

富士通の バイオインフォマティクスへの取り組み

March 5, 2002

富士通株式会社
計算科学技術センター)奥田
m.okuda@jp.fujitsu.com

Contents

- 富士通のバイオインフォマティクへの取り組み
 - 歴史・実績
 - バイオインフォマティク向けソリューション体系
- 代表的なソリューションのご紹介
 - *Post Genome Platform*
 - アプリケーションPKG
- まとめ

化学&バイオ分野への取り組みの歴史

アプリケーションPKG

- 1983年 化学情報管理システム(米国MDL社製**MACCS**)
- 1986年 分子モデリングシステム(呉羽化学工業共同開発**ANCHOR**)
構造活性相関研究支援システム(**ADAPT**)
- 1991年 バイオ研究支援統合システム(**BIORESEARCH Series**)
- 1993年 半経験的分子軌道法アプリ(**MOPAC**)
- 1996年 HTSデータ管理システム(英国OMG社製**RS³ HTS**)
- 1997年 代謝マップDBシステム(**Biofrontier**)

トピックス

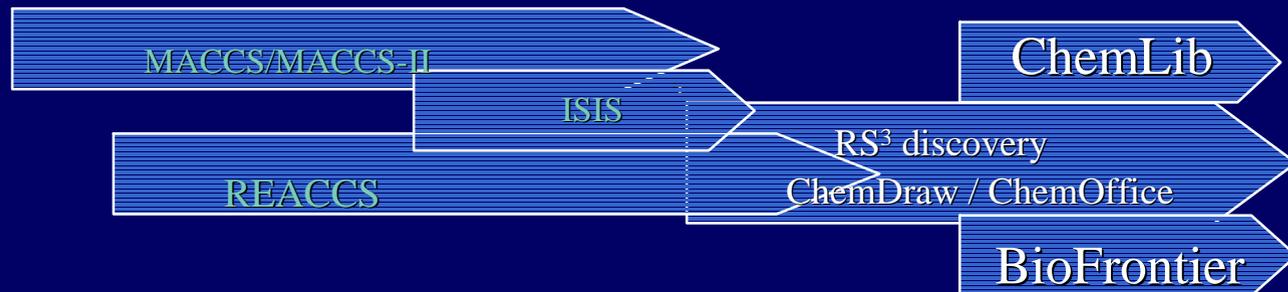
- 1986年 (株)**蛋白工学研究所** 出資参加
- 1991年 分子進化学解析システム(SINCA)を国立遺伝学研究所殿と共同研究開発
- 1998年 JBiC設立、**バイオECプロジェクト**に参加
- 2000年 **ライフサイエンス推進室**設立 **セレスター・レキシコ・サイエンシズ(株)**設立
- 2001年 富士通研究所ナノ&バイオ研究Grp.立ち上げ

2002年 *Bioinformatics* ソリューション 提供開始

富士通の計算化学PKGの歴史



CHEMICAL
INFORMATION
MANAGEMENT
SYSTEMS



MOLECULAR
MODELING



MOLECULAR ORBITAL

MOLECULAR DYNAMICS



LEAD EVOLUTION



CHEMICAL SPREADSHEET



アプリケーションパッケージ導入実績

Bioinformatics

110 システム

Cheminformatics

40 システム

Modeling・解析

200 システム

パソコンパッケージ (Modeling・Cheminformatics等)

国内 15,000 本以上

global 30,000 本以上

バイオ関連システム開発実績

プラットフォーム、アプリを含んだトータルなバイオ関連システムを数多く構築

Bioinformatics

30 社・機関

東京都老人医療センター-殿 老年病DNA多型DB

栄研化学(株)殿

LAMP法プライマ設計システム

明治製菓(株)殿

MEIBIS

(MEiji Integrated BioInformatics System)

等々

バイオ関連システム開発実績(例)

東京都老人医療センター 殿

明治製菓(株) 殿

長寿の秘けつ 遺伝子に聞け

都老人医療センター

配列の個人差比較 データ公開

来年度中に

日本の研究 高レベル

成果 一成果
ロで
テと
コレスな抑制

長寿の秘けつ、遺伝子に聞け。東京都老人医療センターが、長寿の秘けつを解明するために、長寿者の遺伝子を解析し、配列の個人差を比較した。その結果、長寿者の遺伝子には、特定の配列の個人差が顕著に現れていることが分かった。この配列の個人差は、長寿と関連していると考えられる。この研究成果は、来年度中にデータ公開される予定である。

東京都老人医療センターは、長寿者の遺伝子を解析し、配列の個人差を比較した。その結果、長寿者の遺伝子には、特定の配列の個人差が顕著に現れていることが分かった。この配列の個人差は、長寿と関連していると考えられる。この研究成果は、来年度中にデータ公開される予定である。

日本経済新聞 2001年 12月17日

感染症専門研を来春設立

まず細菌・真菌に照準

明治製菓

耐性菌ゲノム解析も本格化

感染症専門研究センターを来春設立する。まず細菌・真菌に照準を絞る。明治製菓は、感染症専門研究センターを来春設立する。このセンターは、細菌・真菌の耐性菌ゲノム解析を本格化する。また、感染症の予防と治療に貢献する研究を行う。このセンターの設立は、感染症の対策に大きく貢献するものと期待されている。

感染症専門研究センターは、細菌・真菌の耐性菌ゲノム解析を本格化する。また、感染症の予防と治療に貢献する研究を行う。このセンターの設立は、感染症の対策に大きく貢献するものと期待されている。

化学工業日報 2001年 11月19日

共同研究への参画

NEDO H.11年度「タンパク機能解析」
国立遺伝学研究所 五條堀先生

NEDO H.12年度「P450薬物代謝酵素DB」
九州大学 大村先生

H.12年度～「遺伝子多型情報に基づく疾患遺伝子探索」
徳島大学ゲノム機能研究センター 板倉先生

H.12年度～ JBiC「SNPs頻度解析センター」
東京大学医科学研究所 中村先生

等々

バイオ関連システム導入&サポート実績

岡崎国立共同研究機構殿：VPP5000/30

国立遺伝学研究所 (NIG) 殿:VPP5000/12,
PRIMEPOWER2000/128 × 2

科学技術振興事業団 (JST)殿：VPP300/16, PRIMEPOWER600/4

産総研 生物情報解析研究センター殿: PRIMERGY N400

理研ゲノム科学総合研究センター (GSC)殿：GP7000F-M2000/52

生物分子工学研究所(BERI) 殿：VX/4, PCクラスタ

等々

国立遺伝学研究所 殿 DDBJ システム

Homology Search Server(2set)



GP7000Sm1000 × 2set
 CPU:UltraSPARC-II (400MHz) × 64
 Main memory:64GB
 Disk: 500GB
 Backup instrument:TIMBERWOLF(350GB)

Super Computer



VPP5000 / 12PE

vector processor: 9.6GFLOPS × 12
 Main memory :176GB
 Disk :576GB

Large scale analysis server(2set)



PRIMEPOWER2000 × 2set

CPU:SPARC64-GP(450MHz) × 128
 Main memory: 128GB
 Disk: 5TB



ftp Server(2set)

GP7000Sm550 × 2set
 CPU:UltraSPARC II(400MHz) × 12
 Main memory: 12GB
 Disk: 2.3TB

Graphics server



SGI Onyx3000
 CPU:R12000(300MHz) × 8
 Main memory:4GB
 Disk: 500GB
 Backup equipment:
 TIMBERWOLF(350GB)

Bio simulation database server



SGI Onyx3000
 CPU:R12000(300MHz) × 8
 Main memory: 500GB
 Backup equipment:
 TIMBERWOLF (350GB)

Genome information server



GP7000Sm350
 CPU: UltraSPARC II (400MHz) × 6
 Main memory :6GB
 Disk:300GB
 Backup equipment:
 TIMBERWOLF (350GB)

Large volume backup management Server



GP7000Sm350
 CPU:UltraSPARCII(400MHz) × 1
 Main memory:1GB
 Disk:500GB
 Backup instrument :POWBERHORN (100TB)

Database server B



GP7000Sm350
 CPU:UltraSPARC II(400MHz) × 4
 Main Memory : 4GB
 Disk : 500GB

Genome analysis sever



DeCypher D40 - B15

Network server(4set)



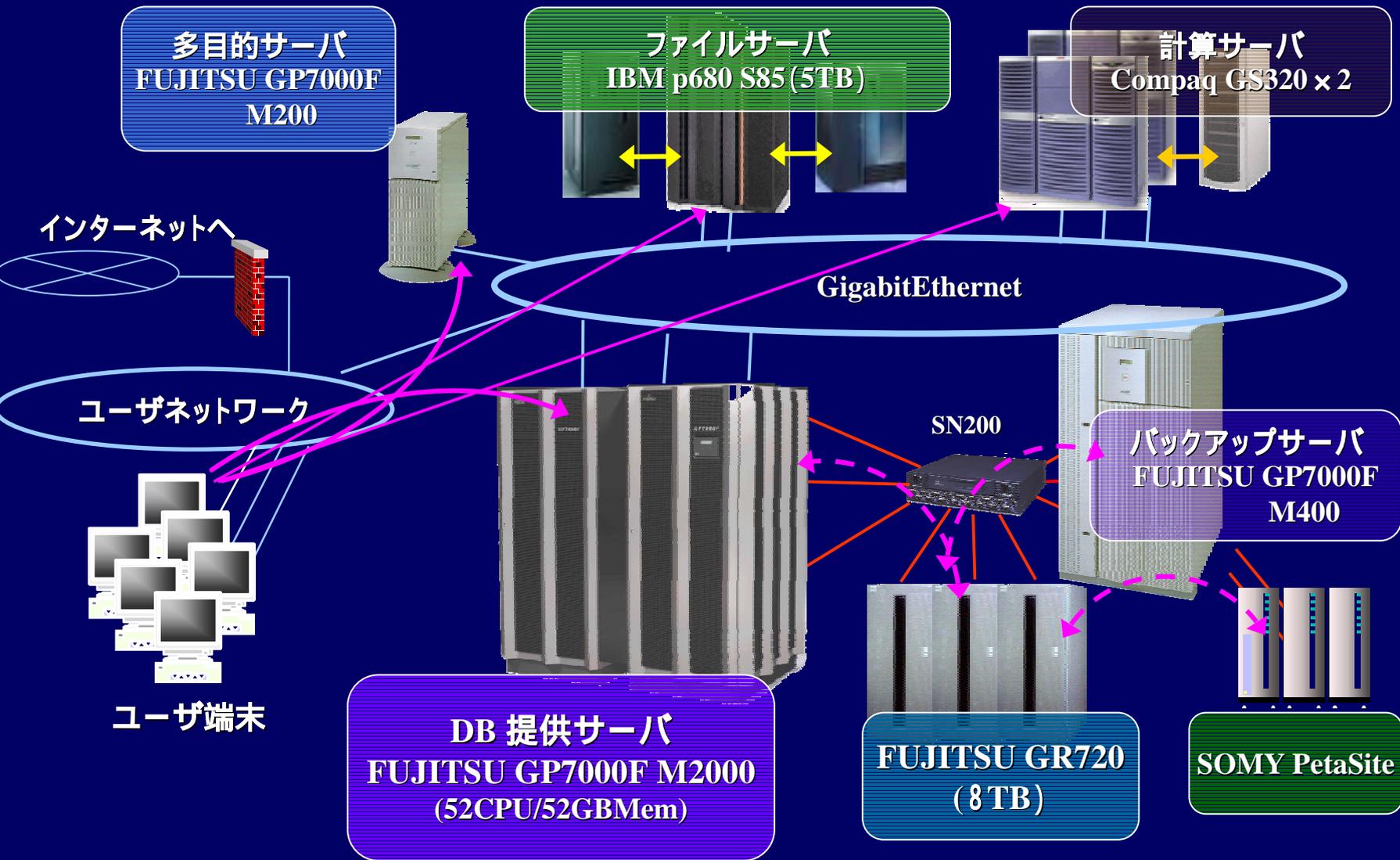
GP7000Sm350 × 4set
 CPU:UltraSPARC II(400MHz) × 2
 Main memory:1GB
 Disk: 150GB/500GB

