

戦略的創造研究推進事業 CREST  
研究領域「マルチスケール・マルチフィジックス現象  
の統合シミュレーション」  
研究課題「ソフトマターの多階層/相互接続シミュ  
レーション」

## 研究終了報告書

研究期間 平成18年10月～平成24年3月

研究代表者: 山本 量一  
(京都大学大学院工学研究科、教授)

## § 1 研究実施の概要

### (1) 実施概要

山本 G、谷口 G、増渕 G、泰岡 G の4拠点を設置し、それぞれ協力しながら主たる研究項目として以下の課題に取り組んだ。

- 1) コロイド分散系のマルチスケール・マルチフィジクスシミュレーション(山本 G)
- 2) 高分子流体のマルチスケール・マルチフィジクスシミュレーション(山本 G、谷口 G)
- 3) 絡み合い高分子系の高速シミュレーション法の開発(増渕 G)
- 4) シミュレーションの高速化(泰岡 G)
- 5) その他の成果(山本 G、谷口 G、増渕 G、泰岡 G)

これらにより、分子動力学シミュレーション、絡み合い高分子シミュレーション、計算流体力学法を組み合わせ、高分子のミクロな分子構造からマクロな流動の様子を統合的にシミュレーションすることが可能となった。各課題の概要は以下の通りである。

### 1)コロイド分散系のマルチスケール・マルチフィジクスシミュレーション(山本 G)

流体力学の効果を効率よく数値計算に反映するための方法である Smoothed Profile (SP) 法を開発し、それを実装したコロイドシミュレータ(KAPSEL)を作成・公開した。既存の方法ではスーパーコンピュータを用いてさえ困難であった、コロイド粒子と溶媒流体の運動を連成させた3次元大規模直接数値シミュレーションをPC レベルで実現可能にし、各種コロイド分散系の定量的解析に成功した。

### 2) 高分子流体のマルチスケール・マルチフィジクスシミュレーション(山本 G、谷口 G)

山本 G では、局所サンプリングのアイデアに基づく計算流体力学(CFD)と分子動力学(MD)とのハイブリット手法の開発を行い、その有効性について詳細に検証した。その結果、新しいハイブリット法では計算する全時空間を MD で行う場合に比べて、数百倍程度の効率で有効な計算を行うことができることを実証した。さらに、局所サンプリング法を用いて平板間の高分子液体の流動解析を行い、高分子液体の特異な流動現象を明らかにし、定量的な解析を行うことに成功した。

谷口 G では、材料・プロセスシミュレーションに適用可能なマルチスケールシミュレーション手法を確立することを目的に研究を行い、巨視的レベルの流体の運動を、粒子法を用いてラグランジュ描像で解くシミュレータを開発した。また、そこで用いる高分子鎖のダイナミクスの高速シミュレータを、増渕グループと共同で開発し、目に見える巨視的な流動と高分子の分子レベルの微視的な配置や形状、そして絡み合いの状態を直接関係づけて計算することに成功した。

### 3) 絡み合い高分子系の高速シミュレーション法の開発(増渕 G)

独自のモデルに基づく高分子専用高速分子シミュレータを開発し、複雑な分子構造を持つ高分子のダイナミクスと流動特性の定量予測に成功した。さらに、分子動力学シミュレーションから幾何的な束縛をからみあいとして抽出し、からみあいのミクロな定義付けを行う手法を開発した。このシミュレータを用いて高分子流体の流動物性パラメータを求め、粗視化シミュレーションと組み合わせることでプラスチックの成形加工性の予測に成功した。谷口 G で開発した流体シミュレータへの高分子シミュレータの埋込を行うため、GPU による高速並列計算を可能にする新たなモデルの開発も行った。

### 4) シミュレーションの高速化(泰岡 G)

準汎用計算機は、一般のCPUに比べて高速だが制約が多く、高速なプログラムを開発するのが難しい。泰岡 G では、準汎用計算機である Playstation 3 や GPU を用いて分子シミュレーションの高速化を行った。開発したプログラムは、ライブラリという形で整備し、研究者のプログラムからすぐに使えるようにした。このライブラリは、分子動力学シミュレーション用プログラムとして世界的に使われている CHARMM プログラムに組み込まれている。また、高速化のノウハウを渦法による乱流計

算プログラムに応用し、大規模 GPU クラスタによる低コストな計算を達成し、Gordon Bell 賞を受賞した。GPU を用いたこれらの高速分子動力学シミュレーションプログラムは、高分子拠点での高分子シミュレータとの連携に用いている。

## 5) その他の成果(山本 G、谷口 G、増淵 G、泰岡 G)

上記以外の成果についても、それぞれ原著論文として発表した。

### (2) 顕著な成果

#### 1. コロイド分散系の直接数値計算法の開発 [9, 55, 77]

概要: Smoothed Profile (SP) 法を開発し、ソフトウェア KAPSEL として公開した。この方法は高い精度と高い計算効率を両立させるものであり、コロイド分散系のシミュレーション手法としては、ブラウン動力学法(1978 年)、ストークス動力学法(1988 年)以来の画期的なものである。

#### 2. 高分子流体のマルチスケールモデリング [44, 68, 70]

概要: 任意の流動条件に対して適用可能なマルチスケール法を開発した。既存の方法では実現できない、高度な成形加工や材料開発に役立つものと期待できる。高分子の流動物性を予測可能なソフトウェア NAPLES と、GPU 対応高速レオロジー計算ソフトウェア FRISCA を開発した。

#### 3. 高速分子動力学シミュレーションを実現する GPU ライブラリの開発 [56]

概要: GPU を用いて分子動力学シミュレーションを加速するプログラムを開発し、ライブラリとして研究者が使えるように整備した。また、高速化のノウハウを渦法による乱流計算プログラムに応用し、大規模 GPU クラスタによる低コストな計算を達成し、Gordon Bell 賞を受賞した。

## § 2. 研究構想

### (1) 当初の研究構想

1) 分子動力学拠点(泰岡 G)、2) 高分子拠点(増淵 G)、3) コロイド拠点(山本 G)、4) マクロ材料拠点(谷口 G)の4研究拠点を置き、それぞれの拠点が開発した異なる階層のシミュレータの相互接続を主な開発項目とする。

### 開発項目1: 分子動力学シミュレーションとコロイドシミュレーションの接続

メソ階層に対する山本のシミュレータとマイクロ階層に対する泰岡の大規模分子動力学(MD)シミュレータとを相互接続する。空間を分割してマイクロ階層とメソ階層を力学的に接続するのは困難であるが、自由度をイオンとコロイド・ホスト流体に分割し、それぞれマイクロとメソでモデルを与えることで統計力学的に矛盾のない独自の手法を開発する。同様の手法は微粒子が高分子媒体に分散した系についても応用可能である。高分子媒体の場合、流動・変形と応力とを関係付ける構成方程式をモデルとして近似式で与える必要があったが、単純な場合を除いて現実の高分子媒体の挙動を広く表現しうる構成方程式のモデルは存在しない。この場合、1. メソ階層で高分子濃度や媒体の流速を計算、2. それを拘束条件としてマイクロ階層で高分子の局所的な化学ポテンシャル(スカラー)と応力(テンソル)を計算、3. その結果をメソ階層シミュレーションで構成方程式の代りに使用する、という手順が有効である。高分子の分子量が大きい場合はマイクロ階層での計算が膨大になるため、泰岡の分子動力学を増淵の粗視化高分子シミュレーションに置き換えることで対処する。

### 開発項目2: 分子動力学シミュレーションと高分子シミュレーションの接続

増淵により開発されている粗視化された高分子シミュレーション NAPLES に化学的な一次構造の効果を大規模分子動力学シミュレーションにより付与する。まず、絡み合いを特徴付ける長さについては、からみあった高分子系を MD シミュレーションで構築し、分子を個別に引っ張ることで、レオロジーデータを経由せずに直接マイクロな情報から絡み合い長さを抽出するなどの方法を用いる。次に、時間スケールについては上記手法で得られた絡み合い構造単位に切った多数の高分子が

らなる系に対して大規模分子動力学法を行い、その系の緩和時間を求める。これらを単位長さ・時間としてマイクロ階層からメゾ階層に渡す。系によっては実時間でミリ秒程度となることから、マイクロ MD 法だけではなく中間に DPD 法や粗視化 MD 法も用いる必要がある。さらに、メゾ階層からマイクロ階層へ高分子鎖の局所的な変形や流動を渡すことや、緩和時間の温度依存性を流動の活性化エネルギーにより決定する手法も検討する。

#### **開発項目3:コロイドシミュレーション・高分子シミュレーションと材料・プロセスシミュレーションの接続**

材料・プロセスシミュレーションでソフトマターの挙動を正しく反映するためには、物質固有の複雑な構成方程式(流動・変形と応力との関係式)を用いる必要がある。しかし、多種多様なソフトマター一般に有効な構成方程式は存在しないし、現実のプロセスでは大きな非平衡状態に達することも多いために困難はさらに大きくなる。そこで、あらかじめ構成方程式を決めておくのではなく、プロセスシミュレーションとコロイドおよび高分子シミュレーションとの接続を考える。具体的には、1. マクロ階層で局所的な流動や変形を計算、2. その条件下でメゾ階層のシミュレーションを行って応力を計算、3. 得られた応力をマクロ階層シミュレーションに戻す、という手順が有効である。理論的には、全てをメゾ階層で計算する場合に比べて計算量は 1/108 程度となる。

#### **開発項目4:プラットフォームの開発**

本プロジェクトでは既の実績のあるプラットフォーム GOURMET をベースとして、大規模計算と高速データ授受に対応出来るように改造する。GOURMET は優れた設計思想に基づいているが、グラフィックスとデータ入出力が弱く、特に大規模なデータをやり取りすると極端に低速化するために、そのまま本プロジェクトに利用することはできない。そこで GOURMET の基本設計を踏襲しつつ、上位互換の次世代プラットフォームを新規開発する。

(2) 新たに追加・修正など変更した研究構想

#### **開発項目1:分子動力学シミュレーションとコロイドシミュレーションの接続**

コロイド系については当初の予定を変更して、KAPSEL ベースの粗視化シミュレーション法を発展させ、流動や任意の電場などの外力のもとでコロイド分散系のダイナミクスを解析できるように拡張した。

#### **開発項目3:コロイドシミュレーション・高分子シミュレーションと材料・プロセスシミュレーションの接続**

プロセス拠点と高分子シミュレータの接続を行うには、従来のモデルは計算負荷が多く不向きであった。また、高分子シミュレータの統計力学的性質を検討する中でモデル自体に修正が必要であることもわかった。これらの問題を解決するためモデルの改良を行った。さらに、計算負荷が少なく GPU 上で動作するシミュレータを新たに開発し計算の大幅な高速化を行った。

#### **開発項目4:プラットフォームの開発**

多様なソフトマターに対して、分子軌道法やバンド計算、あるいは分子動力学法のように一般性のあるモデルを開発することは困難であり、またそのようなニーズもないことがわかった。本研究では汎用プラットフォームの構築をとりやめ、実績のあるプラットフォーム GOURMET を用いる場合と、汎用性に欠けるが高速で自由度の高い独自仕様のライブラリを用いる場合の2通りの方法を併用した。また、それらとは別に、GPU で高速に MD シミュレーションを実行するためのライブラリを作成した。

### **§ 3 研究実施体制**

(1) 「山本」グループ

① 研究参加者

| 氏名           | 所属                      | 役職          | 参加時期         |
|--------------|-------------------------|-------------|--------------|
| 山本 量一        | 京都大学大学院工学研究科            | 教授          | H18.10～      |
| 安田 修悟        | 兵庫県立大学・<br>シミュレーション学研究科 | 准教授         | H19.4～H23.3  |
| 浦長瀬 正幸       | 京都大学大学院工学研究科            | 特定助教        | H20.4～       |
| 石本 志高        | 京都大学大学院工学研究科            | 特定助教        | H22.4～       |
| 石田 佳奈        | 京都大学大学院工学研究科            | 教務補佐員(研究補佐) | H18.10～      |
| 小林 秀樹        | 京都大学大学院工学研究科            | D1-D3       | H20.4～H23.3  |
| 水野 英如        | 京都大学大学院工学研究科            | D1-D3       | H21.4～       |
| 辰巳 怜         | 京都大学大学院工学研究科            | D1-D2       | H22.4～       |
| Saeed Jafari | 京都大学大学院工学研究科            | 研究員         | H22.3～H22.7  |
| Adnan Hamid  | 京都大学大学院工学研究科            | D1          | H22.10～      |
| 施 俊羽         | 京都大学大学院工学研究科            | D1          | H22.10～      |
| 岩下 拓哉        | 京都大学大学院工学研究科            | D1-D3       | H18.10～H21.8 |
| 松岡 佑樹        | 京都大学大学院工学研究科            | M1-M2       | H19.3～H21.3  |
| 山本 剛紀        | 京都大学大学院工学研究科            | M1-M2       | H19.3～H21.3  |
| 久一 真信        | 京都大学大学院工学研究科            | M1-M2       | H18.10～H20.3 |

## ② 研究項目

- コロイドシミュレータの拡張
- 分子動力学法とコロイドシミュレータの連携手法の開発
- 高分子シミュレーションとコロイドシミュレータの連携手法の開発
- プロセスシミュレータとコロイドシミュレータの連携手法の開発
- プラットフォームへの対応
- プロジェクト全体の総括

## (2)「泰岡」グループ

### ① 研究参加者

| 氏名    | 所属           | 役職    | 参加時期        |
|-------|--------------|-------|-------------|
| 泰岡 顕治 | 慶應義塾大学理工学部   | 教授    | H18.10～     |
| 秋元 琢磨 | 慶應義塾大学工学研究科  | 特任助教  | H22.4～      |
| 成見 哲  | 電気通信大学情報理工学部 | 准教授   | H19.4～      |
| 荒井 規允 | 同上           | 助教    | H18.10～     |
| 米川 伊織 | 慶應義塾大学理工学研究科 | M1～M2 | H22.4～      |
| 山本 詠士 | 同上           | M1    | H23.4～      |
| 柏木 弘毅 | 同上           | M1～M2 | H21.4～H23.3 |
| 清水 寛之 | 同上           | M2    | H22.4～H23.3 |
| 原 知之  | 同上           | M2    | H22.4～H23.3 |
| 高橋 和義 | 同上           | M1～M2 | H19.4～H21.3 |
| 亀岡 駿  | 同上           | M1～M2 | H19.4～H21.3 |
| 坂牧 隆司 | 同上           | M1～M2 | H19.4～H21.3 |

## ② 研究項目

- 高分子、コロイド高速計算分子動力学コード開発
- 粗視化分子動力学コード開発
- 高分子シミュレータと分子動力学法の連携手法の開発
- コロイドシミュレータと分子動力学法の連携手法の開発
- プラットフォームへの対応

(3)「増渕」グループ

① 研究参加者

| 氏名     | 所属          | 役職    | 参加時期         |
|--------|-------------|-------|--------------|
| 増渕 雄一  | 京都大学化学研究所   | 准教授   | H18.10～      |
| 畝山 多加志 | 同上          | 特定助教  | H20.4～       |
| 梶川 幸恵  | 同上          | 教務補佐員 | H20.4～H22.3  |
| 全 陈    | 京都大学工学研究科   | D1～D3 | H20.4～H23.3  |
| 堀尾 和史  | 京都大学工学研究科   | M2～D3 | H19.9～H23.3  |
| 斉藤 遼   | 京都大学工学研究科   | M1～M2 | H21.4～H23.3  |
| 片倉 史郎  | 京都大学工学研究科   | M1～M2 | H21.4～H23.3  |
| 平本 啓介  | 京都大学工学研究科   | M1～M2 | H21.4～H23.3  |
| 住田 幸司  | 京都大学工学研究科   | M1～M2 | H22.4～       |
| 川崎 洋志  | 京都大学工学研究科   | M1～M2 | H22.4～       |
| 北野 順也  | 京都大学工学研究科   | M1～M2 | H22.4～       |
| 山本 理史  | 京都大学工学研究科   | M1～M2 | H23.4～       |
| 立入 啓浩  | 京都大学工学研究科   | M1～M2 | H23.4～       |
| 發知 仁志  | 東京農工大学工学研究院 | M1～M2 | H19.9～H21. 3 |
| 森谷 始旦  | 東京農工大学工学研究院 | M1～M2 | H19.9～H21. 3 |
| 宇野 亜紀子 | 京都大学工学研究科   | M1～M2 | H21.4～H22. 3 |

② 研究項目

- 分子動力学法と高分子シミュレータの連携手法の開発
- コロイドシミュレータと高分子シミュレータの連携手法の開発
- プロセスシミュレータと高分子シミュレータの連携手法の開発
- プラットフォームへの対応

(4)「谷口」グループ

① 研究参加者

| 氏名    | 所属            | 役職       | 参加時期        |
|-------|---------------|----------|-------------|
| 谷口 貴志 | 京都大学大学院工学研究科  | 准教授      | H18.10～     |
| 村島 隆浩 | 京都大学大学院工学研究科  | 研究員→特定助教 | H19.4～      |
| 杉本 昌隆 | 山形大学大学院理工学研究科 | 准教授      | H20.4～      |
| 植松 英之 | 山形大学大学院理工学研究科 | D3-4     | H20.4～H22.3 |
| 吉岡 秀剛 | 山形大学大学院理工学研究科 | M1-2     | H20.4～H22.3 |
| 服部 良平 | 山形大学大学院理工学研究科 | M1-2     | H20.4～H22.3 |
| 菊池 康司 | 山形大学大学院理工学研究科 | D1-3     | H21.4～      |
| 小室 綾平 | 山形大学大学院理工学研究科 | D1-3     | H21.4～      |
| 鈴木 伸明 | 山形大学大学院理工学研究科 | M1-2     | H22.4～      |

② 研究項目

- メソスケール高分子シミュレータとの連携によるマクロな流動シミュレーション手法の開発
- 分子レベルシミュレータやコロイド系シミュレータとの連携によるマクロ系(連続体レベル)シミュレーション手法の開発
- 階層間連携を志向したシミュレーション・プラットフォームの構築に関わる概念の研究とその開発

## § 4 研究実施内容及び成果

### 4. 1 コロイド系のマルチスケールモデリング(京都大学 山本グループ)

#### (1)研究実施内容及び成果

コロイド分散系とは、微粒子がホスト溶媒中に分散した物質一般を指し、粒子の体積分率が高くなるに従い、液状からゲル状に変化する。また多くの場合、粒子は電荷を帯びており、溶媒はイオンを含んだ電解質溶液である。本研究では、微粒子/コロイド分散系のシミュレーションについて取り扱う。

シミュレーションの観点から見たコロイド分散系の特殊性は、注目すべき空間・時間のスケールが原子・分子のミクロなスケールと比べて桁違いに大きいことである。コロイド粒子の運動だけでなく、周囲の流体やイオンによる長距離相互作用のために大規模な協調運動が起こり、微視的な時間スケール( $\sim 10^{-10}$  秒)とはかけ離れた  $10^{-3} \sim 10^3$  秒にも達する緩和時間を示す。このようなコロイド分散系の長時間の緩和現象は、通常分子動力学シミュレーション等で解ける最長の時間範囲( $\sim 10^{-6}$  秒)とはかけ離れており、ミクロなモデルに基づいた分子動力学(MD)法でコロイド分散系全体を長時間シミュレーションすることは不可能である。よって、この分野でメソスケールの粗視化モデルに基づくシミュレーション法が発展した。

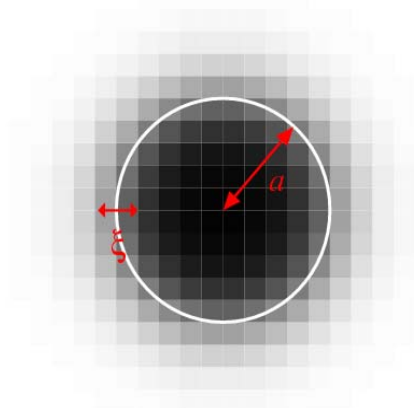
コロイド/微粒子分散系のシミュレーション法としては、長らく Brownian Dynamics(BD)法や Stokesian Dynamics (SD)法など、流体の運動をあらわに計算しない方法が使われてきた。これらの方法の長所は比較的計算が軽いことであるが、溶媒を単なる摩擦媒体又はニュートン流体としているがために、電解質溶液など内部自由度のある複雑流体に粒子が分散している系への拡張が困難であった。1980 年代後半に SD 法が登場して以来、10 年以上目立った変化はなかったが、2000 年を境に状況は劇的に変化する。コロイド分散系のシミュレーション法の開発は、今や数値計算の技術を競い合う恰好のターゲットとなり、百花繚乱の様相を呈している。以下では、我々自身が最近開発した方法を含め、これまでに提案された各種方法の位置づけについて簡単に述べる。

複雑流体への拡張を考えた場合、BD 法や SD 法のように溶媒の自由度を完全に消してしまうのはうまくない。逆に溶媒に分子レベルで詳細なモデルを与えることも計算量の観点から難しい。コロイド粒子のスケールに合わせた粗視化モデルを用いて溶媒を記述し、コロイド粒子の運動と連動させるハイブリッドシミュレーションの手法が有効である。この場合、どのように溶媒をモデル化するか、どのような方法でコロイド粒子と溶媒の運動を連動させるかがシミュレーションの技術的要所となる。前者としては、Navier-Stokes(NS)方程式や Lattice-Boltzmann(LB)法によって流体力学的に溶媒を扱う方法や、Stochastic Rotation(SR)法や Dissipative Particle Dynamics(DPD)法などのように、溶媒を代表粒子で置き換える方法が既に試されている。ここで挙げた順に、モデル化はより粗くなり計算はより軽くなる。

NS 方程式で溶媒の運動を記述する場合、溶媒をコロイド粒子の運動と連動させるためには、コロイド粒子と溶媒の界面において、NS 方程式に境界条件を課す必要がある。Finite Element 法(FEM)など粒子形状にフィットした不規則格子を用いるのが伝統的な方法であるが、計算量が膨大になってしまう問題がある。計算量の点からは、一般的な規則格子を用いて流体の計算を行うことが望ましいが、今度は格子の形状とコロイド粒子の表面とがフィットしないために、境界条件の扱いに困難が生じる。

本来固体のコロイド粒子を、周囲の溶媒に比べて大きな粘性率を持つ流体としてモデル化し、両者の粘性率を界面で滑らかに接続させることでこの問題の解決を図ったのが Fluid Particle Dynamics(FPD)法(田中・荒木)である。その後、溶媒の扱いを NS 方程式から LB 法に変え、新たに界面張力を導入した試みも稲室らによってなされている。

コロイド粒子/溶媒の界面に近接した流体計算の格子点上に、界面からの距離に応じた補助変数を置いて界面位置の指定を行い、NS 方程式と粒子の運動を連動させる方法が梶島らによって提案されている。我々が開発した Smoothed Profile(SP)法でも同様に、図 1.1 のように粒子の内側と外側を判別するために類似の補助変数を導入しているが、界面近傍を特別扱いせず補助変数を全格子点に与えることで計算効率を向上し、複雑流体への拡張性を実現した。ハイブリッドシミュレーションの最も大きな利点は、内部自由度を持った複雑液体溶媒への



$$\phi_i(\vec{x}) = \frac{1}{2} \left[ \tanh \left( \frac{a - |\vec{x} - \vec{R}_i|}{\xi} \right) + 1 \right]$$

図 1.1 SPM では、コロイド粒子と流体の本来の境界条件(白線)を、厚み  $\xi$  のぼやけた界面(グレイの濃淡)で置き換えることで高い計算効率を実現する。

拡張が容易な点にある。コロイド粒子と溶媒に加え、内部自由度(電解質溶液であれば局所的なイオン濃度、高分子や液晶であれば分子の配向方向など)の運動を連動させればよい。SP法の場合、前述の粒子の内外を区別する補助変数を用いてコロイド粒子/溶媒/内部自由度の矛盾のない運動が実現されている。

ここでは、我々が開発した SP 法による濃厚なコロイド分散系への応用について紹介する。特にこれまで理論的な解析の難しかった濃厚な荷電コロイド系の電気泳動現象への適用について特に詳しく紹介する[1-3, 10, 11, 18, 20, 24, 31, 38, 40, 42, 46-48, 54, 55, 77]。

電解質溶液中を電気泳動するコロイド粒子系へ応用した結果を図 1.2 に示す。このシミュレーションでは、コロイド粒子、イオンの濃度場、溶媒の流動場の三つの自由度をそれぞれの第一原理に基づいて扱っている。図 1.2(右) のように、印加する外部電場が弱いときには泳動速度も遅く、イオンはコロイド粒子の周りにほぼ等方的に分布しているが、外部電場が大きくなると泳動速度は速くなり、外部電場の効果と溶媒との摩擦の二つの効果により、イオンの分布は彗星が尾を引くように非等方的になる。図 1.2(左) は世界で初めて成功した、多粒子電気泳動の定量的なシミュレーションのスナップショットである。

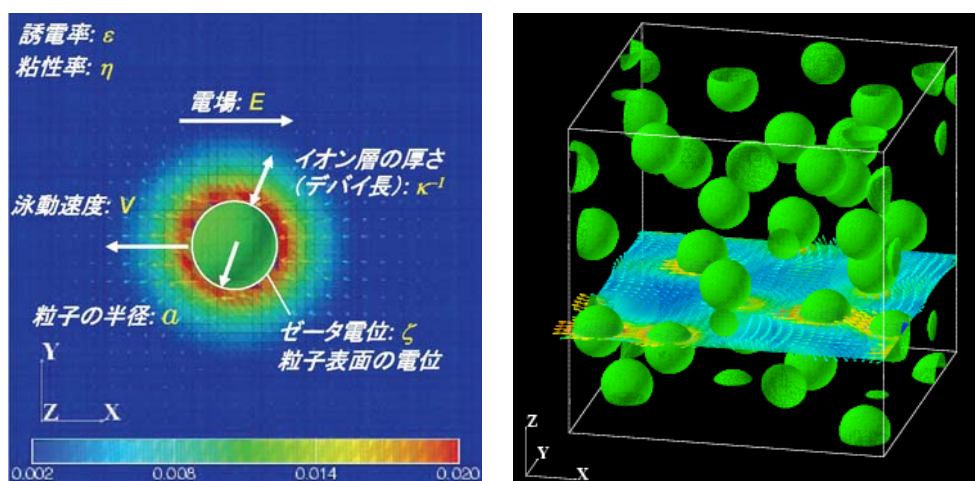


図 1.2 電気泳動の典型的な状況(左図)と、多粒子の電気泳動を世界で初めて定量的にシミュレーションすることに成功したスナップショット(右図)。

これらの成果を発展させ、本研究では以下の拡張を行った。

- コロイド粒子への熱揺らぎ(ブラウン運動)の導入[9, 24, 31]
- 周期境界条件下でせん断流を導入[55, 77]
- 振動電場の導入
- マルチコア並列への対応
- 大規模系への対応

下の図は、拡張したコードを用いて行った鎖状分子のタンブリング運動のシミュレーション(図 1.3)[46]と、定常せん断流下での球状粒子分散系の粘性率の計算結果(図 1.4)[40]である。どちらも高精度・高効率のシミュレーションが実現されている。

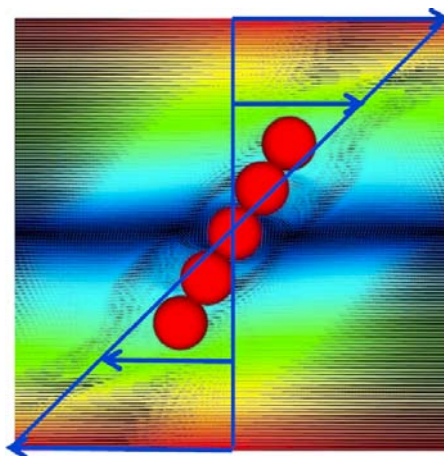


図 1.3 せん断流下にある鎖状分子の回転運動に対する直接数値計算の様子。

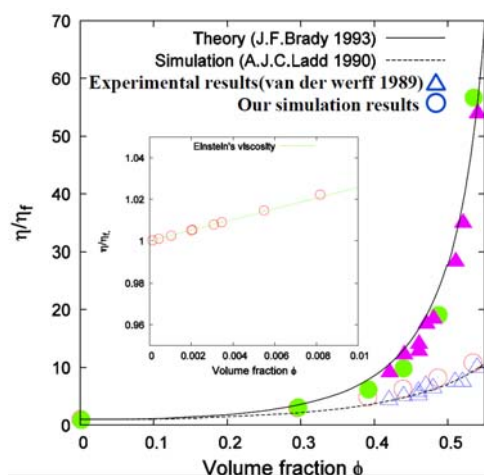


図 1.4 SPM で計算した球状粒子分散系のせん断粘度の体積分率(粒子濃度)依存性

次に示す図 1.5 は、10 万粒子が重力で沈降する大規模シミュレーションのスナップショットである。流体中の粒子は規則正しく沈降するのではなく、流体を介した流体力学的相互作用によって、非常に複雑な乱れた運動を行いながら沈降する。このようなコロイド粒子と流体の大規模なシミュレーションにはスパコンレベルの計算機が必要であったが、本研究で発展させた効率のよい計算方法(SPM)により、パソコンレベルでわずか数日走らせるだけで定量的なシミュレーションが可能になった。なお、本研究で開発した全てのシミュレーションプログラムはコードレベルで無料公開されている。

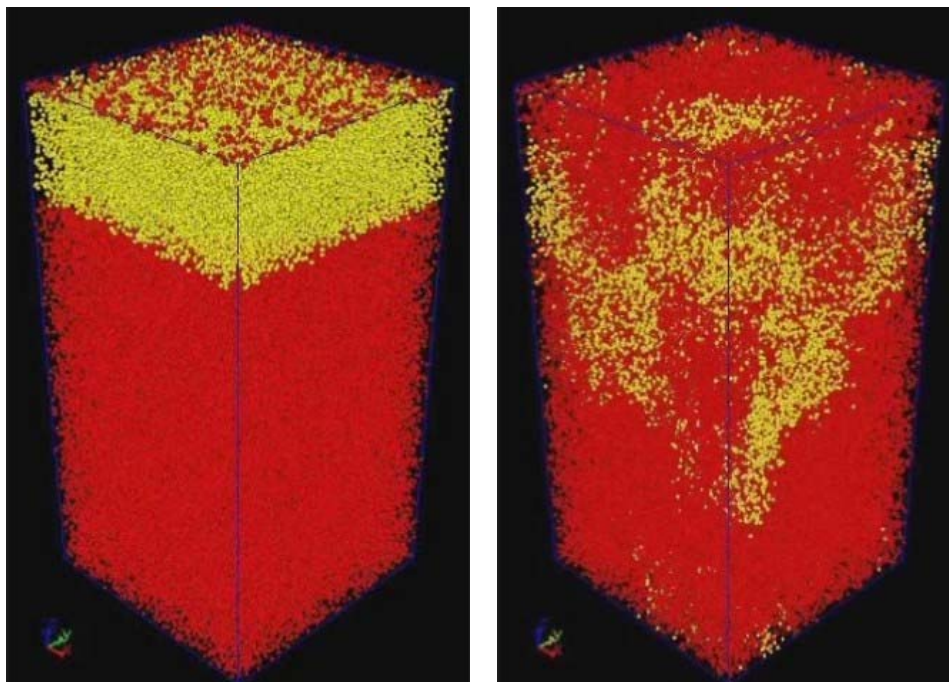


図 1.5 コロイドシミュレーターKAPSEL を用いて、重力によって沈降する 10 万個の粒子の並進・回転運動を、流体の運動と同時シミュレーション(ナビエ・ストークス方程式の直接数値計算)したもの。計算時間はインテル製の Core-i7-3.2GHz(4 コア)マシンを用いて6日間程度と、著しく効率が良い。

## (2)研究成果の今後期待される効果

このシミュレーション法は適応の範囲が大変広く、水中の生体分子や界面が関与する問題、ナノテクノロジーによる機能性材料開発、マイクロ流体デバイスやマイクロラボ等の諸問題への応用が可能である。今後のプログラムの拡張とより速い計算機の使用によって、本研究の成果を産業界へ波及させることが可能である。

## 4. 2 高分子流動のマルチスケールモデリング1(京都大学 山本グループ)

### (1)研究実施内容及び成果

ソフトマター材料の流動は、その材料を構成する内部自由度との運動のカップリングによって複雑な挙動を示す。そのような複雑な流動を数値流体力学(CFD)の方法を使って計算するには、あらかじめその流体の構成方程式が用意されている必要がある。しかし、一般にソフトマター材料のレオロジー特性は非常に複雑であり、多くの場合、その特性を十分に再現できる構成方程式が知られていない。一方、分子動力学(MD)計算においては、材料を構成する分子の挙動を計算するため、その巨視的な構成方程式が未知である場合でも適応できる。しかし、分子ひとつひとつの挙動を追跡する MD 計算によって巨視的な流動を計算しようとなると、莫大な計算時間を要す事になり、そのような計算は現実的には不可能である。

ソフトマターの流動シミュレーションが抱えるこのような問題を解決する一つの方法として、我々は MD と CFD の階層連結シミュレーションを開発した[22, 32, 41, 68]。我々が開発した MD/CFD 階層連結シミュレーションでは、巨視的な流れ場は通常の格子メッシュベースの CFD で計算するが、その際に必要とされる格子点上での局所応力については、構成方程式は用いず、CFD から求められる局所的な流れ場をもとに MD によって直接、数値的に求める。即ち、多数の MD が CFD の各格子点に連結させられており、CFD 計算のタイムステップ毎に MD によって応力の局所サンプリングを行う。この方法を用いる事で、構成方程式があらかじめ分かっていないような複雑な材料の流動でも、CFD の計算スキームを適用して計算する事が可能となり、また MD シミュレーションでは現実的に扱う事ができないような巨視的な系の流動を計

算することが可能となる。

上述のアイデアに基づく MD/CFD 連結計算法を開発するにあたって、まずは、その手法の妥当性を検証するために、Lennard-Jones 分子からなる単純液体に対する基本的な流動について、MD/CFD 連結法を用いて計算した結果と、ナビエ・ストークス方程式を用いて計算した結果と比較することから始めた。図 2.1 は、2次元キャビティ流れの連結計算法(Hybrid)を用いて計算した結果とナビエ・ストークスを用いて計算した結果の速度場のスナップショットの比較である。なお連結計算法では、全ての時空間領域を MD 法だけで計算する場合に比べて512倍の計算効率で計算されたことに相当する結果である。連結計算法では計算結果にノイズが含まれている事が分かるが、このノイズは時間平均を取る事で十分に取除かれ、その結果はナビエ・ストークスの結果と良く一致することを確認した。また、このノイズの性質についても揺動散逸定理に基づく揺らぎの流体力学の理論と比較し詳細に調べた。その結果、我々の MD/CFD 連結計算法で生じるノイズは、揺動散逸定理や中心極限定理などと矛盾しない性質のものであることを確認した。単純液体に対する連結計算法の妥当性の検証の結果については原著論文[22]において報告した。

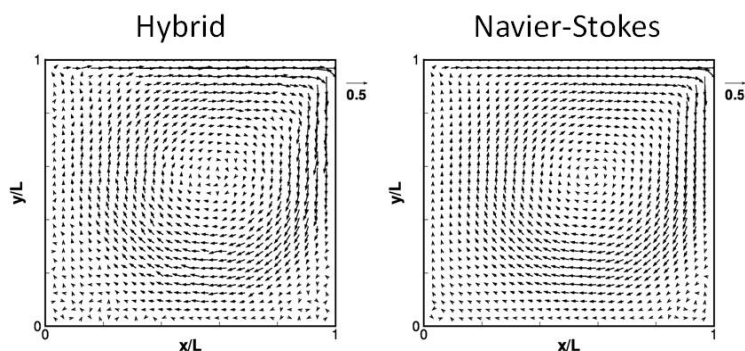


図 2.1 上の壁が左から右にスライドしたときのキャビティ内の流れ. 連結計算法(左)とナビエ・ストークス計算(右)の流れ場のスナップショットの比較.

