

名大 HPC2024 成果報告書

課題名：巨大生体高分子複合体の構造比較手法 MICAN-Banpeiyu の性能評価

名古屋大学細胞生理学研究所センター 佐久間 航也・ID: z40311n

2024年研究・開発計画（提案時）

2024年 4月：①新規ベンチマークデータセットを確定

2024年 5月：②新規ベンチマークデータセットに対して計算開始

2024年 7月：③既存の計算結果（非網羅的）を取りまとめ論文（開発成果報告）を投稿

2024年10月：④新規データセットについての計算結果を解析・論文

2024年度の研究成果

- ① データベース（PDB）から591個の巨大立体構造を選抜し計算を開始した。
- ② ①昨年度までに開発したOpenMP版のプログラムを用い、Type-IIIシステムおよびCloudシステムにて構造比較計算を行った。4月～7月にかけて実行し、計算を終了することができた。多くの場合Cloudシステムのメモリサイズでも実行可能だったが、2割ほどは実行不能であったため、新規に追加したハッシュ作成計算と構造比較計算の部分を分割するスキームを用いるなどして、Type-IIIも利用しながら計算を完了させた。
- ③ 構造比較手法そのものを論文化することを検討していたが、実際に生物学知見が引き出せるということを示した方が良い（インパクトが高まる）という議論があり、③と④を統合して論文を作成している。現在、 $591 \times (591 - 1) / 2$ ペアの計算結果から統計値をまとめ、興味深い具体例などを解析している。

波及効果

2024年度、この研究において実行可能になった超巨大構造比較の結果について外部研究者と話す機会があり、これらの分子を題材に研究を行っている細胞生物学研究者らと共同研究を開始することができた。さらに、この共同研究において未解明の関連遺伝子を発見することができた。

この共同研究では、すでに報告されている構造データと比較するべく、

- ・ 計算機上の複合体モデリング
- ・ 実験的な構造決定

を進めている。これらの成果についての論文を取りまとめる際には、あらためて同様の巨大構造比較を行う必要があり、独立な成果として報告できると期待される。代表者が実験系研究室に異動になったことも幸いしている。正直なところ、生物学的にここまで重要な発見につながるとは想像しておらず、2025年度の進展に非常に期待している。

課題点

1. 2024年6月と11月、複数回にわたり代表者が異動（情報学研究科・博士研究員 → 情報学研究科/高等研究院・特任助教 → 細胞生理学研究センター・現職）することになり、研究が一時停止停止してしまった。
2. 網羅的計算は完了したが、データの更新にどう対応するかという問題が常に残る。特にこのうち、不意に出現する超巨大構造の対応で苦心している。特に重要なものは随時データ更新をチェックし手動でデータ追加をおこなってきたものの、そのなかでも特に巨大であり論文・研究の趣旨からして見過ごすことのできないデータが、2025年3月最終週になって出現してしまい、年度内に対応ができなかった。

ただしハッシュ計算を分割可能にしたことで、その部分は年度内に完了できた。またスライスサイズを調整することで、このようなサイズのターゲットでも Cloud システムでもハッシュ部分は計算可能であることが判明した。さらに細かくとれば Type-I でも計算可能と思われ、次はこの方向性を検討することにしている（いわゆるバカパラレル、ただしノード内では OpenMP 並列になる）。

一方で、二段階目の構造比較部分についてはいまだに Type-III の利用が必須である。不老システム更新に向け Type-III からの依存脱却を推奨されているものの、むしろこのようなシステムがあれば競合が全く参入できなくなることから、どうにかして巨大共有メモリマシンの利用を継続したいと考えている¹。

¹もし不老で無理な場合を考慮し、手元にこのようなマシンを置くことなども含め、どのような実現可能性あるのか、ご相談させていただければ幸いです。

成果

ポスター発表

1. 「巨大生体高分子複合体の構造比較手法 MICAN-Banpeiyu の性能評価」
JHPCN: 学際大規模情報基盤共同利用・共同研究拠点 第16回 シンポジウム
東京コンファレンスセンター・品川 2024年7月11日 発表者：佐久間航也（代表）

口頭発表

2. 「Recent advancements in computational protein science」
下田臨海実験所 下田セミナー
筑波大学 下田臨海実験センター 2024年9月9日 発表者：佐久間航也（代表）
3. 「超巨大生体高分子複合体のバイオインフォマティクス」
第3回タンパク質シンポジウム
東京大学 鉄門記念講堂 2025年1月23日 発表者：太田元規（分担）

現実の実験生物学研究に波及する研究開発成果になってきており、現実世界に影響を与えるような計算科学を志している者として感無量です。このような大規模計算を伴う研究を不老計算機上で遂行させていただけることに対し感謝申し上げます。

以上□