

分子計算ソフトウェア NTChem の開発と巨大分子への応用

理化学研究所 計算科学研究機構 中嶋隆人

nakajima@riken.jp

量子化学に基づいた分子科学計算ソフトウェアは物質科学・生命科学などの多くの分野の共通基盤である。Gaussian (米国) や GAMESS (米国) などの量子化学計算ソフトウェアは計算化学者や実験化学者を問わず世界中で幅広く利用されている。コンピュータの高度化・高性能化に伴い、大規模な分子系を高精度に計算する要望は急速に増しつつある。しかしながら、広く用いられている既存ソフトウェアの多くは単一プロセッサの時代に設計・開発されたものであり、その拡張としての単純な並列化は可能ではあるが、京コンピュータのような超並列スーパーコンピュータにおいて並列化効率が問題となる。全系丸ごとの分子計算に関して言えば、2015年現在では千原子分子程度の第一原理電子状態計算が上限で、新規の機能発現などが期待できるナノスケールサイズの数万原子系に対する計算は不可能である。また、数百原子分子系の第一原理化学反応計算も多数の電子状態計算が必要であり、ほぼ困難である。fragment molecular orbital (FMO) 法のような領域分割法を使っても現状では並列化効率の点で数万原子系が限度であろう。これらの問題について、分子化学分野をはじめとする多くの領域において解決の強い要望が出ている。京やポスト京の圧倒的な計算資源を活かすためには、超並列計算が可能で一般ユーザーが利用できる分子科学計算ソフトウェアの開発が急務である。そこで、われわれは現在、幅広い分野の多くのユーザーの利用に資する汎用分子科学計算ソフトウェア NTChem の開発を行っている。[1, 2] NTChem は一から設計をした新しい国産分子科学計算ソフトウェアである。既存ソフトウェアの持つ多くの機能をカバーしつつ、われわれが新たに開発してきた理論手法の集大成でもあって、他のプログラムでは利用することのできない多くの量子化学計算法を含んでいる。2015年現在、NTChem2013には数千原子分子系に対する第一原理電子状態計算や数百原子分子系の化学反応過程追跡計算を実現するための分子科学理論が実装されている。さらに、京コンピュータなどのマルチコア超並列クラスタ計算システムの性能を引き出すことが可能な並列アルゴリズムが実装されている。2013年8月には京コンピュータ上において NTChem2013 は一般公開されている。本ポスターでは NTChem の特徴、機能、性能について、特に巨大分子の取り組みを中心に紹介する。

[1] NTChem 2013. http://labs.aics.riken.jp/nakajimat_top/ntchem_j.html

[2] T. Nakajima, M. Katouda, M. Kamiya, Y. Nakatsuka, *Int. J. Quantum Chem.* **115**, 349–359 (2015).