

2. 計算科学技術推進体制の構築

HPCI活用のための高度化推進

計算機資源の効率的マネジメント

計算生命科学研究を促進することを目的に、国内外の関連する多くの研究者(医療、製薬関連企業等の研究者含む)が、「京」を中心とするHPCIを効果的に利用するために必要な計算機環境を、整備・運用しています。

「京」利用に関する研究支援協力

「京」を中心とするHPCIの利用に際しては、高度な並列プログラミング技術やノウハウが必要であるため、高度化推進とユーザー支援を行っています。

アウトリーチ活動

若い人材の育成支援

計算生命科学の発展をめざし、高校、大学、企業などで、若い人々のための人材育成支援プログラムを実施しています。

SCLS計算機システム(「京」互換機)の活用

「SCLS計算機システム」の計算機資源を、創薬・医療などの生命科学研究者らに提供し、「京」を中心としたHPCIへの参画を促進します。

人的ネットワークの拡大

生命科学研究者コミュニティにおいて、「京」を中心とするHPCIを活用した計算生命科学への理解を得る活動を行い、幅広い利用を支援します。

研究成果の普及と広報活動

わたしたちの活動を広く一般の皆さまにお伝えし、長期的なご支援を賜るための活動を行っています。

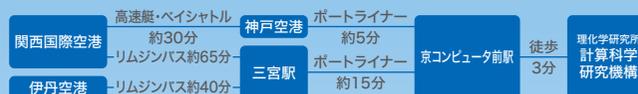
ACCESS MAP



● 新幹線等でお越しの方



● 飛行機でお越しの方



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
企画調整グループ

〒650-0047 兵庫県神戸市中央区港島南町7-1-26
TEL: 078-940-5692 FAX: 078-304-8785 E-mail: senryaku1@riken.jp
<http://www.kobe.riken.jp/stpr1-life/>
2013.2.28改訂 RIKEN 2013-033

HPCI戦略プログラム 戦略分野1

予測する生命科学・医療 および創薬基盤

戦略機関 独立行政法人理化学研究所

予測する生命科学

生命現象は、多様な要素からなる巨大で複雑なシステム(ゲノム、生体分子、細胞、臓器などの様々な階層)によって担われています。生命システムについての実験情報をもとにしてそのモデルを計算機中に構築し、稼働させることで生命現象をシミュレートすることが我々の研究手段です。シミュレーションで扱うことのできる問題は、用いる計算機の性能によって限定され、部分システムへの分割、モデルの粗視化、短時間現象への限定などが必要となります。スーパーコンピュータ「京」は、そのように問題を限定することなしに、システム丸ごとのシミュレーションを可能とします。「京」によるシミュレーション結果は、実験情報の背後に隠されていた生命現象の動作原理を明らかにし、結果として生命現象の予測、制御の可能性を与えます。特に、生命現象として疾病を対象することで、予測、制御のシミュレーションを、医療、創薬への貢献につなげることが我々の最終的な目的です。

参加機関：理化学研究所、名古屋大学、東京大学、日本原子力研究開発機構、沖縄科学技術研究基盤整備機構、東京工業大学、産業技術総合研究所、大阪大学、国立遺伝学研究所、横浜市立大学、京都大学、統計数理研究所(順不同)

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。

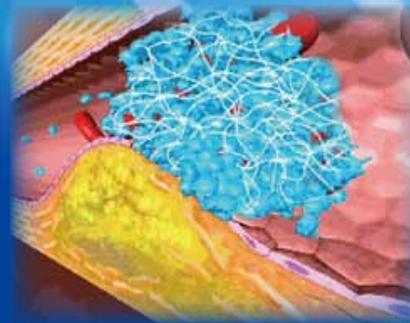
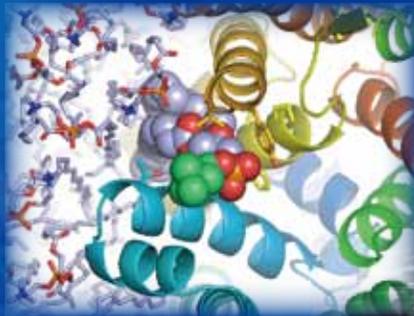
ライフサイエンス分野は、理化学研究所を代表機関として、全国の大学や研究機関が共同して研究を行います。

さらに、計算科学技術コミュニティの発展を目指して、技術講習会やネットワーク形成・拡大にも取り組みます。

1. 研究開発課題

1 細胞内分子ダイナミクスのシミュレーション

マルチスケール分子ダイナミクス・シミュレーションと一分子粒度シミュレーションを解析ツールとして、細胞内環境下における生体分子の構造と機能を研究します。生体膜を介した物質輸送、タンパク質/DNA相互作用、シグナル伝達が、代表的な研究ターゲットです。細胞機能の理解や薬剤設計等への寄与が期待されます。

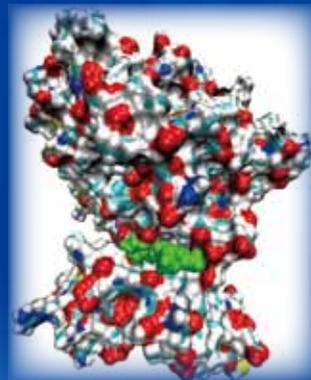


3 予測医療に向けた階層統合シミュレーション

全身筋骨格-脳神経シミュレータ、血栓シミュレータ、心臓シミュレータ、全身血管網シミュレータを結合し、複雑な生命現象のより深い理解と幅広い疾患に対応できる統合シミュレータを構築します。狭心症、心筋梗塞等の心臓疾患や、神経疾患に伴う運動機能障害等の治療法の検討や薬効の評価、予後の予測への貢献が期待されます。

2 創薬応用シミュレーション

新規化合物設計方法の構築、化合物とタンパク質の結合部位同定法の確立を行い、複数の標的タンパク質について薬候補化合物の設計・検証を行う。また、柔軟かい標的部位を持つタンパク質に対するリガンド結合予測法を開発する。効率の良い薬剤設計手法の確立が期待されます。



4 大規模生命データ解析

次世代シーケンサーなどの先端機器を利用して得られるデータを大規模に解析するための手法を開発し、病気や生物多様性の理解、細胞やがんの個性の描出、生体分子ネットワークの理解を目指します。個別化医療やゲノム情報の産業利用への貢献が期待されます。

