

産業用高分子材料開発におけるスーパーコンピュータへの期待

島津彰^{†1} 伊藤嘉章^{†1} 南崎喜博 後藤仁志^{†2} 藤本和士^{†3} 岡田真紀^{†4} 岡崎進^{†4}

ハイパフォーマンスコンピューティング(HPC)は産業用高分子材料の高度な機能化を目指した研究に期待されている。本稿では、理化学研究所のスーパーコンピュータ「京」と東京工業大学のスーパーコンピュータ「TSUBAME2」の産業利用例として、分子シミュレーションによる高分子材料の研究について紹介する。HPCは、産業的に重要となる機能性高分子材料の設計に資する分子レベルの知見を与えてくれる。このことが、HPCの産業的価値を高めていると言える。

Expectations for the supercomputer in development of industrial polymer materials

AKIRA SHIMAZU^{†1} YOSHIAKI ITO^{†1} YOSHIHIRO MINAMIZAKI
HITOSHI GOTO^{†2} KAZUSHI FUJIMOTO^{†3} MASAKI OKADA^{†4}
SUSUMU OKAZAKI^{†4}

High-performance computing (HPC) is expected for the development of high functional polymer materials for industrial applications. Some HPC studies using molecular simulations were carried out for industrial use on the K computer in RIKEN Advanced Institute for Computational Science and on the TSUBAME2 supercomputer in the Tokyo Institute of Technology. HPC enables us to obtain useful information to design important functions for practical use of polymer materials. This means industrial significance of HPC.

高分子系粘着剤のシミュレーション

近年、スマートフォン等の開発において、部材の貼り合せが必須になっており、貼り合せの際に生じる接着界面における分子のふるまいを知ることが製品開発上、共通の課題となっている。このような課題に対応したシミュレーションとして、分子動力学法が挙げられる。しかしながら、一般的なコンピュータでは、高分子量の粘着剤を全原子について現実に近いスケールのシミュレーションを行うことは困難である。そこで、「京」の利用によってこの問題の解決に向けた技術構築を世界で初めて開始した。分子動力学法のアプリケーションには、Modylas[1]や LAMMPP[2]等を利用した。およそ220万原子のアクリル系高分子粘着剤モデルを使った「京」のベンチマークによると、FMM法搭載のModylasでは、数1000ノードの使用によって優れた加速率を示した。従来よりも空間スケールの大きなモデルを用いた研究が可能になり、はく離に要する力を粘着剤/被着体界面近傍における高分子鎖の挙動に関連付けて解析できる技術が得られた。粘着剤はただ強く接着できればよいわけではなく、はがれやすさの制御も実用化のためには重要である。本技術はこのような産業的要請に応える技術として期待される。

高分子系逆浸透膜のシミュレーション

高分子膜を利用した分離技術は、飲料水の製造などに使われており、人々の生活を守る重要な技術となっている。このような高分子膜に要求される機能は、低分子に対する水の高い選択透過性であるが、選択透過性を高分子膜に付与するには、高分子中における水と低分子の拡散挙動に関する分子レベルの知見が役に立つ。そこで、「TSUBAME2」を利用して、逆浸透膜の材料であるポリアミドの脱塩挙動に対応する分子動力学計算を実施したところ、無機イオンがポリアミド内にトラップされる挙動や、水が自由体積サイトを選択的に拡散する挙動が解り、産業的に意義ある知見が得られた。

材料開発を目指したシミュレーション技術は、HPCの進歩が追い風となっている。HPCが拓く新たな研究領域が、産業用高分子材料開発を加速することに期待したい。

謝辞 本研究の一部は、理化学研究所のスーパーコンピュータ「京」を利用して得られたものである(課題番号: hp120080)。

参考文献

- 1) Y. Andoh et al.: MODYLAS: A highly parallelized general-purpose molecular dynamics simulation program for large-scale systems with long-range forces calculated by fast multipole method (FMM) and highly scalable fine-grained new parallel processing algorithms, Journal of Chemical Theory and Computation, Vol.9, No.7, pp.3201-3209 (2013).
- 2) S. J. Plimpton et al.: Computational aspects of many-body potentials, MRS Bulletin, Vol.37, pp.513-521 (2012).

^{†1} 日東電工(株)
Nitto Denko Corporation
^{†2} 豊橋技術科学大学
Toyohashi University of Technology
^{†3} 立命館大学
Ritsumeikan University
^{†4} 名古屋大学
Nagoya University