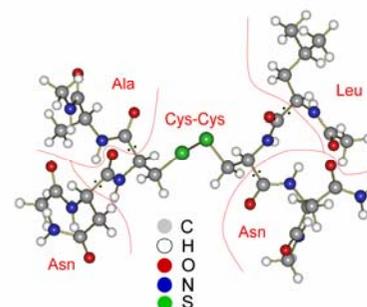


分野名: ナノ

# FMO分子軌道法計算

- プログラム名: GAMESS/FMO
- 開発
  - 産業技術総合研究所 北浦和夫、D.G. Fedorov他
- 概要
  - タンパク質等の巨大分子の電子状態を求める。
  - 対象分子を小さなフラグメントに分割し、各フラグメント及びフラグメント対に対して分子軌道計算を行い、全体のエネルギーを求める。
- アルゴリズム
  - Hartree-Fock 法等による量子化学計算
  - 主に FORTRAN77、一部 C
  - MPI による並列計算
- 現状での計算規模
  - 1フラグメントの平均基底数 300 程度
  - フラグメント数 500 程度
  - PC (Xeon 3GHz dual) 48 ノードで約 5~6 日
  - メモリ容量 500 MB (プロセス毎)、ディスク容量 300MB (ノード毎)
- 次世代スパコンでの計算規模
  - フラグメント数を 20000 程度まで拡張したい。
  - 100 CPU X 10000 ノードの場合の予測時間は約60h。
  - メモリ容量 6 GB (プロセス毎)、ディスク容量 15 GB (ノード毎)



フラグメント分割法



タンパク質の電子構造

- どのようなことが期待されるか？
  - 1 フラグメント当たりの平均原子数を 30~40 とすると 20000 フラグメントでは 60 ~80 万原子のタンパク質の電子状態計算を行うことができる。
  - 水溶液中のタンパク質のモデルとして周りに現実的な数の水分子を配置することも可能になり、生体内の分子の詳細な電子状態計算結果を利用して、薬品開発のためのスクリーニングなどをより高精度に行うことが出来るようになる。