

ギャップドスケールの科学 ／ マイスタールール抽出

伊藤篤史

ito.atsushi@nifs.ac.jp

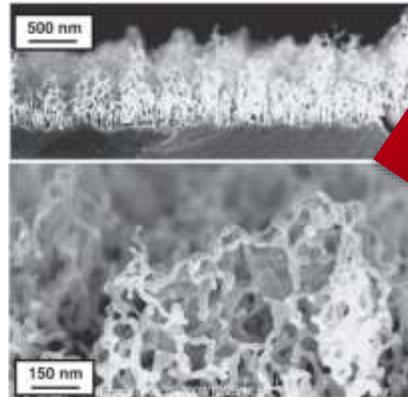
よくあるマルチスケールの表現:

暗黙に、空間と時間は共にスケールが変わる

「本当に自然はそれだけでしょうか？」

プラズマ-物質相互作用(PMI)
の材料側の視点では:

“空間はミクロのまま
時間はマクロ”な系である

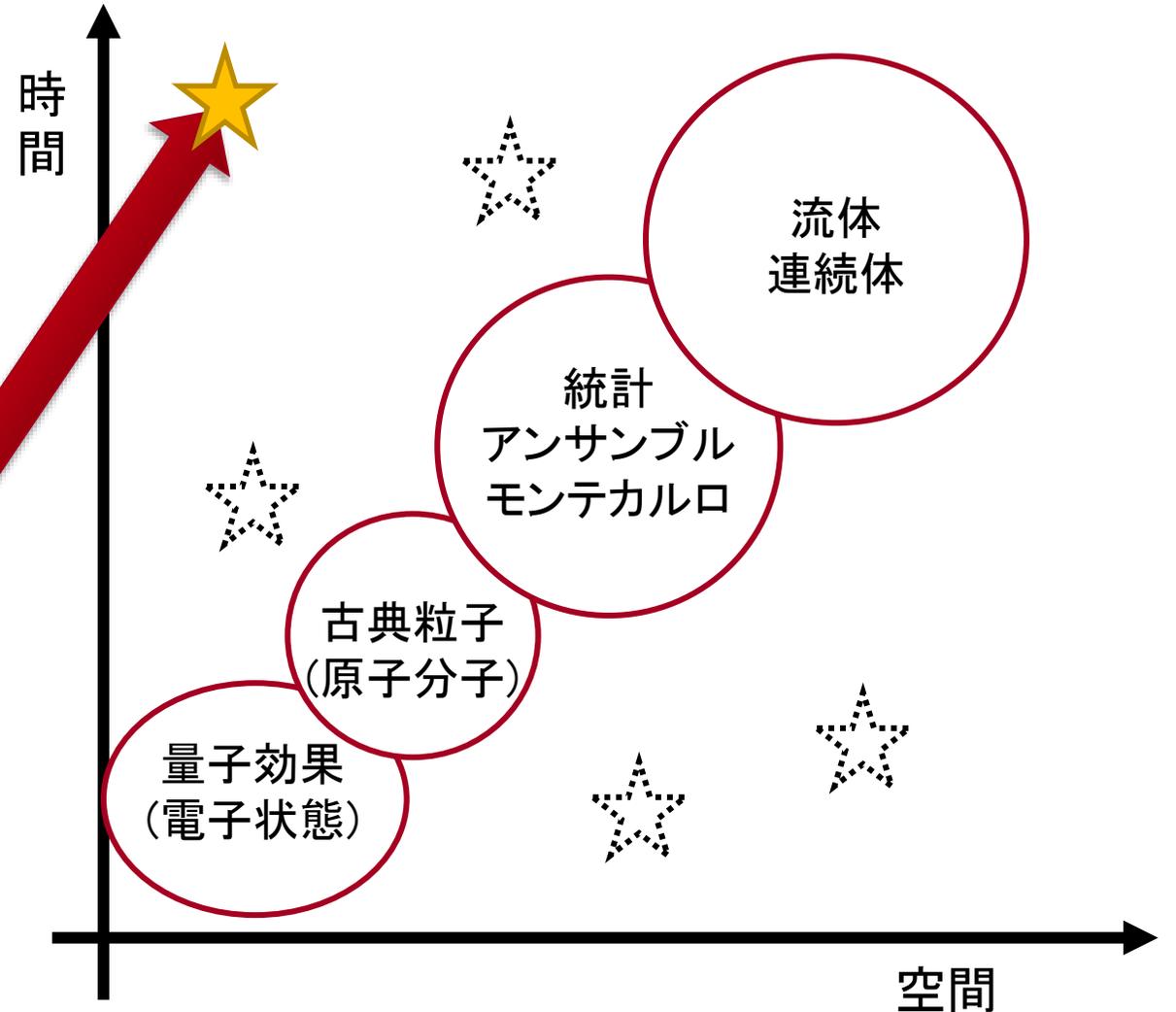


*S. Kajita, et al., JJAP2011

時間と空間のスケールのずれた系:
ギャップドスケール

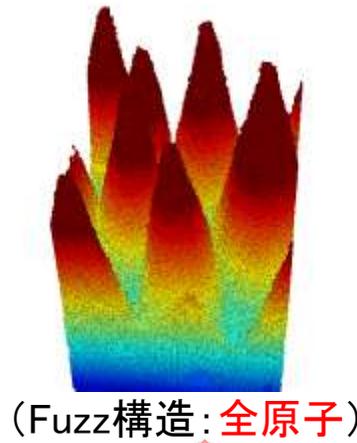
PMI/PWIIに限らず、

「あなたの研究対象、実はギャップドスケールではありませんか？」



分子シミュレーション研究のマルチスケール

時間 ↑

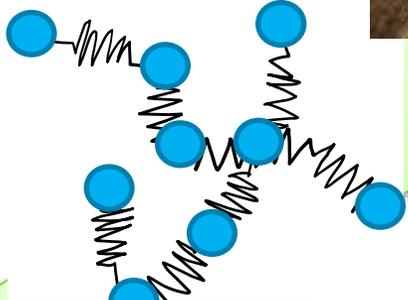


(高粘性流体)



暗黙のマルチスケール

(ばねビーズ模型)

