

4E10 グリッド計算環境における生体分子の分子軌道計算

(産総研グリッド) 長嶋雲兵

新規産業創製へ向けて新規物質設計・製造の高速化・低コスト化が強力に押し進められている。産業界からはシミュレーション技術の高度化により、新規物質設計・製造におけるプロセス改革、設計時間の短縮による製品サイクルの向上、費用の低減、開発の上流工程強化による収益率の向上等が期待されている。また、新規物質設計、製造の工程だけではなく、例えば、遺伝子分野における解析技術の高度化は医薬品分野における遺伝子治療の活性化と新事業の展開が予想され、さらに医薬品開発においては、コンピュータケミストリーやバーチャライブラリなどによるシミュレーション技術の発達によって、新薬開発が安価で高速・安全に行える。このように、シミュレーション技術が高度化することによって、現実にはまだ実現できない物理的条件での計算機実験などが多く試され、様々な産業への波及的効果拡大が予想される。また、その適応市場規模が拡大するとともに、ソフトウェア開発、LSI技術等の要素技術の市場の活性化が可能になる。

生体分子の分子シミュレーションの特徴は、現実の物質の系のサイズが大きく、一つの物質の計算でさえも莫大な計算機資源を必要とすること、また、取り扱う系のサイズにより多数の異なった方法が存在すること、約10種類の原子の組み合わせによって分子が作られるために網羅的な探索を行うときに組み合わせ爆発が容易に起こることである。そのため単一の計算機システムでは、自ずと系のサイズや計算精度に制限がでてくる。現状では、計算機の急激な発展とともに、ナノテクノロジーなど実験技術の進歩により観測される系の粒子サイズが 10^5 程度に小さくなって来たことや、タンパク質等の結晶構造が精度良く測定されるようになってきたために、リアルな系のとり扱いも可能となってきた。しかし、まだまだそのサイズは小さい。取り扱える系の拡大は、分子シミュレーションの有効性を大きく広げることになる。

最近の高速ネットワークを基盤技術とするグリッド技術は、1) スケーラブルな計算機資源の拡大を可能とし、2) より大きな数の計算機システムを利用したポテンシャル面の計算などパラメータの網羅的探索を可能とする計算環境の構築をおこなう。そこでナノ粒子やタンパク質と低分子の分子シミュレーションを可能とするためにグリッド技術を用いた大規模分子シミュレーションプログラムの開発を行う必要がある。

分子レベルの現象の解析には、量子力学に基づく分子軌道法が用いられる。分子軌道法では、分子の安定構造、分子の生成熱、双極子モーメント、イオン化ポテンシャルなど分子独自の性質を得ることができる。タンパク質などの巨大分子に対する大規模分子軌道計算の困難さは、従来分子積分計算およびそれを要素とするフォック行列の生成にあったが、北浦のフラグメント分子軌道法[1]を始め、すでに並列処理やグリッド技術をもちいたフォック行列生成技術を開発し、フォック行列の高効率な生成を実現した。そのため現在の大規模系の分子軌道計算の困難は大規模一般化固有値問題を1つの計算機で解かねばならないところにある。具体的には一つの計算機上に搭載されたメモリサイズが取り扱えるサイズを決めている。その困難を打破するためには、大規模一般化固有値問題の並列分散処理技法の開発とその実装が必要である。これによりスケーラブルな系のサイズの拡大を実現する。具体的には、櫻

井と杉浦[2]によって開発された分散メモリ計算機システム上での大規模一般化固有値問題解法を実装し、大規模系に対する分子軌道計算を効率よく実行する環境を構築する。本方法は、分散並列処理向きの方法であり、従来法であるコレスキー分解法+ハウスホルダー法+バイセクション法に比べ並列分散性が高く、コレスキー分解法やハウスホルダー法のように非ゼロ要素が計算中に増加するという弱点もない。中規模のデータを用いた実験ではグリッド環境下でもほぼ台数に比例する性能向上が得られている。

