

「マルチスケール・マルチフィジックス現象の統合シミュレーション」
平成 18 年度採択研究代表者

山本 量一

京都大学大学院工学研究科・准教授

ソフトマターの多階層/相互接続シミュレーション

1. 研究実施の概要

ソフトマター(柔らかく複雑な物質の総称)の中でも特に機能性材料として重要な高分子系とコロイド系を対象とし, ①「マイクロ階層(原子・分子レベル)・メソ階層(濃度分布や界面など)・マクロ階層(材料の形や製造プロセスなど)が物理的に矛盾なく相互に影響し合う多階層/相互接続シミュレーション手法の確立」と, ②「それを用いた全く新しい包括的材料・プロセス設計ソフトウェアの開発」を行う。平成 19 年度の主な成果は以下の通りであり、着実に研究を推進している。

1) 分子動力学拠点(泰岡)においては, 高分子およびコロイドシミュレータに求められる分子動力学コードを開発するための準備として, 単純なモデル系について分子動力学シミュレーションの高速化に取り組み, 汎用 CPU の 10 倍の計算速度, 10 倍以上の価格性能比を達成した。今後は, 高分子およびコロイドシミュレータに求められるより複雑なモデルに対して, 順次高速化を達成する予定である。

2) 高分子拠点(増淵)では, 分子動力学法と高分子シミュレータの連携手法として, 高分子用大規模高速マイクロシミュレータの開発検討を実施した。今後は, マイクロシミュレータの結果から, メソレベルの絡み合いシミュレータに必要な情報の抽出について取り組む予定である。

3) コロイド拠点(山本)では, 新しいアイデアに基づく CFD+MD のハイブリット計算法の開発を行った。今後, 本手法をより複雑な流体や液体中にイオンを含む場合などの系に対して拡張していく予定である。

4) マクロ材料拠点(谷口)では, マクロな流動場での物質点(流体粒子)の運動を追跡する「粒子描像による流体シミュレーションの開発」に着手し, 粒子描像での計算手法について妥当性を検証した。来年度以降, 各粒子にマイクロなシミュレータを組み込み連携を行っていく予定である。

2. 研究実施内容

(文中にある参照番号は4.(1)に対応する)

ソフトマター(柔らかく複雑な物質の総称)の中でも特に機能性材料として重要な高分子系とコロイド系に対し、マイクロ階層(原子・分子レベル)・メソ階層(濃度分布や界面など)・マクロ階層(材料の形や製造プロセスなど)が物理的に矛盾なく相互に影響し合う多階層/相互接続シミュレーションを実現する。1)分子動力学拠点, 2)高分子拠点, 3)コロイド拠点, 4)プラットフォーム/プロセス拠点の4研究拠点を置き、それぞれの拠点が開発した異なる階層のシミュレータの相互接続を主な開発項目とする。平成19年度の各研究拠点における実施内容は以下の通りである。

1)分子動力学拠点:

高分子およびコロイドシミュレータに求められる分子動力学コードを開発するための準備として、本年度は主に分子動力学シミュレーションの高速化について取り組んだ。近年ゲーム用途に開発された SONYPlaystation 3(PS3)や NVIDIA 社のグラフィックカード(GPU)は、ゲーム以外の汎用の機能を搭載しながら一般の CPU よりも高速なピーク速度を持つ。そこで我々は、PS3 や GPU を用いることで並列コンピュータなしに高速な演算速度を安価に達成することを試みた。まず、単純な Lennard Jones 粒子の分子動力学シミュレーションについて、一般の Quad Core CPU、PS3、GPU、MDGRAPE-3 を用いた計算速度を比較した。MDGRAPE-3 は分子動力学シミュレーション専用の計算機である。この結果、PS3 や GPU は汎用 CPU の 10 倍の計算速度、10 倍以上の価格性能比を達成し、PS3 や GPU が今後の分子動力学シミュレーションに有効に活用出来る可能性が示された。今後は、高分子およびコロイドシミュレータに求められる方法を含めたより複雑な系に対しても PS3 や GPU を使用していく予定である。

