

研究報告書

「数学を応用した新しい動力学シミュレーションの開発」

研究タイプ: 通常型

研究期間: 平成 21 年 10 月～平成 25 年 3 月

研究者: 一宮 尚志

1. 研究のねらい

分子動力学シミュレーションは、物理・化学・工学・医学など、多くの分野において研究に不可欠なツールとなっている。しかし分子動力学シミュレーションの応用が広がるにつれて、従来のシミュレーション法には多くの限界があることも明らかになってきた。その中でも応用上重要と思われるのが、計算時間の問題である。新規医薬品の開発などにおいては、1ミリ秒～1秒程度の間のタンパク質の動きをシミュレーションする必要がある。しかしながら、通常の MD でこのようなシミュレーションを行おうとすると、数か月から1年以上の時間が必要となり、大量にシミュレーションを行うのは現実的ではない。そこで、計算を高速で行うため、物理学などの知識を応用したさまざまなシミュレーション手法が提案されてきたが、数学的考察を用いた高速化のアプローチは存在しなかった。分子動力学は数学の中でも力学系と呼ばれる分野と関係が深い。動力学シミュレーションを数学的に解析し、力学系のアイデアを応用することで、高速な動力学シミュレーションに貢献可能ではないかと考えられる。

一方、分子動力学シミュレーションを数学的に見直すことは、数学にとっても意味があると思われる。たとえば、分子動力学シミュレーションでよく使われる能勢—フーバー方程式は、過去の力学系研究ではあまり考えられてこなかった構造をしている。このような力学系の構造を数学的に明らかにすることで、数学の進歩に寄与することが第二の狙いである。

まとめると、本研究の狙いは以下の2点となる。

- A. 数学の知識を活用し、新しい高速な動力学シミュレーション法を開発する。
- B. 分子動力学シミュレーションのアルゴリズムを数理の観点から分析し、その構造を調べる。

2. 研究成果

(1) 概要

繰り込みの考え方を応用した新しい動力学シミュレーションの手法を考案した。一般に繰り込みとは、系の性質をできるだけ変更せずに粗視化を行う技法である。短い時間空間スケールでの振る舞いを、パラメータの変化という形に「繰り込む」ことにより、大きな時間空間スケールでの系の振る舞いを記述する方程式を得ることができる。これを有効に使用えば、長時間の原子の振る舞いを記述する方程式を導出できるのではないかと、というのが本研究のアイデアである。繰り込みの手続きについては、数学や物理学において多くの手法が提案されているが、動力学シミュレーションに直接応用可能なものはなかった。

本研究において、研究者はランジュバン方程式(有限温度分子動力学シミュレーション

で使われる確率微分方程式の一種)の数値解法に対する新しい繰り込み法を考案し、これに基づいたシミュレーション法を提案した。確率微分方程式の数値計算法であるオイラー—丸山法について粗視化を行い、この繰り込みを用いた新しいシミュレーション法を考案した。この新しいシミュレーション法と、従来よく使われているオイラー—丸山法による数値計算の結果を、30個の原子からなる鎖の運動のシミュレーションで比較したところ

- ・ 計算結果自体はどちらも定量的に一致している
- ・ 計算時間は温度などの条件にもよるが、1/2～1/4程度に短縮化される
- ・ 従来方法では並列化による高速化は殆ど見られないが、新しい方法では並列化による高速化が大きく、場合によっては30%程度高速化する
- ・ ただしメモリ消費量は大きくなる

といったことが判明した。

以上のことから、この新しいシミュレーション技法は、比較的少ない原子の長時間の動きをスーパーコンピュータ上でシミュレーションする場合などに有効であると思われる。

(2) 詳細

研究テーマ A: 数学を応用した新しい動力学シミュレーション法の開発

繰り込みの考え方を応用し、新しい有限温度での動力学シミュレーションの手法を提案した。具体的には、以下の通りである。

有限温度の動力学シミュレーションにおいて、よく使われる方程式にランジュバン方程式がある。この方程式を数値的に解く手法としては、オイラー—丸山アルゴリズムがよく使われている。

$$\frac{dx}{dt} = -\eta \frac{\partial V(x)}{\partial x} + \sigma \xi \quad \text{ランジュバン方程式}$$

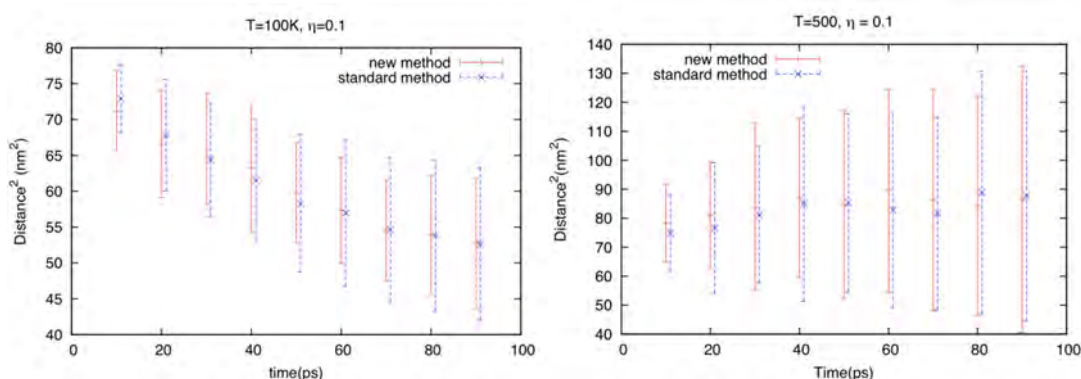


$$x(t + \Delta t) = x(t) - \eta \frac{\partial V(x)}{\partial x} \Big|_{x=x(t)} + \sigma \sqrt{\Delta t} \xi$$

