

丸の内MY PLAZAホール

2008年9月17日

次世代スパコンシンポジウム 分科会D

**「計算科学者、計算工学者、実験研究者および産業  
の接点と人材育成 –ナノ統合ソフトについて–」**

*～階層化と大規模化および粗視化シミュレーション～*

(株)豊田中央研究所

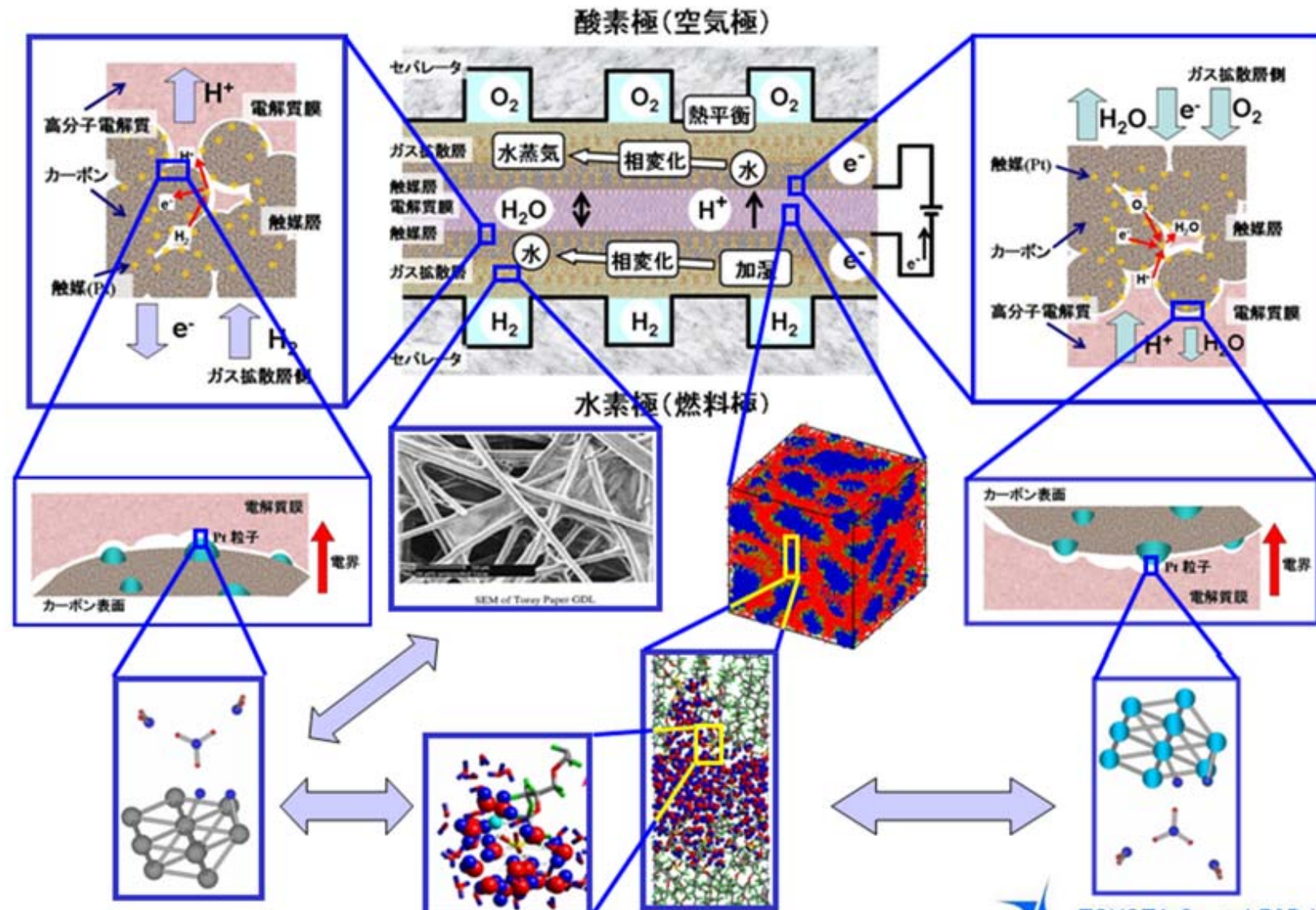
材料基盤分野 材料基盤研究部

計算物理研究室 兵頭志明

