

○計算科学技術推進体制の構築

実施計画に基づき、戦略機関、協力機関、他の戦略分野、計算科学研究機構等との協力体制の整備を進め、業務を円滑に実施する。具体的には、戦略分野1に関連する多くの研究者が「京」コンピュータを中核とするHPCI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う。事業実施にあたっては、研究開発担当者との連携を密に継続して進める。また、他の戦略分野および計算科学研究機構、HPCIコンソーシアムとの連携を行いつつ、戦略分野1の研究開発と一体となったHPCIの利用普及、情報発信と理解増進、および研究教育の人材育成を行う。

I 計算機資源の効率的マネジメント

A 実施計画

戦略分野1の研究者がHPCIを最大限活用し画期的な成果を創出するために、計算機環境（ソフトウェア環境および実行環境等）を整備、運用するとともに、高度化推進支援を行う。また、広く生命科学研究者（医療、製薬関連企業等を含む）がHPCI、および戦略分野1などの計算生命科学研究成果を活用していくことを支援するため、HPCIと互換性のある計算機環境を引き続き整備、運用していく。

B 実施内容(成果)

I-1 「京」の効率的・効果的な資源配分

(1)効果的なHPCI計算資源環境利用のためマネジメント体制

統括責任者、副統括責任者、グループリーダー、グループディレクターを構成メンバーとした運営委員会を設置し、「京」の計算資源の効果的な配分などの戦略立案を月次で行ってきた。また、「京」に関する技術上、運用上の情報をAICS、RISTを通じて研究開発者に提供するとともに、各アプリケーションソフトウェアの高度化等の支援を実施してきた。

資源配分と調整の主な流れ

- ・年度毎：研究計画に基づく、計算資源配分と重点課題の設定。
=>分野別作業部会による承認
- ・月次：個人別、アプリケーション別利用状況の研究分担者への送付。
運営委員会での利用状況の確認と調整。
- ・8月、1月に再配分を実施。

(2)「京」計算資源配分

上記、マネジメントに基づき実施された「京」の資源配分は以下の通りである。分野1全体の研究計画に基づき、年度毎に重点化を行うとともに、月次での進捗管理により、適切な再配分を行った。平成27年度は、課題1と課題3を重点課題として設定し、資源配分を行った。

表 4 年度別「京」計算資源配分

(単位:ノード時間積)

	H24～H27年度「京」計算資源配分				
	H24	H25	H26	H27	累計
課題 1	9,125,652	13,329,085	21,162,261 ^(重点)	18,000,000 ^(重点)	61,616,998
課題 2	10,226,400	10,237,440	24,601,873 ^(重点)	14,000,000	59,065,713
課題 3	26,362,000	20,939,748 ^(重点)	10,340,957	16,100,000 ^(重点)	73,742,705
課題 4	9,894,795	18,941,000 ^(重点)	8,940,957	9,000,000	46,776,752
体制構築	300,000	600,000	440,040	605,732	1,945,772
分野1 計	55,908,847	64,047,273	65,486,088	57,705,732	243,147,940

(3)「京」利用状況

供用開始(平成24年10月)から平成27年度までの「京」利用状況は以下の通りである。一般的に平均以上の利用率を達成し、全期間を通じて利用率は82.9%、平成27年度は88.8%であった。

表5 年度別「京」計算利用状況

(単位:ノード時間積)					
	H24～H27年度「京」利用状況				
	H24	H25	H26	H27	累計
課題1	4,254,409	9,513,969	18,463,066	15,677,091	47,908,535
課題2	10,126,832	10,340,983	24,597,421	14,005,522	59,070,758
課題3	494,312	9,595,080	7,867,442	12,501,885	30,458,719
課題4	7,947,148	16,436,024	8,966,124	8,564,216	41,913,512
体制構築	57,164	302,848	427,300	497,267	1,284,579
分野1 計	22,879,865	46,188,904	60,321,353	51,245,981	180,636,103
利用率	74.5%	72.1%	92.1%	88.8%	82.9%

全期間を通じて計算資源を有効に活用し、「京」を最大限に活用した成果につなげることができた。

I-2 効率的に HPCI を活用するための計算機環境の整備

(1) SCLS 計算機システム(「京」互換機システム)の整備・運用

広く生命科学研究者・技術者が HPCI を積極的に活用していくことを支援するため、SCLS 計算機システム(「京」互換機)を整備し、2013 年 3 月より運用を開始し、2016 年 2 月まで運用を行った。



図 52 SCLS 計算機システム

表 6 SCLS 計算機システムの主な仕様

		SCLS 計算機システム	京コンピュータ
CPU	名前	SPARC64 IXfx	SPARC64 VIIIfx
	理論性能	211 GFLOPS (1.65 GHz)	128 GFLOPS (2GHz)
	コア数	16	8
システム全体	ノード数	48	88,128
	理論性能	10.1 TFLOPS	11.28 PFLOPS
	ノード当たりのメモリ	32GB (全体 1.5TB)	16GB (全体 1.5PB)

II 「京」および HPCI 利用に際しての研究支援

A 実施計画

戦略分野 1 の研究者が HPCI を最大限活用し画期的な成果を創出するために、計算機環境（ソフトウェア環境および実行環境等）を整備、運用するとともに、高度化推進支援を行う。また、広く生命科学研究者（医療、製薬関連企業等を含む）が HPCI、および戦略分野 1 などの計算生命科学研究成果を活用していくことを支援するため、HPCI と互換性のある計算機環境を引き続き整備、運用していく。

B 実施内容(成果)

(1)「京」の効果的な利用に向けて

分野の研究者が「京」を効果的に利用し画期的な成果を創出するために、計算科学研究機構に高度化推進グループが常駐し、「京」を対象とする高度化支援、利用者育成支援等の技術的な支援を行った。計算科学研究機構や RIST が開催する「京」運用懇談会や「京」ユーザーブリーフィング等の会合に参加し、「京」を利用するための高度な並列プログラミング技法や使用についてのノウハウを得るとともに、分野の研究者からの運用に関する要望を伝えるなどの積極的な意見交換を行った。平成27年度は特に MP-CAFEE(および GROMACS)、BENIGN、SIGN-BN の利用に関する技術支援を行った。

(2)「京」の性能を最大限に引き出すためのソフトウェアの高度化

分野の研究者が開発または使用するソフトウェアについて、「京」の性能を最大限に引き出して高い処理性能を発揮するように、「京」ヘルプデスクと連携し高度化の支援を行った。

表 7 高度化支援を行ったソフトウェア

ソフトウェア名	詳細	支援内容
GENESIS [開発ソフトウェア]	分子細胞シミュレータ	性能向上支援
pSpatiocyte [開発ソフトウェア]	分子粒度格子拡散反応系細胞シミュレーション	性能向上支援
MARBLE [開発ソフトウェア]	全原子分子動力学計算	性能向上支援
SCUBA [開発ソフトウェア]	Simulation Codes of hUge Biomolecule Assembly	性能向上支援
μ lib [開発ソフトウェア]	マルチコピー・マルチスケール分子シミュレーション	性能向上支援
MP-CAFEE [開発ソフトウェア]	Massively Parallel Computation of Absolute binding Free Energy	実行支援
BENIGN [開発ソフトウェア]	Biologically Extensible Network Inference Software for Gene Expression Analysis	性能向上支援

GHOST-MP [開発ソフトウェア]	GHOST (Genome-wide Homology Search Tool) System for Massively Parallel Computers	性能向上支援
AMBER	分子動力学シミュレーション	実行支援
R	統計解析	実行支援

(3) HPCI の積極的な活用を支援するための「京」互換機の整備・運用

広く生命科学研究者・技術者が HPCI を積極的に活用していくことを支援するため、SCLS 計算機システム(「京」互換機)を整備・運用した。SCLS 計算機システムは、分野の研究者、利用公募で採択された課題参加者(分野外の研究機関、教育機関、民間企業)、SCLS 計算機システムを使用した講習会の受講者にアカウントを発行し、のべ 300 名超が利用した。本格運用を開始したのちの稼働状況は、全稼働時間に対して 70%~90%の高い使用率となった。平成27年度の有効アカウント数は 125 名で、うち 35 名は民間企業所属である。

(4) 人材育成と研究成果の普及のための講習会の開催

高度な HPCI 環境を使いこなす人材を創出する一環として、分野開発ソフトウェアと「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)のソフトウェアを対象に、SCLS 計算機システムを使用した講習会を開催した。人材育成と研究成果の普及の観点から、分野外の研究機関や教育機関、民間企業を対象とし、平成27年度は 3 回開催し、参加者は 27 名、今までに 13 回の開催で 105 名が参加している。なお、SCLS 計算機システムのシステム規模の制限により、講習会の募集人数は 10 名程度としている。

表 8 SCLS 計算機システムを使用した講習会

対象ソフトウェア	開催年度	参加者数
RICS-K	2013	3
GROMACS	2013	11
ParaHaplo	2013	3
NGSAnalyzer	2013	2
SiGN-BN	2013	8
REIN-K	2013	13
SiGN-BN	2013	11
μ lib	2014	10
CafeMol	2014	11
GHOST-MP	2014	6
SiGN-BN	2015	8
BENIGN	2015	10
GHOST-MP	2015	9

Ⅲ 人材育成

「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、大学、研究機関、民間企業、高等学校等において人材育成活動を進める。さらに、大阪大学、産業技術総合研究所等と連携し、以下の人材育成プログラムを推進する。

A 実施計画

(イ)「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、当該戦略分野1に関連した研究の普及を大学等の研究機関および民間企業の研究者・技術者を対象に、行う。中核的人材の育成を目指し、計算生命科学ソフトウェアの利用法等について講習会を開催する。人材育成の一環として、大阪大学、産業技術総合研究所等と連携し、以下の人材育成プログラムを推進する。

- HPCI 戦略プログラムにおける人材養成プログラムの実施（浅井潔・産業技術総合研究所）
- HPCI 戦略プログラムにおける教育プログラムの実施（田中正夫・大阪大学大学院基礎工学研究科）

(ロ) 将来的な計算生命科学分野に資する若い人材を育成するため、戦略分野1の研究活動内容を題材とした高校生向け広報活動を行う。

B 実施内容（成果）

生命科学を専攻する大学生や大学院生、製薬企業などの社会人を対象に計算生命科学の発展に資するための人材育成の活動と高校生などを対象に計算生命科学の理解増進のための教育とアウトリーチ活動を行ってきた。

Ⅲ-1 社会人、大学院生への人材養成・教育プログラムの実施

「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」のために大学や研究機関、産業界において HPCI を積極的に活用しうる中核的人材育成を目指し、並列化プログラミングやソフトウェアの利用法などについてセミナーや講習会、創薬・医療現場との産学連携セミナーを実施してきた。**大学、企業、研究機関における基礎学習や研究現場での実践学習に役立つと好評であった。**

(1)大阪大学大学院基礎工学研究科における大学院生、社会人対象の講義

大学院学生を主たる対象とした初学者向けの生体现象の数理モデル化の方法論とそのコンピュータシミュレーション技術に関する「バイオシミュレーション特論」、生命科

学におけるデータ・情報解析や医療分野における並列計算技術など生命科学・医療への情報科学の応用に関する「バイオインフォマティクス」、コンピュータシミュレーションを通じた生体・生命現象の理解と予測へのアプローチについて学ぶ「バイオシミュレーション入門」の教育プログラムを継続的に実施した。2011～2014年度で受講者数77人、単位取得者数50人であった。

表9 大学院生を主たる対象とした講義

科 目	受講者数(人)
「バイオシミュレーション特論」(2011-2014年度) 12講義、実習4回、取得2単位	大学院 48 社会人 5
「バイオインフォマティクス」(2011-2014年度) 5講義、実習3回、取得1単位	大学院 16 社会人 5
「バイオシミュレーション入門」(2014年度) 12講義、取得2単位	学部生 : 3

平成27年度(2015年度)は以下の講義を実施した。

1) バイオシミュレーションに関する講義

大学院学生を主たる対象とした初学者向けの生体现象の数理モデル化の方法論とそのコンピュータシミュレーションに関する講義と演習・実習からなるバイオシミュレーションに関する講義「バイオシミュレーション特論(2単位)」を表10の通り実施した。受講者数は、大学院学生9名、単位取得者8名であった。学生の所属は、理学研究科、基礎工学研究科、生命機能研究科、情報科学研究科であった。