単純液体に対して我々の連結計算法の妥当性についての検証を行った後、本手法は平板間の高分子液体の流動解析へ拡張された。高分子液体では、材料を構成する高分子鎖の遅いダイナミクスによって生じるメモリー効果を正しく取り扱う事ができるように MD/CFD 連結計算法を工夫した。平板間の高分子液体の流動解析の成果については、主に3編の原著論文[32, 41, 68]において発表された。以下では、H23 年に発表された振動平板間での高分子液体の動的レオロジー特性の解析の成果[68]について概要を述べる。

高分子液体の動的レオロジーは、板ではさまれた高分子液体に対して片方の板を振動させ高分子液体の様な振動流れを形成することによって測定される。振動板の動きが速くなると、流体の慣性の効果により、振動板上での振動流が遠方に向かうにつれて急激に減少する振動境界層流れが形成される。振動境界層を形成させないための平板の振動数と平板の間隔の関係を求めることは、高分子液体のレオロジー測定において重要な課題である。また、振動境界層流れはハードディスクなどの高速に稼働する部分を有するマイクロ装置内の潤滑油の挙動など、工学的な応用面からも重要な基礎的問題の一つである。

高分子液体のレオロジー特性は非常に複雑で、多くの場合その構成方程式が分かっていない。即ち、多くの高分子液体では計算流体力学(CFD)を用いて振動境界層流れを計算することが出来ない。一方、分子動力学(MD)計算は構成方程式が分かなくても実行可能であり、このような高分子液体の挙動に対しても原理的には適用可能である。しかし、振動境界層の厚みは流体力学的な長さのスケールをもっており、流体力学的な長さのスケールの何倍もの大きな系を全て MD シミュレーションで取り扱うのは現実的には困難である。

本研究では、MD と CFD の階層連結計算法を用いて振動境界層流れにおける高分子液体の動的レオロジー特性を解析した(図 2.2 参照)。この階層連結計算法では、高分子液体の巨視的な流動は固定格子上で通常の CFD 計算によって計算するが、CFD 計算で用いる応力については構成方程式を用いず、各格子点に貼り付けられた MD セルにおいて、その局所的な流動状態に応じた応力を MD 計算によって直接サンプリングしたものを用いる。この階層連結

計算法を用いることで、構成方程式が分かっていないような複雑な流体に対しても、その複雑な流動を効率よく計算することが可能となる。

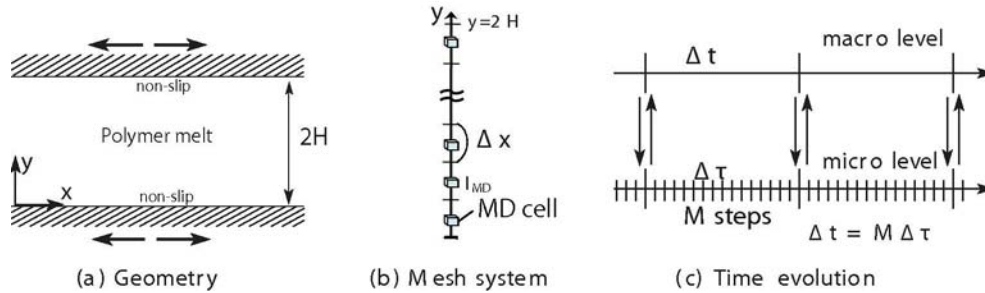


図 2.2 問題と計算方法の概略図. (a)問題の系の概略図. (b)CFD 計算のメッシュと MD セルの配置. (c)CFD 計算と MD 計算の時間発展とデータ交換の概略.

図 2.3 は、高速振動平板間での高分子液体のレオロジー特性(貯蔵弾性率  $G'$  と損失弾性率  $G''$ )の空間変化を示す。高速振動平板上の流体には、振動平板近傍において薄い振動境界層が生じる。このため、高分子液体の局所的な流動状態(局所ひずみ)は振動平板からの距離に応じて急激に変化する。図 2.3 から局所ひずみは振動板から離れるにつれて急激に減少するのが分かる。この局所的な流動状態の変化に応じて、高分子液体のレオロジー特性も空間的に大きく変化する。図 2.3 を見ると、ひずみが大きな振動板極近傍では粘性  $G''$  は弾性  $G'$  より圧倒的に大きく( $G' \ll G''$ )、高分子液体は粘性流体的に振舞うが、局所ひずみが小さくなる平板から遠方では、弾性  $G'$  の方が粘性  $G''$  より大きくなり、高分子液体は粘弾性固体的に振舞う事が分かる。すなわち、高速振動平板上では、高分子液体は粘性流体的領域( $G' \ll G''$ )、粘弾性液体的領域( $G' < G''$ )、粘弾性固体的領域( $G' > G''$ )と三つの異なるレオロジー特性をもつ領域を形成することが明らかにされた。

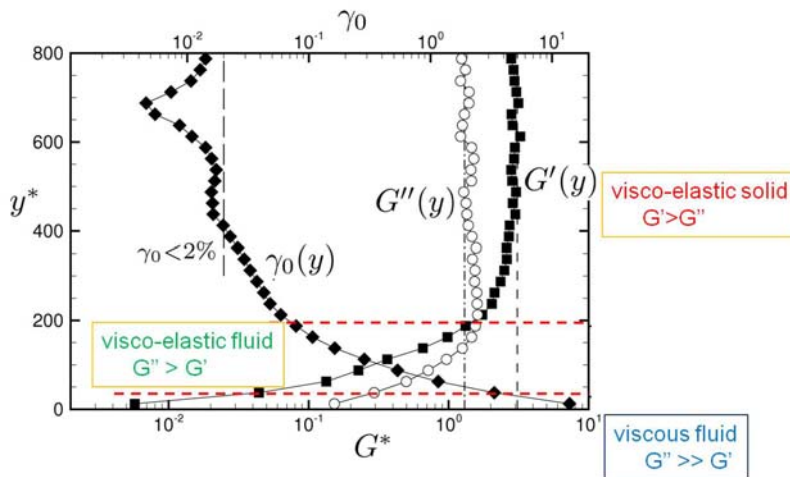


図 2.3 局所レオロジー特性の空間変化.  $G'$ ,  $G''$  は、それぞれ貯蔵弾性率, 損失弾性率を表す(下の横軸).  $\gamma_0$  は局所ひずみの大きさを表す(上の横軸). 縦軸は振動平板からの距離を表す.

図 2.4 は平板の振動数  $\omega_0$  を様々に変化させた時の高分子液体の粘弾性特性 ( $\tan\delta = G''/G'$ ) の変化を、平板振動数(横軸)と局所ひずみ速度(縦軸)に対してプロットしたものである。図の上方はひずみ速度の大きい平板近傍に対応し、下側はひずみ速度の小さい平板遠方に対応する。振動数の小さい時には、粘弾性特性はあまり大きな変化はしないが、振動数が大きくなると粘弾性特性がかなり大きく変化する事が分かる。特に、図の右端(高振動数領域)においては、前段落で述べたように、粘弾性固体領域(e.g.,  $\tan\delta < 1$ )から粘性流体領域(e.g.,  $\tan\delta > 10$ )まで粘弾性特性が大きく変化する事が分かる。

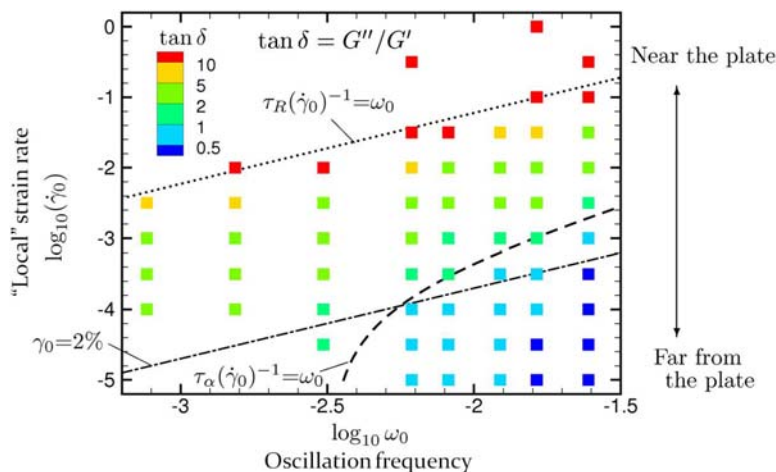


図 2.4 平板振動数 $\omega_0$ を変化させた時の、粘弾性特性 ( $\tan\delta=G''/G'$ ) の変化. 縦軸は局所ひずみ速度, 横軸は振動平板数を表す. 点線と一点鎖線はそれぞれ, 高分子鎖の緩和時間 $\tau_R$ とモノマーの緩和時間 $\tau_\alpha$ の逆数が平板振動数と一致する位置を示す.

最後に、図 2.5 は、局所応力に対するスペクトル解析の結果から非線形応答の強さの空間的变化を示した結果である。図の横軸は、振動平板からの距離  $y$  を各振動数における振動境界層の厚み  $l_b$  で除した無次元距離を表す。縦軸は、基本振動数(平板振動数) $\omega_0$  に対する高調波  $3\omega_0$  の応答の強さを表す。どの平板振動数 $\omega_0$  においても、高調波成分による非線形応答が境界層内部( $y < l_b$ )において、平板に近づくにつれて急激に減衰している様子が分かる。すなわち、境界層内部では(基本)振動数 $\omega_0$  で振動する平板の影響を強く受けて、高分子液体の高調波成分による非線形挙動が抑圧される事が明らかにされた。

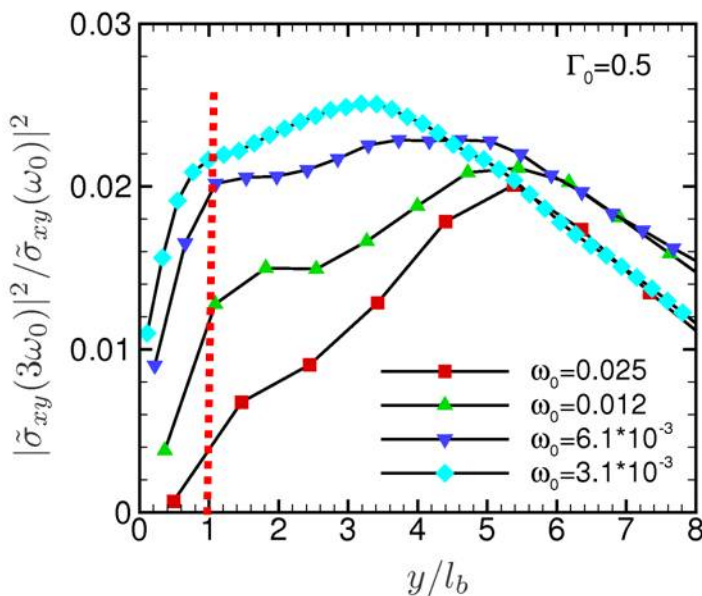


図 2.5 非線形応答の大きさの空間変化. 縦軸は基本振動成分に対する高調波成分の応力パワースペクトルの比. 横軸は、平板からの距離  $y$  を各振動数に対する境界層の厚み  $l_b$  で除した無次元距離.

## (2)研究成果の今後期待される効果

本研究では、ソフトマター材料の流動に対して、局所応力サンプリングと言うアイディアに基づく MD/CFD 連結計算法を世界に先駆けて開発し、実際に、平板間の高分子液体における幾つかの興味深い現象を明らかにした。巨視的なスケールの現象を全て MD 法だけシミュレーションするのは、現在の世界最速の計算機を用いても困難であり、構成方程式の未知な複雑な材料の流動現象の解析に対しては、本研究で開発したような MD/CFD 連結計算法が一つの有効な手法として期待される。

工学分野で利用されるソフトマター材料の多くは、そのレオロジー特性がかなり複雑で、特にその非線形挙動については殆ど分かっていない場合も多い。本研究で開発した MD/CFD 連結計算法は、非線形レオロジー挙動を含む複雑流動に対しても適応可能であり、その工学分野への応用により、様々な分野で重要な成果を挙げる事が期待される。具体的にブレークスルー期待される応用先の一つとして、例えば、高速稼働するナノ・マイクロ装置の解析が挙げられ

る。このような装置が動作する状況は、MD シミュレーションで解析するには大きすぎ、逆に CFD シミュレーションや実験的な手法で解析するには小さすぎるという問題がある。今回の方法は、例えばハードディスクのヘッドやマイクロモーターなど、人間のスケールに比べて非常に小さいが、分子の大きさに比べればずっと大きい可動部を持つ装置の制御や解析のシミュレーションなどへの応用が期待される。

#### 4. 3 シミュレーションの高速化(慶應義塾大学 泰岡グループ)

##### (1)研究実施内容及び成果

##### (A)GPU 用ライブラリの開発

分子動力学拠点では、高分子およびコロイドシミュレータに求められる高速な分子動力学シミュレーションを実現するため、準汎用計算機(Playstation 3 や GPU など)を用いて加速するプログラムを開発し、ライブラリとして研究者が使えるように整備した。

分子動力学シミュレーションでは原子間にクーロン力、分子間力、結合力などが働くが、その中でも非結合力(クーロン力と分子間力)の計算が多くを占める。系が大きくなってくると非結合力の中でもクーロン力が支配的になる。このため、非結合力をいかに高速に計算するかが分子動力学シミュレーションの高速化のカギになる。分子動力学拠点では、準汎用計算機(Playstation 3 や GPU)を用いて高速化を行った。

準汎用計算機とは、一般の CPU に比べて高速だが制約が多い計算機のことである。専用計算機と違ってプログラミング可能であるため汎用であるが、「高速なメモリーが小さい」「コーディングが大変」などの制約があり、高速なプログラムを開発するのが難しい。そこで分子動力学拠点では、アクセラレータ型のプログラミングスタイルで早い時点から準汎用計算機を活用した。アクセラレータ型とは、プログラム全体のうちボトルネックとなっている個所だけを高速なプログラムに置き換えることで全体を高速化する手法である。分子動力学拠点のメンバーは MDGRAPE と呼ばれる分子動力学シミュレーション専用のアクセラレータを開発した経験があり、アクセラレータ型のプログラミングのメリットを熟知していた。アクセラレータ型プログラミングのメリットの一つは、ユーザープログラムとのデータの受け渡し(Application Programming Interface; API)を固定することで、プログラム開発をアプリケーション側とアクセラレータ側の二つに分けられることである。MDGRAPE 用に開発されていた MR3library という API と共通化することで、アプリケーション側プログラムをほとんど修正することなしに準汎用計算機を使えるようにした。

準汎用計算機を使って高速化されたプログラムは、ライブラリという形で整備し、研究者のプログラムからすぐに見えるようにした。このライブラリは、分子動力学シミュレーション用プログラムとして世界的に使われている CHARMM プログラムに組み込まれた。また、高速化のノウハウを渦法による乱流計算プログラムに応用し、大規模 GPU クラスタによる低コストな計算を達成し、Gordon Bell 賞を受賞した。GPU を用いたこれらの高速分子動力学シミュレーションプログラムは、高分子拠点での高分子シミュレータとの連携に用いられている。

以下ではいくつかの項目に分けてより詳しく説明する。

- ① Playstation 3 での高速化
- ② GPU での高速化(カットオフなしの場合)
- ③ GPU での高速化(PME を使った場合)
- ④ GPU での疑似倍精度演算
- ⑤ GPU 用ライブラリ開発と CHARMM への搭載
- ⑥ MultiGPU 化と Gordon Bell 賞受賞

##### ① Playstation 3 での高速化

最初に対応した準汎用計算機は Playstation 3(PS3)である。PS3 に搭載されている Cell processor は、発売時の 2006 年末時点で一般の CPU に比べて単精度演算は 10 倍程度高速であった。PS3 はもともとゲーム用であるが、Cell processor はヘテロジニアス型のマルチコア CPU であり、今でもプログラミングが難しいと言われている。しかし、発売から半年の時点で世

界的に使われている分子動力学シミュレーションプログラム AMBER から PS3 を使えるようにし、一般の CPU の何倍も加速した。短期間で開発が可能であったのは、MDGRAPE の MR3library と同じ API で PS3 を使えるようにライブラリを作成したことが大きい。アクセラレータ型プログラミングに着目した点が有効であった。

表 3.1[21]は、4 コア CPU と PS3 との計算速度を、AMBER プログラムを用いたタンパク質のシミュレーションで比較したものである。CPU で 4 コアを使った場合に比べて 5 倍程度計算が加速されている。同じ速度を達成するためのコストと消費電力で比較すると、それぞれ 40 倍、10 倍よい(2007 年 5 月時点)。準汎用計算機の低コストな点が活かされている。

表 3.1 Playstation 3 を用いた加速率

| Number of particles          |                     | 3,339       | 4,953       | 13,101      |
|------------------------------|---------------------|-------------|-------------|-------------|
| PC with dual Xeon 5160 (sec) | Serial              | 323.6       | 700.2       | 4704.6      |
|                              | 4 processes         | 82.8        | 178.8       | 1215.9      |
| PS3 (sec)                    |                     | 25.5        | 34.2        | 221.9       |
| Acceleration                 | Against serial      | <b>12.7</b> | <b>20.5</b> | <b>21.2</b> |
|                              | Against 4 processes | <b>3.2</b>  | <b>5.2</b>  | <b>5.5</b>  |

## ② GPU での高速化(カットオフなしの場合)

PS3 と同時期に発売されたもう一つの準汎用計算機として GPU (Graphics Processing Unit) がある。GPU はもともと 3 次元グラフィックス専用に開発されたが、当時は限定的ながら少し汎用的な計算が行えるものもあった。2006 年末に NVIDIA 社が発売した GPU は、それまでと違い C 言語のままプログラミングが出来るかなり汎用的な計算機として使えた。しかし、高速なメモリーが 16kbyte と非常に小さいなどの制約が多く、プログラミングは難しかった。

GPU の場合も PS3 同様 MR3library 互換のものを開発することで早くからその高速性を有効活用出来た。表 3.2[(2)8]は、表 3.1 同様 AMBER を用いたタンパク質の分子動力学シミュレーションの計算速度を、8 コア CPU、PS3、GPU、MDGRAPE-3 と比較したものである。GPU は、計算速度では専用計算機の MDGRAPE-3 に劣るものの、コストパフォーマンスでは CPU の 13 倍、MDGRAPE-3 の 6 倍よい(2008 年 12 月時点)。ここでも準汎用計算機の低コストな点が活かされている。

2008 年末時点では MDGRAPE-3 が速度や電力効率で GPU より上回っていたが、現在では速度、コストパフォーマンス、電力効率全ての面で GPU が CPU、PS3、MDGRAPE-3 を上回っている。PS3 や MDGRAPE-3 と違って、定期的にアップデートする GPU のメリットが効いている。

表 3.2 GPU を用いた加速率、コストパフォーマンス、電力パフォーマンス

| System                                | PC with dual Xeon E5430 CPUs (8-process) | PS3       | PC with a Geforce 9800GTX | PC with an MDGRAPE-3 PCI-X card |
|---------------------------------------|------------------------------------------|-----------|---------------------------|---------------------------------|
| Simulation time (sec)                 | 75.1                                     | 34.2      | 20.2                      | 7.1                             |
| Acceleration against host 8 processes | 1.0                                      | 2.2       | 3.7                       | 10.6                            |
| Cost (million JPY)                    | 0.3                                      | 0.05      | 0.2 <sup>‡</sup>          | 1.4 <sup>†</sup>                |
| Acceleration / Cost                   | <b>3.3</b>                               | <b>44</b> | <b>19</b>                 | <b>7.6</b>                      |
| Power (kW)                            | 0.4                                      | 0.2       | 0.3 <sup>‡</sup>          | 0.25 <sup>†</sup>               |
| Acceleration / Power                  | <b>2.5</b>                               | <b>11</b> | <b>12</b>                 | <b>42</b>                       |

<sup>‡</sup> PC with a Core2 Duo E6850 CPU is used as the host computer.

<sup>†</sup> PC with a Core2 Quad Q6600 CPU is used as the host computer.

### ③ GPU での高速化(PME を使った場合)

②では非結合力の計算方法としてカットオフなしのアルゴリズムを用いていた。このアルゴリズムでは原子数を  $N$  とすると、 $O(N)$  の計算量が必要となる。現在ではより高速な Particle Mesh Ewald (PME) 法がよく用いられる。PME 法の計算量は、 $O(N \log N)$  である。PME 法では、クーロン力の計算を実空間と波数空間の二つに分け、実空間ではセルインデックス法を用いて 2 体力をカットオフして計算出来る。波数空間では FFT(Fast Fourier Transform)を用いる。

セルインデックス法を用いると並列度(並列に計算できる度合)が減るため、GPU を効率的に使うのが難しくなる。そこで並列度を確保するため、 $j$  粒子の分割、multiple walk 法を用いた。 $J$  粒子とは、ある原子に力を及ぼす原子のことで、通常 2 重ループになる力の計算ルーチンの内側のループで変数  $j$  が使われることから  $j$  粒子と呼ばれている。逆に力を受ける粒子のことは、外側のループに変数  $i$  と使うことから  $i$  粒子と呼ぶ。 $J$  粒子を分割して同じ  $i$  粒子への計算を複数のスレッドで並列に計算することで、セルインデックス法で並列度が減ることを抑えた。また、複数のセルの計算を異なるブロック(スレッドの集まりで通常 64~128 スレッド)に割り当てることで、並列度を落とさず計算できるようにした(後に multiple walk 法と名付けられた)。

表 3.3 PME 法を用いた 32,768 水分子の計算時間

|             | Real<br>Space | Reciprocal<br>Space | Other | Total |
|-------------|---------------|---------------------|-------|-------|
| without GPU | 13.23         | 1.53                | 0.20  | 14.96 |
| with GPU    | 0.39          | 0.53                | 0.20  | 1.12  |

波数空間の計算では、原子の電荷のグリッドへの割り当て、forward FFT、convolution 計算、reverse FFT、グリッドから原子への力の割り当て、の計算が必要となる。これらの計算はそれ程計算時間が変わらないことから、全ての計算を GPU に対応させた。

表 3.3[27]は、GPU で PME 法を用いた際の 32,768 水分子のシミュレーションでの計算時間を示している。GPU を用いることで CPU の 10 倍以上加速していることが分かる。

### ④ GPU での疑似倍精度演算

コンシューマー向け GPU は単精度演算しか高速ではない。倍精度演算は、単精度演算に比べて約 1/10 の速度しかない。サーバー向け GPU の場合は倍精度演算が単精度演算の半分の速度を持つが、5 倍以上も高価格であることから、ここではコンシューマー向け GPU を対象とする。

分子動力学シミュレーションでは全て単精度計算をした場合に精度が落ちてしまう箇所がある。一つは原子の座標、もう一つは力の積算部分である。GPU で精度を落とさず高速に計算するため、それぞれ以下の方法で解決した。

まず原子の座標の表現方法に 32bit 固定小数点(int 型)を用いた。原子の座標の引き算を行った時に精度が落ちるのだが、固定少数点表現なら有効数字が 32bit あるため、座標の引き算の際に桁落ちしてもまだ単精度程度(24bit)の有効ビット数がある。ただし固定小数点への変換に時間がかかるため、高速なアルゴリズムを開発した[21]。通常何演算も必要なところを 2 演算で行える。

力の積算部分に関しては疑似倍精度演算を行った。これは、二つの単精度表現を組み合わせ一つの数値を表す手法である。その代り、一つの疑似倍精度加算は約 10 の単精度演算、一つの疑似倍精度乗算は約 30 の単精度演算を必要とすることが分かっている。二つの原子間の力を単精度で計算した後、それを精度よく積算(加算)するために、疑似倍精度演算を行う。この際、これまでの手法では 10 演算程度かかってしまい、10 倍くらい遅い倍精度演算器を使った方が若干速くなってしまうので疑似倍精度演算を行うメリットがなかった。しかし、5 演算で倍精度に近い精度で積算できる手法を開発した[56]。この手法であれば倍精度演算器を使って積算するよりも 30%程高速に計算できる。通常単精度表現を二つ使うところ、単精度表現と固

定小数点表現の二つを組み合わせたところが工夫した点である。図 3.1 はこの手法を用いた時の原子に働く平均的なオフセット(本来 0 になるべきもの)を表したものである。この手法ではオフセットが 0 になるため、倍精度演算を用いるよりも精度がよいことが分かる。

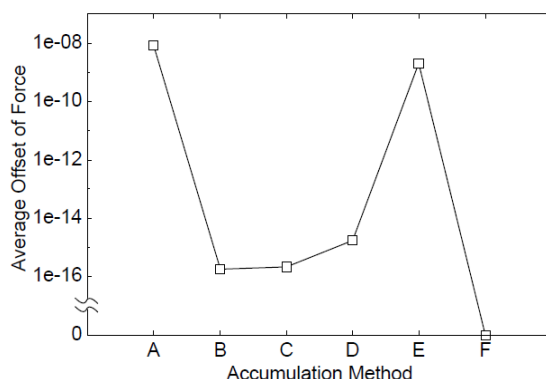


図 3.1 疑似倍精度演算による原子に働く平均的オフセット  
A:単精度での積算、B:倍精度での積算、F:提案手法での積算

#### ⑤ GPU 用ライブラリの開発と CHARMM への搭載

これまでの GPU を使った非結合力の加速プログラムを、他の研究者が使いやすいようにライブラリの形でまとめた。表 3.4 はその抜粋である。これらのライブラリの一部は、KNOPPIX for CUDA と呼ぶ OS にまとめて配布している。KNOPPIX は DVD/USB memory からブート可能な linux であり、KNOPPIX for CUDA は NVIDIA 社向けの開発環境 CUDA やデモプログラムが既にインストールしてあるカスタマイズ版 KNOPPIX である。この DVD でブートすることで OS をインストールすることなくすぐに GPU を使うことが出来る。分子シミュレーションのデモプログラムも組み込まれており、すぐにライブラリを試すことが出来る。

また、このライブラリは世界的に使われている分子シミュレーションプログラムである CHARMM に組み込まれている。このため、GPU をあまり意識することなく研究者が高速な分子動力学シミュレーションを行うことが出来る。

表 3.4 GPU 用ライブラリの例

| カテゴリ     | 関数の名前                            | 機能                                       |
|----------|----------------------------------|------------------------------------------|
| 初期化・終了処理 | MR3init                          | GPU を初期化する                               |
|          | MR3free                          | GPU を解放する                                |
| 力の計算     | MR3calccoulomb                   | クーロン力を計算する                               |
|          | MR3calcvdw                       | 分子間力を計算する                                |
|          | MR3calccoulomb_vdw_ci_exlist     | クーロン力の実空間部分と分子間力を、セルインデックスを使って計算する       |
|          | gpupme                           | 波数空間のクーロン力を計算する                          |
| 力の計算結果回収 | MR3_get forces_and_virialOverlap | GPU での計算結果を回収する(GPU が計算中に CPU が別の計算を行える) |

#### ⑥ MultiGPU 化と Gordon Bell 賞受賞

これまでの説明では GPU を単体で使っていたが、より高速に計算するために複数の GPU を使うことも行われてきている。分子動力学拠点では、複数 GPU (MultiGPU と呼ぶ)の有効性を示すため、これまでのノウハウを使って HPC(High Performance Computing)の世界レベルの計算に挑戦した。具体的には、渦法を使った 16,777,216 粒子の一様等方性乱流の計算を、256GPU を用いて行い、20Tflops の計算速度を達成した。この論文は共著者が行った重力多体問題の計算の数値によってコストパフォーマンスが世界一と認められ、2009 年の Gordon Bell 賞を受賞した[(2)12]。

MultiGPU の経験を分子動力学シミュレーションのプログラムにも応用している。CHARMM ではまだチューニングの余地があるものの MultiGPU に対応している。また、研究室レベルのプログラムでは MultiGPU を用いて更に計算を加速している。このような GPU を用いた分子動力学シミュレーションのプログラムは、高分子拠点での高分子シミュレータとの連携に用いられている。

## (B)シミュレーションの応用

### ① 脂質2重膜の異常拡散現象

細胞内での拡散では、様々な分子が非常に複雑に込み合っているため、異常な拡散現象が度々観測される。我々は、脂質2重膜における脂質分子の込み合いにより、個々の脂質分子が経験するトラップ時間分布がベキ則になる事を発見した[76]。

異常拡散とは、平均2乗変位 (MSD) が時間に対して線形に増大せず、ベキ的に増大する現象の事である。MSD のベキ指数が1より小さい場合には、遅い拡散と呼ばれ、生きている細胞内での mRNA の拡散や粘弾性流体などの分子の混みあった流体でよく観測される。遅い拡散の原因は、三つあり、トラップ時間の平均値が発散(トラップ時間分布がベキ則に従う)、運動の負の相関(粘弾性流体)、拡散する領域のフラクタル性がある。これまでの実験では、分子が混みあった系は粘弾性または幾何学的なフラクタル性が関係すると考えられていた。

我々は、ベキ的なトラップが存在するかどうかを明らかにするため、一つの時系列から得られる長時間平均で定義された MSD (TAMSD) の相対揺らぎ (relative fluctuations) を導入した。TAMSD は、観測時間を無限大にすれば、一定値に収束するため、relative fluctuations は観測時間に対してベキ的にゼロに収束する。ベキ的なトラップを単純化した連続時間ランダムウォーク (CTRW) においてトラップ時間の2次モーメントが発散する場合(平均値が発散する場合には、ゼロに収束しない)、このベキ指数は 0.5 より小さくなる事が理論的にわかった。そして、粘弾性流体のモデルであるフラクショナルブラウン運動 (FBM) では 0.5 となり、CTRW とは異なる振る舞いを示す。さらに、フラクタル格子上的での拡散でも指数は 0.5 となる。したがって、TAMSD の relative fluctuations のスケーリング指数を見る事により、ベキ的なトラップが存在するかどうかを明らかにする事ができる。また、2次モーメントが発散する場合、通常を中心極限定理が破れ、TAMSD の揺らぎは非ガウスの振る舞いを示す。

本研究では、分子動力学シミュレーションを用い、TAMSD には過渡的な遅い拡散が見られ、TAMSD の相対揺らぎのスケーリング指数は 0.5 より小さい事を発見した(図参照)。また、TAMSD の過渡的な遅い拡散はFBMと同じように運動の負の相関と関係する事も確認し、粘弾性と関係する事もわかった。したがって、脂質2重膜は粘弾性があるだけでなく、脂質分子のトラップ時間はベキ則に従い、TAMSD の揺らぎは非ガウスの揺らぎになる事がわかった[76]。

