

令和3年度「富岳」成果創出加速プログラムの採択状況

- 令和3年4月9日～6月9日の公募期間に計12件の応募があり、「富岳」課題推進ワーキンググループによる審査の結果、うち以下の3件を採択した。

領域	課題名	代表者 氏名	代表機関	R3年度 計算資源量(NH)
③	データ駆動型高分子材料研究を変革するデータ基盤創出	吉田 亮	統計数理研究所	1,350,000
③	「富岳」が拓くSociety 5.0時代のスマートデザイン	坪倉 誠	理化学研究所	20,000,000
③	「富岳」を活用した革新的光エネルギー変換材料の実現	中嶋 隆人	理化学研究所	10,200,000

- 9月上旬より事業を開始予定。
- 令和2年度から実施している19課題（うち2課題は計算資源のみ）と併せて、事業全体で22課題となっている。

課題名：データ駆動型高分子材料研究を変革するデータ基盤創出

吉田亮（統計数理研究所・教授）



概要・目標

分子動力学シミュレーションに基づく高分子物性自動計算プログラムRadonPyを用いて、データ駆動型研究に資する世界最大の高分子物性データベースを構築する。多数の大学・企業・国研の連合体を形成し、データベースを共同で開発する。

実施体制・関係機関・詳細

データ科学の先進技術と独自の高分子自動計算の技術，1国研・3大学・14企業による産学の強力なパートナーシップ、そして我が国のフラグシップスパコン「富岳」の計算資源を融合し、10万種類以上の高分子骨格を包含する前人未踏の高分子物性データベースを創出する。

RadonPy

- LAMMPSによる高分子物性計算の自動化を支援するPythonライブラリ
- 力場の割り当て，初期構造生成，エラー処理，平衡・非平衡MDによる物性評価までの全工程を完全に自動化
- 高分子集合系，高分子液晶，架橋高分子
- 最新版：アモルファスポリマーや延伸配向したポリマーの14物性の自動計算に対応

• Thermal conductivity	• Isentropic compressibility
• Thermal diffusivity	• Bulk modulus (isothermal)
• Density	• Isentropic bulk modulus
• Radius of gyration	• Speed of sound
• Specific heat capacity	• Thermal expansion coefficient
• Specific heat capacity	• Linear expansion coefficient
• Compressibility	• Dielectric constant (static)

代表機関：統計数理研究所
協力機関：東京工業大学
連携機関：
東京大学
東京薬科大学
三菱ケミカル株式会社
JSR株式会社
出光興産株式会社
株式会社ダイセル
横浜ゴム株式会社
三井化学株式会社
株式会社日本触媒
東洋紡株式会社
株式会社アスミス
東ソー株式会社
旭化成株式会社
日東電工株式会社
住友ベークライト株式会社
株式会社デンソー

計算候補ポリマーライブラリ

- ◆ 市販ポリマー・公共データベースのポリマー
- ◆ 機械学習で生成した仮想ポリマー

機械学習（実験計画法）

1国研・3大学・14企業（R3年度）によるデータの共同生産

コントリビュータ1 コントリビュータ2 コントリビュータ3

包括的な高分子物性データベース

- ◆ 10万種類以上の高分子骨格
- ◆ 高分子集合系，高分子液晶，架橋高分子
- ◆ 熱物性・力学的特性など

想定される具体的成果

- **【データ駆動型高分子材料研究のデータ基盤】** 10万種類以上の高分子骨格を包含する世界最大の高分子物性データベースを創出する。複数物性の同時分布を観測し，物性空間のパレートフロンティアの位置や構造的特徴を解析することで，高分子科学の体系的知識を獲得する。
- **【マテリアルズインフォマティクス基盤技術】** 高分子物性自動プログラムと分子設計の機械学習アルゴリズムを統合したベイズ最適化による自動分子設計のプログラムを開発する。
- **【新材料創製】** データベースと機械学習を組み合わせることで，革新的な特性を有する新しいポリマーを発見

課題名：「富岳」が拓くSociety 5.0時代のスマートデザイン

坪倉誠（理研計算科学研究センター・チームリーダ）



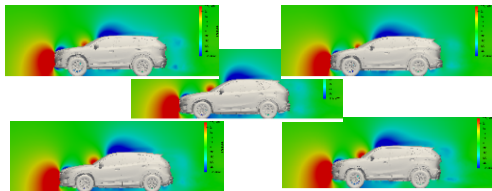
概要・目標

- ◆ 計算科学と情報科学を融合させた新たなデジタルエンジニアリングシステムを創生し、製品デザイン・設計に活用する
- ◆ 4つの具体的な設計・デザインに適用し、産学連携でその有用性を実証し、産業界での実装を目指す

実施体制・関係機関・詳細

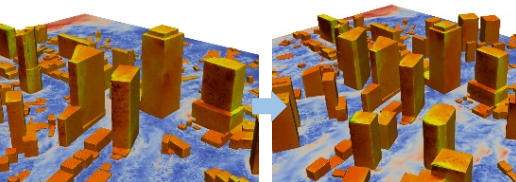
- ◆ 理研R-CCSが開発を進める基盤技術を活用し、全面支援のもと、サブ課題ごとに責任機関が中心となって研究開発する
- ◆ それぞれのサブ課題に応じて産学連携コンソーシアムを設立、システム設計から実証、社会実装までを目指す

