

戦略的創造研究推進事業 CREST  
研究領域「シミュレーション技術の革新と  
実用化基盤の構築」  
研究課題「多階層的バイオレオシミュレータの  
研究開発」

## 研究終了報告書

研究期間 平成14年11月～平成20年3月

研究代表者: 土井正男  
(東京大学大学院工学系研究科 教授)

## 1 研究実施の概要

### 1. 1 研究構想

本研究の目的は、提案者の土井が 1998 年 8 月から 2002 年 3 月にかけて経済産業省の大学連携型産業技術開発制度に基づくプロジェクトの中で開発した、高分子材料に対するシミュレータ「OCTA」をさらに発展させ、生体において重要な役割を果たすソフトマターの流動・変形現象（バイオレオロジー現象）のシミュレーション技術を格段に発展させることである。

これまでのバイオレオロジーの研究は、血液流動、骨の変形など、生体のマクロ階層の現象を連続体力学的に解析するものがほとんどであった。しかしながら、生体現象の解明や生体材料の開発においては、これより下のメゾ階層が問題となることが多い。例えば、毛細血管を流れる赤血球の運動においては、血管と赤血球とのすべりが問題となる。また、水分や栄養分の補給の観点からは毛細管を通した水や物質の流れが重要となる。さらにミクロには、生体膜や生体高分子の流動や変形の現象が重要となる。これらの現象を扱うには、マクロな階層の連続体力学だけでは不十分であり、高分子、コロイド、ミセルなどソフトマター物理の基本にたったモデル化とそれに基づく解析が必要である。そこで、本提案においては、私たちがこれまで開発してきたソフトマターについての統合シミュレータ OCTA を発展させ、生体および生体材料に関連する種々のメゾ階層のレオロジー現象を扱うシミュレータを開発し、その有用性の検証を行うことを提案した。

### 1. 2 研究の実施

研究当初の目的はバイオレオロジー現象解明のためのシミュレーションシステムの開発であった。提案時の実施項目は 4 つのシミュレータ（①バイオ流体、②バイオゲル③バイオ界面④バイオ分子）の開発と、それらを統合するための⑤シミュレーションプラットフォームの開発であった。しかし、2004 年、研究代表者の土井が名古屋大学から東京大学に移り、参加メンバーおよび研究環境が大きく変化した。これにともない、研究の進め方の見直しを行った。

名古屋から東京に移るに伴い、流体グループおよび分子シミュレーショングループと密接な関係を保ちつつ研究を進める事ができなくなった。そのため、問題を整理し、シミュレータの開発目標の見直しを行なった。バイオ流体については、開発の目標を流体中の微粒子や高分子の運動をシミュレーションするシミュレータに絞ることとした。

（これに伴い、これまでバイオ流体シミュレータとよんでいたものを粒子分散系シミュレータと呼ぶことにした。）バイオ界面については、DDS (Drug Delivery System) などの研究で重要となるブロック高分子の作る自己組織構造をシミュレーションするシステムとすることとした。（これに伴い、バイオ界面シミュレータをブロック高分子シミュレータと呼ぶことにした。）さらにバイオ分子の部分は OCTA の既にあるシミュレータを利用すればできると判断し、新規シミュレータの開発は中止した。その一方で、シミュレーションプラットフォームの開発・改良の作業は引き続き強力に進め、完成版を

作ることを目指した。

シミュレーションの開発項目を減らす一方で、東京大学において実験ができる環境が整ったので、実験による現象の確認と、シミュレータの検証を新たな目標に設定した。したがって、東京大学に移ってからの研究目標を以下3つに集約した。

a) 新規シミュレータの開発: 生体および生体工学における微小流動現象を扱うために、微粒子分散系シミュレータ、バイオゲルシミュレータ、ブロック高分子シミュレータの3つのシミュレータを新たに開発する。

b) シミュレーションプラットフォームの開発: 上記シミュレータを統合し、さらに実験データや他チームで開発されたシミュレータも利用できるシミュレーションプラットフォームを開発する。

c) シミュレータの検証: 開発したシステムを用いて、高分子の粘着現象、高分子溶液の乾燥、電解質ゲルの電場変形などの現象に対する多階層モデリングの有用性を検証する。

これらの目標に対しては、それぞれ以下に示すような成果を挙げることができた。

### 1. 3 研究成果

#### 1. 3. 1 新規シミュレータの開発

##### (a) 微粒子分散系シミュレータ

バイオテクノロジーにおいては、微小流路の中を、細胞、たんぱく質、DNAなどの微粒子や高分子を流し、分離・分析を行っている。このような研究においては、流体中に浮かぶ微粒子や高分子がどのように運動するかを知ることが重要である。微粒子分散系シミュレータは流体中に浮かぶ任意形状の微粒子の運動を計算するシミュレータである。アインシュタインのブラウン運動理論に基づき、流体力学的な抵抗力と、熱的揺動力のもとで粒子の運動を計算することができる。特に、無限媒質中を運動する剛体粒子については、あらかじめ移動度テンソルを計算することによって、高速な計算が可能となっている。

我々はこのシミュレータを用いてせん断流下における右巻き粒子と左巻き粒子(キラルな粒子)が分離できることを見出し、粒子の分離法に関する特許を出願した。さらに、表面の荷電の効果を取り入れるシミュレータの開発研究を通して、教科書に書かれている境界条件が不備であることを見出し、新しい境界条件を見出した。この結果は論文として投稿中であり、シミュレータに実装している。

流体中の微粒子運動については、これ以外のモデル化にもとづく方法も検討し、シミュレータを作成し研究を行った。(1)越塚らのMoving Particle Semi-implicit (MPS)法を拡張したシミュレータを作成し、基板上の高分子溶液が蒸発するときには、高分子が表面濃縮されることを示した。(2) Stochastic Rotation Dynamics (SRD)法によるシミュレータを開発し、複雑な形状をした微小流路の中のDNAの運動を解析した。

### (b) バイオゲルシミュレータ

ゲルは、ネットワークとしての弾性体と溶媒としての液体が一様に混じりあったものである。ゲルの弾性体部分と流体部分の運動はお互いにカップルしているが、これまでの取り扱いでは、二つは別々のものとして扱われてきた。(弾性体の変形を解くときには液体の浸透の効果は無視され、液体の浸透の効果を解く時には、弾性体の変形は無視されてきた。)我々は、弾性と拡散のカップルを記述する基礎方程式を定式化し、これにもとづいてゲルの変形と内部の物質の拡散や流動のカップリングを扱うシミュレータを開発した。さらに、この理論を高分子電解質ゲルに拡張し、人工筋肉材料であるナフィオンゲルの電場応答に対して、定電圧印可での人工筋肉の曲げと緩和時間の理論解析を行い、イオン種による緩和挙動の違いを説明することに成功した。また、電解質ゲルの曲げの緩和過程のシミュレーションにより再現することに成功した。

### (c) ブロック高分子シミュレータ(ミセルシミュレータ)

ブロック高分子は溶媒中でミセルやベシクルなどの会合体を形成する。この会合体の形成メカニズムを知ることはDDS (Drug Delivery System) などの応用において重要である。これまで、ブロック高分子の自己組織構造は、経路積分法に基づいた計算で行われていたが、この方法は鎖長の長い高分子については計算時間とメモリの関係で使うことができないという欠点があった。そこで我々は、新たに密度汎関数のモデルを提案し、これに基づいて任意構造のブロック高分子の混合系のつくる自己組織構造を計算するシミュレータを作成した。本方法を用いることで、効率的にブロック高分子の自己組織構造が予測できることが示され、特にミセル系の形状変化のシミュレーションに成功した。

以上3つのシミュレータをまとめて“BRUNCH”と呼ぶことにし、H17年度には、次に述べるシミュレーションプラットフォームとあわせて公開用のプロトタイプ版を作成し、限定配布した(図1)。現在、最終版をまとめているところである。



図1: バイオシミュレータ“BRUNCH”

### 1. 3. 2 シミュレーションプラットフォームの改良

先の経済産業省プロジェクトの中で開発してきた OCTA のシミュレーションプラットフォーム“GOURMET”に対して、高速化と省メモリ化のために、全体にわたり、プログラムを見直し、コア部分を書き換えた。その結果、読み書きについては 10 倍、表示についても数倍の高速化を達成した。また、プラットフォームのデータ構造の記述形式である UDF 文法の拡張を行い、多重配列型データのサポート、バイナリ形式のファイルのサポートするようにした。さらに、スクリプト編集時の undo-redo 機能、画像オブジェクトのピックアップ、移動、回転など、ユーザからの要望のあった機能を付け加えた。

また、シミュレータと実験機器との連携が重要であるとの見地から、プラットフォームと実験機器との間で直接的なデータのやり取りが行えるようツールを整備した。さらに、新たな画像インタフェースを導入して、2次元スライス画像を元に3次元構造のデータを構築しシミュレータと連携させる手法を開発し特許出願した。

### 1. 3. 3 シミュレータの検証

シミュレータの検証研究として高分子の粘着、高分子溶液の乾燥、電解質ゲルの電場変形、の問題を選んだ。これらの問題はいずれも微小な領域におけるレオロジー現象であり、再生医療など医療において重要な現象であると同時に、有機 EL などこれからのデバイステクノロジーにおいても重要な問題である。また、現象を理解する上で、マクロ、メソ、ミクロにまたがる多階層的なアプローチが求められている。このような理由で、シミュレータの検証研究のターゲットとして上記の問題を選び成果を挙げた。

#### (a) 高分子の粘着

分子動力学シミュレーションにより、高分子表面の分子の運動性を調べ、九州大学の梶山らが見出した、表面のガラス転移温度の分子量依存性を再現することに成功した。さらに、基板にグラフトされた高分子薄膜の粘着と剥離を分子動力学によって調べ、剥離挙動は表面のガラス転移温度の上下で大きく変わってくることを示し、粘着性の向上の指針を与えた。この仕事に対して、高分子学会から日本ゼオン賞が与えられた。

これとは別に、高分子を基板に粘着させ、剥離させるときの内部観察を行い、引き離し過程では、内部に球形のキャビティが多数できることを見出した。さらに、キャビテーション挙動を再現する3次元ブロックモデルを提案し、実験において見られる引き離し速度依存性や多数のキャビティが不均一に成長する様子を再現することに成功した。この仕事に対して、接着学会より、日東電工賞が与えられた。

#### (b) 高分子溶液の乾燥

固体基板上に置かれた高分子溶液が乾燥して膜を作る現象はインクジェット印刷技術に関連して重要である。我々は高分子液滴の蒸発過程を観察することにより、最

最終的にできる膜の形状と、高分子の初期濃度、液滴のサイズの関係調べた。その結果、高分子濃度が高い場合には、乾燥に伴い、液滴表面にスキン層が形成され、これが最終形状を決める重要な因子であることを見出した。この現象のモデル化を行い、モデルを用いた数値シミュレーションおよび理論的な解析によって、膜が形成されるための条件を与える表式を得ることに成功した。

### (c) 電解質ゲルの電場変形

産総研の黒田らによって発明されたナフィオンゲルを用いたアクチュエータ、および東大の福島・相田らによって発明されたイオン液体をベースにしたアクチュエータについて、それぞれの動作機構を解明するための実験とモデル化を行った。ナフィオンゲルについては、電場による電気浸透の効果が重要であることを示し、イオン種依存性を説明することができた。イオン液体性のゲルについては、電極層におけるイオンの交換の交換の重要であることを見出した。これらの知見を材料開発に役立てる研究を継続している。

## 2 研究構想及び実施体制

### (1) 研究構想

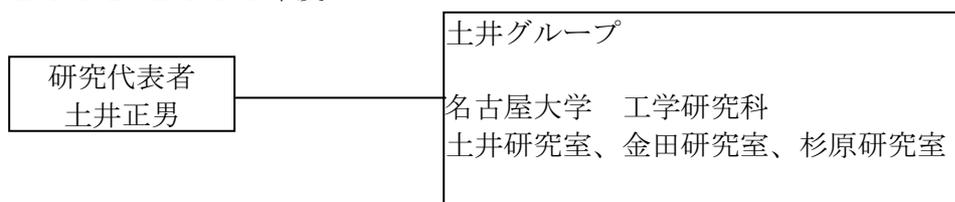
研究開始時の目的は、「OCTA を拡張し、生体組織やバイオマテリアルにおける物質の変形、流動、拡散などのレオロジー現象を解析し多階層的シミュレータを構築する」ということであり、シミュレータの開発が目的であった。開発するシミュレータとして、①バイオ流体、②バイオゲル③バイオ界面④バイオ分子などを扱うシミュレータおよび、それらを統合する⑤シミュレーションプラットフォームの開発を目的に、開発の計画を立てた。しかし、2004 年、研究代表者の土井が名古屋大学から東京大学に移ることとなり、これにともない、研究体制と研究計画の見直しを行った。

新規シミュレータの開発については、当初の計画では、バイオゲル、バイオ流体、バイオ界面、バイオ分子シミュレータの4つの開発を予定していたが、既存シミュレータの状況と我々の進捗状況をみて、開発の目標を絞り込んだ。バイオ流体については、一般的な流体コードではなく、流体効果を入れて微粒子や高分子の運動をシミュレーションするシミュレータに焦点を絞ることとした。（これに伴い、これまで流体シミュレータと区別していたものを粒子分散系シミュレータと区別することにした。）バイオ界面については、DDS などで重要となるブロック高分子シミュレータ（ミセルシミュレータ）に焦点を絞ることとした。さらにバイオ分子の部分は OCTA の既にあるシミュレータを利用すればできると判断し、新規シミュレータの開発は中止した。その一方で、シミュレーションプラットフォームの開発・改良の作業は引き続き強力に進め、完成版を作ることを目指した。

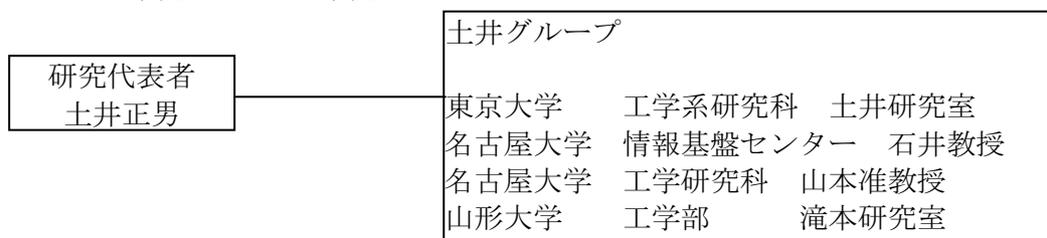
## (2)実施体制

研究体制を構想にあたっては、幾つかのグループに分担させることにより、目標が分散することを避けるために、一箇所に集中して研究を行う方針をとった。したがって、2003年は名古屋大学1チームの体制であったが、2004年以後は東京大学1チームの体制とした。

2002-2003年度



2004年度-2007年度



## 3 研究実施内容及び成果

### 3. 研究実施内容及び成果

#### 3.1 新規シミュレータの開発

新規シミュレータとして微粒子分散系シミュレータ、バイオゲルシミュレータ、ブロック高分子シミュレータの3つのシミュレータを開発した。それぞれの詳細を以下に記す。

##### 3.1.1 微粒子分散系シミュレータ

微粒子分散系シミュレータとして a)任意形状粒子シミュレータ MIKAN、b)MPS 法による流体シミュレータ、c)SRD 法による DNA のシミュレータ の3つを開発した。このうち a)は、任意形状粒子の運動をシミュレーションする汎用性のある完成度の高いシミュレータであるが、b)、c)は研究目的で開発されたものである。以下それぞれについて、機能を詳述する。

##### a)任意形状粒子シミュレータ MIKAN

タンパク、ウイルスなどは、複雑な形状をしており対称性のよいものではない。そこで任意の形状をした粒子のダイナミクスを調べるシミュレータを作成した。このシミュレータの特徴は、あらかじめ粒子の流体効果を評価しておき、ダイナミクスを計算することである。この方法は、孤立した剛体粒子の場合にしか使うことができないが、熱運動の効果を入れて粒子の運動を高速に計算できるという長所がある。

流体の効果の評価には、(1)解析解の分かっている物体の流体効果を足し合わせ

る“重ね合わせモデル”(2)ビーズと呼ぶ球状粒子間の相互作用を考えた“ビーズモデル”(3)三角形の板で作られた形状を考える“境界要素モデル”の3種を実装した。これらのモデルから流体効果を計算しておき、粒子の速度、角速度を算出し、次の時間ステップの粒子の位置、配向を差分で計算することで粒子のダイナミクスを算出した。このような流体効果を前処理で算出する方法を用いることで、多くの粒子の標本平均を取ることや、長時間の粒子のダイナミクスの計算に有利となった。このシミュレータはMIKANと名づけた。

MIKANを用いて、任意形状の微粒子の沈降やせん断流下におけるカイラリティを持つ粒子の分離現象を調べた。

沈降に関しては、回転楕円体のような軸対称な粒子では、粒子は回転せずにスライドしていくような沈降になる。いくつもの回転楕円体を同時に沈降させるとその楕円体の中心は広がるようになる。一方で、プロペラのように複雑な粒子の場合はその中心が重力に平行な方向の円柱内の領域に留まって沈降していくものがあることが分かった。

我々はこのシミュレータを用いてせん断流下における右巻き粒子と左巻き粒子(キラルな粒子)が分離できることを見出した。図2は、カイラリティを持った粒子のせん断流中の運動の例である。粒子は2つの円盤からなる粒子で2つの円盤の法線方向は粒子を結ぶ軸に対して回転しているため、粒子がカイラリティを持っている。図2は、紙面に平行に右向きにせん断が印加された場合の結果を示す。粒子は渦度の方向に移動することが分かる。また、図2の(a), (b), (c), (d)といくにつれて熱運動の効果が大きくなる。熱運動の効果により、粒子の移動の効率が落ちることが分かる。

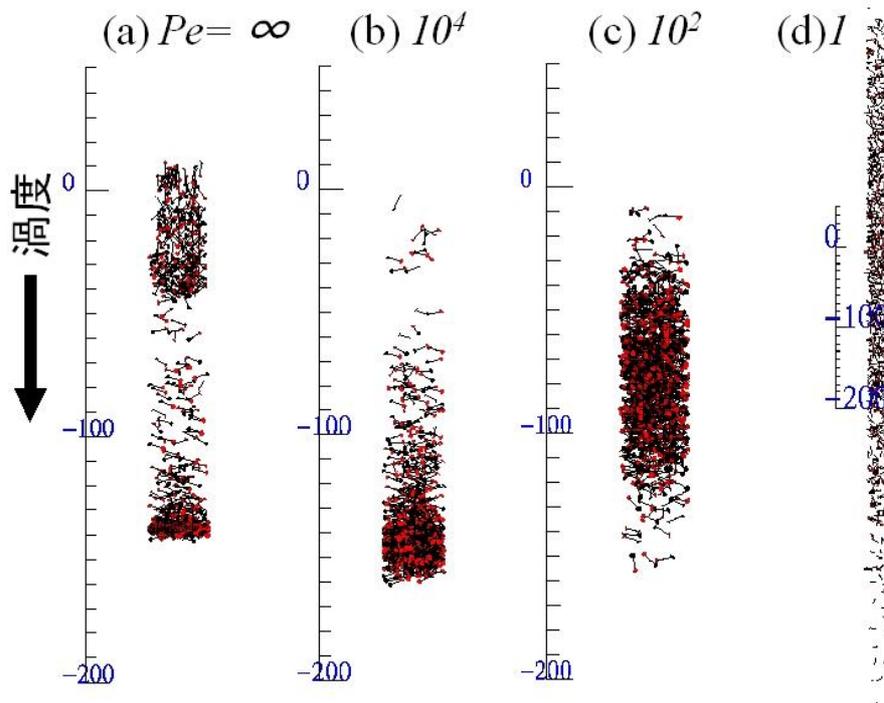


図2:単純せん断流におけるカイラリティを持つ粒子の運動。Pe はペクレ数と呼ばれる無次元数で、せん断流の強さと熱運動の効果の比を表す。(a),(b),(c),(d) の順に熱運動の効果が強

他の形状の粒子についても同様な計算を行った。図3は捩じれたリボン型の粒子である。境界要素モデルを用いて流体効果を算出して、せん断流により分離できることを示した。これらの研究を踏まえ、我々は2重円筒の装置(図4)を考え、その間にカイラリティを持つ粒子をおき、回転させることで粒子が分離できることを考案し、特許として出願した。

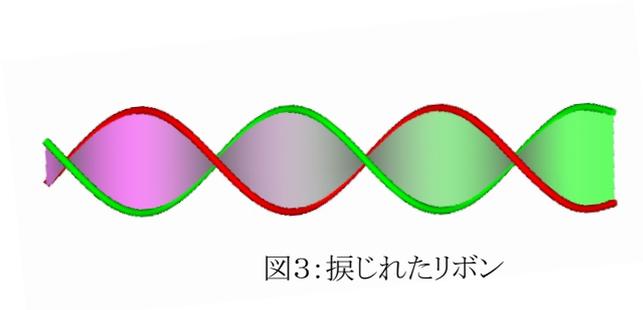


図3:捩じれたリボン

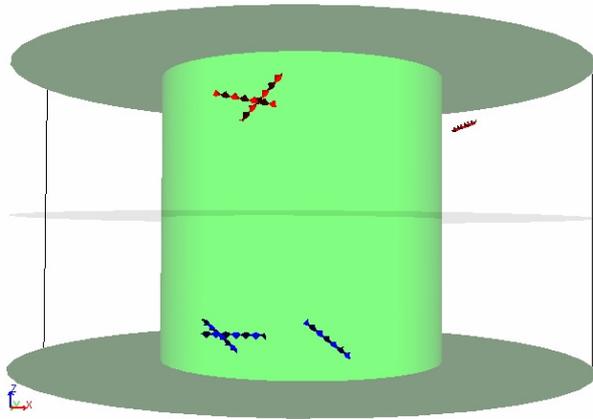


図4:2重円筒による粒子分離装置。赤色と青色の粒子で振れている方向が異なる。円筒が回転することにより、せん断流が印加され、円筒の上下にカイラリティに応じて粒子が移動する。

以上に述べたシミュレータは、電気的に中性な粒子を扱うものである。一方、たんぱく質粒子など、生体由来の粒子には、荷電を持つものが多い。そこで、我々は荷電した粒子に対しても電場、重力場、および流れの中で粒子がどのように運動するかを計算するシミュレータを開発した。このシミュレータは、電気二重層の厚さが粒子のサイズにくらべ十分小さいという近似のもとで成り立つ式を用いている。生体の中での電気二重層の厚さは nm 以下であるので、この近似は多くの粒子について成り立っており、この近似を用いることで計算を著しく簡単化できる。この近似のもとでは、粒子の荷電状態は粒子の表面電位（ゼータ電位）によって特徴付けられ、粒子表面での電場を計算し、粒子表面と流体のスリップの境界条件を与えることで粒子運動を計算できる。

荷電粒子の電場中の運動は、イオンの運動のために中性粒子の運動の様子と質的に違った様子を示す。図 5 は球状の粒子に一樣に荷電した粒子が外部電場を受けて動く際(電気泳動)の回りに作る速度場を示した。この流れ場は、電気的に中性な粒子が沈降する際に作るストークスレットとは異なり、短距離にしか及ばない。

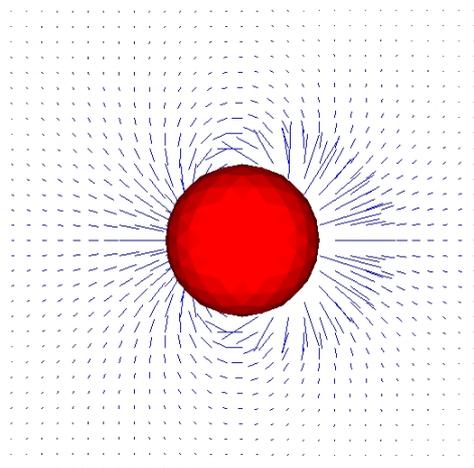


図 5: 帯電した球の周りの流れ場

荷電した粒子の興味深い点では、どんなに複雑な形状をした粒子であっても、表

面電位が一様であれば、電気泳動の際に、回転はしないで一定速度で並進運動をすることである。シミュレータの計算精度を確かめるためにこのことをチェックする計算を行った。図6のようにさまざまな形状の粒子を作成して並進速度を計算した。それぞれについて理論解との比は(a)0.993, (b)0.87, (c)1.00, (d)0.94, (f)0.99, (g) 1.05 となった。鋭く折れ曲がった部分をもつ粒子については数%程度の誤差はあるものの、滑らかな表面をもつ粒子についてはおおよそ適当な値を得ることが出来た。

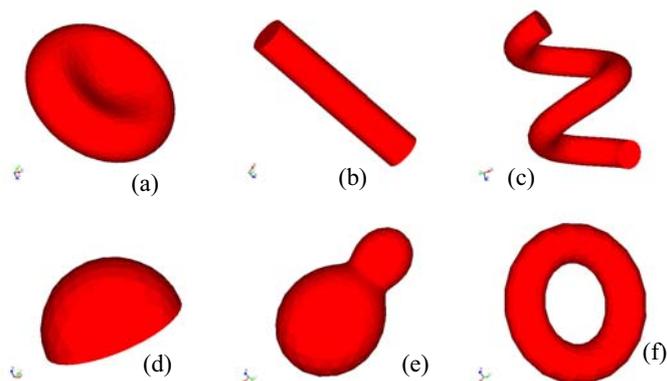


図6:シミュレータの検証のために用いたさまざまな形状の粒子。すべて一様な表面電位をもつ。それぞれの理論値との比較は (a)0.993, (b)0.87, (c)1.00, (d)0.94, (f)0.99, (g) 1.05 である。

一方、非一様な表面電位を持つ粒子の運動は、非常に複雑なものとなる。図7は表面電位が  $\zeta(\theta) \propto 3\cos^2\theta - 1$  という形で与えられる4重極を持った粒子の運動の例を示す。粒子は電場に垂直な方向に移動しており、粒子の初期の向きにより、いろいろな方向に運動している。このような複雑形状、複雑電位分布をもつ粒子のシミュレーションはMIKANで初めて可能になったものである。

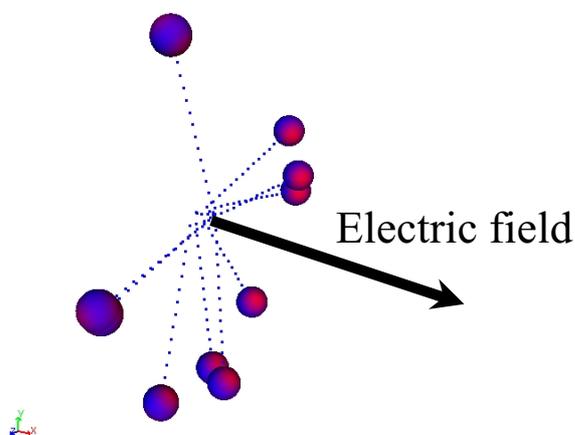


図7:非一様に荷電した粒子の電場の中の運動。粒子は電場と垂直方向に運動している。

以上に述べた系は、無限媒質の中に置かれた単一粒子の運動に関するものである。この場合には、前処理により計算時間を短縮することができる。一方、壁の効果や粒子間相互作用がある場合には、前処理計算が不可能である。そのような場合に対しても計算ができるシミュレータを開発した。このシミュレータでは、粒子の配置ごとに電場および流体の場を境界要素法で解き、それにしたがって粒子を動かすという方法をとる。このシミュレータによる解析結果の例を図8, 9に示す。

図8は電場により電極に引かれた粒子が電極近傍で運動する様子を示す。流体運動の効果により、粒子は互いに近づくことが確認される。このような電極近傍での粒子の運動は電子ペーパーなどにおいて重要である。図9は非一様に荷電した壁近傍の粒子の運動を示す。壁の帯電の効果により、電気浸透流が発生し、粒子が回転しながら動くことが見て取れる。

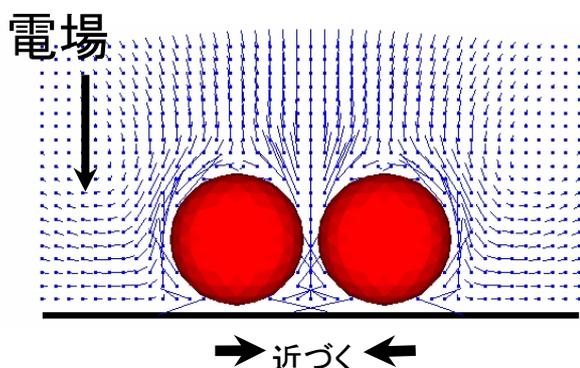


図8：電極付近で凝集する荷電粒子

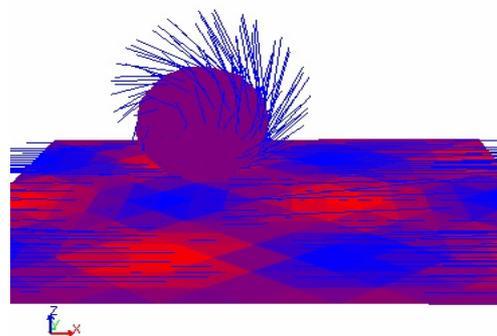


図9：非一様に荷電した壁での粒子

この研究を通して、我々は、薄い電気二重層の極限として従来用いられている理論の欠陥に気づいた。従来用いられている境界条件を使う限り、電気泳動速度は計算できても、沈降電位は計算できず、Onsagerの相反関係を満たすことができない。そこで、我々は、表面電気伝導相を考慮した新しい境界条件を提案し、これを用いればOnsagerの相反定理が満たされることを示した（現在論文準備中）。新しい境界条件を使うと従来の理論にも変更が加えられる。図10は、一様に帯電した球形粒子の電気泳動を、表面電気伝導相を考慮して計算した結果である。図に示すように粒子によって作られる電場は表面電気伝導度の大小によって定性的に異なる振る舞いを示す。バルクと表面の伝導度の比を $\gamma_e$ で表し、その比が小さな時と大きな時では、作られる双極子の向きが逆転している。この効果により、表面電気伝導度が大きくなると電気泳動速度が落ちることが分かった。

