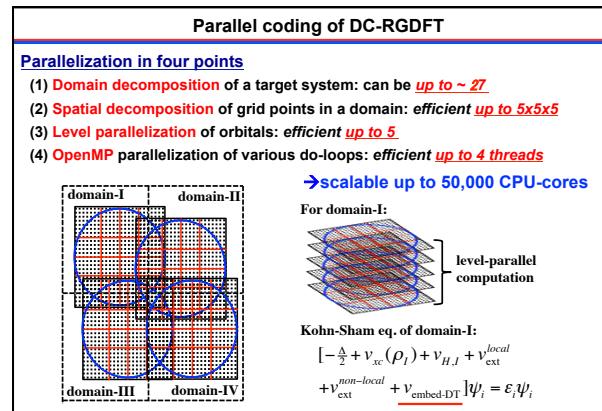
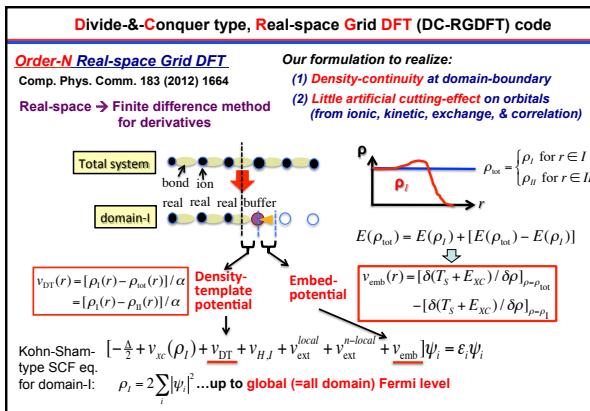
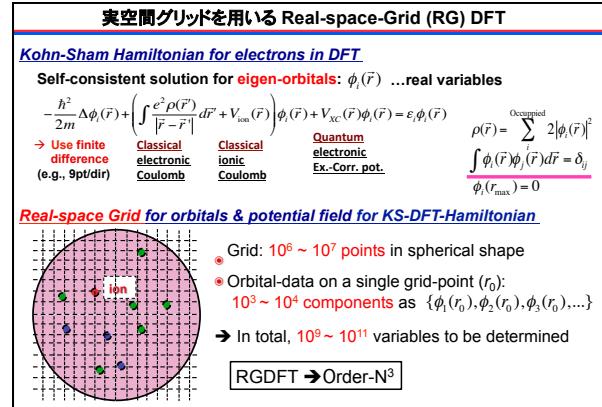
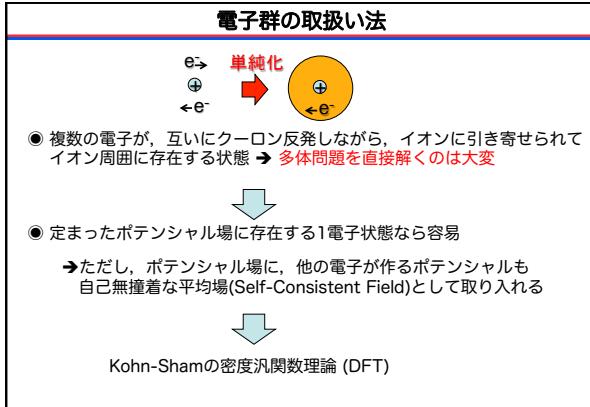
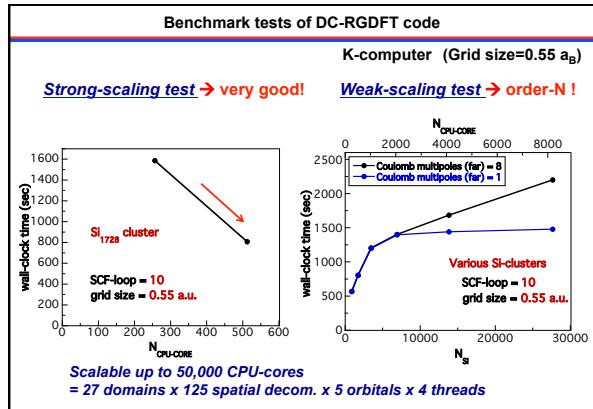


