

jh160036-NAH

## 高分子材料系の粗視化 MD の次世代大規模 HPC 利用の基盤的研究

萩田 克美 (防衛大学校)

本研究では、高分子材料系の粗視化 MD の次世代大規模 HPC 利用の基盤的な研究として、大規模な系で長時間を要する機械的な性質を効率的に評価する手法の開発検討と、実験と密接な 2 次元散乱パターンによる解析手法の研究を行った。併せて、3 次元的に複雑な構造を扱うとともに、3 次元構造が機能/物性との相関があることから、VR 可視化や高精細な 3d プリンティングなども、研究ツールとして活用する技法検討を行った。シミュレーション解析手法の開発としては、2 次元広角散乱パターン像を粗視化 MD 計算から評価できるようにした **Thinning Approximation** や、局所応力を線積分の方法で評価する有効性の確認などを実施した。さらに、HPC 利用の基盤検討のために、ディープラーニングを利用した電子顕微鏡 3 次元データの超解像化技術の開発や、LAMMPS などのアプリケーションの教育などの整備も行った。

### 1. 共同研究に関する情報

#### (1) 共同研究を実施した拠点名

北海道大学 情報基盤センター  
 東京大学 情報基盤センター  
 名古屋大学 情報基盤センター  
 大阪大学 サイバーメディアセンター  
 九州大学 情報基盤研究開発センター

#### (2) 共同研究分野

- 超大規模数値計算系応用分野
- 超大規模データ処理系応用分野
- 超大容量ネットワーク技術分野
- 超大規模情報システム関連研究分野

#### (3) 参加研究者の役割分担

| 参加研究者                   | 役割分担   |
|-------------------------|--|
| 伊達 進<br>(大阪大)           | 広義のストレージ処理システム検討、大規模可視化技術検討、MD アプリ (LAMMPS, Gromacs) の高速計算検討 |
| 萩野 正雄<br>(名古屋大)         | JPHCN-DF 圧縮による広義のストレージ処理系の検討。大規模可視化検討                        |
| 村島 隆浩<br>(東北大)          | 流動下におけるポリマーのマルチスケール計算、3D 可視化検討                               |
| 青柳 岳司<br>(産総研)          | OCTA/cognac での 2 次元散乱解析の検討。LAMMPS-OCTA 連携利用検討                |
| 富永 哲雄<br>(JSR)          | フィラー充填ゴムの 2 次元散乱パターン計算                                       |
| 首藤 靖幸<br>(住友ベークライト/東京大) | 疑似化学反応高分子ゲル (球形/円盤フィラー) の 2 次元散乱パターン計算                       |

| 参加研究者          | 役割分担                                  |
|----------------|---------------------------------------|
| 萩田 克美<br>(防衛大) | 総括、手法高度化、高速化検討、可視化ベースの統合解析環境の検討       |
| 大宮 学<br>(北海道大) | 遠隔可視化の利用技術検討                          |
| 森田 裕史<br>(産総研) | 高分子材料系における粗視化 MD 技法の基礎・応用の検討。可視化表現検討。 |
| 高野 宏<br>(慶大理工) | 高分子 MD の座標時系列データからの特徴的ダイナミクス抽出技法の開発   |

### 2. 研究の目的と意義

これまでの JHPCN 公募課題や「京」HPCI 公募課題 (産業利用含む) での一連の取り組みにより、ナノ粒子充填高分子材料・ゴム材料の大規模粗視化 MD 計算は、技術的進展をし、一定の市民権を得つつある。この粗視化モデルは、化学的詳細を無視したばねビーズモデルではあるが、ナノ粒子の凝集状態や、ポリマーとナノ粒子の相互作用に応じて、多彩な性質を示す系である。歴史的には、ナノ粒子を充填した高分子材料系は、学術研究を

