

11-MD02

粗視化分子動力学法による高分子系シミュレーション基盤の
計算機科学的な高度化検討

萩田克美（防衛大学校）

本研究では、高分子材料の次世代デジタルエンジニアリングの実現に向けて、高分子をバネとビーズで表現した粗視化分子動力学法について、次世代の Peta・Exa スケールコンピューティングを視野に入れた計算機科学的な高度化を進めた。高分子物理（計算科学）側の課題・ニーズについて、計算機科学の専門家とともに解決することに主眼を置いた。高分子物理研究者単独では解決困難な課題の解決につながり、研究が進展した。具体的には、以下の進歩があった。MPI/OpenMP ハイブリッドコードについて、正規乱数生成と通信のオーバーラップによる通信の隠蔽などのチューニング作業を進め、約 1.8 億粒子の系(400nm)³でのプロダクト・ラン実施に目処をつけた。また、当面の最大目標である(1 μ m)³の初期配置作成についても実施可能であることを確認するとともに、フィラー充填高分子材料以外の高分子材料の初期配置作成に関する技法の検討を進めた。さらに、さまざまな高分子系のシミュレーション結果について可視化技法を行うとともに、CAVE を中心にして、探索的可視化による系の詳細な観察に関する検討を進めた。

1. 研究の目的と意義

本研究では、将来の超大規模シミュレーションによる高分子系の材料設計開発（次世代デジタルエンジニアリング）の実現を目標としている。超並列計算用にコーディングした粗視化分子動力学法(MD)法のプログラムを核として、それと関連した研究基盤を、計算機科学的に高度化することで、系統的に整備することを主な目的とした。あわせて、高分子系の大規模時系列データの可視化・メソ尺表現についての検討も重要な目的とした。昨年度の JHPCN 研究では、超大規模粗視化 MD コードの最適化を進めるとともに、フィラー（ナノ粒子）充填高分子系の大規模な初期配置の作成方法の検討や大規模可視化技法の検討を行った。本年度は、昨年度に引き続き、「超大規模粗視化 MD コードの最適化の検討」および「大規模な高分子系の可視化手法の検討とポスト処理（結果解析）の高度化」について、重点的に検討を進めた。

高分子材料・ソフトマテリアル分野では、最近の高分子合成技術の進展に伴い、分子鎖のつながり・形状を頭わに考慮した物質の物性研究が盛んに行われている。さらに、無機有機ハイブリッド材料として、界面活性剤をグラフトした均質なナノ粒子の創成とその配合による高機能（高付加価

値な）高分子フィルム材料に応用されつつある。高分子ナノコンポジット材料に関して、補強効果や破壊などの機械的性質の解明にシミュレーション研究が期待されている。個々の分子鎖のつながりや形状を考慮したシミュレーションには、Kremer-Grest 模型 [J. Chem. Phys. 92 (1990) 5057] と呼ばれるランダム力を含む粗視化 MD 法が標準的な手法としてよく用いられている。この方法はバネビーズ模型と呼ばれるポテンシャルの詳細を重視しないものであり、詳細なポテンシャルを考慮した全原子分子動力学法などに比べて、大きな時間刻みと空間スケールを扱える利点がある。我々は、一辺が約 1 μ m の大きさの領域を扱う大規模シミュレーションをターゲットとして、多くのスパコンを利用し、分散 I/O・分散処理の超並列コードの作成を行ってきた。構築時から分散データ構造と通信について強く配慮しており、現在、実行する計算機毎の最適化（MPI/OpenMP ハイブリッドによる最適化を含む）を検討している。一方で、大規模計算のみならず、これまでの中規模な計算結果を中心に、分析手法の一つとして可視化技法について検討してきた。可視化による研究者・開発者の共通認識の横断的な理解・納得・共有によって、産学連携の「知の創造」を実現する可能性

として期待されている。本研究課題では、没入型三次元立体可視化装置 CAVE を用い、複雑な三次元構造を持つ高分子の構造的特徴的な挙動の発見/認識における有効性を確かめるとともに、さらに実用性を増すためのユーザーインターフェースデバイスなどの検討を行った。

2. 当拠点公募型共同研究として実施した意義

(1) 共同研究を実施した大学名と研究体制

北海道大学

東京大学

名古屋大学

大阪大学

研究代表者を中心に、

(2) 共同研究分野

超大規模数値計算系応用分野

大規模データ処理系応用分野

大規模情報システム関連研究分野

(3) 当公募型共同研究ならではの事項など

本研究では、プログラム・コードのチューニング、関連の新規プログラムの開発支援（最新の並列化済みライブラリの利用に関する相談）、大規模系の効果的な可視化技法など、高分子物理学・物性物理学の専門性とは異なる、計算機科学の諸分野の専門性が必要な事項を検討している。これに対し、本事業 JHPCN を通じ、共同研究を実施した機関に属する研究者（教員）・技術者（技術職員）がもつ専門的なノウハウを提供いただき、円滑に進めることができた。加えて、本研究に関わる関連の研究について、産学連携を含めて、共同研究が複数生まれる形になり、極めて有効に機能していると考えている。

