

二分子複合体結晶構造予測法とハイブリッド並列高速結晶計算技術の開発

○佐藤充晃¹, 上林紺¹, 小幡快之助¹, 小畑繁昭^{1,2}, 後藤仁志¹ (豊橋技大院, 産総研)¹豊橋技術科学大学大学院 (〒441-8580 愛知県豊橋市天白町雲雀ヶ丘 1-1)²産業技術総合研究所 (〒305-8568 茨城県つくば市梅園 1-1-1 中央第2)

医薬品における共結晶 (Co-Crystal) は原薬と各種添加物からなる結晶性複合体であり, 原薬に化学修飾を行わずに物性を改善することができる方法として注目されている. 2007 年の結晶構造予測テスト (CSP2007) では Cocrystal のカテゴリーが設けられ, 2-amido-4-methylpyrimidine と 2-methylbenzoic acid が形成する二分子複合体の結晶構造が出題された¹. そこで本研究では,

我々が開発した 2 分子複合体の網羅的探索法による結晶構造予測法をこの複合体に適用し, 結晶構造中に観測される 2 分子間配置と比較する. また, 以前より, 結晶構造最適化の計算時間を短縮するため MPI/OpenMP ハイブリッド並列処理技術を CONFLEX の結晶計算に導入し, テストを行ってきた^{2,3}. 今回は, 九州大学のスパコン PRIMEHPC FX10 (ノード当たり 16 コア SPARC64 IXfx 1.848GHz, 32GB 主メモリ, Tofu インターコネクト, 総ノード 768 中 96 ノード利用) で行ったテスト結果を報告する.

酢酸の結晶構造の非対称単位 (原子数 864) を (5,5,5) スーパーセルに拡張し, これを基に有効結晶半径 100Å までレプリカ格子を展開した. これは, 前回報告した京大スパコン Green Blade 8000 (ノード当たり 2CPU×8 コア=16 コア Intel Xeon E5 系 2.6 GHz, 64GB 主メモリ, InfiniBand FDR x2, 総ノード 601 ノード中 25 ノード使用) を用いたテストと同じ計算モデルである.

酢酸の結晶構造について, 並列化処理を適用した分子間相互作用の計算部分の高速化効率を求めた (Fig 1.). 京大スパコン 16 コア使用時の高速化率は 7.1 倍であったのに対して, 九大 FX10 スパコンでは 16 コア使用時で 14.6 倍となり, 91% の高い並列化効率に達した. ハイブリッド並列結晶計算のベンチマーク, 及びスーパーコンピュータによる並列化効率の違い, および 2 分子複合体結晶構造予測に関する考察は, ポスター発表において報告する.

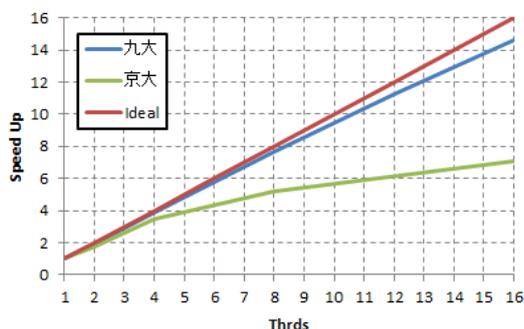


Fig 1. Speed-up of crystal structure calculations

参考文献

1. G. M. Day, T. G. Cooper, et al. *Acta Cryst.* (2009). **B65**, 107–125.
2. 佐藤充晃, 上林紺, 小幡快之助, 小畑繁昭, 後藤仁志, *SCCJ2013 春季年会*, 2P19 (2013).
3. S. Obata, H. Goto, *J. Comput. Aided. Chem.*, **9**, 8-16 (2008); S. Obata, H. Goto, *J. Comput. Chem.*, **Jpn**, **7**, 151-164 (2008).