表10 バイオシミュレーション特論

- =====
- 1)、2) バイオシミュレーション概論
大阪大学 教授 野村泰伸
2015年11月18日(土) 9:30-11:00、11:15-12:45
大阪大学豊中キャンパス基礎工学A棟A338室
 - 3)、4) コンピューテーショナル生理学
大阪大学 教授 野村泰伸
2015年11月18日(土) 13:45-15:15、15:30-17:00
大阪大学豊中キャンパス基礎工学A棟A338室
 - 5)、6) バイオメカニクスシミュレーション
大阪大学 教授 田中正夫
2015年12月5日(土) 9:30-11:00、11:15-12:45
大阪大学豊中キャンパス基礎工学A棟A338室
 - 7)、8) バイオインフォマティクスと新しい創薬

大阪大学 特任教授 坂田 恒昭

2015年12月6日(土) 13:45-15:15、15:30-17:00

大阪大学豊中キャンパス基礎工学A棟A338室

9)、10) 身体運動機能とその崩壊の数理モデルシミュレーション

大阪大学 教授 野村泰伸

2015年12月12日(土) 9:30-11:00、11:15-12:45

大阪大学豊中キャンパス基礎工学A棟A338室

11)、12) 心臓モデルによる興奮伝播シミュレーション

大阪大学 招へい教授(国立循環器病センター研究所・室長) 中沢 一雄

2015年12月12日(土) 13:45-15:15、15:30-17:00

大阪大学豊中キャンパス基礎工学A棟A338室

13) 生体分子動力学実習

大阪大学 講師 越山 顕一朗

2015年12月19日(土) 9:30-11:00

大阪大学豊中キャンパス基礎工学A棟A338室

14) リモデリングシミュレーション実習

龍谷大学 講師 田原大輔

2015年12月19日(土) 11:15-12:45

大阪大学豊中キャンパス基礎工学A棟A338室

15)、16) コンピュータシヨナルバイオメカニクス実習

大阪大学 教授 田中正夫ほか

2016年3月5日(土) 9:30-11:00、11:15-12:45

大阪大学豊中キャンパス基礎工学A棟A338室

=====

2) バイオインフォマティクスに関する講義

大学院学生を主たる対象とした初学者向けの生命科学におけるデータ・情報解析や医療分野における並列計算技術など生命科学・医療への情報科学の応用に関する講義「バイオインフォマティクス(1単位)」を表11の通り実施した。受講者数は、大学院学生7名、単位取得者5名であった。学生の所属は、理学研究科、基礎工学研究科、生命機能研究科、情報科学研究科であった。

表11 バイオインフォマティクス

=====

1) 計算科学による新しい薬創りとは -創薬の基礎と現状

大阪大学 特任教授 坂田恒昭

2016年1月16日(土) 9:30-11:00

大阪大学吹田キャンパス情報科学研究科B棟311

- 2) 計算科学による新しい薬創りとは -計算科学の応用事例
大阪大学 特任教授 坂田恒昭
2016年1月16日(土) 11:15-12:45
大阪大学吹田キャンパス情報科学研究科B棟311
 - 3) 細胞のシステム生物学と合成生物学 1
理化学研究所 江口至洋
2016年1月16日(土) 13:45-15:15
大阪大学吹田キャンパス情報科学研究科B棟311
 - 4) 細胞のシステム生物学と合成生物学 演習
理化学研究所 江口至洋、木戸 善之
2016年1月16日(土) 15:30-17:00
大阪大学吹田キャンパス情報科学研究科B棟311
 - 5) 遺伝子ネットワークの情報解析
大阪大学 教授 松田秀雄
2016年1月23日(土) 9:30-11:00
大阪大学吹田キャンパス情報科学研究科B棟311
 - 6) 遺伝子ネットワークの情報解析演習
大阪大学 准教授 竹中要一
2016年1月23日(土) 11:15-12:45
大阪大学吹田キャンパス情報科学研究科B棟311
 - 7) 並列計算の医療への応用
大阪大学 准教授 伊野 文彦
2016年1月23日(土) 13:45-15:15
大阪大学吹田キャンパス情報科学研究科B棟311
 - 8) 並列計算の医療への応用 演習
大阪大学 助教 置田 真生
2015年1月24日(土) 15:30-17:00
大阪大学吹田キャンパス情報科学研究科B棟311
- =====

3) バイオシミュレーション入門に関する基礎セミナー

学部初年度学生を対象とした、生体・生命における諸現象のコンピュータ上での実現と、コンピュータシミュレーションを通じた生体・生命現象の理解と予測へのアプローチについて学ぶ入門科目として、基礎セミナー「バイオシミュレーション入門(2単位)」を表12の通り実施した。受講者数は2名、単位取得者2名であり、学生の所属は理学部、基礎工学部であった。

表12 バイオシミュレーション入門

-
- 1) イントロダクション、シミュレーションと数学モデル
大阪大学 教授 田中正夫
2015年10月2日(金) 16:20-17:50
大阪大学豊中キャンパス基礎工学A棟A338室
 - 2) 成長・減衰のモデルと間欠的投薬問題
大阪大学 教授 田中正夫
2015年10月16日(金) 16:20-17:50
大阪大学豊中キャンパス基礎工学A棟A338室
 - 3) 骨密度と血中ミネラル濃度
大阪大学 教授 田中正夫
2015年10月23日(金) 16:20-17:50
大阪大学豊中キャンパス基礎工学A棟A338室
 - 4) 生体分子動力学入門
大阪大学 講師 越山顕一郎
2015年10月30日(金) 16:20-17:50
大阪大学豊中キャンパス基礎工学A棟A338室
 - 5) 生体分子動力学シミュレーション
大阪大学 講師 越山顕一郎
2015年11月6日(金) 16:20-17:50
大阪大学豊中キャンパス基礎工学A棟A338室
 - 6) スパコンを使いこなす流体構造連成法
大阪大学 教授 杉山和靖
2015年11月13日(金) 16:20-17:50
大阪大学豊中キャンパス基礎工学A棟A338室
 - 7) 生体力学シミュレーションによる医療支援
大阪大学 教授 和田成生
2015年11月20日(金) 16:20-17:50
大阪大学豊中キャンパス基礎工学A棟A338室
 - 8) 弾性ネットワークモデル：基礎と生体への応用
大阪大学 教授 和田成生
2015年11月27日(金) 16:20-17:50
大阪大学豊中キャンパス基礎工学A棟A338室
 - 9) 「京」を使った血流シミュレーション
大阪大学 教授 杉山和靖
2015年12月4日(金) 16:20-17:50

大阪大学豊中キャンパス基礎工学 A 棟 A338 室

10) 生体システムで観測されるカオス

大阪大学 教授 野村泰伸

2015 年 12 月 11 日 (金) 16:20-17:50

大阪大学豊中キャンパス基礎工学 A 棟 A338 室

11) サーカディアンリズムと非線形結合振動子

大阪大学 教授 野村泰伸

2016 年 1 月 8 日 (金) 16:20-17:50

大阪大学豊中キャンパス基礎工学 A 棟 A338 室

12) バイオシミュレーションの最前線

2015 年 1 月 22 日 (金) 15:30-17:30

グランフロント大阪カンファレンスルーム B01+02

=====

(2) 製薬企業や医療機関との連携促進のための産業界向けシンポジウム

スーパーコンピュータ「京」ならびにその利用環境の現状をタイムリーに紹介するとともに、創薬・医療の現場である産業界において有効に活用いただくための利用者の視点からの期待と展望について交流を目的としたシンポジウム、セミナーを実施した。2011～2014 年度で約 1,100 人の方に参加していただき、「**創薬へのアプローチにおけるスパコンの使い方に役立った**」や「**医療 IT 化の方向性とそれの創薬利用への応用のヒントになった**」などの感想があった。

表 13 産業界向けシンポジウム

セミナー、シンポジウム	参加者数(人)
スーパーコンピュータ「京」と創薬・医療の産学連携セミナー 第1回～第8回(2011-2014年度)	647
大阪大学医工情報連携シンポジウム(2011年)	109
日本機械学会バイオエンジニアリング講演会(2012年)	200
生命医薬情報学連合大会オーガナイズドセッション(2013年)	約50

平成27年度は以下のシンポジウムを実施した。

1) 創薬・医療の産学連携セミナー

シリーズ化している創薬・医療の産学連携セミナーとして

第9回スーパーコンピュータ「京」と創薬・医療の産学連携セミナー

2015年12月18日(金) 13:00-16:40

ステーションコンファレンス東京 501(東京都千代田区)

第10回スーパーコンピュータ「京」と創薬・医療の産学連携セミナー

2016年1月22日(金) 13:00-17:30

グランフロント大阪カンファレンスルーム B01+02(大阪市北区)

を企画・実施した。詳細は図53および図54の通りであり、それぞれの参加者数は、91名、67名であった(図55)。

第9回スーパーコンピュータ「京」と創薬・医療の産学連携セミナー
- HPCI計算生命科学推進プログラム-

日 時：2015年12月18日（金）13:00-16:40

場 所：ステーションコンファレンス東京 501
(東京都千代田区丸の内1-7-12 サピアタワー5階)

参加費：無料 (http://www.scls.riken.jp/forms/2015Dec18_TokyoSeminar/で事前登録をお願いします)

主 催：大阪大学大学院基礎工学研究科 (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」教育プログラム)
理化学研究所HPCI計算生命科学推進プログラム

共 催：大阪大学国際医工情報センター、(公財)都市活力研究所、NPO法人バイオグリッドセンター関西



ビッグデータ解析の最前線

総合司会 坂田恒昭(大阪大学 大学院基礎工学研究科 特任教授)

13:00-13:40 米国における医療ITベンチャー企業の視察報告
-サンフランシスコ/シリコンバレーの注目企業-

株式会社シード・プランニングリサーチ&コンサルティング部 執行役員・主任研究員 五十嵐 夕子

13:40-14:20 東北メディカル・メガバンクの目標と進捗状況

東北メディカル・メガバンク機構 機構長・東北大学大学院医学系研究科 教授 山本 雅之

14:20-15:00 がんゲノムビッグデータ解析から生命科学・医療へ

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健康医療データサイエンス分野 教授 井元 清哉

15:20-16:00 ディープラーニングのバイオテクノロジーへの応用可能性

大阪大学大学院基礎工学研究科機能創成専攻 教授 三宅 淳

16:00-16:40 IBM Watson ~ Cognitive Businessへの挑戦

日本アイ・ビー・エム(株)ワトソン事業部ヘルスケア事業開発部長 溝上 敏文

問合せ先:大阪大学大学院基礎工学研究科 HPCIセミナー事務局 hpci@me.es.osaka-u.ac.jp

図 53 第9回スーパーコンピュータ「京」と創薬・医療の産学連携セミナー

第10回スーパーコンピュータ「京」と創薬・医療の産学連携セミナー
- HPCI計算生命科学推進プログラム-

日 時：2016年1月22日（金）13:00-17:30

場 所：グランフロント大阪カンファレンスルーム B01+02
(大阪市北区大深町3-1 グランフロント大阪タワーB10階)

参加費：無料 (http://www.scls.riken.jp/forms/2016Jan22_OsakaSeminar/ で事前登録をお願いいたします)

主 催：大阪大学大学院基礎工学研究科 (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」教育プログラム)
理化学研究所HPCI計算生命科学推進プログラム

共 催：大阪大学国際医工情報センター、(公財)都市活力研究所、NPO法人バイオグリッドセンター関西



バイオシミュレーションの最前線 司会 坂田恒昭 (大阪大学 大学院基礎工学研究科 特任教授)
Keynotes:

- 13:00-13:45 Drug Safety Prediction Using Systems Pharmacology:
Application of High Performance Computing to Solve Problems
Darrell R Abernethy, Associate Director for Drug Safety, Food and Drug Administration
Professor of Medicine, and Pharmacology and Molecular Science, Johns Hopkins University School of Medicine
- 13:45-14:30 A Database of Drug Interaction Networks for Assessing Drug Safety
Minoru Kanehisa, Professor, Institute for Chemical Research, Kyoto University
- 14:30-15:15 Garuda Platform for Systems Drug Discovery and Digital Health
Hiroaki Kitanō, President, The System Biology Institute, Group Director, RIKEN Integrative Medical
Sciences Center, Professor (Adjunct), Okinawa Science and Technology Institute
- 15:30-16:10 細胞制御における転写因子のデジタル活性化
理化学研究所統合生命医科学研究センター統合細胞システム研究チーム チームリーダー 岡田 真里子
- 16:10-16:50 多数の筋の協調関係が生じる脳内最適化過程のシミュレーション-忘却仮説-
情報通信研究機構脳情報通信融合研究センター 主任研究員 平島 雅也
- 16:50-17:30 超並列計算機上でのマルチスケール血流シミュレーション
大阪大学大学院基礎工学研究科機能創成専攻 教授 杉山 和靖

