

「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・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

1)分子動力学拠点、2)高分子拠点、3)コロイド拠点、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 法によるマイ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)とのハイブリット手法を開発し、全時空間を MD で行う場合に比べて数百倍程度の効率で計算を行うことができることを実証した。また、この技術を応用して高分子流体の解析を行った。

2)分子動力学拠点

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いる。グラフィックカード (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。GPU を用いて、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ている。その成果により、ゴードンベル賞を受賞した。

3)高分子拠点

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、マイ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に基づく高分子シミュレーション技術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。

§ 2. 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、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 顕治(慶應義塾大学、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:増淵 雄一(京都大学、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(京都大学大学院、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

§ 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)

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)コロイド拠点、2)分子動力学拠点、3)高分子拠点、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21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)コロイド拠点:

メソスケールコロイドシミュレーション法の拡張[7, 14, 15, 19, 20]とMD/CFDの連結計算法の開発[8, 16]を行った。MD/CFDの連結計算法は、2平板間の高分子液体の流動挙動解析に応用され、その複雑な流動と特異な力学特性の挙動が明らかにされた。図1はその解析を行った系の概略を表す。ここで2平板は高速に振動している系を考える。図2はその時の高速振動平板上での高分子液体とニュートン流体の流動挙動の比較を示している。高分子液体の場合には流速の変化がより激しく、流速は振動平板から離れると急激に減少している様子が分かる。これは、激しく流動している平板近傍で高分子液体の粘性が低下し(シア・シニング)、平板から加えられる運動が内部まで浸透しないため、あたかも平板近傍でスリップを起こしているように見えるのである。図3は高速振動平板間での高分子液体の局所的な力学特性の変化を表している。高分子液体ではその運動状態によって力学特性が大きく変化することが知られている。高速に振動する平板間では図2に示すようにその流動は激しく変化するため、高分子液体の局所的な力学特性もその局所的な流動状態によって変化する。図3は高分子液体の局所的な弾性(G')と粘性(G'')の大きさの

空間変化を示している。高速に振動する平板間では、高分子液体は振動平板の近傍では粘性流体的に ($G' \ll G''$)、平板から離れたところでは弾性的に ($G' > G''$) とその力学特性を変化させて

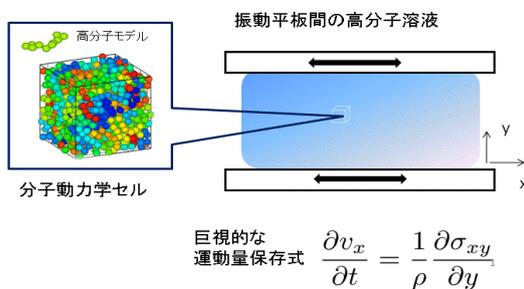


図1. 系の概略図

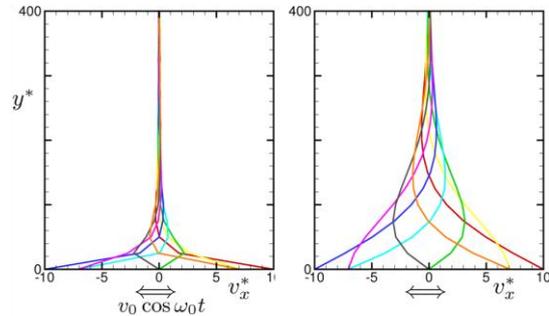


図2. 速度分布の比較。(左)高分子液体。(右)ニュートン流体。図の各線は異なる時間での流速分布を表しています。

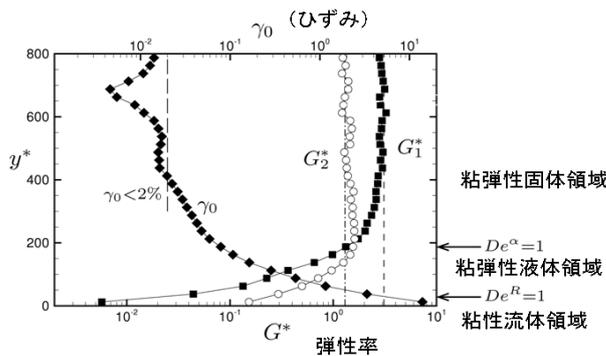


図3. 高分子溶液の局所力学特性の変化。 G_1 は弾性(貯蔵弾性率)、 G_2 は粘性(損失弾性率)を表します。 De はデボラ数を表す。

いることが分かる。本研究で解析した系は、単一のMDシミュレーションで扱うには系のサイズが大きすぎ、またCFDでは高分子液体の力学特性が複雑すぎて有効な構成方程式が得られないような、MDとCFDのどちらにおいても扱うことが困難な系である。具体的にはハードディスクのような高速に稼働する部分を有するマイクロ装置における潤滑油の挙動の解析などが対象となる。本研究では、このような系においてはマルチスケール計算法が有効であることを実証した。

