

# 2020 ACM ゴードン・ベル賞 研究紹介

## “Pushing the Limit of Molecular Dynamics with Ab Initio Accuracy to 100 Million Atoms with Machine Learning”

芝 隼 人

東京大学情報基盤センター

### 1. はじめに

ゴードン・ベル賞は、高い並列実行性能を発揮した HPC アプリケーションに対して毎年 Association for Computing Machinery (ACM) より授与される賞である。例年 4 月に会議録論文の投稿締切が設けられており、査読を経てファイナリストとして選ばれた著者が 11 月に開催される Supercomputing Conference (SC) において発表を行い、これに基づき選考が行われる。2020 年度の SC20 は、当初は米国・アトランタで開催予定であったものの、コロナ禍の影響により 11 月 9～19 日の期間のオンライン開催となったためファイナリストによる研究発表および授賞もオンラインで視聴することになった。今年度のファイナリストには、以下の 6 件が残った（発表順での記載）。2 件は富岳、4 件は Summit（米・オークリッジ国立研究所）を利用したものである。

1. 320 億グリッド数有限要素法による壁面近傍微細乱流渦の大規模シミュレーションによる数値曳航水槽試験（流体工学、富岳）
2. 機械学習の利用による第一原理分子動力学の 1 億原子数規模への拡張（物性科学、Summit）
3. 最先端 HPC システムによる励起状態 GW 計算の加速（物性科学、Summit）
4. 3.5km メッシュ全地球気象シミュレーションからの 1024 個アンサンブルデータ同化（気象学、富岳）
5. スクエア・キロメートル・アレイ電波望遠鏡のフルスケールデータ処理（天文観測、Summit）
6. 136 ペタフロップスのスケーラブルグラフ解析（データ科学、Summit）

全講演が終了後、上記のうちプリンストン大学のメンバーを中心とするグループによる 2. の論文に対して本賞が与えられることが発表された。本グループの成果を要約すれば、「量子力学に基づく計算を用いたのと同等の高い精度の力計算を用いた分子動力学＝第一原理分子動力学の計算を、深層学習手法の利用によって  $10^5$  以上のオーダーで加速し、1 億原子規模まで計算可能となった」というものである。ほんの 10 年前だと第一原理分子動力学は 1000 原子もできなかったことを考えると、隔世の感がある結果である。

2020 年ゴードン・ベル賞グループの一人、北京応用物理与計算数学研究所の Han Wang（王涵）氏はシミュレーションモデリングの分担で中心的な役割を果たしていたようである。個人的な話になり恐縮であるが、2012 年夏にオランダ・ライデンのローレンツ・センターで開催された 1 ヶ月間の小規模ワークショップに一緒に出ていて、オランダで音楽祭めぐりとか一緒にしたくらいには仲良く過ごした思い出がある。もともと氏はソフトマターモデリングや長距離相互作用計算に関わる古典系の手法開発をされていたと想像していたので、ずいぶん毛色の違うことで大きな貢献をされているのを思いがけず見て（講演・質疑応答はグループの別の方々分担された）大

変驚いた。こういう経緯で、今回の授賞対象の研究内容に私も興味を持ち少し調べてみたので、以下に簡単に紹介したい。なお、論文上の表面的な内容しか追跡しておらず不正確な記述があるかもしれないことを、予めご了承ください。

2020・2021年度のゴードン・ベル賞には、地球規模の危機としての COVID-19 問題の解決に向けた HPC 利用に対する特別賞が設置され、4 件の論文（全て Summit を利用）がファイナリストとなって本賞とは別に選考が実施されたことを合わせて付記する。

## 2. 第一原理分子動力学

分子動力学法は多数の原子・分子からなる体系に対して、原子・分子の従う運動方程式を数值的に解くことにより熱力学的・機械的・動力学の性質を明らかにできるシミュレーション手法である。分子動力学法による現象再現の正確性の鍵となるのは、分子間相互作用を記述する力場の精度である。分子間の相対位置の関数として定まっている古典力場の計算はニュートン方程式の単純な実装であり、高速に解くことができるが精度には限りがある。高精度の記述を行うには、量子力学に基づく手法（バンド計算）から定めた有限温度の電子状態密度に基づき各原子分子に加わる力を逐次計算し、時間発展をシミュレーションするべきという一般的な考え方があるが、このような手法は「第一原理分子動力学法」(ab initio molecular dynamics) と総称される。第一原理分子動力学計算に用いる効率的なバンド計算手法のルーツとなっているのは、2020 年ゴードン・ベル賞論文の著者の一人である Roberto Car らによって提案された Car-Parinello 法である。現在では第一原理分子動力学法の手法は当時から大きく変化しているものの、多くは広い意味で Car-Parinello 法に属すると言えるであろう。

