

jh210035-NAH

GPU の高速並列計算で実現する交差禁止制御可能な 高分子シミュレータの開発

萩田 克美 (防衛大学校)

概要

本研究では、高分子鎖のボンド交差禁止を ON/OFF できる分子シミュレーションモデル (MP-SRP 法) を高速並列計算する独自 GPU コードの開発を目指している。独自 GPU コードの作成に向け、「短距離相互作用の粒子系 GPGPU コードの整備」や「マルチノード・マルチ GPU の効率的な利用ノウハウの形成」を進めた。また、GPU 利用技術の検討として、既存解析用コードなどの OpenACC 高速化なども検討した。GPU に関する検討とともに、既存の CPU コードの最適化を進めることで研究の対象とする系の事前検討を行った。特に、環状鎖と線状鎖の混合系における鎖交差禁止の効果を評価するシミュレーションを実施し、環状鎖を貫通する線状鎖の数分布に対し鎖交差禁止の効果が顕著であることを明らかにした。

1. 共同研究に関する情報

(1) 共同研究を実施した拠点名

東京大学 名古屋大学 大阪大学

(2) 共同研究分野

超大規模数値計算系応用分野

(3) 参加研究者の役割分担

参加研究者	役割
萩田克美(防衛大)	代表、技術検討
芝 隼人(東大)	副代表、技術検討
川勝年洋(東北大)	議論、情報提供
村島隆浩(東北大)	議論、技術検討
大熊孝広(ブリヂストン)	議論、技術検討
本田 隆(日本ゼンリン)	議論、技術検討
畝山多加志(名大)	議論、情報提供
下川辺隆史(東大)	議論、情報提供
伊達 進(阪大)	議論、情報提供
片桐孝洋(名大)	議論、情報提供
青柳岳司(産総研)	議論、情報提供

2. 研究の目的と意義

(研究目的)

高分子材料は、ソフトな工業材料として、広く

使われている材料物質である。高分子には、紐状の形状で自在に折れ曲がるという特徴や、鎖同士が互いに交差せず絡まりあう特徴がある。これらにより、機械的性質が発現する。分子動力学シミュレーションで、ボンド交差禁止の効果を明示的に検証することは必要であるが、一般にボンド交差禁止を ON/OFF すると熱力学状態が変わってしまう技術的問題がある。

これに対して、課題代表者らは、ボンド交差禁止を ON/OFF しても、パラメータをうまく選ぶことで、同じ熱力学状態となる MP-SRP (Multi-Points Segmental Repulsive Potential) モデル [岩岡, 萩田, 高野, J. Chem. Phys. 2018, 149, 114901]を開発してきた。図1のように、ボンド上に、多数の仮想的斥力点を置きボンド間の力を計

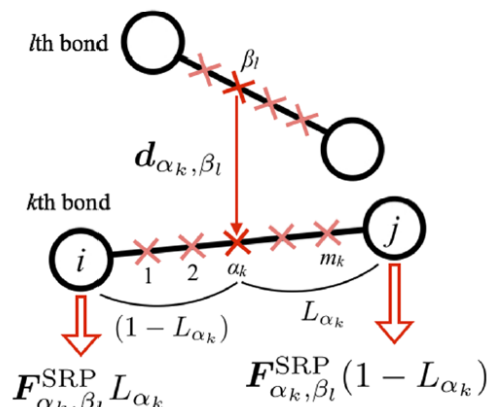


図1 MP-SRP 法の計算イメージ

算することで、ボンドが交差できないようにしている。このボンド間の力を計算する点が、既存の高分子用コードとは異なる。仮想点を増やし、適切なパラメータを与えれば同じ熱力学状態でボンド交差禁止の ON/OFF ができるが、それに応じて計算量が増大する。従って、GPGPU 利用で高速化したい。

