

GPUスパコンを活用した高分子系の 大規模／大容量MD計算の事例紹介

hp220114 MD計算による結晶性高分子の伸張結晶化挙動解明と物性制御予測
hp220113 水中Tetra-PEGゲルの負のエネルギー弾性と粘弾性の分子論的解明
jh220038 GPU並列計算による高分子材料系シミュレーションの高速化技法の検討

防衛大 萩田

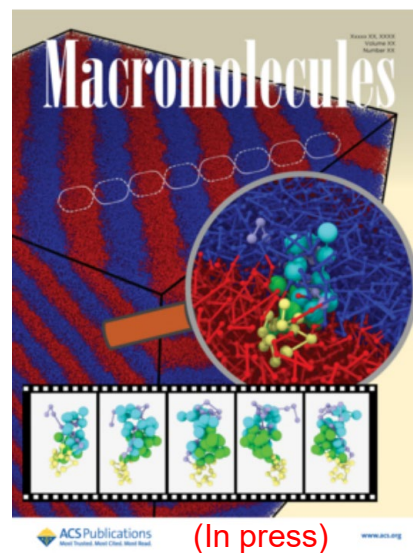
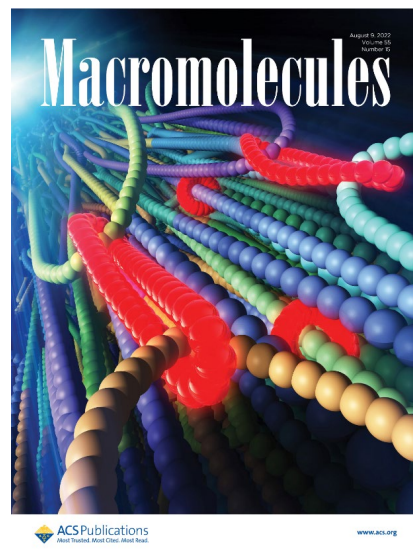
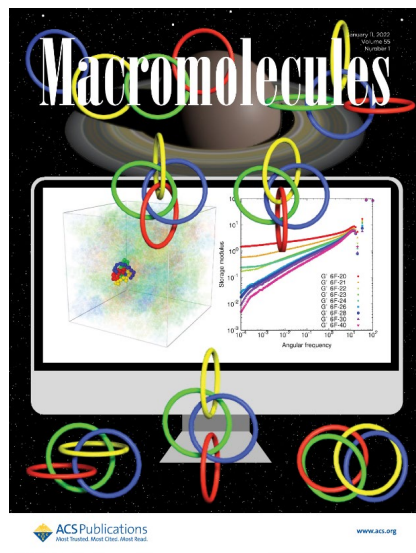
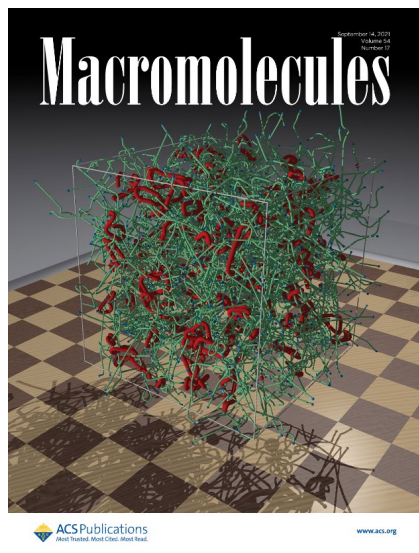
2022.9.13火曜日 1535-1555

第3回スーパーコンピュータ「不老」ユーザ会

1

高分子物理・材料でのGPU活用

- <昨年> この1年程度で、GPUを活用できる研究環境が、すごく整った。
- <今年> 系統的なプロダクトランで、多くの成果創出に繋がった。
 - 高分子物理系のTop Journalでの多数の出版。

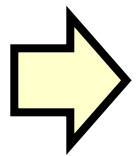


2

高分子物理・材料でのGPU活用

ハード環境

- V100やA100の、高性能なマルチGPU環境
- RTX 3090などの、高性能なゲームGPUの普及



H100やRTX 4090の新GPU性能は、大いに期待。

ソフト環境 <オープンソースのソフトウェア>

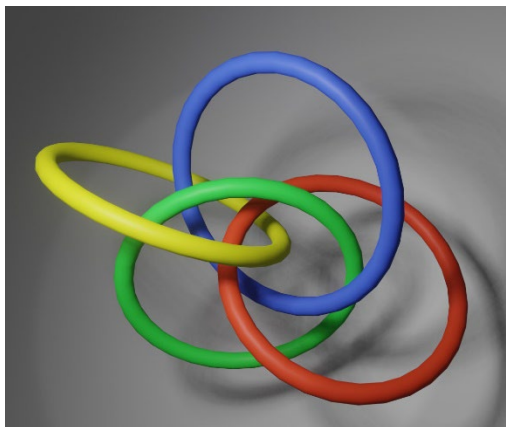
- “Single”-GPUの性能向上（単精度＋GPU内計算）
 - マルチGPUでも性能が出るようになった。（検討余地あり）

	Single GPU性能	マルチ GPU	ばね ビーズ	DPD	UAMD/ 全原子	ReaxFF
Gromacs	◎	◎	—	—	◎	—
HOOMD-blue	◎	△?	◎	◎	△	—
LAMMPS	△	○	○	○	△	◎

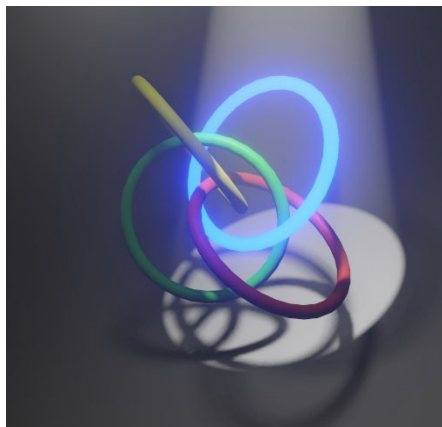
<余談> Cover Art作りでのGPU活用

- Cover Art作りでも、GPUを活用していきたい。
 - Cover Artでは、レンダリング負荷の大きい「光」の計算が、好まれる傾向。
 - Blenderの例

