HPCI戦略プログラム　分野1「予測する生命科学・医療および創薬基盤」

BioSupercomputing Newsletter

2014.3 Vol.10

CONTENTS

Open Up SPECIAL TALK 座談会

階層を超えた生体統合シミュレーションの実現をめざして

分子レベルの現象から組織や器官の挙動を再現・予測するモデル開発に挑む

清水 和弥／山村 直人／鷲尾 巧　東京大学 ―― 2

ZOOM IN SCLS研究開発に迫る

課題1　細胞内分子ダイナミクスのシミュレーション

自由エネルギー計算でDNAとタンパク質の世界を解き明かす

米谷 佳晃　日本原子力研究開発機構 ―― 4

課題3　予測医療に向けた階層統合シミュレーション

全身筋骨格-神経系統合シミュレーション

鮎澤 光　東京大学 ―― 5

課題4　大規模生命データ解析

エネルギー消費に貢献する褐色脂肪細胞の機能の解明と制御に向けて

大安 裕美　大阪大学 ―― 6

SCLS Gotcha!

産総研生命情報工学研究センターの人材養成プログラム ―― 7

SC13「京」ブースでショートレクチャー ―― 7

座談会

階層を超えた生体統合シミュレーションの実現をめざして

分子レベルの現象から組織や器官の挙動を再現・予測するモデル開発に挑む

課題3「予測医療に向けた階層統合シミュレーション」（代表：東京大学・高木 周教授）は、昨年春に終了したグランドチャレンジプログラムで個別に開発が進められてきた生体シミュレータ（血栓症、心臓、筋骨格、脳神経系など）を統合し、心筋梗塞をはじめさまざまな疾患における複雑なプロセスを再現し、病態の予測や治療の支援に貢献することをめざしている。新たに開発される統合シミュレータのモデル開発では、「京」の高い計算能力を有効に活用し、分子レベルから生体レベルのすべてを数値表現するマルチスケール、力学的現象、生化学反応、電気的現象といったいろいろな現象を扱うマルチフィジックスを同時に実現することが求められている。今回は、多くの課題と向き合いながら、課題3の研究開発に取り組む3名の研究者に話を聞いた。

東京大学　大学院工学系研究科　特任研究員　清水 和弥
東京大学　大学院工学系研究科　特任研究員　山村 直人
東京大学　新領域創成科学研究科　特任准教授　鷲尾　巧

階層統合によるモデル構築が必要

―― みなさんは具体的にどのような研究に取り組んでいるのですか。

清水　私と山村さんは、例えばパーキンソン病のような神経疾患による運動機能障害の解明をめざして、生体内で起きているミクロからマクロまでの活動を再現する、人間の全身筋骨格－神経系統合シミュレーションモデルの開発を進めています。脳で運動指令がつくられて、脊髄などの信号伝達経路でさまざまに修飾され、最終的に筋肉が収縮したり、関節が動く。そうした一連の過程をコンピュータ上でシミュレーションできるようにして、病気の原因究明や治療に貢献するのが、私たちの研究開発の目的です。そのなかで、私が主に担当しているのは、脊髄の神経ネットワークモデルの構築です。

山村　私は、脊髄からの指令をたとえば四肢の筋肉で受け取り、筋肉が収縮して関節運動が行われる、そうした筋骨格系の運動シミュレータを開発しています。脳については別のグループが担当していて、今後、脳・脊髄・筋骨格系をひとつに統合していく予定です。

鷲尾　私たちのグループは、生きた心臓そのものを「京」で再現する心臓シミュレータ（UT-Heart）の開発を進めています。そのなかで、今は心臓の拍動のモデル化に取り組んでいます。基本的には、個々の分子の動きをもとに、物理法則に従った方程式を解きながら、拍動をコンピュータ上で再現しようというわけです。とはいえ、分子が単独で動いているのではなく、他の分子やまわりの筋肉などの影響を受けるため、平均的な動きを記述する方程式をつくることはとても難しい。さらに分子に働く力から、よりマクロな連続体にかかる力を計算して心筋の動きを再現するだけでなく、心臓から拍出される血液という流体と心室壁との相互作用を解かなければなりません。その血液も心臓単独で計算できるわけではなく、体全体の血液の流れを再現する必要があります。そのためには、「京」のような大きな計算資源を活用して、分子から体循環まで一貫して扱わなければ、現象がうまく再現できないのです。

山村　骨格筋の場合も、基本的には心筋とほぼ同じです。私たちも今ちょうど、鷲尾さんが取り組んでいるように、筋肉の収縮や関節運動を分子レベルから立ち上げるモデルを構築しているところです。

清水　神経系では、細胞の表面にある穴を閉じたり開いたりして、内外にミネラル分を移動させることで電気信号をやり取りしています。そのため、信号伝達のシミュレーションでも、分子よりやや大きいですが、細胞レベルより分子に近いスケールを含むモデル構築に取り組んでいます。脳神経系に比べれば、関節をひとつ動かす程度のシミュレーションでは、それほど大きな計算資源は必要ありませんが、将来的に「歩いたり、走ったり」といった全身を使う動きを視野に入れた場合は、脊髄神経系だけでもかなり大きな計算資源が必要になってきます。

