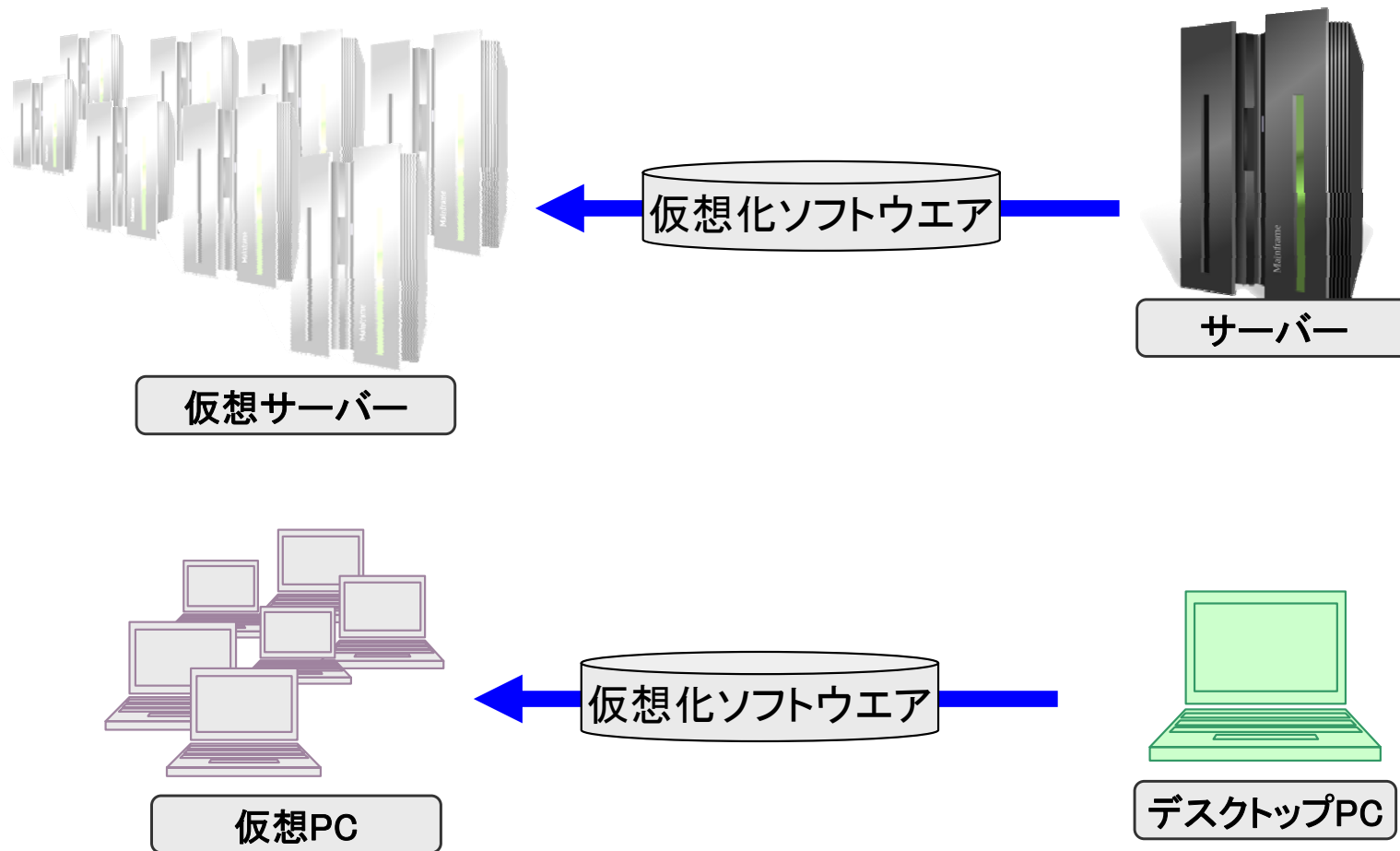


仮想化技術で始める超快適な生体高分子 解析環境のレシピ

大阪大学 蛋白質研究所： 小林直宏

仮想化技術とは・・・
メリットとデメリット

仮想化って何？



物理マシン上に仮想的なPCを
構築して動作させる

仮想化技術———何がそんなにいいの？

少電力化、省スペース化(たくさんのOSが1台に)

耐障害性向上(仮想サーバーを冗長的に構築)

バックアップ、復元操作が容易

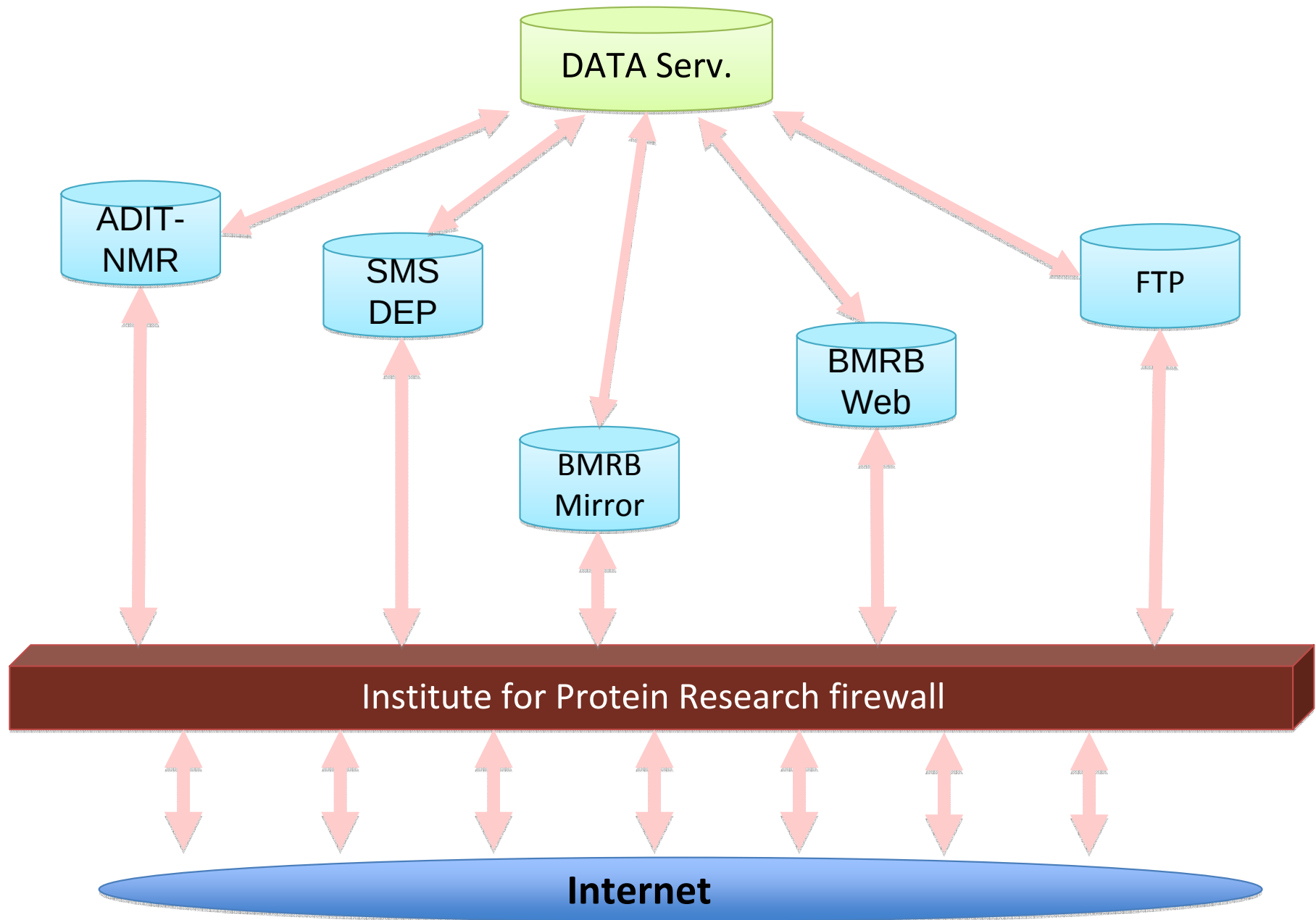
(仮想OSイメージをコピーすればいい)

アプリケーションなどの長期運用が可能

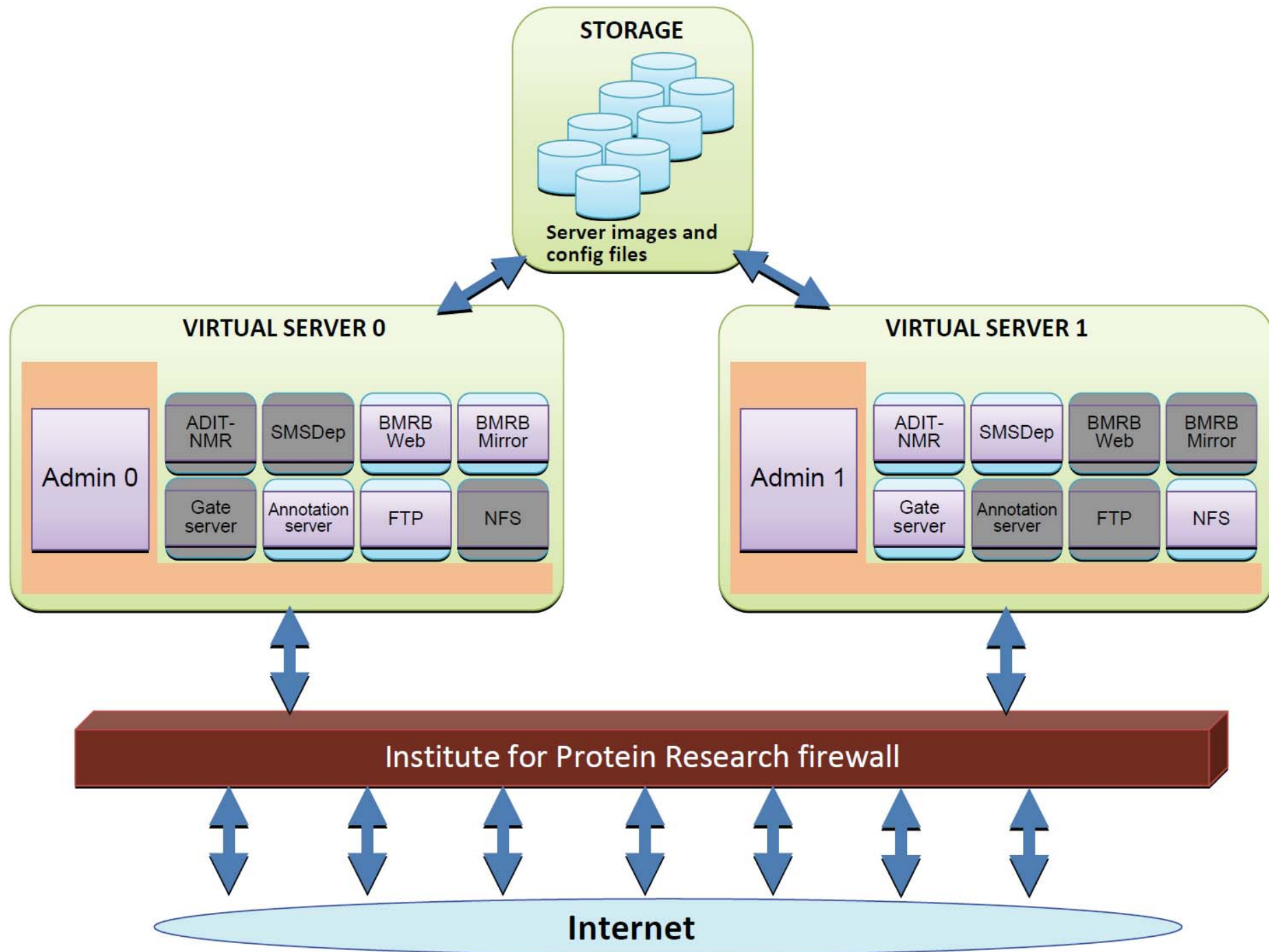
ハードウェアの寿命、故障等の心配から解放される・・・？

仮想マシンといっても意外と速い・・・

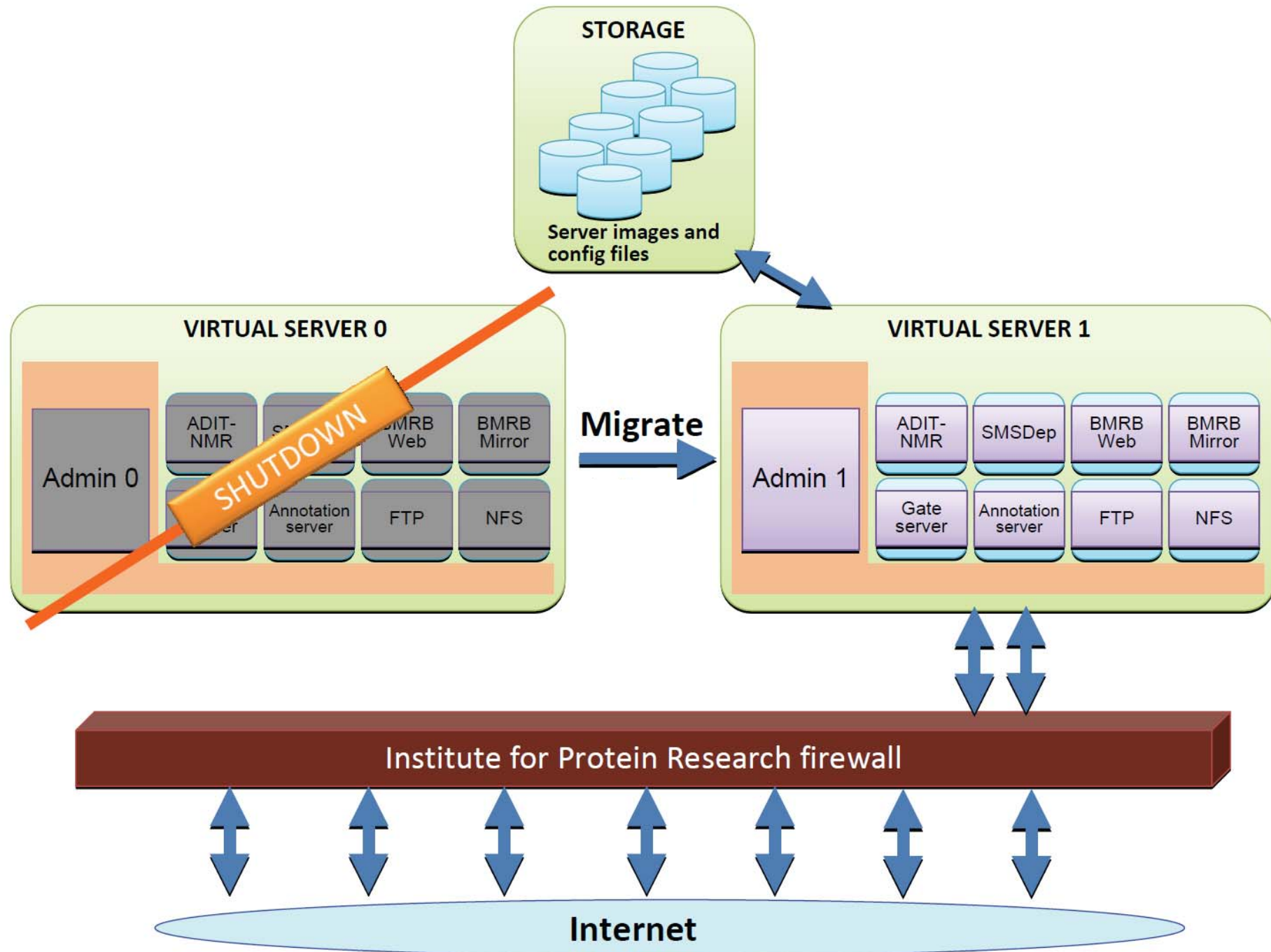
サーバー群を仮想化する前の構成



サーバー群仮想化による耐障害性の強化



サーバー群仮想化による耐障害性の強化



使えるアプリケーションは？

- ◎ オフィス系 (Office2003など)
- ◎ メールソフト (Outlookなど)
- ◎ ウェブブラウザ (Firefoxなど)
- ◎ ネットワーク共有
- 並列処理 (OpenMPIなど)
- ◎ 軽い構造計算 (CYANA, Xplorなど)
- △ 重いMD計算 (Amber, Gromacsなど)
- △ 分子モデルビューアー (MolMol, PyMolなど)
- サーバー関連 (apache, sshdなど)
- × 動画処理、3Dゲームなど

(注) 全て個人的な見解です

多くの解析用アプリケーションをインストールした仮想OSイメージ

CentOS6.2-32bit/64bit + VirtualBox

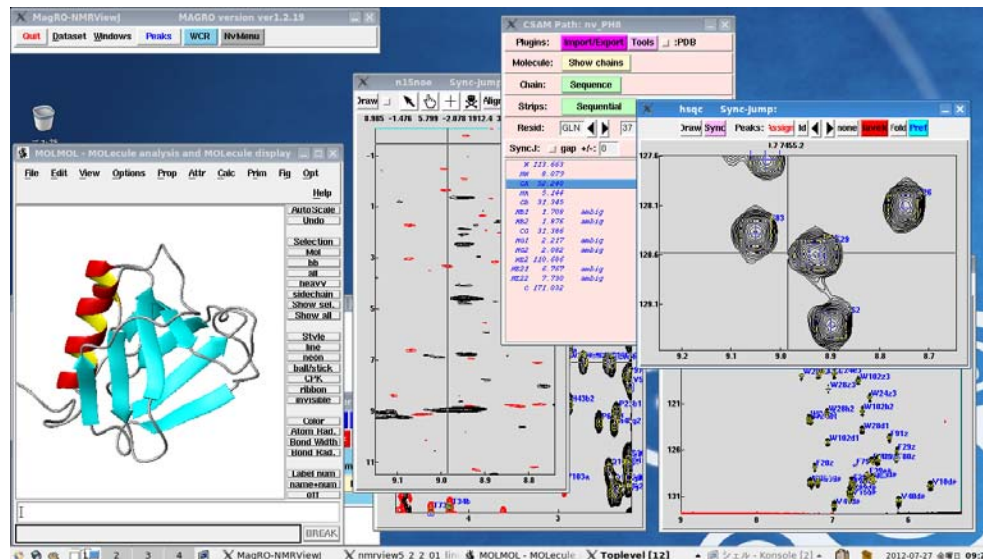
NMRPipe, MagRO-NMRView,
CcpNmr, MolMol, SPARTA+, ShiftX

*Cyana, Xplor-NIH, CNS

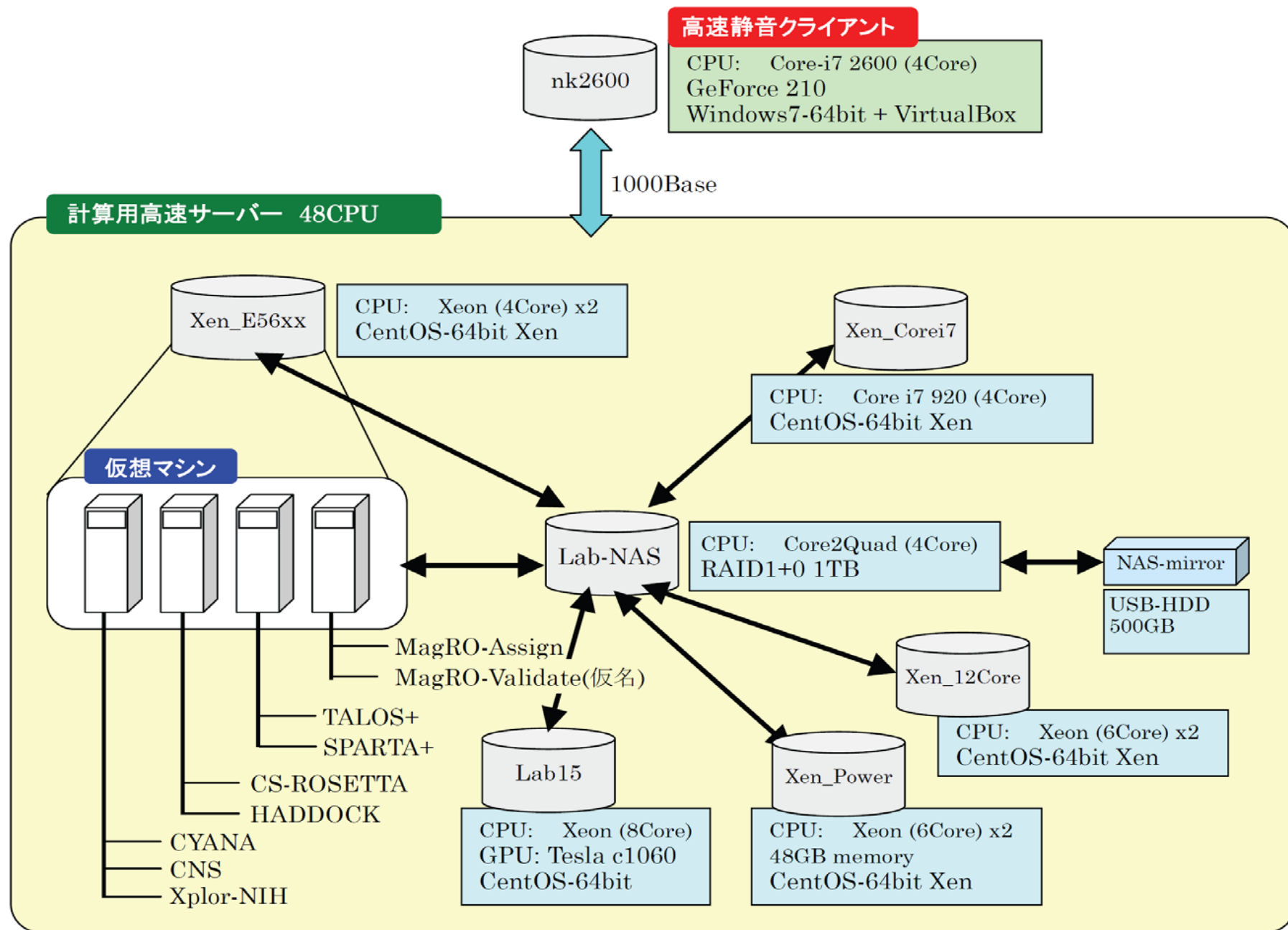
CS-ROSETTA, HADDOCK

*Amber12, Gromacs, *Gaussian

* 商用に付きライセンスを購入する必要があります



小規模内部ネットワークに実装された解析用サーバー群



仮想化のデメリットも知っておこう...

