

10-MD01

粗視化分子動力学法による高分子系シミュレーション基盤の 計算機科学的高度化検討 萩田 克美（防衛大学校）

本研究では、高分子やゴム材料の次世代デジタルエンジニアリングの実現に向けて、高分子をバネとビーズで表現した粗視化分子動力学法について、次世代の Peta・Exa スケールコンピューティングを視野に入れた計算機科学的高度化を進めた。高分子物理（計算科学）側の課題・ニーズについて、計算機科学の専門家とともに解決することに主眼を置いた。高分子物理研究者単独では解決困難な課題の解決につながり、研究が進展した。具体的には、以下の進歩があった。既存の規模を凌駕する 3.5 億粒子クラスの初期配置を実際に作成した。大規模な系の探索的可視化や高臨場感のある没入型立体可視化が可能になった。正規乱数の生成では、従来的高速化より、CPU ハードウェア処理性能の向上のため三角関数を計算する方法が高速であることを確かめた。超並列コードにインバランス解消機構の組込みを始めとする高速化を実施した。ネットワーク型で大規模計算のプロダクト・ラン実施に必要なインフラ利用法の向上ができた。

1. 研究の目的と意義

本研究では、将来の超大規模シミュレーションによる高分子系の材料設計開発（次世代デジタルエンジニアリング）の実現を目標として、超並列計算用にコーディングした粗視化分子動力学 (MD) 法のコードのチューニングとそれを利用した研究基盤を、計算機科学的高度化することで、系統的に整備することを主な目的とした。あわせて、高分子系の大規模時系列データの可視化・メソ化表現手法についての検討も重要な目的とした。

本年度は、大規模な初期配置を効率的に作成する手法や、大規模可視化技法を中心に、シミュレーションで問題を解決する計算科学者と、計算機の専門家が密に協力して、研究開発を実施した。

高分子材料・ソフトマテリアル分野では、最近の高分子合成技術の進展に伴い、分子鎖のつながり・形状を頭わに考慮した物質の物性研究が盛んに行われている。分子鎖のつながりや形状を考慮したシミュレーションには、Kremer-Grest 模型[J. Chem. Phys. 92 (1990) 5057] と呼ばれるランダム力を含む粗視化 MD 法が標準的な手法としてよく用いられている。我々は、地球シミュレータを利用し、分散入出力・分散計算の実装を行った。今後のスカラ計算機でのチューニングを行うとともに、並列性向上の手段として並列ノード間の計算コストのインバランス解消機構の実装も行う必

要がある。一方で、高分子系材料で重要なメソからマクロにつなぐサブマイクロ領域の検討には、粗視化 MD 法が最適である。より大きなスケールを扱うマクロな計算手法（有限要素法）などのパラメータ決定や妥当性検証に、粗視化 MD の大規模計算やメソ化（さらなる粗視化や平均化）の手法の開発が欠かせない。故に、大型計算機を駆使した粗視化 MD 計算の基盤の整備が重要である。

高分子材料・ソフトマテリアルは、現代社会の基盤をなすものであり、現在も進化し続けている。タイヤゴム材料やプラスチック材料をはじめとする高分子ナノコンポジットは、多くの工業製品に用いられている。地球環境保護の観点から、更なる高性能化が望まれている。高分子合成等の製造技術の最近の急速な発展の恩恵を受けるために、分子レベルでの材料開発が期待されている。現状は、分子レベルでのメカニズムの理解を経ずに、試行錯誤で材料を発見的に改良している。今後は、分子シミュレーションによる予測・設計・メカニズムの解明が期待されている。最近の我々の研究で、タイヤゴム材料については、実験で観測される粘弾性の物性値が定量的に評価できることがわかったことも、実用への期待を高めているところである。本研究を深化させ、大規模計算を活用した成功例を示すことで、産業界への応用展開を促進したいと考えている。多くの産学のユーザーが、

小さな計算から大規模計算までシームレスに移行できるように、既存のソフトマテリアル統合シミュレータ OCTA[<http://octa.jp/>]との連携、大規模な系のスムーズな可視化、可視化空間の動的探索への対応など、先端要素技術の検討は重要である。

