

jh160024

PM-2 次元散乱パターン RMC 法による SPring-8 実験からの 3 次元構造モデル構築の HPC 利用スキーム構築

富永哲雄 (JSR 株式会社)

概要

本研究では、PM-2DpRMC 法による解析とポスト処理について、JHPCN スパコン上で効率よく実施するための試験開発を行った。SPring-8 で観察した実ゴム材料の小角 X 線散乱データ「2 次元散乱パターン」をもとに、PM-2DpRMC 法でゴム中のシリカ粒子の構造配置データを推定する解析プロセスの作業効率化を目指した。PM-2DpRMC 法で得た構造データおよび関連する実験データを解析する要素技術として、大規模な 3d-FFT の実行性能評価を行うとともに、深層学習による画像認識、数学的な特徴分析・分類法、効果的な可視化法について基礎的な検討を実施した。

1. 共同研究に関する情報

(1) 共同研究を実施した拠点名

北海道大学 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) 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
富永 哲雄 (JSR)	総括、SPring-8 実験の実施、PM-2DpRMC 法による実用解析
萩野 正雄 (名古屋大)	大規模計算システムの構築と利用に関する検討・アドバイス
萩田 克美 (防衛大)	PM-2DpRMC 法の開発と、応用に向けた準備
大宮 学 (北海道大)	大規模計算システムの構築と利用に関する検討・アドバイス
清川 清 (大阪大)	画像処理工学とその関連に関する検討・アドバイス
曾根 卓男 (JSR)	試料作成、SPring-8 実験の実施
佐野 則道 (JASRI)	PM-2DpRMC 解析に係る可視化ベース統合環境の検討アドバイス

参加研究者	役割分担
福嶋 喜章 (J-PARC/CROSS)	PM-2DpRMC 解析に係る可視化ベース統合環境の検討アドバイス
山田 武 (J-PARC/CROSS)	PM-2DpRMC 解析に係る可視化ベース統合環境の検討アドバイス
常行 真司 (東京大)	マテリアルインフォマティクスに関する科学的アドバイス

2. 研究の目的と意義

本研究の目的は、SPring-8 や J-PARC 等の小角散乱実験で観察される 2 次元散乱パターンから、3 次元構造モデル構築を行う逆モンテカルロ法解析について、JHPCN のスパコンを利用して系統的に実施するための統合的な解析環境を構築するものである。特に、スパコンでの大規模解析実施から、遠隔可視化装置を利用した比較分析までの利用を統合的に支援する利用スキームを構築することを目的としている。さらに、構築したスキームを、先行利用するとともに、一般に公開することで SPring-8 や J-PARC での同種の研究への成果還元をすることも目的である。

本研究では、シリカナノ粒子充填 SBR の延伸過程の 2 次元散乱パターンと応力歪みカーブを同時計測する実験の解析ツールの構築を目指している。2016 年度までに同時計測のための専用装置を開発済みで、2016 年度中に SPring-8 で初回実験を実施した (10 月 22 日～24 日)。この実験により、

延伸過程の 2 次元散乱パターンを、従来よりも細かく計測することが可能となり、それらの 2 次元散乱パターン群から、種々の条件で製造したゴム中のシリカナノ粒子の挙動をモデリングし比較検討することが期待されている。

SPring-8 で得られる 2 次元散乱パターンの RMC 解析について、副代表者の防衛大 萩田先生が 2007 年の最初の論文以降、コードが公開されてこなかった。計算機能力の向上を受け、副代表者の防衛大 萩田先生は、H27 年度に、公開を想定した新アルゴリズムで高速に計算する実装コード(Particle Mesh 2 次元散乱パターン RMC; PM-2DpRMC)を作成した。共同研究において、予備実験で得た 2 次元散乱パターンに対する予備的な解析を実施している。この予備検討の結果から、以下の点が問題点として認識している。

- ・ PM-2DpRMC コードは、1 ノード内の SMP 並列のみ対応している。高 SMP 並列対応が十分ではない。より大規模な系を扱うために、SGI Altix UV2000 や vSMP などの超高 SMP 環境の利用が望ましい。今後の大規模系での効果的な計算のためには、MPI 対応や、XeonPhi・GPGPU 対応が望まれる。
- ・ 逆問題推定としては、種々のパラメータ条件に対する感度分析を行う必要があり、それを円滑にする支援環境の整備が望ましい。
- ・ さらに、得られた結果のビジュアルベースアナリシスなども、必要である。

