

## 研究課題別中間評価結果

1. 研究課題名： 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
2. 研究代表者名： 長嶋 雲兵 ((独)産業技術総合研究所計算科学的研究部門 主幹研究員)

### 3. 研究概要

金属クラスター やタンパク質等の大規模分子系の現象を取り扱える系のサイズ拡大とパラメータの網羅的探索を可能とする分子シミュレーション環境の構築をめざし、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を行った。具体的な研究項目は以下の5項目であった。①FMO法のGrid化と評価:GFMOの開発、②GFMO-MOの実装と評価:GFMO-MOの開発、③射影法による一般化固有値問題の解法:櫻井-杉浦法の開発、④ポテンシャル面探査分散処理システムの設計、⑤プロトンの波動性を考慮した方法(MC\_MO法)のFMO法への導入。

### 4. 中間評価結果

#### 4-1. 研究の進捗状況と今後の見込み

FMO法を基盤にした拡張としては、系の全体の分子軌道を求めるようにしたこと、電子と核を同等に量子的に扱うMC-MO法を組み込んだことが興味深い。また大規模の固有値問題についての高並列計算可能な新しい手法の開発は重要な貢献である。

期待としてはあったが実際に可能かどうかやってみなければわからなかった、大規模分子の計算、および並列計算の方法などを実際に行うことができたことを評価する。具体的には分子軌道の具体的な形を表示したシステムとしては世界最大のリゾチーム分子およびDNAモデル分子の計算を実行することができた。

研究実施体制は2つのグループの連携体制が十分に機能し、よく情報の交流が行われており協力的に課題に取り組んでいる。

#### 4-2. 研究成果の現状と今後の見込み

これまで小規模の分子数にしか適用できなかったシミュレーションに対して、クラスタコンピュータを使って大規模な場合にも適用できる理論的手法とソフトウェアを提供し、大規模計算ができる可能性を示した点でインパクトが高い。

従来のFMO法の持つ制約は、全体の分子軌道を求めていなかったという点だけではなく、計算精度の点もいずれは問題になる可能性がある。この点の改良も今後の重要な課題になりうる。また固有値問題の新しい解法は計算科学に広くインパクトのある成果である。

#### 4-3. 今後の研究に向けて

固有値問題の解法は、基盤的なライブラリーとして広く使えるようにすることを期待する。FMO法については、全エネルギー計算の精度向上を目指すことが重要である。

当初期待した成果が予想どおりでてきており、応用問題を増やし、方法やプログラムのプラットフォームアップを行う必要がある。また、プロトンを含む系の研究開発進展のため、研究グループの実施体制の変更を行う予定であるが、研究分担を明確にして調整を行ってほしい。

#### 4-4. 戦略目標に向けての展望

大規模固有値問題の新しい解法は、シミュレーション技術の革新の例として捉えられる。特に、次世代スパコンプロジェクトにおいては、超並列が避けられないで、それが可能な固有値問題の解法の意義は大きい。

グリッド計算環境における分散処理の有用性を示すだけでなく、計算機シミュレーションの重要性をより広い領域に認識していただけるように研究を進めていくことが必要である。特に数学と情報科学と分子科学の融合により、それぞれの分野にインパクトを与えていくことを期待する。

#### 4-5. 総合的評価

FMO法による系全体の分子軌道を求めるためには、必然的に大規模な固有値問題を解かなければならない。この必然性と、これから並列計算への展開から新しい固有値問題の解法が得られたことは、意義のある成果である。今後はFMO法そのものへのインパクトのある成果も期待したい。