

2009
12/18



アドバンスソフト技術セミナー ナノ・バイオシミュレーションの現状と当社の取り組み

量子化学計算への取り組み

アドバンスソフト株式会社
技術第2部 主事研究員
日野 理

1.

発表内容

- 弊社における計算化学への取り組み
- 量子(計算)化学計算ソフトウェアADBSの現状
- ADBSの目指す方向性
- ADBSの短期的テーマ
- まとめ



弊社における計算化学への取り組み

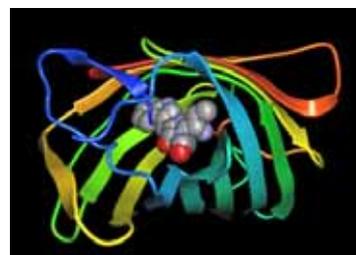
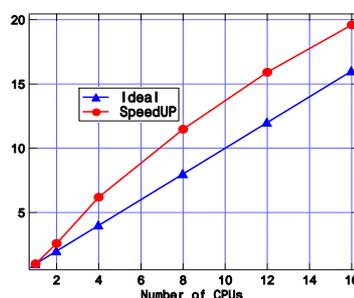
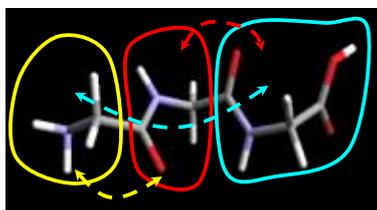
量子化学計算ソフトウェア ADBS (Advance/BioStation)

- ✦フラグメント分子軌道(FMO)法に基づく巨大分子量子化学計算
- 基本計算モデル: XUFF(分子力場)、HF、MP2、DFT

- ✦高い計算パフォーマンス: アルゴリズム & 並列化
- RIMP2(MP2の高速計算アルゴリズム)を採用
- 99%を越える並列化率

✦導入予定の機能

- TDHF、TDDFT法による励起状態計算
- LR(Linear Response)法による物性値計算
- DFTによる構造最適化



3

弊社における計算化学への取り組み

計算化学に関連する 受託解析、受託開発作業

✦量子化学計算

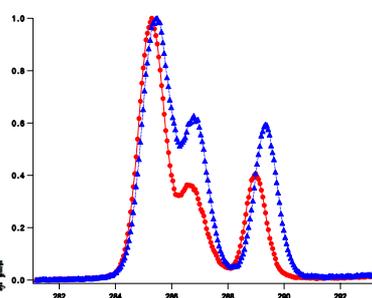
- 分子のイオン化ポテンシャル、励起エネルギー、基準振動解析、化学反応経路探索、FMO法による受容体/リガンド結合能

✦ホモロジーモデリング、ドッキング、分子動力学計算

- 立体構造データの存在しないタンパク質のモデリング
- リガンドとのドッキングサイト探索、分子動力学計算

✦シミュレーション計算プログラムのカスタマイズ

- プロファイリング、逐次計算チューニング、並列化、並列性能調査



地球シミュレータ



4

量子(計算)化学計算ソフトウェアADBSの現状

- ✦FMO法を基礎とした巨大分子の量子化学計算
 - 200アミノ酸残基レベルの生体分子量子計算が1日程度で可能
 - ファーマコフォア周辺の第一原理による相互作用解析
 - 摂動理論、密度汎関数理論などの高精度計算
 - 汎用分子力場(XUFF) + 可変電荷を組み合わせた分子力学計算
 - QM / MM計算

✦並列計算

- ベンチマーク計算で99.95%の並列化率
- 1ライセンスで任意のプロセス数による並列計算(c.f. ガウシアン)

✦GUI

- 計算エンジンを起動させるための複雑な入力ファイル生成
- 計算結果に基づく種々の解析
- 計算結果の可視化



5

量子(計算)化学計算ソフトウェアADBSの現状

- ✦FMO法を基礎とした巨大分子の量子化学計算
 - 生体分子に特化(し過ぎている!?) 一般の高分子化合物、ナノチューブ、デンドリマー、分子クラスター等の巨大分子系への適用が困難
 - 物性値の計算機能が不足
 - よりきめ細かな相互作用解析
 - 官能基単位での相互作用解析