SuperSINET

Internet



理研ゲノム科学総合研究センター-殿システム



Contents

- 富士通のバイオインフォマティクスの取り組み
 - 歴史・実績
 - バイオインフォマティクス向けソリューション体系
- 代表的なソリューションのご紹介
 - アプリケーションPKG
 - *Post Genome Platform*
- まとめ

バイオインフォマティクスの動向

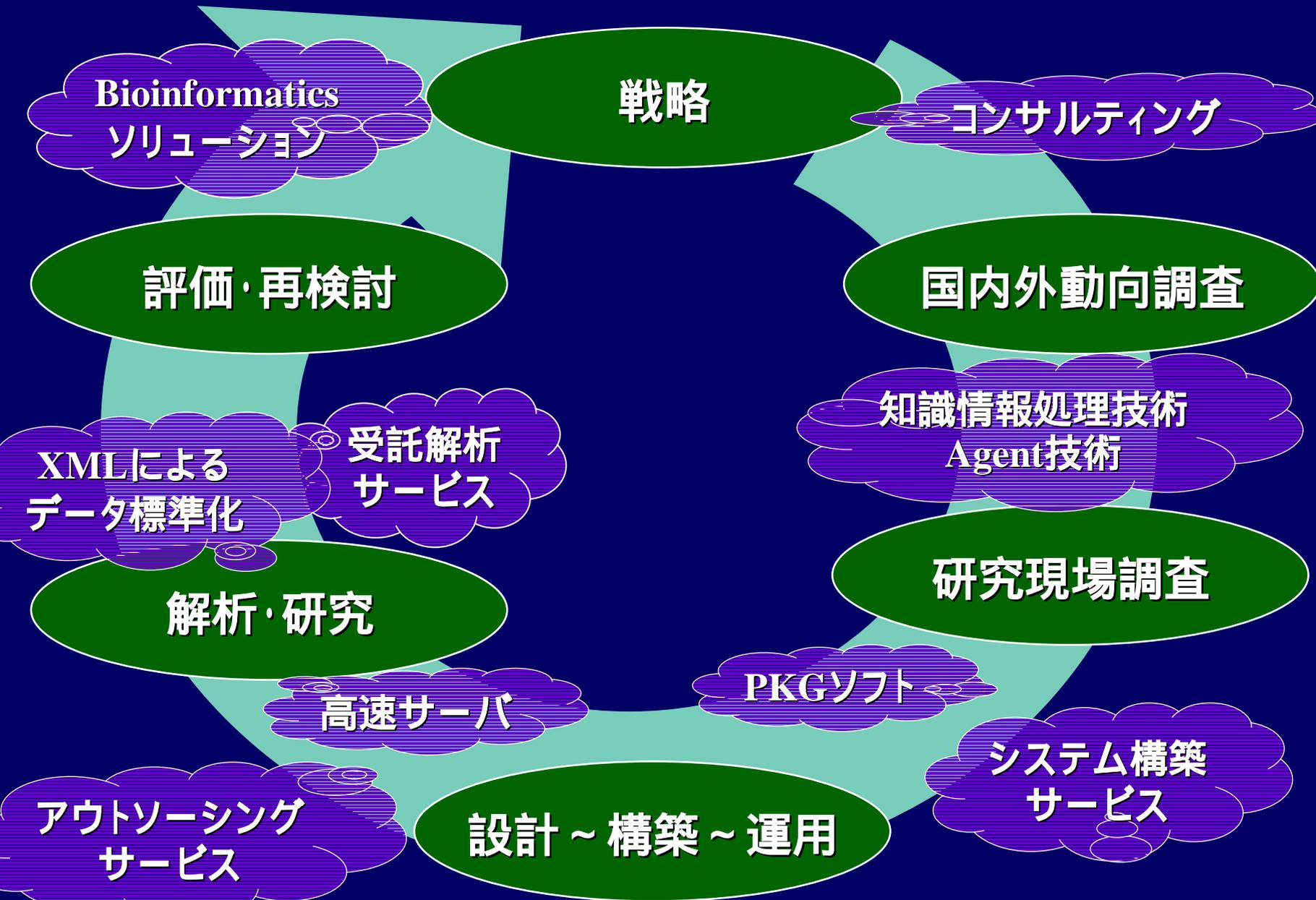


ゲノム創薬及び
研究情報管理/研究ワークフローの
設計～開発を戦略的にデザイン

バイオインフォマティクス現場の課題



ITベンダが提供できる解決策



富士通のノウハウを結集

分子軌道計算
分子動力学計算

QSAR

化学情報管理

毒性予測

遺伝子探索

代謝・活性予測

HTS

遺伝子
アノテーション

PRIMEPOWER
VPP5000

統計解析

情報検索

高速コンパイラ

インターネット

知識情報処理

エージェント

ベクトル/並列
チューニング

セキュリティ

富士通の
Bioinformatics
ソリューション

富士通のバイオインフォマティクス・ソリューション体系

Outsourcing

専門家リソースの活用

【システム運用】



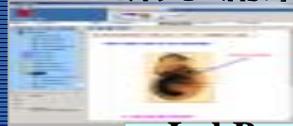
【受託解析・コンサルティング】



Web Solution

固有の研究ワー
のシステム化

バイオ研究・創薬研究のアプリケーションソフトを統合



LabBook



ChemOffice WebServer

Application

目的別専門
PKGの提供



Genomic XML Browser



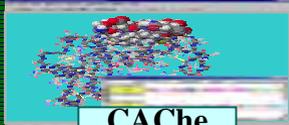
GeneDiscovery



BioFrontier



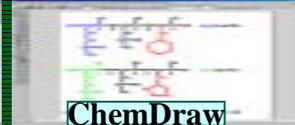
RS3 HTS



CAChe



WinMOPAC



ChemDraw



TOPKAT

Infrastructure

バイオに最適化された
インフラの提供

Post Genome Platform



研究所内システム



NetLaboratory

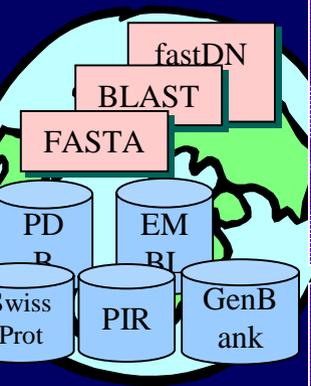


公開データベース

Contents

- 富士通のバイオインフォマティクスの取り組み
 - 歴史・体制
 - バイオインフォマティク向けソリューション体系
- 代表的なソリューションのご紹介
 - *Post Genome Platform*
 - ◆ コンセプト
 - ◆ ソフトウェア
 - ◆ ハードウェア
 - アプリケーションPKG
- まとめ

現場のインフラの課題を情報屋が解釈すると



公開データ、優れたプログラムが世界規模で散在、色々な形で存在し、さらに爆発的に増大して収集、更新、アクセスが大変。

- 大規模・広域分散データのアクセス&管理問題
- データ形式変換問題

大量のデータから自分の欲しい情報を早く、正確に取り出したい。

- 大規模データベースの管理&高速検索問題

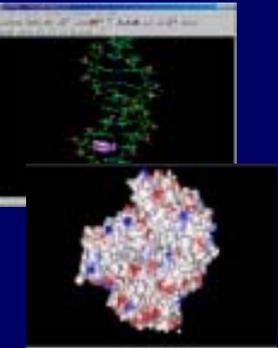
自分の研究のためには各種のデータ、プログラムを組み合わせ、連携した複雑な処理が必要

- 処理プロセス&情報フローの管理・制御問題

複雑なタンパク質の構造・挙動の解明、タンパク質と他の化合物の相互作用の解明を早く・精密に行いたい。

- 超高速の数値シミュレーション問題

解析シナリオ
Motif解析



問題解決に向けてのインフラソリューションの提案



遠隔地の各種資源

バイオ統合ブラウザ

*: 開発コード名

Post Genome Platform

ソフトウェアプラットフォーム

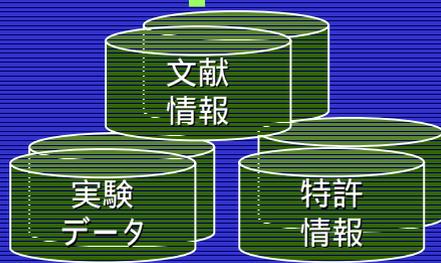
バイオインフォマティクス統合ソフトウェア **EIDOS***
(Webサービス連携、DB&プログラム I/F、ブラウザビュー統合等)。

