

課題番号: hp120033

表題今後のHPCI計画推進のあり方に関する検討ワーキンググループ(第19回)



東洋紡株式会社
総合研究所
阿部幸浩

目的と研究体制

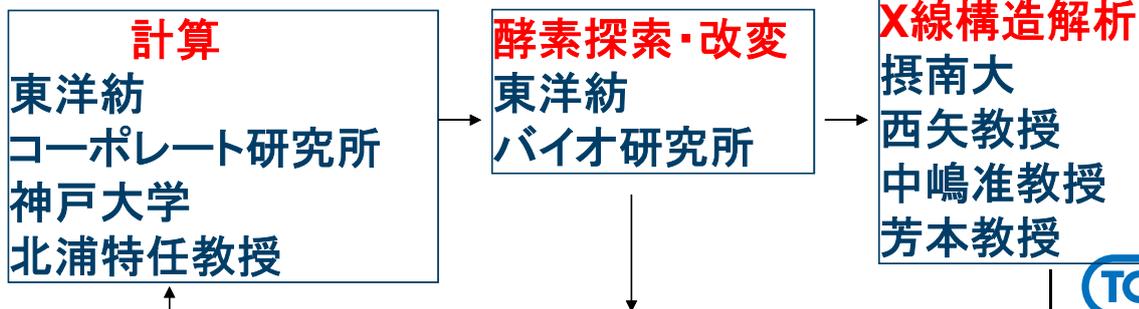
目的 酵素の効率的な機能改変
より合理的に、より高精度に



基質と残基との相互作用の明確化

酵素研究の手法

- | | |
|---------------------------|-------|
| ①スクリーニング & 変異処理 | 1989年 |
| ②遺伝子操作 | 1992年 |
| ③たんぱく質工学 | 1994年 |
| ④たんぱく質工学 (構造ベース (X線構造解析)) | 2003年 |
| ⑤たんぱく質工学 (In Silicoベース) | 2012年 |



京の良いところ

実行速度が速い

当社ワークステーションの100-200倍の実行速度(768 nodes使用時)

当社WSで25日程度掛かる計算が3時間程度で終了

FMO/RIMP2/6-31G(d)による酵素の電子状態の計算

大メモリー

⇒ 大きな系の計算が可能

FMO法の場合

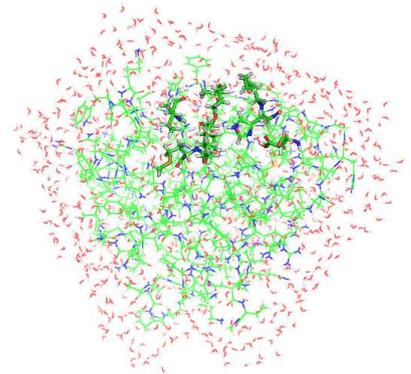
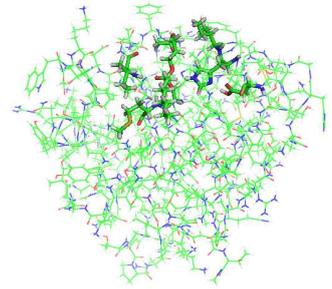
当社WS: 真空中に浮かんだ酵素の電子状態の計算

8820原子

京: 溶媒中の酵素の電子状態の計算

溶媒の役割がわかるであろう。

27000原子



システムとして使いにくいところ

投入したジョブがなかなか始まらない、または後回しにされる

```
klogin3$ pjstat
JOB_ID  JOB_NAME  MD ST  USER  START_DATE  ELAPSE_LIM  NODE_REQUIRE
2080016  J1cf3XYLg4  NM QUE k00559  (07/03 05:35)<  0005:00:00  768:8x12x8
```

7月2日12時頃にジョブ投入

```
klogin3$ pjstat
JOB_ID  JOB_NAME  MD ST  USER  START_DATE  ELAPSE_LIM  NODE_REQUIRE
2080016  J1cf3XYLg4  NM QUE k00559  (07/03 09:37)<  0005:00:00  768:8x12x8
```

⇒ 最近は、大分ジョブが入り易くなってきています。

データ領域が何度も変更される

volume1 ⇒ volume63

ステージイン、アウト

手持ちのソースコードがそのままでは動かない。

ソースの変更または複雑なshでの指定

並列処理

Gamessのddiとtofuの相性



制度としてやりにくいところ

オブリゲーション: 成果報告

事前アナウンス

期間終了後に報告書提出

始まってみたら

中間報告会 3月、10月

開発グループとの共同の研究テーマでは、この頻度では報告が大変

期間: 1年間

チューニング: 極めて専門的な技術が必要

インターフェイス: 計算規模が大きくなってきたため、既存のインターフェイスでは入力ファイルを作れない、出力を読めないため、ユーティリティプログラムを作る等しながら対応している。

… 使用期間が限定された民間企業には敷居が高い

応募回数

産業利用: 2回/年 + トライアルユース

会社の研究テーマ開始時期と審査時期が必ずしも一致しているわけではない。



京に望むこと

京上で動く化学計算用ソフトウェアの充実

計算は、いくつかの手法を組み合わせる行うことが多い。

現在使っている、または将来使いたいソフトウェア

分子軌道法 GAMESS/FMO法 PAL版 神戸大学 北浦先生

CMSI版 神戸大学 北浦先生

GAMESS/RWFE-SCF法 理研公開版 京大 林先生

望むこと

NWChem、Gaussian、Amberのような汎用ソフトウェアのライブラリー化

NWChem: 高並列化に対応すると言われているMO法ソフト

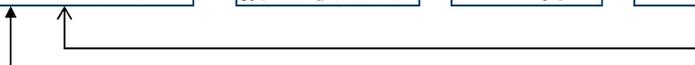
Gaussian: 世界で最も使われているであろうMO法ソフト

Amber: タンパク専用のMM, MDシミュレーションソフト

FMO法、RWFE-SCF法に使う構造を作成

特に、RWFE-SCF法は、AmberでMDシミュレーションを行い、そのトラジェクトリーを使用する。

X線酵素構造 → ミューテーション → 構造最適化 → MD計算 → MO計算 → 実験





Ideas & Chemistry

All Rights Reserved