

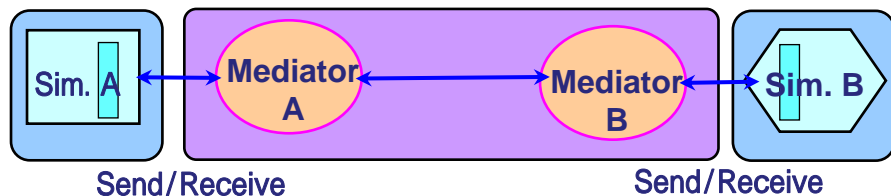
グリッド連成ミドルウェア Mediator

グリッド連成ミドルウェア (Mediator) において、アプリケーション間のデータ交換にファイルを用いるSBC (Storage-based Communications) 方式をサポートしました。また、Mediatorを適用した応用計算として有限要素法 (FEM) と分子動力学法 (MD) による連成計算を実現しました。

1. データ交換方式の拡張

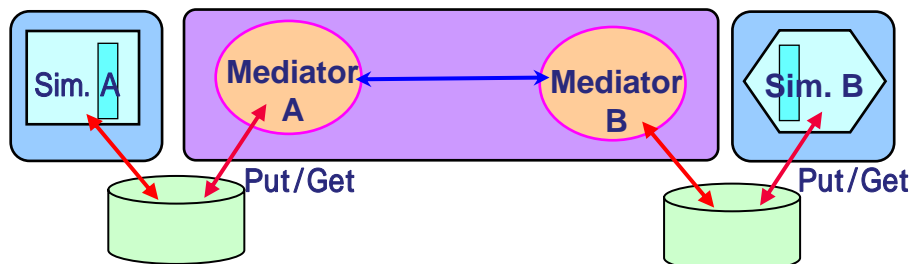
H16年度まで:

アプリケーション間のデータ交換をMPI通信で実現



H17年度:SBC方式のサポート

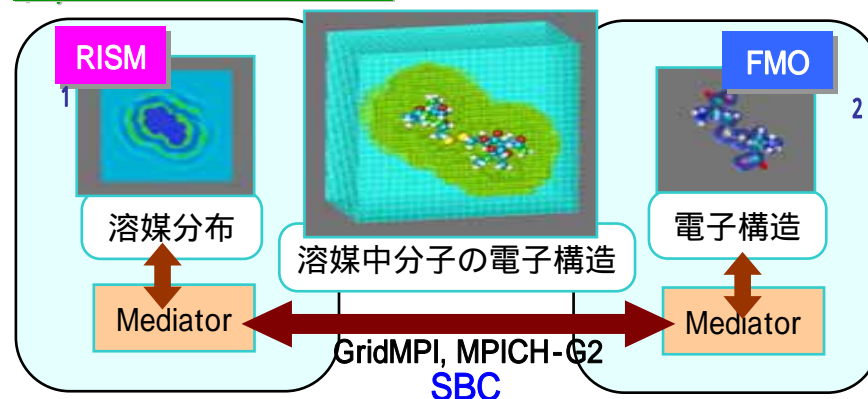
アプリケーション間のデータ交換をファイルで実現



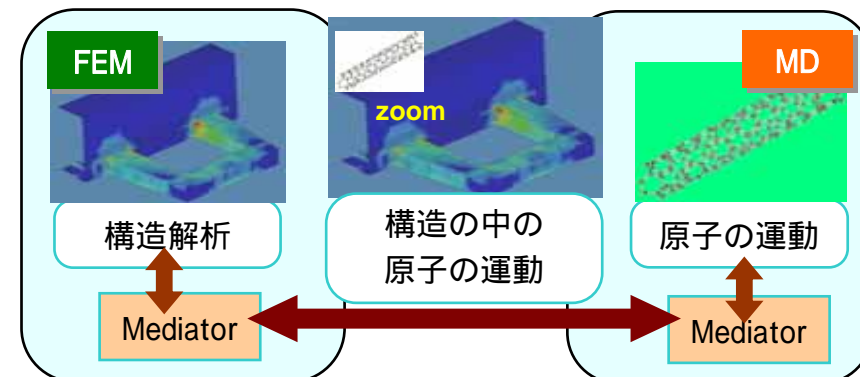
連成アプリの結合度に応じて柔軟に通信プロトコルを選択
= Flexibilityの向上