問合せ先: 大阪大学大学院基礎工学研究科 HPCIセミナー事務局 hpci@me.es.osaka-u.ac.jp

図 54 第 10 回スーパーコンピュータ「京」と創薬・医療の産学連携セミナー



(東京会場)



(大阪会場)

図 55 スーパーコンピュータ「京」と創薬・医療の産学連携セミナー会場の様子

2) サテライトシンポジウム

第10回スーパーコンピュータ「京」と創薬・医療の産学連携セミナーの東京地区におけるサテライトとして、同セミナーにアメリカ食品医薬品局より招聘した講師他によるシンポジウム

HPCI計算生命科学推進プログラム緊急シンポジウム「医療ビッグデータの未来」

2016年1月21日(木) 13:30-16:30

日本橋ライフサイエンスハブ(東京都中央区)

を企画・実施した。詳細は図56の通りであり、参加者は約40名であった(図57)。

HPCI計算生命科学推進プログラム 緊急シンポジウム

「医療ビッグデータの未来」

日時：1月21日(木) 13:30

場所：日本橋ライフサイエンスハブ(室町千葉銀三井ビル8F)

言語：すべてのプログラムは、英語で行われます。

主催：大阪大学大学院基礎工学研究科(HPCI戦略プログラム1「予測する生命科学・医療および創薬基盤」教育プログラム)、国立研究開発法人理化学研究所、特定非営利活動法人システムバイオロジー研究機構

協賛：日本橋ライフサイエンスハブ、三井不動産株式会社、nature partner journal (npj) Systems Biology and Applications

13:30-14:30 Keynote Lecture:

“A Drug Safety Data Warehouse to Advance Predictive Toxicology”
Darrell Abernethy, Drug Safety Division, U.S. Food and Drug Administration

14:30-15:00

“Perspective of Medical Big Data”
Kazuhiro Sakurada, Sony Computer Science Laboratories, Inc., RIKEN

15:00-15:30

“Technical Issues in Medical Big Data Analysis”
Hiroaki Kitano, Systems Biology Institute, and IMS/RIKEN

15:30-16:30

Discussions and Private Meetings



図56 HPCI計算生命科学推進プログラム緊急シンポジウム



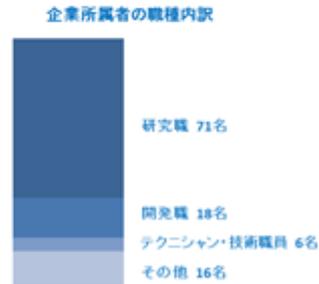
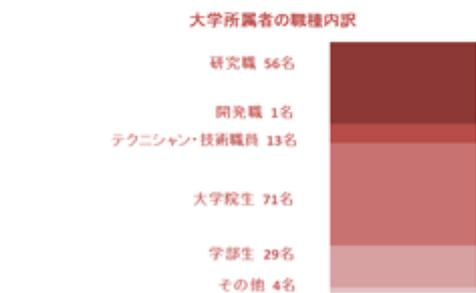
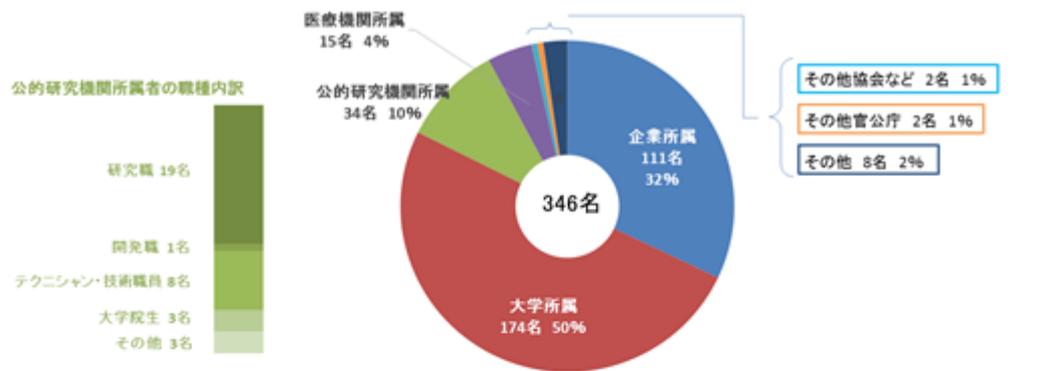
図 57 緊急シンポジウム会場の様子

(3) 産業技術総合研究所との連携による人材育成プログラム

産業技術総合研究所創薬基盤研究部門と連携して教育プログラムを編成・実施し、我が国の計算科学技術体制構築に資する人材育成を行うセミナー、講習会を実施した。2011～2014年度で**大学等研究機関、民間企業からのべ約3,800人の参加があり基礎学習および研究現場での実践学習に役立っていると好評**であった。

表 14 人材養成プログラム（セミナー、講習会、ワークショップ、e-ラーニング）

	参加者数(人)
HPCI セミナー（2011-2014年度） 計算機を利用した生命科学の最先端の話題を提供するセミナー	のべ 1,529
HPCI 講習会 ・次世代シーケンサーコース（2011年度） ・創薬インフォマティクス実習コース（2012-2014年度） ・バイオインフォマティクス実習コース（2012-2014年度） ・次世代シーケンサー解析入門コース（2012年度）	33 のべ 150 のべ 582 41
HPCI ワークショップ 先端のテーマを設定し広く一般向けに開催（年1回）	446
HPCI e-ラーニング ・HPCI セミナー e-ラーニングコース（31講義） ・バイオインフォマティクス e-ラーニング準備コース（6講義） ・バイオインフォマティクス e-ラーニングコース（14講義） ・創薬インフォマティクス e-ラーニングコース（9講義） ・創薬インフォマティクス アドバンスト e-ラーニング準備コース（3講義） ・Graph Mining e-ラーニングコース（3講義） ・Linux 基礎（7講義）	2012年度 311 2013年度 338 2014年度 346



平成27年3月31日現在

図 58 e-ラーニングコース受講者プロフィール

(4) 大学・大学院での講義、セミナーの実施

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などに協力し、2011～2014 年度で 7 大学、約 1500 人の大学、大学院生、教員の方々に計算生命科学への理解を深めた。

表 15 大学、大学院での講義

実施機関	講義名	参加者数
2011 年度		
東京理科大学大学院薬学系研究科	<ul style="list-style-type: none"> ・薬品物理化学特論 スーパーコンピュータと生命科学 ・スーパーコンピュータと創薬ターゲットの探索 ・スーパーコンピュータと創薬 	博士前期 1 年 97
東京医科歯科大学大学院	<ul style="list-style-type: none"> ・生命システムモデリング特論 細胞のシステム生物学 	博士前期 1 年、10
福井大学ライフサイエンスイノベーション推進機構セミナー	<ul style="list-style-type: none"> ・スパコン「京」と計算生命科学 	教職員、大学生、大学院生 63
2012 年度		
京都大学大学院薬学部	<ul style="list-style-type: none"> ・システム生物学と合成生物学 ・スーパーコンピュータ「京」を用いた生命科学研究 	15 教職員、大学生、大学院生 15
大阪大学 MEI センター	<ul style="list-style-type: none"> ・医用工学情報工学入門コース ・細胞のシステム生物学と合成生物学（講義、実習） 	9 4
神戸大学発達科学部	学際性について - スーパーコンピュータ「京」が仲介する生物と物理学、化学、数学の融合を例に -	学部 1 年 293
東京理科大学大学院薬学系研究科	スーパーコンピュータ「京」と計算生命科学	博士前期 1 年、10
京都大学大学院薬学研究科	スーパーコンピュータ「京」を用いた生命科学研究	教職員、大学生、院生 15
2013 年度		
神戸大学発達科学部	学際性について - スーパーコンピュータ「京」が仲介する生物学と物理学、化学、数学の融合を例に -	学部 1 年 278
2014 年度		
神戸大学発達科学部	学際性について - スーパーコンピュータ「京」が仲介する生物学と物理学、化学、数学の融合を例に -	学部 1 年 314
神戸大学大学院システム情報学研究科	大規模シミュレーション概論Ⅱ <ul style="list-style-type: none"> ・第 2 回 分野 1 予測する生命科学・医療および創薬基盤 	
大阪大学大学院情報科学研究科	臨床医工学・情報学スキルアップ講座 <ul style="list-style-type: none"> ・細胞のシステム生物学と合成生物学 	
2015 年度		
神戸大学発達科学部	学際性について - スーパーコンピュータ「京」が仲介する生物学と物理学、化学、数学の融合を例に -	学部 1 年 287
大阪大学大学院情報科学研究科	臨床医工学・情報学スキルアップ講座 <ul style="list-style-type: none"> ・細胞のシステム生物学と合成生物学 	

平成27年度（2015年度）に実施した講義の詳細は以下のとおりである。

1) 神戸大学発達科学部「発達科学への招待」

『学際性について 生物学と数学、物理学、化学の融合を例に』（2015年6月19日、6月26日）

開催場所：神戸大学発達科学部（兵庫県）

講師：江口至洋（理化学研究所 HPCI 計算生命科学推進プログラム、副プログラムディレクター）

参加者：学部1年生、287名

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シーケ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いることを主なテーマとして学際性について話した。学生たちには文系、理系進路の悩みもあり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ことも強調した。学生からは学際性を考えるにあたって学問の広がりを探求する深さについて考え、様々な型の人間になりたいという意見が飛び交った。

2) 大阪大学臨床医工学・情報学スキルアップ講座

「細胞のシステム生物学と合成生物学」（2016年1月16日）

開催場所：大阪大学大学院情報科学研究科

講師：江口至洋（理化学研究所 HPCI 計算生命科学推進プログラム副プログラムディレクター）

(5) 遠隔インタラクティブ講義「計算生命科学の基礎」

2014年度より神戸大学計算科学教育センターと連携し、大学生、大学院生、ポスドク、大学教員、研究所・企業の研究者を対象に生命科学と理工学の学際的研究領域である計算生命科学について連続した遠隔講義を実施してきた。体系的にかつ最新分野について学べるよう多くの研究者の協力を得てカリキュラムを作成することができ今後の標準的な計算生命科学のカリキュラムに資するものとなった。国内、海外から参加登録をいただいた約450名の受講生からは「広範囲な分野で最先端の内容が基礎的なところから説明されているのかよかった」「計算のツールや考え方など知識を得ることができてよかった」「適用事例が新しく新鮮で興味深かった」などの感想が寄せられ好評であった。

表16 「計算生命科学の基礎」 講義15回の詳細（2014年度）

10月7日（火）	はじめに：計算生命科学の概要 江口至洋（理化学研究所 HPCI 計算生命科学推進プログラム、副プログラムディレクター）
第1編 ゲノムから見る生命科学	
10月14日（火）	1.1 ゲノムに記された大規模生命情報の解析

	奥野恭史（京都大学大学院医学研究科、教授）
10月21日（火）	1.2 バイオメディカル・インフォマティクス 奥野恭史（京都大学大学院医学研究科、教授）
10月28日（火）	1.3 遺伝子ネットワーク解析：遺伝子間の相関と因果関係を見る 土井淳（株式会社セルイノベーター 研究開発部、部長）
11月4日（火）	1.4 細胞のシステム生物学 江口至洋（理化学研究所 HPCI 計算生命科学推進プログラム、副プログラムディレクター）
第2編 タンパク質からみる生命科学	
11月11日（火）	2.1 計算生命科学のための量子化学基礎 佐藤文俊（東京大学生産技術研究所、教授）
11月18日（火）	2.2 タンパク質の量子化学計算 福澤薫（日本大学松戸歯学部、助教）
11月25日（火）	2.3 分子動力学計算と生体高分子の機能解析：タンパク質の動的構造と機能 中津井雅彦（神戸大学大学院工学研究科、特命助教）
12月2日（火）	2.4 分子動力学計算における拡張サンプリングシミュレーション 中津井雅彦（神戸大学大学院工学研究科、特命助教）
12月9日（火）	2.5 タンパク質の生物学的機能と化学反応 林重彦（京都大学大学院理学研究科、教授）
第3編 医療・創薬における計算生命科学	
12月16日（火）	3.1 創薬におけるビッグデータ 都地昭夫（塩野義製薬株式会社解析センター、グループ長） 北西由武（塩野義製薬株式会社解析センター、サブグループ長）
1月13日（火）	3.2 創薬における計算生命科学：分子動力学計算を中心に 広川貴次（産業技術総合研究所創薬分子プロファイリング研究センター、研究チーム長）
1月20日（火）	3.3 創薬における計算生命科学：量子化学計算を中心に 福澤薫（日本大学松戸歯学部、助教）
1月27日（火）	3.4 医療におけるビッグデータ 田中博（東京医科歯科大学大学院 疾患生命科学部、教授）
2月3日（火）	3.5 医療における計算生命科学：不整脈における心臓興奮伝播現象を中心に 中沢一雄（国立循環器病研究センター研究所、室長） 稲田慎（国立循環器病研究センター研究所、特任研究員）