サブ課題A（神戸大）
意匠空間を考慮したAI支援多目的最適化による自動車空力デザイン



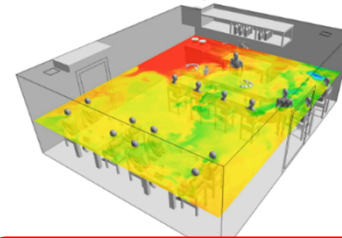
連携：成果創出

サブ課題B（東工大）
変容する都市・建築の自然擾乱対応の性能設計



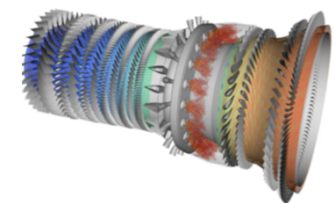
連携：成果創出

サブ課題C（九大）
新興ウイルス感染症にロバストで健康・快適・サステナブルなポストコロナ時代の室内環境設計



連携：JST・CRESTコロナ課題

サブ課題D（京大）
マルチコンポーネント統合シミュレーションによるカーボンフリーガスタービン設計



連携：成果創出・NEDO

共通基盤：三位一体のR-CCS高度化利用研究の活用

計算科学
基盤ソフトウェア：CUBE, FrontFlow/red

計算機科学
「富岳」利用支援

データ科学
AI活用プロジェクト：DL4Fugaku

想定される具体的成果

- ◆ 性能試験の代替としてのシミュレーションを脱却し、サイバー空間とフィジカル空間の高度結合によるスマートデザインシステムの実現
- ◆ 自動車空力、都市・建築、室内環境、ガスタービンに対して、実設計や政策立案のためのシステムの社会実装

「富岳」を活用した革新的光エネルギー変換材料の実現

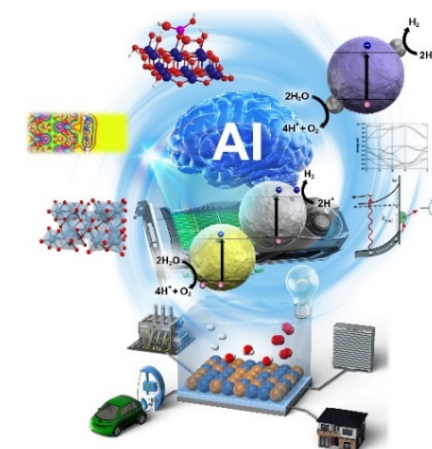
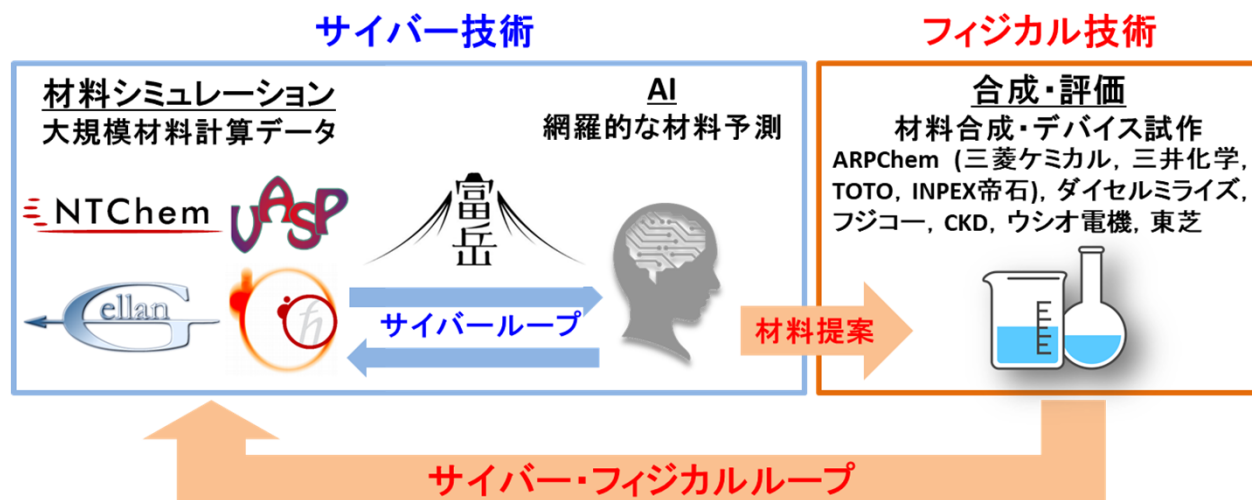
中嶋隆人（理研・チームリーダー）



概要・目標

- ◆ 「富岳」での材料シミュレーション・インフォマティクスにより、企業組合との連携で革新的光エネルギー変換材料を社会実装する。光触媒による水素製造・ウイルス不活性化による感染症対策・高効率太陽電池の産業レベルでの実現を目指す。

