

平成 30 年 5 月 13 日現在

機関番号：11301

研究種目：若手研究(B)

研究期間：2015～2017

課題番号：15K17733

研究課題名(和文)非定常非線形高分子流動のためのマルチスケールシミュレーション手法の開発

研究課題名(英文)Development of Multiscale Simulation Technique for Non-Linear Polymer Melt Flow on Unsteady State

研究代表者

村島 隆浩(Murashima, Takahiro)

東北大学・理学研究科・助教

研究者番号：50565520

交付決定額(研究期間全体)：(直接経費) 3,000,000円

研究成果の概要(和文)：高分子流体の示す非線形流動挙動はミクロスケールの分子運動がマクロスケールの流動挙動に影響を及ぼすためミクロスケールとマクロスケールのダイナミクスを連成して解くマルチスケールシミュレーション手法の開発が重要である。本研究では非定常状態を取り扱うためミクロスケールの揺らぎを抑えるための統計処理の方法のうち、アンサンブル平均と移動時間平均の方法についての考察を行った。またミクロスケールのシミュレーションを分子動力学シミュレーションに置き換える場合に必要な分子動力学シミュレーションの境界条件の取り扱いについての考察を行った。

研究成果の概要(英文)：In the nonlinear flow behavior exhibited by polymer fluids, it is important to develop a multi-scale simulation method to solve by combining microscale and macroscale dynamics because microscale molecular motion affects macroscale flow behavior. In this study, we deal with the nonsteady state and consider the method of statistical processing to suppress the microscale fluctuation on the ensemble average and the moving time average method. We also considered the handling of the boundary condition of molecular dynamics simulation which is necessary when microscale simulation is replaced with molecular dynamics simulation.

研究分野：統計物理

キーワード：マルチスケールシミュレーション 高分子 レオロジー 分子動力学シミュレーション

### 1. 研究開始当初の背景

高分子溶融体の流動はミクロスケールの高分子が非常に遅い緩和を示すためにマクロスケールの流動挙動に影響を及ぼす。高分子溶融体の流動挙動を理解するためにはミクロスケールの高分子ダイナミクスとマクロスケールの流動を一つの枠組みで取り扱う必要があるが、その二つのスケール間の時間・空間スケールに大きなギャップがあるためにシミュレーションにおいては個別の問題として取り扱うことが多かった。ミクロスケールの分子シミュレーションとマクロスケールの分子シミュレーションを連成するマルチスケールシミュレーション法はこのスケールギャップを大規模な並列計算により解決しようとする方法で、研究開始時までに、円柱周りの流動に応用した解析により高分子の伸びや配向、絡み合い数の空間分布が上流側と下流側で非対称になることがわかっていった。しかしながらこの解析は定常流動挙動について行われており、非定常流動に関しては行われていなかった。非定常流動を解析するためにはミクロスケールシミュレーションの統計精度を向上させる必要がある。またここで扱われていたミクロスケールシミュレーションはレプテーション理論に基づいた平均場的手法を用いているため、一般の高分子への応用が難しい。そこでミクロシミュレーションを分子動力学シミュレーションへ置き換えたいが、そもそも分子動力学シミュレーションの非平衡シミュレーション手法が未成熟なため一般の変形を取り扱えない課題があった。

### 2. 研究の目的

高分子流体のマルチスケールシミュレーション手法を非定常流動、伸長変形流動、熱伝導流動などの複雑な流動挙動に適用するために未だ解決されていない基礎的な問題を克服し、マルチスケールシミュレーション手法を実際の製品開発の現場で使えるアプリケーションへ応用展開するための基盤を築くことが本研究の目的である。

### 3. 研究の方法

主に計算機シミュレーションを行った。マクロスケールの流体シミュレーションとミクロスケールの分子シミュレーションを連成させて解くマルチスケールシミュレーションは、本来個別に取り扱うことを想定している異なる手法を連成させるためにこれまで想定されていない新たな課題が生じる。それぞれの課題について、従来あるアプローチを応用、新しい方法を開発することで課題解決に取り組んだ。

### 4. 研究成果

(1) マルチスケールシミュレーションの大規模並列化

マルチスケールシミュレーションは各要素にミクロスケールのシミュレーションをつなげて、各ミクロスケールシミュレーションを並列に実行することで、高速に計算を行うことができる。しかしながら扱う系が大きくなるとマクロスケールのシミュレーションの並列化を行う必要があり、さらにマクロスケールシミュレーションとミクロスケールシミュレーション間のデータ通信の工夫が必要になる。その課題を解決した。(雑誌論文)

### (2) ミクロスケールシミュレーション手法の統計精度向上のための考察

ミクロスケールシミュレーションの統計精度向上のため、粒子数を増やすアンサンブル平均の方法と移動時間平均を用いる方法を考察した。粒子数を増やすアンサンブル平均の方法は並列数を増やすことで計算時間を増やすことなく実施することができるため、将来超大規模な並列計算機を使用することができれば有効な方法である。移動時間平均の方法は長時間平均を取る必要があるために、原理的には計算時間を短縮することができない。しかしながらどちらの方法も現在の計算機資源を用いる場合においては組み合わせ合わせて使うのが妥当である[1]。

### (3) 分子動力学シミュレーションの伸長流動

マルチスケールシミュレーションを一般の問題に応用するには、ミクロスケールシミュレーションを分子シミュレーションに置き換えたい。そのようなマルチスケールシミュレーションはすでにあるが、分子シミュレーションは単純せん断変形に限られるなど制限がある。そこで分子動力学シミュレーションの一般の変形を考える最初の課題として伸長流動を分子動力学シミュレーションで行うことの考察を行った。最近、Nicholson, Rutledge によって開発された Uniform Extensional Flow 法を高分子シミュレーションに応用するためのコード開発を行い、高分子溶融体の伸長流動挙動解析を行った[1]。

### 参考文献

[1] T. Murashima, K. Hagita, T. Kawakatsu, "Elongational viscosity of weakly entangled polymer melt via coarse-grained molecular dynamics simulation", arxiv:1803.01517.

