

|  |  |            |
|--|--|------------|
| 演 題  | Windows版PEACH(2): 並列計算によるシミュレーション  |            |
| 発 表 者<br>( 所 属 )                                   | 中田 吉郎、 荻野 峰正 (群馬大学工学部)   |            |
| 連 絡 先  | 〒371 - 8510 前橋市荒牧町4-2 群馬大学工学部工学基礎 生物物理研究室<br>電話 027 - 220 - 7563 ファックス 027 - 220 - 7566<br>E-Mail nakata@aramaki.gunma-u.ac.jp |            |
| キ ー ワ ー ド  | 分子動力学、PEACH, 並列計算、MPICH、生体高分子  |            |
| 開 発 意 図<br>適 用 分 野<br>期 待 効 果<br>特 徴 な ど           | 分子動力学計算 PEACH システム Windows 版を並列計算できるようにした。これによって相当大きな系のシミュレーションもパソコンで実行できるようになった。  |            |
| 環 境  | 適 応 機 種 名  | PC/AT 互換機  |
|  | O S 名  | MS-Windows |
|  | ソ ー ス 言 語  | Fortran    |
|  | 周 辺 機 器  |            |
| 流 通 形 態<br>( 右 の い ず れ か に<br>を つ け て<br>く だ さ い ) | ・日本コンピュータ化学会の無償利用<br>ソフトとする<br>・ <u>独自に頒布する</u><br>・ソフトハウス、出版社等から市販<br>・ソフトの頒布は行なわない<br>・その他                                   | 具 体 的 方 法  |
|  | ・未定  |            |

## 1. はじめに

生体高分子の研究分野で広く用いられている分子動力学計算法をパソコン環境で利用するために、古明地らによって開発された PEACH システム[1]を Windows 環境に移植した[2,3]。しかし対象とする系が複雑になると計算時間が非常にかかるようになる。そこで本研究では計算能力を上げるために、並列計算という何台かの計算機をつなぎ協調作業させ、一台のときよりも速く計算させる方法を用いることにした。その方法の一つとして MPI (Message-Passing Interface) というライブラリがある。これは MPI フォーラムより 1994 年に発表され MPICH として Argonne National Laboratories より配布されている[4]。

## 2. システムの概要

並列計算までの手順は、まず始めにプログラムをライブラリーを用いて並列化する。PEACH Ver.3.0 の runmd モジュールは MPI ライブラリーを用いて並列化されているので、それを Windows 用に若干

の変更を行えばよい。次に複数台の WindowsNT マシン (NT,2000,XP) を用意し、それらを LAN でつなぎ、それぞれに MPICH をインストールする。このときすべてのマシンのユーザ名とパスワードは同一にしておく。そのうちの 1 台をホストマシンとして並列化されたプログラムを実行すると並列計算が行われる。MPI はマルチアーキテクチャには対応していないので、同一の OS/CPU アーキテクチャの計算機をクラスタリングして一つの計算機として使うのに向いている。

### 3. 計算例と実行時間

計算例としてプリオンタンパク質の中心部分の NMR 解析構造 (103 アミノ酸残基、1AG2) を用いて、水中での分子動力学計算によるシミュレーションを行った。設定温度を 300K と 400K とし、熱的な性質を比較検討した。溶媒は水 (4004 分子) とし、周期境界条件、NTV の箱型モデル、クーロンの計算にはエワルド法を用いた。シミュレーション時間は数ナノ秒を目標とした。また比較のため BPTI の X 線解析構造 (58 アミノ酸残基、6PTI) を用いたシミュレーションも行った。

表 1. 計算モデルと計算速度

| 蛋白質  | アミノ酸数 | 溶媒のセル (3)    | H <sub>2</sub> O 数 | 計算速度 /10ps  |
|------|-------|--------------|--------------------|-------------|
| 6PTI | 58    | 46 × 46 × 46 | 2645               | 8 h         |
| 1AG2 | 103   | 53 × 53 × 53 | 4004               | 16 h<br>6h* |

\* 並列計算 (3 台使用) の場合

図 1. 根平均二乗変位の時間変化

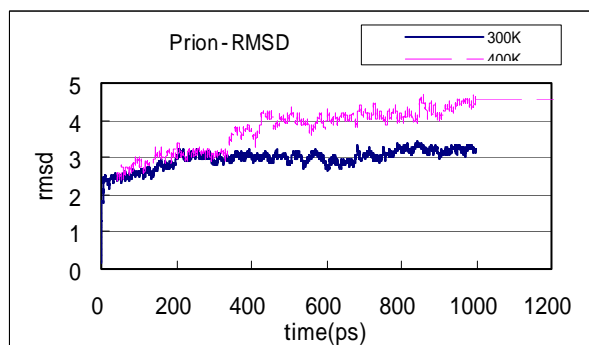


図 1 には、分子全体の初期構造からの構造の変位 (根平均二乗変位) の時間変化を示す。このデータから見ると、300K においては、始めの 200ps ぐらいまでの間で水中に入れた結晶構造が緩んで構造変位が生じたと思われる。その後はほぼ一定値を保っている。400K に温度を高くしてシミュレートした場合は、400ps あたりからさらに別の構造変位が生じている。

市販の Windows パソコン (Pentium、2GHz) を使用したが、計算速度は 10ps 当たり 16 時間であった (表 1)。つぎにパソコンを 3 台用いて並列計算を行ったところ、10ps 当たり 6 時間ぐらいに高速化することができた。並列計算はパソコンの台数を増やすとその分計算速度は速くなるが、一方でネットワークを介してのデータのやり取りの時間もかかるようになるので、無制限に増やせばよいというものではない。

### 4. 参考文献

- 1) [staff.aist.go.jp/y-komeiji/peach/peach.html](http://staff.aist.go.jp/y-komeiji/peach/peach.html)
- 2) 中田吉郎、滝沢俊治、Windows 版 PEACH とそのシミュレーション表示、化学ソフトウェア学会年会 2001 研究討論会、埼玉、2001 年 9 月。
- 3) [www3.nibh.go.jp/~nakata/peach/peachw.html](http://www3.nibh.go.jp/~nakata/peach/peachw.html)
- 4) [www-unix.mcs.anl.gov/~ashton/mpich.nt/](http://www-unix.mcs.anl.gov/~ashton/mpich.nt/)