

課題名 (タイトル) :

大規模並列化に適した MD プログラム開発

利用者氏名 : ○大野 洋介¹, 小山 洋², 長谷川 亜樹², 舛本 現², 似鳥 啓吾³, 古石 貴裕⁴,
森本 元太郎⁵, 吉田 正典⁶, 田附 八束⁶, 熊木 竜也⁶, 来栖 瑛佑⁶,
ノヴィッチコフ グレブ⁶, 荒川 貴道⁷, 三十尾 潔高⁸, 吉川 広幸⁸

理研での所属研究室名 :

¹社会知創成事業 次世代計算科学研究開発プログラム

次世代生命体統合シミュレーション研究推進グループ 生命体基盤ソフトウェア開発・高度化チーム

²神戸研究所 HPCI 計算生命科学推進プログラム 高度化推進グループ

³筑波大学 計算科学研究センター

⁴社会知創成事業 イノベーション推進センター 産業界との融合的連携研究プログラム
界面ナノ構造研究チーム

⁵神戸研究所 生命システム研究センター 生命モデリングコア 計算分子設計研究グループ

⁶株式会社 爆発研究所

⁷株式会社 計算力学研究センター

⁸株式会社 情報数理研究所

-
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
次世代生命体統合シミュレーションソフトウェアの研究開発では生命科学で「京」を活用するためのソフトウェア開発を行なっている。その一つである大規模並列化に適した MD プログラムの開発において、アルゴリズムの改良・検証、性能比較のために RICC を使用した。
 2. 具体的な利用内容、計算方法
全原子古典分子動力学計算を空間分割で並列実行する。
 3. 結果
RICC と「京」で最適化による数値誤差の範囲で計算結果がなかった。
記述次第で「京」の実効効率が高い場合があった。
 4. まとめ
「京」で大規模並列化に適した MD プログラムの開発に重大な問題はない。
 5. 今後の計画・展望
より大規模での実証を進める。

平成 23 年度 RICC 利用研究成果リスト

【その他】

SC11 (2011/11/14-17) ポスター展示

ポスター発表

ISLiM 成果報告会 2011 (2011/12/21-22)

次世代生命体統合シミュレーションソフトウェアの研究開発 (ライフ) 公開シンポジウム (2012/3/5-6)