

地球シミュレータ上における分子動力学計算の加速と MgO の自己拡散への応用

Acceleration of molecular dynamics and its application to self-diffusion of lower mantle MgO

伊藤 洋介[1], 鳥海 光弘[2]

Yosuke Ito[1], Mitsuhiro Toriumi[2]

[1] 東大・理・地惑, [2] 東大、新領域

[1] Earth and Planetary Sci., Univ of Tokyo, [2] Complexity S and E., Univ. Tokyo

1 緒言

地球内部物質の塑性変形に関する性質（レオロジー）は、地球全体のダイナミクスを理解するために知る必要がある。塑性変形は物質が持っている欠陥（空孔、転位、粒界）に支配されているから、MD によってこれらの欠陥の性質を調べれば、地球内部物質の塑性変形が明らかになる可能性がある。しかし、これらの欠陥の MD 計算は多数原子を必要とするため、計算時間が多くなりすぎることから困難であった。本研究は、まず、MD 計算を高速にするための技術開発を行なった。次に、開発したプログラムを用いて、下部マントルを構成する一つの物質である MgO の自己拡散を調べた。本発表はそれらの詳細を紹介する。

2 技術開発

よく知られた MD プログラムである MXDTRICL（河村 1996）をベースに開発を行なった。まず、距離計算部分の大きなサイズ依存性($O(N^2)$)を減らすために、セル分割を伴う粒子登録法を導入した。次に、地球シミュレータ上で走らせるために、ベクトル化及び並列化をほどこした。開発したプログラムは SUPER-MXDTRICL と名付けられた。

PC および地球シミュレータ上でのベンチマークの結果、粒子登録法、ベクトル化、並列化の3つは、原子数が大きいときにいずれも効果的に計算を加速することが分かった。SUPER-MXDTRICL は、地球シミュレータ上で、 10^6 原子の MD 計算を、3.7sec/step(128 ノード), 1.8sec/step(512 ノード)のパフォーマンスで実行した。

3 MgO の自己拡散

MgO の自己拡散を、結晶に空孔対を一对導入した系によって MD 計算を行なった。まず、 10^7 step 計算することによって拡散係数の精度が保たれることが分かった。常圧における移動と形成の活性化エンタルピーは実験とよく一致して、本手法の妥当性を示した。拡散係数は圧力の増加に従って、はじめの線形に近い減少から徐々に圧力依存性が小さくなり、60-100GPa 付近においてわずかな増加に転じた。このふるまいは、下部マントルに存在する MgO の自己拡散の性質を表している可能性がある。Nabarro-Herring の構成方程式から、MgO の格子内拡散クリープに支配されていると仮定した下部マントルの粘性率が計算された。結果は 1000km 付近までは深さに従い増大するが、それ以後は減少に転じ、1000km から 2900km(CMB)まで 1.5 桁程度減少した。この結果は、現在知られている。下部マントル最深部での活発なテクトニクス活動の原因になっている可能性がある。

4 まとめ

技術開発によって達成された 10^6 原子の計算時間は実用的であり、欠陥を含んだ系の MD が可能になったといえる。下部マントル条件における MgO の自己拡散が MD 計算によって明らかになったことは、MD 計算の、欠陥の性質の研究への有効性を示す。今後、さらに複雑な欠陥を含んだ系の性質が MD 計算によって調べられ、その結果、今まで分からなかった、地球内部物質の塑性変形が明らかになることが期待される。