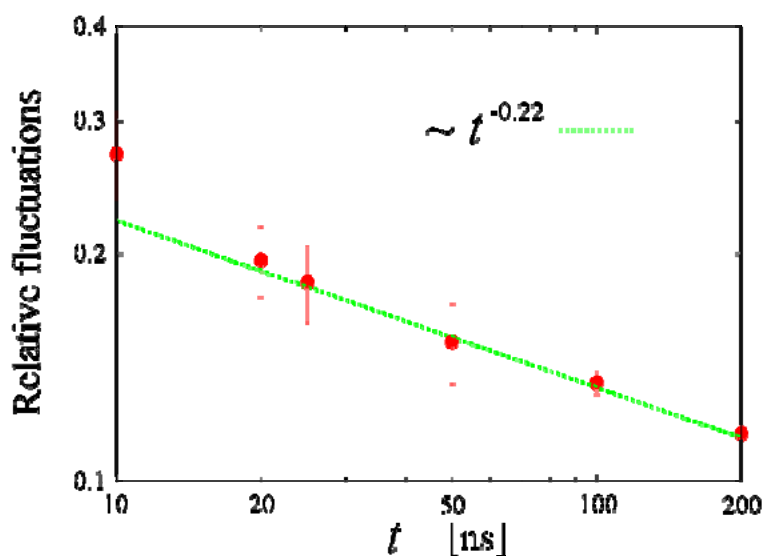


図 3.2 脂質2重膜における脂質分子の TAMSD の relative fluctuations。

## ② 棒状液晶のマルチスケール分子動力学シミュレーション

液晶の特異な物性は分子の配向に由来するため、液晶の物性の解明には分子動力学 (MD) 法をはじめとする分子シミュレーションが有用である。しかしながら、一般に液晶の分子シミュレーションは多大な計算コストを必要とするため、アトミスティックなモデルでは単純な計算にも時間がかかりすぎる。一方粗視化シミュレーションでは液晶分子の情報を表現しきれないため誤差が大きくなってしまう。そこで本研究ではアトミスティックなモデル (OPLS-UA モデル) と粗視化モデル (Gay-Berne モデル) を組み合わせたシミュレーション手法を開発し、計算コストを軽くしつつ実験系をよく再現することを試みた。

本研究で開発したシミュレーション手法は、粗視化 MD のパラメータを、アトミスティック MD を用いて更新していくものである (図 3.3)。更新したパラメータは分子の形状に関するもので、エネルギー等分配則などを用いて計算した。

本研究の手法を用いて 5CB(4-pentyl-4'-cyanobiphenyl) の相転移温度を加熱過程と冷却過程それぞれで調べたところ、液-液晶相転移温度については非常によい一致を見せた (表 3.5)。

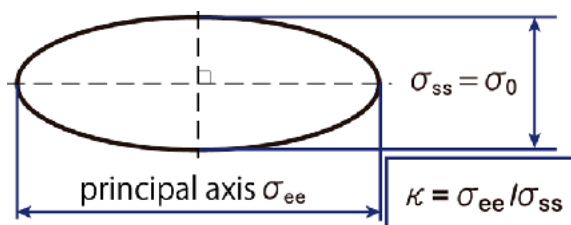


図 3.3 更新した粗視化パラメータ。

表 3.5 相転移温度の比較。run1 は 10K、run2 は 2K 刻みで温度を変化させている。run1/run2 の結果は[冷却過程/加熱過程]。

|           | exp. | run1    | run2    |
|-----------|------|---------|---------|
| 液晶相⇌固相[K] | 297  | 170/210 | -       |
| 液相⇌液晶相[K] | 308  | 310/330 | 302/314 |

## ③ 鎖状高分子の系におけるフルアトム MD と粗視化 MD の接続

高分子の緩和現象を理解することは成形加工などにとって非常に重要であるが、分子のからみあいに起因する非常に長時間に渡る緩和時間がシミュレーションによる解析を困難にしている。本プロジェクトではアトミスティック MD、粗視化 MD、メソスケールシミュレータ (NAPLES) などを接続することで高分子の長時間のふるまいを一本のシミュレーションで観ることを目的としているが、ここではアトミスティック MD と粗視化 MD の接続について述べる。

本研究では、粗視化 MD のパラメータをアトミスティック MD から直接計算するのではなく、アトミスティック MD から Rouse パラメータを計算し、その Rouse パラメータから粗視化 MD のパラメータを計算する。高分子のガラス領域のふるまいはアトミスティック MD を用いないと計算できないため、アトミスティック MD の計算時間はガラス領域を十分カバーしている必要がある。これに関してはアトミスティック MD とそれから得た Rouse パラメータから計算した線形粘弾性を比較することで確認できる。以上を異なる鎖長のポリエチレン (PE) とポリイソプレン (PI) について行った。

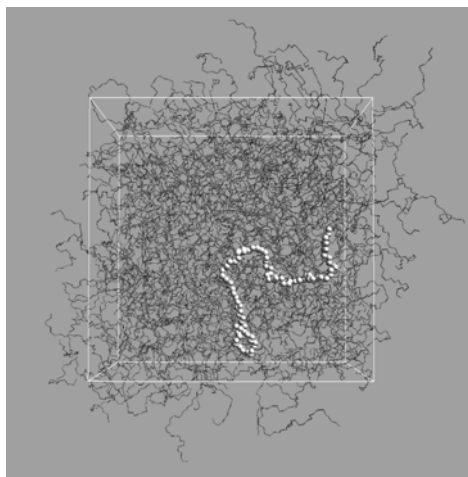


図 3.4 重合度 100 PE のスナップショット

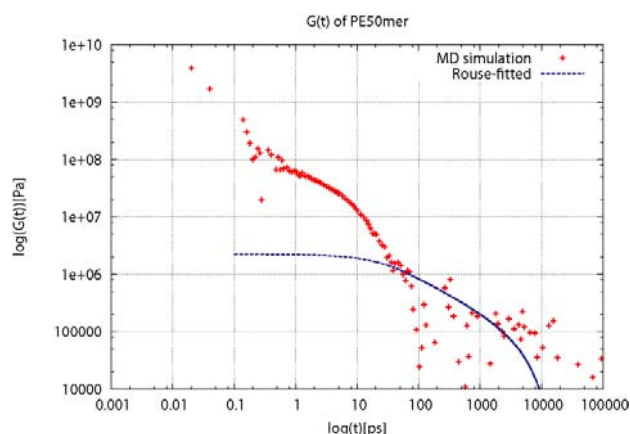


図 3.5 重合度 50 PE の線形緩和弾性率

#### ④ 散逸粒子動力学(DPD: Dissipative Particle Dynamics)法を用いた界面活性剤水溶液と分子モーターに関する研究

分子シミュレーション法の一つである散逸粒子動力学(DPD: Dissipative Particle Dynamics)法という手法を用いて、ソフトマターを対象としたシミュレーションを行い、そのダイナミクスについて研究を行った。

まず紐状ミセルの自己組織化に関する研究を行った[6]。紐状ミセルは組織形成ダイナミクスの特異性により工業的に様々な応用が模索され、一部実用化されている。しかしながら紐状ミセルの挙動は、時間と空間のスケールが広範囲に渡るため理解が進んでいない。本研究では形成過程が、1)球状ミセルの核生成、2)球状ミセルの生成および成長、3)球状ミセルから棒状ミセルへの転移、4)棒状・紐状ミセルの生成および成長の4段階から構成されていることを明らかにした。またミセルは会合数によってその形状を分類できることを示した。

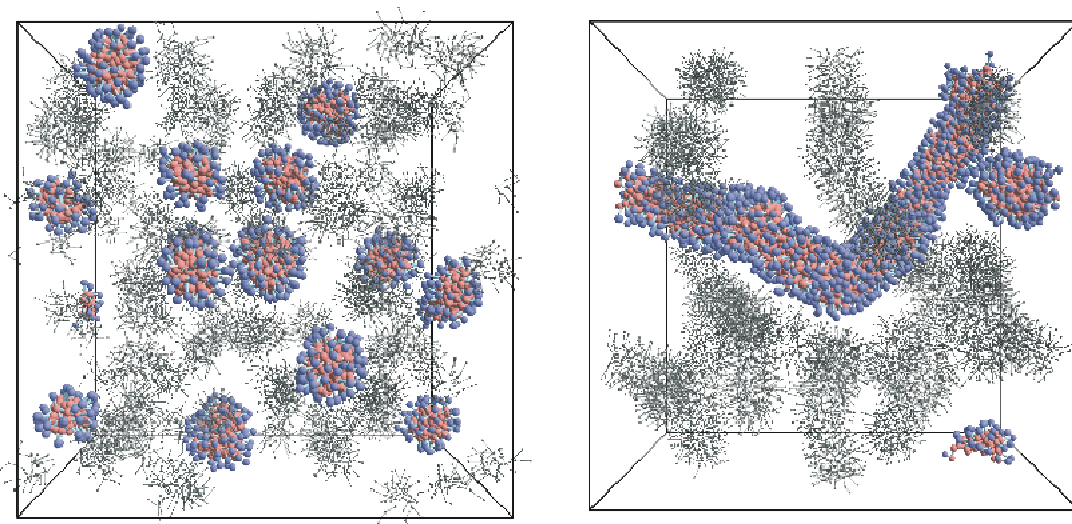


図 3.6 紐状ミセル水溶液のスナップショット 左: 0.11  $\mu s$  右: 52.51  $\mu s$

次にソフトマターのナノ空間閉じ込め系の研究を行った[11]。これまで閉じ込め系の研究は、水等の比較的単純な液体に対するものが主な対象であった。本研究では紐状ミセル水溶液をナノチューブ内に閉じ込め、水溶液の濃度をパラメータにとり、ナノチューブの化学的性質を親水性、疎水性、中性と切り替えて、水溶液のモルフォロジーを調べた。その結果、閉じ込め系の

空間的な拘束力と、ソフトマターの自己集合が合わさり、バルクでは見られない集合形体や相が現れた。そしてそのうちいくつかはこれまで報告例のない全く新しいものであった。

(a) Hydrophobic wall

(b) Hydrophilic wall

(c) Neutral wall

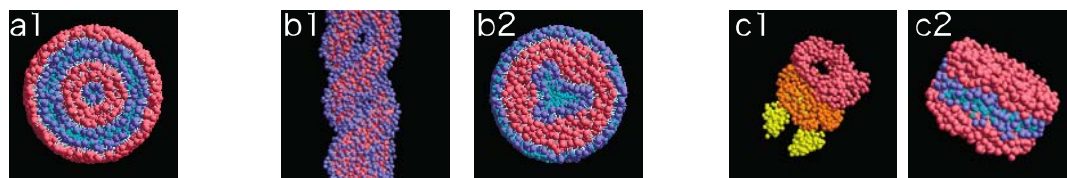


図 3.7 代表的な平衡構造のスナップショット a1: bi-layer nanotube(80%), b1: rope-like micelle(50%), b2: cylindrical bi-layer(80%), c1: hybrid micelle(60%), c2: hybrid disk(80%)

さらに Feynman のサーマル・ラチェット・モデルを用いた高効率ナノモーターシステムの設計を行った[49]。サーマル・ラチェット・モデルは生体分子モーターのモデルのひとつで、このモデルを利用すれば高効率で省サイズのモーターが作成可能であると言われている。しかしながら、これまでこのモデルを物理的に実現する方法はわかっていなかった。本研究では、固/液界面に疎水性の装飾を施し、気泡生成現象を制御することで、サーマル・ラチェット・モデルを物理的に実現することに成功した。またこのモデルによって得られた運動と分子モーターの運動の比較を行ったところ、両者は良く一致し、またエネルギー変換効率は 60 %程度だった。

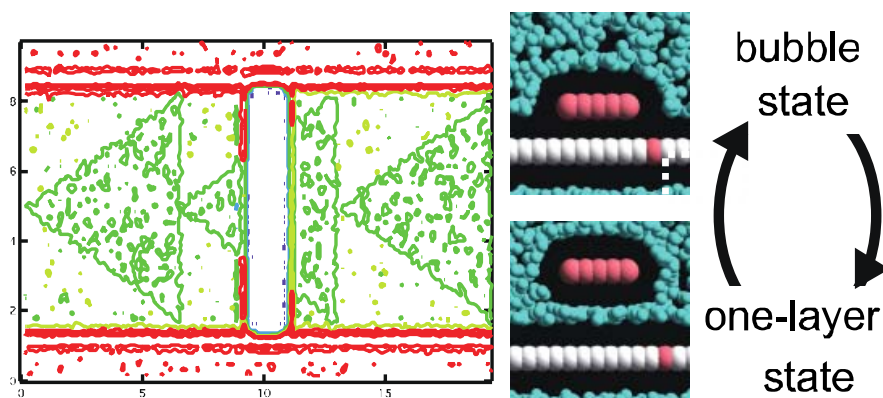


図 3.8 左: bubble state における水粒子の密度等高線図 右: bubble state および one-layer state のスナップショット

#### ⑤ IPS(isotropic periodic sum)法を用いたクーロン力計算の高速化の検証

分子動力学(MD)シミュレーションは、物質を構成する分子の運動を記述する方程式を逐次的に解くことで物質分子系の時間発展を追跡する手法である。近年の計算機性能の向上により、専用計算機や並列計算を用いた大規模系の MD シミュレーションが注目されている。現在では数万～十萬個の分子数を用いて数十～百ナノ秒程度の時間発展を追うことが可能となっており、マルチスケールな現象の階層的接続手法への強力な援用ツールとしても効果的な運用が可能であると期待されている。しかし、巨大分子に関わる現象を観察するためにはマイクロ秒オーダーの時間発展が必要となる。そこで本研究では、既存のものよりも高速な計算手法を用いた大規模かつ長時間の MD シミュレーションを目指す。

MD シミュレーションにおいて最も計算量の多い箇所は、分子間相互作用の計算である。特に長距離相互作用の計算は計算量を増大させる最大の要因となる。既存の手法のひとつであるカットオフ法は最もシンプルなアルゴリズムを持ち、並列化効率が高い。しかし長距離相互作用の計算精度に問題がある。一方、長距離効果の厳密な計算を可能にした Ewald 法は速度と並列化効率に問題がある。そのため、本研究では IPS(isotropic periodic sum)法と呼ばれる、カットオフ法と同様のアルゴリズムを持ち、長距離効果を近似的に考慮した長距離相互作用計算

手法に注目した。しかし IPS 法は比較的新しい相互作用計算手法であり、その精度検証が不可欠であった。そこで(1) Lennard-Jones 液体における IPS 法の精度検証[4]、(2) 水バルクにおける IPS 法のカットオフ依存性の検証[53, 74]、(3) 水気液界面における IPS 法の精度検証[67]、(4) IPS/Tree 法の開発[71]がそれぞれ行われた。(1)において、IPS 法は十分に低い計算コストで主要な熱力学量(ポテンシャルエネルギー、圧力、輸送係数など)に対して十分な精度を与えることが示された。(2)では、水分子の液体構造を記述する最も基本的な物理量である動径分布関数に、特徴的なカットオフ依存性を発見した。これを回避するために長いカットオフをとる必要があることが判明した。(3)においても水の気液界面構造を良く再現するためには十分に長いカットオフが必要であることがわかった。長いカットオフは計算量の増加につながるため、長いカットオフと計算量の低減を両立した新たな手法として IPS/Tree 法を開発した。IPS/Tree 法は階層的空間分割構造による多重極展開法と IPS 法を組み合わせた新たな手法であり、計算量を低減しつつ十分な精度を発揮することが確認された。

#### (2)研究成果の今後期待される効果

分子動力学シミュレーションの高速化については、GPU 用のライブラリの開発がすみ、CHARMM への搭載を行うことができた。ライブラリは、自作のソフトウェアを始め他のソフトウェアでも使用することができることから、PME 法を用いたクーロン力の計算や Lennard-Jones ポテンシャルを用いた近距離力の計算に適用できる。また、FMM 法について渦法を例としてプログラムを開発してきており、今後分子動力学シミュレーションに応用することにより、より大規模な計算が可能となることが期待できる。

シミュレーションの応用としては、計算を高速化したことから粗視化の計算を行う前、または粗視化の計算のために必要な分子動力学シミュレーションが長時間行うことができるようになり、計算の応用が広がった。今後はさらに難しい系における計算が可能になっていくと考えられる。

### 4. 4 (京都大学 増淵グループ)

#### (1)研究実施内容及び成果

##### (A) 分子動力学と高分子専用シミュレータの連携

分子シミュレーションによる高分子の溶融物性予測の難しさは、1) ダイナミクスが重要なこと、2) 系の緩和時間が長いこと、にある。比較的低分子のものは緩和時間が短く、平衡に近い状態で材料として用いられるため、溶融物性も Green-Kubo 公式により求められる。ところが高分子の場合は、緩和時間が成形加工プロセスの特徴的時間に比べてはるかに長く、非平衡ないし準平衡状態で固定化される。したがって材料物性を予測するためには、系に与えられた外乱の履歴を考慮して系のダイナミクスを予測することが必要になる。特に溶融物性はそのような高分子の緩和が端的に現れるものであり、流動や変形によって分子に与えられた変形が回復していく過程に対応している。

高分子の溶融物性とダイナミクスの特異性は、「からみあい」によるものとされている。からみあいは分子鎖どうしが互いにすり抜けることはできないという幾何学的な制約である。からみあいは(不思議なことに)平衡状態には影響せず、高分子の運動に対する幾何学的束縛として働き、ダイナミクスだけを変質させると考えられている。

高分子に適用可能な分子シミュレーション手法は様々あるが、からみあった高分子の長時間ダイナミクスを実用的に追うことができる手法は少ない。Full atomistic または United atom 分子動力学 (MD) では計算可能時間が  $10^{-9}$ sec 程度であり、高分子に含まれる原子のパッキングの乱れや局所的な回転運動を見るには向いているが、分子全体の運動を見ることはできない。いくつかの原子をひとまとめにして計算コストを落とす Coarse-grained (粗視化) MD は、 $10^{-3}$ sec 程度までの計算を行うことができ、粗視化ポテンシャルを通して(粗視化されているとはいえ)分子間相互作用を考えることもできるので高分子では多用される(本プロジェクトでも論文[5]で利用している)。しかし高分子のからみあい運動を扱うには不十分である。さらに粗視化レベルを上げた DPD (Dissipative Particle Dynamics) 法[6, 11]は、平衡状態を議論するには好適

であり計算も高速だが、一般に用いられる保存力項が分子間のすりぬけを許すために本質的にからみあいを扱えない。Self-consistent Field 法(SCF)などの密度汎関数に基づく方法も平衡構造を議論するには極めて有用であるが、多くの場合からみあい効果は考えられていない。考えられている場合でも、からみあいの影響をマクロに評価した構成方程式(外乱と応答の関係を表す式)が必要であり、構成方程式と分子構造との関係が一義に決められていない現状では分子シミュレーション手法としては利用に困難がある。

一方、高分子のからみあいだけに注目して、高分子系のダイナミクスを記述する理論が高分子物理学の黎明期から提案され発展してきた。しかし化学的な意味での相互作用はあまり取り入れられてこなかった。発展とともに大きく分ければ、1)からみあいが疑似架橋であるとする理論、2)からみあいを管状の束縛として考えるレプテーション理論、3)上記二つの考えを組み合わせたスリップリング理論、である。これらはからみあいが分子運動に及ぼす影響を巧みに抽出し、それによって変質された境界条件の下で高分子のダイナミクスを記述するため、分子シミュレーションというよりは抽象化された半現象論的モデルに基づく数値計算に近い。例えばレプテーション理論では、からみあった高分子系という複雑な多体問題を、管様の境界条件でダイナミクスが束縛された一本鎖の問題に引き直して定式化している。多体の運動を直接計算しないので計算は当然速いが、化学的な相互作用を入れるには困難がある。

我々は高分子の長時間ダイナミクスを予測できる理論モデルとして Primitive Chain Network (PCN) モデルを提案し開発をすすめてきた。PCN モデルは、1) スリップリング模型の考えを拡張した実空間でのからみあい運動の記述と、2) 系の局所平衡を仮定した密度汎関数モデル的な化学ポテンシャルの取り扱い、に特徴がある。

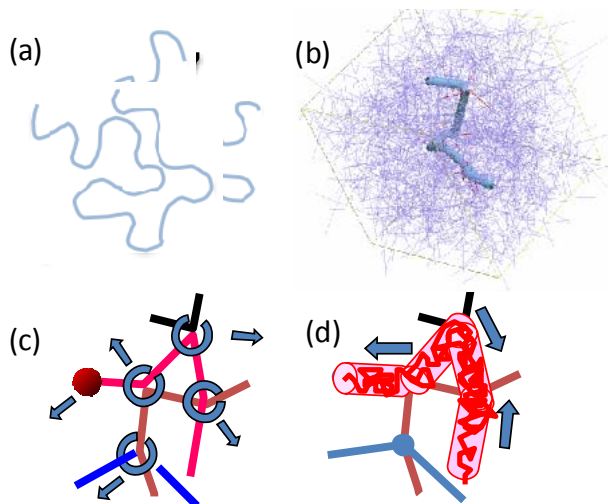


図 4.1 PCN モデルの概念図。(a)からみあった高分子、(b)シミュレーションスナップショット、(c)からみあい点の運動、(d)モノマーの輸送

からみあった高分子の系を図 4.1のように考える。系内のからみあいに注目し、スリップリング描像に基づいて以下を仮定する。1)一つのからみあいには二つの分子が寄与している。2)からみあい点は末端からしか外れない。3)からみあい点は分子鎖上をすべることができる。その上ですべての鎖を3次元セル内でスリップリングにより結合させてからみあいネットワークをつくる。(従来のスリップリングモデルは実空間上の鎖間の接続がない。) 3次元空間上で多体粒子の運動を解くという意味で、従来の分子シミュレーションに近い考え方が可能であり、かつ異種の高分子の混合等、分子シミュレーションの対象となりやすい問題を容易に解くことができる。

系のダイナミクスは、1)スリップリング(からみあい点)の運動、2)からみあい点間のモノマーの移送、3)からみあい構造の変化、で記述する。1)および2)の運動に寄与する物理化学的な力として、摩擦力、部分鎖の張力、化学ポテンシャル場による熱力学的力、熱揺動力、を考え

る。運動方程式は以下ようになる。

$$2\zeta \frac{d\mathbf{R}}{dt} = \frac{3kT}{b^2} \sum_i^4 \frac{\mathbf{r}_i}{n_i} - 2n_0 \nabla \mu + \mathbf{F} \quad (1)$$

$$\frac{\zeta}{\rho} \frac{dn}{dt} = \frac{3kT}{b^2} \left( \frac{r_i}{n_i} - \frac{r_{i-1}}{n_{i-1}} \right) - n_0 \nabla \mu + f \quad (2)$$

式(1)はスリップリnkの運動を記述するもので、左辺が摩擦力であり、 $\zeta$  はスリップリnkの抵抗、 $\mathbf{R}$  はスリップリnkの位置を表す。右辺第1項は部分鎖の張力のスリップリnkにおける力学的バランスを表し、 $b$  は管内にある高分子を構成するモノマーの長さ、 $n$  は当該セグメントに含まれるモノマーの数、 $\mathbf{r}$  はセグメント間をつなぐボンドベクトルである。右辺第2項は熱力学的力で、 $\mu$  は化学ポテンシャル、 $n_0$  は  $n$  の平衡値である。最後に右辺第3項  $\mathbf{F}$  は揺動散逸定理を満たす熱揺動力である。式(2)はからみあい点間のモノマーの移送を記述し、それぞれの項の意味は式(1)と同じだが、鎖に沿って一次元で考える。なおブレンドの場合や共重合体で異なるモノマーを含む場合には、モノマー種による  $\zeta$  や  $b$  の違いを考慮して容易に拡張できる。また分岐鎖を考える場合には、分岐点において  $dn/dt=0$  とする。

分子間相互作用は化学ポテンシャルを通じて導入する。化学ポテンシャルを求めるための自由エネルギーは以下を用いている。

$$A = A_{mix} + A_{vol} \quad (3)$$

$$A_{mix}/kT = \chi \phi_\alpha \phi_\beta \quad (4)$$

$$A_{vol}/kT = \begin{cases} \varepsilon \left( \frac{\phi}{\langle \phi \rangle} - 1 \right)^2 & \text{for } \phi > \langle \phi \rangle \\ 0 & \text{for } \phi \leq \langle \phi \rangle \end{cases} \quad (5)$$

ここで  $\phi$  はモノマーの分率、 $\chi$  はフローリーの相互作用パラメータであり、 $\phi$  の添字  $\alpha$  と  $\beta$  は異なる化学種を示す。 $\varepsilon$  は非圧縮性を担保するための現象論的弾性パラメータである。化学ポテンシャル場を計算するにあたっては、系を  $a=b\sqrt{n_0}$  の大きさのメッシュに分けて、それぞれのメッシュ毎に局所的な化学ポテンシャルを定義している。

最後にからみあい構造の変化についてはアルゴリズム的に処理する。スリップリnk描像によれば、スリップリnk(からみあい)は、分子の末端でしか抜けない。この仮定に従い、末端セグメントのモノマー数を監視し、以下の条件を満たすかどうか判定する。

$$0.5 < n/n_0 < 1.5 \quad (6)$$

この条件よりも当該モノマー数が少ない場合、当該末端に隣接するからみあい点は消滅する。逆に当該モノマー数が多い場合には、周辺のセグメントからランダムに選んだ一つと新しくからみあい点を生成する。なお、1分子中に複数の分岐点をもつ高分子(H 形や楕円形等)の場合には、末端だけでの系のトポロジー変化だけでは不十分であるため、さらに複雑な取り扱いが求められる。

計算結果を現実の系に対応させるには式(1)、(2)のパラメータ  $a$  と  $\zeta$  が必要になるが、多くの場合はこれらの量ではなく、実験的に求めやすい単位弾性率  $G_0$  および単位時間  $\tau_0$  を用いる[7]。これらの量は高分子の一次構造と温度に依存するが、分子量、分子量分布、分岐構造にはよらない。実際、分子量に対する分子鎖の広がり/緩和時間/粘度など、種々の物理量の依存性は高分子の一次構造によらず普遍的なものだが、その普遍性を本モデルも再現する。

半経験的なパラメータ  $a$  と  $\zeta$  を適切に決めれば、あらゆる分子構造をもつ高分子の長時間ダイナミクスと流動特性を高精度に予測することが可能である[12, 13, 14, 15, 17, 25, 26, 34, 37, 43, 64, 73, 81]。図 4.2 に分岐構造を持つポリスチレンの伸長変形に対する過渡応答を予測した結果を示す。この計算は本手法の他に実施可能なものがない。

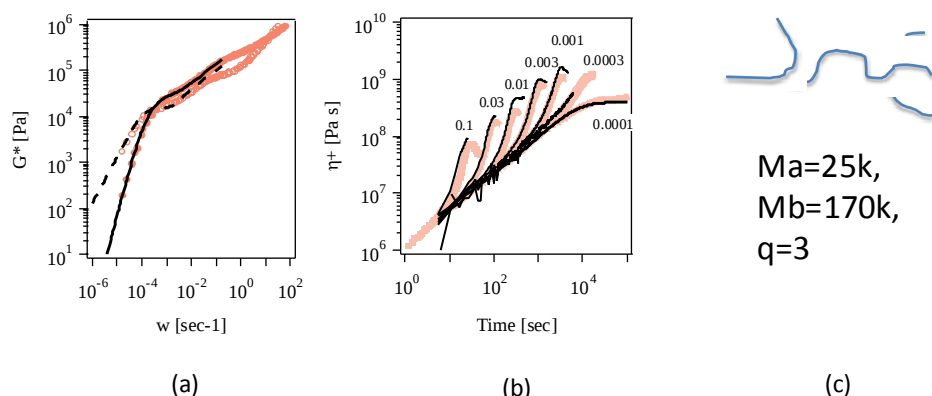


図 4.2 PCN モデルによる高分子ダイナミクスおよび流動物性の予測(a)動的粘弾性(赤が実験、黒が計算)(b)一軸伸長粘度の過渡変化(数値はひずみ速度)(c)分岐 PS の分子構造(Ma は分岐鎖分子量、Mb は主鎖分子量、q は分岐点からの鎖数)

このように我々の高分子シミュレータは高分子のダイナミクスと流動物性を定量予測することができるが、半経験的なモデルであるためにモデルのパラメータのミクロな意味は明確ではない。そこで分子動力学シミュレーションに対し、分子間の幾何的な束縛を抽出する手法を適用して、我々の高分子シミュレータと連結することを試みた。

我々は粗視化分子動力学シミュレーションから得られた高分子に対しプリミティブパス抽出と呼ばれる手法を用いることで高分子の形成する特徴的ネットワークを抽出し、ネットワークの統計的性質を PCN モデルのからみあいネットワークと比較した[44]。プリミティブパス抽出で得られるネットワーク構造の統計的性質を記述する様々な物理量、例えばからみあい点数の分布やネットワークボンドのサイズ分布は PCN モデルのからみあいネットワークのものとよく一致することがわかった。また緩和関数のような動的な統計量についても二つのモデルの結果はよく一致することがわかった。プリミティブパス抽出で得られた統計量を PCN モデルの統計量と比較することで半経験的なパラメータ  $a$  と  $\zeta$  を分子動力学シミュレーションから決定し、PCN モデルへと接続することが可能となった。

分子動力学シミュレーションでは PCN モデルとは異なり、からみあいの効果は高分子を構成する要素間の相互作用の結果という形で自然に生じる。しかしながら既に述べたように粗視化分子動力学シミュレーションではからみあい高分子のダイナミクスを長時間扱うのは難しい。高分子のミクロスケールの構造と PCN モデルの接続手法を開発したことで、従来の手法では実現困難なミクロスケール構造の情報を反映したからみあった高分子のシミュレーションが実現できるようになった。

我々の高分子シミュレータをミクロに検討する過程で、モデルそのものにも修正が必要であることがわかった。まず式(2)はこの表式では系が平衡状態に達することが保証できない。これは式(2)が平衡状態を保証するための条件である詳細釣り合い条件を満たしていないためである。我々は式(2)を統計力学と確率微分方程式の視点から詳細に検討することで、わずかな改変を導入することで詳細釣り合い関係を回復できることを見いだした。これにより、統計力学的に適切な平衡状態を再現できる改良版モデルを得ることに成功した。また、式(2)は適当な条件下で統計力学的に厳密な形式の良い近似となっており、統計力学的精度があまり必要とされない場合には従来のモデルが利用できることがわかった[61]。

ここまでで検討されていない式(3)–(5)についても統計力学的な検討を行った。式(3)–(5)の表す相互作用のうち、式(5)の相互作用は非圧縮性を実現するために現象論的に導入されたものであり、これまで統計力学的視点からの検討は行われてこなかった。我々は PCN モデルを単純化し解析的に扱えるスリップリングモデルを考えることで PCN モデルにおける相互作用の詳細な検討を試みた。その結果、スリップリングで結合された高分子からなる系には常に人工的な引力相互作用が生じることを示した。この引力は本来存在しないはずのものであり、従ってこれを実効的な形で打ち消すためにモデルに斥力を導入する必要がある。我々は式(5)の現象

論的弾性パラメータを適切に選ぶことで人工的引力を妥当な形で打ち消せることを示した。これにより PCN モデルの相互作用をスリッリンクの統計力学的視点から正当化することに成功した。

#### (B) 高分子専用シミュレータとプロセスシミュレータの連携

(A) で説明した我々の高分子シミュレータを流動シミュレータと組み合わせることにより、高分子の分子構造が高分子材料のプロセッシングにどのように影響するかを予測する技術を開発した。

まずパラメータを介した連結法である。樹脂の流動挙動予測を用いれば、その結果を通常の実験データと同じように考えて流体シミュレーションにおける樹脂流動パラメータを取得し、それを入力とする流体計算によって材料の成形加工特性を予測できる。この場合樹脂の流動挙動を現象論的にパラメータ化して流体計算に渡すのでシミュレータ間に直接の連結はない。

具体例として、我々の高分子シミュレータにより計算された樹脂の流動特性を成形加工 CAE の入力として使い、射出成形品のその検討を行った結果を示す[75]。図 4.3 に解析の流れを示す。

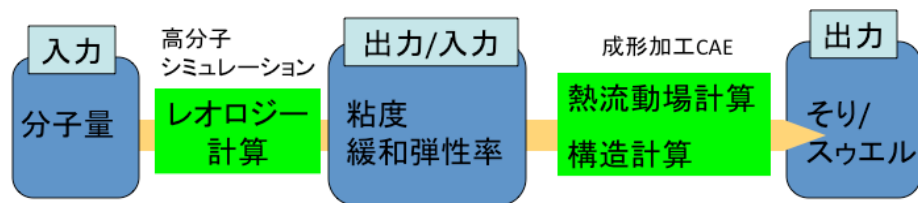


図 4.3 高分子シミュレーションと成形加工 CAE の連携の模式図

図 4.4 に射出成形のそり予測に関する結果を示す。分子量の異なるポリスチレンを用いて薄肉成型品を作成することを想定する。分子量がある臨界値よりも小さいときは金型の温度差により上方向にそるが、分子量が大きくなると分子配向の影響により残留応力が強くなるために逆方向にそる。

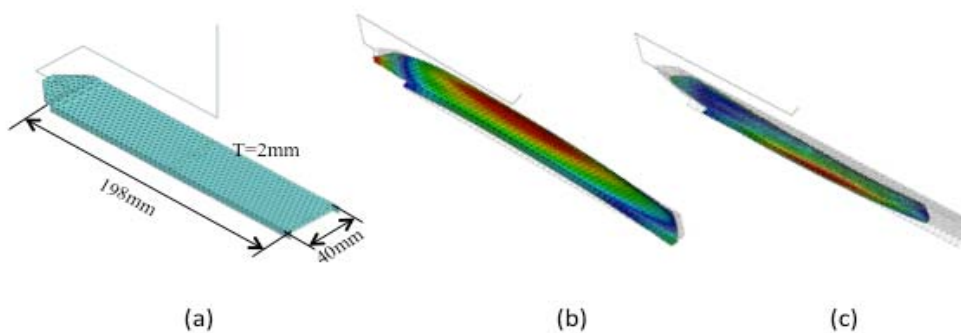


図 4.4 パラメータ連結による射出成形のそり解析。(a)薄肉成型品モデル(b)分子量が小さい場合(c)分子量が大きい場合

高分子シミュレータにおいて、分子運動をトレースしていることを積極的に利用すれば、成形加工過程における分子運動を解析する弱連結法を考えることができる。いくつかの方法が考えられるが、ここではシミュレーションプログラム間にフィードバックのない弱い連結を試行した。まずパラメータ連結と同様に樹脂の流動挙動を高分子シミュレータで計算し、得られた結果を樹脂物性として流体計算を実施する。流体計算によって得られた熱流動場を NAPLES に与える外力として戻し、その条件下での分子運動を観察する。