何でも仮想化出来るわけではない(特殊デバイス、OSのタイプ)

Windows, MacOSXなどライセンス的に困難

高いマシンスペックを必要とする
バックアップなどに大量のストレージを消費する

稼働中のマシンの仮想化は大変難しい
P2Vソフトを利用すればよいが、そう簡単ではない...

ライセンスの扱いには特に注意が必要です！

くれぐれも自己責任でお願いします

分からなかったらとりあえず
ググって見てください
(*google->*)

著作権は守ってください

デスクトップPCで構築してみよう

何を用意する？

最近発売されたPC1台

CPU: Core i7 あるいはCore i5

メモリ: 8MB以上

ハードディスク: 1TB以上

仮想OSソフトウェア

VirtualBox, VMWare, Xen, KVMなど

OSインストーラー(Linux系)

CentOS, Ubuntu....

どのくらいのスペックが必要か



サーバー向け

Xeon 560番台、6-Core X 2 (12-Core)

32GB メモリ

256GB SSD (~300MB/sec)

2TB RAID1+0 / 2TB RAID1+0 mirror

ホストOS: CentOS 5.7-64bit / Xen



デスクトップ向け

Core i7-2600 (4-Core)

12GBメモリ

128G SSD (~400MB/sec)

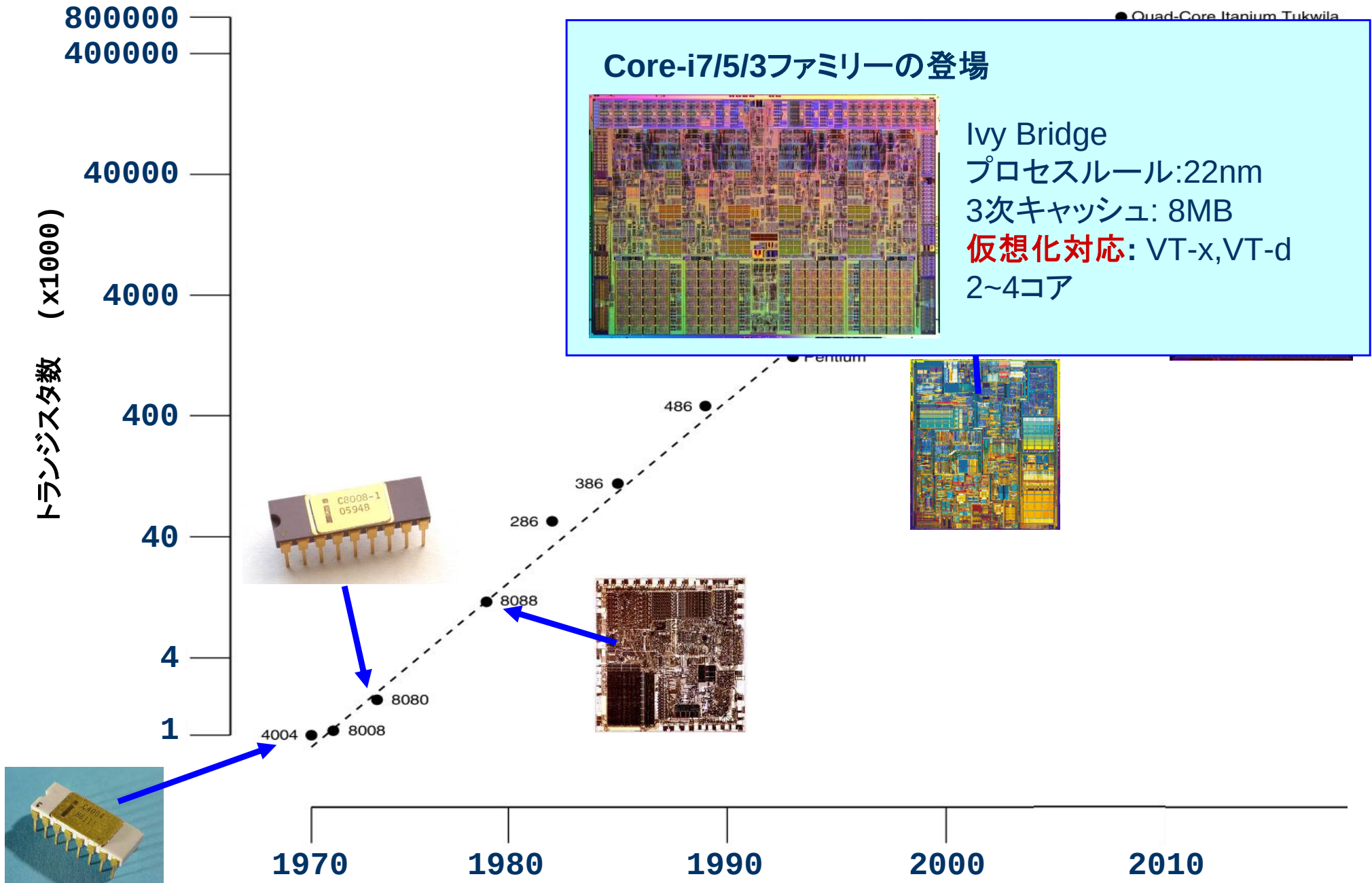
1TB ソフトウェアRAID1

USB3.0 (~300MB/sec)

ホストOS: Windows7-64bit / VirtualBox

コア数、搭載メモリも多めに
ストレージの転送速度も重要

CPUについて: 計算機の高速化、マルチコア化は急速に進む



チェック項目 1

CPUが仮想技術に対応しているか？

最近のCPUはほとんど対応しているが
念のため確認すべし（最低限 Intel VT-x）

google -> CPU 性能比較

チェック項目2

BIOSで仮想機能を有効にする(結構敷居が高い?)

起動後にBIOSに入る(入れないと話ならない...)
"Intel Virtualization" などを"Enable"にする

MacOSXでは不要

Windows系パソコンでは要注意です

チェック項目3

物理マシンのOSは64bitが基本

たくさんメモリを搭載できる(メモリは多めに)
64bitOSの仮想化などに有効

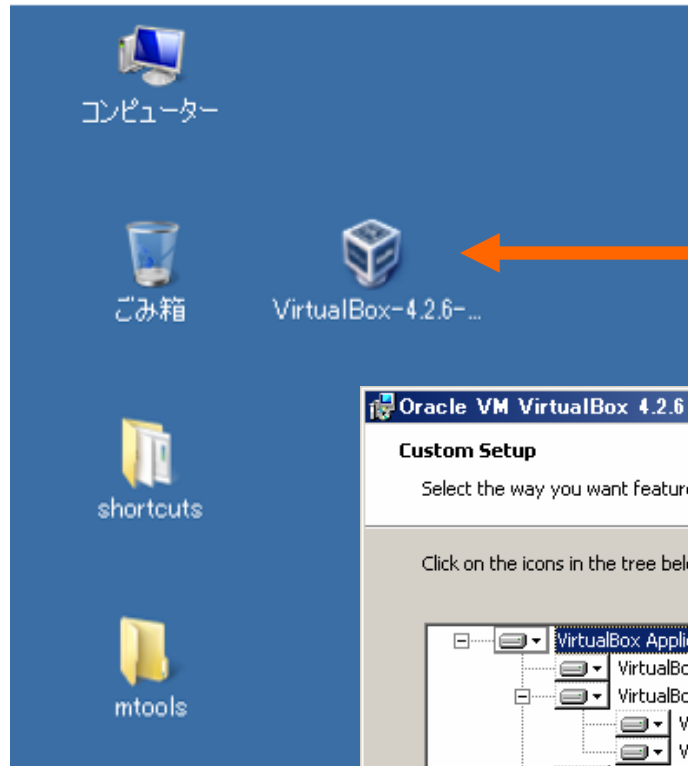
まずは仮想化ソフトの調達

google -> VirtualBox

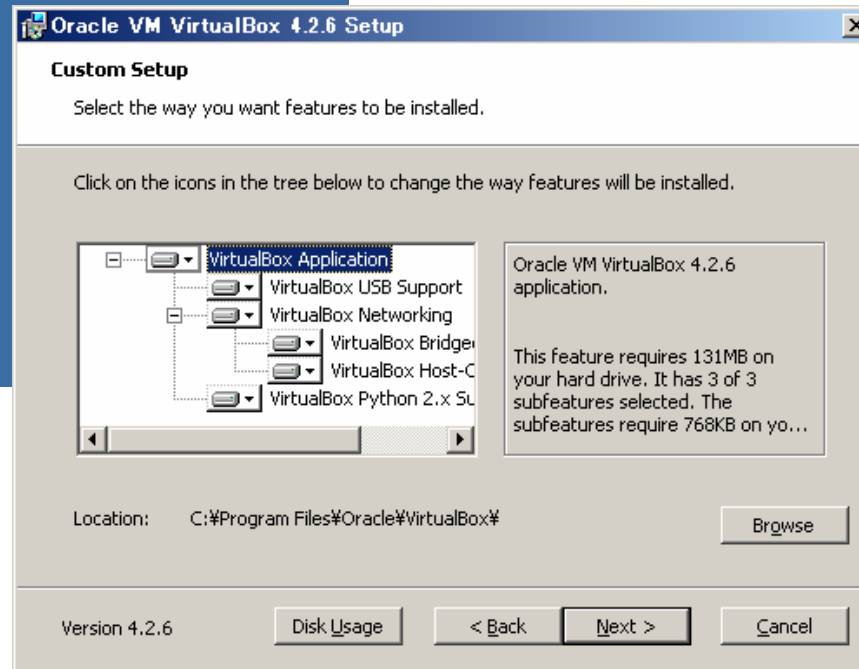
The image shows a web browser window displaying the VirtualBox.org website. The browser's address bar shows the URL <https://www.virtualbox.org>. The website features a large "VirtualBox" logo and a "Welcome to VirtualBox.org!" message. A sidebar on the left contains links for "About", "Screenshots", "Downloads", "Documentation", "End-user docs", "Technical docs", "Contribute", and "Community". The main content area includes a "News Flash" section with several announcements, including "VirtualBox 4.2 released!" and "VirtualBox 4.1.22 released!". Below the news, there is a "Hot picks" section with links to "Pre-built virtual machines for developers", "phpVirtualBox AJAX web interface", and "IQEmu automated Windows VM creation". At the bottom of the page, there is a red "ORACLE" logo and links for "Contact", "Privacy policy", and "Terms of Use".

On the right side of the browser window, another website is partially visible, which is Xen.org. It features a large "Xen.org" logo and a cartoon character of a panda wearing a yellow hat and holding a green stick. Below the character, there is text about "Xen Projects" and a list of links for "Xen Hypervisor", "Xen Cloud Platform", "Xen ARM", and "Other Xen.org projects".

VirtualBoxのインストール (20～30分)



ダブルクリック

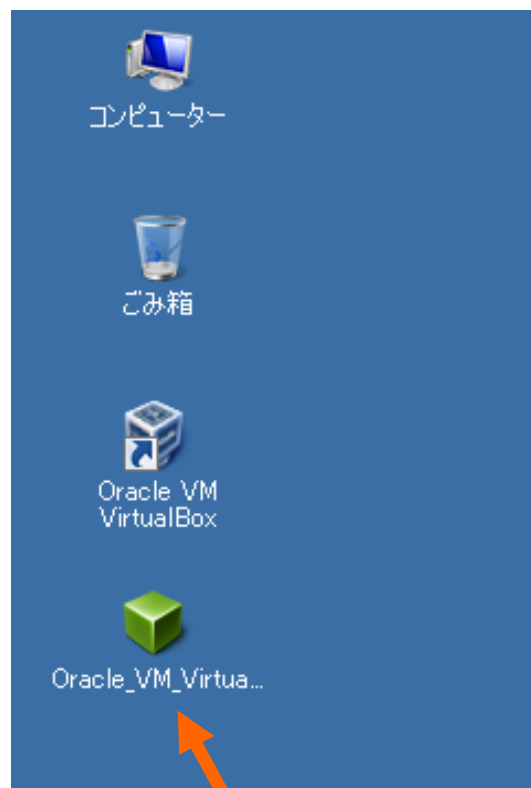


→ → → 終了！

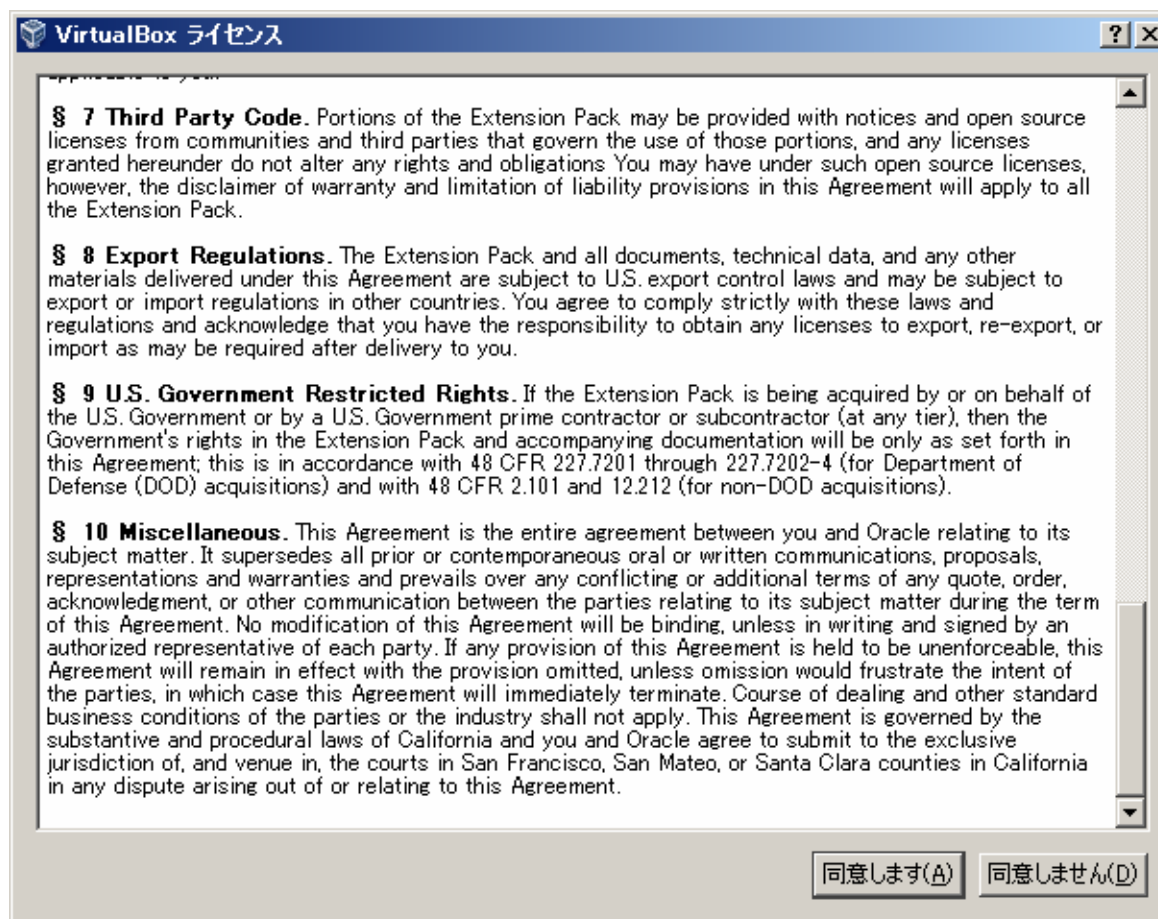
割となすがままでクリックしてみる...

ディスクの残り容量に注意！
～40GBくらいは欲しいです

拡張パックのインストール(~1分)



ダブルクリック

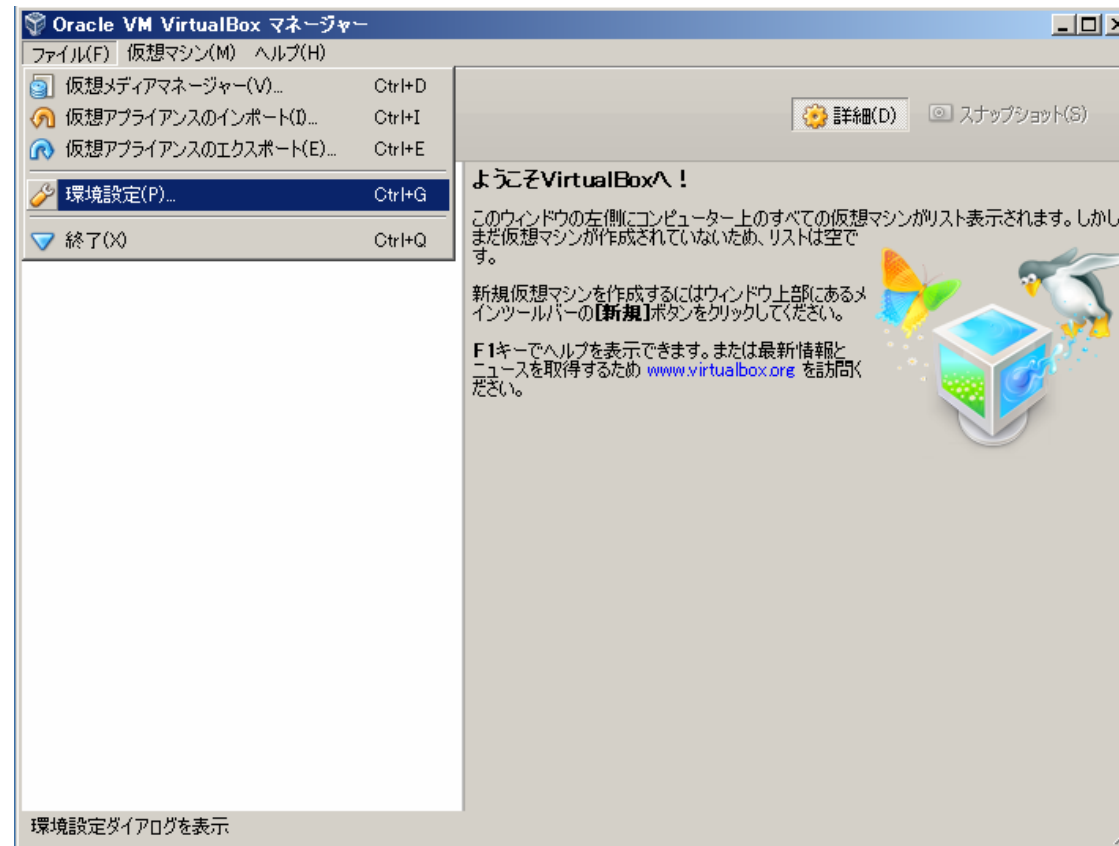


同意してインストールするだけ

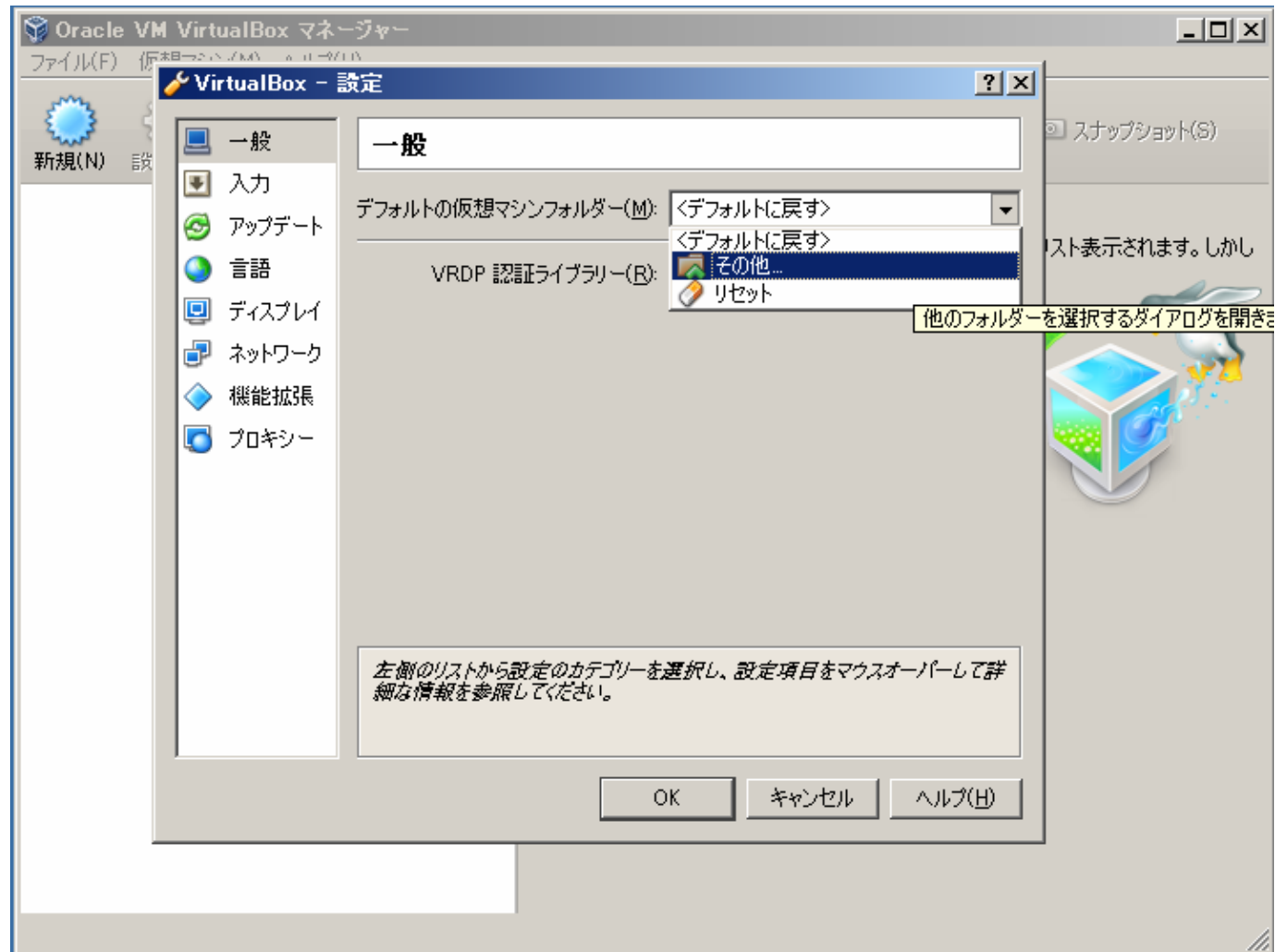
VirtualBoxの環境設定(~5分)



