

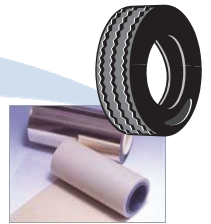
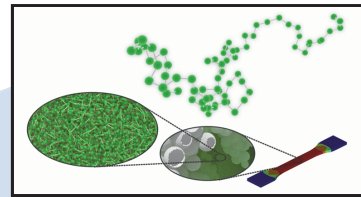
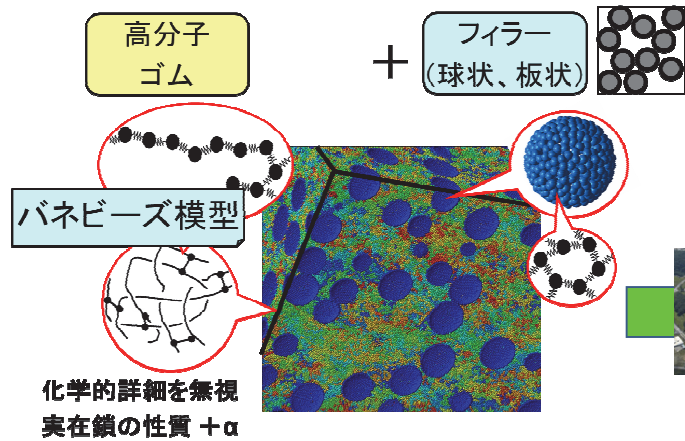
jh160036-NAH

萩田 克美 (防衛大学校)

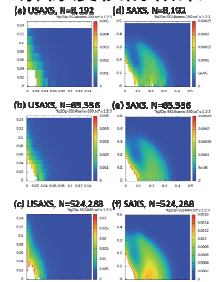
高分子材料系の粗視化MDの次世代大規模HPC利用の基盤的研究



フィラー充填高分子材料のモデル



2次元散乱乱パターン  
の計算規模(フィラー数)  
と解像度検討結果



課題事項

- ・SPring-8の実験データの解像度には、より大規模な計算が必要。  
→今の64倍。52万個のナノ粒子  
→100億粒子の粗視化MD計算
- ・時間方向で、 $10^6$ 倍遅くしたい。  
※実験とシミュレーションでの延伸速度の差。  
→別のScience/Algorithmが必要。

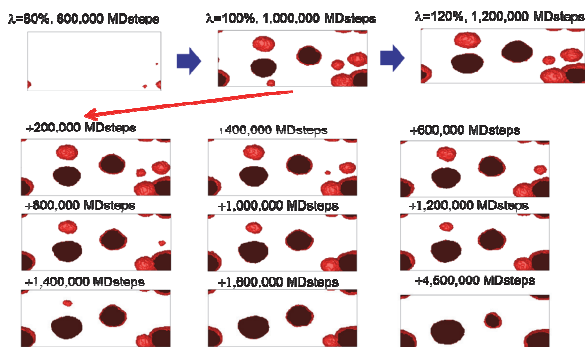
検討目標

- ・Minimize計算とMDの組合せ等での高速化の可能性検討。  
→解きたい問題が準静的なので。
- ・大規模product-runのインフラ整備
- ・フィラー系は、来年度以降、本格実施。  
(今年度は、計算機リソースの問題で、準備)  
来年度に、HPCI課題へ申請する準備。

検討中の事項

延伸速度依存性を軽減する評価法の検討

- ・フィラーなしのポリマーメルトの延伸破壊検討に集中  
※ボイドの成長を、高速な評価ができるか？  
※ $N=1024$ の鎖を6400本のKremer-Grest模型



$\lambda=200\%$



真球になるまでを高速に計算する技法開発の問題

LAMMPSの大規模・高速計算技法の検証

- ・先導的なテーマでの計算事例の創出  
※スパコン/SPring-8の連携サイエンス課題  
※ナノ粒子充填高分子系での国際的連携や、計算科学的リード  
→ 論文化のProduct-run。(資源問題で来年度に延期。今年度は準備。)
- ・高速化の国際動向: Phi対応+GPU対応(Kokkos)への catch-up  
→ 勉強会などを通じた、広い共同検討体制。  
(さまざまな研究テーマでの相互実証確認の推進)

名大	日程	内容	特徴
阪大	4/9, 5/14	LAMMPS利用入門セミナー	基礎、ナノ粒子系
阪大	4/14, 6/1, 7/12, 他	高分子材料系LAMMPS大規模計算の活用入門セミナー	基礎、大規模、GPU、Phi、最適化、産学連携
北大	10月頃予定	LAMMPS大規模計算の滞在型勉強会	商用クラウド活用
兵庫県立大 FOCUS/RIST	10/26, 12/7	高分子材料LAMMPS利用入門セミナー	基礎、産学連携、大規模 ※タイアップセミナーあり
関東周辺	後期	<企画検討中>	基礎、未定

LAMMPSの大規模可視化のコモディティ化

- ・遠隔可視化装置 (SGI Altix UV 2000) の活用。Co-work space。  
※2次元散乱パターン解析の推進。
- ・高品位な大規模系可視化 (Pov-ray等) の作業効率の向上。  
※ball-stick系の大規模可視化。