

異方性の高いシミュレーションセルにおける 高速多重極展開法

¹名大院工・計算セ, ²名大院工, ³分子研

○吉井範行^{1,2}, 安藤嘉倫³, 岡崎 進^{2,1,3}

Fast multipole method for highly anisotropic simulation cells

○Noriyuki Yoshii^{1,2}, Yoshimichi Andoh³, Susumu Okazaki^{2,1,3}

¹ Center for Computational Science, Graduate School of Engineering, Nagoya Univ., Japan

² Graduate School of Engineering, Nagoya Univ., Japan

³ Institute for Molecular Science, Japan

【Abstract】 Fast Multipole Method (FMM) is an order N algorithm for electrostatic interaction calculation. It is suitable for large scale MD calculations including a large number of charges. In this algorithm, the electrostatic potential is calculated using multipole expansions and local expansions. Due to the convergence condition of transformation between these expansions, some geometrical restrictions in charge distribution exist. Therefore, in the conventional MD calculation, the simulation cell was limited to a cube or its similar shapes. In this study, we propose a new method excluding this restriction. So far, the Ewald sum has been executed for the multipole moment of whole simulation cell. In this study, the Ewald sum was executed for the multipole moment of “subcells” of the simulation cell. As a result, it was possible to execute the FMM with highly anisotropic simulation cell without increasing the calculation time.

【はじめに】 近年のコンピュータの大規模並列化に伴って、分子動力学 (MD) 計算の対象系も大規模化の一途をたどっている。大規模化を実現するためには、ボトルネックとなる静電相互作用部の高速化が必須である。従来、周期境界条件が課された系においては particle mesh Ewald(PME)法が広く用いられてきた。PME 法の計算負荷はオーダー $N \log N$ であり高速化がなされている。しかしながら、高速フーリエ変換 (FFT)において必要となる全ノード間通信がボトルネックとなり、高並列環境においては十分な性能を引き出すことが難しい。計算量が少なく、また並列計算との親和性も高い静電相互作用計算の確立を目指して、これまで種々の工夫がなされてきた。その中で、最も早くからオーダー N を実現したのが Greengard と Rokhlin によって提案された高速多重極展開法 (FMM) [1]である。この方法は、提案当初より周期系への適用がなされるとともに、近年においても GPU や高並列コンピュータに合わせた高速化をはじめ、種々の拡張がなされている。我々も独自開発している汎用分子動力学計算ソフト MODYLAS において周期境界条件に対応した FMM を実装し、高並列コンピュータへの最適化を進めている[2,3]。

FMM ではある領域の点電荷をまとめて多極子モーメントで表現する。ポテンシャルを評価する際には、これを評価点の近傍でテイラー展開 (局所展開) しない。この変換を M2L と呼ぶ。この M2L の際に、電荷分布について幾何学的な制約が課される。そのために、立方体から著しく外れた異方性の高い系に対して FMM を適用するのは困難であった。一方、MD 計算では膜系や細孔系といった異方性の高い系のシミ

ュレーションは決して珍しくない。そこで本研究では異方性の高い基本セルの場合においても、著しい計算負荷の増大や計算精度の低下といった問題が生じない、新しい FMM を提案する。

【異方性が高い系の FMM】 M2L において、多極子モーメントを持つドメイン A と局所展開係数を求めるドメイン B のそれぞれの外接球を考える。それらの半径がいずれも a 、またドメイン A と B との間の距離を ρ とする。このとき M2L によって得られる局所展開が収束するためには、 $\rho > (c+1)a$ という条件、つまりドメイン A と B が十分に離れている (well separated) 条件を満たさなければならない(ただし $c > 1$) [1]。ドメインが立方体に近い形状の場合、この条件は第二隣接ドメインで満足される。一方、平板や角柱といった異方性の高い形状場合、ドメインの長辺方向は第二隣接ドメインで満たされるが、短辺方向についてはいくつも遠方のドメインまで満たさなくなる。このように条件を満たさない場合は、より小さなドメインを用いて多数の M2L 計算を行わねばならず、計算負荷が大幅に増加してしまう。

