

課題番号 jh130038-NA19

フィラー充填系高分子材料の粗視化分子動力学解析の HPC 活用研究

森田 裕史 ((独)産業技術総合研究所ナノシステム研究部門)

概要 本研究では、フィラー充填高分子複合材料系等を対象にした粗視化分子動力学 (MD) シミュレーションについて、HPC を活用するための研究を行う。具体的には、ソフトマテリアル統合シミュレータ OCTA を用いた小中規模計算から、LAMMPS を利用した大規模計算まで、産学連携によるオープンイノベーション基盤 (共通で利用できるシミュレーション用データやモデル構築手法、計算技法、アルゴリズム、可視化等) を系統的に整備し、今後の産学連携に役立てるためのプラットフォームの構築を行う。

1. 研究の目的と意義

本研究では、高機能フィルム材料、高機能構造材、タイヤゴム材料など、様々な工業製品に用いられているフィラー充填系高分子複合材料の大規模粗視化分子動力学法シミュレーションについて、その活用と今後の産学官連携に役立てるためのプラットフォームの構築を行う研究を実施する。近年は、サステイナブルな材料形態や、更なる高機能化・高性能化が望まれている。これらの材料の精密な機能や物性の創成には、当然ながら分子レベルでの材料設計が必要となる。現状、試行錯誤による材料開発が依然として主流であるが、今後は分子シミュレーションによるメカニズムの解明を通じて、予測・設計することが期待されている。よって、高分子系の粗視化分子動力学法は、複雑な物性発現を予測する手法として、学術的にも、産業的にも注目されている。

高分子材料シミュレーションは、2002 年にソフトウェア OCTA の公開後、劇的に変化した。最新版 OCTA2013 に含まれる複数のシミュレータが並列化対応し、中規模シミュレーションへの道が開かれた。OCTA は、企業の研究者にもよく使われているシミュレーションシステムであり、「ソフトマテリアル統合シミュレータ OCTA」と「大規模計算」の連携/接続により、OCTA 利用の企業の研究開発者、国内の学術研究者の多くが、大規模計算や大規模可視化 (可視化ベースの探索的研究) をはじめる敷居を低くめ、大きな波及効果が期待できる。一方、大規模並列計算のプログラムとしては、米国サンディア研究所の LAMMPS が、デファクト・スタ

ンダードとなっている。そこで、LAMMPS を用いるための取り巻く環境整備が今後必要となる。

高分子材料シミュレーションのフィラー充填系高分子材料への適用も望まれている。フィラー充填系の機械的性質について、粗視化 MD 解析による仮想実験技術の確立等が望まれる。例えば、OCTA を核として、小さな計算から LAMMPS を利用した大規模計算までシームレスに移行できるコンバータ、円滑なパラメータスタディ、大規模な系のスムーズな可視化などが行える研究プラットフォームができると、学術的な研究者だけでなく、企業における材料の研究開発者にもツールとして提供することが可能となる。また、この分野の研究はまだ歴史が浅いこともあり計算科学分野の研究者も少ないが、産学官共に研究者の需要が増えており、産学官連携によるオープンイノベーションとしての将来性も高い。

以上より、本研究では、フィラー充填高分子複合材料系 (ナノコンポジット) の粗視化分子動力学 (MD) シミュレーションの大規模計算を通じて、産学連携によるオープンイノベーション基盤 (関係者が共通で利用できるシミュレーション用データやモデル構築手法、計算技法、アルゴリズム等) についての技術的な検討を、計算科学者、計算機科学者、計算機技術者が協働することで、系統的に整備することを主な目的とする。

具体的な内容を述べる。まず、(1)シミュレータの整備が必要となるが、LAMMPS、OCTA での大規模計算による検証のためにスパコンを利用する必要があり、それぞれ特徴のあるスパコンについて、

対応を考える必要に迫られている。次に(2)モデル・計算手法の構築として、初期配置の効率的な作成や、架橋を始めとするモデルの構築手法も含み、スパコンを利用したパラメータスタディの効率的な実施が必要となる。(3)として、シミュレーションデータの解析技術の整備が必要である。超大規模な粗視化 MD シミュレーション結果を解析・可視化し、その結果から新たな知見を得て、活用していく実効的な研究の推進のためには、可視化技法を始めとする計算機科学的な高度化が必要である。複雑な 3 次元構造の理解には、探索的可視化が有効である。このような方向の研究は、高分子計算物理の研究者のみでは限界があり、計算機の専門家の協力を得ることを必要としている。

以上より、LAMMPS を用いた大規模計算技術の産学官での共有と育成、OCTA-LAMMPS 間の連携利用、オープンイノベーション基盤整備は、スパコンの学術利用・産業利用の視点から喫緊の課題であり、本研究課題ではこれらの問題に取り組んだ。

2. 当拠点公募型共同研究として実施した意義

(1) 共同研究を実施した拠点名および役割分担

・北海道大学 情報基盤センター

SMP 並列版 OCTA/cognac の改良、LAMMPS の大規模実行支援、OCTA/SUSHI の MPI 並列化支援、効率的なパラメータスタディ技法の議論検討

