分子動力学法ソルバ
LAMMPSによる解析事例

shingo0323northwind@gmail.com

LAMMPS is distributed by Sandia National Labotories, a US Department of Energy laboratory
http://lammps.sandia.gov/index.html

■アジェンダ

- LAMMPSとは
- 主な機能と制限、ベンチマーク
- Peridynamicsについて
- 可視化ツール
- まとめ

■LAMMPSとは

・アメリカのSANDIA国立研究所が中心になって開発を進めるオープンソース（GPL）の古典的分子動力学法パッケージ

Large-scale Atomic/Molecular Massively Parallel Simulator

の頭文字をとって、LAMMPSと略称

・開発のコアメンバはSANDIA研の３人　http://lammps.sandia.gov/authors.html
Steve Plimpton、Aidan Thompson、Paul Crozier

SANDIA研究所以外の研究機関(ORNL、LBNL、LLNL)や大学にも多くの開発協力者がいて、むしろ非SANDIAの研究者が開発した部分の方が多い
（コードの80%がコア部分から拡張された部分)

・S.Plimptonらが開発した大元の並列MDコードがParaDYN,1993(F77)、それを改良したのがLAMMPS99(F77)、金属主体のポテンシャルから機能追加して拡張したのがLAMMPS2001(F90)

→２００４年に言語をC++に変更して、新たにLAMMPSとしてリリース

Ref.　Fast Parallel Algorithms for Short-Range Molecular Dynamics,
S. J. Plimpton, J Comp Phys, 117, 1-19 (1995).

■（古典的）分子動力学・・・Classical Molecular Dynamics

・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（ミクロな場、微小時間）

・支配方程式はニュートン方程式　F=ma

※比較対象として、あげられる第一原理（分子動力学）計算（First Principal MD、ab initio calculation）という方法もあるが、解いている方程式はシュレディンガー方程式(時間依存or非依存)で全くの別物

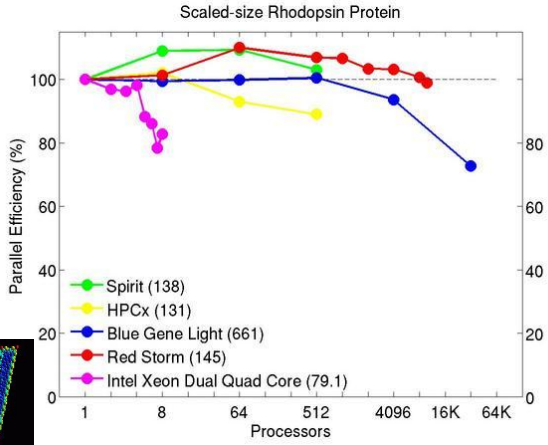
古典的MDは粒子間相互作用を決定する力場を経験的なパラメータを用いて計算しているのに対し、第一原理計算は非経験的な手法で求解。そのため、精度が高い。反面、計算コストは粒子数Nの３乗のオーダーに比例。
古典MDはNもしくはNlogNに比例???

・古典MDは陽的な時間進行法でちょっとずつ粒子を動かしながら平衡・安定な状態までを解く。連立方程式を解かないので省メモリだが、ステップ数は膨大。

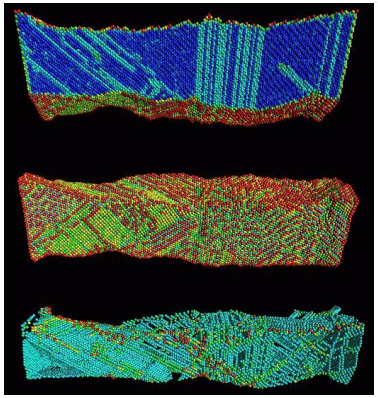
・CPUリソースの内訳は概ね以下の通り
力場（pair time）　80%　隣接点探索 15%　その他　5%

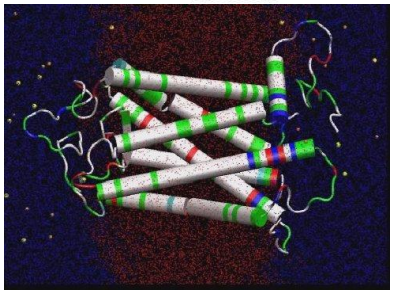
・FEM、FVMなどの他計算手法と比べて、顕著なストロングポイントは並列化が容易？
→スーパーコンピューティングのノーベル賞、ゴードンベル賞の候補にほぼ毎年選出

■5つの特徴（P. Crozier LAMMPS tutorial ,2011 wor



1）並列性能
最大でLLNLのBlueGene/Lにて64,000並列で実績有
（weak scaling)





2）機能が豊富
Solid mechanics、Biophysics、chemistry、
Granular Flow、Materials Science

3）モジュール方式
pair_reax.cpp、pair_reax.h
fix_nve.cpp、fix_nve.h
機能は基本的にソースとヘッダファイルのみで構成されている？

4）ポテンシャルの適用範囲
ペアポテンシャル：LJ、Buckingham、Morse、Yukawa、　電子場ポテンシャル
多体ポテンシャル：EAM、FS、MEAM、EIM、SW、Tersoff、
粗大化ポテンシャル：DPD、GayBerne、　mesoポテンシャル：granular、peridynamics
Long-range　クーロン力/分散力：Ewald、PPPM
そのほか、bond potentials / angle potentials / dihedral potentials / water potentials

5）高い拡張性
全コード17.5万行のうち、3.5万行だけがLAMMPSのコア部分

■機能と制限

・粒子のスタイル
原子、粗視化粒子、有機分子、プロテイン、DNA、金属、グラニュラー、
有限な球体粒子や楕円粒子、剛体粒子、粗視化メソスケールモデル

・力場
Pair potentials ： LJ、Buckingham、Morse、Yukawa
Manybody potentials ： EAM、FS、modified EAM、SW、Tersoff、ReaxFF
Coarse-grained potentials ： DPD、GayBerne、DLVO、colloidal
Mesoscopic potentials ： granular、perdynamics、SPH
Polymer potentials ： all-atom、united-atom、bead-spring、breakable
Long-range Coulombics / dispersion ： Ewald、PPPM

・特別な機能
Stochastic rotation dynamics(SRD)、atom-to-continuum coupling with FEM
Coupling rigid body integration、DSMC、temperature accelerated dynamics

・高速化
OpenMP、GPU、CUDA/OpenCL、Optimize

制限
GUI無、分子モデリング、力場の係数決定、可視化ツール、第一原理計算には未対応

■add-on package

・ELBA-LAMMPS（Mario Orsi ）
ELBA Coarse-grain modelを用いるための支援ツールキット

・LIGGGHTS(Christoph Kloss@JKU)
Discrete Element Particle Simulator
→LAMMPSと下位互換性をもったLAMMPSにあるDEM機能を拡張したパッケージ

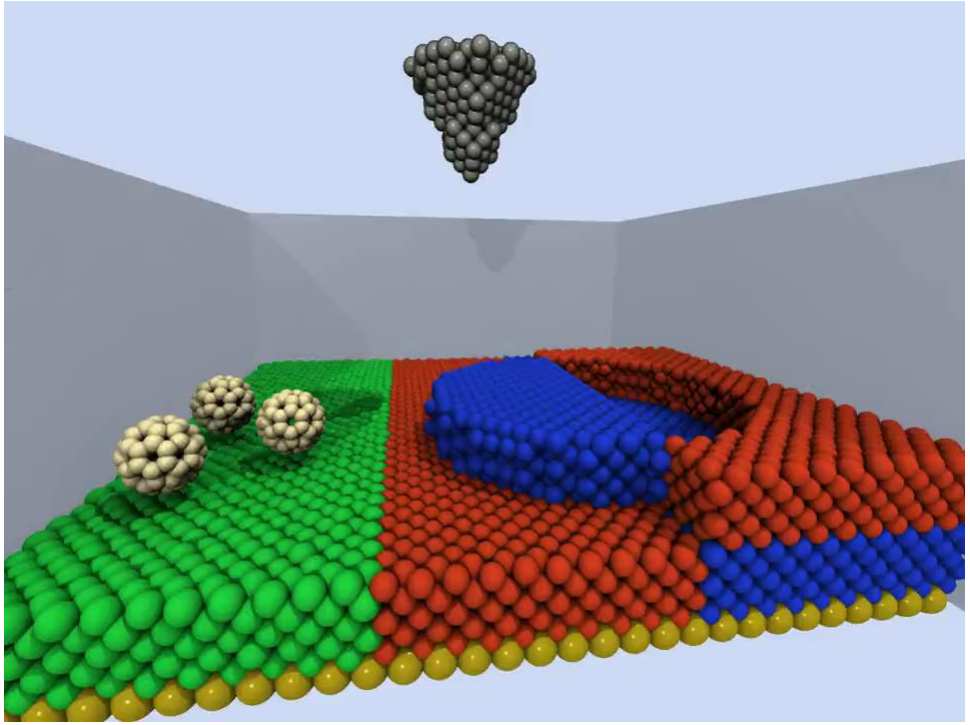
1）マクロな粒子の吸着をモデル化できるように接触定式化を再実装
2）CADからできた三角形メッシュのインポート、ハンドリング
3）移動メッシュ
4）粒子追加アルゴリズムの改良
5）接触粒子間の熱伝導/熱伝達
そのほか、楕円粒子、任意形状での6自由度剛体運動、壁面せん断応力

