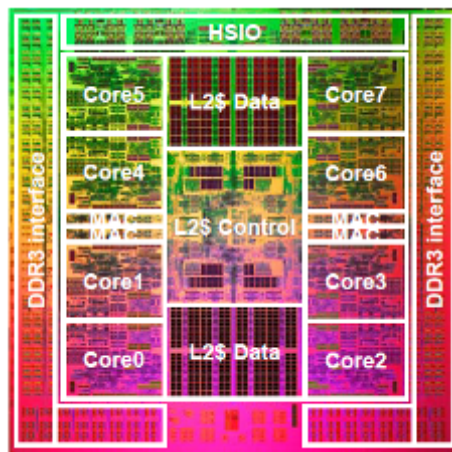


# 将来への挑戦 創薬応用シミュレーション

藤谷 秀章

東京大学 先端科学技術研究センター



SPARC64VIII fx (2GHz)

ピーク性能 128GFlops

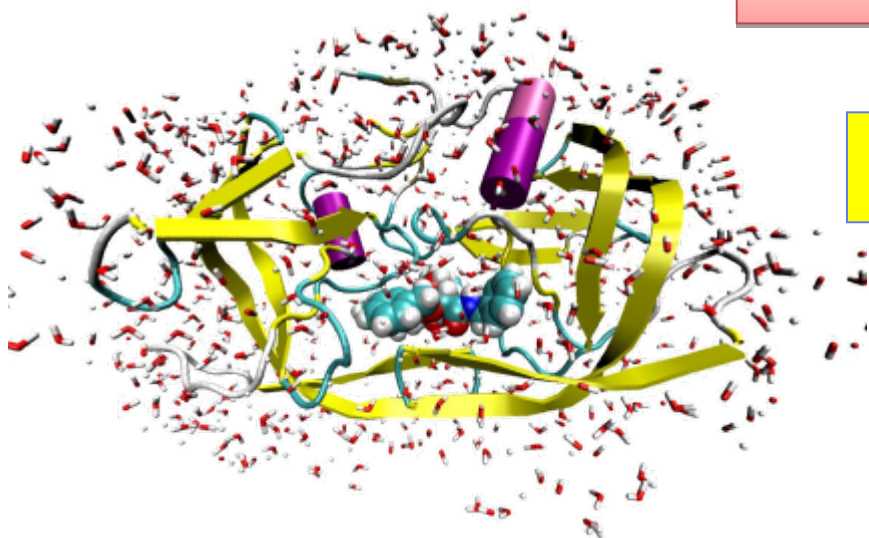
消費電力 58W

8万CPU × 8 cores = 64 万cores

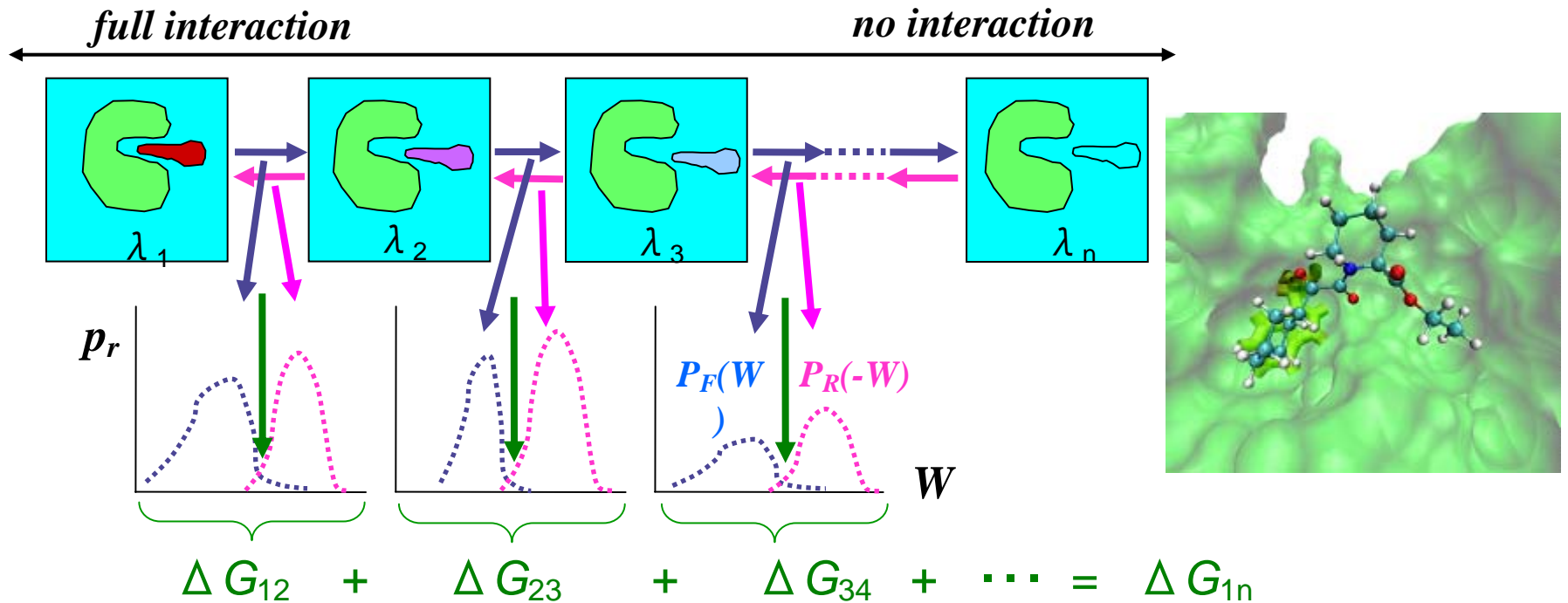
より精確なタンパク質モデル



並列処理が難しく