GRID
I/F

超高速XML検索
超高速テキスト検索
BSMLコンバータ

最適化された共通ライブラリ

タンパク質解析MOPAC、相同性検索BLAST



ハードウェアプラットフォーム

超高速計算・大容量データ処理を実現

PCクラスタ

PRIMEPOWER

次期HPCサーバ

サービス

システム構築、アプリ最適化、システム利用&運用支援

Contents

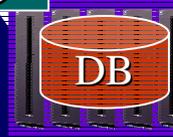
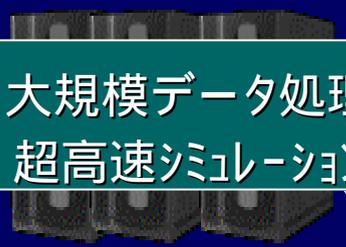
- 富士通のバイオインフォマティクスの取り組み
 - 歴史・体制
 - バイオインフォマティクス向けソリューション体系
- 代表的なソリューションのご紹介
 - *Post Genome Platform*
 - ◆ コンセプト
 - ◆ ハードウェア
 - ◆ ソフトウェア
 - アプリケーションPKG
- まとめ

バイオインフォマティクに最適なハードウェアプラットフォーム

大規模データ処理&超高速処理を実現するUNIXサーバ

- **PRIMEPOWER**による大規模&超高速DBハンドリング
 - 拡張性・信頼性に優れたSolarisサーバ
 - 高信頼・超高速ファイルシステム
- **次期HPCサーバ**による超高速シミュレーション
 - 世界最高性能、TBクラスメモリの次世代HPCサーバ

大規模データ処理
超高速シミュレーション



高速ディスク装置

効率的な専用処理を実現するPCクラスタ

- 幅広い製品レンジの**PRIMERGY PC クラスタ**
 - CPU : Pen3, Pen4, 1way ~ 4Way
 - インターコネク: Myrinet , GigabitEthernet
 - 並列環境 : Score, Beowolf型

大規模PCクラスタ



ホストサーバ

並列版専用アプリ
による効率的な
処理の実現

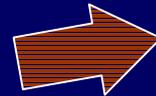
次期HPCサーバのご紹介

- ベクトルスパコンの技術と大規模スカラサーバの技術を融合したバイオインフォマティクスに最適な**次世代のHPCサーバ**を提供予定

VPP5000



- ベクトル技術
- 命令の先行制御技術
- 高速クロスバによる分散メモリ並列化技術
- 高性能コンパイラ



次期HPCサーバ

PRIMEPOWER

- 共有メモリ並列化技術
- メモリアクセス先行制御技術



次期HPCサーバのご紹介 - 特徴 -

- 超高速なバイオシミュレーションを実現する **世界最高速システム**

⇒ over 1GHz プロセッサ
1ノード : 500 Gflops以上、システム : 60 Tflops 以上

- バイオ特有な大規模計算 & 複雑かつ大規模な検索を実現する **世界最大規模のメモリ容量**

⇒ 1ノード : 0.5TB
システム : 64TB

- 大規模なバイオデータ処理を実現する **世界最大規模のスケールビリティ**

⇒ 1ノード : 128CPU、システム : 16,000 cpu以上
ノード間高速光コネク

- 大規模システムの導入を可能とした運用・設置性

⇒ メインフレーム並の **高信頼性**
高密度実装、省電力設計

Contents

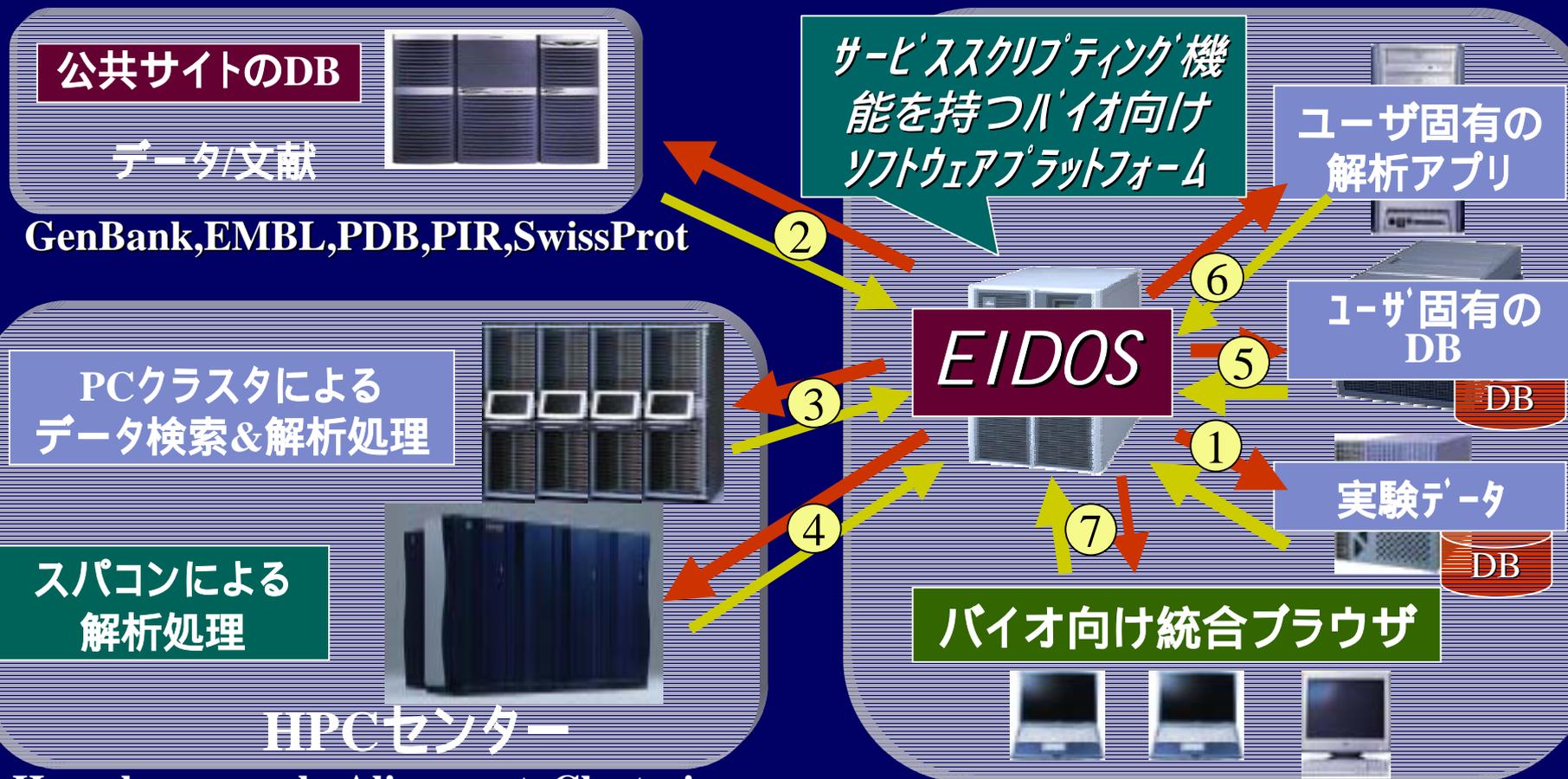
- 富士通のバイオインフォマティクスの取り組み
 - 歴史・体制
 - バイオインフォマティクス向けソリューション体系
- 代表的なソリューションのご紹介
 - *Post Genome Platform*
 - ◆ コンセプト
 - ◆ ハードウェア
 - ◆ ソフトウェア
 - アプリケーションPKG
- まとめ

ソフトウェアプラットフォーム EIDOS*

*: 開発コード名

巨大で複雑な情報からの知識発見を加速

著名なパブリックサイトの 資源・研究所内の遠隔資源・ユーザの資源を連携させたオリジナルワークフローを実現するソフトプラットフォーム!



HPCセンター

Homology search, Alignment, Clustering,...

EIDOS のWebサービス連携動作イメージ

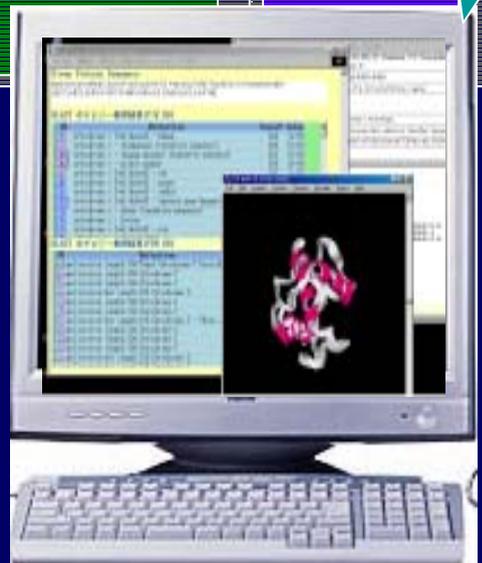
ID: X3626 XX解析

ID: X3626 XX解析

ゲノム情報

解析結果

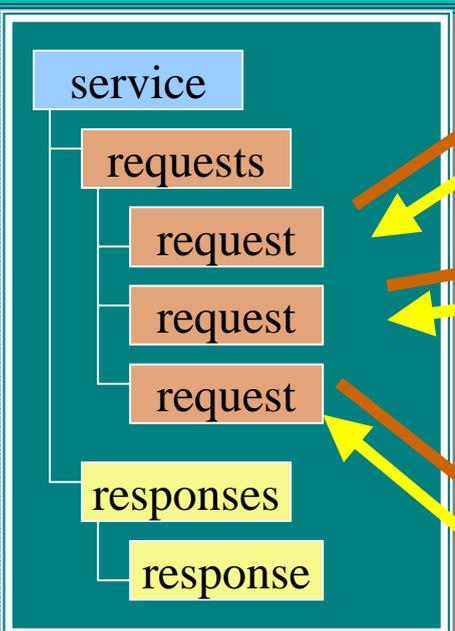
関連文書一覧



http
リクエスト

UDSによるサービスの定義
(User Defined Service Script)

ブラウザビュー統合



バイオDB I/F

バイオアプリ I/F

http



ゲノムDBサーバ

Servlet



文献DBサーバ

SOAP



XML XX解析サーバ

レスポンス

EIDOSの機能

バイオインフォマティクスに必要とされる各種プロセス(データハンドリング、解析処理、表示処理)を簡単なUIで実現。

➡ 研究者のコンピュータ利用の負担を大幅に削減し、効率的かつ高度なデータ処理を実現。

●Webサービス連携

- タグ形式の簡易サービス定義(UDS)
- 複数サービス実行の自動スケジューリング
- 大容量データ交換(ストリーム通信)
- ロングジョブ対応(バックグラウンド化)