これらの問題点を克服するために、スーパーコンピューティングに関する幅広い専門領域の研究者の協力を得たい。本課題の代表者(JSR 富永)と副代表者(防衛大 萩田先生)は、理論物理学出身の計算物理ユーザーであり、計算機科学分野の最新知識、経験、ノウハウが十分ではない。副代表者の名大 萩野先生をはじめとする計算機科学分野の専門家の助言・協力を得て、協調的相補的な研究実施していくことで、当該分野の研究を大きく発展させられると考えている。

SPring-8 で得られる 2 次元散乱パターンの RMC 解析について、公開予定のコードでの解析が

円滑に実施できる環境を構築することは、当社の実験データの解析に役立つのみではなく、構築した統合的な解析環境を公開することで、SPring-8 や J-PARC 等を利用した我が国の産業界に広く貢献することが可能である。種々の条件で製造したゴムの中でのシリカナノ粒子の挙動を把握することは、ゴム材料の改良の判断材料となり、当社の材料開発における意義は大きい。学術的にも、2 次元散乱パターンに対する RMC 解析は、事例数を増やして検証されるべきである。解析用のプログラムコードが、容易に利用できる環境を整備することは、学術的にも産業的にも意義が大きい。特に、解析後の可視化解析の環境が整うことは、実験研究者にとって、有意義なものである。

3. 当拠点公募型共同研究として実施した意義

これまでの予備検討で認識した問題点を解決するためには、本制度を通じて、情報基盤センターに所属する幅広い専門領域の研究者の協力を得ることが的確であると考えている。超高 SMP 環境での効率的な OpenMP コードの作成、vSMP の効率的な利用、MPI 対応、XeonPhi 対応、GPGPU 対応については、高い専門性を持つ研究者の協力が必要である。また、高速化したコードや解析環境等は一般に公開する予定であることから、当拠点公募型共同研究として実施することが最適であると考えている。

ビジュアルベースアナリシスの一端となる Deep Learning (深層学習; 機械学習) の HPC 活用は、未知の検討対象において、パラメータ探索を行う際に欠かせず、新しい形の大規模計算利用でもあり、センターと連携して利用環境の整備が必要なため、本制度での共同研究とした意義は大きい。

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。

5. 今年度の研究成果の詳細

(1) PM-2DpRMC 法の基礎開発に関する検討

PM-2DpRMC 法では、試行的な粒子配置から、密度場に変換し 3d-FFT を施し 2 次元散乱パターンを計算し、試行的な粒子の動きで、実験で得た 2 次元散乱パターンに一致する配置を推定する方法である。また、2 次元散乱パターンの変化を線形内挿で細かく算定し、その変化に合わせた粒子の動きを同様に推定する方法である。本研究では、初期配置は、未延伸状態の 1 次元スペクトルで RMC 推定したナノ粒子配置を用いた。

開発済みの PM-2DpRMC 法の新プログラムコードについて、フランス ESPCI の研究グループが出版済みの論文 [S. Rose, et. al., SoftMatter 11 (2015) 5905] の図のデータ (図 1) を用いて動作確認を実施した。このデータは、ハイドロゲル中のシリカナノ粒子の構造を放射光実験施設で観察したものである。対象の系は、シリカとポリマーの重量比が 5:1 で、シリカナノ粒子の体積分率が 0.212 となるものである。シリカナノ粒子の直径を 28nm と仮定し、2048 粒子の系について、PM-2DpRMC 法の解析を実施した。

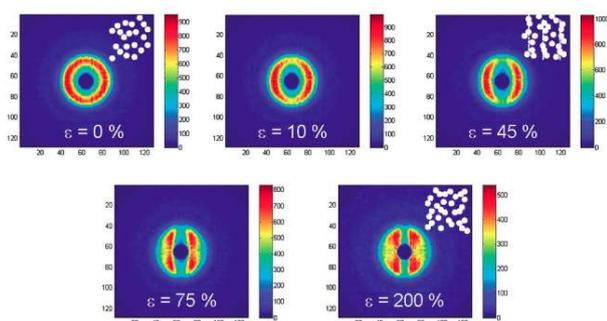


図 1 フランス ESPCI の研究グループが出版済みの論文 [S. Rose, et. al., SoftMatter 11 (2015) 5905] のデータ。ハイドロゲル中のシリカナノ粒子の構造を放射光実験施設で観察したもの。シリカの体積分率は 21.2%。

