

## セル分割によるマルチスケール分子動力学計算プログラムの開発とマルチプロセスによる高速化

○三浦隆治<sup>1</sup>、坪井秀行<sup>1</sup>、古山通久<sup>1</sup>、畠山望<sup>1</sup>、遠藤明<sup>1</sup>、  
高羽洋充<sup>1</sup>、久保百司<sup>1</sup>、Del Carpio Carlos<sup>1</sup>、宮本明<sup>2,1</sup>

<sup>1</sup>東北大学大学院工学研究科応用化学専攻

(〒980-8579 仙台市青葉区荒巻字青葉 6-6-11-1302)

<sup>2</sup>東北大学未来科学技術共同研究センター

(〒980-8579 宮城県仙台市青葉区荒巻字青葉 6-6-10)

### 【緒言】

分子動力学法は分子シミュレーション手法の中でも特に大規模な系で原子分子レベルでの動的挙動を解析することが可能であり、各方面に応用が進められているが、実験結果と直接比較できるような計算を行うためには、更なる系の大規模化と計算速度の向上が求められている。しかしながら、現在一般に使用されているコンピュータでは記憶容量等の問題から直接的な系の大規模化は上限に近づいている。また、シリコンベースの半導体によるプロセッサ速度の向上も近年頭打ちとなりつつあり、今後は複数のプロセッサによる並列処理が計算速度の向上に不可欠となってくるものと思われる。そこで本研究では、従来の分子動力学計算プログラムをもとに、巨大な計算セルを複数の小さなセルに分割して個別に計算するプログラムを開発したほか、デュアルコアまたはデュアルプロセッサシステムを想定した計算プロセスの二重化を行った。

### 【方法】

本研究の開発ベースとして、これまで当研究室で開発してきた分子動力学計算プログラム New-RYUDO を用いた。

巨大な系を複数のセルに分割して計算する方法としては、個々のセルを New-RYUDO ベースの専用プログラムで計算しつつ、全体を制御するためのプログラムを別途作成した。また各セルの計算においては、隣のセルの原子を固定原子として参照するようにして、セル間の相互作用を考慮した。

デュアルプロセスによる高速化については、実際に計算ステップを進めるループに入る直前に計算プログラムの分身である子プロセスを生成し、プロセス間通信技術を用いて計算コストの高い部分を親プロセスと子プロセスで分担する方法を導入した。ここで実際に分担するのは、各原子間ポテンシャルによるエネルギーおよび力の計算を行う部分とし、そのほか各原子運動の計算や温度制御、圧力制御などは、すべて親プロセス側でのみ処理することとした。

### 【結果】

各計算手法の動作確認および計算速度の検証用として、ここでは Na-ZSM5 型ゼオライトの完全イオンモデルを用いた。

図 1 および図 2 は、複数セルに分割して計算する方法の動作確認を行った結果を示す。図 1 および図 2 のセルは上下で接しており、水平方向にはそれぞれの複製が接するようにした。各セルでは 1 回当たり 10step の計算を行い、これを制御プログ

ラムから交互に 1,000 回呼び出すことで、合計 10,000step の計算を行った。ここで 1step は 0.5[fs]とした。温度制御は 10step 計算後に速度スケージングで 1 回だけ実施され、10step の平均温度が 300[K]になるよう設定した。各セルはいずれも初期構造をよく維持しており、複数セルによる計算が正常に実行できたといえる。これらのセルには軸長が等しい以外の制約が無いため、全く異なるモデルや、さらに多数のセルを追加して、より複雑かつ大規模な系を計算可能である。

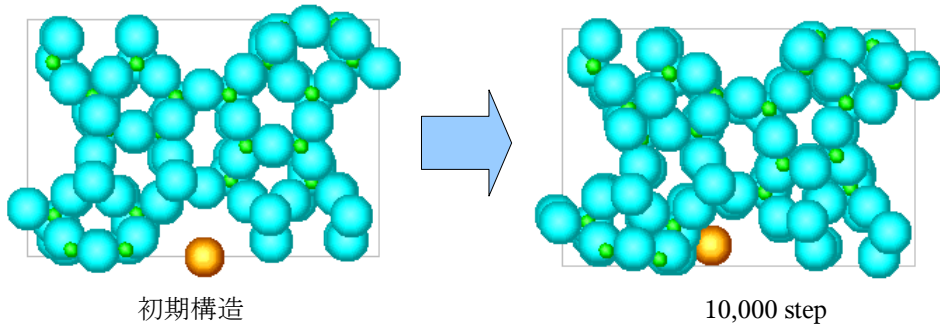


図1 複数セル計算における第1セル

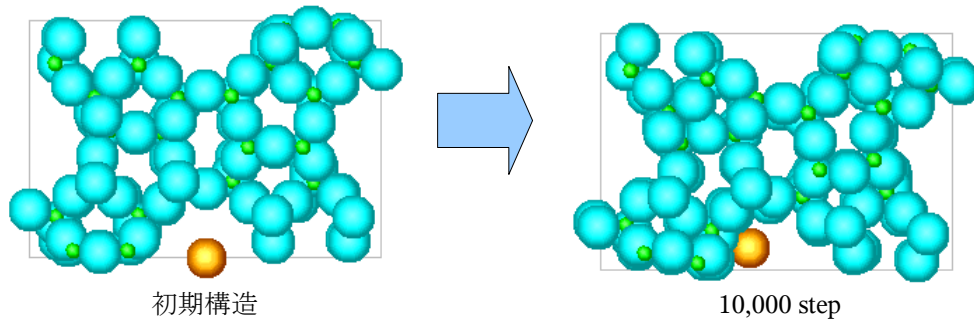


図2 複数セル計算における第2セル

図3はデュアルプロセスによる高速化を行った計算結果を示す。ここで温度は 300[K]一定、圧力は1気圧一定とし、5,000step の計算を行った。基本的に従来のシングルプロセスと同等の計算であるため、計算結果が数値的にすべて一致することを確認した。一方、実際に計算にかかった時間はデュアルプロセスの場合で1分17秒であり、シングルプロセスの2分23秒に対しおよそ1.86倍の計算速度となった。これは一般のデュアル化ツールなどによらず、プログラムのソースコードを直接変更した成果といえる。

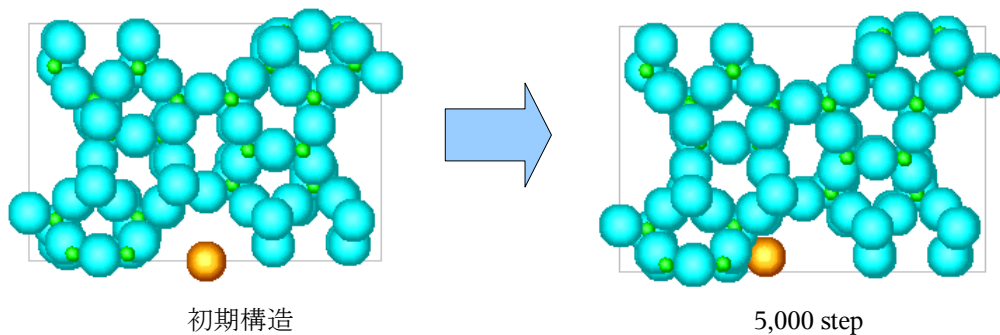


図3 デュアルプロセス化New-RYUDOによる計算結果

以上より、本研究で開発した新しい分子動力学計算プログラムにより、より大規模で複雑な系を、より高速に計算することが可能になったといえる。