

重点課題5

エネルギーの高効率な創出、変換・貯蔵、利用の新規基盤技術の開発

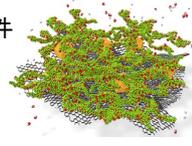
複雑な現実複合系の分子レベルでの全系シミュレーションを行い、高効率なエネルギーの創出、変換・貯蔵、利用の全過程を実験と連携して解明し、エネルギー問題解決のための新規基盤技術を開発する。

本課題の主な成果

1. NTChem:「富岳」での目標性能を達成見込み、1万原子系の励起状態計算
GELLAN: 10^{20} 以上の電子配置の超高精度励起状態計算
MODYLAS: 1億原子系の超大規模、1ステップ3msの超高速分子動力学計算
2. 絶対に発火しない長寿命電解液を開発 (Nature Communications 7, 12032 (2016)、Nature Energy 1, 16129 (2016)、Nature Energy 3, 22-29 (2018)、2017年度「Best Use of HPC in Manufacturing」受賞、日本経済新聞等19件掲載) 企業での実用化研究へ進展
3. 「京」の第一原理計算とマテリアルズ・インフォマティクス手法でペロブスカイト太陽電池の新材料候補を発見 (J. Phys. Chem. Lett. 8, 4826 (2017)、日本経済新聞等11件掲載) 実験研究者との実証実験計画中
4. 企業(27件)・国家プロジェクト(18件)・実験研究者(51グループ)との連携体制構築



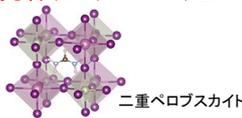
有機薄膜太陽電池のドナー・アクセプター界面での電荷分離



燃料電池の電極四相界面



二次電池電解液



重点課題5 エネルギーの高効率な創出、変換・貯蔵、利用の新規基盤技術の開発

サブ課題A: 新エネルギー源の創出・確保 — 太陽光エネルギー (神戸大・天能精一郎)

目標

高効率太陽光エネルギー変換による新エネルギー源の創出を目指す。複雑なスピン状態を含む天然・人工光合成系の素反応から物質設計までを取り扱える統合的な計算手法を確立し、水分解反応の本質解明と新エネルギー創出に有望な物質探索を行う。また、太陽電池の物質設計とモルフォロジー・界面の制御に貢献できるシミュレーション技術の開発を行い、高効率太陽電池の実現に向けた計算的アプローチを推進することにより次世代のエネルギー資源の創出に貢献する。

緑: 科学的成果 青: 実用的成果

成果内容と科学的・社会的意義

成果(1)

- 太陽電池のエネルギー変換要因特定に向けた大規模シミュレーションの実現
- 人工光合成の反応機構の解明に向け高精度シミュレーションの実現

①太陽電池シミュレーションに向けた基盤アプリNTChem:

電子状態計算→1万原子系 励起状態計算

11,682原子, 93,456基底の

第一原理計算で20.5%の並列

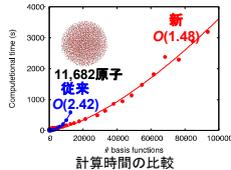
効率を達成。

当初目標達成見込み

励起状態計算(TDDFT)に

向けて超並列疎行列ライ

ブラリ等の高度化中



②人工光合成シミュレーションに向けた基盤アプリGELLAN:

量子化学計算→ 10^{20} 以上の電子配置からなる超高精度励起状態計算

10^{20} 以上の電子配置を扱える高精度ソルバにより光触媒候補

の遷移金属錯体における高精度計算を実証。「富岳」に向けて更

に高度化中

成果(2)

- 太陽電池の高効率化に向けた電荷分離機構の解明
- ペロブスカイト太陽電池やペロブスカイト水分解光触媒の新材料候補を提案

太陽電池のドナー・アクセプター界面における電荷分離機構を解明

- 有機無機ペロブスカイト太陽電池
- 有機薄膜太陽電池

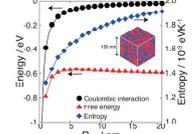
第一原理計算を実施し、ハイスループット・スクリーニングにより材料候補を提案

- 二重ペロブスカイト太陽電池
- 可視光応答型ペロブスカイト水分解光触媒

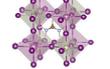
日本経済新聞等11件に掲載

プレスリリース: 2017/10/05 「京」でペロブスカイト太陽電池の新材料候補を発見

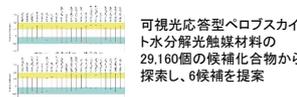
J. Phys. Chem. Lett. 8, 4826 (2017)



電荷分離機構の解明
有機太陽電池の電子と正孔はエントロピー拡散によって分離



二重ペロブスカイト太陽電池材料の11,025個の候補化合物から探索し、51候補を提案



可視光応答型ペロブスカイト水分解光触媒材料の29,160個の候補化合物から探索し、6候補を提案
APL Mater. 6, 101103 (2018).

重点課題5 エネルギーの高効率な創出、変換・貯蔵、利用の新規基盤技術の開発
サブ課題B: エネルギーの変換・貯蔵 — 電気化学エネルギー (東大・杉野修)

目標

第一原理電子状態理論に基づく電極反応の計算と分子動力学法に基づく電解質の計算を統合させることにより、均一系の化学・表面物性・粗視化に基づく材料科学的なアプローチでは理解が困難であった二次電池や燃料電池の分子論を構築する。またこの方法を用いて、測定が困難な電極界面を解明しそれを二次電池や燃料電池の電流電圧曲線の予測につなげ、信頼性の向上に貢献できる手法を確立する。これを用いて次世代・次々世代電池技術の重要問題に挑戦し、蓄電・水素エネルギー社会の実現に貢献する。

成果内容と科学的・社会的意義

緑: 科学的成果 青: 実用的成果

成果(1) 基盤アプリMODYLAS、stat-GPMDを活用し二次電池・燃料電池の微視的機構解明に向けた世界最大規模のシミュレーションの実現

①MODYLAS: 分子動力学計算→1~10億原子系 超大規模分子動力学計算

新規アルゴリズムにより通信時間を50%削減、FMM計算主要部分の演算量を約6分の1に削減。プロトン移動の組み込み、不均一系の浸透係数の計算手法の開発など、「富岳」に向けて更に高度化中

②stat-GPMD: 第一原理分子動力学→5千原子系 電極反応

5千原子系の第一原理サンプリング達成。FFT高速化等により速度が17%向上。反応解析の実証およびメモリ削減等の更なる高度化中

上記のアプリをそろえて総合的なシミュレーションを行える体制を構築した例は他所には見られない。先鋭的な成果を創出すると同時にそこで培ったノウハウをアプリと共に普及させることにより我が国の電池開発技術のレベルアップに大きく貢献する。

成果(2) 二次電池: 安全で高性能な電解液を開発

1. 燃えにくい高性能な電解液の開発
2. 水を用いた安全・安価・高性能な電解液の開発
3. 絶対に発火しない長寿命電解液の開発

プレスリリース

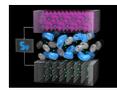
Nature系に3報 日本経済新聞等19件に掲載

2016/06/29 燃えにくい電解液を用いた高性能4.6Vリチウムイオン電池
 Nature Communications 7, 12032 (2016)

2016/08/27 新たなリチウムイオン伝導性液体の発見 水を用いた安全・安価・高性能な超3V動作リチウムイオン電池へ
 Nature Energy 1, 16129 (2016)

2017/11/28 “火を消す”高性能電解液を開発 - 絶対に発火しない長寿命電池の実現へ
 Nature Energy 3, 22-29 (2018)

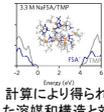
2017/11/13 SC17「HPCwire」の読者が選ぶ2017年度「Best Use of HPC in Manufacturing」を受賞



5 V級Liイオン電池の作動イメージ図



2種類のリチウム塩と水からハイドレートメルトに



計算により得られた溶媒和構造と対応する電子状態。元素戦略(触媒・電池)京大、東大との連携により実施



Best Use of HPC in Manufacturing受賞



重点課題5 エネルギーの高効率な創出、変換・貯蔵、利用の新規基盤技術の開発
サブ課題C: エネルギー・資源の有効利用 — 化学エネルギー (岡山大・田中秀樹)

目標

化学エネルギー創成から消費に至る過程において、メタンやCO₂の分離・回収、貯蔵、触媒反応によるエネルギー・資源の有効利用に関わる基盤技術を開発し、高効率な分離・回収、貯蔵、相互変換法の実用への橋渡しとするための指針を提供する。そのために、電子状態理論と分子動力学法を基盤とした統合シミュレーション技術を開発し、実用的な物質設計に向け分子レベルからの指針を提供する。ハイドレート分解によるメタン資源の採取方法の効率化、燃料電池非白金系触媒の開発、アミンをはじめ高効率材料を用いたCO₂の分離・回収技術の発展に貢献することにより、エネルギー多消費型工業プロセスを革新する。