＋OpenFOAMとのCFD-DEM 2way or 4way coupling(並列性能は今後改善？)

パッケージはフリーだが、開発者らが定期的にスクールを開催、サポートも充実

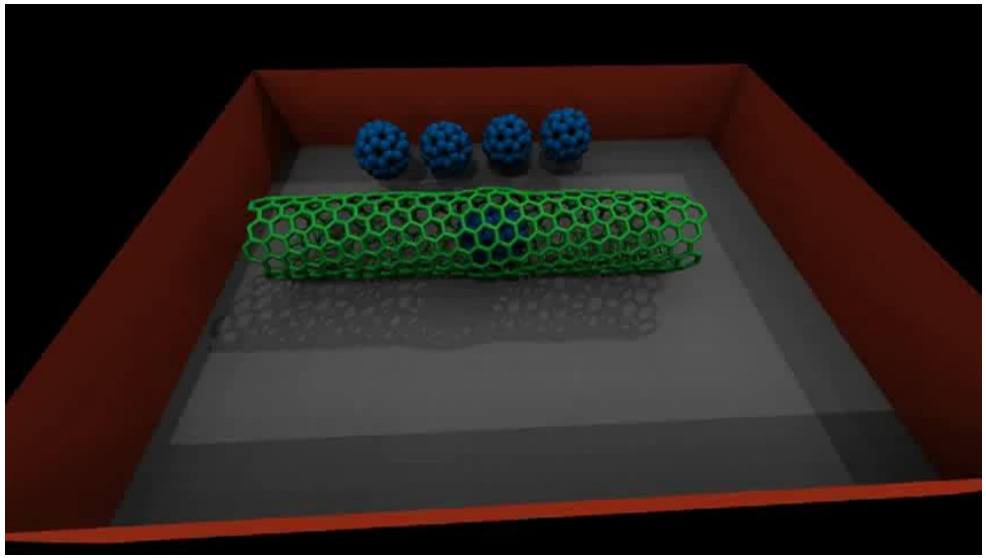
・LAMMPS-ICMS - Axel Kohlmeyer's add-ons to LAMMPS
先行開発版、コアメンバーの一人　Dr.Kohlmeyer（temple U）がリポジトリでソース管理
次ページでyoutube上の動画を紹介

■Dr. Kohlmeyer's movies from youtube



Visualization with VMD

※ホームページでこのinput fileも公開されている



■ベンチマーク

・手持ちのマシンでパッケージに収録されているベンチマーク問題を計算、
開発元などで計測された多種のマシンとのパフォーマンスを比較

マシンスペック
CPU：AMD PhenomⅡX6 1055T (6core)、 memory：16GB、OS：openSUSE 11.4 x86_64

例題・・・LJポテンシャル 32000atoms、100step、NVE time integration
①問題の粒子数固定で並列数増加(strong scaling)

	PhenomⅡ	4coreXeon	ASCI red	Mac laptop	IBM BG/L	Cray XT5
Clock rate	2.8GHz	2.66GHz	P3 333MHz	G4 1.0GHz	P440 700MHz	Opteron 2.4GHz
Date	Mar 12	May 08	Aug 04	Aug 04	May 05	Jun 11
1core	3.191	4.31	62.9	4.31	29.0	5.36
8(6)core	0.816	0.762	8.75	-	4.261	0.73

②並列数Nに応じて、ベースモデルから粒子数N倍(weak scaling)

	PhenomⅡ	4coreXeon	ASCI red	Mac laptop	IBM BG/L	Cray XT5
8(6)core	4.551	7.009	67.7	-	31.004	6.56
Scaled eff	70.1%	61.5%	92.9%	-	93.5%	81.7%

Peridynamicsについて

■Peridynamics とは

Wikipediaより

Peridynamics is a formulation of continuum mechanics that is oriented toward deformations with discontinuities, especially fractures.

・・・FEMに代表される従来の連続体力学理論による偏微分方程式を求解する
解法ではき裂などの不連続場を求める際に空間の微分量が求められず、破綻する。
そのため、破壊を伴う解析ではき裂面近傍の取り扱いに特殊な手法を用いている。
（応力拡大係数、J積分、T積分・・・）

Peridynamics では

①微分方程式ではなく、積分方程式を解く

②よく使われる例えは、「分子動力学の連続体力学バージョン」
　→有限の距離で相互作用する球体の運動によって、連続体場を表現

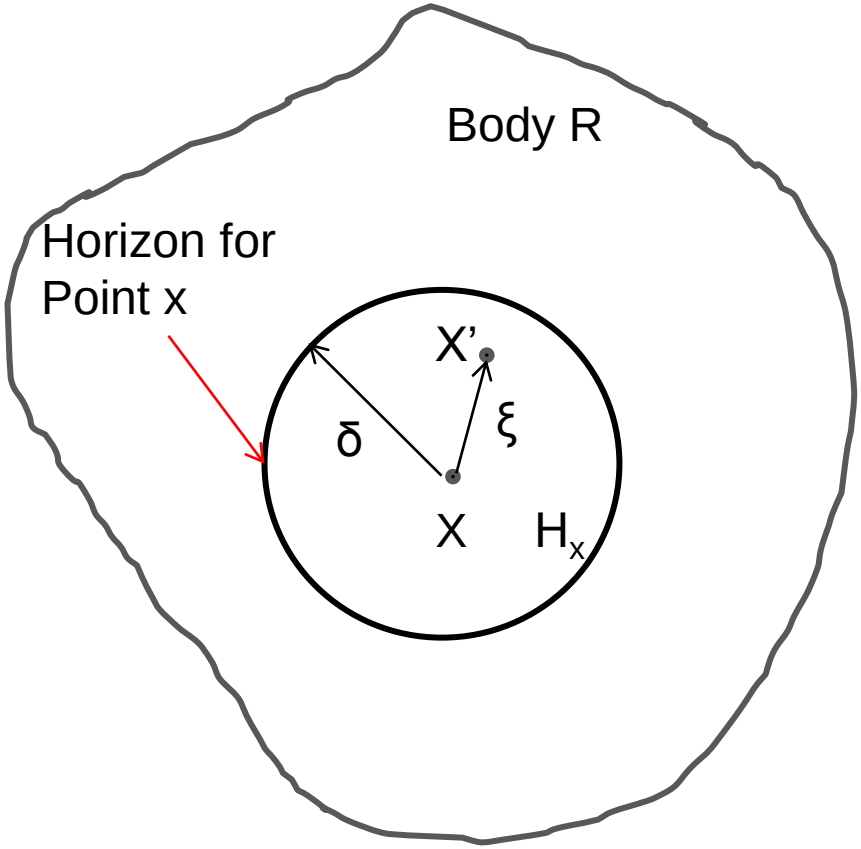
③局所化、き裂の進展を特殊な取り扱いを行うことなく、自然に再現できる

※The term "peridynamic," comes from the prefix *peri,* which means *all around*, *near*, or *surrounding*; and the root *dyna*, which means *force* or *power.*

■定式化

$$\rho\ddot{u}(x,t) = \int_{H_x} f(u(x',t) - u(x,t), x' - x)dV_{x'} + b(x,t),$$

H_x： xの隣接点、 u: 変位ベクトル
b： body force density field、 ρ：質量密度
f：pairwise force function



参照座標系での相対位置 ξ = x' – x
相対変位 η = u(x' ,t) – u(x, t)

η + ξ：2体間の現在の相対位置ベクトル

x と x' の2体間の相互作用 = "bond", -> special case of elastic interaction "spring"

