

スーパーコンピューター「京」 ～生命科学に吹き込む新しい風～



理化学研究所

HPCI計算生命科学
推進プログラム

江口至洋

yeguchi@riken.jp

1

今日は、こんなことをお話しします

- 「京」が世界最速のスパコンになりました。
 - 最速の鍵は並列計算にあります。
 - 将来、みなさんは机上で「スパコン」を使えます。
- 「京」で5つの分野の研究が進められています。
- 「京」と生物学(生命科学)?
 - 生物学と数学、物理、化学は陸続きです。
 - 京はその繋がりをさらに強めます。

2

学問は常に進化しています。生物学は特に！

2003年 ヒトの30億塩基対を解読

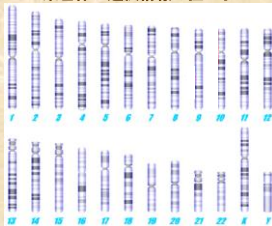
ヒトゲノムの塩基配列

```
CTGGAGGGGCTAGACATTGCCCTCCAGAGAGAGACCCACACCCCT  
CCAGGCTTGAACGGCCAGGGTGTCCCTTCTACTTGGAGAGAGCA  
GCCCAAGGCACTCTCCAGGGGGTCTGGGACACAGCTGGGCTTCA  
AGGTCTCTGCTCCCTCCAGCCACCCACTAGAGGCTGCTGGGATCC  
TGGATCTAGCTCCCTGGCCACACACTGGCAAGCTGATCTGCTG  
CACGAAGGCCCTCTGGGCATGGTGGTCTTCCAGGCTGGAGTCT  
GTCTCAGACACCTTGTAGTGCCAGGCCCTGAGGTTGAGAGCTGG  
GGGTCTCTGAGGGCTGTGAGGCCCCAGGAGGCCCTGGGGAAAGTG  
CTCTGCTTGGCTCCCGCCGGCCCTGCCAGGGCTGGCTTGGCCCTCC  
TACTGGCTCCCGCCTCCAGGCTCCCTCCCTACACACTGCTCA  
AGGAGGACCCATGCTCTCCAGGCTCCCGGGCTCAGAGCACTGTG  
GGCTCTGGGGCAGCCAGGCTATCTGGCTGGGATGGCTCAGGG  
TGGAAAGGGCGAAGGGAGGGGTCTCCAGATAGCTGGTGGCCACTA  
CCAAACCCCTCGGGCAGAGAGCCAAAGGCTGGGTGTGTCCAGAG  
GGCCCGAGAGGGTCCAGGGCTGGAGCCAGGGTGGACATAGGAT  
GCAGGGCCGGGGCAGAGATCTCCAGCTCCCTGGCCCATGTT  
CTCATCTCGCTGCTTGGGACTCTGATCTGGCCCTGGTGGCTAA  
GAGGAGGTAAAGGGCTCCAGGACAGAGGGCTGGAGGCCATGGCCC  
CTCACATGGGTGAGGCTGGACCTCAGGGTGGCTGCTGGAGAGCT  
GGAGGGCCGGGGGTGACCCAGGGGCTCAGCCAGATGACACT  
ATGGGGTGTATGGTCTATGGGACTGGCCAGGAGGGAGATGGG  
CTCCAGAGAGAGG
```

1953年 ワトソンとクリック
DNAの二重らせんモデル



1902年 サットン
染色体が遺伝情報の担い手



www.riken.jp/e-world/info/release/press/2004/040803/index.html
Watson, J. D. & Crick, F. H. C., (1953) Nature 171, 737-738
EMBL-Bank: V00565.1 : Human gene for preproinsulin, from chromosome 11

3



スパコン「京」って何？

4

スパコン「京」 連続して世界第1位を獲得

2011年6月20日朝日新聞の記事から、
『日本スパコン 1位じゃなきゃ!』、『神戸の「京」世界最速に!』

2011年11月15日神戸新聞の記事から、
『スパコン速度 中国の4倍!』、『神戸の「京」V2達成!』

5

圧倒的な1位 (LINPACK性能値: 10.5 Petaflops)