・東京大学 情報基盤センター

LAMMPS の大規模実行支援、時系列データの圧縮技術検討

・名古屋大学 情報基盤センター

大規模可視化検討、LAMMPS の大規模実行支援、

・東京工業大学 学術国際情報センター

GPU を活用した LAMMPS の大規模実行支援、GPU 活用ライブラリの性能評価など

(2) 共同研究分野

超大規模数値計算系応用分野

(3) 当公募型共同研究ならではの事項など

シミュレーションで研究する計算科学側の研究者のみでは実現困難な事項について、計算機システムに関する専門的な知識を持つ拠点教員、拠点職

員の支援を受け、共同で問題を解決したり、議論したりすることで、進展を得ることができている。また、産学官連携の観点では、公募型共同研究で行っているということから、本研究で行った成果については、特定の企業に権利が属さないオープンイノベーションの形での利用を想定して実施できている。さらに今後、様々な連携に水平展開が見込まれる。また、複数の研究者で持ち寄り研究として実施し、結果やノウハウの交換による全体の計算技術向上を目指すかたちで研究を行うことについても、共同研究として行うことによる本課題の 1 つのメリットとして示すことができる。

3. 研究成果の詳細と当初計画の達成状況

(1) 研究成果の詳細について

本年度は、フィルター充填ゴム材料の基礎的事項の計算を集中的に実施し、今後産学官でフィルター充填高分子材料の大規模シミュレーションを行う際の基盤技術の確立を目指して研究を進めた。具体的には、1) 共通で利用できるシミュレータの整備、2) モデル・計算手法の構築と大規模シミュレーションのベンチマーク、3) シミュレーションデータの解析技術の整備の各項目について、技術的課題について取り組み、基盤的計算結果が得られるように進めた。各項目は、下記の通りである。

1) 共通で利用できるシミュレータの基盤整備

- ・GPU を活用する LAMMPS の大規模計算の検討
- ・OCTA/SUSHI 並列化版による高分子相分離構造を含む系の超大規模計算の可能性検討
- ・LAMMPS における各種評価、及びチューニング
- ・中規模計算のための COGNAC/OCTA の加速化
(注： ソフトウェア名を下線で示す。)

2) モデル・計算手法の構築と大規模シミュレーションのベンチマーク

- ・大規模なフィルター充填高分子系の初期配置作成と LAMMPS を用いた効率化の検討
- ・フィルター充填系高分子材料の大規模計算の汎用(コモディティ)的实施のためのスタート地点となる規模のベンチマーク系の整備
- ・次世代のトップスパコンで実現可能なパラメー

タ計算研究のためのベンチマーク系の整備

3) シミュレーションデータの解析技術の整備

・パラメータスタディの効率的な実施技法の検討
以下に、その概要を述べる。

3.1 GPU を活用する LAMMPS の大規模計算の検討

数学と材料科学と物理学の連携として、K4 格子 (砂田格子、(10, 3)-a グラフ) が、注目されている。K4 格子は、周期境界条件下でジャイロイドと呼ばれる極小曲面、すなわち Schwarz の G surface の骨格に相当するものである。高分子の相分離構造としては、ダブルジャイロイド構造が安定した構造として観察されている。ダブルジャイロイド構造は、ジャイロイド構造が入れ子になった構造である。純粋数学に基づいて発想した新材料の探索として、K4 フェノール樹脂の検討を行っている。

ダブル K4 格子を骨格に持つ K4 フェノール樹脂は、図 1 の構造になる。ダブル K4 フェノール樹脂は、single K4 樹脂に比べて等方性が高いことから、変形に対して、より安定になると想像できる。LAMMPS を利用した古典分子動力学計算のより、応力歪み関係の評価することで、弾性率などの物性を評価することができる。フェノール樹脂では、フェノール (六員環) に酸素原子を 1 つ有している。この酸素は、フェノール間をつなぐ炭素と結合する 3 つ炭素原子とは、別の 3 つの炭素原子の内の 1 つとランダムに結合している。仮想材料として、この酸素のない場合を考えることとした。

本研究では、予備的な計算として、TSUBEME2.5 を用い、1024MPI procs (86 ノード) などの大規模計算を実施した。本研究でのクーロン力の計算には、PPPM 法を用いた。歪速度 0.000002 (box units/fsec) で、4%まで一定速度で延伸させる 800,000MDsteps の計算 (timestep=0.25fsec) を行った。その結果を図 2 に示す。

図の緑色の線、黄緑色の線は、Single K4 フェノールの応力歪み関係である。フェノール部の酸素の有無によって、応力の値の差がないことが分かる。一方で、入れ子格子になった double K4

フェノール樹脂では、酸素の有無によって、応力歪み関係が大きく変わることが分かる。水色の線は、酸素がある場合で、ピンク色は酸素を取り除いた場合である。この結果は、入れ子格子の場合、酸素原子の存在 (酸素原子と、もう一方のネットワークの原子との衝突など) で、応力歪み関係が大きく変わることが分かった。現時点での歪み速度は非常に速いものであり、歪み速度依存性の評価などの課題が残っている。