## Massively Parallel Computation of Absolute binding Free Energy



非平衡等式 (Jarzynski, 1997年) 
$$\Delta G = -RT \ln \left\langle \exp \left( -\frac{W}{RT} \right) \right\rangle$$

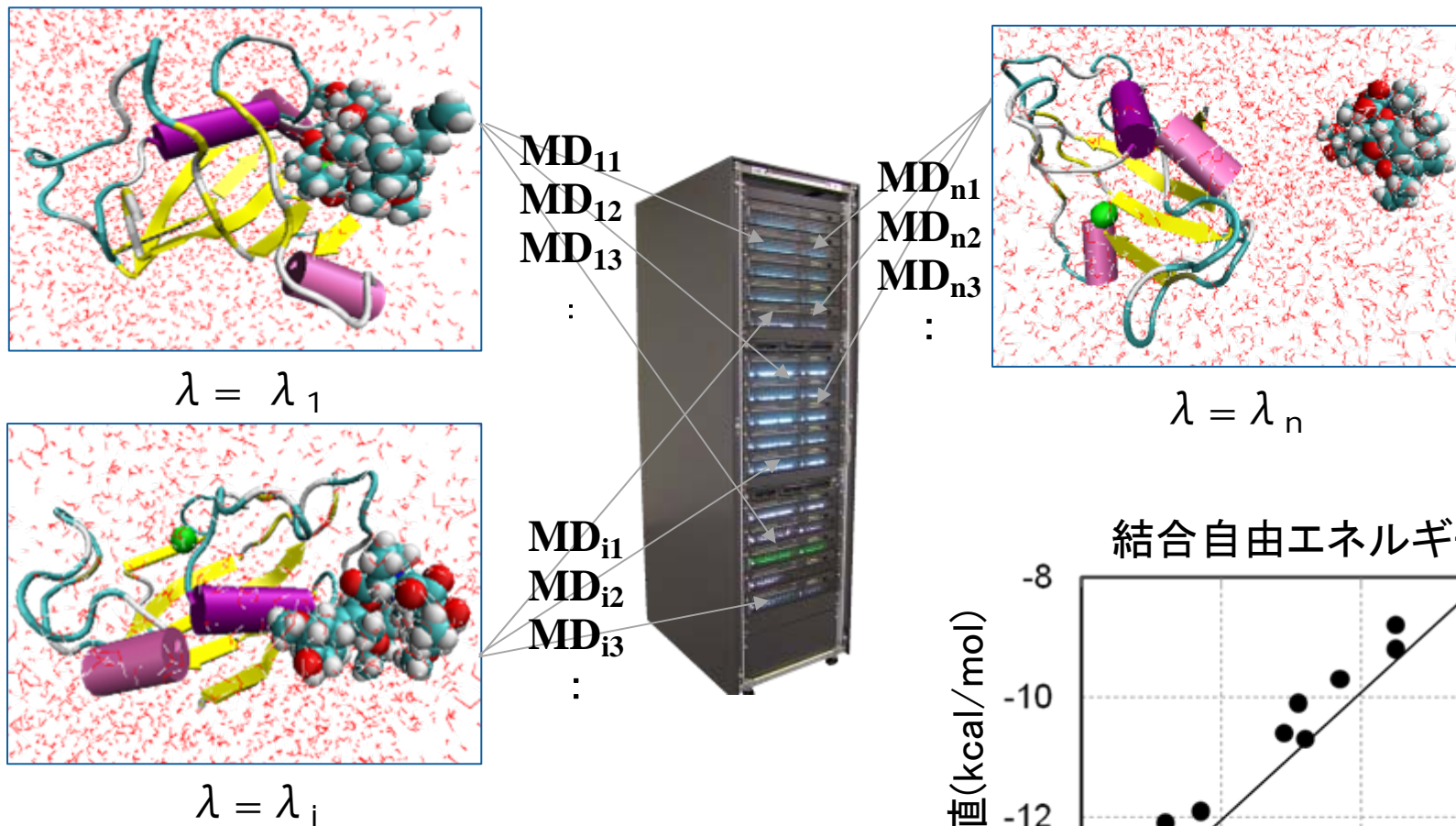
32 x 12 x 2 = 768 parallel  
(lambda) x (sample) x (double annihilation)

