



2年目を迎え産業界と連携して大規模な実証計算を展開中

文部科学省ITプログラム「戦略的基盤ソフトウェアの開発」プロジェクトは、昨年5月にスタートし1年有余、ソフトウェアの開発体制はほぼ確立し、本格的な活動を開始しました。更に助言機関を新設する等体制強化が図られ、産学連携による実証ソフトの開発を加速しています。

平成14年度の成果として3月に成果報告書を発行、その代表的な成果である13本の世界的なレベルの実証ソフトを6月・9月に公開し、1,800件を超えるダウンロードがなされました。現在産業界と連携して大規模な実証計算を展開しています。

ソフトウェアの公開

各分野の実証ソフトウェアは、6月にバイオ等が10本、又9月にナノが3本であり、各々世界初、あるいは世界的レベルの機能を有するものです。

6月公開の概要は本誌第4号、9月公開のナノの概要は本号に掲載しましたが、詳細はホームページをご覧ください。又ダウンロードも簡単に出来ますので、是非ホームページよりその機能をお試し下さい。

産学連携による実証計算

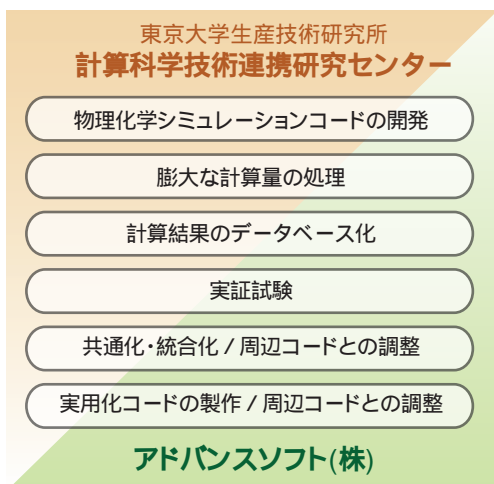
本プロジェクトの目玉である「実証計算」については、産業界と連携しながら積極的な展開を図っています。例えば、流体・構造グループでは、(株)日立製作所等、民間企業と具体的なテーマで実証計算を進めております。産と学との特徴を活かした新しい形での連携が進んでおり、その成果が期待されています。

アドバンスソフト(株)との連携による実用化

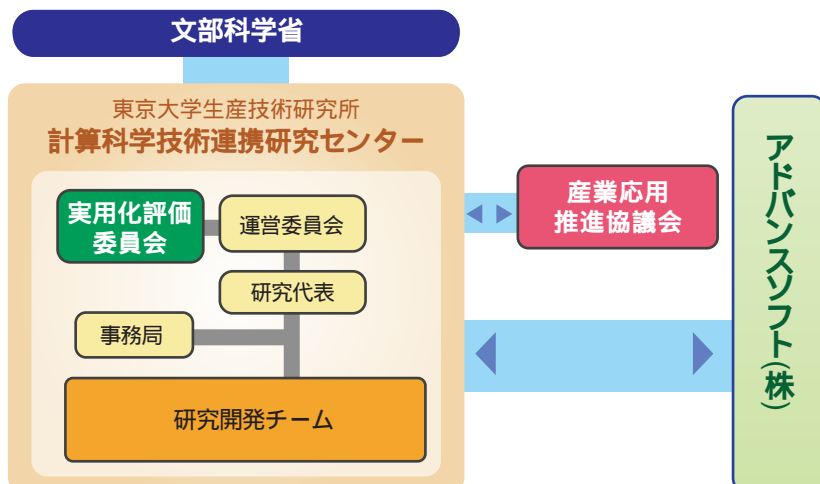
本プロジェクトは産学連携により実証ソフトを開発するだけでなく、改良・メンテナンスが継続して実施される仕組みを作ることが重要な目標となっています。そのためには、このプロジェクトの事業化を推進するベンチャー企業との連携強化が不可欠です。アドバンスソフト(株)は実証ソフトが産業における基盤ツールとして実用性を高め商用化・事業化を達成すべく全社をあげてその実現に邁進しております。

プロジェクト推進体制の更なる強化

プロジェクトでは、産学の指導的有識者に参画戴く組織を新設しました。実用化評価委員会では、プロジェクト実用化のための助言をいただいております。産業応用推進協議会では、開発ソフト普及のために広く会員を募り、又相互に交流を図る新たな体制を整備する活動を開始しています。



