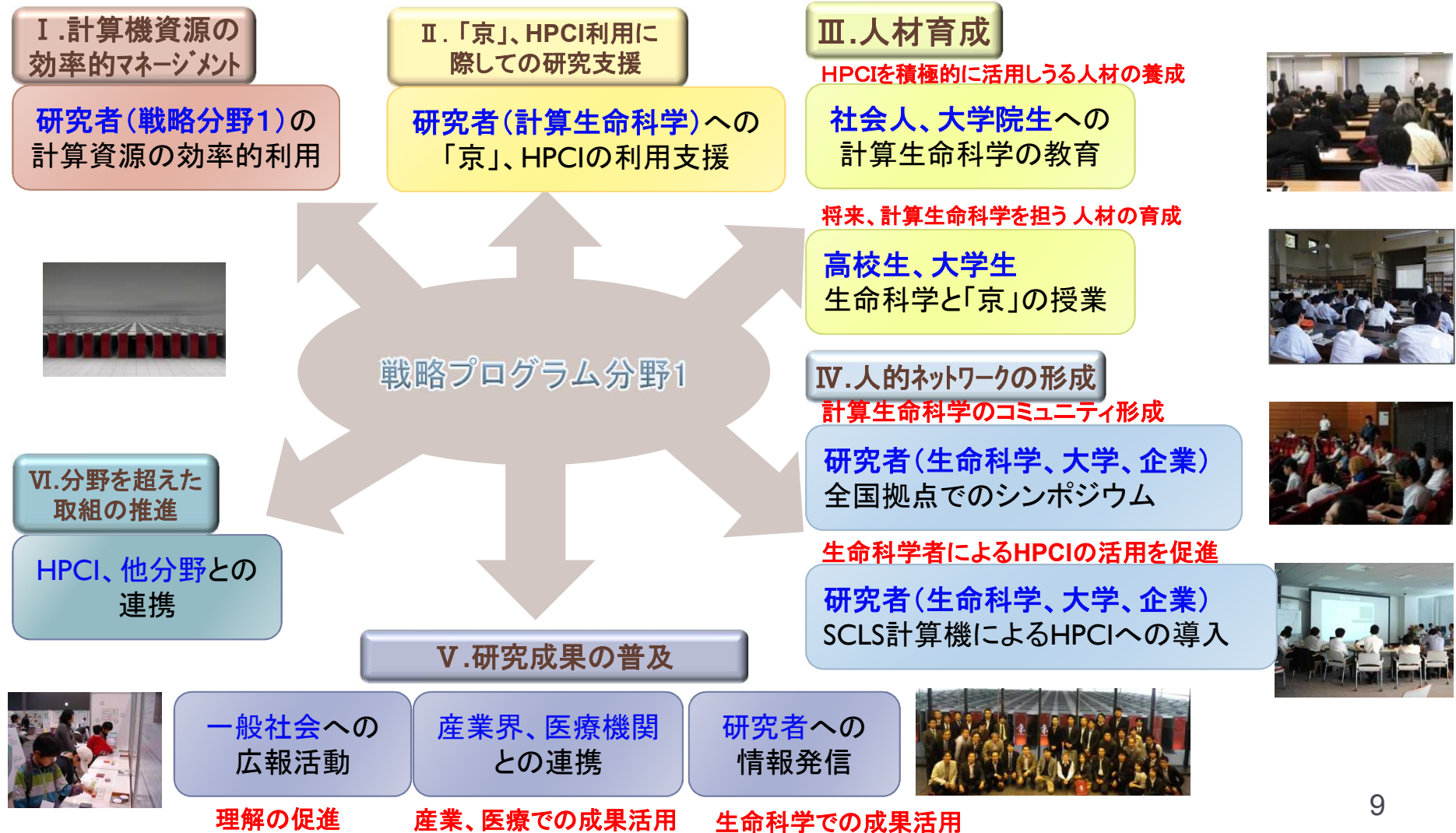


計算科学推進体制の構築

「京」の高度な活用体制の構築と 幅広い層（研究者から一般社会まで）へのアウトリーチと教育の実施



(5) 体制構築の実施計画と最終目標

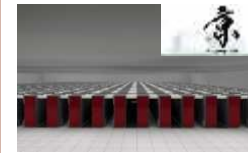
	前半 (H23～H25上期)	後半 (H25上期～H27)	最終目標
当初計画	I. 計算機資源の効率的なマネジメント	成果に向けた戦略的資源配分(年次計画、月次調整)の実施	「京」の高度な活用体制の構築と研究者から一般社会までの情報発信と教育体制の構築
	II. 「京」、HPCI利用に際しての研究支援	「京」活用支援、ソフトウェア高度化支援の実施 HPCI環境を効果的に利用する計算環境の整備運用	
	III. 人材育成	HPCIを積極的に活用する人材の養成(セミナー等開催) 継続化 将来、計算生命科学を担う人材の育成(大学、高校の講義)	HPCIによる画期的な成果を創出できる環境整備の提供、研究支援がなされている。
	IV. 人的ネットワークの形成	コミュニティの形成と連携の促進 (連携シンポジウム、SCLS計算機システムによる導入)	戦略1に関連する研究者(医療・製薬関連企業を含む)によるHPCIの利用が進んでいる。
	V. 研究成果の普及	研究者への情報発信。一般社会への広報活動。 産業界との連携の促進	
	VI. 分野を超えた取組の推進	AICS、戦略5分野との研究会、共同での広報活動の実施 グランドチャレンジとの連携、成果の活用	
		大学院、及び研究機関にて継続しうる教育プログラムが設置され、大学生、大学院生、社会人を対象とした人材育成がなされている。	
現状	実施内容		見直し計画
	○戦略的な資源配分の実施 (重点課題選定と年次、月次での調整)		★当初計画に加えて以下を実施
	○アプリ(10本)の高度化支援 ○SCLS計算機システムの整備・運用		人的ネットワークの形成をさらに促進
	○社会人、大学生への教育プログラムの実施 ○大学、高校での講義		研究成果を普及する仕組みの構築。 (ポータルサイトの構築。講習会を実施)
	○全国の拠点連携シンポジウムの開催 ○SCLS計算機システムの利用公募の実施		
	○産業界との連携 (分野1ソフトによる企業の「京」利用) ○広報活動(HP,パンフ,記者勉強会)		
	○AICS、戦略5分野との広報、教育活動 ○グランドチャレンジ・ソフトの活用と普及		
			HPCIを中心とした計算生命科学のネットワークが形成されている。
			成果が医療・創薬の分野で理解され、活用/実用に向けた取り組みが進んでいる。
			HPCIの環境が有効に活用できる仕組みが出来上がり、各科学技術分野が連携し、実験科学、理論科学そして計算科学が鼎立しうる環境の構築が進んでいる。

(5) 体制構築 <これまでの成果内容>①

I. 計算機資源の効率的マネジメント

(1) 戦略的な資源配分の実施

- ・資源配分方針の策定(「京」を利用した成果の科学的・社会的重要性)
- ・年次: 研究開発およびソフトウェア開発計画に基づく重点課題選定と資源配分
- ・月次: 進捗状況の把握とそれに応じた再配分の実施。



