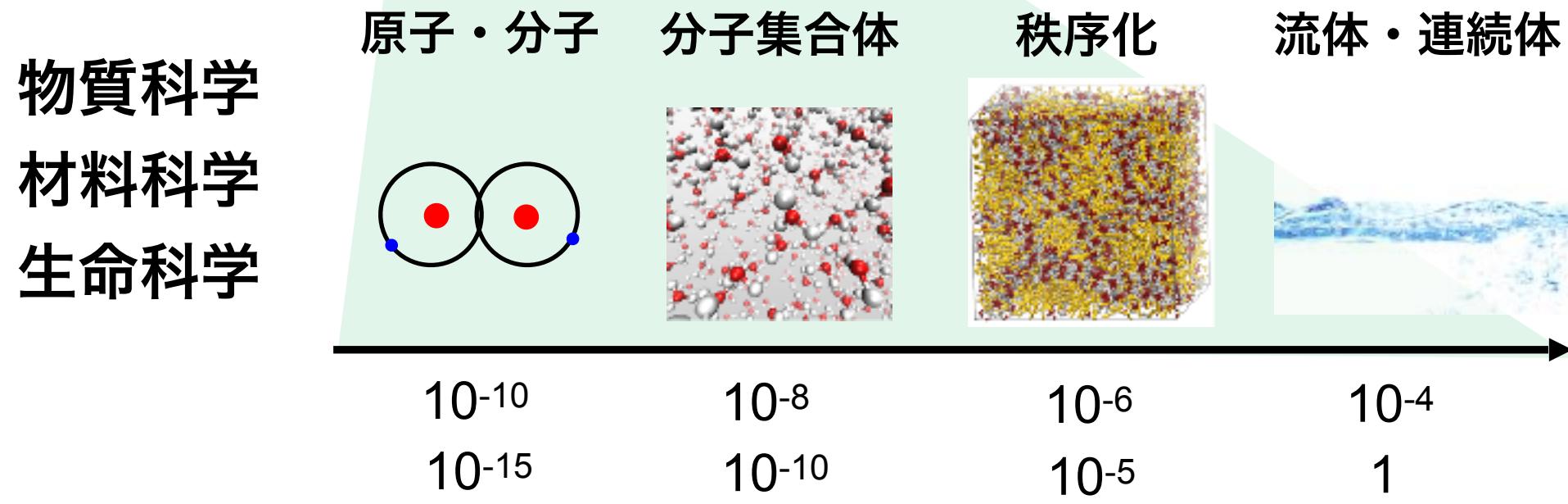
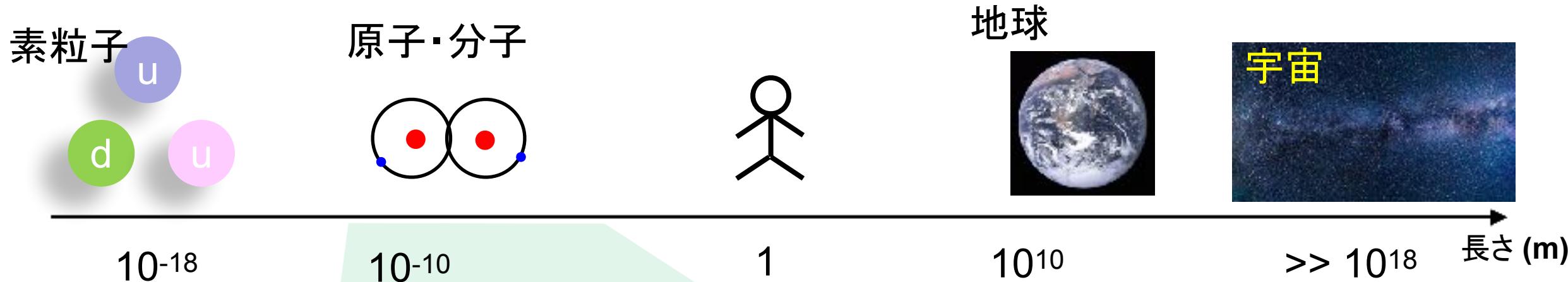


