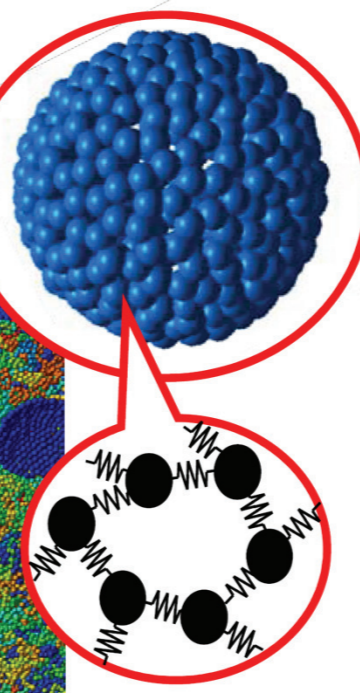
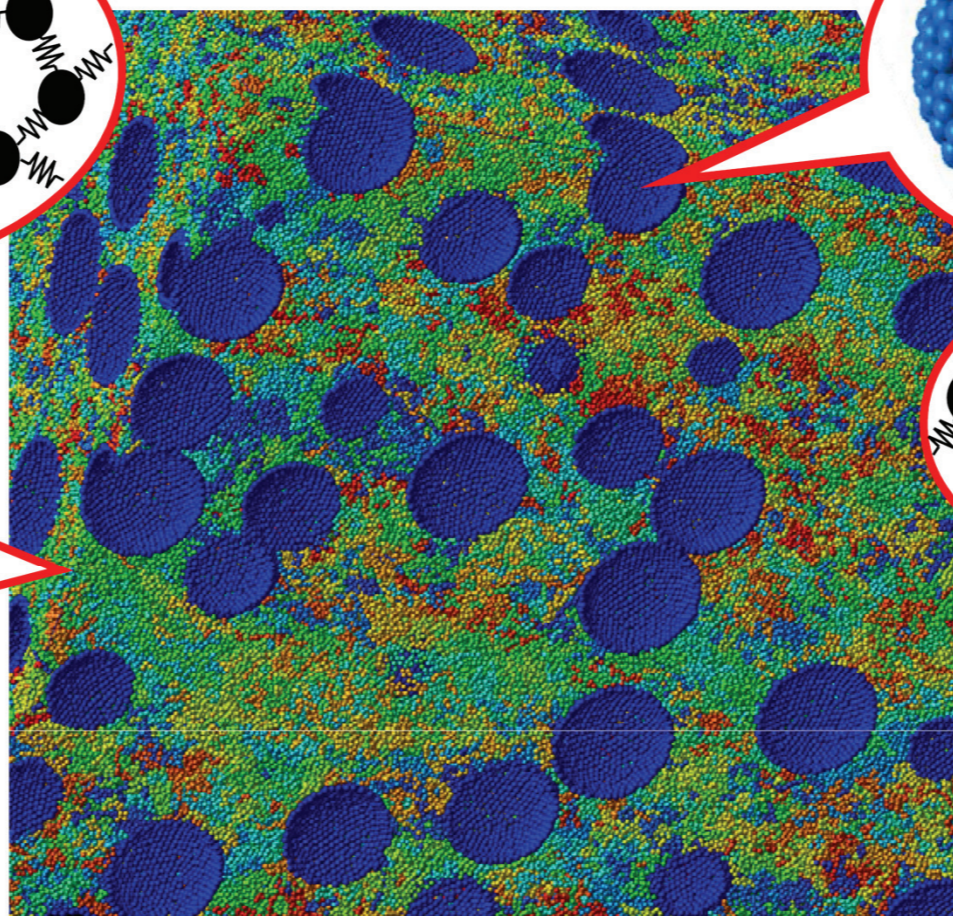
