

戦略的創造研究推進事業 CREST
研究領域「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」
研究課題「ナノ・メゾ・マイクロの複雑固液界面の
大規模数値解析」

研究終了報告書

研究期間 平成17年10月～平成23年3月

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)

§ 1 研究実施の概要

産業界で重要な役割をしている材料やシステムの多くは、電子スケール階層、(古典的)原子スケール階層、粗視化スケール階層、連続体スケール階層からなる多階層系であり、階層間の相互作用によりその性能を実現している。本研究では、電子系には大規模計算の為にオーダーN 化など、一方、その他の階層にはパラメータ授受的な考え方を適用して下位階層の物理過程を導入し、各階層のコードの適用範囲を広げた。さらに、それらのコードの同時並列型ハイブリッド化を進め、幾つかの工学上の基礎問題に適用した。また、異なる階層のコード間で必要なデータ転送量が少ないハイブリッドシミュレーションに対して、大規模グリッド上での長時間の安定実行を検証した。

電子スケールと原子スケールの接続: 実空間密度汎関数法をハイブリッド法での量子領域の電子状態計算に適用する。本法では量子領域の境界条件や電荷状態を自由に設定でき、原子スケール階層とのハイブリッド化に適している。単一の量子領域を複数の量子領域に分割し、その領域同士のオーバーラップを出来るだけ小さくとれるオーダーN 型の実空間密度汎関数コードの開発も進めた。

実空間密度汎関数法と分子間ポテンシャルを、必要とする物理精度に応じて各部分領域に適用するハイブリッド量子古典コードを開発した。エネルギーバリア計算にも適用可能とした。半導体、金属、セラミックにおいて動的でアダプティブな量子領域選択アルゴリズムを実現した。手法の検証を含めたハイブリッド量子古典シミュレーションを幾つか行った。トライボロジーに関連し、Si 表面をダイヤモンドチップで押擦りする際に、吸着水滴が表面酸化する可能性を示した。また、Li イオン二次電池に関連し、陰極グラファイト内での Li 拡散が応力に鋭敏であることを明らかにした。

ハイブリッド量子古典法は、計算手法毎に適切な並列計算機を割り当てることで、グリッドを効率よく用いる大規模シミュレーションの実現が期待される。我々は、グリッドにおける遠隔手続き呼び出しと MPI を組み合わせたプログラミングモデルを提唱し、実証実験を通じてその有効性を示した。

原子スケールと粗視化スケールの接続: 固体を対象に、粗視化粒子法の開発を行った。粗視化粒子法は、原子変位をある重み関数を用いた粗視化条件下での熱統計平均を通じて粗視化ハミルトニアンを得るボトムアップ型の手法である。最初に、低温状態を想定して原子系にフォノン近似を適用し、コード化した。次に、重み関数の適切な形状を求めると共に、有限温度での原子系に適用出来るように発展させた。また、液体系を対象に、化学反応部から離れたところに位置する溶媒分子の高速計算を目指し、剛体分子集団の時間発展アルゴリズムを開発した。

ハイブリッド原子-粗視化粒子シミュレーションに際して、原子領域と粗視化領域の境界において、両領域でのフォノン群速度や存在可能な波数ゾーンの違いに起因する、不自然な波反射を十分小さくできる動的スケール結合法を開発した。さらに、有限温度でのスケール間結合法に発展させた。開発したハイブリッドコードを2次元固体の破壊過程に適用し、実用上十分な動的接続精度を持つことを検証した。

また、グリッド上の非均質な計算環境で効率よく実行する高性能計算技術として近年急速に注目されている GPGPU を利用して、粗視化粒子法コードの高速化に関する研究を行った。

流体スケールと粗視化スケールの接続: 流れを表現する格子ボルツマン法において、流固界面での速度すべり現象など非連続体側リミットにも対応できるように平衡分布関数の再構成などの基礎方程式を改良し、気液2相流にも適用できることを確認した。

流体計算と固体計算のハイブリッド化は、大別して、多孔質媒質中の流れや層流中の微小弾性体など少ない変形度の固体と層流との相互作用の問題、乱流中における鎖状高分子などのように大きく変形しながら流体と相互作用する問題の2種類を扱った。

前者の問題では、流体に格子ボルツマン法を用い、最初に多孔質媒質の媒質表面が疎水性あるいは親水性の場合に多孔媒質内に浸透していく様子を解析した。次に、グラフェン等の固体を、粗視化粒子法によりその分子間ポテンシャルを直接用いて粗視化し、格子ボルツマン法により表現された流れ場の中での動的振る舞いを解析した。これらの解析では、滑らかな固流界面形状の再構築手法、固体と流体の特性時間のギャップを吸収するアルゴリズムの開発が必須であった。後者の問題では、鎖状高分子を非線形バネで結合された多数のビーズで表し、流体はナビエ・ストークス方程式をスペクトル法により解析した。

§ 2. 研究構想

(1) 当初の研究構想

本プロジェクトでは、ナノスケールでの液／気体-固体原子間の化学反応を取り入れた原子論的計算法が主となるシミュレーションコードと、マイクロ・メゾスケールでの流体および粗視化モデル計算法が主となるシミュレーションコードに大別し、ワイドレンジなプロセスを扱うハイブリッドコード群にまとめることを目指していた。以下 A-C に、研究開始時に立案した個別目標を記す。

A. 電子スケールと原子スケールの接続(ナノスケール用ハイブリッド)

- A.1. 多数の原子群の電子状態計算が可能となるように電子状態計算コードを改良すること。
- A.2. ナノメートル規模の微細構造を持った固体に対し密度汎関数法等の量子論的電子状態計算法と古典論的分子動力学法を融合するハイブリッド量子古典計算法を發展させ固体と液／気体との境界近傍領域についても取り扱えるように改良すること。
- A.3. ハイブリッド量子古典シミュレーションを実行する際に、量子計算法を適用する領域を動的にアダプティブに選択するアルゴリズムを考案すること。
- A.4. 経験的な意味で化学反応を記述できる古典論的原子間ポテンシャルを開発すること等により、電子状態計算を直接行わずに、化学反応を部分的に考慮した高速シミュレーションも目指すこと。
- A.5. 排ガス触媒コンバーター、燃料電池、MEMS/NEMS など輸送・エネルギー・電子産業界で重要な役割を果たす材料内での化学反応過程に関するハイブリッドシミュレーションを実施すること。

B. 流体スケールと粗視化スケールの接続(マイクロ・メゾスケール用ハイブリッドコード)

- B.1. 接触角やスリップ速度など流体-固体間の相互作用に起因する界面物性を格子ボルツマン法の境界条件に取り入れる手法を考案すること。
- B.2. 静的な多孔物質中を移動する流体を流体-固体間の特性を取り入れてシミュレートする、格子ボルツマン法による流体コードを開発すること。
- B.3. 流体相には格子ボルツマン法、固体相には粗視化法を適用してハイブリッド化し、両相の粗視化度を相境界近傍で合わせることで両者をスムーズに接続することを目指すこと。
- B.4. 動的に変化する物質と相互作用する複雑流体に適用できるようにハイブリッドコードを發展させること。

C. グリッド環境でのシミュレーション

- C.1. 多数のノードを用いた大規模ハイブリッドシミュレーションが安定して実行できるように、Remote Procedure Call 型のグリッドミドルウェア Ninf-G を用いてハイブリッドコードをグリッド化し、ノード故障に備えた並列ジョブの制御を行うように改良すること。
- C.2. 実際に大規模グリッド環境上でのハイブリッドシミュレーションを行いながら、開発したグリッド計算技術の検証および改良を進めること。

(2) 新たに追加・修正など変更した研究構想

(1)に記した個別目標の多くは達成できたが、以下については修正、新展開により再設定、あるいは追加した。

1. 上記 A.4.に記した、経験的な意味で化学反応を記述できる古典論的原子間ポテンシャルを開発することについては、ハイブリッド量子古典シミュレーション法が順調に成果をあげたため必要性が低下し、実施項目からはずした。
2. 当初の計画では抜けていた、固体中での原子スケールとメゾスケールの動的接続も重要であることが判明したため、(i)固体用の粗視化粒子法の精度改良及びその有限温度系への発

展, (ii)原子スケールと粗視化スケールの接続法の開発, (iii)液体および固体に対する様々な粗視化法の特徴を比較検討することに役立つため, 熟慮らぎしている内部自由度を考慮した粗視化変数の動力学方程式を一般的に導出することの3点を実施項目に加えた.

3. 上記 B.2.に関連して, デジタル画像データとして与えられた固体面の離散的データから滑らかな界面形状に境界面を変換する手法についても開発し, 生体内流れの解析に展開した.
4. 上記 C.2 に記したグリッド上でのハイブリッドシミュレーションについては, ハイブリッド量子古典コードは適しているが, 他のハイブリッドコードは適切でないことが分かった. このため, ハイブリッド量子古典コードについてのみグリッド化を行った.
5. 上記 C.のグリッド環境でのハイブリッドシミュレーションに関連して, グリッド上の非均質な計算環境で効率よく実行する高性能計算技術の1つとして近年急速に注目されている GPGPU を利用して粗視化粒子法を高速計算することを研究項目に加えた.

§3 研究実施体制

(1) 名工大グループ

① 研究参加者

氏名	所属	役職	参加時期
尾形 修司	名古屋工業大学大学院 工学研究科	教授	H17.10～H23.3
後藤 俊幸	同上	教授	H17.10～H23.3
渡邊 威	同上	准教授	H17.10～H23.3
小林 亮	同上	助教	H18.4～H23.3
大西 順也	名古屋工業大学	非常勤研究員	H18.4～H19.3
井上 洋平	同上	非常勤研究員	H19.4～H23.1
河野 貴久	名古屋工業大学大学院 工学研究科	D3	H17.10～H21.3
遠藤 剛	同上	M2	H17.10～H19.3
高垣 昌夫	同上	M2	H17.10～H19.3
飯田 裕樹	同上	M2	H17.10～H19.3
後藤 謙次	同上	M2	H17.10～H19.3
和合 純	同上	M2	H17.10～H19.3
中村 貴英	同上	D2	H19.4～H23.3
阿部 裕也	同上	M2	H19.4～H21.3
田中 順二	同上	M2	H19.4～H20.3
野々垣 昭則	同上	M2	H19.4～H21.3
校條 祐輔	同上	M2	H19.4～H21.3
吉野 正人	信州大学工学部	准教授	H19.4～H23.3
箕浦 康弘	名古屋工業大学大学院 工学研究科	M2	H20.4～H22.3
宇野 聡志	同上	M1	H21.4～H22.3
米本 隆	名古屋工業大学大学院 工学研究科	M2	H19.4～H21.3
中野 愛一郎	Univ. of South. Calif.	教授	H19.4～H21.3
五十嵐 誉廣	日本原子力研究開発機構 原子力基礎工学研究部門	研究員	H19.4～H21.3
中尾 太貴	名古屋工業大学大学院 工学研究科	M2	H21.4～H23.3
中村 太志	同上	M2	H21.4～H23.3
櫻井 克	同上	M2	H21.4～H23.3
樋口 拓磨	同上	M2	H22.4～H23.3
水越 智彦	同上	M1	H22.4～H23.3
下村 拓也	同上	M1	H22.4～H23.3
鈴木 裕有紀	同上	M1	H22.4～H23.3
畑中 祥吾	同上	M1	H22.4～H23.3
金 相佑	同上	M1	H22.4～H23.3
鍛島 康裕	同上	D1	H22.4～H23.3
田村 友幸	名古屋工業大学	特任助教	H22.4～H23.3

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 研究参加者

氏名	所属	役職	参加時期
兵頭 志明	豊田中央研究所先端研究センター	主席研究員	H17.10～H23.3
樋山 みやび	豊田中央研究所材料分野 材料基盤研究部	客員研究員	H18.4～H22.3
牛 小東	同上	客員研究員	H18.4～H20.3
棟方 稔久	同上	技師補	H18.4～H22.3
大庭 伸子	豊田中央研究所材料基盤研究部	研究員	H20.5～H23.3

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) 大阪府立大グループ

① 研究参加者

氏名	所属	役職	参加時期
須賀 一彦	大阪府立大学大学院 工学研究科	教授	H18.4～H23.3
西尾 圭史	同上	M2	H19.4～H20.3
田中 友和	同上	M2	H19.4～H21.3
西口 彰一	同上	M2	H19.4～H21.3
村田 道友	同上	M2	H19.4～H21.3
松村 康弘	同上	M2	H20.4～H21.3
竹中 奨	同上	M2	H20.4～H22.3
久保 昌之	同上	M2	H20.4～H22.3
芦高 優	同上	M2	H20.4～H22.3
金田 昌之	同上	准教授	H21.4～H23.3
桐石 卓	同上	M2	H21.4～H23.3
富永 聡	同上	M2	H21.4～H23.3
織田 文太郎	同上	M2	H21.4～H23.3
松島 佑介	同上	M2	H22.4～H23.3
伊東 敬彦	同上	M1	H22.4～H23.3
石橋 優	同上	M1	H22.4～H23.3
植田 遼介	同上	M1	H22.4～H23.3
上田 武広	同上	M1	H22.4～H23.3
平馬 弘章	同上	M1	H22.4～H23.3
森 基泰	同上	M1	H22.4～H23.3
湯村 将司	同上	M1	H22.4～H23.3

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研究参加者

氏名	所属	役職	参加時期
田中 良夫	産業技術総合研究所 情報技術研究部門	主幹研究員	H17.10～H23.3
武宮 博	産業技術総合研究所 グリッド研究センター	特別研究員	H17.10～H20.3
谷村 勇輔	産業技術総合研究所 情報技術研究部門	研究員	H17.10～H23.3
宗 応文	同上	特別研究員	H18.4～H22.3
増田 知記	同上	派遣職員	H22.5～H22.9

②研究項目

- ・ シミュレーションコードのグリッド化
- ・ グリッド環境での動的計算機割当実験

§ 4 研究実施内容及び成果

4. 1 ナノ・メゾ・マイクロスケール用ハイブリッドコードの開発(名工大グループ)

(1)研究実施内容及び成果

名工大グループは、電子・原子・粗視化の方向にナノからメゾへスケールアップするアプローチを担当するサブグループと、逆に連続体(マイクロ超)スケールに原子スケールあるいは原子を粗視化したスケールを取り入れてスケールダウンするサブグループからなる。以下には、ナノからメゾへのアプローチに関する主な研究項目、続いてマイクロからメゾへのアプローチに関する主な研究項目の順に、各項目の内容や成果等を概説する。

ナノからメゾへのアプローチ: 電子状態計算コードの改良

並列計算機用の電子状態計算コードの改良を、シミュレーションの対象系を分割した領域毎に密度汎関数法(=量子)あるいは分子動力学法(=古典)を必要精度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において利用することを前提に行った。我々は、境界条件を電荷状態も含めて比較的自由に設定でき、大規模な並列化にも適している実空間差分型の密度汎関数法を使っている。この手法では、軌道関数およびハートレー場を3次元メッシュ上での数値として表現し、微分演算は多点の差分で近似する。平面波基底を使わないため高速フーリエ変換は必要ではない。並列化は、この3次元メッシュを空間分割し、それぞれを各計算ノードにあてることで実現する。ハイブリッド量子古典法では、互いに隣接する原子のクラスターを量子領域とするため、一様な空間分割の場合には、3次元メッシュの周辺部を担当する計算ノードは計算量およびデータ量が中心部を担当する計算ノードの場合よりも顕著に少なくなる。このことから、3次元メッシュを、その全体形状を考慮に入れて計算ノードの負荷が出来るだけバランスするように、アダプティブに空間分割するように改良し約 20%効率をあげた。

上記の実空間密度汎関数コードで計算可能なサイズよりも大きな量子領域において、原子に働く力が密度汎関数法で計算できるように、divide-and-conquer 型の実空間密度汎関数コードを、独自のアイデアを入れて開発している。この方法では、単一の量子系を複数の領域にオーバーラップを含めて分割する。オーバーラップの大きさを出来るだけ小さくするように工夫した自己無撞着な Kohn-Sham 方程式を、領域毎に統一フェルミレベルで解くことで全電子密度および原子に働く力を計速計算する。その工夫の第1は、ある領域について、そのオーバーラップ部分の電子密度が全体の電子密度の中に埋め込まれている(embed)とみなし、その embed 効果を表すポテンシャルを局所密度近似で Kohn-Sham 方程式に取り入れることで領域の分断が電子におよぼす効果を出るだけ少なくすることである。第2は、オーバーラップ部分の電子密度が、全体の電子密度からずれる場合にそれを補正する働きをする密度テンプレートポテンシャルを、さらに Kohn-Sham 方程式に導入することである。酸

化 Si クラスタや Al 金属等への精度検証テストでは、各原子に働く力が分割場所にあまり依存せず、良好な結果を示した。

ナノからメゾへのアプローチ: アダプティブなハイブリッド量子古典コードの開発

ハイブリッド量子古典法での、原子論的(古典)手法と電子論的(量子)手法で扱う両領域の力学的結合には、これまでに開発した buffered cluster 法を用いた。ハイブリッド量子古典法を、摩擦や原子拡散の場合など化学反応する場所が時間とともに変化・移動する場合にも適用可能とするために、量子領域のアダプティブな選択アルゴリズムを考案した。これはハイブリッド量子古典シミュレーション実行中に原子振動周期のオーダーで、瞬間的な全原子配置を対象に、2原子間距離の平衡値からのずれ、3体角の平衡値からのずれ、古典分子間力が組み込まれていない原子ペア等を考慮にいれて、量子領域を再選択するアルゴリズムである。この量子領域の切り替えにより、当然エネルギーは保存しないが、原子に働く力はほぼ連続となるため、ダイナミクスは信頼できる。実際に、(i)H 終端化した Si ナノチップと Si 基盤の間に水クラスターあるいは水酸基を含む水クラスターを挟みこみチップを擦った場合に発生する化学反応に関するシミュレーション (図1-1 参照), (ii) H 終端化した 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(4. 4参照), (iii) H 終端化したダイヤモンドチップを H 終端化した Si 表面の上で、水分子がチップに吸着した状態で押擦りするシミュレーション(図1-2 参照)等を行った。それぞれ、(i)では接触部、(ii)では O 原子の周囲部とボンドが破壊された Si の周辺部、(iii)では接触部を量子領域としてアダプティブに選んだ。例えば(iii)のケースでは、シミュレーションの結果、接触部の配置に依存して、吸着した水が押擦りにより解離し、Si を酸化しうることを見いだした。

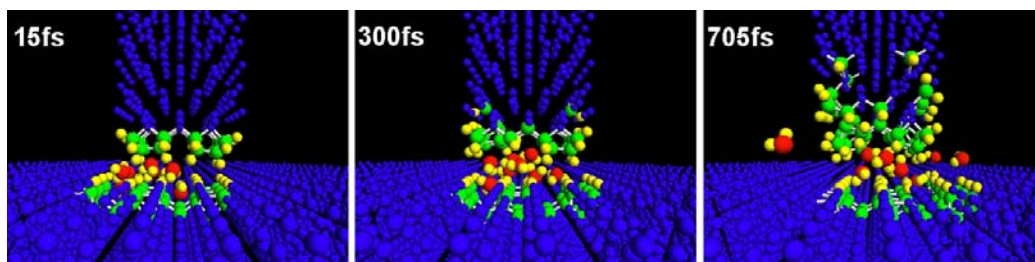


図1-1: H 終端化 Si チップと H 終端化 Si 表面間に水酸基を含む水分子クラスターを挿んだ系について、チップを横移動して原子スケールの摩擦を調べるハイブリッド量子古典シミュレーション。量子領域(Si=緑,H=黄,O=赤)は動的に変化する。

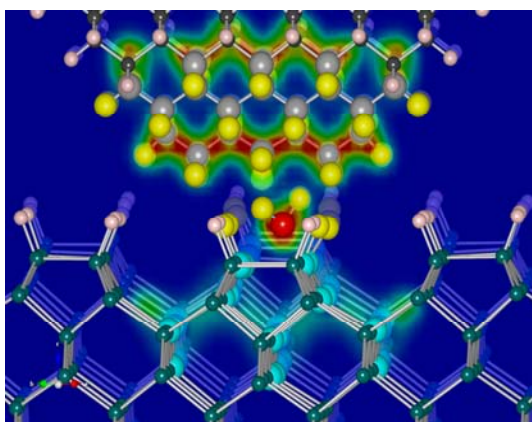


図1-2: H 終端化したダイヤモンドチップを水分子がチップに吸着した状態で、H 終端化した Si 表面の上で押擦りするシミュレーションの初期状態。

さらに, Li イオン2次電池の陰極として知られている Li-グラファイト層間化合物に対して, Liとその周囲の炭素原子群領域を量子領域に設定し, 他の炭素原子は古典領域とする, ハイブリッド量子古典シミュレーションを行った. ハイブリッド量子古典法での古典ポテンシャルは, 平衡原子配置からのずれが比較的少ない範囲で高精度であれば良いので, 古典領域用の原子間ポテンシャルの開発は比較的容易である. このシミュレーション用に, グラファイトの異なる層間のファンデルワールス力による炭素-炭素間ポテンシャルを, 層の重なり具合を良く再現するように新たに開発した. Li の熱拡散に従い, 量子領域はアダプティブに再選択した. シミュレーションの結果, Li はグラファイト中で近隣の炭素に電子を供給し, 一価の陽イオンとして存在しているとみなせることが分かった(図 1-3 参照). また, Li の拡散係数は低ドーパ量の条件での実験値を良く再現していることが確認できた(図 1-4 参照).

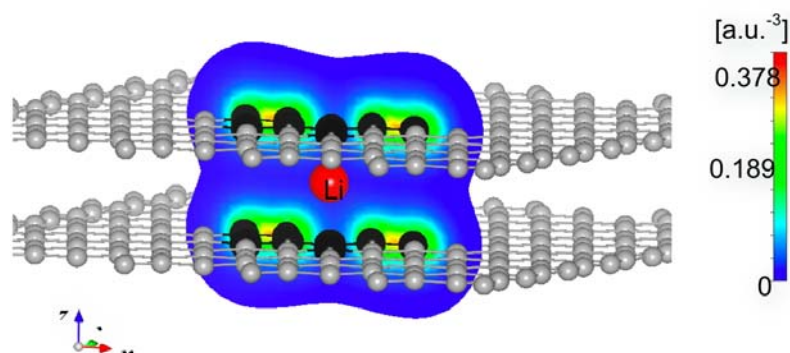


図1-3: ハイブリッド量子古典シミュレーション法で計算した Li 近傍での価電子密度の分布.