弱連結の例として溶融紡糸において紡糸線上における分子挙動の解析をおこなった。流体

計算により定常状態を計算し、紡糸線上の流体要素がうけるひずみ速度の時間変化を求めた。得られたひずみ速度場の時間変化を高分子シミュレータに入力として与え、分子挙動を観察した。概念図を図 4.5 に示す。これにより流体計算では得られない分子レベルでの情報、例えば分子の伸びや分子間のからみあい状態の変化などを把握できる。

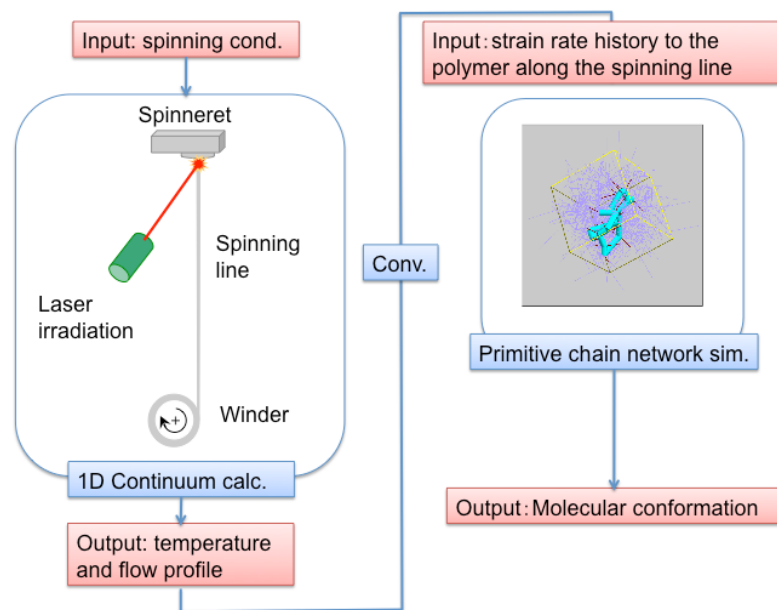


図 4.5 弱連結による紡糸線上の分子運動解析

弱連結の手法ではシミュレータ間にフィードバックがないので非定常流動の場合には計算の妥当性を担保できない。そこで流体計算における各流体要素に高分子シミュレータを埋込み、同時に実行して逐次情報をやり取りする埋込連結が必要になる。

後述するように我々は粒子法流体シミュレータの各流体要素に高分子シミュレータを接続した大規模計算法を試しているが、この計算の実施のためには(A)節で説明した高分子シミュレータでは計算負荷が大きすぎる。そこで新たに高速計算に適したモデルを開発し、グラフィックプロセッサユニット (GPU) の利用による高速化を行った[65]。

(A) で示した PCN モデルではからみあいネットワークの力学的なバランスや相互作用の効果を考慮しているため、シミュレーションの際に多数の高分子が複雑に相互作用する方程式を扱う必要がある。このような高分子間の相互作用を直接的に扱うモデルは高精度な結果を与えるが、その分計算コストが大きくなってしまう。我々は必要な計算コストを抑えるため高分子間の相互作用を大幅に簡易化した 1 本鎖スリッスプリングモデルを開発した。このモデルでは高分子間の相互作用は平均場近似の元で単純化した形で扱われ、その結果個々の高分子は統計的に独立となり効率的な並列処理が可能となる。

我々は大規模並列処理が可能な GPU 上で動作する 1 本鎖スリッスプリングモデルシミュレータを開発した[65]。GPU 上でのシミュレーションは非常に高速であり、通常の CPU 上で動作するシミュレータと比較して約 300 倍という大幅な高速化を実現した。さらに、スリッスプリングモデルの統計力学的性質とレオロジー的性質を PCN モデルと比較することで、PCN モデルとの定量的な接続も可能にした。

## (2)研究成果の今後期待される効果

(A) 本研究により、高分子のガラス領域から流動領域に至る、ナノ秒から数百秒までの十数桁にもおよぶ長時間ダイナミクスをシミュレーションで定量予測できるようになった。これはプラスチック、ゴム、繊維を始めとする高分子材料の開発に工学的に大きく寄与すると考えられる。

今後は異なる材料のブレンドなどに拡張されればさらに有用性が増す。異種材料のブレンド物のように不均一な系を扱うことができるようになれば、生体高分子にも適用範囲を広げることが可能になると考えられる。

(B) 本研究により高分子の分子設計とプロセス設計を接続することができるようになった。これにより例えば、プロセスに適した高分子の材料設計による汎用材料の高付加価値化、機能性高分子の性能を最大化するプロセス設計、リサイクルにおける高分子の劣化を考慮したプロセス設計、などの実現が考えられる。

#### 4.5 ソフトマテリアル系材料マクロシミュレーションのための階層間連携シミュレーション手法の開発(京都大学 谷口グループ)

##### (1) 研究実施内容及び成果

##### ① 研究背景及びマルチスケールシミュレーションの対象としての高分子系材料

ソフトマターの中でも高分子や液晶の流動現象では、その流動が分子配向や高分子であれば伸びのような微視的自由度の状態に深く関係していることが知られている。特に高分子材料は身の回りのありとあらゆる製品に用いられており、分子レベルの情報と熔融状態での流動の関係を保ったままマクロな流動が計算可能となれば、その意義は非常に高い。

我々は初年度(H18 年度)、液晶と高分子液体のせん断流動下での配向シミュレーションに関して調査とマルチスケールシミュレーションの可能性についての検討から研究をスタートした。液晶配向のシミュレーション法では、配向分布関数を解く方法と分子の運動をランジュバン方程式により直接解く方法がある。後者は前者に比べ数値計算負荷が高く、マクロな流動のシミュレーションとの連携に用いるには難しい。このシミュレータを用いて液晶流体のマクロ流動とのシミュレーションの検討を行っていった。また、同時に、高分子液体と関連した流動プロセスのシミュレーションをマルチスケールで行うための調査を行った。液晶系のマルチシミュレーションでは配向関数を用いる方法で検討を進めたが、既に幾つかの先行研究(Chono(1999), Schieber(1996))があることと、高分子の系の方が液晶系よりは将来的に応用範囲が広いこと、また増淵グループと相補的な関係でマルチスケールシミュレーションの研究を進めることが可能であること等の理由から、本グループでの研究対象を高分子液体の流動のマクロスケールシミュレーションに集中させることにした。

高分子材料の重要な特徴の一つは、熱を加えると熔融し流動性を示すということであり、それを利用して材料を変形させ、それを冷却することで望みの形をした固体を作り出すことができるという点にある。更に、高分子液体はその流動履歴によって非常に複雑で非線形な応答を示す。よって、高分子熔融体の流動を研究し数値計算により予測することは、サイエンスとして興味深いのみならず、工業的にも非常に重要である。しかしながら、高分子熔融体の流動の数値計算予測は簡単ではない、というのは流動が流体を構成している高分子のミクロな状態に強く依存するためであり、また、一般に工業的に用いられる高分子は十分に長い分子長を有し複雑に絡み合っており、系に加えられた歪や歪速度に対する微視的レベルでの高分子鎖の応答が複雑であるからである。言い換えるなら、高分子流動の予測の問題は本質的にマルチスケールの問題であり、多くの場合、マクロとミクロの状態のダイナミクスで時間スケールの分離が可能ではない。

高分子液体の流動挙動を正しく予測するためには、物質固有の複雑なミクロな自由度の情報(分子の絡み合いや配向など)をマクロな変数(応力場など)の方程式にどのように反映させるかが重要となる。実際に、流体の運動方程式を解こうとすると応力場に対する構成方程式(流体の変形量や変形速度と応力との関係式)を用いる必要がある。しかし、一般の高分子液体に有効な構成方程式は存在しないし、現実のプロセスは非平衡・非線形状態であることが多く、従来から知られている(半経験的)構成方程式の妥当性は非常に低くなる。そこで、我々は応力を構成方程式から求めるのではなく、ミクロな自由度を取り込んだシミュレータにより求め、各場所でのミクロな状態とマクロな流動場の状態が連携し合うことにより、ミクロな情報からマクロな流動現象を再現する数値計算手法を確立することに取り組んだ。中でも、本グループは高分子熔融体の材料成形プロセスに応用可能なマルチスケールシミュレーション法の確立を目指して

研究を進めた。このような方法では、ミクロなシミュレータとして絡み合った高分子鎖のダイナミクスを高速にかつ精度よく計算するシミュレータの開発が重要であり、これらのシミュレータとマクロな流動シミュレータとの接続により、精度の高いプロセスの予測を行うことが可能となると期待し研究を進めた。この高分子鎖のダイナミクスのシミュレータの開発は、増淵グループと共同研究を行うことにより効率よく研究を進めることを考えた。

## ② 粒子描像での数値流体力学法の開発

通常、多くの流体シミュレーションでは、空間を格子により分割し、オイラー描像において流体の運動方程式を解くことが行われる。しかし、上述した高分子液体のマルチスケールシミュレーション法では、「各物質点が時々刻々変化する流動場の中でどのように時間発展を続けてきたか」という履歴を正確に捉えることが重要となる。そこで、我々はマクロな流動場での物質点(流体粒子)の運動の追跡には、流体を小さいが十分にマクロなスケールの流体粒子の集合で表現し、その流体粒子をラグランジュ的に追跡する方法が最も適切であると考え、H19(2007)年度から H20(2008)年度にかけて、マクロな流動場での流体粒子(次の研究ステップでこの粒子一つ一つにミクロなシミュレータを乗せることになる)の運動を追跡する「粒子描像による流体シミュレーションの開発」を行った。この方法の開発は、ミクロなシミュレータとマクロな流動シミュレータとを連携させる上で基礎となる部分であり非常に重要となる。まずは、粒子描像でのマクロな流動の計算手法について、その妥当性を検証した。

粒子描像でマクロな流体の運動を解くための代表的な方法として、SPH 法(Smoothed Particle Hydrodynamic Method)や MPS 法(Moving Particle Semi-Implicit Method)がある。SPH 法は、重み関数を用いて一つの粒子からある点への寄与を表現し、場の量を多数の粒子からの寄与の重ね合わせで表現する方法である。一方、MPS 法は計算で必要となる勾配や発散といった微分演算子に対しあるモデル式を定義し、それを解きたい微分方程式に適用して解を求める方法である。SPH 法は歴史が古く、方法論に対する研究が国内外で多数行われていたため、この方法を用いてマルチスケールシミュレーションを実行することにした。しかしながら、SPH 法が元々、高分子液体のような非圧縮性流体に対してではなく、宇宙空間中に様々な密度で存在する物質の大規模運動を流体として捉えた圧縮性流体を扱うために開発されたこともあり、流体の非圧縮性を本研究で対象としている流体を扱う程度に十分なレベルで満足させることができるか検討を行う必要があった。そこで、過去の文献調査等と合わせて、以下の二つの方法(a)、(b)を具体的に適用して検討をおこなった。(a)は、従来から検討されている「流体をバロトロピー流体とみなす方法(流体の圧力を密度の関数として扱う)」である。この方法では、関数形を変えても十分な非圧縮性を満たすことができないことが分かった。そこで、(b) 流体粒子間に弱い斥力を働かせる方法を検討した。この方法で、十分な精度の非圧縮性を実現できることが分かった(図 5.1 参照)。またこのような擬似的な圧力項を導入しても解析解とよく一致することがわかった(図 5.2 参照)。実際の成形プロセスでは、高分子液体は流路の中を流れて、最終的に鋳型に入れられて成形される。よって、「粒子描像において、流体・壁間の界面を正確に表せるか」ということが重要となる。ここでは、壁面を固定した粒子の集合体で記述する方法を検討した。この方法では、壁面近傍で数値振動が発生しやすいことが分かった。これは、壁面と流体との間で速度が不連続に変化するために、速度プロファイルに好ましくない振動が出現するためであることがわかった。この数値振動を抑制する方法として、以下の二つの方法(c)、(d)の検討を行った。まず、(c) 人工粘性項を組み入れ、その重みを変えながら、どのように振動が抑えられるかを検討した。ある程度の重みで人工粘性を導入すると、数値振動が抑制されるのが分かった。また、(d) 壁面と流体間の不連続性をなくすために、流体の速度・応力テンソルを外挿する方法を検討した。この方法では、人工粘性を導入することなく、振動を抑制することができることを1次元問題で確認した。また、以下の方法を用いて全体的にアルゴリズムの効率化をはかった。Linked Cell List 法の実装、Verlet Neighbor List 法と Linked cell list 法を組み合わせる相互作用の表作りを行う方法の実装を行い、計算時間を大幅に短縮することができた。以上のように、様々な方法を取り入れ、改良を行い粒子法に基づく流体計算の計算速度と精度を向上させることができた。この結果を踏まえて、H20(2008)年度から各粒子にミクロな

シミュレータを組み込むマルチスケールシミュレーション法の開発に着手した。

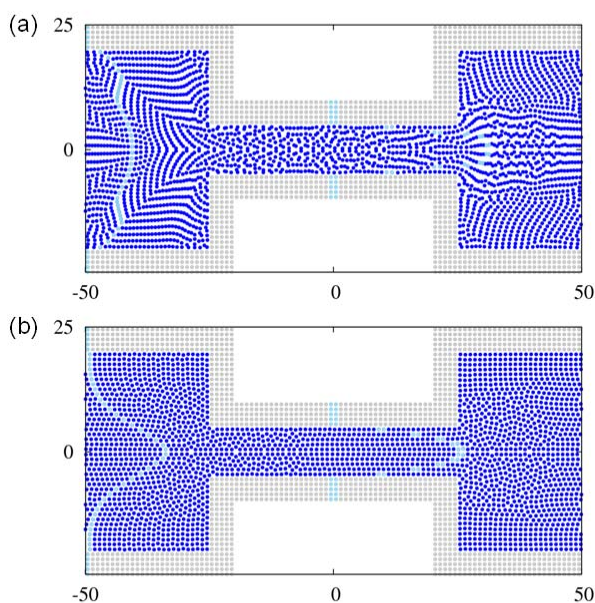


図 5.1 圧力項改善による密度むらの低減。(a)では SPH 法特有の密度のむらが生じているが、(b)ではそのような密度のむらがない。

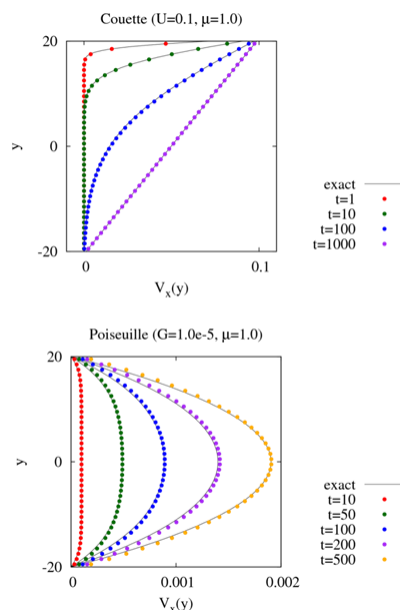


図 5.2 擬似的な圧力項を導入した場合の Couette 流、Poiseuille 流。図中の実線は解析解を示す。シミュレーション結果と解析解がよく一致しているのがわかる。

### ③ 高分子流体(一般の流れ)のためのマルチスケールシミュレーション手法の開発 ーからみあいの無い高分子モデルの接続ー [45]

H20(2008)年度から、各粒子に計算負荷の少ないマイクロ系のシミュレータ(絡み合いのない高分子のモデル系)を用いたマルチスケールシミュレーションを行うことで、理論的に予測される高分子流動の挙動を再現することで本手法の有効性を示すことを試みた。

ソフトマター一般のマクロな流体方程式は Cauchy の運動方程式に従う。単純な液体の流動予測の際には、この Cauchy の運動方程式の応力テンソルが速度勾配テンソルに比例するとした Navier-Stokes 方程式を解く。しかし Navier-Stokes 方程式には弾性の効果が含まれていないため、そのような性質を持つソフトマター一般の流動を記述することはできない。流体をラグランジュ的に解くための方法である粒子法は、この Navier-Stokes 方程式を解くには適しているが、Cauchy の運動方程式をそのままでは解くことができない。Navier-Stokes 方程式を Cauchy の運動方程式の形に式を変形してから粒子法を適用すると、粒子法がもつ数値不安定性が現れるために、安定に解くことができない。したがって、まず、はじめに Cauchy の運動方程式をラグランジュ的に精度よく解くための方法を開発する必要がある。粒子法で Cauchy の運動方程式を取り扱う試みは、2002 年に Ellero らによって行われているが、彼らの方法ではある特定の構成方程式を用いた場合にはうまくいく方法であり、構成方程式を仮定しない場合には、適切に不安定性を回避するための指針がない。そこで、彼らの方法を用いず、より直接的に Cauchy の運動方程式を粒子法で取り扱うための方法を考案した。具体的には Zhang らが 2004 年に開発した Modified Smoothed Particle Hydrodynamics (MSPH) 法を用いることを考えた。巨視的レベルの時間発展を解く際に、速度場の勾配、圧力場の勾配、応力テンソルの勾配のように場の量の空間微分を粒子法により求める必要がある。これらの空間微分を求める際に、Modified Smoothed Particle Hydrodynamics (MSPH) 法で提案されている方法が非常に精度がよいということが分かった。MSPH 法はオリジナルの SPH 法を出発点にテイラー展開に基づいて微分

演算を再定義することでオリジナルの SPH 法の欠点である界面や境界上での粒子点不足から生じる解の振動をほぼ無視できるほどに小さくすることを可能にした方法である。また微分演算の精度もオリジナルの SPH 法に比べると格段に改善されており、値が急激に変化する場合の微分もうまく取り扱えるようになっている。また、この方法では先述の粒子法がもつ数値不安定性を解消できることが分かったので、この MSPH 法を Cauchy の運動方程式を解く際に用いることにした。

具体的な例として、流路内的高分子流体の流れの問題を選び、この系での振る舞いを考察することで、本研究で用いるマルチスケール法の妥当性の検証を行った。ミクロな高分子をダンベルモデルという 2 個の玉をバネでつないただけという非常に簡単なモデルで記述し、流体要素はそのダンベルの集合体から成るとしてシミュレーションを行った。ダンベルモデルは連続体極限では Maxwell モデルという線形の構成方程式に一致するため、問題が正しく解けているかどうか判断する際に都合がよい。検証問題にこのモデルを用いることにした。Maxwell モデルの場合とダンベルモデルの場合について解いた過渡的な流れを図 5.3 と 5.4 に示す。まず、Maxwell モデルの緩和時間を短くしていくとニュートン流体に一致し、その振る舞いが図から読み取ることができる。そして、緩和時間を長くすると、流体がプラグフローを示しており、これは粘弾性流体に特徴的な振る舞いである。したがって、我々の開発した一般の流体へ適用可能な粒子法がきちんと問題を取り扱えていることがわかる。次にダンベルモデルを用いた図 5.4 を示す。ダンベルモデルは有限個のダンベルで流体要素を記述するために統計力学的なゆらぎを持つ。原理的にはこのゆらぎはダンベルの個数を増加させることで減少させることが可能である。実際ここで考察した問題では一つの流体要素あたり 1000 個のダンベルを用いているが、このダンベルの個数を 10000 個にした場合、この統計力学的なゆらぎは結果にほとんど影響を与えないことがわかった。緩和時間が短い場合にはゆらぎの影響が強く表れるために Maxwell モデルの結果とずれる傾向にあるが、緩和時間が長い場合には Maxwell モデルの結果とダンベルモデルの結果はほぼ等しい結果を出すことがわかった。

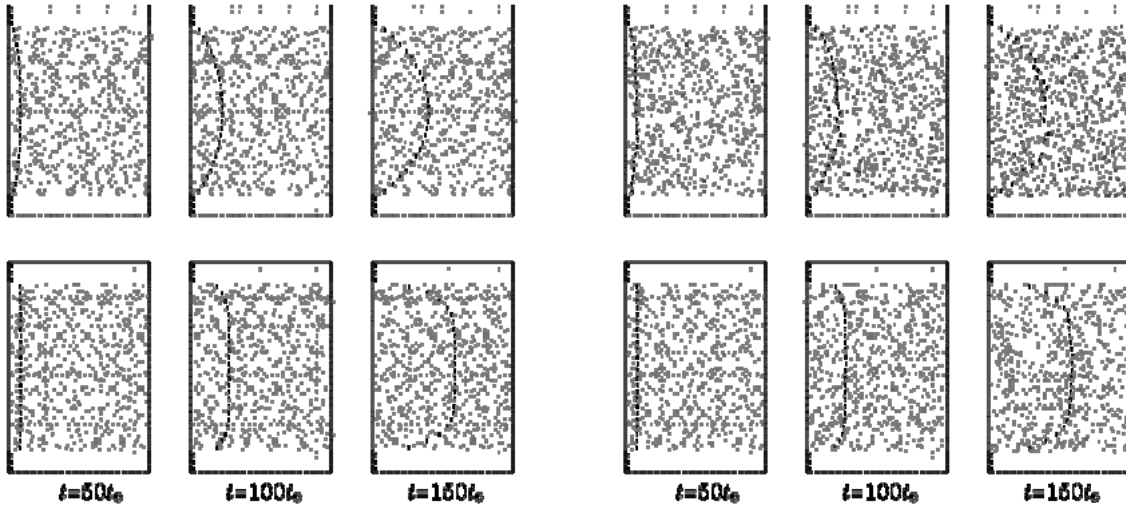


図 5.3 高分子流体の流れ。Maxwell モデルの構成方程式を用いた場合。上段は緩和時間が  $10t_0$  下段は緩和時間が  $1000t_0$ 。

図 5.4 高分子流体の流れ。ダンベルモデルを用いた場合。上段・下段のパラメータは Maxwell モデルに対応するように選んだ。

以上のように、粒子法の適用範囲をニュートン流体から一般の流体へと拡張した。ここで開発された方法は高分子流体に限らず一般のソフトマター流体に適用可能な方法である。粒子法を用いた解析を広く一般の流体に対して適用することで、従来の流体力学的手法では取扱いが困難な流体の流動履歴が重要な問題を取り扱うことが可能である。よって、H20(2008)年度のこの成果を踏まえて、H21(2009)年度からは、より複雑な系として、からみあいのある高分子溶融

体の流動現象に焦点を当て、この方法を適用することを試みた。

#### ④ 高分子流体(一般の流れ)のためのマルチスケールシミュレーション手法の開発

##### ーからみあい高分子モデルの接続ー

H21(2009)年度からは、それまでダンベルモデルを用いていたマイクロな高分子モデルを、より実用的な高分子モデル(高分子間のからみあいを考慮したモデル)に置き換えることを行い、まずは単純な流動様式である平行平板間の流れの問題を解き、正しく問題が取り扱えていること検証した。一般の分岐構造を有する高分子のからみあいに由来する応力の流動に対する応答を構成方程式で記述することは現在のところ世界中のどの研究者も成功しておらず、将来的にもほぼ不可能であると考えられているため、マルチスケールシミュレーションを行う本質的な意義はここにある。つまり、高分子流体は本質的にマクロスコピックな方程式だけでは閉じておらず、ミクロスコピックな情報、特に高分子間のからみあいを何らかの形で取り扱わなければならない。からみあった高分子の状態を直接取り扱おうとすると、高分子それ自身が非常に大きな運動の自由度を持っているために、一つの流体要素の計算をするだけで非常に時間がかかってしまい、マルチスケールシミュレーションは非現実的なものになってしまう。したがって、流体要素を構成する高分子モデルはそれ自身が非常に高速に(つまり、低計算負荷で)動くものでなくてはならない。からみあった高分子の変形に対する力学応答を計算するシミュレーション手法はいくつか提案されており、それぞれ実験結果をよく再現する。同 CREST チームの増淵グループが開発した Primitive chain network model (NAPLES)は非常に応用範囲が広いという特徴がある。NAPLES では短い時間スケールの問題も適用できるのであるが、あまり短い時間スケールが問題とならない遅い流れを扱う場合、NAPLES をさらに粗視化した Slip-link model (PASTA) が NAPLES より短い時間で計算することが可能であり、かつ、長い時間スケールでは NAPLES と同等の精度で実験結果を再現するので、からみあった高分子溶融体を取り扱うには PASTA が有効であると判断した(ただし分子形状等に制限がある)。

そこで PASTA を粒子法シミュレーションに接続して、並行平板間的高分子溶融体の流れを調べた。上流下流の圧力差を3段階(High, Medium, Low)変えた場合の流動方向の速度  $V_x$ 、せん断応力  $\sigma_{yx}$ 、せん断速度  $\kappa_{yx}$  を、異なる高分子6種類( $Z=5, 10, 20$  の線形高分子、 $Z_a=2.5, 5, 10$  の星型高分子)について調べたところ( $Z$ は高分子のからみあい数、 $Z_a$ は星型高分子の分岐した腕のからみあい数)、 $Z=20$  の線形高分子、 $Z_a=10$  の星型高分子でせん断速度が直線からずれる顕著な非線形性を示していることがわかる(図 5.5, 5.6 を参照)。これは高分子が緩和時間の逆数程度のせん断速度を受けると非線形性を示し、長い高分子ほど緩和時間が大きいためにより低いせん断速度で非線形性を示すことに対応しており、我々の開発したシミュレーション手法が正しく機能していることがわかる。

A:  $2.0 \times 10^{-4}$  (High) B:  $1.0 \times 10^{-4}$  (Medium) C:  $0.5 \times 10^{-4}$  (Low) ( $= f_x$ )

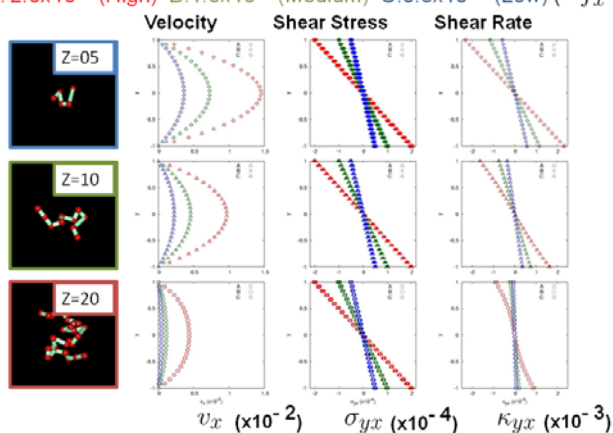


図 5.5 線形のからみあい高分子( $Z=5, 10, 20$ )の場合の三つの異なる圧力勾配下における速度場  $V_x$ 、せん断応力  $\sigma_{yx}$ 、せん断速度  $\kappa_{yx}$

A:  $2.0 \times 10^{-4}$  (High) B:  $1.0 \times 10^{-4}$  (Medium) C:  $0.5 \times 10^{-4}$  (Low) ( $= f_x$ )

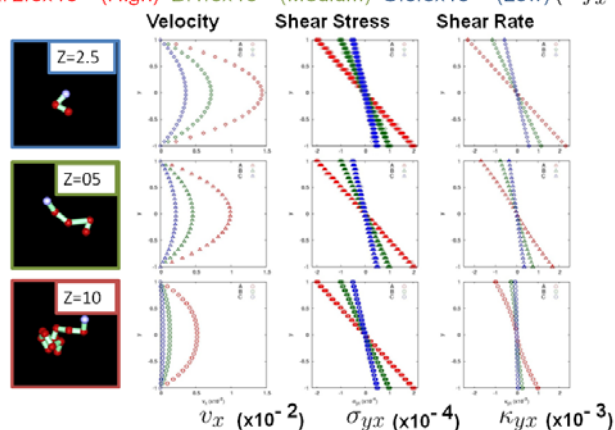


図 5.6 星型高分子 ( $Z_a=2.5, 5, 10$ ) の場合の三つの異なる圧力勾配下における速度場  $V_x$ 、せん断応力  $\sigma_{yx}$ 、せん断速度  $\kappa_{yx}$

このように分子の長さや形状を指定できる高分子溶融体の流動シミュレーションというのは世界的に例が無い。よって、この方法が実際の工業的なプロセスでの流動の問題に適用できれば、高分子系材料開発に非常に強いインパクトを与えられると考え、H22(2010)年度から、より複雑な流路を高分子溶融体が流れる時の流動履歴が流動挙動に及ぼす影響の問題に取り組むことにした。

#### ⑤ 高分子流体(一般の流れ)のためのマルチスケールシミュレーション手法の開発

ーからみあい高分子溶融体の複雑な流れの場合ー [70]

H21(2009)年度までの成果を踏まえ、H22(2010)年度から工業的なプロセスに適用可能な複雑な流路での流動の問題に取り組んだ。具体的には、流体要素を高分子シミュレータにより構成し、マクロな流動を粒子描像によって記述するマルチスケール高分子流動シミュレーションを開発し、それを用いて、空間に固定されたシリンダー状の物体周りのからみあった高分子溶融体(高分子の形状・長さを指定)の流れを解析した。高分子の形態変形はある特徴的な時間スケール(緩和時間)で起こるために、ある時刻の分子の形態は緩和時間程度過去のせん断流動場からの履歴の影響を受ける。シリンダー状物体の周囲を高分子流体が通り過ぎる際、上流側と下流側でたとえ同じせん断流動場下にあったとしても上流と下流では分子の状態は全く異なる。それは、下流側の高分子がシリンダー周囲を通り過ぎる際に受けたせん断を記憶しているのに対し、上流側ではそのせん断の記憶はせん断を受けた時からの経過時間に応じて、弱まるかまたは消失してしまうからである。したがって上流側・下流側で高分子は異なる分子状態にある為、その状態を反映し応力場は上流側・下流側で全く異なる振る舞いを示す。そのためシリンダーに対して上流側と下流側で対称なせん断流動場下にある高分子流体は非対称な応力場を示す。図 5.7 にその様子を示す。この非対称な応力場は緩和時間程度過去の流動履歴の影響を受けるために現れる。我々の開発した計算手法はこのような流動履歴の影響を受ける流体に対して有効であり、本研究ではその有効性を実証した。

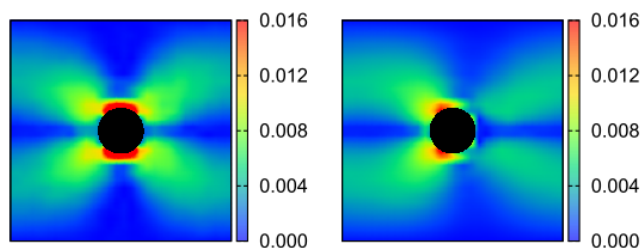


図 5.7 左:せん断場。右:応力場。せん断場がほぼ対称なのに対し応力場が非対称になるのは流動履歴の影響

マクロスコピックな流動は流体力学的手法で取扱い、ミクロスコピックな高分子の挙動は分子動力学的手法で取扱うというマルチスケールシミュレーション手法は、1990年代ごろに Öttinger

ら(1993)によって提唱され、その後、LIM 法(1995)、LPM 法(1998)、BCF 法(1997)、DFM 法(1999)など多数の研究者の働きによってマルチスケールシミュレーション手法(ミクロな情報を持った流体力学的手法)は発展してきた。しかしながら、過去のマルチスケール手法では高分子間のからみ合いの効果をとり入れるのに平均場モデルを用いているため、分子の実体を考慮することができない。平均場モデルではなく分子の実体を持った高分子モデルをマルチスケール手法に適用することは、過去の手法の枠組みでは困難である。つまり上記の方法でミクロスコピックなモデルをからみ合いが考慮されたモデルに変更したとしても、からみあった高分子溶融体のシミュレーションにはならない。また上記の方法では分子の形状を指定することはできない。近年になり、Renら(2005)やDeら(2006)により流体力学手法と分子動力学手法を組み合わせたマルチスケールシミュレーション手法が開発されたが、これらの方法では流動方向の並進対称性を仮定した問題を想定しているために、高分子のミクロな状態の移流を正しく取り扱うことができないので、一般の複雑な流動には適用できない方法であった。我々は、からみ合いのない高分子液体はもちろんのこと、からみ合いのある高分子溶融体に対しても適用できる方法で、さらに一般の複雑な流動に対しても適用可能な方法を開発した。我々の方法ではラグランジュ法とよばれる流体要素を流体粒子で表す方法を用いており、個々の流体粒子に高分子シミュレータを埋め込んでいるために、高分子の軌道が流体の軌道とつじつまの合う形になっており、過去の方法では取扱いが困難であったミクロスコピックな情報の移流が内在する問題を解くことが可能となった。本研究で「シリンダー周りのからみあった高分子溶融体の流れ」を解いたのは、この問題が過去に存在するどの方法でも本質的に解くことができない問題であったためである。

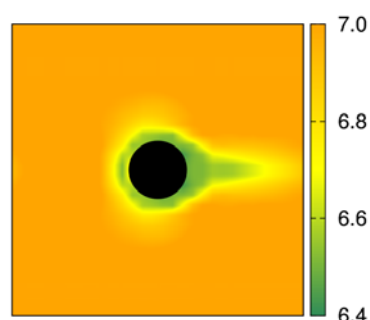


図 5.8 ミクロスコピックな情報のマクロスコピックな空間分布の例: 高分子のからみあい数の空間分布

さらに、本方法を用いてミクロスコピックな情報のマクロスコピックな空間分布を調べることが可能である。本方法で用いる高分子モデル(PASTA)は高分子間のからみ合いの度合いをからみあい数という情報として保持しているため、からみあい数の流動中におけるマクロな空間分布を調べた。図 5.8 から明らかなように、からみあい数はシリンダー周囲で減少しており、からみあい数が減少した領域は下流側に広がるという振る舞いをするのがわかった。からみあい数の減少の原因は高分子の伸びと関係あることが、高分子の平均長さの空間分布を調べることでわかった。