II. 「京」およびHPCI利用に際しての研究支援

- (1) 「京」の利用支援、アプリ(10本)の高度化支援の実施。
- (2) 「京」互換SCLS計算機システムの整備・運用
- (3) 利用者講習会の開催



SCLS計算機システム
(10.1 Teraflops)

半数が企業関係者

III. 人材育成

(1) 社会人、大学院生への人材養成・教育プログラムの実施 **HPCIを積極的に活用しうる人材の養成**

- ・産総研CRBC: セミナー、チュートリアル、ワークショップ、e-ラーニング 延べ約1,800名が受講
- ・阪大基礎工 : 講義(40名)、産業界向けシンポジウム 7回, 延べ710名が参加



「京を使ったターゲット探索が現実味を帯びてきた」

(2) 大学、高校での講義

計算生命科学と京の理解を深め、将来、計算生命科学を担う人材の育成

① 大学、大学院

- ・東京理科大、東京医科歯科大、福井大、京大、阪大、神戸大 14回, 延べ516名が受講

② 高校生

- ・高校での出張授業(神戸高校、西脇高校、宇都宮高校など) 7回, 延べ320名が受講
- ・高校生を対象とした科学イベント等への出展 8回, 1,000名以上が参加

「計算科学と生命科学という一見離れた分野の関係性と将来的な可能性について認識を深めた」(多数の意見)



「生物も! スーパーコンピュータのイメージが変わった」

「コンピュータがわたしたちの生活に非常に密着していることに驚いた」(多数の意見)

(5) 体制構築 <これまでの成果内容>②

IV. 人的ネットワークの形成

- (1) 学会や全国の拠点大学と連携したシンポジウムの開催
 - ・九大、東大医科研、東北大、岡山大、北大 等
 - ・バイオインフォマティクス学会、生物物理学会、分子生物学会 等

計算生命科学のコミュニティを形成し、連携を推進する
12回, 延べ1,000名以上が参加
- (2) 京互換SCLS計算機システムの公募利用

生命科学者によるHPCIの活用を促進
3回公募を実施、27課題, 110名が利用



独創性・優位性

- ・地方拠点の育成による継続的な人材養成
- ・研究者から一般まで幅広い層に応じたアウトリーチ活動と教育活動

V. 研究成果の普及

- (1) 広報活動
 - ・ホームページ、パンフレット、ニュースレター(年2回)
 - ・記者・メディア向け勉強会の開催

プログラムの研究成果に対する理解の促進
90%以上が「理解しやすかった」
- (2) 産業界との連携
 - ・「新薬開発を加速する「京」インシリコ創薬基盤の構築」(京大奥野教授)を支援
 - ・田辺三菱製薬の研究者がMP-CAFEEの有効性に関して論文発表

産業界への研究成果の普及と京の利用促進
製薬企業10社、IT企業2社、大学・研究機関3

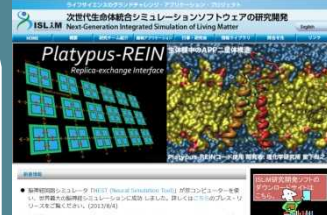


課題2 藤谷教授のソフト MP-CAFEEの利用

成果の利活用

IV. 分野を超えた取組の推進

- (1) シンポジウムや合同研究交流会等の開催(研究ノウハウの共有促進)
- (2) 計算科学研究機構および戦略5分野との連携(教育とアウトリーチ活動)の実施
 - ・HPCI戦略分野1×分野2 シンポジウム in 名大(2013年12月17日)
 - ・機構・5分野共同での講義の実施(神戸大学発達科学部 2012年度後期)
- (3) グランドチャレンジ・ライフとの連携(ソフトウェアの公開と講習会の実施)



Platypus-REIN Application Interface

參考資料

分野1 予測する生命科学・医療および創薬基盤

細胞内分子ダイナミクスのシミュレーション(課題代表者:理化学研究所・杉田有治)

研究概要

蛋白質や核酸などの溶液中の生体高分子のダイナミクスと機能の関係は理論計算と実験によって詳しく調べられてきた。特に、薬剤と蛋白質の相互作用は創薬において重要であることは言うまでもない。しかし、蛋白質や核酸が分子機械として実際に働く細胞内の環境を露に取り込んだ分子シミュレーションは従来は行われていなかった。「京」の演算能力を最大限に発揮することができる研究課題として、細胞質内分子混雑環境における生体高分子や代謝物のダイナミクスと相互作用、信号伝達への影響、核内混み合い環境でのクロマチンの動態モデリング、転写因子などの遺伝子探索動態などの計算を行う。

研究体制

課題代表者(杉田有治:理化学研究所)、研究分担者(高橋恒一(理化学研究所)、池口満徳(横浜市大)、高田彰二(京都大学)、林重彦(京都大学)、河野秀俊(原子力機構)、石谷隆一郎(東京大学))。

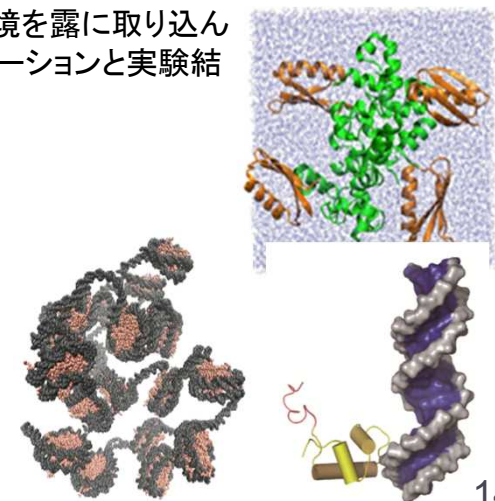
特に、細胞質内分子混雑環境のシミュレーションを杉田、高橋、高田、林が行い、核内混み合い環境のシミュレーションを高橋、池口、高田、河野、石谷が行う。さらに、大学や研究機関の実験研究者と連携することで、細胞内分子ダイナミクスシミュレーションによって得られた計算結果を実験的に検証することのできる体制を整えている。

成果内容と科学的又は社会的意義

細胞内分子ダイナミクスのシミュレーションにより、細胞質中の蛋白質や核酸の動態を明らかにすることに成功

この研究課題では、これまで計算機の演算能力の不足によって解析することができなかった細胞環境を露に取り込んだ分子動力学計算を「京」を用いて行い、従来のシミュレーションでは不可能であった大規模シミュレーションと実験結果との比較による細胞内分子動態を解明することに成功した。

- ・ 全原子分子動力学シミュレーションを用いて、分子混雑系における蛋白質の安定性や水和構造の変化を明らかにした。さらに細胞内分子混雑系のモデリングを行い、「京」を用いた超大規模分子動力学計算を実行した。また、一分子粒度シミュレーションによって、信号伝達経路における応答の不均一性を再現することができた。今後は、これらを統合して、EGF信号伝達経路におけるMEK・ERKモチーフへの分子混雑の影響を解明する。
- ・ クロマチンを構成する基本構造であるヌクレオソームの2つの結晶構造について、自由エネルギー解析を行い、特異的・非特異的なDNA結合様式などを解明した。今後は、X線結晶構造解析、溶液散乱、一分子解析、SACLAなどの最先端実験計測との連携を深めていくことで、ヌクレオソーム多量体やクロマチンの動的構造と転写因子の機能などを解明する。