2) 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、本年度は2007年度および2008年度に引き続き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[3-6]。近年ゲーム用途に開発されたSONY Playstation 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、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。昨年は水の系やタンパク質/水の系について、PS3、GPU、MDGRAPE-3(分子動力学専用計算機)を用いた計算速度を比較した。今年はさらにコロイド系における計算の高

速化のため、クーロン力の高速化について研究を行った。この結果、GPUを用いてPME法による高速化とFMMによる高速化を行った。これらの計算コードが汎用的に使えるように開発を行った。これらの結果からGPUを用いた計算がゴードン・ベル賞を受賞した。

3) 高分子拠点:

プロジェクト全体の研究開発項目とロードマップに従い、本グループにおける研究計画の各項目についてH21年度は以下の研究を行った。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前年度に引き続き行った。関連して、高分子シミュレータにおける分子の空間的な広がりについての予測精度の検討[10, 11, 13]を実施した。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:開発中の固体粒子分散系用の高分子シミュレータ[2]および高分子液体の固体への転移[1]について検討を進めた。山本グループとの連携による相互接続理論の検討を行った。関連して、固体壁面が存在する系における高分子運動のモデル化[12]を実施した。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:前年度に引き続き谷口グループとの連携により相互接続理論の検討[17]を行った。4)プラットフォームへの対応:プラットフォーム設計のための議論を他拠点と継続した。

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。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(流動・変形と応力の関係式)の適用は困難である。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。

本研究では前年度から引き続き、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」を行い、計算手法の精度を向上させ、各粒子にマイクロなシミュレータを組み込み、計算負荷の少ないマイクロなシミュレータを用いた試験的な計算において手法の有効性を示した[17]。来年度は、高分子拠点のシミュレータとの連携を継続して行い、流動可視化実験(高分子溶融体に蛍光剤を混ぜて流動の様子を光学顕微鏡で観測する実験)との比較検証を進めていく予定である。

§ 4. 成果発表等

(4-1) 原著論文発表

● 論文詳細情報

1. 増渕雄一, "プリミティブチェーンネットワークシミュレーションによる高分子材料の応力緩和挙動の予測", 日本ゴム協会誌, 82(11), 459 (2009).
2. Yuichi Masubuchi, Hiroshi Watanabe, Giovanni Ianniruberto, Francesco Greco, and Giuseppe Marrucci, "Primitive Chain Network Simulations for Particle Dispersed Polymers", International Journal of Polymers and Technologies, 1(1), 17 (2009)
3. 坂牧隆司, 成見哲, 泰岡顕治, "グラフィックカードを用いた水表面張力の高速分子動力学シミュレーション", 情報処理学会論文誌 コンピューティングシステム, 2(2), 89-97, (2009).
4. Yokota, R., Narumi, T., Sakamaki, R., Kameoka, S., Obi, S., and Yasuoka, K. , "Fast Multipole Methods on a Cluster of GPUs for the Meshless Simulation of Turbulence Computer Physics Communications", Comput. Phys. Commun., 180, 2066(2009).
[DOI: 10.1016/j.cpc.2009.06.009]
5. Narumi, T., Yasuoka, K., Taiji, M., and Höfner, S., "Current Performance Gains from Utilizing the GPU or the ASIC MDGRAPE-3 within an Enhanced Poisson Boltzmann Approach", J. Comput Chem., 30, 2351(2009).
[DOI: 10.1002/jcc.21257]
6. E. Dushanov, Kh. Kholmurodov, G. Aru, V. Korenkov, W. Smith, Y. Ohno, T. Narumi, G. Morimoto, M. Taiji, and K. Yasuoka, "JINR CICC in Computational Chemistry and Nanotechnology Problems: DL_POLY Performance for Different Communication Architectures", Physics of Particles and Nuclei Letters, 6(3), 251, (2009).
[DOI: 10.1134/S154747710903011X]
7. Takuya Iwashita, Yasuya Nakayama, and Ryoichi Yamamoto, "Velocity autocorrelation function of fluctuating particles in incompressible fluids, -Toward direct numerical simulation of particle dispersions-", Prog. Theor. Phys. Suppl. 178, 86-91 (2009).
[DOI: 10.1143/PTPS.178.86]
8. Shugo Yasuda and Ryoichi Yamamoto, "Rheological properties of polymer melt between rapidly oscillating plates: an application of multiscale modeling", EPL 86, 18002 (2009).
[DOI: 0.1209/0295-5075/86/18002]
9. Takashi Uneyama, "Coarse-Grained Brownian Dynamics Simulations for Symmetric Diblock Copolymer Melts Based on the Soft Dumbbell Model", Nihon Reoroji Gakkaishi (J. Soc. Rheol. Japan), 37 (2), 81-90 (2009).
[DOI: doi:10.1678/rheology.37.81]
10. Yuichi Masubuchi, Takashi Uneyama, Hiroshi Watanabe, Giovanni Ianniruberto, Francesco Greco and Giuseppe Marrucci, "Primitive Chain Network Simulations of Conformational Relaxation for Individual Molecules in the Entangled State. II. Retraction from Stretched States", Nihon Reoroji Gakkaishi (J. Soc. Rheol. Japan), 37 (2), 65-68

