

研究課題別中間評価結果

1. 研究課題名:ソフトマターの多階層/相互接続シミュレーション

2. 研究代表者:山本 量一(京都大学大学院工学研究科 教授)

3. 研究概要

1)コロイド拠点、2)分子動力学拠点、3)高分子拠点、4)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と、それを用いたソフトマターの基礎研究を主な研究内容としている。

1)コロイド拠点

この拠点が持つコロイド系のシミュレーション技術を基盤とし、コロイド系に有効なメソシミュレータとMD法によるミクロシミュレータとの相互接続を行っている。局所サンプリングのアイデアに基づく計算流体力学(CFD)と分子動力学(MD)とのハイブリッド手法の開発をすでに行い、その有効性について詳細に検証した。その結果、新しいハイブリッド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。この成果は論文として投稿済みであるとともに、10月にフロリダ州タラハシで行われるMMM2008国際会議にて発表を予定している。

2)分子動力学拠点

これまでハードウェアとソフトウェアの両面で高速化のための開発を行ってきた。その一つがグラフィックカード(GPU)による高速化である。GPUはもともと三次元グラフィックスを高速に描画するために進化してきたものであるが、近年汎用の計算にも使用することが出来るようになった。例えばNVIDIA社の最新GPUであるGeForce GTX280は、Intelの最新CPUの10倍の単精度ピーク計算速度を持ち、コストパフォーマンスはCPUの何倍もよい。最近、実用的な分子動力学シミュレーションの実行を劇的に加速することに成功した。世界的によく使われている分子動力学シミュレーションプログラムであるAMBERやCHARMMからGPUを使えるように修正し、CPUに対し何十倍も加速することが出来る。

3)高分子拠点

本拠点が独自に有する高分子シミュレーション技術は半経験的なモデルに基づいており、種々のモデル上の仮定を認めることで高速計算を可能にしている。経験に寄らない分子動力学シミュレーションなどと接続するためには、分子動力学計算で得られる結果をパラメータとして半経験モデルに渡す方法が有効である。高分子の長時間ダイナミクスの記述には「からみあい」という概念が用いられる。高分子間の幾何的な束縛を理想化した概念であるが、ミクロな実体は明らかではなく、からみあいの定義もモデルによって様々であった。我々は、分子動力学シミュレーションにより、幾何的な束縛をからみあいとして定量化して抽出し、分子動力学シミュレーションと半経験的なモデルとの定量的な接続を試みている。

4)プロセス拠点

本拠点では、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ミ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、ミ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、我々のプロセス拠点ではマクロな流動場での物質点(内部自由度を有する流体粒子)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」を進めている。

4. 中間報告結果

4-1. 研究の進捗状況及び研究成果の現状

一部方針変更(プラットフォーム開発)があったが、他は当初計画どおりであり、順調に進捗している。コロイド拠点でのCFD・MDハイブリッドシミュレーションなど意欲的な研究がされ成果も挙がっている。また、分子動力学計算の加速については、一定の成果がみられる。ソフトマターという巨視的な物質の振る舞いの解明に分子

レベルの特徴を取り入れる連結シミュレーション手法を開発するために、高分子系とコロイド系を取り上げ具体的開発をすすめる方向性は評価できる。高分子の絡み合い点を抽出する粗視化は興味深い。

新たな展開とまでは言えないかもしれないが、高分子シミュレータと分子動力学計算の連携方法について新たな研究項目が追加された。研究について絶えず向上しようとする姿勢が感じられる。

成果の科学的・技術的インパクトでは、本研究は、ソフトマターのシミュレーション基盤の開発にあり、新たな知見を得る、或いは手法の研究開発を行うというものではない。従って、新規性に欠けるという意味では、科学的インパクトや重要度は標準的である。類似研究との比較では、課題がかなり限定されており、世界的には本チームは特異な存在である。従って、比較するというものではなく、この分野で具体的で実用に供する成果を出すことがまず求められる。ソフトマター研究では国内をリードする研究グループの一つと思われる。国際的な研究競争の核心についての水準は必ずしも明確でないが、研究代表者・分担者の年齢から今後の国際的發展が期待される。

研究実施体制については、山本グループを中心に本研究を進めているが、4つの拠点間の共同研究・連携を更に密にし、研究成果(基盤構築)を上げることが必要である。各拠点が独立に研究開発しているように見える。

研究費の執行については、特に問題なく、妥当である。

現在までの研究成果としては、コロイドシミュレータの拡張や CFD/MD ハイブリッド計算手法の開発を実施、高分子粗視化モデルと MD の連結シミュレーションの実施、ラグランジェ描像による粒子法流体シミュレータの開発、等の成果が得られている。

4-2. 今後の研究に向けて

今後の研究の進め方については、目標が比較的シンプルで明白であるため、方向性、体制は妥当である。今後の成果次第で場合によってはグループ毎の予算に傾斜をつけても良いように思われる。各課題の成果を統合して相互接続シミュレーションを行うためのプラットフォームの実現について、年次計画等を明確にする必要がある。各拠点の独自性の高いシミュレータをベースに統合化された研究基盤構築というのは、一見矛盾しているように見える。統合化基盤構築を目指すには、お互いの連携を強化することが必要であろう。

今後見込まれる成果については、意外性のある結果は出ないかもしれないが、良質の研究成果が得られるように思われる。プラットフォームを一般の人が利用できる形に完成させるにはかなりのブレークスルーを必要とする。

戦略目標に向けての貢献、成果の社会的なインパクトの見通しについては、ソフトマター分野での標準的なプラットフォームが構築出来、それが広く使われることになれば、そのインパクトは大きいものがある。本領域の主題の一部である、マルチスケールシミュレーションに貢献する研究課題である。

4-3. 総合評価

ソフトマターシミュレーションにおける標準を目指すことは、非常に意欲的な目標であり、そのプラットフォームが構築でき、広く使われるようになれば、その成果は大いに期待できる。現在の所。各拠点の研究開発は計画通り順調に進捗している。

但し、統合化されたプラットフォーム構築を目指すには、今後、各拠点間の連携を一層強化することが必要であろう。また、構築されたプラットフォームがこのプロジェクト終了後、広く使われる為には、このプロジェクト期間内に、その先を見据えた準備(プラットフォームの維持、保守、サポート、強化の体制・やり方など)を行っておくべきと考える。

コロイドなど応用を限定しており、しかも世界のあらゆるところで同じような目標に向けての競争ではなく、独自

の領域に限定した取り組みで得られた成果は必ず無駄にはならず生きてくる。この意味で本チームの研究は今後も有用であると判断する。

当該チームはこの課題についての大規模な国際シンポジウムをすでに1件開催しているが、研究終了までに新たな国内及び国際ワークショップ、シンポジウムを開催することが望まれる。