

時間と空間の並列計算でものづくり革新!

研究課題: 時空間並列計算による高性能マルチスケール解析手法の確立



劉麗君 (大阪大学/工学研究科 助教)



研究概要

<研究背景・解決すべき問題>

- 連続体力学の計算手法
線形化などの単純な仮定に基づいて経験的に得られる構成関係式を用いるため、実規模の問題を模擬できる一方、計算精度が限られている
- 第一原理や分子動力学
複雑な系を高精度にモデル化できるが、計算コストが高いため、現実的な系の研究に直接使用することは非常に困難である

高精度かつ高計算効率を持つ超高性能マルチスケール解析手法の開発が必要

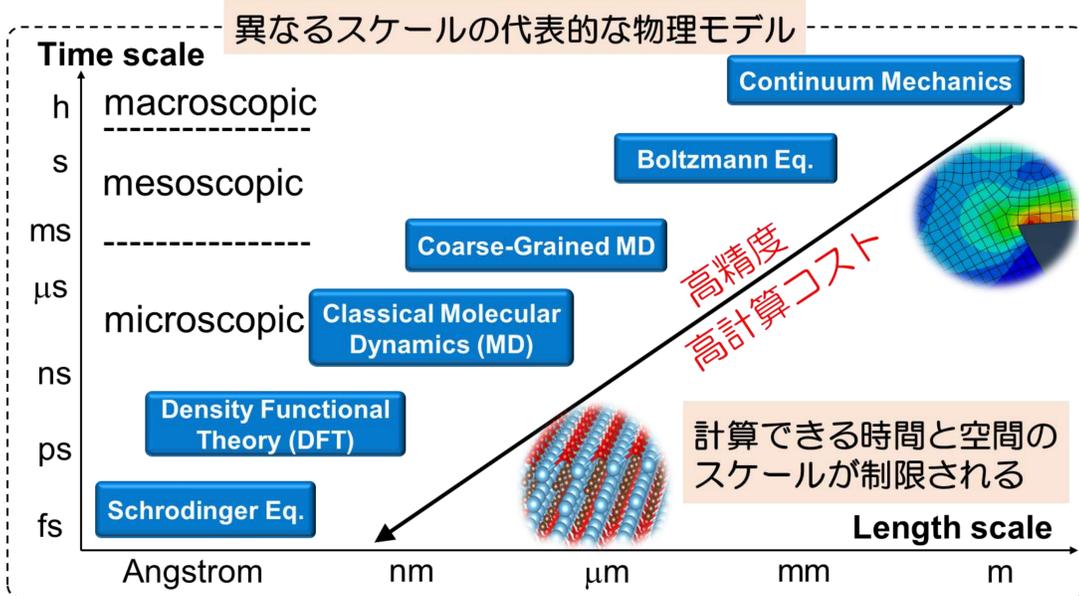
<解決方法・波及効果>

- 研究項目1: 機械学習に基づく原子間ポテンシャルの開発
- 研究項目2: 時間並列計算手法の開発

機械学習と時間並列計算を用いたマルチスケール解析手法により、高速かつ高精度な物性評価や新規材料開発の実現へ!

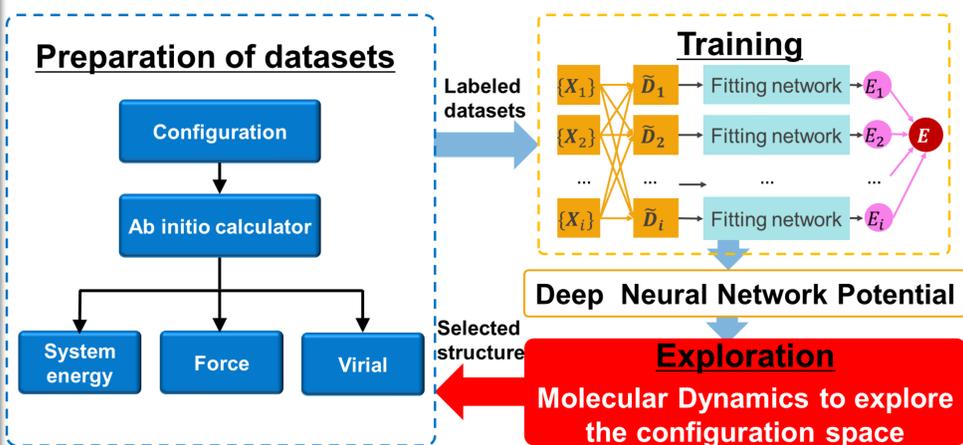
<成果・今後の展開>

- 第一原理計算に匹敵するくらいの計算精度を持つ深層学習ポテンシャルの開発に成功し、計算速度は10000倍以上の高速化を実現
- 時間並列手法を開発し、古典分子動力学の精度を維持したまま2000倍以上の高速化を実現
- 現在、炭素鋼、新規半導体材料等の不純物拡散解析と材料制御への適用を進めている