新しい原子論的シミュレーション法/アルゴリズムで チャレンジする自動車関連部品の高性能化		
シミュレーションの産業利用		
対象scale	対象物理	計算法、現況
1-10 ² nm	電子構造, 原子配置, 化学反応	電子状態、イオン/原子の動力学、分子構造 (密度汎関数法、分子軌道法、分子動力学法...) →基礎手法は、ある程度固まっているが... 規模/時間 vs. 精度の相反する需要
0.1-10μm	材料の微細構造, 相構造、相変化	高分子系/固体系/流液体系毎に、調べたい物理量 に応じて、熱統計力学(自由エネルギー)も援用 →混沌とした状況
> 10 μm	流れ、変形, 振動、空力	連続体(流体、構造体)方程式の様々な数值解法 (差分法、波数空間法、有限要素法、粒子法...) →特定分野の企業では、プレゼンツールでなく CAEとして、重要技術と認知されている

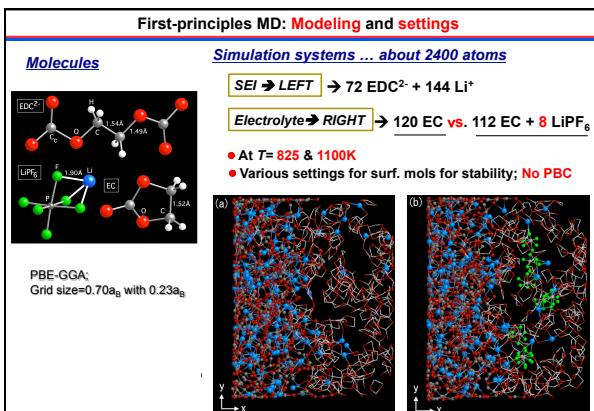
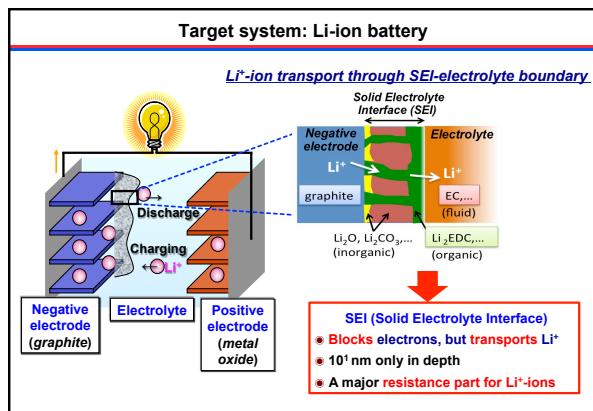
本日の内容	
1.	電子系のための、オーダーN型の実空間グリッドDFTの開発 → 固体電解質皮膜-電解液界面でのLiイオン透過 → 2次電池
2.	稠密固体にも適用できる、ハイブリッド量子古典法の開発 →無機有機界面の熱伝導、物理化学的強度 →放熱材料、塗装
3.	高速な、剛体分子動力学アルゴリズムの開発 →氷と水、不凍タンパク質 →○○液 (with hybrid sim.)
1.	電子系のための、オーダーN型の実空間グリッドDFTの開発 → 固体電解質皮膜-電解液界面でのLiイオン透過 → 2次電池
2.	稠密固体にも適用できる、ハイブリッド量子古典法の開発 →無機有機界面の熱伝導、物理化学的強度 →放熱材料、塗料
3.	高速な、剛体分子動力学アルゴリズムの開発 →氷と水、不凍タンパク質 →○○液 (with hybrid sim.)

