

次世代スパコンの構造解析への貢献

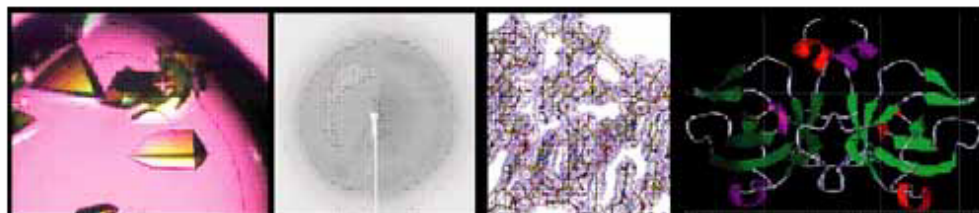
放射光からの構造決定



Spring-8 (播磨)

RSCC

(和光)



タンパク質結晶のX線回折像を元に電子密度計算を行い、構造を決定

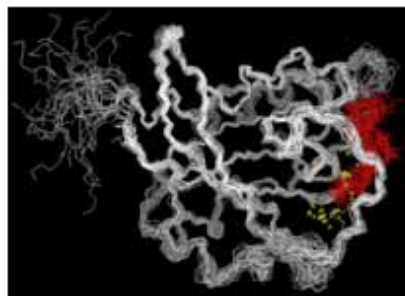
現状

スカラー: 約0.1テラFLOPS / 人手で3ヶ月

今後

平成17年度のMD-GRAPE3 (100テラFLOPS) 増強で精度向上と時間短縮 (1日)

NMRによる構造決定



NMR (横浜)

初期値を仮定、NMRからの信号に合うように分子構造をコンピュータで自動計算

現状

スカラー: 約0.7TFLOPSで24時間

今後

実験数の増加と処理時間短縮のため、RSCC (1.5TFLOPS) も活用し14時間に短縮

次世代スパコンの構造解析への貢献

放射光からの構造決定



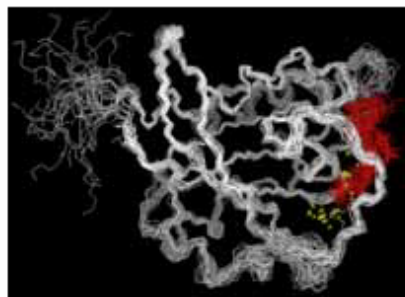
- ・ 放射光の企業利用頻度は高く、環境整備・運用体制はかなり向上
- 次世代スパコンの利用環境はSPring-8 同等以上が前提
- ・ 超高磁場NMRの企業利用が本格的に開始
- SPring-8 & 鶴見NMRとスパコンの連携(連結)

ユーザーが次世代スパコンを意識すること無く、最先端施設を利用できる環境の実現 (産業利用の優先枠を確保)

NMRによる構造決定



初期値を... NMRからの信号に合うように分子構造をコンピュータで自動計算



NMR (横浜)