順位、国	機関	速さ
1. 日本	京 (理化学研究所)	10.5
2. 中国	天河1A (国防科学大学)	2.6
3. 米国	ジャガー (オークリッジ国立研究所)	1.8
4. 中国	星雲 (国立スパコンセンター)	1.3
5. 日本	TSUBAMA2.0 (東京工業大学)	1.2

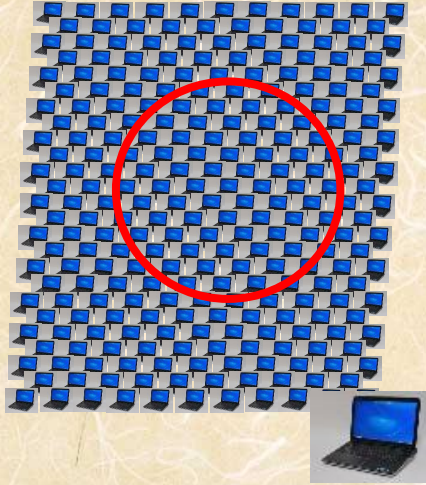
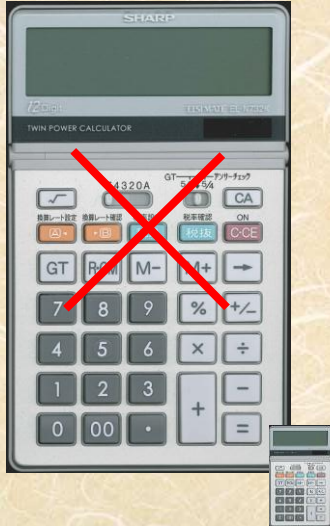
Flops (フロップス) 一秒間に処理できる浮動小数点計算の数

6

スパコン「京」?

大きな電卓、ではありません。

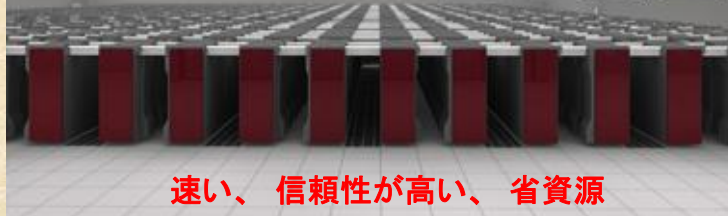
どちらかというと、連結された大量のパソコンです。



7

スパコン「京」!

