

## 分子動力学ソルバー LAMMPSの概要

並木 武文\* 小瀬村 大亮\*\*

## Overview of LAMMPS : Molecular Dynamics Simulator

Takefumi Namiki\* and Daisuke Kosemura\*\*

分子動力学ソルバーLAMMPS は、米国サンディア国立研究所で継続的に開発され、GPL の形で公開されている古典分子動力学法を用いたオープンソースソフトウェアである。LAMMPS は、金属や半導体のような固体材料、生体分子や高分子のソフトマテリアル、粗視化やメソスコピックに対応できるポテンシャルを装備している。さらに、MPI を利用した並列計算機で大規模計算が可能であり、多数の原子分子を有する系での分子動力学計算に効果を発揮する。

当社では、材料開発に有効なシミュレーション・サービスを実施しており、そのひとつとして LAMMPS を用いた分子動力学計算のサービスを行っている。また、LAMMPS などのソルバー向けの GUI ソフトウェア開発等の受託開発サービスも行っており、将来的には、現在当社で独自開発中の材料設計プラットフォームのひとつの機能として、LAMMPS のインターフェイスを整備することを計画している。

本稿では、LAMMPS の概要を説明するとともに、LAMMPS を用いた解析事例を紹介する。

**Key word:** 分子動力学法、大規模計算、並列計算機、LAMMPS

## 1. はじめに

分子動力学ソルバーLAMMPS は、1990 年代の中ごろに、米国の 2 つの研究所（サンディア国立研究所とローレンスリバモア国立研究所）と 3 つの民間企業（クレイ、ブリストル・マイヤーズ スクイブ社、デュポン）の共同研究開発により開発が開始された。このプロジェクトの目的は、大規模な並列計算ができる古典分子動力学法のコードを開発することであり、Steve Plimpton を中心に開発が進められた。この最初のプロジェクトが終了した後に、最後の FORTRAN77 バージョンである LAMMPS99 がリリースされた。その後、サンディア国立研究所での開発が継続され、メモリ管理のために FORTRAN90 に移植され、LAMMPS

2001 としてリリースされた。現在の LAMMPS は、C++ で書き直され、2004 年にオープンソースとして公開されたものがベースとなっている。これは、それ以前にリリースされたバージョンの内容よりも非常に多くの機能を有している。ここには、それまでにサンディア国立研究所で開発されていた並列分子動力学コードの ParaDyn、Warp、GranFlow の機能が含まれている。その後、2006 年後半にサンディア国立研究所の Aidan Thompson により、自身のコードである GRASP の LAMMPS への統合が開始された。GRASP は並列計算のためのフレームワークである。このコードは、炭素系や金属系で利用される多くのタイプの多体ポテンシャル（Stillinger-Weber、 Tersoff、 ReaxFF）を利用できると同時に、反応力場を利用する際に必要とされる電荷平衡計算ルーチンを含んでいる。

ここに示した経緯も合わせ、過去のコードを LAMMPS の web サイトからダウンロードすることが可能である。LAMMPS のソースコードの大きさは、2004 年に C++ に書き直された時点で

\*アドバンスソフト株式会社 事業開発室 室長  
Business Promotion Group, AdvanceSoft Corporation

\*\*アドバンスソフト株式会社 第 1 事業部  
1<sup>st</sup> Computational Science and Engineering Group,  
AdvanceSoft Corporation

52,967 行であり、2010 年の時点ですでに 207,018 行となっている。その後も LAMMPS は四半期ごとにリリースを繰り返され、現在では 20 万行をはるかに超えるソフトウェアとなっている。ただし、数万行のコア部分に多くのモジュールが付属する構成となっており、高い拡張性を持つことがひとつの特長となっている。

## 2. 機能

LAMMPS は、古典分子動力学法を用いたソフトウェアである。古典分子動力学法の原理は、空間中の粒子の相互作用を解くことで原子、分子の運動を計算することであり、支配方程式はニュートンの運動方程式である。粒子の種類としては、球、楕円球、剛体等の数多くのタイプを有する。また、ポテンシャルは、初歩的な LJ 等のペアポテンシャルから、 Tersoff をはじめとする多体ポテンシャル、DPD による粗視化ポテンシャルや Ewald のような長いレンジの力場も装備している。その他、ナノ、メソ、連続体のスケールに対応可能なソルバーとして、金属や半導体のような固体材料、生体分子や高分子のソフトマテリアル、粗視化やメソスコピックに対応できるポテンシャルを装備している。

LAMMPS は、並列計算機で大規模な計算が可能な分子動力学ソルバーである。解析領域において空間での領域分割を行い、メッセージパッシングで並列化を行っている。通常の CPU ではもちろんのこと、GPU や XeonPhi でも性能が出るようになっており、これらの性能はリリースされる全ての機能に対応している。

## 3. 解析事例

古典分子動力学法が有効と考えられる対象のひとつに高分子材料がある。これは、高分子の物性が分子運動に起因するところが大きいからである。そこで、LAMMPS を用いて高分子材料を解析した事例について以下に紹介する。

### 3.1. ガラス転移温度の計算

高分子材料の物性を表す重要な指標のひとつ

に、ガラス転移温度がある。そこで、ポリマーの温度と体積の関係を LAMMPS で計算し、ガラス転移温度を評価した。ポリマーは、化学的な詳細を省略したばねビーズモデル (Kremer-Grest モデル[2]) を用いた。数密度 0.85、原子数 5,000、相互作用 LJ ポテンシャル (カットオフ 2.5) を設定した系について NPT アンサンブルで計算し、設定した温度において十分に緩和させて体積を算出した。計算結果を、体積の温度依存性として図 1 にまとめた。