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大学名

北海道大学
東京大学
名古屋大学
大阪大学

(2) 共同研究分野

超大規模数値計算系応用分野
大規模データ処理系応用分野
大規模情報システム関連研究分野

(3) 当公募型共同研究ならではの事項など

本研究のスコープは、計算科学（高分子物理学）と計算機科学の連携による計算機利用技法に関する研究である。本研究課題の範囲では、高分子系の理解を目的とするプロダクト・ランによる研究は実施していない。本年度は、将来規模のシミュレーション研究を可能とするための要素技術検討を行った。特に、高分子物理学（計算科学）の研究者グループ単独では困難な課題について、計算機科学研究者や計算機技術者の協力を得て、高度なプログラミング技法、効率的なデータハンドリング技法、高度な可視化技法などの検討を行った。

本公募型研究は、一般的な研究者が参画できる、複数の情報基盤センターの大型計算機を連携して利用することが前提の、ほぼ唯一の公的な機会である。特に、計算機科学の専門家からネットワーク型研究を前提とした技術指導をいただくとともに多くの議論をしていただいたこと、が最大の意義である。これまでは、制度上、個別の情報基盤センターでの利用であり、複数のセンターを連携した利用については、利用者責任で解決すべきものであった。複数の情報基盤センターとの連携によって、世界最大規模の計算実施目処が立つ結果となり、研究進展に多大に貢献していると言える。

北海道大学情報基盤センターでは、大規模データ処理技法の検討、超並列コードのチューニング、並列乱数生成に関する検討、大規模可視化のためのプラットフォーム検討、OCTA/cognac とのシームレス接続に関する検討を実施した。

東京大学情報基盤センターでは、超並列コードのチューニング、大規模な系の並列可視化技法の検討を実施した。

名古屋大学情報基盤センターでは、大規模な初期配置の作成方法の検討、大規模可視化のためのプラットフォーム検討、大規模な系の並列可視化技法の検討を実施した。

大阪大学サイバーメディアセンターでは、CAVEを利用した高臨場感可視化の検討を実施した。

複数センターとの連携による研究の成果として、現在の高分子物理学研究として行われるプロダクト・ランよりもはるかに大きな規模を実現する枠組みの構築を行い、実証することができた。

3. 研究成果の詳細

(1) 超大規模シミュレーションの初期配置の作成方法の検討

障害物（フィラーなど）が存在する空間中で、絡まりあう長い高分子鎖の配置を作成する問題は、容易ではない。材料に対応した密度は、粗視化高分子の球の体積を1とする場合、約0.5にもおおよぶ。空いている空間に高分子をランダムに伸ばして配置を作成しようとする、鎖が長く系が大きい場合ほど、配置が作成できる確率は小さくなる。

また、ゴム材料などの高分子系では、エネルギーよりもエントロピーの効果が重要であり、初期配置作成時においては、エネルギーの（見かけの）緩和よりも、配置の緩和が本質的である。そのため、ある初期配置が得られるとしても、その後の配置の緩和が容易な構造でなければならない。（簡単に言うと、長い直鎖を並べた初期配置は簡単に作れるが、配置を緩和させることは無理である。）

さらに、超大規模な系を考える場合、計算コストが全粒子数 N に比例した（オーダー N ）手法を実現する必要がある。加えて、これまで研究例がな

い「不均一に配置されたフィラーが存在するような系」でも実用的である手法を開発する必要がある。(フィラーが存在する空間中の高分子の存在確率は、エントロピー効果で、単純ではなくなる。この点については、現在、X線や中性子等の大規模な実験的研究が盛んに行われている。)

高分子の配置の緩和の程度を評価する基準としては、最長緩和時間を評価する(厳密な)方法と、各鎖の広がり分布関数が緩和した状態と一致する場合により判断とする方法がよく用いられている。前者の方法のためには、(不可能ではないが)莫大な計算コストを要する。本研究では、迅速な初期配置の作成方法の開発の観点から、後者を基準として、作成方法の善し悪しについて判断した。

