

大学院教育支援機構（DoGS）海外渡航助成金 報告書

Outcome report

計画名 Plan	フランスでの流体力学に関するスクールへの参加
氏名 Name	鷹橋碧音
研究科・専攻・学年 Graduate school/Division/Year level	工学研究科・航空宇宙工学専攻・博士後期課程 1 回
渡航国 Country	フランス
渡航日程 Travel schedule	2025 年 2 月 21 日 ~ 2025 年 3 月 3 日

渡航計画の概要 Outline of the travel plan

本渡航の目的は 2025 年 2 月 23 日から 2025 年 3 月 1 日の 7 日間、フランスのリヨンにある INSA Lyon（国立応用科学院リヨン校）で開催された「Ab Initio and Molecular Dynamics school 2025」に参加し、流体力学に関する数値シミュレーションの手法を身につけること、および国内外の研究者と交流することである。Ab Initio（第一原理計算）とは原子・分子の電子状態を量子力学に基づいて求めるシミュレーションで、Molecular Dynamics（分子動力学法、MD）は運動方程式を数値的に解くことで原子・分子の運動を求めるシミュレーションである。どちらも流体（および固体）を原子・分子のスケールで捉えるための方法のひとつであり、従来の連続体流体力学では正確な記述が難しかったような、非平衡の度合いが高い流体现象を扱うことができる。私の専門は気体分子運動論と呼ばれる分野で、気体分子の集団を統計的に扱うことで、分子の位置と速度に関する分布関数の変化を通して流体の運動を捉えるものである。MD も気体分子運動論も連続体の枠組みを超えた流体现象を扱うことができ、ミクロな現象とマクロな現象の関係性を明らかにするには必要不可欠な分野と言える。気体分子運動論で得られた結果と MD シミュレーションで得られた結果は比較検討されることも多く、MD について理解しておくことは私の研究にとって有用である。また、単に新たな手法を身につけるだけでなく、海外渡航という機会を活かし、研究についての議論・交流の相手となる研究者と国際的なつながりを作ることも目標としている。

成果 Outcome

スクールにはフランス・日本・ギリシャから学生 30 名、講師 12 名（オンラインも含む）が参加し、活発な国際交流の場となった。最初の 2 日間は MD と Ab Initio の理論について講義が行われた。それぞれの根底にある物理を把握することで、シミュレーション手法の全体像をつかむことができた。続いて 3 日目と 4 日目には実際にソフトウェアを動かしながらシミュレーションについてのチュートリアルが行われた。MD で用いた LAMMPS、Ab Initio で用いた Quantum Espresso はどちらも汎用コードであり、サンプル問題程度であれば比較的簡単にシミュレーションを実行できた。しかし、実行自体の容易さの一方で、シミュレーションの妥当性や精度を保証するためのパラメータスタディについては慎重に行う必要があることも実感を持って学ぶことができた。5 日目以降は 4 人 1 組のチームに分かれてプロジェクト課題に取り組んだ。スクール前半で学んだ内容をより発展的な問題に適用することで、学習内容を定着させることができた。また、プロジェクトを進める中で MD や Ab Initio を専門としているチームメイトから実際の研究についての話も聞くことができた。

これらの内容に加えて、スクール全日程を通して毎日 1 人ずつ講師によるセミナーが行われ、MD と Ab Initio を用いた最新の研究・話題が紹介された。そのためチュートリアルやプロジェクト課題だけでは学ぶことが難しかった、スーパーコンピュータを用いた大規模なシミュレーションのスケールや、応用先のバリエーションの豊富さについても知ることができ、将来的に自分の研究に活用する可能性を探るための良い情報となった。

今後の展望 Prospects for the future

今回のスクールで学ぶことができた基本的な手法をベースとして、現在の研究課題を含めて様々な流体問題に対して MD シミュレーションを適用できる可能性があると考えられる。実際に研究に用いる段階に至るには追加学習が必須であるが、将来的には自らの手で運動論と MD という 2 つの手法によるアプローチが可能になり、同一の現象を異なる視点から比較できるようになると考えられる。