

ABINIT-MP(X) による京での FMO 計算

(東大生産研¹, 立教大理², みずほ情報総研³, 産総研⁴, お茶大院人文創成科学⁵, 神戸大院シス情⁶) 沖山 佳生¹, 望月 祐志^{1,2}, 福澤 薫^{1,3}, 古明地 勇人⁴, 森 寛敏⁵, 渡邊 千鶴¹, 田中 成典⁶

FMO calculations with ABINIT-MP(X) on the K computer

(Univ. Tokyo, IIS¹, Rikkyo Univ.², Mizuho-IR³, AIST⁴, Ochanomizu Univ.⁵, Kobe Univ.⁶)

Y. Okiyama¹, Y. Mochizuki^{1,2}, K. Fukuzawa^{1,3}, Y. Komeiji⁴, H. Mori⁵, C. Watanabe¹, S. Tanaka⁶

【序論】フラグメント分子軌道法 (FMO 法)[1] 計算プログラムである ABINIT-MP(X)[2,3] を用いて、これまで様々なタンパク質をはじめとする大規模生体分子系の計算が行われている。Fortran 言語および標準的な並列化手法を用いて開発されて来た ABINIT-MP(X) は汎用性のあるプログラムとして PC クラスタから個人のワークステーションに至る様々な計算環境で動作し、特に地球シミュレータ (ES2) においては、ベクトル機向けチューニングによって、世界最大規模の量子化学計算を非常に高効率で実行している (インフルエンザウイルス膜タンパク質とその抗体複合体 36160 原子系に対する FMO2-MP3/6-31G が 1024VPU を用いて 5.8 時間で完走 [4])。2012 年秋から本格稼働されるペタスケールスパコンである京においても、超並列性とハードウェアの特徴を活かしてプログラムの性能を発揮し、実用性のある大規模 FMO 計算を実行することが重要である。

その実用上の一つの計算モデルが、高次多体展開 FMO 計算による高精度詳細相互作用解析である。我々のグループでは 4 体補正まで取り込んだ FMO4 計算 [5]

$$E_{\text{total}}^{\text{FMO4}} = \sum_I E_I' + \sum_{I>J} \Delta \tilde{E}_{IJ} + \sum_{I>J>K} \Delta \tilde{E}_{IJK} + \sum_{I>J>K>L} \Delta \tilde{E}_{IJKL} \quad (1)$$

を開発し、従来より細かいフラグメント分割手法と組み合わせることで、精度を落とすことなく、さらに詳細なフラグメント間相互作用 (IFIE) 解析の提案を行っている。このような詳細な分割が機能部位ごとの相互作用解析を可能とし、近年注目されている創薬手法の一つである fragment-based drug design (FBDD) の観点からも、FMO 法の創薬への応用上重要な役割を果たすことが期待される。その一方で、多体展開項を 3 体、4 体へと拡張することで、SCF ならびに高次相関計算の対象となるフラグメントペアの組み合わせが増大し、系全体での計算コストが問題になってくる。しかし、フラグメントサイズの縮小とそのようなタスクリストの増加は京スパコンのような省メモリ型超並列計算機には上手くフィットし、2 体計算まででは満たすことのできなかった多数の並列ノードを利用することで、膨大なフラグメントペアを一気に処理することが可能となる。

また、超並列性を活かした計算モデルとして、分子動力学 (MD) と組み合わせ、多数の構造サンプリングを実行することが考えられる (FMO-MD [6])。複数のジョブを並列的に処理することによって、これまで取得が困難であった量のアンサンブルを用いた統計的な議論が可能になれば、大規模分子系における一つの大きなブレイクスルーを迎えることが期待される。

本発表では、京の試験利用期間のトライアル枠 (192 ノード / 1536 コア、1 時間) で行ったテスト計算の結果について報告を行う。

【結果と考察】ここでは京を用いた FMO4 計算の実行結果を紹介する。テスト計算には半径 15Å で発生させた droplet 構造の水クラスタ (分子数 418) を用いた (図 1)。また MP2 レベルの計算を基底関数 6-31G と 6-31G** について行い、フラット MPI による並列化、フラグメントごとに割り当てたコア数を 1 とした。ここで、それぞれ基底関数の数が 5434 および 10450 であり、分極関数の追加による積分コスト増を考慮しても、問題の規模が約 2 倍の増加に対して、計算時間も 2 倍強と、ほぼ線形にスケールしていることが分かる (表 1)。また、両基底で SCF の方が MP2 よりもコストが高いことも見てとれる。その他の応用事例やハイブリッド並列による実行性能は当日ポスターセッションで報告する。

表 1: FMO4-MP2 計算の計測時間とタスクリスト数

	6-31G	6-31G**	Task list	($_{NF}C_{nmers}$)
Monomer SCF	60.5	85.1	418	(418)
Monomer MP2	3.3	3.3		
Dimer SCF	13.4	19.3	5219	(87153)
Dimer MP2	11.5	11.4		
Trimer SCF	65.1	123.3	21180	(12085216)
Trimer MP2	30.2	64.8		
Tetramer SCF	216.4	463.1	40811	(1253841160)
Tetramer MP2	117.3	340.9		
FMO (Total)	600.9	1301.0		

【謝辞】本研究は東大生産研 RISS プロジェクトの支援のもとで行われている。

【参考文献】 [1] K. Kitaura, *et al.*, *Chem. Phys. Lett.*, **312** (1999) 319. [2] T. Nakano, *et al.*, *Chem. Phys. Lett.* **351** (2002) 475. [3] Y. Mochizuki, *et al.*, *Chem. Phys. Lett.* **457** (2008) 396. [4] Y. Mochizuki, *et al.*, *Chem. Phys. Lett.* **493** (2010) 346. [5] T. Nakano, *et al.*, *Chem. Phys. Lett.* **523** (2012) 128. [6] Y. Komeiji, *et al.*, InTech Open Access Review Journal (<http://bit.ly/HkefpI>).

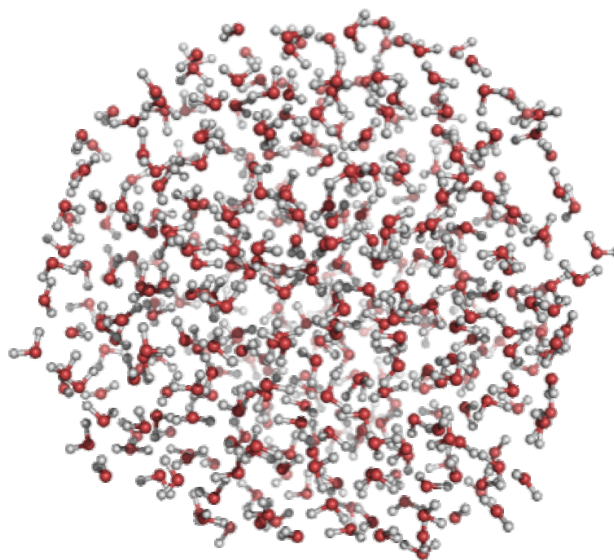


図 1: 水クラスタ (H₂O)₄₁₈ の構造