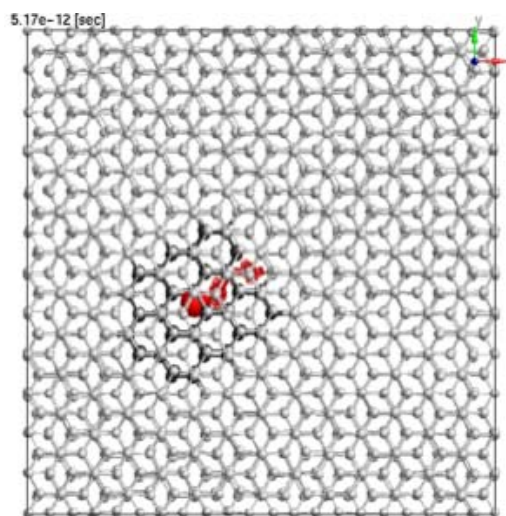


図1-4: ハイブリッド量子古典シミュレーションによるグラファイトの層間に挟まれた Li 原子の動き(赤線).

Li の拡散係数が, グラファイトを構成する炭素層の重なり方の違いや外部応力に大変鋭敏であることも見いだしている. このことが, Li-グラファイト層間化合物で観測される, Li 密度増大と共に発生する Li 配置構造の遷移の様子をうまく説明することを見いだした. このような多数原子が関係する長距離歪みを直接取り入れつつ化学反応を扱うことが, 我々が開発したハイブリッド量子古典法を使うと可能となる.

一方, 比較的高いバリアエネルギーを持つ過程については, 長時間のシミュレーションを

実行しても、そのバリアを超えることは困難である。このような長い時間スケールの現象を、ハイブリッド量子古典法を用いて調べるために、Nudged Elastic Band (NEB)法と組み合わせたNEB 化ハイブリッド量子古典コードを開発した。その適用例として、Si およびアルミナ結晶内での原子拡散バリアエネルギーの外部応力依存性を考えた。例えば、Si デバイス等の内部では、酸化層との界面で Si 結晶は数パーセント程度の歪みを受けている。実際に Si 結晶を広範囲(-2 から 9%)に歪ませ、NEB 化ハイブリッド量子古典コードを用いて計算すると、歪み方向と率に依存して酸素原子の拡散バリアエネルギーが大きく(-0.5eV から+0.5eV の範囲)変化することが分かった。

ナノからメゾへのアプローチ: 粗視化粒子法の開発

原子スケールと連続体スケールの間には、一方向長さで4桁にもおよぶギャップがあるため、ギャップを埋めるスケールでの計算手法の開発が待たれている。準連続体近似(quasi-continuum 法)のような、連続体近似に原子スケールの描像を考慮するトップダウン型アプローチとは異なる、原子スケールを直接粗視化するボトムアップ型アプローチにより研究開発した。我々の粗視化粒子法は、原子系の全てのフォノンモードを熱統計力学に基づいて粗視化系に繰り込んでいるため、フォノン分散関係を良く再現する。そのため、粗視化粒子法は原子系との動的接続には最も適していると考えられる。しかし、これまで提案されていた粗視化粒子法では、粗視化する原子数の次元の逆行列演算が必要なため、大規模系への適用が難しく、また基準座標からの変位でエネルギーが書かれていたために大規模変形や回転する場合へ適用することもできなかった。

我々は、再帰的に粗視化する方法を開発し、行列演算コストを大幅に削減して任意サイズの大規模系へ適用することを可能とした。また、エネルギー表式を相対座標表示にし、局所的な回転に対する補正を導入することによって大規模変形や回転する場合の計算も可能とし(図1-5左参照)、粗視化粒子法が実際の系に適用可能であることを示した。さらに、粗視化粒子法において、唯一任意性がある原子の重み関数について、様々な波数での変形エネルギー等、様々な観点から総合的に最適化を行った。粗視化粒子法の適用範囲を広げるために、有限温度での非線形効果や、非一様性を取り入れた粗視化粒子法についても、その研究開発を進めている。

ナノからメゾへのアプローチ: ハイブリッド原子-粗視化粒子法の開発

粗視化粒子法を使うことで線形弾性変形領域の粗視化計算が可能となるが、強い応力のかかった非線形性の強い領域や、原子間結合の切断・組み換えなど化学反応の起こる領域では原子スケールでの計算が必要となる。そのため、このような領域に原子(電子)スケールの計算方法である分子動力学を適用し、周辺の線形領域に用いている粗視化粒子法と滑らかに接続することで、全原子を分子動力学で扱う場合と同等の精度で大規模系の計算を効率的に行うことを考えた。その実現のためには、原子と粗視化粒子を接続する際、(i)歪み場が連続的に繋がること、(ii)長波長の波が境界を完全に透過し、原子側で発生した短波長の波が境界で反射しないこと、(iii)短波長の波のエネルギーを散逸させながらも有限温度に保つことが必要とされる。これまでに原子と、FEMや準連続体近似法を接続する方法が多数提案されてきたが、上記の必要項目全てを満足するものはなかった。

我々は、原子と粗視化粒子の接続のために、上記必要項目をすべて満たすハイブリッド原子-粗視化粒子法を開発した。この接続法では、原子-粒子境界に図1-6のように extra 原子と extra 粒子を、原子系と粗視化粒子系が重なる領域にそれぞれ用意し、その領域において extra 原子・粒子は、対応する実在粒子・原子からのずれを緩やかに散逸させる。このように原子系と粗視化粒子系を接続することで、境界においても原子は原子と、粒子は粒子と相互作用するために作用反作用が破れないため、歪み場が連続的に繋がる。また、長波長の波は完全に透過し、短波長の波は extra 原子・粒子の領域で緩やかに除去することができ、反射を抑制することが可能となる。また extra 原子に対して散逸に対応した揺動項を加えることで短波長の波を除去するとともに有限温度のシミュレーションも可能となる。この接

続法を用いたハイブリッド原子-粗視化粒子法により2次元固体に関する亀裂進展のシミュレーションを行い, 全原子の分子動力学計算での結果と比較すると(図1-5右参照), 温度ゼロだけでなく有限温度においてもほぼ同等の結果を得られた. この際, 原子領域は時間と共にアダプティブに再選択している. 粗視化領域から原子領域に戻す事が, 粗視化粒子系でのエネルギー状態が線形弾性の範囲では原子系の最低エネルギー配置に相当するため可能であることは, 重要なポイントである.

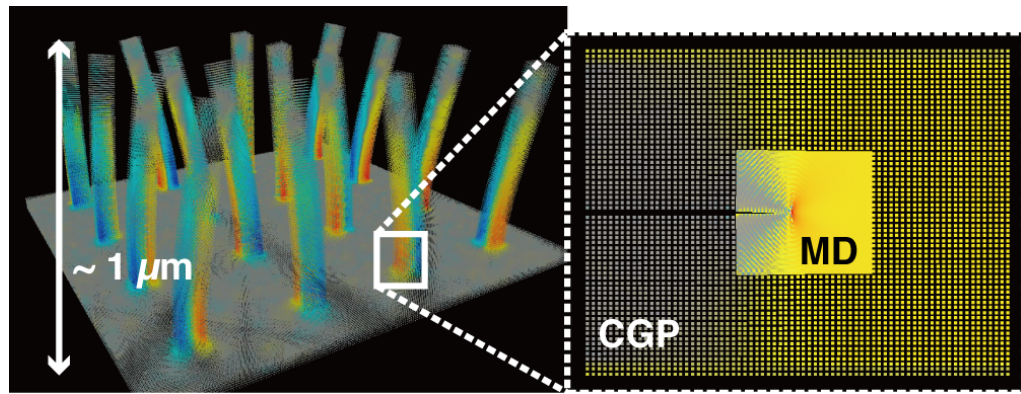


図1-5: 大規模系の粗視化粒子法とハイブリッド原子-粗視化粒子法.

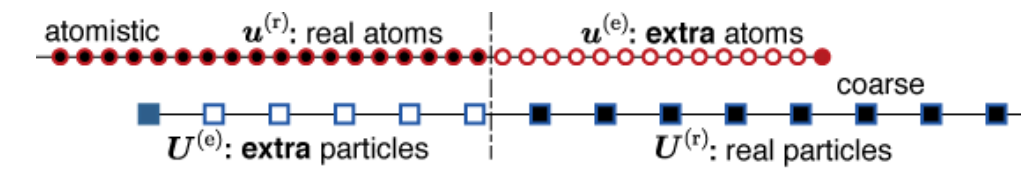


図1-6: 原子-粗視化粒子境界付近の原子・粒子の配置.

マイクロからメゾへのアプローチ: 流体と粗視化固体のハイブリッド化

原子レベルの粗視化を通じての固体相と流体相との相互作用を解析した. 多孔質媒体中の流れの取り扱いから始め, 層流中の微小弾性棒や弾性板などの明瞭な幾何学的形状を持った(あるいは保ったまま変形する)固体と層流との相互作用の問題を扱った. この際, 固体相は粗視化粒子法により, 流体相は複雑界面を持った流体の表現に適している格子ボルツマン法により解析した.

燃料電池内の拡散層を念頭に, 多孔質媒質内の流動現象のように静止した複雑境界周りの流れを, 物体と流体が接触角を持って相互する場合や2相共存の場合を含めて, 格子ボルツマン法によりシミュレートした. 2相分離過程に関する格子ボルツマン動力学の途中で得られたランダムパターンについて, その1相を媒質, 他相を空隙とみなすことで多孔質媒質を模擬した. この空隙内での流動を格子ボルツマン法で解析し, ダルシー法則が成立すること, 空隙率の関数として透過率を見いだした(図 1-7 参照).

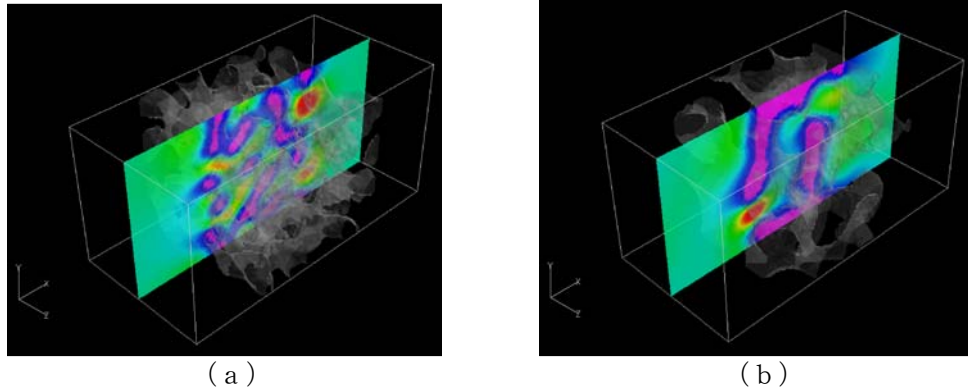


図1-7: 多孔質媒質中の流れ. 左下から右上にかけて圧力勾配を印加.
カラーは断面での速度の大きさ. 媒質の表面積は, (a)12, (b)5.5.

媒質表面が疎水性の場合に流量が増えることなど, 実験結果と一致する計算結果が得られた. 一様なせん断流れ場中におかれた液滴の変形を解析し, キャピラリー数の増加とともに球形から回転楕円体に変形し破壊に至る過程が実験データとよく合う結果が得られた. さらに, 渦中に分散された気泡と流れ場の相互作用を調べ, 表面張力が強く気泡が渦管周辺に存在する場合には流れの運動エネルギーと渦度の減衰が促進されることが分かった. また, 一般的に気泡は渦中心に捉えられる性質をもつ. このことは非常に小さい気泡が渦の可視化において有用なマーカーになることを裏付けている.

上記の基礎的解析を踏まえて, メゾスケールの変形する固流境界での相互作用問題を対象としたハイブリッドコードを開発した. 固体原子系を粗視化する粗視化粒子法と格子ボルツマン方程式による流体相を, 埋め込み境界法(Immersed Boundary Method)を用いて空間的に接続した. この接合が本研究の核心部分の1つである. 埋め込み境界法は, 物体周りの流れを Navier-Stokes 方程式を数値的に解く手法として元々開発された方法であるが, これを格子ボルツマン方程式に適用しその精度を確認した. 3次元一様流中におかれた円柱に働く抗力係数 C_D について, 埋め込み境界法を用いて, 格子ボルツマン方程式により計算結果と Navier-Stokes 方程式による計算結果を比較した. レイノルズ数が 100 までの範囲で, 両計算値は(実験値とも)約5%程度の誤差内で一致することを確認した.

埋め込み境界法は, 固体表面を仮想的な粒子の集合として表現するため, 粗視化粒子法と適合性がよい. 粗視化粒子の間隔と格子ボルツマン法における最小格子間隔は同程度に選ぶことで空間スケールを合わせる(図1-8). しかしなお, 時間スケールにはなお大きな隔りがある為, さらに時間軸において粗視化を行う必要がある. この取り扱いが安定な数値計算を行う上で重要である. 時間軸での粗視化は, 流体変数を断熱的に取り扱う一方, 固体粒子はその各時間ステップで仮想的に流体と運動量交換を行っているとして時間積分を行い, 流体変数へはこの粒子の運動量変化の時間積分結果を返す(図1-9)ことで行う. 粒子位置は一般には流体格子点上にはないため, 流体への反作用をラグランジュ補間により流体格子点に分配する.

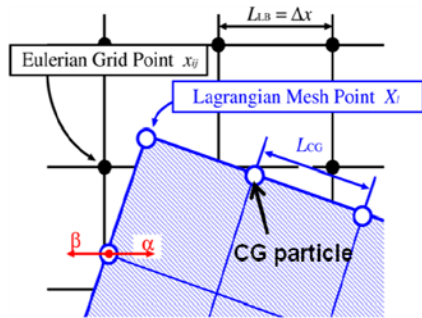


図1-8: 流体格子と固体粒子の境界と運動量交換.

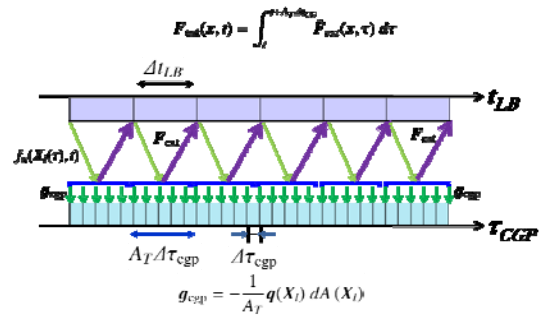


図1-9: 流体計算と固体計算における時間積分の方法.

ハイブリッドシミュレーションとして最初に、2次元ポアズイユ流れ中(空気)におかれたアルゴン粒子からなる仮想的な板(長さ $20 \mu\text{m}$)との相互作用の問題を扱った. 多数のアルゴン板を並べた場合には、先頭の板の変形が最も大きくなり、その後列の板の間にはほとんど流れが存在せず、多数の板が1つの物体であるかのように流れ場が形成された(図1-10). このような設定の応用には例えば、基盤に作成した多数のアルゴン弾性板に表面レイリー波を誘起することで流体を駆動する、マイクロドライバーがある. 図1-11は、シミュレーションで得たある時刻の流れ場とアルゴン板の様子である. 興味深いことに、短い時間間隔では流体は振動運動を行うが、長時間にわたってはレイリー波の進行方向とは逆の方向に実効的な流れが誘起されることがわかった.

さらに、グラフェンと流体との相互作用問題をハイブリッドシミュレーションにより扱った. 1つの粗視化粒子は 2×10^6 炭素原子数に相当し、 5×40 個の粗視化粒子($1.2 \mu\text{m} \times 8.8 \mu\text{m}$)が1枚のグラフェンを表現する. このスケールでの時間スケールの比は150である. 1枚のグラフェンが定常な流れ場にある角度を持って置かれた場合について、流れ場や抵抗及び揚力を計算した. 迎え角が45度以下の場合には、グラフェンの振動は時間的に次第に成長した. スケールはずいぶん異なるが、いわゆる翼のフラッター現象がこの場合にも見出されたことになる. さらに、2枚のグラフェンを一定距離だけ離して流れに平行においた場合のふるまいを解析した. 図1-12はレイノルズ数が40の時の幾つかの時刻におけるグラフェンと渦度場の様子である. 時間の経過とともに、グラフェンの振動は微小な対称モードから次第に大振幅の非対称でカオティックな振動に移行していくことが見て取れる. グラフェンの後ろ側には複雑な流れ場が形成されている. またグラフェン内におけるストレス分布も計算することができた. このことは、流れによるグラフェンの変形にともなう電荷分布の変化により流れから微小な電力を得る可能性も示唆している.

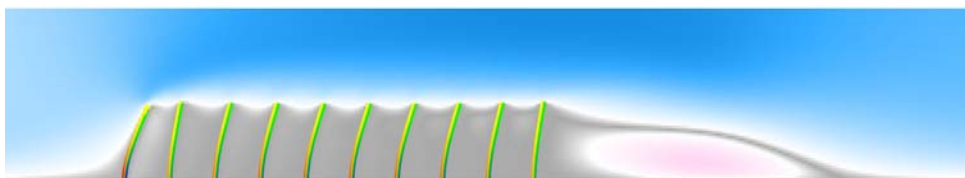


図1-10: 平板上に固定されたアルゴン原子の弾性板の集団と流れの相互作用. 流体の色は渦度, 板色は内部ストレス. 板の下流には閉じた渦が形成する($Re=18.7$).



図1-11: レイリー波によって駆動される弾性板に誘起する流れ。
矢印は速度ベクトル, カラーは流れの渦度を表す(Re=0.15).

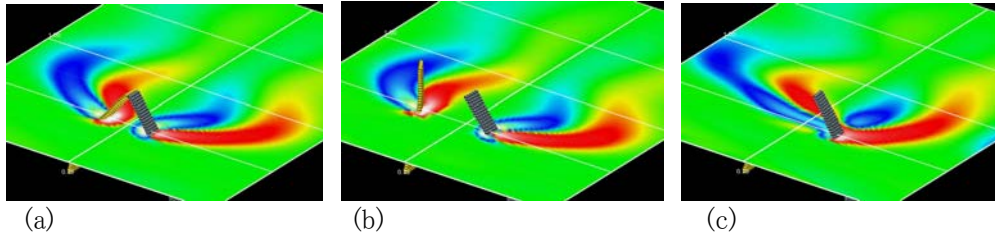


図1-12: 一様流中(x 方向)におかれたグラフェン薄膜と渦度の平面内分布。
流れは左下から右上に向かっている(Re=40):(a)13.8 μs, (b) 15.6 μs,
(c)22.7 μs.

上記の計算においては、粗視化粒子法と格子ボルツマン法を埋め込み境界法を用いて結合する際に、2つの巨視的仮定を導入している。その第1は流体相の仮想粒子と粗視化されたグラフェン粒子とは反発係数が1であること、第2はグラフェン相が流体に対して固定壁として振る舞うとの仮定である。実際には、反発係数は流体分子と粗視化されたグラフェン粒子間の相互作用ポテンシャルにより求められるべきものであり、固定壁の仮定も両相の分子の質量比を考慮に入れてしかるべきものである。この事実をできるだけ忠実に計算に反映してこそ、マイクロからメソへの計算科学的なアプローチが完結すると考える。先ず、格子ボルツマン法における粒子分布関数について、境界で両相の質量比 χ と反発係数 e を取り込んだ境界条件を導いた。反発係数は、粒子から構成される流体中においた1枚のグラフェンとの相互作用を直接 MD で計算することにより反発係数 $e=0.66$ と求めた。これら ($e=0.66, \chi=0.45$) を埋め込み境界法に代入し、グラフェンと流体との相互作用を再度計算した(図1-13)。グラフェンが受ける抗力と振動について求めた結果、質量比が増大する時、あるいは反発係数が減少する時、グラフェンが受ける流体力が減少することが分かった。この特性はこれまで完全弾性衝突($e=1$)とし、幾つかの質量比($\chi=0, 0.5, 1.0$)について計算したものに比べて極めて妥当なものであることが分かった。このことは、マイクロからメソスケールにわたってすべての物理過程を計算科学の方法で求めた方法の有効性と妥当性を強く支持しているものである。

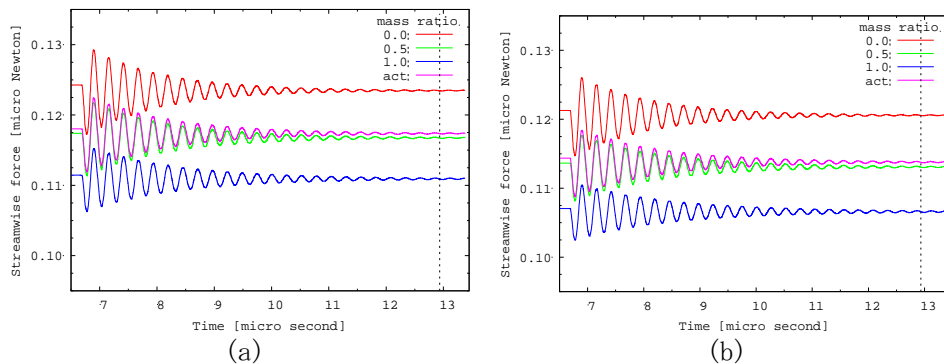


図1-13: 質量比 $\chi=0, 0.5, 1.0, 0.45$ (exact)に対する1枚のグラフェンが受ける流体力
(a)反発係数 $e=1$, (b) 反発係数 $e=0.66$ (MD により計算)

マイクロからメゾへのアプローチ: 流体に含まれる鎖状高分子の影響

乱流中における鎖状高分子などのように、幾何学的形状が流れによって大きく変形しながら相互作用する問題を扱った。乱流中にごく少量の鎖状高分子を添加するだけで、物体に働く抵抗が大きく低減することはよく知られているが、その基本的メカニズムの解明はまだまだ十分ではない。鎖状高分子の長さスケールは乱流中の最小渦スケール(コルモゴロフ長さ、約 $50 \mu\text{m}$)よりも小さいがその時間スケールは極めて大きい範囲にわたって変化し、その中には乱流の慣性領域での時間スケールと同程度にまでになる場合があり、乱流は高分子の影響を大きく受ける。一方、物質の混合を考えるとコルモゴロフスケールよりも小さいスケールも重要である。本研究では、乱流と高分子が相互作用するメゾスケール($50 \mu\text{m}$ から数センチ)での力学と統計性を中心にした。鎖状高分子を多数のビーズが非線形バネで結合されたモデルとして記述し、流体相は Navier-Stokes 方程式をスペクトル法により解析し、グラフィエンと流体との相互作用の時に開発した時間軸での粗視化法を援用して相互作用を解析した。

乱流中では、高分子の濃度などのスカラー量のゆらぎは速度場のそれと比べて一段と大きい。乱流に関するシミュレーションの結果、大きな濃度勾配の領域は厚さがコルモゴロフ長さ程度の2次元構造をもって空間的にランダムに分布し(図1-14)ていることが分かった。また、濃度勾配の確率密度関数は引き延ばされた指数分布($P(x) \propto \exp(-|x|^a)$, $0 < a < 1$)をしていることが見出された。一方、平均スカラー勾配(高分子濃度勾配)がある場合の平均スカラー流束(ヌッセルト数)は、流れのペクレ数に比例して増大し、濃度は平均勾配の方向に沿って階段状に増えていくことが可視化により確認された。さらにスカラーフラックスの揺らぎのスペクトルは理論的には $k^{-7/3}$ になることが予測されていたが、世界最大規模の直接数値計算によりこれを世界で初めて確認した(図1-15)。スカラーフラックスの揺らぎの確率密度関数が非対称な指数分布になることを示し理論的説明を与えた。