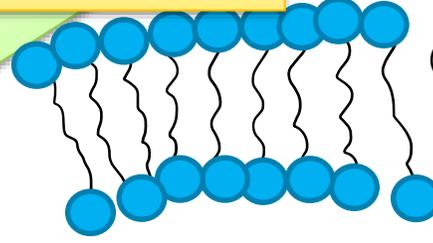


流体・連続体

Hybrid 計算
加速・時間粗視化

(ポリエチレン)

粗視化粒子



(細胞膜)

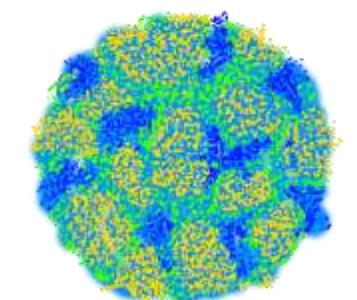
理想

量子化学

全原子

(たんぱく質)

超並列スパコン



(ウイルス: 全原子)

空間 →

プラズマへの感謝

- 分子シミュレーション研究の中においても、PMI/PWIは**時間方向を伸ばす(加速・粗視化)**という独自の発展を遂げられた
- プラズマが気体よりもさらに希薄で、材料への入射頻度が非常に小さいためギャップドスケールで物事を捉える必要性が生じた(**プラズマならではの点**)

材料シミュレーションの研究展開はここまでに抑えて、
本日は、皆さんを巻き込める話題を

分野間の連携や、アウトリーチ活動を続けてきて思うこと

- 「核融合(の仕組み)」は比較的伝わる。「プラズマ」は伝わりにくい。
- 「核融合」の方が聞き手にとって関連部分を見つけやすい
- 「プラズマ」が聞き手に取ってわからないため、「役に立つか？」という物差しで見られてしまう

