

MD-01

萩田 克美 (防衛大学校 応用物理学科)

# 粗視化分子動力学法による高分子系シミュレーション基盤の 計算機科学的な高度化検討



## 高分子系の粗視化分子動力学法

単純な「球」と「バネ」  
→ 排除体積効果(交差の禁止)

粒子間ポテンシャル(レナードジョーンズの斥力項)

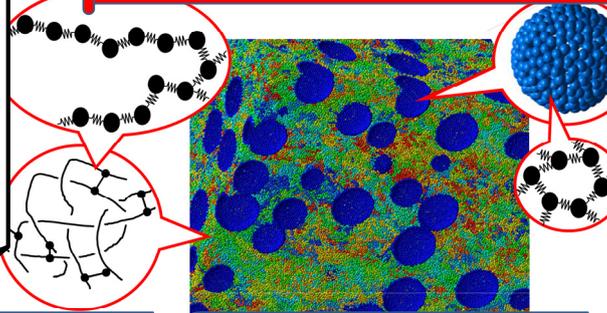
$$U_{LJ} = \begin{cases} 4\epsilon \left[ \left(\frac{\sigma}{r}\right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{r}\right)^6 + \frac{1}{4} \right] & \text{for } r \leq 2^{1/6}\sigma \\ 0 & \text{for } r \geq 2^{1/6}\sigma \end{cases}$$

バネのポテンシャル(伸びきらないバネ)

$$U_{FENE} = -\frac{k}{2} R_0^2 \ln \left( 1 - \frac{r^2}{R_0^2} \right)$$

ランダム力(乱数)による動力学

## (フィラー充填)高分子材料



## Challenge & dream

ゴム材料のマクロ物性  
議論としての理想  
(1 μm)<sup>3</sup>の立方体  
(フィラーの粒径分散、フィラーの  
モルフォロジーが議論できる。  
Spring-8実験等との対応も確実)

26万Coresで実現  
(約50億粒子の規模)

SCOPE

絡まりあう紐が示す  
性質を明らかにする

ダイナミクス・粘弾性  
ナノ領域での破壊

有限要素法(FEM)で  
到達できない領域へ

複雑な力場や、その  
競合問題を扱わない  
(単純なポテンシャル  
で表現する程度)

### 最近の研究の進展

タイヤゴム材料の設計指標(粘  
弾性; tan δ)の系統的評価可能  
になった。→ **実開発にも近い。**

計算機科学的  
進化が必要

### 課題1

既存ソフトを利用  
した大規模計算

#### 中規模SMP高速化

- (北海道大学SR11000中心に)
- ※既存ソフトを利用し既存のノウハウ・ツールをそのまま活用したい。
- ※乱数発生負荷が大きいので、並列的に乱数を生成することが残された課題。(今年度実装事項)
- ※多くの実証検証と、大規模計算の入門環境の提供(普及)

COGNAC

### 課題2

本格的な大規模  
超並列計算技術

#### スカラーチューニング

- (東京大学HA8000中心に)
- ※長い高分子用の領域分割型の超並列コードは実装開発済み。
- ※(未実施の)スカラーチューニングを行い、512Coresでの安定的な計算を実現。
- ※インバランスの解消に関するコードの高度化も行う。

独自の超並列コード  
(分散入出力対応済)

### 課題3

大規模系の効果  
的な可視化技術

#### AVSの活用とプレ処理

- (名古屋大学HX600中心に)
- ※大規模系でも、インタラクティブに、高分子の動きを觀賞したい。
- ※大規模系を扱う高精細な動画作成の技術確立(ツール化)を行う。
- ※現状、AVSのCacheが約6GB。可視化に不要なデータを動的にプレ処理する等の改造が必要。

AVS/Express  
AVS/Express Viz  
AVS/Express Developer

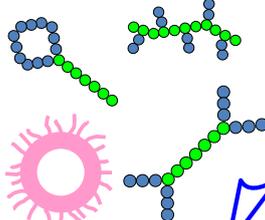
## Network基盤の活用

近未来の開発  
技術の形成へ

## (高分子科学の実験的研究の進展)

### 高分子合成法の 発達

トポロジカルな高分子



### 高分子材料形成 技術の発達



## 高分子材料の 次世代デジタル エンジニアリング

スパコン



将来の自動車用樹脂から、  
ゴム製品、フィルム製品、日用品や食品までの  
広い応用へ  
さらには、**高分子物理・化学の基礎の進展**へ