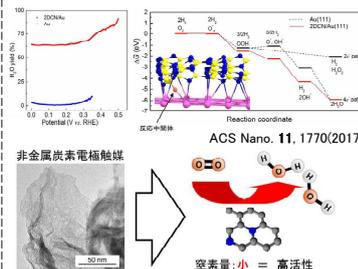
成果内容と科学的・社会的意義

緑: 科学的成果 青: 実用的成果

成果(1): 非白金族新規電極触媒の開発に向けた新しい作用原理の発見

- 窒化炭素との接合による金触媒の活性化
- 微量な窒素導入による炭素材料の酸素還元電極触媒化

本成果により、燃料電池普及の重要な課題となっている非白金族電極触媒に対する基礎・応用研究がより活発になることが期待される。



図(左上)水の生成率。金(青線)では水がほとんど合成できないが、ヘテロ接合型(赤線)では合成可能となる。図(右上)金表面(黒)とヘテロ接合型触媒(赤)の反応経路。
 ACS Nano, 11, 11770 (2017)
 ACS Catal, 8, 8162 (2018)

成果(2): CO₂分離・回収におけるアミン溶液の反応機構解明

- 吸収塔・再生塔でのアミン溶液の反応機構をシミュレーションで解明

超並列量子分子動力学シミュレーションにより、アミン溶液へのCO₂吸収反応の微視的機構を見出した。また、再生塔で起こる逆反応は図の逆過程とは異なる機構で進行することを突き止めた。本成果により、吸収塔と再生塔の両方に最適なアミン溶液の設計可能性が示唆された。A社との共同研究では、シミュレーションによる知見に基づいて開発したアミン溶液を試験プラントにおいて性能試験を実施している。

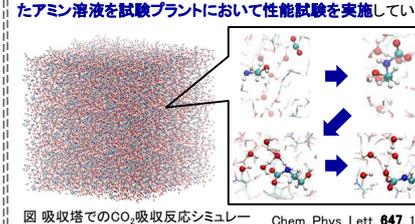


図 吸収塔でのCO₂吸収反応シミュレーションから得られた反応機構
 Chem. Phys. Lett. 647, 127 (2016)
 Bull. Chem. Soc. Jpn. 90, 1230 (2017)

重点課題6

革新的クリーンエネルギーシステムの実用化

エネルギーシステムの中核をなす複雑な物理現象を第一原理解析により、詳細に予測・解明し、超高効率・低環境負荷な革新的クリーンエネルギーシステムの実用化を大幅に加速する。

本課題の主な成果

1. 石炭ガス化炉、燃料電池、洋上ウインドファーム、磁気閉じ込め核融合炉のクリーンエネルギーシステムの実機のデジタルツインの実現。
すなわち、4種のシステムの極めて複雑な形状、大規模、連成、「京」、ポスト「京」での計算、を達成するマルチスケール・マルチフィジクス統合シミュレーションの世界初の実現。
(日本物理学会賞3件、プラズマ・核融合学会賞3件)
(Nature Communications1件、Physical Review Letters3件、ICCES2019 Plenary Lecture、WCCM-ECCOMAS2020 Plenary Lecture)
2. ターゲットアプリ(ADVENTURE)、プラズマコード(GT5D等)のコーディングの推進。ADVENTUREは「京」の35倍以上の性能向上。
3. 実用的成果への期待としては、各システムのスケールアップ時の定量的予測性が担保可能となる。その結果、途中のスケールの実証テストをスキップできる可能性がある。また、実用化までの開発期間短縮、信頼性向上、開発コスト・運用コスト低減、国際競争力向上がある。

重点課題6 革新的クリーンエネルギーシステムの実用化

サブ課題A: 高圧燃焼・ガス化を伴うエネルギー変換システム(サブ課題代表者: 東京大学・吉村 忍)

目標

ラボスケール(投入熱量0.76MWth)の石炭ガス化炉(電中研炉)やパイロットスケール(50MWth)の超臨界圧CO₂燃焼器を対象に、世界初の炉構造・反応(固気液三相燃焼流)・伝熱と冷却を連成させたマルチスケール・マルチフィジクス統合シミュレーションを実現し、V&Vを実証する。また、これらのソフトウェア群を用いた設計環境を構築する。さらに、ポスト「京」におけるターゲット問題であるベンチスケール(熱投入量16MWth)石炭ガス化炉(三菱重工実験炉)の解析準備を完了する。

成果内容と科学的・社会的意義

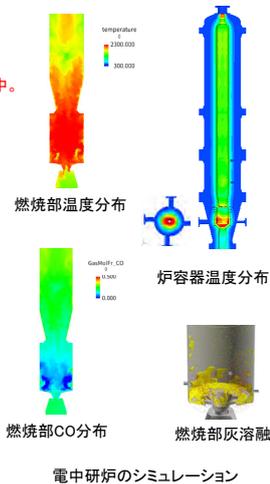
緑: 科学的成果 青: 実用的成果

成果(1)ラボスケール石炭ガス化炉(電中研炉)を対象に、世界初の炉構造・反応・冷却マルチスケール・マルチフィジクスシミュレーションを実現した。解析結果と試験結果との比較によるV&Vを遂行中。
成果(2)パイロットスケール超臨界CO₂燃焼器を対象に、燃焼解析と計測値との比較によるV&Vを遂行中。
成果(3)ベンチスケール石炭ガス化炉(三菱実験炉)の解析に関してメーカーとNDAを締結しモデル構築を遂行中。

(1)の成果は、灰溶融モデルを組込んだ固気液三相燃焼流(LES)解析コードFFR-Comb(FVM)、冷却管による移流拡散冷却解析機能(DG)を組込んだ熱伝導解析コードADVENTURE_Thermal(FEM)、繰返し弾塑性とクリープ解析、熱ひずみ解析機能を組込んだ構造解析コードADVENTURE_Solid(FEM)を、並列連成カプラーREVOCAP_Couplerを用いて「京」上で大規模並列連成解析を実現することによりはじめて達成される成果であり、計算科学的に特筆すべき成果である。また、ベンチスケール石炭ガス化炉とパイロットスケール超臨界CO₂燃焼器の全系シミュレーションの実現は、炉型スケールアップ時の非線形効果の定量的予測性能を高めるとともに、炭種の違いや燃焼方式の違い(空気吹き、酸素吹き、O₂/CO₂吹き等)に対する適切な炉パラメータ探索の試行錯誤プロセスを大幅に削減し、実用化を大幅に加速できる。大規模燃焼解析については米国ExaCT等のコード開発があるが、燃焼シミュレーションのみに特化しており、灰溶融や冷却挙動、構造健全性評価まで考慮したマルチフィジクス・マルチスケール統合シミュレーションは本研究が世界初である。

(2)の成果は、超高压(30MPa程度)条件に用いる実在気体モデル及び燃焼モデルの評価・検証を詳細に行った上で、実際のパイロットスケールの超臨界圧CO₂ガスタービン燃焼器を対象にしたLES解析を世界で初めて実施したものである。

(3)の成果は、ポスト「京」におけるターゲット問題であるベンチスケール石炭ガス化炉(三菱実験炉)について、メーカーとNDAを締結し、情報の提供を受け、モデル構築を行っているものである。H31年度末までに燃焼部のモデルを構築し、試解析を実施するとともに、冷却管を含む炉容器については、モデルを構築中であり、今後、構築したモデルを用いた熱伝導解析、構造解析の試計算を遂行予定である。



重点課題6 革新的クリーンエネルギーシステムの実用化

サブ課題B: 気液二相流及び電極の超大規模解析による燃料電池設計プロセスの高度化(東京大学・鹿園直毅)

目標

PEFCスタックの高出力密度化・低コスト化(4kW/L以上、Pt使用量0.1g/kW以下)に貢献するセル・電極設計シミュレーション技術を開発する。
SOFC電極の高耐久性実現(15年以上に相当するSOFC耐久性評価)に貢献できる電極3次元シミュレーション技術を開発する。

緑: 科学的成果 青: 実用的成果

成果内容と科学的・社会的意義

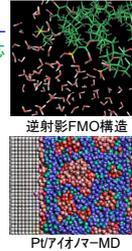
- 成果(1) オープンソースCFDコードへの高速行列ソルバ導入、10セル積層ショートスタック計算を達成
- 成果(2) 実触媒層構造及び実作製プロセスを対象にした反応輸送連成解析技術の開発
- 成果(3) フラグメント分子軌道計算と粗視化シミュレーションの連携技術、金属触媒とアイオノマー間の相互作用算出手法を開発
- 成果(4) SOFC電極の最適設計に貢献できるツール群を開発

世界に先駆けて燃料電池のナノ~メゾ~マクロ連携マルチスケールシミュレーションを実現

(1)の成果は、燃料電池ショートスタックのマクロシミュレーション(気液二相流計算)を実現(10セル積層、約14億メッシュ)し、カーボン繊維構造のGDL基材と流路界面の液水挙動も計算可能となり、二相流解析コードの適用範囲を拡大したものである。広範な作動条件における詳細二相流解析によって流路内の二相圧力増倍・気液速度比と全体性能シミュレーションの二相流モデルパラメータを連結し、JARI評価セルの限界性能を定量的に再現した。この成果により、排水性を向上させるための実機セルの流路設計、GDLと流路構造の組合せなど燃料電池の構造条件や流量などの作動条件の検討に活用できるようになる。

