

6月20日(月)

講義の内容, 成績評価方針(server-500.cc.kyu・)

サイエンスGrid NAREGI

- 連成ミドルウェアの概要
- 連成計算とその類型化



- グリッドの概要
 Gridコンピューティングとは サイエンス分野での利用
 ビジネス分野での利用
- 計算科学の概論
 - ■主要なシミュレーション手法
- サイエンスGrid NAREGI
 Globus, Unicoreの現状 NAREGIミドルウエア概要
 連成計算とその類型化
- Globus Tool Kit version 4
 GT4の動向に依存・・
 NAREGIミドルウエアのデモに変 更するかもしれない

講義資料はWebで公開 server-500.cc.kyushu-u.ac.jp



NAREGIにおける上位層





NAREGIプロジェクトの概要

基本層(WP1 東工大 松岡教授) ■ スーパー・スケジューラ ■ 分散情報サービス ■ グリッドVM

上位層

- WP3 国情研 宇佐見教授
- PSE
- ワークフローツール
- グリッド可視化

ネットワーク&認証層 WP2 大阪大学 下條教授 ■ PKI ■ 認証連携 VO対応







NAREGIソフトウェア階層とWP2





- 目的
 - (資源)遠隔地に設置され、高速なネットワークで接続された複数のコンピュータ(クラスタやSMP機)
 - (環境)標準的なグリッド機能(セキュリティ、情報サービス、実行環境) e.g. NAREGI, GT3.0
 - VO/VCにおけるプログラム/ソフトウエア開発環境を提供
- 設計指針
 - 従来の並列プログラミングとの親和性がよいこと
 - 大規模計算ユーザのプログラム移行性
 - グリッド環境をユーザが意識しないこと
 - 独特のコマンド等を覚える必要がない
 - 小規模から大規模まで安定して拡張できること
 - 高いスケーラビリティ(100TFlops規模のグリッドでも動作する)

Grid RPC / Grid MPI を採用 esearch Grid Initiative



Grid MPI と Grid RPC

	Grid MPI	Grid RPC
特徴	並列プログラムの構造 を理解する必要があり、 若干困難であるが、記 述能力は高い。並列性 が複雑に絡み合う場合 に有効。	特定の計算部分を遠隔 実行するだけなので、 VO/VCにおけるプログ ラムが <mark>容易。比較的単</mark> 純な並列性を記述する 場合に有効。
	MPI プログラムがその まま動作可能	RPC呼出手続きの記述 を若干追加
GGF 関連 WG	IMPI/OpenMPI	Grid RPC WG
主な実装	MPICH-G/2, PACX- MPI, STAMPI, Grid MPI, OpenMPI	Ninf, NetSolve National Research Grid Initiativ



Grid RPC

・認定ソフトウエア naregi-wp2-rpc-041221 _Ninf-G version 2.3.0 のリリース
・大規模実証実験(Ninf-G2) _アプリケーションの長時間実行による評価 _アプリケーションの実行による実用性評価
・Ninf-G versin 3.0.0aの開発

National Research Grid Initiative



GridRPC 機能•動作概要



<u>グリッド上の複数の高性能計算機を利用した大規模計算</u>

Ninf として 1994から開発を開始 → 成果を NAREGI に組み込む National Research Grid Initiative



GridRPCの開発計画(前期)

	H15	H16	H17
計画	Ninf-G Version 2 (Ninf-G2)を開発。各課 題に対応したGridRPC APIの実装を行なう。 また、GGFにおいて GridRPC APIの標準化 を進める。	Ninf-G2の評価および改 良。 GT3を用いたNinf-G Version 3 (Ninf-G3) の プロトタイプ開発。性能・ 機能の検証。	Ninf-G3正式版開発。
成果 物	Ninf-G Version 2.0.0a を SC2003において配 布。 Ninf-G Version 2.0.0 を年度末に配布。	Ninf-G Version 2.1 を SC2004において配布。 Ninf-G3 プロトタイプ	Ninf-G Version 3.0 を 年度末に配布。 GT4, Univa Globus等 に対応したNinf-G Version 4 の開発
標準 化	GGF-7にてGridRPC WGの立ち上げ。	GGF-12にて標準APIの 参照実装を提供。 GridRPC WG。	