$$|\xi| > \delta \Rightarrow f(\eta,\xi) = 0 \quad \forall\eta$$

・・・ δ＝horizon、 点xからδ以上の距離の点との相互作用力は無 ≈ cut off radius

■定式化（続き）

the general form of the bond force

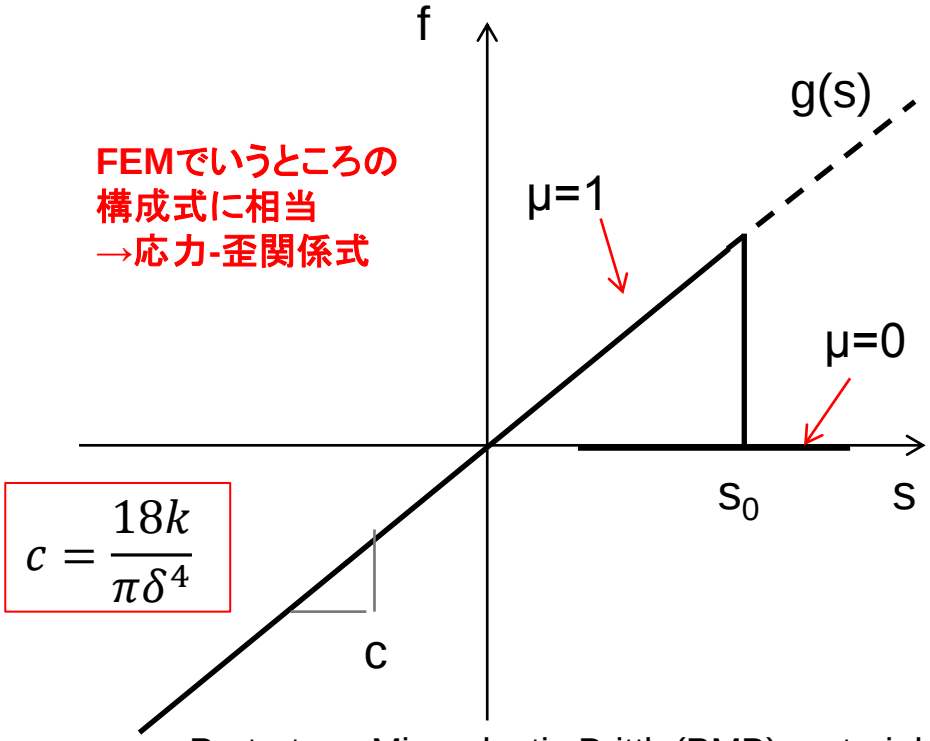
$$f(\eta,\xi) = \frac{\xi+\eta}{|\xi+\eta|} f(y(t),\xi,t) \qquad \forall \xi,\eta$$

$$y = |\eta+\xi|$$

bond stretch s

$$s = \frac{|\xi+\eta| - |\xi|}{|\xi|} = \frac{y-|\xi|}{|\xi|}$$

$$f(s,t,\xi) = \mu(t,\xi) = \mu(t,\xi)c \times s$$



$$c = \frac{18k}{\pi\delta^4}$$

Proto-type Microelastic Brittle(PMB) material
→脆性材料（コンクリート）的な挙動を表現

C：spring constant、 μ： 履歴依存のダメージ関数

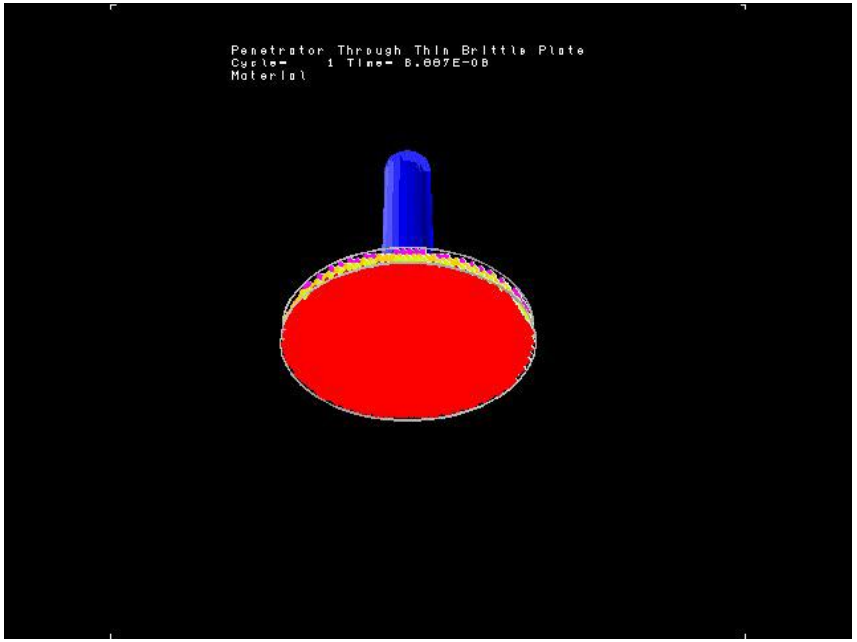
$$\mu(t,\xi) = \begin{cases} 1 & if\ s(t',\xi) < s_0 \\ 0 & otherwise \end{cases}$$

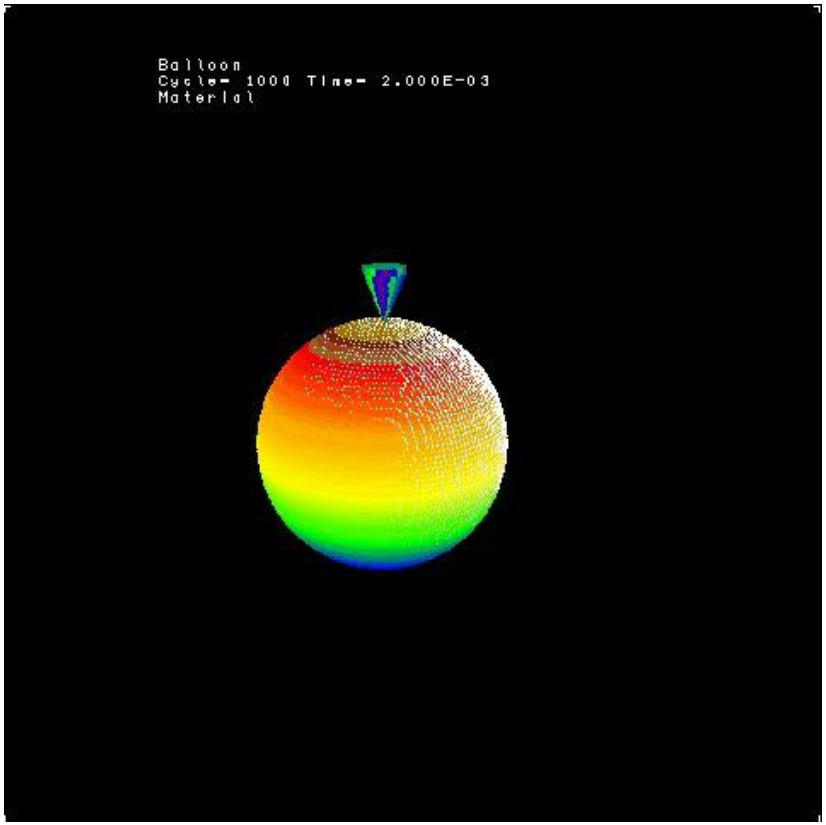
※粒子同士のoverlapを防ぐのに、short-range force(repulsive only)を追加

$$f_s(\eta,\xi) = \frac{\xi+\eta}{|\xi+\eta|} min\left\{0, \frac{c_s}{\delta}(\|\xi+\eta\| - d_s)\right\} \quad , d_s = min\{0.9\|x-x'\|, 1.35(r_s + r'_s)\}$$

■EMU code

Peridynamicsの生みの親であるSANDIA研のDr. Stewart.Sillingが開発した
オリジナルコード(F90)　http://www.sandia.gov/emu/emu.htm





★Membrane/barが使える、塑性・粘塑性が使える、複合材・コンクリートも扱える
LAMMPSに搭載されている機能＋αがある研究用コード(Not free)

LAMMPSへの実装は共同研究者のDr. M.Parks@SANDIAが実施、近々にupdate?

■Peridynamics via finite element analysis

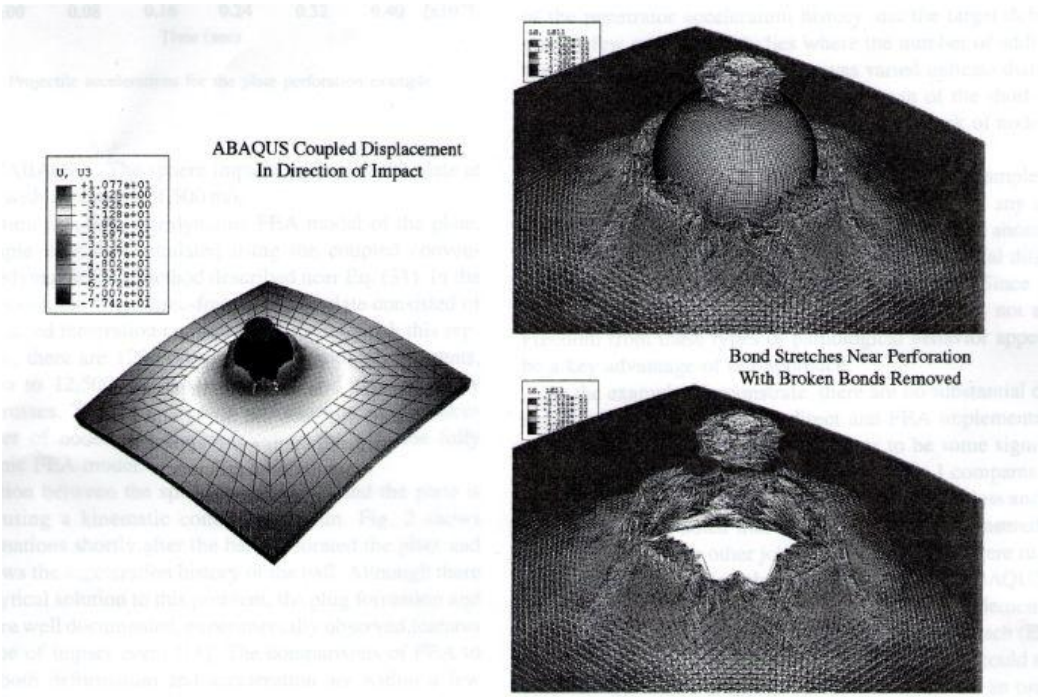
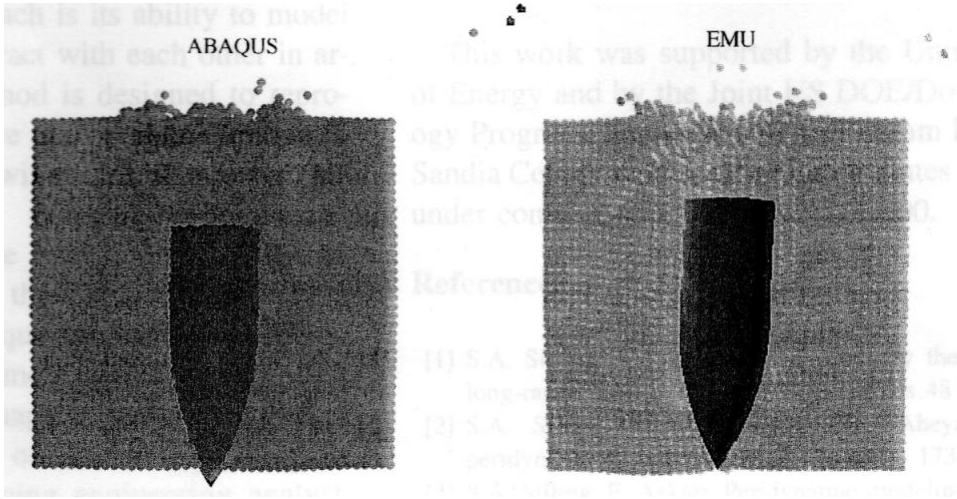