●ブラウザビュー統合

- 複数サービスの結果をブラウザ上に統合

●各種バイオデータ&プログラム向けインターフェイス

- 代表的なバイオDB、プログラム向けI/Fによりシステム構築作業を軽減

●研究開発支援サービス

- ユーザ様のバイオインフォマティクスシステム構築を支援

EIDOSの各種インターフェイスとサービス

- ゲノムDBインターフェイス
GenBank, DDBJ, EMBL
 - 蛋白質DBインターフェイス
PDB, PIR, SWISS-PROT
 - バイオ関連プログラムインターフェイス
ホモロジーサーチ : BLAST, FASTA
マルチプルアライメント : ClustalW
 - DBインターフェイス
Oracle : RDBMS
BizSearch : **超高速XML検索**
瞬索 : テキスト検索
 - 標準プログラムインターフェイス
SOAP, Bean, XSLT, JavaMail
- 研究開発支援サービス
 - EIDOS 導入支援
 - EIDOSを利用したユーザ様システム構築支援

EIDOSの適用例 蛋白質群のモチーフ発見

SODHO PAT. 国立遺伝学研究所, 富士通株

公共サイト



タンパクDB
文献検索



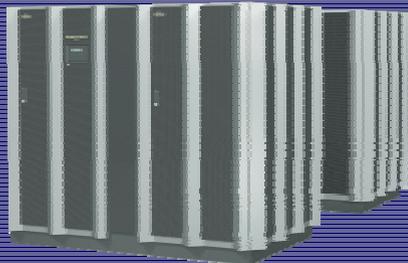
WEB server
with **EIDOS**



PC上での
モチーフ探索



PCクラスタによる
ホモジークラスタリング



大規模サーバによる
マルチプルアライメント

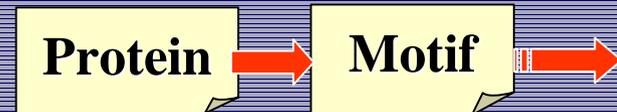
HPCセンター



browser on
notebook PC



browser on
desktop PC



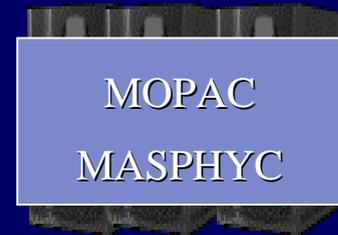
on site

Post Genome Platformの共通ライブラリ

ハードウェアプラットフォームに最適された解析ソフトウェア

- 次期HPCサーバに**高速化・並列化**された解析ソフトウェアを提供
 - 半経験的分子軌道法アプリ**MOPAC2002**によるタンパク解析
 - 分子動力学法アプリ**MASPHYC**によるタンパク解析
- PCクラスタに**高速化・並列化**されたソフトウェアを提供
 - **BLAST**

次期HPCサーバ



大規模PCクラスタ



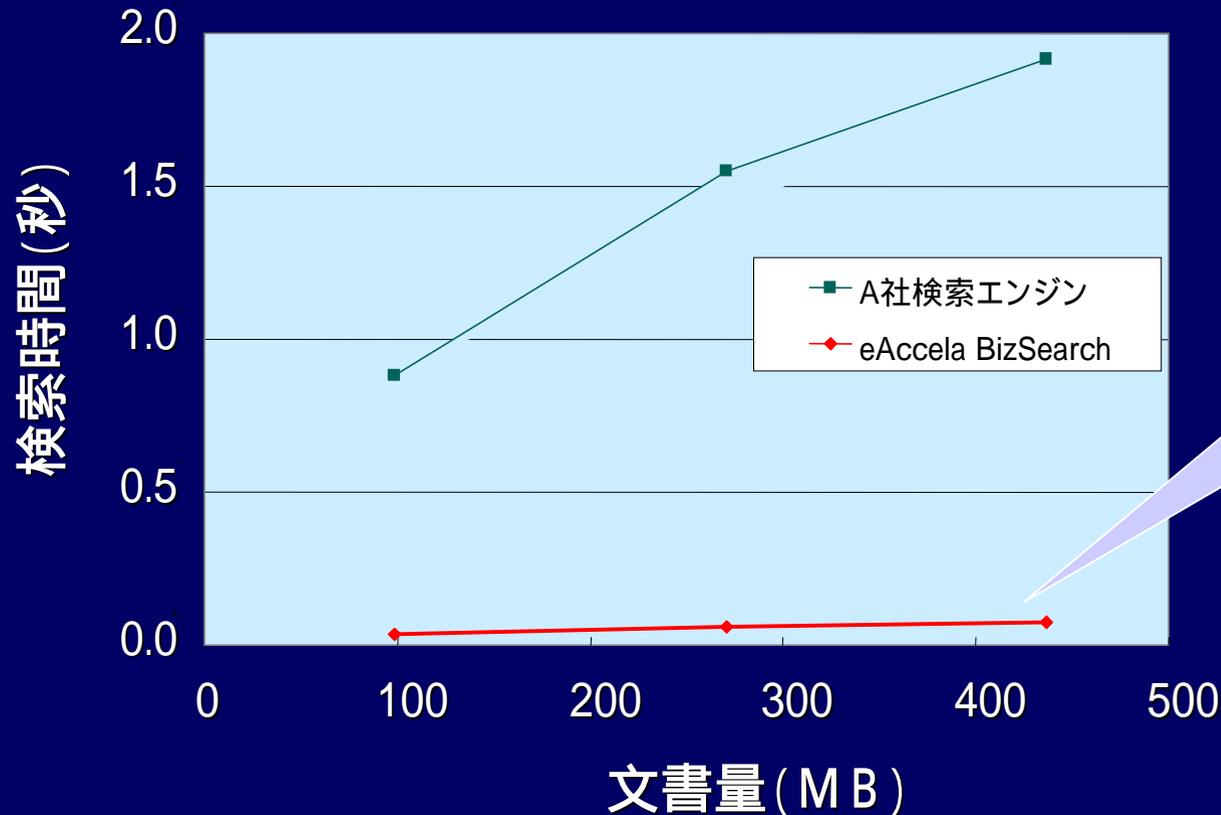
並列版BLASTによる
遺伝子解析

大規模データ処理を実現する検索システム

- 超高速テキスト検索エンジン & XML検索エンジン
 - **BizSearch** (富士通研究所が開発、アクセラテクノロジー(株)が製品化した世界最高速レベルのテキスト検索エンジン+XML検索エンジン)

世界トップクラスの超高速検索

文章検索性能



- 同時に多数の利用者にサービスできる超高性能設計
- 公開サイト、イントラネットなどのネットサービス仕様

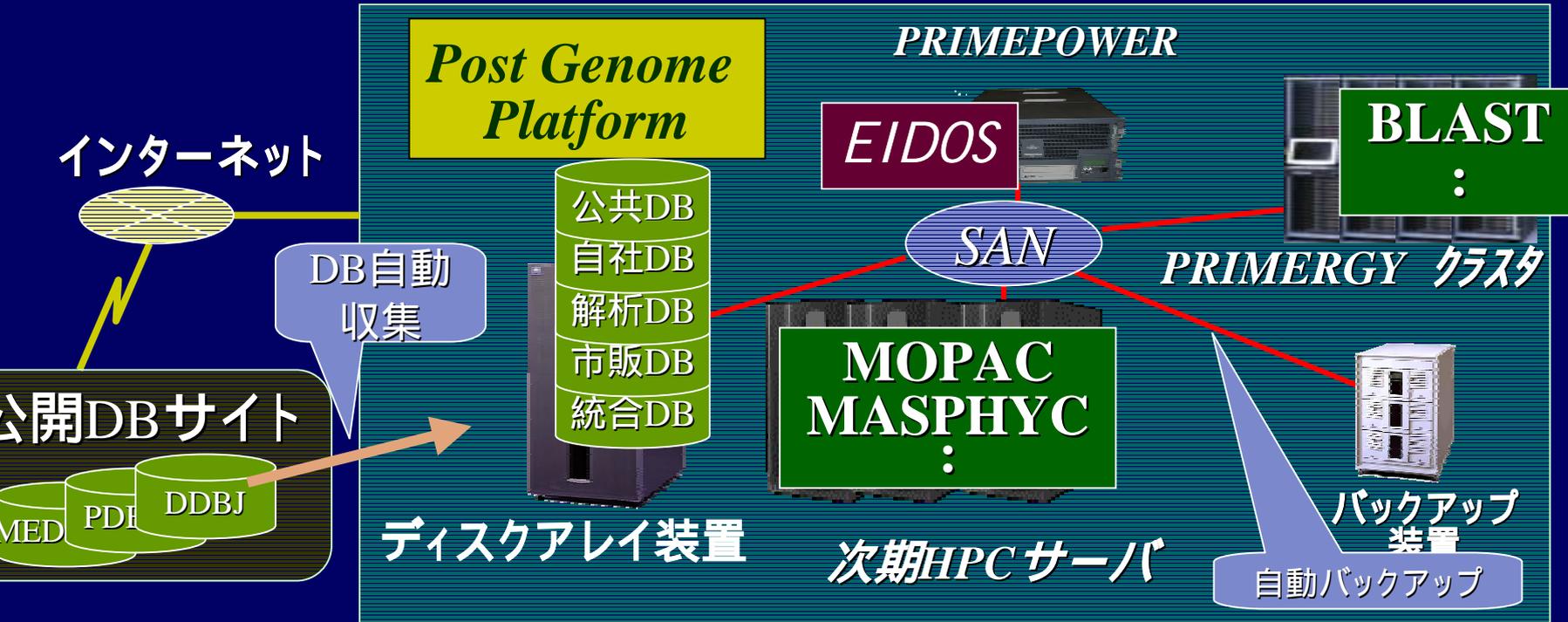
BizSearch によるXMLドキュメント検索の実現

- XMLの強みを活かした多彩な検索機能
 - 全文検索
 - タグ毎の検索
 - タグによる制約条件の設定
- XMLドキュメントをBizSearchレポジトリに格納するため、XML専用のデータベースは不要
- XML-DBやXMLマニュアルなどの高速検索が可能。バイオ分野で利用が拡大するXMLに最適な検索エンジン。

```
<?xml version="1.0" encoding="UTF-8"?>
<!-- これはコメントです -->
<root>
  <data id="id1">
    <!-- これはdata1です -->
    <aaa>3 8 2 4</aaa>
    <bbb>これは<keyword>&quot;キーワード&quot;</keyword>です。</bbb>
    <xxx attr="属性1">データX1</xxx>
    <xxx attr="属性2">データX2</xxx>
    <xxx attr="属性3">データX3</xxx>
  </data>
  <data id="id2">
    <!-- これはdata2です -->
  </data>
</root>
```



