

「京」が切り拓くライフサイエンスの 最前線へようこそ！！

平成25年9月9日

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

プログラムディレクター

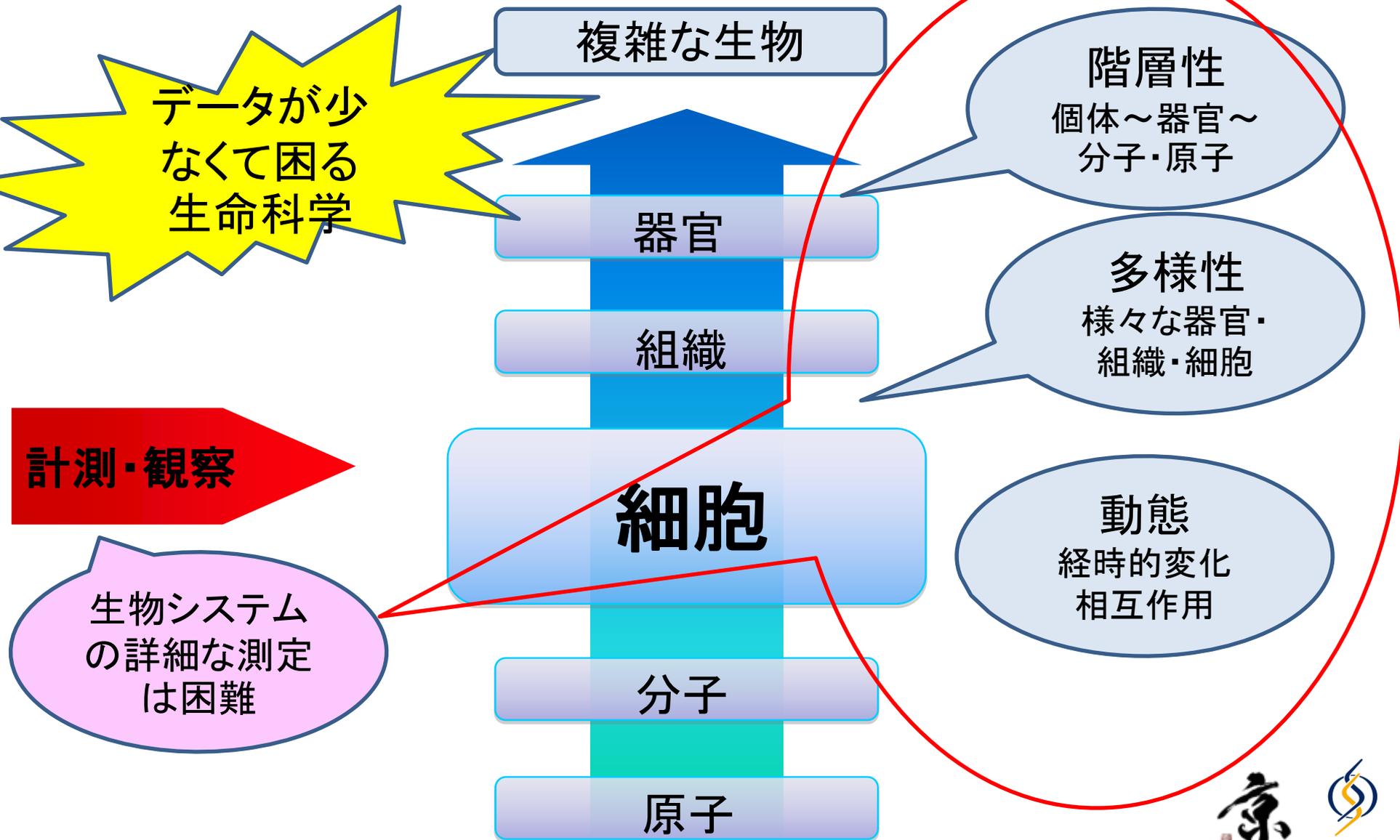
柳田 敏雄



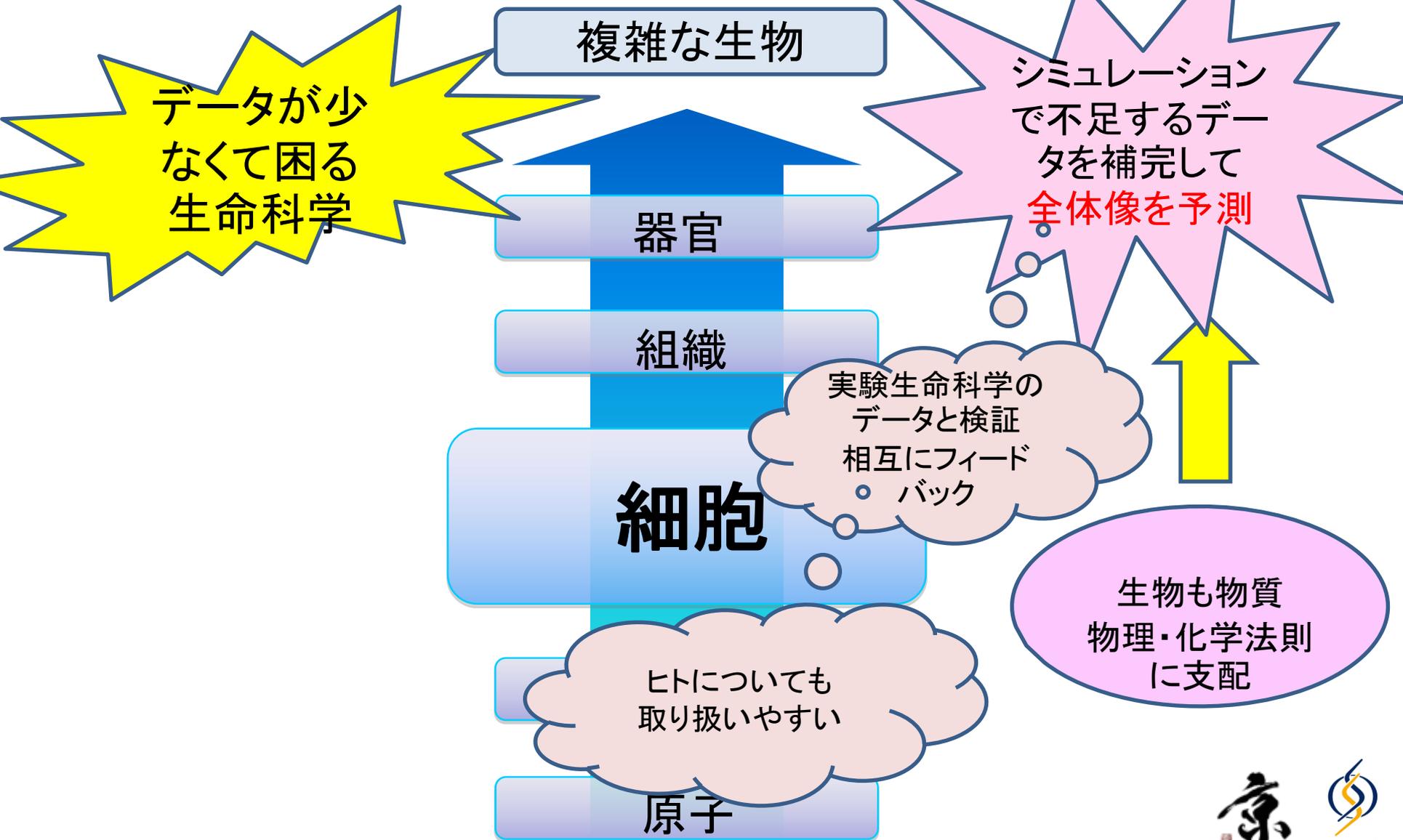
なぜ生命科学にスーパーコンピュータが必要なのか

- 生命科学の二つの側面への対応
 - データが少なくて困る生命科学
 - データが多すぎて困る生命科学
- スーパーコンピュータの能力を二通りに活用
 - 膨大な計算資源を一度に用いることが必要な課題
 - ある程度の規模の計算を膨大な条件について効率的にこなす課題

なぜ生命科学にスーパーコンピュータが必要なのか



なぜ生命科学にスーパーコンピュータが必要なのか



なぜ生命科学にスーパーコンピュータが必要なのか

データが多すぎて困る生命科学

オミックス解析の進歩

非コードRNA

タンパク質へ翻訳されずに機能するRNA

後天的な修飾

DNAの塩基配列の変化なしに、後天的に遺伝子発現が変異

超多自由度・膨大な組み合わせ
→複雑システム

次世代シーケンサーの普及による膨大なデータの取得→

ビッグデータの時代

スーパーコンピュータで解明を目指す

データを使いこなす

本日、御紹介する課題

- データが少なくて困る問題への対応：コンピュータ上での生命の再現
 - 生命の一つの単位をスーパーコンピュータを用いてできる限り精緻に再現
 - ➡ ○細胞内環境での蛋白質や核酸の分子ダイナミクスの解析
 - ー様々な分子で混雑した細胞内環境での蛋白質の機能発揮の仕組みを再現
