

# BioSupercomputing Newsletter

2015.9 Vol.13

## CONTENTS

### Open Up SPECIAL TALK 座談会

「京」を用いて結合自由エネルギーを  
正確に予測し次世代の創薬支援へ  
山下雄史 / 篠田 恵子 東京大学 — 2

SCLS Eyes S-cruise ソフトウェア開発の現場から  
「京」を活用して巨大生体分子システムの  
分子動力学シミュレーションを実現  
杉田 有治 / ジェウン・ジョン / 森 貴治 理化学研究所 — 6

### 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  
バクテリア細胞質の丸ごとモデリングと  
全原子分子動力学シミュレーション  
優 乙石 理化学研究所 — 8

課題3 予測医療に向けた階層統合シミュレーション  
ヒトをモデリングし、ヒトを理解する  
村井 昭彦 産業技術総合研究所 — 9

課題3 予測医療に向けた階層統合シミュレーション  
ヒト静止立位と二足歩行の神経制御  
— 運動揺らぎと神経疾患によるその変容 —  
野村 泰伸 / Chunjiang Fu 大阪大学 — 10

### SCLS Gotcha!

神戸大学発達科学部での講義  
「学際性について：生物学と数学、物理学、化学の融合を例に」— 11  
第3回外部諮問委員会 — 11

NEXT STAGE・ポスト「京」重点課題へのチャレンジ  
生体分子システムの機能制御による革新的創薬基盤の構築  
奥野 恭史 理化学研究所 — 12

個別化・予防医療を支援する統合計算生命科学  
宮野 悟 東京大学 — 14

 [www.scls.riken.jp/](http://www.scls.riken.jp/)





## 課題2 創薬応用シミュレーション

# 「京」を用いて結合自由エネルギーを正確に

## シミュレーション科学で生体分子の振る舞いを解き明かし低分子医薬品・抗体医薬品候補の探索に役立てる

課題2「創薬応用シミュレーション」(代表: 東京大学・藤谷秀章教授) は、独自に開発した分子動力学 (MD) に基づく結合自由エネルギー計算手法を用いて、疾病の標的タンパク質に強く結合する薬候補化合物の探索や、タンパク質間相互作用の解析を行い、計算科学による創薬プロセスの革新を目指している。今回は「京」を活用して、疾病の標的タンパク質の働きを抑える新規化合物や抗体医薬品の創出に資する研究に取り組む2名の研究者に話を聞いた。

### バイオシミュレーション研究との出会い

●最初に、お二人が現在の研究に取り組むことになった経緯についてお話しください。

山下 高校時代に数学で物理現象を記述することの面白さを実感し、研究の道に進んでからもずっと計算科学を続けてきました。もともと量子力学に興味があり、プロトンの研究をしていましたが、バイオ分野でもプロトンが大事な役割を果たす現象がたくさんあることから、そちらに応用展開していこうと米国で分子生物学などバイオ関連の研究に携わり、タンパク質の研究を行ったのがこちらに

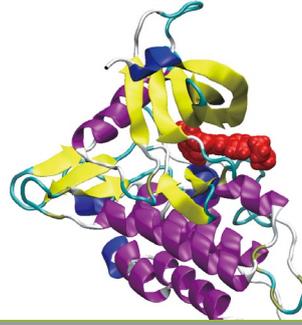
来るきっかけでした。タンパク質のシミュレーションが病気を治す薬の開発という、自分が考えていたよりも幅広く活用できることに興味を持ち、チャレンジすることに決めました。自分の研究が医療という社会の重要課題に直接つながるというのはやりがいもありますし、少しでも貢献できれば、自分にとっても嬉しいことです。2011年1月にこちらに来て、バイオシミュレーションや薬に関連するタンパク質をターゲットにした分子動力学計算による研究を進めてきました。

篠田 私は、大学時代は物理の相転移という現象にとっても魅力を感じて最初は実験の研究室に入り、放射光を用いた合金のX線回折実験を中心に研究を行いました。実験では滅多に見られない現象を実際に間近に目にすることができたりして非常にエキサイティングでしたが、一方でその現象がなぜどのように起きるのか、もっとモデル研究や理論に踏み込んでいきたいという思いもありました。修士、博士課程は別々の大学院に進み、修士課程では希釈強磁性体の相転移を、博士課程では量子液体の積分方程式の研

## 山下 雄史

東京大学 先端科学技術研究センター  
システム生物医学 特任准教授

「京」を活用したシミュレーション研究で重要なのは、失敗を恐れないことだと思います。どんどん経験して、試行錯誤のなかから確かな成果を得ることが大事です。そして、その経験のなかから、次につながるビジョンを見いだすことも必要です。

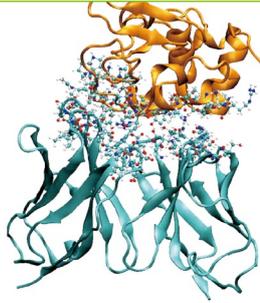


阻害薬と結合しているキナーゼの構造: リボンがキナーゼを、赤い球が阻害薬を表している。

## 篠田 恵子

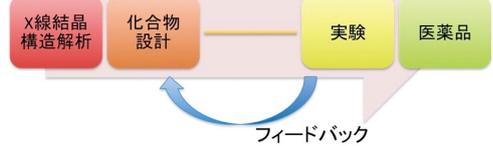
東京大学 先端科学技術研究センター  
システム生物医学 特任助教

「京」の高度な精算性能を十分に活かせるシミュレーション手法や系で研究を進めていくことが、「京」を使う上で大切なことだと思います。1つ1つはそれほど大きくない計算でも、それを大量に流すことで、統計的な解釈が可能になります。

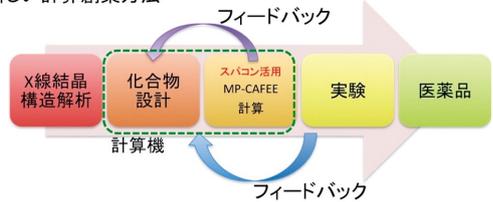


抗原 (オレンジ) と抗体 (青)。抗原と抗体界面で相互作用している重要な残基を原子表示してある。

従来の計算創薬方法



スーパーコンピュータを利用する新しい計算創薬方法



図：新しい計算創薬方法の可能性

## 予測し次世代の創薬支援へ

究を行いました。MDシミュレーションを用いた研究は産総研のポストドク時代に初めて行いました。その後企業のポストドクとして材料開発や量子化学計算など、いろいろなことをやってきましたが、いつも中途半端な感じが否めなく、自分でじっくり考えて仮説を立て、深く研究に踏み込んでいくことがなかなかできない

ことにフラストレーションがたまっていました。そんなとき、こちらに採用が決まりました。ちょうど、山下さんが入る1か月前、2010年の12月でした。スーパーコンピュータを使って生体分子のMDシミュレーションを行い、その構造やダイナミクスを調べて薬の開発に役立てる研究は、目的が明快で、出口に直結してい

るところに面白さとやりがいを感じました。また、一緒に研究を行うウェットの先生方も、計算科学の成果を活かして薬を開発したいという思いに溢れています。シミュレーション研究が、ダイレクトに薬の開発に活用されるというのは大きなプレッシャーですが、ぜひ実現させたいという気持ちです。

### 新しい創薬に貢献する研究を推進

#### ●お二人は、課題2でどのような研究に取り組んでおられるのですか。

山下 課題2で私がまず手掛けたのは、キナーゼを阻害する分子標的薬の研究です。多くの薬は、病気の原因となるタンパク質の機能を抑えることで薬としての役割を果たします。薬を見つけるためには、生体内の標的タンパク質と強く相互作用する化合物を探し出す必要があります。そこでスーパーコンピュータによるシミュレーションによって、標的タンパク質と化合物の結合自由エネルギーを

評価し、薬として有望な化合物を見つけ出そうというわけです。結合自由エネルギーは、分子がどれくらい標的タンパク質を認識できるかを示す物理量の1つです。私たちは「京」を使って、藤谷らが開発した「MP-CAFEI」という結合自由エネルギー計算法により、高い精度で新規の薬候補化合物の活性予測を行い、阻害活性の高い化合物の設計・探索を進めています。ちなみに、「MP-CAFEI」のエンジンともいべきMDプログラムは、オープンソースで開発されている

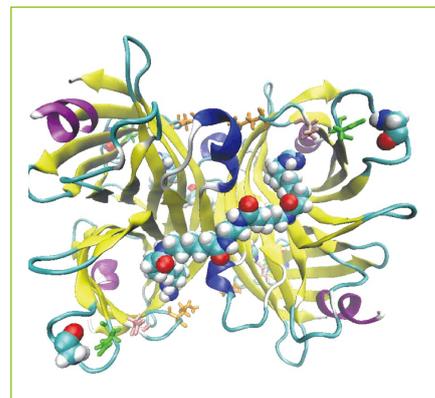
「GROMACS」で、これをストックホルム大学などの開発者らの協力で「京」向けにチューニングし、初期に比べて計算効率がおおよそ2倍に向上しました。この高速化で結合自由エネルギー計算は、さらに効率よく実行できるようになっています。これによって、有望な薬候補化合物を見つけ出すための技術的な基盤が整い、昨年あたりから大規模なデータが蓄積されはじめ、それをベースに新たな創薬の可能性を吟味した論文も出せるようになりました。これからは、たくさん計