モデル化のための基礎的な情報取得が難しい

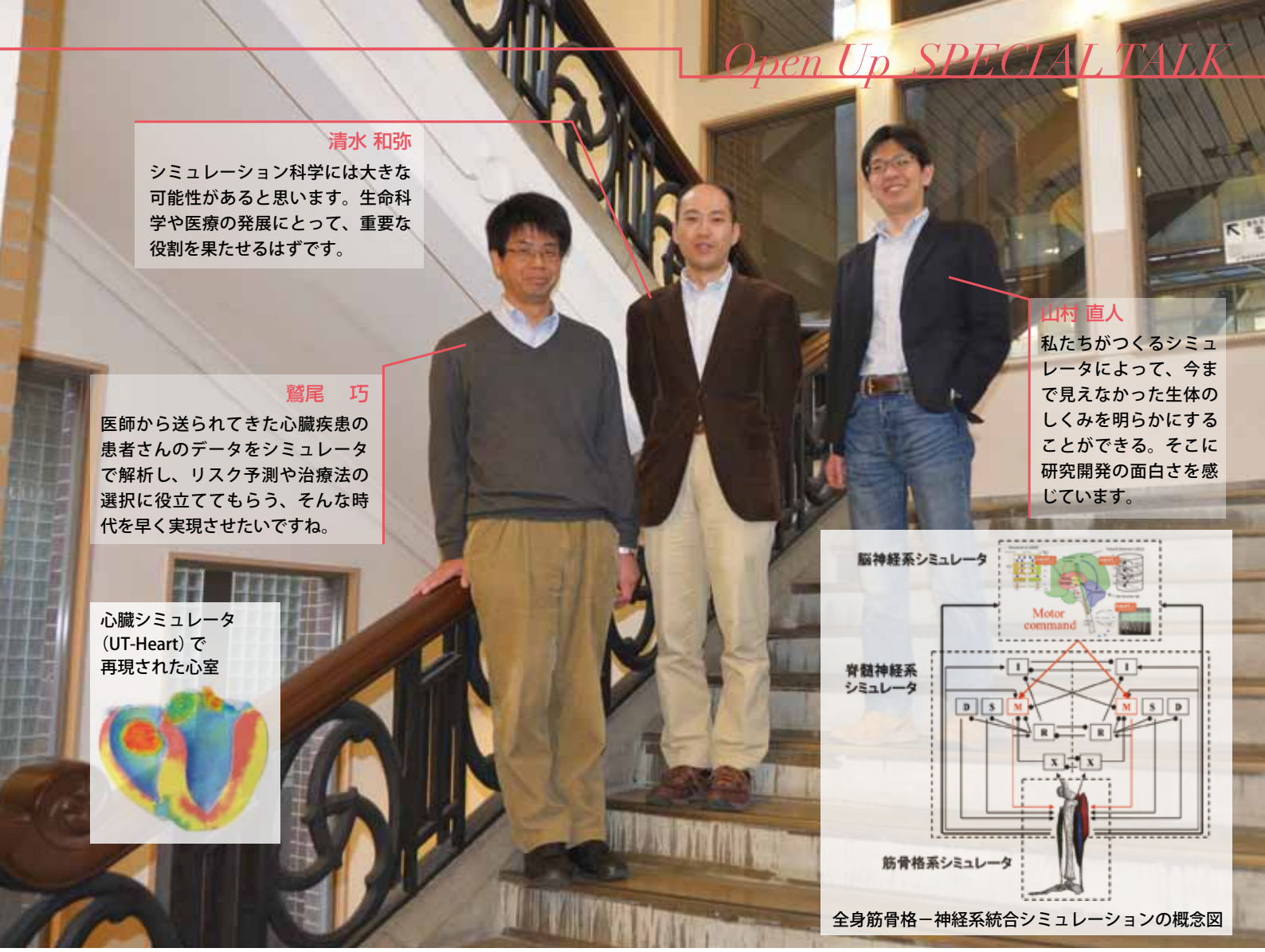
―― シミュレータ構築を進める上で、最も苦労しているのはどのような点ですか。

清水　生命科学分野に携わる前は、主に流体のシミュレーションをやっていたのですが、例えば工学的なシミュレーションの場合は、基本になる詳細な設計図があり、電気抵抗や熱伝導率を調べるなど、モデル化に必要な材料試験も比較的簡単にできます。しかし対象が人体となると、すぐに解剖して測るわけにもいきませんから、基礎的な情報がなかなか得られない難しさがあります。

山村　私も生体を扱う前は、主に金属薄板の成形シミュレーションなどをやっていましたから、人体の基礎的なデータを手に入れることの難しさや苦労を実感しています。特に私たちは、“生きている人体”で測りたいわけです。なるべく針を刺したりせず、非侵襲で測定できればいいのですが、それもなかなか難しい。さらに、個人差も非常に大きい。骨格筋の形状などは、MRIのデータなどを利用していますが、例えば骨につながって筋収縮の力を伝える腱膜などは、薄くてうまく写りません。測定できないものは、解剖学的な文献などに頼るしかないのが実情です。