Post Genome PlatformによるバイオHPCセンターの実現



• システムの特長

- 複数DBへの容易なアクセス, データ解析プロセスの自動化
- 大規模タンパク質解析計算の超高速処理
(最適化・並列化されたアプリ + 大規模サーバ)
- 遺伝子機能解析の高スループット処理(PCクラスタ)
- 大容量データの高速度処理(高速・高信頼ファイルシステム)

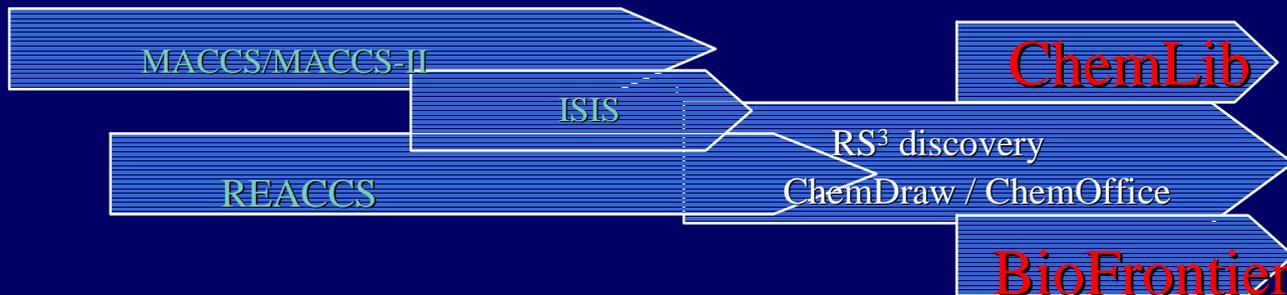
Contents

- 富士通のバイオインフォマティクスの取り組み
 - 歴史・体制
 - バイオインフォマティク向けソリューション体系
- 代表的なソリューションのご紹介
 - *Post Genome Platform*
 - アプリケーションPKG
 - ◆ *Biofrontier* と Chemlib
 - ◆ MOPAC2002の適用例とチューニング事例
- まとめ

富士通の計算化学PKGの歴史



CHEMICAL
INFORMATION
MANAGEMENT
SYSTEMS



MOLECULAR
MODELING



MOLECULAR ORBITAL

MOLECULAR DYNAMICS



LEAD EVOLUTION



CHEMICAL SPREADSHEET



Biofrontierとは

- 生体内で物質がどのような反応により作られ、どのような反応により分解されるか(代謝マップ)をデータベース化したもの
- 冊子媒体では不可能な、構造式や反応式をキーとして必要な情報へアクセスすることを、可能としたのが特長

Biofrontier 機能概要

代謝経路情報
約5,500反応

酵素阻害剤情報
約8,300阻害剤

酵素情報
約1,300酵素

分子の特性検索

分子の部分構造検索

反応式検索

基質・生成物部分構造検索

反応式部分構造検索

最短経路・代償性経路検索

名称検索

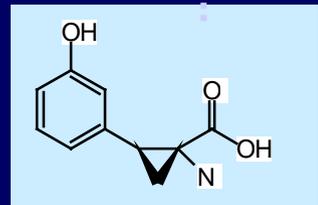
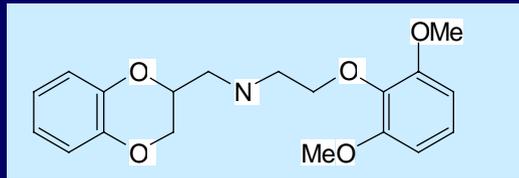
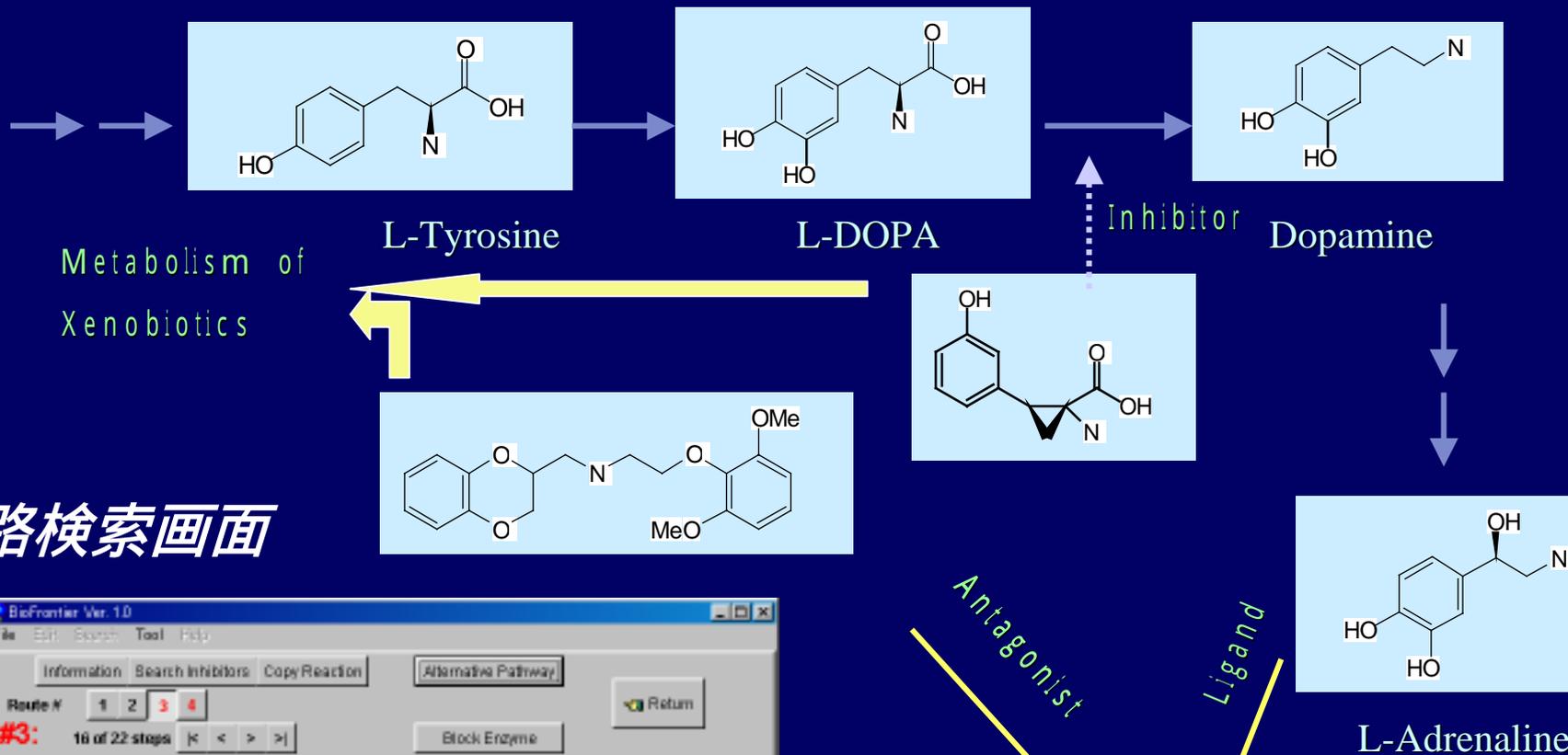
経路範囲検索

阻害剤検索

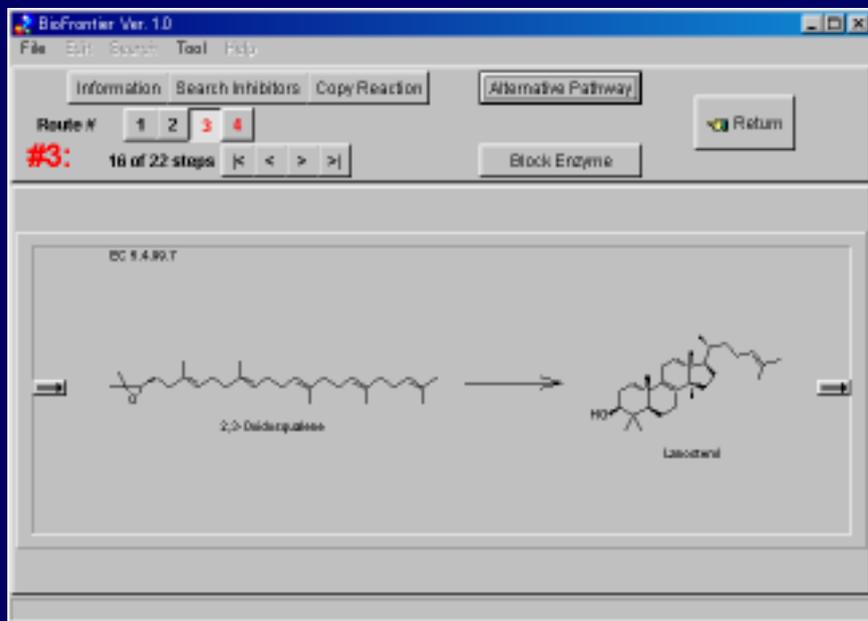
カテゴリー別表示

分子モデリング

BioFrontierと生体内ネットワーク



経路検索画面



Chemlib (*Chemistry library*)とは

「化学情報処理に必要な機能をモジュール化」

- コンピュータによる、種々の化学情報(構造や反応)処理を、処理毎にサブルーチン化したプログラムライブラリー
- 化学分野のシステムを構築する際、部品として利用できるのが特長

- 統一された相互インターフェース
- FORTRANソースコード
- 多OS (Windows, UNIX, 汎用機)
- 異種言語 (FORTRAN, C, VB) 環境で利用可能
- Chemlibにより高速検索可能な化合物DBを構築可能
 - ~ 百万化合物に対して30 ~ 40秒

Chemlibの主な機能

(1) 誘導体の作成

- 原子、結合、原子団、分子の付加、削除、種類の変更
- Conformationの変更 etc.