算した結果をしっかりと解析して、サイエンスとしての成果を出していくことが、私たちの大事なミッションになると思っています。

私自身はもともとベーシックな研究をしてきて、そこにいちばん大きなモチベーションがあるので、創薬応用研究を進めながらも、それに付随して基礎的な現象の不思議な側面や、また明らかになっていないことに引き寄せられる部分もあります。実践に向けてどんどん応用が進む一方で、ベーシックな部分で、まだ不十分なところも実はたくさん残されています。全てがパーフェクトな手法として完成したわけではありません。アカデミアであるからには、これからさらなる探究を続けていく必要があります。そのために、実際の計算を行って結果を出していくとともに、そうした側面の研究も続けていくという、レンジの広い研究を、現在はやっています。

**篠田** 私が取り組んでいるのは、化学合成の低分子化合物より分子量が大きく構造も複雑な抗体医薬の開発に向けた研究です。抗体医薬は、抗原と呼ばれる標的タンパク質に特異的に強く相互作用する抗体を薬として応用するもので、バイオ

医薬の1つです。抗体そのものが薬になることもありますし、他の化合物やタンパク質と組み合わせることにより治療を行うこともあります。例えばプレターゲティング法のように、抗体でがんの位置を特定し、抗体につないだタンパク質と特異的に結合する化合物に薬をのせて運んで治療するというような方法に応用されることもあります。いずれにせよ、抗体と標的タンパク質との親和性、つまり抗原とくっつく強度を高めることが非常に重要になります。現在は扱っている抗体の親和性の向上を目指すことと、もう少しベーシックな部分、具体的には、抗原-抗体がどのように結合するのかをシミュレーションで調べています。というのも、扱っている抗体が非常に特殊で、抗原を認識するところにプロリンという残基があり、それが認識する前と結合した後で立体構造が変化（シストランス構造変異）するのです。その変化にはものすごくエネルギーが必要で、それがいろいろな生物学的なプロセスのスイッチを担っているともいわれています。この転移のメカニズムをMDシミュレーションで直接見るのは時間がかかりすぎて難しいのですが、何かそのメカニズムを知



図：プレターゲティング治療法に用いられる“キュービッド”と“プシケ”の結合構造。“キュービッド”（リボン表示）とつながった抗体が標的タンパク質に結合し、薬をのせて運ぶ“プシケ”（中央のvan der Waals表示）は“キュービッド”に特異的に結合する。

る手掛かりが得られれば、抗原を認識する部分の設計に結び付けることができるのではないかと考えています。

結合過程や結合構造を明らかにするために、「京」を使ってMDシミュレーションを1,000本近く、それもいろいろな軌道を描きながら結合するようにしてみました。数多く流すことによって、いろいろな場合を見ながら推測していこうというわけです。このような基礎的なメカニズムの解明は生物学的にも非常に重要で、後に必ず薬の開発にも結び付くと考えています。

## 次世代に向けた研究ビジョンの構築もミッションの1つ

●いよいよ最終年度に入りましたが、これまでの成果を踏まえて、今年度はどのように研究を進めていきたいとお考えですか。

**山下** 先ほどもお話ししたように、高速で計算する手法が整い、1つのテーマに200以上の化合物を計算するといった大規模なチャレンジを行ってきました。今後はより詳しい解析を通して、「なぜそうなるのか」を明らかにするための方法をブラッシュアップしていくことが重要だと考えています。そうすることで、例えばキナーゼ阻害薬にしても、より効率よく設計・探索が可能になるはずです。また、シミュレーション成果を創薬に結び付けていくためには、実験の存在も大きいと考えています。どれだけシミュレーションが頑張っても、やはりシミュ

レーションはある意味で現実の模倣であり、あくまでも予測です。現実により近づけていくためには、いろいろな段階で、きちんとした実験や検証を重ね合わせて、シミュレーションとリアリティの整合性を検証することが必要です。その繰り返しでシミュレーションの高精度化につながりますし、創薬プロセス全体の高速化・効率化にも大いに役立つはずで

す。実験とシミュレーションの関係について、若い人たちに勘違いしないでほしいのは、実験に合わせてシミュレーションを行っているのではないということです。モデルはあくまでも物理ベースで、純粋に理論から組み立てられています。実験の存在も大きいといったのは、結果を都合よく実験に合わせるためではなく、モデルが現実をよく再現していない

ところを見つけてアップデートしていくためです。いわば実験は答え合わせのようなもので、なぜ合わないのかを見つけ出すために大切なのです。そこはとても重要で、シミュレーション研究でいちばん頑張らなければいけないところです。

そうしたことも考えながら、今年度は担当している主要なテーマを成果に結び付けるとともに、手法やメソッドをよりブラッシュアップさせていながら、新しいクエストに応えるためのシミュレーションを付け加えていくこともやっていきたいと思っています。シミュレーションの成果は、一方で次の実験の人た



ちに引き渡すわけですが、私の手の内にも成果は残るわけで、それを将来の解析技術の向上に役立てたり、興味深いタンパク質の性質を理解するヒントが得られたりすれば、もっと面白くなるはずです。すでにできている手法をそのまま動かすだけでなく、自分の頭を使って、もっと発展させていくことができれば、それは素晴らしいことですよね。場合によっては、結合自由エネルギーだけでなく、そこにプラスすることによってより高い成果が得られる技法があるかもしれません。アルゴリズムも同様です。これまでは高速化が中心でしたが、もっと他にできることがあるはず。たとえば、活性予測の切り口を変えることで、有効な薬候補化合物のバリエーションを広げることができるかもしれません。今すぐには役に立たないかもしれませんが、それらを次の世代、次のチャレンジで活かしてもらえるような考え方や理論としてしっかり残していくことも、私たちの大

事なミッションであると思っています。  
**篠田** 昨年、「京」を使って水を含めた系で初期運動量を変えて1,000本近いMDシミュレーションを実施し、その直接のアウトプットである時系列データの解析を途中まで進めました。今はその解析の続きをやっていますが、その解析の結果をしっかりとまとめるのが今年度の仕事かなと思っています。先ほど山下さんから「GROMACS」が「京」で動くようになった話が出ましたが、私はその恩恵を大いに受けて、とても楽をさせていただきました。それでもMD計算はたいへんな作業で、気は遣いました。特に初期のころの「京」は、データが100%出てくることがあまりなく、途中で止まってしまったり、エラーが出てデータがダメになるなどトラブルもありました。最終的には1,200本近く流して1,000本弱のデータが揃いました。また、首尾よくデータが得られても、それが完全なデータかという問題もあって、そのチェックも苦労し

ました。とにかくこれほどの大規模計算は自分でも初めてのことで、はじめのうちは、どこをチェックすれば成果を引き出すためのデータセットとして使えるのかもまだよく分かっていない状態でした。それでもとにかくチェックを終えて、少なくとも1,000本弱は大丈夫というところまでこぎつけました。解析はまだ途中ですが、結合までの時間や結合している時間・回数もさまざまで、結合しないものもあるなど、いろいろな動きが見えています。抗原・抗体の結合過程を、ここまで大規模にシミュレーションした例は、おそらくこれまでなかったと思います。その意味でも、この成果から結合プロセスのダイナミクスをしっかりと見ていきたいと考えています。



## 自分たちの研究を医療に役立てたい

### ●5年後、10年後を見据えて、今後どのような研究に取り組んでいきたいとお考えですか。

**山下** 研究のスパンからいうと、おそらく1つのテーマに取り組んで、ある答えにたどり着くまでに、5年くらいは普通にかかりますよね。そう考えると、10年というのもけっして遠い先のことではありませんね。私ははじめにお話したように、もともと物理的なメカニズムに興味があって、バイオロジーだけをずっと続けていきたいというわけではありませんが、今はタンパク質や細胞のなかの分子の振る舞いなどが次々に明らかにされ、バイオシミュレーションも大きく発展しようとしています。非常に面白い分野だと思っています。その意味でも、今後は1つのタンパク質だけでなく、タンパク質の集団を取り扱うシミュレーションや、特殊な働きをするタンパク質などを見ていき、そのなかから面白い物理を探っていくという研究を続けていきたい

と考えています。もちろん生体分子を扱う限りは、実際の医療とも切り離せませんから、医療に役立つようなシミュレーション研究もやっていきたい。例えば、病気の原因を明らかにするような研究もその1つですね。やはり糸口はいろいろな病気にあるように思います。タンパク質のちょっとした違いで、思いもよらない重篤な症状につながることもあります。小さな設計ミス、組み立てミスが何を引き起こすのかを分子・原子レベルで解明していくということが、これからもっと重要になるはず。そこに貢献していきたいと思っています。

**篠田** 今はまだ1つの抗体しか扱っていませんが、5年後くらいには、抗体のシミュレーションのことなら何でも分かる、そんな職人というかスペシャリストになりたいというのが、1つの目標です。かつて、企業のポスドクに就いていたころ、上司が量子化学の専門家だったのですが、その人は分子構造を見ただけで、

「これ、どこか間違ってるぞ。何か気持ち悪い」といって誤りを直感的に見つけてしまうんです。私は驚いて「なぜ分かるんですか」と聞いたら、「分子の気持ちになれば、分かるんだよ」と話していました。私もそんな風に、分子シミュレーションの可視化映像を見ただけで、「このあたりを動かしたら、もっと結合する抗体になるぞ」くらいのことが言えるようになりたいですね。さらに、抗体の研究を通して、医療にも貢献できるような、重要な現象のメカニズムの解明に取り組んでいきたいと思っています。それから、もちろん今後もコンピュータシミュレーション技術を活かした計算科学的な研究も行っていますが、例えば統計力学など、もっと別のアプローチでバイオロジーの世界と向き合ってみたいという気持ちもあります。これはまだ漠然とした思いでしかないのですが。