高分子材料の挙動は巨視的なスケールの絡み合いで決定づけられるため、このようなモデルに対して空間、時間の両方向での大規模化・高速化が可能となればその理解に大きく貢献する。高分子鎖の力場は一般に古典の短距離多体相互作用で与えられる。このような計算はメモリ容量・帯域に対する要求が弱く、むしろ純粋に演算数によって支配されるため、GPGPU を活用することによる加速が可能な好個の例である。一方、MP-SRP 法では、図 1 に示したように、ボンド交差禁止を実現するボンド間の力の計算など特有の取り扱いがあり、既存のシミュレーションパッケージに依存して研究を行うことには困難が伴う。

本研究課題の目的は、最新の GPGPU の演算性能を活かしてこれまでにない時空規模の計算を実現する高並列の高分子シミュレータを開発し、これに MR-SRP モデルを搭載することによって高分子鎖の機械的特性の解明を促進することである。

(研究の意義)

ボンド交差禁止を実現するボンド間力の計算は MP-SRP 法特有であり通常の全原子 MD 計算や DPD 計算と異なるため、Gromacs, LAMMPS, HOOMD-blue をはじめとする既存の汎用ソフトウェアを改造して高い性能を出すことは難しい。MP-SRP 法の適用にあたり DPD 計算の新規コードを作成することで、競争力となるハードウェアの性能限界を出し切った開発にも力点を置ける。また、高分子物理学者が新しい計算手法を拡張改造しやすいリファレンスコードとして整備することで、波及効果も期待できる。

ソフトマテリアル汎用シミュレータ OCTA では階層間の接続を目指しているが、現状はファイル

経由での疎な接続に留まっている。MP-SRP 法の DPD 計算を実装した改造しやすい GPGPU コードが存在すれば、OCTA/SUSHI など知られる高分子 SCF 計算と密な接続をした多階層計算が可能になる。すなわち、本研究における並列アプリケーション開発は、ソフトマテリアル多階層・多階層シミュレーションの雛形としての意義を持つ。

(研究計画全体の目的と今年度の目的)

全体の目的は、交差禁止制御可能な高分子シミュレータを開発し、マルチノードのマルチ GPU を駆使して高分子物理や高分子材料のシミュレーション実施環境を整備・構築することである。そのために、コード開発から効率的利用に関するノウハウ構築や情報共有を実施目的としている。

今年度は、「最初に、single GPU のコードを作成して最適化する。その後、既存 GPU コード (Gromacs, LAMMPS, HOOMD-blue 等) の知見を流用し multi-GPU 環境のコードの作成を検討する。」を目的とした。あわせて、「既存の CPU コードのアルゴリズムを見直して高速化し、研究課題の整理のために研究対象とする系の挙動の事前把握を試みること」や「マルチノード・マルチ GPU の効率的な利用ノウハウを得るため、既存 GPU コード (Gromacs, LAMMPS, HOOMD-blue 等) の利用に関する知見を得ること」も目的とした。

3. 当拠点公募型研究として実施した意義

最新の GPGPU の HPC としての効率的利用のためには、最新の技術情報を欠かすことができない。マルチノードでのマルチ GPU の効率的な並列利用には、プログラムコードの開発に並び、通信ハードウェアに適したシステムソフトウェアの利用ノウハウが極めて重要である。現に、ライブラリのバージョンアップ等が性能を大きく左右するため、最新の技術的分析と対処が常に重要であった。このような状況から、JHPCN センター教員との密な情報共有と対応検討は、本課題の遂行に欠かすことができず、本課題の根本的意義であると言える。

4. 前年度までに得られた研究成果の概要

(2021 年度開始の課題のため、記述なし。)

5. 今年度の研究成果の詳細

プログラム開発に加えて、マルチノードのマルチ GPU を駆使して高分子物理や高分子材料のシミュレーション実施環境を整備・構築する狙いを念頭に、下記の研究テーマを実施した。

[1] MP-SRP 法に対応した GPGPU コードの作成

- (a) GPGPU コードの整備
- (b) マルチノード・マルチ GPU の効率的な利用ノウハウの形成
- (c) 解析コード等での GPU 活用技術の検討