(2) 構造の認識

- 芳香環系の抽出、あるいは芳香環系に局在化結合を楔型結合のup / downからR / S配置を求める、あるいはその逆 etc.

(3) 2D、3D相互変換

(4) conformation energy relax

(5) 結合表のみから2D図の発生

(6) 正準化(unique)番号の生成

(7) 構造のunique文字列による表現

(8) 部分構造の検出

(9) 反応中心の自動認識

(10) Z-matrixの作成、Z-matrixから座標と結合表

⋮
etc.

Contents

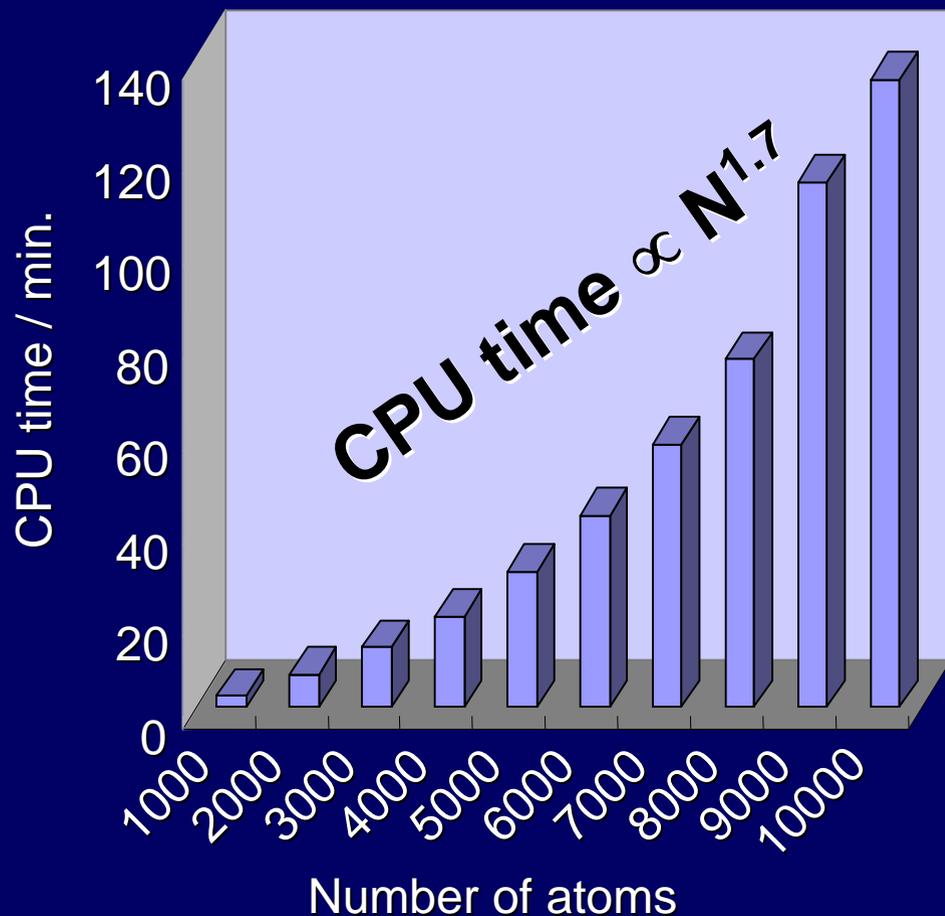
- 富士通のバイオインフォマティクスの取り組み
 - 歴史・体制
 - バイオインフォマティクス向けソリューション体系
- 代表的なソリューションのご紹介
 - *Post Genome Platform*
 - アプリケーションPKG
 - ◆ *Biofrontier* と Chemlib
 - ◆ MOPAC2002の適用例とチューニング事例
- まとめ

分子軌道法パッケージ MOPAC2002

- MOPAC2002は、世界で最も広く使われている**半経験的分子軌道法パッケージ**。
- 半経験的分子軌道法の特徴である計算速度の速さを活かし、タンパク質・核酸などの**巨大分子系への適用**が可能。
- タンパク質・核酸の電子状態、タンパク質中の個々の残基が持つ電荷、タンパク質-リガンド相互作用エネルギー値の評価などが可能であり、バイオケミカル分野における様々な応用が考えられる。
- さらに富士通プラットフォーム向けに**最適化、並列化**を行い高速な処理を実現。

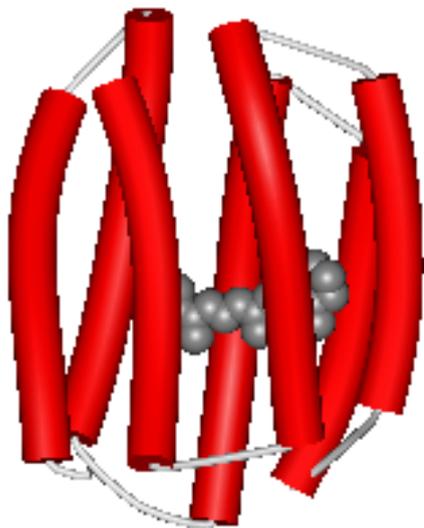
MOPAC2002の特徴 - MOZYME法-

- 原子数が数千～1万の大規模な分子系でも計算時間の増加を抑えることができる高速な計算手法。
- タンパク質などの巨大分子系の計算でも実用的な計算時間で解析可能。



ポリアラニンの一点計算

全原子を考慮したバクテリオロドプシンの分子軌道計算



全原子を考慮したバクテリオロドプシンの分子軌道計算により、レチナルポケットの静電ポテンシャル解析およびそのポテンシャル場での吸収波長の評価を行った。

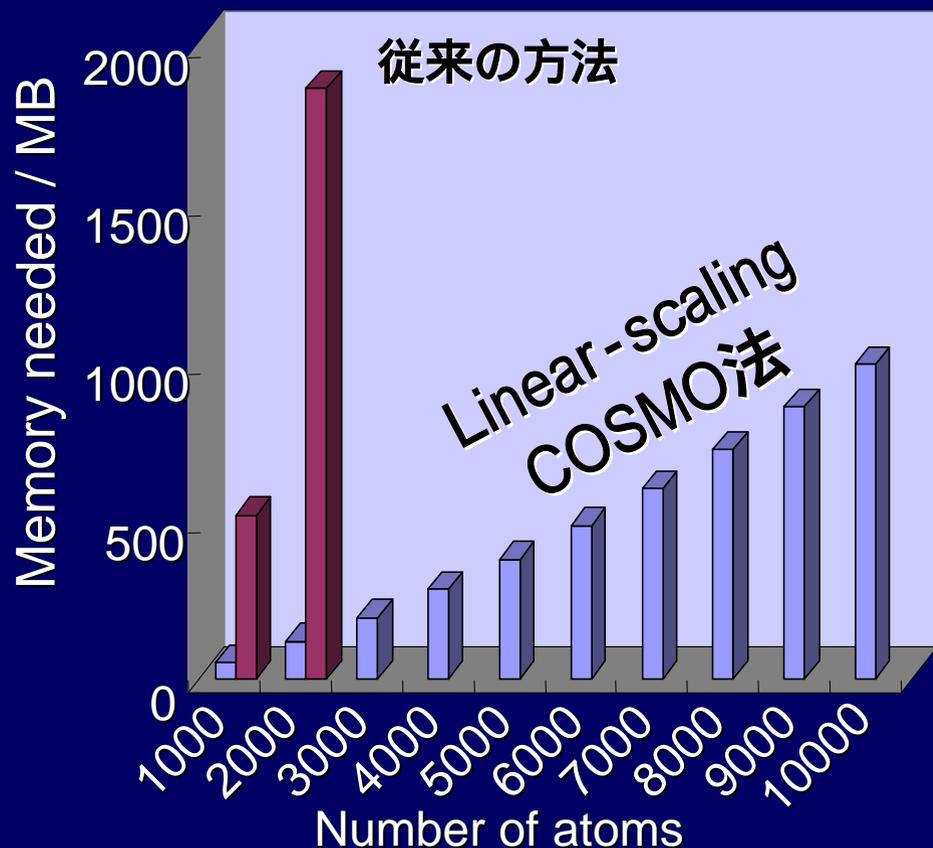
Chemical Physics Letters
294(1998) 162-166

