

分子動力学計算における高速多重極展開法の拡張

○吉井 範行^{1,2}, 安藤 嘉倫¹, 岡崎 進^{2,1}¹名大院工計算セ, ²名大院工

yoshii@ccs.engg.nagoya-u.ac.jp

分子動力学(MD)シミュレーションでは、静電相互作用の計算が大きなウエイトを占める。周期境界条件下でこの静電相互作用を精度良く計算するために、通常、点電荷数 N に対して演算量が $O(N \log N)$ の Particle Mesh Ewald(PME)法が用いられる。しかしながら、PME 法において用いられる高速フーリエ変換は分散型の MPI 並列を行った際に全プロセス間の通信を必要とするため、ノード数の (すなわちプロセス数の) 多い超並列コンピュータでは高い MPI 並列化効率を実現することは容易ではない。超並列環境において静電相互作用を効率的に計算するには、高速多重極展開法 (FMM) が有効である[1]。この方法では、多極子モーメントや局所展開係数をノード間で通信する必要があるが、それらの通信は近隣のノード間で行うものがほとんどである。また、遠方にある多極子モーメントは広い領域でまとめられるため、転送すべき情報量が少なく通信負荷を抑制できる。さらに、相互作用する距離が長いほど大きくまとめて計算するため、全計算量が $O(N)$ に抑えられる。このような特徴から、超並列コンピュータを用いて大規模系の MD 計算を行うためには、今後ますます FMM が重要になると考えられる。我々は、京コンピュータレベルの高並列環境においても高効率で実行可能な、FMM を実装した汎用 MD 計算用ソフトウェア MODYLAS を開発し、ソースコードを web 上に公開した[2]。これを用いて、これまでに 650 万原子からなるウイルスカプシド系の全原子 MD 計算[3]をはじめ、種々の大規模 MD 計算を実施してきた。

しかしながら、FMM を利用した MD 計算の研究例は未だ少ない。そのため、FMM を用いた MD 計算を行う場合に必要となる表式が得られていないことが多い。ここでは、これまでに定式化されていなかったものとして、圧力テンソルを取り上げ、その表式を与える。これにより FMM を用いて Parrinello-Rahman タイプの圧力制御の MD 計算が実行可能となる。

さらに通常の xyz 3 方向への周期境界条件のみならず、 x および y の 2 方向の周期境界条件下での FMM も可能となるように拡張を行った。2 方向のみ周期境界条件を課した場合、Ewald 法では計算負荷が非常に大きくなることが知られているが、ここで示す手法は $O(N)$ が実現されており、大規模系においても高速に実行が可能である。

今回求めた表式によって得られた圧力テンソルと Ewald 法によって求めた厳密な値との差をしてみる。図にテンソルの 9 つの成分について求めた相対誤差の平均を示す。FMM では、多極子展開の展開次数 n を指定する。図ではその n が大きくなるに従い、計算精度が上がっている様子が確認できる。これより、 n を適当に選択することによって、望みの精度で計算可能であることが分かる。

[1] L. F. Greengard, In the Rapid Evaluation of Potential Fields in Particle Systems, MIT Press, Cambridge, MA (1988).

[2] Y. Andoh *et al.*, J. Chem. Theory Comput. **9**, 3201 (2013). <http://www.modylas.org/>にて公開。

[3] Y. Andoh *et al.*, J. Chem. Phys. **141**, 165101 (2014).

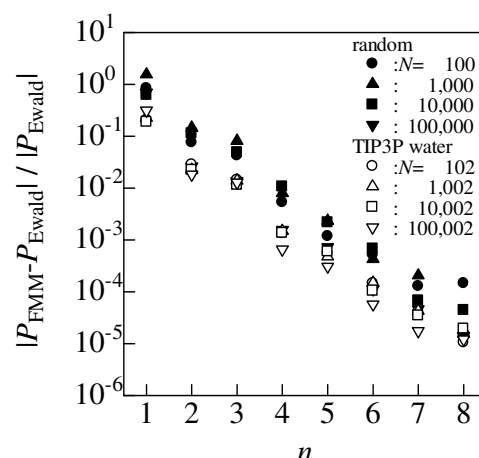


図. FMM より求めた圧力テンソルと Ewald 法によって求めた厳密な値との相対誤差. 9 つの成分の相対誤差の平均値を、多極子展開の次数 n の関数として示す. 基本セル中の点電荷分布として、乱数を用いて生成したもの、および TIP3P モデルの純水系の MD 計算結果から得られたものを用いた. N は点電荷数.