



研究目的：2次元散乱パターンから3次元構造モデルを構築する

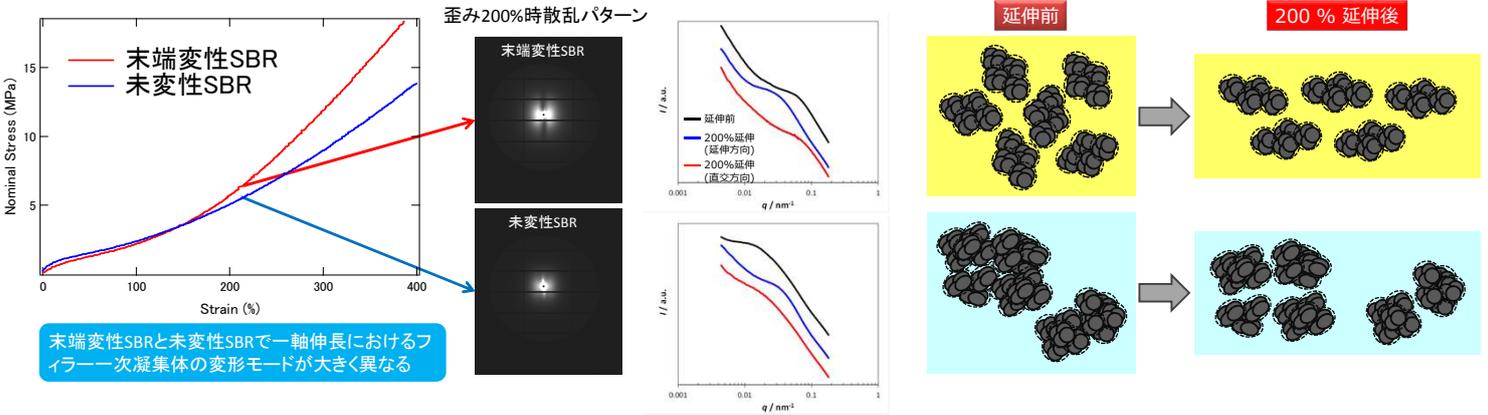


構造推定

PM-2次元散乱パターンRMC法

- ・2007年の2次元散乱パターンRMC法の改良版
- ・改良点は、散乱パターンの計算法
→ 高精度化・高速化。

課題例：延伸したゴム配合物の異方的2次元散乱パターン (SPring-8)



今年度の検討目標

- ・PM-2DpRMCコードのチューニング
演算効率の向上
時間方向並列化
アクセラレータ(GPU, Phi)利用検討
- ・大規模3D-FFTの効率的な実行
名古屋大学 FX100, CX400+Phi
北海道大学 SR-16000
大阪大学 SX-ACE
- ・遠隔可視化装置の利用
名古屋大学 利用環境整備, 3次元可視化
- ・実験データの実証検証
検証用モデル系の検討
延伸ゴム試料への適用検討

将来目標

- ・国内スパコンのマルチプラットフォーム対応
プロダクトランに最良の計算機検討
北大クラウドの利用
- ・大規模系に向けた更なる高速化
SMP/MPI, GPGPU, XeonPhi
- ・統合解析環境の産学共同利用
高速化済PM-2DRMCコード
遠隔可視化環境
SPring-8/JASRI, J-PARC/CROSSIによる支援
- ・人工知能との連動
3次元構造情報のデータ解析
逆問題推定