

TSUBAME 共同利用 平成 26 年度 学術利用 成果報告書

利用課題名 分子動力学法によるナノ間隙内流動特性の解明
英文 Molecular dynamics simulation of nano-flows利用課題責任者
須賀 一彦所属
大阪府立大学

本課題ではカーボンナノチューブ(CNT)内部の流動解析に分子動力学法(MD)を適用して行った。MDでは分子数が多くなるにつれ MPI により最適に並列化されたコードでも計算時間が膨大になるため、CUDA+MPI により並列化されたプログラムコードの開発を行い、現状ではまだ改善の余地は大きいものの、約16倍計算速度を向上させた。この開発プログラムを用いて CNT 内部を流れる液体アルゴンの流動解析を行った結果、管径が大きくなるにしたがい流動特性がナノからマクロに遷移するプロセスを詳らかに議論した。

This research discusses flows inside a carbon nanotube (CNT) by molecular dynamics(MD) simulation.

Even the fully parallelized code for MPI cannot be fast enough for simulations of many molecules because of too long CPU time required. This research optimizes the parallelized code for CUDA+MPI and evaluates the code. As a result, the new code performs sixteen times as fast as the conventional one. Computations of liquid argon flows inside the larger CNT by this code elucidate the transition process between the nano and macro flow physics.

Keywords: Molecular dynamics, Carbon nanotube, Argon, Liquid, CUDA

背景と目的

近年、カーボンナノチューブ(CNT: Carbon Nanotube)内部を流れるガスや水が高速になるといった報告がされるなど、マイクロ・ナノオーダーにおける流動特性の特異性が注目されている。そのような流れはガス交換膜のようなマイクロ多孔質にも現れ、さらには MEMS/NEMS やバイオ、医療、宇宙といった様々な分野での応用が期待されている。しかし、そのような流れ場を実験的に解明するのは困難であり、分子動力学法(MD: Molecular Dynamics)による数値シミュレーションが有効な手段である。そこで本研究では、MD シミュレーションにより、カーボンナノチューブ内やグラフェンチャンネル内部の流動解析を行うことで、炭素の六員環構造を持った壁面近傍での基本的流動特性について詳細に調べた。また、GPU を用いて計算を行うことにより、従来では計算できなかった大きな計算領域で

の解析を目指した。

概要

本課題では、GPU を用いた計算による MD シミュレーションを行った。まず、従来用いていた MPI による並列化と今回行った CUDA+MPI による並列化による計算時間の比較を行った。その上で、CNT 内部を流れる液体状態のアルゴンの流動解析を行い、CNT 内流動現象で見られる遷移現象について議論を行った。

なお、流体分子間と流体分子と壁分子間のポテンシャル関数には L-J ポテンシャルを用い、壁分子間のポテンシャルには Brenner ポテンシャルを用いた。近傍分子の探索手法には Book-keeping 法を用いた。

結果および考察

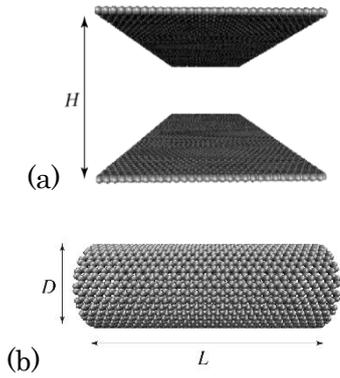


図 1-(a) グラフェンチャンネル計算領域, (b) CNT 計算領域

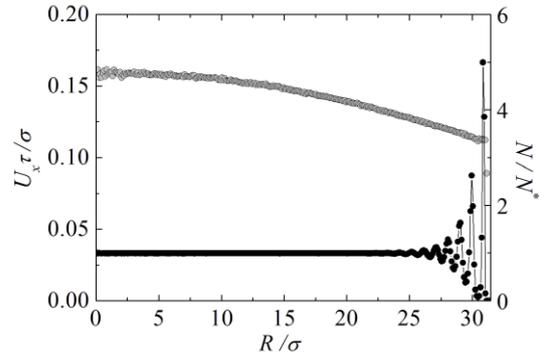


図 5 速度分布と数密度分布($D=21.4$ [nm])

