

## 直鎖高分子の並列分子動力学法シミュレーション

林 亮子 堀口 進

北陸先端科学技術大学院大学 情報科学研究科

分子動力学法を用いて直鎖高分子のシミュレーションを行なうためには、単原子分子で用いるような  $N$  体間相互作用の計算と、直鎖に沿った相互作用の計算の両方を効率良く行なう必要がある。本研究では、直鎖に沿った相互作用に適する分子均等分割法と  $N$  体間相互作用の計算に適するドメイン分割法について議論する。分子均等分割法とドメイン分割法を超並列計算機 CM-5 上に実装し、並列シミュレーションの処理性能について検討した。 $N$  体間相互作用は  $O(N^2)$  であるため、ドメイン分割法の方が分子均等法よりも分子数の増加に対して計算時間の増加を小さくすることができた。しかしこの並列化手法は、直鎖に沿った相互作用の計算時間が増加し、 $N$  体間相互作用と同程度の計算時間が必要になる。そのため、非常に長い直鎖高分子を扱う場合は、直鎖に沿った相互作用の計算手法を検討する必要がある。

## Parallel Computer Simulations of Polymers by Molecular Dynamics

Ryoko Hayashi Susumu Horiguchi

School of Information Science  
Japan Advanced Institute of Science and Technology

Parallel computer simulations of polymers by molecular dynamics (MD) are discussed by implementing them on a parallel computer. Polymer simulations requires multi-particle interactions as well as  $N$ -body interactions. Here we have implemented parallel polymer simulations using both of the domain decomposition method and the molecule distribution on a parallel computer, CM-5. The domain decomposition method achieves excellent parallel performance for  $N$ -body interaction. The multi-particle interactions, however, makes parallel simulation slow for long polymers.

### 1 はじめに

分子動力学法 [1](MD) は、物理や化学、材料設計の分野で重要性を増しているコンピュータ・シミュレーションの手法である。計算機の高速度化ともなつて MD は種々の分子を扱うことが可能となり、電氣的に中性な単原子分子だけで

はなく、水分子や生体高分子のシミュレーションも行なわれている。特に超並列計算機の発達によって、蛋白質のような巨大分子まで扱うことが期待されている。本論文では、3次元空間中の直鎖高分子を扱う超並列 MD シミュレーションについて報告する。

単原子分子を扱う MD の並列化に際して、Tamayo[2] らは 3 種類の並列化手法を実装、比較し、計算する空間を分割してプロセッシングエレメント (PE) に割り当てるドメイン分割法が有効であることを示した。Beazley, Lomdahl[3] は 1024PE の超並列計算機上で、ドメイン分割法を用いて  $6.7 \times 10^7$  分子を計算している。林と堀口 [4] はドメイン分割法においてドメインの PE への割り当て方法を検討し、超並列計算機を用いた大規模シミュレーションでは立方体のドメインを 3 次元メッシュの結合網に割り当てる方法が最適であることを示した。

直鎖高分子 [5] は、巨大分子と単原子分子の中間的なモデルと見なすことができるが、この直鎖高分子を扱う MD の並列化に関する研究が近年注目されている。Esselink[6] らは直鎖に沿った相互作用を計算する手続きをドメイン分割法に組みこむ方法を示し、50 モノマーを結合した 200 分子の直鎖高分子シミュレーションを行なった。Brown[7] らはドメイン分割法を用いて 100 モノマーを結合した 640 分子の直鎖高分子シミュレーションを行なった。しかし、これらの研究では相互作用の計算量や PE 数の拡張性について十分に検討されていない。

本稿では直鎖高分子の並列 MD を超並列計算機 CM-5[8] 上に実装し、分子均等分割法やドメイン分割法の並列化手法の有効性について議論する。本論文の構成は以下の通りである。第 2 節では本論文で用いた直鎖高分子モデルを示す。第 3 節では直鎖高分子の分子動力学法を並列化する手法について述べる。第 4 節では 2 つの並列化手法による並列 MD プログラムを並列計算機 CM-5 上に実装した結果を示し、実行時間について議論する。第 5 節はまとめである。

## 2 直鎖高分子モデル

直鎖高分子はモノマーが直線状に連なった高分子である。本研究では、直鎖高分子として Rigby-Roe モデル [5] を用いる。これは、アルカンに適用するモデルであり、 $\text{CH}_2$  および  $\text{CH}_3$  を表す球体のモノマーがばねで結合されたものである。Rigby-Roe モデルの概略を図 1 に示す。相互作

