

12-MD03

高分子系粗視化シミュレーション基盤の計算機科学的な高度化検討

萩田 克美 (防衛大学校)

概要 本研究では、高分子材料の次世代デジタルエンジニアリングの実現に向けて、高分子をバネとビーズで表現した粗視化分子動力学法、およびその周辺の技法について、計算機科学的な高度化を進めた。大規模計算の実行環境／技術に加えて、計算結果の検討手法の検討も行った。複雑な 3 次元構造の分類・特徴付けに、計算幾何学的手法を用いる検討も行った。当初目的であった大規模な粗視化分子動力学法による高分子材料中のナノ粒子の 2 次元散乱パターンへの延伸開放過程での変化を観察する仮想実験が可能であることを確かめた。加えて、2 次元散乱パターンなどの逆空間情報からナノ粒子の構造や高分子相分離構造を推定する逆モンテカルロ法についての検討も深めた。さらに、可視化技法やその関連技術の検討も引き続き実施した。当初計画に加えて、相分離したブロックコポリマーの機械的性質に関する粗視化シミュレーションも実施した。

1. 研究の目的と意義

本研究では、将来の超大規模シミュレーションによる高分子複合材料系（ナノコンポジット）の材料設計開発（次世代デジタルエンジニアリング）の実現を目標としている。そのために、超並列計算実施、複合材料系のシミュレーション初期配置作成、結果（大規模時系列データ）の高度な解析・可視化などの研究基盤の準備・整備を目的とした。また、広い分野の研究者のアドバイスを頂き、統合的に知見を取り込んで、将来の活用のシーズとなる検討を実施することを方針として取り組んだ。なお、H25 年度の JHPCN 研究課題は、フィルター充填高分子材料の粗視化 MD 解析研究に焦点をあて、産総研 森田先生が代表で、産学両側のメンバーが参画した形として、オープン・イノベーションのために、より発展させ継続することとした。また、大規模可視化については、名古屋大学 HPC プロジェクトとして拡大継続させ、他のテーマについても、JHPCN 以外の研究プログラムなどで継続し、発展させている。

H23 年度までの JHPCN 研究では、超大規模粗視化 MD コードの最適化を進めるとともに、フィルター（ナノ粒子）充填高分子系を中心に「超並列計算用にコーディングした粗視化分子動力学 (MD) 法のプログラム・コードの最適化の検討」「大規模な初期配置の効率的な作成方法の検討」および「大規模な高分子系の可視化手法の検討とポスト処理（結果

解析）の高度化」について、重点的に検討を進めた。H24 年度は、（計算機科学的知見を取り込み活用する）一連の取り組みの最終年度として、課題名も若干変更し、計算機科学と計算科学に加えて、3 次元物体の見方・特徴付けと関連する計算幾何学の活用を目指し、「計算機科学－計算科学－計算幾何学 (数学)」との横断的連携も含めた検討とした。

高分子材料・ソフトマテリアル分野では、最近の高分子合成技術の進展に伴い、分子鎖のつながり・形状を顕微鏡に考慮した物質の物性研究が盛んに行われている。さらに、無機有機ハイブリッド材料として、界面活性剤をグラフトした均質なナノ粒子の創成とその配合による高機能（高付加価値な）高分子フィルム材料に応用されつつある。高分子ナノコンポジット材料に関して、補強効果や破壊などの機械的性質や熱伝導特性の解明にシミュレーション研究が期待されている。個々の分子鎖のつながりや形状を考慮したシミュレーションには、Kremer-Grest 模型[J. Chem. Phys. 92 (1990) 5057] と呼ばれるランダム力を含む粗視化 MD 法が標準的な手法としてよく用いられている。この方法はバネビーズ模型と呼ばれるポテンシャルの詳細を重視しないものであり、詳細なポテンシャルを考慮した全原子分子動力学法などに比べて、大きな時間刻みと空間スケールを扱える利点がある。我々は、一辺が約 $1\mu\text{m}$ の大きさの領域を扱う大規模シミュレーションをターゲットとして、

多くのスパコンを利用し、分散データ構造と通信について強く配慮しつつ、分散 I/O・分散処理の超並列コードを作成した。一方で、現実の材料を予測するモデル化は、支配因子の多さから、とても難しい。地道にこの系の理解を深めるためにも、多くの研究者による基礎検討が必要である。そのために、並列版 OCTA/cognac の日立 SR16000 での利用普及（北大以外への導入）や IntelCPU 版の公開などを促すとともに、さまざまなスパコンでの並列計算実施のために米国製の汎用アプリ LAMMPS の連携利活用について検討した。また、分析手法の一つとして可視化技法も検討した。OCTA/cognac データの AVS/Express 可視化用関連ツールなどを公開した。本研究課題では、複雑な三次元構造を持つ高分子の構造の特徴的な挙動の発見／認識を目的のために、没入型三次元立体可視化装置 CAVE を用い、それらの関連検討を行った。

