

## 研究課題別事後評価結果

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. 研究代表者名及び主たる研究参加者名(研究機関名・職名は研究参加期間終了時点):

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)

主たる共同研究者

兵頭 志明 ((株)豊田中央研究所先端研究センター 主席研究員)

須賀 一彦 (大阪府立大学大学院工学研究科 教授)(平成 18 年 4 月～)

田中 良夫 ((独)産業技術総合研究所情報技術研究部門 主幹研究員)

3. 研究実施概要

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。本研究では、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、気液二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。

#### 4. 事後評価結果

##### 4-1. 研究の達成状況及び得られた研究成果(論文・口頭発表等の外部発表、特許の取得状況等を含む)

本研究では、材料やシステムが多階層系に対して、電子系ではオーダーN化、その他の階層に対しては授受的な考え方を適用し、下位階層の物理過程を導入して各階層のコードの適用範囲を広げ、かつ同時並列型ハイブリッド化を進めた。これを固体破壊過程に適用して実用上十分な精度を持つことを検証した。また、これを工学基礎問題、例えば流固界面での速度滑り現象の解析としてグラフェンの流れ場中での動的振る舞い等に適用して有為な成果を得ている。

このように、量子効果から流体状態までのスケールを、電子系、古典原子系、粗視化粒子系、流体の4スケールに分けて開発し、電子系-古典原子系、古典原子系-粗視化粒子系、粗視化粒子系-流体、の隣接領域をそれぞれ結合することができ、当初の目標の大部分が達成できたことは大いに評価できる。特に、電子系と古典力学系を接続する hybrid QM-CL(電子系-古典原子系)において本研究で開発された手法の精度検証を含む実証を行い、更に幾つかの分野で応用までを実施したことは高く評価できる。例えば、Li2次イオン電池において固体(グラファイト)を膨張させても、圧縮しても Li イオンの移動度が上がる現象を発見するなど固体相での進展が評価できる。

しかしながら、反面、扱った領域が極めて広範囲のため、個々のテーマの達成度が不十分だった点も見受けられる。アプリケーションは、それが有効であることが実証されて初めて、それらが広く使われ、アプリケーションによる成果創出が出来るものである。テーマをもう少し絞って、それらを深く極める方が効果的であったかもしれない。

当初計画では想定されていなかった新たな展開として、古典原子系の開発に於いて、ハイブリッド量子古典法(電子系-古典原子系)が成果を上げたため、当初予定の化学反応を経験パラメータ化することは中止したとあるが、経験パラメータ化からはイノベーションは生まれないであろうから、妥当な判断であったと考える。また、粗視化粒子法コードに関し、GridからGPUへの新たな展開があったが、これは望ましい展開であったと判断する。

外部発表に関しては、研究誌論文 28 件と十分に発表されており、招待講演も国際学会 17 件、国内学会 24 件と多く評価できる。アダプティブに量子領域を選択できるハイブリッド量子古典法論文は大いに評価でき、他にも評価できる論文がかなりあるが、一つとびぬけた革新的なアルゴリズムの開発が欲しかったようにも思われる。

研究の進め方については、本研究が広範囲且つ挑戦的な領域をカバーする研究であるにも関わらず、それぞれのテーマを適切に遂行した点が評価できる。4つの領域の結合においてそれぞれがよい成果を出している事実が、チームの体制・遂行に問題がなかった証拠であろう。

#### 4-2. 研究成果の科学技術や社会へのインパクト、戦略目標への貢献

本研究は、本領域の目的であるマルチスケール・マルチフィジックスの統合シミュレーションに最も忠実に挑戦した研究課題であって、テーマが示すとおり、その目的は、ナノ・メゾ・マイクロにわたる極めて広範囲のマルチスケール・マルチフィジックス現象の数値シミュレータ開発である。特にその中でも、典型的なマルチフィジックス現象である固液界面を対象としているものである。このような領域は、科学的にも産業応用面からも数値解析(計算科学)による貢献・成果が大いに期待されるところである。