現状

スカラー: 約0.7TFLOPSで24時間

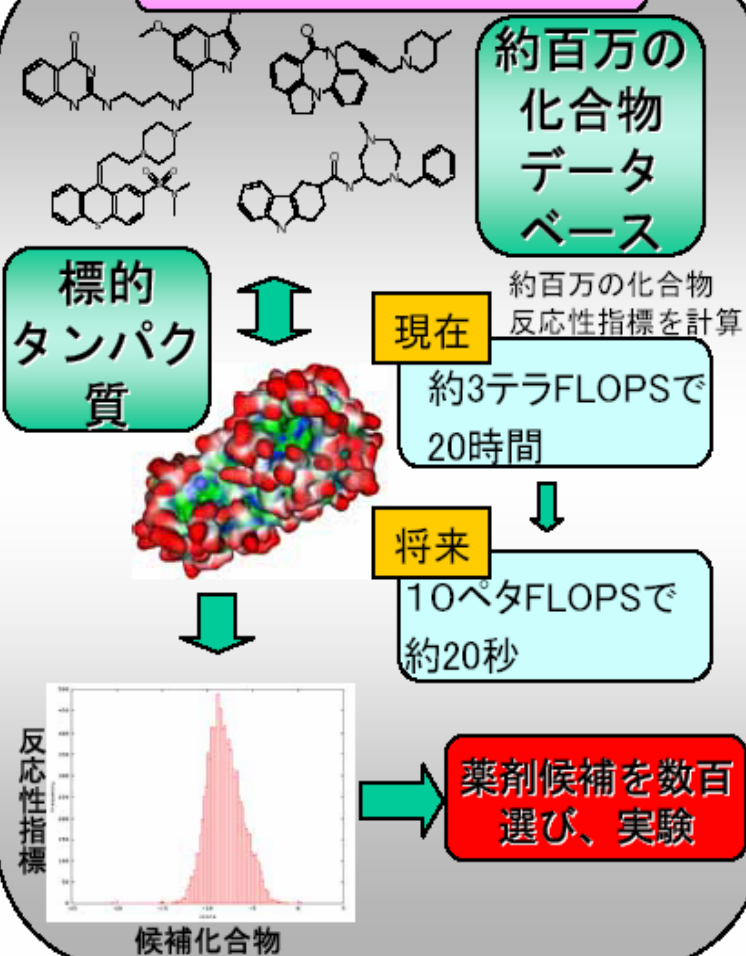
今後

実験数の増加と処理時間短縮のため、RSCC (1.5TFLOPS)も活用し14時間に短縮

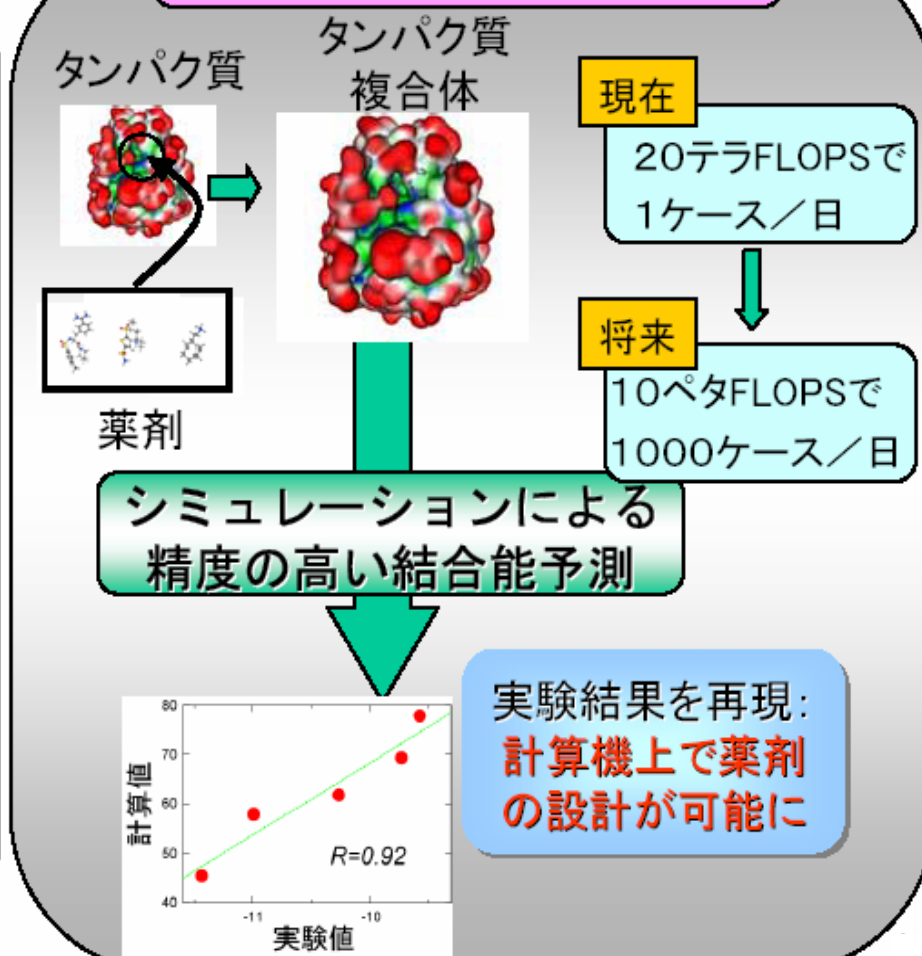
次世代スパコンの創薬への貢献

- ・ スカラーは薬剤候補の絞り込みが得意、化合物データベースから薬剤候補を選択
 - ・ 専用計算機は精度の高い結合能予測により薬剤の設計が可能
- 今後、両者を密接に連携させることが重要