2. 当拠点公募型共同研究として実施した意義

(1) 共同研究を実施した大学名と研究体制

北海道大学、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

大規模データ処理系応用分野

大規模情報システム関連研究分野

(3) 当公募型共同研究ならではの事項など

本研究では、プログラム・コードのチューニング、最適化方針の検討、関連の新規プログラムの開発支援（最新の並列化済みライブラリの利用に関する相談を含む）、大規模系の効果的な可視化技法など、高分子物理学・物性物理学の専門性とは異なる、計算機科学の諸分野の専門性が必要な事項を検討している。これに対し、JHPCN を通じ、共同研究を実施した機関に属する研究者（教員）・技術者（技術職員）がもつ専門的なノウハウを提供いただき、円滑に進めることができた。

また、これまでの JHPCN 研究の複数項目について、各大学（センター）の専門性を踏まえつつ、JHPCN 以外でも発展的に継続するに至っている。

3. 研究成果の詳細と当初計画の達成状況

(1) 研究成果の詳細について

① 高分子系の粗視化分子動力学法のコードの最適化作業・ファイル出力の隠蔽化検討

本研究課題の主たる目的の一つは、ショーケースとして、延伸させたナノ粒子充填高分子材料について、粗視化 MD による仮想実験を行い、放射光や中性子などで観察した際によく見られる 2 次元散乱パターンの特徴を、比較検討することである。独自の超並列コード (MPI-OpenMP ハイブリッド) の作成を行い、Fujitsu FX10 等を用いて、2048 個のナノ粒子を含む約 5000 万粒子の大規模計算を実施した。その結果として、2 次元散乱パターンの特徴的な挙動が再現できること、ナノ粒子の構造に応じて応力増大が異なることが明らかになったことなど、当初目的を達成した。ほぼランダムに配置されたナノ粒子が、近隣のナノ粒子と衝突することで、相関を生み、複数の実験で報告されている 4 点スポットが生じていることが明らかになった。また、ナノ粒子系の散乱のモデル関数としてよく用いられる Debye-Bueche 関数をもとに、ナノ粒子の凝集の具合が異なる系を RMC 法で作成し、応力歪み曲線を比較したところ、凝集度合いに応じて、応力の値が大きくなることが分かった。

現実の計算機環境では、演算ノードとファイル I/O 性能は、全体のバランスで最適化されているため、特定のプログラムでは最適ではない場合がある。特定の解析や可視化のために短い時間間隔で記録する場合などは、ファイル I/O 性能が不足する。全てのノードが同時に書き込み要求すると、輻輳により性能低下する。I/O バッファサイズを超えれば、書き込み待ちも無視できない。特に、NFS 環境の計算機クラスターでは、顕著となる。MPI-I/O においては、ランダムアクセス対策の Collective I/O や、I/O と計算のオーバーラップのためのノンブロッキング I/O が実装されている。しかしながら、（ランダムアクセスでもない）大規模データの同時書き込みの輻輳対策は、環境依存であり、ユー

ザ一側で実施する余地がある。(IO のライブラリで将来サポートされることを期待しているが、) 本検討課題では、NFS 環境における Split File 方式による分散出力を、最大同時書き込み数を制御することで、全体性能を向上させる方法を検討した。具体的には、次の通り。MPI/OpenMP のハイブリッドを想定する。演算用と IO 用の 2 つの MPI プロセスを 1 組と考える。(IO 専用ノードに MPI プロセスを配置できる場合は、IO 専用ノードに配置することを想定した。) 演算用の MPI プロセスは、IO 用の MPI プロセスにデータを通信で渡す。IO 用の MPI-Communicator 内で、同時に書き込む MPI プロセスを制御する。東大の Fujitsu FX10 やその他の環境で試し、書き込み待ちの解消、輻輳の抑制で、実時間が短縮されることを確かめた。IO プロセスのためにインバランスなどの性能低下が発生し、演算への影響はある。更なる向上が必要である。この方向の技術検討は、システム全体のネットワーク IO 性能、OS の IO バッファのポリシー、IO ノード利用を含めたスパコンの運用と密接に関係があるため、必要に応じて、計算機システムを含めて検討することが望ましく、将来の課題とする。

② 高分子系の粗視化分子動力学法の汎用アプリの活用環境整備

コモディティ化や今後のコードの維持コスト、および新しい計算アーキテクチャへの対応を踏まえ、米国 (Sandia 研究所) 製の汎用アプリである LAMMPS の利用環境の整備についても検討した。大規模向けの超並列の自作コードや北大スパコンの SMP 並列化 OCTA/cognac から LAMMPS のデータ形式への効率的なデータ変換などについて検討した。また、LAMMPS のカスタマイズ利用や個別計算機環境での最適化作業の可能性について、検討した。