中心として、高分子の流動体としての性質に興味  
が注がれてきた。高分子流動体は、ゴムとは異な  
り、架橋などによる高分子ネットワークを形成し  
ていない。それ故、工業的な問題への応用・メカ  
ニズム解明には、現状、自由度が高すぎる。フィ  
ラー充填ゴム材料の場合、架橋高分子ネットワー  
クの網目サイズ、内在する絡まりあいの状態、ナ  
ノ粒子などのフィラーの構造と、マクロな力学的  
性質が密接に関係することが実験的にも知られて  
おり、大規模粗視化 MD シミュレーションで、そ  
の一端が明らかになりつつある。延伸ゴム中のフ  
ィラー構造を観察する手法として、SPring-8 での  
極小角散乱実験 (USAXS) の活用が進んでいる。  
最近、研究代表者らの検討により、USAXS の実  
験データと、ナノ粒子や円盤状 Clay を充填した高  
分子系のシミュレーションとの、2次元散乱パタ  
ーンの直接比較が可能であることを示している  
[Hagita, Morita, Doi, Takano, Macromolecules,  
49 (2016) 1972-1983]。フィラーが充填されてい  
ない高分子材料系について、粗視化 MD の結果か  
ら、全原子 MD で得られるような2次元広角散乱  
(WAXS) パターンを精度よく近似計算する手法  
(thinning approximation) を、研究代表者らは  
考案した[論文準備中]。これにより、延伸させた  
高分子鎖の構造やナノポイドによる2次元散乱パ  
ターンのシミュレーション予測が可能になった。  
シミュレーション結果と実験との比較やデータ同  
化などに、材料の研究開発に将来貢献できると考  
えられる。

応力歪曲線の予測の観点からは、現在の延伸速  
度と比べ、10 の 3~5 乗程度ゆっくりさせた延  
伸を行う必要がある。延伸速度を遅くすると、測  
定の揺らぎ幅も増大するため系の拡大も必要であ  
る。トータルとして、「京」の時代より  $10^{10}$  倍の  
計算量を要求すると 50 年後に実現される計算能  
力に相当する。一方、応力歪曲線の評価という命  
題では、準静的な変形後の力のつり合い状態での  
応力テンソルの異方性が評価できればよく、真に  
ダイナミクスの問題とは言えない。この観点で効  
率よくかつ精度よく応力歪関係を評価する方法の

構築と検証がブレークスルーとなる。

高分子系材料の粗視化MD模型の計算の工夫と  
して、単純なMD法計算を超えた評価法が必要で  
ある。この2~3年の計画で下記の課題を重点的  
にクリアし飛躍的な活用を実現することを考えた。

- ゆっくりした延伸下の応力歪曲線を、従来よ  
り短時間の計算で、精度よく予測する近似手  
法の開発
- SPring-8 実験に対応した2次元散乱パターン  
解析の実用化と実証事例の積み増し

これらの計算手法の実現は、工学的な応用とし  
て重要であり、両者が結びつくこと(データ同化  
など)で、メカニズム解明が進み、材料開発が可  
能となれば、様々な産業用品への応用が期待され、  
学術及び産業の競争力となると考えている。

### 3. 当拠点公募型共同研究として実施した意義

将来のスパコン環境を見据えたコード開発や改  
良のためには、JHPCN 拠点の構成教員との情報  
交換やディスカッションが、非常に有意義である。  
これまでも関連の課題で協力いただいております。  
拠点構成教員の実力や信頼は高いと考えている。

本研究課題では、高分子材料について、高分子  
物理の視点で大規模シミュレーションと大規模可  
視化を行う課題である。大規模シミュレーション、  
大規模データの処理、そして、大規模可視化の効  
率的な実施のために、構成拠点の教職員の専門的  
な協力を得て、協働することが最良な方法である。  
これまでも、シミュレーションによる研究をした  
い研究者側と、構成拠点の教職員の能力を相補的  
に合わせて、研究者側はシミュレーション技術の  
向上につながり、構成拠点側としてはシステムの  
利用を通じて他のユーザーの利便性の向上に資す  
るなどの実益もあった。今後も協力・協働体制を  
継続し、ユーザーと構成拠点の連携により、広く  
計算科学・計算機科学の発展に貢献できると考  
えている。

#### 4. 前年度までに得られた研究成果の概要

今年度申請した新規課題である。

前々年度までの JHCPN 課題実施で蓄積した技術的ノウハウを生かして、研究課題を遂行するものである。これまで、フィラー充填高分子材料のモデルの提案と基礎的検討を実施してきた。H22～H24 まで、萩田が課題代表者を務め、高分子系の粗視化 MD に関する大規模計算の基盤を整備する共同研究課題を実施した。大規模粗視化 MD 法の並列計算技術の検討、VR 可視化を含む大規模系の可視化技術などの基盤的整備を行った。H25 と H26 は、産総研 森田（副代表者）が課題代表者を務め、主題をフィラー充填高分子材料にフォーカスして、HPC システムを活用したフィラー充填ゴム材料の粗視化 MD 解析研究を実施してきた。

