

先端研究拠点事業—国際戦略型—
「ソフトマターと情報に関する非平衡ダイナミクス」
共同研究プログラム 派遣報告書

2013年 9月 2日

氏名(ふりがな)	村島 隆浩 (むらしま たかひろ)
所属機関・部局・専攻内の所属分野	東北大学大学院理学研究科物理専攻物性理論
職名	助教
メールアドレス	murasima@cmpt.phys.tohoku.ac.jp
電話番号、FAX	022-795-5718

派遣先

受け入れ研究者氏名	Friederike Schmid
所属機関(国)	Johannes Gutenberg University, Mainz (Germany)
身分	Professor
メールアドレス	Friederike.schmid@uni-mainz.de
研究室 URL	http://www.komet331.physik.uni-mainz.de/schmid.php
電話番号、FAX	+49-6131-39-20365 / 20496

共同研究

研究課題名	和文	ソフトマターシミュレーションの粗視化モデル
	英文	Coarse-grained model for soft matter simulation
派遣期間	2013年8月19日～2013年8月25日	

実際に行った研究活動、成果などを1-2ページ程度で記述してください。

今回、先端研究拠点事業・共同研究プログラムを利用し、Johannes Gutenberg University の Schmid 教授を受け入れ研究者として、同大学のある Mainz 市を訪問した。今回の Mainz 市訪問の目的は、受け入れ研究者の Schmid 教授、Georg August University の Marcus Müller 教授、University of Texas at Austin の Venkat Ganesan 教授、Max Planck Institute for Polymer Research の Burkhard Dunweg 教授が主催した国際ワークショップ”Coarse-graining multicomponent soft matter systems: equilibrium and dynamics” (8/21-23, Max Planck Institute for Polymer Research)に参加し、粗視化モデル開発の最先端の情報を収集すること、及びドイツの研究者らと広く交流を深めることであり、今回の訪問でその目的は十分達成された。会議2日目の最後に口頭発表する機会が与えられ、”Multiscale simulation for soft matters”というタイトルで講演を行った。

私が行っている研究は「ソフトマターのマルチスケールシミュレーション」というミクロスケールのシミュレーションとマクロスケールのシミュレーションを連動させる新しいシミュレーションの方法を開発することである。従来のシミュレーション手法ではミクロスケールの問題とマクロスケールの問題を同時に扱うには計算量が膨大になるという観点からそれぞれ独立に取り扱われ、今現在



図1 : Max Planck Institute for Polymer Research の入口。Johannes Gutenberg University のキャンパス内にある。

もスケール別に行うシミュレーションが主流である。しかし多くの物理現象はミクロスケールの問題とマクロスケールの問題が密接に関係しているため独立に取り扱える問題は限られている。そこで膨大な計算量を減らすために問題の本質を失わない程度に情報の粗視化(coarse-graining)を行うことで、大規模で複雑な問題も取扱うことが可能となる。従来はこのような粗視化手法のこともマルチスケールシミュレーションと呼んでいた。私の行っているマルチスケールシミュレーションは、この粗視化されたシミュレーションをさらにマクロなスケールの流体シミュレーションに接続することにより、マクロスケールの現象をミクロスケールの分子運動から説明することが可能となるシミュレーション手法である。そして、粗視化モデルを別のものに置き換えることにより、異なる物質のシミュレーションも可能となる。したがって私の行っているマルチスケールシミュレーション手法を異なる現象を示す物質へと応用するには、ミクロスケールを記述する粗視化モデルの開発が重要であり、粗視化モデル開発の現状を把握しておく必要がある。今回の会議で議論された内容は高分子、液晶、コロイド、生体膜などソフトマターの代表的な分野を幅広くカバーしており様々な粗視化手法を知ることができた。汎用的な方法 (United-atom model の粗視化された力場の決定方法、relative entropy の取り扱い、reverse monte carlo 法を用いた状態の生成など) の基礎的な部分の解説を含む講演があり、今後の研究推進への参考になった。残念ながら私が行っているようなマルチスケールシミュレーション手法の講演はなかったが、日本国内では粗視化シミュレーションに特化した会議はほとんどないので、この会議に参加し情報収集できたことは貴重な機会であった。

今回参加した会議の最後に全体討論の時間があり、本会議で取り上げられなかった話や、粗視化モデルで今後改善していくべき点が挙げられた (図3参照)。時間スケール分離の問題、力場の決定方法の問題、長距離力 (静電気力) の問題、レアイベントの問題など、粗視化する際につきまとう問題や、粗視化モデルを用いても取扱いが困難な問題など、現状では困難なまま残されていることがわかる。このような問題を今後どのように取り扱っていくのかはとても難しい。ひとつの方針としては、大規模な系の計算を直接行い、その結果から物理的な本質をとらえ、そこから粗視化モデルを構築するということが挙げられる。計算機の性能向上により、従来粗視化しないと困難であった問題も、粗視化なしの大規模なままで取り扱われることが可能になりつつある。問題の規模が大規模化するほど、対象は複雑化し物理的な本質をとらえることが困難になる。情報の粗視化はまさに物理的な問題の本質をとらえる作業にほかならない。粗視化モデルの開発は情報処理の方法と密接に関係している。今後ますます物性分野の研究者と情報分野の研究者の交流が必要である。また次の機会に、本事業を活用して研究交流を進めていきたい。

最後に、今回私のドイツへの渡航を許可いただいた佐々真一教授と、事務手続きでお世話になった秘書の中西陽子様へ感謝いたします。また写真を提供いただいた防衛大の萩田克美博士へ感謝いたします。



図2 : Marcus Müller 教授の開会の挨拶

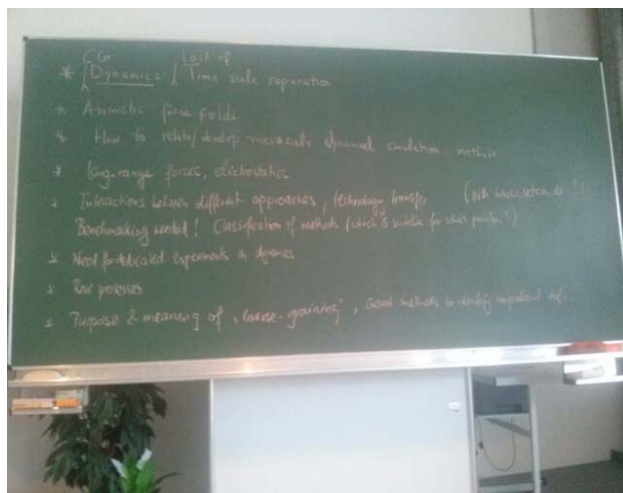


図3 : ワークショップ最後の全体討論の板書 (撮影 : 防衛大・萩田氏)

問題の規模が大規模化するほど、対象は複雑化し物理的な本質をとらえることが困難になる。情報の粗視化はまさに物理的な問題の本質をとらえる作業にほかならない。粗視化モデルの開発は情報処理の方法と密接に関係している。今後ますます物性分野の研究者と情報分野の研究者の交流が必要である。また次の機会に、本事業を活用して研究交流を進めていきたい。