物質・材料・生命科学の基盤としての 並列分子動力学シミュレーション

芝 隼人 東京大学情報基盤センター



計算科学シミュレーションの扱う空間スケール



分子動力学法

ニュートンの運動方程式

= 粒子に力がかかると運動加速度が生ずる

$$m\vec{a}_i = \sum_j \vec{f}_{ij}$$

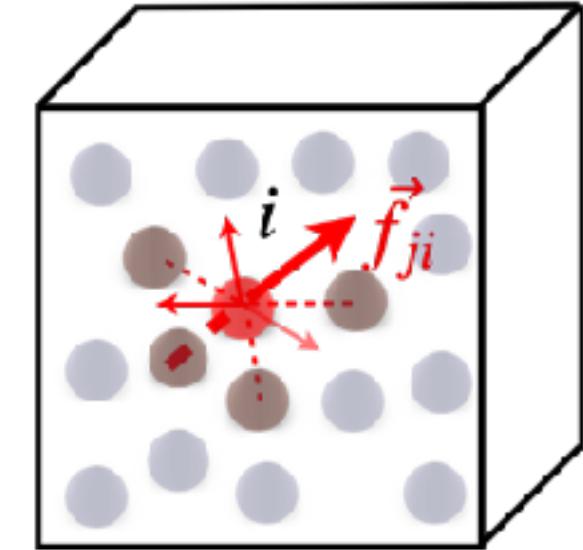
時間ごとに力を足して、コンピューターで逐次、運動方程式を解く



粒子集合体の性質を明らかにすることができます。

世界初の分子動力学シミュレーション

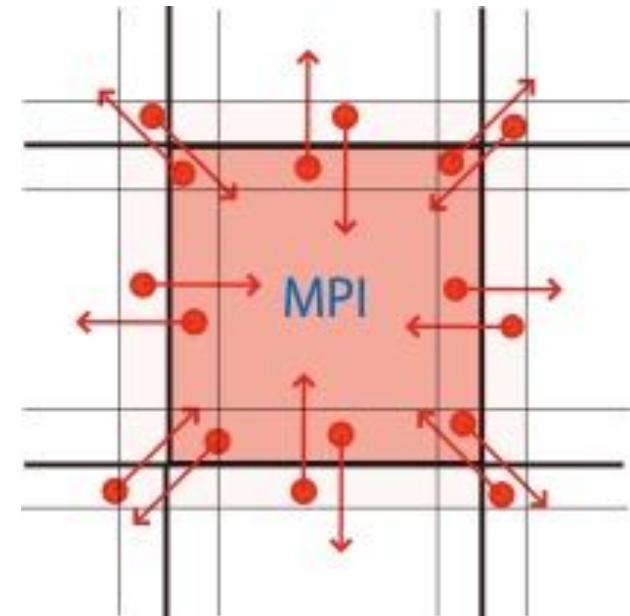
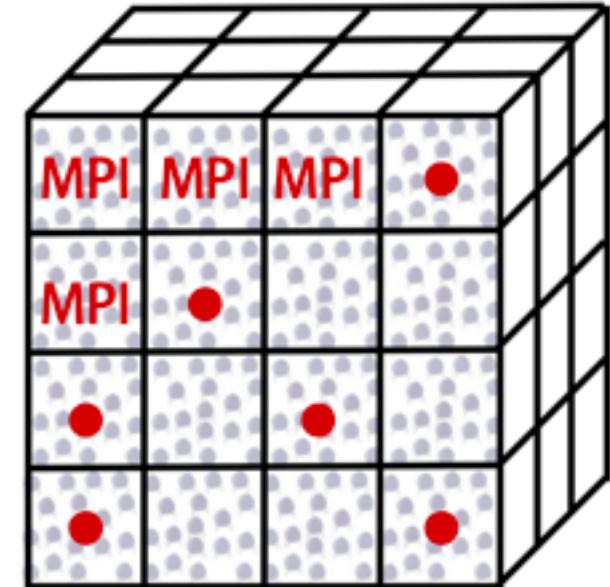
= 1957年 2次元剛体円盤の固液転移 (B. J. Alder & T. E. Wainwright)



並列分子動力学法

シミュレーション空間を分割して
異なるプロセッサにタスクを効率的に割り振る

- CPU間で粒子を通信する (基本だが大変)
- CPUのタイプに合わせた高速化をする
or 力の計算をGPUなどに任せる (中級)
- 近年の計算機特有のキャッシュメモリを
有效地に生かすデータ構造を採用 (上級)
- 専用計算機の構築 (D. E. Shaw, 2008)