大規模計算での利用にあたり、チューニングポイントを分析した。粒子系の分子動力学法で一般的な、演算の高速化、通信の最適化、インバランス解消、加えて、FFT の最適化の可能性について検討した。LAMMPS においては、ユーザーが簡単に

ポテンシャルの追加などができる構造になっており、局所演算の最適化検討が可能である。通信については、変更は不可能であるが、バッファサイズの変更などが有効になる点があった。Fujitsu FX10 では、富士通 MPI の仕様から、いくつかの制約があり、パラメータの変更が実効的な意味を持った。インバランスの解消は、大幅な変更が必要となり、困難と考えられる。また、FFT の最適化については、並列数の抑制など、今後の最適化指針を得ることができた。

参考的な検討として、比較的少ない原子数の全原子模型 (LAMMPS の標準的なベンチマークである rhodopsin 32000 原子等) の高速化検討のため、Fujitsu FX10、Hitachi SR16000 などと比較評価した。Hitachi SR16000 では、12nodes/384Cores が限界で、100MDsteps の計算が 0.29 秒となった。検討は完全ではないが、FX10 よりも SR16000 の方が良い性能を示していた。また、この計算規模では PPPM の FFT メッシュ数は 32^3 と少なく、並列数の限界が 10 ノード程度であった。Pair ポテンシャルの計算や通信のスケラビリティを踏まえ、PPPM や FFT の並列数を抑制することで性能向上可能と考えられる。

表 1 SR16000 での LAMMPS の実計算時間の評価 (時間単位は、秒。1MPI を 20MP で実行。)

MPI	Node	LOOPtime	Pair	Comm	Kspace	FFTtime
32	1	1.608	0.937	0.061	0.257	0.055
64	2	0.883	0.468	0.051	0.170	0.039
128	4	0.528	0.235	0.046	0.134	0.041
192	6	0.407	0.157	0.040	0.125	0.043
256	8	0.340	0.119	0.027	0.124	0.047
384	12	0.295	0.081	0.037	0.122	0.056
512	16	0.628	0.061	0.021	0.225	0.075

大規模な粗視化 MD 計算について、LAMMPS の設定方法等の比較検討を行い、東大の FX10 でベンチマーク評価した。多数本の N=512 の高分子鎖が絡み合う 2 億 (226, 492, 416) 粒子の系について、LJ ポテンシャルのカットオフ長を 1.12246σ 、 2.5σ とした場合について、2000MDsteps のループ時間を評価した。(演算密度が小さく、MPI/OMP hybrid よりも、flatMPI の方が、性能が良かった。)

表 2 FX10 での LAMMPS の実計算時間の評価

	4096MPI	8192MPI	16384MPI
LOOPTime (rc=1.12246)	178.072s	91.4289s	47.5028s
1MDsteps あたり	89msec	46msec	24msec
比率	3.75	1.92	1.0
LOOPTime (rc=2.5)	664.015s	357.784	173.285
1MDsteps あたり	332msec	179msec	87msec
比率	3.83	2.06	1.0
rc=1.12246 と rc=2.5 の比	3.73	3.91	3.65

なお、H25 年度の JHPCN 課題（産総研 森田先生代表）の予備的検討では、東工大 Tsubame2.0 で 1024MPI+1024GPU の評価を行っており、rc=1.12246 で 264 秒、rc=2.5 で 277 秒であった。rc=2.5 の場合に GPU の性能が発揮され、rc=1.12246 では GPU のメリットは薄いことが、分かる。すなわち、「京」や Fujitsu FX10 では、rc=1.12246 のような、演算密度の低い計算に、非常に強いと言える。また、rc=2.5 の場合も、「京」の方が高性能と予想できる。TITAN は、18,688 の NVIDIA Tesla K20X を搭載しており、1024MPI+1024GPU の 20~40 倍の性能と目され、楽観的な単純計算で 7~14 秒となる。「京」は、663,552Cores で、1MPI プロセスあたり 341 粒子と概ねスケールする領域にあり、安全側の遅い見積もりをしても、5 秒程度と考えられる。「京」フルノード利用での性能実証が期待される。