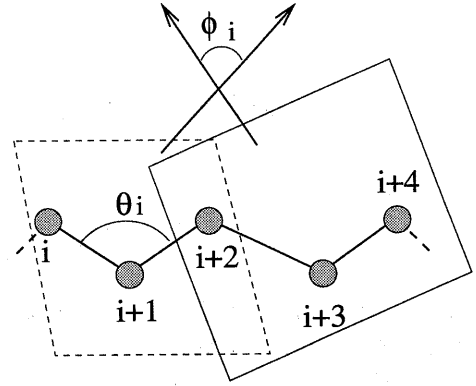


図 1: Rigby-Roe モデルの概略

用は以下に示す 4 つの相互作用の総和である。

1. 2 体力 (C-C 結合ポテンシャル)

$$E_{b,i} = \frac{1}{2} k_b (l_i - l_0)^2 \quad (1)$$

$l_i$  は結合の長さであり、 $l_0$  は安定な結合の長さである。

2. 3 体力 (C-C-C 結合角ポテンシャル)

$$E_{\theta,i} = \frac{1}{2} k_{\theta} (\cos \theta_i - \cos \theta_0)^2 \quad (2)$$

$\theta_i$  は結合角であり、 $\theta_0$  は安定な結合角である。

3. 4 体力 (ねじれポテンシャル)

$$E_{\phi,i} = k_{\phi} \sum_{n=0}^5 a_n \cos^n \phi_i \quad (3)$$

$\phi_i$  はねじれの角度である。

4. N 体力 (レナード・ジョーンズポテンシャル)

$$E_{nb,ij} = 4\epsilon \left[ \left( \frac{r^*}{r_{ij}} \right)^{12} - \left( \frac{r^*}{r_{ij}} \right)^6 \right], \quad r_{ij} \leq r_c = 1.5r^* \quad (4)$$

$$E_{nb,ij} = 0.0, \quad r_{ij} > r_c \quad (5)$$

$r_{ij}$  はモノマー  $i$  とモノマー  $j$  の距離であり、別の分子に属するモノマー間の全組みあわ

せと同一分子に属する3つ以上のモノマーを隔てたモノマーの組みあわせ(図1中の*i*と*i+4*以降のモノマーの組みあわせ)に適用する。

相互作用の表式中の各パラメータには[5]の数値を用いる。以後上記1., 2., 3.をあわせて結合の相互作用と称する。*N*モノマーを扱うMDシミュレーションでは、結合の相互作用の計算複雑度は $O(N)$ である。

### 3 並列化手法

#### 3.1 分子均等分割法

分子均等分割法は直鎖分子を同数ずつPEに割り当てる。今回行なった実装では、*N*体力を計算する際に全PE間でデータを交換する。分子均等分割法では、結合の相互作用はPEに割り当てたモノマーの位置データのみによって計算できる。そのため結合の相互作用の計算について最適な並列化手法である。しかし、*N*体力の計算では、すべての組みあわせのモノマー間距離を計算するので、計算複雑度は $O(N^2)$ である。そのために、PE数およびモノマー数が大きくなると、*N*体力を計算する手続きが処理時間を増大させる。

#### 3.2 ドメイン分割法

ドメイン分割法は、シミュレーションを行なう空間を分割してPEに割り当てる並列化手法である。ドメイン分割法の概略を図2に示す。計算する空間は、*N*体力の力の切断距離 $r_c$ (図2中のcut-off distance)程度の大きさを持つ「セル」に分割し、複数のまとまったセルでドメインを構成する。*N*体力を計算する際に、PE間でモノマーのデータを交換する。このとき各PEは、ドメインが隣接するPEとのみ通信すればよく、さらにドメイン表面のセルのデータのみを交換すればよい。そのため、ドメイン分割法は、*N*体力を効率良く計算することができる。本研究では、図3に示した四角柱ドメイン[4]を使用する。