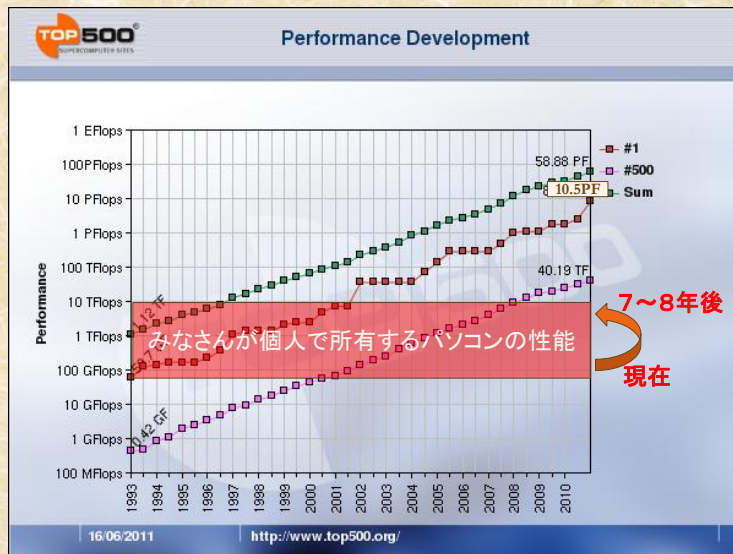
8万個以上のCPUが合わ
さって1京/秒の計算速度



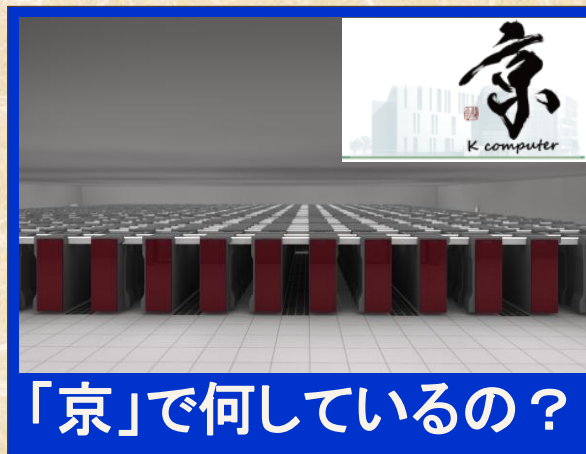
速い、信頼性が高い、省資源

8

皆さんが30歳代、スパコンは机の上にありますよ！



9



10

取り組んでいる5つの分野



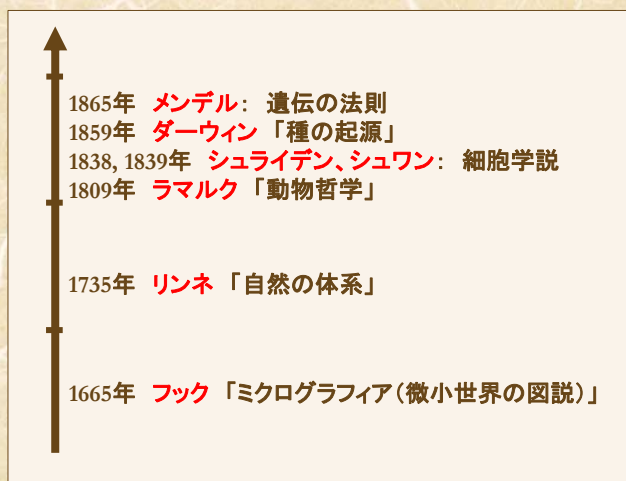
生物学？

生物学のキーワード

- 生命ある物(生きている物)
- 細胞(生命のはじまり)
- 遺伝(遺伝情報を子孫に伝える)
- 進化(ヒトを含めた種の起源)
- 多様性(ヒトは多くの生物と共にある)

13

生物学の基礎を築いた人たち



14

細胞と名付けよう！生命は細胞にはじまる！

細胞cellの名付け親は、あのフックの法則のフックさんです。

フック (1635~1703)
「コルクは空気に満たされたcellからなっている」



「コルクの形態または組織構造について」
約150倍の顕微鏡を用いた図説(1665年)

シュライデンとシュワンが、「細胞説」を唱えました。約200年後に。



シュライデン シュワン
(1804~1881) (1810~1882)

「細胞が生物の基本単位である」
(1838-1839年)

<http://commons.wikimedia.org>

15

「神」が創造した鉱物、植物、動物を分類しよう！

「自然の体系」第1版(1735年)約590種、第10版(1758年)約4,400種の動物を記載



リンネ
(1707~1778)

鉱物は成長する。
植物は成長し、生きる。
動物は成長し、生き、感覚を持つ。
もはや新しい種は生じない。

CAROLI LINNÆI REGNUM ANIMALE					
I QUADRUPEDIA	II AVES	III AMPHIBIA	IV PISCES	V INSECTA	VI VERMES
...
PARADOXA					
目録					
属種					

ヒトの位置付け：動物界の最初(図表の左上)にヒト属(汝自身を知るもの)を置いた。

<http://www.biologie.uni-hamburg.de/b-online/e01/linne.htm>
[http://en.wikipedia.org/wiki/File:Linnaeus_-_Regnum_Animale_\(1735\).png](http://en.wikipedia.org/wiki/File:Linnaeus_-_Regnum_Animale_(1735).png)

16

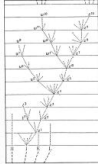
生物は進化し、今のヒトがいる！

種の起原

(上)

ダーウィン著

八杉龍一訳



自然選択と適者生存の事実を科学的に実証して進化論を確立し、自然科学の分野においてはもちろん、社会観・文化観など物見かた全般に決定的な影響を及ぼした著作として、この「種の起原」の名を知らぬ人はいない。本書は、底本に1859年の初版を用い、さらに最終第6版までの各版の異同をくわしく記した決定版である。(全2冊)



青 9124
岩波文庫



(1809-1882)

本の正式な題名は
「自然選択、すなわち
生存競争において有利な変種が保存されること
による種の起源について」

- **自然選択**：生存競争において有利な変種が保存され、**強い遺伝の法則**によって子孫に伝えられる。
- ところで、**遺伝的変異**がどのように生じ、いかにして子孫に伝えられるかという**遺伝の法則**はどうなっているのだろう????????

