

NTChem による化学反応探索

理化学研究所・計算科学研究機構 中嶋隆人

分子化学分野をはじめとする多くの研究領域において、京コンピュータを利用した大規模で複雑な分子系を高精度に計算する要望が出ている。このため、理化学研究所・計算科学研究機構・量子系分子科学研究チームでは以下に示す研究を行い、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」の開発を京コンピュータ上で行ってきた。(1) 他の量子化学計算プログラムでは扱うことができない大規模分子向け分子計算法、高速計算法、高精度分子計算法の理論とそのアルゴリズムを開発する。(2) それらの理論・アルゴリズムに基づき、我が国独自の分子科学計算ソフトウェアを新たに開発し公開することで、タンパク質の丸ごと計算のような数万原子分子の電子状態計算や、数百~千原子分子系の化学反応の詳細な追跡計算を高速かつ高精度に実現する。

「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。「NTChem」の第一版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。「NTChem」の第一版の主な機能は以下の通りである。

(1) Hartree-Fock 法および密度汎関数 (DFT) 法に基づく基底状態の電子状態計算, (2) 時間依存密度汎関数法と遷移ポテンシャル法に基づく励起状態の電子状態計算, (3) GFC 法, RIDFT 法, Dual-level DFT 法などによる線形あるいは低スケーリング DFT 計算, (4) PDM や擬対角化法などの対角化フリー法による低スケーリング SCF 計算, (5) Coupled-cluster 法と量子モンテカルロ法に基づく基底状態および励起状態の高精度電子相関計算, (6) 高並列化 RI-MP2 法による大規模分子電子相関計算, (7) 高次 Douglas-Kroll 法や RESC 法などに基づいたスピン-軌道相互作用を含む 2 成分相対論的電子状態計算, (8) QM/MM 法や ONIOM 法による巨大分子のモデル計算, (9) 効率良い化学反応経路探索計算, (10) ab initio 分子動力学法計算, (11) NMR 化学シフトや電子スピン共鳴などの磁気的性質の計算, (12) 最大相互作用 (MIO) 法や相互作用軌道 (PIO) 法による分子間相互作用解析

「NTChem」の第一版である「NTChem2013」は本年 8 月に京コンピュータ上において一般公開されている。本講演では「NTChem」の特徴、機能、性能に関し、特に、「NTChem」がターゲットにしている数百原子分子系の化学反応探索の応用例を中心に紹介する。