

グリッド技術を用いた高速化、可用性の拡大

## 大規模分子軌道計算プログラムの開発

新規物質製造の低コスト化のために、分子シミュレーション技術の高度化により、新規物質設計・製造における開発時間の短縮等による収益率の向上が期待されている。また、生体分子や遺伝子分野における分子シミュレーション技術の高度化は遺伝子治療の活性化や医薬品開発の低コスト化が期待されている。

分子レベルの現象の解析には、量子力学に基づく分子軌道(MO)法が用いられる。MO法では、分子独自の性質や化学反応過程を精密に解析することができる。例えば図に示すDNAとエストロゲンレセプター(ER)二量体の系のMO計算は、偽の女性ホルモン(環境ホルモン)を取り込んだER二量体とDNAの相互作用を精密に調べることを可能とし、なぜER二量体がDNAと結合するのか、なぜ偽のホルモンが異常を引き起こすのかを明らかにすることができる。

生体分子のような大規模系のMO計算の困難は、従来分子積分計算およびそれを要素とするフォック行列の生成にあったが、我々はすでにFMO法<sup>1)</sup>をもとに並列処理やグリッド技術を用いた高速フォック行列生成技術を開発し、高効率な生成を実現した。そのため現在のMO計算の困難は行列の対角化を1つの

計算機で解かねばならないところにある。従来のFMO法では、MOが定義されておらず、われわれが新たにFMO-MO<sup>2)</sup>を定義した。FMO-MOでは、行列要素を並列に生成し、対角化を1つの計算機で行いエネルギーおよびMOを求める。この対角化には基底関数(図の系では約二万)の三乗に比例する演算量と二乗に比例するメモリが必要である。ただし、この時必要な固有値・固有ベクトルは、0付近の数個でしかない。そのため射影法<sup>3)</sup>を改良し、重要なMOだけを求める方法を開発した。この射影法はグリッド技術を用いることを前提に開発された方法であり、グリッド上では高速に必要なMOを求めることができる。さらに計算機を増やすことにより利用可能なメモリ量がスケラブルに増加するので系のサイズの変化に柔軟に対応することができ、さらに大規模な系のMO計算が可能となった。図の系でERはDNA上で配位位置と方向を決めるために二量体を形成することがわかった。

本研究により、生体系やナノサイズの系の現象の理解が格段にすすむばかりでなく、分子シミュレーションの可用性の拡大が加速され、新規材料開発や創業の効率を上げることが期待される。

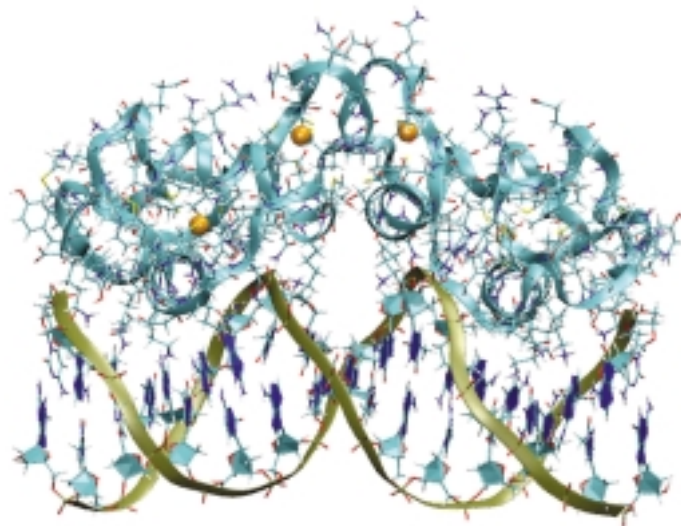


図 DNAとエストロゲン二量体の結合の様子



ながしまうんべい  
長嶋雲兵

u.nagashima@aist.go.jp  
グリッド研究センター

### 関連情報

- 1) K. Kitaura, T. Sawai, T. Asada, T. Nakano, M. Uebayashi, Chem. Phys. Lett., Vol. 312, 319 (1999).
- 2) Y. Inadomi, T. Nakano, K. Kitaura, U. Nagashima, Chem. Phys. Lett., Vol. 364, 139 (2002).
- 3) T. Sakurai, H. Sugiura, J. Comput. Appl. Math, Vol. 159, 119-128 (2003).