



## JSTグローバルサイエンスキャンパス におけるシミュレーション研究

研究・開発機関 : 神戸大学、兵庫県立大学  
 利用施設 : 兵庫県立大学スパコン等  
 計算規模 : 1,360並列、約50TFlops  
 利用ソフトウェア : 高校生自作コード、GROMACS等

### Before

- 高校生がスパコンを使うきっかけを提供するには、コンテスト出場などのイベント参加型の行動が必要でした。
- グローバルサイエンスキャンパス (GSC) は、大学が高校生を選抜して育成する制度ですが、高校生が自発的に考えたテーマを研究室に提案し、実践することはとてもハードルが高く、所属研究室のテーマを手伝うような事例もありました。

### After

- 神戸大学が中心となり2017年に開始したGSC-ROOTでは、「根源を問う」をテーマに、兵庫県立大学、関西学院大学、甲南大学の4大学が参加し、高校生の発想力を活かして研究テーマを提案させる仕組みを作りました。
- 1年目の基礎ステージでは「京」の見学などスパコン教育を、2年目の実践ステージではシミュレーション研究を実施しました。

### 背景と目的

2014年度より、高校生を対象とし、グローバルに活躍しうる傑出した科学技術人材を育成することを目的とした国立研究開発法人科学技術振興機構 (JST) のプログラム「グローバルサイエンスキャンパス (GSC)」が始動しました。

SSH (スーパーサイエンスハイスクール) が高校を支援するのに対して、GSCは大学を支援し、高校生 (一部中学生) を育成します。GSCは通常は単独の大学で実施しますが、2017年に神戸大学は、県内の兵庫県立大学、関西学院大学、甲南大学の4大学と共同でGSC-ROOTプログラムを開始しました。また、県内にあるスーパーコンピュータ「京」、放射光施設「SPring-8」、県立の「西はりま天文台」や「人と自然の博物館」などの施設とも連携し、「根源を問う」をテーマに、高校生たちが自分で考える力を養うことを最優先に行いました。

1年目は「基礎ステージ」として、選抜された40名の高校生に対して科学的な思考方法や英語に関する座学を行うと同時に、上記の大学や施設を訪問して研究者と交流し、研究紹介を受けます。そして、研究テーマを自分の力で考えて、調査し、提案プレゼンをします。

ここからが教員は大変で、10名前後の高校生を選抜し、そのテーマの実施できそうな研究室を4大学を中心に探します。つまり、「高校生側の思いを大学教員側が受け止める」という考え方であり、通常の大学生の研究室配属と全く異なります。そして2年目は実際に研究室に配属し、研究を行います。また、その成果をアメリカのワシントン大学で開催される学会で英語ポスター発表をします (図1)。その際、現地でプレゼン技術のセミナーや研究室訪問なども行います。



図1 ワシントン大学における学会発表

### 利用成果

高校生たちの提案したテーマはどれもユニークです。1期生の谷内太陽さんは、陸上部のキャプテンで、外因性の貧血の機構を明らかにしたいと考えました。そこで、兵庫県立大学大学院情報科学研究科の鷺津研究室において、赤血球のバネモデルの論文を参考にプログラムをゼロから作成し、変形シミュレーション解析を行いました (図2)。



図2 バネモデルによる赤血球の変形シミュレーション初期状態 (左)、異常変形後 (右)

同じく1期生の播口奈々美さんは水泳部に所属しており、最適なクロールの手の形を流体シミュレーションで見出せるのではないかと考えました。そこで、「京」を活用している理化学研究所および神戸大学大学院システム情報学研究所の坪倉研究室において、水中での手を変化させて、手に作用する流体力と手の周りの流れの関係を調べました (図3)。

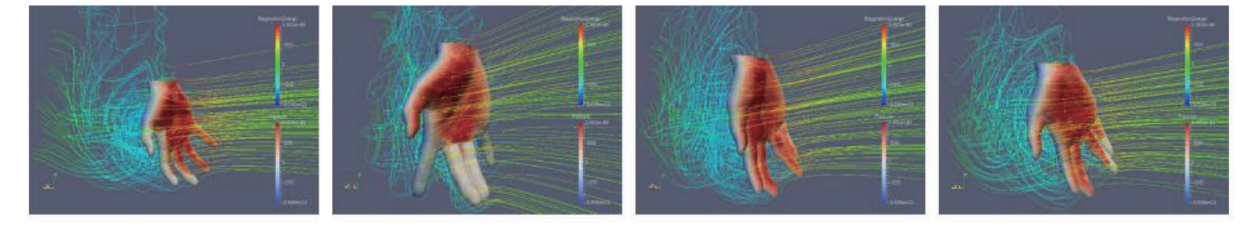


図3 クロール泳法における手の形と流体抵抗。左からボール、キツネ、ブタ、チューリップ型。

2期生の後藤優奈さんは、水道の蛇口から流れる水の流れを見て、そのねじれに周期的な秩序性が存在するのではないかと考えました。そこで、神戸大学大学院システム情報学研究所の陰山研究室でシミュレーション研究を行い、蛇口の形状をうまく調整すれば多角柱がねじれたような水流が形成されることを明らかにしました (図4)。この研究はアメリカ物理学会の著名ジャーナルである Phys. Rev. Fluids に掲載されました<sup>[1]</sup>。

3期生の中塚佳奈さんは、奈良県民として伝統産業である墨に興味がありました。煤 (グラファイト) は、分散剤に膠 (コラーゲン) を用いると水に溶けますが、寒天 (アガロース) には溶けません。この機構について、コラーゲン上の親水基と疎水基の存在に着目し、鷺津研究室において分子動力学シミュレーションを行いました (図5)。

これらのテーマは、それぞれの研究室の普段の研究対象ではありません。しかし、高校生の発想を活かすため各研究室でサポートしました。これは、シミュレーション学の持つ自由さとも相通じます。今後の学生の皆さんの活躍が期待されます。



図4 ねじれ水流の形成シミュレーション

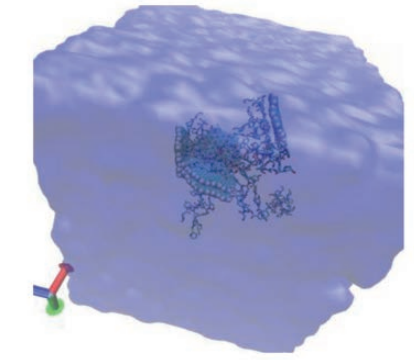


図5 コラーゲン分子のグラファイト片への吸着過程の分子動力学シミュレーション

出典: [1] A. Kageyama Y. Goto, Phys. Rev. Fluids 5, 064002 (2020).