

グリッド環境に対応した分子動力学法の開発と 分子動力学法・分子軌道法連成法の開発

1. 2002 年度の具体的な研究計画

1-1. グリッド環境に対応した分子動力学シミュレーション・システムの設計と開発

蛋白質研究所と産業技術総合研究所・生物情報解析研究センターが開発してきた、生体分子用分子動力学シミュレーション・プログラム (prestoX-basic) を、グリッド環境に対応させるとともに、専用 MD ボード上でも稼働させ、PC クラスタと専用 MD ボード等の異機種計算機上で作動するシステムとする。

1-2. グリッド環境に対応した分子動力学法・分子軌道法連成法の開発

上記分子動力学計算プログラム prestoX-basic と、日本電気(株)基礎研究所によって開発中された分子軌道計算プログラム AMOSS を連結した連成プログラムを開発し、高精度の解析を要する部位には分子軌道計算による電子状態解析を行い、同時に溶媒を含む生体分子系についてのダイナミクスを分子動力学計算によって解析するシステムとする。

2. 2002 年度の進捗状況と研究成果

2-1. グリッド環境に対応した分子動力学法の開発

2-1-1. prestoX-basic の専用 MD ボード用への適応

prestoX-basic 版が、専用 MD ボード (MD-Grape2) 上で稼働するように、一部のソースコードを書き換え、オリジナルソフトと同様の結果が出ることを確認し、また、その高速性能を確認した。(表 1)

表 1 . MD-Grape2 上での prestoX-basic の性能向上

prestoX-basic + MR1 Library for MD-Grape 2

Host Computer: 1 GHz Pen3 × 2 + MD-Grape2 Board × 1

1) New Subroutine: MD_Grape.f90

Initialize MDGrape 2

2) Modification of Fast_Nonbonded.f90

Calculate 1-5interaction

計算性能 (prestoX-basic + MD-Grape2 × 1Board)

- i) Tip4p 5 1 1 分子 + Ethanol 7倍の計算速度向上
- ii) Tip4p766分子 + Ethanol 10倍の計算速度向上
- iii) Tip4p1000分子 + Ethanol 20倍の計算速度向上

2-1-2. 複数の異機種計算機を連結する MPI 通信の開発

日本原子力研究所開発の異機種計算機間 MPI ライブラリ Stampi (以下 Stampi) を大阪大学バイオグリッドセンターの基盤システム (SCore ベース Linux クラスタ、以下 Grid1)、および、グリッド計算システム 2(78 ノード、以下 Grid2))に適用した際の動作検証および通信性能評価を行った。(表 2)

表 2 . 複数の異機種計算機を連結する MPI 通信の開発作業、動作検証および性能評価

・基盤システムへのインストールは以下の手順で行った。

(1) Stampi ソースの展開、及び、ソースディレクトリへの移動

(2) configure スクリプトの実行

(3) make

(4) make install

・動作検証は、以下のテストプログラムを実行することによって行った。

(1) t4.c : MPI-2 の子プロセス起動を検証するテストプログラム。Grid1 を親、Grid2 を子とするパターン、及び、親子を逆とするパターンで動作検証した。

(2) t5.f : MPI-2 の子プロセス起動を検証するテストプログラム。Grid1 を親、Grid2 を子とするパターン、及び、親子を逆とするパターンで動作検証した。

(3) t6s.c および t6c.c : MPI-2 のクライアント・サーバ型接続を検証するテストプログラム。Grid1 をサーバ、Grid2 をクライアントとするパターン、及び、クライアントとサーバを逆とするパターンで動作検証した。

・性能評価：性能評価は、以下のテストプログラムを実行して行った。

(1) perf.c : ベンダ MPI を用いた内部通信、及び、Stampi を用いた外部通信のそれぞれについて、4 バイト(int のサイズ)~4,000,000 バイトまでのラウンドトリップ時間を計測し、通信性能を求めるプログラム。データは MPI_INT として通信するため、Linux/x86 ではエンディアンの変換オーバーヘッドが発生した。

(2) perf2.c : ベンダ MPI を用いた内部通信、及び、Stampi を用いた外部通信のそれぞれについて、4 バイト(int のサイズ)~4,000,000 バイトまでのラウンドトリップ時間を計測し、通信性能を求めるプログラム。データは MPI_BYTE として通信するため、Linux/x86 でもエンディアンの変換オーバーヘッドは発生しなかった。

2-2. グリッド環境に対応した分子動力学法・分子軌道法連成法の開発

2-2-1. 異なるレベルのアプリケーション・プログラムがグリッド上で統合化され連成計算を実行する仕組み (バイオフーガ) の設計と開発

グリッド環境下で稼動する様々なアプリケーションをさらに高度化して利用するためには、それら複数のプログラムを統合化した利用が次の課題となる。我々は、グリッド上の異機種・多様なマシンのハード上で、異なるレベルのアプリケーション・プログラムが統合化されて連成計算を実行する仕組み：バイオフーガ BioPfuga (Biosimulation Platform United on Grid Architecture)の設計と開発を行った。

バイオフィーガを具体化するためには、各アプリケーション・プログラムのパーツ化と、各アプリケーション・プログラム間のデータ授受の標準化が必要である。特に後者のために、その記述仕様として UDS-XML (Universal Data Set-XML)を提案し、スキーマの設計とデータ・ハンドリングを行うための各種ツールを開発・整備した。(表3、図1(a)~(c))

