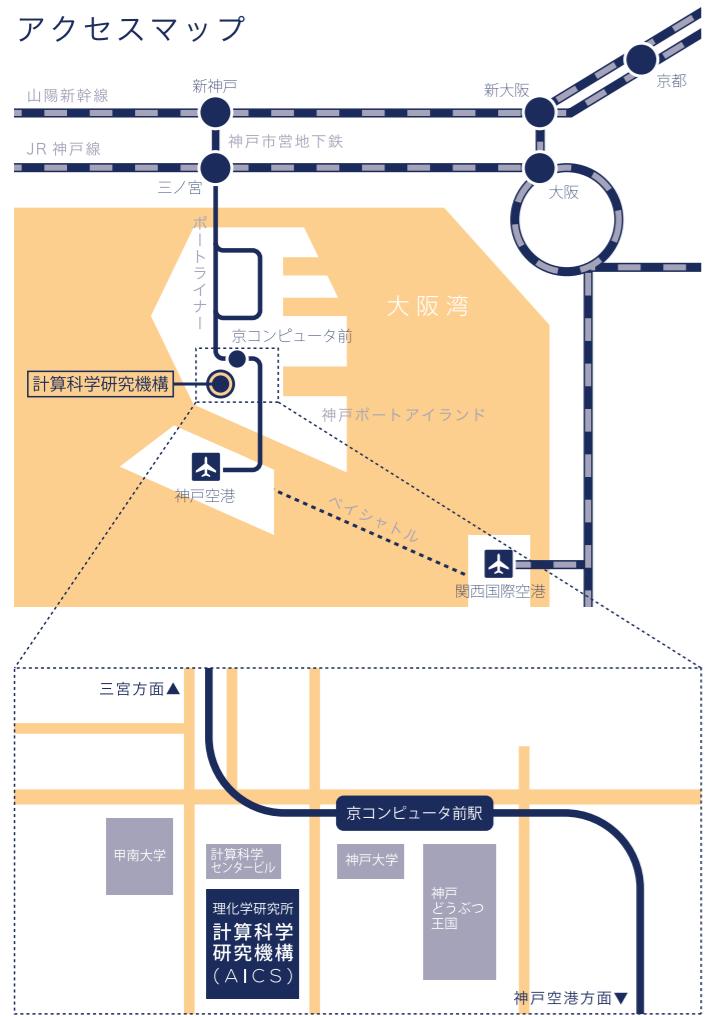
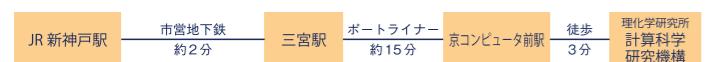




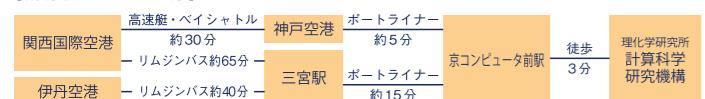
アクセスマップ



【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

理化学研究所計算科学研究機構内

TEL: 078-940-5692 FAX: 078-304-8785

E-mail: senryakul@riken.jp

HPCI戦略プログラム 分野1

予測する学・ 生命療基盤 ・ 創薬

代表機関 独立行政法人理化学研究所

生命科学のパラダイムシフトを 引き起こす計算生命科学

20世紀後半の生命科学は「生命現象を分子のレベルまで掘り下げて解析することにより、はじめて、生命体の機能をあますところなく理解することができる」とのパラダイムのもと、進められてきました。

特にDNAシークエンサー、質量分析器、一分子計測などの計測技術の開発は目覚ましく、生命体の分子レベルでの理解は急速に深化してきました。しかし、生命体は分子レベルから個体レベルに至る階層性を有しており、かつ個々の階層はヘテロ（異質）な特徴とダイナミックな特徴を合わせています。このような複雑で動的な多階層システムとしての生命体の理解には新たなパラダイム・システムが今、求められているのです。