分野1 予測する生命科学・医療および創薬基盤 創薬応用シミュレーション(課題代表者: 東京大学先端研・藤谷 秀章)

研究概要

新しい治療医薬品が待望されている疾患の標的タンパク質に十分な強度で結合する薬候補化合物をMP-CAFEE法を用いて探索設計する。従来の結合自由エネルギー計算法では5kcal/mol以上の誤差があり、計算で候補化合物を選別するのは不可能であった。我々はMP-CAFEEを用いて1kcal/mol以下の精度で新規の薬候補化合物の活性予測を行い、候補化合物の構造最適化を行う。新薬が望まれる新しい疾患標的タンパク質に対する化合物設計と活性予測計算を行い、実際に合成して化学・細胞アッセイを行うに値する化合物を設計・探索する

研究体制

東京大学先端研と理化学研究所の二つの研究グループが計算手法を共有して、それぞれの創薬標的に対する新薬開発を独立して推進する。先端研チームでは児玉龍彦、浜窪隆雄、油谷浩幸、酒井寿郎の研究グループが 疾患標的探索、化学・細胞アッセイ、動物実験などを担当し、富士通株式会社の朝永惇グループが化合物DE NOVO設計を行う。理研チームでは後藤俊男をリーダーとして理研創薬・医療技術基盤グループが疾患標的探索、化学・細胞アッセイ、化合物設計など行う。MP-CAFEEで使用している分子力学プログラムGROMACSの中心開発者であるストックホルム大学のLindahlと結合エネルギー計算法を一緒に考案したスタンフォード大学のPandeを課題メンバーに加えた。

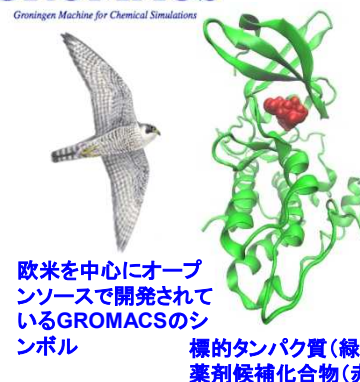
成果内容と科学的又は社会的意義

- ①分子力学プログラムGROMACSを京コンピュータ向けにアセンブラレベルでチューニングして計算効率を2倍に高めた。
- ②ガンの治療標的タンパク質に対してフラグメント法で設計し270化合物の結合自由エネルギー計算を高効率で実行。

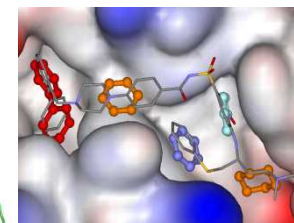
①分子力学プログラムGROMACSを京コンピュータのSparc64 CPU向けにアセンブラレベルでチューニングした計算コアプログラムをストックホルム大学のLindahlと共同で開発して本年5月にGROMACS正式リリース版で公開した。

②ガンの治療標的タンパク質でX線立体構造が取られているタンパク質に対して新規薬候補化合物の設計を進めている。タンパク質の活性中心に入り込める可能性がある化合物をフラグメント法で約9000個設計して、その水溶性、薬物毒性、合成可能性などを精査して約700個に絞り込んだ。水中での熱揺らぎを取り入れた分子力学計算を行いタンパク質結合中心に安定に存在し続けた270個の設計分子に対して、タンパク質との結合自由エネルギーを京コンピュータ用いてMP-CAFEEで計算した。その結果を詳細に調べた処、MP-CAFEE計算の前に行った分子力学計算の時間が不十分だったために、化合物が安定な結合モードに到達していない場合が多数ある事が明らかになった。タンパク質構造が変化するのに十分な時間の分子力学計算を行い、化合物が酵素活性を阻害する結合モードを実現するかを調べながら、より詳細な設計を進めている。

GROMACS
Groningen Machine for Chemical Simulations



欧米を中心にオープンソースで開発されているGROMACSのシンボル
標的タンパク質(緑)と薬候補化合物(赤)



標的タンパク質のへこみの部分に入り込める薬候補化合物をフラグメントを繋いで設計している様子

分野1 予測する生命科学・医療および創薬基盤

予測医療に向けた階層統合シミュレーション(課題代表者:東京大学・高木 周)

研究概要

少子高齢化が進む現代社会においては、健康寿命の延伸のためにも、疾患の早期発見、早期治療が極めて重要な意義を持つ。本課題では、グランドチャレンジプログラム「次世代生命体統合シミュレーション」のソフトウェア開発において、これまで「京」向けに開発が進められてきたソフトウェアの中から特に連続体力学を基礎とした方程式と、分子生物学・脳科学を結びつけるソフトウェアの拡張を図り、病態の再現を通して、疾患の早期発見と低侵襲の治療法の検討を支援するツールの開発を行う。特に、世界に類を見ないサルコマレベルから心臓全体までの3階層統合に成功した心臓シミュレータ(UT-Heart)と、世界最大の脳神経計算に成功したNESTを柱に、心筋梗塞、パーキンソン病などをターゲットにして研究開発を進める。

研究体制

本課題は、長期的にはシステムとして統合された人体を作り上げていくことを念頭に、グループリーダーの高木が、循環器系および筋骨格系のテーマの両方に関わる。どちらのテーマも分子生物学の知見を取り入れたマクロな器官への階層統合が鍵であり、利用される数学的ツールや計算手法は共有できる部分が多い。循環器系では、久田ら(東大)が開発をつづけてきたUT-Heartと、高木(東大)、後藤(東海大)が協力して開発を進めてきた血栓シミュレータを接合し、心筋梗塞のシミュレーションを行うことを大きなテーマの1つとする。筋骨格系は、脳神経系との階層統合を重視し、脳科学を専門とする銅谷(沖縄科技大)、筋骨格-神経系の統合モデルを有する中村(東大)、マルチスケール骨格筋モデルを開発している高木(東大)が連携しシミュレータを開発し、パーキンソン病の実験データを有する野村(阪大)と協力してモデリングを進める。

成果内容と科学的又は社会的意義

- (1) サルコマレベルからの3階層統合の心臓シミュレーションにより、タンパク分子レベルの異常が心臓の拍出量に与える影響を調べることに成功
- (2) 小型霊長類の脳サイズに匹敵する世界最大の脳シミュレーションに成功。
- (3) 大脳基底核モデルのシミュレーションにより、パーキンソン病サルの実験で観測されている振動現象を再現することに成功
- (4) 心筋梗塞シミュレーションに関連し、血小板内部の生化学反応を取り入れることにより、抗血小板薬の薬効評価に向けたモデリングを行った

(1)の成果により、タンパク分子レベルの異常が、心臓全体の病態にどのような影響を与えるかを調べることが可能となり、実験的には不可能な遺伝子操作ヒトモデルをコンピュータ上に作り出すことができる。