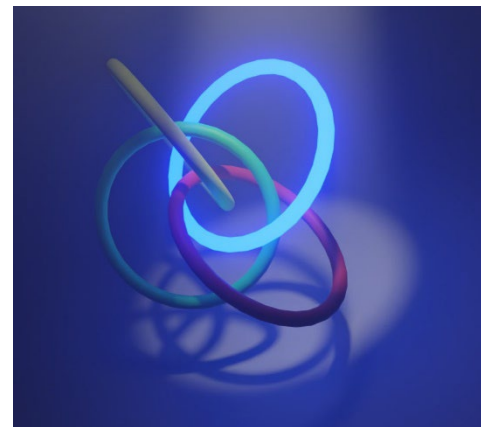
Fogなし環境
レンダリング: Eevee



Fog中のスポットライト
レンダリング: Eevee

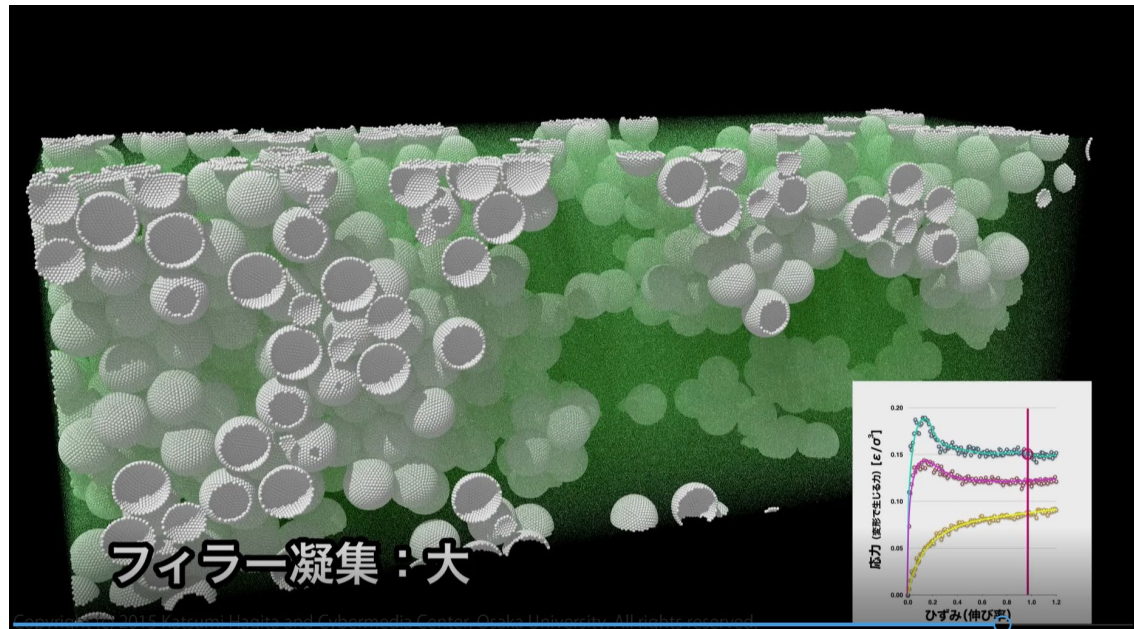
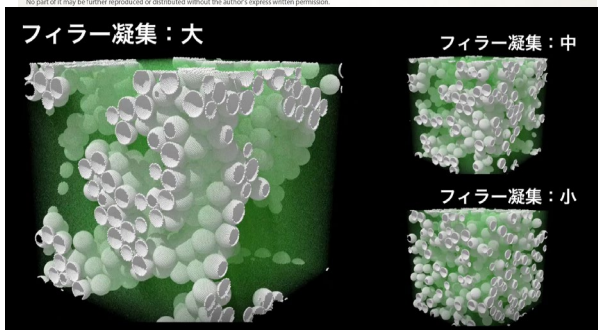
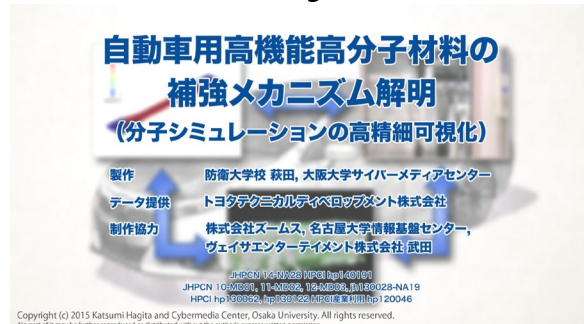


Fog中のスポットライト
レンダリング: Cycles (GPU)



<余談> 絵作りでのGPU活用

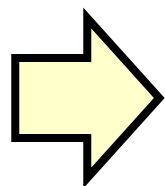
- 2015年頃、HPCI課題で、高精細レンダリング
 - 8K画像、動画の作成。
 - Pov-rayで、光の計算を強化した条件。(高負荷)



- GPUスパコンを活かした、高精細レンダリングの動画作り(絵作り)にも、再び挑戦したい所。

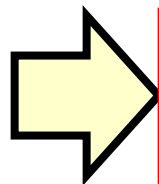
本日の事例紹介トピック

- 大容量計算
 - 多数のパラメータ条件のrunを、Single-GPU計算で効率よく計算する。
 - HooMD-blue や Gromacsの事例



プロダクトラン → 成果創出のサイクル

- 大規模計算
 - マルチノード・マルチGPU利用のMassive並列計算。
 - GromacsやLAMMPSの事例。



最先端大規模計算で、新たに物理量が合理的に予測できるようになることは、次世代MI基盤として重要

大容量計算のノウハウ

- (昔) 実行制御用のmpicxxプログラムを作成。
- (今) Pythonのsubprocess-futures.concurrentによる大量タスクの並列実行制御。

```
from concurrent import futures
import time
import sys
import os
import subprocess

num_tasks=8
num_workers=8

def exec_func(index):
    print('index: %s started.' % index)
    shcmd='./run-'+str(index)+'.sh'
    process = subprocess.run(shcmd, stdout=subprocess.PIPE, shell=True)
    print('index: %s ended.' % index)

future_list = []
with futures.ThreadPoolExecutor(max_workers=num_workers) as executor:
    for i in range(num_tasks):
        future = executor.submit(fn=exec_func, index=i)
        future_list.append(future)
    = futures.as_completed(fs=future_list)
print('completed.')
```

大容量計算のノウハウ

- バッチスクリプトとサブスクリプトの構成
 - HooMDのGPU単体利用: KG粗視化MDやDPD

```
#!/bin/sh
#PJM
module load XXXX

python3 run-sub-gpus.py
```

```
from concurrent import futures
import subprocess

num_tasks=4
num_workers=4

def exec_func(index):
    if index == 0:
        shcmd = "cd ./00; ./run-hoomd.sh 0"
    if index == 1:
        shcmd = "cd ./01; ./run-hoomd.sh 1"
    if index == 2:
        shcmd = "cd ./02; ./run-hoomd.sh 2"
    if index == 3:
        shcmd = "cd ./03; ./run-hoomd.sh 3"
    process = subprocess.run(shcmd, stdout=subprocess.PIPE, shell=True)

future_list = []
with futures.ThreadPoolExecutor(max_workers=num_workers) as executor:
    for i in range(num_tasks):
        future = executor.submit(fn=exec_func, index=i)
        future_list.append(future)

_ = futures.as_completed(fs=future_list)

print('completed.')
```

```
#!/bin/sh

source activate venv-hoomdAng
export CUDA_VISIBLE_DEVICES=$1
python3 ./hoomd-singleGPU.py
```


大容量計算のノウハウ

- バッチスクリプトとサブスクリプトの構成
 - GromacsのGPU単体利用: 全原子MD(クーロンカ)

```
#!/bin/sh
#PJM
module load XXXX

python3 run-sub-gpus.py
```

```
from concurrent import futures
import subprocess

num_tasks=4
num_workers=4

def exec_func(index):
    if index == 0:
        shcmd = "cd ./00: ./run-gmx.sh 0"
```

```
#!/bin/sh
export OMP_NUM_THREADS=6
export CUDA_VISIBLE_DEVICES=$1
INGRO=GMX.gro
INTOP=GMX.top
GFILE=GMX-1.gro
CFILE=GMX-1.cpt
if [ -e $CFILE ]
then
if [ ! -e $GFILE ]
then
gmx mdrun -v -deffnm GMX-1 -bonded gpu -nb gpu -pme gpu -ntmpi 1 -cpi $CFILE
fi
else
if [ ! -e $GFILE ]
then
gmx grompp -f GMX.mdp -o GMX-1.tpr -c GMX-0.gro -r $INGRO -p $INTOP -maxwarn 4
gmx mdrun -v -deffnm GMX-1 -bonded gpu -nb gpu -pme gpu -ntmpi 1
fi
fi
```

ell=True)

s executor:

大容量計算のノウハウ

- 実行時に、nvidia-smiで監視しておきたい場合。

```
from concurrent import futures
import subprocess

num_tasks=5
num_workers=5

def exec_func(index):
    if index == 0:
        shcmd = "cd ./00; ./run-gmx.sh 0"
    if index == 1:
        shcmd = "cd ./01; ./run-gmx.sh 1"
    if index == 2:
        shcmd = "cd ./02; ./run-gmx.sh 2"
    if index == 3:
        shcmd = "cd ./03; ./run-gmx.sh 3"
    if index == 4:
        shcmd = "for ((i=0;i<10;i++));do sleep 600; nvidia-smi; done > log"
    process = subprocess.run(shcmd, stdout=subprocess.PIPE,shell=True)

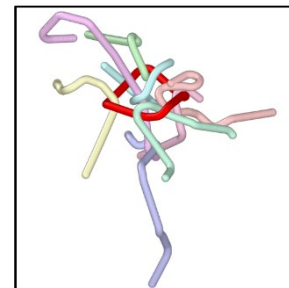
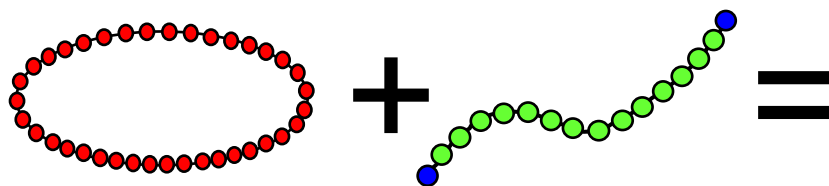
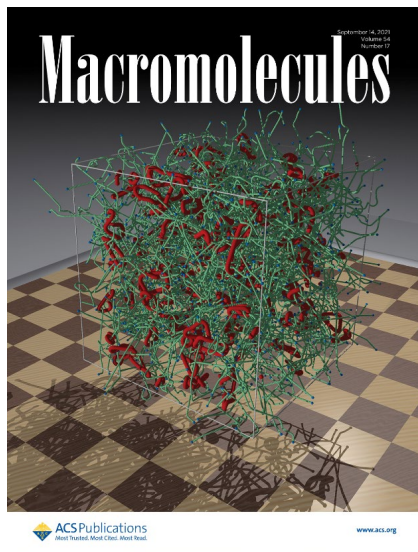
future_list = []
with futures.ThreadPoolExecutor(max_workers=num_workers) as executor:
    for i in range(num_tasks):
        future = executor.submit(fn=exec_func, index=i)
        future_list.append(future)

    _ = futures.as_completed(fs=future_list)

print('completed.')
```

