

SCLS計算機システム講習会

2013/3/27

理化学研究所

HPCI計算生命科学推進プログラム

木戸 善之



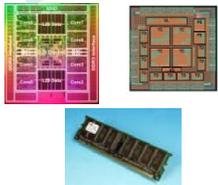
©RIKEN

京のハードウェア構成



ノード

CPU×1
ICC×1
メモリ×8



演算性能：1280億回/秒
メモリ容量：16GB

システムボード

ノード×4



5120億回/秒
64GB

計算ラック

システムボード×24
IOシステムボード×6



12.3兆回/秒
1.5TB

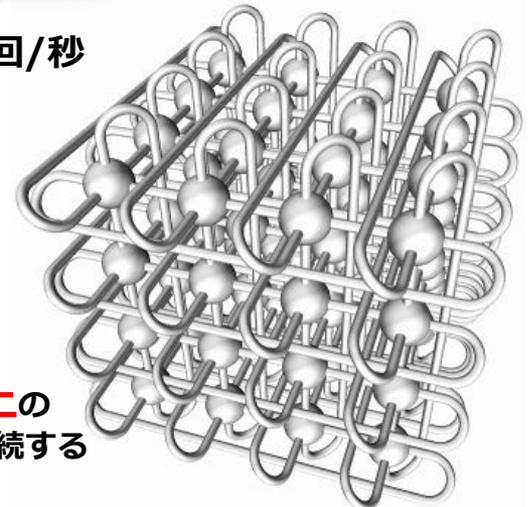
計算ラック群

計算ラック×8
ディスクラック×2



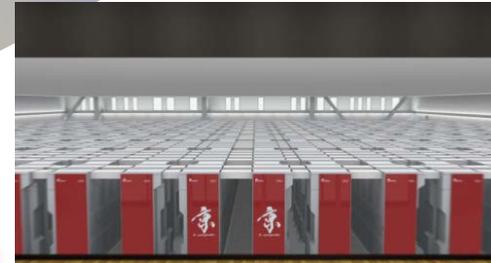
98.4兆回/秒
12TB

80,000個以上の
CPU間を相互に接続する
インターコネクト



システム全体

計算ラック×800以上

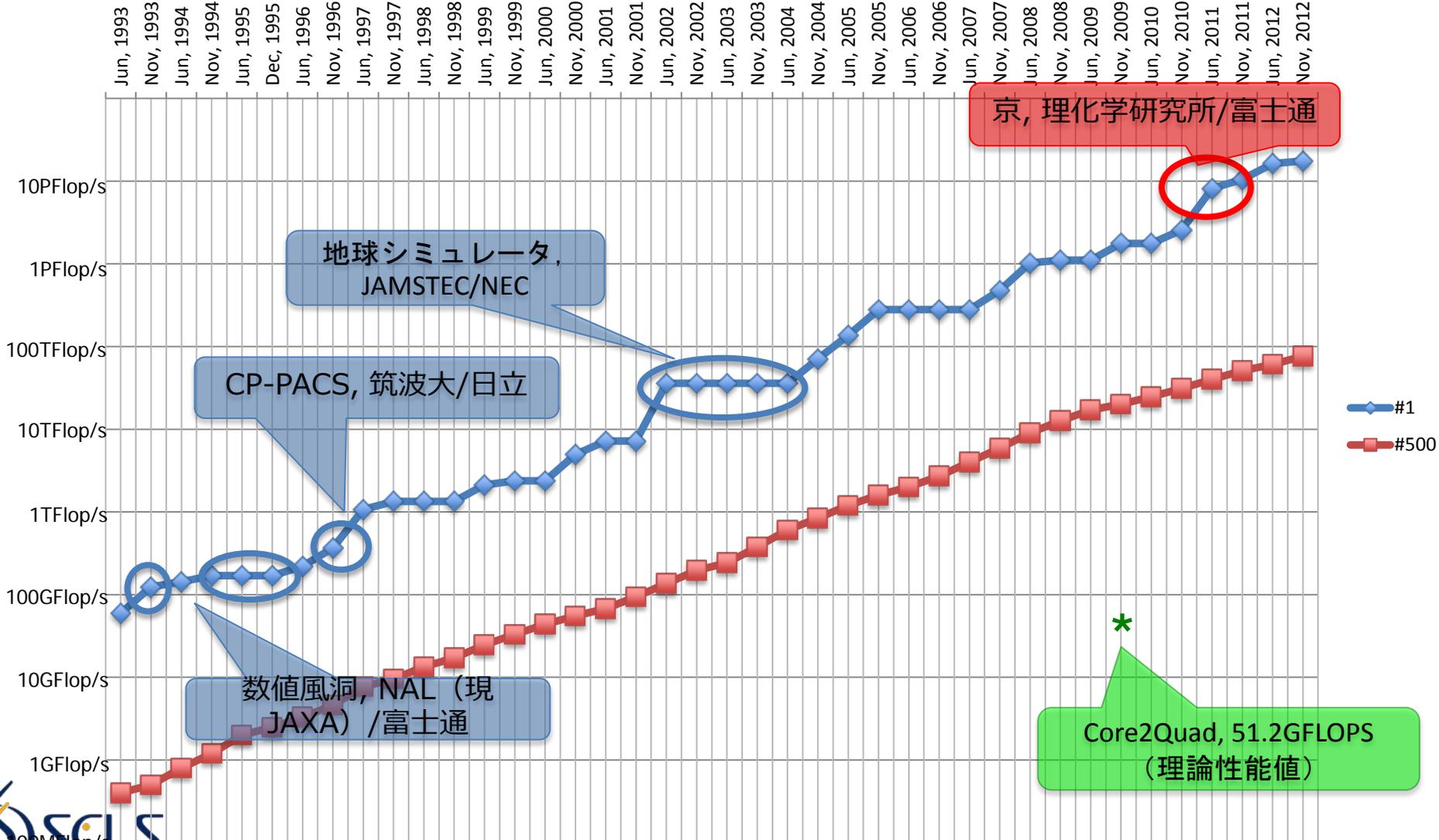


1京回/秒 = 10ペタフロップス
1PB以上

世界のスパコン計算性能ランキング (TOP500, Nov. 2012)

順位	システム名称	設置場所／ベンダー	国名	速さ (PFLOPS)
1	Titan (AMD Opteron + NVIDIA K20x)	オークリッジ国立研究所／Cray	米国	17.6
2	Sequoia (BG/Q PowerBQC)	ローレンス・リバモア国立研究所 ／IBM	米国	16.3
3	京 (SPARC64 VIIIfx)	理研AICS／富士通	日本	10.5
4	Mira (BG/Q PowerBQC)	アルゴンヌ国立研究所／IBM	米国	8.2
5	JUQUEEN (BG/Q PowerBQC)	ユーリヒ総合研究機構／IBM	ドイツ	4.1

Top500 Nov. 2012



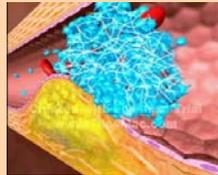
仕様

		京コン ピュータ	SCLS計算機 システム	神戸 pi- computer	東大 Oakleaf-FX
CPU	名前	SPARC64 VIIIfx	SPARC64 IXfx	SPARC64 IXfx	SPARC64 IXfx
	理論性能	128 GFLOPS (2GHz)	211.0 GFLOPS (1.65GHz)	211.0 GFLOPS (1.65GHz)	238.6 GFLOPS (1.84GHz)
	コア数	8	16	16	16
システム全 体	ノード数	88,128	48	96	4,800
	理論性能	11.28 PFLOPS	10.1 TFLOPS	20.2 TFLOPS	1.13 PFLOPS
	メモリ	16GB (1.5PB)	32GB (1.5TB)	32GB (3.0TB)	32 GB (150TB)

