

解説

超大規模材料シミュレーションのための Asia-Pacific GRID戦略的活用構想

Strategic Application of Asia-Pacific GRID for Ultrascale Materials Simulations

執筆者プロフィール



中野 愛一郎
Aiichiro NAKANO

◎1989年東京大学大学院理学系研究科博士課程修了, アルゴン国立研究所博士研究員, ルイジアナ州立大学助教授準教授を経て現職
◎研究・専門テーマは超並列シミュレーションアルゴリズムおよび可視化技術
◎Associate Professor
University of Southern California, Departments of Computer Science, Physics & Astronomy, and Chemical Engineering & Materials Science (3651 Watt Way, VHE 610, Los Angeles, CA 90089-0242, USA /
E-mail : anakano@usc.edu)



Rajiv K. KALIA

◎Ph.D., Northwestern University, 1976
◎研究・専門テーマは Large atomistic and multiscale simulations of materials properties and processes.
◎Professor
University of Southern California, Departments of Physics & Astronomy, Chemical Engineering & Materials Science, and Computer Science (3651 Watt Way, VHE 614, Los Angeles, CA 90089-0242, USA /
E-mail : rkalia@usc.edu)



Priya VASHISHTA

◎Ph.D., Indian Institute of Technology, Kanpur, 1967
◎研究・専門テーマは Large atomistic and multiscale simulations of materials properties and processes.
◎Professor
University of Southern California, Departments of Chemical Engineering & Materials Science, Physics & Astronomy, and Computer Science (3651 Watt Way, VHE 606, Los Angeles, CA 90089-0242, USA /
E-mail : priyav@usc.edu)



尾形 修司
Shuji OGATA

◎1986年東京大学理学部物理学科卒業, 1991年東京大学大学院理学系研究科博士課程修了(理学博士), 東京大学理学部助手, 山口大学工学部助教授を経て, 2005年名古屋工業大学大学院工学研究科教授
◎研究・専門テーマは計算物性全般。最近では, 電子状態計算, 分子動力学, 連続体力学に関するコード開発とハイブリッド化, 大規模計算グリッド上での応用シミュレーション
◎名古屋工業大学教授 大学院工学研究科 (〒466-8555 名古屋市昭和区御器所町 /
E-mail : ogata@nitech.ac.jp)



関口 智嗣
Satoshi SEKIGUCHI

◎1982年東京大学理学部情報科学科卒業, 1984年筑波大学大学院理工学研究科修士課程修了, 1984年通商産業省工業技術院電子技術総合研究所入所, 2001年組織変更により独立行政法人産業技術総合研究所, 情報処理研究部門 副研究部門長, 2002年同所グリッド研究センター設立研究センター長
◎研究・専門テーマは計算機科学, 情報処理技術, 並列処理技術, グリッド技術, 高速ネットワーク技術
◎産業技術総合研究所 グリッド研究センターセンター長
(〒305-8568 つくば市梅園1-1-1 つくば中央第二 / E-mail : s.sekiguchi@aist.go.jp)



田中 良夫
Yoshio TANAKA

◎1987年慶應義塾大学理工学部数理科学科卒業, 1995年慶應義塾大学大学院理工学研究科後期博士課程単位取得退学(博士(工学)), 1996年技術研究組合新情報処理開発機構研究員, 2000年通商産業省工業技術院電子技術総合研究所, 2001年独立行政法人産業技術総合研究所に改組, 2002年同所グリッド研究センター基盤ソフトウェアチーム長
◎研究・専門テーマはグリッドにおけるプログラミングミドルウェア, グリッドセキュリティ, およびテストベッド構築に関する研究に従事
◎産業技術総合研究所 グリッド研究センター (〒305-8568 つくば市梅園1-1-1 つくば中央第二 / E-mail : yoshio.tanaka@aist.go.jp)



鶴田 健二
Kenji TSURUTA

◎1994年東京大学大学院理学系研究科博士課程修了, 博士(理学), ルイジアナ州立大学を経て, 1998年より現職
◎研究・専門テーマは計算材料科学, 電子物性学
◎岡山大助教授大学院 自然科学研究科 産業創成工学専攻 電気電子機能開発学 (〒700-8530 岡山市津島中3-1-1 /
E-mail : tsuruta@elec.okayama-u.ac.jp)