[2] MP-SRP 法を利用した研究テーマの事前検討

- (a) GPU コードの最適化
- (b) 架橋ネットワーク等におけるトポロジー効果の評価
- (c) 環状鎖と線状鎖の混合系における鎖交差禁止の効果の評価

[3] MP-SRP 法のパラメータの機械的探索の自動化の検討

[1] MP-SRP 法に対応した GPGPU コードの作成

(a) GPGPU コードの整備

本研究では、既存の短距離相互作用系向けの分子動力学の GPU コードをベースとして、DPD 法や MP-SRP 法を組み込んだ独自 GPU コードを作成することを目指している。最初に、single GPU のコードを作成して最適化する計画とした。その後、既存 GPU コード (Gromacs, LAMMPS, HOOMD-blue 等) の知見を流用し multi-GPU 環境のコードを作成する予定を考えている。

現在、副代表者 (芝 東大) が所有し研究活動に長年使用してきた 3 次元の短距離相互作用系向けの分子動力学コードの GPGPU 化を実施している。開発結果として 2021 年度では、比較対照用のシングル GPU コードを作成し、その性能解析を完了す

ることができた。隣接粒子リスト (Verlet list) を SortedList 型のままとした状態で相互作用力場計算を行う書き換えにより、力場のカーネル部分については理論ピークに近い速度での計算が達成される。同様の実装を副代表者のコードをベースとして multi-GPU で行うことは比較的容易である。

このもとの、計算時間の 40% 近くが粒子の位置情報のデバイスへの転送・力情報のホストへの転送に費やされ、20% 近くの時間が隣接リストの転送に費やされる結果であった。これらの隠蔽を行うには、運動方程式の積分をデバイス側で行えるような実装の実現が必要である。

以上の情報に基づき、プログラムの移植性の観点から、grid サーチについてはホスト CPU でデザインとした上で multi-GPU 向け実装を進めている。

(b) マルチノード・マルチ GPU の効率的な利用ノウハウの形成

名大「不老」・東大「Wisteria/BDEC-01」・阪大「SQUID」の GPU システムのバッチジョブ下において、マルチノード・マルチ GPU で性能を最大限に活かした計算を実施するための利用技術を検討した。

マルチノード・マルチ GPU で、高い性能が期待される系として、「クーロン力の計算をしないユナイテッドアトム(UA)模型の大規模系」について、各システムで最大限の性能が発揮できる条件のベンチマークテストを実施した。(クーロン力がない場合、全体通信のコストを大幅に軽減できることから、高い並列計算性能が期待できる。) UA 模型の MD 計算では、Gromacs を用いたマルチノード・マルチ GPU 並列計算で、ポリエチレンなどの結晶性高分子の静置下での結晶化の再現などで必要な超大規模な系の長時間計算を効率的に実施できると期待される。

本研究では、GPU に対応した MD 計算のコミュニティコードである Gromacs, LAMMPS, HOOMD-blue 等で、知見把握として、名大「不老」・東大「Wisteria/BDEC-01」・阪大「SQUID」で、これらのコードのマルチノード・マルチ GPU 利

用で効率よく利用する技術検討を行った。`nsys`でのプロファイル取得等で、アプリケーションの挙動を把握しつつ、適切な実行オプションを設定するなどの検討を進めた。

100万粒子のポリエチレンのUAMD計算に関しては、名大「不老」・東大「Wisteria/BDEC-01」・阪大「SQUID」において、Gromacsによるマルチノード・マルチGPU並列計算のベンチマークを取得した。ここでは、時間刻みを5fsとして、1日で計算できるシミュレーション長(ナノ秒単位)を評価した。名大「不老」のNVIDIA V100の計算では、表1に示すように、良いスケラビリティを示していた。一方で、4月と8月の計測では、性能値が異なっていた。ドライバなどのシステムソフトウェアの更新の影響で、性能が左右されることも明らかになった。常に最適化検討することの重要性を示唆している。

表1 名大でのベンチマークの結果

ノード数	GPU数 (MPI数)	ns/day (4月計測)	ns/day (8月計測)
1	4	120.441	112.560
4	16	348.527	306.190
8	32	521.053	402.881
16	64	742.913	551.185
32	128	1004.919	X

次に、2021年夏に供用開始されNVIDIA A100を搭載した東大「Wisteria/BDEC-01」と阪大「SQUID」において、同じ系のベンチマークを計測した。表2にその結果を示す。