- (2009).
[DOI: doi:10.1678/rheology.37.65]
11. Takashi Uneyama, Yuichi Masubuchi, Kazushi Horio, Yumi Matsumiya, Hiroshi Watanabe, Jai A. Pathak, C. Michael Roland, "A theoretical analysis of rheodielectric response of type-A polymer chains", *J. Polym. Sci. B: Polym. Phys.*, 47(11), 1039–1057, (2009).
[DOI: doi:10.1002/polb.21708]
 12. Satoru Okuda, Yasuhiro. Inoue, Yuichi Masubuchi, Takashi Uneyama and Masaki Hojo, "Wall boundary model for primitive chain network simulations", *J. Chem. Phys.* 130(21), 214907, (2009).
[DOI: doi:10.1063/1.3140941]
 13. Yuichi Masubuchi, Kenji Furuichi, Kazushi Horio, Takashi Uneyama, Hiroshi Watanabe, Giovanni Ianniruberto, Francesco Greco, and Giuseppe Marrucci, "Primitive chain network simulations for entangled DNA solutions", *J. Chem. Phys.* 131, 114906, (2009).
[DOI: doi:10.1063/1.3225994]
 14. R. Yamamoto, Y. Nakayama, and K. Kim, "Smoothed profile method to simulate colloidal particles in complex fluids", *Int. J. Mod. Phys. C*, 20, 1457–1465 (2009).
[DOI: 10.1142/S0129183109014515]
 15. T. Iwashita and R. Yamamoto, "Direct numerical simulations for non-Newtonian rheology of concentrated particle dispersions", *Phys. Rev. E* 80, 061402 (2009).
[DOI: 10.1103/PhysRevE.80.061402]
 16. Shugo Yasuda and Ryoichi Yamamoto, "Multiscale modeling and simulation for polymer melt flows between parallel plates", *Phys. Rev. E* 81, 036308 (2010).
[DOI: 10.1103/PhysRevE.81.036308]
 17. Takahiro Murashima and Takashi Taniguchi, "Multiscale Lagrangian Fluid Dynamics Simulation for Polymeric Fluid", *J. Pol. Sci. Part B*, 48, 886 (2010).
[DOI: 10.1002/polb.21975]
 18. Ryoichi Yamamoto and Yuuki Matsuoka, "Dynamic heterogeneity in supercooled liquids studied by molecular dynamics, isoconfigurational ensemble, and normal mode analysis", preprint, <http://arxiv.org/abs/0910.2535>
 19. Hideki Kobayashi and Ryoichi Yamamoto, "Tumbling motion of a single chain in shear flow: a crossover from Brownian to non-Brownian behavior", preprint, <http://arxiv.org/abs/0910.2404>
 20. T. Iwashita, T. Kumagai and R. Yamamoto, "A direct numerical simulation method for complex modulus of particle dispersions", preprint, <http://arxiv.org/abs/0908.4505>

(4-2) その他

1. プレスリリース, 「山本 量一教授、安田修悟特定助教が高速振動する平板間の高分子液体の動きを新開発の「マルチスケールモデリング」で解析」, 2009/4/27