

高分子系の粗視化分子動力学法の超並列大規模コードの開発

萩田 克美

所属名, 防衛大学校 応用物理学科

メールアドレス, hagita@nda.ac.jp

概要: 我々は、高分子系、特に、ゴムに着目し、大規模シミュレーションによって、それらの物性の原理的理解を進めるとともに、産業応用を目指している。特に、10 ペタフロップス級の次世代スーパーコンピュータで挑戦したい研究として、タイヤ材料で重要な位置づけにある「ゴムとナノ粒子の混在によるゴムの補強効果」の原理を明らかにしたいと考えている。最初のステップとして、地球シミュレータを用いて、高分子系の粗視化分子動力学法の超並列大規模コードを作成した。約 1.3 億粒子の系で 4096CPU を用いた計算を行い、25000CPU 程度まで並列計算が可能であることを確かめた。今後、SPring-8 等の大型施設での実験との連携を含め、関連する研究を進めていく。

1 はじめに

高分子材料の開発・改良を目的とした分子レベルの大規模シミュレーションの実現は、間近になりつつある。たとえば、タイヤ用のゴムの材料では、特徴的なスケールとして、サブマイクロの球(フィラー)が作る構造が補強効果に対して重要であるという実験事実があり、この系の再現シミュレーションには、サブミリオオーダーの規模の計算が必要である。さらに、高分子系では遅い緩和を示すことから、計算時間も必然的に長くなる。そのため、超並列環境で比較的高速に動作するプログラムの開発が必要である。一方で、分子動力学(MD)計算のプログラム開発については、タンパク質の MD 計算などバイオ系の強いニーズを受け、専用チップの開発などさまざまな展開がある。それらも考慮しながら大規模計算を計画することが重要であると考えている。タンパク質の系では、数万から数十万の原子数が現時点でのターゲットにされているが、我々の計算では、数百万から数億の原子数が必要であり、それらの技術を活用するにしても、近隣プロセスとの通信に関する工夫が必要である。実際に超並列環境でプログラムを実行するためには、高い並列性が必要である。このためには、通信を極力減らし、計算に必要なデータを局所化する必要がある。幸いなことに我々が扱う系では、クーロン相互作用を考慮しないために、バイオ系に比べて、データの局所化は簡単である。我々は最初の取り組みとして、超並列化した大規模な高分子系用の粗視化分子動力学プログラムを、地球シミュレータなどで作成した。

高分子材料に関するシミュレーション技術は広く産業に利用されており、大規模なシミュレーションでこそ解明できる問題が多々残されている。例えば、ゴムという物質は世界第二次大戦においては戦略物資のひとつであったが、現在でも人類にとって無視できない材料である。いまでは、自動車とタイヤのゴムは不可分な関係にあり、ゴム材料の開発はタイヤの転がり抵抗(CO₂)削減という課題とも密接である。我々は、今後、スパコンを活用していき、高分子コンポジットや多彩なトポロジーを持つ高分子の振る舞いの理解、それらの新奇な特性の発見、現在のシミュレーションでよく用いられている現象論を仮定しないシミュレーションでの材料開発、現象論そのものの理解を考えている。『実際のゴム』では、ミクロブラウン運動とマクロブラウン運動の関係が重要である。久保亮五著「ゴム弾性」¹の一節には、「ゴムを割合すみやかに冷却すれば、結晶化をおこさず無定形に保っておくことができる。生ゴムは加硫されたゴムのように振る舞う。実際、結び目の生成により、網状構造が加硫ゴムと類似してくるからだろう。」という洞察がある。また、ゴムの挙動については「比較的大きな範囲にわたる分子運動が緩慢にしか行われないこと、したがって結晶化の過程が一般に長い時間を要することが、ゴムにおける複雑な時間効果、温度効果の原因となるのである。」という核心的な記述もある。現実のスケール関係を考慮した大規模シミュレーションを行うことで、このような洞察を、目で見ることができであろうし、ミクロな物理を明らかにしてエンジ

ニアリングすることも可能と考えている。

SPring-8 や地球シミュレータを有し、今後、ペタスケールコンピュータを構築する我が国としては、これらを駆使して、大型施設での先端的な実験、大規模なシミュレーションと統計力学的な視点で、ソフトマター複合体の基礎を理解するとともに、それをベースとして実際のものづくりを意識した研究開発を進め産業に寄与していくことが重要であると考えられる。