(2)の成果は、作製プロセスを考慮した、電極構造と発電特性の関連評価技術を確立したものである。DLVO理論を基にしたメゾシミュレーションにより凝集形状を再現、FIB-SEMIによる画像取得、炭素凝集体計算、レベルセット法を基に、実触媒層の3D構造構築を達成し、反応計算を実施。これにより、経験的だったプロセス操作と電池特性の紐づけ技術支援、マクロシミュレーションへの橋渡し技術を確立。

(3)の成果は、FMOミクロ計算から有効パラメータを非経験的に算定してDPDメゾシミュレーションを行うFMO-DPD法を確立(汎用性と信頼性を確保)したものである。FMO-DPDによりMEA/水クラスターのメゾスケール構造を評価、実験結果と定量的に対応。メゾスケール構造からナノスケール構造への逆射影プロトコルも整備、還元構造でのFMO計算による相互作用解析も実施(右図)。新規の高速DPDコードも開発。これらの成果により、実験計測が困難とされるMEA内のナノ界面構造モデリングと輸送特性との相関を把握できるようになる。



さらに、金属触媒とアイオノマー間の相互作用パラメータを非経験的に算出するミクロ計算手法も開発。粗視化MD解析(メゾスケール)によりPU/Nafion二相界面の構造モデリングを実施。触媒表面における水ネットワーク構造を解析。この成果により、実験計測が困難なMEA触媒近傍でのアイオノマー被覆状態、輸送特性の解析技術、メゾ解析への材料情報の橋渡し、が可能となる。

(4)の成果は、SOFC電極の長時間耐久性の評価に向けた過電圧特性、Ni相焼結挙動の予測、及び最適な電極構造の提案を目的としたツール群を開発したものである。この成果により、実験計測が困難な長時間挙動が予測可能となるだけでなく、最新の製造技術(ナノインプリント等)と組み合わせることで革新的電極構造の設計が可能となり、電極性能の飛躍的向上が期待できる。

重点課題6 革新的クリーンエネルギーシステムの実用化

サブ課題C: 高効率風力発電システム構築のための大規模数値解析(豊橋技術科学大学・飯田明由)

目標

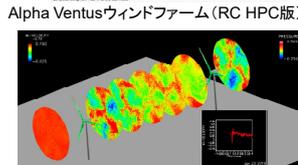
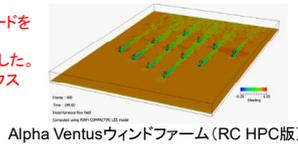
洋上ウインドファームの発電性能予測、構造信頼性評価に注力したマルチスケール・マルチフィジクス統合シミュレーション技術を開発する。具体的には、①大型風車の相互干渉解析手法の確立、②流体構造連成振動解析による風車ブレードの振動応答、応力解、累積疲労損傷解析技術の開発、③洋上ウインドファーム全体のシミュレーションの大規模化と多風向同時解析技術の開発、を行う。

緑: 科学的成果 青: 実用的成果

成果内容と科学的・社会的意義

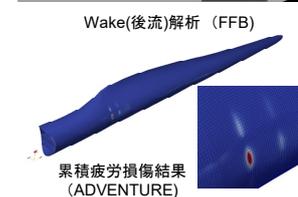
- 成果(1) 大型発電用風車の単体発電性能と後流(Wake)影響を定量評価可能なLES流体シミュレーションコードを開発した。
- 成果(2) 洋上ウインドファームの発電性能評価に必要なマルチスケール流体シミュレーションシステムを開発した。
- 成果(3) 洋上ウインドファームの風車ブレードの累積疲労損傷評価のための、マルチスケール・マルチフィジクスシミュレーションシステムを開発した。

(1)の成果は、ローター直径130mを超える発電用大型風車(NREL5MW)単体の発電性能と後流(Wake)影響評価を、LESベースの詳細CFD解析(FFB)により高精度に評価できるようになったものである。このコードを用いることにより、ウインドファームにおいて、風車後流が後方配置の風車の発電性能や累積疲労損傷に与える影響を詳細に評価する基盤が確立したことになる。



(2)の成果は、RC HPC版がほぼ完成し、洋上ウインドファーム全体シミュレーションと多風向同時解析が可能となったことにより、ファーム全体の発電性能評価が可能となるものである。さらに、現在、タンデム配置の2つの大型風車の解析をRC HPC版とFFBを用いて行い、両者の結果を詳細に比較検討することにより、RC HPC版に組み込む工学Wakeモデルの高度化を図ることが可能となり、ひいては洋上ウインドファーム全体の発電性能評価の精度向上に大いに役立つ。

(3)の成果は、並列LES解析コードFFB(FEM)(重点課題⑧のターゲットアプリ)と並列構造解析コードADVENTURE_Solid(FEM)(重点課題⑥のターゲットアプリ)を並列連成カプラー-REVOCAP_Couplerを介して連携した流体構造連成振動解析システム(オフライン片方向連成)を構築したものである。さらに、積層複合材料(積層ソリッド要素)から構成される大型風車ブレードの変形・応力解析を行うのみならず、ブレード内部に累積する累積疲労損傷分布を定量的に解析評価できるようになった。この成果により、大気境界層流れ場に含まれる乱流成分や、Wake(後流)がブレードの累積疲労損傷に与える影響を高精度に評価することが可能となる。大型発電用風車ブレードを対象とした、このような高精度の累積疲労損傷評価システムは、世界的に存在せず、計算科学的にも、材料強度的にも大きな価値があり、さらに実用的価値も大変大きい。



重点課題6 革新的クリーンエネルギーシステムの実用化
サブ課題D: 核融合炉の炉心設計(日本原子力研究開発機構・井戸村泰宏)

目標 国内大型実験プロジェクトと連携した実証研究によりITERの核燃焼プラズマ解析に必要な計算モデルを確立するとともに、Oakforest-PACS全系規模の強スケーリングを実現する。これにより、世界最先端の計算精度と計算性能をもつ国産核燃焼プラズマ解析コードを完成させる。

成果内容と科学的・社会的意義

成果(1)LHD装置の重水素実験開始に先駆けて水素に対する重水素の閉じ込め性能改善を予測し実験を先導。
 成果(2)JT-60U装置における高エネルギー粒子駆動MHD現象を解析し、長時間スケールのバースト現象を再現。
 成果(3)メニーコア最適化技術、省通信型行列ソルバを開発し、Oakforest-PACS全系の強スケーリングを達成。
 成果(4)主要コードをオープンソース化、計算基盤技術の他課題への適用により成果の利活用を促進。

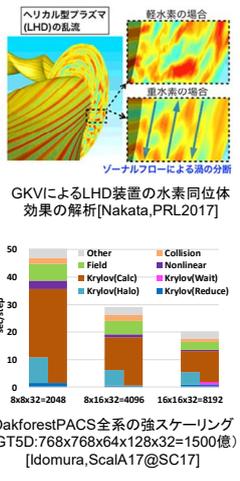
(1)の成果により、多種イオン系乱流輸送に関して、LHD装置の重水素実験で観測された閉込め性能改善をGKVで実験に先駆けて予測し、コードの妥当性を示すとともに、水素と重水素の乱流輸送の違い(水素同位体効果)の解明に世界で初めて成功[Nakata,PRL2017]。本成果により重水素、三重水素等からなるITERの核燃焼プラズマの閉じ込め性能評価に必要な計算モデル検証が大きく前進。引き続き、不純物イオンの輸送に関する実証研究を継続中。

(2)の成果により、長時間スケールMHD現象に関して、MEGAで独自開発したマルチ時間スケール計算手法[Todo,NJP2016]により、高エネルギー粒子駆動MHD現象のバースト現象の再現に世界で初めて成功[Bierwage,Nat.Comm.2018]。コードの妥当性を定量的に示し、目標を達成。本成果によりITERの α 粒子閉じ込め性能評価に必要な計算モデルを確立。

(3)の成果により、GT5Dにおいてメニーコア最適化技術[Asahi,IEEE-TPDS2017]、省通信型行列ソルバ[Idomura, ScaI17@SC17]等の計算技術を開発し、コデザイン技術課題を解決。「京」の10倍以上のノード性能でOakforest-PACS全系(8192ノード)までの強スケーリングを示し、目標を達成。本成果によりポスト「京」のエクサスケール計算基盤技術を確立。

(4)の成果により、開発コードを国内外の実験解析(国内2装置、国外4装置)に活用して国際競争力を向上するとともに、局所的乱流解析コードGKVをオープンソース化し、若手・実験研究者向けの講習会を実施。また、計算基盤技術を他分野(燃料電池電極解析、原子炉熱流動解析等)に適用し、開発技術の汎用性を実証。引き続き、開発技術の公開に向けたオープンソース整備を継続中。

