

東京大学情報基盤センター

トライアルユース利用成果報告書

提出日：平成 24 年 10 月 29 日

研究題目 (申込課題名)	フラグメント分子軌道法およびエネルギー表示法を活用した並列自由エネルギー計算		
フリガナ 氏 名 (※1)	印	利用者番号 (プロジェクトコード)	
所 属 (※2)	株式会社クロスアビリティ 計算科学事業部		職 名
利用計算機 システム	FX10 スーパーコンピュータシステム		
申込区分	1. 無償トライアルユース		2. 有償トライアルユース
コース	1. パーソナルコース (※3 コース1 ・ コース2)		2. グループコース 3. グループコース (企業利用)
利用期間	平成 24 年 4 月 ～ 平成 24 年 9 月		

- ※1 グループコースの場合は、利用申込書に記載した代表者名を記入してください。
- ※2 企業の方の場合は、企業名および部署名を記入してください。
- ※3 どちらかに○をつけてください。
- ※4 本報告書は、利用状況調査等に活用し、センター広報・Web ページには利用件数を公開いたします（グループコース（企業利用）を除く）。
- ※5 グループコース（企業利用）については、利用終了後に申込課題名および企業名をセンター広報・Web ページに公開いたします。

- 本報告書は、利用期間終了後 1 ヶ月以内に東京大学 情報システム部 情報戦略課 研究支援チームまでご提出ください。
- 本様式の変更はできません。

受付日	平成 年 月 日	受付印	
-----	----------	-----	--

※記入の際は各項目の枠内に収まるように記入してください。補足資料を付加することは可能です。

1. 利用の概略

1) 利用目的・内容

利用アルゴリズムはハートリーフォック法に基づくフラグメント分子軌道法[1]と分子動力学法、および京大発のエネルギー表示法[2-4]の3つであり、これらを錬成させて最終的に得たい自由エネルギーの値を得ることを最終目的とする。これらはすべて高速かつ並列化効率の高いアルゴリズムではあるが、複数のタンパクを扱うと、主にサンプリングを増やすための分子動力学法の計算量は甚大なものとなるため、自社だけの計算資源では十分ではない。なお、コアの数が基本的に重要であり、メモリを必要とするアプリケーションではない。また、サンプリングは長時間必要ではないため、ストレージ不足の心配も少ない。

[1]K. Kitaura et al., *Chem Phys. Letters*. 313,701(1999);312,319(1999)

[2]Matubayasi and Nakahara, *J. Chem. Phys.* 2000, 113, 6070-6081

[3]Matubayasi and Nakahara, *J. Chem. Phys.* 2002, 117, 3605-3616

[4]Matubayasi and Nakahara. *J. Chem. Phys.* 2003, 119, 9686-9702

計算手法

- *1) 並列化効率の高い量子化学計： GAMESS FMO
- *2) 高速な分子動力学ソフトウェア： Amber, Gromacs
- *3) 京大発のエネルギー表示法のアルゴリズム： ermod