戦略的基盤ソフトウェア開発の内容と連携



プロジェクト推進体制の強化

● タンパク質 - 化学物質相互作用解析研究グループ

ウィルスと阻害剤の相互作用をシミュレーションで説明

抗SARSウイルス薬の効率的開発に光明

タンパク質 - 化学物質相互作用解析グループではタンパク質 - 化学物質相互作用解析システム「ABINIT-MP BioStation」の開発を行っています。ここではこのシステムの中で中核的な役割をもつ分子間相互作用解析プログラムABINIT-MPを用いた抗SARSウイルス薬の探索について紹介します。ABINIT-MPはフラグメント分子軌道(FMO)法を採用することで、タンパク質とリガンドとの相互作用を量子力学に基づいて高精度かつ高速に計算できるプログラムです。従来のプログラムでは不可能であったアミノ酸残基のような原子集団間の相互作用を量子論的に計算できることが特徴です。

今回紹介する相互作用解析では、まずSARSウイルスプロテアーゼに対してバーチャルリガンドスクリーニング(VLS)を行い、さらにVLSによって得られたコンフォメーションを用いてアミノ酸残基と低分子化合物との相互作用をABINIT-MPによって解析しました。¹⁾²⁾

分子間相互作用解析プログラム「ABINIT-MP」を用いて、SARSウイルスプロテアーゼと阻害剤候補物質との相互作用解析を実施し、難しいと思われたメカニズムの解明に寄与できる事が分かりました。これにより実験負担の軽減等が図られ医薬品高分子設計効率化の可能性が出てきました。

SARSウイルスプロテアーゼの構造は北里大学薬学部梅山秀明教授に提供していただいたPDFAMSIによるホモロジーモデリングによる3次元構造を用いました。

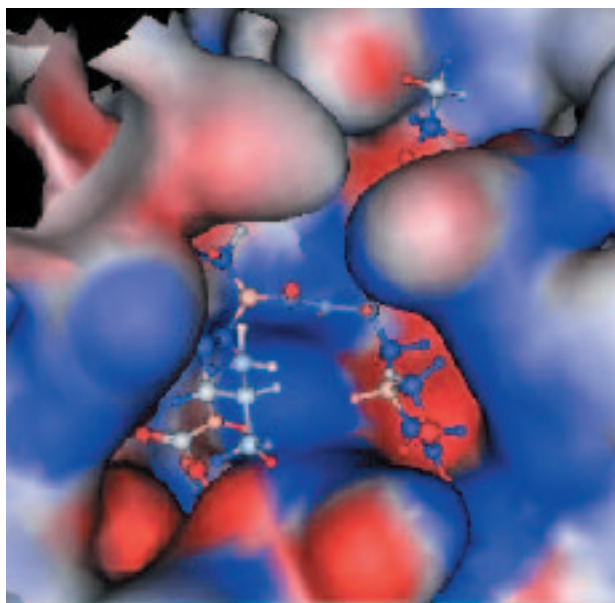
計算結果からリガンドとしての薬剤が酵素タンパク質に結合することにより起こる電荷移動の様子が初めてわかりました。¹⁾

このような計算によって得られる情報から、

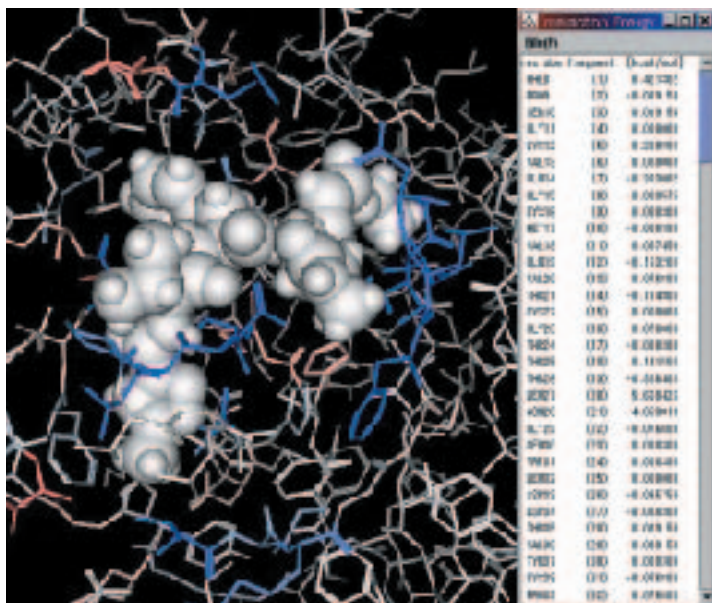
(1) 古典的な力場やスコア関数を用いる従来の方法とは異なる、電荷移動まで含めた量子論的な相互作用解析を用いたタンパク質が分子を認識するメカニズムの解明

(2) 大量のリガンド候補からVLSにより絞り込んだ化合物について相互作用解析を行い、フォールスポジティブを減らすことによる実験負担の軽減

が期待され、QSARやde novoデザインと併用することでより効率的な医薬品の分子設計が可能となります。



¹⁾ リガンドが結合することによって起こる電荷移動 (赤はリガンド結合による電子の減少を、青は電子の増加を示す。)