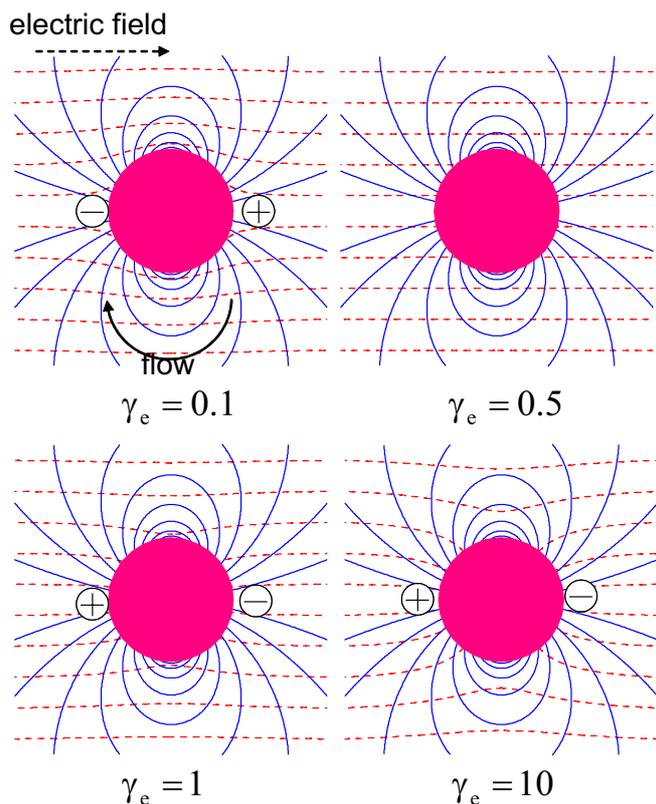


図 10: 電気泳動時における粒子の周りの電場。赤い破線が電場、青い実線が流れ場を表す。

上に述べた粒子シミュレータの開発には境界要素法と呼ばれる方法を用いてきたが、境界要素法は、要素数が多くなると必要なメモリが劇的に増加し、現実的な系を十分に表現できない。この困難を克服するため、我々は、高速多重極展開アルゴリズムを用いた境界要素法を実装した。この方法を使いポアソン方程式のソルバーを作成した。130万要素程度の計算は行なうことが確認できている。このような計算は従来の境界要素法では不可能な計算である。

高速多重極展開アルゴリズムを用いた計算例として、液滴の乾燥過程の解析例を示す。(ここで考えているのはインクジェットプリンティングにおける基板上的インクの乾燥問題であり、その背景については3.3.3で述べる。)我々はインクジェットにより基板上に作られた微小液滴の平衡形状と、その形状からの溶媒の蒸発速度を計算するシミュレータを作成した。(液滴の平衡形状は表面エネルギーが最小になるという条件から求めることができる。また、液滴の蒸発速度は、溶媒分子濃度の従うラプラス方程式を高速多重極展開法で解くことによって求めることができる。)図11に解析例を示す。基板と液滴の接触角は赤色の部分が60度、緑色の部分が120度となるような条件においた。図中の矢印は液滴表面における溶媒分子の蒸発速度を表す。

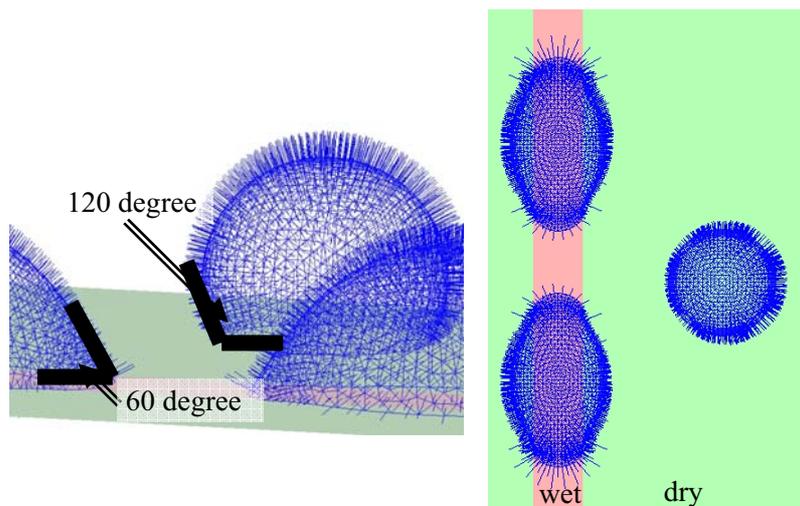


図 11: 濡れ性の異なる基盤での液滴蒸発

以上の研究に関するシミュレータは、2007年10月1日現在、  
<http://rheo.t.u-tokyo.ac.jp/~makino/simulator/simulator.html>  
 にて、公開している。

#### b) MPS 法による流体シミュレータ

MPS 法 (Moving Particle Semi-implicit 法) は、東京大学の越塚教授らの開発したメッシュレスな流体ソルバーであり、移動境界問題を解くのに適した方法である。我々は高分子溶液の乾燥過程の解析にこの方法を適用した。高分子溶液を扱うために、2成分流体を扱えるよう MPS 法を拡張した。解析結果の一例 (基板上の高分子液滴蒸) を図 12 に示す。

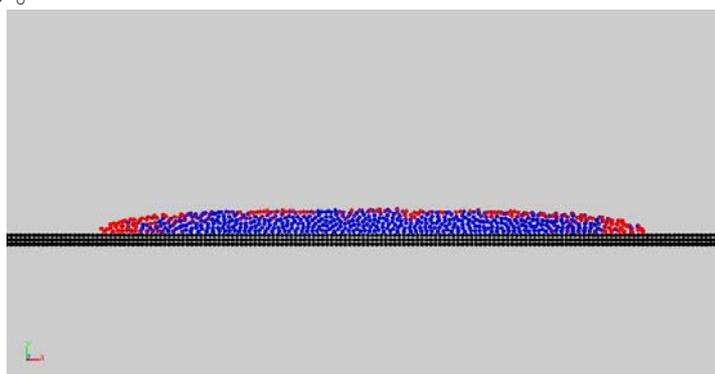


図 12: 基板上での高分子溶液の蒸発現象 (赤色部分が高分子濃厚部分)

また、粘弾性構成式を MPS 法で扱えるよう定式化を行い実装をした。これをキャピラリ一内の流れ、狭窄流路における粘弾性流体の流れに適用し、有限差分法による結果と定性的に一致する結果を得た (図 13)。更に、弾性体/流体の連成問題を扱えるようにプログラムを改良し、ざり流動場の中におかれた柔らかな弾性粒子の運動を解析した (図 14)。ここでタンクトレッド運動と呼ばれる運動が見て取れる。このシミュレータは VINE と

いう名で Brunch に含まれている。

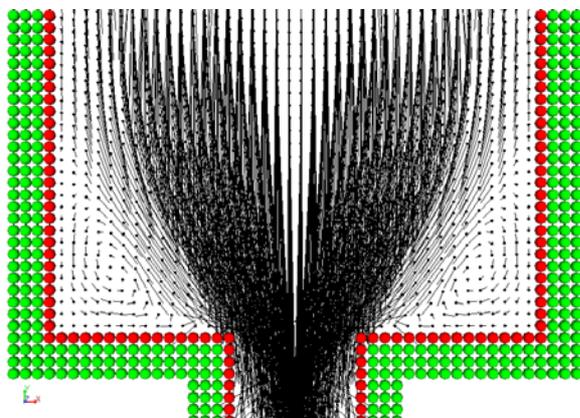


図 13: 狭窄流路中での contraction flow

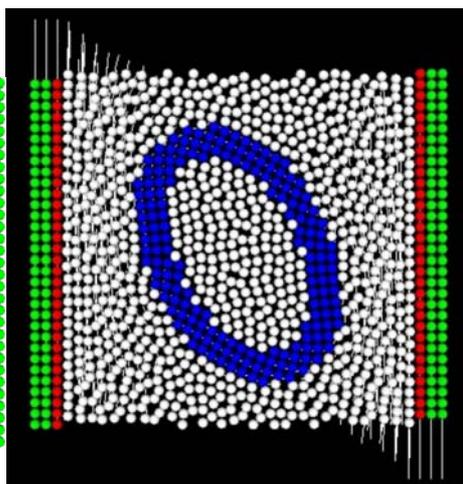


図 14: タンクトレッド運動

#### c) SRD 法による DNA のシミュレータ

DNA の分離・分析のためには細い流路内に DNA を流すことが行われている。DNA の運動においては、要素の各部分の間の流体を介した相互作用（流体力学的相互作用）が重要であることが知られているが、これを取り入れた計算は難しかった。これまで seen テンソルを用いる方法が用いられてきたが、この方法では流路の壁の効果を取り入れることができない。我々は、SRD (Stochastic Rotational Dynamics) という粒子法を用いて、任意形状の流路の中を流れる DNA の運動を計算するシミュレータを開発した。

SRD 法とは、流体運動を表す仮想的流体粒子を考え、流体粒子の並進、衝突を計算することで流体運動を表現するシミュレーション手法である。計算アルゴリズムが分子動力学と類似しているため、(a) 高分子など分散粒子を導入することが容易、(b) 熱運動の効果が自動的に取り入れられる、などのメリットがある。我々は、この方法を用いて任意形状の流路内の流体運動と DNA の運動を連成して計算するシミュレータを開発した。十分大きな容器の中の DNA の運動については、無限媒質中での従来理論の結果を再現することを確認した。続いて、流路内の DNA の運動を計算し、流路内の DNA の滞在確率の分布などを求めた。図 15 は、拡大縮小を伴う流路内での DNA の運動をシミュレーションした結果である。

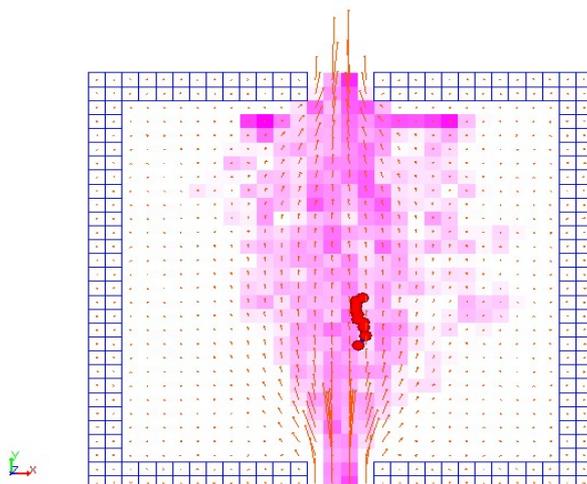


図 15：流路内を流れる DNA(赤色)。色の濃淡は DNA の存在していた頻度を表す。

### 3.1.2 バイオゲルシミュレータ

ゲルは、バイオレオロジーにおいては重要な意味をもつ物質である。レオロジー的にはほとんどの生体組織はゲルとみなすことができる。また、医療に用いられる多くの高分子材料もゲルである。ゲルの運動はこれまで、変形あるいは拡散の現象が別々に扱われてきたが、実際には、ゲルの弾性変形と溶媒の拡散はカップルしている。我々は、弾性と拡散のカップルを記述する基礎方程式を定式化し、これにもとづいてゲルの変形と内部の物質の拡散を計算するシミュレータを開発した。特に生体内で重要な相互作用の 1 つである電解質効果を考えた高分子電解質ゲルを扱うシミュレータの設計と開発を行なった。

高分子電解質ゲルのダイナミクスとして、ゲルへ与えられる応力および水の移動などを考慮した応力拡散結合モデルを定式化し理論解析を行った。高分子電解質、カウンターイオンおよび水という 3 つの成分のそれぞれにつき運動方程式を立て、定電圧印可での高分子電解質ゲルの曲げと緩和時間の理論解析を行った。その結果、ゲルに定電圧を印加したとき、ゲルが急速に曲がった後、元の形に向かって緩和してゆく現象を説明することができた。また、この緩和現象において、イオンのサイズが重要であることをしめし、大きいイオンで緩和が遅くなる現象を説明することができた。これらの結果は、解析計算を行うと同時にシミュレータを使っても確かめることができた(図 16)。

また、高分子液滴の乾燥とゲル化の過程のシミュレーションを目指し、流体解析プログラムにメッシュ変形法(Arbitrary Lagrangian Eulerian formulations, ALE)と表面曲率の計算による界面張力の計算機能を実装した。これにより、表面変形によるラプラス圧の効果で誘起される流れや、粘度変化による流れの減衰の効果、高分子液滴の乾燥過程での溶質分布の解析、表面に出来る高分子濃厚層の厚さ分布の解析を行った。さらに、弾性膜の負圧下でのバックリング過程の解析を行った(図 17)。

本シミュレータは、バイオゲルシミュレータ Gelato として“Brunch”に含まれ

ている。

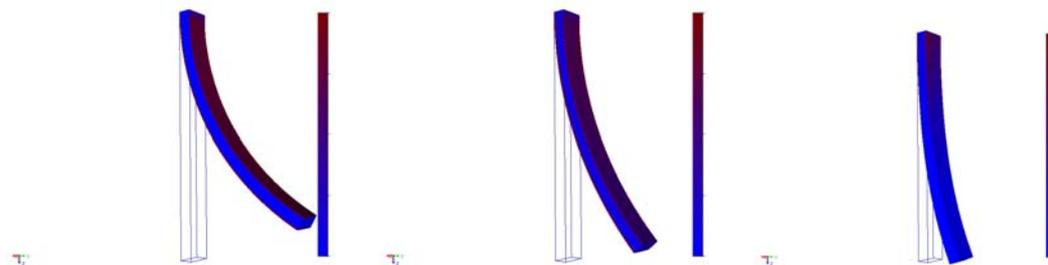


図 16：定電圧印可時の電解質ゲルの変形（定電圧が加わるとゲルは、急速に曲がるがやがてゆっくりもとの形にもどってゆく。）

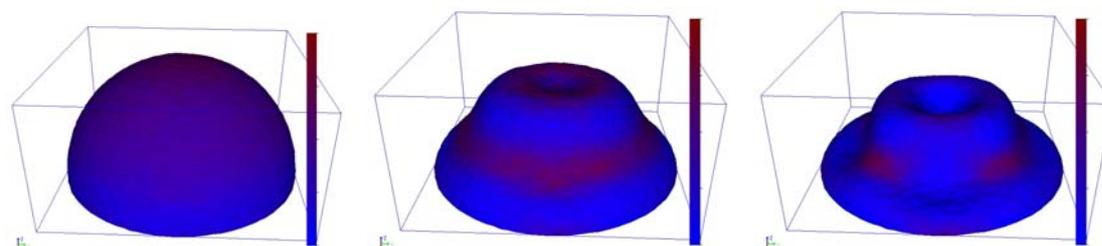


図 17：弾性膜の負圧下でのバックリング過程の解析

### 3.1.3 ブロック高分子シミュレータ（ミセルシミュレータ）

ブロック高分子は、温度を変えると異種ブロックが相に分かれて、ミセルなど種々の自己組織構造を作ることが知られている。どのような構造のブロック高分子がどのような条件化でミセルを形成するかは、DDS(ドラッグデリバリーシステム)などの応用において重要である。従来、ブロック高分子のつくる自己組織構造は、経路積分法に基づく自己無撞着方程式を解くことにより計算されていたが、この方法では、ブロック高分子の鎖長が長くなると計算時間とメモリが急激に長くなるという欠点があった。我々は、ジブロック高分子について提出された Ohta-Kawasaki 理論を拡張することにより、一般の構造をしたブロック高分子の任意の混合物に対する、密度汎関数の表式を与えた。これをもとにした、自己組織構造の計算は、従来法に比べて数十倍から数百倍高速の計算ができることがわかった(図 18)。これにより、これまでの方法では計算が難しかったブロック高分子の溶液系におけるベシクル形成の過程がシミュレートできるようになった。本シミュレータは Drops と名づけられており、<http://www.ton.sphys.kyoto-u.ac.jp/~uneyama/drops.html>にて、公開されている。

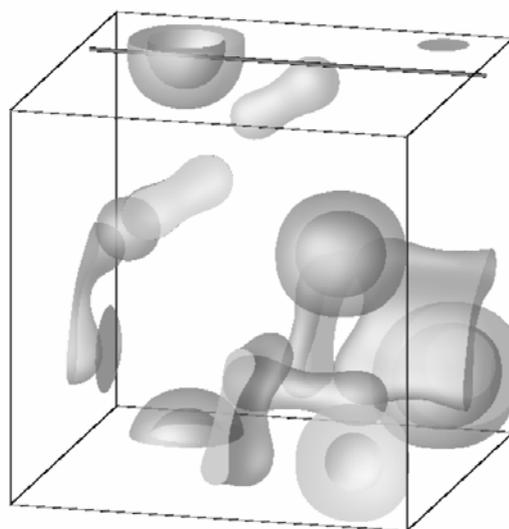


図 18：ブロック高分子溶液におけるベシクルの形成

### 3.2 シミュレーションプラットフォームの改良

OCTA プロジェクトの中では、高分子材料に対するマルチスケール解析を行う基盤として、シミュレーションプラットフォーム“GOURMET”を開発した。GOURMET は様々なシミュレータの共通のユーザインタフェースを与えると同時に、独立に開発されたシミュレータ間の連携を助けるツールとしての役割も果たす。GOURMET は UDF (User Definable Format) というデータ形式を介して、各シミュレータが必要とする入力情報、出力情報をデータベース化し、必要な情報の取り出し、書き換え、一つのシミュレータの出力情報から別のシミュレータの入力情報を自動作成するものである。我々が目指しているシミュレータの連携は、データの内容と形式をあらかじめ定めておく固定的な連携ではなく、シミュレータの変化と発展に対応することのできる自立・分散・協調的な連携であり、GOURMET はこの思想を実現するために作られたものである。本研究においても同じ思想を継承し、GOURMET の継続的な改良を主要な開発項目として取り上げた。本研究課題では三つの方向から GOURMET の拡張を行った。

- (a) シミュレータ/プラットフォームインタフェースの開発
- (b) ユーザビリティの大幅な向上
- (c) 実験機器との連携

#### 3.2.1 シミュレータ/プラットフォームインタフェースの開発

シミュレーションエンジンとプラットフォームの間でデータをやり取りするためのインタフェースをプログラムのコア部分から大きく書き換えた。OCTA の開発の際には、シミュレーションエンジン全てが、C++で書かれていたことから、C++のインタフェースのみをサポートしていたが、流体をはじめとした多くのシミュレータは、C 若しくは FORTRAN で書かれていることが多かった。これらのユーザの要望に応えるため、C、

FORTRAN 用のインタフェースの開発を行なった。これによって、OCTA プロジェクト、及び本研究課題以外で開発されている国内外の様々なシミュレーションエンジンをプラットフォーム “GOURMET” で扱えるようにする基盤ができた。

### 3.2.2 ユーザビリティの大幅な向上

Gouremt は読み込んだ UDF データの内容を表示するデータ表示ウインドウ、データを加工する Python ウインドウ、データを 3 次元的に可視化して表示するグラフィックウインドウ、という三つのウインドウを持っている。それぞれの部分に以下のような改良を加えた。

#### 3.2.2.1 データ表示ウインドウの改良

GOURMET のデータ表示ウインドウについて、これまで多量のデータを扱うときは、処理速度が遅くなるという欠点があった。3.2.1 に述べたコア部分の書き換えにより、この点は解消できた。この改良を行うと同時に、以下のような機能追加を行ないユーザビリティを向上させた。

- (a) 従来の GOURMET では 1 次元配列の表示機能しかなかったが、多次元配列表示機能を追加した。
- (b) データの大規模化に対応するため、UDF ファイルをバイナリー化した BDF ファイルを扱えるようにした。このバイナリー化は、I/O 速度を大きく改善し、ファイルのオープンに掛かる作業時間が 10 倍程度高速化できた。
- (c) これまで、巨大配列データの一部を表示するときには著しく時間がかかったが、大規模なデータでも、表示に必要な一部のみを読み込むようにすることで、データの高速表示を可能にした。
- (d) HELP 機能も強化した。情報が従来までは、テキストのみが記載できていたが、これを URL をリンクすることまで機能拡張をおこなった。

#### 3.2.2.2 Python ウインドウの改良

Python ウインドウとは UDF データを加工するための Python プログラムを書く部分である。この部分についても使いやすくするための様々な機能追加をおこなった。

- (a) これまでの GOURMET では対象としている UDF ファイルは一つであり、そのファイルの中のデータは、データ名に \$ マークを追加することにより Python プログラムから参照することができた。この機能を拡張し、別の UDF ファイルのデータに対しても、\$\$ マークに続けて、UDF ファイルのファイル名とデータ名を書けばデータの参照ができるようにした。これを用いることで、異なる UDF ファイルの間でデータのやり取りがより容易に行なえるようになった。
- (b) Python プログラムのスクリプト編集画面に対して、種々のアシストする機能を付け加えた。たとえば、Python スクリプトの中のキーワードのハイライト表示、スクリプトテキスト編集の UNDO/REDO 機能の追加、などにより Python プログラミングが行

ないやすいようにした。

- (c) 次に述べるグラフィックウィンドウの改良とも関係するが、任意の描画対象と UDF データを関連付ける機能の追加をおこなった。グラフィック表示しているオブジェクトをピックアップすると、それに関連付けた UDF 内のデータ情報を表示し、グラフィック画面からマウス操作により UDF データの内容の書き換えを行なう機能である。例えば、粒子を表示しておき、それをマウスで移動させることにより、粒子の位置データを書き換えることができる。この操作の画面の一例を図 19 に示す。

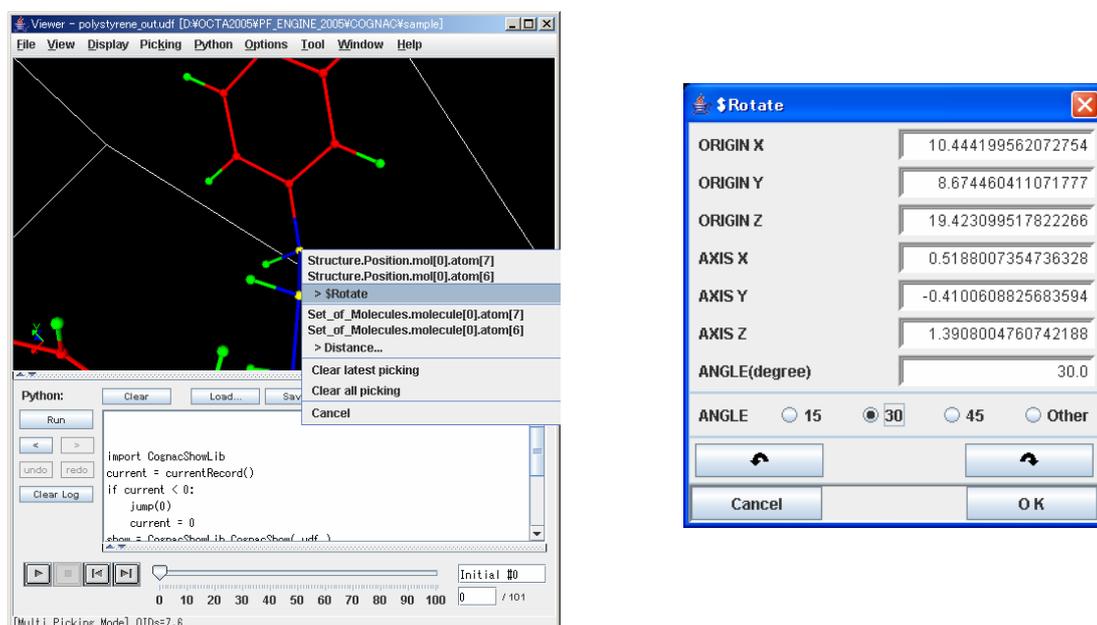


図 19:ピックアップと回転:アクション選択により左に示すウィンドウが開き、分子を回転させることができる。この操作の結果は UDF データにも反映される。

### 3.2.2.3 グラフィックウィンドウの改良

これまでの GOURMET では、描画の主要部分を GL4Java に任せていたが、(a) フリーの GL4Java ライブラリの開発がストップしており、今後の発展が見込まれない、(b) 表示スピードが遅いという欠点があった。そこで、描画プログラムを C で全面的に書き直し、かつベースとなる描画ライブラリを GL4Java から JOGL に書き換える作業を行なった。この結果、表示速度は数倍速くなり、メモリも半分ほどに減った。さらに表示に関して次のような機能追加を行った。

- (a) 等値面のスムーズシェーディングおよび HSV 色描画
- (b) チューブおよびリボンを描画する機能
- (c) イメージファイルを背景や矩形で描画する機能
- (d) ボリュームレンダリング機能

- (e) GUIプロパティの保存機能
- (f) 描画対象の3次元移動（平行移動・回転移動）機能
- (g) マウスによる描画対象の3次元平行移動機能
- (h) 矢印描画の矢じりの大きさ自動調整機能
- (i) 構造メッシュからの等値面にフタをする機能
- (j) 非構造メッシュから等値面を描画する機能
- (k) 描画面面での視点の方向および位置の取得および設定機能
- (l) イメージファイルの書き出し及び背景イメージにPNG形式ファイルの扱える機能

以上の改良により、GOURMETの高速化、省メモリ化が実現でき、ユーザビリティが大幅に向上した。

### 3.2.3 実験機器との連携

GOURMETは様々なシミュレータの自立・分散・協調的な連携を目指して作られたものである。このような設計思想を持つGOURMETは、シミュレータ間の連携だけでなく、シミュレータと実験機器との連携にも役立てることができるはずである。このように考えて、実験機器との連携を助ける機能をGOURMETに追加した。

#### 3.2.3.1 実験機器とのインタフェース

プラットフォームと実験機器との間で直接的なデータのやり取りが行えるようPythonライブラリを整備した。これにより、GPIB, シリアル等のインタフェースを通して、(a)プラットフォームから実験機器を操作する、(b)実験機器の出力データをUDFの中に取り込む、(c)実験データの解析をGOURMETで行なう、などの操作がスムーズに行なえるようになった。この機能は、我々のグループの実験研究で使われ、有用性が示された。

#### 3.2.3.2 3次元構造の取り込みと仮想実験環境の構築

多くの実験機器は画像データを出力する。特に、近年は3次元イメージング技術が発達しており、構造情報が3D画像情報として与えられることが多い。我々は、得られた2次元および3次元の構造情報を、GOURMETに取り込むプログラムを開発した。一例を図20に示す。これは、X線CTで測定されたネズミの画像を読み込み、GOURMETで描画させた結果である。この表示には、骨の部分とネズミの皮膚の部分の2枚の界面を表示させている。GOURMETでは、任意の界面の表示が行なえることから、内蔵などの部分を内部に表示することも可能である。現時点では、3D情報の取り込みは、医療現場でよく用いられているDICOMフォーマットに対応していないが、現在ライブラリを整備中である。

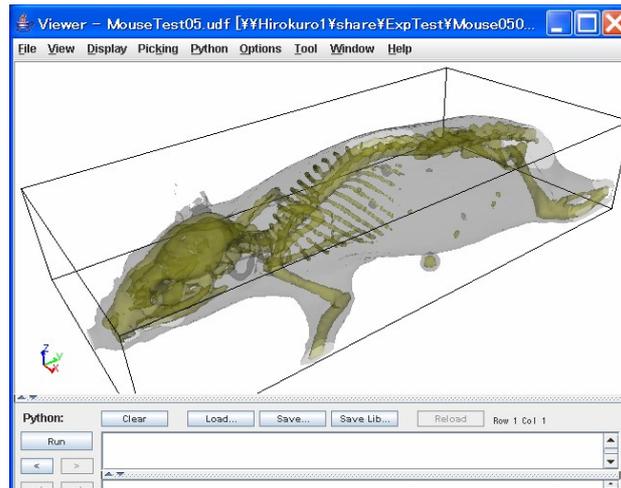


図 20 X線CTで測定されたMouseの画像を取り込み  
GOURMETでイメージングした結果

実験機器が出力する実在の3次元構造をGOURMETに取り込むことにより、GOURMETのシミュレーション機能を用いて様々なことができる。たとえば実験機器によって得られた実在の構造に対して、仮想実験をしたり、見えない情報を付加して表示することができる。

このような利用法の一例を図 21 に示す。これは、京都工芸繊維大学の陣内らによって測定された、ポリブタジエンと d-ポリブタジエンの相分離構造である。このスライス画像のピクセルデータを読み込み、シミュレーションで行なう初期構造データとして必要な領域、及びそれを保存するためのデータサイズを決定し、取得データをスケールすることで、必要な構造データを含んだUDFファイルを作成する。得られたUDFファイルは、他のシミュレータの初期構造に転送することができ、OCTAのエンジンのSUSHIや、MUFFINのデータへと変換できる。また、GOURMETを介して、グラフィック画面に表示された形状データ（三角メッシュ）をNastranフォーマットの構造に移行することができ、これを利用すれば、多くの市販のFEMシミュレータでもシミュレーションができるようになっている。

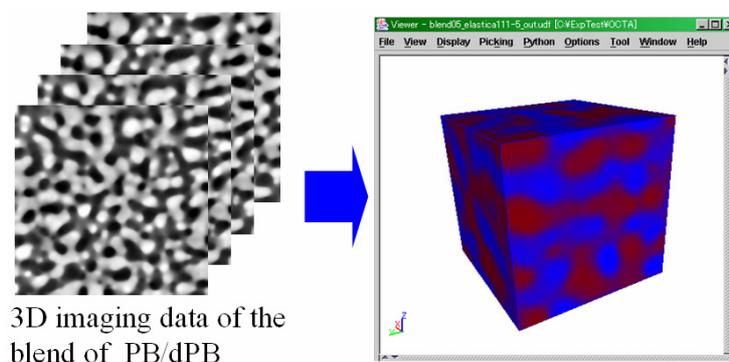


図 21 3D イメージング実験から得られた構造データを  
GOURMETに取り込んだ結果の表示

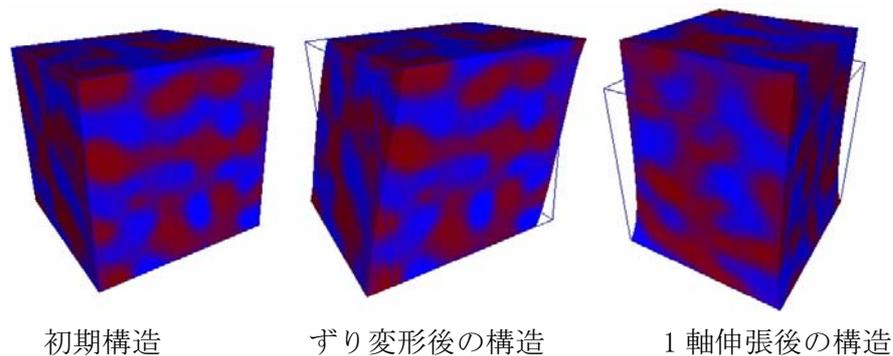


図 22 イメージングから得られた実在構造に変形のシミュレーションを行なった際の構造

図 2 2 には、実験で得られた構造に対して、ずり、一軸伸張を変えた際の変形構造を示す。もともとのゴムの弾性率を入力して計算を行い、微小な変形構造の自由エネルギーを求めることで、計算で用いた局所領域の弾性率も求めることができる。

