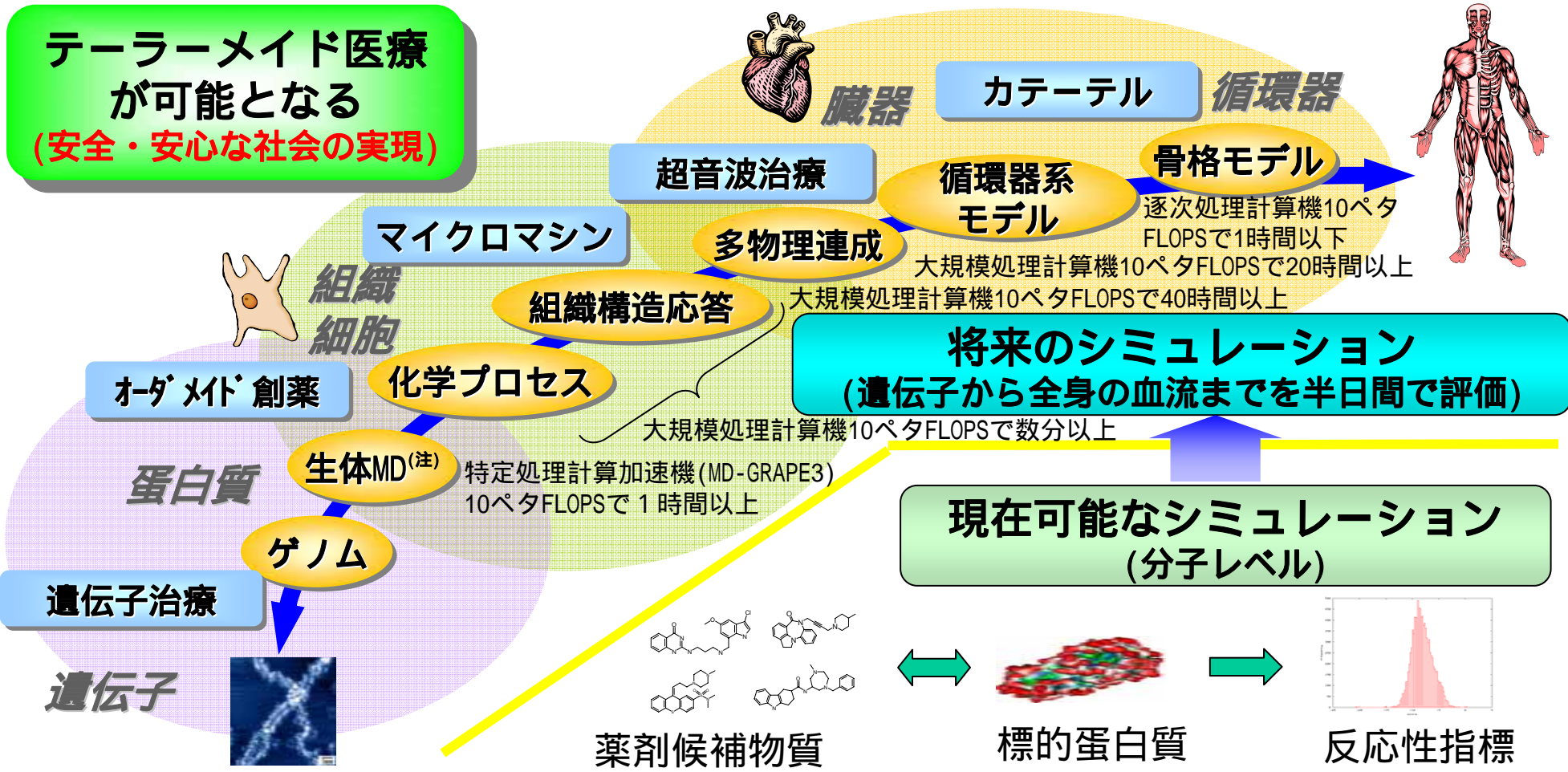


科学界からの期待：ライフサイエンス（6）

分子レベルシミュレーションから生体シミュレーションへ
新薬設計 / 薬剤効果の解析、診療補助などが実用レベルへ



注:分子動力学。原子間ポテンシャルの下に、古典力学におけるニュートン方程式を解いて、系の静的、動的安定構造や、ダイナミクスを解析する手法。

科学界からの期待：ライフサイエンス（7）

タンパク3000プロジェクト（タンパク質の構造決定）

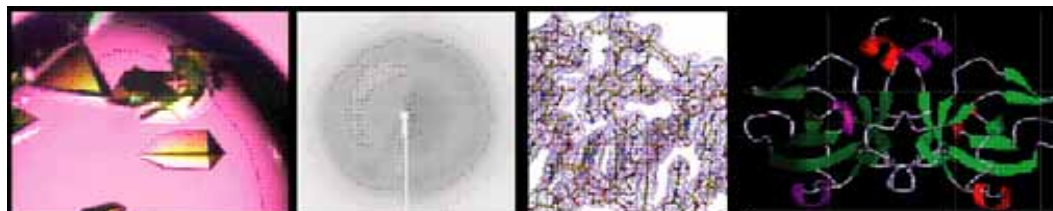
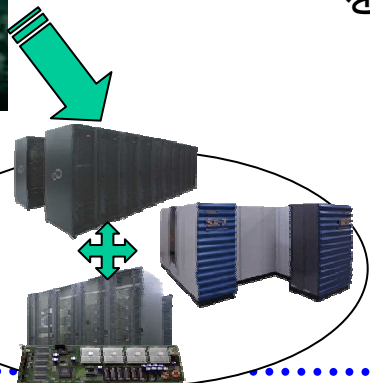
放射光からの構造決定



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

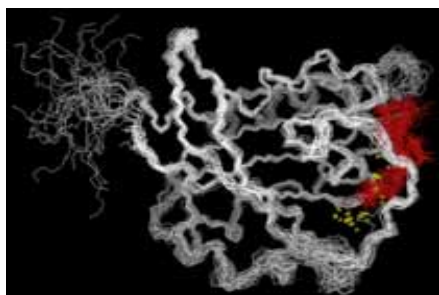
現状

逐次処理計算機：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**1日に時間短縮**

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

