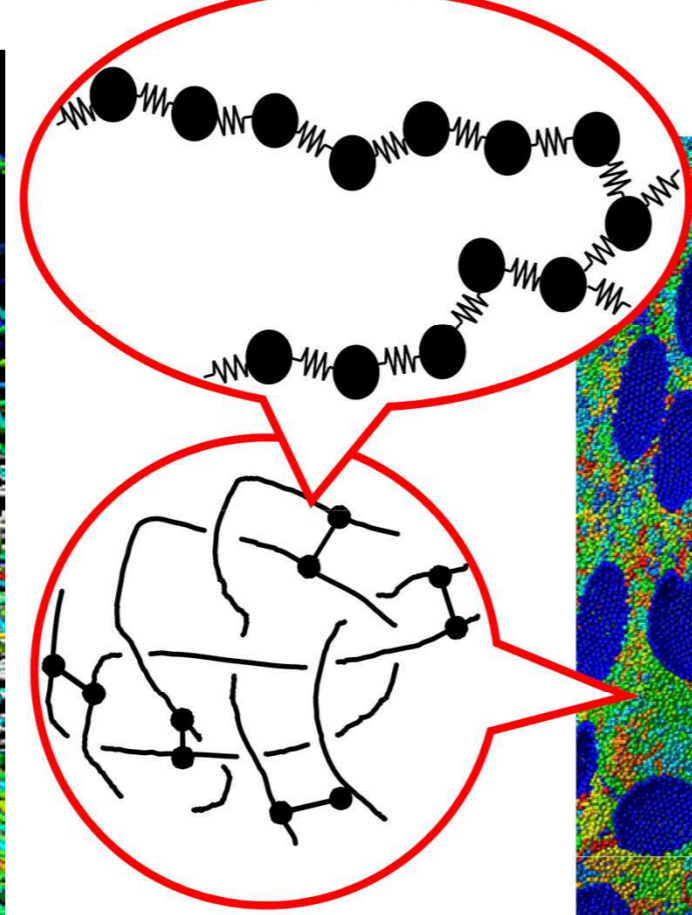
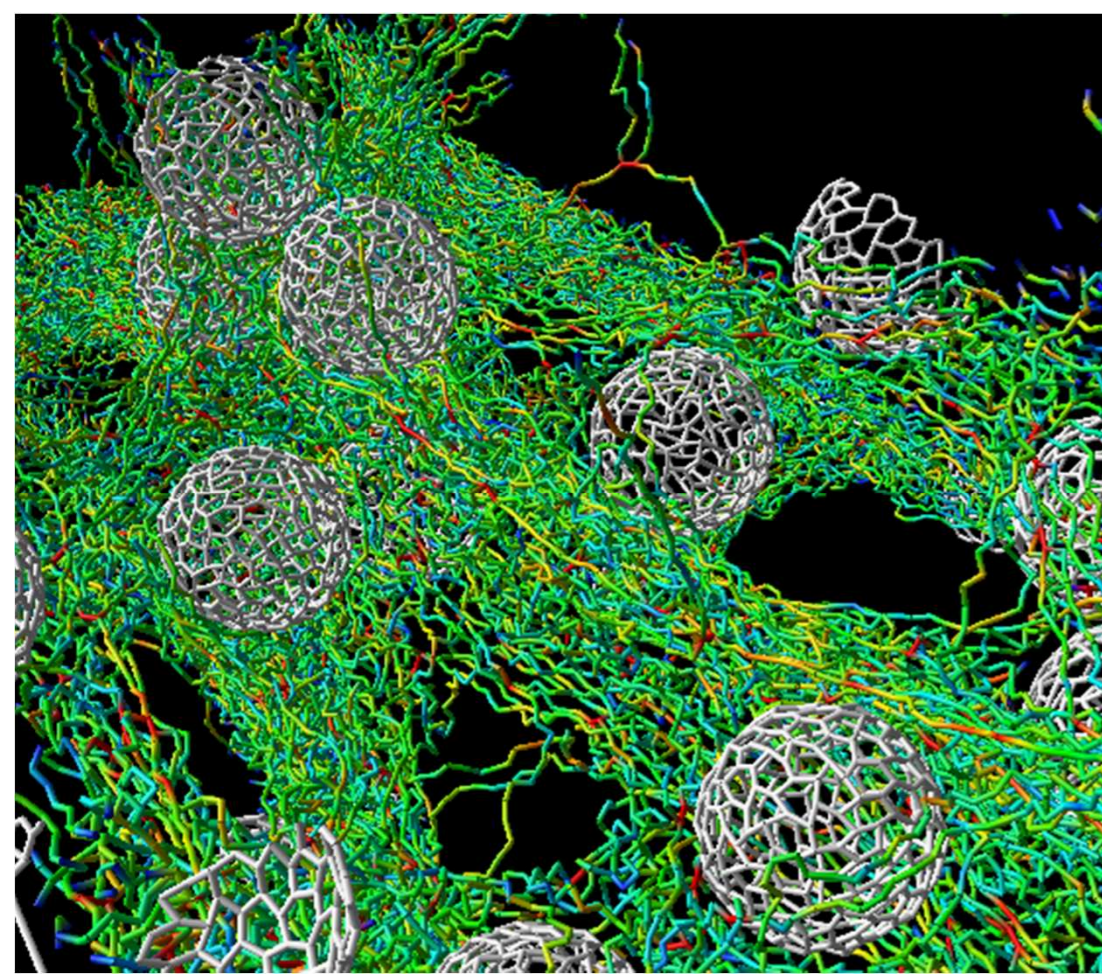