 - ➡ ○ウイルスの営みを分子レベルで解明
 - ーウイルスやレセプターの動きを計算機の中に再現
 - 分子の動きや異常が組織・人体にもたらす影響(病気など)を階層をつなげて再現
 - ➡ ○予測医療に向けた階層統合シミュレーション
 - ースーパーコンピュータの膨大な計算資源を一度に用いて再現
- データが多すぎて困る問題への対応：複雑な遺伝子発現ネットワークの解明
 - ➡ ○アンチメタボの新規メカニズムやがんの薬剤耐性システムの多様性
 - ー膨大な条件を効率的に計算し、複雑なネットワークを解明
- 強い実用化・目的志向での挑戦：創薬の効率向上
 - ➡ ○「京」を利用した新しい創薬プロセスの可能性
 - ー膨大な条件を効率的に計算し、多くの候補化合物の薬としての可能性を高い精度で計算

推進体制

分野1：予測する生命科学・医療及び創薬基盤

分野マネージャ（阪大 中村春木）

理化学研究所（統括 柳田敏雄）

研究開発（副統括 木寺詔紀）

計算科学推進体制の構築（副統括 江口至洋）

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（GL:理研 杉田有治）

戦略課題2
創薬応用シミュレーション（GL: 東大先端研 藤谷秀章）

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（GL: 東大工 高木周）

戦略課題4
大規模生命データ解析（GL: 東大医科研 宮野悟）

開発したソフトウェアの高度化
情報発信
人材育成
等

分野2：新物質・エネルギー創成

分子機能と物質変換
全原子シミュレーションによるウイルスの分子科学の展開（名大 岡崎進）

GLはグループリーダーの略