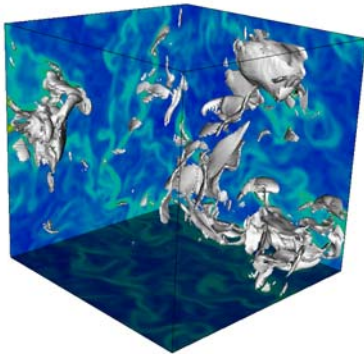


図1-14: 乱流中に大きな濃度勾配を持つ領域(灰色部分)の空間分布

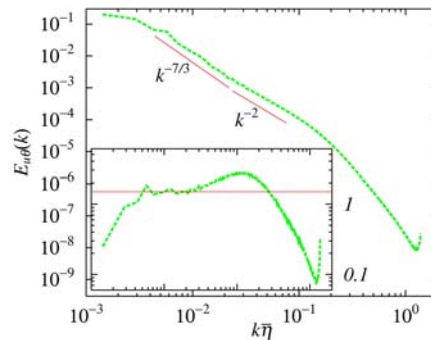


図1-15: 乱流によるスカラーフラックスの $k^{-7/3}$ スペクトル

乱流の影響により伸張、収縮を行う鎖状高分子の動力学と統計性について、高分子の内部自由度の数値積分に大きな計算資源を割り当ててシミュレーションを行った。まず、1つの計算ノード上で格子点数 128^3 を用いて定常な等方性乱流($Re_\lambda=47$)を計算し、この中に20個のビーズからなる鎖状高分子を多数浮遊させた。ただし、高分子は乱流により流され変形を受けるが、高分子から乱流への反作用はないとした。ビーズを結合する非線形バネは有限長の伸びを持つため、最大伸張時前後ではバネに大きな復元力が働き計算が不安定になりやすい。このため、高分子動力学の時間積分において時間刻み幅を小さくする必要があった。流体運動との時間接合においては、グラフィエンと流体との相互作用の時と同様に、流体相を断熱的に取った。乱流の最小渦の特性時間(t_h)と高分子バネの特性時間(t_p)との比 $Wi = t_p / t_h$ (ワイゼンベルグ数)を 0.01-100 まで変化させ、鎖状高分子のコイル・ストレッチ転移の統計法則、鎖状高分子の構成セグメント数依存性、統計的射影演算子の手法による鎖状高分子のモデリングを行った。その結果、コイル・ストレッチ転移はワイゼンベルグ

数が 4 程度のときに起こること等を見いだした。図1-16は異なるワイゼンベルグ数における高分子の末端間距離の確率密度関数を示したものである。Wiが4から10に変化する時に確率密度関数のピークが短いほうから長い方に移動することがわかる。また、図1-17は末端間距離の自己相関関数の時間積分であり、Wi=4 付近でピークをとることが分かった。高分子がコイルあるいは引き伸ばされた状態にあるのは乱流場中のどの位置なのかを調べるために、Wiと局所的なストレイン場のトポロジーとの関連性を解析した。その結果、Wiが大きいときには不安定な圧縮領域を除くすべてのストレイン場のトポロジーで高分子の引き伸ばしができることが分かった。また、鎖状高分子を2個のビーズからなるダンベルモデルとして取り扱うために、ダンベルモデルのパラメータを 20 ビーズの高分子モデルから統計的射影法を用いて推定する手法を開発した。

乱流中の高分子の個数を大規模に増やすには計算の大規模並列化が欠かせない。乱流のレイノルズ数があまり大きくない場合には、乱流場を1つの計算ノードで行い、そのデータを他のN-1 ノードに分配し、各ノードできわめて多数の鎖状高分子の計算を行う(図1-18)。1つの鎖状高分子をダンベルモデルで表現しこれを約 10^9 個減衰乱流において分散させ、乱流との運動量交換も取り入れて乱流の変化をみた。高分子の添加により、乱流のエネルギー散逸は小さくなり、エネルギースペクトルの高波数部分が励起され、間欠性が抑制されることが分かった。より高いレイノルズ数の乱流による物質や熱輸送、高分子や微小粒子との相互作用を解析するには、高解像度の乱流を生成する必要がある。この目的のためスペクトル法による乱流コードを並列化し高速に計算するための3次元FFTの高性能化を図った。また、3次元FFTではプロセッサ間の通信が計算のボトルネックになるので、空間的に局所的な乱流ソルバーの可能性を探るために格子ボルツマン法による等方性乱流のコードを開発しスケラビリティや計算速度、精度などをスペクトル法と比べた。格子ボルツマン法のスケラビリティはよいが、運動エネルギースペクトルの高波数領域での減衰が大きいこと、圧力スペクトルには意図しないキックが生じることが分かった。

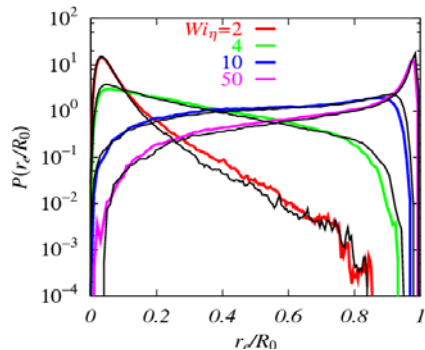


図1-16: 鎖状高分子の末端間距離の確率密度関数のワイゼンベルグ数依存性

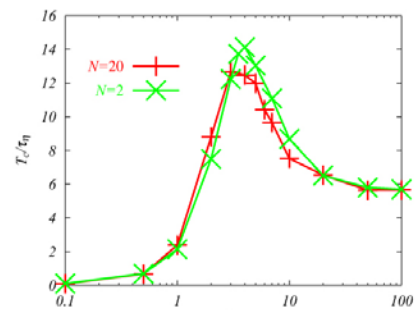


図1-17: 末端間距離の自己相関関数の時間積分。

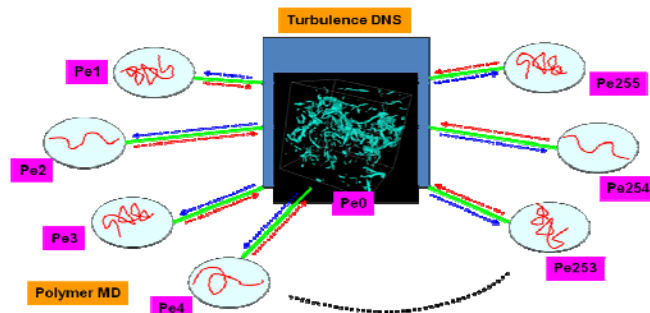


図1-18: 乱流中における多数の高分子の並列計算。乱流は直接数値計算し、その速度場が各プロセスに送られ、高分子のダイナミクスが計算される。

(2)研究成果の今後期待される効果

ナノからメゾへのアプローチについては、現在開発中の divide-and-conquer 型の実空間密度汎関数コードを、ハイブリッド量子古典法に組み入れることが出来ると、これまで以上に大きな実際のサイズの対象系にハイブリッド量子古典法を使うことが出来る。そのハイブリッド量子古典法に、さらに外部電場を明示的に取り入れることが出来るように改良できると、リチウムイオン2次電池中の電極反応、陰極ナノ局所酸化に代表されるトライボケミカル加工、電気めっき等、産業界の様々な分野の先進技術の直接的シミュレーションが可能となる。これらのメカニズムについてはまだ良く分からない部分が多く、経験に頼っていることが多いのが実情であるが、このような液体固体界面での分子化学反応について外部電場を明示的に取り入れた実際の状況での第一原理的シミュレーションが実現できるようになると、上記のミクロなプロセスについての詳細な解釈が、多くの研究費をかけずまた環境に負荷をかけず可能となり、それらの高機能化のために大きな貢献が出来ると思われる。

固体の為の、メゾスケールでのボトムアップ型粗視化理論である粗視化粒子法は、有限温度での非線形弾性を扱えるように現在改良させつつある。これにさらに格子欠陥と取り入れるように出来ると、応用範囲が大きく広がると思われる。メゾスケールの計算手法は、まだ決定版といえる手法がなく、その有力な候補として今後の発展が期待できる。

マイクロからメゾへのアプローチについては、ボトムアップにメゾスケールまで粗視化した固体表現と流体運動との相互作用を予測する数値計算法は本研究のユニークな点であり、マイクロスケールでの流体関連デバイス開発のための基礎的な特性の予測手法として今後発展が期待できる。より一層実際の状況をシミュレートするためには、これまで以上に高速で大規模な並列計算が必要となる。計算負荷の大きい部分を GPGPU(General Purpose Graphical Processing Unit)により高速化を図ることも視野に入ってくる(4.4参照)。乱流による高分子など物質濃度の輸送においても、高解像度と高速な計算手法がさらに必要とされ、このための高速FFTの開発、大規模並列化をさらに進める必要がある。本研究で得られた高分子と乱流との相互作用のシミュレーション手法は、たとえば雲などにみられるようなマイクロ物理過程と乱流との相互作用をシミュレーションする上で大きな土台となる。

4.2 階層的的手法による流体計算と原子間ポテンシャルの適用範囲拡大 (豊田中研グループ)

(1)研究実施内容及び成果

階層的的手法による化学反応の近似表現

触媒コンバーターや燃料電池等で用いられる材料のナノおよびマイクロ・メゾスケールでのシミュレーションでは化学反応の取扱いが重要な要素となる。ナノスケールではハイブリッド量子古典シミュレーションによって化学反応を取り扱うことが可能であるが、マイクロ・メゾスケールでの時間スケールは化学反応による分子配置の変化とは大きく異なるために有効な方法を開発する必要がある。実用材料における複雑境界問題への適用を考えると、マイクロ・メゾスケールシミュレーションの方法に適した化学反応の近似的表現を得ることは重要である。本研究課題では、指定した「反応領域」から生成する分子の確率密度の時間変化を記述するために、散乱理論の援用を試みた。少ない計算量の記述法であることを要件として組み換えチャンネル結合法を検討し、チャンネルの分類を反応前後の分子の相対配向によって区別することにより反応ポテンシャル面の情報を低計算量で取り出せることを解析的に確認した。さらに、この手続きを古典分子動力学計算における時間発展の過程に条件付き確率として導入するアルゴリズムの検討を進めた。

予想以上にアルゴリズム開発に手間取っており、残念ながら適正なシミュレーションを実行できるプログラムコードの完成には至っていない。本質的な問題が見つかったわけではないため、改めて複数ある研究の優先度を考え直す必要がある。

角運動量ベルレアルゴリズムの開発

ナノスケールでの現象の記述において、注目する現象(例えば化学反応における結合の組換え)が起こっている領域から離れたところに位置する「溶媒」分子は現象に直接関与する分子ほどは詳細に扱う必要が無い。そこで溶媒分子を剛体として扱うことがしばしば行われるが、粗いモデル化を活かした計算効率と計算精度および安定性の確保を両立させたアルゴリズムの開発が必要となる。本研究課題では、分子動力学計算で良く用いられる速度ベルレ法を剛体の回転運動に適用することを考えた。

回転運動は複数の構成粒子が互いに拘束し合って行う運動であるため、通常分子動力学法で用いられる時間発展アルゴリズムに拘束による条件を導入しておくとしミュレーションの安定性や精度保証に有利であると予想される。回転運動による座標変換をオイラー角によって定義される quaternion を用いて表現しておき、構成粒子の位置と運動量の変化を回転座標系で表わすことを考えた。速度ベルレ法と同様の形式で位置と角運動量の時間発展を進めることが出来ることが分かり、これを角運動量ベルレ法と名付けることにした。

$AX_nY_{(4-n)}$ ($0 \leq n \leq 4$) 型の分子を対象として計算条件を検討し、単原子分子集団に対するベルレ法と同等の時間発展に対する安定性が得られること、良好な時間反転性を示すことが確認された。さらに、quaternion の成分の二乗和が1になるという性質を拘束条件として本アルゴリズムを改良し、特に時間刻みが大きい場合のシミュレーションの計算精度を向上させた。また、四塩化炭素の気液平衡相図を計算することにより、実験を再現できるレベルのプログラムコードになっていることを確認した。この方法は化学反応の取扱いそのものに適用できるものではないが、反応に直接関与しない溶媒分子を効率的かつ効果的に扱うための方法であり、本研究課題における関連技術として意味があるものと考えている。剛体分子モデルを用いた分子動力学シミュレーションでは、数値的な安定性だけでなく固定した自由度へのエネルギーや運動量の散逸を考える必要がある。すなわち、与えた運動エネルギーが適切に分配されるように制御する必要がある。quaternion に関する拘束条件の導入は、単純な意味での数値誤差の蓄積を押えるだけではなく、内部自由度を固定することによって生じる誤差を補償する効果も含まれているものと考えられる。

様々な内部自由度に対する一般的な粗視化動力学方程式の導出

これまでに提案されている粗視化動力学法は、粗視化粒子の重心運動に関しては分子描像に基づく演繹的な導出がなされているが、分子配向や分子内振動に注目した方法では現象論的に導入された方程式を用いるのが常であった。そこで本研究課題では、内部自由度を考慮した粗視化動力学方程式の一般的な定式化を検討し、内部振動の振幅が小さく回転運動との相互作用が無視できる場合(通常分子の低振動状態)での方程式を導出した。ここで仮定した条件の範囲では、粗視化粒子の重心の並進、回転、内部振動のいずれに対しても同じ構造を有する方程式で記述することができ、任意の自由度に対して粗視化動力学方程式が構成できることが示された。

化学反応ポテンシャル面上の運動は Intrinsic Reaction Coordinate (IRC) に沿った運動として特徴付けられることが分かっている。IRC に沿った運動以外の運動モードは局所的には互いに直交するモードとして定義できるので、直交化して表現された複数の内部自由度を有する系の粗視化動力学方程式を定式化することにより、古典分子動力学計算における時間発展の過程に化学反応による変化を条件付き確率として導入するアルゴリズムの開発方針がより明確になるものと考えられる。例えば、剛体分子モデルのように内部自由度を固定した取扱いにおけるエネルギーもしくは運動量の散逸の影響を、より適切に取り扱うための方針も得られるものと期待される。剛体分子の運動に対する内部振動の影響や他自由度の運動の影響下での IRC 上の運動等を記述する根拠が得られたと考えられる。

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

複雑多孔材料における気液2相系での熱・流体シミュレーションに適用するために、大阪府大および名工大グループと共同して格子ボルツマン法に原子散乱衝突を取り入れること

を検討した。このための参照系として、分子動力学シミュレーションを大阪府大と共同して行った。複雑多孔材料として燃料電池のガス拡散層を想定した計算条件や計算精度の評価を行いながら進めてきた。具体的には、格子ボルツマン法の基本プログラムに加えて、ガス拡散層の構造評価法、さらに水蒸気と水からなる2相流を計算するプログラムの開発を行った。ペーパー型のガス拡散層で繊維表面が親水的である場合と疎水的である場合の気液2相流の計算を実施し、基本的な要件が再現できることを確認した。また、マイクロ流れの特徴のひとつである界面での速度すべり現象を捉えるために、格子ボルツマン法での平衡分布関数の再構成など基礎方程式レベルでの検討を行い、基本問題(クエット流, ポアゼイユ流)に対して検証計算を行った。さらに、この格子ボルツマン法を、マイクロスケール翼上の気流の解析に適用した。

マイクロ気体輸送設計と効率に関する空気力学的特性を理解するために、動力学モデルを用いて低レイノルズ数($Re < 150$)のマイクロスケール翼上の流れについてのシミュレーションを行った。ここで検討した翼のモデルは2次元モデルで翼の長さに対する厚みの比が5%の平板である。低 Re 領域では粘性と圧縮性の効果が大きく、 Re が減少すると希薄化による効果が増加した。低 Re では5%平板の空気力学的特性はほとんどなく、この結果は従来の報告と一致することが確かめられた。 Re が小さいとき平板は気体の粘性により流れを遅くし、この効果は Re の減少とともに増大する。通常、翼の空気力学的特性は揚力係数と抵抗係数によって調べることが行われる。5%平板の流れについて異なる迎角と Re における抵抗係数と揚力係数を調べると、 Re が 1.357 と 13.57 の場合は、揚力係数は常に抵抗係数よりも小さいことが認められた。

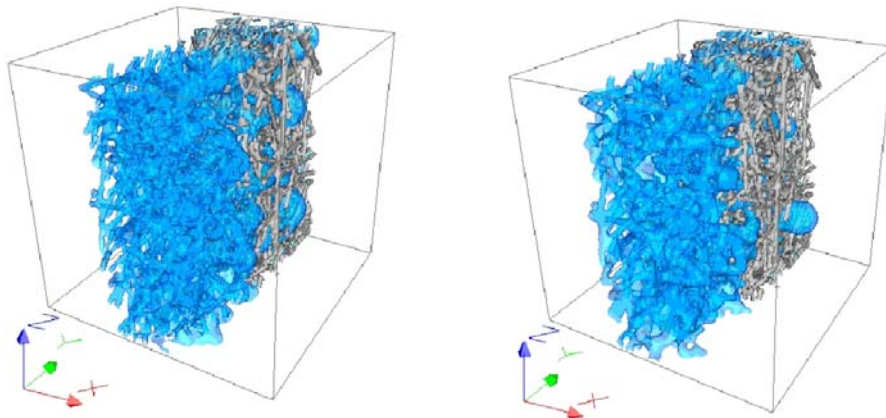


図2-1: 格子ボルツマン法による繊維状ガス拡散層を流れる気液2相のシミュレーション:
(左) 繊維表面が親水的な場合, (右) 疎水的な場合.

ハイブリッド量子古典シミュレーション法のLi-グラファイト系への適用

名工大グループと共同して、Liイオン電池の基礎系としても重要となっているLi-グラファイト層間化合物に対して、電子状態の変化が重要となる挿入Liとグラファイトを含む領域を量子領域に設定し、他の炭素原子は古典領域とする、ハイブリッド量子古典シミュレーションを行った。その詳細は、名工大グループのセクション(4. 1)に記している。

(2)研究成果の今後期待される効果

液体および固体に関して、これまでに多数の粗視化モデルが提唱されてきた。本研究課題の中で行った一般的な粗視化動力学理論は、それらの類似性や差異を明確にするために有用であろう。

大阪府大と共同で、拡散界面理論と対流・熱輸送理論に基づいた格子ボルツマン法の計算スキームの新たな導出を試みている。ここで、相変化は異なる2相間の質量移動を考慮す

ることによりモデルに取り込まれている。モデルの基本的な確認を行い、相変化効果を現象的に捉えられるところまでに至っているが、実験値との比較を通じて、相変化を含んだ流体の数値計算に定量的評価が出来るようになると、雲発生等の環境問題から様々な生産工程まで、そのインパクトは広範囲に及ぶであろう。

名工大グループと共同で、ハイブリッド量子古典法に外部電場を導入することを目指しており、実用化に成功すると電池等様々な応用が考えられる。

4.3 メゾからの複雑境界熱流体問題への適用(大阪府大グループ)

(1)研究実施内容及び成果

非連続体側のリミットにも対応できるように拡張した格子ボルツマン法を開発し、これを実装した複雑境界の流体解析コードを開発することをテーマにした。そうすることで、輸送・エネルギー産業で重要な役割を果たす触媒コンバーターや燃料電池等で用いられる材料中の連続体的な取り扱いが破綻する領域(燃料電池における触媒層や電解質膜内の様に、クヌッセン数(Knudsen 数=平均自由行程/系の代表長さ)が比較的大きくなる領域)を含む総合的な解析技術の構築を目指した。研究開発は、豊田中研グループと共同で行った。また、多孔体内や複雑境界面でのシミュレーションの際に必要な境界面形状を、少ないデータから再構築する手法の開発や、これらを発展・応用した生体内流れ解析コードの開発も行った。

非連続体側のリミットに対応した格子ボルツマン法(μ -flow 格子ボルツマン法)の開発

μ -flow 格子ボルツマン法は以下の3点において、通常の格子ボルツマン法に改良を加え、連続体-非連続体流れを解析できるようにしている。マイクロ/ナノ流れになると流体分子と壁面分子の相互作用により、全体の流速に対して壁面上での流体分子速度が無視できなくなり、いわゆる粘着壁条件が適用できなくなる。そこで、(i)拡散反射境界モデルを格子ボルツマン法に導入した。このモデルは流体分子が壁面に衝突後、完全拡散反射するとして格子ボルツマン法で解く分布関数を記述するものである。次に、連続体流れでは格子ボルツマン法で解く分布関数の緩和時間が粘性係数によって支配されるが、壁面近傍での緩和時間の修正をクヌッセン数に依存して行う(ii)有効緩和時間の導入を行った。一般的には、格子ボルツマン法で取り扱う分布関数はエルミート空間に完全な形で投影できないため、必ずエイリアシング誤差を伴う。高クヌッセン数流れになるとこのエイリアシング誤差が無視できなくなり、数値的な不安定を招くと考えられるので、 μ -flow 格子ボルツマン法の分布関数の非平衡部分をエルミート空間に展開したものに置き換える(iii)規格化処理を導入した。

以上の μ -flow 格子ボルツマン法を組み込んだ2次元/3次元コードを新たに開発し、マイクロ流れの解析を行い、文献データおよび分子動力学(MD)解析の結果と比較することで、手法の妥当性を検証した。図3-1は、2次元平板ポワズイユ流れの壁面滑り速度 U_s と中心線速度 U_c を平均速度 U_b で除したもののクヌッセン数(Kn)に対する変化を文献の準解析解(DSMC,LBE)と比較したものである。格子ボルツマン法の方程式を解く際に適用する離散速度モデルにD2Q21モデルを用いた方が簡便なD2Q9モデルを用いるより、優れた結果を得られることが示されている。図3-2は同じ流れ場の流量 Q の Kn 依存関係を示したもので、やはりD2Q21モデルを用いれば、かなり正確に流れ場を μ -flow LBMによって取り扱うことができることが分かった。

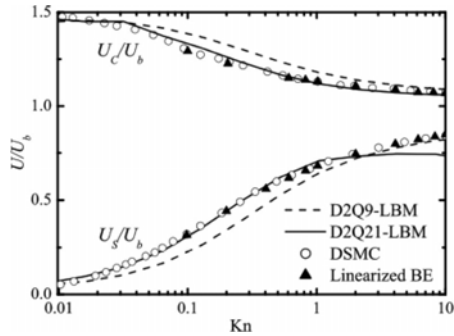


図3-1: 2次元ポワズイユ流れの滑り速度と中心線速度.