清水　神経系は、おそらく筋骨格以上に測定が困難だと思います。

鷲尾　心臓も同様です。例えば心臓の形については、CTスキャンやMRIのデータがありますが、心臓は絶えず動いていますので、生きている人間の自然な形状は、正確には分からないし、個人差もありま



清水 和弥
シミュレーション科学には大きな可能性があると思います。生命科学や医療の発展にとって、重要な役割を果たせるはずです。

鷲尾　巧
医師から送られてきた心臓疾患の患者さんのデータをシミュレータで解析し、リスク予測や治療法の選択に役立ててもらう、そんな時代を早く実現させたいですね。

山村 直人
私たちがつくるシミュレータによって、今まで見えなかった生体のしくみを明らかにすることができる。そこに研究開発の面白さを感じています。

心臓シミュレータ（UT-Heart）で再現された心室

全身筋骨格－神経系統合シミュレーションの概念図

す。また心筋は非常に複雑で、筋線維がねじれるように走っており、15%ほど縮むだけで約60%の血液を拍出できるという非常に巧妙な構造を持っています。そうした詳しい構造も、現在の計測技術では解剖するか、心臓を止めない限り調べることができません。私たちにできるのは、可能な限り多くのデータや実験結果を集めて、特徴的な現象を余すところなく再現できるモデルをつくり上げるということです。

社会に貢献できるシミュレータの開発をめざす

鷲尾　幸いなことに、「京」が使えるようになって心臓シミュレータの信頼性が向上したことから、分子生物学で実験を中心に取り組んでおられる研究者や心臓外科の医師の方々も、シミュレーションに高い関心を持ってくださるようになり、実験を引き受けていただいたり、データを提供していただける協力関係が広がりつつあります。また、生まれながらに心臓に欠陥がある患者さんの手術方法を決める際に、シミュレーションが活用できないかという話も出ています。一方では、心臓シミュレータを利用して肥大型心筋症という病気の発症メカニズムを明らかにするチャレンジも始まっています。臨床医学と基礎医学の両面で心臓シミュレータが役に立てると同時に、そこから得られる成果によって、さらにシミュレーションモデルを高度なものにしていけるのではないかと考えています。

山村　医療現場や分子生物学の基礎研究者とシミュレーション科学が協力しながら、お互いに高め合ってくというのは、素晴らしいことですね。全身筋骨格－神経系統合シミュレーションの場合は、まだモデル開発の段階ですが、もう少し進めば、医療現場や基礎研究者にも興味を持っていただけると思っています。

清水　例えば、パーキンソン病はその発症メカニズムさえもよく分かっていませんが、シミュレーションによって明らかにされ、治療方針を決める際に役立つようになれば、状況は大きく変わるはずです。シミュレーション科学が医療にとっても、基礎研究にとっても役立つものだということを実証していくことは、私たちの大事な役割のひとつですね。

鷲尾　さらに、医療現場の医師と分子生物学の研究者は、実際はあまりつながっていませんが、階層統合シミュレーションはその橋渡しができるかもしれません。そのためにも、シミュレータの信頼性を高めていくことが重要です。

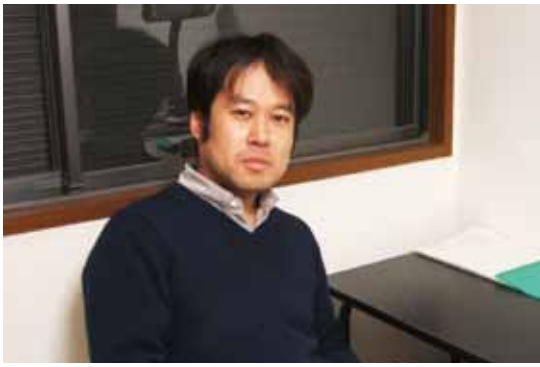
山村　社会に貢献できる、確かな成果を生み出していかなければいけないということですね。

鷲尾　シミュレータは、単に論文を書くための道具ではなく、社会に役立つものだと認めてもらえるものに仕上げていくことが、このプロジェクトに参加する私たちのゴールなのだと思います。

課題1　細胞内分子ダイナミクスのシミュレーション

自由エネルギー計算でDNAとタンパク質の世界を解き明かす

日本原子力研究開発機構　量子ビーム応用研究部門　米谷 佳晃



自由エネルギーは、原子・分子集合体のさまざまな現象を理解する上で重要な指標です。水を冷やすと氷になります。これは、氷の自由エネルギーが水の自由エネルギーより小さくなったからです。分子動力学法※と呼ばれるコンピュータシミュレーションを使って自由エネルギーを計算することにより、このような原子・分子の世界でおこる現象を予測することが可能です。

DNAやタンパク質が登場する細胞内の世界も、根底にある物理法則は水の場合と同じです。そのため、自由エネルギーを計算することで、分子認識、構造形成、分子輸送などさまざまな生命現象を理解できると期待されています。しかし、水の場合と比べると、DNAやタンパク質の自由エネルギー計算は極めて困難です。分子構造が複雑で、時々刻々と変化しているからです。自由エネルギーを正しく見積もるには、時々刻々と変化する分子構造を十分にサンプリングする必要があるのですが、これには極めて長い計算時間がかかります。