(2)の成果では、17億3,000万個の神経細胞、10兆4,000億個のシナプス結合からなる神経回路のシミュレーションを実現した。これはマーモセットなど小型霊長類の全脳に相当する規模であり、ヒトの脳機能解明に向けた第一歩を踏み出すことができた。

(3)の成果では、深部脳刺激療法のターゲットである淡蒼球と視床下核で、パーキンソン病の病態の1つである振戦の倍程度の周波数での振動現象を再現することに成功。今後は視床、大脳皮質を含む脳回路と筋肉からのフィードバック系も含めた、脳神経系-骨格筋階層統合シミュレータにより、部位により異なる周波数での振動や固縮を再現できるかが焦点となる。

(4)は、現時点では、血小板粘着に対して赤血球の存在や血流のせん断率が与える影響を調べて、実験と比較している段階。この段階で、実験結果との比較による検証を終えた後、抗血小板薬の薬効再現に向けた大規模計算を実施する。



分野1 予測する生命科学・医療および創薬基盤

大規模生命データ解析(課題代表者:東京大学医科学研究所・宮野 悟)

研究概要

ヒトのゲノムは個々人で多様であり、さらに、がんゲノムは浸潤、転移、薬剤耐性獲得などの過程で4次元的進化を遂げている細胞集団である。また、ゲノムの変化はなくとも、外部刺激にตอบสนองして機能分化を誘導する細胞の分子メカニズムも現状では局所的にしか捉えられていない。そのため、大規模データ解析という方法論が、このシステムの複雑さを捉えるためには有効である。そこで、超並列シーケンサー技術で生産されるゲノムを基軸とした大規模生命データ解析を「京」を用いて実施し、がんのシステム異常及びその個性や脂肪細胞の機能分化を背後で操っている分子ネットワークを網羅的に解明する。これにより、がんやメタボリックシンドロームなどの病態を御すための方法論及び医療介入の予測法の構築に寄与することを目標とする。

研究体制

大規模生命データ解析では、1) 大規模データ解析によるがんのシステム異常の網羅的解析とその応用(東大・宮野悟)、2) 大規模生体分子ネットワーク解析による脂肪細胞組織の刺激応答の網羅的解析とその応用(阪大・松田秀雄)、3) 次世代シーケンサーデータ解析のための情報処理システムの開発(東工大・秋山泰)の研究を推進している。新学術領域「システムがん」、「国際がんゲノムコンソーシアム」、名大医学部・高橋隆教授、九州大学病院別府病院・外科三森功士教授、京都大学医学系研究科小川誠司教授、基盤(S)「脂肪細胞プロジェクト」(研究代表 河田照雄・京大院農)等と連携しながら、実証や医療応用に向けた取り組みを行っている。

成果内容と科学的又は社会的意義

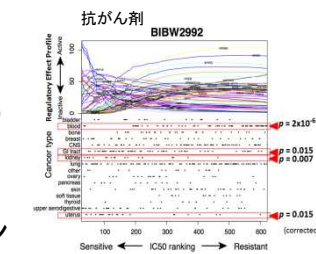
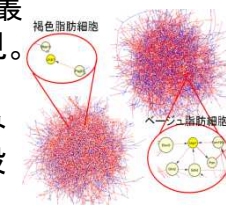
大規模データ解析技術により、細胞の機能分化の新規メカニズムやがんのシステム異常の多様性が浮き上がってきた

次世代シーケンサーデータを超高速に解析できるストレージを含めた「京」利用技術を開発した。その性能をヒト口腔内微生物叢のメタゲノムデータの解析で検討した結果、5億リード/時という性能を達成し、口腔内9部位での機能分子の分布の違いを発見。

骨格筋の100倍の熱産生能力をもつ褐色脂肪細胞と、同様の能力をもつ寒冷刺激によって白色脂肪細胞から分化したベージュ脂肪細胞の遺伝子ネットワークを1万遺伝子規模で解析した結果、熱産生のキーとなっている遺伝子の惹起の仕組みが両細胞で遺伝子ネットワークとして大きく異なっていることが示唆され、現在、マウスを使った実験により生物学的検証の段階に入っている。

抗がん剤の種類、がん細胞株の種類、薬剤感受性/耐性の関係をシステムの違いとして解明するために、100種以上の化合物、600~700種のがん細胞株の遺伝子発現データ、抗がん剤に対するIC50スコアのネットワーク解析を実施。その結果402億個の遺伝子因果が抽出され現在分析中。大腸がんの進化解析及び進化シミュレーションの研究も「京」での解析を準備中。がんの進化過程のどの時点で転移が起こり、がんがどのようにヘテロ性を獲得していくか、その全容が「京」で明らかになる可能性有り。

個々人のがんの分子病態システムや薬の作用点や副作用の原因パスウェイを予測や、また正常な細胞が環境要因などの刺激により機能分化するプログラムの解明に貢献し、生活習慣病の改善や予防や、がんという極めて複雑なシステム異常を背景とする病気への挑戦の道を拓く。そして、個別化医療の基礎となる診断技術、オーダーメイド投薬、予後予測などの応用貢献する。



補足資料

戦略分野1の基本的な方針

「京」の性能を最大限に生かし
「予測する生命科学・医療および創薬基盤」
についての研究成果を創出する

バイオロジー、医療・創薬に具体的に役立つ重要な問題を
「京」によって解く。

バイオロジー、医療・創薬の中でHPCが使われる基盤を
着実に築いていく。

HPCによるバイオロジーの発展



バイオロジーによるHPCの発展

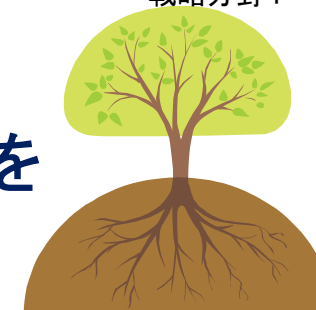
複雑な生命システムの理解の深化
より安全で有効な医療・創薬へ

グランドチャレンジ



“芽が出た”

戦略分野1



“根付かせる”



平成24年度から平成25年度へ

～平成24年度

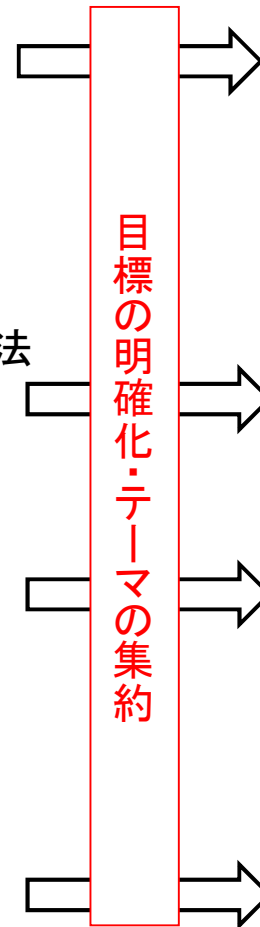
平成25年度～

課題1 細胞内混み合い
信号伝達
大量情報解析
膜輸送
ヌクレオソーム
(グラントチャレンジ・ライフ)

課題2 超並列結合自由エネルギー計算法
柔らかい標的タンパク質

課題3 パーキンソン病
血栓症
(グラントチャレンジ・ライフ)