## (2)研究成果の今後期待される効果

本研究グループは、計算流体力学と粗視化高分子動力学法をハイブリッドすることによって、それぞれの方法が持つ欠点を解決するマルチスケールシミュレーション法を開発した。そして、目に見える巨視的な流動と高分子の分子レベルの微視的な配置や形状、そして絡み合いの状態を直接関係づけて計算することに成功した。その結果、今までの計算手法では知ることができなかった高分子同士の絡み合い量の空間分布を知ることができた。また、今回のマルチスケールシミュレーション法は任意の流動条件に対して適用可能な方法であり、また実験では調べるのが困難な微視的な情報(高分子の配向の状態やからみあい状態の流動中における空間分布)を本方法では解析することが可能であるため、より高度な成形加工や応用開発に役立つものと期待できる。また、より広い観点で、本研究で確立したこの方法論は、「微視的な分子

構造を変化させたときの巨視的な物性の予測のようなボトムアップ型の物性予測」や「材料に付与したい巨視的物性を実現するために要求される微視的構造の探索のような逆問題への応用」に新しい道を開き、新機能性材料の開発や物質科学のさまざまな分野に応用できるものと期待できる。

また、本研究で開発したハイブリッド型のマルチスケールシミュレーション法は、通常の分子動力学法とは異なり、次世代スパコンのように膨大な CPU を持つコンピューターとの相性が極めて高いというユニークな特徴も持っている。これは、計算負荷の最も高い分子動力学法による計算部分が各計算点で独立であるため、計算の並列実行が容易であることに起因している。この方法を次世代スパコンで用いることにより、分子数が 100 億個にも達する世界最大規模の分子動力学シミュレーションを実現することができると考えている。これまで有効なシミュレーションを行うことが難しかった、大規模な流動・変形現象を伴う機能性材料の製造プロセスのまるごと解析といった、理論や実験では全く歯が立たない未開拓の問題へのアプローチが可能となると考えている。

## § 5 成果発表等

(1)原著論文発表 (国内(和文)誌 8 件、国際(欧文)誌 80 件)

1. Ryoichi Yamamoto, Kim kang, and Yasuya Nakayama, "KAPSEL: Kyoto Advanced Particle Simulator for ELectrohydrodynamics -Toward Direct Numerical Simulations of Colloidal Dispersions-", KONA, 24, 167-182 (2006).
2. 名嘉山祥也, 金鋼, 山本量一, "Smoothed Profile 法によるコロイド系の直接数値シミュレーション", 粉体工学会誌, 44, 191-197 (2007).
3. Ryoichi Yamamoto, Kang Kim, and Yasuya Nakayama, "Strict simulations of non-equilibrium dynamics of colloids", Colloids and Surfaces A: Physicochemical and Engineering Aspects, 311, 42-47 (2007). [DOI: 10.1016/j.colsurfa.2007.08.041 ]
4. Kazuaki Takahashi, Kenji Yasuoka, and Tetsu Narumi, "Cutoff radius effect of isotropic periodic sum method for transport coefficients of Lennard-Jones liquid", J. Chem. Phys., 127, 114511 (2007). [DOI: 10.1063/1.2775929 ]
5. N. Hosono, Y. Masubuchi, H. Furukawa and T. Watanabe, "A molecular dynamics simulation study on polymer networks of end-linked flexible or rigid chains", J. Chem. Phys., 127, 164905, (2007) [DOI: 10.1063/1.2790007]
6. Noriyoshi Arai, Kenji Yasuoka, Yuichi Masubuchi, "Spontaneous self-assembly process for threadlike micelles", J. Chem. Phys., 126, 244905 (2007). [DOI: 10.1063/1.2747240 ]
7. Y. Masubuchi, G. Ianniruberto, F. Greco and G. Marrucci, "Unit of molecular weight, stress and time of the primitive chain network simulations for polymer melts", J. Non-newtonian Fluid Mech., 149 (1-3), 87-92 (2008). [DOI: 10.1016/j.jnnfm.2007.02.014]
8. M. Moriya, K. Oogo, Y. Masubuchi and T. Asakura, "Flow analysis of aqueous solution of silk fibroin in the spinneret of Bombyx mori silkworm by combination of viscosity measurement and finite element method calculation", Polymer, 49(4), 952-956 (2008) [DOI: 10.1016/j.polymer.2007.12.032]
9. Takuya Iwashita, Yasuya Nakayama, and Ryoichi Yamamoto, "A numerical model for Brownian particles fluctuating in incompressible fluids", J. Phys. Soc. Jpn., 77, 074007, (2008). [DOI: 10.1143/JPSJ.77.074007]
10. Yasuya Nakayama, Kang Kim and Ryoichi Yamamoto, "Simulating (electro) hydrodynamic effects in colloidal dispersions: smoothed profile method", Eur. Phys. J. E, 26, 361-368 (2008). [DOI: 10.1140/epje/i2007-10332-y]
11. Noriyoshi Arai, Kenji Yasuoka, X. C. Zeng, "Self-Assembly of Surfactants and Polymorphic Transition in Nanotubes", J. Am. Chem. Soc., 130, 7916-7920 (2008). [DOI: 10.1021/ja7108739 ]
12. Takatoshi Yaoita, Takeharu Isaki, Yuichi Masubuchi, Hiroshi Watanabe,

- Giovanni Ianniruberto, Francesco Greco, and Giuseppe Marrucci, "Statics, linear, and nonlinear dynamics of entangled polystyrene melts simulated through the primitive chain network model", *J Chem Phys*, 128, 154901 (2008) [DOI: 10.1063/1.2899653]
13. Yuichi Masubuchi, Hiroshi Watanabe, Giovanni Ianniruberto, Francesco Greco, and Giuseppe Marrucci, "Primitive chain network simulations of conformational relaxation for individual molecules in the entangled state", *NIHON REOROJI GAKKAISHI (J. Soc. Rheol. Jpn.)*, 36, 181-185, (2008) [DOI: 10.1678/rheology.37.65]
  14. Yuichi Masubuchi, Hiroshi Watanabe, Giovanni Ianniruberto, Francesco Greco, and Giuseppe Marrucci, "Comparison among Slip-Link Simulations of Bidisperse Linear Polymer Melts", *Macromolecules*, 41, 8275-8280, (2008) [DOI: 10.1021/ma800954q]
  15. Kenji Furuichi, Chisato Nonomura, Yuichi Masubuchi, Hiroshi Watanabe, Giovanni Ianniruberto, Francesco Greco, and Giuseppe Marrucci, "Entangled polymer orientation and stretch under large step shear deformations in primitive chain network simulations", *Rheologica Acta*, 47, 591-599, (2008) [DOI: 10.1007/s00397-008-0258-3]
  16. Quan Chen, Yumi Matsumiya, Yuichi Masubuchi, Hiroshi Watanabe, and Tadashi Inoue, "Component Dynamics in Polyisoprene/Poly(4-tert-butylstyrene) Miscible Blends", *Macromolecules*, 41, 8694-8711, (2008) [DOI: 10.1021/ma8013417]
  17. Yuichi Masubuchi, Giovanni Ianniruberto, Francesco Greco, and Giuseppe Marrucci, "Primitive Chain Network Simulations for Bidisperse Linear Polymers", *Int. J. Nano Adv. Eng. Mat., Part A*. 1(1), 35-40 (2008).
  18. Ryoichi Yamamoto, Kang Kim, Yasuya Nakayama, Kunimasa Miyazaki, David R. Reichman, "On the Role of Hydrodynamic Interactions in Colloidal Gelation", *J. Phys. Soc. Jpn.*, 77, 084804 (2008). [DOI: 10.1143/JPSJ.77.084804]
  19. Toshiki Mima, Tetsu Narumi, Shun Kameoka, and Kenji Yasuoka, "Cell size dependence of orientational order of uniaxial liquid", *Molecular Simulation*, 34, 761-773(2008). [DOI: 10.1080/08927020802256058]
  20. Yasuya Nakayama, Kang Kim and Ryoichi Yamamoto, "Smoothed Profile Method for Direct Simulation of Flowing (Charged) Colloids in Solvents", *AES Technical Reviews International Journal of Nano and Advanced Engineering Materials*, 1, 21-28 (2008).
  21. Tetsu Narumi, Shun Kameoka, Makoto Taiji, and Kenji Yasuoka, "Accelerating Molecular Dynamics Simulation on PLAYSTATION 3 Platform using "Virtual-GRAPE" Programming Model", *SIAM Journal on Scientific Computing*, 30, 3108-3125 (2008). [DOI: 10.1137/070692054]
  22. Shugo Yasuda and Ryoichi Yamamoto, "A Model for Hybrid Simulations of Molecular Dynamics and Computational Fluid Dynamics", *Phys. Fluids* 20, 113101 (2008). [DOI: 10.1063/1.3003218]
  23. Yosuke Kadomae, Masahiro Amagasa, Masataka Sugimoto, Takashi Taniguchi and Kiyohito Koyama, "Effect of electric current on beads formation in electrospinning of poly(vinyl alcohol)", *International Polymer Processing* 23, 377-384 (2008). [DOI: 10.3139/217.2140]
  24. Takuya Iwashita and Ryoichi Yamamoto, "Short-time motion of Brownian particles in a shear flow", *Phys. Rev. E* 79, 031401 (2009). [DOI: 10.1103/PhysRevE.79.031401]
  25. 増渕雄一, "プリミティブチェーンネットワークシミュレーションによる高分子材料の応力緩和挙動の予測", *日本ゴム協会誌*, 82(11), 459-463 (2009).
  26. Yuichi Masubuchi, Hiroshi Watanabe, Giovanni Ianniruberto, Francesco Greco, and Giuseppe Marrucci, "Primitive Chain Network Simulations for Particle

- Dispersed Polymers ", International Journal of Polymers and Technologies, 1(1), 17-21, (2009).
27. 坂牧隆司, 成見哲, 泰岡顕治, "グラフィックカードを用いた水表面張力の高速分子動力学シミュレーション", 情報処理学会論文誌 コンピューティングシステム, 2(2), 89-97, (2009).
  28. Yokota, R., Narumi, T., Sakamaki, R., Kameoka, S., Obi, S., and Yasuoka, K., "Fast Multipole Methods on a Cluster of GPUs for the Meshless Simulation of Turbulence Computer Physics Communications", Comput. Phys. Commun., 180, 2066 (2009).[DOI: 10.1016/j.cpc.2009.06.009 ]
  29. Narumi, T., Yasuoka, K., Taiji, M., and Hofinger, S., "Current Performance Gains from Utilizing the GPU or the ASIC MDGRAPE-3 within an Enhanced Poisson Boltzmann Approach", J. Comput Chem., 30, 2351(2009).[DOI: 10.1002/jcc.21257 ]
  30. E. Dushanov, Kh. Kholmurodov, G. Aru, V. Korenkov, W. Smith, Y. Ohno, T. Narumi, G. Morimoto, M. Taiji, and K. Yasuoka, "JINR CICC in Computational Chemistry and Nanotechnology Problems: DL\_POLY Performance for Different Communication Architectures", Physics of Particles and Nuclei Letters, 6(3), 251, (2009).[DOI: 10.1134/S154747710903011X ]
  31. Takuya Iwashita, Yasuya Nakayama, and Ryoichi Yamamoto, "Velocity autocorrelation function of fluctuating particles in incompressible fluids, -Toward direct numerical simulation of particle dispersions-", Prog. Theor. Phys. Suppl. 178, 86-91 (2009).[DOI: 10.1143/PTPS.178.86 ]
  32. Shugo Yasuda and Ryoichi Yamamoto, "Rheological properties of polymer melt between rapidly oscillating plates: an application of multiscale modeling", EPL 86, 18002 (2009).[DOI: 10.1209/0295-5075/86/18002]
  33. Takashi Uneyama, "Coarse-Grained Brownian Dynamics Simulations for Symmetric Diblock Copolymer Melts Based on the Soft Dumbbell Model", Nihon Reorogi Gakkaishi (J. Soc. Rheol. Japan), 37(2), 81-90 (2009).[DOI: 10.1678/rheology.37.81]
  34. Yuichi Masubuchi, Takashi Uneyama, Hiroshi Watanabe, Giovanni Ianniruberto, Francesco Greco and Giuseppe Marrucci, "Primitive Chain Network Simulations of Conformational Relaxation for Individual Molecules in the Entangled State. II. Retraction from Stretched States", Nihon Reorogi Gakkaishi (J. Soc. Rheol. Japan), 37(2), 65-68 (2009).[DOI: 10.1678/rheology.37.65]
  35. Takashi Uneyama, Yuichi Masubuchi, Kazushi Horio, Yumi Matsumiya, Hiroshi Watanabe, Jai A. Pathak, C. Michael Roland, "A theoretical analysis of rheodielectric response of type-A polymer chains", J. Polym. Sci. B: Polym. Phys., 47(11), 1039-1057, (2009)[DOI: 10.1002/polb.21708]
  36. Satoru Okuda, Yasuhiro Inoue, Yuichi Masubuchi, Takashi Uneyama and Masaki Hojo, "Wall boundary model for primitive chain network simulations", J. Chem. Phys. 130(21), 214907, (2009).[DOI: 10.1063/1.3140941]
  37. Yuichi Masubuchi, Kenji Furuichi, Kazushi Horio, Takashi Uneyama, Hiroshi Watanabe, Giovanni Ianniruberto, Francesco Greco, and Giuseppe Marrucci, "Primitive chain network simulations for entangled DNA solutions", J. Chem. Phys. 131, 114906, (2009)[DOI: 10.1063/1.3225994]
  38. R. Yamamoto, Y. Nakayama, and K. Kim, "Smoothed profile method to simulate colloidal particles in complex fluids", Int. J. Mod. Phys. C, 20, 1457-1465 (2009).[DOI: 10.1142/S0129183109014515 ]
  39. Yosuke Kadomae, Yasuhide Maruyama, Masataka Sugimoto, Takashi Taniguchi and Kiyohito Koyama, "Relation between Tacticity and Fiber Diameter in Melt-Electrospinning of Polypropylene", Fibers and Polymers, 10,

- pp. 275-279 (2009)[DOI:10.1007/s12221-009-0275-6 ]
40. T. Iwashita and R. Yamamoto, "Direct numerical simulations for non-Newtonian rheology of concentrated particle dispersions", *Phys. Rev. E* 80, 061402 (2009)[DOI: 10.1103/PhysRevE.80.061402]
  41. Shugo Yasuda and Ryoichi Yamamoto, "Multiscale modeling and simulation for polymer melt flows between parallel plates", *Phys. Rev. E* 81, 036308 (2010).[DOI: 10.1103/PhysRevE.81.036308 ]
  42. Yasuya Nakayama, Kang. Kim, and Ryoichi Yamamoto, "Direct simulation of flowing colloidal dispersions by smoothed profile method", *Advanced Powder Technology*, 21, 206--211 (2010).[DOI: 10.1016/j.appt.2009.11.011 ]
  43. K. Furuichi, C. Nonomura, Y. Masubuchi and H. Watanabe, "Chain contraction and nonlinear stress damping in primitive chain network simulations", *J Chem Phys*, 133, 174902 (2010).[DOI: 10.1063/1.3502681]
  44. Y. Masubuchi, T. Uneyama, H. Watanabe, G. Ianniruberto, F. Greco, and G. Marrucci, "Structure of entangled polymer network from primitive chain network simulations", *J. Chem. Phys.* 132, 134902 (2010).[DOI: 10.1063/1.3370346]
  45. Takahiro Murashima, Takashi Taniguchi, "Multiscale Lagrangian Fluid Dynamics Simulation for Polymeric Fluid", *J. Polym. Sci. B*, 48, 886-893 (2010).[DOI: 10.1002/polb.21975 ]
  46. Hideki Kobayashi and Ryoichi Yamamoto, "Tumbling motion of a single chain in shear flow: a crossover from Brownian to non-Brownian behavior", *Phys.Rev.E*, 81, 041807 (2010).[DOI: 10.1103/PhysRevE.81.041807 ]
  47. Takuya Iwashita, Takuya Kumagai and Ryoichi Yamamoto, "A direct numerical simulation method for complex modulus of particle dispersions", *Eur. Phys. J. E*, 32, 357-363 (2010).[DOI: 10.1140/epje/i2010-10638-7 ]
  48. Hideyuki. Mizuno and Ryoichi. Yamamoto, "Lifetime of dynamical heterogeneity in a highly supercooled liquid", *Phys.Rev.E*, 82,030501(R)(2010).[DOI: 10.1103/PhysRevE.82.030501 ]
  49. N. Arai, K. Yasuoka, T. Koishi, and T. Ebisuzaki, "Asymmetric Brownian motor driven by bubble formation in a hydrophobic channel", *ACS Nano*, 4, 5905(2010).[DOI : 10.1021/nm101855d ]
  50. Yosuke Kadomae, Masataka Sugimoto, Takashi Taniguchi, and Kiyohito Koyama, "Discharge behaviors and jet profiles during Electrospinning of Poly(vinyl alcohol)", *Polymer Engineering and Science*, 50: 1788-1796, (2010). [DOI : 10.1002/pen.21713 ]
  51. T. Narumi, K. Yasuoka, M. Taiji, F. Zerbetto, and S. Hoefinger, "Fast Calculation of Electrostatic Potentials on the GPU or the ASIC MD-GRAPE-3", *Computer Journal*, 54(7): 1181-1187, (2011). First published online November 3, 2010. [DOI : 10.1093/comjnl/bxq079 ]
  52. H. J. Myung, R. Sakamaki, K. J. Oh, T. Narumi, K. Yasuoka, and S. Lee, "Accelerating molecular dynamics simulation using graphics processing unit", *Bulletin of the Korean Chemical Society*, 31, 3639(2010).[DOI: 10.5012/bkcs.2010.31.12.3639 ]
  53. K. Takahashi, T. Narumi, and K. Yasuoka, "Cutoff radius effect of isotropic periodic sum method in homogeneous system. II. Water", *J. Chem. Phys.*, 133, 014109(2010).[DOI : 10.1063/1.3462241 ]
  54. Saeed Jafari, Ryoichi Yamamoto, and Mohamad Rahnema "Lattice-Boltzmann method combined with smoothed-profile method for particulate suspensions", *Phys. Rev. E*, 83, 026702 (2011). [ DOI : 10.1103/PhysRevE.83.026702 ]
  55. H. Kobayashi and R. Yamamoto, "Implementation of Lees-Edwards periodic boundary conditions for direct numerical simulations of particle dispersions under shear flow", *J. Chem. Phys.*, 134, 064110 (2011). [ DOI :

- 10.1063/1.3537974 ]
56. T. Narumi, T. Hamada, K. Nitadori, R. Sakamaki, and K. Yasuoka, "Fast Quasi Double-Precision Method with Single-Precision Hardware to Accelerate Scientific Applications", *International Journal of Computational Methods*, 8(3), 561-581 (2011). [DOI : 10.1142/S0219876211002708 ]
  57. R. Sakamaki, A. K. Sum, T. Narumi, and K. Yasuoka, "Molecular dynamics simulations of vapor/liquid coexistence using the nonpolarizable water models", *J. Chem. Phys.*, 134, 124708 (2011). [DOI : 10.1063/1.3574038 ]
  58. H. Mizuno and R. Yamamoto, "Dynamical heterogeneity in a highly supercooled liquid: Consistent calculations of correlation length, intensity, and lifetime", *Phys.Rev.E*, 84,011506(2011).[DOI: 10.1103/PhysRevE.84.011506 ]
  59. Y. Kawasaki, H. Watanabe and T. Uneyama, "A note for Kohlrausch-Williams-Watts relaxation function", *Nihon Reorogi Gakkaishi (J. Soc. Rheol. Japan)*, 39(3), 127-131 (2011). [DOI:10.1678/rheology.39.127]
  60. T. Miyata, Y. Yamamoto, T. Uneyama, Y. Nakamura and S.-L. Zhang, "Optimization of the multishift QR algorithm with coprocessors for non-Hermitian eigenvalue problems", *East Asian J. Appl. Math.*, 1(2), 187-196 (2011). [DOI:10.4208/eajam.300510.250311a ]
  61. T. Uneyama and K. Horio, "Equilibrium statistics of weakly slip-linked Gaussian polymer chains", *J. Polym. Sci. B: Polym. Phys.*, 49(13), 966-977 (2011). [DOI:10.1002/polb.22267]
  62. T. Uneyama, K. Horio and H. Watanabe, "Anisotropic mobility model for polymers under shear and its linear response functions", *Phys. Rev. E*, 83(6), 061802 (2011). [DOI:10.1103/PhysRevE.83.061802]
  63. N. Rakkapao, V. Vao-soongnern, Y. Masubuchi and H. Watanabe, "Miscibility of chitosan/poly(ethylene oxide) blends and effect of doping alkali and alkali earth metal ions on chitosan/PEO interaction", *Polymer*, 52(12), 2618-2627 (2011). [DOI:10.1016/j.polymer.2011.03.044 ]
  64. Y. Masubuchi, T. Yaoita, Y. Matsumiya and H. Watanabe, "Primitive chain network simulations for asymmetric star polymers", *J. Chem. Phys.*, 134, 194905 (2011) [DOI:10.1063/1.3590276 ]
  65. T. Uneyama, "Single chain slip-spring model for fast rheology simulations of entangled polymers on GPU", *Nihon Reorogi Gakkaishi (J. Soc. Rheol. Japan)*, 39(4), 135-152 (2011)
  66. R. Sakamaki, A. K. Sum, T. Narumi, R. Ohmura, and K. Yasuoka, "Thermodynamic Properties of Methane/Water Interface Predicted by Molecular Dynamics Simulations", *J. Chem. Phys.*, 134, 144702(2011). [DOI:10.1063/1.3579480 ]
  67. K. Z. Takahashi, T. Narumi, and K. Yasuoka, "Cutoff radius effect of the isotropic periodic sum and Wolf method in liquid-vapor interfaces of water", *J. Chem. Phys.*, 134, 174112(2011). [DOI:10.1063/1.3578473 ]
  68. S. Yasuda and R. Yamamoto, "Dynamic rheology of a supercooled polymer melt in nonuniform oscillating flows between rapidly oscillating plates", *Phys. Rev. E* 84, 031501 (2011). [DOI:10.1103/PhysRevE.84.031501]
  69. T. Taniguchi, Miho Yanagisawa and Masayuki Imai "Numerical investigations of the dynamics of two-component vesicles", *J. Phys. Cond. Matt.* 23, 284103 (2011). [DOI:10.1088/0953-8984/23/28/284103 ]
  70. T. Murashima and T. Taniguchi, "Multiscale simulation of history-dependent flow in entangled polymer melts", *Europhys. Lett.* 96, 18002 (2011). [DOI:10.1209/0295-5075/96/18002 ]
  71. K. Z. Takahashi, T. Narumi, and K. Yasuoka, "A combination of the tree-code and IPS method to simulate large scale systems by molecular dynamics", *J. Chem. Phys.*, 135, 174108(2011). [DOI :10.1063/1.3658640]

72. C. Chung, T. Uneyama, Y. Masubuchi and H. Watanabe, "Numerical study of chain conformation on shear banding using diffusive Rolie-Poly model", *Rheologica Acta*, 50, 753-766 (2012) [DOI:10.1007/s00397-011-0554-1]
73. Y. Masubuchi, Y. Matsumiya, H. Watanabe, S. Shiromoto, M. Tsutsubuchi and Y. Togawa, "Primitive chain network simulations for comb-branched polymer under step shear deformations", *Rheo. Acta*, 51, 193-200 (2012) [DOI:10.1007/s00397-011-0574-x]
74. K. Takahashi, T. Narumi, and K. Yasuoka, "Cutoff radius effect of the isotropic periodic sum method for polar molecules in a bulk water system", *Molec. Simul.*, 38(5), 397-403(2012). [DOI : 10.1080/08927022.2010.547857]
75. Y. Masubuchi, T. Uneyama and K. Saito, "A multi-scale simulation of polymer processing utilizing parameter-based bridging in melt rheology", *J. Appl. Polymer Sci.*, Article first published online: 30 JAN 2012 [DOI: 10.1002/app.36593]
76. T. Akimoto, E. Yamamoto, K. Yasuoka, Y. Hirano, and M. Yasui, "Non-Gaussian Fluctuations Resulting from Power-Law Trapping in a Lipid Bilayer", *Phys. Rev. Lett.*, 107, 178103 (2011). [DOI: 10.1103/PhysRevLett.107.178103]
77. H. Kobayashi and R. Yamamoto, "Re-entrant transition in the shear viscosity of dilute rigid rod dispersions," *Phys. Rev. E* 84 051404 (2011). [DOI: 05140410.1103/PhysRevE.84.051404]
78. T. Yaoita, T. Isaki, Y. Masubuchi, H. Watanabe, G. Ianniruberto and G. Marrucci, "Primitive Chain Network Simulation of Elongational Flows of Entangled Linear Chains: Role of Finite Chain Extensibility", *Macromolecules*, 44(24), 9675–9682 (2011) [DOI: 10.1021/ma202166y]
79. E. van Ruymbeke, Y. Masubuchi, and H. Watanabe, "Effective Value of the Dynamic Dilution Exponent in Bidisperse Linear Polymers: From 1 to  $4/3$ ", *Macromolecules*, 45, 2085–2098 (2012). [DOI: 10.1021/ma202167q]
80. Satoru Okuda, Takashi Uneyama, Yasuhiro Inoue, Yuichi Masubuchi, and Masaki Hojo, "Soft-core Interaction Between Entanglement Segments for Primitive Chain Network Simulations", *Nihon Reoroji Gakkaishi (J. Soc. Rheol. Jpn.)* 40(1), 21-30 (2012). [DOI:10.1678/rheology.40.21]
81. T. Yaoita, T. Isaki, Y. Masubuchi, H. Watanabe, G. Ianniruberto and G. Marrucci, "Primitive Chain Network Simulation of Elongational Flows of Entangled Linear Chains: Stretch/Orientation-induced Reduction of Monomeric Friction", *Macromolecules*, Articles ASAP, published on March 6, (2012). [DOI: 10.1021/ma202525v]
82. Shinya Suzuki, Takashi Uneyama, Tadashi Inoue, and Hiroshi Watanabe, "Rheology of Aqueous Solution of Hydrophobically Modified Ethoxylated Urethane (HEUR) with Fluorescent Probes at Chain Ends: Thinning Mechanism", *Nihon Reoroji Gakkaishi (J. Soc. Rheol. Jpn.)* 40(1), 31-36. (2012). [DOI:10.1678/rheology.40.31]
83. Shinya Suzuki, Takashi Uneyama, Tadashi Inoue, and Hiroshi Watanabe, "Nonlinear Rheology of Telechelic Associative Polymer Networks: Shear Thickening and Thinning Behavior of Hydrophobically Modified Ethoxylated Urethane (HEUR) in Aqueous Solution", *Macromolecules* 45(2), 888-898 (2012) [DOI: 10.1021/ma202050x].
84. Masayuki Uragane, Takashi Taniguchi, and Ryoichi Yamamoto, "Electrostatic potential around a charged colloidal particle in an electrolyte solution with ion strong coupling", *J. Phys. Soc. Jpn.* 81 024803 (2012). [10.1143/JPSJ.81.024803]
85. Hideyuki Mizuno and Ryoichi Yamamoto, "Dynamical heterogeneity in a highly supercooled liquid under a sheared situation," *J. Chem. Phys.*, 136, 084505 (2012). [10.1063/1.3688227]

86. N. Arai, K. Yasuoka, and X. C. Zeng, "Nanochannel with Uniform and Janus Surfaces: Shear Thinning and Thickening in Surfactant Solution", *Langmuir*, 28(5), 2866-2872(2012). [DOI:10.1021/la2034643]
87. Takahiro Murashima, Shugo Yasuda, Takashi Taniguchi, and Ryoichi Yamamoto, "Multiscale Simulations for Polymeric Flow", **submitted**.
88. H. Mizuno and R. Yamamoto, "Mechanical Responses and Stress Fluctuations of a Strongly Sheared Supercooled Liquid", **submitted**.

(2)その他の著作物(総説、書籍など)

1. 金鋼, 名嘉山祥也, 山本量一, "荷電コロイド分散系の直接数値シミュレーション-KAPSELの原理と操作-", 粉体工学会誌, 44, 28-36 (2007).
2. Y. Nakayama, K. Kim and R. Yamamoto, "Smoothed Profile Method for Direct Simulation of Flowing (Charged) Colloids in Solvents", *Proceedings of AES - ATEMA First International Conference (2007)* pp.277-284 (2007).
3. 名嘉山祥也, 金鋼, 山本量一, "コロイド分散系の直接数値シミュレーション", *ケミカルエンジニアリング*, 52, 340-345 (2007).
4. 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", *液晶*, 11, 259-266 (2007).
5. 山本量一, "荷電コロイド分散系の計算機シミュレーション", *セラミックス*, 43, 77-86 (2008).
6. 山本量一, "コロイド系のハイブリッドシミュレーション", *高分子*, 56, 1001 (2007).
7. 名嘉山祥也, 金鋼, 岩下拓哉, 山本量一, "コロイド分散系の直接数値シミュレーション", 九州大学応用力学研究所研究集会報告「乱流現象及び多自由度系の動力学、構造と統計法則」19ME-S7. (2008).
8. Tetsu Narumi, Ryuji Sakamaki, Shun Kameoka, Kenji Yasuoka, "Overheads in Accelerating Molecular Dynamics Simulations with GPUs", *Proceedings of the 9th International Conference on Parallel and Distributed Computing, Applications, and Technologies (PDCAT'08)*, pp. 143-150, Dunedin, New Zealand, (2008). [DOI: 10.1109/PDCAT.2008.68 ]
9. 増渕雄一, "粗視化分子動力学法による熔融紡糸過程におけるからみあいの解析", 精密高分子の基礎と実用化技術, シーエムシー出版, 66-74 (2008).
10. Tetsu Narumi, Tsuyoshi Hamada, Keigo Nitadori, Ryuji Sakamaki, Shun Kameoka, Kenji Yasuoka, "High-Performance Quasi Double-Precision Method using Single-Precision Hardware for Molecular Dynamics Simulations with GPUs", *Proceedings of HPC Asia 2009*, Kaohsiung, Taiwan.
11. 安田修悟, 山本量一, "ソフトマターのマルチスケールシミュレーション: 高分子溶液の流動解析への応用", *プラズマ・核融合学会誌* 85-09, 607 (2009).
12. Tsuyoshi Hamada, Rio Yokota, Keigo Nitadori, Tetsu Narumi, Kenji Yasuoka, Makoto Taiji, Kiyoshi Oguri, "42 TFlops Hierarchical N-body Simulations on GPUs with Applications in both Astrophysics and Turbulence", *Proceedings of the SC2009, USB memory, Portland, USA, (2009)*. [DOI: 10.1145/1654059.1654123 ]
13. 増渕雄一, "レオロジー的評価", *ソフトマター*, 丸善, 高原淳・栗原和枝・前田瑞夫編, 181-189 (2009).
14. 増渕雄一, "熔融体基本特性(研究総覧)", *成形加工*, 22(7), 358-361 (2010).
15. 増渕雄一, "高分子の高速分子シミュレーション法", *アンサンブル(分子シミュレーション研究会誌)*, 12(1), 2 - 7 (2010).
16. 増渕雄一, "高分子成形加工の分子シミュレーション", *日本機械学会計算力学部門ニュースレター (CMD News Letter)* 44, 14-15 (2010).
17. 増渕雄一, "おもしろレオロジー", 技術評論社(2010).
18. 増渕雄一, "高分子ダイナミクスのシミュレーション", *高分子*, 60(2), 85-88 (2011).

19. 増渕雄一, “溶融体基本物性(研究総覧)”, 成形加工, 23(7), 414-417 (2011).
20. 城本征治, 筒渕雅明, 東川芳晃, 増渕雄一, “スタートアップせん断流れの Primitive Chain Network シミュレーション”, 成形加工, 23(4), 211-215 (2011).
21. 畝山多加志, “からみあった高分子のレオロジーの分子理論”, 高分子 60(4), 199-200 (2011).
22. 村島隆浩, 谷口貴志, “高分子溶融体のミクロスコピックな状態変化とマクロスコピックな流動”, 分子シミュレーション研究会会誌 “アンサンブル”, 13(3), 118 (2011).
23. 畝山多加志, “高分子からみあい系のミクロ・メソスケール分子モデルの接続”, 分子シミュレーション研究会会誌 “アンサンブル”, 13(3), 112-117 (2011).
24. 安田修悟, 山本量一, “振動境界層流れにおける高分子液体の動的レオロジー特性”, 分子シミュレーション研究会会誌 “アンサンブル”, 13, 105 (2011).
25. 増渕雄一, “基礎高分子科学 演習編”, 東京化学同人, 高分子学会編, 5.3-5.5 節 (2011).
26. 村島隆浩, 安田修悟, 谷口貴志, 山本量一, “ソフトマターの多階層・相互接続シミュレーション—高分子メルトのマルチスケールモデル—”, 工業材料, 60, 27-30, (2012).
27. 金鋼, 名嘉山祥也, 山本量一, “粉体工学ハンドブック”の2節を担当(朝倉書店から出版予定).
28. K. Kim, Y. Nakayama, and R. Yamamoto, “Electrical Phenomena at Interfaces and Biointerfaces: Fundamentals and Applications in Nano-, Bio-, and Environmental Sciences” の2章を担当 (Wiley から出版予定)
29. 安田修悟, 村島隆浩, 谷口貴志, 山本量一, “ソフトマターのマルチスケールシミュレーション”, 日本シミュレーション学会誌, 印刷中.
30. 谷口貴志, 山本量一, “解説:ソフトマターのマルチスケールシミュレーション”, 日本物理学会誌, 印刷中.

