

研究報告書

「時空間並列計算による高性能マルチスケール解析手法の確立」

研究期間： 2019年4月～2021年3月
研究者番号： 50231
研究者： 劉麗君

1. 研究のねらい

材料構造の最適化や新規材料の設計などには高精度な計算手法による特性予測が必要不可欠である。これまでに良く用いられてきたマクロスケールのモデリング方法では実スケールのシミュレーションができるものの、線形化などの非常に単純なアイデアに基づいて経験的に得られることが多く、離散的またはマイクロスケールの効果がある複雑なシステムでは、経験的なアプローチの成功は限られている。

一方、原子レベルの計算手法、例えば第一原理計算や分子動力学(MD)計算などは計算コストが高いため、現在世界中最速なペタスケールのスパコンを利用しても最長マイクロ秒までしか計算できない。材料の組成は原子レベルでの反応現象を再現する必要があり、ミリ秒程度の時間スケールの反応計算が必要となる。しかしながら、現状のスパコンと通常的空間並列計算のみではミリ秒の反応を再現できないため、拡散やと変態などの問題に関して、材料内部構造の長時間発展挙動に関する原子レベルのメカニズム解明調査が困難である。

そこで、高性能マルチスケール解析手法が必要される。異なるスケールのモデルを同時に検討することで、巨視的モデルの効率と微視的モデルの精度を共有するアプローチを実現する本研究テーマの着想に至った。本研究では、スーパーコンピューティング技術を駆使した時間並列計算手法を新規アイデアとして提案し、第一原理計算の精度を保持しつつ、時間スケールを克服するマルチスケール計算の実現を狙う。本マルチスケール解析手法の確立により、今後の新規半導体材料等の不純物拡散、炭素鋼内部構造の発展解析と材料制御の指針を得るところまでを目指す。

2. 研究成果

(1) 概要

本研究では、時間並列計算の概念を導入しつつ、スーパーコンピューティング技術を駆使した時間並列計算手法の確立を目指し、以下の2つの研究テーマを進めた。

研究テーマ A 「機械学習に基づく原子間ポテンシャルの開発と検証」

研究テーマ B 「時間並列計算手法の開発と炭素鋼のシミュレーション応用」

まず研究テーマ A については、機械学習の手法を用いて、密度汎関数法の精度を維持しながら、同時に分子動力学の効率も維持することで、密度汎関数理論が計算できるスケールから分子動力学が計算できるスケールまでの拡張を実現した。密度汎関数法から得たデータを学習データセットとして用い、MD 計算のための機械学習ポテンシャルを作成した。そのポテンシャルを実際に MD 計算に適用し結果として、計算時間は従来の経験的ポテンシャルと比べ同等にもかかわらず、密度汎関数法に匹敵するくらいの計算精度を得る

ことができた。

また、研究テーマ B については、時間スケールを並列化するために、時間方向の軌跡を複数の独立な軌跡に分割し、これらの軌跡を並列に計算するアプローチを用いた。これにより超並列コンピューターの性能を最大限に利用して長い時間スケールの軌跡を生成することができる。 α 鉄中の炭素原子の拡散計算に適用することにより、従来の分子動力学 (MD) 計算と同精度の結果が得られることを定量的に示した。さらに、従来の逐次 MD 計算と比べると、2000 倍以上の高速化を実現できた。

(2) 詳細

研究テーマ A「機械学習に基づく原子間ポテンシャルの開発」

材料開発の分野では、密度汎関数法 (DFT) が良く用いられている。この理論は、原子と分子の量子挙動を記述する基本方程式シュレディンガー方程式の解を見つけるための非常に高精度であると同時に、計算コストも非常に高い方法である。通常、モデルのサイズは数百原子に制限されており、最大シミュレーション時間も数十ピコ秒のオーダーである。一方で、古典分子動力学は経験的ポテンシャルを使用する原子シミュレーションの方法であり、マイクロ秒程度の数百万の原子を含む大規模なシステムをシミュレーションすることができる。しかし、高速であるものの複雑なシステムには大きな誤差が生じる。そこで、本研究は密度汎関数法を用いた計算により、マグネシウム、鉄の単体と合金のデータベース作成を行った。各結晶構造の幾何構造と全エネルギー、力など情報をデータセットとし、深層ニューラルネット及びアクティブランニング手法を用いて原子ポテンシャルを作成した(国際学会1, 2)。