初期条件では、同一分子に属するモノマーは同じPEに割りあてられる。しかし、タイムス

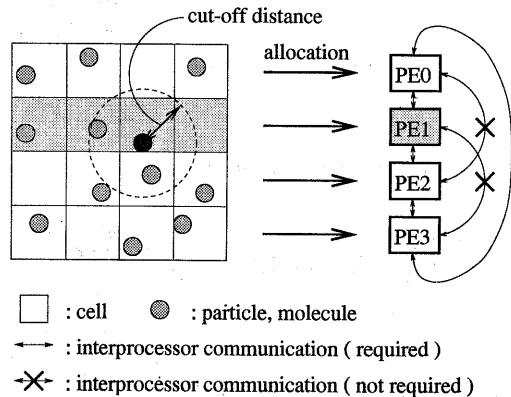


図2: ドメイン分割法の概略

テップとともにモノマーは移動し、一般には複数のPEが同一分子に属するモノマーを持つ。そのため結合の相互作用を計算する際に、連続するモノマーを探す必要がある。ここでは、分子のデータとして分子の番号とモノマーの順番を加えた。各PEは自分の持つ分子の番号リストをつくり、分子の位置データを交換するPE間通信の際に、自分の持つ分子に属する全モノマーのデータを取得する。結合の相互作用の計算では、最初に自分の持つ分子に属するモノマーを探して一覧表をつくり、必要なデータを参照する。

## 4 性能評価

### 4.1 並列計算機環境

本論文では、128PEの並列計算機CM-5[8]上の実装を行なった。CM-5はPEにSPARC microprocessor(浮動小数点演算ユニット、33MHz, 22MIPS, 4.2MFLOPS)を使用し、1PEに4基のベクトルユニット(1基あたり16MHz, 32MFLOPS)を持つ分散メモリ型計算機である。結合網はfat treeであり、各PEはtreeの葉にあたる。そのため、任意の2PE間で直接通信することができる。ここではFORTRANの並列拡張言語CM FortranにCMMDメッセージ通信ライブラリを併用し、MIMD型処理を行なった。

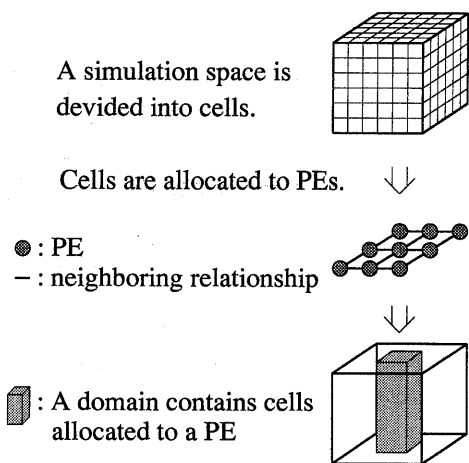


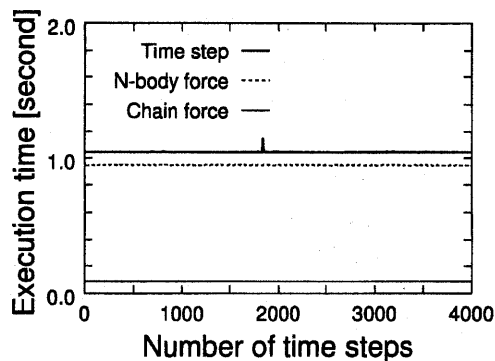
図 3: 四角柱ドメインの概略

## 4.2 密度変化と処理時間

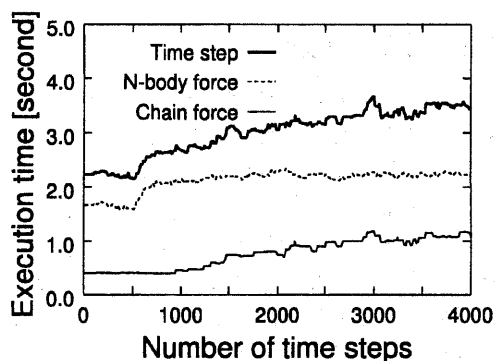
直鎖高分子の MD では、初期条件を分子の密度が非常に小さい状態に設定し、位置の補正を加えて目的の密度を持つ状態をつくる。分子均等分割法とドメイン分割法で、密度変化に対する処理時間変化を調べた結果を図 4 に示す。以下の図中で Time step は 1 タイムステップの処理時間、N-body force は N 体力の計算時間、Chain force は結合の相互作用の計算時間である。分子均等分割法では、計算量および通信量は密度に依存しないので、密度変化に対して処理時間の変化はほとんどない。実際に、図 4(a) によると処理時間の変化は非常に小さい。ドメイン分割法では計算量および通信量は密度に依存するので、図 4(b) にみられるように、密度変化に対して処理時間は変化する。

