

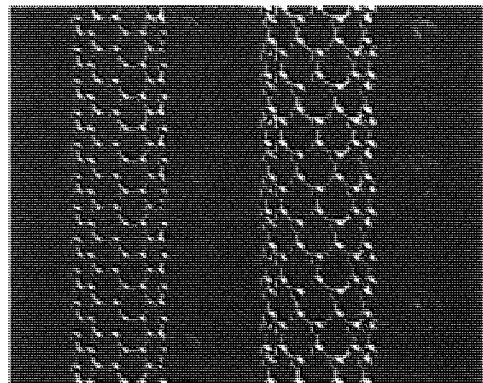
## 賢いシミュレーションによる震災復興に向けた新機能性材料の実用化加速に関する調査

(財)高度情報科学技術研究機構 計算科学技術部 中村 賢

東日本大地震、津波および福島第一原子力発電所事故等により、わが国は歴史的な大災害を被り、早期の復興・復旧は喫緊の課題である。しかし、技術的に見れば、復興、復旧に、先端的な新機能性物質を応用し、復興・復旧をイノベーションとして実現する機会ととらえる。しかし、その実用過程の技術的な困難さ、実用までの時間的制限などから、そうした挑戦は避けられるケースが多い。そこで、復興に役立つような新機能材料の応用とその実用化段階を加速するような方策を調査した。

本研究調査研究では、まず国内外の機能性材料としてカーボンナノチューブ（CNT）等の応用に着目して、実用化段階におけるシミュレーションの動向を調べた。その結果、国内では信州大学等でCNTを樹脂、ゴム、金属等に混ぜ込んで機能を高度化する応用研究を進めていることが明らかになった。また海外においては、米国オークリッジ国立研究所において、実験施設と世界トップクラスの大規模高性能スパコン（タイタン、ジャガー）による大規模シミュレーションを上手く活用・協業して実用化につながる環境汚染対応の新機能性物質を生み出していることも明らかになった。さらにそこには米国カーボンナノテクの指導的立場のミンガン州立大学トマネク教授を訪問調査した結果、教授も深く研究所に関与し米国内のみならず国外の多くの専門家の知恵が集積される体制になっていることも分かった。

本調査研究では、具体例として吸着特性に優れるCNTを対象にして、CNTが環境中の放射性物質の吸着が可能か、またその応用性、さらには除染システムへの発展をシミュレーション試行しながら調査した。その結果、CNTはセシウムをよく吸着できること、そのメカニズムはCNTとセシウムとの間でd電子軌道を介したパイ結合間の量子力学的な電子移動で支配されていることがシミュレーションから初めて明らかになった。こうしたことから、CNTとセシウムとの吸着特性は環境に影響されることも明らかになり。例えば水中や海水中では吸着は可能であるが、空気中では不可能で、もし空気



中の水分と反応してセシウムがイオン化されれば吸着できるなど環境の影響が明らかになった。さらに、導電性樹脂にもCNTと同様の作用があることも明らかになった。

CNTの特性を応用して除染システムとして実用化すると仮定して、そのシステム像を描いてみた。その結果、CNTをフィルターとして応用するならば、現実的には、CNTを燃糸しフィルター形状にすれば濾過機と考えられる。また、環境中の水系に配置され、濾過後のCNTフィルターを耐放射線性のキャスクで処理施設へ運搬し、さらに処理施設では約700度で酸化燃焼させて減容し、焼却灰等はガラス固化・貯蔵するような、現状で核燃料サイクルでもほぼ完成されたサイクル技術を応用するシステム像を考えることもできる。

こうした概念を実用化するには、濾過機のCNTフィルターとして加工する場合、CNTの長尺化、燃糸技術、繊維化技術などの確立が必要であり、それらにはCNTの生成制御、CNTのねじり、バンドルシミュレーションによる支援が必須となる。またシステムにおいては、気象、植生、土地利用、水文、遮蔽などの環境及び除染戦略シミュレーション等が必要であり、こうした多様なシミュレーション群の支援は実用化段階の短縮化に役立つことがわかる。しかし、成立にはコスト等、政治的側面の影響が大きいと思われる。

これらの試行的シミュレーションの結果を踏まえて、一般的に新機能材料から製品を開発する過程において、特に実用化段階を加速するような賢いシミュレーションの在り方を調査した。

賢いシミュレーションとは、技術進歩が速い、ICT技術、クラウド、大規模データベース、大規模高性能スパコンなどを駆使し問題解決を幅広くかつ連続的に行えるシミュレーション環境(コンビナトリ)である。具体的には、製品開発過程において、オリジナルな概念から製品構想、さらに加工を含めた実用化段階、実証、製品、市場へと一連の過程で、多様な概念を集積し、設計思考実験から製品へ見通し、加工法、安全、コスト評価などを、ICT技術、高性能スパコン等を駆使して、統合的かつ連続的にシミュレーションし開発を短縮化するシステムである。特に、新機能性材料を応用するナノテクノロジーなどでは、原子分子の加工法シミュレーションが重要であり、量子力学からレーザ加工等までに広がる統合的シミュレーションが重要であることがわかる。

以上の調査結果から、復興に役立つような賢いシミュレーションを基にした新機能性材料の実用化段階の加速を目的とするシミュレーション・コンビナトリの開発整備構想を纏めた。

具体的な開発目標は新機能性材料の概念段階から、実用に向かう長い期間において、加工法開発など実用化過程を加速するために、賢いシミュレーションを利用して問題解決を幅

広くかつ連続的に行える環境(コンビナトリ)である。

具体的には、

- ・多様な理論・モデリングの選択組み合わせ、その利用におけるモデルパラメータ調整
- ・小規模から大規模な並列シミュレーションの実施
- ・加工法などに関する知能知識ベースの利用
- ・得られる解からの最適化の探索
- ・製造プロセスのコスト評価
- ・新機能材料の安全性評価等

の一連の過程を多数複雑なシミュレーション法で実施し、知識経験ベースをも利用しつつ、また最新のスパコン等の大規模な計算資源を効率的に利用して行うシミュレーション・コンビナトリ環境(アプリケーション群)である。

開発内容としては、(a) 新機能性材料の発現さらに新機能を応用して実現しようとする新製品、新システム等の具体的なアイデアの集積及び設計する機能の開発、(b) 実用化段階を加速するための加工法のシミュレーション機能の開発、例えば、原子分子を直接ナノスケールで加工する、原子分子を加工可能なマイクロレベルまで成長させる加工、マイクロスケール(一部ナノスケールも含む)のナノ構造体の加工、ナノ構造体の樹脂等への混ぜ込み技術等に関するシミュレーション・パッケージである。(c) 製品の安全性、経済性を評価するシミュレーション群などで構成されるコンビナトリである。計算機環境は現状また今後、100ペタ級、エクサ(1000ペタ)級へと段階的に拡大されるスパコンとともに今後発展するネットワーク、クラウドシステムを効果的に活用して利用することになる。

開発期間は、約5年とし、予算：約50億；国の出資で、体制は大学、民間企業、ソフトウェア業界のコンソーシャム体制が必要である。

復興、復旧に、先端的な新機能性物質を応用し、復興・復旧をイノベーションとして実現する機会ととらえ、日本に固有な、また世界にも貢献できる賢いシミュレーションを最先端のHPC技術を利用して、素早く実施できるようにすることは、今後のわが国の新しい産業応用分野の創成へとなる。