

論文審査の結果の要旨

申請者氏名 関嶋 政和

分子動力学法とは、多原子系における原子の運動を、原子間の相互作用を計算しながら、個々の原子に対する Newton の運動方程式を積分することにより求める方法である。分子動力学法は、時々刻々の原子の位置・速度を計算することにより、タンパク質、核酸、糖、脂質のような生体分子の構造、動力学、熱力学などを理解するための重要な手段となっている。本研究は、現在ある分子動力学法によるコンピュータシミュレーションを、より詳細・より大規模に行うために、並列計算機上で並列計算する上で重要である並列基盤システムとその上で動作する並列分子動力学アルゴリズムの開発、及び分子動力学シミュレーションによる構造空間のサンプリングを行うことで、フォールディング機構の解明や、タンパク質の安定性の変化などの自由エネルギー曲面を求める多くの問題にも適用できる拡張アンサンブル法についての研究を行ったものであり、本文は6章からなっている。

第1章において本研究の背景と意義について述べた後、第2章においては分子動力学法の手法の説明と並列計算機上で用いられているアルゴリズムである原子分割法と空間分割法について述べ、その問題点について指摘をした。

第3章においては、本研究で開発した並列基盤システム Parsley について述べている。これは、Master/Slave 方式を取っている。並列処理可能な部分問題をサブタスクとして定義し、サブタスク間に計算の依存関係を記述することで、Master プロセッサは Slave プロセッサに対してサブタスクを割り当てる。この方法により、空間分割法のようにプロセッサ間に同期が必要なアプリケーションにおいて、依存関係を満たしたものから順に実行を行うということで、同期による制約を緩和が実現できる。また、具体的に Parsley を分子動力学法と FMM(Fast Multipole Method)への適用について述べている。

第4章においては、Parsley のスケジューリング機構について述べている。スケジューリングとは、並列計算機においてどの計算をどのような順番でどのプロセッサで実行するかであり、並列計算機上のアプリケーションの性能に強く影響を与えている。本研究では、様々な計算機上で最適な性能を示すように、並列計算機の性能と利用状況に動的に適應するスケジューリング法を開発した。

第5章においては、分子動力学法を用いて構造空間を効率よくサンプリングする拡張アンサンブル法の理論について述べている。拡張アンサンブル法のうち、レプリカ交換法を本研究では用いたが、この方法を用いることでローカルミニマム状態にトラップされないでランダムウォークを実現することについて述べている。

第6章では、3~5章で述べたシステムとアプリケーションによる性能評価などの結果について述べている。ウシ臍臓トリプシンインヒビター 1分子と多数の水分子からなる系(総原子数 16735)に対し分子動力学シミュレーションを実行した。従来の空間分割法と Parsley

によって並列化した手法を大規模並列計算機 HITACHI SR2201 上で実行し性能を比較した結果、本研究で開発した Parsley による方法が、125 プロセッサのとき 1 プロセッサのときの 30.4 倍となり、125 プロセッサのとき従来の空間分割法より 3.49 倍早く処理が終了するという高い性能を示した。とくに、プロセッサ数によらず、プロセッサ間の同期・通信にかかる時間が大幅に短縮された。また、SR2201 だけでなく、多くの並列計算機、およびワークステーションをネットワークで結合した分散システム上でそのまま利用することができる。本研究では、さらに Parsley とその上で動作する分子動力学シミュレーションを並列計算機 IBM SP/2 及び COMPAQ DS20 クラスタ上に移植した。IBM SP/2 では 32 プロセッサのとき 1 プロセッサのときの 4.95 倍の性能が得られ、COMPAQ DS20 では 16 プロセッサのとき 1 プロセッサのときの 9.8 倍の性能が得られることを示した。また、従来の空間分割法との比較では、IBM SP/2、COMPAQ DS20 でそれぞれ 5.77 倍、7.92 倍の性能が得られており、Parsley による方法が有効であることを示した。本研究ではまた、分子動力学法のように同じ処理を繰り返し実行する性質を持つプログラムに対しタスクの実行時間を計測し、その履歴を用いることにより自動的にスケジューリング方式を改善する方式を開発した。これにより、プロセッサのアイドルタイムを 35~55% 減少させるのに成功した。また、本研究では、Parsley REM MD' というレプリカ交換法を実装し、WHAM を用いることでこれらの各レプリカによるサンプリングから各状態の出現確率が正しく求められることを確認した。

以上要約すると、分子動力学法の並列化について並列計算機を効率的に利用するためのシステムから開発し、その適用によりその可搬性と高性能さを示し、また拡張アンサンブル法により構造空間の効率の良いサンプリング法を実現したものであり、法学的上、応用上貢献するところが少なくない。よって審査委員一同は、本論文が博士(農学)の学位論文として価値あるものと認めた。