<http://darwin-online.org.uk/>

17

おそらく粒子の形をした「遺伝子」があるのだろう、 遺伝の仕組みを明らかにしよう！

メンデル

雑種植物の研究

岩槻邦男・須原準平訳



栽培植物の新品種を作るための人工交配をヒントに、メンデル(1822-84)は、ブルノの修道院の庭で8年にわたりエンドウの交配実験を行なった。きわめて科学的に遂行された実験を厳密に検証したこの論文は、当時はその価値を認められず、1900年になって再発見され、遺伝学の基本的な法則にメンデルの名が冠せられることとなった。



青 932-1
岩波文庫



(1822-1884)

2年かけて、純系種を選出し、8年かけて交配実験を行うという「**かなりの勇気**を必要とする**実験**」を行った。

優性形質Aと劣性形質aをもつ雑種第1世代(F_1)Aaを掛け合わせると、雑種第2世代(F_2)に対して次の展開式が得られる。

$$(A+a) \times (A+a) = AA + 2Aa + aa$$

このような「**かなりの勇気**を必要とする**実験**」を、**目的と仮説なし**に行うことはない！?

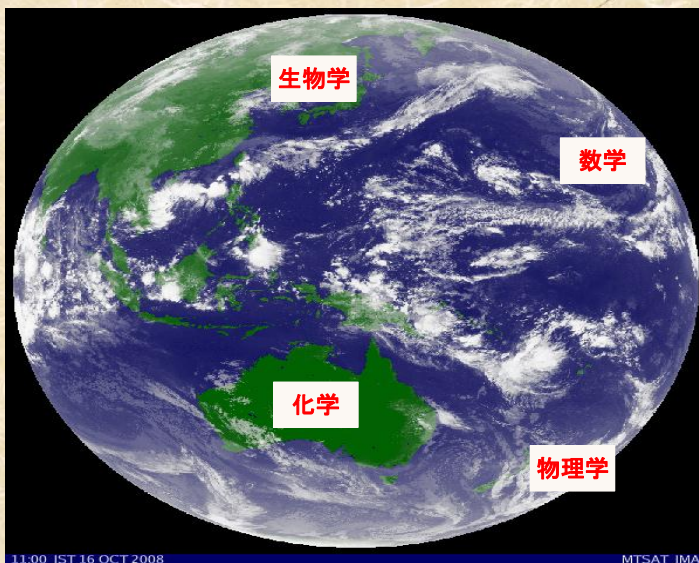
- ・**生物の進化の歴史**にとって重大な意味を有する問題を最終的に解決する。
- ・観賞植物で新しい種をつくるために行われる人工受精のたびにみられる**顕著な法則性**を追跡するために、**さらなる実験**を行った。

「私は実験物理学の教師です。」(メンデルの手紙に書かれています！)

<http://www.jic.ac.uk/germplas/pisum/zgs4f.htm>

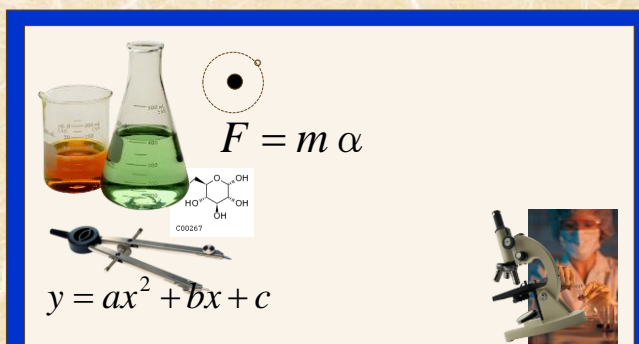
18

生物学と数学、化学、物理学は離れ小島！



http://www.data.kishou.go.jp/obs-env/portal/chishiki_ondanka/p01.html

19



生物学は離れ小島？

20

離れ小島を繋げ出した人たち

- 1965年 ワトソン 「遺伝子の分子生物学」
1961年 タンパク質のX線結晶構造解析
1953年 ワトソン、クリック：DNAの二重らせんモデル
1943年 シュレディンガー 「生命とは何か」
1926年 シュレディンガー：量子力学を確立
- 1865年 メンデル：遺伝の法則
1859年 ダーウィン 「種の起源」
1838, 1839年 シュライデン、シュワン：細胞学説
- 1828年 ウェーラー：シアン酸アンモニウムから尿素を合成
$$\text{NH}_4\text{OCN} \longrightarrow \text{H}_2\text{NCONH}_2$$
- 1735年 リンネ 「自然の体系」
- 1687年 ニュートン：運動方程式
1665年 フック 「ミクログラフィア(微小世界の図説)」