アプリケーションの長時間実行による評価 - 国際グリッドテストベッド上でのTDDFT -

- 目的
 - Ninf-G2の品質の検証
 - Ninf-G2のエラー検知機能の検証
 - 耐障害機能の実装技術開発
- 実験
 - 量子化学計算(TDDFT)をNinf-G2を用いて実装
 - アジア・太平洋地域の国際的な試 験環境上で長時間実行
 - 8カ国、10機関により提供される合 計210CPUのテストベッド







アプリケーションの実装による実用性評価 — Hybrid QM/MD simulationの実装 –

- 大規模なAtomistic simulationの高精度実行を可 能にするため、MD SimulationとQM simulationを 連携
 - MD simulation
 - 全領域の原子の振舞いを計算
 - 経験的原子間ポテンシャルを用いた古典MDシミュレーション
 - QM simulation
 - 興味のある領域のみを対象に実行, MDの結果を修正
 - 密度汎関数 (DFT)に基づくQMシミュレーション





National Research Grid Initiative



アプリケーションの実装による実用性評価 — Hybrid QM/MD simulationの実装-(続き)

- アプリケーションの特徴
 - 複数のQM領域を定義可能(個々のQM領域は独立に計 算可能)



 Ninf-Gとlocal MPIを組み合わせて実装(新たなプログラミン グモデルの提案)



実験におけるアプリケーションの動作







National Research Grid Initiative



GridRPC グリッドプログラミング環境【まとめ】







Grid MPI

認定ソフトウエア naregi-wp2-mpi-041106

MPI-IO、リモート書きこみ、動的プロセス生成等の機能をMPI-2.0 標準仕様に準拠させる改良を実施。 MPI-IO、リモート書込み、動的プロセス生成等の機能などをMPI-2.0 標準仕様に準拠。テストスイート(MPI Validation Suite)にて動作を確認。

Grid MPIによりTCP/IPの通信トラフィックが極端に性能低下する現象を明らかにしシステム改良を実施。

National Research Grid Initiative



Grid MPI 開発計画(前期)

	H15	H16	H17
計画	 (開発課題) •MPI-1機能&IMPI •TCP/IP輻輳制御アルゴ リズムのプロトタイプ実装 (研究課題) •トポロジを考慮した通信 機構の設計とプロトタイプ 作成 •チェックポイント機能の設 計 	 (開発課題) •MPI-2機能への拡張と 品質向上 •ベンダMPIとのインター フェイスの設計 (研究課題) •TCP/IP輻輳制御アルゴ リズムの実装と評価 •トポロジを考慮した通信 機構の評価 	 (開発課題) •GridMPIの全体評価および調整 •チェックポイント機能の実装 •ベンダMPIとのインターフェイスの実装 •トポロジを考慮した通信機構の実装
成果 物	Grid MPI Evaluation Version SC03にて配布 (MPI-1機能+IMPI) Grid MPI Version 0.1 (MPI-1機能 +IMPI+TCP/IPチューニン グ)	Grid MPI Version 0.2 SC04にて配布(MPI-2機 構)	Grid MPI Version 1.0 SC05にて配布(チェック ポイント機能付き、ベンダ MPIインターフェイス込 み)

National Research Grid Initiative



主要なフリーMPI実装との互換性比較

	ANL Test Suite	Intel Test Suite
GridMPI	100% Pass	100% Pass
ver.0.2	(Fail: 0/142)	(Fail: 0/493)
MPICH-G2 ver.1.2.6	90.8% Pass	87.2% Pass
+ Globus3.2	(Fail: 13/142)	(Fail: 63/493)
LAM-MPI	92.3% Pass	92.3% Pass
ver.7.1.1	(Fail: 11/142)	(Fail: 16/493)

- ANL Test Suite (Argonne National Laboratoryが開発)
- Intel Test Suite (Intelが開発)



NAS Parallel Benchmarks (NPB2.3)



- GridMPIを1とした時の相対性能を表示
 - 8ノードクラスタを2組接続
 - LAM-MPIはクラスタ構成、バイトオーダー変換なし
 - MPICH-G2ではFTは実行できず

National Research Grid Initiative

来週(6月20日)の講義は情報基盤センター多目的講義室

次週は

- 連成計算の類型化
- Mediator/GridMPI 連成プログラミング (プログラミング層の続き)
 を予定しています.