近年、「京」に代表されるようなコンピュータの高速化により、生体分子の自由エネルギー計算も、ようやく手の届く範囲に入り、この数年間で多くの研究者が取り組むようになってきました。我々は、生体分子のなかでも特にDNAとタンパク質の相互作用に注目し、自由エネルギー計算をもとに、細胞内の生命現象を解き明かしていこうと考えています。図1は、最近、我々が計算したラックリプレッサーと呼ばれるタンパク質についての結果です。ラックリプレッサーがDNAから離れていく過程の構造変化と自由エネルギー変化を、Adaptive Biasing Force [1]と呼ばれる分子動力学法を使って導きました[2]。

この計算結果は、学術的には、２つの点で意義があると考えています。１つは、「DNAの周りでタンパク質はどのように運動しているのか」について手掛かりを得たことです。自由エネルギー計算の結果から、タンパク質がDNAから離れることはまれで、主にDNAに沿って移動しているという説が有力であることが分かりました。これは、DNA配列探索メカニズムの解明につながる問題で、生命科学の分野で最もホットな話題の１つとして、現在も論争が続いています。

もう１つは、特異的認識の問題です。A、T、G、Cの４種類の塩基からなるさまざまなＤＮＡ配列のうち、ラックリプレッサータンパク質は、GTGAGCGを含む領域に特に強く結合することが分かっていました。しかし、その理由は分かっていませんでした。我々は、自由エネルギー計算の結果をもとに、そのような特定の配列に強く結合する仕組みを明らかにすることに成功しました。この結果は、遺伝子発現メカニズムの分子論的解明につながると考えられています。

現段階では、DNAやタンパク質の一部を取り出して計算を行っていますが、将来、エクサスケールコンピューティングが実現すれば、もっと大規模な計算ができるようになります。細胞核内のDNAは、ヌクレオソーム構造と呼ばれるコンパクトに折りたたまれた状態で収納されているのですが、そのようなDNAからタンパク質がターゲット配列を探し出す様子をシミュレートすることも可能になると考えています。

※分子動力学法：ニュートンの運動方程式を解くことによって原子や分子の運動を解析するシミュレーション手法。

【参考文献】

[1] E. Darve, D. Rodríguez-Gómez, A. Pohorille, *J. Chem. Phys.*, **128**, 144120 (2008).
[2] Y. Yonetani, H. Kono, *J. Phys. Chem. B,* **117**, 7535 (2013).

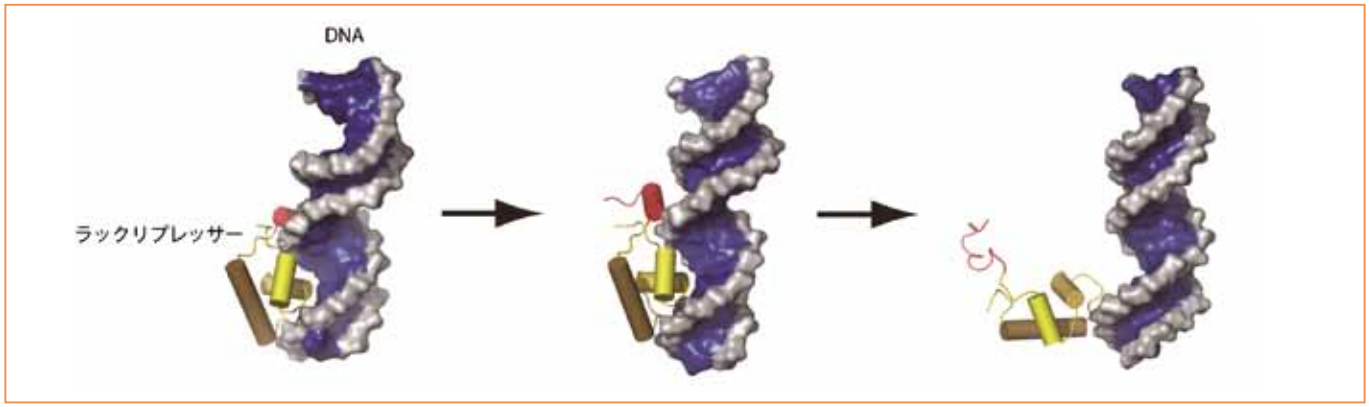


図１：ラックリプレッサータンパク質がＤＮＡから離れていく過程

●このレポートの詳しい情報は 右記のURLをご覧ください　http://www.kobe.riken.jp/stpr1-life/newsletter/Vol.10/zoomin01.html