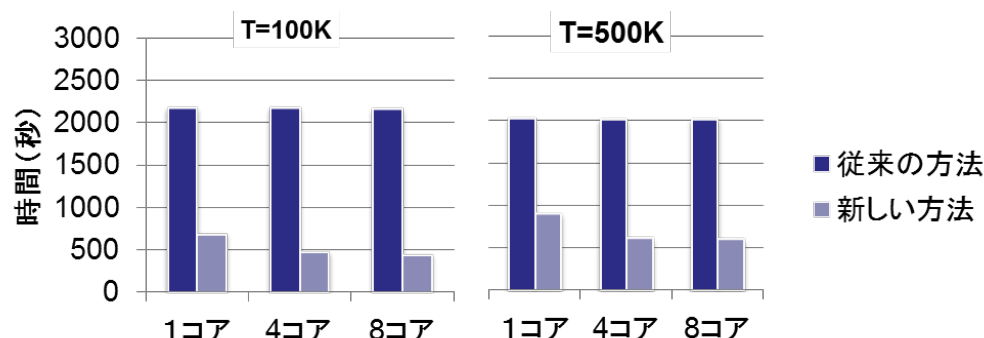
オイラー—丸山アルゴリズム

このような数値計算のアルゴリズムは、ある時刻 t の状態 $x(t)$ から時刻 $t + \Delta t$ の状態 $x(t + \Delta t)$ への写像とみなすことができる。この写像に対して繰り込みの手法を適用するというのが今回提案した手法の主要なアイデアである。繰り込みとは、一般に粗視化の効果をパラメータの変化に押し込めることで、モデルの定量的変化を抑える手法である。今の場合には、 $x(t) \rightarrow x(t + \Delta t)$ という写像から、 $x(t) \rightarrow x(t + 2\Delta t)$ という写像を構成する手法となる。この手法をもう一度繰り返すと、 $x(t) \rightarrow x(t + 2\Delta t)$ という写像から、 $x(t) \rightarrow x(t + 4\Delta t)$ という写像を得られる。これを利用して、 $x(t) \rightarrow x(t + 2^n \Delta t)$ という写像を構成し、これを用いて動力学シミュレーションを行おう、というのが本手法のアイデアである。今回は、初期値 $x(t)$ と分散 σ という二つのパラメータに粗視化の効果を繰り込む手法を考案した。

この新しいシミュレーション法の性能を確かめるため、新しい手法と従来からあるオイラー—丸山法によるシミュレーションを行い、その結果を比較することにした。モデルとしては、炭素原子30個が鎖状につながった系を仮想的に考え、温度100Kの場合500Kの場合、各々30回ずつの数値シミュレーションを行った。



シミュレーション結果の一部を上図に示す。これは、鎖の両端の原子の間の距離の時間変化を示したものであり、点は平均値、縦線の長さは標準偏差を表す。今回提案した方法による結果(赤)と、従来のオイラー—丸山法(青)で示した結果は定量的に一致していることがわかる。



シミュレーションに要した時間を上に示す。今回開発したシミュレーション法は、温度に依らず従来法より高速であった。特に低温、かつ使用するCPUコアの数が多い場合に高速化が顕著であり、温度100K、8コアの場合には4倍近くまで高速化されている。

以上のように、今回新しく開発したアルゴリズムは、既存のアルゴリズムと定量的に一致する結果を与える高速なアルゴリズムである。欠点としては、繰り込みの過程において行列計算を必要とするためメモリの消費量は大きくなることが挙げられる。この点から、本提案手法は比較的少数の原子からなる系を長時間シミュレーションするのに向いている手法と思われる。この内容は現在論文に纏めて投稿中である。

研究テーマ B: 分子動力学のアルゴリズムの数学的解析

能勢—フーバー力学系の挙動について、数値計算を用いた研究を行った。能勢—フーバー力学系は、有限温度でのシミュレーションによく使われるモデルであるが、その詳しい性質はよくわかっておらず、一部の系で KAM 的なトーラスが存在するとの報告があるのみである。

本研究では、特に遷移現象のダイナミクスの理解を中心に研究を行った。一つのエネルギー極小状態から別のエネルギー極小状態への系の変化である遷移は、以下の理由で研究対象として興味深い。

