

5-5 ポスト「京」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」 (文部科学省)

5-5-1 はじめに

「京」コンピュータの後継機を開発するための文部科学省「フラッグシップ2020」（通称：ポスト「京」）が，平成27年2月より開始された。このプロジェクトは，最先端のスーパーコンピュータにおけるシステムとアプリケーションを協調的に開発し，我が国が直面する社会的・科学的課題（健康長寿，防災・減災，エネルギー，産業競争力，基礎科学の重点9課題）の解決に貢献することを目的とするものである。

・ 予定期間：平成26年度～31年度（計画変更あり），システムとアプリケーションの開発。

〔平成32年度～，運用・利用研究（別プロジェクトを予定）〕

・ 実施機関：－ポスト「京」システム開発：理化学研究所（富士通）

－重点課題研究：9課題を国が定めて実施機関を公募し，決定。

平成26年4月～8月，文科省検討委員会で課題決定。

平成26年10月公募開始，平成26年12月採択決定。

従来から「京」を研究に利用していた研究者を中心に，分子研が責任機関となりエネルギー課題の一つである重点課題⑤を推進している。

5-5-2 重点課題⑤研究課題について

ポスト「京」を駆使することにより，太陽電池，人工光合成による新エネルギーの創出・確保，燃料電池，二次電池によるエネルギーの変換・貯蔵，また，メタンやCO₂の分離・回収，貯蔵，触媒反応によるエネルギー・資源の有効利用など，太陽光エネルギー，電気エネルギーや化学エネルギーにおいて中心的な役割を担う複雑で複合的な分子・物質過程に対する電子・分子レベルでの全系シミュレーションを行い，実験研究者，産業界と連携して，高効率，低コスト，また環境に優しく持続可能なエネルギー新規基盤技術を確立する。

同時に，これまで計算機資源の不足により制限されていた孤立系や部分系における単一現象の科学から脱却し，現実系である界面，不均一性を有する電子，分子の複合現象を統合的に捉え得る新しい学術的視点を確立し，科学的なブレークスルーを達成する。

(1) サブ課題A 新エネルギー源の創出・確保——太陽電池，人工光合成

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。スピンの組み換えを含む天然・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タの開発を行い，スピン制御や熱電変換などの新機構に基づく高効率太陽電池を実現することにより，次世代のエネルギー資源の創出に貢献する。

(2) サブ課題B エネルギーの変換・貯蔵——燃料電池，二次電池

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，セパレータの計算を統合させ，個々の部材の性能に加えて，システムとしての二次電池の充放電曲線や燃料電池の電流電圧曲線を予測し，信頼性の向上に貢献できる手法を確立する。この中で，諮問委員や実験研究者からの指摘に基づき実施計画を検討した結果，実験では観察することが難しい電極界面近傍でのマイクロ機構の解明に特に注力することとした。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。

(3) サブ課題C エネルギー・資源の有効利用——メタン、CO₂、高効率触媒

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構築し、実用的な物質設計に向け分子レベルからの指針を供する。ハイドレートの有効利用、高効率触媒の開発、CO₂の回収・分離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。

(4) 基盤アプリケーションの設計開発

ポスト「京」を有効に活用し、国家的に取り組むべき社会的・科学的課題の解決に資するアプリケーションを開発するため、本重点課題では4つの基盤アプリケーションを設定する。「京」で実効的な超並列計算の実績があり、本重点課題で共通に利用できる観点から、量子化学計算プログラム (NTChem, GELLAN)、分子動力学計算プログラム (MODYLAS)、第一原理計算プログラム (stat-CPMD) の4つを基盤アプリケーションとし、ポスト「京」での超並列計算で実効性が上がるように設計開発を行う。

5-5-3 重点課題⑤実施体制について

・代表機関：分子研，分担機関：10 機関

(名大×2，東大×2，神戸大，理研，物材機構，岡山大，北大，早大)

課題実施者 11 名，博士研究員 21 名，事務局 2 名+補助者 1 名

・協力機関：77 機関，内企業 16 社

5-5-4 平成 30 年度について

平成 30 年度は、平成 28 年度から開始した本格実施（4 年間）の 3 年目である。4 つの基盤アプリケーションを中核に研究開発を進めており、基幹機能の開発と「京」を活用して先行的成果を幾つか創出することができた。平成 29 年度に行われた中間評価での指摘事項に対応するため、インフォマティクス活用ワーキンググループ (IA-WG) を設置し、本課題でのインフォマティクス技術の積極的活用の可能性の検討を開始した。8 月には第 1 回若手勉強会を合宿形式で開催し、研究員レベルでの研究開発の進捗や課題について情報交換・意見交換を行い、若手研究者間の連携・親睦を深めた。12 月には「第 2 回実験・産業との連携シンポジウム」を「化学エネルギーの有効利用」のテーマの下、北海道大学フロンティア化学教育研究センターレクチャーホール（鈴木章ホール）にて開催し、4 名の実験・企業研究者を招聘し他プロジェクトや産業界との連携について討議した。併せて、「第 5 回公開シンポジウム」を同ホールにて開催し、サブ課題責任者、サブ課題実施者による研究進捗及び成果報告、基盤アプリ設計開発 WG、AI-WG の進捗報告に加えて、マテリアルズ・インフォマティクス事例報告を設け、最終目標に向けた研究開発について議論した。

5-5-5 今後の課題と取組みについて

本プロジェクトでは、前述のように、ポスト「京」に向けたアプリケーションプログラムを開発することが求められており、基盤アプリケーション 4 本をベースに幾つかのシミュレータを開発している。また、アプリケーションの実証のため応用研究も行っている。更に、開発したアプリケーションのアカデミア・産業界への普及や、その利用人材の育成も進めている。海外の同様なプロジェクトに比して、我が国の国際競争力強化の源泉となる科学技術の創生を目指して邁進している。