

「富岳」材料物理化学課題・「富岳」燃料電池課題 合同公開シンポジウム（成果報告会）

2023年4月に発足しました文部科学省スーパーコンピュータ「富岳」成果創出加速プログラム「物理-化学連携による持続的成長に向けた高機能・長寿命材料の探索・制御」課題は、電池・触媒、磁性、高分子、構造材料の4つの材料分野について、ミクロスケールからの材料開発ブレークスルーを目指し、物理・化学の基本原則に立脚した「富岳」を最大限活用する計算/データ科学研究を実行することで、世界最高水準の基礎研究遂行と我が国の産業競争力強化への貢献を達成することを目標に研究を推進してきました。同じく「燃料電池触媒層の物質輸送機構解明に向けた、マルチスケール計算技術構築とその活用」課題は、燃料電池触媒層内のプロトン・酸素ガスの物質輸送機構解明のために、量子化学計算、分子動力学計算、機械学習、粗視化ダイナミクスを組み合わせたマルチスケール計算技術を開発し、一つの計算手法では到達することができない、広域な時空間領域での物質輸送機構を「富岳」を用いて解明することを目標に研究を推進してきました。今回の合同公開シンポジウムでは、両課題の1年間の研究成果を報告いたします。

本合同公開シンポジウム（成果報告会）では、課題の概要を課題責任者から、研究成果を実施者から報告いたします。併せて、株式会社 豊田中央研究所 金城様と統計数理研究所 吉田様から特別講演を賜ります。成果の公開・展開の機会といたしたく、皆様のご参加、宜しくお願いいたします。

プログラム（敬称略）

- 13:30 開会挨拶：館山 佳尚（物質・材料研究機構）
13:35 来賓挨拶：国分 政秀（文部科学省）
13:40 「富岳」材料物理化学課題概要：館山 佳尚（物質・材料研究機構）
13:45 「富岳」燃料電池課題概要：藤本 和士（関西大学）
13:50 招待講演「高分子電解質溶液の乾燥過程のシミュレーション ～全原子モデルに基づいた粗視化と大規模化で見えてきたこと～」金城 友之（株式会社 豊田中央研究所）
14:20 「燃料電池触媒層内部の物質輸送解明に向けた自由エネルギーと拡散係数の機械学習モデルの作成」永井 哲郎（福岡大学）
14:40 「燃料電池触媒層におけるTest Particle Insertion Methodを用いた酸素局所自由エネルギー解析」岡村 優希（トヨタ自動車株式会社）
14:55 休憩
15:05 招待講演「高分子物性自動計算によるデータ創出とデータ駆動型材料研究の実践」吉田 亮（情報・システム研究機構 統計数理研究所）
15:35 「蓄電池電極材料の劣化に関わる応力下・充電条件下におけるイオン伝導機構の解明：DFT-MDサンプリング」館山 佳尚（物質・材料研究機構）
15:55 「多元系固溶体材料の第一原理計算・機械学習・アンサンブルサンプリング連携フレームワークの開発」笠松 秀輔（山形大学）
16:10 「親水高分子ブラシによる不純物侵入阻害の分子機構」矢ヶ崎 琢磨（大阪大学）
16:30 「教師なし機械学習に基づく高分子内水分子の拡散性評価手法」安田 一希（慶應義塾大学）
16:45 休憩
16:55 「FPKKR法を用いた磁気異方性の第一原理計算とデータの創出」奥村 晴紀（産業技術総合研究所）
17:10 「磁性材料のための基盤的シミュレーションコードの高度化とデータの創出」福島 鉄也（産業技術総合研究所）
17:30 「ニューラルネットワークポテンシャル分子動力学ソフトウェアの開発とハイエントロピー合金への応用」久保 百司（東北大学 金属材料研究所）
17:50 「ニューラルネットワーク原子間ポテンシャルを用いた水素環境下における鉄の変形・破壊解析」新里 秀平（大阪大学）
18:05 閉会挨拶：藤本 和士（関西大学）

©RIKEN

日時：2024年2月29日（木）13:30～18:10

形式：オンライン開催（配信方法等は参加登録時に表示）

参加費：無料

参加登録：以下URLまたはQRコードのフォームに必要事項をご記入の上お申し込みください。

<https://forms.gle/NvmmUkHnoPUxzxYS7>

主催：国立研究開発法人 物質・材料研究機構「富岳」材料物理化学課題、大学法人 関西大学「富岳」燃料電池課題

協賛：計算物質科学協会、スーパーコンピュータ「富岳」成果創出加速プログラム「計算材料科学が主導するデータ駆動型研究手法の開発とマテリアル革新」、計算物質科学スーパーコンピュータ共用事業、計算物質科学人材育成コンソーシアム、物質・材料研究機構 エネルギー・環境材料研究センター

後援：スーパーコンピューティング技術産業応用協会、公益財団法人 計算科学振興財団、一般財団法人 高度情報科学技術研究機構

問い合わせ先：「富岳」材料物理化学課題 事務局 fugaku-mpc-office@ml.nims.go.jp