表2 東大・阪大でのベンチマークの結果

ノード数	GPU数 (MPI数)	ns/day (東大)	ns/day (阪大)
1	8	262.641	291.100
2	16	414.496	433.492
4	32	626.704	584.688
8	64	549.630	680.177

表2から、ノード数が大きい場合、通信負荷の増大による性能劣化が見られた。ベンチマークに用いた100万粒子のUAMDモデルの規模では、ノード数を64では、明らかに通信律速になってい

る。なお、プロダクトランとして実施する予定の1600万粒子の規模であれば、8ノードで64枚のNVIDIA A100で良い性能が出せると見込まれる。

10月には、東大と阪大での実行の差を把握する目的で、`nsys`でプロファイル取得し、`nsys-ui`で挙動の違いを比較検討した。この際、東大の64ノードでは、341.506(ns/day)という著しい性能低下が見られた。結果的には、Gromacsの動的付加分散機能をOFFにすることで、601.244(ns/day)の性能を確保することができた。

UAMDモデルに加えて、ReaxFF法のマルチノード・マルチGPU利用について検討した。ReaxFF法は、原子間の力の計算が古典MD計算に比べて重いために、ステップあたりの負荷が大きいため並列化の効果が出やすく、マルチノード・マルチGPU利用により、大きな性能向上が期待できる。LAMMPSでは、KOKKOSパッケージを利用することで、マルチノード・マルチGPU利用が可能である。表3は、2,149,216原子の系を1000 MD steps 計算した場合の経過時間[s]を示している。結果として、良いスケラビリティを示すことが分かった。

表3 LAMMPS ReaxFF 計算のベンチマーク

ノード数	GPU数 (MPI数)	経過時間 [s]
1	8	144.520
2	16	71.499
4	32	39.472
8	64	26.763

なお、HOOMD-blueについては、効率的なマルチGPU利用は検討中である。single GPU利用で、Kremer-Grestモデルの粗視化MDや、DPD計算で高い性能を示すことを確認している。HOOMD-blueでは、NVLINKを利用したUnified memoryでの並列やMPIとの組み合わせ利用もサポートしており、マルチGPUでの性能向上が期待できる。粗視化MDやDPD計算についてベンチマーク評価と利用最適化は、今後早急を実施する予定である。

(c) 解析コード等での GPU 活用技術の検討

GPU 活用の技術検討の一環として、さまざまな解析処理に用いるコード類に対する OpenACC 利用の GPU 高速化について、調査検討を実施した。OpenACC を用いれば、Fortran コードの GPU 高速化が簡単にできるとともに、高速フーリエ変換 (FFT) ライブラリの GPU 高速化も可能である。データを GPU 側に保持したまま、OpenACC と CuFFT による計算を実施することで、ホスト-デバイス間の通信コストを軽減し、配列の足し込み計算と 3D-FFT を繰り返す解析処理の高速化が期待できる。

配列の足し込み計算と 3D-FFT を繰り返す解析処理として、「放射光実験データからゴム中ナノ粒子の構造変化を推定する PM-2DpRMC コード」を我々は開発している。本検討では、OpenACC と CuFFT の同時利用で最適化された公開配布可能コードを作成した。現在、査読結果を受けて、論文の改訂中である。

OpenACC と CuFFT の同時利用は技術的には簡単であることを確かめた。利用のポイントは次の通りであった。

- 「!\$acc data copyin」句で、デバイスに送るデータ配列を明示する。
 - 「cufftExecD2Z」関数で、デバイス上で FFT を実施する。cufftPlan3D や cufftDestroy は、使い回すことでオーバーヘッド削減できる。
 - 3D 配列の足し込みは、gang/vector 並列の流儀に従い、「!\$acc loop」句で、外側から gang-seq(worker)-vector で分割し、足し込み時には「!\$acc atomic」を指定する。
 - なお、3D 配列の足し込み先の配列の初期化では「!\$acc kernels」句内で gang 分割をする。
- 性能比較の詳細や実コードについては、今後、論文化して公開する予定である。

