

GRIDコンピューティングによるタンパク質の量子化学計算

— QM/MM連成プログラムの開発と将来展望 —

(阪大蛋白研、阪大院理¹、日立東日本²、日立基礎研³、NEC基礎研⁴)米澤康滋、中村春木、山中秀介¹、山口兆¹、黒澤隆²、何希倫³、
佐久間俊広⁴、中田一人⁴、○高田俊和⁴

【序】次世代の計算環境として、GRID が注目されている。GRID では、電力の供給と同じように、パソコンをインターネットに接続するだけで、必要なコンピュータパワーの供給が受けられるようになるといわれている。スーパーコンピュータが手元になくても、例えば、タンパク質の計算が、ブラウザとの会話だけで行えることになる。これは、シミュレーションスタイルの変革であり、分子シミュレーションのみならず、色々な分野のシミュレーションが、遠からずグリッドコンピューティングを指向するものと考えられる。

このような背景の下、大阪大学バイオグリッドプロジェクトでは、GRID 技術のバイオインフォマティクスへの応用を目指して、1) グリッド基盤技術、2) データグリッド技術、3) コンピューティンググリッド技術、4) 遠隔操作技術、の4分野について、緊密な連携を取りながら、研究開発を進めている[1]。コンピューティンググリッドグループの研究活動のひとつとして、分子動力学、分子軌道法、密度汎関数法を連成した QM/MM (Quantum Mechanics/Molecular Mechanics) プログラムの開発を進めている。本講演では、そのプログラムの開発方針と構造的特徴、GRID 環境下での稼動状況、生体分子への応用などについて、報告する。尚、生体分子のシミュレーションに必要な連成プログラムを作成するための基本的考え方を、BioPfuga (Biosimulation Platform United on Grid Architecture) と呼んでいる。

【プログラムの構成】MM計算を行う prestoX-basic と QM 計算を行う AMOSS を連成したプログラムの構造と、制御及びデータの流れを、図に示す。本プログラムでは、1) AMOSS が QM 空間に属する原子核に働く力を QM・MM 空間の相互作用も考慮して計算する、2) prestoX-basic が MM 領域の原子核に働く力の計算と AMOSS の結果を合わせ、 δt 秒後の新しい原子核の座標を計算する、3) Couple Controller なるプログラムが、これらのデータの流れとプロセスの生成を、同期を取りながら制御する、のステップを繰り返して、MD 計算を行っている。GDFT プログラムによる電子相関の計算は、QM 計算部に組み込まれて行われるが、現在この連成作業を進めている。この構造の為、prestoX-basic と AMOSS を、GRID 上で同時並行的に稼動させることが可能であり、プロセッサが十分あれば、QM・MM 空間に対する並列処理による高速化が期待される。また、本システムでは、連成を迅速に行うために、データの入出力は、それぞれのプログラムで独立に行っているが、連成が進めば、自然

に融合されていくと考えている。

【プログラムの特徴】 GRID では、分散処理が基本である。また、連成プログラムの構成単位間のインターフェースを簡素化するために、

- 1) 中間データに統一された名前をつけ、ファイルに保存することで、中間データの共有化を図る。現時点では、バイナリデータ中心であるが、一部に関しては XML を用いている。データのリーダビリティの向上には、全てのデータを XML 化する必要があると考えている。
- 2) プログラムを、個別計算機能に分割し、所謂 SPMD から MPMD への移行を行っている。spawn との併用により、ダイナミックなプロセス生成が可能となり、GRID に適したプログラム構造となっている。

の2点を、プログラム開発の基本方針としている。長期間に渡り、独立に開発されてきた prestoX-basic と AMOSS が、極めて短期間に融合されたことにより、引数によるインターフェースに比べて、格段に連成し易くなっていることが示された。

【計算結果と今後の課題】 エタノール+水系の QM/MM 分子動力学計算を、動作確認のためのテストとして行った。QM 空間として、エタノールと2分子の水、MM空間には226個の水を配置して、分子グラフィックスによりその動きを表示した。現在、GDFTを連成しているので、電子相関を考慮した MD 計算を計画している所である。また、aquaporin など膜タンパク質への応用も開始している。BioPfuga に基づく連成プログラムは、極めて柔軟性に富んでおり、色々なプログラムと連携しながら、発展していく可能性が高いと考えられる。今後、多くの賛同者を得て、生体分子の汎用シミュレーションシステムとして、機能強化が図られることを期待している。

Workflow of BioPfuga for prestoX-basic (MM) and AMOSS (QM)

