

予測する生命科学 医療および創薬基盤を目指して

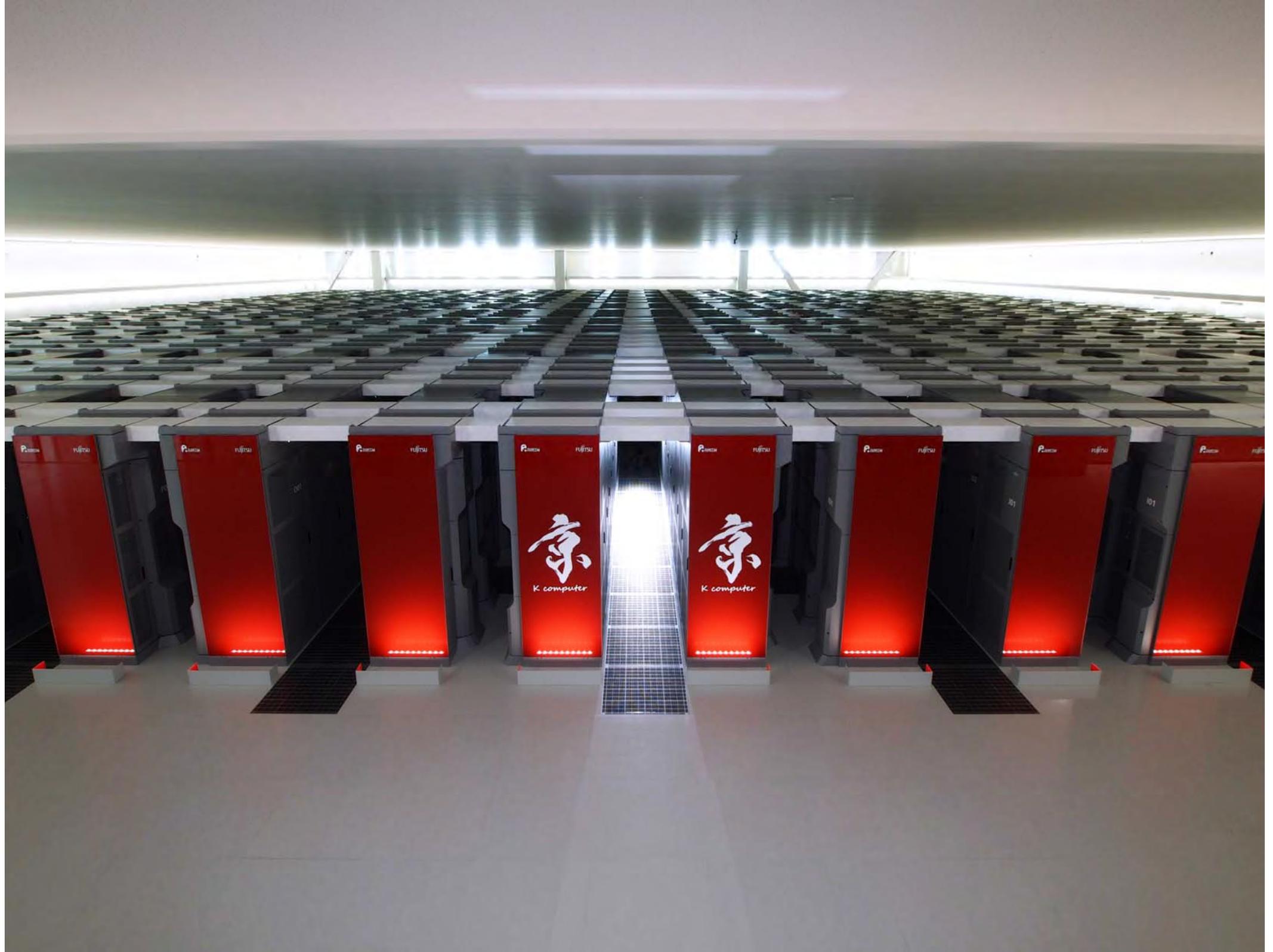
理化学研究所

HPCI計算生命科学推進プログラム 企画調整チーム
パブリックアウトリーチ担当

神内 衣里香

(HPCI戦略プログラム 分野1)





