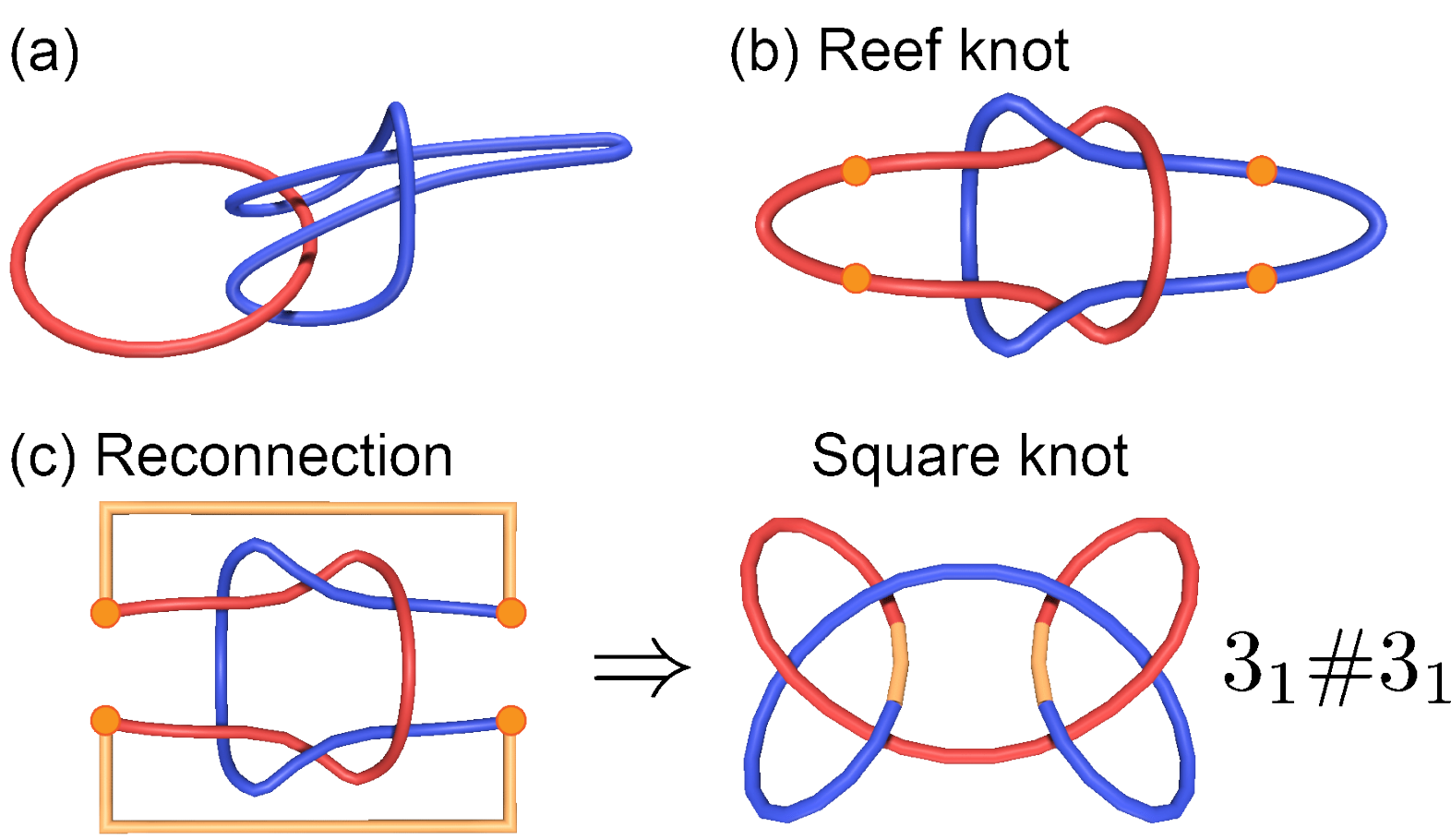


jh250040

代表者: 萩田 克美 (防衛大学校) 発表者: 村島 隆浩 (東北大学)



