

# 準古典マッピング動力学シミュレーション法 プログラムの実装とベンチマーク

近畿大学 理工学部 鬼頭宏任

名古屋大学大学院理学研究科 木村明洋

目的 多くの色素サイトを持つ光合成系の光捕集機構を調べるために、電子非断熱分子動力学シミュレーションのプログラム実装と精度検証を行う。

内容 2019年に提案された新規準古典マッピング動力学法である修正線形化半古典(mLSC)法のプログラムをMPIによる並列化実装し、ベンチマーク計算を行った。

結果 FMO光合成アンテナ蛋白質3量体に対する24サイトモデルの励起エネルギー移動をSQUID 4ノード並列でシミュレートすることに成功した。

利用した計算機 SQUID 汎用CPUノード群

20ピコ秒シミュレーションに使用した資源

実行時間 3.74 時間

並列化 4ノード (304プロセス)並列

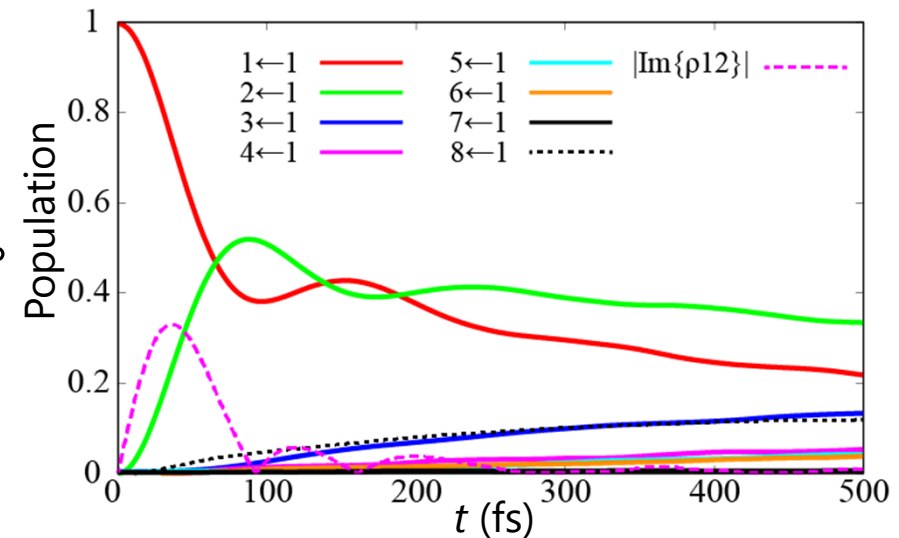


図 FMO3量体モデルに対するmLSC法シミュレーション結果