

日本学術振興会  
プロセスシステム工学第143委員会  
平成13年度第4回研究会議事録

1. 日 時： 平成13年12月7日（金） 13：20～17：00

2. 場 所： 京都 京都テルサ （京都市南区東九条）

3. 出席者： 45名（順不同）

委員長：小野木克明（名古屋大）

委 員：高松武一郎（京都大学）、橋本伊織（京都大学）、西谷紘一（奈良先端大）、大杉 健（ジャパンエナジー）、重政 隆（東芝）、長谷部伸治（京都大学）、柘植義文（九州大学）、平尾雅彦（東京大学）、大嶋正裕（京都大学）、山下善之（東北大学）、橋爪 進（名古屋大学）、梅田富雄（千葉工業大学）、仁井田和雄（千葉工業大学）、大野 弘（神戸大学）、富田重幸（宮崎大学）、栗本英和（名古屋大学）、中岩 勝（産業技術総合研究所）、橋本芳宏（名古屋工業大学）、瀧野哲郎（東京工業大学）、吉田雅俊（東北大学）、山場久昭（宮崎大学）、武田和宏（九州大学）、矢野智之（名古屋大学）、黒岡武俊（奈良先端大）、加納 学（京都大学）、松本秀行（東京工業大学）、立野繁之（九州大学）、樋口文孝（出光石油化学）、山崎克彦（鐘淵化学工業）、岩崎純尊（クラレエンジニアリング）、大田原健太郎（呉羽テクノエンジ）、武田真人（昭和電工）、轡 義則（住友化学工業）、服部洋文（東亜合成）、中本政志（東芝）、村岡俊和（代理：村川純、日産化学工業）、春成 孝（日産化学工業）、松岡 豊（代理：八百板隆俊、三井化学）、林田 豊（三井化学）、坂本英幸（横河電機）

委員以外の出席者：

新田友茂（大阪大学）、増淵雄一（名古屋大学）、坪井明男（三菱化学）、清水佳子（東芝）

4. 研究会 テーマ：「分子シミュレーション技術をPSEはいかに取り込むか」

1) 「分子シミュレーションによる物性推算と材料設計」（資料#1, #2）

大阪大学 新田 友茂 氏

分子シミュレーションの位置づけについて説明があり、分子シミュレーションは分子の運動を計算することにより平衡物性・輸送物性を推算する手法であり、モンテカルロ法（MC法）と分子動力学法（MD法）に大別されるなどの概説があった。そして、平衡計算、非平衡現象、量子化計算のそれぞれに対して提案されている各種方法の紹介と分子シミュレーションの現状について説明があった。また、コンピュータのアニメーションによる視覚的な計算結果の説明もあった。

<質疑応答>

大嶋：気液平衡では何成分系までシミュレーションできるか。

新田：行って見たことがあるのは3成分系までである。ただし、2成分系でも揮発度の高い、例えば1000個の分子に対して1個の分子が入り出すような系は、GEMC法とは別の方法を用いた方がよい。

大嶋：分子シミュレーションの結果がどのように設計論に活かされる可能性があるのか。

新田：吸着や気液平衡に関する従来のモデル式のパラメータを決めるという方向で一旦分子シミュレーションを行い、それをプロセスのシミュレータにフィードバックする方法がよいと考えられる。また、分子シミュレーションによる粒子の動きが材料の設計に何らかのひらめきを与えていると思われる。

平尾：平衡・非平衡現象以外にも化学反応に対してもいろいろな情報が知りたいが、これからどのような分野に分子シミュレーションが使われていくのか。

新田：現在、我々のグループの半分は超臨界水中の反応をおいかけている。この量子化学計算はここ5年ぐらいでかなり一般的に使えるようになって考えられる。

2) 「高分子の長時間物性を予測する新しい分子シミュレーション手法」（資料#3, #4, #5）

名古屋大学 増淵 雄一 氏

分子シミュレーションは分子の運動を計算することでマクロな物性を予測する手法であり、種々の分野で一定の成果を上げてきているが、高分子は、分子量が大きいことと、問題となる現象が長時間の緩和を含むことが多いことから、分子シミュレーションで扱える問題は限られていることの説明があった。そして、この壁を乗り越えるために講演者らが開発している一つの粗視化分子シミュレーションモデル(Primitive Chain Network Model)の紹介があった。これにより、高分子系の千秒をこえるような長時間の現象を扱えるようになる。

<質疑応答>

西谷：NAPLES (New Algorithm for Polymeric Liquids Entangled Strained)パッケージの名前のなかにアルゴリズムという言葉があるが、紹介された研究のオリジナリティはどのようにモデルを作ったのかにあると考えられ、あえてアルゴリズムという言葉を使った意味合いは何か。