1. はじめに

近年のシミュレーション法, アルゴリズム, および超並列計算技術の進歩は, 10~100億個の原子を含んだ原子論

図の中の文字はすべて打ち直しております。ご確認下さい。

的シミュレーションを可能にした⁽¹⁾。ところが先端的ナノ材料設計においては、原子レベルの化学反応が長距離の応力現象と不可分に結合していることが多い。これら複雑な階層的現象を研究するには、高精度だが大計算量を要する量子力学的 (QM) シミュレーションによる化学反応の記述を、より粗視的な原子論的シミュレーションの中に、必要な場所と時間のみ埋め込む必要がある。これら最新の階層的分子動力学 (HMD) 法⁽²⁾ は、さまざまな近似レベルでの QM シミュレーション法を利用しつつある。例えば、100 万原子を含んだ第一原理的な密度汎関数計算⁽³⁾ や 1 億原子を含んだ化学反応的力場 (ReaxFF)⁽⁴⁾ 計算が可能になりつつある。アダプティブな HMD シミュレーションの並列化は、動的に変化する計算負荷に起因する困難を伴う⁽⁵⁾。地理的に分散した並列計算機を高速回線で接続した GRID は、HMD シミュレーションに理想的な計算環境を提供する。本稿は HMD シミュレーションの GRID 実装に関する最近の進展を紹介する。

2. 階層的分子動力学シミュレーションの GRID 実装

分子動力学 (MD) 法においては物質が原子の集合体として記述され、Newton 方程式を数値的に積分することにより、各原子の座標と速度が時間の関数として求められる。各原子に働く力は原子間の力場から導かれる。従来の MD 力場は、多原子座標の陽関数として表される。一方量子力学 (QM) 計算は、原子内の電子波動関数を陽に取り扱うことで化学反応を記述する。例えば密度汎関数 (DFT) 法は、電子数 (N) の指数関数に比例した多電子問題の計算量を、 N 個の 1 電子問題を自己無撞着に解くことにより $O(N^3)$ に減らす。筆者らはさらに、空間的に局在した領域内の物理量の線形結合として全系の物理量を記述する divide-and-conquer (DC) 法を用い、近似精度が高く、かつ MD シミュレーション中のエネルギーを良く保存する $O(N)$ DFT 法を開発した⁽³⁾。ところが HMD シミュレーションにおける MD と QM 計算をスムーズに接続するためには、中間のシミュレーション層を導入する必要があることが最近分かってきた (図 1)。この化学反応的力場 (ReaxFF) MD 法⁽⁴⁾ においては、力場が環境に依存して変化する。ReaxFF 法は、原子間の共有結合の強度が周囲の原子数によって変化するボンド・オーダー・ポテンシャルを利用して化学反応を記述する。また、電荷平衡 (QEq) 法を用いて原子間の電荷移動を各 MD ステップごとに決定する。一方、ReaxFF 力場は数千個の第一原理的量子力学計算結果から成るデータベースを用いた学習を通じて決定される。筆者らは、時空間多重解像度法と計算空間分割法を組み合わせ、高並列化効率を有する MD, ReaxFF, および DFT アルゴリズムを開発してきた⁽¹⁾。