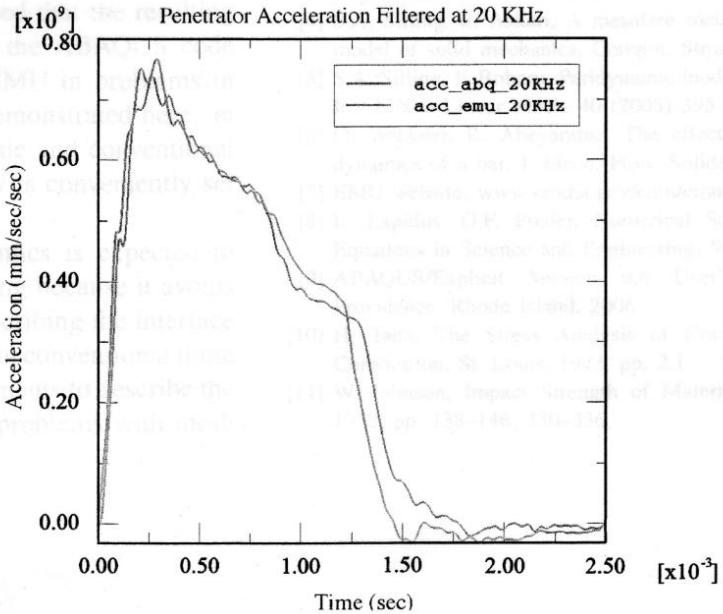
Fig. 2. Deformations for the plate perforation example.



R.Macek(LANL)、S.Silling
Finite Elements in Analysis
and Design、43 (2007) 1169-1178

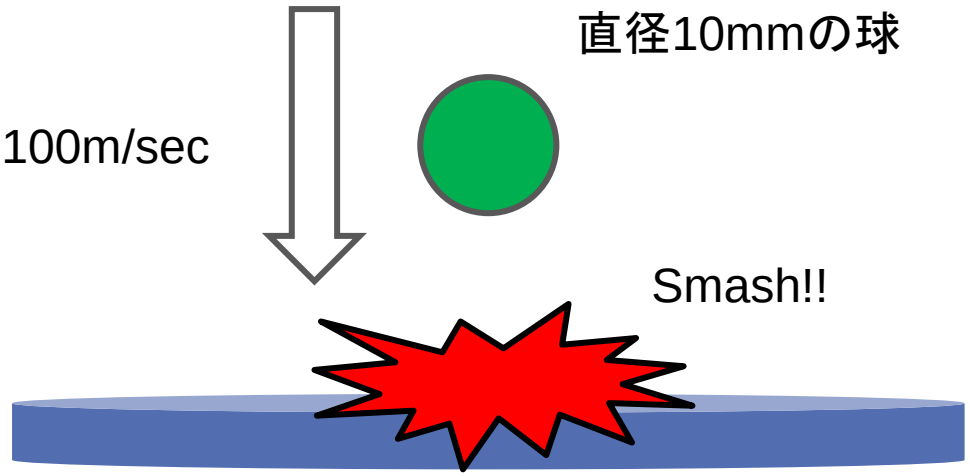
FEMとのカップリングならびに市販
コードへの実装(Abaqus Explicit)

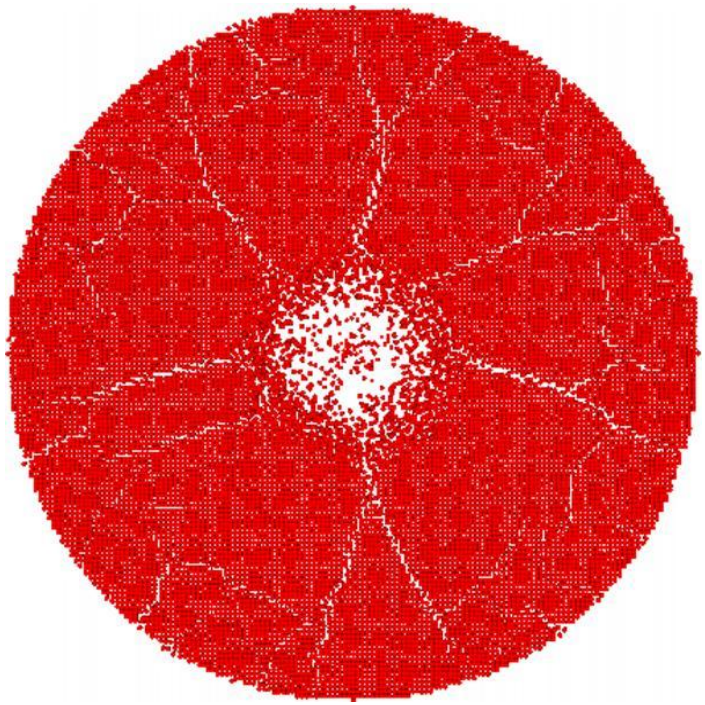
粒子(節点)間の相互作用は非線形
トラス要素で表現



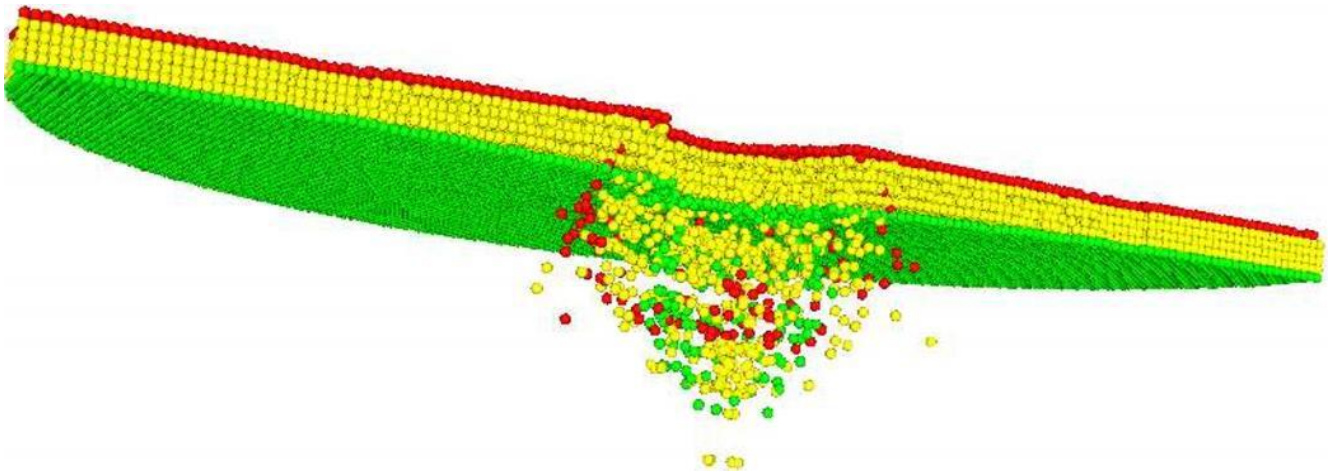
■example1 : impact of a sphere on a brittle target

