

1P157 FMO-MO 法による大規模分子軌道計算: グリッド化の可能性

(科技振 CREST¹, 産総研 計算科学², 筑波大院 シス情³)

○梅田宏明^{1,2}, 稲富雄一^{1,2}, 渡邊寿雄^{1,2}, 多田野寛人³, 櫻井鉄也³ 長嶋雲兵^{1,2}

序

分子軌道の中で最も反応に関与しやすい軌道であるフロンティア軌道は、結合の生成・切断などに深く関与すると考えられ、化学反応の定性的な理解には欠かすことのできないものである。活性部位の特定などに利用できるフロンティア軌道のこの特徴は創薬などでは特に重要であり、生体高分子のような巨大分子に対する高速な分子軌道計算が求められるようになってきている。高度な並列化が可能な大規模分子軌道計算法であるフラグメント分子軌道(FMO)法[1]を拡張した FMO-MO 法[2]は、フロンティア軌道を得ることのできないという従来の FMO 法の大きな欠点を解消するものであり、今後広く利用されることが予想される。また分子全体の SCF 計算を行なわない FMO-MO 法ではフロンティア軌道付近の数個の分子軌道のみを計算すればよいため、固有値のエネルギーの範囲を指定して分子軌道を求めることのできる櫻井-杉浦法[3]が有効に利用できる。櫻井-杉浦法は密な通信を必要としないため、グリッド環境下でも十分な性能が発揮できると考えられる。本発表では、大規模計算を可能とするグリッド環境下での FMO-MO 計算の実現に向け計算量や通信量を見積もった。

FMO-MO 計算

FMO-MO 計算は主に(1)FMO 計算, (2)分子全体のフォック行列の作成, (3)フォック行列の対角化の3つのステップから構成されている(図 1)。図 2 に FMO 計算ステップのフローチャートとモデル DNA 分子(40 塩基対, 10108 基底, 図 3)を計算した場合の計算量および通信量を示した。フラグメント間及びフラグメント内の並列化が可能であるため、リモート実行プログラムとして MPI プログラムを呼ぶことのできる GridRPC(図 4, 例えば Ninf-G2[4])向きの計算であると言える。一方、巨大分子に適用した場合には密度行列の取り扱いが問題となる可能性がある。

