

課題名 (タイトル) :

くりこみ群分子動力学法の検証

利用者氏名 : 西田 豪

理研での所属研究室名 : 和光研究所 基幹研究所 連携研究部門

理研一東海ゴム人間共存ロボット連携センター ロボット動作研究チーム

1. 本課題の研究の背景、目的、関係するプロジェクトとの関係

数値解析と自動制御の統合は、計算機の急速な発展に従い、工学においてその重要性を増している。しかし、制御モデルの目的は、数値モデルの目的と異なる。制御モデルは、設計と適用の観点から汎用性が重視される。この制御設計と適用手法は、実装および再調整の簡略化の要求から、体系的かつ理解が容易、しかしながら、数学的もしくは物理的本質を得ていなければならない。一方で、数値モデルは、物理現象を再現するために正確である必要があるが、計算機環境に関する物理的制限はない。数値解析は、オフラインでの反復試行により実行される。例えば、機構設計などにおいて、数値解析の段階で、制御設計を陽に考慮できるならば、より高度な開発が可能となる。

本研究の目的は、統計的な意味においてスケール対称性を持った分子動力学 (Molecular Dynamics, MD) 法から導出される、くりこみ群分子動力学 (Renormalized Molecular Dynamics, RMD) 法を用いて、数値計算法と制御設計法の統一的枠組みを確立する事である。

MD 法は、原子間相互作用を利用して、物理現象を再現する。MD 法は、基本的に、高分子のような非常に微小な対象に対して適用される。RMD 法は、この MD 法の適用対象を、機械系のような比較的大きな対象や、気体における固体などの多重物理系などに拡張できる。RMD 法は、相互作用が厳密に正しければ、固体、液体、気体の間や、異なった物質の間の切り替え曲面が自然に再現される。RMD 法を用いた PDE の解析では、これまで問題であった、境界条件における複雑かつ特定の問題設定にのみ有効な仮定を導入する必要性が

ない。

RMD 法の統計的性質は、Hamiltonian によって定義される古典的な分配関数によって表される。くりこみ Hamilton 系 (renormalized Hamiltonian (RH) systems) は、粗視化された Hamiltonian を定義することによって導入される。このくりこみ Hamilton 系を、境界制御の制御標準系として採用する。本研究では、制御モデルとして重要な弾性体を含んでいる、固体に対する RMD 法を主に議論する。

2. 具体的な利用内容、計算方法

粗視化された MD 法、即ち、RMD 法を、MDGRAPE-3 クラスタを用いて、実際に計算により、計算速度と計算精度のスケラビリティが粗視化のレベル変化により得られるかどうか、検証を行う。

3. 結果

モデル化対象とする、柔軟構造物の実験データ取得のスケジュール遅延により、現在の所、実際の計算は 3 月末となる予定である。

4. まとめ

本スーパーコンピュータ利用の準備として、現計算科学研究機構 (旧基幹研究所 先端計算科学研究領域 システム計算生物学研究グループ高速分子シミュレーション研究チーム) の援助を受け、デスクトップ PC 用 MDGRAPE-3 PCI ボードを利用して、プログラムを開発した。

5. 今後の計画・展望

計算アルゴリズムの並列化による、計算の高速化が期待される。

6. RICC の継続利用を希望の場合は、これまで利用した状況（どの程度研究が進んだか、研究においてどこまで計算出来て、何が出来ていないか）や、継続して利用する際に行う具体的な内容

本研究の準備的検証は、

G.Nishida and R. Ikeura, ``Boundary Controls and Interconnection for Scalable Hamiltonian Systems Governed by Molecular Dynamics'', Physcon 2011 in León, Spain, Sep, 2011.

にて発表済みであり、また、学術論文誌に

Gou Nishida, Daiji Ichishima and Kenji Fujimoto, ``Scalable Hamiltonian Model of Elastic Continuum for Boundary Controls'', SIAM Journal on Control and Optimization.

として投稿中である。これらの成果を、スーパーコンピュータの利点を生かして発展させる必要がある。

7. 一般利用で演算時間を使い切れなかった理由

該当せず。

8. 利用研究成果が無かった場合の理由

本簡易利用申請が 2011 年 11 月であり、それ以降の利用の為、本システムを利用した研究成果を得る為に十分な期間がなかった為。