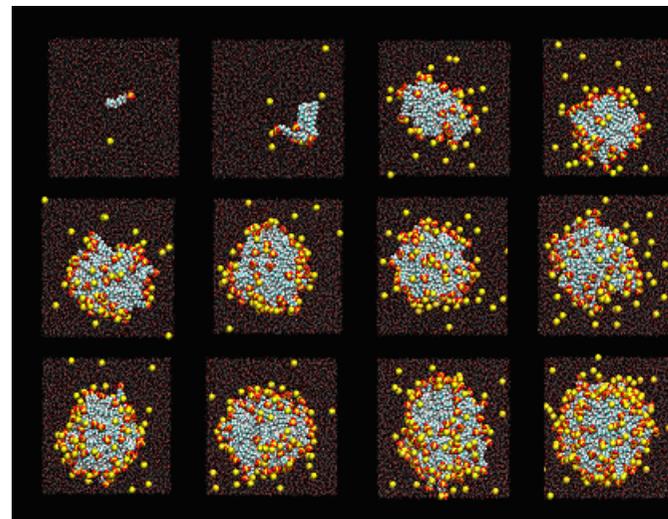


分野名: ナノ

高並列汎用分子動力学計算ソフトウェア

- プログラム名: Modylas
- 開発
 - 分子科学研究所 教授 岡崎進
(NAREGI プロジェクトにて大規模化)
- 概要
 - 任意の分子系に対する汎用の大規模分子動力学計算プログラム。
 - 自由エネルギー計算をはじめとして、ナノサイエンスに必要な多様な計算に対応。
- アルゴリズム
 - 長距離相互作用計算には Particle Mesh Ewald 法、Ewald 法、FMM法から選択
 - 現時点では、領域分割と粒子分割を併用
 - アンサンブルは、NVE、NVT、NPT(斜方セル含む)から選択
 - SHAKE 法、RATTLE 法、ROLL 法による拘束の動力学が可能
 - 時間発展には RESPA法を使用
- 現状での計算規模
 - PME法: 100 万原子 2 s/step (3 TFlops、512 CPU)
 - Tree法: 1000 万原子 20 s/step (5 TFlops、800 CPU)
- 次世代スパコンでの計算規模
 - 高度な並列化により、それぞれの計算手法で数百倍から千倍程度の長時間ダイナミクスを実現
 - メモリー容量は現状程度



水中のミセル生成の分子動力学シミュレーション

- どのようなことが期待されるか？
 - ウイルス(溶媒を含めると約 1000 万原子)の全原子計算や、リボソーム(数十万原子)の長時間計算が可能となる。
 - 計算科学によるウイルスの分子科学やドラッグデリバリシステムのナノプロセスの解明が原子レベルで可能となり、人類にとって極めて重要な情報を得ることが期待される。