本研究課題で開発していった GOURMET は、OCTA2003、OCTA2005、OCTA2006、OCTA2007 へ組み込まれ、OCTA の利用者拡大へと繋がった。さらに、GOURMET の機能を利用して、物理学に現れる様々な現象を仮想実験しつつ学ぶ本「物理仮想実験室」を出版した。この本には、CD が添付されており、読者は GOURMET を通して、様々なシミュレータを動かすことができる仕組みとなっている。



図 2 3 物理仮想実験室とその目次

### 物理仮想実験室

#### 目次

- 第 1 章 GOURMET を使ってみよう
- 第 2 章 プログラミングと 3 次元表示
- 第 3 章 データの構造化とアニメーション
- 第 4 章 力学
- 第 5 章 電磁気
- 第 6 章 波動
- 第 7 章 量子力学
- 第 8 章 統計力学
- 第 9 章 カオスとフラクタル
- 第 10 章 より大規模な計算のために

また、我々は、本研究課題以外で開発されている様々なエンジンを GOURMET を通じて利用し、普及するようにする活動もおこなった。具体的には、学生をターゲットとした夏の学校を 2 回、研究者をターゲットとした公開シンポジウムを 3 度開催した。

### 3.3 多階層モデリングの検証

多階層モデリングの有用性を示す研究として、我々のグループは、(a) 高分子の粘着 (b) 高分子溶液の乾燥、及び(c) 電解質ゲルの電場変形の3つのテーマについて実験的な研究を行った。

#### 3.3.1 高分子の粘着・剥離

ソフトマテリアルの界面レオロジー現象である粘着を対象に検証研究をおこなった。粘着現象は、ソフトマテリアルの工業的な利用だけでなく、再生医療など医用工学においても重要な問題である。検証研究においては、nm オーダのマイクロなスケールの研究と、mmオーダのマクロなスケールの研究を行なった。また、関連する研究として摩擦現象の研究も行なった。

##### 3.3.1.1 ミクロスケールの粘着研究

ミクロスケールの粘着研究として、膜厚 10nm 程度の高分子のグラフト膜の粘着について、粗視化分子動力学法を用いて研究を行なった。図 24 に示すとおり、2 枚のグラフト膜を用意し、その膜を圧着させたのち剥離する試験を計算機上で行なった。

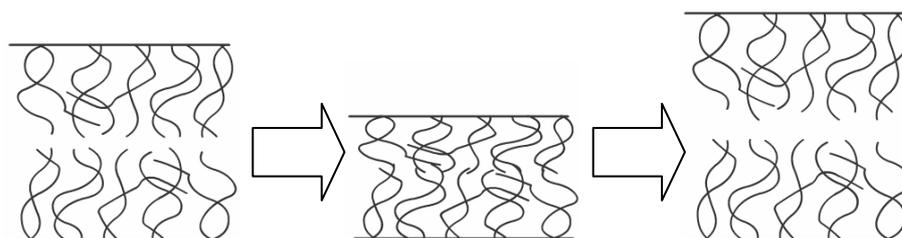


図 24 高分子グラフト膜の粘着・剥離のシミュレーション

研究結果として、下記の図に示す3つの剥離パターンと、それを説明できる剥離のストレスー距離カーブが得られた。

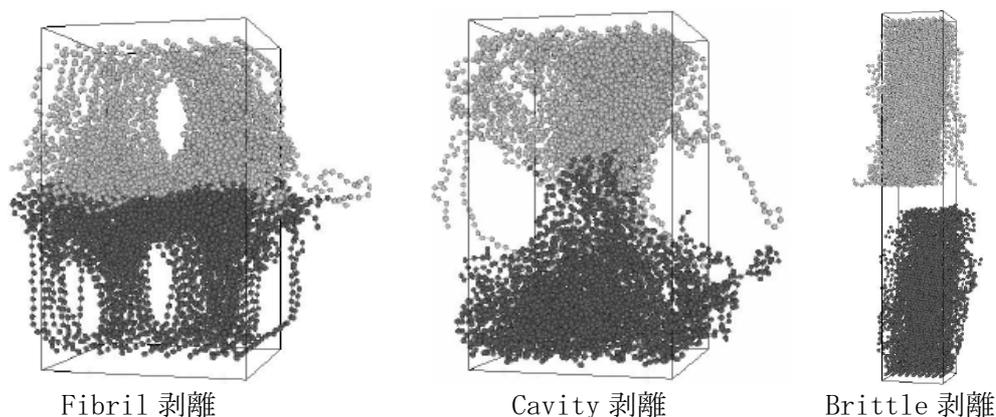


図 25 高分子グラフト膜間の剥離パターン

これらの剥離パターンは、下記に示すマクロな粘着剤の剥離パターンでも見られている構造で、マルチスケール問題として考えた場合、異なるスケールでの現象に関する相似性がみられることを見出した。

### 3.3.1.2 マクロスケールの粘着研究

マクロスケールの粘着研究として、粘着剤のプローブタック実験を行ない、それに対する理論・シミュレーションを用いた解析を行なった。プローブタック試験とは、図26に示すように半径5mm程度の円柱状の金属棒(プローブ)を粘着剤の薄膜に対して、圧着し、その後引き離しを行なう試験である。プローブを引き離す際に、粘着材の内部に図27に示すようなキャビティが発生する。キャビティは引き離しに伴い、粘着剤内部に大きな負圧が生じることによって発生する。キャビティは、最初中心付近に表れ成長し、図27に示したようなキャビティでプローブ界面が埋め尽くされた構造を経て、最終的には剥離が起こる。

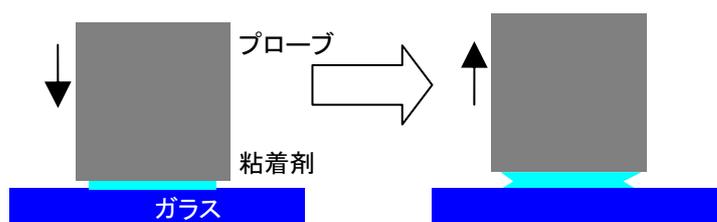


図26 粘着剤のプローブタック試験



図27 粘着剤のプローブタック実験の結果

プローブタック試験の実験と同時に、理論とシミュレーションによる解析研究も行なった。粘着剤内部の流れについて潤滑近似を用い、粘着剤のレオロジー構成方程式から、負圧の分布を計算し、これとキャビティの成長則とを組み合わせる流れを解くという計算法を考え、これに基づく解析を行なった。図28に解析結果の例を示す。ここでは、プローブの引き離し過程における応力-歪み曲線とキャビティの分布を示している。応力歪み曲線の引き離し速度依存性、粘着剤の厚み依存性などは、実験の結果とよくあっている。また、キャビティの発生と応力の関係についても実験的知見とよく一致している。

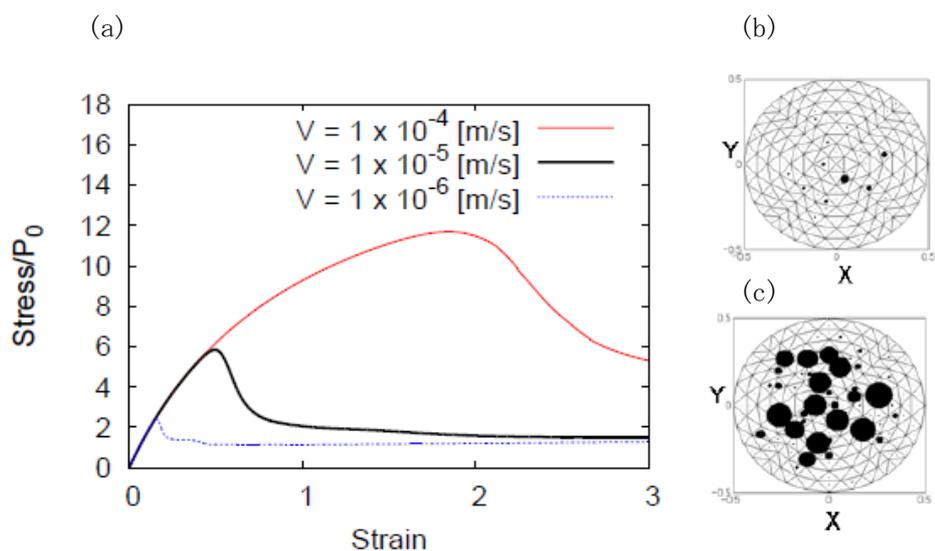


図 28 3D ブロックモデルにおける結果。(a) 3つの異なる引離し速度における応力-歪み曲線。  $V = 1 \times 10^{-5}$  m/s での (b)  $\varepsilon = 0.48$ , (c)  $\varepsilon = 1.5$  におけるキャビティ生成の様子。

### 3.3.1.3 摩擦研究

粘着の研究から、高分子と界面のすべり、すなわち接触線の運動が重要であることを認識し、これをさらに詳しく調べるために、摩擦の実験にも取り組んだ。図 29 に示すように潤滑剤を含む PDMS ゲルをガラス基板に対してを回転させ、レーザ干渉法をもちいて潤滑領域の境界（接触線）の運動を観察した。

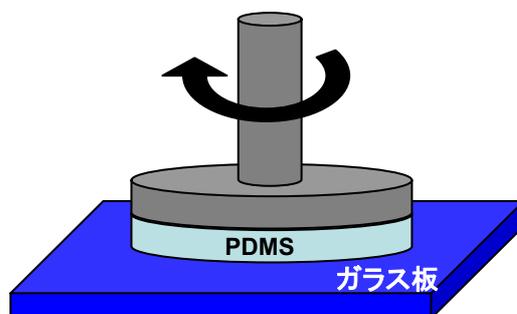


図 29 PDMS ゲルのガラス基板上の摩擦実験

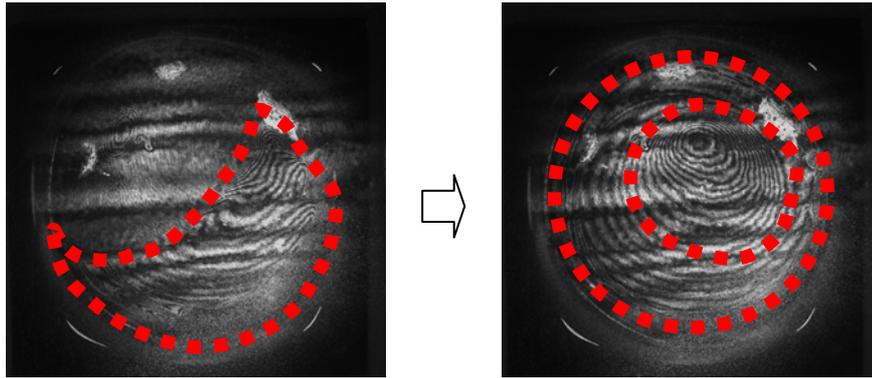


図 30 PDMS ゲルのガラス基板上の摩擦実験における潤滑層の観察  
赤の点線内で囲まれた領域が潤滑領域を表す。

これと並行して、摩擦現象に対するマイクロなスケールの研究も行なった。東工大の西らは、プローブ顕微鏡を用いてプローブと高分子膜表面の間の摩擦を研究した。プローブを高分子膜に対して、押し込んだあと水平方向に動かすと、マイクロな摩擦カーブが得られる。この結果を理解するため、分子動力学により、高分子表面の分子運動を調べた。シミュレーションで得られた摩擦力と変位の関係は実験で得られたものと定性的に一致した。図 32 に、シミュレーションによって得られたスナップショットを示す。この図より、プローブが接した高分子鎖を観察すると、鎖がプローブを動かしている方向に対して引き伸ばされ、その結果プローブに接している鎖が配向することが示された。この結果は、AFM プローブを使って高分子表面を傷をつけたナノラビング表面で液晶がよく配向するという現象と関連しており興味深い。

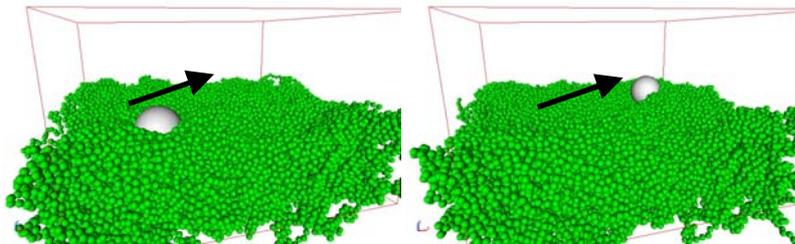


図 32 プローブ摩擦シミュレーションにおけるスナップショット

### 3.3.2 高分子溶液の乾燥

基板上におかれた高分子を含む液滴が乾燥して行く過程は、日常的に見慣れている現象であるが、内部での流動、接触線の運動などが絡む複雑な問題である。また、近年はインクジェットプリンティング技術と関連して、この現象が非常に注目されている。我々は高分子液滴が乾燥してできた後の高分子膜の形状と乾燥条件の関係を調べることを目的として研究を行なった。

蒸発による高分子膜形成のもっとも簡単なモデルとして、我々は、蒸発による高分子濃度の上昇に伴う液体の粘度上昇のみを取り入れるモデルで計算を行なった。基板上的液体に対して潤滑近似を用い、液体内部の速度場を計算し、液体の質量保存の式か

ら液体の形状変化の方程式を導いた。このモデルによる計算結果を図 33 に示す。

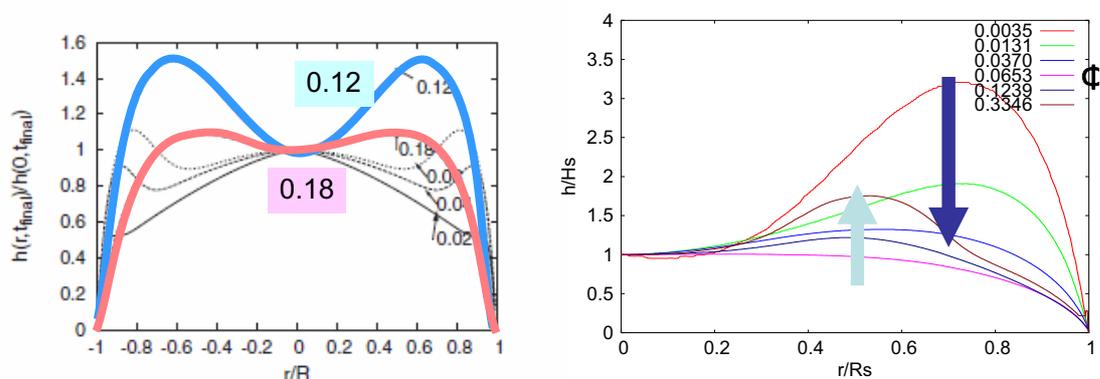


図 33 高分子溶液の乾燥に伴う最終的な高分子膜の形状。左 モデルによる計算結果(図中の数字は初期の高分子濃度を示す。) 右: 実験で得られた高分子膜の形状

図 33 に示すように、このモデルによれば、初期の高分子濃度の増加にともない、高分子膜の凹凸は減ることになる。実際、実験によると高分子濃度が数%以下の場合はこのような傾向が見られる。しかし、実験によると、高分子濃度を高くすると、逆に表面の凹凸が増すと言うことになる。

そこで、液滴の蒸発過程の観察実験を行ったところ、高分子濃度が高い場合には、図 34 に示すように、液滴表面に高分子が濃縮してスキン層が形成されていることがわかった。スキン層が形成されると表面は弾性体の膜ができるので、蒸発がすすみ内部の圧力が下がると、スキン層は弾性不安定性を起こし、内側にへこむことが考えられる。このような考え方を確かめるために、半球形をした球殻状のゲル膜を考え、その内側の体積を小さくしたときのゲルの弾性変形をゲルシミュレータで計算してみた。その結果を図 35 に示す。この計算から弾性不安定性によるバックリングが、中央部と側面において起こることが示された。さらに、この理論解析を行なった場合にも、バックリングが起こることが示されている。

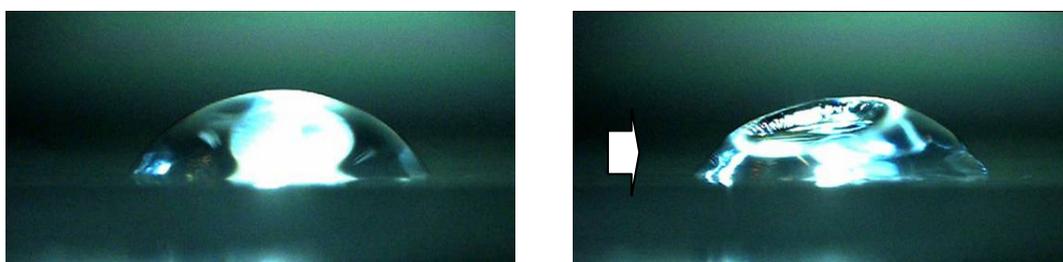


図 34 微小液滴の乾燥において見られるスキン層形成

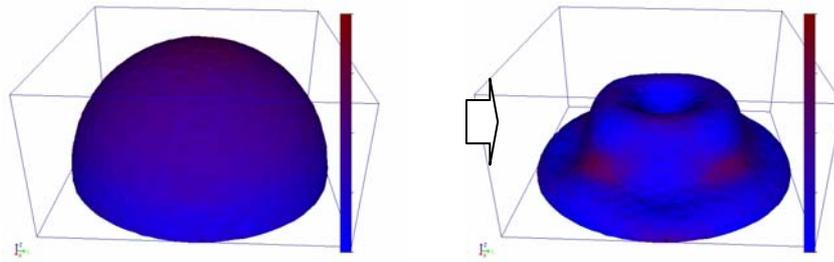


図 35 スキン層の弾性不安定性をゲルシミュレータを用いて計算した結果

### 3.3.3 電解質ゲルの電場変形

近年、ナノバイオテクノロジー分野において、人工筋肉の研究が盛んに行なわれている。その人工筋肉の1つとして、電場によるゲルの変形が注目されている。そこで、本研究課題においても、ゲルシミュレータの応用を目的として、ゲルに電場を加えたときの変形の様子を実験とシミュレーションによって調べた。ゲルとして、(a)水を溶媒とする電解質ゲル(b)イオン液体を溶媒とする中性ゲルの二つのタイプを調べた。

#### 3.3.3.1 水を溶媒とする電解質ゲルの電場応答

大阪産総研の黒田らはナフィオン膜の両側に金を接合させたアクチュエータを発明した。このゲルの動作機構を理論と実験により調べた。

図 36 にナフィオンゲルアクチュエータの両側に階段状の電場をかけたときのアクチュエータの変位の時間変化を示す。電場をかけた時にアクチュエータは急速に曲がるが、やがてゆっくり緩和してゆくのがわかる。この挙動を説明するために、高分子電解質、カウンターイオン、水の3流体モデルに基づき、定電圧印可でのゲルの曲げと緩和の理論解析を行った。この結果、イオンサイズによる緩和挙動の違い、ゲル厚みの効果などについて、実験で得られている挙動を説明することができた。また、この機構をゲルシミュレータに実装した。ゲルシミュレータによる計算結果を図 37 に示す。

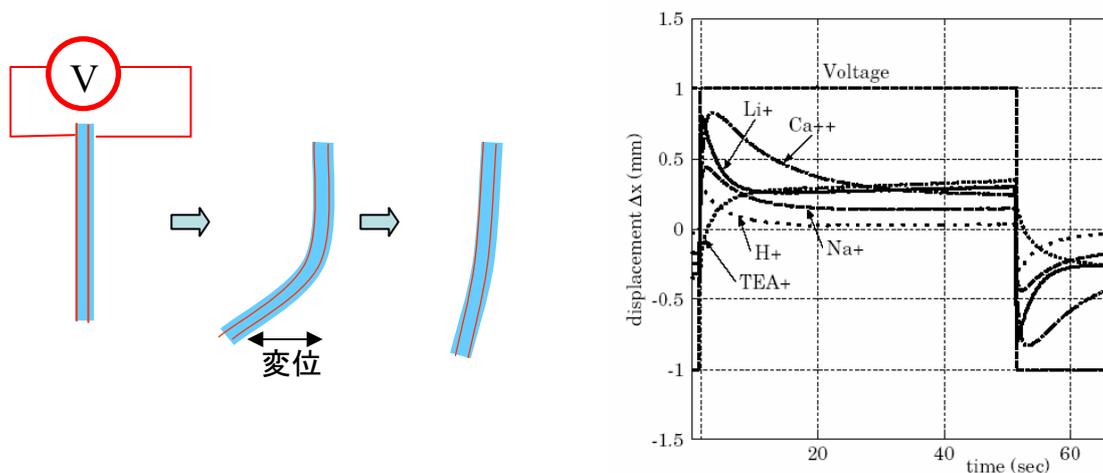


図 36 ナフィオンゲルアクチュエータに階段上の電場をかけたときの変位の時間変化

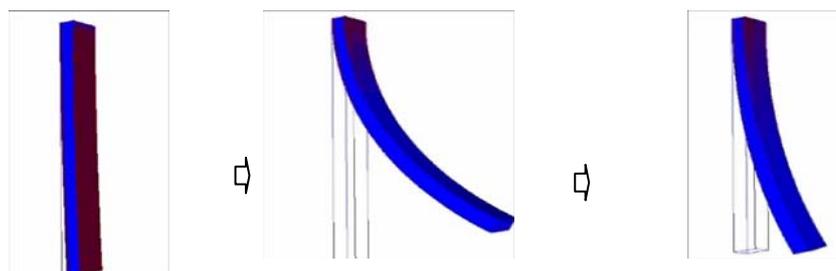


図 37 イオン性ゲルにステップ電場を加えたときのゲルの変形と緩和

### 3.3.3.2 イオン液体を溶媒とする中性ゲルの電場応答挙動

東大の福島・相田らは、イオン液体を溶媒とし、カーボンナノチューブと高分子 (PVDF) を混ぜて電極をつくり、これで高分子ゲルをはさむことによってアクチュエータができることを示した。図 38 に示すように、このゲルに電場を印加した時の変形挙動は電解質ゲルと全く異なる。電場を加えるとゲルは変形するが、緩和の効果が見られない。われわれは、この挙動を説明するモデルを構築中である。

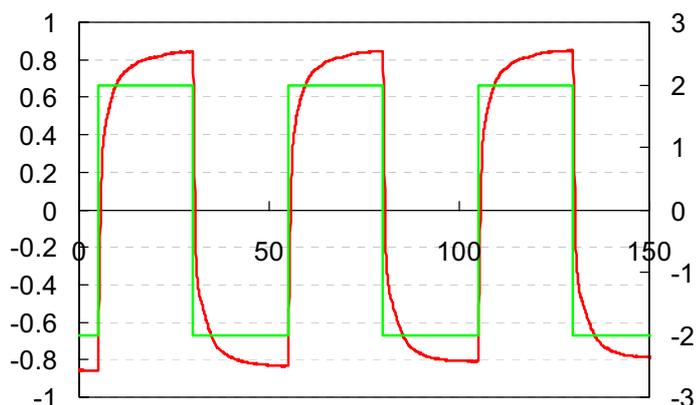


図 38 イオン液体を溶媒とする中性ゲルにステップ電場を加えたときの変位の時間変化

### 3. 3 研究成果の今後期待される効果

本研究により、3つの汎用的な新規シミュレータを作成した。微粒子分散系シミュレータは任意形状の粒子の重力場、磁場、電場などのもとでの運動が計算できるので MEMS への応用が期待できる。またこの研究を通して、カイラリティのある粒子をせん断流動場という物理的な場で分離できることを見出したが、この発見は、学問的にも応用的にも重要であると考えられる。バイオゲルシミュレータにより、ゲルの弾性変形と物質拡散の重要性が示されたが、これは今後のバイオレオロジーの研究に重要であると考えられる。ブロック高分子シミュレータは、近似的な密度汎関数表式を用いていると言う意味で、経路積分法に比べて精度は劣るが、経路積分法にくらべて桁違いに高速に計算できるという利点がある。今後は、経路積分法の計算と組み合わせることにより、より

利用価値が高まると考えられる。

シミュレーションプラットフォーム GOURMET の改良は、もっとも目に見える形の成果といえる。改良作業により、5 年前の GOURMET の持っていた種々の不具合がなくなり、スピード、操作性が格段に向上した。物理仮想実験室の出版に見られるように、パーソナルユースのためには十分な実用性能を持つものになったといえることができる。

本研究期間中を通して、我々は OCTA の中心的な思想である。自立・分散・協調型のシミュレーション連携の重要性を訴えてきた。GOURMET はその思想のプログラム上の表現である。この考え方の賛同者を増やすために、これまで、様々な活動を行ってきた。国内においては、研究者を対象とした 3 度のシンポジウムを開くと共に、学生を対象にした OCTA 夏の学校を 2 度にわたって開催した。また、企業のユーザを中心に開かれてきた OCTA ワークショップをサポートしてきた。このワークショップは毎月定例のミーティングが 3 年半におよんで開かれてきた。OCTA のユーザは海外でも増えており、今年 8 月にはタイで OCTA の講習会が開かれ、日本から講師が招かれ、タイ全国の大学、企業から 30 名の参加者があり、3 日間にわたって熱心に講習を受けた。このような OCTA の普及に、改良された GOURMET が大きく貢献していることは間違いない。GOURMET の改良以外に、本研究により新しくシミュレータが追加されたわけであるから、OCTA の普及にさらに弾みがつくことが期待される。

OCTA の利用は少しずつ広がっており、次世代スーパーコンピュータのターゲットアプリケーションに選ばれたり、文部科学省 “先端研究施設共用イノベーション創出事業” のなかで、名大の情報基盤センター、および地球シミュレータでの活用が進められている。このような要望のなかで、GOURMET の大規模系への対応が重要な課題となっている。これまで OCTA のシステムはすべてパソコンでの使用を前提にしており、スーパーコンピュータでの使用を全く考えてこなかった。しかし、次世代スーパーコンピュータのプロジェクトが始動するにつれ、OCTA のユーザからも大規模系に対応して欲しいという声が出るようになった。本研究期間中は、この要望に応えるための作業は全く行なうことができななかったが、OCTA の次の発展のためには、GOURMET の大規模系への対応は是非やっておかなくてはならないことであると認識している。

検証研究においては、多様な問題について、実験とシミュレーションを組み合わせる研究を行なった。本研究課題の立ち上げ当初は、実験の検証研究は予定していなかったが、具体的に実験を行なってみることで、シミュレータのモデルでは考えられないような様々なことが問題になることがわかった。これにより、新しいモデル化と（研究目的の）シミュレータの開発が行われた。すなわち、研究の現場では、モデルもシミュレータも刻々変化・発展を遂げている。そのような中で我々が OCTA プロジェクトで提唱した、柔軟なインタフェースの有用性を確認することができた。GOURMETwo 実験機器と連携させようという発想はこの中で生まれたものであり、このアイデアは今後さらに発展させてゆくことができるものと信じている。

#### 4 研究参加者

##### ①土井グループ（バイオレオシミュレータのの研究開発）

氏名	所属	役職	研究項目	参加時期
土井 正男	東京大学大学院工学系研究科	教授	研究の統括、シミュレーションプラットフォームの開発	平成14年11月～平成20年3月
金田 行雄	名古屋大学大学院工学研究科	教授	バイオ流体シミュレータの構築	平成14年11月～平成17年3月
杉原 正顕	名古屋大学大学院工学研究科	教授	バイオシミュレータ群の高速化	平成14年11月～平成17年3月
滝本 淳一	山形大学工学部	教授	バイオ流体シミュレータの開発、シミュレーションプラットフォームの開発	平成14年11月～平成20年3月
石井 克哉	名古屋大学情報連携基盤センター 大学院工学研究科	教授	バイオ流体シミュレータの構築	平成14年11月～平成20年3月
石原 卓	名古屋大学大学院工学研究科	講師	バイオ流体シミュレータの構築	平成14年11月～平成17年3月
吉田 恭	名古屋大学大学院工学研究科	助手	バイオ流体シミュレータの構築	平成14年11月～平成16年5月
松尾 宇泰	名古屋大学大学院工学研究科	助手	バイオシミュレータ群の高速化	平成14年11月～平成16年3月
増渕 雄一	東京農工大学大学院工学研究科	助教授	マルチスケールモデリングの実証、シミュレーションプラットフォームの開発	平成14年11月～平成16年9月
森田 裕史	(独)科学技術振興機構	CREST 研究員	マルチスケールモデリングの実証、シミュレーションプラットフォームの開発	平成15年1月～平成20年3月
山上 達也	東京大学大学院工学系研究科	助教	バイオゲルシミュレータの開発、シミュレーションプラットフォームの開発	平成15年4月～平成19年8月
西谷 英輔	(独)科学技術振興機構	CREST 研究員	バイオ流体シミュレータの構築	平成15年4月～平成17年9月
芳松 克則	名古屋大学大学院工学研究科	助手	バイオ流体シミュレータの構築	平成15年4月～平成17年3月

山本 有作	名古屋大学大学院工学研究科	助教授	バイオシミュレータ群の高速化	平成 15 年 7 月～平成 20 年 3 月
牧野 真人	(独) 科学技術振興機構	CREST 研究補助員 (D)	微粒子分散系シミュレータの開発	平成 15 年 7 月～平成 16 年 3 月
牧野 真人	(独) 科学技術振興機構	CREST 研究員	微粒子分散系シミュレータの開発	平成 16 年 4 月～平成 20 年 3 月
谷口 貴志	山形大学工学部	准教授	バイオゲルシミュレータの開発、シミュレーションプラットフォームの開発	平成 16 年 8 月～平成 20 年 3 月
金子 大作	北陸先端科学技術大学院大学	助教	バイオレオロジーの実験的検証	平成 17 年 4 月～平成 20 年 3 月
奥菌 透	東京大学大学院工学系研究科	特任講師	バイオメンブレンシミュレータの構築	平成 17 年 5 月～平成 20 年 3 月
三俣 哲	山形大学大学院理工学研究科	助教	シミュレータの検証	平成 19 年 4 月～平成 20 年 3 月
畝山 多加志	名古屋大学大学院工学研究科	CREST 研究補助員 (M)	ブロック高分子シミュレータの開発	平成 16 年 5 月～平成 16 年 9 月
山口 哲生	東京大学大学院工学系研究科	CREST 研究補助員 (D)	マルチスケールモデリングの実証	平成 16 年 10 月～平成 18 年 3 月
山口 哲生	東京大学大学院工学系研究科	助教	マルチスケールモデリングの実証	平成 19 年 11 月～平成 20 年 3 月
渡 信彦	東京大学大学院工学系研究科	CREST 研究補助員	微粒子分散系シミュレータの研究	平成 18 年 4 月～平成 18 年 11 月
内田 和子	(独) 科学技術振興機構	CREST チーム事務員	研究チームでの研究事務	平成 15 年 2 月～平成 16 年 6 月
内田 和子	(独) 科学技術振興機構	CREST 研究補助員	研究チームでの研究事務	平成 16 年 7 月～平成 16 年 8 月
瀬戸 友里絵	(独) 科学技術振興機構	CREST 研究補助員	研究チームでの研究事務	平成 16 年 5 月～平成 16 年 5 月
瀬戸 友里絵	(独) 科学技術振興機構	CREST チーム事務員	研究チームでの研究事務	平成 16 年 6 月～平成 18 年 4 月
三俣 巳佳	(独) 科学技術振興機構	CREST	研究チームでの研	平成 16 年 12 月～