緑:科学的成果 青:実用的成果



重点課題6 革新的クリーンエネルギーシステムの実用化
全体推進(サブ課題代表者:東京大学・吉村 忍)

目標 プロジェクト管理、大型計算機資源の確保・サブ課題間調整、に加えて、アプリケーション研究開発における共通の課題を、各サブ課題や他重点課題と協力して推進する。具体的には、①コデザイン、②マルチフィジクス達成とV&V、③マルチスケール連携とV&V、④大規模行列計算とデータ可視化に関する連携、⑤アプリケーション普及活動とV&V、⑥人材育成、を推進する。

成果内容と科学的・社会的意義

成果(1)ADVENTURE(ターゲットアプリ)、プラズマ解析コード等)を中心に、コデザインを推進
 成果(2)マルチフィジクスSIM基盤の構築と活用(FFB/FFR-Comb⇄REVOCAP_Coupler⇄ADVENTURE_Solid, Thermal)達成の実現(サブ課題A、Cと協力)
 成果(3)マルチスケールSIM連携基盤の構築と活用、普及促進(サブ課題Bと協力、重点⑥⑧連携、重点⑥①連携、重点⑥⑤連携)
 成果(4)各アプリケーション(ADVENTURE、FFR-Comb、ABINIT-MP、PHASE/0、REVOCAP_Coupler、プラズマコード等)の普及活動とV&V推進
 成果(5)大規模行列計算、データ可視化に関するサブ課題間連携の推進(サブ課題D、B連携)
 成果(6)人材育成の推進(ポスドク雇用、院生教育、講習会実施)

(1)の成果は、コデザインチューニング成果をADVENTUREへ実装中。適切な時期に実機計測を行う。

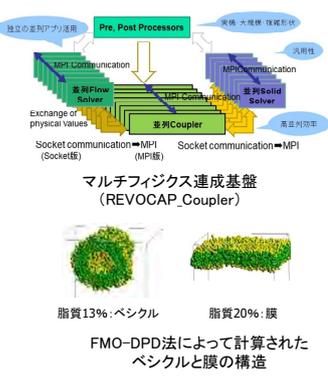
(2)の成果は、Socket版Couplerを石炭ガス化炉、洋上大型風車解析へ適用したものである。(サブ課題A、Cで報告)また、新たに開発したMPI版Couplerを石炭ガス化炉でテスト中である。

(3)の成果は、FMO計算(ナノスケール)から得られた有効パラメータ χ を用いるDPD計算(メソスケール)をFMO-DPD法として整備し、燃料電池電解質膜だけでなくタイヤゴム素材、脂質膜、タンパク質へも応用展開した。さらに、FMO-DPD用の有効パラメータ算定システムをFCEWSとして公開した。また、ジョブの自動投入/回収システムWHEELとFCEWSとの連携(重点課題⑥⑧連携)、凝集性タンパク質のFMO-DPD計算(重点課題⑥①連携)を行った。

(4)の成果は、各アプリ毎にコンソーシアムやユーザーグループ形成、最新アプリ・最新機能公開、講習会開催、企業等とNDA締結、実機V&V推進、等を遂行している。また、ABINIT-MP(FMO)の機能向上と改良を進めると共に、HPCI拠点に公開ライブラリプログラムとして提供し、FMO-DDコンソーシアム(2016年、2017年の「京」利用課題の優秀成果賞)などで利用された。

(5)の成果は、サブ課題Dで開発した大規模行列計算アルゴリズムを、サブBの電極アプリへの適用準備を進めている。
 今後、マルチスケールSIM&マルチフィジクスSIMのモデル構築、連携法、計算、V&Vに関するノウハウ・共有事項を全サブ課題と協力し、最終年度にとりまとめる予定。
 各アプリケーションの普及活動の定常化に向けた準備を進める予定。

緑:科学的成果 青:実用的成果



重点課題7

次世代の産業を支える新機能デバイス・高性能材料の創成

国際競争力の高いエレクトロニクス技術や構造材料、機能化学品等の開発を、大規模超並列計算と計測・実験からのデータやビッグデータ解析との連携によって加速し、次世代の産業を支えるデバイス・材料を創成する。

本課題の主な成果

1. パワーデバイス材料SiCの性能劣化原因をRSDFT計算で解明
(Phys Rev Lett, 112, 136403, 2014 / Nano Lett, 17, 6458, 2017 / Jpn J Appl Phys, 57, 125701, 2018 / APEX, 11, 121301, 2018)
 2. 電磁場と第一原理で物質の光応答を計算する世界唯一のアプリSALMONを開発公開
(M. Noda et al, Comp. Phys. Comm. 235, 356 (2019) / 光工学業績賞 (高野榮一賞) / HPCI利用研究課題優秀成果賞)
 3. 第一原理計算と新手法開発で実験結果に隠れた本質を紐解き、**新超伝導機構**を提唱
(物理学会若手奨励賞 / 物理学会論文賞 / 文部科学大臣表彰科学技術賞(研究部門))
 4. **磁性材料**に有効な記述子を見出し最適な化学組成に効率的に導く**機械学習手法**開発
(STAM 18, 756(2017) / J. Phys. Soc. Jpn. 87, 113801(2018) / Phys. Rev. Mater. 3, 053807(2019) / 物理学会論文賞)
 5. 大規模分子動力学計算と大規模フェーズフィールド法の融合で、
金属材料微細組織形成過程の高精度計算を開発
(Adv. Sim. Theo. 1(2018)1800065 / Comp. Mater. Sci. 152(2018)118 / Model. Sim. Mater. Sci. Eng. 27(2019) 054002)
 6. 水処理やガス透過を規定する**ポリマーの分離能**が分子間相互作用から予測可能に
(日本化学会 第36回学術賞 / J. Chem. Phys. 148, 214903 (2018).)
 7. **界面、欠陥、不純物**等を含む大規模非周期系シミュレーションのための、
高効率・高精度分割統治法を開発し、**OpenMX**に実装
(J. Phys. Cond. Mat. 30(2018), 295502-1 / Phys. Rev. B 98(2018), 245137-1 / J. Phys. Chem. 122(2018), 27292)
- * 重点課題(7)公開アプリ紹介WEB「MateriApps」関連活動が文部科学大臣表彰科学技術賞(科学技術振興部門)受賞

重点課題7 次世代の産業を支える新機能デバイス・高性能材料の創成

サブ課題A: 高機能半導体デバイス (サブ課題代表者: 名古屋大学 押山 淳)

目標

持続する未来社会を支える半導体デバイスの演繹的ものづくり(プロセス・インフォーマティクス)に資する、ポスト京アーキテクチャ上での計算物質科学の手法を確立し、パワーエレクトロニクス材料の基礎科学的本質を解明すると同時に、次世代プロセス・デバイスシミュレーション技術を確立する。

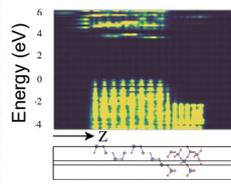
成果内容と科学的・社会的意義

成果(1)・ポスト京上での物質科学計算に最適な実空間スキーム(RSDFT, RS-CPMDコード, 2011年ゴードンベル賞)の高速化・高機能化を達成し、10万原子サブナノ秒量子論シミュレーションを可能にするるとともに、デバイスシミュレーション手法との結合により、量子論デバイスシミュレータを構築した。
成果(2)・①パワーデバイス材料であるSiCにおけるfloating 状態を計算で発見し、SiC-MOSデバイスでのキャリアトラップの内因的理由を解明。②同じくパワーデバイス材料であるGaNのエピ成長機構の素過程の解明。③量子論デバイスシミュレータによるSiナノワイヤFETのIV特性解明

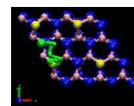
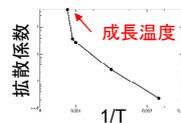
(1)の成果により、数万原子規模の系統的な第一原理計算が可能となり、一例として、**次世代チャネル材料**である二層グラフェンにおける積層捻れとディラック電子の速度繰り込み現象が見いだされた。また、数千原子CPMDシミュレーションにより、従来抜くことが難しかった**アモルファス材料**の原子構造と電子状態の因果関係を解き明かす処方箋が与えられた。「富岳」コンピュータにより、実際の**デバイス構造におけるアモルファスの性質解明**が期待できる。また量子論デバイスシミュレーションによるSiナノワイヤFETのIV特性解明は、**デバイスデザインへの新たな演繹的アプローチ**を示している。

(2)のfloating state 発見の成果は、固体物理学の**教科書の記述変更**を促すものであり、計算科学的手法による**物性科学分野でのブレークスルー**である。さらにこのfloating stateがパワーデバイスであるSiC/SiO₂界面での電子トラップを引き起こすという**発見(右図)**は(その後実験で確認された)、**基礎科学とデバイス開発が、コンピュータシミュレーションにより、ともに進んでいくことの重要性を如実に示しており、ポスト「京」プロジェクトの社会的重要性の証**となっている。