(3)国際学会発表及び主要な国内学会発表

- ① 招待講演 (国内会議 48 件、国際会議 36 件)
  1. 増渕雄一, “成形性制御に向けた高分子ダイナミクス高速計算法”[招待講演], 日本材料学会第 60 回高分子材料セミナー(第 144 回高分子材料部門委員会)(京都市), 2006/12/01.
  2. 山本量一, “ソフトマターの計算機シミュレーション”, 東京大学物性研究所短期研究会「計算物性科学におけるスーパーコンピュータ利用の現状と展望」(柏市), 2006/12/12.
  3. 山本量一, “コロイド分散系の直接数値シミュレーション: KAPSEL の原理と応用例”, (社)化学工学会 粒子・流体プロセス部会セミナー「現象のシミュレーション解析と装置開発・プロセス操作への応用」(大阪市), 2007/01/26.
  4. 増渕雄一, “からみあいに基づくシミュレーションを中心とした多階層計算の現状と課題”[依頼講演], ミニワークショップ “高分子の流動場結晶化とレオロジー” (東工大, 東京都), 2007/01/29-30.
  5. 増渕雄一, “高分子からみあいモデルを中心とした多階層計算”[招待講演], 文部科学省科学研究費補助金特定領域研究 “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” (東大, 東京都), 2007/3/15-16 [invited].
  6. 山本量一, “ソフトマターのマルチスケールシミュレーションを目指して(メソからのアプローチ)”, 第5回 HSS ワークショップ(札幌市), 2007/03/16.
  7. 増渕雄一, “高分子ブレンド共重合体の計算科学”(招待講演), 第15回複合材料界面シンポジウム(京都市), 2007/4/26.
  8. Ryoichi Yamamoto, Takuya Iwashita, Kang Kim, and Yasuya Nakayama, “Direct numerical simulations of colloidal dispersions under external force”, International Symposium “Frontiers of Advanced Particle Handling Science”,

- (July 28, 2007, Kyoto, Japan)
9. Tetsu Narumi, Toshikazu Ebisuzaki, Makoto Taiji, and Kenji Yasuoka, "Accelerating Molecular Dynamics Simulations by Special-Purpose Computers and Game Consoles[invited]", CALCON2007 (62nd Calorimetry Conference), Hawaii, USA, 2007/08/05-10
  10. Tetsu Narumi, Ryuji Sakamaki, Shun Kameoka, Makoto Taiji, and Kenji Yasuoka, "Special-Purpose Computers and Video-Game Consoles as a High Performance Computing Platform for Molecular Dynamics Simulation[invited]", The 9th High Performance Computing International Conference & Exhibition, Seoul, Korea, 2007/09/09-12.
  11. Ryoichi Yamamoto, Supercooled Liquids under Shear: Computational analysis on single and collective particle motions, Workshop on Fundamental Issues in Metallic Glasses (October 22-26, 2007, Guilin and Kunming, China)
  12. 山本量一, 安田修悟, "コロイド分散系の直接数値計算法とその応用(メソからマルチスケールへ)", 第 20 回計算力学講演会(京都市), 2007/11/26.
  13. 増渕雄一, "レオロジーと高分子シミュレーション"(招待講演), 高分子学会 高分子計算機科学研究会講座, 2007/11/27(東京都) [invited].
  14. 増渕雄一, "高分子シミュレーションの現状と課題"(招待講演), 日本材料学会複合材料部門委員会 第 214 回例会(大阪市), 2007/12/7 [invited].
  15. 山本量一, 安田修悟, "ソフトマターのマルチスケールシミュレーション", CREST 研究集会「ナノ・メゾ・マイクロ流動現象における計算科学」(名古屋市), 2007/12/14.
  16. Ryoichi Yamamoto and Takuya Iwashita, Direct numerical simulations of colloidal dispersions: electrophoresis, thermal fluctuations, shear thickening, etc..., International Symposium "Frontiers of Advanced Particle Handling Science" (January 28-29, 2008, Kyoto, Japan)
  17. 増渕雄一, "高分子の長時間ダイナミクスとシミュレーション"(招待講演)第 56 期 第 4 回日本材料学会分子動力学部門委員会(京都市), 2008/3/7 [invited].
  18. 増渕雄一, "高分子シミュレーションの現状と課題"(招待講演)第25回 高分子学会 千葉地域活動若手セミナー(千葉市), 2008/3/14 [invited].
  19. 増渕雄一, "からみあった高分子の分子シミュレーション法"(招待講演), 高分子基礎物性・高分子計算機科学合同研究会(東京都), 2008/3/10-11 [invited].
  20. Ryoichi Yamamoto, S. Yamamori, Yasuya Nakayama, and Kang Kim, "Direct Numerical Simulations for Electrokinetics of Colloids", The 5th International Conference "Interface Against Pollution" (Kyoto, Japan) 2008/06/01-04
  21. 増渕雄一, "シミュレーションによる高分子の物性予測", 第54回高分子夏季大学(鹿児島), 2008/07/18.
  22. Takashi Taniguchi, "Review of Multi-scale and Multi-Physics Simulation", 高分子学会 高分子計算機科学研究会(富士市), 2008/08/07.
  23. Yuichi Masubuchi, "A Model for Molecular Simulations of Entangled Polymer Systems", ATEMA-AES (Cessena, Italy), 2008/09/02
  24. Yuichi Masubuchi, "Molecular simulations of polymers with primitive chain network model", MSSMBS'08 (Moscow, Russia), 2008/09/11
  25. Tetsu Narumi, Ryuji Sakamaki, Shun Kameoka, Kenji Yasuoka, "Using Special-Purpose and Video-Game Computers for Accelerating Molecular Dynamics Simulations", MSSMBS'08 (Moscow, Russia), 2008/09/12
  26. 畝山多加志, "両親媒性ブロックコポリマーの形成するミセル構造の密度汎関数シミュレーション", 関西レオロジー研究会第 56 回例会, (神戸), 2008/11/15.
  27. Ryoichi Yamamoto, "Kinetic Heterogeneity Revisited: A Normal Mode Analysis", Japan-France bilateral meeting on Frontier of Glassy Physics (Kyoto, Japan) 2008/11/19-23
  28. 山本量一, "コロイド分散系の直接数値シミュレーション", 第 14 回流動化・粒子プロセス

- シンポジウム(吹田市), 2008/12/11-12.
29. Yuichi Masubuchi, "Molecular Simulations for Entangled Polymer Dynamics", The 3rd International Symposium on Polymer Science, (Nagoya, Japan), 2008/11/10
  30. 増渕雄一, "高分子のダイナミクスとレオロジーの分子シミュレーション", 第22期CAMMフォーラム 本例会, (東京・神谷町) 2009/2/6.
  31. 増渕雄一, "高分子の長時間ダイナミクスとレオロジーの計算", (社)新化学発展協会先端化学技術部会・コンピュータケミストリー分科会高分子ワークショップ基礎講座, (京都) 2009/2/27.
  32. Ryoichi Yamamoto, "Direct numerical simulations for the dynamics of colloidal dispersions", Joint Mini-Symposium between Chemical Engineering Dept., National Tsing Hua University, Taiwan and Chemical Science and Technology Div., Kyoto University, (Kyoto, Japan), 2009/02/10
  33. 山本量一, "界面動電現象の計算機シミュレーション", シンポジウム「ナノ、バイオ、環境科学の基礎としての界面動電現象」(つくば市), 2009/03/07.
  34. 増渕雄一, "高分子の長時間ダイナミクスのシミュレーション", 九州大学 GCOE 第 73 回グローバルセミナー(九州大学), 2009/3/26.
  35. Ryoichi Yamamoto and Shugo Yasuda, "Rheological properties of polymer melt between rapidly oscillating plates: an application of multiscale modeling", IMA Annual Program Year Workshop "Molecular Simulations: Algorithms, Analysis, and Applications" (Minneapolis, USA) 2009/05/18-22
  36. 増渕雄一, "からみあい高分子の多階層計算", 第 58 回理論応用力学講演会(東京), 2009/6/11.
  37. 増渕雄一, "からみあい高分子のシミュレーション", 第 47 回高分子材料自由討論会(蒲郡) 2009/7/6.
  38. 増渕雄一, "高分子の運動とレオロジー", 第 19 回東海ミニシンポジウム, 豊田中央研究所(長久手町), 2009/9/7.
  39. 増渕雄一, "粗視化分子シミュレーションによる高分子の長時間ダイナミクスの可視化", 化学工学会第 41 回秋季大会, 広島大学(東広島), 2009/9/18.
  40. Ryoichi Yamamoto and Shugo Yasuda, "An application of multi-scale simulations to flows of polymeric fluids" The 32nd Advanced Particle Handling Science Seminar (Kyoto, Japan) [2009/09/20]
  41. Ryoichi Yamamoto, "Dynamics of colloidal particles in external fields", International Workshop on "Dynamic Cross-Effect in Softly Condensed Matter" (Tokyo, Japan) [2009/11/04-05]
  42. 増渕雄一, "からみあい高分子ダイナミクスのシミュレーション", 第 24 回中国四国地区高分子若手研究会, あわぎんホール(徳島) 2009/11/13.
  43. Yuichi Masubuchi, "Primitive Chain Network Simulations for Entangled Polymer Dynamics", 3rd NU-UM Joint Symposium on Supramacromolecular Material Science and Engineering in the 21st Century (Nagoya Jpn) 2009/11/12-13
  44. 安田修悟, 山本量一, "ソフトマターのマルチスケールシミュレーション: 現状と展望", 非平衡ソフトマター物理学のフロンティア 第 3 回公開シンポジウム(京都) [2009/11/20-21].
  45. 安田修悟, "2 平板間における高分子溶液の流れのマルチスケールシミュレーション", 関西レオロジー研究会 第 58 回講演会(京都) 2009/11/28.
  46. Ryoichi Yamamoto and Shugo Yasuda, "An application of multiscale simulations to flows of complex fluids", International Conference on "Multiscale Modeling and Simulations of Hard and Soft Materials" (Bangalore, India) [2009/12/17-20]
  47. Yuichi Masubuchi, "Multi-scale simulations with primitive chain network

- model for entangled polymers", International Conference on "Multiscale Modeling and Simulations of Hard and Soft Materials" (Bangalore, India), 2009/12/17-20
48. 畝山多加志, 増渕雄一, "からみあった高分子のマルチスケールシミュレーションと高速応力シミュレーション", 物性研究所短期研究会計算物理学, 東京大学物性研究所(千葉), 2009/12/10.
  49. 増渕雄一, "高分子液体の高速分子シミュレーション法", 第23回分子シミュレーション討論会, 吹上ホール(名古屋), 2009/12/1 (学術賞受賞講演).
  50. 山本量一, "ソフトマターのマルチスケールシミュレーション", スーパーコンピューターワークショップ 2010「大規模並列分子シミュレーションの最前線」, 自然科学研究機構岡崎コンファレンスセンター(岡崎市), 2010/1/13-14.
  51. Takashi Uneyama, "Continuum field model approach to diblock copolymer micelles", Sapporo Winter School 2010, Hokkaido University (Sapporo), 2010/2/19
  52. 増渕雄一, "高分子のレオロジーとそのシミュレーション", 09-2 高分子基礎物性・高分子計算機科学合同研究会, 東大山上会館(東京), 2010/3/1.
  53. 増渕雄一, "ゼロからのレオロジー", プラスチック成形加工学会関西支部 第1回成形加工基礎講座, パナソニック電工(門真市), 2010/3/4, 11, 18, 27.
  54. Tetsu Narumi, "Achieving Enough Accuracy without Double-Precision Hardware to Accelerate Molecular Dynamics Simulations with GPUs", 2nd International Workshop on Advances in Computational Mechanics (IWACOM-II) (Yokohama, Japan), 2010/3/29-31
  55. Ryoichi Yamamoto, "Systematic analyzes on growing time/length scales in the dynamics of supercooled liquids", "Emerging Concepts in Glass Physics" (KITP at UCSB, Santa Barbara, USA) [2010/06/21-25]
  56. 山本量一, "ソフトマターの計算科学: 粗視化(メソスケールモデリング)のすすめ", 科研費特定領域「実在系の分子理論」シンポジウム(分子研, 岡崎市) [2010/07/10].
  57. Tetsu Narumi, "What the GPU Computing Technology Can or Cannot in the Near Future", Symposium on Computational mechanics on GPUs and modern many-core processors in the 9th World Congress on Computational Mechanics (WCCM) and 4th Asian Pacific Congress on Computational Mechanics (APACOM) (Sydney, Australia) [2010/07/19]
  58. 村島隆浩, "高分子流体のためのマルチスケールシミュレーション", 関西レオロジー研究会 第59回講演会(京大化研) [2010/07/22].
  59. Ryoichi Yamamoto, "Direct numerical simulations of colloidal dispersions: Smoothed profile method", CECAM Workshop on "Mesoscale methods for colloidal hydrodynamics" (CECAM-EPFL, Lausanne, Switzerland) [2010/07/19-21]
  60. 増渕雄一, "分子シミュレーションによる高分子の溶融物性予測", 化学工学会 第42回秋季大会, 同志社大学(京都) [2010/09/07].
  61. Ryoichi Yamamoto, "Complex dynamics of colloidal systems under external force: DNS approach to resolve hydrodynamic interaction", Workshop on "the Dynamics of the Glass/Jamming Transition" in celebration of the 80th birthday of Prof. Kyozi Kawasaki (Novotel Ambassador Busan, Korea) [2010/09/8-11]
  62. 荒井規允, "散逸粒子動力学法によるソフトマターダイナミクスの解析", 新化学発展協会 高分子ワークショップ, (東京) [2010/10/15].
  63. Shugo Yasuda, "Dynamic rheology of a supercooled polymer melt in oscillating boundary layer flows", Micro and Macroscopic Approaches in Fluid Dynamic (Kyoto University, Kyoto) [2010/11/5]
  64. 増渕雄一, "高分子の溶融状態におけるからみあいと粘弾性物性", 第18回日本ポリイミド・芳香族系高分子研究会(東京) [2010/11/26].

65. Ryoichi Yamamoto, "Complex Dynamics of Colloidal Systems under External Force: DNS Approach to Resolve Hydrodynamic Interaction", Core-to-Core 2010 World Network Seminar on Advanced Particle Science and Technology (Miyako Messe Kyoto, Kyoto) [2010/11/23-26]
66. 山本量一, "粗視化モデリングのすすめ:分子科学とソフトマター科学の接点" 第 8 回京都大学福井謙一記念研究センターシンポジウム(福井謙一記念研究センター, 京都市) [2010/12/3].
67. 山本量一, "ソフトマターのマルチスケールシミュレーション", CMSI 計算分子科学研究拠点 第1回研究会(自然科学研究機構, 岡崎市) [2011/2/4].
68. 山本量一, "高分子流体のマルチスケールシミュレーション", 第 19 回産業応用協議会スーパーコンピューティングセミナー(関東 IT ソフトウェア健保会館, 東京都) [2011/2/17].
69. 増渕雄一, "成形加工のマルチスケールシミュレーション", 最先端の押出 CAE セミナー, (中野サンプラザ, 東京) [2011/2/21].
70. Ryoichi Yamamoto, "Direct Numerical Simulations of Colloidal Dispersions", International workshop on "Fundamental process of electrokinetics in relation to colloidal flocculation and sedimentation" (Tsukuba University, Tsukuba) [2011/3/11-12]
71. 増渕雄一, "高分子レオロジーのシミュレーションとその工学的利用", 高分子学会高分子同友会関西勉強会, (薬業年金会館, 大阪) [2011/7/12].
72. 山本量一, "展望講演:複雑流体の移動現象のための新しいシミュレーション法の開発", 化学工学会 第 43 回秋季大会, (名古屋工業大学, 名古屋市) [2011/9/14-16].
73. 増渕雄一, "高分子レオロジーの基礎と物性", 日本レオロジー学会レオロジーイブニングセミナー2011, (三井化学袖ヶ浦センター, 千葉) [2011/10/28].
74. 増渕雄一, "高分子レオロジーのシミュレーション", 日本ゴム協会力学研究分科会, (大阪科学技術センター, 大阪) [2011/11/17].
75. 増渕雄一, "高分子ネットワークのシミュレーション(仮)", 高分子学会ポリマーフロンティア21, (場所未定) [2012/3/2].
76. Ryoichi Yamamoto, "Direct Numerical Simulations for Colloidal Dispersions", 11th International conference on "Computational & Experimental Engineering and Sciences" (ICCES'11)(Grand Metro Park Hotel, Nanjing, China) [2011/4/18-21]
77. Ryoichi Yamamoto, "Direct numerical simulations of colloidal particles under DC and AC electric fields", CECAM Workshop on "New Challenges for the Simulation of Electrokinetic Phenomena" (Universite Pierre et Marie Curie, Paris, France) [2011/5/4-6]
78. Shugo Yasuda, "Multi-scale simulation of polymeric liquids confined between oscillating parallel plates", International Workshop for Molecular Simulations for Polymers", (ICR, Uji, Kyoto) [2011/9/9]
79. Takahiro Murashima, "Multiscale Simulation for Entangled Polymer Melts", International Workshop for Molecular Simulations for Polymers", (ICR, Uji, Kyoto) [2011/9/9]
80. Takashi Uneyama, "Acceleration of rheology simulations for entangled polymers by coarse-graining and GPU", International Workshop for Molecular Simulations for Polymers, (ICR, Uji, Kyoto) [2011/9/9]
81. Ryoichi Yamamoto, "Multiscale Simulations for Polymeric Flow", CECAM Workshop on "Multiscale Modeling of Simple and Complex Liquid Flow Using Particle-Continuum Hybrids"(ZCAM, Zaragoza, Spain) [2011/10/5-7]
82. Ryoichi Yamamoto, "Mechanical response of supercooled liquid to 3D shear flow", French-Japanese meeting on Jamming, Glasses and Phase transitions (Institute of Henri Poincare, Paris, France ) [2011/12/7-10]

83. Ryoichi Yamamoto, "DNS (direct numerical simulation) approach for the dynamics of colloidal dispersions", 14th Asia Pacific Confederation of Chemical Engineering Congress, APCCChE 2012, (Suntec Center, Singapore) [2012/2/21-24]
84. H. Mizuno and R. Yamamoto, "Mechanical Responses and Stress Fluctuations of a Strongly Sheared Supercooled Liquid", The 5th International Discussion Meeting on Glass Transition, (Sendai, Japan) [2012/02/27-2012/03/01]

② 口頭発表 (国内会議 114 件、国際会議 42 件)

1. Takashi Uneyama, "Coarse-Grained Rheological Model of Entangled Polymers for Multiscale Simulations for Multiscale Simulations", The 2nd international symposium on "Multi-scale Simulations of Biological and Soft Materials" (MSBSM 2011), (Kyoto University, Kyoto) 2011/9/11
2. Yuichi Masubuchi, "Primitive chain network simulations; problems and possible improvements", Illinois Institute of Technology, seminar talk for Prof. Shieber's group, (Chicago, USA) 2006/11/13
3. 齋藤圭一, 市田真己, 多田和美, 増渕雄一, 堀尾和史, 谷藤眞一郎, "マルチスケールシミュレーションによる分子配向予測とそり解析への応用", プラスチック成形加工学会第14回秋季大会(成形加工シンポジウム'06 岐阜市) 2006/11/23.
4. 高橋和義, 泰岡顕治, 成見哲, "分子動力学シミュレーションにおける IPS 法とカットオフ法による動的性質の比較", 熱工学シンポジウム 2006(横浜市) 2006/11/24.
5. 荒井規允, 泰岡顕治, 増渕雄一, "散逸粒子動力学シミュレーションによる剪断流れ下における紐状ミセルの生成過程の解明", 熱工学シンポジウム 2006(横浜市) 2006/11/25.
6. 増渕雄一, Giovanni Ianniruberto, Francesco Greco, Giuseppe Marrucci, "高分子からみあい編み目構造の異階層間比較", 第20回分子シミュレーション討論会(仙台市) 2006/11/27.
7. 山本量一, "ソフトマターの計算機シミュレーション"[特別セッション招待講演], 東京大学物性研究所短期研究会「計算物性科学におけるスーパーコンピュータ利用の現状と展望」(千葉県柏市) 2006/12/12.
8. 荒井規允, 泰岡顕治, 増渕雄一, "散逸粒子動力学シミュレーションによる紐状ミセル水溶液のダイナミクスの解明", 第56回理論応用力学講演会(東京都) 2007/03/09.
9. 高橋和義, 泰岡顕治, 成見哲, "分子動力学シミュレーションにおける IPS 法とカットオフ法による動的性質の比較: LJ 流体と水", 第56回理論応用力学講演会(東京都) 2007/03/08.
10. 岩下拓哉, 山本量一, 名嘉山祥也, "熱揺らぎと流体力学相互作用を考慮した高分子鎖の緩和シミュレーション", ソフトマター 第一回公開シンポジウム(東京) 2007/03/15-16.
11. 山本量一, "ソフトマターのマルチスケールシミュレーションを目指して"[招待講演], 第5回北大シミュレーションサロン(HSS)ワークショップ(札幌市) 2007/03/16.
12. 山本量一, 岩下拓哉, 名嘉山祥也, "熱揺らぎと流体力学相互作用を考慮した微粒子分散系のシミュレーション", 化学工学会第72年会(京都市) 2007/03/19.
13. 岩下拓哉, 山本量一, 名嘉山祥也, "流体力学相互作用を考慮した高分子鎖のダイナミクス", 日本物理学会 2007 春季大会(鹿児島市) 2007/03/18-21.
14. 岩下拓哉, 山本量一, "ブラウン運動を考慮したナノスケール微粒子系の新しい直接数値計算法", 粉体工学会 2007 春季研究発表会(東京都) 2007/05/22-23.
15. Ryoichi Yamamoto, Takuya Iwashita, Kang Kim, and Yasuya Nakayama, "Direct Numerical Simulations of Colloidal Dispersions under External Fields", The YITP workshop on "New Frontiers in Colloidal Physics: A Bridge between Micro- and Macroscopic Concepts in Soft Matter" (Kyoto, Japan) 2007/07/25-27

16. 岩下拓哉, 名嘉山祥也, 山本量一, "新しい直接数値計算法による高分子鎖の緩和ダイナミクス", 第 12 回高分子計算機科学討論会(滋賀県) 2007/08/9-10.
17. 増渕雄一, Giovanni Ianniruberto, Giuseppe Marrucci, Francesco Greco, "からみあい描像による高分子の粗視化シミュレーションと多階層計算", 日本物理学会第62回年次大会(札幌市), 2007/9/22.
18. 荒井規允, 泰岡顕治, 増渕雄一, "散逸粒子動力学法を用いた紐状ミセルのダイナミクスの解明", 第 55 回レオロジー討論会(金沢市) 2007/11/1-3.
19. 荒井規允, 泰岡顕治, 増渕雄一, "剪断下の散逸粒子動力学シミュレーションによる紐状ミセル水溶液のダイナミクスの解明", 熱工学コンファレンス 2007(京都) 2007/11/23-24.
20. 亀岡駿, 美馬俊喜, 成見哲, 戎崎俊一, 泰岡顕治, "分子動力学シミュレーションにおける拡散係数のシステムサイズ依存性", 熱工学コンファレンス 2007(京都) 2007/11/23-24.
21. Shugo Yasuda and Ryoichi Yamamoto, "A Model for Hybrid Simulations of Molecular Dynamics and CFD", Symposium on the 50th Anniversary of the Alder transition, Kanazawa, 2007/11/30.
22. 増渕雄一, "高分子の分子レオロジー"第 107 回化学研究所研究発表会(京都府), 2007/12/7.
23. Naoi, Y. Mausbuchi, H. Watanabe, N. Tsukahara, Y. Kojima, H. Yoshikawa, M. Tatsumi, "Effect of Viscoelasticity on Single Screw Extrusion for Polyethylene", The 3rd International Workshop for Far East Asian Young Rheologists, (Shanghai, China) 2008/1/25-27
24. K. Horio, Y. Masubuchi, H. Watanabe, R. Khaliullin, J. D. Schieber, "A free energy of entangled polymer networks with non-bonding interactions", The 3rd International Workshop for Far East Asian Young Rheologists, (Shanghai, China) 2008/1/25-27
25. 安田修悟, 山本量一, "分子動力学と CFD の連結シミュレーションのモデル", 化学工学会 第 73 回年会(浜松) 2008/03/17-19.
26. 亀岡駿, 坂牧隆司, 美馬俊喜, 成見哲, 泰岡顕治, "専用・準汎用計算機を用いた液晶の分子動力学シミュレーション", 第 45 回日本伝熱シンポジウム, つくば市, 2008/05/22.
27. Ryoichi Yamamoto and Satoshi Yamamori, "Anisotropic interactions between charged colloidal particles under external electric fields", International Symposium on Non-Equilibrium Soft Matter, Kyoto University, June 3, 2008
28. 荒井規允, 泰岡顕治, X. C. Zeng, "ナノチューブ内の界面活性剤水溶液の自己組織化", 第 57 回理論応用力学講演会, 東京都, 2008/06/10.
29. Tetsu Narumi, Ryuji Sakamaki, Shun Kameoka, Rio Yokota, Shinnosuke Obi, and Kenji Yasuoka, "Using Special-Purpose and Video-Game Computers for Accelerating Particle Based Simulations", International Symposium on Multi-scale Simulations of Biological and Soft Materials (MSBSM2008), Tokyo, 2008/06/18-20
30. Ryoichi Yamamoto, "MSS Project Overview", International Symposium on Multi-scale Simulations of Biological and Soft Materials (MSBSM2008), (Tokyo, Japan) 2008/06/18-20
31. Shugo Yasuda and Ryoichi Yamamoto, "A model for hybrid simulations of MD and CFD", International Symposium on Multi-scale Simulations of Biological and Soft Materials (MSBSM2008), (Tokyo, Japan) 2008/06/18-20
32. Takashi Uneyama, "Static and Dynamic Density Functional Theory and Simulations for Micellar Structures in Block Copolymer Systems", Seminar in Department of Physics, Astronomy and Mathematics, University of Central Lancashire, UK, 2008/7/3

33. Yuichi Masubuchi, Hiroshi Watanabe, Giovanni Ianniruberto, Francesco Greco, and Giuseppe Marrucci, "Primitive Chain Network Simulations for Particle Dispersed Polymers", The XVth International Congress on Rheology, (Monterey, USA) 2008/08/05
34. Takatoshi Yaoita, Takeharu Isaki, Yuichi Masubuchi, Hiroshi Watanabe, Giovanni Ianniruberto, Francesco Greco, and Giuseppe Marrucci, "Rheology of entangled polymeric liquids through simulations of the primitive chain network model with finite extensibility", The XVth International Congress on Rheology, (Monterey, USA) 2008/08/05
35. Takashi Uneyama, "Coarse-grained Molecular Simulations for Microphase-Separated Diblock Copolymer Systems Based on the Soft Dumbbell Model", The Asian Workshop on Polymer Processing 2008 (AWPP2008), Tokyo, 2008/08/27
36. Ryoichi Yamamoto, "Growing Length and Time Scales in Glass-forming Liquids (discussant of Dasgupta)", Lorentz Center Workshop on "Dynamical heterogeneities in glasses, colloids and granular media", (Leiden, The Netherlands) 2008/08/25-09/05
37. 安田修悟, 山本量一, "CFDとMDの連結シミュレーションのモデル", 日本流体力学会 年会 2008, (神戸) 2008/09/04-07.
38. Tetsu Narumi, Ryuji Sakamaki, Shun Kameoka, Kenji Yasuoka, "Using Special-Purpose and Video-Game Computers for Accelerating Molecular Dynamics Simulations", Molecular Simulation Studies in Material and Biological Sciences [MSSMBS2008], (Dubna, Russia) 2008/09/10-09/12
39. 畝山多加志, 増渕雄一, "からみあった高分子系の分子動力学シミュレーションからプリミティブチェーンネットワークシミュレーションへの接続", 物理学会 2008 年秋季大会, (岩手), 2008/09/20.
40. 増渕雄一, "高分子レオロジーのシミュレーション", 第 14 回成形加工夏季セミナー(隠岐), 2008/09/16.
41. 山本剛紀, 山本量一, "微粒子分散系の直接数値計算:大規模化とその応用", 化学工学会 第 40 回秋季大会, (仙台) 2008/09/24-26.
42. 村島隆浩, 谷口貴志, "粒子法ベース・マルチスケールシミュレーション", 第 56 回レオロジー討論会(新潟) 2008/10/06.
43. 畝山多加志, 増渕雄一, "粗視化分子動力学とプリミティブチェーンネットワークモデルを組み合わせたからみあった高分子系の粘弾性のシミュレーション", 第 56 回レオロジー討論会(新潟) 2008/10/06.
44. 八百板隆俊, 伊崎健晴, 増渕雄一, 渡辺 宏, Francesco Greco, Giovanni Ianniruberto, Giuseppe Marrucci, "プリミティブチェーンネットワークモデルによるポリスチレン熔融体および溶液の一軸伸長粘度予測", 第 56 回レオロジー討論会(新潟) 2008/10/06.
45. 古市謙次, 野々村千里, 大田康雄, 増渕雄一, 渡辺 宏, Giovanni Ianniruberto, Giuseppe Marrucci, Francesco Greco, "非線形レオロジーにおける伸長一配向デカップリング近似の検証", 第 56 回レオロジー討論会(新潟) 2008/10/06.
46. 荒井規允, 泰岡顕治, Xiao Cheng Zeng, "散逸粒子動力学法を用いたナノチューブ内における界面活性剤水溶液の自己組織化構造", 第 56 回レオロジー討論会(新潟) 2008/10/06.
47. 畝山多加志, 増渕雄一, "粗視化分子動力学モデルとプリミティブチェーンネットワークモデルを用いた高分子レオロジーのシミュレーション", 第 20 回高分子加工技術討論会(名古屋) 2008/10/21.
48. 岩下拓哉, 名嘉山祥也, 山本量一, "流体力学的相互作用と熱揺らぎを考慮した微粒子分散系の非線形レオロジー", 粉体工学会 2008 秋季研究発表会(東京都)

- 2008/10/30-31.
49. Shugo Yasuda and Ryoichi Yamamoto, "A Model for Hybrid Simulations of MD and CFD", Multiscale Materials Modeling Conference (MMM-2008), (Tallahassee, USA) 2008/10/27-31
  50. 坂牧隆司, 成見哲, 泰岡顕治, "GPU を用いた大規模分子動力学シミュレーション", 日本機械学会 第 21 回計算力学講演会(沖縄) 2008/11/1-3.
  51. 荒井規允, 泰岡顕治, X. C. Zeng, "閉じ込められた系におけるミセル水溶液の自己組織化", 2008 年度高分子計算機科学研究会・高分子ナノテクノロジー研究会合同討論会(東京) 2008/12/12.
  52. 村島隆浩, 谷口貴志, "ラグランジュ法を用いた二階層連携シミュレーション", 2008 年度高分子計算機科学研究会・高分子ナノテクノロジー研究会合同討論会(東京) 2008/12/12.
  53. 畝山多加志, 増渕雄一, "粗視化分子動力学モデルとプリミティブチェーンネットワークモデルの連携による高分子からみあい系シミュレーション", 2008 年度高分子計算機科学研究会・高分子ナノテクノロジー研究会合同討論会(東京) 2008/12/12.
  54. 増渕雄一, "ナノ粒子を含む高分子からみあい系のモデル", 2008 年度高分子計算機科学研究会・高分子ナノテクノロジー研究会合同討論会(東京) 2008/12/12.
  55. Takahiro Murashima and Takashi Taniguchi, "Multiscale Lagrangian Hydrodynamics Simulation for Polymer Rheology", The 4th International Workshop for Far East Asian Young Rheologists (Nakhon Ratchasima, Thailand) 2009/01/21-23
  56. 畝山多加志, 増渕雄一, "プリミティブチェーンネットワークモデルの新規からみあい再構築スキームと分子動力学モデルとの接続", 高分子基礎研究会 2009(新潟) 2009/1/22.
  57. 古市謙次, 野々村千里, 大田康雄, 増渕雄一, 渡辺宏, Giovanni Ianniruberto, Giuseppe Marrucci, Francesco Greco, "非線形レオロジーにおける応力テンソルのデカップリング近似の検証", 高分子基礎研究会 2009(新潟) 2009/1/22.
  58. 八百板隆俊, 伊崎健晴, 増渕雄一, 渡辺 宏, Francesco Greco, Giovanni Ianniruberto, Giuseppe Marrucci, "ポリスチレン溶融体の伸長変形下における挙動の予測", 高分子基礎研究会 2009(新潟) 2009/1/22.
  59. Shugo Yasuda and Ryoichi Yamamoto, "Hybrid simulation of MD and CFD for the behavior of a supercooled polymer melt between two parallel plates", SciSSP 2009 (Kashiwa) 2009/2/16
  60. 山本 剛紀, 山本 量一, "微粒子沈降系における速度相関", 化学工学会第 74 年会(横浜) 2009/03/19.
  61. 小林 秀樹, 山本 量一, "せん断流下棒状粒子の回転運動", 日本物理学会 2009 年春季大会(東京) 2009/03/28.
  62. 岩下拓哉, 山本 量一, "定常ずり流動下における微粒子分散系の直接数値計算", 日本物理学会 2009 年春季大会(東京) 2009/03/30.
  63. Tetsu Narumi, Tsuyoshi Hamada, Keigo Nitadori, Ryuji Sakamaki, Shun Kameoka, Kenji Yasuoka, "High-Performance Quasi Double-Precision Method using Single-Precision Hardware for Molecular Dynamics Simulations with GPUs", HPC Asia 2009, Kaohsiung, Taiwan, Mar., 2009.
  64. Rio Yokota, Tetsu Narumi, Ryuji Sakamaki, Kenji Yasuoka and Shinnosuke Obi, "Fast Multipole Methods on GPUs for the Meshfree Simulation of Turbulence", 10th US National Congress on Computational Mechanics, Ohio, USA, Jul., 2009.
  65. Rio Yokota, Tetsu Narumi, Ryuji Sakamaki, Shun Kameoka, Kenji Yasuoka and Shinnosuke Obi, "DNS of Homogeneous Turbulence Using Vortex Methods Accelerated by the FMM on a Cluster of GPUs", Parallel Computational Fluid

