九州大学学術情報リポジトリ
Kyushu University Institutional Repository

マテリアルサイエンスにおける計算科学の応用

宗藤, 伸治
九州大学大学院工学研究院材料工学部門

https://doi.org/10.15017/1472517

出版情報：九州大学情報基盤センター広報 : 全国共同利用版. 5 (2), pp.61-64, 2005-10. Computing and Communications Center, Kyushu University
バージョン：
権利関係：

マテリアルサイエンスにおける計算科学の応用

宗藤　伸治*

概要　材料科学分野における計算の応用の観点から、並列計算の利用体系について述べ、平成17年4月に九州大学情報基盤センターに導入された高性能演算サーバー(p5モデル595)の性能評価および活用法に関して論ずる。

1. まえがき

材料科学計算分野では1つの計算を高速に短時間で行うことも必要ではあるが、独立した計算を種々の条件で行うことが多く、高速に計算してくれるマシンは当然頼りになるが、独立計算を複数行えるようCPU数が求められる。また、材料科学計算分野に従事している研究者の多くはプログラミングの技術よりも物理現象に注目しているため、研究に用いているプログラムを並列化するために時間をかけることを嫌う傾向にあると思われる。しかしながら、現在ではCPU単体での性能向上が頭打ちになりつつあり、計算結果をより高速に算出するには並列化への取り組みも避けて通ることはできなくなりつつある。

本稿では，多CPUを用いた材料科学計算の利用方法として、複数の逐次プログラムを多くのCPUを用いて独立に行う場合と1つの並列化プログラムを複数のCPUを用いて行う場合の2つの観点から平成17年4月に九州大学情報基盤センターに導入された高性能演算サーバー(p5モデル595)の性能評価および活用法について論ずる。

2. 計算手法(分子動力学法)

材料科学計算分野において原子レベルのミクロな領域の構造や動的挙動の解析を行う手法の1つに分子動力学法があり、筆者はこの手法を用いて主にシリコンの結晶成長メカニズムの解析に関する研究に従事してきた[i,ii]。分子動力学法で取り扱う最小コンポーネントは原子であり、通常数千から数万原子を用いて計算が行われる。まず、初期状態におけるそれぞれの原子の座標を与え、その状態における各原子に働く力を原子間相互作用力を記述したポテンシャル[iii,iv]と呼ばれる関数を微分することにより算出する。その後、求められた力を用いて運動方程式を解くことにより微小時間後の各原子の座標が得られる。この力の算出→微小時間後の座標算出を1サイクル(1 MD[1]ステップ)とし、これを逐次的に行うことにより計算が進行していく。図1に分子動力学法の計算手順を模式的に表したものを示す。計算に必要な時間は、原子数や行うMDステップ数に依存するが、結晶成長シ

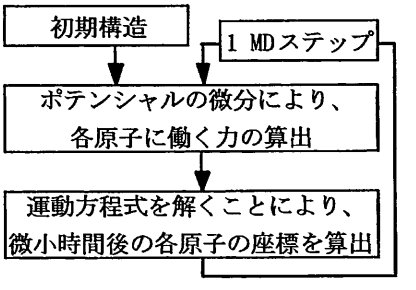

図1　分子動力学法の計算手順

*九州大学大学院工学研究院材料工学部門　　munetoh@zaiko.kyushu-u.ac.jp

1 Molecular Dynamics

ミュレーション(図 2)などの物理現象を解析するためには最新の計算機を用いても数ヶ月のオーダーとなる。

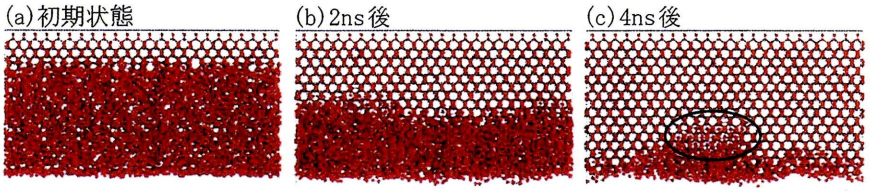

図2　分子動力学法によるシリコンの固相成長シミュレーションの例。
図中丸で囲んだ部分に欠陥の発生が確認できる。分子動力学法は
このようなミクロレベルでの物理現象のメカニズム解析に力を発揮する。