オーダーNの超並列化を考える場合、空間分割がうまくいけば簡単である。今回は、最初に閉じた小さな領域に区分した空間中で小さいスケールの初期配置を作成し、その後全体を結合させた後に体積を大きくしていく方法について試した。この場合、鎖が、低濃度で広く拡散するので、よく広がることを期待した。結果的には、この方法では、超並列化はできるが、得られた結果に、作成方法の履歴が大きく残ることを確認した。本検討では、ポリマーの存在密度に粗密のある場合の超並列コードの動作検証も兼ねて、フィラーの直径が約30nmを2048個含み、長さ1024の鎖を327,680本が存在する巨大な系(約3.5億粒子)について実際に計算を行った。なお、接する2つの鎖の配置を交換するdouble bridge法による緩和の促進も一定の効果が期待されるが、今後の課題とした。

これまでの検討結果や試行的な計算の結果を踏まえて、フィラーが存在する場合でも、フィラーが存在しない場合でも有効な、最も現実的な方法は、格子模型を用い、鎖を長くしながら初期配置を作成する方法と考えられる。実際に、3.5億粒子の系(周期境界条件の箱の一辺が約500nm)を作成した。ただし、将来的には、一辺がおおよそ1 μ mの計算を行う予定である。この場合、粒子数は28億となり、2の31乗を超える。従って、プロダクト・ラン用の超並列コードを含めて、

Fortran型宣言について、Integer(4)から、Integer(8)への変更などが必要になり、より大きい並列システムが必要になる。本質的な課題は存在しないと考えており、可能であれば、今年度に対応を検討し、試作試験を行う予定である。

(2) 高分子系の粗視化分子動力学法コードのチューニング

高い並列性を得るためには、各MPIプロセスが担当する計算コストのインバランスを解消する仕組みの内包がキーとなる。我々のフィラー充填ゴムの粗視化MD模型では、計算量軽減のために中空のフィラーを用いており、フィラーが不規則的に配置されているために、空間分割した場合、各MPIプロセスの計算コストにインバランスが発生する。各MPIプロセスの計算コストの多くは、位置・速度の更新を主担当している粒子の数に依存する。これは、近隣粒子との非結合力の計算が計算の多くを占めているためである。従って、本研究では、主担当粒子の数を、周辺のMPIプロセスで分担させることで、均等化する方法を実装した。

本研究では、均等化のために近隣MPIプロセスと融通する主担当粒子数は、連立方程式を解くのではなく、Von Neumannの数値安定性を満たす範囲の大きな拡散係数を用いた拡散方程式の時間発展を数値的に解いて、その積算流量から評価した。これは、将来の超大規模計算の実装として、全体通信をせずに、隣接通信かつ(徐々に最適解に近づけていく)オンライン解法で、融通する数を決めることとしたためである。

MPI/OpenMPハイブリッド化に関する検討は、現在進行中である。机上検討・試作検討の結果として、優先度を下げた。MPI/OpenMPハイブリッド化のポイントは、共有メモリの書き込みオーバーヘッドと、通信のオーバーヘッドのトレードオフとのバランスである。本研究では、複数のMPIプロセスを束ね、共通化できる部分をOpenMP化する方法で、SMPノード内の計算コストの均等化を保ちつつ高速化を目指すこととした。粗視化MD法では、隣接粒子間力の計算、鎖に沿ったボンド力の計算、ランダム力の計算を主に行う。隣接粒子間力は空

間分割して計算するので、MPI/OpenMP 化に適合しやすい。鎖に沿ったボンド力は、ボンドリストに従って計算するため、MPI/OpenMP 化に適合しやすい。ただし、この2つは、一般にランダム書き込みとなるため、共有メモリの書き込みコストが高くなる。その回避のために、空間分割した領域の並び順に合わせてローカル粒子番号を並び変える実装を追加した。最後に、ランダム力の実装は、最も良い効率のために、SMP 内のノード毎に独立して並列的に計算する方法とした。(乱数の状態配列や、一様乱数から正規乱数への変換を Do ループ分割で並列化できないことはないが、そのパフォーマンスは高くない。) なお、MPI/OpenMP ハイブリッドのコードは、特定の計算機にあったコーディングや指示文設定をしなければ、大きな技術的利益が見込めない可能性から、プロダクト・ランの自紙ではないために、踏み込んだ最適化調整は優先度を下げることとした。