Kremer-Grest粗視化MDの成果

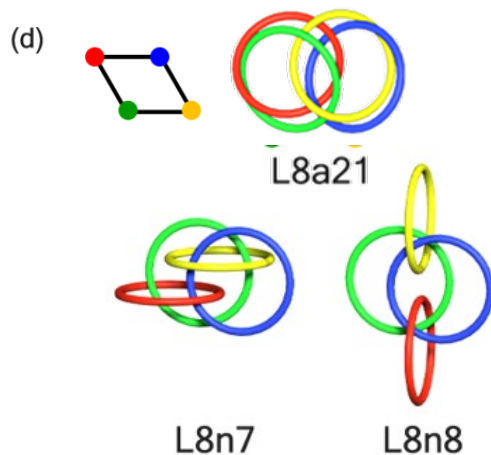
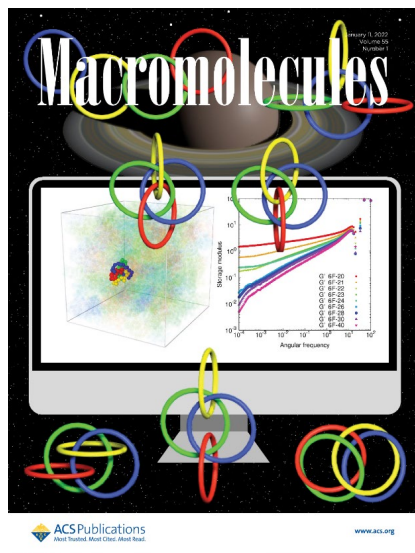
- 環状鎖と線状鎖が混合した系の一連の計算
- 貫通状態の静的構造の統計的性質



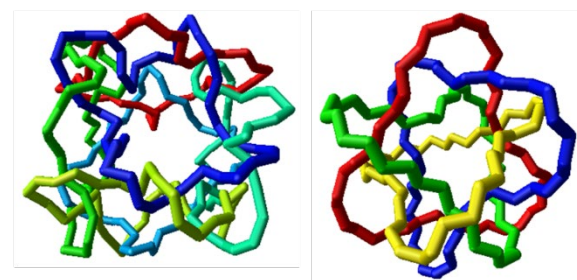
- K. Hagita, T. Murashima, Effect of Chain-Penetration on Ring Shape for Mixtures of Rings and Linear Polymers. *Polymer* **2021** 218, 123493.
- K. Hagita, T. Murashima, Multi-Ring Configurations and Penetration of Linear Chains into Rings on Bonded Ring Systems and Polycatenanes in Linear Chain Matrices. *Polymer* **2021** 223, 123705.
- K. Hagita, T. Murashima, Molecular Dynamics Simulations of Ring Shapes on a Ring Fraction in Ring-Linear Polymer Blends. *Macromolecules* **2021** 54, 8043.
- K. Hagita, et al., Efficient compressed database of equilibrated configurations of ring-linear polymer blends for MD simulations. *Sci. Data* **2022** 9, 40.
- K. Hagita, T. Murashima, H. Shiba, N. Iwaoka, T. Kawakatsu, Role of chain crossing prohibition on chain penetration in ring-linear blends through dissipative particle dynamics simulations. *Comput. Mat. Sci.* **2022** 203, 111104.

Kremer-Grest粗視化MDの成果

- 環状鎖を含む系の特異なレオロジー挙動



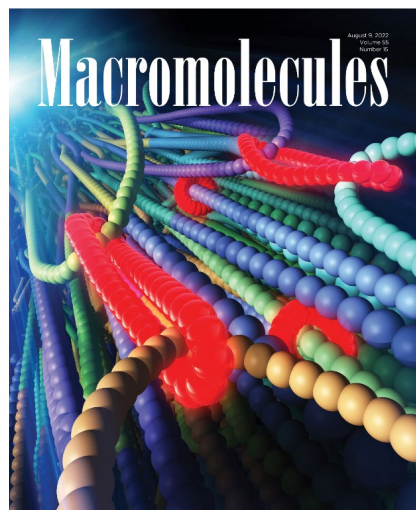
(a) Peptide-[6]-catenane (b) Peptide-[4]-catenane



- T. Murashima, K. Hagita, T. Kawakatsu, Viscosity Overshoot in Biaxial Elongational Flow: Coarse-Grained Molecular Dynamics Simulation of Ring-Linear Polymer Mixtures. *Macromolecules* **2021** 54, 7210.
- K. Hagita, T. Murashima, N. Sakata, Mathematical Classification and Rheological Properties of Ring Catenane Structures. *Macromolecules* **2022** 55, 166.
- T. Murashima, K. Hagita, T. Kawakatsu, Topological transition in multicyclic chains with structural symmetry inducing stress-overshoot phenomena in multicyclic/linear blends under biaxial elongational flow. *Macromolecules*, *under review*.

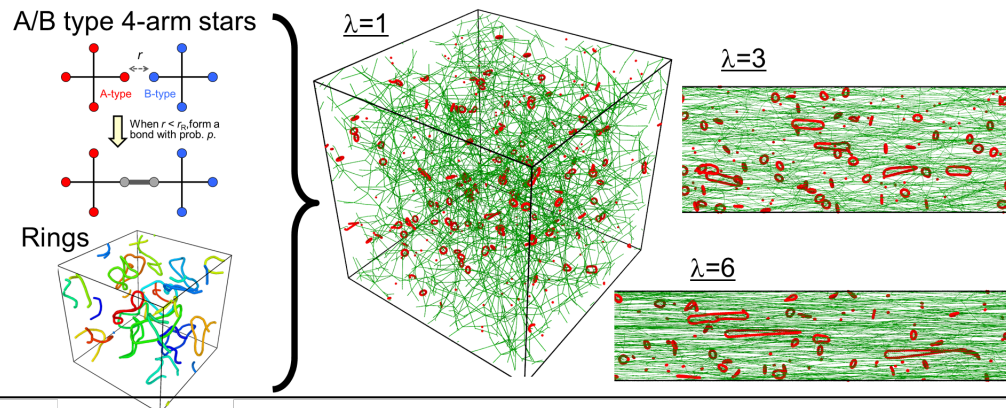
Kremer-Grest粗視化MDの成果

環状鎖を充填した架橋ネットワークの補強



ACSPublications
Most Trusted Most Cited Most Read

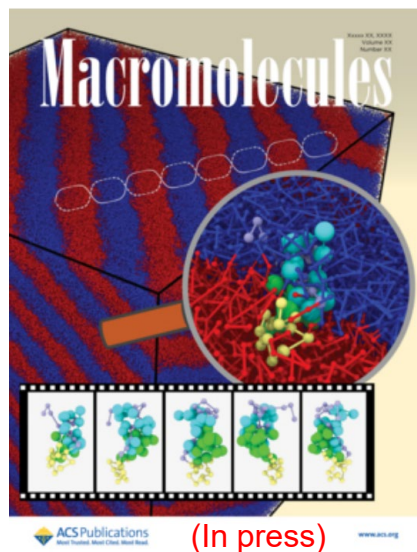
www.acs.org



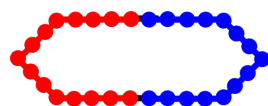
- K. Hagita, T. Murashima, Effect of chain-penetration on ring shape for mixtures of rings and linear polymers. *Polymer* **2021** 218, 123493.
- K. Hagita, T. Murashima, H. Jinnai, Demonstration of reinforcement in polymer composite with rings penetrating the diamond-lattice network. *Polymer* **2022** 243, 124637.
- K. Hagita, T. Murashima, M. Ebe, T. Isono, T. Satoh, Trapping probabilities of multiple rings in end-linked gels. *Polymer* **2022** 245, 124683.
- K. Hagita, T. Murashima, Multi-Ring Configurations and Penetration of Linear Chains into Rings on Bonded Ring Systems and Polycatenanes in Linear Chain Matrices. *SoftMatter* **2022** 18, 894.
- K. Hagita, T. Murashima, T. Ohkuma, H. Jinnai, Ring-Filling Effect on Stress-Strain Curves of Randomly End-Linked Tetra-Arm Prepolymers. *Macromolecules* **2022** 218, 123493.