# 「京」を活用して巨大生体分子システムの分子動力学シミュレーションを実現

## 超並列分子動力学計算ソフトウェア「GENESIS」

理化学研究所杉田理論分子科学研究室 主任研究員、  
理化学研究所計算科学研究機構粒子系生物物理研究チーム チームリーダー **杉田 有治**  
理化学研究所計算科学研究機構粒子系生物物理研究チーム 研究員 **ジェウン・ジョン**  
理化学研究所杉田理論分子科学研究室 研究員 **森 貴治**



理化学研究所計算科学研究機構粒子系生物物理研究チームの杉田有治チームリーダーらの共同研究チームは、これまで開発を続けてきた超並列分子動力学計算ソフトウェア「GENESIS」を、2015年5月8日からオープンソースソフトウェアとして無償で公開した。「GENESIS」は、「京」のアーキテクチャを考慮した独自の計算アルゴリズムを導入することによって並列計算の高効率化を達成し、これまで困難であった細胞環境を想定した1億個の原子で構成される系についても高速な分子動力学シミュレーションを実現。また従来のように、タンパク質1分子や細胞膜・糖鎖・核酸などの生体分子シミュレーションも可能だ。公開前から高い関心が寄せられており、今後、基礎研究から創薬研究まで幅広く活用されることが期待されている。開発の経緯やその特徴などについて話を聞いた。

### 「京」の性能を最大限に活かす分子動力学ソフトを

— いつごろから「GENESIS」の開発に取り組みましたのですか。

**杉田** 「京」の完成前、2010年ころから開発を始めました。コンピューターを用いて分子集団系内の原子間相互作用を物理法則に基づいて計算し、分子の動きを再現する方法は「分子動力学 (MD) 法」と呼ばれます。これまでに世界中で数多くのMDシミュレーションソフトウェアが開発されていますが、「京」のように多数のCPUを用いて、大規模な分子集団系に従来の計算アルゴリズムを適応しようとしても、CPU間の通信時間が増大するため高速計算に限界があります。そこで、「京」の性能を最大限活かせるMDシミュレーションソフトウェアを自分たちでつくろうと開発に着手しました。ただ、開発が容易でないことは目に見えていましたから、個人的には取りかかる

までのハードルはとて高かったというのが正直なところ。最初は思うようにスピードが上がりませんでした。さらに研究に使えるものにするためにはいろいろな機能も追加していかなければならず、途中、何度も絶望的な気分になりました。中心になって開発を進めてくれた森さんやジョンさんも、いつになったらゴールが見えるのか分からない状況なかで開発を続けていたと思います。

**森** 最初は、既存のソフトウェアと同じ結果が出るかどうか注力しました。同じ結果が出ないということは、「GENESIS」にバグがあるということですから。次にアルゴリズムですが、シミュレーションでは温度や圧力を一定に保つという方法があり、そうした方法を付け加えていくのですが、最初のうちは私が導入したアルゴリズムが間違っていたた

めか、温度制御は問題なく進んだものの、圧力制御の方はけっこう苦労しました。とにかく勉強を積み重ねながら、1つずつ問題を解決していったという感じ。基本的なアルゴリズムを入れないと研究が始まらないので、まず基本的なことができるようにして、その上で新しい方法を開発していこうと思っていました。

**ジョン** 私はここに来るまで電子状態理論に関する量子化学計算をやっていて、MD計算についてはほとんど知りませんでしたから、論文を読み、イチからMD法について勉強しなければなりません。それでも、最先端の「京」が使えるということは大きな魅力でした。これまでできなかった新しい経験やインパクトのある成果が得られるだろうし、自分にとってよいチャレンジになると思ってやってきました。

### ATDYNとSPDYN

— 壁を乗り越えて、開発が大きく進展したのはいつごろでしたか。

**杉田** SPDYNの開発が軌道に乗ってからだと思います。「GENEIS」は、ATDYNとSPDYNという2つのMDプログラムと解析

ツールとで構成されています。原子分割法を導入したATDYNは、粒子間相互作用の全ペアの計算を並列化するアルゴリズムを用いているのに対して、SPDYNは空間分割法によって空間全体を小さなドメイン

(領域) やセルに分割し、そこに含まれる粒子間相互作用ペアの計算を並列化するアルゴリズムを用いています。言い換えれば、ATDYNは相互作用を単純にCPUの数で分割しているのに対して、SPDYNはデー

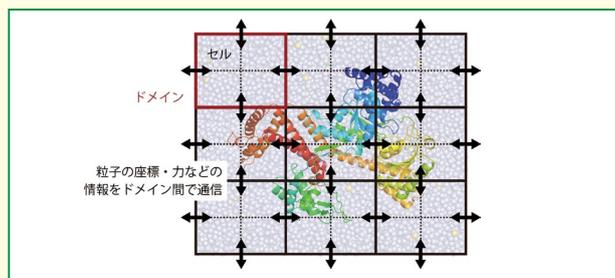


図1：SPDYNの空間分割法の概念図

SPDYNに導入している空間分割法では、シミュレーションの全体空間（ボックス）をドメイン（実線枠）とセル（点線枠）に分割。MPIプロトコルを用いた並列計算では、各ドメインに各MPIプロセスを割り当て、粒子の座標や力、ドメイン間を移動する粒子の情報などを通信する（矢印）。

タ分割というイメージで、ドメインやセルのなかの相互作用だけを分割しているわけです。SPDYNでは、データ通信が主に隣接するドメイン間で発生するため、データ通信量を大幅に削減することができ、より大きな系を高速に計算することができます。これを実現するために徹底的な分割を行い、余分なデータを持たないようにしました。ここまでやるのはたいへんでしたが、ジョンさんが頑張ってくれました。

——「GENESIS」のもう一つの大きな特徴は、レプリカ交換分子動力学 (REMD)

## より高機能なMD法の確立を目指して

——「GENESIS」は、いよいよ2015年5月8日からオープンソースソフトウェアとして公開されました。

杉田 ソフトウェアは常にアップデートしていくものなので、どのタイミングで公開するかについてはいろいろ考えましたが、ベンチマークでも世界最高水準の速さを達成しましたし、論文も発表しましたから、よいタイミングではないかと判断しました。今後の目標としては、「GENESIS」をMDプログラムの世界標準というか、MDシミュレーションソフトウェアといえば「GENESIS」と呼ばれるまでに高めていきたいと考えています。私たちの研究室でも、新しいことをやりたい研究者は、どんどん「GENESIS」に新しい機能を付け加えて、それを自分たちの研究に活かし、最終的には誰もが使えるように汎用化して、次のバージョンに組み込んでいこうとしています。

森 私も開発を続けながら、今は

法の導入ですね。

杉田 REMD法は、対象とする分子集団系のコピー（レプリカ）をいくつも用意して、それぞれ異なる温度を含むMDシミュレーションを並列に実行し、ある頻度でパラメーターを交換することで、異なる条件のシミュレーションを混合させる方法です。パラメーター交換によって、例えば低温から高温までさまざまな温度で、タンパク質の立体構造を一度に予測することができます。普通のMDでも多様な構造が取れますが、計算に時間がかかり過ぎます。「京」を使っても、十

「GENESIS」を使って膜タンパク質の機能について応用研究を進めています。当然、「GENESIS」に入っていない機能、普通のMDではできないようなことは、自分で開発して加えていくことになります。そうすることによって、自然に「GENESIS」が発展していけばいいと思っています。

ジョン 私の場合は、「京」もしくは「京」以外のコンピューターでも構いませんが、とにかく「GENESIS」をより速く使いやすいするための開発に取り組んでいます。例えば、これは「京」ではありませんが、グラフィックプロセッシングユニット (GPU) を応用してMD計算を速くするGPGPUの開発が、ほぼ仕上がりました。また、ポスト「京」に関するプロジェクトも、もう動き出しています。「GENESIS」はポスト「京」のター

対談後、若い研究者や学生からの質疑応答やフリートークが行われました。詳細は下記URLでご覧いただけます。

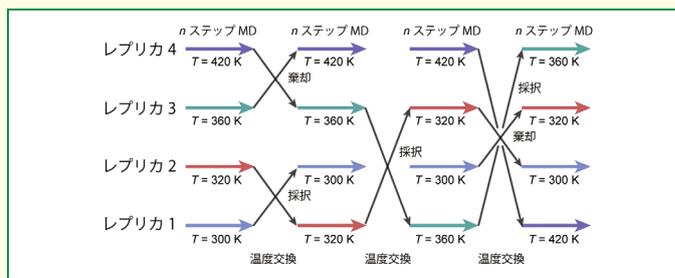


図2：レプリカ交換分子動力学 (REMD) 法 の概念図

REMD法では、対象とする系のコピー（レプリカ）を複数用意し、それぞれ異なる温度を割り当てて、それらを並列に計算し、あるステップごとにレプリカ間で温度交換を試みる。交換が採択されれば温度を交換し、棄却されればそのままの温度で計算を進める。