課題3　予測医療に向けた階層統合シミュレーション

全身筋骨格−神経系統合シミュレーション

東京大学　大学院情報理工学系研究科　知能機械情報学専攻　中村・高野研究室　**鮎澤 光**

私たちはスーパーコンピュータを用いた数値計算を通じて、パーキンソン病を理解することを１つの大きな目標としております。パーキンソン病では、手足のふるえ、筋の固縮、立位時にバランス保持が難しくなるなどの障害がおこります。こうした原因として、脳内でドーパミンと呼ばれる神経伝達物質が不足するためだといわれています。しかし、脳内でのドーパミン不足が、なぜ全身の運動機能に障害をおこすかというメカニズムについては、未だによく分かっていない状況です。この研究では、脳内でおこる現象から全身の運動までの流れを解明するために、脳・脊髄・全身筋骨格を全て統合した大規模シミュレーションを行って、運動機能障害をもたらす神経疾患のメカニズムを解明しようとしています。このような大規模なシミュレーションを行うために、スーパーコンピュータを必要としています。

全身統合シミュレーションでは、脳・脊髄神経系、細胞レベルからの筋収縮、全身筋骨格系の運動など、異種のシミュレーションを連動させます。そのため、さまざまな研究背景を持った複数の研究グループが協力して進めています。私たちの研究グループは、本来はヒューマノイドロボットの研究・開発を行っています。人のようなロボットをつくる研究は、人を知り、理解する研究でもあります。近年では、ロボットテクノロジーを応用した人の骨格・筋・神経のモデリングによって、人の運動計測から筋張力の推定や、神経反射ネットワークの同定も可能になりつつあります。私たちのグループでは、53個の骨リンク、1,206本に細分化された筋・腱を持った全身筋骨格モデルを開発しており、現在では、リアルタイムで運動中の筋張力を推定することが可能です（図１）。

私たちは前述の筋骨格モデルに対して、他研究グループと連携しながら、詳細な筋モデルと細胞レベルでの筋活動シミュレーション、脳・脊髄神経系シミュレーションとの接続を試みています。前述のモデルでは通常のコンピュータでの計算を前提としているため、筋は単純なワイヤ型モデルを利用しています。この研究では、筋繊維から構成される骨格筋モデルを利用し、全身の脊髄神経系のネットワークを構築して、これらの間を接続します。単純な筋モデルと脊髄神経系ネットワークを接続した上腕モデルのシミュレーションでは、上腕の筋で伸張反射と呼ばれる現象を再現できています（図２）。この現象は、筋が引き伸ばされると反射的に筋収縮が生ずるもので、筋が伸ばされた神経信号が脊髄を介することで、その筋を逆に収縮させる信号を送ります。こうした現象の再現は、筋骨格モデルと脊髄神経ネットワークを連結したシミュレーションならではの結果といえます。これらは、さらに脳モデルと接続され、脳の信号から全身筋骨格が駆動されるシミュレーションを実現する予定です。