本研究では、シリカナノ粒子は、単一の粒径 28nm と仮定して、構造因子の 2 次元散乱パターンを計

算した。PM-2DpRMC 法の解析過程では、構造因子の 2 次元散乱パターンに一致するナノ粒子の配置を求めた。その結果は、図 2 の通りである。

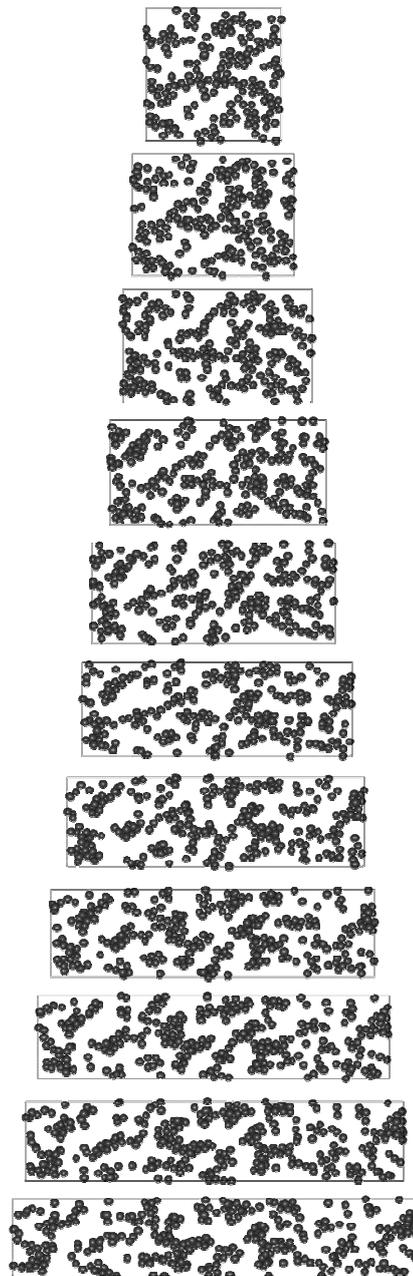


図 2 延伸中のフィラー配置の PM-2DpRMC 法によるモデリングの結果。上から、0%~200%まで 20%刻み。

これらにより、解析および可視化のフレームワークの確認および技術習得については、概ね完了した。

(2) PM-2DpRMC 法の実用と作業の効率化に関する検討

SPring-8 BL19B2 の USAXS 測定装置に応力歪み測定装置を設置し、2 次元散乱パターンと応力歪み曲線の同時測定を実施した。試料は、スチレンブタジエンゴム (SBR) にシリカおよび硫黄などのゴム配合薬品を配合し、バンバリーミキサーで混練後、プレス成型加硫で得られたゴムシートを用いた。USAXS の測定条件は、X 線エネルギー 18 keV、カメラ長 31.358 m、露光時間 2 sec とし、2 次元検出器は PILATUS-2M を用いた。応力歪み測定装置を用い、伸長速度 2 mm/s で応力歪みヒステリシスループ測定を行った。応力歪み測定装置で引き伸ばされたゴム試料について、異方的な 2 次元散乱パターンを得た。この 2 次元散乱データに対しバックグラウンドのシグナルを取り除く処理を行い、粒径 18.8nm を仮定し計算した構造因子の 2 次元パターンを PM-2DpRMC 法の入力データとして用いた。

