

「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

本課題では, MEMS, 燃料電池, 排気ガス触媒コンバーター等の材料に見られる動的変形する流体固体界面での物理化学過程への適用を旨とし, 階層的的手法による固体および流体計算コードの高適用範囲化, それらを結合して同時並列的に計算する手法の開発, 大規模グリッド計算環境でのシミュレーションの実現を, ナノからのスケールアップと, 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 H18 年度は, ハイブリッド量子古典コードの応用例としてナノスケール部品間の原子スケール摩擦と SIMOX 技術に関連したシミュレーションを行い, 量子領域のアダプティブな動的再選択アルゴリズムの改良を行った. さらに, 応力付与した材料内での化学反応計算の為に, nudged elastic band 法と組み合わせたコードを開発し, Si 基材料中の不純物拡散バリアエネルギーの応力による変化を計算した. また, 複雑形状界面の長時間シミュレーションで必須な化学反応の高速近似計算の為に, 電荷可変型原子間ポテンシャルモデルによる階層的取扱を進めた.

マイクロ・メゾスケール用コードの開発に関し H18 年度は, 格子ボルツマン法を多孔質媒質中の二相流体に適用可能とする為に, 親水/疎水性の表現, 中程度のクヌッセン数環境で特に有用な散乱関数の導入を, 階層的取扱により進めた. また, 微小固体を巨視的乱流場に添加した状況に対応した基本コードを作成した. 他方, 固体の新しい粗視化手法である粗視化粒子法の開発を進め, その2成分化, ナノからマイクロにいたる任意スケールでの粗視化を可能にした. さらに, 流体固体連成化の為に, 離散的な固体面データを滑らかな境界面に変換する手法の研究を進め, 実際に格子ボルツマン法と粗視化粒子法とを動的に接続するコードを試作した.

計算グリッド上での大規模ハイブリッドシミュレーション実現に関し H18 年度は, 同時並列型手法によりハイブリッド量子古典法と nudged elastic band 法を融合したコードを, 産総研が開発した Grid 用ミドルウェア Ninf-G によりグリッド化した. 複数の量子計算タスクの負荷バランスをとるスケジューリングモジュールの研究開発を進めた. 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通じて, 長時間実行に必要な要素技術の評価, 今後改良すべき項目の明確化を行った.

2. 研究実施内容

1. ナノスケール用コードの開発

1.1 同時並列型ハイブリッドコード

対象系を領域分割し、領域毎に密度汎関数法(=量子)と分子動力学法(=古典)を必要に応じて適用する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。量子領域のアダプティブな動的再選択アルゴリズムの改良に役立つ為に、適用例として、ナノスケールの Si 部品同士の原子スケール摩擦現象(図1参照)と Si 基板に高速 O 原子を打ち込む SIMOX 技術に関するシミュレーションを行った。また一般に、ナノ材料の設計に際しては応力付与された材料内での化学反応バリアエネルギーの計算が有用である。ハイブリッド量子古典法と nudged elastic band (NEB)法を組み合わせ、反応経路とバリアエネルギーを計算するNEB-ハイブリッド量子古典コードを開発した。このコードでは、量子計算、古典計算、NEB 計算の頻度を適切に制御し、全系の計算効率を高めている。例として、Si 結晶中の O 原子拡散バリアエネルギーの応力依存性を計算し、バリアが応力に敏感であることを示した。

