

兵庫県立大学大学院  
シミュレーション学研究科  
鷺津研究室





兵庫県 神戸市中央区のポートアイランドに  
私たちの大学院はあります



【交通アクセス】

JR・阪急・阪神 三宮駅からポートライナー  
京コンピュータ前駅下車 西へ歩道沿い徒歩2分  
『計算科学センタービル』とスパコン施設が目印





### ポートアイランド内

- ・ 先端医療技術の研究開発拠点 (神戸医療産業都市)
- ・ 計算科学技術施設
- ・ 上記施設と連携し高度な研究を実施する大学

**先端医療・計算科学分野の研究が活発**



神戸大学医学部附属  
国際がん医療  
研究センター



神戸低侵襲  
がん医療センター



多細胞システム  
形成研究センター



融合連携  
イノベーション  
推進棟



理研R-CCS  
(富岳コンピュータ)



高度計算科学  
研究支援センター  
etc...

神戸大学統合研究拠点, 甲南大学, 兵庫県立大学大学院, 神戸学院大学, 兵庫医療大学

大学も数多く進出  
学園都市としての一面もあり





- 理研R-CCS  
富岳コンピュータ：大規模計算
- 計算科学振興機構  
FOCUSスパコン：産業利用
- 兵庫県立大シミュレーション学研究科  
スパコン：研究・教育

日本を代表する  
【計算科学の研究開発拠点】

兵庫県立大学大学院シミュレーション学研究科 (右) の外観 (左は理研R-CCS 中に富岳コンピュータがあります) 計算科学振興機構は右建物の1~2階です





○クラスタ型並列計算機

- ・ 68ノード, 58TFlops
- ・ メモリ8.7TB
- ・ インターコネク ト4x FDR Infiniband
- ・ アクセラレータ Intel Xeon Phi, NVIDIA TESLA

○共有メモリ型計算機SGI UV300G (2台)