他分野*に伝わるように、プラズマとは何かを改めて問いたい

* 大プロの競争相手は天文・素粒子、大型競争的資金の競争相手はナノテク・化学・生物

* 伊藤の関わる主な学会・研究会(プラ核関係以外):

- 物理学会領域10(主にナノ物理), ・分子シミュレーション学会(統計物理・理論化学・ナノ物理・生物物理) ・応物(低温プラズマ)
- 計算統計物理学研究会, ・レアイベント科学研究会

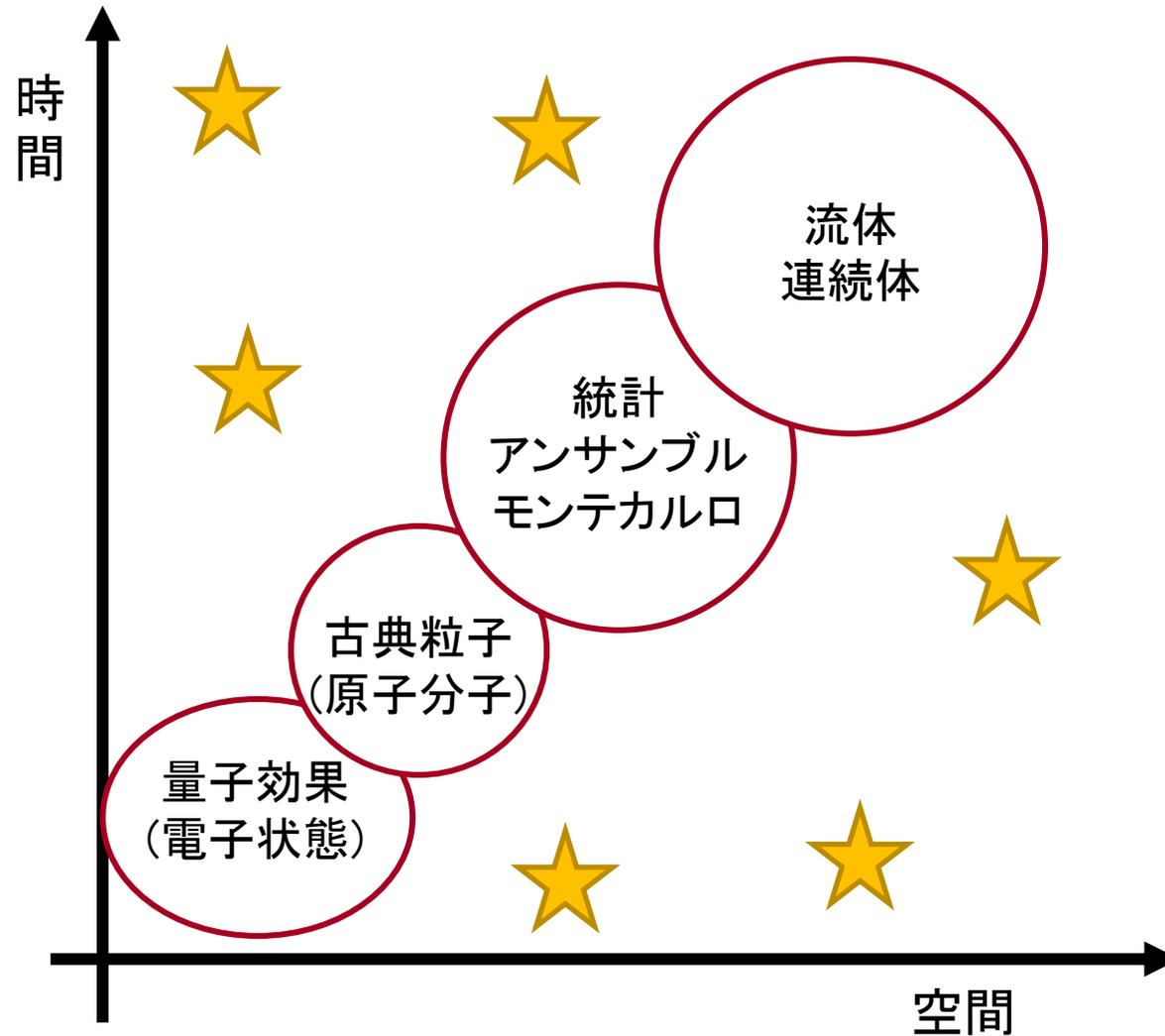
ナノ物理・化学の研究者には、おそらくこんな疑問がある

- 電離すればプラズマか？
 - 集団運動してこそプラズマ？
- 分布関数が取れないほど希薄だが？（空間スケールが小さいと）
 - nm^2 表面に飛来するプラズマ粒子は1 μ 秒に1つ
- デバイ長より短いスケールでもプラズマか？
 - 電子が周りにいないから遮蔽できない
 - そもそも電子は波か？
 - ナノプラズマ？（低温プラズマで時々聞かれる用語）
- 表面にナノスケールの凹凸があるとき、シーブは？
- 気体からプラズマへの相転移はどれくらいわかっている？

