



分類	量子化学計算
キーワード	タンパク質、量子化学計算、密度汎関数法
開発者	佐藤文俊、平野敏行、阿部敏彦、上村典子、 下向智美、恒川直樹、西村康幸、松田潤一
作成年月	2011年6月
コード名	ProteinDF
使用言語	C++

◇ProteinDF System 2011 概要

当グループは、密度汎関数法でタンパク質分子の全電子カノニカル波動関数を計算する ProteinDF システムを開発している [1、2]。計算法の汎用性から、タンパク質に限らず様々な巨大分子の電子状態を解析できるため、ナノスケールものづくり設計に貢献できる。本公開ソフトウェアは、実用的なプリ・ポスト処理機能を追加しつつ、本システムをバイオ・ナノ分子特性シミュレーションシステムとして発展させた新バージョンである。本バージョンでは、2010 版で公開した量子化学計算の標準法であるハイブリッド汎関数 B3LYP 法のさらなる高速版に加え、分散力や長距離交換相互作用が改善される CAM-B3LYP 法を搭載した。また、これらの力計算も行うことができる。さらに、本システムの統括グラフィカル・ユーザー・インターフェース (GUI) を大幅にリファクタリングして、各種機能をコンポーネント化し、操作性を向上させた。本ソフトウェアは随時アップデートしており、ダウンロードして無料で利用することができる [3]。

◇注目すべき新機能・開発項目

巨大分子のための密度汎関数計算エンジン：ProteinDF は MPI-OpenMP のハイブリッド並列処理を行っている。Beowulf 型クラスタでは、各ノードに搭載されている物理メモリの容量が MPI プロセスの利用可能メモリサイズとなる。タンパク質のような巨大分子の全電子密度汎関数計算では、計算に必要な行列一つが数 GB～数十 GB 程度にもなり、一つのプロセスでは扱うことが出来ない。そこで巨大な大域行列を MPI 1 プロセスのメモリに収まる部分行列に分割し、クラスタ全体で一つの大域行列を扱うアルゴリズムを実装した。大域行列の分割方法は、ブロックサイクリックデータ分割を採用した。この分割方法は線形演算ライブラリ ScaLAPACK で採用されており、計算に必要な行列積、逆行列、

対角化の演算に使用することができる。一方、密度汎関数計算に必要な分子積分、数値積分はオリジナルコードであり、大域行列の分割方法にしたがって書き換えている。これにより、一般的な PC クラスタから数千並列計算機まで効率良く実行することができる。また、本バージョンでは B3LYP 法、長距離交換相互作用補正 (LC) 法をより一般化した CAM-B3LYP 法も実装した。

$$E_x^{B3} = (1-\alpha)E_x^{Slater} + \alpha E_x^{HF} + c^{B88} \Delta E_x^{B88}$$

$$\frac{1}{r_{12}} = \frac{1 - [\alpha + \beta \cdot \text{erf}(w r_{12})]}{r_{12}} + \frac{\alpha + \beta \cdot \text{erf}(w r_{12})}{r_{12}}$$

$\alpha=0.2$ 、 $\alpha+\beta=0.2$ のとき B3LYP 法、 $\alpha=0.0$ 、 $\alpha+\beta=1.0$ のとき LC 法、そして $\alpha=0.2$ 、 $\alpha+\beta=0.6$ のとき CAM-B3LYP 法となる。なお、これらのエネルギー勾配計算機能も併せて提供している。構造最適化計算や第一原理分子動力学計算に使用できる。

統括 GUI：これまでの統括 GUI である ProteinEditor は、シミュレーション達成をサポートすることを主目的としたことから、インターフェースがポスト処理仕様であった。しかし、分子モデリング機能に関しては、ユーザの要望が多岐に渡るため単一の機能実装ではこれに応えられない場合が多い。この問題を解決するため、プログラムのリファクタリングを行い、データ構造をプラットフォーム非依存へと変更することで、強力な拡張性をもたせた。これにより、ユーザは、C++、C#、Python などのコード記述によってシミュレーションアシスト機能やモデリング機能を外部プログラムとして使用することができる。

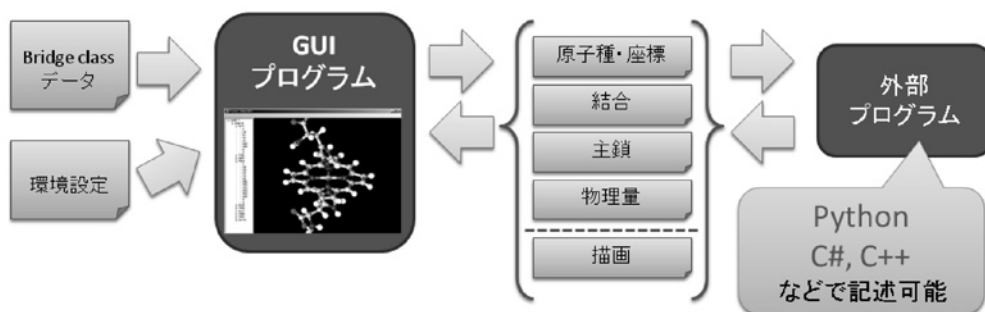


Figure 1. The design of the ProteinEditor2011 that contains much flexibility of usability and development

◇参考文献

- [1] 佐藤文俊、恒川直樹、吉廣 保、平野敏行、井原直樹、柏木 浩：“タンパク質密度汎関数法”、柏木浩監修、森北出版、(2008)
- [2] 上村(西野)典子、佐藤文俊、恒川直樹、西村康幸、平野敏行、吉廣 保、甘利真司、加藤昭史、小林将人、田中成典、中野達也、福澤 薫、望月祐志：“プログラムで実践する 生体分子量子化学計算－ProteinDF/ABINIT-MPの基礎と応用”、佐藤文俊、中野達也、望月祐志編、森北出版、(2008)
- [3] <http://www.ciss.iis.u-tokyo.ac.jp/>

(執筆責任者：佐藤文俊)