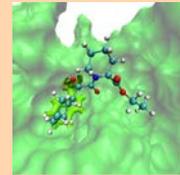
取り組んでいる5つの戦略分野

予測する生命科学・医療および創薬基盤

予測医療と革新的創薬



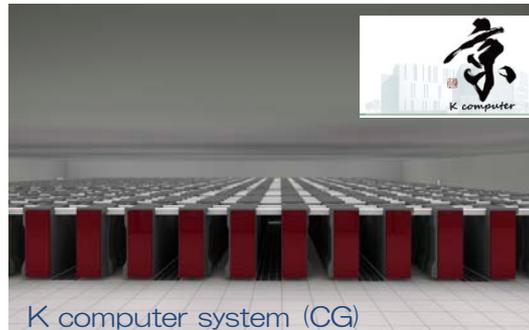
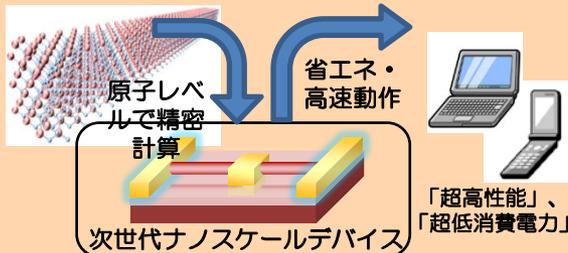
血栓成長による血管閉塞シミュレーション



薬候補のタンパク質への結合シミュレーション

新物質・エネルギー創成

世界に先駆けた次世代デバイスを提唱



物質と宇宙の起源と構造

大質量星の超新星爆発の解明



防災・減災に資する地球変動予測

集中豪雨や地震の予測



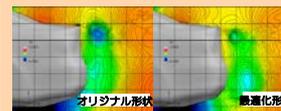
集中豪雨の再現実験



新潟県中越地震による強い揺れの広がり

次世代ものづくり

設計プロセスの革新



車体後部周りの超精緻解析による最適形状の究明



戦略分野1 活動と目的

I. HPC計算機資源の効率的活用

- HPCIを最大限活用するために、最新のHPC研究を進め、もってHPCの高度化推進を行う。

II. 人材育成

- 大学、企業等の研究者、学生を対象に計算生命科学の理解増進を図り、人材を育成していく。

III. 人的ネットワークの形成

- 計算生命科学のコミュニティを形成し、連携を図る。

IV. 研究成果の普及

- アウトリーチ活動を行う。研究成果の実用化をめざす。

V. 分野を超えた取組の推進

- 計算科学研究機構、他分野との連携を促進する。



戦略分野1

で検索!

HPCI戦略分野1さんにツイートする
@HPCI_Senryaku1

HPCI戦略分野1
@HPCI_Senryaku1

HPCI戦略分野1は、「京」を中心としたスパコンリソースのインフラを利用した生命科学分野の研究を行っているプログラムです。理化学研究所HPCI計算生命科学推進プログラムを代表機関として、全国の大学や研究機関と研究を推進しており、こちらはその公式アカウントです。研究成果や「京」、計算生命科学の情報を発信していきます!

13 ツイート 10 フォロー 7 フォロワー

フォロー中

- ツイート
- HPCI戦略分野1** @HPCI_Senryaku1 22時間
「第2回 科学の甲子園全国大会」(3月23日-25日 兵庫県立総合体育館 兵庫県西宮市)に出展します。rikai.jst.go.jp/koushien/tourn...
開く
 - HPCI戦略分野1** @HPCI_Senryaku1 23時間
「HPCI」の最新情報や「京」の活用事例に関する講演や、2月21-22日(大阪)2月23-24日(東京)を、理研とHPCI法人パナオクリオセンター関西が主催します。ご参加お待ちしております。biogrid.jp/pdf/insilicose...
開く
 - HPCI戦略分野1** @HPCI_Senryaku1 1月21日
高度情報科学技術研究機構が、「一般向けHPCセミナー第2回チュエニング技法編」セミナーを、2月21-22日に理化学研究所 計算科学研究機構で開催します。詳細はWebへ。hpci-office.jp/k-computer/sem...
開く
 - 理化学研究所 (理研) @RIKEN_JP 1月10日

@HPCI_Senryaku1

- おすすめユーザー · 更新 · すべて見る
- 橋山由紀夫** @hatoyamayukio
Yuuichi Teranishiさんと他のユーザーにフォロー
 - 堀義人/Yoshito Hori** @Yoshito...
河野太郎さんと他のユーザーにフォロー
 - 蓮舫** @renho_sha
Yuuichi Teranishiさんと他のユーザーにフォロー
- カテゴリ別に見る · 友だちを見つける





戦略分野1

で検索!

いいねボタンを押して下さい!



京と京互換機

京



京互換機
(SCLS計
算機シス
テム)



SCLS計算機システム概要

計算ノード (PR M E HPC FX10)

総演算性能 :11.3 TFLOPS
 総主記憶 :1.5 TB
 総メモリバンド幅 :4.0 TB/s
 構成 :48計算ノード+3 D ノード
 演算性能 :211G Fbps(1ノード=1CPU)
 主記憶 :32GB /ノード
 メモリバンド幅 :85GB/s /ノード
 ノード間通信 :6次元メッシュ/トラス
 (片方向5GB/s x 双方向)



管理系ノード

運用管理ノード 
 PR M E R G Y R X 2 0 0 S 6 × 1 ノード

ジョブ管理ノード 
 PR M E R G Y R X 2 0 0 S 6 × 1 ノード

ログインノード 
 PR M E R G Y R X 2 0 0 S 6 × 1 ノード

ファイルサーバ 
 PR M E R G Y R X 2 0 0 S 6 × 1 ノード

磁気ディスク装置 
 E T E R N U S D X 8 0 S 2 × 1 台
 D i s k N L - S A S 2 T B × 9 6
 R A D 6 (0 D + 2 P) × 8 グループ



Infin Bandスイッチ
 M e l l a n o x I S 5 0 2 2 x 1



Ethernetスイッチ
 S R - S 3 4 8 T C 1 x 1

— Infin Band
 — Fibre Channel
 — Ethernet

R I C C

所内 LAN

利用者

仕様

		京コン ピュータ	SCLS計算機 システム	神戸 pi- computer	東大 Oakleaf-FX
CPU	名前	SPARC64 VIIIfx	SPARC64 IXfx	SPARC64 IXfx	SPARC64 IXfx
	理論性能	128 GFLOPS (2GHz)	211.0 GFLOPS (1.65GHz)	211.0 GFLOPS (1.65GHz)	238.6 GFLOPS (1.84GHz)
	コア数	8	16	16	16
システム全 体	ノード数	88,128	48	96	4,800
	理論性能	11.28 PFLOPS	10.1 TFLOPS	20.2 TFLOPS	1.13 PFLOPS
	メモリ	16GB (1.5PB)	32GB (1.5TB)	32GB (3.0TB)	32 GB (150TB)