2. Mediatorを適用した応用計算

(A)RISM-FMO連成計算



(B)FEM-MD連成計算



1 オリジナルコードは 分子科学研究所 平田グループにて開発された。

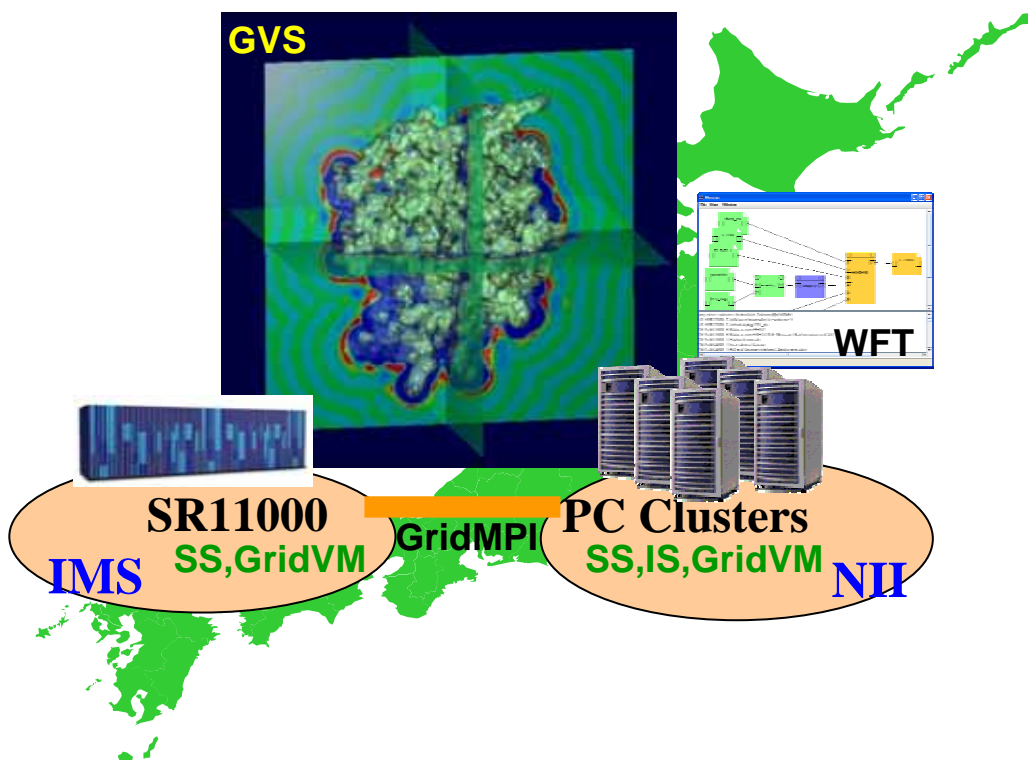
2 オリジナルコードは 産業技術総合研究所 北浦グループにて開発された。

RISM-FMO連成計算による大規模計算(水中のリゾチーム)

水中のリゾチーム分子(2021原子)を対象とした大規模連成計算シミュレーションをグリッド環境上にて実施しました。また、連成アクセラレータを適用することで連成計算の大幅な計算時間短縮に結びつくことを検証しました。

1. 大規模計算(水中のリゾチーム)

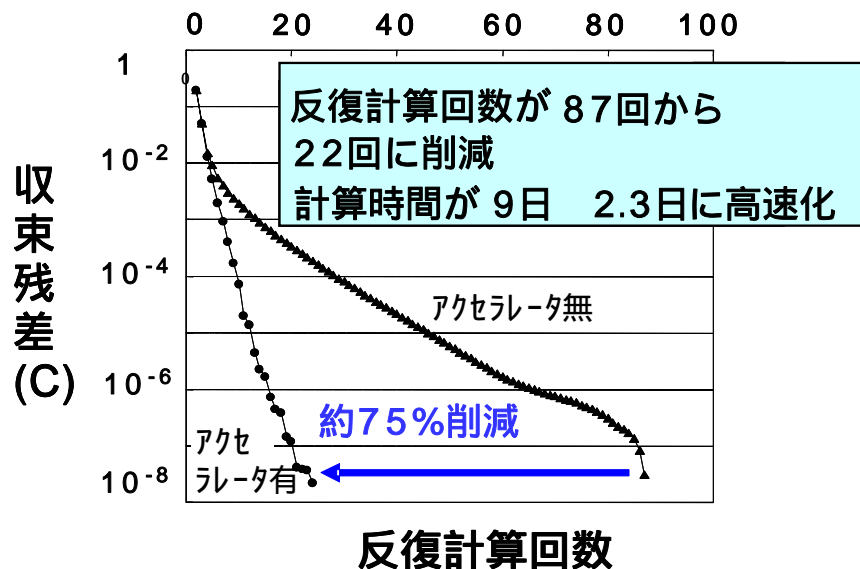
NIIサイトとIMSサイトに構築したNAREGIグリッド環境上で大規模RISM-FMO連成計算を実証しました



