

並列計算グリッドを用いたハイブリッド量子／古典数値解析法の開発

名古屋工業大学大学院 工学研究科 ○尾形 修司

Development of hybrid quantum-classical simulation schemes for parallel computation grids
Shuji Ogata, Nagoya Institute of Technology

Abstract:

We have developed multiscale, hybrid quantum-classical simulation schemes for ceramics and semiconductors to run on the computation grids. First, various quantum and classical simulation codes have been developed using the real-space electronic-density-functional theory, the tight-binding approximation, the molecular dynamics, and the coarse-grained particles methods. Second, those codes have been combined with a novel algorithm into the hybrid quantum-classical simulation codes. The hybrid simulation codes have been applied to various realistic engineering problems such as the stress corrosion cracking of Si and alumina. Third, benchmark tests of the grid hybrid simulation have been performed using the hybrid density-functional-theory/molecular-dynamics code on a PC cluster located at different laboratories. It has been proofed that the hybrid simulation codes can run efficiently on the PC grid.

1. はじめに

セラミックスおよび半導体は産業界で重要な役割を果たしてきたが、今後はさらに多機能・高機能化を進めると共に、より過酷な環境でも安定して使用できるセラミックス・半導体を開発することが求められよう。多様なセラミックス・半導体材料分野に共通する研究テーマの一つは、ナノメートル規模の微細加工を施すことにより新たな特性を発現させることである。例えば、セラミックスにしばしば見られる脆性破壊は応用上問題であるが、セラミックスを構成する粒径をマイクロメートル以下にすると脆性破壊にくくなることがある。しかし、微細化により内部残留ストレスを生じ、耐腐食性を下げる可能性も合わせ持つ。また、LSI内部の誘電性絶縁体としては、Siを部分酸化させて形成したSiO₂が用いられているが、集積度上昇と共に将来は数Å厚程度相当にまで薄くする必要があり絶縁性の破れが懸念されている。

シミュレーション法を用いた理論計算では通常、元々の対象系を計算可能な小規模モデルへ替え、その電子構造や原子構造に関する計算結果から実際の現象のメカニズムを類推するという流れをとる。しかし、近年見られる計算機能力の急激な拡大により、現実に近い大規模系を直接対象とし、その電子構造と応力場との相関、さらに化学反応に起因したその相関のダイナミックスを微視的に計算する可能性が生じている。微細構造を持つ系の内部応力場を考慮する際には、系の形状および大きさを取り入れた現実的な大規模原子系を対象にする必要がある。一方、環境分子－材料原子間、粒界（添加）原子間の化学反応を予測するためには、化学反応を予測できる精度をもった計算手法を用いたシミュレーションにより、化学反応で生成される熱が散逸するのに十分な原子数を扱うことが必要である。つまり、分子軌道法や密度汎関数法など、ある程度以上の精度を持つ量子力学計算法を用いつつ現実的大規模系のシミュレーションを行うことが望ましい。

実際には、現存の最大規模の計算機を使っても、例えば通常の密度汎関数法を用いると実際的大規模規

模原子系を扱うことは不可能である。そのため図1のように、近似精度(同時に計算量も)が異なる幾つかの量子力学的および古典力学的計算手法を、その精度を必要とする空間スケール領域に適用することで、全計算量を少なくするマルチスケールハイブリッド量子古典シミュレーション法が有効と思われる。

我々は本研究において第一に、ハイブリッド量子古典シミュレーションで用いることを前提に、密度汎関数法、強束縛近似法、分子動力学法、粗視化粒子法的高速計算コードを開発した。第二に、これらの量子および古典計算コードを融合するハイブリッド手法の改良を進め、量子領域を自動的にアダプティブに選択することができるアルゴリズムを開発した。近年、パソコン(PC)にフリーソフトウェアを組み合わせることで価格性能比良く並列計算機(PCクラスター)を構築し、シミュレーション等に利用する研究室が増えてきた。PCクラスターをネットワーク統合したPCグリッドは各研究室のPCクラスターの能力を飛躍的に高める可能性をもっているため、その有効利用は今後ますます必要となってくる。第三に、我々のハイブリッド量子古典コードは、PCグリッド環境を有効利用できることを実証した。

