

○梅田宏明<sup>1,2\*</sup>、稲富雄一<sup>3</sup>、渡邊寿雄<sup>1,2</sup>、石元孝佳<sup>1,2</sup>、長嶋雲兵<sup>1,2</sup>

<sup>1</sup>科学技術振興機構 CREST、<sup>2</sup>産業技術総合研究所 計算科学研究部門、  
<sup>3</sup>九州大学 情報基盤研究開発センター、\*E-mail address: h-umeda@aist.go.jp

生体分子のような大規模系の分子軌道計算では Fock 行列の生成に全計算時間の 9 割以上の時間を費やすことが知られている。これまで我々は Ninf-G を利用することで、Grid 上の多数の計算機を効果的に利用する並列 Fock 行列計算プログラムを開発してきた [1]。しかし我々の開発してきたアルゴリズムは Fock 行列及び密度行列の全体を全ての計算機が保持していることを仮定しており、数万次元を超えるような計算を実行するにはメモリ量が問題となってしまうていた。本発表では、FMO-MO 法[2]による大規模分子軌道計算のための大規模 Fock 行列計算プログラムを開発したので、これを紹介する。

開発したプログラムのテストとして、溶媒(2,096H<sub>2</sub>O + 9Cl)中のリゾチーム分子 (Fig. 1) についての FMO-MO 計算を行なった。この系は STO-3G 基底関数で 20,758 基底になり、Fock 行列・密度行列のサイズがそれぞれ 1.6GB、合計で 3.2GB になってしまうため、これまで 32bit PU を用いた Linux PC クラスタでは計算が不可能であった。しかし今回開発したプログラムを使えば、このサイズの Fock 行列が AIST スーパークラスタ [3] F32 部 (32bit dual Xeon 3.06GHz 4GB メモリ/ノード) を用いて 4 時間弱 (254PU の場合) で生成できる。また FMO-MO 計算全体で見れば 5 時間程度でこの分子軌道 (Fig. 1) が得られており、高速な大規模分子軌道計算を実現している。

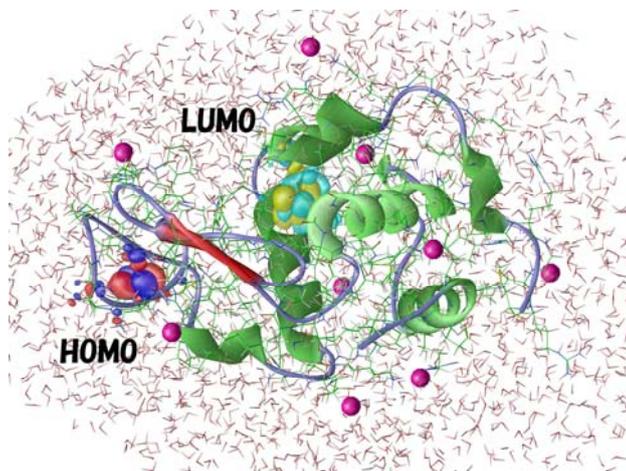


Fig. 1 Lysozyme molecule in solvent and its frontier orbitals.

謝辞: 本研究の一部は、科学技術振興機構, CREST プロジェクト「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」(研究展示 EX01)によるものである。

[1] H. Umeda et al., *J. Comput. Chem. Jpn.*, **4**, 179(2005), H. Umeda et al., 日本コンピュータ化学会 2006 春季年会 1P21 など. [2] Y. Inadomi et al., *Chem. Phys. Lett.*, **378**, 589(2002). [3] AIST Super Cluster, <http://unit.aist.go.jp/tacc/ci/supercluster.html>.