

システム変更等のお知らせ

(2022.9.1 – 2022.10.31 変更)

1. ハードウェア

- 1.1 Wisteria/BDEC-01 スーパーコンピュータシステム … なし
- 1.2 Oakbridge-CX スーパーコンピュータシステム … なし
- 1.3 Ipomoea-01 大規模共通ストレージシステム … なし

2. ソフトウェア

2.1 Red Hat Enterprise Linux 8 (Wisteria/BDEC-01)

▶ Aquarius

NVIDIA HPC SDK	v22.7	(2022.10.28)
GCC	v12.2.0	(2022.10.28)

▶ ログインノード

ffmpeg	4.2.7-1	(2022.9.16)
NVIDIA HPC SDK	v22.7	(2022.10.28)

インストールを実施しました。利用方法については、利用支援ポータルのお知らせ、またはドキュメント閲覧より利用手引書をご覧ください。

- 2.2 Red Hat Enterprise Linux 7, CentOS 7 (Oakbridge-CX) … なし
- 2.3 Red Hat Enterprise Linux 8 (Ipomoea-01) … なし

3. その他

3.1 Wisteria/BDEC-01 における AlphaFold2 データベースの提供について

Wisteria/BDEC-01 の共有ファイルシステム上で、タンパク質の構造予測プログラム AlphaFold2 で使用されているデータベースを提供します (Aquarius での使用を想定、2022年10月20日現在の最新版)。ぜひご利用ください。本データベースは容量が大きく、全体を公式のデータリポジトリから取得すると通常約1日を要します。以下のディレクトリ内にデータベース一式が置かれてあり、実行時に指定いただくことで使用可能です。

`/work/share/alphafold2_database`

このディレクトリの OST 分散ストライプ数は 32 に設定されています。hhblits などデータベース配列検索の並列数を上げて実行することにより、立体構造予測前に CPU で行われるデータの検索時間を大きく短縮することが可能です。使用にあたっては以下のことをご了承ください。

- データベースは最新版に更新することがありますが、更新に伴うアナウンスはいたしません。
- 当センターでは AlphaFold2 の実行プログラムの構築・インストールのサポートはしていません。