

演 題	なぜ材料開発に大規模計算が必要か	
発 表 者 (所 属)	長嶋雲兵 (産業技術総合研究所グリッド研究センター)	
連 絡 先	〒305-8568 つくば市梅園 1-1-1 産業技術総合研究所グリッド研究センター tel: 0298-61-5730 Email: u.nagashima@aist.go.jp	
キ ー ワ ー ド	材料開発、大規模計算、専用計算機、グリッド	
開 発 意 図 適 用 分 野 期 待 効 果 特 徴 な ど	材料開発のための計算機シミュレーションに何故大規模計算が必要であるのかをタンパク質の分子動力学計算と環境ホルモンの生理活性の計算の2つの例を示しながら説明し、さらに大規模計算のための方法として専用計算機開発とインターネット上の分散情報処理手法 (Grid 技術) を紹介する。	
環 境	適 応 機 種 名	
	O S 名	
	ソ ー ス 言 語	
	周 辺 機 器	
流 通 形 態 (右 の い ず れ か に を つ け て く だ さ い)	・日本コンピュータ化学会の無償利用ソフトとする	具 体 的 方 法
	・独自に頒布する ・ソフトハウス、出版社等から市販 ・ソフトの頒布は行なわない ・その他 ・未定	

1. 大規模系を小規模モデルで近似すると何が起こるか

大規模科学計算機シミュレーションの究極の目的は、数多くのリアルな実験に代わり、計算機内に自然を正しく再現することで、安価で安全で高速な実験環境を構築し、材料の開発期間の短縮と開発コストの削減にある。

ところが、材料系の計算機シミュレーションは、その計算量が膨大であるため、設計したい大きさの大規模分子ではなくそれを簡素化した小規模モデル分子への適用がせいぜいである。実際、数年前までは数百基底 (数十原子) の分子軌道計算でさえ多大な労力を必要としていた。そのため、分子設計や材料設計に必要な情報をなかなか十分与える事ができないでいる。

実際に計算が可能となるように、深い考察無しに物理的に根拠のない近似を仮定したり、取り扱う系のサイズを縮小したりすると実験を正しく再現できないことが多かったり、特別な効果だけを強調

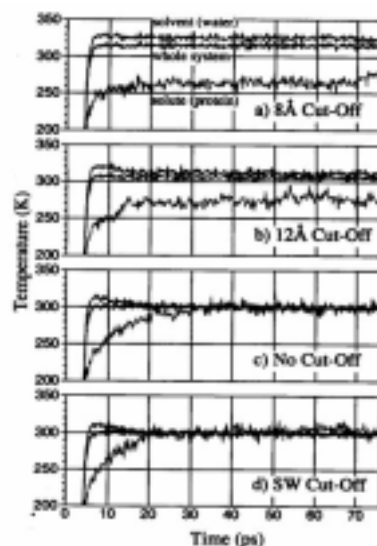


Figure 1 Temperature profiles during the simulations. Temperature separation between solute (protein) and solvent (water) is observed in CR (a) and C12 (b) but not in NC (c) and SW (d). Explanations for abbreviations CR, C12, NC and SW, see text.

してしまうことが多い。そのため、シミュレーション結果の正しい比較ができないことが多くなる。

Figure 1 に、小田ら[1]がMD専用計算機 MDE を用いて行った例を示す。クーロン力のカットオフを仮定したMD計算を行うとタンパク質の内部温度と外部温度の差が現れ、物理的に全く正しくない結果を与え、正しく計算すると両者が一致する例である。とくに薬物設計の現場で重要な基質と受容体の相互作用の計算は、手を抜いて系を小さくすると実験を再現せず、手を抜かず大規模計算すると実験を再現することが多い。講演ではいくつか例を示すが、特に生体物質などでは弱い相互作用が重要なので、系のサイズの縮小は致命的なエラーを与えることが多い。

2.より高速な計算機・ネットワークを、高速で広大な記憶装置を – より精密な設計に向けて –

大規模計算を可能とするためには、大規模な計算を可能とする計算機システムの開発が欠かせない。汎用大規模計算機の開発には莫大な予算が必要であるが、専用計算機の開発は比較的安価に計算装置の高速化と高精度化が実現可能である。Figure 2 に我々が開発している組込型分子軌道計算専用計算機 EHPC の外観を示した。Figure 3 は、性能評価の結果である。高い線形の性能向上が得られている



Figure 2 System overview of EHPC

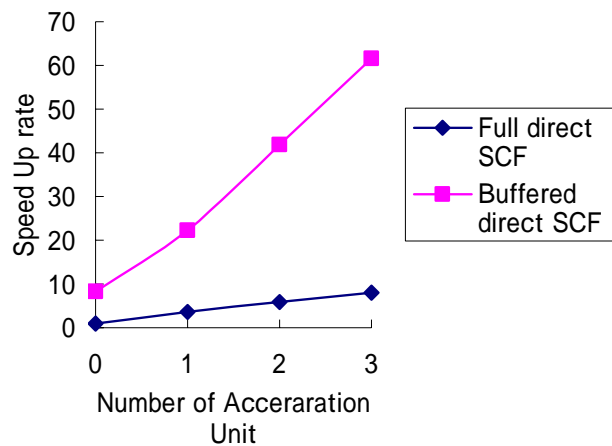


Figure 3 Speedup rate of number of units

また、最近、ネットワークに結合された計算資源の効率的利用と高度集約化のために Grid 技術といわれる広域分散情報処理技術が注目を集めている。今や家庭や事務所にある PC の 95%は利用されていないとの報告もある。Grid-Computing は、それを科学技術計算に利用しようと言ういささか虫の良い企てである。Grid 技術は、ネットワーク上の計算機資源へのフレキシブルなアクセスおよび統合を可能とし、欲しいときにそれなりの高性能仮想計算機システムの構築が可能である。Grid 技術をもちいることで、コンビナトリアルコンピューティングが可能となりパラメータ最適化等多次元最適化やインシリコでのハイスループットスクリーニングやハイブリッドコンピューティングによる知識サーチとシミュレーションの統合が可能となると期待されている。

専用計算機や Grid 技術で作られる新たな計算機システムは、計算機アーキテクチャの変更である。ベクトル計算機が小原の分子積分計算法の開発を引き出したように、新たなアーキテクチャ上での全く新しい計算法が生まれ、大規模計算機シミュレーションが容易に実行可能な環境が作られるのは、そう遠く無いかもしれない。楽観的すぎるか？

参考文献 [1] Oda, Miyagawa, Kitamura, Molecular Simulation, 167(1996).