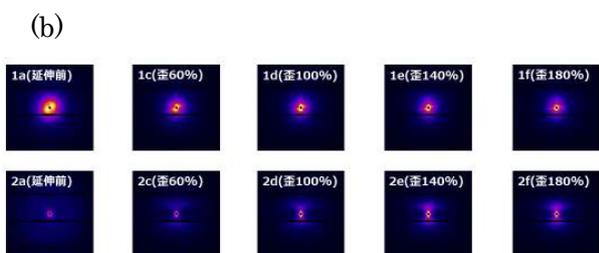
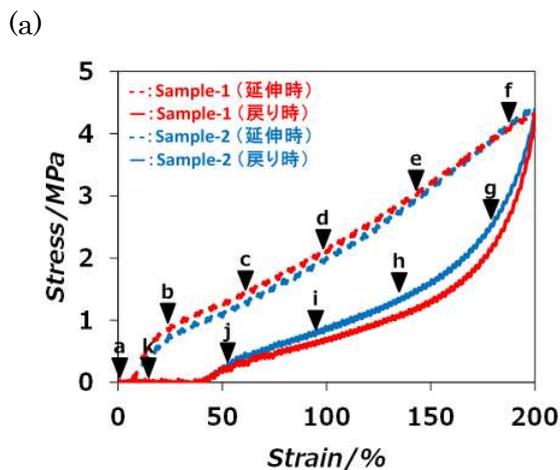


図 3 Spring-8 で実施した同時測定で得られた (a) 応力歪み曲線、(b) 2 次元散乱パターン

図 3 (a) に 2 種類の試料の応力歪み曲線、(b) にそれぞれの延伸時における歪み 5 水準の 2 次元散

乱パターンを示す。Sample 1 は、ポリマー末端に官能基を持たない未変性 SBR 配合物、Sample 2 は、ポリマー末端にフィラーと相互作用する官能基を導入した末端変性 SBR 配合物である。応力歪み曲線は試料間で異なることが分かる。2 次元散乱パターンについて、延伸前の状態で違いがあり、延伸によるパターン変化も大きく異なることが分かる。試料間でフィラー構造が異なり、変形モードにも違いがあると考えられる。

本研究では、この実験データに対して、周期境界条件下で、粒径が 18.8nm の粒子の 524288 個の 3 次元配置を推定した。末端変性ポリマーや未変性ポリマーなどの複数の系について解析を行い、特性の評価を行った。PM-2DpRMC 法では、散乱パターン計算用のメッシュサイズ、微小延伸の大きさ、微小延伸後の RMC 試行数などのパラメータの選定が必要である。

これらの検討を効率よく行うために、処理のスク립ト化を行った。そのために、プログラムコードと IO の見直しを実施し、連続計算処理の効率を高める改善をした。特に、演算の高速化については、北大 SR16000 では、高い SMP 性能を出すことができた。5 ~ 8 倍の性能を得ることができた。Intel 系では SMP 並列化の限界が (8 倍程度と) 小さく、やはり、MPI 分散並列で対応するしかないとの結論に至った。加えて、SX-ACE での高速計算の可能性を追求したが、SR16000 を超える性能を得ることは、容易ではないとの判断に至った。

図 4 と図 5 に、検討結果の一例を示す。今回は、未延伸での周期境界条件下の箱の大きさは約 2253nm であり、未延伸でのメッシュ数は 256^3 とした。(1) に示した予備検討結果などに基づき、微小延伸の大きさは、0.1% とした。したがって、本研究では、微小延伸後の RMC 試行数 dT に対する χ^2 乗値の挙動を調べた。

図 5 から、 dT の値が、5000 や 10000 のように小さい場合、 χ^2 乗値が累積的に悪化し、50000 のように大きい場合は、低い値を取ることを確認した。現状、ノイズが多いことから、メッシュ数が $(512)^3$ や $(1024)^3$ での計算が今後の課題である。