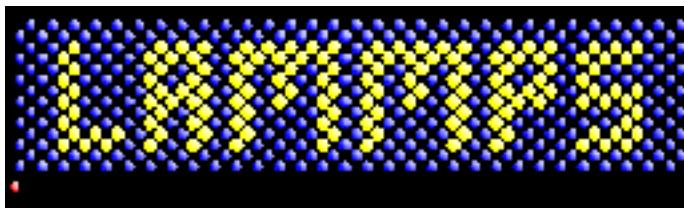


並列分子動力学ソフトウェア

現在、オープンソースソフトウェアですぐにスパコン上での並列計算ができる。
力場、アンサンブル、自由エネルギー計算などを多彩に設定可能。



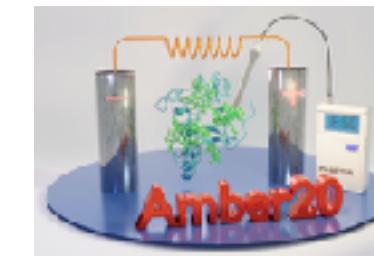
CPU 特異的実装による超高速計算、GPUも対応
生体系分子動力学計算のデファクトスタンダード



高並列対応

C++モジュール方式での実装

必要に応じたソース改変・拡張が容易
様々なモデリングに対応



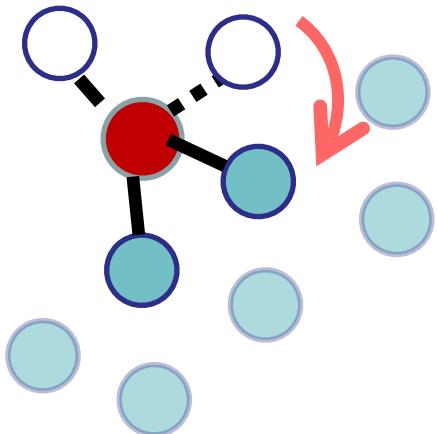
【有償】



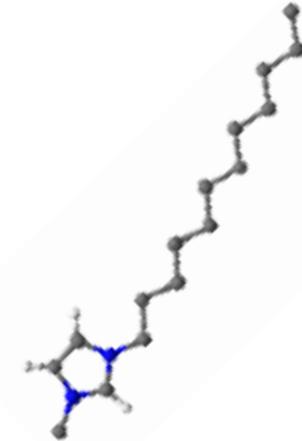
GENESIS
Generalized-ensemble simulation system

