

EX01 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

長嶋雲兵^{1,2}、櫻井鉄也^{1,2,3}、立川仁典^{1,4}、石元孝佳^{1,2}、梅田宏明^{1,2}、北幸海^{1,4}、渡邊寿雄^{1,2}
¹科学技術振興機構 CREST、²産総研、³筑波大、⁴横浜市大

JST, CREST 研究領域「シミュレーション技術の革新と実用化基盤の構築」の研究プロジェクト「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」は、グリッド技術を利用した FMO-MO 計算[1]プログラムの開発と大規模分子軌道計算の実現を目指したプロジェクト(期間:2003.10-2009.3 5.5 年間, 256 百万円)である。特に FMO-MO 計算に適した一般化固有値問題解法として櫻井-杉浦法[2]を利用することにより、グリッド環境下でも効果的な並列計算が可能となる。またプロトンの波動性を考慮した MC_MO 法との連携や、分散処理によるポテンシャル面の精密計算なども研究の対象としている。

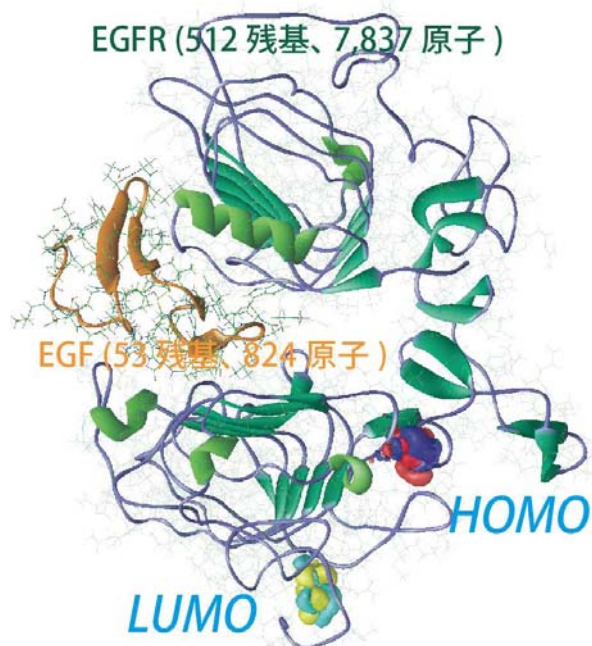
我々の開発した FMO-MO 法は大規模分子軌道計算が可能なフラグメント分子軌道法 (FMO)[3]を拡張した計算法であり、FMO 法では得られなかった大規模分子の分子軌道を求めることを可能にする計算法である。図 1 は 512 残基のアミノ酸からなる epidermal growth factor 受容体(EGFR、7,837 原子)のリガンド分子(53 残基、824 原子)と結合した際の HOMO および LUMO を FMO-MO 計算(FMO-HF/STO-3G)により求めたものである。大規模分子軌道計算に適した FMO-MO 法を用い、櫻井-杉浦法によって並列対角化を行なうことで、この系(26,461 基底)は大規模 PC クラスタである AIST スーパークラスタ上ならわずか 6 時間(Table 1)で計算することができた。その他に、大規模 Fock 行列作成や櫻井-杉浦法のグリッド化などについても紹介する。

[1] Y. Inadomi et al., *Chem. Phys. Lett.*, **364** 139 (2002). [2] T. Sakurai et al., *J. Comput. Appl. Math.*, **159**, 119 (2003). [3] K. Kitaura et al., *Chem. Phys. Lett.*, **312**, 319 (1999), K. Kitaura et al., *Chem. Phys. Lett.*, **313**, 701 (1999), T. Nakano et al., *Chem. Phys. Lett.*, **318**, 614 (2000).

Table 1 FMO-MO法での計算時間

	経過時間/CPU数 EGFR+リガンド
FMO計算	2.0 hr / 128 ^{*1}
Fock行列作成	3.9 hr / 248 ^{*2}
一般化固有値問題	3.0min / 64 ^{*2}
全計算時間	6.0 hr

^{*1}産総研スーパークラスタ(ASC)のP32クラスタ部 (Dual Opteron 246, 2GHz×1,072台)を使用。
^{*2}ASC-F32クラスタ部(Dual Xeon 3.06GHz×256台)を使用。Screening threshold=1.0D-10



EGFR-EGF complex and frontier orbitals.
FMO/HF/STO-3G (26,461 basis)