レポート課題2 (2005.5.23 出題)の × 切は6月6日(月) 深夜ですが、 少しなら遅れて提出しても受理.



Application層: 話の内容

1. 連成シミュレーションの序

- 1.1 数理・数値シミュレーション(単一モデル)の適応例
- 1.2 シミュレーション手法の特徴
- 1.3 シミュレーション手順と数値計算
- 1.4 数理・数値モデルと離散化
- 1.5 連成シミュレーション)の重要性(+注意点)
- 1.6 連成ライブラリMediator
- 2. 具体例 溶媒と淡白質
- 3. 連成を意識した疎結合モジュール

1.1 数理・数値シミュレーションの適応 例(1/3)

- 生物 生態, ライフゲーム, 進化, ・・
 化学 化学反応, スペクトル, 合成, 薬品の機能と構造・・
- 物理 結晶(固体),液体,気体,液晶,
 流体 風,乱流,衝撃波,音波,津波,
 マントル対流,
 - 天体 少数多体(太陽系),銀河,銀河衝突, 恒星の進化・・

電磁気 回路,デバイス,レーザー,光学,磁石,・・

- 生体・バイオ タンパク質、ゲノム、
 細菌、組織、器官、個体・・
- 経済・社会学 株価,物流,数理経済,・・

(続きのスライド2/3)

- 電力 発電(燃焼,水力,原子力),電力輸送••
- 音響 ホールの設計,楽器の設計,共鳴••
- スポーツ 用具設計(ゴルフ?), 運動ホーム解析,

変化球(魔球?)



- ·気象·海洋 数值予報、台風進路予測、太陽熱、··
- •地殻 地震予知、地震波解析、地殻変動、
 地球形成、地下資源探査
- ・建築 高層ビルの耐震計算、ビル風、
 ビルの熱管理
- ・土木 橋梁の耐震・耐風計算、港湾の津波、ダム http://www.athome.co.jp/academy/physics/phy05.html

(続きのスライド3/3)

 航空工学 翼形と空気抵抗、翼胴、 機体構造解析、・・
 車両 車体構造、衝突、空気抵抗
 船舶 船体の耐波構造、渦対策、腐食解析
 原子炉 炉構造、動特性、安全性解析
 ・機械 エンジン、精密構造、材料力学、 回転・振動解析、音場・騒音解析・・

1.2 シミュレーション手法の特徴

- 多くの構成要素からなる系の振る舞いを、構成要素 間の基本法則に従ってコンピュータで計算し、その マクロな振る舞い(時間的発展, 定常状態の性質, 統計量など)を観測する手法
- ミクロ(構成要素間)の法則から出発し、マクロ(シス テム)の挙動を解析する手法

・・「部分」から「全体」へ・・

しばしば構成的手法とも呼ばれる

数値シミュレーションの利点(過信すれば欠点)

・適切なモデルを設定することにより、着目している現象を覆い隠してしまう様々な要因を排除できるので、
 物理的な本質を捉えやすい

・温度や圧力など、パラメタを自由に調節できる。した がって、実現しようとすると膨大な経費を要するような 極限条件下や、現実の系では実現不可能な条件での 物理的知見を得ることができる

・自由度が比較的小さな場合には正確な結果が得られるので、実験結果や解析的に厳密解が得られない問題にたいして、観測値の予測と吟味、近似理論の検討や改良のための規準となり得る

1.3 シミュレーション手順と数値計算



- ・ 目的の明確化, 要求精度
- 全体と部分,物理モデル・・
- 構成要素の基礎方程式,微分 方程式など・・
- 離散化、アルゴリズム、データ 構造、並列分散構造・・
- 数値解(近似解)の計算
- 膨大な数値の山
- - 解釈, 説明, 予測

1.4 数理・数値モデルと離散化 (格子モデルと粒子モデル)

格子モデルによる離散化

構成要素が連続体(または連続体とみなせる場合) 対象としている系「全体」の空間,時間範囲で, x y z t の4次元変数の場(ベクトル,スカラー)を 扱う.