	興機構	研究補助員	究事務	平成20年3月
清水 麻衣	(独)科学技術振興機構	CREST研究補助員	研究チームでの研究事務	平成18年4月～平成18年4月
清水 麻衣	(独)科学技術振興機構	CRESTチーム事務員	研究チームでの研究事務	平成18年5月～平成20年3月
梶谷 忠志	東京大学大学院工学系研究科	大学院生(D)	シミュレータの検証	平成19年4月～平成20年3月
木田 智士	東京大学大学院工学系研究科	大学院生(D)	シミュレータの検証	平成19年4月～平成19年9月
押川 幹樹	東京大学大学院工学系研究科	大学院生(M)	シミュレータの開発	平成19年4月～平成20年3月
丁 英基	東京大学大学院工学系研究科	大学院生(M)	シミュレータの検証	平成19年4月～平成20年3月
小林 潤	東京大学大学院工学系研究科	大学院生(M)	シミュレータの開発	平成19年4月～平成20年3月
高橋 克典	東京大学大学院工学系研究科	大学院生(M)	シミュレータの検証	平成19年4月～平成20年3月
森下 善広	東京大学大学院工学系研究科	大学院生(M)	シミュレータの検証	平成19年4月～平成20年3月
新井 玲央	東京大学大学院工学系研究科	学部生	シミュレータの検証	平成19年4月～平成20年3月
石橋 隆行	東京大学大学院工学系研究科	学部生	シミュレータの検証	平成19年4月～平成20年3月
米本 隆	東京大学大学院工学系研究科	学部生	シミュレータの検証	平成19年4月～平成20年3月
小川 優子	山形大学大学院理工学研究科	大学院生(M)	シミュレータの開発	平成19年4月～平成20年3月
堀越 裕樹	山形大学大学院理工学研究科	大学院生(M)	シミュレータの検証	平成19年4月～平成20年3月
垣内 友輔	山形大学大学院理工学研究科	大学院生(M)	シミュレータの検証	平成19年4月～平成20年3月
高橋 英明	山形大学大学院理工学研究科	大学院生(M)	シミュレータの開発	平成19年4月～平成20年3月
前野 慧	山形大学大学院理工学研究科	大学院生(M)	シミュレータの開発	平成19年4月～平成20年3月
宮田 考史	名古屋大学大学院工学研究科	大学院生(D)	バイオシミュレータ群の高速化	平成19年4月～平成20年3月
今倉 暁	名古屋大学大学院工学研究科	大学院生(M)	バイオシミュレータ群の高速化	平成19年4月～平成20年3月
深谷 猛	名古屋大学大学院工学研究科	大学院生(M)	バイオシミュレータ群の高速化	平成19年4月～平成20年3月
森 大介	名古屋大学大学院工学研究科	大学院生(M)	バイオシミュレータ群の高速化	平成19年4月～平成20年3月

## 5 招聘した研究者等

氏名（所属、役職）	招聘の目的	滞在先	滞在期間
Hans Jörg Limbach (the Max Planck Institute for Polymer Research in Mainz, Scientific staff)	バイオレオセミナーへの参加、講演及び多階層的バイオシミュレータの研究開発の打ち合わせ。	東京大学大学院工学系研究科・物理工学専攻・土井研究室	平成16年8月4日～8月16日
Andrew Kraynik (Sandia National Laboratories, Professor)	土井研究室主宰のセミナーへの参加、講演及び多階層的バイオレオシミュレータの研究開発に関する打ち合わせ。	東京大学大学院工学系研究科・物理工学専攻・土井研究室	平成17年9月25日～10月1日
Constantino Creton (Laboratory PPMD ESPCI Paris, Directeur de Recherche)	土井研究室主宰のセミナーへの参加、講演及び多階層的バイオレオシミュレータの研究開発に関する打ち合わせ。	東京大学大学院工学系研究科・物理工学専攻・土井研究室	平成17年10月20日～10月22日
Yuanze Xu (Department of Macromolecular science, Fudan University, Professor)	土井研究室主宰のセミナーへの参加、講演及び多階層的バイオレオシミュレータの研究開発に関する打ち合わせ。	東京大学大学院工学系研究科・物理工学専攻・土井研究室	平成18年7月10日～7月11日

## 6 成果発表等

(1) 原著論文発表 (国内誌 1件、国際誌 59件)

### 国内誌

1. 森田裕史 (CREST-JST) : “高分子鎖レベルから観る粘着現象と薄膜のガラス転移温度”, 高分子論文集, 64(8), 516-524 (2007).

### 国際誌

1. M. Doi and J. Takimoto: “Molecular modeling of entanglement”, Phil. Trans. Roy. Soc. Lond. A, 301, 641-652, (2003).
2. M. Doi: “OCTA (Open Computational Tool for Advanced Material Technology)”, Macromol. Symp. Progress in Polymer Science and Technology ed M. Xu (Wiley-VCH), 195, 101-107, (2003).

3. T. Shima, H. Kuni, Y. Okabe, M. Doi, X-F. Yuan and T. Kawakatsu: “Self-consistent field theory of viscoelastic behaviour of inhomogeneous dense polymer systems”, *Macromolecules*, 36(24), 91–99, (2003).
4. M. Doi: “Challenges in polymer physics”, *Pure Appl. Chem.*, 75(10), 1395–1402, (2003).
5. M. Makino and M. Doi: “Sedimentation of a particle with translation-rotation coupling”, *J. Phys. Soc. Jpn.*, 72(11), 2699–2701, (2003).
6. Takashi Taniguchi and Masao Doi : “Modeling of the STP method in the new LSI fabrication process I –the film transfer process –”, *Jpn J. Appl.Phys.* 43 6968–6973 (2004).
7. T. Yamaue, T. Taniguchi and M. Doi: “The simulation of the swelling and deswelling dynamics of gels”, *Molecular Physics*, 102(2), 167–172, (2004).
8. Yuichi Masubuchi, Masao Doi, Francesco Greco, Giovanni Ianniruberto and Giuseppe Marrucci : “Stochastic simulation of viscoelasticity and phaseseparation of polymer liquids”, *Computational Modeling and Simulation of Materials*, part B 19–26 (2004) .
9. H. Morita, T. Ikehara, T. Nishi and M. Doi: “Study of nanorheology and nanotribology by coarse-grained molecular dynamics simulation”, *Polymer Journal*, 36(3), 265–269, (2004).
10. T. Yamaue (Univ. of Tokyo, JST/CREST) and M. Doi (Univ. of Tokyo, JST/CREST) : “The Theory of One-Dimensional Swelling Dynamics of Polymer Gels under Mechanical Constraint” , *Physical Review E*, 69, 41402 (2004) .
11. H. Morita (JST/CREST), T. Kawakatsu (Tohoku Univ.), M. Doi (Univ. of Tokyo), D. Yamaguchi (Kyoto Univ.), M. Takenaka (Kyoto Univ.) and T. Hashimoto( Kyoto Univ.): “Phase separated structures in a binary blend of diblock copolymers under an extensional force field –Helical domain structure–”, *Journal of Physical Society of Japan.* 73(5), 1371–1374 (2004).
12. T. Yamaue (Univ. of Tokyo, JST/CREST) and M. Doi (Univ. of Tokyo, JST/CREST): “Swelling Dynamics of Constrained Thin-Plate Gels under an External Force”, *Physical Review E*, 70, 011401 (2004).
13. M. Makino (JST/CREST) and M. Doi (Univ. of Tokyo, JST/CREST): “Viscoelasticity of dilute solutions of particles of general shape”, *Journal of the Physical Society of Japan*, 73(11), 3020–3025 (2004).
14. M. Makino (JST/CREST) and M. Doi (Univ. of Tokyo, JST/CREST): “Brownian motion of a particle of General Shape in Newtonian Fluid”, *Journal of the Physical Society of Japan*, 73(10), 2739–2745 (2004).
15. Hiroshi Morita, Takayuki Ikehara, Toshio Nishi and Masao Doi : “Study of nanorheology and nanotribology by coarse grained molecular dynamics simulation”, *Polymer J.* 36 265–269 (2004) .
16. Hiroshi Morita, Toshihiro Kawakatsu, Masao Doi, Daisuke Yamaguchi, Mikihiro Takenaka and Takeji Hashimoto : “Phase separated structure in a binary blend of diblock copolymers under external force field – helical domain structure–”, *J. Phys. Soc. Jpn* 73 1371–1374 (2004).
17. T. Yamaue (Univ. of Tokyo, JST/CREST) and M. Doi (Univ. of Tokyo, JST/CREST): “The Stress Diffusion Coupling in the Swelling Dynamics of Cylindrical Gels”, *Journal of Chemical Physics*, 122, 084703 (2005).
18. T. Yamaue (Univ. of Tokyo, JST/CREST), H. Mukai( Nagoya Univ.), K. Asaka (AIST ) and M. Doi (Univ. of Tokyo, JST/CREST): “Electro Stress Diffusion Coupling Model for Polyelectrolyte Gels”, *Macromolecules*, 38(4), 1349–1356 (2005) .
19. M. Doi (JST/CREST, Univ. of Tokyo) and M. Makino (JST/CREST): “Motion of

- micro-particles of complex shape”, *Prog. Polym. Sci.*, 30, 876–884 (2005).
20. Masao Doi and Tatsuya Yamaue : “Variational bounds for the relaxation times of swelling gels”, *Phys. Rev. E* 71, 041404 (2005).
  21. Takashi Uneyama and Masao Doi : “Calculation of the micellar structure of polymer surfactant based on the density functional theory ” , *Macromolecules*, 38, 5817–5825(2005).
  22. Takashi Uneyama and Masao Doi : “Density functional theory for block copolymer melts and blends”, *Macromolecules*, 38 196–205 (2005).
  23. Masao Doi and Masato Makino : “Sedimentation of particles of general shape”, *Phys. Fluid*, 17 043601/1–7 (2005).
  24. Kin’ya Ozawa, Eisuke Nishitani and Masao Doi : “Modeling the drying process of liquid droplet to form thin film”, *Jpn J. Appl. Phys.* 44, 4229–4234 (2005).
  25. H. Morita (JST/CREST), M. Yamada (Nagoya Univ.), T. Yamaguchi and M. Doi (Univ. of Tokyo, JST/CREST): “Molecular dynamics study of the adhesion between end-grafted polymer films”, *Polymer Journal*, 37(10), 782–788 (2005).
  26. Masato Makino (JST/CREST) and Masao Doi (Univ. of Tokyo, JST/CREST): “Migration of twisted ribbon-like particles in simple shear flow”, *Physics of fluids* 17, 103605(2005).
  27. Tadashi Kajiya (Univ. of Tokyo), Eisuke Nishitani (JRI), Tatsuya Yamaue (Univ. of Tokyo, JST/CREST) and Masao Doi (Univ. of Tokyo, JST/CREST): “Piling to buckling transition in the drying process of polymer solution drop on substrate having large contact angle”, *Phys. Rev. E* 73, 011601/1–5 (2006).
  28. Tetsuo Yamaguchi, Hiroshi Morita, Masao Doi (Univ. of Tokyo, JST/CREST), “Modeling on Debonding Dynamics of Pressure Sensitive Adhesives”, *Euro Phys. J. E*, Vol.20, No.1, 7, May 30, 2006.
  29. Masato Makino(JST/CREST), Hideaki Koda(Nagoya Univ.) and Masao Doi(Univ. of Tokyo, JST/CREST): “Anomalous Orientation of Dipolar Particle in Shear and Magnetic Field”, *Journal of the Physical Society of Japan* Vol.75, No.6, June 2006, 064714 1–4.
  30. Hiroshi Morita(JST/CREST), Keiji Tanaka(Kyusyu Univ.), Tisato Kajiyama(Kyusyu Univ.), Toshio Nishi(Tokyo Institute of Technology), Masao Doi(Univ. of Tokyo, JST/CREST), “Study of the Glass Transition Temperature of Polymer Surface by Coarse-grained Molecular Dynamics Simulation”, *Macromolecules*, Vol. 39, No. 18, September 5 2006.
  31. T. Okuzono (Univ. of Tokyo, JST/CREST), K. Ozawa (Seiko Epson), and M. Doi (Univ. of Tokyo, JST/CREST): “Simple Model of Skin Formation Caused by Solvent Evaporation in Polymer Solutions” *Phys. Rev. Lett.* Vol.97, 136103 (2006).
  32. Tadashi Kajiya(Univ. of Tokyo), Eisuke Nishitani, Tatsuya Yamaue and Masao Doi(Univ. of Tokyo, JST/CREST): “Piling to buckling transition in the drying process of polymer solution drop on substrate having large contact angle”, *Phys. Rev. E* 73, 011601/1–5 (2006).
  33. K. Ozawa, T. Okuzono, and M. Doi: “Diffusion Process during Drying to Cause the Skin Formation in Polymer Solutions”, *Jpn. J. Appl. Phys.* Vol. 45, No. 11, pp. 8817–8822 (2006).
  34. T. Yamaguchi, and M. Doi (Univ. Tokyo CREST-JST): “Debonding dynamics of pressure-sensitive adhesives: 3D model”, *Eur. Phys. J. E* 21, 331 (2006).
  35. Tetsu. Mitsumata, Kazuki Sakai, and Jun-ichi Takimoto (Univ. Yamagata): “Giant Reduction in Dynamic Modulus of  $\kappa$ -Carrageenan Magnetic Gels”, *J. Phys. Chem. B*, 110, pp.20217–20223(2006).
  36. Tetsu. Mitsumata, Kazuki Sakai, and Jun-ichi Takimoto (Univ. Yamagata): “Rheological

- Characteristics and Magnetization Effects of Magnetic Gels”, *Trans. Mater. Res. Soc. Jpn.* 31 [3], pp.807–810(2006).
37. Tetsu. Mitsumata, Kazuki Sakai, and Jun-ichi Takimoto (Univ. Yamagata): “Developments for A Fluid Pump Using Magnetic Gels”, *Trans. Mater. Res. Soc. Jpn.* 31 [3], pp.803–805(2006).
  38. Takashi Taniguchi (Univ. Yamagata&JST-CREST), Tetsu Mitsumata, Matataka Sugimoto, and Kiyohito Koyama: “Anisotropy in Elastic Modulus of Hydrogel containing Magnetic Particles”, *Physica A*, 370, pp.240–244 (2006).
  39. Hiroshi Morita (CREST-JST), Haruki Miura (Nagoya Univ.), Masamichi Yamada(Nagoya Univ.), Tetsuo Yamaguchi(Univ. Tokyo CREST-JST), Masao Doi(Univ. Tokyo CREST-JST): “Molecular Dynamics Study of the Adhesion between End-Grafted Polymer Films II -Effect of Grafting Density-”, *Polymer Journal*, 39(1), 73–80 (2007). Publication 15, Jan., 2007.
  40. Nobuhiko Watari, Makino Masato (Univ. of Tokyo, JST/CREST), Norio Kikuchi, Ronald G. Larson and Masao Doi (Univ. of Tokyo, JST/CREST): “Simulation of DNA motion in a microchannel using stochastic rotation dynamics”, *Journal of Chemical Physics* 126,094902 (2007).
  41. T. Yamaguchi (Univ. of Tokyo, JST/CREST), K. Koike (Univ. of Tokyo), and M. Doi (Univ. of Tokyo, JST/CREST): “In-situ Observation of Stereoscopic Shape of Cavities in Soft Adhesives”, *Europhys. Lett.* 77, 64002 (2007).
  42. Masao Doi and Tetsuo Yamaguchi (Univ. of Tokyo, JST/CREST): “Analytical Solution for the Deformation of Pressure Sensitive Adhesives Confined between Two Rigid Plates”, *J. NonNewtonian Fluid Mech*, 145 52–56 (2007).
  43. Daisuke Kaneko (JST/CREST), Masaki Oshikawa, Tetsuo Yamaguchi, Jian Ping Gong and Masao Doi: “Friction coefficient between rubber and solid substrate -Effect of rubber thickness -”, *J.Phys. Soc. Jpn*, 76 043601–3 (2007).
  44. Tatsuya Yamaue (Univ. of Tokyo): “Finite element simulation of the drying and deformation process of polymer solution droplet on substrates using ALE method”, *Theoretical and Applied Mechanics Japan Vol.56* (2008), ISBN978-4-902416-12-1, ISSN 1348-0693.
  45. Tetsu. Mitsumata, Hiroyuki Kawada, Jun-ichi Takimoto(Univ. Yamagata, JST/CREST): “Thermosensitive solutions and gels consisting of Poly(vinyl alcohol) and sodium silicate”, *Materials Letters*, 61, pp.3878–3881(2007).
  46. T. Mitsumata and T. Okazaki (Univ. Yamagata, JST/CREST): “Magnetization-Induced Reduction in Dynamic Modulus of Polyurethane Elastomers Loaded with Ferrite”, *Jpn. J. Appl. Phys.* Volume: 46 Issue: 7A Pages: 4220–4224 Published: JUL 2007.
  47. Tetsu Mitsumata, Takafumi Yamamoto, Emiko Suzuki, and Jun-ichi Takimoto (Univ. Yamagata, JST/CREST): “Giant Magnetorheological Effect of Agar Magnetic Gels”, *Trans. Mater. Res. Soc. Jpn.*, 32(3) 811 (2007).
  48. Yuki Horikoshi, Tetsu Mitsumata, and Jun-ichi Takimoto (Univ. Yamagata, JST/CREST): “Developments for a Fluid Valve Using Magnetic Gels”, *Trans. Mater. Res. Soc. Jpn.*, 31(3) 807 (2006).
  49. Tetsu Mitsumata, Hiroyuki Kawada, Jun-ichi Takimoto (Univ. Yamagata, JST/CREST): “Thermosensitive solutions and gels consisting of poly (vinyl alcohol) and sodium silicate”, *MATERIALS LETTERS* Volume: 61 Issue: 18 Pages: 3878–3881 Published: JUL 2007.
  50. Tetsu Mitsumata, Hiroyuki Kawada, Jun-ichi Takimoto (Univ. Yamagata, JST/CREST): “Thermosensitive solutions and gels consisting of poly (vinyl alcohol) and sodium silicate”,

Materials Letters.in press Volume 61, Issue 18, July 2007, Pages 3878-3881

51. Daisuke Kaneko, Masaki Oshikawa, Tetsuo Yamaguchi, Jian Ping Gong and Masao Doi (Univ. of Tokyo): “Friction coefficient between rubber and solid substrate –Effect of rubber thickness –” J. Phys. Soc. Jpn, 76 043601-3 (2007)
52. Yoshihiro Morishita, Hiroshi Morita, Daisaku Kaneko, Masao Doi (Univ. of Tokyo): “Dynamics of a contact line in the adhesion process between spherical PDMS rubber and glass substrate”(2008)
53. Youngki Jung, Tadashi Kajiya, Tatsuya Yamaue and Masao Doi: “Film Formation Kinetics in the Drying Process of Polymer Solution Enclosed by Bank”(2008)
54. Hiroshi Morita, Taku Ozawa, Naoki Kobayashi, Hiroo Fukunaga, Masao Doi: “Dissipative particle dynamics study for the phase separated structures of polymer thin film caused by solvent evaporation”, レオロジー学会誌(2008)
55. Tohru Okuzono, Masao Doi: “Effects of elasticity on drying processes of polymer solutions”, Phys. Rev. E 77, 020401 (2008)
56. Masao Doi and Masato Makino: “Electrokinetic boundary condition compatible with the Onsager reciprocal relation in the thin double layer approximation”, J. Chem. Phys. 128 044715(1-9) (2008)
57. Daisaku Kaneko, Masaru Kobayashi, Masaki Oshikawa, Hiroshi Morita, and Masao Doi: “In-situ observation of lubrication dynamics between rubber and glass substrate”, J. Phys. Soc. Jpn. 77 014602-014606 (2008)
58. Daisaku Kaneko, Masaru Kobayashi, Masaki Oshikawa, Hiroshi Morita, and Masao Doi: “In-situ Observation of Lubrication Dynamics between Soft Elastomer and Glass Substrate”, J. Phys. Soc. Jpn, 77(1), 014602 (2008)
59. T. Okuzono and M. Doi: “Effects of elasticity on drying processes of polymer solutions,”, Phys. Rev. E. 77, 030501 (2008).

## (2) その他の著作物

1. 増渕雄一, 土井正男: “高分子系の統合シミュレーションシステム”, 化学工業, 67(8), 436-439, (2003).
2. 増渕雄一, 土井正男: “多階層的バイオレオシミュレータの研究開発”, 化学工業, 15 263-266, (2003).
3. 森田裕史: ゴム・エラストマーの界面・表面の理論・シミュレーション, 「ゴム・エラストマーの界面と機能」, CMC 出版, 2003 年 9 月 30 日発刊, pp21-38.
4. 土井正男, 滝本淳一(編集): 物理仮想実験室, 名古屋大学出版会, 2004 年 3 月出版.
5. 土井正男: “ソフトマテリアルシミュレータ OCTA”, 日本物理学会誌, 59(2), 84-91, (2004).
6. 森田裕史: “自己無撞着場法を用いた高分子表面のシミュレーション”, 分子シミュレーション研究会 Newsletter アンサンブル, 23, 23-26, (2003)
7. 森田裕史 (JST/CREST): “高分子表面における分子鎖ダイナミクス(モデリング)” 高分子, 53(7), 499 (2004)
8. 森田裕史 (JST/CREST), 古河弘光(日本電子(株)), 清水美代子(日本電子(株)): “高分子材料における 3 次元相分離構造シミュレーション” 材料の科学と工学, 41(5), 26-31, (2004).
9. 森田裕史 (JST/CREST), 土井正男(東大院工): “分子鎖レベルから見た接着現象 Adhesion Mechanism Analyzed by Chain Structures” 日本接着学会誌, 40(11), 521-523 (2004).

10. 森田裕史：“3次元顕微鏡像上に高分子の鎖構造をイメージングする”，機能材料，25(7)，5-11(2005)。
11. 山上達也，土井正男：“ソフトマテリアル統合シミュレータ OCTA”，日本機械学会誌 108 28-31(2005)。
12. 森田裕史，陣内浩司，西 敏夫，土井正男：“三次元仮想イメージング実験を用いたソフトマテリアルの構造解析”，高分子論文集，62 502-507,2005年10月25日。
13. 森田裕史(JST/CREST・東大院工)，山田雅道(名大院工)，山口哲生(JST/CREST・東大院工)，土井正男(JST/CREST・東大院工)：“Molecular Dynamics Study of the Adhesion between End-grafted Polymer Films”，月刊 高分子5月号 Vol.55 No.5，2006(384)，2006年5月1日。
14. 土井正男(JST/CREST・東大院工)：“-近未来のマイクロ CAE- マルチスケールモデリングの課題と未来”，成形加工，18,653-656(2006)。
15. 森田裕史，土井正男(JST/CREST・東大院工)：“粗視化分子動力学法を用いた薄膜のガラス転移温度と表面物性の解析”，高分子加工，77-82，(2006)。
16. 土井正男(JST/CREST・東大院工)：“統計力学”1-227，朝倉書店(2006)。
17. 森田裕史(JST/CREST・東大院工)，土井正男(JST/CREST・東大院工)：“第2章4.2節 高分子鎖レベルの接着・粘着挙動のシミュレーション”，「粘着技術の3A」，リアライズ理工センター／リアライズ AT，2006年8月31日。
18. 土井正男，山口哲生(JST/CREST・東大院工)：“高分子の粘着と剥離—マイクロ・メソの視点から—”，成形加工，19，23-25，(2007)。
19. 青柳岳司(旭化成)，土井正男(JST/CREST・東大院工)：“ソフトマテリアルのための統合シミュレーションシステム“OCTA””，応用物理学会誌 76，179-182，(2007)。
20. 森田裕史(CREST-JST)，土井正男(東大院工，CREST-JST)：“粗視化シミュレーションを用いた粘着・剥離の挙動解析”，コンバーテック 3月号，ページ 56-62,2007年3月15日。
21. 牧野真人，土井正男 (JST/CREST・東大院工)：“一般形状をした粒子のシミュレーション”，成形加工，19，429-432，(2007)。
22. 土井正男：“追悼 ピエールジル・ドジャンヌ博士”物理学会誌
23. 土井正男：“ソフトマター物理”，学術の動向 小特集 物理学の今日から明日へ 7月号，p56-57(2007)。
24. 山上達也(東大院工，CREST-JST)：“樹脂の硬化度・硬化挙動の測定と評価方法”，サイエンス&テクノロジー社，体裁：B5判上製本 本文 575頁，ISBNコード：ISBN978-4-903413-26-6，2007年7月13日(金)発行。
25. 森田裕史(CREST-JST)：“ゴム材料に対する粗視化分子動力学シミュレーションの適用事例”，日本ゴム協会誌，80，350,(2007)。
26. 森田裕史(CREST-JST)，土井正男(JST/CREST・東大院工)：“高分子薄膜のひきはがしにおける構造形成”，自己組織化ハンドブック(2007)。
27. 山口哲生(JST/CREST・東大院工)，大亦聡，Costantino Creton，土井正男(JST/CREST・東大院工)：“粘着性のある物質の粘着と摩擦”，トライボロジスト 第53巻 第3号 150ページ，2008。
28. 土井正男(JST/CREST・東大院工)：“高分子と計算機”特集 計算する高分子、計算される高分子の素描，高分子学会誌 56 975-975(2007)
29. 山口哲生(JST/CREST・東大院工)，小池啓輔，Constantino Creton，土井正男(JST/CREST・東大院工)：“粘着剤引離しに関する可視化実験”，接着学会誌，第43巻12号 468ページ(2007)
30. 森田裕史(JST/CREST)，土井正男(JST/CREST・東大院工)：“粗視化シミュレーションを用いた粘着・剥離の挙動解析”，コンバーテック 3 56-62 (2007)

31. 土井正男 (JST/CREST・東大院工): “ナノテクノロジーにおけるマルチスケールモデリングと OCTA の考え方”, ポリファイル巻頭言
32. 山本量一, 米谷慎, 奥菌透, 福田順一: 「液晶の計算機シミュレーション」日本液晶学会誌『液晶』11 (3), 259--266 (2007).
33. 丁英基: “Drying Process of PS-DPMA Solution on Substrate with Bank”, 高分子学会誌 10月号 Hot Topics, vol56, 821, 2007.
34. 山口哲生, 小池啓輔, Costantino Creton, 土井正男 (ESPCI, JST/CREST, 東大工), “粘着剤引離しに関する可視化実験”, 日本接着学会誌第 43 巻 12 号 468 ページ (2007)
35. 森田裕史 (CREST-JST): “分子動力学法を用いた高分子材料の接着・融着への適用”, 成型加工, 19(11), 705, (2007)
36. 森田裕史 (CREST-JST), 土井正男 (東大院工, CREST-JST): “メソシミュレーションと接着”, 接着ハンドブック第 4 版, P246, (2007)
37. 山口哲生, 大亦聡, コスタンティーノ・クレトン, 土井正男 (ESPCI, JST/CREST, 東大工), “粘着性のある物質の粘着と摩擦”, トライボロジスト第 53 巻第 3 号 (2008)
38. 山上達也, 他著, 高橋恭介 監修, “インクジェットプリンターの応用と材料 II” CMC 出版 発行, B5 判 約 300 頁, (基礎編<インクジェットの基礎物理> 第5章 インクジェットインク乾燥の計測と解析), 2007 年 11 月発行
39. 山上達也: “プリンタブルエレクトロニクス技術開発最前線”, 技術情報協会 発行 (材料開発・応用技術編, 第 1 章), 2008 年 1 月発行

### (3) 学会発表

① 招待講演 (国内会議 39 件、国際会議 30 件)

#### 国内

1. 土井正男 (名大院工 JST/CREST): “理論応用力学連合会 パネル講演“高分子の絡み合い””, 東京, 学術会議, 2003 年 1 月 29 日.
2. 土井正男 (名大院工 JST/CREST): “ソフトマテリアルレオロジーの理論的研究”, レオロジー学会 2003 年総会および 30 周年記念年会, 京大会館, 2003 年 5 月 16 日.
3. 森田裕史 (JST/CREST): “動的自己無撞着理論を用いた相分離ダイナミクス計算”, 高分子学会九州地区高分子若手研究会講演会, 休暇村志賀島, 福岡市東区, 2004 年 8 月 21 日.
4. 森田裕史 (JST/CREST): “OCTA システム: 高分子材料における多階層シミュレータを目指して”, 第 35 回応用物理学会スクール A, 東北学院大学泉キャンパス, 仙台市, 2004 年 9 月 3 日.
5. 土井正男 (東大院工, JST/CREST): “ソフトマテリアル統合シミュレータ OCTA の現状と展望”, 第 53 回高分子討論会: レビュー講演, 北海道大学高等教育機能能力開発総合センター, 2004 年 9 月 16 日.
6. 山上達也 (東大院工, JST/CREST), 土井正男 (東大院工, JST/CREST): “ソフトマテリアル統合シミュレータ OCTA の概要とシミュレーションプラットフォームの機能”, IUMRS-ICAM03 フォローアップミーティング「ナノ材料のマルチスケールデザイン」, 三光荘/岡山県, 2004 年 9 月 25 日.
7. 森田裕史 (JST/CREST), 古河弘光 (日本電子(株)): “高分子材料における 3 次元相分離構造シミュレーション”, 日本材料科学会「ナノ材料設計・評価のためのシミュレーション技術」, 青山学院大学, 2004 年 11 月 19 日.
8. 土井正男 (東大院工, JST/CREST): “高分子材料シミュレーション技術の展望”, NEDO シンポジウム「身近になったナノシミュレーション」, 東京ビッグサイト, 2005 年 2 月 25 日.

