

「マルチスケール・マルチフィジックス現象の統合シミュレーション」

平成 18 年度採択研究代表者

長岡 正隆

(名古屋大学 大学院情報科学研究科 教授)

「凝集反応系マルチスケールシミュレーションの研究開発
—大規模原子情報の疎視化・再構成技法・疎視的理論の開発—」

1. 研究実施の概要

凝集化学反応系シミュレーションの基盤技術を開発することが大きな狙いである。今年度は必要な基盤技法と非経験的QM/MM-MDシミュレーションを可能とするインターフェイスQM/MM-IFの開発した。平成19年度末までには、この開発の第一段階が達成する予定である。次に、新しい疎視化理論の開発を目的として、大規模原子運動情報から疎視化パラメータを取り出す疎視化変換技法の開発と疎視化理論の構築を進めた。本開発は基礎的かつ理論的な研究開発であるため、後三年間の開発期間を見込んでいる。最後に、並行コンピューティング技法による凝集化学反応系シミュレーションの実現を目的として、アンサンブルMD(EMD)法と、そのための並行コンピューティング技法の開発を進めた。開発工程の順調な進捗が達成できており、平成 19 年度末には第一段階の研究開発が達成できる見通しである。

2. 研究実施内容

●研究実施項目：(テーマ I) 凝集化学反応系シミュレーションの基盤技術の開発

凝集化学反応系シミュレーションの基盤技術を開発することを目的として、第一に、QM/MMハミルトニアン用パラメータ調製ツールの開発を開始した。第二に、半経験的QM/MM-分子動力学(MD)シミュレーションプログラム(ROAR2.1)に自由エネルギー勾配法による構造最適化スキームを実装するためのアルゴリズムを検討した。第三に、非経験的(ab initio)QM/MM-MDシミュレーションを可能とするために、ab initio分子軌道(MO)法プログラムGAUSSIANとMD法プログラムAMBERとのインターフェイス、QM/MM-IFを開発するための技術的な基本方針を確定し、β版を作成した。

§ I-1. QM/MM-MDシミュレーション用パラメータ調製ソフトウェアの開発(パート I)

QM/MMハミルトニアン用のパラメータ調製ツールの開発に向けた設計指針の確定とデータ調査を進めた。合わせて、次年度以降の研究開発作業に備えた。

§ I-2. QM/MM-MDシミュレーションへの自由エネルギー勾配法の実装(パート I)

半経験的QM/MM-分子動力学(MD)シミュレーションプログラムに自由エネルギー勾配法

による構造最適化スキームを実装するためのコンピュータ環境の整備を進めた。具体的な最適なアルゴリズムとして、Steepest Descent 法に加えて BFGS 法を採用することにした。

§ I-3. QM/MM-MDシミュレーション・インターフェイスの開発

ab initio 分子軌道 (MO) 法プログラムGAUSSIANと MD 法プログラムAMBERとのインターフェイス、QM/MM-IFの開発に向けてアルゴリズム設計とコンピュータ実行環境の整備を進めた。年度最後に、その β 版(含、サブルーチン“gaussfg.f”)を試作した。

●研究実施項目：(テーマⅡ) 凝集化学反応系シミュレーションに基づいた疎視化理論の開発

新しい疎視化理論の開発を目的として、QM/MM-MD シミュレーションを具体例(HF 水溶液、アンモニア水溶液など)に適用した。それと同時に、大規模原子運動情報(個別原子の位置・運動量の時系列データ $\{r_i(t), p_i(t)\}$)から疎視化パラメータ(数密度分布や温度分布など)を取り出す疎視化変換技法を研究開発した。得られた時空数密度分布を入力初期分布として、最大エントロピー原理に基礎をおいた体系的な時空分布再構成技法の研究開発を開始し、疎視化理論の構築を進めた。

§ II-1. MDシミュレーション・データの疎視化理論の開発

QM/MM-MD シミュレーションを具体例(HF 水溶液、アンモニア水溶液など)に適用できるように環境設備の整備と、プログラム開発計画を確定した。年度中に導入した PC クラスターシステムを用いて、予備的な数値計算を実行して大規模原子運動情報(個別原子の位置・運動量の時系列データ $\{r_i(t), p_i(t)\}$)の蓄積した。

§ II-2. 最大エントロピー法による再構成技法の開発

疎視化パラメータ(数密度分布や温度分布など)を取り出す疎視化変換技法を開発するための基本的概念整備を進めた。他方、独立成分分析や主成分解析の適用可能性も検討し、微視的情報に基礎をおいた溶媒分子系の時空分布に対する疎視化理論の構築を進めた。また、最大エントロピー原理に基礎をおいた体系的な時空分布再構成技法(細視化技法)に関する文献調査を進めた。

●研究実施項目：(テーマⅢ) 並行コンピューティングによる凝集化学反応系シミュレーションの実現

並行コンピューティング技法による凝集化学反応系シミュレーションの実現を目的として、或る熱力学的状態に対応する一つの初期位相分布から組織的に選ばれた多数の初期条件群から開始した MD 計算を、複数の(multi-)CPU(あるいはノード、コア)からなる計算機サーバーで並行して実行させるアンサンブルMD(EMD)法を開発した。合わせて、そのための並行コンピューティング技法を開発した。

§ III-1. 並行コンピューティングによる統計情報生成の技術開発と効率化

或る熱力学的状態に対応する一つの初期位相分布から組織的に選ばれた多数の初期条件群から開始した MD 計算を、複数の(multi-)CPU(あるいはノード、コア)からなる計算機サーバーで並行して実行させるアンサンブルMD(EMD)法の基本設計を進めた。また、関連した並行コンピューティング技法の開発(非平衡状態解析システム(NeSAS))を開始した。年度最

後には、その β 版を試作した。さらに、時間発展形の微分方程式を高精度数値計算する数値スキームの安定性について研究し、安定に計算が可能なパラメータの範囲を確定した。

3. 研究実施体制

(1)「長岡」グループ

① 研究分担グループ長：長岡 正隆(名古屋大学 教授)

② 研究項目

研究実施項目:(テーマⅠ)凝集化学反応系シミュレーションの基盤技術の開発

- ・ QM/MM-MDシミュレーション用パラメータ調製ソフトウェアの開発 (パートⅠ)
- ・ QM/MM-MDシミュレーションへの自由エネルギー勾配法の実装 (パートⅠ)
- ・ QM/MM-MDシミュレーション・インターフェイスの開発

研究実施項目:(テーマⅡ)凝集化学反応系シミュレーションに基づいた疎視化理論の開発

- ・ MDシミュレーション・データの疎視化理論の開発
- ・ 最大エントロピー法による再構成技法の開発

研究実施項目:(テーマⅢ)並行コンピューティングによる凝集化学反応系シミュレーションの実現

- ・ 並行コンピューティングによる統計情報生成の技術開発と効率化