2 多彩なトポロジーをもつ高分子とコンポジット、そして応用

高分子の高分子たる所以は、多彩なトポロジーにあるといっても過言ではない。高分子・ゴムの粘弾性は、紐(ひも)であるという性質だけで導くことができる。化学的な性質を考慮せずとも、高分子のトポロジーを考慮することでも機能が発現する。もう少し具体的に言うと、高分子は約 1nm の特性長を持った紐がつくる構造体であり、 μm オーダーで、非常に多彩なマクロな物性を発現している。現実的な高分子材料の場合は、特徴的なスケールでの物理という概念だけではすべてを理解することができない。シミュレーションの実力は、あるスケールに対応したある物理をパラメータでつなぐことにとどまらず、複数のスケールの物理が入り込んだ状況も再現できることである。

高分子コンポジットは、ナノからサブマイクロのスケールでの複合材料である。例えば、タイヤのゴムは、ゴムの中に配合された数十 nm のフィラーと呼ばれるカーボンブラック球やシリカ球のネットワーク構造とゴムのネットワークのバランスで、非常に強靱な性質を示している。実際のものづくりの現場では、フィラーの経験的調整によって転がり抵抗を削減している。これら原理はいまも不明である。先端的な産業応用のためにも、我々は SPring-8 実験と地球シミュレータでのシミュレーションでこの原理の解明を進めている。

3 高分子系の超並列MDコードの作成

高分子系でも大規模なシミュレーションのニーズは高く、並列化されたシミュレーションパッケージが普及している。これらのパッケージでは、1 ノードのメモリ上に記憶できるサイズが、扱うことができる粒子数の限界を決めている。我々は、1 億粒子オーダーの計算を考えている。1 ノードに 1TB のメモリがあれば、1 億粒子の系は実現可能であるが、そのような規模の全体通信は大規模化の阻害要因になることは明白である。そこで、我々

は、通信を極力減らし、計算に必要なデータを局所化した超並列大規模分子動力学コードを作成した。高分子系の粗視化モデルとしては、標準的に用いられる、Kremer-Grest 模型²を用いた。また、分散入出力に対応し、別の SMP サーバなど上で解析するプログラム類も作成した。1MPI プロセスが担当する粒子数が大きいため、インバランスは比較的小さくなると想像される。1MD サイクルでの通信を、近隣プロセスとの通信を座標の交換のみの 1 回と、制御用の全体通信の 1 回を行うものとした。近隣プロセスとの通信は、座標と力の交換の 2 回行うことが多いが、本プログラムでは計算負担を増やす代わりに通信を削減した。全体通信は 0,1 フラグの OR をとるものにした。模型の詳細の説明は省略するが、地球シミュレータでベンチマークした結果は、下表の通りである。

表 1 超並列コードのベンチマーク結果

粒子数	約 1.3 億粒子	
MD step 数	2500	
CPU 数	4096	512
Mainloop の計算時間(秒)	393.806	2763.4
ベクトル化率	96.37%	95.32%
総利用メモリ	3.03TB	1.07TB
並列化率	99.9960%	
並列可能 CPU 数	25080.7	

なお、実際に、フィラーを混在した系では、物質の粗密によるインバランスも考えられるので、さらなる改良を検討している。さらに、今後の展開として、この超並列コードの MD コアの部分を、バイオ系で開発されたコードや専用チップに置き換えるラッパーとしての利用も検討している。

我々は、高分子やそれらの複合材料を、現象論を排した大規模シミュレーションで理解することを基本スタンスとしている。これまでの準備を下に、今後は、タイヤのゴムのような数十 nm の球が作る μm オーダーのネットワーク構造と高分子のネットワークが作る系の粗視化分子動力学シミュレーションを行い、ゴムの強靱性を理解し、新しい材料を開発することを目標の 1 つとしている。

発表では、新たに作成したプログラムの実装法や、実際に計算を行う高分子系についての検討状況 (SPring-8 等の大型施設での実験との連携)、そして今後の展望について報告する。

参考文献

- [1] 久保亮五、「ゴム弾性」、河出書房、1947 年 (復刻版、裳華房)
- [2] K. Kremer and G.S. Grest: J. Chem. Phys. **92** (1990) 5057