内容

- HPCI戦略プログラム 4年目を迎えて
 - 分野1 (SCLS) の活動
- 「京」・HPCIシステム利用研究課題公募
- 「京」の先に見えるものは

内容

- HPCI戦略プログラム 4年目を迎えて
 - 分野1 (SCLS) の活動
- 「京」・HPCIシステム利用研究課題公募
- 「京」の先に見えるものは

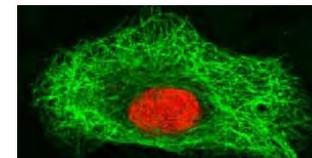
SCLSの活動



課題 1

細胞内分子ダイナミクスのシミュレーション

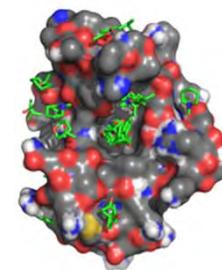
代表：杉田 有治 理化学研究所



課題 2

創薬応用シミュレーション

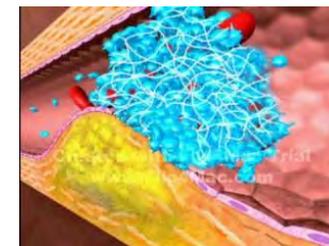
代表：藤谷 秀章 東京大学先端科学技術研究センター



課題 3

予測医療に向けた階層統合シミュレーション

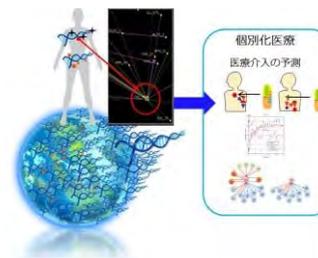
代表：高木 周 東京大学大学院工学系研究科



課題 4

大規模生命データ解析

代表：宮野 悟 東京大学医科学研究所



UT-Heart



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

代表機関 独立行政法人理化学研究所

HOME

SCLSについて

研究内容を知る

人材育成・教育

情報ライブラリ

スパコンを利用する

SCLSを学ぼう

専任内検索

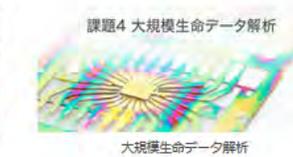
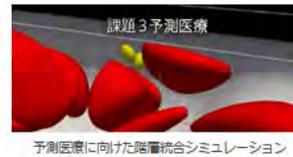
検索



最新のお知らせ

- 2014/08/14 [人材育成・教育](#) **S-cruiseソフトウェアフォーラム（交流広場）公開。**
- 2014/07/22 [イベント](#) **未来をひらくスーパーコンピュータ～「京」からその先へ限りなき挑戦へ 向（8/23-24東京）**
- 2014/07/14 [人材育成・教育](#) **2014年度第2期SCLS計算機システム（京コンピュータ互換スーパーコンピュータシステム）利用の公募開始（7/14）※公募の受付は終了しました。**
- 2014/07/11 [メタデータ・リリース](#) **マルチスケール・マルチフィジックス心臓シミュレータ UT-Heart(映像コンテンツ7/11公開)**

4つの研究課題



トピックス

<p>計算生命科学とは？</p> <p>SCLSの研究内容について、その概要をわかりやすく紹介します。</p>	<p>SCLS 計算機システム</p> <p>スパコン「京」と互換性が高いSCLS計算機システムの公募情報です。</p>	<p>S-cruiseソフトウェア</p> <p>研究開発ソフトウェアを紹介するS-cruiseポータルサイトページです。</p>	<p>e-SCLS</p> <p>お好きな時間に計算生命科学等を学べるe-learningを公開しています。</p>	<p>Newsletter</p> <p>SCLSの研究成果や活動を紹介している広報誌をご覧ください。</p>	<p>イベント情報</p> <p>セミナーやシンポジウム、一般公開などの情報一覧を掲載しています。</p>
---	--	---	--	---	---