計算生命科学は、スーパーコンピュータを積極的に活用することにより、革新的な計測技術から生み出されるヘテロなビッグ・データを効率的に解析し、動的な多階層システムを整合的につなぎ、生命システムを総体として理解することを目的としています。この結果、生命科学ははじめて予測可能性と制御可能性を獲得することが出来るのです。

複雑な生命現象の
理解と予測に向けて
計算生命科学の明日を拓く

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」

「予測する生命科学・医療および創薬基盤」は、生命科学の分野において社会的・学術的大きなブレークスルーが期待されており、理化学研究所HPCI計算生命科学推進プログラムが代表機関となり、全国の大学、研究機関が参画し共同して研究を行なっています。研究課題をそれぞれ、「細胞内分子ダイナミクスのシミュレーション」、「創薬応用シミュレーション」、「予測医療に向けた階層統合シミュレーション」そして「大規模生命データ解析」の4つを設定し、ゲノム・タンパク質から細胞・臓器・全身にわたる生命現象を統合的に理解する事により、疾患メカニズムの解明と予測を行います。医療や創薬プロセスの高度化への寄与も期待されます。

スパコンで生命現象を理解する

私たちの体は、臓器、組織、細胞、分子という階層からなる複雑な「システム」と見なすことができます。生命現象はどれも、このシステムが働くことで起こります。そこで、SCLS*では、このシステムをスパコンの中で再現し、働かせることによって研究を進めています。これによって、生命現象を理解し、予測するとともに、新しい薬や病気のよりよい治療法につなげることが目標です。

*SCLS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」の英語表記である「Supercomputational Life Science」から来ています。読み方は“エスクルス”です。



生物の階層システム

私たちの体は約60兆個の細胞からなるが、その細胞の一つひとつはタンパク質やDNAなどの分子からできている。細胞が集まって機能をもった組織となり、さらに組織が集まって臓器となる。そして、臓器が機能的につながって私たちの体をつくりあげている。

SCLSの研究開発体制

統括責任者 理化学研究所 柳田敏雄

副プログラムディレクター 理化学研究所・横浜市立大学 木寺詔紀

理化学研究所 江口至洋

細胞内分子ダイナミクスのシミュレーション (代表:理化学研究所 杉田有治)

たくさんの分子で混み合っている細胞の中で、一つひとつの分子がどのような働きをするかを調べています。生命現象の解明はもちろん、薬の開発にも役立つ研究です。

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)

分子レベルから細胞、組織、臓器という階層を統合したシミュレーション研究を進めています。心臓や血管の病気、神経の病気の治療法や薬の開発に役立ちます。

創薬応用シミュレーション (代表:東京大学 藤谷秀章)

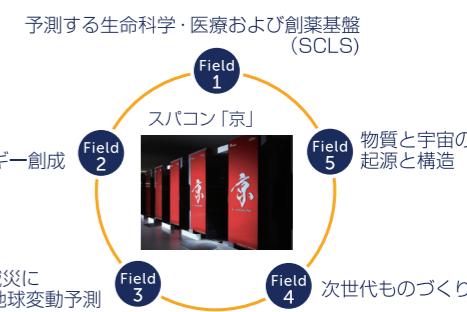
薬の候補となる分子を効率よく探すため、薬が作用する相手のタンパク質と候補分子の結合のしかたや結合の強さを、計算によって精確に明らかにします。

大規模生命データ解析 (代表:東京大学 宮野悟)

解析技術の進歩によって得られるようになったゲノムのビッグデータから、生命現象や病気の理解につながる情報を引き出すための研究を行い、個別化医療を支えます。

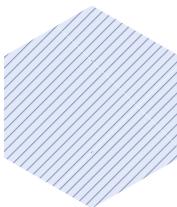
HPCI戦略プログラムとは？

「京」を中心に、大学などのスパコンをネットワークでつなぎだHPCI（ハイパフォーマンス・コンピューティング・インフラ）を最大限に活用して、世界最高水準の研究成果の創出をめざす文部科学省のプログラムです。重点的に研究開発を行う5つの分野が定められており、SCLSは生命科学分野の研究を実施しています。