(3) 超大規模並列計算で必要となる正規乱数の並列生成アルゴリズムに関する検討

粗視化分子動力学法では、MD ステップ毎に粒子数分だけの大量の正規乱数を利用している。ここで、大量の“質の良い”正規乱数の生成が課題となる。一様乱数から正規乱数への変換では、ボックスミュラー法がよく用いられている。以下では、一様乱数の生成と正規乱数への変換についての並列化について検討した。

現在、一様乱数の生成には、メルセンヌ・ツイスター(MT)が標準的な疑似乱数生成アルゴリズムとして利用されている。数学的に安全に独立な乱数を並列的に生成する方法としては、MT の状態配列の時間発展パラメータを変える方法 (Dynamic Creator) と、確実に時間距離が離れた状態配列を生成する方法 (MT-jump) の2つがある[<http://www.math.sci.hiroshima-u.ac.jp/~m-mat/MT>]。MT-jump の利用は状態配列を変えるだけなので、実装は簡単である。将来両方に対応するために、本研究では、DC を用いて、10,000 以上の独立な系列の MT 乱数を生成し、実際に利用することとした。

ボックスミュラー法は、2 つの一様乱数の組か

ら、三角関数を用いて、2 つ正規乱数を生成する変換である。高速化の実装として、三角関数を回避するために、(2 つの乱数の二乗和が 1 以下という) 条件を満たさない乱数組を捨てる方法がある。前者は計算コストが高く、後者は捨てるべき乱数組 (生成する一様乱数の組の数) が予測できず並列に不利というデメリットがある。(捨てる一様乱数は約 28%。) 三角関数のハードウェア処理速度が向上しているので、従来の常識の再検証は価値がある。100 万個の正規乱数を 100 回連続で作成し、作成に要する時間を比較した。なお、一様乱数は 1 万個ずつ作成した。Xeon E5540@ 2.53GHz では、2.86 秒 vs 2.89 秒でほぼ同じであり、三角関数のコストは確かに小さい。三角関数を使う方法で、100 万個の一様乱数を分割せずに一度に作ると、2.30 秒と高速化された。これは、MT がストリーム処理のためキャッシュが効いているためと考えられる。SR16000 では、3.03 秒 vs 3.99 秒と、三角関数を利用した方が速い。また、一様乱数生成を分割しないと、2.79 秒と大規模処理性能が効く。

上記の検討を踏まえて、SMP 環境下で並列に乱数を生成するロジックを並列版 OCTA/cognac に導入し、粗視化 MD 計算における乱数生成の並列化を実現した。これにより、OCTA/cognac から大規模計算にシームレスに接続する環境の整備ができた。今後、産学の利用者への普及と大規模計算への発展が期待できる。

(4) 大規模系の可視化技法の検討①

(可視化プラットフォームの検討・開発)

高分子材料の研究を目的とし、小さな高分子系から大規模な高分子系までのシミュレーションの結果をシームレスに可視化できる枠組みの開発のために、AVS/Express を利用して可視化技法を検討した。特に、OCTA/cognac での計算結果と超並列シミュレーションコードでの計算結果について、シームレスに解析・可視化するためのデータ形式や標準的な可視化方法の整理を行った。バネとビーズで表現されるひも状の高分子系を可視化する場合、AVS/Express では AVS UCD 形式 (非構造格子) を用いたデータを用意する必要がある。AVS

UCD 形式では、ビーズ（球）の位置座標と、バネ（ボンド）の結合情報を記録し、ビーズとバネに対応した複数の属性値を記録できる。高分子材料の研究を目的とする場合、ボンドの属性値に基づいてボンドの色を付けることや、任意の方向／任意の厚さでスライスした像が示せることが、可視化ソフトにおいて重要である。なお、本検討に先立って、ParaView と VisIt を用いた可視化について検討した。ParaView では AVS UCD 形式の可視化もでき、AVS/Express と似た仕組みである。ただし、上記の要求性能の実現には、コードの改良が必要となる。現状、VisIt では、PDB 形式などの汎用形式を用いる必要があり、機能が不十分である。（この範囲であれば、VMD でもよさそうである。）