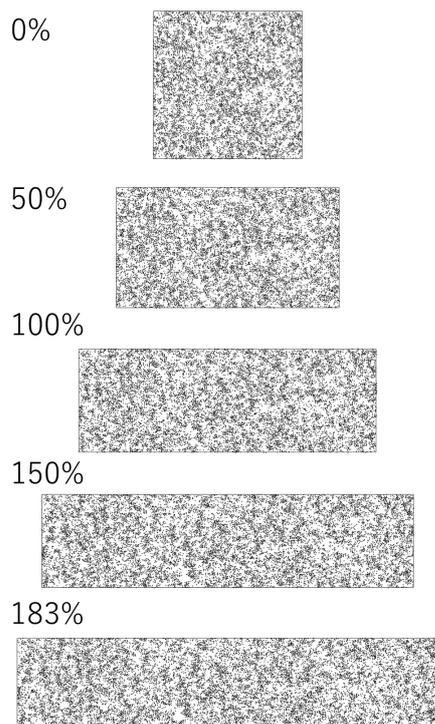


図 4 延伸させた末端変性 SBR 中のナノ粒子挙動の PM-2DpRMC 法によるモデリングの結果。

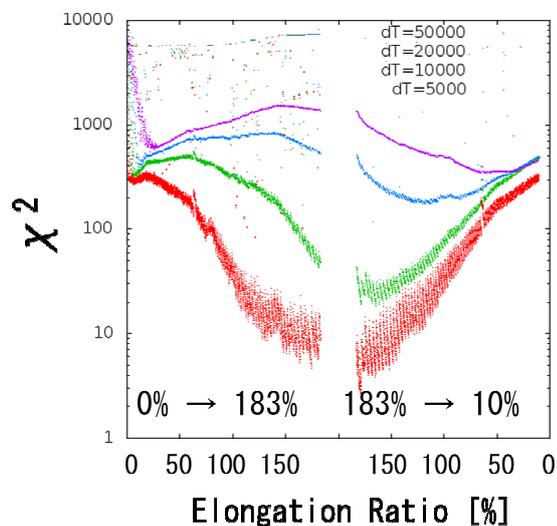


図 5 末端変性 SBR 中のナノ粒子挙動の PM-2DpRMC 解析中の χ^2 乗値の挙動の dT 依存性

(3) 大規模 3d-FFT の効率的実施に関する検討

本格的な実験データでの高解像度での PM-2DpRMC 解析や関連の処理では、大規模な 3d-FFT の効率的な実施が必要となる。本研究課題

では、 2560^3 と 5120^3 のような大規模な 3d-FFT の実行性能評価を実施した。計算機としては、北大 Hitachi SR16000、名大 Fujitsu FX100、SGI Altix UV 2000、阪大 NEC SX-ACE を検討対象とした。

北大 SR16000 において、大規模 3d-FFT ミドルウェアとして p3dfft-2.7.5 を用いて、大規模 3d-FFT の実行について検討した。ベンチマーク計測には、3次元 FFT のロードモジュール test_rand_f.x (ソース driver_rand.F90) を使用した。本ロードモジュールでは、乱数を使用して算出した初期データについて、正変換 (REAL \rightarrow COMPLEX) と逆変換 (COMPLEX \rightarrow REAL) を実行している。

2560^3 の場合、ミドルウェアが必要とするメモリサイズは、134.22GB であった。10 ノード以下ではメモリ容量が不足するため、12、16、20 ノードを用いて実行時間の分析を行った。同じノード数の利用でも、ノード内 MPI 数、OpenMP 並列数、3d-FFT の 2 軸分割数に応じて、実行時間が大きく変わる。例えば、同じ 16 ノード実行でも実行時間が 8.1s \sim 24.7s と大きく変化した。FFT のベースモジュールとして、fftw-3.1.2 を用いた場合、ノード内のプロセスを 64MPIx10openMP や 32MPIx10openMP とした場合に実行時間が短くなった。FFT のベースモジュールとして、ESSL を用いた場合、全体的に通信時間が小さくなり高速化される傾向があった。また、ESSL 利用の場合、1 ノード内のプロセスが 64MPIx10openMP ではなく、16MPIx40openMP の実行時間が最短であった。

5120^3 の場合、ミドルウェアが必要とするメモリサイズは、1074GB であった。96 ノード以下ではメモリが不足して実行できないため、96、112、120、128 ノードを用いて実行時間を分析した。112 ノードと 120 ノードの場合に、1 ノード内の MPI 数と OpenMP 数を変更して実行時間を測定した所、最短の 13.4[s] から最長の 48.3[s] まで大きくばらついていて、 2560^3 の場合に比べ、通信時間の比率が大きく、ノード数を 112 ノードから増やしても、実行時間低下にはつながらなかった。計算時間が最短となる計算条件は、112 ノードで 64MPIx10openMP とした場合であった。