上記の他に、昨年度行った DPD 法を用いた紐状ミセル生成のシミュレーション[1]および IPS を用いた Lennard-Jones 流体のシミュレーション[2]について原著論文として発表した。

2)高分子拠点:

本拠点では、1)分子動力学法と高分子シミュレータの連携手法の開発:高分子用大規模高速マイクロシミュレータの開発検討を実施し、試験的に高分子のゲル化過程の計算を実施した[3]。また、マイクロシミュレータとの連携に必須な高分子シミュレータの分子パラメータを現象論的に確定させた[4]。あわせて、マイクロな場の記述に基づく高分子用の新モデルの検討を行っている。2)コロイドシミュレータと高分子シミュレータの連携手法の開発:固体粒子分散系用の高分子シミュレータをあらたに開発した。3)プロセスシミュレータと高分子シミュレータの連携手法の開発:プロセスシミュレータを試験的に用いて、蚕体内の高分子液体の流れ場を計算した[5]。また連携の試行として、NEDO の高強度繊維プロジェクトにおける紡糸過程の計算を実施した。4)プラットフォームへの対応:東京大学土井正男教授による OCTA プロジェクトプラットフォームに対する高分子シミュレータの対応を行い、一般の試行に供した。

3)コロイド拠点:

本拠点では、メソスケールシミュレーションの拡張[6-8]と、新しいアイデアに基づく CFD+MD

のハイブリット計算法の開発を行った。我々のアイデアは、巨視的な流れ場は通常の格子メッシュベースの CFD で計算を行うが、その際に必要とされる応力に対する構成関係には具体的なモデルは用いず、CFD から求められる局所的な流れ場をもとに MD によって直接、数値的に求められるものを用いる。即ち、CFD 計算のタイムステップ毎に MD によって応力の局所サンプリングを行う。

本年度は、この局所サンプリングのアイデアに基づく CFD/MD ハイブリット計算手法の開発を行い、その手法の有効性についての検証を行った。その結果、我々のハイブリット法では、計算する全時空間を MD で行う場合に比べて、数百倍程度の効率で有効な計算を行うことができることを実証した。また、我々のハイブリット法では計算効率を上げていくと計算結果にノイズ(揺らぎ)が目立つようになるが、そのノイズの性質について揺動散逸定理に基づく揺らぎの流体力学の理論と比較し詳細に調べた。その結果、我々のハイブリット計算で生じるノイズは、揺動散逸定理や中心極限定理などと矛盾しない性質のものであることを確認した。

本研究の成果は原著論文[9]として投稿した。今後は、本手法を分子モデルがより複雑な場合や液体中にイオンを含む場合などの複雑流体に対して拡張していく予定である。

4)プラットフォーム/プロセス拠点:

材料・プロセスシミュレーションでソフトマターの挙動を正しく予測するためには、物質固有の複雑なマイクロな自由度の情報(分子の絡み合いや配向など)をマクロな変数(応力場など)の方程式にどのように反映させるかが重要となる。実際、マクロなレベルで方程式を解こうとすると構成方程式(流動・変形と応力との関係式)を用いる必要がある。しかし、多種多様なソフトマター一般に有効な構成方程式は存在しないし、現実のプロセスは非平衡状態である場合も多いために、従来知られている構成方程式の適用はさらに困難となる。

本研究では、予め構成方程式を決めておくのではなく、構成方程式により求めていたマクロな場をマイクロな自由度を取り込んだシミュレータにより求め、それらと連携し合うことにより、マイクロな情報からマクロな現象を再現する数値計算手法を確立することを目的としている。このようなシミュレーション手法では、「各物質点がどのような場の中で時間発展を続けてきたか」という履歴を正確に捉えることが重要となる。そこで、本年度はマクロな流動場での物質点(流体粒子)の運動を追跡する「粒子描像による流体シミュレーションの開発」を行った。今年度は粒子描像での計算手法について、その妥当性を検証した。来年度は、この結果を踏まえて、各粒子にマイクロなシミュレータを組み込み連携を本格的に行っていく予定である。

