

科学研究費助成事業（基盤研究（S））研究進捗評価

課題番号	20226005	研究期間	平成20年度～平成24年度
研究課題名	超高速化量子分子動力学法に基づくマルチレベルトライボロジーシミュレータの開発	研究代表者 (所属・職)	宮本 明（東北大学・未来科学技術共同研究センター・教授）

【平成23年度 研究進捗評価結果】

評価	評価基準
A+	当初目標を超える研究の進展があり、期待以上の成果が見込まれる
○	A
	B
	C
<p>(意見等)</p> <p>本研究は、ナノ摩擦界面における皮膜形成過程など化学反応を伴う現象を、量子論に基づいたマイクロ、メゾ、マクロをつなぐマルチスケールシミュレータの開発を行っている。まず、超高速化量子分子動力学法トライボロジーシミュレータ、反応表現付トライボロジーシミュレータ、時間発展加速化理論、粒子間相互作用ポテンシャル精密決定自動化プログラム、化学反応表現付連続体力学シミュレータなどの開発を行い、エンジン添加剤の有効性の検証を行うなど着実な成果を挙げている。今後、当初目標に向けて順調に研究を進展させることにより、期待どおりの成果が見込まれる。</p>	

【平成25年度 検証結果】

検証結果	研究進捗評価結果どおりの研究成果が達成された。
A	<p>当初の研究目的である量子論に基づいたマイクロとメゾ、マクロを含むマルチレベルトライボロジーシミュレータの開発が行われた。超高速化量子分子動力学トライボロジーシミュレータや、メゾスケールでトライボロジー現象を解明可能な反応表現付トライボロジーシミュレータの開発、時間発展加速化理論の開発を行って、高速化と安定化を実現した。</p> <p>また、粒子間相互作用ポテンシャル精密決定自動化プログラムと、化学反応表現付連続体力学シミュレータの開発を行い、エンジン添加剤のトライボケミカル反応機構解明へ適用して有効性を検証した。当初の予定どおりの成果が達成されている。</p> <p>国際的な学術雑誌や学会等で研究成果が公表されており、社会的な周知活動もしっかりなされている。</p>