H24 の検討では、3 億粒子系（周期境界条件の一辺が、500nm 程度）でのインパクト（効用）について、予備的評価を行った。粘弾性の評価などでは、小さなシステムサイズの場合、S/N 比の問題から、10%以上の大きな振幅の周期的歪みを加えることが多い。粘弾性の評価や防振ゴムの性能評価では、本来、1%以下の実用的な歪み範囲での計算機実験を行いたい。約 3 億粒子の系で、歪み幅 2%での振動変形の計算機実験を行い、誤差の程度を評価した。図 1 に、平均処理をしていない応力の瞬間値を示す。ランダム力によるノイズが、変形による応力変化の程度に比べ、小さく、2%よりも小さい歪み下でも、応答の遅れや $\tan \delta$ を評価できることが期待される。これらから、「京」で計算の実現性が実証されれば、今後、世界に登場する 100 ペタ、1 エクサの計算機でこの研究が花開くことが見込まれる入り口が見えてきたと言える。

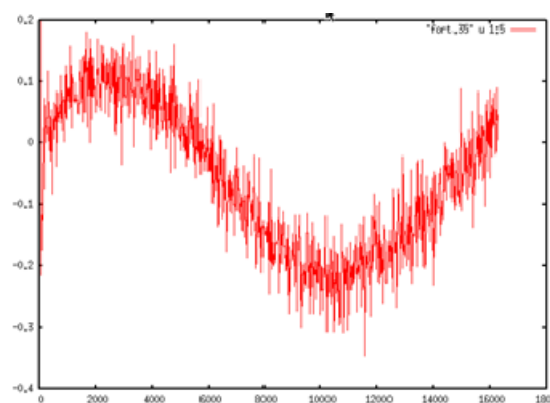


図 1 歪み 2%で変形させた時の応力応答挙動

③ 逆問題解法による散乱実験データの大規模計算解析

本研究課題では、ナノ粒子充填高分子材料や高分子相分離構造など、多彩な構造をもつ高分子材料の粗視化したシミュレーションを研究対象としている。高分子材料に関連した 10nm~サブ μm の実物の構造に関する情報を得る観察手段として、SPring-8 などの放射光実験や中性子実験が行われている。散乱実験では、CCD などで、フーリエ変換した 3 次元逆空間（波数空間）断面の 2 次元散乱パターンを観測している。周期境界条件を課したシミュレーションでは、局所的な構造は揺らいでいるものの、ある大きさ以上では均質なものと考えている。シミュレーションのために、現実の物を現像するイメージングではなく、実験で観測したデータの特徴を反映したモデル構築を考える。

モデル構築において、散乱データなどの入力の情報量に十分にして、（解析的／非解析的を問わず）逆変換として構造を決める事ができれば、明快である。情報量は不足するが、他の実験や知見を拘束条件にして解空間を狭めることで、構造を推定すること（もっともらしいモデルを構築するデータ同化）も、シミュレーションとの連携では有効な場合がある。

高分子相分離構造では、結晶のように、Bragg ピーク的なスポットが観測されるが、幅を持つなど、散乱パターン全体にわたって何らかの情報を含んでいると言える。これら全体の情報を活用し

て、モデル構築をすることを考えている。粒子描像で扱う逆モンテカルロ法や、密度場描像を扱う各種の手法について、検討した。

密度場データに対しては、Oversampling 法や、(逆モンテカルロ法にちなんだ制約を課した) Simulated Annealing 法を用いて、散乱パターンに一致する構造(密度場)を推定する問題に帰着される。その場合、散乱パターンは、密度場のフーリエ変換で計算されるため、上記の推定問題において、多頻度で、FFT が用いられる。サイズは、 1024^3 やそれ以上にも及び、演算量・メモリともに、厳しくなる。実際の実験データは、全ての波数領域をカバーせずに、小角領域(低波数)に限定されている。情報量の観点も踏まえ、波数空間の刻み Δq は、実空間の大きさ L に対して、 $\Delta q < 2\pi/L$ となる条件で、扱われる。Oversampling 法で収束解を得る場合、(ML-EM 法のように)FFT-IFFT を伴う逐次式を発展させる。このとき、実空間データの周りに 0 領域をパディングする。散乱パターンの計算では、低波数側だけを使っている。一方で、Oversampling 法の計算では、逆空間領域を全て活用することが通常である。一方で、逆空間の内、本質的に影響が小さい所をゼロで近似すると、演算量は \log オーダーで削減できる(Pruned FFT)。いま、 $C\Delta q = 2\pi/L$ となる条件で(C は、4~16 を想定)計算する場合を考えてみる。実空間領域が N^3 点、波数空間が全体で $(CN)^3$ 点とする。0 パディングした $(CN)^3$ 点の FFT は、 C^3 回の N^3 点の FFT と等価である。 N^3 点の FFT の前に、係数を掛ける操作が必要であり、 N^3 回の演算増加となるが、分割した N^3 点の FFT は、独立に実施可能な上、作業メモリや通信コストの削減という、計算実施上の利点があり、大いに活用できた。さらに、Oversampling 法の計算では、逆空間の情報を全て使わなくとも、いわば low pass filter をかけても、実用上は、同等の収束性能が得られる数値実験結果を得た。

