

生体系の分子シミュレーションの展開と SAXS との連携

池口 満徳

横浜市立大学 生命医科学研究科

スーパーコンピュータ「京」の運用が、2019年8月で終了した。これから、次世代スーパーコンピュータ「富岳」の構築が始まり、2021年ごろに運用開始になる予定である。「京」は、運用開始の頃には世界1位の速度を誇ったが、2019年6月のリストでは世界20位まで後退した。このように、コンピュータの世界は日進月歩である。ライフ分野でも、スーパーコンピュータは様々な活用されているが、分子の世界ではタンパク質などの分子シミュレーションがその主な用途である。コンピュータの発達とともに、生体分子シミュレーションは、適用範囲を拡大してきた。室温、溶液状態では、タンパク質は、ダイナミックに運動しており、それが機能と密接に結びついている。そこで、X線結晶構造やクライオ電子顕微鏡構造を元にして、スーパーコンピュータ等を用いた分子動力学シミュレーション研究がよくなされるようになってきた。その計算結果は、室温、溶液状態の構造アンサンブルを測定できるBioSAXSと連携させることで、さらに有効性が向上する。本講演では、スーパーコンピュータを用いた分子シミュレーションの最近の展開とBioSAXSとの連携について紹介したいと考えている。