

「マルチスケール・マルチフィジックス現象の統合シミュレーション」

平成 17 年度採択研究代表者

尾形 修司

(名古屋工業大学 大学院工学研究科 教授)

「ナノ・メゾ・マイクロの複雑固液界面の大規模数値解析」

1. 研究実施の概要

本研究課題では、MEMS、燃料電池、排気ガス触媒コンバーター等に代表される、流体固体境界近傍での物理化学過程が重要な役割をする高機能材料への適用を旨とし、様々な並列計算コードを同時並列的に融合したハイブリッドコードの開発とそのGrid適用化研究を、ナノからメゾへのスケールアップと、逆にマイクロからメゾへのスケールダウンの両方向から行う。

ナノスケール用コードの開発に関し H17 年度は、最近提案した buffered cluster 法を用いたハイブリッド量子古典シミュレーションコードを作製し、MEMS の原子スケール摩擦に関する応用シミュレーションの実施等を通じて、電子状態計算を適用する領域である量子領域の動的な選択をシミュレーション進行に従ってアダプティブに行うアルゴリズムの改良を行った。また、複雑境界での物理化学過程に対する長時間シミュレーションを実施する際に必須となる化学反応の高速近似計算アルゴリズムに関して検討し、その実現を H18 年度の目標とした。

マイクロ・メゾスケール用コード開発に関し H17 年度は、流体計算法として採用する格子ボルツマン法の記述が妥当と見なせる空間スケール範囲の調査、その流体固体境界に分子レベルの液体/気体-固体相互作用に起因する物性値を取り入れる手法の検討を行った。H18 年度はこれら検討結果を踏まえて、流体固体界面現象への適用を目指す。

計算グリッド上で大規模ハイブリッドシミュレーションを長時間実行するために必要な要素技術の評価およびグリッド上で大規模ハイブリッドシミュレーション実現の妥当性の検証を H17 年度に行なった。名工大で開発したナノスケール用ハイブリッドシミュレーションコードを産総研が開発したグリッド用プログラミングミドルウェア Ninf-G を用いてグリッド化し、日米間の複数のスーパーコンピュータを用いた実証実験を行った。

2. 研究実施内容

本研究課題では、諸産業で重要な役割を果たす MEMS、触媒コンバーター、燃料電池等で用いられる材料の高機能化・高性能化に大規模マルチスケールシミュレーションの技術

で貢献するために、ナノスケールとマイクロの両方向から、実用材料における複雑な流体固体境界の物理化学過程に適用できる計算手法およびハイブリッドプログラムコードの開発を行う。H17年度は以下の研究を実施した。

1) ナノからメゾスケールへのアプローチ

古典原子論的手法と量子電子論的手法で扱う両領域の力学的結合のために我々が開発した buffered cluster 法を用い、同時並列型ハイブリッド量子古典シミュレーションコードの開発を進めた。電子状態計算法として密度汎関数法を採用し、総計算量の最小化のために、量子領域の動的拡大および動的分割を、シミュレーションの進行に従ってアダプティブに行うアルゴリズムを考案した。ハイブリッド量子古典コードの適用例として、MEMS における Si 基材料間の原子スケールでの摩擦に関するシミュレーションを実施し、実用的規模で高精度なハイブリッド量子古典シミュレーションが可能であることを実証した。その際、量子領域のアダプティブな選択アルゴリズムにおいて、さらに改良を要する項目を明確化した。また、密度汎関数法コードの並列化度を計算ノードの3次元空間配置を考慮に入れてアダプティブに電子固有関数等を空間分割するように改良することで約 20%向上させた

メゾスケールで不均一な微細構造を持つ材料の内部に対して、原子スケールでの化学反応をシミュレートする際に、古典原子論的シミュレーションに化学反応を半経験的に取り入れる電荷平衡型手法の検討を行った。より第一原理的なレベルで化学反応を取り入れる手法を含め、階層的な取扱手法の検討を進めた。