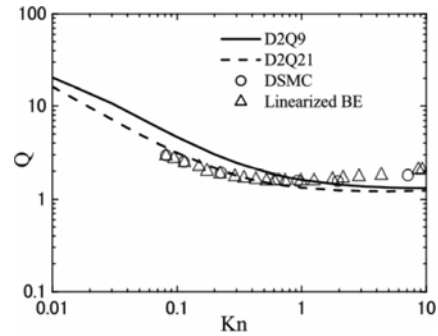


図3-2: 2次元ポワズイユ流れの流量.

さらに μ -flow 格子ボルツマン法を、より複雑な流れ場である角柱を挿入した2次元チャネル流れで評価した。まず、このような流れ場では前述のエイリアシング誤差が図3-3(a)に示すように顕著に表れるが、規格化処理を施すことで(b)のように滑らかな分布が得られることを確認した。図3-4に示すように μ -flow 格子ボルツマン法の予測結果はMD 解析と比較して十分妥当であることが確認でき、 $Kn=0.1$ 程度ではD2Q9 モデルでも十分な解が得られることが分かった。

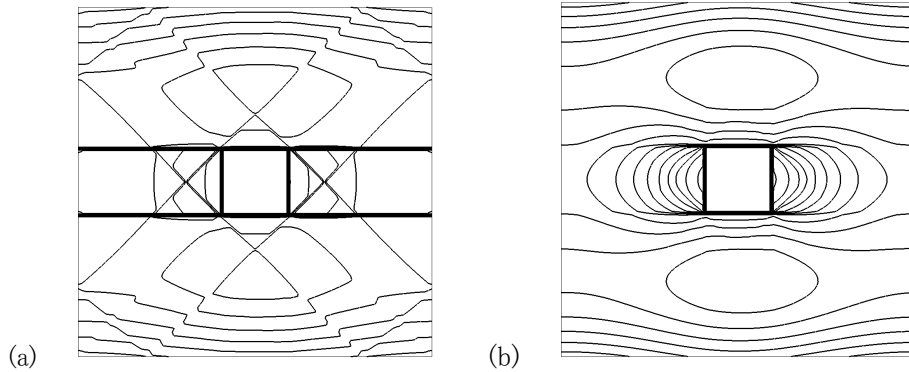


図3-3: 速度の等値線(エイリアシング誤差の影響);
(a)規格化処理なし, (b) 規格化処理後.

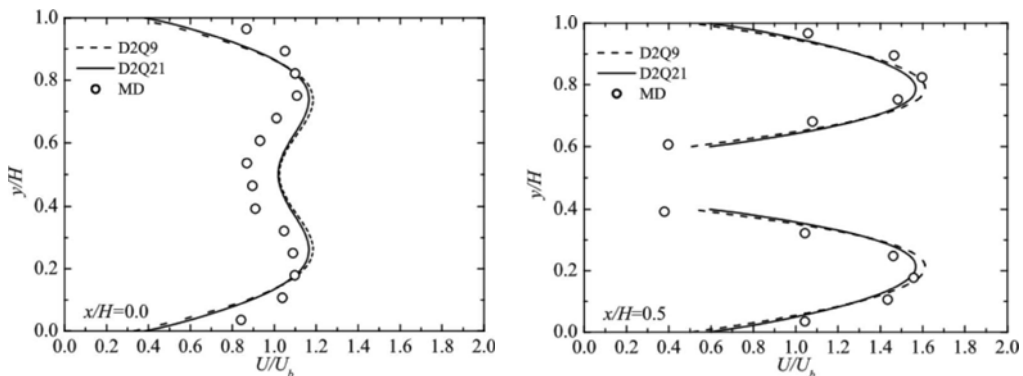


図3-4: 速度分布の比較: $Kn=0.1$.

次に、 μ -flow 格子ボルツマン法の3次元コードを用いて、非連続体領域 ($Kn=0.2$) の3次元ナノメッシュ内流れ(図3-5)を解析し、分子動力学シミュレーション(MD)結果との比較を通じてその精度とロバスト性を検証した。複雑な流れ場になると、2次元角柱流れ場で示されたものと同様に、簡便なD3Q19 離散速度モデルでも精度の高いD3Q39 モデルに匹敵す

る解が得られることを確認した。

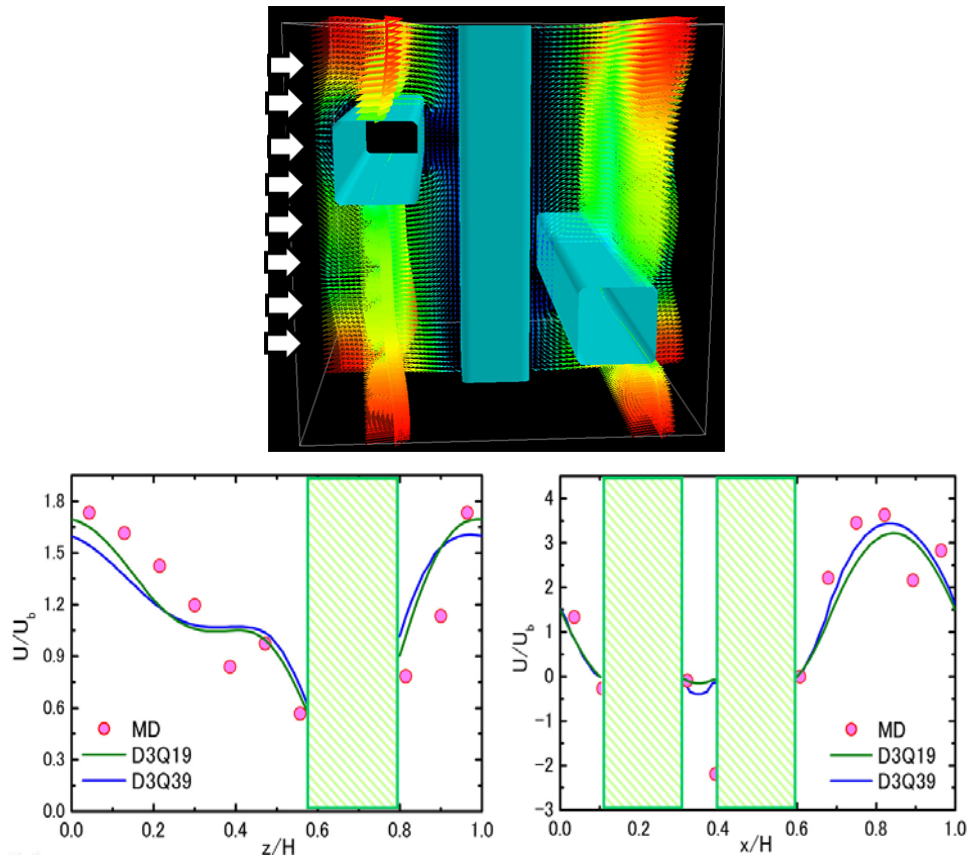


図3-5: 分子動力学法および格子ボルツマン法で計算したナノメッシュ内流れに関する、流体速度場の位置依存性の比較。

界面再構築(BRC)法の開発

通常、多孔体などの複雑固体界面は CT スキャンなどの手法により、2値化されたデジタルデータとして与えられる。つまり、曲線形状でも階段状境界として表現される。したがって、この階段状境界を初期値として、失われた本来の曲線形状を再構築するために、レベルセット法の最初期化プロセスを応用する独自の2段階界面再構築(BRC)法を開発した。図3-6に示すように界面形状はほぼ満足に再構築でき、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比較的粗い解像度の計算でも図3-7に示すように、従来手法に比べて実験値によく対応する結果を得ることがわかった。この手法を図3-8に示すように格子ボルツマン法コードによる多孔体内熱流動解析に応用した。さらに、格子ボルツマン法コードで多孔体に接する界面流動を解析し、界面での摩擦や滑り速度の定量的評価法を提示した。

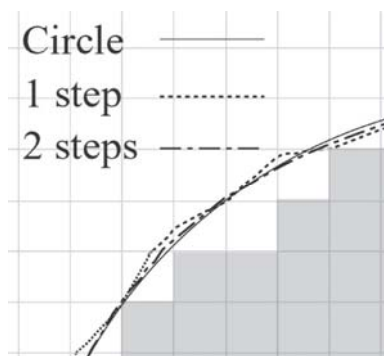


図3-6: 界面再構築:影部が円形の初期入力形状

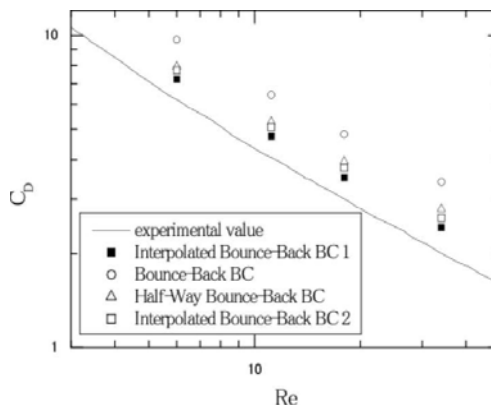
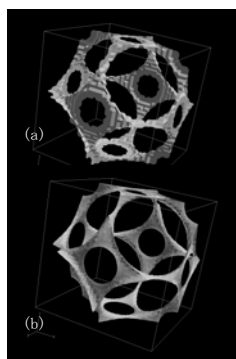
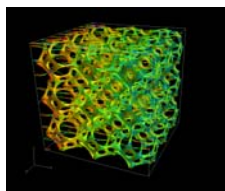


図3-7: 球の抵抗係数, ■:本手法.



(c)



(d)

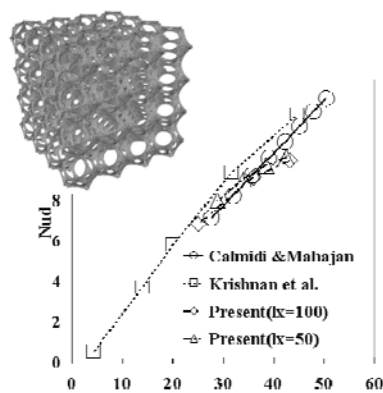


図3-8: 界面再構築法による多孔体内格子ボルツマン法解析:(a)初期形状, (b)再構築後, (c)多孔体内流動解析, (d)多孔体内熱流動解析におけるヌッセルト数分布の実験値との比較.

生体内流れ解析コードの開発

複雑境界面での流体-固体のハイブリッド解析の応用として, デジタル画像データとして与えられた固体面の離散的データから滑らかな界面形状に境界面を変換する手法(BRC法)を生体内流れへ展開した. 人体の鼻腔を CT スキャンデータから境界形状を構成すると図3-9(a)のような表面になるが, 本 BRC 法を適用すると図3-9(b)のような滑らかな表面が構築できる.

次に, 鼻孔などの生体内の流れ場は乱流であることが多いので, 開発した格子ボルツマン法コードで乱流場に適用できるように拡張し, ラージ・エディ・シミュレーション(LES)ができるようにした. そこでは, 境界面に解析的壁関数モデルを新たに開発し適用するなど, 生体内流の汎用解析コードへの拡張を進めた.

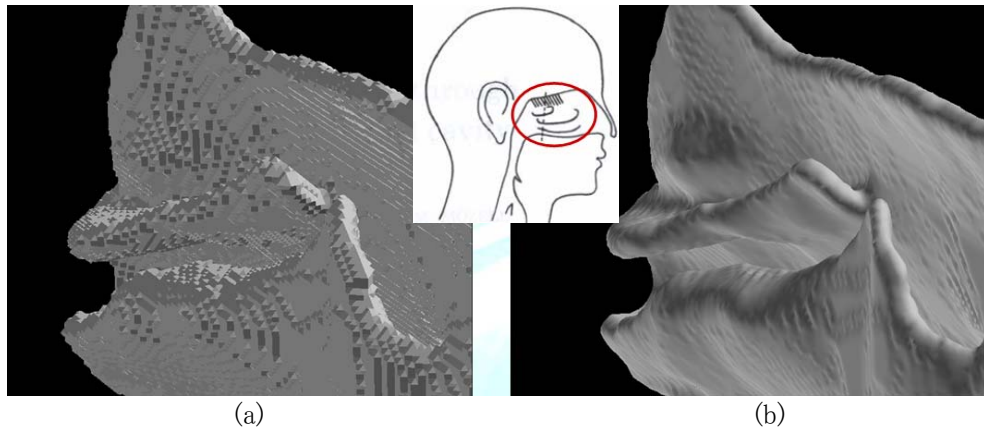


図3-9: 人体鼻孔内形状: (a) 初期表面, (b) 再構築後.

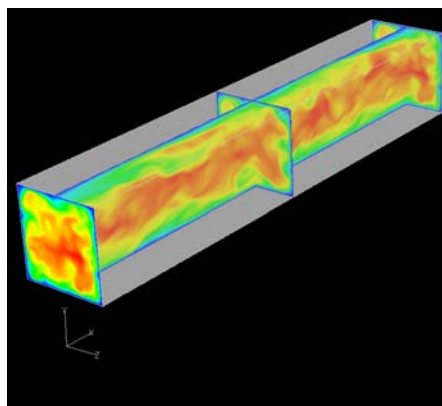


図3-10: 格子ボルツマン法コードによる矩形管内乱流の LES.

(2)研究成果の今後期待される効果

本研究によって、格子ボルツマン法を基礎として、マイクロ/ナノ流れの μ -flow 格子ボルツマン法から、乱流の LES にまで適用できる計算コードが開発された。1つの計算コードでナノスケールからバルクスケールの解析まで対応できるので、スケール間でシミュレーション手法やコードを変換する必要がなく、今後容易に大規模マルチスケールシミュレーションに対応できる。本コードは、たとえば、燃料電池の電解質膜から拡散層流路に至る統合シミュレーターの中核に位置づけられる。また、生体の CT スキャンデータから容易に界面形状を再構築し、内臓組織内部の微細な構造から、血流・気流をふくめた総合的な物質移動解析の応用展開に期待できる。

4.4 グリッド環境でのシミュレーション(産総研グループ)

(1)研究実施内容及び成果

本プロジェクトで開発するハイブリッドコードをはじめ、マルチスケールシミュレーションは、異なる計算手法同士を疎に結合し、並列実行する形態のものが多い。このような計算形態は、地理的に分散され、ネットワークで接続された複数のスーパーコンピュータにより構成されるグリッドとの相性が非常に良く、グリッド上での大規模シミュレーション実行が期待されるものである。特に、名工大グループが開発したハイブリッド量子古典コードは、異なる計算手法同士で相互転送を要するデータ量が少ないことを特徴として持つ。このため、計算手法毎

に適切な並列計算機を割当ててすることで、グリッドを効率よく用いる大規模シミュレーションの検証を、ハイブリッド量子古典法を用いて行った。また、最近ヘテロな計算環境として特に注目されている GPGPU を、名工大グループが開発した粗視化粒子法コードの計算に利用することで進めた。

グリッド環境でのハイブリッド量子古典シミュレーション

グリッドの特長としては、(i)複数の計算機が地理的に分散配置されていること、(ii)ハードウェア、ソフトウェア(OS など)、およびそのコンフィグレーションなど、様々な面で非均質性が存在すること、(iii)メンテナンスおよびバッチキューの状況によって利用可能な計算機が静的には決まらない可能性があること、(iv)ネットワーク障害やハードウェア障害などの障害は不可避であること、(v)数千～数万あるいは数十万プロセッサ規模のスケラビリティが求められることなどがある。

本研究においては、グリッド上の数千プロセッサ規模の大規模な計算資源上で数週間から数ヶ月に及ぶ長時間実行を必要とする大規模シミュレーションを実現する、シミュレーションの実装・実行技術の研究を行った。グリッド上で大規模シミュレーションを長時間にわたり実行するためのシミュレーションの実装方法、障害発生時あるいは利用中の計算機が利用不可となった場合の対処方法、グリッド上の計算資源を適切に割り当てる手法を開発した。本研究の成果により、単体のスーパーコンピュータでは困難な大規模シミュレーションの実行が可能となった。また、手元に大型スーパーコンピュータを持たずとも、グリッド上の計算資源を利用した大規模シミュレーションが可能となり、応用分野の研究者らが大規模シミュレーションを行う機会を広げることができる。さらに、ここで開発した手法はグリッドに特化するものではなく、次世代スーパーコンピュータのように数百万コア級の大規模計算環境における、新たなプログラミングモデルとしても適用可能である。

シミュレーションの実装方法としてはメッセージパッシング(MPI)型の並列プログラミングモデルを用いて計算に利用する全ノードを制御する実装が主流であったが、この方法には、たとえ1ノードでも故障が発生するとシミュレーション全体の停止に至ってしまうことや、シミュレーションの進捗に応じて動的に計算資源を追加・削除したり、利用する計算機を切り替えたりすることが困難であるといった問題がある。そのため、グリッド上で長時間安定して実行可能な大規模シミュレーションの実装には適していない。本研究においては、グリッドにおける遠隔手続き呼び出し(Grid Remote Procedure Call, GridRPC)とMPIを組み合わせたプログラミングモデルを提唱し、実証実験を通じてその有効性を検証した。また、グリッド上の非均質な計算環境で効率よく実行する高性能計算技術に関する研究開発を進め、性能評価を行った。

GridRPC は、グリッドにおける遠隔手続き呼び出しによるプログラムモデルである。GridRPC システムは、PC やワークステーションなどの手元の端末からネットワークを通してスーパーコンピュータやクラスターシステムなどの高性能計算機システムを利用する仕組みをユーザに提供する。利用する計算機が地理的に離れている場所にあることやソフトウェア/ハードウェアアーキテクチャが異なることなどをユーザに意識させることなく、従来の関数呼び出しに似た方法で遠隔地にある高性能計算機システムを利用することを可能にする。GridRPC システムは、クライアント・サーバ型の計算システムであり、サーバに存在する計算ルーチンをクライアント側のプログラムから容易に実行できるようにすることを目的としている。クライアント側にはプログラマに対してAPIを提供し、RPC 呼び出しを行うクライアントライブラリが必要になる。サーバ側にはルーチンのインタフェース情報からスタブルーチンを生成するインタフェース情報コンパイラとRPC 呼び出しを受けてスタブルーチンを起動するなんらかの実行実体が必要になる。クライアントが複数のサーバに独立した処理を振り分けて実行させることにより、複数の処理の並列実行が可能となる。この際、各サーバにおける処理はお互いに独立なため、いずれかのサーバに障害が発生しても他のサーバでの処理には影響を与えず、耐障害性の高いアプリケーションを実装することができる。また、計算量やサーバの利用可能性に応じて利用するサーバを追加、削除、移動することができる。本研究におい

では、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(図4-1 参照)。

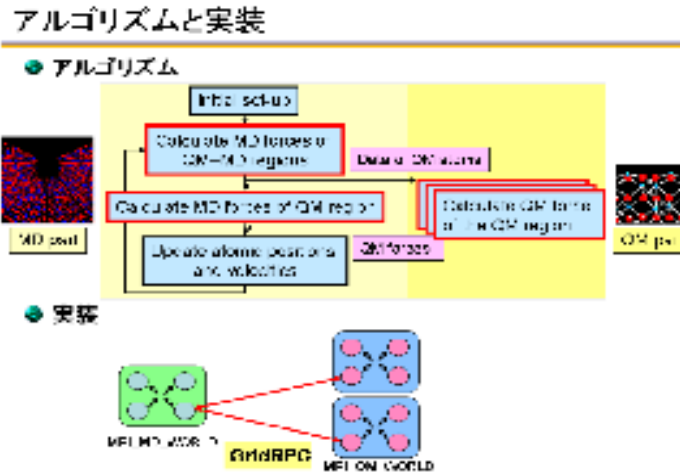


図4-1: GridRPC と MPI によるハイブリッド量子古典シミュレーションコード実装の概念

我々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の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った。具体的には、名工大グループが開発したナノスケール用ハイブリッド量子古典シミュレーションコードを、産総研が開発した GridRPC システムである Ninf-G と MPI を用いたハイブリッドプログラミングモデルに基づいて実装、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 日間実行し、合計 15 万 CPU 時間を利用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った。

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。実際に Ninf-G によりグリッド適用化したハイブリッド量子古典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い、我々のアプローチの妥当性を検証した。図4-2に示すように、SIMOX(Separation by Implanted Oxygen)を模して5個のO原子のSi入射過程についてシミュレーションを実施した。各O原子とその周囲のSi、さらにボンド破壊したSi群を、量子領域としてアダプティブに再選択した。

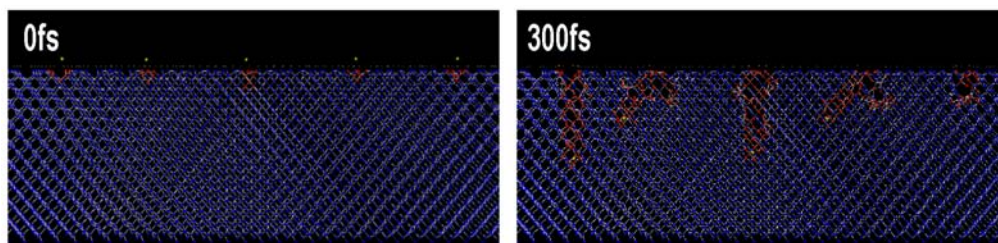


図4-2: 環太平洋グリッド上で実施した、グリッド適用化ハイブリッド量子古典シミュレーション。5カ所でO原子(エネルギー240eV)をSi基板に入射。Siボンド破壊過程に際して、アダプティブに再選択した密度汎関数計算を行う量子領域(量子原子は赤色および黄色球で表示)は時間と共に拡大した。

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た。図4-3に、最後の 10 日間の実行の様子を示す。表に示されているのが計算機の予約状況であり、1コマが128 プロセッサを表している。例えば、5つのQM計算に対し、最初の2日間は産総研のクラスターP32とM64を用い、その次の3日間は産総研のクラスターに加え、米国NCSAのクラスターとピッツバーグスーパーコンピュータセンターのクラスター(TCS)を利用し、その次の3日間は南カリフォルニア大学のクラスター(USC)を利用し、最後の2日間は東京大学と東京工業大学のクラスターを利用している事を表している。表の下にある実行チャートがシミュレーション実行の推移を示しており、予約期間が終了すると、利用する計算機が切り替わっていることが分かる。

