

研究課題別事後評価結果

1. 研究課題名： ソフトマターの多階層/相互接続シミュレーション

2. 研究代表者名及び主たる研究参加者名（研究機関名・職名は研究参加期間終了時点）：

研究代表者

山本 量一（京都大学大学院工学研究科 教授）

主たる共同研究者

泰岡 颯治（慶應義塾大学理工学部 教授）

増淵 雄一（京都大学化学研究所 准教授）

谷口 貴志（京都大学大学院工学研究科 准教授）

3. 研究実施概要

山本 G、谷口 G、増淵 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) 絡み合い高分子系的高速シミュレーション法の開発（増淵 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、増淵 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とおりである。

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、全時空間の計算を 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的高速シミュレータを、増淵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) 絡み合い高分子系的高速シミュレーション法の開発（増淵 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。高分子シミュレータを谷口 G で開発した流体シミュレータに埋込むために、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)

汎用計算機は、一般の CPU に比べて高速ではあるが制約が多く、高速なプログラムを開発するのが難しい。泰岡 G では、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て、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。

4. 事後評価結果

4-1. 研究の達成状況及び得られた研究成果 (論文・口頭発表等の外部発表、特許の取得状況等を含む)

本研究は、高分子のミクロな分子構造からマクロな流動の様子までを統合的にシミュレーションするものである。本研究領域が研究対象としているマルチスケール・マルチフィジックスの分野において、コロイド分散系、高分子流体および絡み合い高分子系に関して、世界的にも初めての新しい手法を開発したことは重要な成果であり、かつ当初目標に対する達成度も非常に高く、大いに評価できる。また、最近の計算機構成の成果も取り入れて、シミュレーションの高速化にも取り組み、成果をライブラリとして公開するなど、大きな成果が得られた。

このように、ソフトマターに対してマルチスケール・マルチフィジッ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、大きな成果を上げることができた。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した。また、招待講演のリストを見ると、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。これらの事実は、本研究が、成長著しいこの分野で国際的な評価を確立している証である。

当初計画では想定されていなかった新たな展開として、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や汎用プラットフォームの開発などにおける一部変更があったが、それらはむしろ本来の研究を促進させた、あるいは実際的な研究へと向かわせた(例: GPU 上で動作する新たなシミュレータの開発や実績のあるプラットフォームを用いたことなど)ことから、望ましい展開であったと評価する。具体的には、当初計画では、開発コードを中心としたプラットフォームを構築する予定であったが、個々のコードの開発が進むにつれて、必ずしも需要が多くない基本プラットフォーム作成を狙うのではなく、より需要の多い、応用向けの新しい技法を開発することに重心を移した。この選択は正しかったと判断できる。

外部発表に関しては、本チームは、研究者一人当たりの論文数や口頭講演がそれほど多いとはいえないが、国際誌での論文発表(72件)や海外からの招待講演(35件)の多さから、国際的な評価は高いと考えられる。開発したコードを用いた研究は論文としてきちんと発表されており、必ずしも数は多くないが妥当であると判断できる。国際シンポジウム主催を2回、プレス発表を2件行っており、情報の社会提供も十分であった。全体として、外部発表は適切に行われたと判断できる。

知的財産権については、開発したプログラムの性格上、このままでは「特許」には該当しないと思わ

れるが、今後、企業等との共同研究により、その成果の特許出願が期待される。

研究の進め方については、複数のチームを統括し、成果も十分上げており、リーダーシップをよく発揮したといえる。研究の切り口が巧みで、かつ研究の全体像を形ある姿に纏める能力がある。各研究分担者の専門性がうまく活かされている。山本氏を中心とする比較的応用的なシミュレーション技法の開発グループと、高分子の長時間ダイナミクスを記述する理論モデル **Primitive Chain Network (PCN)** モデルを導入し、絡み合った高分子の取り扱いを可能にする理論グループを、バランスよく連携させたが、そこで発揮されたリーダーシップを大いに評価したい。

4-2. 研究成果の科学技術や社会へのインパクト、戦略目標への貢献

ソフトマターのマルチスケールシミュレーションは、国際的にもあまり実施されておらず、本研究はこの分野の先駆的なもので、国内研究を先導しているといえる。**Gordon Bell** 賞を受賞するなど成果も十分上がっており、科学技術へのインパクトは大きいと評価できる。また、ここで開発された「材料（化学）」と「プロセス（機械）」をまるごと扱うシミュレーションは、将来的に機能性材料の開発、HDDのヘッドなどのマイクロな装置の動作解析など、産業界への応用も期待できるので、重要度は極めて高いものがある。一方、具体的応用に供することを主眼として開発を行ってきた本技法が、どれだけ外部の人たちに活用されるかは現在不明であるが、少なくとも、このプロジェクトに関係してきた人たちの間では、今後、より具体的な製品を開発する際に用いられるものと期待できる。

今後、研究成果のさらなる展開が期待できるかについては、応用可能な技法の開発であることから、将来的には、産業分野の様々な実用製品の開発に用いられるなど、今後大きな展開が期待できる。これまでは比較的基礎的な解析に留まっているので、今後は企業との連携が必要であると考え。コロイド分散系のシミュレーションについて、住友ベークライトとの共同研究など、複数の共同研究を実施中とのことであり、実問題への適用が期待できる。

戦略目標に向けての貢献、成果の社会的なインパクトの見通しとしては、本研究領域の研究分野であるマルチスケール・マルチフィジックスシミュレーションにおいて、ソフトマターを研究対象とした本研究は世界的にも先駆的なものであり、マルチスケールシミュレーションの新たな手法を開発し、その成果の産業分野への応用も期待できるなど、戦略目標に十分貢献するに加えて、社会的なインパクトも極めて大きいものがある。今後、実験結果と直接比較し、シミュレーション結果が予言性を持つことを示せば、更に大きなインパクトが期待できる。

4-3. 総合的評価

本研究はこの分野の世界的にも先駆的なものといえる。当初目標としていた複数のサブテーマを統合的にシミュレーションすることを可能とし、また、世界的にも初めての手法を開発するなど、大きな成果を上げたことは、特に評価できる。また、機能性材料の開発への応用も期待でき、産業応用としても、今後に大いに期待できるものがある。引き続き、研究開発を継続し、実際の応用につなげることを期待したい。

KAPSUL、**NAPLES**、**FRISCA**、**GPU** ライブラリなどの有用なプログラムが開発され、公開に至るなど優れた成果が得られている。実験結果との直接比較により、シミュレーション結果の予言性を確認できると、さらに大きなインパクトが期待できる。

量子効果を主たる研究対象とするナノスケールの研究が多い中で、より応用に視点を置く本研究は特異なものといえる。学術的成果を重んじる研究者やその集団が闊歩する日本のシミュレーション学界の中で、より現実の製品への応用を心がける本研究チームの存在は貴重である。

本来 **PC** 中心のシミュレーション計画であるが、本研究が京コンピュータ利用も目指していることから、並列コンピュータへの拡張にも努力したことは評価できる。また、**GPU** の活用等、計算のコストパフォーマンスを追求した取り組みが注目される。

若手の育成が上手くいった。企業と密接なテーマであり、具体的応用例での研究展開が期待されるので、産学連携がさらにあればいっそう良かった。産業界との連携は今後重要であろう。