これらは、ミクロスケールで見た時の疑問点

実験系のように空間はミクロのまま時間をマクロにした極限
“ギャップドスケール”では、どうなるのか？

PMI/PWI/低温プラズマを例に出したが、
ギャップドスケールはもっと色々なところで現れているはず



垣根を越えて、共にギャップドスケールの科学を展開しましょう！

10年後の自分へ向けて

マイスタールール

「あなたのご研究、十分に深まっています。

そこから次のステージへ飛躍したいですね。

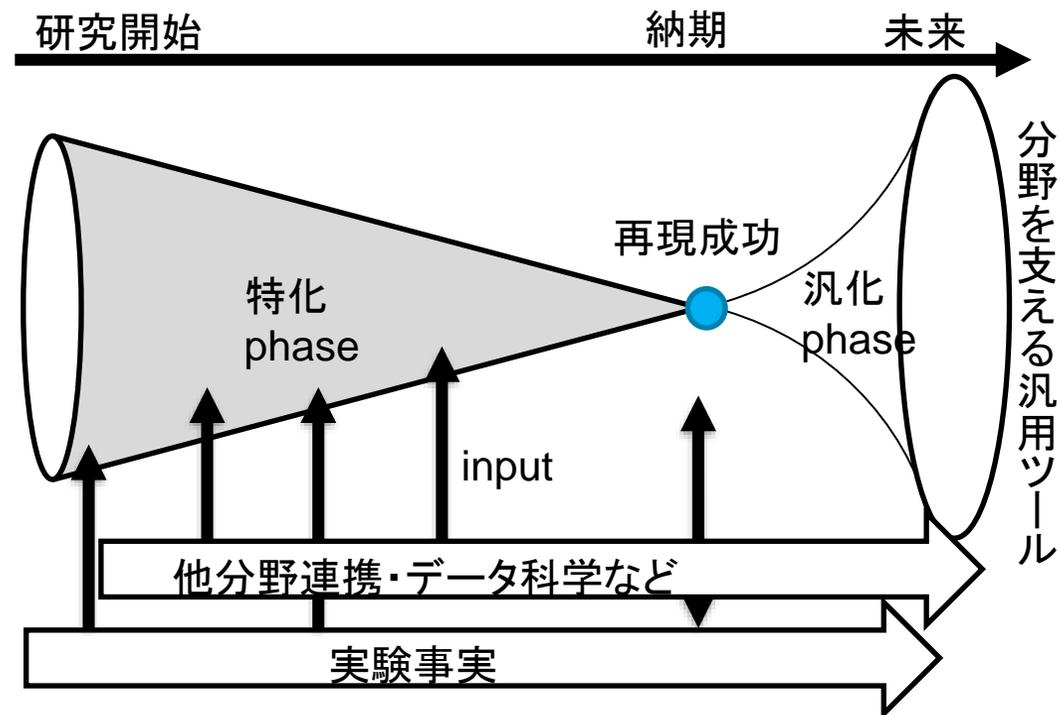
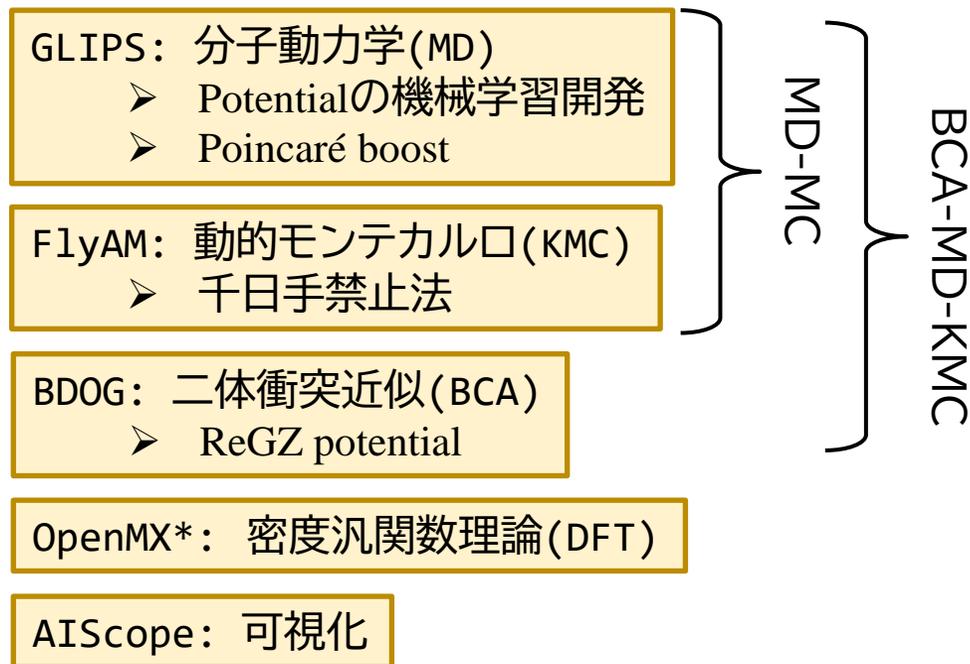
ところで、そのあなたの職人芸、

どのように維持しますか？

どのように後世に伝えますか？」

バックスキッピングなシミュレーション研究スタイル

- 目的達成のために、使えるものは何でも使って辿り着く(※各理論・手法の適用範囲は研究者モラルを厳守)
- 既存の方法では足りないならチャンス！ そこに新しい科学の展開がある



弱点: どこかの時点で並行開発のコストが個人リソースを上回る

MDのポテンシャル関数の数式からの自動コード生成

ポテンシャル関数

$$U(\{\mathbf{r}\}) = \frac{1}{2} \sum_{i,j \neq i} V_{Z_i Z_j}(r_{ij}) - \sum_i F(\rho_i(\{\mathbf{r}\})),$$

$$V_{Z_i Z_j}(r_{ij}) = \frac{Z_i Z_j e^2}{4\pi\epsilon_0 r_{ij}} \exp(-\alpha_{Z_i Z_j} r_{ij}) [1 + \beta_{Z_i Z_j} r_{ij}^2 + \gamma_{Z_i Z_j} r_{ij}^3]$$