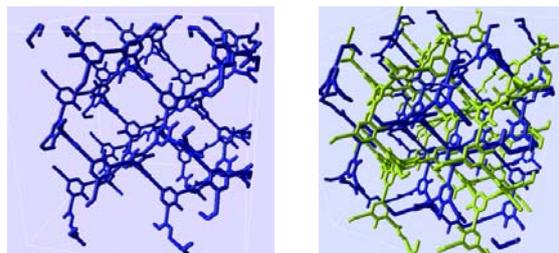


図 1 K4 フェノール樹脂の模式図

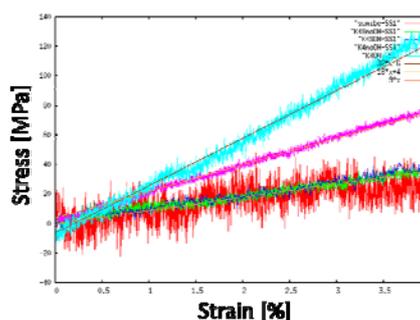


図 2 K4 フェノールの応力歪み曲線

(本研究は、JHPCN 課題 (ID: jh130038) および HPCI 課題 (ID: hp130062)、名古屋大学 H25 年度 HPC プロジェクトの下で、Hitachi SR16000, Fujitsu CX400 and TSUBAME 2.5 を利用した研究である。議論において、住友ベークライト 和泉博士、東大物性研 中尾博士、東北大 西浦教授、小谷教授、川添教授に、ご協力いただきました。)

3.2 OCTA/SUSHI 並列化版による高分子相分離構造を含む系の超大規模計算の可能性検討

東工大の TSUBAME2.5 の性能を発揮するためには、GPGPU を有効に利用すると共に、MPI 並列下で GPGPU を有効に利用できることが望ましい。また、高性能な高分子素材を開発するためには、メゾ・

スケールでの重要な物理現象である相分離現象を精度良く予想できなくてはならない。そこで、これまで、TSUBAMEの産業利用トライアルユース『みんなのスパコン』TSUBAMEによる日本再生の課題「メソ構造を持つ高分子材料のマルチスケール・シミュレーション」(H24/9~H25/8)で、高分子の SCF 法のシミュレーションができる OCTA/SUSHI を 1 GPU で利用できるように改良すると共に MPI・GPGPU を利用した多ノード計算にも利用できるようにも改良した。しかし、GPGPU が利用する PCI-Express バスのデータ転送速度が遅いため、フラット MPI 以上に MPI 通信やホスト・デバイス間通信（ここでのホストとは GPGPU が搭載されているノードの CPU 側、デバイスとは GPGPU 側を意味する）の隠蔽の努力をし、計算速度の向上に努める必要がある。そこで本 JHPCN 課題において、ホスト・デバイス間通信の高速化を行った。

SUSHI は C++を開発言語として利用している。また、GPGPU の実装には NVIDIA 社の CUDA を利用し、直接デバイス・カーネルを実装した。OpenACC（ディレクティブにより並列化を指定する方法）は利用しなかった。SUSHI が利用する高分子の SCF 法の詳細な実装方法の説明は、ここでは割愛する。

SCF 法の計算では、有限差分法（FDM 法）を利用する。よって、MPI 並列（FDM の領域分割法）では、領域分割した糊代部分の通信のオーバー・ヘッドの低減が高速化に最も効果的と判断された。

SUSHI の GPGPU 利用の実装では、ホスト・デバイス間通信を極力避けるため、主要なデータは全てデバイスメモリ上で確保している。よって、演算は GPGPU 上で実行され、ホスト側のメモリは実質上利用しない。しかし、MPI 並列ではホスト・デバイス間通信でデバイス上のデータをホスト側に転送した後、ホスト間で MPI 通信を行う。そこで、以下の手法によりホスト・デバイス間通信の高速化を行った。

(a) Pinned メモリの利用

ホスト側のメモリの Malloc には、CUDA の Pinned メモリを利用した。これは、ホスト側のメモリ領域を固定することにより通信の高速化をはかるも

のである。具体的には、`cudaMallocOnHost` 関数を利用した。

(b) 糊代演算の先行と通信の並列化

ホスト・デバイス間通信の高速化は、非同期通信による通信の隠蔽により行う。その方法は次の通りである。

i) 糊代部分の演算を先行する。

ii) 糊代部分のデータのホスト・デバイス間非同期通信と糊代以外の演算を並列化することにより通信の隠蔽をはかる。これらの方法を利用するために CUDA のストリーム関数機能と Pinned メモリの非同期通信を行う `cudaMemcpyAsync` 関数を利用した。

システム・サイズ=51.6³、メッシュ・サイズ=96³、鎖長 N=20 の SCF 計算の静的計算における 1 時間当たりの SCF 回数を速度の指標とした。利用した計算資源は、32 ノード×2 (CPU+GPU) の 64 コア並列 (TSUBAME2.5) で、デバイスの指定は各ノードの ID=0, 1 を利用するよう明示的に行った。

MPI・GPGPU 計算において、ホスト・デバイス間通信の隠蔽有・無で比較した結果、1 例ではあるが、ホスト・デバイス間通信の隠蔽により、高分子の SCF 法における MPI・GPU 計算を約 18%高速化することを示すことができた。MPI・GPU 並列の高速化は、より大規模な系で効果的であることがわかっており、今後の高分子材料の大規模シミュレーションに寄与できるものと考えられる。