表 17 「計算生命科学の基礎Ⅱ」 講義 15 回の詳細（2015 年度）

10月7日（水）	はじめに 計算生命科学の概要 田中成典 神戸大学大学院 システム情報学研究科 教授
第1編 ゲノムから見る生命科学	
10月14日（水）	1.1 ヒトの病気はヒトの研究で～生命情報の統合によるヒト生物学と先制医療 松田文彦（京都大学大学院 医学研究科 附属ゲノム医学センター、センター長）
10月21日（水）	1.2 生物システムの設計：システム生物学から合成生物学へ 荒木通啓 神戸大学 自然科学系先端融合研究環 特命准教授
10月28日（水）	1.3 遺伝子ネットワーク解析：細胞の状態変化の過程を探る 松田秀雄 大阪大学大学院 情報科学研究科 教授
11月4日（水）	1.4 到来する大規模生命情報の解析に備えて

Ⅲ-2 学生、大学院生、高校教員、高校生を対象とした講義、アウトリーチ活動

生物学データの爆発的増加の時代、これからの生命科学研究を担う若者にも生物学に物理や化学、数学の知識が必要であることを理解してもらうことは重要と考え、計算生命科学の理解を深め、若い研究者として将来的な参画を図ることを目的とし高校生などを対象に講義やアウトリーチ活動を行った。

(1) 高校生に対する教育

2011～2014年度で613人の若い人への教育活動を行い(表18)、「スパコン『京』と計算生命科学」や「生物学とスーパーコンピュータ『京』」の授業に参加した高校生、教員からは「スーパーコンピュータのイメージが講義を受けることで変わった」「計算機が私たちの生活に非常に密着していることに驚いた」「生物の分野で物理や化学、数学の知識も使い、運動方程式も使うことを知り驚いた」などの感想があった。

表 18 高等学校での出張授業

実施校	参加人数
2011 年度	
兵庫県立神戸高等学校 総合理学科 1 年生	47
兵庫県立西脇高等学校 科学教育類型 2 年生	90
2012 年度	
福岡県生物部会 (教員対象)	40
福岡県立福岡高等学校 修猷館高等学校 1 年生	47
栃木県立宇都宮高等学校	56
兵庫県立西脇高等学校 科学教育類型 2 年生	65
2013 年度	
岡山県高等学校教員生物部研修会 (教員対象)	18
兵庫県立西脇高等学校	62
岡山県立玉島高等学校 理数科 1 年生	36
兵庫県立加古川東高等学校 理数科 2 年生	39
2014 年度	
沖縄県高等学校物理教育研究会 (教員対象)	20
岡山県立玉島高等学校 理数科 1 年生	33
2015 年度	
石川県高等学校文化連盟理科部秋期行事 「高校生のための実験・実習セミナー」	60

平成27年度（2015年度）に実施したセミナーの詳細は以下の通りである。

1) 石川県高等学校文化連盟理科部秋期行事「高校生のための実験・実習セミナー」
(11月13日)

開催場所：石川県立金沢二水高等学校（石川県）

講演：「生物学とスーパーコンピュータ『京』」

参加者数：60名

計算生命科学の分野が生物学と数学、物理学、化学の融合を促進しており学際性の重要性を伝えた。生徒からは物理学選択者だが大学に進学したら生物学の講義も受けてみたいと思ったや幅広く学んでいこうと思ったという感想が得られた。アミノ酸塩基配列を並べるパズルやアミノ酸の分子模型を使って構造を調べる実習も行った。生物、化学共に精一杯勉強続けていきたいという力強い感想もあった。



図 60 出張授業の講義と実習の様子

(2) 高校生を対象にしたアウトリーチ活動

研究成果や研究活動について高校生や専門家でない人にもわかりやすい内容のパネルを作成した。**貸出できることでいつでもどこでも活用**していただけることから**全国の高校生を対象**とした自然科学の大会やサイエンスイベントに出展したり貸出したりすることで計算生命科学の発展と理解増進、研究成果の普及を図った。スパコン「京」を使ってどのようなことをやっているかを知らなかったり、計算生命科学という言葉は初めて耳にしたりした高校生らは**展示パネルを一枚一枚丁寧に読んでくれていた。「京」が実際どのようなことに使用されているのかが分からなかったが、水分子やDNAのそれぞれが力によってどのように動いているか計算できていると知り驚いた**（細胞内分子ダイナミクスシミュレーションの可視化ビデオを見た感想）

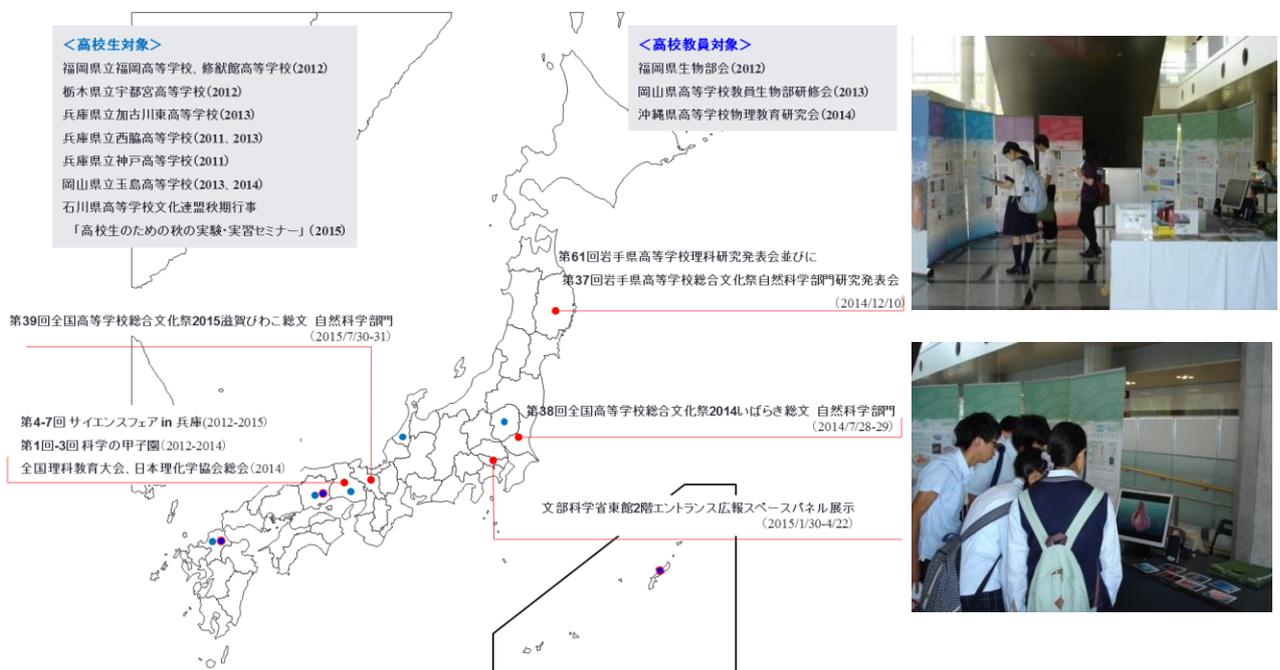


図 61 高校生への出張授業とアウトリーチ活動

平成27年度（2015年度）に行った活動の詳細は以下の通りである。

1) 第8回サイエンスフェア in 兵庫（2016年1月31日）

開催場所：神戸国際展示場（兵庫県）

主催：兵庫「咲いテク」事業推進委員会

参加者数：高校 兵庫県内 39校、県外（大阪）2校、参加生徒 1147名、企業・大学・研究機関等 181名、一般参加（見学） 164名、来賓 13名

科学技術分野の研究活動に取り組む高校生への発表の場であり、研究・開発に取り組む企業、研究機関との交流や若者の科学技術分野への期待と憧れの増大を図ることを狙いとして行われている。

神戸地区、播磨地区の研究6拠点（CDB、CLST、QBIC、Spring・8、AICS、SCLS）と和光本部が出展した。

SCLSでは今年で3回目となる大学生、大学院生との共同企画でサイエンスカフェ『おしえてセンパイ「理系進路と大学生活」』とサイエンストークを実施し、高校生らの研究意欲を高め、科学技術関係への進路希望へ導くことに貢献した。



図 62 サイエンスカフェの様子

2) 第 39 回全国高等学校総合文化祭びわこ大会自然科学部門 (2015 年 7 月 30 日～31 日)

開催場所：八日市文化芸術会館 (滋賀県)

33 都道府県 138 校の代表校から高校生らが科学技術に関する研究発表、ポスター発表を行った。SCLS は『生命のしくみを「京」で再現—人体の複雑さに挑み、新しい医療をめざす—』のパネルと細胞ダイナミクスのシミュレーション映像を展示した。『「京」が実際にどのようなことに使用されているのか知らなかったが水分子やDNAのそれぞれが力によってどのように動いているか計算できていると知り驚いた。』という熱心な感想があった。次回開催の実行委員の高校教員からは、第40回全国高等学校総合文化祭ひろしま大会における展示の要請を受けた。



図 63 パネル展示の様子

IV 人的ネットワークの形成

A 実施計画

計算生命科学分野における HPCI の利用普及を行う。戦略分野 1 の研究開発のすそ野を広げ、HPCI の普及を促進するため、プロジェクト外部の利用者との連携を強化する。平成 27 年度は、引き続き、成果の普及のみならず人的ネットワークの形成を進めるため、学会等におけるシンポジウムの開催や発表・展示・セミナーなどを行う。また、大学と連携しシンポジウムの開催を行う。

B 実施内容(成果)

HPCI 環境の利用とこれからの計算生命科学について理解を深めてもらうよう、計算生命科学のコミュニティを形成し連携を推進することを目的に、広く生命科学（分子生物学、細胞生物学、生物物理学、医学、薬学、医用工学、バイオインフォマティクス等）のコミュニティに対し、SCLS 計算機システムの利用公募の推進と国内外の各種関連学会で講演を実施した。さらに研究分野だけでなく一般のみなさまからの協力、支援を得ることを図るため積極的な出展活動を行い研究成果の紹介と情報発信を行った。

IV-1 学会や全国の拠点大学と連携したシンポジウムの開催

計算生命科学の重要性を理解していただき、そのコミュニティ形成と連携を推進することを目的に全国の大学と連携したシンポジウムや学会におけるシンポジウムを開催した。シンポジウムの内容は「スーパーコンピュータ「京」と「生命科学」をメインテーマに 2011 年度:3 件、2012 年度:5 件、2013 年度:6 件、2014 年度:5 件、2015 年度 7 件実施した。

「興味深い内容で新しい視野の切り口にしたい」「医療、診断へ IT が入り込む将来像のイメージや目指すべきチャレンジが理解できた」「京」利用の具体的イメージが得られた」との感想があった。

表 19 学会、全国の拠点大学との連携シンポジウム開催実績

タイトル	主催、大会会場	参加者
2011 年度		
『世界最速スーパーコンピュータ「京」と生命科学』	九州大学	70
第 1 回「細胞環境の測定とモデリング」	第 4 回 JSBi 応用システムバイオロジー研究会 ワークショップ	60
「第 3 回新たな創薬パラダイムの創出」	東京大学医科学研究所	70
2012 年度		
『データ駆動型生命情報科学の挑戦 —スーパーコンピュータ「京」と生命情報科学の接点—』	東北大学 シンポジウム	102