2. 連成アクセラレータ

- アプリケーション間で交換する反復データを保存
- 保存したデータの履歴から収束解を予測
- データ交換時に予測した収束解を使用し反復を削減

(A) 水中のリゾチーム分子にて検証



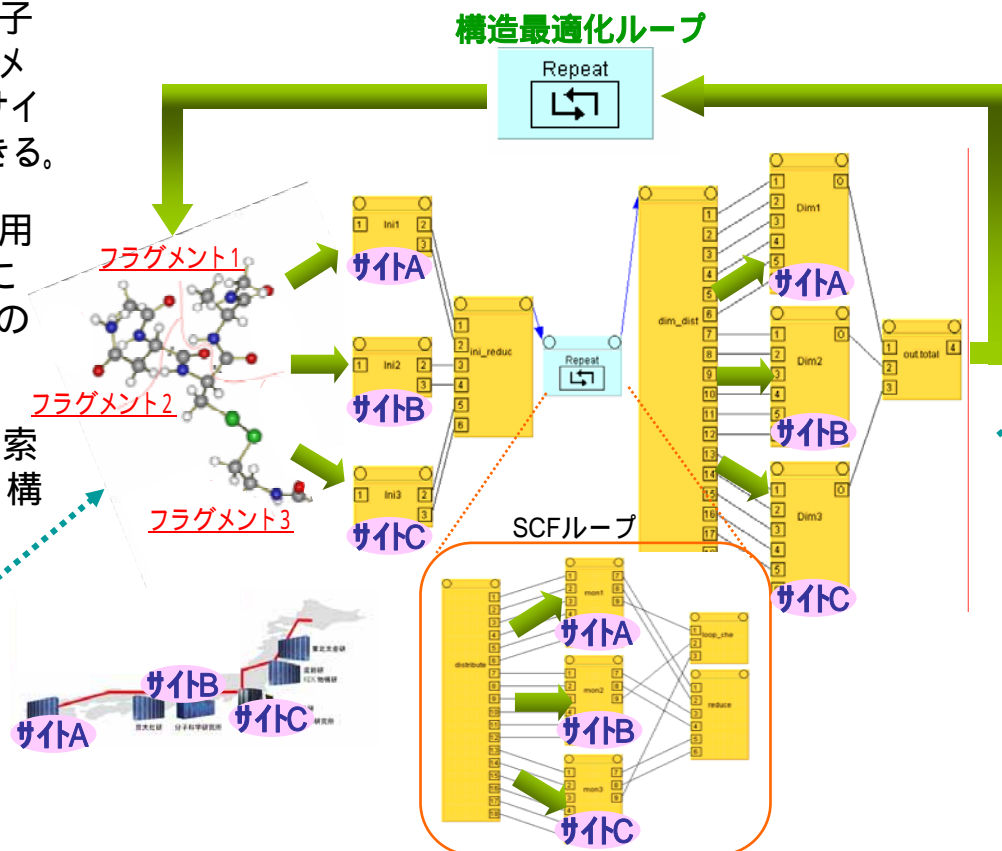
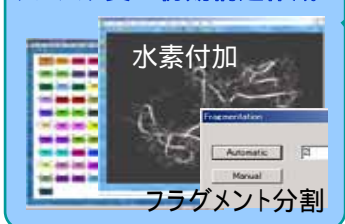
疎結合FMOによる構造最適化計算