## 4.3 分子の数と処理時間

次に、使用 PE 数および分子の長さを固定し、分子の数を増加させた場合の実行時間の変化を図 5 に示す。以下の図中で Chain distribution は分子均等分割法、Domain decomposition はドメイン分割法の 1 タイムステップの処理時間である。ドメイン分割法では線形的に実行時間が増大するのに比べて、分子均等分割法では  $O(N^2)$



(a) 分子均等分割法



(b) ドメイン分割法

図 4: 直鎖高分子 MD シミュレーションの CM-5 上での実行時間 (1 分子 8 モノマー、36 分子、9PE 使用、無次元化温度 2.53、500 タイムステップから 3500 タイムステップで密度を 0.256 から 0.636 に補正)

的に実行時間が増大する。

## 4.4 使用 PE 数と処理時間

1PE あたりの分子の数を固定して、使用 PE 数と 1 タイムステップの実行時間の関係を調べた。結果を図 6 に示す。1PE あたりの計算量は変化しないので、理想的には使用 PE 数によらず実行時間が一定になる。ドメイン分割法では使用 PE 数増加に対して実行時間はほとんど一定である。分子均等分割法では、全体のモノマー数が増加するため、実行時間が増加する。

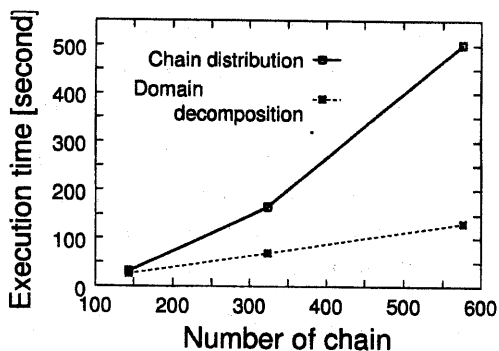


図 5: 分子の数を変化させた場合の実行時間変化 (1分子 64 モノマー、36PE 使用、無次元化温度 2.53、密度 0.256)

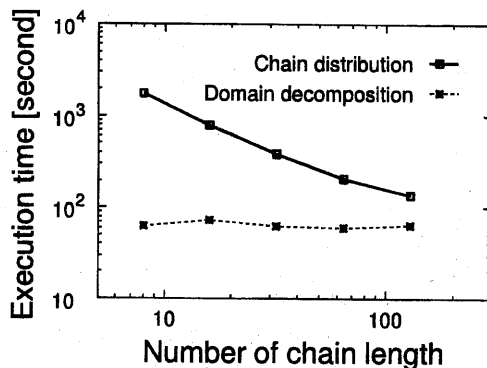


図 7: 分子の長さを変化させた場合の実行時間変化 (64PE 使用、無次元化温度 2.53、密度 0.256、全モノマー数を 32768 モノマーに固定)

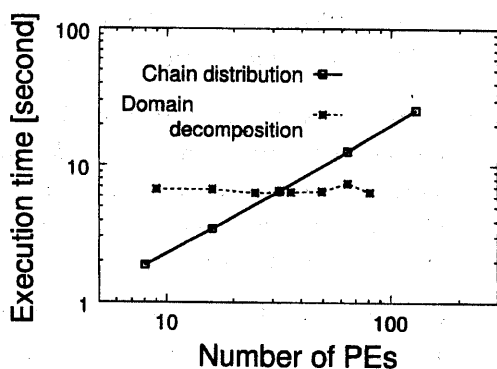


図 6: 使用 PE 数を変化させた場合の実行時間変化 (1分子 16 モノマー、無次元化温度 2.53、密度 0.256、1PE の持つ分子を 4 分子に固定)

#### 4.5 分子の長さ と 処理時間

全モノマー数を固定し、直鎖の長さが 1 タイムステップの処理時間に与える影響を調べた。結果を図 7 に示す。分子均等分割法プログラムでは、相互作用を分子ごとにベクトル化する。そのため、直鎖が長くなるとベクトル長を大きくでき、処理時間を削減することができる。それに対してドメイン分割法では、直鎖の長さは 1 タイムステップの処理時間にほとんど影響しない。