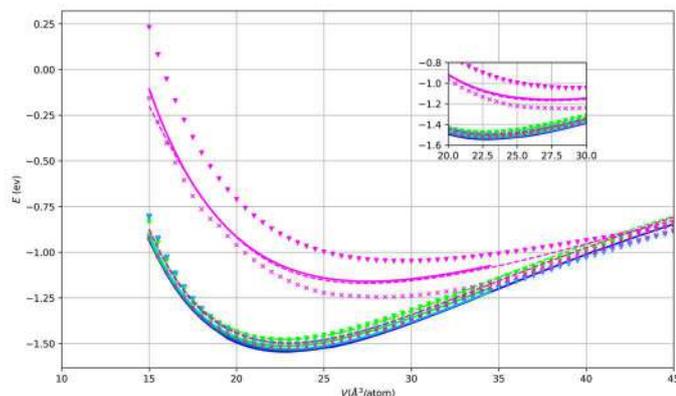


図1. 深層学習ポテンシャル(×)、アクティブランニングポテンシャル(点線)、MEAMポテンシャル(▼)を用いた MD と DFT(実線)で計算したポテンシャルエネルギー比較

図1に、作成したデータベースを用いて学習した深層学習ポテンシャル、アクティブランニングポテンシャルと経験的ポテンシャル MEAM を MD 計算に適用し、Materials Project からダウンロードした訓練に使用されていない結晶構造を用いてポテンシャルエネルギーの結果を示す。アクティブランニングは DFT の結果とほぼ一致し、他のポテンシャルより高い予測精度を得たことがわかった。

また、計算時間について、DFT 計算に匹敵するくらいの計算精度を得た深層学習ポテンシャルは従来の経験的ポテンシャルと比べやや計算時間が長くなったが、DFT より 10000 倍以上の高速化を実現した。

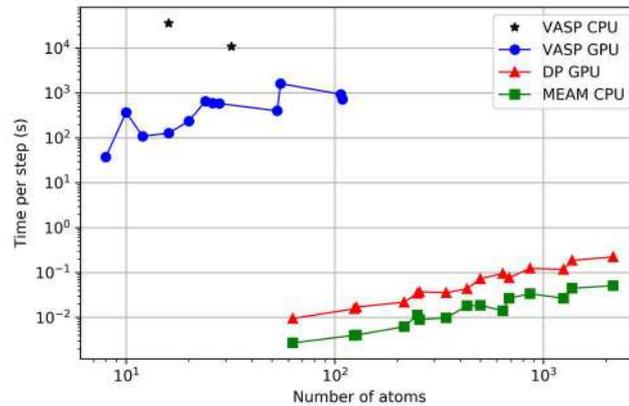


図2. 計算時間の比較

研究テーマ B「時間並列計算手法の開発と炭素鋼のシミュレーション応用」

これまでのほとんどの時間並列計算の方法は、高精度で計算コストが高いファインソルバーと低精度で計算コストが低いコースソルバーを組み合わせ、並列処理で軌跡の近似を反復的に再現する予測と修正アルゴリズムに基づいており、加速性能に大きな影響を与えるコースソルバーの選択が困難である課題があった。そこで、本研究ではスーパーコンピューティング技術を駆使した時間並列計算手法を新規アイデアとして提案し、時間スケールを克服する長時間分子動力学計算の実現を目指す。

基本的な概念は、計算対象を複数のプロセッサに複製してランダムモメンタムを与えて同時に計算することにより、初期状態からの脱出ルートを見つける時間を短縮させ、さらに、準定常分布(Quasi-Stationary Distribution)を準備すれば、状態遷移の軌跡は時間に依存なくなり、最終状態と初期状態が一致する軌跡を結合することができる。これにより、長い軌跡を生成することができ、時間スケールの拡張が可能になった(国際学会1)。図3に示すように、時間並列 MD は古典 MD の精度と同等であるが、計算速度は逐次 MD 計算より 2000 倍以上高速化することができた。

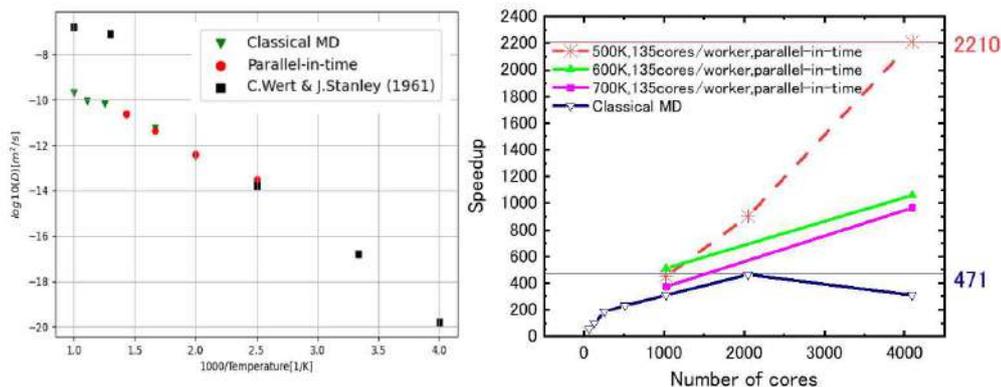


図3. 計算精度と計算時間

3. 今後の展開

本研究は時間並列計算と機械学習手法を用いて、高性能マルチスケール解析手法を確立することができた。この解析手法の適用対象は鉄鋼材料だけでなく、電子デバイス、ナノ材料など幅広い分野で使用できる点で汎用性が高く、多くの材料を対象とした応用研究が期待できる。すでに電子工学や化学分野の実験系研究者と密に連携した物性評価解析に乗り出しており、シミュレーターへの幅広い応用展開を視野に入れた研究に引き続き取り組んでいく。特に、情報学の知識をフル活用して工学の知識と融合させることで、幅広い分野で使われるシミュレーターを創出することで、世の中に研究成果の形で社会還元して貢献していきたい。