統括責任者あいさつ

Message from the Program Director



今日生命科学は飛躍的に発展しております。これは遺伝子工学を使った分子生物学の進展によるところが大きい。

しかし、これらの研究は遺伝子やそれがコードする蛋白質の性質や役割などを調べる要素研究が中心でした。

遺伝子や蛋白質の異常を調べれば病気の仕組みや治療法が解ると期待されてきましたが、それは稀な例で、一般的には事態はもっと複雑であることが解ってきました。

人間をはじめとする生物では、遺伝情報に従って蛋白質分子がつくられ、分子の階層の働きが組み合わせり細胞につながり、多種多様な細胞の働きが器官の働きにつながっていきます。すなわち、生命活動は複雑な階層構造を持つダイナミックなシステムで営まれています。生命機能、そしてその異常（病気）を理解するためには、従来の研究に加え、これからは要素を統合する、すなわち、要素が構成する複雑な階層をもつシステムを研究することが重要です。

現在、分析計測技術が飛躍的に進歩しており、分子、細胞、器官、そして個体に至る各階層の詳細なデータが得られるようになってきています。

しかし、問題はこれらの階層を如何につなぐかということです。例えば、細胞の場合、そこで起こっている多種多様な分子反応の組合せの数は膨大になり、この膨大な数の分子反応の組合せを如何に統合して、細胞の状態を捉え、その運命を予測し操作するかという問題を解くということです。

すなわち、細胞や個体の異常（病気）は遺伝子や分子の異常と1：1でつながっているではなく、多くの要因が階層間で複雑に絡み合って起こります。

我々はこの難解な問題に挑戦する強力なツールを手に入れました。一秒間に10の16乗回の四則計算を行うスーパーコンピュータ「京」です。

各階層で得られた膨大なデータを基に計算機シミュレーションで分子から細胞、個体まで階層をつなぐことを可能にすると期待されます。しかし、実験データを計算すれば階層がつながるというほど単純な問題ではありません。細胞の場合であれば、単純な分子反応の組合せでは組合せ爆発がおこり、上の階層の細胞の記述は不可能です。そこには、自由度の何桁にも及ぶ劇的なリダクションの仕組みがあるはずで、それを探る実験的、理論的研究との密な融合が必須です。

HPCI戦略プログラム 分野1（SCLS）の活動は、生命科学にとっても計算科学的に見ても新たなチャレンジになります。この新たなクライテリアをみなさんと一緒に切り開いていきたいと考えております。



統括責任者
理化学研究所

柳田 敏雄

Program Director: Toshio Yanagida

実施体制

Implementation Structure

研究開発

Research and Development

▶ Page 5,6,7,8

細胞内分子ダイナミクスのシミュレーション
Simulations of biomolecules under cellular environments

創薬応用シミュレーション
Simulation applicable to drug design

予測医療に向けた階層統合シミュレーション
Hierarchical integrated simulation for predictive medicine

大規模生命データ解析
Large-scale analysis of life data



副プログラムディレクター
木寺詔紀
理化学研究所・横浜市立大学

Deputy Program Director:
Akinori Kidera

SCLSの研究開発部分の統括をする立場にあります。SCLSにおいて新たに作られたといえる「スーパーコンピュータを用いた計算生命科学」という学問領域における進むべき方向についての認識に基づいて、グループリーダーと議論を繰り返しながら、プログラムを進めています。このプログラムの終了までに成果を上げるということに止まらず、計算生命科学における研究の基盤を確立することをめざして活動をしています。

計算科学技術推進体制の構築

Establishment of the Research System for Computational Science

▶ Page 9,10

高度化推進グループ
High Performance Computing Development Group

企画調整グループ
Planning and Coordination Group



副プログラムディレクター
江口至洋
理化学研究所

Deputy Program Director:
Yukihiro Eguchi

スーパーコンピュータ「京」の運営主体である計算科学研究機構や他の戦略分野等との協力体制のもと計算科学技術推進体制の整備を行っています。SCLSに関連する多くの研究者や研究開発担当者と連絡を密にとりながら、その研究者が「京」を中心とするHPCI環境を効果的に利用するためのソフトウェア環境および実行環境の整備を行っています。また、SCLSの研究開発と一体となって、人材育成、人的ネットワークの形成、研究成果の普及、分野を超えた取り組みの推進を行っています。