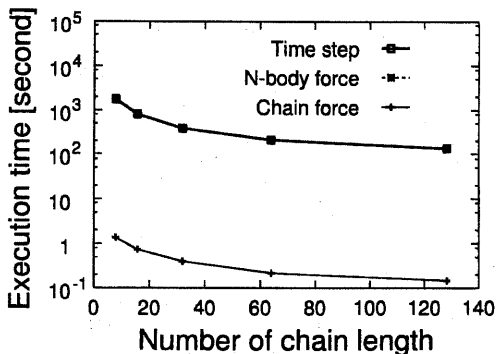
直鎖の長さを変化させた場合について、さらに実行時間の内訳を図 8 に示す。図 8(a) によると、分子均等分割法では N 体力の計算時間と結

合の相互作用の計算時間は、ともに直鎖の長さが増加するとともに減少している。分子均等分割法では結合の相互作用計算時間を効率良く計算することができ、特に 128 モノマーの場合は 0.2 秒程度で計算できる。それに対してドメイン分割法では、128 モノマーの場合に結合の相互作用計算時間は 30 秒程度であり、N 体力の計算時間と同程度である。ドメイン分割法を使用した場合、結合の相互作用計算時間は、分子均等分割法を使用した場合の約 100 倍に相当し、理想的な計算時間よりも大幅に計算時間を必要とする。

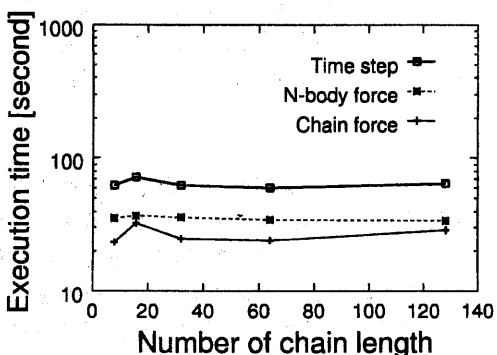
一般に直鎖の長さを大きくすると、扱う直鎖分子の数も大きくする必要がある。そのため、非常に長い直鎖高分子を扱う場合には、結合の相互作用の計算時間削減を考慮する必要がある。

#### 5 おわりに

本稿では、直鎖高分子を扱う並列 MD シミュレーションを 2 つの手法により実装し、実行時間を比較した。その結果、結合の相互作用の計算が全体の実行時間を増大させていることがわかった。直鎖高分子の並列 MD シミュレーションでは、N 体力を効率良く計算する手法だけではなく、結合の相互作用を効率良く計算する手



(a) 分子均等分割法



(b) ドメイン分割法

図 8: 分子の長さを変化させた場合の実行時間の内訳 (64PE 使用、無次元化温度 2.53、密度 0.256、全モノマー数を 32768 モノマーに固定)

法を組みあわせる必要がある。

今後は 1. 分子均等分割法において N 体力計算の効率改善、2. ドメイン分割法において結合の相互作用計算の効率改善という 2 つの側面から直鎖高分子の MD プログラムを改良する予定である。

## 参考文献

- [1] D. W. Heermann, (小澤哲、篠嶋妥 訳)、シミュレーション物理学、シュプリンガー・フェアラーク東京、1990
- [2] P. Tamayo, J. P. Mesirov and B. M.

Boghosian, *Parallel Approaches to Short Range Molecular Dynamics Simulations*, Proceedings of Supercomputing 91(1991).

- [3] D. M. Beazley and P. S. Lomdahl, *Message-passing multi-cell molecular dynamics on the Connection Machine 5*, Parallel Computing 20(1994)173-195.
- [4] R. Hayashi and S. Horiguchi, *Domain decomposition scheme for parallel molecular dynamics simulation*, Proceedings of HPC Asia '97 (1997), to appear
- [5] D. Rigby and R. -J. Roe, *Molecular dynamics simulation of polymer liquid and glass. 1. Glass transition*, J. Chem. Phys., Vol.87, No.12 (1987) 7285-7292
- [6] K. Esselink and P. A. J. Hilbers, *Efficient Parallel Implementation of Molecular Dynamics on a Toroidal Network. Part II. Multi-particle Potentials*, Journal of Computational physics, Vol.106,(1993) 108-114
- [7] D. Brown, J. H. R. Clarke, M. Okuda and T. Yamazaki, *A domain decomposition parallel processing algorithm for molecular dynamics simulations of polymers*, Computer Physics Communications, 83(1994)1-13.
- [8] *Connection Machine CM-5 Technical Summary*, Thinking Machines Corporation, November 1992