$$F(\rho) = \frac{\rho}{\sqrt{\rho + d^2}}$$

メタコンパイラDAMA

- 数式の解析的な微分操作
- 効率的なコードの生成

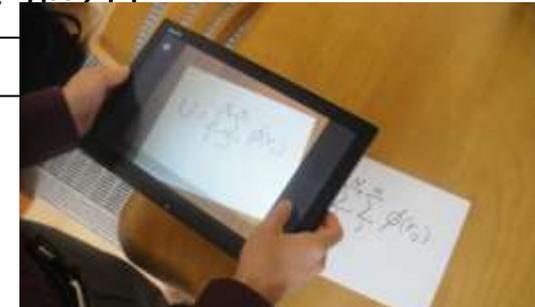
特許第6738087号

MD用のコード

```
416 double PotentialAndForce(int N, const vec3d* r, vec3d* f, LCL* pLCL)
417 //adition 1////////////////////////////////////
418 static const int MAX_NUM_BOND = 200; // the average of b
419 VGVECTOR bvvector[MAX_NUM_BOND];
420 //////////////////////////////////////adition 1//
421 const double coef21d560 = 1.0;
422 const double coef21c460 = coef21d560;
423 double sum21c460 = 0.0;
424 const double coef225438 = coef21c460;
425 for (int i = 0; i < N; i++){
426     int twobody_endpoint;
427     int bv_idx_i_end = 0;
428     const double coef21c6e0 = coef225438;
429     const double coef21c7e0 = 0.500000 * coef21c6e0;
430     double sum21c7e0 = 0.0;
431     vec3d dsum21c7e0_dr_i = { 0.0, 0.0, 0.0 };
432     const double coef225ab8 = coef21c7e0;
433     //adition 2////////////////////////////////////
434     {
435         if (bv_idx_i_end == 0){
436             bv_idx_i_end = GetBondListVG(pLCL, i, r, CUTOFF_L2,
437         }
438     //////////////////////////////////////////////////adition 2//
439     //adition 3////////////////////////////////////
440     for (int bv_idx_i = 0; bv_idx_i < bv_idx_i_end; bv_idx
```

テキスト形式の入力 (TeX like 形式)

```
U = ¥sum_i^N {0.5 ¥sum_j^{¥N_i} V(r_{ij})
    - F( ¥sum_j^{¥N_i} ¥phi(r_{ij})) }
V_{ij}(x) = Z_i Z_j / x ¥exp(-a_{Z_i}{Z_j}x)(...
¥phi(x) = B^2 x ¥exp(-c x) D(x)
F(x) = x / (¥sqrt(x + d^2))
```



オプション: OCR読み取り

MD用の原子間のポテンシャルモデルを機械学習で開発する場合

(マテリアルズインフォマティクスの)