DPD計算の成果

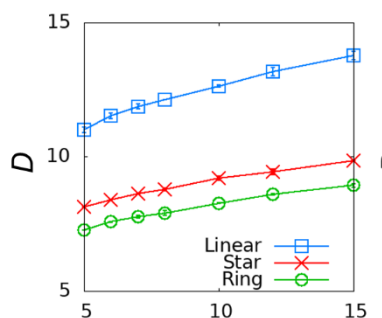
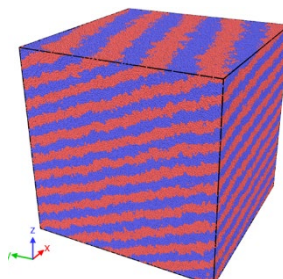
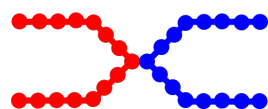
- ブロックコポリマーの相分離構造
- 分子トポロジーの効果



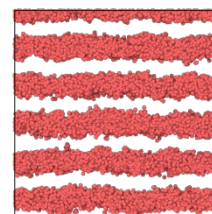
(a) Ring, $N = 30$



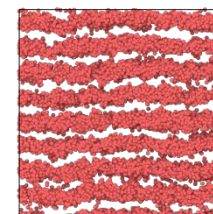
(c) Star, $N = 30$



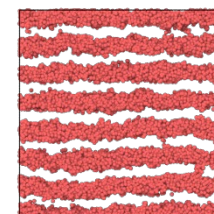
(a) Linear, $\Delta a = 5$



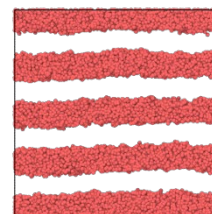
(b) Ring, $\Delta a = 5$



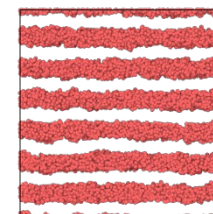
(c) Star, $\Delta a = 5$



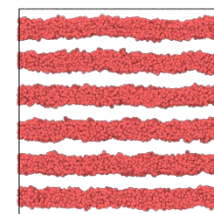
(d) Linear, $\Delta a = 15$



(e) Ring, $\Delta a = 15$



(f) Star, $\Delta a = 15$



- K. Hagita, T. Murashima, T. Kawakasu, Lamellar Domain Spacing of Symmetric Linear, Ring, and Four-Arm-Star Block Copolymer Blends. *Macromolecules* **2022**, in press. [10.1021/acs.macromol.2c00500](https://doi.org/10.1021/acs.macromol.2c00500)

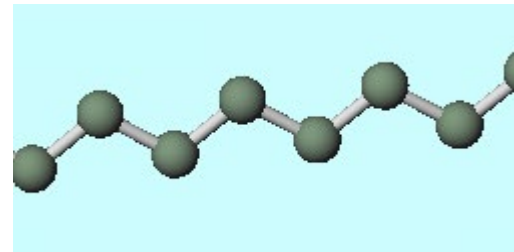
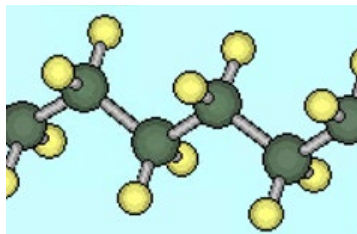
大規模計算でのGPU活用

- 大規模計算では、スケールするアルゴリズムであることがポイント。
 - MD計算の場合
 - スケーラビリティ阻害要因： **クーロン力の計算**
 - 高分子材料のMDでは、場合分けされる。
 - **クーロン力が重要な計算**
 - 現実系のクーロン力すら、評価できない雑な問題もある。
 - **クーロン力が重要ではない計算**
- ⇒ **こちらは、高いスケーラビリティが期待できる。**

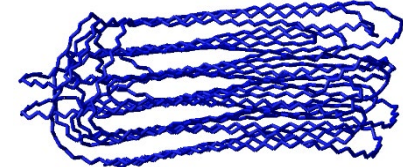
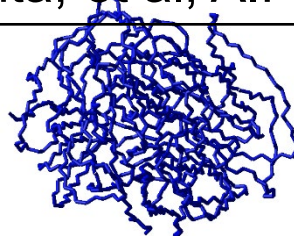
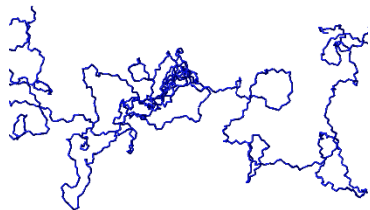
大規模計算でのGPU活用

- クーロン力がなくても、良さそうな系。

ポリエチレン(-CH₂-)の系

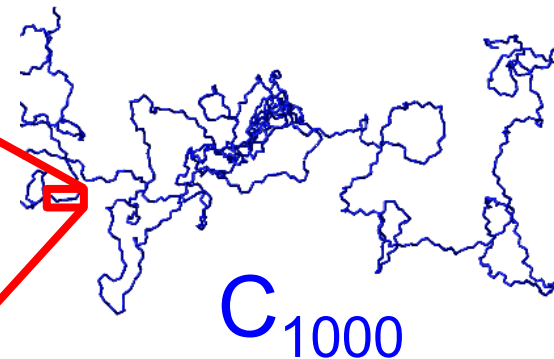
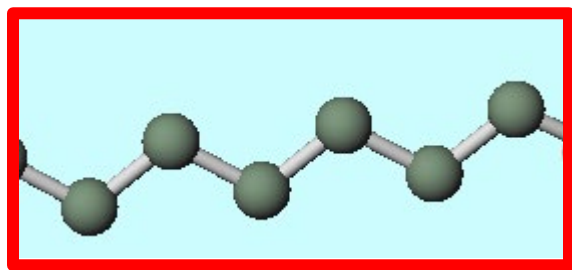
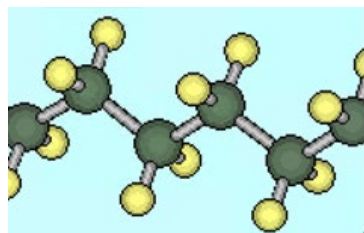


- 高精度な物性再現ができる力場が開発されている。**TraPPE-UA力場**
 - MD計算の手始めとして、「**自発的構造形成**」を確かめる研究が、多くなされた。(今もある。)
 - 力場の比較 K. Hagita, et al, AIP Adv. 2018, 8, 115108.