2) マイクロからメゾへのアプローチ

格子ボルツマン法は、局所的な衝突項等により流動挙動をコントロールするため、動的な複雑界面を持った流体の表現に適しており、本アプローチにおいて主要な役割を果たす。格子ボルツマン法に関し、流体記述が妥当と見なせる空間スケール範囲の調査、その境界条件に分子レベルの流体固体相互作用に起因する物性値を取り入れる手法の検討、時間経過と共に複雑に変化する流体-固体界面に適用する為に今後改良を要する項目の明確化を行った。

連続体として扱う流体と原子論的に扱う固体とではそれぞれ扱う時空間スケールが大きく異なるため、両領域の同時並列的計算に際して固体中の原子集団の粗視化が必須である。固体中に仮設定した粗視化粒子間の剛性マトリックスを、局所的熱平衡を仮定したフォノン近似により原子間相互作用ポテンシャルから第一原理的に計算し動的シミュレーションを行う、粗視化粒子法のコード化を進めた。

開発中の流体固体ハイブリッドコードの適用対象の一つとして、燃料電池の酸素極における水生成反応に注目し、その準備として格子ボルツマン法を用いた流体領域での気液混相状態にある熱・流体の取り扱いについて検討を始めた。

3) ハイブリッドコードのグリッド適用化

我々が開発する同時並列型ハイブリッドシミュレーションコードは計算量のオーダーが大きく異なる計算手法を複数組み合わせることで構成され、その計算量非均一性が特徴の一つである。このため、グリッド計算環境での実行に適している。

本年度はグリッド上で大規模ハイブリッドシミュレーションを長時間実行するために必要な要素技術の評価およびグリッド上で大規模ハイブリッドシミュレーションの妥当性の検証を行なった。名工大が開発したナノスケール用ハイブリッドシミュレーションプログラムを産総研が開発したグリッド用プログラミングミドルウェアNinf-Gを用いてグリッド化し、日米の合計8台のスーパーコンピュータにより構成されるグリッド上で約20日間実行する実証実験を通じて要素技術の評価および妥当性の検証を行なった。

動的に計算規模が変化するという特性を持つ大規模シミュレーションプログラムをGridRPCとMPIを組み合わせるプログラミングモデルに基づくことによりグリッド化することで、グリッド上で長時間実行可能なプログラムを実装できることを示した。実装に際しては、予約ベースの実行と遊休計算機の動的利用という2種類の実行シナリオを検討し、それらのシナリオに沿って長時間実行するためにアプリケーションに実装すべき機能、計算機選択戦略に関して知見を得た。また実際にハイブリッドシミュレーションコードを環太平洋グリッド上で長時間継続計算実験を行なうことにより、我々のアプローチの妥当性を検証した。長期間の継続計算については、最長22日間の継続実行を実現し、GridRPCを用いた実装が不安定なグリッド上でも安定して動作するアプリケーションの開発に有効であることや、Ninf-Gが提供する障害検知機能が有用であること、また過去の履歴に基づき安定した計算実績を持つ計算機を優先して利用する選択戦略が有効であることがわかった。また、実用レベルで大規模長時間実行グリッドシミュレーションを実施するために、より洗練された障害復旧機能の実現に加え、グリッドの運用管理形態の改善が必要であることや、複数の量子計算の負荷バランスを適切に行なうことが重要であることなどが明らかになった。

3. 研究実施体制

名工大グループ

- ① 研究分担グループ長：尾形 修司（名古屋工業大学、教授）
- ② 研究項目：固体のためのハイブリッド量子古典シミュレーションコードの開発、格子ボルツマン法を用いたハイブリッド流体固体シミュレーション手法の開発

豊田中研グループ

- ① 研究分担グループ長：兵頭 志明（豊田中央研究所、研究室長）
- ② 研究項目：複雑な流体固体境界に適用できる計算法の開発、気液混相状態にある

熱・流体計算法の開発

産総研グループ

- ① 研究分担グループ長：田中 良夫（産業技術総合研究所、チーム長）
- ② 研究項目：固体のためのハイブリッド量子古典コードのグリッド化