同じく(2)の成果の一つである、**GaNのエピタキシャル成長の機構解明**は、量子論にとって未踏領域である結晶成長現象解明への**チャレンジ**である。激化するパワーデバイス開発競争の鍵を握るのは、**高品質のエピタキシャル薄膜形成技術**であり、ノーベル物理学賞受賞の光エレクトロニクスにおける薄膜形成技術に比して、格段の技術向上が必要である。今般、高精度CPMDシミュレーションにより、GaN成長表面での**Ga原子は2次元液体状態**となっていることが判明した。すなわち**エピ成長は固体上ではなく液体上でのものづくり現象**である。「富岳」コンピュータによる、より大規模な動的シミュレーションは、**新たな演繹的アプローチのものづくり法の高い可能性を示唆**している。



左図説明: SiC/SiO₂界面での電子状態密度の空間とエネルギー依存性。状態密度の高い点が黄色で示されており、左側がSiCサイド、右側がSiO₂サイドであり、黄色で挟まれた黒の領域がバンドギャップを表している。界面での原子積層のずれにより、界面での伝導帯下端が0.3 eV下がっていることがわかる。



上図説明: GaNエピ成長での成長温度(摂氏1000度)では表面Ga原子は突如激しい拡散運動を始める(右パネル緑原子の軌跡)。長時間シミュレーションにより、線形応答理論を用いて拡散係数を求めると、当該温度で急激なジャンプを示す(左パネル)。

重点課題7 次世代の産業を支える新機能デバイス・高性能材料の創成
サブ課題B: 光・電子融合デバイス(サブ課題代表者:筑波大学・矢花一浩)

目標

電子ダイナミクスの第一原理計算に立脚した新しい光科学シミュレーションの方法を確立し、開発した計算コードをオープンソースソフトウェアとして公開する。それを用いて新奇な光デバイス原理の開拓や光加工技術の確立を、実験グループ、企業とも連携して遂行する。

成果内容と科学的・社会的意義

緑: 科学的成果 青: 実用的成果

- (1)ソフト成果: 第一原理計算に基づく光科学汎用の計算コードSALMONを開発し、コード論文を出版するとともに、様々なプロセッサに最適化した。
- (2)研究成果: 実験研究者と連携し、シリコンの波数励起や誘電体光応答の超高速変化など、新奇光デバイス原理に関わる知見を得た。

(1)ソフト成果

(内容)

分子・ナノ物質・表面界面・バルク物質など多彩な物質の光応答を、光電磁場・電子・イオンの運動に対する第一原理計算により記述する他に例のない光科学ソフトウェアSALMONを開発し公開した。計算機科学者との密接な連携により、「京」のみならずOakforest-PACSをはじめとする主要スーパーコンピュータにおいて高効率な超大規模計算を可能にした。

(意義)

先端の光科学研究が対象とする光と物質が強く結合した諸現象に対して有効なソフトウェアを開発し、近接場光励起やアト秒科学、非熱レーザー加工の解明などが可能となった。特に光電磁場と電子の運動を多階層で連結した第一原理計算手法は、他に例がないものである。国際チュートリアルシンポジウムの開催により、世界標準ソフトウェアとしてSALMONの認知が進んでいる。

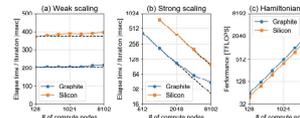
(2)研究成果

(内容)

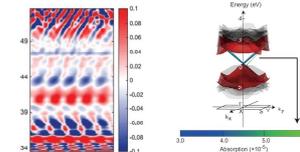
金属ナノ粒子によるシリコンの波数励起過程を、現実的な設定で大規模計算により実証し、実験グループとの連携により波数励起に基づく光デバイスが試作され、その有効性の検証を進めている。高強度パルス光と誘電体薄膜の相互作用をアト秒実験グループと連携して明らかにし、誘電体の光学特性がフェムト秒以下の時間スケールで変化することや、薄膜を用いてパルス光の波形を制御できることを明らかにした。

(意義)

近接場光励起・アト秒科学・レーザー加工などの先端の光科学研究において、SALMONが第一原理計算に基づき、アト秒・ナノメートルの時空間解像度で現象を解明する精緻なシミュレータとなることを示した。今後「富岳」を利用する大規模計算により、近接場を用いた新奇デバイスやペタヘルツで動作するデバイスの設計、非熱レーザー加工の解明が大きく発展すると期待できる。



KNLクラスOakforest-PACSでの全系性能評価
 Y. Hirokawa et al. ISC High Performance 2018, pp.205.



ダイヤモンドの光学的性質の超高速変化に対する第一原理シミュレーション。
 M. Lucchini et al. Science 353, 916 (2016)
 シリコンの励起を波数空間で示す。
 M. Noda et al. Phys. Rev. Appl. 11, 044053 (2019)

重点課題7 次世代の産業を支える新機能デバイス・高性能材料の創成
サブ課題C: 超伝導・新機能デバイス材料 (サブ課題代表者:東京大学 今田正俊)

目標

最終目標: 第一原理計算を基礎に強相関電子物質の電子構造解明に適用できるアルゴリズムの開発・応用と、富岳を活用するための手法開発。特に、銅酸化物などの高温超伝導機構、トポロジカル機能物質の新概念実証、界面や非平衡への概念適用を富岳で可能にするコード開発と適用。

成果内容と科学的・社会的意義

緑: 科学的成果 青: 実用的成果

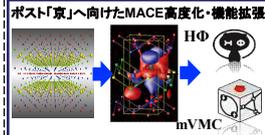
- 成果(1)第一原理的に強相関電子系の定量予測と物質設計を可能にする「HΦ」、「mVMC」、「RESPACK」の開発、高度化、公開を進めた。
- 成果(2) 高温超伝導体、トポロジカル物質の第一原理計算を、富岳を有効活用して推進する手法を開発し、「京」での計算で実験の定量再現に成功した。
- 成果(3) 強相関電子物質の長年の難問である高温超伝導と量子スピン液体現象の、実験結果に隠れた特徴を抽出し、新超伝導機構等を提唱した。
- 成果(4) 界面、非平衡での計算手法を開発し、富岳での計算に備えて「京」に適用し、超伝導やトポロジカル機能の増幅、最適化の基礎原理を発見した。

(1)の成果により、RESPACK等を活用して強相関有効ハミルトニアンを導出し、インターフェースを介してHΦ、mVMCなどの低エネルギーソルバーを用いて解く一貫スキームを構築した。このスキームにスピン軌道相互作用、電子格子相互作用、非平衡時間発展を組み込み、ソルバーにテンソルネットワークなどを含める等の高度化と機能拡張も進めた。高度な機能拡張のみならず、実験家も使えるソフトとしても、コード公開と普及活動を進め、強相関電子系に対する有力手法・一貫シミュレータとしての地位を確立した。本成果は21世紀初頭まで不可能であった強相関電子系の第一原理的定量的系統計算を行なう手法が開拓され実装されたという意義がある。次世代機能素子として注目される強相関デバイス、トポロジカルデバイス、機能素子開発の武器となる。第一原理的に挑戦しうる一貫手法とその公開は世界的にもほとんど例がない。

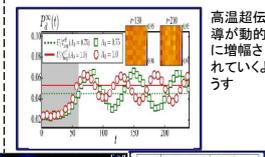
(2)の成果により、第一原理有効ハミルトニアンを導出して、「京」を活用して解き、銅酸化物での強相関電子系特有の超伝導と電荷不均一相の激しい競合を明らかにし、電荷不均一相を抑えて超伝導が優越する機構を定量解明した。スピン液体の候補であるイリジウムやルテチウム化合物で実験を定量再現した。本成果は銅酸化物超伝導体の30年以上の難問を第一原理的に解き、道を開くなど、富岳でのより系統的な解明の出発点にもなる。

(3)の成果により、今までの実験では隠れていた超伝導が「高温化」する機構を抽出し、これを検証するために機械学習を活用して実験研究者と連携する道を開いた。またイリジウム酸化物の磁性的裏にある、スピン液体や磁壁の持つトポロジカル機能を解明した。本成果は解析の難しい強相関電子系の実験結果に隠れる本質を計算や機械学習を用いて解明していく先駆例の一つとなり、実験結果の解析で実験研究者と連携が進み、実験と計算科学が連携して機能開発、探索していくデータ科学手法の展望を開いた。これらの基礎原理の解明が将来の産業創出に与える影響は未知であると同時に計り知れない。

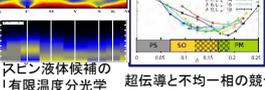
(4)の成果により、強相関電子系の界面や非平衡という物性科学のフロンティアを研究する道筋と手法が開拓された。本成果は強相関電子の非平衡状態で超伝導が増幅する機構の一つを見出し、界面で超伝導が最適化される一般的な機構の発見に寄与した。同時に実験と連携してフロンティア開拓を進め、実験の難しい問題での連携の道を開いた。