3. 研究成果の詳細と当初計画の達成状況

(1) 研究成果の詳細について

① 高分子系の粗視化分子動力学法のコードのチューニング

本研究課題では、荷電系の計算を扱わない、基本的には短距離力で記述される不均質構造を扱う、バネビーズ模型の高分子系の粗視化分子

動力学シミュレーション（Kremer-Grest 模型）を念頭に議論を進める。このモデルでは、セグメント間に、LJ ポテンシャル（斥力のみ、または、引力付き）を課し、鎖のつながりを FENE ポテンシャルで表現した模型である。ここで、FENE ポテンシャルは、

$$U_{\text{FENE}} = -\frac{k}{2}R_0^2 \ln \left(1 - \frac{r^2}{R_0^2} \right)$$

の表式で与える。伸びの最大長 R_0 を 1.5σ とすることで、鎖同士の交差を防ぎ、排除体積条件を実現し、計算量が膨大である交差チェックを省略している。ここで、 σ は、LJ ポテンシャルの距離の単位である。また、Kremer-Grest 模型では、動力学は、正規乱数で与えられるランダム力を粒子毎に課すことで、実現している。

高分子材料の検討においては、材料が密であることから、隣接粒子との LJ ポテンシャルの計算が、演算時間の割合の多くを占める。次点は、正規乱数の生成である。超並列コードでは、1MD ステップ毎に 1 回行う全体通信の割合も大きい。

実際の超並列計算のプロダクト・ランにおいては、系が巨大になることから、計算結果の出力が問題となる。例えば、周期境界条件(PBC)の大きさが 400nm の系の場合、1 時刻に対し、90GB のファイル出力(非圧縮テキスト)となる。分散出力としても負荷は大きい。分子動力学計算では、可能な限り、小さな時間間隔毎に、時系列データを出力したい。(一般に、超並列の規模が巨大になるほど、チェックポイント出力は相対的に重要となり、チェックポイント出力の時間間隔は短くなる傾向がある。加えて、動画可視化においても、細かい時間刻みでのファイル出力が望まれる。)一般的な MPI プログラミングでは、ファイル出力の間、演算はしていない。ファイル出力の時間が支配的になる場合、このような演算-出力待ちの連鎖は、実効的ではない。このような場合、演算とファイル出力を分離することが望ましい。SMT (Simultaneous Multi-Threading) 機能の有効性の向上(Hitachi SR16000 M1) や、IO ノードの分離などの技術ト

レンドを踏まえると、演算の MPI プロセスと IO の MPI プロセスがペアとして機能させる方法が単純かつ、効果的であると想像される。実装検討の結果、「演算は MPI-OpenMP ハイブリッド化され、演算プロセスとは別の IO プロセスで、出力する。」方式を主として最適化検討した。本研究課題では、分散 IO を行う (超) 超並列プログラムにおいて、演算や IO、その後の処理を含めた実効的なパフォーマンスを発揮させるために、異なる動作をする 2 つのプロセスを同時稼働させる「二質性(twin-geneous)プログラミング」を提案し、実装に関する検討を行った。Hitachi SR16000 M1、Intel 系のクラスター計算機 (手元の 12Cores×8 ノードや、e-Science 若手女性研究者支援のクラスター12Cores×64 ノードなど)、Fujitsu PRIMEHPC-FX10 (2012 年 4 月上旬に確認) で、動作確認を行い、短時間間隔での高頻度出力の IO 処理の隠蔽化がうまくいった。現時点では、IO ノード分離型の大規模スパコンで、IO ノードをユーザー利用可とするシステム構成での運用検討が十分になされておらず、大規模計算で活用できるかの見通しは不明であり、今後の検討・実証検証を期待している。

本年度は、MPI と SMP の併用による経過時間の短縮を目的として、MPI-OpenMP ハイブリッド化のコード改良作業を行い、多くの環境での動作検証を実施した。詳細のチューニング (さらなる性能向上) は、H24 年度に実施予定である。

LJ 計算部分については、LJ ポテンシャルのカットオフ長の程度の小領域に分割しており、SMP 並列化のための分割の基本単位とした。対象とする計算は不均一系のため、小領域内の粒子数は一定とはならない。各 SMP スレッドが担当する計算負荷 (単純には粒子数) が均一となるように、小領域の担当割当を決定することとした。また、バルク部分と、隣接ノードに近い部分では、1 粒子あたりの計算負荷が大きく異なる。2 つの区分に分割して、実際の計算時間に基づいた学習で、計算時間特性を係数化し、重み付き割り当てをする実装上の工夫も行った。加え

