

プロジェクト名(タイトル): 富岳における大規模分子シミュレーションの検討

利用者氏名: ○井上 頌基

理研における所属研究室名: 計算科学研究センター 量子系分子科学研究チーム

1. 本プロジェクトの研究の背景、目的、関係するプロジェクトとの関係

富岳における大規模分子シミュレーションを行う上での様々なベンチマークを行う。

2. 具体的な利用内容、計算方法

富岳での大規模分子シミュレーションを目指して、計算に用いるプログラムの検討を始めに、富岳での分子動力学計算の必要計算時間の見積もりを行う。まず、“Restricted Ion Transport by Plasticizing Side Chains in Polycarbonate-Based Solid Electrolytes” (Mahsa Ebadi, et.al., *Macromolecules*, 53, 764–774 (2020)) の追試を行い、高分子中のリチウムイオンの拡散係数の計算に必要な計算資源量および所要時間を見積もった。

3. 結果

初めに Tinker-HP での検討を行ったが、2つのバージョン(v1.1v, v1.2(当時最新バージョン))について、v1.1vは初めのうちには流れるもののある時点でデッドロックが生じ計算が進まなくなりいつデッドロックが生じるかは不定)、v1.2 はエラーメッセージもなく突然落ちる(いつ落ちるかは不定)といった並列計算エラーの頻発を経験し、Tinker-HP の使用は見送るという判断に至った。その後、使用するプログラムを LAMMPS に変更したところ良好なベンチマーク結果が得られた。図1には水分子 4096 個(12288 原子系)でのベンチマーク結果を示す。

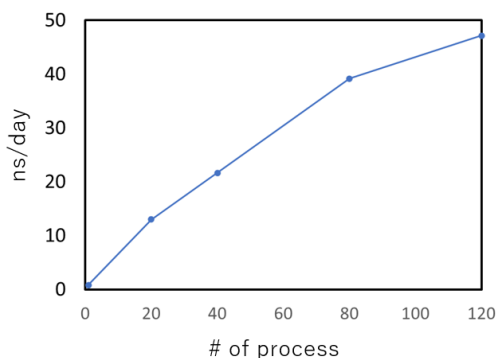


図.1 水分子 4096 個(12288 原子系)におけるプロセス数と1日当たりのシミュレーション時間の関係

ベンチマークの結果、この程度のサイズの系では 120 プロ

セス(3 ノード)を用いて上限の 3 日間で 120ns 以上のシミュレーションが可能であることが分かった。続いて、2. で示した先行研究の追試を行った。拡散係数は Mean Square displacement (MSD) から計算することができる。計算例として図 2. に PTMC 高分子中のリチウムイオンにおけるいくつかの温度での MSD を示した。

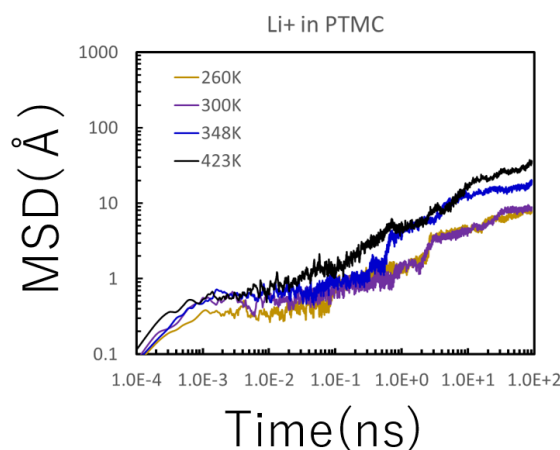


図.2 PTMC 高分子中でのリチウムイオンの MSD

このように得られた MSD は極めてノイズが大きく、このままでは拡散係数の見積りに使えないことが分かった。これに対する対処法は大量にコピーした系を作り各コピーの結果を平均化することが考えられるが、大量の初期状態を用意することは多大な労力と計算量を伴う。そこで、MSD の計算式を以下のように変更して対処することにした。

$$\left\langle \left| \mathbf{R}(t_j + t_0) - \mathbf{R}(t_0) \right|^2 \right\rangle \Rightarrow \frac{1}{M} \sum_{i=0}^{M-1} \left\langle \left| \mathbf{R}(t_{j+i} + t_i) - \mathbf{R}(t_i) \right|^2 \right\rangle$$

この変更により、平均化した分だけさらに長いシミュレーション時間が必要になり、現在のところ 1000ns のシミュレーション時間と 1000ns 分の平均化が必要とし、全くロスタイムなくジョブをリスタートし続けることができた場合、43 日必要であると見積もられた。

一連の計算で 3/1 時点において 865674(h)を利用した。

4. まとめ

富岳と HOKUSAI の 1 ノード当たりのハードウェア性能は似通っているため、HOKUSAI でのベンチマークは有効である。その上で、系のサイズごとに所定のシミュレーションを行うための必要ノード数および所要時間の見積もりが得られた。

5. 今後の計画・展望

一部の中規模な計算については HOKUSAI でも論文用のデータをとることが可能なため、現在計算中の一部の計算は HOKUSAI で継続して計算を行いたい。