SCLS
SUPERCOMPUTATIONAL LIFE SCIENCE

Theme 1 細胞内分子ダイナミクスの シミュレーション

—細胞環境における分子および細胞スケールシミュレーション—

Simulations of biomolecules under cellular environments

-Simulations of molecular crowding under cellular environments-



課題1代表

杉田有治

理化学研究所

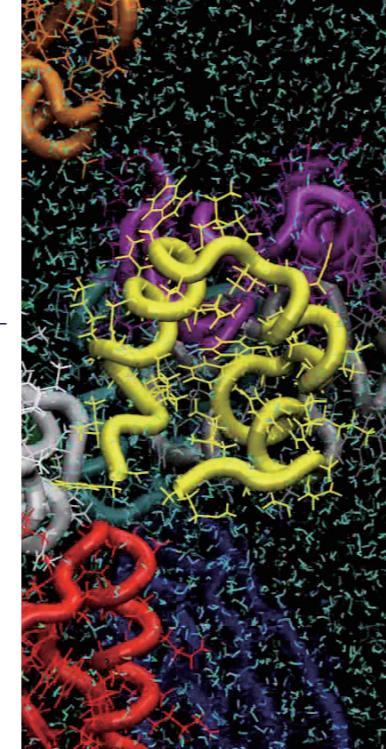
Group Leader: Yuji Sugita
(Theoretical Molecular Science Laboratory, RIKEN)



K. Takahashi S. Takada S. Hayashi H. Kono M. Ikeguchi

分子シミュレーションの計算手法の開発と応用研究に取り組み、これまで到達することができなかつた細胞スケールの生命現象を解明し、将来的な医療・創薬のデザインの実現を目指します。

細胞の中の多くは水ですが、タンパク質なども30%以上を占め、ひしめきあっています。細胞環境下でのタンパク質の長時間の振る舞いを計算し、細胞機能との関係を明らかにしていきます。病気の多くは細胞内タンパク質の機能不全ともいえる現象がきっかけで起こり、最近の実験の多くは細胞内でのタンパク質の振る舞いがあるがままに研究しようとしています。一方、これまでの小さな計算機では到底そのような条件での計算はできません。単純化し、溶液の中で孤立した1つのタンパク質の計算をせざるをえませんでした。私たちは、スーパーコンピュータ「京」の優れた計算能力によって、これまでにないスケールで細胞環境に近い条件下でタンパク質の働く姿をとらえたいと考えています。



細胞内分子混雑状態のシミュレーションの一場面

1 細胞内環境を考慮した信号伝達経路のモデリング Cellular crowding environment and its effect

細胞内分子混雑 Molecular crowding in cell

超並列ソフトウェア GENESIS を用いて、「京」を用いて初めて可能となった一千万から一億原子を含む超大規模分子動力学計算を行い、細胞内環境、特に細胞質内分子混雑環境がタンパク質の安定性、分子運動、機能に及ぼす影響を調べています。

Yuji Sugita (RIKEN) **杉田有治**
理化学研究所 杉田理論分子科学研究室

リン酸化複合体 Phosphorylated complex

粗視化シミュレータ CafeMol を用いて、細胞内環境における信号伝達分子リン酸化酵素複合体 MEK-ERK の動的な相互作用、複合体構造について、MEK の N 末端ループを介した相互作用などの動態に着目しつつモデリングを行なっています。

Shoji Takada (Kyoto Univ.) **高田彰二**
京都大学大学院 理学研究科

2 核内混み合い環境でのヌクレオソーム、クロマチンの機能 Multi-scale modeling of Chromatin and Nucleosome

ヌクレオソーム Nucleosome

ヒトなど真核生物のゲノムはヌクレオソーム（ヒストンタンパク質とDNAの複合体）の形で収納されています。私たちは、ヒストンの種類や化学修飾がその収納状態をどのように変化させるか調べることによって、ヌクレオソームの分子機能を明らかにする研究を行っています。