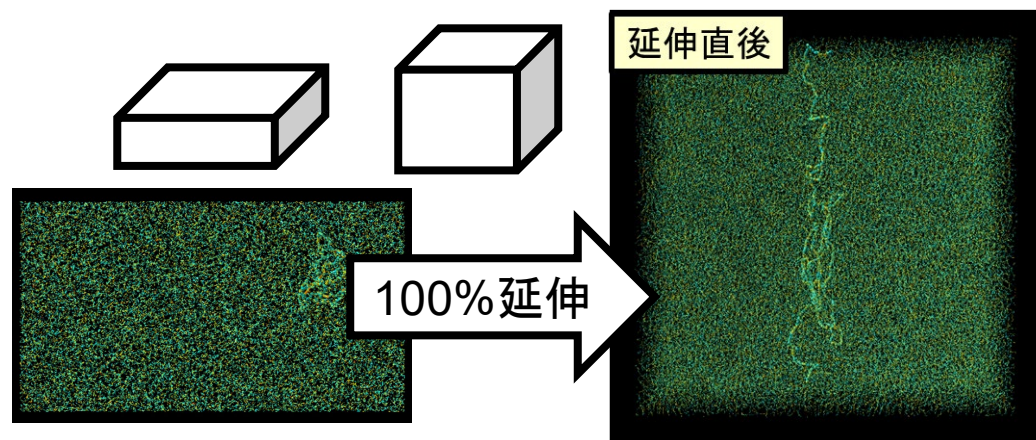


あるプロセスを再現する定量的評価

- ポリエチレンの CH_2 を、United-AtomとしたMD
– 力場は、TraPPE-UA力場。



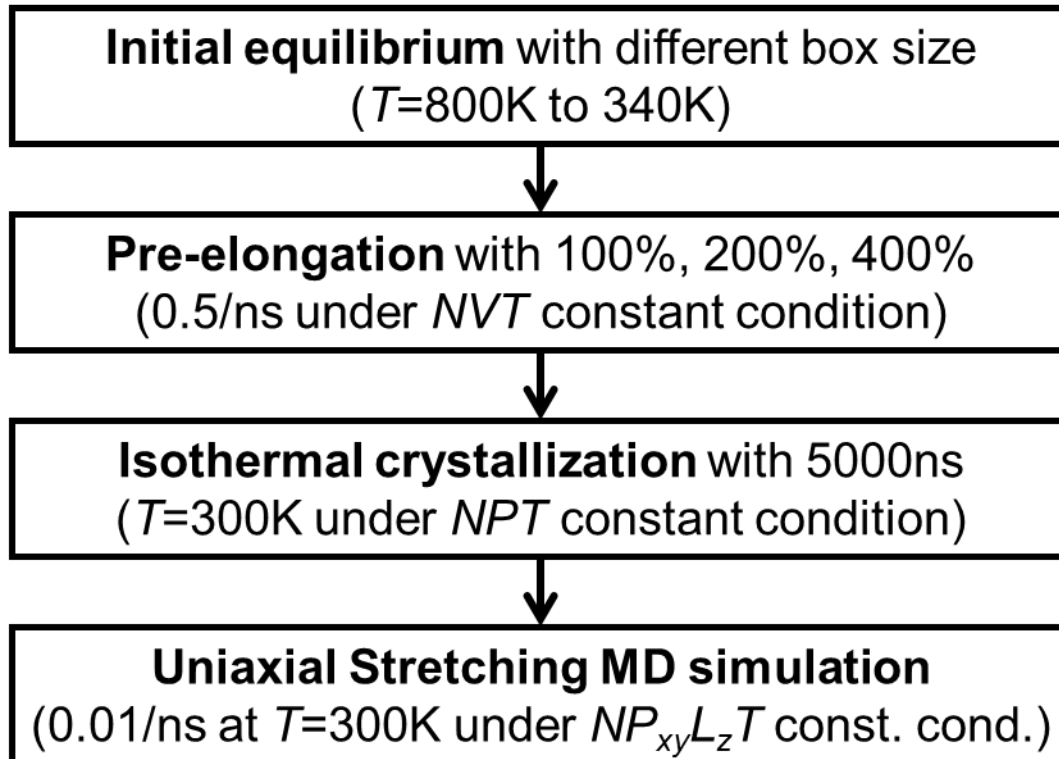
- 多数本を、周期境界条件の箱に入れ、緩和。
- 事前延伸 (preEL=100%等) して、静置計算。



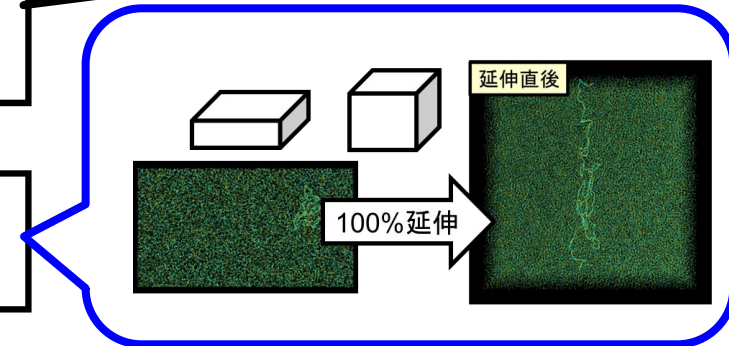
長時間待てば、
結晶化した構造
が得られる。

あるプロセスを再現する定量的評価

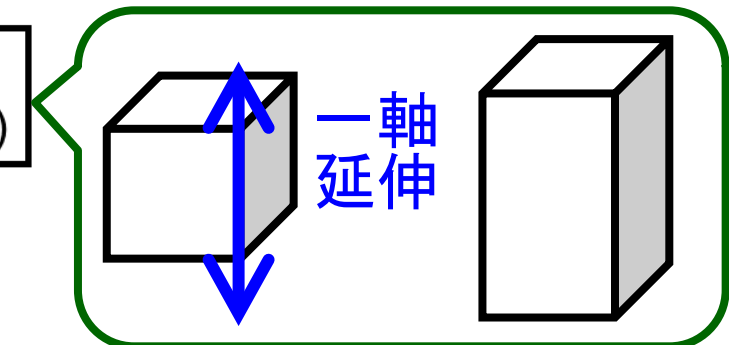
シミュレーションの流れ



ほっておく。(溶かす)



ほっておく。(結晶化)



あるプロセスを再現する定量的評価

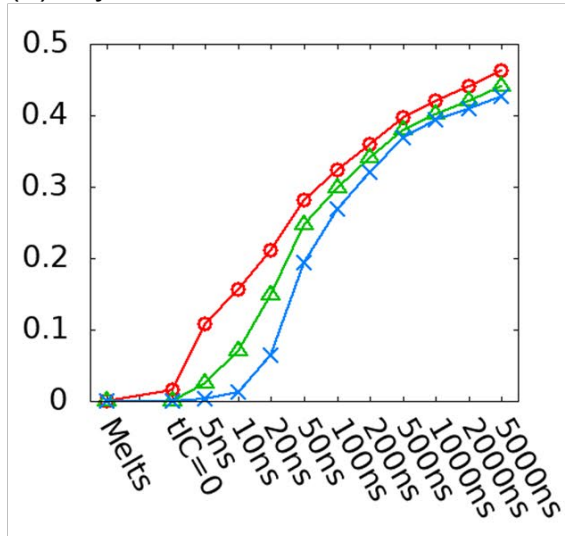
- システムサイズは、大きくしたい。
- 静置して長時間待つ必要がある。

(5 μ 秒くらいは計算したい。)

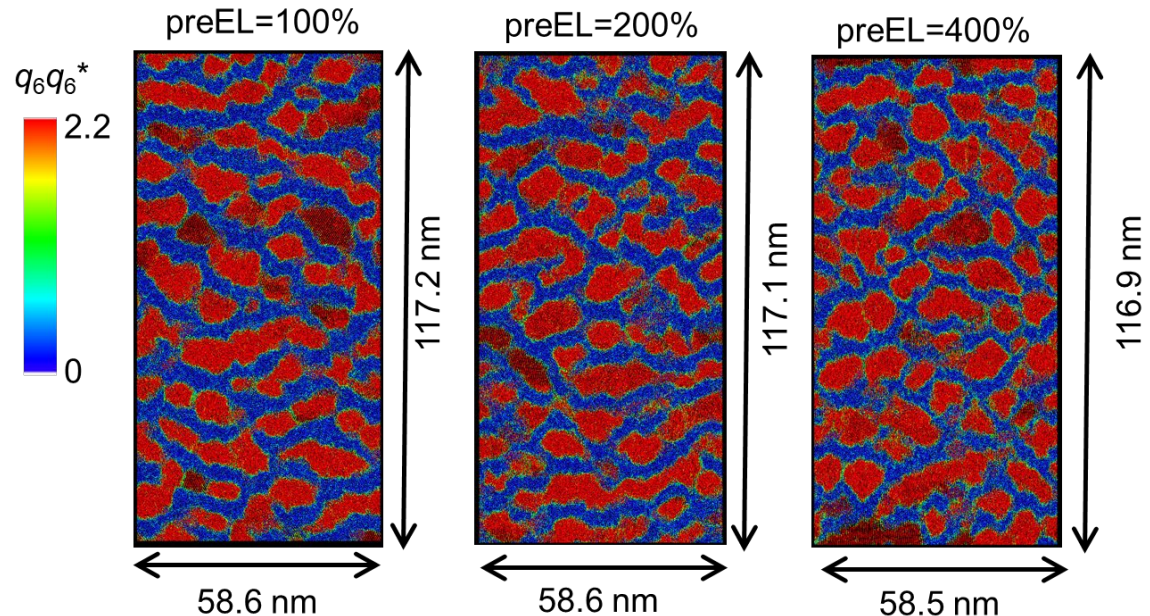
→ スパコン (多数のGPUやCPU)

