

課題名 (タイトル) :

生命分子の実験的制限付き構造決定

利用者氏名 : 山崎 俊夫

所属 : ライフサイエンス技術基盤研究センター 構造・合成生物学部門 NMR施設

1. 本課題の研究の背景、目的、関係するプロジェクトとの関係
タンパク質の構造を求めるために NMR などからの断片的構造情報を有効利用するためのプログラム開発と、応用を行った。
2. 具体的な利用内容、計算方法
経験的力場を用いて、良い構造空間を動力学 simulation で探索し、実験から得られる構造情報と合うものを見つける。構造空間は人為的に次元拡張をすることで、鎖状高分子での絡まりを避けるようなプログラムを開発した。gwmpc での optimization に時間を要した。
3. 結果
gwmpc は intel の CPU に比べ、2 倍ほど遅い上に compiler で optimization の choice に疑問がある。directive で多くの場合、ほぼ良い optimization になることが分かった。vector 長が小さい時、vector 化を抑えないといけない。vector 化の overhead が大きいようだ。
4. まとめ
intel CPU での利用に比べ、4 倍ほどの CPU 数を使って同等の計算能力になった。利用者が多くなってくると、CPU を使い続けられないし、簡単に上限に至ってしまう。
5. 今後の計画・展望
NMR の化学シフト計算にも利用したい。構造計算と融合したい。