構造最適化計算に疎結合FMO法¹を利用することで、巨大分子の構造最適化計算を実現しました。本計算は以下のようにワークフローを用いてGrid上での分散処理を可能としました。

1. 疎結合FMOを利用した構造最適化計算

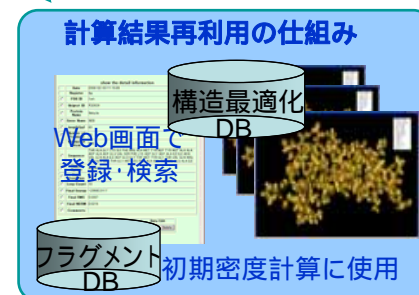
- 1) 疎結合FMOはタンパク質分子を数アミノ残基ごとのフラグメント単位に分割し、異なるサイトで計算処理することができる。
- 2) Grid環境下で疎結合FMOを用いると複数のサイトで並列に計算を処理でき、巨大分子の計算が可能となる。
- 3) 疎結合FMOと安定構造を探索するプログラムを連携させ、構造最適化計算を行った。

タンパク質の初期構造作成



2. 計算結果の有効活用

- 1) 構造最適化計算で得られた分子座標やMO情報をDBで管理している。現在、データグリッド機能(WP4)と連携するための開発を行っている。
- 2) 収束したフラグメントMO情報を別分子の計算時に再利用することによりSCFループの低減を実現した。



¹ FMO理論は産業技術総合研究所北浦博士によって提唱された。

ナノサイエンス実証研究

機能性ナノ分子

タンパク質の電子状態

計算構造(紫)と実験構造(緑)

レチナール近辺の水素結合ネットワーク(点線)

CH₂相互作用と分子認識

自己集合

カプセル化

バクテリオロドプシンのFMO計算

分子研・永田

ナノ磁性

高密度磁気デバイス

N/Cu(100)

60nm

5nm

分子研・永田

東大・常行真司

表面吸着原子系の自己組織化

格子グリーン関数法, DFT

東大・宮下晴二

分子性磁性体

分子性磁性体の量子ダイナミクス

東大・赤井久樹

ナノ磁性体の第一原理電子状態計算

スピングリーン関数法によるオーダーク計算

東大・高田一

磁性ナノ粒子系の静的・動的性質

数値的厳密対角化法

Ewald和

巨大行列計算

ナノ複合系設計

複合系量子伝導

光学応答、電子励起による反応制御

第一原理電子状態計算

複合系(分子やワイヤと電極)の電子伝導

産総研・小林伸彦

Fe-Pd

at c=0.5

T=1020K → 820K

100nm

レーザー場によるナフタレンの電子雲のぼらざとイオン化

東大・矢野一浩

ナノ組織化材料

実用組織化材料のマルチスケール解析

東大・毛利哲夫

$t^* = 0.01, 3.59, 16.70$

ナノ分子集合体

産業応用

3D-RISM

ミセルの生成自由エネルギー計算

分子研・平田

分子研・岡崎

Nelson法のMD(左, 東レ・茂木)

サブマイクロスケールのトラクションのMD(右, 豊田中研・長谷)

レプリカ交換MC

実験

タンパク質の折れたみ構造

東大・岡本

カーボンナノチューブ中の水(上)とシリコン(下)の一次元結晶

東大・田中

ナノ電子系

強相関電子系のナノ構造の干渉現象

東大・永島

短注行列法

ナノテクノロジー用材料設計

東大・川原

全電子結合基法

スピン注入型ナノ電子デバイス

日立・小野

スピン蓄積量の目安

3D

1-n

1-out

生体組織による磁気ナノ構造のスピンスピン計算

強相関電子の内部自由制御

遷移金属化合物, 磁性材料, 有機化合物, ナノ構造材料, 量子ドット, ナノデバイス, ...

デバイスの例: 光スイッチ

低次元プラストリート強相関電子系の探索

東大・小林

実分モンテカルロ法

ナノスピントロニクス理論

東大・前川

量子ドット列デバイスの電子相関効果

NTT・田村

ナノ磁性複合系の量子伝導

東大・井上

量子伝導法

グリッドナノシミュレータ

複雑な入力、多様な実行パターン、多様なソフトの組み合わせ

PSE, ワークフロー-GUI, スケジューラ, ...