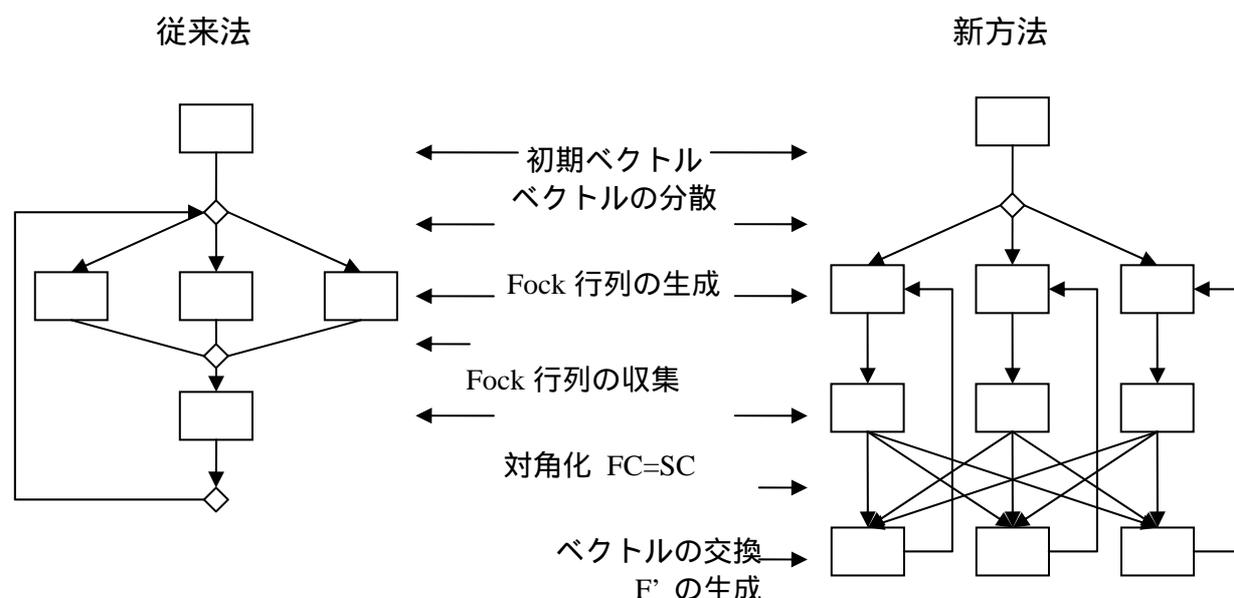


図1 分子軌道計算の従来法と新方法のアルゴリズムの比較

図1に従来の方法と新しい方法の模式図を示した。従来の方法は、行列要素は並列分散方式で生成するが、対角化は1つの計算機で実行する。新しい方法では、行列要素生成と対角化を並列分散方式で実行するため1つの計算機あたりのメモリ要求量は従来法に比べ格段に小さい。また、この方式では、計算機を増やすことにより利用可能なメモリ量がスケラブルに増加するので系のサイズの変化に柔軟に対応することができる。

グリッド技術はいうなれば計算アーキテクチャの変更である。ベクトル計算機の出現により小原の分子積分高速算法を始めいくつかの革命的な計算方法が出現したように、アーキテクチャの変更に伴い計算方法が急激な変化を受けることがある。そしてそれは従来の方法に比べ格段によい方法であることが多い。本研究により、グリッド技術をもちいた従来法の改良を行うことで、将来の計算法の急激な変化を起こすためのきっかけとなることが期待される。

参考文献

- [1] K. Kitaura, T. Sawai, T. Asada, T. Nakano, M. Uebayasi, Pair interaction molecular orbital Method: an approximate computational method for molecular interactions, Chem. Phys. Lett. 312 (1999) 319-324.
- [2] T. Sakurai and H. Sugiura, A projection method for generalized eigenvalue problems using numerical integration, J. Comput. Appl. Math. 159 (2003) 119--128.