9. 土井正男 (東大院工, JST/CREST): “Mathematical modeling of gel dynamics”, COE プログラム研究集会「材料科学の数理的側面」, 北海道大学, 2005 年 3 月 4 日.
10. 森田裕史 ( JST/CREST): “3次元実在構造を用いた高分子材料シミュレーション”, 第2回 SORST 計算化学会, 東京大学, 2006 年 1 月 18 日
11. 土井正男 (東大院工, JST/CREST): “高分子シミュレーションとナノテクノロジー”, 高分子ナノテクノロジー研究会, 東京ビッグサイト, 2006 年 2 月 22 日.
12. 土井正男 (東大院工, JST/CREST): “高分子科学における理論とシミュレーションの役割”, 高分子科学におけるフロンティアシンポジウムー連携から融合へー, 高分子学会研究推進委員会, タワーホール船堀, 2006 年 3 月 10 日.
13. 土井正男 (JST-CREST・東大院工): “山本三三三の擬網目モデル”, レオロジー学会 2006 年総会および第 33 年会, 化学会館, 千代田区神田駿河台, 2006 年 5 月 12 日.
14. 山口哲生 (JST-CREST・東大院工)、小池啓輔 (東大院工)、土井正男 (JST-CREST・東大院工): “粘着剤界面破壊のダイナミクス”, 日本接着学会第 92 回粘着研究会、東京大学、2006 年 5 月 12 日.
15. 森田裕史 (JST-CREST・東大院工)、山田雅道 (名大院工)、山口哲生 (JST-CREST・東大院工)、土井正男 (JST-CREST・東大院工): “Molecular Dynamics Study of the Adhesion between End-grafted Films”, 第 55 回高分子学会年次大会, 名古屋国際会議場, 2006 年 5 月 24 日.
16. 森田裕史 (JST-CREST・東大院工): “シミュレーションで観察する高分子材料中の一分子鎖”, 関東高分子若手研究会 2006 春の講演会, 東京工業大学大岡山キャンパス, 2006 年 6 月 10 日.
17. 土井正男 (JST-CREST・東大院工): “マルチスケールモデリンに向けてー材料分野におけるアプローチー”, 非線形 CAE 勉強会 (NPO 非線形 CAE 協会), 中央大学駿河台記念館, 2006 年 6 月 17 日.
18. 山上達也 (JST-CREST・東大院工): “高分子電解質ゲルの電場下での変形ダイナミクスと平衡状態へのカウンターイオンのサイズ効果”, 理研 BMC フォーラム・ソフトマテリアル応用部会・合同講演会, 理研・バイオメテックコントロールセンター, 名古屋, 2006 年 6 月 26 日.
19. 森田裕史 (JST-CREST・東大院工): “表面・界面のレオロジー現象に対する分子動力学法の適用”, 高分子計算機科学研究会, 東京工業大学大岡山キャンパス, 2006 年 7 月 14 日.
20. 土井正男, 牧野真人 (JST-CREST・東大院工): “高分子電解質のダイナミクスー電解質溶液における流体力学的相互作用ー”, 物理学会シンポジウム「コロイド粒子間相互作用の制御と構造形成, 千葉大学, 2006 年 9 月 26 日.
21. 山上達也: “多相構造シミュレータ Muffin の現状と 展望ー Muffin version 5 紹介ー”, (社)新化学発展協会・先端化学技術部会 講演会, 大津, 2006 年 10 月 27 日.
22. 牧野真人 (CREST-JST): “薄い電気 2 重層を持つ粒子の電気泳動シミュレーションモデル”, (社)新化学発展協会・先端化学技術部会 講演会, 大津, 2006 年 10 月 27 日.
23. 森田裕史 (CREST-JST): “メソスケールにおける接着・粘着のシミュレーション”, (社)ゴム協会 第 55 回接着研究分科会, ゴム協会(赤坂), 2006 年 11 月 9 日.
24. 土井正男 (東大院工, CREST-JST): “粘着現象のモデリング”, 粘着研究会 25 周年記念セミナー, 東京大学山上会館, 2006 年 11 月 10 日.
25. 土井正男 (東大院工, CREST-JST): “高分子の粘着と剥離ーマイクロ・メソの視点からー” プラスチック成型加工学会 秋季大会特別講演, 岐阜大学, 2006 年 11 月 23 日.
26. 土井正男 (東大院工, CREST-JST): “基板上の高分子溶液の乾燥過程”, 高分子ナノテクノロジー研究会・高分子計算機科学研究会, 東京工業大学百年記念館, 2006 年 12 月 7 日.

27. 森田裕史 (CREST-JST): “高分子薄膜表面のナノレオロジーシミュレーション”, 日本表面科学会ソフトナノテクノロジー研究部会, 東工大すずかけ台キャンパス, 2007年3月12日.
28. 森田裕史 (CREST-JST): “高分子薄膜内のマクロ相分離ダイナミクスシミュレーションとその課題”, 京大化研ミニワークショップ, 京都大学化学研究所, 2007年4月3日.
29. 土井正男 (東大院工, CREST-JST): “ソフトマテリアルのシミュレーション”, スーパーコンピューティング技術産業応用協議会, 東京, 赤坂, 2007年3月22日.
30. 土井正男 (東大院工, CREST-JST): “計算物性物理の進展と今後の展望”, “科学研究費重点領域 計算物理学から15年 多体系・巨視系のダイナミクス」からの進展” 高山一先生退職記念シンポジウム, 東大山上会館, 2007年5月12日.
31. 森田裕史 (CREST-JST): “高分子薄膜の表面・界面におけるガラス転移温度とレオロジー現象の解析”, (社)新化学発展協会 先端化学技術部会 講演会, 東京, 2007年7月18日.
32. 土井正男 (東大院工, CREST-JST): “ソフトマターのモデリング”, 未踏科学技術協会サイエンスサマー道場 ソフトマテリアル, 長野県, 飯綱高原, 2007年8月17日.
33. 土井正男 (JST/CREST・東大院工): “ソフトマターのレオロジー”, 物理学会レビューセッション, 北海道大学, 2007年9月23日.
34. 土井正男 (東大院工, CREST-JST): “ソフトマター”, 次世代スーパーコンピューティング・シンポジウム2007 計算物質科学連絡会議, 丸の内, 東京, 2007年10月3日.
35. 森田裕史 (CREST-JST): “OCTA を用いたソフトマテリアルの仮想実験”, J-OCTA Users Conference 2007, 名古屋国際会議場, 2007年10月31日.
36. 奥菌透 (東京大学): “高分子溶液乾燥過程のダイナミクス”, MSS セミナー@米沢 #01, 山形大学, 2008年1月21日.
37. 牧野真人 (JST-CREST): “マランゴニ効果による液滴分散系の熱泳動シミュレーション～高速多重極展開境界要素法シミュレータの GOURMET による連携～”, MSS セミナー@米沢 #01, 山形大学, 2008年1月21日.
38. 牧野真人 (JST-CREST): “薄い電気二重層における界面動電現象の相反定理”, 第8回 IAP2008 プレセミナー「界面動電現象と環境」, 筑波大学 総合研究棟 A, 2008年2月16日.
39. 牧野真人: “外場下における荷電粒子のダイナミクス”, 日本物理学会 第63回年次大会, 近畿大学大学本部キャンパス, 2008年3月24日予定

## 国際

1. Masao Doi (Nagoya Univ., JST/CREST): “Challenges in Polymer Physics”, IUPAC Meeting on Mission and challenges in polymer science and technology in 21st Century Kyoto International Conference Hall, Kyoto, Japan, December 3, 2002.
2. Masao Doi (Nagoya Univ., JST/CREST): “Mechanical properties of ABA triblock copolymers studied by self-consistent field theory and molecular dynamics calculation”, High Polymer Research Group 43rd Annual Meeting, Manor House, Moretonhampstead, Exeter, UK, April 29, 2003.
3. Masao Doi (Nagoya Univ., JST/CREST): “Simulation Technology Supporting Nanotechnology”, JSME-IIP/ASME-ISPS Joint Conference on Micromechatronics for Information and Precision Equipment, Pacifico Yokohama, June 17, 2003.
4. Masao Doi (Nagoya Univ., JST/CREST): “OCTA (Open Computational Tool for Advanced Material Technology)” FOMMS (Foundation of Molecular Modeling and Simulation) 2003, Keystone, Colorado USA, July 8, 2003.
5. M. Doi (Nagoya Univ., JST/CREST), T. Aoyagi (Asahi Kasei Corp.) and T. Honda (Zeon

- Corp.) : “Mechanical Properties of ABA Tri-block Copolymers – A study using OCTA –”, An International Conference on Advances in Petrochemicals and Polymers in the New Millennium, Le Royal Meridien Hotel, Bangkok, Thailand, July 23, 2003.
6. Masao Doi(Nagoya Univ., JST/CREST): “OCTA (Open Computational Tool for Advanced Material Technology”, Korea–Japan joint symposium on Nanoengineering 2003 KAIST, Daejeon Korea, November 27, 2003.
  7. Masao Doi(Nagoya Univ., JST/CREST) and Masato Makino(Nagoya Univ., JST/CREST) : “Migration of Chiral Particles in Shear Flow”, International Workshop on Dynamics of Complex Fluids Yukawa Institute, Kyoto University, Kyoto, Japan, March 8 2004.
  8. M. Doi (Univ. of Tokyo, JST/CREST) and M. Makino (JST/CREST): “Motion of Micro Particles of Complex Shape”, 40<sup>th</sup> IUPAC International Symposium on Macromolecules World Polymer Congress MACRO 2004, Palais des Congrès de Paris, Paris, France, July 9, 2004.
  9. M. Doi (Univ. of Tokyo, JST/CREST) and M. Makino (JST/CREST): “Motion of Complex shaped particles in Newtonian fluid” 14th International Congress on Rheology 2004, Coex Convention Center, Korea, Seoul, August 26, 2004.
  10. M. Doi (Univ. of Tokyo, JST/CREST): “Dynamics of gels, 1 and 2”, Summer school of soft condensed matter in Taiwan, 台湾中央大学, Taiwan, September 10, 2004.
  11. T. Taniguchi (Yamagata Univ., JST/CREST), T. Suzuki (Yamagata Univ.), A. Sugimoto (Yamagata Univ.) and K. Koyama (Yamagata Univ.): “Meso–structural change of PP/PVDF Blend Melts under External Electric Fields”, The Ninth International Conference on Electro–rheological (ER) Fluids and Magneto–rheological (MR) Suspensions, 中国科学院物理研究所, 中华人民共和国北京, August 29, 2004.
  12. M. Doi (Univ. of Tokyo, JST/CREST) : “Data structure in OCTA system”, International Symposium on Materials Databases, 都市センターホテル, Tokyo, March 15, 2005.
  13. Masao Doi (JST/CREST, Univ. of Tokyo) : “Brownian motion of complex shaped particle – Can we separate chiral particles in shear flow?–”, 100years of Brownian Motion – a European Science Foundation– STOCHDYN Conference, Italy, July 30 2005.
  14. Masao Doi (Univ. of Tokyo, JST/CREST) : “Multi Scale Modeling –A Challenge in the Next Generation Computational Science and Engineering”, The 14th International Conference on Discrete Simulation of Fluid Dynamics in Complex Systems Kyoto University, Kyoto Japan, August 22 2005.
  15. Masao Doi (Univ. of Tokyo, JST/CREST) : “Rheology – a study of old prophet The mountain flowed before the Lord.” Postech–Asian Pacific Center of Theoretical Physics Distinguished Lecture Series, November 9 2005.
  16. Masao Doi (Univ. of Tokyo, JST/CREST) : “Challenge of Multiscale Modeling”, Hong Kong University of Science and Technology, January 9 2006.
  17. Masao Doi (Univ. of Tokyo, JST/CREST) : “Rheology At Polymer Surface”, Nagoya COE Symposium, Nagoya Univ., May 27 2006.
  18. Masao Doi (Univ. of Tokyo, JST/CREST) : “Micro–Meso modeling of polymer adhesion1”, Symposium on Progress and Future Prospects in Molecular Dynamics Simulation –In Memory of Professor Shuichi Nosé–, Keiou Univ., June 6 2006.
  19. T. Okuzono (Univ. of Tokyo, JST/CREST) : “Nonequilibrium dynamics of liquid crystal monolayers, ” , 2006 International Conference on Applied Mathematics and Interdisciplinary Research -- Nankai, Nankai University, Tianjin, P. R. China, June 13, 2006.

20. T. Okuzono (Univ. of Tokyo, JST/CREST) : “Nonequilibrium dynamics of liquid crystal films”, Workshop on Multiscale Modeling of Complex Fluids, Peking University, Beijing, June 17, 2006.
21. Masao Doi (Univ. of Tokyo, JST/CREST) : “Rheology at Solid–Polymer Interface”, The International Symposium 2006 Materials & Processes for Advanced Microlithography and Nanotechnology, Chiba Univ., June 28 2006.
22. T. Okuzono (Univ. of Tokyo, JST/CREST) : “Nonequilibrium dynamics of liquid crystal films” 21st Century COE and SEIKEN (No.46) International Workshop on Recent Advances in Soft Matter Physics, Institute of Industrial Science, the University of Tokyo, August 21, 2006.
23. Masao Doi (Univ. of Tokyo, JST/CREST) : “Drying process of polymer solution”, 21st COE workshop on recent advances in soft matter physics, Institute of Industrial Science, Komaba, Tokyo, August 22 2006.
24. Masao Doi (Univ. of Tokyo, JST/CREST) : “Rheology at Polymer Surfaces”, Plenary lecture at The 3rd World Congress on Adhesion and Related Phenomena, Beijing, China, organized by Prof. Yi, October 16 2006.
25. Masao Doi (Univ. of Tokyo, JST/CREST) : “Micro–Meso Modeling of Polymer Adhesions”, ICRIS’07 The Science and Technology of Well–Controlled Polymer Assemblies, Kyoto, June 13 2007.
26. Masao Doi (Univ. of Tokyo, JST/CREST) : “Mathematical modeling of gels – stress diffusion coupling”, Nato summer school on active gels, Cargese, Corsica, France, July 3 2007.
27. Masao Doi (Univ. of Tokyo, JST/CREST) : “Mathematical modeling of gels – volume transition”, Nato summer school on active gels, Cargese, Corsica, France, July 4 2007.
28. Masao Doi (Univ. of Tokyo, JST/CREST) : “Mathematical modeling of gels – electro–stress diffusion coupling”, Nato summer school on active gels, Cargese, Corsica, France, July 5 2007.
29. Masao Doi (Univ. of Tokyo, JST/CREST): “Electro–Responsive Gels”, Gel Sympo 2007, Tokyo, Japan, 8 August 2007.
30. Masao Doi (Univ. of Tokyo, JST/CREST): “Modeling of Polymer Adhesives”, Polymer Physics Group biennial meeting, University of Durham, U.K., 11 September 2007.

① 口頭発表 (国内 136件、国際 60件)

国内

1. 森田裕史(JST-CREST), 池原飛之(神奈川大工), 西敏夫(東工大院工), 土井正男(名大院工): “モデル化した高分子表面における分子鎖解析 – OCTAを用いて –”, レオロジー学会 2003年総会および30周年記念年会, 京大会館, 2003年5月15日.
2. 芳松克則(JST-CREST), 水島二郎(同志社大工): “平行2円板間放射状流れにおける対称性の破れ”, 日本流体力学会年会, 工学院大学(新宿校舎), 2003年7月30日.
3. 牧野真人, 土井正男(名大院工): “鏡の国のニュートン流動場における粒子”, 京都大学基礎物理学研究所研究会, 京都大学基礎物理学研究所, 2003年7月31日.
4. 森田裕史(JST-CREST), 池原飛之(神奈川大工), 西敏夫(東工大院理工), 土井正男(名大院工): “高分子表面上のAFM探針操作に関するモデルシミュレーション”, 京都大学基礎物理学研究所研究会 ソフトマターの物理学 2003 – 普遍性と多様性, 京都大学基礎物理学研究所, 2003年7月31日.

5. 牧野真人, 土井正男(名大院工):“ニュートン流体下におけるプロペラ状粒子の運動”, 第 51 回レオロジー討論会, 奈良女子大学, 2003 年 9 月 17 日.
6. 森田裕史(JST-CREST), 池原飛之(神奈川大工), 西 敏夫(東工大院工), 土井正男(名大院工):“モデル化した高分子表面における分子鎖解析(2)”, 第 51 回レオロジー討論会, 奈良女子大学, 2003 年 9 月 17 日.
7. 森田裕史(JST-CREST), 池原飛之(神奈川大工), 西 敏夫(東工大院工), 土井正男(名大院工):“高分子表面及び AFM 探針摩擦における分子鎖ダイナミクス”, 第 52 回高分子討論会, 山口大学, 2003 年 9 月 25 日.
8. 山上達也(JST-CREST), 土井正男(名大院工):“高分子ゲルの膨潤における Dynamics Stress-Diffusion Coupling”, 第 52 回高分子討論会, 山口大学, 2003 年 9 月 26 日.(依頼)
9. 山上達也(JST-CREST):“多相構造シミュレータ MUFFIN 解説”, 第 8 回高分子計算機科学研究会講座「ソフトマテリアル統合シミュレータ OCTA の徹底活用」, 東京大学物性研究所, 2003 年 11 月 21 日.
10. 山上達也(JST-CREST):“多相構造シミュレータ Muffin の概要と適用事例”, (社)新化学発展協会講演会・先端化学技術部会・講演会, (社)新化学発展協会, 2004 年 1 月 19 日.
11. 山上達也(JST-CREST):“多相構造シミュレータ Muffin の機能概要と適用研究事例”, (社)高分子学会・第9回高分子計算機科学研究会講座, 東工大 100 年記念フェライト会議室, 2004 年 3 月 4 日.
12. 芳松克則(JST-CREST), 金田行雄(名大院工):“ストークス流中の振れた細長い物体に働く抵抗”, 日本物理学会第 59 回年次大会, 九州大学箱崎地区, 2004 年 3 月 28 日.
13. 則竹康司(名大院工), 森田裕史(JST/CREST), 滝本淳一(名大院工, JST/CREST), 土井正男(東大院工, JST/CREST):“グラフト鎖表面間摩擦の粗視化分子動力学シミュレーション”, レオロジー学会第 31 年会, 東京大学, 2004 年 5 月 13 日.
14. 山上達也(東大院工, JST/CREST):“The stress diffusion coupling in gel dynamics”, 豊田理化学研究所 第 17 回「ソフトマテリアルの物性制御」研究会, 東京大学, 2004 年 5 月 15 日.
15. 畝山多加志(名大院工, JST/CREST), 土井正男(東大院工, JST/CREST):“一般化 Ohta-Kawasaki 理論を用いたブロックコポリマーメートル及びブレンドのマイクロ相分離構造シミュレーション”, 高分子学会年次大会, 神戸国際会議場(ポートアイランド)2004 年 5 月 25 日.
16. 山上達也(東大院工, JST/CREST), 土井正男(東大院工, JST/CREST):“高分子ゲル薄膜の膨潤収縮ダイナミクスの理論解析” 高分子学会年次大会, 神戸国際会議場(ポートアイランド), 2004 年 5 月 27 日.
17. 森田裕史(JST/CREST), 中嶋健(東工大院理工), 池原飛之(神奈川大), 土井正男(東大院工, JST/CREST), 西敏夫(東工大院理工):“分子動力学法による AFM フォースカーブ測定 of 温度・速度依存性解析” 高分子学会年次大会, 神戸国際会議場(ポートアイランド), 2004 年 5 月 27 日.
18. 山上達也(東大院工, JST/CREST), 土井正男(東大院工, JST/CREST):“電解質ゲルアクチュエータの電場応力拡散結合の解析”, 京都大学基礎物理学研究所研究会「ソフトマターの物理学 2004-変形と流動」, 京都大学基礎物理学研究所, 2004 年 7 月 27 日.
19. 牧野真人(JST/CREST), 土井正男(東大院工, JST/CREST):“せん断流動下における熱揺動を伴う粒子の分離”, 京都大学基礎物理学研究所研究会「ソフトマターの物理学 2004-変形と流動」, 京都大学基礎物理学研究所, 2004 年 7 月 27 日.
20. 西谷英輔(JST/CREST), 土井正男(東大院工, JST/CREST):“MPS 法による高分子液滴蒸発のシミュレーション”, 京都大学基礎物理学研究所研究会「ソフトマターの物理学 2004-変形と流動」, 京都大学基礎物理学研究所, 2004 年 7 月 27 日.

21. 土井正男(東大院工, JST/CREST), 森田裕史(JST/CREST), 山上達也(東大院工, JST/CREST): “OCTA システムの新しい展開ー3D イメージングによる実験とシミュレーションの融合”, 第 53 回高分子討論会, 北海道大学高等教育機能能力開発総合センター, 2004 年 9 月 16 日.(依頼)
22. 山上達也(東大院工, JST/CREST), 土井正男(東大院工, JST/CREST): “ゲルダイナミクスの応力拡散結合”, 第 53 回高分子討論会, 特定テーマ:スマートゲル, 北海道大学高等教育機能能力開発総合センター, 2004 年 9 月 16 日.
23. 山上達也(東大院工, JST/CREST), 土井正男(東大院工, JST/CREST): “有限要素法によるゲルの応力拡散結合モデルのシミュレーション法”, 第 53 回高分子討論会/特定テーマ: 計算機材料設計, 北海道大学, 2004 年 9 月 16 日.(依頼)
24. 森田裕史(JST/CREST), 陣内浩司(京工織大繊維), 川勝年洋(東北大院理), 西川幸宏(京工織大繊維), 畝山多加志(名大院工, JST/CREST), 土井正男(東大院工, JST/CREST), 西敏夫(東工大院理工, JST/CREST): “3次元レベルでのシミュレーションと実験の協調による新しい構造解析”, 第 53 回高分子討論会, 北海道大学, 2004 年 9 月 16 日.(依頼)
25. 則竹康司(名大院工), 森田裕史(JST/CREST), 滝本淳一(山形大工, JST/CREST), 土井正男(東大院工, JST/CREST): “分子動力学法を用いたグラフト鎖表面間摩擦の研究”, 第 53 回高分子討論会, 北海道大学高等教育機能開発総合センター、札幌市, 2004 年 9 月 16 日.(依頼)
26. 牧野真人(JST/CREST), 土井正男(東大院工, JST/CREST): “ビーズモデルを用いた粒子まわりの流動場計算”, 第 52 回レオロジー討論会, 弘前大学理工学部, 弘前市, 2004 年 9 月 23 日.
27. 森田裕史(JST/CREST), 川勝年洋(東北大院工), 土井正男(東大院工, JST/CREST), 山口大輔(京大院工), 竹中幹人(京大院工), 橋本竹治(京大院工): “伸張変形による閉空間内ラメラの構造転移の検討”, 第 52 回レオロジー討論会, 弘前大学理工学部, 弘前市, 2004 年 9 月 23 日.
28. 山上達也(東大院工, JST/CREST): “固体高分子電解質膜の電気浸透と変形ダイナミクス”, (社)新化学発展協会 OCTA ワークショップ, 熱海聚楽ホテル/静岡県, 2004 年 10 月 15 日.
29. 大場貴浩(名大院工), 芳松克則(名大院工, JST/CREST): “境界要素法と細長物体理論のハイブリッドスキームの開発ー鞭毛虫の推進に関する数値解析ー” 第 18 回数値流体力学シンポジウム, 流体力学会, 国立オリンピック記念青少年総合センター, 代々木, 2004 年 12 月 15 日.
30. 森田裕史(JST/CREST), 陣内浩司(京工織大繊維), 川勝年洋(東北大院理), 西川幸宏(京工織大繊維), 畝山多加志(名大院工, JST/CREST), 土井正男(東大院工, JST/CREST), 西敏夫(東工大院理工): “3次元イメージング実験とシミュレーションの協調による高分子鎖観察”, 高分子学会第2回高分子ナノテクノロジー研究討論会, 東京工業大学, 2004 年 12 月 10 日.
31. 谷口貴志(山形大工, JST/CREST): “国際会議報告 ERMR2004(9<sup>th</sup> Int. Conf. on ERF and MRS, Beijing)”, エレクトロレオロジー研究会第 24 回例会, 大阪大学中之島センター, 大阪府, 2004 年 12 月 17 日.
32. 山上達也(東大院工, JST/CREST), 土井正男(東大院工, JST/CREST): “電場応力拡散結合モデルによるソフトアクチュエータの変形シミュレーション”, 第5回計測自動制御学会(SICE)システムインテグレーション部門講演会(SI2004), つくば国際会議場, 2004 年 12 月 18 日.

33. 山上達也 (東大院工, JST/CREST), 土井正男(東大院工, JST/CREST):“電場下での高分子電解質ゲルの変形と緩和のダイナミクス”,第54回理論応用力学講演会(NCTAM2005),日本学術会議,2005年1月26日.
34. 山口哲生 (東大院工, JST/CREST), 森田裕史(JST/CREST), 土井正男 (東大院工, JST/CREST):“粘着剤引き離しの動力学モデル”,2004年度高分子基礎研究会,文部科学省共済組合箱根宿泊所 強羅静雲荘,2005年1月29日.
35. 土井正男 (東大院工, JST/CREST), 森田裕史(JST/CREST), 山口哲生 (東大院工, JST/CREST):“高分子の粘着現象のマイクロ・メソモデル”,日本接着学会 粘着研究会第85回例会, 東京大学農学部1号館8番教室,2005年3月11日.
36. 畝山多加志 (名大院工, JST/CREST), 土井正男 (東大院工, JST/CREST):“密度汎関数理論を用いたジブロックコポリマーベシクルのシミュレーション”,第60回物理学会年次大会, 東京理科大野田キャンパス,2005年3月26日.
37. 芳松克則 (名大院工, JST/CREST), 大場貴浩(名大院工):“鞭毛の平面運動による微生物の推進—頭部形状の効果—”,第60回物理学会年次大会,東京理科大野田キャンパス, 2005年3月24日.
38. 西谷英輔(JST/CREST), 土井正男 (東大院工, JST/CREST), 小澤欣也 (名大院工):“MPS法による粘弾性流体の基礎的なシミュレーション”,第54回高分子学会年次大会, パシフィコ横浜,2005年5月25日.
39. 森田裕史 (JST/CREST),山田雅道 (名大院工),三浦春樹 (名大院工),土井正男(東大院工, JST/CREST):“粗視化分子動力学を用いた表面ガラス転移温度の鎖構造依存性の検討”,第54回高分子学会年次大会,パシフィコ横浜,2005年5月27日.
40. 山上達也、土井正男(東大院工/CREST-JST):“イオン導電性高分子アクチュエータの変形・緩和のダイナミクスの3流体モデルに基づく解析”,第54回高分子学会年次大会, パシフィコ横浜,2005年5月27日.
41. 山口哲生(東大院工, JST/CREST), 土井正男 (東大院工, JST/CREST):“粘着剤引き離しのシミュレーション”,日本接着学会第43回年次大会、関西大学,2005年6月23日.
42. 牧野真人 (JST/CREST), 土井正男 (東大院工, JST/CREST):“単純せん断流におけるメビウスの帯”,第6回関東ソフトマター研究会,東京大学 駒場IIキャンパス 生産技術研究所 コンベンションホール,2005年8月23日.
43. 奥蘭透(東大院工, CREST-JST),多辺由佳(早大理工),横山浩(産総研):“カイラル液晶膜の非平衡ダイナミクス—流体力学的効果—”,2005年日本液晶学会討論会,立命館大学,2005年9月6日.
44. 奥蘭透(東大院工, CREST-JST),多辺由佳(早大理工),横山浩(産総研):“カイラル液晶膜の非平衡ダイナミクスにおける流体力学的効果”,日本物理学会2005年秋季大会,同志社大学,2005年9月20日.
45. 山上達也(東大院工, CREST-JST),中村光佑(東大院工),谷口貴志(山形大院工, CREST-JST),土井正男(東大院工, CREST-JST):“高分子電解質ゲルと電極界面の電気二重層構造の組成依存性”,第54回高分子討論会,特定テーマ:スマートゲル、山形大学,2005年9月20日.(依頼)
46. 森田裕史(CREST-JST),山田雅道(名大院工),三浦春樹(名大院工),山口哲生(東大院工, CREST-JST),土井正男(東大院工, CREST-JST):“グラフト膜間における接着・粘着に関する分子動力学シミュレーション”,第54回高分子討論会,山形大学,2005年9月21日.
47. 西谷英輔(JST/CREST) 土井正男(東大院工, JST/CREST):“MPS法による粘弾性流体解析”,第54回高分子討論会,山形大学,2005年9月21日.

