

「シミュレーション技術の革新と実用化基盤の構築」

平成15年度採択研究代表者

長嶋 雲兵

(産業技術総合研究所グリッド研究センター 総括研究員)

「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」

1. 研究実施の概要

新規物質製造の低コスト化のために、分子シミュレーション技術の高度化により、新規物質設計・製造や遺伝子治療の活性化ならびに医薬品開発において、開発時間の短縮や低コスト化等による収益率の向上が期待されている。そのため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う。具体的な開発項目は以下の5項目である。

- ① FMO法のGrid化と評価：GFMOの開発
- ② GFMO-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ポテンシャル面探索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

2. 研究実施内容

- ① FMO法のGrid化と評価：GFMOの開発

16年度は、負荷分散、ならびにGrid化を考慮に入れて、並列フラグメント分子軌道計算プログラムABINIT-MPの予備的プログラムを実装した。また、FMO法を制御している部分と、そこから呼び出されているルーチンとの接合を行うためのインターフェイスを決定した。

- ② GFMO-MOの実装と評価：GFMO-MOの開発

本年度は、与えられた中規模のFock行列と重なり行列を用いて、現在使用可能な一般化固有値問題用ライブラリ(Lapack, ScaLapackなど)を使って解くための、試験的プログラムを作成した。

- 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

16年度は、長嶋グループの開発するグリッド環境向けの行列の生成法(GFMO)と並列化した射影法による一般化固有値問題の解法(櫻井・杉浦法)を組み合わせ、プログラムを実装した。また、方法の適用範囲を広げる前処理法を開発した。いくつかのテスト計算に

より、分子軌道計算で現れるフォック行列に 対してその有効性を確認した。

④ポテンシャル面探索分散処理システムの設計

16年度は、CoHを例に取り、計算方法の検討をおこなった。CoHの分子定数計算には、原子核上でのカスプを記述するための基底関数が本質的に必要であることがわかった。

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：

平成16年度は、タンパク質等の生体内分子で重要な水素結合系の詳細な相互作用解析のために、プロトンの波動性を考慮した方法(MC_MO法)をFMO法に実装し、FMO-MC_MO法を開発した。また、グリシン5量体((Gly)₅)の α -helix構造を用いて性能評価をおこなったところ、MC_MO法とFMO-MC_MO法(5フラグメント分割)の一点計算、構造最適化によるエネルギー差はわずか0.02 kcal/molとなり、FMO-MC_MO法の計算結果はMC_MO法と精度よく一致することを確認した。

7. 今後の見通し

本年度は、プログラムの整備と予備的な計算を行ったため、論文発表は少なかった。来年度は、実応用として大規模分子系の計算を行い、さらに開発を続行する。

3. 研究実施体制

長嶋グループ

- ① 研究分担グループ長：長嶋雲兵 (産業技術総合研究所、統括研究員)
- ② 研究項目：
 - ① FMO法のGrid化と評価：GFMOの開発
 - ② GFMO-MOの実装と評価：GFMO-MOの開発
 - ③ ポテンシャル面探索分散処理システムの設計
 - ④ 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

櫻井グループ

- ① 研究分担グループ長：櫻井 鉄也 (筑波大学大学院システム情報工学研究科、助教授)
- ② 研究項目：
 - ① 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. 主な研究成果の発表

(1) 論文発表

- M. S. Petkovic, T. Sakurai and L. Rancic, Family of simultaneous methods of Hansen-Patrick's type, Appl. Numer. Math., Vol. 50, No. 3--4, pp. 489--510 (2004).
- T. Sakurai, H. Tadano, Y. Inadomi and U. Nagashima, A moment-based method for large-scale generalized eigenvalue problems, Appl. Num. Anal. Comp.

Math., Vol. 1, No. 3, pp. 516--523 (2004).

- T. Sakurai, H. Tadano, Y. Inadomi and U. Nagashima, A moment-based method for large scale eigenvalue problems, Proc. ICNAAM, Chalkis, pp. 333--336 (2004).
- H. Tadano and T. Sakurai, A method for avoiding breakdown in product-type iterative methods and its behavior for Toeplitz linear systems, Proc. ICNAAM, Chalkis, pp. 384--387 (2004).
- T. Sakurai, K. Hayakawa, M. Sato and D. Takahashi, A parallel method for large sparse generalized eigenvalue problems by OmniRPC in a grid environment, Lecture Notes in Computer Science (accepted).
- 小笠原匡, 多田野寛人, 櫻井鉄也, 伊藤祥司, Shifted Linear Systemsに対する Krylov部分空間反復法と固有値問題への応用, 応用数理学会論文誌, Vol. 14, No. 3, pp. 193--205 (2004).
- 櫻井鉄也, 多田野寛人, 早川賢太郎, 佐藤三久, 高橋大介, 長嶋雲兵, 稲富雄一, 梅田宏明, 渡邊寿雄, 大規模固有値問題のmaster-worker型並列解法, 情報処理学会ACS論文誌 (accepted).
- 稲富雄一, 梅田宏明, 渡邊寿雄, 櫻井鉄也, 長嶋雲兵, FMO-MO法による大規模分子軌道計算, 情報処理学会ACS論文誌 (accepted).
- Takayoshi Ishimoto, Hiroaki Tokiwa, Hiroyuki Teramae, and Umpei Nagashima
Theoretical study of intramolecular interaction energies during dynamics simulations of oligopeptides by the fragment MO-Hamiltonian algorithm (FMO-HA) method
Journal of Chemical Physics 2004年10月16日投稿中
- Takayoshi Ishimoto, Masanori Tachikawa, Hiroaki Tokiwa, and Umpei Nagashima
Isotope Effects on Hydrogen (Deuterium)-Absorbing Pt Clusters Calculated Using the Multi-Component Molecular Orbital Method
Molecular Physics 2004年12月6日投稿中
- Takayoshi Ishimoto, Masanori Tachikawa, Hiroaki Tokiwa, and Umpei Nagashima
Kinetic and geometrical isotope effects in hydrogen-atom transfer reaction, as calculated by the multi-component molecular orbital method
Chemical Physics 2004年12月3日投稿中