

タンパク質全電子計算で得られる 静電ポテンシャルの高速な計算手法の開発

○湯川英宜¹, 平野敏行², 佐藤文俊²

¹東京大学大学院工学系研究科(〒113-0033 東京都文京区本郷 7-3-1)

²東京大学生産技術研究所(〒153-8505 東京都目黒区駒場 4-6-1)

【緒言】

タンパク質の静電相互作用は、その立体構造の形成やタンパク質-タンパク質およびリガンド間に働く相互作用の1つである。我々はガウス型基底関数に基づく全電子密度汎関数法プログラム ProteinDF を開発し[1]、得られた波動関数からタンパク質の高精度な静電ポテンシャルを得ることに成功した。しかし、静電ポテンシャルの分子積分は比較的計算コストが高いうえに、詳細な分布を得るためには、分子を囲む空間において十分に細かいピッチによる3次元グリッド全点上で値を求めなければならない。したがって、タンパク質のような大規模分子では膨大な計算量が必要となる。そこで、①静電ポテンシャルの計算手法を改良、②並列計算機に適した実装手法の開発により、大規模分子の全電子計算に適した、高速かつ高精度な静電ポテンシャルの計算手法の開発を目的とした。

【方法と結果】

- ① 高速な分子積分の計算法の一つにスクリーニング法がよく知られている[2]。本研究では、(a) 重なり積分 (b)密度行列によるスクリーニング法を併用することにより、計算量を大幅に減らした。図1に本研究の方法(A)と、対照としてスクリーニング法を用いなかった場合(B)における、軌道数と計算時間の関係を示した。両対数グラフの傾きから、(A)および(B)のサイズ依存性はそれぞれ1.7、2.4と求められた。さらに、遠距離間におけるポテンシャル計算の効率向上を目指し、FMM(高速多重極展開)を用いた高速化方法を検討している。
- ② 計算効率が向上した①の手法を用いても、1 CPU(PentiumD 3.0 GHz)ではインスリン(51 残基、4461 軌道)の静電ポテンシャル計算に要する時間は約36時間にもなる。実用的な時間で計算するためには並列化が必須である。プログラムの並列化はMPIを用いて実装した。各CPUへは基底関数のシェルの組み合わせ毎に計算タスクを分配することにより、タスクの均等化と並列化効率の向上を図った。さらなる高速化を目指し、GPU(Graphics Processing Unit)の活用を検討中である。

【参考文献】

- [1] F. Sato, T. Yoshihiro, M. Era, H. Kashiwagi, *Chem. Phys. Lett.*, **341** (2001), 645.
- [2] E. Schwegler, M. Challacombe, *J. Chem. Phys.*, **105**, 2726 (1996).

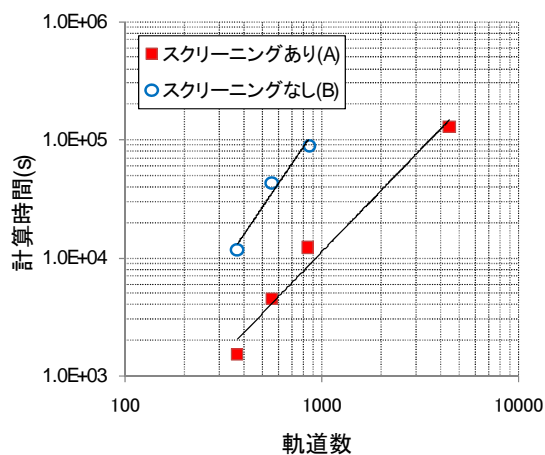


図1 軌道数と計算時間の比較