阪大 NEC SX-ACE において、3d-FFT の処理性能を評価するとともに、FFTW (Intel MKL) との互換利用/計算結果比較のために、ASL ライブラリと MathKeisan ライブラリの利用環境整備を、阪大サイバーと NEC と協力して共同で実施した。2560³ や 5120³ 等の大規模な計算では、MPI 並列が必要であることから、ASL ライブラリの分散並列計算ルーチン PUF3FB について、FFT/TRANS(転置)/IFFT の 3 ステップを時間計測した。

表 1 SX-ACE での 3d-FFT 関連の計算時間 (秒)

サイズ	2560 ³			5120 ³	
	Node 数	64	128	256	128
FFT	6.83	3.31	0.80	30.02	18.95
TRANS	5.60	3.16	1.03	28.34	15.05
IFFT	6.43	3.93	2.70	34.02	19.50

名大では、Fujitsu FX100 と SGI UV2000 での大規模 3d-FFT については、p3dffft-2.7.5 を用いた。これは、2DDECOMP や OpenFFT などのライブラリの選択肢もあるが、北大での計測との比較のためである。

Fujitsu FX100 では、512 ノード利用の範囲で、2560³ のみ実行可能であった。

256MPI x 8SMP = 3.374 (秒)

512MPI x 4SMP = 3.377 (秒)

1024MPI x 2SMP = 3.805 (秒)

SGI Altix UV 2000 では、2560³ と 5120³ の計算を実施した。5120³ の計算では、約 7TB のメモリを使用していた。512 MPI プロセスでは、2560³ の計算は、17.026 (秒)、5120³ の計算は、439.64 (秒) であった。

(4) 可視化分析術としての画像の判別手法に関する検討

高分子材料中のシリカナノ粒子の構造は、機能(物性)と密接に関係していると考えられている。このことから、TEM (透過型電子顕微鏡) 像や、散乱実験データから逆モンテカルロ法で構造推定し

たスライス像から、機能(物性)との相関を機械学習で判定できるのではないかという期待がある。

本研究課題では、シミュレーション結果の解析手法の 1 つとして、Tensorflow を用いた機械学習でのフィルター構造の判別可能性について検討した。図 6 に示すように、末端変性 SBR と未変性 SBR の RMC の結果とランダムな点列の 3 種類の判別について検討した。予備検討として、人物写真と名前の対応関係でよく用いられる Deep Learning 手法を用いた。学習用画像 80 枚、テスト用画像 80 枚、事後評価用画像 10 枚のセットで、入力画像の解像度や「畳み込み層+プーリング層」の段数に対する未知画像の判別性能の評価を行った。画像の領域については、(250nm)²、(500nm)²、(1000nm)² の 3 つのスライス像(厚さ 45nm)を比較した。解像度と段数は、次の組み合わせを用いた。

- 56 x 56 pixel の入力に対し、畳み込み層 3 層 + 全結合層 2 層
- 112 x 112 pixel の入力に対し、畳み込み層 4 層 + 全結合層 3 層

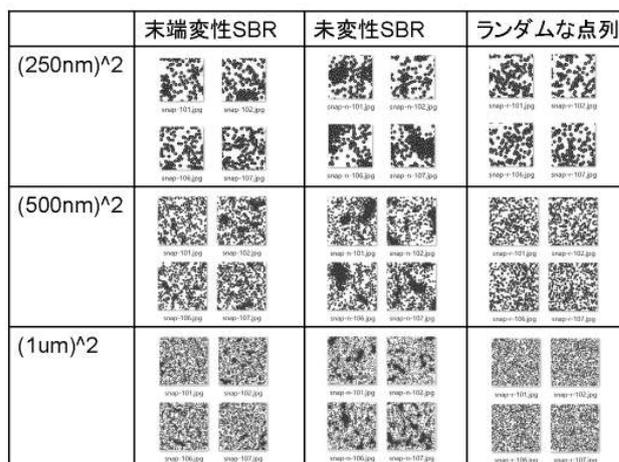


図 6 Deep Learning の検討に用いたデータセットの例

(500nm)²、(1000nm)² の場合は、56 x 56 pixel では学習ができなかった(収束しなかった)。これは、解像度が足りないためと考えられる。学習(収束)した結果を用いて、未知の画像に対する正当数を評価した。その結果を、表 2 に示す。