簡単なコンパイル、ジョブの投入の実演 ライブラリやインストールアプリの紹介

2013/3/27

理化学研究所

HPCI計算生命科学推進プログラム

木戸 善之

ユーザから見たSCLS計算機システム

ユーザクライアント



SINETにつながつたサイト
(大学・研究所) からアクセス

インターネット

VPN接続でログイン

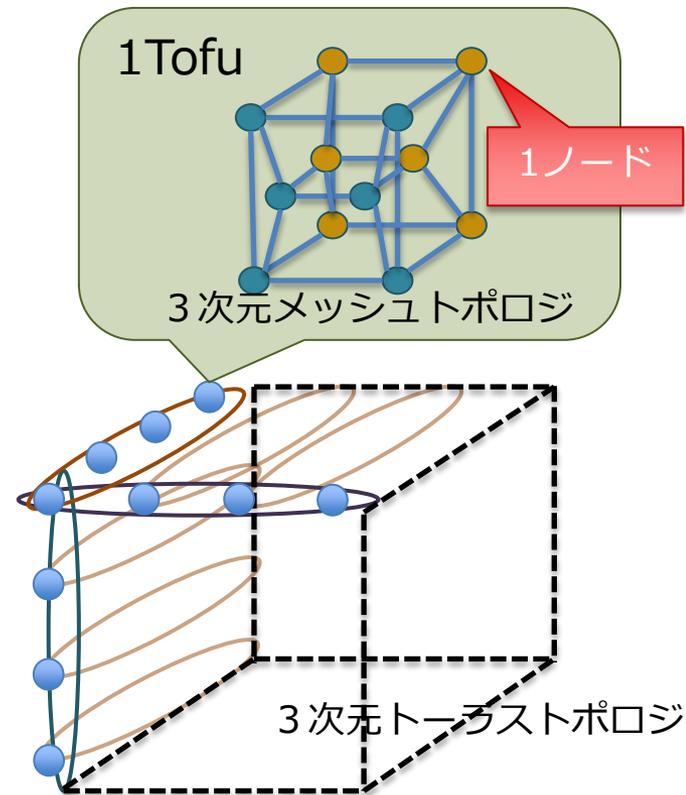
ログインノード

ログインノードから
計算ノードへジョブ投入

計算ノード

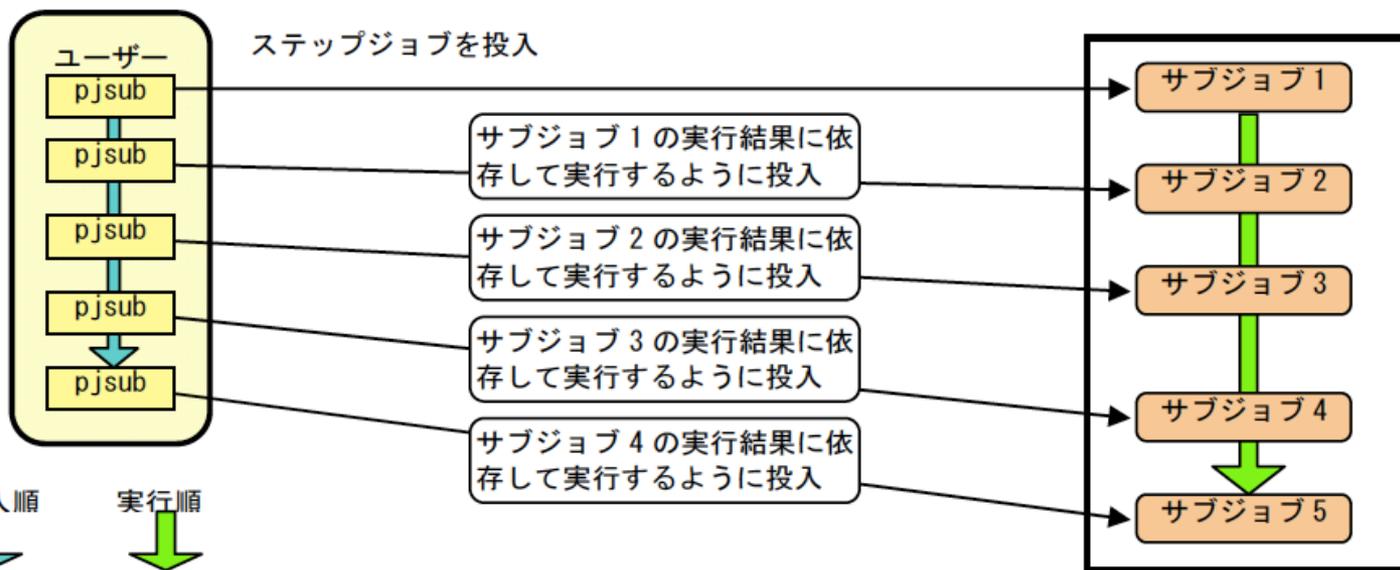
Tofu (Torus Fusion) インターコネクト

- ノード間(CPU間)の通信技術
- アーキテクチャ
 - 6次元メッシュ/トーラストポロジ
 - 3次元メッシュの**12ノードを1Tofu**
 - Tofu単位を3次元トーラストポロジで接続
 - バンド幅:5GB/s
- 特徴
 - 高並列を実現する**スケーラビリティ**
 - 最大約10万ノード規模
($98,304=32 \times 32 \times 8 \times 2 \times 3 \times 2$)
 - **高い可用性**
 - 任意にメッシュ分割しても常に3次元トーラストポロジを構成
 - 故障ノードを回避してトーラストポロジを構成



FX10ジョブコマンド (SCLS)

- pjsub : ジョブの投入
 - バッチジョブ
 - pjsub go.sh
 - ステップ実行
 - pjsub --step



ジョブスクリプト

- 京との違い
 - ステージングがない

```
#!/bin/sh
#----- pjsub option -----#
#PJM -L "rscgrp=small"
#PJM -L "node=12"
#PJM --mpi "proc=24"
#PJM -L "elapsed=10:00"
#PJM -j
#----- Program execution -----#
export OMP_NUM_THREADS=8
mpiexec ./a.out
```

リソースグループ指定
ノード数指定 (1次元)
プロセス数の指定
経過時間指定

スレッド数指定
アプリの実行

- ジョブの実行

```
[y-kido@scls water]$ pjsub go.sh
[INFO] PJM 0000 pjsub Job 2875 submitted.
[y-kido@scls water]$
```

インタラクティブジョブ (vanilla)

- 対話型ジョブ実行
 - 計算ノードのコンソール
 - pjsub --interact

```
[username@scsls:~]$ pjsub --interact          ジョブ投入
[INFO] PJM 0000 pjsub Job 12345 submitted.    ジョブ投入完了
[INFO] PJM 0081 .connected.
[INFO] PJM 0082 pjsub Interactive job 12345 started.  ジョブ開始
[username@a01-001 ~]$ frt hello_world.f95
[username@a01-001 ~]$ ./a.out
Hello world
[username@a01-001 ~]$ exit                  ジョブ終了
exit
[INFO] PJM 0083 pjsub Interactive job 12345 completed.
[username@scsls:~]$ ログインノード復帰
```

インタラクティブジョブ (MPI)

