

平成 26 年度 TSUBAME 産業利用トライアルユース 成果報告書

利用課題名 電子写真システム設計のための並列シミュレーション技術の開発
英文: Development of scalable paralleled simulation method for a design of electrophotography

世古丈裕
Tomohiro Seko

富士ゼロックス株式会社
Fuji Xerox Co., Ltd.
<http://www.fujixerox.co.jp>

本研究は、電子写真システム設計用大規模並列シミュレーション技術を開発することを目的とする。第 1 に分子動力学法により、全原子モデルおよび粗視化 United Atom モデルを用いて、数 100 万粒子規模のポリカーボネイト分子に対する並列性能を検証した。粗視化 United Atom モデルは、1024 コア並列規模で良好な並列計算性能を示した。第 2 に個別要素法により、現像器内の 100 万粒子規模の現像剤に対する粒子挙動シミュレーションの並列性能を検証し、216 コアで並列化効果を持つことを確認できた。

A purpose of this study is developing a large parallel simulation technique for electrophotographic system. First, performance of parallel molecular dynamics simulation is verified by the full atomistic model and the coarse-grained united-atom model for polycarbonate with a few million atoms or particles. The united-atom model shows good parallel performance at 1024 parallel cores. Second, performance of parallel distinct element method is verified for a motion of 1 million development particles. Effect of parallel calculation is confirmed at 216 cores.

Keywords: Molecular Dynamics, Distinct Element Method, Electrophotography, Coarse-grained

背景と目的

電子写真システムは、電磁界・熱・流体・機械的な作用などの物理現象と、トナーや感光体など機能性材料の化学的特性を複雑に組み合わせることによって構成されている。このため従来は、実験による摺り合わせ型開発が行われてきたが、近年では数値シミュレーションの設計への活用が活発化してきている。しかし、電子写真システムで用いられる機能材料や、現像器内のトナー挙動をより精度良くシミュレーションで再現するには、膨大な数のトナー粒子の計算が必要となり、増加する計算時間が大きな課題となっている。このような電子写真システム設計用シミュレーションが抱える技術課題を克服するため、大規模原子・粒子数での並列計算技術の開発が必要となっている。

本研究では、第 1 に、分子動力学 (Molecular Dynamics、MD) 法を用い、トナーなど電子写真用材料を対象とした大規模 MD シミュレーション手法を開発し、数 100 万原子規模での性能を検証する。第 2 に、より実機に近い条件での現像剤挙動解析を実現するた

めに、大規模並列個別要素法 (Distinct Element Method、DEM) 計算技術を開発し、並列性能を検証する。

概要

(1) 大規模 MD シミュレーション

ポリカーボネイト分子 (図 1) を対象に、全原子モデルおよび粗視化 United Atom モデルを用いて、数 100 万原子/粒子規模の並列性能を検証する。

ここで全原子モデルは、全ての原子の構造情報と相互作用を考慮に入れたモデルである。一方、粗視化 United Atom モデルは炭素原子と水素原子をグループ化することで、分子構造情報と静電相互作用計算を省略し、計算量を削減した近似 (粗視化) モデルである。なお MD シミュレーションには、JSOL 社製 J-OCTA / VSOP ver.1.8 プログラムを用いた。

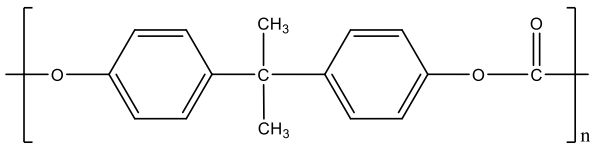


図 1 ポリカーボネイトの分子構造

(2) 大規模 DEM シミュレーション

電子写真システムの現像器における、現像剤粒子挙動に対する計算を実施する。現像器の概要を図 2 に示す。電子写真システムでは、トナー粒子と磁性キャリア粒子からなる現像剤が磁性ローラに吸着し、トリマーによって一定の現像剤層の厚みに制御されて搬送された後、トナー粒子が感光体上の潜像に付着(現像)することで画像を形成する。画像形成後に、現像剤はいったん磁性ローラから磁力によって剥離し、オーガスクリーユで混合されて新たなトナー粒子を補給した後、再度磁性ローラに吸着する過程を繰り返す。現像剤粒子シミュレーションでは、このような粒子の挙動を対象としている。たとえば現像ニップ(図 2 中の領域①)でトナー粒子が感光体に付着し画像が形成される過程(図 3)では、感光体と磁性ローラ間に印加された電圧などの条件毎の付着トナー数を解析し、適切な画質を形成できる設計条件を明らかにできる [1]。また磁性ローラ(図 2 中の領域②)から現像剤が剥離されるピックアップ過程(図 4)を解析することで、画質劣化の原因となるピックアップ不良(剥離した現像剤が、オーガーに落下することなく、磁性ローラに再吸着される問題)の発生原因を調査することなどが可能である [2]。