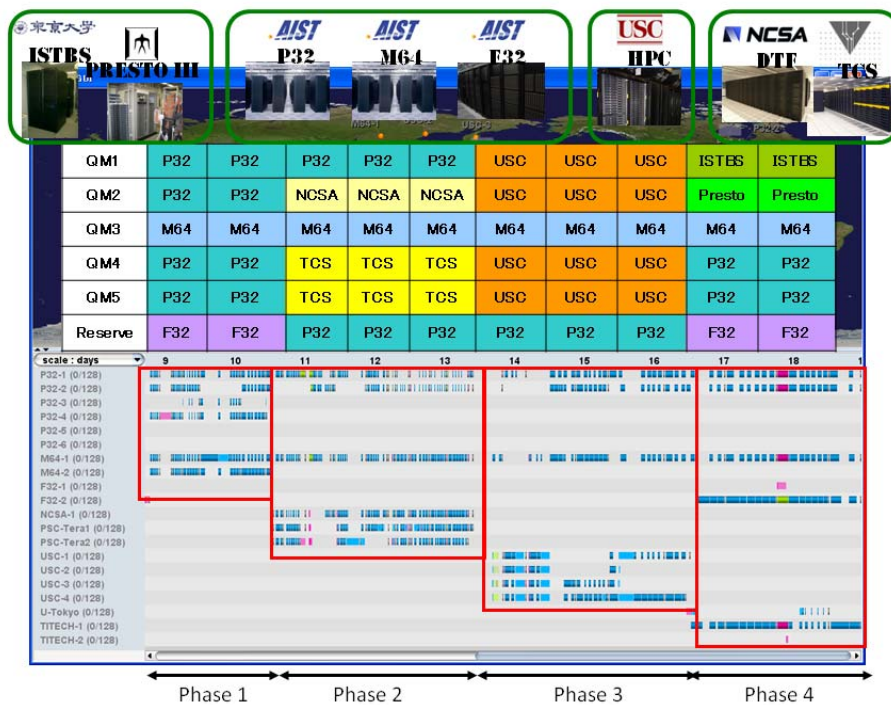


図4-3: 環太平洋グリッド上で実施したシミュレーション実行の様子。

シミュレーション実行中の量子領域の原子の数と、量子計算に用いるプロセッサ数の変化の様子を図4-4に示す。本シミュレーションにおいては、5タイムステップ毎に量子領域の拡張/分割を実行し、その結果47回の拡張と8回の分割が行われた。シミュレーション開始時は、量子領域の原子数は70程度であり、量子計算に必要とされるプロセッサ数も数台程度であったが、シミュレーションが進むにつれて量子領域の原子数が徐々に増加し、最終的に量子領域の原子数は約350、量子計算に用いたプロセッサ数は最大で約700に至ったことが分かる。重要なのは、この量子領域の拡張/分割や、それに伴うプロセッサ数の変更が、すべてシミュレーションの実行を中断せず自動的に行われたことにある。これは、開発した実装技術がシミュレーションの計算量に応じて動的に計算資源を追加・削除できることを示している。

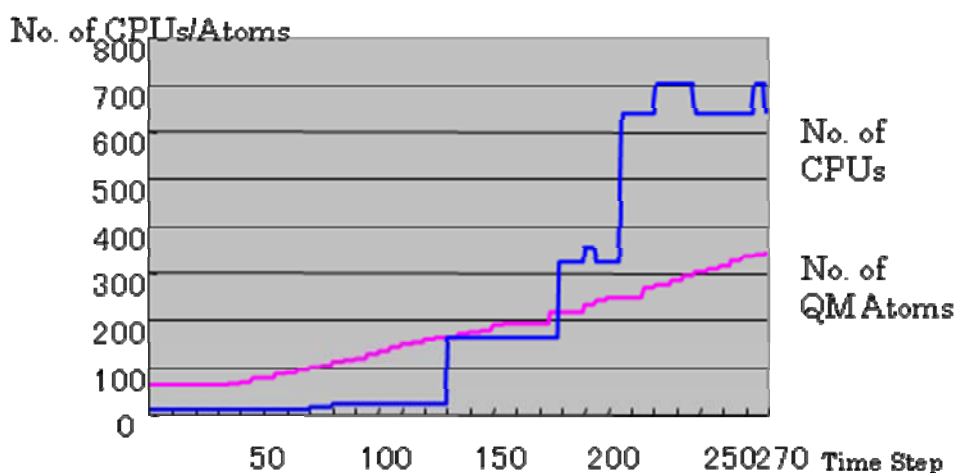


図4-4: 量子計算の対象とする原子の数と、量子計算に用いるプロセッサ数。

実行チャートの一部を拡大したものを図4-5に示す。今回のシミュレーションにおいては、計算資源の切り替えが行われるのは、大別してスケジューリングに基づく場合と、障害発生による場合の2通りある。スケジューリングに基づく変更は、計算資源の予約期間を過ぎてしまった場合に行われる。障害発生による変更は、サーバ側から明確なエラー通知があった場合や、処理を要求してから一定時間反応がなかった場合のタイムアウトが発生した場合などに行われる。図4-5を見ると、いずれの場合においても適切に計算資源の切り替えが行われ、グリッドのような比較的不安定な環境でも、障害を検知して適切に対処することにより、シミュレーションを安定して長時間実行できたことが確認できる。

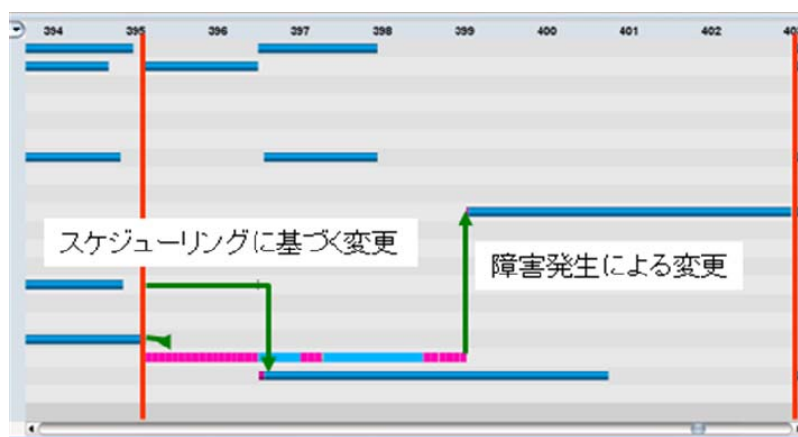


図4-5: 計算資源の切り替えの様子。

以上の実験により、GridRPC と MPI を用いた実装が、不安定なグリッド上でも安定動作するアプリケーションの開発に有効であること、Ninf-G が提供する障害検知機能が有効であること、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、複数の量子計算の負荷バランスを適切に行うことが重要であることなどを明らかにした。本研究の成果は世界的に見ても独自性や先導性の高いものであり、

実証実験のように実際に国際的な大規模グリッド上で 20 日間以上にわたってシミュレーションを継続し、合計 15 万 CPU 時間の処理を行ったような例は存在しない。大規模タスク並列アプリケーションに対するプログラミング手法としては、アルゴンヌ国立研究所が中心となって開発しているスクリプト言語 Swift によるものや、ウイスコンシン大学が中心となって開発している Condor の DAGMAN を用いたワークフロー記述による方法などがある。しかし、Swift は C 言語で記述するような細かな制御を記述することが難しく、また DAGMAN の場合は循環グラフを記述できないという問題がある。また、近年であれば MapReduce によるプログラミングが注目されているが、これも記述の柔軟性という点で、マルチスケールシミュレーションのようなプログラムの実装には適していない。GridRPC のプログラミングインタフェース(API) は我々が中心となってグリッドの標準化団体 Open Grid Forum において標準化が完了し、Ninf-G の他にテネシー大学が開発している GridSolve やフランスインリア国立研究所が開発している DIET などの処理系との互換性が確認されている。GridRPC と MPI を組み合わせたプログラミングモデルは大規模環境で長時間安定して動作するアプリケーション開発に適したプログラミング手法であり、今後さらなる展開が期待される。

また、上記の研究成果に基づき、複数の量子計算の負荷バランスを適切に行うスケジューリングモジュールの研究開発を進めるとともに、同時並列型ハイブリッド手法と組み合わせて実装した Nudged Elastic Band(NEB)法による NEB 化ハイブリッド量子古典シミュレーションコード(名工大グループと共同開発)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4-6参照)。

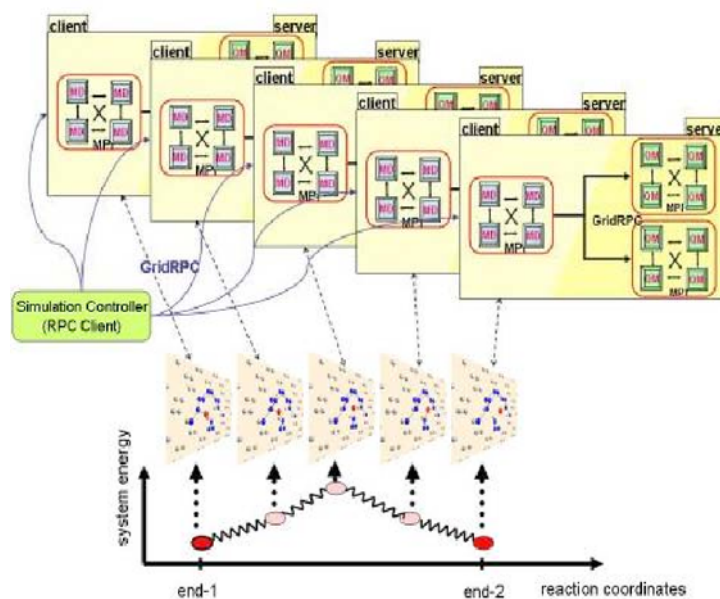


図4-6: グリッド適用化した NEB 化ハイブリッド量子古典シミュレーションコードの概念。

グリッド化した NEB 化ハイブリッド量子古典法について、グリッド上で長時間安定稼働させるための実現フレームワークを確立した。本フレームワークは、(i)GridRPC と MPI を組み合わせたプログラミングモデル、(ii)最適な資源割り当てを行う GRPLib(Grid Resource Provisioning Library)、(iii) 障害発生や予約期限切れなどによりリソースの利用可能性が変わった場合に対処する AITS(Application Internal Task Scheduler)により構成される。GRPLib はクライアント API、中間層の予約ブローカと資源配分サービス、及び物理層のバックエンド・サービスという 3 層モデルで構成され、グリッドミドルウェア Globus Toolkit を用いて実装した。アプリケーションが資源を要求すると、GRPLib は中間層の資源配分サービスに問い合わせ、条件を満たすサイトの資源に対する予約 ID を取得する。その後、アプリケーションは予約 ID を用いて

予約された資源を利用する。

図4-7に、F32 クラスター(産総研、192CPU), P32 クラスター(産総研、256CPU), NCSA クラスター(米国 National Center for Supercomputing Alliance、256CPU), Purdue クラスター(米国 Purdue University、256CPU), SDSC クラスター(米国 San Diego Supercomputer Center、128CPU), USC クラスター(米国 University of Southern California、257CPU)の、日米6台のクラスターを用いて行った実証実験の結果を示す。本実験においては、GridRPC と MPI を用いて実装した NEB 法によるシミュレーションコードを用いて、γ-アルミナ内の水素拡散反応のシミュレーションを行った。図4-7の横軸は時間軸で、1つのブロックが5分間の実行を意味する。GridRPC のクライアントは RPC を用いて 30 個の部分問題を遠隔計算機(クラスター)上で実行する。各部分問題は 64 あるいは 256CPU を用いる MPI プログラムにより処理され、この処理を収束するまで繰り返す。実験環境は、256CPU の部分問題1つと 64CPU の部分問題 17 個を同時に処理できるプロセッサ資源を有しているため、30 個の部分問題のうち、合計 18 個の部分問題を同時に処理することができる。本来は、これらの部分問題をどのクラスター上で実行するかをアプリケーション実行時にユーザが指定すると共に、アプリケーションプログラム自体にリソース選択やリソース切り替えのロジックを埋め込んで実装する必要があったが、今回開発した GRPLib および AITS の機能により、これらリソース管理のロジックをアプリケーションから分離し、容易にアプリケーションを実装・実行できることが確認できた。本実証実験により、本フレームワークが大規模計算におけるリソースの確保、障害発生時の対処、ロードバランスの改良等に有効であることが確認された。

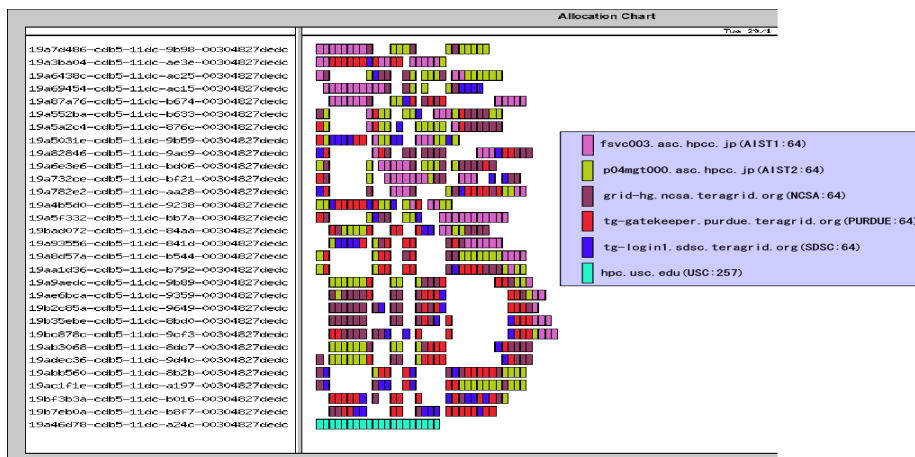


図4-7: 6つのクラスターから成るテストベッド上でのシミュレーション実行チャート。

粗視化粒子法コードの GPGPU 化

グリッド上の非均質な計算環境で効率よく実行する高性能計算技術として、近年急速に注目されている GPGPU を利用して、粗視化粒子法コードの高速化に関する研究を行った。具体的には、名工大グループが開発し、Fortran で記述されたハイブリッド原子-粗視化粒子コードを、GPGPU 向けのプログラミング環境 CUDA 上に移植し、性能評価を行った。GPGPU での高速化の対象となるのは、幅と高さがそれぞれ 20 の単位の粗視化粒子計算であり、複数の単位を同時に処理することにより、相対的な並列化のオーバーヘッドを抑えて並列化効率を高めた。表1に、20x20 の単位を 32 個同時に処理した場合の性能評価結果を示す。ここでは、Intel Xeon X5550 を 2 基搭載した HP Z800 ワークステーションと、Z800 に GPGPU のボードとして NVIDIA Tesla C1060 および NVIDIA Tesla C2050 を利用した場合の評価結果を示している。

表1 粗視化粒子コード部分の GPGPU による計算.

環境	ソフトウェア	処理時間 (秒)	移植部分 (秒)	その他の部 分(秒)	高速化 率
Z800	オリジナル版 (Fortran)	1124.85	1083.19	41.66	1.00
	C言語移植版 最適化後	333.90	295.05	38.85	3.37
Z800 + C1060	最適化後	39.97	24.96	15.01	28.14
Z800 + C2050	最適化後	30.71	15.79	14.92	36.63

Fortran 言語を C 言語に移植していくつかの最適化を行う事で, オリジナル版と比べて 3 倍程度の高速化が実現できたが, Tesla C1060 を利用することで約 28 倍の高速化を達成できた. さらに Tesla C2050 の場合には, 約 36 倍の高速化が達成された. 今後さらに高速化を進めるためには, Fortran 側のプログラムで行っている I/O 部分の最適化などが有効であると思われる.

(2)研究成果の今後期待される効果

本研究において開発した RPC と MPI を組み合わせたプログラミングモデルは, マルチスケールシミュレーションのように複数の独立したタスクを同時実行する形態のアプリケーションに有効であるが, グリッドのみならず, 数 100 万コアを超える大規模なスーパーコンピュータ上で安定して長時間実行するプログラミング手法としても適している. 今後はグリッドやクラウドなどの分散環境や, 次世代スーパーコンピュータのような大規模スーパーコンピュータなど様々な計算基盤上で, 本研究の成果が活用されていくことが期待される.

§ 5 成果発表等

(1)原著論文発表 (国内(和文)誌 4 件、国際(欧文)誌 27 件)

1. 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.
2. 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.
3. 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.
4. Shuji Ogata and Takahisa Kouno: Hybrid Simulations for Designing of Nano-Interfacial Structures, Solid State Phenomena, Vol. 127, pp. 57-62, 2007.
5. Xiao-dong Niu, Toshihisa Munekata, Shiaki Hyodo, and Kazuhiko Suga: An Investigation of gas-diffusion-layer properties in PEM fuel cell by a multiphase multiple-relaxation-time lattice Boltzmann model, J. Power Sources, Vol. 172, pp. 542-552, 2007.
6. Xiao-dong Niu, Shiaki Hyodo, Toshihisa Munekata, and Kazuhiko Suga: Kinetic lattice Boltzmann method for micro gas flows: Issues on boundary condition, relaxation time, and regularization, Phys. Rev. E, Vol. 76, p. 036711-1-8, 2007.
7. Takeshi Watanabe and Toshiyuki Gotoh: Intermittency and accuracy of direct numerical

- simulation for turbulence and passive scalar turbulence, *J. Fluid Mech.*, Vol. 590, p. 117, 2007.
8. Takeshi Watanabe and Toshiyuki Gotoh: Scalar flux spectrum in passive scalar convected by homogeneous turbulence under a uniform mean scalar gradient, *Phys. Fluids*, Vol. 19, p. 121701 2007.
 9. Takahisa Kouno and Shuji Ogata: Activation Energy for Oxygen Diffusion in Strained Silicon: A Hybrid Quantum-Classical Simulation Study with the Nudged Elastic Band Method, *J. Phys. Soc. Jpn*, Vol. 77, No.5, pp. 54708-1-10, 2008.
 10. Miyabi Hiyama, Tomoyuki Kinjo, and Shi-aki Hyodo: Angular Momentum Form of Verlet Algorithm for Rigid Molecules, *J. Phys Soc. Jpn.*, Vol.77, pp. 064001-12, 2008.
 11. Yohei Inoue, Junji Tanaka, Ryo Kobayashi, Shuji Ogata, and Toshiyuki Gotoh: Multi scale numerical simulation of fluid-solid interaction, *Materials Transactions*, Vol. 49, No. 11, pp. 2550-2558, 2008.
 12. Ryo Kobayashi, Takahide Nakamura, and Shuji Ogata: Development and Implementation of Recursive Coarse-Grained Particle Method for Meso-Scale Simulation, *Materials Transactions*, Vol. 49, No.11, pp. 2541-2549, 2008.
 13. K. Suga, T. Tanaka, Y. Nishio, and M. Murata: A boundary reconstruction scheme for lattice Boltzmann flow simulation in porous media, *Progress in Computational Fluid Dynamics*, Vol. 9, pp. 201-207, 2009. DOI: 10.1504/PCFD.2009.024820
 14. Y. Song, Y. Tanaka, H. Takemiya, H. Nakada, S. Sekiguchi, A. Nakano, and S. Ogata: The Development and Evaluation of an Integrated Framework Supporting Sustainable Execution for Large-Scale Computations on Grids, *International Journal of Computational Science*, Vol. 3, No. 1, pp. 18-31, 2009.
 15. K. Suga and Y. Nishio: Three dimensional microscopic flow simulation across the interface of a porous wall and clear fluid by the lattice Boltzmann method, *The Open Transp. Phenom. J.*, Vol. 1, pp. 35-44, 2009. doi: 10.2174/1877729500901010035.
 16. S. Ogata, R. Kobayashi, and T. Gotoh: A Suite of Hybrid Simulation Schemes for Nano-to-Micrometer Scale Processes at Solid-Fluid Interfaces, *Progress of Theoretical Physics Supplement*, Vol. 178, pp. 149-156, 2009.
 17. X.-D. Niu, S. Hyodo, K. Suga, and H. Yamaguchi: Lattice Boltzmann simulation of gas flow over micro-scale airfoils, *Comput. Fluids*, Vol. 38, pp. 1675-1681, 2009.
 18. T. Watanabe and T. Gotoh: Coil-stretch transition in an ensemble of polymers in isotropic turbulence, *Phys. Rev. E*, Vol. 81, pp. 066301-1-16, 2010.
 19. Yohei Inoue, Ryo Kobayashi, Shuji Ogata, and Toshiyuki Gotoh: Numerical simulation of fluid induced vibration of graphenes at micron scales, *Comp. Model. in Eng. & Sci.*, Vol. 63, No. 2, pp. 137-162, 2010.
 20. 兵頭志明, 土井正男: 高分子シミュレーションにおけるマルチスケールモデリングと粗視化の方法, *高分子論文集*, Vol. 67, pp. 164-178, 2010. doi:10.1295/koron.67.164.
 21. R. Kobayashi, T. Nakamura, and S. Ogata: A simple dynamical scale-coupling method for concurrent simulation of hybridized atomistic/coarse-grained-particle system, *Int. J. Num. Meth. Eng.*, Vol. 83, Issue 2, pp. 249-268, 2010.
 22. Shuji Ogata, Yuya Abe, Nobuko Ohba, and Ryo Kobayashi: Stress-induced nano-oxidation of silicon by diamond-tip in moisture environment: a hybrid quantum-classical simulation study, *J. Appl. Phys.*, Vol. 108, Issue 6, pp. 064313-1-12, 2010. DOI: 10.1063/1.3481451
 23. K. Suga and M. Kubo: Modeling turbulent high Schmidt number mass transfer across undeformable gas-liquid interfaces, *Int. J. Heat Mass Transfer*, Vol. 53, Nos. 15-16, pp. 2989-2995, 2010. doi: 10.1016/j.ijheatmasstransfer.2010.03.033
 24. K. Suga, S. Takenaka, M. Kaneda, T. Ito, T. Kinjo, S. Hyodo: Evaluation of a lattice Boltzmann method in a complex nano-flow, *Phys. Rev. E*, vol. 82, pp. 016701-1-10, 2010.

DOI: 10.1103/PhysRevE.82.016701

25. K Suga and T. Ito: Lattice Boltzmann flow models for micro/nano fluidics, *Comp. Model. in Eng. & Sci.*, vol.63, No. 3, pp. 223-242, 2010.
26. K. Suga, S. Takenaka, T. Ito, M. Kaneda: Lattice Boltzmann flow simulation in a combined nanochannel, *Advances in Applied Mathematics and Mechanics*, Vol. 2, No.5, pp. 609-625, 2010. doi: 10.4208/aamm.10-10S06
27. 竹中奨, 金田昌之, 須賀一彦, 金城友之, 兵頭志明: LBMによるナノチャンネル内流動解析, *日本機械学会論文集 B 編 76 巻 770 号*, pp. 1525-1533, 2010,
28. S. Hyodo: Coarse-Grained Equation of Motion for Many Particle System Containing Internal Degrees of Freedom, Special issue on Frontiers of Computer-Aided Engineering, *Jpn. J. Ind. Appl. Math.*, accepted.
29. 竹中奨, 金田昌之, 須賀一彦, 金城友之, 兵頭志明: 三次元ナノ多孔体内流れの LBM 解析, *日本機械学会論文集 B 編 76 巻 772 号*, pp.2032-2038, 2010.
30. Y. Inoue, T. Gotoh: Effects of finite mass-ratio and inelastic reflection on the interaction between graphene and laminar flow, *Phil. Trans. Roy. Soc. A*, No. RSTA20110094, 2011, in press.
31. K. Suga, S. Takenaka, T. Kinjo, S. Hyodo: Simulation of 3-D nano-mesh flows by a micro-flow LBM and its evaluation against the MD simulations, *Prog. Compu. Fluid Dyn.*, Vol.11, 2011, in press.