て、メモリアクセスの向上を目的とした並び替えや、粒子数をなるべく均等にする隣接融通処理などを実装したが、バネビーズ模型の粗視化 MD 計算では、タイムステップの刻みを大きくとった場合には、有効とは言えない結果であった。

本年度は、MPI-OpenMP ハイブリッド化に加えて、正規乱数の計算と通信の隠蔽化を検討した。具体的には、OpenMP の parallel 句で、XYZ の 6 ノードとの隣接通信 (pack-unpack 含む) の実施の際に、並列化できない乱数の状態ベクトルの更新を行う実装とした。状態ベクトルの更新後の、「shift と ieor による一様乱数への変換」と「三角関数と対数を用いた正規乱数への変換」については、OMP PARALLEL DO で分割並列化するとともに、通信と状態ベクトルの更新と並列して実行させる実装も行った。通信、状態ベクトルの更新、その後の処理のバランスを自動チューニングさせることは、今後の課題である。

② 超大規模シミュレーションの初期配置の作成方法の検討

粗視化分子動力学法を活用した高分子材料の物性に関する研究として期待されている応用対象としては、ゴム材料、プラスチック材料、フィルム材料、繊維材料などを想定している。これらの高分子材料では、フィラー (ナノ粒子) 充填系 (ナノコンポジット) のみならず、2 種の高分子の相分離系 (ハードセグメントとソフトセグメントの相分離など) や、一部の高分子鎖が架橋剤などで凝縮させたマイクロゲル系など、ナノスケールでのスケール競合により機能発現に繋がる系がある。このようなナノスケールの構造のスケール関係が、機械的性質に重要な役割を果たす系に対しては、粗視化 MD 法は強力な研究手法である。

本研究課題では、上記の系を粗視化 MD 法の大規模シミュレーションで検討するために必要な、初期配置の作成方法を系統的に検討した。本年度は、直径 15nm のナノ粒子を 8192 個含む一辺 400nm の系の初期データ (1.8 億粒子の系) を北

大や名大のスパコンを利用して作成した。

Hitachi SR16000 M1 で正しく動作することを確認した。(また、Fujitsu PRIMEHPC FX10 でも、1440 ノード利用の動作確認をした。)

本研究では、具体的に、実験データや、メソッド化された計算手法(高分子描像を無視した場の計算)から、高分子鎖のバネビーズ模型の初期配置を系統的に作成する方法について検討した。

方法 1) 逆モンテカルロ法を用いた極小角散乱実験からのナノ粒子配置のデータ同化。および、高分子配置の生成。

方法 2) 動的平均場法・散逸粒子法や TEM の 3 次元実験データから求めた相分離構造に基づく、高分子配置の生成。

方法 1 の検討については、フィルター充填高分子材料のナノ粒子の配置を X 線散乱実験等のデータから逆モンテカルロ法で同定し、フィルターを配置した空間に、高分子を適に配置するものである。1.8 億粒子の系よりも大きな系の作成についても技術的目処をつけた。

方法 2 の検討については、今年度より開始した。まず、粗視化 MD の大規模計算の対象とする相分離構造を決める計算手法の検討を始めた。高分子の相分離構造の検討には、散逸粒子(DPD)法や動的平均場法がよく用いられている。DPD 法は、Kremer-Grest 模型の粗視化 MD 法と計算項目は類似しており、SMP 並列化版 OCTA/cognac などで計算することが出来る。一方で、動的平均場計算は、OCTA/sushi で行われる。本年度は、sushi について、Hitachi SR16000 M1 上での SMP 並列化に関する検討を始めた所である。

得られた相分離構造から、高分子配置を求め方法については、現在、いくつか類型に分けて検討を開始し、実装と検証を進めている。

なお、可視化事例の充実も併せて、(昨年度の検討成果) SMP 並列化版 OCTA/cognac の計算検証として、DPD 法の計算を進めるとともに、核融合科学研究所、九州大学、(岡崎) 計算科学研究センターなどの、Hitachi SR16000 で、SMP 並列化版 OCTA/cognac が動作することを確認した。

③ 汎用 3 次元可視化装置を活用した高分子系の複雑構造の認知・理解の促進技術の検討 (ポスト処理・結果解析の高度化)