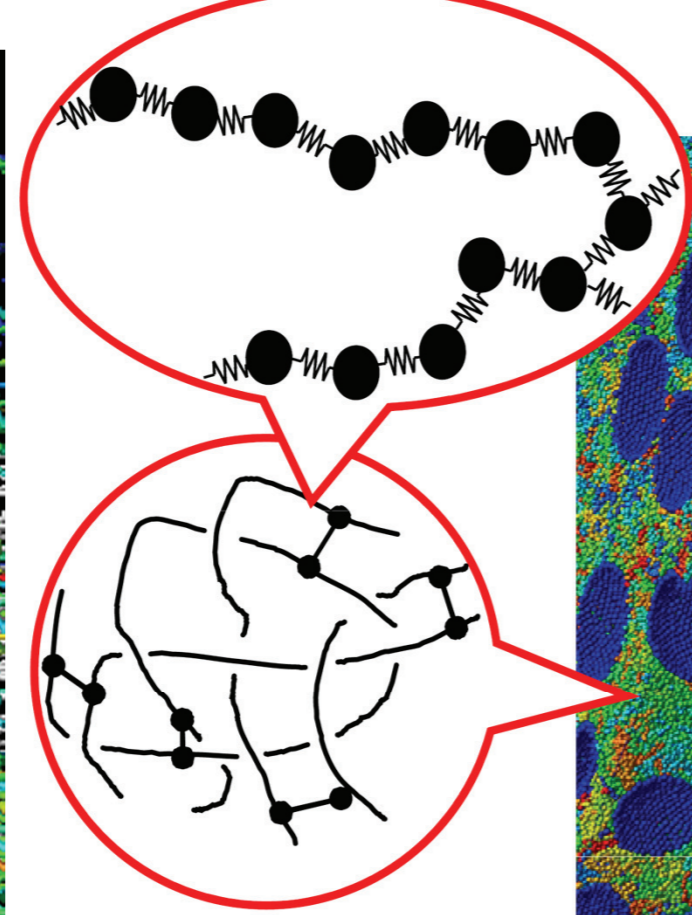
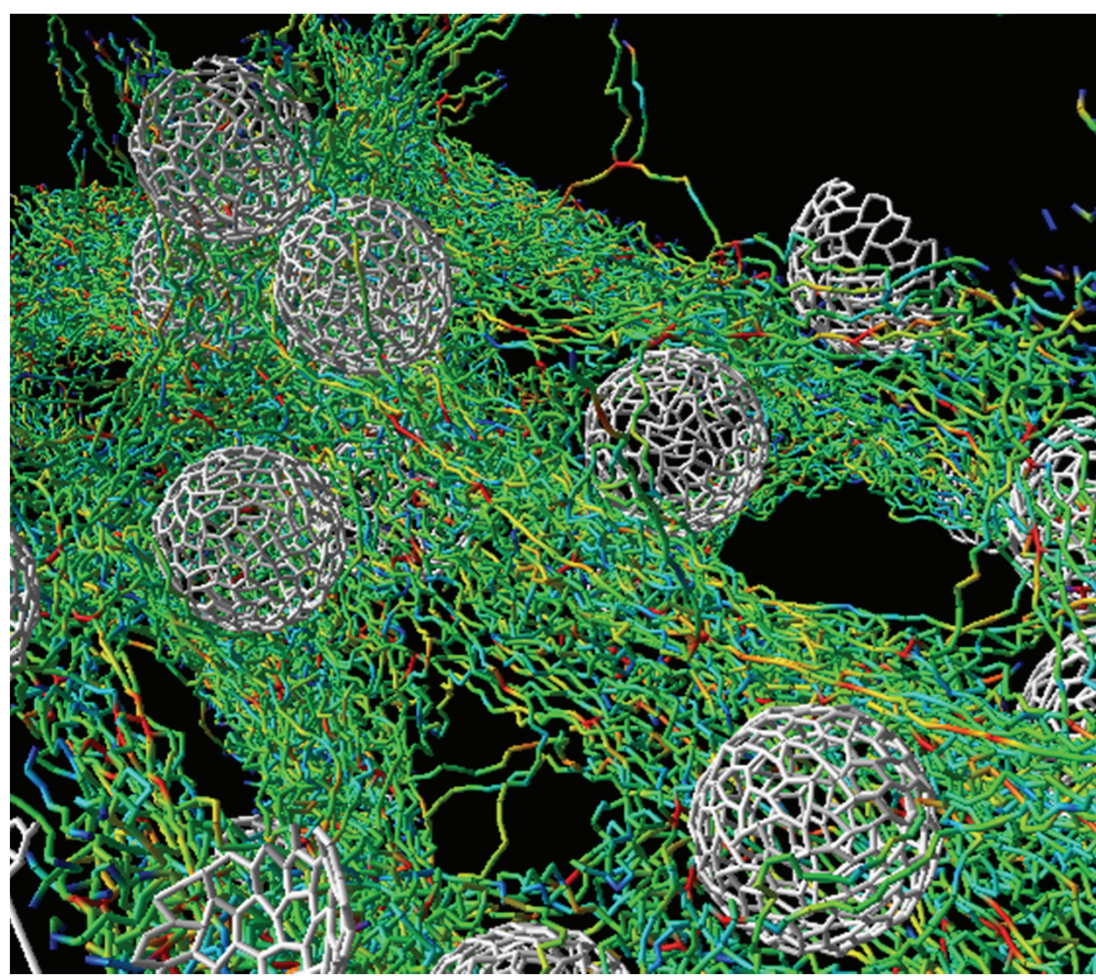