マニュアルに記載されているサンプルモデル

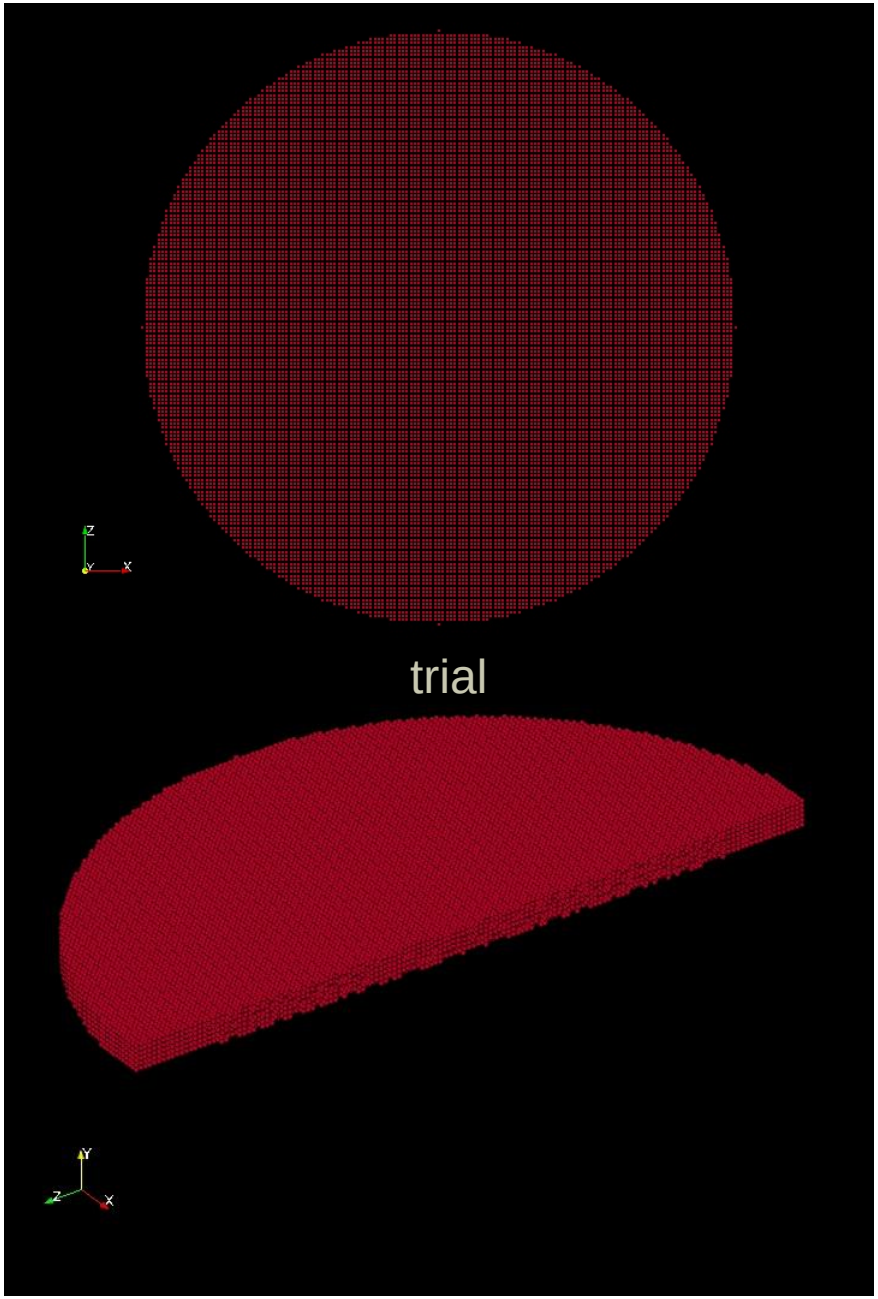


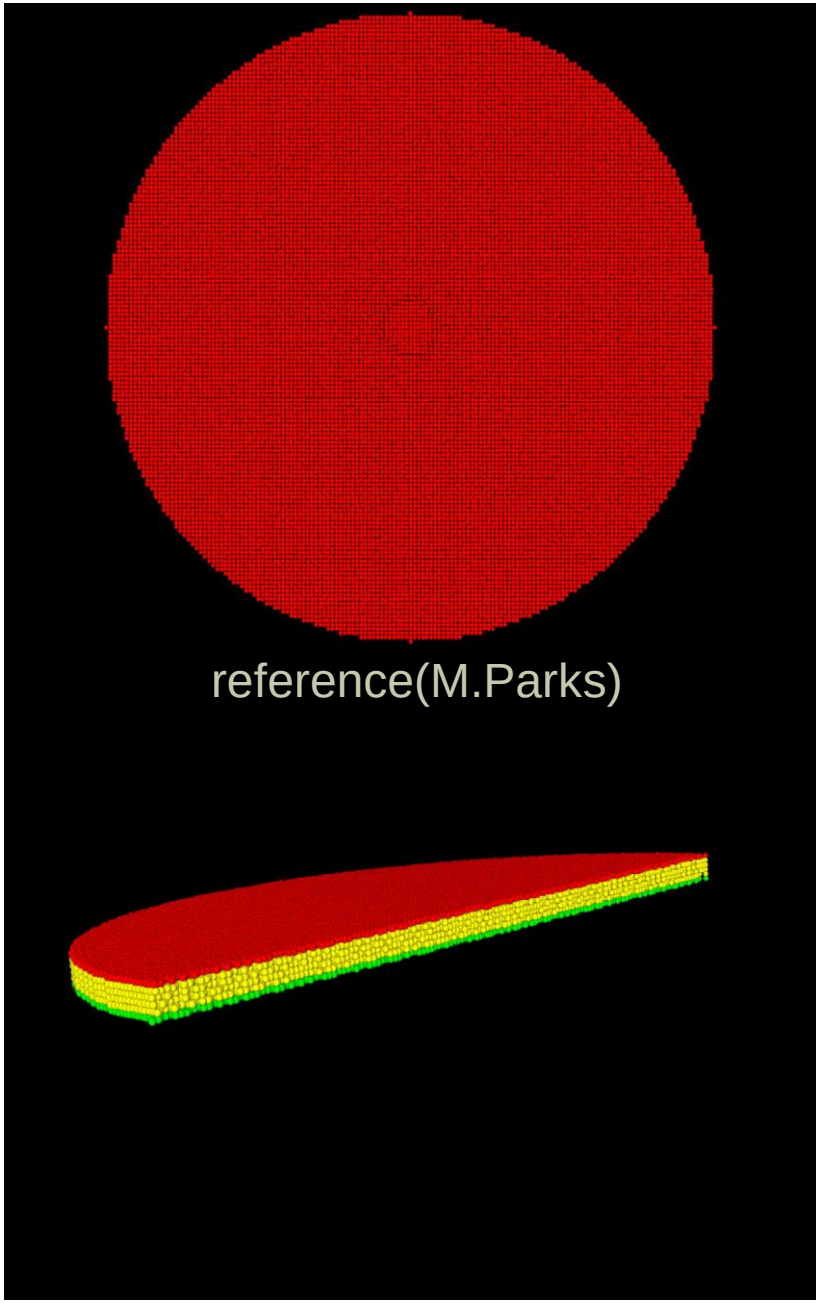


直径74mm、厚さ2.5mmの円板



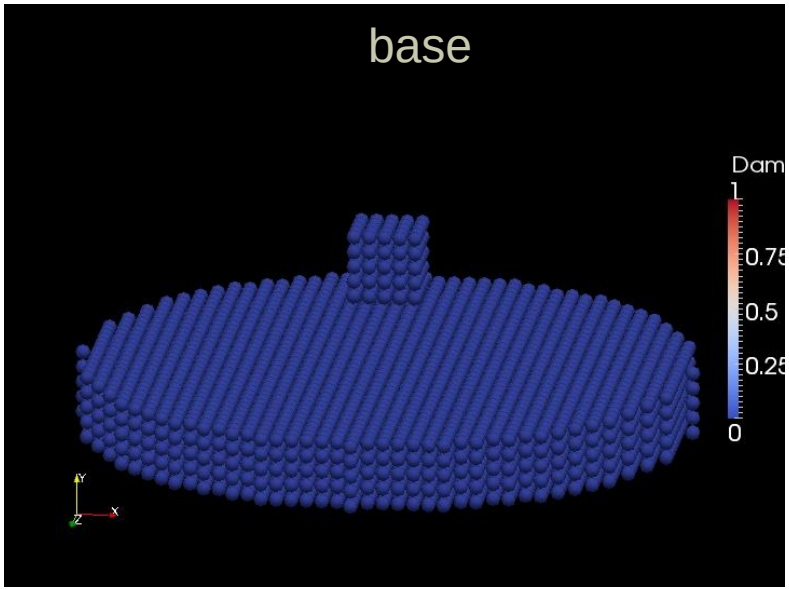
■example1 : impact of a sphere on a brittle target