複雑な 3 次元構造をもつ高分子材料系のシミュレーションに対するポスト処理・結果解析手法として、可視化に関する検討を重点的に実施した。特に、大規模なデータの可視化処理と、没入型の立体可視化を含む高品質な可視化技法の検討を行った。大規模なデータ空間中で特徴的な挙動を観察する場合、大規模系を丸ごと可視化しつつ、データ空間中を自由自在に移動しながら拡大縮小を行う探索的可視化を行いたい。データが大規模な場合、その処理が問題となる。大規模系の丸ごと可視化については、「データ読み込み」「フィルタリング」「レンダリング」を、連続的に処理を行う。高速化のための並列化としては、分散ファイルから時系列データを並列に読み込み、データフィルタも並列的に行う、大規模なバックエンドシステムを利用するのが常套である。一方で、レンダリングについては、グラフィックカード(GPU)の処理能力や、CPU から GPU へのデータ転送能力に依存している。我々としては、共通のバックエンドシステムについては最新動向を注視することとして検討は行わず、高分子系における可視化の特有事項やユーザーインターフェースの検討に力を入れる方針とした。また、AVS/Express をベースとして可視化表現の検討をしているので、AVS/Express と大規模データ処理システムとを連携させるインターフェース等を検討した。

大規模データに関する高解像度の静止画可視化/印刷出力は、プレゼンテーションのみならず、大規模系のデータ確認や全体的な構造の確認にも有効な手段である。例えば、A0 で 300dpi の場合、おおよそ 14000×10000 ピクセルとなる。我々は、名古屋大に導入されている並列化版 AVS/Express PCE を用い、一部機能拡張を経て、A0 のフル解像度での出力を可能とするように整備した。圧縮処理なしで A0 ポスターに印刷する

ことで、全体像から個々の詳細までみることができた。参考として、系をスライスし、高解像度で出力した画像データの一部を図 1 に示す。

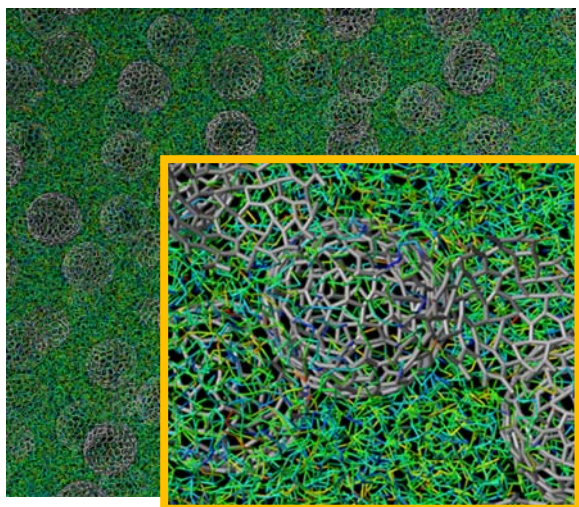


図 1 スライス像のアップの様子

複雑な 3 次元構造を持つ高分子材料系の構造を詳しく観察する際、単純な立体視機能のみでは、不十分と感ずることが多い。それは、視点、可視化対象やスライス面などを自由自在に動かすことが、人間の空間認知の仕組み（運動視差）に関係しており、複雑な構造を理解するための、直感的かつ有用な手法だからである。本研究課題では、可視化対象を体感動作と連動させて回転・移動させるためのユーザーインターフェースデバイスについて、次の項目を検討した。

- ・Wii リモコンや iPad を用いた可視化対象の回転や移動などの探索のための操作性向上
- ・CAVE（没入型立体可視化装置）を利用した体感的な視点探索や、上記との組み合わせによる操作性の向上

Wii リモコンの位置検出センサーを用いて、可視化対象の回転や移動の操作を行う検討をした。共有メモリを利用した独自ポーリングプログラムを作成し、AVS/Express で位置情報を取り込むモジュールを作成した。10msec 毎の位置検出と情報アップデートを非同期に行う仕組みとした。現状のセンサーでは、絶対位置の推定精度が悪いため、平行移動操作を Wii リモコンや iPad2 で行うことは難しいことを確かめた。

この改善の検討は、今後の課題である。

CAVE では、没入型の可視化のために、絶対位置のトラッキングが行われている。立体視は両眼視差により実現されているが、立体構造の認知の観点では、実際に身体を動かすことで得られる運動視差も重要な要素である。本研究課題では、CAVE 空間中で興味のある部分を探索するために、全身を使う、つまり、身体をユーザーインターフェースデバイスとして活用することを検討した。CAVE 空間中では、通常のパソコンの画面上でマウスによるスクロールなどよりも、良い視点／画角を素早く見つけることができる傾向があることがわかった。我々は、CAVE 空間中で利用者が見ている視野を、そのまま、キャプチャーする仕組み（仮称：バーチャルデジカメ）を構築し、その有効性を検証した。得られた画像を図 2～図 4 に示す。なお、この成果は、フィラックス社の EasyVR のオプションの一形態として、普及し、科学研究での広い活用を期待し、特許化せず、公知化することとした。

