
1. 利用の概略

1) 利用目的・内容

従来の材料開発は、専門家の経験と勘に基づいて膨大な開発期間とコストをかけて行われてきたが、これに対して近年、AI技術や機械学習など情報科学の知見を活用して効率的な材料開発を行う「マテリアルズ・インフォマティクス(MI)」が注目されている。我々は、大規模材料の量子化学計算を機械学習用の教師データの蓄積及び学習結果の妥当性の評価に用い、量子化学計算とAI技術を融合させた新しいM技術の開発を進める。更に、M技術を起点に材料開発プロセス全体をデジタルトランスフォーメーション化し、ものづくりのアプローチを根本から変え、ものづくり強化に貢献する。

2) 利用意義(産業利用の観点から)

M開発が促進されることでSustainable Manufacturingの実現に貢献できる。

3) スーパーコンピュータを利用する必要

ナノスケールの材料開発では、材料の形状やサイズ、混合状態がその特性に大きく影響するため、数1000原子におよぶ大規模な系を高精度な手法で扱うことが望ましい。このような系に対して第一原理計算手法による電子状態計算を行うためには、数千ノードの計算機の利用が必要となる。また、新材料探索においては、多様で複雑なナノ構造を取り扱う必要があり、その種類は数万にも及ぶ場合がある。これら

を効率よく探索するためにはこれらの計算を複数並列で計算できることが望ましい。しかしながら、このような先端シミュレーションの産業応用は開発の途上であり、必ずしも普及しているわけではないことから、社内で利用可能なリソースは限られている。化合物のスペクトル計算を中心に、主に自グループの計算機では実行困難な100から数千ノードを利用する計算を多数実行する。

2. 成果の概要

1) 本利用で得られた成果(成果が得られなかった場合はその理由)

※内容を以下のうちから選択の上、計算機利用の観点から得られた知見を中心に記載してください。

(G) 計算科学、2. コンピュータ・サイエンス、3. プログラムチューニング、4. その他)

GAMESSや GAUSSIANを用いた量子化学計算を実施して、反応経路探索や振動スペクトル計算での活用可能性を探った。今後のHPCの有効活用に向けた並列計算条件などを見出すことができた。

2) 社会・経済への波及効果の見通し

M活用に向けたHPC利用促進が期待される。

3) その他の成果