本計算手法は、相分離ということで進めたが、次年度は、この加速した計算コードを利用して、フィルター充填構造の作成を進めていく予定である。

3.3 スパコンの計算機利用技術の向上として、多機種、多環境、GPU 利用などの条件下での LAMMPS の計算性能の評価

GPU を搭載したスパコン TSUBAME2.5 を利用し、GPU クラスタ環境での、LAMMPS の効率的な実行について検討している。GPU は、特に計算負荷の大きいフルアトム模型の古典 MD 計算で威力を発揮すると考えている。TSUBAME2.5 へのアップグレ

ードに伴い、複数のプロセスから 1 つの GPU を用いた計算を実施できる設定になったことを受け、mGPUs-nCores (MPIprocs) での効率的な実行方法について検討した。Mpiexec での MPIprocs とホストの配置設定などにより、性能の差異が生じることを把握しており、詳細の検討・調整が必要である。

最終的には、LAMMPS の最新安定版 (1Feb14) と比較的新しい開発版 (19Mar14) について検討した。全原子模型 (atom_style full/cuda) について、USER-CUDA パッケージを利用し、TSUBAME2.5 を 6 ノード利用した 16 GPU-64Cores のジョブ動作を確認した。(なお、18GPU- 72Cores では、動作しなかった。) GPU パッケージでは、512GPU-512Cores のように、GPU の数と Core の数が同数の場合のみに安定的に動作した。同一条件では、GPU パッケージの方が、高速であった。今後、詳細検討する。

粗視化 MD については、GPU パッケージのみが対応しており、512GPU-512Cores で、ファイラー充填粗視化 MD 模型について、約 8000 万粒子の系 (3.6 節で準備した初期配置データを、replicate 文で 8 倍のシステムサイズにしたもの) の計算が、並列的に計算できることを確かめた。500 steps の計算に GPU なしで 760 秒の所、GPU 利用で約 100 秒程度に短縮されることを確かめた。

3.4 中規模計算のための COGNAC/OCTA の加速化

LAMMPS と共に、粗視化分子動力学法を行うシミュレーターとして OCTA/COGNAC がある。OCTA/COGNAC は、バージョン 7.1 について北海道大学において並列化対応として、コードの修正が行われ、北大のスパコンにおいてロードモジュールが利用できていた。2013 年初めにリリースされた COGNAC8.3.1 でも開発者の青柳氏らによって並列化対応がなされたが、並列化により一部の計算が並列化前のコードを用いた場合より 1core の計算などでは遅くなるという現象が起こっていた。そこで、COGNAC の開発者の青柳氏に北海道大学において行った並列化技術情報を提供することで、新たに COGNAC8.3.3 が開発され、最近リリースさ

れた。現在北大の SR16000 を用いてこの COGNAC8.3.3 のベンチマークについて、検討した。その結果を図 3 に示す。結果として、従来公開していた 7.1 と遜色なく、COGNAC 8.3.1 より大幅に高速に計算が行えるようになった。

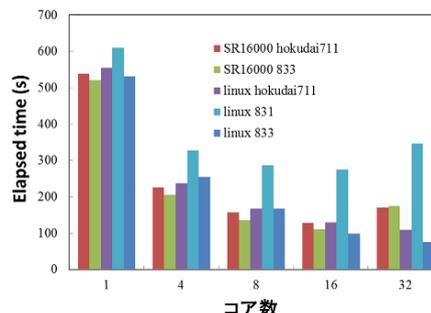


図 3 SR16000 を用いた COGNAC のベンチマーク

また、OCTA を用いた中規模計算を行う際に、ファイラー分散系シミュレーションを用いてファイラー配置を求めることも行っている。これについては、現在研究を進めている。

3.5 大規模なファイラー充填高分子系の初期配置作成と LAMMPS を用いた効率化の検討

ファイラー充填系の研究に必要な、ナノ粒子の配置を考慮した初期配置作成に取り組んでいる。そこで、実在材料を用いた実験から得られる散乱関数を用いて、ナノ粒子のモデル配置を生成させ、初期構造を作成した。具体的には、Debye Bueche 関数から、逆モンテカルロ法で初期構造を作成した。散乱関数の相関長は同一とし、散乱強度の強さを変化させ、凝集の具合を変えたものを、オープンバージョン用の初期配置の候補として作成した。

$$I(q) = \frac{A}{(1 + \xi^2 q^2)^2} \quad (\text{式 1})$$

本研究では相関長は $\xi = 11.25\text{nm}$ とした。また、散乱強度は、 $A = 11.5, 5, 75, 2.875, 1.4375, 0.71875$ と変化させた。作成したナノ粒子の 3 次元配置モデルのスライス像は、図 4 の通りである。