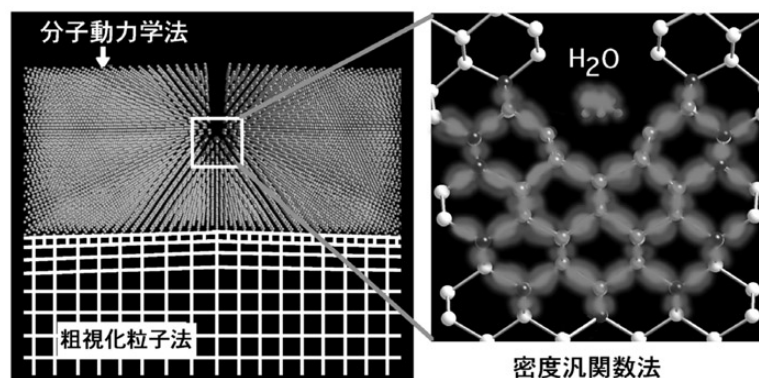


図1. ハイブリッド量子古典シミュレーション法における領域分割の概念図

2. 研究開発項目とその成果概要

2.1 様々な量子および古典計算コードの開発

以前から実用化を進めていた量子計算法である密度汎関数法と強束縛近似法の並列計算コードを完成させた。また粗視化粒子法の計算手法を改良し、大変形する系にも適用できる実用コードを作成した。

密度汎関数法に基づく電子状態計算コードを完成させた。並列計算機上で効率よく計算するために実空間有限差分法を採用していた。平面波基底による方法に用いられる高速フーリエ変換のような全空間に渡る演算が現れないため、効率的な並列化が可能となっている。並列化には領域分割法を採用している。また、波動関数の空間分布における短波長成分の収束性を高速化するために最近接格子点平均法によるプレコンディショニングを用い、長波長成分の収束性加速にはマルチグリッド法を使用している。

強束縛近似に基づく並列計算型オーダーN電子状態計算コードは、既にその基本部分が設計済みであり、並列化効率を高めたコードを開発した。例えば、8ノードPCクラスターを用いて並列化効率を実測すると、シリコン単結晶の電子状態を計算する際に約80%の並列化率を示し、開発した強束縛近似計算コードは十分実用的であった。

材料のマクロ構造をシミュレートする手法としては有限要素法が有名であるが、波伝播特性、分子動力学領域との接合特性等に問題があった。これらの問題点を克服する為に、統計力学を用いた原子集団を代表する粒子(粗視化粒子)を導入し、その粗視化粒子群によってマクロ材料形状を扱う。粗視化粒子の座標と速度を $\{U_k, UY_k\}$ とすると、粗視化粒子の全エネルギーは、 $E(U_k, UY_k) = \int d\{x_\mu\} d\{p_\mu\} H_{MD} \Delta \exp(-\beta H_{MD}) / Z$ と計算できる。ここで、 $\{x_k, p_k\}$ は原子の座標と運動量であり、 H_{MD} は原子系のハミルトニアン、 Z は分配関数、 Δ は粗視化粒子と原子との間の満たす拘束

条件である。この方法は、1次元系で行ったテストでは、波伝播特性を改善した。また、粗視化度をコントロールすることで、粗視化粒子法領域は自動的に分子動力学領域とシームレスに接続する利点を持つ。我々は、多次元に拡張すると共に、大規模変形に耐えうるように改良した定式化を提案した。また、実際に現実的原子間ポテンシャルを用いて実用コードを作成した。