3.　高性能演算サーバー(p5 モデル 595)の CPU 単体の性能評価

ここで本題とはそれるが、新規に九大情報基盤センターに導入される高性能演算サーバーIBM p5 モデル 595(CPU：Power5, 1.9GHz)と他社の個人向けワークステーションとの CPU 単体性能を比較するために、筆者らが独自に開発した分子動力学プログラムを用いて、ベンチマークを行った結果を図 3 に示す。比較に用いた CPU は現在市販されているものでも比較的最新のモデルである。1990 年代には Alpha チップが当時最速であり、科学計算に従事する研究者はよくこの CPU を用いていたが、現在ではインテル社製の CPU である Itanium2 や Xeon などに大きく差をつけられていることが分かる。その中で Power5 は Itanium2 チップには及ばないものの、Alpha チップの 1.3 倍高速であることが分かった。

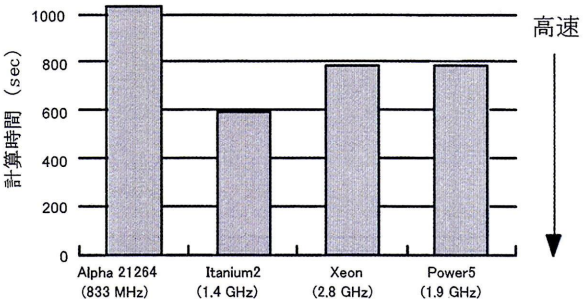

図3　Power5 と他社CPU との単体性能比較

4.　複数の逐次プログラムを多くの CPU を用いて独立に行う場合

材料科学計算に限らず、多くの計算では各種の条件やパラメーターを少しずつ変えた計算を複数行い、得られる結果への影響を議論することがよくある。変化させるパラメーターの変化の刻みが多い場合、多数 CPU があった場合当然ながらすべての計算結果が早く算出されることになる。図 4 に分子動力学法を用いてシリコン融液に剪断応力を与えた場合に生じる速度勾配を測定することにより、粘性係数を求めた結果を示す。この計算では、図中の測定点 1 つを算出するのに最新の CPU を用いても約 2 日間必要とする。ある温度での粘性係数は剪断応力 - 速度勾配の直線の傾きで与えられるため、測定点が多いほど得られる値の精度が向上する。Itanium2、1.4GHz の CPU を 2 つ用いて 2 週間使用した場合では、14 条件での計算が行えた。一方、Power5 の CPU を 8 つ用いて 1 週間使用した場合では、50 条件での計算が行えた。このように、CPU の数を多く使用でき

る環境では多くの計算結果算出が見込める。この観点からも、新規に導入された 400 以上の CPU を持つ高性能演算サーバーは、並列化を行っていない逐次プログラムを用いる場合にでも大いに力を発揮すると考えられる。

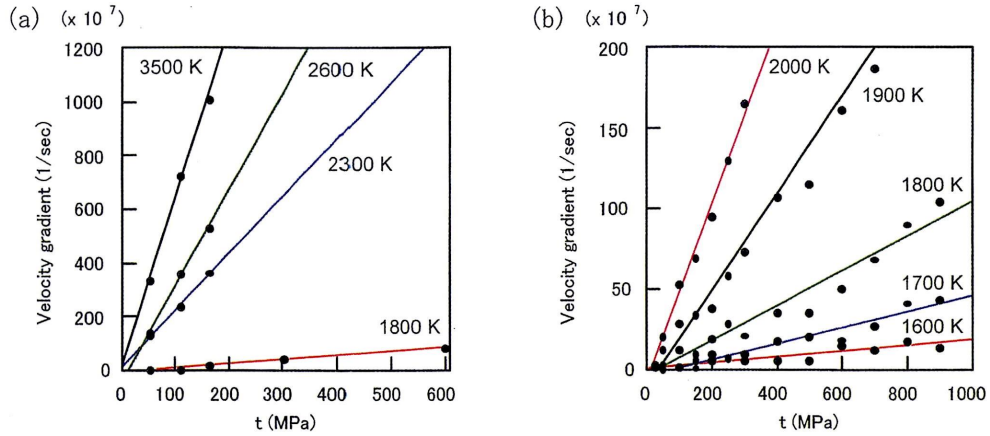

図4 シリコン融液の剪断応力と速度勾配の測定計算の結果。粘性係数は傾きで与えられる。
(a) Itanium2x2CPU マシンにて2週間で得られた結果、
(b) Power5x8CPU にて1週間で得られた結果

5. 1つの並列化プログラムを複数の CPU を用いて行う場合

まえがきでも述べたように、既に完成された逐次プログラムを並列化するための労力は甚大であるため、並列化技術そのものを研究対象としている研究者以外は、その労力をできる限り回避しようと考えていると思われる。しかしながら、Red brick wall と称されるデバイスの微細化による速度向上の限界が現実のものとなってきている現在では、並列化によって計算速度を向上させようとする動きは当然のことと思われる。

