

- ◆【優先課題】心疾患のマルチスケール・マルチフィジックスシミュレーション
 - ・心臓の難病の一つである肥大型心筋症の病態をサルコメア蛋白質という分子レベルの変異から細胞、心臓の動きまでを計算して解析することに成功しました。
- ◆【優先課題】課題2「創薬応用シミュレーション」
 - ・約300種類の新規化合物について、ガン治療の標的蛋白質の働きを妨げる強さを高精度で計算し、新薬の候補となる結合特性をもった化合物を11個見いだすことに成功しました。

平成24年度の成果（分野1）

◆課題1「細胞内分子ダイナミクスのシミュレーション」

- ・細胞内では、狭い空間にたくさんの分子が詰め込まれています。そのような混みあった状態での蛋白質の働きを予測し解析しました。

◆課題3「予測医療に向けた階層統合シミュレーション」

- ・神経が信号を作り出すシミュレーションとその信号によって骨格筋が収縮するシミュレーションを統合することに成功しました。

◆課題4「大規模生命データ解析」

- ・ゲノムの情報が高速に解読されるようになったため、情報量が爆発的に拡大して解析が困難になっています。そのような巨大なゲノムデータを「京」で解析するソフトウェア技術を完成しました。

◆計算科学推進体制の構築

- ・ソフトウェアの「京」での効率的な稼働を支援し、HPCについての教育とアウトリーチ活動を推進しました。研究成果の普及へ向け多くの研究者が使える計算機環境を整備しました。

平成25年度計画：研究開発課題（分野1）

◆課題1「細胞内分子ダイナミクスのシミュレーション」

医療および創薬基盤を確立するための分子レベルの研究を進めます

・細胞内の環境を考慮した信号伝達経路のモデリング

→量子化学、全原子分子動力学、粗視化モデル、一分子粒度モデルなど
様々な粒度の計算手法を 組み合わせ、統合したモデルによって解析します。

・核内混合環境でのヌクレオソーム、クロマチンの機能発現機構

→全原子分子動力学と粗視化モデルを組み合わせ、現実に近い統合した
モデルによって解析します。

◆課題2「創薬応用シミュレーション」

新薬の候補化合物を効率よく見出します

・高精度の薬候補化合物の薬理活性予測を行い創薬プロセスを加速し
ます。

→「京」を最大限に活用した超並列の計算法をさらに広い分野に応用し
ます。

平成25年度計画：研究開発課題（分野1）

◆課題3「**予測医療に向けた階層統合シミュレーション**」

心疾患とパーキンソン病を対象にして、新しい治療法の確立にむけた研究を行います

・**虚血性心疾患の病態シミュレーション**

→血栓形成シミュレータと心臓シミュレータを組み合わせ、統合したモデルで解析します。

・**運動機能障害の病態シミュレーション**

→筋骨格シミュレータと脳神経系シミュレータを組み合わせ、パーキンソン病の統合したモデルで解析します。

◆課題4「**大規模生命データ解析**」

がんや糖尿病を対象に個別化医療(一人ひとりの個性にかなった医療)に寄与します

・**がんのシステム異常と脂肪細胞の機能分化の大規模ネットワーク解析**

→大量のゲノムを解析し、病態などをもたらす仕組みを明らかにします。

・**ヒト体内共生細菌のメタゲノム解析**

→「京」を最大限に活用して次世代シーケンサーから得られるデータを解析します。

平成25年度分野配分枠計算資源量配分（分野1）

| | 総ノード時間 積(ノード数 時) | 分野内の分 野配分枠全 体に対する 割合(%) | 使用最大ノー ド数(ノード数 /job) | 最大計 算時間 (時 /job) | 最大メモ リ量 (TB/job) | 総ディス ク容量 (TB) |
|------|------------------------|----------------------------------|----------------------------|---------------------------|----------------------------|---------------------|
| 課題1 | 10,237,934 | 19.70% | 9,600 | 16.0 | 80.0 | 2,540.0 |
| 課題2 | 10,237,440 | 19.70% | 40,000 | 24.0 | 320.0 | 1,200.0 |
| 課題3 | 15,449,748 | 29.74% | 80,000 | 60.0 | 1,120.0 | 1,880.0 |
| 課題4 | 15,431,000 | 29.70% | 80,000 | 8.0 | 1,280.0 | 1,400.0 |
| 体制構築 | 600,000 | 1.15% | 10,000 | 24.0 | 160.0 | 222.4 |
| 合計 | 51,956,122 | 100.00% | 80,000 | 60 | 1,280 | 7,242.4 |

平成25年度重点課題追加配分枠申請資源量 (分野1)

| | 総ノード時間 積(ノード数 時) | 重点課題 追加配分 枠での割 合(%) | 使用最大 ノード数 (ノード数 /job) | 最大計 算時間 (時 /job) | 最大メモ リ量 (TB/job) | 総ディス ク容量 (TB) |
|-----|------------------------|------------------------------|--------------------------------|---------------------------|----------------------------|---------------------|
| 課題3 | 9,000,000 | 12.99% | 80,000 | 24.0 | 1,120.0 | 2,150.0 |
| 課題4 | 7,000,000 | 10.10% | 40,000 | 6.0 | 640.0 | 340.0 |
| 合計 | 16,000,000 | 23.09% | 80,000 | 24.0 | 1,120.0 | 2,490.0 |

平成25年度計画：推進体制構築（分野1）

主な事柄

- ◆ 広く生命科学研究者（医療、製薬企業を含む）がHPCIを最大限活用していくため、HPCI環境と互換性のある計算機環境を整備することにより、高度化を支援し、利用を促進します。
- ◆ 阪大、産総研および東大と連携し、中核的人材の育成を目指した並列プログラミングを含む計算生命科学講習会を実施。また、高校生向けの授業を実施します。
- ◆ 引き続き計算生命科学の人的ネットワーク形成を進めるため、拠点大学等の研究機関と連携してシンポジウム等を開催します。
- ◆ 生命科学研究者、製薬企業の研究者、技術者および医療従事者を対象としたシンポジウム等を行い、研究成果の普及を推進します。