これらのナノ粒子構造モデルは、直径約 15nm のファイラーを 512 個含む系であり、標準的な検討で用いられる密度で、Kremer-Grest 模型を配置する

と、約 1000 万粒子程度の LJ 粒子からなる系となった。北大の SR16000 や名大 CX400 等で独自コードを用いて、格子模型で作成した初期配置について、MD を破綻させないで緩和させる計算を、効率的に実施できるように整備した。(その検討結果を、別途、フィラー充填高分子材料を検討する「京」産業利用課題の初期配置作成にも活用した。) これらの作成されたモデルについて、独自コードを用いたシミュレーションを実施し、基本的な特性とモデルの確認を行った。

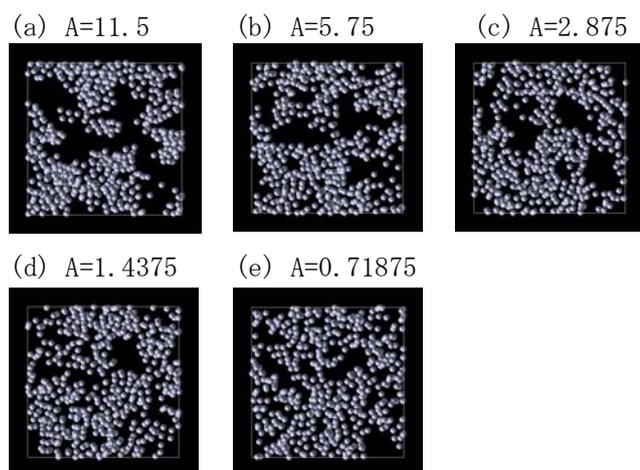


図 4 構築したナノ粒子 3 次元構造のスライス像

これらの配置については、オープンイノベーション用のデータ(共同研究の下での利用)として、基盤的な計算結果を得るために、検証と実証を進めている。より詳細な研究は、トヨタテクニカルディベロップメントの「京」産業利用課題および、3.6 章に示す研究として実施されている。

さらに、ナノマトリックス構造を有するフィラー充填高分子材料の初期配置作成方法の検討も行った。天然ゴム粒子は、約 $1\mu\text{m}$ の直径を持つ糸まり状の状態が存在する。この糸まりは、加熱や外部からの攪拌で、解くことができるものである。この天然ゴム粒子の周りに、フィラーとなるナノ粒子を吸着させ、フィラーネットワークを構築した後に、高分子を解き、かみ合い状態を変えることができる。このように作成したフィラー充填ゴム材料はフィラーの体積分率が低くても、フィラー同士がパーコレーションすることから、物性への影響を与え、特徴的な挙動を示すと予想される。

このように作成されたフィラーネットワークを有する構造はナノマトリックス構造と呼ばれている。

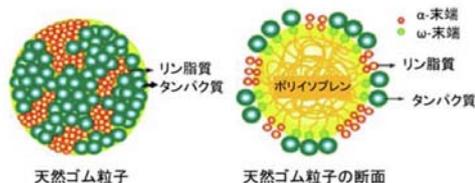


図 5 天然ゴムのナノマトリックス構造

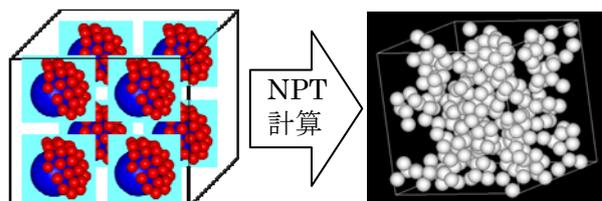


図 6 ナノマトリックス構造作成のイメージ

ナノマトリックス構造のフィラー構造モデル構築を考える場合、図 5 のように、天然ゴム粒子は直径の大きな球でフィラーは小さい球で粗視化できると考えられる。本研究では、このような天然ゴム粒子(ナノ粒子付き)を複数配置し、NPT 計算で、ナノ粒子の体積分率を調整することで、ナノ粒子の初期配置を作成する方法を検討した。

3.6 LAMMPS を用いた大規模フィラー充填系粗視化 MD 計算の実行とベンチマーク

フィラー充填系高分子材料として、小規模モデル、及び大規模モデルの 2 つのモデルにおいて、検討を行った。小規模なモデルでは、図 7 に示す通りフィラーを均一に配置した分散モデル(高分子 46 本、フィラー 16 個)とフィラー同士の一部が接触している接触配置モデル(高分子 64 本、フィラー 21 個)を用意した。フィラーの半径は 7σ でモデルに対する体積含有率は 30% とした。

図 8 に小規模モデルを歪速度 2×10^{-5} で一軸伸張変形させた時の応力 - 歪カーブを示す。ポアソン比は 0.5 と仮定した。2 種類のモデルはいずれも架橋ゴムより高い応力を発揮しており、フィラー充填による補強効果を再現している。一方で、フィラー接触モデル(赤線)のカーブを見ると、

接触の無い均一配置モデル（青線）と比較し微小な歪の領域から高い応力を出していることが確認できる。この高い応力は、接触配置モデルの変形時にフィラー同士が接触・衝突してお互いの動きを拘束するために発揮されていることが、応力を熱運動からの寄与、非結合相互作用からの寄与、結合相互作用からの寄与、フィラーを剛体として保つための外力からの寄与と詳細に分割して調べることにより明らかになった。

