

Approche hiérarchique pour la dynamique moléculaire en champs de force polarisables à large échelle

Igor CHOLLET, LAGA - Villetaneuse Louis LAGARDÈRE, LCT - Paris
Jean-Philip PIQUEMAL, LCT - Paris

L'évaluation naïve des énergies en dynamique moléculaire peut constituer une limitation pour les simulations lorsque le nombre d'atome dépasse un certain seuil. En effet, pour un système de N atomes, le coût en terme d'opérations arithmétiques d'une telle tâche est de l'ordre de $\mathcal{O}(N^2)$ et doit se réaliser à chaque pas de temps de la simulation, ce qui devient rapidement prohibitif. Dans le cadre de champs de force polarisables, cette énergie \mathcal{E} s'exprime sous la forme suivante :

$$\mathcal{E} := \sum_{\mathbf{t} \in \alpha \mathbb{Z}^3} \sum_{\mathbf{x} \in X} \sum_{\mathbf{y} \in X} \mathcal{D}_{\mathbf{x}} \mathcal{D}_{\mathbf{y}} G(\mathbf{x}, \mathbf{y} + \mathbf{t}) \quad (1)$$

où α désigne le diamètre de la boîte de calcul, X est un nuage de points correspondant aux positions des atomes, G est une loi d'interaction (typiquement un noyau de Coulomb $\|\mathbf{x} - \mathbf{y}\|^{-1}$) et $\mathcal{D}_{\mathbf{u}}$ est une combinaison linéaire de dérivées partielles dont les coefficients sont fixés pour un atome \mathbf{u} donné. Ici, la série sur \mathbf{t} , dupliquant la boîte de calcul dans toutes les directions de sorte à mimer un milieu non vide, est seulement conditionnellement convergente, compliquant encore son calcul numérique en pratique.

Pour ces raisons, une large part des codes de calcul exploitent les algorithmes type "Particle Mesh Ewald" (PME [2]), eux-même basés sur une combinaison entre sommation d'Ewald (qui reformule le problème en une somme de séries absolument convergentes) et transformée de Fourier rapide (FFT), autorisant un calcul approché avec une complexité $\mathcal{O}(N \log N)$. Cependant, cette approche montre d'importantes limitations sur des architectures de calcul en mémoire distribuée, nécessaires lorsque les systèmes d'atomes dépassent une certaine taille, typiquement dans le cadre de petits systèmes biologiques.

Aussi, dans cet exposé, nous présenterons une nouvelle alternative à PME nommée ANKH, basée sur les méthodes hiérarchiques [4, 3, 1] pour les problèmes à N corps et résolvant ce problème de scalabilité tout en réduisant la complexité du calcul à un coût linéaire plutôt que linéarithmique. Nous introduirons dans un premier temps ces méthodes hiérarchiques, puis nous expliquerons de quelle façon celles ci peuvent se prêter à des applications aux calculs d'énergie pour les champs de force polarisables sur des architectures modernes. Des résultats numériques illustreront le potentiel de l'approche proposée.

- [1] I. Chollet, X. Claeys, P. Fortin, L. Grigori. *A Directional Equispaced interpolation-based Fast Multipole Method for oscillatory kernels*. SIAM Journal on Scientific Computing, **45(1)**, 2023.
- [2] T. Darden, D. York, L. Pedersen. *Particle mesh Ewald : An $N \log(N)$ method for Ewald sums in large systems*. The Journal of Chemical Physics, **98(12)**, 1993.
- [3] W. Fong, E. Darve. *The black-box fast multipole method*. Journal of Computational Physics, **228(23)**, 2009.
- [4] L. Greengard, V. Rokhlin. *A fast algorithm for particle simulations*. Journal of Computational Physics, **73(2)**, 1987.