Hidetoshi Kono (JAERI) **河野秀俊**
日本原子力研究開発機構

クロマチン Chromatin

粗視化シミュレータ CafeMol を用いて、核内環境におけるモデルクロマチンであるポリヌクレオソームの構造と動態を解析しています。また、混み合ったクロマチン構造の中で転写因子がどのように遺伝情報を探索するかの動態を解析しています。

Shoji Takada (Kyoto Univ.) **高田彰二**
京都大学大学院 理学研究科

2 達経路のモデリング on signal transduction pathway

信号伝達経路全体モデリング Modeling of signal transduction pathway

細胞内分子の混雑や局在などを陽に表現した精密なシミュレーションのためのソフトウェア pSpatioocyte を開発し、同じ種類の細胞が同一の刺激に対して示す応答がばらつく現象（応答不均一性）について研究しています。

Koichi Takahashi (RIKEN) **高橋恒一**
理化学研究所 生命システム研究センター

反応自由エネルギー解析 Analysis of reaction free energy

細胞内信号伝達は、複数のリン酸化酵素のリン酸化反応により行われます。我々は、ハイブリッド QM/MM 法を用いて、細胞環境におけるリン酸化酵素の化学反応活性の分子機構を明らかにし、細胞内信号伝達の理解と制御に向けた分子論的基盤を構築することを目指しています。

Shigehiko Hayashi (Kyoto Univ.) **林重彦**
京都大学大学院 理学研究科

3 発現機構

核内 DNA 結合タンパク質 DNA-binding proteins in nucleus

分子動力学シミュレーションを用いて、核内 DNA 結合タンパク質の機能ダイナミクスの研究を行っています。特に、分子動力学 (MD) と X 線小角散乱実験 (SAXS) を連携させる MD-SAXS 法を開発し、実験系と密に連携しつつ、研究を行っています。

Mitsunori Ikeguchi (Yokohama City Univ.) **池口満徳**
横浜市立大学 生命医科学研究科

Theme 2 創薬応用シミュレーション

—革新的な薬の活性予測シミュレーション—

Simulation applicable to drug design

-Simulation to predict activities of innovative drugs-



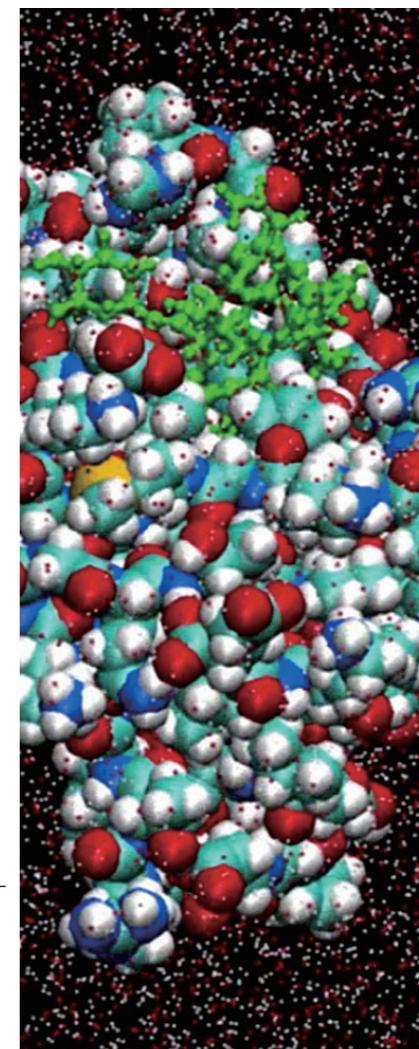
課題2代表

藤谷秀章

東京大学 先端科学技術研究センター

Group Leader: Hideaki Fujitani
(Research Center for Advanced Science and Technology, The Univ. of Tokyo)

