

研究課題別中間評価結果

1. 研究課題名： ナノ・メゾ・マイクロの複雑固液界面の大規模数値解析

2. 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）

3. 研究概要

本課題の目的は、MEMS、燃料電池、微細加工流路等に見られる複雑形状・動的変形する流体-固体界面近傍での物理的・化学的過程への適用を旨とし、階層的取扱により適用範囲を広げた様々な固体・流体計算法を、対象系の部分領域に必要に応じて適用する同時並列型ハイブリッド手法を開発すること、同時並列型であることを活かし大規模グリッド計算環境でそれらの実用的シミュレーションを実現することである。開発は、ナノメートルからのスケールアップとマイクロ超メートルからのスケールダウンの双方向から行う。

ナノスケールからの研究では、開発した領域接続法を用いてハイブリッド量子-古典コードを作製し、摩擦やインデンテーション等に関するシミュレーションを通じて、電子密度汎関数法による量子領域の動的選択法の改良・精度検証を行った。さらに、応力下の材料内のエネルギー障壁を持つ素過程の為にハイブリッド量子-古典法を Nudged Elastic Band(NEB)法と融合し、実際に歪み Si やアルミナ中での不純物拡散バリア計算に適用した。局所熱平衡の固体に適する粗視化粒子法の開発を進め、その多成分化、熱膨張・ソフト化の表現、任意スケールへの再帰的粗視化に成功し、原子領域との接続を実現した。

マイクロ超スケールからの研究では、格子ボルツマン法を複雑多孔媒質中の流れに適用する為に、親水/疎水性の表現、小さな空間スケールで特に重要となる分子散乱を取り入れた。また、微小固体を巨視的乱流場に添加した系の基本コードを作成した。実測した離散的固体面データから滑らかな固体面を再構築する方法を考案し、実際に燃料電池の繊維状フィルター内の気液二相流を壁面の親水/疎水性を取り入れて計算することに成功した。流体と弾性固体の動的ハイブリッド化のテストを、上記粗視化粒子法により得た実際的な棒状弾性体を2次元ポアズイユ流中に抗して設置した系で行なった。

計算グリッド上で大規模ハイブリッドシミュレーションを長時間実行するために必要な要素技術の開発・評価を行なった。上記ハイブリッド量子-古典コードを、開発したミドルウェア Ninf-G を用いてグリッド適用化し、必要とする計算能力が動的変化する物理過程を対象に、太平洋をまたぐ大規模グリッドを用いて運用テストを行った。その経験から複数の量子計算タスクの負荷バランスをとり耐故障性が高いスケジューリングモジュールの開発を進め、グリッド適用化した上記 NEB 融合化ハイブリッド量子-古典コードを用いた実証実験を進めた。

4. 中間報告結果

4-1. 研究の進捗状況及び研究成果の現状

① ナノスケール用ハイブリッドコードの開発、② マイクロ・メゾスケール用ハイブリッドコードの開発、③ 産業界で重要な材料に関する応用シミュレーション、④ シミュレーションコードのグリッド化、のいずれの研究テーマにおいても、プロトタイプの開発を終え、一部練成計算の検証を実施中或いは実施見込みとなっており、当初の計画のとおり順調に研究が進んでいる。

新たな展開の観点からは、流体計算に関して、乱流による物質粒子の輸送や高分子添加等による散逸構造の変化を分子動力学法を乱流計算手法に組み込み、メソスコピックな視点から数値計算することを試みており、乱流場の生成は十分効率化が図られている。しかし、分子動力学法の導入についてはまだ初歩的段階であり新たな展開が生じているとまではいいがたい。

類似研究との比較では、量子・古典の境界を adaptive に動かす、複数粒子を一つの仮想粒子として扱う粗視化、流体と物体の共存などにおいて独自の方法を展開している点が評価できる。

研究実施体制については、課題の抽出と其の対応につき、良く検討されており、進め方は妥当である。体制については、各チーム間との連携が図られているとともに、民間の参加も得て、成果の実用化についても考慮されているものとなっている。

研究費の執行については、予定通りに執行されており、特に問題となる事項は無い。

現在までの研究成果としては、QM/MM、MM/CG、CG/FD の境界のつなぎに関して予定どおり基本的な手法が実現されている。また、日米間で、グリッド間での長期・大規模実証実験が可能となっている。

4-2. 今後の研究に向けて

これまでの各研究テーマのハイブリッドコードを高精度化するとともに、全体を統合するソフトウェアシステムを構築するのが今後の課題である。

いずれの研究テーマにおいても、流体計算には格子ボルツマン法 (LBM) を使用することとなっているが、LBM の適用が十分でない場合には、他の流体計算法を用いてシミュレーションを実施するなどの柔軟な対処を薦めたい。

また、次世代スパコンでの効率的実行を期待する一方で、適用計算として、社会へのインパクトのある課題設定をする必要があると思われる、アプリケーションの選択に一層の工夫が期待される。

この研究の個々の要素は提案者のオリジナルというよりは、すでに存在する手法を様々に組み合わせて、生産技術により近い領域のシミュレーションを意識したものであり、その限りでは十分な成果が挙げられると思われる。一方、同様の研究は米国を始めとして、数多く行われており、そのような研究から抜きん出ることができるかどうか問われるので、この点を念頭において研究を進めていただきたい。

4-3. 総合評価

量子・古典の境界を adaptive に動かす、複数粒子を一つの仮想粒子として扱う粗視化、流体と物体の共存など、独自の方法を展開している点が高く評価できる。また、各研究テーマのハイブリットコードの統合化の結果、光る成果が出るのが期待される。

現在までに QM/MM、MM/CG、CG/FD の境界のつなぎに関して予定どおり基本的な手法が実現されている。ただし、流体計算に使用している格子ボルツマン法 (LBM) についてその適用が適切でない場合もあるようなので、必要に応じて他の流体計算法を適用したシミュレーションを実施することについても検討することを薦めたい。

本課題は、物質界面の異なる物理化学現象を扱う問題であり、信頼できるシミュレーションが出来るならば、広い応用分野が想定され、その科学的・技術的インパクトは極めて大きいと考えられる。また、本研究では、企業も入り具体的な排気浄化触媒や燃料電池セルなどの実用システム開発も挙げており、この点でもインパクトは大きいと考えられる。