

利用可能ソフトウェア、研究実施事例

主な利用可能ソフトウェア

青文字は学術利用のみのソフトウェア、サブシステムとの対応についてはWebページでご確認ください

可視化：NICE DCV, AVS/Express, [FieldView](#), ParaView, POV-Ray, VMD, 3D AVS Player, ffmpeg, ffplay, [IDL](#), [ENVI](#), MicroAVS, [3dsMax](#), Open SceneGraph 数値計算：FFTW, SuperLU, METIS, Scotch, PETSc, MUMPUS, Xabclib, ppOpen-HPC, LINSNS_V, DHPMM_F 入出力：HDFS, NetCDF, JHPCN-DF 画像処理：OpenCV 粒子シミュレーション：Geant4 機械学習：Caffe, Chainer, Keras, PyTorch, TensorFlow, Theano, MXnet, ONNX メッシャー：Pointwise 統合ソフトウェア：[HyperWorks](#) 流体解析：OpenFOAM, FrontFlow blue/red 構造解析：[LS-Dyna](#), FrontISTR 計算化学：[AMBER](#), Gaussian, GAMESS-US, Gromacs, LAMMPS, NAMD, Modylas コンテナ：Singularity

2020年度HPCI採択課題一覧

☆は若手人材育成課題、★は「富岳」成果創出課題

課題番号	課題名	課題代表者
hp200002 ☆	Photo-sensitive 2D-arrangement of -OH/H2O on brookite TiO2 (210)	Yang Lei (金沢大学)
hp200019 ☆	Ab Initio Investigation of the Lower Mantle Point Defect Chemistry of the Earth	Sebastian Ritterbex (愛媛大学)
hp200035	第一原理計算による無衝突衝撃波における粒子加速の研究	天野 孝伸 (東京大学)
hp200039	金属微粒子と複合金属酸化物の触媒作用の電子論研究；理解と予測を目指して	榊 茂好 (京都大学)
hp200042	乱流の大規模DNSを用いた大気汚染物質拡散データベースの構築	石原 卓 (岡山大学)
hp200057	マルチピコ秒相対論レーザー物質相互作用による非平衡輻射プラズマの数値研究	城崎 知至 (広島大学)
hp200060	高速なハイブリッドシミュレーションによる金属表面での分子反応	尾形 修司 (名古屋工業大学)
hp200107	計算科学的手法を用いた高レイノルズ数壁面乱流場における凍結乱流仮説の検証	辻 義之 (名古屋大学)
hp200120 ★	環境適合型機能性化学品	松林 伸幸 (大阪大学)
hp200122 ★	省エネルギー次世代半導体デバイス開発のための量子論マルチシミュレーション	押山 淳 (名古屋大学)
hp200123 ★	スーパーシミュレーションとAIを連携活用した実機クリーンエネルギーシステムのデジタルツインの構築と活用	吉村 忍 (東京大学)
hp200128 ★	防災・減災に資する新時代の大アンサンブル気象・大気環境予測	佐藤 正輝 (東京大学)

旧システム(FX100)を用いたCOVID-19対策研究事例

コロナウイルスのメインプロテアーゼとN3阻害剤の複合構造に関するフラグメント分子軌道計算

畑田峻, 奥脇弘次, 望月祐志 (立教大学), 福澤薫 (星薬科大学), 古明地勇人 (産業技術総合研究所), 冲山佳生 (国立医薬品食品衛生研究所), 田中成典 (神戸大学院)

SARS-CoV-2 メインプロテアーゼとN3阻害剤の結晶構造

- 現在、世界各地で流行しているCOVID-19感染症の原因ウイルスSARS-CoV-2について世界中で研究が行われている
- 2020年2月に、LiuらによってSARS-CoV-2のメインプロテアーゼと、阻害能を有する化合物の複合体の結晶構造が発表された (PDB ID: 6LU7)

- メインプロテアーゼ
タンパク質を切断する酵素で、ウイルスの増殖時に機能する重要なタンパク質でありその阻害は、抗HIV薬でも取られる戦略である

本研究では、フラグメント分子軌道法と6LU7結晶構造を用いてメインプロテアーゼ-N3阻害剤間の相互作用解析を行った

フラグメント分子軌道法を用いた相互作用解析

- 解析方法
N3阻害剤を5つの部位に、タンパク質をアミノ酸単位にフラグメント分割し、フラグメント間の相互作用エネルギー (FIE) を算出
気相条件・溶媒条件下でそれぞれ計算
- 計算環境：FX-100・ABINIT-MP
気相条件：128ノード 16スレッド 256プロセス 1.4時間
溶媒条件：192ノード 16スレッド 384プロセス 30.5時間

解析結果

Fragment	エネルギー (kcal/mol)	主な相互作用
Fragment3	-47.50 (気相)	-49.45 (溶媒)
Fragment2	-28.41 (気相)	-26.92 (溶媒)
Fragment1	-24.23 (気相)	-26.20 (溶媒)
Fragment4	-84.85 (溶媒)	-79.58 (溶媒)
Fragment5	-21.32 (気相)	-17.77 (溶媒)

Fragment4 とメインプロテアーゼタンパク質の相互作用

他の部位に比べて大きな安定化相互作用を示したFragment4に着目すると、His163やHis164 (FIE値はMet165に割り当て) と非常に安定的な相互作用を形成していることがわかった

メインプロテアーゼとN3阻害剤の相互作用におけるFragment4部位とHis163, His164の相互作用の重要性が定量的に明らかになった

結果のまとめ

Space for structural modification (Fragment5)

Important interaction (Fragment4)

His163, His164, Glu166, Gln189, Thr190による安定化の寄与が重要
Fragment4と周辺残基との相互作用が特に大きい
また、Fragment5周辺には空間があるため、阻害剤の構造を改変し同様の解析を行うことで有用な知見が得られるのではないかと考えられる

最新の研究成果が米国化学会の専門誌に受理されています：

Fragment molecular orbital based interaction analyses on COVID-19 main protease - inhibitor N3 complex (PDB ID:6LU7), J. Chem. Inf. Model. 2020, Publication Date: June 15, 2020, <https://doi.org/10.1021/acs.jcim.0c00283>