

2次元 Particle-mesh Ewald 法の開発

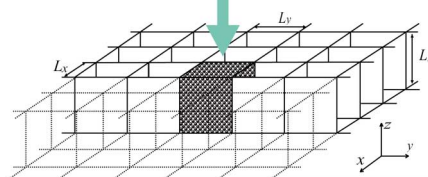
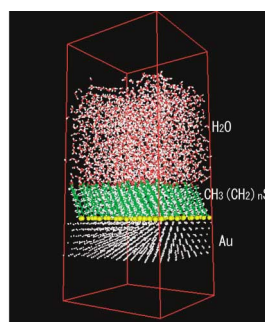
分子シミュレーション技術は、材料設計や生体高分子の分子挙動解明等において、実験からは得ることが困難な情報を提供してくれる。この分子シミュレーションの計算過程において、静電相互作用の計算は、全計算時間の95%以上を占め、かつその計算精度がシミュレーション全体の信憑性を左右する。そのため、この静電相互作用を高速・高精度に計算する事が、ナノ構造体や生体高分子系において、シミュレーションが真に役立つためには不可欠な課題となっている。

この様な中、液体や固体のように空間的等方性を持った系における静電相互作用は、3次元 Particle-mesh Ewald (PME) 法などの開発・普及により、精度を落とすことなく高速に求めることができるようになった。しかしながら、液晶、生体高分子膜、表面などのように空間的異方性を持った系(2次元周期境界条件を持った3次元系、又は擬2次元系と呼ばれている(図))における静電相互作用の計算は、四半世紀以上にわたる計算手法の開発にもかかわらず、計算量(演算回数)が N^2 (N は荷電粒子数)に比例する点を解決するには至らなかった。そのため、この分野における分子シミュレーションの応用研究が滞る原因になっていた。

本研究では、上記擬2次元系における静電相互作用を高速・高精度に計算するアルゴリズム(2次元PME法)を開発し、多くの汎用分子シミュレーションプログラムに簡単に組み込めるライブラリを構築した。

この2次元PME法の画期的な点は、静電相互作用が $N \log N$ に比例する計算量で計算できる点にある。2次元PME法では、従来の2次元Ewald法と同様に、全相互作用を実空間からの寄与と逆格子空間からの寄与に分けて計算するが、この逆格子空間における格子和の計算において、スプライン補間・フーリエ変換・フーリエ積分を組み合わせることにより、従来法と同精度の計算に必要な格子点数を減し計算量を削減することに成功した。そして、この逆格子空間の計算の高速化により、全相互作用計算における実空間の寄与を相対的に小さくでき、静電相互作用が逆格子空間の格子和の計算量 $N \log N$ に比例する計算量で求めることができるようになる。この N^2 から $N \log N$ のオーダーへの計算量削減の効果は、 $N = 3,000$ の系では、数百倍の計算の高速化につながる(表)。よって、この2次元PME法により、従来にはない大規模な高精度分子シミュレーションが実現可能となり、応用研究が加速されることが期待される。

一方、このライブラリは、AMBER、GROMACS、NAMDなどの世界中で使われている多くの汎用分子シミュレーションプログラムに容易に組み込むことができるよう、インターフェイスのモジュール化と入出力データ構造の簡素化を図っている。このライブラリが、多くのユーザーに普及することを期待し、グリッド研究センターのWebページにおいて、GPLで公開している。



	系 1	系 2	系 3
荷電粒子数[N] (個)	2,928	2,955	2,817
$L_x = L_y$ (Å)	32.15	22.29	46.35
L_z (Å)	32.15	66.87	15.45
従来方法 (秒)	1098.29	1455.58	1828.77
2次元PME法 (秒)	2.38	6.52	2.86
高速化率 (倍)	461.5	223.2	639.4

a) 力の最大誤差が $0.01 \text{ kcal mol}^{-1} \text{ \AA}^{-1}$ 以内とした場合の Compaq Alpha Station XP1000 (Alpha21264 667MHz) での最速値。

表 従来方法と2次元PME法による擬2次元系の静電相互作用計算時間^{a)}

図(上) 自己組織化膜(アルカンチオール)のシミュレーション基本単位の例
(下) 擬2次元系(x軸およびy軸方向へ周期性を持ち、かつz軸方向は周期性を持たない3次元系)



かわたまさあき
川田正晃
m.kawata@aist.go.jp
グリッド研究センター

関連情報

- <http://unit.aist.go.jp/grid/>
- m.kawata, et al., J. Chem. Phys., vol.116, p.3430 (2002)、及びその参考文献。
- m.kawata and U. Nagashima, Tech. Proc. of the 2003 Nanotechnology Conference and Trade Show, vol.2, p.554(2003).