(2)その他の著作物(総説、書籍など)

1. Yoshio Tanaka, Hiroshi Takemiya, Satoshi Sekiguchi, Shuji Ogata, Rajiv K. Kalia, Aiichiro Nakano, Priya Vashishta: Adaptive Grid-enabled SIMOX Simulation on Japan-US Grid Testbed, in *Proceedings of TeraGrid'06*, pp. 6, 2006.
2. Takahiro Igarashi, Shuji Ogata, and Takashi Tsukada: Development and Application of Hybrid Fast-Coarse-Grained-Particle/Molecular-Dynamics Simulation Method, in *Proceedings of Third International Conference on Multiscale Materials Modeling (Freiburg, Germany)*, pp. 179-182, 2006.
3. Shuji Ogata, Takahiro Igarashi, Takahisa Kouno, Ryo Kobayashi, and Hiroki Iida: Hybrid Density-Functional-Theory/Molecular-Dynamics/Fast-Coarse-Grained-Particle Simulation Schemes for Reaction Processes at Nano-Interfaces, in *Proceedings of Third International Conference on Multiscale Materials Modeling (Freiburg, Germany)*, pp. 219-222, 2006.
4. Shuji Ogata, Takahisa Kouno, and Takahiro Igarashi: Hybrid Quantum-Classical Simulation study of Nano-Interfaces, *Ceramic Transactions*, Vol. 191, pp. 3-18, 2006.
5. 井上洋平, 田中順二, 小林亮, 尾形修司, 後藤俊幸: 埋め込み境界法を適用した格子ボルツマン法による流体・変形物体の相互作用の解析, 第 20 回計算力学講演会講演論文集, No.07-36, pp. 635, 2007.
6. 渡邊 威, 後藤 俊幸: 固体粒子の乱流拡散とその乱流への影響, 九州大学応用力学研究 所研究集会”乱流現象及び多自由度系の動力学, 構造と統計法則”, 研究集会報告 18ME-S7, 2007.
7. T. Gotoh and T. Watanabe: Computational Physics of Turbulence, in *Proceedings CD-ROM of APCOM07-EPMESC XI*, pp. 10, 2007.
8. Yoshio Tanaka, Hiroshi Takemiya, Yingwen Song, Satoshi Sekiguchi, Shuji Ogata, Takahisa Kouno, Rajiv K. Kalia, Aiichiro Nakano, and Priya Vashishta: Implementation and Evaluation of Sustainable Multiscale Simulations on the Grid, in *Proceeding CD-ROM of APCOM07-EPMESC XI*, pp. 10, 2007.
9. Ryo Kobayashi, Shuji Ogata, Yohei Inoue, Junji Tanaka, and Toshiyuki Gotoh: Fast

- Coarse-Grained Particle Method and Its Hybridization with Molecular Dynamics and Fluid Dynamics,
in Proceeding CD-ROM of APCOM07-EPMESC XI, pp. 10, 2007.
10. 小林亮, 尾形修司: ハイブリッド・シミュレーションへ向けての粗視化粒子法の拡張, 分子シミュレーション研究会会誌 アンサンブル, Vol. 9. No. 3 (分子シミュレーション研究会), pp.22-26, 2007.
 11. H. Touil, M. Y. Hussaini, T. Gotoh, R. Rubinstein, and S.L. Woodruff: Intrinsic Langevin models of turbulence, Proceedings of IUTAM Symposium on Computational Physics and New Perspectives in Turbulence, Edited by S. Kaneda, Springer, pp. 261-266, 2008.
 12. 米本 隆, 後藤 俊幸, 渡邊 威: 格子ボルツマン法による一様等方乱流の数値計算, 九州大学応用力学研究所研究集会報告, pp. 29-36, 2008.
 13. 渡邊 威: 乱流の秩序化過程と間欠性におけるスケーリング則, 九州大学応用力学研究所研究集会報告, pp. 86-93, 2008.
 14. T. Watanabe: Anomalous Scaling Laws of Passive Scalar Intermittency in Three Dimensional Turbulence, in Proceedings of IUTAM symposium 2006 Nagoya Computational Physics and New Perspectives in Turbulence, Edited by Y. Kaneda, pp. 111-116, Springer, 2008.
 15. Ryo Kobayashi, Takahide Nakamura, and Shuji Ogata: Development of hybrid atomistic/coarse-grained dynamic simulation approach, Journal of Computational and Theoretical Nanoscience, Vol. 5, No.8, pp. 1768-1771, 2008.
 16. Ryo Kobayashi, Takahide Nakamura, and Shuji Ogata: Large-Scale Simulation of Oscillating Metal-Nanorod: Application of the Hybrid Molecular-Dynamics/Coarse-Grained-Particle Approach, in Proceedings of Multiscale Modeling of Materials 2008, Edited by A.El-Azab (Frodida State Univ.), pp. 210-213, 2008.
 17. Shuji Ogata, Yuya Abe, and Ryo Kobayashi: Adaptive Hybridization of Density-Functional Theory and Molecular Dynamics: Reaction of Pressurized Water Molecule Trapped in Between Nano-Structured Diamond and Silicon, Mat. Res. Soc. Symp. Proc.(Symposium W, 2008 Fall meeting), pp. 6, 2009.
 18. Takahide Nakamura, Ryo Kobayashi, and Shuji Ogata: Recursive Coarse-Grained Particle Method for Inhomogeneous Materials: Re-formulation Based on Atom-relaxation, Mat. Res. Soc. Symp. Proc.(Symposium W, 2008 Fall meeting), pp. 6, 2009.
 19. 井上洋平, 小林 亮, 尾形修司, 後藤俊幸: ハイブリッド手法によるグラフェン微小薄膜と流体との相互作用解析, 日本流体力学会第 23 回数値流体力学シンポジウム 講演論文集 (CD-ROM), C4-4, 2009.
 20. 尾形修司, 後藤俊幸: 固体物理と流体物理のスケールギャップを埋める多階層シミュレーション, 小特集: 連結階層モデルによって見えてきたプラズマシミュレーションの新たな局面 物性分野における連結階層シミュレーション, プラズマ・核融合学会誌, Vol. 85, pp. 602-606, 2009.
 21. Nobuko Ohba, Shuji Ogata, Ryo Kobayashi, Shunsuke Yamakawa, and Shi-aki Hyodo: Hybrid quantum-classical simulation on the Li-graphite intercalation compound, in Proceedings of Multiscale Modeling of Materials 2010, Edited by P. Gumbsch and E.v.d. Guessen, (Fraunhofer Inst., Germany), pp. 110-113, 2010.
 22. Ryo Kobayashi, Takahide Nakamura, and Shuji Ogata: Hybrid atomistic/coarse-grained-particle simulation of dynamic crack growth in a brittle material, in Proceedings of Multiscale Modeling of Materials 2010, Edited by P. Gumbsch and E.v.d. Guessen, (Fraunhofer Inst., Germany), pp. 81-84, 2010.
 23. Takahide Nakamura, Ryo Kobayashi, and Shuji Ogata: Advancement of the coarse-grained particle method for finite temperature solids, in Proceedings of Multiscale Modeling of Materials 2010, Edited by P. Gumbsch and E.v.d. Guessen, (Fraunhofer Inst., Germany), pp.

106-109, 2010.

24. 渡邊威, 宇野聡志, 後藤俊幸: 等方乱流中に分散したダンベルモデルの数値シミュレーション, 日本流体力学会年会 2010 拡張要旨集, pp. 5, 2010.

(3)国際学会発表及び主要な国内学会発表

① 招待講演 (国内会議 25 件、国際会議 17 件)

1. Shuji Ogata (NIT): Hybrid Quantum Classical Simulation over the Pacific Grid: Concurrent Coupling of Coarse Grained Particles, Molecular Dynamics, and Electronic Structure Schemes for Materials Simulations, ICCES05, Chennai, India, Dec. 3, 2005.
2. 尾形修司(名工大): 領域分割による粗視化-分子動力学-密度汎関数融合型計算法とそのセラミックスおよび半導体材料への応用, 豊田中央研究所-研究談話会, 長久手, 愛知, 2005年11月14日.
3. 尾形修司(名工大): 材料工学のための多解像度大規模シミュレーション, 日本物理学会年次大会, 松山, 2006年3月29日(シンポジウム講演).
4. 尾形修司(名工大): ハイブリッド量子古典シミュレーション法とその原子スケール摩擦への応用, 第4回分子シミュレーションのトライボロジーへの応用研究会, 豊田中央研究所, 2006.4.7.
5. Shuji Ogata (NIT): Hybrid Simulations for Designing of Nano-Interfacial Structures, DIS06 Int'l conference, Osaka University, May 18, 2006.
6. 後藤俊幸(名工大): ナノ・メゾ・マイクロの複雑固液界面の大規模数値解析, 第5回LBM研究会, 九州大学, 2006年5月19日.
7. T. Gotoh (NIT): Anomalous Scaling of a Passive Scalar Under Mean Scalar Gradient, Stirring and Mixing in Turbulence: the Lagrangian Approach, Lorentz Center, Universiteit, Leiden, Aug. 29, 2006.
8. 尾形修司(名工大): 同時並列型ハイブリッドシミュレーションによる高機能性ナノ材料の開発, 日本金属学会春期大会, 千葉工業大学, 2007年3月28日.
9. Shuji Ogata (NIT): A suite of hybrid simulation schemes for reaction processes at interfaces in nano-to-micrometer scales, Plasticity 2007, The Alyeska Prince Hotel, Alaska, U.S.A., 2007.6.2-6.
10. 尾形修司(名工大): ナノ・メゾ・マイクロの複雑固液界面の大規模数値解析, 分子シミュレーション夏の学校, 大津, 2007.8.1-3.
11. 兵頭志明(豊田中研): 階層的シミュレーションと粗視化, 高分子学会第12回高分子計算機討論会, KKR ホテル琵琶湖, 2007.8.9.
12. 尾形修司(名工大): ナノ・メゾ・マイクロの複雑固液界面の大規模数値解析, 第56回高分子討論会, 名古屋工業大学, 2007.9.19.
13. 兵頭志明(豊田中研): 粗視化の理論とその必要性, 日本化学会第1回関東支部大会, 首都大学東京, 2007.9.27.
14. Toshiyuki Gotoh and Takeshi Watanabe (NIT): Computational physics of turbulence, Keynote Lecture, APCOM'07-EPMESC XI, Kyoto, 2007.12.3-6.
15. Yoshio Tanaka, Hiroshi Takemiya, Yingwen Song, Satoshi Sekiguchi (AIST), Shuji Ogata, Takahisa Kouno (NIT), Rajiv K. Kalia, Aiichiro Nakano, Priya Vashishta (USC): Implementation and Evaluation of Sustainable Multiscale Simulations on the Grid, APCOM'07-EPMESC XI, Kyoto, 2007.12.3-6.
16. Ryo Kobayashi, Shuji Ogata, Yohei Inoue, Junji Tanaka, and Toshiyuki Gotoh (NIT): Fast coarse-grained particle method and its hybridization with molecular dynamics and fluid dynamics, APCOM'07-EPMESC XI, Kyoto, 2007.12.3-6.
17. Xiao-dong Niu (TCL): Lattice Boltzmann method for modeling micro gas flows: kinetic theoretic foundation and applications, 第8回LBM研究会, 豊田中央研究

- 所, 2007.12.12.
18. 田中良夫(産総研): 超ハイエンドコンピューティングへの挑戦, 情報処理学会全国大会パネル討論, 筑波大学, 2008.3.14.
 19. 井上洋平, 田中順二, 小林亮, 尾形修司, 後藤俊幸(名工大): 粗視化粒子法と埋め込み境界法によるマイクロスケール流体・固体連成問題の解析, 第9回LBM研究会, 京都大学, 2008年5月30日.
 20. 須賀一彦(大阪府大): LBMによる多孔体内/外流れの解析について, 第9回LBM研究会, 京都大学, 2008年5月30日.
 21. 尾形修司(名工大): ナノ・メゾ・マイクロの複雑固液界面の大規模数値解析, 第7回東海地区CSI事業報告会, 名古屋大学, 2008年9月26日.
 22. 兵頭志明(豊田中研): 実用材料に対する階層的シミュレーションと粗視化の方法, 第22回分子シミュレーション討論会, 岡山大学, 2008年11月17日.
 23. 尾形修司(名工大): 多階層の同時並列型シミュレーションによるチャレンジ: ナノからマイクロ超まで, 第22回分子シミュレーション討論会, 岡山大学, 2008年11月17日.
 24. 兵頭志明(豊田中研): 階層的材料シミュレーションと粗視化の方法 -実用材料における使用環境を考慮した分子シミュレーションに向けて-, 第2回分子シミュレーションスクール, 岡崎, 2008年12月22-26日.
 25. 須賀一彦(大阪府大): 多孔体内外のマルチスケール流動シミュレーション, 日本伝熱学会関西支部2008年度第3回講演討論会, 大阪, 2008年12月22日.
 26. 尾形修司(名工大): 固体物理と流体物理のスケールギャップを埋める多階層シミュレーション, 次世代スパコンに向けた計算材料科学の課題と展望, 東京大学山上会館, 2009年7月21日.
 27. 尾形修司(名工大): 階層型ハイブリッドシミュレーションコードの開発, 第3回シミュレーション科学シンポジウム, 核融合科学研究所, 土岐市, 2009年9月17-18日.
 28. 兵頭志明(豊田中研): 衝突頻度の計算法と効率的反応経路探索法への期待, シンポジウム「化学反応経路探索のニューフロンティア」(財豊田理化学研究所), 豊田中央研究所, 2009年9月24日.
 29. 兵頭志明(豊田中研): 階層型シミュレーションと粗視化の方法, 第22回計算力学講演会, 金沢大学, 2009年10月12日.
 30. 尾形修司(名工大): 固体物理と流体物理のスケールギャップを埋める多階層シミュレーション, 東大物性研短期研究会, 2009年12月10-11日.
 31. R. Kobayashi, Y. Inoue, T. Nakamura, S. Ogata, and T. Gotoh (NIT): Concurrent hybrid simulations of coarse-grained particle method with molecular dynamics and/or fluid dynamics, Int. Conf. on Comp. Exp. Eng. Sci. 2009, Thailand, 2009.4.8-13.
 32. Y. Song, Y. Tanaka, and S. Sekiguchi (AIST): Exploiting Computing Power from Underlying Architectures, International Joint Conference on Computer Sciences and Optimization 2009, Hong Kong, China, 2009.4.24-26.
 33. T. Gotoh and T. Watanabe (NIT): On the scalar transfer flux in homogeneous isotropic turbulence, EUROMECH Colloquium 512, Turin, Italy, 2009.10.26.
 34. K. Suga (OPU): Tackling complex turbulent surface phenomena by analytical surface-functions, 2nd Asian Symp. Comp. Heat Transfer and Fluid Flow, Jeju, South Korea, 2009.10.
 35. Y. Song, Y. Tanaka (AIST), S. Ogata (NIT), and S. Sekiguchi (AIST): Challenges of Multi-core Computing Based on CBE and CUDA, Fifteenth International Conference on Parallel and Distributed Systems, Shenzhen, China, 2009.12.9-11.
 36. K. Suga, S. Takenaka (AIST), T. Kinjo, S. Hyodo (TCL): Lattice Boltzmann Modeling for Nanoscopic Flow Simulation, Int. Conf. on Comp. Exp. Eng. Sci. 2010, Las Vegas, USA, 2010.3.29.

37. S. Ogata, Y. Inoue, R. Kobayashi, T. Gotoh (NIT): Concurrent hybridization of lattice-Boltzmann fluid and coarse-grained particle solid, Int. Conf. on Comp. Exp. Eng. Sci. 2010, Las Vegas, USA, 2010 3.29.
38. T. Gotoh (NIT): On the scalar transfer flux in homogeneous isotropic turbulence, EUROMECH Colloquium 512, Turin, Italy, Oct. 26., 2009.
39. 兵頭志明(豊田中研):材料の自発的構造形成と材料設計, 日本化学会第90春季年会(2010)産学交流シンポジウム2010「化学の世界をシミュレーション」(近畿大学本部キャンパス), 2010年3月28日.
40. T. Gotoh (NIT): Numerical simulation of fluid induced vibration of micron scale graphenes, Ilmenau University of Technology, May 26, 2010.
41. 兵頭志明(豊田中研):マイクロとマクロの現象を繋ぐこと -いったい何が問題なのか-, 日本材料科学会第59期第1回分子動力学部門委員会(公開部門委員会), 北見工業大学, 2010年9月22日.
42. 井上洋平(同志社大学)「メゾスケールにおける流体・構造体連成シミュレーション」同志社大学 微粒子科学技術センター講演会「先進微粒子材料の科学と工学の融合」, 2011年3月11日

② 口頭発表 (国内会議 109件、国際会議 41件)

1. 高垣昌夫, 後藤俊幸(名工大): 多孔質表面近傍およびその内部の流動解析, 日本流体力学会中部支部講演会, 岐阜大学, 2005年11月25日.
2. Yoshio Tanaka (AIST): Joint Grid experiments on AIST-TeraGrid-PRAGMA testbed, Supercomputing 2006, Seattle, USA, November 14-17, 2005 (research exhibits).
3. Yoshio Tanaka (AIST): Recent AIST activities for making Grid a real infrastructure for large-scale applications, APSTC Technical Review Meeting, Singapore, Singapore, January 11, 2006.
4. Yoshio Tanaka (AIST): Recent activities on building a production Grid in the Asia Pacific Region, APAN Middleware Workshop, Tokyo, Japan, January 22, 2006.
5. Yoshio Tanaka (AIST): Implementation and evaluation of large-scale long-run applications on the Grid, 2nd Korea-Japan Grid Symposium, Tokyo, Japan, January 25, 2006.
6. Yoshio Tanaka (AIST): Introduction of PRAGMA routine-basis experiment, Global Grid Forum 16, Athens, Greece, February 13, 2006.
7. 尾形修司, 河野貴久(名工大): ハイブリッド DFT-MD 法による Si 基材料のナノ摩擦, 日本物理学会年次大会, 松山, 2006年3月27日.
8. 河野貴久, 尾形修司(名工大): 歪んだ Si 結晶中の酸素拡散:ハイブリッド DFT-MD 法による機構解析, 日本物理学会年次大会, 松山, 2006年3月27日.
9. 遠藤剛, 後藤俊幸(名工大): 多孔質内部の流動解析, 日本物理学会年次大会, 松山, 2006年3月28日.
10. 武宮博, 田中良夫, 中田秀基, 関口智嗣(産総研): 大規模長時間実行 Grid アプリケーションの実装と評価, 先進的計算基盤システムシンポジウム, Vol. 2006, No. 5, pp. 351-358, 2006.5.
11. Yoshio Tanaka, Hiroshi Takemiya, Satoshi Sekiguchi (AIST), Shuji Ogata (NIT), Aiichiro Nakano, Rajiv K. Kalia, Priya Vashishta (LSU): Adaptive Grid-enabled SIMOX Simulation on Japan-US Grid Testbed, TeraGrid Conference 2006, June 2006.
12. H. Touil (Paris VI), M. Y. Hussaini (FSU), T. Gotoh (NIT), R. Rubinstein (NASA LaRC), and S. L. Woodruff (FSU): Intrinsic Langevin models of Turbulence, Nagoya Univ., Sept. 14, 2006.
13. Takahiro Igarashi (JAEA), Shuji Ogata (NIT), and Takashi Tsukada (JAEA):

- Development and Application of Hybrid Fast-Coarse-Grained-Particle/Molecular-Dynamics Simulation Method, Third International Conference on Multiscale Materials Modeling, Sept. 18-22, 2006.
14. Shuji Ogata, Takahiro Igarashi, Takahisa Kouno, Ryo Kobayashi, and Hiroki Iida (NIT): Hybrid Density-Functional-Theory/Molecular-Dynamics/Fast-Coarse-Grained-Particle Simulation Schemes for Reaction Processes at Nano-Interfaces, Third International Conference on Multiscale Materials Modeling, Sept. 18-22, 2006.
 15. 飯田裕樹, 尾形修司, 小林亮(名工大):粗視化粒子法の2種原子系への拡張, 日本物理学会秋季大会, 千葉大学, 2006年9月26日.
 16. 小林亮, 尾形修司, 後藤俊幸(名工大):格子ボルツマン法、粗視化粒子法を用いた流体・固体ハイブリッド計算, 日本物理学会秋季大会, 千葉大学, 2006年9月26日.
 17. 和合純, 河野貴久, 尾形修司(名工大):ハイブリッド密度汎関数一分子動力学法によるSIMOX初期過程のシミュレーション, 日本物理学会秋季大会, 千葉大学, 2006年9月26日.
 18. 高垣昌夫, 後藤俊幸(名工大):親水性と疎水性を併せ持つ多孔質内の流れ, 日本物理学会秋季大会, 千葉大学, 2006年9月.
 19. 奥村徹, 後藤俊幸, 渡邊威(名工大):乱流のランジュバンモデリング, 日本物理学会秋季大会, 千葉大学, 2006年9月.
 20. 渡邊威, 後藤俊幸(名工大):パッシブスカラー乱流における間欠性と非等方性の影響について, 日本物理学会秋季大会, 千葉大学, 2006年9月.
 21. Yingwen Song, Yoshio Tanaka, Hiroshi Takemiya, and Satoshi Sekiguchi (AIST): Dynamic Resource Allocation Based on On-the-fly Reservation, IEEE International Conference on Computer and Information Technology, Sep., 2006.
 22. 鈴木敏夫, 渡邊威, 後藤俊幸(名工大):固体粒子の乱流拡散とその乱流への影響, 九州大学応用力学研究所研究集会:乱流現象及び多自由度系の動力学, 構造と統計法則, 九州大学, 2006年11月.
 23. 高垣昌夫, 後藤俊幸(名工大):非等方多孔質中の2相流の格子ボルツマン法による解析, 日本物理学会春季大会, 鹿児島大学, 2007年3月.
 24. 小林亮, 飯田裕樹, 中村貴英, 尾形修司(名工大):高速粗視化粒子法の再帰適用による $\text{nm} \sim \mu\text{m}$ スケールのシミュレーション:多成分系適用と熱伝導特性, 日本物理学会春季大会, 鹿児島大学, 2007年3月18日.
 25. 尾形修司, 河野貴久, 和合純(名工大):ナノ歪固体のハイブリッド量子古典シミュレーション:原子スケール摩擦, 原子拡散バリア, SIMOX, 日本物理学会春季大会, 鹿児島大学, 2007年3月18日.
 26. Y. Tanaka (AIST): Implementation of a flexible, robust, and efficient Grid-enabled QM/CL simulation, International conference on computational methods, Hiroshima, 2007.4.4-6.
 27. Xiao-dong Niu, Shiaki Hyodo, Toshihisa Munekata (TCL), and Kazuhiko Suga (OPU): Kinetic lattice Boltzmann method for microscale gas flows: Issues on boundary condition, relaxation time, and regularization, The 4th ICMMS Conference, Munich, Germany, 2007.7.16-20.
 28. Y. Inoue, J. Tanaka, T. Gotoh and S. Ogata (NIT): Interaction between flow and coarse-grained particle system, 16th Discrete Simulation of Fluid Dynamics (DSFD 2007), Banff, Canada, 2007.7.23-27.
 29. 渡邊威, 後藤俊幸(名工大):パッシブスカラー乱流におけるスカラーフラックススベクトルの振る舞い, 日本流体力学学会年会, 東京大学, 2007.8.6-8.
 30. 西尾圭史, 田中友和, 村田道友, 須賀一彦(大阪府大):境界面再構築法と組み合