なお、実際の解析処理で、次のような副次的な知見が得られた。OpenACC と CuFFT を利用した解析処理のコードは、性能が十分に引き出す最適化が実現できていない面がある。そのため、世代の古いゲーム用 GPU でも、最新 GPU と比し

ては、相対的に良い性能を保っていた。少し古いゲーム用 GPU も、OpenACC コードでの解析用途であれば、長い寿命で利用できそうである。

[2] MP-SRP 法を利用した研究テーマの事前検討

(a) CPU コードの最適化

GPU コード作成の前に、インハウスの既存 CPU コードの MP-SRP 計算部分の最適化を行い、公開可能なコードを作成した。計算コストの削減のため、図 2 に示すように、連続する SRP 斥力点間のペア計算の順序について、改良した。MP-SRP 法では、近接するボンドの上に連続配置された SRP 斥力点間の力を計算する。MP-SRP の計算には、カットオフ長があるため、距離の離れた SRP 斥力点間の計算を不要とすることができる。SRP 斥力点は直線上に配置されていることから、近隣の SRP 斥力点間の距離の情報があれば、SRP 斥力点間の距離を計算せずともカットオフ長よりも長いと判定できる場合がある。具体的には、図 2 に示すように、ボンド上の SRP 斥力点の計算順序を、ボンドの端からではなく、最近接点から端に向けて計算する順序とすることで、多くのペアの距離計算を省くことができた。

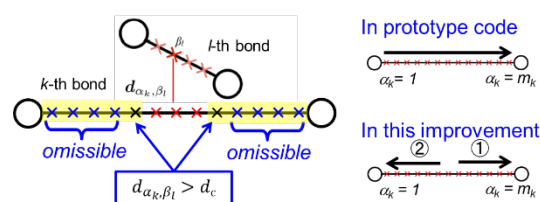


図 2 MP-SRP 法の高速度イメージ

大規模な MP-SRP 法の DPD 計算における並列性能を評価するため、614,440 DPD 粒子の系が 10,000 steps 計算する時間のスケーラビリティを、阪大 SQUID で評価した。なお、SQUID は、1 ノードあたり、2 基の Intel Xeon Platinum 8368 (Icelake / 2.40 GHz 38 cores) を搭載している。表 1 は、ノード数 (MPI 並列数) に対する経過時間を示している。この結果から、614,440 DPD 粒子の系では 32 ノードまでは実用にふさわしくスケ

ールしていた。

表 1 MP-SRP 法のスケラビリティ評価の結果

Number of nodes	Number of procs	Elapsed time [s]
8	608	200.0
16	1216	108.4
32	2432	61.72
64	4864	36.91
128	9728	26.34

(b) 架橋ネットワーク等におけるトポロジー効果の評価

作成中の GPU コードの応用のターゲットとしては、架橋したポリマーネットワークが一軸延伸で発現する応力における鎖交差禁止の効果を評価することを計画している。ここでは、絡み合う長いポリマーについて、ランダムな位置で2つのポリマー間にボンドを設定するランダム架橋を想定している。この架橋ネットワークの応力歪み特性は、ポリマー同士を繋いだ架橋点と、絡み合い点に影響すると考えられている。鎖交差禁止を ON/OFF することで、この両者の効果を分離することができるかと期待している。

このような研究の実現のためには、交差する鎖同士を横切る力が継続的に働いている場合に、利用している MP-SRP のパラメータがどの程度鎖の交差を防ぐことができるかを把握する必要がある。例えば、無限に細かく SRP 点を置けば、十分に交差を防ぐことができるが、計算コストが膨大になる。一方で、SRP 点の間隔を大きくすると、交差にかかる力が弱くても交差してしまうと考えられる。ターゲットとする計算に応じて、計算コストとのトレードオフで、MP-SRP のパラメータや時間刻みの値などを、うまく選ぶ必要がある。

鎖交差禁止（トポロジー保存）におけるパラメータ選定の必要性を明らかにするために、環状鎖メルトの鎖長依存性について調べた。環状鎖のメルトでは、鎖長が長いほど、局所的に鎖を交差させようとする力が強くなるようである。DPD 粒子数 $N = 480$ の環状鎖のメルト（全 599,040 粒子）では、時間刻みが $\Delta t = 0.01$ で 100 万ステップの間

