

Student ID

Name

問1 分子力学 (MM) と分子動力学 (MD) の違いを説明せよ。

問2 分子動力学法において、結合原子間の相互作用(bonded interaction)としてモデル化されているエネルギーの名称を3種類あげ、ごく簡単に説明せよ。

a)

b)

c)

問3 分子動力学法において、非結合原子間の相互作用(non-bonded interaction)としてモデル化されているエネルギーの名称を2種類あげ、ごく簡単に説明せよ。

a)

b)

(裏面へ続く)

問4 上記の問2および問3で掲げた合計5種類のエネルギーの計算の中で、多数の原子からなる系の分子動力学シミュレーションを1ステップ進めるために、もっとも多くの計算を要するのは、どのエネルギーの計算か。1つだけを選び、その理由とともに述べよ。

問5 (optional : 補足問題) 多数の原子からなるある系の分子動力学シミュレーションは、100GFlops の計算機上では1ステップあたりに実時間で1 sec. かかるという。ここで1ステップは 1 fs (femto sec., 10^{-15} sec.)にあたる現象を再現するための計算である。

(a) 1 ms (mili sec.)相当のシミュレーションを計算をするには実時間でどれだけかかるか。

(b) ここで仮に、計算機システムの全体的な性能に比例して、シミュレーションの計算速度が決まると仮定すると、100PFlops (Peta は 10^{15})の計算機があれば、1ms の計算にかかる時間はどれだけか？

(c) Top500 におけるベンチマーク性能が 100PF を超える計算機が登場するのは、西暦何年くらいと予想できるか？

(d) 「計算機システムの全体的な性能に比例して、シミュレーションの計算速度が決まる」という仮定に無理があるとしたらどのような点か。説明せよ。