# 実用材料における階層構造の例(高分子形燃料電池)

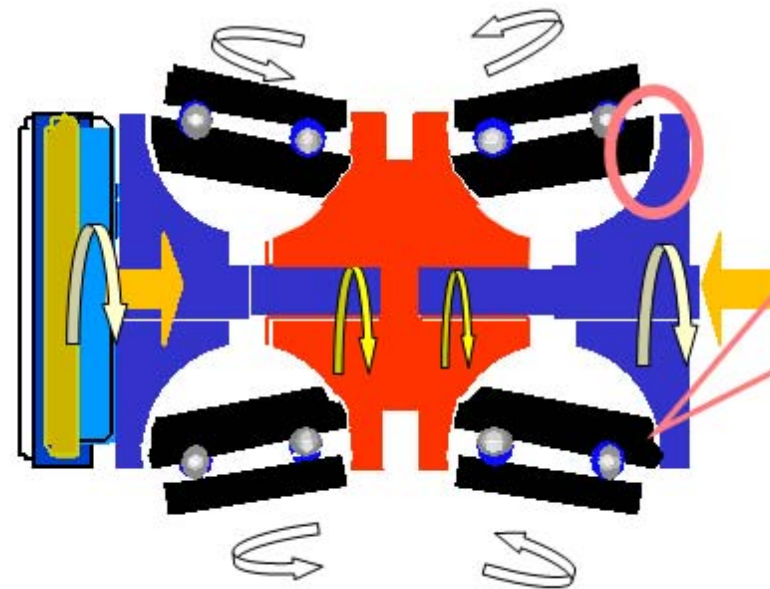
各パーツにおける材料が多階層にわたって相互作用している

全体の特性理解のために必要な捉え方(実験研究でも重要) ← 関連の理解にはシミュレーションが必須

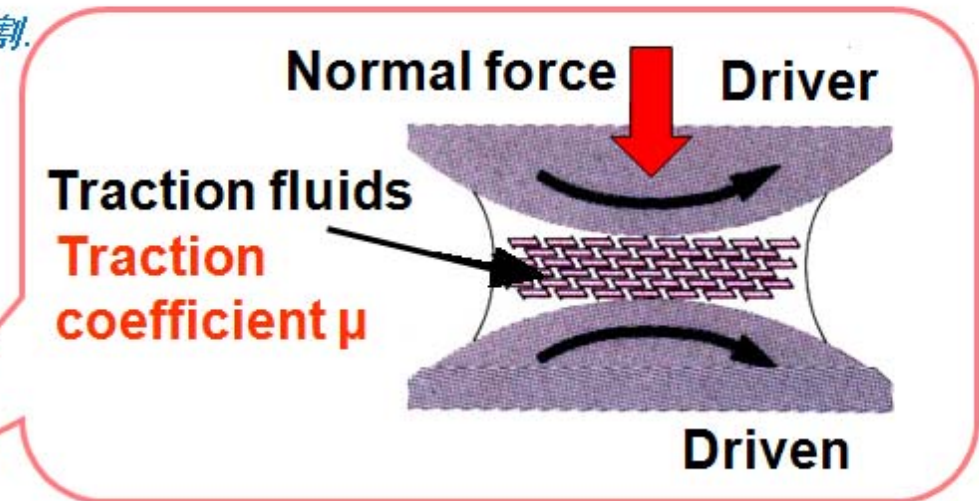


# Lubricating Oil Film as Traction Fluids

実用的課題における大規模分子シミュレーションの役割.