(フィラー充填)高分子材料

もっとも単純なバネ・ビーズ模型

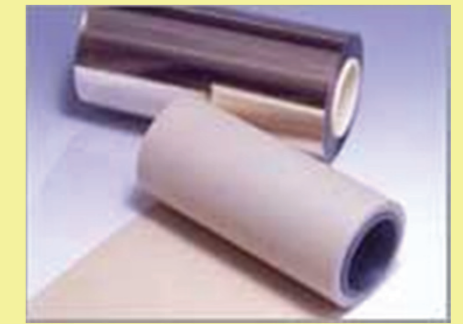


新機能／高性能産業応用

ゴム・エラストマー



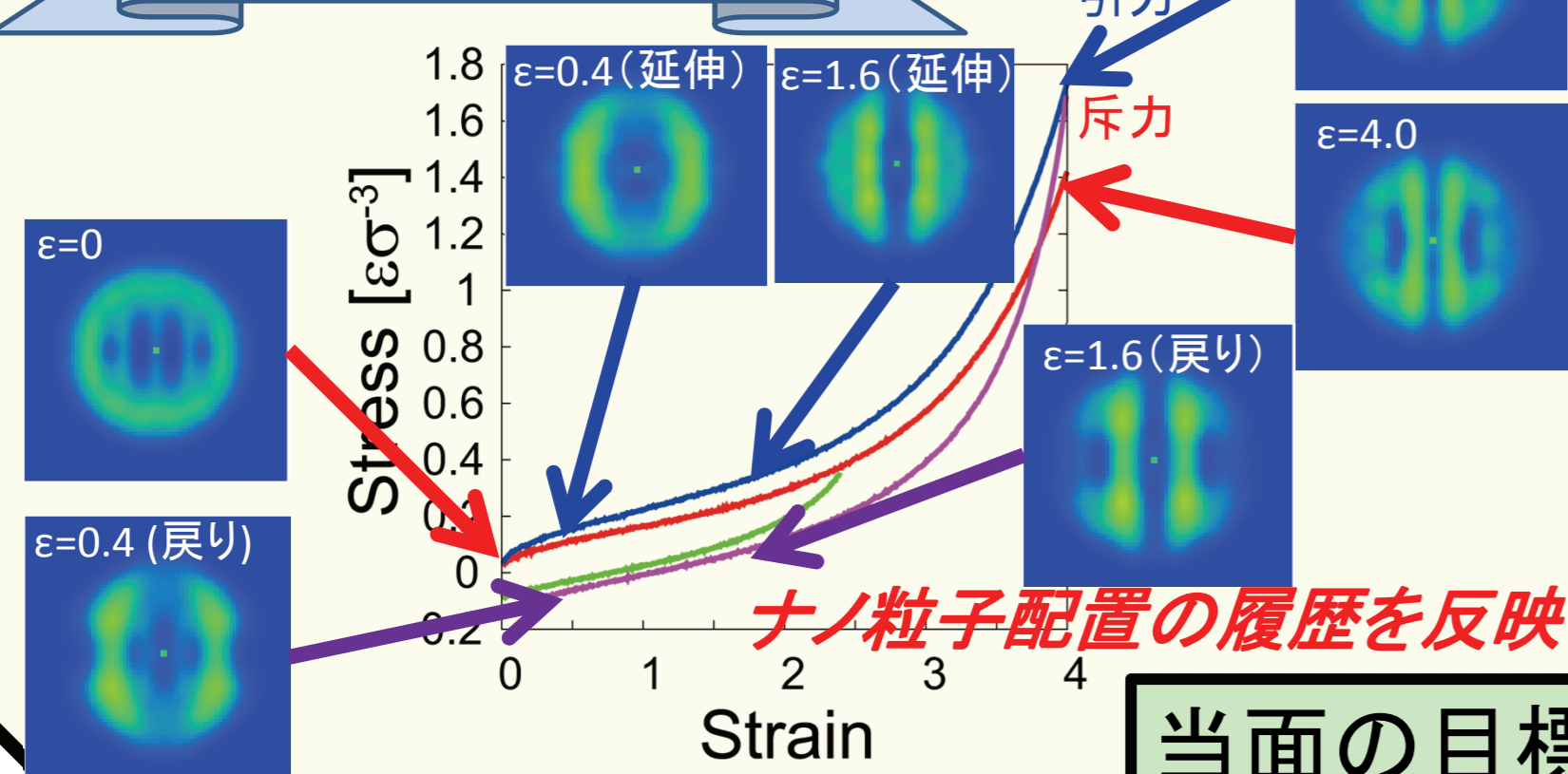
フィルム材料



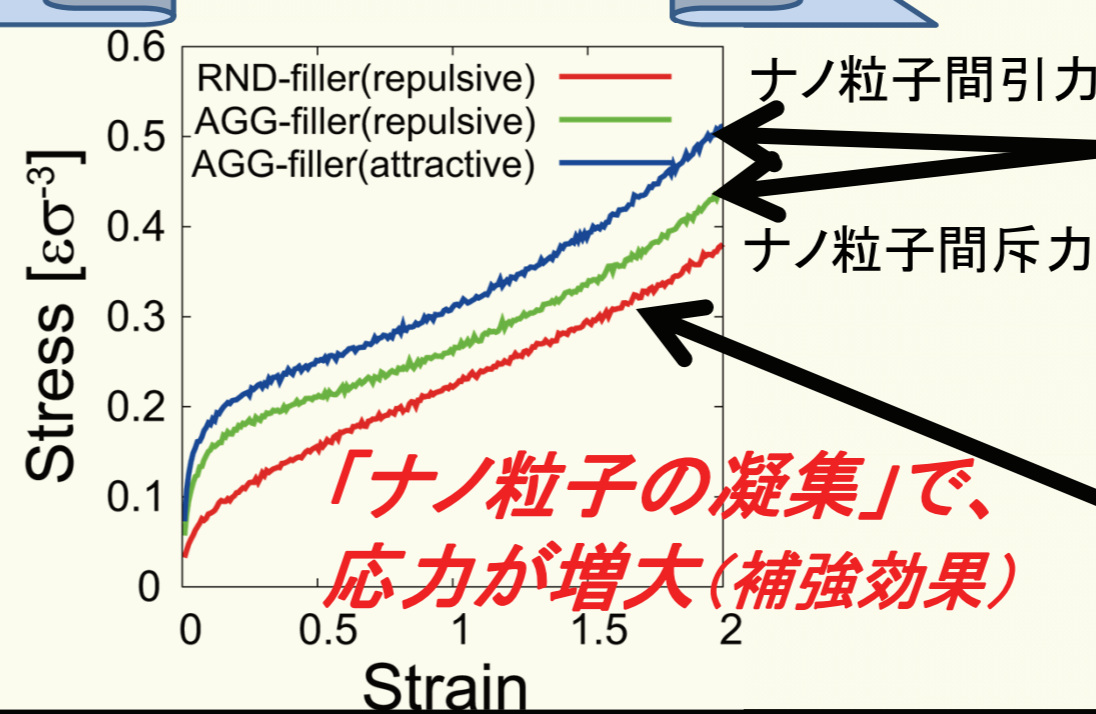
高分子の分子レベル形状効果の応用

東大FX10やe-Scienceクラスター等の計算事例

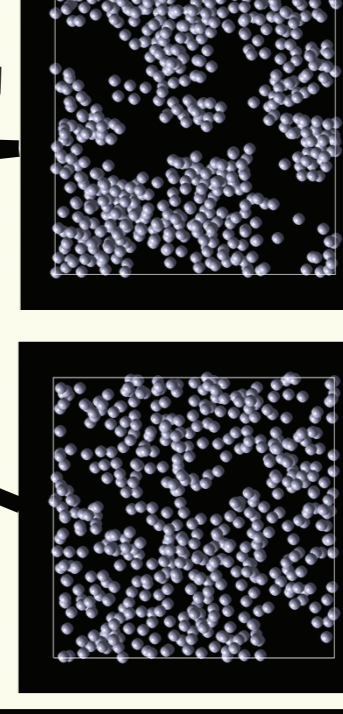
延伸した場合の散乱パターン



ナノ粒子の凝集構造に応じたSSカーブ



3次元配置をスライス表示



Debye-Bueche式

$$I(q) \propto 1/(1 + \xi^2 q^2)^2$$

散乱強度に応じて、粒子の凝集状況(局所密度)が変化

逆モンテカルロ法

散乱プロファイルに一致する3次元構造を逆問題推定

当面の目標課題は、FX10や、SR16000/M1で、概ね解決できる見通し。あとは、普及してもらう期待。

次なる課題の挑戦へ

H22,H23実施内容

課題1

独自の超並列コード (分散入出力対応済)

本格的な大規模超並列計算技術

- ・大規模系の効率的な初期配置作成方法