分に多様な構造が得られません。その点、REMD法では同じ計算時間で普通のMDの何十倍、何百倍の空間構造を取ることが可能です。さらに、低温では初期構造に近い状態であることがよくありますが、高温のシミュレーションを混合させることで、初期構造とは異なる立体構造を探索することもできます。また、「GENESIS」では温度だけでなく、圧力や表面張力・拘束力など、いろいろな条件を交換することができます。こうしたREMD法については、森さんが粘り強く開発に取り組んでくれました。

ゲットアプリの1つに選ばれており、ソフトウェア開発者とベンダーが協力して、「GENESIS」がもっと速くなるように、ソフトウェアだけでなくマシンのアーキテクチャも一緒に進化させていくというコーデザインを検討しています。

杉田 今後は、今の「GENESIS」にできないものを取り入れていく、さらにはまったく新しいオリジナルな付加価値を付けていくことを考えています。つまり高機能化です。さらに、「京」以外のマシンでもより高速化させていくことを目指します。幅広い計算環境でより高速化できれば、もっとユーザーが増え、研究や創薬などに活用してもらえないかと思っています。



After SPECIAL TALK

# バクテリア細胞質の丸ごとモデリングと全原子分子動力学シミュレーション

理化学研究所 杉田理論分子科学研究室 優 乙石



めて成立するものです。

現在、シミュレーション自体はほぼ終了し、100ナノ秒程度の時間内に生体分子が細胞内でどのような動きをしているかを、いよいよ解析している最中です。タンパク質の拡散する速さなどは、実験値と良く対応していることが確認できました。その他にも細胞内の酵素の立体構造や代謝物の動きなどにおいて、試験管内の希薄な溶液環境では見られない多くの発見がありました。今後は創薬分野への応用も視野に入れて、細胞内におけるタンパク質間相互作用や代謝物と酵素の結合などを調査するために、より長時間のシミュレーションを実行する予定です。

[1] Complete Atomistic Model of a Bacterial Cytoplasm for Integrating Physics, Biochemistry, and Systems Biology *Journal of Molecular Graphics and Modelling*. Michael Feig, Ryuhei Harada, Takaharu Mori, Isseki Yu, Koichi Takahashi and Yuji Sugita. *J. Mol. Graph. Model.*, 58, 1–9 (2015).

[2] GENESISホームページ  
<http://www.riken.jp/TMS2012/cbp/en/research/software/genesis/index.html>

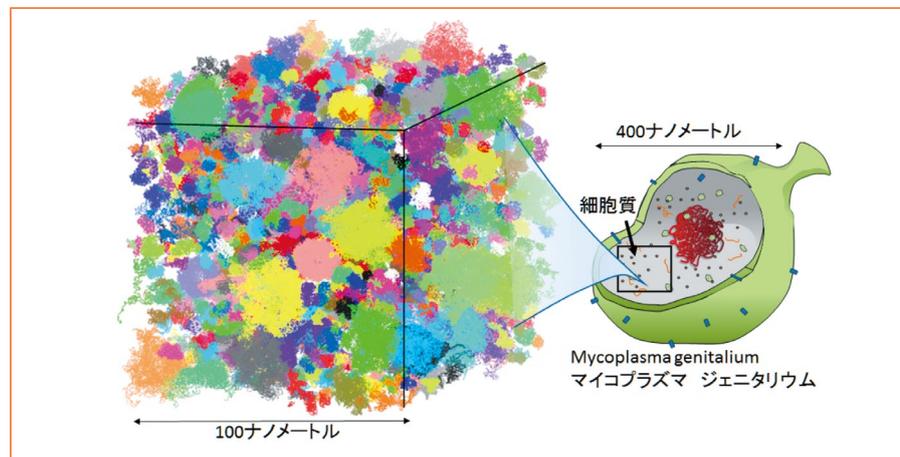
[3] GENESIS: a hybrid - parallel and multi - scale molecular dynamics simulator with enhanced sampling algorithms for biomolecular and cellular simulations.  
Jaewoon Jung, Takaharu Mori, Chigusa Kobayashi, Yasuhiro Matsunaga, Takao Yoda, Michael Feig, Yuji Sugita.  
*WIREs Comput. Mol. Sci.*, (DOI: 10.1002/wcms.1220)

「細胞内は約7割の空間を水が占めています」と聞くと、空間的に余裕のある環境を想像すると思いますが、実際はそうではありません。水以外の分子の占有率が30%の空間というのは、生体分子が非常に混み合っていて、たくさんのタンパク質や低分子、イオンなどが満員電車のごとく詰まっています。そうした混雑環境でタンパク質や低分子がどのような動きや相互作用を示しているかは、生物学的にも、また創薬分野においても重要な問いです。しかし、細胞内の分子の動きは実験的測定が難しく、よく分かっていません。

私たちは、スーパーコンピュータ「京」を用いた大規模な分子動力学 (MD) 計算 (原子に働く力を計算し、運動方程式を繰り返し解くことによって、分子全体の動きをつぶさに追跡するシミュレーション方法) によって、細胞内における生体分子のふるまいを原子レベルで解明することを目指しています。具体的には、*Mycoplasma genitalium* というバクテリアの細胞質をシミュレーションしています。

細胞質モデルは1000万原子～1億原子

で構成されます (下図)。この超大規模モデルは、理化学研究所の研究者 (森貴治 研究者、原田隆平 研究者) と、アメリカの共同研究者 (Michael Feig ミシガン州立大学教授) が作成しました<sup>[1]</sup>。マイコプラズマの遺伝子は全部分かっているので、タンパク質の種類がほぼ決定できます。また、生体高分子や代謝物分子の網羅的解析データがありますので、どんな分子がどれぐらいの濃度で存在するかも評価できます。このようにさまざまな実験データを用いることで、細胞膜とDNA以外の生体分子とその濃度がほぼ完全に「原子レベル」で再現できました。私は、こうしてできた「細胞質の丸ごとモデル」を、計算科学研究機構の研究者が開発したMDシミュレーションプログラム「GENESIS」<sup>[2]</sup>と「京」を使って動かしています。GENESISは、超大規模並列MDシミュレーションを可能にするためにさまざまな新技術が実装されたプログラムで、数十万個のCPUを同時に稼働させても効率が落ちません<sup>[3]</sup>。言い換えれば、私たちの研究は「京」の計算パワーとGENESISの高効率性が組み合わさって初



図：右: *Mycoplasma genitalium* の模式図。左：マイコプラズマ細胞質の原子モデル。各生体高分子を異なる色で表示した。一辺は100ナノメートルほどで、水分子を含め1億個の原子で構成される。



# ヒトをモデリングし、ヒトを理解する

産業技術総合研究所 人間情報研究部門 デジタルヒューマン研究グループ 村井 昭彦

私たちは、コンピュータ上にヒトのモデルをつくり、運動などの計測データからヒトの状態を推定することでヒトを理解しようとしています。膨大な要素からなる非常に精密なヒトのモデルは計算コストが非常に高いため、スーパーコンピュータのような高度並列計算が必要となってきます。

ヒトの状態を表わす情報の1つとして、筋張力などの体性感覚情報があります。私たちは光学式モーションキャプチャや床反力計、筋電計を用いた計測とヒトのモデルを用いることで、筋活動度の推定を実現しています。ヒトをワイヤで駆動される剛体リンク系とみなすことで、ロボティクスの分野で発展した運動・動力学計算基盤が適用できます。ヒトの筋骨格モデルは、実際の骨格標本をCTスキャンしたものをデータ処理し(AIST成人男性骨格形状データとして公開)、その上に筋・腱・靭帯の端点および経路点を解剖学に忠実に配置したものを製作しました。このモデルに基づき、運動学を解くことで関節角、動力学を解くことで床反力および関節トルク、そして筋張力二乗和最小などの最適化問題を解くことで全身の各筋の

筋張力を推定します。

アプリケーションとして、「マジックミラー」を開発しています。これは筋張力のリアルタイム推定および可視化を実現したシステムで、1秒間に60フレームの高速推定を行っています。被験者はディスプレイの前で運動を行い、ディスプレイにはビデオカメラで取得された被験者の映像および筋張力を表す筋骨格モデルが重畳表示されます。これにより、被験者はあたかも自分の筋が服を透かして見えているように感じることから、マジックミラーと呼んでいます。このアプリケーションは運動障害などの定量的診断やリハビリテーションの効果の確認、スポーツトレーニングの支援などさまざまな応用が期待されます。従来これらの分野におけるアドバイスは運動の観測と経験則により行われてきましたが、筋張力の可視化により被験者の状態の定量的な把握が可能となり、またリアルタイムの可視化によりバイオフィードバックが可能となります。

またヒトの運動制御システムの解明のために、筋骨格モデル上に解剖学的な神経回路モデルを構築した神経筋骨格システムを開発しています。これはヒトの運



動の原始的な部分である体性反射をモデル化したもので、固有感覚が入力されると神経信号伝達による時間遅れ後の筋活動が出力されます。前述の計算基盤により、このシステムの入出力である筋の長さ、張力などの情報が計算でき、入出力間のネットワークを実験データから同定できます。このシステムは、ヒトに見られる膝蓋腱反射のような体性反射だけでなく、ヒトに見られるつまづきに対する反応などのシミュレーションを実現します。また感覚と運動の関係を表現することから、今後運動のパフォーマンスを上げる感覚の推定が可能になり、その感覚を実現するスポーツウェアやシューズの開発への展開が期待されます。

