

研究課題名 FDPSを用いた大規模核生成分子動力学シミュレーションコードの開発

利用者氏名 (所属機関) 野村昂太郎 (神戸大学)

利用カテゴリ XC-B

以下に成果の概要を記入してください。ページ数に上限はありませんが、最終的に提出されるPDFのファイルサイズの上限は2MBです。

Summarize your achievement in this document. Though there is no page limitation, eventual size of the file must not exceed 2 MB in the PDF format.

概要

本課題では、粒子シミュレーションコード開発フレームワークFramework for Developing Particle Simulator (FDPS)を用いて液滴核生成分子動力学シミュレーションコードの開発を行った。液滴核生成シミュレーションでは、シミュレーションが進むにつれて初期条件の均一な気相から液滴が生成され、徐々に系の密度分布が均一ではなくなっていく。そのため、空間分割が均一な場合には液滴ができるにつれてロードバランスが悪化する。FDPSではマルチセッション法を用いた動的な空間分割を行うため、液滴核生成シミュレーションにおいても性能が悪化しない。性能評価として、先行研究[1]で用いられている汎用分子動力学シミュレーションプログラムLAMMPS[2]との性能比較を行った。

また、Particle-Particle Particle-Mesh(PPPM)法では、粒子間相互作用にカットオフ関数を適用して、長距離相互作用を波数空間で計算するため、多重極モーメントの計算が複雑になり、計算量が増加する。計算量を削減する。そのため、AVX-512命令セットのテーブル命令を用いた区間多項式近似の実装を行い、計算の高速化を図った。

不均一系における既存コードとの性能比較

初期条件として、12000 SPC/E水分子を数密度 0.012 nm^{-3} で均一に配置した。系は1000 Kで平衡化し、時間 $t = 0 \text{ ns}$ において速度スケールリングを用いて350 Kに冷却した。計算は速度スケールリング法を用いて粒子数、体積、温度一定のシミュレーションを行った。LAMMPSではカットオフ距離を $63 \text{ \AA}$ 、FDPSでは $58.3 \text{ \AA}$ とした。遠距離相互作用の計算にはPPPM法を用い、自作コードでは近距離力の計算にTree法を用いてTreePM法とした。計算精度としては力の相対誤差は 10^{-5} 程度になるようにパラメータを選んだ。

図1に時刻 $t = 1 \text{ ns}$ から 10 ns の系のスナップショットを示す。最初均一に分布していた水分子が液滴を形成し、徐々に液滴が大きくなり、密度に偏りができている。図2に1ノード18MPIプロセス実行における計算速度を示す。縦軸は計算が1日に進む時間、横軸は時刻である。LAMMPS(紫)での実行では時間が進み、密度分布が均一でなくなるにつれて計算速度が低下している。一方、FDPS(見込角 $\theta = 0.3$ (緑)及び $\theta = 0.5$ (水色))では、それほど計算速度が低下していないことがわかる。

