

ディビジョン番号	3
ディビジョン名	理論化学・情報化学・計算化学

大項目	1. 理論化学
中項目	1-1. 電子状態
小項目	1-1-8. 大規模計算（2）

<p>概要（200字以内）</p> <p>電子状態理論の分野では、生体分子やナノ分子などを実験値と比較できる実用的な精度で計算することが大きな課題のひとつであり、大きな分子を取り扱う方法論が盛んに開発されて来た。最近では、並列計算機が普及し、並列計算による加速によって計算時間を減らすという方法が一般的になっている。今回は、新しいアルゴリズムや近似など理論による解決と併せて報告する。</p>
<p>現状と最前線</p> <p>現在、電子状態理論の分野で開発されている大きな分子を取り扱う方法は「既存の方法論の並列化」と「新しい理論と近似の開発」の2つに大きく分けられるように思われる。</p> <p>○既存の方法論の並列化</p> <p>既に数十台の計算機を利用して、数千軌道の分子軌道計算、2次摂動法（MP2法）による電子相関エネルギー計算や構造最適化が可能なアルゴリズムとプログラムが開発されている。並列化計算は、近似が導入されていないため結果に信頼性があり、個々の研究室規模での計算では、今後、主流になる可能性が高いように思われる。しかしながら、次世代スーパーコンピュータプロジェクトで開発されているような数千～万のCPUを使った大規模並列計算機を有効に利用するには、現状では並列化効率が低い。</p> <p>並列化効率の点から言えば、量子モンテカルロ法（拡散モンテカルロ法）が有望であり、最近の発展は目覚ましいものがある。多数の計算機を利用し多数のサンプルを採ることによって、乱数を使用することから生じる統計誤差を減らすことができるという利点もある。しかしながら、この方法で一般的に利用されている節固定近似（fixed-node approximation）を使うためには、試行関数を求めるために通常の量子化学計算が必要になる。また、結果に試行関数依存性が生じるという問題点も存在する。</p>

#### ○新しい理論と近似の開発

諸熊先生のONIOM法、北浦先生のフラグメントMO法など、大きな分子を幾つかの領域に分割し、離れた領域同士の相互作用を近似することによって計算労力を減らす理論が提案されている。これらの理論は、既にナノやバイオなど様々な系に応用され成果をあげており、また、既存の方法論との組み合わせが比較的容易という利点もある。欠点としては、領域の分割の仕方など計算条件の選定に任意性があり、利用者の習熟度が要求される。

また、既存の方法論は、一般的に分子軌道法で系のサイズの3乗、2次摂動(MP2)法では系のサイズの5乗に比例して計算労力が増加すると言われており、これが電子状態理論の大きな分子への応用を困難にしている。これらの理論に様々な近似を導入して、計算労力が系のサイズに比例するような方法(オーダーNの方法)が提案されている。しかしながら、計算労力を減少させるために近似を導入しているため誤差が生じ、得られた結果の信頼性が低くなっている。応用する系が大きくなったときも、誤差を小分子における計算と同程度に抑えることが課題である。

#### 将来予測と方向性

##### ・ 5年後までに解決・実現が望まれる課題

大規模並列計算機を有効利用できる量子化学計算プログラムの開発

ナノサイズ分子の高精度電子状態計算

##### ・ 10年後までに解決・実現が望まれる課題

生体分子の高精度電子状態計算

#### キーワード

電子状態理論、大規模計算、並列化、

(執筆者: 大塚 勇起 )