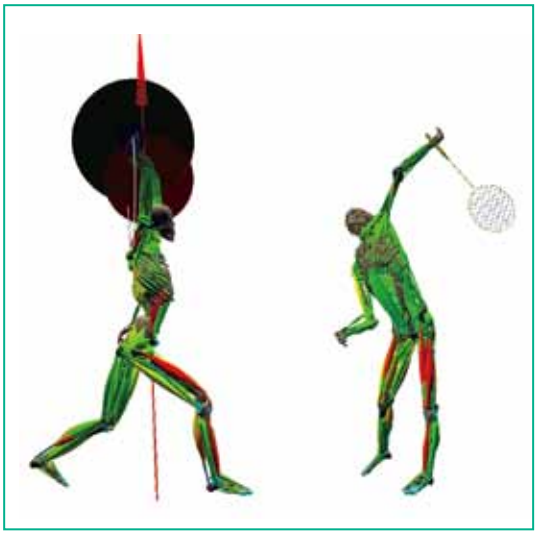


図１：筋張力推定の視覚表示例。緑色から赤色に変化するにつれて筋はより活動している。

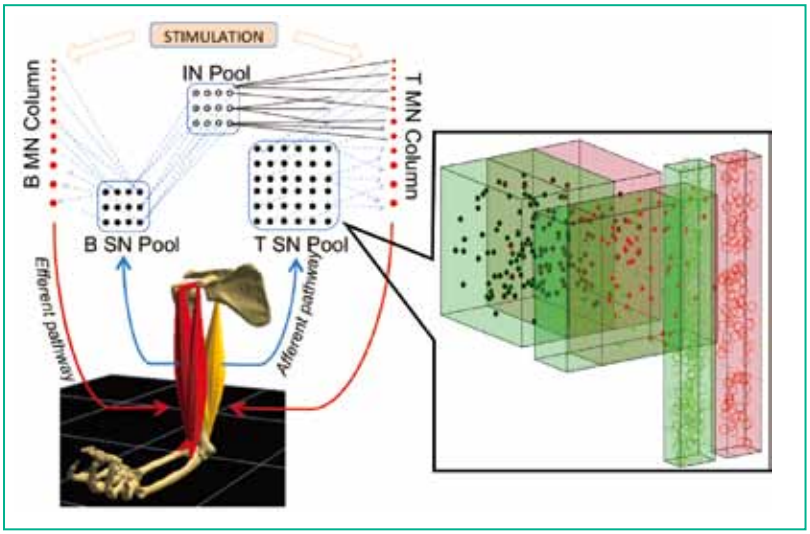


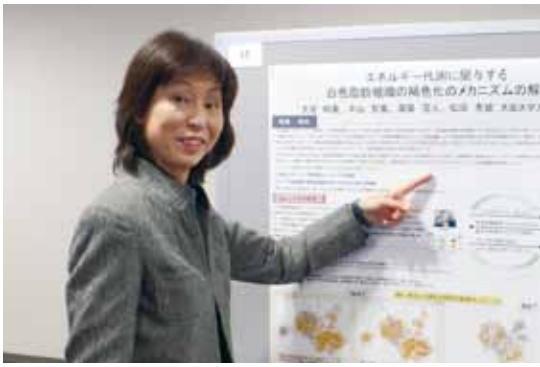
図２：上腕の筋骨格モデルと脊髄神経モデルを接続したシミュレーション。

●このレポートの詳しい情報は 右記のURLをご覧ください http://www.kobe.riken.jp/stpr1-life/newsletter/Vol.10/zoomin02.html

課題4　大規模生命データ解析

エネルギー消費に貢献する褐色脂肪細胞の機能の解明と制御に向けて

大阪大学　大学院情報科学研究科　バイオ情報工学専攻　松田研究室　大安 裕美



ふだん厄介もの扱いされる脂肪細胞には大きく分けて２種類あり、白色脂肪細胞はエネルギー源となる脂肪の蓄積と生理活性物質の分泌を担い、褐色脂肪細胞は体温調節に向けた熱産生のために脂肪を分解してエネルギーを消費するという機能が知られています。ヒトの場合、生後しばらくすると消滅すると考えられていた褐色細胞が、実は成人にも存在し、その脂肪代謝の働きは肥満や糖尿病といった生活習慣病と密接な関係にあることが近年明らかになったことから、基礎・臨床の両面で熱く研究が推進されています。マウスを使ったこれまでの研究から、褐色脂肪細胞での脂肪分解に関わる遺伝子やそのメカニズムが一部わかってきています。交感神経から刺激を受けたβアドレナリン受容体のシグナル伝達経路が活性化し、この細胞に大量に存在するUCP-1という膜たんぱく質が、ミトコンドリアにおいて熱産生を促します。また、寒冷刺激によって、白色脂肪細胞のなかからベージュ脂肪細胞といわれる褐色脂肪細胞に似た第３の脂肪細胞が分化し（褐色化）、褐色脂肪細胞と共に熱産生に寄与します（図1）。しかし、褐色化のメカニズムはわかっておらず、褐色脂肪細胞とベージュ脂肪細胞との関係も不明です。また、脂肪分解に至る経路は複数あるとされ、指揮系統の頂点に立ち、総司令官として機能するマスター遺伝子やエネルギー代謝制御機構の全貌は解明されていません。今後、これらのことが明らかにされて、コントロールが可能になれば、生活習慣病の予防や病状の改善に繋がるものと考えられています。

私たちのグループでは、ヒトの褐色脂肪細胞がマウスのベージュ脂肪細胞に似ているとされていることから、マウスをモデル生物として脂肪細胞の研究を行っている京都大学大学院農学研究科の河田照雄教授のグループと共同で、褐色脂肪細胞の機能解明とエネルギー代謝制御に向けた研究に取り組んでいます。河田教授の研究室では、寒冷刺激下（４℃）で飼育されたマウスの脂肪組織から、遺伝子を網羅的に観測できるマイクロアレイやRNA-seqによって遺伝子の発現量を測定しています。私たちはそのデータを用いて、白色・褐色・ベージュ脂肪細胞を特徴づける遺伝子や遺伝子間の制御関係を抽出しています。約2万5000種類の遺伝子について、数時間おきに発現量を測定したデータを解析するためには膨大な計算資源が必要なため、これまでのコンピュータで処理することは困難でした。スーパーコンピュータ「京」はこのような大量データを高速に処理し、遺伝子制御ネットワークの推定を可能にしました（図2）。

これまでの研究で、ベージュ脂肪細胞は褐色脂肪細胞とは異なる独自の遺伝子群と経路で速やかにUCP-1を誘導し、脂肪の代謝に携わっていることがわかってきました。私たちは、このように脂肪細胞における遺伝子の制御関係を解明することで、生活習慣病の改善につながる情報を得ることを目指しています。