✦並列計算

- 分散処理を前提とした並列計算、マルチコアPCにおける並列計算はやや不効率
- GPUを用いた並列計算の可能性

✦GUI

- GUIで行うべき作業をソルバが行っている(フラグメント分割等)
- ソルバとの連携が不十分



6

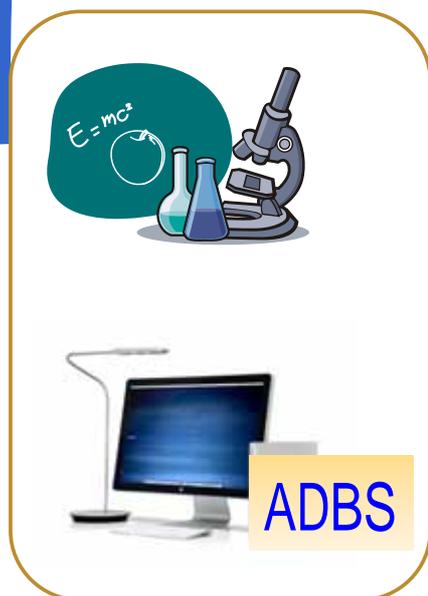
ADBSの目指す方向性

- ✦計算機能 **対象となる分子の拡大、物性値の計算**
 - より一般的な巨大分子の第一原理計算 生体分子 + 分子クラスター、一般の高分子、etc.
 - 小分子の高精度 / 多目的な計算 大規模計算の基盤
 - 分子力学計算モジュールの拡張
- ✦計算速度 **1台のデスクトップ計算機でも動く**
 - マルチコアPC(8コア~)上で、共有メモリ型の並列計算
 - ダイナミックな分散処理の導入(MPI_Spawn)
 - GPUの活用
- ✦GUI **プリポストソフトウェアとして独立**
 - 直観的な分子ビルディング・モデリング機能
 - ソルバが扱いやすいデータの生成
 - ソルバ出力から計算できる物理量はGUIで処理
 - ソルバを柔軟に制御
 - 他の量子化学計算ソフトウェアも制御可能

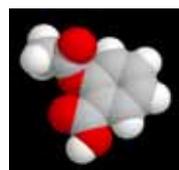


7

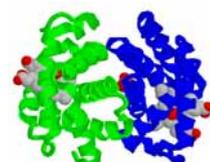
ADBSの目指す方向性



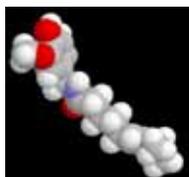
ジャスミン(香)



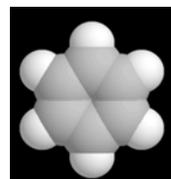
アスピリン(薬)



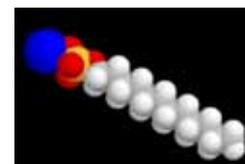
ヘモグロビン(生)



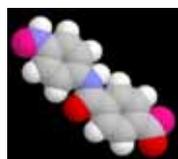
カプサイシン(味)



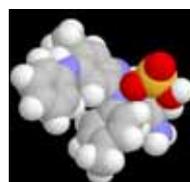
ベンゼン(化)



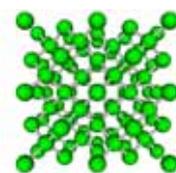
ドデシル硫酸ナトリウム(美)



ナイロン(高)



モーブ(色)



シリコン(材)



8

ADBSの短期的テーマ

- ✦FMO法以外の巨大分子計算法の導入
 - “分割統治 (Divide and Conquer) 法” (c.f. GAMESS)
 - RI法による高速化
 - 励起状態計算法 (CIS, RPA, TDDFT)
 - 線形応答計算法 (光学応答、磁気応答)
 - 構造最適化 (DFT, MP2)
- ✦並列計算
 - マルチスレッド並列化
 - ダイナミックな分散処理の導入
- ✦GUI
 - ソルバ入力ファイル作成支援機能 (分子分割、キーワードチェック)
 - ポスト解析機能 (静電ポテンシャル、MO表示)
- ✦解析事例の蓄積
 - 創薬への応用例
 - 分子設計への応用例



9

まとめ

- ✦弊社における計算化学への取り組み
 - ADBS販売 / 受託解析・開発
- ✦量子(計算)化学計算ソフトウェアADBSの現状、方向性
 - 現状生体分子に特化、これからはその枠を超える
 - あらゆる分野の分子 / 材料設計で貢献できるソフトウェア
 - 使いやすいソフトウェア
- ✦ADBSの短期的テーマ
 - すでいくつかの課題に着手
 - 高い目標に向かって着実に課題をクリア



10