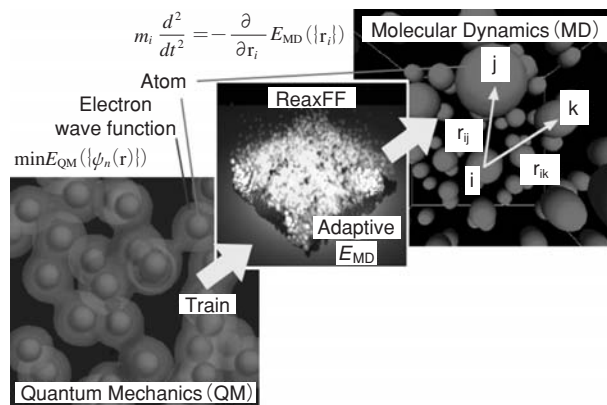


図1 量子力学(QM)計算, 化学反応的力場(ReaxFF)計算, および分子動力学(MD)シミュレーションを組み合わせた階層的分子動力学(HMD)法の概念図

精度の異なるシミュレーション法を、シームレスな HMD シミュレーションとして組み合わせる手法の一つとして、加算的ハイブリッド法がある。この方法は、系を階層的な部分空間に分割し ($S_0 \supset S_1 \supset S_2 \supset \dots$), より小さな部分空間をより高精度のシミュレーション法で取り扱う ($M_\alpha, \alpha = 0, 1, 2, \dots$; 例えば MD \leftarrow ReaxFF \leftarrow DFT $\leftarrow \dots$)。これらのシミュレーション法による計算値の外挿として物理量を表すことにより、既存のプログラムを最小の労力で組み合わせることが可能になり、また MD や QM モジュール間の相互依存性や情報交換量を最小化することができる。筆者らは、加算的ハイブリッド法を用いた階層的 MD/QM シミュレーション法を開発した⁽²⁾。さらに高効率化を図るため、MD シミュレーション中に埋め込まれた DFT 計算を、DC 法を用いて小さな QM クラスタ計算に分割した。

筆者らは、GRID 対応した Message Passing Interface (MPI-G2) 言語を用いて、階層的 MD/QM シミュレーションを、日米間に分散した PC クラスタから成る GRID 上に実装した⁽⁵⁾。MD および各 QM クラスタ計算は、異なったプロセッサ・グループとして、異なった PC クラスタに割り当てられる。さらに各サブ計算は空間分割法により並列化される。この MD/QM 法によるシリコンキ裂先端における水分子の反応シミュレーションは、日米間に分散した 25PC 上で並列化効率 0.94 を達成した。

MPI-G2 実装の問題点の一つは、実行時間中にプロセッサの数が変えられないことである。このため、化学反応領域が動的に変化する現象の記述に適さない。この問題を克服するため、筆者らは最近、GRID Remote Procedure Call (GRPC) と MPI-G2 を組み合わせた、ハイブリッド GRID 実装を行った。ここでは、MD 計算が複数の QM クラスタ計算を必要に応じて GRPC として呼び出す。各 QM クラスタ計算は、MPI-G2 を用いて空間分割法によって並列化される。筆者らは SC04 会議において、ハイブリッド GRPC

+ MPI-G2 実装を用いた MD/QM シミュレーションを、産業技術総合研究所（産総研）のスーパークラスとアメリカ科学技術財団（NSF）の TeraGRID（www.teragrid.org）上の 1792 プロセッサを接続した GRID 上で実行した（図 2）。この国際共同研究をさらに進展させるため、アジア・パシフィック地域間のパートナーシップである ApGRID¹（www.apgrid.org）の利用を進めている。

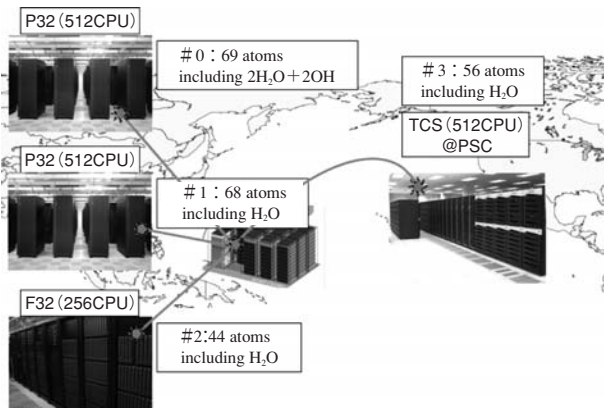


図 2 産総研-NSF GRID 上での MD/QM シミュレーション

3. ナノ材料の大規模原子論的シミュレーション

前章で述べた技術の進歩により、大規模 HMD シミュレーションが材料のさまざまな現象や性質を予測できるようになった。ここでは、いくつかの例を挙げてみたい。

3.1 応力腐食割れ

応力腐食割れにおいては、原子レベルの化学反応と巨視的な応力現象が不可分に結びついている。腐食のコストはアメリカの国民総生産の 3% を占め、応力腐食割れの原子論的機構の解明およびき裂進展速度の定量的な予測は社会的に重要である。