多くの医薬品はタンパク質を標的としており、より効果的な薬を見つけ出すためには、生体内の標的タンパク質と強く相互作用する化合物（リガンド）を探し出す必要があります。私たちは、スーパーコンピュータ「京」を用いた分子動力学計算により、標的タンパク質と薬の候補である化合物を含む系のシミュレーションを行っています。タンパク質と化合物間の結合の強さを精密にそして高速に計算し、標的タンパク質だけに強く作用する新しい化合物を設計することにより、短時間で効率よく低分子医薬品を開発することをめざしています。



分子動力学シミュレーションの一場面

Theme 3 予測医療に向けた 階層統合シミュレーション

—循環器系および筋骨格系・神経系の階層統合シミュレーション—

Hierarchical integrated simulation for predictive medicine

-Simulation in the circulatory organ system and the musculoskeletal / cerebral nervous systems-



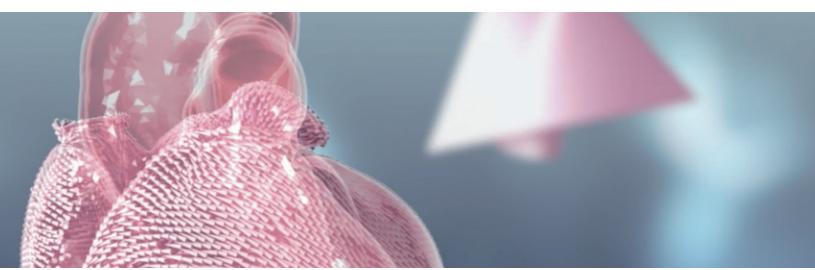
課題3代表

高木 周

東京大学大学院 工学系研究科



Group Leader: Shu Takagi
(School of Engineering, The Univ. of Tokyo)



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」の一場面

1 心筋梗塞・脳梗塞のマルチスケールシミュレーション

Multi-scale simulation of myocardial infarction and cerebral infarction

血栓症のモデリング

Modeling of thrombosis

血小板細胞は血管壁の恒常性維持に重要な役割を演じています。血管壁損傷部位の血小板細胞集積には血管壁のvon Willebrand因子と血小板細胞上のGPIbaが特異な役割を演じます。両分子の構造から接着力をシミュレーションしています。血小板細胞活性化シミュレーションとの連成を目指します。

Shinya Goto (Tokai Univ.) 後藤信哉
東海大学 医学部内科学系

マルチスケール血栓シミュレータ

Multi-scale thrombosis simulator

心筋梗塞の最終段階である血栓症を再現するため、多数の赤血球や血小板の変形流動構造に関する血流解析を実施しながら、血小板の動脈硬化層への粘着から始まる血栓の生成・成長プロセスを再現し、抗血小板薬のモデリングなどを行っています。

Shu Takagi (The Univ. of Tokyo) 高木 周
東京大学大学院 工学系研究科

3

神経疾患による運動機能障害 全身筋骨格-神経系統合シミュレーション

Integrated simulation of the whole-body
for clarification of motor dysfunction due to
neurological diseases

全身筋骨格神経系シミュレータ

Whole-body musculoskeletal simulator

パーキンソン病患者における運動症状の臨床計測データ解析に基づき、健常者の運動機能と患者における運動症状の発現メカニズムを数理モデル化し、「京」を用いた大規模かつ詳細な神経・筋・骨格系モデルシミュレーションの定量的基盤を提供することを目指しています。

Yoshihiko Nakamura (The Univ. of Tokyo) 中村仁彦
東京大学大学院 情報理工学系研究科

解明のための ユレーショント

musculoskeletal and nervous system
neurological diseases

パーキンソン病のモデリング

Modeling of Parkinson's disease

通常の環境では脂肪を貯蔵する脂肪細胞が、寒冷刺激により熱を産生する褐色様脂肪細胞に転換する過程に着目して、そこで働く遺伝子ネットワークを「京」を用いて網羅的に解析することで、肥満は正の新たな戦略につながる、熱産生能の制御メカニズムを明らかにすることを目指します。