第一原理分子動力学計算はヴァリエーションがいくつもあり、その紹介は本稿では控える。VASP, Quantum Espresso, CP2K, OpenMX, RSDFT, CONQUEST などのソフトウェアで、それぞれの特性に応じた第一原理分子動力学の実行が可能と思われる。2020 年ゴードン・ベル賞論文中には明確な記載がないが、Quantum Espresso (水) および VASP (銅) における Car-Parinello 分子動力学ルーチンを使用して、力場の訓練データセットの生成が行われたと思われる。

## 3. 深層ポテンシャル分子動力学 (DPMD)

今回のゴードン・ベル賞論文 (Jia, 2020) に先行して、同じく著者である Han Wang, Weinan E らは、2018 年 4 月に深層ポテンシャル分子動力学 (deep potential molecular dynamics, DPMD) の手法をアメリカ物理学会の専門誌 *Physical Review Letters* に新たに発表した (Zhang, 2018)。DPMD は、原子配置とエネルギーの対応関係を深層ニューラルネットワークによって学習し、実際のシミュレーション計算では学習結果を利用することで分子動力学シミュレーションを飛躍的に加速する手法である。

DPMD は、Embedded Atom Method (EAM) という経験論的な多体力ポテンシャルに近い考え方で力場ポテンシャルを構成しており、原子  $i$  のエネルギー  $E_i$  をカットオフ径内に位置する近傍原子の状態から決める。すなわち、近傍粒子  $j$  の位置を原子  $i$  の位置を表現する関数  $\{\mathbf{D}_{ij}\}$  として

$$(A) \quad \mathbf{D}_{ij} = \{1/R_{ij}\} \quad (\text{原子間距離の逆数})$$

$$(B) \quad \mathbf{D}_{ij} = \{1/R_{ij}, x_{ij}/R_{ij}, y_{ij}/R_{ij}, z_{ij}/R_{ij}\} \quad (\text{角度を含む情報})$$

のいずれかを考慮、この関数  $\{\mathbf{D}_{ij}\}$  を入力層、原子  $i$  のエネルギー  $E_i$  を出力層とする深層ニューラルネットワークを構築する。入力層・出力層間には隠れ層が非線形変換  $\varphi(x) = \tanh x$  を介し

$$d_k^{\text{out}} = \varphi(\sum_l w_{kl} d_l^{\text{in}} + b_k) \quad (1)$$

という形が入るが、論文中では隠れ層の数は数層でもかなりの精度が確保できるとされている。コスト関数としては、粒子あたりエネルギー・粒子  $i$  への力・ビリアルテンソルにおける訓練データと DPMD の結果との間の差を考慮して

$$L(p_e, p_f, p_\xi) = p_e \Delta \epsilon^2 + \frac{p_f}{3N} \sum_i |\Delta \mathbf{F}_i|^2 + \frac{p_\xi}{9} \|\Delta \xi\|^2 \quad (2)$$

を用い、それぞれの係数  $p_e, p_f, p_\xi$  を訓練時に漸次調整しながら Adam 法による隠れ層の最適化を行っている。学習元となるデータは第一原理分子動力学計算から与えられる。

DPMD においては、分子動力学実行フェーズでは計算量が問題サイズに対して線形にスケールする。力場を小規模の第一原理分子動力学からアレイジョブ的に大量に訓練したあとに行う大規模系の並列分子動力学シミュレーションの実装そのものは技術的に難しくない。今回論文では並列分子シミュレータ LAMMPS の改良コードが使用されたように見受けられる。ただし、局所範囲内の短距離多体相互作用のみが考慮され、クーロン長距離相互作用はカットオフ距離で切断された取り扱いとなっている。クーロン力の正当な取り扱いこそが第一原理分子動力学法の本質であるという観点からは、依然大きな課題が残っていると言えるだろう。

#### 4. 高速化技術

2020 年ゴードン・ベル賞論文 (Jia, 2020) においては、Summit スーパーコンピュータ 最大 4,560 ノードを用いた DPMD の計算が報告された。物理系として水および銅の計算が実施されている。水の分子科学・材料科学における重要性は言うまでもないが、銅についてはその経験論的ポテンシャルが外力変形時の歪み-応力関係を比較的良好に再現することから、ベンチマーク計算によく使用されるという背景がある。