2.2 ハイブリッドアルゴリズムの改良

通常良く用いられ本研究開発の当初にも用いていたハイブリッドアルゴリズム(結合原子法)では、対象とする材料内に設定する量子領域(量子クラスター)の形状および大きさに依存して、量子-古典境界領域の原子構造が本来保持すべき原子構造から大きくずれる場合があった。これは量子領域の選択にシミュレーション結果が依存することを意味し、ハイブリッド量子/古典法を実用化する上で問題であった。この問題を解決するために、設定する量子クラスターに含まれる原子数より多数の原子数からなる”装飾された量子クラスター”の計算を援用する新しいハイブリッド密度汎関数—分子動力学法を考案し、その実用化コードを作成した(図2にその並列計算フローチャートを示す)。Siやアルミナのストレス腐食破壊メカニズムに関するシミュレーション等に用い、新しいハイブリッド密度汎関数—分子動力学コードが実用的であることを実証した。

強束縛近似に基づく並列計算型オーダーN電子状態計算コードを分子動力学法に融合するハイブリッド強束縛—分子動力学コードの作成を行った。実際に、Si界面を含むSi系の界面部分を強束縛法で扱い、その他を分子動力学法で扱うハイブリッドシミュレーションを行い、妥当な結果を得た。

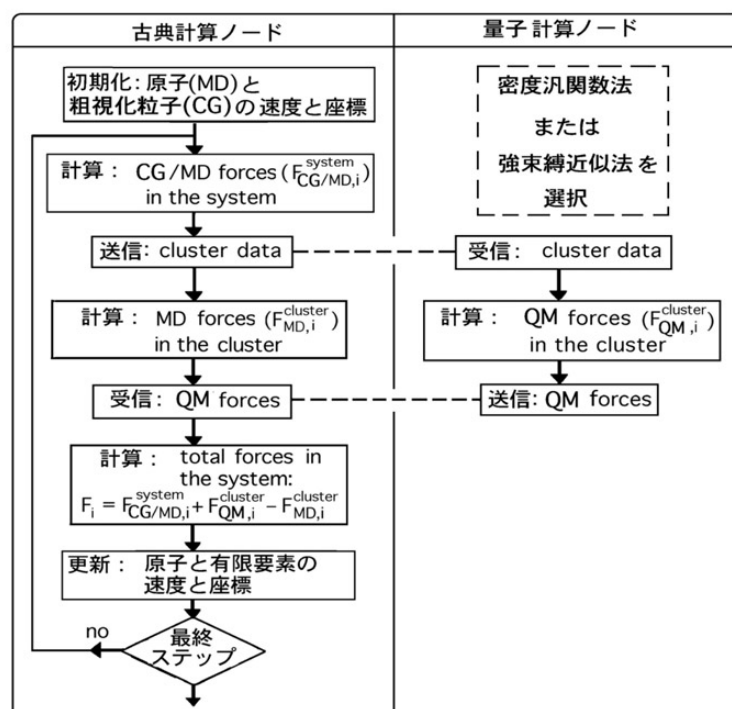


図2. ハイブリッド量子古典シミュレーション法における並列計算フローチャート

2.3 PGグリッド環境でのハイブリッド量子古典シミュレーション

ハイブリッド量子古典コードがグリッド環境で効率良く動くことを確かめるために、ベンチマークテストを行った。山口大学のPCクラスターに、ルイジアナ州立大学、広島大学、新潟大学のPCクラスターを加えたPCグリッド環境下で、ハイブリッド量子古典コードを実行した。Siのクラック先端近傍に水分子

に置いて化学反応させる場合において、古典計算をルイジアナ州立大学の1ノード、第1番目の密度汎関数(DFT)領域を山口大学の8ノード、第2番目のDFT領域を新潟大学の8ノード、第3番目のDFT領域を広島大学の8ノードに計算させるように設定し、DFT領域の数を増大させるにつれて、1ステップ計算するのに要する時間が、どの程度長くなるか調べた。このテストでは日本国内のPCクラスターはSINETで繋がっていた。また、各ノードの計算性能は同じ(Pentium 2.0GHz)であり、PCクラスター内のノードはGigabit Ethernetで互いに繋がっていた。その結果、1ステップに要する時間は、210秒(DFT領域1つ)、220秒(2つ)、225秒(3つ)であり、DFT領域の数を増やし空間的に離れたPCクラスターを同時に使うようにしても、5%程度しか1ステップに要する時間は増えなかった。これは、本ハイブリッド法が、計算グリッド環境に大変適していることを示している。この実測の際には、アプリケーションが立ち上がる際にしばしば、ネットワークの混雑度によりMPI起動時間切れになった。現在は、グリッド基盤ソフトであるGlobusを導入しさらにMPICH-G2を用いて、シミュレーションがより安定して実行できるようになっている。