Taishin Nomura (Osaka Univ.) 野村泰伸
大阪大学大学院 基礎工学研究科

4 大脳基底核-視床-大脳皮質の 神経回路モデル

Neural circuit model of the basal ganglia,
the thalamus, and the cerebral cortex

大脳基底核と視床、大脳皮質をつなぐ神経回路は行動制御と学習に重要な役割を果たし、その病変は様々な精神神経疾患を引き起します。我々は解剖学、生理学の詳細なデータをもとに、この回路の健常時の機能とパーキンソン病での振戦などの病態を再現するモデルを構築しています。

Kenji Doya (OIST) 銀谷賢治
沖縄科学技術大学院大学 神経計算ユニット

5 筋織維からのマルチスケール 骨格筋シミュレータ

Multi-scale musculoskeletal-system simulator
constructed from muscle fiber model

パーキンソン病による手足の震え（振戦）や筋肉の強張り（固縮）を再現するため、筋織維の集合体としての骨格筋の動きを再現するシミュレータを開発しています。脳からのシグナルが脊髄を介して運動ニューロンに伝えられ、その結果、筋肉全体が収縮する様子を再現します。

Shu Takagi (The Univ. of Tokyo) 高木 周
東京大学大学院 工学系研究科

Theme 4 大規模生命データ解析

—生命プログラムとその多様性の理解—

Large-scale analysis of life data

-Understanding the life program and its diversity-

がんとメタボは国民の健康の最大の関心事です。

ゲノム情報をはじめとする、大規模な生命データを高速に解析し、がんなどの病気の個別化医療の進展に寄与します。

個別化医療とは、個人それぞれのゲノム情報や生活習慣データなどを活用し、個々人に最適な医療・健康管理を行うことです。患者さんにとって安心安全な無駄のない医療が受けられるようになると期待されています。

特に、がんは、ゲノムに蓄積した変異により、無限に増殖する能力を得て、不死となり、転移し、抗がん剤に対しても薬剤耐性を獲得する、たいへん複雑なシステム異常の病気です。我が国では、国民の半分が人生のどこかでがんに直面しています。現在、世界中の研究者が協力して、大規模にがんのゲノムや遺伝子発現異常の解析をしていますが、その膨大な量のデータ解析がボトルネックになっています。「京」はそのデータ解析に威力を發揮し、がんのシステム異常を網羅的に暴きだすこと、最適ながんの予防、診断、治療法の開発を飛躍的に加速することを目指しています。



課題4代表

宮野 悟

東京大学 医科学研究所

Group Leader:
Satoru Miyano
(The Institute of Medical Science,
The Univ. of Tokyo)



H. Matsuda Y. Akiyama

1 大規模データ解析によるがんのシステム異常の網羅的解析とその応用

Exhaustive large-scale data analysis of abnormalities caused by cancer and its application

数万のがん検体・細胞株のゲノムやトランск립トームデータをゲノム変異から遺伝子ネットワークまで大規模に「京」で解析し、がんのシステム異常の多様性を網羅的に明らかにする。同時に、がんが多様性を生み出す数理原理を探求し、個々人のがんの治療戦略に貢献します。

Satoru Miyano (The Univ. of Tokyo) 宮野 悟
東京大学 医科学研究所

2 大規模生体分子ネットワーク解析による 脂肪細胞組織の刺激応答の網羅的解析とその応用

Exhaustive analysis of stimulus-response of adipose tissue by large-scale biomolecular network analysis and its application

通常の環境では脂肪を貯蔵する脂肪細胞が、寒冷刺激により熱を産生する褐色様脂肪細胞に転換する過程に着目して、そこで働く遺伝子ネットワークを「京」を用いて網羅的に解析することで、肥満は正の新たな戦略につながる、熱産生能の制御メカニズムを明らかにすることを目指します。

Hideo Matsuda (Osaka Univ.) 松田秀雄
大阪大学大学院 情報科学研究所

3 次世代シーケンサーデータ解析のための情報処理システムの開発

Development of information-processing system for next generation sequencer data analysis

ヒトの腸内・口腔・皮膚等の細菌叢中のDNAを系統的に機能解析することで、様々な状況における細菌叢と人体等の相互作用の理解を実現します。開発したGHOST-MPソフトウェアは、ハイブリッド並列化と負荷分散機構により、高感度な相同性検索を超高速に実行可能です。