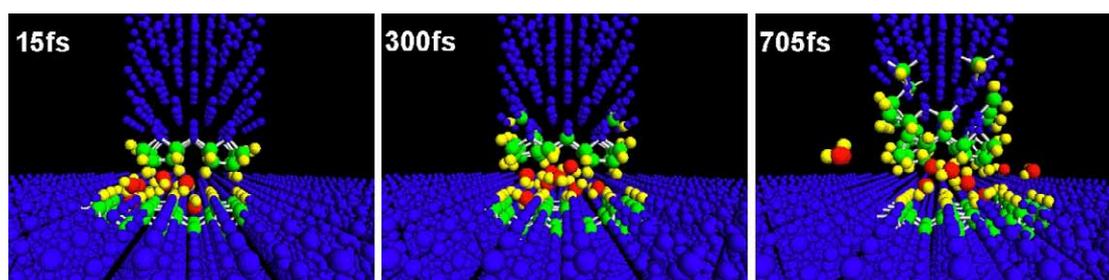


図1. 微細 Si 部品間の原子スケール摩擦に関するハイブリッド量子古典シミュレーション。初期状態では Si チップ先端に水滴が吸着している。量子領域(Si=緑,H=黄,O=赤)は動的に変化している。

1.2 階層的的手法による化学反応の近似表現

複雑形状界面を持つ系の実験的な長時間シミュレーションを実現するには、化学反応の高速近似計算が必須である。電荷可変型原子間ポテンシャルモデルを用いた階層的取扱の研究を進めた。 γ アルミナは、イオン結合性が高く、アモルファス的な多孔構造を持ち、触媒担体としても使われている有用な材料である。 γ アルミナ内での水素等の原子拡散バリアエネルギー計算に役立つ為、古典領域に電荷可変型原子間ポテンシャルを適用し、NEB-ハイブリッド量子古典法を用いたコードを試作した。また、剛体分子集団の古典運動を計算するのに適した時間発展アルゴリズムを新たに開発した。

2. マイクロ・メゾスケール用コードの開発

2.1 階層的的手法による流体計算コードの広適用化

格子ボルツマン法を多孔媒質中の二相流体系に適用する為に、媒質の親水・疎水性の表現

(図2参照), 中程度(~ 10)のクヌッセン数環境で特に精度が高い散乱関数の導入を進めた. また, 微小固体(あるいは気体)粒子が巨視的乱流場におかれたときの両者の相互作用を解析する基本コードを作成した.

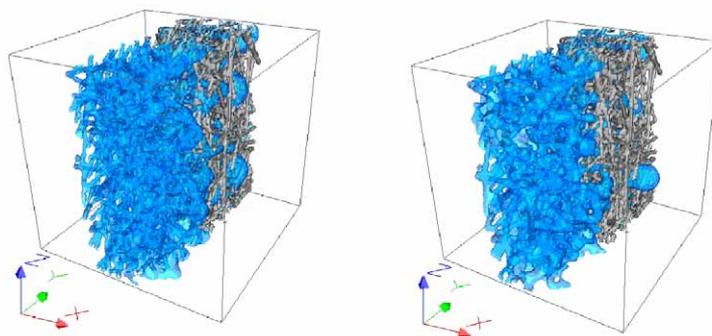


図2. 繊維状ガス拡散層を流れる気液2相: 繊維表面が親水的(左), 疎水的(右)な場合.

2.2 固体の粗視化, 流体-固体連成化

固体の新しい粗視化手法である粗視化粒子法の開発を進め, その2成分化, ナノからマイクロにわたる任意スケールでの粗視化を可能にした. 粗視化した系は, 弾性率, フォノン分散関係, 波束伝播等に関して高精度であることを確認した.

流体-固体連成化に役立つ為, レベルセット法の再初期化プロセスを応用し, 離散的な固体面データを滑らかな界面に変換する2段階界面再構築法を新たに開発した. この手法と組み合わせた格子ボルツマン法による球体周りの流れ解析による抵抗係数は, 低解像度の固体面データの場合でも実験値とよく一致した.

アルゴン原子からなる棒状の結晶格子系(2次元)とそれを取り巻く格子ボルツマン法による流体系との力学的相互作用を取り入れた基本コードを作成した. 時空間スケールに関する両系間の大きなギャップを埋めるため, 粗視化粒子法を用いて結晶格子系を流体系スケール程度まで高度に粗視化した. 両系の力学的接続には, 粗視化粒子が受ける Stokes 型ドラッグの作用およびその流体への反作用を用いた.

