

構造生物学研究におけるクラウド活用の現在と展望

構造生物学領域では、X 線結晶構造解析やクライオ電子顕微鏡単粒子解析などの生体高分子立体構造決定手法ではデータ解析のために、一時的に大量の計算リソースを使用します。クラウドでは必要な時に必要な量の計算リソースを確保できるため、需要に応じた大規模計算環境の構築が可能です。本セッションでは、Amazon Web Services における High Performance Computing 環境の概要に加え、高エネルギー加速器研究機構 山田悠介先生、守屋俊夫先生より、クラウドの、研究への活用状況や今後の発展性についてご紹介いただきます。

Amazon Web Services で創(はじ)めるクラウド HPC

宮本大輔

アマゾン ウェブ サービス ジャパン株式会社 技術統括本部

AWS では、クラウドのスケラビリティを活用することで、必要な時に必要な種類の必要な量の計算リソースを確保することが可能となり、大規模な処理をコスト効率よく実現することが可能です。また、このようなスケラブルな計算環境を構築するため、Slurm などのジョブスケジューラと連動してサーバの起動・停止を行う AWS ParallelCluster といったサービスも提供しています。本発表では、この AWS ParallelCluster を中心に、クラウド上で創薬研究を行うための基礎についてご紹介します。

KEK 構造生物学研究センターにおけるクラウド利用

山田悠介

高エネルギー加速器研究機構 物質構造科学研究所 構造生物学研究センター

大学共同利用機関法人高エネルギー加速器研究機構にある構造生物学研究センターでは放射光施設フォトンファクトリーにある放射光ビームラインを用いたタンパク質 X 線結晶構造解析や溶液散乱構造解析、そしてクライオ電子顕微鏡を用いた単粒子構造解析に関連する測定と解析技術の開発をするとともに、それらの技術をユーザー利用に供している。

近年の手法の高度化、特に測定の自動化で短時間に大量のデータ取得が可能となったことに伴い、解析により多くの計算リソースが必要となり、その確保が喫緊の課題である。当センターではクラウドの豊富な計算リソースや利便性に着目し、測定データの解析への活用を進めている。本発表では、タンパク質 X 線結晶構造解析における活用例を中心にクラウド利用の取り組みについて紹介する。

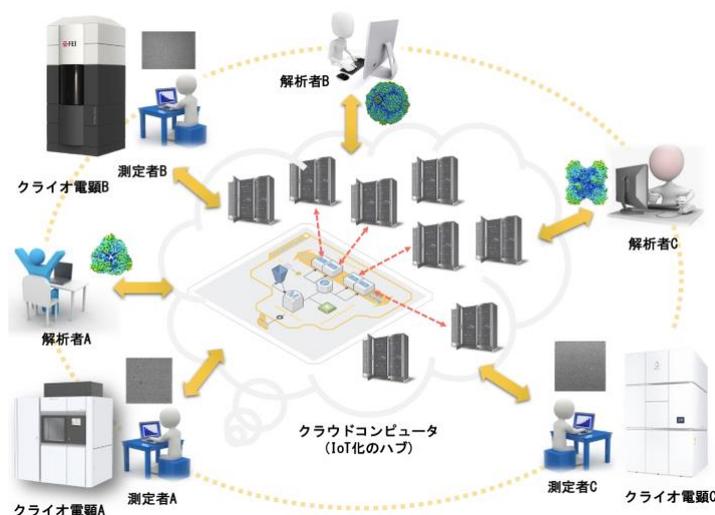
AWS ParallelCluster をハブとした 単粒子クライオ電子顕微鏡構造ベースの化合物スクリーニング現場の IoT 化

守屋俊夫

高エネルギー加速器研究機構 物質構造科学研究所 構造生物学研究センター

現在、創薬の標的ではあるが結晶化の難しい膜タンパク質や超分子複合体等、X線結晶構造解析法の適用が困難な対象の立体構造を原子分解能で可視化する技術として最も広く利用されているのは単粒子クライオ電子顕微鏡法(以下、クライオ電顕法)である。新型コロナウイルス感染症対策の反省から、構造ベースのドラッグデザインの要となる化合物スクリーニングにクライオ電顕法も実用できるようになることが望まれている。しかし、成熟したX線結晶構造解析法と比較すると、本手法は化合物スクリーニングに必要なスループットが十分でない。よって、その特徴を最大限に活かすためには、化合物とタンパク質が結合した構造を極短時間で決定するためのインフラを早急に確立する必要がある。そこで我々は、クライオ電顕法によるタンパク質構造解析に関わる「もの」、つまり、電子顕微鏡、解析計算ハードウェアとソフトウェア、そして人(測定者、解析者)を繋ぐ解析現場のIoT化に取り組んでいる(図1)。この取り組みでは、無尽蔵の計算資源を提供するクラウドの代表であるAWS ParallelClusterをハブとして利用することで、関連する全ての作業を一元的にモニターすることを目指している。これによって、一つ一つの作業の詳細をデータベース化し、測定者と解析者のノウハウを蓄積し、これらの構造解析経験データを利用する深層学習で構造ベースの化合物スクリーニング工程の完全な自動化を行う計画である。これが実現すれば、測定から高分解能構造の決定をシームレスに繋ぐことが可能になる。これによって、COVID-19等の新興感染症に関連する社会問題を生物学の力で解決するための技術基盤を確立し、生物学と関連産業分野の発展を狙う。本発表では、我々のこれまでの取り組みと今後の展望について紹介したい。

図 1



AWS ヘルスケア・ライフサイエンスのご紹介ページ：

<https://aws.amazon.com/jp/local/health/>

お問い合わせ先：<https://aws.amazon.com/jp/contact-us/>

