

「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指して、同時並列型ハイブリッドコードの研究開発を、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返し、流体および固体用の様々な手法が取り扱うことができるスケールの幅を広げている。

[ナノからメゾスケールへのアプローチ]

同時並列型ハイブリッド量子古典シミュレーションを実現する主要技法の一つである、アダプティブな量子(密度汎関数計算)領域設定法の実用性を高めるために、今年度は Li イオン電池の負極として利用されている Li-グラファイト層間化合物を対象に、熱拡散する Li 原子とその近傍炭素原子群を量子領域に動的設定するシミュレーションを行った。さらに Li 拡散過程の Li 密度依存性について計算を進めている。また、密度汎関数法による量子計算をさらに効率よく行うために、全系を部分領域の重ね合わせ集合体とする分割統治法の考え方を取り入れたオーダーN 型コードの開発を進めた。

パラメーター授受型のハイブリッドシミュレーションでの利用を踏まえ、化学反応領域での反応生成物濃度の時間発展を効率良く計算するために、反応記述に組み換えチャンネル法を用いさらに古典領域での分子運動と接続させるアルゴリズムの検討を進めた。

局所熱平衡原理に基づいて固体の原子間ポテンシャル系を粗視化する粗視化粒子法を有限温度に拡張する定式化を行った。また、ハイブリッド粗視化粒子原子シミュレーションの亀裂破壊過程への適用を通じて、異なるスケール間を接続する新手法の精度検証を行った。過去に提案された様々な粗視化動力学シミュレーション法の総合的理解に役立つ為、多分子系の運動方程式を任意自由度の部分空間に射影する手続きにより粗視化動力学方程式を導く理論手法を提

案した.

[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、グラフェン薄膜と流体との3次元相互作用を解析するために、グラフェン薄膜に粗視化粒子法、流体運動に格子ボルツマン法を適用したコードを開発しその挙動を解析すると同時に、その並列化進め性能評価を行った。また、スペクトルDNS法で計算した乱流中に分散する多数の鎖状高分子を扱う並列化コードを開発し、その応答特性の統計則を調べた。

燃料電池における触媒層の様に、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同時に扱える手法として、これまでに非連続体側リミット対応型格子ボルツマン法コードを開発してきた。今年度はこのコードを、燃料電池多孔体を模した3次元ナノメッシュ内の流れに適用し、別途実施した分子動力学シミュレーションの結果との詳細な比較検討を行った。

計算グリッド上の非均質な計算資源を効率よく利用する手法の確立に向け、名工大グループが開発する格子ボルツマン法による流体シミュレーションをヘテロジニアス・マルチコアアーキテクチャの1つであるCell Broadband Engine(Cell/B.E.<sup>TM</sup>)上に移植し、その性能評価を行った。

## § 2. 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の高精度化
- ・マイクロ・メゾスケール用ハイブリッドコードの開発と適用

### (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

- ・階層的な手法による化学反応の近似表現
- ・ナノ・メゾスケール用ハイブリッドコードの実用的課題への適用

### (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((独)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

### § 3. 研究実施内容

(文中に番号がある場合は(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ている。今年度は、Li イオン電池の負極として実用化されている 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 とその周囲の炭素原子群を量子領域に設定し、熱による Li の移動に従って量子領域も移動させるシミュレーションを行った。その際、グラファイトの層間相互作用に対してレナード・ジョーンズポテンシャルを基本形とする独自の原子間ポテンシャルモデルを作成し、系全体の古典分子動力学計算に取り込んだ。シミュレーションの結果、層間相互作用の効果により Li の拡散が抑えられることが分かった。

量子力学計算を効率的に行うために、全系を部分領域の重ね合わせ集合体とする分割統治法の考え方を取り入れたオーダー N 型のプログラム開発を進めた。その際、高い計算精度を維持するように embedded cluster 法の考えを援用し、各領域間相互作用が補正項として加わった Kohn-Sham ハミルトニアンを導入した。いくつかのモデル分子に本手法を適用し、部分領域間の相互作用を考慮することで系を分割計算した場合においても、分割無で求めた電荷密度分布を精度良く再現することを確認した。

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進めている。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、散乱理論の援用を試みた。少ない計算量の記述法であることを要件として組み換えチャンネル結合法を検討し、チャンネルの分類を反応前後の分子の相対配向によって区別することにより反応ポテンシャル面の情報を低計算量で取り出せることを確認した。さらに、古典分子動力学計算における時間発展の過程に条件付き確率として導入するアルゴリズムの検討を進めている。

異なる特性スケールを持つ部分系を接続する際、各系で存在できるフォノンの波数領域幅が異なるために不自然なフォノン反射等が接続部で生じる問題が知られている。我々は、比較的簡単にコード実装ができ、少ない計算量で物理的に妥当な領域間接続が実現できる新手法を公表した<sup>4)</sup>。実際に、固体原子系の破壊過程に適用し、ハイブリッド粗視粒子原子シミュレーションの結果が、全原子シミュレーションの結果と良く一致することを確認した。また、有限温度での非線形効果を取り入れた粗視化粒子法の研究開発を進めた。

