

ナノ分野における『グランドチャレンジ』課題への挑戦と 計算科学

自然科学研究機構・分子科学研究所

平田文男

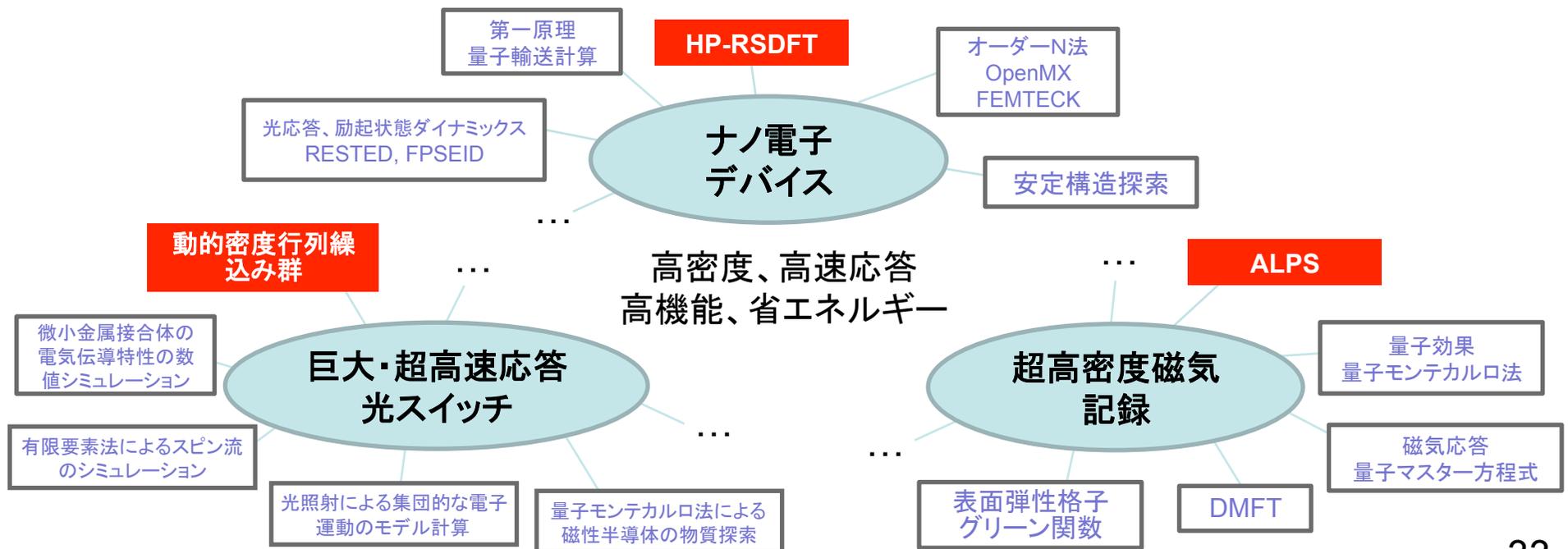
「学際計算科学による新たな知の発見・統合・創出」シンポジウム
2010年5月6日
筑波大学

計算科学と「次世代スパコン」で
何ができるようになるか？

次世代ナノ情報機能・材料 研究概要

CMOSの次の世代のナノテクノロジーまで見据えた、さらなる高密度実装を目指した新規電子デバイスや巨大・超高速応答光スイッチ、超高密度磁気記録の基礎となる理論・計算科学方法論の確立を目指す。

- ナノテクノロジーを利用した電子デバイスの高速、高機能化
- 超低消費電力デバイスの実現
- 巨大応答をもつ高機能デバイスの開発
- 超高速光スイッチによる「オール光ネットワーク」への道筋
- 超高密度磁気デバイスの開発
- 磁気デバイスのダイナミクスの解明



次世代ナノ生体物質 研究概要

ナノスケールの生体物質の分子科学

- ・生命システムの要素基盤、ナノ基盤の構築
- ・全電子、全原子シミュレーション
- ・生命が利用するナノ物質
- ・DDS等への応用
- ・方法論の確立

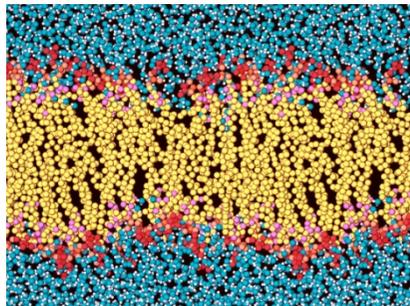
溶媒・水

物質科学

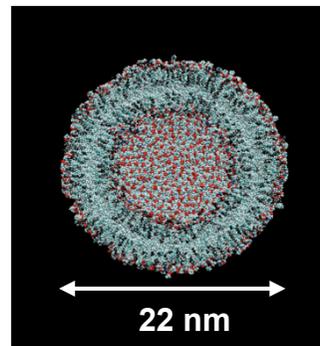
タンパク質

脂質膜

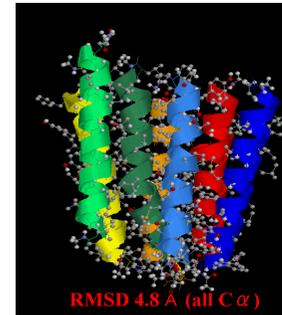
1. タンパク質高度シミュレーション新規方法論
2. イオンチャンネルの分子過程
3. ウイルスの分子科学
4. 細胞膜の分子科学
5. ナノ生体物質輸送(DDSのナノ過程)
6. 新規ナノ生体物質の創生と利用



