

jh220038課題
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

防衛大 萩田

2022.7.7

2022年度 JHPCN(学際大規模情報基盤
共同利用・共同研究拠点)シンポジウム

本課題のねらい

- シミュレーション研究者として、

マルチGPUを活用した大規模計算で、
他を追従させない良い計算結果を出して、論文化

- そのために、

汎用高分子アプリのマルチGPU利用の高度化
(ちゃんと、高い性能を出して、利用するノウハウ形成／共有)

鎖の交差禁止をON/OFFできるモデルの高速コード開発
(ON/OFFで、熱力学的状態を維持する条件で)

昨年度の課題の概要

jh210035-NAH課題 GPUの高速並列計算で実現する
交差禁止制御可能な高分子シミュレータの開発

• 成果のポイント

- GPUコードの開発。(概ねの道筋を付けた。)
- CPUコードの最適化と、一部テーマの検討＋論文化
 - Comput. Mater. Sci. 2022, 203, 111104の出版
- MP-SRPパラメータの自動機械探索化に向けた、効率的なテスト方法の検討。
 - Trefoil knotを保持できるパラメータを見つける方向。
- マルチノードマルチGPU利用のノウハウ形成
 - 加えて、OpenACCによるGPU利用のノウハウ形成も

高分子のモデル／MP-SRP法の説明

- 鎖の交差の禁止： 環状鎖の問題
 - 交差のON/OFFで物性が変わる。

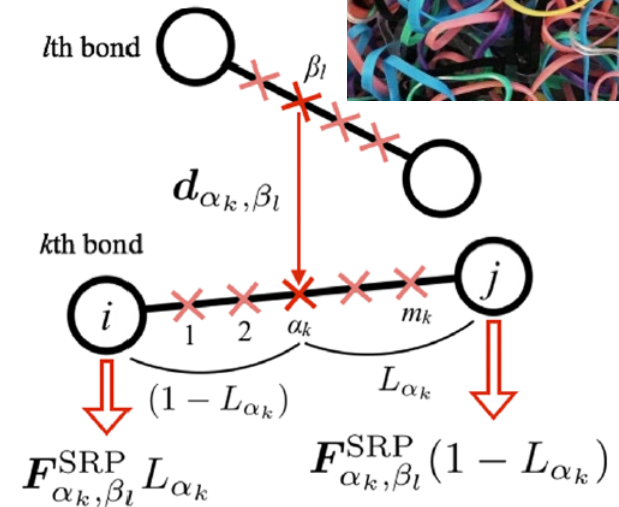


- 計算モデルは？

– DPD法のMP-SRP法で可能。

- 多数の斥力中間点を挿入。
- 但し、計算コスト大

→ GPUで解決を期待。



– 計算特性は？

- 4粒子間の力の計算の問題になる。
 - 正確には、2粒子間と、その隣の2粒子の合わせて4粒子。
- 斥力中間点の計算は、SIMD向き。
- 幾何学的条件で、計算不要を判定可能。

検討アイテムと、研究参画者

代表
防衛大・萩田

• メインアイテム

MP-SRP法のGPUコードの作成

副代表
東大・芝先生

東大
下川辺先生

• サブアイテム

– 最新GPU利用技術の獲得

HPCプログラミング

CUDA

OpenACC

東北大
村島先生

名大
片桐先生

ブリヂストン
大熊博士

CUDA-aware-MPI

名大
畝山先生

システム利用技術

Gromacs

LAMMPS

阪大
伊達先生

HooMD-bule

– 若手・学生への技術情報普及展開 (+企業研究者)

東大
作道先生

東大(学生)
長原さん

京都工繊大
藤原先生

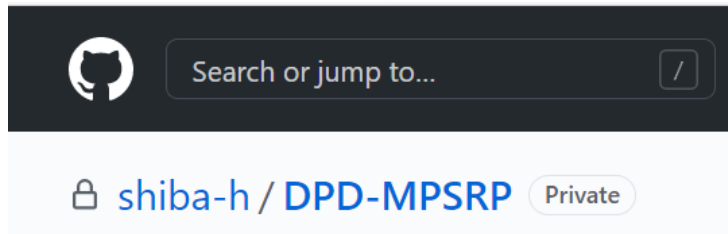
京都工繊大(学生)
川波さん

京都工繊大(学生)
寺川さん

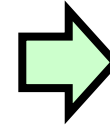
京都工繊大(学生)
波木さん

MP-SRP法のGPUコードの作成

- (スタート地点) 芝先生の粒子系超並列GPUコード



粒子系コード



拡張開発の流れ

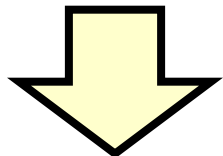
DPD法への対応
(粒子ペアでの同一乱数発生が必要)