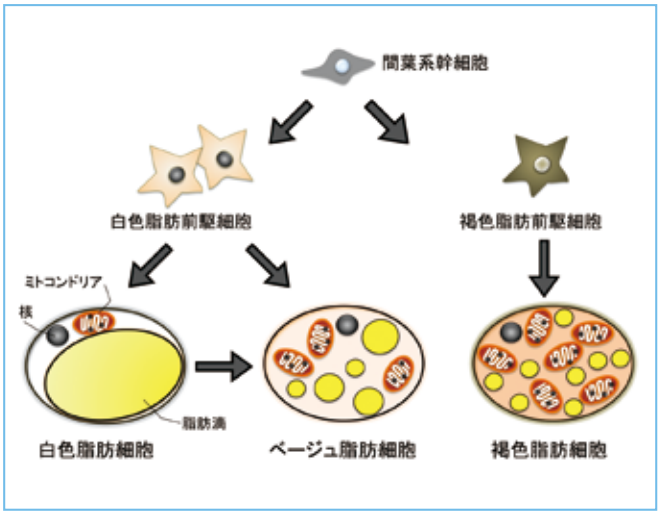


図１：脂肪細胞の種類と分化
ミトコンドリア中の点はUCP-1を表す。

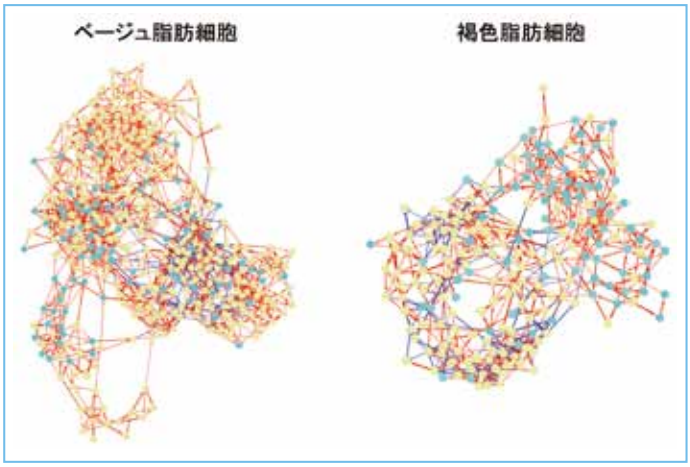


図２：脂肪細胞内において寒冷刺激下で大きな発現変動が見られた遺伝子間の制御ネットワーク
○が遺伝子、赤線が促進、青線が抑制の制御関係を示す。
青い○はベージュ脂肪細胞と褐色脂肪細胞で共通に検出された遺伝子。

●このレポートの詳しい情報は 右記のURLをご覧ください　http://www.kobe.riken.jp/stpr1-life/newsletter/Vol.10/zoomin03.html

SCLS Gotcha!

産総研生命情報工学研究センターの人材養成プログラム

神戸ポートアイランドとよく似た雰囲気の人工島、東京・お台場。ここで産業技術総合研究所生命情報工学研究センター（産総研CBRC）がSCLSの人材養成プログラムを実施しています。大規模計算機による研究成果は、各地で開催されるシンポジウムなどでよく報告されています。しかし実際に自分の研究で使ってみたいと思っても、ライフサイエンス分野の方々にとって計算機の使用はまだまだ敷居が高いものです。そこでCBRCでは、計算機利用者人口を少しでも増やし、いつか「京」のような大規模計算機で研究ができる人が生まれてくることを期待して人材養成を行っています。

HPCI講習会の様子

ここでの人材養成の特徴は、大規模計算の研究の成果や展望を広く一般に向けて発信する「ワークショップ」、多数の最先端の研究者による「セミナー」、1人1台のPCを用いた実習がある「講習会」、“スキマ時間”を活用して受講できる「e-ラーニング」と、4つのスタイルで充実した教育を実施していることです。

このうちセミナーは、一般公開しているだけでなく東京大学大学院新領域創生科学研究科の協力により単位認定科目となっており、東大の3つのキャンパスにTV会議システムを通じて配信されています。企業の方を含むプロの研究者と共に同じ講義を聞いている学生に、よい刺激を与えていることを期待して、毎年企画しています。

e-ラーニングの画面例　講義ビデオの進行に合わせてスライドが切り替わります。

講習会のカリキュラムは、基本的なデータファイルフォーマットについてから始まり、実際の解析パイプラインでよく使われる解析ソフトウェアの使用法まで学ぶ、実践的なものとなっています。

e-ラーニングでは基礎から最先端まで幅広い約60の講義（2014年1月現在）に、毎年最新の講義ビデオを追加しながら、みなさんをお待ちしています。

詳しくはホームページをご覧ください。
http://hpci.cbrc.jp/

SCLS Gotcha!

SC13「京」ブースでショートレクチャー

11月18日から22日までSupercomputing Conference 2013 (SC13)が米国デンバーで開催されました。理化学研究所 HPCI計算生命科学推進プログラムからは、高度化推進チームの研究員 宮内 敦と、企画調整チーム員 神内 衣里香が参加し、世界のスーパーコンピュータに関する情報収集などを行いました。

SC13は、HPC（ハイパフォーマンス・コンピューティング）の活用や、科学の発展・学識向上に関する研究や教育に役立つための情報交換、話し合い、連携の機会を提供する場として、今年で25回目を迎えた高性能計算技術に関する世界最大の国際会議です。

「京」ブースで研究活動の説明をするスタッフ

講演や論文発表などに加え、スパコンランキング「Top500」やゴードンベル賞の発表、大学、研究機関、企業ブースの出展などがあります。

「京」を運営・管理する理化学研究所 計算科学研究機構は、昨年に引き続き出展に参加し、「京」を使った研究活動の展示のほか、関係機関（HPCI戦略プログラム含む）からの講演者によるショートレクチャーを開催しました。