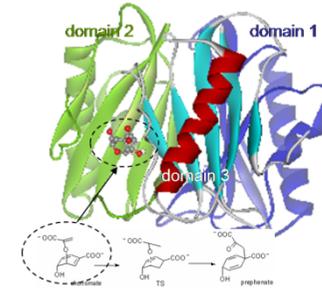
平面脂質膜



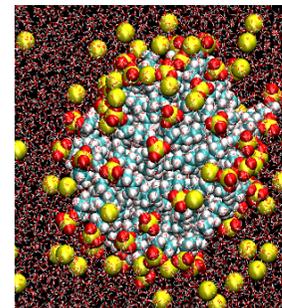
リポソーム



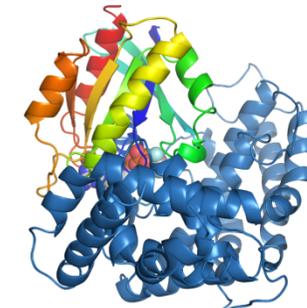
タンパク質の構造予測



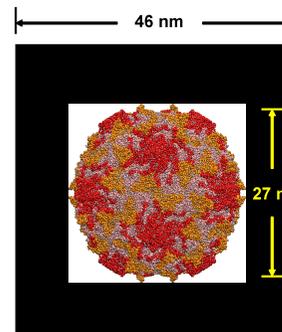
タンパク質の全電子計算



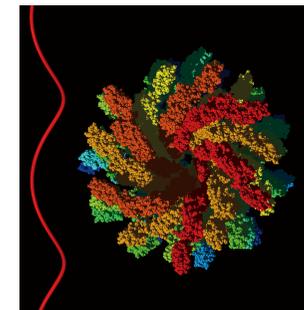
球状ミセル



タンパク質複合体



ウイルス

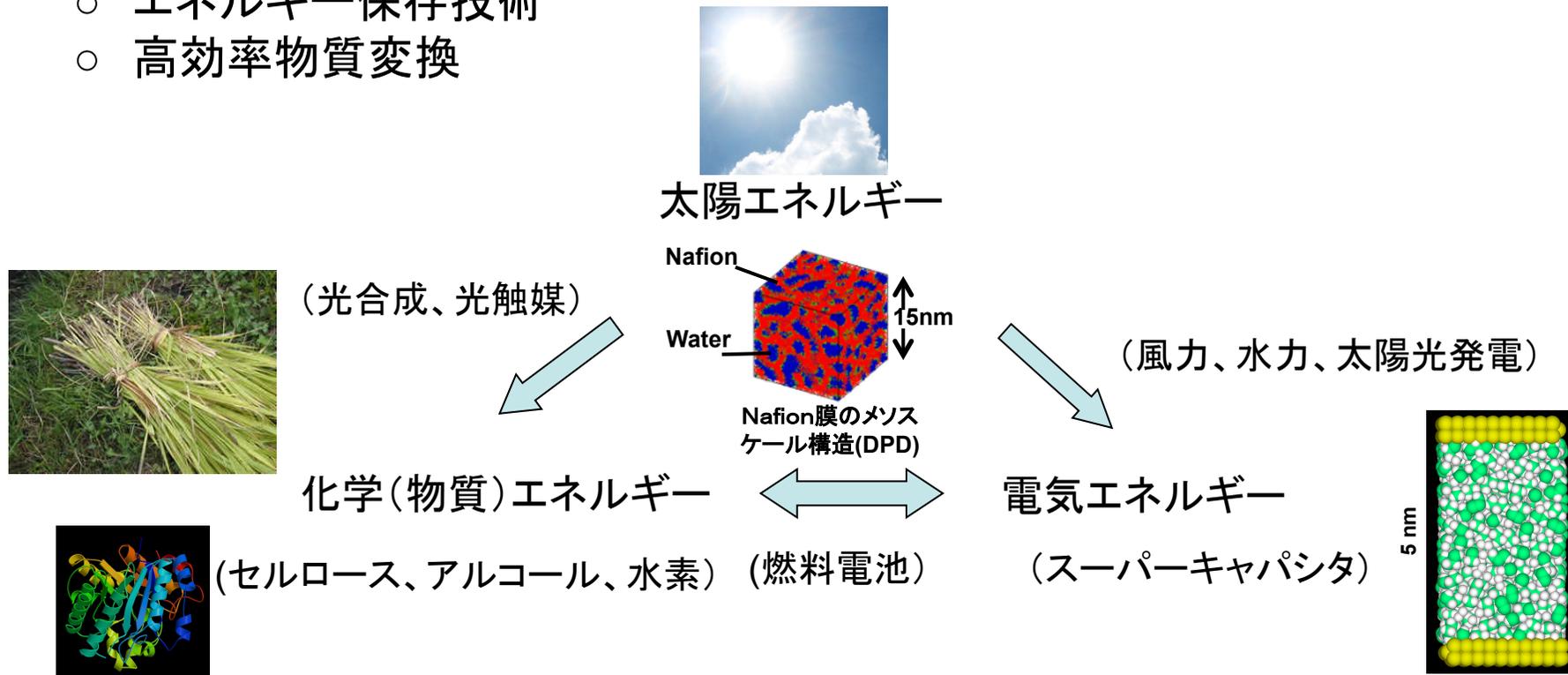


べん毛繊維

次世代エネルギー 研究概要

化石燃料に代わる恒久的エネルギー源として太陽エネルギーの固定、変換、利用、貯蔵技術の基礎となる理論・計算科学方法論の確立を目指す。

- 化石燃料からの脱却を目指すアルコール燃料サイクルの確立
- 光触媒による太陽エネルギーの固定
- 光合成による太陽エネルギーの固定
- 燃料電池の作動原理における分子過程の解明
- エネルギー保存技術
- 高効率物質変換



何故、ナノサイエンスが計算科学にとって挑戦的か？

ミクロ

($10^{-11} \sim 10^{-8}$ M)

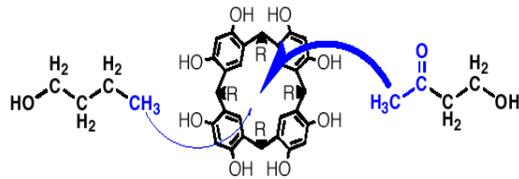
ナノ

($10^{-9} \sim 10^{-6}$ M)

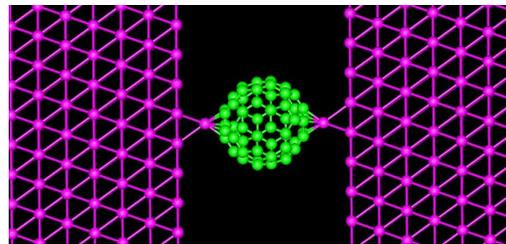
マクロ

($10^{-6} \sim$ M)

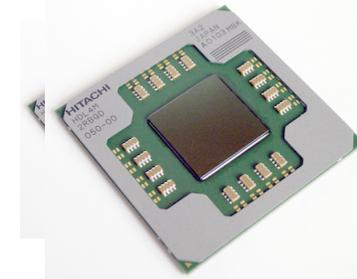
電子、原子、分子



巨大分子
分子集合体



目に見える
物質



量子力学
力学

統計力学

熱力学、弾性体力学
流体力学、電磁気学

???

実際の問題(デバイスなど)ではこれらの全空間領域および時間領域をカバーする方法論が必要。

現在のコンピュータの最高性能： ～300テラ

次世代スパコンの期待される性能： ～10ペタ

確かに早くなるが、たかだか、100倍程度

一方、実際のナノの問題は単にサイズや時間スケールの点だけから見ても、はるかに大きい。同時に、量子力学から熱力学(連続体力学)までの多くの階層の物理を含む。

従来の理論、方法論、計算プログラムをそのまま適用したのでは太刀打ちできない。

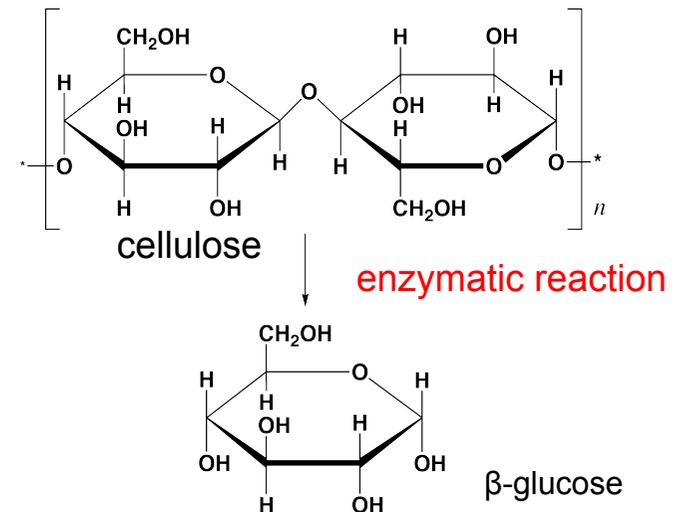
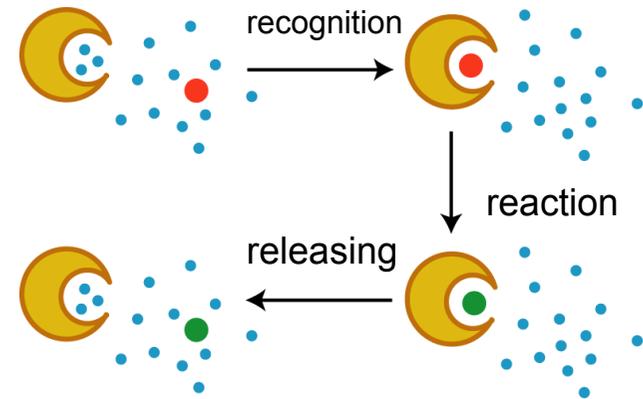
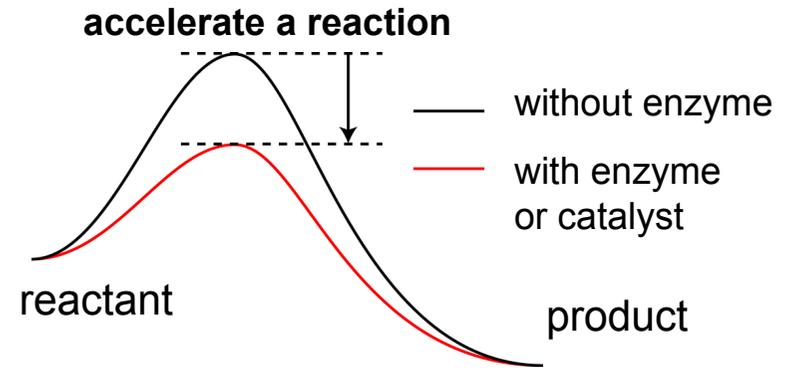
- ・個々の要素となる理論・方法論(量子力学、統計力学、分子シミュレーション)とプログラムの高度化(超並列化)
- ・それらの理論・方法論を組み合わせるマルチスケール・マルチフィジックス方法論の開発