『スーパーコンピュータ「京」と生命科学～生命科学に取り組む異分野の融合と交流の推進』	岡山大学 シンポジウム	225
『新生命科学分野開拓とスーパーコンピュータ「京」』	九州大学 シンポジウム	81
『スーパーコンピューティング：分子ネットワークと細胞内ダイナミクス』	第 50 回日本生物物理学会年会 シンポジウム	1,500
「生命科学におけるスパコン京の活用」	CBI/JSBi/Omix2012 生命医薬情報学連 合大会	621
2013 年度		
第 2 回『スーパーコンピュータ「京」と生命科学～生命科学に取り組む異分野の融合と交流の推進』	岡山大学 シンポジウム	105
「未来を拓く生体予測シミュレーション－ハイパフォーマンス・コンピュータの医療応用への挑戦－」	北大－理研 ジョイントシンポジウ ム	103
『新生命科学分野開拓とスーパーコンピュータ「京」』	九州大学 シンポジウム	90
「生体高分子複合体を計算する－相互作用で何が起きるのか」	HPCI 戦略プログラム分野 1×分野 2 シ ンポジウム in 名大	60
「生命科学と計算科学がみる未来」	第 51 回日本生物物理学会年会 セミナー	110
スーパーコンピュータの活用による生命の階層的、システムの理解－戦略的に疾病を御するため－	第 36 回分子生物学会 ワークショップ	90
2014 年度		
『生命科学に取り組む異分野の融合と交流の推進 第 3 回 スーパーコンピュータ「京」と生命科学』	岡山大学 シンポジウム	160
『新生命科学分野開拓とスーパーコンピュータ「京」』	九州大学シンポジウム	90
「スーパーコンピューティング創薬－これまでとこれから－」	第 14 回日本蛋白質科学会年会 ランチョンセミナー	100
「スーパーコンピューティング－計算科学と情報科学の接点－生命科学と計算科学がみる未来」	第 52 回日本生物物理学会年会 ランチョンセミナー	100
「生命科学におけるビッグデータマイニング－医療への実践を目指して」	第 3 回生命医薬情報学連合大会 オーガナイズドセッション	121
2015 年度		
『生命科学に取り組む異分野の融合と交流の推進 第 4 回 スーパーコンピュータ「京」と生命科学』	岡山大学 シンポジウム	246
『新生命科学分野開拓とスーパーコンピュータ「京」』	九州大学 シンポジウム	82
「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」	第 53 回日本生物物理学会年会 シンポジウム	80
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－	第 38 回日本分子生物学会年会 ワークショップ	111
生命科学におけるインフォマティクスと物理	日本バイオインフォマティクス学会	40

化学の融合 ーバイオインフォマティクスを広い視点から 鳥瞰するー	スポンサーセッション	
並列配列相同子検索プログラム「GHOST-MP」講 習会	日本バイオインフォマティクス学会 チュートリアルセッション	11
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」	CBI 学会 2015 年大会 スポンサーセッション	67

平成27年度（2015年度）に行った活動の詳細は以下の通りである。

1) 岡山大学シンポジウム（2015年6月12日）

『生命科学に取り組む異分野の融合と交流の推進 第4回 スーパーコンピュータ「京」と生命科学』

開催場所：岡山大学創立五十周年記念館

主催：岡山大学 共催：理化学研究所 HPCI 計算生命科学推進プログラム

趣旨と内容：本シンポジウムは今回で第4回を数え、計算科学を駆使した生命科学研究に取り組む研究者6名が講演を行った。講演は、生命科学研究のための専用計算機ハードウェアおよび計算アルゴリズムの開発、数理科学によるがん進展の理論モデルの構築とコンピュータシミュレーション、バクテリアの系統樹解析と分子動力学計算による酵素の分子進化の追跡、「京」を使用した研究例など多彩であった。「京」を活用した最新の応用研究例として、高精度結合自由エネルギー計算による創薬候補化合物の評価、タンパク質ーリガンド複合体の量子化学計算による相互作用解析、次世代シーケンサから得られる膨大なゲノム情報の解析など、現在最先端で行われている研究が紹介された。招待講演者とシンポジウム主催者等がパネラーとして壇上に上がり、「スーパーコンピュータが拓く生命科学の未来」と題してパネル討論会を講演後に行った。スーパーコンピュータを活用した今後の生命科学の発展について色々な観点から議論が深まると同時に、その発展を支える人材育成の重要性まで意見交換が行われた。

参加者数：246名

2) 第53回日本生物物理学会年会（2015年9月13日～15日）（土井）

シンポジウム

「次世代スパコン「ポスト京」が拓くスーパーコンピューティング」

開催場所：金沢大学（石川県）

大会主催：日本生物物理学会

参加者数：84名

趣旨と内容：スパコンの世界は日進月歩で、スパコン「京」以降も世界各国で開発競争が続いている。日本でもすでにポスト「京」に向けたスパコン開発がスタートしているが、ハードウェア開発と並行して、そこでさらに膨大になる計算資源を有効

活用する方法開発も急務である。生命科学分野においても、生体分子シミュレーション、ゲノム、創薬、医療まで、幅広い応用が期待されている。このシンポジウムではポスト「京」時代のバイオスーパーコンピューティングの展望を議論した。

3) CBI 学会 2015 年大会 (2015 年 10 月 27 日～29 日) (土井)

大会テーマ：創薬のオープンイノベーションー新領域と in silico の接点ー
iPS 創薬・アカデミア創薬・ビッグデータ

開催場所：タワーホール船堀 (東京都)

大会主催：CBI 学会

参加者数：67 名

スポンサーセッション

講演：創薬応用シミュレーションが Big Challenge になる理由

藤谷 秀章 (東京大学先端科学技術研究センター)

フラグメント分子軌道法に基づくアカデミア創薬

田中成典 (神戸大学大学院システム情報学研究科)

4) 生命医薬情報学連合大会 2015 年大会 (2015 年 10 月 29 日～31 日) (土井)

スポンサーセッション

「生命科学におけるインフォマティクスと物理化学の融合

ーバイオインフォマティクスを広い視点から鳥瞰するー」

チュートリアルセッション

「並列配列相同性検索プログラム「GHOST-MP」講習会」

開催場所：京都大学おうばくプラザ (京都府)

大会主催：日本バイオインフォマティクス学会、情報計算化学生物学会、オミックス医療学会の共催

参加者数：スポンサーセッション：40 名、チュートリアルセッション：11 名

趣旨と内容：計測技術の急激な進展は、分子から細胞に至る生命ビッグデータを私たちにもたらし、より広い視点から生命を捉える必要性を私たちに訴えかけている。ここでは、物理化学、システム科学、そして情報科学の視点から最近の研究動向を明らかにし、それら諸学問が相互に連携し、これからのバイオインフォマティクスが進むべき道について議論を行った。また、ハイパフォーマンスコンピュータ応用の振興を目指し、並列配列相同性検索プログラム「GHOST-MP」講習会を実施した。

5) 第 5 回世界工学会議 (2015 年 11 月 30 日～12 月 2 日) (土井)

技術展示会

開催場所：国立京都国際会館 アネックスホール (京都府)

大会主催：日本学術会議、公益社団法人日本工学会、世界工学団体連盟、国際連合教育科学文化機関

参加者数：約 300 名

趣旨と内容：日本が 21 世紀においても持続可能な発展を遂げる科学技術イノベーション立国であることを紹介するとともに、地域と地球的視野の両面に立って、持続可能な発展を実現するために必要なイノベーションと、その実現を支える基盤技術の進展に焦点を当てた情報交換の場として提供された国際会議の技術展示会にあらゆる分野を横断し技術の進化と社会への貢献のために理研からは HPCI 計算生命科学推進プログラム、環境資源科学研究センター、ライフサイエンス技術基盤研究センターの 3 つの研究拠点と理研本部（産学連携、百周年、広報/外務）が出席した。

6) BMB2015（第 38 回分子生物学会年会・第 88 回生化学会大会合同大会）（2015 年 12 月 1 日～4 日）（土井）

ワークショップ

「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–」

開催場所：神戸ポートピアホテル（兵庫県）

大会主催：日本分子生物学会、日本生化学会

参加者数：111 名

趣旨と内容：急激なゲノム解析技術の革新と高精度計測機器の登場は、研究ならびに医療現場で新たな健康・医療ビッグデータを生み出しつつある。一方、「京」に代表されるスーパーコンピュータの進歩は生命科学・医学の歴史においてかつてないビッグデータ解析研究とシミュレーション研究を可能としてきている。これら研究の先には生命科学および医学をさらに高度化し、国民の健康に資するための新たなパラダイムの創出が期待されている。

本ワークショップでは、現在および将来（2020 年代）のスーパーコンピュータを視野に入れ、健康・医療ビッグデータ解析と生体階層統合シミュレーションを融合し、個々人に適した医療および、健康寿命を延ばす予防医療をめざした研究戦略について議論した。

7) 九州大学シンポジウム（2015 年 12 月 17 日）

『新生命科学分野開拓とスーパーコンピュータ「京」』

開催場所：九州大学箱崎キャンパス国際ホール

主催：九州大学、理化学研究所 HPCI 計算生命科学推進プログラム

趣旨と内容：生命科学の分野で「京」を活用するプロジェクトが始まって 5 年が経

過しようとしている。この5年で創薬分野では製薬企業を中心に多くの参画者を得ることができ、新しい研究開発パラダイムが生まれる兆しがある。戦略分野1では心臓シミュレータ UT-Heart が世界の研究者を驚かせる成果を上げ、臨床応用をめざした取り組みが進んでいる。また、大規模生命データ解析研究でも「京」を用いて初めて解き明かされた画期的な研究成果が上がっている。21世紀、生命科学の分野では、DNA シークエンサーなど計測技術の進歩と相まって、スーパーコンピュータの活用が急速に進んでいくものと予測される。本シンポジウムではそれらの研究成果について講演を行い、また今後の展望について意見交換がなされた。

参加者数： 82名

IV-2 シンポジウムなどでのポスター発表および展示

幅広い分野の研究者と産業界や一般のみなさまを対象に国内外で積極的に出展活動を行い研究成果の紹介と情報発信を行った。2011年度:6件、2012年度:8件、2013年度:6件、2014年度:12件、2015年度5件実施した。

表 20 シンポジウムなどでのポスター発表および展示実績

	主催、大会会場	参加者
2011年度		
ポスター発表	PDB40 Symposium, " Supercomputational life science in Japan"	267
ブース展示	理化学研究所神戸研究所・計算科学研究機構一般公開（計算科学研究機構）	1,950
ブース展示	CBI/JSBi2011 合同学会（神戸国際会議場、兵庫）	626
ブース展示	SC11(Supercomputing 2011)（Washington State Convention & Trade Center）	11,000
ポスター展示	第25回「理化学研究所と産業界との交流会」（ホテルオークラ東京、東京）	459
市民講座	次世代スーパーコンピュータセミナー『健康をささえるスパコン「京」!!』（神戸国際会議場、兵庫）	56
2012年度		
ブース展示	Bio Japan 2012（パシフィコ横浜、神奈川）	12,369
ブース展示	計算物理国際会議 2012（CCP2012）（神戸、兵庫）	
ポスター展示	理化学研究所一般公開（筑波事業所、和光本所、播磨事業所、仙台事業所、横浜事業所）	3,500
ブース展示	理化学研究所神戸研究所・計算科学研究機構一般公開（計算科学研究機構）	—
ブース展示	SC12(Supercomputing Conference 2012)（ソルトレイク、USA）	9,822
ポスター展示	第26回「理化学研究所と産業界との交流会」（ホテルオークラ東京）	445
ブース展示	TUT-CMSI 見える化シンポジウム（秋葉原UDX、東京）	136
セミナー	千里振興財団 D1 セミナー『スーパーコンピュータ「京」の医療・創薬分野への応用』（千里ライフサイエンスセンタービル）	116
2013年度		
ブース展示	Bio Japan 2012（パシフィコ横浜、神奈川）	300
ポスター展示	理化学研究所一般公開（和光本所、横浜事業所）	
ブース展示	理化学研究所神戸研究所・計算科学研究機構一般公開（計算科学研究機構）	2,150
ブース展示	サイエンスアゴラ 2013（日本科学未来館、東京）	600
ブース展示、ショートレクチャー	SC13(Supercomputing Conference 2013)（デンバー、USA）	10,550
ポスター展示	第27回「理化学研究所と産業界との交流会」（ホテルオークラ東京、東京）	505
2014年度		
ブース展示	Bio Japan 2014	300
ブース展示	理化学研究所神戸研究所・計算科学研究機構一般公開（計算科学研究機構）	2,500
ポスター展示	理化学研究所一般公開（筑波、和光、播磨、横浜）	—
ブース展示	サイエンスアゴラ 2014（日本科学未来館、東京）	10,142
ブース展示	SC14(Supercomputing Conference 2014)（ニューオリンズ、USA）	11,000