逐次処理計算機：約0.7テラFLOPSで**24時間**

今後

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

科学界からの期待：ライフサイエンス（8）

生命の神秘を知る（RNA機能解析と遺伝統計解析）

RNA機能解析

RNA^(注1)の機能を解明するのが目標

現在：ネズミDNAの解析、
0.5テラFLOPSの逐次処理計算機で
1時間/ケース

今後：ヒトDNAでは計算量が100万倍以上

10ペタFLOPSの逐次処理計算機で**10～100時間**

または

10ペタFLOPSの大規模処理計算機で**1～10時間**



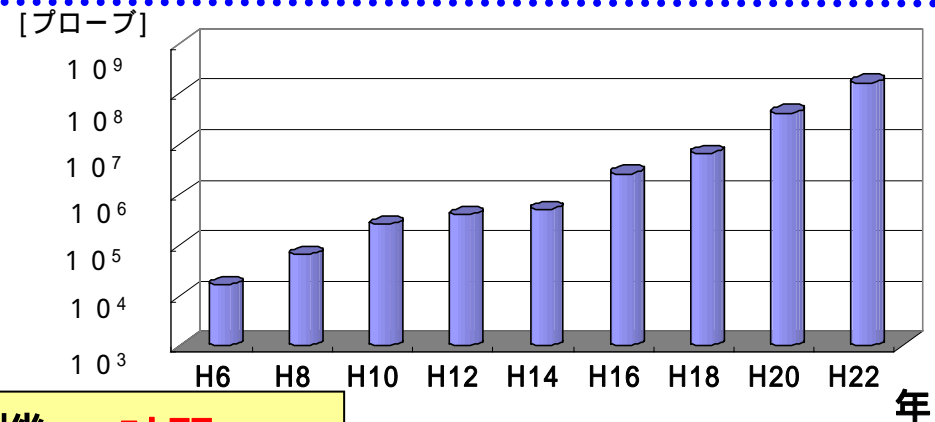
遺伝統計解析

人の遺伝子と遺伝病の関係を網羅的に
調べ上げ、遺伝病の原因遺伝子を特定する。

現在：RSCC(14テラFLOPS)で30家族（9座位^(注2)）

の計算が100日 **あり得ない。**

今後：この計算が **10ペタFLOPSの逐次処理計算機で2時間**



注1: DNAの遺伝子情報の伝達やタンパク質の合成を行う。

注2: 遺伝地図上で遺伝子が存在する場所。ゲノム上での遺伝子の存在位置。