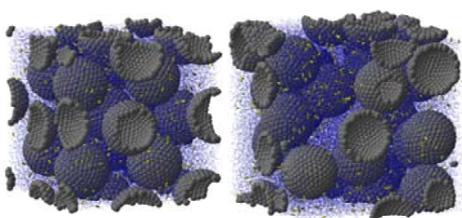


図 7 フィラー充填構造のスナップショット。左、右図は、フィラーの分散、接触構造を示す。

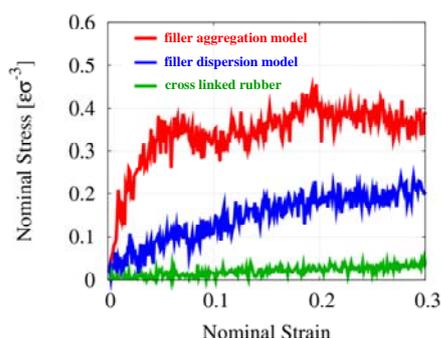


図 8 小規模系の伸張計算における応力歪曲線

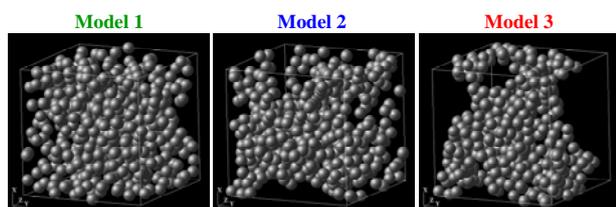


図 9 異なる分散構造をもった大規模系の初期構造。

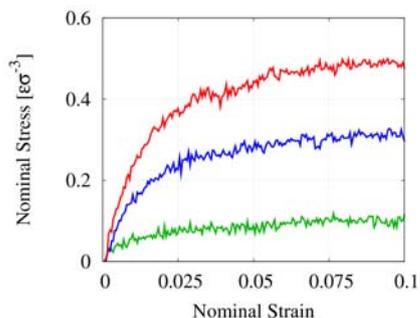


図 10 図 9 大規模系伸張計算における応力歪曲線

続いて、フィラーの接触状態の変化がゴムの特性に及ぼす影響を調べるため、大規模なモデルを作成し小規模なモデルと同様に歪速度 2×10^{-5} に対するゴムモデルの引張り特性の変化を解析した。モデルは半径が 11.3σ のフィラーが 512 個、高分子鎖が 10240 本で構成され、体積含有率は約 29% とした。さらに、図 9 に示すように、フィラーの配置（凝集状態）の異なる 3 つのモデルを作成した。大規模ゴムモデルを一軸伸張変形させた時の応力変化と歪の関係を図 10 に示した。フィラーの凝集が顕著なモデルになるほど（Model 1→3）変形に対して高い応力を発揮していることが確認できる。この原因はフィラーの凝集が顕著なモデルほど、フィラー同士の接触頻度が高くなりフィラーの運動性が悪くなるためである。

3.8 次世代のトップスパコンで実現可能なパラメータ計算研究のためのベンチマーク系の整備

次世代のトップスパコン向けのベンチマーク系の整備は、スパコンの成長とともに大規模化し、今後は、1 億～100 億粒子といった超大規模系の計算での評価が欠かせない。

LAMMPS においては、replicate コマンドにより、周期境界条件のミラーを作成し、大規模系のデータを作成できる。しかしながら、架橋高分子系においては、周期境界条件をまたぐ結合を有するために、正常に機能しない。ネットワークグラフを分解することで、周期境界条件を wrap するネットワーク結合を特別に扱うことは可能である。もし、高分子鎖と架橋という事前知識がなければ、大規模な 3 次元グラフ解析の課題と成る。大規模グラフ解析は、数学・計算機科学の課題として精力的に研究されているが、現在の技術でも事実上困難な問題である。一方で、高分子鎖と架橋という事前知識を用いることで、架橋のリストを作成して対応することができる。この考えに基づき、大規模データを作成する手順を検討し、実証確認した。なお、replicate 文を用いた大規模データの作成については、LAMMPS 開発チームともディスカッション／情報交換を行った。

3.8 パラメータスタディの効率的な実施技法の検討

複数センターのシステムを連携利用し、材料研究のためのパラメータスタディの効率的な実施技法に関するディスカッションを行った。特に、センターのセキュリティ対策や、今後導入されるシステムの動向を踏まえて、昨年度試作した（計算の半自動実施の）ツールや WEB 利用などの実利用に向けたフレームの改良に向けた議論を深めた。複数センター利用の連携に関しては、データ移動の（自動ツール化）問題は、転送バンド幅の問題に加えて、公開鍵のパスフレーズ設定やデータ移動の片方向アクセスなどのセキュリティ設定などを考慮する必要がある。有力候補の HPCI ストレージは計算ノードにマウントされていないことや比較的高速なディスクへのコピー後のデータアクセスが実質必要であるという課題もある。将来の HPCI ストレージの利用に向け、数日にわたるデータコピーに対応するため、代理証明書の自動発行（WEB 試験ツールの活用）や、expect コマンドと cron を活用した myproxy-login コマンドの発行などの仕組みの基礎検討を行った。このような課題を認識しつつ、新しいシステムでの解決も、一つの方向と考えている。北大の新クラウドでは、高速アクセス可能なストレージが搭載されるなどの動きもあり、その利用を前提としたツール改良を行うか、さらに議論を深めて行く考えである。

