

No. 4 SCUBA

プログラムの名称	日本語名称	生体高分子動力学シミュレーションシステム	
	英語名称	Simulation Codes for hUge Biomolecular Assembly	
	略称	SCUBA	
概要及び目的	SCUBAは主に核酸、蛋白質の機能発現メカニズム解析研究を目的として開発された、分子動力学シミュレーションシステムである。SCUBAは系のエネルギー、温度、圧力を一定に保つ様々な時間積分アルゴリズム、レプリカ交換、自由エネルギー計算、エネルギー最小化、基準振動解析、系の原子分布異方性により引き起こされる並列化効率の悪化を防ぐための動的ロードバランスなど、最新のアルゴリズムを搭載している。		
キーワード	日本語	英語	
	分子動力学シミュレーション	molecular dynamics simulation	
	並列化	parallelization	
生体高分子	bio-molecule		
計算内容、機能及び特徴	<p>計算内容</p> <ol style="list-style-type: none"> 1. 生体高分子の分子シミュレーション <p>機能</p> <ol style="list-style-type: none"> 1. エネルギー最小化 2. 基準振動解析 3. 分子動力学シミュレーション <p>特徴</p> <ol style="list-style-type: none"> 1. 分子のトポロジー情報と座標を用いて計算する。 2. 空間分割法による並列化により、数百万原子以上の生体超分子の分子動力学シミュレーションが可能。 3. 計算内容の詳細をユーザーが指定できるよう、多くのオプションが用意されている。 4. メンテナンス、拡張性を考慮して、プログラムは機能別にモジュール化されている。 5. 分子座標はデカルト座標系とする。 		
実行可能計算機	PC Cluster, BX900, FX1, FX10, 京		
実行可能OS	Unix		
プログラミング言語	FORTRAN90, Open MPI, Open MP		
参考文献等	<p><引用すべき参考文献></p> <p>(1)Hisashi Ishida, Yasumasa Joti, Mariko Higuchi, Takuma Kano, Akio Kitao and Nobuhiro Go, Development of Molecular Dynamics Simulation System for Large-Scale Supra-Biomolecules, PABIOS (Parallel BIOMolecular Simulator), Annual Report of the Earth Simulator Center, 175-179, (2004) (注：PABIOSはSCUBAの旧名称)</p> <p><代表参考文献></p> <p>(1)Hisashi Ishida and Steven Hayward, Path of nascent polypeptide in exit tunnel revealed by molecular dynamics simulation of ribosome, Biophysical Journal, 95, 5962-5973 (2008)</p> <p>(2)Hisashi Ishida, Molecular dynamics simulation system for structural analysis of biomolecules by high performance computing, Progress in Nuclear Science and Technology, 2, 470-476 (2011)</p> <p>(3)Hisashi Ishida, Essential function of the N-termini tails of the proteasome for the gating mechanism revealed by molecular dynamics simulations, Proteins: Structure, Function, and Bioinformatics, (2014), 82, 1985-1999</p> <p>(4)Hisashi Ishida, Free-energy landscape of reverse tRNA translocation through the ribosome analyzed by electron microscopy density maps and molecular dynamics simulations, PLOS ONE, (2014), 9, e101951</p> <p><参考にした文献></p> <p>(1)D. Brown, J. H. R. Clarke, M. Okuda and T. Yamazaki, A domain decomposition parallelization strategy for molecular dynamics simulations on distributed memory machines. Comp. Phys. Commun. 74 67-80 (1993).</p> <p><マニュアル></p> <p>(1)生体高分子動力学シミュレーションシステムSCUBA - マニュアル</p>		
提供物件	<input checked="" type="checkbox"/> 1. ソースプログラム <input type="checkbox"/> 2. ロードモジュール <input type="checkbox"/> 3. J C L <input checked="" type="checkbox"/> 4. 入力データ <input checked="" type="checkbox"/> 5. 出力データ		
機構外利用の限定条件	利用による成果公表についての事前協議の必要性 <input type="checkbox"/> 1. 有 <input checked="" type="checkbox"/> 2. 無		
サンプルデータの概要	分子シミュレーション制御入力ファイル、入力構造ファイル、出力構造ファイル		