ポスター展示	第 28 回「理化学研究所と産業界との交流会」(ホテルオークラ東京、東京)	457
対話	サイエンスカフェ神戸/対話型パブコメ (神戸大学統合研究拠点、兵庫)	20
ブース展示	子ども霞が関見学デー (文部科学省第一講堂、東京)	620
出張パネル展示	文部科学省東館 2 階エントランス広報スペース展示	—
講演	バイオスーパーコンピューティング東北 2014 『予測する生命科学・医療および創薬基盤「京」を用いた計算生命科学』	—
講演	第 352 回 CBI 学会研究講演会「HPC の生命科学へのインパクト」	—
講演	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」 (日本学術会議講堂)	—
2015 年度		
ブース展示	サイエンスアゴラ 2015 (日本科学未来館、東京)	9,145
ブース展示	SC15(Supercomputing Conference 2014) (オースティン、USA)	12,157
ブース展示	第 5 回世界工学会議 (国立京都国際会館、京都)	2,000
ポスター展示	第 29 回「理化学研究所と産業界との交流会」	308
ポスター展示	スパコン「京」がひらく科学と社会	—

平成 27 年度 (2015 年度) に行った活動の詳細は以下の通りである。

1) 理化学研究所一般公開

- ・和光地区 (2015 年 4 月 18 日)
SCLS の研究内容を紹介した一般向けパネル展示と成果動画の上映。
- ・播磨地区 (2015 年 4 月 26 日)
SCLS の研究内容を紹介した一般向けパネル展示と成果動画の上映、生命の階層システムについてイラストで分かりやすく理解できるペーパークラフトを実施。
- ・横浜地区 (2015 年 8 月 29 日)
SCLS の研究内容を紹介した一般向けパネル展示と成果動画の上映。
- ・神戸地区 (2015 年 10 月 24 日)
神戸第 2 地区一般来場者数 2,590 人。
SCLS の研究紹介パネル『生命のしくみを「京」で再現—人体の複雑さに挑み、新しい医療をめざす—』の展示と DNA の二重らせんが動き出すアニメーションの工作を実施。アニメーションの仕組みを使った動く工作は親子からシニアの方まで幅広い年齢層に参加していただいた。細胞内分子ダイナミクスシミュレーションの動画の上映も行った。
- ・大阪地区 (2015 年 11 月 7 日)
SCLS の研究内容を紹介した一般向けパネル展示と成果動画の上映、生命の階層システムについてイラストで分かりやすく理解できるペーパークラフトを実施。

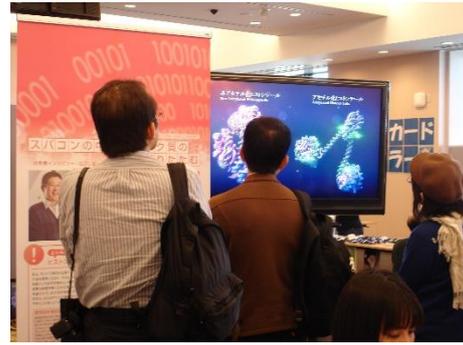


図 64 神戸地区一般公開の様子

2) サイエンスアゴラ 2015 (2015 年 11 月 14 日-15 日、日本科学未来館) (土井)

開催場所：日本科学未来館 (東京都)

主催：独立行政法人科学技術振興機構

参加者数：10,142 名

「光が魅せる体の中のアートな世界」科学と社会をつなぐ場として市民との科学コミュニケーション活動に取り組む人たちが集う科学交流イベントが東京・お台場で 3 日間行われ、来場者数は 7,378 人、出展者を含めると 10,142 人が参加した。理研神戸地区からはライフサイエンス技術基盤研究センター、生命システム研究センター、多細胞システム形成研究センター、HPCI 計算生命科学推進プログラムの 4 センターが合同で出展した。

「光が魅せる体の中のアートな世界」をテーマにそれぞれのセンターの研究成果からみられる美しい画像や不思議な画像を展示した。SCLS は細胞内分子ダイナミクスシミュレーションの映像を上映した。会場は家族連れや理科に関心のある小中学生、研究に興味のある高校生、大学生、他分野の研究者や学校教員など幅広い来場者でにぎわっていた。



図 65 サイエンスアゴラの様子

3) SC15(Supercomputing Conference 2015)ブース展示 (2015年11月15-20日)

開催場所：米国テキサス州オースティンコンベンションセンター

趣旨と内容：ハイパフォーマンスコンピューティング（高性能計算技術）、ネットワークワーキング、ストレージとアナリシス研究者と専門家が集まる1988年から毎年開催されている国際会議で、今回は27回目となる。計算科学研究機構、5分野、RISTが協力し、「京」成果を中心に、利活用に関する情報や取り組みについて紹介するブースを出展した。5回目となる今回は「京」の成果、「京」のシステム、ポスト「京」に向けた展望を軸として、ポスター展示やショートレクチャー、成果動画の上映がなされた。

分野1ショートレクチャータイトル：

TITLE: DOES COMPUTATIONAL LIFE SCIENCE TRANSFORM? FIVE YEARS' ACTIVITIES OF SPIRE 1

参加者数：12,157名

4) 第29回「理化学研究所と産業界との交流会」(2016年2月15日)

開催場所：ホテルニューオータニ（東京）

主催：理化学研究所と親しむ会

趣旨と内容：理化学研究所の役員、研究者等と企業の経営者、研究開発担当者との交流を目的として、毎年2月に文部科学省の協力も得て、理化学研究所研究者による最新の研究成果に関する講演および懇親会を開催している。毎回多様な業種の企業が参加している。懇親会会場では理化学研究所の研究センター等のパネルを35点展示し、各センターの研究者や広報担当者などが研究内容や施設について説明を行った。戦略分野1のパネルや映像を展示し、参加企業に研究内容について説明を行った。

パネル名：心疾患の合理的治療のためのマルチスケール・マルチフィジックス心臓シミュレーション UT-Heart

参加者数：308名

IV-3 SCLS 計算機システム公募利用の推進

多くの生命科学研究者による HPCI の活用を促進するため、医療および創薬を含む生命科学分野において、SCLS 計算機システム（「京」互換機システム）を整備し、**利用公募を行うことで広く研究者・技術者が HPCI を積極的に活用していくことを支援**した。大学、研究所、民間企業など幅広い範囲からの応募があり、採択件数 35 件、利用者数 124 名であり**利用率は約 70%**と活用されている。また**一部の SCLS 計算機システム利用者が「京」の利用を始めている**事例もある。

表 21 SCLS 計算機システム利用公募状況（2011 年～2014 年度）

公募時期	採択件数 (利用者数)	採択者研究代表機関
2012 年 12 月期	14 (51)	国立遺伝学研究所、公益財団法人がん研究会、理化学研究所生命システム研究センター、沖縄科学技術大学院大学オープンバイオロジーユニット、東京工業大学大学院情報理工学研究科、東京大学生産技術研究所、岡山大学大学院環境生命科学研究科、京都大学化学研究所、理化学研究所分子イメージング科学研究センター、理化学研究所杉田理論分子科学研究室、大阪大学大学院基礎工学研究科、理化学研究所次世代計算科学研究開発プログラム
2013 年 6 月期	8 (33)	横浜国立大学大学院工学研究院、早稲田大学高等研究所、医薬基盤研究所、NPO 法人 バイオグリッドセンター関西、塩野義製薬株式会社、岡山大学大学院環境生命科学研究科、東京大学大学院総合文化研究科、理化学研究所ライフサイエンス技術基盤研究センター
2013 年 10 月期	5 (14)	九州大学生体防御医学研究所、千葉大学大学院工学研究科、東京大学情報理工学系研究科、九州大学大学院工学研究院、(株)セルイノベーター
2014 年 3 月期	5 (22)	神戸大学システム情報学研究科、近畿大学先端技術総合研究所、旭化成ファーマ株式会社、東京農工大学農学府農学部、大阪大学大学院薬学研究科
2014 年 8 月期	3 (4)	理化学研究所放射光科学総合研究センター、国立国際医療研究センター研究所、岡山大学大学院自然科学研究科
2015 年 3 月期	7 (13)	東京大学生産技術研究所、近畿大学生物理工学部、千葉工業大学工学部、東京農工大学大学院工学研究院、農業・食品産業技術総合研究機構 果樹研究所、神戸大学大学院システム情報学研究科、千葉大学大学院工学研究科

V 研究成果の普及

A 実施計画

計算生命科学の情報発信と理解増進活動を行う。国内外の研究者に対し当該戦略分野1の研究開発の理解を広めるとともに、産業界や国民から広く理解を得るための活動を行う。具体的には、全国の研究者に認知されるための活動として、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研究開発の成果などの情報発信をするとともに、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や、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行う。また、ホームページや、ニュースレターにて研究成果の紹介、および情報の発信を行っていく。

B 実施内容(成果)

V-1 広報媒体やイベントを通じた情報発信・普及

国内外の研究者に対し研究開発の理解を広めるとともに、産業界や国民から広く理解を得るための活動を行った。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研究開発の成果などの情報発信を行った。また、パンフレット、ニュースレターやウェブサイトにて研究成果の紹介、および情報の発信を行った。

(1)パンフレット、ニュースレター発行(日本語版、英語版)

1) パンフレット発行

研究者や企業、一般などを対象として研究活動の重要性を伝えることにより社会的な価値の理解を得るため、対象別にパンフレットを制作した。



図 66 パンフレット

(左) 一般向け 1種類

(右) 研究者、企業向け 2種類

2) BioSupercomputing Newsletter 発行、Web 版 (日本語版、英語版)

コンテンツ拡充により Web サイトでトップページに次ぐアクセス数を維持(Web 版)

最新の情報を提供する Newsletter を年2回、発行してきた。

【2011-2014年度】Vol. 5~12

【2015年度】Vol. 13 (2015年9月発行)、Vol. 14 (2016年2月発行予定)

(2) インターネットによる情報発信

計算生命科学の初心者から専門家までマルチに対応した Web サイト

1) ホームページ（日本語、英語）

【2011 年度】日本語版 2011 年 7 月 1 日改変、英語版 2011 年 11 月 1 日開設。

【2012 年度】活動の拡充に伴うコンテンツの充実と利便性の向上のための改良。SNS 開設。

【2013 年度】デザイン及び構成のサイト刷新リニューアル。ソフトウェア提供のための改良。

【2014 年度】サイトページの追加およびコンテンツの充実。

【2015 年度】サイトページの追加およびコンテンツの充実。



図 67 ニュースレターとホームページ

(3) 研究紹介コンテンツ

分野 1 の研究内容や研究者を全国の高校や科学館、科学イベントの会場などで紹介することで、若い人への計算生命科学分野の人材育成と研究について普及を図るため、高校生以上を対象とした研究紹介コンテンツを制作し、シンポジウムなどでの展示に活用した。

1) パネル



図 68 研究紹介パネル

2) 動画

- 【2013 年度】 研究者に聞く Vol. 1 (日本語版・英語版)
研究者に聞く Vol. 2 (日本語版・英語版)
- 【2014 年度】 研究者に聞く Vol. 3 (日本語版・英語版)
 - ・ コンピュータの中で生きる細胞～音楽から生命科学へ～ (Long)
 - ・ コンピュータの中で生きる細胞～細胞シミュレーション～ (Short)
- 【2015 年度】 研究者に聞く Vol. 4 (日本語版・英語版)
 - ・ 計算機シミュレーションで探る新しい薬づくり (Long and Short)

(4)可視化コンテンツ

一般市民への研究成果の普及と医療従事者への医学界へのシミュレータ応用の普及を図るために計算結果に基づき可視化コンテンツを制作した。

【2013年度】 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

【2014年度】 核内混み合い環境でのヌクレオソーム、クロマチンの機能と発現機構

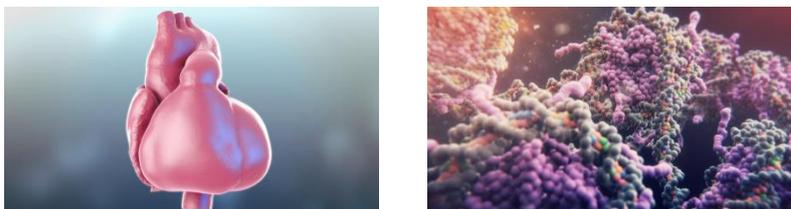


図 69 可視化コンテンツ

(左) 心臓シミュレータ (右) ヌクレオソーム

UT-Heart 映像は、世界最大規模の CG の国際会議 SIGGRAPH2015 コンピュータアニメーションフェスティバルにて BEST VISUALIZATION OR SIMULATION を受賞した。国内外のメディアで数多く取り上げられ、You tube 再生回数（英語版）は 25 万回以上を記録し大きな反響を得た。