(1) 教師データの準備

量子科学計算(DFTなど)から
{原子配置, エネルギー}
のDBを生成

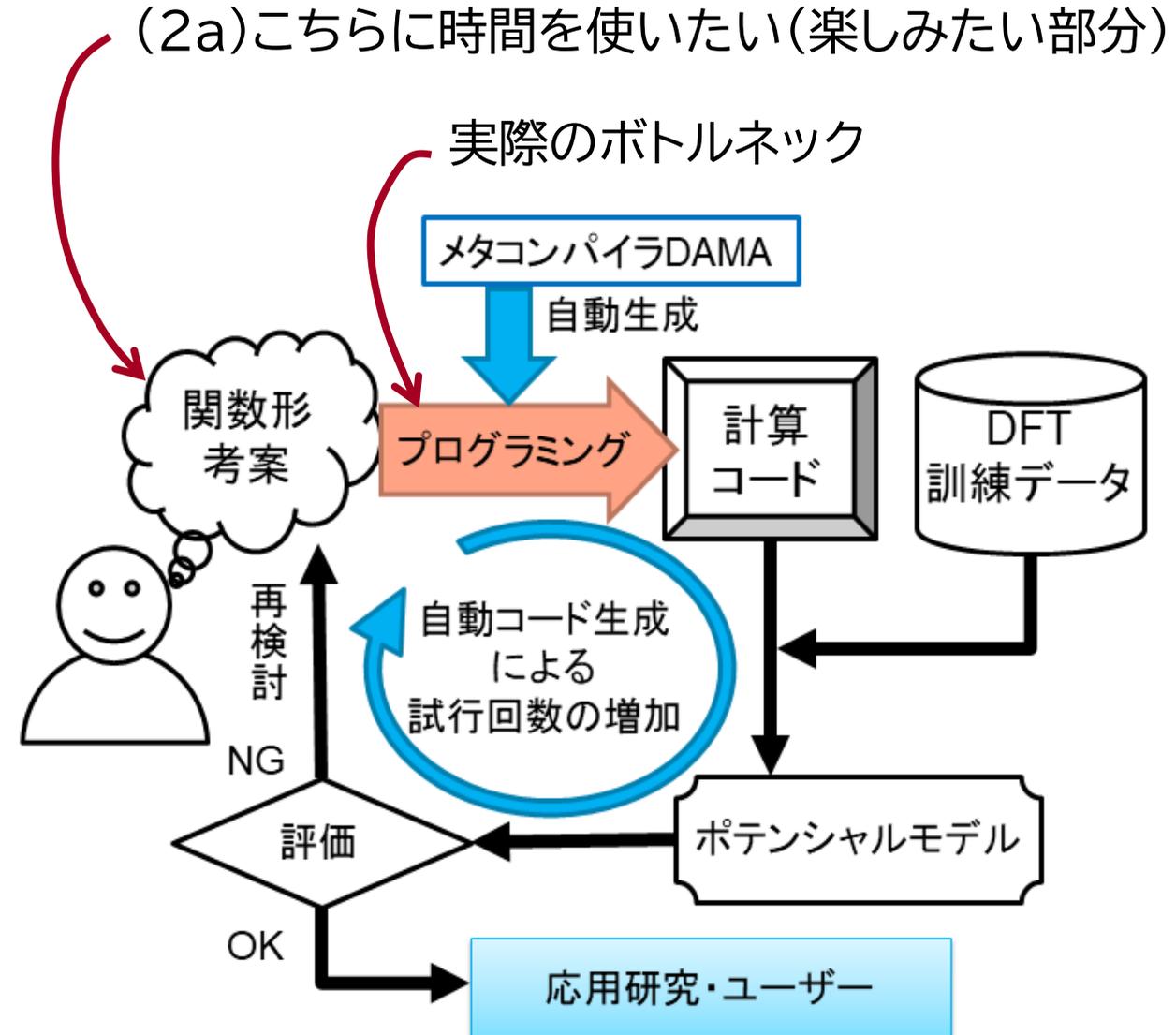
(2) 関数形(モデル)の考案

(2a) 物理・化学の法則に由来したモデル考案

- ボトルネックは数式考案後のコード化作業

(2b) 関数の形すら自動で決めさせる

- ニューラルネット等
- 外挿性が悪い



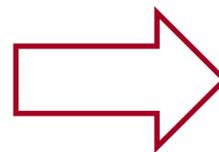
自動化 ⇒ マイスタールール？

例) 数式からの自動コード生成は、原理的には多くのシミュレーションでも可能。

それを伊藤が行ったとすると、、、

➤ MDに適用した場合

- 上手い数式変形が分かる
- コードチューニングの経験値が十分ある
- 気を付けるべき細部を経験的に知っている



マ イ ス タ ー ル ル
職人だけの経験則

➤ 流体/MHD/PICに適用した場合

- 数ある差分法の良し悪しが分からない
- 境界条件の勘所が分からない
- コードチューニング経験が足りない



単なる自動化

職人のやり方を自動化することが重要

→どうやって抽出するか？を研究

5～10年、ユニットで取り組む提案

ギャップドスケールの科学

- 時間と空間のスケールに差がある現象
- 法則の適用範囲を再考し、プラズマとは何かをもう一度問う
- 「役に立つ」ではなく、「興味を持ってもらう」ために

10年後も、また新しいことにチャレンジできるように

マイスタールール

- 自動化を超えて職人芸を抽出
- 他者からも取り出せるか？
- 職人が次の課題に進むために～人材育成関連まで