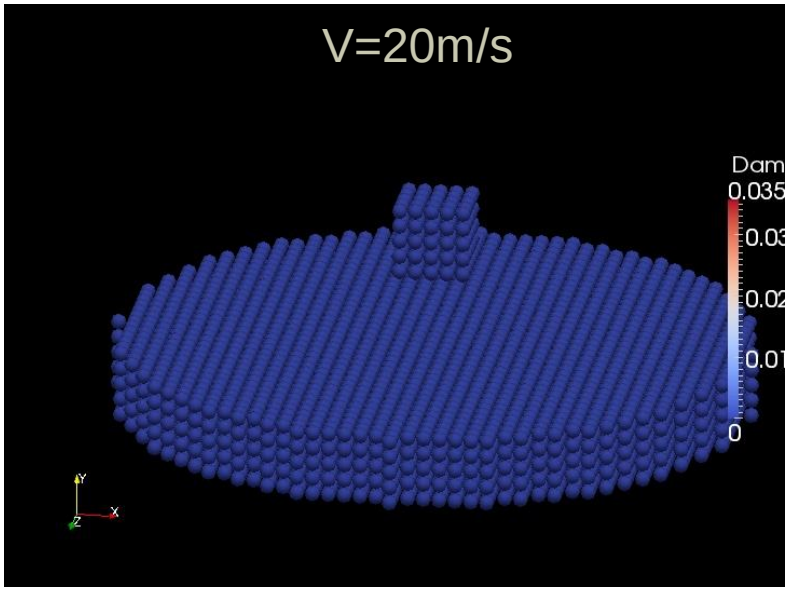


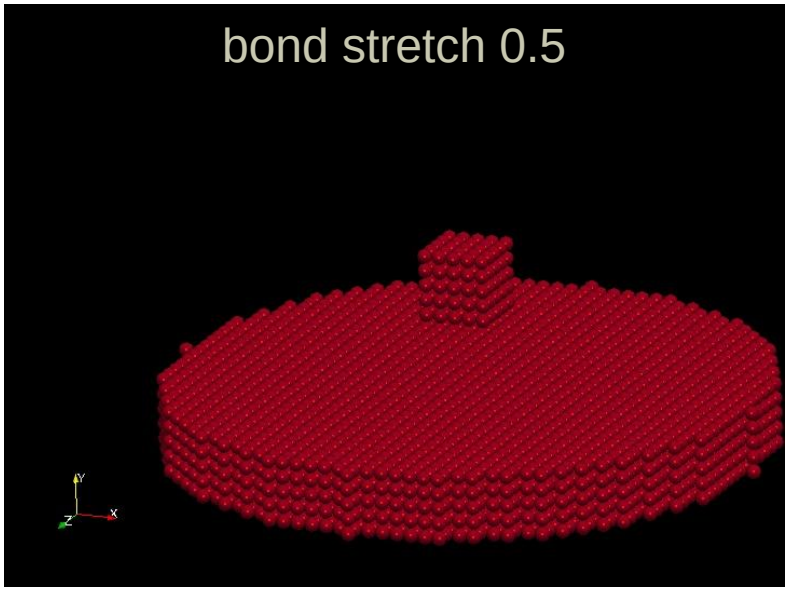


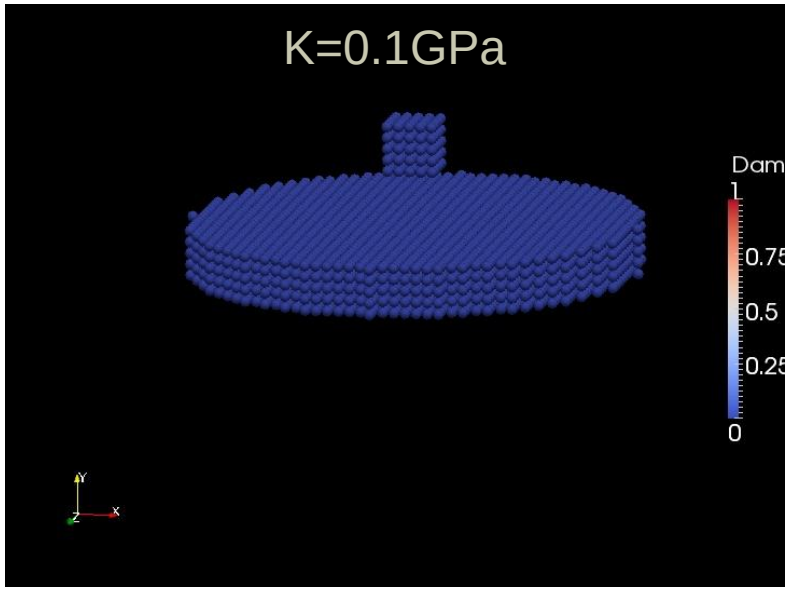
■example1 : impact of a sphere on a brittle target

簡略化モデルでパラメータサーベイ　ベース：V=200m/s 、K=14.9GPa 、bond stretch=0.005



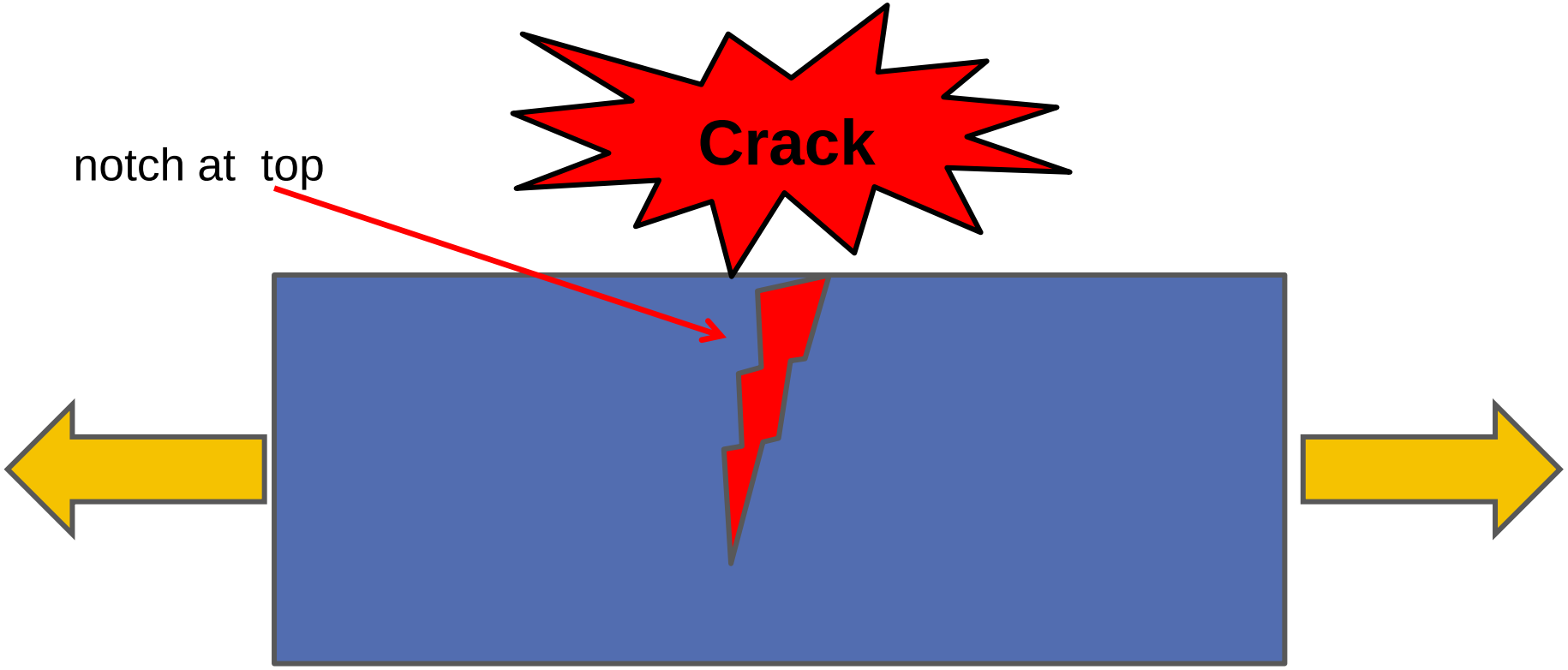






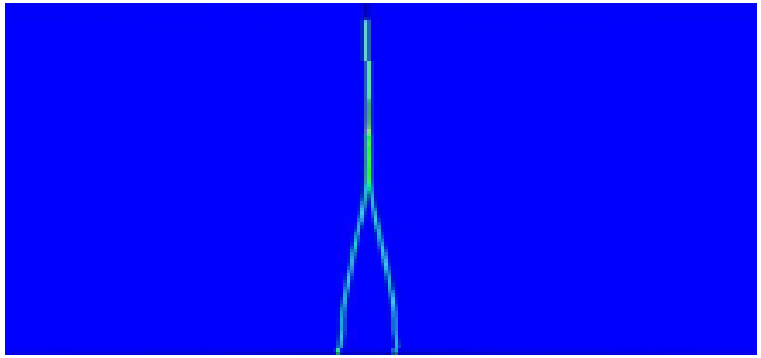
■example2：crack growth

Soda-lime glass plate(microscope slide)
Dimensions : 3×1×0.05、 Density:2.44kg/m^3
Elastic Modulus: 79GPa、 Time: 50μsec(20k timestep)

