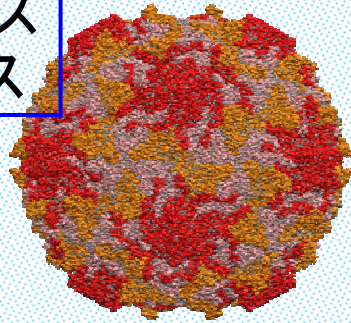


科学界からの期待：ナノバイオ（2）

感染機構や免疫機構解明のための全原子シミュレーション
(巨大生体分子の動作機構解明、ライフサイエンスとの融合領域)

小児麻痺ウイルス
リンゴ病ウイルス



小児麻痺ウイルスのカプシド
タンパク質でできたウイルスの殻

1000万原子系の分子動力学計算

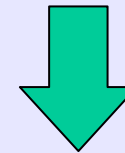
セル多極子展開法による長距離相互作用の評価

安定構造、カプシドタンパク質間の接合構造と熱運動、
熱安定性、構造のpH依存性、化学物質との相互作用、
環境依存性、脂質膜、タンパク質との相互作用などをシミュレーション

1,000万原子系の分子動力学計算

現状

1マイクロ秒に500年:不可能
(5テラフロップス)



将来

1マイクロ秒に3ヶ月:現実的
(10ペタFLOPS超)

・10ペタフロップス級の高性能計算機を用いた大規模シミュレーションにより、
水中のウイルス構造やその動作を解析、ウイルスの感染機構や免疫機構を解明

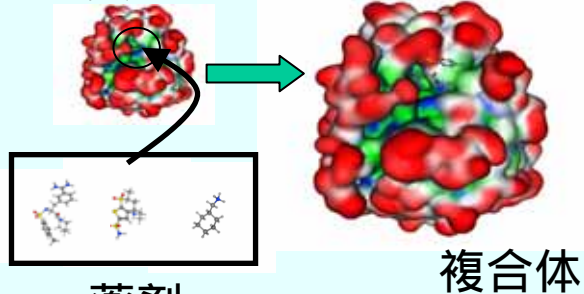
期待される成果

未克服のウイルスに対する予防法と治療法の開発に寄与が可能となり、国民の健康維持に資する。

科学界からの期待：ライフサイエンス（1）

創薬のための近似シミュレーション(薬剤の高精度スクリーニング)

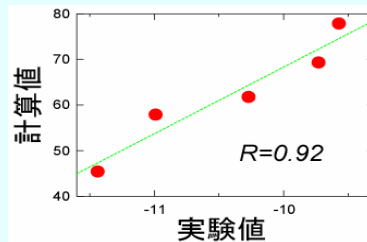
タンパク質



薬剤

複合体

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

薬剤候補のスクリーニング数

現状

1日60サンプル: 実験レベル
(20テラフロップス)

今後

1日3000サンプル: **実用化**
(ペタフロップス)

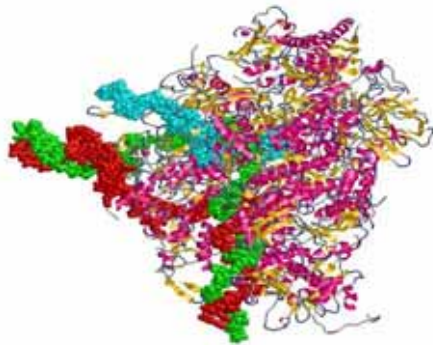
ペタフロップス級の高性能計算機を用いた大規模シミュレーションにより、薬の候補物質を発見し、創薬を加速

期待される成果

薬剤候補の化合物と、ウイルス、がん細胞との結合予測によるインフルエンザやC型肝炎の治療薬・抗がん剤などの開発促進によって、国民の健康維持に資する。

科学界からの期待：ライフサイエンス（２）

創薬のための近似シミュレーション(巨大生体分子の動作機構解明)



RNA合成酵素
50万原子の
DNAからRNAに
情報を写す機構
を解析



正常型プリオン



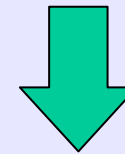
異常体

正常型プリオンが凝集により構造が変わって病気
になる動作の機構解明

100万原子の系を1ナノ秒計算

現状

1マイクロ秒に2年:不可能
(20テラフロップス)



今後

1マイクロ秒に2週:**実用的**
(ペタフロップス)

