

「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 17 年度採択研究代表者

尾形 修司

名古屋工業大学大学院工学研究科・教授

ナノ・メゾ・マイクロの複雑固液界面の大規模数値解析

1. 研究実施の概要

我々のチームは、流体と固体が共存する実際的な材料への適用を目標として、同時並列型ハイブリッドコードの開発とそのグリッド適用化研究に、ナノからメゾへのスケールアップと、マイクロからメゾへのスケールダウンの両方向からアプローチしている。また両アプローチのために、隣接するスケール階層での物理を繰り込み、流体および固体用の様々な手法が取り扱えるスケール幅を広げている。

[ナノからメゾスケールへのアプローチ]

同時並列型のハイブリッド量子古典コードで用いる、古典原子系の中に量子計算(電子密度汎関数法)を適用する領域を動的に設定する量子領域アダプティブ設定法について、ナノ材料中の不純物拡散過程やナノ摩擦過程等に関する大規模シミュレーションのグリッドを含む様々な計算環境での実施を通じて、その精度検証および高精度化を行った。さらにハイブリッド量子古典コードを、二次電池材料の基礎系である Li-グラファイト層間化合物に応用し、複雑境界問題のひとつである電極-電解質界面反応への応用を進めた。

設定した化学反応領域での反応生成物濃度の時間発展を簡便な形式で表式化し、パラメータ一授受型での多階層解析に利用することを目指している。反応の記述に、組み換えチャンネル法の採用を検討し、古典領域における運動との接続を可能とする計算手続きの定式化を進めた。また、局所熱平衡原理に基づいて第一原理的に固体の原子間ポテンシャルを粗視化する粗視化粒子法の実用化を進めた。

[マイクロからメゾへのアプローチ]

同時並列型ハイブリッドコードの開発に関しては、複雑境界を持つ流体-固体系に格子ボルツマン法と粗視化粒子法をそれぞれ適用し、2次元系での検討を経て3次元系にも適用可能とした。格子ボルツマン法コードを並列化したのち乱流計算に適用してその性能評価を行い、さらにそのコードのグリッド適用化を検討した。また DNS 法で計算した乱流中に分散する鎖状高分子の応答特性統計則を調べた。

燃料電池における触媒層や電解質膜内の様に、Knudsen 数(=平均自由行程/系の代表長さ)が比較的に大きくなり、連続体としての取り扱いが破綻する可能性がある領域がある。この非連続体-連続体マルチスケール問題を視野におき、これまでに開発した非連続体側リミット対応型格子ボルツマン法コードの境界条件設定法を改良すると共に、別途に行う分子動力学シミュレーションの結果と比較することで、その精度検証を行った。

2. 研究実施内容(文中にある参照番号は 4.(1)に対応する)

[ナノからメゾスケールへのアプローチ]

ハイブリッド量子古典シミュレーション法の実用性を高めるために、様々な対象系に適用可能な、量子領域のアダプティブ選択アルゴリズムの開発を進めた。水分子が存在する環境で、ダイヤモンドやアルミナ等のナノインデントを、Si 表面で擦る際や押し下げる際に、その接触部の Si が酸化する場合があると報告されている。我々は、量子領域自動選択アルゴリズムの精度検証のため、この実験設定をハイブリッド量子古典法で模倣し、時間と共に移動あるいは大きさが変化する接触部を電子密度汎関数法で精度良く扱った。その結果、インデント形状、接触位置、擦り速度等の様々な設定の違いにより、水分子の逃散あるいは Si の酸化が生じることがわかり、それら全ての場合においてアダプティブ選択アルゴリズムが適切に機能していることを確認した。また、Li イオン電池の基礎系として重要な Li-グラファイト層間化合物に対して、電子状態の変化が重要となる挿入 Li とグラファイトを含む領域を量子領域に設定し、他の炭素原子は古典領域とする、ハイブリッド量子古典シミュレーションを行った。その結果、Li はグラファイト中で一価の陽イオンとして存在していると、みなせることが分かり(図 1 参照)、そのダイナミクスから得られた拡散係数は低ドーパ量の条件での実験値を良く再現していることが確認できた。