このように現像剤粒子挙動シミュレーションは、電子写真システムの効果的な設計支援手段であり、設計開発業務で活用が進んでいる。しかしながら、粒子の磁性ローラへの吸着と剥離を繰り返すピックアップ過程をシミュレーションで再現するためには、多くの計算粒子数と、定常(平衡)状態に至るまでの長いシミュレーション・ステップ数を要するという課題があった。

そこで、このピックアップ過程の定常状態を再現する新しいモデルとして、粒子定常供給モデルを考案した [3]。本モデルは、図 5 に示すように、領域 B から領域 C に移動した粒子を領域 A に移動させることで、計算粒子数を増大させることなく、領域 B を常に一定数の粒子が

存在する定常状態にできることを特徴とする。ここで領域 B から C に移動した粒子は、他の粒子と相互作用しないダミー粒子に変換した後、領域 A に座標を移す。その後、領域 A から B に移動した際に、ダミー粒子から元の現像剤粒子に再変換する。これによって、計算系全体では粒子数は一定であるものの、常に領域 B に新しい粒子が供給される挙動が模擬できる。今回は、ピックアップされた粒子が、磁性ローラ上流部に移動することで、一定量の粒子が磁性ローラ上に存在できるようモデル化し、並列計算性能を検証した。

なお本計算には、富士ゼロックスが開発した並列 DEM プログラムを用いた。本プログラムは、MPI 並列アルゴリズムとして力分割並列法を実装しており[1]、加えて共有メモリ型並列処理とのハイブリッド並列計算技術も導入している。

