505 分子動力学法の並列化による大規模解析

Large Scale Analysis of Molecular Dynamics by Parallel Processing

○高橋 昭如 (東大工[院]) 正 矢川 元基 (東大工)

Akiyuki Takahashi, University of Tokyo, 7-3-1, Hongo, Bunkyo, Tokyo, 113-8656
Genki Yagawa, ibid.

Key Words : Molecular Dynamics, Johnson Potential, Spatial Decomposition, PC cluster

1. 緒言

従来き裂を含む構造物およびき裂そのものは連続体力学を基にした破壊力学ハラメータである応力拡大係数やJ積分値を用いて解析が行われてきた。しかし、これらの破壊力学ハラメータはマクロな視点からき裂をとらえているためにき裂の進展の本質的なメカニズムなどを調べることができなかった。そこで、近年原子(分子)を計算において陽に取り扱い原子そのもののダイナミクスを計算する分子動力学法のき裂問題への適用が試みられている。しかし、分子動力学法により取り扱うことのできる領域は極めて小さいために構造物のマクロな挙動は有限要素法で解析し、き裂先端付近は分子動力学法で解析するマルチスケール解析手法も提案されている^[1]。また近年のコンピュータ、特に超並列計算機や、PC クラスタの進歩により計算に取り扱うことのできる原子の数は極めて大きくなりつつある^[2]。

本報では大規模なマルチスケール解析(原子領域で10億原子)を目標にMPI(Message Passing Interface)を用いて分子動力学法の並列化を行い、PCクラスタ上に実装した。PCクラスタ上での並列分子動力学法の並列性能を評価し、分子動力学法によるき裂問題解析の例を示す。

2. 計算手法

2.1 分子動力学法

本研究では α 鉄を解析対象とし、式(1)に示すような経験的2体間ポテンシャルであるJohnson^[3]ポテンシャル[4]を用いた。

$$\Phi = C_0(r - C_1)^3 + C_2r + C_3 \quad (1)$$

また、時間積分にはVelocity Verlet法^[5]を用いた。本方法は初期条件として各原子の座標と速度を指定し計算を行う。

2.2 分子動力学法の並列化

分子動力学法の並列化は最も一般的に用いられているSpatial Decomposition^[6]を用いて行った。図1にその具体的な通信の様子を示す。

Fig.1 Spatial Decomposition Method

領域1において領域1-Cは本来領域2-Aの影響も考慮しなければならないが領域を分割されているために領域1内では完全に原子にかかる力を計算することができない。一方領域1-Cに対応する領域2内の領域2-Bは影響範囲の原子がすべて領域2内にあるので原子にかかる力の計算を完全に行うことができる。そこで、領域2-Bにおいては各原子にかかる力を計算し、座標を更新した後に領域2-Bの原子の座標を領域1-Cに通信し領域1-Cの原子の座標とする。また、領域1-B、領域2-Cについても同様である。

3. 並列性能評価

並列化した分子動力学法コードをPCクラスタ(VT-Alpha533MHz, 512MB, Fast Ethernet)上に実装し、PCクラスタ上での並列性能について調べた。図2に計算に用いたモデルと同等の形状のモデルを示す。本研究はき裂問題の解析を対象としているので、図2のように正方形領域の左端部から中央部に向けてき裂がモデル化されている。また、正方形領域の端部領域の原子には、与えられた応力拡大係数によって求められた線形弾性解に従う速度を与える。上下のき裂面間距離は相互作用力が働かないようにJohnsonポテンシャルのカットオフ距離以上にした。板圧方向には周期的境界条件を与え平面ひずみ状態を仮定する。実際に並列性能評価に用いたモデルは原子数10372665である。

Fig.2 MD Model with a Crack (18180 Atoms)

並列化によるスピードアップの様子を計算する上では式(2)に示すように計算機1台を用いて計算したときに要する計算時間を知ることが必要であるが、10372665原子の計算を1台の計算機を用いて行うことは極めて困難である。

$$Speedup = \frac{T_1}{T_n} \quad (2)$$

ここで、式(2)中の T_1 1台の計算機を用いて計算したときの時間を

示し、 T_0 は n 台の計算機を用いて計算したときの時間を示す。ここで、式(2)の T_i は何台の計算機を用いた場合も一定であるので、ここでは各台数の計算機による計算時間の逆数を取り、その勾配の様子から並列性能を推測する。計算時間の逆数を取ったときのグラフを図3に示す。一般にスピードアップの曲線はほぼ直線的にスピードアップした後曲線を描きスピードアップが停滞する傾向がある。図3から逆数曲線がほぼ直線を示していることが見られ、本並列化分子動力学法が PC クラスタ上で良好なスピードアップを示していることがわかる。

Fig.3 Estimation of parallel performance

4. き裂問題の解析例

PC クラスタ環境上での並列分子動力学法解析の例として、き裂問題の解析を図2と同様の形状を有するモデルを用いて行った。解析において与えた諸条件を表1に示す。

Table.1 Analysis Conditions

Stress Intensity Factor K_I	$8.14 \text{ MPa} \cdot \text{m}^{1/2}$
Initial position	b.c.c.
Temperature	300K
Potential	Johnson potential
Temperature Control	Velocity scaling method

解析に用いたモデルは原子数が2,050,065で、モデルのサイズは約 $0.129 \mu\text{m} \times 0.129 \mu\text{m}$ で、厚さ方向は 1.43 nm である。Spatial decomposition を用いて領域を 4×4 に分割し16台のPCを用いて解析を行った。正方領域の境界付近の原子には応力拡大係数によって求められる線形弾性解の変位を速度境界条件として与えた。図4に時刻16ps(図4(a))と時刻32ps(図4(b))の時のき裂進展の様子を示す。初期き裂の先端の位置は図4(a)の左からおよそ4分の1の位置にある。図4(a)を見ると、き裂は初期のき裂方向にほぼまっすぐ進展しており、また破面は非常に平らになっている様子が見られ、脆性的に破壊している様子が見られる。図4(b)からは、き裂が図4(a)の時刻からさらに脆性的に進展し、その後でき裂先端が鈍化し、き裂が2方向に分岐している様子が見られる。また、分岐後の破面は極めて粗くなっており、ディンプル破面に良く似た様相を示している。本モデルは原子によって構成されたモデルであり、極めて微視的なものであるためディンプル破壊が起きたということは難しいが、脆性的に進展していたき裂が、延性的な破壊に遷移したと考えることができる。

(a) 16 ps

(b) 32 ps

Fig.4 Crack propagation

5. 結言

Spatial decomposition を用いて並列化された分子動力学法プログラムを PC クラスタ上に実装し、その並列性能を評価した。また、およそ2百万原子によるき裂問題の解析を PC クラスタ環境で行い、妥当な結果を得ることができた。

参考文献

- [1] Kohlhoff, S., Gumbsch, P. and Fischmeister, H., Phil. Mag., A, 64(1991), pp.851-878.
- [2] Abraham, F. F., et al, J. Mech. Phys. Solids, 45(1997), pp.1461-1471
- [3] Johnson, R. A., Phys. Rev. A, 134(1964), pp.1329-1336
- [4] Swope, W. C., et al, J. Chem. Phys., 76(1982), p.637
- [5] 岡田、奥田、日本機械学会第11回計算力学講演会講演論文集, p.79