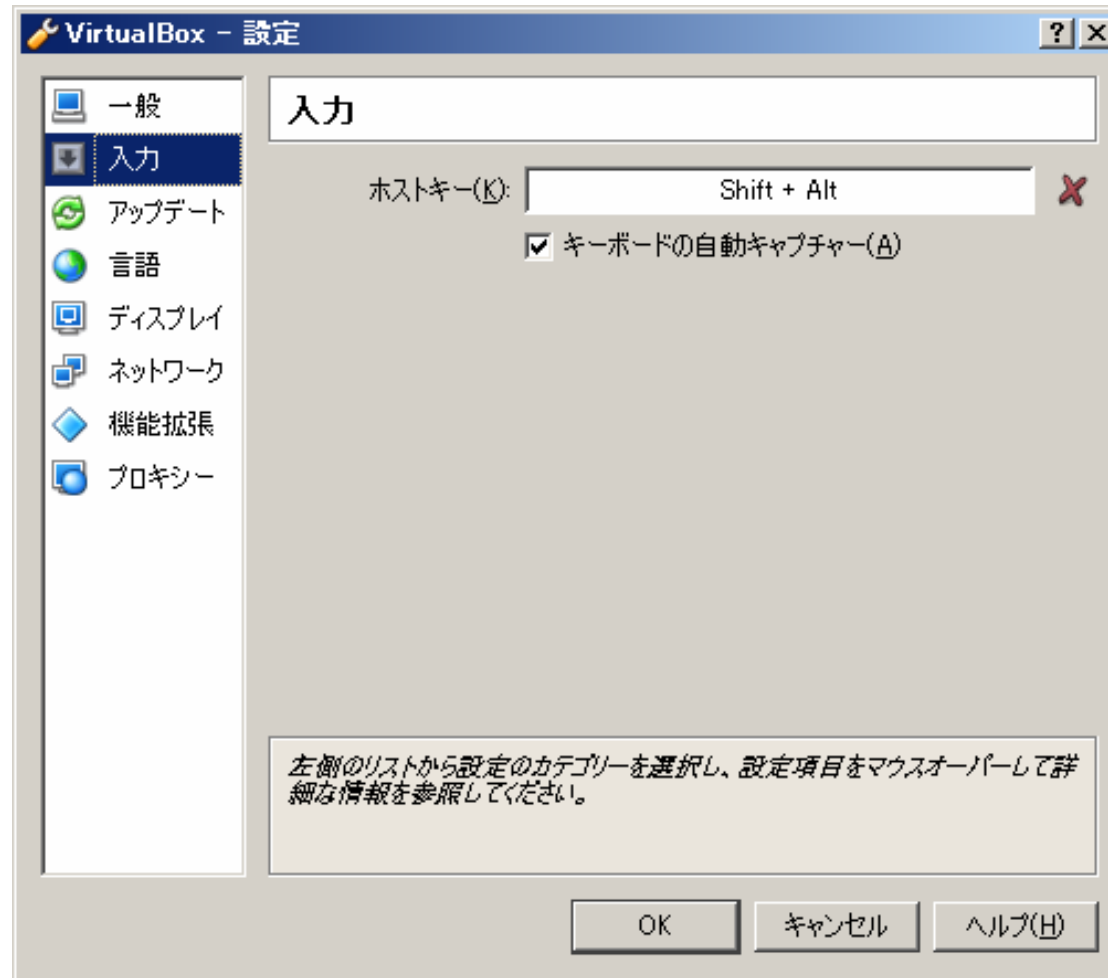
ダブルクリック



仮想イメージ置き場の指定

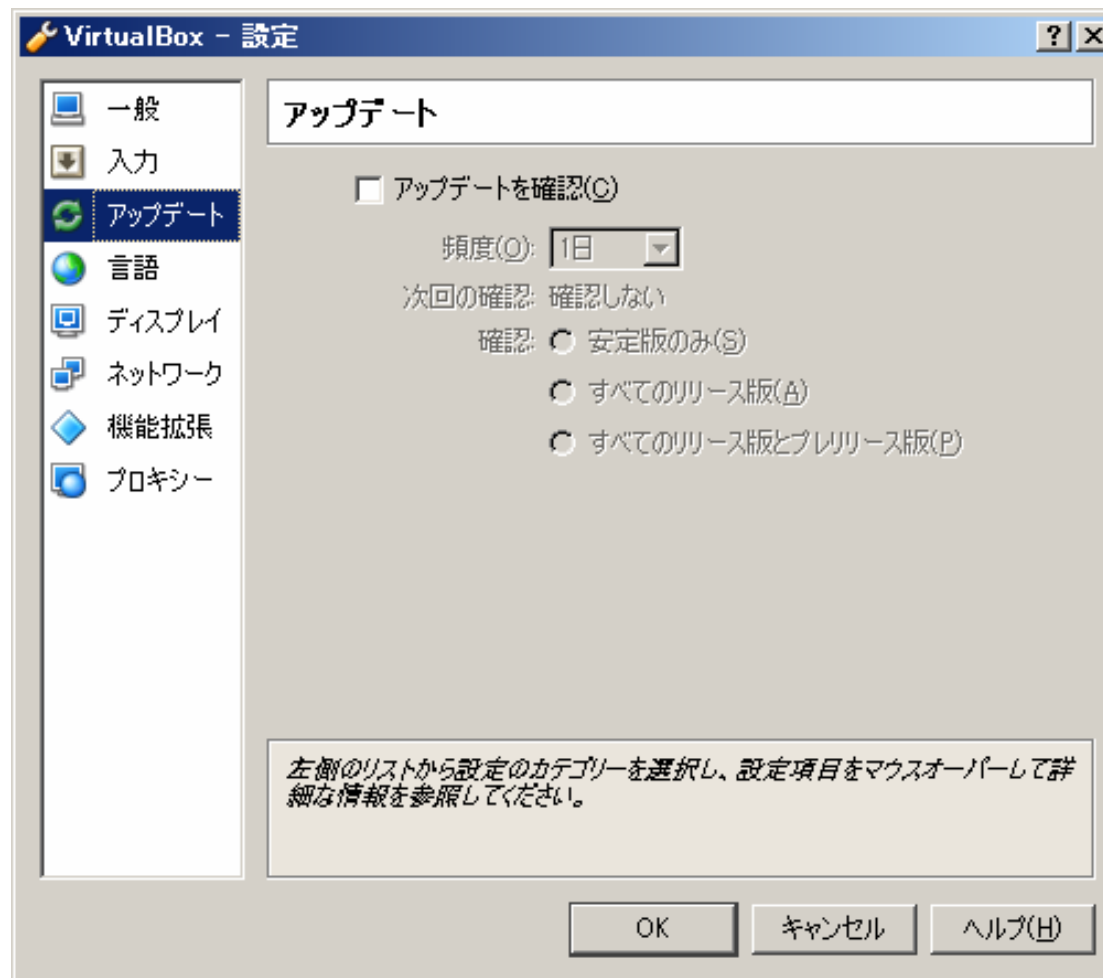


仮想画面から出るためのキー設定



結構大事・・・押せるキーじゃないと駄目
忘れないようにメモっておこう

アップデートは慎重に・・・



最新版にして不具合が出ることも直ることもあります

仮想OSをインストールしてみる

CentOS5.7 64bit

OSの調達

google -> CentOS

www.centos.org - centos.org content - Mozilla Firefox

ファイル(E) 編集(E) 表示(V) 履歴(S) ブックマーク(B) ツール(T) ヘルプ(H)

www.centos.org/modules/tinycontent/index.php?id=30

Google

CentOS

The Community ENTERprise Operating System

Home Donate Information Support Wiki Downloads Contact Us Search Register Login

CentOS North American Mirrors (Countries and States A-M)

updated: Feb 26, 2013 02:44 UTC

[North American Mirrors](#) (Countries and States N-Z)

[European Mirrors](#) (Countries A-M)

[European Mirrors](#) (Countries N-Z)

[South American, Asian, Oceania, Middle Eastern, African and Other Regional Mirrors](#)

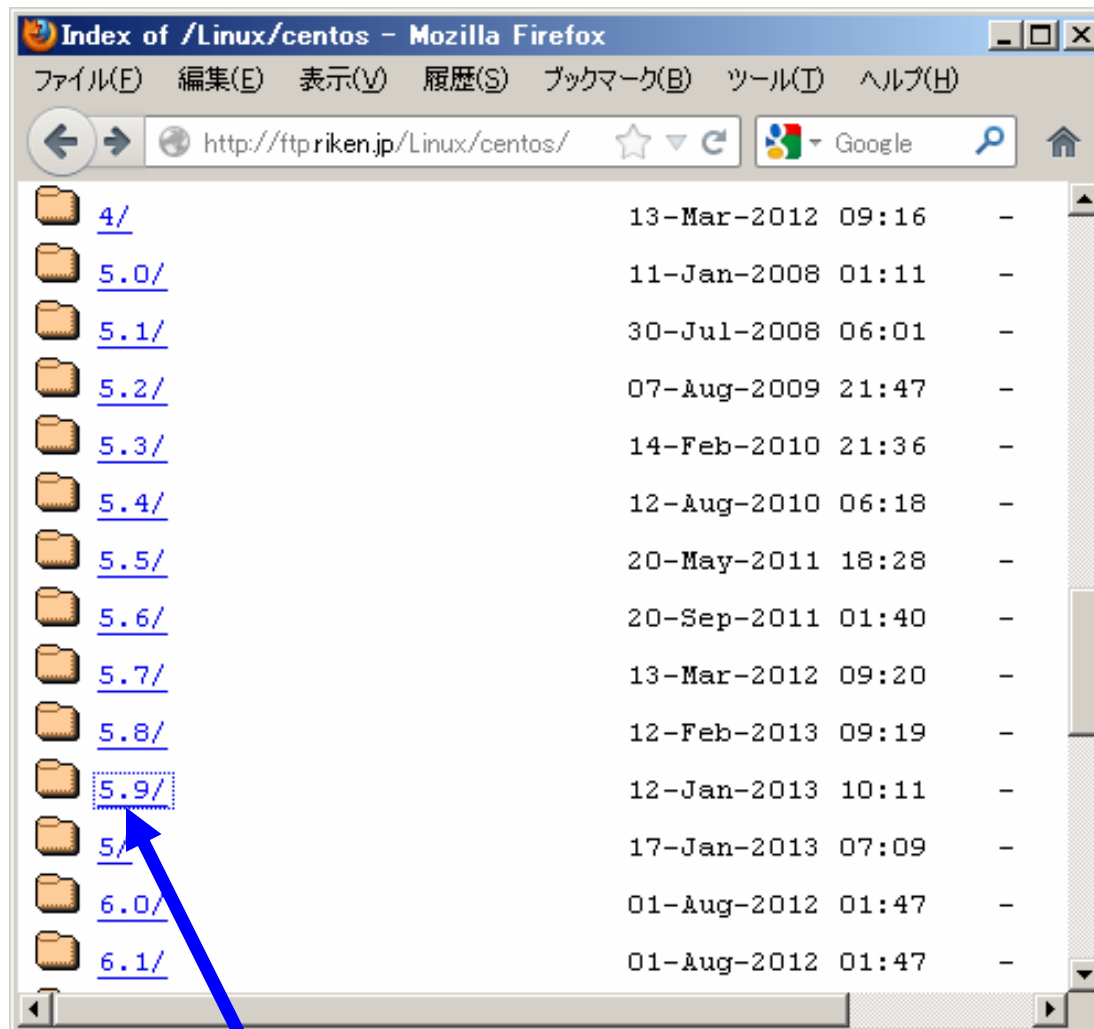
Tier 1 (OC3 or faster)

Country (Region)	State (Area)	Organization Name	Versions	Architectures	Direct DVD Downloads
Canada	AB	Arctic Network Mirrors	All	All	Yes HTTP FTP RSYNC
Canada	BC	Simon Fraser University	All	All	Yes HTTP
North America	Mexico	Epochteca	All	All	Yes HTTP
North America	Mexico	Webxscreen	5 6	All	Yes HTTP
US	AK	Arctic Region Supercomputing Center	All	All	Yes HTTP FTP
US	AL	Millry Telephone Co	All	All	Yes HTTP FTP
US	AL	Teklinks	All	All	Yes HTTP FTP
US	AZ	Easynews	All	All	Yes HTTP FTP
US	AZ	Singlehop, LLC	All	All	Yes HTTP
US	CA	Energy Sciences Network	All	All	Yes HTTP FTP RSYNC
US	CA	FreedomVoice	All	All	Yes HTTP FTP RSYNC
US	CA	Harvey Mudd College	All	All	Yes HTTP
US	CA	Linux Kernel Archives	All	All	Yes HTTP FTP RSYNC
US	CA	NDCHost	All	All	Yes HTTP
US	CA	Pac-12 Enterprises	All	All	Yes HTTP
US	CA	Sonic.net	All	All	Yes HTTP FTP
US	CA	SONN	All	All	Yes HTTP
US	CA	Stanford University	All	All	Yes HTTP FTP RSYNC
US	CA	University of Southern California	3 4 5 6	All	Yes HTTP FTP RSYNC
US	CO	FDCservers.net LLC (Denver)	All	All	Yes HTTP

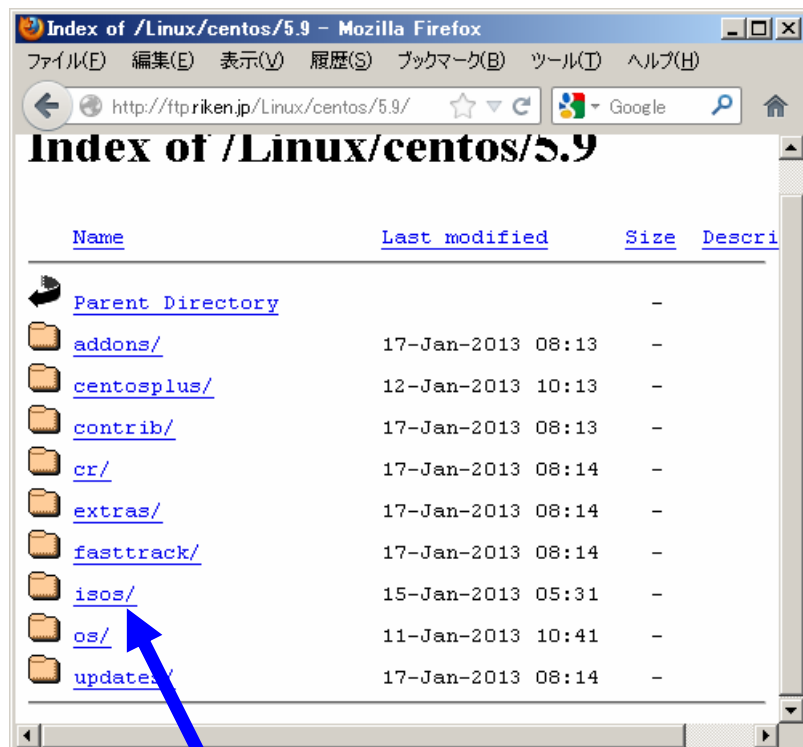
アジア向けサイトに移動

www.centos.org - centos.org content - Mozilla Firefox							
ファイル(F) 編集(E) 表示(V) 履歴(S) ブックマーク(B) ツール(T) ヘルプ(H)							
www.centos.org/modules/tinycontent/index.php?id=32							
Asia	China	Beijing Teletron Telecom Engineering	All	All	Yes	HTTP	
Asia	China	Dalian Neusoft University of Information	All	All	Yes	HTTP FTP	
Asia	China	Grand Cloud	All	All	Yes	HTTP	
Asia	China	NetEase	4 5 6	All	Yes	HTTP	
Asia	China	Northeastern University, Shenyang Liaoni	All	All	Yes	HTTP	
Asia	China	Sohu Inc, Beijing P.R. China	All	i386 x86_64	Yes	HTTP	
Asia	China	Star Studio of UESTC	All	All	Yes	HTTP FTP	
Asia	China	Tsinghua University	All	All	Yes	HTTP	
Asia	China	University of Science and Tech of China	All	All	Yes	HTTP	
Asia	China - Hong Kong	Asia Web Services Ltd.	4 5 6	i386 x86_64	Yes	HTTP FTP	
Asia	Hong Kong	01LINK NETWORK SERVICES LIMITED	All	All	Yes	HTTP FTP RSYNC	
Asia	Hong Kong	CommuniLink Internet Limited	All	All	Yes	HTTP FTP	
Asia	Hong Kong	i-System Technology Limited	All	All	Yes	HTTP FTP	
Asia	Hong Kong	SunnyVision Limited	All	All	Yes	HTTP	
Asia	India	AOL Online India Pvt. Ltd.	All	All	Yes	HTTP	
Asia	India	Cyber Futuristics India Pvt Ltd - Go4hos	All	All	Yes	HTTP FTP RSYNC	
Asia	India	Honesty Net Solutions (I) Pvt Ltd	All	All	Yes	HTTP	
Asia	India	Indian Institute of Technology, Madras	All	i386 x86_64	Yes	HTTP FTP RSYNC	
Asia	India	National Brain Research Centre	All	All	Yes	HTTP	
Asia	Indonesia	Biznet Networks	All	All	Yes	HTTP RSYNC	
Asia	Indonesia	DATAUTAMA-NET-ID	All	All	Yes	HTTP	
Asia	Indonesia	JR Webhost	All	All	Yes	HTTP	
Asia	Indonesia	Maxindo Mitra Solusi, PT. Maintain by RNDK Indonesia.	All	All	Yes	HTTP RSYNC	
Asia	Japan	FAIRWAY Corporation	All	All	Yes	HTTP FTP	
Asia	Japan	Internet Initiative Japan Inc.	All	All	Yes	HTTP FTP RSYNC	
Asia	Japan	JAIST	All	All	Yes	HTTP FTP RSYNC	
Asia	Japan	KDDI R&D Laboratories Inc.	All	All	Yes	HTTP FTP RSYNC	
Asia	Japan	NARA Inst of Science and Technology	All	All	Yes	HTTP FTP RSYNC	
Asia	Japan	RIKEN Research Institute	All	All	Yes	HTTP FTP RSYNC	
Asia	Japan	WIDEProject Tsukuba NOC	All	All	Yes	HTTP	
Asia	Kazakhstan	Neolabs LLP	All	All	Yes	HTTP FTP RSYNC	
Asia	Korea	AoneNetworks Co.,Ltd.	All	All	Yes	HTTP	
Asia	Korea	CDNetworks Co., Ltd.	All	All	Yes	HTTP FTP	
Asia	Korea	Daum Communications Corp	All	All	Yes	HTTP FTP	
Asia	Korea	NeowizGames corp.					FTP RSYNC
Asia	Korea	TODAY&TOMORROW CO., LTD.					
Asia	Korea	Yongbok.net					FTP
Asia	Malaysia	Hostemo Technology Sdn Bhd	All	All	Yes	HTTP	
Asia	Malaysia	IP ServerOne Solutions Sdn Bhd	All	All	Yes	HTTP	
Asia	Malaysia	OSCC MAMPU	4 5 6	All	Yes	HTTP	
Asia	Malaysia	Universiti Teknologi Malaysia	All	All	Yes	HTTP RSYNC	

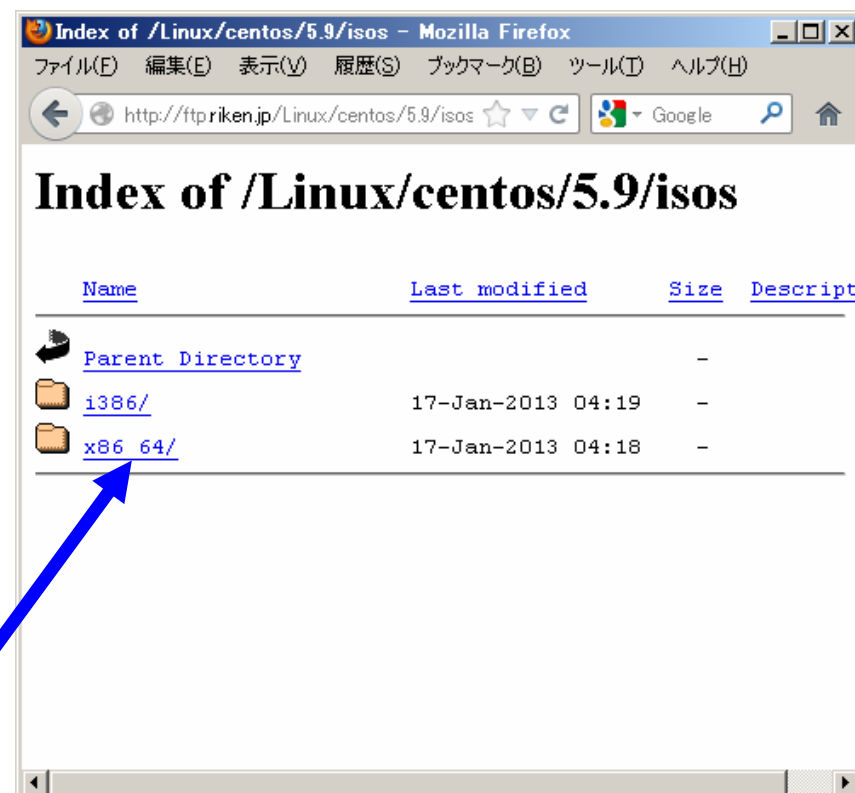
HTTPでダウンロード



最新版はCentOS5.9



isoファイル置き場



64bit版

Index of /Linux/centos/5.9/isos/x86_64 - Mozilla Firefox

ファイル(E) 編集(E) 表示(V) 履歴(S) ブックマーク(B) ツール(T) ヘルプ(H)