実施体制・関係機関・詳細



革新的な水素製造光触媒の実現

神戸大・奈良先端大

網羅的な計算とAIを活用した最適光学応答と電荷分離特性を持つ半導体、助触媒、欠陥の組合せ探索により、内部量子収率100%かつ可視光応答する光触媒材料探索を実現

ウイルス不活性化による感染症対策

神戸大・京大

光触媒による感染症ウイルス不活性化と過酸化水素選択的生成反応のメカニズムについて明らかにし、感染症対策機能を有する光触媒の高効率化と実用化を目指す。

高効率非鉛化ペロブスカイト太陽電池の新材料設計 理研・京大・ENEOS

一千万種程度のペロブスカイトに対するハイスループット計算により、高効率・安定な非鉛化ペロブスカイト太陽電池の材料探索を実現し、変換効率30%以上の高効率な非鉛ペロブスカイト・タンデム太陽電池を提案する。

想定される具体的成果

- ◆ 企業組合との連携による日本発の技術を使った世界最高水準の変換効率10%超の水素発生光触媒の実現
- ◆ 感染症ウイルスを不活性化する光触媒と消毒用過酸化水素を高効率・選択的に生成する光触媒の社会実装
- ◆ シリコン系を凌駕する変換効率30%超の非鉛化ペロブスカイト太陽電池の実用化

令和2年度～4年度の実施課題（既存課題）一覧

（参考）

※新型コロナウイルス感染症拡大前の公募・採択であった為、左記関連課題は無し

課題名	研究代表者（所属 ※令和元年度現在）
領域① 人類の普遍的課題への挑戦と未来開拓	
量子物質の創発と機能のための基礎科学 —「富岳」と最先端実験の密連携による革新的強相関電子科学	今田 正俊（早稲田大学理工学術院総合研究所）
全原子・粗視化分子動力学による細胞内分子動態の解明	杉田 有治（理化学研究所生命機能科学研究センター）
シミュレーションで探る基礎科学：素粒子の基本法則から元素の生成まで	橋本 省二（高エネルギー加速器研究機構素粒子原子核研究所）
宇宙の構造形成と進化から惑星表層環境変動までの統一的描像の構築	牧野 淳一郎（神戸大学理学研究科）
大規模データ解析と人工知能技術によるがんの起源と多様性の解明	宮野 悟（東京医科歯科大学M&Dデータ科学センター）
脳結合データ解析と機能構造推定に基づくヒトスケール全脳シミュレーション※	山崎 匡（電気通信大学大学院情報理工学研究科）
核燃焼プラズマ閉じ込め物理の開拓	渡邊 智彦（名古屋大学大学院理学研究科）
領域② 国民の生命・財産を守る取組の強化	
プレジジョンメディスンを加速する創薬ビッグデータ統合システムの推進	奥野 恭史（理化学研究所計算科学研究センターHPC/AI駆動型医薬プラットフォーム部門）
防災・減災に資する新時代の大アンサンブル気象・大気環境予測	佐藤 正樹（東京大学大気海洋研究所）
マルチスケール心臓シミュレータと大規模臨床データの革新的統合による心不全パ デミックの克服	久田 俊明（株式会社UT-Heart研究所）
大規模数値シミュレーションによる地震発生から地震動・地盤増幅評価までの統合 的予測システムの構築とその社会実装	堀 高峰（海洋研究開発機構海域地震火山部門・地震津波予測研 究開発センター）

※計算資源のみ配分(事業費は交付せず)

令和2年度～4年度の実施課題（既存課題）一覧

（参考）

課題名	研究代表者（所属 ※2/28現在）
領域③ 産業競争力の強化	
省エネルギー次世代半導体デバイス開発のための量子論マルチシミュレーション	押山 淳（名古屋大学 未来材料・システム研究所）
「富岳」を利用した革新的流体性能予測技術の研究開発	加藤 千幸（東京大学 生産技術研究所革新的シミュレーション研究センター）
航空機フライト試験を代替する近未来型設計技術の先導的実証研究	河合 宗司（東北大学大学院 工学研究科）
次世代二次電池・燃料電池開発によるET革命に向けた計算・データ材料科学研究	館山 佳尚（物質・材料研究機構 エネルギー・環境材料研究拠点）
環境適合型機能性化学品	松林 伸幸（大阪大学 大学院基礎工学研究科）
大規模計算とデータ駆動手法による高性能永久磁石の開発	三宅 隆（産業技術総合研究所 材料・化学領域 機能材料コンピュータショナルデザイン研究センター）
スーパーシミュレーションとAI を連携活用した実機クリーンエネルギーシステムのデジタルツインの構築と活用	吉村 忍（東京大学大学院工学系研究科）
領域④ 研究基盤	
全脳血液循環シミュレーションデータ 科学に基づく個別化医療支援技術の開発※	和田 成生（大阪大学院基礎工学研究科）

全19件：バイオ・ライフ…6件（うち2件は計算資源のみ）、地震・気象・防災…2件、工学・ものづくり・エネルギー…4件
物性・材料・化学…5件、素粒子・宇宙…2件

※計算資源のみ配分（事業費は交付せず）