バンド手術: ほどける結び目から
ほどけない結び目への変換

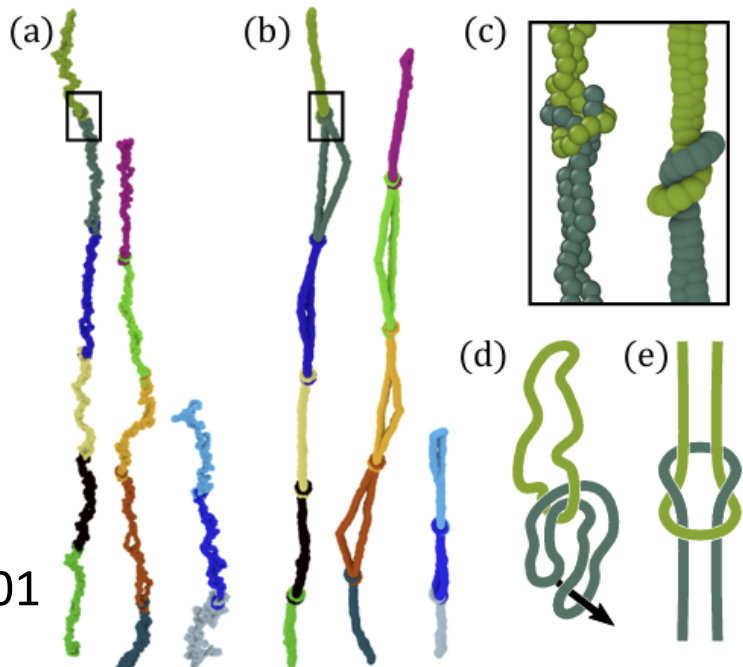


純粋
数学

Active ring melts

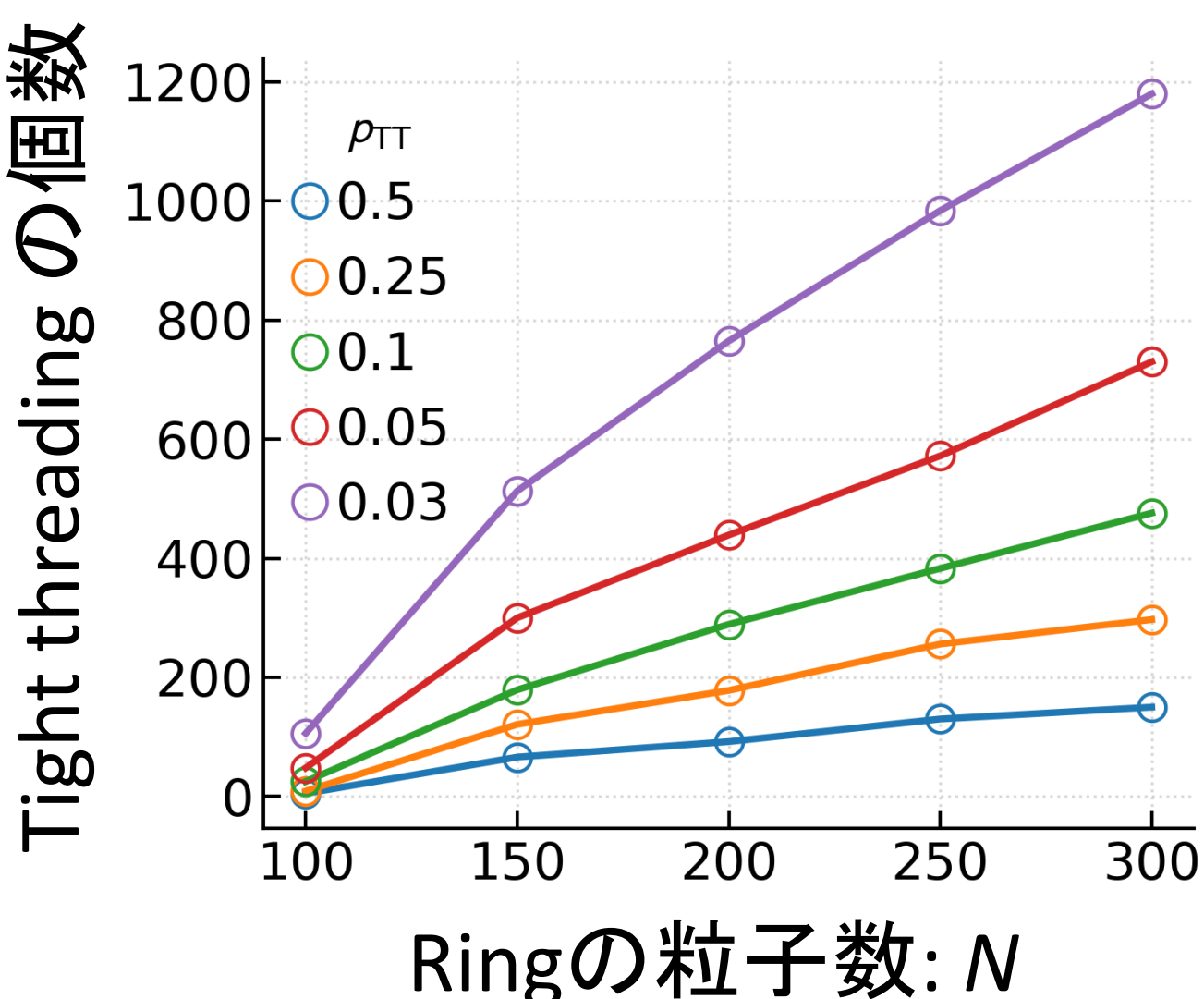