最初に、OCTA/cognac と超並列コードとの接続を行うために、（詳細は示さないが）中間データフォーマットを作成した。その中間フォーマットから、AVS 用の入力データを作成することとした。また、中間フォーマットの拡張部に、ボンド長などの属性値を加えることで、可視化・解析に必要な基礎データの扱いも可能とした。

なお、本検討の過程で、OCTA/cognac の UDF 形式の巨大ファイルのハンドリング技法に関する検討を行った。UDF 形式は、tex-like な制御記述子を用いたユーザー定義可能なデータ形式である。通常、OCTA/cognac では、python を利用し構文解析を行う。UDF ファイルから、座標データのみを取り出す場合、より簡単で高速な（ストリーム型の）処理が可能である。本研究では、1 ファイルが 100GB を超える大規模な系の時系列データを、北大の並列化版 cognac を用いて生成し、作成したツールで効率よくデータを扱えることを確かめた。

(5) 大規模系の可視化技法の検討②

(VR 空間での高速な探索的可視化)

大規模なシミュレーションの結果から大域的な振る舞いや特徴的な振る舞いを把握するためには、何からの情報縮約が有効であるが、効果的な縮約方法が不明の場合、そのまま可視化をすることも意義は大きい。超大規模な系の“丸ごと可視化”を実現するためには、分散 I/O (フィルタリング)、

分散マッピング、分散レンダリングを行う必要がある。本研究では、すでに並列分散化の実装がなされている AVS/Express 並列化版 (PCE, PST 版) を用いて、超大規模な高分子系の“丸ごと可視化”についての技術検討・開発を行った。

高分子材料の分子鎖の挙動を探索的な可視化で観察する場合、ポイントは、全体のうちの部分的な空間や、様々な方向でスライスした空間を可視化すること、分子レベルでの挙動が観察できるスケールまでズームアップすることである。特に、薄くスライスした像を表示し、スイープや回転などの連続描画をすることが重要な性能要件となる。

ここでは、可視化する元データは各ノードのメモリ上に分散して格納されており、すみやかにフィルター・マップ処理がなされ、並列分散レンダリングを実施する場合を考える。

並列可視化用のデータは、素朴には、図 1(a) のように板状の空間などに分割する。このまま、薄いスライス像やズームアップ像を表示させると、可視化ノードの計算コストインバランスが生じる。

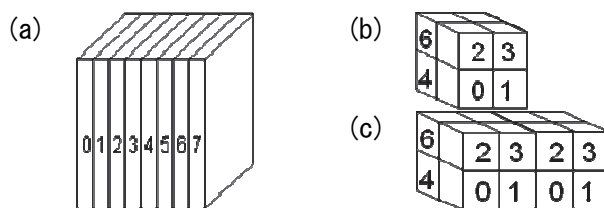


図 1 並列可視化の空間分割イメージ

その回避策として、図 1(b) のように小さい領域に分割して、ノード番号順に割り当てた塊を作り、図 1(c) のように並べる方法が思いつく。この場合、分割した領域の大きさと担当ノードの割り当て（並べ方）がポイントになる。分割する空間を大きくすると分散レンダリングで有効なノードの数が少なくなり、一方で、分割する空間を小さくしすぎると隣接する分割空間の接続面でのオーバーヘッドが大きくなってしまう。また、薄くスライスした場合には、ノード毎の可視化処理にインバランスが生じる。特に、軸に沿ったスライス面のスイープなどの実用的な可視化で問題が生じる。