- ・ 80コア
- ・ メモリ2TB

\* 2021年に新製品にリプレイス予定



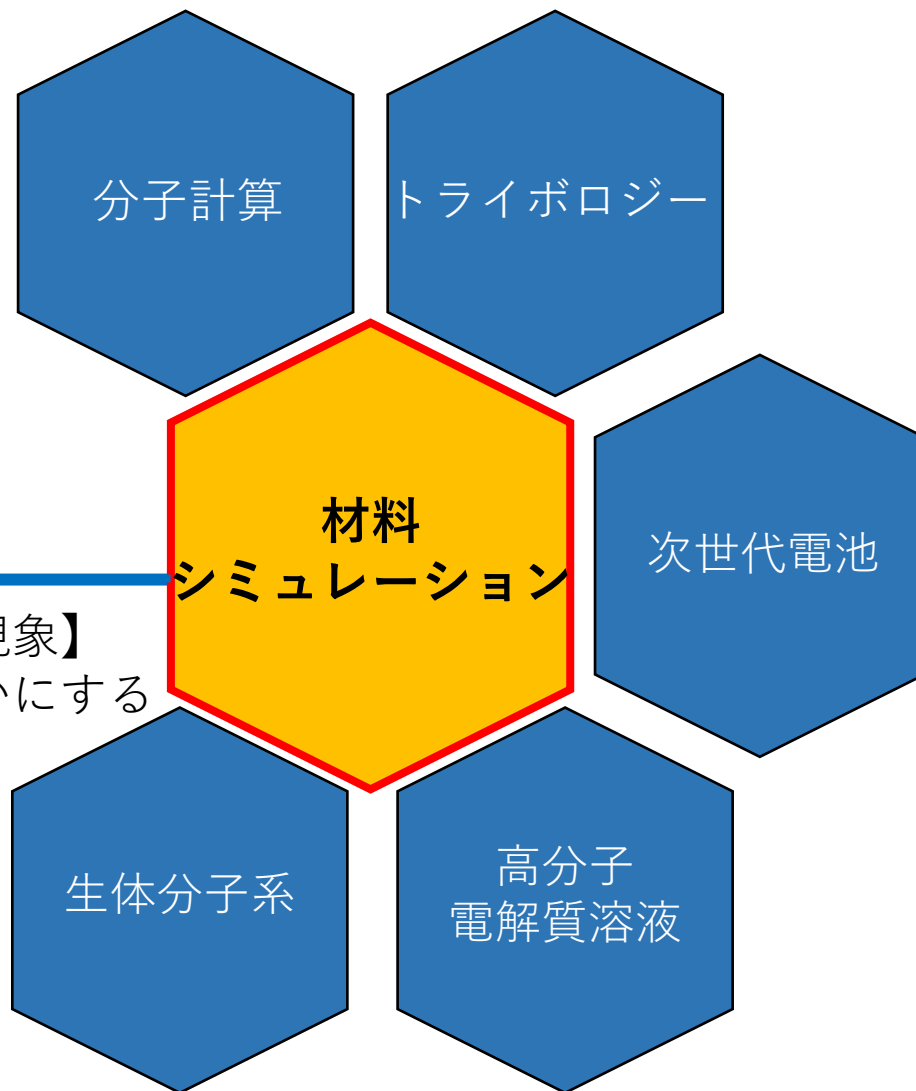
○CAVE 3次元立体可視化装置

- ・ 4面CAVE装置, 3.2m × 2.0m × 2.0m
- ・ ワイヤレストラッキング
- ・ 3次元音響



# 研究紹介

- 着眼点【界面の分子集団の物理化学現象】  
これを分子シミュレーションで明らかにする

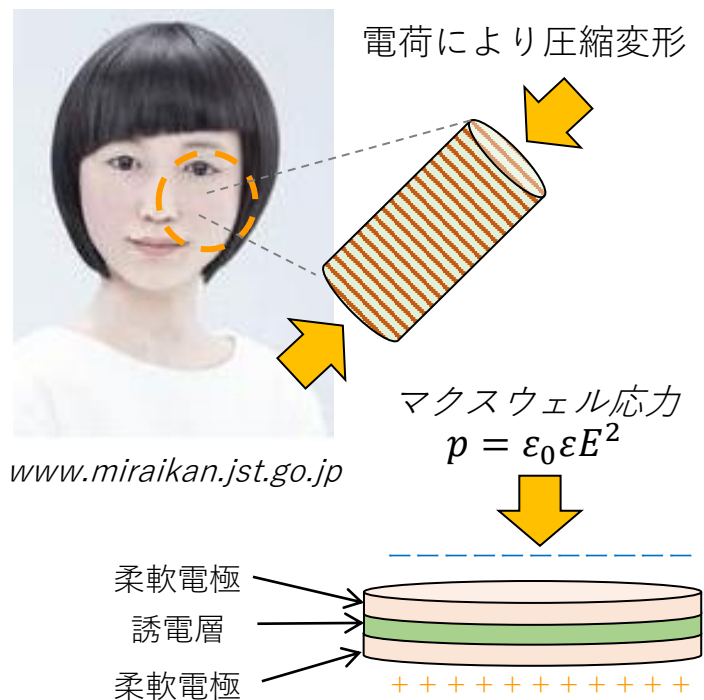


## 【パーシステントホモロジを用いたポリマー高次構造の推定】

### 研究目的

- **スーパーコンピュータ(京を使用)**を使った**大規模分子シミュレーションの結果\*)**を探索アルゴリズムにより解析し、**比誘電率に寄与する高次構造を表現**する

