

コンピュータの利用研究会

1. 研究会の目的

コンピュータは現在あらゆる分野において利用され、我々の生活にも深く関わりを持つようになってきた。触媒研究においても例外ではなく、基礎研究から生産現場に至るまで不可欠な道具となってきている。このような情勢を背景に発足した本研究会は今年度で第9期の3年目(通算27年目)を迎えた。この間に触媒におけるコンピュータの利用は益々活発化し、計算化学による新しい触媒の設計などの飛躍的進歩が見られるとともに、新たなコンピュータの利用方法も増えてきた。例えば、密度汎関数法、post Hartree-Fock 法、第一原理分子動力学法、Tight-Binding 量子分子動力学法、分子動力学法、モンテカルロ法、粗視化手法、ニューラルネットワーク、インフォマティクスなどの多様な手法が活用されている。最近では、電子レベルから μm スケールまでのマルチスケールでの触媒解析やスーパーコンピュータを活用した大規模解析が重要となってきている。第9期では、前期に引き続き、実験との融合・実際のものづくりへの発展を意識しつつ、様々な学びの場やツールを提供するとともに、大学・研究機関など基礎・応用研究の現場と企業など技術開発の現場との連携・交流に繋がるイベントも企画した。

2. 研究会活動の概略、動向、展望（敬称略）

平成28年度の主な活動は下記の通りである。第118回触媒討論会「コンピュータ利用」セッションに参加し、特別講演として牛山 浩先生（東京大）「不均一触媒反応に対する理論化学的手法による取組」、依頼講演として北河康隆先生（大阪大）「金属ナノクラスターの構造と電子状態—量子化学計算によるアプローチ—」にお願いし、それに加え一般講演23件というセッション内容で活発な議論が行われた。また、平成28年度触媒学会コンピュータの利用研究会セミナーを、平成28年12月2日（金）に三菱重工横浜ビルにて開催した。君塚 肇先生（大阪大）による「金属材料中の水素の存在状態と拡散機構に関する量子論的モデリング」、石元孝佳先生（広島大）による「金属ナノ粒子の機能発現機構解明に向けた大規模第一原理計算」、そして森 一樹先生（伊藤忠テクノソリューションズ）による「マルチスケールシミュレーションのための機械特性パラメータの研究」という招待講演3件による講演会を行った。参加者約20名で活発な議論が行われた。

3. 世話人代表

亙 紀子

〒220-8401 神奈川県横浜市西区みなとみらい 三菱重工業 総合研究所

TEL: 045-211-3474 FAX: 045-200-9922 E-mail: noriko_watari@mhi.co.jp

事務局 久保百司

〒980-8577 宮城県仙台市青葉区片平 2-1-1 東北大学 金属材料研究所

TEL: 022-215-2050 FAX: 022-215-2051 E-mail: momoji@imr.tohoku.ac.jp

4. トピックス ～大規模化～

触媒のシミュレーションに用いられるソフトには、基本的には原子レベルの計算を行う量子化学計算・分子動力学計算・第一原理分子動力学計算・粗視化シミュレーション、データベースに基づく詳細化学反応解析や平衡計算等、様々な種類がある。この中で計算性能の向上と最も適合性があるものがおそらく分子動力学計算であろう。近年の計算機性能の向上に伴いスーパーコンピュータを用いれば一億個の原子を含む計算も可能になった。一億個の原子を含む計算セルはサブミクロンサイズなので実現象の把握には十分とは言えないが、国内で一番大きな計算機である理化学研究所の「京」で使用されているアプリケーションのTOP3が分子動力学シミュレーションソフトである。この分野の進展がいかにか活発であるかが窺える。計算の大規模化に情報の処理が追いつかず、可視化やデータ解析が課題になっている。

触媒討論会では、牛山 浩先生にクラスターモデルによる触媒活性の検討をゼオライト触媒の金属担持モデルについてお話いただいた。北河康隆先生には、金属がナノクラスター化した極限の状態についてのフロンティア軌道理論を用いたアプローチをご講演いただいた。これら触媒研究のシミュレーションの定石である手法の精緻化に加え、今回の討論会では東北大学の宮本研究室による新しい分子動力学手法の取組の紹介を多数いただいた。古典的な分子動力学計算では、反応を扱えないが大きなモデルを扱うことが可能で計算は高速、一方、量子分子動力学計算では、反応は扱えるがモデルが小さくて計算が遅い、という相補的な関係を巧みに取り込み、反応を扱いつつ計算も高速に行う量子分子動力学計算ソフトを開発した。原子間の距離に応じてポテンシャルを変えてゆく。従来、量子分子動力学計算用のポテンシャルを決めるために人手によるフィッティング過程が必要であったが、これをインフォマティックス的方法で自動化した。

研究会主催セミナーでは、君塚 肇先生に金属中の水素の拡散挙動について、経路積分を用いたマルチレプリカ分子動力学法による研究成果をご紹介いただいた。水素は元素の中で最も質量が小さく、原子核の量子揺らぎの効果が無視できない。ファインマンの経路積分は難解な物理であるが、この概念を分かりやすくご講演いただいた。この方法は並列計算への適合性が高く計算機の大規模化と好相性である。石元孝佳先生には、1000 原子を超える Pd クラスターモデルを用いた金属ナノ粒子の物理・化学的性質の解明の取組についてご紹介いただいた。2406 原子の Pd クラスターは、約 4nm のサイズになる。大きなクラスターの量子化学的状態の解析をどのように行うべきかという討議が活発になされた。このように大きなサイズになると、配置エントロピーの効果を評価できるという新たな知見が得られている。森 一樹先生には、連続体シミュレーションで使用する Fe-Ni-Cr 合金の弾性定数を、古典分子動力学法を用いて予測する取組についてご講演いただいた。合金の場合、原子の配置の場合の数が非常に大きい。それを頭わに取扱い 4000 原子、10000 ケースの検討を行った。その結果、弾性定数に Ni-Ni 距離が大きな影響を与えることを見出した。古典的なモデリングによる結果の偏りであるかどうかを現在検証中である。大規模な計算では、実現象と直接比較ができるので、比較手法の検討も研究の課題である。

最近のインフォマティックスに対するクローズアップのトレンドも手伝って、コンピュータの利用研究会は、触媒討論会でのセッションの発表件数、聴講者数ともに増大傾向にある。本研究会は、次年度も引き続き分野にとらわれない学際的シミュレーションやシミュレーションの新しい適用方法の紹介を行って行きたい。