これらの研究成果や技術的ノウハウを、北大・産総研の包括連携等の事業でのワークショップ開催を含めて産業界に広く公開し、「京」産業利用課題などでの研究課題実施に応用展開してきた。これらの一連の研究成果を総合して、フィラー充填ゴムの粗視化 MD モデルの系について、種々のパラメータ軸に対する挙動が明らかになりつつある。特に、H27 年度には、フィラーの動きを反映した 2 次元散乱パターンの評価が可能となり、新展開を迎えることとなった。

H27 年度は JHCPN 課題を実施しなかったが、継続的研究により、延伸させたフィラー充填ゴムの粗視化 MD 研究に関して進展があり、より発展させるために H28 年度に課題申請した。

#### 5. 今年度の研究成果の詳細

##### (1) シア流動下の高分子メルトの 2 次元散乱パターン評価

高分子メルトは、シア流動下において、ずり速度が速いと、鎖の向きが、ずり変形 (図 1a) により配向することが、2 次元広角散乱 (WAXS) パターン観察実験などで実験的に観察されている。閾値となるずり速度は、メルト中の 1 本の高分子鎖の

最長緩和時間で特徴付けられる。従って、長い鎖に対して、遅い変形を与える問題となる。この 2 次元 WAXS パターンは、原子や粒子の配置から計算することができ、ずり速度が速い場合に 2 点のスポットとして観察される。原子分子の描像 (スケール) である全原子モデルでは、現実の長い鎖を扱うことが難しい。一方で、粗視化 MD 模型 (Kremer-Grest 模型) では、ボンドの長さが、非結合の隣接粒子間距離と同じであるために、ボンド配向の情報が埋もれ、WAXS パターンが評価できない。この問題回避として、我々は、KG 模型の粒子間ボンドの中心に仮想粒子を置いて WAXS パターン近似計算する方法「Thinning Approximation; TA 近似」(図 1b)を開発した。図 1cd のように、TA 近似はうまくいくことを確認した。

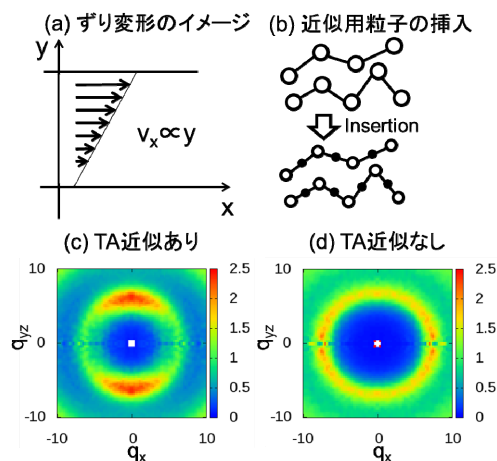


図 1 ずり変形のイメージと TA 近似の概念図、TA 近似の有無の違い

なお、この研究過程で、全原子モデル MD に用いられる力場 (DREIDING、AMBER、CHARMM、OPLS 等) については、静的な構造の再現性は高められているが、流動性などの動的な性質が壊滅的に悪い場合があることがわかった。ずり速度 (動的性質) と 2 次元 WAXS パターン (静的構造) の同時検討は、MD 模型や力場のベンチマークとして有効であることが見いだされた。反応 (結合・切断) を扱える ReaxFF や REBO 系の MD 計算でも、有効とわかった。今後、このような詳細な計算手法を活用したマルチスケールでのシミュレーションにより、破壊を伴う現象を詳しく調べる予定である。

(2) ポリエチレンの結晶化挙動に関する研究

ポリエチレンの結晶化は、結晶核が形成し、結晶化領域が拡大し、ラメラ層を形成していくと考えられている。ずり流動下での配向と同様に、2次元 WAXS パターンの変化として表せると考えられる。結晶化ポリエチレンの破壊挙動や、ポリエチレン鎖の分岐の影響等も、興味深い課題である。

H28 年度の後期に、2次元 WAXS パターンに関わる研究として、ポリエチレンが結晶化していく様子の検討を開始した。粗視化モデルとしては、United Atom 模型を用い、DREDING 力場を用いた。