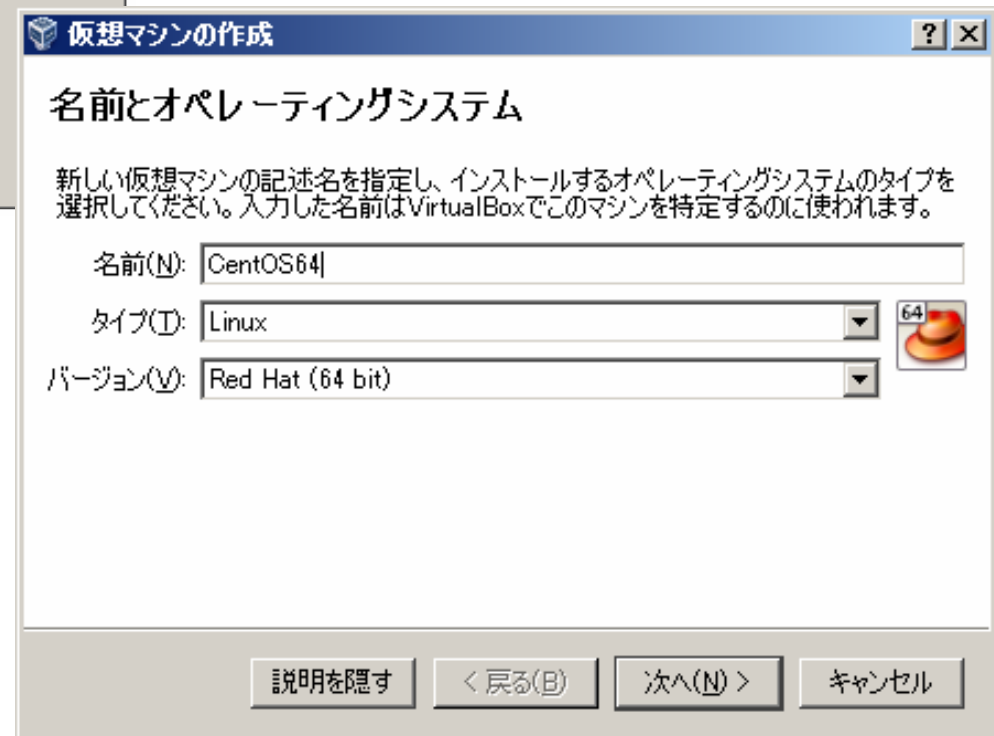
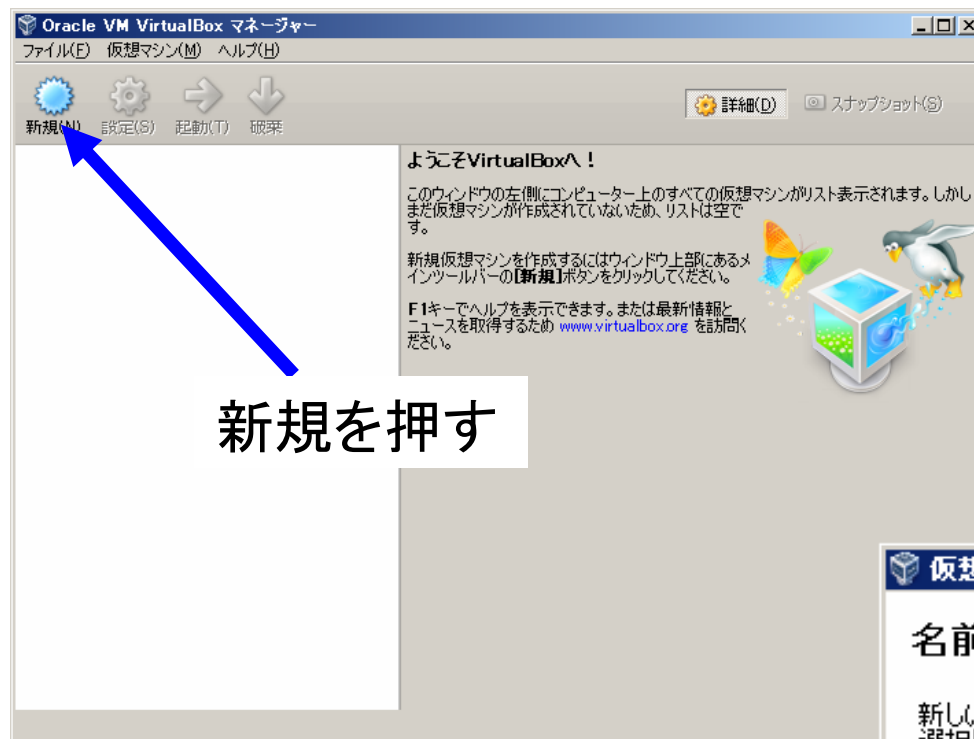
http://ftpriken.jp/Linux/centos/5.9/isos/x86_64/

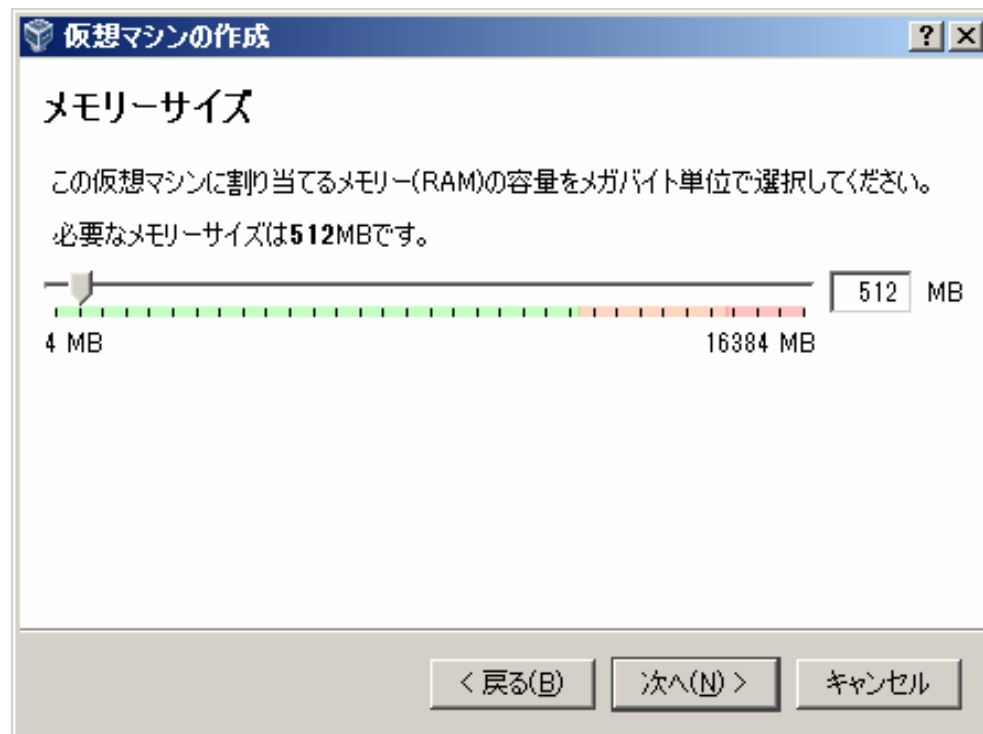
Index of /Linux/centos/5.9/isos/x86_64

Name	Last modified	Size
Parent Directory	-	-
 CentOS-5.9-x86_64-bin-1of9.iso	12-Jan-2013 04:10	625M
 CentOS-5.9-x86_64-bin-1to9.torrent	17-Jan-2013 04:14	204K
 CentOS-5.9-x86_64-bin-1to9.torrent.md5sum.txt	17-Jan-2013 04:18	69
 CentOS-5.9-x86_64-bin-1to9.torrent.md5sum.txt.asc	17-Jan-2013 03:30	305
 CentOS-5.9-x86_64-bin-1to9.torrent.sha1sum.txt	17-Jan-2013 04:18	77
 CentOS-5.9-x86_64-bin-1to9.torrent.sha1sum.txt.asc	17-Jan-2013 03:30	313
 CentOS-5.9-x86_64-bin-1to9.torrent.sha256sum.txt	17-Jan-2013 04:18	101
 CentOS-5.9-x86_64-bin-1to9.torrent.sha256sum.txt.asc	17-Jan-2013 03:30	337
 CentOS-5.9-x86_64-bin-2of9.iso	12-Jan-2013 04:10	606M
 CentOS-5.9-x86_64-bin-3of9.iso	12-Jan-2013 04:10	631M
 CentOS-5.9-x86_64-bin-4of9.iso	12-Jan-2013 04:10	634M
 CentOS-5.9-x86_64-bin-5of9.iso	12-Jan-2013 04:10	604M
 CentOS-5.9-x86_64-bin-6of9.iso	12-Jan-2013 04:10	637M
 CentOS-5.9-x86_64-bin-7of9.iso		
 CentOS-5.9-x86_64-bin-8of9.iso	12-Jan-2013 04:10	182M
 CentOS-5.9-x86_64-bin-9of9.iso	12-Jan-2013 04:10	182M
 CentOS-5.9-x86_64-bin-DVD-1of2.iso	14-Jan-2013 21:23	4.4G
 CentOS-5.9-x86_64-bin-DVD-2of2.iso	14-Jan-2013 21:23	718M
 CentOS-5.9-x86_64-bin-DVD.torrent	17-Jan-2013 04:13	203K

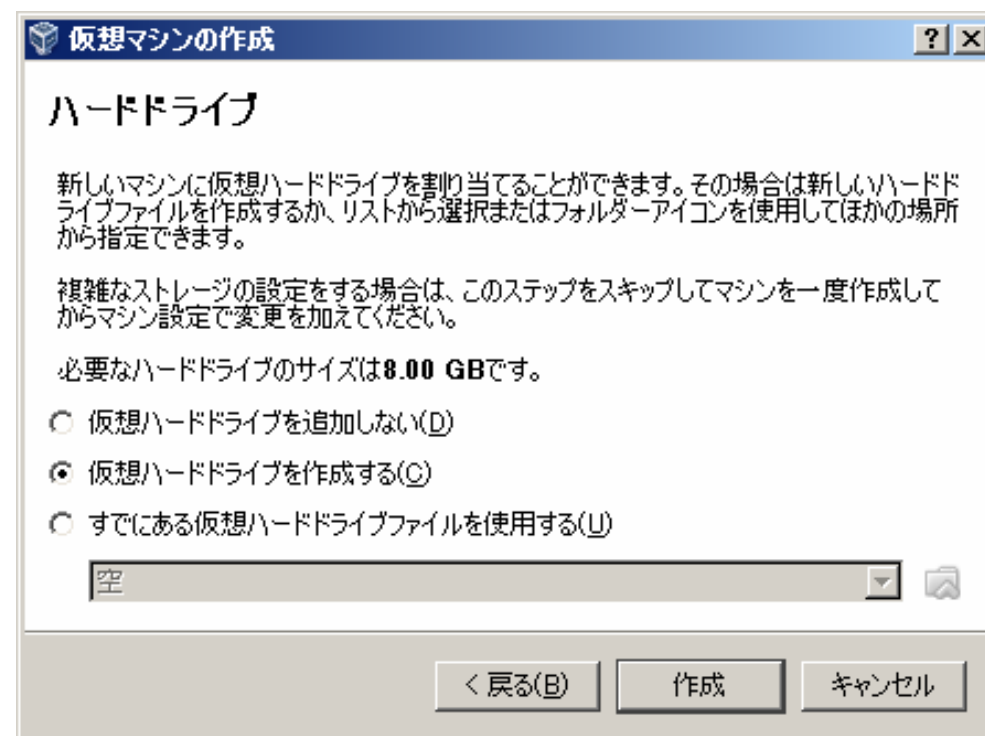
DVD版 1 of 2だけでOK

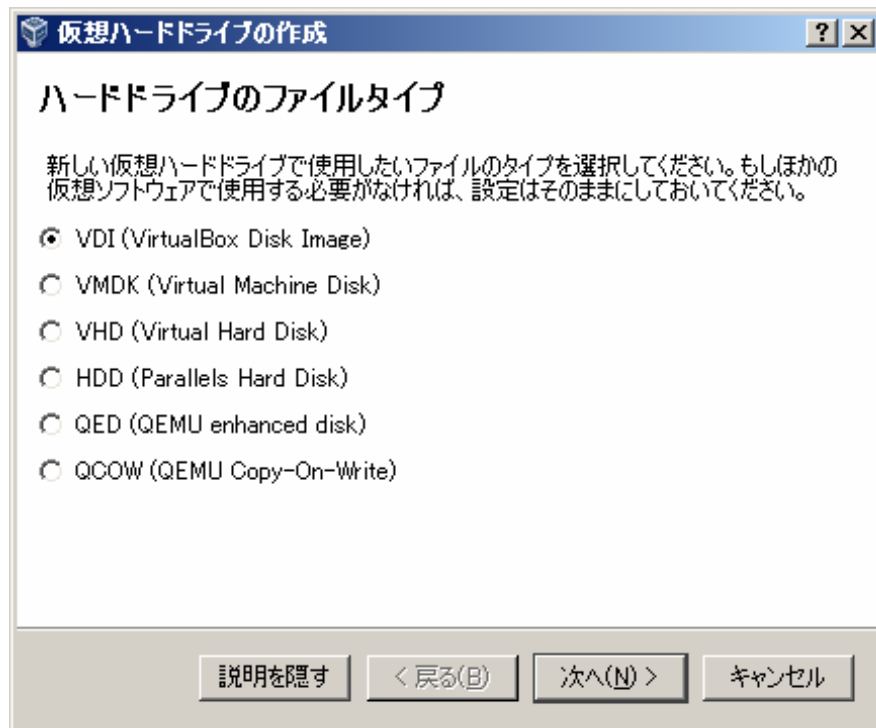
仮想OSのインストール準備（～5分）





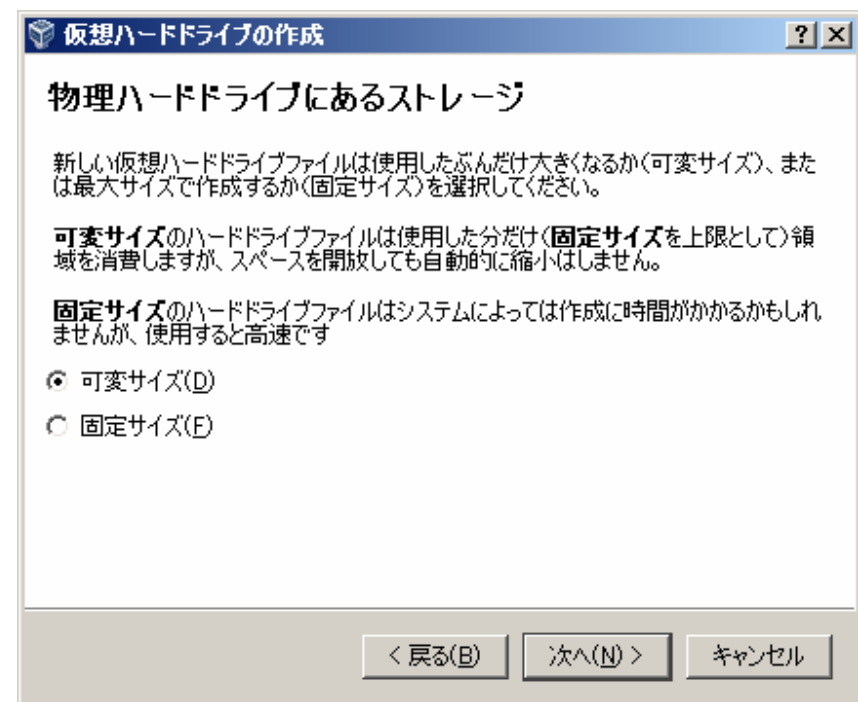
メモリのサイズは後で変更できます



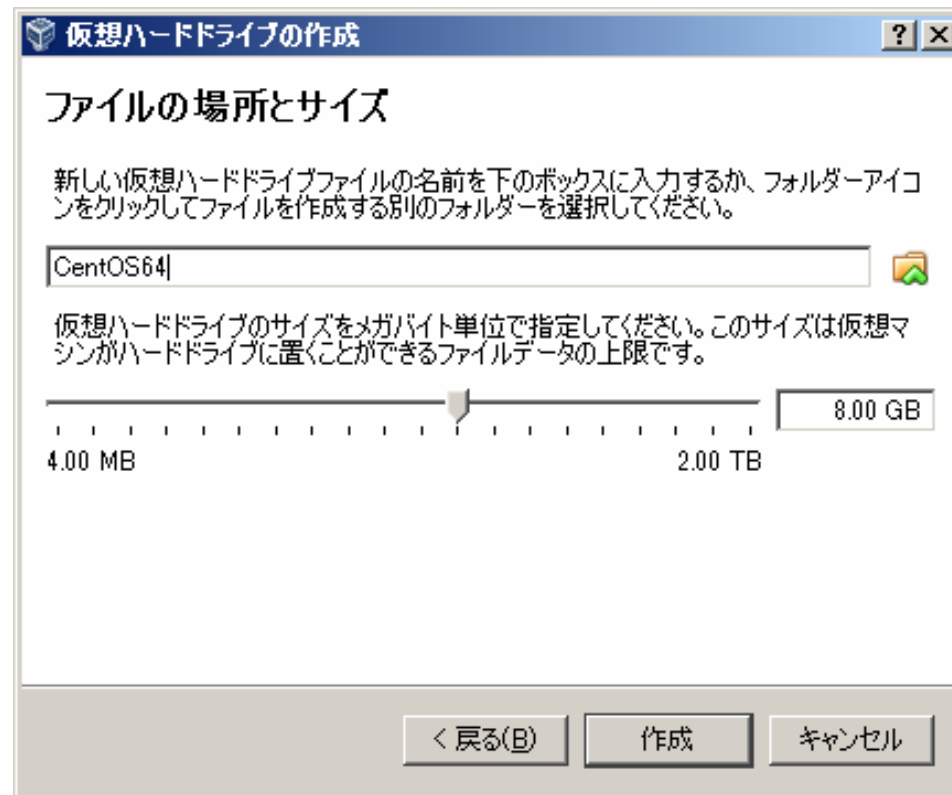


とりあえずVDIを選びます

可変サイズをお勧めします



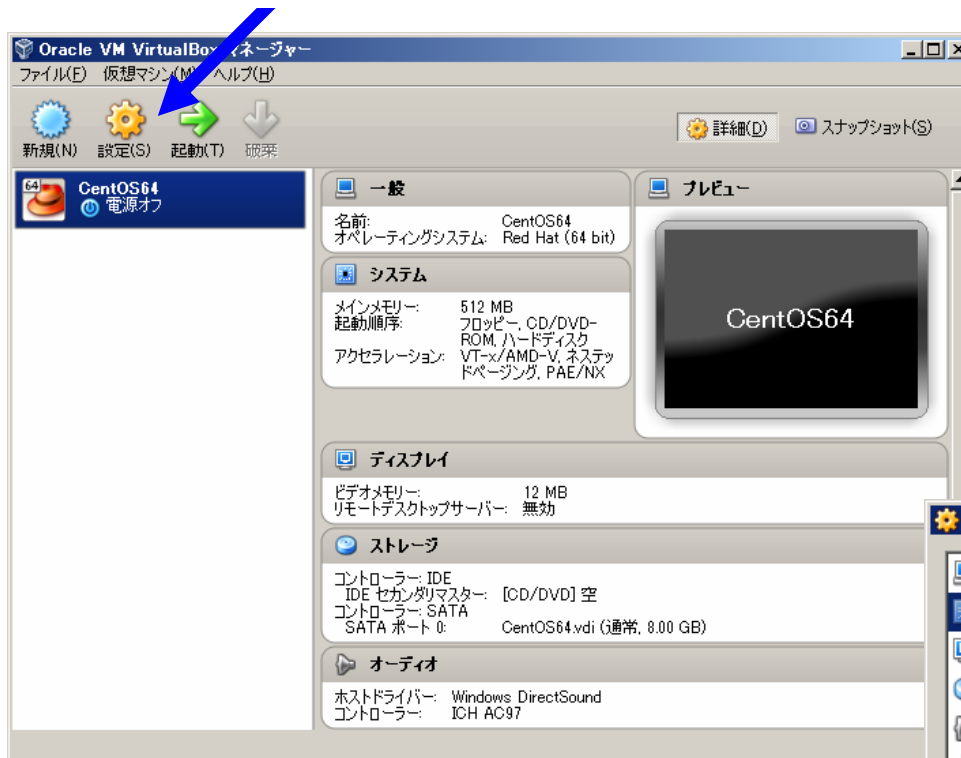
ファイルのサイズを決めるが結構大事です



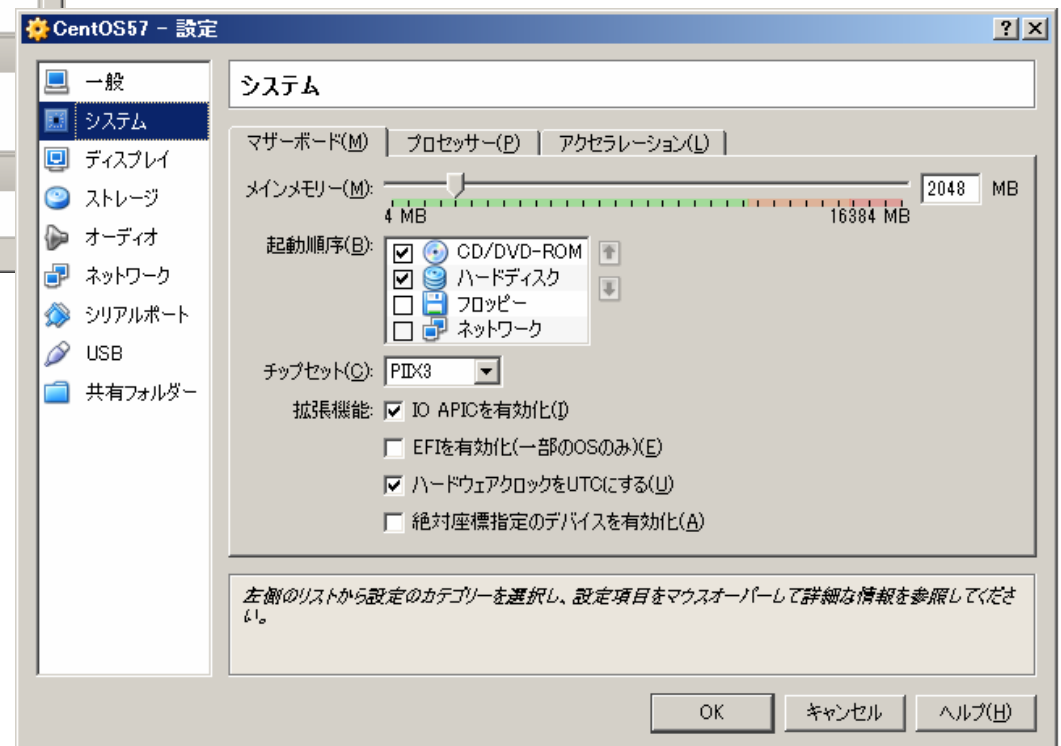
後でサイズを小さくするのは**とても大変です**！
一方、パーティションを増やす、削除するのは簡単です