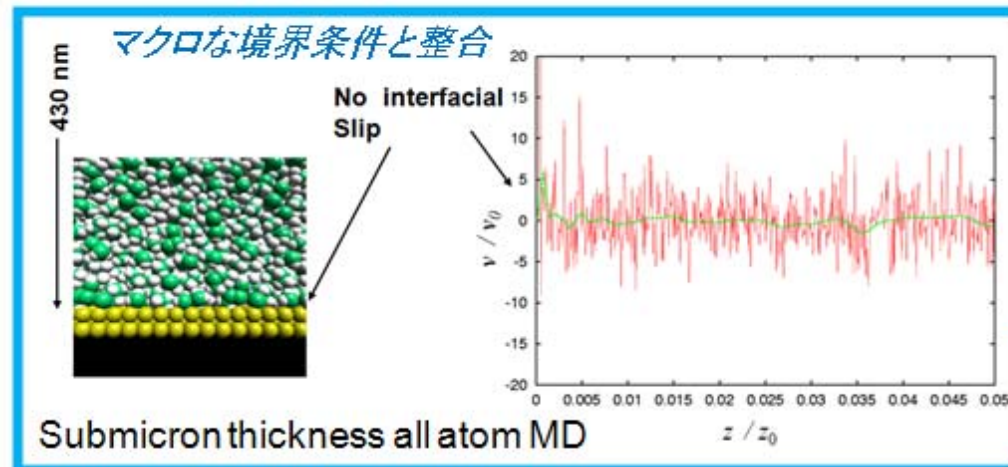


Half toroidal CVT  
(Continuously Variable Transmission)