3. 大規模計算グリッド上でのハイブリッドシミュレーションの実現

ハイブリッド量子古典シミュレーションにおいて複数の量子領域に関する計算負荷制御を行なうスケジューリングモジュールの研究開発を進め, NEB 法と組み合わせたシミュレーションコードを GridRPC と MPI を組み合わせたプログラミング手法を用いてグリッド化した(図3参照). 大規模な日米計算グリッド上での実証実験に向け, γ アルミナ中での水素原子拡散バリア計算のために開発した NEB-ハイブリッドコードを日米計算グリッド上で試実行しその性能評価を行った. 各計算資源の性能差を評価し, 負荷制御をより適切に行うことが出来るスケジューラの開発が急務であるとわかった.

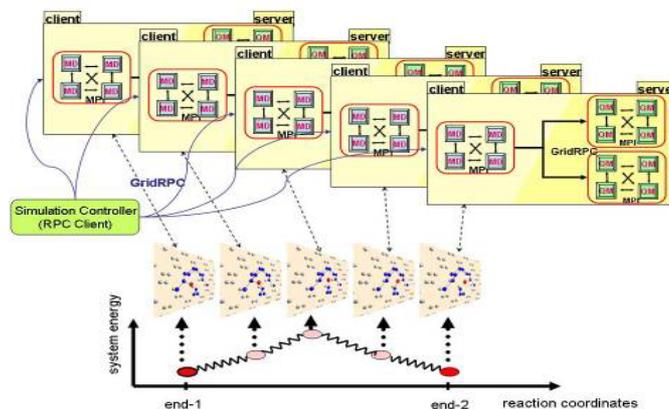


図3. 計算グリッド環境での NEB-ハイブリッド量子古典コードの概念.

3. 研究実施体制

(1) 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

- ・ ナノ・メゾスケール用ハイブリッドコード開発
- ・ マイクロ・メゾスケール用ハイブリッドコードの開発

(2) 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 室長)

② 研究項目

- ・ 階層的的手法による格子ボルツマン法の複雑微細境界問題への適用範囲拡大
- ・ 階層的的手法による化学反応の近似表現

(3) 大阪府大グループ

① 研究分担グループ長：須賀 一彦(大阪府立大学 教授)

② 研究項目

- ・ メゾからの複雑境界熱流体問題への適用

(4) 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 主幹研究員)

② 研究項目

- ・ グリッド環境での動的計算機割当実験

4. 研究成果の発表等

(1) 論文発表(原著論文)

- 武宮博, 田中良夫, 中田秀基, 関口智嗣: 動的に計算量が変化する大規模長時間実行 Grid アプリケーションの実現, 情報処理学会論文誌:コンピューティングシステム, Vol. 47, No. SIG18, pp.31-43, 2006.
- Yoshio Tanaka, Hiroshi Takemiya, Hidemoto Nakada, and Satoshi Sekiguchi: Design and Implementation of Flexible, Robust and Efficient Grid-enabled Hybrid QM/MD Simulation, Computational Methods in Science and Technology, Poznan Supercomputing and Networking Center, Vol. 12, No. 1, pp. 79-87, 2006.
- Hiroshi Takemiya, Yoshio Tanaka, Satoshi Sekiguchi, Shuji Ogata, Aiichiro Nakano, Rajiv K. Kalia, and Priya Vashishta: Sustainable Adaptive Grid Supercomputing: Multiscale Simulation of Semiconductor Processing Across the Pacific, Proceedings CD-ROM of Supercomputing2006, pp.11, 2006.
- Shuji Ogata and Takahisa Kouno: Hybrid Simulations for Designing of Nano-Interfacial Structures, Solid State Phenomena, Vol. 127, pp. 57-62, 2007.