

受付 ID	15a-20
分野	物質科学

オーダーN 法 DFT 計算プログラムの生体系応用計算での性能調査

Assessment of an order-N DFT code on large biomolecular system

大塚 教雄

国立研究開発法人理化学研究所 生命システム研究センター

1. 研究目的

本研究では、我々が開発してきたオーダーN 法 DFT 計算プログラム CONQUEST を具体的な生体分子系に適用し、応用計算におけるプログラムの並列化効率、実行効率等の性能評価や問題抽出を行う。通常行われている第一原理計算手法では数千原子程度の計算が限界であるが、我々は数万から10万、さらに100万原子程度までの系に対して第一原理計算による理論研究を可能とする手法を提供することを目的としている。精度が十分に制御された計算を高効率で実現することにより、生体系やナノ構造物質に対する理論研究のブレークスルーを目指す。

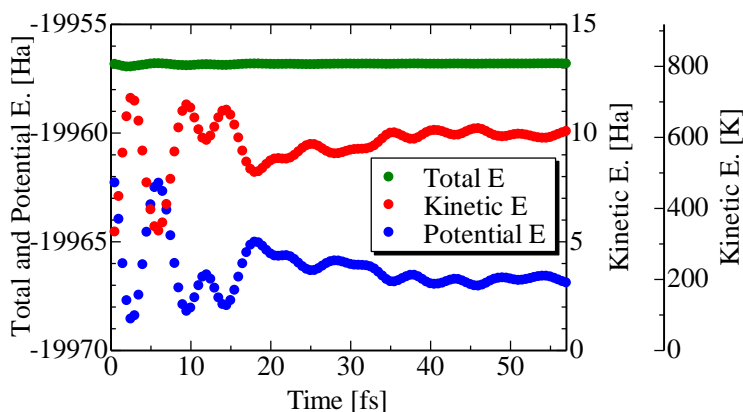
この研究課題では、今後の応用研究を進める基盤となる計算プログラムや計算機システムの多方面から問題点の抽出や内容を明らかにする事を目的としている。具体的には、(課題1) 最新の超並列計算機上での CONQUEST の性能調査、(課題2) 具体的な大規模生体分子系を用いた計算からの計算問題点を抽出、を実施していく。

2. 研究成果の内容

課題1では、具体的な生体分子系として、水和したDNA系(DNA: 634原子、Mg: 9原子、H₂O: 932分子 = 2796原子)を例に実際の計算に対応しうる計算データを採取した。1例として、第一原理分子動力学計算を想定としたテスト計算では、16ノード使用で1日に約~10step程度のサンプリングができた。我々の他のデータからは、さらに早い計算が実現できると考えている。問題点の1つはファイル制御に関するものと特定できた。

課題2として、上記の水和したDNA系を用いて、CONQUESTによるオーダーN法第一原理分子動力学(XL-BOMD)計算を行った。計算条件として、PBE/SZP、non-self-consistentのオーダーN計算、MD計算の初期温度を300K、時間刻みを0.5fsとした。図は、CONQUESTのXL-BOMD計算による、ポテンシャルエネルギー、運動エネルギー、それらの和である全エネルギーのトラジェクトリの1例を示している。全エネルギーは保存しており、20fs以降は安定したトラジェクトリを示す事が分かった。これらの計算結果を基に、温度制御法として速度スケールリング法と能勢-フー

バー法の導入するに至っている。



3. 学際共同利用として実施した意義

我々のオーダーN計算は、密度行列最適化という手法を用いて全エネルギー、一電子密度、最適化構造などを求めており、対角化計算を行わない。このため、物性を決めているフェルミ準位付近の固有値や固有波動関数を求めることはできない。しかしながら、この学際共同利用を通し筑波大学櫻井先生と議論する事で、我々のプログラムによる大規模疎行列ハミルトニアン行列を櫻井先生の手法による対角化計算と組み合わせる事が可能となり更なる進展が可能となった。

4. 今後の展望

上記に示した様に、大規模生体分子系の第一原理分子動力学計算の実行可能と共に trajectories の各点における固有値と固有波動関数を求める事も可能となりつつある。これらを基に大規模生体分子系の複雑かつ大規模な動力学データや電子状態解析を行う手法の開発を行う必要がある。

5. 成果発表

(1) 学術論文

(2) 学会発表

大塚教雄他、第53回日本生物物理学会年会、金沢、2015年9月（ポスター）

大塚教雄他、第9回分子科学討論会2015、東京、2015年9月（ポスター）

(3) その他

大塚教雄、京都大学医学部奥野研究室セミナー、京都、2016年1月（依頼講演）

大塚教雄、東京理科大学総合研究院バイオオルガノメタリクス研究部門研究交流会、東京、2016年3月（一般講演）

使用計算機	使用計算機に○	配分リソース※
HA-PACS		
HA-PACS/TCA		
COMA	○	1040
※配分リソースについては 32node 換算時間をご記入ください。		