図 2 は、10nsec 間に 200%の延伸を与えた後に、静置した場合の自発的なラメラ層結晶形成の様子を示したものである。この図の計算では、1本の鎖は、1000 個の炭素原子 (United Atom 粒子) からなり、125 本を扱った。なお、1000 本や 2000 本などのより大きな系でも同様の振る舞いであった。

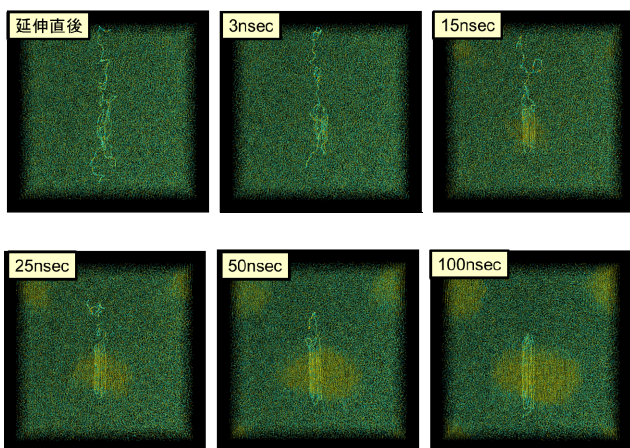


図 2 徐々に結晶化するポリエチレン鎖の挙動

分岐のない鎖が、1つのラメラ層に折りたたんでいく様子が見られた。ここで、可視化像の色は、各ボンドでの x-y 面 (延伸軸は z 軸) のパッキングを反映したものである。(ラメラ層では三角格子状に鎖が並ぶ。) 冷却プロセスなどに応じて、ラメラ層をまたぐ鎖 (tie 分子) が発生すると考えられ、破壊挙動に大きな影響を与えられられる。

基礎的な検討として、直鎖、環状鎖、分岐鎖で、結晶化する温度が異なることを確かめた。環状鎖は、直鎖に比べて、高温で結晶化する。一方で、

分岐がある場合、直鎖に比べ、低温で結晶化した。これは、末端を持つ部分鎖の効果と考えられる。

次に、短い分岐鎖の場合に、分岐鎖 (n=3 個の炭素原子) の空間分布について、1本あたりの分岐鎖の本数 (k 本) に応じた挙動を調べた (図 3)。ラメラ結晶層の外に分岐鎖が、押し出されていることを確認した。

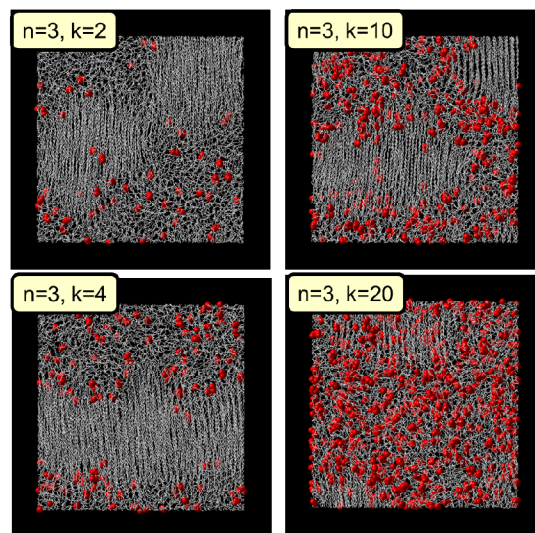


図 3 分岐を持つポリエチレンの結晶化と分岐鎖の空間分布

(3) 高分子メルトの延伸破壊・ナノボイド形成

高分子メルトをポアソン比が 0.5 未満で一軸延伸させると、ボイドが生成される。これまで、単純な粒子の系でもボイドの生成は議論されている。高分子メルトの場合、鎖長に応じて特性時間が変わるため、残留する応力により変形されたボイドが真球状に回復する挙動 (回復時間等) を詳しく調べることができる。また、架橋がない場合、ボイド成長は、ナノスケールから、マクロに至るまで連続に生じる。一方、架橋がある場合、架橋によってネットワークの広がり方が制約される。実際のゴム材料では、ナノスケールでのボイドの挙動に興味がある。ナノスケールの場合、実像観察が困難ではあるが、X 線小角散乱実験の 2次元散乱パターンで明確に観察できることが実験的に知られている。本研究では、実際にシミュレーションで、極僅かな大きさのボイドが形成されると、2次元散乱パターンに特徴的な振る舞いが現れるこ