What is the enzymatic reaction?
 Why is it difficult to treat by theory?

catalysts: enhances reaction rate dramatically.
 (1000 to 1million times)
 example: binap by Prof. Noyori
 enzyme (biocatalyst) : catalyses almost all
 chemical reactions occurring in our body

feature:
 (1) it works in water (theory of water is essential)
 (2) **it should accommodate substrate molecules
 in the active-site (molecular recognition)**

The reaction to alcohol from cellulose (2 steps)
 (1) cellulose → sugar (glucose)
 (2) sugar → alcohol
 Enzymes concern both reactions, but the mechanism
 of the first step has not been well understood.



主な物理、化学の理論と計算手法

量子力学計算

$$H\Psi = E\Psi$$

固有値問題

液体の統計力学 (RISM, 3D-RISM)

$$h(r) = c(r) + \int c(\mathbf{r}') h(|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|) d\mathbf{r}'$$
$$c(r) = \exp\left[-\frac{u(r)}{kT} + h(r) - c(r)\right] - 1 - [h(r) - c(r)]$$

非線形の積分方程式

Fourier変換によるiteration

分子シミュレーション

$$m \frac{d^2 \mathbf{r}}{dt^2} = - \frac{dU}{d\mathbf{r}}$$

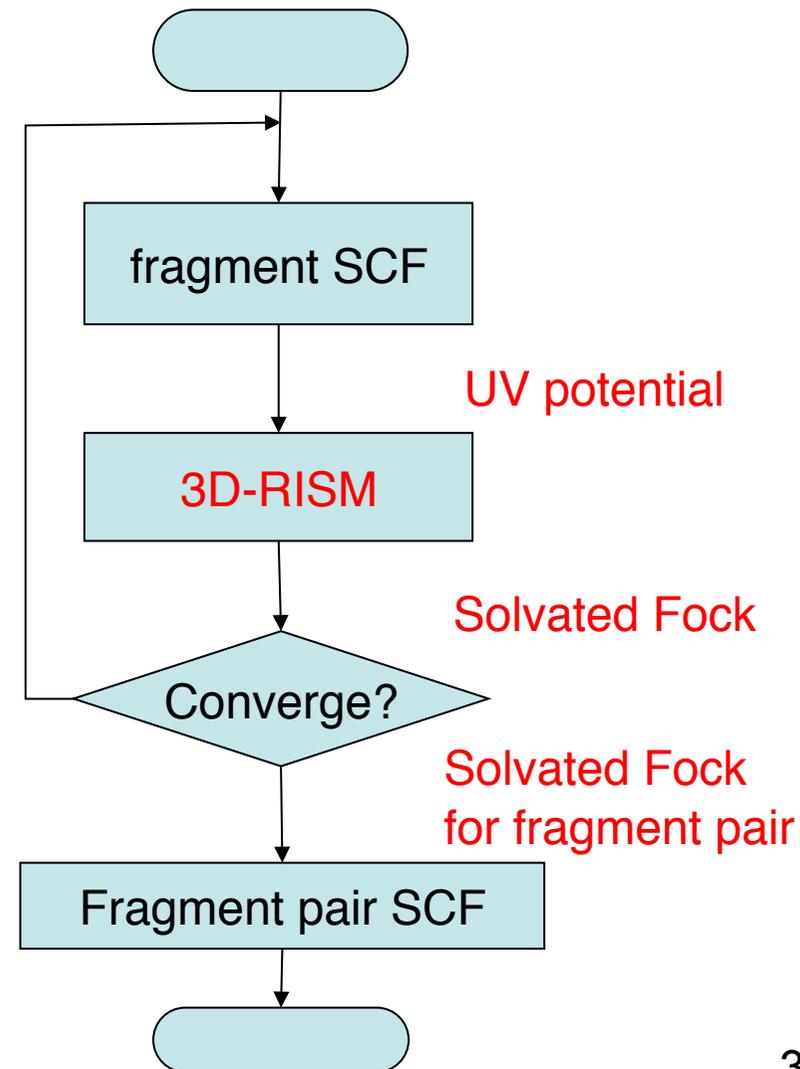
テーラー展開に基づく数値積分

原子間距離の計算

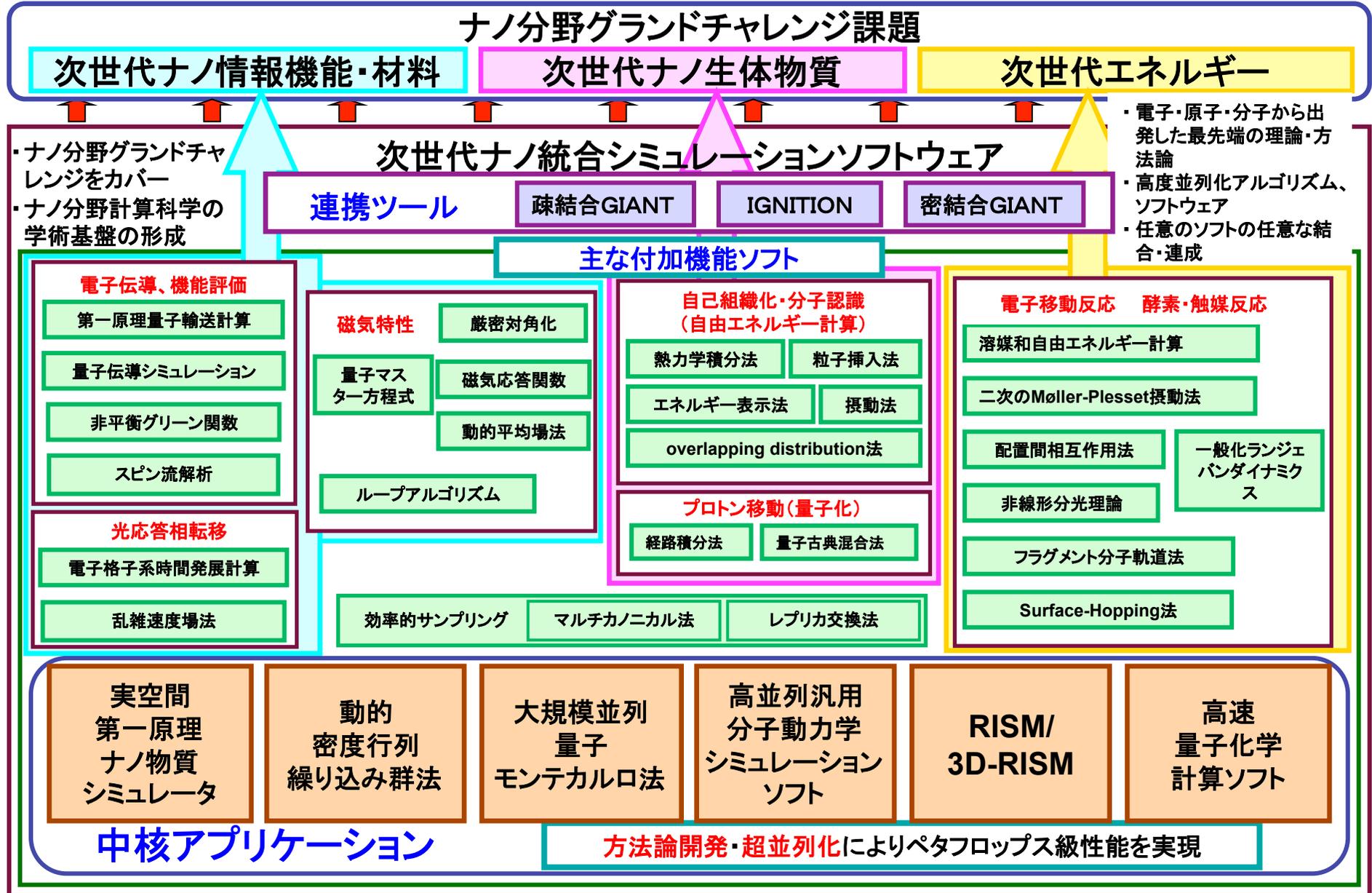