1600万原子の例

(a) Crystallinities



(b) Order parameter at $\varepsilon = 0.0$ after $t_C = 5000$ ns

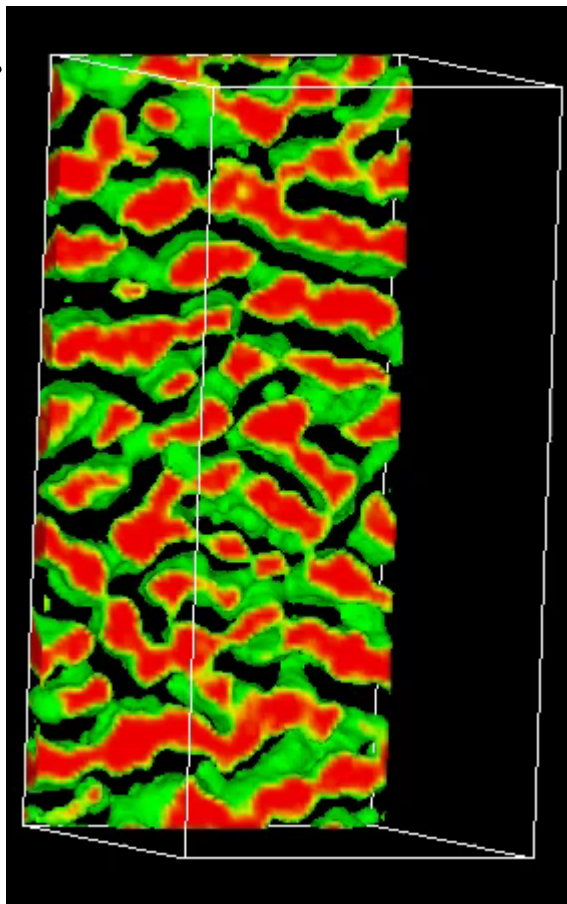
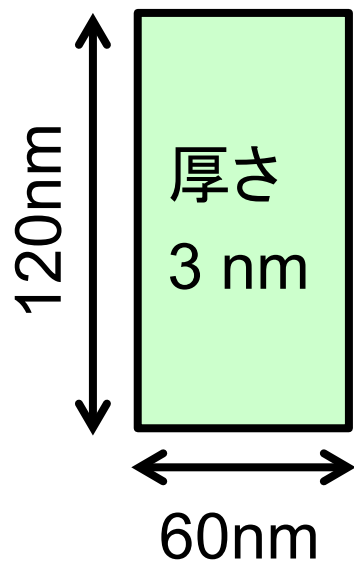


結晶化度の高い領域 (3Dクラスタ)

- T=340K

preEL
100%

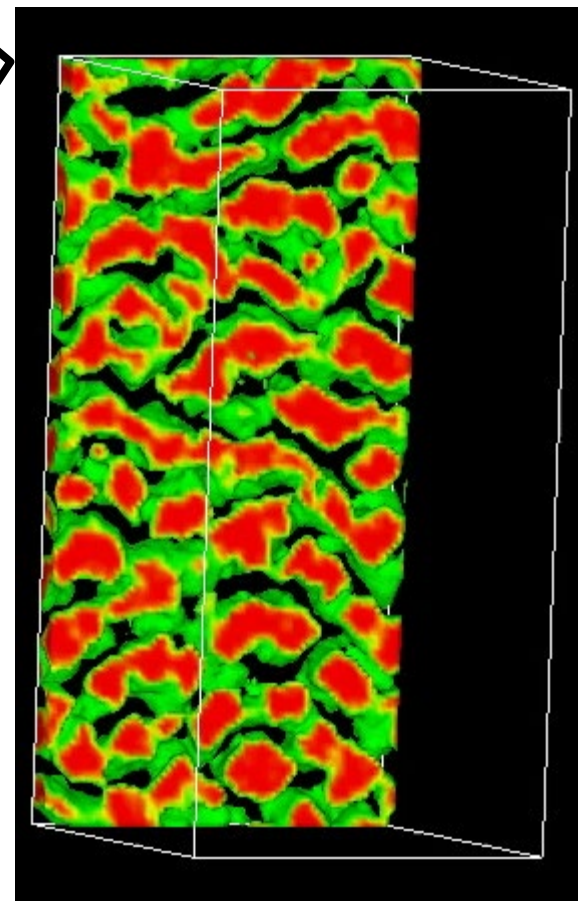
平均Trans
セグメント長
n_tran = 8.213



4000ns

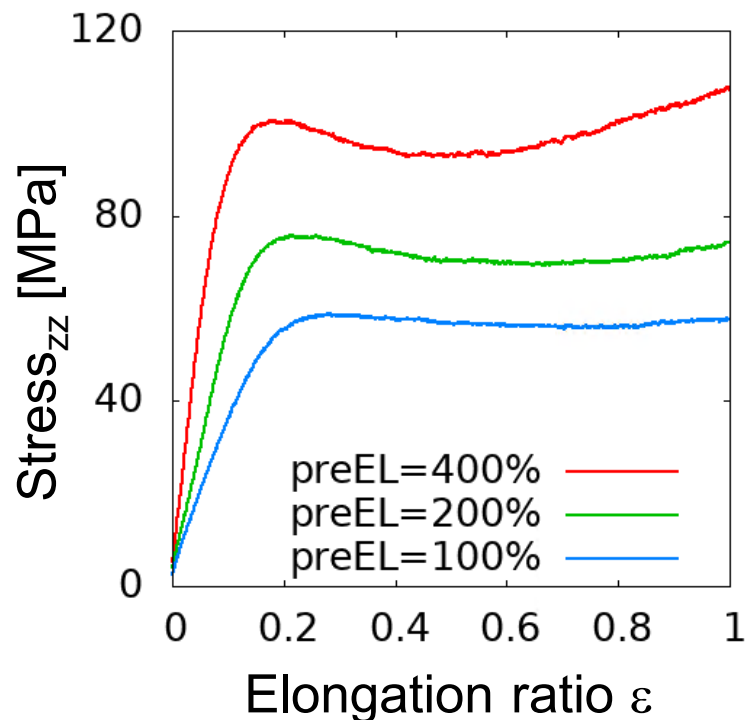
preEL
400%

n_trans =
9.398



一軸延伸／SSカーブ評価

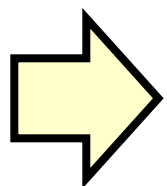
- 歪記憶による強化（応力値の増大）を示す結果。



$T=340\text{K}$

$d\lambda/dt=0.01 [1/\text{ns}] = 10^7 [1/\text{s}]$

ポアソン比 0.5



対応するモデル実験系での検証が望ましい

変形後の再結晶化によるPEの強化

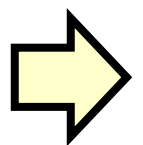
- 先行事例

- 一軸圧縮やロール延伸による結晶性高分子の強化 (彦坂先生)
- 歪記憶によるPEの強化 (アクチュエータ研究分野)
 - Kanik, et al. Science 365, 145-150 (2019)
 - Yuan, et al. Science 365, 155-158 (2019)
 - Yoshizawa, et al. Sensors and Actuators A 323, 112634 (2021)

- MD計算と比較に適したモデル実験系

→ 「一軸延伸で、歪記憶を与えたPEの系」

東京農工大 斎藤、東大 阿部らによる実験 (散乱+力学)



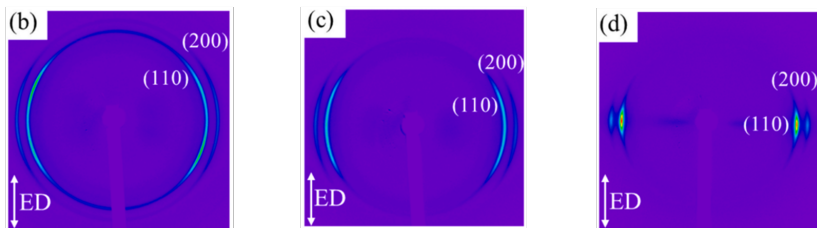
T. Maruyama, E. Abe, H. Saito, Polymer, 236 (2021) 124343.