一方、粒子法ベースの逆モンテカルロ(RMC)法については、これまで、数千程度を対象としていたが、大規模化が想定されるため、大規模な粒子系計算で用いられる手法を活用した高速化作業を実

施した。試行動きの排除体積条件の確認における Cell-index 法の適用などを行った。2次元散乱パターンに対する RMC 計算では、ヒストグラムからの散乱パターンの計算(フーリエ変換に相当)において、変換係数のメモリ格納(三角関数の計算回避)が高速化に有効である。作業メモリを多く要するため、クラスター計算機等での効率化のために、圧縮格納法について検討した。また、東大 FX10 の登場で 1000Cores 程度を利用した予備的計算が容易になり、実時間が短縮されたことから、収束解を効率よく得るためのノウハウ検討が可能となり、大幅に改良された。(今後、多くの散乱パターンの解析に活用できると期待している。)

また、本検討手法の発展として、太陽電池薄膜中のフラーレン誘導体の空間分布の温度変化観察など C_{60} を粗視化粒子と見なした RMC 法の応用や、CNT 等の線状/棒状の物体に関する 3次元構造推定方法や有機半導体の表面での構造変化に関する放射光実験/中性子実験/X線自由電子レーザー実験の多変数推定問題の開発など、HPC を活用した構造の逆推定の手法開発を今後も進める。

④ 高速フーリエ変換の利用方法に関する検討

我々の関連する計算では、3次元空間の FFT を多く利用することから、FFT の利用方法に関する比較検討を行った。まず、メモリ共有型の並列化 FFT について、Intel 系計算機、Hitachi SR16000 において、FFTW, MKL, 日立 MATRIX/MPP を比較検討した。問題サイズや計算環境により、一長一短があるので、問題に応じて、ベストを選択する必要がある。また、我々が主に利用するアプリ LAMMPS においても、PPPM や FFT については、改良が継続的に行われており、今後の期待される。

H24 年度の本研究課題では、スパース行列に対するフーリエ変換に対する工夫について検討した。③の逆問題解法においては、0 値の領域がブロック状に存在するので、Pruned FFT として計算が簡略できる。小さな FFT に分割され、独立に計算できることから、ワーキングメモリの抑制、通信の

抑制などにより、PC からスパコンで高速化され、大きな問題も扱うことを可能とすること確かめた。最近、(信号解析を目的とした) スパース行列に対する FFT の高速化について、MIT の k スパース FFT や Intel の 1 次元 FFT の高速化などが報告されおり、その応用や参考の可能性について検討したい。

⑤ 計算位相幾何学の方法を用いた空間の特徴付けと、HPC 活用時の工夫の検討

計算機の発達から、計算幾何学(computational homology)という分野が進展している。トポロジー特徴付けでは、CHomP という Betti 数を計算するソフトウェアが、高分子科学で有用である。Betti とは、Euler 数を交代和で構成する量であり、ドメインの数、トンネルの数、ホールの数などの詳細なトポロジー情報を持つ。3次元中では、Betti 数(b_0, b_1, b_2, b_3)は、Euler 数 $\chi = b_0 - b_1 + b_2 - b_3$ である。高分子相分離構造で見られるダブルジャイロイド(DG)構造のユニットセルの Betti 数(2, 10, 0, 0)であり、目視や Euler 数では不可能な、他の構造(極小曲面構造)と数値的区別が可能となる。

Betti 数解析は、3D-CT や 3D-TEM で取得した高分子相分離構造の幾何学的特徴付けに有用である。現在、具体的な実験データを、分析中である。(このような解析法は、同様に複雑な 3次元構造を持つ fMRI、CT などの医療分野でも注目されている。)

逆モンテカルロ(RMC)法の研究の観点から、解空間の絞り込み手段の一つとして、Betti 数を罰金関数として利用することができる。1次元散乱スペクトルからの 3次元構造の再現は、一般に情報量不足から、ill-posed 問題である。RMC 法では、他の制約情報を付加することで、情報量の補強をした Simulated Annealing 法に相当する。1周期の DG 構造に関して、1次元散乱スペクトルに対する RMC 法では、Betti 数の制約を与えることで、DG 構造が再現できることが分かった。更に詳細に調べると、0 番目のベッチ数 b_0 (ドメイン数の制約)の寄与が重要であることを明らかにした。

