

理研イブニングセミナーは、理研の研究を産業界に伝え、連携を推進することを目的としています。

第56回

理研

イブニングセミナー

神戸開催



スパコンよりも10倍速い!

## 創薬シミュレーション専用計算機「MDGRAPE-4A」の開発秘話

分子動力学シミュレーションは、タンパク質の構造最適化、タンパク質と薬剤の結合自由エネルギー計算など、様々な形で創薬への応用が進んでいます。

タンパク質は生体内で大きく形を変えながら働いていますが、その変化はゆっくりとしており、1ミリ秒(1/1000秒)付近までの計算が望まれています。

しかし、京などの普通のスパコンでは、並列化の難しさのため、計算に1年以上の時間がかかってしまいます。

この問題を解決するため、我々のグループでは、通常のスパコンに比べ10倍以上の加速を可能にする分子動力学計算専用計算機MDGRAPE-4Aの開発を進めています。このために専用のLSIの開発まで行いました。

現在はシステムの製造中で、2018年度中には完成させ、2019年度以降ユーザに提供する予定です。

講演ではシステム開発およびその応用可能性について紹介します。

発表者：泰地 真弘人

生命機能科学研究センター  
計算分子設計研究チーム



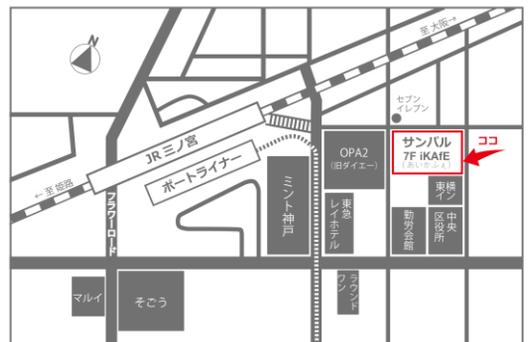
研究チームの紹介ページ⇒



2018. 12.05 (水)  
17:30~18:30 [参加無料]

### 【会場】

健康“生き活き”羅針盤リサーチコンプレックス  
三宮拠点「iKAFE (あいかふえ)」  
(神戸市中央区雲井通5-3-1 サンパル7F)



### 【お申込み】

理化学研究所イブニングセミナー事務局  
担当：神吉 (かんき)

Email: : [evening-seminar@riken.jp](mailto:evening-seminar@riken.jp)

件名を「12/5 理研イブニングセミナー参加申込」とし、  
お名前・ご所属・連絡先アドレスをご記入のうえ、  
メールでお手続きください。

<主催> 理研 イノベーション事業本部 企業共創部  
理研 健康生き活き羅針盤リサーチコンプレックス推進プログラム  
<共催> 神戸商工会議所