粒子モデルによる離散化

構成要素が粒子(または粒子とみなせる場合) 対象としている系「全体」の各粒子について, x y z t の4次元の変数(ベクトル, スカラー)を扱う



数値シミュレーションではコンピュータが扱える 表現に方程式を変換する(微分を差分などで表す)

格子モデルの例

●2次元拡散(熱伝導)方程式

2次元の場合も基本的には1次元と同様である。鉄板の温度 分布の時間的変化を考える。

独立変数:時刻*t*、鉄板上の位置*x*,*y* 未知関数:時刻*t*における点(*x*,*y*)での、鉄板での温度*u*(*t*,*x*,*y*) パラメータ:熱伝導率*k*、鉄板の比熱σ、鉄板の面密度 ρ 表現する法則:熱量の保存則

ポアソン方程式の代表例

$$\sigma \rho \frac{\partial u}{\partial t} = k \left(\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} \right)$$
$$\frac{k}{\sigma \rho} = 1.0$$

$$\frac{\partial u(x_n, y_m, t_l)}{\partial t} = \frac{u(x_n, y_m, t_{l+1}) - u(x_n, y_m, t_l)}{\Delta t}$$

$$\frac{\partial^2}{\partial x^2} u(x_n, y_m, t_l) = \frac{u(x_{n+1}, y_m, t_l) - 2u(x_n, y_m, t_l) + u(x_{n-1}, y_m, t_l)}{h^2}$$
$$\frac{\partial^2}{\partial y^2} u(x_n, y_m, t_l) = \frac{u(x_n, y_{m+1}, t_l) - 2u(x_n, y_m, t_l) + u(x_n, y_{m-1}, t_l)}{k^2}$$

初期条件と境界条件(Dirichlet境界条件)

 $1 \le n \le N - 1 \qquad u(x, y, 0) = u_0(x, y)$ $1 \le m \le N - 1 \qquad u(x_N, 0, t) = 0 \qquad u(0, y_N, t) = 0$ $0 \le l \qquad u(x_N, y_N, t) = 0$

x, y方向に3分割した場合 $1 \le n \le 3$ $1 \le m \le 3$ t = 0 f_{110} f_{120} f_{130} 0 f_{210} 0 f_{220} 0 f_{230} 0 f_{310} 0 f_{320}

$$f_{110} = u_{010} + u_{100} \quad f_{120} = u_{020} \quad f_{130} = u_{030}$$

$$f_{210} = u_{200} \quad f_{220} = 0 \quad f_{230} = 0 \quad f_{310} = u_{300}$$