デプロイ, 実行, 達成, ...

mother screen

実行フロー(コントロールフロー, データフロー)の指定と実行

WP1, WP2, WP3, WP5, WP6

連携可能

入力GUI

各プログラムの入力データ

速度, 圧力, 原子数, ストップ数

basic set, CI, 収束条件, 連携, ...

標準データ形式で出力

標準データ形式

BMSML, CML

東大・中村

ナノ初期情報生成ツール

タンパク質, 核酸, 有機物分子, 固体, 結晶

大規模の付加, 水の付加

結合情報, xyz座標, 力場パラメータ, ...

標準データ形式で出力

分子研・岡崎

アプリケーション間データ交換ツール(GIANT)

数値定数テンプレート, 入力出力テンプレート

標準データ形式

BMSML, CML, x/y/z形式

分子研・永田

アプリケーションソフト

NAREGI開発ソフト, その他のソフトも組み込み可

各プロジェクトへ参加

標準データ形式 GIANT

標準データ形式 GIANT

標準データ形式 GIANT

標準データ形式 GIANT

標準データ形式 GIANT

標準データ形式 GIANT

MD

RISM

MO

固体

電子

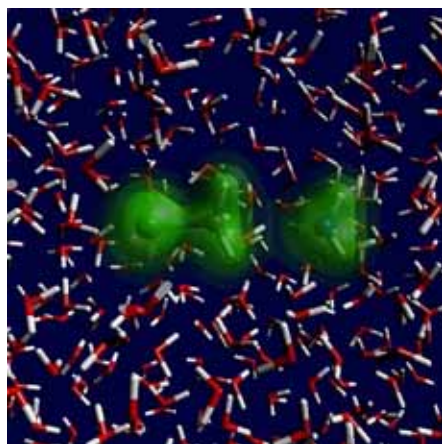
MD-MO システム連成計算 - 市販プログラムの組み込み -

(分子研)岡崎 進、森田明弘、水谷文保、山田篤志、岩橋建輔、吉井範行

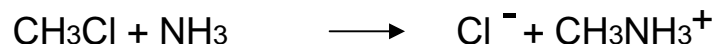
分子動力学計算(MD)と量子化学計算(MO)を組み合わせ、溶液内化学反応(SN2反応)をシミュレート

1. 本計算のポイント

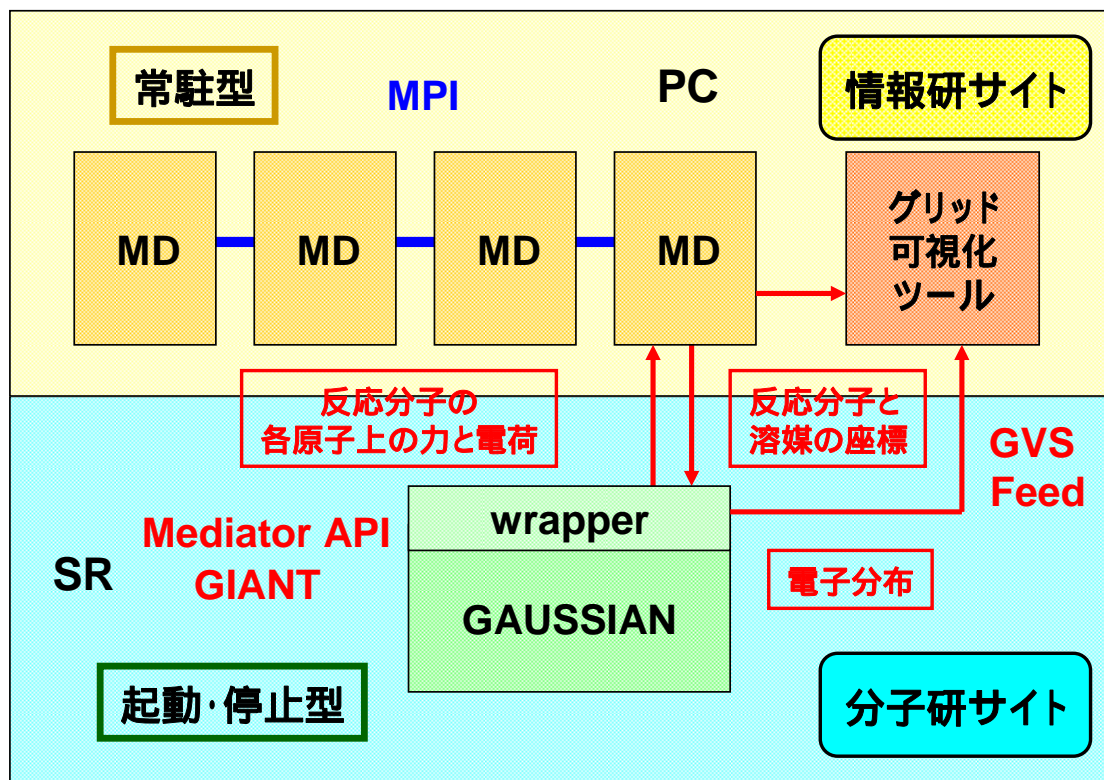
- 異なるサイト(分子研、情報研)の異機種のコンピュータを連動して計算
- 市販プログラム(Gaussian MO)にまったく手を加えず、自己開発プログラム(MD)と組み合わせて連成計算