並列処理では、最も処理時間のかかるノードで全体処理時間が決まる。従って、取り出した空間内のノードの割り当てを均等にしたい。可視化は、

一般に、平面または小さなブロックを単位としてみなすことができる。具体的には、64 ノードで分割する際に、8x8x1 の小領域からなる平面や 4x4x4 の小領域からなる立方体を取り出したときに、あるノードが担当している領域数の最大数を 2 となる拘束条件が並列性の観点から重要である。従って、ブロック内の開始ノード番号の並び順をランダムにする場合よりも、規則的なシフト値を選ぶ方がよいと考えられる。なお、あらかじめ可視化のパターン（例えば、スライスの回転角度や厚さ等）が決まっている場合には、シミュレーションで、担当ノードの最適化が可能と想像される。

本研究では、具体的には、約 3.5 億粒子などの超大規模な系について扱い、並列可視化の枠組みを作り上げることを目標としている。並列可視化において、どのような空間分割サイズが適当であるかについて検討した。加えて、スライス時の並列インバランスを解消するための並列データ配置方法についての検討を行った。

本研究では、検討の結果として、分割領域の一边は、スライス時に用いる最小厚さ程度の 2.5 とした。並列レンダリングのノード数を 8 や 64 とした場合に、AVS/Express PST での描画を行い、スライス像を回転させた際にデータ処理量のバランスが概ね取れていることを確認した。

さらなる高速化としては、AVS/Express 自身に、カメラ位置との関係から画面表示される面を仮定して、ある深さよりも奥にあるオブジェクトのレンダリングをしないフィルタリング機能を具備する必要があると考えている。スライスや複雑な切り抜きにも対応するためには、多くの検討が必要である。現在、プロトタイプ検討を行っている。

(6) 大規模系の可視化技法の検討③

(VR 空間での高臨場感可視化)

高分子系を延伸させることによってボイドが形成され破壊に至るシミュレーションでは、長い高分子が互にくっつくために、ドメインと空隙がともに連結したスポンジ状の 3 次元的に複雑な形状をとりうる。延伸下では、相対的に細い部分に力がかかりつつ高分子鎖がほぐれることで破壊し

ていくことが予想される。シミュレーションの結果について、どのような部分が細いのか、細い部分では分子鎖レベルでどのような振る舞いをしてるかを、迅速かつ直感的に把握したい。巨視的な構造から分子鎖レベルの挙動までをシームレスに把握するためには、サイバー空間に没入して探索できることがベストである。このような没入型の立体可視化では、CAVE システムがよく用いられている。CAVE は、立方体の 4 つの面が立体視スクリーンとなっており、ヘッドマウント式の位置センサーからの情報をもいって観測者の視線の向きに追従した画像を投影する装置である。このため、仮想空間の中に没入している感覚が得られる。

本研究では、大阪大学の CAVE を利用した可視化技法の検討を行った。最初に、小さいデータの例として、3 次元的に複雑な構造をもつ高分子系であるタンパク質の立体構造や分子動力学法のトラジェクトリーの CAVE 上での可視化を行った。CAVE で没入型の立体可視化を行う場合、OpenGL で作成されたアプリケーションであれば、市販の FusionVR というソフトウェアを利用することで、PC における NVIDIA 3D Vision のように既存の可視化プログラムの変更を伴わずに、CAVE 可視化できる。タンパク質の構造可視化ソフトとしては、イリノイ大学製の VMD と市販の Molefeat の 2 つについて試した。これらのソフトについて、没入型の立体可視化は良好であった。また、FusionVR では、複数の OpenGL 画面を合成して VR 空間に表示させることができる。遠隔の複数の研究者（観測者）間で、注目すべき個所の情報共有（“あしあと”をつける）ができる。矢印は位置と方向の 5 変数制御が必要なことから操作が簡単ではなかった。単純に、立方体のフレームや、 α 透過させた球などを表示させて、位置のみの 3 変数制御の方が、操作が簡単であり、実用的であることが分かった。

次に、AVS/Express MPE (Multi Pipe Edition) を用いて、CAVE 可視化を行った。2 次元の場合に比べ、圧倒的な臨場感があり、3 次元の空間認知が容易である。鎖がほどける状況などの分子鎖レベルの動きを把握する場合、ズームアップにする