### 研究背景



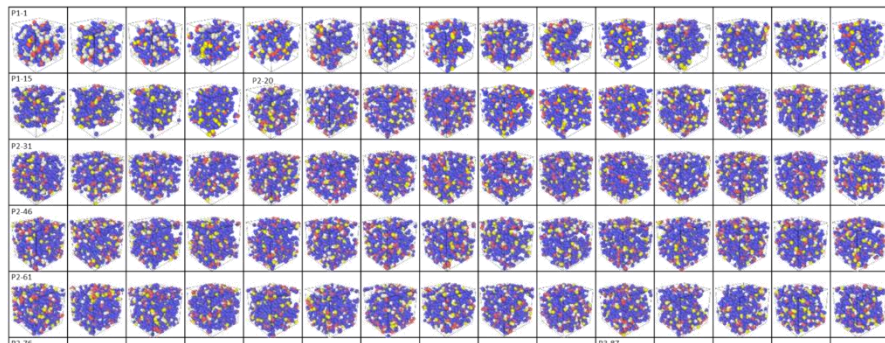
- 誘電エラストマ(弾性高分子)は柔らかいセンサ, アクチュエータとして有用なデバイス
- 動作には複雑な制御が必要
  - ↳ 材料設計の段階でこれらの電気, 物理特性などを正確に予測することが不可欠
- **MI(マテリアルズインフォマティクス)を活用した材料開発が必須**

\*) 清水陽平, 鷺津仁志ら, 平成29年度利用報告書「京」産業利用(トライアル・ユース), HPCI(2018)

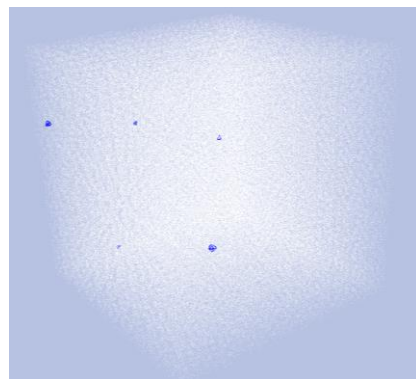
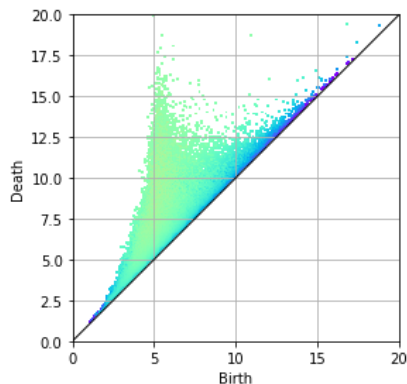
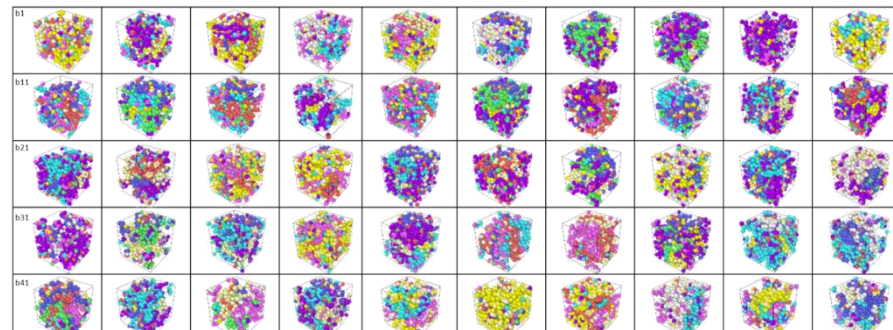


■ 京を用い、セルサイズ30nmで243パターンの網羅的な極性ポリマーを想定したデータセットを作成し、パーシステント図を計算

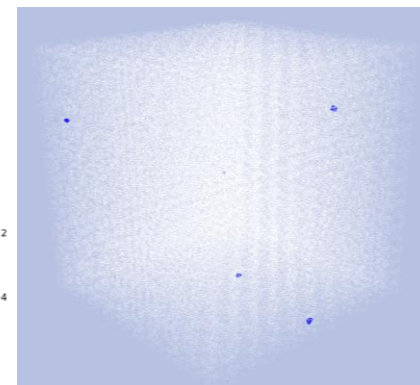
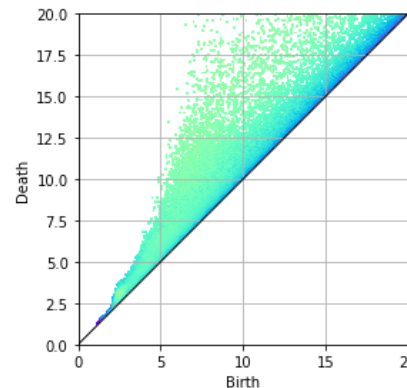
NBRポリマーの例