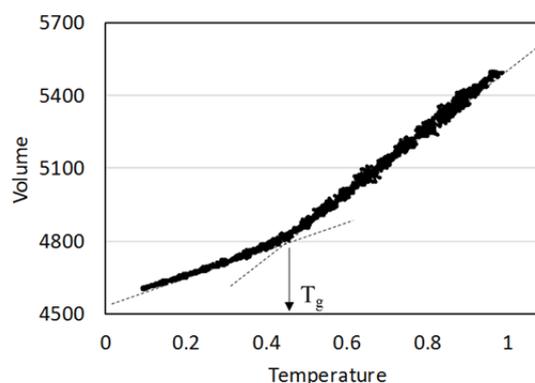


図 1 ポリマーのガラス転移温度評価

図 1 より、温度 0.45 近傍にガラス転移温度が発現していることを確認できる。

### 3.2. 架橋反応の計算

エポキシ樹脂は、硬化剤と組み合わせることによってさまざまな特性を持つ硬化樹脂を作成することができる。その硬化反応は分子間の架橋反応に起因するが、そのメカニズムを解析することは非常に重要である。そこで、エポキシとアミンの架橋反応について LAMMPS を用いて検討した。本例では、架橋反応を模擬するために、LAMMPS の bond/create コマンドと bond/break コマンド[3] を使用した。これらは、あらかじめ指定した原子ペアが指定した条件を満たした場合に、ボンドを形成したり切断したりするコマンドである。

本例では、エポキシは DGEBA (C<sub>21</sub>H<sub>24</sub>O<sub>4</sub>)、硬化剤は TETA (C<sub>6</sub>H<sub>18</sub>N<sub>4</sub>) を計算対象とし、原子数が約 45,000 の全原子モデルで計算した。

図 2 に、計算した各種ボンド (N-H、C-N、C-O、

O-H) の反応前後の数を示す。

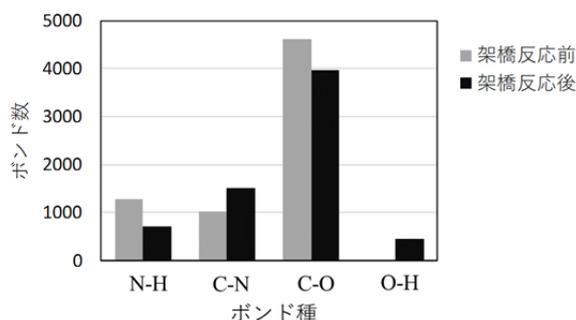


図2 ボンドの形成と切断のヒストグラム

図2より、N-H、C-Oのボンドが切断され、C-N、O-Hのボンドが形成されていることが分かる。

図3に、算出されたボンド種ごとのボンド数の時間変化を示す。これにより、ある程度時間が経過すると、架橋反応が起こらなくなることが分かる。

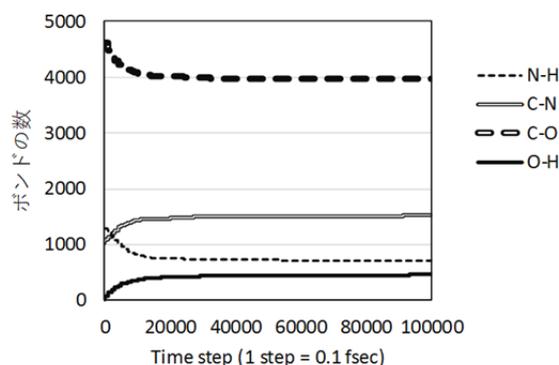


図3 ボンドの形成と切断の時間変化

以上のように、LAMMPS を用いてエポキシ樹脂の架橋反応を検討できる可能性が確認できた。今後は、ボンドの形成と切断のアルゴリズム高精度化、架橋反応後のアングルやトーションの設定、電荷の最適化などを組み込んだ計算を行う予定である。

#### 4. 今後の事業展開

LAMMPS はオープンソースではあり、誰でも簡単に入手できる。しかし、機能が多種多様で多岐にわたることや、計算原理を正しく理解しなければ正しい結果を得ることができないことなど

から、使いこなすことはかなり難しい。また、解析したい現象が、LAMMPS のどの機能を使用して解析すれば妥当な結果を得ることができるかどうかを検討することも容易ではない。従って、LAMMPS を使いこなすためには、多大な時間を必要とする。

そこで、LAMMPS の解析経験の豊富な当社技術者が、お客様に代わって LAMMPS のデータを作成して解析を行い、その結果を評価するサービスを実施している。また、LAMMPS のライセンスの許容範囲内で、関連するツールの開発や可視化のためのツールの整備も実施している。

今後は、当社で開発している材料プラットフォームにおいても、LAMMPS とのインターフェイスを開発する予定である。この材料プラットフォームは、当社で開発販売を行っている第一原理計算ソフトウェア Advance/PHASE を中心とした材料設計全般に利用可能なプラットフォームであり、分子動力学ソフトウェアとしては LAMMPS をその主要ソルバーと位置付けている。

#### 5. 謝辞

LAMMPS を用いた高分子材料の分子動力学計算にあたり、さまざまなご指導を賜った防衛大学校応用物理学科の萩田克美講師に深謝いたします。

#### 参考文献

- [1] <http://lammps.sandia.gov>
- [2] K. Kremer and G. G. Grest, J. Chem. Phys., 92 (1990) p.5057
- [3] <http://lammps.sandia.gov/doc/Manual.html>

※ 技術情報誌アドバンスシミュレーションは、アドバンスソフト株式会社 ホームページのシミュレーション図書館から、PDF ファイルがダウンロードできます。(ダウンロードしていただくには、アドバンス/シミュレーションフォーラム会員登録が必要です。)