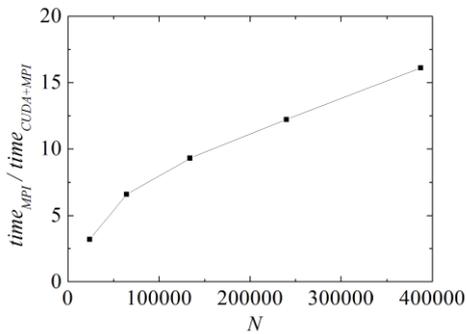


図 2 計算時間の比較

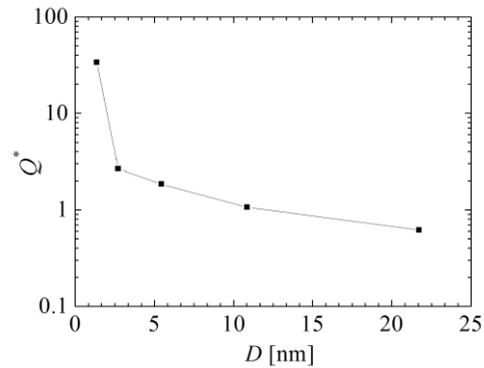


図 6 無次元化流量分布

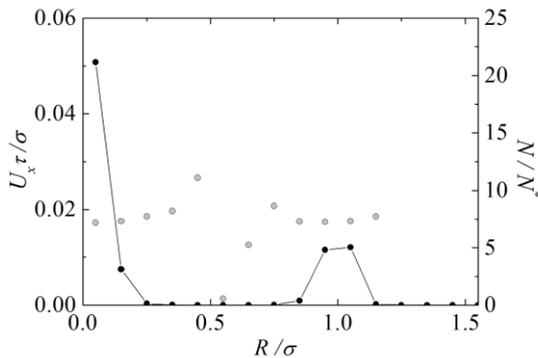


図 3 速度分布と数密度分布($D=1.05$ [nm])

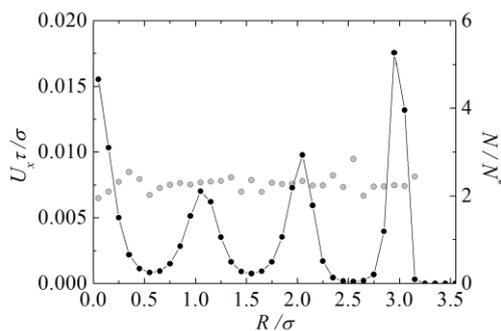


図 4 速度分布と数密度分布($D=2.41$ [nm])

1-(a)に示すグラフェンチャンネルとし、流体分子をアルゴンとした。流体分子数を9730~259590個、壁分子を14336~127488個として5000ステップの計算時間を計測した。MPIを用いた並列化による計算ではCPUにIntel(R) Xeon(R) CPU X5670 @ 2.93GHzを用いて12コアによる計算を行った。なお、このコードは最大限に並列化されている。CUDA+MPIを用いた並列化による計算では3枚のGPUを用いて計算を行った。図2に計算結果を示す。分子数 N が増加するにつれ計算速度が向上しており、最大で16倍程度の速度向上が得られた。

図1-(b)に示す、管径 $D=1.05$ ~ 21.4 [nm]、管長 $L=49.2$ [nm]のアームチェア型CNT内部の外力駆動によるアルゴンの流動解析を行った。CNTはカイラル指数(6,6),(7,7)⋯(160,160),(300,300)と多くのケースを対象にした。計算条件は、圧力、温度がそれぞれ約34[Mpa]、151[K]の液体状態となるよう無次元数密度 $\rho^*=0.8$ 、無次元温度 $T^*=1.0$ とした。図

計算時間を比較する際の計算条件は、壁を図

3-5 に一例として $D=1.05, 2.41, 21.4$ [nm] の場合の主流方向の速度分布と数密度分布を示す。これらの図から管径が大きくなるにつれ壁面近傍での速度と管中心での速度の差が大きくなって、全体の流動はプラグ流動的な特徴から粘性効果のあるマクロ的な振る舞いに近づくことがわかる。また、数密度分布から管径 1.05 [nm] の場合、 $R/\sigma=1$ と管軸に流体分子が集り、管径 2.41 [nm] では管軸以外に流体分子の層が三層できるが、この傾向は管壁近くに限定されることが、管径 21.4 [nm] の数密度分布からわかる。したがって、管径が数ナノメートルと小さいとき、または管壁極近傍のみにナノ流動特性が制限されることが確認できる。

図 6 に管径を変化させたときの無次元化された流量の分布を示す。無次元化された流量 Q^* は以下の式で定義する。

$$Q^* = \frac{\int_0^R \rho' U(r) 2\pi r dr}{\rho^* \pi R^2 F_u} \quad (1)$$

ここで、 R は CNT の半径、 ρ' は局所密度、 ρ^* は平均密度、 $F_u = R^2 N^* f / \mu$ で、 N^* は流体分子数、 f は外力、 μ は粘性係数である。図 6 から無次元化流量は管径が 1 [nm] から大きくなると 2 [nm] 付近で急激に減少し、その後は徐々に減少し、ある一定値に収束すると考えられる。このように液体アルゴンにおいてもナノ流動からマクロ流動の遷移過程が 2 [nm] 付近の管径で行われることを確認した。そして、そのメカニズムについて現在、データ解析を行いながら詳細に議論している。

まとめ、今後の課題

CUDA+MPI による並列化を行った計算を用いて分子動力学シミュレーションを行った。ここでは、カーボンナノチューブ内の液体流動力学を詳らかにするべく、液体アルゴン流動を詳細に検討した。計算プログラムは従来の MPI により最適化された並列計算と比べ、16 倍程度の計算速度向上を得ているが、さらに高速化させることが必要である。現状でも、従来では行えなかった、領域サイズの大きな計算を行うことができたが、今後の課題としては、近傍分子の探索手法として CUDA に馴染みよい領域分割法を工夫するなど、プログラム

コードのさらなる最適化を行い、より大規模の計算を実施する。