

jh220038

## GPU 並列計算による高分子材料系シミュレーションの高速化技法の検討

萩田 克美 (防衛大学校)

### 概要

本研究では、「マルチノードのマルチ GPU を効率よく利用する技術」のノウハウ形成を中心として、自動的な利用法（パラメータ最適化を含む）の確立、マルチ GPU 利用の独自コード開発などの HPC 研究を目指している。ゴムのような高分子材料では、長い鎖が絡まりあうため、大規模かつ高速な HPC が必要となる。本研究課題では、「①独自 GPGPU コードの開発」「②パラメータの機械探索の自動化の検討」「③汎用高分子アプリでの GPU 利用の高度化」を進めた。①では、「短距離相互作用の粒子系の分子シミュレーション」と「ゴム中ナノ粒子構造を 2 次元散乱パターンから 3 次元モデル構築する探索計算」を扱った。加えて、GPU 利用技術の検討として、OpenACC と cuFFT のマルチノード利用も検討した。②では、Python を活用し、作業の自動化／省人化／効率化を進めた。③では、HOOMD-blue のマルチ GPU 利用や、AlphaFold2 の活用など、アウトプット志向の検討を進めた。水中 PEG ネットワークの負のエネルギー弾性に関する検討では、統計的な解析アプローチを考案し、ノイズに埋もれた有意なデータを引き出すことに成功した。

### 1. 共同研究に関する情報

#### (1) 共同利用・共同研究を実施している拠点名

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

#### (2) 課題分野

大規模計算科学課題分野

#### (3) 共同研究分野

超大規模数値計算系応用分野

大熊孝広(ブリヂストン)	議論、技術検討
作道直幸(東大)	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
川波竜太(京都工繊大)	技術検討と活用
寺川和志(京都工繊大)	技術検討と活用
波木 陸(京都工繊大)	技術検討と活用
長原颯大(東大)	技術検討と活用

#### (4) 参加研究者の役割分担

(5) 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
村島隆浩(東北大)	議論、技術提供
藤原 進(京都工繊大)	議論、技術検討

### 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。ゴムのような高

分子材料では、長い鎖が絡まりあうため遅い緩和の系となり、必然的に、大規模かつ高速な HPC が必要になる。対消費電力性能の観点からも GPU への移行が必須となっており、様々な材料シミュレーションにおいて複数の GPU を高速に接続した並列計算は必須かつ次世代の持続可能社会における研究開発に寄与する。高分子材料研究の国際競争においても、マルチ GPU のシステムで最大限性能を発揮させたコンピューティングの実現が、勝負の分け目である。

2021 年度の JHPCN 課題では、GPU コード開発と、GPU アプリの活用手法検討を実施した。専用 GPU コードの開発として、鎖交差禁止による効果の本質に迫るため、熱力学状態を保ちつつ鎖交差禁止の ON/OFF できる MP-SRP (Multi-Points Segmental Repulsive Potential) モデルを検討した。加えて、Gromacs や LAMMPS 等の既存の MD アプリで、マルチノードのマルチ GPU を効率よく利用する事例検討も進めた。

これらの研究背景を踏まえ、2022 年度は、「マルチノードのマルチ GPU を効率よく利用する技術」のノウハウ形成から自動最適化までを含め、マルチ GPU 利用の独自コード開発を中心とした HPC 研究を行うことを目的とした。これにより、最新 GPU (や次世代の GPU) の演算性能を十分に活かし、これまでになかった時空規模の計算を実現し、高分子材料系の機械的特性の解明を促進することが、大きな目的である。

#### (研究の意義)

マルチノードに搭載された複数の GPU を効率よく利用する技術は、高分子材料の研究においても重要な武器である。計算力を背景にして、大規模 MD シミュレーションにより科学的真実を導くことは、論文出版という学術研究や、産業応用での設計評価において、競争力の源泉になる。

MP-SRP 法という独自の散逸粒子動力学(DPD)計算などの独自手法で独自の GPU 専用コードを作成することは、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。さらに、ソフトマテリアルの多階層強連結シミュレーションを実現する将来のコード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、高分子物理・高分子材料のシミュレーション分野でニーズのある GPU を活用する HPC 技術を高め、論文出版として成果創出することである。