- 対話型ジョブ実行

- pjsub --interact -L "node=1" --mpi "proc=16"

```
[username@sc1s:~]$ pjsub --interact -L "node=1" --mpi "proc=16"
[INFO] PJM 0000 pjsub Job 12346 submitted.          ジョブ投入完了
[INFO] PJM 0081 .connected.
[INFO] PJM 0082 pjsub Interactive job 12346 started.  ジョブ開始
[username@a01-001 ~]$ mpifrt hello_world_mpi.f95
[username@a01-001 ~]$ mpiexec ./a.out
Hello world from rank 0 process
(snip)
Hello world from rank 15 process
[username@a01-001 ~]$ exit          ジョブ終了
exit
[INFO] PJM 0083 pjsub Interactive job 12346 completed.
[username@sc1s:~]$                  ログインノード復帰
```



FX10コンパイラ(富士通)

	言語	クロスコンパイラ	OWNコンパイラ	自動並列	OpenMP
非MPI	Fortran	frtpx	frt	-Kparallel	-Kopenmp
	C	fccpx	fcc		
	C++	FCCpx	FCC		
MPI	Fortran	mpifrtpx	mpifrt		
	C	mpifccpx	mpifcc		
	C++	mpiFCCpx	mpiFCC		
並列	XPFortran	xpfrtpx	xpfrt		

覚えておくと良いオプション

オプション	概要
-Kfast	高速に実行するオブジェクトを生成するオプション
-Kparallel	自動並列
-Kvisimpact	-Kfast,parallelと等価

FX10コンパイラ (gcc)

	言語	クロスコンパイラ	OWNコンパイラ
非MPI	Fortran	gfortranpx	gfortran
	C	gccpx	gcc
	C++	g++px	g++

じゃあちょっとHello, Worldでも

```
#include <stdio.h>

int main() {
    printf("Hello, SCLS!¥n");
    return 1;
}
```

MPIを使ったHello, World

```
#include <stdio.h>
#include <string.h>
#include <mpi.h>

int main(int argc, char *argv[]) {
    int rank, size;
    char message[20];
    MPI_Status status;
    MPI_Init(&argc, &argv);
    MPI_Comm_rank(MPI_COMM_WORLD, &rank);
    MPI_Comm_size(MPI_COMM_WORLD, &size);

    if (rank == 0) {
        strcpy(message, "Hello, SCLS");
        int i = 1;
        for (i = 1; i < size; i++) {
            MPI_Send(message, strlen(message) + 1, MPI_CHAR, i, 99, MPI_COMM_WORLD);
        }
        printf("rank[%d] send: message\n", rank);
    } else {
        MPI_Recv(message, 20, MPI_CHAR, 0, 99, MPI_COMM_WORLD, &status);
        printf("rank[%d] received: %s\n", rank, message);
    }
    MPI_Finalize();
    return 1;
}
```

OpenMPを使ったHello, World

```
#include <stdio.h>
#include <string.h>
#include "omp.h"

int main(int argc, char *argv[]) {
    int threads, tid;
#pragma omp parallel private(threads, tid)
    {
        tid = omp_get_thread_num();
        printf("Hello, SCLS thread = %d\n", tid);
        if ( tid == 0 ) {
            threads = omp_get_num_threads();
            printf("Number of threads = %d\n", threads);
        }
    }
}
```

ライブラリー一覧

ライブラリ	概要
BLAS/LAPACK/ScaLAPACK	数学ライブラリ(富士通コンパイラ)
SSL II	数学ライブラリ
FFTW	離散フーリエ変換ライブラリ
Boost C++	C++汎用ライブラリ
HDF5	Hierarchical Data Format 5 自己記述型データフォーマットのアクセサ
NetCDF	配列志向型データフォーマットのアクセサ
SQLite	データベース管理システム

SQLiteなどライブラリを使ったソースの コンパイル

```
[username@scls:~]$ module list
Currently Loaded Modulefiles:
  1) TCSuite/GM-1.2.1-03
[username@scls:~]$ module load SQLite
[username@scls:~]$ module list
Currently Loaded Modulefiles:
  1) TCSuite/GM-1.2.1-03 2) SQLite/3.7.15.2
[username@scls:~]$
[username@scls:~]$ fccpx -Kfast sample.c -lsqlite3
```

インストールする予定のアプリ ISLiMのWeb

The screenshot shows a web browser window displaying the ISLiM website. The browser's address bar shows the URL www.csrp.riken.jp. The website header includes the ISLiM logo and the text "次世代生命体統合シミュレーションソフトウェアの研究開発" (Research and Development of Next-Generation Integrated Simulation Software of Living Matter). A navigation menu contains links for HOME, 概要 (Overview), 研究チーム紹介 (Research Team Introduction), 開発アプリケーション (Development Applications), 行事・研究会 (Events/Seminars), 情報ライブラリ (Information Library), 問合せ先 (Contact Us), and リンク (Links). The main content area features a large blue link: <http://www.csrp.riken.jp>. Below this link, a red text overlay reads "ただし今後変更の可能性あります" (However, there is a possibility of change in the future). At the bottom of the page, a "新着情報" (New Information) section lists several news items, including a newsletter release and two seminars. A red rectangular box highlights a small graphic in the bottom right corner that says "ISLiM研究開発ソフトのダウンロードサイトはこちら。" (The download site for ISLiM research development software is here.) with an arrow pointing to the highlighted link.

理研・次世代計算科学

www.csrp.riken.jp

ライフサイエンスのグランドチャレンジ・アプリケーション・プロジェクト

ISLiM
Next-Generation Integrated Simulation of Living Matter

English

HOME 概要 研究チーム紹介 開発アプリケーション 行事・研究会 情報ライブラリ 問合せ先 リンク

昆虫脳LAL-VPC神経回路の予備的なシミュレーション

<http://www.csrp.riken.jp>

ただし今後変更の可能性あります

IOSSIMコード使用 開発責任者: 東京大学 神崎亮平

新着情報

- ニュースレター第8号をWebで公開しました。(2013/3/1)
- 「グランドチャレンジ・アプリケーションの研究開発」公開シンポジウムを東大 山上会館で、3月11日(月)に開催します。詳細と参加申し込みは、[こちら](#)をごらんください。(2013/1/28)
- ISLiMソフトウェア研究開発報告会を東大武田ホールで、1月10日(木)-11日(金)に開催します。詳細と参加申し込みは、[こちら](#)をごらんください。(2012/12/3)

ISLiM研究開発ソフトのダウンロードサイトはこちら。

ISLiM開発アプリのWeb

理研・次世代計算科学

www.islim.org/islim-di_j.html

Google

ライフサイエンスのグランドチャレンジ・アプリケーション・プロジェクト

 **次世代生命体統合シミュレーションソフトウェアの研究開発**
Next-Generation Integrated Simulation of Living Matter

English

HOME 概要 研究チーム紹介 開発アプリケーション 行事・研究会 情報ライブラリ 問合せ先 リンク

ダウンロード

(Updated on 2013/3/26)

●ダウンロードについて
本プロジェクトではその成果を社会に還元する一環として、研究開発の成果物である、スーパーコンピュータ「京」で稼働する開発ソフトウェアをプロジェクト期間中(2006年10月~2013年3月末)にソースコード・レベルで順次公開していきます。ただし一部の開発ソフトウェアについてはソースコードの公開ができないため、バイナリー・コードによる公開となります。また中間成果物である、高並列クラスター上で稼働するバージョンも同様に可能な範囲で公開いたします。産業界での利用、あるいは学生・大学院生の教育への活用など、広くご利用ください。(本プロジェクトでは複数の大学、研究機関から研究開発者が参加・連携してプロジェクトを進めています。そのため、研究開発者の所属機関のダウンロードサイトにリンクしているケースもありますので、ご了承ください。またプロジェクトの進捗に合わせ、ダウンロードについての内容も更新されますので、最新情報についてはこのページでご確認ください。)