ポスト「京」へ向けたMACE高度化・機能拡張



ポスト「京」で有用な強相関電子系ソフト開発



高温超伝導が動的に増幅されていくようす
 スピン液体候補の有限温度分光学
 超伝導と不均一相の競合

重点課題7 次世代の産業を支える新機能デバイス・高性能材料の創成
サブ課題D: 高性能永久磁石・磁性材料 (国立研究開発法人産業技術総合研究所・三宅隆)

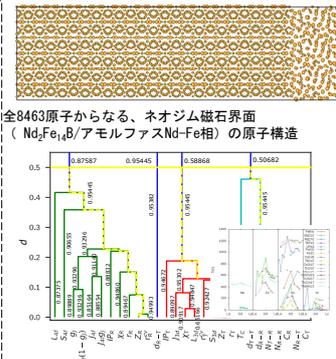
目標
 1万原子を含む磁石材料の第一原理計算を可能にするとともに、インフォマティクスを活用した新規磁石の計算探索技術を開発する。

成果内容と科学的・社会的意義 緑: 科学的成果 青: 実用的成果

成果(1).....8500 原子規模のネオジム磁石界面の第一原理計算を可能とするソフトの高度化に成功
成果(2).....磁性材料に有効な記述子とデータ科学的解析法、化学組成を効率的に最適化する機械学習手法を開発

成果(1)
 (内容)
 > **ネオジム磁石主相 (Nd₂Fe₁₄B) に対する定量的な原子論的スピン模型を構築し、有限温度磁性を解析する手法を開発。**
 > **第一原理計算により、希土類磁石粒界の原子スケールの磁気物性値を評価する技術を開発。** サブ課題Gと協力して OpenMX コードを高度化し、4000 原子規模のネオジム磁石の主相・副相界面の最適構造を決定。8500 原子規模の界面系に対して動作確認。
 (意義)
 > 電動車の駆動モータに用いる高性能磁石には耐熱性が求められ、150℃以上の高温領域における高い保磁力が必要である。保磁力は粒子や材料組織に依存するが、その微視的機構は未だに解明されていない。元素戦略PJ等の最新の実験情報と本シミュレーション技術を組み合わせることにより、磁石実材料の粒界近傍の磁化反転機構の解明が進展すると期待できる。

成果(2)
 (内容)
 > 物性値を予測するための**汎用的な記述子である軌道場行列を考案**。4220 種類の遷移金属化合物の生成エネルギーや 658 種類の化合物の局所磁気モーメントに対して有効性を検証。
 > 階層クラスタリングを用いて**重要な記述子を特定するサブグループ関連性解析を開発**。希土類遷移金属合金のキュリー温度を制御する記述子を特定。
 > **ベイズ最適化とデータ同化を用いた効率的な化学組成の最適化手法を開発**。RFe₁₂ 型希土類化合物を対象として有効性を検証。
 (意義)
 > **マテリアルズ・インフォマティクスによる材料開発の加速は産業競争力に直結するため注目が大きい**。Nd₂Fe₁₄B を超える磁気特性を有する RFe₁₂ 型化合物等へ本技術を適用し、新規磁石材料開発を加速することが期待される。



全8463原子からなる、ネオジム磁石界面 (Nd₂Fe₁₄B/アモルファスNd-Fe相) の原子構造

希土類遷移金属合金のキュリー温度のサブグループ関連性解析

重点課題7 次世代の産業を支える新機能デバイス・高性能材料の創成
サブ課題E: 高信頼性構造材料

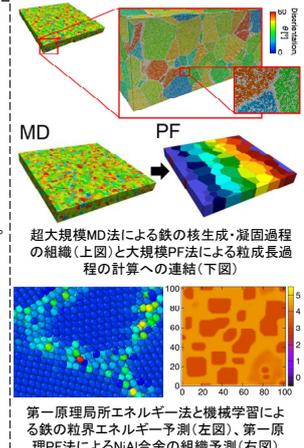
目標 金属系構造材料の性能を支配する微細組織の解明と設計のため、微細組織の構成要素や合金(溶質)元素との相互作用等を大規模第一原理計算で解明し、高精度データとして蓄積する。第一原理計算をメゾ・マクロに繋ぐマルチスケール計算技術を構築し、大規模フェーズフィールド法計算による凝固から粒成長、微細組織形成の高精度シミュレーションを実現する。

成果内容と科学的・社会的意義 緑: 科学的成果 青: 実用的成果

成果(1) 大規模並列計算を駆使した革新手法による大規模MDと大規模PFの融合・連結で、金属材料の微細組織形成過程の高精度計算が可能に。
成果(2) 電子が支配する鉄の粒界・転位と合金(溶質)元素の相互作用を解明。第一原理計算をメゾ・マクロに接続する新規計算技術を開発。

(1)の成果 並列計算技術を駆使して、鉄の融体から核生成・凝固・粒成長を経て微細組織に至る過程の**超大規模分子動力学(MD)計算を達成**。この核生成・凝固の構造をフェーズフィールド(PF)法に連結し、その後の粒成長計算を、同一空間スケールでMDとPFの両法で実行することに成功(世界初)。原子レベル情報が自然にメゾ・マクロの組織形成過程に繋がるとともに「データ同化」により原子レベル物性値をPF法に同時に高精度に抽出・連結することも可能に。また、大規模PF法による凝固計算(デンドライト成長)で重力による自然対流効果を取り入れる技術開発に成功(世界初)。より現実的な高精度凝固組織計算が可能に。
 (意義) 原子スケール(大規模MD)情報を大きなスケール域(大規模PF法)に高効率・高精度に伝達する技術が開発でき、融体から凝固、微細組織形成までの高精度マルチスケール計算の基幹部分が確立できた。また、自然対流など凝固デンドライト組織を決定する環境因子(温度、流体等)を取り入れることで、実プロセスに近い条件を反映させた計算が可能。「富岳」による**超大規模の並列計算でさらに現実的な大規模構造が扱える**。融体から微細組織に至る過程は金属系構造材料の性能を支配し、厳密なプロセス設計が必須。高精度マルチスケール計算による現象解明と設計・制御は、技術的・社会的インパクトが極めて大きい。

(2)の成果 電子が支配する鉄の粒界・転位と一連の合金(溶質)元素との相互作用を大規模第一原理計算で高精度に解明、その機構を局所エネルギー法で明らかにした(世界初)。第一原理計算をメゾ・マクロに繋ぐ手法として、局所エネルギー法と機械学習の連携による粒界エネルギー予測技術、さらに、第一原理自由エネルギー計算とPF法の連携による合金の組織予測技術(第一原理PF法)を確立した(世界初)。
 (意義) 粒界・転位と一連の合金(溶質)元素の相互作用とその機構解明は、金属材料の基礎科学の革新である。第一原理計算をメゾ・マクロに繋ぐ手法の確立は、上記の大規模MD・大規模PFの計算技術と組み合わせ、さらなる高精度化を可能にし、また合金や溶質の扱いを可能にする。第一原理PF法による合金組織予測は、「富岳」による並列計算で大規模化でき、多元合金にまで拡張できる。第一原理局所エネルギー法と機械学習の連携においても、より複雑な構造が扱える。金属系構造材料の微細組織計算の一層の高精度化を可能にし、新規材料開発や高性能化に大きく寄与する。



MD PF

超大規模MD法による鉄の核生成・凝固過程の組織(上図)と大規模PF法による粒成長過程の計算への連結(下図)

第一原理局所エネルギー法と機械学習による鉄の粒界エネルギー予測(左図)、第一原理PF法によるNiAl合金の組織予測(右図)

重点課題7 次世代の産業を支える新機能デバイス・高性能材料の創成
サブ課題F: 次世代機能性化学品

目標

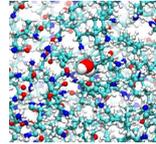
トポロジー制御共重合体における小分子(水やガス)の分配挙動を解析し、ポリマーの相溶性を規定する化学ポテンシャルの全原子計算を行うとともに、有機/無機界面の接着強度を自由エネルギーのレベルで定量化し、古典/量子ハイブリッド計算によって接着の劣化機構を明らかにする。

成果内容と科学的・社会的意義

緑: 科学的成果 青: 実用的成果

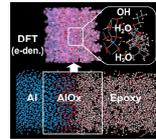
成果(1): ポリマーの相溶性と小分子分配の全原子自由エネルギー計算、および、接着強度劣化に関わる反応分子のハイブリッド計算を可能にした
成果(2): 多様なトポロジーにおける共重合体の物質分配機能を評価し、異種界面の接着強度や接着仕事の実験値を再現し劣化の素反応を解明した