増淵：指摘のようにこれはモデル自体が新しいものである。アルゴリズムという言葉が入ったのは、最初に名前としてNAPLESがあつて、それに合うように単語を考えた面もある。

橋本(芳)：チューブのからみあいが増え変化していく際に、どう新たにからみあうかということはそう決まるものなのか。

増淵：決まらない。そこは運動方程式で表せない部分であつて、アルゴリズムで解決するしかなく簡単にはいかない。現在使っているからみあいのルールはほぼ現実に即していると考えられる。

長谷部：このシミュレーションを行うには2つのパラメータを与えていたが、実験を検証した結果では、先にパラメータを与えたのか、それとも実験に合うようにパラメータをチューニングしたのか。

増淵：後者である。例に挙げたシミュレーションの対象は溶液系であり、シミュレーションに必要なパラメータを実験的に求めることができない。

長谷部：今後このシミュレーションを適用する場合には、実験を必ず1回はしなければならないのか、あるいは今までの物性データがあればそれからパラメータを推測できると考えているのか。

増淵：後者である。シミュレーション対象のものに対して誰かが1回実験を行って物性データが得られていれば、分子量を変えようが、分子量分布を変えようが、すべて同じ2つのパラメータでシミュレーションを行うことができる。

新田：分子量分布の問題はどのくらいきくのか。

増淵：レオロジーでは分子量は重要なパラメータである。計算で分子量分布を正確に扱おうとするならばそれだけシステムサイズを大きくとる必要がある。

新田：初期配置はどうしているのか。

増淵：初期配置はとりあえずランダムに置いて、定常状態になるまで少し待たなければならない。

### 3) 「分子シミュレーションを利用した物性推算について」(資料#6)

三菱化学(株) 坪井 明男 氏

最初に、三菱化学と研究所の関連について紹介があった。次に、企業におけるプロダクト及びプロセス開発において、分子シミュレーションがどのように活用され、期待されているかについて、溶媒選定への応用などを例に挙げて説明があった。最後に、企業での分子シミュレーションの今後の展望として、蛋白の晶析などへの応用について話があった。

<質疑応答>

長谷部：何人ぐらいのグループで行っているのか。

坪井：グループ自体は10人であり、そのなかで分子シミュレーションを行っているのは1人である。

西谷：企業側から分子シミュレーションに期待するところ、それをかわざるを得ない場合の理由を教えてください。各事例に対して従来の方法を使わずに分子シミュレーションを使った理由を教えてください。

坪井：物性という立場から実際に使えると考えられるのは、化学工学プロセスの分野であると考えられる。今使っているのが分子量が100~200といった医薬の分野であり、分子シミュレーションは満足して使えるツールだと認識している。まだ溶媒という切り口からは使っていないので、期待を込めて溶媒への応用を例として挙げた。

大嶋：Drug Discoveryとかマテリアルのことを行うときに、分子シミュレーションでいろいろ検討してみるというのが一つのアプローチであり、その一方でマイクロリアクタのように実験主体で検討してみようとするアプローチもあり、どちらが伸びると思われるか。

坪井：企業としてはhigh throughputが一番であり、分子シミュレーションによるアプローチはまだ遠いと

考えられる。ただし、high throughput を解析する上では、実験だけではなく 2つのアプローチをうまく組み合わせていくのがよいと思われる。

松本 (秀)：医薬の溶媒の選択において分子シミュレーションを使うことによりコストが下がったなどの例はあるのか。

坪井：溶媒の選択は経験で選んでいるのが現状であり、その選択に対して何らかの裏付けを分子シミュレーションにより得たいという現場のニーズがある。

平尾：いろいろなツールを使っているが、それらをうまく組み合わせて使いたい場合、その組み合わせを誰がどのように決めているのか。

坪井：物性という見地に立って決めているのは 1 人だけである。一方、MO や MC の専門家もおり、彼らから情報を集めて判断している。

西谷：200 例のうちの約 30%が溶媒選定であり、その検討の中で分子シミュレーションを使った例は何件あるのか。

坪井：少なくとも医薬のものは数十例ある。

#### 4) 総合討論「分子シミュレーション技術を PSEはいかに利用できるか」

京都大学 長谷部 伸治 委員

まず、講師への質疑応答があった。また、分子シミュレーションの現状と今後の進展を踏まえて、PSE の研究者が取り組むべき課題について議論があった。

##### <質疑応答>

長谷部：分子シミュレーションにはいろいろな方法があり、すべての分野を一人がカバーすることはできないと思われるが。

新田：MD と MC は一人でやれそうだが、量子化学が入ってくると一人では難しいと考えられる。これはコアカリキュラムの問題であり、量子化学から入らせた方がこれからの学生は伸びるのではないかと。