²⁾ リガンドを中心とした周辺残基との相互作用 (青はリガンド結合により不安定化している残基を、赤は安定化している残基を示す。)

● ナノシミュレーション研究グループ

ナノシミュレーション用ソフトウェアを公開

信頼性の高い大規模計算が可能に

ナノシミュレーショングループでは、次世代半導体やナノデバイスの開発に役立つナノスケールのシミュレーションシステム、CHASE-3PTを開発しました。本システムの特徴は、大規模ナノ構造の特性が高精度に予測可能になることです。超微細化、高集積化の限界に挑戦する次世代半導体ナノデバイス開発等のキーツールになることが期待されます。

(1) PHASE

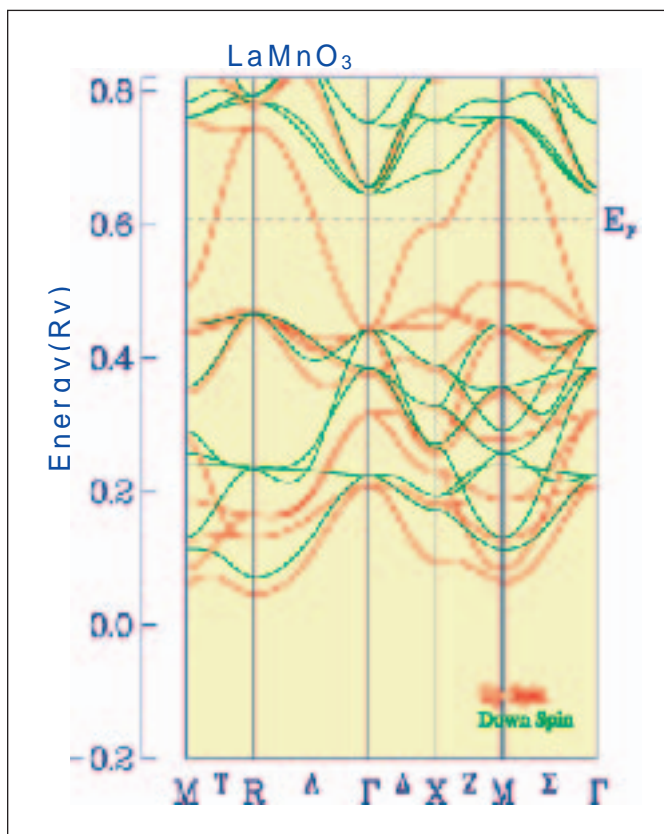
平面波擬ポテンシャル法は、バンド計算手法の中で今日最も良く使われているものです。PHASEは、この分野で世界水準に達する機能を有します。擬ポテンシャルは、ノルム保存型に加えウルトラソフト擬ポテンシャルが使用可能で、第一列元素等空間的に局在した原子軌道を持つ元素も容易に扱うことができます。これらの擬ポテンシャルは、CIAOにより作成可能です。