48. 山口哲生(JST/CREST, 東大院工), 森田裕史(JST/CREST), 土井正男(JST/CREST, 東大院工): “粘着剤引離しのシミュレーション”, 日本物理学会 2005 年秋季大会、同志社大学, 2005 年 9 月 21 日.
49. 森田裕史(JST-CREST, 東大院工): “実験との対応を目指した高分子材料のメソ領域シミュレーション”, (社)近畿化学協会コンピューター化学部会第 64 回例会, 大阪, 2005 年 10 月 18 日.
50. 山上達也(東大院工/CREST-JST)、チョンヨンギ(東大院工)、梶谷忠志(東大院工)、土井正男(東大院工/CREST-JST): “疎水性基盤上での高分子液滴の乾燥過程における固化と変形”, 第 53 回レオロジー討論会, 豊橋, 2005 年 11 月 29 日.
51. 森田裕史(JST-CREST・東大院工), 山田雅道(名大院工), 三浦春樹(名大院工), 山口哲生(JST-CREST・東大院工), 土井正男(JST-CREST・東大院工): “鎖のトポロジー効果を含めたグラフト鎖膜間の接着・粘着シミュレーション”, 第 53 回レオロジー討論会, 豊橋, 2005 年 11 月 29 日.(依頼)
52. 牧野真人(JST-CREST)、小多秀明(名大院工)、土井正男(東大院工, JST/CREST): “任意形状、任意電荷分布を持った粒子の電気泳動シミュレーション” 第 11 回 高分子計算機科学討論会, 大阪府立大学学術交流会館大ホール, 2006 年 3 月 3 日.
53. 山上達也(東大院工/CREST-JST)、チョンヨンギ(東大院工)、梶谷忠志(東大院工)、土井正男(東大院工/CREST-JST): “高分子液滴の乾燥過程におけるドット形成のダイナミクス”, 第 61 回 日本物理学会年次大会, 松山大学, 愛媛大学, 2006 年 3 月 29 日.(依頼)
54. 山口哲生(JST/CREST, 東大院工), 小池 啓輔(東大院工), 土井 正男(JST/CREST, 東大院工): “粘着剤引離しにおけるキャビテーション”, 日本物理学会 2006 年年次大会, 松山大学, 2006 年 3 月 29 日.
55. 山上達也(東大院工/JST-CREST): “多相構造シミュレータ Muffin の概要”, 2006 年度新化学発展協会 OCTA ワークショップ 第 1 回会合, 東京大学・山上会館, 2006 年 4 月 19 日.
56. 山口哲生(東大院工/JST-CREST)、小池啓輔(東大院工)、土井正男(東大院工/JST-CREST): “粘着剤中のキャビテーションのモデル化”, 第 55 回高分子学会年次大会, 名古屋国際会議場, 2006 年 5 月 24 日.
57. 森田裕史(東大院工/JST-CREST)、三浦春樹、山田雅道(名大院工)、山口哲生、土井正男(東大院工/JST-CREST): “グラフト膜の運動性に関するグラフト密度依存性の検討”, 第 55 回高分子学会年次大会, 名古屋国際会議場, 2006 年 5 月 26 日.
58. 金子大作(東大院工, JST-CREST), 押川幹樹(東大院工), 山口哲生(東大院工, JST-CREST), 森田裕史(東大院工, JST-CREST), 山上達也(東大院工, JST/CREST), 山本健(小林理研), Jian Ping Gong(北大院理), 土井正男(東大院工, JST/CREST): “ソフトマターすべり摩擦の形状依存特性(II)~摩擦界面撥水による高摩擦転移”, 第 55 回高分子年次大会, 名古屋国際会議場, 2006 年 5 月 26 日.
59. 杉森 秀一、松脇 右京、陣内 浩司(京工織大)、森田 裕史(JST・東大院工)、土井 正男(東大院工)、西 敏夫(東工大院理工): “SCF シミュレーションを用いたブロック共重合体薄膜におけるマイクロ相分離構造の構造変化に関する解析”, 第 55 回高分子学会年次大会, 名古屋国際会議場, 2006 年 5 月 26 日.
60. 中村光佑(東大院工), 山上達也, 土井正男(東大院工, JST-CREST): “カーボンナノチューブアクチュエータ電極層の弾性率のイオン性液体濃度依存性”, 第 55 回高分子年次大会, 名古屋国際会議場, 2006 年 5 月 25 日.
61. 山本昌(東大院工), 山上達也, 森田裕史, 土井正男(東大院工, JST-CREST): “高分子液滴乾燥後のナノレオロジーマッピング”, 第 55 回高分子年次大会, 名古屋国際会議場, 2006 年 5 月 26 日.

62. 押川幹樹(東大院工), 金子大作, 山口哲生, 森田裕史(東大院工, JST-CREST), Jian Ping Gong(北大院理), 土井正男 (東大院工, JST-CREST):“ソフトマターすべり摩擦の形状依存特性”, 第 55 回高分子年次大会, 名古屋国際会議場, 2006 年 5 月 26 日.
63. 丁英基(東大院工), 山上達也, 土井正男 (東大院工, JST-CREST):“蒸発速度の異なる混合溶媒での高分子液滴の乾燥過程と薄膜形成のダイナミクス”, 第 55 回高分子年次大会, 名古屋国際会議場, 2006 年 5 月 26 日.
64. 山口哲生 (JST-CREST・東大院工)、小池啓輔(東大院工)、土井正男 (JST-CREST/東大院工):“粘着剤引離しの動的 3 次元観察”、日本接着学会第 44 回年次大会、愛知工業大学、2006 年 6 月 30 日.
65. 山上達也 (東大院工/JST-CREST):“スロットダイ標準モデルと乾燥標準モデルの検討”, 塗布技術研究会・塗布乾燥シミュレーションWG定例ミーティング, 井上金属工業, 滋賀県野洲市, 2006 年 7 月 21 日.
66. 山口哲生 (JST-CREST・東大院工)、小池啓輔(東大院工)、土井正男 (JST-CREST・東大院工):“粘着剤界面破壊のダイナミクス”、第 2 回トライボロジー、ダイナミクス夏の学校、電気通信大学、2006 年 9 月 8 日.
67. 谷口貴志(山形大学、JST-CREST)、杉本昌隆、小山清人:“二成分液晶系のレオロジー”, 第 55 回高分子討論会, 富山大学, 2006 年 9 月 22 日.
68. 森田裕史(東大院工/JST-CREST)、三浦春樹、山田雅道(名大院工)、山口哲生、土井正男(東大院工/JST-CREST):“グラフト膜間における接着・粘着に関する分子動力学シミュレーション(2)”, 第 55 回高分子討論会, 富山大学, 2006 年 9 月 21 日.
69. 杉森 秀一(京工繊大)、松脇 右京(東レリサーチセンター)、陣内 浩司(京工繊大)、森田裕史(JST-CREST・東大院工)、土井 正男(東大院工)、西 敏夫(東工大院理工):“三次元電子顕微鏡イメージに基づいた SCF シミュレーション-ポリマーと基板の相互作用パラメーター決定法とその適用”, 第 55 回高分子討論会, 富山大学, 2006 年 9 月 21 日.
70. 中村光佑(東大院工), 高橋克典(東大工), 山上達也, 土井正男 (東大院工, JST-CREST):“カーボンナノチューブアクチュエータ電極の電場下での応力測定”, 第 55 回高分子討論会, 富山大学, 2006 年 9 月 21 日.
71. 小林 直樹(三井化学)、森田 裕史(JST-CREST・東大院工)、小沢 拓(日本総研)、福永宏雄(富士フィルム)、“散逸粒子動力学法を用いた高分子薄膜の溶媒蒸発シミュレーション”, 第 55 回高分子討論会, 富山大学, 2006 年 9 月 21 日.
72. 谷口貴志(山形大学、JST-CREST)、内野良一、杉本昌隆、小山清人:“秩序無秩序相転移近傍のブロック共重合体の電場下での構造形成 ダイナミクス”, 第 55 回高分子討論会, 富山大学, 2006 年 9 月 22 日.
73. 土井正男, 牧野真人(JST-CREST・東大院工):“高分子電解質のダイナミクス -電解質溶液における流体力学的相互作用-”, 物理学会でのシンポジウム「コロイド粒子間相互作用の制御と構造形成」, 千葉大学・西千葉キャンパス, 2006 年 9 月 26 日.
74. 山上達也(東大院工/JST-CREST)、チョン ヨンギ(東大院工)、土井正男(東大院工/JST-CREST):“高分子液滴の蒸発時のマランゴニ流とドット形成過程の蒸発速度および接触角度依存性のシミュレーション”, 日本物理学会, 千葉大学・西千葉キャンパス, 2006 年 9 月 25 日.
75. 奥蘭透(東大工/JST CREST)、小澤欣也(セイコーエプソン)、土井正男(東大工/JST-CREST):“高分子溶液の乾燥に伴う皮膜形成のモデル”, 日本物理学会 2006 年秋季大会, 千葉大学西千葉キャンパス, 千葉市, 2006 年 9 月 25 日.
76. 牧野真人(東大院工/JST-CREST):“任意形状粒子シミュレータ MIKAN による振れた粒子のダイナミクス”, OCTA 夏の学校 2006, 東京大学, 2006 年 9 月 29 日.

77. 森田裕史(東大院工/JST-CREST)、三浦春樹、山田雅道(名大院工)、山口哲生、土井正男(東大院工/JST-CREST):“グラフト膜間の接着・粘着シミュレーション -グラフト密度の検証-”, 第 54 回レオロジー討論会,九州大学,2006 年 10 月 4 日.
78. 牧野真人、土井正男(東大院工/JST-CREST):“電場下における薄い電気 2 重層を持った粒子の 2 体間相互作用”,第 54 回レオロジー討論会,九州大学筑紫キャンパス,2006 年 10 月 4 日.
79. 山口哲生(JST-CREST/東大院工)、小池啓輔(東大院工)、土井正男(JST-CREST・東大院工):“粘着剤引離しにおける破壊面の動的立体可視化”,第 54 回レオロジー討論会,九州大学筑紫キャンパス,2006 年 10 月 4 日.
80. 中村光佑(東大院工)、高橋克典(東大工)、山上達也、土井正男(東大院工, JST-CREST):“カーボンナノチューブアクチュエータ電極の電場下におけるひずみ・発生応力の測定”, 第 54 回レオロジー討論会,九州大学筑紫キャンパス,2006 年 10 月 4 日.
81. 丁英基(東大院工)、山上達也、土井正男(東大院工, JST-CREST):“蒸発速度の異なる混合溶媒での高分子液滴の乾燥過程と薄膜形成のダイナミクス”, 第 54 回レオロジー討論会,九州大学筑紫キャンパス,2006 年 10 月 4 日.
82. 小川優子、三俣哲、滝本淳一(山形大学):“二次元高分子のレオロジーのシミュレーション”, 第 54 回レオロジー討論会,九州大学筑紫キャンパス,2006 年 10 月 4 日.
83. 滝本淳一(山形大学):“分岐高分子の非線形レオロジーのシミュレーションによる予測”, 第 54 回レオロジー討論会,九州大学筑紫キャンパス,2006 年 10 月 4 日.
84. 谷口貴志(山形大学,JST-CREST)、内野良一、杉本昌隆、小山清人:“ブロック共重合体ラメラ構造の電場下での配向ダイナミクス”, 第 54 回レオロジー討論会,九州大学筑紫キャンパス,2006 年 10 月 5 日.
85. 山口哲生(東大院工, JST-CREST)、小池啓輔(東大院工)、土井正男(東大院工, JST-CREST):“粘着剤引離しにおける破壊面の動的立体可視化、日本レオロジー学会第 54 回レオロジー討論会”,九州大学筑紫キャンパス,2006 年 10 月 5 日.
86. 滝本淳一(山形大学):“シミュレーションによる分岐高分子のレオロジー予測”, プラスチック成形加工学会第 14 回秋季大会,岐阜大学 大学院工学研究科工学,2006 年 11 月 23 日.
87. 牧野真人、土井正男(東大院工/JST-CREST):“外場下における非対称な性質を持つ粒子のシミュレーション”,第 14 回秋季大会(成形加工シンポジウム'06 岐阜),岐阜大学 大学院工学研究科工学部,2006 年 11 月 23 日.
88. 森田裕史(CREST-JST), 陣内浩司(京都工繊大院), 杉森秀一(京都工繊大院), 川勝年洋(東北大院理), 西敏夫(東工大院理工), 土井正男(東大院工, CREST-JST):“マイクロ相分離構造の界面における単一分子鎖の構造”, 高分子ナノテクノロジー研究会高分子計算機科学研究会・合同討論会,東京工業大学百年記念館, 大岡山, 2006 年 12 月 7 日.
89. 山本 昌(東大院工), 山上達也(東大院工, CREST-JST), 森田裕史(CREST-JST), 土井正男(東大院工, CREST-JST):“高分子液滴の乾燥過程における局所粘弾性測定”, 高分子ナノテクノロジー研究会高分子計算機科学研究会・合同討論会,東京工業大学百年記念館フェライト会議室, 大岡山, 2006 年 12 月 7 日.
90. 杉森秀一(京工繊大), 松脇右京(東レリサーチ), 陣内浩司(京都工繊大院), 森田裕史(CREST-JST), 土井正男(東大院工, CREST-JST), 西敏夫(東工大院理工):“三次元電子顕微鏡イメージに基づいた SCF シミュレーション”, 高分子ナノテクノロジー研究会高分子計算機科学研究会・合同討論会,東京工業大学百年記念館, 大岡山, 2006 年 12 月 7 日.

91. 牧野真人、土井正男 (JST-CREST/東大院工):“さまざまな異方性を持つ微粒子の希薄分散系シミュレータ”,2006 年度高分子ナノテクノロジー研究会・高分子計算機科学研究会合同討論会,東京工業大学百年記念館フェライト会議室,2006 年 12 月 8 日.
92. 三俣哲、酒井和樹、滝本淳一(山形大学):“寒天磁性ゲルの巨大磁気弾性効果”,第 17 回日本 MRS 学術シンポジウム,日本大学理学部駿河台キャンパス,2006 年 12 月 8 日.
93. 山口哲生 (JST-CREST/東大院工)、大亦聡(東大工)、土井正男 (JST-CREST/東大院工):“粘着性ゲルシートのすべり摩擦特性”,基研研究会「粉体物理の現状と展望」,京都大学基礎物理学研究所,2006 年 12 月 25 日.
94. 山口哲生 (JST-CREST/東大院工)、大亦聡(東大工)、土井正男 (JST-CREST/東大院工):“粘着性ゲルシートのすべり摩擦特性”,第 2 回 LSW 研究会,北海道大学,2007 年 1 月 12 日.
95. 山本昌(東大院工)、山上達也、森田裕史、土井正男 (JST-CREST/東大院工):“高分子液滴の蒸発に伴う表面クラストの形成過程”,第 18 回高分子ゲル研究討論会,東京大学山上会館大会議室,2007 年 1 月 17 日.
96. 中村光佑(東大院工)、高橋克典(東大工)、山上達也、土井正男 (JST-CREST/東大院工):“カーボンナノチューブ・イオン液体アクチュエータの電極層の歪み測定”,第 18 回高分子ゲル研究討論会,東京大学山上会館大会議室,2007 年 1 月 18 日.
97. 山上達也、土井正男 (JST-CREST/東大院工):“高分子液滴の乾燥過程の有限要素法シミュレーション”,第 56 回 理論応用力学講演会,学術会議(東京),2007 年 3 月 9 日.
98. 山口哲生、土井正男 (JST-CREST/東大院工):“粘着剤引離しにおけるキャビテーションと破壊”,第 56 回 理論応用力学講演会,学術会議(東京),2007 年 3 月 9 日.
99. 森田裕史 (CREST-JST):“高分子薄膜表面のナノオロジーシミュレーション”,日本表面科学会ソフトナノテクノロジー研究部会,東工大すずかけ台キャンパス,2007 年 3 月 12 日(依頼).
100. 谷口貴志(山形大学、JST-CREST)、内野良一、杉本昌隆、小山清人:“ブロック共重合体ラメラ構造の電場下での配向ダイナミクス”,科研費特定領域研究「非平衡ソフトマター物理学の創成:メソスコピック系の構造とダイナミクス」第 1 回公開シンポジウム,東京大学弥生講堂 一条ホール,2007 年 3 月 16 日.
101. 山口哲生、土井正男 (JST-CREST/東大院工):“粘着剤引離しにおけるキャビテーションと破壊”,日本物理学会 2007 年春季大会,鹿児島大学郡元キャンパス,2007 年 3 月 20 日.
102. 中村光佑(東大院工)、高橋克典(東大工)、山上達也、土井正男 (JST-CREST/東大院工):“カーボンナノチューブ・イオン液体アクチュエータ電極の電場下における歪みの測定”,日本物理学会 2007 年春季大会,鹿児島大学郡元キャンパス,2007 年 3 月 20 日.
103. 大亦聡(東大工)、山口哲生、土井正男 (JST-CREST/東大院工):“滑りのない滑り摩擦現象”,日本物理学会 2007 年春季大会,鹿児島大学郡元キャンパス,2007 年 3 月 20 日.
104. 奥菌透 (JST-CREST/東大院工)、押川幹樹(東大院工)、土井正男 (JST-CREST/東大院工):“高分子溶液乾燥過程のダイナミクス”,日本物理学会 2007 年春季大会,鹿児島大学郡元キャンパス,2007 年 3 月 21 日.
105. 土井正男:“ソフトマテリアルのシミュレーション”,スーパーコンピューティング技術産業応用協議会,2007 年 3 月 22 日(依頼)
106. 森田裕史 (CREST-JST):“高分子薄膜内のマクロ相分離ダイナミクスシミュレーションとその課題”,京大化研ミニワークショップ,京都大学化学研究所,2007 年 4 月 3 日.(依頼)
107. 土井正男 “科学研究費重点領域 計算物理学から 15 年 多体系・巨視系のダイナミクス」からの進展”高山一先生退職記念シンポジウム、;計算物性物理の進展と今後の展望 東大山上会館 2007 年 5 月 12 日.
108. 森田裕史 (JST-CREST)、田中敬二、土村 悠、長村利彦、土井正男 (JST-CREST/東大院工):“粗視化分子動力学法を用いた高分子薄膜の基板界面近くのガラス転移温度の解析”,

- 日本レオロジー学会第 34 年会,京大会館,2007 年 5 月 15 日.
- 109.小林 潤(東大院工)、金子 大作、土井 正男(JST-CREST/東大院工):“ゲルの摩擦における流体潤滑-境界潤滑転移”,第 56 回高分子学会年次大会,国立京都国際会館,2007 年 5 月 29 日.
  - 110.三俣哲,滝本淳一(山形大学):“磁性ゲルの磁化による巨大な弾性率減少のメカニズム”,第 56 回高分子学会年次大会,国立京都国際会館,2007 年 5 月 30 日.
  - 111.丁英基、山本昌(東大院工)、山上達也、土井 正男(JST-CREST/東大院工):“バンクでの高分子液滴の乾燥過程”,第 56 回高分子学会年次大会,国立京都国際会館,2007 年 5 月 30 日.
  - 112.森田裕史(JST-CREST)、森下善広(東大院工)、金子大作(JST-CREST)、土井正男(JST-CREST/東大院工):“ゴム粒子-基板間の粘着ダイナミクス”,第 56 回高分子学会年次大会,京都,2007 年 5 月 31 日.
  - 113.山上達也(JST-CREST/東大院工):“主題=高分子における解析法の進歩-実験,理論,シミュレーション「微小高分子液滴の乾燥過程の計測・モデル化・シミュレーション」”,第 66 回武蔵野地区高分子懇話会,2007 年 6 月 29 日.
  - 114.森田裕史(CREST-JST):“高分子薄膜の表面・界面におけるガラス転移温度とレオロジー現象の解析”,(社)新化学発展協会先端化学技術部会講演会,東京,2007 年 7 月 18 日.(依頼)
  - 115.山上達也、土井正男(JST-CREST/東大院工):“基盤との接触角度の大きい液滴の乾燥過程における流動の解析”,日本流体力学会 年会 2007,2007 年 8 月 7 日.
  - 116.森田裕史(CREST-JST):“高分子ブラシの構造と粘着・摩擦 特性に関するシミュレーション”,濃厚ブラシ研究会,京都大学化学研究所,2007 年 8 月 23 日.(依頼)
  - 117.奥蘭透、多辺由佳:“カイラル液晶膜の非平衡ダイナミクス”,2007 年日本液晶学会討論会,東京工業大学大岡山キャンパス,2007 年 9 月 14 日.
  - 118.奥蘭透(JST-CREST/東大院工)、押川幹樹(東大院工)、土井正男(JST-CREST/東大院工):“基板上の高分子溶液乾燥過程のモデリングとシミュレーション”,第 56 回高分子討論会,名古屋工業大学,2007 年 9 月 19 日.
  - 119.森田裕史(JST-CREST)、陣内 浩司、杉森 秀一、西 敏夫、土井正男:“3 次元イメージング実験で得られたドメイン 構造中の 1 分子シミュレーション”,第 56 回高分子討論会,名古屋工業大学,2007 年 9 月 19 日.
  - 120.森田 裕史(JST-CREST)、田中 敬二、長村 利彦、土井 正男:“高分子薄膜の基板界面近くのガラス転移温度と分子鎖ダイナミクスの解析”,第 56 回高分子討論会,名古屋工業大学,2007 年 9 月 19 日.
  - 121.三俣哲,滝本淳一(山形大学):“電解質多糖の低周波誘電緩和”,第 56 回高分子討論会,名古屋工業大学,2007 年 9 月 21 日.
  - 122.奥蘭透、押川幹樹、土井正男(東大院工):“高分子溶液乾燥過程のモデリングとシミュレーション”,日本物理学会第 62 回年次大会,北海道大学札幌キャンパス,2007 年 9 月 24 日.
  - 123.丁英基、山上達也、土井正男(東大院工):“バンクでの高分子液滴の乾燥ダイナミクス”,日本物理学会第 62 回年次大会,北海道大学札幌キャンパス,2007 年 9 月 24 日.
  - 124.土井正男(東大院工):“計算機シミュレーションによる材料設計の展望”,兵庫県 科学技術シンポジウム「次世代スパコンが拓く 21 世紀の科学技術」,神戸市 県公館,兵庫県,2007 年 10 月 5 日.(依頼)
  - 125.森田裕史(CREST-JST),田中敬二(九大院工),立石洋平(九大院工),長村利彦(九大院工),土井正男(東大院工,CREST-JST):“分子動力学法を用いた高分子-基板界面モデルと分子鎖ダイナミクスの解析”,第 55 回レオロジー討論会,金沢大学,2007 年 11 月 1 日.
  - 126.牧野真人、小林潤、土井正男(東大院工,CREST/JST):“高速多重極展開アルゴリズムを用いた境界要素法による液滴蒸発シミュレータの開発”,第 55 回レオロジー討論会,金沢大学(角間キャンパス),2007 年 11 月 3 日
  - 127.森下 善広(東大・土井研)“PDMS ゴムのガラス基板に対する粘着における接触線の運動”,第 7 回 関東ソフトマター研究会,東京大学柏キャンパス 総合研究棟,2007 年 11 月 10 日

- 128.梶谷 忠志(東大・土井研)“高分子液滴乾燥・成膜のダイナミクス”, 第7回 関東ソフトマター研究会,東京大学柏キャンパス 総合研究棟,2007年11月10日
- 129.土井正男,“他階層的シミュレータの研究開発”, 第3回「シミュレーション技術の革新と実用化基盤の構築」領域シンポジウム, 慶応義塾大(三田)北館ホール 2007年11月20日
- 130.山口哲生(東大工)“粘着性ゲルシートのすべり摩擦”, 日本ゴム協会第19回エラストマー討論会、京大会館、2007年12月6日
- 131.土井正男(東京大学・大学院工学研究科):“高分子溶液の乾燥と成膜のダイナミクス”,NEQ SOFT 第2回シンポジウム,名古屋大学IB 電子情報館,2008年1月7日.(依頼)
- 132.森田裕史(CREST-JST):“マイクロとマクロのスケールにおける固体基板に接触した高分子の解析”, 高分子学会 高分子表面研究会, 東京工業大学, 2008年1月17日.(依頼)
- 133.森田裕史(CREST-JST):“高分子-固体間界面における ミクロからマクロスケールの解析”, 第二回 MSS セミナー, 山形大学, 2008年2月1日.(依頼)
- 134.森田裕史(CREST-JST):“粘着・剥離時の接触線観察実験とそのモデル化”, 九州大学グローバルCOEセミナー, 九州大学, 2008年3月13日.(依頼)
- 135.山口哲生(東大工)“ゲル粒子系の変形と運動”, 日本物理学会第63回年次大会、近畿大学、2008年3月25日予定
- 136.奥蘭透、押川幹樹、土井正男、「高分子溶液乾燥過程のダイナミクス」日本物理学会第63回年次大会、2008年3月26日、近畿大学本部キャンパス(東大阪市)予定

#### 国際

1. K. Ishii, T. Nihei and S. Adachi (Nagoya Univ.): “Vortical flow simulation using combined compact difference scheme with high resolution”, Second MIT Conference on Computational Fluid and Solid Mechanics, Massachusetts Institute of Technology, Massachusetts, U. S. A., June 18, 2003.
2. T. Yamaue (JST CREST), T. Taniguchi (Yamagata Univ.), and M. Doi (Nagoya Univ.): “The simulation of the swelling and deswelling dynamics of gels, FOMMS2003, Foundation of Molecular Modeling and Simulation”, Keystone Resort, Colorado, U. S. A., July 7, 2003.
3. M. Makino and M. Doi (Nagoya Univ.): “Migration of a complex structured particle in Newtonian fluid”, The 75th Annual Meeting of the Society of Rheology, Pittsburgh, Pennsylvania Sheraton Station Square Hotel, October 12, 2003.
4. J. Takimoto and M. Doi (Nagoya Univ.): “Prediction of elongational viscosities of polymer melts by stochastic simulation”, The 75th Annual Meeting of the Society of Rheology, Pittsburgh, Pennsylvania Sheraton Station Square Hotel, October 16, 2003.
5. T. Yamaue (JST CREST), M. Doi (Nagoya Univ.): “The simulation of the swelling dynamics of gels by the stress-diffusion coupling model”, ISSP International Workshop 5<sup>th</sup> Gel Symposium (GelSympo2003), Kashiwa Campus, The University of Tokyo, November 19, 2003.
6. H. Morita (JST CREST), T. Ikehara (Kanagawa Univ.), T. Nishi (Tokyo Institute of Technology) and M. Doi (Nagoya Univ.): “Molecular dynamics simulation study of an interacted system between polymer surface and tip of atomic force microscopy”, 8th Pacific Polymer Conference, Bangkok (Thailand), November 26, 2003.
7. T. Yamaue (JST CREST), and M. Doi (Nagoya Univ.): “Swelling kinetics of constrained thin-plate gels by the linearized stress-diffusion coupling model”, International Workshop on Dynamics of Complex Fluids, Yukawa Institute for Theoretical Physics, Kyoto Univ., March 9, 2004.
8. T. Yamaue (Univ. of Tokyo, JST/CREST), H. Mukai (Nagoya Univ.) and M. Doi (Univ. of

- Tokyo, JST/CREST): “The theory and simulation of the bending dynamics of polyelectrolyte membrane by electric stimuli” The Second Conference on Artificial Muscles, Biomimetic System Engineering, 産業技術総合研究所関西センター, Ikeda, Osaka, May 20, 2004.
9. Y. Masubuchi (東農工大工, JST/CREST), M. Doi (Univ. of Tokyo, JST/CREST), F. Greco (Italy CNR), G. Ianniruberto (Naples Univ.) and G. Marrucci (Naples Univ.): “Stochastic simulation of viscoelasticity and phase separation of polymeric liquids”, The 3rd International Conference Computational Modeling and Simulation of Materials (SIMTEC), SN-4: Modeling and Simulating Materials Nanoworld, Acireale (Catania), Sicily, Italy, June 2, 2004.
  10. T. Yamaue (Univ. of Tokyo, JST/CREST) and M. Doi (Univ. of Tokyo, JST/CREST): “Application of the integrated simulator OCTA for the active devices of polymeric gels”, The 3rd International Conference Computational Modeling and Simulation of Materials (SIMTEC), SN-4: Modeling and Simulating Materials Nanoworld, Acireale(Catania), Sicily, Italy, June 3, 2004. (依頼)
  11. H. Morita (JST/CREST), K. Nakajima (Tokyo Inst. Tech.), T. Ikehara (Kanagawa Univ.), T. Nishi (Tokyo Inst. Tech.), M. Doi(Univ. of Tokyo, JST/CREST) : “Coarse-grained molecular dynamics simulation study of nanorheology and nanotribology”, 40<sup>th</sup> IUPAC International Symposium on Macromolecules World Polymer Congress MACRO 2004, Palais des Congrès de Paris, Paris, France, July 8, 2004.
  12. T. Uneyama (Nagoya Univ., JST/CREST), M. Doi (Univ. of Tokyo, JST/CREST): “Density Functional Theory for Block Copolymer Blends – Application for Micellar Systems–”, 40<sup>th</sup> IUPAC International Symposium on Macromolecules World Polymer Congress MACRO 2004, Palais des Congrès de Paris, Paris, France, July 5, 2004.
  13. H. Morita (JST/CREST), T. Ikehara (Kanagawa Univ.), T. Nishi (Tokyo Inst. Tech.) and M. Doi (Univ. of Tokyo, JST/CREST): “Molecular dynamics simulation study of the polymer chain attached with a tip of atomic force microscopy”, International Congress on Rheology 2004, コエックス コンベンションセンター, Korea, Seoul, August 26, 2004.
  14. J. Takimoto (Yamagata Univ., JST/CREST), Y. Masubuchi (東農工大工, JST/CREST) and M. Doi (Univ. of Tokyo, JST/CREST): “Prediction of rheology branched polymers by simulation” 14th International Congress on Rheology 2004, コエックス コンベンションセンター, Korea, Seoul, August 23, 2004.
  15. T. Taniguchi ( Yamagata Univ., JST/CREST), K. Kobayashi ( Yamagata Univ.), A. Sugimoto ( Yamagata Univ.) and K. Koyama ( Yamagata Univ.) : “Slippage of Polymer melts depending on wall materials in capillary flow”, 14th International Congress on Rheology 2004, コエックス コンベンションセンター, Korea, Seoul, August 24, 2004.
  16. Y. Masubuchi (東京農工大, JST/CREST), F. Greco (Italy CNR), G. Ianniruberto (Naples Univ.) and G. Marrucci (Naples Univ.): “Effect of topological change around branch points in sliplink networks”, 14th International Congress on Rheology 2004, コエックス コンベンションセンター, Korea, Seoul, August 26, 2004.
  17. T. Yamaue (Univ. of Tokyo, JST/CREST), M. Doi (Univ. of Tokyo, JST/CREST):“Simulation of the electro-active polymer gels by the integrated simulator OCTA”, 第 3 回日中材料設計シンポジウム, 東京大学山上会館, Tokyo, October 25, 2004.
  18. J. Takimoto (山形大工, JST/CREST) and M. Doi (Univ. of Tokyo, JST/CREST): “Prediction of Rheology of Entangles Polymer Liquid by Simulation”, International Workshop on physics of Soft Matter Complexes, Tokyo Metropolitan Univ., Tokyo,

November 29, 2004.