萩田 克美 (防衛大学校 応用物理学科)

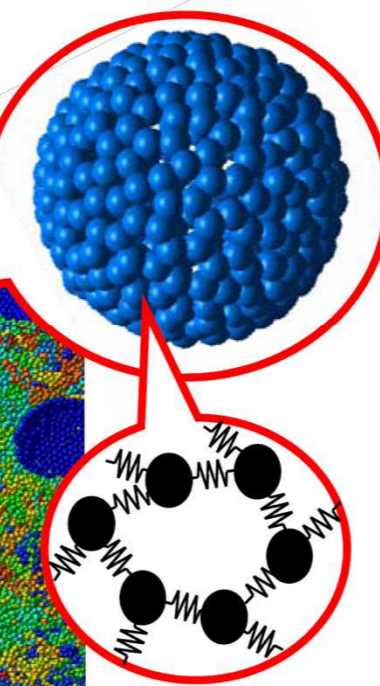
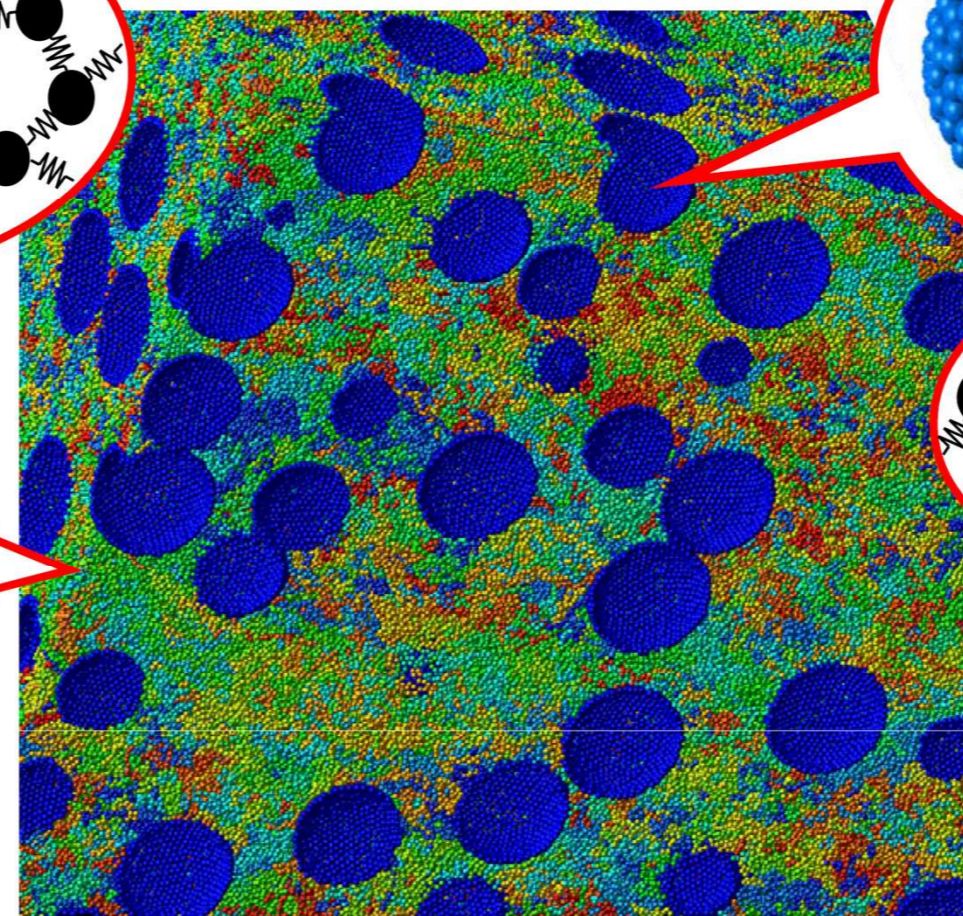
粗視化分子動力学法による高分子系シミュレーション基盤の 計算機科学的高度化検討