筆者らは MD/QM シミュレーションを用いて、シリコンき裂先端における水分子の反応が応力拡大係数 (K) に敏感に依存することを見出した⁽⁶⁾。 $K=0.4\text{MPa}\cdot\text{m}^{1/2}$ の場合、水分子は分解して Si 表面に吸着し Si-H と Si-OH 基を形成するか、き裂先端の Si-Si ボンドを酸化し Si-O-Si 構造を形成する。これに対し $K=0.4\text{MPa}\cdot\text{m}^{1/2}$ の場合、水分子は Si-Si ボンドを酸化するか、あるいはこれを切断し亀裂進展に寄与することが分かった。

3.2 スーパーハード・セラミックス材料の仮想ナノ圧子試験

炭化けい素 (SiC) などのセラミックスは、軽量高強度で腐食しにくく、高温での利用に適しているものの、そのもろさに欠点がある。最近、粒径が数ナノメートルのセラミックス粒子を圧縮した材料が、通常のセラミックスには見られない延性（柔軟性）を併せ持つことが発見された。

これらのナノ材料の、ナノ領域での表面における機械的性質の唯一の試験法として、ナノ圧子が注目されつつある。筆者らは、このいわゆるナノ相セラミックスに対するナノ圧子試験の MD シミュレーションを行った⁽⁷⁾。ナノ相炭化けい素 (n-SiC) は、粒径 8nm のクラスタを高温下で圧縮することにより作られた。圧子を押す際の負荷の変化から計算された堅さ (39GPa) は最近のスーパーハード n-SiC に対する実験結果 (粒径 5~20nm に対し 30~50GPa) と良く一致する。また結晶粒間にわたる連続的な変位から、結晶粒内の転位による不連続的な変位へのクロスオーバー現象を発見した。実際のナノセラミックスの焼結においては焼結助剤の化学反応が重要であり、この効果の HMD 法による研究を開始した。

4. 将来の展望

本稿において、大規模原子論的シミュレーション・アルゴリズム、階層的シミュレーション法、および GRID 技術の学際的融合によって、従来不可能であった複雑な材料の性質や過程を予言的に研究し得る段階に達しつつあることを示した。これらの新しい研究手法を活用し、ナノ・エナジエティック材料の燃焼などの新たなナノサイエンスの分野が開拓されることを期待している。

ここで紹介した研究結果は、ウイスコンシン大学の Iza-bela Szlufarska 教授、ルイジアナ州立大学の菊池英明博士、熊本大学の下條冬樹教授、新潟大学の家富洋教授、産総研の武宮博士との共同研究の成果であり、協力して活発な研究グループを創りだしていただいたことに深く感謝いたします。

(原稿受付 2005 年 7 月 22 日)

●文 献

- (1) Nakano, A., Kalia, R.K., Vashishta, P., Campbell, T.J., Ogata, S., Shimojo, F. and Saini, S., *Scientific Programming*, **10** (2002), 263.
- (2) Ogata, S., Lidorikis, E., Shimojo, F., Nakano, A., Vashishta, P. and Kalia, R.K., *Computer Physics Communications*, **138**(2001), 143; Ogata, S., *Physical Review B***72**, (2005), 045348
- (3) Shimojo, F., Kalia, R.K., Nakano, A. and Vashishta, P. *Computer Physics Communications*, **167**(2005), 151.
- (4) Strachan, A., Kober, E.M., van Duin, A.C.T., Oxgaard, J. and Goddard III, W.A., *Journal of Chemical Physics*, **122** (2005), 054502.
- (5) Kikuchi, H., Kalia, R.K., Nakano, A., Vashishta, P., Iyetomi, H., Ogata, S., Kouno, T., Shimojo, F., Tsuruta, K. and Saini, S., *Proceedings of the Supercomputing 2002* (IEEE Computer Society, Los Alamitos, CA, 2002).
- (6) Ogata, S., Shimojo, F., Kalia, R.K., Nakano, A. and Vashishta, P., *Journal of Applied Physics*, **95**(2004), 5316.
- (7) Szlufarska, I., Nakano, A. and Vashishta, P., *Science*, (August 5, 2005 issue), in press.