CHomP の計算は、比較的計算コストを要するた

め、その高速化が望まれる。あるセルのフィールドデータを増減させる操作において、局所的なトポロジーが不変であれば、大域的なトポロジーは変わらないことは自明である。ゆえに、RMC 法の大抵の試行において、CHomP での全体計算は不要なはずである。変更のあったセルの周辺 26 セルにおいて変更がない場合に、周辺 26 セルを含む 3^3 セルの unwrap の Betti 数が不変であれば、トポロジー不変と判定できる。(同様のトポロジー判定は、ボクセルデータの細線化処理における除去可能なセルの判定で必要となるものであり、その方向での応用も考えられる。)既存の文献の方法では、経験的に見出された煩雑なフローで判定している模様であり、Betti 数・CHomP を用いれば、簡潔になることを記述しておく。あわせて、Betti 数を用いれば、任意の次元空間での細線化を容易とすることから、データマイニングなどの領域での活用も今後検討したい。なお、2次元中での細線化処理では、Euler 数で判定できるので、Betti 数が Euler 数を一般化したものと感じることができる。

日本ゼオン 本田博士との共同研究において OCTA/sushi で計算した、5つの異なる高分子相分離構造について、物性と構造の関連を特徴付ける試みとして、Betti 数解析を行った。Betti 数の振る舞いは、概ね同じであり、大域的な分類はできるが、詳細の分類は難しい様子であった。この方向の検討には、少なくとも、系を大きくしサンプル数を増やすなどの統計の積み増しが必要である。今後も、引き続き検討していく。

⑥ 初期配置作成のためのメソスケールシミュレーション手法の大規模化と、粗視化分子動力学法との連携

高分子相分離構造のメソスケールの構造シミュレータとして、OCTA/sushi がある。OCTA では、密度場描像の sushi と粒子描像の cognac が、連携したマルチスケールシミュレーションを構成するデザインとなっている。具体的には、sushi で作成したメソ構造から、粗視化分子動力学法の初期配置

を作成し、分子鎖レベルでの挙動を考慮した物性解析を可能としている。OCTA/sushi の開発者である日本ゼオン 本田博士と協力し、sushi の大規模化とその活用について検討した。大規模化した sushi の結果を、北大スパコン(Hitachi SR16000)で SMP 並列化した OCTA/cognac を用いることで、OCTA が意図したデータ連携(密度場描像から粒子描像へ変換処理)が、大規模・高速化されることを確かめた。また、粗視化 MD 計算の実行では、複数ノードを利用した(MPI)並列化の恩恵を受けるために、OCTA/cognac から LAMMPS にデータ変換して、計算するスキームも確認した。

その上で、日本ゼオンの地球シミュレータ産業利用プログラム課題と共同/分担で、非平衡相分離状態の高分子材料を延伸させる粗視化分子力学シミュレーションを実施した。(ここでは、①で開発検討した独自作成のコードを用いた。)延伸過程における応力歪み関係を評価し、非平衡な相分離構造と応力の(歪みに対する)立ち上がり挙動の間に相関があることを見出した。シミュレーションによる現実材料の開発・検討として、今後、この方向の研究も深めていく予定である。

⑦ 探索的可視化のための可視化関連技術の要素技術検討

探索的可視化を実現するためには、高い臨場性、高い操作性が重要となる。手段としては、CAVE や 3D テレビの活用があげられる。この分野については、JHPCN 学際拠点研究を開始した 3 年前に比べ、世の中のレベルは急速に進化した。AVS/Express を活用することで、可視化エンジンの開発を回避し、道具として使うことに徹した。興味のある領域 ROI を円滑に抽出することや、特徴付け(表現手法を含む)が、高い操作性のために重要である。

今年度は、大規模データをオンラインで操作しながら、大規模系を丸ごと可視化することを検討した。超多粒子系の粒子データの丸ごと大規模可視化については、自然科学研究機構の若手連携課題とも連携し、超多粒子系のそのまま描画を検討

している。動画を扱う場合には、データ供給も問題である。また、可視化やデータの解析において、データ変換・読み込みにおける IO 処理も無視できないことが多い。テキスト IO 処理では、ディスク IO とともに、atof のエラーチェックが遅いために、処理が遅くなっている。そこで、エラーチェックを除いた実装を行うことで、atof の動作を 6~7 倍とし、作業の効率化を図った。(国立天文台 武田博士との議論。)さらに、可視化のための効率的な技法の検討を行った。分子動力学法などの計算内部で、CLF 条件に比べ過剰に取得している位置座標の時系列データを効率よく 3 次関数などにデータ圧縮する手法で、演算は増えるが IO サイズを削減することで、可視化やデータ解析のために有用な相対的に精度高い座標出力が可能となった。