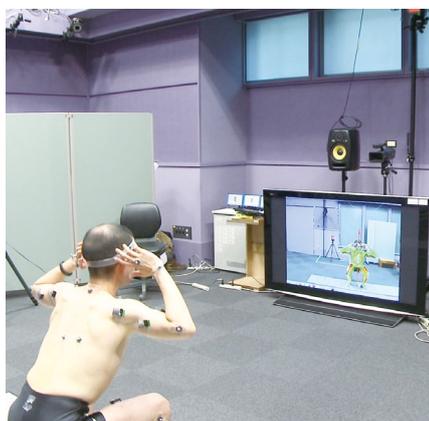


図1：リアルタイム筋張力可視化システム「マジックミラー」。筋が活動すると緑色から赤色に変化する。

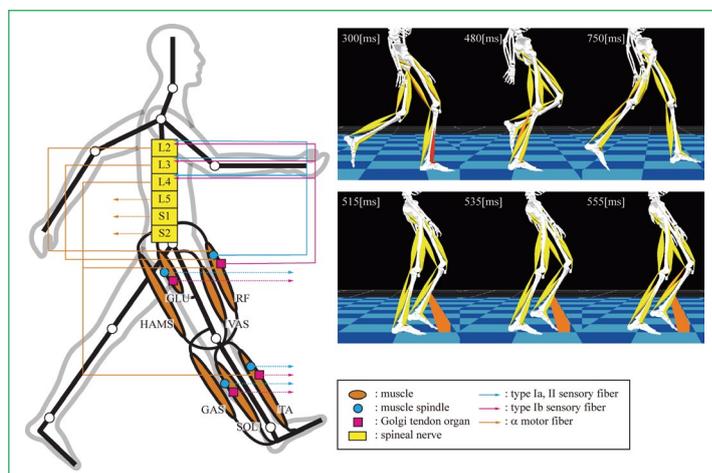


図2：神経筋骨格システム(左)。歩行とつまづきのシミュレーション(右)。



# ヒト静止立位と二足歩行の神経制御 — 運動揺らぎと神経疾患によるその変容 —

大阪大学 大学院基礎工学研究科 機能創成専攻生体工学領域

野村 泰伸  
Chunjiang Fu

ヒューマノイドロボット全盛の時代、コンピュータの中でヒトの身体運動を模擬・シミュレーションした数理モデルが直立したり二足で歩いたりする様子をご覧になっても、「これはすごい！」と感銘を受ける読者はあまりおいでにならないでしょう。しかし、ヒト生体運動の脳・神経制御（モーターコントロール）を研究する私たちにとっては、ヒューマノイドとヒトの運動は、見た目も運動の動力学的性質も、相当に異なります。

私たちが直立姿勢を保ち静かに立っているとき、身体の姿勢は微小に揺らいでいます。これは静止立位時姿勢動揺と呼ばれます。直立姿勢は機械力学的に不安定な倒立振子のようなもので、ヒトの脳神経は、筋肉が発生する力を介して、振子が倒れないように安定化しています。このよう考えますと、「姿勢動揺が大きい人は姿勢の安定性が低い」と思われるかもしれませんが、ところが、私たちはこの直感が常に正しいとは限らないことを明らかにしました。私たちは、阪大病院神経内科・国立刀根山病院と共同で、運動障害を伴う神経疾患であるパーキンソン病を患った患者さんの立位姿勢や歩行

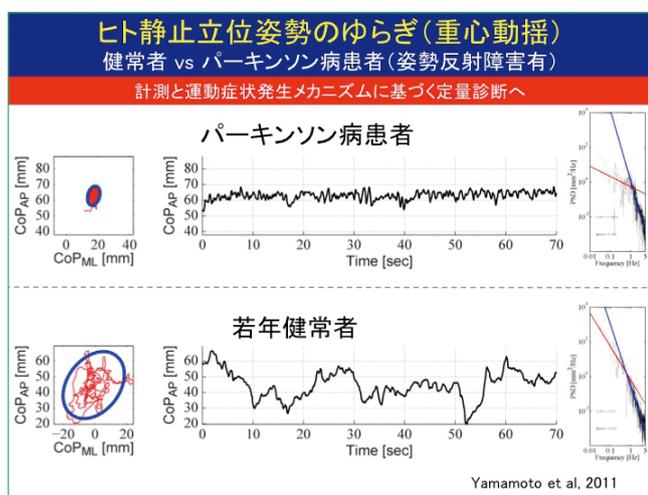
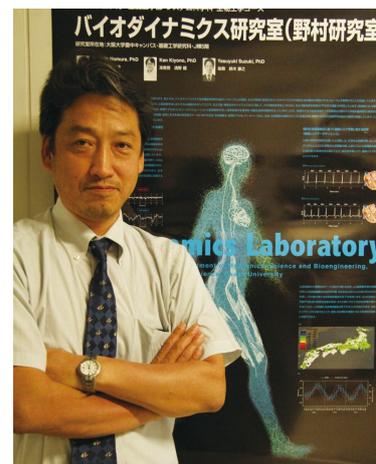
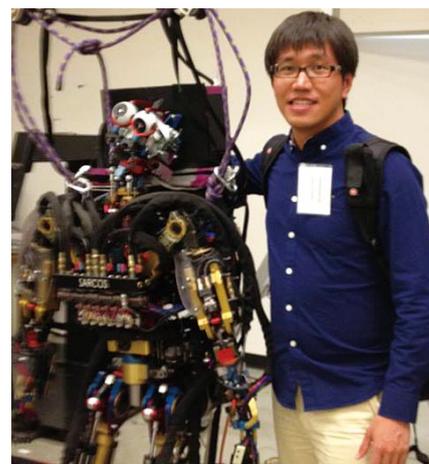
運動の研究をしています。患者さんの中には姿勢が不安定になり転倒しやすくなる症状を示す方がおられます。このような患者さんと健常者の姿勢動揺（足圧中心点CoP変動）を比べると、直感に反して、健常者の姿勢動揺の方が大きかったです（図参照）。つまり、健常者の姿勢は柔軟で、患者さんの姿勢は剛直だと言えます。

私たちは、姿勢制御の数学モデル（コンピュータシミュレーションモデル）を構築し、計測実験の結果を機械力学とシステム科学の論理で説明することを試みました。その結果、ヒトの脳は身体の直立姿勢からの変位を直立姿勢に引き戻すような制御を常に持続的に行ってはおらず、制御を行わず重力に身を任せておく時間帯を間欠的に作り出していると仮定すると、健常者に見られるゆっくりとした比較的大きな姿勢動揺をうまく説明できることが分かりました。逆に、持続的な制御を仮定すると、患者さんに見られる小さな姿勢動揺になります。さらに、持続制御では、制御装置（脳）の特性が少しでも変わってしまうと姿勢を安定化できなくなってしまうのですが、間欠制御では、制御装置の

特性がかなり大幅に変わっても直立姿勢をロバスト（頑強）に安定化できること、また、間欠制御の方がエネルギー効

率が高いことも分かりました。最新の研究で、二足歩行の脳・神経制御も立位姿勢と同じように説明できることが分かってきています。

しはしば「生体機能はロボットのような人工装置と比べて柔軟性が高い」と言われます。柔軟性は運動の揺らぎを生み出します。揺らぎの生成・消失メカニズムの解明は、健康科学の基盤を提供すると考えられます。スーパーコンピュータの中に構築したヒトの脳神経・筋・骨格系の詳細で大規模な数学モデルは、ヒトと同じような柔らかな運動（運動揺らぎ）を再現することができるのでしょうか。パーキンソン病患者さんに対応すると考えられる制御器の特性の変化は、患者さんの運動計測で観測されたような運動揺らぎの変容を再現することはできるでしょうか。スーパーコンピュータ「京」を用いた私たちの挑戦は続きます。





## 神戸大学発達科学部での講義

# 「学際性について：生物学と数学、物理学、化学の融合を例に」

理化学研究所 HPCI計算生命科学推進プログラム 副統括 江口 至洋

2015年6月19日と26日に「学際性について」と題した講義を行いました。この講義は神戸大学発達科学部が新入生に対して行う「発達科学への招待」の1コマとして行われているもので、キーワードは学際性です。私は過去4年にわたって講義する機会を与えられてきました。昨年までは『21世紀に入り、「京」を中心とするスーパーコンピュータと、DNAシークエンサーなどの計測技術

の急速な進歩が、生物学と数学、物理学、化学の融合を促進してきている』ことを主なテーマとし、学際性について話してきました。今年度も大筋に変化はありませんが、昨年度、発達科学部の中でも文系に所属する学生から「私は文系ですが、社会に出ていくと理系が有利と言われます。どうでしょうか。」という質問を頂いたこともあり、文系と理系の調和ある発展が社会にとって必要であるし、実社会で出会う問題の解決には文理融合した知識が求められる点も強調することにしました。実際、ゲノム編集技術による「デザインされた赤ちゃんDesigner Baby」の創出が今、世界的な問題になってきています。理系の研究者は「自分の行っている研究は善である」という考えを持っており、そうでな