課題4 大量配列解析法
ネットワーク解析
RNA相互作用
分子系統解析
(グラントチャレンジ・ライフ)



細胞内信号伝達
クロマチン構造と転写

超並列結合自由エネルギー計算法

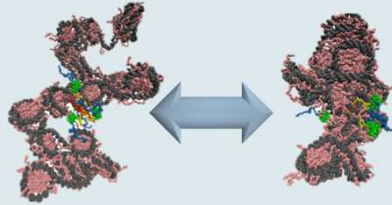
心筋梗塞・心臓
パーキンソン病

がんのシステム異常のネットワーク解析
脂肪細胞の刺激応答
ヒト共生菌メタゲノム解析

主な研究内容

クロマチンの機能発現機構

遺伝子発現の乱れ=>疾患や癌



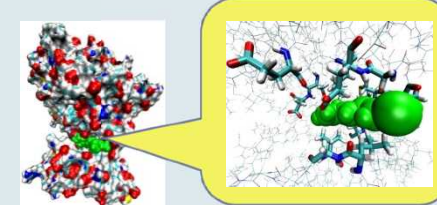
最先端計測
SACLA
NMR
X線



大規模マルチスケール
シミュレーション
全原子分子動力学
量子化学、粗視化計算

創薬プロセスの革新

高速、高精度計算で創薬プロセスを加速



高精度結合自由
エネルギー計算
MP-CAFEE

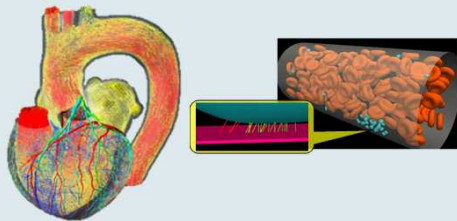


創薬標的情報
化合物合成・検証
製薬企業
東大先端研



心筋梗塞シミュレーション

血栓成長過程からの心筋梗塞の再現と薬効評価



実験計測・医療応用
東大医学部
東大病院
東海大医学部



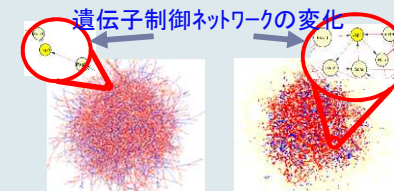
超高速マルチスケール
マルチフィジックスシミュレーション
心臓シミュレーション
血栓シミュレーション

がんの薬剤耐性システムの多様性

がんは身体の中で進化する

脂肪細胞分化のメカニズム解明

脂肪細胞は寒冷刺激で熱産生細胞に変化



大規模遺伝子
ネットワーク解析
SiGN
BENIGN



実験計測・医療応用
国際がんゲノムコンソーシアム
脂肪細胞プロジェクト
名大医学部、九大病院等

外部諮問委員会： 成果を高く評価 分野の発展のための努力を期待



Peter Kohl 委員長



郷通子 委員



金岡昌治 委員



Peter Kohl Chair in cardiac Biophysics and Systems
Biology, Imperial College

郷通子 情報・システム研究機構 理事

金岡 昌治 住化分析センター(株) 代表取締役社長

第1回(2012年1月)

プロジェクトの方針、研究計画について高く評価
その上で以下のような指摘があった。

1. 内外関連プロジェクトとの研究交流、
挑戦的試みの必要性
2. 京で行う研究の精査
3. 15年の戦略的な展望をもって、デザイン
すべき

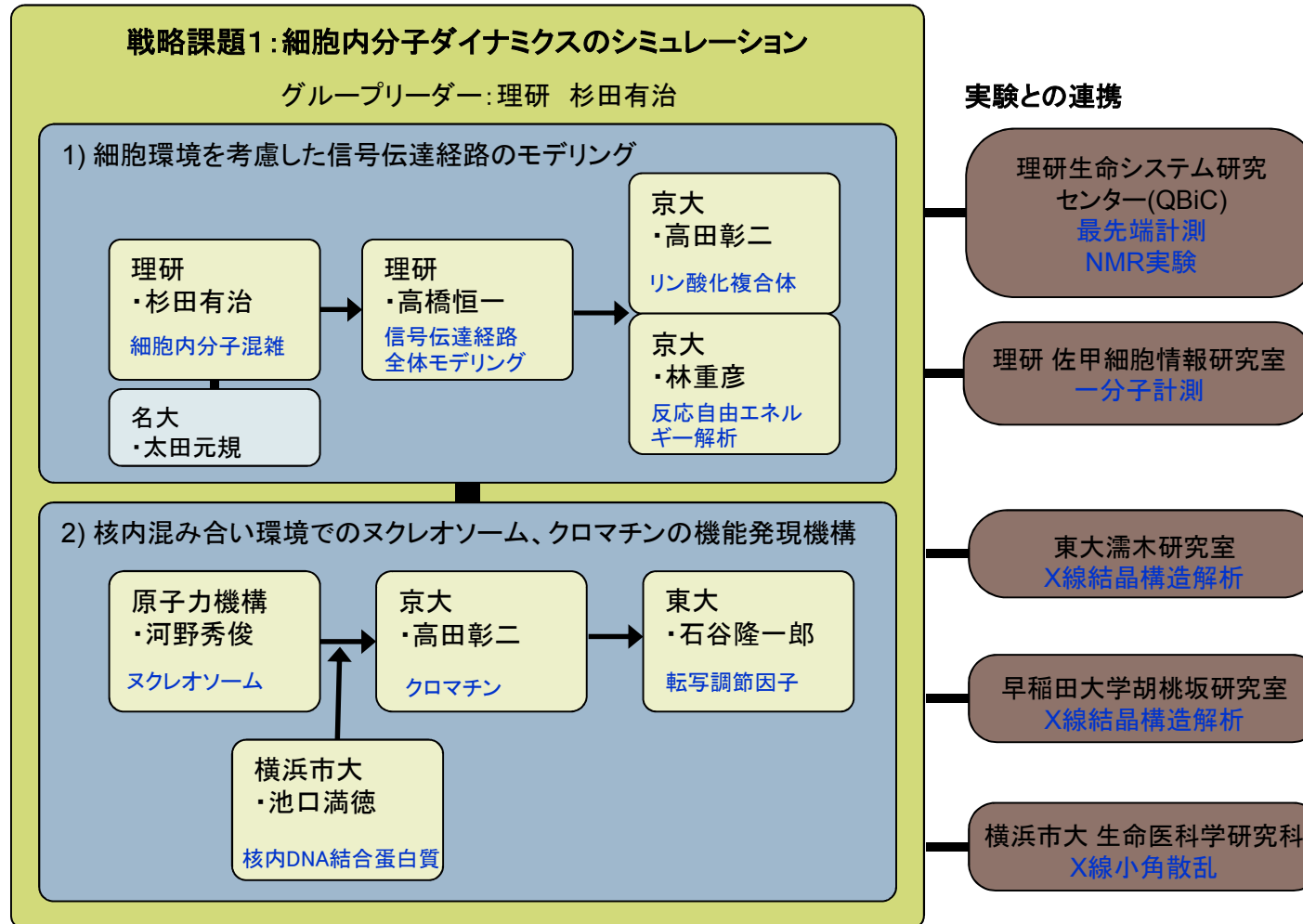
第2回(2013年9月)