bacteriorhodopsin

MOPAC2002を用いることにより原子数3,686であるバクテリオロドプシンの全電子計算を実行することが可能になった。

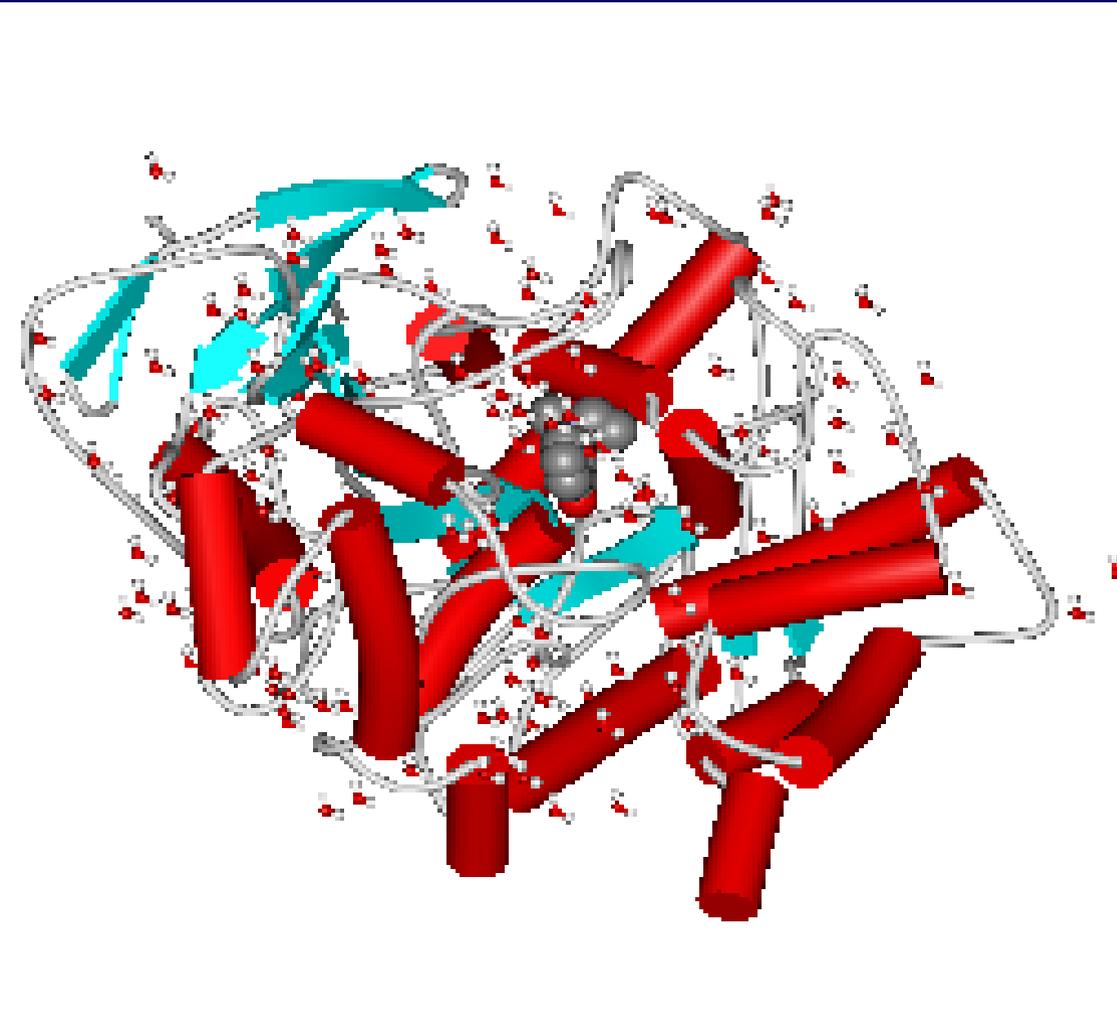
MOPAC2002の特徴 - Linear-scaling COSMO法 -

- 従来のCOSMO法に比べ、メモリの使用量を、10分の1以下と大幅に削減。
- タンパク質の機能に重要な溶媒効果を含めた分子軌道計算が可能に。



溶媒効果を含めたポリアラニンの
一点計算

溶媒との相互作用の解析例



ACETYLCHOLINESTERASE COMPLEXED WITH EDROPHONIUM

- 極性分子
- 蛋白質のフォールディングに果たす疎水性の役割の解析
- 水と蛋白質等の極性部位との相互作用に関する解析

MOPAC2002のチューニングによる性能向上

- MPI並列からOpenMP並列へ変更

最大63%
性能UP

MPI
メッセージパッシングモデル データ空間と処理を分割
分散メモリ型 並列計算機向き



OpenMP
データパラレルモデル データ空間共有・処理を並列化
共有メモリ型 並列計算機向き

- コンパイラオプションによる富士通製SPARC向け最適化
M&A命令生成, プリフェッチ, 命令スケジューリング改善, 等

23%
性能UP

- ラージページ機能の利用によるTLBミス削減

7%性能UP

MPI並列からOpenMP並列への変更例

MPI並列

[配列pの初期化处理]

```
do i = ...
  if (Mod(i, nnodes) == myid) then
    do j = ...
      do k = ...
        l = loc(i, j, k)
        p(l) = p(l) + f(i, j)
      end do
    end do
  end if
end do
```

全プロセス数
自プロセス番号

配列pをpbufに
足し込む通信

```
call mpi_allreduce (p, pbuf,
& mpack1, mpi_double_precision,
& mpi_sum, mpi_comm_world, ierr)
```

```
do i = 1, mpack1
  p(i) = pbuf(i)
end do
```

OpenMP並列

```
!$OMP PARALLEL DEFAULT(PRIVATE) &
!$OMP SHARED(pbuf, loc, f, p)
[ 配列p, pbufの初期化处理 ]
```

```
!$OMP DO
do i = ...
  do j = ...
    do k = ...
      l = loc(i, j, k)
      pbuf(l, iam) = pbuf(l, iam) + f(i, j)
    end do
  end do
end do
!$OMP END DO
```

次のDO文を並列に
実行させる指示行

自スレッド番号

```
do ip=1, np
!$OMP DO
do i=1, mpack1
  p(i) = p(i) + pbuf(i, ip)
enddo
!$OMP END DO
enddo
!$OMP END PARALLEL
```

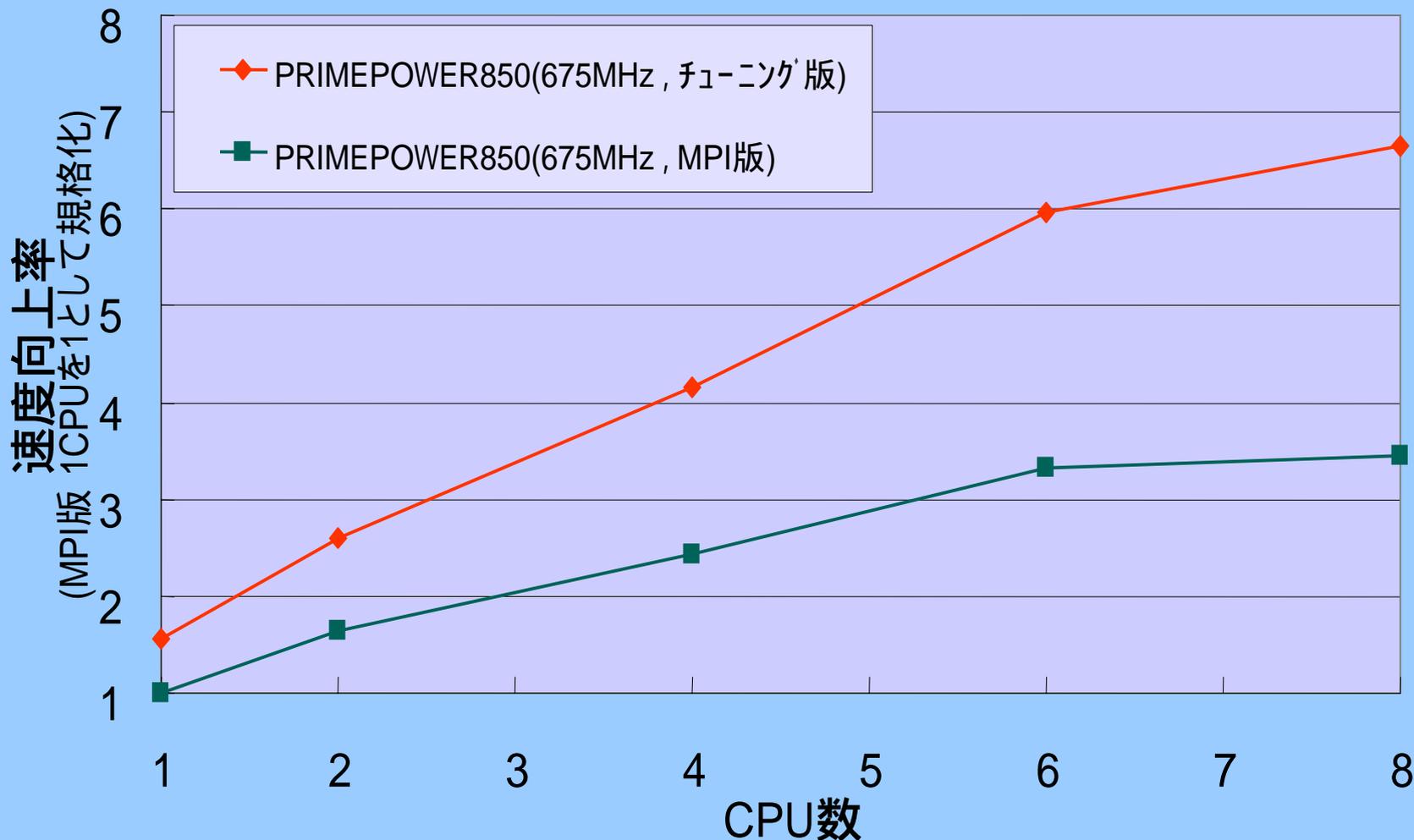
全スレッド数

演算を
並列に実行

- 通信量を大幅に削減

MOPAC2002の並列性能向上例

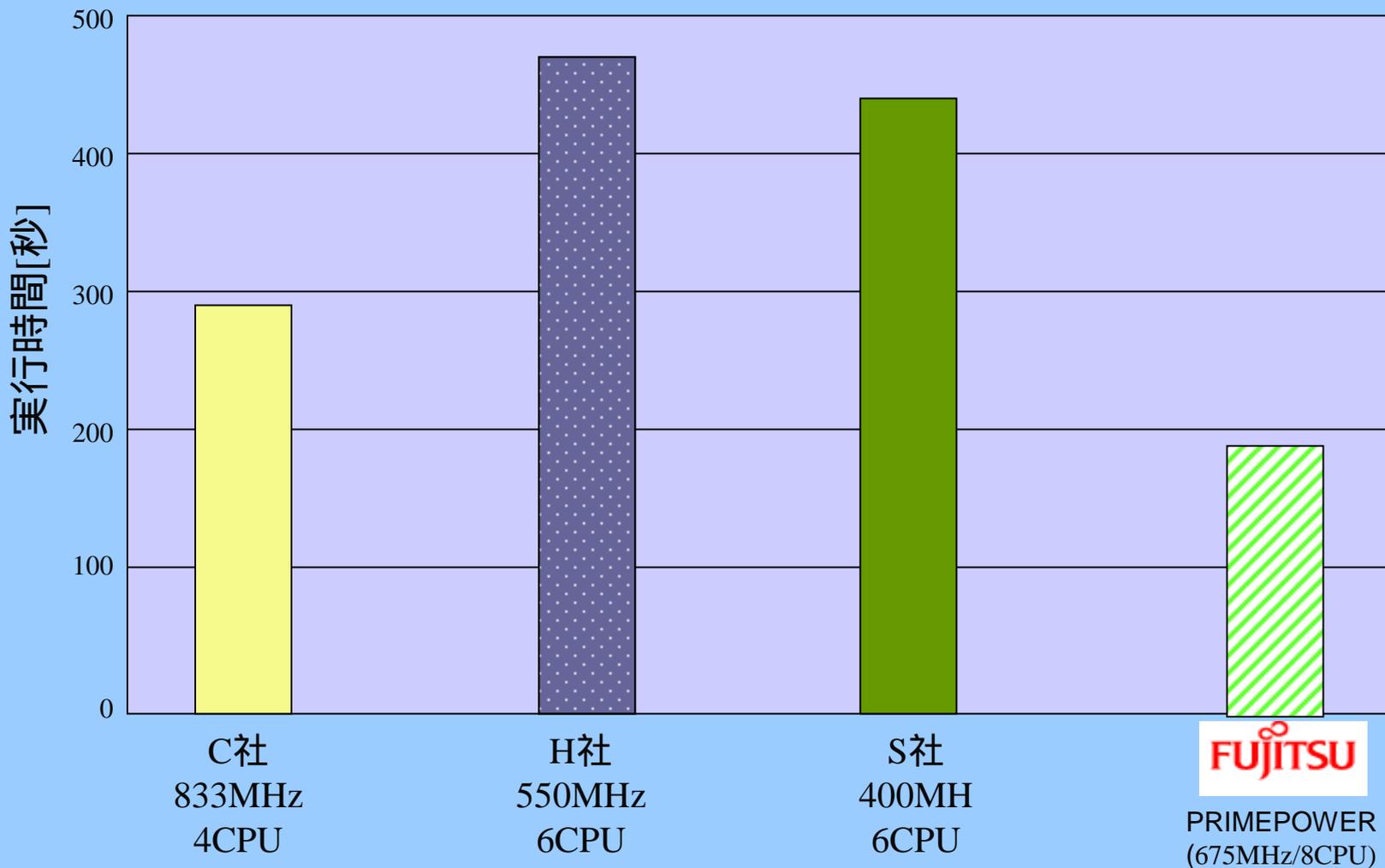
膜タンパク質(バクテリオロドプシン, 3686原子)のエネルギー*計算



*: 生成熱

MOPAC2002の計算速度比較(1)