長谷部：研究という立場から、グループをつくってこれから研究を進めていこうとしているのか、あるいは一研究室をでるのは難しいと考えているのか。

新田：量子化学で新しいアイデアを出すというのはなかなか難しい。新しい分野での計算は、既存のものだけではできないものが多いと思われる。今は、理学部の化学を出た人と議論しながら化学工学として何が欲しいのかを伝えてやってもらうしか手がないと思われる。しかし、化学工学のカリキュラムで育ちつつ、そういう人の指導を受けながらプログラムを作っている学生は、一人でもやれるのではないかと。

長谷部：プロセスシステムで必要なデータを分子シミュレーションからもらい、またシミュレーションの結果をフィードバックするなど、プロセスシステム、分子シミュレーション、ケミストの 3つのグループの連携が必要になってくると考える。

大嶋：分子シミュレーション研究会のメンバーはどういうところに興味があるのか。

増淵：分子シミュレーションで今のところできない部分を埋めていこうという立場で研究を進めている方が多い。また、物性をきちんと予測しようというより、分子レベルで何が起きているのかを見て、そこで得られた知見が物理的に合致するものであれば、それから新しいことを得たいという立場が多い。

大嶋：物性がまだ完備していないところを分子レベルまで戻ってみることによってそれらを推定しようという立場と、bulk なプロセスから医薬や先端材料へシフトしていく中で、今まで偏微分方程式を用いて扱ってきた分布定数系を粒子のレベルから眺めて、設計・制御していく立場があると思う。

富田：モデルの意味がわかればそれほど難しくないが、それが今までできなかったのはモデルを立てるだけの知識がなかったからであり、現象を知るということは重要であると思う。PSE はシステムをメインに考えるため、要素技術の組合せで考えようという視点が強過ぎたと感じた。分子シミュレーションを活かすためには、対象を分子レベルで見なければならぬ部分は何かを明らかにするとともに、今までのシステムとして対象を見てきたやり方とどう結びつくかを考える必要がある。

長谷部：PSE と分子シミュレーションの関係で 2つ考えられる。一つは、分子シミュレーション技術へ PSE が貢献できるのではないかと。例えば、我々はデータ解析手法や最適化手法を持っており、それらを分子シミュレーション技術のレベルアップに寄与できるのではないかと。もう一つは、PSE 研究へ分子シミュレーションを取り込むことである。我々が必要としているデータを必要な精度で得られるような分子シミュレーションおよび実験との組合せが考えられるのではないかと。また、マイクロ化学プラントのように、分子シミュレーションを組み込んだ製品設計・装置設計を考えなければならない時代に

入ってきたのではないか。

春成：現在の計算機ではどのくらいのレベルまで解けるようになってきているのか。

新田：WS をつなげて 10~20 個の CPU を使って並列に計算させて、計算時間が 1 週間をリミットに解いている（粒子数が 1 万個未満）。アメリカでは政府が準備した大型計算機をかなり自由に使えるグループがあって、そこでのデータは粒子数が数十万個のものが得られている。

増淵：MD エンジン（分子ダイナミクスを計算する専用のハードウェア；現在第 2 世代）を使うと、10 万個ぐらい計算できる。もう一つはいくつかの分子をまとめて 1 つ粒子とみることにより計算する粒子数を減らすアプローチがある。どのくらいの細かさでシミュレーションをするかは、何を見たいか、何を得たいかによる。

西谷：分子シミュレーションを用いて何を見たいのか、どうしたいのかをはっきりすることが、モデリングシミュレーションの基本である。また、PSE と分子シミュレーションの分野で、どういう課題を見つけるのかでどうかかわるのが決まると思われる。

配布資料：

#1: 分子シミュレーションによる物性推算と材料設計

#2: 分子シミュレーション：相平衡と輸送現象への応用，化学工学会第 66 年会，S202，広島(2001)

#3: Brownian simulations of a network of reptating primitive chains, J. Chem. Physics, Vol. 115, No. 9 (2001)

#4: からみあいでの力学平衡が応力緩和に及ぼす影響，第 49 回レオロジー討論会，神戸(2001)

#5: Primitive chain network simulation of entangled polymers under large deformations, ICAPP2001, Yonezawa Japan (2001)

#6: Solvent selection for pharmaceuticals, Fluid Phase Equilibria, (2001)