3.9 大規模粒子系の時系列データ記録に関するシステムソフトウェア検討

分子動力学法で得られる粒子座標の時系列データは、可視化目的や解析目的で、比較的高い頻度（短い時間間隔）での記録が望まれている。精度を制約した記録、Hoffmann 符号化で圧縮した記録や、多項式近似による圧縮記録などがある。これらには、それぞれ、精度や、圧縮復号時の演算コストなどの特性の違いがある。生体高分子の系では、XTC という精度を制約し Hoffmann 符号化で圧縮した記録方式が用いられている。

時系列データを多項式近似で圧縮する方法については、自然科学研究機構のプロジェクトと連携し、TOKI (Time Order, Kinetic, and Irreversible) 圧縮として検討を深めた。多項式の最小二乗評価の高速化計算手法や、Chebyshev 多項式を用いて minimax 多項式を評価する方法についても検討を行った。プラズマ粒子シミュレーションのデータを中心に、基本性能評価や、圧縮法として有利となる特性についての分析を行った。

(2) 当初計画の達成状況について

(2)-1) 共通で利用できるシミュレータの基盤整備

・GPU を活用する LAMMPS の大規模計算の検討

・LAMMPS における各種評価、及び最適化検討

LAMMPS の大規模計算として、クーロン力を含む全原子モデルの MD 計算について、GPU を利用した大規模な計算を実施し、応力歪曲線評価やガラス転移温度評価などのアレイジョブを効率よく実施できることを確かめることができた。以上より、GPU 利用した LAMMPS 並列計算の最適条件の探索や利用方法の見通しを立てることができ、H26 年度において活用が期待できるようになった。また、新たに見出されたテーマは、他の HPCI・JHPCN 課題として別途展開する。

・並列化版 OCTA/SUSHI 超大規模計算の可能性検討

GPU を用いた OCTA/SUSHI 大規模計算の TSUBAME の上で大規模並列対応は、従来に比べて 18%もの加速を達成し、次年度行う COGNAC-SUSHI 連携を用いたファイラー充填系初期構造作成について SUSHI を用いる目途を立てることができた。

・中規模計算のための COGNAC/OCTA の加速化

北大 SR16000 に対して、最新版 OCTA/COGNAC8.3.3 を動作できるように整備し、従来版の並列化版 COGNAC7.1 や、COGNAC8.3.1 に比べて、高速に実行できることが確認できた。

(2)-2) モデル・計算手法の構築と大規模シミュレーションのベンチマーク

・ファイラー充填系高分子材料の大規模計算の汎用（コモディティ）的实施のためのスタート地点となる規模のベンチマーク系の整備

1000 万粒子系のフィラーを含む粗視化 MD 模型の LAMMPS 利用並列計算について、フィラーモルフォロジーの際による応力歪関係の評価の妥当性検証について、概ね終了することができた

・大規模なフィラー充填高分子系の初期配置作成と LAMMPS を用いた効率化の検討

・次世代のトップスパソコンで実現可能なパラメータ計算研究のためのベンチマーク系の整備

大規模なフィラー充填系の初期配置を作成し、計算を実施する基盤的検討も予定通り達成することができた

(2)-3) シミュレーションデータの解析技術の整備

・パラメータスタディの効率的な実施技法の検討

パラメータスタディの実施などを想定し、多拠点のセンターを、シームレスに利用するためのシステム検討（特に、セキュリティ対応策への自動化技術等）を実施した。セキュリティ対策強化に応じた技術的対応の増加のために、検討が停滞していたが、北大クラウドサーバからの自動ログインやロボット処理を実現するための基盤技術の基礎検討を完了した。今年度は具体的なパラメータスタディの実施環境の検討を深めることができなかったため、次年度継続して検討を進める。

・大規模粒子系の時系列データ記録に関するシステムソフトウェア検討

高い IO 性能が要求される時系列データ解析や大規模 VR 可視化のための基盤技術として、粒子系の時系列データの圧縮法について、他の研究課題等と連携して、検討を進めた。また、新たに見出されたテーマは、他の HPCI・JHPCN 課題として別途展開する。

(2)-4) その他の特記事項

本研究課題は、今後の高分子材料研究におけるオープンイノベーションのための技術的な整備を目的としており、外部への情報発信も重要である。そこで、本研究課題の成果として、2014 年 1 月 22 日に「北大一産総研 包括連携等事業ワークショップ」を開催し、多数の産学官の研究者に参加いただき、情報提供することができた。H26 年度も開催し、引き続き情報発信していく予定である。

4. 今後の展望

フィラー充填高分子材料における粗視化 MD の大規模計算を実施する環境について、JHPCN 共同研究という様々なハードウェアを使うことができる状況(利点)の下で、ハードウェアソフトウェアをセットで考えた観点から、かなり整備できてきた。研究が進展したことから、今後進めるべき課題、さらに手が届きそうな課題も見えてきた。例えば、OCTA における COGNAC-SUSHI 連携等を大規模で行う点については、次年度に進めるべきテーマとなると考えている。また、得られた知見についてもかなり蓄積ができてきた。COGNAC-SUSHI 連携以外にも OCTA を核としたシミュレーター(プログラム間)連携も重要であり、今後の JHPCN 活動等で応用・活用事例を積み増していきたい。一方で、産学官連携研究などを通じて、広く活用促進させることが重要となると考えている。