Fujitani et al, JCP (2005)

# 標的タンパク質に対する薬の活性予測

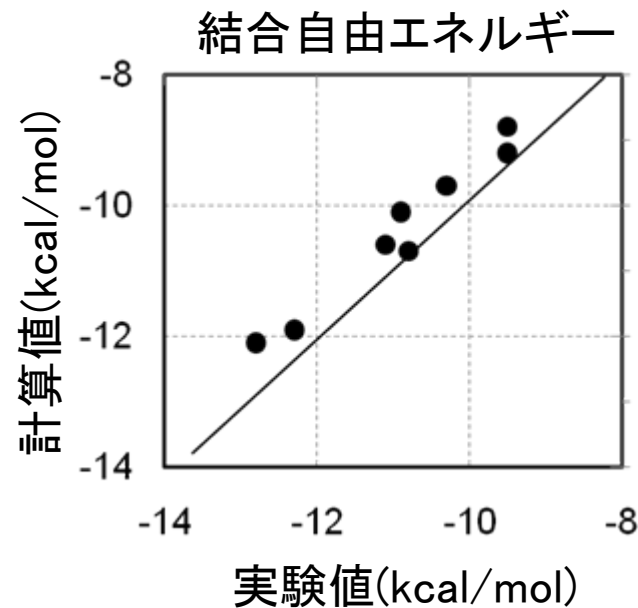


Univ. Tokyo



768 × 100MPI並列 = 76,800

「京」であれば可能に

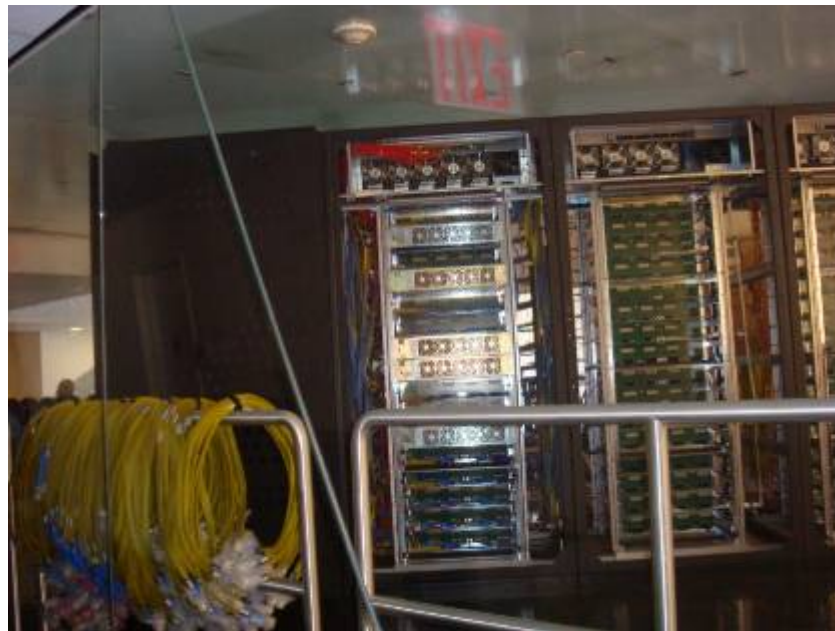






1988年 D E Shaw & Co 設立(hedge fund)  
1994年 クリントン大統領 Science advisor  
2002年 DESRES設立  
2009年 オバマ大統領 Science advisor

## 分子動力学専用計算機(ANTON)



汎用CPUの**150倍高速**



富士通  
90nmテクノ  
ロジー

2008年9月 512Antonチップで並列計算機

# 分子動力学創薬が産業競争力強化に

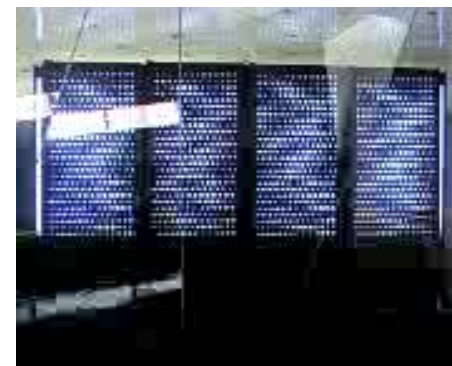


Univ. Tokyo

## 分子動力学専用計算機 (ANTON)

512chipが11台、1024 chipsが1台、2048 chipsが1台

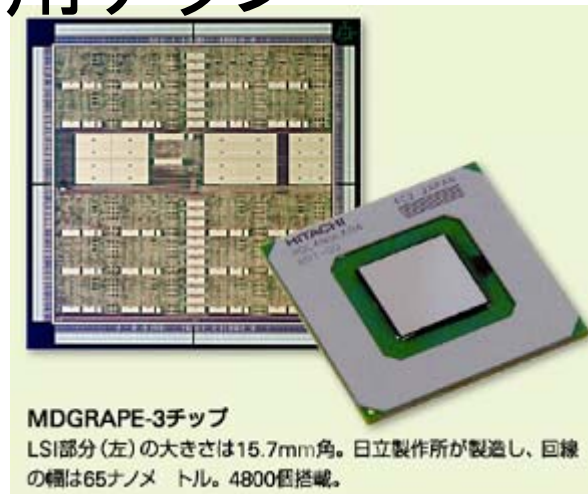
- 2010年10月 ミリ秒の分子動力学計算がScienceに掲載
- 2010年10月 Pittsburgh Supercomputer Center (PSC)でAntonによる研究がスタート
- 2011年1月 GPCRの構造変化をANTONで解明 (Nature)