マルチスケール・マルチフィジックス計算の例

3D-RISM-FMO

- 3D-RISMとFMOの連成計算
 - 溶質の電子状態と溶媒分布を自己無撞着に計算
- ボトルネック
 - Solvated Fock及びelectro-static potential
 - 容易に並列化可能
 - FMO
 - 3D-RISM → 3D-FFT
- 非並列ではFMOとSolvated Fock(及びpotential)が圧倒的に負荷が高いが、並列効率が良いので高速化が期待できる



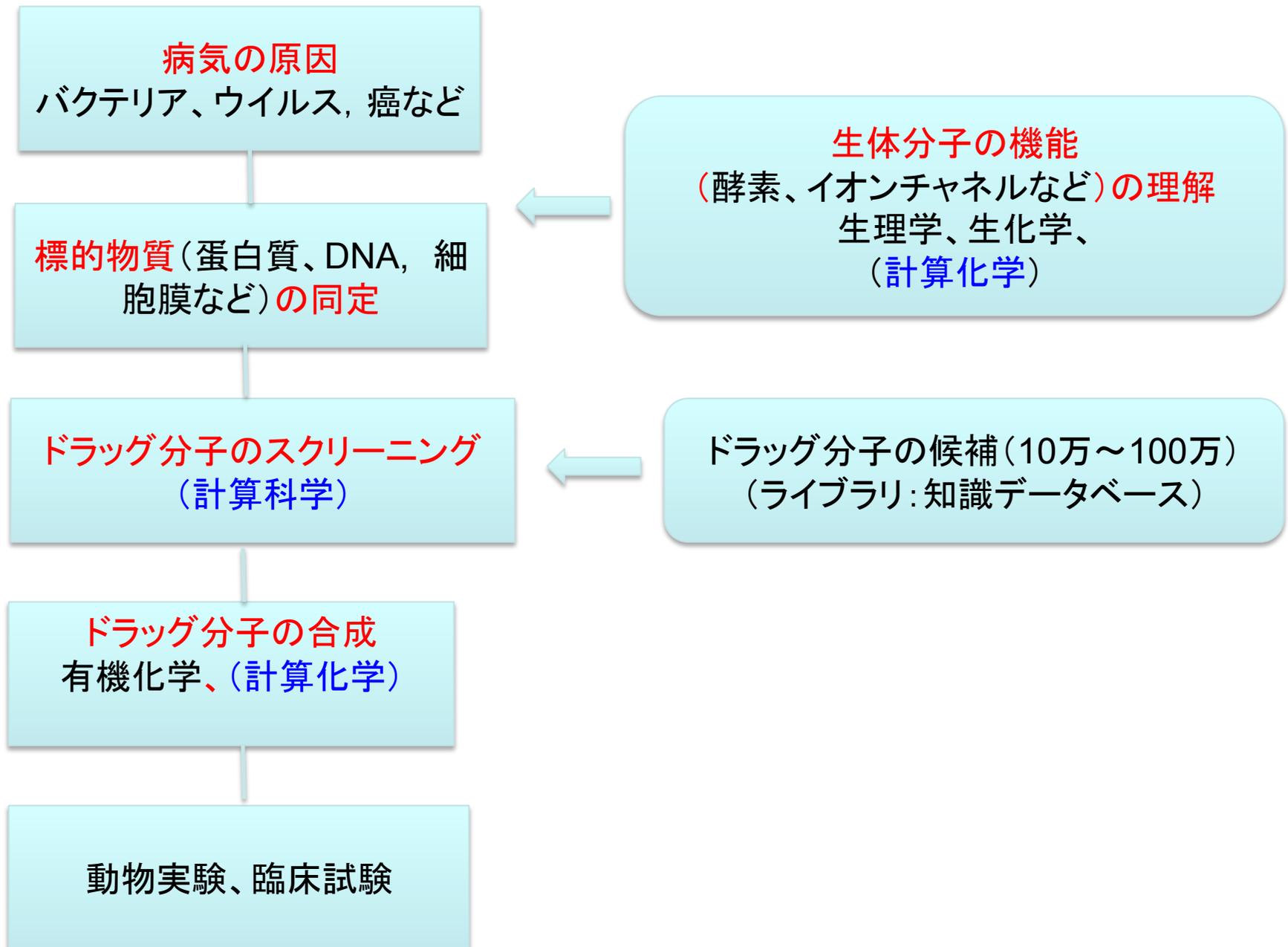
次世代ナノ統合シミュレーションソフトウェア



中核アプリ高度化

中核アプリ名	責任者	開発内容
実空間第一原理ナノ物質シミュレータ	押山	(1) MPI による、実空間セル並列とバンド並列の多層並列の有効性の検討と、対応プログラム開発。 (2) Open MP によるノード内スレッド間並列の有効性検討。
動的密度繰り込み群法	遠山	(1)線形応答感受率プログラムチューニング (2)その他・最適化
大規模並列量子モンテカルロ法	藤堂	アプリケーションの逐次処理部、ループ認識処理部の並列化効率の改善
高並列汎用分子動力学シミュレーションソフト modylas	岡崎	(1)単体性演算能のチューニング ・条件分岐の除去、・配列データの並び替え、・演算量の削減 (2)高並列化のチューニング ・通信量の削減、・3次元隣接通信の採用
RISM/3D-RISM	平田	(1)3次元FFTの2次元分割対応版3D-RISMコード開発 (筑波佐藤グループとの共同開発) (2)細部のチューニング(メモリ分散、IOの見直しなど) (3)T2KIによる大規模スパコンでの運用テスト
高速量子化学計算ソフト	永瀬 北浦	(1)データ転送量の削減 ・電子密度行列の転送量を削減するための改良 ・T2KIによる性能測定 (2)細部のチューニング
中核アプリの大規模並列化支援	佐藤	中核アプリ6本に対し、並列性および性能の詳細な解析を行い、必要に応じてモデルや数値計算アルゴリズムの改善などの支援。具体的には既存の大規模システムでプログラムを実行し、定量的な評価とアルゴリズムの検討・改善の支援を進める。なお、具体的なプログラムへの変更については担当のメーカーと打ち合わせをしつつ進める。また、同時にマルチコアプロセッサの利用等の次世代スパコン利用に必要な並列化の方法についても検討する。
開発環境 (T2K)		