$$f_{320} = 0 \quad f_{330} = 0$$

$$\begin{split} 1 \leq n \leq 3 \quad 1 \leq m \leq 3 \quad l = 0 \rightarrow 1 \\ \begin{pmatrix} \lambda & h^{-2} & 0 & h^{-2} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ h^{-2} & \lambda & h^{-2} & 0 & h^{-2} & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & h^{-2} & \lambda & 0 & 0 & h^{-2} & 0 & 0 & 0 \\ h^{-2} & 0 & 0 & \lambda & h^{-2} & 0 & h^{-2} & 0 & 0 \\ 0 & h^{-2} & 0 & h^{-2} & \lambda & h^{-2} & 0 & h^{-2} & 0 \\ 0 & 0 & h^{-2} & 0 & h^{-2} & \lambda & 0 & 0 & h^{-2} \\ 0 & 0 & 0 & h^{-2} & 0 & 0 & \lambda & h^{-2} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & h^{-2} & 0 & h^{-2} & \lambda & h^{-2} \\ 0 & 0 & 0 & 0 & h^{-2} & 0 & h^{-2} & \lambda & h^{-2} \\ 0 & 0 & 0 & 0 & h^{-2} & 0 & h^{-2} & \lambda & h^{-2} \\ 0 & 0 & 0 & 0 & h^{-2} & 0 & h^{-2} & \lambda & h^{-2} \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & h^{-2} & 0 & h^{-2} & \lambda & h^{-2} \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & h^{-2} & 0 & h^{-2} & \lambda & h^{-2} \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & h^{-2} & 0 & h^{-2} & \lambda & h^{-2} \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & h^{-2} & 0 & h^{-2} & \lambda & h^{-2} \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & h^{-2} & 0 & h^{-2} & \lambda & h^{-2} \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & h^{-2} & 0 & h^{-2} & \lambda & h^{-2} \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & h^{-2} & 0 & h^{-2} & \lambda & h^{-2} \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & h^{-2} & 0 & h^{-2} & \lambda & h^{-2} \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & h^{-2} & 0 & h^{-2} & \lambda & h^{-2} \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & h^{-2} & 0 & h^{-2} & \lambda & h^{-2} \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & h^{-2} & 0 & h^{-2} & \lambda & h^{-2} \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & h^{-2} & 0 & h^{-2} & \lambda & h^{-2} \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & h^{-2} & 0 & h^{-2} & \lambda & h^{-2} \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & h^{-2} & 0 & h^{-2} & \lambda & h^{-2} \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & h^{-2} & 0 & h^{-2} & \lambda & h^{-2} \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & h^{-2} & 0 & h^{-2} & \lambda & h^{-2} \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & h^{-2} & 0 & h^{-2} & \lambda & h^{-2} \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & h^{-2} & 0 & h^{-2} & \lambda & h^{-2} \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & h^{-2} & 0 & h^{-2} & \lambda & h^{-2} \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & h^{-2} & 0 & h^{-2} & \lambda & h^{-2} \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & h^{-2} & 0 & h^{-2} & \lambda & h^{-2} \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & h^{-2} & 0 & h^{-2} & \lambda & h^{-2} \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & h^{-2} & 0 & h^{-2} & \lambda & h^{-2} \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & h^{-2} & 0 & h^{-2} & \lambda & h^{-2} \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & h^{-2} & 0 & h^{-2} & \lambda & h^{-2} \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & h^{-2} & 0 & h^{-2} &$$

1.5 Coupled Simulation (連成シミュレー ション)の重要性

- 現実の理学, 工学, 社会学の現象はひとつのモ デルで表現できるほど簡単ではない.
- 現象を理解(説明,予測)するために全体のシ ステムを部分に分割して考えてみる手法がある.
- 全体が複雑に絡み合っている様に見える現象の中にも、部分要素間の相互作用(Couplings)が本質的であるとみなせる場合がある.

連成シミュレーションとは

シミュレーション対象の全体を「複数の部分系に分割」し、部分系の計算途中でお互いのデータを交換しながら全体を解く手法.

部分系Aを解く手法 ⇔ 部分系Bを解く手法

(例)分子軌道計算/分子動力学計算 構造力学計算/分子動力学計算 流体計算/構造力学計算 統計力学計算/分子軌道計算····etc

データ交換の頻度とデータ量は、部分系間の依存度、結合の強さにより、 弱連成・・強連成と区別することがある.
連成シミュレーションの例(1/2)

- 空間,時間的に局所的な相互作用 (Couplings)でモデル化できる場合に有効
 (例)2つの部分系が「面」で接している 構造物とまわりの風(流体)など
 演算量と情報交換量の関係も分散計算向き
- 全体は近似モデルを適用するが、「重要な部分は厳密に解く」(複合シミュレーション)

(例) 合金の変形, 亀裂生成

>

⇒ 構造力学+分子動力学

Tacoma(タコマ)橋の崩壊

 Washington state, On November 7 of 1940, at approximately 11:00 AM, the Tacoma Narrows suspension-bridge collapsed due to wind-induced vibrations.

橋のねじれ(固有)振動 ~ 風による振動



単ーモデルの適応範囲を超えた?