21

シュレディンガーやワトソンが言ったこと！

1943年 シュレディンガー 「生命は、物理や化学の法則に従って生きている！」

- 1) 遺伝子は非周期的な結晶構造をとっている。
- 2) 生命は負のエントロピーを食べている。

1953年前後までの一般的な考え
「遺伝子は染色体の中のタンパク質が担っているのだろう。」

1953年 ワトソンとクリック 「遺伝情報はDNAの塩基配列に刻まれている。」



1965年 ワトソン 「細胞は化学の法則に従って生きている」

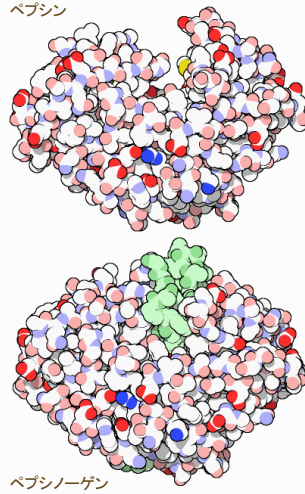
さまざまな生命現象に対するわれわれの理解を分子レベルにまで掘り下げていくなれば、やがてわれわれは、生きていく状態の基本的な性質を理解しうる。

22

タンパク質の機能と構造！

1836年に発見された酵素 ペプシン

機能：
胃の主細胞から分泌される。
胃の中の酸性環境下で食物を消化するよう最適化されている。
非常にでたらめな酵素で、タンパク質を様々な長さの断片に切断する。



<http://www.pdbj.org/mom/index.php?l=ja&p=012>

23

花成ホルモン(フロリゲン)！ 1936年チャイラキアンが提唱

2 花芽形成と発芽の調節

A 光周性 日長(1日の昼間の長さ)の長短(実際には連続した暗黒時間の長短)によって、花芽の形成などが左右される性質を光周性という。

花芽形成と日長との関係から、種子植物は次のように大別される。

長日植物	日長が約11～14時間以上で花芽形成促進	春咲きが多い	アブラナ・ニンジン・ダイコン・コムギ・ヒメジョオン・アヤメ・ホウレンソウ
短日植物	日長が約14～16時間以下で花芽形成促進	秋咲きが多い	キク・ダイズ・アサガオ・オナモミ・アサ・タバコ・コスモス
中性植物	日長と無関係に花芽形成が起こる	四季咲きが多い	ナス・トマト・ヒマワリ・タンポポ・エンドウ・ハコベ・ソバ・キュウリ

B 花芽形成と暗期の長さ (1) 長日処理と短日処理 長日植物は、早朝または夕刻に人工的な照明を与える長日処理によって、花芽を形成させることができる。



(2) 限界暗期 花芽形成に必要な、長日植物では最長の、短日植物では最短の暗期の長さを限界暗期という。短日植物では、短日処理中の暗期をごく短時間の閃光で中断(光中断)すると、花芽形成が起こらなくなる。これから、花芽形成には一定時間以上の連続した暗期(限界暗期)が必要であることがわかる。

(3) 花成ホルモン 光周性を示す植物の花芽形成の促進にはたらく物質は花成ホルモン(フロリゲン)と名づけられたが、その実体は明らかではない。この植物ホルモンは、一定時間の暗期が条件となって葉でつくられ、篩管を通して花芽形成部位に運ばれると考えられている。

