

第11回大型実験施設とスーパーコンピュータとの 連携利用シンポジウム報告

公益財団法人高輝度光科学研究センター
産学総合支援室

佐藤 眞直

1. はじめに

10月17日に東京・秋葉原のUDX NEXT-1,2における現地開催とオンラインのハイブリッド形式にて開催した「大型実験施設とスーパーコンピュータとの連携利用シンポジウム」について報告する。

本シンポジウムは、SPring-8/SACLA/NanoTerasu、J-PARC MLFといった大型実験施設と「富岳/京」をはじめとするスーパーコンピュータとの連携利用によって新たな研究成果を生み出すことを目指し、実験計測と計算科学の研究者が集う場として2014年より、放射光施設SPring-8/SACLA/NanoTerasuの登録機関である(公財)高輝度光科学研究センター(JASRI)、中性子施設J-PARC MLFの登録機関である(一財)総合科学研究機構(CROSS)、それから高速電子計算機施設「富岳」の登録機関である(一財)高度情報科学技術研究機構(RIST)の3者の共同主催で開催されてきた。その内容としては、これら先端大型研究施設の連携活用による利用成果の深化が期待される研究分野をテーマとして掲げ、その分野のトピックスに取り組む研究者による講演会を行い、施設間連携活用の可能性について議論を行ってきた。第11回を迎える今回は、持続可能な社会の実現と安全・安心なインフラ構築に不可欠な「構造材料」をテーマとし、6名の講師の方にご講演いただいた。参加者総数は150名であり、その所属内訳は、企業47名、大学19名、国立研究開発法人11名、財団法人60名、行政8名、その他5名であった。また、上記参加者のうちオンラインでの参加は86名であった。

プログラムは以下の五つのセッションの構成であった。

第1セッション：施設と登録機関の現状（開会挨拶、施設と登録機関の紹介）

第2セッション：構造材料研究における量子ビームと計算機の利活用

第3セッション：マルチスケールシミュレーションを用いた材料設計

第4セッション：放射光・中性子を利用した構造材料の評価

第5セッション：ポスター展示

以下に詳細を記す。

2. 開会挨拶および第1セッション：施設と登録機関の現状

まず、主催者を代表してJASRIの中川 敦史理事長およびCROSSの横溝 英明理事長から開会の挨拶がなされた後、文部科学省の伊藤有佳子参事官補佐から挨拶があり、その中で本シンポジウムが取り扱う先端大型研究施設の連携利用は、現在策定に向けた議論が進められている次期の第7期科学技術・イノベーション基本計画の「研究力の強化」、「人材育成」、「イノベーション力の向上」、「経済安全保障との連携」といった主要な柱に貢献する重要な取り組みであることをコメントいただいた。



写真1 講演会場の様子
(文部科学省 伊藤参事官補佐 ご挨拶)

続いて、JASRIの久保田 康成 利用推進部長、CROSSの松浦 直人 研究開発部長、RISTの齊藤 哲 産業利用推進部長から、それぞれの機関が利用促進業務を担当するSPring-8/SACLA/NanoTerasu、J-PARC、富岳・HPCIの施設紹介（運転状況、利用状況、利用制度、等）が行われた。

3. 第2セッション：構造材料研究における量子ビームと計算機の利活用

第2セッションでは、金属の構造材料への量子ビーム、計算科学の相補的活用に関する活用事例紹介に関する講演が2件行われた。

1件目は、茨城大学の友田 陽 名誉教授から、大型の国家プロジェクトによって牽引された近年の金属構造材料の強度・変形特性（機械特性）の制御を目指した研究のトレンドについて講演いただいた。国家プロジェクトの例として、自動車軽量化を目指した革新的新構造材料研究開発、航空機産業への貢献を目指したSIP（戦略的イノベーション創造プログラム）、構造材料の機械特性の基礎学理の追究を目指した元素戦略プロジェクトの構造材料研究拠点を上げられ、その中で、「材料創製」、「実験・解析」、「計算科学」の3者が緊密に協力し合う三位一体のアプローチが、日本の金属構造材料研究における標準的なスタイルとして確立されたことが紹介された。このスタイルによって進められた、計算科学による金属材料の機械特性予測の実現を目的とする機械特性の発現メカニズムの研究において、そのメカニズムの主要因となる金属組織に生じる現象（格子歪み、転位密度、結晶粒径、集合組織、等）を評価する強力なツールとして量子ビームによる回折測定実験が機能することを、前述の国家プロジェクトで取り組まれた研究事例を用いて説明された。これにより金属構造材料研究における放射光・中性子の量子ビームによる実験技術と計算科学の相補的連携の重要性を示された。さらに今後の展望として、計算科学による機械特性予測について「ある組織から特性を予測する」順解析は可能になりつつあるが、「望ましい特性を持つための組織設計を予測する」という逆解析は解が一意に定まらないため非常に難しく、その解の候補を効率的に探索するた