 When the twisting motion was at the maximum, elevation of the sidewalk at the right was 28 feet (8.5m) higher than the sidewalk at the left (It had not been

expected).



共鳴・共振



http://cee.carleton.ca/Exhibits/Tacoma_Narrows/index.html

連成シミュレーションの例(2/2)

 空間時間スケールの異なる現象を(多く は・むりやり)結びつける.
 Multi-Scale Multi-Physics Simulations

保存量や系の対象性を考慮した物理量の
 「意味変換」が必要な場合が多い。

(例) 多粒子の平均運動⇔圧力

- (例) 粒子座標⇔メッシュ(格子点)
- (例)疎視化動力学

我々の研究室ではMediatorというグリッド環境向けの 連成ライブラリを日立製作所と一緒に作っている

グリッド連成ミドルウェア(Mediator)は高度セマンティック変換 をサポートすることによって、指定された相関関係にある離散点 上の物理量を交換する



マルチスケール生体シミュレーション

夢のような話・・・?



連成計算の注意点

- いつでも「部分と全体」に分割できるわけではない・・
- 初期値敏感,非線形系のカオス
 同ーモデルでも,初期条件によって,どこでいつCouplingが強くなり系の振る舞いに大きく影響するか予測が困難.
- 決定論モデル(力学など)だけでは取り扱えない場合もある ⇒確率統計モデル

決定論モデル:時間を遡ったり進めたりできる. 確率モデル:未来のことは確率的にしかわからない.

バタフライ・エフィクト



「君を救う為、僕は何度でも過去に帰る」

http://www.butterflyeffect.jp/



1.6 連成ライブラリMediator

For Multi-Scale and Multi-Physics Simulations

A new grid middleware is developed which allows various kinds of Nano-application softwares to be coupled efficiently for solving multi-scale problems.

Mediator tool											
	MPI Core										
	RPIM Interface					Latency-aware Communication					re on
					Vendor MPI	-	Topology				
		2 12	SCore	GRAM		Request Interface					
	S					Request Layer					
	sh	Š				P2P Interface					
						IMPI	TCP/IP	PMv2	MX	02G	vendor MPI



Mediator: Grid middleware for Coupled Simulations

The mediators provide high-level transparency in data communication between different discretization methods associated with a model specific spatial and temporal scale based on our physical requirements.





Discretization methods

Particle method, Finite difference method, Finite element method

Parallel programming style

SPMD or MPMD in static or dynamic invoke

High-level semantic transformation

In-sphere, In-rectangle, 1st nearest neighbors, **Nearest points**

Communication paradigm

One-way, Variable, two-way communication

Interconnection

MPICH-G2, MPICH, GridMPI(developed by WP2-NAREGI)

Hardware architecture

Linux clusters, AIX, Solaris, etc.

2. 具体例 溶媒と淡白質 Mediator assisted Molecular dynamics(MD) and Poisson-Boltzmann(PB) coupled simulation(1)



Mediator assisted Molecular dynamics(MD) and Poisson-Boltzmann(PB) coupled simulation(2)



 $\Delta pKa = \Delta G_{p \rightarrow u}(\text{protein}) / 2.303 \text{ k}_{B}T - pKa(Glu) (=4.4)$

pKa value(\sim 6) at COOH in Glu35 \rightarrow roughly 50 times larger probability compared with amino sites around







$$F_{\mu\nu}^{I} \leftarrow \sum_{\gamma} \rho q_{\gamma} h_{\gamma}(\mathbf{r}_{g}) \left\langle \mu \left| \frac{1}{\left| \mathbf{r}' - \mathbf{r}_{g} \right|} \right| \nu \right\rangle \quad (\mu, \nu \in I)$$



reduce 1-e integral calculations for

environmental potential part by solvent

data data data data RISM \longleftrightarrow Mediator \longleftrightarrow Mediator \longleftrightarrow FMO

Data Exchanges in RISM-FMO

(Solvent distribution and Charge)



