

課題名 (タイトル) :

GPU を用いた生体高分子の高速分子動力学計算

利用者氏名 : ○中村 春木*, **, 肥後 順一**, 神谷 成敏**, 笠原 浩太**, 真下 忠彰***

所属 : *本所 情報基盤センター 技術開発ユニット, **大阪大学 蛋白質研究所, ***産総研

1. 本課題の研究の背景、目的、関係するプロジェクトとの関係

我々は、生体高分子系を含む一般の分子系において、遠距離力である静電相互作用を、Ewald法を用いずに高い精度で算出できる Zero-Multipole Summation 法を最近開発した (Fukuda (2013) J. Chem. Phys.)。中でも Zero-Dipole Summation (ZD) 法は、純水のような均一系でも、蛋白質や DNA 溶液のような不均一系においても、12~14 Å 程度の短い距離で相互作用をカットオフしても、良い精度で分子動力学計算へ応用できることが確認された (Fukuda et al. (2012) J. Chem. Phys.; Kamiya et al. (2013) Chem. Phys. Lett.; Arakawa et al. (2013) PLoS One)。さらに、このアルゴリズムを MPI と GPU 内での二重の空間分割手法を用いて並列化し、GPU システム用の CUDA プログラム (myPresto/psygene-G) を開発して高速の分子動力学計算を可能にした (Mahimo et al. (2013) J. Chem. Theory Comput.)。この手法を用いて、ATP の加水分解反応で得たエネルギーを使って微小管に沿って滑り運動するモーター蛋白質であるダイニンの系 (ATP、ADP、水分子、イオン原子を考慮すると約百万原子) における分子運動の観測や、マルチカノニカル計算と組み合わせた蛋白質フォールディングの計算には巨大な計算機資源が必要であるが、GPU を搭載した理研スーパーコンピュータを使うことで可能となる。

2. 具体的な利用内容、計算方法

情報基盤センターの PC クラスタ 2 ノード (pf07, pf08) を使用し、ダイニンの分子動力学計算を実施した。ダイニンの構造として、高分解能の細胞質ダイニンの構造 (Kon et al. (2012) Nature) を用いた。水溶液中でのダイニンの運動を再現するために、ダイニンの周りに陽に水分子を配した。

最終的に、ダイニンの系は、総原子数 980,265 から成る巨大な系となり (図 1)、ダイニン 53,433 原子、ATP 1 分子、ADP 3 分子、水 308,520 分子、マグネシウムイオン 1 個、ナトリウムイオン 574 個、塩化物イオン 527 個から構成された。

分子動力学計算には、我々が開発したプログラム psygene-G を用いた。常温 (300 K) におけるカノニカル分子動力学計算を実施した。系の境界条件を周期的境界条件で取り扱い、セルの x, y, z 成分の長さは、それぞれ、167, 333, 180 Å となった。静電相互作用を ZD 法で取り扱った。ZD 法のカットオフ距離を 12 Å とした。重原子と水素原子の間の結合を SHAKE 法で拘束した。時間刻みを 1 fs とした。構造トラジェクトリを 10,000 ステップ (10 ps) 毎に保存した。

使用した PC クラスタ 2 ノードには、計 8 枚の GPGPU が搭載されている。計算系の x, y, z 成分をそれぞれ 2 分割することで系を 8 分割し、これらの計算を各 CPU のプロセッサと GPU に割り当てることで、8 並列の計算を実行した。

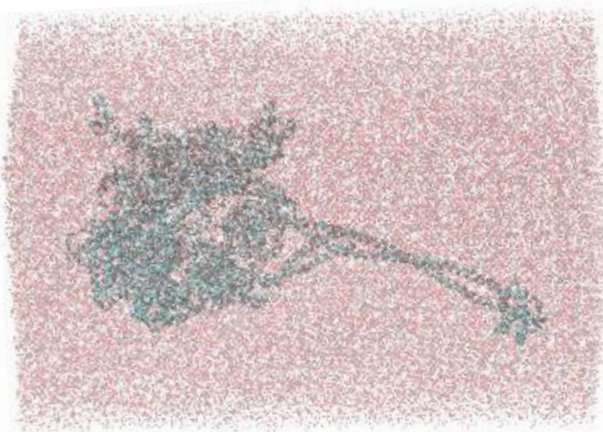


図 1 ダイニンの計算系

3. 結果

これまで筑波大学の HA-PACS システム (Appro Xtreme-X with four GPUs, 2 × Intel E5 (8 cores,

2.6 GHz), 128GB (DDR3, 1600 MHz), 4 × NVIDIA M2090 nodes, and 2 Infiniband QDR (Mellanox ConnectX-3 dual head)) で実行してきた psygene-G を pf クラスタ用に書き換え、動作確認を完了した。

表 1 にダイニンの分子動力学計算におけるポテンシャルエネルギーと計算時間を示す。1000 ステップ後のポテンシャルエネルギーを比較したところ、HA-PACS と pf の間には小数点以下 7 桁目まで完全に一致し、同一の計算精度が得られることが確認された。次に、8 並列における、1000 ステップの計算に要する計算時間を比較したところ pf の方が約 2 % 程度短い結果が得られ、情報基盤センターの PC クラスタの方が従来の環境よりもパフォーマンスが高いことが確認された。

表 1 ダイニンの分子動力学計算におけるポテンシャルエネルギーと計算時間

Computer system	Total potential energy (kcal/mol)	Comput. Time (sec / 1000 steps)
HA-PACS	-0.3182891E+07	282.6
pf	-0.3182891E+07	275.9

64 並列以上の並列計算を実施したい。

4. まとめ

我々が開発した高パフォーマンスな分子動力学計算プログラム psygene-G を情報基盤センターの PC クラスタ用に書き換え動作確認を行ったところ、従来の計算環境と同一の計算精度が得られた。更に、8 並列における計算時間を比較したところ、情報基盤センターの PC クラスタの方が従来の環境よりもパフォーマンスが高いことが確認された。

5. 今後の計画・展望

psygene-G は、今回実施した 8 並列の分子動力学計算にとどまらず、より高度な並列計算（例えば 64 並列）においても高いパフォーマンスが得られることが分かっている (Mahimo et al. (2013) J. Chem. Theory Comput.)。また、ダイニンの構造変化を解析するためには、マイクロ秒オーダーの長時間計算が必要であるため、可能であれば、

平成 25 年度 RICC 利用研究成果リスト

【論文、学会報告・雑誌などの論文発表】

【国際会議などの予稿集、proceeding】

【国際会議、学会などでの口頭発表】

Narutoshi Kamiya, Tadaaki Mashimo, Yu Takano, Takahide Kon, Genji Kurisu, Haruki Nakamura.
“Molecular dynamics simulations of dynein motor domain in explicit water” 58th Annual meeting for
Biophysical Society, Feb. 19 (2014), Moscone Center, San Francisco, USA.

【その他】