論文 (Jia, 2020) 中では、主として次の技術改良が報告されている。

##### A) 計算粒度向上と隣接リストの工夫

DPMD のモデルにおいて最も計算負荷が大きいのは、原子間距離の距離など局所環境の情報を深層ニューラルネットに埋め込む行列 “environmental matrix” の構成である。一方、局所環境は隣接粒子  $j$  に関わる情報から決まるため、その情報を保持する隣接リストのデータ構造と類似した性質を持つ。本論文では、隣接リストの順序を工夫し、原子種ごとに整列した上で距離順にソートをかけて構築することによって、条件分岐を避けて隣接リストから environmental matrix を構成できるように工夫をしている。

また隣接リストは (A) 粒子種 (B) 距離 (C) 粒子番号、の 3 つの情報を保持するものとなっているが、これらを 64 ビットで表現するデータ構造の記述改良も合わせて行われている。

##### B) ニューラルネットワーク実装の改良

Environmental matrix が構成できてしまえば、深層学習の計算そのものについて実行すること自体は TensorFlow の標準機能において可能であるが、今回のモデルでは限界性能に近い速度が発揮されない。理由として、隠れ層の計算においては  $x \cdot W + b$  の形の行列計算が多数行われ律速となるが、DPMD のモデルの性質上、行列  $x$  が場合によっては 100 万行というようなサイズに及ぶ縦長のものだからである (行列  $W$  のサイズは非常に小さい)。このため通常の深層学習と比較すると、行列行列積 (MUTMUL) よりも最適化の不十分な和演算 (SUM) の

方に大幅に計算負荷がかかる。これらの演算を CUBLAS GEMM でまとめて処理することができるように TensorFlow の書き換えが実施されている。

また、隠れ層間の順伝搬に際しては活性化関数である TANH の演算が繰り返し行われるが、力を計算する際にエネルギーを変位で微分をとるため出力に対する微分関数 TANHGrad も必要となる。両者を一括して順伝搬の際に同時計算するべく対応する CUDA カーネルを追加することによって、計算の高速化が実現されている。

### C) 混合精度演算の実装

DPMD はポテンシャルの微分計算の負荷のかかる部分を深層学習によって置き換えるため、混合精度演算による演算を実装しやすくなる。今回の計算では、2種類の混合精度演算 MIX-32, MIX-16 について十分な安定性および精度が確保できることが確認されている。MIX-32 は隠れ層の自由パラメータを単精度 (32-bit) で実装しており、MIX-16 は自由パラメータの大半を半精度(16-bit)とするが、3 層目以降の fitting や TANH は単精度を保持するものである。これにより、倍精度/MIX-32 および MIX-32/MIX-16 の比において、ほとんどの場合 1.7 倍以上という理想的な加速を得ることに成功している。

以上を中心とする技術改良の結果として、Summit 全系 4,560 ノードを使用した計算では、銅 15,925,248 原子に対して倍精度 91.0 PFlops という計算性能を記録した。対理論ピーク性能比で 45% にも及ぶ実行効率である。ストロングスケーリングによるベンチマークについても大変良好であり、数十ナノ秒という長時間のシミュレーションに耐えるものであると言える。第一原理計算の精度でのシミュレーションとしては前人未到の時空規模の計算とあって良いであろう。

## 5. 最後に

以上、2020 年ゴードン・ベル賞の授賞対象研究について簡単に紹介した。相互作用の局所性を利用してシミュレーションを加速するという考え方は古典分子動力学計算の延長線上にあるもので、物理モデルそのものには革新的なアイデアがあるわけではないように思う。深層学習に精度の補償を肩代わりさせることで  $10^5$  倍ものオーダーの計算の加速をさせることに成功しているという実用的観点からみた飛躍、それが可能な問題を見つける目の付け所が瞠目に値するものと思われる。物質科学モデリングと応用数理の双方の研究者の共同研究ならではの成果を達成したグループの実行力に感嘆するとともに、日本国内の高性能計算分野の研究者に対しても示唆的なところが多いのではなかろうかと考え、ここに記事を執筆した次第である。

本稿の最終稿に対してコメントをくださった似鳥啓吾博士（理研 R-CCS）に感謝する。

## 参 考 文 献

Linfeng Zhang, Jiequn Han, Han Wang, Roberto Car, and Weinan E, “Deep Potential Molecular Dynamics: A Scalable Model with the Accuracy of Quantum Mechanics”, *Physical Review Letters* Vol. 120, pp. 143001/1-6, 2018.

Weile Jia, Han Wang, Mohan Chen, Denghui Lu, Lin Lin, Roberto Car, Weinan E, and Linfeng Zhang, “Pushing the limit of molecular dynamics with *ab initio* accuracy to 100 million atoms with machine learning”, in Proceedings of SC’20: International Conference for High Performance Computing, Networking, Storage, and Analysis. IEEE, November 2020, No. 5, pp. 1-14.