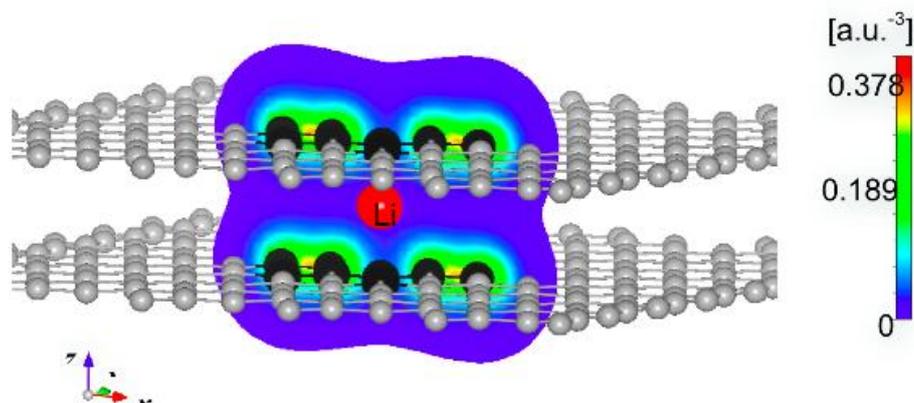


図1. ハイブリッド量子古典シミュレーション法で計算した、Li 近傍での価電子密度の分布。

高バリアエネルギー過程のために開発した Nudged Elastic Band (NEB)法を取り入れたハイブリッド量子古典コードの有用性を、Si 中の酸素拡散バリアエネルギーの外部応力依存問題を例に実証した。¹⁾ さらに NEB 法化ハイブリッド量子古典コードをグリッド適用化し、そのコードの日米グリッド上での実行を通じて、ハイブリッドシミュレーションコードを大規模グリッド上で実行する際の

動的資源割り当て手法を確立した。⁶⁾

化学反応を近似的に高速計算するための方法とそのプログラムコードの開発を検討した。指定した「反応領域」から生成する分子の確率密度の時間変化を記述するために、散乱理論の適用を試みている。少ない計算量の記述法であることが実用上必要であり、組み換えチャンネル結合法の検討を進めた。また関連して、分子の剛体としての回転運動を簡便な形式で取り入れたベルレ型分子動力学アルゴリズムを構築した。²⁾

メブスケールでの固体表現法の一つとして、原子集団のある平均変位を粗視化粒子の変位で表し、その拘束条件のもとでフォノン近似を適用した熱統計平均を通じて系のエネルギー期待値を計算することで、粗視化粒子間の実効バネ係数(方向および粒子ペア毎に異なる)を得る粗視化粒子法の開発とその実用化を進めた。特に、再帰的操作により広範囲の粗視化度を可能とし、また局所的回転の適切な取扱法を考案して大変形構造体に適用可能とした。⁴⁾ さらに、原子系との適切なスケール間接続法、シミュレーション実行中に格子欠陥等を粗視化粒子間ポテンシャルの再計算を通じて動的に取り入れる方法等の研究開発を進めている。

[マイクロからメブへのアプローチ]

流体-固体共存系に格子ボルツマン法と粗視化粒子法をそれぞれ適用し、両者を動的に相互結合するための時間粗視化境界条件を組み込んだハイブリッドコードを開発してきた。今年度は、MEMS デバイスへの応用を念頭におき、レイリー波により励起される2次元列柱による流体輸送の問題に応用した。³⁾ その結果、レイリー波の進行方向とは逆向きに流れが生じることを見いだすと共に、その流量の列柱弾性率・列間隔・レイリー波振動数依存性等を明らかにした(図2参照)。さらに、より興味深い3次元系への展開として、カーボンナノチューブやグラフェンと流体との相互作用を記述するハイブリッドコードの開発を進めている。3次元化に伴う計算量増大を考え、グリッド適用化を検討した。

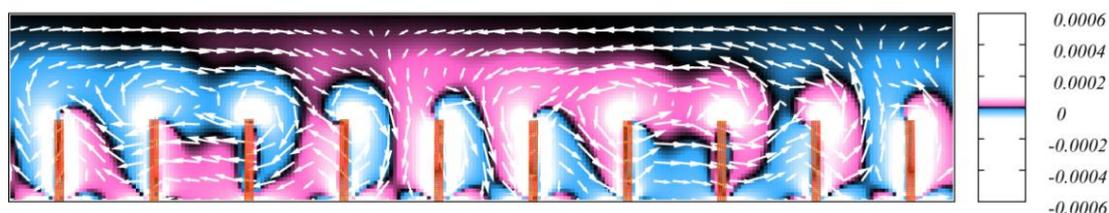


図2. 底板表面を左から右に進行するレイリー波によって振動する弾性棒群が、平均として反対方向(左向き)の流れを誘起する。カラーは渦度分布、矢印は速度ベクトル。

非連続体側リミット対応型の格子ボルツマン法コードを用いて、非連続体領域($Kn=0.08$)の障害物チャンネル流れ(図3左参照)を解析し、分子動力学シミュレーション結果との比較を通じてその精度を検証した(図3右参照)。レベルセット法を組み合わせた格子ボルツマン法⁵⁾コードで多孔体内の熱流動を解析し、実験結果との比較を通じて、手法・コードの信頼性を確認した。さらに、生体内の乱流場に適用できるようにLBMラージ・エディ・シミュレーションコードを開発し、生体内乱流への適用を進めている。