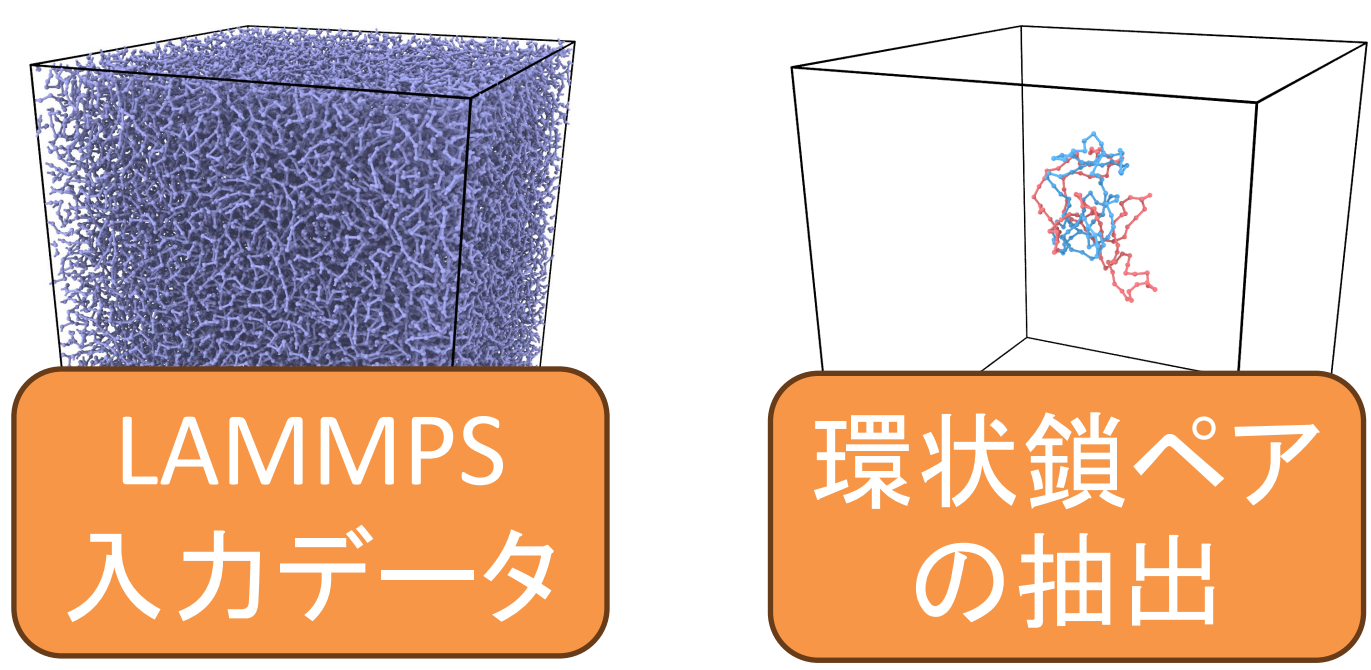
- ◆環状鎖の粒子の一部が、温度が高いActive粒子
- ◆“ガラス化”する
- ◆Tight threadingと呼ばれる環状鎖同士の過渡的絡み

