



久保 百司 教授
Prof. Momoji Kubo

超大規模計算科学シミュレーションの産業展開

Super-Large-Scale Computational Science Simulations for Industrial Development

■ 研究の概要

世界的に早急な対策が求められているエネルギー・環境問題の解決、安全・安心社会の実現、さらには日本発の新産業創出のためには、理論に基づく高度な材料設計・材料開発が強く求められています。これまで電子・原子レベルの計算科学シミュレーション技術は、目的とする機能・特性を創成するための最適な元素の設計に、多大なる貢献を果たしてきました。しかし、周期表の中の元素の数は限られていることから、本プロジェクトでは「元素に頼らない材料設計」を戦略目標とし、金属・セラミックス・高分子・炭素材料など多成分から構成される複雑なコンポジット材料の理論設計を実現することを目的としています。

これまで、最適な元素の理論設計には数百～数千原子系の計算科学シミュレーションで十分でしたが、本プロジェクトで目指すコンポジット材料の理論設計には、数百万～数億原子から構成される超大規模シミュレーションの活用が必須です。そこで本プロジェクトでは、代表者がこれまでに開発してきた超大規模計算科学シミュレーション技術を、燃料電池、トライボロジー、構造材料などの具体的な産業課題に応用することで、世界に先駆けて超大規模計算科学に基づく多成分コンポジット材料の理論設計を実現します。これにより、産業分野において「元素に頼らない材

料設計」を実現する計算科学技術の革新を目指します。

■ 研究の目的

代表者はこれまで、スーパーコンピュータの活用と独自の超大規模シミュレーション技術の開発によって、数百万～数億原子から構成される超大規模計算科学シミュレーションを実現してきました。その一方で、代表者は「化学反応」に加えて「摩擦、衝撃、応力、流体、電子、熱、光、電場など」が複雑に絡み合った現象を解明可能とするマルチフィジックス計算科学技術を開発してきました。そこで本プロジェクトでは、これまでに開発してきた「超大規模シミュレーション技術」と「マルチフィジックス計算科学技術」を融合することで、金属・セラミックス・高分子・炭素材料などの多成分から構成されるコンポジット材料について、機能・特性予測のみならず、材料劣化・摩耗・腐食・破壊現象などの解明、さらには材料の合成、加工プロセスの解明を可能とするマルチフィジックス計算科学シミュレーション技術の産業展開を目指します。

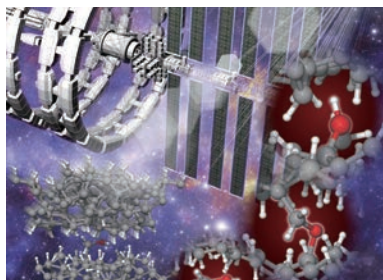
■ 研究の特色

本プロジェクトでは、ナノスケールの化学反応が、マクロスケールの①機能・特性、②材料劣化・摩耗・腐食・破壊現象、③合成・加

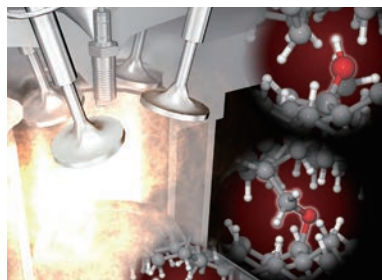
工プロセスに与える影響を解明するマルチスケール計算科学の実現をも目指します。本プロジェクトで推進する超大規模計算科学シミュレーション技術により、nmから μm スケールまでの現象に対して全原子計算を実施することで、電子顕微鏡さらには光学顕微鏡でも観察可能な現象の解明を可能とします。これにより、従来は実験では観察できない現象の解明を目的としていた計算科学技術を実験と直接比較が可能な技術にまで発展させるイノベーションを実現します。

■ 期待される成果

本プロジェクトでは、超大規模計算科学シミュレーションによって、単純に「計算サイズ」を大きくするのではなく、計算科学の本質的な「質」の変革を目指します。例えば、燃料電池分野ではこれまでの計算科学が対象としてきた触媒への添加元素の設計では無く、触媒層の3次元構造の設計を可能とし「元素に頼らない材料設計」を実現します。さらに、トライボロジー分野では小規模計算による摩擦現象の解明から、超大規模計算によって初めて可能となる摩耗現象の解明へとパラダイムシフトを実現します。これらの革新により、産業技術への計算科学の貢献にイノベーションをもたらすことを目的としています。



宇宙機器のマルチスケールシミュレーション



エンジン用潤滑剤のマルチスケールシミュレーション



太陽電池のマルチスケールシミュレーション