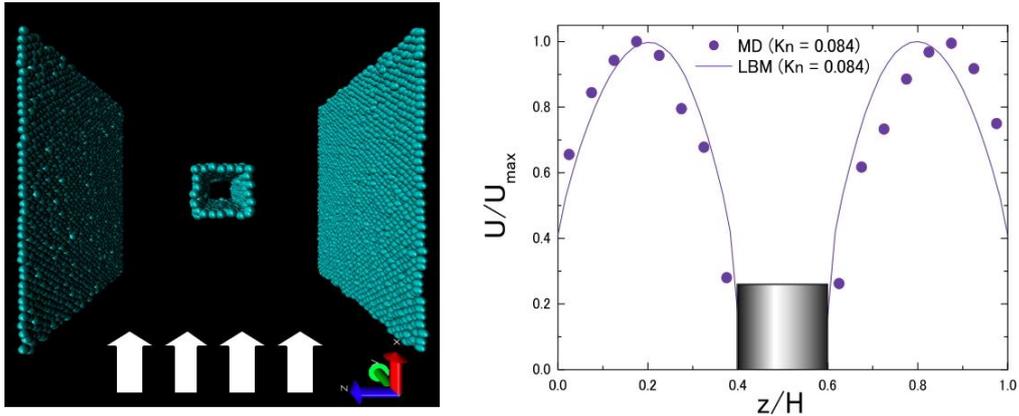


図3. 分子動力学法および格子ボルツマン法で計算した障害物チャンネル流れに関する、流体速度場の位置依存性の比較。

乱流場がその中に導入した鎖状高分子に与える影響を数値解析した。DNS (Navier Stokes 方程式の直接数値計算) 法で乱流を計算し、その中に入れた鎖状高分子のコイル・ストレッチ転移の統計法則を調べた。その結果、コイル・ストレッチ転移は流体の粘性力と弾性力の比であるワイゼンベルグ数(Wi)が 4 程度のときに起こること、鎖状高分子の末端間距離のゆらぎの相関時間は Wi に対して単調でないこと、高分子のストレッチの方向は乱流ストレイン場の第 2 固有ベクトルの方向に近く渦度ベクトルとの類似性があること等が分かった。

3. 研究実施体制

(1) 名工大グループ

- ① 研究分担グループ長: 尾形 修司 (名古屋工業大学大学院、教授)
- ② 研究項目
 - ・ ナノ・メゾスケール用ハイブリッドコード開発
 - ・ マイクロ・メゾスケール用ハイブリッドコードの開発

(2) 豊田中研グループ

- ① 研究分担グループ長: 兵頭 志明 (株式会社豊田中央研究所、室長)
- ② 研究項目
 - ・ 階層的手法による格子ボルツマン法の複雑微細境界問題への適用範囲拡大
 - ・ 階層的手法による化学反応の近似表現

(3) 大阪府大グループ

- ① 研究分担グループ長: 須賀 一彦 (大阪府立大学大学院、教授)
- ② 研究項目
 - メゾからの複雑境界熱流体問題への適用

(4) 産総研グループ

①研究分担グループ長: 田中 良夫(産業技術総合研究所、主幹研究員)

②研究項目

シミュレーションコードのグリッド化

4. 研究成果の発表等

(1) 論文発表 (原著論文)

1. Takahisa Kouno and Shuji Ogata: Activation Energy for Oxygen Diffusion in Strained Silicon: A Hybrid Quantum-Classical Simulation Study with the Nudged Elastic Band Method, J. Phys. Soc. Jpn, Vol. 77, No.5, pp. 54708-1-10, 2008.
2. Miyabi Hiyama, Tomoyuki Kinjo, and Shi-aki Hyodo: Angular Momentum Form of Verlet Algorithm for Rigid Molecules, J. Phys Soc. Jpn., Vol.77, pp. 64001, 2008.
3. Yohei Inoue, Junji Tanaka, Ryo Kobayashi, Shuji Ogata, and Toshiyuki Gotoh: Multi scale numerical simulation of fluid-solid interaction, Materials Transactions, Vol. 49, No. 11, pp. 2550-2558, 2008.
4. Ryo Kobayashi, Takahide Nakamura and Shuji Ogata: Development and Implementation of Recursive Coarse-Grained Particle Method for Meso-Scale Simulation, Materials Transactions, Vol. 49, No.11, pp. 2541-2549, 2008.
5. K. Suga, T. Tanaka, Y. Nishio, and M. Murata: A boundary reconstruction scheme for lattice Boltzmann flow simulation in porous media, Progress in Computational Fluid Dynamics, Vol. 9, pp. 201-207, 2009.
6. Y. Song, Y. Tanaka, H. Takemiya, H. Nakada, S. Sekiguchi, A. Nakano, and S. Ogata: The Development and Evaluation of an Integrated Framework Supporting Sustainable Execution for Large-Scale Computations on Grids, International Journal of Computational Science, Vol. 3, No.1, pp. 18-31, 2009.

(2) 特許出願

平成 20 年度 国内特許出願件数 : 0 件 (CREST 研究期間累積件数 : 0 件)