とを確かめた。

ナノボイドのサイズ分布や挙動のばらつきなどの統計的性質を考慮するためには、大規模なシステムサイズが必要となる。東京大学 FX10 を利用した比較的大規模な計算を実施し、統計的性質の議論が可能かを検討している。図 4 は、 $N=1024$  の鎖が 51200 本の場合に、架橋の有無で、比較した結果の可視化像を示している。延伸率を 80%, 90%, 100%, 110%, 120% と変えた結果である。今回の延伸速度では、80% 付近で、ナノボイドが発生し、成長していく様子が見られた。両者の差は少なく見えるが、ボイドの楕円体の楕円度が異なる。

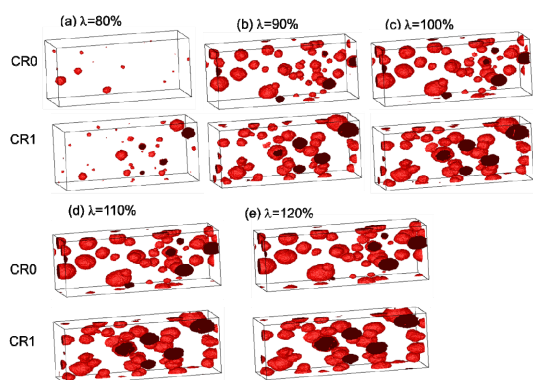


図 4  $N=1024$  の長さの鎖が 51200 本の系。  
CR0 は架橋なし。CR1 は架橋あり。

高分子メルト中で発生したボイドの周辺では、一部の高分子が応力を負担すると考えられる。粒子系の MD では、局所応力計算は、粒子毎の応力(ベリアル)を空間メッシュに割当て平均を取る方法と、Irvin-Kirkwood のように線積分の平均を取る方法がある。東北大 中村らが LAMMPS で実装した線積分のモジュールを利用し、ナノボイドの周りの管状に強い応力が分布することを確かめた。今後の応用については検討中である。

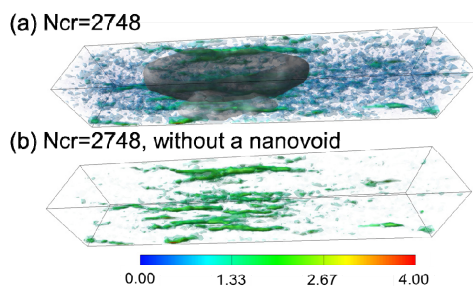


図 5 ナノボイドと、その周りの応力分布

#### (4) 粒径分散を持つフィラー系の 2 次元散乱パターンの評価

延伸させたフィラー充填ゴムではナノキャビティ発生し、破壊起点となる。ナノ粒子とポリマーの界面で発生する「界面破壊」と、ポリマー内で発生する「凝集破壊」がある。ポリマーとナノ粒子の相互作用の違いにより、両者に分かれる。その様子と結果の概要は、図 6 に示すとおりである。

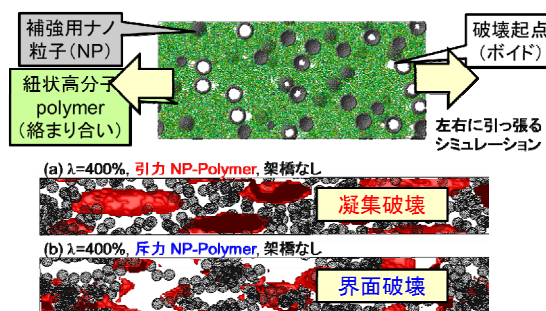


図 6 フィラー充填高分子材料の延伸破壊

フィラー充填高分子中で発生したナノボイドは、フランス ESPCI Creton グループが、2 次元散乱パターンの変化として捉えている。現実の実験では、ナノ粒子の粒径が分散を持っており、SAXS パターンの見た目が異なる。粒径分散を考慮することで、フィラーの粒径を均一と仮定した場合の影響をなくし、現実の実験で観測される 2 次元散乱パターンの比較が可能となった。現在、ナノ粒子の粒径を独立に設定した粒径分散を含むフィラー充填高分子材料の延伸シミュレーションを行い、2 次元散乱パターンの挙動を確認している。