V-2 メディア(TV・新聞・雑誌など)での報道、プレスリリース

(1) 新聞・雑誌、テレビ放映、プレスリリース等

一覧については参考資料参照。

(2) 報道機関への説明会の開催

マスコミを通じたアウトリーチ活動を実施した。2013 年度のアンケートでは「理解しやすかった」が 90%を超え、2015 年度においては全体を通して「とても良い」「良かった」と、参加者全員より感想が寄せられた。実施後に新聞や雑誌にて研究成果が記事化され、メディアを通じて計算生命科学の重要性を発信することに繋がった。

表 22 マスコミを通じたアウトリーチ活動

実施日	タイトル	実施機関	メディア参加数
2012/11/6	第 1 回 広報・記者勉強会	計算科学研究機構、HPCI 戦略プログラム 5 分野、高度情報科学技術研究機構	12社
2013/2/6	第 2 回 広報・記者勉強会	計算科学研究機構、HPCI 戦略プログラム 5 分野、高度情報科学技術研究機構	10社
2013/9/9	“「京」が切り拓くライフサイエンス最前線！”記者勉強会	HPCI 戦略プログラム 分野1および分野2、 計算科学研究機構	10社
2015/9/30	第 2 回“「京」が切り拓くライフサイエンス最前線！”記者勉強会	HPCI 戦略プログラム 分野1、 計算科学研究機構	11社

V-3 「京」見学および講義の実施

計算生命科学の理解促進を図るため「京」施設の見学、HPCI 戦略プログラムの概要や研究課題の説明を、計算科学研究機構と連携し実施した。計35回、200人以上の見学者への対応を行った。

V-4 産業界との連携

「京」を活用した創薬研究の初期段階における創薬企業の連携体制の構築

研究成果の普及とスーパーコンピュータ「京」の利用促進するために大学、製薬企業とベンダーから成る組織を設立し、インシリコ創薬事業の支援を実施している。2つのコンソーシアムの設立と運営の支援を実施した。

(1)KBDD 創薬コンソーシアム

目的：コンピュータ創薬に挑むため、大学、製薬企業とベンダーから成る組織を設立し、新薬開発を加速するため「京」の産業利用枠に応募し、戦略分野1で開発されたソフトウェアの実用化を目指す基盤を構築した。

申請主体（事務局）：NPO 法人バイオグリッドセンター関西

研究代表：奥野恭史（京都大学薬学研究科、教授）

製薬企業：2012年度：11社、2013年度：14社、2014年度：23）

アステラス製薬(株)、アスピオファーマ(株)、エーザイ(株)、小野薬品工業(株)、科研製薬(株)、(株)カネカ、キッセイ薬品工業(株)、協和発酵キリン(株)、杏林製薬(株)、参天製薬(株)、塩野義製薬(株)、千寿製薬(株)、大正製薬(株)、大日本住友製薬(株)、田辺三菱製薬(株)、帝人ファーマ(株)、東レ(株)、日本新薬(株)、日本たばこ産業(株)、日産化学工業(株)、マルホ(株)、Meiji Seika ファルマ(株)、持田製薬(株)

IT企業（2社）：(株)京都コンステラ・テクノロジーズ、三井情報(株)

大学等：京都大学大学院薬学研究科、神戸大学大学院工学研究科、(独)産業技術総合研究所、理化学研究所理研 HPCI 計算生命科学推進プログラム企画調整グループ



図 70 KBDD 創薬コンソーシアム

(2) FMO 創薬コンソーシアム

目的：日本初の理論手法であるフラグメント分子軌道 (FMO) 法の創薬への活用

FMO 創薬コンソーシアム：製薬企業 (11 社)、情報系企業 (1 社)、教育・研究機関 (6 機関)

協力機関：戦略分野 1 「予測する生命科学：医療および創薬基盤」、
戦略分野 4 「次世代ものづくり」、
大阪大学、神戸大学、日本大学、岡山理科大学、豊橋技術科学大学、理
研

2015 年度「京」産業利用枠「HPCI を活用した FMO 創薬プラットフォームの構築」

代表者： 福沢薫 (日本大学)

副代表者： 田中成典 (神戸大学)、本間光貴 (理化学研究所)

参加企業： 10 社

V-5 ソフトウェアの普及

(1) ソフトウェア・ダウンロードサイト

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)および分野 1 において「京」で開発されたソフトウェアの成果を普及することを目的に、分野 1 のホームページ内に作製した。

生命科学研究者や医療、創薬系産業界(含む医療機関)の研究者、技術者などの利用者にとってより一層利用しやすい環境を整備し、生命科学研究者や産業界等への利用支援・裾野拡大に取り組むことにより、産業競争力の強化、科学技術・イノベーション推進に大きく貢献することを目的としている。

VI 分野を超えた取組の推進

A 実施計画

戦略的連携を進める。具体的には、他の戦略分野、計算科学研究機構、HPCI コンソーシアムとの連携を進める。

B 実施内容（成果）

VI-1 連携推進会議による円滑な連携の推進

計算科学研究機構と HPCI 戦略プログラム 5 分野および R I S T の間での相互の情報交換や連携のための会議を平成 22 年のフィージビリティスタディ実施段階から平成 27 年 12 月 10 日までに 18 回開催し、「京」の有効な活用、広報や人材育成の連携に関し、協力と意思決定を行った。さらに具体的な検討に関しては、連携推進会議のもとに広報責任者会議などの会議を設置し、詳細な検討を行った。

その結果、合同研究交流会、共同でのシンポジウム開催、広報活動などを着実に実施することができた。また、今後の発展につなげるため、ポスト「京」重点課題との重点課題連携推進会議も平成 27 年 8 月 26 日より開始されている。

VI-2 連携によるシンポジウム、広報活動等の実施

(1) HPCI 戦略プログラム 5 分野合同研究交流会

HPCI 戦略プログラム 5 分野にて、「京」利用開始にあたって、技術的情報を共有し、研究活動の促進を図るため研究交流会を開催した。研究交流会では、分野を超えて計算科学を活用するという観点で盛んな議論が行われた。

2011 年 6 月から 2013 年 1 月まで計 5 回開催し、「京」の供用開始に伴う情報交換とノウハウの共有という目的を達成した。

(2) 「京」コンピュータシンポジウム及び 5 分野ワークショップ開催

計算科学研究機構および戦略 5 分野が協力し、シンポジウム・ワークショップを 5 回開催し、数多くの参加者に対し、研究成果の説明を行った。

- ① 次世代スーパーコンピューティング・シンポジウム 2010
および第 1 回戦略プログラム 5 分野合同ワークショップ
「生命科学における高性能計算」(柳田敏雄 統括責任者) 参加人数:303 名
- ② 京コンピュータシンポジウム&5 分野ワークショップ開催
(2012 年 6 月 14、15 日、ニチイ学館 (神戸))
「創薬応用シミュレーション」(藤谷秀章 GL) 参加人数:389 名 (両日)
- ③ 京コンピュータシンポジウム 2013
(2013 年 5 月 13 日、東京イイノカンファレンスセンター)
「生きた心臓を京に再現」杉浦清了 (東京大学・教授)
「スパコン「京」が拓く医薬品開発の未来 -速い安い旨い薬づくり-」
奥野恭史 (京都大学・教授)
- ④ 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 -

(2014年8月23日～24日(講演会23日) 科学技術館(東京))

参加者数：講演会229名、展示各日700名 計1,400名

「スパコンが加速するがん研究」 宮野 悟(東京大学医科学研究所・教授)

「招待講演 sickケアからhealthケアへ DeNAの挑戦 ～ポスト京に期待すること～」

南場 智子(株式会社ディー・エヌ・エー 取締役)

⑤ 「スーパーコンピュータの今とこれから」

(2016年1月29日 よみうり大手町ホール(東京))

「基礎医学と臨床医学をつなぐ心臓シミュレータ UT-Heart」

久田 俊明(東京大学・名誉教授/(株)UT-Heart 研究所 代表取締役会長)

(3)HPCI成果報告会への協力

HPCIの利用支援を実施する高度情報科学技術研究機構が主催する成果報告会において、戦略分野としての発表などの協力を実施した。

① 第1回「京」を中核とするHPCIシステム利用研究課題 成果報告会

(2014年10月30日 コクヨホール(東京))

「基礎医学とベッドサイドを繋ぐ心臓シミュレータ」(東京大学・教授)

② 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

(2015年10月26日 日本科学未来館(東京))

「パネルディスカッション～HPCI 戦略プログラムが達成したもの～」

(藤谷秀章 GL(東京大学・教授))

(4) 戦略プログラム 最終年度成果報告会「スパコン「京」がひらく科学と社会」

戦略プログラム最終年度となる平成 27 年度には、計算科学研究機構および戦略 5 分野、高度情報科学技術研究機構が協力し、「スパコン「京」がひらく科学と社会」と題して一連のシンポジウムを開催した。これにより、幅広い分野において、「京」によって初めて可能となった成果を報告することができた。

スパコン「京」がひらく科学と社会
HPCI 戦略プログラム最終年度に行うシンポジウム一覧

ACIS RIST シンポジウム「スーパーコンピュータの今とこれから」
2016年1月29日(金)10:00～17:00
会場 よみうり大手町ホール 内容 「京」での研究成果、ポスト「京」の開発状況など
対象 一般、メディア、関係者 参加方法 事前登録(当日受付可) 参加費 無料
問い合わせ <http://www.aics.riken.jp/> メール: aics-koho@riken.jp 電話: 078-940-5738
主催: 理化学研究所計算科学研究機構、高度情報科学技術研究機構

RIST 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
2015年10月26日(月)10:00～18:00
会場 日本科学未来館 内容 優秀成果、戦略分野の成果、ポスター発表
対象 課題参加者、研究者、メディア 参加方法 事前登録(当日受付可) 参加費 無料
問い合わせ <http://www.hpci-office.jp/> メール: koho@hpci-office.jp 電話: 078-599-9511
主催: 高度情報科学技術研究機構

分野1 Supercomputational Life Science 2015 ～分野1 予測する生命科学・医療および創薬基盤～
2015年10月20日(火)～21日(水)
会場 東京大学 武田ホール テーマ 細胞質、創薬、血栓症、骨格筋、がん
対象 一般、メディア、関係者 参加方法 事前登録(当日受付可) 参加費 無料
問い合わせ <http://www.scls.riken.jp/scls2015/> メール: scls-registration@riken.jp 電話: 078-940-5835
主催: 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」

分野2 第6回 CMSI 研究会 ～分野2「新物質・エネルギー創成」最終成果報告会～
2015年12月7日(月)～8日(火)
会場 東京大学 小柴ホール テーマ 新量子相、新物質、先端デバイス、分子機能と物質変換
対象 一般、メディア、関係者 参加方法 事前登録(当日受付可) 参加費 無料
問い合わせ <http://www.cms-initiative.jp/> メール: adm-office@cms-initiative.jp 電話: 04-7136-3279
主催: 計算物質科学イニシアティブ(物性研、分子研、金研)、HPCI 戦略プログラム分野2「新物質・エネルギー創成」

分野3 防災・減災に資する地球変動予測 最終成果報告会
2016年1月28日(木)
会場 インノカンパレンスセンター Room A 内容 最終年度の成果を中心に、5年間全体の成果を紹介
対象 関係者、研究者、メディア 参加方法 事前登録(当日受付可) 参加費 無料
問い合わせ <http://www.jamstec.go.jp/hpci-sp/> メール: hpci-spro@jamstec.go.jp 電話: 045-778-5753
主催: 海洋研究開発機構

分野4 第6回 HPCI 戦略プログラム「分野4 次世代ものづくり」シンポジウム (最終成果報告会)
2016年3月23日(水)～24日(木)
会場 東京大学生産技術研究所コンベンションホール 内容 各課題からの成果発表およびユーザーからの事例紹介
対象 一般、メディア、関係者 参加方法 事前登録(当日受付可) 参加費 無料
問い合わせ <http://www.spire.iis.u-tokyo.ac.jp/> メール: office@ciss.iis.u-tokyo.ac.jp 電話: 03-5452-6661
主催: 東京大学生産技術研究所(予定)

分野5 国際シンポジウム「クオークから宇宙まで」
2015年11月4日(水)～8日(日) 市民講演会 7日(土)15:00～17:00
会場 奈良春日野国際フォーラム 豊～I-RA-KA～ テーマ 格子QCD、原子核、超新星爆発、ブラックホール
対象 一般、メディア、関係者 参加方法 事前登録(当日受付可) 参加費 無料
問い合わせ <http://www.jicfus.jp/> 電話: 029-853-6250
主催: HPCI 戦略プログラム分野5「物質と宇宙の起源と構造」