本研究課題では、従来の高並列計算スパコンからの置き換えのトレンドとして、2021 年度から本格的に供用開始された「マルチノードのマルチ GPU 搭載スパコン」において、高分子物理・材料のシミュレーション研究を効率的に実施するための基盤構築を目的としている。特に、直接型高速通信機構の積極的活用を念頭に置き、①独自アルゴリズムのシミュレータコードの開発、②既存 MD 計算アプリの効率的利用、③データ解析向けの独自 GPU コードの開発を、HPC 活用の要素技術開発として 3 年程度で検討する計画である。

すなわち、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・構築することが目的である。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. 当拠点の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 年度の JHPCN 課題では、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、MP-SRP 法を中心にして、次の 3 つの研究テーマについて検討した。「①独自 GPGPU コードの作成」「②独自 CPU コードを利用した研究テーマの事前検討」「③パラメータの機械的探索の自動化の検討」①では、副代表 芝が中心に粒子系 GPGPU コードを整備し、拡張を検討した。それとともに、マルチノード・マルチ GPU の効率的な利用について検討した。また、OpenACC 等を活用し、解析コード等での GPU 活用技術を検討した。②では、CPU コードを最適化するとともに、架橋ネットワーク等におけるトポロジー効果や、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する研究を実施した。③については、python スクリプトとの連携による解析やシミュレーションの計算制御の自動化、省人化、効率化の検討を進めた。特に、モデルパラメータとトポロジー保存に関するベンチマーク系として、環状鎖の結び目(Trefoil knot)とその数学判定量の利用が有用であることを見出した。

### 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] 独自 GPGPU コードの作成

- (a) MP-SRP 法の GPGPU コード開発
- (b) OpenACC を活用した独自コード開発

#### [2] パラメータの機械的探索の自動化の検討

#### [3] 汎用高分子アプリでの GPU 利用の高度化

- (a) Gromacs, HOOMD-blue, LAMMPS の活用深化
- (b) Amber や AlphaFold 2 などの生体高分子 MD ツールの活用検討

上記に加えて、高分子材料の研究者や学生への情報普及として、オンライン勉強会を実施し、OpenACC 利用や東大・名大・阪大のスパコン利用のノウハウを交換した。

#### [1] 独自 GPGPU コードの作成

##### (a) MP-SRP 法の GPGPU コード開発

粒子系 GPGPU コードを拡張して、DPD 法や MP-SRP 法に対応するための検討を実施した。技術的検討を重ねたものの、最終的には、研究戦略の変更として、本検討項目を縮小した。

2022 年度の間接報告に対する審査コメントで、独自アルゴリズムのシミュレータコードの開発の遅れが指摘された。2021 年度の成果である CPU コードの最適化で予想以上に周辺研究が進んだ結果として、MP-SRP モデルの独自 GPU コード開発の優先度が相対的に低下した。研究環境を総合的に判断して、他の研究を優先させる判断をした。

##### (b) OpenACC を活用した独自コード開発

GPGPU の活用は、分子シミュレーションのみならず、実験データの解析、特に、逆問題的モデリングでの活用が期待される。これまで、京コンピュータの利用を初めとする HPCI/JHPCN のスパコンを利用して、手法開発を行ってきた。特に、

SPring-8 で計測した 2 次元小角散乱データから、三次元構造モデルを構築する PM-2DpRMC コードは、ゴム中ナノ粒子の試行的配置に対し、3 次元 FFT 計算と畳み込み計算を多数回繰り返すモンテカルロ探索計算であることから、OpenACC 活用が期待できる。2021 年度の JHPCN 課題等での検討で、OpenACC を用いれば、Fortran コードの GPU 高速化が簡便にできるとともに、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と判断した。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 を繰り返し行う解析処理の高速化が期待できる。