(フィラー充填)高分子材料



もっとも単純な
バネ・ビーズ模型



新機能／高性能
産業応用



高分子の
分子レベル
形状効果
の応用

H22実施内容

課題1

独自の超並列コード
(分散入出力対応済)

本格的な大規模 超並列計算技術

- ・大規模な初期配置作成法を完成
- ・MPIプロセスが担当する粒子数のインバランス解消を実装

課題2

OCTA COGNAC

既存ソフトのSMP 大規模並列化

- ・並列乱数生成の実装完了
- ・大規模計算の実証検証を実施
- ・バイナリ配布の実施方法を検討

課題3

AVS/Express
AVS/Express Viz
AVS/Express Developer

大規模系の効果 的な可視化技術

- ・大規模並列可視化を実証検証
- ・並列可視化用データ分割法を検討
- ・CAVEでの没入型探索的可視化

H23実施内容

粗視化MD法だけでなく周辺研究へも波及

<超大規模・超並列計算>

課題5

通信の隠蔽化

- ・(計算依存性がない)乱数生成と通信を重ねて隠蔽化
- ・乱数生成は、「一様乱数生成」と「正規乱数への変換」の2つのブロックからなる。Stream処理で高速化可能 (GPUやSandy-Bridge等の併用効果も評価したい。)

課題6

動的imbalance解消

- ・H22検討では、MPIproc毎の粒子数均一化を実装した。
- ・実測した実行時間(実負荷)ベースのインバランス解消の実装へ。(実行時間の再現不確定性への対応。)

課題7

File出力の隠蔽化

- ・高分子材料系では、配置の時系列を多く記録したい。
- ・全MPIprocからの同時書き込みの性能低下(輻輳など)を避けるために、**順繰りに共有FSに書き込む実装**。(SlaveのMPIprocを立ち上げる予備案で効果確認済み)

課題8

個別CPU最適化

- ・MPI/OpenMPハイブリッドやMPI2のメモリアクセス機能を活用した最適化の検討。
- ※OpenMPではメモリアサインに要注意。課題9で検討。
- ・GPUやSandy-Bridgeなどを併用した計算高速化の検討。(解析用の時間相関関数の計算に大きく活用できる。)