仮想OSインストール設定（～5分）

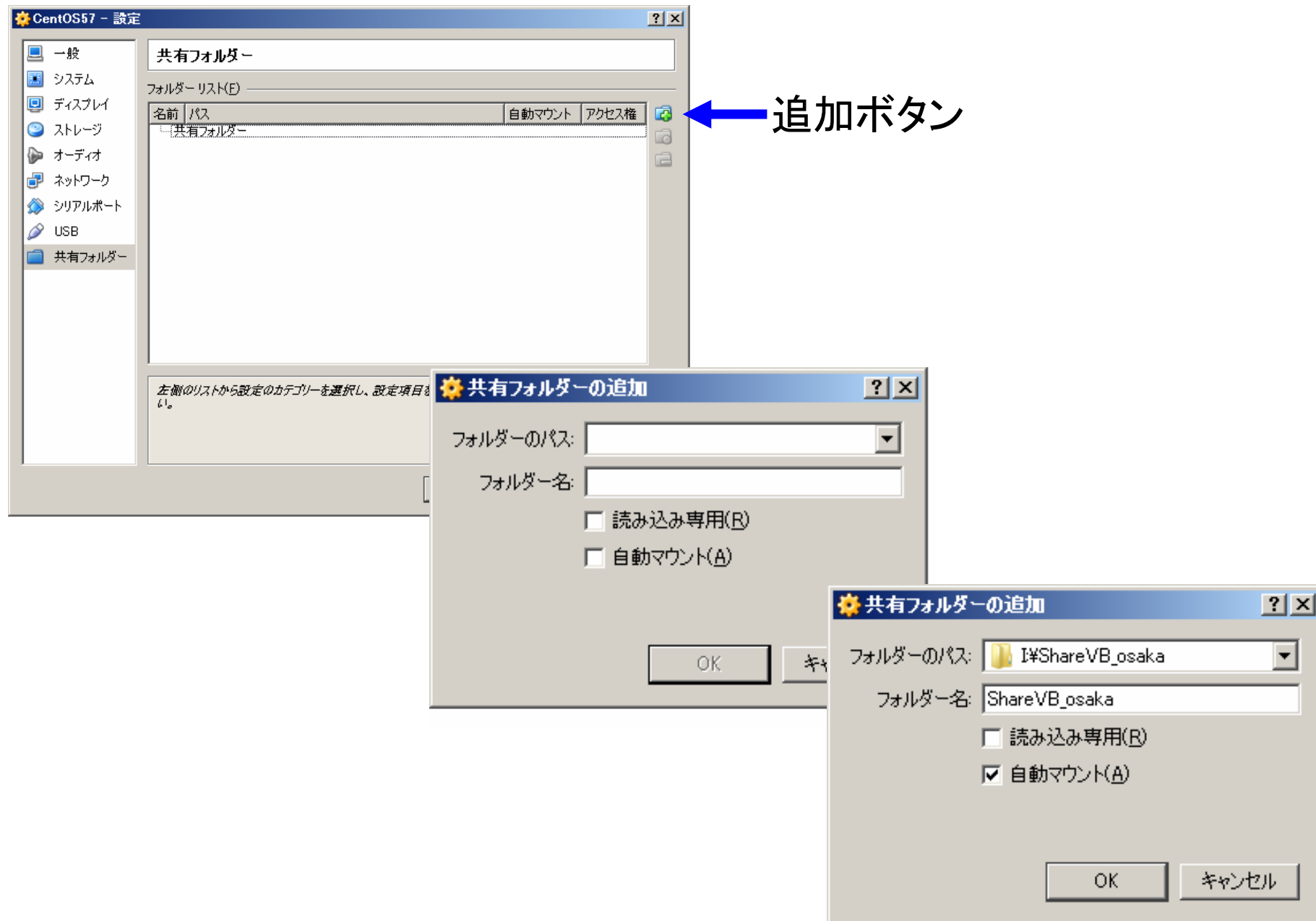
設定ボタンから



搭載メモリ、CPU数などの設定

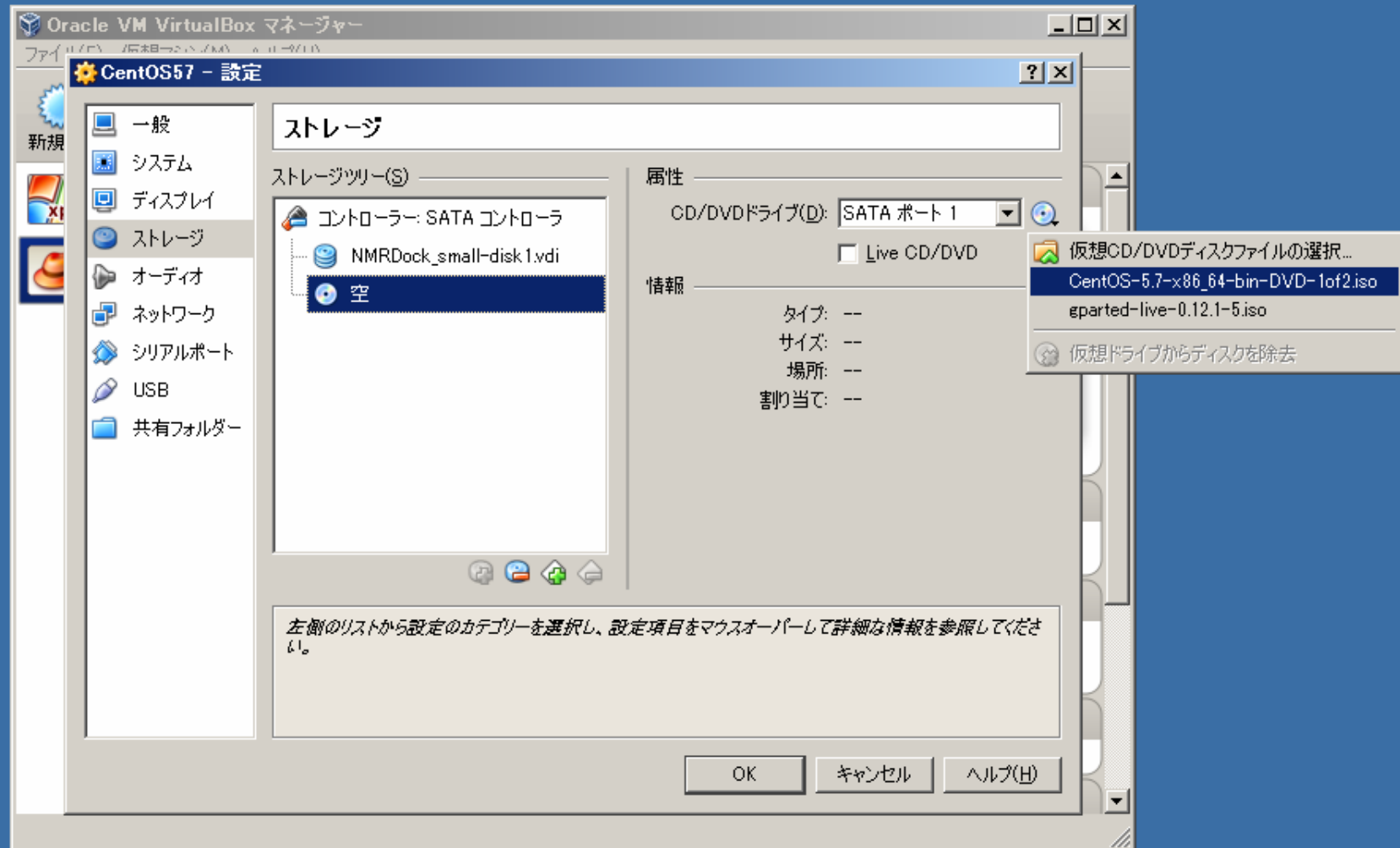


共有フォルダーの設定（～5分）

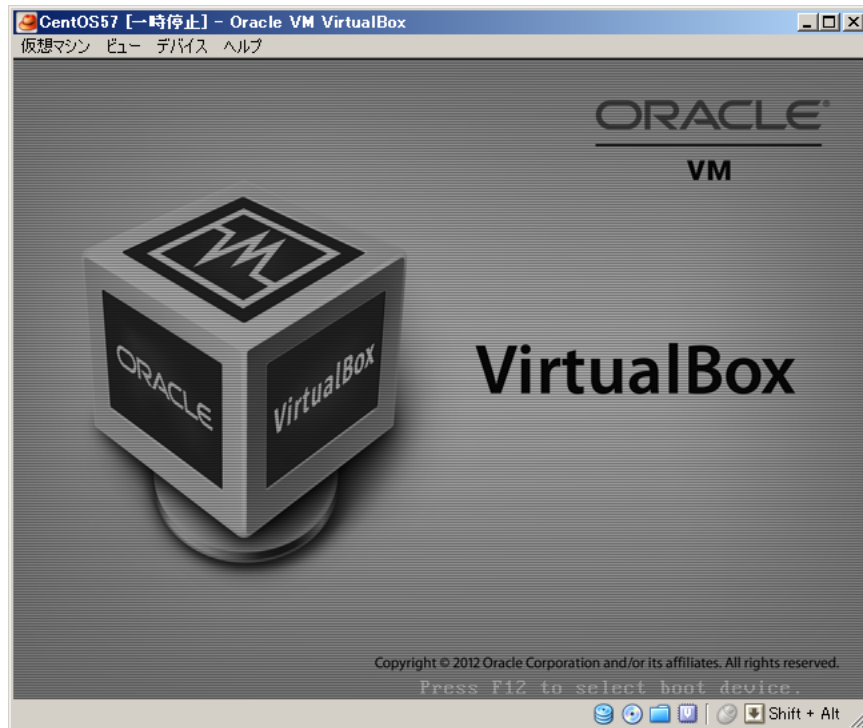


仮想OSインストールの設定（～5分）

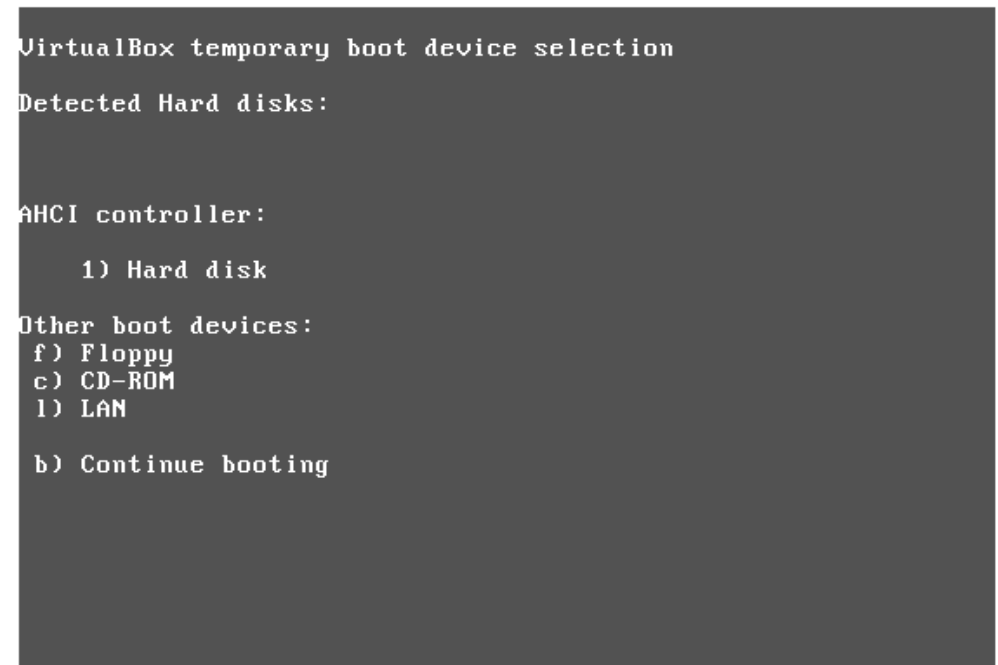
先ほどダウンロードしてきたCentOSインストールファイルを指定



仮想OSインストールの開始



この画面で素早くF12を押します

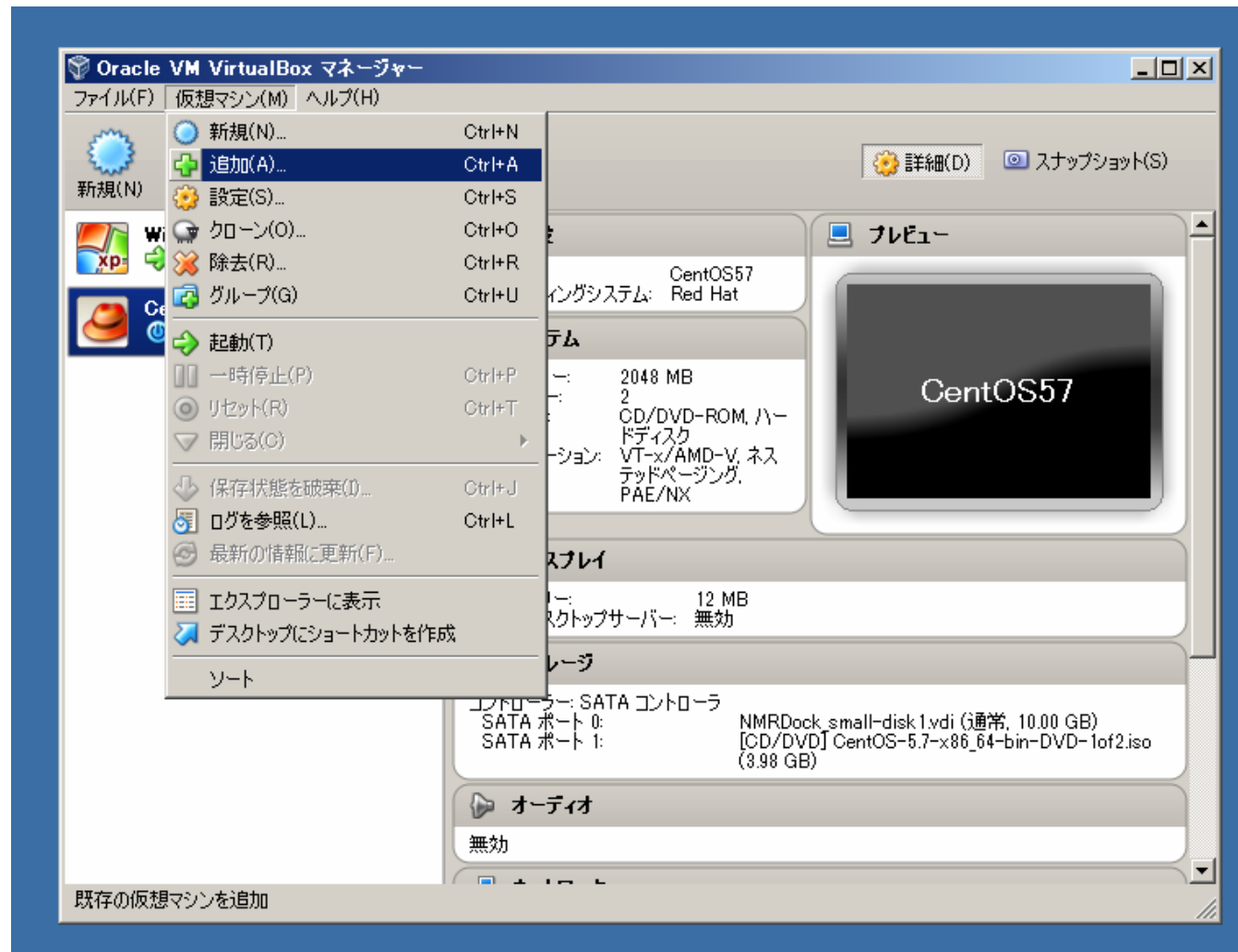


Cを押します

これ以降は通常のCentOSのインストールです・・・
慣れないと結構時間が掛かります

仮想OSイメージの運用

仮想OSイメージの読み込み

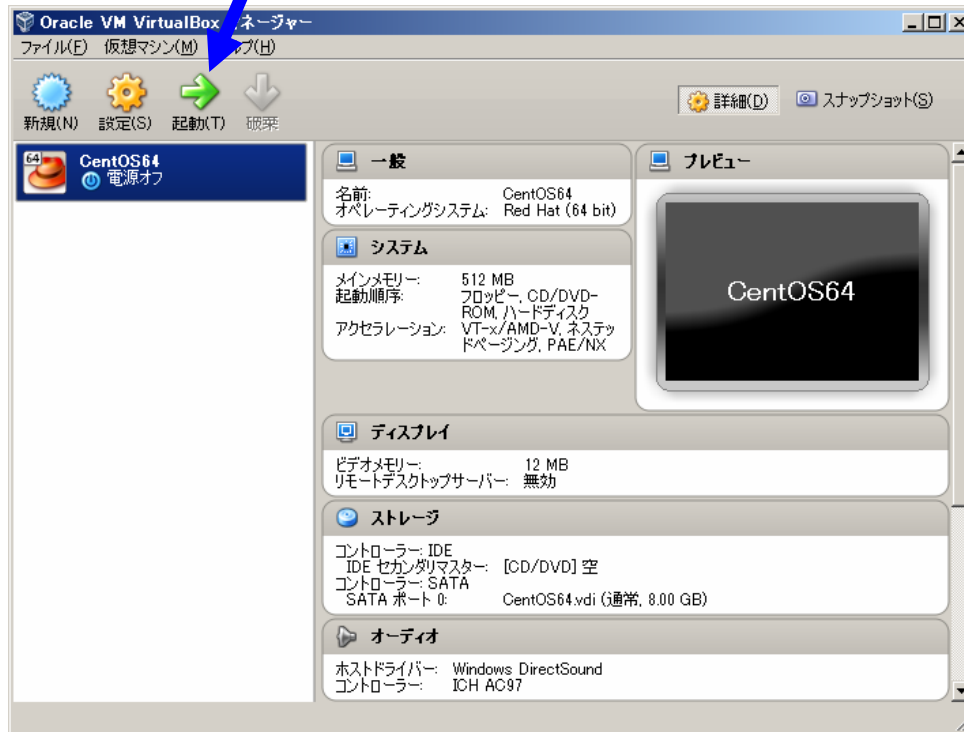


ただ読み込むだけ、エラーが出なければOK!