Seated, from left to right: Mark Murcko, Vertex CTO and Schrödinger SAB member; Ramy Farid, Schrödinger President; Bill Gates; Rich Friesner, Schrödinger Founder and SAB Chairman; Boris Nikolic, Bill & Melinda Gates Foundation Senior Program Officer

Standing, from left to right: David Vaskevitch, Microsoft CTO (retired); Carl Decicco, BMS SVP Discovery Chemistry and Candidate Optimization; Dennis Holt, GSK Director of Chemistry; Paul Anderson, Schrödinger SAB member; Tony Wood, Pfizer SVP and Worldwide Head of Medicinal Chemistry; Muz Mansuri, Gilead SVP of Research; Scott Biller, Agios Pharma CSO; Hans-Joachim Böhm, Roche Basel Global Head of Medicinal Chemistry; Sandy Mills, Merck VP and Global Head of Chemistry; David E. Shaw, D. E. Shaw Research Chief Scientist

- ◆ 日本のコンピュータ技術の高さ  
「京」、MDGRAPE、ANTON
- ◆ 戦略的なIT創薬への取組み
- ◆ 専用チップ機能が汎用チップへ



MDGRAPE-3チップ

LSI部分(左)の大きさは15.7mm角。日立製作所が製造し、巨線の幅は65ナノメートル。4800倍搭載。