



## HPCI戦略分野1

「予測する生命科学・医療および創薬基盤」  
のめざすもの

副統括 木寺詔紀

[HPCI概要 Summary](#)

[利用案内 Guide](#)

[課題公募 Invite](#)

[利用者向け User](#)

[利用成果 Result](#)

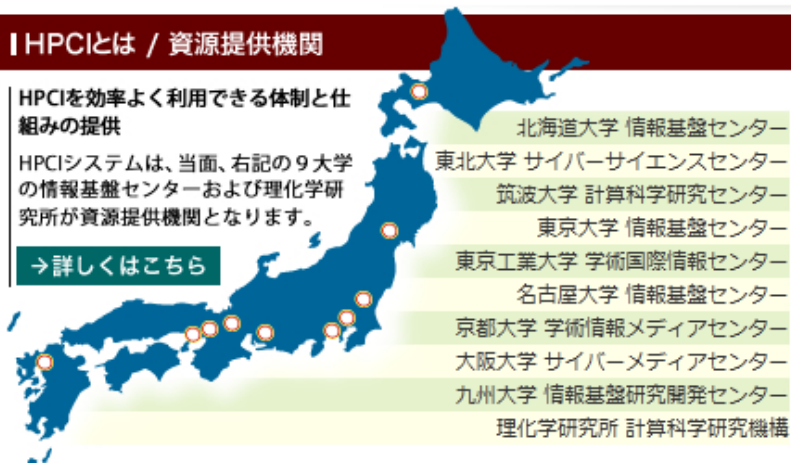


### I HPCIとは / 資源提供機関

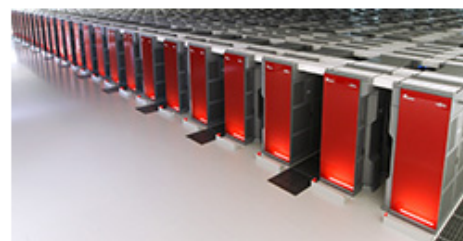
HPCIを効率よく利用できる体制と仕組みの提供

HPCIシステムは、当面、右記の9大学の情報基盤センターおよび理化学研究所が資源提供機関となります。

[→詳しくはこちら](#)



- 北海道大学 情報基盤センター
- 東北大学 サイバーサイエンスセンター
- 筑波大学 計算科学研究センター
- 東京大学 情報基盤センター
- 東京工業大学 学術国際情報センター
- 名古屋大学 情報基盤センター
- 京都大学 学術情報メディアセンター
- 大阪大学 サイバーメディアセンター
- 九州大学 情報基盤研究開発センター
- 理化学研究所 計算科学研究機構



2012年秋  
本格始動!

[→詳しくはこちら](#)

### 資源提供機関リンク

- |                          |                              |
|--------------------------|------------------------------|
| 北海道大学<br>情報基盤センター        | 名古屋大学<br>情報基盤センター            |
| 東北大学<br>サイバーサイエンスセンター    | 京都大学 学術情報<br>メディアセンター        |
| 筑波大学<br>計算科学研究センター       | 大阪大学<br>サイバーメディアセンター         |
| 東京大学<br>情報基盤センター         | 九州大学 情報基盤<br>研究開発センター        |
| 東京工業大学<br>学術国際<br>情報センター | 独立行政法人<br>理化学研究所<br>計算科学研究機構 |
| 国立<br>情報学<br>研究所         | その他HPCI<br>システム構成機関          |

# 一般社団法人HPCIコンソーシアム

## ユーザー視点のインフラ構築を目指して

### お知らせ News

2012年8月31日 ホームページを公開しました。

[お知らせ一覧](#)

### プレスリリース Press Release

現在、プレスリリースはありません。

### 理事長の挨拶 Greeting

我が国が、科学技術並びに産業界の広汎な分野で今後とも世界をリードし続けるため、計算科学技術のいっそうの振興が求められております。このようななか、一般社団法人HPCIコンソーシアムは、我が国の計算科学技術に関わる全ての方々並びに諸機関に開かれた組織として、平成24年4月に設立されました。