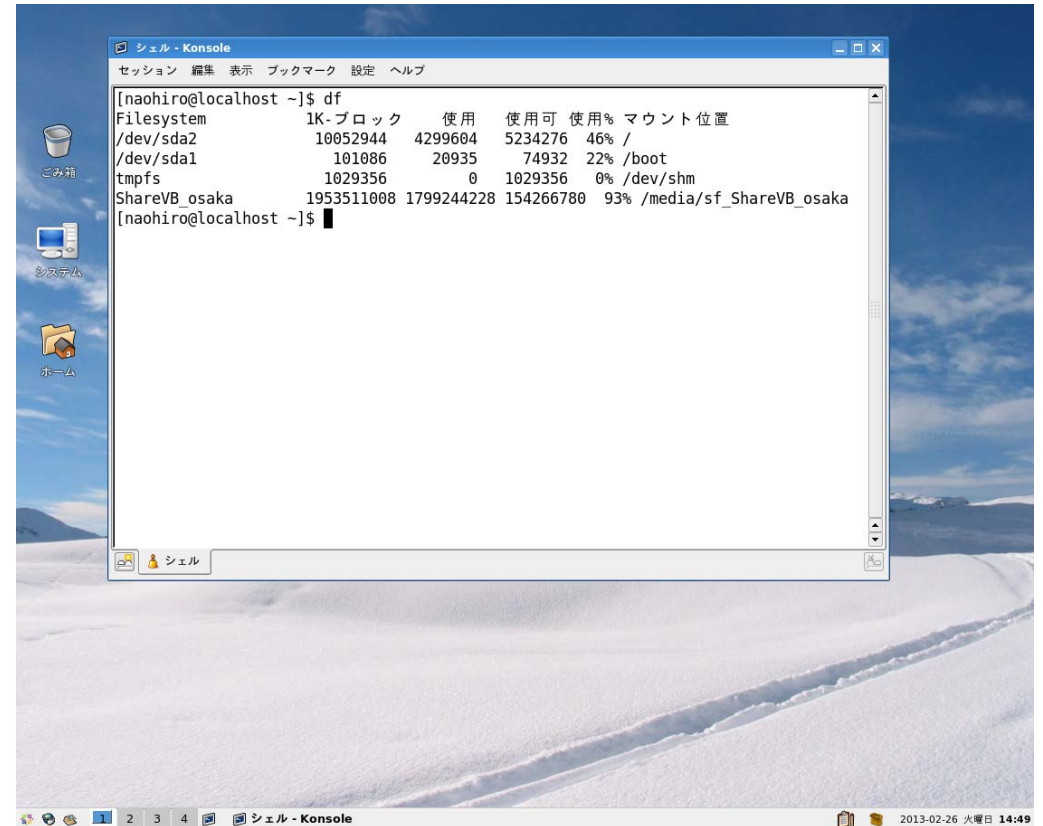
メモリ、CPU数、共有フォルダなどは再設定します

仮想OSイメージの起動

起動ボタン



これもエラーが出なければOK!

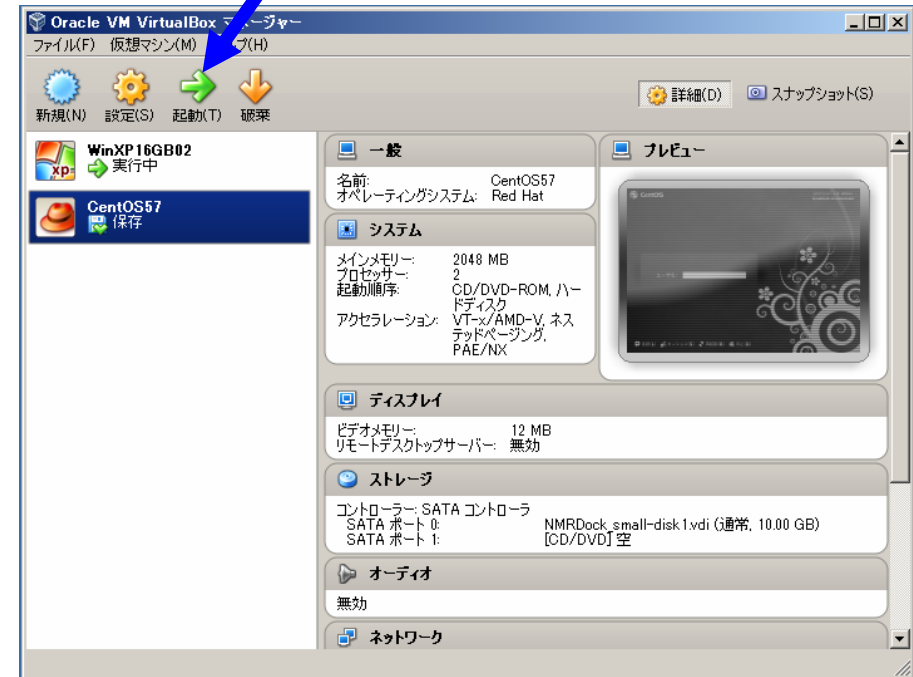


めでたく起動できました！

仮想OSイメージの一時停止

Windowを閉じるだけ

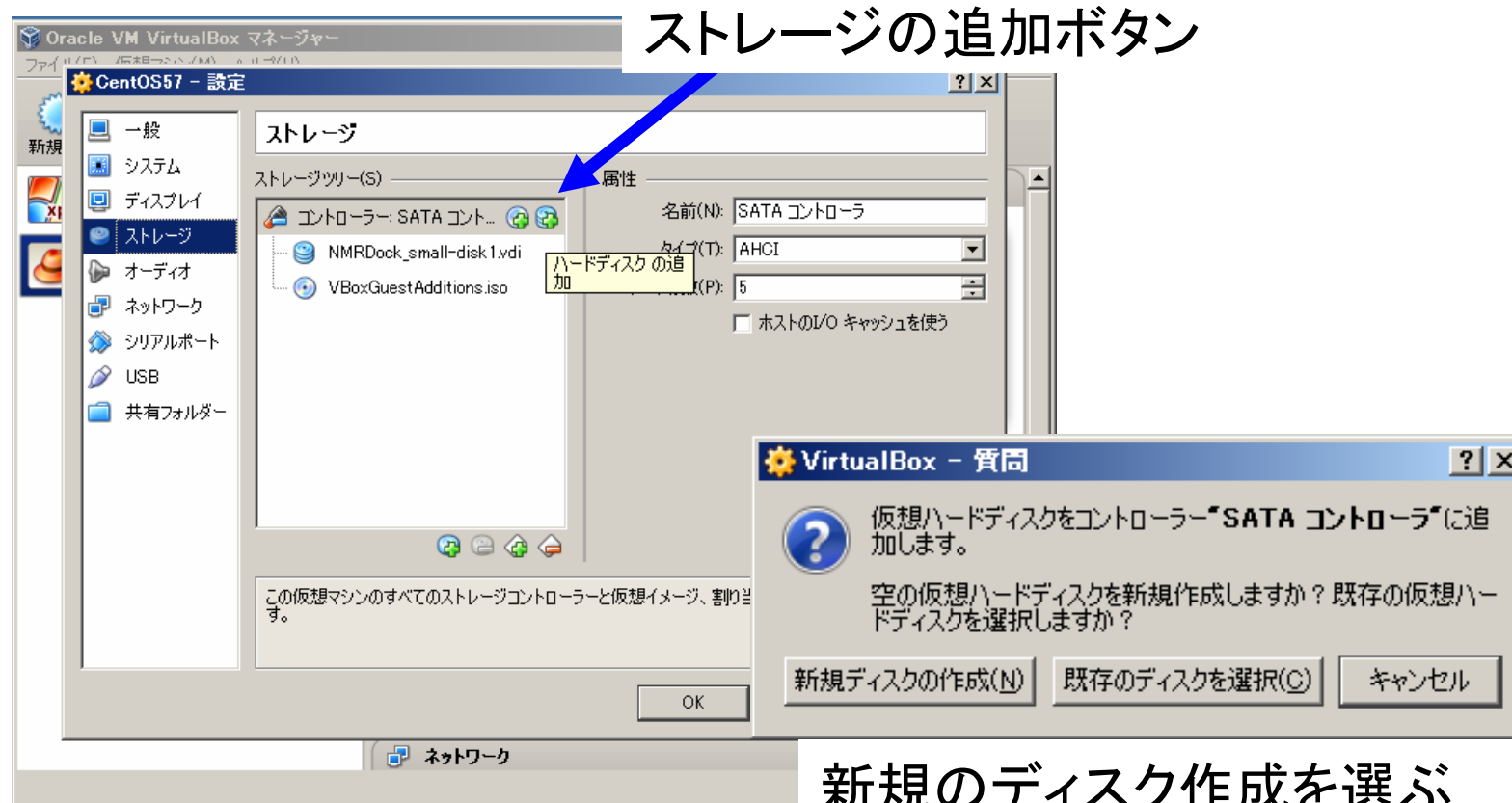
一時停止状態から復帰できる



仮想マシンの状態を保存する

(注) たまに復帰できないことがあります！

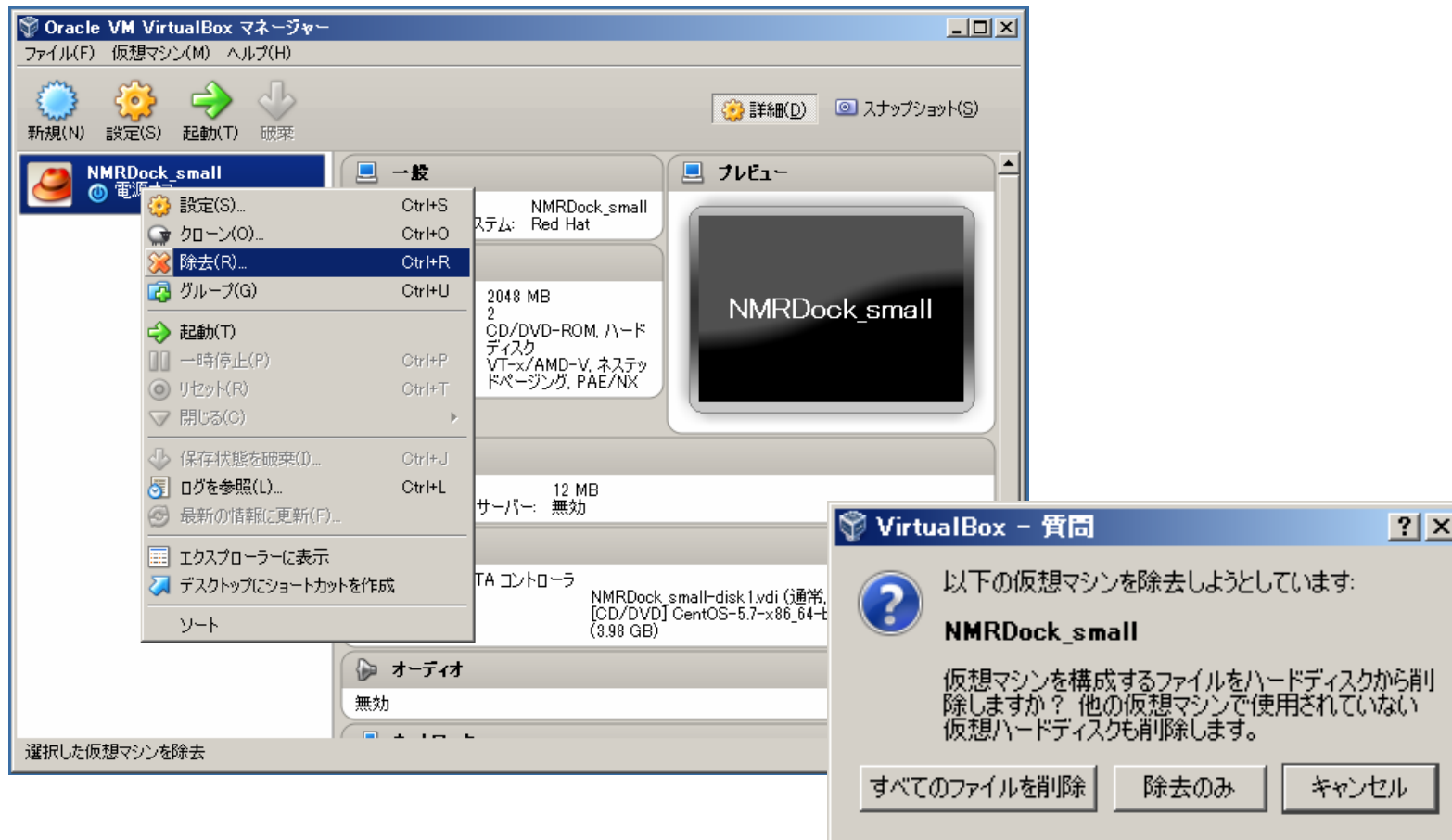
仮想ハードディスクの追加（削除）



この後はVDI、可変サイズなどを選んでサイズを決めます
くれぐれもあまり大きなサイズにしないように
(8GBくらいがよいでしょう)

ディスクの削除は逆の操作を行います

仮想マシンの削除

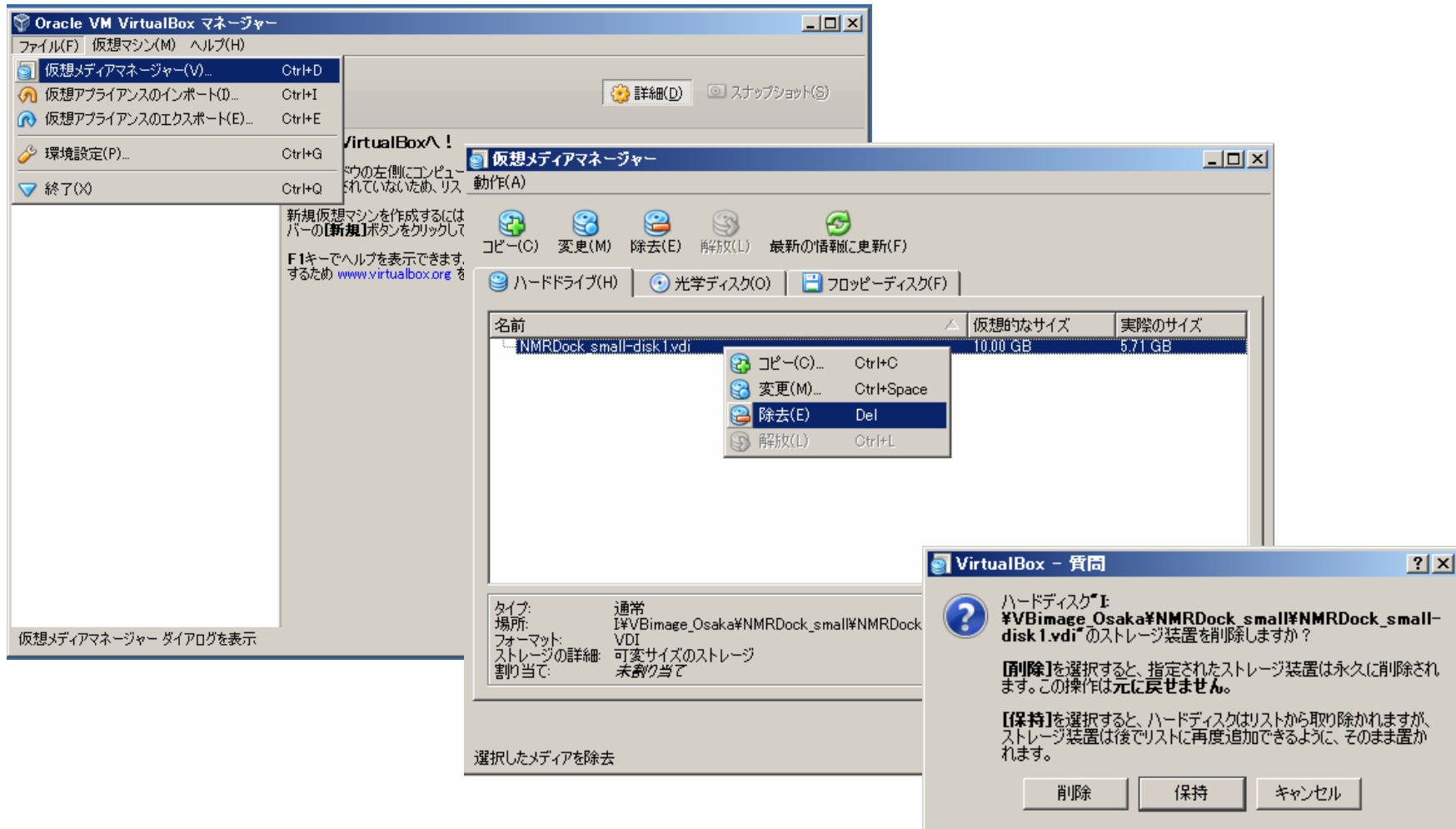


”除去のみ”を選びます

(注) ”すべてのファイルを削除”を選ぶと本当にみんな消されてしまいます。慎重に操作してください。

仮想マシンの削除(つづき)

仮想ディスクマネージャーから稼働中のディスクを除去します

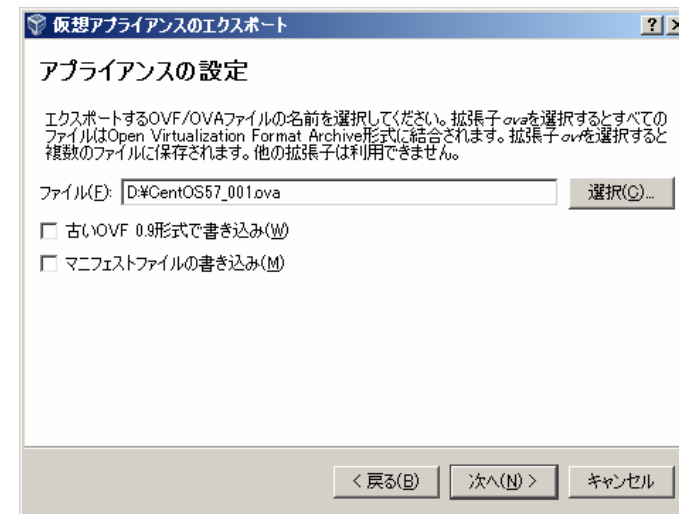
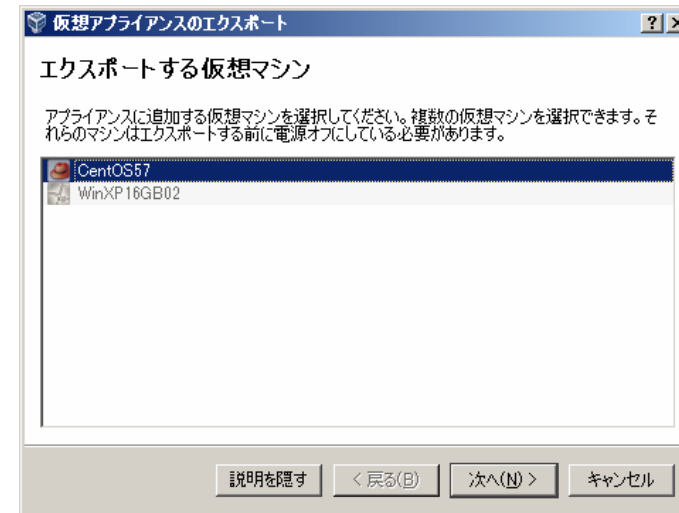
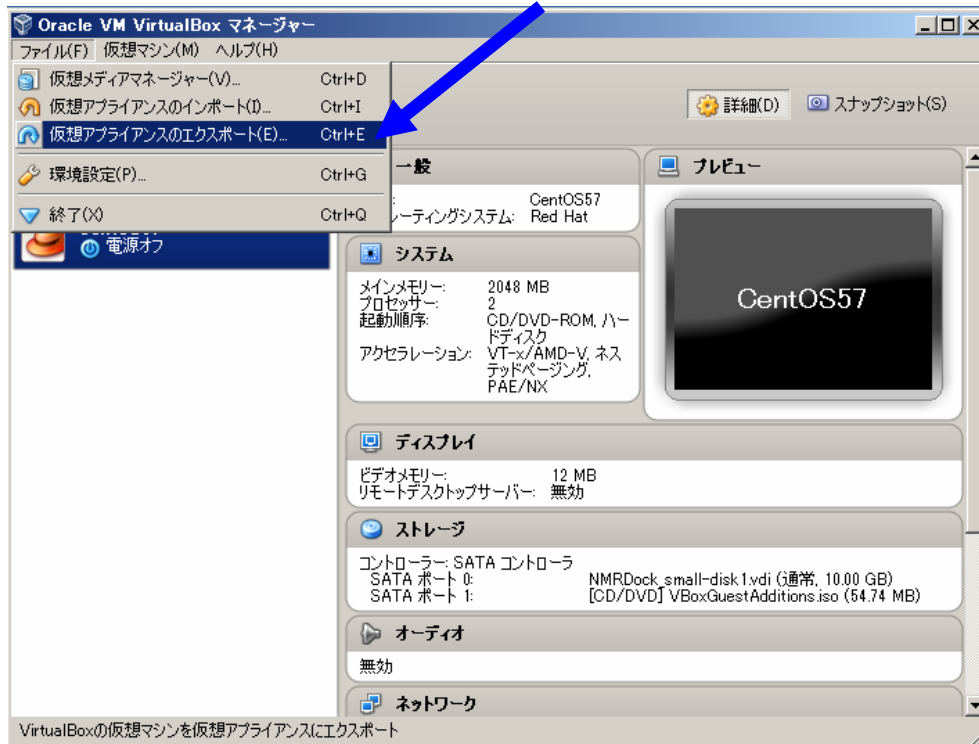