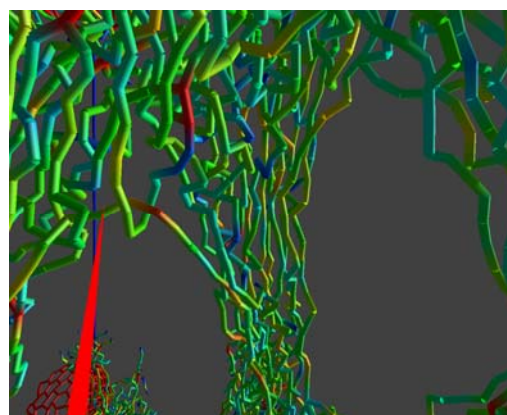


図 2 高分子鎖のバーチャルデジカメ像

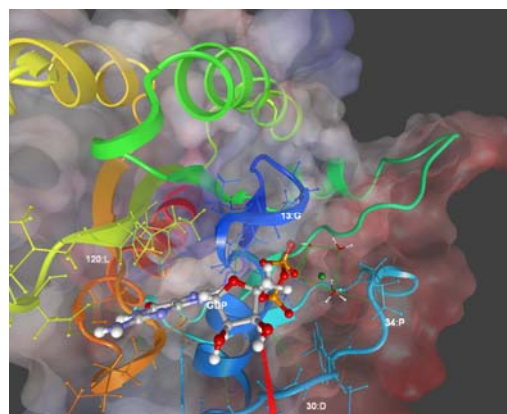


図 3 タンパク質のバーチャルデジカメ像

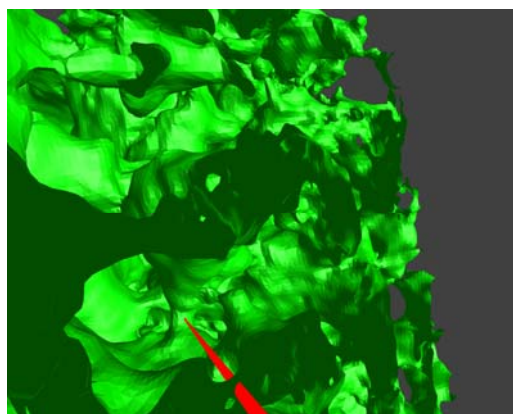


図 4 CT 実験データのバーチャルデジカメ像
(京都工芸繊維大学 西川先生ご提供)

本研究課題では、AVS/Express for CAVE を利用し、身体をユーザーインターフェースデバイスとする場合に必要なシステム機能の洗い出しを行い、プロトタイプを検討した。結果論的には、iPad2 から VNC を利用し、AVS/Express のモジュール利用を行う方法が、操作性や効率が高いことがわかった。特に、CAVE 空間内でのリモート操作の導入により、パラメータの細やかな変更が CAVE 空間内の観察者本人が実施することが可能になったことは有意義である。(従来は、1 人で効果的に利用することが事実上困難であった。) なお、リモート操作については、VNC、RDP、AirDisplay について、複数のソフトウェアを比較した。結果として、iTapVNC clinet が最も良いと思われることを付記しておく。

超大規模系のレンダリング手法の検討として、本研究課題に関連し、核融合研 伊藤先生、大谷先生らによって、OpenGL ベース、Direct3D ベースでの超多粒子系の高速な球レンダリング技法の検討が行われている。高速な球描画としては、Point Sprite が有効である。Point Sprite は点に画像を貼り付ける機能である。平面と大きさを指定して、球を描いた画像を貼り付ける。GPU 上のシェーダーを利用して平面を算定する方法で、1000 万粒子系を扱うことが可能であることを示した。また、Ball-Stick 系など、粗視化 MD 計算で用いる描画手法について、OpenGL と Direct3D でのプログラムの相互性を整理し、

どちらでも同等の描画が可能なコーディング法の整理を行った。現在、最新の GeForce カードにて、分子動力学計算との同時可視化の技法などの検討を進めている。なお、Point Sprite 機能については、AVS/ Express ver. 8 において、Ball-Stick 系の可視化強化として導入された。

CAVE での高速描画を目的に、自作の OpenGL プログラムの CAVE 対応法について整理した。東京大学工学部 伊藤伸泰先生グループの多粒子用ビューアを共同で CAVE 対応させた。H24 年度の JHPCN 研究で活用検討を行うこととした。

また、レンダリングの効率化においては、GPU へのデータ転送対策が重要なので、粒子系の時系列データの(可視化目的の)圧縮記録法に関する基礎的検討を開始した。これは、トラジェクトリーデータの容量対策としても重要である。

このほかの活動として、物性研 芝先生、野口先生とともに、東京大学 物性研究所(物性理論/スパコン担当部門)の一般公開用コンテンツ作成を、高分子材料系の可視化技法の検討の一環として行った。その成果物を、3 次元立体視で、一般向けに紹介した。図 5 に、流れによる赤血球の変形の様子を示した可視化コンテンツのスナップショットを示す。