HPCI戦略プログラム

<p>予測する生命科学・医療および創薬基盤 戦略分野1</p>	<p>新物質・エネルギー創成 戦略分野2</p>	<p>防災・減災に資する地球変動予測 戦略分野3</p>	<p>次世代ものづくり 戦略分野4</p>	<p>物質と宇宙の起源と構造 戦略分野5</p>
-------------------------------------	------------------------------	----------------------------------	---------------------------	------------------------------

SCLS HPCI戦略プログラムは、スーパーコンピュータ「京」を中心とした革新的ハイパフォーマンス・コンピューティング・インフラ（HPCI）を活用し、画期的な成果の創出、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。分野1（SCLS）は、生命科学を予測します。

FOLLOW US ON [SHARE](#) [サイト](#) [いいね!](#)

HPCI 戦略分野 1 いいね! 44

HPCI 戦略分野 1
8月13日 22:13

S-cruiseソフトウェアフォーラム（交流広場）を公開しました。 <http://t.co/bX5dHwCvCG>

フォーラム（交流広場）



S-cruiseソフトウェア情報

分子動力学計算

Software	Chief Developer	Homepage
GENESIS	杉田 有治 (理化学研究所)	↑
全原子モデルによる超並列分子動力学計算を行うspdynと、レプリカ交換法などの拡張アンサンブル計算、全原子・粗視化モデル計算を行うatdynの二つのプログラムにより、細胞環境のシミュレーションから、生体内反応の自由エネルギー計算まで幅広い研究に対応します。		
MARBLE	池口 満徳 (横浜市立大学大学院生命医科学研究科)	↑
原子レベルの分子モデルを用いた分子動力学法による超並列計算を行い、各種構造生物学実験と連携しつつ、溶液中や生体膜中のタンパク質の挙動をシミュレーションします。		
SCUBA	石田 恒 (日本原子力研究開発機構)	
全原子モデル計算により核酸やタンパク質などの生体高分子を対象にした分子動力学シミュレーションを実行します。		
CafeMol	高田 彰二 (京都大学理学研究科)	↑
原子よりも粗視化された分子モデルを用いた分子動力学法による超並列計算を行い、実験的手法では研究困難な生体高分子のダイナミクスをシミュレーションします。		
MP-CAFFE	藤谷 秀章 (東京大学先端科学技術研究センター)	
非平衡統計力学理論に基づく超並列の全原子分子動力学計算をおこない、病気の原因となる標的タンパク質と医薬品候補である低分子化合物との結合自由エネルギーを計算します。		
u2lib	木寺 詔紀 (横浜市立大学・理化学研究所)	↑
タンパク質や核酸、薬剤など生体分子を計算対象とします。反応の時間スケールが短い(ミリ秒~秒)のために、通常の分子動力学法では追跡が困難な、生体分子同士の相互作用やこれに伴う立体構造変化過程を、統計力学に基づいた、マルチコピー・マルチスケール分子シミュレーション法を用いて再現します。		

生体内反応シミュレーション

Software	Chief Developer	Homepage
pSpatioocyte	高橋 恒一 (理化学研究所)	
格子ベースのモンテカルロ法を用いて反応拡散方程式を計算し、細胞内のシグナル伝達経路等の生化学反応系をタンパク質一分子レベルかつ細胞スケールでシミュレーションします。		

脳神経系シミュレーション

Software	Chief Developer	Homepage
NEST	銅谷 賢治 (沖縄科学技術大学院大学)	
大脳基底核モデルのパラメータ推定と約10万個のコンダクタンスベースなHodgkin-Huxleyタイプニューロンを用いた皮質大脳基底核ループの大規模シミュレーションを行います。		

