

課題名(タイトル):

長時間分子動力学シミュレーションのデータ解析プログラムの開発と応用

利用者氏名:

○小山 洋平

理研における所属研究室名:

生命機能科学研究センター 計算分子設計研究チーム

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

報告者が所属する研究室ではタンパク質などの生体分子の機能を理解するために行う分子動力学シミュレーションに特化した専用計算機の開発が行われている。分子動力学シミュレーションでは原子に働く力を計算し、その力に基づいて原子の位置や速度を更新する。この力の中で、クーロン力は遠く離れた原子間にも影響を及ぼすため、力の計算を高速化するために様々な工夫が必要となる。

2. 具体的な利用内容、計算方法

本年度はクーロン力を含むより広いクラスの関数を専用計算機などで計算しやすい別の関数で近似した際に生じる誤差の理論的な数式を導出することができた。この理論的な数式が妥当であるかを確認するために、自作の Python プログラムを用いて様々な関数とそのパラメーターを変えて数値的な誤差と理論的な誤差の数式との比較を行った。

3. 結果

この結果、理論的な誤差の数式が妥当であることが確認できた。現在、これらの詳細な結果についての論文を準備中である。