Kremer et al. Nat. Commun. 2020, 11, 26
Grest et al. Phys. Rev. Lett. 2020, 124, 027801



HPC
計算科学

判定をタスク並列化



課題事項

- ・バンド手術ベースのトポロジー解析は、高コストかつ、計算量のバラツキが大きい。 **HPC的に解決**
- ・より複雑な解析の実現

検討目標

- ・MDXを活用し、並列データ解析
→ MDXを便利使うツール作成
- ・解析用データの生成
→ 環状鎖メルトのMD計算

検討中の事項

純粋数学の大規模計算機実験の実施基盤整備

- ◆ 純粋数学の計算機実験に、一気に1000倍以上の規模の問題を扱う「HPC的な飛躍的進化」を導入し、国際的優位性を得て、現実世界の問題に貢献しうる高分子材料系解析で数学の有効性を示す。
- ◆ 計算機力を背景にして、新しい純粋数学の構築(動機を含め)に貢献する高分子材料系データの創出を行う。

MDXをAPIを通じて利用する支援ツールの作成

- ◆ MDXをAPI利用するためのスクリプトを整理(整備)
→ git-hubで公開済。
<https://github.com/hypsakata/mdx-tools>
・機能: VMリスト表示、VMの電源ON、。。。。。
- **純粋数学解析とMD計算を組み込んだAI探索ツールの作成と実用 (数学が予測する構造の発見)**

※来年度のJHPCN課題では、Kubernetesクラスタ(北大)の活用ノウハウ構築を実施したい予定。
→ 効率的なコンテナ作成などの基礎的なノウハウも検討

解析用データの生成(MD計算のHPC最適化)

- ◆ LAMMPSの高速化 (fix-langevinのOMP化、乱数のSFMT化)
※WS～スパコン～富岳(全系)の、全域での演算性能向上
→ **粗視化MD模型でのゲル(架橋ネットワーク)の計算を、27億粒子系で、富岳全系利用の見込み。**
- ※小規模系では、1割～2割の速度向上。
- ◆ HooMD-bule 利用の高度化
※新しいバージョンへの対応。Angleポテンシャル等の独自拡張
- ◆ Gromacs 利用の高度化 → Miyabiでの高性能演算実現目標
※2.88億粒子のUAMD計算(水素原子を無視した原子模型)

Miyabi	Gromacs	256 GPUs	66.73 ns/day
Miyabi	Gromacs	128 GPUs	50.27 ns/day
富岳	LAMMPS	12288ノード	40.51 ns/day
富岳	LAMMPS	82944ノード	184.3 ns/day

※30MP

LAMMPSの分散IO技術の利用最適化

- ◆ 将来発生しうる課題への解決の先行検討
※LAMMPS分散IOデータを、効率よくハンドルするノウハウ形成
※2.88億粒子系では、LAMMPSのnative処理では、1TBのメモリが必要な模様。(富岳pre-postで動作)
- ◆ MDXでのPythonベースの解析用ツール化したい。作業中。