分子動力学法では、全原子の座標が算出されるまで次の MD ステップに進むことができないため、並列化のターゲットは 1MD ステップ内での力の計算および微小時間後の位置の算出部分である。その場合、複数の CPU に担当原子を割り当て、各 CPU にそれぞれの担当原子についての力、座標を計算させる方法が考えられる。この方法におけるボトルネックは、担当原子の座標を算出した後の CPU 間の担当原子座標の情報の通信である。図 5 に分子動力学法に並列化を適用した場合の計算手順を模式的に表したものを示す。この図

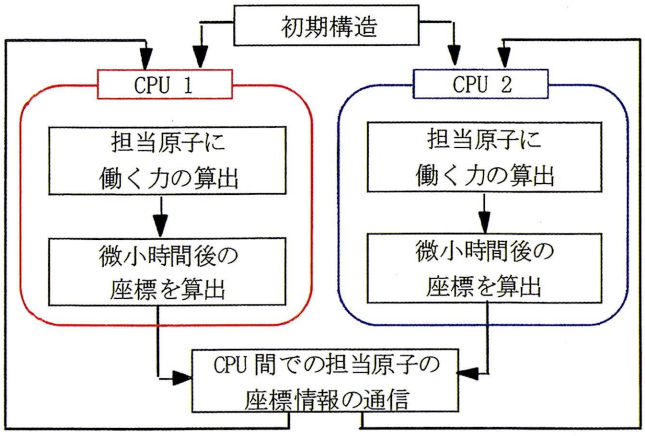

図 5 分子動力学法に並列化を適用した場合の計算手順

に示した流れに従い、既存の逐次プログラムを並列化した。用いた CPU 数と計算に要する時間の関係を図 6 に示す。この計算は 1CPU のみを用いた逐次プログラムで動かした場合、約 900 秒で完了する。2CPU を用いた場合約 500 秒で完了し、通信のボトルネックのために理論である 1/2 の計算時間より若干多くの計算時間を要した。CPU 数が増えるに従って、計算時間は短縮されていくが、理論値との差が大きくなっていく結果となった。さらに CPU 数を増やし、16CPU を用いた場合は、逆に 4CPU を用いた場合より計算時間が多く必要とする結果を得た。これは、CPU 数を増やすことによって、各 CPU の負担が軽減される反面、通信量が増え、通信にかかる負担の割合が顕著になってくるためと考えられる。そのため、分子動力学法において並列化技術を適用する場合、如何に通信の量を減らし効率化を図るかがキーポイントであると思われる。

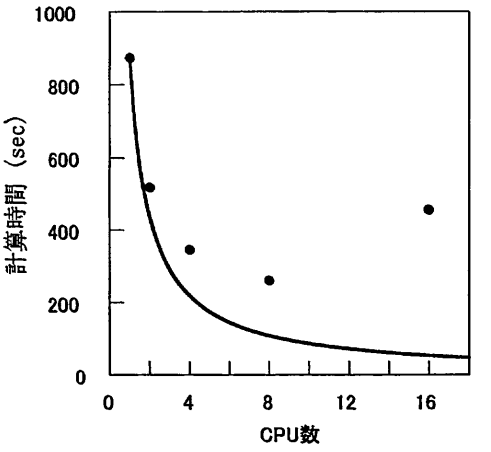

図 6　並列分子動力学計算における CPU 数と計算時間の関係。実線は理論値を示す。

6. まとめ

材料科学分野への計算の実用の観点から、複数の逐次プログラムを多くの CPU を用いて独立に行う場合と 1 つの並列化プログラムを複数の CPU を用いて行う場合の 2 つについて、計算結果算出に必要な時間に焦点をあて論じてきた。大学情報基盤センターに新規に導入された高性能演算サーバーは、多くの CPU を持ち、CPU 単体の性能も比較的高いポテンシャルを持っているため、並列化技術を持たないユーザーあるいは研究者にとっても有効なマシンであると考えられる。さらに並列化技術を既に習得しているユーザーにとっては、大いに力を発揮できる環境であると思われる。

最後に、以上述べてきた結果を算出するにあたり、1 ヶ月間にわたり高性能演算サーバーの使用の場を提供頂いた九州大学情報基盤センターの方々に感謝いたします。

参考文献

[i] S. Munetoh, K. Moriguchi, A. Shintani, K. Nishihira, and T. Motooka, Phys. Rev. B 64, 193314 (2001).
[ii] S. Munetoh, K. Moriguchi, K. Kamei, A. Shintani, and T. Motooka, Phys. Rev. Lett. 86, 4879 (2001).
[iii] J. Tersoff, Phys. Rev. B 38, 9902 (1988).
[iv] J. Tersoff, Phys. Rev. B 39, 5566 (1989).