いと創造的で先進的な研究を行うことはできません。そう考えることは自然で通常は正しいのですが、その研究を今進めるべきか、あるいはその研究成果を社会が受容するかどうかは別問題で、文系と理系の両分野の知識を十全に踏まえた考察が求められます。学生が「学際性」を考えるにあたって、学問領域の広がりや探究する深さという2つの軸で考えてはどうだろうかと提案しています。例えばT字型人間やII字型人間です。計算生命科学は計算科学と生命科学の2つの足を持ったII字型人間が取り組む学問領域と言えます。当然その2つの足を結ぶ線には生命倫理などの文系知識が必須です。学生からは「くさび型人間がいい」という予想外の意見も寄せられました。若い人が創造的に新しい学際的研究領域を作り上げていってくれることを切に願っています。



神戸大学発達科学部の学舎



## 第3回外部諮問委員会

理化学研究所 HPCI計算生命科学推進プログラム 企画調整グループ

平成27年7月3日(金)、雨が降りしきるなか理研東京連絡事務所に第3回外部諮問委員会が開催されました。この委員会は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」がより良い活動を行っていくため、国内外の学術および産業分野の有識者で構成された外部諮問委員から、研究内容および活動について助言を得る重要な委員会です。

平成24年1月に開催された第1回、そし



集合写真

て翌年の9月に開催された第2回で出された委員からの提言を踏まえ、これまで進めてきた研究活動の成果を発表しました。また、本年度がプロジェクトの最終年度となるため、後継プロジェクトへ最終成果をどう受け継いで行くのが焦点となる委員会となりました。

まず、研究開発の担当副統括から外部諮問委員会からの提言に対する全般的回答が発表され、ついで各4研究課題のグループリーダーによる研究開発の最終目標、進捗、成果および今後の展開についての発表がなされました。最後に計算科学技術推進体制構築の担当副統括から研究開発支援、研究成果の普及、人的ネットワークの形成、人材育成についての発表がなされました。また、それぞれの発表の後には質疑応答や委員からの提言も盛んに行われ、美り多い



委員会の様子

委員会となりました。

これから来年3月までは、最終成果に向けさらに研究を加速させるとともに、その後続くプロジェクトへの円滑な橋渡しをいかに実現させるかが重要な課題となります。今回の外部諮問委員会では、それら課題解決へ向けた貴重な助言を得ることができました。この場をかりて外部諮問委員会の委員のみなさま、郷通子先生、Peter Kohl先生、金岡昌治先生に感謝申し上げます。

# NEXT STAGE

文部科学省が推進するフラッグシップ2020プロジェクト（スーパーコンピュータ「京」の後継機となるポスト「京」開発プロジェクト）において、国家基幹技術として国家的に解決を目指す社会的・科学的課題として9つの重点課題が設定された。

カテゴリ「健康長寿社会の実現」では(1)「生体分子システムの機能制御による革新的創薬基盤の構築」と(2)「個別化・予防医療を支援する統合計算生命科学」の2つの重点課題について実施機関が選定され、2015年2月よりプロジェクトがスタートし活動を始めている。重点課題(1)(2)は、生命科学にどのような画期的成果をもたらすのか。課題責任者である奥野恭史氏、宮野悟氏に聞いた。

## 生体分子システムの機能制御による革新的創薬基盤の構築

重点課題1 課題責任者

奥野 恭史

理化学研究所生命システム研究センター 客員主管研究員

ポスト「京」により、超高速分子シミュレーションを実現し、副作用因子を含む多数の生体分子について、機能阻害のみでなく、機能制御までも達成することにより、有効性が高く、さらに安全な創薬を実現します。

2020年の本格運用を目指し、次世代のスーパーコンピュータであるポスト「京」の開発がいよいよ始まりました。2020年は東京オリンピック開催の年であり、我々はポスト「京」を武器として科学技術の金メダルを目指すこととなります。

ポスト「京」開発では、科学的課題に加え、社会的課題も重視され、創薬・医療・気象・ものづくり・宇宙などの9つの重点課題にイノベーションをもたらす計算技術（アプリケーション）の開発が行われています。私はこれら9つの重点課題の1つである創薬分野「生体分子システムの機能制御による革新的創薬基盤の構築」の責任者を担当させていただくことになりました。この場をお借りして、我々のポスト「京」創薬の研究目標や概要についてご紹介させていただきます。

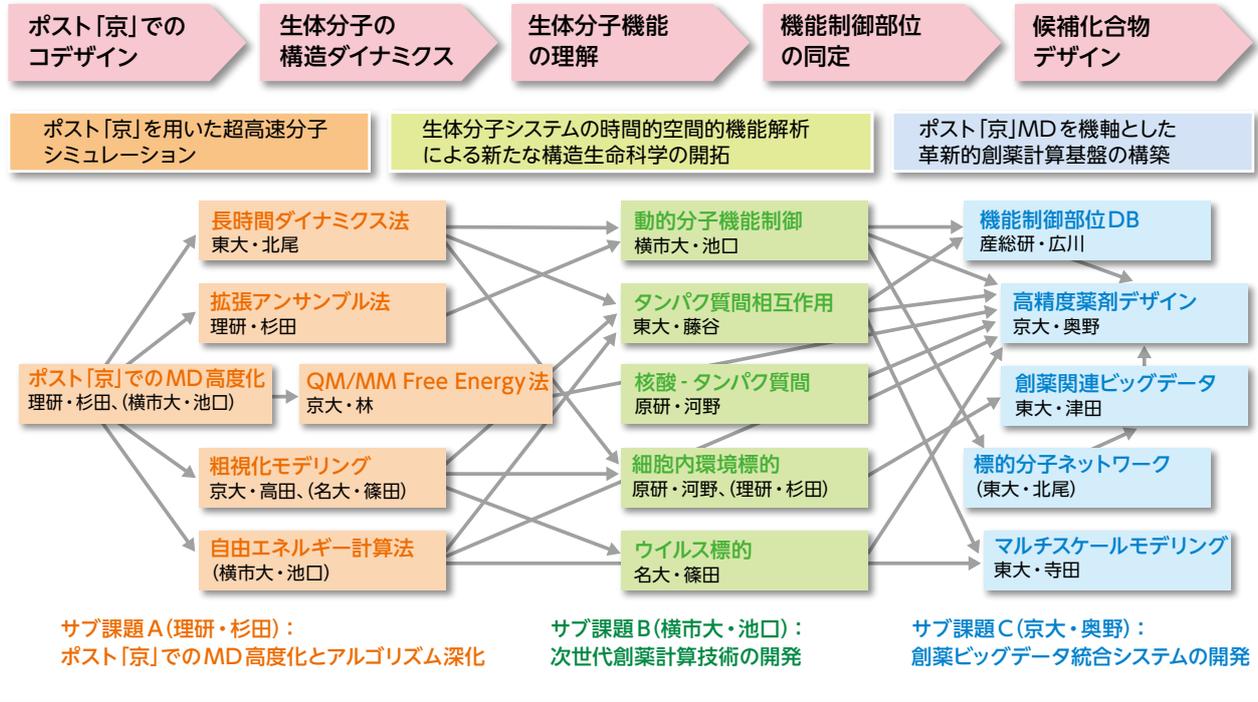
この数十年、製薬業界では、新薬の承認数が横ばい状態（20品目程度/年）であるのに対し、研究開発費が増え続けて

いるという深刻な問題に直面しています。このことから「開発費を抑えながら、新薬創出を加速すること」は創薬・医療分野にとっての最重要課題となっています。したがって、我々の最終的な目標は、ポスト「京」の圧倒的パワーを用いることで、これら製薬会社が抱える課題の克服に資することにあります。ポスト「京」では、生体分子の動きをシミュレーションする計算（分子動力学計算）の速度を「京」の数十倍の速さにすることによって、生体内分子（タンパク質など）の長時間（ミリ秒レベル）の動きを捉え、さらに多くの生体内分子を対象にした創薬シミュレーションを実現することを目指します。これにより、疾患の原因タンパク質の動的制御や複数の創薬関連タンパク質を加味したドラッグデザインの新しい方法を開拓します。具体的には、ポスト「京」の演算能力を最大限に活かす分子シミュレーション技術を開発することで（サブ課題A）、生体分子システムの時

間的空間的機能解析を実現する新たな構造生命科学と次世代創薬計算技術を開発します（サブ課題B）。さらには、これらの要素計算技術を開発する過程で、高精度かつ超高速の革新的な創薬計算基盤の確立を目指します（サブ課題C）。本プロジェクトで開発するポスト「京」を基軸とする創薬計算基盤が製薬現場で利用されることで、これまでの創薬の実験プロセスが計算機シミュレーションに置き換わるなどの開発プロセスの効率化につながり、医薬品開発コストの劇的削減、ひいては医療費の削減につながるものと期待できます。さらには、標的タンパク質の動的機能制御創薬、タンパク質-核酸の超分子複合体を標的とするエピジェネティック創薬、超大規模生体システムのシミュレーションに基づくシステム創薬などの新たな創薬の革新