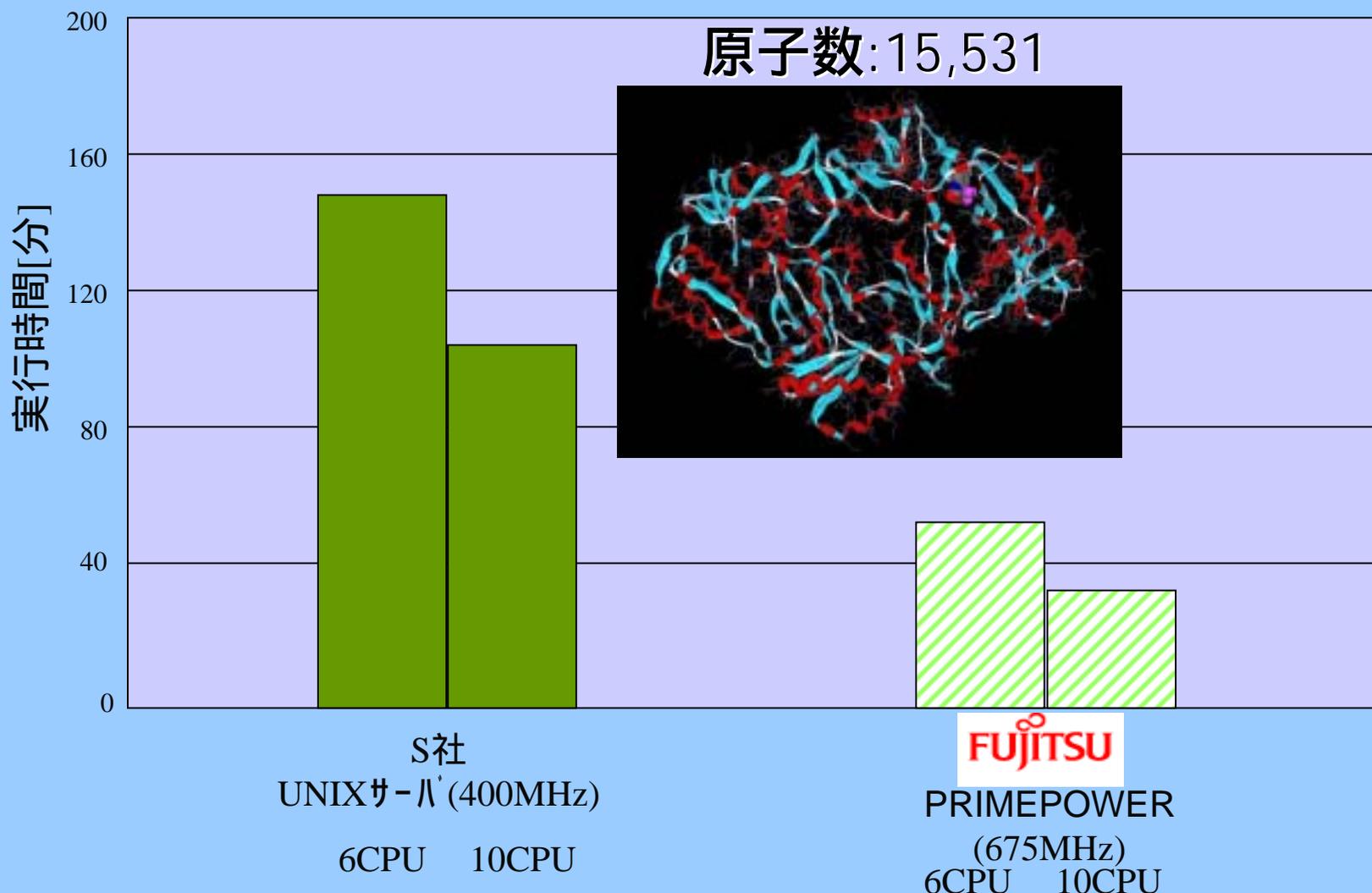
膜タンパク質(バクテリオロドプシン 3,686原子)のエネルギー*計算



*: 生成熱

MOPAC2002の計算速度比較(2)

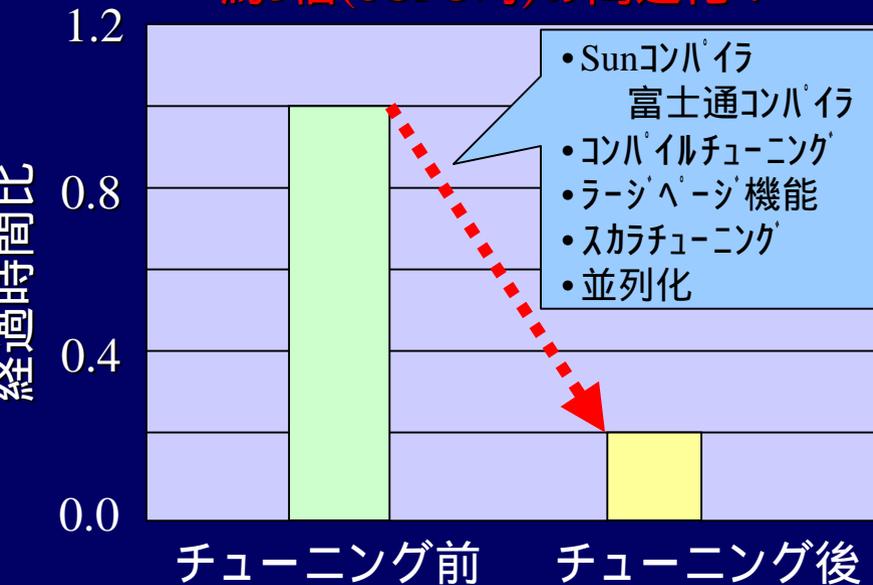
HIV逆転写酵素・阻害剤複合体(Efavirenz)のエネルギー*計算



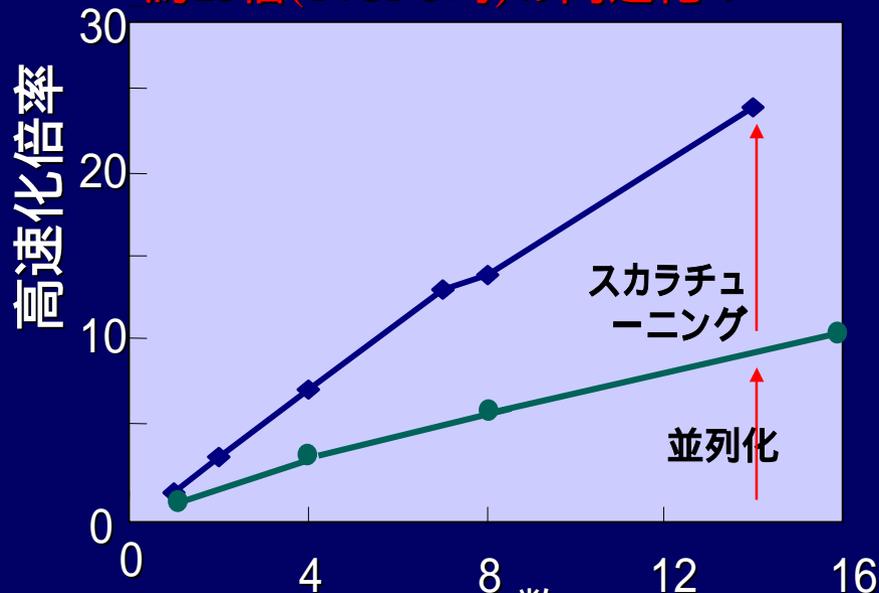
バイオインフォマティクスを支える充実したサービスメニュー

- バイオ向けシステムの構築&運用/利用支援サービス
 - お客様のニーズに合わせたシステムの構築
 - 構築したシステムの運用と利用を支援
- アプリケーションチューニングサービス
 - アプリケーションが利用されるプラットフォーム向けのチューニング (スカラーチューニング、並列化)を実施

分子動力学計算アプリ
約5倍(8CPU時)の高速化！



流体解析プログラム
約25倍(14CPU時)の高速化！



Contents

- 富士通のバイオインフォマティクスの取り組み
 - 歴史・体制
 - バイオインフォマティクス向けソリューション体系
- 代表的なソリューションのご紹介
 - *Post Genome Platform*
 - アプリケーションPKG
 - ◆ *Biofrontier* と Chemlib
 - ◆ MOPAC2002の適用例とチューニング事例
- まとめ

まとめ

ポストゲノム時代の
バイオインフォマティクス・ソリューション を提供

- *Outsourcing* : システム運用受託
解析・コンサルティング
- *Web Solution* : 固有の研究フロー のシステム化
- *Application* : プラットフォームに最適化された
目的別専門PKG
- *Infrastructure* : ***Post Genome Platform***
(ハード、PKG、サービス、統合ソフト)

富士通はお客様の
バイオ研究・開発を支援いたします。



FUJITSU

THE POSSIBILITIES ARE INFINITE