JHPCN 課題や東大情報基盤センターの GPU ミニキャンプを通じて、OpenACC+cuFFT で GPU を利用するコードを開発した。コード公開の論文を Computer Physics Communications 誌に投稿したが、現在も Under Review であり、公開に至っていない。なお、この間に、公開予定のコードを利用して実験データを解析した論文が Macromolecules 誌[6]で出版された。図 1 は、PM-2DpRMC 解析のイメージを示したものである。なお、2019 年の論文[Soft Matter, (15) 7237-7249, 2019.]では 2048 個のナノ粒子に対する解析規模であったものが、524288 個に大規模化できた。

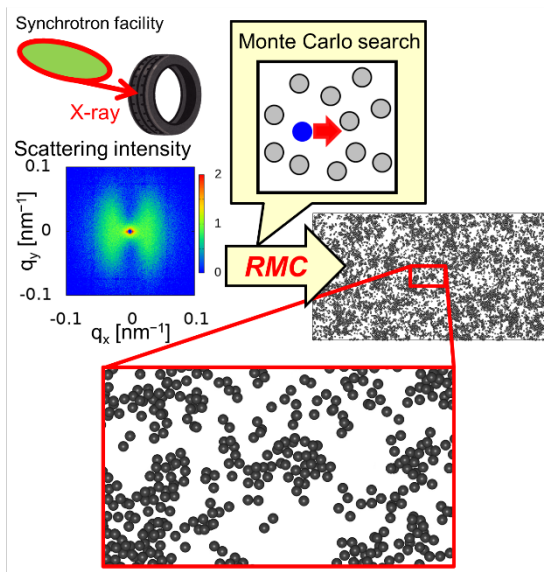


図 1 PM-2DpRMC 解析のイメージ

上記の成果は、Single GPU によるものである。より大規模な系を扱うために、マルチ GPU の利用技法についての検討を行った。現時点では、cufftXt でのマルチ GPU-3D-FFT の実施と、cufftXtLib のデータ管理フレームワークを活用（想定外利用）したノード内での高速な Gather の実現で、ノード内マルチ GPU で最適化できるとの見通しを得ることができた。

## [2] パラメータの機械的探索の自動化の検討

分子シミュレーションでは、種々のパラメータの値に応じて、ミクロな挙動やマクロな物性が変化する。シミュレータの開発としては、狙った物理挙動を示すパラメータを探索したい。この探索の自動化、省人化、効率化は、重要である。

本研究課題では、当初、MP-SRP モデルのパラメータ探索を進めた。2021 年度に最適化した CPU コードを用いた。鎖交差禁止の維持の確認方法として、Trefoil knot (図 2 参照) のメルトの長時間計算後に、すべての ring の結び目判定を行うスキームを確立した。機械的探索のために python スクリプトを作成し、「線状鎖のメルトで熱力学状態を満たす MP-SRP 法のパラメータを試行的に探索した後に、鎖交差禁止の実現を Trefoil knot で評価する」繰り返し作業を効率化した。



図 2 Trefoil knot

関連研究として、python の Topoly パッケージを活用した Trefoil knot の数学的解析手法を活かし、ポリエチレンの Trefoil knot メルトについて、United-Atom モデルを用いた MD 計算で結晶化挙動に関する研究[4]を実施した。

加えて、MP-SRP 法のベースとなる DPD 法について、種々のパラメータを変化させた大規模計算で、SCF 理論計算との定量的対応と鎖の形状に対する効果を詳しく調べた[2,5]。

MP-SRP 法よりも確実に鎖の交差を禁止する分子シミュレーションモデルとして、Kremer-Grest 模型がよく知られている。MP-SRP 法がベースとする DPD 法については、多くの研究により、相分離構造形成に関するパラメータの挙動が理解されている。一方で、KG 模型での相分離構造形成に関するパラメータは十分に検討されていない。そこで、我々は、パラメータ値の探索の自動化/効率化検討の実践的活用の練習台として、KG 模型による相分離構造形成に関するパラメータを開発することとした。この研究では、図 3 に示すように、ラメラ構造を仮定した初期配置を用いて、平衡状態を得る計算を行い、種々のパラメータ値に対するラメラドメイン幅の変化を調べた。2023 年度中に論文出版を目指している。