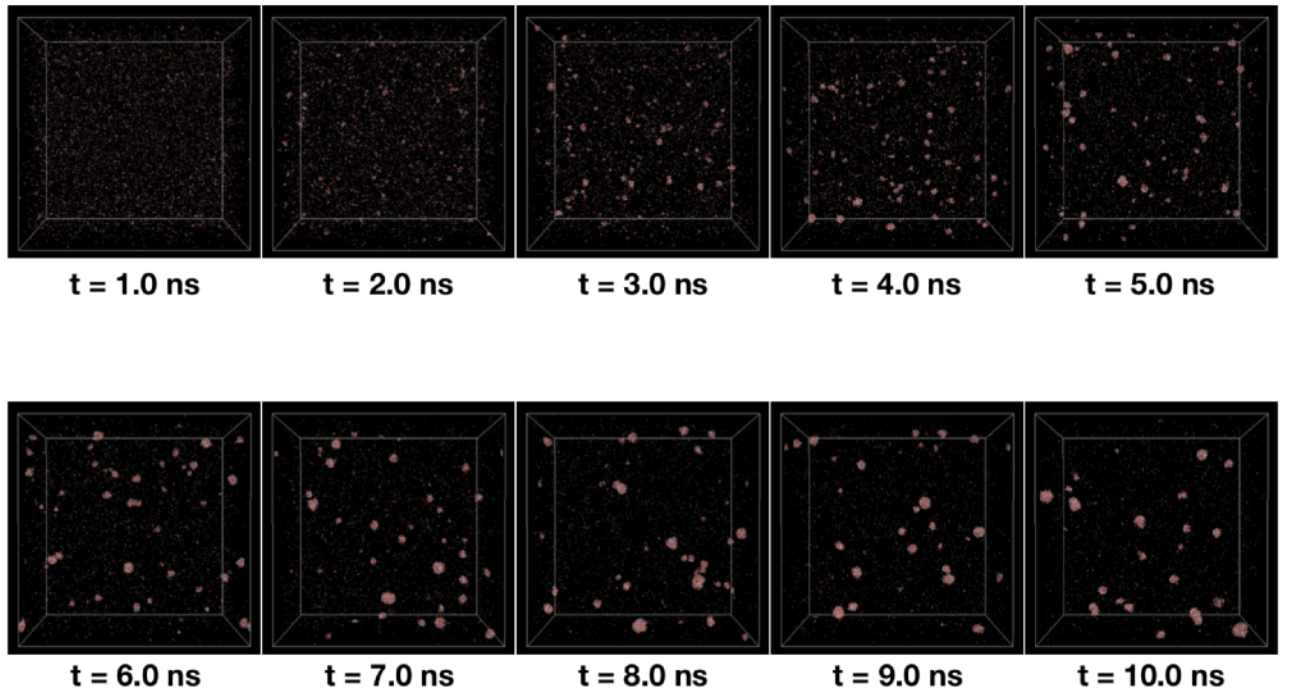


図1 時刻 $t = 1 \text{ ns}$ から 10 ns でのスナップショット. 徐々に液滴が形成されている.

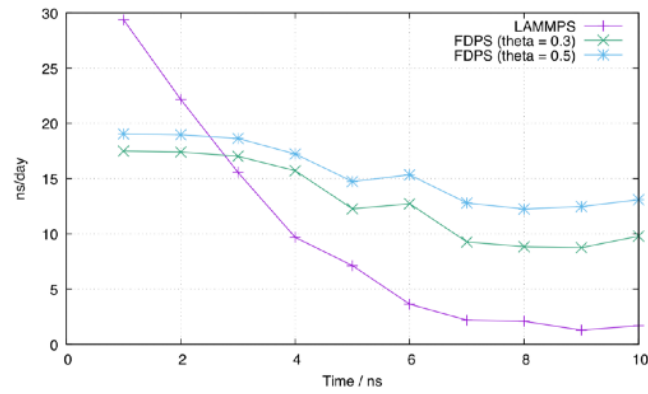


図2 各時刻における計算速度.

区間多項式近似を用いた多重極モーメント計算の高速化

FDPSでPPPM法に用いるS2型のカットオフ関数は以下のように表される.

$$S(r) = \begin{cases} \frac{48}{\pi a^4} \left(\frac{a}{2} - r \right) & r < \frac{a}{2} \\ 0 & r \geq \frac{a}{2} \end{cases}$$

このとき, モノポール, ダイポール, クアドロポールからの加速度 $\mathbf{a}_M$, $\mathbf{a}_D$, $\mathbf{a}_Q$ は, それぞれ

$$\begin{aligned} \mathbf{a}_M &= -g_1(r) \cdot \frac{1}{r^3} \mathbf{r}, \\ \mathbf{a}_D &= -g_2(r) \cdot \frac{(\mathbf{r} \cdot \mathbf{d})}{r^5} \mathbf{r} - g_1(r) \cdot \frac{1}{r^3} \mathbf{d}, \\ \mathbf{a}_Q &= -\frac{1}{2r^5} \left[\left(g_3(r) \cdot \frac{(\mathbf{r}^T \mathbf{Q} \mathbf{r})}{r^2} + g_2(r) \cdot \text{tr}(\mathbf{Q}) \right) \mathbf{r} + 2g_2(r) \cdot (\mathbf{Q} \mathbf{r}) \right] \end{aligned}$$

となる。ここでは,

$$\eta = \frac{2r}{a}, s = \max(2 - \eta, 0), t = \max(1 - \eta, 0)$$

および,

$$\begin{aligned} -g_1(r) &= -\frac{s^5(7s^3 - 64s^2 + 182s - 168) - 4t^6(7t^2 - 32t + 28)}{140} \\ 3g_2(r) &= \frac{s^4(35s^4 - 368s^3 + 1442s^2 - 2520s + 1680)}{140} - \frac{t^5(35t^3 - 184t^2 + 308t - 168)}{35} \\ -15g_3(r) &= \frac{3s^3(35s^5 - 432s^4 + 2198s^3 - 5768s^2 + 7840s - 4480)}{140} - \frac{3t^4(35t^4 - 216t^3 + 532t^2 - 616t + 280)}{35} \end{aligned}$$