UAMD計算と実験との比較

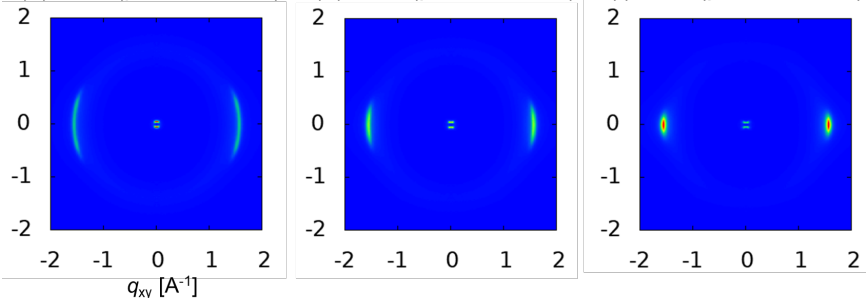
WAXS (広角散乱実験)

… 良く一致している。

(a) 実験[1] (preEL=100%) (b) 実験[1] (preEL=200%) (c) 実験[1] (preEL=400%)



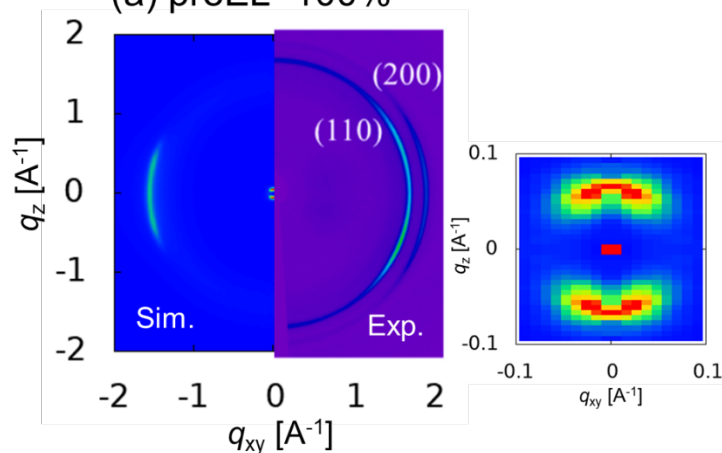
(d) 計算 (preEL=100%) (e) 計算 (preEL=200%) (f) 計算 (preEL=400%)



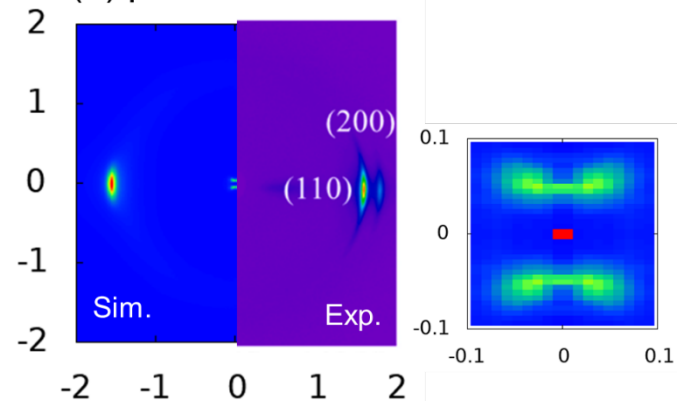
SAXS (小角散乱実験)

… 定性的に一致している。

(a) preEL=100%

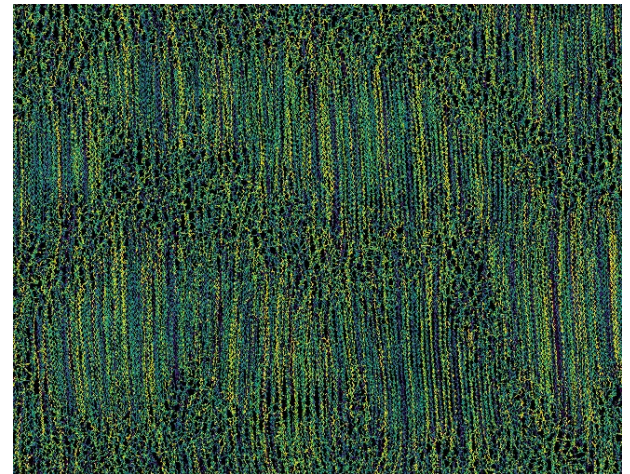
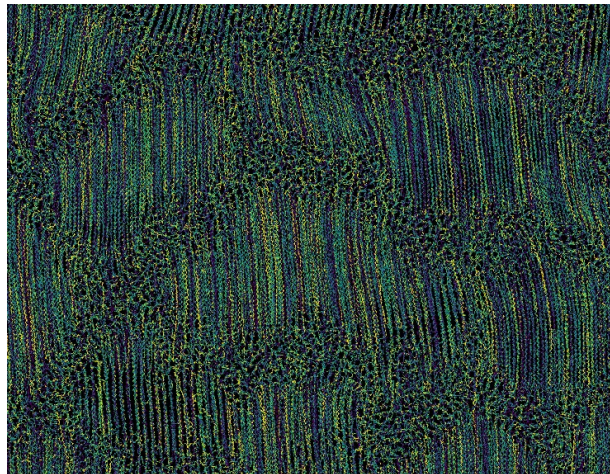
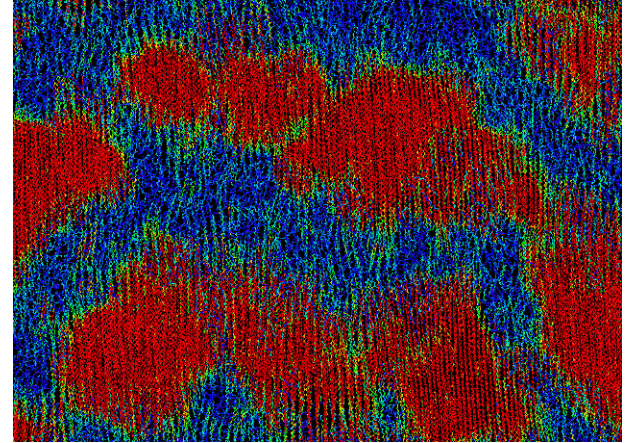
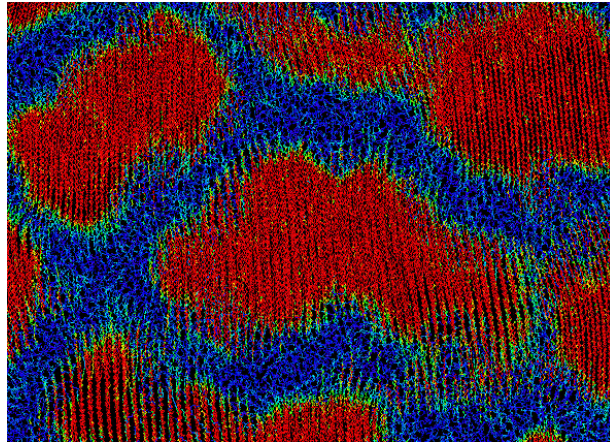
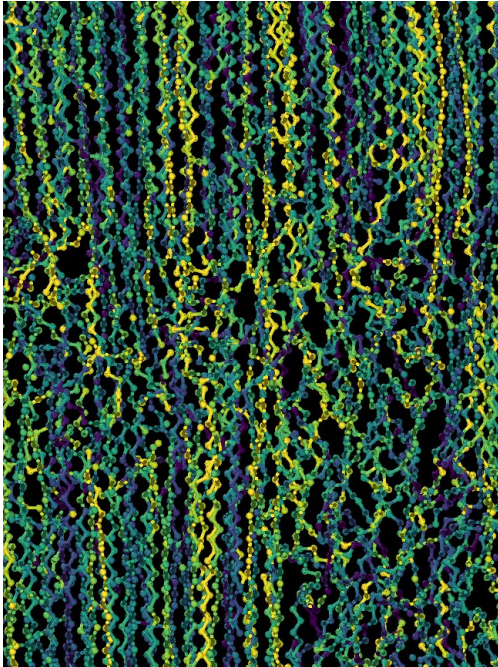