(1)の成果により、ブロック共重合体やグラフト共重合体への小分子(水やガス)の分配挙動の予測、および、相溶性を規定するポリマー全体の化学ポテンシャルの全原子計算が可能になるとともに、有機系接着剤と金属の接着強度やその劣化ダイナミクスを、劣化要因とされる侵入分子群を丸ごと含めた規模で電子レベルから定量的に解析できるようになった。ポリマー系の研究では、ポリマー内セグメントの相互作用から溶解自由エネルギーを構成する手法を実装することで**溶解性を決定するポリマー内構造要素の同定**を可能にし、さらに、ポリマーの繰り返し単位であるモノマーと周囲との相互作用を逐次的に導入する手法を定式化することで、これまで不可能とされていたポリマー全体の過剰化学ポテンシャルの全原子計算ができるようになった。有機/無機界面の研究では、1000原子を超える量子領域を含む古典/量子ハイブリッド計算を実用的な計算時間で遂行することを可能とし、**高分子で複雑に装飾された金属表面と液体との接着仕事を簡便に自動計算する手法を開発**した。本成果の意義は、海水淡水化やガス/リア性のようなポリマー材料の主要機能である物質分配、および、熱可塑性と耐衝撃性の両立などの要請を満たす**ポリマーブレンドの調製可能性を原子レベルの相互作用の知見から予測することが可能になったこと**、また、自動車などの組立産業におけるさらなる高度化(軽量化、高耐久化など)の鍵を握るとされる**異種素材間接着への原子レベルのアプローチ**が可能になったことである。



ポリエチレンとポリアクリルアミドのグラフト共重合体への水の吸収

(2)の成果として、ポリエチレンとポリアクリルアミドの**共重合体における吸水自由エネルギーが共重合比によって規定される**ことが明らかになり、スルホン酸をもつアイオンマーにおける酸素の吸収性と透過性をポリマーの分岐度やフッ化度を変えて検討することでポリマー鎖の柔軟性が透過性の制御因子であることが示された。さらに、ポリエチレン、ポリプロピレン、ポリメチルメタクリレートなどの全原子MD計算から、ポリマー相溶性を決定する過剰化学ポテンシャルの主要項は数十モノマー程度の全原子計算から得られることが見出された。また、実際的で大規模な古典/量子ハイブリッド計算をAl金属とエポキシ樹脂の接着界面に適用することで、実験結果と合致する接着強度のシミュレーション結果を得ることに成功するとともに、基板金属と樹脂との接触部に侵入した水分子等によって**金属原子、樹脂官能基、水分子の三つ巴で生じる接着劣化の反応素過程を複数発見し接着強度が半減すること**を見出した。本成果の意義は、ポリマー構造の複雑化(共重合化、分岐、ヘテロ原子の導入)に対する小分子(水やガス)の分配挙動の応答が原子レベルの相互作用に基づくMD計算によって予測可能になったこと、および、素材産業からの長年の要請であった**ポリマー相溶性の問題に対する原子レベルからのアプローチ**が構築されたことにある。さらに、**有機/無機の異素材界面の接着強度や劣化メカニズムが電子・原子レベルで解析可能**になったことは、複合化が進む材料開発分野に対する意義深い貢献である。



接着劣化 (Al基板-樹脂)のハイブリッドシミュレーション

重点課題7 次世代の産業を支える新機能デバイス・高性能材料の創成
サブ課題G: 共通基盤シミュレーション手法

目標

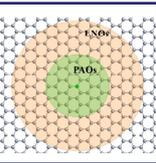
磁石材料(サブ課題D)、鉄鋼材料(サブ課題E)、機能性化学品(サブ課題F)と連携し、1万原子以上から構成される複雑界面構造や複雑液体の大規模第一原理電子状態計算を可能とする効率的なオーダーN計算手法を開発し、第一原理ソフトウェアOpenMXに実装・公開する。

成果内容と科学的・社会的意義

緑: 科学的成果 青: 実用的成果

成果(1): 光電子分光スペクトルの高精度計算手法や局在自然軌道を用いた高効率・高精度分割統治法を実装したOpenMXを開発
成果(2): 汎用ソフトウェアOpenMXを活用し、新規二次元材料(シリセン、ポロフェン)及び触媒材料(単分散Pt原子)の構造同定に成功

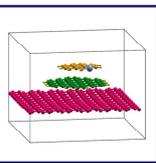
(1)ソフト成果
 (内容) 多岐に亘る物質群の材料特性を統一した枠組みで系統的に調べることが可能な汎用第一原理電子状態計算ソフトウェアOpenMXを開発した。特に**光電子分光スペクトルの高精度計算手法及び局在自然軌道を用いた高効率・高精度分割統治法: DC-LNO法を新たに開発し(上図)、サブ課題D、サブ課題E、サブ課題Fとの連携を強化した。**



DC-LNO法の概念図

(意義) 磁石材料、鉄鋼材料、電池材料などの機能特性は結晶構造や分子構造に加えて、二次構造である界面構造、欠陥、転位、不純物添加などの複合要因により決定されており、その機能と構造の相関を詳細に明らかにするためには本質的に実デバイス構造を再現した大規模計算が必要である。本成果により、第一原理計算の立場から**複雑構造の直接計算が可能となり、実験との直接的な比較ができるようになる**。開発したOpenMXはGNU-GPLの規約の下で順次、一般公開を進めており、本重点課題を超えて**大学や産業界で広く活用され、計算物質科学のさらなる発展に貢献**できる。

(1)研究成果
 (内容) 計算量が原子数に比例するオーダーN第一原理計算手法は1990年代初頭より、活発に研究が進められてきたが、計算精度、数値安定性、汎用性の面から未だ万能な手法は開発されていない。我々は**局在自然軌道法と分割統治法を融合**することで、従来の手法を超える汎用性の高い計算手法(DC-LNO法)の開発に成功した。本手法により**絶縁体のみならず、金属に対しても高精度計算が可能であり、その超並列性から、「富岳」コンピュータ上で高い並列効率が期待される**。またプロジェクト前半で開発した光電子分光スペクトルの高精度計算手法の適用研究を北海道大学・郷原グループと共同で展開し、**グラフェンに単原子分散したPt原子の原子レベルでの担持構造とその電子状態を初めて明らかとした(下図)。**



単原子分散Ptの担持構造

(意義) 汎用性の高いオーダーN第一原理計算の適用範囲は極めて広い。磁石材料、鉄鋼材料、電池材料の構造・機能相関の理解、イオン液体の動的振る舞い、地球深部での高温・高圧下での物質の構造予測等への応用展開が期待される。実材料開発で議論される二次構造(界面構造、欠陥、転位、不純物添加)の直接計算を可能とする第一原理電子状態計算手法を新たに開発したことにより、「富岳」コンピュータ上で本手法による超並列計算を実行することで、**現実 に即したシミュレーションを実現**され第一原理計算の産業応用が加速される。

重点課題8

近未来型ものづくりを先導する革新的設計・製造プロセスの開発

製品コンセプトを初期段階で定量評価し最適化する革新的設計手法、コストを最小化する革新的製造プロセス、およびそれらの核となる超高速統合シミュレーションを研究開発し、付加価値の高いものづくりを実現する。

本課題の主な成果

1. コデザインの取組により、ニーズに沿った価値創造と費用対効果の大きいものづくりを実現するためのアプリケーションの高速化を実施し、ターゲットアプリであるFFBはポスト「京」で100倍以上を達成できる見込みを得るとともに、その高速化の成果を他のキラーアプリに展開。
2. 開発したアプリにより、自由表面の影響も考慮した船の抵抗試験を実施し、曳航水槽試験のシミュレーションによる代替が可能であることを実証。また、「京」では実現できなかった実機航空機複雑形状の空力解析が、ポスト「京」で実現できることを検証。
3. HPCを駆使した多目的最適設計技術の実用化の可能性について、自動車の空力最適化とターボ機械の性能・騒音最適化問題を対象に実証中。

重点課題8 近未来型ものづくりを先導する革新的設計・製造プロセスの開発

サブ課題A: 設計を革新する多目的設計探索・高速計算技術の研究開発(宇宙航空研究開発機構・大山聖)

目標

多目的最適設計探索技術について、設計解を見出すまでの時間を飛躍的に短縮するとともに、制約条件が強い場合においても設計解を見出すことができるアルゴリズムの研究開発を行う。また、高速計算技術研究開発については、主要なアプリケーションに実装し、その効果を検証する。

成果内容と科学的・社会的意義

緑: 科学的成果 青: 実用的成果

成果(1)多目的設計探索について、多目的設計最適化アルゴリズムを開発し、テスト問題で計算時間が1/3以下になることを確認(図1)

成果(2)高速計算技術・時間並列計算について、オリジナルのコードに比べ、計算速度が2倍から13倍になることを確認(図2)

多目的設計探索に関しては、「京」を用いることによりその有効性を証明できたが、最適設計解を見出すまでに要する時間が40日以上掛かったり、制約条件が強い場合は最適設計解(パレート最適解)を見出せなかったりする場合があることが判明した。そこで、設計解を見出すまでの時間を飛躍的に短縮するとともに、制約条件が強い場合においても設計解を見出すことができるアルゴリズムの開発を行う。また、重点課題⑧で開発する全てのアプリケーションに共通する課題として解析に要する時間の短縮があるため、多目的設計探索技術の研究開発に加えて、時間短縮のための共通基盤技術として、高速計算技術の研究開発し、主要なアプリケーションに実装し、その効果を検証する。