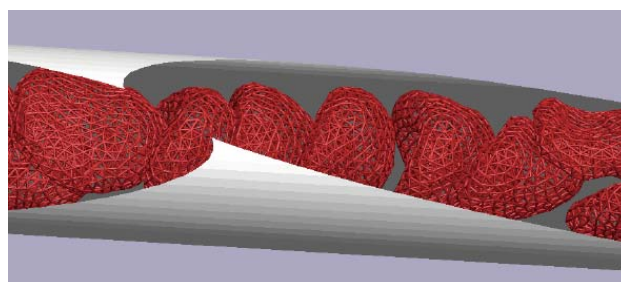


図 5 流れによる赤血球の変形の様子

(2) 当初計画の達成状況について

申請書で当初予定した項目を着実に実施している。超並列コードの改良項目については、第一弾の実装が概ね完了したところであり、今後更なる最適化を進める予定である。初期配置作成については、対象とする系の拡充に重要であり、来年度以降も継続的に実施する検討項目である。ポスト処理の検討は、大規模可視化と大規模データ処理

を課題項目とした。本研究課題での可視化の検討結果は、AVS/Express の新バージョンへの機能追加や、EasyVR のオプション追加として、実際の製品にも反映され、有意義であった。

4. 今後の展望

今後は、超大規模なトップスパコンの活用、および、材料開発への応用向けの効率的なパラメータ・スタディが課題となる。以下のような展望に基づいて、現在、検討を進めている。

超大規模なトップスパコンの利用に関しては、問題設定の意義と作業効率の観点で、関心を持っている。PBC サイズが 400nm 程度では、北大 Hitachi SR16000 M1 (128nodes×32Cores)や、東大 Fujitsu PRIMEHPC FX10 (1440nodes×16Cores)が、効率よく作業できる状況である。高分子材料系においては、概ね 1 μ m 程度でバルクと考えることができ、また、粗視化 MD 法ではなく別のメソ化された計算手法を用いる方が適切と考えられる。

(ゆえに、1 μ m は、最大の問題サイズと言うことができる。) 1 μ m のシステムでは、28 億粒子の系となる。フィルター充填高分子材料では、不均一に配置されたナノ粒子と、その周りにある高分子(マトリックス)が互いに絡み合い複雑な配置をとっていることが、その機能・物性に関連している。そのため、シミュレーション研究においては、初期配置の作成が最も難しい作業となり、計算量も必要となる。現在、400nm のシステムの初期配置作成に、Altix 4700 (1TB メモリ)を用いている。我々の試算では、メモリが支配的であることから、1 μ m のシステム (28 億粒子の系) の初期配置の作成は、北大 Hitachi SR16000 M1 や東大 Fujitsu PRIMEHPC FX10 の利用が必要となると考えている。

材料開発などの応用に向け、大規模計算で計算すべきパラメータの絞り込みにおいて、パラメータ・スタディの効率化は重要な課題である。JHPCN 研究課題として、東大 奥田先生、キャトルアイサイエンス 上島博士が実施している、RCM(R&D Chain Management)の活用検討と連携し、SMP 並列

化版の OCTA/cognac と AVS/Express を利用する枠組みの検討を行っている。(H24 年度の JHPCN 研究では、進展のためメンバーを相互交流している。)

計算機の進歩とコードの整備も進み、周期境界条件の一辺が、1 μ m のシステムへの到達も可能となりつつあるが、材料研究として、実際に明らかにする問題設定が、今後重要となる。計算機科学の視点としては、必要となるための準備も重要であり、実現のために解決すべき計算機技術の課題もある。(中間報告にも記したとおり、中空フィルターを利用する場合、超多数ノードにおいては MPI_Allreduce の代わりに第 n 隣接ノードからの効率的な gather を用いたい。性能の観点から、同時通信を想定しないユーザーコードではなく、同時通信数を想定したシステムレベルの実装を期待している。) 材料研究として解きたい問題によっては、中空フィルターを用いた明快なモデル設定を近似し、粒子凝集体としてフィルターを再現することで十分なこともある。粒子凝集体で表現することで、中空フィルターに用いた長い相互作用距離がなくなるため、LAMMPS 等の汎用並列パッケージを用いることが可能となる。(OCTA/cognac では、極端に大きさの異なる粒子など、多種の距離の相互作用距離を効率的に扱かえる、汎用パッケージとは異なる特徴がある。) 初期配置作成や詳細な検討には、独自コードが効率的であると考えられる。一方で、材料研究での競争と普及の観点では、ペタスケール対応を目的に財政的支援をされている LAMMPS 等の汎用パッケージを積極的に利用する手段検討も欠かせない。北大 SR16000/M1 や東大 FX10 で、LAMMPS の動作検証をしているが、現状のパッケージでは、MPI/OpenMP ハイブリッドでは性能が出ていない模様であるが、今後の改良は期待できる。(I/O についても、1.8 億粒子の系では、非圧縮テキスト形式で 45GB 程度となり、初期のデータ読込の問題がある。東大 FX10 では、28GB メモリ制約で、約 2000 万粒子が限界。) その観点からも、計算モデルの(提案)構築と、初期配置の作成が、材料研究としてはやはり重要であると考えている。複数のセンターを横断的利用、超大規模計算機