#### (5) Clay 充填高分子系の 2 次元散乱パターン評価

Clay (円盤状フィラー) を含む高分子ゲルについては、図 7 に示すようなモデルで、延伸させたゲルの中性子小角散乱実験の 2 次元散乱パターンを良く再現 (予測) するとともに、応力歪み曲線も同時に再現することがわかった。今後は一軸延伸に加えて、シア流動化中の Clay 充填ゲルの 2 次元散乱パターン実験との対応 (図 7 のような粗視化 MD モデルでの再現可能性) を検討して行く予定である。

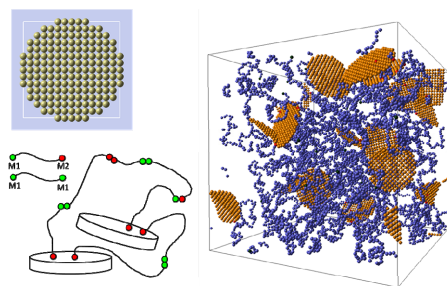


図 7 Clay 充填ゲルの模型説明図

(6) 粗視化 MD 計算の Ball-stick 系の VR 可視化、3d プリンティング活用、WEB データ転送における JHPCN-DF 圧縮技術の活用

粗視化 MD 計算の Ball-stick 系の可視化技法として、Oculus Rift/HTC VIVE での 3d-VR や、AVS/Express の表示結果のフルカラー 3d プリントや高精細 3d プリンティングを、複雑な状況認知や理解のためのシミュレーション結果の表現ツールとして検討した。

特に、エポキシ樹脂やフェノール樹脂などの樹脂材料がアモルファス様に架橋反応した結果の印刷では、浮動小数点データの下位ビットを 0 代置する圧縮法 JHPCN-DF が、有効であった。ナイロン製の高精細 3d プリントの注文 WEB では、圧縮後データサイズが 100MB 以下に限定されているため、JHPCN-DF による圧縮でこの制限問題を回避できた。実際の例の 1 つは、図 8 である。オリジナルデータと、JHPCN-DF 圧縮後のサイズを示している。



|                   | size   |
|-------------------|--------|
| AVSが出力したSTL       | 149MB  |
| Meshmixerで修正後のSTL | 177MB  |
| 上記のzip後           | 113MB  |
| 精度0.001           | 72.8MB |
| 精度0.0001          | 85.4MB |
| 精度0.00001         | 97.8MB |

図 8 3d プリント例 (3 万原子の系) とサイズ

なお、同じナイロンの材質で、同じボンド径で、アモルファスシリカガラス ( $a\text{-SiO}_2$ ) の構造を 3d プリントしたところ、フェノール樹脂の構造に比べ、硬い構造となることを確かめた。これは、ネットワーク構造に由来した硬さの違いを体感できるデモとして有効であると考えられる。

(7) ディープラーニングを用いたファイラー配置間撮像の超解像化

VR 可視化に関連する技術として、ゴム中のファイラーを 3 次元計測したデータに対する超解像化処理に、ディープラーニングを利用する HPC 技術の検討を行った。イオンビームで試料削りつつ、断面を SEM 観察する FIB-SEM で取得したデータについて、z 軸方向のデータが粗い計測となる場合に、x-y 面内の情報で機械学習し、超解像化するディープラーニング技術が有効であることを確認した。その処理のイメージを図 9 に示す。

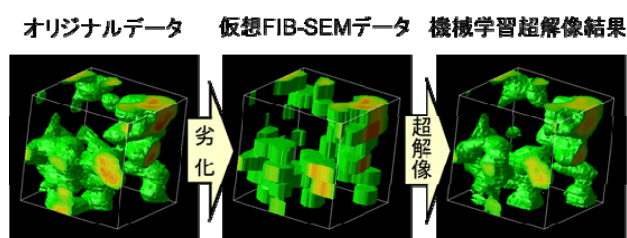


図 9 FIB-SEM データの超解像化検討のイメージ

本処理では、TensorFlow ver. 0.12.0 を用いた。これらの HPC 処理の実施可能性について、阪大 FCC サーバや、名大 SGI Altix UV2000 で検討した。最終的には、小さい領域を基本単位として、学習させて超解像化処理し、パッチワーク処理する方法が、効率がよいと判断した。今後は、条件の異なる材料で有効性の実証を行う予定である。