### 5. 主な発表論文等

(研究代表者、研究分担者及び連携研究者には下線)

〔雑誌論文〕(計4件)

Takahiro Murashima, Inter node parallelization of multiscale fluid particle simulation towards large-scale polymeric fluid simulation, Microsystem

Technologies, 査読有, Vol. 24, 2017, pp. 765-769.

Takahiro Murashima, Multiscale simulation performed on ISSP super computer: Analysis of entangled polymer melt flow, Activity Report 2015 / Supercomputer Center, Institute for Solid State Physics, The University of Tokyo 査読無 (招待論文), 2016, pp. 35-43.

村島隆浩, 分子シミュレーション研究者のための PC クラスタ入門、分子シミュレーション研究会会誌「アンサンブル」、17巻、2015、209-217

A. M. Ito et al, T. Murashima et al, Molecular dynamics and Monte Carlo hybrid simulation for fuzzy tungsten nanostructure formation, Nuclear Fusion, 査読有, Vol. 55, 2015, 73013.

[学会発表](計21件)

Takahiro Murashima, Elongational flows in coarse-grained molecular dynamics simulation, Bridging the Scales in Soft Matter Simulations(招待講演)(国際学会), 2018

Takahiro Murashima, Multiscale simulation of polymer flow developed for K computer, International workshop on simulations of soft-matters(招待講演)(国際学会), 2017

Takahiro Murashima, Multiscale simulation for polymeric liquid flow, Computational Sciences Workshop 2017(CSW2017)(招待講演)(国際学会), 2017

Takahiro Murashima, Multiscale Simulation of Polymeric Liquids with Heat Transportation, APS March Meeting 2017 (国際学会), 2017

村島隆浩, 分子シミュレーションによる高分子溶融体の伸長年度解析、第31回分子シミュレーション討論会、2017年

Takahiro Murashima, Uniaxial Elongational Flow of Entangled Polymer Melt: Coarse-Grained Molecular Dynamics Simulation, The 5th International Conference on Smart Systems Engineering 2017 (Smasy 2017) (国際学会), 2017

村島隆浩, 高分子流体のマルチスケールシミュレーション、計算統計物理学研究会 第7回研究会(招待講演), 2017年

村島隆浩, 高分子流体のマルチスケールシミュレーション、インフォーマルセミナー(秋田県立大学、石本研究室)(招待講演), 2017年

村島隆浩, 高分子流体のマルチスケールシミュレーション、日本複合学会 第13回分子シミュレーション講義(招待講演), 2017年

村島隆浩, 複雑流体のための大規模マルチスケールシミュレーションの開発、物性研究

所スパコン共同利用・CCMS 合同研究会「計算物質科学の今と未来」(招待講演), 2017年

村島隆浩, スリップリンクモデルにおける流動中の高分子のコンフォーメーション、日本物理学会第71回年次大会、2016年

Takahiro Murashima, Multiscale simulation based on kernel gradient free method, The XVIIth International Congress on Rheology (ICR2016) (国際学会), 2016

村島隆浩, 高分子流体のマルチスケールシミュレーション、第65回高分子討論会、2016年

Takahiro Murashima, Multiscale Simulation for Large Scale System, The 4th International Conference on Smart Systems Engineering 2016 (Smasy2016) (国際学会), 2016

Takahiro Murashima, Multiscale simulation of polymer melt for large scale system, The 4th International Conference on Molecular Simulation (国際学会), 2016

村島隆浩, 高分子流体のマルチスケールシミュレーション、プラスチック成形加工学会 第26回年次大会(招待講演), 2015年

村島隆浩, 高分子流体のマルチスケールシミュレーションによる変形履歴の可視化、九大物性理論研究室・統計物理学研究室合同セミナー、2015年

村島隆浩, 高分子流体計算の並列効率向上と3D可視化、JHPCN:学際大規模情報基盤共同利用・共同拠点第7回シンポジウム、2015年

Takahiro Murashima, Multiscale Flow Dynamics of Entangled Polymer Melt, IWACOM III (招待講演)(国際学会), 2015

村島隆浩, 高分子流体のマルチスケールシミュレーション 高分子の変形履歴、計算科学連携センターセミナー~分子シミュレーションの産学利用のこれから~(招待講演), 2015年

②村島隆浩, 流動中の高分子の変形履歴の可視化、第29回分子シミュレーション討論会、2015年

[図書](計0件)

[産業財産権]

出願状況(計0件)

名称:  
発明者:  
権利者:  
種類:  
番号:  
出願年月日:  
国内外の別:

取得状況(計0件)

名称：  
発明者：  
権利者：  
種類：  
番号：  
取得年月日：  
国内外の別：

〔その他〕  
ホームページ等  
<http://www.cmpt.phys.tohoku.ac.jp/~murasima>

#### 6. 研究組織

(1) 研究代表者  
村島 隆浩 (MURASHIMA, Takahiro)  
東北大学・大学院理学研究科・助教  
研究者番号：50565520

(2) 研究分担者  
( )

研究者番号：

(3) 連携研究者  
( )

研究者番号：

(4) 研究協力者  
( )