- ・MPI/OpenMPハイブリッド／通信の隠蔽化
- ・IO専用MPIプロセスを立てる2質性プログラミングでファイル出力の隠蔽化

課題2

OCTA COGNAC + alpha

既存ソフトのSMP大規模並列化

- ・多数CoresでのOpenMP化技法の検討
- ・並列乱数生成の実装完了
- ・大規模計算の実証検証を実施
- ・OCTA/SUSHI(相分離シミュレータ)連携

課題3

AVS/Express + alpha

大規模系の効果的な可視化技術

- ・大規模並列可視化を実証検証
- ・CAVE没入型探索的可視化+UIデバイス
- ・超大規模粒子系のリアルタイム可視化技法の検討(データ圧縮法の検討)

最終年度実施内容

構築した基盤環境のブラッシュアップと活用

プロダクトラン

- ・東大PrimeHPC FX-10、北大 Hitachi SR16000/M1を利用した、プロダクトランを実施し、計算事例を示す。(東北大金研スパコンでの応用指向計算に活用。)(超多ノード大規模より、マルチパラメータ指向。)

OCTA活用+マルチパラメータサーベイ

- ・SMP-OCTA/cognacを用いた、OCTA/SUSHI(相分離構造のメソスケール平均場シミュレータ)連携の大規模計算事例