である。S2カットオフがない場合は $g_1(r)$, $g_2(r)$, $g_3(r)$ は定数であるため、S2カットオフがある場合の相互作用の計算量は大きくなる。

S2カットオフ関数を適用する場合の多重極モーメント計算を高速化するため、 $g_1(r)$, $g_2(r)$, $g_3(r)$ を近似することを考える。近似手法としては、我々が開発している区間多項式近似を用いた。区間多項式近似では、近似する関数の定義域(ここでは $0 \leq r < a/2$)をいくつか区切り、それぞれの区間において、多項式近似を行う。区間を細かく区切ることで、低次数の多項式近似を行っても、精度を保つことができる。XC-50で使用可能なAVX-512命令セットや、スーパーコンピュータ富岳で使用可能なARMv8命令セットでは、SIMDレジスタをテーブルとして用いることができる命令があるため、SIMDレジスタの要素数分に定義域を区切り、各次数の近似係数をSIMDレジスタに保持することで、テーブルへのランダムアクセスをなくし、効率よく多項式近似を計算することができる。

区間多項式近似を用いた多重極モーメント計算を実装し、近似を用いた場合の精度を評価した。図3と4にTree法を用いない場合見込角 $\theta = 0.0$ と用いた場合($\theta = 0.3$)の相互作用の誤差の累積分布関数を示す。計算条件として、1500 SPC/E水分子を密度1.00 g/cm³

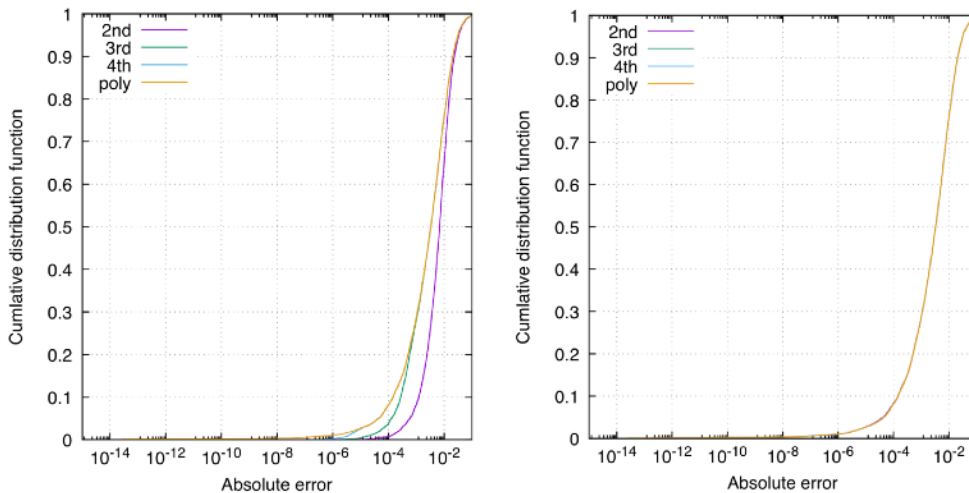


図3 区間多項式近似を用いない場合(黄)と用いた場合(2次：紫, 3次：緑, 4次：水色)の見込角 $\theta = 0.0$ と比較した相互作用の絶対誤差の累積分布関数。

で一様に分布させ、見込角 θ は0.3として、Tree法を用いない場合 ($\theta = 0.0$) と比較した。相互作用の計算は単精度で行い、相互作用の和を取る際には倍精度を用いた。poly(黄)は区間多項式近似を用いない場合、2nd(紫)、3rd(緑)、4th(水色)はそれぞれ、多項式近似の次数が2、3、4次の場合である。g1に関しては、3次または4次、g2は2次で十分な精度で近似できている。それぞれの係数において適切に次数を設定することで精度を保ちながらさらに計算量を削減できることがわかった。

結論

PPPMおよびTreePM法を用いた水の液滴核生成分子動力学シミュレーションコードを開発し、分子シミュレーションパッケージソフトLAMMPSと性能比較を行った。自作コードでは、液滴の生成が進んだ密度分布が不均一な系においてもロードバランスが保たれ、比較的計算速度が低下しないことが確認された。また、数十から数百nsほどの液滴核生成のシミュレーションを行うにあたって、十分な速度であることも確認した。

また、多重極モーメントの計算をAVX-512命令セット上で高速化するために、区間多項式近似を用いた実装を行い、近似精度の評価を行った。

今後は、大規模な計算を行い、性能評価を行う。

参考文献

- [1] Diemand, J., Angéilil, R., Tanaka, K. K., & Tanaka, H. 2013, J. Chem. Phys., 139, 074309.
- [2] <https://lammmps.sandia.gov>