

ソフトマターに対するハイブリットシミュレーション法のモデル

安田 修悟, 山本 量一

京都大学 工学研究科 化学工学専攻, JST/CREST

yasuda@cheme.kyoto-u.ac.jp, ryoichi@cheme.kyoto-u.ac.jp

概要: ソフトマターシミュレーションにおいて有効な多階層連結シミュレーションの開発に対して MD-CFD ハイブリット計算法のモデルについて発表する。我々の計算法では、CFD レベルでは格子メッシュに基づく手法を用いるが、各格子点はそれぞれに独立な MD セルと連結されており、その各 MD セルでは CFD で計算される“局所的な流れ場”に応じた“局所応力”を計算する。本発表では、我々の手法の有効性を検証するために通常のニュートン流体に対する CFD と比較した結果について主に発表する。また、いくつかの複雑流体に対する応用についても発表する予定である。

1 はじめに

ソフトマターに対して有効な多階層/相互接続シミュレーション法の開発について発表する。ソフトマターとは、柔らかく複雑な物質を総称する言葉で、例えば、高分子、コロイド、ゲル、膜、などがこれに属する。これらの物質は様々な特徴的な個性を持っており、その多様な個性は機能性材料として活用されるため、ソフトマターは学術的な側面のみならず工学的にも重要な研究対象である。これまで物質のシミュレーション研究で最も活用されてきた手法は、おそらく分子動力学 (MD) 法やモンテカルロ (MC) 法であろう。分子シミュレーションでは物質の個性をうまく分子モデルに組み込むことができるという優れた特徴がある。しかしながら、分子・原子レベルでの時空間スケールで計算を行うため、実質的に計算可能な系の大きさはかなり小さく (例えばアボガドロ数個の分子×1 秒間の計算を想定し、分子シミュレーションを行うための計算機資源を見積もると、現在の地球シミュレータを占有しても 10^{20} 年という途方もない時間になる)、100~1000 秒にも及ぶ長時間の緩和現象を示すソフトマターの巨視的な振舞に適用することは実質的に不可能である。このような場合には連続体近似に基づく取扱いが有効である。ソフトマターは柔らかく変形しやすいため、ある種の流体として取扱うことができる。問題はその変形に対する応力応答が非常に複雑であり、通常の流体解析

に用いられる既存の計算流体力学 (CFD) スキームでは取扱うことができないという点である。我々はこの問題に対して、MD と CFD をカップリングさせた多階層連結シミュレーション法で対処することを考える。即ち、物質の巨視的な振舞 (ながれ) を CFD で解きながら、CFD と連結させた MD によって物質の個性 (応力応答など) を計算させ、その結果を再び CFD に反映させて計算を進めていく方法を開発する。

2 数値計算法

我々の手法では、マクロな流動場は通常の格子メッシュを用いた CFD のスキームを用いる。CFD において各タイムステップで必要な圧力場は構成方程式を用いず、MD シミュレーションで直接計算する。即ち、CFD の各格子は MD セルと連携が取られており、CFD で求められた流動場から各格子でのひずみ速度などを求めそれを拘束条件に MD を実行し、ずり応力を計算する。この際、CFD の格子メッシュ上で求められるひずみ速度テンソルの情報をそのまま MD に渡すのではなく、その局所的な流動場に対して各 MD でリーズ・エドワードの周期境界条件が使えるような座標系への変換を行う。このようにして得られた各格子でのずり応力と非圧縮条件から、CFD で新しいタイムステップでの流動場を求める。