# ポスト「京」のパワーを創薬に直結する研究体制



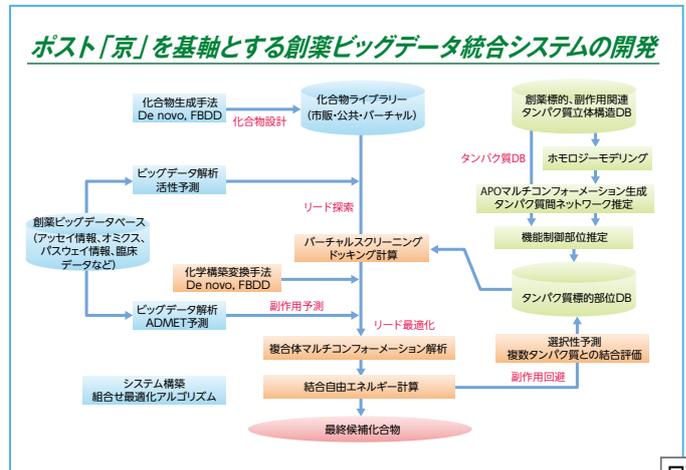
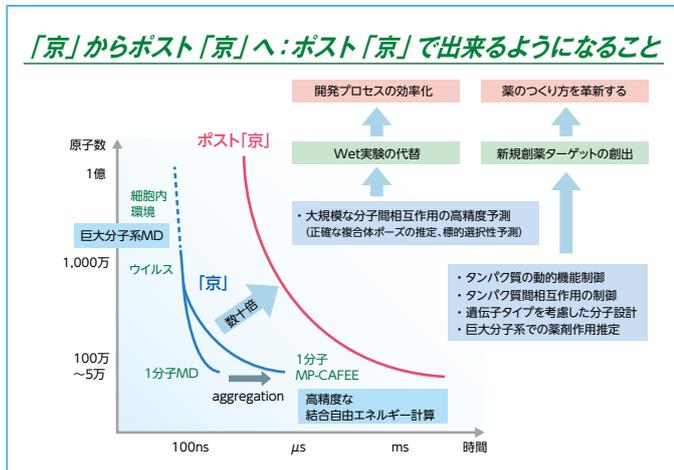
重点課題1 研究実施体制

的アプローチを開拓することで、これまで開発が困難であった新薬の創出や医薬品開発のスピードアップにつながり、結果として新薬を求める患者全体への貢献が期待されます。

私は、現在の「京」に触れて自分の計算科学に対する世界観が大きく変わる衝撃を受けました。国の威信をかけて開発するスーパーコンピュータの意味は、産業上の利益を生むことや世界ランキングでトッ

プを獲るばかりでなく、日本の将来を背負って立つ次世代の若者に夢を与えるものでもあります。実際、スパコンは15年先の汎用計算機の性能を先取りしていると言われることから、2020年に完成するポスト「京」は2035年の計算機環境の世界を我々に見せてくれることとなります。それだけにポスト「京」への期待と責任は大きく、創薬分野での開発に関与する私どもも世界に負けない創薬計算基盤の構築を

成し遂げるべく研究開発に進進する所存です。最後にみなさまにお願いしたいことは、2015年の手近な価値観を2035年の未来を拓くポスト「京」に押し付けるのではなく、常に前向きかつ建設的なご意見を頂戴したいということです。日本の産業と科学の持続的発展を支えるポスト「京」の開発が成功するためにも、今後ますますのご支援とご協力を賜りますようお願い申し上げます。



● レポートの詳細は右記URLでご覧ください。 <http://www.scls.riken.jp/newsletter/Vol.13/nextstage01.html>



# 個別化・予防医療を支援する 統合計算生命科学

重点課題2 課題責任者  
宮野 悟  
東京大学医科学研究所 教授



統合計算生命科学という新たなパラダイムの創成により個別化・予防医療を支援し、スーパーコンピュータが健康長寿社会を支えます。

病気は、臓器群の変調という現象として現れますが、その背景には生命の設計図とも呼ばれるゲノムがあり、オミクスとよばれるエピゲノム・RNA・タンパク質など多彩な分子が細胞を制御・構成しています。また、細胞には環境や加齢により長い時間をかけて変化していく個々人で異なる細胞コンテキストがあり、そのもとで機能している臓器の状態も多様です。さらに、一生変わらないとされていたゲノムも、造血幹細胞には加齢とともにゲノム変異が着実に蓄積していることが報告されています。また、さまざまな環境要因の影響を受けながら長い生体時空間的プロセスの中で生じるがんは、ヒトが生れたときからそのプロセスが始まっているといっても過言ではありません。個々人の多様性だけでなく、個人の一生にも多様性があります。これが、科学が明らかにした高齢化社会の現

実といえます。

一方、ゲノムシーケンス技術の革新は、エピゲノム・RNAデータを含め、既にペタバイト単位の量のデータを生み出しています。画像や生理データなどを含む高精度臨床データも大規模に蓄積されています。2006年に始まったグランドチャレンジプログラム、続く戦略分野プログラムでは、「京」をフルに動かせる心臓シミュレータUT-Heartを初めとする世界最高レベルのシミュレーション技術を開発しました。また、全遺伝子やノンコーディングRNAを対象とした大規模生命データ解析技術の開発により、数十テラバイト規模のデータに対応できるようになり、「京」を使って初めて可能になったがん生物学上の発見や予測法の開発などがありました。しかし、UT-Heartによるサルコメアから血液駆出まで1.5心拍のマルチスケールシミュレ

ーションは極めて画期的成果ですが、ほぼ全「京」を用いて17時間の連続稼働が必要でした。がん研究では、国際連携により主な約50種のがん種などについて5%程度の頻度の主要な変異が、総計で「京」程度の計算能力を合わせることで同定されています。しかし、「個々人のがん」を捉えるには全ゲノム解析に基づき、1%以下の頻度の変異を網羅的に見いだすことが必須であり、「京」では5000日を要してしまいます。上に述べましたようにヒトの多様性がさまざまな観点から明らかになる中、大規模な画像や生理データ、さらには健康情報やゲノム情報と個々人の病態の分子メカニズムとの乖離を埋める技術が不可欠となっています。これら心臓シミュレーションとがんだけについても、我が国をとりまく人類が挑戦しなければならない極めて重要な科学的・医学的課題の前には、「京」

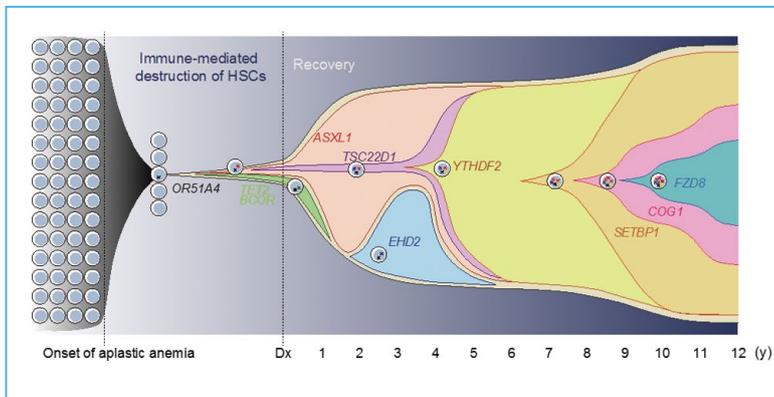


図1：再生不良貧血から骨髓異形成症候群へ至る12年間のクローンの進化

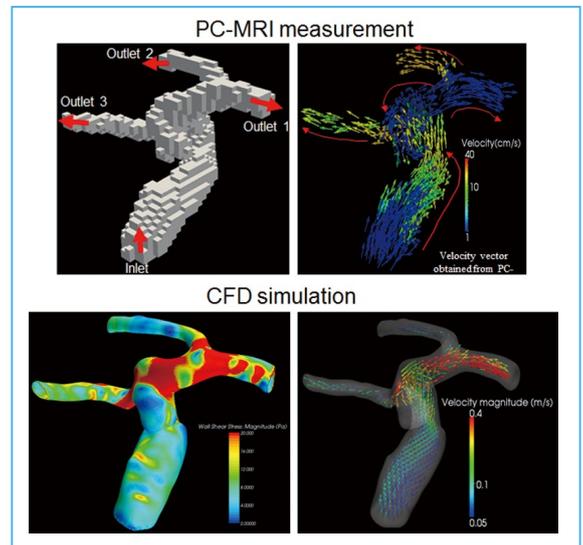
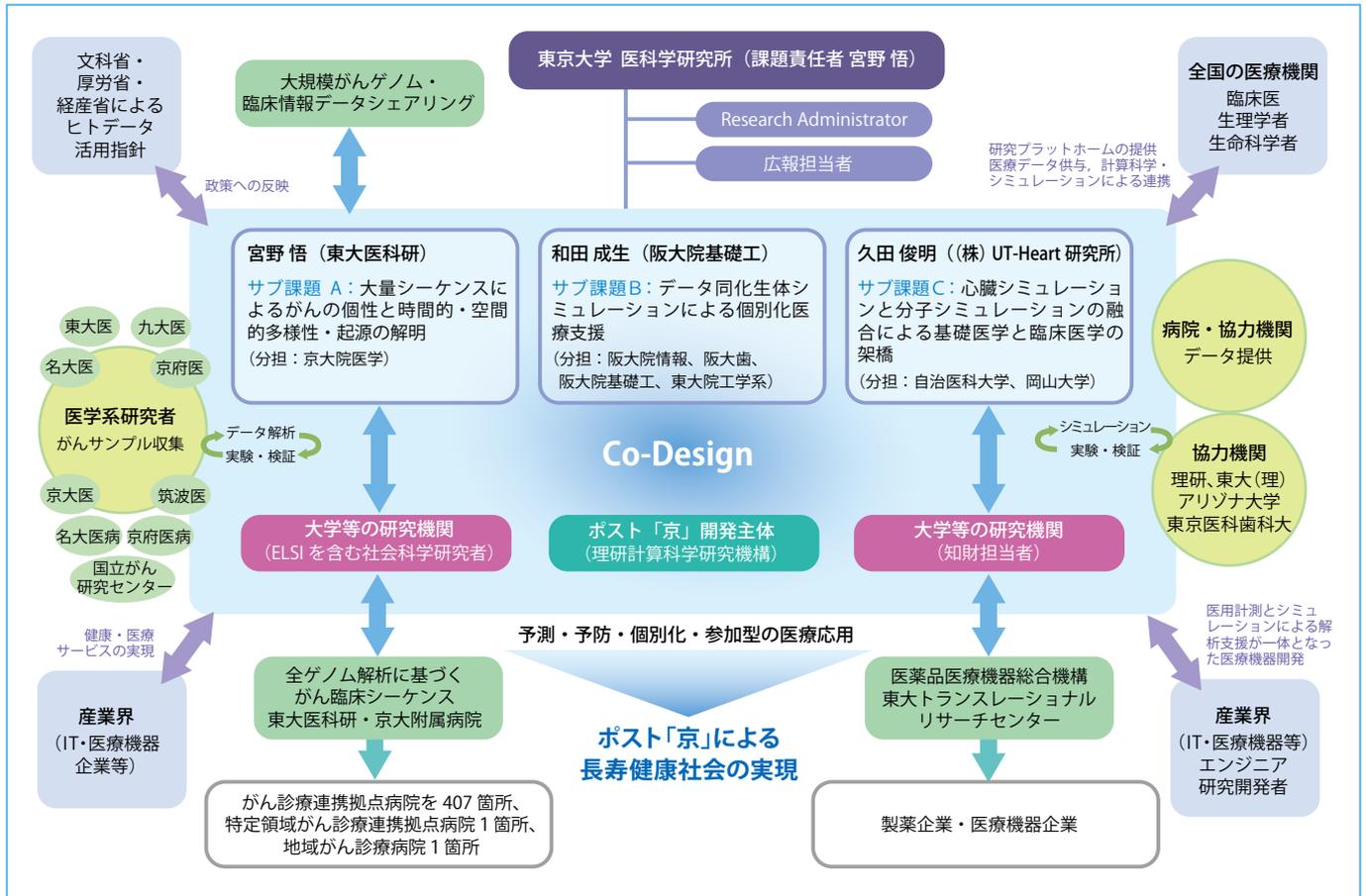