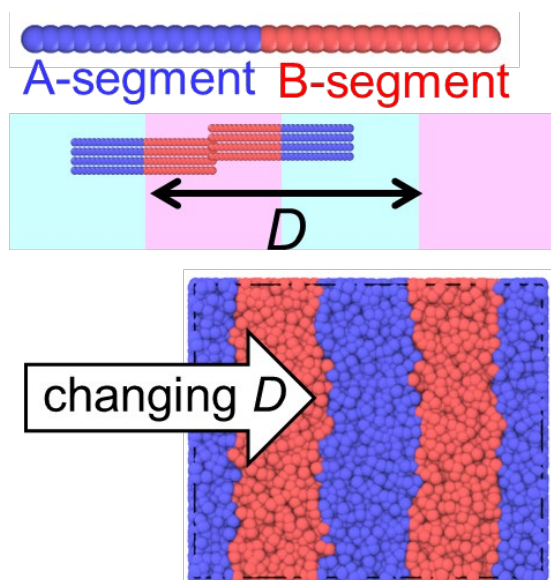


図 3 ラメラドメイン幅評価のイメージ

### [3] 汎用高分子アプリでの GPU 利用の高度化

#### (a) Gromacs, HOOMD-blue, LAMMPS の活用深化

高分子物理・高分子材料の MD 計算で GPU を効率よく活用した汎用アプリとして、Gromacs, HOOMD-blue, LAMMPS がよく知られている。特に、我々は、Single GPU 利用で多くの研究成果を上げている。より大規模な系を扱うために、マルチノードのマルチ GPU で、効率よく利用する技術の確立を目指している。

粗視化 MD 計算については、環状鎖と線状鎖の

混合系の平衡状態の配置を得るために、HOOMD-blue で Single GPU を活用した大規模計算を実施した。これらから、論文成果[1][3]が得られた。2022 年度の検討では、今後の活用のために、HOOMD-blue をノード内 GPU 並列で利用する環境整備を行った。HOOMD-blue ver. 2.9.3 の python API から、最新の ver. 3 への移行を行うとともに、東大 Wisteria BDEC-01 にて、A100 を用いて、ベンチマーク評価を実施した。

100 万粒子(1000 粒子/鎖が 1000 本)の Kremer-Grest 模型では、GPU 数を増やすと、step/second の値の向上が観測できた。現状の利用法では、Single GPU で使う方が合理的である。今後、コードレベルでの動作確認を行い、複数 GPU の活用技術を高めていく必要がある。

表 1 KG 模型の GPU 並列のベンチマーク結果

GPU 数	step/second
1	1446
2	1692
4	1918
6	2004
8	918

United Atom MD 計算では、Gromacs と LAMMPS の利用を検討した。Shear 変形、一軸変形、二軸変形などの変形を伴う計算は、現状、LAMMPS を利用する必要がある。TraPPE-UA 力場では、ポリエチレン、ポリイソプレン、ポリプロピレンの計算に、クーロン力の計算を必要としない。長距離力であるクーロン力を計算しない UAMD 模型の場合、高い並列性能が期待できる。LAMMPS の GPU パッケージと KOKKOS パッケージの性能比較や最適化を実施した。

Gromacs を用いた UAMD 計算については、1600 万粒子のポリエチレンの結晶化プロセスの計算を、東大 Wisteria BDEC-01 や阪大 SQUID の 8 ノード並列 (64 枚の A100) で、効率よく利用でき、約 150ns/day の性能を示すことを確かめた。なお、通信ライブラリやセキュリティによる