4 節でも述べるが、本手法の計算アルゴリズムにおける特徴の一つは、CFD 計算格子に関連付けら

れた各 MD セルにおいて、MD 計算がそれぞれ独立に実行されることにある。従って、ほぼ理想的な並列計算を実行することができる。

3 結果

本計算手法を用いて、レナード・ジョーンズ液体の一次元、二次元の基本的な流れを解析し、得られた結果をナビエ・ストークス方程式の結果と比較することで、我々のハイブリット計算法の妥当性について検証した。とくに、CFD で計算されるスケールと CFD に連結させられた個々の MD で計算されるスケールとの比とその場合の計算精度に注目して調べた。図 1 は 2 平板間におけるポアズイユ流れの一次元計算の結果である。MD 計算では、計算される Box の長さ L_{MD} は CFD のメッシュ間隔 Δx の $1/4$ 、 $L_{MD}/\Delta x=1/4$ 、サンプリング時間 t_{MD} は CFD の時間ステップ間隔 Δt の $1/4$ 、 $t_{MD}/\Delta t=1/4$ 、に相当するスケールの計算である。即ち、大雑把に言って、我々のハイブリット法ではフル MD の場合に比べて時空間で 4×4 倍の効率の良い計算をしていることに対応する。図の実線はナビエ・ストークスの解、□印が我々のハイブリット法の結果である。図 1 (a) はある時刻の瞬間の流れ、図 1 (b) はある時間間隔で平均をとった時の流れを表す。(a) から、ハイブリット法の結果がナビエ・ストークスの解の周りで大きく揺らいでいる様子が見られる。これは、MD 計算に含まれるノイズが CFD レベルで拡大されて入ってくることによると考えられる。しかし、図 1 (b) から、そのノイズは時間平均をとることにより取り除かれることがわかる。また他の計算結果から、MD の計算スケールを大きくしていくことでノイズが小さくなることも確認された。またハイブリット法で入ってくるノイズについて詳細に調べるために、ナビエ・ストークス方程式の応力項に揺動散逸定理を満たすノイズを加えた Fluctuating Hydrodynamics (FH) との比較も行った。図 2 は我々の結果 ($L_{MD}/\Delta x=t_{MD}/\Delta t=1$ の場合) と FH の結果の応力のパワースペクトルの比較である。両者がよく一致している様子が分かる。このことはハイ

ブリット法で見られるノイズは ($L_{MD}/\Delta x=t_{MD}/\Delta t=1$ の場合には) 揺動散逸定理を満たす白色ノイズであることを示している。また $L_{MD}/\Delta x$ と $t_{MD}/\Delta t$ の比を大きくして効率を上げると揺らぎが大きくなるが、この際には中心極限定理によって予測されるある関係式に従ってノイズが大きくなることも確認されている。

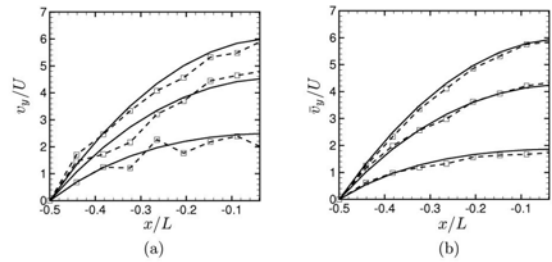


図 1 : 2 平板チャンネルにおけるポアズイユ流れの時間発展を表す。□はハイブリット法による結果。実線は CFD の結果。(a) CFD タイムステップで 200, 500, 1500 における瞬間の速度分布。(b) CFD タイムステップで 300 ステップの時間平均をとった結果。

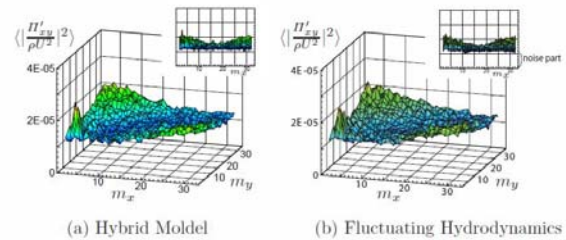


図 2 : 応力のパワースペクトルの比較。

4 次世代スパコンへの展開

我々のハイブリット法では、CFD の計算格子点の数だけ、それぞれ独立な MD 計算を CFD の各タイムステップにおいて行う。計算量の大部分は MD 計算に費やされる。従って、それぞれの MD セル毎に一つの CPU を割り当てて並列化をすることで、ほぼ理想的な効率で並列化数千程度の計算は容易に達成される。更に、MD 計算はベクトル計算に向いており各 CPU で高度なベクトル化率 (99%程度) を達成する計算が可能である。このように我々の手法は次世代スパコンでの実行に大変適した計算法であり、これを用いることでソフトマターのシミュレーションにおいて様々なブレイクスルーが期待できる。