

研究課題別中間評価結果

1. 研究課題名：フラグメント分子軌道法による生体分子計算システムの開発

2. 研究代表者名：田中 成典（神戸大学大学院人間発達環境学研究科 教授）

3. 研究概要

フラグメント分子軌道（FMO）法に基づく生体分子第一原理計算システムの構築を①Post-HF（Hartree-Fock）法による電子相関の導入や重元素・励起状態・反応ダイナミクスの取り扱い、応答法による物性値の算定などのプログラム開発、②大規模計算のためのプリポストGUI機能の開発、③医療・創薬・ナノテク分野等における先導的・実証的な応用計算の遂行の3つのアプローチを主軸として複合的に展開している。

4. 中間評価結果

4-1. 研究の進捗状況と今後の見込み

FMO法の基本的性能向上について、多くの進展が既に得られている。特に、Post-HF法、およびモデル内殻ポテンシャル法の導入は重要であり計画通り進んでいる。また計算結果の解析ツール、専用のプリポストGUIの開発など多岐にわたる開発が進められている。大規模系の応用計算においても興味深い成果が得られている。

本グループの参加者の一人でもある北浦氏はFMOの提唱者でもあり独自に研究プロジェクトを進めており、既成のソフトであるGAMESSに組み込んでいるのに対し、本研究ではすべて自作しGUIもプロジェクト内で開発している。そのため新機能の導入が直裁であり、また地球シミュレータ等のベクトル計算機への対応も可能である。FMO法としては相互に競いあって、わが国オリジナルな手法の発展が図られていることは好ましい。

研究実施体制はプログラム開発グループと応用グループとから成っており、両者の効率のよい連携が実現している。今後応用分野へのさらなる展開が期待される。

4-2. 研究成果の現状と今後の見込み

分子量の大きな生体分子の電子状態の計算、非経験的な分子動力学などについて成果をあげ論文等で発表している。また創薬企業から引き合いがあるなど、産業界への寄与が期待される。さらに応用への展開だけでなく、量子モンテカルロ法をFMOと組み合わせるなど新しい方法論とその実装についても多くの成果が期待される。

4-3. 今後の研究に向けて

シミュレーションが進むにつれてコンピュータ等の設備環境が不足してきているが、神戸大に設置した100台レベルのクラスタコンピュータの他、東工大等の計算機設備資源の利用を計画している。今後は有限な資源を活用して、どのような応用上の問題を解いて成果を出すかが課題である。

またプロジェクト前半は可能性のあるシミュレーションテーマを広く考え多くの研究グループで対応しているが、後半に向かうに当たり深い精査が研究代表者には必要である。

4-4. 戦略目標に向けての展望

生体高分子は医療と密接な関連があり、その量子的振る舞いがコンピュータによって予言できることは応用的にも大きな意味をもつ。本研究のシミュレーションはインハウスでのPCクラスタでも計算ができ、またスーパーコンピュータでも計算ができることを目指している。アプリケーションに関しても、あまりにアカデミックで非実用的なシミュレーションではなく、実用に即した病気のメカニズムの解明、創薬、環境化学物質の影響などに使えることが

でき、戦略達成目標である実用化基盤の構築という観点からも十分な社会還元につながるものと期待する。

4-5. 総合的評価

FMOを用いて大規模な分子計算を行うことは大変挑戦的であり、多くの応用が期待されている。実用化の面では創薬上有益とされるリガンドの官能基の違いを可視的・定量的に分析することが可能という点が注目され、創薬企業の現場で実践的に試用されている。

本研究領域では競争相手も多いので、研究後半に向けて本グループの特徴を生かすような方向性を見定めるべきである。そのためには複数グループでの推進体制をとっているため、各グループ間での連携を密接にする運営が重要である。

今後、本プロジェクトは地球シミュレータ等スーパーコンピュータ施設での利用を推進する予定であるが、さらに次世代スーパーコンピュータ上での利用も想定した開発を進める必要がある。