このチームのように異スケール領域、異物性領域を連結していくアルゴリズムをコツコツと開発し、具体的問題に応用していくことは、地道ではあるが、将来の技術の蓄積として大切であり、この分野のレベルを着実に上げることによって貢献することとなるであろう。

得られた研究成果のインパクトに関しては、その実際的な評価はこれからと考える。アプリの成果はそれが使われ、且つそれによって成果がでるものだからである。国内外の類似研究との比較では、個々のテーマのレベルや重要度では、本研究のレベル・重要度は極めて高いと言える。

先に述べたように、量子効果から流体状態までのスケールを4スケールに分け、隣接領域を結合する方法論(アルゴリズム)を具体的に開発したことは評価できる。ただそれぞれの結合は各分野の研究者が精力的にやっており、競争的研究である。本CREST研究で夫々の特質を感得されたので、今後は、いずれかの領域に力を集中し、世界を完全にリードする斬新な接続アルゴリズム開発をしてほしい。例えば、これまでの成果から見て、恐らく量子・古典の連結に集中するのがいいのではないかと思われる。

Li イオン電池開発への展開などは社会的に重要であり、その社会的インパクトは大きい。この意味において、Li<sub>2</sub> 次イオン電池において固体を膨張させても、圧縮しても Li イオンの移動度が上がる現象を発見するなど固体相での進展は評価できる。しかし、液体相は本質的に現象論的方法論(格子ボルツマン)に止まっており、電極界面での化学反応(本質的には液相になっている)を取り扱う上ではかなり不十分ではないかと考えられるので、今後更なる研究を期待する。

戦略目標への貢献に関しては、本研究領域のそもそもの目標が、「マルチスケール・マルチフィジックス(超大規模・複雑)なシミュレーションを実現する効率的な計算手順を確立し、最適化設計問題・連成解析などの先端シミュレーション技術を我が国の最先端のコンピューティング環境を駆使して開発することを目的とする。」と言うことであり、この目標と照らし合わせれば、本研究の目標はこれとびったり合致している。既に述べたように、目標達成に向けての貢献及び社会的な成果が得られるか否かは、ひとえに今後の研究の完成度及びアプリの実証いかに掛かっていると言える。従って、引き続き研究を継続し、本研究を真に実りあるものにするのを期待したい。但し、成果を確実に出すためには、研究領域をある程度、選択・集中することも必要と考える。

特記すべき事項としては、本 CREST 成果により、名古屋工業大学で大学院の新専攻「創成シミュレーション工学専攻」が 2008 年度発足となったことが挙げられる。

#### 4-3. 総合的評価

シミュレーション研究分野の更なる進展は、計算機という機械の性能向上に依存するというよりは、研究者の研究努力いかに掛かっている。その点で尾形チームは正にその一つの典型として、異なったスケールの違い、物理の違いを結合するという一点に絞り、量子と古典粒子、古典粒子と流体等を連結する方法論(アルゴリズム)を具体的に開発し、且つ具体的な問題に適応してその実効性の検証を試みており、大いに評価できる。特に、電子系と古典力学系を接続するhybrid QM-CLにおいて本研究で開発された手法の精度検証を含む実証を行い、更に幾つかの分野で応用までを実施したことは高く評価できる。縁の下の力持ち的研究であり、必ずしも派手さはないが、このような仕事は徐々に大きな力となって、社会にじわじわとその成果がにじみ出てくるのが期待できる。

本研究が扱う領域は、個々のテーマ一つ一つが挑戦的且つ成果が大いに期待できるものなので、それぞれを中途半端に終わらせることなく、今後も引き続き研究開発を継続することが望まれる。今後、常に多い競争的資金が入ることは考えられないことから、尾形チームが世界をリードしていくためには、手広く行うのではなく、集中と選択が必要と考える。