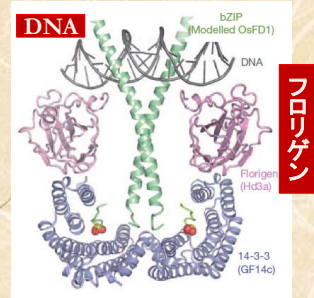
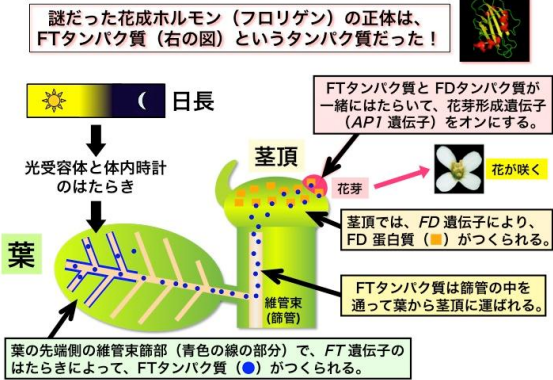
24

花成ホルモン(フロリゲン)！

ワトソン(1965年)の主張「さまざまな生命現象に対するわれわれの理解を分子レベルにまで掘り下げていくなれば、やがてわれわれは、生きていく状態の基本的な性質を理解しうる。」が、日本の研究者によっても、実現されてきています。

2005年～

われわれが解明した花成ホルモン(フロリゲン)の正体と働き

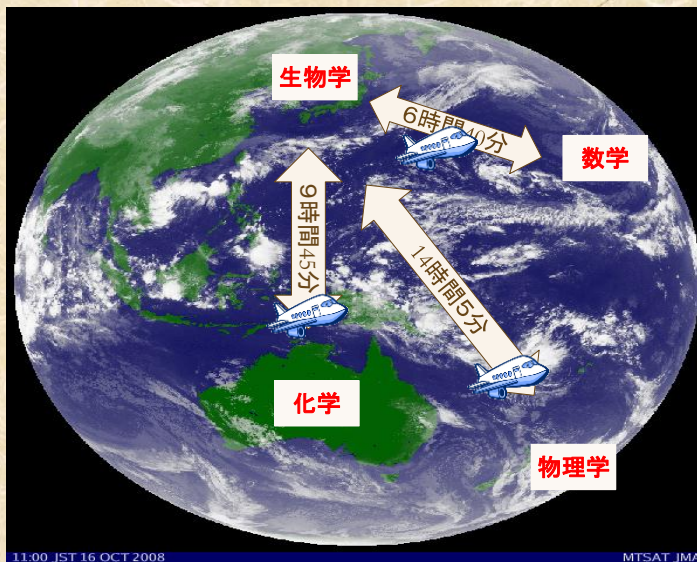


アブラナ科の植物(長日植物): FT
イネ(短日植物): Hd3a

http://www.lif.kyoto-u.ac.jp/labs/plantdevbio/for_general_audience.html
<http://bsw3.naist.jp/courses/courses101.html>