と、平面上に可視化した場合に比べて、探索的に観察・探知することが非常に容易であった。複数スクリーンである必要はないが、没入型の立体可視化は、長い高分子の部分鎖の詳細な挙動や構造を検討する有効な手段の一つであると感じた。

フィラー充填ポリマー材料の分子鎖挙動を検討する場合、分子鎖の挙動が分かりやすいように、薄くスライスしたものを表示させることが一般的である。このとき、高分子鎖は特定の方向に向いていないために、スライス面の位置や向きを変える必要がある。このスライス面の操作は、数値ベースで行うことは容易ではない。今後は、位置センサーデバイス（例えば、iPadやWiiリモコン等）を用いるなどして、直感的に操作できるようにする必要がある。この学際的研究の方向性の一つとして、市販のヘッドマウント型の位置センサー付ディスプレイや位置センサーデバイスを活用した効果的なシミュレーション結果の検討ツールの研究開発が重要であると思われる。

(7) ネットワーク型研究の技法に関する検討 (大規模ファイル転送に関する検討)

UDP通信が制約されたFirewall内等からのTCP接続による大規模ファイル転送を実現するための検討を行った。所属機関や複数の情報基盤センター間のファイル転送を行う場合、ネットワークの遅延時間等のために、ネットワーク性能が最大に活かすことができない。多数のファイルについて、TCP接続によるscp転送については、単純に複数のscpのセッションに分割すれば、高速化できる。単一の巨大ファイルの転送については、転送プログラムのTCPマルチセッション化が必須である。当初、scpプログラムのTCPマルチセッション化を検討した。結果的には、lftpで実装されていることが判明したため、lftpを利用することとした。lftpでは、巨大ファイルの並列download(pget -n 32 ファイル名)と、多数ファイルの並列転送(mirror -L --parallel=32 ディレクトリ名/mirror -R -L --parallel=32 ディレクトリ名)ができる。なお、並列での送信が存在しない理由は、接続先がラウンドロビンDNSの場合、セッション

毎に異なる計算機に接続され、実装が煩雑となるためと考えられる。この場合、ひと手間増えるが、ファイルを分割して送信し再結合するしかない。

本検討では、pgetを利用し10GB以上の解析・可視化用ファイルを転送した場合について、セッション数と転送速度の関係を評価した。北大一名古屋間では、8~32セッションで、10~37MB/sであった。32セッションでは、15~37MB/sで変動が大きかった。北大・名古屋間以外では、Firewallや設定の関係で単方向転送のみ並列化されている。名古屋←東大では、40~45MB/s（並列化しない場合は、12MB/s）であった。北大←東大では、6~20MB/sであった。Firewall内にあるサーバへの転送の典型例として、防衛大内部への転送時間を評価した。防衛大は、SINET3へ横浜国大を経由して、1Gbpsの回線で接続されている。防衛大←名古屋と防衛大←東大は、6~8MB/s、防衛大←北大は、3.6~6MB/sであった。このことから、Firewallの処理性能が影響していることが推察される。

上記のことから、地方の大学などからも相応に利用することが可能であることがわかった。今後は、SINET4で、さらなる高速化が期待できる。

4. これまでの進捗状況と今後の展望

北大/東大/名大/阪大のセンターとの連携によるネットワーク型研究で、将来規模の粗視化MD計算に関する「初期配置の作成手法」、「大規模可視化技法」等の整備に目処を立てることができた。

北大では、超並列コードでの実装アルゴリズム、可視化技法の検討、OCTA/cognacとのシームレス接続の実証計算を中心に行った。東大では、超並列コードでの実装アルゴリズムと可視化技法を検討した。名大では、大規模初期配置の作成方法、可視化技法の検討を中心に実施した。阪大では、高臨場感可視化技法の検討を行った。

本研究の進捗状況としては、実証検証計算の一部が遅れているものの、当初達成目標の多くは、達成した。目標の1つである超並列コードのMPI/OpenMP並列化の検討は、試作や机上の検討を進めた結果、期待利益の観点から優先度を下げた。