めに大規模データベースの構築が重要となるであろうことが説明された。

2件目は、日本原子力研究開発機構の菖蒲 敬久 先生から、金属組織に生じる格子歪みの回折測定による評価技術の具体例として、放射光と中性子それぞれの特徴および両者の相補利用による利点について講演いただいた。まず中性子応用の特徴として、その材料に対する高い透過能を活用して実機に近い大型構造材料の内部応力分布の非破壊測定が可能である点を挙げて、その実例としてコンクリート建造物の耐震補強などに用いられる後施工アンカーの内部応力分布の評価事例が紹介された。次に放射光応用の特徴として、高輝度光源による高速・高空間分解能測定が可能である点を挙げて、その実例としてレーザーピーニングによる表面改質材の表面近傍の残留応力分布の高空間分解能測定の事例や、レーザー溶接材の高温引張下での溶接部近傍の歪み分布変化のその場測定の事例が紹介された。さらに中性子の材料深部測定能と放射光の高空間分解能を組み合わせる相補的に活用した事例として、放射光・中性子相補活用による自動車のクランクシャフト部品内部全体の高精細な応力分布の評価に成功した事例が紹介された。



写真2 講演会場の様子
(茨城大学 友田先生 ご講演)

4. 第3セッション：マルチスケールシミュレーションを用いた材料設計

第3セッションでは、構造材料研究に計算科学によるシミュレーションを主体的に活用した事例を紹介する講演が2件行われた。

1件目は、慶應義塾大学の村松 真由 先生から、ナノ多結晶金属が示す特異な機械特性のメカニズム解明を目的としたシミュレーション技術開発の研究成果についてご講演いただいた。このナノ多結晶金属は、高強度でありながら比較的高延性を示すという特異な機械特性を示す。このメカニズムの仮説として、塑性変形を主として担う「転位」が微細化された結晶粒内に入りにくくなって変形が阻害される高強度化のメカニズムに対し、変形の代替メカニズムとして結晶構造が部分的に変化する「双晶」が機能しているのではないかという説が提唱されており、この検証をシミュレーションで行うことが課題となっている。この「転位」や「双晶」のような結晶欠陥の発生・進展といった原子レベルの現象を再現するシミュレーション手法としては分子動力学(MD)が多用されるが、構造材料が経験するマクロな変形下の応力状態を再現することは難しい。そのため、その問題を解決する手法として、マクロな変形を連続体力学スケールの有限要素法(FEM)でモデル化し、結晶欠陥をMDシミュレーションでモデル化して両者を連結するマルチスケールシミュレーション手法を開発された。講演ではその連結に必要なFEM-MD間の情報伝達の工夫や想定される大規模解析を可能にするための計算コスト削減の工夫について説明され、この手法の意義として局所的な単純な現象解明であればミクロ単独のMDで十分な場合もあるが、不均一な変形状態が想定される現実の構造物を扱う場合、有効であると示された。

2件目は、住友ゴム工業株式会社の内藤 正登 先生から、同社の次世代タイヤ開発研究におけるマルチスケールシミュレーションの活用成果についてご講演いただいた。講演では、相反関係にあるタイヤの3つの主要性能(グリップ性能、転がり抵抗、耐摩耗性能)をそれらの相反関係を克服して全体的にバランスよく向上させるタイヤゴム材料設計指針を得ることを目的とした、ゴム材料の内部構造と性能の相関解明へのコンピュータシミュレーションの応用について紹介された。シミュレーション手法としては、複合材料であるゴム材料の階層的な内部構造で起こる現象が時空間的に広いスケールにまたがるため、そのスケールに応じて複数のシミュレーシ

ン手法(量子化学計算、全原子MD、粗視化MD、FEM、等)を組み合わせ使い分ける「マルチスケールシミュレーション」を活用された。その事例として転がり抵抗の原因となるエネルギーロスが発生するゴム内部構造の部位の予測、タイヤ摩耗の破壊プロセスのシミュレーション、環境に応じて分子ネットワークを変化させて機械特性(硬さ)を変化させるタイヤゴム材料の開発への応用成果が説明され、特に最後の事例は同社の次世代タイヤ技術「アクティブトレッド」の開発に繋がったことが紹介された。



写真3 講演会場の様子
(住友ゴム工業株式会社 内藤先生 ご講演)