全身筋骨格系シミュレーション

Software	Chief Developer	Homepage
K-BODY	中村 仁彦 (東京大学大学院情報理工学系研究科)	
詳細な骨筋格モデルとその体積効果を考慮した人の全身筋骨格の動力学計算モデルを構築します。そして、脳神経系からの信号を入力としたシミュレーション、および人の運動計測データからの入力の同定・解析を行います。		
Hi-Muscle	高木 周 (東京大学大学院工学系研究科)	
運動ニューロンからのシグナルにより筋繊維レベルの収縮を計算し、結果として骨筋格全体の収縮を扱うマルチスケール骨筋格シミュレータです。		

心臓シミュレーション

Software	Chief Developer	Homepage
UT-HEART	久田 俊明 (東京大学大学院新領域創成科学研究科)	↑ ↑
細胞下の機能タンパク質レベルの電気化学・力学現象を再現した心筋細胞モデルを使って心臓を組み上げ、心臓の拍動と血流までを再現します。		

血栓シミュレーション

Software	Chief Developer	Homepage
EX-THROM	高木 周 (東京大学大学院工学系研究科)	
血小板表面のGP1baと血管壁および血漿中のフォンウィルブランド因子(vWF)との相互作用を分子レベルの結合を考慮した計算で再現し、その後の血小板の活性化から凝固に向かう複雑な生化学反応を再現します。		

次世代シーケンサーデータ解析

Software	Chief Developer	Homepage
GHOST-MP	秋山 泰 (東京工業大学大学院情報理工学系研究科)	↑
与えられた大量の塩基配列の類似配列検索をアミノ酸配列データベースに対して行う同源性解析ソフトウェアです。与えられた塩基配列を6リーディング・フレームでアミノ酸配列に変換し、アミノ酸配列データベースから類似する配列を検索することで高感度の検索を実現します。		
Genomon	宮野 悟 (東京大学医科学研究所)	↑
がんゲノムのエクソーム、RNAシーケンズデータ、全ゲノムシーケンズデータを解析し、変異/バリエーション(SNV)・コピーナンババリエーション(CNV)の推定、融合遺伝子の推定等により、がんのシステム異常をシーケンズ、トランスクリプトームレベルで大規模網羅的に明らかにします		

生体分子ネットワーク解析

Software	Chief Developer	Homepage
SIGN-BN	宮野 悟 (東京大学医科学研究所)	↑
ベイジアンネットワークにより、遺伝子発現データから遺伝子間の発現の静的・動的依存関係を表す遺伝子ネットワークを推定します。		
SIGN-L1	宮野 悟 (東京大学医科学研究所)	↑
L1 正則化法により、遺伝子発現データから遺伝子間の発現の静的依存関係を表す遺伝子ネットワークを推定します。また Network Profiler機能では、個人を特徴づける特徴量(モジュレーター)に依存して遺伝子間の発現の依存関係が変化する遺伝子ネットワークを推定します。		
SIGN-SSM	宮野 悟 (東京大学医科学研究所)	↑
状態空間モデルにより、時系列遺伝子発現データから、遺伝子発現モジュール間および個々の遺伝子間の動的依存関係を表すネットワークを推定します。		
BENIGN	松田 秀雄 (大阪大学大学院情報科学研究科)	
種々の条件下での生体分子の発現データから、各条件下での生体分子間の発現の依存関係を表すネットワークをベイジアンネットワークにより推定し、相互の比較を可能にします。		
EEM	新井田 敦 (東京大学)	↑
遺伝子セット情報に基づいてmRNA発現データ中で共発現している遺伝子群、発現モジュールを抽出します。		

ISLiMソフトウェア群

「次世代生命体統合シミュレーションソフトウェアの研究開発」(ISLiM)にて開発されたソフトウェアの[公開サイト](#)をご覧ください。

その他

Software	Chief Developer	Homepage
GROMACS		↑
分子動力学計算でタンパク質分子などの動的な挙動を解析しうるとともに、自由エネルギーなどの統計力学量をも求めることができます。		
GROMACS-Viewer	(理化学研究所 HPC計算生命科学推進プログラム)	
GROMACS由来の構造ファイルやデータファイルを、トラジェクトリの時系列で同期して可視化します。		
R (GNU R)		↑
統計解析向け言語およびその実行環境で、データ操作や計算、表示のためのソフトウェアスイートです。		



