**高性能计算在分子动力学的应用**

**（简介）**

研究机体中各种生物大分子的相互作用方式,是理解生命活动基 本机制的基础,以调控生物学活性的受体为靶位的肽类或模拟肽类配基药物研发是生物学和医学中最领先的研究领域之一。分子动力学模拟作为一种重要的重要工 具,可以模拟生物大分子体系的运动行为、构象改变机制以及研究分子及其配体、分子各组成部分之间的相互作用,解释和阐明生物大分子的序列信息以及微观尺度 上复杂的、动态的生物过程,以传统实验数据为基础,在更深层次上解决相关的科学问题,弥补传统实验技术的不足,目前已广泛应用于蛋白质、核酸等生物大分子 微观尺度的结构与功能研究之中。

生物大分子之间的识别/结合/催化等过程一般都是发生在微秒时间尺度甚至更长时间,而分子动力学模拟需要利用飞秒时间步长 来模拟计算才可精确刻画分子运动过程,消耗的计算资源是普通个人计算机与工作站所无法提供的,必须利用大型集群的众多处理器进行并行计算,来实现几万原子 至百万原子病毒体系的数亿步计算模拟任务,完成分析关键蛋白质分子的动力学行为,细胞膜表面配体受体间的结合过程及其机理以及病毒衣壳蛋白质体系的组装动 力学过程等。然而,在这些实际应用首先要面临的一个问题就是如何合理的完成计算模拟任务在并行集群上的部署优化,构建完整的分子动力模拟研究平台,充分利 用大型集群计算资源,高效地完成研究工作。本文首先基于MOSIX2并行操作系统构建了计算能力为千亿次PC集群,利用NAMD软件进行了万原子体系皮秒 时间尺度的分子动力学模拟部署测试；随后利用了山东大学(山东省)高性能计算中心的浪潮TS10000十万亿次集群,完成了万原子体系纳秒时间尺度的部署 测试；最后在国家超级计算济南中心使用了神威4000A百万亿次集群以及“神威蓝光”千万亿次超级计算机,使用NAMD和GROMACS软件完成了万原子 体系近微秒级以及百万原子纳秒级的超大规模的部署测试,并完成了同时利用近十万处理器核心的副本交换分子动力学模拟测试分析。从整个部署测试结果来看,普 通小型集群适于做分子动力学模拟任务的一些准备工作,如模型的构建、参数的优化等,而十万亿次集群上适合运行小体系的计算模拟以及大体系的计算模拟准备工 作,对超大体系则必须要部署到百万亿次及千万亿次集群上,利用大规模的计算资源在可接受的时间范围内完成模拟任务。分子动力学模拟所得数据是在分子中每一 个原子在三维空间中随时间的运动轨迹,所以只有三维图像才能有效地表示这些大分子所包含的信息,而以往专业的可视化技术与设备都是极其昂贵的,所以本论文 基于廉价的3D VISION图形解决方案,搭建了生物大分子3D显示与分析平台,用于分析自身免疫性疾病相关蛋白质分子识别的动态机理。基于已有的实验发现,生长因子 (PGRN)可以结合于肿瘤坏死因子受体(TNFR),从而抑制TNF-a介导的致炎效应,本论文通过动力学模拟确定了PGRN与TNFR2的结合模式与 决定PGRN与TNFR2结合的关键氨基酸。通过构建PGRN虚拟突变体,计算模拟进一步证实PGRN结合TNFR2并发挥抗炎功能对这些氨基酸的依赖性 和静电作用介导的PGRN/TNFR2结合模式。

**（山东省高性能计算中心）**

2014.04.27启用。在山大济南软件园校区。山东省高性能计算中心是继上海市超算中心之后，国内第二个省级高性能计算中心。中心的整个计算环境的投资为1500万元，由山东大学和济南市高新技术开发区联合共建，挂靠在山东大学，建设在齐鲁软件学院，整个环境的总计算能力为13000亿次/秒，存储容量为18TB。与浪潮（北京）电子信息产业有限公司、国际商业机器（中国）有限公司（IBM）、英特尔（中国）有限公司（INTEL）、视算电脑科技（中国）有限公司（SGI）等公司合作。

**（国家超级计算济南中心）**

http://baike.baidu.com/link?url=xUL1CBhQDjGh0D-GB59yeBgsHx7cqQyV1fK28OUpo87jCpI\_7Azw1jF5itC4ezCQwUx0E4OLucFn\_bEBb2Y6Ia

**（浪潮TS10000）**

官方说明 （含有功能和技术的详细介绍）：<http://www.inspur.com/lcjtww/443012/444624/450134/452175/561815/index.html#>

**（神威蓝光）**

<http://baike.baidu.com/link?url=d3c5PxpdBMUBgFcYwlArvcgCqS2skmUMr9JRnLu4WXNpClu1pK-Cw9rCaiCYpXmvQkRJqYKbBdZSlfVsH6tgUa>

**（MOSIX并行操作系统）**

简介：

https://www.aliyun.com/zixun/content/3\_12\_521807.html

特征：

<http://www.ibm.com/developerworks/cn/linux/cluster/mosix/part2/>

**（NAMD）**

用于在大规模并行计算机上快速模拟大分子体系的并行分子动力学代码。

<http://baike.baidu.com/link?url=OuPgmQPKlBljDDVwS5QhmCOjykEk4prpDHIgmtclKvmdNGxgwOB4hedeDK1hp283N52qp1izGx9Kmq61SKNe-K>

注：神威4000A百度不着不知道为啥 只有他在气象方面的应用 所以没有列出来。