

プロジェクト名(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. 本プロジェクトの研究の背景、目的、関係するプロジェクトとの関係

これまでに分子動力学シミュレーションのクーロン力の計算手法である TME 法(tensor-structured multilevel Ewald summation method)を開発し、所属研究室で開発された分子動力学専用計算機である MDGRAPE-4A に組み込まれている(Morimoto et al., SC '21)。TME 法ではポテンシャルエネルギーを短距離・中距離・長距離の3成分に分ける。このとき中距離成分を積分表示してガウス求積法を適用することで複数のガウス関数の重み付き和で近似した。この一方で、積分表示は一意に決まるわけではなく、変数変換することにより異なる積分表示が得られ、どの積分表示にガウス求積法を適用するかで近似の良さが変わることが分かった。これまでにこの問題を特殊な場合として含む、より一般的な理論的な枠組みを構築し、数値的な検証を行ってきた。

2. 具体的な利用内容、計算方法

本年度はこれまでに開発してきた前述の理論的な枠組みを検証するための Python コードの再テストや論文の図表作成に必要なデータを生成するためのプログラムを作成し、変数変換の組み合わせや近似する関数のパラメーターを変えて検証を行った。この結果、理論的に導出した誤差評価を数値的に検証することができ、これらの結果をまとめた論文を投稿した。