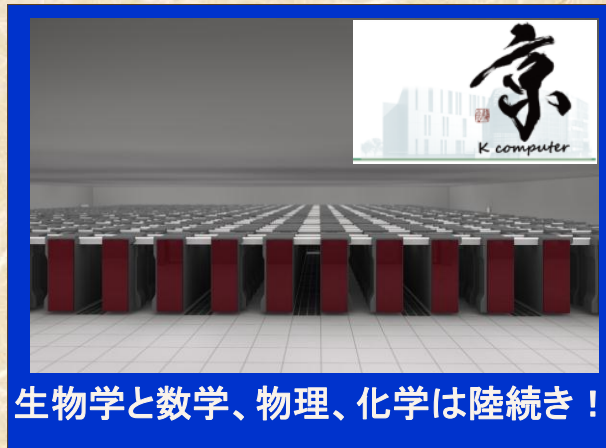
25

生物学と数学、化学、物理学が近づいてきた！



http://www.data.kishou.go.jp/obs-env/portal/chishiki_ondanka/p01.html

26



生物学と数学、物理、化学は陸続き！

27

計測技術と計算機科学の飛躍的な進歩

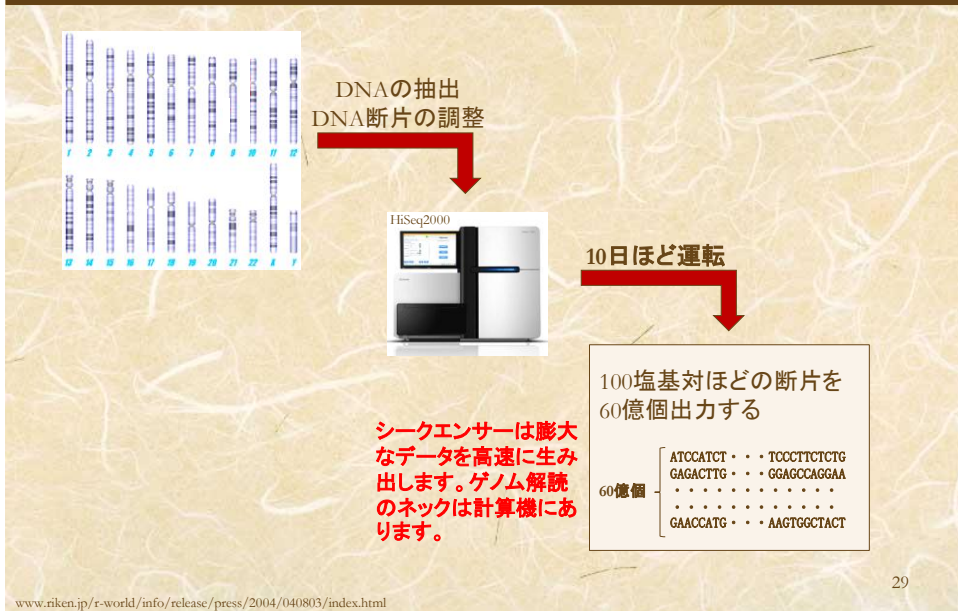
- 2012年 スーパーコンピュータ「京」
- 2008年 下村脩： 蛍光タンパク質(ノーベル化学賞)
- 2005年 次世代DNAシーケンサー
- 2002年 田中耕一： タンパク質を飛ばす(ノーベル化学賞)
- 1994年 DNAチップ
- 1977年 サンガー： DNA塩基配列決定法
- 1965年 ワトソン「遺伝子の分子生物学」
- 1961年 タンパク質のX線結晶構造解析
- 1953年 ワトソン、クリック： DNAの二重らせんモデル
- 1943年 シュレディンガー「生命とは何か」
- 1926年 シュレディンガー： 量子力学を確立

- 1865年 メンデル： 遺伝の法則
- 1859年 ダーウィン「種の起源」
- 1838, 1839年 シュライデン、シュワン： 細胞学説
- 1828年 ヴェーラー： 人工的に有機物である尿素を合成

- 1735年 リンネ「自然の体系」
- 1687年 ニュートン： 運動方程式
- 1665年 フック「ミクログラフィア(微小世界の図説)」

28

次世代DNAシーケンサー？



一人一人のゲノムの塩基配列を決める！

$$30\text{億塩基対} \div 100\text{塩基対/断片} \times 30\text{重複度} = 9\text{億断片}$$

AGAACCTGATCAAGAATGGCAAGCTGAAGGACTTCTCTGAAGACCCACAAACACACCCGGCCAGCAAGTACTTCCCGAGGCCGCTGCCCTGATAGGGGA
 GATCAAGAATGGCAA AAGGACTGCCTGTAG GGCCAGCAAGTACTTCC CCCCAGGCCGCTGCC

↑ ↑

青字で示す膨大な数の断片を、赤字で示すテンプレート配列に貼り付けていきます。ちょっと一致しない文字↑も考慮して。

```

    GGCCAGCAAGTACTTCC
    GATCAAGAATGGCAA
    . . . . .
    CCCCAGGCCGCTGCC
    AAGGACTGCCTGTAG
  