- Dynamics (ParCFD) 2009, California, USA, May., 2009.
66. 坂牧 隆司, 成見 哲, 泰岡 顕治, "依頼講演: CUDA を用いた分子動力学シミュレーションの高速化", 平成 21 年第 1 回神戸シミュレーションスクール, 金沢, 2009/9.
  67. 高橋和義, 成見哲, 泰岡顕治, "Isotropic Periodic Sum 法および Wolf 法を用いた MD シミュレーション", 第 46 回日本伝熱シンポジウム, 京都, 日本, 2009/06.
  68. 坂牧隆司, 成見哲, 大村亮, 泰岡顕治, "水/メタン気液界面の分子動力学シミュレーション", 第 46 回日本伝熱シンポジウム, 京都, 日本, 2009/06.
  69. 成見哲, 坂牧隆司, 泰岡顕治, "分子動力学シミュレーションの GPU による高速化", 第 14 回計算工学講演会, 東京, 日本, 2009/05.
  70. 坂牧隆司, 成見哲, 泰岡顕治, "グラフィックカードを用いた水表面張力の高速分子動力学シミュレーション", HPCS2009, 東京, 日本, 2009/01.
  71. Giovanni Ianniruberto, Yuichi Masubuchi, Hiroshi Watanabe, Francesco Greco and Giuseppe Marrucci, "Primitive chain network simulations of conformational relaxation for individual molecules in the entangled state", 5th Annual European Rheology Conference, (Cardiff, UK), 2009/4/15
  72. 畠山多加志, 増渕雄一, "からみあった高分子系の線形粘弾性のマルチスケールシミュレーションによる計算", 日本レオロジー学会第 36 年会, (京都), 2009/5/15.
  73. 増渕雄一, 畠山多加志, "高分子レオロジーの多階層計算による成形現象の解析", プラスチック成形加工学会第 20 回年次大会, (東京), 2009/6/3.
  74. 安田修悟, 山本量一, "高速振動平板間における高分子溶液の流れ: マルチスケールモデリングの応用", 第 58 回理論応用力学講演会, (東京), 2009/6/11.
  75. 畠山多加志, 増渕雄一, "分子動力学モデルとプリミティブチェーンネットワークモデルの接続とからみあった高分子系の線形粘弾性シミュレーション", 第 58 回理論応用力学講演会, (東京), 2009/6/11.
  76. Shugo Yasuda and Ryoichi Yamamoto, "Viscoelastic behavior of polymer melt in rapidly oscillating plates: an application of multiscale modeling", RIMS Workshop, Mathematical Analysis in Fluid and Gas Dynamics, (Kyoto), 2009/7/8
  77. 村島隆浩, 谷口貴志, "高分子レオロジーのためのマルチスケールシミュレーション", 第 13 回高分子計算機科学研究討論会(滋賀) 2009/07/30-31.
  78. 浦長瀬正幸, 山本量一, "イオン強結合と電荷反転", 第 13 回高分子計算機科学研究討論会(滋賀) 2009/07/30-31.
  79. 安田修悟, 山本量一, "高速振動平板間における高分子溶液の流れのマルチスケールシミュレーション", 日本流体力学会 年会2009, (東京), 2009/9/2.
  80. 増渕雄一, "成形加工の分子シミュレーションと今後の展望", 第15回 成形加工夏季セミナー, (蓼科), 2009/9/4.
  81. Yuichi Masubuchi, "A multi-scale simulation of fiber spinning utilizing primitive chain network simulations", The 10th Asia Textile Conference (ATC-10), (Ueda), 2009/9/9
  82. 村島隆浩, 谷口貴志, "高分子レオロジーのための階層連携シミュレーション", 日本物理学会 2009 年秋季大会(熊本大学) 2009/09/25-28.
  83. 古市謙次, 野々村千里, 大田康雄, 増渕雄一, 渡辺 宏, Giovanni Ianniruberto, Giuseppe Marrucci, Francesco Greco, "プリミティブチェーンネットワークシミュレーションによる高分子の伸張緩和の解析", 第 57 回レオロジー討論会, (宇部), 2009/10/5.
  84. 畠山多加志, 増渕雄一, "プリミティブチェーンネットワークモデルの平衡状態の統計力学的解析", 第 57 回レオロジー討論会, (宇部), 2009/10/5.
  85. 増渕雄一, 畠山多加志, 渡辺 宏, "プリミティブチェーンネットワークモデルにおける流動下での高分子の形態緩和", 第 57 回レオロジー討論会, (宇部), 2009/10/5.
  86. 村島隆浩, 谷口貴志, "高分子レオロジーシミュレータと流体シミュレータによる階層連

- 携シミュレーション", 第 57 回レオロジー討論会(宇部) 2009/10/5-7.
87. 坂牧隆司, 成見哲, 泰岡顕治, "分子動力学シミュレーションにおける Particle Mesh Ewald 法の GPU への実装と評価", 第 22 回計算力学講演会, 金沢, 2009 年 10 月.
  88. Takashi Uneyama and Yuichi Masubuchi, "Multiscale molecular simulation of linear viscoelasticity of entangled polymers by the molecular dynamics and primitive chain network models", The Society of Rheology 81st Annual Meeting, (Madison, Wisconsin, USA) 2009/10/19
  89. 増渕雄一, "架橋高分子のレオロジーのシミュレーション", 成形加工シンポジウム 09, (長崎) 2009/11/07.
  90. 村島隆浩, 谷口貴志, "高分子流体のための階層連携シミュレーション", 第 23 回分子シミュレーション討論会(名古屋) 2009/11/30.
  91. 山本量一, 安田修悟, "マルチスケールモデリングによる高分子液体のレオロジー解析", 第 23 回分子シミュレーション討論会(名古屋) 2009/11/30.
  92. Shugo Yasuda and Ryoichi Yamamoto, "Multi-scale simulation of polymer melt flows between parallel plates", 62nd Annual Meeting of the APS DFD (Minneapolis, MN) 2009/11/22-24
  93. Hideki Kobayashi and Ryoichi Yamamoto, "Tumbling motion of a single chain in shear flow: A crossover from Brownian to non-Brownian behavior", The 5th International Workshop for East Asian Young Rheologists, Pusan National University(Pusan, Korea) 2010/1/21-23
  94. 畠山多加志, "スリップリングで弱く結合された多数鎖モデルの平衡統計の解析", 高分子基礎研究会 2010, ウェルサンピア新潟(新潟) 2010/1/30.
  95. 山本量一, "ソフトマターのマルチスケールシミュレーション: 現状と展望", 次世代スパコン物性科学分野研究会「新物質とエネルギー」, 東京フォーラム(東京都), 2010/3/10-11.
  96. Ryoichi Yamamoto, "Direct Numerical Simulations of Colloidal Dispersions in External Fields", Eloquent2010, (Mainz, Germany) 2010/3/14-17
  97. 安田修悟, 山本量一, "高分子液体の流動解析: マルチスケールシミュレーションの応用", 化学工学会 第75回年会(鹿児島) 2010/03/18-20.
  98. 畠山多加志, "スリップリングで結合された Gauss 鎖の平衡状態での統計力学的性質", 日本物理学会 2010 年春季大会(岡山大学) 2010/03/20-23.
  99. 小林秀樹, 山本量一, "煎断流下鎖の粘性率の数値計算的解析", 日本物理学会 2010 年春季大会(岡山大学) 2010/03/20-23.
  100. 水野英如, 山本量一, "過冷却液体の動的不均一性の寿命", 日本物理学会 2010 年春季大会(岡山大学) 2010/03/20-23.
  101. 安田修悟, 山本量一, "マルチスケールシミュレーションによる2平板間の高分子液体の挙動解析", 第 15 回 計算工学講演会(福岡), 2010/5/26-28.
  102. 村島隆浩, 谷口貴志, "高分子流体のためのラグランジュ描像におけるマルチスケールシミュレーション", 第 15 回計算工学講演会(福岡) 2010/5/26-5/28.
  103. 浦長瀬正幸, 山本量一, "多価イオンを含む電解質溶液中における荷電コロイドの電荷反転現象", 第 15 回計算工学講演会(福岡) 2010/5/26-5/28.
  104. 小林秀樹, 山本量一, "A Numerical Method to Calculate Viscosity at Particle Dispersion in Shear Flow with Periodic Boundary Condition", 第 15 回 計算工学講演会(福岡), 2010/5/26-28.
  105. 畠山多加志, "粗視化 Brownian ダイナミクスモデルによるジブロックコポリマーメルト・ミセルの剪断流動下での構造形成シミュレーション", 第 15 回計算工学講演会, 九州大学(福岡), 2010/5/28.
  106. 畠山多加志, 増渕雄一, "からみあった高分子系のレオロジーシミュレーションのためのマルチスケールシミュレーション手法構築", 第 15 回計算工学講演会, 九州大学(福岡), 2010/5/28.

107. Yuichi Masubuchi, "Multi-scale simulations for entangled polymers utilizing primitive chain network simulations", MACRO2010 43rd IUPAC World Polymer Congress (Glasgow), 2010/7/15
108. 安田修悟, 山本量一, "平板間の高分子液体の挙動解析: マルチスケールシミュレーションの応用", 日本混相流学会年会講演会 2010 年(浜松), 2010/7/17-19.
109. Noriyoshi Arai, Kenji Yasuoka, Yuichi Masubuchi, "Self-Assembly of Aqueous Surfactant Solutions in Nanotubes", 5th Pacific Rim Conference on Rheology Sapporo, 2010/08/01-06
110. Takahiro Murashima and Takashi Taniguchi, "Multiscale Fluid Particle Simulation for Polymeric Liquids", 5th Pacific Rim Conference on Rheology Sapporo, 2010/08/01-06
111. Hideki Kobayashi and Ryoichi Yamamoto, "Viscosity transition from non-Newtonian to Newtonian in dilute solutions of rigid rod", 5th Pacific Rim Conference on Rheology Sapporo, 2010/08/01-06
112. Takashi Uneyama, "Statistical Mechanical Analysis of Equilibrium Properties for the Primitive Chain Network Model", 5th Pacific Rim Conference on Rheology, Sapporo, 2010/8/2
113. Kazuaki Takahashi, Tetsu Narumi, Kenji Yasuoka, "Cutoff Radius Effect of Isotropic Periodic Sum Method in Water Homogeneous/Heterogeneous System", ICCT-2010 21st IUPAC International Conference on Chemical Thermodynamics, Ibaraki, 2010/8/1-6
114. Yuichi Masubuchi, "Conformational relaxation cannot be reproduced by tube/sliplink models", ICR International Workshop "Unsettled Issues in Rheology and Dynamics of Softmatters", Obaku Plaza, 2010/8/8
115. 小林秀樹, 山本量一, "せん断流下鎖分散系の粘性率の数値計算的解析", 化学工学会第 42 回秋季大会(同志社大学), 2010/09/06-08.
116. 安田修悟, 山本量一, "平板間における高分子液体の粘弾性流動のマルチスケールシミュレーション", 日本流体力学会 年会 2010(札幌), 2010/9/9-11.
117. 畠山多加志, "グラフィックプロセッサを用いたからみあつた高分子系の高速レオロジーシミュレーション", 日本物理学会平成 22 年度秋季大会, (札幌), 2010/9/15.
118. 村島隆浩, 谷口貴志, "マルチスケールシミュレーションで見る高分子流動", 第59回高分子討論会(札幌)2010/9/15-17.
119. 畠山多加志, "スリッスプリングモデルを用いた GPU 上でのからみあい高分子系のレオロジーの高速計算", 第59回高分子討論会(札幌), 2010/9/24.
120. 増渕雄一, "粗視化シミュレーションにおける分岐高分子の緩和と分岐点の運動", 第59回高分子討論会, (札幌), 2010/9/24.
121. Iori Yonekawa, Kenji Yasuoka, "Multiscale simulation of nematic liquid crystals", International Workshop MSSMBS-2010 "Molecular Simulation Studies in Material and Biological Sciences", Moscow, Russia, 2010/9/26-29
122. 増渕雄一, 畠山多加志, 渡辺宏, "プリミティブチェーンネットワークモデルにおけるからみあつた高分子の形態緩和", 第 58 回レオロジー討論会(仙台)2010/10/4.
123. 畠山多加志, "スリッスプリングモデルに基づく 1 本鎖からみあい高分子モデルのレオロジーと統計学的性質", 第 58 回レオロジー討論会(仙台)2010/10/4.
124. Takahiro Murashima and Takashi Taniguchi, "Application of Polymeric Fluid Particle Simulation to Entangled Polymer Melts", 5th International Conference Multiscale Materials Modeling 2010 (Freiburg, Germany) 2010/10/04-08
125. Shugo Yasuda and Ryoichi Yamamoto, "Multiscale Simulation for polymer melt flows in parallel plates", Fifth International Conference on Multiscale Materials Modeling (Freiburg), 2010/10/4-8.
126. 荒井規允, 泰岡顕治, 増渕雄一, "散逸粒子動力学法による紐状ミセルのせん断誘起

- 構造の解析", 第 58 回レオロジー討論会, 宮城, 2010/10/6-8.
127. 村島隆浩, 谷口貴志, "高分子溶融体のためのマルチスケールシミュレーション", 成形加工シンポジウム'10(神戸大学)2010/11/12-13.
  128. 荒井規允, 泰岡顕治, 古石貴裕, 戎崎俊一, "気泡生成を利用した高効率ナノモーターシステムの分子シミュレーション", 第 24 回分子シミュレーション討論会(福井)2010/11/26.
  129. 金子敏宏, 秋元琢磨, 泰岡顕治, 光武重代理, Xiao Cheng Zeng, "マルチカノニカル分子動力学法による分子クラスターの転移現象の解明", 第 24 回分子シミュレーション討論会(福井)2010/11/26.
  130. 水野英如, 山本量一, "過冷却液体における動的不均一性の寿命", 第 24 回分子シミュレーション討論会(福井)2010/11/26.
  131. 水野英如, 山本量一, "過冷却液体における動的不均一性の寿命", 東京大学物性研究所短期研究会「ガラス物理の諸問題－実験と理論の接点－」(千葉)2010/11/30.
  132. T. Murashima and Takashi Taniguchi, "Multiscale Simulation of Polymer Melt", The 5th International Workshop for East Asian Young Rheologists (Yamagata, Japan) 2011/01/20-22
  133. 水野英如, 山本量一, "過冷却液体の非線形構成方程式", 第一回京大物理ソフトマター研究会(京都)2011/3/10.
  134. Kazuaki Takahashi, Tetsu Narumi, Kenji Yasuoka, "Cutoff Radius Effect of Water Configuration Using the Wolf Method", 8th ASME/JSME Thermal Engineering Joint Conference, Hawaii, 2011/03/15
  135. 水野英如, 山本量一, "過冷却液体の非線形構成方程式", 化学工学会第 76 回春季大会(東京農工大学), 2011/03/22-24.
  136. 水野英如, 山本量一, "過冷却液体の非線形構成方程式", 日本物理学会 2011 年春季大会(新潟大学)2011/03/25-28.
  137. 辰巳 怜, 山本量一, "圧縮性溶媒中での溶質分子の運動", 日本物理学会 2011 年春季大会(新潟)2011/03/25-28.
  138. 増渕雄一, 松宮由実, 渡辺 宏, "非対称星型高分子のプリミティブチェーンネットワークシミュレーション", 日本レオロジー学会第 38 年会(京都リサーチパーク)2011/5/20.
  139. 石本志高, 村島隆浩, 谷口貴志, 山本量一, "2D Lattice Liquid Models", 日本物理学会 2011 年春季大会(新潟大学)2011/03/25-28.
  140. 畝山多加志, "スリップリンク型モデルのスリップリンク間平均セグメント数と平坦部弾性率の関係", 日本レオロジー学会第 38 年会(京都リサーチパーク)2011/5/20.
  141. 安田修悟, 山本量一, "振動境界層における高分子液体の動的レオロジー", 日本流体力学会 年会 2011, (東京)2011/09/08.
  142. 水野英如, 山本量一, "過冷却液体の力学応答に対する一般化構成方程式の検討", 日本流体力学会 年会 2011, (東京)2011/09/08.
  143. 辰巳 怜, 山本量一, "コロイド分散系中の超音波減衰の直接数値シミュレーション", 第 63 回コロイドおよび界面化学討論会(京都)2011/09/09.
  144. 水野英如, 山本量一, "過冷却液体の力学応答に対する一般化構成方程式の検討", 化学工学会 第 43 回秋季大会, (名古屋)2011/09/016.
  145. Eiji Yamamoto, Takuma Akimoto, Kenji Yasuoka, Yoshinori Hirano, Masato Akimoto, "Molecular Dynamics Simulations on Pressure Reversal of General Anesthesia in a Lipid Bilayer", 第 49 回生物物理学会年会, (姫路)2011/09/16.
  146. 辰巳 怜, 山本量一, "粘性流体中の粒子による音波減衰", 日本物理学会 2011 年秋季大会(富山)2011/09/21.
  147. 秋元琢磨, 山本詠士, 泰岡顕治, 平野秀典, 安井正人, "脂質 2 重膜におけるベキ的なトラップによる輸送係数の非ガウスの揺らぎ", 日本物理学会 2011 年秋季大会(富山)2011/09/22.

148. 増渕雄一, "スリップリングシミュレーションにおける分岐点近傍のからみあいダイナミクス", 第 60 回高分子討論会(岡山) 2011/9/28.
149. 増渕雄一, 松宮由実, 渡辺宏, 城本征治, 筒渕雅明, 東川芳晃, "楕形高分子の大変形応力緩和における束縛解放", 第 59 回レオロジー討論会(桐生) 2011/10/8.
150. 増渕雄一, "プリミティブチェーンネットワークシミュレーションによる高分子材料の応力緩和挙動の予測", 第 23 回エラストマー討論会(小倉) 2011/12/2.
151. Kazuaki Takahashi, Ryuji Sakamaki, Rio Yokota, Lorena A. Barba, Tetsu Narumi, Kenji Yasuoka, "A combination of the Tree code and IPS method to simulate large scale systems by molecular dynamics", International Conference on Computational Science (ICCS2011), Singapore, 2011/06/01
152. Takahiro Murashima, Takashi Taniguchi, "Multiscale Fluid Dynamics Simulation for Entangled Polymer Melts", The 2nd international symposium on "Multi-scale Simulations of Biological and Soft Materials" (MSBSM 2011), (Kyoto University, Kyoto) 2011/9/11
153. 安田修悟, 山本量一, "高速振動平板間における高分子液体の非線形レオロジー", 第 21 回日本 MRS 学術シンポジウム(横浜) 2011/12/19-21.
154. 秋元琢磨, 山本詠士, 泰岡顕治, 平野秀典, 安井正人, "脂質 2 重膜における粘弾性とトラップ時間のベキ則", 第 25 回分子シミュレーション討論会(東京工業大学) 2011/12/05.
155. 山本詠士, 秋元琢磨, 平野秀典, 泰岡顕治, 安井正人, "水/キセノン/脂質二重膜の分子動力学シミュレーション", 第 32 回日本熱物性シンポジウム(慶應義塾大学) 2011/11/23.
156. 荒井規允, 泰岡顕治, X. C. Zeng, "疎水性のストライプパターンを持つナノチャネルに閉じ込められた界面活性剤水溶液のモルフォロジーおよびダイナミクス", 第 59 回レオロジー討論会(桐生) 2011/10/8.

③ ポスター発表 (国内会議 53 件、国際会議 66 件)

1. 岩下拓哉, 山本量一, 名嘉山祥也, "流体力学相互作用を考慮したブラウン運動する微粒子の直接数値計算"[P], 日本レオロジー学会 2007 第 34 回年会(京都市) 2007/05/14-15.
2. 山本量一, "外場下のコロイド分散系の直接数値計算"[P], 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2回領域研究会(米沢市) 2007/06/21-23.
3. Ryoichi Yamamoto, Takuya Iwashita, Kang Kim, and Yasuya Nakayama, "Direct Numerical Simulations of Colloidal Dispersions under External Fields"[P], Soft, Complex, and Biological Matter Conference (SOCOBIM-2007): Satellite Conference of IUPAP Statphys 23 (Terrasini, Sicily, Italy) 2007/07/15-19
4. Shugo Yasuda, Takuya Nishiyama, and Takaji Inamuro, "Lattice Boltzmann simulation of the dispersion of aggregated Brownian particles in shear flows"[P], The YITP workshop on "New Frontiers in Colloidal Physics: A Bridge between Micro- and Macroscopic Concepts in Soft Matter" (Kyoto, Japan) 2007/07/25-27
5. Kazuaki Takahashi, Kenji Yasuoka, and Tetsu Narumi, "Transport Properties for Lennard-Jones Fluid and Water by Isotropic Periodic Sum Method in Molecular Dynamics Simulation"[P], The 8th Asian Thermophysical Properties Conference, Fukuoka, Japan, 2007/08/21-24.
6. 村島隆浩, "SPH による流体のシミュレーション"[P], 第 1 回ソフトマター物理若手勉強会(広島県) 2007/08/27-29.
7. 岩下拓哉, 名嘉山祥也, 山本量一, "非圧縮性ニュートン流体中に分散したブラウン粒

- 子に対する直接数値計算手法[P]", 第 1 回ソフトマター物理若手勉強会(広島県) 2007/08/27-29.
8. 坂牧隆司, 成見哲, 泰岡顕治, "グラフィックカードを用いた高速分子動力学シミュレーション[P]", 次世代スーパーコンピューティング・シンポジウム 2007(東京) 2007/10/3-4.
  9. 岩下拓哉, 名嘉山祥也, 山本量一, "ニュートン流体中に分散したブラウン粒子に対する付加質量の影響[P]", 日本機械学会 第20回計算力学講演会 CMD2007(京都市) 2007/11/26-28.
  10. 荒井規允, 泰岡顕治, 増渕雄一, "散逸粒子動力学法を用いた紐状ミセル水溶液のダイナミクスと剪断誘起構造についての考察[P]", 第21回分子シミュレーション討論会(金沢市) 2007/11/26-28.
  11. 亀岡駿, 美馬俊喜, 成見哲, 戎崎俊一, 泰岡顕治, "拡散係数の分子動力学シミュレーションにおけるシステムサイズ依存性[P]", 第21回分子シミュレーション討論会, 金沢, 日本, 2007/11/26-28.
  12. 高橋和義, 成見哲, 泰岡顕治, "均一系の分子動力学シミュレーションにおける IPS 法の有効性[P]", 第21回分子シミュレーション討論会, 金沢, 日本, 2007/11/26-28.
  13. 坂牧隆司, 成見哲, 泰岡顕治, "ビデオゲーム用ハードウェアを用いた高速分子動力学シミュレーション[P]", 第21回分子シミュレーション討論会(金沢市) 2007/11/26-28.
  14. Takuya Iwashita, Yasuya Nakayama and Ryoichi Yamamoto, "The velocity autocorrelation function of a Brownian particle by direct numerical simulation: Generalized Langevin equation and Long time tail[P]", Symposium on the 50th Anniversary of the Alder transition kanazawa, 2007/11/29-30
  15. 安田修悟, 山本量一, "分子動力学と CFD の連結シミュレーションのモデル[P]", ソフトマター第2回公開シンポジウム(名古屋) 2008/01/07-08.
  16. 岩下拓哉, 名嘉山祥也, 山本量一, "微粒子分散系の直接数値シミュレーション[P]", ソフトマター第2回公開シンポジウム(名古屋) 2008/01/07-08.
  17. T. Murashima and T. Taniguchi, "Smoothed Particle Hydrodynamics for Rheological Phenomena"[P], The 3rd International Workshop for Far East Asian Young Rheologists, (Shanghai, China) 2008/1/25-27
  18. 村島隆浩, 谷口貴志, "SPH による非ニュートン流体のシミュレーション"[P], 日本物理学会第63回年次大会(近畿大学, 大阪府) 2008/03/22-26.
  19. Shugo Yasuda and Ryoichi Yamamoto, "Consistent Hybrid Simulation of MD and CFD[P]", APS March Meeting 2008 (New Orleans, USA) 2008/03/10-14
  20. T. Yaoita, T. Isaki, Y. Masubuchi, H. Watanabe, G. Ianniruberto, F. Greco, G. Marrucci, "Molecular simulation and Dynamics On nonlinear rheological properties In entangled polymeric liquids", MDOI2008 (Tokyo, Japan), 2008/3/28-29 [P]
  21. S. Okuda, Y. Inoue, M. Hojo, and Y. Masubuchi, "A Wall Boundary Condition for Primitive Chain Network Simulations", MDOI2008 (Tokyo, Japan), 2008/3/28-29 [P]
  22. Y. Masubuchi, G. Ianniruberto, F. Greco and G. Marrucci, "Primitive chain network simulations for entangled polymers with solid particles", MDOI2008 (Tokyo, Japan), 2008/3/28-29 [P]
  23. K. Horio, Y. Masubuchi, H. Watanabe, R. Khaliullin and J. D. Schieber, "Chain statistics in entangled polymer networks with Gaussian-chain interactions", MDOI2008 (Tokyo, Japan), 2008/3/28-29 [P]
  24. K. Furuichi, C. Nonomura, Y. Masubuchi, H. Watanabe, G. Ianniruberto, F. Greco and G. Marrucci, "Damping functions of scarcely entangled polymers in primitive chain network simulations", MDOI2008 (Tokyo, Japan), 2008/3/28-29 [P]

25. Q. Chen, Y. Matsumiya, Y. Masubuchi, H. Watanabe, "Component dynamics in polyisoprene/poly(4-tert-butyl styrene) miscible blends", MDOI2008 (Tokyo, Japan), 2008/3/28-29 [P]
26. N. Arai, K. Yasuoka and Y. Masubuchi, "Dissipative Particle Dynamics Simulation for Dynamics of Threadlike Micellar Solutions", MDOI2008 (Tokyo, Japan), 2008/3/28-29 [P]
27. T. Murashima and T. Taniguchi, "Dynamics of Fluid Particles with Internal Degree of Freedom"[P], Meso-scale Dynamics on Interface (MDOI) 2008 (Tokyo) 2008/03/28-29
28. Shugo Yasuda and Ryoichi Yamamoto, "A model for multi-scale simulation coupling Molecular Dynamics and CFD[P]", MDOI2008 (Tokyo, Japan), 2008/3/28-29
29. Takuya Iwashita, Takuya Hirata, Yasuya Nakayama, Ryoichi Yamamoto, "Nonlinear rheology of particle dispersions by direct numerical simulation[P]" MDOI2008 (Tokyo, Japan), 2008/3/28-29
30. Ryoichi Yamamoto and Satoshi Yamamori, "Anisotropic interactions between charged colloidal particles under external electric fields[P]" MDOI2008 (Tokyo, Japan), 2008/3/28-29
31. T. Murashima, T. Taniguchi, "Particle-based Simulation for Multi-scale Simulations", International Symposium on Multi-scale Simulations of Biological and Soft Materials (MSBSM2008), Akihabara Crossfield, June 19, 2008
32. K. Horio, T. Uneyama, Y. Masubuchi, H. Watanabe, R. Khaliullin and J. D. Schieber, "A Free Energy of Entangled Polymer Networks with Chain Statistics and Segment-Segment Interactions", International Symposium on Multi-scale Simulations of Biological and Soft Materials (MSBSM2008), Akihabara Crossfield, June 19, 2008
33. T. Uneyama, "Dynamic Density Functional Simulations for Morphological Transition Dynamics of Block Copolymer Micelles", International Symposium on Multi-scale Simulations of Biological and Soft Materials (MSBSM2008), Akihabara Crossfield, June 19, 2008
34. Y. Masubuchi, K. Horio and T. Uneyama, "Multi-Scale Simulations for Entangled Polymers with Primitive Chain Network Simulations", International Symposium on Multi-scale Simulations of Biological and Soft Materials (MSBSM2008), Akihabara Crossfield, June 19, 2008
35. T. Yaoita, T. Isaki, Y. Masubuchi, H. Watanabe, G. Ianniruberto, F. Greco and G. Marrucci, "Nonlinear behavior of entangled polystyrene melts predicted by a 3D Slip-link model", International Symposium on Non-Equilibrium Soft Matter, Kyoto University, June 3, 2008
36. 堀尾和史, 畝山多加志, 増渕雄一, 渡辺 宏, Renat Khaliullin, Jay D. Schieber, "形態エントロピーと密度場相互作用を考慮した高分子からみあい系の自由エネルギー", 日本レオロジー学会第35年会, 日本ペイント(東京), 平成20年5月14日.
37. Shun Kameoka, Ryuji Sakamaki, Toshiki Mima, Tetsu Narumi, and Kenji Yasuoka, "Acceleration of molecular dynamics simulation of liquid crystals", International Symposium on Multi-scale Simulations of Biological and Soft Materials (MSBSM2008), Tokyo, 2008/06/19
38. Kazuaki Takahashi, Kenji Yasuoka, and Tetsu Narumi, "Molecular Dynamics Simulation of Homogeneous System using Isotropic Periodic Sum Method", International Symposium on Multi-scale Simulations of Biological and Soft Materials (MSBSM2008), Tokyo, 2008/06/19
39. R. Sakamaki, T. Narumi, and K. Yasuoka, "Large Scale Molecular Dynamics Simulation using Graphic Processing Unit" International Symposium on

- Multi-scale Simulations of Biological and Soft Materials (MSBSM2008), Tokyo, 2008/06/19
40. Noriyoshi Arai, Kenji Yasuoka and X. C. Zeng, "Self-Assembly of Aqueous Surfactant Solutions in Nanotubes", International Symposium on Multi-scale Simulations of Biological and Soft Materials (MSBSM2008), Tokyo, 2008/06/19
  41. Takuya Iwashita, Yasuya Nakayama and Ryoichi Yamamoto, "A model for Brownian particles fluctuating in incompressible Newtonian fluids", International Symposium on Multi-scale Simulations of Biological and Soft Materials (MSBSM2008), Tokyo, 2008/06/19
  42. Kazushi Horio, Yuichi Masubuchi, Hiroshi Watanabe, Renat Khaliullin, and Jay D. Schieber, "Effective pairwise potentials in entangled polymer networks", The XVth International Congress on Rheology, Monterey, USA, 2008/08/07
  43. Yuichi Masubuchi, "Primitive Chain Network Simulations for Polymer Rheology", The Asian Workshop on Polymer Processing 2008 (AWPP2008), Tokyo Institute of Technology, Tokyo, 2008/08/27
  44. 岩下拓哉, 山本剛紀, 名嘉山祥也, 金剛, 山本量一, "微粒子・溶媒・熱揺らぎの直接数値シミュレーション", 次世代スーパーコンピューティング・シンポジウム 2008, 東京, 2008/09/16-17.
  45. 安田修悟, 山本量一, "ソフトマターに対するハイブリットシミュレーションのモデル", 次世代スーパーコンピューティング・シンポジウム 2008, 東京, 2008/09/16-17.
  46. 村島隆浩, 谷口貴志, "高分子流動のためのマルチスケールシミュレーション", 日本物理学会 2008 年秋季大会, 岩手, 2008/09/20.
  47. 畝山多加志, 増渕雄一, "分子動力学とプリミティブチェーンネットワークモデルを用いた高分子からみあい系のシミュレーション", 第 57 回高分子討論会, 大阪, 2008/09/26.
  48. Takahiro Murashima and Takashi Taniguchi, "Multiscale simulation for rheological phenomena", Multiscale Materials Modeling Conference (MMM-2008), (Tallahassee, USA) 2008/10/27-31
  49. 高橋和義, 泰岡顕治, 成見哲, "IPS 法, Wolf 法と Ewald 法の精度比較"第 22 回分子シミュレーション討論会, 岡山大学, 2008/11/17-19.
  50. 荒井規允, 泰岡顕治, X. C. Zeng, "散逸粒子動力学法による閉じ込められた系における界面活性剤水溶液の自己組織化構造", 第 22 回分子シミュレーション討論会, 岡山大学, 2008/11/17-19.
  51. 亀岡駿, 坂牧隆司, 成見哲, 泰岡顕治, "専用・汎用計算機による液晶の MD シミュレーション", 第 22 回分子シミュレーション討論会, 岡山大学, 2008/11/17-19.
  52. 村島隆浩, 谷口貴志, "ラグランジュ法を用いた階層間連携シミュレーション", 第 22 回分子シミュレーション討論会, 岡山大学, 2008/11/17-19.
  53. Yuki Matsuoka and Ryoichi Yamamoto, "Correlation between Dynamic Heterogeneity and Static Particle Configurations: Normal Mode Analysis", Unifying Concepts in Glass Physics? (UCGP2008), (Kyoto) 2008/11/25-28
  54. Yuichi Masubuchi, "A Molecular Model for Entangled Polymers, Blends and Composites", IUMRS-ICA2008, Nagoya Congress Center (Nagoya), 2008/12/12
  55. Takashi Uneyama, "Density Functional Simulations for Self-Assembling Micellar Structures in Amphiphilic Block Copolymer Solutions", IUMRS-ICA2008, Nagoya Congress Center (Nagoya), 2008/12/12
  56. Takashi Uneyama and Yuichi Masubuchi, "Multiscale Simulation of Entangled Polymers based on the Molecular Dynamics and Primitive Chain Network Models", de Gennes Discussion Conference, Hotel Alpina, Chamonix (France) 2009/02/02
  57. Shun Kameoka, Tetsu Narumi, Kenji Yasuoka, "Client-Server Architecture for Accelerating Molecular Dynamics Simulations with a PLAYSTATION 3

- Cluster", HPC Asia 2009, Kaohsiung, Taiwan, Mar., 2009.
58. Ryuji Sakamaki, Ryo Ohmura, Tetsu Narumi, Kenji Yasuoka, "Calculation of Thermodynamics Properties on Methane / Water Interface Using fast Molecular Dynamics Simulation", The 3rd Mini-Symposium on Liquids, Okayama, Japan, 2009/06.
  59. 村島隆浩, 谷口貴志, "複雑流体のための階層連携シミュレーション", 第4回ソフトマター領域研究会(北海道大学) 2009/07/1-3.
  60. Ryoichi Yamamoto and Takuya Iwashita "Direct numerical simulations of colloidal dispersions: electrophoresis and non-linear rheology", Faraday Discussion 144: Multiscale Modelling of Soft Matter, (University of Groningen, The Netherlands), 2009/07/20-22
  61. 村島隆浩, 谷口貴志, "高分子マルチスケールシミュレーションの大規模並列化", 第3回ソフトマター物理若手勉強会(筑波大学) 2009/09/2-4.
  62. 浦長瀬正幸, 山本量一, "イオン強結合状態における電荷反転現象", 日本物理学会 2009 年秋季大会(熊本大学) 2009/09/25-28.
  63. 原知之, 光武亜代理, 成見哲, 泰岡顕治, "拡張アンサンブル法を用いた両親媒性ペプチド分子の構造解析", 第23回分子シミュレーション討論会, 愛知, 日本, 2009 年 11 月.
  64. 清水寛之, 平野秀典, 成見哲, 泰岡顕治, 安井正人, "細胞膜におけるキセノン麻酔の圧拮抗に関する分指動力学計算", 第23回分子シミュレーション討論会, 愛知, 日本, 2009 年 11 月.
  65. 高橋和義, 成見哲, 泰岡顕治, "水バルクおよび気液界面系における IPS 法および Wolf 法のカットオフ依存性", 第23回分子シミュレーション討論会, 愛知, 日本, 2009 年 11 月.
  66. 坂牧隆司, 成見哲, 泰岡顕治, "CUDA を用いた分子間相互作用計算高速化ライブラリの評価および気液界面物性の計算", 第23回分子シミュレーション討論会, 愛知, 日本, 2009 年 11 月.
  67. 荒井規允, 金城友之, 泰岡顕治, 兵頭志明, "Lennard-Jones 系における分子動力学法と粗粒子化粒子動力学法の比較", 第23回分子シミュレーション討論会, 愛知, 日本, 2009 年 11 月.
  68. Shugo Yasuda and Ryoichi Yamamoto, "Multi-scale simulation for polymer melt flows in parallel plates", International Conference on "Multiscale Modeling and Simulations of Hard and Soft Materials" (Bangalore, India) [2009/12/17-20]
  69. Takahiro Murashima and Takashi Taniguchi, "Multiscale Simulation on Fluid Dynamics for Polymeric Liquids" The 5th International Workshop for East Asian Young Rheologists, Pusan National University(Pusan, Korea) 2010/1/21-23
  70. 村島隆浩, 谷口貴志, "マルチスケール高分子流体シミュレーションのシアシニング流れ", 日本物理学会第65回年次大会(岡山大学) 2010/03/20-23.
  71. 畝山多加志, "スリップリングに基づくからみあい高分子モデルの平衡統計の解析", 日本レオロジー学会第37年会(東京), 2010/5/13.
  72. Yuichi Masubuchi, "Coarse-Grained Simulations of Entangled Polymers", 8TH JAPAN - CHINA CONFERENCE ON ADVANCED POLYMER NANOTECHNOLOGY (Tokyo), 2010/5/18
  73. Takahiro Murashima and Takashi Taniguchi, "Multiscale Simulation on Lagrangian Fluid Dynamics for Polymer Melts", International Soft Matter Conference 2010, (Granada, Spain) 2010/07/05-08
  74. Shugo Yasuda and Ryoichi Yamamoto, "Dynamic rheology of polymeric liquid in rapidly oscillating plates: an application of multi-scale simulation", International Soft Matter Conference 2010 (Granada), 2010/7/5-8.