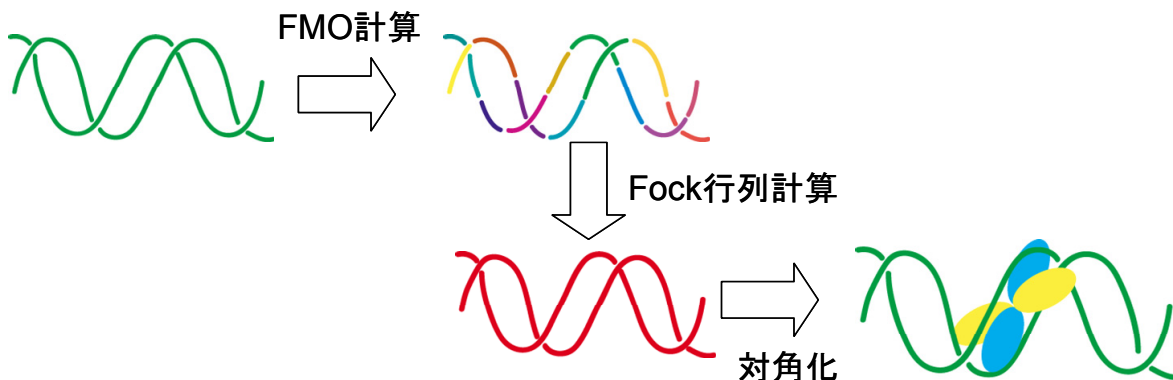


図 1 FMO-MO 計算の概念図。(1)FMO 計算 (2)フォック行列の作成 (3)フォック行列の対角化の 3 ステップにより分子軌道を求める。

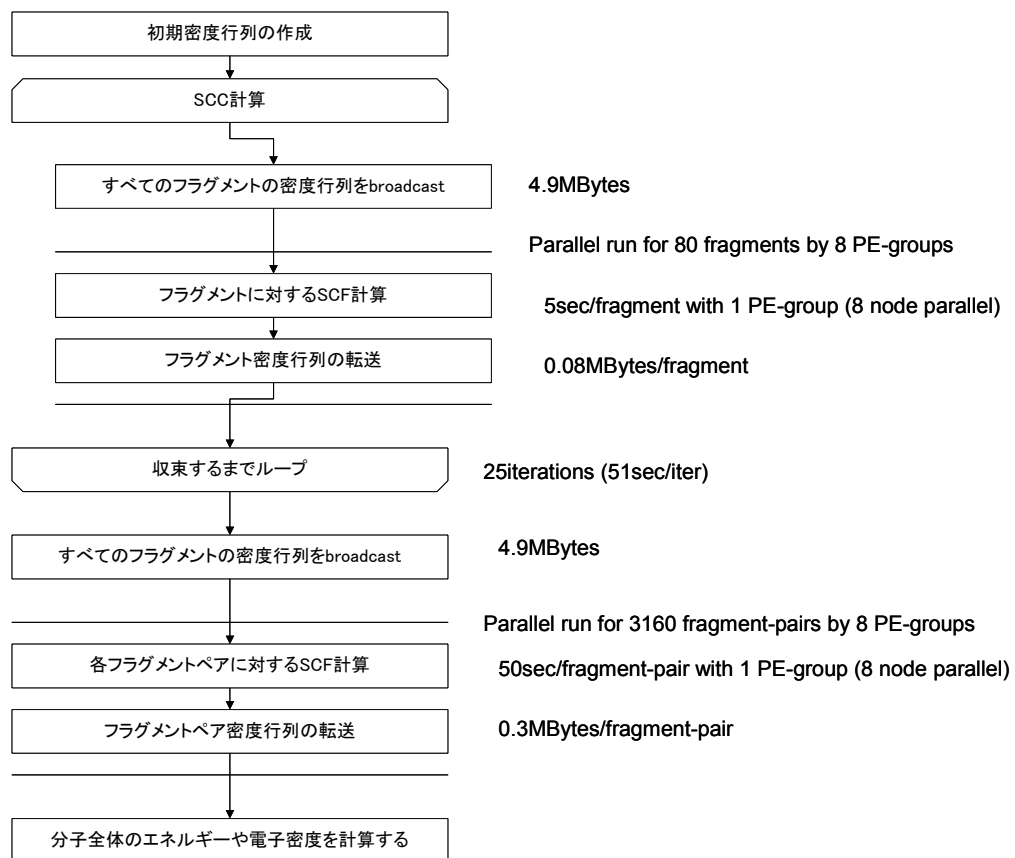


図 2 FMO 計算のフローチャート(右の数字は 10108 基底のモデル DNA(40 塩基対, 図 3)を計算(64-node Pentium4, AIST スーパークラスター)した場合の実測値)

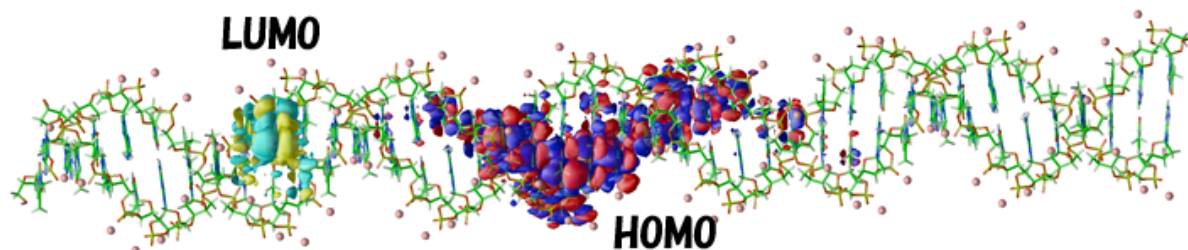


図 3 モデル DNA 分子(10108 基底, 40 塩基対)とフロンティア軌道

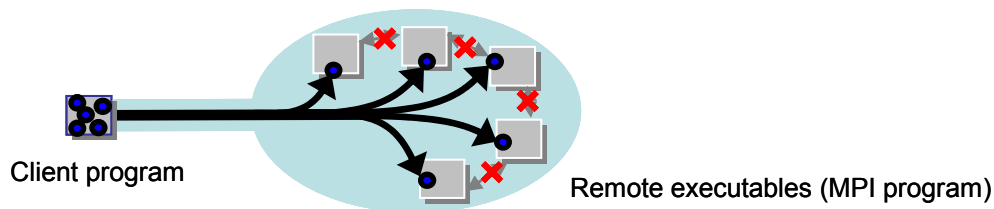


図 4 GridRPC モデル(with MPI 並列)

- [1] T. Nakano, T. Kaminuma, T. Sato, K. Fukuzawa, Y. Akiyama, M. Uebayasi, and K. Kitaura, *Chem. Phys. Lett.*, **351**, 475 (2002).
- [2] Y. Inadomi, T. Nakano, K. Kitaura and U. Nagashima, *Chem. Phys. Lett.*, **364**, 139 (2002).
- [3] T. Sakurai and H. Sugiura, *J. Comput. Appl. Math.*, **159**, 119 (2003).
- [4] “Ninf: A Global Computing Interface”, <http://ninf.apgrid.org/>.