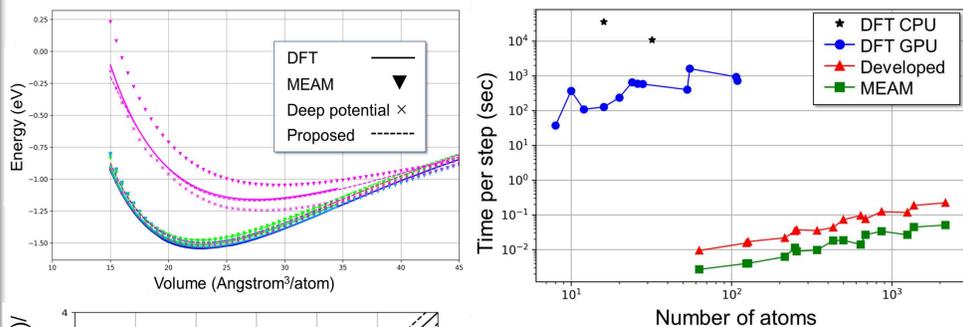


機械学習に基づく原子間ポテンシャルの開発

機械学習に基づく原子間ポテンシャルの作成



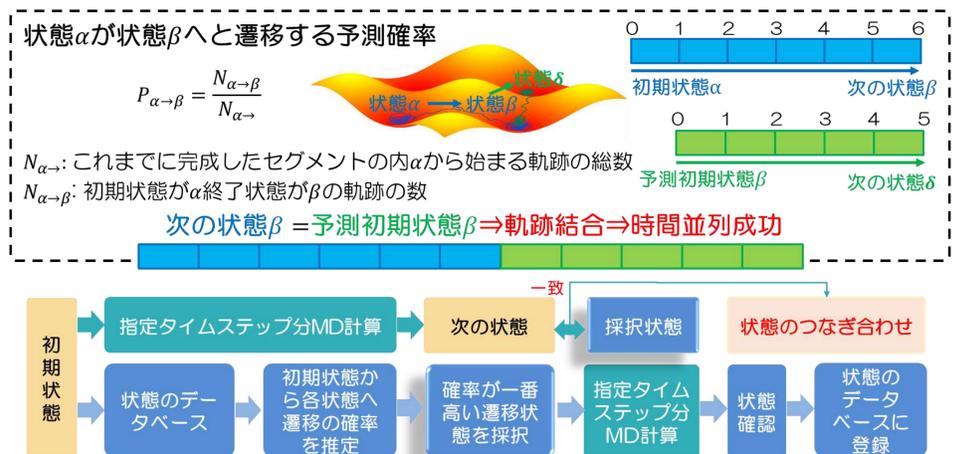
機械学習ポテンシャルの性能評価



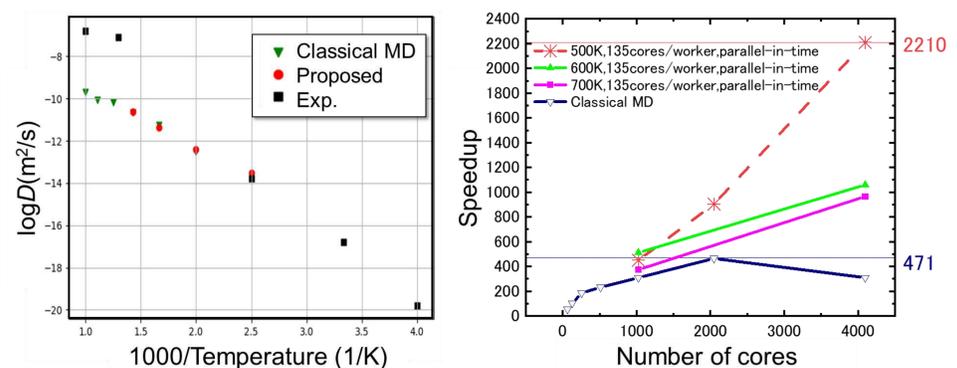
- 作成した原子間ポテンシャルと経験的ポテンシャル(MEAM)をMD計算に適用し、DFTの結果とほぼ一致し、MEAMより高い予測精度が得られた
- DFTより10000倍以上の高速化を実現

時間並列計算手法の開発

時間並列計算手法の概要



時間並列計算の性能評価



- 本提案手法を α 鉄中の炭素原子の拡散計算に適用した結果、従来の分子動力学計算と遜色ない高い精度であった
- 並列性能に関して、低温(遷移時間が長く、計算の困難度が高い)になるほど、提案手法が従来の分子動力学計算より顕著な優位性を示した