- ・マルチパラメータサーベイのシステム化技術(RCM)のOCTA/cognacでの実践。(奥田先生projectと連携実施。)

超多粒子系VR

- ・高分子系など、粒子系の超大規模可視化に関する計算機科学的検討。(H24採択NINS若手研究との連携実施。)
- ・複雑な3次元ネットワーク構造を持つ物性材料系の可視化技法の検討。(炭素構造のマッカーイ結晶やCNT等含む。)

コモディティ化

- ・米国のアプリLAMMPSを利用した計算の実施。(移行)(独自コードは初期配置作成等の高ノウハウ用途に限定)
- ・LAMMPSの並列化仕様に応じた、計算モデルの変更。
- ・LAMMPS-libを活用したカスタムアプリのOpenACC対応など。

逆問題解法

- ・逆モンテカルロ法を用いた、多様なナノ粒子凝集ストラクチャの作成と、それに基づく初期配置作成。(＋計算事例)
- ・逆問題解法の数学的背景と効率化に関する検討
- ・パラメータ探索効率化など、知的探索手段の検討

数学的分析

- ・フィラーや高分子の凝集ネットワーク構造の計算位相幾何学的分析と特徴付け。(Betti数判定など)
- ・純粋数学から導かれる構造を用いた、計算事例の実施。(数学的対称性や「きれいさ」と、物性との対応関係。)

技術情勢を踏まえた対応。また、解決すべき事象が必要とする計算規模も判明。分散IO非対応のLAMMPSでも、実施可能。