本研究では、異方性の高い系においても効率的に M2L を実行するために、ドメインをできるだけ立方体に近い形状で行うように工夫した。従来のように基本セル内の多極子モーメントを一つにしてしまうのではなく、いくつかの立方体状のサブセルに分ける。そして複数のサブセルの多極子モーメントについてそれぞれ Ewald 和を計算する。これにより well separated 条件を満たす M2L を行いつつ、サブセル小さなドメインの M2L 計算を多数行うことを回避し、高い計算効率を実現した。

今、基本セル内がサブセルに分割されており、局所展開係数を求めたいサブセルの中心に原点があるしよう。そこからの位置が $\rho_{\mathbf{v}}$ の別のサブセル \mathbf{v} に次数 η オーダー λ の多極子モーメント $M_{\eta}^{\lambda}(\mathbf{v})$ があるとす。このサブセル \mathbf{v} および位置 \mathbf{n} にあるイメージセル中の同一のサブセルが原点に作る局所展開係数 L_j^k は、球面調和関数 $Y_{\eta+j}^{\lambda-k}(\widehat{\mathbf{n}+\rho_{\mathbf{v}}})$ を用いて、

$$L_j^k = \sum_{\eta=0}^p \sum_{\lambda=-\eta}^{\eta} T^{MLk,\lambda}_{j,\eta} \sum_{\mathbf{n}} \sum_{\mathbf{v}} M_{\eta}^{\lambda}(\mathbf{v}) \frac{Y_{\eta+j}^{\lambda-k}(\widehat{\mathbf{n}+\rho_{\mathbf{v}}})}{|\mathbf{n}+\rho_{\mathbf{v}}|^{\eta+j+1}}, \quad (1)$$

と表せる。式(1)の主要部 $S_{j,\eta}^{k,\lambda} = \sum_{\mathbf{n}} \sum_{\mathbf{v}} M_{\eta}^{\lambda}(\mathbf{v}) \frac{Y_{\eta+j}^{\lambda-k}(\widehat{\mathbf{n}+\rho_{\mathbf{v}}})}{|\mathbf{n}+\rho_{\mathbf{v}}|^{\eta+j+1}}$ は、ガンマ関数 $\Gamma(\alpha)$ および第二種不完全ガンマ関数 $\Gamma(\alpha, x)$ を用いて、

$$S_{j,\eta}^{k,\lambda} = \sum_{\mathbf{n}} \sum_{\mathbf{v}} M_{\eta}^{\lambda}(\mathbf{v}) \frac{Y_{\eta+j}^{\lambda-k}(\widehat{\mathbf{n}+\rho_{\mathbf{v}}}) \Gamma\left(\eta+j+\frac{1}{2}, \kappa^2 |\mathbf{n}+\rho_{\mathbf{v}}|^2\right)}{|\mathbf{n}+\rho_{\mathbf{v}}|^{\eta+j+1} \Gamma\left(\eta+j+\frac{1}{2}\right)} \\ + \sum_{k \neq 0} \sum_{\mathbf{v}} M_{\eta}^{\lambda}(\mathbf{v}) \frac{\pi^{\frac{3}{2}} (-i)^{\eta+j}}{\Gamma\left(\eta+j+\frac{1}{2}\right)} Y_{\eta+j}^{\lambda-k}(\widehat{\mathbf{k}}) |\mathbf{k}|^{\eta+j-2} e^{\frac{|\mathbf{k}|^2}{4\kappa^2} e^{i\mathbf{k} \cdot \rho_{\mathbf{v}}}} - \frac{2\kappa}{\sqrt{\pi}} M_{\eta}^{\lambda}(\mathbf{0}) \delta_{\eta+j,0} \delta_{\lambda-k,0} \quad (2)$$

と表せる。右辺第一項は実空間、第二は波数空間からの寄与、第三項は self term である。この式(2)を用いてイメージセルを含めた周囲のサブセルからの寄与を取り入れることにより、従来では不可能であった異方性の高い系についての効率的な FMM 計算が行えるようになる。

【参考文献】

- [1] L. F. Greengard, *In the Rapid Evaluation of Potential Fields in Particle Systems*, MIT Press, MA (1988).
- [2] Y. Andoh, et al., *J. Chem. Theory Comput.* **9**, 3201 (2013).
- [3] N. Yoshii, et al, *J. Comput. Chem.* **39**, 1192 (2018).