Yutaka Akiyama (Tokyo Institute of Technology) 秋山 泰
東京工業大学 大学院情報理工学研究科

高度化推進グループ High Performance Computing Development Group

1 計算機資源の効率的マネジメント Management of computational resources

研究ポテンシャルを最大限に発揮するため、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環境を効率的に利用するために必要とされる計算機環境を整備・運用しています。その一環として、大学、公的機関、民間の計算生命科学研究者、技術者がHPCIを積極的に活用することを支援するために、「京」と互換性の高い「SCLS計算機システム」を運用しています。また、「SCLS計算機システム」にHPCIで使用可能なソフトウェアの実行環境を整備し、利用支援を行っています。

企画調整グループ Planning and Coordination Group

3 人材育成 Human resource development

「高度な計算科学技術環境を使いこなせる人材の創出」および「最先端コンピューティング研究教育拠点の形成」のため、大阪大学や産業技術総合研究所、東京大学等と連携し、学生、大学院生、社会人を対象とした人材育成プログラムを推進し、将来にわたり継続していく仕組みを構築しています。若い段階から、生命科学分野における高度な計算機環境の重要性を理解してもらうため、高校生などを対象に計算生命科学についての講義や研究紹介を行っています。また、全国の大学等研究機関で実施されている生命科学を専攻する大学生や大学院生を対象にした講義等に協力し、計算生命科学への理解を深めてもらいます。

2 戦略分野における次世代スパコン利用に関する研究支援協力 K computer-use support in SCLS

「京」の利用を効率的に進めため、高度化推進とユーザー支援を行っています。「京」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り、計算科学研究機構や他の戦略分野との連携は必須です。そのため、計算科学研究機構を本拠地とし、研究支援要員の配備・活用を行っています。また、高度なHPCI環境を使いこなしうる人材（開発者および利用者）を創出する一環として、計算科学研究機構、他の戦略分野、「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) 等とも連携し、並列化プログラミングやソフトウェア利用法について講習会やセミナーを開催しています。

4 人的ネットワークの形成 Establishment of human networks

広く生命科学（分子生物学、細胞生物学、生物物理学、薬学、医学、バイオインフォマティクス等）のコミュニティに、HPCI環境での計算生命科学を理解してもらうため、国内外の各種関連学会でシンポジウムやポスター発表を行っています。平成24年度にSCLSに導入した「京」と互換性の高いSCLS計算機システムの利用公募を、全国の生命科学研究者、技術者を対象に実施し、HPCIの活用を促進しています。また、利用者を対象とした講習会も行っています。

5 研究成果の普及 Dissemination of research outcomes

国内外の研究者と産業界や一般の皆様に対し、SCLSの研究開発への理解を深めてもらうためにホームページ、研究者向けと一般向けの紹介冊子、ニュースレター（BioSupercomputing Newsletter）にて研究成果の紹介および情報の発信を行っています。また、学会におけるシンポジウムの開催や発表・展示・セミナー活動を通して、研究開発の成果などの情報発信を行っています。特にホームページでは、次世代生命体統合シミュレーションソフトウェアの一部をSCLS計算機システムに移植したソフトウェアとSCLSのソフトウェアを、S-cruiseソフトウェア情報※で公開し生命科学の研究者・技術者への活用を図っていきます。さらに、製薬企業の研究者、技術者および医療従事者を対象としたシンポジウム、または「京」を中心とするHPCIの紹介と利用ニーズを高めることを目的とした会合を実施しています。製薬企業や医療機関との連携を進め、研究成果の産業化、利活用の支援を引き続き実施しています。

S-cruiseソフトウェア情報：<http://www.scls.riken.jp/scruise/>



6 分野を超えた取組の推進 Interdisciplinary projects

高度な計算科学技術環境を使いこなせる人材を育成するため、計算科学研究機構や他の戦略分野と連携し、並列化プログラミングやソフトウェアの利用法についての講習会等を開催しています。また、他の戦略分野や計算科学研究機構との連携のもと、相互の技術交流を図り、研究成果の普及についても促進を行っています。