保持を選びます

(注) ”削除”を選ぶと本当にディスクを消されてしまいます。
面倒ですが慎重に操作してください。

仮想マシンのバックアップを取る

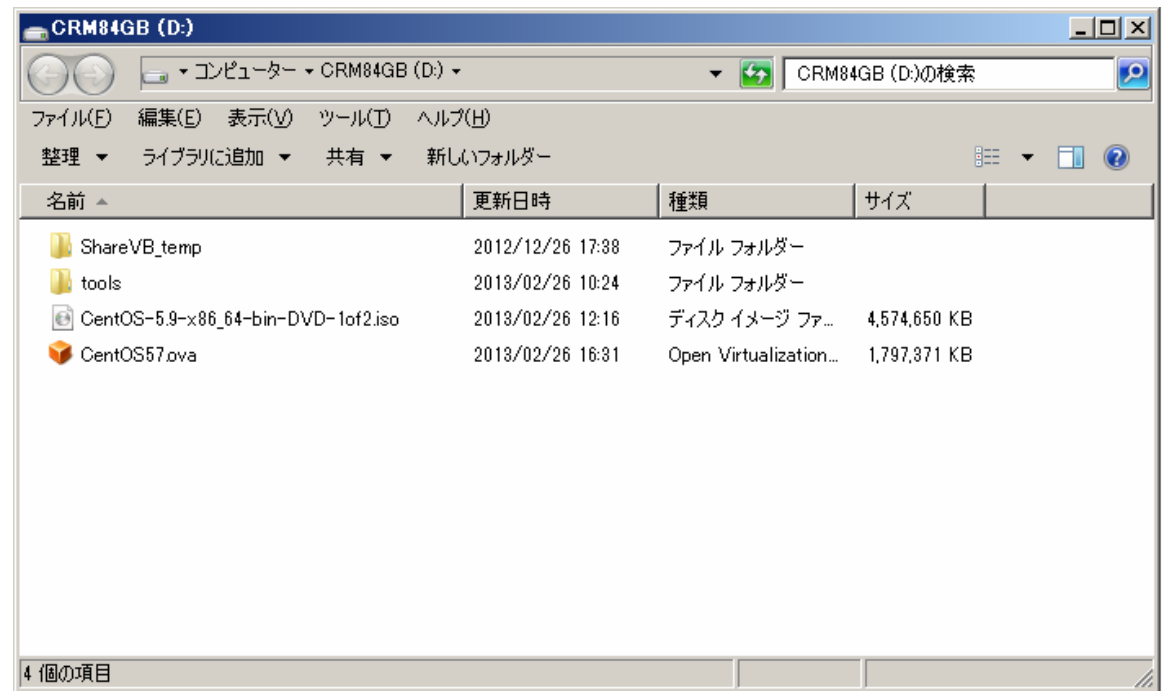
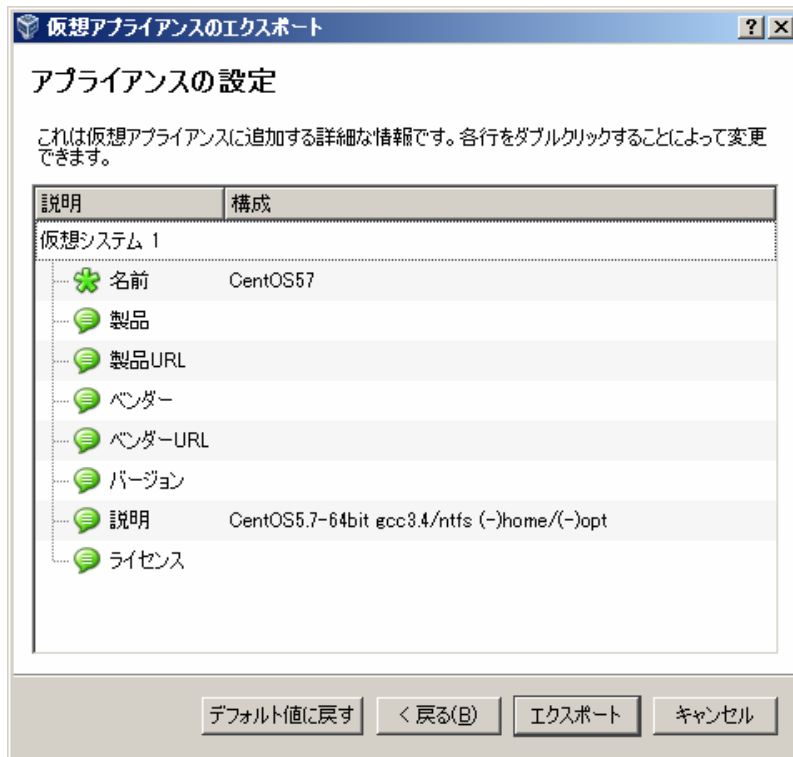
仮想アプライアンスのエクスポートを選びます



アプライアンスの保存場所とファイル名を指定します

仮想マシンのバックアップを取る（つづき）

仮想アプライアンスの設定



エクスポートを押すとovaファイル作成が始まります
数分掛かりますが、3分の1ほどのサイズになります

仮想アプライアンスの読み込み



ovaファイルを指定するだけです。
エラーが出なければ成功！

次回の中級編を企画中...

クラウドストレージの利用（仮想OSから使用）

Dropbox, iCloudなど *google->Dropbox*

出張先などでファイル共有できる

PC, サーバー, タブレット、携帯電話などあらゆる
端末で使用可能



パーティションサイズの縮める（結構難しい！）

空き領域をzeroで埋め、gpartedによりパーティション
を縮め、vboxmanageでshrinkさせる

google->"virtualbox パーティション 縮小"

次回の中級編を企画中・・・(つづき)

仮想PC間での並列計算

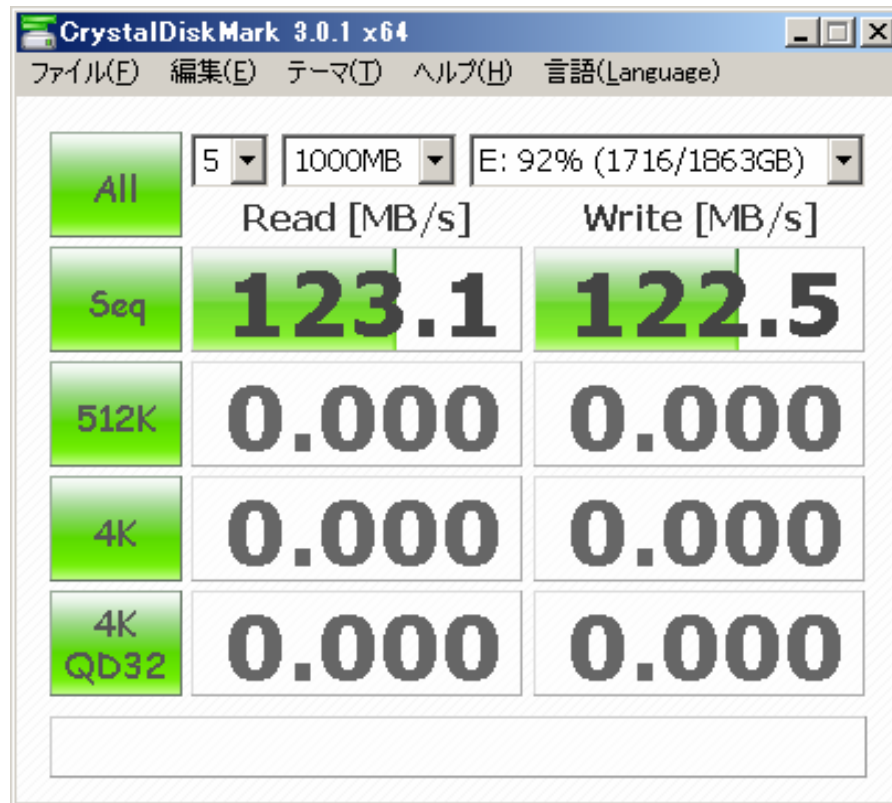
ネットワークカードをburiidgeに設定し、通常の
OpenMPIでの並列計算環境を構築する

google->"virtualbox OpenMPI"

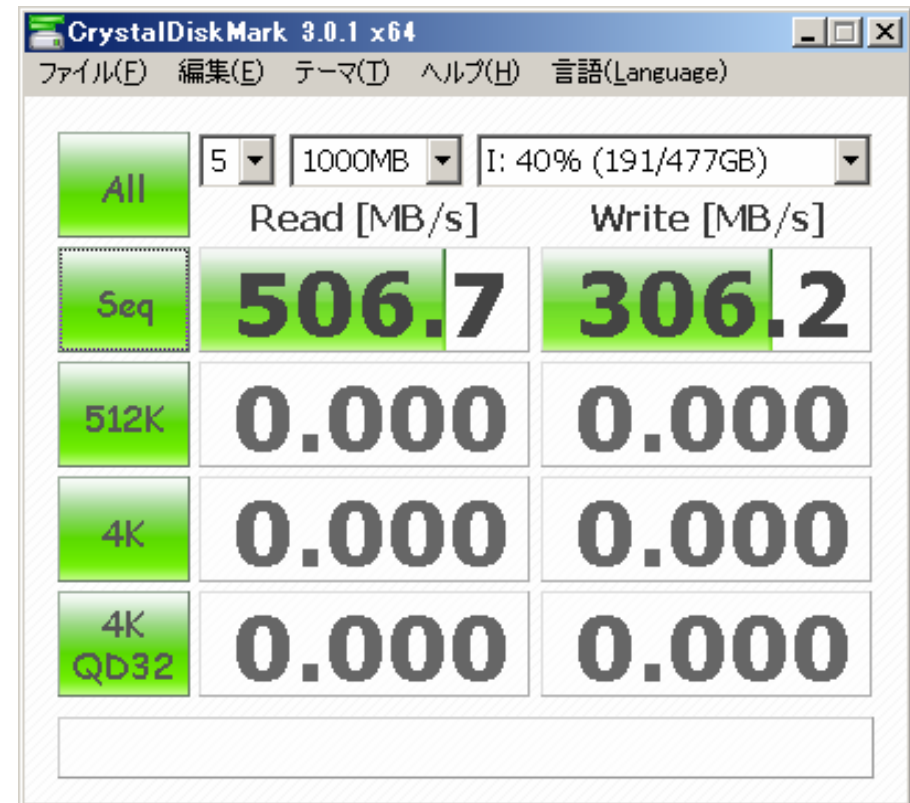
物理マシンから仮想マシンへ変換する

VMWareの変換ツール、Paragon Virtualization
Managerなどを使う

SSDを使いましょう



3.5インチハードディスク2TB



2.5インチSSD 512GB

(注)非常にまれですがデータが破壊されることがありますので
バックアップは頻繁にとる必要があります

秘訣として・・・

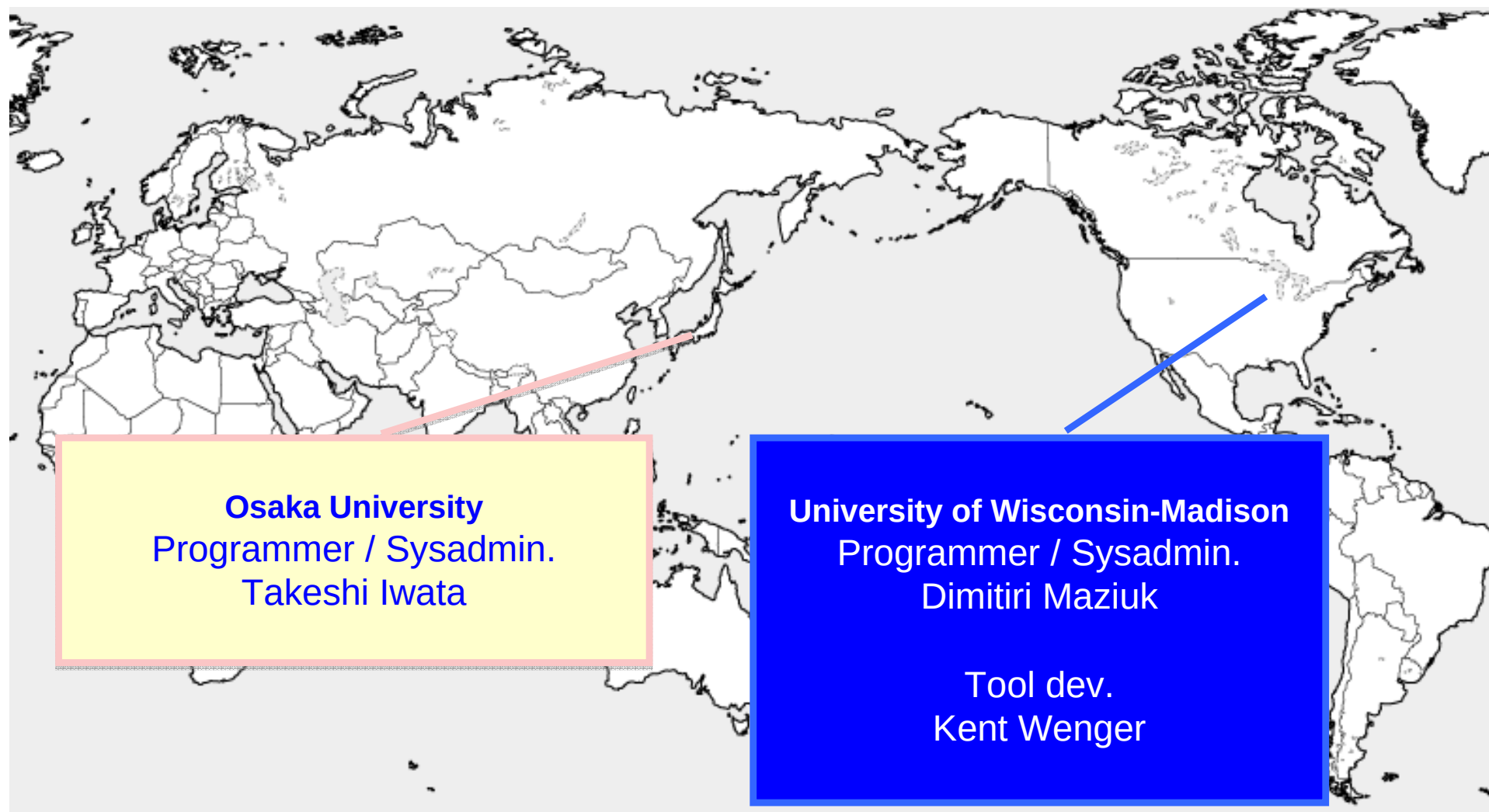
分からなければまず、ググれ！

バックアップを取るべし

著作権をまもるべし

PDBj-BMRBにより開発されたツール群の紹介

NMRデータベースの運用・開発とその連携



研究者の要望を元に、互いに連携しながら機能の向上を目的に開発を行なっている。

ADIT-NMR Entry Start Page - Mozilla Firefox

nmradit.protein.osaka-u.ac.jp/bmr-b-adit/

RCSB PDB PROTEIN DATA BANK

BMRB

Auto Dep Input Tool

Tutorial BMRB Home PDB Home Contact us

ADIT-NMR tool for creating individual or combined depositions to BMRB and PDB

The PDB entry requirements can be found on this page: <http://www.wwpdb.org/policy.html>

To create a new ADIT-NMR deposition
(including an NMR structure based on a previously deposited set of assigned chemical shifts):

- Press the BEGIN button

New ADIT-NMR Session

BEGIN

To continue with an existing session from

- Enter your session restart ID
- Press the CONTINUE SESSION button

Continue Previous Session

Session Restart ID
example: 2008-07-01.serverhostname.9999.L

To begin a new deposition using a previous session's restart ID
(metadata such as author names will be filled in from the previous deposition):

- Enter the previous deposition's Restart ID
- Press the NEW SESSION button

New Session Copied From Previous Deposition

Previous Session's Restart ID
example: 2006-07-01.serverhostname.9999.L

Please send any questions regarding your PDB entry to: deposit@deposit.rcsb.org
Please send any questions regarding your BMRB entry to: bmrhelp@bmr.b.wisc.edu
Questions, comments, and suggestions regarding the ADIT-NMR deposition tool itself can be sent to: nmradit@protein.osaka-u.ac.jp

Access to BMRB Biological NMR Data

www.bmr.b.wisc.edu/search/

BMRB

Biological Magnetic Resonance Data Bank

A Repository for Data from NMR Spectroscopy on Proteins, Peptides, Nucleic Acids, and other Biomolecules

Google Search

Search Archive	Validation Tools	Deposit Data	NMR Statistics	Spectroscopists' Corner	Programmers' Corner	Home
Site Map	FTP Access	Structural Genomics and other "omics"	Metabolomics	Educational Outreach	NMR Data Formats	Useful NMR Links

Search

Access to BMRB Biological NMR Data

Retrieve entry by BMRB accession number

By: ☒ Accession number ☐ Deposition code (explain the difference)

Find BMRB entries by ID

☐ Search references provided by entry author

☒ Search references generated by weekly BLAST search

Lookup table for the "find BMRB entries" form above:

Matched submitted BMRB-PDB entries:

list of matches derived from BLAST search, with extra information. See [README](#) for details.

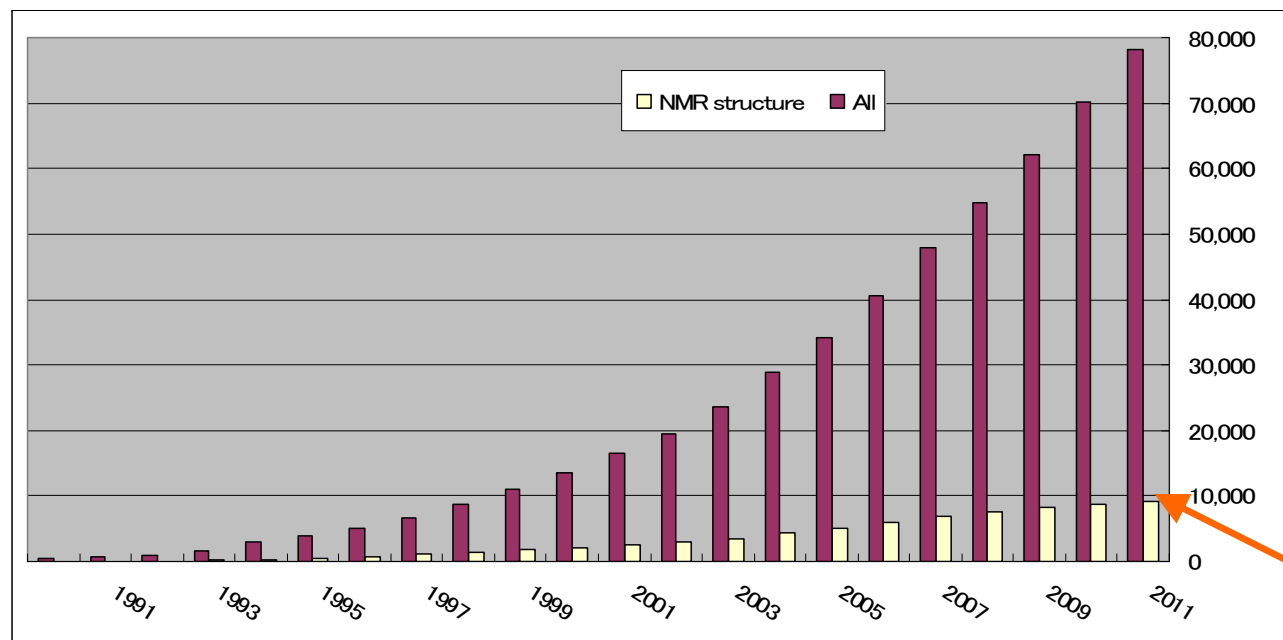
entries submitted to PDB and BMRB from the same deposition session

Search for substring(s) in entry titles

View NMR restraints by PDB ID

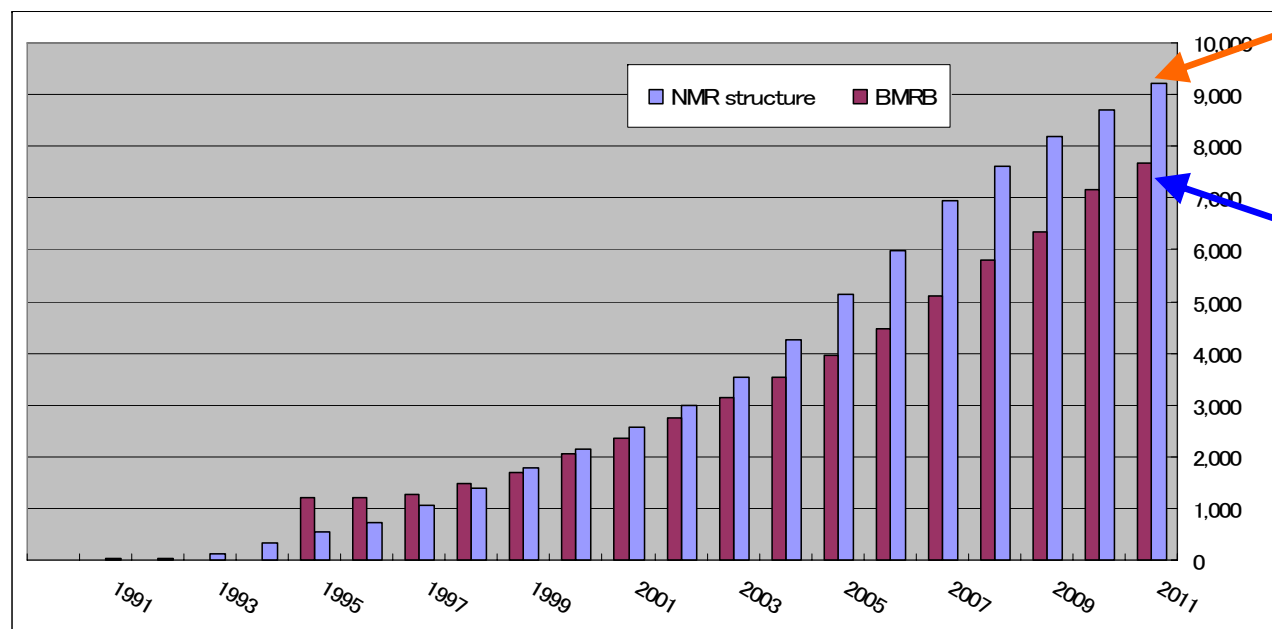
Experimental [Chemical Shift Query](#)