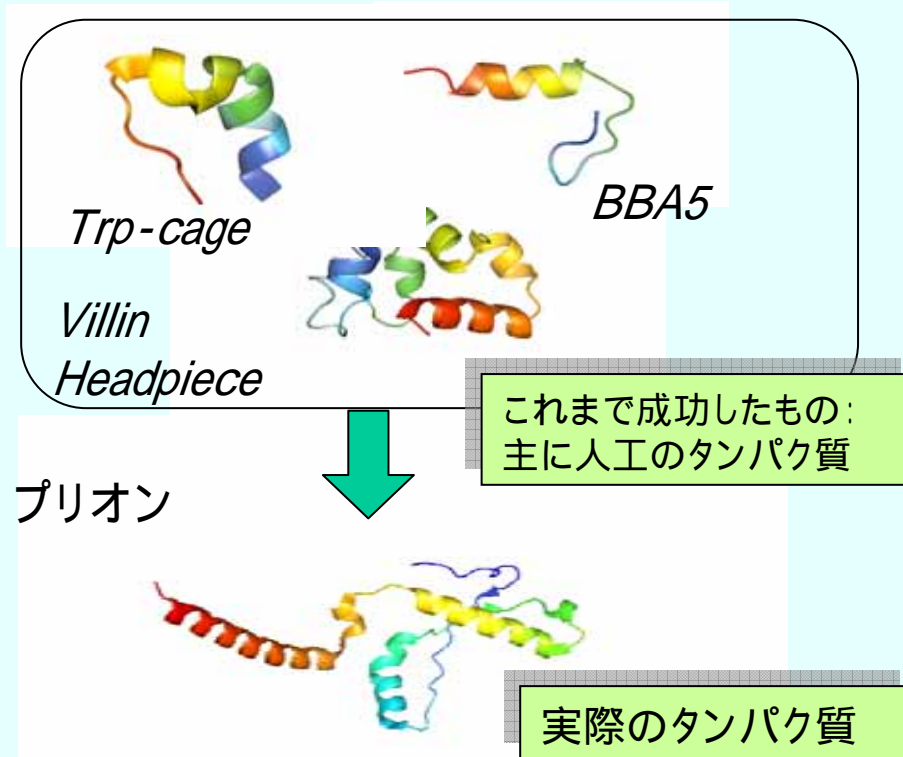
・ペタフロップス級の高性能計算機を用いた大規模シミュレーションにより、巨大タンパク質・タンパク質複合・凝集体の性質を解明

期待される成果

ガンや糖尿病などの機構解明を通じた新薬開発の促進によって、国民の健康維持に資する。

科学界からの期待：ライフサイエンス（3）

創薬のための近似シミュレーション(タンパク質の立体構造予測)



2万原子の系を累積1ミリ秒計算

現状

1ミリ秒に12年：不可能
(20テラフロップス)

今後

1ミリ秒に2週：**画期的**
(ペタフロップス)