Electronic structure of Nano-scale solute immersed in solvent

Summary of Coupled simulation model

Coupled simulation	RISM-FMO	MD-PB			
Discretization method	FDM / Irregular point	Particle / FDM			
Physical quantities to be transformed	Solvent charge density to charge on solvent atoms	Dielectric distribution, Charge on atoms to charge density			
Correlation specification	In-rectangular	In-sphere			
Transformation function	Weighted function conserving charge	Weighted function equalizing electric field			
Programming style	Sequential / Master-Worker	Master-Worker / Sequential			
Communication paradigm	Two-way iterative communication	One-way, Variable communication			
Interconnection	GridMPI, MPICH-G2, GridFTP, MPICH, Score	MPICH, MPI2, Stampi			
Server machines	Hitachi SR8000, AIX, Linux, Alpha clusters	Hitachi SR8000, SR2201, DEC, Sun clusters			

Solvent interactions of hydrolysis in Lysozyme

A catalytic mechanism of hydrolysis in Lysozyme is Analyzed by RISM-FMO, in which proton transfer leads to bacteriolysis in peptidoglycan of bacterial cell wall.



Electronic structure analysis on Proton transfer in Lysozyme (in solution)

proto hn **RISM-F** picture

Comparison between Mulliken Charge and RESP Charge(AMBER) in Solute



Mulliken charge in solute



連成計算と非連成計算の違い

Grid Environment for demonstration purpose

NII Resources



Demonstration of RISM-FMO coupled Sim.

(1) NAREGI Workflow by WP3



(2) Execution



(3) Visualization via AVS





3.1 Distributed FMO calculations based on NAREGI WorkFlow Tool

- 3.2 Full Geometry Optimizations by RISM-FMO-TINKER
- 3.3 Grid DataBase Tool for Electronic Structure and Geometry of Protein

Grid enabling of the GAMESS FMO prog.



NAREGI WorkFlow in loosely-coupled FMO



Protein Molecules examined by Loosely coupled FMO on Computational Grid



Workflow based Grid FMO Simulations of protein



Fragment Electron Density in Grid FMO



Fragment Electron Density in Grid FMO



Full Geometry Optimization of Protein in water 3D-RISM/FMO with loosely coupled TINKER



(1) Met-enkephalin (1PLW)

The amino-acid sequence is 'TYR–GLY–GL' PHE–MET'. We start the optimization procec from the Model 1 of PDB data "1plw".





Force on Each Atom (Inverse of the Free Energy Gradient)



Fig.2 The left figure shows the structure and the force vectors before the optimization. The right is after the optimization by TINKER/RISM-FMO optimizer. The red arrows represent quantum mechanical force vectors given by FMO coupled to 3D-RISM, and the blue ones represent the gradients of solvation free energy calculated from the output of RISM.





Fig.3 Solvent charge distribution is compared between results of classical 3D-RISM calculation (the left figure) and 3D-RISM/FMO coupled simulation (the right figure).



This is called the smallest protein with only 10 amino acids, the sequence of which is

GLY-TYR-ASP-PRO-GLU-THR-GLY-THR-TRP-GLY

The structure is the model 1 in pdb data '1uao'.








Fig.5 The left figure shows the structure and the force vectors before the optimization. The right is after the optimization by TINKER/RISM-FMO optimizer. The red arrows represent quantum mechanical force vectors given by FMO coupled to 3D-RISM, and the blue ones represent the gradients of solvation free energy calculated from the output of RISM.

Solvent Distribution by 3D-RISM/FMO coupled simulation



Fig.6 Solvent charge distribution by 3D-RISM/FMO coupled simulation is compared between results for the original structure (the left figure) and the modified structure after 20 iterations (the right figure). Almost no difference can be seen between these two molecular structure, while the difference in solvent distribution can be found.



- タスクフロー
 - 逐次型, 並列型
- データフロー
 - 一方向, 双方向
- データ変換(含:意味変換)
 - 一意的変換, 一意でない「同意的」変換

■ その他

■ 常駐型, 非常駐型タスク







(高見,大庭)者によるGrid計算の実演デモを 予定しています.場所はここ.

> Unicore+Naregi上位層 Globus(ver.3.2)