図2：データ同化生体シミュレーション



重点課題2 研究実施体制

のパワーを超えること、そしてそれを活用する技術を開発するという大きな壁が立ちはだかっています。そしてこれらの病態の統合的理解は、人智・手技をはるかに超えた複雑さを有していることが次第に明らかになってきています。ポスト「京」が必要とされる所以といえるでしょう。

重点課題2では、ポスト「京」によって初めて実現できる「情報の技術」、「物理の原理の応用」、そして「ビッグデータの活用」により、環境・生体時空間的

にゲノムから全身を捉え、がん・循環器系・神経系など、全身の疾患に対して、その病態の理解と効果的な治療の探索法の研究を行い、その成果を個別化・予防医療へ返す支援基盤となる統合計算生命科学を確立することを目的としています。

この目的のために、本重点課題では3つのサブ課題を実施します。サブ課題A「大量シーケンスによるがんの個性と時間的・空間的多様性・起源の解明」(サブ課題責任者：宮野 悟) (図1)では、ライフサイエンスにおいてかつてない規模の大規模データを解析し、サブ課題B「データ同化生体シミュレーションによる個別化医療支援」(サブ課題責任者：和田 成生) (図2)では、高度の生体階層統合シミュレーションに個体データを同化させる技術を開発します。この大規模データに基づくアプローチと並行して、サブ課題C「心臓シミュレーションと分子シミュレーションの融合による基礎医学と臨床医学の架橋」(サブ課題責任者：久田俊明) (図3)では、分子細胞レベルの研究と臓器個体レベルの研究を融合させ、ミクロとマクロのメカニクスとを関連させて定量的にとらえたシミュレーションモデルの研究開発を行います。

超高齢社会が迫る中、本課題の成果が、健康寿命の社会を支える基礎となり、加齢などとともに生じるさまざまな病気に対して、統合計算生命科学という新たなパラダイムが国民の健康に資することは大きな社会的意義があると考えています。

超高齢社会が迫る中、本課題の成果が、健康寿命の社会を支える基礎となり、加齢などとともに生じるさまざまな病気に対して、統合計算生命科学という新たなパラダイムが国民の健康に資することは大きな社会的意義があると考えています。

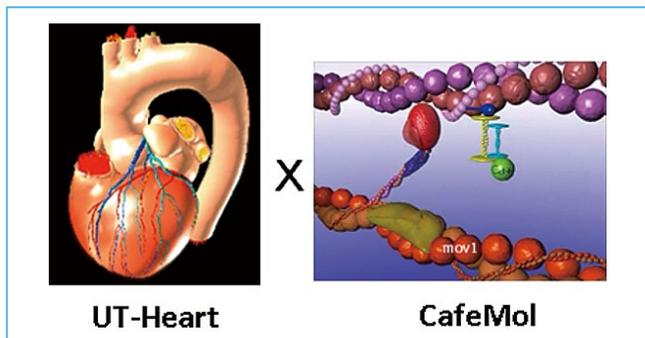


図3：心臓シミュレーションと分子シミュレーションの融合

●レポートの詳細は右記URLをご覧ください。

<http://www.scls.riken.jp/newsletter/Vol.13/nextstage02.html>



## RP WS スパコン「京」がひらく科学と社会 Supercomputational Life Science 2015

- 日 程：2015年10月20日(火)～21日(水)
- 場 所：東京大学 武田ホール(東京都文京区本郷)
- 参加費：無料(懇親会は会費制)



プログラムや参加申し込み等の詳細はこちらからご覧ください。

第1日目 10:00～17:50 International Workshop on Current Topics (18:00～懇親会)

第2日目 9:30～18:25 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」成果報告会

## SM 神戸大学計算科学教育センターとの連携遠隔講義 計算生命科学の基礎 II 生命科学と理工学の融合による 生命理解と健康・医療への応用(全15回)

- 日 程：2015年10月7日(水)～2016年2月3日(水)  
毎週水曜日 17:00～18:30
- 場 所：神戸大学工学部学舎1階  
C3-101(創造工学スタジオ2)

詳細は <http://www.scls.riken.jp/e-scls/2015-2016.html> をご覧ください。

## News & Events

### SP 第53回日本生物物理学会年会

- 日 程：9月13日(日)～15日(火)
- 場 所：金沢大学(石川県金沢市)
- シンポジウム 9月13日(日) 午前中  
次世代スパコン「ポスト京」が拓く  
バイオスーパーコンピューティング  
オーガナイザー：池口 満徳(横浜市大)

### EX 理化学研究所 一般公開(神戸)

- 日 程：10月24日(土)
- 場 所：理化学研究所計算科学研究機構(兵庫県神戸市)

### RP 第2回「京」を中核とするHPCIシステム 利用研究課題成果報告会

- 日 程：10月26日(月)
- 場 所：日本科学未来館(東京都江東区)

### SM CBI学会2015年大会

- 日 程：10月27日(火)～29日(木)
- 場 所：タワーホール船堀(東京都江戸川区)
- スポンサーセッション：10月28日(水) 16:00～17:30  
司 会：江口 至洋(理化学研究所HPCI計算生命科学推進プログラム)

### SM 生命医療情報学連合大会2015年大会 2015年日本バイオインフォマティクス学会年会

- 日 程：10月29日(木)～31日(土)
- 場 所：京都大学宇治キャンパス(京都府京都市)
- スポンサーセッション：10月30日(金) 13:30～15:30

### 生命科学におけるインフォマティクスと物理学の融合 —バイオインフォマティクスを広い視点から鳥瞰する—

- チュートリアルセッション：10月30日(金) 15:45～17:15  
並列配列相同検索プログラム「GHOST-MP」講習会

### EX サイエンスアゴラ2015

- 日 程：11月14日(土)～15日(日) <展示期間>
- 場 所：日本科学未来館(東京都江東区)

### WS 第38回日本分子生物学会年会

- 日 程：12月1日(火)～4日(金)
- 場 所：神戸ポートピアホテル(兵庫県神戸市)
- ワークショップ：12月4日(金) 14:00～16:30  
個別化・予防医療での新たなパラダイムの創出  
—健康・医療ビッグデータとスーパーコンピュータがもたらすもの—  
オーガナイザー：  
宮野 悟(東京大学医科学研究所ヒトゲノム解析センター)  
井元 清哉(東京大学医科学研究所ヘルスインテリジェンスセンター)

### SP 第9回京コンピュータ・シンポジウム(仮)

- 日 程：2016年1月29日(金)
- 場 所：よみうり大手町ホール(東京都千代田区)

### SP 第39回日本バイオレオロジー学会年会

- 日 程：2016年6月18日(土)～19日(日)
- 場 所：東海大学校友会館(東京都千代田区)
- テーマ：血流と動脈硬化、血栓性イベントの関連に関する  
医工連携に基づくバイオレオロジー
- 年会長：後藤 信哉(東海大学医学部内科学系循環器内科学)



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.13 2015.9

国立研究開発法人理化学研究所 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: 078-940-5835 FAX: 078-304-8785

発行：平成27年8月

RIKEN 2015-056