

14-NA22

高分子流体計算の並列効率向上と 3D 可視化

村島隆浩（東北大学）

概要

ミクロの分子シミュレーションとマクロの流体シミュレーションを接続するマルチスケールシミュレーションはデータ量が膨大なため、分子の時系列データを保存して後処理によって可視化する従来型の方法は困難である。そこで我々は **Interactive** なデータアクセスと 3D タイルディスプレイを用いた可視化により必要なデータにアクセスし効率よく情報を取り出すことでこの困難を克服したい。

紐状ミセル流体のハイブリッドシミュレーションを用いた流動解析及び、紐状ミセルの複雑なネットワーク構造の可視化を行った。コードのチューニングを行い、実行効率を高めた。

1. 共同研究に関する情報

(1) 共同研究を実施した拠点名

東北大学サイバーサイエンスセンター

(2) 共同研究分野

- 超大規模数値計算系応用分野
- 超大規模データ処理系応用分野
- 超大容量ネットワーク技術分野
- 超大規模情報システム関連研究分野

(3) 参加研究者の役割分担

村島隆浩

開発全般・計算実施

江川隆輔

並列化効率・3D 可視化検討、技術支援

萩田克美

粗視化モデル開発・3D 可視化検討、技術支援

戸田昌利

粗視化モデル・3D 可視化検討、技術支援

2. 研究の目的と意義

(研究の目的)

高分子流体の流動挙動をシミュレーションすることは、流体要素の変形とその応力の対応関係が非線形でかつ履歴に依存することから、非常に困難な問題である。一般に変形と応力の時間発展方程式である構成方程式を仮定することで高分子の流動挙動をシミュレーションすることがよく行われるが、構成方程式を求めること自体が非常に困難で、設定した材料の分子構造を反映したシミュレーションを行うことはできていない。そこで本研究代表者は高分子流体のマルチスケールシミュレーション法を開発し、構成方程式を用いる代わりに高分子シミュレータを用いることで、材料の分子構造を反映した高分子流体のシミュレーションを可能にした。本研究課題では高分子流体のマルチスケールシミュレーション法の並列化効率の検討・向上を行うことで、次世代のスーパーコンピュータ上での実行可能性についての検討を行う。またマルチスケールシミュレーション実行中の高分子の状態の 3D 可視化により応用上重要な流動中の高分子の配向制御に関して検討する。

(研究の意義)

高分子熔融体などのソフトマターはマクロスケールの変形に対する応答や流動がミクロスケールの分子集団の運動に依存するマルチスケールな特徴を持つ。しかしながら、ミクロスケールからマ

クロススケールまでの全ての分子自由度を同時に取り扱うことは原理的に不可能であるため、従来は、マクロスケールの流動現象はマクロスケールだけで、ミクロスケールの分子集団の運動はミクロスケールだけで、それぞれ別々に取り扱われてきた。我々は従来の枠組みにおいて、マクロスケールの変形に対する応答を記述するための構成方程式の代わりに、ミクロスケールの分子シミュレーションを実施することで、ソフトマターのマルチスケール性を記述する計算手法の研究・開発を進めており、マクロスケールな複雑な流動中の分子状態を直接調べることを可能にした。この方法は高分子溶融体のミクロスケールの状態が織りなす高次構造を解析するのに役立つ、今後、ソフトマター材料を利用した製品の強度強化や高機能化の探索に有効な方法である。

3. 当拠点公募型共同研究として実施した意義

本課題で提案しているマルチスケールシミュレーション手法の開発は主に申請者個人で行っている。計算効率を上げるためのノウハウを持ち合わせていないため、必然的に計算効率の悪いコードになっている。計算機科学センター（東北大サイバーサイエンスセンター）との共同研究により、コードのチューニングを行っていただくことで、研究が加速することを期待する。また 3D 可視化装置を使ったデータ可視化を行うことで、従来では困難であった局所的な分子配向情報のマクロスケールな空間分布を得ることができると考えられる。コードチューニングにより、1.5 倍以上の高速化が達成され、今後更なる高速化が見込まれる。

4. 前年度までに得られた研究成果の概要

(新規課題のため無し)

5. 今年度の研究成果の詳細

今年度はミクロスケールの分子モデルとして、粒子・連続場ハイブリッドモデルを用いマクロスケールは 1 次元系を仮定したマルチスケールシミュレーションを実施した。粒子・連続場ハイブリッドモデルは粗視化高分子モデルを拡張したもので、界面活性剤の作るミセルの融合・分裂の力学を取り込んだモデルである。したがって従来の高分子モデルでは取扱いが困難だった、ネットワーク構造の形成やせん断流動下における構造破壊を調べることが可能である。