Blendポリマーの例



最も高い比誘電率をもつポリマーとその仮想空隙構造



最も低い比誘電率をもつポリマーとその仮想空隙構造

Y. Shimizu, T. Kurokawa, H. Arai, H. Washizu, "The elucidation of polymer higher-order structure from cell size dependency of molecular simulation using persistent homology"



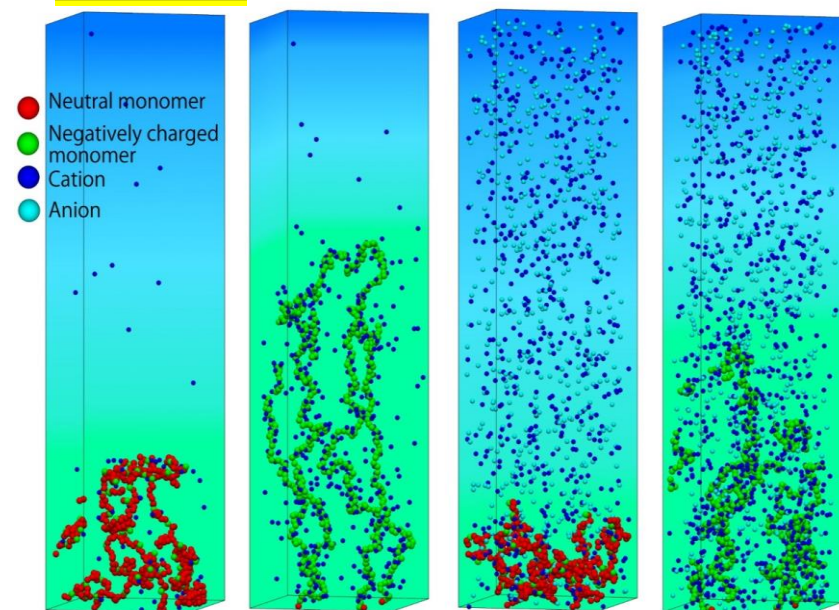


## 【散逸粒子動力学の溶媒分子を分極させる新モデルを考案】

### 研究目的

- 高分子電解質溶液を取り扱うのに相応しいシミュレーション技術の構築 (散逸粒子動力学における溶媒和の再現方法の提案)

### 研究背景



- 高分子電解質ブラシは流体潤滑並みの低摩擦を発現する
- この現象を分子レベルで解析するには以下を考慮する必要あり
  - ・ 高分子鎖の運動
  - ・ 溶媒の流れ
  - ・ イオンの周囲の溶媒和構造

従来の散逸粒子動力学では極性の考慮が困難

↳ 散逸粒子動力学の溶媒粒子を分極させるモデルを考案

H. Washizu, T. Kinjo, H. Yoshida, Friction, 2(1), 73 (2014)

T. Kinjo, H. Yoshida, H. Washizu,

"Coarse-grained simulations of polyelectrolyte brushes using a hybrid model", Colloid Polym. Sci., 296(3), 441-449 (2018)