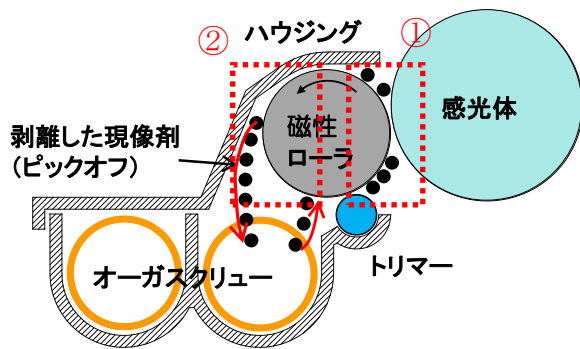


図 2 電子写真現像器の構造

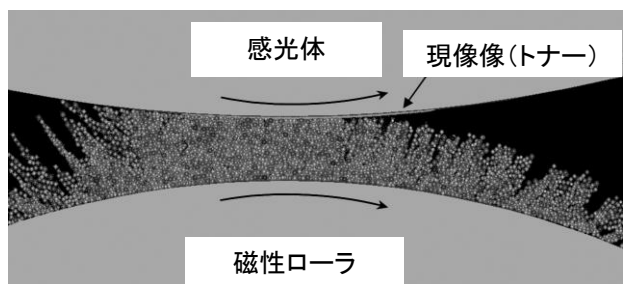


図 3 現像ニップ(領域①)での画像形成シミュレーション

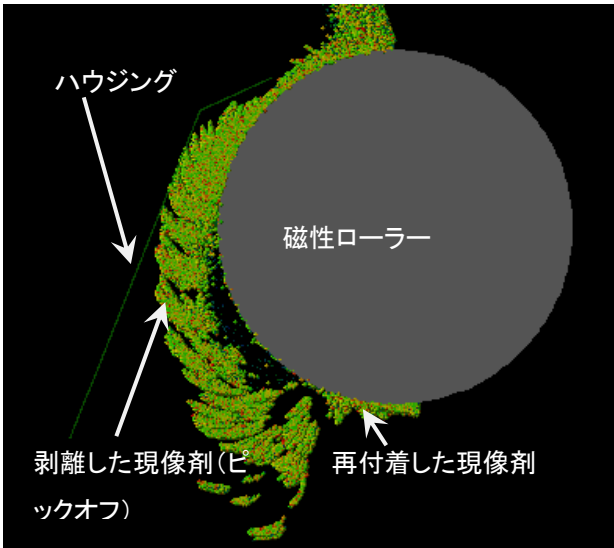


図 4 磁性ローラ近傍(領域②)でのピックアップ・シミュレーション

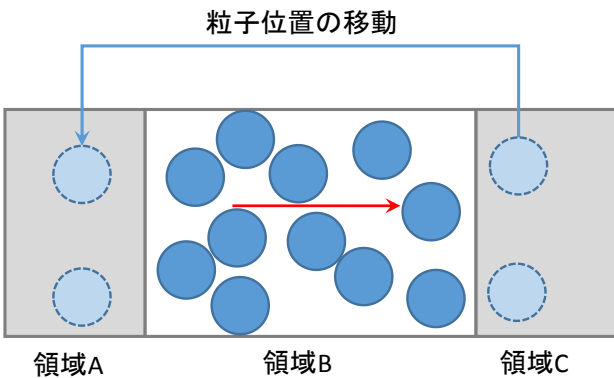


図 5 粒子定常供給モデル概念図

結果および考察

(1) 大規模 MD シミュレーション

各モデルの並列性能を検証した。全原子モデルによるポリカーボネイト 286 万原子(2160 分子)、1000 ステップ(1 ps)に対する 128 から 1024 コア並列までの計算時間測定結果を図 6 に示す。128 から 256 コア並列では並列数の増加に応じて計算時間が短縮した。一方で 512 および 1024 コア並列においては逆に計算時間が増加した。この傾向は図 7 に示す約 100 万原子の計算条件でも見られ、256 および 512 コア並列での計算時間が 128 コア並列の場合より長くなった。これは全原子モデルのようにプロセッサ間通信量の多い計算モデルでは、原子数および並列プロセッサ数が多い条件では

通信オーバーヘッドが顕著になることが要因と推定する。これより全原子モデル数 100 万原子以上に対する、TSUBAME による数 100 コア並列以上の大規模並列計算実現には、プログラム改良など技術改善が必要であると判断した。

次に、同様の性能検証を粗視化 United Atom モデルに対して行った。用いたモデルは、390 万粒子(5120 分子)、10000 ステップ(10 ps)であり、全原子モデルの場合と同様に 128 から 1024 コア並列までの計算時間を測定した(図 8)。粗視化 United Atom モデルの場合は、並列コア数増加に伴って計算時間は短縮傾向にあり(図 8、9)、1024 コア並列では 128 コア並列に対して相対的な並列効率は 53 %と実用利用できる範囲にあることを検証した。