水中での化学反応



2. システム連携構成



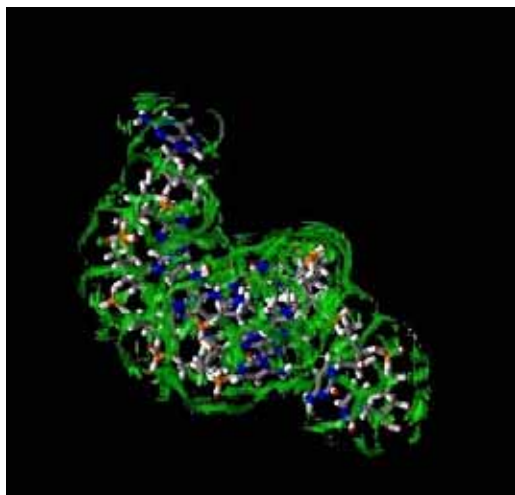
レプリカ交換 RISM-MC システム連成計算

(分子研、名大、立命館大、慶応大) 平田文男、岡本祐幸、今井隆志、光武亜代理、丸山 豊

レプリカ交換モンテカルロ法と3次元RISM理論を連成して、溶液内RNAの立体構造と水和構造を計算

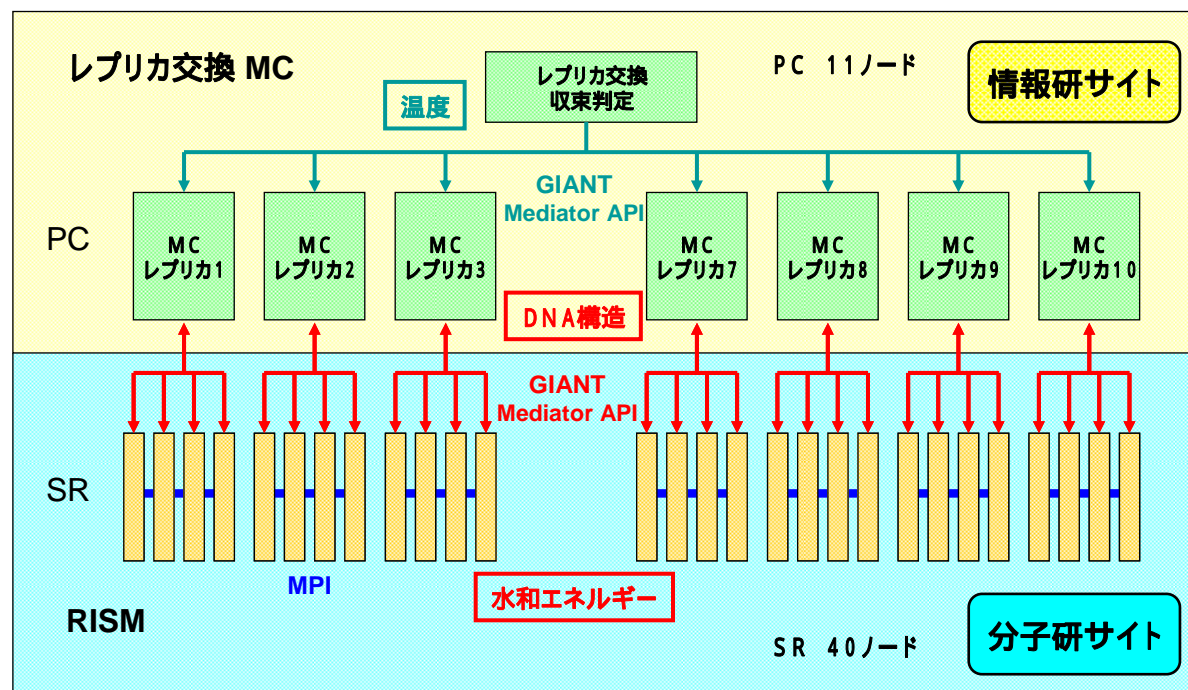
1. 本計算のポイント

- 異なるサイト(分子研、情報研)の異機種のコピュータを連動して計算
- 3種の異なるプログラムをMediator APIの挿入以外にはソースの変更無しに容易に連成、結合。
- 多数のレプリカの並列処理による高効率化



水中でのRNA分子構造

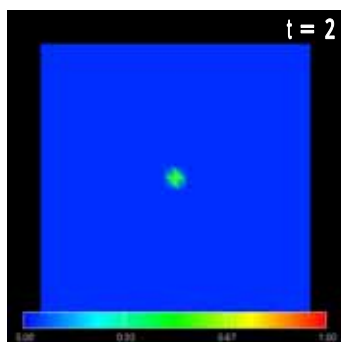
2. システム連携構成



グリッドを利用した光励起状態の動的緩和過程の研究