SCLSでは、「Collaboration of Education and Outreach activities」と題し、SCLSの活動や知識を共有し、共同研究や教育・アウトリーチ活動においてグローバルな連携を築くきっかけの場になればという思いを胸に、レクチャーを行いました。

SCLSショートレクチャーの様子

講演後には、バイオインフォマティクスの教育などについての質問のほか、アウトリーチ活動に力をいれている米国政府機関とも情報を共有することができました。またSCLSの活動や、日本との教育・アウトリーチ活動に興味を示す団体との交流も生まれ、活動拡充の可能性を感じたレクチャーとなりました。

News & Events

2014年度 第1期スーパーコンピュータ「京」と互換性を有するSCLS計算機システムの利用公募

大学、公的機関、民間の生命科学研究者・技術者に、スーパーコンピュータ「京」との互換性の高いSCLS計算機システム（HPCI戦略プログラム 分野1が保有する並列コンピュータ）の利用公募を行い、無料で提供します。
詳しくは分野1（SCLS）Webページをご覧ください（http://www.kobe.riken.jp/stpr1-life/）。

●公募期間 2月3日（月）～ 3月3日（月） ●審査結果通知 3月下旬 ●利用期間 2014年4月1日（火）～ 2015年3月31日（火）

高校出張授業のご案内

SCLSは、計算生命科学の発展を願って、次代を担う日本全国の高校生を対象に最新の科学技術について考え、理解を深めることを目的とした計算生命科学についての授業を行っています。学校や社会教育施設などで行われる授業や、科学技術推進のためのイベント講演会などの目的にご活用いただけます。高校教員を対象とした研修会での授業も実施しています。
詳しくは、Webページをご覧ください（http://www.kobe.riken.jp/stpr1-life/）。また、HPCI計算生命科学推進プログラム 企画調整グループ（e-mail：senryaku1@riken.jp）までご連絡下さい。

岡山県立玉島高等学校での塩基配列の実習

北大―理研ジョイントシンポジウム

学生5minutes session 未来医療を拓く生体予測シミュレーション

―ハイパフォーマンス・コンピュータの医療応用への挑戦―

2013年8月1日（木）北海道大学学術交流会館講堂にて、「未来医療を拓く生体予測シミュレーション ―ハイパフォーマンス・コンピュータの医療応用への挑戦―」を、北海道大学創成研究機構とSCLSの共同主催で開催しました。スーパーコンピュータ「京」を活用した最先端研究を行っている研究者とともに、バイオメカニクス、生体システム、生理機能の研究者を招いて、ハイパフォーマンスコンピュータを用いた医療技術・予測医療の可能性について討論をしました。
学部生、大学院生を対象として、『スパコン「京」を利用できたら、どんな医療応用を目指した研究をしますか?』というテーマで公募を行い、6人の大学院生の方に発表をしていただきました。
素晴らしい発表をありがとうございました。

発表者のみなさん
左から八幡健太さん（埼大院）、富田直さん（北大院）、Stephanie Nixさん（東北大院）、武石直樹さん（東北大院）、大谷智仁さん（阪大院）、荒井雅貴さん（九大院）

HPCI戦略プログラム 分野1×分野2 シンポジウム in 名大

「生体分子複合システムを計算する―相互作用は何をもたらすのか―」

2013年12月17日（火）名古屋大学IB電子情報館大講義室にて、分野1と分野2が協力して、相互作用が誘起する分子機能発展メカニズムに焦点をあて、ハイパフォーマンスコンピューティングがもたらす可能性をテーマとしたシンポジウムを開催しました。
対象は生体分子ですが、分野1、分野2を含めそれぞれ異なる バックグラウンドの研究者による発表に対し、研究者間の活発な質疑討論が交わされました。

第3回科学の甲子園全国大会（3月21日（金）～24日（月））

全国の高校生がチームを組んで科学の知識と技能を競う科学の甲子園に、SCLSが出展します。（3月23日（日））

文部科学省高性能汎用計算機高度利用事業
HPCI戦略プログラム 分野1
予測する生命科学・医療および創薬基盤
Supercomputational Life Science

HPCI戦略プログラムは、スーパーコンピュータ「京」を中心としたHPCI（High Performance Computing Infrastructure）を最大限に活用することによって、戦略的に取り組むべき5つの研究分野において画期的な成果を産み出し、計算科学技術の飛躍的な発展を目指す文部科学省のプログラムです。
「予測する生命科学・医療および創薬基盤」は、理化学研究所を代表機関として、大規模シミュレーション・高度なデータ解析に基づく生命現象の理解と予測、およびそれを通じた薬剤・医療のデザインの実現を目指して研究を実施しています。

BioSupercomputing Newsletter Vol.10 2014.3

独立行政法人理化学研究所 HPCI計算生命科学推進プログラム
〒650-0047 兵庫県神戸市中央区港島南町7-1-26 理化学研究所計算科学研究機構研究棟3階R301
TEL：078-940-5692 FAX：078-304-8785 http://www.kobe.riken.jp/stpr1-life

発行：平成26年3月
RIKEN 2014-022