の利用においては、データ転送が大きな課題である。H24 年度より東大 Fujitsu PRIMEHPC-FX10 の利用が開始され、現実となっている。これにより玉突きの、一時データ保存の問題が生じることが予想される。これについても、実効的な対処を考えなければならぬと認識し、検討中である。

5. 研究成果リスト

(1) 学術論文 (投稿中のものは「投稿中」と明記)

- R. Shirasaki, Y. Yoshikai, H. Qian, S. Fujiwara, Y. Tamura and H. Nakamura, “Dissipative Particle Dynamics Simulation of Phase Behavior in Bolaamphiphilic Solution”, Plasma Fusion Res. 6, 2401116 (2011).
- Y. Tamura, K. Ukita, N. Mizuguchi and S. Fujiwara, “Design Support System with Haptic Feedback and Real-Time Interference Function”, Plasma Fusion Res. 6, 2406061 (2011).
- S. Fujiwara, T. Itoh, M. Hashimoto, Y. Tamura, H. Nakamura and R. Horiuchi, “Molecular Dynamics Simulation of Micellar Shape Change in Amphiphilic Solution”, Plasma Fusion Res. 6, 2401040 (2011).
- Y. Tamura, S. Fujiwara, T. Umetani and H. Nakamura, “Bracelet shaped thermal display for representing numerical data”, J. Electron. Mater. 40(5), 823-829 (2011).

(2) 国際会議プロシーディングス

- M. Isobe, “Statistical Law of Turbulence in Granular Gas”, Conference on Computational Physics 2011 (Gatlinburg, TN, USA) (2011.10.30-11.3)

(3) 国際会議発表

- K. Hagita, “Coarse-grained simulation approaches of filled polymer nano-composites”, European Workshop on Nano

composites and polymer dynamics (Montpellier, France) (2011.6.16-17)

- K. Hagita, H. Kishimoto, Y. Shinohara, Y. Amemiya and, T. Arai, “Morphology modelling of polydisperse nano-particles in a rubber using 1/8-resolved pseudo-particles Reverse Monte Carlo method”, The 2nd international symposium “Multi-scale Simulations of Biological and Soft Materials (Kyoto) (2011.9.10)
 - R. Shirasaki, Hu-Jun Qian, S. Fujiwara and H. Nakamura, “Investigation of phase behavior of bolaamphiphilic solution using dissipative particle dynamics simulation”, 30th JSST Annual Conference (JSST 2011) International Conference on Modeling and Simulation Technology, Tokyo (JAPAN), October 22, 2011.
 - S. Fujiwara, M. Hashimoto and T. Itoh, “Molecular Dynamics Simulation of Micelle Formation in Amphiphilic Solution: Effect of Molecular Rigidity”, The 2nd FAPS Polymer Congress, Beijing (CHINA), May 10, 2011.
 - K. Hagita, “Coarse-Grained Simulation Approaches for Nano-Design of Soft Materials with Mind of Combination among Experiments and Math-Material”, The 2012 WPI-AIMR Annual Workshop (Sendai, Japan) (2012.2.21)
 - K. Hagita, H. Morita, M. Doi, H. Takano, “Glass transition temperature of polymer nano-composites with polymer and filler interactions”, APS March Meeting 2012 (Boston, USA) (2012.2.29)
- (4) 国内会議発表
- 萩田克美, 寺本 敬, “ダブルジャイロイド状の粒子群から計算した 2 次元散乱パターンのリバーソモンテカルロ解析による構造再構成 3”, 高分子学会 第 60 回年次大会, (大阪国際会議