表 2 各 10 枚の未知画像に対する正答数

	末端変性 SBR	未変性 SBR
$(250\text{nm})^2$, 56x56	5/10 枚	3/10 枚
$(500\text{nm})^2$, 112x112	7/10 枚	5/10 枚
$(1000\text{nm})^2$, 112x112	7/10 枚	8/10 枚

この予備計算では、明らかにデータセット数が少ない。実践的な検討のために大量のデータ生成をするための画像作成自動化や、大規模な分散 Deep Learning の実施に関する準備検討を行った。画像作成の自動化に関しては、名大情報基盤センターに、スクリプト動作環境や WEB 操作環境を整備していただいた。

名大の遠隔可視化環境等を利用し、「末端変性 SBR」、「未変性 SBR」、「ランダムな点列」を train 用と test 用に各 8000 枚のスナップショット像 (112×112 pixel) を作成し、学習させた。Test の正答率を図 7 に示す。この結果からは、 $(1000\text{nm})^2$ は十分に学習できていることがわかる。



図 7 Deep Learning 中のパラメータの変化

学習用画像とは独立な未知画像を各 1000 枚作成し、判別した。それぞれの正答数を表 3 に示す。

表 3 各 1000 枚の未知画像に対する正答数

	末端変性	未変性	ランダム
$(250\text{nm})^2$	167 枚	532 枚	962 枚
$(500\text{nm})^2$	398 枚	679 枚	999 枚
$(1000\text{nm})^2$	785 枚	915 枚	1000 枚

この結果からは、 $(250\text{nm})^2$ のような小さい領域よりも、 $(1000\text{nm})^2$ のような大きな領域のスナップショットであれば、判別がつく可能性が高いと、(人間の主観なく、機械学習の判断として) 客観的に言える。 $(500\text{nm})^2$ については、より長時間の

学習過程で、Test の正答率を高めた後での性能評価を行う必要がある。

なお、阪大 VCC サーバを用いて、Tensorflow の Multi GPU 利用も利用検討した。テストしたケースでは、1 ノードあたり 3GPU の利用はできたが、4GPU の同時利用ができなかった問題が残った。分散学習についても検討したが、それによる顕著な成果を得ることはできなかった。

6. 今年度の進捗状況と今後の展望

昨年度に開発された PM-2DpRMC 法のコードについて、文献のデータおよび、新規計測データを用いて、JHPCN スパコンで一連の解析作業を実施し、検討作業の効率化を検討した。併せて、PM-2DpRMC 法で得られるナノ粒子の構造データのポスト処理技術として、大規模可視化の効率的環境の整備、大規模系 (2560^3 や 5120^3) の 3d-FFT の利用環境整備、Deep Learning 技術の利用環境整備などを行い、今後の活用に道筋をつけた。

一方で、PM-2DpRMC 解析の計算処理を早くするために、XeonPhi や GPGPU を利用した計算の高速化については、十分に良い結果を得ることができていない。将来、JHPCN 課題などを通じて一般公開する際に整備すべき、今後の課題である。

当面は、PM-2DpRMC 解析やその特性検討を進め、論文発表することが今後の展望である。その後、あらためて JHPCN 課題などで一般公開化などの検討を進めたい。

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, “フィルター充填末端変性 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)

・ K.Hagita, T. Tominaga, T.Sone, “Large-scale reverse Monte Carlo analysis for ultra-small-angle X-ray scattering data of silica nanoparticles in end-modified rubbers” , 投稿予定

(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)

・ K. Hagita, “Coarse grained MD study of Weissenberg number dependence of 2D scattering patterns of polymer melts under shear flow” , IRC2016, Kyoto (2016.8).

・ 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 (2016.8).

・ K. Hagita, “Coarse grained MD simulations of polymer nanocomposites ” , *Soft Matter - Theoretical and Industrial Challenges*, Cambridge, UK (2016.9).

・ 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)

・ 富永哲雄, “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” , H27 年度 HPCI 成果報告会, 品川コクヨホール (2016.10)

・ 曾根卓男, “マルチスケール粗視化 RMC 法によるナノ粒子凝集構造の解析” , H27 年度 HPCI 成果報告会, 品川コクヨホール (2016.10)

・ 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, “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, “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 (2016.9)

・ 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 (2016.11)

・ 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 (2017.3)

(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 64 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」