可視化の検討としては、同じ物の異なる表現、ある表現では等価である別物の比較などが、結果の考察段階で重要である。目視ベースでの直感を得るために、AVS/Express を用いて、2 つの異なる可視化対象を同期させて回転させるモジュールの作成と利活用などを行った。高分子相分離構造で見られる DG 構造のその骨格の K4 格子の比較は良い例である。なお、K4 格子は、3 次元空間中で配位数 3 の等方的な格子である。(配位数 4 の等方的な格子はダイヤモンド構造である。)高分子相分離構造では、穴あきラメラ(グラファイト構造)から、Fddd 構造、DG 構造と、条件に応じて構造変化すると考えられている。(これら全て、配位数 3 のネットワーク。)それらの散乱パターン群から、③で検討した逆問題解法で構造推定することで Pathway を明らかにすることを一つの目標と考えており、その過程でも活用できると考えている。また、逆問題解法で推定した高分子材料中のナノ粒子の構造についても、配合などが異なる複数の系について比較する実験も存在し、その比較検討にも 3 次元可視化は有効な手段である。

可視化関連技術の検討に関しては、H25 年度名古屋大学 HPC プロジェクトの研究課題を主として、同じ要素技術共有できる他分野にも対象を広げ、活動を拡大させることとした。

⑧ モデル検証のためのパラメータスタディ 効率化のためのシステム化検討

高分子物理・材料科学としての地道な研究のためには、多くのパラメータについて、系統的に実施する必要がある。その円滑な支援や効率化のために、システム化の検討を行った。具体的には、東京大学 奥田先生とキャトルアイサイエンス 上島博士が実施している RCM(R&D Chain Management) の活用検討として、北大の SMP 並列化版 OCTA/congac と AVS/Express を連携させる仕組みを実際に構築し、有効性の評価を行った。有効性は高いものの、個別の研究室での導入は資金面やシステム面で難しいと感じた。

H24 年度後半において、シミュレーション実施の人的コスト削減（システム化）を目的として、自作ツールの開発を行った。「ジョブ監視や継続ジョブ投入などのルーチンの消費的時間の削減」と、「作業記録と追記メモの保存」という機能に絞り、WEB からのスパコン利用を可能とするシステムとした。ユーザーは、図 2 のように、コマンドを WEB で入力し、ブログのような形で、入力したコマンドと出力結果が記載される。また、ルーチン作業のロボット化は、crontab を用い、perl スクリプトを実行する簡素なものとした。さらに、実作業フローの分析から、上記 2 つに同様の UI を用いるとともに、コメント追記機能を重視した。

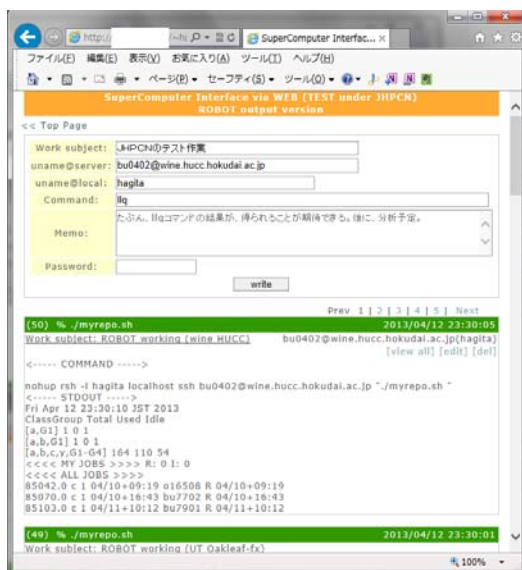


図 2 WEB インターフェースの概要

本システムの利用に関する実証検証として、アメリカ物理学会 March Meeting（ボルチモア）の会場および移動中の空港等の国内外の WiFi 環境を経由し、スマホからのジョブ実行やロボット作業の状況確認などが円滑にできることを確かめた。

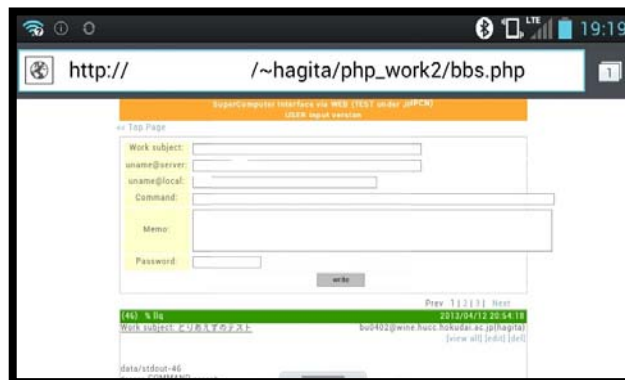


図 3 スマホでの利用画面

今後は、産学連携共同研究などでスパコンを利用する際の支援ツールとして発展させるべく、H25 年度の JHPCN 研究課題（産総研 森田先生代表）等においても、検討を進めていく予定である。

