

2012

## ABINIT-MP フラグメント分子軌道コードへのMP2 エンジンの組込み

○望月祐志<sup>1</sup>、中野達也<sup>2</sup>、小池上繁<sup>1</sup>、谷森奏一郎<sup>1</sup>、阿部行伸<sup>1</sup>、  
長嶋雲兵<sup>3</sup>、北浦和夫<sup>3</sup>

<sup>1</sup> 東京大学生産技術研究所・アドバンスソフト(〒153-8904 目黒区駒場 4-6-1)

<sup>2</sup> 国立医薬品食品衛生研究所(〒158-8501 世田谷区上用賀 1-18-1)

<sup>3</sup> 産業技術総合研究所(〒321-7654 つくば市梅園 1-1-1)

### 【はじめに】

これまで私達のグループでは、フラグメント分子軌道(FMO)法[1]に基づき、並列処理によって巨大生体分子の実時間計算を可能とする ABINIT-MP コード[2]を HF、HF-gradient(MD)レベルで開発してきている。生体系では水素結合や van der Waals 相互作用が重要であり、その記述には電子相関を考慮した扱いが本質的であるが、残念ながら密度汎関数法は適しておらず、MP2 が最も直截なレシピとなる。そこで私達は、相関エネルギー、並びに近似的な応答電子密度の計算がファイルレスで行える並列化 MP2 エンジン[3]を開発し、ABINIT-MP に組み込んだ。

### 【アルゴリズムと実装】

MP2 の積分変換アルゴリズムは望月らによって汎用 CI 用に提案されたレシピ[4]を翻案したもので、紙面の都合で詳細は省くが、(1)多重閾値判断による実効演算数の低減、(2)最深部の DAXPY/DDOT 処理、(3)通信量の最小化、が図られている。基底積分の利用は、In-Core と Direct の扱いが出来る。並列化には MPI の標準ルーチンのみを使い、“特別な仮想共有メモリ”は必要としないため、並列専用機から PC クラスタまでプラットフォームを選ぶことはない。

### 【テスト】

実装された MP2 エンジンを Dual Xeon(3.06GHz)/GigaEthernet のクラスタで 60CPU 用いてベンチマーク計算したところ、“十分に高速”であることが確かめられた。下図は、6-31G 基底による水分子 1,024 個の系の HF-MP2 差電子密度である(水 1 個=1 フラグメントで設定)。ターンアラウンド時間は、HF のみで 368 秒、HF+MP2 で 394 秒である。タンパク質では、リゾチームの場合(2,036 原子、6-31G 基底で総関数 11,420)、11.8 時間で MP2 エネルギーが得られている。現在、負荷分散の改善の高速化作業に入っている。

### 【謝辞】

本研究の一部は、文部科学省 IT プログラム『戦略的基盤ソフトウェアの開発』プロジェクトの支援により行われた。

### 【参考文献】

- [1] Kitaura et al. Chem.Phys.Lett. 313 (1999) 701
- [2] Nakano et al, <http://molddb.nihs.go.jp/abinitmp/>
- [3] Mochizuki et al. submitted for publication
- [4] Mochizuki et al. Theor. Chim. Acta 93(1996) 211