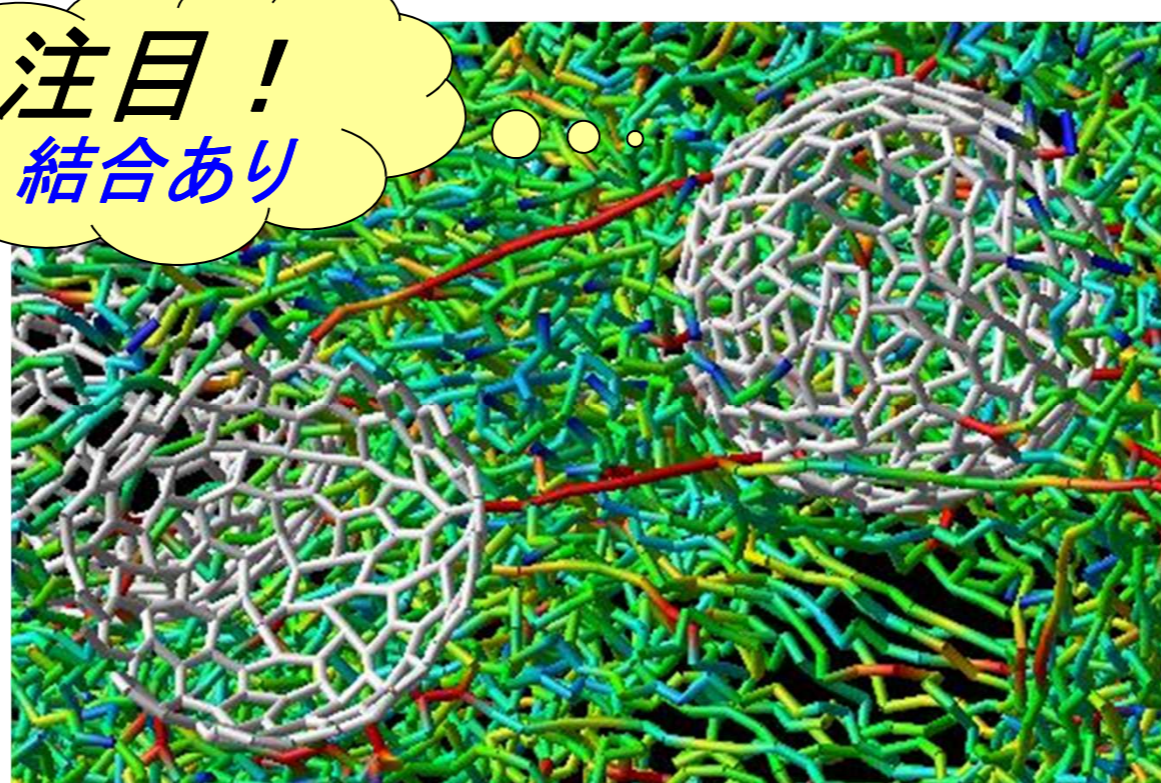
<既存ソフトSMP並列化>

課題9

普及・展開活動

- ・超大規模高分子系粗視化MDの普及へのブリッジとして、**OCTA/cognacのSMP並列化版を一般公開(北大発)**。
- ※Power版、Intel版。Power版は分子研/核融合研で利用中
- ・そのための検証として、DPD法(散逸粒子動力学法)等の計算対象を追加し、さらに必要な並列化作業を実施。
- ※DPD法は、燃料電池の高分子電解膜のメソ構造予測などに使われている計算手法。Cognacで計算可能。

注目!
結合あり



大規模データの解析手法検討

課題3

空間構造の特徴付け

- ・粗密構造のあるネットワークの特徴を数学的に特徴づけ分類して、可視化表現/情報発見に活用。
- ・ポリマーの破壊で、分岐数や、分裂の数などを見る。

課題4

時系列変化の特徴付け

- ・架橋やナノ粒子との結合部付近での高分子形状に起因した特徴的挙動の分析方法を検討する。
- ・可視化における強調表示の物理量として活用。

<大規模・高品位可視化>

課題1

丸ごと可視化

- ・大規模シミュレーションの全体から、局所的な分子鎖の形状までを**シームレスかつ没入的に観察**したい。(実験研究者・開発者と同じ土俵で理解共有するため)
- ・大規模可視化のためには、分散処理、高性能なI/O、メモリ利用の効率化が欠かせず、残課題が多い。
- ※将来は、ある種の平均操作で、メソ化をはかりたい。(そのアイデアのためにも、丸ごと可視化は一手段。)
- ・関連分野(ソフトマター等)の可視化事例集積度を高め、材料研究指向で密なball-stick系の表現技法を検討。

課題2

操作UIデバイス

- ・H22検討では、CAVE等でも、可視化対象の回転操作やスライス面の回転操作で、マウスでの困難さが顕在化。
- ・**WiiリモコンやiPad2の位置センサ**を利用して、可視化対象の回転などを、**体感的に操作**したい。
- ※サイバー空間に没入し、詳細をよく観察したい。(左図)
- ※AVS/Expressとのインターフェースについては、実装案を検討済み。(Wiiリモコンで予備的な検証も実施済)