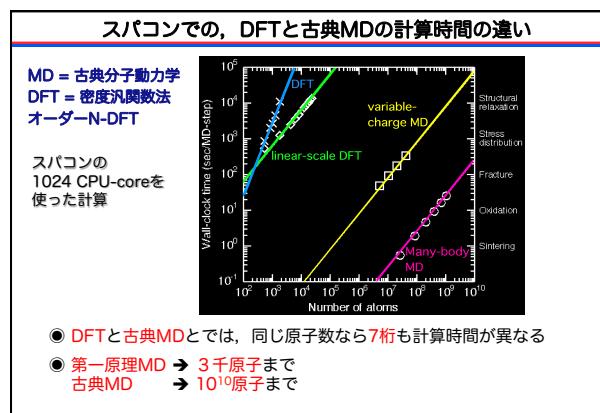
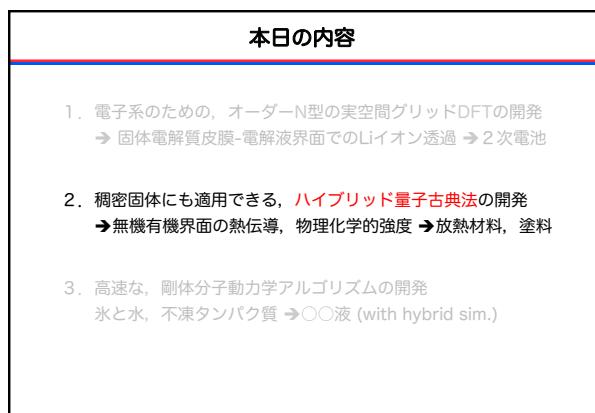
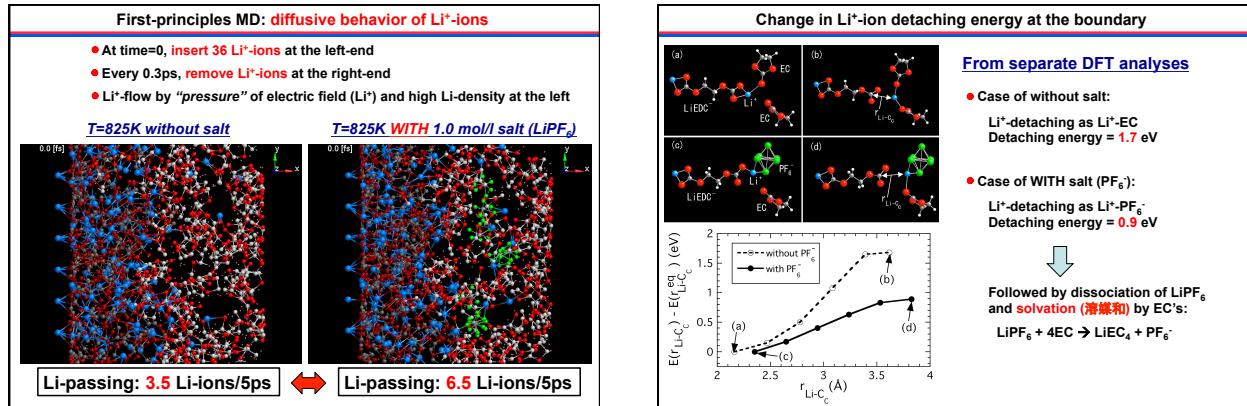