- わせた格子ボルツマン法による多孔体内流れの解析, 日本流体力学会年会, 東京大学, 2007.8.6-8.
31. 田中友和, 西尾圭史, 村田道友, 須賀一彦(大阪府大): 格子ボルツマン法による多孔体内流動解析のための境界面再構築法の開発, 日本機械学会 2007 年度年次大会講演会, 大阪, 2007.9.9-12.
 32. Y. Song, Y. Tanaka, H. Takemiya, and S. Sekiguchi (AIST): A reservation-based programmable web service framework for resource provisioning and Grid virtualization, International conference on high performance computing asia, Seoul, Korea, 2007.9.12.
 33. 尾形修司, 阿部祐也, 中村貴英, 小林亮, 河野貴久(名工大): アダプティブなハイブリッド量子古典シミュレーション法, 日本物理学会, 北海道大学, 2007.9.21.
 34. 阿部祐也, 中村貴英, 小林亮, 尾形修司(名工大): 金属系の対するハイブリッド量子古典法の精度検証, 日本物理学会, 北海道大学, 2007.9.21.
 35. 小林亮, 中村貴英, 尾形修司(名工大): 金属表面侵食の分子動力学-粗視化粒子法ハイブリッドシミュレーション, 日本物理学会, 北海道大学, 2007.9.21.
 36. 中村貴英, 小林亮, 尾形修司(名工大): マルチスケールシミュレーションのための粗視化粒子法の高精度化: 非調和性の導入, 日本物理学会, 北海道大学, 2007.9.21.
 37. Y. Song, H. Takemiya, Y. Tanaka, and S. Sekiguchi (AIST): Web service-based dynamic resource and job managements for large-scale and long-time Grid computations, IEEE 7th international conference on computer and information technology, Aizu-Wakamatsu, 2007.10.17-19.
 38. K. Suga, T. Tanaka, Y. Nishio, and M. Murata (OPU): A boundary reconstruction scheme for lattice Boltzmann flow simulation in porous media, 1st Asian Symp. Comp. Heat Transfer and Fluid Flow, Xi'an, China, 2007.10.18-21.
 39. Ryo Kobayashi, Takahide Nakamura, and Shuji Ogata (NIT): Development of hybrid atomistic/coarse-grained dynamic simulation approach, The 5th International Conference on Physical and Numerical Simulation of Materials Processing, Zhengzhou, China, 2007.10.23-27.
 40. Xiao-dong Niu, 兵頭志明, 棟方稔久(豊田中研), 須賀一彦(大阪府大): 格子ボルツマン法による燃料電池ガス拡散層内の多相流れの解, 日本機械学会第 20 回計算力学講演会, 同志社大学, 2007.11.
 41. 井上洋平, 田中順二, 小林亮, 尾形修司, 後藤俊幸(名工大): 埋め込み境界法を適用した格子ボルツマン法による流体・変形物体の相互作用の解析, 日本機械学会第 20 回計算力学講演会, 同志社大学, 2007.11.
 42. 廣實孝史, 吉野正人, 三谷浩光(信州大): 低レイノルズ数流れにおける安定問題の格子ボルツマンシミュレーション, 日本機械学会第 20 回計算力学講演会, 同志社大学, 2007.11.
 43. 田中順二, 井上洋平, 小林亮, 尾形修司, 後藤俊幸(名工大): 粗視化粒子法と格子ボルツマン法による流体・構造体相互作用の解析, 日本流体力学会中部支部会, 名古屋大学, 2007.11.
 44. 米本隆, 後藤俊幸, 渡邊威(名工大): 格子ボルツマン法による非圧縮乱流の直接数値計算, 日本流体力学会中部支部会, 名古屋大学, 2007.11.
 45. 渡邊威(名工大): 乱流の秩序化過程と間欠性におけるスケーリング則, 九州大学応用力学研究所研究集会-乱流現象及び多自由度系の動力学, 構造と統計法則, 九州大学, 2007.11.
 46. 米本隆, 後藤俊幸, 渡邊威(名工大): 格子ボルツマン法による非圧縮乱流の直接数値計算, 九州大学応用力学研究所研究集会-乱流現象及び多自由度系の動力学, 構造と統計法則, 九州大学, 2007.11.

47. 村山寿郎, 吉野正人(信州大): 固体を含む二相系 LBM における弾性モデルの検討, 第 21 回数値流体力学シンポジウム, 東京, 2007.12.19-21.
48. 西尾圭史, 須賀一彦(大阪府大): 多孔壁をもつチャンネル流れの LBM 数値解析, 第 21 回数値流体力学シンポジウム, 東京, 2007.12.19-21.
49. Miyabi Hiyama, Tomoyuki Kinjo, and Shiaki Hyodo (TCL): Angular Momentum Form of Verlet Algorithm for Rigid Molecules, American Physical Society March Meeting, 2008.3.14.
50. 西尾圭史, 須賀一彦(大阪府大): 格子ボルツマン法による多孔体-チャンネル境界流れの解析, 機械学会関西支部第 83 期定時総会講演会, 大阪, 2008.3.14-15.
51. 阿部祐也, 尾形修司, 小林亮, 中村貴英(名工大): 乱れた金属系に対するハイブリッド量子古典法の領域接続精度, 日本物理学会年次大会, 近畿大学, 2008.3.23.
52. 中村貴英, 小林亮, 尾形修司(名工大): 粗視化粒子法のカーボンナノチューブへの適用, 日本物理学会年次大会, 近畿大学, 2008.3.23.
53. 小林亮, 中村貴英, 後藤謙次, 尾形修司(名工大): 金属ナノスケール突起物の振動制御: ハイブリッド粗視化粒子原子シミュレーション法適用, 日本物理学会年次大会, 近畿大学, 2008.3.23.
54. 渡邊威, 後藤俊幸(名工大): 一様平均スカラー勾配下の乱流輸送におけるスカラーフラックスの統計, 日本物理学会年次大会, 近畿大学, 2008.3.
55. 小林亮, 中村貴英, 尾形修司(名工大): 金属ナノ構造の振動制御: 原子粗視化粒子ハイブリッドシミュレーション, 日本金属学会, 武蔵工業大学, 2008.3.26.
56. T. Watanabe (NIT): Scalar flux statistics and intermittency in passive scalar turbulence with a mean gradient, Frontiers of Computational Science -Macroscopic Systems/Fluid Mechanics, Nagoya Univ., 2008.3.26.
57. 竹中奨(大阪府大), 牛小東(豊田中研), 金城友之(豊田中研), 兵頭志明(豊田中研), 須賀一彦(大阪府大): 高クヌッセン数マイクロ流路流れの LBM 解析, 第 45 回日本伝熱シンポジウム, つくば, 2008.5.21-23.
58. 田中順二, 井上洋平, 小林亮, 尾形修司, 後藤俊幸(名工大): 粗視化粒子法と格子ボルツマン法によるマイクロスケール変形物体と流体との相互作用の解析, 第 57 回理論応用力学講演会, 東京, 2008 年 6 月 10-12 日.
59. Yohei Inoue, Shuji Ogata, Ryo Kobayashi, and Toshiyuki Gotoh(NIT): Interaction between Microscale Structures and Fluids studied by Coarse-Grained Particle Method and Lattice Boltzmann Method, International Conference on Mesoscopic Methods in Engineering and Science (ICMMES), Amsterdam, Nederland, 2008.6.16-20.
60. Yohei Inoue, Junji Tanaka, Ryo Kobayashi, Shuji Ogata, and Toshiyuki Gotoh (NIT): Interaction between Microscale Structures and Fluids studied by Coarse-Grained Particle Method and Lattice Boltzmann Method, 17th International Conference on the Discrete Simulation of Fluid Dynamics, Florianópolis, Brazil, 2008.8.4-8.
61. K.Suga and Y. Nishio (OPU): Lattice Boltzmann flow simulation of porous medium-clear fluid interface regions, 19th Int. Symp. on Transp. Phenomena, Reykjavik, Iceland, 2008.8.17-21.
62. Y. Song, Y. Tanaka, H. Nakada, and S. Sekiguchi (AIST): Towards Simplifying Grid Enablement for Scientific Applications, The 2008 International Symposium on Applied Computing and Computational Sciences, Hong Kong, China, 2008.8.
63. 須賀一彦, 久保昌之(大阪府大): 気液界面における物質輸送のモデリングについて, 日本流体力学会年会, 神戸, 2008.9.4-7.
64. 尾形修司, 阿部祐也, 小林亮(名工大): C ナノチップの Si への押下擦過程: ハイブリッド量子古典シミュレーション, 日本物理学会 2008 年秋季大会, 2008 年 9 月 22 日.

65. 中村貴英, 小林亮, 尾形修司(名工大):粗視化粒子法の乱れた炭素系への適用, 日本物理学会 2008 年秋季大会,2008 年 9 月 22 日.
66. 小林亮, 中村貴英, 尾形修司(名工大):大規模変形に起因する欠陥生成のシミュレーション:原子-粗視化粒子のハイブリッド法, 日本物理学会 2008 年秋季大会, 2008 年 9 月 22 日.
67. 大庭伸子, 山川俊輔, 兵頭志明(豊田中研), 尾形修司(名工大):ハイブリッド量子古典シミュレーション法の層間化合物への応用, 日本物理学会 2008 年秋季大会, 岩手大学, 2008 年 9 月 22 日.
68. 米本隆, 渡邊威, 後藤俊幸(名工大):格子ボルツマン法による一様等方性減衰乱流の直接数値計算, 日本物理学会 2008 年秋季大会, 2008 年 9 月 23 日.
69. 野々垣昭則, 後藤俊幸, 井上洋平(名工大):せん断流れ場中の二相系の時間発展, 日本物理学 2008 年秋季大会, 2008 年 9 月 23 日.
70. 校條祐輔, 後藤俊幸, 井上洋平(名工大):多重格子を用いた Kelvin-Helmholtz 不安定性の直接数値計算, 日本物理学会 2008 年秋季大会, 2008 年 9 月 23 日.
71. 渡邊威, 後藤俊幸(名工大):乱流中の単一高分子鎖の挙動の数値シミュレーション, 日本物理学会 2008 年秋季大会, 2008 年 9 月 23 日.
72. 小林亮, 中村貴英, 尾形修司(名工大):大規模変形に起因する欠陥生成の解析:原子・粗視化粒子のハイブリッド法, 日本金属学会 2008 年秋期大会, 熊本大学, 2008 年 9 月 24 日.
73. K. Suga and S. Nishiguchi (OPU): Application of an analytical wall-function to a 3D diffuser flow, 13th ERCOFTAC/IAHR Workshop on Refined Turbulence Modelling, Graz, Austria, 2008.9.25-26.
74. Ryo Kobayashi, Takahide Nakamura, and Shuji Ogata (NIT): Large-Scale Simulation of Oscillating Metal-Nanorod: Application of the Hybrid Molecular-Dynamics/Coarse-Grained-Particle Approach, The Fourth International Conference on Multiscale Materials Modeling (MMM), Florida, U.S.A, 2008.10.27-31.
75. Shuji Ogata, Yuya Abe, and Ryo Kobayashi (NIT): Adaptive Embedding of the Electronic-Density-Functional-Theory in the Classical Molecular Dynamics: Application to Nano-Indentation, The Fourth International Conference on Multiscale Materials Modeling (MMM), Florida, U.S.A, 2008.10.27-31.
76. 田中友和, 須賀一彦(大阪府大):MRT 格子ボルツマン法によるダクト内流れの解析, 第21回日本機械学会計算力学部門講演会, 沖縄, 2008.11.2.
77. 井上洋平, 小林亮, 尾形修司, 後藤俊幸(名工大):三次元マイクロスケール流体・固体間相互作用ハイブリッド計算法, 第6回日本流体力学会中部支部講演会, 名古屋, 2008 年 11 月 8 日.
78. 米本隆, 渡邊威, 後藤俊幸(名工大):格子ボルツマン法による一様等方性減衰乱流の直接数値計算, 第6回日本流体力学会中部支部講演会, 名古屋, 2008 年 11 月 8 日.
79. 野々垣昭則, 井上洋平, 後藤俊幸(名工大):せん断流れ場中の二相系の時間発展, 第6回日本流体力学会中部支部講演会, 名古屋, 2008 年 11 月 8 日.
80. 校條祐輔, 井上洋平, 後藤俊幸(名工大):多重格子を用いた Kelvin-Helmholtz 不安定性の直接数値計算, 第6回日本流体力学会中部支部講演会, 名古屋, 2008 年 11 月 8 日.
81. 後藤俊幸, 渡邊威(名工大):平均一様スカラー勾配のもとでの乱流スカラー場の統計, 九州大学応用力学研究所研究集会(乱流現象及び多自由度系の動力学, 構造と統計法則), 九州大学, 2008 年 11 月 13-15 日.
82. Takahide Nakamura, Ryo Kobayashi, and Shuji Ogata (NIT): Recursive Coarse-Grained Particle Method for Inhomogeneous Materials, Materials Research

- Society (MRS) Meeting, Boston, U.S.A., 2008.12.2.
83. Y. Song, H. Takemiya, Y. Tanaka, H. Nakada, and S. Sekiguchi(AIST): GRPLib: A Web Service Based Framework Supporting Sustainable Execution of Large-scale and Long-time Grid Applications, IEEE International Symposium on Parallel and Distributed Processing and Applications, Sydney, Australia, 2008.12.
 84. 村田道友, 須賀一彦(大阪府大): 熱格子ボルツマン法による多孔体の伝熱性能解析, 第 22 回数値流体力学シンポジウム, 東京, 2008.12.18.
 85. 田中友和, 須賀一彦(大阪府大): 格子ボルツマン法 LES の壁面境界モデル, 日本機械学会関西支部第84期定時総会講演会, 大阪, 2009年3月16-17日.
 86. 大庭伸子, 山川俊輔, 兵頭志明(豊田中研), 尾形修司(名工大): ハイブリッド量子古典シミュレーション法による層間化合物のダイナミクス, 日本物理学会第 64 回年次大会, 東京, 2009年3月28日.
 87. 小林亮, 中村貴英, 尾形修司(名工大): 大規模シミュレーションのための原子・粗視化粒子境界における弾性波の無反射条件の提案, 日本物理学会第 64 回年次大会, 東京, 2009年3月28日.
 88. 中村貴英, 小林亮, 尾形修司(名工大): Atom-Relax Coarse-Grained Particle Method を用いた結晶粒界を含む金属系の欠陥生成シミュレーション, 日本物理学会第 64 回年次大会, 東京, 2009年3月28日.
 89. 小林亮, 中村貴英, 尾形修司(名工大): 原子・粗視化粒子の同時並列的ハイブリッド計算手法, 日本金属学会, 日本金属学会 2009 年春期大会, 東京, 2009年3月29日.
 90. 井上洋平, 小林亮, 尾形修司, 後藤俊幸(名工大): 粗視化粒子法と格子ボルツマン法によるマイクロスケール変形物体と流体との相互作用の解析, 第 58 回理論応用力学講演会, 東京, 2009年6月9-11日.
 91. 小林亮, 中村貴英, 尾形修司(名工大): 金属亀裂進展のマルチスケール・シミュレーション, 第 58 回理論応用力学講演会, 東京, 2009年6月9-11日.
 92. 竹中奨, 須賀一彦(大阪府大), 金城友之, 兵頭志明(豊田中研): ナノ/メゾ多孔体内流れの LBM 解析, 日本混相流学会年会講演会, 熊本大学, 2009年8月9日.
 93. 久保昌之, 須賀一彦(大阪府大): 多孔質壁 AWF による透過性壁面チャンネル流れの解析, 日本流体力学会年会, 東洋大学, 2009年9月3日.
 94. 井上洋平, 小林亮, 尾形修司, 後藤俊幸(名工大): ハイブリッド手法による微小薄膜と流体との連成解析, 日本物理学会秋季大会, 熊本, 2009年9月25-28日.
 95. 渡邊威, 後藤俊幸(名工大): 一様乱流中の単一高分子鎖の挙動とモデリング, 日本物理学会秋季大会, 熊本大学, 2009年9月25-28日.
 96. 大庭伸子(豊田中研), 尾形修司, 小林亮(名工大), 山川俊輔, 兵頭志明(豊田中研): グラファイト層間化合物における Li 拡散に関するハイブリッド量子古典シミュレーション, 日本物理学会秋季大会, 熊本大学, 2009年9月25日.
 97. 大庭伸子(豊田中研), 尾形修司, 小林亮(名工大), 兵頭志明(豊田中研): ハイブリッド量子古典シミュレーションにおける量子領域間相互作用の考慮, 日本物理学会秋季大会, 熊本大学, 2009年9月26日.
 98. 小林亮, 中村貴英, 尾形修司(名工大): 亀裂進展のマルチスケール解析: 原子-粗視化粒子のハイブリッド法, 日本物理学会秋季大会, 熊本大学, 2009年9月26日.
 99. 井上洋平, 小林亮, 尾形修司, 後藤俊幸(名工大): 流体-グラフェン相互作用のハイブリッドシミュレーション, 日本機械学会第 22 回計算力学講演会, 金沢, 2009年10月10-12日.
 100. 渡邊威, 後藤俊幸(名工大): 乱流中の単一高分子鎖の挙動とその統計性, 日本機械学会第 22 回計算力学講演会, 金沢大学, 2009年10月10-12日.
 101. 松島佑介, 金田昌之, 須賀一彦(大阪府大): 熱格子ボルツマン法による多孔体内熱流動の数値解析, 日本機械学会第 22 回計算力学講演会, 金沢大学, 2009年10

- 月 12 日.
102. 竹中奨, 須賀一彦(大阪府大), 金城友之, 兵頭志明(豊田中研): MD と LBM によるナノ/メゾ多孔体内流れのマルチスケール・シミュレーション, 日本機械学会第 22 回計算力学講演会, 金沢大学, 2009 年 10 月 12 日.
 103. 大庭伸子(豊田中研), 尾形修司, 小林亮(名工大), 山川俊輔, 兵頭志明(豊田中研): グラファイト層間化合物に対するハイブリッド量子古典シミュレーション, 日本機械学会第 22 回計算力学講演会, 金沢大学, 2009 年 10 月 12 日.
 104. 樋山みやび(豊田中研), 兵頭志明(豊田中研): 分子間の相対配向を取り入れた反応確率の計算方法, 日本機械学会第 22 回計算力学講演会, 金沢大学, 2009 年 10 月 12 日.
 105. 小林亮, 中村貴英, 尾形修司(名工大): 原子-粗視化粒子ハイブリッド法による亀裂進展のマルチスケール解析, 日本機械学会第 22 回計算力学講演会, 金沢大学, 2009 年 10 月 12 日.
 106. 中村貴英, 小林亮, 尾形修司(名工大): 原子緩和粗視化粒子法: 有限温度での固体の粗視化について, 日本機械学会第 22 回計算力学講演会, 金沢大学, 2009 年 10 月 12 日.
 107. 中尾太貴, 中村太志, 小林亮, 尾形修司(名工大): 液体・金属界面におけるバブル崩壊に関する分子動力学シミュレーション, 日本機械学会第 22 回計算力学講演会, 金沢大学, 2009 年 10 月 12 日.
 108. 中村太志, 中尾太貴, 小林亮, 尾形修司(名工大): 流れ中のグラフェン群の挙動に関する分子動力学シミュレーション, 日本機械学会第 22 回計算力学講演会, 金沢大学, 2009 年 10 月 12 日.
 109. 尾形修司(名工大): 固固および固液界面のハイブリッド量子古典シミュレーション, 日本機械学会第 22 回計算力学講演会, 金沢大学, 2009 年 10 月 12 日.
 110. 宋応文, 田中良夫(産総研), 尾形修司(名工大), 関口智嗣(産総研): グリッドにおける大規模計算向けの QoS 資源管理機構の開発, 日本機械学会第 22 回計算力学講演会, 金沢大学, 2009 年 10 月 10-12 日.
 111. 渡邊威, 後藤俊幸(名工大): 乱流中の高分子鎖モデルの数値シミュレーション, 九州大学応用力学研究所研究集会(RIAM 研究集会) 乱流現象及び非平衡系の多様性と普遍性, 2009 年 11 月 12-14 日.
 112. 大庭伸子(豊田中研), 尾形修司, 小林亮(名工大), 山川俊輔, 兵頭志明(豊田中研): グラファイト層間化合物における Li 拡散に関するハイブリッド量子古典シミュレーション, 第 23 回分子シミュレーション討論会, 名古屋市中小企業振興会館, 2009 年 12 月 2 日.
 113. 井上洋平, 小林亮, 尾形修司, 後藤俊幸(名工大): ハイブリッド手法によるグラフェン微小薄膜と流体との相互作用解析, 日本流体力学会第 23 回数値流体力学シンポジウム, 仙台, 2009 年 12 月 16-18 日.
 114. 桐石 卓, 田中友和, 金田昌之, 須賀一彦(大阪府大): 壁関数モデルを用いた多緩和時間モデル格子ボルツマン法 LES によるダクト流れの数値解析, 第 24 回数値流体力学シンポジウム, 仙台, 2009 年 12 月 16 日.
 115. 織田文太郎, 金田昌之, 須賀一彦(大阪府大): 多緩和時間モデル格子ボルツマン法による多孔体壁チャンネル流れの数値解析, 第 24 回数値流体力学シンポジウム, 仙台, 2009 年 12 月 16 日.
 116. 竹中奨, 須賀一彦(大阪府大), 金城友之, 兵頭志明(豊田中研): MD と LBM によるナノスケール多孔体内流動の数値解析, 日本機械学会関西支部第 85 期定時総会講演会, 神戸大学, 2010 年 3 月 17 日.
 117. 大庭伸子(豊田中研), 尾形修司, 小林亮(名工大), 山川俊輔, 兵頭志明(豊田中研): ハイブリッド量子古典シミュレーションによるグラファイト層間化合物の動力学的研究: 層間 Li 拡散過程の密度依存性, 日本物理学会第 65 回年次大会, 岡山大