4. 自己評価

・研究目的の達成状況

本研究の目的は高性能マルチスケール解析手法の確立を目指して、時間並列手法を提案することができた。また機械学習手法の導入により、巨視的モデルの効率と微視的モデルの精度を共有するアプローチでマルチスケールを実現した。さらに、炭素鋼材料の分子動力学解析に提案手法を適用することで、実問題に開発手法の有用性も検証した。その意味で、解析手法の確立の目標は達成できたと考えられる。また、ACT-I 加速フェーズの研究を通じて、研究者として大きく成長し、国際共同研究もいくつか展開することができ、個の確立の面からみるも十分達成できたと思う。

・研究の進め方

本研究テーマは非常に挑戦性が高く、技術的に難易度も高かった背景から、米国、中国、日本国内の共同研究者と密に議論を行いながら進めた。研究費は、計算環境の構築、共同研

研究者との打ち合わせ旅費、研究成果発表（論文のオープンアクセス費、国際会議での発表）などに執行した。

・研究成果の科学技術及び学術・産業・社会・文化への波及効果

本研究テーマである高性能マルチスケール解析手法の創出により、計算主体の超高速研究開発を行うことができるため、社会的波及効果が大きい。さらに空間並列計算、時間並列計算については情報学の分野における基礎研究の側面も強く、高精度かつ高速な計算手法の学理を探究できる点でも意義深い。今後は電子デバイスや結晶成長、鉄鋼材料などの幅広い分野で本研究で開発した手法を適用し、世の中に研究成果で貢献していきたい。

・研究課題の独創性・挑戦性

時間並列計算手法と機械学習を同時に導入したマルチスケール計算に関する研究は前例がなく、独創性と新規点があるプロジェクトであった。情報学の知識だけでなく、材料科学、固体力学やなどの分野の知識融合した分野を横断型の学際的な本研究は、産業応用上価値が高いことに加え、高い挑戦性がある。

5. 主な研究成果リスト

(1) 論文(原著論文)発表

1. Chun Yik Wong, Wai Yin Wong, Lijun Liu, Yoji Shibutani, Kee Shyuan Loh, Molecular Dynamic Simulation Approach to Understand the Physical and Proton Transport Properties of Chitosan/Sulfonated Poly(Vinyl Alcohol) Composite Membranes, Polymer, Vol. 217, 123458, 2021.
2. Lijun Liu, Kazuaki Sekiya, Masao Ogino, Koki Masui, A COMINRES-QLP method for solving complex symmetric linear systems. Electrical Engineering in Japan, pp. 1-11, 2021.
3. Koki Masui, Masao Ogino, Lijun Liu, Multiple-precision iterative methods for the solution of complex symmetric systems of electromagnetic analysis, Numerical Methods for Flows in Lecture Notes in Computational Science and Engineering, pp. 321-329, 2020.

(2) 特許出願

研究期間累積件数:0 件

(2) その他の成果(主要な学会発表、受賞、著作物、プレスリリース等)

1. Lijun Liu, Yoji Shibutani, Long-Time Molecular Dynamics: Parallel-in-Time Integration and Machine Learning Interatomic Potentials, 14th WCCM & ECCOMAS Congress 2020 (Virtual congress), January 11-15, 2021.
2. Lijun Liu, Daisuke Matsunaka, Yoji Shibutani, New Deep Learning Interatomic Potential for Pure Magnesium, The 11th International Conference on Computational Methods (Virtual conference), August 9-12, 2020.
3. Lijun Liu, Haoyuan Li, Jean-Luc Bredas, Evaluation of An Efficient 3D Poisson Solver for

Organic Field-Effect Transistors Simulation, COMPUMAG 2019, Paris, France, July 15-19, 2019.
4. Kazuaki Sekiya, Masao Ogino, Lijun Liu, Koki Masui, Efficient Mixed-precision Iterative Methods for High-frequency Electromagnetic Field Analysis, COMPUMAG 2019, Paris, France, July 15-19, 2019.
5. Lijun Liu, Haoyuan Li, Jean-Luc Bredas, Simulations of Organic Field-Effect Transistors by the Combination of Finite Difference Method and Kinetic Monte Carlo Method, The 10th International Conference on Computational Methods 2019, Singapore, July 9-13, 2019.