(8) 成果の普及 (教育などを含む)

本 JHPCN 課題などで得た成果の一般社会への広い還元を目的として、LAMMPS の利用や Ball-stick 系のシミュレーション結果の 3d プリンティング活用について、技術伝達・教育を主とした研究会を実施した。

LAMMPS の初歩的利用については、4/9 と 5/14 全 2 回 名大情基セ 1F 可視化室で実施した。さらに、GPU 活用や ReaxFF 計算などの発展を含めたものを、4/14, 6/1, 7/13, 8/3 の全 4 回で阪大サイバー うめきた拠点にて実施した。これらの名大と阪大での研究会を通じて検討整理した教育用コン

テンツについて、H28 年度後期より、兵庫県立大 /FOCUS/RIST にて定期的に開催し始めた LAMMPS 初心者講習会のコンテンツとした。H28 年度後期分として、10/26 と 12/6 に入門編、12/7 に LAMMPS の仮想実験セミナーを行った。さらに、1/24 には、Rescale や AWS の協力を得て、LAMMPS を HPC クラウドで利用やそのノウハウの共有を目指した LAMMPS 利用のハンズオンセミナーを実施した。

Ball-stick 系のシミュレーション結果の 3d プリンティング活用については、AVS/Express で、表示結果をフルカラー 3d プリントする改良モジュールを作成し、その  $\beta$  版利用と講習を、阪大一名大-東北大の 3 拠点をテレビ会議接続して、阪大うめきたで 5/11 に実施し、情報共有した。

さらに、Oculus Rift 等での 3dVR 活用検討として、NIMS や東大物性研で、材料シミュレーション向けの活用検討セミナーをデモ付きで実施した。

## 6. 今年度の進捗状況と今後の展望

2次元散乱パターンに関する計算手法の開発や関連事例の積み増しなどは、順調に概ね達成できた。一方で、ゆっくりした延伸下の応力歪曲線を、従来よりも短時間の計算で精度よく予測する近似手法の開発については、様々な検討を行っている所である。これについては、継続的に 2~3 年程度で、良い方法を構築したいと考えている。今後、本研究課題を通じて検討した 2次元散乱パターンや局所応力評価の方法などの技術的なノウハウを普及展開させたいと考えている。

また、今年度の当初の検討項目の延長として、「ポリエチレンの結晶化挙動」と「ディーブローニングを用いた電子顕微鏡 3d データの超解像化」について、新たに検討を進めることができた。ポリエチレンの結晶化挙動およびその破壊挙動に関する検討は、今後検討を深めていく予定である。「ディーブローニングを用いた電子顕微鏡 3d データの超解像化」の技術は、VR 可視化技術と連携して、材料開発の現場で、有効性を発揮すると考えており、その普及は今後の課題である。

## 7. 研究成果リスト

### (1) 学術論文

・萩田克美, 富永哲雄, 畠添拓実, 曾根卓男, 森田裕史, 高野宏, “フィラー充填末端変性 SBR の粗視化 MD 計算の 2 次元散乱パターン解析”, 日本ゴム協会誌 (研究論文), 89 (2016) 199-204. (査読有)

・K. Hagita, H. Morita, M. Doi and H. Takano, “Coarse-Grained Molecular Dynamics Simulation of Filled Polymer Nanocomposites under Uniaxial Elongation”, *Macromolecules* 49 (2016) 1972-1983. (査読有)

・K. Hagita, H. Morita and H. Takano, “Coarse-Grained Molecular Dynamics Simulation of Filled Polymer Nanocomposites under Uniaxial Elongation”, *Polymer* 99 (2016) 368-375. (査読有)

・Y. Shudo, A. Izumi, K. Hagita, T. Nakao, and M. Shibayama, “Large-scale molecular dynamics simulation of crosslinked phenolic resins using pseudo-reaction model”, *Polymer*, 103 (2016) 261-276. (査読有)

・L. Liu, M. Ogino, and K. Hagita, “Efficient Compression of Scientific Floating-Point Data and An Application in Structural Analysis”, *Transactions of the Japan Society for Computational Engineering and Science*, 2017 (2017) 20170002. (査読有)

