

Elongation 法分子軌道計算の PC クラスタによる実用化試作

企業 / 株式会社トランス・ニュー・テクノロジー

研究者 / 青木百合子（広島大学大学院理学研究科助教授）

タンパク質などに代表される非周期性巨大高分子の電子状態を効率良く計算するための方法であるElongation法を更に高速化するための階層構造的並列化アルゴリズムを複数台のPCによって構成されるPCクラスタの上に半経験的分子軌道計算法を用いて実装した。



試作 PC クラスタ

Elongation は以下のような方式で分子軌道を計算するものである。

1. オリゴマーの分子軌道計算。
2. 計算されたオリゴマーの分子軌道を、後から結合するモノマーとの相互作用の強い軌道 (Active LMO) と殆ど無い軌道とに分割。
3. オリゴマーの Active LMO と結合するモノマーとで分子軌道計算。

以上 2 ~ 3 をモノマーを結合する度に繰り返す。

この方法は高分子の重合反応である開始反応、成長反応、停止反応をエミュレートしながら分子を理論的に伸長させていくことに相当し、反応末端のみを厳密に解いていくことで逐次、高分子系全体の電子状態が正確に求まることが示されている。

階層構造的にこの方法を適用することで、複数の部分分子の電子状態をそれぞれ並列に計算した上で、これらの分子を結合させ、さらに巨大な分子構造の計算を高速に行うことが出来る。