分子スケール・アプリケーション

 **量子科学計算(QM)、分子動力学計算(MM)、粗視化モデル計算(CG)の手法を結合したQM/MM、MM/CG法によって、マルチスケールシミュレーションを実現するためのプログラム。**

番号	アプリケーション	コード名	ダウンロード	開発機関
M-1	マルチコピー・マルチスケール分子シミュレーション法 開発の基盤となるクラスライブラリ	mu2lib-K (開発コード名 Platypus-MM/CG)	ダウンロード	理化学研究所
M-2	レプリカ交換分子動力学計算インターフェイス	REIN-K (開発コード名 Platypus-REIN)	ダウンロード	理化学研究所

分子スケール・アプリケーション

M-1	マルチコピー・マルチスケール分子シミュレーション法 開発の基盤となるクラスライブラリ	Platypus-MM/CG	木寺詔紀	理化学研究所
M-2	レプリカ交換分子動力学計算インターフェイス	Platypus-REIN	杉田有治	理化学研究所
M-3	全原子分子動力学計算	MARBLE	池口満徳	横浜市立大学
M-4	粗視化モデル計算	CafeMol	高田彰二	京都大学
M-5	密度汎関数法に基づくタンパク質全電子波動関数計算	ProteinDF	佐藤文俊	東京大学
M-6	ハイブリッドQM/MM反応自由エネルギー計算	Platypus-QM/MM-FE	林重彦	京都大学
M-7	量子化学計算	Platypus-QM	中村春木	大阪大学
M-8	量子化学計算/分子動力学計算	Platypus-QM/MM	中村春木	大阪大学
M-9	粗視化モデル計算/分子動力学計算	Platypus-CGM/MM	中村春木	大阪大学

細胞スケール・アプリケーション

C-1	細胞シミュレーションプラットフォーム	RICS	横田秀夫	理化学研究所
-----	--------------------	------	------	--------

臓器全身スケール・アプリケーション

O-1	全身ボクセルシミュレーション (ボクセル構造流体連成解析プログラム)	ZZ-EFSI	高木周	理化学研究所
O-2	微小循環シミュレータ (埋め込み境界法による微小循環プログラム)	ZZ-RBC	高木周	理化学研究所
O-3	重粒子線治療シミュレーション	ZZ-DOSE	石川顕一	理化学研究所
O-4	低侵襲治療シミュレーション (ボクセル超音波伝播プログラム)	ZZ-HIFU	沖田浩平	東京大学
O-5	肺呼吸・肺循環シミュレーション	ZZ-LUNG	石峯康浩	理化学研究所
O-6	マルチスケール・マルチフィジックス心臓シミュレーション	UTHeart	久田俊明	東京大学

データ解析融合アプリケーション

D-1	ハプロタイプ関連解析に於ける統計検定を行うためのソフトウェア	ParaHaplo	角田達彦	理化学研究所
D-2	次世代シーケンス解析プログラム	NGS analyzer	角田達彦	理化学研究所
D-3	拡張RAT法による2 SNP組合せの全ゲノム関連解析ソフトウェア	ExRAT	角田達彦	理化学研究所
D-4	大規模遺伝子制御ネットワーク推定プログラム	SiGN-BN	宮野悟	東京大学
D-5	再帰的正則化法による生体内分子の大規模ネットワーク推定プログラム	SiGN-L1	宮野悟	東京大学
D-6	状態空間モデルによる時系列データからの 遺伝子ネットワーク推定プログラム	SiGN-SSM	宮野悟	東京大学
D-7	データ解析融合プラットフォーム	SBiP	宮野悟	東京大学
D-8	生命体データ同化プログラム	LiSDAS	樋口知之	統計数理研究所
D-9	網羅的タンパク質ドッキング解析プログラム	MEGADOCK	秋山泰	東京工業大