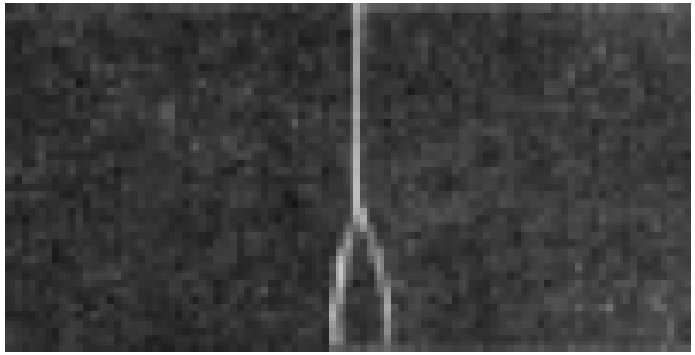


S F. Bowden, J. Brunton, J. Field, and A. Heyes, *Controlled fracture of brittle solids and interruption of electrical current*, Nature, 216, 42, pp.38-42, 1967

■example2：crack growth Result (M.Parks@SANDIA)



Peridynamics



Physical Experiment*

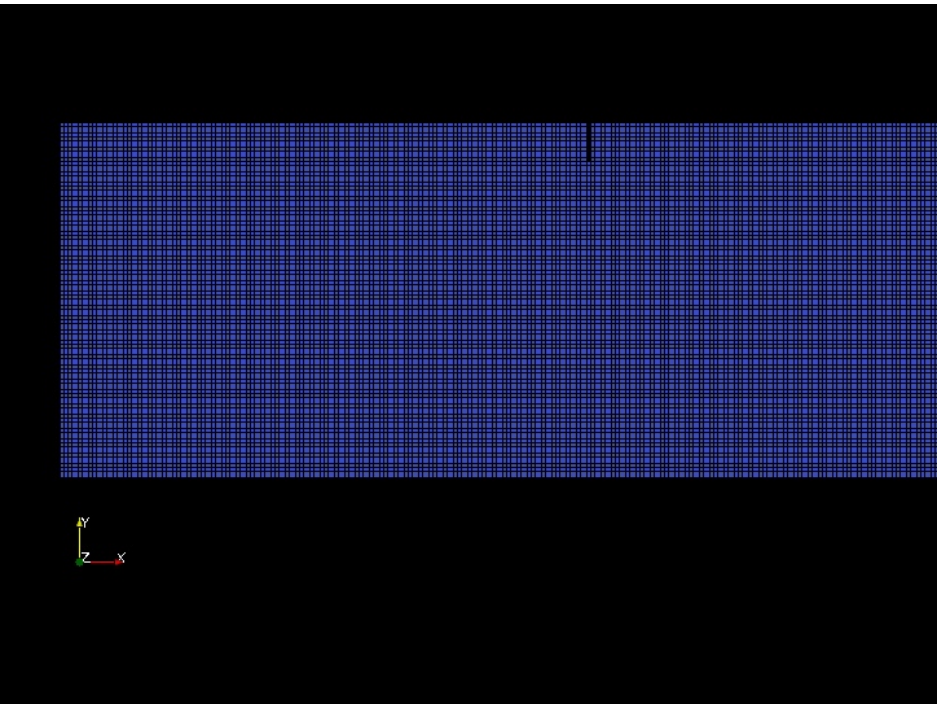
Large Scale Peridynamics Simulation @ Dawn(LLNL), IBM BG/P

Size: 82million particles 、20k timesteps → 6hours on 65k cores

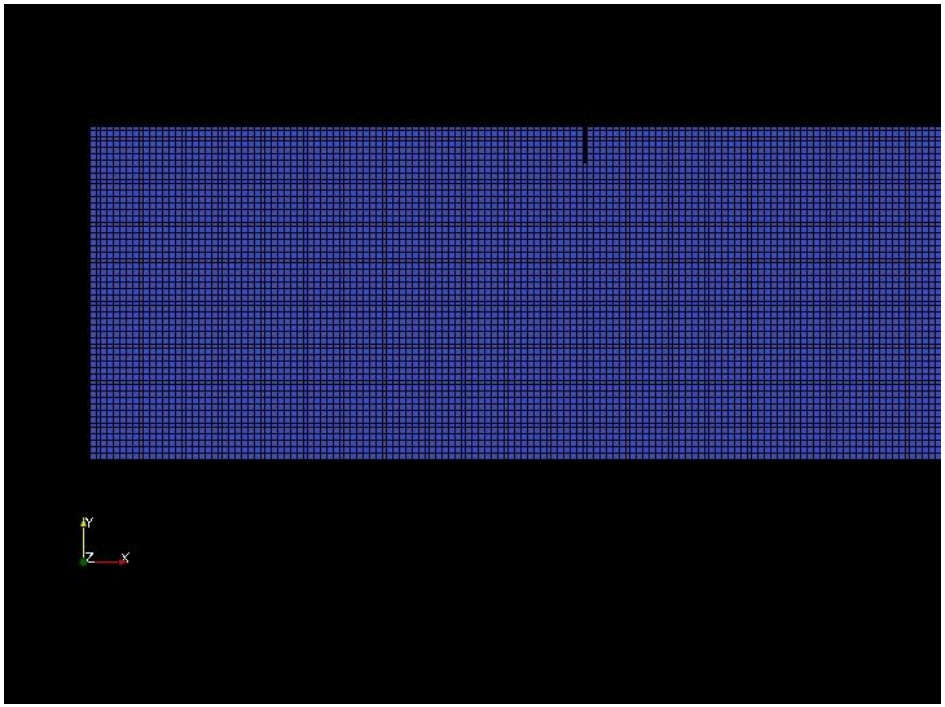
Weak Scaling Results

Cores	Particles	Particles/Core	RunTime(sec)
512	262,144	4096	14.417
4,096	2,097,152	4096	14.708
32,768	16,777,216	4096	15.275

