

## 3C1b

### ProteinDF システムによるタンパク質電子構造解析

(<sup>1</sup>東大情基, <sup>2</sup>東大生研, <sup>3</sup>日立機械) ○佐藤文俊<sup>1,2</sup>, 稲葉亨<sup>3</sup>, 井原直樹<sup>2</sup>, 恒川直樹<sup>2</sup>,  
西野典子<sup>2</sup>, 西村康幸<sup>2</sup>, 平野敏行<sup>2</sup>, 吉廣保<sup>2</sup>, 柏木浩<sup>2</sup>  
E-mail: satofumi@iis.u-tokyo.ac.jp

当グループではタンパク質の性質を電子レベルで理解することを目的に、タンパク質全電子計算に基づくシミュレーションシステムを開発している。そのエンジンとなるプログラムは ProteinDF であり、手法には resolution of identity (RI)法に基づくガウス関数を基底関数とした密度汎関数法(DFT)による手法を採用した[1]。タンパク質のような大規模分子の電子状態解析を達成するためには、特に次の二点が重要となる。一つは巨大 SCF 計算を収束させるために、非常に精度のよい初期値を作成すること[2]、もう一つは計算が大規模になるため、効率の良い並列化を行うことである。本発表では後者の並列化について報告し、インスリン 6 量体の計算に適用した結果について議論する。

RI 法で計算律速となるルーチンは、分子積分演算、交換相関項の数値積分、そして行列演算である。分子積分演算は、大量のメモリ領域を要するすべての行列要素を各 CPU に分散保存させる、独自のアルゴリズムで並列化した。本手法における分子積分計算並列効率向上の鍵は、積分カットオフで生き残ったインデックスをシェルタイプ毎に均等圧縮分散処理させることである[3]。交換相関項に関しては一中心に変換して計算するため、並列化は容易である。行列演算は対角化、行列積、逆行列であり、並列版行列演算ライブラリ ScaLAPACK (密行列用)を用いた。本ライブラリも行列要素を分散保持するため、全ての演算は 1CPU 毎に超巨大メモリを必要としないプログラム構造となった。

インスリン 6 量体(306 残基, 原子数 4,716, 電子数 18,552, 基底関数 26,766, 補助基底関数 48,600)の全電子状態計算を行なった(図 1)[4]。使用した計算機は 64 個の Itanium2 プロセッサが NUMalink™ (3.2 GB/s)で結合された SGI Altix3700 で、ピーク性能は 333 GFLOPS である。全電子計算は擬カノニカル局在化軌道による初期値作成法[2]とアンダーソンの収束加速法により、17 回の SCF 計算で無事に収束した(図 2)。全計算時間は 65 時間で、SCF 一回転目では 86%の並列化効率が得られた。133 残基のインターロイキンを用いて、Altix3700 と Gbitイーサで接続した PC クラスタで同様の計算見積もりを行った結果、ネットワークスピードが遅い場合(PC クラスタ)、行列演算が大きく影響を受けて全体の効率が下がるが、本手法による分子積分、交換相関並列計算に関してはネットワークスピードの影響が少ないことが明らかになった。本研究により、100CPU クラスで有効に並列化された RI-DFT カノニカル分子軌道法プログラムが完成した(実際に 512CPU で有効であることが確かめられている)。

インスリン 6 量体の電子密度分布を単量体のもものと比較した結果、静的な解析の範囲ではあるがインスリン 6 量体を安定化させている可能性があるアミノ酸残基を抽出することができた。これらを別のアミノ酸残基に置換することにより、単量体が安定なインスリンが設計できるかもしれない。

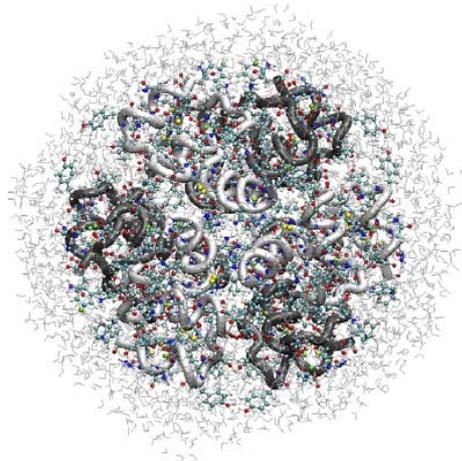


図 1: インスリン 6 量体計算構造  
溶媒分子は MM として扱った。

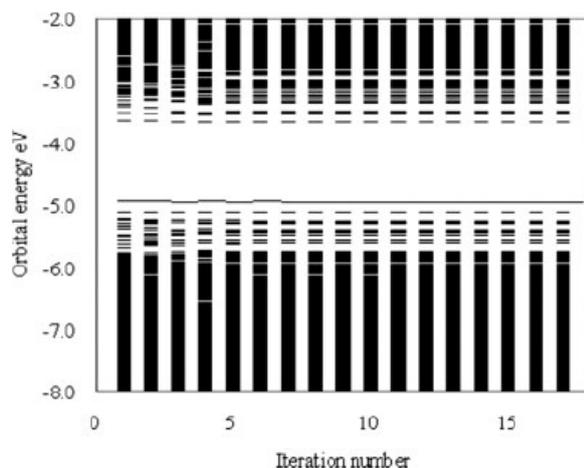


図 2: インスリン 6 量体全電子計算 SCF 履歴  
縦軸は KS 軌道エネルギー, 横軸は SCF 回数。

- [1] J. Andzelm, E. Wimmer, *J. Chem. Phys.*, **96**, 1280 (1992).
- [2] H. Kashiwagi, et al., *Molecular Physics*, **101**, 81 (2003); T. Inaba, et al., *J. Comput. Chem.*, **26**, 987 (2005).
- [3] T. Inaba, F. Sato, *J. Comput. Chem.*, **28**, 984 (2007).
- [4] T. Inaba, et al., *Chem. Phys. Lett.*, **434**, 331 (2007).