に、交差はしていなかった。なお、交差の判定は、環状鎖のペアについて、ガウスリンク数を計算し、カテナンを形成していないことを確かめた。一方で、 $N = 1920$ の環状鎖のメルト（全 9,584,640 粒子）では、 $\Delta t = 0.0025$ であれば、100 万ステップの間に交差しないことを確認した。この大規模計算は、阪大 SQUID の 512 ノードを利用して実施した。

上記では結び目を持たない環状鎖（trivial knot）を扱ったが、結び目をもつ環状鎖（trefoil knot 等）のメルトでは、交差のために trefoil knot が trivial knot になってしまう挙動を確認している。これは、局在した knot における交差を促す局所的な力の影響と考えられ、MP-SRP のパラメータや時間刻みの値をうまく選ぶ必要があることを示唆している。このような系に対するパラメータの選定は、GPU コードの開発後に実施したいタスクである。

(c) 環状鎖と線状鎖の混合系における鎖交差禁止の効果の評価

DPD 法において、鎖交差禁止の ON/OFF で影響があることを明らかにするために、環状鎖と線状鎖が混合した系における、環状鎖を貫通する線状鎖の数分布について調べた。本検討では、環状鎖と線状鎖の体積割合が 1:10 の場合のみを扱った。ここで、鎖交差禁止がない場合は、Groot-Warren 型の標準的な DPD 計算 (sDPD) とした。線状鎖のメルトにおいて、密度などの熱力学状態が sDPD と同じになる MP-SRP のパラメータを用いた。

図 3 は、環状鎖と線状鎖の 1 本あたりの DPD 粒子数が $(N_{\text{ring}}, N_{\text{linear}}) = (80, 80)$ の場合について、初期配置における貫通数分布と、十分に時間が経過した後の貫通数分布の結果を示した。ここで、鎖交差禁止がない場合は sDPD、鎖交差禁止がある場合は MP-SRP である。なお、初期配置は、環状鎖のメルトと線状鎖のメルトをそれぞれ独立に平衡緩和させた系を重ね合わせ、重なりを push-off させたものである。図 3 から分かるように、鎖交差禁止がある場合、平均貫通数が少なくなること

が分かった。これは、鎖交差禁止で、環状鎖同士
の交差が禁止されるため、実効的に環状鎖の広が
りが小さくなるためと考えられる。

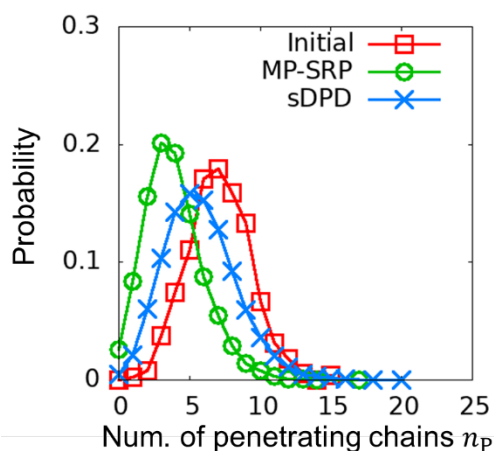


図 3 環状鎖を貫通する線状鎖の数の分布

[3] MP-SRP 法のパラメータの機械的探索の自動化の検討

本テーマは、主に、GPU コード開発後に実施するテーマである。2021 年度は、関連情報の収集と、予備的な検討を実施した。

GPU コード開発後に、全原子 MD/UAMD から IBI 粗視化した DPD 模型に対する MP-SRP パラメータの自動探索を行うことを計画している。反復法でパラメータを探索する部分を、複数の独立系を並列に計算する粒子群最適化(PSO: Particle Swarm Optimization)法などの最適化法を適用することを計画している。