(2) 当初計画の達成状況について

高分子系の大規模な粗視化 MD 解析研究の基盤整備としては、概ね達成したいことは達成できた。これらの実施例を呼び水として、実験なども含めた産学連携等の共同研究体制で、スパコンを利用した実際の高分子材料科学研究を促進させたい。なお、当初は、超大規模計算に向け、独自コードの改良を考えたが、スパコンの運用などの制約から、IO まで含めた大胆な最適化は難しく、GPU 対応やコモディティ化を踏まえて、米国の汎用アプリ LAMMPS を徹底的に活用する戦略に変更した。

4. 今後の展望

H22～H24 年度の JHPCN 学際拠点研究では、スパコンを軸とした高分子系粗視化シミュレーション基盤の計算機科学的高度化検討を行ってきた。これらの活動を通じて、プログラムの大規模対応、大規模可視化の実現/効率化、スパコン利用環境

の利便性向上を図ることができた。

H25 年度の JHPCN 研究では、計算機科学的高度化から、実際の高分子材料研究にスコープを絞り、材料研究としての HPC 活用検討を、産総研 森田先生の代表の下で産学連携の体制で実施していく。

一方で、高分子材料研究の周辺技術となる大規模可視化、スパコン利用の利便性向上、解析関連の数値計算技法等は、JHPCN での検討を継続させる形で、共同研究を発展させる予定で進めている。

5. 研究成果リスト

(1) 学術論文（投稿中のものは「投稿中」と明記）なし。

(2) 国際会議プロシーディングス

• H. Ohtani, K. Hagita, A. M. Ito, T. Kato, T. Saitoh, and T. Takeda, “Irreversible Data Compression Concepts with Polynomial Fitting in Time-Order of Particle Trajectory for Visualization of Huge Particle System”, *Journal of Physics: Conference Series* (in press)

(3) 国際会議発表

- K. Hagita, M. Doi, H. Takano, H. Morita, “Coarse grained molecular dynamics simulation of filled polymer nano-composites”, *ICR 2012* (Lisbon, Portugal) (2012. 8)
- K. Hagita, and T. Arai, “A study of RMC analysis using small pseudo particles to estimate morphology of nano-particles from small angle scattering data”, *RMC-5*, (Budapest, Hungary) (2012. 9)
- H. Ohtani, K. Hagita, A. M. Ito, T. Kato, T. Saitoh, and T. Takeda, “Data compression concepts on scientific visualization for time-series data of huge particle system”, *Conference on Computational Physics 2012 (CCP2012)*, (Kobe, Japan) (2012. 10)

• H. Ohtani, K. Hagita, A. M. Ito, T. Kato, T. Saitoh, and T. Takeda, “Data compression concepts for time-series data of huge particle system” *US-Japan JIFT Workshop 2012 on “Innovative Methods in Plasma Particle Simulations”*, (Providence, RI, USA) (2012. 11)

(4) 国内会議発表

- 萩田克美, 棟朝雅晴, 上島豊, 大宮学, “ASNARO-RCM を用いた OCTA/cognac のパラメータサーベイの効率化に関する報告”, 第 17 回 計算工学講演会, (京都) (2012. 5)
- 萩田克美, “高分子複合材料のナノ構造の解析と没入型立体可視化”, *SPring-8 利用推進協議会ヘルスケア研究会* (第 13 回), (大阪) (2012. 12)
- 萩田克美, “阪大 CAVE を利用した高分子ナノ材料の没入可視化検討”, 「バーチャルリアリティ装置による表現法の追求」研究会 核融合科学研究所, (土岐) (2013. 1)

(5) その他（特許, プレス発表, 著書等）

なし。

謝辞

高分子ナノコンポジットの粗視化 MD 法の大規模計算の共同研究者である産総研 森田主任研究員、慶大理工高野教授、豊田理研 土井先生（現：中国 北京航空航天大学）には、多くのご協力・ご助言を頂いた。コード最適化、可視化技法の検討にあたっては、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の教職員の協力を得た。計算幾何学（数学）を活用した取り組みでは、旭川医大 寺本准教授、東北大学 西浦教授、小谷教授のご協力・ご助言を頂いた。可視化関連技術の検討では、国立天文台 武田博士（現：ヴェイサエンターテイメント）と有益な議論をさせて頂いた。高分子相分離系の関連については、京都工芸繊維大 西川准教授、京都工繊大 藤原准教授、日本ゼオン 本田博士、京都大学 竹中准教授から、ご協力・ご助言を頂いた。上記に加えて、計算利用の技術的側面において、日立製作所関係者、日本電気 (NEC) 関係者、サイバネット・システム関係者には、多大な協力を得た。H24 年度の JHPCN 学際拠点研究において、日本ゼオン、三ツ星ベルト、トヨタテクニカルディベロップメント、JSR、日東電工、三菱化学科学技術研究センターから、さまざまな協力を得ました。