さらに、OCTA/COGNAC などでのパラメータスタディは、材料検討や物理現象解明において、重要である。今後、本研究課題のメンバーである北大棟朝先生と、サイエンスクラウドなどの活用を視野に入れながら、この方向の検討を進めていく。

加えて、高精細な高解像度可視化装置を用いた VR 可視化技術は、研究者間の議論の促進や、理解増進、アウトリーチ活動などに有効であることが期待される。H26 年度以降は、いくつかのセンター教員との可視化等においてもさらなる連携を深め、この方向の検討も強化させていく考えである。

本 JHPCN 課題では、フィラー充填系高分子材料の研究を核として、幅広い検討を実施している。関連し派生する萌芽的な HPC 研究が立ち上がり、現に、H26 年度の HPCI 研究課題や JHPCN 課題として、実施されることとなった。今後の展開において、フィラー充填系高分子材料を核にさらに広範な高分子材料への適用を考えながら、複数センター間でのネットワーク型連携を活用する課題として、計算科学と計算機科学の研究者らが協力できる検討体制をとりながら、さらに産学官連携で進めることができる研究を検討している。

5. 研究成果リスト

(1) 学術論文 (投稿中のものは「投稿中」と明記)

・森田裕史、青柳裕子、小林秀樹、” 球形フィラー/2 成分ポリマー混合系における相分離構造シミュレーションプログラムの開発”, 日本ゴム協会誌 (査読有), 86, 222 (2013).

(2) 国際会議プロシーディングス

・K. Hagita, H. Ohtani, T. Kato, and, S. Ishiguro, “TOKI compression for plasma particle simulation”, Plasma and Fusion Research, (2013), accepted.

(3) 国際会議発表

・K. Hagita, “Brief reviews of combined simulations of polymer nano-composite systems by using LAMMPS”, 2013 LAMMPS workshop, (Albuquerque, USA), (2013.8)

・K. Hagita, “Brief reviews of combined simulations of polymer nano-composite systems”, CECAM Workshop: Coarse-graining multicomponent soft matter systems: equilibrium and dynamics, (Mainz, Germany), (2013.8)

・K. Hagita, “Study of interface effect of nano-particles of polymer nano-composite system”, MDOI 2013 (Beijing, China) (2013.9)

・H. Ohtani, K. Hagita, A. M. Ito, T. Kato, T. Saitoh and T. Takeda, “Time-Order Kinetic Irreversible Compression Scheme for Visualization of Large Particle System”, Refreed Poster at IEEE Vis2013 (Atlanta, USA) (2013.10).

・K. Hagita, “Stress-strain relation of K4 Phenolic resins by classical MD simulation”, ACCMSVO-8 (Sendai, Japan) (2013.11)

・K. Hagita, T. Takeda, T. Kato, H. Ohtani, S. Ishiguro, “Efficient data Compression of time series of particles’ positions for High-throughput Animated Visualization”, Refreed Poster at SC13 (Denver, USA) (2013.11).

・T. Kato, H. Ohtani, S. Ishiguro, and K. Hagita,

“Study of TOKI compression for plasma particle simulation”, (Toki, JAPAN) (2013.11)

・Kentarō Nagaya, Masatoshi Sato, Yosuke Kimura, The Microscopic Effect of Filler Aggregation on Dynamic Shear Modulus of Rubber: A Coarse-Grained Molecular Dynamics Study, The 13th Pacific Polymer Conference (Taiwan) (2013.11)

・K. Hagita, “Large-scale cg-MD simulation of polymer nano-composite filled with nano-particles”, ESPCI-Michelin workshop (Paris, France) (2013.12)

・K. Hagita, “Stress-strain relation of K4 phenolic resins by classical MD simulation”, APS March Meeting 2014 (Denver, USA) (2014.3)

・K. Hagita, “Activity of study group of LAMMPS (Polymer Physics and Materials) in JAPAN”, LAMMPS Developers & Users Meeting (Trieste, Italy) (2014.3)

(4) 国内会議発表

・萩田 克美, “ナノマトリックス構造を有する高分子複合体の粗視化シミュレーション解析”, 高分子討論会(金沢大学) (2013.9)

・佐藤 正俊, 永治 健太郎, 木村 陽介, 萩田 克美, 粗視化分子動力学法によるゴム特性のメカニズム解析, 日本機械学会 第 26 回計算力学講演会 (CMD2013) (2013.11)

・森田裕史, 萩田克美, 高野宏, フィラー充填系ゴムの多階層シミュレーション法の開発, 第 25 回エラストマー討論会 (京都大学) (2013.10)

・本田 隆, “高分子溶融体中に存在する固体粒子の分布構造” 第 14 回高分子計算機科学研究討論会 ポスター 東工大、大岡山 (2014).

(5) その他 (特許, プレス発表, 著書等)

特になし。