

宿主－細菌相互作用解析のための網羅的ドッキングシミュレーション

大阪大学大学院歯学研究科 大野誠之

- 目的 宿主と細菌の表層タンパク質間における相互作用を高速にスクリーニングするシステムの構築
- 内容 プログラム**MEGADOCK**を用いて、ヒトの表層タンパク質約**3,300**分子と肺炎球菌の表層タンパク質約**100**分子の網羅的ドッキングシミュレーションを実施すると計算に約**90**日を要した。シミュレーションの応用のため、プログラムの最適化による高速化を図った。
- 結果 **GCC + OpenMPI + FFTW3**環境でシミュレーションした分子ペアのうち、最長**608.7**秒を要していた。コンパイラおよびMPIをIntel系に変更しても性能向上が得られなかった一方、実行時間の約**90%**をFFTが占めていたことから、FFTライブラリを**Intel MKL**に置き換えることで実行時間が約**363.0**秒へと短縮された。さらに、**OCTOPUS2**環境でMKLを用いた場合には約**168.6**秒まで短縮され、従来環境と比較して約**3.6**倍の高速化を達成した。また、**GPU**環境での計算も同等の性能であった。**CPU**環境での最適化および**GPU**ノードの使用は、従来**90**日を要した網羅的シミュレーションを**30**日以下へと短縮した。
- 利用した計算機 **SQUID** 汎用CPUノード群・GPUノード群

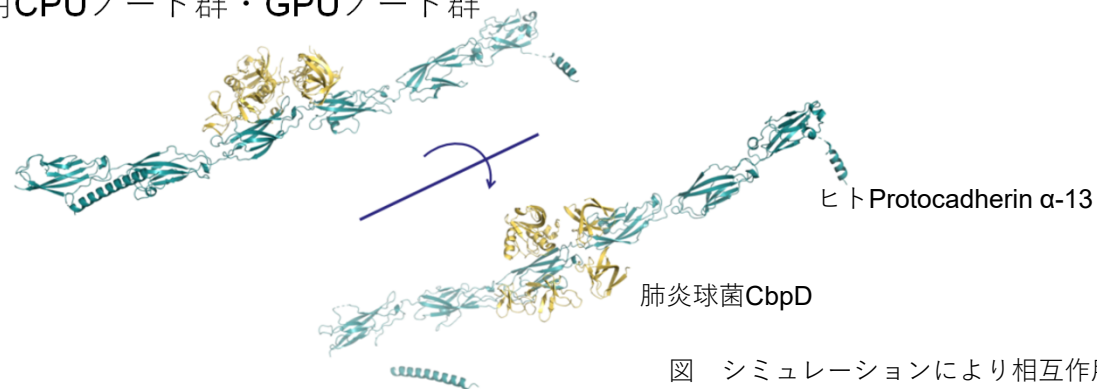


図 シミュレーションにより相互作用が予測されたペアの例