

## 4E12

### NTChem: 超並列環境に資する分子科学計算ソフトウェアの開発

(理研・計算科学研究機構) 中嶋隆人

NTChem: a high-performance software package for molecular electronic structure calculation

(RIKEN AICS) Takahito Nakajima

量子化学に基づいた分子科学計算ソフトウェアは物質科学・生命科学・モノづくりなどの多くの分野の共通基盤である。Gaussian (米国) や GAMESS (米国) などの量子化学計算ソフトウェアは計算科学者や実験科学者を問わず世界中で幅広く利用されている。コンピュータの高度化・高性能化に伴い、大規模な分子系を高精度に計算する要望は急速に増しつつある。この要望に応えるため、超並列計算が可能で一般ユーザーが利用できる国産分子科学計算ソフトウェアの開発が国際的にも急務である。広く用いられている既存ソフトウェアの多くは単一プロセッサの時代に設計・開発されたものであり、その拡張としての単純な並列化は可能であるが、京コンピュータのような超並列スーパーコンピュータにおいて並列化効率が問題となる。全系丸ごと計算に関して言えば、千原子分子程度の第一原理電子状態計算が上限で、新規の機能発現などが期待できるナノスケールサイズの数万原子系に対する計算は不可能である。また、数百原子分子系の第一原理化学反応計算も多数の電子状態計算が必要であり、ほぼ困難である。FMO法のような領域分割法を使っても並列化効率の点では数万原子系が限度であろう。これらの問題について、分子化学分野をはじめとする多くの領域において京コンピュータを利用した解決の強い要望が出ている。このため、理化学研究所・計算科学研究機構・量子系分子科学研究チームでは以下に示す研究を行い、幅広い分野の多くのユーザーの利用に資する汎用分子科学計算ソフトウェア「NTChem」の開発を行ってきた。

- (1) 他の量子化学計算プログラムでは扱うことができない大規模分子向け分子計算法, 高速計算法, 高精度分子計算法の理論とそのアルゴリズムを開発する。
- (2) それらの理論・アルゴリズムに基づき, 我が国独自の分子科学計算ソフトウェアを新たに開発し公開することで, タンパク質の丸ごと計算のような数万原子分子の電子状態計算や, 数百~千原子分子系の化学反応の詳細な追跡計算を高速かつ高精度に実現する。

「NTChem」は一から設計をした新しい国産分子科学計算ソフトウェアである。既存ソフトウェアの持つ多くの機能をカバーしつつ, われわれが新たに開発してきた理論手法の集大成でもあって, 他のプログラムでは利用することのできない多くの量子化学計算法を含んでいる。「NTChem」の第一版には数千原子分子系に対する第一原理電子状態計算や数百原子分子系の化学反応過程追跡計算を実現するための分子科学理論が実装されている。さらに, 京コ

ンピュータなどのマルチコア超並列クラスタ計算システムの性能を引き出すことが可能な並列アルゴリズムが実装されている。「NTChem」の第一版の主な機能は以下の通りである。

- (1) Hartree-Fock 法および密度汎関数 (DFT) 法に基づく基底状態の電子状態計算
- (2) 時間依存密度汎関数法と遷移ポテンシャル法に基づく励起状態の電子状態計算
- (3) GFC 法, RIDFT 法, Dual-level DFT 法などによる線形あるいは低スケーリング DFT 計算
- (4) PDM や擬対角化法などの対角化フリー法による低スケーリング SCF 計算
- (5) Coupled-cluster 法と量子モンテカルロ法に基づく基底状態および励起状態の高精度電子相関計算
- (6) 高並列化 RI-MP2 法による高精度大規模分子電子相関計算
- (7) 高次 Douglas-Kroll 法や RESC 法などに基づいたスピン-軌道相互作用を含む 2 成分相対論的電子状態計算
- (8) QM/MM 法や ONIOM 法による巨大分子のモデル計算
- (9) 効率良い化学反応経路探索計算
- (10) ab initio 分子動力学法計算
- (11) NMR 化学シフトや電子スピン共鳴などの磁氣的性質の計算
- (12) Maximally interaction orbital (MIO) 法や相互作用軌道 (PIO) 法による分子間相互作用解析

本年秋には京コンピュータ上において「NTChem2013」を一般公開する予定である。本講演では「NTChem」の特徴、機能、性能に関し実例を踏まえながら紹介する。

## NTChem



既存ソフトウェアの持つ多くの機能をカバーし、既存ソフトウェアでは出来ない独自の方法を含む(相対論計算, 大規模DFT, RI-MP2, 高次CC, QMC, ...)

<p style="text-align: center; margin: 0;"><b>HF &amp; DFT</b></p> <ul style="list-style-type: none"> <li>- 閉殻系, 開殻系 (1+2成分)</li> <li>- 各種汎関数: LDA, GGA, 混成GGA, LC-GGA</li> <li>- 各種数値グリッド</li> <li>- エネルギー微分 (1+2成分)</li> <li>- 励起状態TDDFT</li> </ul>	<p style="text-align: center; margin: 0;"><b>高速SCF計算</b></p> <ul style="list-style-type: none"> <li>- 積分計算高速化</li> <li>- 各種収束法: DIIS, 2次収束, 直接最小化</li> <li>- 各種SCF技術: 非整数占有数, レベルシフト</li> <li>- 対角化フリー法 (PDM, 擬対角化)</li> </ul>
<p style="text-align: center; margin: 0;"><b>大規模分子計算</b></p> <ul style="list-style-type: none"> <li>- クーロン積分 Order-N化(GFC)</li> <li>- Resolution of Identity(RI)法</li> <li>- Dual-level DFT</li> <li>- RI-MP2法</li> <li>- 領域分割法 (ONIOM, QM/MM)</li> </ul>	<p style="text-align: center; margin: 0;"><b>その他</b></p> <ul style="list-style-type: none"> <li>- 波動関数法 (CC, MP2)</li> <li>- 擬ポテンシャル (ECP, MCP)</li> <li>- 各種相対論的方法: DKn, RESC, RA, スピン-軌道効果</li> <li>- NMR, EPR, 磁化率計算</li> </ul>