BMRB (BioMagResBank): 生体高分子NMRデータベース



NMR構造は年間500件以上
BMRBエントリーは600件以上
のペースで増え続けている

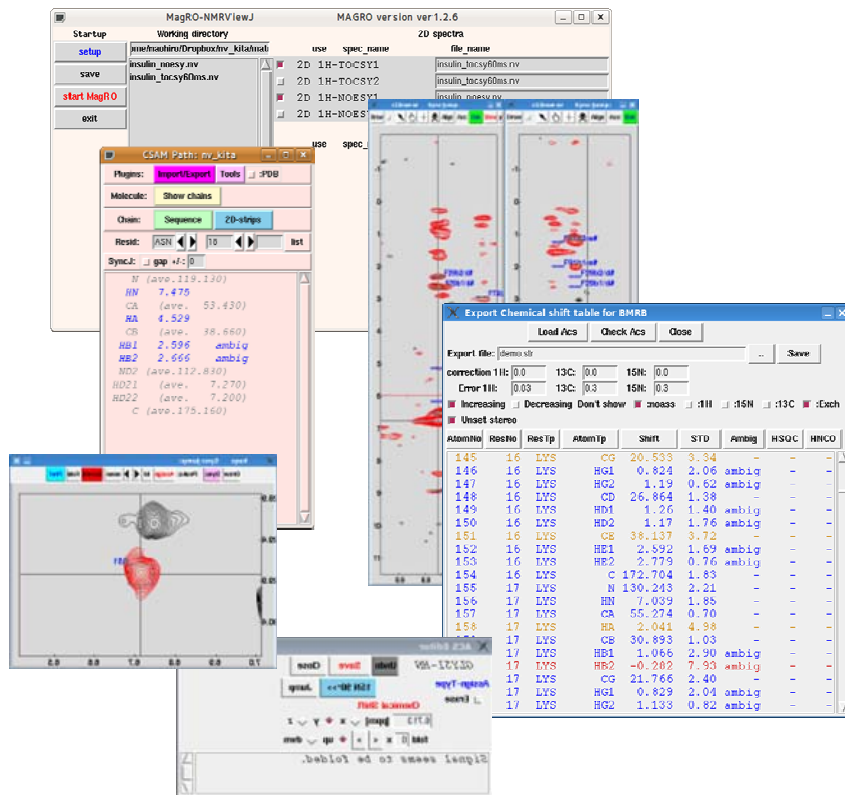
2011年12月末の時点で
NMR構造は約9,200件



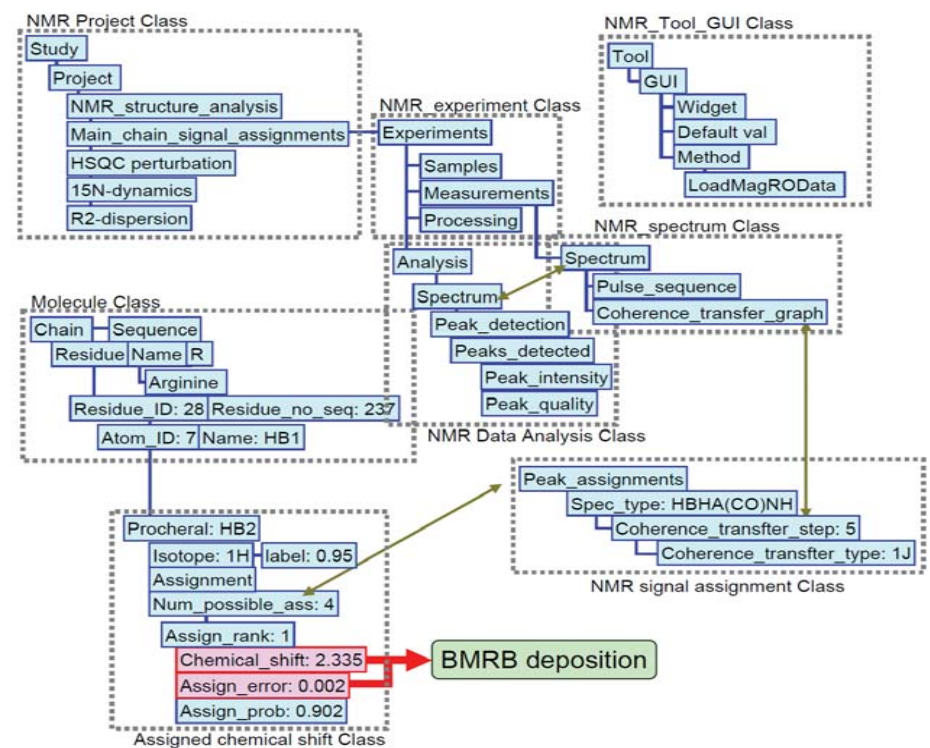
BMRBエントリーは約7,600件
に達している

MagRO-NMRView: NMRデータ解析とデータベース登録支援

GUIによるNMRデータの解析と登録準備の支援機能

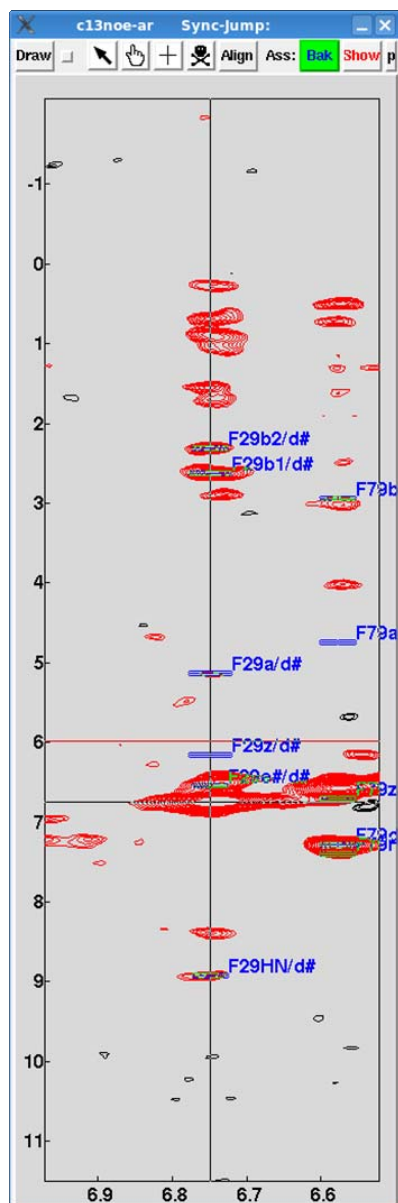


MagRO-NMRViewがサポートする 複雑なNMR実験データの構造

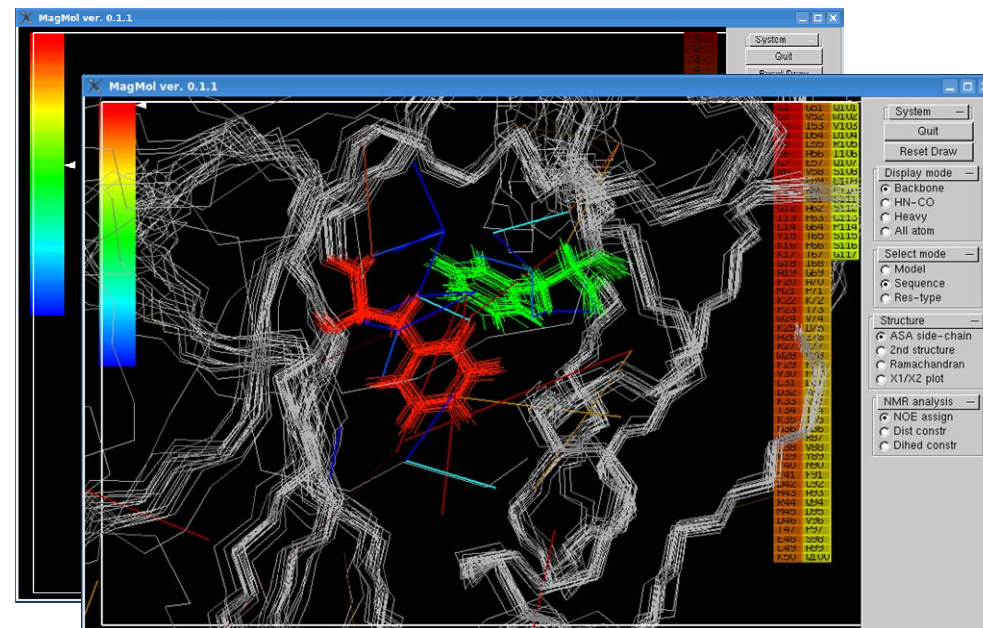
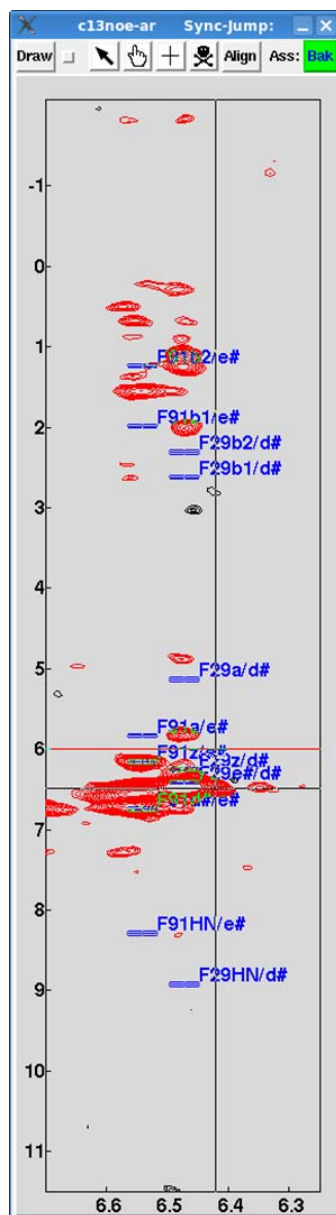


MagRO-Mol: NMR構造、NOE解析データの表示

正しい側鎖帰属

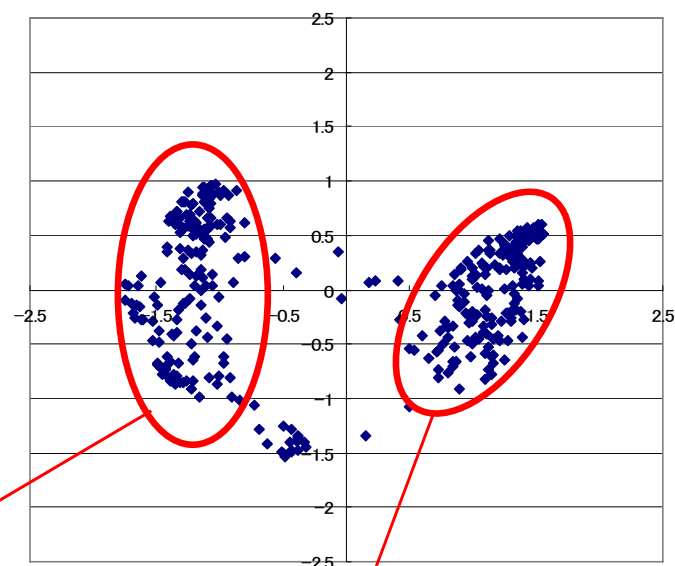
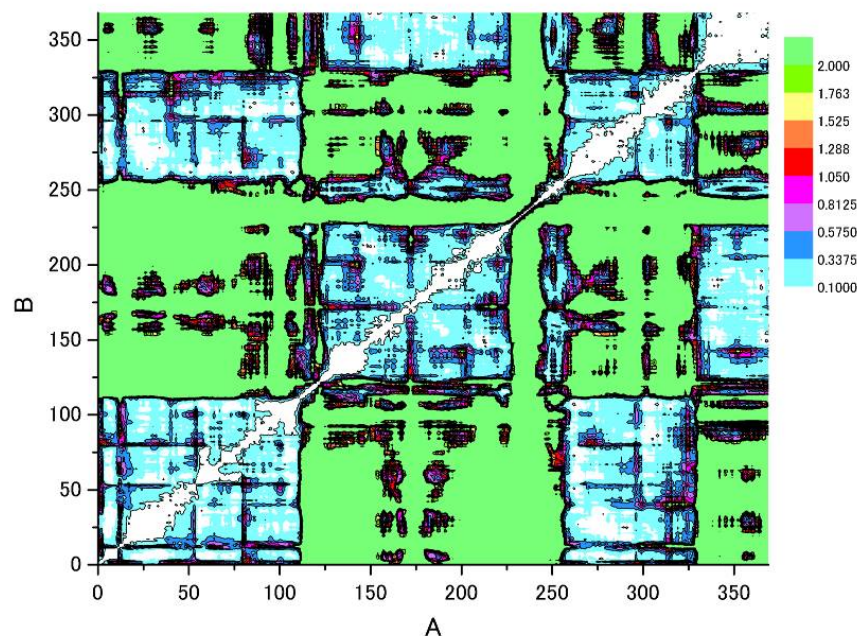


間違った側鎖帰属



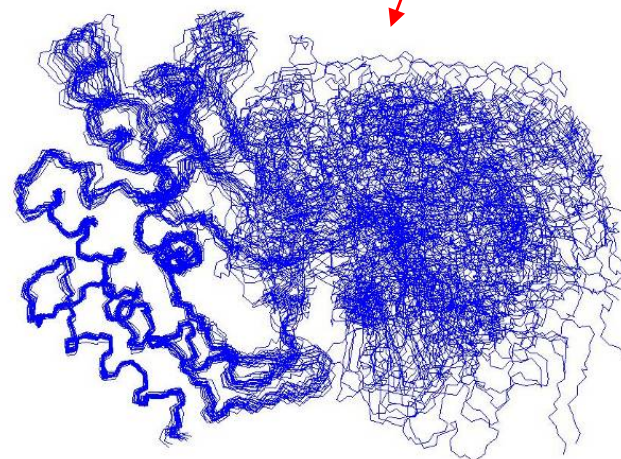
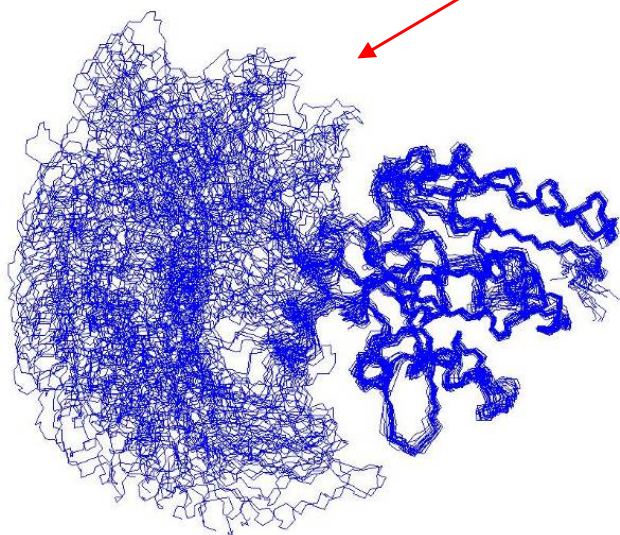
no_NOE, bad contact	L14:2HB-L14:HN	viol_level: -0.440
no_NOE, bad contact	L14:2HB-F29:HN	viol_level: -1.339
no_NOE, bad contact	F91:HA-F91:HN	viol_level: -0.212
no_NOE, bad contact	F91:2HB-F91:HN	viol_level: -0.043
no_NOE, bad contact	L14:3HB-C92:HN	viol_level: -2.447
no_NOE, bad contact	W102:HZ2-L14:HG	viol_level: -0.222
no_NOE, bad contact	F29:2HB-L141:HD1	viol_level: -0.354
no_NOE, bad contact	F29:3HB-L141:HD1	viol_level: -0.591
no_NOE, bad contact	W102:HE3-L31:HG	viol_level: -0.810
no_NOE, bad contact	I106:3HG1-L31:HG	viol_level: -2.083
no_NOE, bad contact	F29:2HB-F29:HD1	viol_level: -3.712
...		
...		
no_NOE, bad contact	W102:HZ3-F29:3HB	viol_level: -1.296
no_NOE, bad contact	F80:HZ-F91:2HB	viol_level: -2.903
no_NOE, bad contact	L14:3HB-F91:3HB	viol_level: -2.990
no_NOE, bad contact	F80:HZ-F91:3HB	viol_level: -2.435
no_NOE, bad contact	F91:HD1-F91:3HB	viol_level: -1.487

fit_robot: マルチドメイン構造に対しても構造重ね合わせを自動実行



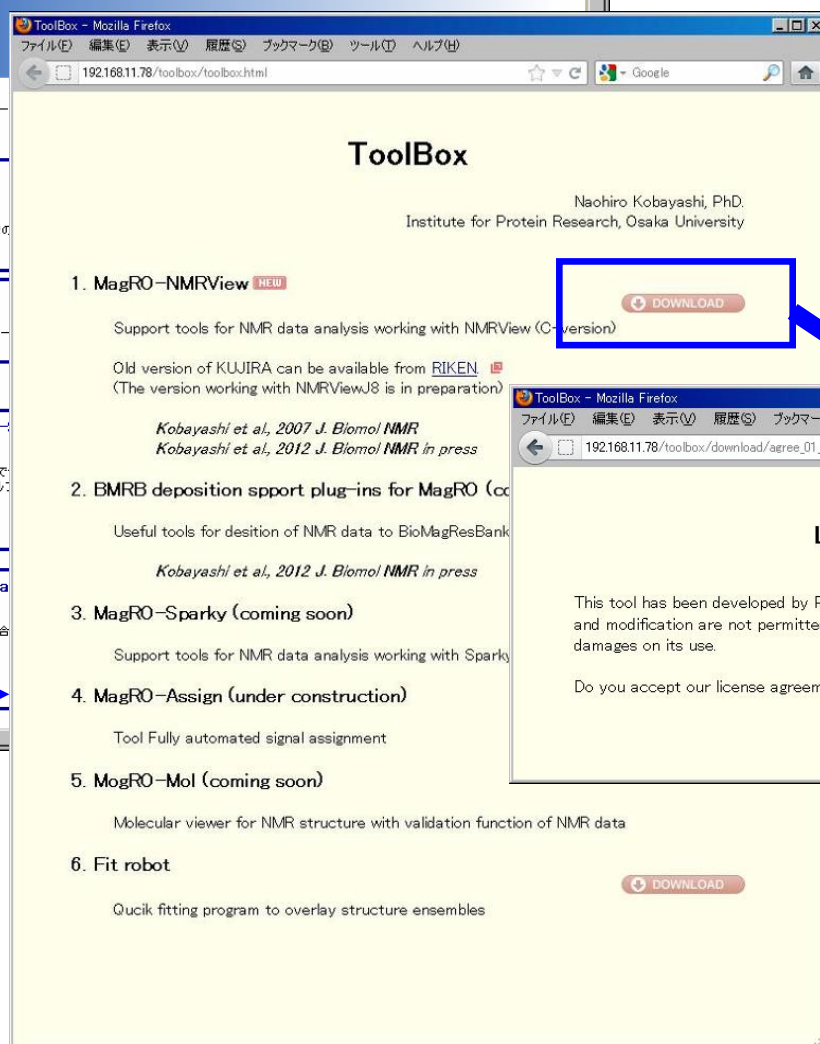
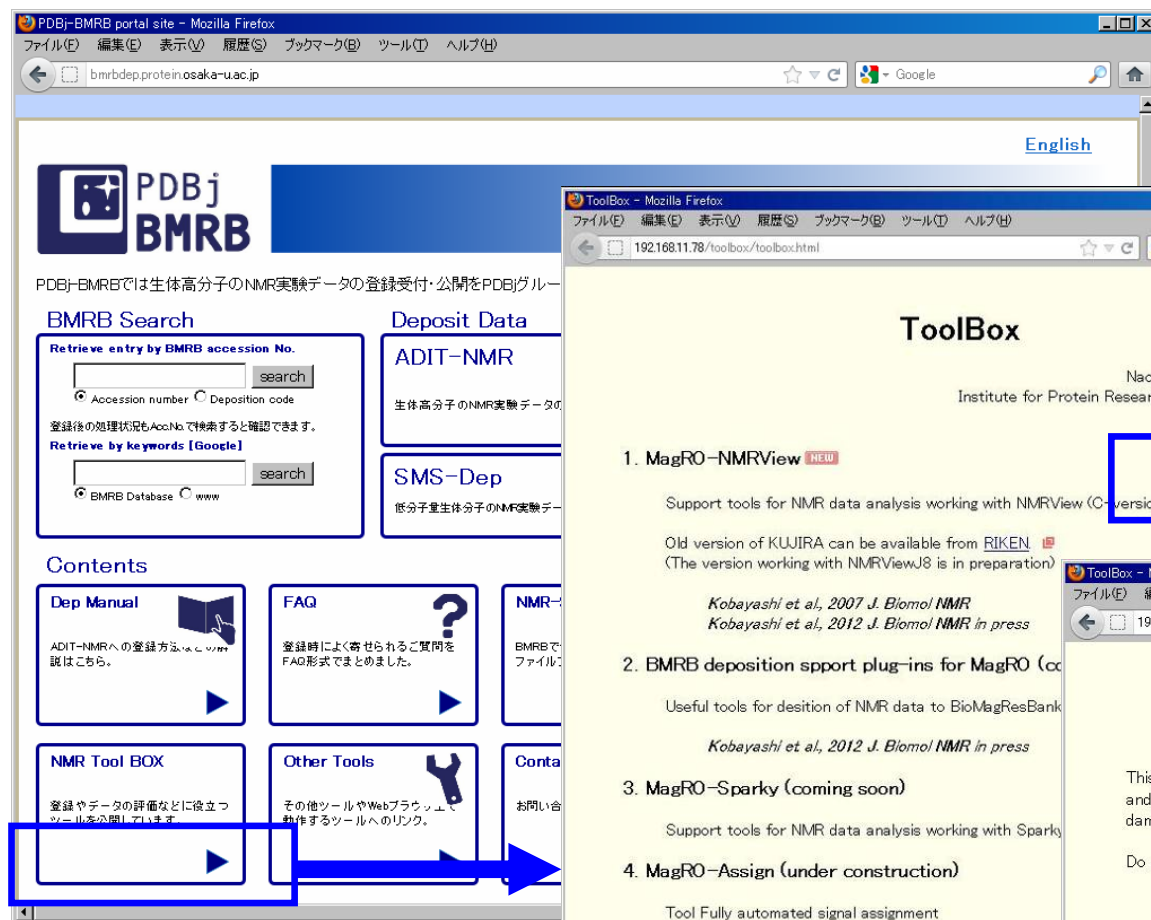
2つに分かれているのは明白だが...ちょっと分かりにくい

多次元尺度構成法で2次元にembedしたmap
明確なクラスターが2つ見える



ツール群の公開サイト: NMRToolBox

googleなどで
"BMRB osaka" を検索し
てください



ご清聴ありがとうございました