本年度は、大規模計算の計算機技法の高度化を目標して、集中的に検討を進めた結果、比較的な進展ができた。故に、自己評価も高い状況である。

課題としては、大規模シミュレーション実施が可能となった結果として新たな課題が見えてきた。特に、「さらに“良い”可視化と解析が必要」である。そのためには、可視化関連のシステム機能の拡充、解析に関する理論ベースの研究、可視化空間を探索／操作するためのユーザー・インターフェース(UI)・デバイスの活用の研究開発が急務である。なお、産学への普及を考えれば、ユーザー操作パネルの検討が重要であるが、予算面からも、本研究課題のスコープ外と考えている。

粗視化MD法では、マクロ物理量だけでなく、分子レベルでの挙動観察からも重要な知見が得られる。このためには、新たな解析技法／理論の研究開発や可視化技術の向上が必要である。特に、計算結果を最大限利活用するためには、実験研究者のインスピレーションを喚起すること、社会一般の方々に面白みを伝えることが重要である。大規模になればなるほど、系が複雑なり、可視化が難しくなる。現時点では、大規模粗視化MDでは大規模な可視化技法が未成熟のために可視化結果を基にした検討議論が十分とは言えない。さらに、大規模可視化を用いた探索的な検討の実施のためには、例えばスライス面の回転動作などについて、ユーザーの直感的動作を具現化するためのUIデバイスの活用研究が非常に重要と考えている。

5. 研究成果リスト

(1) 学術論文

本課題研究によるものは、なし。

(2) 国際会議プロシーディングス

本課題研究によるものは、なし。

(3) 国際会議発表

・萩田、森田、土井、高野：「Deformation and Fracture of Coarse-grained Model of Filled Rubber Composites」アメリカ物理学会 March Meeting (2011.3) <予定>

(4) 国内会議発表

・萩田：「ポリマー・ナノコンポジット材料に関する大規模シミュレーション手法の開発」物性研スパソコン共同利用報告会 (2011.1)

・萩田：「フィラー充填高分子の延伸破壊の大規模MDシミュレーション」次世代スーパーコンピュータシンポジウム2010 (2011.1) <予定>

・木村、佐藤、萩田、大宮：「フィラー含有ゴムの粗視化分子動力学解析」次世代スーパーコンピュータシンポジウム2010 (2011.1) <予定>

・尾藤、内藤、萩田、森田、高野、土井：「粗視化MDモデルを用いたフィラー充填ゴムの動的粘弾性解析」次世代スーパーコンピュータシンポジウム2010 (2011.1) <予定>

・幸谷、黒木、萩田：「高分子系粗視化MDの大規模・高品質可視化手法の検討」次世代スーパーコンピュータシンポジウム2010 (2011.1) <予定>

・森田、高野、土井、萩田：「フィラー充填高分子材料の大規模粗視化MDシミュレーション」計算シミュレーションの新たな産業応用への展望 (2011.2) <予定>

・萩田、高野、土井、森田：「粗視化分子動力学によるフィラー充填ポリマーメルトの延伸破壊シミュレーション」日本物理学会 (2011.3) <予定>

・萩田、高野、土井、森田：「フィラー充填高分子系のガラス転移温度の粗視化MD解析」第60回高分子学会年次大会 (2011.5) <予定>

・森田、高野、土井、萩田：「ガラス転移温度へのフィラー高分子界面相互作用の効果」日本ゴム協会年次大会 (2011.5) <予定>

(5) その他（特許，プレス発表，著書等）

本課題研究によるものは、なし。

謝辞

本研究課題の共同研究者である産総研 森田主任研究員、慶大理工 高野教授、東大工 土井教授、北大情報基盤センター 大宮教授、東大情報基盤センター 中島教授、片桐准教授、名大情報基盤センター 石井教授、高橋技官には、共同研究者として、多くのご協力・ご助言を頂いた。海洋研究開発機構 地球シミュレータセンター関係者（新宮GL、渡邊センター長他）、日本電気(NEC)関係者、日立製作所関係者、サイバネット・システム関係者には、本研究課題推進にあたり、多大な協力を得た。本研究成果の活用展開にあたっては、住友ゴム工業株式会社、トヨタテクニカルディベロップメント株式会社からの協力を得た。