

## スーパーコンピュータ「富岳」時代の分子シミュレーション Molecular Simulations in Supercomputer “Fugaku” Era

池口 満徳  
Mitsunori Ikeguchi

横浜市立大学 大学院生命医科学研究科  
理化学研究所 計算科学研究センター  
Yokohama City University

今年、スーパーコンピュータ「富岳」が完成し、共用が開始された。報道にもあるように、「富岳」は、世界のスーパーコンピュータの各種ランキングにて世界1位をとるなど、すばらしい性能を誇るコンピュータである。この「富岳」を計算創薬の分野で有効活用できたら、たいへん面白いことができるのではないかと期待が膨らむ。その中でも、分子動力学シミュレーションは、創薬標的タンパク質の立体構造変化などの動的性質を解き明かすための計算手法で、「富岳」での活用が期待されているアプリケーションのうちの一つである。

しかし、「富岳」での分子動力学シミュレーションにも問題がある。ANTON や MD-GRAPE といった分子動力学専用計算機と異なり、「富岳」はいろんな用途に使う汎用の計算機である。分子動力学シミュレーションでは、計算しなくてはならない相互作用が密に分布しているので、どうしても並列化効率に限界がある。つまり、典型的な創薬ターゲット程度の系に対する単独の分子動力学シミュレーションでは、「富岳」の数十ノードぐらいで計算性能向上に限界がくる。しかし、「富岳」には15万以上のノードがあり、その巨大なノード数ゆえにすばらしい計算性能を示しているのである。したがって、この膨大なノード数を分子動力学シミュレーションにどう活かすかが問われている。

そこでキーとなるのは、初期構造や温度などの条件を変更した複数の分子動力学シミュレーションを並列で計算するレプリカ系の計算法である。この方法では、レプリカ間の通信は、完全になし、計算条件の交換程度にまで制限できる。もともと分子動力学シミュレーションは、時間発展を計算する方法ではあるが、カオス的な振る舞いのため、その統計的性質に意味があるとされる。したがって、多数の分子動力学シミュレーションの統計的性質を扱うのは、むしろ、理にかなっているわけである。レプリカ系の計算には、典型的には温度を交換しながら進む温度レプリカ交換法があるが、最近では例えばリガンド結合部位だけに温度変化を絞ることが可能な gREST 法なども提案されている。また、非常に長い時間かかる大きな構造変化に対しては、構造変化経路にレプリカを配置して自由エネルギー最小経路を得る STRING 法もある。さらには、多数の分子動力学シミュレーションの結果をマルコフ過程の形で統合して、速度論モデルを得るマルコフ状態モデルもある。「富岳」では、このような方法を駆使する必要があるように思われる。講演では、これらの方法について、最近の応用例を示しながら、議論したいと考えている。