(b) preEL=400%



詳しいメカニズムを探りたい

- 応力鎖
 - σ_{zz} を短時刻平均

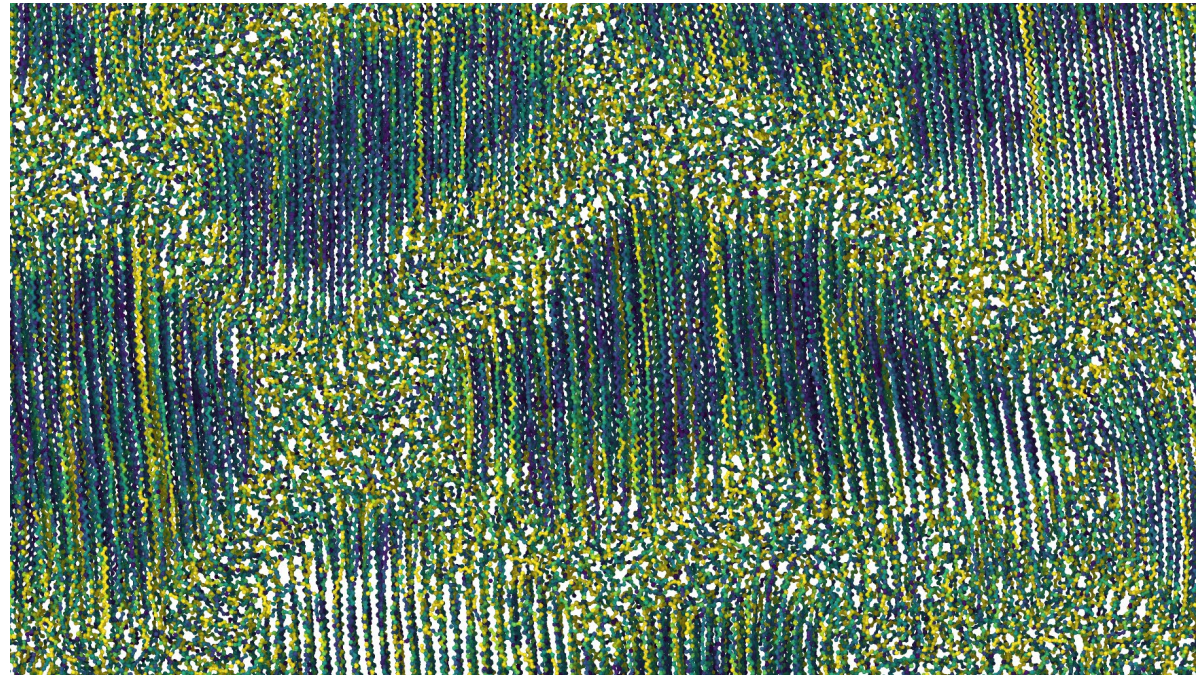
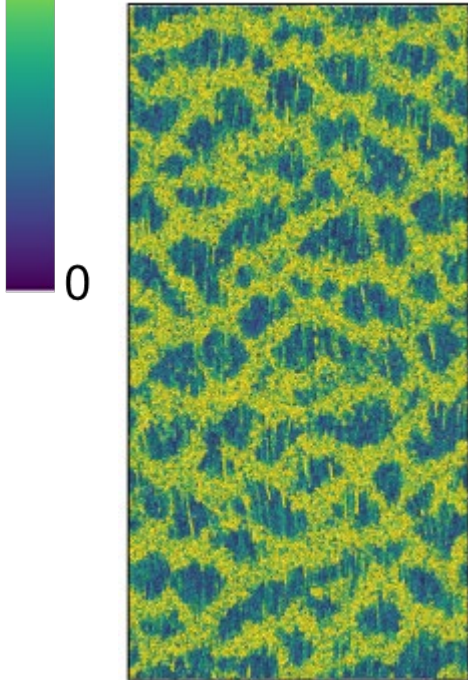


詳しいメカニズムを探りたい

- アモルファス層が、力学に寄与する様子は？
→ von Mises 応力値で色付け。

vM Stress

2×10^5

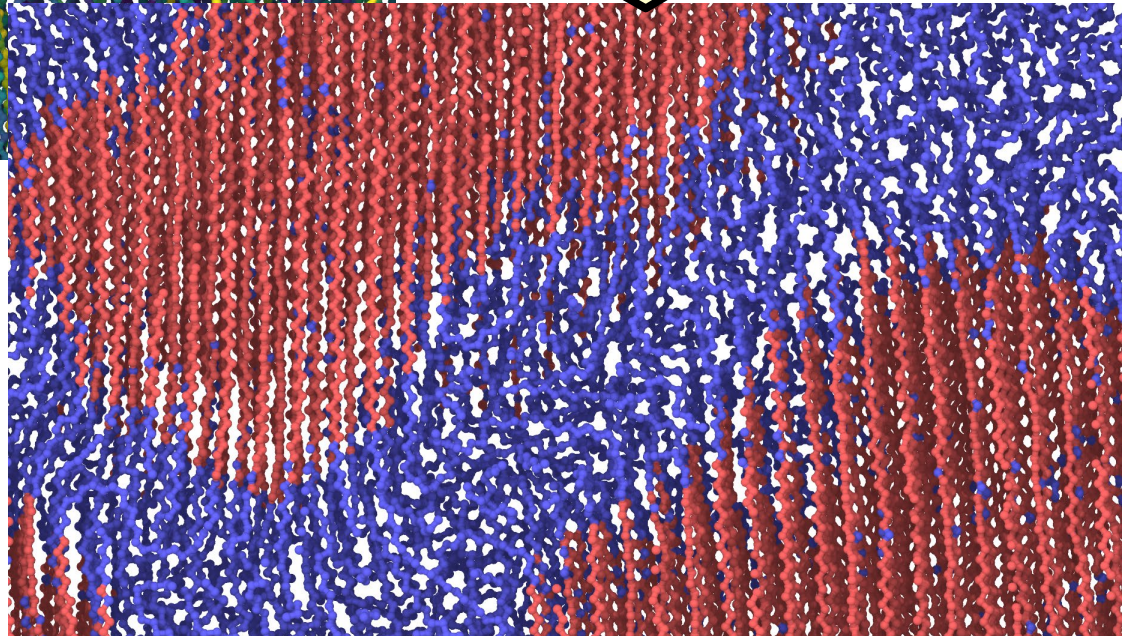


詳しいメカニズムを探りたい



結晶－非結晶の表示

von Mises応力表示

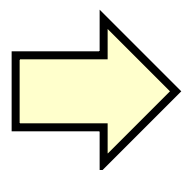


まとめ

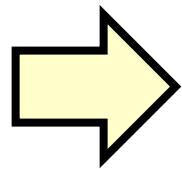
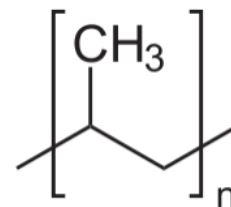
- たくさんのGPU (V100, A100)を使うことで、たくさん研究出版ができています。 *感謝感謝*
- **No GPU, No research-Life ! Too.**
- 困っていること。
 - Cuda-aware MPIが、難しい。
 - アプリの利用に関しての情報が少なく、若い人(大学院生)がフラットには使いにくい。
 - Gromacs、LAMMPSのGPU利用くらいは、サンプルスクリプトなどがあった方が良いのでは？
 - あと、(各センターでの)moduleのloadの依存関係の情報入手も、難しくなりつつある。 Ex. Gromacs使うのには、何が必要??
 - » HPCIスパコンが性能良く使えるよう環境整備する事務局マター？

時間があれば、、、

- 結晶性高分子材料の検討(計算&実験)では、伸長結晶化(+それによる自己補強)が、ホットな話題である。



HPCIで、名大スパコン「不老」活用
(hp210134, hp220114)
ポリプロピレン(iPP)複合材料



富岳課題 2022B期 (+2021A期+2020A期)
(hp220215)
ポリイソプレン(PI)
※対象サイズが大きいので、
GPUではちょっと難しく、富岳が必要！