High traction coefficient fluids

Minimization and  
higher capacity of CVT

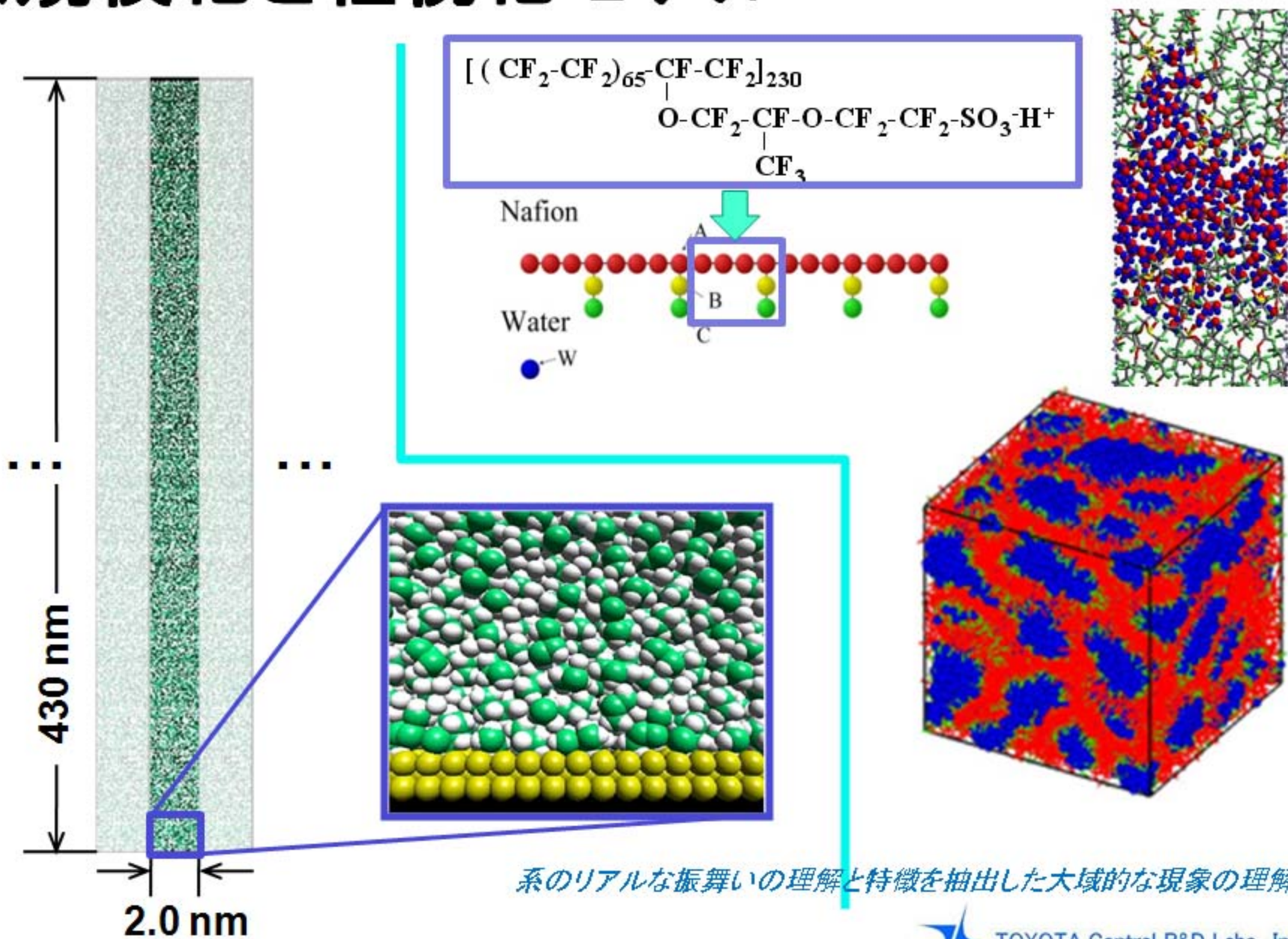


← ミクロとマクロの違いの一端を理解する情報

H. Washizu, S. Sanda, T. Ohmori,  
N. Nishino, A. Suzuki, S. Hyodo,  
2005-2008.



# 大規模化と粗視化モデル



# 専門性と総合力（人材育成）

確かな専門性と幅広い領域の総合力が要求される

⇒ 総合力を養う教育課程



S. Miyata

## ・Newton力学

$$F = m a$$



## ・連続体力学

$$(\epsilon - \epsilon^0) = C \sigma$$

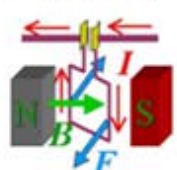
## ・流体力学

$$\frac{\partial \mathbf{v}}{\partial t} + (\mathbf{v} \cdot \nabla) \mathbf{v} = -\frac{1}{\rho} \nabla p + \frac{\eta}{\rho} \Delta \mathbf{v}$$

## ・相対性理論

$$E = m c^2$$

## ・電磁気学



$$\nabla \cdot \mathbf{D} = \rho$$

$$\nabla \times \mathbf{E} = -\frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t}$$

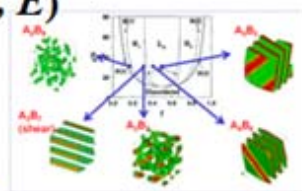
$$\nabla \cdot \mathbf{B} = 0$$

$$\nabla \times \mathbf{H} = \mathbf{j} + \frac{\partial \mathbf{D}}{\partial t}$$

## ・統計力学

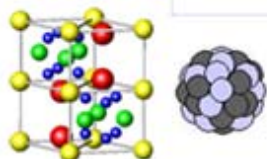
$$S(N, V, E) = k \ln W(N, V, E)$$

$$Z_q = \sum_i \exp\left(-\frac{N_i E_i}{kT}\right)$$



## ・量子力学

$$E \Psi = \left( -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V \right) \Psi$$



科学的、技術的な  
スキルだけでなく...

## チャレンジ精神と 冒険心

与えられた課題に対するチャ  
レンジのみでなく未踏の領域  
に踏み込む体力と気力が必要

“customer” と  
“クレーマー”

「お客様」の立場に徹して簡単  
に満足できることを要求  
自らの積極的な関わりを拒絶

## 「分かり易さ」の 落とし穴

複雑さの取扱いが次世代への  
活路

「分かり難いこと」を分かって  
する気力と体力