```

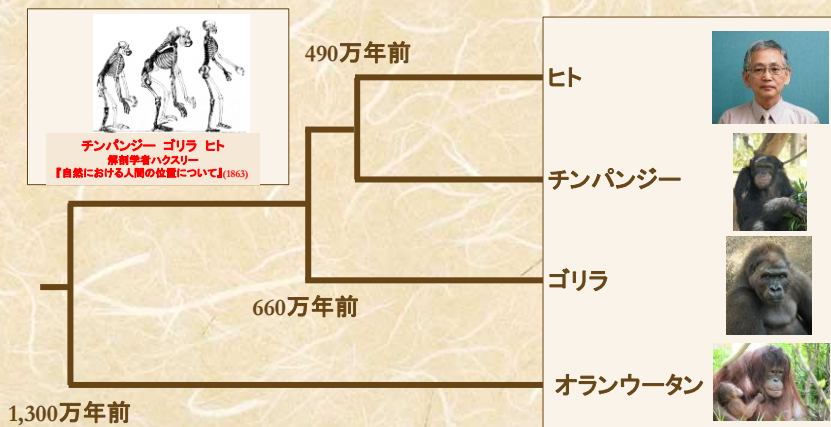
9億断片のジグソーパズルを京がする！



31

塩基配列から系統樹！

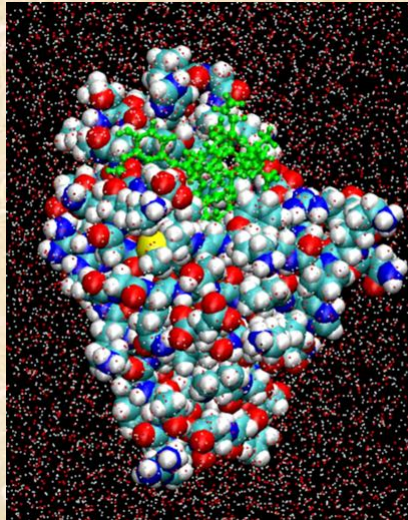
ヒトを含む類人猿の進化の歴史も、姿・形からではなく、DNAの塩基配列から推定されています。



<http://ja.wikipedia.org/>
<http://www.noichizoo.or.jp/>
<http://www.higashiyama.city.nagoya.jp/>
<http://www.city.sapporo.jp/zoo/>

32

タンパク質の動きを計算機顕微鏡で見ると



タンパク質はアミノ酸が長く繋がったものですが、細胞内で「じっと」しているわけではなく、大きく動いています。その動きは、普通の顕微鏡ではみえませんが、「計算機顕微鏡」ではみえます。
高校の物理の教科書にあるニュートンの運動方程式を解くのです。

$$F = m a$$

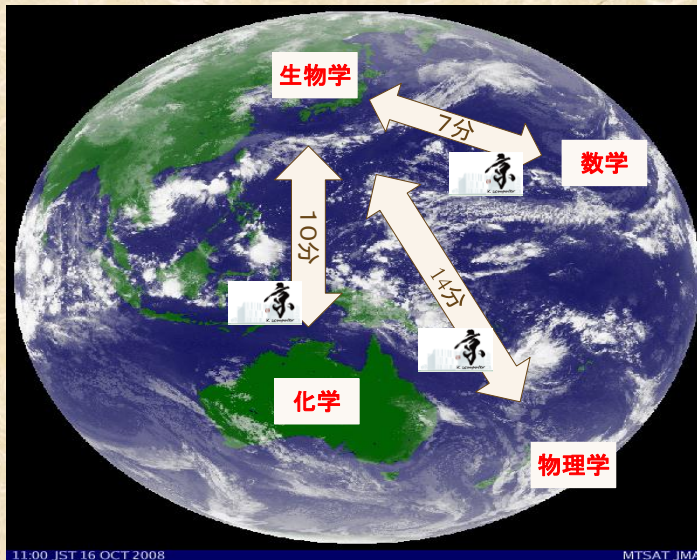
力Fは、フックの法則やクーロンの法則、ファンデルワールス力など高校の物理や化学の教科書にある法則に従って導かれています。

免疫抑制剤FK506とタンパク質FKBPの動き

東京大学 藤谷先生のご好意による

33

生物学と数学、化学、物理学は「陸続き」！



11:00 JST 16 OCT 2008

MTSAT-1A

http://www.data.kishou.go.jp/obs-env/portal/chishiki_ondanka/p01.html

34

みなさんの近くに「陸続き」になった例がありますよ！



明石海峡大橋：兵庫と淡路島と徳島を陸続きにしました。
スパコン京が、生物学と物理学、化学、数学を繋いだように。

http://kobe-mari.maxs.jp/akashikaikyo_bridge/
<http://maps.google.com/>

35

ご清聴ありがとうございました。

36