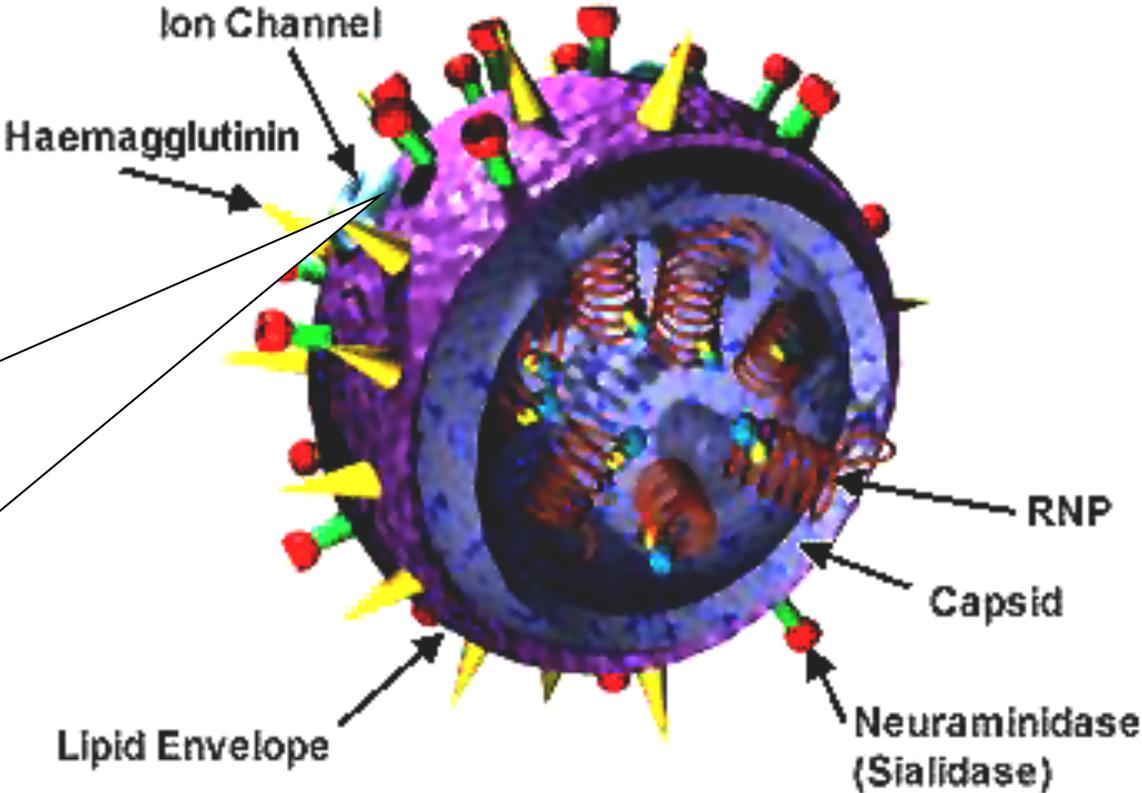
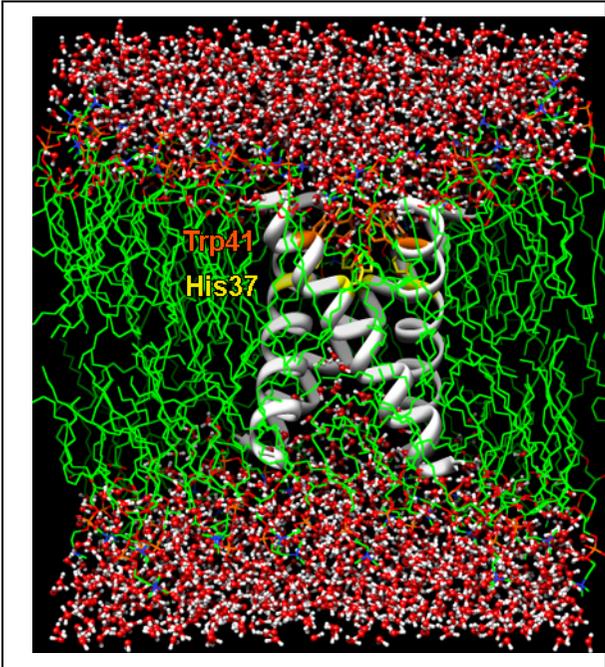
具体的イメージ(例: 創薬)



Mechanism of proton conduction
in M2 channel (a channel in virus).

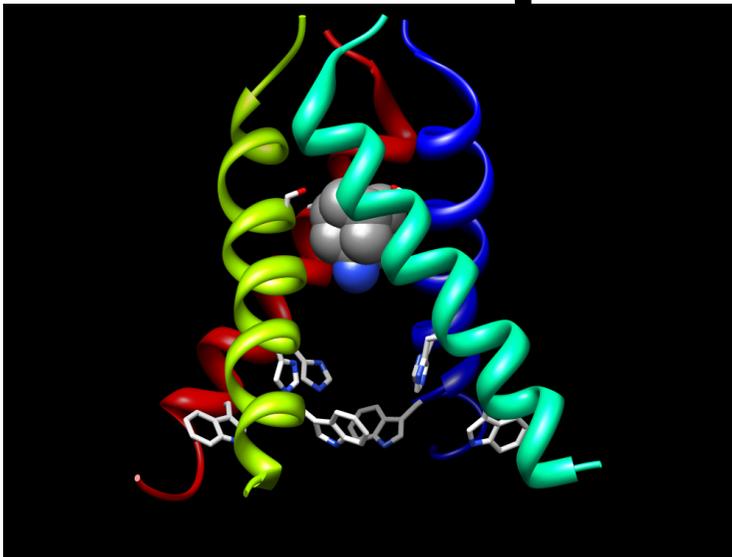
M2 Channel and Influenza virus

M2 Channel

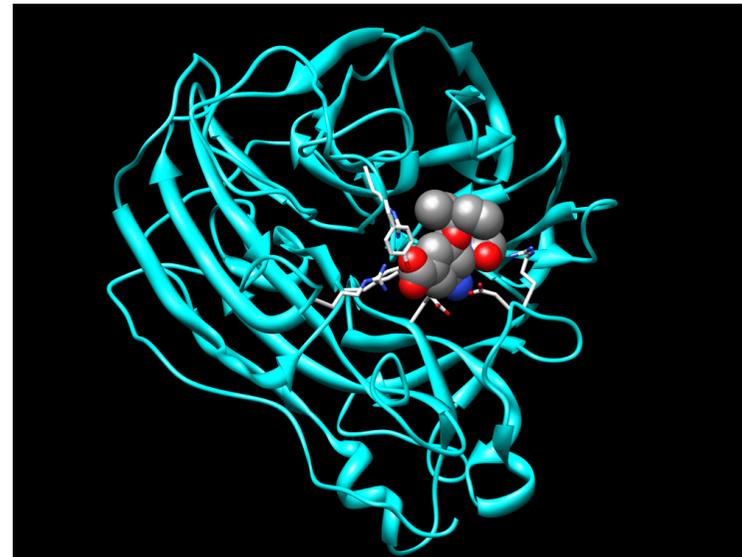


Influenza drugs

- M2 Block (amatedine and rimatedine)
- Neuraminidase inhibitors (zanamivir and oseltamivir [Tamiflu])