- ・ハミルトン系の遷移現象は、ヘテロクリニック軌道や、法双曲不変多様体の理論等を通してよく理解されている。能勢—フーバー力学系はハミルトン系ではないが、KAM 的なトラス構造を持つなどハミルトン系に似た特徴を持っており、ハミルトン系の理論の拡張で対応できる可能性がある。
- ・能勢—フーバー力学系は、Gibbs 分布を不変測度として持つことが知られているが、遷移確率に対する Arrhenius 則が成り立つかどうか不明である。
- ・応用の面では、遷移現象の分子動力学シミュレーションはもっとも難しい問題のひとつである。能勢—フーバー力学系の遷移現象について理解することで、遷移確率を加速させる新たな方法が得られる可能性がある。

$$\frac{dx_i}{dt} = p_i/m_i$$

$$\frac{dp_i}{dt} = -\frac{\partial V(x)}{\partial x_i} - \frac{\eta p_i}{Q} \quad \text{能勢—フーバー力学系}$$

$$\frac{d\eta}{dt} = \sum \frac{p_i^2}{m_i} - 3Nk_B T$$

以上のような動機から、遷移現象を伴うモデルとして、1 次元周期ポテンシャル中の能勢—フーバー力学系について数値的に研究を行った結果、以下のようなことが分かった。

- ・遷移の時間相関が大きく、Arrhenius の法則は成り立っていない。
また、その相関は物理的な意味を持たないパラメータに強く依存している。このことから、遷移を伴うダイナミクスのシミュレーションを行うのに能勢—フーバー力学系は適していないものと思われる。
- ・ハミルトン系の遷移の理論では、不安定固定点を繋ぐヘテロクリニック軌道が重要な役割を果たすことが知られているが、能勢—フーバー力学系で不安定固定点に対応するものは、ポテンシャルの微分が0の点に存在する不安定解($x=\text{一定}$, $p=0$)である。しかしながら、ハミルトン力学系におけるヘテロクリニック軌道に対応するものを考えるのはこの系では容易ではなく、さらに研究が必要である。

3. 今後の展開

研究テーマ A: 数学を応用した新しい動力学シミュレーション法の開発

今回開発した数値計算アルゴリズムに関して、さらに改良、高速化を重ねると共に、実用化を図りたいと考えている。特に、スーパーコンピュータを用いたタンパク質の折り畳みのシミュレーション技術として、実用化を目指していきたい。

研究テーマ B: 分子動力学のアルゴリズムの数学的解析

今回の研究では具体的な成果は出なかったが、多くの研究者から興味深く、意義のある問題であると評価を頂いている。今後は力学系により詳しい数値研究者の協力を得つつ、研究を進め、ハミルトン系の遷移の理論に対応する能勢—フーバー力学系の遷移の理論を構築したい。

4. 自己評価

狙いのうち、数学の知見や技法を応用したシミュレーション技法の開発に関しては、従来の方法よりも高速なシミュレーション技法を提案することができた。実際のシミュレーションに応用するには時間が足りず間に合わなかったが、まずまずの成果であると評価している。

一方、分子動力学シミュレーションアルゴリズムの数学的解析に関しては、予定よりも成果が下回ることになった。これに関しては、事前に想定していたよりもはるかに問題が難しく、研究者の数学的素養では解決できなかったことが要因である。できる限り早期に、ハミルトン力学系等に詳しい研究者の協力を仰ぐべきであったと反省している。

5. 研究総括の見解

ミクロの支配法則からマクロの振る舞いを導出することは、我々の世界の階層性を理解する上で本質的であり、統計力学の基本問題である。分子動力学法はミクロの世界での振る舞いを有効に計算するために開発された一般的な方法であるが、要素数が膨大な場合や、長時間計算には現実的でないことが多い。一宮氏は繰り込み群の手法を用いて、この手法の加速化を試み、小数系の場合には、精度を保ちつつ、その加速化に成功した。これは今後の発展によっては、大きなポテンシャルをもつと言える。しかし生命系や実際の材料系においては、関与する要素数は多く、メモリー消費も無視できなくなるので、より本質的な改良が不可欠であろう。しかし、元の問題の困難さを考えると、一つの一里塚を残したといえる。今後の新たな数学との協働によりブレークスルーを目指して欲しい。

6. 主な研究成果リスト

(1) 論文(原著論文)発表

なし

(2) 特許出願

研究期間累積件数: 0件

(3) その他の成果(主要な学会発表、受賞、著作物、プレスリリース等)

学会/国際会議発表

1. Takashi Ichinomiya, "Deterministic Diffusion in Nose-Hoover system", StatPhysHK, HongKong Baptist University, 2010.7.14
2. Takashi Ichinomiya, "Mathematical Aspect of Molecular Dynamical Simulation methods", International work shop "Emerging Topics in Nonlinear Science", Shross-Goldrain, Italy, 2010.9.15
3. Takashi Ichonomiya, "Renormalization approach to solve Langevin's equation", EASIAM 2011, Waseda University Kitakyushu Campus, 2011. 6. 29.
4. 一宮 尚志, "Langevin 方程式の数値計算に対する繰り込み的アプローチ", "日本物理学2011年秋季大会、富山大学", 2011.9.22
5. Takashi Ichinomiya, "Renormalization approach to solve Langevin equation numerically", Dynamics Days US 2012, Baltimore, 2012. 1.5