- 場) (2011. 5. 25)
- ・萩田克美, 高野 宏, 土井正男, 森田裕史, “フィルター充填高分子系のガラス転移温度の粗視化 MD 解析”, 高分子学会 第 60 回年次大会, (大阪国際会議場) (2011. 5. 27)
 - ・萩田克美, 高野 宏, 土井正男, 森田裕史, “粗視化分子動力学によるフィルター充填ポリマーメルトの延伸破壊シミュレーション 2”, 日本物理学会 2011 年秋季大会, (富山大学) (2011. 9. 24)
 - ・萩田克美, “高分子ナノコンポジットの粗視化 MD と VR 可視化分析”, 第 2 回計算統計物理学研究会, (金沢大学) (2011. 9. 25)
 - ・萩田克美, 高野 宏, 土井正男, 森田裕史, “フィルター充填ゴムの延伸における分子特異点効果の粗視化 MD 解析”, 高分子学会 第 60 回高分子討論会, (岡山大学) (2011. 9. 29)
 - ・萩田克美, “没入型可視化装置を用いた 3 次元複雑形状の空間内探索的観察事例の紹介”, 「バーチャルリアリティ装置による表現法の追求」研究会, (核融合科学研究所), (2011. 12. 9)
 - ・萩田克美, “ポリマーナノコンポジットの非線形レオロジーの理解に向けた粗視化分子動力学アプローチ”, MRS-J 学術シンポジウム, (横浜情報文化センター) (2011. 12. 20)
 - ・萩田克美, 高野 宏, 土井正男, 森田裕史, “フィルター充填ポリマーメルトのガラス転移温度に対する界面相互作用の影響”, 日本物理学会 2012 年々次大会, (関西学院大学) (2012. 3. 24)
 - ・萩田 克美, 棟朝 雅晴, 上島 豊, 大宮 学, “ASNARO-RCM を用いた OCTA/cognac のパラメータサーベ이의効率化に関する報告”, (京都教育文化センター), (2012. 5. 29 予定)
 - ・森田裕史, 田中敬二, 高野 宏, 土井正男, 萩田克美, “フィルター充填系高分子材料のガラス転移温度のシミュレーション解析”, 第 59 回レオロジー討論会, (桐生市市民文化会館) (2011. 10. 6)
 - ・森田裕史, 高野 宏, 土井正男, 萩田克美, 田中敬二, “ゴルーガラス間転移温度へのフィルター
- 高分子界面相互作用の効果 (2)”, 第 23 回エラストマー討論会, (北九州国際会議場) (2011. 12. 2)
 - ・藤原 進, 橋本 雅人, 伊藤 孝, “両親媒性溶液中におけるミセル形状変化に及ぼす分子の剛直性の効果”, 第 60 回高分子学会年次大会, (大阪国際会議場) (2011. 5. 26)
 - ・黒澤 勇作, 藤原 進, 伊藤 孝, 橋本 雅人, 吉川 研一, “単一屈曲—半屈曲ジブロックコポリマーの折り畳み転移に関するブラウン動力学研究”, 第 60 回高分子討論会, (岡山大学) (2011. 9. 28)
 - ・宮田 匠, 藤原 進, 伊藤 孝, 橋本 雅人, “双頭型両親媒性分子の相挙動に関する粗視化分子動力学シミュレーション”, 第 60 回高分子討論会, (岡山大学) (2011. 9. 28)
 - ・藤原 進, 橋本 雅人, 伊藤 孝, “両親媒性溶液中におけるミセル形成とミセル形状変化の分子動力学シミュレーション”, 第 60 回高分子討論会, (岡山大学) (2011. 9. 28)
 - ・老田健太郎, 繁田浩功, 清川清, 野崎一徳, 竹村治雄, 「歯茎摩擦音[s]における乱流解析のための対話的可視化」, 電子情報通信学会 マルチメディア・仮想環境基礎(MVE)研究会, Oct. 13, 2011.
- (5) その他 (特許, プレス発表, 著書等)
- 本研究課題によるものは、なし。

謝辞

高分子ナノコンポジットの粗視化 MD 法の大規模計算の共同研究者である産総研 森田主任研究員、慶大理工高野教授、東大工 土井教授には、多くのご協力・ご助言を頂いた。コード最適化については、北大情報基盤センター 大宮教授、東大情報基盤センター 中島教授、片桐准教授、JAMSTEC 新宮 GL、福井博士、上原 GL から、ご協力・ご助言を頂いた。可視化技法の検討にあたっては、阪大サイバーメディアセンター 清川准教授、菊池教授、野崎講師、名大情報基盤センター 石井教授、高橋技官、核融合研 大谷准教授、伊藤博士、東大物性研 野口准教授、芝博士、名工大 礪部博士、JAMSTEC 荒木 GL、川原博士から、ご協力・ご助言を頂いた。可視化検討用データとして、SACT による実験観察 3 次元構造データを、京都工繊大 西川博士から、ご提供いただいた。相分離系の検討については、千歳科技大 寺本准教授、京都工繊大 藤原准教授、日本ゼオン 本田博士から、ご協力・ご助言

を頂いた。現在進行中のゲルの系に関するシミュレーションモデル検討に関して、神奈川県産業技術センター津留崎博士から、ご協力・ご助言を頂いた。上記の他、日立製作所関係者、日本電気(NEC)関係者、サイバネット・システム関係者、フィアラックス関係者には、多大な協力を得た。本研究成果の活用については、住友ゴム工業、日本ゼオン、トヨタテクニカルディベロップメントからの協力を得た。