(2) CIAO

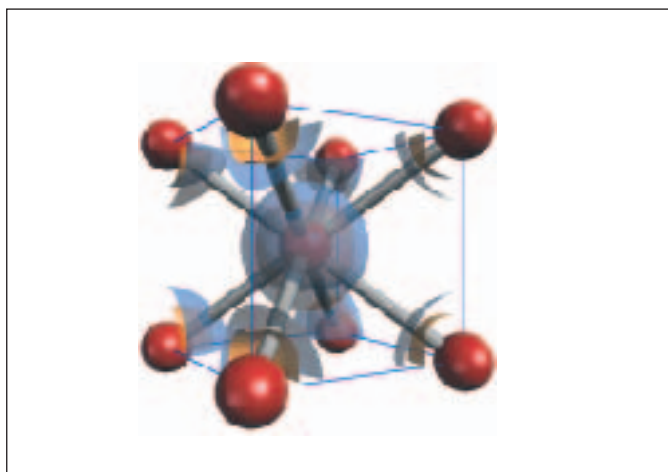
CIAOはPHASE用擬ポテンシャルを作成するプログラムです。

(3) ABCAP

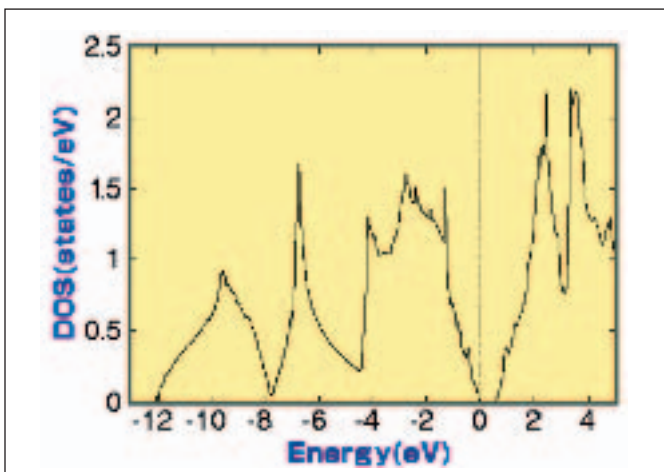
ABCAPは、全電子に対する電子状態計算を行い、擬ポテンシャル法が不得手としているd電子やf電子を含む系に対しても信頼性の高い計算を行うことが可能です。このため、磁性体に対する電子状態計算にも効果的です。① また、内殻電子が関与する分光実験の解析が可能で、ナノ構造解析にも有効です。PHASEとABCAPでは、入力ファイルがタグ形式で構成され、初心者でも入力パラメータの意味が理解し易いように設計されています。また、付属ソフトにより、バンド構造をはじめ様々なグラフィックス出力が可能であり、②③ 計算結果の解析が容易に行えるようになります。



① ABCAPで計算したLaMnO3の強磁性相のバンド構造。



② PHASE計算結果のグラフィックス表示例。黄色と青色の面は、強磁性体である鉄における2種類のスピンのための密度の等値面を表す。



③ PHASEで計算したシリコン半導体の状態密度。

ワークショップ報告

本年度のワークショップは、6月の開発ソフトの公開以降ほぼ月2回の頻度で開催され、各プロジェクトの公開したソフトの利用法、実証計算の経過についての報告が行われています。内容は従来の構想/計画から、公開ソフトの報告を中心とした具体的な内容となっており、講演・質疑にも熱がこもってきています。定員オーバーで受講申込を締切る例も多くなってきておりますので、下記開催予定をご確認の上、是非早めにお申込み下さい。

第6回 次世代流体解析 7月17日(木)

FrontFlow名で公開した乱流LES解析コード2件のソフト:[FrontFlow/red] (燃焼・混相流解析)と[FrontFlow/blue] (ターボ機械/流体音解析)を紹介しました。特に今回はパネルディスカッションでは、産学の有識者をパネリストに迎え、「次世代流体解析システムの実用化」に向けての討論を行いました。

第7回 次世代構造解析 7月23日(水)

NEXSTのタイトルで公開した3本の構造解析ソフトの紹介を中心に講演を行いました。

第8回 次世代量子化学計算 8月22日(金)

ProteinDFのタイトルで公開したソフトを報告、更にタンパク質量子化学計算の最先端の研究者を招き、ミニシンポジウムとポスターセッションも併せ行い、情報交換がなされました。

第9回 HPC-MW 8月26日(火)

HPC-MWの開発計画と進捗状況を報告し、ハードウェア動向と解析ソフトの実用化に向け、土木分野における実業務の解析応用例の発表が行われました。

第10回 統合プラットフォーム 9月11日(木)

流体と構造の連成解析の応用例として、日立と連携してポンプの騒音解析を中心に実証例が報告されました。

第11回 ナノシミュレーション 9月17日(木)

9月5日公開した3本の実正ソフトを紹介しました。



パネルディスカス



熱心な質議で活気ある会場風景



ポスターセッション



加藤代表講演

第2回シンポジウム案内

12月3,4日

本プロジェクトの第2回となるこのシンポジウムでは、戦略的基盤ソフトウェアによる実証例として産業界をリードする代表的な成果が報告されます。

更に我国を代表する計算科学技術の研究者、産業界の技術者等を幅広くお招きし、計算科学技術の現状・課題と将来の産業化への展望を討論する予定です。

ホームページはお早めにお申込み下さい。

15年度下半期ワークショップ・シンポジウム開催予定

詳細はホームページのシンポジウム案内をご参照の上、ホームページより申込下さい。

2003		グループ
10月17日	第12回「HPCモデルウェア」	HPC
28日	第13回「タンパク質 - 化学物質相互作用解析」	タンパク質
11月15日 ~21日	Super-Computing 2003 (Phoenix, 15-21 Nov.) 出展	全体
12月03日 04日	第2回「戦略的基盤ソフトウェアの開発」シンポジウム	全体
2004		
1月20日	第14回「次世代流体解析」、「次世代構造解析」、「統合プラットフォーム」	流体、構造、PSE
2月10日	第15回「ナノシミュレーション」	ナノシミュレーション
2月13日	第16回「次世代量子化学計算」	量子化学計算

資料請求お問合わせ先

TEL : 03-5452-6661 FAX : 03-5452-6662 E-mail : office@fsis.iis.u-tokyo.ac.jp URL : http://www.fsis.iis.u-tokyo.ac.jp/