前回から研究の具体化が飛躍的に進んだ。
「京」ならではの成果の質の高さは驚くべきもの
前回指摘事項への真摯な取組みを評価。

今回は、計算生命科学の長期的な発展を促すため
の以下の助言に留める。

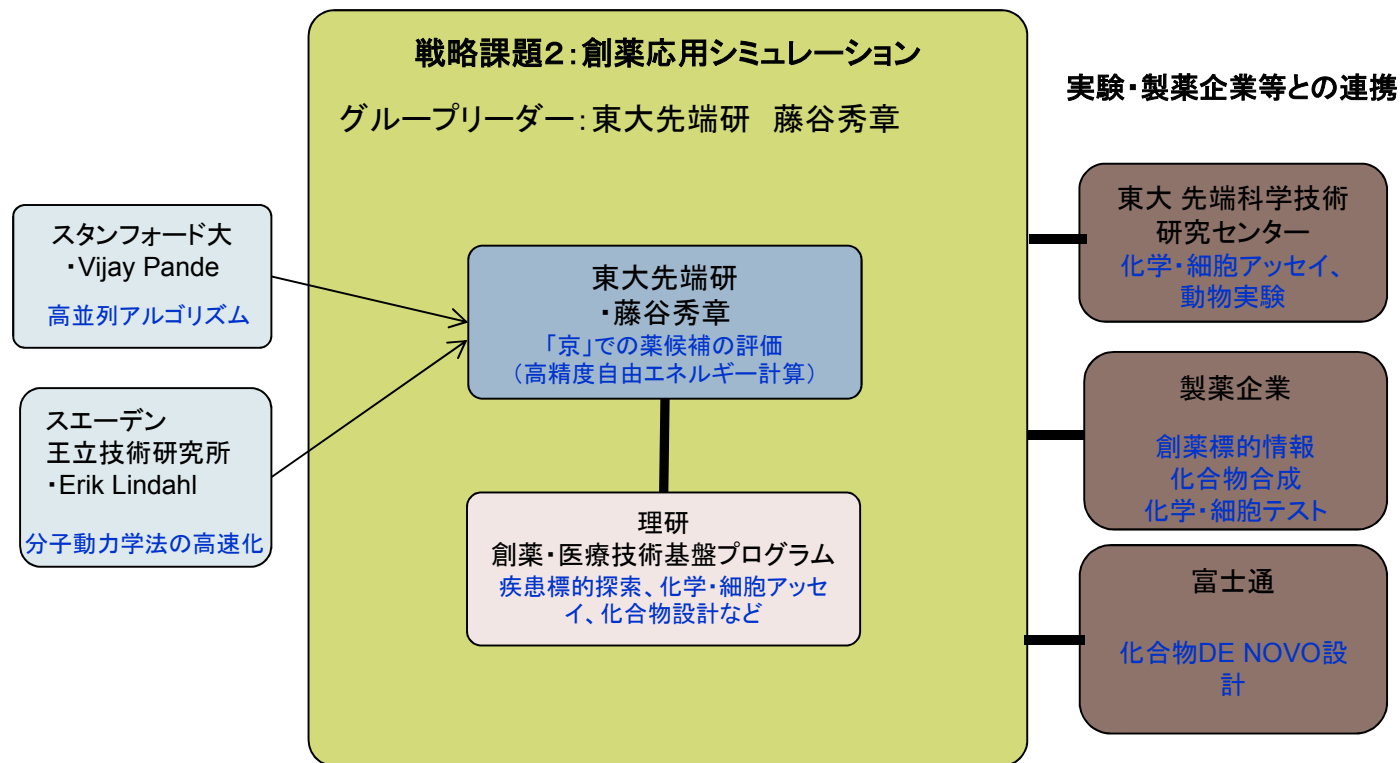
1. 次につなげるための成果の積極的な広報
2. 実験生命科学を含めたコラボレーションの
さらなる改善
3. バリデーションのさらなる強化
4. 人材育成-質の高い研究者の新規参入を評価
5. 計算機利用の制約への危惧

戦略課題1:細胞内分子ダイナミクスのシミュレーション



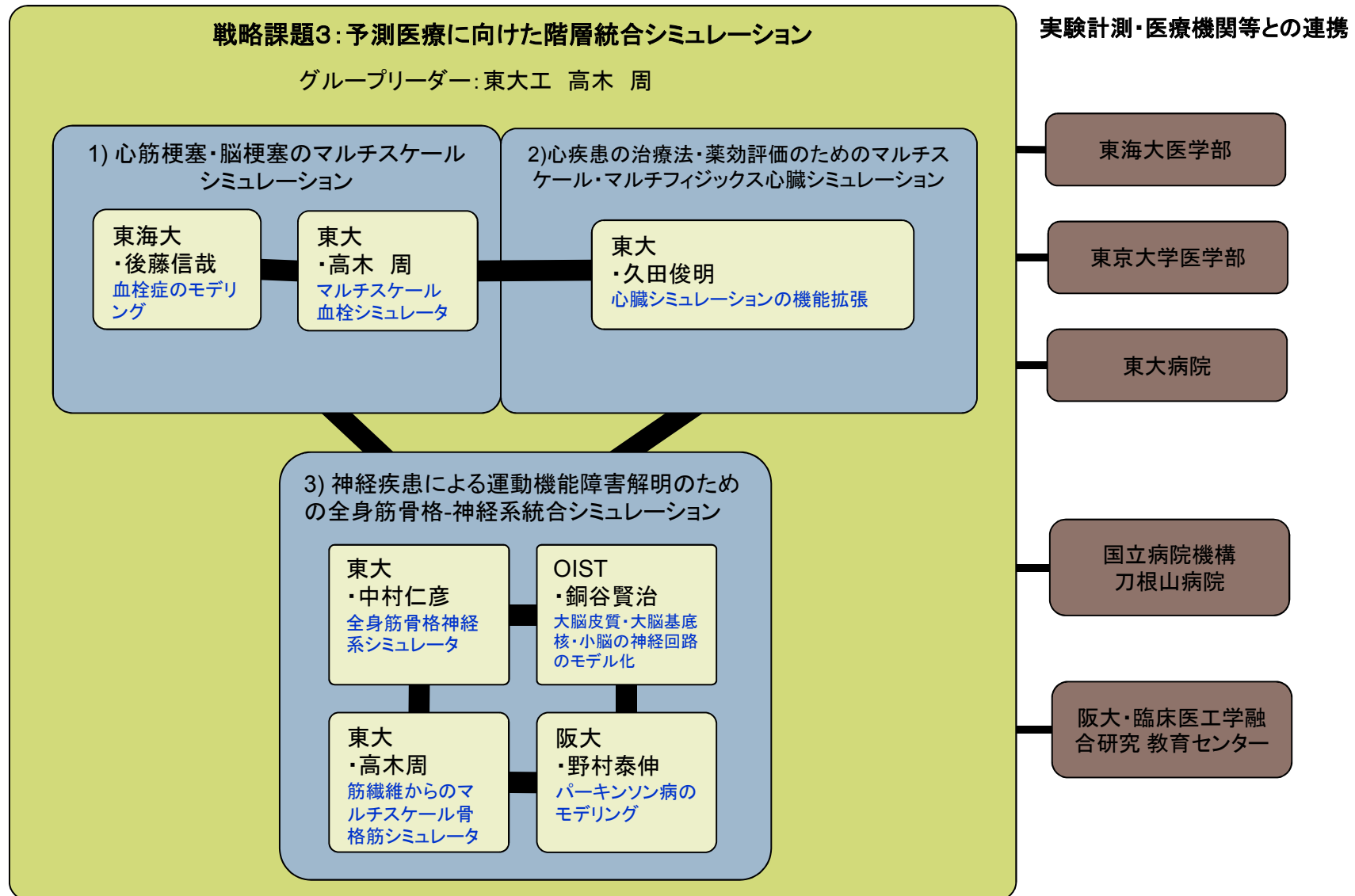
実験との連携体制により、
 ・最新の実験データに基づく、シミュレーションの実施
 ・計算成果の実証
 ・これらのフィードバックにより、新たな知見を得て、生命科学・医療
 の発展に貢献