19. T. Taniguchi (山形大工, JST/CREST), M. Sugimoto (山形大工), K. Koyama (山形大工) : “Deformation of Polyelectrolyte Gel under electric field”, International Workshop on physics of Soft Matter Complexes, Tokyo Metropolitan Univ., Tokyo, December 1, 2004.
20. M. Doi (Univ. of Tokyo, JST/CREST): “Swelling and Deformation of Gels: An old problem revisited”, Seminar at Biological and Soft System group in Cavendish Laboratory, Cavendish Laboratory, Cambridge, UK, January 19, 2005.
21. Hiroshi Morita and Masao Doi (JST/CREST, Univ. of Tokyo) : “Virtual Imaging Experiments for the soft matters on the real 3D structures – addition of the interface for the imaging files to “GOURMET” –”, 2<sup>nd</sup> Biorheo International Symposium 2005 – Multiscale Modeling in Soft Matter –, Univ. of Tokyo, June 21 2005.
22. Eisuke Nishitani (JST/CREST) and Masao Doi (JST/CREST, Univ. of Tokyo) : “MPS Simulator for complex fluid”, 2<sup>nd</sup> Biorheo International Symposium 2005 – Multiscale Modeling in Soft Matter –, Univ. of Tokyo, June 21 2005.
23. Tetsuo Yamaguchi (JST/CREST, Univ. of Tokyo), Hiroshi Morita (JST/CREST), Masao Doi (JST/CREST, Univ. of Tokyo) : “A Model for Debonding Dynamics of Pressure Sensitive Adhesives”, 2<sup>nd</sup> Biorheo International Symposium 2005 – Multiscale Modeling in Soft Matter –, Univ. of Tokyo, June 21 2005.
24. Daisaku Kaneko (JST/CREST, Univ. of Tokyo), Jian Ping Gong (Hokkaido Univ.), Yoshihito Nagata (Hokkaido Univ.), Masao Doi (JST/CREST, Univ. of Tokyo) : “Kinetics of Fluid Spreading on Soft and Wet Matter”, 2<sup>nd</sup> Biorheo International Symposium 2005 – Multiscale Modeling in Soft Matter –, Univ. of Tokyo, June 21 2005.
25. Tetsuya Yamaue, Masao Doi (JST/CREST, Univ. of Tokyo) : “Short introduction of bio-gel simulator”, 2<sup>nd</sup> Biorheo International Symposium 2005 – Multiscale Modeling in Soft Matter –, Univ. of Tokyo, June 21 2005.
26. Takashi Taniguchi (JST /CREST, Yamagata Univ.), M Sugimoto (Yamagata Univ.), K Koyama (Yamagata Univ.), G.H Fredrickson (Univ. of California), Q Wang (Univ. of California) : “Equilibrium behavior of polyelectrolyte brushes and interaction between brush-coated walls”, 6th Liquid Matter Conference, Utrecht University, Utrecht, Holland, July 4 2005.
27. Tetsuo Yamaguchi (JST/CREST, Univ. of Tokyo), Hiroshi Morita (JST/CREST) and Masao Doi (JST/CREST, Univ. of Tokyo) : “A Model for Debonding Dynamics of Pressure Sensitive Adhesives”, The 8th SPSJ International Polymer Conference (IPC 2005), Fukuoka, July 27 2005.
28. Hiroshi Morita (JST/CREST), Hiroshi Jinnai (Kyoto Univ.), Toshihiro Kawakatsu (Tohoku Univ.), Yukihiro Nishikawa (Kyoto Univ.), Takashi Uneyama (Kyoto Univ.), Masao Doi (JST/CREST, Univ. of Tokyo) and Toshio Nishi (Tokyo Institute of Technology) : “Chain conformation analysis in domain structures using 3d TEM observation and 3d SCF simulation”, The 8th SPSJ International Polymer Conference (IPC 2005), Fukuoka, July 28 2005.
29. Tatsuya Yamaue (JST/CREST, Univ. of Tokyo), Masao Doi (JST/CREST, Univ. of Tokyo) : “Electro Stress Diffusion Coupling Model for Polyelectrolyte Gel Dynamics”, The 8th SPSJ International Polymer Conference (IPC 2005), Fukuoka, July 27 2005.
30. Eisuke Nishitani (JST/CREST) and Masao Doi (JST/CREST, Univ. of Tokyo) : “Basic analysis of viscoelastic fluid using MPS method”, YITP Workshop “ Soft Matter as Structured Materials” Yukawa Institute for Theoretical Physics, Kyoto Univ., August 1,

- 2005.
31. Tetsuo Yamaguchi (JST/CREST, Univ. of Tokyo), Hiroshi Morita (JST/CREST), Masao Doi (JST/CREST, Univ. of Tokyo): “Modeling on Debonding Dynamics of Pressure Sensitive Adhesives”, YITP Workshop “Soft Matter as Structured Materials” Yukawa Institute for Theoretical Physics, Kyoto Univ., August 2, 2005.
  32. Hiroshi Morita (JST/CREST), Hiroshi Jinnai (Kyoto Univ.), Yukihiro Nishikawa (Kyoto Univ.), Toshihiro KAWAKATSU (Tohoku. Univ.), Takashi UNEYAMA (Kyoto Univ.), Toshio Nishi (Tokyo Institute of Technology) and Masao Doi (JST/CREST, Univ. of Tokyo): “Self consistent field simulation on the structure obtained by 3D TEM”, YITP Workshop “Soft Matter as Structured Materials” Yukawa Institute for Theoretical Physics, Kyoto Univ., August 1, 2005.
  33. Jun-ichi Takimoto (JST/CREST, Yamagata University): “Prediction of Nonlinear Rheology of Polymers by Stochastic Simulation”, 4<sup>th</sup> Pacific Rim Conference on Rheology, Purple Mountain Hotel, Shanghai, China, August 10, 2005.
  34. Masao Doi (JST/CREST, Univ. of Tokyo): “Multi Scale Modeling –A Challenge in the Next Generation Computational Science and Engineering”, The 14th International Conference on Discrete Simulation of Fluid Dynamics in Complex Systems Kyoto University, Kyoto Japan, 21 August 2005.
  35. Hiroshi Morita (JST-CREST), Hiroshi Jinnai (Kyoto Institute of Technology), Toshihiro Kawakatsu (Tohoku University), Yukihiro Nishikawa (Kyoto Institute of Technology), Takashi Uneyama (Kyoto University), Masao Doi (The University of Tokyo, JST-CREST), Toshio Nishi (Tokyo Institute of Technology): “Chain Conformation Analysis in Domain Structures Using the Combinatorial Method of 3d TEM Observations and 3d SCF Simulations”, International Rubber Conference 2005, Yokohama, 28 October 2005.
  36. Morita, Hiroshi (JST-CREST, Univ. Tokyo), Yamada, Masamichi (Nagoya Univ.), Yamaguchi, Tetsuo (Univ. Tokyo, JST-CREST), Doi, Masao (Univ. Tokyo, JST-CREST): “Coarse-grained molecular dynamics study of a loading-unloading process between polymer grafted films”, Pacificchem 2005 Congress, Hawaii, USA, 16 December 2005.
  37. Yamaguchi, Tetsuo (Univ. Tokyo, JST-CREST), Morita, Hiroshi (JST-CREST, Univ. Tokyo) and Doi, Masao (Univ. Tokyo, JST-CREST): “Modeling on Debonding Dynamics of Pressure Sensitive Adhesives”, 2006 Adhesion Society Annual Meeting, Jacksonville, Florida, USA, 21 February 2006.
  38. Tetsu Mitsumata, Yuki Horikoshi, Kazuki Skai, Jun-ichi Takimoto (Univ. Yamagata & JST): “Motion of Magneto-Driven Polymer Gels”, 1st International Symposium on Next-Generation Actuators Leading Breakthroughs, Chiba, April 20, 2006. O
  39. Tatsuya Yamaue and Masao Doi (The Univ. of Tokyo and JST/CREST): “Ion size effects of dynamics and statics for polyelectrolyte gel actuators based on the electro stress diffusion coupling model”, 第3回 人工筋肉国際会議 A Nanobiotechnology Research -- The Perspective of Artificial Muscles --, Tokyo, May 30, 2006.
  40. Hiroshi Morita (JST/CREST & Univ. Tokyo) M. Yamada, H. Miura (Nagoya Univ.), T. Yamaguchi, and M. Doi (Univ. Tokyo): “Molecular Dynamics Study of the Adhesion between End-grafted Films”, International Symposium on Polymer Physics (PP2006), Suzhou, China, June 1, 2006.
  41. Jun-ichi Takimoto, Masataka Sugimoto, Takashi Taniguchi and Kiyohito Koyama: “Prediction of Elongational Viscosities of Polymeric Liquids By Stochastic Simulation”, 22nd Annual Meeting of the Polymer Processing Society, Yamagata, July 3, 2006. O
  42. Tatsuya Yamaue and Masao Doi (The Univ. of Tokyo and JST/CREST): “The kinetics of

- dot formation induced by Marangoni flow in the drying process of polymer solution drop with mixed solvent”, International Workshop on Mesoscale and Multiscale Description of Complex Fluids, Monash University, Prato, Italy, 6, July 2006.
43. Tatsuya Yamaue, Jung Youngki and Masao Doi (The Univ. of Tokyo and JST/CREST): “Dot formation kinetics induced by Marangoni flow in the drying process of polymer solution drop”, YITP Workshop Structures and Dynamics in Soft Matter, Kyoto, Japan, 16, July, 2006.
  44. T. Yamaguchi, K. Koike, and M. Doi (Univ. of Tokyo, JST/CREST): “Cavitation and Fracture in Soft Adhesives”, International Workshop on Recent Advances in Soft Matter Physics, Tokyo, 22, August, 2006.
  45. N. Watari, M. Makino, M. Doi (Univ. of Tokyo, JST/CREST): “Study of DNA dynamics in an arbitrary geometry using Stochastic Rotation Dynamics simulation”, International Workshop on Recent Advances in Soft Matter Physics, Univ Tokyo Komaba, 22, August, 2006.
  46. T. Yamaguchi, K. Koike, and M. Doi (Univ. of Tokyo, CREST-JST): “In-situ observation of cavitation-induced fracture in soft adhesives”, 4th Pisa Workshop, Pisa, Italy, 17, September, 2006.
  47. Tatsuya Yamaue and Masao Doi (The Univ. of Tokyo and JST/CREST): “The modeling and simulation of dot formation kinetics in the drying process of polymer solution drop”, 3<sup>rd</sup>. International Conference of MMM (Multi Scale Material Modeling), Freiburg, Germany, September 18–22, 2006.
  48. T. Yamaguchi and M. Doi (The Univ. of Tokyo and JST/CREST): “Deformation and cavitation in soft adhesives”, The Adhesion society 30<sup>th</sup> Annual meeting, Florida, USA, Feb, 20, 2007.
  49. Hiroshi Morita (CREST-JST), Yoshihiro Morishita (Univ. Tokyo), Daisaku Kaneko (CREST-JST), Masao Doi (Univ. Tokyo & CREST-JST): “Dynamics of the adhesion between rubber particle and solid substrate – using molecular dynamics simulations and experiments –”, Institute of Chemical Research International symposium, 京大芝蘭会館, 2007-6-12.
  50. Masao Doi Micro-Meso Modeling of Polymer Adhesions, ICRIS’07 The Science and Technology of Well-Controlled Polymer Assemblies, Kyoto 2007-06-13 (招待)
  51. Masao Doi Mathematical modeling of gels – stress diffusion coupling, Nato summer school on active gels, Cargese, Corsica, France, 2007-07-03 (招待)
  52. Masao Doi, Mathematical modeling of gels – volume transition, Nato summer school on active gels, Cargese, Corsica, France, 2007-07-04 (招待)
  53. Masao Doi, Mathematical modeling of gels – electro-stress diffusion coupling, Nato summer school on active gels, Cargese, Corsica, France 2007-07-05 (招待)
  54. Masao Doi (Univ. of Tokyo, JST/CREST): “Electro-Responsive Gels”, Gel Sympo 2007, Tokyo, Japan, 8 August 2007. (招待)
  55. H. Morita (JST/CREST), H. Miura, M. Yamada, T. Yamaguchi, M. Doi: “Coarse Grained Molecular Dynamics Simulation of the Adhesion between End-grafted Polymer Films”, International Conference on Science of Friction, Irigo, Aichi, 11, September, 2007.
  56. D. Kaneko (JST/CREST), M. Kobayashi, H. Morita, M. Doi: “Lubricated Rubber Friction – In situ Observation of Friction Interface–”, International Conference on Science of Friction, Irigo, Aichi, 11, September, 2007.
  57. Masao Doi (Univ. of Tokyo, JST/CREST): “Modeling of Polymer Adhesives”, Polymer Physics Group biennial meeting, University of Durham, U.K., 11 September 2007. (招待)

58. H Morita (CREST-JST), H Miura (Nagoya Univ.), G Yamada (Nagoya Univ.), T Yamaguchi (Univ. Tokyo & JST), M Doi (Univ. Tokyo & JST): "Molecular Dynamics Study of the Adhesion between End-grafted Polymer Films", International Conference on Science of Friction, Aichi(Irago), 2007- 9-19.
59. H Morita (CREST-JST), M Doi (Univ. Tokyo & JST): "Integrated Simulation System for Polymeric Materials "OCTA" and its Application to Polymer Nanotechnology", 第7回中日高分子ナノテクノロジー科学技術交流セミナー, 上海、2007-11-27.
60. H Morita (CREST-JST), M Doi (Univ. Tokyo & JST): "Molecular Dynamics Simulation Study of a Chain Dynamics in the Adhesion Process between Polymeric Materials", The 10th Pacific Polymer Conference (PPC-10), Kobe, 2007-12-6.

② ポスター発表 (国内 64件、国際 30件)

国内

1. 牧野真人, 土井正男(名大院工): "複雑形状をした粒子のシミュレーション手法", 第51回レオロジー討論会, 奈良女子大学, 2003年9月18日.
2. 牧野真人 (JST/CREST): "一般形状粒子希薄分散系シミュレータ MIKAN で遊ぶ", 第5回関東ソフトマター研究会, お茶の水女子大学, 2004年8月20日.
3. 山口哲生 (JST/CREST, 東大院工), 森田裕史 (JST/CREST), 土井正男 (JST/CREST, 東大院工): "粘着剤引離しのシミュレーション", 第6回関東ソフトマター研究会, 東京大学 駒場IIキャンパス 生産技術研究所 コンベンションホール, 2005年8月23日.
4. 山上達也, 土井正男 (東大院工/JST-CREST): "イオン性ゲルと電極界面の境界層モデリング - 刺激応答特性と材料設計の関係 -", JST-CREST 成果報告会, 東京大学, 2005年12月7日.
5. 山本昌 (東大院工), 山上達也, 森田裕史, 土井正男 (東大院工/JST-CREST): "高分子液滴乾燥後の粘弾性測定", レオロジー学会 2006年総会および第33年会, 化学会館, 千代田区神田駿河台, 2006年5月11日.
6. 中村光佑 (東大院工), 山上達也, 土井正男 (東大院工/JST-CREST): "カーボンナノチューブアクチュエータ電極層の弾性率測定; イオン性液体濃度依存性", レオロジー学会 2006年総会および第33年会, 化学会館, 千代田区神田駿河台, 2006年5月11日.
7. 山上達也, 土井正男 (東大院工/JST-CREST): "高分子ゲルの乾燥過程のシミュレーション: 変形過程と残留応力", レオロジー学会 2006年総会および第33年会, 化学会館, 千代田区神田駿河台, 2006年5月11日.
8. 山上達也, 土井正男 (東大院工/JST-CREST): "高分子ゲルの乾燥過程の2流体モデルに基づくシミュレーション", 第55回高分子学会年次大会, 名古屋国際会議場, 2006年5月25日.
9. 三俣哲, 大鹿智貴, 鶴見篤士, 滝本淳一 (山形大学): "PVA ゲルの弾性率に及ぼす塩添加効果II", 第55回高分子学会年次大会, 名古屋国際会議場, 2006年5月26日.
10. 三俣哲, 山本隆史, 酒井和樹, 滝本淳一 (山形大学): "磁性ゲルの巨大磁気弾性効果に及ぼす母相の影響", 第55回高分子学会年次大会, 名古屋国際会議場, 2006年5月26日.
11. 長谷川千佳子, 河田寛之, 三俣哲, 滝本淳一 (山形大学): "PVA とケイ酸ナトリウムからなる物理ゲルの膨潤度", 第55回高分子学会年次大会, 名古屋国際会議場, 2006年5月26日.
12. 河田寛之, 三俣哲, 滝本淳一 (山形大学): "PVA とケイ酸ナトリウムの混合溶液とゲルの可視光透過率", 第55回高分子学会年次大会, 名古屋国際会議場, 2006年5月26日.

13. 奥藪透(東大院工、JST-CREST)、多辺由佳(早大理工、JST ERATO/SORST):“カイラルスメクティックフィルムの非平衡ダイナミクス”, 2006 年日本液晶学会討論会,秋田大学手形キャンパス,秋田市,2006 年 9 月 14 日.
14. 牧野真人、土井正男(東大院工/JST-CREST):“非一様荷電コロイドのシミュレーション手法”,第 59 回コロイドおよび界面化学討論会,北海道大学・高等教育機能開発総合センター,2006 年 9 月 15 日.
15. 渡信彦、牧野真人、土井正男(東大院工、JST-CREST):“Simualtion of DNA in a confined geometry using SRD method”, 第 59 回コロイドおよび界面化学討論会,北海道大学, 9 月 15 日.
16. 山本昌(東大院工), 山上達也, 森田裕史, 土井正男 (東大院工, JST-CREST):“高分子液滴乾燥過程における表面レオロジー”, 第 55 回高分子討論会,富山大学,2006 年 9 月 20 日.
17. 吉田升、三俣哲、滝本淳一(山形大学):“ストロンチウムフェライトを含ませたカラギーナンゲルの磁気弾性効果”, 第 55 回高分子討論会,富山大学,2006 年 9 月 21 日.
18. 酒井和樹、三俣哲、滝本淳一(山形大学):“磁場配向させた磁性ゲルの磁気弾性効果”, 第 55 回高分子討論会,富山大学,2006 年 9 月 21 日.
19. 三俣哲、水野真、斎藤友一、滝本淳一(山形大学):“磁性体を含ませた N-イソプロピルアクリルアミドゲルの体積相転移に及ぼす磁場効果”, 第 55 回高分子討論会,富山大学,2006 年 9 月 21 日.
20. 牧野真人、土井正男(東大院工/JST-CREST):“境界要素法による液滴蒸発のシミュレーション”,OCTA 夏の学校 2006,東京大学工学部 2 号館,2006 年 9 月 29 日.
21. 渡信彦、牧野真人、土井正男(東大院工/JST-CREST):“SRD 法による複雑境界下における DNA 運動のシミュレーション”, OCTA 夏の学校,東京大学, 2006 年 9 月 29 日.
22. 牧野真人(東大院工/JST-CREST)、田中陽、増渕雄一(東農工大):“シミュレーションによるせん断流下におけるカイラル粒子の磁気配向と分離”,第 54 回レオロジー討論会,九州大学筑紫キャンパス,2006 年 10 月 4 日.
23. 鈴木恵美子、三俣哲、滝本淳一(山形大学):“寒天磁性ゲルの弾性率に及ぼす磁化効果”, 第 54 回レオロジー討論会,九州大学筑紫キャンパス,2006 年 10 月 4 日.
24. 山口哲生、土井正男、(JST-CREST/東大院工):“粘着剤引離しにおけるキャビテーションと破壊”,COMSOL カンファレンス 2006 東京,秋葉原,2006 年 12 月 1 日.
25. 堀越裕樹、三俣哲、滝本淳一(山形大学):“磁性ゲルを用いたバルブの開発”, 第 17 回日本 MRS 学術シンポジウム,日本大学理学部駿河台キャンパス, 2006 年 12 月 8 日.
26. 金子大作(CREST-JST), 小林潤(東大工), 押川幹樹(東大院工), Jian Ping Gong(北海道大学), 土井正男(東大院工/JST-CREST):“潤滑剤を含むソフトマターのすべり摩擦 II- バルク物性が潤滑界面に及ぼす効果の考察 -”,第18回高分子ゲル研究討論会,東京大学 山上会館,2007 年 1 月 17 日.
27. 山上達也(東大院工/JST-CREST), 中村光祐(東大院工), 土井正男(東大院工/JST-CREST):“バイオゲルシミュレータによるソフトアクチュエータの変形シミュレーション- イオン液体・カーボンナノチューブアクチュエータの動作原理の測定 -”,第2回「シミュレーション技術の革新と実用化基盤の構築」領域シンポジウム,JA ビル 8 階国際会議室,2007 年 1 月 22 日.
28. 金子大作(CREST-JST), 小林潤(東大工), 押川幹樹(東大院工), Jian Ping Gong(北海道大学), 土井正男(東大院工/JST-CREST):“ソフトマターの潤滑摩擦 ゴム厚みの効果”, 第2回「シミュレーション技術の革新と実用化基盤の構築」領域CREST・さきがけシンポジウムシンポジウム,JAビル 8 階国際会議室,2007 年 1 月 22 日.

29. 牧野真人、土井正男(東大院工/JST-CREST):“剛体粒子、高分子の分散系シミュレーション”,第2回「シミュレーション技術の革新と実用化基盤の構築」領域シンポジウム,JAビル8階国際会議室,2007年1月22日.
30. 山口哲生(JST-CREST/東大院工)、大亦聡(東大工)、土井正男(JST-CREST/東大院工):“粘着・剥離のダイナミクス”第2回「シミュレーション技術の革新と実用化基盤の構築」領域CREST・さきがけシンポジウムシンポジウム,JAビル8階国際会議室,2007年1月22日.
31. 奥菌透、土井正男(東大院工/JST-CREST):“高分子溶液乾燥過程のモデリングとシミュレーション”JST「シミュレーション技術の革新と実用化基盤の構築」第2回シンポジウム,JAビル,東京,2007年1月23日.
32. 山上達也、土井正男(JST-CREST/東大院工):“接触角度の大きい高分子液滴の乾燥過程の有限要素法シミュレーション”,科研費特定領域研究「非平衡ソフトマター物理学の創成:メソスコピック系の構造とダイナミクス」第1回公開シンポジウム,東京大学弥生講堂 一条ホール,2007年3月16日.
33. 牧野真人、土井正男(東大院工/JST-CREST):“薄い電気2重層を持つ球状粒子の電気化学現象”,科研費特定領域研究「非平衡ソフトマター物理学の創成:メソスコピック系の構造とダイナミクス」第1回公開シンポジウム,東京大学弥生講堂 一条ホール,2007年3月16日.
34. 金子大作(CREST-JST)、小林潤(東大工)、押川幹樹(東大院工)、土井正男(東大院工/JST-CREST):“潤滑剤を含むソフトマターのすべり摩擦(III)ー潤滑界面の直接観察による摩擦機構の解明ー”,日本物理学会2007年春季大会,鹿児島大学郡元キャンパス,2007年3月20日.
35. 高橋克典(東大工)、中村光佑(東大院工)、山上達也、土井正男(東大院工/JST-CREST):“カーボンナノチューブアクチュエータ内の電位分布非対称形成過程の計測”,日本物理学会2007年春季大会,鹿児島大学郡元キャンパス,2007年3月20日.
36. 森下善広(東大院工)、森田裕史、金子大作、土井正男(東大院工/JST-CREST):“PDMS ゴムのガラス基板に対する粘着における接触線の運動”,第56回高分子学会年次大会,国立京都国際会館,2007年5月29日.
37. 高橋克典、中村光佑(東大院工)、山上達也、土井正男(東大院工/JST-CREST):“イオン液体・カーボンナノチューブアクチュエータの電極歪みのイオン種依存性”,第56回高分子学会年次大会,国立京都国際会館,2007年5月29日.
38. 三俣哲、岡崎貴彦、滝本淳一(山形大学):“磁性微粒子を含ませたポリウレタンエラストマーの巨大磁気弾性効果”,第56回高分子学会年次大会,国立京都国際会館,2007年5月30日.
39. 栗林哲朗、吉田升、三俣哲、滝本淳一(山形大学):“カラギーナン磁性ゲルの巨大磁気弾性効果に及ぼす磁性体種の効果”,第56回高分子学会年次大会,国立京都国際会館,2007年5月30日.
40. 垣内友輔、三俣哲、滝本淳一(山形大学):“磁性ゲルの磁化による巨大な弾性率減少のメカニズム”,第56回高分子学会年次大会,国立京都国際会館,2007年5月30日.
41. 梶谷忠志、丁英基(東大院工)、山上達也、土井正男(東大院工/JST-CREST):“高分子液滴の乾燥・成膜ダイナミクスの研究”,第2回領域研究会,米沢市・伝国の杜,2007年6月22日.
42. 丁英基(東大院工)、山上達也、土井正男(東大院工/JST-CREST):“バンクでの高分子液滴の乾燥ダイナミクス”,第1回ソフトマター物理若手勉強会,宮島ホテルまこと,2007年8月28日.

43. 梶谷忠志、丁英基(東大院工)、山上達也、土井正男(東大院工/JST-CREST):“高分子液滴の乾燥・成膜ダイナミクスの研究”,第1回ソフトマター物理若手勉強会,宮島ホテルまこと,2007年8月28日.
44. 梶井智代,三俣哲,滝本淳一(山形大学):“ケイ酸ナトリウムを用いて合成したPVAゲルフィルムの中の動的粘弾性”,第56回高分子討論会,名古屋工業大学,2007年9月20日.
45. 松村顕子,三俣哲,滝本淳一(山形大学):“PVAとケイ酸カリウムの混合水溶液の可視光透過率”,第56回高分子討論会,名古屋工業大学,2007年9月21日.
46. 梶谷忠志、丁英基(東大院工)、山上達也、土井正男(東大院工/JST-CREST):“微小高分子液滴の乾燥,薄膜生成におけるダイナミクスの研究”,日本物理学会第62回年次大会,北海道大学札幌キャンパス,2007年9月23日.
47. 押川幹樹(東大院工)、奥蘭透、土井正男(東大院工/JST-CREST):“lubrication modelによる,乾燥現象の二次元におけるシミュレーション”,日本物理学会第62回年次大会,北海道大学札幌キャンパス,2007年9月23日.
48. 森下善広(東大院工)、森田裕史、金子大作、土井正男(東大院工/JST-CREST):“PDMSゴムのガラス基板に対する粘着における接触線の運動”,日本物理学会第62回年次大会,北海道大学札幌キャンパス,2007年9月23日.
49. 高橋克典(東大院工)、山上達也、土井正男(東大院工/JST-CREST):“イオン導電性高分子ゲルの変形入力に対する電流・電場応答と応力緩和過程の解析”,日本物理学会第62回年次大会,北海道大学札幌キャンパス,2007年9月23日.
50. 丁英基(東大院工)、山上達也、土井正男(東大院工/JST-CREST):“バンクでの高分子液滴の乾燥ダイナミクス”,日本物理学会第62回年次大会,北海道大学札幌キャンパス,2007年9月23日.
51. 牧野 真人(東大・土井研)“液滴分散系の高速度多重極展開-境界要素法シミュレータを実装した感想”,第7回 関東ソフトマター研究会,東京大学柏キャンパス 総合研究棟,2007年11月10日
52. 丁 英基(東大・土井研)“バンクでの高分子液滴の乾燥プロセス”,第7回 関東ソフトマター研究会,東京大学柏キャンパス 総合研究棟,2007年11月10日
53. 押川 幹樹 (東大・土井研)“二次元 lubrication-model による乾燥ダイナミクスのシミュレーション”,第7回 関東ソフトマター研究会,東京大学柏キャンパス 総合研究棟,2007年11月10日
54. 小林 潤(東大・土井研)“高速多重極展開境界要素法による液滴の蒸発シミュレーション”,第7回 関東ソフトマター研究会,東京大学柏キャンパス 総合研究棟,2007年11月10日
55. 高橋 克典(東大・土井研)“イオン導電性高分子ゲルの変形入力に対する電流・電場応答の解析”,第7回 関東ソフトマター研究会,東京大学柏キャンパス 総合研究棟,2007年11月10日(ポスター)
56. 奥蘭透:“高分子溶液乾燥過程のダイナミクス”第3回「シミュレーション技術の革新と実用化基盤の構築」領域シンポジウム,慶応義塾大(三田)北館ホール 2007年11月21日
57. 山口哲生:“粘着剤の界面剥離における非線形粘弾性効果”第3回「シミュレーション技術の革新と実用化基盤の構築」領域シンポジウム,慶応義塾大(三田)北館ホール 2007年11月21日
58. 森田裕史:“ソフトマターレオロジー現象のシミュレーションと実験による解析”第3回「シミュレーション技術の革新と実用化基盤の構築」領域シンポジウム,慶応義塾大(三田)北館ホール 2007年11月21日
59. 牧野真人:“粒子分散系シミュレータと液滴蒸発シミュレータ”第3回「シミュレーション技術の革新と実用化基盤の構築」領域シンポジウム,慶応義塾大(三田)北館ホール 2007年11月21日

60. 土井正男:“シミュレーションプラットフォームの開発—自立・分散・協調的なシミュレータの連携をめざして—”第3回「シミュレーション技術の革新と実用化基盤の構築」領域シンポジウム, 慶応義塾大(三田)北館ホール 2007年11月21日
61. 山口哲生、大亦聡、土井正男(東大院工):“粘性ゲルシートのすべり摩擦”, NEQ SOFT 第2回シンポジウム, 名古屋大学 IB 電子情報館, 2008年1月7日.
62. 牧野真人(JST/CREST、東大院工)、土井正男(東大院工):“マランゴニ効果による液滴分散系の熱泳動”, NEQ SOFT 第2回シンポジウム, 名古屋大学 IB 電子情報館, 2008年1月7日.
63. 奥蘭透、押川幹樹、土井正男(東大院工):“高分子溶液乾燥過程のダイナミクス”, NEQ SOFT 第2回シンポジウム, 名古屋大学 IB 電子情報館, 2008年1月8日.
64. 小林潤(東大院工):“高速多重極展開境界要素法による液滴の蒸発シミュレーション”, NEQ SOFT 第2回シンポジウム, 名古屋大学 IB 電子情報館, 2008年1月8日.

