

分子動力学計算における相互作用計算の高速化手法の評価

(金大院・自然科学) 吉田津日門、齋藤大明、川口一朋、長尾秀実

Evaluation of acceleration method of interaction calculation in molecular dynamics calculation

(Kanazawa Univ.) Tsuhito Yoshida, Hiroaki Saito, Kazutomo Kawaguchi, Hidemi Nagao

1 [序]

分子動力学 (MD) 計算は、タンパク質などの生体分子系でのシミュレーションに使われている。しかし、MD 計算は計算量が粒子数の二乗に比例するため、生体分子系の様な大規模系では計算時間が膨大になる。それを解決するためには、計算機の性能を上げる他に、計算プログラムを見直すことでも高速化が可能である。そこで、MD 計算の計算時間の大部分を占めている LJ 相互作用とクーロン相互作用の計算の高速化を行い、それぞれ複数ある高速化手法について計算時間を比較する。本研究では水分子モデルの一つである TIP3P を用いる。TIP3P を用いることで LJ 相互作用、クーロン相互作用の計算ができ、また粒子数を増やすことでタンパク質系の計算と同様な計算量で計算の実行ができる。その結果からタンパク質系のシミュレーションにおいてどのような手法が有効であるか考察する。

2 [方法]

TIP3P を用いて粒子数、カットオフ距離を変化させた場合において各高速化手法の相互作用計算時間を比較する。計算条件は周期境界条件下で密度一定の基本セル中に水分子があるとして、温度は 300K とする。カットオフ距離を変える場合は分子数 256、粒子数を変える場合はカットオフ距離 10Å で計算する。LJ 相互作用の様な短い距離で収束する相互作用計算では、最初にカットオフを行う。しかし、全粒子対についてカットオフ処理をすると、相互作用が明らかに働かない粒子対の距離も求めなければならない。以下にその距離計算の回数を減らす方法を示す。LJ 相互作用の高速化手法は 2 つあり、一定距離内の粒子を数ステップごとに登録する帳簿法と、セルを区切って計算範囲を減らすセルインデックス法がある。

2.1 帳簿法

まず、予めカットオフ距離 (R_c) よりも広い距離 (R_s) 内にいる粒子を登録する。そして登録した粒子に対してのみカットオフ距離と比較する。粒子の登録は数ステップごとに更新をする。粒子登録の更新時間の間隔 (Δt) と R_s の大まかな設定は次の式 (1) で求める [1]。

$$\Delta t \leq \frac{R_s - R_c}{2V_{MAX}} \quad (1)$$

V_{MAX} は粒子の最大速度を表す。

2.2 セルインデックス法

まず、セルの各軸方向にカットオフ (あるいはそれ以下) の距離で小さいセル (サブセル) に区切る。次に各サブセル内にある粒子の数と座標を登録する。そして対象の粒子が登録されているサブセルと隣り合ったサブセル内の粒子との距離を計算し、カットオフ距

離との比較をする。この方法はカットオフ距離がセルの長さの4分の1以上の場合、すべてのサブセルについて粒子間距離を求めなければならないため、カットオフ距離がセルの長さの4分の1以下でなければ効果がない。

2.3 帳簿法・セルインデックス法両方を用いた方法

まず、帳簿法で用いるカットオフ距離よりも広い距離でサブセルに区切り、セルインデックス法と同様の操作を行う。次に、それぞれ区切ったサブセルにおいて、帳簿法を用いて粒子の登録をする。その後は毎ステップ、サブセル内の粒子を更新し、式(1)で求めた時間 Δt ごとに帳簿の更新をする。

2.4 PME(Particle Mesh Ewald) 法

PME 法はクーロン相互作用の高速化手法の一つである。周期境界条件でのクーロン相互作用を計算するには、エwald法を用いる必要がある。エwald法とは、セル内の粒子対は実空間の計算をし、同セルでない粒子対は逆格子空間の計算を行う方法である。そこでさらに逆格子空間の計算を高速フーリエ変換 (FFT) を用いて計算する方法が PME 法である。

3 [結果と考察]

LJ ポテンシャルについての計算結果を示す。カットオフ距離と粒子数について高速化手法を導入していない場合と、帳簿法(以下、手法1)セルインデックス法(手法2)両方を用いた場合(手法3)で計算した図をそれぞれ図1,2に示した。カットオフ距離を変化させた場合と粒子数を変化させた場合でどの方法も変更前と比べて高速化できていることが分かる。図1から、カットオフ距離が大きくなると手法1の方が他の手法より速くなり、さらに大きくなるに連れて手法1と手法2,3との差が大きくなっている。したがってカットオフ距離がセルに対して大きく取らなければならない場合、手法1を用いると良いことが分かる。また、図2から、粒子数が多い場合は手法2を用いると良いことが分かる。クーロンポテンシャルについての高速化手法との比較は当日会場で発表する。

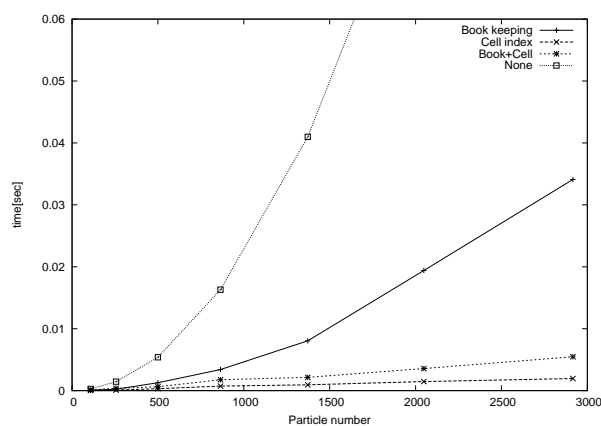
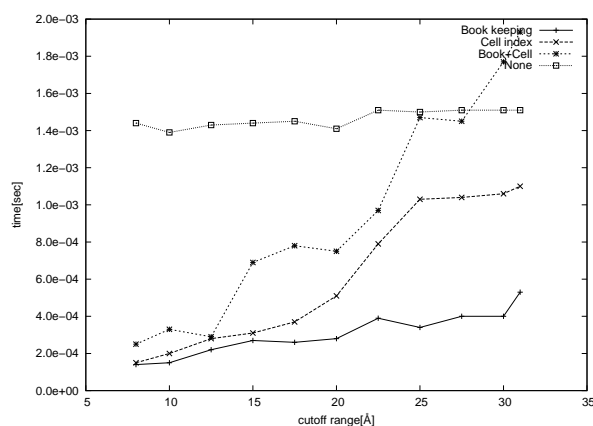


図 1: カットオフ距離に対する 1 ステップあたりの計算時間
図 2: 粒子数に対する 1 ステップあたりの計算時間

4 [参考文献]

[1] H.Watanabe, M.suzuki, and N.Ito “ Efficient Implementations of Molecular Dynamics Simulations for Lennard-Joned Systems ” Progress of Theoretical Physics Vol.126 August 2011 203-235