スカラーが得意な分野



専用計算機が得意な分野



次世代スパコンの創薬への貢献

- ・ スカラーは薬剤候補の絞り込みが得意、化合物データベースから薬剤候補を選択
 - ・ 専用計算機は精度の高い結合能予測により薬剤の設計が可能
- 今後、両者を密接に連携させることが重要

スカラーが得意な分野

- ・ ヒト由来の疾患関連(膜)タンパク質の構造解析(実測)は未だに困難
- ・ タンパク3000プロジェクト、ターゲットタンパク研究プログラム等の成果を有効活用

→ 薬剤スクリーニング、薬剤設計等への貢献

次世代スパコンの活用事例(高速・高精度・高効率)を提示

専用計算機が得意な分野

シミュレーションによる
精度の高い結合能予測

実験結果を再現:
計算機上で薬剤
の設計が可能に

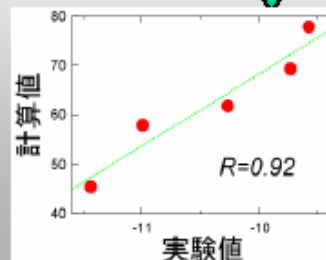
将来

10ペタFLOPSで
約20秒

薬剤候補を数百
選び、実験

反応性指標

候補化合物



宇宙環境の有効利用 → 「きぼう」日本実験棟

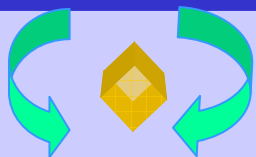
プログレス補給船
打上



ソユーズ宇宙船
回収

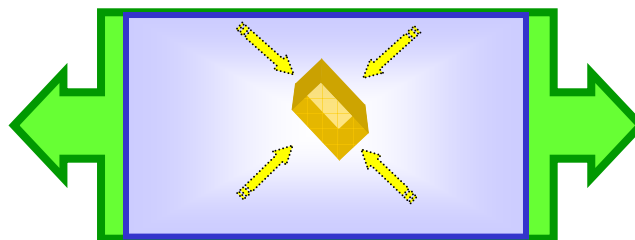


地上



密度差対流により
濃度が均一化(乱れ)

- ・分子配列の乱れ
- ・クラスター化
- ・微結晶落下



周囲のタンパク分子を取り込み
ながら結晶が成長
→ 結晶周囲のタンパク質濃度
が低下

宇宙(微小重力)



密度差対流抑制により
濃度勾配が維持



アステラス製薬株式会社

Acta Crystallographica F61 (2005), 346-349

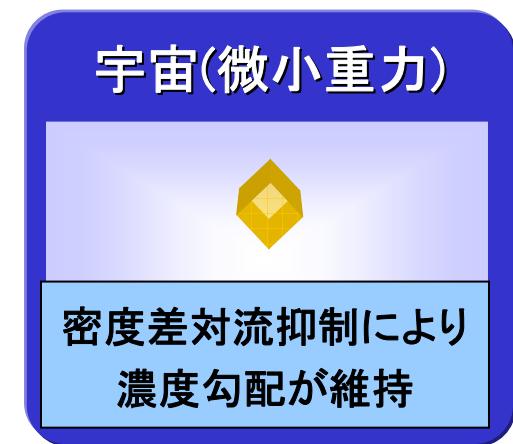
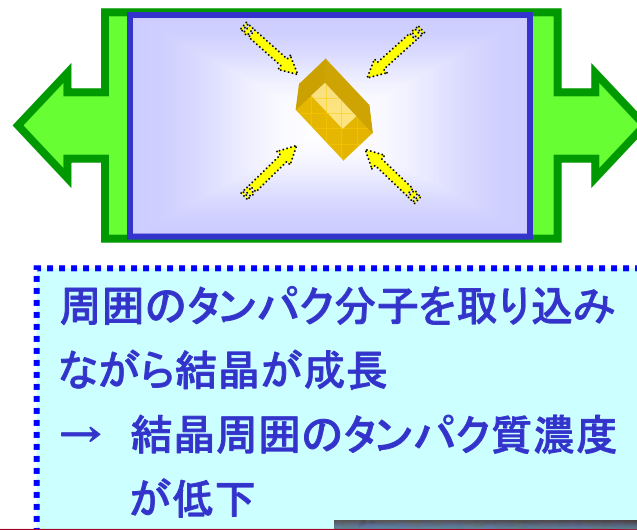
宇宙実験 2.2 Å 分解能
(地上とは異なる結晶系)