3. ネットワークの活用について

我々の開発したハイブリッド量子古典コードにおいて、古典計算ノードとDFT計算ノードとの間で相互に転送するデータは、DFT計算する原子クラスターの原子種、座標、原子が感じる力、エネルギーだけであり、データ量はクラスター原子数のオーダーに過ぎない。この特徴のため、複数のPCクラスターが接続された計算グリッド環境で、1つのDFT計算が同じPCクラスター内で行われるようにすると、すべての計算ノードを高効率で使うグリッドシミュレーションが可能になる。汎用学術ネットワークであるSINETを用いたテストにおいても上記(2.3)したように十分実用的な規模のシミュレーションを効率良く実行できることを確認した。

今後、超高速ネットワークが国内の多くの機関に設置され、さらに海外との相互乗り入れが進むと、様々な国に存在する多数のPCクラスターを同時に利用する超大規模グリッドハイブリッドシミュレーションが可能となろう。シミュレーションの適用が見込まれる対象には、ナノ材料、生体材料、次世代電子デバイス等、多くの重要な技術が含まれる。現在、アダプティブに量子領域再設定するアルゴリズムを加えたハイブリッド量子古典シミュレーションコードを用い、国内の名古屋工業大学—山口大学—新潟大学—岡山大学—熊本大学、アメリカ・南カリフォルニア大学、さらにシンガポール等Asia-Pacific諸国を加えた国際的グリッド上でのグリッドハイブリッドシミュレーションのテストを進めている。

4. まとめ

ナノメートル規模の微細構造を持つセラミックスや半導体材料のマルチスケールハイブリッド量子古典シミュレーションをグリッド計算環境で大規模に実行するために、第一に様々な量子および古典計算法の開発を行った。第二に、これらの量子および古典計算法を、マルチスケール分割した系に適用し、ハイブリッドアルゴリズムの改良を進めることで、量子領域の選択に強く依存せず安定して実行できるため量子領域をアダプティブに自動選択できるハイブリッドコードを開発した。第三に、開発メンバーの研究室に設置した多数のPCクラスターを相互接続したPCグリッドを用いて、コード開発中に適宜、ハイブリッドコードの実用化テストを行なった。現在のSINETが持つバンド幅であっても、グリッド計算環境でのハイブリッド量子古典シミュレーションが可能であることを実証した。

5. 研究開発実施体制

代表研究者 名古屋工業大学大学院 工学研究科 尾形 修司

研究分担

研究開発項目：ハイブリッドコードの汎用化に関する研究

名古屋工業大学大学院 工学研究科

尾形 修司、五十嵐 誉廣 (JST研究員)、Rachid Belkada (JST研究員)

研究協力者

菊池 英明 (ルイジアナ州立大学)、中野 愛一郎 (南カリフォルニア大学)、
Rajiv E. Kalia (南カリフォルニア大学)、Priya Vashishta (南カリフォルニア大学)、
Noam Bernstein (Naval Research Lab.)、Giulia Galli (Lawrence Livermore Lab.)

研究開発項目：グリッドハイブリッドコードの開発

山口大学 工学部

松浦 満、赤井 光治

研究開発項目：グリッド密度汎関数計算コードの開発

熊本大学 理学部

下條 冬樹

研究開発項目：グリッド強束縛計算コードの開発

岡山大学 工学部

鶴田 健二

研究開発項目：グリッドの高度利用に関する研究

新潟大学 理学部

家富 洋