「ermod」 についての特長的説明

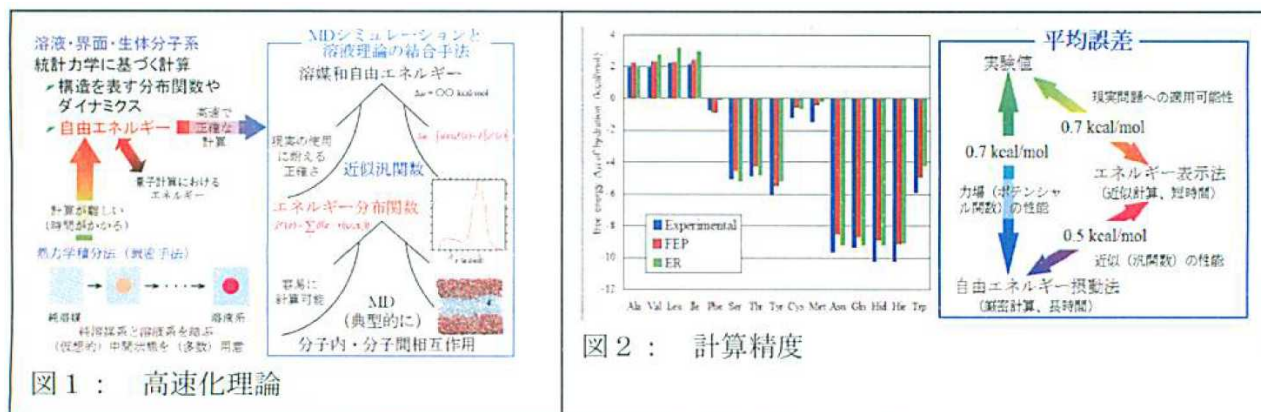


図2： 計算精度

図1のように、熱力学積分法で厳密に解く計算の純溶媒と溶液系の間状態をすべて省くことで相当数の分子動力学計算の数を減らし、数十倍の高速化を達成するという特徴がある。それでいて、理論的には不完全であり、溶媒-溶質相互作用をエネルギーに分解してしまうことで構造依存性（界面、不均一系、膜タンパクにも適用可能）もない。

図2のように、アミノ酸アナログとの比較計算を行うと、実験値、および自由エネルギー摂動法による厳密手法と遜色ない精度を達成している。速度対効果は抜群である。

以上が ermod の特長である。

2) 利用意義

低分子化合物とタンパクの結合自由エネルギー計算の高速・高精度化は主として医療品開発に携わるメーカーにとり、喫緊の課題となっている。量子化学計算の知見を反映させて大規模に分子動力学を行う課題は多数の計算資源を扱う必要があり、また利用自体に非常に高度なソフトウェア技術を必要とするため、医療品メーカーには安易に手を出しづらい分野となっている。多数の計算資源を有する京コンピュータでの医療品メーカーの利用を促進するためには、錬成の I/F 開発、事前の評価およびソフトウェア整備が必要であり、アプリケーション開発者のサポートが必要な分野である。

3) スーパーコンピューターを利用する必要性

とにかく必要な計算量が多い

2. 成果の概要

1) 今後得られるであろう成果の見通し

まずは今回の成果について説明する。

クローン J 行列アルゴリズムを実装したオリジナルの J-matrix エンジンに GAMESS のフラグメント分子軌道法の環境静電ポテンシャル計算 (ESP) に係るオリジナルコードと一部入れ替えることで、トータルの FMO 加速を実現した。

計算対象： ヒトインスリン (2HIU)

環境静電ポテンシャル (ESP) と合計時間の FMO2/6-31G 加速率

	ESP	Total
8node x 8core = 64core	1.73	1.50
12node x 8core = 96core	1.86	1.57

※エネルギー値 (a. u.) はフラグメントの総合計で小数点 5 桁まで一致しており、実用上問題ない。

今回の成果は、FX10 アーキテクチャにおいて、QM/MD のボトルネックとなる QM 部分の加速に成功したというものである。今後得られるであろう成果の見通しであるが、MD 部分である Gromacs および Amber12 を練成させる必要があるが、京コンピュータ向けにこれらのソフト自身がチューニングしているという情報もあるので、そちらがリリースされた後に対応するのが賢明と考えている。MD のポスト処理となる ermod は既に FX10 アーキテクチャで動作済なので、練成処理するだけでよい。他 ermod 自体のリガンドバインディング高精度化という新しい課題が出てきたので、そちらは基礎研究にゆだねる必要がある。

2) 社会・経済への波及効果の見通し

※パーソナルコースを利用された企業の方およびグループコース（企業利用）の場合のみ記入

3) その他の成果

弊社で販売・開発を始めた Winmostar™ から FX10 のクラスタにジョブ投入できる可能性を見出した。

<http://winmostar.com/>

計算科学に興味を持つ実験家に計算機利用を普及させるには重要な成果である。