宇宙環境の有効利用 → 「きぼう」日本実験棟

プログレス補給船
打上

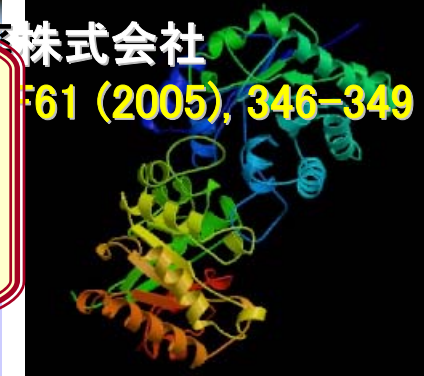


ソユーズ宇宙船
回収



- ・ 宇宙環境での予測精度向上、極限環境をシミュレーションで実施
 - ・ 全ての生命(生物)への重力影響、宇宙放射線の現象を解析して生命の進化解明を目指すシステム生物学的アプローチ
- 膨大なデータ処理が必須: 次世代スパコンの貢献に期待

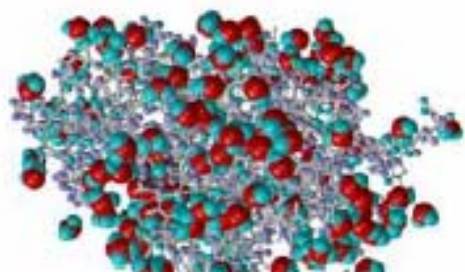
蛋白質構造解析能
(地上とは異なる結晶系)



株式会社
61 (2005), 346-349

大強度陽子加速器施設 中性子線の利用

J-PARC (Japan Proton Accelerator Research Complex)



中性子回折
[水素・水和構造
を含む構造解析]



X線回折法
[結晶構造解析]



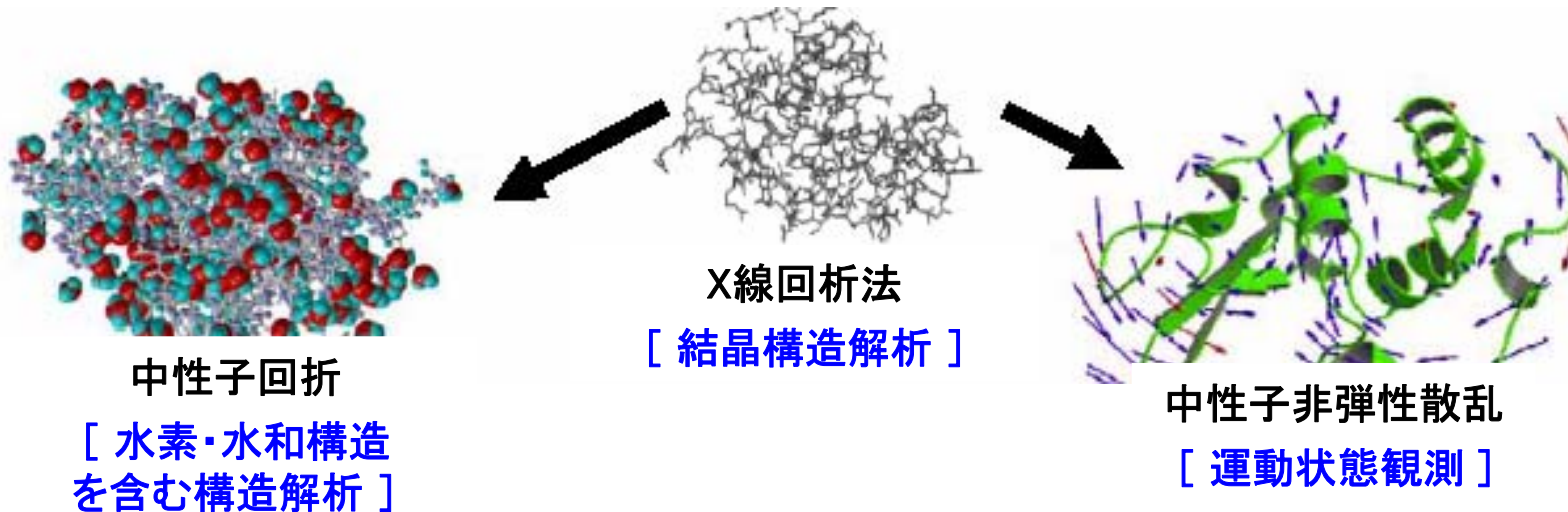
中性子非弾性散乱
[運動状態観測]