マルチスケールシミュレーションによりスリット間の紐状ミセル溶液の流動挙動を解析した。2 枚のスリット間を流れる紐状ミセル溶液の流動を調べる。スリット壁直上では速度ゼロの非すべり条件を仮定した。静止した状態から流動を開始すると、流路中央部で流速を調べたところは①大きく上昇、②大きく減少、③少し上昇、④定常と 4 段階の振る舞いを生じた。スリット壁近傍ではこの変動の振幅が小さい。せん断速度について調べると流路中央部とスリット壁近傍では流速の場合とは異なり、スリット壁近傍で大きく変動する振る舞いが見られた。せん断応力の振る舞いに関しては①大きく上昇、②大きく減少、③緩やかに減少、④定常と先の 2 つと比べると大きく振る舞いが異なる。また①と②の間の応力のピークが表れる時間が流路中央に行くほど遅くなることがわかった。非一様なせん断速度場における応力場の予測は従来の非平衡 MD シミュレーションでは困難であり、マルチスケールシミュレーションにより初めて解析が可能になった。さらに定常状態での紐状ミセル溶液の状態を調べると、流路中央とスリット壁近傍ではミセルの分岐数が 10%ほど異なり、流路中央ではネットワーク構造が保たれているが、スリット壁近傍ではネットワーク構造が破壊され、弾性を低下させていることがわかった。この結果スリット壁近傍では速度場の振る舞いがニュートン流体であるが、流路中央では非ニュートン流体となっていることがわかった。また、ネットワーク構造を可視化することにより、流路中

中央部とスリット壁近傍で異なる構造をとっていることがわかった。流路中央部ではネットワーク構造が複雑に分岐しているために、どの方向から見ても空隙率が低いが、スリット壁近傍では流動方向から見た場合と他の方向から見た場合とで大きく異なり、流動方向から見た場合、空隙率が高く、その他の方向から見た場合には流路中央部と同様空隙率が低いことがわかった。内部構造を可視化することにより、数値データからは読み取れない情報を得ることができた。今後はより長時間の計算を実施し流動不安定挙動の原因を解明する。

本研究におけるマルチスケールシミュレーション手法は多数の分子シミュレーションを連動させるために、相応な計算機資源を必要とする。少しでも計算時間を減らすためには分子シミュレーションの高速化が必要である。東北大学サイバーサイエンスセンターと協力してコードのチューニングを行った。性能調査を行ったところ、1回あたりの計算時間は短い、呼び出し回数の多いサブルーチンがコスト上位に多数しめることがわかり、関数呼び出しのオーバーヘッドが累積し、コストが増加していることが判明した。高速化の方針としてインライン展開により関数呼び出しのオーバーヘッド削減し、高速化を図った。コンパイルオプションによる自動インライン展開と、自動展開されないサブルーチンに指示行を挿入して明示的に行うインライン展開を行った。結果、1.5 倍以上性能が向上した。

SX-ACE を用いて性能分析を実施したところ、ベクトル化効率が低く、演算性能があまり出ていないことが判明した。理論演算性能比は SX-ACE が Intel IvyBridge の 3.3 倍高いにも関わらず、IvyBridge で実行した方が 8.5 倍速い結果となった。ベクトル化阻害要因として、ループ内に、malloc, calloc, free, printf, exit などのベクトル化対象外の処理が存在していること、for 文内に while 文が存在するなど、ベクトル化不可のループ構造が存在するなど、依存関係が不明なループとなっていることが判明した。またデータの依存関係が非自明なデータ構造となっているため

に、ベクトル化されていないことが判明した。ベクトル化阻害要因の主たる原因はエラー処理とメモリー管理の部分であり、今後ソースコードを書き換えることで対処していく。

6. 今年度の進捗状況と今後の展望

初期的なプロファイル解析とコードチューニングで想定していた以上の高速化が図れた。今後ボトルネックの調査、改善により更なる高速化が図れると期待している。コードの高速化効率化に関しては当初想定していた通りの進捗状況である。

3D 可視化に関しては、流路中央部とスリット壁近傍で紐状ミセルの分子状態の違いを局所的な可視化によって表示することにより違いを抽出することができた。大域的にどのような変化をしているかを把握するためにも大型ディスプレイを用いた可視化が重要である。兵庫県立大学の CAVE を用いた 3D 可視化の実証研究を 2015 年度より開始し、今後より効果的な可視化を検討していく。

7. 研究成果リスト

(1) 学術論文

なし

(2) 国際会議プロシーディングス

なし

(3) 国際会議発表

“Multiscale Analysis of One-dimensional Fluid Dynamics of Wormlike Micellar Solution”,
T. Murashima, T. Toda, T. Kawakatsu,
“Multiscale simulation methods for soft matter systems”, 2014/10/06, Mainz, Germany.

“Multiscale Simulation of Wormlike Micellar

Solution - Network Structure in Non-uniform Flow Field”, T. Murashima, T. Toda, T. Kawakatsu, “The AIMR International Symposium 2015”, 2015/02/17-18, Sendai, Japan.

(4) 国内会議発表

“高分子流体計算の並列効率向上と 3D 可視化”, 村島隆造, “学際大規模情報基盤共同利用・共同研究拠点第 6 回シンポジウム”, 2014/7/10, 東京

“マルチスケールシミュレーションによる紐状ミセル溶液の流動解析”, 村島隆造, 戸田昌利, 川勝年洋, “第 62 回レオロジー討論会”, 2014/10/15, 福井市

“ソフトマター流体のマルチスケールシミュレーション”, 村島隆造, “Smart Simulation of Softmatter, Structured fluid and Stokes flow 2014”, 2014/10/18, 米沢市

“紐状ミセル溶液のマルチスケールシミュレーション—非一様流動場中のネットワーク構造—”, 村島隆造, 戸田昌利, 川勝年洋, “第 4 回ソフトマター研究会”, 2015/01/07, 名古屋市

“スリップリンクモデルにおける高分子溶融体の流動中の変形と応力の関係”, 村島隆造, “日本物理学会 第 70 回年次大会”, 2015/03/22, 東京

(5) その他 (特許, プレス発表, 著書等)

なし