(1)の成果に関しては、実数設計変数の適応的離散化により計算時間を7割削減できることを確認した。(2)の成果に関しては、パイプライン法の適用によりオリジナルのコードと比較して計算速度が2倍になること、また、フェーズフィールド法に適用した場合13倍の加速を実現を確認した。これらを他のサブ課題で開発するアプリケーションに実装することにより、製品コスト低減や高品質化に貢献できる新設計基盤を整備し、産業競争力強化に貢献できる。現在多目的設計探索については、他のサブ課題への展開として、重点課題⑧のサブ課題Bとの連携による、自動車の空力最適化、および、サブ課題Cとの連携による、ターボ機械の性能・騒音の最適化の実証研究を開始した。

最終達成目標としては、多目的設計探索に関しては、重点課題⑧のサブ課題Bまたはサブ課題Cと連携することにより、それぞれ自動車の空力最適化、または、ファンの性能・騒音の最適化に適用し、また、高速計算技術に関しては、重点課題⑥のサブ課題Bのフェーズフィールド法や重点課題⑧のサブ課題Cの流体シミュレーションに適用し、多目的設計探索および高速化の効果をj確認する。

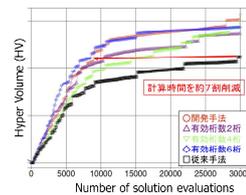


図1 マツダベンチマーク問題を用いた性能比較

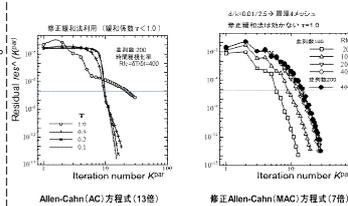


図2 時間並列による高速計算技術を用いたフェーズフィールド法に適用し、13倍の加速を実現

重点課題8 近未来型ものづくりを先導する革新的設計・製造プロセスの開発

サブ課題B: リアルタイム・リアルワールド自動車統合設計システムの研究開発(神戸大学大学院・坪倉誠)

目標

従来の1/10以下の時間で定常空力予測が可能なアプリケーションを開発する。また、設計問題に対する多目的最適設計解を見出すことを可能するために、構造振動/強度解析機能、圧縮性熱流体解析機能、移動境界解析機能を具備したアプリケーションを開発する。

成果内容と科学的・社会的意義

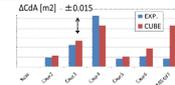
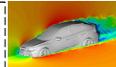
緑: 科学的成果 青: 実用的成果

- 成果(1)実車空力解析に対してプリ処理・コアカーネル高速化により、約120時間要していた解析ターンアラウンドタイム(TAT)最短12時間以内を実現(図1)
- 成果(2)空力性能多目的最適化フレームワークを構築しその有用性を実証(図2)
- 成果(3)オイラー構造解析・圧縮性解析・6自由度移動境界解析の基本プログラムを開発し、ホワイトボディを用いた剛性解析について精度検証を実施(図3)

新素材や新たな動力を用いた次世代自動車を早急にかつ高い品質で実現するためには、既存の実験代替を目的としたCAEを活用した設計手法に対して、より高次元でCAEを利用した設計プロセスの革新が必要である。本サブ課題では、「京」で実現した自動車空力連成解析を基盤技術としてHPC環境を活用することで、設計上流側でデザイナーと技術者が協調したコンセプトデザインを支援する(リアルタイム)と共に、時々刻々と変化する運転条件変化を考慮した(リアルワールド)シミュレーションを実現することで予測精度・信頼性向上を実現することを旨とした。

(1)の成果に関しては、実車フルモデルの複雑な形状を用いた空力解析について、既存の非構造格子系ソルバーに対して、ソルバー部分のみで数十倍の加速を実現し、現状のTATは最短12時間以内を実現した。これにより、自動車の排出ガス・燃費試験法の国際基準WLTP(Worldwide harmonized Light vehicles Test Procedure)認証の取得に向けた解析が可能であることが実証されたと共に、上流設計側でデザイナーと技術者が協調してコンセプトデザインを実施することが可能となる。また、(2)の成果として、サブ課題Aと連携して、多目的最適化フレームワークを構築し、ポスト「京」自動車コンソーシアム活動によりその有用性を実証すると共に、(3)の成果として、プリ処理(メッシュ生成)が高次元オイラー型構造解析法を実装、粒子法による薄板構造のモデル化に成功、および5億セル規模の強度解析を実現し、その精度検証を実施した。これにより、設計初期段階において、空力・強度・音・熱・振動などの複数の物理現象が関連した設計問題に対する多目的最適設計解を見出すことが可能となる。

これらの成果により、当初目標として掲げた「TAT12時間での実車空力解析と、実走行状態における多目的設計最適化が可能、構造解析機能、圧縮性熱流体解析機能、移動境界解析機能を具備したアプリケーションプログラムを開発し、走行燃費と高速走行操縦安定性の両立を目的とした、自動車の多目的最適設計問題を実施し、開発したアプリケーションの性能および効果を確認する」ことを達成する。



▲タイヤ回転時の6仕様空力抵抗差
図1 乗用車の国際燃費基準(WLTP)の認証取得に向けた精度検証

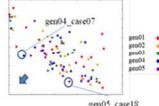
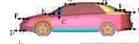


図2 自動車空力性能多目的最適化

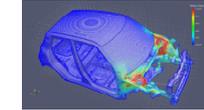


図3 自動車ボディ強度解析

重点課題8 近未来型ものづくりを先導する革新的設計・製造プロセスの開発

サブ課題C: 準直接計算技術を活用したターボ機械設計・評価システムの開発(東京大学生産技術研究所・加藤千幸)

目標

既存のアプリケーション(FFB)の計算速度の大幅な向上と計算規模や計算機能の拡大、LES解析用の新たな壁面モデルの開発と実装、および、計算格子の完全自動生成と流体騒音の直接計算が可能、Lattice Boltzmann法(LBM)に基づく新規アプリケーション(FFX)の開発を行う。

成果内容と科学的・社会的意義

緑: 科学的成果 青: 実用的成果

- 成果(1)FFBについて、ポスト「京」で100倍以上の高速化を達成できる見込みを得(コデザイン成果)、その効果を船の自航計算等により検証中(図1)
- 成果(2)FFBに対して圧縮性流れ解析機能を実装したコードの検証を実施。また、LES用壁面モデルを開発し、その効果を検証中
- 成果(3)LBMによるプロトタイププログラム(FFX)を開発し、ベンチマークテストを実施(図2)

HPCI戦略プログラム分野4の一つの研究開発課題の成果として、従来十分には解明されていなかった複雑な非定常流動現象を解明したりすることが可能であることを実証したが、これらの計算には「京」の数千ノードから数万ノードの計算資源が必要であるため、直ちに企業における実用化には至らなかったなどの問題点も顕在化した。そのため、計算速度の大幅な向上と計算規模や計算機能の拡大、計算資源量の大幅な削減を目指したLES解析用の新たな壁面モデルを実装した既存のアプリケーション(FFB)、および、計算格子の完全自動生成と流体騒音の直接計算が可能、Lattice Boltzmann法(LBM)に基づく新規アプリケーション(FFX)の開発を行う。

(1)の成果に関して、これまでに実施したチューニングにより2.1倍、アルゴリズム変更によりコアカーネルベースで4.9倍(実測)の高速化を達成しており、CPUの性能向上と合わせて、ポスト「京」で100倍以上の高速化を達成できる見込みを得、その効果を船の自航試験のベンチマーク計算等により検証している。(2)の成果に関して、圧縮性流れ解析機能を実装し、ターボ機械の解析用のオーバーセット機能を検証しており、また、LES用壁面モデルを開発し、その効果を検証している。これらにより、「京」を用いても解析を実施することができなかった、少なくとも見積もっても5,000億以上の格子が必要となる多段ポンプや水車のLES解析および、「京」で実証した既存のアプリケーションではできなかった流体騒音の直接的な予測が可能となる。(3)の成果に関して、FFXを開発し、計算速度、計算精度の検証を開始し、「京」の6万ノードを用いた2兆格子の計算を実施し、ピーク性能の6%の計算速度で動作することを確認した。これにより、計算格子の完全自動生成と流体騒音の直接計算が可能となる。

最終達成目標としては、サブ課題Aと連携して、開発されたFFBがファンの性能・騒音の多目的最適設計に適用して、その効果の予備的な検証を実施する。また、シミュレータによるノード性能の予測から計算速度を推定するとともに、ネットワーク性能と通信量からアプリケーション全体の性能を評価する。

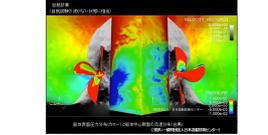
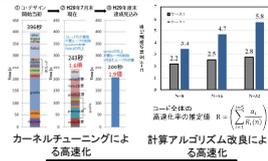


図1 FFBの高速化の状況(上)とその結果を利用した自航試験のベンチマーク計算(下)

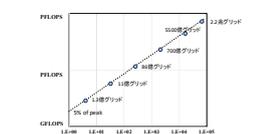


図2 FFXの「京」におけるweak-scaleベンチマークテスト