

# 時空間並列計算と機械学習を用いた 高性能マルチスケール解析手法の開発と応用



**キーワード** 時空間並列計算、分子動力学計算、第一原理計算、機械学習、大規模計算

劉麗君 LIJUN LIU

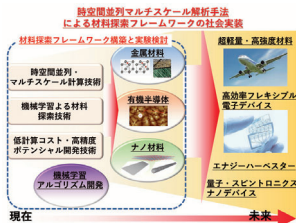
機械工学専攻 助教

機能構造学講座 固体力学領域 渋谷・田中 研究室



## ここがポイント！【研究内容】

- スーパーコンピューティング技術を駆使した時間並列計算手法と機械学習を用いて、第一原理計算の精度を保持しつつ、時空間スケールを克服する高性能マルチスケール計算を実現。
- マルチスケール解析手法を開発し、新規半導体材料等の不純物拡散、炭素鋼内部構造の発展解析と新規材料性能予測などに適用。
- 日米中の著名・新進気鋭の研究者・日本の企業と強力に連携し、国際的研究チームによる汎用性の高い材料開発シミュレータとしての優位性獲得を目指す。



応用分野

金属材料、半導体材料、ナノ材料

論文・解説等

- [1] Lijun Liu, Yoji Shibutani, 14th WCCM & ECCOMAS Congress 2020 (Virtual congress), 2021.
- [2] Lijun Liu et al., *Electrical Engineering in Japan*, pp. 1-11, 2021.
- [3] Lijun Liu et al., *COMPUMAG* 2019, 2019.

連絡先 URL

<http://www-comec.mech.eng.osaka-u.ac.jp/liu.html>

