

高精度分子シミュレーション法の開発

生体高分子やナノマテリアルの分野では、分子レベルの精密なシミュレーションは実験的な測定手段の限界を補う役割に止まらず、研究の方針を決定する手段としても用いられている。分子シミュレーションではポテンシャルエネルギーや原子に働く力などの力場関数を繰り返し評価して分子構造の統計集団を生成する。この力場関数には一般に経験に基づいて定められた簡便な関数のセットが用いられる。しかし既存の力場関数が利用できる分子種は限られており、ほとんどの分子では力場パラメータの調整なしにシミュレーションを実行することはできない。また化学結合の組換えを伴う系や電子励起状態など、力場に簡単な関数形が期待できない系も存在する。これらの領域をカバーするため、分子軌道法など量子論に基いた手法を用いて力場関数を評価し、シミュレーションを実行するシステムを開発している。この手法は電子の波動関数に基いて力場を計算するため、幅広い化学種に対応できるだけでなく、力場関数の精度を系統的に改善することも可能となる。

量子論的な手法は古典的な力場関数と比較して桁違いの計算時間を要する。このため本システムの分子動力学計算では、数値積分公式を改良して力場計算の回数を削減している。またモンテカルロ計算ではレプリカ交換

法 (REXMC) を実装し、複数の力場計算を独立・並行に実行して計算時間を短縮している。REXMC 法で得られた結果の一例を図に示す。これは cis-azobenzene を核に持つ aryl ether dendrimer 分子の安定構造で、半経験的分子軌道法 (PM3) を力場計算に用いた REXMC シミュレーションで特定した。古典的な力場関数を用いる場合、アゾ基部分には既存の力場関数がないため、パラメータの決定から始めなければならない。本システムではこのような前準備が不要であるばかりでなく、 π 結合を通じた電荷の再分配も自然な形で記述できるので、簡便かつ高精度にシミュレーションを実行することができる。

この REXMC シミュレーションでは力場計算の同時実行にグリッド技術を用いており、一台のクラスター計算機上での並列計算から遠隔地の計算機を利用した広域分散処理まで対応可能である。特に複数の大型計算機が利用可能なケースでは、個々の力場計算を大型機上で並列処理することで階層的な並列化を実現でき、実験精度の力場関数を用いたシミュレーションが可能となる。2002 年秋に実施した実験では、3ヶ国4サイトに分散配置された7台の大型計算機上で最大860個のCPUを統合的に利用し、精密なシミュレーションが実行できることを示した。

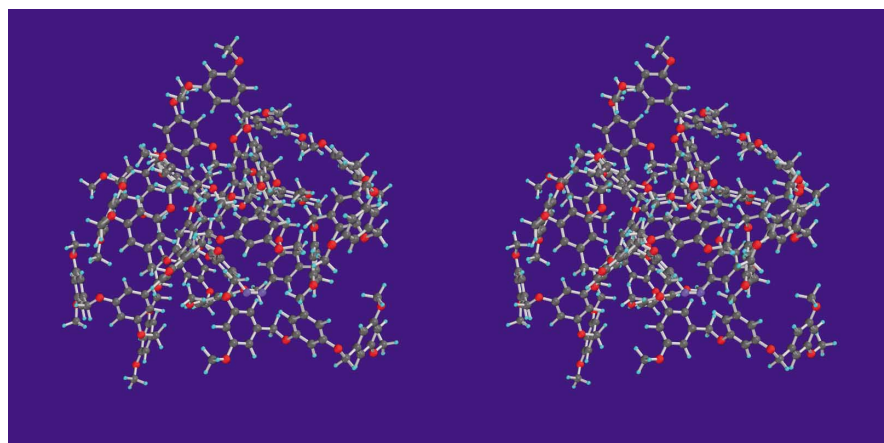


図 REXMC シミュレーションより得られた Aryl ether dendrimer 分子の安定構造 (立体視図・並行法)



いけがみつとむ
池上 努
t-ikegami@aist.go.jp
グリッド研究センター

関連情報

- T. Ikegami, N. Kurita, H. Sekino, Y. Ishikawa: J. Phys. Chem. A, Vol. 107, 4555 (2003).
- 池上, 武宮, 長嶋, 田中, 関口: 情報処理学会論文誌 コンピューティングシステム, Vol. 44, 14 (2003).