トップ > S-cruiseソフトウェア情報 > ソフトウェア名 > GENESIS

- スパコンを利用する
- S-cruiseソフトウェア情報
- ソフトウェア利用について
- ソフトウェア一覧
- よくある質問
- フォーラム (交流広場)
- リンク集
- SCLS計算機システム
- 「京」を中核とする HPCIシステムの利用

GENESIS

1. プログラム名

GENESIS

2. 開発責任者

杉田 有治 (理化学研究所 主任研究員)

3. 主な開発者

Jaewoon Jung (理化学研究所 計算科学研究機構)
 森 貴治 (理化学研究所 理論分子科学研究室)

4. 内容

概要

全原子モデルによる短並列分子動力学計算を行うspdynと、レプリカ交換法などの拡張アンサンブル計算、全原子、粗視化モデル計算を行うatdynの二つのプログラムにより、細胞規模のシミュレーションから、生体内反応の自由エネルギー計算まで幅広い研究に対応できる。

詳細

生体分子シミュレーションは、実験では観測不可能な実際のタンパク質や生体内分子の動きをとらえることができる手法として、近年広く行われている。更に、「京」コンピュータなどの短並列計算機の出現により、従来の計算では不可能であった時間的・空間的規模の計算を行うことが期待されている。我々は現在まで様々なアプローチから、時間的・空間的規模を広げる計算手法を提案しており、これらは、大まかに、3つの手法に分けることができる。1) 分子動力学法における並列手法を高度化させる事により長時間計算を可能とする手法[1]、2) レプリカ交換法などの拡張アンサンブル法を用い、タンパク質や生体内分子の構造変化を効率的にサンプリングする手法[2-4]、3) マルチレゾリューション計算により、より広い空間・時間的規模の計算を行う手法。GENESISは、我々が開発したこれらの手法を取り込んだ分子動力学計算プログラムである。1)の短並列化計算を可能としたspdynと、2)の手法を可能としたatdynという、二つの分子動力学法プログラムを持つ。これらのプログラムから、細胞規模のシミュレーションから、生体内反応の自由エネルギー計算まで幅広い研究に適用が可能となっている。また更に、解析用プログラムも付属しており、計算したトラジェクトリから、構造変化の様相を探ることも可能である。

5. どのようなことができるか

- 細胞内環境を模した分子凝縮環境下での全原子モデルによるシミュレーション。タンパク質の安定性や運動の変化などを解析し、分子凝縮環境がどの様にタンパク質の機能に影響を与えるのかを解析できる。
- イオンポンプなど、構造変化が生体機能に重要な役割を与えるタンパク質における自由エネルギー計算、反応と共役した構造変化の様相の解析を可能とする。



計算生命科学とは?



SCLS 計算機システム



S-cruiseソフトウェア



Newsletter



出張授業



イベント情報

- プログラム／開発者名
- 内容
- 何ができるか
- 関係論文
- チュートリアル資料
- 関連する教科書
- マニュアル
- 処理の手順
- ソフトウェアダウンロード
- 著作権およびライセンス
- ソフトウェアの概要