M2 blocked

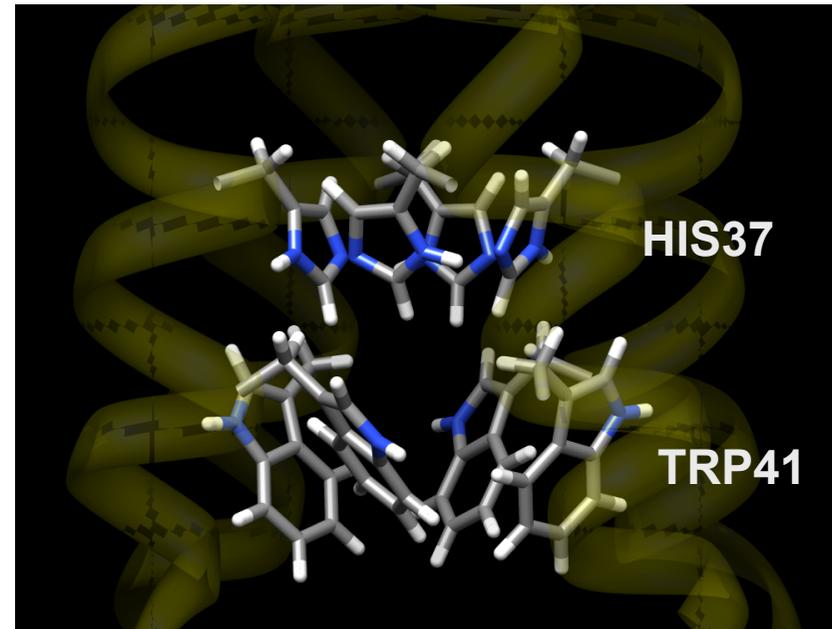


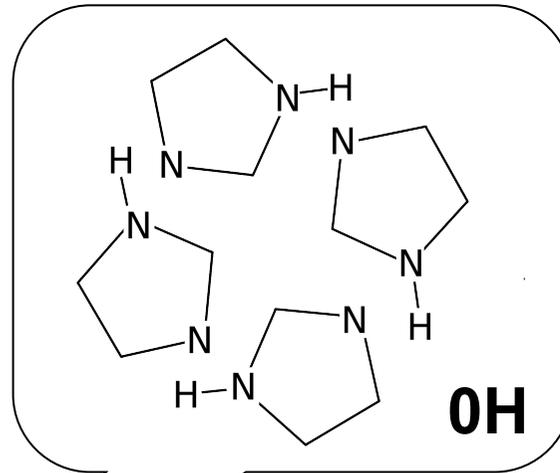
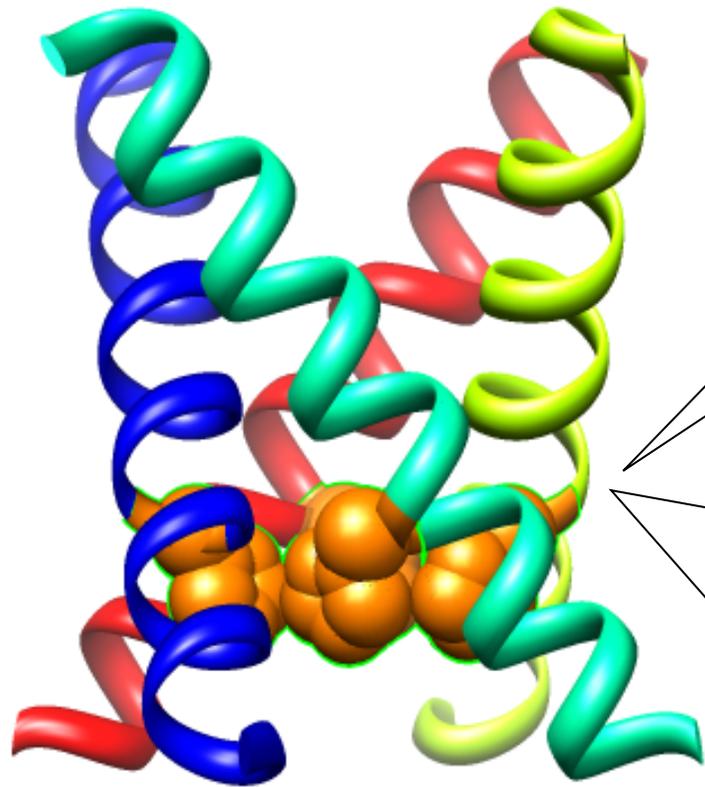
N1-oseltamivir complex

pKa of HIS

- The experiment shows that the four HISs have different pKa (8.2, 8.2, 6.3, 5.0).
- → each HIS is “protonated” at **different pH**

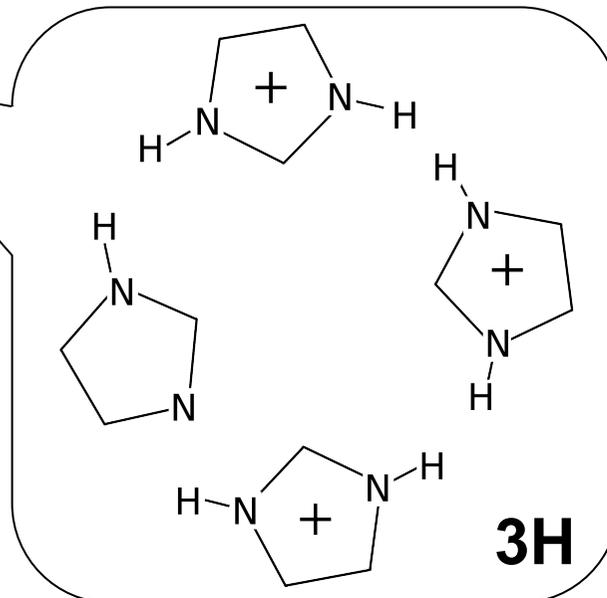
pH > 7.5, channel closed
pH < 6.5, channel opened