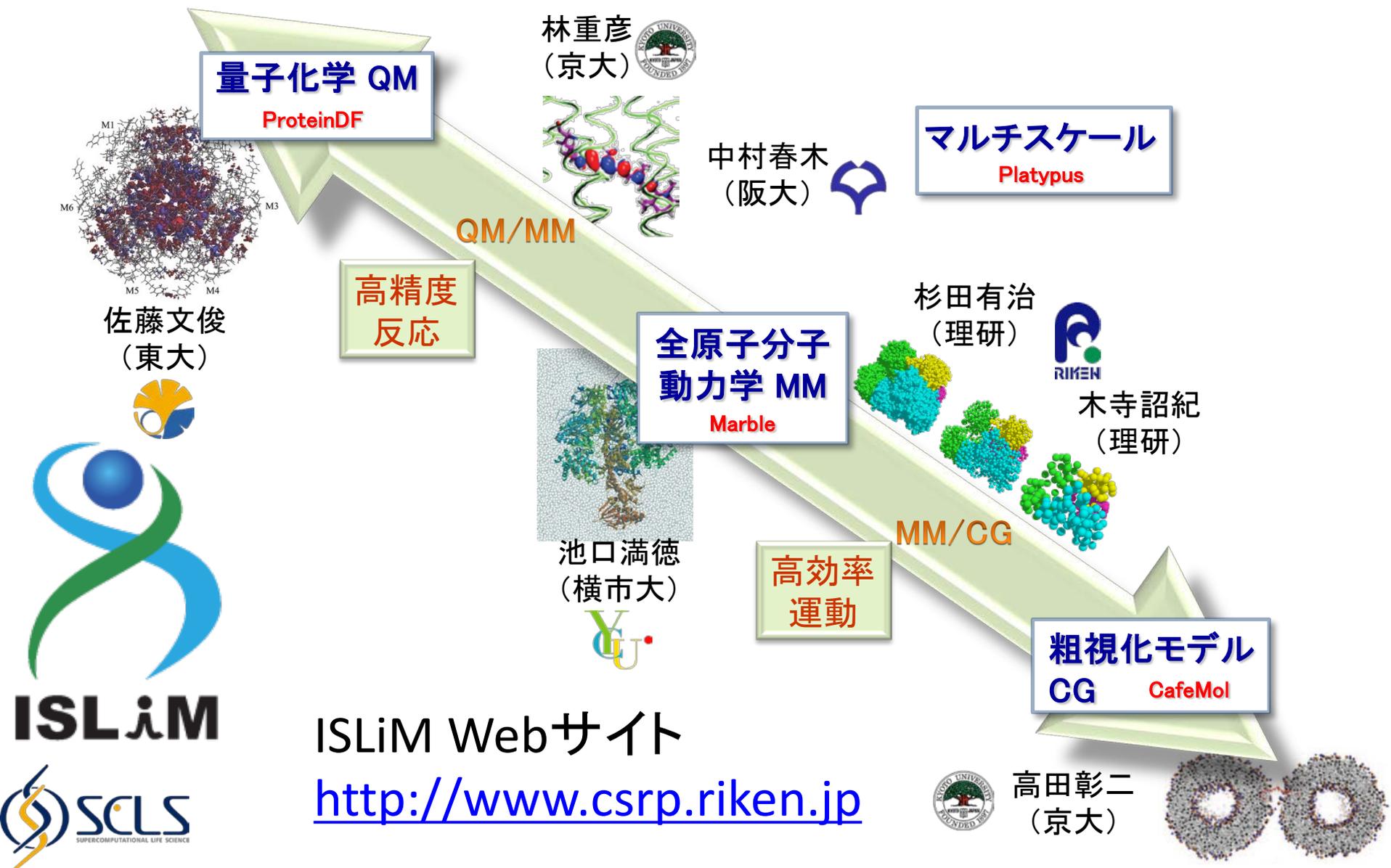
脳神経系アプリケーション

B-1	Neural Simulation Tool	NEST	MarkusDiesmann	理化学研究所
B-2	Cortical Microcircuit Developed on NEST	CMDN	深井朋樹	理化学研究所
B-3	全視覚系モデルによる視覚情報処理の解析 (視覚系シミュレーションのための共有プラットフォーム)	VSM	臼井支朗	理化学研究所
B-4	神経細胞形態シミュレーションキット	NeuroMorphoKit	行縄直人	京都大学
B-5	昆虫嗅覚系全脳シミュレータ	IOSSIM	神崎亮平	東京大学

生命体基盤ソフトウェア

H-1	大規模並列用MDコアプログラム	cppmd	大野洋介	理化学研究所
H-2	分散並列大規模データ可視化システム	LSV	小野謙二	理化学研究所
H-3	アプリケーションミドルウェア	SPHERE	小野謙二	理化学研究所
H-4	大規模仮想化合物ライブラリ	VLSVL	船津公人	東京大学

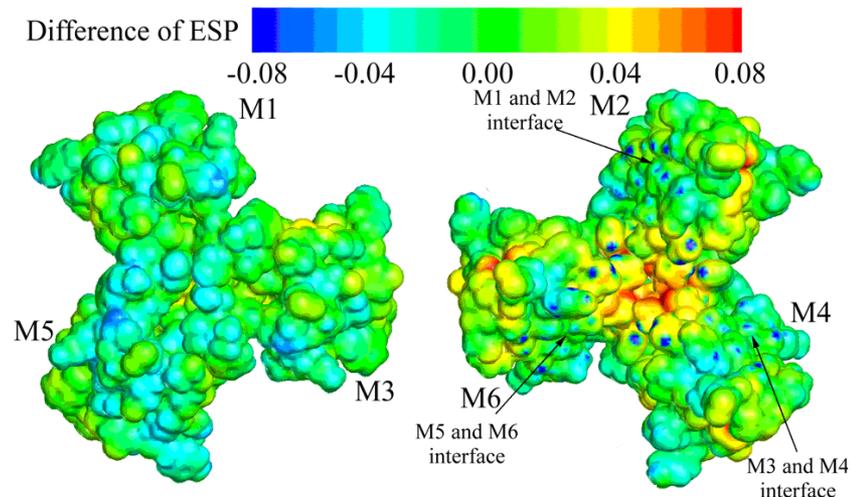
ISLiM 分子スケールアプリケーション



量子化学 QM



- 開発責任者
 - 東京大学生産技術研究所教授 佐藤文俊
- 概要
 - 複雑かつ大規模・高精度が要求されるタンパク質の全電子を密度汎関数法に基づきカノニカル軌道で計算する。
 - 励起状態も含めた第一原理分子動力学計算が可能。
- 離散化(計算モデル化)の方法
 - 分子軌道法
- 計算方法
 - 直接法による密行列の対角化
- 並列化の方法
 - 原子分割法、RT アルゴリズム+シェルタイプ分類均等分割法。
- 開発言語とライブラリ
 - C++, MPI, OpenMP, ScaLAPACK
- コードの公開状況
 - バイナリコードを無償で利用可能。
 - <http://www.ciss.iis.u-tokyo.ac.jp/dl/>
- 現状での計算規模
 - 306 残基、27,000 軌道、基底状態計算(世界最大)
 - Altix3700(64 CPU)で実行、300 GFlops
 - メモリ容量 256 GB、ディスク容量 1 TB



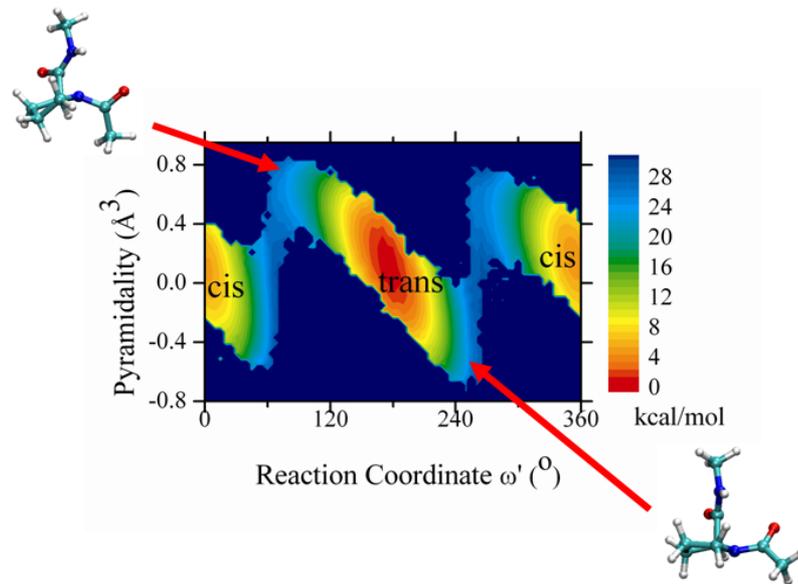
インスリン6量体静電ポテンシャルの古典計算との差

- 次世代機「京」での計算規模
 - ほぼ全てのタンパク質に対応するため計算規模を3倍に
 - 基底状態だけでなく、励起状態のダイナミクスを解析
 - メモリ容量 2PB、ディスク容量 10 PB(励起状態)
- どんなことができるか
 - 創薬の信頼性の高い基礎研究のみならず、医薬品開発の高品位化および高効率化、ならびに次世代の医薬品研究開発モデルの創成といった応用に貢献できる。
 - 方法特許やビジネスモデル特許などを含め欧米に対する優位性を実現できる。
 - 触媒、分子素子、環境物質などへの応用も大いに期待できる。