ベイジアンネットワークを用いた遺伝子ネットワークの推定と解析 (1)
土井 淳 / 株式会社セルイノベーター 研究開発部



『戦略分野1「予測する生命科学:医療および
創業基盤」』

2014-03-14

SiGN講習会資料: ベイジアンネットワークを用いた遺伝子ネットワークの 推定と解析

土井 淳

atsushi_doi@cell-innovator.com

株式会社セルイノベーター
研究開発部

福岡市東区箱崎6-10-1
九州大学 産学連携棟I アントレプレナーシ
<http://www.cell-innovator.com>



だれにでもわかる拡張サンプリングシミュレーション (1)
木寺 昭紀 / 理研 HPCI、横浜市大



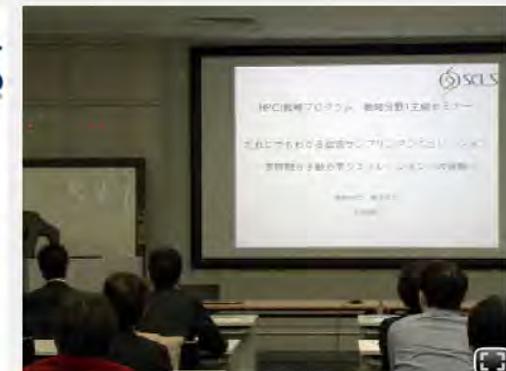
HPCI戦略プログラム・戦略分野1主催セミナー

だれにでもわかる拡張サンプリングシミュレーション

—長時間分子動力学シミュレーションへの挑戦—

理研 HPCI、横浜市大

木寺 昭紀



内容

- HPCI戦略プログラム 4年目を迎えて
 - 分野1 (SCLS) の活動
- 「京」・HPCIシステム利用研究課題公募
- 「京」の先に見えるものは

「京」、HPCI利用研究課題公募

- 募集開始 9月5日（金）
- 受付開始 10月1日（水）
- 締め切り 11月6日（木） 17時※電子申請
- 結果通知 平成27年2月初旬
- 利用開始 平成27年4月1日（水）
- 課題募集説明会
 - 東京 9月12日（金）、9月19日（金）
 - 神戸 9月5日（金）、9月30日（火）

高度情報科学技術研究機構(RIST)

URL: <https://www.hpci-office.jp/>



「京」の産業利用におけるトライアル・ユース、有償利用課題については、随時受付中

内容

- HPCI戦略プログラム 4年目を迎えて
 - 分野1 (SCLS) の活動
- 「京」・HPCIシステム利用研究課題公募
- 「京」の先に見えるものは

重点課題（9課題）

カテゴリ	重点課題
健康長寿社会の実現	<p>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 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、機能阻害ばかりでなく、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する。</p> <p>② 個別化・予防医療を支援する統合計算生命科学 健康・医療ビッグデータの大規模解析とそれらを用いて得られる最適なモデルによる生体シミュレーション（心臓、脳神経など）により、個々人に適した医療、健康寿命を延ばす予防をめざした医療を支援する。</p>
防災・環境問題	<p>③ 地震・津波による複合災害の統合的予測システムの構築 内閣府・自治体等の防災システムに実装しうる、大規模計算を使った地震・津波による災害・被害シミュレーションの解析手法を開発し、過去の被害経験からでは予測困難な複合災害のための統合的予測手法を構築する。</p> <p>④ 観測ビッグデータを活用した気象と地球環境の予測の高度化 観測ビッグデータを組み入れたモデル計算で、局地的豪雨や竜巻、台風等を高精度に予測し、また、人間活動による環境変化の影響を予測し監視するシステムの基盤を構築する。環境政策や防災、健康対策へ貢献する。</p>
エネルギー問題	<p>⑤ エネルギーの高効率な創出、変換・貯蔵、利用の新規基盤技術の開発 複雑な現実複合系の分子レベルでの全系シミュレーションを行い、高効率なエネルギーの創出、変換・貯蔵、利用の全過程を実験と連携して解明し、エネルギー問題解決のための新規基盤技術を開発する。</p> <p>⑥ 革新的クリーンエネルギーシステムの実用化 エネルギーシステムの中核をなす複雑な物理現象を第一原理解析により、詳細に予測・解明し、超高効率・低環境負荷な革新的クリーンエネルギーシステムの実用化を大幅に加速する。</p>
産業競争力の強化	<p>⑦ 次世代の産業を支える新機能デバイス・高性能材料の創成 国際競争力の高いエレクトロニクス技術や構造材料、機能化学品等の開発を、大規模超並列計算と計測・実験からのデータやビッグデータ解析との連携によって加速し、次世代の産業を支えるデバイス・材料を創成する。</p> <p>⑧ 近未来型ものづくりを先導する革新的設計・製造プロセスの開発 製品コンセプトを初期段階で定量評価し最適化する革新的設計手法、コストを最小化する革新的製造プロセス、およびそれらの核となる超高速統合シミュレーションを研究開発し、付加価値の高いものづくりを実現する。</p>
基礎科学の発展	<p>⑨ 宇宙の基本法則と進化の解明 素粒子から宇宙までの異なるスケールにまたがる現象の超精密計算を実現し、大型実験・観測のデータと組み合わせ、多くの謎が残されている素粒子・原子核・宇宙物理学全体にわたる物質創成史を解明する。</p>