図 71 最終年度成果報告会「スパコン「京」がひらく科学と社会」

(5) Supercomputational Life Science 2015

戦略分野 1 として、2015 年 10 月 20 日、21 日に東京大学武田先端知ビルにおいて、『-スパコン「京」がひらく科学と社会 - Supercomputational Life Science 2015 (SCLS2015)』を開催し、143名の参加があった。

1 日目は International Workshop として、海外からの著名な研究者を招聘し、大規模計算による生命科学分野での研究に関して活発な議論が行われた。

スパコン「京」がひらく科学と社会

Supercomputational Life Science 2015 (SCLS2015)

Takeda Hall, Takeda Sentanchi Building, The University of Tokyo

DAY1 International Workshop on Current Topics

Tuesday, October 20, 2015	
9:30 – 10:00	Registration
10:00 – 10:20	Opening Remarks
10:00 – 10:10	Yoichiro Matsumoto, RIKEN
10:10 – 10:20	Toshio Yanagida, RIKEN
10:20 – 11:30	Session 1: Challenge for the Slow Motions of Biomolecules by Advanced MD Simulation Methods (Session Chair: Yuji Sugita, RIKEN)
10:20 – 10:50	Impact on Nucleosome Dynamics via Histone Variants and Post-Translational Modifications Hidetoshi Kono, Japan Atomic Energy Agency
10:50 – 11:30	Millisecond Dynamics of RNA Polymerase II Translocation at Atomic Resolution Xuhui Huang, The Hong Kong University of Science and Technology
(90 minutes)	Lunch (and Poster Set-Up)
13:00 – 14:10	Session 2: GROMACS: Its Applications and Future (Session Chair: Hideaki Fujitani, The University of Tokyo)
13:00 – 13:30	Molecular Simulation for Antibody Drug Development Keiko Shinoda, The University of Tokyo
13:30 – 14:10	The Path to Exascale Molecular Simulation: Parallelization, Acceleration, and Ensemble Simulation Techniques to Understand Biological Macromolecules Erik Lindahl, Stockholm University and KTH Royal Institute of Technology
14:10 – 15:10	Poster Session (and Coffee Break)
15:10 – 16:20	Session 3: Integrated Simulation of the Basal Ganglia Circuit for Understanding Its Function and Pathology (Session Chair: Shu Takagi, The University of Tokyo)
15:10 – 15:40	Can an Integrated Model of the Basal Ganglia-Thalamo-Cortico-Spinal Network and the Musculoskeletal System Reproduce Healthy and Pathological Motor Behaviors? Kenji Doya, Okinawa Institute of Science and Technology Graduate University
15:40 – 16:20	Sensing Positive Versus Negative Reward Related Signals in the Direct and Indirect Basal Ganglia Pathways - A Computational Investigation of Read-Out Mechanisms Jeanette Hellgren Kotaleski, KTH Royal Institute of Technology
(20 minutes)	Coffee Break
16:40 – 17:50	Session 4: Biomedical Big Data Analysis (Session Chair: Hideo Matsuda, Osaka University)
16:40 – 17:20	Breast Cancer Phenotype Characterization by Network-Based Omics Data Analysis Sun Kim, Seoul National University
17:20 – 17:50	Supercomputers for Cancer Research and Cancer Big Data Satoru Miyano, The University of Tokyo
18:00 – 20:00	Reception

2日目は各課題の研究者によって、「京」によって可能となった研究成果の報告を実施した。また、1日目、2日目にはポスターセッションを開催し、研究者と参加者との間での詳細な議論が行われた。

DAY2 : 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

10月21日(水)	
9:00-9:30	受付
オープニング	
9:30-9:45	工藤雄之 (文部科学省 研究振興局 参事官 (情報担当) 付 計算科学技術推進室 室長) 柳田敏雄 (理化学研究所 HPCI 計算生命科学推進プログラム)
9:45-11:35	研究報告 課題1「細胞内分子ダイナミクスのシミュレーション」 杉田有治 (理化学研究所杉田理論分子科学研究室) バクテリア細胞質の全原子分子モデルと大規模分子動力学シミュレーション 杉田有治 (理化学研究所杉田理論分子科学研究室) (1時間50分) GL: 30 分 PI: 15分×4=60 分 質疑 計 20 分
	上皮成長因子応答経路の1分子粒度シミュレーション 高橋恒一 (理化学研究所生命システム研究センター) リン酸化酵素反応機構の理解に向けた自由エネルギー解析 林重彦 (京都大学大学院理学研究科) MD+SAXS法を用いた核内DNA結合タンパク質の機能構造シミュレーション 池口満徳 (横浜市立大学生命医科学研究科) 粗視化分子モデルを用いたリン酸化酵素複合体とクロマチンの動的モデリング 高田彰二 (京都大学大学院理学研究科)
11:35-12:15	研究報告 課題2「創薬応用シミュレーション」 藤谷秀章 (東京大学先端科学技術研究センター) GL: 25~30 分 リガンドによるタンパク質の構造変化と結合自由エネルギー 質疑 10~15分 藤谷秀章 (東京大学先端科学技術研究センター)
12:15-13:15	昼食
13:15-14:15	ポスターセッション
14:15-16:05	研究報告 課題3「予測医療に向けた階層統合シミュレーション」 高木周 (東京大学大学院工学系研究科) 抗血小板薬効予測のためのマルチスケール血栓症シミュレーションと筋繊維の集合体としての骨格筋のシミュレーション 高木周 (東京大学大学院工学系研究科) (1時間50分) GL: 30 分 PI: 15分×4=60 分 質疑 計 20 分
	抗血小板薬効予測を可能とする階層統合シミュレータの開発に向けたモデリング 後藤信哉 (東海大学医学部内科学系) 心疾患の合理的治療のためのマルチスケール・マルチフィジックス心臓シミュレーション 久田俊明 (株式会社 UT-Heart 研究所) ヒトの運動器、運動神経、感覚神経からなるシステムの統合シミュレーション 中村仁彦 (東京大学大学院情報理工学系研究科) コンプライアントな生体筋・腱系に駆動されるヒト骨格系の運動制御に対して大脳基底核が果たす役割の数理モデル化 野村泰伸 (大阪大学大学院基礎工学研究科)
(10分)	休憩
16:15-17:25	研究報告 課題4「大規模生命データ解析」 宮野悟 (東京大学医科学研究所) (1時間10分) GL: 25~30 分 PI: 15分×2=30 分 質疑 10~15 分
	大規模生命データ解析:「京」で初めて見えた世界 宮野悟 (東京大学医科学研究所) 大規模生体分子ネットワーク解析による脂肪細胞のエネルギー消費への転換機構の解明 松田秀雄 (大阪大学大学院情報科学研究科) 次世代シーケンサデータ解析のための情報処理システムの開発 秋山泰 (東京工業大学大学院情報理工学研究科)
(10分)	休憩
17:35-18:15 (40分)	成果報告「計算生命科学の教育とアウトリーチー ー現在と未来」 江口至洋 (理化学研究所HPCI計算生命科学推進プログラム)
18:15-18:25	クロージング・ポスター賞発表



図 73 SCLS2015

(上)成果報告会プログラム (左下)シンポジウム会場の様子 (右下)ポスターセッション

(6) SC出展等への協力

毎年、米国で開催される S C (The International Conference for High Performance Computing, Networking, Storage and Analysis, 参加者約 10,000 名)において、計算科学研究機構と HPCI 戦略 5 分野と連携して共同出展を行っている。

- SC11(2011 年 11 月 12-18 日、米国ワシントン州シアトル)
- SC12(2012 年 11 月 12-15 日、米国ユタ州ソルトレイクシティ)
- SC13(2013 年 11 月 17-22 日、米国コロラド州デンバー)
- SC14(2014 年 11 月 16-20 日、米国レイジアナ州ニューオリンズ)
- SC15(2015 年 11 月 15-20 日、米国テキサス州オースティン)

(7) 大学での共同講義

神戸大学発達科学部にて 2012 年度後期「自然環境科学特論 D」(11 月 17 日、12 月 1 日、15 日)において、計算科学研究機構と 5 分野とで、スーパーコンピュータ「京」を用いた計算科学が自然環境をどのように把握し、解析しているのか、さらにその結果が人および社会に与えるインパクト、もたらす福音に焦点をあてたオムニバス形式の連携授業「スーパーコンピュータ『京』が開く新しい科学」(受講者:22 名)を実施した。

さらに、2013 年度より、神戸大学大学院システム情報科「大規模計算科学講座(連携講座):大規模シミュレーション概論」において、計算科学研究機構、戦略分野 5 分野の研究者の連携による講義が、継続的に実施されている。

Ⅶ プロジェクトの総合的推進

A 実施計画

研究開発と計算科学技術推進体制構築の推進にむけ、関係機関との連携を強化する。また、プロジェクト全体の連携を密とし、円滑に運営していくために、当該分野1の運営委員会を定期的に開催し情報共有を継続して行う。また、研究開発課題関係者の会議や成果報告会、参画各機関の関係者による会議、外部諮問委員会を開催する。さらに、平成27年度は、プロジェクトの最終的な成果を報告するため、招待講演者を交えたシンポジウムを開催する。

B 実施内容(成果)

(1) 運営委員会

プロジェクト全体の運営に関する意志決定を行うため、統括責任者・副統括責任者・グループリーダーなどによる運営委員会を実施した(第1回:平成23年4月26日~第54回:平成28年3月18日)。

これにより、「研究開発」と「計算科学技術推進体制の構築」が情報共有をほかり、協調してプロジェクトの推進を行った。この運営委員会において、プロジェクトの進捗管理、計算資源の配分、予算配分、新規課題についての調整など円滑かつ効率的に実施することができた。

平成27年度は以下の日程で運営委員会を開催した。

第44回運営委員会	4月30日(月)15:00-17:00	東大医科研
第45回運営委員会	5月18日(月)15:00-17:00	理研東京連絡事務所
第46回運営委員会	6月19日(金)15:00-17:00	理研東京連絡事務所
第47回運営委員会	7月17日(金)15:00-17:00	理研東京連絡事務所
第48回運営委員会	9月18日(金)10:00-12:00	理研東京連絡事務所
第49回運営委員会	10月21日(水)12:15-13:30	東大武田ホール 控室
第50回運営委員会	11月20日(金)15:00-17:00	理研東京連絡事務所
第51回運営委員会	12月25日(金)14:00-16:00	東大医科研
第52回運営委員会	1月15日(金)15:00-17:00	理研東京連絡事務所
第53回運営委員会	2月19日(金)15:00-17:00	理研東京連絡事務所
第54回運営委員会	3月18日(金)15:00-17:00	理研東京連絡事務所

(2) 全体ワークショップ

プロジェクトの全参加者が、個々の研究の進捗状況と今後の計画について発表し、互いに理解を深め、議論を行うことでより良い成果に繋げ、プロジェクト全体の今後の方向性を検討し、次年度の計画立案、資源配分に反映させることを目的として実施した。また、若手研究者によるポスターセッションも開催し、研究者間での交流も行うことができた。

第1回 2011年12月3日~4日 (理研和光 鈴木梅太郎ホール)

第2回 2012年11月29日~30日 (理研計算科学研究機構)

第3回 2015年1月6日~7日 (理研計算科学研究機構)

平成27年度は全体ワークショップにかえて、公開のシンポジウム SCLS2015 を開催した。

(3)外部諮問委員会

HPCI 戦略プログラム分野1の適切、かつ最良な推進を目的とし、国内の有識者、海外の専門家からなる外部諮問委員会を開催した。

①外部諮問委員

Peter Kohl (Chair in Cardiac Biophysics and Systems Biology,
Imperial College, National Heart and Lung Institute, The Heart
Science Centre, Professor)

郷 通子 (情報・システム研究機構、理事)

金岡 昌治 (株式会社住化分析センター、代表取締役社長)

②開催状況

第1回 2012年1月10-11日：研究計画の説明と委員からの Recommendation

第2回 2013年9月29-30日：研究実施状況、Recommendation 対応状況の説明

第3回 2015年7月3日：最終成果の報告

最終報告に対する委員会の report :

“The outcome of large scale simulations are **impressive** and will have a **great impact** not only on our **understanding of life mechanisms** but also for **medical applications**, such as **drug discovery, diagnostics, and treatment of diseases.**”



図 74 外部諮問委員会