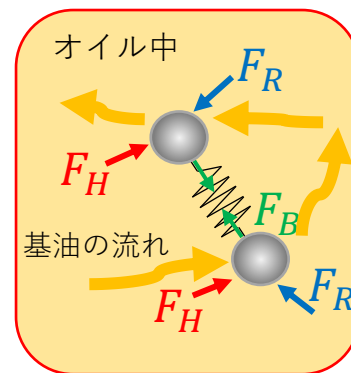
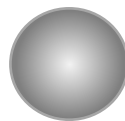
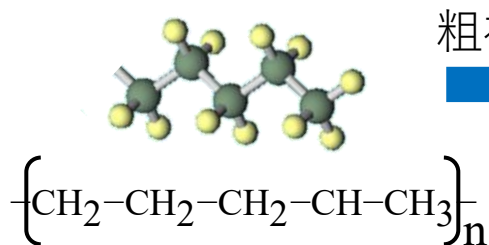
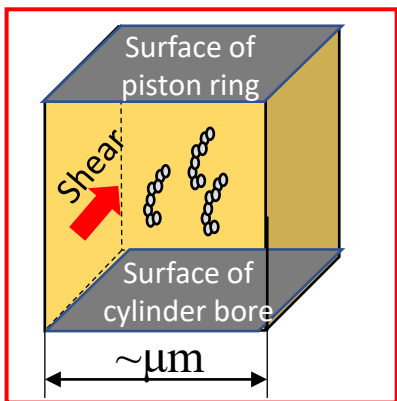


## 【流体一粒子間の相互作用を考慮した連成シミュレーション手法】

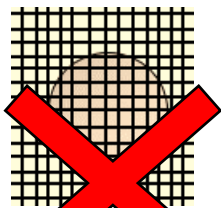
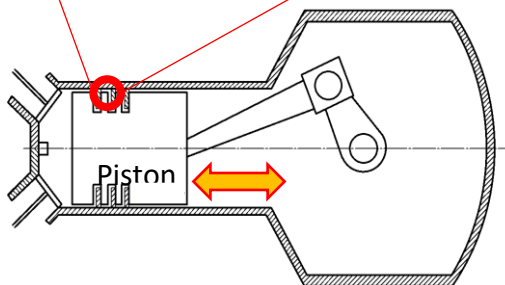
### 研究目的

- エンジンオイル等に添加される粘度指数向上剤 (潤滑油の温度による粘度変化量を抑える効果を持つ高分子) の強摺動環境下における挙動を解析する

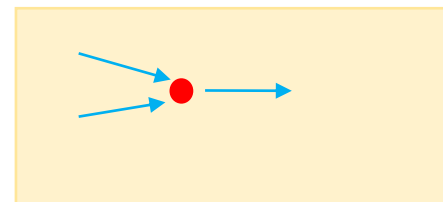
### 研究背景



- 粒子一流体間の相互作用のモデル化が粗視化分子シミュレーションの課題



粒子周辺の流体を直接計算  
(有限体積法など)



点粒子を考え流体との相互作用をモデル化



溶媒 (基油) の流体としての振舞い

格子ボルツマン法  
(LBM, Lattice Boltzmann Method)

高分子 (VII) の運動

ブラウン動力学法  
(BD, Brownian Dynamics)

両者をカップリングした  
ハイブリッドシミュレーション手法\*)を用いる

○Lattice-Boltzman Method(BGK model) + External force term

$$f_i(\mathbf{x}+\mathbf{c}_i\Delta t, t+\Delta t) = f_i(\mathbf{x}, t) - \frac{1}{\tau} [f_i(\mathbf{x}, t) - f_i^{eq}(\mathbf{x}, t)] + E_i \frac{3F_p \mathbf{c}_i}{C} \Delta t$$

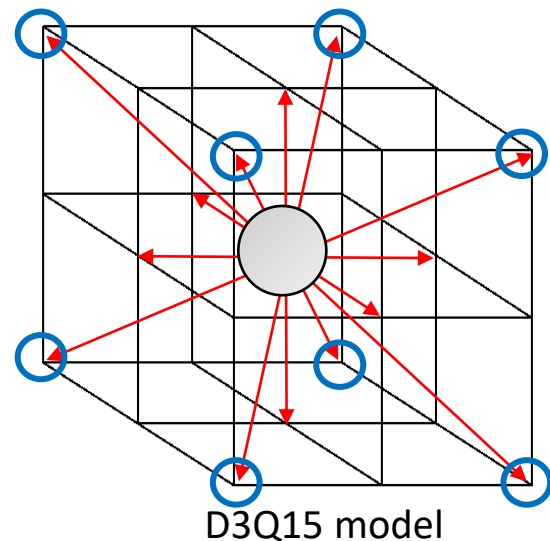
○Langevin Equation

$$m \frac{d\mathbf{V}}{dt} = \mathbf{F}_R + \mathbf{F}_H + \mathbf{F}_c + \mathbf{F}_B$$