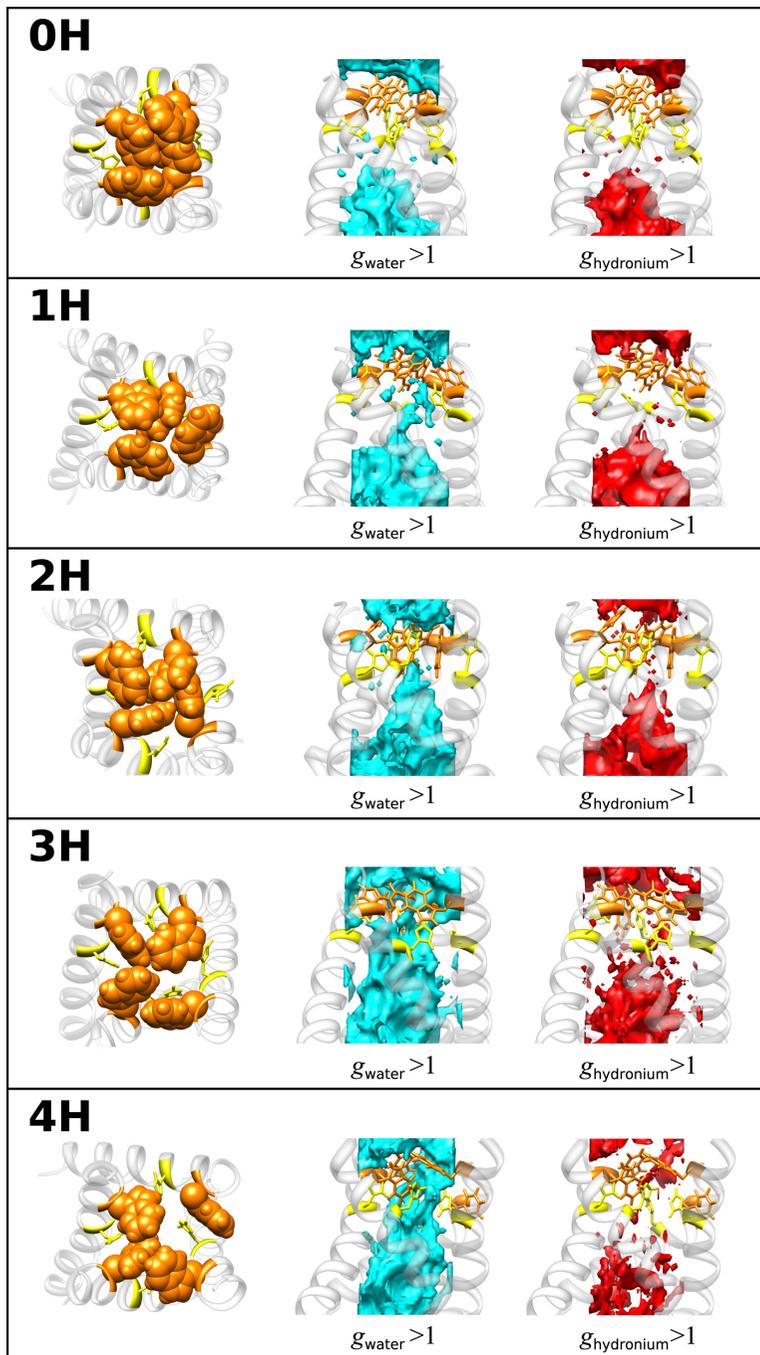
Closed channel

- 0H
- 1H
- 2H

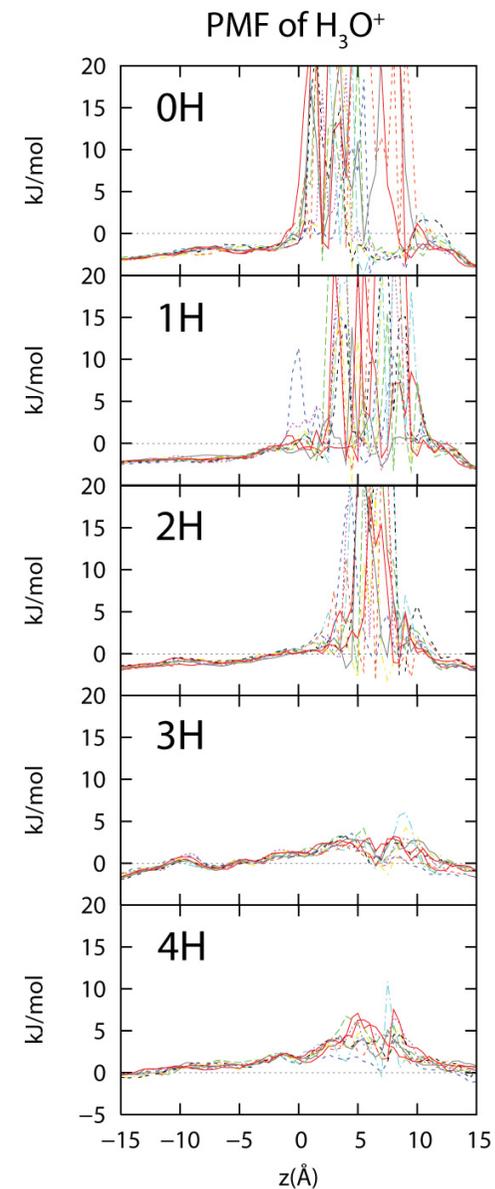
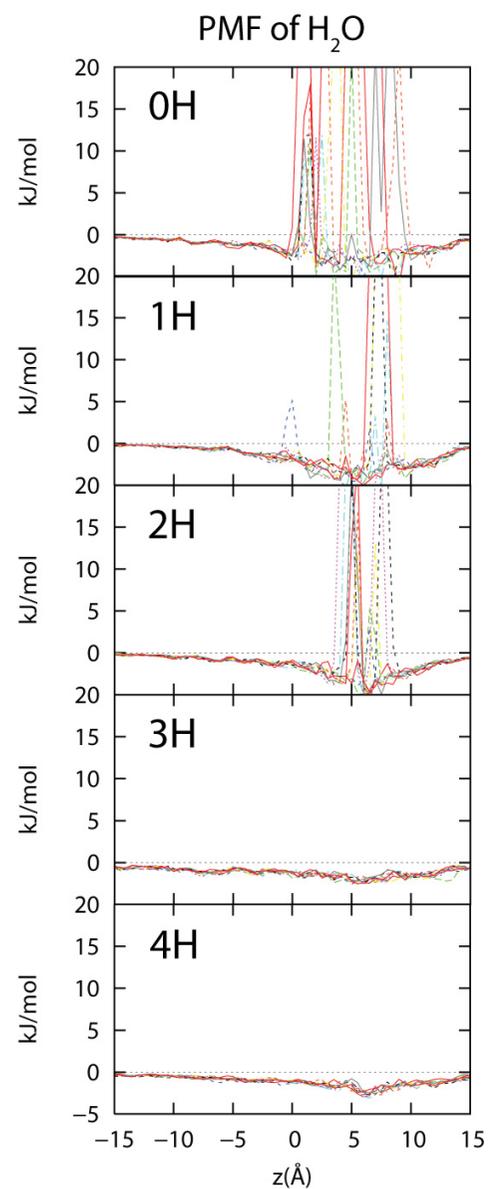


Opened channel

- 3H
- 4H

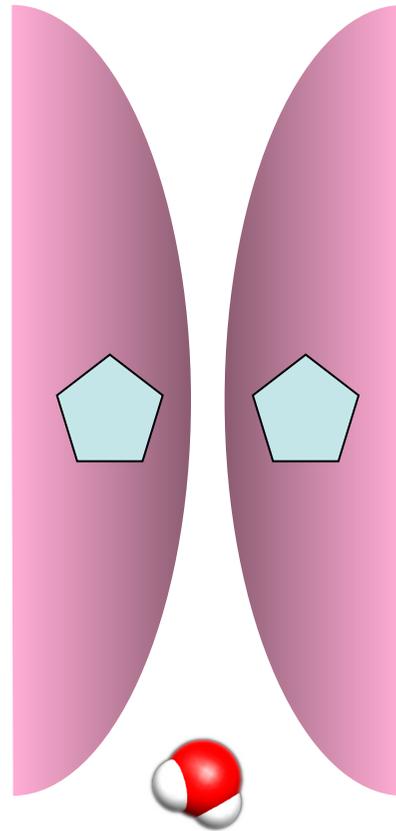


3D and 1D distributions of water and H_3O^+ in M2 channel



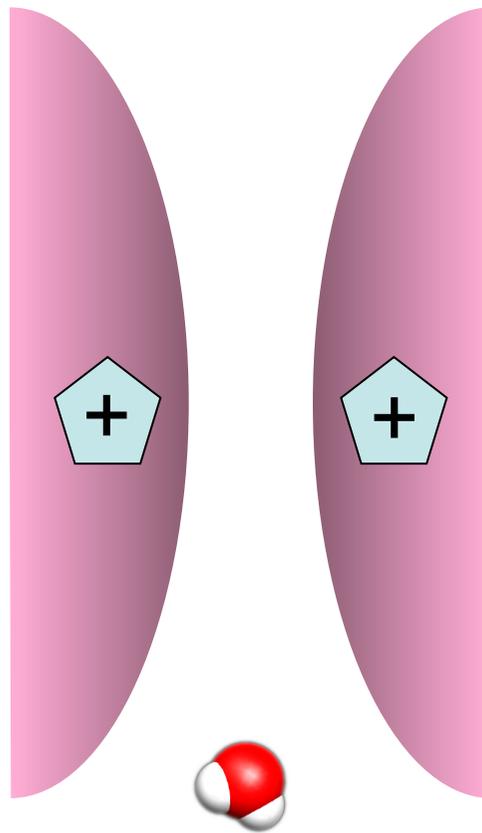
Gating in M2-Channel

A smart mechanism to control the proton conduction !



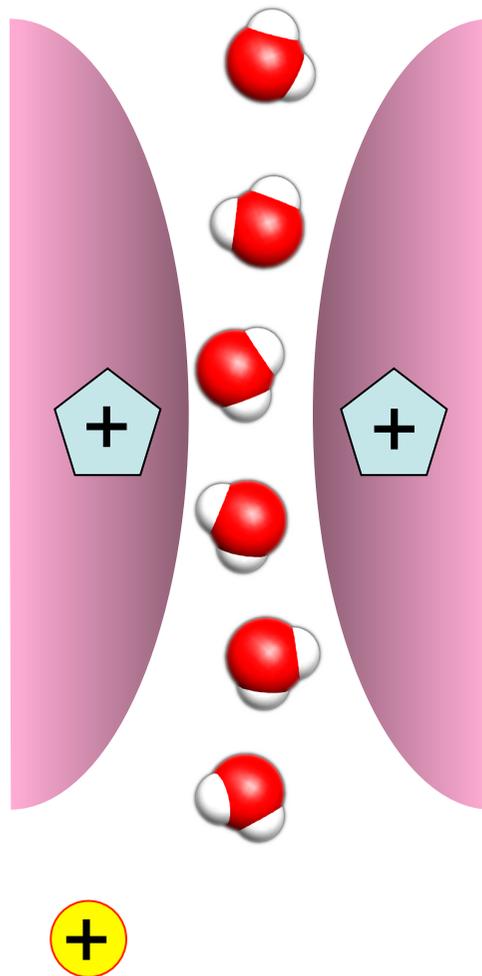
Gating in M2-Channel

A smart mechanism to control the proton conduction !