萌芽的課題 (4課題)

将来性を考慮し、今後、実現化を検討する課題

⑩ 基礎科学のフロンティア—極限への挑戦

極限を探究する基礎科学のフロンティアで、実験・観測や「京」を用いた個別計算科学の成果にもかかわらず答の出ていない難問に、ポスト「京」のみがなし得る新しい科学の共創と学際連携で挑み、解決を目指す。

⑪ 複数の社会経済現象の相互作用のモデル構築とその応用研究

複雑且つ急速に変化する現代社会で生じる様々な問題に政策・施策が俊敏に対応するために、交通や経済など社会活動の個々の要素が互いに影響し合う効果を取り入れて把握・分析・予測するシステムを研究開発する。

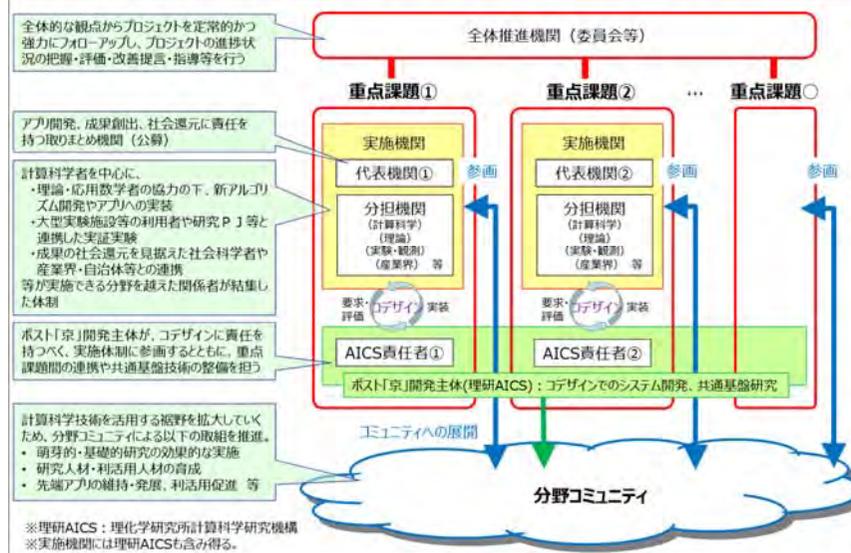
⑫ 太陽系外惑星(第二の地球)の誕生と太陽系内惑星環境変動の解明

宇宙、地球・惑星、気象、分子化学分野の計算科学と宇宙観測・実験が連携する学際的な取り組みにより、観測・実験と直接比較可能な大規模計算を実現し、地球型惑星の起源、太陽系環境、星間分子化学を探究する。

⑬ 思考を実現する神経回路機構の解明と人工知能への応用

革新技术による脳科学の大量のデータを融合した大規模多階層モデルを構築し、ポスト「京」での大規模シミュレーションにより人間の精神活動を脳の物理的実体にねざして再現し、人工知能への応用をはかる。

ポスト「京」重点課題に関するアプリケーション開発・研究開発推進体制のイメージ (第3章)