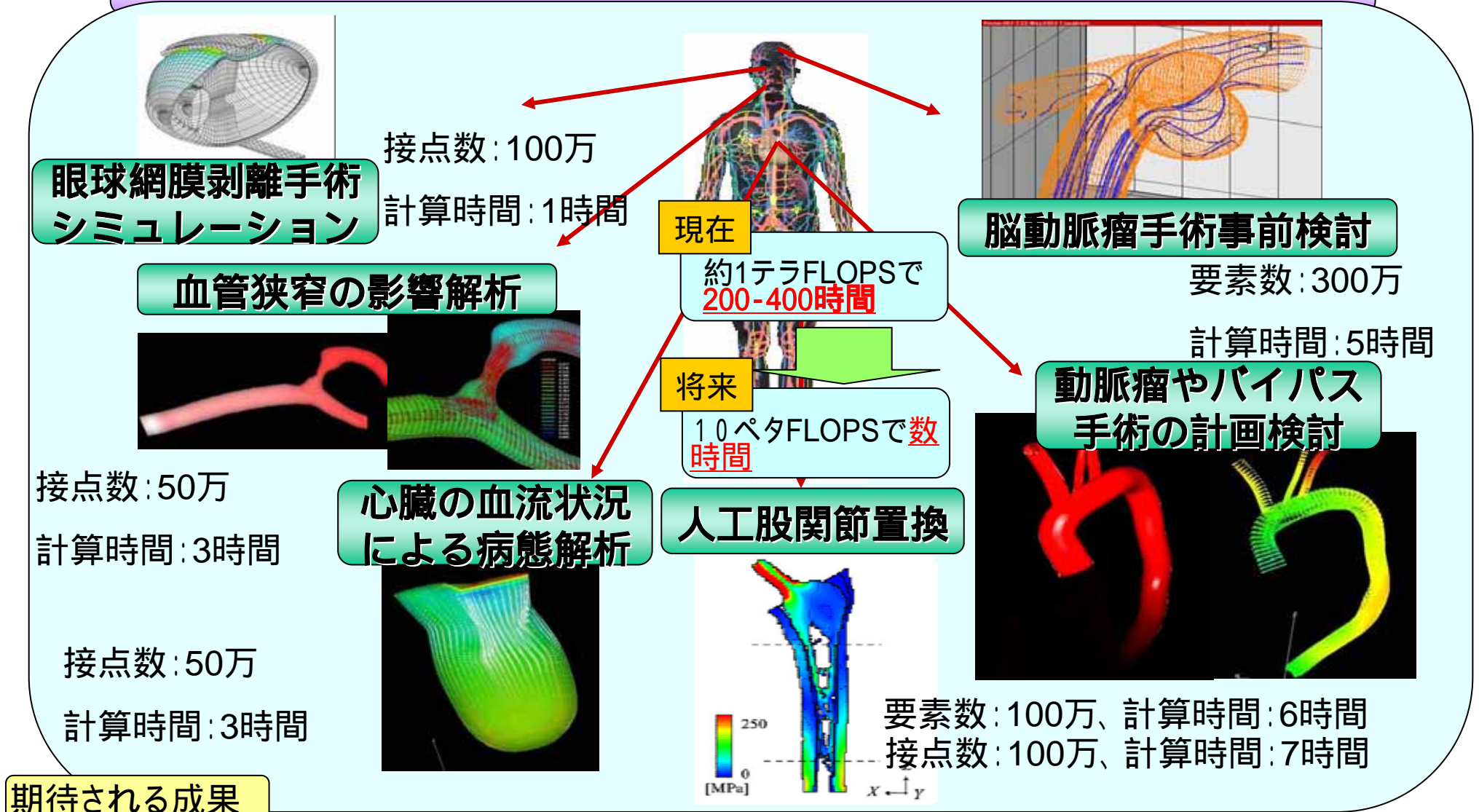
ペタフロップス級の高性能計算機を用いた大規模シミュレーションにより、タンパク質のフォールディングを予測、機構解明

期待される成果

プリオン病・アルツハイマー病などの発病機構解明による新規治療法の開発、および、**タンパク質の構造解明**を通じた効率的な創薬を推進することで、国民の健康維持に資する。

科学界からの期待：ライフサイエンス（４）

人体シミュレーション(手術計画支援)



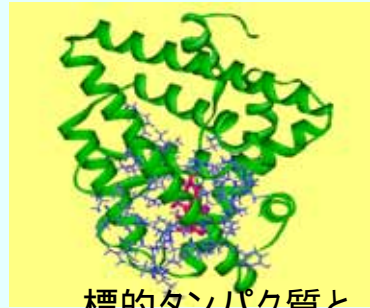
期待される成果

脳動脈瘤手術、血管狭窄の影響のシミュレーションを行うことで、手術計画を支援し、医療現場での革新を起こす。

提供: (独)理化学研究所

科学界からの期待：ライフサイエンス（5）

創薬のための詳細シミュレーション（生体高分子の量子力学計算）



標的タンパク質と
医薬品分子の接合

標的タンパク質と医薬品
分子の結合部分の運動

call MPI_ALLREDUCE

大規模処理計算機

1ステップ毎に
原子の座標と
電荷を交換

異機種間接続
超高速
インターコネクション

地球シミュレータでは
不可能な異機種計算
機間の連携計算でブ
レークスルーを狙う。

結合部分の外側の
標的タンパク質の運動

call MPI_ALLREDUCE

逐次処理計算機

標的タンパク質の周囲の
溶媒分子（水）の運動

call MPI_ALLREDUCE

特定処理計算加速機

期待される成果

医薬品候補の体内での吸収から排泄までの過程を約1カ月で予測できることで、医薬品の開発で革命を起こす。それにより高度な医薬品の開発が実現でき、国民の健康維持に資する。