



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
作成年月日	2014年4月
コード名	ProteinDF
使用言語	C++

◇ProteinDF 2014 概要

我々は、密度汎関数法に基づき、タンパク質分子全体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。本ソフトウェアは近日中にインターネット上に公開予定である[3]。

◇グリッドフリー法による解析的交換相関項計算

グリッドフリー法は密度の行列表現を用いて交換相関項を計算する方法である。密度の行列表現に対し専用の基底関数セットを用いることにより、グリッドフリー法の課題であったシミュレーション精度を改善することに成功した[4、5]。また、コレスキー分解法を適用することで、密度の行列表現の計算に必要な4中心重なり積分をSCF繰り返し計算の前に1度だけ行い、SCF繰り返し計算中は行列演算のみを行う計算方法を開発した。これにより、計算精度を損なうことなく、計算コストを大幅に軽減することができた。

◇第3世代電子状態計算プログラム

スーパーコンピュータ「京」をはじめとする現在主流のスーパーコンピュータは、分散メモリ型並列計算機に分類される。多数の計算ノードが高速ネットワークで接続された分散メモリ型並列計算機では、通常1つのプロセスが専有できるメモリ領域は計算ノードのメモリ量を超えることができない。タンパク質のような巨大分子電子状態計算では、80GBを越える行列を同時に複数扱う必要がある。したがって、分散メモリ型並列計算機で巨大分子のカノニカル電子状態計算を行うためには、大規模行列をノード全体に分散保持しなければならない。現在主流のダイレクトSCF法では、SCF繰り返し計算中に高コストな分子積分・数値積分を行う。分散保持された行列にアクセスしながらこれらの計算タスクが均等になるように並列処理することは非常に難しく、並列性能向上の課題となっていた。

新たに開発した第3世代電子状態計算法[6]は、コレスキー分解に基づき、SCF 繰り返し計算前に1度だけ分子積分を行い、SCF 計算中は行列演算のみを行う計算方法である。ScaLAPACKのような行列演算ライブラリを用いることにより、並列計算機でも効率良く行列演算が可能である。コレスキー分解は数学的に厳密に計算精度を制御することができることも、本手法の利点の一つである。一方、本手法ではコレスキーベクトルの格納に大量のメモリが必要になることが欠点となる。しかし、大規模コレスキーベクトルは計算ノード全体で保持できれば良く、今後の並列計算機では問題にならないだろう。

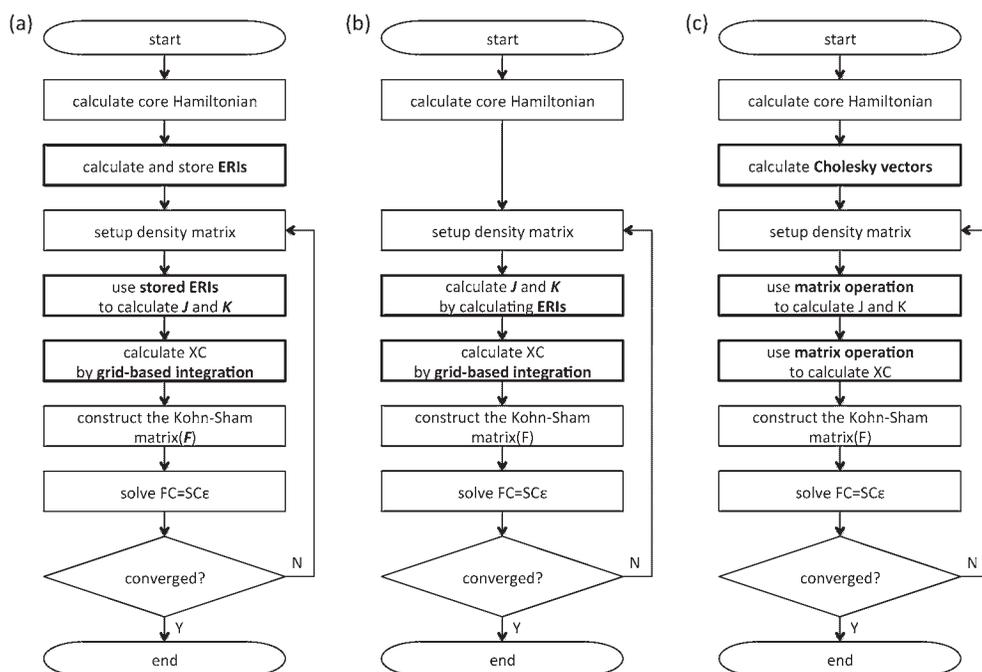


Fig. 1 Schematic representing (a) FILE, (b) direct, and (c) 3G DFT method.

本研究の一部は、文部科学省高性能汎用計算機高度利用事業「HPCI 戦略プログラム」分野4次世代ものづくりの補助を受け実施した。関連各位に謝意を表す。

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://satolab.iis.u-tokyo.ac.jp/>
- [4] 樋口 恒、平野敏行、佐藤文俊、生産研究（2014）
- [5] T. Hirano, H. Higuchi, F. Sato, *submitted elsewhere*.
- [6] T. Hirano, F. Sato, *Phys. Chem. Chem. Phys.*, 2014. DOI: 10.1039/C3CP55514C

（執筆責任者：平野敏行、佐藤文俊）