OS 環境の影響を受けるようであり、それらの状況把握のため、適宜、ベンチマーク評価を実施した。

全原子 MD 計算では、Gromacs の Single GPU 計算の効率的実施方法の検討を進めた。特に、水中の PEG ネットワークの機械的性質の解明を研究対象とした。弾性率におけるエネルギーの寄与とエントロピーの寄与が、見かけ上、ゼロとなる温度  $T_E$  から、負のエネルギー弾性の存在を確かめることを目指した。これまでの JHPCN 課題の検討成果で Python の subprocess を用いたタスク並列により、Gromacs の Single GPU 計算実施の効率化ができています。しかしながら、現在実施可能な計算時間では、応力  $\sigma$  と Shear strain  $\gamma$  の間の線形関係を綺麗に得ることは、全原子 MD 計算では無理である。例えば、応力緩和は、図 5 に示すとおりバラツキが大きく、40ns 後のブロック平均（赤線）も安定していない。さらに、 $T_E$  を得るために、 $\sigma$  と  $\gamma$  の線形関係の傾き  $G$  の  $T$  に対する線形関係を綺麗に得ることはより厳しい。そこで、我々は、関心のある指標のみを統計的に評価する手法を検討することとした。Gromacs の生データを系統的に保存し、Python によるスクリプト処理で、種々のデータ解析検討をできる体制を構築した。結果として、 $T_E$  のみを、複数の温度  $T$  と  $\gamma$  における  $\sigma$  のデータ点から、Multivariate regression の問題として統計的に評価するアプローチを確立した。なお、 $(T, \gamma)$  における  $\sigma$  も誤差の大きな値であった。体積一定の条件で 16 個の  $(T, \gamma)$  に対して全長  $t_{sim}=360ns$  の計算を実施して、 $T_E$  のみを評価した。図 5 に示すように、制限した  $t_{sim}$  に対する  $T_E$  の振る舞いから、誤差は押さえられてる感触を得た。また、別の誤差の評価方法として、箱ひげ図解析を用いた。具体的には、16 個のデータ点から 1 つの点を除いた 15 個のデータ点からなる 16 セットに対して、それぞれ、 $T_E$  を評価し、箱ひげ図解析をした。これは、この 16 個の  $T_E$  がガウス分布に従わないためである。なお、得られた  $T_E$  は既存実験結果からの推測として妥当なものであった。統計的なアプローチで、ノイズに埋もれた有意なデータを引き出すことに成功したと言える。

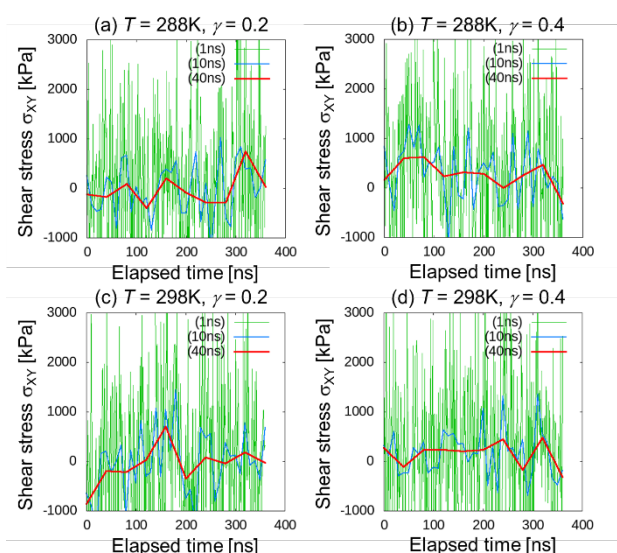


図 4 水中 PEG ネットワークの応力緩和

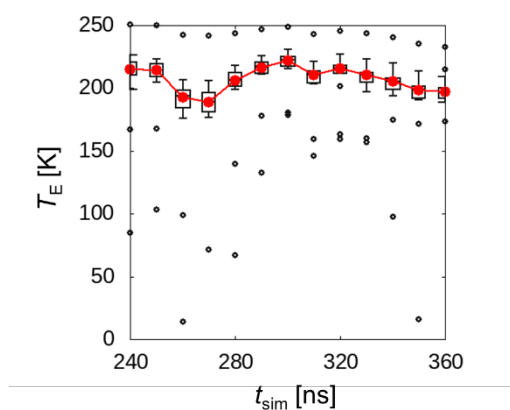


図 5 水中 PEG ネットワークの  $T_E$  の挙動

#### (b) Amber や AlphaFold 2 などの生体高分子 MD ツールの活用検討

2021 年度中間報告以降の新たな進展として、アミノ酸配列からの構造予測ツール AlphaFold2 の活用や、Amber の GPU 利用などの検討を進めた。

AlphaFold2 では、HHblits と呼ばれる処理において、ストレージ性能が、経過時間に大きく影響することが知られている。この対応として、名大や東大のスパコンでは、高速ストレージを利用する方法が紹介されている。2022 年度中には、M2. SSD で、4TB の容量を持ち 7300MB/s read の性能を有する製品が市販された。そこで、手元の PC (Ryzen 9 5950X) に上記の SSD を搭載して、スパコンとの性能比較を行った。まず、ストレージのロードを明確化するために、4TB の SATA-SSD