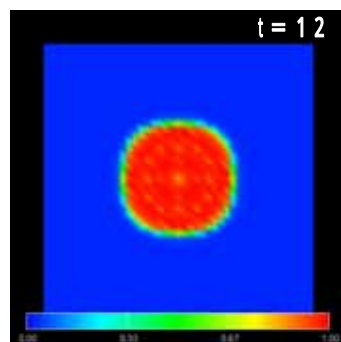
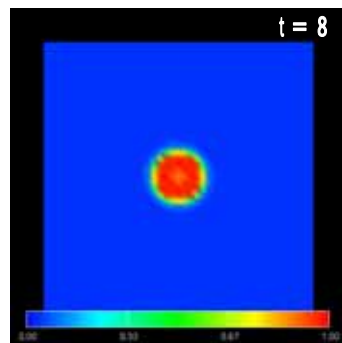
光による微弱な励起状態がコヒーレントに物質全体に広がっていく現象は、スイッチングデバイスへの応用においても重要であるが、この現象の理解において主要な問題とされる励起ドメインの動力学的な構造を調べるために、グリッドを用いた数値解析を行なった。

1. 励起ドメインの広がり

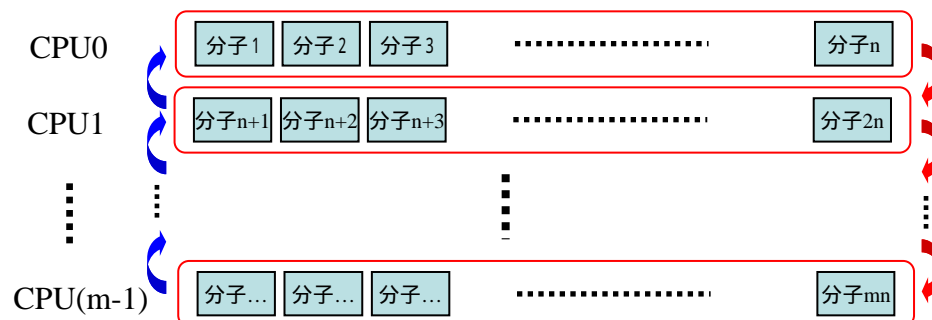


← 約50nm →

大規模計算によって
ドメイン成長の動力学が
初めてわかった。
($t = 1$ は約150-200fsecに対応)



2. GridMPIを用いたマルチプラットフォームでの計算検討



各CPUに n 分子を割り付け

分子内の動力学は厳密に解き、1ステップ毎にノード間通信によって分子の歪みや励起密度の情報を交換

通常分子動力学計算よりも遥かに計算コストが高い。
gridMPIによる並列化と大規模計算が必須