- 学, 2010年3月23日.
118. 中村貴英, 小林亮, 尾形修司(名工大): 固体のための粗視化粒子法の改良: 重み関数の最適化と有限温度効果, 日本物理学会第65回年次大会, 岡山大学, 2010年3月23日.
 119. 小林亮, 中村貴英, 尾形修司(名工大): 原子-粗視化粒子ハイブリッド法による亀裂進展の大規模シミュレーション, 日本物理学会第65回年次大会, 岡山大学, 2010年3月23日.
 120. 小林亮, 中村貴英, 尾形修司(名工大): 原子-粗視化粒子のハイブリッド法による亀裂進展のマルチスケール解析, 日本金属学会講演大会, 筑波大学, 2010年3月30日.
 121. Y. Song, Y. Tanaka (AIST), H. Takemiya (JAEA), A. Nakano (USC), S. Ogata (NIT), and S. Sekiguchi (AIST): The Grid Enablement and Sustainable Simulation of Multiscale Physics Applications, IEEE International Symposium on Cluster, Cloud, and Grid Computing, Shanghai, China, 2009.5.18-21.
 122. S. Takenaka, K. Suga (OPU), T. Kinjo, S. Hyodo (TCL): Flow simulations in a sub-micro porous medium by the lattice Boltzmann and the molecular dynamics methods, 7th Int. ASME conf. on Nanochannels, Microchannels and Minichannels, Pohang, South Korea, 2009.6.
 123. K. Suga and M. Kubo (OPU): Modeling high Schmidt number turbulent scalar transport across air-water interfaces, 6th Int. Symp. Turb. Shear Flow Phenomena, Seoul, South Korea, 2009.6.23.
 124. T. Watanabe (NIT): Single Polymer Dynamics in Isotropic Turbulence, RIMS Workshop "Mathematics and Physics across the Diversity of Turbulence Phenomena", Kobe, Institute, Kobe, 2009.7.9-11.
 125. Y. Inoue, R. Kobayashi, S. Ogata, and T. Gotoh (NIT): Hybrid Simulation of the Interaction between Fluid and Microscale Graphenes, 6th International Conference for Mesoscopic Methods in Engineering and Science (ICMMES2009), Canton, China, 2009.7.13-17.
 126. S. Ogata (NIT): Concurrent hybridization of molecular dynamics and quantum electro-mechanics or statistical coarse-graining scheme, ICCES special symp. meshless & other novel comp. methods, Slovenia, 2009.8.31-9.2.
 127. R. Kobayashi, T. Nakamura, and S. Ogata (NIT): Concurrent hybrid simulations of coarse-grained particle method with molecular dynamics and/or fluid dynamics, Int. Conf. Num. Anal. Appl. Math., Greece, 2009.9.18-22.
 128. S. Takenaka, K. Suga (OPU), T. Kinjo, and S. Hyodo (TCL): LBM and MD simulation of a flow in a nano-porous medium, 2nd Asian Symp. Comp. Heat Transfer and Fluid Flow, Jeju, South Korea, 2009.10.
 129. 渡邊威, 後藤俊幸(名工大): 乱流中の高分子鎖モデルの数値シミュレーション, 九州大学応用力学研究所研究集会(RIAM 研究集会) 乱流現象及び非平衡系の多様性と普遍性, 2009年11月
 130. 後藤俊幸, 渡邊威(名工大): 平均スカラー勾配下での乱流スカラーフラックスの統計法則. 日本物理学会第65回年次大会 岡山大学津島キャンパス, 2010年3月.
 131. 井上洋平, 箕浦康広, 後藤俊幸(名工大): マイクロスケールにおける流体・構造体連成問題の数値シミュレーション, 第15回 計算工学講演会(福岡), 2010年5月
 132. 兵頭志明(豊田中研): ミクロとマクロの数学的表現におけるギャップについて, 第13回理論化学討論会, 北海道大学, 2010年5月24日.
 133. 伊東敬彦, 竹中奨, 金田昌之, 須賀一彦(大阪府大): LBMとMDによるナノ多孔体内流れのシミュレーション, 第47回日本伝熱シンポジウム, 札幌, 2010.5.26-28.
 134. Y. Inoue, R. Kobayashi, S. Ogata, and T. Gotoh (NIT): Fluid-solid interaction at

- micro scales with finite mass ratio, 19th Discrete simulation of fluid dynamics (DSFD2010), Rome, Italy, Jul. 2010
135. 井上洋平(名工大):メゾスケールでの流体・構造連成に関するハイブリッドシミュレーションとその応用, 第4回 核融合科学研究所・名古屋工業大学合同セミナー(土岐), 2010年8月.
136. K. Suga, S. Takenaka, T. Ito, M. Kaneda (OPU), T. Kinjo, S. Hyodo(TCL): Lattice Boltzmann flow simulation in micro-nano transitional porous media, .14th Int. Heat Transfer Conf., Washinton, DC, U.S.A, 2010.8.8-8.13.
137. 渡邊威, 宇野聡志, 後藤俊幸(名工大):等方乱流中に分散したダンベルモデルの数値シミュレーション, 日本流体力学会年会 2010, 北海道大学, 2010年9月.
138. 小林亮, 中村貴英, 尾形修司(名工大):亀裂先端からの転位発生の粒径依存性:マルチスケール・シミュレーション解析, 日本物理学会秋期大会, 大阪府立大学, 2010年9月23日.
139. 大庭伸子(豊田中研), 尾形修司, 小林亮, 田村友幸(名工大), 山川俊輔, 兵頭志明(豊田中研):ハイブリッド量子古典シミュレーションによるグラファイト層間化合物の動力学的研究:グラファイトの構造変化とLi拡散, 日本物理学会秋期大会, 大阪府立大学, 2010年9月24日.
140. 大庭伸子(豊田中研), 尾形修司, 小林亮, 田村友幸(名工大), 兵頭志明(豊田中研):量子領域間相互作用を考慮したハイブリッド量子古典シミュレーション法の精度評価, 日本物理学会秋期大会, 大阪府立大学, 2010年9月26日.
141. 渡邊威, 宇野聡志, 後藤俊幸(名工大):高分子鎖のモデルと乱流場の相互作用に関する数値シミュレーション, 日本物理学会秋季大会, 大阪府立大学, 2010年9月.
142. 後藤俊, 渡邊威(名工大):一様な平均勾配のもとでのパッシブスカラー乱流の統計, 日本機械学会 2010年度年次大会, 名古屋工業大学, 2010年9月.
143. 中村貴英, 小林亮, 尾形修司(名工大):粗視化粒子法:重み関数の最適化と有限温度粗視化ダイナミクスについて, 第24回分子シミュレーション討論会, 金沢, 2010年11月24日.
144. 大庭伸子, 尾形修司, 小林亮, 田村友幸(名工大), 山川俊輔, 兵頭志明(豊田中研):ハイブリッド量子古典シミュレーションによるグラファイト層間化合物の動力学的研究:グラファイトの構造変化とLi拡散, 第24回分子シミュレーション討論会, 金沢, 2010年11月25日.
145. S. Ogata, N. Ohba, T. Tamura, and R. Kobayashi (NIT): Development of Order-N Real-Space DFT and Its Concurrent Hybridization with Classical MD: Accuracy, Performance, and Its Applications, Materials Research Society Fall Meeting, Boston, 2011.12.1.
146. R. Kobayashi, T. Nakamura, and S. Ogata (NIT): Multiscale Atomistic/Coarse-Grained Simulation of Fast Crack Propagation, Materials Research Society Fall Meeting, Boston, 2011.12.1.
147. 小林亮, 中村貴英, 尾形修司(名工大):亀裂進展の動的・有限温度マルチスケール解析, 第20回日本MRS学術シンポジウム, 横浜. 2010年12月20日.
148. M. Kaneda, Y. Matsushima, K. Suga(OPU): Numerical Simulation For Heat And Fluid Flow Through Porous Media, ASME/JSME 2011 8th Thermal Eng. Joint Conf., Honolulu, Hawaii, USA, 2011.3.12-3.17.
149. 桐石 卓, 金田昌之, 須賀一彦(大阪府大): 壁関数モデルを用いた多緩和時間格子ボルツマン法 LES によるダクト内乱流の数値解析, 日本機械学会関西支部第86期定時総会講演会, 京工繊大, 2011年3月.
150. 井上洋平(同志社大学), 小林亮, 尾形修司, 後藤俊幸(名工大):密度比を考慮した流体と弾性体の連成解析, 日本物理学会第66回年次大会, 新潟大学, 2011

年 3 月 25 日.

③ ポスター発表 (国内会議 28 件、国際会議 4 件)

1. T. Watanabe (NIT): Anomalous Scaling Laws of Passive Scalar Intermittency in Three-Dimensional Turbulence, Proceedings of IUTAM Symposium on Computational Physics and New Perspectives in Turbulence, Nagoya, Sept. 12, 2006.
2. 宋応文, 武宮博, 田中良夫, 関口智嗣(産総研): グリッド上での大規模シミュレーションに向けての計算資源の動的予約配分 API の開発, ハイパフォーマンスコンピューティングと計算科学シンポジウム, 2007.1.
3. 宋応文, 田中良夫, 武宮博, 関口智嗣(産総研): 大規模計算のためのグリッド計算資源の仮想化 API の開発, 第 5 回先進的計算基盤システムシンポジウム, 学術総合センター, 東京, 2007.5.23-25.
4. 樋山みやび, 金城友之, 兵頭志明(豊田中研): 剛体分子の分子動力学計算における角運動量ベールアルゴリズム, 第 21 回分子シミュレーション討論会, 金沢, 2007.11.26-28.
5. 宋応文, 田中良夫, 武宮博, 関口智嗣(産総研): グリッドにおける MPI アプリケーションのサービス指向アーキテクチャー: フレームワークの提案, ハイパフォーマンスコンピューティングと計算科学シンポジウム, 東京工業大学, 2008.1.17-18.
6. 宋応文, 武宮博, 池上努, 田中良夫, 関口智嗣(産総研): 計算グリッドにおける資源配分システム的设计及び開発, 第 6 回先進的計算基盤システムシンポジウム SACSIS 2008, 広島, 2008 年 6 月 11-13 日.
7. 井上洋平, 小林亮, 尾形修司, 後藤俊幸(名工大): Numerical Simulation of Microscale Fluid-Structure Interactions, 第 2 回シミュレーション科学シンポジウム, 多治見, 2008.9.25.
8. 竹中奨, 須賀一彦(大阪府大), 金城友之, 兵頭志明(豊田中研): MD と LBM によるマイクロ多孔体内流れのシミュレーション, 第 22 回分子シミュレーション討論会, 岡山大学, 2008 年 11 月 18 日.
9. 樋山みやび(豊田中研), 兵頭志明(豊田中研): 古典運動の軌跡と反応確率を用いた化学反応ダイナミックスの扱い, 第 22 回分子シミュレーション討論会, 岡山大学, 2008 年 11 月 18 日.
10. 大庭伸子, 山川俊輔, 兵頭志明(豊田中研), 尾形修司(名工大): ハイブリッド量子古典シミュレーション法の層間化合物への応用, 第 22 回分子シミュレーション討論会, 岡山大学, 2008 年 11 月 18 日.
11. 小林亮, 中村貴英, 尾形修司(名工大): 欠陥を含むグラフェンの脆性破壊シミュレーション: 原子-粗視化粒子のハイブリッド法, 第 22 回分子シミュレーション討論会, 岡山大学, 2008 年 11 月 18 日.
12. 中村貴英, 小林亮, 尾形修司(名工大): 粗視化粒子法の非一様系への適用: 乱れた炭素系の粗視化, 第 22 回分子シミュレーション討論会, 岡山大学, 2008 年 11 月 18 日.
13. Shuji Ogata, Yuya Abe, and Ryo Kobayashi(NIT): Adaptive Hybridization of Density-Functional Theory and Molecular Dynamics: Reaction of Pressurized Water Molecule Trapped in Between Nano-Structured Diamond and Silicon, Materials Research Society (MRS) Meeting, Boston, U.S.A., 2008.12.2.
14. 樋山みやび, 兵頭志明(豊田中研): 分子間の相対配向を取り入れた反応確率の計算方法, 第 12 回理論化学討論会, 東京大学, 2009 年 5 月 28 日.
15. 宋応文(産総研), 井上洋平(名工大), 田中良夫(産総研), 尾形修司, 後藤俊幸(名工大), 関口智嗣(産総研): マルチコア上での格子ボルツマン手法の開発, 第 7 回先進的計算基盤システムシンポジウム SACSIS 2009, 広島, 2009 年 5 月 28-29 日.
16. 竹中奨, 須賀一彦(大阪府大), 金城友之, 兵頭志明(豊田中研): ナノ多孔体内流

- れの MD シミュレーション, 第 46 回日本伝熱シンポジウム, 京都, 2009 年 6 月 2 日.
17. 樋山みやび, 兵頭志明(豊田中研):分子間の相対配向を取り入れた反応確率の計算方法, 第3回分子科学討論会, 名古屋大学, 2009 年 9 月 22 日.
 18. 井上洋平, 小林亮, 尾形修司, 後藤俊幸(名工大):微小スケールにおける流体・固体ハイブリッドシミュレーション, 日本流体力学会中部支部講演会, 名古屋, 2009 年 11 月 16 日.
 19. 渡邊威, 後藤俊幸(名工大):Scalar-flux statistics in passive scalar turbulence with a mean gradient, 日本流体力学会中部支部講演会, 名古屋, 2009 年 11 月 16 日.
 20. 小林亮, 中村貴英, 尾形修司(名工大):亀裂進展のマルチスケール解析、第23回分子シミュレーション討論会, 名古屋市中小企業振興会館, 2009 年 12 月 2 日.
 21. 中村貴英, 小林亮, 尾形修司(名工大):粗視化粒子法:有限温度での固体の粗視化について, 第23回分子シミュレーション討論会, 名古屋市中小企業振興会館, 2009 年 12 月 2 日.
 22. 中尾太貴(名工大), 鍛島康裕(名造大), 小林亮, 尾形修司(名工大):液体・金属界面におけるバブル崩壊に関するシミュレーション, 第23回分子シミュレーション討論会, 名古屋市中小企業振興会館, 2009 年 12 月 2 日.
 23. 中村太志, 中尾太貴, 小林亮, 尾形修司(名工大):流れ中のグラフェン群の挙動に関する分子動力学シミュレーション, 第23回分子シミュレーション討論会, 名古屋市中小企業振興会館, 2009 年 12 月 2 日.
 24. R. Kobayashi, T. Nakamura, and S. Ogata (NIT): Hybrid MD-CGP simulation of the crack propagation, 4th ACCMS VO, Sendai, 2010.1.12-14.
 25. T. Nakamura, R. Kobayashi, and S. Ogata (NIT): Improvement of Coarse-Grained Particle Method: Optimized Weighting Function and Finite Temperature Effects, 4th ACCMS VO, Sendai, 2010.1.12-14.
 26. 櫻井克, 中村貴英, 小林亮, 田村友幸, 尾形修司(名工大):シリカガラスの第一原理引張試験, 第 24 回分子シミュレーション討論会, 金沢, 2010 年 11 月 24 日.
 27. 樋口拓磨, 田村友幸, 小林亮, 尾形修司(名工大):OpenMP+MPI 並列による MD コードの高速化, 第 24 回分子シミュレーション討論会, 金沢, 2010 年 11 月 24 日.
 28. 中尾太貴, 小林亮, 田村友幸, 尾形修司(名工大):グラファイトの剥離に関する分子動力学法を用いた大規模シミュレーション, 第 24 回分子シミュレーション討論会, 金沢, 2010 年 11 月 25 日.
 29. 中村太志, 中尾太貴, 小林亮, 尾形修司(名工大):流れ中のグラフェンの挙動に関する分子動力学シミュレーション, 第24回分子シミュレーション討論会, 金沢, 2010 年 11 月 25 日.
 30. 中尾太貴, 中村貴英, 小林亮, 田村友幸, 尾形修司(名工大):グラファイトの剥離に関する分子動力学法を用いた大規模シミュレーション, 第 20 回日本 MRS 学術シンポジウム, 横浜, 2010 年 12 月 20 日.
 31. 櫻井克, 中村貴英, 小林亮, 田村友幸, 尾形修司(名工大):水分子を含んだシリカガラスの第一原理引張試験, 第 20 回日本 MRS 学術シンポジウム, 横浜, 2010 年 12 月 20 日.
 32. 中村貴英, 小林亮, 尾形修司(名工大):粗視化粒子法の有限温度固体への発展, 第 20 回日本 MRS 学術シンポジウム, 横浜, 2010 年 12 月 20 日.

(4)知財出願

- ①国内出願 (0 件)
- ②海外出願 (0 件)
- ③その他の知的財産権
なし

(5)受賞・報道等

① 受賞

1. 関口智嗣, 田中良夫, 中田秀基(産総研):平成 21 年度科学技術分野の文部科学大臣表彰・科学技術賞(研究部門)「科学技術計算用グリッドミドルウェアの研究」.
2. 尾形修司(名工大):日本機械学会 優秀講演表彰(2010.2), 論文題目「固固および固液界面のハイブリッド量子古典シミュレーション」.
3. 大庭伸子(豊田中研):日本機械学会 優秀技術講演表彰(2010.2), 論文題目「グラファイト層間化合物に対するハイブリッド量子古典シミュレーション」.
4. 小林亮(名工大):第20回日本MRS学術シンポジウム奨励賞(2011.1.6), 講演題目「亀裂進展の動的・有限温度マルチスケール解析」.

②マスコミ(新聞・TV等)報道

なし

③その他

なし

(6)成果展開事例

①実用化に向けての展開

なし

②社会還元的な展開活動

なし

§ 6 研究期間中の主なワークショップ、シンポジウム、アウトリーチ等の活動

年月日	名称	場所	参加人数	概要
2006.3.16	第一回 CREST マルチスケール計算科学ワークショップ	名古屋工業大学, 名古屋市	約 30	Prof. A. Nakano (南カリフォルニア大)による基調公開講演の後, 当 CREST の主要な共同研究者による講演と討議を行った
2006.9.15	CREST 第2回講演会	名古屋工業大学	30	Prof. I. Procaccia (WI S)を招聘し, ガラス転移等のマルチスケールシミュレーションの現状を, 公開講演会を通じて伺った.
2006.12.15	CREST 第3回講演会	名古屋工業大学	20	鶴田助教授(岡山大学)を招聘し, ナノ相材料の大規模分子動力学シミュレーションの現状を, 公開講演会を通じて伺った.
2007.1.18	CREST 第4回講演会	名古屋工業大学	30	Assist. Prof. Gang Lu (Cal. Sta. Univ.)を招聘し, 金属に関するマルチスケールシミュレーションの現状を, 公開講演会を通じて伺った.
2007.7.17	CREST 第5回講演会	名古屋工業大学	25	仙田康浩博士(山口大)を招聘し, ハイブリッド法に関する講演と議論
2007.11.27	CREST 第6回講演会	名古屋工業大学	30	S. Banerjee 博士(USB)を招聘し, 講演と議論
2007.11.30	HT Lab. Seminar	大阪府立大学	30	Prof. S. Banerjee (USB)を招聘し, LBM シミュレーションの乱流解析への展開を, 公開講演会を通じて伺った.

2007.12.14	CREST 第7回講演会	名古屋工業大学	30	大島まり博士(東大), 山本量一博士(京大), 佐野理博士(東京農工大), 吉野正人博士(信州大)等による講演と議論
2008.2.27	CREST 第8回講演会(兼 流体力学セミナー)	名古屋工業大学	30	R. Rubinstein 博士(NASA)による講演と議論
2008.3.28	CREST 第9回講演会	名古屋工業大学	20	J. Schumacher 博士(Tech. Univ. Ilmenau)による講演と議論
2009.10.9	流れの科学談話会兼 第10回CREST講演会	名古屋工業大学	16	Schumacher 教授による講演「乱流による乾燥および湿潤大気における熱輸送」
2009.10.23	第11回CREST講演会	名古屋工業大学	20	梶田晴司博士(豊田中央研究所)による講演「原子レベルにおける固体間摩擦機構: 格子振動励起によるエネルギー散逸」
2009.10.12-14	日本機械学会第22回計算力学講演会オーガナイズドシンポジウム	金沢大学	50 (全500)	本CRESTチームがオーガナイズドセッションを企画
2009.11.30-12.2	第23回分子シミュレーション討論会	名古屋市中 小企業振興 会館	200	名工大Gが実行委員会を形成し運営
2010.2.19	流体力学セミナー兼第12回CREST講演会	名古屋工業大学	20	R. Rubinstein 博士(NASA Langley Res. Cent.)による講演「Statistical theory of turbulence: The debate between Kraichnan and Proudman at the 1961 Marseille conference」
2010.3.2	日本流体力学会中部支部特別セミナー兼第13回CREST講演会	名古屋工業大学	20	L. Biferale 教授(Univ. of Roma)による講演「Inertial particle pair dispersion in homogeneous and isotropic turbulent flows」と議論
2010.12.17	第14回CREST講演会	名古屋工業大学	20	塚本教授グループ(阿南高専), 飯塚准教授(日本工大)との合同講演会においてハイブリッド計算法の適用系に関する議論

§7 結び

電子系と古典原子系とのハイブリッド化は、ほぼ開始当初考えていた通りに研究開発が進んだと思っている。応用シミュレーションについても、Li イオン2次電池の陰極グラファイト内でのLiの挙動など最近も興味深い結果が出つつある。電子状態計算の大規模化についても、divide-and-conquer型のコードのプロトタイプがほぼ出来ている。まだ論文投稿前であり、ハイブリッド量子古典法にも使っていない段階ではあるが、順調と感じている。今後の自然な展開として、外部電場を印可した実際的な状況にも適用できるようにハイブリッド量子古典法を改良することが急務と考えている。

原子系を粗視化することについては、開始当初は粗視化にあまり重点をおいていなかった為もあり、論文化を含め実用化にはあと1年程度必要と思っている。既存の固体粗視化法は、統計力学をほとんど使わない方法が主流であったので、我々のボトムアップ型の粗視化法を完成させることは意義深いと考えている。

マイクロメートルスケールを扱う流体力学と固体力学とのハイブリッド化に際しては、我々は CNT やグラフェンなど擬低次元材料を基盤に付けて流れ中に置くモデルを理論の中で考え、シミュレーションしてきた。最近実際に、図1-10(セクション4. 1)で我々が設定したような様子で、基盤に多数の CNT を付け気体流れ中に置く実験が、我々が想定していたパラメータ領域で行われた (Battiato et al., Phys. Rev. Lett. 105, 144504 (2010)). 理論と実験が近づいた訳であり、意を強くしている。

研究代表者としては、名工大内で密な議論を毎週のように行うことができ、また豊田中研からは研究員 1 名が博士課程に入学して本 CREST プロジェクトにも参加するなど、物理的距離が比較的近い研究者が研究代表者の近くに多数いたことが、全体の研究遂行を促進する為に変に大変有効であったと感じている。