との比較を行った。T1050 という事例では、hhblits.py を cpu=16 とした場合に、M2. SSD と SATA-SSD で、HHblits の処理経過時間は、約 1430 秒と 2430 秒の差であった。理論的性能を仮定すれば、約 1430 秒の内、約 100 秒がストレージの処理時間と考えられる。M2. SSD では、スパコンと同等の処理性能であった。一方で、スパコンでは、他のユーザの利用に影響されていると感じる事例があった。高性能な M2. SSD が低価格化したことから、スパコンと高性能パソコンの利用バランスが重要と言える。

PPG というシーケンスが繰り返されるコラーゲンは、3重ヘリックスを形成することがよく知られている。AlphaFold2 で、3重ヘリックス構造を得ることができる。正確には、AlphaFold2 が予測した構造を初期配置として、Amber で構造最適化すると、3重ヘリックス構造になった。また、初期配置のバラツキにより、図6に示すように、ダンパー状の準安定構造が得られた。これは、3重ヘリックス構造の“ひも”が水中にある場合、両端の長さを短くすると、図6のような構造を取り得、ダンパーのような働きをすることが想起される。ナノマシンとしての応用を期待したい。

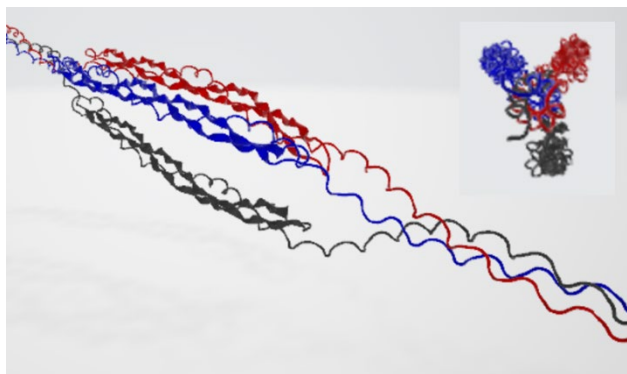


図6 コラーゲンアミノ酸配列の予測構造

また、基礎科学の観点としては、DNA などのヘリックス構造をもつ水中生体高分子では、弾性に対するエネルギー寄与とエントロピー寄与（温度依存項の寄与）を評価すると、負のエネルギー弾性を示すことがモデル計算から予想されている。

アミノ酸配列をモデル的变化させ、ヘリックス構造の高次構造を制御することで、負のエネルギー弾性を詳しく解明する研究が可能と考えている。2023 年度の HPCI 課題は不採択となったため、2024 年度の HPCI 課題申請に向けて、継続的に検討を行う予定である。

#### [4] 若手・学生向けの情報共有の勉強会実施

若手学生に、複数センターでの活用を実践的に経験させ、スパコン利用ノウハウを交換する勉強会の実施に向けて、継続的に活動した。また、OpenACC の活用スキルを関係者内で高めるために、「積分(縮約)」「拡散方程式」「行列積」について、CPU/CUDA/OpenACC の3者のコードを整備し、対応する教材資料を作成し、改良を進めた。

2022 年 11 月 29 日に、Zoom を利用して、下記の内容の勉強会を実施した。主に、大学院生による実際の利用ノウハウの交換を実施した。

- ・名大/阪大/東大のスパコンで操作練習 GPU 版 Gromacs と Amber のコンパイルとジョブ実行
- ・OpenACC/CUDA の概要と利用体験
- ・東大/阪大/名大の3センターでの Gromacs の GPU 利用に関する事例紹介と、利用のコツやノウハウについて [東大 長原]
- ・Amber の GPU 版利用のコツやノウハウについて [京都工繊大 寺川]
- ・DNA やタンパクの PDB データ (AlphaFold2 含む) から出発した Ambertools の利用法 [京都工繊大 川波]
- ・東大 GPU スパコンを利用した AlphaFold2 の効率的利用実習 [東大 長原]
- ・各 GPU スパコンでの AlphaFold2 の利用とベンチマーク [東大 芝]

