

異方性のある系に対する高速多重極展開法

(名大院工 計算セ*, 名大院工**) ○吉井範行**, 安藤嘉倫*, 岡崎 進**,*

Fast multipole method for anisotropic systems

(Center for Computational Science, Graduate School of Engineering, Nagoya Univ.*,
Graduate School of Engineering, Nagoya Univ.**)

○Noriyuki Yoshii**, Yoshimichi Andoh*, Susumu Okazaki**,*

【諸言】分子動力学(MD)計算において最も計算負荷の大きな部分は静電相互作用計算である。静電相互作用は、通常 Ewald 法の波数空間部分を高速フーリエ変換(FFT)によって計算する Particle Mesh Ewald(PME)法[1]が広く利用されている。PME 法では、対象系の粒子数を N とすると、FFT を利用することにより演算量を $O(\text{Mog}N)$ に抑えることが可能であり、Ewald 法と比較して効率的に計算できる。しかしながら、超並列コンピュータを用いて大規模系の MD 計算を実施する際には、FFT では通常全ノード間の通信を行うため、高速実行が困難となる。

ノード数が数千～数万におよぶ超並列コンピュータにおいて、静電相互作用を効率的に計算する方法として、高速多重極展開法 (FMM[2]) が有効である。この方法では、ある領域内の電荷が作るポテンシャルは、一つが多極子モーメントや局所展開係数によって表現される。さらに、相互作用する距離が離れるに従ってまとめる領域が大きくなる。これにより演算量を $O(N)$ にまで軽減することができる。また、多極子モーメントや局所展開係数のみを通信すればよいため、通信負荷も小さくて済む。こういった利点から、今後の超並列コンピュータの普及に伴い、FMM はさらに重要性を増すものと考えられる。

我々はこれまで、FMM を実装した汎用の分子動力学計算ソフトウェア MODYLAS を開発し、web 上にてソースコードを公開してきた[3]。また MODYLAS を用いて、これまで 650 万原子からなるウイルスカプシド系の全原子 MD 計算[4]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、現状では FMM を利用した MD 計算の汎用ソフトは MODYLAS の他にはほとんどない。したがって、FMM を用いたときの種々の表式、たとえば (1) 1, 2 次元方向への周期境界条件を課した場合の FMM や (2) レナードジョーンズ相互作用をはじめとした r^{-n} 型の相互作用の表式、(3) 圧力テンソル表式といったものが未開発のままである。そこで、我々は FMM を用いた MD 計算のさらなる普及において不可欠となるこれらの定式化を進めてきた。

【理論】(1) に関しては Ewald 法の考え方を踏襲した。不完全ガンマ関数とその補関数を用いて相互作用関数を分割し、そのうちの減衰の速い補関数の方は実空間で評価し、減衰の遅い関数については 1, 2 次元方向のフーリエ変換を行うことによって

波数の関数として式を得た。(2)については、 r^1 型相互作用が Legendre 多項式を用いて表現できるのと同様に、 r^λ 型相互作用が Gegenbauer 多項式を用いて表現できることを利用した。この Gegenbauer 多項式を、さらに球面調和関数の加法定理を用いて展開することにより、FMM の表式を構築することができる。この方法では、さらに周期境界条件をも考慮することが可能である。(3)に関しては、ポテンシャルの局所展開による表式を、基本セルのパラメータで微分することにより圧力テンソルの表式を得ることができる。

【結果と考察】(1)に関して、周期境界条件を課した基本セル中に、ランダムな粒子配置を発生させたとき、および純水系の MD 計算で得られた分子配置のときの系のポテンシャルエネルギーをそれぞれ計算した。Ewald 法から得られた厳密値との相対誤差を図 1 に示す。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く様子が確認できる。これより、 n を適当に選択することによって、望みの精度で計算が可能であることが分かる。通常の 2 次元周期系の Ewald 法の場合、計算負荷が非常に大きくなることが知られている。ここで示す手法では演算量は $O(N)$ であり、通常の Ewald 法より高速に計算が可能である。

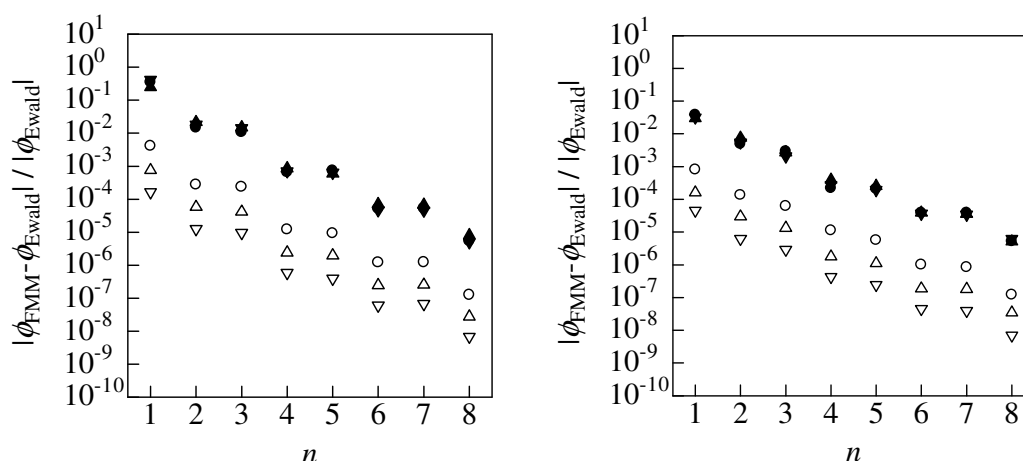


図 1. FMM より求めた 2 および 1 次元方向に周期境界条件がかかった系のポテンシャルエネルギーと Ewald 法によって求めた厳密な値との相対誤差. 多極子展開の展開次数 n の関数として示す. 2 次元 (左図) および 1 次元 (右図) の周期境界条件を課している. 基本セル中の点電荷の配置は、乱数を用いて (filled)、あるいは TIP3P モデルの純水系の MD 計算結果から (open) 作成した. 点電荷数は 100 (●)、1,000 (▲)、10,000 (▼) 程度である.

参考文献

- [1] U. Essmann *et al.*, J. Chem. Phys. **103**, 8577 (1995).
- [2] L. F. Greengard, In The Rapid Evaluation of Potential Fields in Particle Systems, MIT Press, Cambridge, MA (1988).
- [3] Y. Andoh *et al.*, J. Chem. Theory Comput. **9**, 3201 (2013); <http://www.modylas.org/>.
- [4] Y. Andoh *et al.*, J. Chem. Phys. **141**, 165101 (2014).