・Y. Shudo, A. Izumi, K. Hagita, T. Nakao, and M. Shibayama, “Structure-mechanical property relationships in crosslinked phenolic resin investigated by molecular dynamics simulation”, *Polymer*, (2017.2) in press. (査読有)

### (2) 国際会議プロシーディングス

なし

### (3) 会議発表(口頭, ポスター等)

・萩田克美, “ナノ粒子充填高分子系の粗視化 MD 法による仮想散乱実験”, 物性研究所スパコン共

同利用・CCMS 合同研究会 「計算物質科学の今と未来」, 東京大学 (2016.04)

・萩田克美, 萩野正雄, 佐原亮二, 川添良幸, “ペンタグラフェンの物性と工学応用構造体の計算”, 物性研究所スパコン共同利用・CCMS 合同研究会 「計算物質科学の今と未来」, 東京大学 (2016.04)

・K. Hagita, H. Takano, “Dynamical Symmetry Breaking of Relaxation Rates of a Single Star Polymer with 6 Arms due to Excluded Volume Effects at the Center”, STATPHYS26, Lyon, France (2016.07)

・K. Hagita, “Coarse grained MD study of Weissenberg number dependence of 2D scattering patterns of polymer melts under shear flow”, IRC2016, Kyoto (2016.08).

・K. Hagita, “MD study of a fracture of filler filled polymer nanocomposites by using LAMMPS and OCTA”, Symposium on Molecular dynamics of materials from assembly to fracture, Philadelphia, USA (2016.08).

・K. Hagita, “Coarse grained MD simulations of polymer nanocomposites”, Soft Matter - Theoretical and Industrial Challenges, Cambridge, UK (2016.09).

・萩田克美, “高分子材料・物理系の LAMMPS 活用研究の紹介”, 日本材料学会 分子動力学部門委員会, 東京大学 (2016.09)

・萩田克美, 岩岡伸之, 高野宏 “中心部にナノ粒子を含有した非線状高分子の緩和モード”, 日本物理学会, 金沢大学 (2016.09)

・萩田克美, “高分子材料系の大規模粗視化 MD 計算と計算機科学”, 高分子学会 高分子討論会, 神奈川大学 (2016.09)

・富永哲雄, “末端変性スチレンブタジエンゴム配合物の大規模分子動力学シミュレーション”, 第 2 回材料系ワークショップ, 秋葉原 UDX NEXT-1 (2016.10)

・萩田克美, “フィラーを充填した系の粗視化 MD の新展開と当面の課題”, 高分子学会 高分子計算機科学研究会, 東京工業大学 (2016.10)

・K. Hagita, “MD study of nanovoids of elongated filler-filled polymer nanocomposites”, 3rd Micheline-ESPCI workshop, Paris, France (2016.11)

・K. Hagita, Y. Kawazoe, “General Applications of the Pentagraphene Structure”, The 11th General Meeting of ACCMS-VO, Sendai (2016.12)

・萩田克美, “ナノ材料系の高性能電子顕微鏡像の VR 可視化”, 先進的描画技術を用いた可視化表現法の研究会 (2017.1)

・K. Hagita, H. Morita, H. Takano, “Coarse grained MD simulations of a fracture of filler-filled polymer nanocomposites under uniaxial elongation”, APS March Meeting 2017, New Orleans, USA (2017.3)

・萩田克美, 森田裕史, 高野宏, “延伸させたナノ粒子充填高分子材料中のナノボイド挙動の粗視化 MD 解析”, 日本物理学会 第 7 2 回年次大会 (2017.3)

・萩田克美, 岩岡伸之, 藤原進, “高分子材料の破壊と補強に関する粗視化 MD シミュレーション”, 物性研究所スパコン共同利用・CCMS 合同研究会 「計算物質科学の今と未来」, 東京大学 (2017.4)

#### (4) その他 (特許, プレス発表, 著書等)

・富永哲雄, 畠添拓実, 曾根卓男, 森田裕史, 萩田克美, “大規模粗視化 MD シミュレーションを用いた次世代高機能ポリマー材料の開発”, JSR テクニカルレビュー, 123 (2016) 22-26.

・萩田克美, 富永哲雄, 畠添拓実, 曾根卓男, 森田裕史, 高野宏, 日本ゴム協会 第 6 4 回優秀論文賞 「フィラー充填末端変性 SBR の粗視化 MD 計算の 2 次元散乱パターン解析」