表3 . データ書き込みツール : udspout_xml と読み込み (パース) ツール : udsget_xml

[機能]

UDSデータをXML形式のファイルへの書き込みまたは読み込みのためのライブラリ (C, C++, FORTRANで利用可能)

[フォーム]

Text : テキストデータ

HexDec : バイナリデータを1データ単位で16進表記

Base64 : Base64方式でエンコードされたバイナリデータ

[特徴]

データの内容、書式、長さ、単位、コメントがXMLで記述。

図 1 . UDSXMLの例

(a) UDS-XML (form = text)

```
<?xml version="1.0" encoding="UTF-8"?>
<uds_data size="4" count="200" unit="AU" form="text">
  <uds_content> sample_text.xml </uds_content>
  <uds_comment> Sample of UDS-XML (text) </uds_comment>
  <uds_array_count>20</uds_array_count>
  <uds_array seq="1" element="number" length="10"> 0 0.01 0.02 0.03 0.04 0.05
    0.06 0.07 0.08 0.09 </uds_array>
  <uds_array seq="2" element="number" length="10"> 0.1 0.11 0.12 0.13 0.14 0.15
    0.16 0.17 0.18 0.19 </uds_array>
  :
  <uds_array seq="20" element="number" length="10"> 1.9 1.91 1.92 1.93 1.94 1.95
    1.96 1.97 1.98 1.99 </uds_array>
</uds_data>
```

(b) UDS-XML (form = HexDec)

```
<?xml version="1.0" encoding="UTF-8"?>
<uds_data size="4" count="200" unit="AU" form="hex">
  <uds_content> sample_hxd.xml </uds_content>
  <uds_comment> Sample of UDS-XML (hexdec) </uds_comment>
  <uds_array_count>22</uds_array_count>
  <uds_array seq="1" element="character" length="76">
000000003c23d70a3ca3d70a3cf5c28f3d23d70a3d4ccccd3d75c28f3d8f5c293da3d70a3d
b8</uds_array>
  <uds_array seq="2" element="character" length="76">
51ec3dccccd3de147ae3df5c28f3e051eb83e0f5c293e19999a3e23d70a3e2e147b3e3851e
c</uds_array>
  :
  <uds_array seq="21" element="character" length="76">
3ff33333ff47ae13ff5c28f3ff70a3d3ff851ec3ff9999a3ffae1483ffc28f63ffd70a43ffe
</uds_array>
  <uds_array seq="22" element="character" length="4">b852</uds_array>
</uds_data>
```

(c) UDS-XML (form = Base64)

```
<?xml version="1.0" encoding="UTF-8"?>
<uds_data size="1" count="200" unit="AU" form="b64">
  <uds_content> sample_hxd.xml </uds_content>
  <uds_comment> Sample of UDS-XML (hexdec) </uds_comment>
  <uds_array_count>4</uds_array_count>
  <uds_array seq="1" element="character" length="76">
pLWkq6TipMik0qS1pLekzrrupMokv6XQpaSlyqXqpcehvKW/pPKlqKXzpbOhvKXJp
LekxqS9pM6l</uds_array>
  <uds_array seq="2" element="character" length="76">
x6G8pb+k8qPYo82jzLfBvLCkx6XVpaGlpKXrpMvK3cK4pLmk66XXpe2lsKXppeCkz
qXGpbmlyKTH</uds_array>
  <uds_array seq="3" element="character" length="76">p
Lmho6XXpe2lsKXppeCkrMC1vu+ky8awpKSkxqSkpOu+7LnnpM+ks6TOyrikrMC1p
Lekr8bJpOGk</uds_array>
  <uds_array seq="4" element="character" length="40">xqSkpOukz6S6pMekuaG
jpMmkpqTHpLek56Smoak=</uds_array>
</uds_data>
```

2-2-2. 分子動力学法・分子軌道法連成法の開発

今年度は、複数のアプリケーション・プログラムのうちで、特に、分子動力学計算プログラム PrestoX-basic と分子軌道計算プログラム AMOSS を連結し、バイオファーマのプラットフォーム上で稼働させる連成プログラムのプロト版を開発し、水溶液中のエタノールを解析対象に動作検証を行った。

まず、QM/MM インターフェース開発における、prestoX-basic 用 XML ファイル入力部を設計・開発した。具体的には、XML で記述された生体分子のトポロジーが書かれたファイルよりデータを取得する API を開発した。機能としては、

- ・ 初期化
- ・ 処理終了
- ・ パース実行
- ・ パース領域開放
- ・ エントリー名取得
- ・ chain ブロック数取得
- ・ chain 情報取得
- ・ フラット TPL ファイル名取得
- ・ nonbonded 情報取得
- ・ atom 情報取得
- ・ bond 情報取得
- ・ angle 情報取得
- ・ torsion 情報取得
- ・ improper torsion 情報取得
- ・ エラー情報取得

である。

次に、日立製作所および日本電気と共同して作成した QM/MM 連成プログラムの動作を確認するため、単一グリッドの PC クラスタ上で、エタノール C_2H_5OH の水和構造を解析し物理的な検証を行った。(図2)