ポリマーへの対応
(ボンド情報の分散管理)



MP-SRP法への対応
(ボンド情報の分散管理)



スパコンでのGPU関連技術に関する情報収集結果や現在の動向を踏まえて

- (現状の方針) 「Singleノードで、Multi-GPU用のミニコード」を開発し、上記拡張開発を効率化
 - 大規模超並列では、MPIへの対応が肝。
 - 現状は研究の初期段階。Singleノード複数GPUで、より効率的かつ高速な計算をしたいニーズが強い。

MP-SRP法のGPUコードの作成

- Singleノード用ミニコードなら、「**ノード内の超高速通信を活かした技法**」の検討ができる。
- 「**粒子ペアで同一の乱数値の生成**」の効率的な実装の検討が、DPD法では肝である。
 - 複数ノードでの領域分割では、工夫が必要。
 - Singleノード限定と、複数ノード対応で性能差は必然。
- Singleノード用ミニコードの開発を通じて「**ボンド情報の分散管理**」の対応方針を明確化の予定。
- ミニコード開発の副次的効果（**普及展開・教育**）
 - ➡ ミニコード開発例ならば、**学生や若手研究者に、教育展開しやすい**。（合宿形式／集中セミナー）

マルチノードマルチGPU効率的な利用

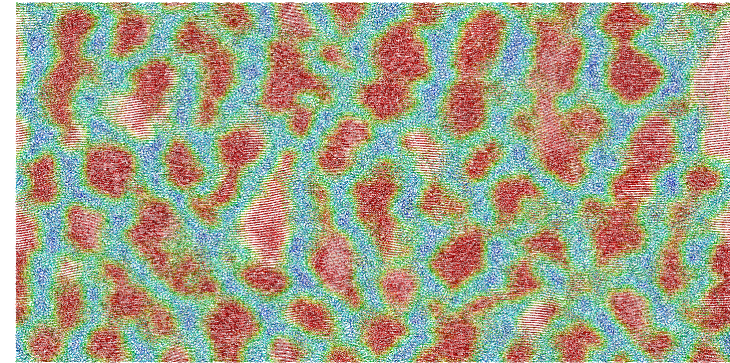
- Multi-nodes, Multi-GPUs
 - 名大不老 V100
 - 東大Wisteria/BDEC-01 A100
 - 阪大SQUID A100

- UCXの挙動を理解した利用
(環境変数設定等)が重要
- ジョブ実行の仕方の優良解を
自動的にサジェストされたい。

- ノウハウ形成と、適用拡大
 - Gromacs
 - カットオフしたクーロン力の計
算について、実用性の検証。
 - 精度よりも、大規模性を優先。

ポリエチレンの結晶構造 1600万原子

※MD計算と、力学実験、放
射光、電子顕微鏡が、全
て一致する良い結果
@ 科研費新学術領域
ミルフィーユ構造材料



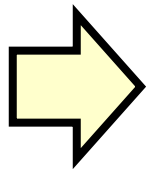
64枚で
並列計算



約150ns/day

若手・学生への技術情報普及展開

- 高分子材料の研究（シミュレーション実施）にすぐに使える情報としての整理（ノウハウ形成）
- 共同研究を通じて、若手・学生へ技術情報普及展開する。（ミニセミナーや情報交換、技術指導）
 - 産業界にも、共同研究を通じ、技術情報を普及展開。



Zoomやメールベースでの情報共有に加えて、
対面での行事も、徐々に復活させたいところ。

「高分子材料のシミュレーションでのGPU活用の
ミニキャンプ」など。。。 （今夏にできるか？）