Platypus-QM/MM

量子化学計算／分子動力学連成計算

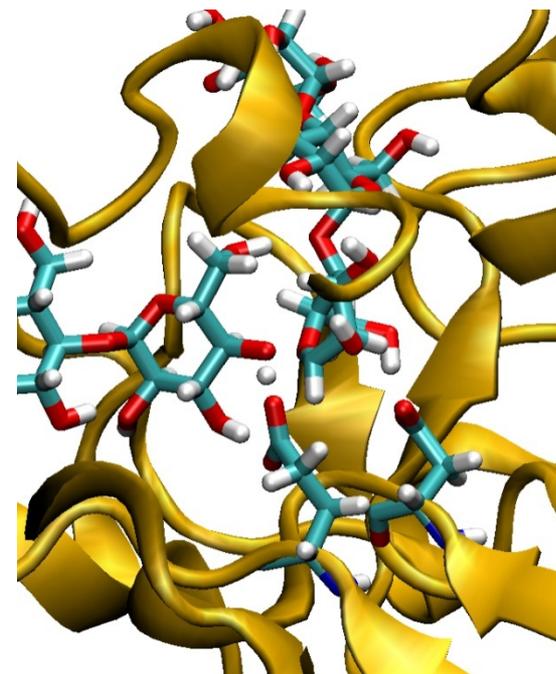


ピラミダリティの反応座標依存性の量子古典連成計算

- 開発責任者
 - 大阪大学蛋白質研究所教授 中村春木
- 概要
 - 電子状態の効果を分子動力学に取り込むことで酵素反応機構などの生体高分子の精密解析を行う。
- 離散化(計算モデル化)の方法
 - 分子軌道法、分子動力学法
- 計算方法
 - 直接法による密行列対角化、反復法による疎行列連立方程式求解、改良Wolf等
- 並列化の方法
 - 領域分割(分子軌道法)、原子分割(MD)
- 開発言語とライブラリ
 - FORTRAN77, Fortran90, C, MPI, OpenMP, ScaLAPACK, LAPACK
- コードの公開状況
 - 未公開
- 現状での計算規模
 - プロリン及びN-methylacetamide(量子系)の水溶液中(水分子は古典粒子)における異性化熱力学過程の解明
 - 20000原子を蛋白研PCクラスタ256コアで解析
 - メモリ容量 300Mbyte/コア、ディスク容量 3GB
- 次世代機「京」での計算規模
 - 数100-数1000電子系と、それを取り巻く数10万古典原子による反応自由エネルギー地形を64万コアで解析
 - 基底状態だけでなく、励起状態のダイナミクスを解析
 - メモリ容量 1.6GB/コア、ディスク容量数GPB
- どんなことができるか
 - 生命活動に重要な酵素反応機構や、その反応を制御する薬物などの開発に有用な知見を得ることができる。

Platypus-QM/MM-FE

ハイブリッド QM/MM 反応自由エネルギー計算



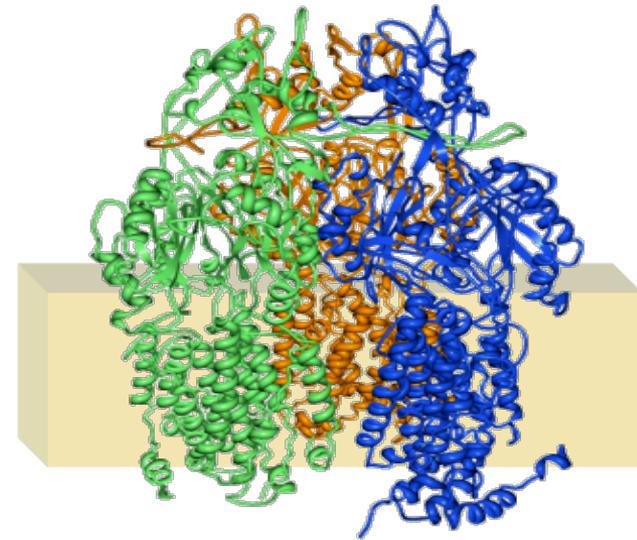
α -amylase 酵素中のpolysaccharide 基質の加水分解反応遷移状態

- 開発責任者
 - 京都大学大学院理学研究科准教授 林重彦
- 概要
 - 量子化学的手法(QM)と分子力場法(MM)のハイブリッドである QM/MM 法により、生体分子内の反応基質分子の自由エネルギー最適構造の決定及び反応性解析を行う。
- 離散化(計算モデル化)の方法
 - 分子軌道法、分子力場法
- 計算方法
 - Reweighting法(自由エネルギー)、Ewald 法(クーロン)。
- 並列化の方法
 - MM 構造サンプル分割
- 開発言語とライブラリ
 - FORTRAN77, GAMESS の socks ライブラリ
- コードの公開状況
 - ソースコードを無償で利用可能。要相談。
- 現状での計算規模
 - α -amylase 酵素における polysaccharide(二量体部分)の自由エネルギー構造最適化。
 - 7万原子系、QM 原子数 69、基底関数 650、MM 構造サンプル数 140,000
 - PC128 コア、メモリ容量 256 GB、ディスク容量 50 GB

- 次世代機「京」での計算規模
 - 多剤排出トランスポーター
 - 約50万原子、MM構造サンプル数 100 万
 - メモリ容量 4 TB、ディスク容量 4 TB
- どんなことができるか
 - 酵素反応における基質の反応性解析が行える。
 - 生体エネルギー変換で最も重要であるプロトン濃度勾配を用いた分子機能が明らかになる。

MARBLE

全原子分子動力学計算



多剤排出トランスポーターAcrB

- 開発責任者
 - 横浜市立大学大学院総合理学研究科准教授 池口満徳
- 概要
 - タンパク質や核酸など生体分子の立体構造で、水素まで含んだ**全原子モデル**を解く。
- 離散化(計算モデル化)の方法
 - 古典分子動力学
- 計算方法
 - FFTを用いたParticle Mesh Ewald法
 - シンプレクティック数値積分法
- 並列化の方法
 - 空間分割, スレッド並列はループ分割
- 開発言語とライブラリ
 - C, MPI, OpenMP
- コードの公開状況
 - 「京」においてバイナリを無償で利用可能
- 現状での計算規模
 - 10万-100万原子系
 - Cray XE6で3000コア並列
 - メモリ容量 4 GB/node、ディスク容量 1 TB
- 次世代機「京」での計算規模
 - 多剤排出トランスポーター(約50万原子)
 - 反復回数 10^9 回以上
 - メモリ容量 16 GB/node、ディスク容量 10 TB
- どんなことができるか
 - 膜タンパク質が大規模な構造変化を行う様子をシミュレートすることができる。
 - 薬剤耐性菌の原因因子である多剤排出トランスポーターのシミュレーションを行うことにより、菌が異物を排出する際の分子機構を明らかにする。

Platypus-MM/CG

マルチコピー・マルチスケール分子シミュレーション法開発の基盤となるクラスライブラリ

全原子モデル計算を用いて粗視化空間における最適パスを探索

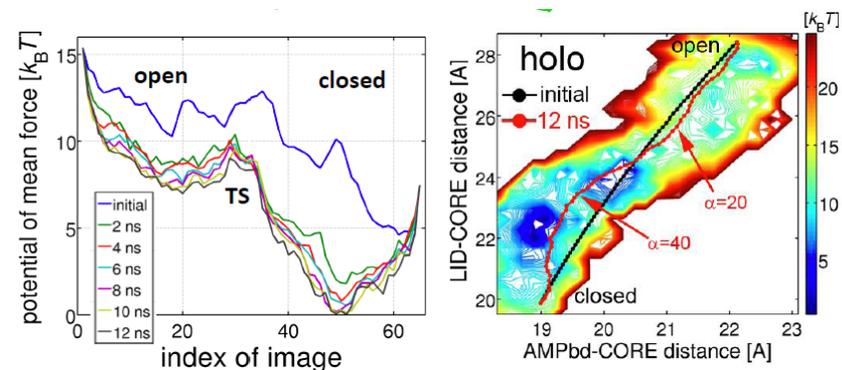
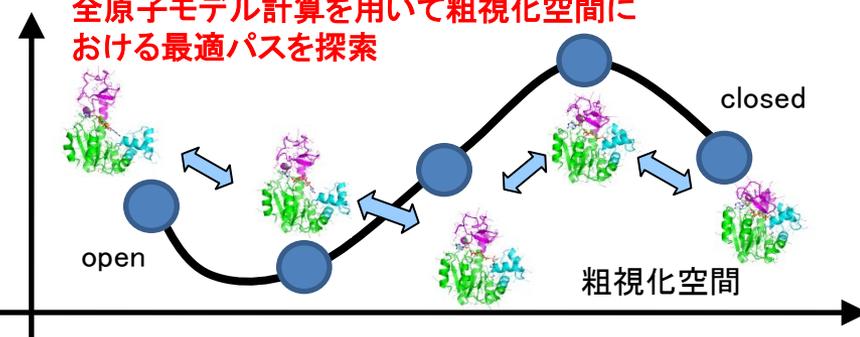