茨城県 東海

大強度陽子加速器施設 中性子線の利用

J-PARC (Japan Proton Accelerator Research Complex)



- ・ 数少ない実測情報の創薬への有効活用
 - ・ X線回析情報と中性子回析情報の相互(相補)利用方策
 - ・ 複合体、分子間相互作用の予測精度向上
- 次世代スパコンの計算能力(高速・高精度シミュレーション)に期待

X線自由電子レーザー(XFEL)への期待

- 日本独自の戦略 (1) 独自技術によるコンパクト化 ⇒ 早期実現可能、優れた拡張性
(2) SPring-8との相乗効果 ⇒ 多様な研究手法の展開

X線自由電子レーザーとSPring-8を併設することにより、
同一サイトに集積された世界最高性能の光源拠点が実現

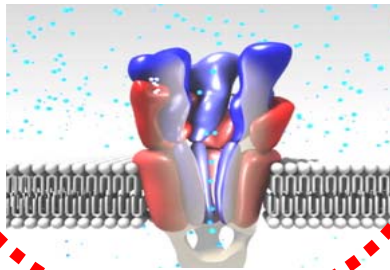
X線自由電子レーザー施設
(H18~H22)完成予想図

兵庫県 播磨

大型放射光施設
SPring-8

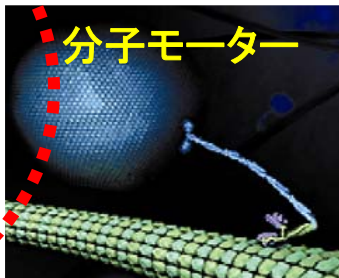
X線自由電子レーザー
プロトタイプ機施設

膜タンパク質
一分子構造解析

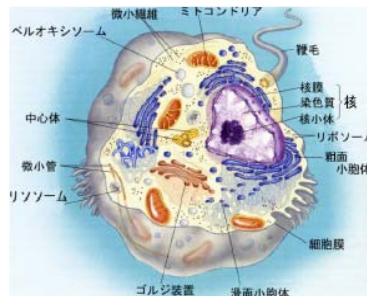


生体ナノマシンの
ダイナミクス

分子モーター



高分解能細胞
イメージング



- ・ 夢の光 XFELの有効利用
- ・ 膨大な計算量が発生
- スパコンとXFELの連携 (ワーキンググループ発足)

1. 製薬産業の創薬研究開発 概況

臨床前の創薬プロセスの加速化および合理化によって、優れた開発候補化合物を見出すことが重要 → 探索ステージの不確実性は極めて高い

2. 合理的な創薬プロセスへ 構造情報利用

- ・ 次世代スパコンの構造解析、診断・薬剤設計等(特に脳・神経系疾患)への貢献
→ スパコンの活用事例(高速・高精度・高効率)を提示
- ・ 次世代スパコンの利用環境整備、運用体制構築が重要
→ ユーザーがスパコンを意識することなく、先端施設を利用できる環境の実現

3. 最先端科学技術の創薬への貢献

- ・ 宇宙環境での予測精度向上、極限状態をシミュレーション、システム生物学的アプローチ → 次世代スパコンの貢献に期待
- ・ X線回析情報と中性子回析情報の相互(相補)利用方策、複合体・分子間相互作用の予測精度向上
→ 次世代スパコンの計算能力(高速・高精度シミュレーション)に期待
- ・ 夢の光 XFELの有効利用に伴う膨大な計算量が発生
→ スパコンとXFELの連携(ワーキンググループ発足)