戦略課題2: 創薬応用シミュレーションの研究体制



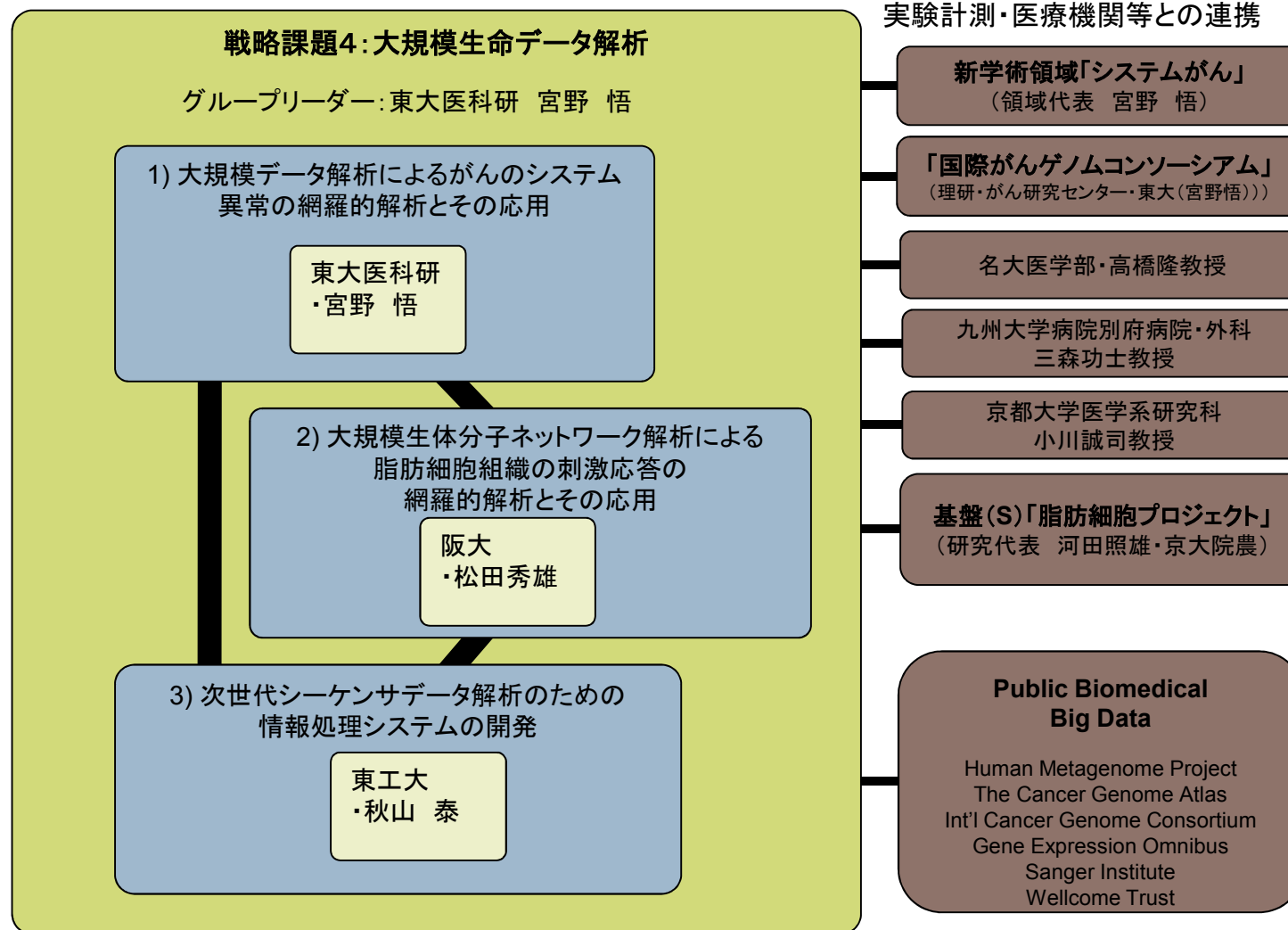
これらの連携体制により、計算科学を用いた新たな創薬プロセスの実証と発展が可能となる。

戦略課題3: 予測医療に向けた階層統合シミュレーションの研究体制



これらの連携体制により、計算科学の医療応用の具体的実証と発展が可能となる。

戦略課題4:大規模生命データ解析の研究体制



これらの連携体制により、大規模生命データ解析の医学への応用とその発展が可能となる。

1. 分野全体の概要 (体制)

HPCI

理研 AICS

RIST

研究開発

【副統括：理研・木寺詔紀】

戦略課題	研究者
杉田有治	高木 周
高橋恒一	後藤信哉
高田彰二	久田俊明
林 重彦	中村仁彦
河野秀俊	銅谷賢治
石谷隆一郎	野村泰伸
池口満徳	宮野 悟
藤谷秀章	松田秀雄
	秋山 泰

理研 情報基盤センター

次世代生命体統合シミュレーションの研究開発

戦略分野2：
新物質・エネルギー創成

戦略分野3：
防災・減災に資する地球変動予測

戦略分野4：
次世代ものづくり

戦略分野5：
物質と宇宙の起源と構造

理研 AICS

1-サーブリーフing
運用懇談会

講習会
開発支援

連携推進会議
合同シンポ
研究会

広報情報連絡会

計算科学推進体制の構築

【副統括：理研 江口至洋】

高度化推進 【グループディレクター：理研 江口至洋】

- 1) 計算資源の効率的マネジメント
- 2) 「京」利用に関する研究支援、協力

企画調整 【グループディレクター：理研 茶山秀一】

- 3) 人材育成
 - ①大学、研究機関による教育実施
 - 集中講義、産学連携セミナー 阪大基礎工(田中正夫)
 - セミナー、ワークショップ、e-ラーニング等 産総研CRBC(浅井 潔)
 - ②講義・授業等の実施 東大新領域創成科学研究科
 - 東京理科大、神戸大、阪大、京成大、東京医科歯科大、福井大 等
 - 神戸高校、西脇高校、福岡高校、修猷館高校、宇都宮高校、岡山県高校教員研修会、福岡県生物部等