5. 第4セッション：放射光・中性子を利用した構造材料の評価

第4セッションでは、放射光・中性子の量子ビーム分析技術を用いた構造材料研究事例を紹介する講演が2件行われた。

1件目は、京都大学の今井 友也 先生から、生物系の構造材料であるセルロース合成プロセスの検討への放射光小角X線散乱(SAXS)の応用についてご講演いただいた。講演の内容は、複数の結晶多形を示すセルロースのうち最も高い結晶弾性率を示す生物からしか合成されないセルロースI型(繊維状構造)について、その人工合成プロセスにつながる形成過程のメカニズム解明を目指した研究事例が紹介された。このメカニズムに関する知見を得るために、酢酸菌から抽出した酵素によって人工的に合成できるII型(ボール状構造)の形成過程をSPring-8 BL40B2における放射光SAXSのその場測定で観察

した結果、小さな素構造が形成される初期段階とその素構造が急激に集合し成長し始める第2段階があることがわかり、この第2段階の無秩序な集合を制御する機構がセルロースI型を合成する酵素に備わっていることが推定される知見を得られたことが説明された。

2件目は、秋山精鋼株式会社の西田 智 先生から鉄鋼丸棒の引き抜き加工における残留応力解析への中性子線回折とFEMシミュレーションの応用についてご講演いただいた。講演内容は構造材料メーカーである同社の引き抜き加工等の工程で製造した構造用鋼が顧客先での加工時に変形・反り、精度低下、割れなどの問題を生じるケースの対策として、その原因と考えられる鋼材中の残留応力分布の評価とその発生メカニズムの検討を茨城大学の西野研究室との共同研究で実施した研究事例をご紹介いただいた。引き抜き加工、矯正加工を施された丸棒鋼中の残留応力分布の評価をJ-PARC MLFの「匠」で実施した結果、引き抜き加工で生じた残留応力分布が矯正加工により低減する様子が確認され、その結果をFEMシミュレーションと比較したところほぼ実験結果を再現していることが確認された。この結果を元にした日常的な品質保証へのフィードバックとして、上記の結果から信頼性が保証されたFEMシミュレーションと実験室X線回折装置を併用した簡易評価法を考案されたことが紹介された。



写真4 講演会場の様子
(京都大学 今井先生 ご講演)

6. 閉会挨拶および第5セッション：ポスター展示

第4セッション終了後、主催者を代表してRIST

の田島 保英理事長から閉会の挨拶がなされた。

その後、ポスター展示および意見交換の時間が持たれた。このポスター展示は参加者の意見交換の機会を増やすため、昼食休憩後にも時間が設けられた。ポスターの内容としては、主催者であるJASRI、CROSS、RISTからのそれぞれが利用促進業務を実施する施設についての紹介の他、物質・材料研究機構、茨城大学、三菱マテリアル株式会社、日本原子力研究開発機構、産業技術総合研究所から、構造材料に対して放射光・中性子・大型計算機を利用した研究に関連する報告がなされた。その他、本年度は新しい企画として株式会社Quemixから同社が開発した材料開発研究用のソフトウェアのデモンストレーション展示が行われ、内容の充実を図った。その結果として、従来よりも盛況となり、活発な意見交換が行われていた。



写真5 ポスター会場の様子

7. まとめ

今回、「構造材料」という機能を主眼としたテーマ設定のもとで、構造材料として長い歴史を持つ金属からタイヤゴムの有機材料や新しい生体由来材料まで多様な材料研究事例を紹介でき、各々に対して放射光、中性子、計算科学の組み合わせでその課題に合わせた多角的なアプローチができることを示すことができた。またその成果についても、学術的な基礎研究から企業の事業への貢献まで幅広く活用できることを紹介することができた。これにより、本シンポジウムの目的である放射光、中性子、計算科学の連携活用による研究成果の深化の可能性をアピールし、これら先端大型研究施設の連携利用の検

討へのヒントを参加者に提供することは果たせたと考える。

本企画の3登録機関の連携活動は、これまで連携利用による研究成果の情報を発信する「種まき」を行ってきたが、今後はより積極的な活動として、例えば各機関が運用する共用施設の利用を実際に体験する「研修会」等の開催などの具体的な利用を獲得する「収穫」にシフトすることを検討している。

最後に、本シンポジウムの開催に際し、講師選定や講師の先生方との交渉にあたっていただいた3登録機関で構成されるプログラム委員の方々へメンバーのお名前を記して感謝を申し上げます。

(プログラム委員)

浅見 暁 (RIST)、漆原 良昌 (JASRI)、瀬戸 秀紀 (CROSS)、筒井 智嗣 (JASRI)、舟越 賢一 (CROSS)、吉澤 香奈子 (RIST)

佐藤 真直 SATO Masugu

(公財) 高輝度光科学研究センター
産学総合支援室

〒679-5198 兵庫県佐用郡佐用町光都 1-1-1

TEL : 0791-58-0924

e-mail : msato@spring8.or.jp