#### 6. 進捗状況の自己評価と今後の展望

全体の進捗としては、概ね順調である。MP-SPR 法の独自 GPU コードの開発については、CPU コード最適化が予想以上に良かったことなどの研究環境の変化により、縮小した。

大枠の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%  
※MP-SRP 法の独自 GPU コード開発は中止  
※PM-2DpRMC 法の GPU コード開発に移行。
- [2] パラメータ探索 …… 90%  
※MP-SRP 法の関連は、上記に合わせ中止。  
※KG 模型の相分離構造形成の問題に移行。
- [3] GPU 利用の高度化 …… 50%

中間評価コメントを受け、研究の現状を総合的に分析し、今後の成果を最大化できる研究テーマへの軌道修正を行った。

今後の展望として、2023 年度の JHPCN 課題実施期間中に、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。特に、「基板に拘束された高分子系の粗視化 MD 計算」と「水中の高分子の全原子 MD 計算」のテーマに焦点を充てて検討を進める予定である。

## 7. 研究業績

### (1) 学術論文 (査読あり)

- [1] K. Hagita, T. Murashima, T. Ohkuma, H. Jinnia, 'Ring-Filling Effect on Stress-Strain Curves of Randomly End-Linked Tetra-Arm Prepolymers', *Macromolecules* (55), pp. 6547-6571, 2022
- [2] K. Hagita, T. Murashima, T. Kawakatsu, 'Lamellar Domain Spacing of Symmetric Linear, Ring, and Four-Arm-Star Block Copolymer Blends', *Macromolecules* (55) pp. 8021-8031, 2022.
- [3] T. Murashima, K. Hagita, T. Kawakatsu, 'Topological transition in multicyclic chains with structural symmetry inducing stress-overshoot phenomena in multicyclic/linear blends under biaxial elongational flow', *Macromolecules* (55) pp. 9358-9372, 2022.
- [4] K. Hagita, T. Murashima, N. Sakata, K. Shimokawa, T. Deguchi, E. Uehara, S. Fujiwara, 'Molecular

Dynamics of Topological Barriers on the Crystallization Behavior of Ring Polyethylene Melts with Trefoil Knots', *Macromolecules* (56) pp. 15-27, 2023.

[5] K. Hagita, T. Murashima, 'Practical compatibility between self-consistent field theory and dissipative particle dynamics', *Polymer* (269) pp. 125733, 2023.

[6] K. Hagita, T. Tominaga, R. Yamamoto, T. Sone, 'Structural changes of aggregated filler particles in elongated rubbers through two-dimensional pattern reverse Monte Carlo modeling', *Macromolecules*, 2023, in press.

[7] K. Hagita, T. Miyata, H. Jinnai, 'Molecular Dynamics Simulations on Epoxy/Silica Interfaces Using Stable Atomic Models of Silica Surfaces', *Langmuir*, 2023, in press.

(2) 国際会議プロシーディングス (査読あり)  
なし

(3) 国際会議発表 (査読なし)  
なし

(4) 国内会議発表 (査読なし)

[10] 萩田克美, 'GPU スパコンを活用した高分子系の大規模/大容量 MD 計算の事例紹介', 第 3 回スーパーコンピュータ「不老」ユーズ会 (2022.9)

[11] 村島隆浩, 萩田克美, 川勝年洋, '環状鎖(単環、多環)と線状鎖の混合系の二軸伸長流動下におけるストレスオーバーシュートの解析', 第 71 回高分子討論会, (2022/9/5), 北海道大学

[12] 萩田克美, 村島隆浩, '環状鎖と線状鎖の混合系の粗視化分子動力学シミュレーション', 第 71 回高分子討論会, 2022/9/7, 北海道大学

[13] 長原颯大, 萩田克美, 村島隆浩, 作道直幸, 酒井崇匡, 'テトラ PEG ハイドロゲルの弾性の全原子分子動力学計算', 高分子ゲル研究討論会, 2023 年 1 月 19 日-20 日

(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