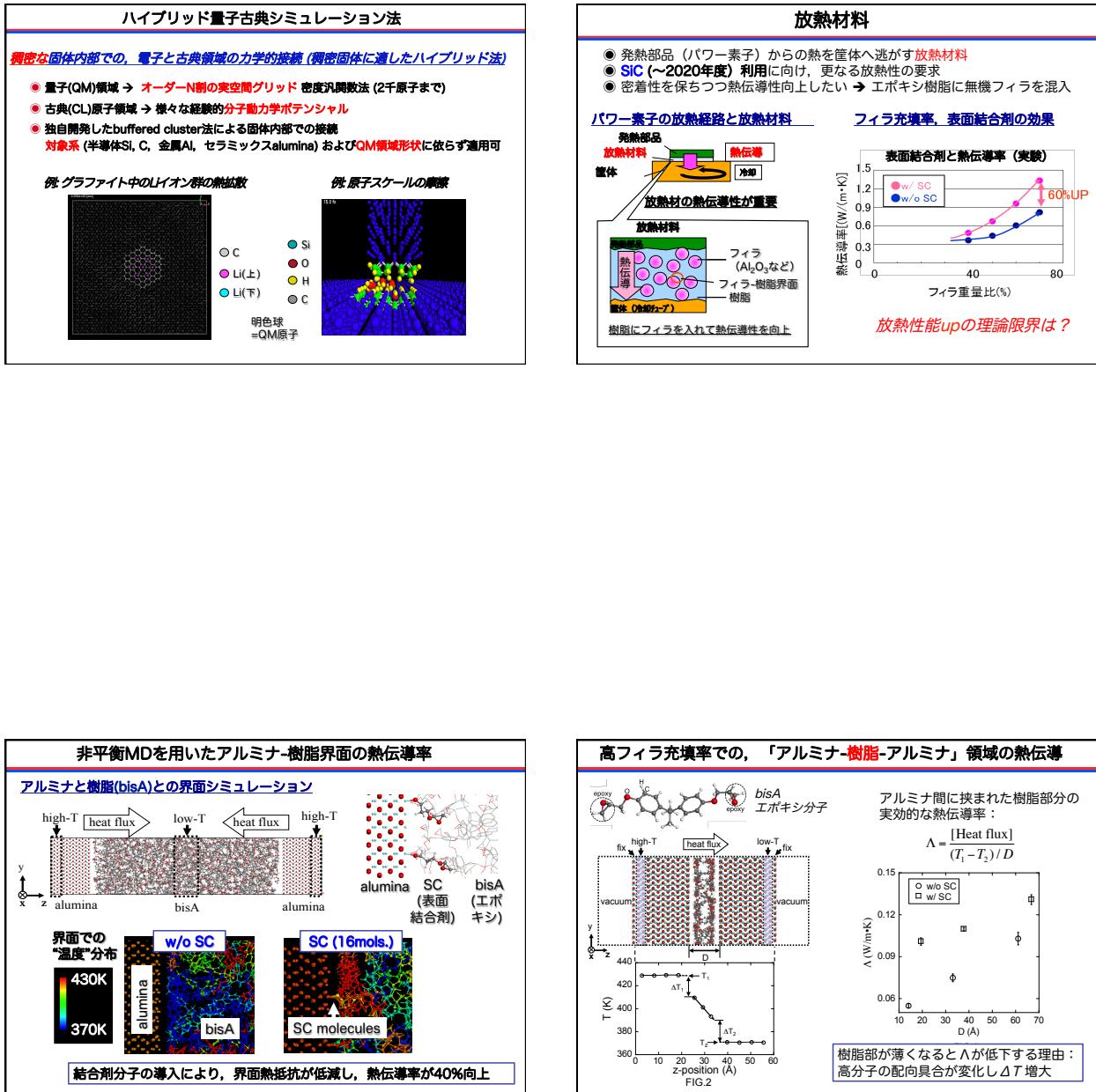


現在のMDシミュレーションで扱える対象系の規模

- **2大分子動力学(MD)シミュレーション法**
 - * 密度汎関数法(DFT)で電子状態計算 → イオンに働く力で第一原理MD
 - * 古典原子間ポテンシャルによる古典MD
- **スバコン活用の為、2大シミュレーション法のコードを高度並列化**
 - 粒子間の(実効的)相互作用距離が有限であることを利用する
空間分割法による並列化 → Order-N化
- **実用的な、対象系規模**
 - 数千個のCPUコアを用いて、電子系でも、古典原子系でも、
 10^{10} 個の自由度系まで







固体材料の皮膜系、有機・無機材料との界面系

金属の塗装・接着部の物理化学的耐久性

金属: Al, Mg, Fe, Zn...
樹脂: エポキシ樹脂, PP...

Work in progress...

本日の内容

- 電子系のための、オーダーN型の実空間グリッドDFTの開発
→ 固体電解質皮膜-電解液界面でのLiイオン透過 → 2次電池
- 稠密固体にも適用できる、ハイブリッド量子古典法の開発
→ 無機有機界面の熱伝導、物理化学的強度 → 放熱材料、塗料
- 高速な、剛体分子動力学アルゴリズムの開発
→ 氷と水、不凍タンパク質 → ○○液 (with hybrid sim.)

New rigid-body MD algorithm: idea

- Rigid-body molecules: TIP4P potential with a long time-step = 5.0 fs
- Fast time-reversible algorithm for rigid-body dynamics:
Fastest algorithm with explicit time-reversibility

Ideas to ENFORCE time-reversibility

Angular position (quaternion): q	Angular velocity in body-fixed-frame: Ω
Angular velocity in lab-frame: ω	Moment of inertia: I
$q^{(n+1)} = q^{(n)} + \frac{\Delta t}{2} \frac{d\omega^{(n)}}{dt}$	$I_i \frac{d\Omega_i}{dt} = (I_j - I_k) \Omega_j \Omega_k + \text{torque}_i$
$q^{(n)} = q^{(n+1)} + (-\Delta t) \omega^{(n+1)} + \frac{(-\Delta t)^2}{2} \frac{d\omega^{(n+1)}}{dt}$	$\omega = A q \Omega$

⇒ Get complex non-linear Eq. for $(n+1)$ -th $\omega^{(n+1)}$
⇒ Simplify the Eq. without losing time-reversibility → iteration free!

Simulation results of Quasi-Liquid-Layer (QLL) of ice

- 1.31 million Water molecules
- Top surface: (0001) surface
- Height-difference (=bump height) ~ 12 Å

Red → bumps (凸)
 T_m : bulk melting temp.