図. スtring法の概念図(上)とタンパクへの応用例(下)

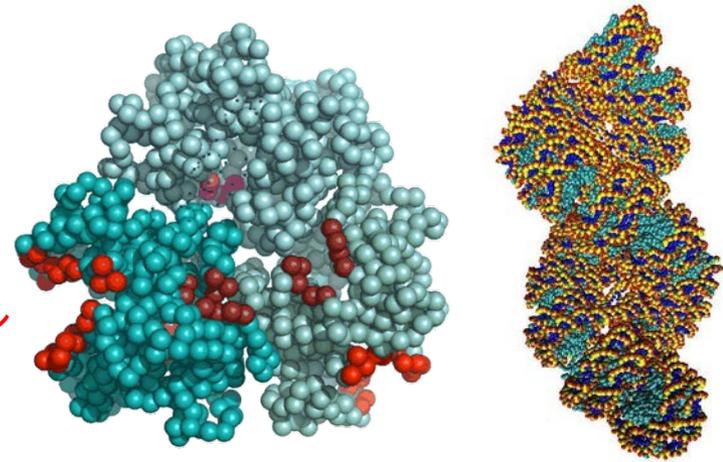
• どのようなことができるか

- 薬剤などの生理活性物質がタンパク質など生体高分子に結合する過程を再現できるようになる
- 薬剤の結合やタンパク質同士の結合に伴う立体構造変化を予測できるようになる
- 結合過程や立体構造変化過程の解析から、活性の高い物質の創出やタンパク質の機能改変につながる手がかりが得られる。

- 開発責任者
 - 理化学研究所分子スケール研究開発チーム
 - チームリーダー 木寺詔紀
- 概要
 - タンパク質や核酸、薬剤など生体分子を計算対象とする。反応の時間スケールが遅い(ミリ秒~秒)ために、通常のMDでは追跡が困難な、生体分子同士の相互作用やこれに伴う立体構造変化過程の再現を目的とする。
- 離散化(計算モデル化)の方法
 - マルチコピー・マルチスケール連成分子動力学法
- 計算方法
 - レプリカ交換法、MSES法、ストリング法、粒子フィルタ法
- 並列化の方法
 - コピー間並列(MPI並列)、ループ分割(MPI・スレッド並列)
- 開発言語とライブラリ
 - C++, MPI, OpenMP, LAPACK, FFTW, NetCDF
- コードの公開状況:
 - バイナリコードを無償で利用可能
- 現状での計算規模
 - アデニル酸キナーゼ立体構造変化パスウェイ探索
 - 1,600万原子系(6万原子系×256コピー)
 - RICC 8192コア、メモリ容量 52 GB、ディスク容量 10 TB
- 次世代機「京」での計算規模
 - 多剤排出トランスポーター(AcrB)
 - 1億2,800万原子系(50万原子系×256コピー)
 - 65,536コア(256コア/コピー)使用
 - メモリ容量 416 GB、ディスク容量 1 PB

CafeMol

粗視化分子モデル計算



トランスポーター(左)とDNAヒストン複合系(右)

- 開発責任者
 - 京都大学理学研究科准教授 高田彰二
- 概要
 - 粗視化分子モデル計算により大規模生体分子の長時間シミュレーションを行う。
- 離散化(計算モデル化)の方法
 - 粗視化された分子モデルによる古典分子動力学法
- 計算方法
 - Langevin方程式の時間発展を数値的に積分する。
- 並列化の方法
 - Neighbor list方式、レプリカ交換法
- 開発言語とライブラリ
 - Fortran90, MPI, OpenMP
- コードの公開状況
 - <http://www.cafemol.org> からダウンロード可。
- 現状での計算規模
 - 1万残基タンパク質のミリ秒相当のシミュレーションが可能
 - PCクラスタで8192コア並列
 - メモリ容量 2 GB/コア、ディスク容量 1 TB
- 次世代機「京」での計算規模
 - 10万粒子(100万原子)系の秒相当のシミュレーション
 - 反復回数 10^{10} 回以上
 - メモリ容量 2 GB/コア、ディスク容量 1 PB
- どんなことができるか
 - X線回折やNMRによる構造情報が存在するタンパク質、核酸などの動態の分子動力学シミュレーション。とくに構造変化を伴うタンパク質ドッキング、分子モーターやトランスポーターの大規模構造変化などをシミュレーションできる。
 - 例として、キネシンの動態、多剤排出トランスポーターの動態、DNAヒストン複合系(ヌクレオソーム)など。

CafeMolの利用

- /home/islim/cafemol/cafemol2_sclsのディレクトリをホームにコピー
- `$ cp -fr /home/islim/cafemol/cafemol2_scls ~`
- タンパク質sh3のシミュレーション
 - `pjsub sh3.sh`
- 130塩基対のDNAのシミュレーション
 - `pjsub dna.sh`

シミュレーション結果の動画作成

- `cafemol2_scls/utility/caffe_move_making.sh`を参照
- 動画作成にはPyMolとMplayerが必要
 - 一般的なLinuxで動作可能
 - <http://www.pymol.org/>
 - <http://www.mplayerhq.hu/>

「京」創薬支援アプリ (ISLiM ソフトウェア)講習会

- 東京会場: 理研 東京連絡事務所 (内幸町)
 - 2/7(木)
 - #1: 13:00-15:00 REIN-K (Platpus-)
 - #2: 15:00-17:00 CafeMol
 - 3/8 (金)
 - #3: 13:00-15:00 MARBLE-K
 - #4: 15:00-17:00 mu2lib-K
- 大阪会場: 都市活力研究所 (梅田)
 - 2/20 (水)
 - #5: 13:00-15:00 mu2lib-K
 - #6: 15:00-17:00 MARBLE-K
 - 3/12(火)
 - #7: 13:00-15:00 REIN-K
 - #8: 15:00-17:00 CafeMol

* 案内URL

* <http://www.biogrid.jp/pdf/insilicoseminar6.pdf> 2012年度は全て無料!

* ダウンロードサイト

* http://www.islim.org/islim-dl_j.html



受講者募集

インシリコ創薬支援事業のお知らせ

大阪・梅田で創薬関連のアプリケーションの
技術的総合支援事業を開始いたします

- 講習会**
 - ・ 講師は創薬専門のITベンダーやアプリの開発者
 - ・ 実習付きコースあり
- 相談会**
 - ・ 個別課題の相談受付
 - ・ 個別コンサルティングの実施
- マッチング**
 - ・ チャレンジablな課題解決に向けたプロジェクトをコーディネート

bioGrid