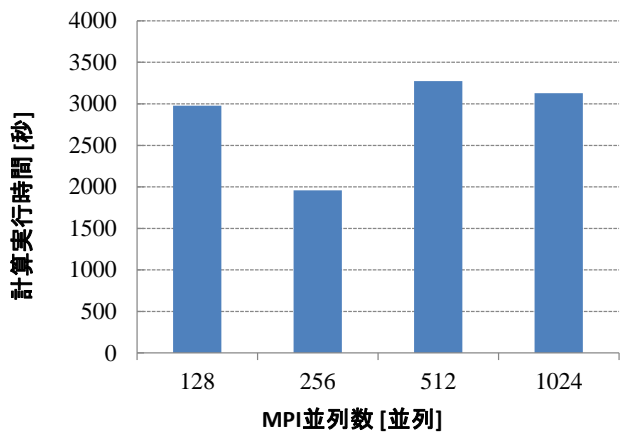


図 6 全原子モデル 286 万原子での計算時間測定結果

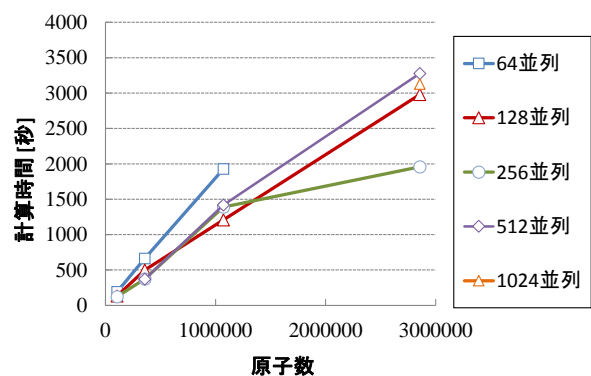


図 7 全原子モデルに対する各並列数での計算時間の原子数依存性

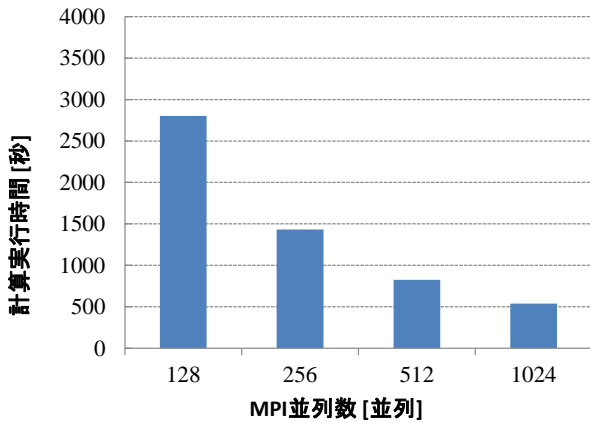


図 8 粗視化 United Atom モデル 390 万粒子での計算時間測定結果

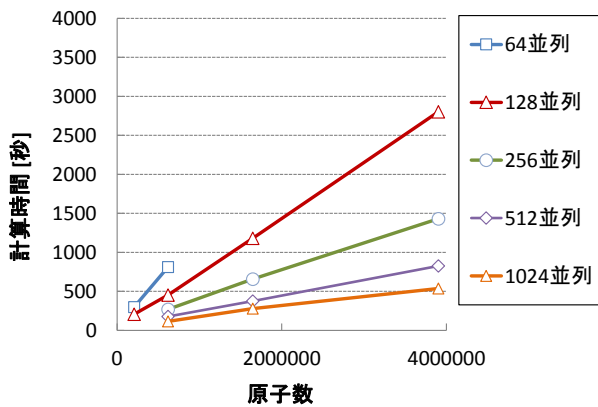


図 9 粗視化モデルに対する各並列数での計算時間の原子数依存性

(2) 大規模 DEM シミュレーション

100 万個の現像剤粒子に対してピックアップ計算を行った。図 5 の領域 B に属する粒子数が約 1.2 万から 57 万粒子となる 6 条件において、並列コア数 24、96、216 コアでの計算時間を計測し、粒子定常供給モデルの大規模並列性能を検証した。本計算では、MPI 分散並列処理と共有メモリ並列処理を同時に利用するハイブリッド並列方式で実施した。1CPU あたり、6 スレッドからなる共有メモリ並列処理を実施し、CPU 間には MPI 分散並列処理を用いた。したがって 96 コア並列の場合、16 個の CPU を用いて、各 CPU のインコア内では 6 スレッドの共有メモリ並列処理を行い、16CPU 間は MPI 分散並列処理を適用している。

得られた、各粒子数条件での相対計算速度(1ステップあたりの計算時間を、575,800 粒子数/24 コア条件を基準に相対値化したもの)のコア数依存性の結果を図 10 に示す。どの粒子数条件においても、並列コア数の増加に伴って相対計算速度の向上がみられ、富士ゼロックスが開発した個別要素法用の並列処理技術(MPI による力分割並列法[1]及び共有メモリ型並列処理のハイブリッド並列技術)と連携した粒子定常供給モデルは 200 コア規模での並列化効果を持つことを確認できた。一方で、粒子数 575,800 個に対して、粒子数 12,312 個の相対計算速度は 1.5~3.0 倍に留まった。これは粒子数差が約 50 倍あることを考慮すると低い計算速度向上であり、計算粒子数に依存する並列性能が低いことを示している。ダミー粒子化などの処理に時間が掛かっていることが原因と考えられる。

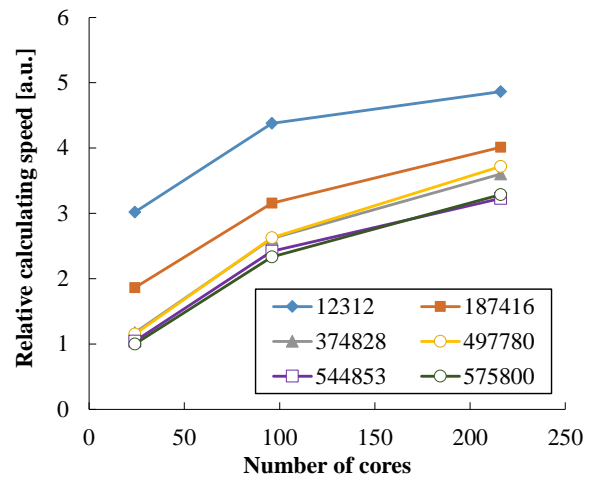


図 10 各粒子数条件での相対計算速度のコア数依存性

まとめ、今後の課題

MD シミュレーションにおいては、粗視化 United Atom モデルによる最大 390 万粒子/1024 コア並列までの計算性能を検証できた。これより、従来の計算環境では実施困難であった大規模並列 MD 計算が、TSUBAME を用いることで実現できる目処が得られた。

DEM シミュレーションでは、100 万粒子/216 コア並列規模までのピックアップ計算が可能であることを検証できた。ただし、定常供給モデルの並列性能が低いことも

明らかになり、今後は本アルゴリズムを改善する。また今回は 100 万粒子以上の規模ではプログラムが正常動作しなかったため、本不具合にも対応してゆく。

文献

- [1] 世古、島田、廣岡、中山、“DEM による現像剤粒子シミュレーションのための高効率並列計算アルゴリズム”、日本画像学会誌、49、pp.391-397 (2010)
- [2] 峯本、藤野、岩永、“二成分現像剤ピックアップ挙動の数値シミュレーション”、Imaging Conference JAPAN 2013 論文集、pp.165-168 (2013)
- [3] 大島、向井、長尾、藤野、“粒子挙動解析装置及びプログラム”、特願 2014-060885 (2014)