

4Pa036 最小二乗型近似を用いた高速多重極展開法(FMM)の 能率的精度向上～FMM-LMS の開発

(豊橋技科大工)・○野中尋史、関野秀男

[はじめに]

高速多重極展開法(以下 FMM)はクーロン力計算の高速近似法として、古典 MD や量子化学計算などで使用されている。しかし、長時間の MD シミュレーションの場合、保存量の保存が悪くなる。これを解決するには、近似度をあげるしかないが、現在のところ、方法としては、直接計算部分を増やすか、多重極展開ないしは局所展開の展開次数を上げるかの二つしかない。これらの方法では計算時間が大幅に増えるため、効率が低下してしまう。本研究では、高精度高能率な MD シミュレーションを行うために FMM の局所展開に従来の Taylor 展開に換えて、最小二乗型近似多項式を用いた新しいアルゴリズム「FMM-LMS(FMM-Least Mean Squares)」を開発したので報告する。本手法は膨大なシミュレーションステップを要する大規模生体分子を長時間シミュレーションする場合、特に効果的であることが期待される。なお、今回は cartesian-FMM に適用したが、spherical-harmonics を用いた FMM に対しても同様に応用できる。

[理論とアルゴリズム]

今、任意の関数 $f(x,y,z)$ を関数列 $\{\phi(x,y,z)\}$ の線形和 $\bar{f}(x,y,z)$ で近似することを考える。目的関数と近似多項式の領域 D における誤差を L_2 測度ではかると、

$$\iiint_D (f(x,y,z) - \bar{f}(x,y,z))^2 dx dy dz$$

変分条件より、上式を最小化する関数列の係数ベクトル $\mathbf{c}$ に関する以下の正規方程式が導かれる

$$\mathbf{A}\mathbf{c} = \mathbf{b}$$

ここで、 $\mathbf{A}$ は gram 行列で、その ij 要素 $\mathbf{A}_{ij}$ と定数ベクトル $\mathbf{b}$ の i 要素 $\mathbf{b}_i$ は下式で表される。

$$\mathbf{A}_{ij} = \iiint_D \phi_i(x,y,z)\phi_j(x,y,z) dx dy dz, \quad \mathbf{b}_i = \iiint_D f(x,y,z)\phi_i(x,y,z) dx dy dz$$

本研究では $\bar{f}(x,y,z)$ を多項式としたもの、すなわち、 L_2 誤差ノルムを最小化した最小二乗型多項式を FMM の局所展開に用いることで、従来使用されてきた Taylor 展開と比較して、精度を向上させる。

ここで、gram 行列の導出は FMM における各レベル基本セル寸法のみ依存するため、各レベルで 1 回計算するだけでよい。また、定数ベクトルは、シミュレーションステップに依存する多重極係数部分とまったく依存しない部分との掛け算で表現されるので、後者はシミュレーション前に 1 回計算するだけでよい。このため、各シミュレーションステップにおける計算時間は従来法と変わらない。

[計算結果]

本手法により計算した例を示す。精度は従来法の 2 倍程よい。また、前処理で計算する積分計算部分は負荷が重いが、シミュレーションステップに依存する部分のみを見ると従来法とほぼ同じである。このため、シミュレーションステップが長いと非常に効果的となってくる。なお実際の、MD シミュレーションに適用した場合の詳細は当日に発表する。

計算例 1) ランダムに電荷、位置を分布させた場合の静電ポテンシャルの計算 (1000 原子)

表 1 計算精度

エネルギー単位は原子単位。ただし、カッコ内の数値は厳密に計算した場合と比較したときの相対誤差(%)を示す

直接計算	337454.880564
FMM-局所 Talor 展開(従来法)	337517.129733(0.000184)
FMM-局所最小二乗型展開(本手法)	337484.309418(0.000087)

表 2 計算速度

実行環境は PentiumIII 766MHz、メモリ 192MB、C で作成、計算時間は C 言語の clock() 関数で測定(単位秒)

FMM-局所 Taylor 展開(従来法)	※0(前処理) + 0.560000(シミュレーション部)
FMM-局所最小二乗型展開(本手法)	48.300000(前処理) + 0.471000(シミュレーション部)

※clock() では測定不能、ほぼ無視できる計算時間

計算例 2) デンドリマー第 5 世代 L5-2bf (1120 原子)

表 3 計算精度

エネルギー単位は原子単位。ただし、カッコ内の数値は厳密に計算した場合と比較したときの相対誤差(%)を示す

直接計算	-47.852184
FMM-局所 Taylor 展開(従来法)	-47.835422 (0.0188)
FMM-局所最小二乗型展開(本手法)	-47.846655 (0.0087)

表 4 計算速度

実行環境は PentiumIII 766MHz、メモリ 192MB、C で作成、計算時間は C 言語の clock() 関数で測定(単位秒)

FMM-局所 Taylor 展開(従来法)	※0(前処理) +0.400000(シミュレーション部)
FMM-局所最小二乗型展開(本手法)	48.410000(前処理) +0.310000(シミュレーション部)

※clock() では測定不能、ほぼ無視できる計算時間

本研究は科学技術振興事業団の計算科学技術活用型特定研究開発推進事業(ACT-JST)(研究開発課題「DNA のナノ領域ダイナミクス
の第一原理的解析」)の援助を受けて行われました