$$\mathbf{F}_H = -\gamma(\mathbf{V}_i(t) - \mathbf{u}^\infty(t, \mathbf{r}_i))$$

$$\mathbf{F}_p = -\mathbf{F}_H \delta(\mathbf{x} - \mathbf{r}_m)$$

Inserting as an external force



\*) H. Yoshida, T. Kinjo, H. Washizu, "Numerical simulation method for Brownian particles dispersed in incompressible fluids", Chem. Phys. Lett., 737 (2019) 136809.



溶媒 (基油) の流体としての振舞い

格子ボルツマン法  
(LBM, Lattice Boltzmann Method)

高分子 (VII) の運動

ブラウン動力学法  
(BD, Brownian Dynamics)

両者をカップリングした  
ハイブリッドシミュレーション手法\*)を用いる

Differences in the flow of VII molecules  
at different sliding speeds

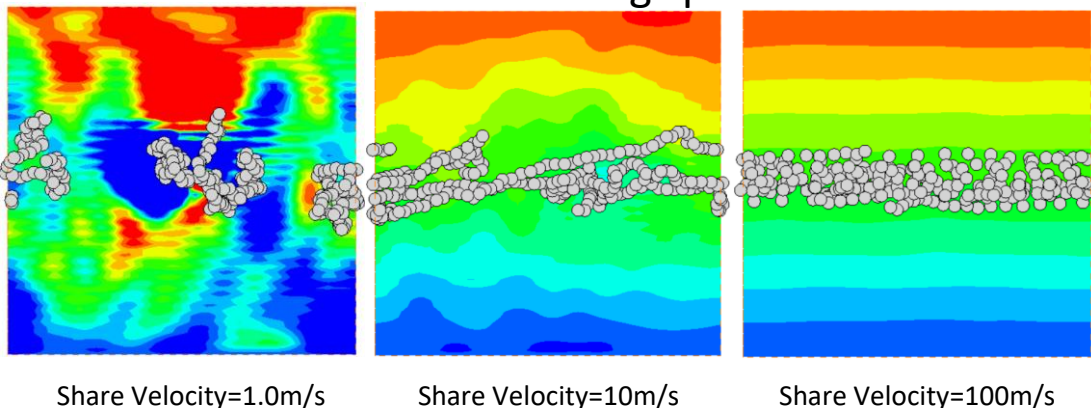
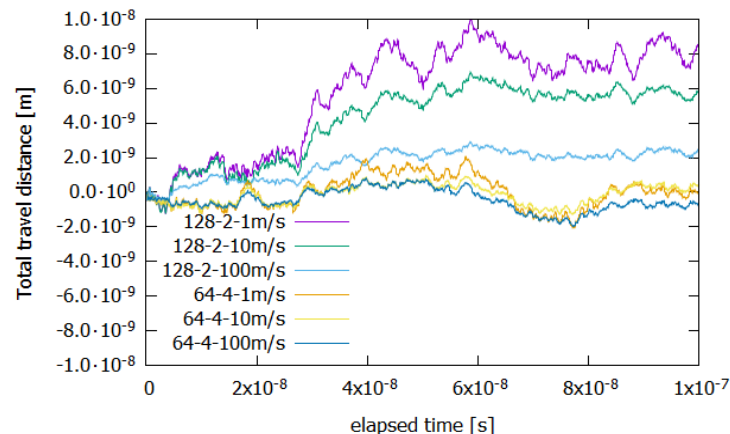


Fig.1 Average movement of polymeric particles in the Z-direction elapsed time





最後までご視聴いただき  
ありがとうございました！！



鷺津研究室HP



スパコンで解き明かす摩擦の  
シミュレーション学

2021年 4月に情報科学研究科開設予定



情報科学研究科  
Webサイト



情報科学研究科  
Youtube PR動画

こちらも是非ご覧ください！！

