

[はじめに]

DNA や生体高分子などの巨大系を *ab-initio* 計算とほぼ同等の精度で解析する方法として FMO 法が注目されている。以下、FMO 法の特徴を挙げる。

- (1) 通常 Hartree-Fock レベルの非経験的分子軌道法では、分子の大きさの 4 乗に比例した計算時間がかかるが、FMO 法では 2 乗に比例することになり、大幅な高速化が可能である。
- (2) 個々のフラグメント (ペア) の計算は独立して行うことが可能であり、各計算ノード間の通信量が少ないことから、FMO 法は並列計算に適したアルゴリズムである。
- (3) FMO 法は、個々のフラグメント (ペア) の電子状態を計算する方法に依存しないため、ほとんどすべての電子状態計算法を適用できる。

しかしながら、巨大系においては、大規模並列計算をもってしてもその計算コストは膨大となり、それを押さえることが求められている。計算負荷が特に大きいのはフラグメント間の静電相互ポテンシャル算定の部分であり、ここをいかに高速化するかが、全体の計算効率上昇につながる。本研究では、静電相互作用が多重極展開により表現できることに着目し、フラグメント間の静電相互作用を各フラグメントにおける多重極子間相互作用に置き換えることで精度よく計算の高速化が図れることを示した。

[FMO 法の原理]

FMO 法においては、最初に N 個のフラグメントに分割する。次にフラグメントをそれぞれ独立に計算する。フラグメントを計算する際に、計算するフラグメント以外の (N-1) 個のフラグメントからの静電ポテンシャルをフラグメントに足しこむ。(式 1)

$$H^I = H_0^I + \sum_n \sum_{J \neq I} V_J(\mathbf{r}_n) \cdots (1)$$

ここで、 H_0^I は、I フラグメントの KS ハミルトニアンであり、 $V_J(\mathbf{r}_n)$ は、J フラグメント内にある電子及び原子核 n からの静電ポテンシャルの和である。

次にフラグメントペアの計算を行う。フラグメントペアの計算の際には、フラグメントの計算の時と同様、そのフラグメントペアからの寄与を周りからの静電ポテンシャルで近似して取り込む。(式 2)

$$H^{IJ} = H_0^{IJ} + \sum_n \sum_{K \neq I, J} V_K(\mathbf{r}_n) \cdots (2)$$

ここで、 H_0^{IJ} は、I-J フラグメントペアの KS ハミルトニアンであり、 $V_K(\mathbf{r}_n)$ は、K フラグメント内にある電子及び原子核 n からの静電ポテンシャルの和である。

式1、式2を用いてそれぞれフラグメント、フラグメントペアのエネルギー E_i, E_{ij} を求め、これらから系の全エネルギー E を式(3)より導く。

$$E = \sum_{J>I}^N E_{IJ} - (N-2) \sum_I^N E_I \cdots (3)$$

[本研究の原理]

計算のボトルネックとなる静電相互作用を擬似古典粒子の張る多重極展開により近似することを考える。古典粒子 i により古典粒子 j が感じる静電相互作用 $V(\mathbf{r}_{ij})$ は式(4)のような展開点における多重極展開で表すことができる。

$$V(\mathbf{r}_{ij}) = q_j \left(\frac{Z_{iR}}{R_j} + \frac{\sum_{\alpha} \mu_{i\alpha} R_{i\alpha}}{R_j^3} + \frac{1}{2} \frac{\sum_{\alpha} \sum_{\beta} Q_{i\alpha\beta} R_{i\alpha} R_{i\beta}}{R_j^5} + \cdots \right) \cdots (4)$$

ただし、 r_{ij} は、粒子 ij 間の距離、 \mathbf{R}_j は展開点と粒子 j の距離ベクトルで、 R_j はそのノルム、 $R_{j\alpha}$ はその要素である。また、 q_j は粒子 j の電荷、 Z_{iR} は展開点周りに張る粒子 i の単極子能率、 $\mu_{i\alpha}$ は展開点周りに張る粒子 i の双極子能率、 $Q_{i\alpha\beta}$ は展開点周りに張る粒子 i の四重極子能率である。

(図1)

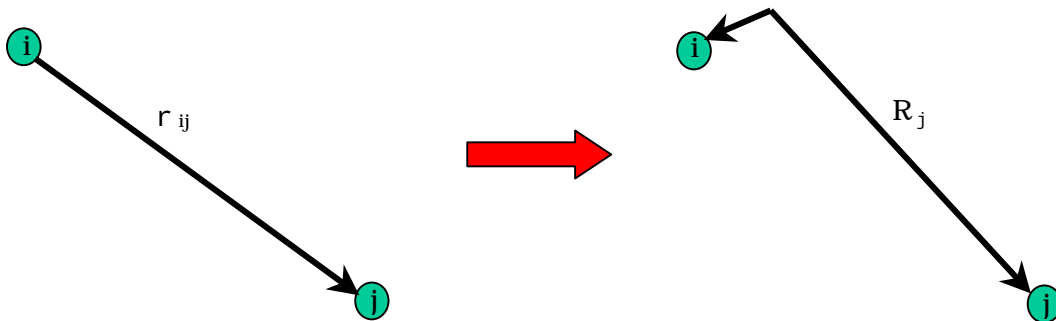


図1. 左のような i から j よりの静電相互作用を、展開点中心よりの多重極展開で表す。

量子系では、電子は空間分布している。そこで、本研究では、電子分布間の相互作用を擬似古典粒子で作られる多重極子相互作用で近似する。具体的には、量子化学計算により得られたフラグメントの誘起多重極子能率をもとに擬似的な古典粒子を置き、フラグメント間の静電相互作用は、この擬似的な古典粒子よりの作用に近似した。

当日は多重極子の次数と精度の関係などについて発表する。

本研究は科学技術振興事業団の計算科学技術活用型特定研究開発推進事業(ACT-JST)(研究開発課題「DNA のナノ領域ダイナミクスの第一原理的解析」)の援助を受けて行われました