■example2：crack growth

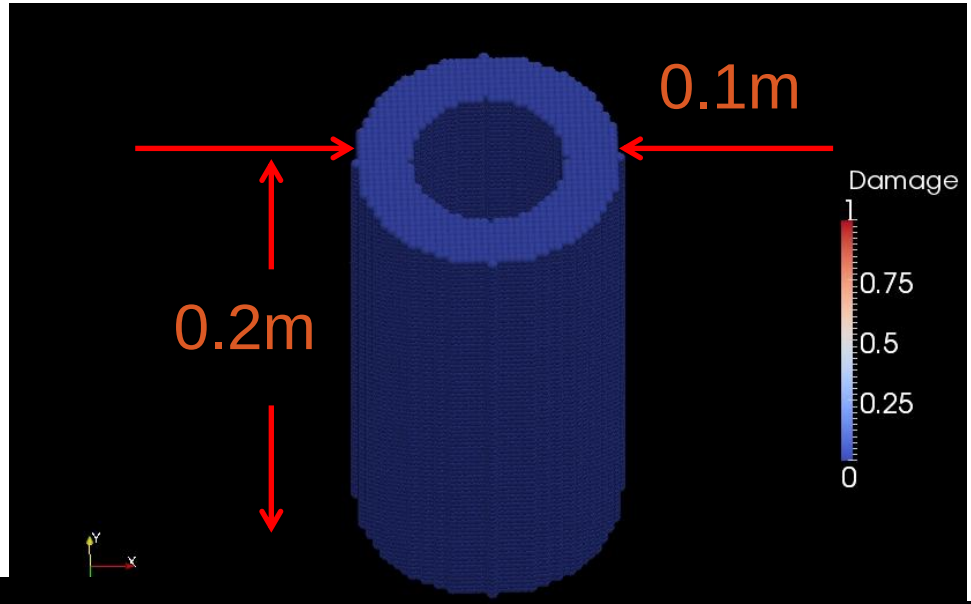


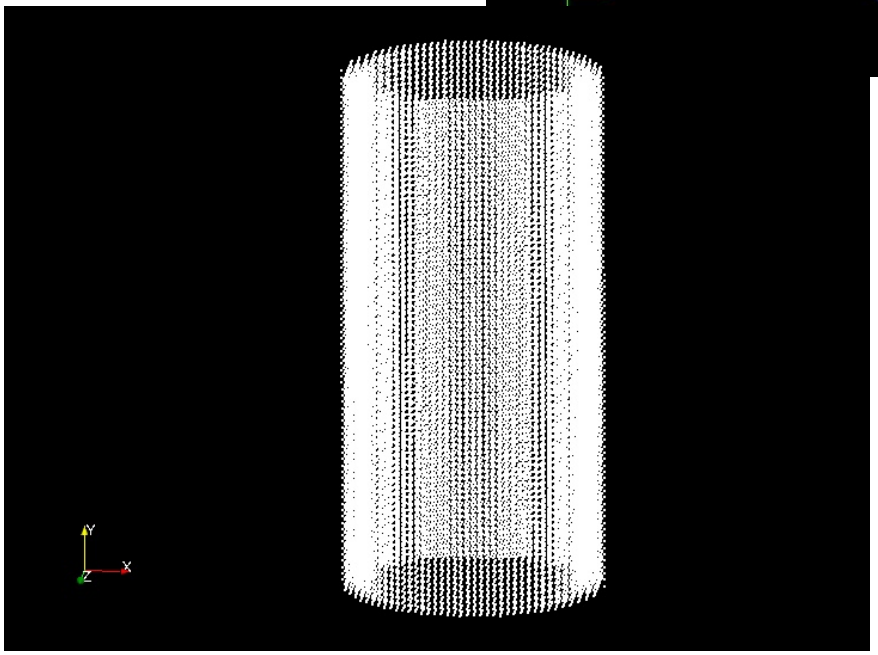
Critical bond stretch S_{00}=5e-3



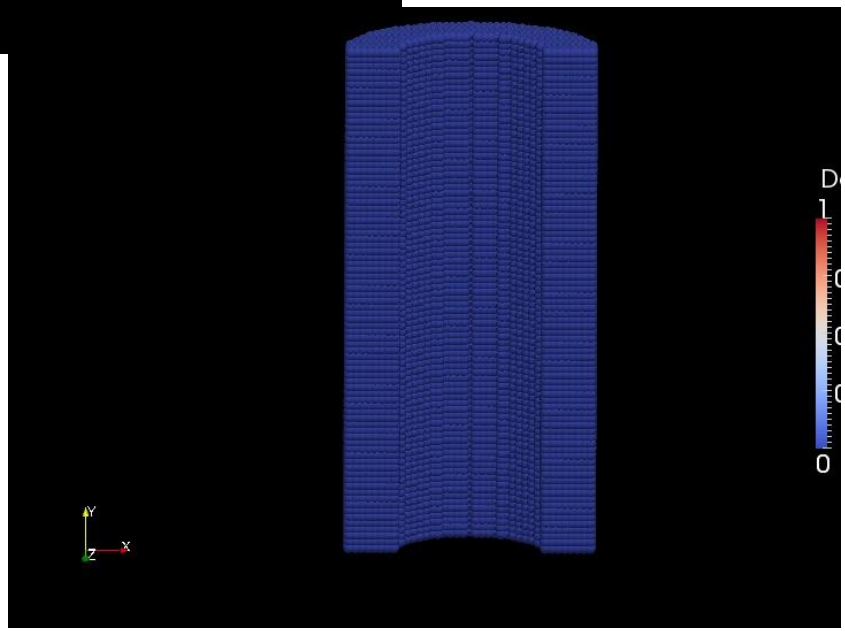
Critical bond stretch S_{00}=5e-4

■example3：uniaxial compression





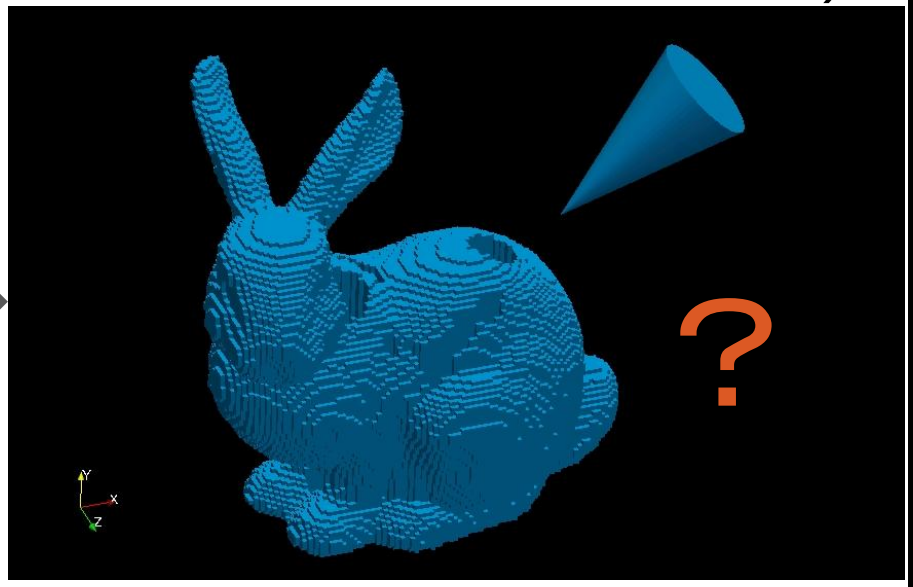
Fault : dt=1.0e-7



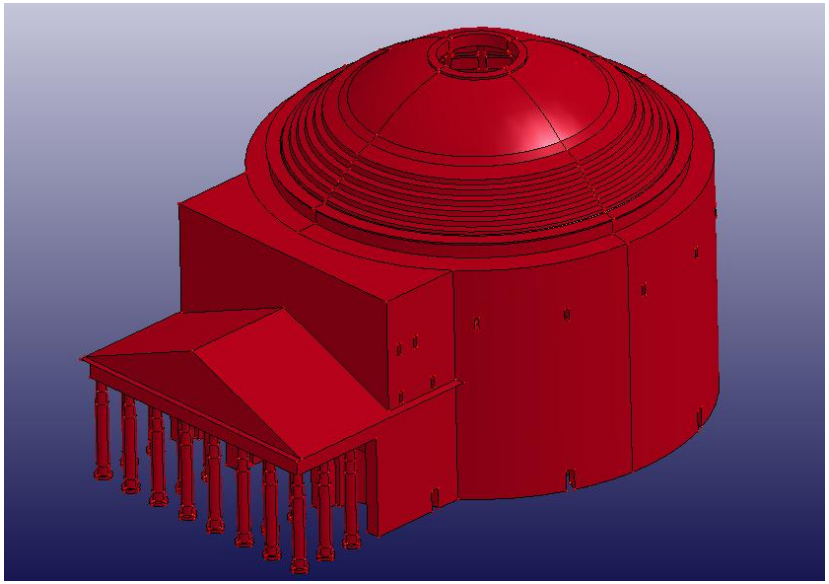
Boundary condition mistake?

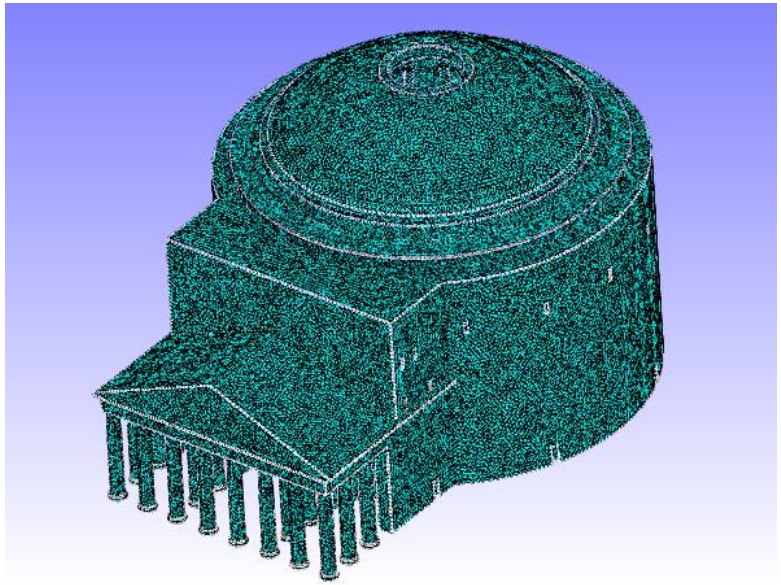
■ complex geometry analysis is under construction

Stanford bunny → voxel meshing(binvox http://www.cs.princeton.edu/~min/binvox/)



Pantheon → Adventure Tetmesh(http://adventure.sys.t.u-tokyo.ac.jp/jp/software/overview.html)





■参考文献

「Reformulation of elasticity theory for discontinuities and long-range forces」S.A.Silling
J.Mech.Phys.Solids 48 (2000) 175-209

「A meshfree method based on the peridynamic model of solid mechanics」 S.A.Silling、E.Askari
Computers & Structures 83 (2005) 1526-1535

「Peridynamic modeling of membranes and fibers」
S.A.Silling、F.Bobaru
Int J of Non-Linear Mechanics 40 (2005) 395-409

「Implementing peridynamics within a molecular dynamics code」M.Parks、R.Lehoucq、S.Plimpton、S.Silling
Com Phys Comm 179 (2008) 777-783

その他、多数の関連資料

■可視化ツール

分子動力学法での可視化はフリーソフトも十分高機能なものが数多く存在、 以下メジャーなソフトを列記

・VMD

・AtomEye

・ovito

・Rasmol

汎用の可視化ソフトもMDの可視化に対応

・Paraview、Visit、ensight etc

■まとめ

・分子動力学法ソルバLAMMPSに関する概要と幾つかの事例紹介

・peridynamicsについては破壊現象に対象を絞った使い方であれば、
有意な結果を得ることができる(可能性がある？)
ただし、
課題1・・・応力、歪みの定義が異なるので既存データとの比較が難しい

課題2・・・他のメッシュフリー法同様、計算時間がかかる
→並列化で対応

今後の展望
他手法との比較
→XFEM(code-aster)、EFGM(PETR KRYSL'S code)、DEM(LIGGGHTS)

機能の拡張
→LAMMPSのアップデート+αで文献参考に改良にチャレンジ

大規模計算
→amazon EC2？、各大学の計算機センターを借りる？？？