「京」の先に見えるものは

■ポスト「京」で重点的に取り組むべき社会的・科学的課題についての検討委員会

■検討メンバー

安西 祐一
郎 日本学術振興会理事長

内山田 竹
志 スーパーコンピューティング技術産業応用協議
会
運営委員長／トヨタ自動車代表取締役会長

大隅 典子 東北大学大学院医学系研究科教授

小宮山 宏 三菱総合研究所理事長

◎ 城山 英明 東京大学公共政策大学院院長

住 明正 国立環境研究所理事長

関口和一 日本経済新聞社論説委員兼産業部編集委員

瀧澤 美奈子 科学ジャーナリスト

土屋 裕弘 田辺三菱製薬代表取締役会長

○ 土居 範久 慶應義塾大学名誉教授

土井 美和子 独立行政法人情報通信研究機構監事

林 春男 京都大学防災研究所巨大災害研究センター教授

平尾 公彦 理化学研究所計算科学研究機構長

(◎ : 主査、○ : 主査代理) (合計13名) (50音順)

「京」の先に見えるものは

■ 公募内容

- 代表機関としての全体提案
- 分担機関としての部分提案

■ 公募に係る審査

- 代表機関、サブ課題及び推進体制の大枠、部分提案への対応決定

■ スケジュール

- 平成26年秋頃 : 公募
- 平成26年秋～冬頃 : 公募に係る審査および代表機関等の決定
- 平成26年秋～冬頃 : 事業開始
- 平成27年春～夏頃 : 開発計画の評価
- 平成27年夏頃 : アプリケーション開発着手



HPCI戦略分野1
@HPCI_Senryaku1

HPCI戦略分野1は、「京」を中心としたスパコンリソースのインフラを利用した生命科学分野の研究を行っているプログラムです。理化学研究所HPCI計算生命科学推進プログラムを代表機関として、全国の大学や研究機関と研究を推進しており、こちらはその公式アカウントです。研究成果や「京」、計算生命科学の情報を発信していきます。

ツイート 161 | 画像/動画 9 | フォロー 15 | フォロワー 74 | その他

プロフィールを編集

ツイート ツイートと返信

HPCI戦略分野1 @HPCI_Senryaku1 · 9月27日
9/28（日）、AICS主催『スパコンを知る集い in 大阪～「京」そしてその先へ～』にて、分野1の課題1代表でもある杉田有治が講演「スパコンで化学する～化学反応から細胞内のタンパク質の動きまで～」中高生の皆様どうぞ！ aics.riken.jp/shirutsudo/me...

HPCI戦略分野1 @HPCI_Senryaku1 · 8月26日
9/6(土)8時～10時「理研 横浜地区一般公開」の全イベントプログラム公開中。当日のパンフレット(PDF)もダウンロードできます。分野1は今年も出展！皆様のご来場をお待ちしております。 yokohama.riken.jp/openday2014/

HPCI戦略分野1 @HPCI_Senryaku1 · 8月27日
日本学術会議講主催の学術フォーラム「生命情報ビッグデータ時代における新しい生命科学」(8/29東京)にて、当プログラム副統括 木寺詔紀が講演「スパコンを用いたビッグデータ解析の生命科学における役割」。事前の申し込み不要。生着順。 sci.go.jp/ja/event/inf2014/

HPCI戦略分野1 @HPCI_Senryaku1 · 8月25日
九州大学、分野1共同主催でシンポジウム『新生命科学分野開拓とスーパーコンピュータ「京」』(9/16九州大学医学部百年講堂)を開催します。入場無料。事前の申し込みが必要です。詳細はこちら。 agr.kyushu-u.ac.jp/sympk/

戦略分野1

で検索!

@HPCI_Senryaku1



HPCI 戦略分野 1

URL または検索語句を入力します

Google

友達を見つける

Erika ホーム 友達を検索

Facebookページを作成

最近
2014年
2013年
2012年
開始日

戦略分野1

HPCI 戦略分野 1
団体

「いいね！」しています フォロー中 メッセージ

タイムライン 基本データ **写真** いいね! Twitter

いいね! 47件

友達にHPCI 戦略分野 1を紹介しましょう

いいね!

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」
<http://www.scls.niken.jp/>
編集を提案

その先へ〜
aics.niken.jp
スーパーコンピュータ（スパコン）は、多くの方々にとって遠く存在が忘れられがちです。毎週、毎日に電子版、

いいね! コメントする @HPCI_Senryaku1 on Twitter シェア

で検索!

いいねボタンを押して下さい!