機械的に探索した MP-SRP パラメータの有効性検証を系統的に実施する方法（検証の対象とする系の選定と解析方法）を、上記の [2] で最適化検討した CPU コードを用いて検討を進めた。それとともに、本検討のために必要となるリファレンスデータの蓄積を念頭にし、ポリイソプレン (PI)、ポリエチレン (PE)、ポリエチレングリコール (PEG)、エポキシ樹脂などについて、全原子 MD や UAMD 模型のシミュレーション技術の開発などを進めた。

6. 今年度の進捗状況と今後の展望

全体の進捗としては、概ね順調である。

テーマ毎の定量的な進捗率は、概ね、以下の通りである。

[1] GPU コード作成	...	60%
[2] 研究対象の事前調査	...	80%
[3] パラメータ探索	...	20%

「[2] 研究対象の事前調査」の研究進展として、当初想定されなかった新たな課題点が明らかになったことから、「[3] パラメータ探索」に関して研究対象の問題解決のために必要なタスクも増大している点に注意する必要がある。結果的には、現実的な計算コストで成果が見込める研究テーマの見極めが重要と考えている。

今後の展望としては、当初設定した GPU コードの完成を目指すとともに、本研究を通じて得られた「マルチノード・マルチ GPU のシステムで、大規模な分子シミュレーションを効率的に実施するノウハウ」を最大限に活かして、インパクトのある研究成果を創出する方向を目指したい。あわせて、「マルチノード・マルチ GPU のシステムで、大規模な分子シミュレーションを効率的に実施するノウハウ」などの技術情報を、若手 (学生) や企業研究者を含めた多くの研究者に対して普及させることで、波及効果を得ることも目指していく。

7. 研究業績一覧

(発表予定も含む。投稿中・投稿予定は含まない)

(1) 学術論文 (査読あり)

- [1] K. Hagita, T. Murashima, H. Shiba, N. Iwaoka, T. Kawakatsu, 'Role of chain crossing prohibition on chain penetration in ring-linear blends through dissipative particle dynamics simulations', Computational Materials Science (203), pp. 111104, 2022
- [2] K. Hagita, T. Murashima, M. Ebe, T. Isono, T. Satoh, 'Trapping probabilities

of multiple rings in end-linked gels',
Polymer (235) pp. 124683, 2022.

[3] K. Hagita, T. Murashima, M. Ogino, M. Omiya, K. Ono, T. Deguchi, H. Jinnai, T. Kawakatsu, 'Efficient Compressed Database of Equilibrated Configurations of Ring-Linear Polymer Blends for Molecular Dynamics Simulations', Scientific Data (9) pp. 40, 2022.

[4] K. Hagita, T. Murashima, N. Sakata, 'Mathematical Classification and Rheological Properties of Ring Catenane Structures', Macromolecules (55) pp. 166-177, 2022.

[5] K. Hagita, T. Murashima, 'Molecular Dynamics Simulations of Ring Shapes on a Ring Fraction in Ring-Linear Polymer Blends', Macromolecules (54) pp. 8043-8051, 2021.

[6] T. Murashima, K. Hagita, T. Kawakatsu, 'Viscosity Overshoot in Biaxial Elongational Flow: Coarse-Grained Molecular Dynamics Simulation of Ring-Linear Polymer Mixtures', Macromolecules (54) pp. 7210-7225, 2021.

[7] K. Hagita, T. Aoyagi, Y. Abe, S. Genda, T. Honda, 'Deep learning-based estimation of Flory-Huggins parameter of A-B block copolymers from cross-sectional images of phase-separated structures.', Scientific Reports (11), pp. 12322, 2021.

(2) 国際会議プロシーディングス (査読あり)

[8] H. Shiba, "Enhancing efficient computation of long-wavelength relaxation dynamics in a 2D liquid involving millions of particles", J. Phys.: Conf. Ser. 207, 111104 (2022).

(3) 国際会議発表 (査読なし)

なし

(4) 国内会議発表 (査読なし)

[9] 萩田克美, 'マルチノード GPU を利用した大規模な高分子系の MD 計算の事例紹介', 第 2 回スーパーコンピュータ「不老」ユーザ会 (2021.8)

(5) 公開したライブラリなど

なし

(6) その他(特許, プレスリリース, 著書等)

なし