75. Hideki Kobayashi and Ryoichi Yamamoto, "Viscosity transition from non-Newtonian to Newtonian in dilute solutions of rigid rod", International Soft Matter Conference 2010, (Granada, Spain) 2010/07/05-08
76. Yukitaka Ishimoto, "On the toroid-toroidal globule transition of the DNA condensation", International Soft Matter Conference 2010, (Granada, Spain) 2010/07/05-08
77. Yuichi Masubuchi, T. Uneyama and H. Watanabe, "Chain Dynamics in a Modified Primitive Chain Network Model with Uncoupled Sliplinks", 5th Pacific Rim Conference on Rheology (Sapporo) 2010/8/3
78. Takashi Uneyama, "Effect of Hydrophilic/Hydrophobic Interactions to Phase Separation Structures in Diblock Copolymer Solutions", ISSP International Workshop on Soft Matter Physics "Structural Rheology"(Kashiwa) 2010/8/10
79. Yukitaka Ishimoto, "On the conformational transitions of the DNA condensation", International Symposium on Non-Equilibrium Soft Matter 2010, (Nara) 2010/08/17-20
80. Masayuki Uranagase and Ryoichi Yamamoto "Overcharging of a Charged Colloidal Particle Due to Ion Strong Coupling", International Conference on Nanoscopic Colloid and Surface Science (Makuhari) 2010/9/19-22
81. 小林秀樹, 山本量一, "Viscosity transition from non-Newtonian to Newtonian in dilute solutions of rigid rod", 第 4 回ソフトマター物理若手勉強会 (大阪大学) 2010/11/12-13.
82. 村島隆浩, 谷口貴志, "高分子流体のためのマルチスケールシミュレーション", 第3回 田中豊一記念シンポジウム(京都大学桂) 2010/11/19-20.
83. 高橋和義, 成見哲, 泰岡顕治, "Isotropic Periodic Sum 法と Particle-Particle Particle-Cell 法を組み合わせた長距離相互作用計算手法の開発", 第 24 回分子シミュレーション討論会(福井) 2010/11/24-26.
84. 山本詠士, 秋元琢磨, 泰岡顕治, 平野秀典, 安井正人, "キセノン分子と圧力が脂質二重膜に与える影響に関する分子動力学計算", 第 24 回分子シミュレーション討論会(福井) 2010/11/24-26.
85. 秋元琢磨, 山本詠士, 泰岡顕治, 平野秀典, 安井正人, "脂質 2 重膜における脂質の拡散の解析", 第 24 回分子シミュレーション討論会(福井) 2010/11/24-26.
86. 柏木弘毅, 秋元琢磨, 泰岡顕治, 荒井規允, 平野秀典, 安井正人, "散逸粒子動力学法を用いたアクアポリンの自己集合", 第 24 回分子シミュレーション討論会(福井) 2010/11/24-26.
87. 米川伊織, 泰岡顕治, "ネマティック液晶のマルチスケール分子動力学シミュレーション", 第 24 回分子シミュレーション討論会(福井) 2010/11/24-26.
88. 浦長瀬正幸, 山本量一, "イオン強結合状態における荷電コロイド系の分子動力学シミュレーションによる解析", 第 24 回分子シミュレーション討論会(福井) 2010/11/24-26.
89. 村島隆浩, 谷口貴志, "高分子流体の履歴の影響", 第 24 回分子シミュレーション討論会(福井) 2010/11/24-26.
90. 村島 隆浩, 谷口貴志, "高分子溶融体のマルチスケールシミュレーション", 第一回京大物理ソフトマター研究会(京都) 2011/3/10.
91. 石本志高, 村島隆浩, 谷口貴志, 山本量一, "2D Lattice Liquid Models", 第一回京大物理ソフトマター研究会(京都) 2011/3/10.
92. 村島隆浩, 谷口貴志, "高分子溶融体のミクロスコピックな状態の移流", 第一回ソフトマター研究会, キャンパスプラザ京都(京都) 2011/8/3.
93. 畝山多加志, "定常剪断流動下での時間依存する微小剪断変形に対する応力の線形応答", 第一回ソフトマター研究会, キャンパスプラザ京都(京都) 2011/8/3.
94. 安田修悟, 山本量一, "高速振動平板間にある高分子液体の非線形レオロジー挙動", 計算分子科学研究拠点 第2回研究会(神戸) 2011/08/11-12.

95. 村島隆浩, 谷口貴志, "高分子流体のためのマルチスケールシミュレーション", 第2回計算統計物理学研究会(金沢大学) 2011/09/25.
96. 増淵雄一, "多体スリップリンクモデルにおける動的管膨張", 第 60 回高分子討論会(岡山) 2011/9/28.
97. 村島隆浩, 谷口貴志, "からみあった高分子溶融体のマルチスケールシミュレーション", 第60回高分子討論会(岡山大学) 2011/09/29.
98. Rei Tatsumi and Ryoichi Yamamoto, "Numerical Simulation Analysis of Ultrasound Attenuation in a Colloidal Solution", The 5th International Mini-Symposium on Liquids, Okayama, 2011/06/25
99. 米川伊織, 泰岡顕治, "棒状液晶のマルチスケール分子動力学シミュレーション", 第 25 回分子シミュレーション討論会(東京工業大学) 2011/12/06.
100. 坂牧隆司, Amadeu Sum, 成見哲, 大村亮, 泰岡顕治, "Direct Coexistence 法を用いた固液または気液平衡の分子シミュレーション", 第 25 回分子シミュレーション討論会(東京工業大学) 2011/12/06.
101. 荒井規允, 泰岡顕治, X. C. Zeng, "ナノチャネルに閉じ込められた界面活性剤水溶液の散逸粒子動力学シミュレーション", 第 25 回分子シミュレーション討論会(東京工業大学) 2011/12/06.
102. 山本詠士, 秋元琢磨, 平野秀典, 泰岡顕治, 安井正人, "外圧の増加が脂質二重膜内のキセノン分子へ与える影響", 第 25 回分子シミュレーション討論会(東京工業大学) 2011/12/05.
103. 高橋和義, 成見哲, 泰岡顕治, "LIPS 法:均一系および不均一系の長距離相互作用計算に対応した一般化 IPS 法の開発", 第 25 回分子シミュレーション討論会(東京工業大学) 2011/12/05.
104. T. Murashima and T. Taniguchi, "Advection of Microscopic States in Entangled Polymer Melt Flow", The 5th International Mini-Symposium on Liquids, Okayama, 2011/06/25
105. Hideyuki Mizuno and Ryoichi Yamamoto, "Rheological behaviors of a supercooled liquid under general shear strains", The 5th International Mini-Symposium on Liquids, Okayama, 2011/06/25
106. Ryuji Sakamaki, Amadeu K. Sum, Tetsu Narumi, Kenji Yasuoka, "Phase equilibria for common water models", The 5th International Mini-Symposium on Liquids, Okayama, 2011/06/25
107. Ryuji Sakamaki, Kenji Yasuoka, Eric M. Grzelak, David T. Wu, Ryo Ohmura, Amadeu K. Sum, "Calculation of interfacial tensions between hydrate and liquid phases using molecular simulation", 7th International Conference on Gas Hydrates ICGH7 2011, Edinburgh, Scotland, 2011/07/19
108. Ryuji Sakamaki, Amadeu Sum, Tetsu Narumi, Kenji Yasuoka, "Solid/liquid and liquid/vapor equilibria for common water models", 8th Liquid Matter Conference, Wien, Austria, 2011/09/06
109. Takuma Akimoto, Eiji Yamamoto, Kenji Yasuoka, Yoshinori Hirano, Masato Yasui, "Non-Gaussian fluctuation of Time-averaged Mean Square Displacement in Lipid Bilayer", 8th Liquid Matter Conference, Wien, Austria, 2011/09/08
110. Noriyoshi Arai, Kenji Yasuoka, Xiao Cheng Zeng, "Dissipative Particle Dynamics Simulation for Surfactant Solution Confined to Nanochannel with Striped Janus Surfaces", 8th Liquid Matter Conference, Wien, Austria, 2011/09/08
111. Iori Yonekawa, Kenji Yasuoka, "Multiscale simulation of rod-like liquid crystals", 8th Liquid Matter Conference, Wien, Austria, 2011/09/09
112. Rei Tatsumi and Ryoichi Yamamoto, "Direct Numerical Simulation for Acoustic Properties of Dispersion", The 2nd international symposium on

- "Multi-scale Simulations of Biological and Soft Materials" (MSBSM2011), Kyoto, 2011/9/11
113. Shugo Yasuda, Ryoichi Yamamoto, "Dynamic rheology of a polymeric liquid in oscillatory boundary layer flows", The 2nd international symposium on "Multi-scale Simulations of Biological and Soft Materials" (MSBSM2011), (Kyoto University, Kyoto) 2011/9/11
  114. Iori Yonekawa, Kenji Yasuoka, Yuichi Masubuchi, "Multiscale simulation of entangled polymer melts", The 2nd international symposium on "Multi-scale Simulations of Biological and Soft Materials" (MSBSM2011), (Kyoto University, Kyoto) 2011/9/11
  115. Ryuji Sakamaki, Rio Yokota, Tetsu Narumi, Kenji Yasuoka, "Accelerating Classical Molecular Simulations on a GPU cluster", The 2nd international symposium on "Multi-scale Simulations of Biological and Soft Materials" (MSBSM2011), (Kyoto University, Kyoto) 2011/9/11
  116. Takuma Akimoto, Eiji Yamamoto, Kenji Yasuoka, Yoshinori Hirano, Masato Yasui, "Non-Gaussian Fluctuations Resulting from Long Time Trapping in Lipid Bilayers", The 2nd international symposium on "Multi-scale Simulations of Biological and Soft Materials" (MSBSM2011), (Kyoto University, Kyoto) 2011/9/11
  117. Noriyoshi Arai, Kenji Yasuoka, Xiao Cheng Zeng, "Dissipative Particle Dynamics Simulation for Surfactant Solution in Confined System", The 2nd international symposium on "Multi-scale Simulations of Biological and Soft Materials" (MSBSM2011), (Kyoto University, Kyoto) 2011/9/11
  118. Hideyuki Mizuno and Ryoichi Yamamoto, "Mechanical Responses of a Supercooled Liquid in Non-Equilibrium State", The 2nd international symposium on "Multi-scale Simulations of Biological and Soft Materials" (MSBSM2011), Kyoto, 2011/9/11
  119. Yuichi Masubuchi, "Multi-scale Simulations for Entangled Polymers with Primitive Chain Network Model", The 2nd international symposium on "Multi-scale Simulations of Biological and Soft Materials" (MSBSM 2011), (Kyoto University, Kyoto) 2011/9/11

(4)知財出願

- ①国内出願 (0 件)
- ②海外出願 (0 件)
- ③その他の知的財産権  
なし

(5)受賞・報道等

①受賞

1. 泰岡顕治, "流体の界面・核生成現象の微視的機構の大規模分子シミュレーションによる研究", 分子シミュレーション研究会学術賞(第 20 回分子シミュレーション討論会, 仙台市) 2006/11/26
2. 山本量一, "計算機シミュレーションによるガラスとコロイド系の研究", ホソカワ研究奨励賞(千里阪急ホテル, 豊中市) 2007/01/29
3. 岩下拓哉, 山本量一, "ブラウン運動を考慮したナノスケール微粒子系の新しい直接数値計算手法", 粉体工学会 2007 春季研究発表会 Best Presentation(BP)賞(東京都) 2007/05/22
4. 坂牧隆司, "ビデオゲーム用ハードウェアを用いた高速分子動力学シミュレーション", 学生ポスター賞(第 21 回分子シミュレーション討論会, 金沢市) 2007/11/27
5. 小林秀樹, "定常せん断流中鎖の回転運動－熱揺らぎ支配からせん断流支配への変

- 化”, 優秀ポスター賞(第3回ソフトマター物理若手勉強会, つくば市) 2009/9/4
6. 泰岡 顕治, 成見 哲, “42 TFlops hierarchical N-body simulations on GPUs with applications in both astrophysics and turbulence”, 2009 年米電気電子学会ゴードン・ベル賞 price-performance 部門 (米国オレゴン州ポートランド) 2009/11/19
  7. 増渕雄一, “高分子液体の高速分子シミュレーション法”, 分子シミュレーション研究会平成21年度学術賞(第23回分子シミュレーション討論会, 名古屋市) 2009/11/30
  8. 増渕雄一, “Primitive Chain Network Simulations of Conformational Relaxation for Individual Molecules in the Entangled State”, 2010 年度日本レオロジー学会論文賞(日本レオロジー学会第 37 年会, 東京都) 2010/5/13
  9. 小林秀樹, “Viscosity Transition from non-Newtonian to Newtonian in dilute rigid rod solutions”, 第4回ソフトマター物理若手勉強会優秀ポスター賞, (大阪) 2010/11/13
  10. 小林秀樹, “せん断流下鎖分散系の粘性率の数値計算的解析”, 化学工学会第42回秋季大会 粒子・流体プロセス部会シンポジウム 賞(京都) 2010/10/1
  11. 増渕雄一, “高分子ネットワークのシミュレーション手法の開発”, 日本ゴム協会第2回ブリヂストンソフトマテリアルフロンティア賞奨励賞, 日本ゴム協会第78回通常総会(東京) 2011/5/30

## ②マスコミ(新聞・TV等)報道

1. プレス発表 科学技術振興機構報 第 631 号 (平成21年4月15日)

高速振動する平板間の高分子液体の動きを新開発の「マルチスケールモデリング」で解析

概要: JST目的基礎研究事業の一環として、京都大学 大学院工学研究科の山本 量一 教授と安田 修悟 特定助教らは、計算流体力学法と分子動力学法の組み合わせによる新しい「マルチスケールシミュレーション法」を開発し、高速振動する平板間の高分子溶液の複雑な流動挙動を解析することに成功した。

2. プレス発表 科学技術振興機構報 第 828 号 (平成23年9月9日)

「高温プラスチック流体のシミュレーションに成功ー金型・射出成形などの材料設計に応用広がるー」

概要: JST課題達成型基礎研究の一環として、京都大学 大学院工学研究科の山本量一教授と村島 隆浩 特定助教、谷口 貴志 准教授らは、計算流体力学法と高分子動力学法の組み合わせによる「高分子流体のためのマルチスケールシミュレーション法」を用いて、円筒の周りを流れる高分子溶融体の複雑な流動挙動を再現することに成功した。

## ③その他

なし

## (6)成果展開事例

### ①実用化に向けての展開

- ・ 高分子のシミュレーション技術に関して株式会社 HASL 社、株式会社 JSOL において、本プロジェクトの成果の一部であるソフトウェア NAPLES に、ユーザーインターフェース等を追加した実用化版を開発、市販(増渕 G)。

### ②社会還元的な展開活動

- ・ 本研究の成果であるソフトウェア KAPSEL をインターネット (<http://www-tph.cheme.kyoto-u.ac.jp/kapsel/>) で公開し、無料で提供している。

- ・本研究の成果の一部であるソフトウェアNAPLESを、OCTA(<http://octa.jp>) パッケージに含めて無料配布中

## § 6 研究期間中の主なワークショップ、シンポジウム、アウトリーチ等の活動

| 年月日                                     | 名称                                                   | 場所                               | 参加人数                                                         | 概要                                                                                                                                                                   |
|-----------------------------------------|------------------------------------------------------|----------------------------------|--------------------------------------------------------------|----------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
| 2006 年<br>(H18 年)<br>12 月<br>2, 9, 16 日 | モバイルキッズケ<br>ミカルラボ 2006                               | 米沢市理科研<br>修センター                  | 12 月 2 日:<br>50 人<br>12 月 9 日:<br>56 人<br>12 月 16 日:<br>27 人 | テーマ:身近なものでプラスチックを作る<br>「牛乳の成分から環境にやさしいプラス<br>チックを作る」                                                                                                                 |
| 2007 年<br>12 月 7 日                      | MSS セミナー<br>@京都#01                                   | 京都大学 桂<br>A3-025                 | 8 人                                                          | 島伸一郎(海洋研究開発機構)<br>「超水滴法による雲形成と降水現象の数<br>値シミュレーション」                                                                                                                   |
| 2007 年<br>12 月 11 日                     | MSS セミナー<br>@京都#02                                   | 京都大学 桂<br>A3-025                 | 10 人                                                         | 大西領(海洋研究開発機構)<br>「乱流雲中における慣性を持った雲粒子<br>の衝突現象」                                                                                                                        |
| 2008 年<br>1 月 15 日                      | MSS セミナー<br>@京都#03                                   | 京都大学 桂<br>A3-025                 | 13 人                                                         | 井上康博(京大)<br>「複雑流体の微視的な粒子モデル」                                                                                                                                         |
| 2008 年<br>1 月 21 日                      | MSS セミナー<br>@米沢#01                                   | 山形大学<br>工学部<br>6 号館 6 階 621<br>室 | 約 15 人                                                       | 奥菌透(東京大)<br>「高分子溶液乾燥過程のダイナミクス」<br>牧野真人(東京大)<br>「マランゴニ効果による液滴分散系の熱<br>泳動シミュレーション」<br>～高速多重極展開境界要素法シミュレ<br>ータの GOURMET による連携                                           |
| 2008 年<br>2 月 1 日                       | MSS セミナー<br>@米沢#02                                   | 山形大学<br>工学部<br>6 号館 6 階 621<br>室 | 約 15 人                                                       | 森田裕史(東京大)<br>「高分子-固体間界面におけるマイクロから<br>マクロスケールの解析」<br>礪部雅晴(名工大)<br>「2次元剛体球系の速度自己相関関数と<br>ロングタイムテール」                                                                    |
| 2008 年<br>2 月 5 日                       | MSS セミナー<br>@京都#04                                   | 京都大学 桂<br>A3-025                 | 11 人                                                         | 田口智清(神戸大)<br>「多孔性媒体を過ぎる希薄気体流の拡散<br>モデル」                                                                                                                              |
| 2008 年<br>2 月 22 日                      | MSS セミナー<br>@米沢#03                                   | 山形大学<br>工学部<br>6 号館 6 階 621<br>室 | 約 15 人                                                       | 金鋼(分子研)<br>「コロイド電気泳動シミュレータ KAPSEL<br>の紹介」<br>山田耕太郎(首都大)<br>「ジブロック共重合体系における共連結ミ<br>クロ相分離構造」<br>南暁彦(京都大)<br>「Theoretical study on phase separation of<br>electrolytes」 |
| 2008 年<br>3 月<br>20, 21 日               | Rheology and<br>Dynamics of<br>Entangled<br>Polymers | 京都                               | 25                                                           | 招待講演者 3 名による集中講義, ポス<br>ター10 件                                                                                                                                       |

| 年月日                       | 名称                                                                             | 場所            | 参加人数                                                                                      | 概要                                                                                                                                                                                                           |
|---------------------------|--------------------------------------------------------------------------------|---------------|-------------------------------------------------------------------------------------------|--------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
| 2008 年<br>3 月<br>28, 29 日 | Multiscale<br>Dynamics on<br>Interface 2008                                    | 東京            | 95                                                                                        | 外国人招待講演者 6 名, 国内招待講演者 11 名, ポスター発表 41 件                                                                                                                                                                      |
| 2008 年<br>5 月 13 日        | MSS セミナー<br>@京都                                                                | 京都<br>(京都大学桂) | 15                                                                                        | 講演者: 和田浩史 (京都大学)                                                                                                                                                                                             |
| 2008 年<br>5 月 30 日        | MSS セミナー<br>@京都                                                                | 京都<br>(京都大学桂) | 15                                                                                        | 講演者: Rosalind Allen (The University of Edinburgh)                                                                                                                                                            |
| 2008 年<br>6 月<br>18-20 日  | 国際シンポジウム<br>"Multiscale<br>Simulations of<br>Biological and<br>Soft Materials" | 東京            | 120                                                                                       | CREST 三上チームと共催                                                                                                                                                                                               |
| 2008 年<br>6 月 25 日        | MSS セミナー<br>@京都                                                                | 京都<br>(京都大学桂) | 12                                                                                        | 講演者: 御手洗菜美子<br>(九州大学)                                                                                                                                                                                        |
| 2008 年<br>8 月 2, 3 日      | 科学フェスティバル in よねざわ<br>2008「さわって、<br>作って、びっくり<br>プラスチック」                         | 山形大学<br>工学部   | 1 日目:<br>85 名(小・中<br>学生),<br>43 名(保護<br>者)<br>2 日目:<br>126 名(小・<br>中学生),<br>63 名(保護<br>者) | 1.「カゼインプラスチック」<br>みんなが知っている牛乳からプラスチ<br>ックを作ろう。<br>2.「縮むプラスチック」<br>シュリンクフィルムを使ってオリジナル<br>の包装フィルムを作ろう。<br>3.「超音波を使ってプラスチックをくっつ<br>けてみよう」<br>接着剤を使わずに物をくっつける方法<br>があるんだよ。<br>それは、超音波だ！ みんなで超音波<br>の不思議体験をしてみよう。 |
| 2008 年<br>9 月 9 日         | MSS セミナー<br>@京都                                                                | 京都<br>(京都大学桂) | 12                                                                                        | 講演者: 畝山 多加志 (京都大学化学研<br>究所)                                                                                                                                                                                  |
| 2008 年<br>9 月 11 日        | MSS セミナー<br>@京都                                                                | 京都<br>(京都大学桂) | 12                                                                                        | 講演者: 村島隆浩 (山形大工)、荒井規<br>允、高橋和義、亀岡駿 (慶應大工)                                                                                                                                                                    |
| 2009 年<br>2 月 6 日         | MSS セミナー<br>@京都                                                                | 京都            | 40                                                                                        | 講演者: 墨智成 (豊橋技科大)                                                                                                                                                                                             |
| 2009 年<br>1 月 27 日        | MSS セミナー<br>@米沢                                                                | 米沢            | 20                                                                                        | 講演者: 登阪雅聡 (京都大化研)                                                                                                                                                                                            |
| 2009 年<br>1 月 29 日        | MSS セミナー<br>@米沢                                                                | 米沢            | 25                                                                                        | 講演者: 登阪雅聡 (京都大化研)                                                                                                                                                                                            |
| 2009 年<br>7 月 13 日        | MSS セミナー<br>@京都#11                                                             | 京都大学          | 12 名                                                                                      | Prof. P.Ziherl (University of Ljubljana) に<br>よる講演                                                                                                                                                           |
| 2009 年<br>7 月 15 日        | MSS セミナー<br>@京都#12                                                             | 京都大学          | 12 名                                                                                      | Prof. P.Ziherl (University of Ljubljana) に<br>よる講演                                                                                                                                                           |
| 2009 年<br>7 月 28 日        | MSS セミナー<br>@京都#13                                                             | 京都大学          | 12 名                                                                                      | 古川亮 (東京大学) による講演                                                                                                                                                                                             |
| 2009 年<br>8 月 5 日         | MSS<br>ミニシンポジウム                                                                | 京都大学          | 45 名                                                                                      | チーム内外の講師による講演 8 件                                                                                                                                                                                            |
| 2010 年<br>3 月 8 日         | MSS セミナー<br>@京都#14                                                             | 京都大学          | 12 名                                                                                      | Prof. Radhakrishnan (University of<br>Pennsylvania) による講演                                                                                                                                                    |

| 年月日                   | 名称                                                                                          | 場所   | 参加人数        | 概要                                                                                                                                   |
|-----------------------|---------------------------------------------------------------------------------------------|------|-------------|--------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
| 2010 年<br>7 月 15 日    | MSS Seminar<br>@Kyoto#15                                                                    | 京都大学 | 15 名        | Tadanori Koga (Dept. of Materials Science and Engineering, Stony Brook University)                                                   |
| 2010 年<br>10 月 8 日    | MSS Seminar<br>@Kyoto#16                                                                    | 京都大学 | 15 名        | B.V.R. Tata (Homi-Bhabha National Institute (HBNI), India)                                                                           |
| 2010 年<br>12 月 17 日   | MSS Seminar<br>@Kyoto#17                                                                    | 京都大学 | 15 名        | Dr. Sanoop Ramachandran (Tokyo Metropolitan University)                                                                              |
| 2011 年<br>1 月 5 日     | MSS Seminar<br>@Kyoto#18                                                                    | 京都大学 | 15 名        | K. Yokoi (School of Engineering, Cardiff University, UK)                                                                             |
| 2011 年<br>3 月 17 日    | MSS Seminar<br>@Kyoto#19                                                                    | 京都大学 | 震災のため<br>中止 | Ole Hassager (Dept. of Chemical and Biochemical Engineering, Technical University of Denmark)                                        |
| 2011 年<br>4 月 5 日     | MSS Seminar<br>@Kyoto#20                                                                    | 京都大学 | 震災のため<br>中止 | Mykola Tasinkevych (Max Planck Institute, Germany)                                                                                   |
| 2011 年<br>9 月 9 日     | International<br>Workshop on<br>Molecular<br>Simulation of<br>Polymers                      | 京都大学 | 20 名        | Doros Theodorou(National Technical University of Athens, Greek)による基調講演ほか                                                             |
| 2011 年<br>9 月 10-12 日 | 第 2 回国際研究シンポジウム<br>"Multiscale Simulations of Biological and Soft Materials"                | 京都大学 | 80 名        | 2 回目の国際シンポジウム                                                                                                                        |
| 2011 年<br>9 月 13 日    | ワンデーセミナー:<br>Computational transport phenomena: At the cutting edge of Chemical Engineering | 京都大学 | 60 名        | Juan de Pablo (Wisconsin, USA)<br>Ryoichi Yamamoto (Kyoto, Japan)<br>Yannis Kevrekidis (Princeton, USA)<br>John Brady (Caltech, USA) |
| 2011 年<br>11 月 30 日   | MSS Seminar<br>@Kyoto#21                                                                    | 京都大学 | 15 名        | Hugo K. Christenson, School of Physics and Astronomy, University of Leeds                                                            |
| 2011 年<br>12 月 26 日   | MSS Seminar<br>@Kyoto#22                                                                    | 京都大学 | 15 名        | 清水正宏 准教授(大阪大学)                                                                                                                       |
| 2012 年<br>2 月 17 日    | MSS Seminar<br>@Kyoto#23                                                                    | 京都大学 | 15 名        | Anaël Lemaître (Laboratoire Navier, Université Paris-Est)                                                                            |
| 2012 年<br>3 月 9 日     | MSS Seminar<br>@Kyoto#24                                                                    | 京都大学 | 18 名        | Prof. Ole Hassager (Technical University of Denmark)                                                                                 |
| 2012 年<br>3 月 27 日    | MSS Seminar<br>@Kyoto#25                                                                    | 京都大学 | 10 名        | Dr. Shoichi Toyabe (Ludwig-Maximilians-Universität München)                                                                          |
| 2012 年<br>3 月 29 日    | MSS Seminar<br>@Kyoto#26                                                                    | 京都大学 | 8 名         | Dr. Tamer Zaki (Imperial College London)                                                                                             |

## § 7 結び

長期にわたり十分な支援をいただいたことに、まずは心から感謝の意を表したい。おかげで研究に集中することができ、思う存分新しい挑戦に打ち込むことができた。また、研究員・スタッフの給与面でも十分な費用があったため、優秀な研究者に PD として参加してもらうことができた。計算機環境についても、PC クラスタだけでなく GPU のような特殊環境を構築できるだけの十分な研究費があり、大規模シミュレーションや特殊環境向けシミュレータ開発を行う上で非常に有用であった。定期的に行われたミーティングでは若手研究者や学生が活発に議論に参加し、研究遂行だけでなく若手育成としても大いに成果があった。

本報告書で詳しく述べたとおり、ソフトマターに対してマルチスケール・マルチフィジクスシミュレーションを導入するという新しい課題に挑戦し、大きな成果を挙げることが出来たと自負している。欧米を中心に計算科学の最先端としてこの分野が成長しつつあるが、本来のマルチスケールモデリングに果敢に挑戦しているグループはあまりない。そのような中、日本から独自の貢献をし、オリジナリティーの高い研究成果を通して国際的な認知を勝ち得たことは特筆すべき点である。5年間の活動期間中に2回の国際シンポジウムを主催し、いずれにおいてもこの分野を牽引する世界トップレベルの研究者を招聘することができた。また、我々の招待講演のリストを見ていただければ分かるように、海外でこの分野の国際会議が開催される際には、チームメンバーの誰かが招聘されているような状況である。これらの事実は、我々の研究が、成長著しいこの分野で国際的な評価を確立していることの証に他ならない。

研究成果の参考データ:

|              |      |              |
|--------------|------|--------------|
| ● 原著論文       | 88報  | (国内 8、国際80)  |
| ● 総説、会議録、著書  | 30報  | (国内25、国際 5)  |
| ● 招待講演       | 84件  | (国内48、国際36)  |
| ● 研究発表(口頭)   | 156件 | (国内114、国際42) |
| ● 研究発表(ポスター) | 119件 | (国内53、国際66)  |
| ● 受賞         | 11件  | (国内10、国際 1)  |

5年間の活動期間を通して、我々のチームでは研究者の人材育成という面でも大きな成果があった。まず、4名のグループリーダー全員が昇任、あるいは希望に添って異動した。また、CREST 経費で採用した研究員7名全員が研究者として次の職を得ることが出来た(2名が准教授として、2名が助教として国公立大学に採用、他の3名も全て大学等の研究職に採用)。これまでに博士の学位を得た学生は6名おり、その全員が大学の助教やポスドク研究員として、あるいは企業で研究職を得て活躍している。各人の努力の賜であることはもちろんであるが、ソフトマターのマルチスケール・マルチフィジクスシミュレーションという研究分野事態が成長段階にあり、高性能計算機の開発とも相まって、今後大きな発展が見込める魅力的な研究分野であることが一助になっているのは間違いない。

## 国際会議の写真



2011年9月、国際シンポジウムの招待講演者と組織委員での会食の様子



2009年12月、バンガロール(インド)で開催されたマルチスケールシミュレーションに関する国際会議でのパネルディスカッションの様子