- 4) 人的ネットワークの形成
 - ①地域別・大学連携シンポジウム
北大、東北大、名大、岡山大、九州大 等
 - ②ワークショップ・セミナー開催
日本生物物理学会、情報計算化学生物学会、バイオインフォマティクス学会、オミックス医療研究会、分子生物学会等
 - ③ HPCI利用普及のためのSCLS計算機システム公募利用

- 5) 研究成果の普及
 - ①ホームページ, Twitter, Facebook
 - ②ニュースレター, パンフ
 - ③学会、イベントでの展示発表
S C、Bio Japan、サイエンスフェアin兵庫、科学の甲子園等
 - ④産業界との連携
「京」産業利用：【代表 京大 奥野恭史】「新薬開発を加速する「京」イノベーション創薬基盤の構築」アストファーマ、イーザイ、小野薬品、キッセイ薬品、参天製薬、塩野義製薬、大日本住友製薬、田辺三菱製薬、日本新薬、科研製薬、京都コンストラ・テクノロジーズ、三井情報 等
 - ⑤開発ソフトウェアの普及

6) 分野を超えた取組の推進

社会

高校生・大学生
市民

医療従事者
産業界

生命科学(含：医療、創薬)の
研究者コミュニティ

アプリケーション一覧(1)

課題名	アプリケーションソフトウェア	概要
課題1 細胞内分子ダイナミクスのシミュレーション	[GENESIS] 分子細胞シミュレータ	マルチレゾリューションモデルに基づく分子動力学計算を行い、膜タンパク質のダイナミクスや細胞環境のシミュレーションを行う。とくに拡張アンサンブル法などに基づくサンプリング手法を利用できる
	[pSpatioocyte] 1分子粒度格子拡散反応系細胞シミュレーション	細胞を模した空間格子上で分子の拡散と反応を超並列計算することにより、真核細胞内におけるシグナル伝達系をシミュレートする
	[MARBLE] 全原子分子動力学計算	全原子分子動力学法による超並列計算を行い、実験的手法では研究困難な膜蛋白質のダイナミクスをシミュレーションを追求する。さらに、QM/MM自由エネルギー計算を行う。
	[SCUBA] Simulation Codes of hUge Biomolecule Assembly	数百万原子の生体超分子系を扱う大規模な分子動力学シミュレーションシステム。DNAタンパク質複合体の自由エネルギー解析を精度よく行うことが可能。
	[CafeMol] 粗視化生体分子シミュレーション	粗視化されたモデルを用いた分子動力学法による超並列計算を行い、実験的手法では研究困難な生体高分子のダイナミクスをシミュレーションを追求する
課題2 創薬応用シミュレーション	[MP-CAFEE , GROMACS] Massively Parallel Computation of Absolute binding Free Energy	全原子分子動力学法による超並列計算を行い、医薬標的タンパク質と薬分子の結合自由エネルギーを非平衡統計力学理論を用いて計算する方法。

アプリケーション一覧(2)

課題名	アプリケーションソフトウェア	概要
課題3 予測医療に向けた 階層統合シミュ レーション	[NEST] 脳神経系シミュレータ	大脳基底核モデルのパラメータ推定と約10万個のコンダクタンスベースなHodgkin-Huxleyタイプニューロンを用いた皮質大脳基底核ループの大規模シミュレーション。
	[K-Body] 全身筋骨格シミュレータ	詳細な骨格筋モデルとその体積効果を考慮した人の全身筋骨格の動力学計算モデルを構築する。脳神経系からの信号を入力としたシミュレーション、および人の運動計測データからの入力との同定・解析を行う。
	[UT-Heart] マルチスケール・マルチフィジックス心臓シミュレータ	細胞下の機能タンパクレベルの電気化学・力学現象を再現した心筋細胞モデルを使って心臓を組み上げ、心臓の拍動と血流までを再現するシミュレータ。拡張型心筋症、狭心症をはじめ様々な心疾患の再現と薬効の評価が可能。
	[EX-THROM] マルチスケール血栓シミュレータ	血小板表面のGP1baと血管壁および血漿中のフォンウィルブランド因子(vWF)との相互作用を分子レベルの結合を考慮した計算で再現し、その後の血小板の活性化から凝固に向かう複雑な生化学反応を再現する。
	[HI-Muscle] 筋繊維レベルからの骨格筋マルチスケールシミュレータ	運動ニューロンからのシグナルにより筋繊維レベルの収縮を計算し、結果として骨格筋全体の収縮を扱うマルチスケール骨格筋シミュレータ
課題4 大規模生命データ 解析	[SiGN] 大規模遺伝子ネットワーク推定ソフトウェア	遺伝子発現データから遺伝子間の発現の静的・動的依存関係を表す遺伝子ネットワークを推定するソフトウェアで、ゲノムワイド遺伝子ネットワーク推定に基づくデータ解析により、多様な多数のがんサンプルデータ、薬剤、臨床データを用いて、それらの薬剤応答や予後の良・不良のシステムの相違を遺伝子ネットワークとして抽出する。これによりがんの個性をシステムとして暴き出し、個別化遺伝子ネットワークの解析に応用する。
	[BENIGN] Biologically Extensible Network Inference Software for Gene Expression Analysis	生物学的知見に基づく既知の生体分子ネットワークを含む多数の条件下でのネットワークを推定し、それらを拡張・統合することにより、大規模な生体分子ネットワークを網羅的に推定・解析し、脂肪細胞分化のシステムの解明に応用する。
	[GHOST-MP] GHOST (Genome-wide Homology Search Tool) System for Massively Parallel Computers	次世代シーケンサデータ解析のための情報処理システムを改良利用し、次世代シーケンサーによる大量のゲノム情報に対して、メタゲノム配列相同性検索、並びに研究の進展に応じて新たに必要とされるシーケンス情報処理を中心として、効率的なアルゴリズムを開発することで実時間で解析を可能とする。

■ 産業技術総合研究所生命情報工学研究センター（CBRC）

総計1,821名

（1）HPCIセミナー

2011～2012年度で延べ725名が受講

2012年度冬学期「情報生命科学特別講義II」を兼ねたセミナー（12講義）

対象：学科大学院生および企業などの社会人

東京大学大学院新領域創成科学研究科情報生命科学専攻にTV配信し単位認定

（2）2012年度 HPCI チュートリアルセミナー（実習形式）

2011～2013年9月で合計211名が受講

- ① 創薬インフォマティクス実習コース
- ② バイオインフォマティクス実習コース
- ③ 次世代シーケンサーコース
- ④ SCLS計算機の公募利用者向け講習会

（3）HPCI ワークショップ

2011～2013年で合計325名が参加

「HPCが可能にした次世代創薬 ～ビッグデータの活かし方～」(2013年9月11日)

（4）HPCI e-ラーニング（通年開講）

2012、2013年で計560名が利用

4コース（52講義）

平成25年度e-ラーニング受講者内訳
(2013年8月20時点)