## 国際

1. Masato Makino (JST/CREST), Hideaki Koda (Nagoya Univ.) and Masao Doi (JST/CREST, Univ. of Tokyo): “Motion of arbitrary shaped particles under external field”, 2<sup>nd</sup> Biorheo International Symposium 2005 – Multiscale Modeling in Soft Matter –, Univ. of Tokyo, June 21 2005.
2. Tatsuya Yamaue (JST/CREST, Univ. of Tokyo), Kousuke Nakamura (Univ. of Tokyo) and Masao Doi (JST/CREST, Univ. of Tokyo): “Calculation of the structure of the electric double layer on polyelectrolyte gel-electrode interfaces”, YITP Workshop “Soft Matter as Structured Materials” Yukawa Institute for Theoretical Physics, Kyoto Univ., August 1, 2005.
3. Toru Okuzono (JST/CREST, Univ. of Tokyo), Yuka Tabe (Waseda Univ.) and Hiroshi Yokoyama (AIST): “Nonequilibrium dynamics of liquid crystal films with chiral order”, YITP Workshop “Soft Matter as Structured Materials” Yukawa Institute for Theoretical Physics, Kyoto Univ., August 2, 2005.
4. Tatsuya Yamaue (The Univ. of Tokyo, CREST-JST), Tadashi Kajiyama (The Univ. of Tokyo), Eisuke Nishitani (CREST-JST) and Masao Doi (The Univ. of Tokyo, CREST-JST): “The receding and deformation kinetics of drying process of polymer solution drop on hydrophobic substrate”, Kyoto workshop on “Development of Nonequilibrium Physics in Material and Biological Sciences”, Yukawa Institute for Theoretical Physics (YITP), Kyoto University, 6 October 2005.
5. Tatsuya Yamaue (The Univ. of Tokyo, CREST-JST), Tadashi Kajiyama (The Univ. of Tokyo), Eisuke Nishitani (JRI) and Masao Doi (The Univ. of Tokyo, CREST-JST): “The deformation kinetics of polymer solution drop in drying process on hydrophobic substrate”, GelSympo2005 : Polymer Gels: Fundamentals and Bio-science, University Conference Hall, Hokkaido University, Sapporo, Japan, October 17, 2005.
6. D. Kaneko (JST/CREST), Jian Ping Gong (Hokkaido Univ.), Y. Nagata (Hokkaido Univ.), M. Zrínyi (Budapest Univ. of Technology and Economics), M. Doi (JST/CREST, The Univ. of Tokyo): “Fluid Spreading on Viscoelastic Substrates”, GelSympo2005 : Polymer Gels: Fundamentals and Bio-science, University Conference Hall, Hokkaido University, Sapporo, Japan, October 16, 2005.
7. Hiroshi Morita (JST & Univ. Tokyo) M. Yamada, H. Miura (Nagoya Univ.), T. Yamaguchi, and M. Doi (Univ. Tokyo): “Coarse Grained Molecular Dynamics Study of the Adhesion between End-grafted Polymer Films”, International Symposium on Molecular Simulations,

- Kanazawa, 24 March 2006.
8. Tetsuo Yamaguchi (The Univ. of Tokyo and JST/CREST) Keisuke Koike (The Univ. of Tokyo) Masao Doi (The Univ. of Tokyo and JST/CREST):“In-situ stereoscopic observation of dynamic fracture in soft adhesives”, 9<sup>th</sup> Tamura symposium, The Univ. of Tokyo, Koshiba Hall, May 23, 2006.
  9. T. Yamaguchi, K. Koike, M. Do (Univ. of Tokyo, CREST-JST): “Visualization of Cavitation-induced Dynamic Fracture in Soft Adhesives”, YITP Workshop Structures and Dynamics in Soft Matter, Kyoto, 14, July, 2006.
  10. Kousuke Nakamura (Univ. Tokyo), Tatsuya Yamaue, Masao Doi (JST/CREST, Univ. Tokyo): “Elasticity of the electrode of CNT actuator and its effect on the deformation”, YITP Workshop Structures and Dynamics in Soft Matter, Kyoto, Japan, 14, July, 2006.
  11. T. Okuzono and M. Doi (Univ. of Tokyo, JST-CREST):“A simple model of skin formation in solvent evaporation processes”, YITP Workshop Structures and Dynamics in Soft Matter, Yukawa Institute for Theoretical Physics, Kyoto, Japan, July 15, 2006.
  12. N. Watari, M. Makino, M. Doi (Univ. of Tokyo, JST-CREST):“Simulation of DNA motion with hydrodynamic interactions in a microfluidic channel”, YITP Workshop Structures and Dynamics in Soft Matter, Kyoto, 15, July, 2006.
  13. Hiroshi Morita (JST, Univ. Tokyo), Hiroshi Jinnai, Hidekazu Sugimori (Kyoto Inst. Tech.), Toshihiro Kawakatsu (Tohoku Univ.), Toshio Nishi (Tokyo Inst. Tech.), Masao Doi (Univ. Tokyo):“Single chain distributions at the interface in micro phase separated structures obtained by self consistent field calculations”, YITP Workshop Structures and Dynamics in Soft Matter, Kyoto, Japan, 16, July, 2006.
  14. Masato Makino and Masao Doi (JST, Univ. Tokyo): “Electrophoresis simulation of charged particles with thin double layer”, YITP Workshop Structures and Dynamics in Soft Matter, Kyoto, Japan, 16, July, 2006.
  15. Hidekazu Sugimori, Hiroshi Jinnai (Kyoto Inst. Tech.), Hiroshi Morita, Masao Doi (Tokyo Univ., JST/CREST), Toshio Nishi (Tokyo Inst. Tech) : “The morphological change in block copolymer thin films analyzed by SCF simulation.”, YITP Workshop Structures and Dynamics in Soft Matter, Kyoto, Japan, 16, July, 2006.
  16. Takashi Taniguchi (Univ. Yamagata, JST/CREST), Masataka Sugimoto and Kiyohito Koyama: “Dynamics of Binary Mixture of Liquid Crystal”, 21st century COE and SEIKEN (No. 46) International Workshop on Recent Advances in Soft Matter Physics, Convention hall, Institute of Industrial Science, The University of Toyko, August 21, 2006.
  17. Masato Makino and Masao Doi (JST, Univ. Tokyo): “Simulations of arbitrary shaped and non-uniform charged particles”, International Workshop on Recent Advances in Soft Matter Physics, Univ. Tokyo Komaba, Japan, 22, August, 2006.
  18. Tatsuya Yamaue and Masao Doi (The Univ. of Tokyo, JST/CREST):“Analysis of the Marangoni effect in the dot formation kinetics of polymer solution droplets having large contact angle”, International Workshop on Recent Advances in Soft Matter Physics, Univ. Tokyo Komaba ,22 August, 2006.
  19. Hiroshi Morita (JST/CREST, Univ. Tokyo), H. Miura, M. Yamada (Nagoya Univ.), T. Yamaguchi, and M. Doi (JST/CREST, Univ. Tokyo) : “Coarse-grained Molecular dynamics simulation study of an adhesion between grafted polymer films –grafted density dependency–”, International Workshop on Recent Advances in Soft Matter Physics, Univ. Tokyo Komaba, Japan, 22 August, 2006.

20. Kousuke Nakamura (Univ. Tokyo), Tatsuya Yamaue, Masao Doi (JST/CREST, Univ. Tokyo): “Measurement of the cathode and anode strain of CNT actuator”, International Workshop on Recent Advances in Soft Matter Physics, Univ. Tokyo Komaba, Japan, 22 August, 2006.
21. Akira Yamamoto (Univ. Tokyo), Tatsuya Yamaue, Hiroshi Morita, Masao Doi (JST/CREST, Univ. Tokyo): “Evaporation Process of sessile polymer droplet”, International Workshop on Recent Advances in Soft Matter Physics, Univ. Tokyo Komaba, Japan, 22 August, 2006.
22. Hiroshi Morita (JST, Univ. Tokyo), H. Miura, M. Yamada (Nagoya Univ.), T. Yamaguchi, and M. Doi (JST, Univ. Tokyo): “Coarse Grained Molecular Dynamics Simulation of the Adhesion between End-grafted Polymer Films”, 4th International workshop on nonequilibrium thermodynamics and complex fluids, Rhodes, Greece, 5, Sep. 2006.
23. Takashi Taniguchi (Univ. Yamagata, JST/CREST), Masataka Sugimoto and Kiyohito Koyama: “Bending Rigidity of Polymer Coated Membrane”, The 12th International Conference on Surface and Colloid Science, Beijing International Conventional Center (BICC), Beijing, China, October 15, 2006.
24. T. Okuzono and M. Doi (The Univ. of Tokyo and JST/CREST): “Simple model of skin formation at free surface of polymer solutions”, Juelich Soft Matter Days 2006, Bonn, Germany, Nov. 16, 2006.
25. Hiroshi Morita (JST-CREST), Yoshihiro Morishita, Daisaku Kaneko, and Masao Doi, : “Dynamics of the adhesion between rubber particle and solid substrate - using molecular dynamics simulations and experiments -”, Institute of Chemical Research, Kyoto University, International Symposium, Kyoto, 12 June 2007.
26. T. Okuzono (JST, Univ. Tokyo) and Y. Tabe: “Nonequilibrium pattern formation in chiral liquid crystal films”, Statphys 23, Genova, Italy, July 10 2007.
27. T. Okuzono and M. Doi (JST, Univ. Tokyo) : “Modeling of Drying Processes of Polymer Solutions”, YITP Workshop 2007 New Frontiers in Colloidal Physics: A Bridge between Micro- and Macroscopic Concepts in Soft Matter, Kyoto, Japan July 26 2007.
28. Masato Makino and Masao Doi (JST, Univ. Tokyo): “Reciprocal relation of charged particle with thin electric double layer”, YITP Workshop New frontiers in Colloid Physics: A Bridge between Micro- and Macroscopic Concepts in Soft Matter , Kyoto, Japan, 27 July 2007.
29. T. Okuzono, M. Oshikawa, and M. Doi: “Dynamics of Drying Processes in Polymer Solutions,” International Soft Matter Conference 2007, October 3, 2007, Eurogress Aachen, Germany.
30. T. Okuzono, M. Oshikawa, and M. Doi, “Dynamics of drying of polymer solutions on a substrate,” International symposium on Meso-scale Dynamics on Interface 2008, March 28, 2008, Tokyo, Japan. 予定
31. Masato Makino and Masao Doi: “Thermophoresis in droplet dispersions driven by Marangoni effects with fast multipole boundary element method”, International workshop on Mesoscale Dynamics on Interface, 2008 Sanjyo Conference Hall in the University of Tokyo, Tokyo, Japan, 28, March, 2008 予定

#### (4) 特許出願

##### ① 国内出願 (1件)

1. 発明の名称：鏡像異性粒子の分離装置および分離方法、並びに、分離シミュレーション方法

発明者：牧野真人, 土井正男, 増渕雄一 (JST/CREST, 名大院工)  
出願人：独立行政法人 科学技術振興機構  
出願日：2003年11月14日  
出願番号：2003-385763

②海外出願 (2件)

1. 発明の名称：異種高分子の化合物の分子運動解析方法および解析プログラム  
発明者：増渕雄一, 土井正男, Giuseppe Marrucci, Giovanni Ianniruberto, Francesco Greco  
出願日：2003年3月31日  
特許出願人：独立行政法人 科学技術振興機構  
国際出願番号：PCT/JP03/04107
2. 発明の名称：実験装置と連動させる仮想実験インタフェース  
発明者：森田裕史 (JST/CREST)、土井正男 (東大院工、JST/CREST)、山上達也 (東大院工、JST/CREST)  
出願人：独立行政法人 科学技術振興機構  
出願日：2004年8月31日 (PCT)  
国際出願番号：JP2005/015372

(5)受賞等

①受賞

1. 受賞者：土井正男  
賞：レオロジー学会賞  
授賞団体：レオロジー学会  
受賞日：平成15年5月15日  
場所：京大会館
2. 受賞者：土井正男  
賞：Honorary Fellow (名誉会員)  
授賞団体：Institute of Physics (イギリス物理学会)  
受賞日：平成17年1月20日  
場所：Savoy Hotel, Londo, UK
3. 受賞者：森田裕史  
賞：Polymer Journal 論文賞-日本ゼオン賞  
授賞団体：第55回高分子学会年次大会  
受賞日：平成18年5月24日  
場所：名古屋国際会議場
4. 受賞者：山口哲生  
賞：日東電工賞-ポスター賞  
授賞団体：日本接着学会第44回年次大会  
受賞日：平成18年6月30日  
場所：愛知工業大学愛知会館

②新聞報道

1. 掲載先：化学工業日報  
掲載日：2005年6月6日  
材料設計支援システム 「OCTA」普及に弾み  
導入用CDに大きな反響

## 7 研究期間中の主な活動

### 7.1 ワークショップ・シンポジウム等

#### シンポジウム

年月日	名称	場所	参加人数	概要
平成 15 年 11 月 10 日	JST バイオレオプロジェクト 2003 年度公開シンポジウム 連続体モデリングとシミュレーション技術の新発展	名古屋大学 ベンチャービジネスラボラトリー 3F	46 人	最近の連続体系におけるモデリングとシミュレーション技術の展開について議論。連続体モデリングにおける解析法や計算技術を展望し、OCTA の現状を報告した。
平成 16 年 3 月 22 日	第 2 回バイオレオシンポジウム New Frontier in Soft Material Science	名古屋大学 工学部 3 号館 バイオレオ会議室	23 人	ソフトマテリアル科学分野における最新動向をキャッチアップする。ソフトマテリアルの最新動向について集中的な議論を行い、今後の動向を探った。
平成 17 年 6 月 21 日～ 22 日	(国際シンポジウム) JST Biorheo project 2 <sup>nd</sup> Biorheo International Symposium 2005 -Multiscale Modeling in Soft Matter-	東京大学 山上会館 大会議室	65 人	ソフトマテリアルを対象としたマルチスケールモデリングについての最新の動向に関する議論。ソフトマテリアルに関するマルチスケールモデリングのための要素技術(新しいメソスケールシミュレーション手法)とその統合化のあり方について議論する。また、我々のプロジェクトで開発したソフトウェアの概要紹介とデモンストレーションを行う。

## OCTA 夏の学校

年月日	名称	場所	参加人数	概要
平成 15 年 9 月 3 日～5 日	OCTA 夏の学校 2003	ホテル ボ ンセ ジュ ール (愛 知 県 蒲 郡 市)	43 人	学生および企業研究者に 対して、OCTA の使い方の 講習会を開いた。また、 参加者からの利用法につ いてのアイデアについて も討論を行った。
平成 18 年 9 月 28 日 ～ 9 月 30 日	OCTA 夏の学校 2006	東京大学 本 郷 キ ャ ン パ ス 学 部 2 号 館	54 人	学生および企業研究者に 対して、OCTA の使い方の 講習会を開いた。また、 参加者からの利用法につ いてのアイデアについて も討論を行った。

## チーム内打ち合わせ及び研究室主宰セミナー

年月日	名称	場所	参加人数	概要
平成 15 年 4 月 3 日	チーム内打ち合わせ	名 古 屋 大 学 工 学 部 3 号 館 バイ オ レ オ 会 議 室	15 人	新人紹介、事務連絡、研 究報告
平成 15 年 4 月 22 日	土井研究室セミナー	名 古 屋 大 学 工 学 部 3 号 館 バイ オ レ オ 会 議 室	20 人	Dr. Tataに講演頂く
平成 15 年 5 月 8 日	チーム内打ち合わせ	名 古 屋 大 学 工 学 部 3 号 館 バイ オ レ オ 会 議 室	15 人	事務連絡、研究報告
平成 15 年 6 月 5 日	チーム内打ち合わせ	名 古 屋 大 学 工 学 部 3 号 館 バイ オ レ オ 会 議 室	15 人	事務連絡、研究報告、 平成15年度研究計画
平成 15 年 7 月 3 日	チーム内打ち合わせ	名 古 屋 大 学 工 学 部 3 号 館 バイ オ レ オ 会	14 人	事務連絡、研究報告、 バイオレオシンポジウム について

		議室		
平成 15 年 8 月 7 日	チーム内打ち合わせ	名古屋大 学工学部 3 号館バイ オレオ会 議室	15 人	事務連絡、研究報告、 バイオレオシンポジウ ムについて
平成 15 年 8 月 7 日	土井研究室セミナー	名古屋大 学工学部 3 号館バイ オレオ会 議室	19 人	訪問研究員河野晴彦氏に 講演頂く
平成15年 9月11日	チーム内打ち合わせ	名古屋大 学工学部 3 号館バイ オレオ会 議室	13 人	事務連絡、研究報告
平成 15 年 10月6日	チーム内打ち合わせ	名古屋大 学工学部 3 号館バイ オレオ会 議室	17 人	事務連絡、研究報告、 進捗状況について
平成 15 年 11 月 14 日	チーム内打ち合わせ	名古屋大 学工学部 3 号館バイ オレオ会 議室	14 人	事務連絡、研究報告、 バイオレオシンポジウ ム、進捗会議について
平成 15 年 12月19日	チーム内打ち合わせ	名古屋大 学工学部 3 号館バイ オレオ会 議室	12 人	事務連絡、研究報告
平成15年 12月19日	土井研究室セミナー	名古屋大 学工学部 3 号館バイ オレオ会 議室	16 人	(独) 海上技術安全研究 所研究員岡氏に講演頂く
平成 16 年 1 月 20 日	土井研究室セミナー	名古屋大 学工学部 3 号館バイ オレオ会 議室	20 人	Prof. M P Allenに講演頂 く
平成 16 年 1 月 9 日	チーム内打ち合わせ	名古屋大 学工学部 3 号館バイ オレオ会	17 人	事務連絡、研究報告

		議室		
平成 16 年 1 月 9 日	土井研究室セミナー	名古屋大 学工学部 3 号館バイ オレオ会 議室	22 人	日立製作所中央研究所主 任研究員何氏に講演頂く
平成 16 年 2 月 13 日	チーム内打ち合わせ	名古屋大 学工学部 3 号館バイ オレオ会 議室	16 人	事務連絡、研究報告、 平成16年度研究体制につ いて
平成 16 年 2 月 13 日	土井研究室セミナー	名古屋大 学工学部 3 号館バイ オレオ会 議室	20 人	理化学研究所研究員我妻 氏に講演頂く
平成 16 年 3 月 5 日	チーム内打ち合わせ	名古屋大 学工学部 3 号館バイ オレオ会 議室	12 人	事務連絡、研究報告
平成 16 年 3 月 5 日	土井研究室セミナー	名古屋大 学工学部 3 号館バイ オレオ会 議室	16 人	京都大学小貫研研究員古 川氏に講演頂く
平成16年 4 月 6 日	チーム内打ち合わせ	東京大学 工学部6号 館325号室	8 人	今年度の計画概要、事務 連絡、研究報告
平成16年 4月6日	土井研究室セミナー	東京大学 工学部6号 館325号室	12 人	産総研安積先生に講演頂 く
平成 16 年 5 月 12 日	チーム内打ち合わせ	東京大学 工学部6号 館325号室	6 人	事務連絡、研究報告
平成 16 年 5 月 12 日	土井研究室セミナー	東京大学 工学部6号 館325号室	11 人	京都大学瀧川先生に講演 頂く
平成 16 年 5 月 24 日	土井研究室セミナー	東京大学 工学部6号 館325号室	13 人	Dr. Ichikiに講演頂く
平成 16 年 6 月 23 日	チーム内打ち合わせ	東京大学 工学部6号 館325号室	8 人	事務連絡、研究計画につ いて、研究報告

平成 16 年 6 月 23 日	土井研究室セミナー	東京大学 工学部 6 号 館 325 号室	13 人	京都大学講師山本先生に 講演頂く
平成 16 年 7 月 14 日	チーム内打ち合わせ	東京大学 工学部 6 号 館 325 号室	8 人	事務連絡、研究計画につ いて、研究報告
平成 16 年 8 月 5 日	土井研究室セミナー	東京大学 工学部 6 号 館 325 号室 及び 320 号 室	13 人	招聘研究員 Dr. Limbach に 講演及びチュートリアル 頂く
平成 16 年 9 月 6 日	チーム内打ち合わせ	東京大学 工学部 6 号 館 325 号室	7 人	事務連絡、報告会準備、 研究報告
平成 16 年 9 月 6 日	土井研究室セミナー	東京大学 工学部 6 号 館 325 号室	17 人	Prof. Andelman に講演頂 く
平成 16 年 10 月 5 日	チーム内打ち合わせ	東京大学 工学部 6 号 館 325 号室	5 人	事務連絡、物品検査につ いて、研究報告
平成 16 年 10 月 5 日	土井研究室セミナー	東京大学 工学部 6 号 館 325 号室	12 人	東京都立大助教授 Yang 先 生に講演頂く
平成 16 年 12 月 2 日	土井研究室セミナー	東京大学 工学部 6 号 館 325 号室	17 人	Prof. Lu 及び Prof. Cates に講演頂く
平成 16 年 12 月 3 日	チーム内打ち合わせ	東京大学 工学部 6 号 館 325 号室	8 人	事務連絡、土井先生米国 出張報告、国際シンポジ ウムについて、研究報告
平成 17 年 1 月 14 日	チーム内打ち合わせ	東京大学 工学部 6 号 館 325 号室	7 人	事務連絡、人材募集につ いて、国際シンポジウム について、研究報告
平成 17 年 1 月 14 日	土井研究室セミナー	東京大学 工学部 6 号 館 325 号室	17 人	東京大学客員研究員山本 氏に講演頂く
平成 17 年 2 月 24 日	チーム内打ち合わせ	東京大学 工学部 6 号 館 320 号室	7 人	予算について、国際シン ポジウムについて、バイ オレオ成果ソフトの CD 作 成について
平成 17 年 4 月 1 日	チーム内打ち合わせ	東京大学 工学部 6 号 館 320 号室	7 人	新人紹介、事務連絡、チ ーム内の役割分担につ いて、セミナーについて
平成 17 年 4 月 5 日	土井研究室セミナー	東京大学 工学部 6 号 館 325 号室	19 人	Dr. 菊池に講演頂く

平成17年 5月10日	チーム内打ち合わせ	東京大学 工学部6号 館 C376 号 室	8人	事務連絡、予算について、 国際シンポジウムについ て
平成17年 5月10日	土井研究室セミナー	東京大学 工学部6号 館 325号室	19人	Prof. Yuan に講演頂く
平成17年 5月23日	土井研究室セミナー	東京大学 工学部6号 館 325号室	19人	Prof. Lesnoff に講演頂 く
平成17年 5月25日	土井研究室セミナー	東京大学 工学部6号 館 325号室	13人	元ニチバン(株)齊藤氏及び 広島大学助教授戸田先生 に講演頂く
平成17年 6月13日	チーム内打ち合わせ	東京大学 工学部6号 館 325号室	8人	事務連絡、国際シンポジ ウムについて
平成17年 6月13日	土井研究室セミナー	東京大学 工学部6号 館 325号室	19人	JST 派遣研究員奥村氏に 講演頂く
平成17年 7月7日	土井研究室セミナー	東京大学 工学部6号 館325号室	17人	北海道大学助手飯間氏に 講演頂く
平成17年 9月26日	チーム内打ち合わせ	東京大学 工学部6号 館325号室	8人	グループウェアによるス ケジュール管理につい て、Biorheo2005残務処理 について
平成17年 9月30日	チーム内打ち合わせ	東京大学 工学部6号 館 C376 号 室	7人	JST中間報告について
平成17年 10月14日	チーム内打ち合わせ	東京大学 工学部6号 館325号室	6人	グループウェアによるス ケジュール管理につい て、Biorheo2005 残務処理 について、JST 中間報告 について
平成17年 10月14日	土井研究室セミナー	東京大学 工学部6号 館 325号室	16人	東京大学 (システム量子) 助手大西氏に講演頂く
平成17年 11月14日	チーム内打ち合わせ	東京大学 工学部6号 館 325号室	7人	CREST シンポジウムに関 する打ち合わせ
平成18年 1月19日	土井研究室セミナー	東京大学 工学部6号 館 325号室	17人	北海道大学教授グン先生 に講演頂く
平成18年 3月9日	チーム内打ち合わせ	東京大学 工学部6号	7人	引越し、人事異動、研究 テーマについて

		館輪講室 C		
平成 18 年 4 月 3 日	チーム内打ち合わせ	東京大学 工学部 6 号 館 325 号室	11 人	新人紹介、事務連絡、チ ーム内の役割分担につ いて、セミナーにつ いて
平成 18 年 4 月 17 日	土井研究室セミナー	東京大学 工学部 6 号 館 325 号室	17 人	Dr. Harald Pleiner に講 演いただく
平成 18 年 5 月 10 日	土井研究室セミナー	東京大学 工学部 6 号 館 325 号室	17 人	東京工業大学助教授、佐 藤千明先生に講演いた だく
平成 18 年 6 月 9 日	土井研究室セミナー	東京大学 工学部 6 号 館 大会議 室	17 人	Prof. McKinley に講演 いただく
平成 18 年 6 月 29 日	土井研究室セミナー	東京大学 工学部 6 号 館 325 号室	17 人	横浜国立大学教授、渡 邊正義先生に講演いた だく
平成 18 年 6 月 29 日	土井研究室セミナー	東京大学 工学部 6 号 館 325 号室	17 人	Prof. Shi-Qing Wang に 講演いただく
平成 18 年 7 月 3 日	チーム内打ち合わせ	東京大学 工学部 6 号 館 325 号室	8 人	顕微鏡の購入につ いて
平成 18 年 7 月 10 日	土井研究室セミナー	東京大学 工学部 6 号 館 325 号室	17 人	Prof. Yuanze Xu に講演 いただく
平成 18 年 7 月 24 日	チーム内打ち合わせ	東京大学 工学部 6 号 館 325 号室	8 人	今年度の予算につ いて
平成 18 年 7 月 26 日	土井研究室セミナー	東京大学 工学部 6 号 館 325 号室	17 人	Prof. Frederic Nallet に講演いただく
平成 18 年 8 月 18 日	土井研究室セミナー	東京大学 工学部 6 号 館 325 号室	10 人	日本大学教授、中原明 生先生に講演いただく
平成 18 年 9 月 27 日	土井研究室セミナー	東京大学 工学部 6 号 館 325 号室	17 人	名古屋大学名誉教授、 大沢文夫先生に講演 いただく
平成 18 年 9 月 27 日	チーム内打ち合わせ	東京大学 工学部 6 号 館 325 号室	9 人	今年度の予算につ いて
平成 18 年 11 月 8 日	土井研究室セミナー	東京大学 工学部 6 号 館 325 号室	17 人	花王株式会社 構造解 析センター、山田真爾 氏に講演いただく

平成 18 年 11 月 15 日	土井研究室セミナー	東京大学 工学部 6 号 館 325 号室	17 人	名古屋短期大学助教授, 鏡裕行先生に講演いた だく
平成 18 年 11 月 17 日	土井研究室セミナー	東京大学 工学部 6 号 館 325 号室	17 人	産業技術総合研究所, 安 積欣志氏・清原健司氏に 講演いただく
平成 18 年 12 月 5 日	土井研究室セミナー	東京大学 工学部 6 号 館 325 号室	17 人	九州工業大学助教授, 山 村方人先生に講演いた だく
平成 19 年 1 月 11 日	土井研究室セミナー	東京大学 工学部 6 号 館 325 号室	17 人	九州大学大学院助教授, 田中敬二先生に講演いた だく
平成 19 年 2 月 27 日	チーム内打ち合わせ	東京大学 工学部 6 号 館 320 号室	7 人	今年度の研究のまとめと 今後の進め方について
平成 19 年 3 月 27 日	土井研究室セミナー	東京大学 工学部 6 号 館 325 号室	10 人	ユーリッヒ大学, 野口先 生に講演いただく
平成 19 年 3 月 27 日	チーム内打ち合わせ	東京大学 工学部 6 号 館 325 号室	6 人	H19 年度の研究テーマに ついて
平成19年 4 月 16 日	土井研究室セミナー	東京大学 工学部 6 号 館 中会議室	15 人	東京理科大学・上野一郎 講師に講演いただく
平成19年 4 月 16 日	土井研究室セミナー	東京大学 工学部 6 号 館 中会議室	15 人	東京医科歯科大学・中村 真人助教授に講演いた だく
平成19年 4 月 18 日	土井研究室セミナー	東京大学 工学部 6 号 館 輪講室 C	15 人	理化学研究所・小野謙二 研究員に講演いただく
平成19年 4 月 19 日	土井研究室セミナー	東京大学 工学部 8 号 館 314 号室	15 人	University of Central Lancashire, U.K. の Prof. Zvelindovsky に講 演いただく
平成19年 7 月 30 日	土井研究室セミナー	東京大学 工学部 6 号 館 325 号室	15 人	Ecole Supérieure de Physique et de Chimie Industrielles, France の Dr. Armand Ajdari に講 演いただく
平成19年 7 月 31 日	土井研究室セミナー	東京大学 工学部 6 号 館 中会議室	15 人	Forschungszentrum Juelich, Germany の Prof. Jan Dhont と Prof. Gerhard Gompper に講演

				いただく
平成19年 8月21日	土井研究室セミナー	東京大学 工学部6号 館 325号室	15人	名古屋市立大学・山中淳 平准教授に講演いただく
平成19年 8月9日	土井研究室セミナー	東京大学 工学部6号 館 大会議室	15人	ESPCI 成田哲治 CNRS researcher に講演いた だく
平成19年 9月29日	土井研究室セミナー	東京大学 工学部6号 館 325号室	15人	University of Michigan の Prof. Ronald G Larson に講演いただく

## 8 結び

私が本プロジェクト提案をつた動機は、我々が開発してきた OCTA というソフトウェアをさらに発展させたいということであった。本プロジェクトでは、シミュレータは新規に開発するが、シミュレーションプラットフォームについては、これまでの成果を引き継いで、拡張と改良を重ねるという方針を採ってきた。シミュレーションプラットフォームの改良を加えた部分はその都度公開する一方で、説明と普及のための努力を重ねてきた。

シミュレーションプラットフォームを使うメリットは、シミュレータ連携という公式上の目的だけでなく、表示ツールとしての便利さ、データ解析の容易さ、他のシミュレータの計算結果との比較の容易さ、プログラム管理のしやすさなど、さまざまな現実的メリットがあることを訴えてきた。5年前のシステムには様々な不備があったため、このような訴えがなかなか受け入れられなかったが、本プロジェクトにおける改良作業の結果、プラットフォームは安定に動作し、ほぼ満足のゆく機能をもつものになってきた。プラットフォームの利用法を物理の問題で訴えた”物理仮想実験室“を出版し、同時に2度のOCTA夏の学校、および3度のワークショップを開いてOCTAの考えを訴えてきた。そのような活動の結果、OCTAの利用は少しずつ広がっている。

しかしながら、OCTAを今後どのように維持管理してゆくかという点では、当面はともかくとして長期的にどうするかについて展望を見出せないでいる。ソフトウェアを公開し、アップグレードする労力は大変である。現在の制度では、この手間をすべてボランティアに頼っている。これでは、良質のソフトが集積し、計算科学が発展してゆくことにならないのではないかという危惧を抱いている。2007年10月3,4日に行なわれた次世代スーパーコンピュータシンポジウムの計算物質連絡会議分科会のパネル討論の席でこの問題について話をしたところ、かなりの人が同じ問題意識をもっている

ことがわかった。今後は、計算科学のコミュニティの中で議論してゆかなくてはいけないことであるが、同時に、国や JST などの funding agency にも考えていただきたい問題である。