粗視化動力学シミュレーションにおいては、検討すべき課題に適した自由度を任意に抽出した計算が出来ることが望ましい。今年度は、多分子系の運動方程式から、任意の自由度の部分空間に射影する手続きによって、系の粗視化動力学方程式を得る理論を構築した。また、導出した方程式に現れる分子定数の評価を行うことによって、各項が物理的に意味のある振舞いを示し得ることを確認した<sup>2,3)</sup>。

[マイクロからメゾへのアプローチ]

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、両系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、グラフェン薄膜と流れとの 3 次元的相互作用により励起される薄膜の振動を解析した。その結果、一様な流れにおかれた 1 枚のグラフェンシートは、流れ方向となす角度に依存して多様な運動をすることが見出された。直角の場合は、単にしなるだけであるが、斜めの場合は、大きな鞭のようなしなり振動を行うこともある。流れに平行におかれた 2 枚のグラフェンシートの場合(図1参照)には、シート上边上流部は時間発展と共に外向きに広がりつつ振動するようになり、上辺下流部は平衡位置を挟んでほぼ均等に振動すること等も分かった(図2参照)。3次元化に伴う計算量増大を考え、並列化コードを開発しつつある。

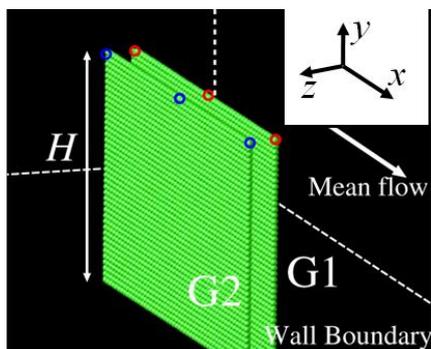


図1. 一様流中(x 方向)におかれたグラフェン薄膜(G1 と G2)

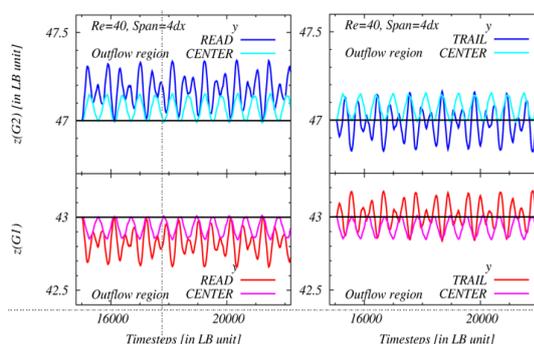


図2. 薄膜変位の時間変化:  
左・上边上流部, 右・上辺下流部

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。スカラー乱流の DNS (Navier Stokes 方程式とスカラー輸送方程式の直接数値計算)の波数空間コードの並列化と高速化をさらに進めた。また、乱流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、鎖状高分子の構成セグメント数依存性、統計的射影演算子の手法による鎖状高分子のモデリングを行った。その結果、コイル・ストレッチ転移は乱流運動の特性時間であるコルモゴロフ時間と高分子の緩和時間の比であるワイセンベルグ数が 4 程度のときに起こること等を見いだした。乱流中に多数の高分子鎖が分散した系を計算するためにコード並列化を進めた。

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=0.24)の 3次元ナノメッシュ内流れを解析し、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とロ

バスト性を検証した。格子ボルツマン法コードで多孔体に接する界面流動を解析し、界面での摩擦や滑り速度の定量的評価法を提示した<sup>1)</sup>。さらに、格子ボルツマン法ラージ・エディ・シミュレーションコード用の壁モデルの開発を進め、生体内乱流などの汎用解析コードへの拡張を進めた。

計算グリッド上の非均質な計算資源を効率よく利用する手法の確立に向け、名工大グループが開発する格子ボルツマン法による流体シミュレーションをヘテロジニアス・マルチコアアーキテクチャの1つである Cell Broadband Engine(Cell/B.E.<sup>TM</sup>)上に移植し、その性能評価を行った。その結果、利用するコア数に応じた性能向上が得られることを確認した。

## § 4. 成果発表等

### (4-1) 原著論文発表

#### ●論文詳細情報

1. K. Suga (OPU) and Y. Nishio (OPU): Three dimensional microscopic flow simulation across the interface of a porous wall and clear fluid by the lattice Boltzmann method, *The Open Transp. Phenom. J.*, Vol.1, pp. 35-44 (2009). doi: 10.2174/1877729500901010035.
2. S. Hyodo (TCR&D): Coarse-Grained Equation of Motion for Many Particle System Containing Internal Degrees of Freedom, Special issue on Frontiers of Computer-Aided Engineering, *Jpn. J. Ind. Appl. Math. (JJIAM)*, accepted.
3. 兵頭志明(豊田中研), 土井正男(東大): 高分子シミュレーションにおけるマルチスケールモデリングと粗視化の方法, *高分子論文集(邦文)*, Vol. 67, pp. 164-178 (2010). doi:10.1295/koron.67.164.
4. R. Kobayashi (NIT), T. Nakamura (NIT), and S. Ogata (NIT): A simple dynamical scale-coupling method for concurrent simulation of hybridized atomistic/coarse-grained-particle system, *Int. J. Num. Meth. Eng.*, accepted.