3. 研究実施体制

(1)「山本」グループ

① 研究分担グループ長:山本 量一(京都大学大学院工学研究科、准教授)

② 研究項目

- 1) コロイドシミュレータの拡張
- 2) 分子動力学法とコロイドシミュレータの連携手法の開発
- 3) 高分子シミュレーションとコロイドシミュレータの連携手法の開発
- 4) プロセスシミュレータとコロイドシミュレータの連携手法の開発
- 5) プラットフォームへの対応
- 6) プロジェクト全体の総括

(2)「泰岡」グループ

① 研究分担グループ長: 泰岡 颯治 (慶應義塾大学理工学部、准教授)

② 研究項目

- 1) 高分子、コロイド高速計算分子動力学コード開発
- 2) 粗視化分子動力学コード開発
- 3) 高分子シミュレータと分子動力学法の連携手法の開発
- 4) コロイドシミュレータと分子動力学法の連携手法の開発
- 5) プラットフォームへの対応

(3)「増淵」グループ

① 研究分担グループ長: 杉山 裕子 (京都大学化学研究所、准教授)

② 研究項目

- 1) 分子動力学法と高分子シミュレータの連携手法の開発
- 2) コロイドシミュレータと高分子シミュレータの連携手法の開発
- 3) プロセスシミュレータと高分子シミュレータの連携手法の開発
- 4) プラットフォームへの対応

(4)「谷口」グループ

① 研究分担グループ長: 谷口 貴志 (山形大学大学院理工学研究科、准教授)

② 研究項目

- 1) メソスケール高分子シミュレータとの連携によるマクロな流動シミュレーション手法の開発
- 2) 分子レベルシミュレータやコロイド系シミュレータとの連携によるマクロ系(連続体レベル)シミュレーション手法の開発
- 3) 階層間連携を志向したシミュレーション・プラットフォームの構築に関わる概念の研究とその開発

4. 研究成果の発表等

(1) 論文発表(原著論文)

1. Noriyoshi Arai, Kenji Yasuoka, Yuichi Masubuchi, "Spontaneous self-assembly process for threadlike micelles", *J. Chem. Phys.*, 126, 244905 (2007).
2. Kazuaki Takahashi, Kenji Yasuoka, and Tetsu Narumi, "Cutoff radius effect of isotropic periodic sum method for transport coefficients of Lennard-Jones liquid", *J. Chem. Phys.*, 127, 114511 (2007).
3. N. Hosono, Y. Masubuchi, H. Furukawa and T. Watanabe, "A molecular dynamics simulation study on polymer networks of end-linked flexible or rigid chains", *J. Chem. Phys.*, 127, 164905, (2007)
4. Y. Masubuchi, G. Ianniruberto, F. Greco and G. Marrucci, "Unit of molecular weight, stress and time of the primitive chain network simulations for polymer melts ", *J. Non-Newtonian Fluid Mech.*, 149 (1-3), 8792 (2008).
5. M. Moriya, K. Oogo, Y. Masubuchi and T. Asakura, "Flow analysis of aqueous solution of silk fibroin in the spinneret of Bombyx mori silkworm by combination of viscosity measurement and finite element method calculation", *Polymer*, 49(4), 952-956 (2008)
6. Yasuya Nakayama, Kang Kim, and Ryoichi Yamamoto, "Simulating (electro)hydrodynamic effects in colloidal dispersions: smoothed profile method", to be published.
7. Takuya Iwashita, Yasuya Nakayama and Ryoichi Yamamoto, "Velocity autocorrelation function of a Brownian particle by direct numerical simulation: Generalized Langevin equation and Long time tails", to be published.
8. Takuya Iwashita, Yasuya Nakayama, and Ryoichi Yamamoto, "A Numerical Model for Brownian Particles Fluctuating in Incompressible Fluids", to be published.
9. Shugo Yasuda and Ryoichi Yamamoto, "A Model for Hybrid Simulations of Molecular Dynamics and CFD", to be published.