Gating in M2-Channel

A smart mechanism to control the proton conduction !



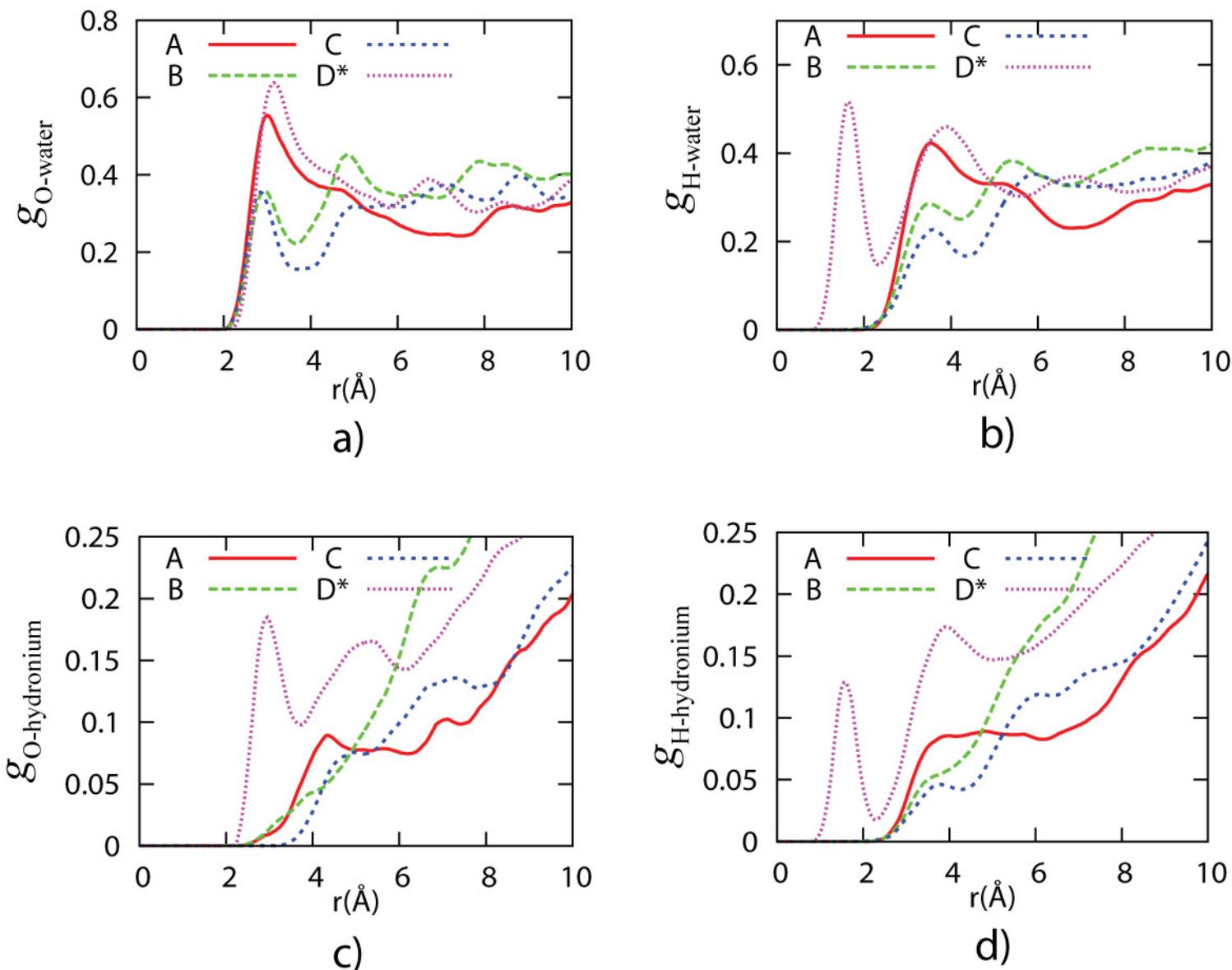
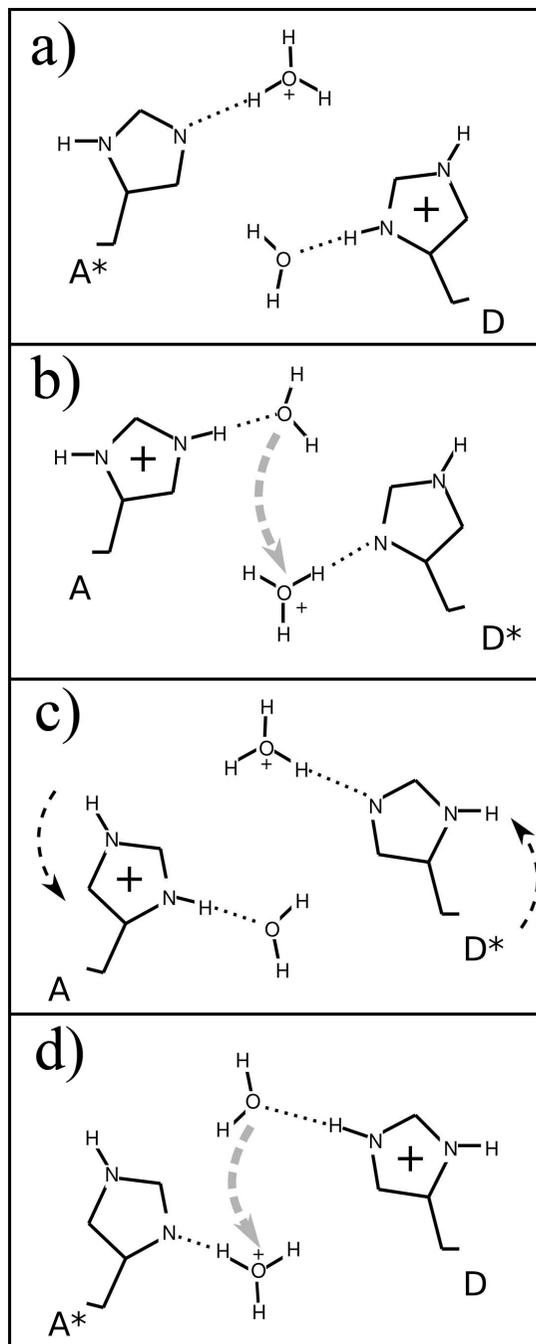


Figure 4 Radial distribution functions of oxygen of water (a), hydrogen of water (b), oxygen of hydronium (c), and hydrogen of hydronium ion around the nitrogen of imidazole. A, B, and C represent protonated His, and D represent non-protonated His.

Proposed model of the proton transfer through the His residues.



a) A non-protonated His (A*) is H-bonded to a H₃O⁺, while a protonated His (D) is H-bonded to a H₂O.

b) The proton is donated from the H₃O⁺ to A* to protonate it, while protonated His (D) donates a proton to the water molecule. .

The process effectively transfers a proton from a water molecule to the other. (His mediated Grotthus Mechanism.)

c) A and D* make small conformational change to prepare for a next proton.

d) The same process as in process b) takes place to transfer effectively a proton from a water molecule to the other.

謝辞:

ナノ統合拠点のメンバー各位

Collaborators:

N. Yoshida (IMS), S. Chong(IMS), Y. Maruyama (IMS),
T. Miyata (IMS), S. Phongphananee (IMS),
Y. Kiyota (SOKENDAI, IMS), R. Ishizuka(UC, San Diego),
A. Kovalenko(NINT,Canada), T. Imai (Riken),

筑波大学計算科学研究センターの皆様:

佐藤先生、高橋先生、朴先生

文部科学省