多彩な時空間モデリング

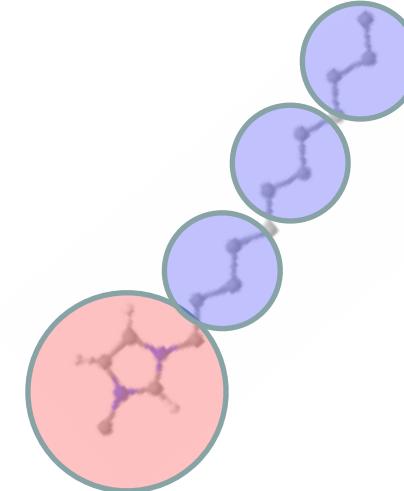
力場 = 広い時間空間スケールをカバーする様々なモデルが存在



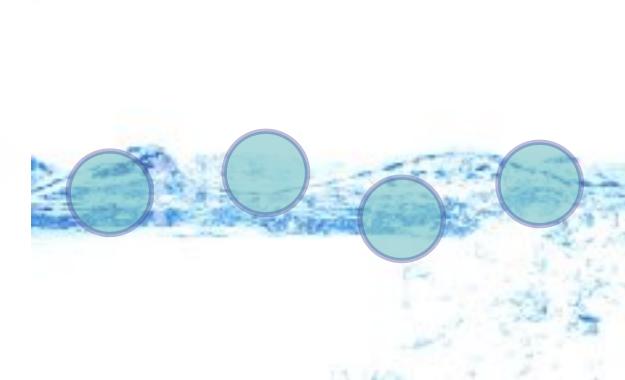
反応力場



全原子力場



粗視化力場



粒子法による流体力学

ミクロ = 化学反応 \leftrightarrow 全原子・粗視化力場 \leftrightarrow マクロ側 = 流体力学

汎用的なソフトウェアフレームワークの研究開発

最近の研究から：2次元ガラスの新規な性質の発見

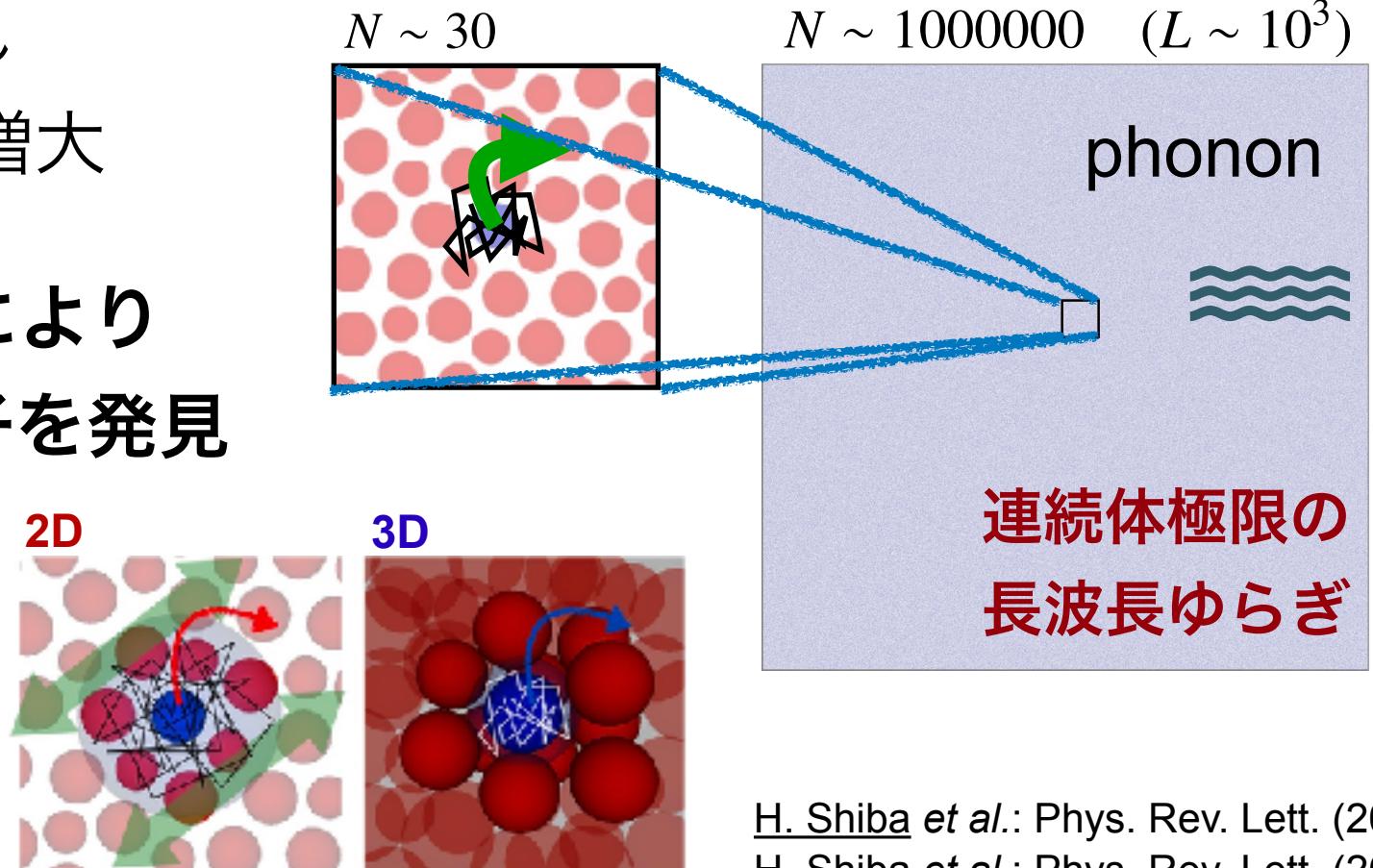
ガラス = 液体を急冷しどろどろになる → 固体のように固まる
液体らしさと固体らしさの共存

粒子が周りの粒子に囲まれ
閉じ込められる → 粘度増大

大規模シミュレーションにより
2次元のガラスの支配因子を発見

- + 弹性振動の発散 ($\sim \log L$)
- + 拡散係数の発散 ($\sim \log L$)

→ ガラス転移に影響?



分子動力学法

原子分子からマクロを繋ぐ基軸となる手法

- 基礎科学、応用科学の両面で重要

21世紀に入り、並列計算用のオープンソースソフトウェアが普及

- 多くの機能がスーパーコンピューター上で「誰でも」利用可能に

展望

量子力学 \Leftrightarrow 古典力学 \Leftrightarrow 流体力学 多階層シミュレーション

データ科学的アプローチの活用