一般社団法人HPCIコンソーシアム  
理事長 宇川 彰

平成18年度に開始された次世代スパコンプロジェクトが、平成21年11月の事業仕分けを踏まえてHPCI計画へと発展して以来既に2年半が経過しました。HPCI計画は、二つの大きな柱に支えられております。その一つは、利用者視点に立脚して、次世代スパコン「京」を中核とし、我が国のHPC基盤全体を連携するHPCIシステムの整備と運用であります。もう一つの柱が、このような日本全国に広がるシステムを舞台として、計算科学技術の振興に携わる幅広いコミュニティの活動を支え、その意見を集約するコンソーシアムの構築であります。

HPCIコンソーシアムの構築は、平成22年7月に38機関をメンバーとする「準備段階HPCIコンソーシアム」により出発いたしました。その後、1年半の検討を経て、本年1月に、HPCIコンソーシアムの具体像が最終報告として取りまとめられました。この最終報告に基づいて一般社団法人HPCIコンソーシアムの設立準備が進められ、4月2日に法人設立に至りました。



## ■HPCI戦略プログラム

HPCI戦略プログラムは、社会的・学術的に大きなブレイクスルーが期待できる分野(戦略分野)において、HPCIを活用した成果の創出と、研究推進・研究支援や人材育成等を進めていくための体制整備を進めていくものです。

具体的には、「京」を中核とするHPCIを最大限活用し、1画期的な成果創出、2高度な計算科学技術環境を使いこなせる人材の創出、3最先端コンピューティング研究教育拠点の形成を目指し、戦略機関を中心に戦略分野の「研究開発」及び「計算科学技術推進体制の構築」を推進していきます

文部科学省においては、平成21年に戦略分野として、以下の5つを決定しました。現在、各戦略分野における研究開発等を牽引する機関(戦略機関)を中心に先端的なシミュレーション研究や人材育成プログラムが行われています。

- ・ 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:理化学研究所)
- ・ 戦略分野2 新物質・エネルギー創成(戦略機関:東京大学物性研究所、分子科学研究所、東北大学金属材料研究所)
- ・ 戦略分野3 防災・減災に資する地球変動予測(戦略機関:海洋研究開発機構)
- ・ 戦略分野4 次世代ものづくり(戦略機関:東京大学生産技術研究所、宇宙航空研究開発機構、日本原子力研究開発機構)
- ・ 戦略分野5 物質と宇宙の起源と構造(戦略機関:筑波大学、高エネルギー加速器研究機構、国立天文台)

### HPCI戦略プログラム戦略分野

「京」を中核とするHPCIを最大限活用し、①画期的な成果創出、②高度な計算科学技術環境を使いこなせる人材の創出、③最先端コンピューティング研究教育拠点の形成を目指し、戦略機関を中心に戦略分野の「研究開発」及び「計算科学技術推進体制の構築」を推進する。

	<戦略分野>	<戦略機関>
分野1	<b>予測する生命科学・医療および創薬基盤</b> <small>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ことにより、疾病メカニズムの解明と予測をおこなう。医療や創薬プロセスの高度化への寄与も期待される。</small>	・理化学研究所
分野2	<b>新物質・エネルギー創成</b> <small>物質を原子・電子レベルから総合的に理解することにより、新規機能分子や電子デバイス、更には各種電池やバイオマスなどの新規エネルギーの開発を目指す。</small>	・東大物性研(代表) ・分子研 ・東北大金材研
分野3	<b>防災・減災に資する地球変動予測</b> <small>高精度の気候変動シミュレーションにより地球温暖化に伴う影響予測や集中豪雨の予測を行う。また、地震・津波について、これらが建造物に与える被害をも考慮した予測を行う。</small>	・海洋研究開発機構
分野4	<b>次世代ものづくり</b> <small>先端的要素技術の創成～組み合わせ最適化～丸ごとあるがまま性能評価・寿命予測というプロセス全体を、シミュレーション主導でシームレスに行う。新しいものづくりプロセスの開発を行う。</small>	・東大生産研(代表) ・宇宙航空研究開発機構 ・日本原子力研究開発機構
分野5	<b>物質と宇宙の起源と構造</b> <small>物質の究極的創成構造から星・銀河の誕生と進化の全プロセスの解明まで、極微の素粒子から宇宙全体に至る基礎科学を融合し、物質と宇宙の起源と構造を統合的に理解する。</small>	・筑波大(代表) ・高エネ研 ・国立天文台

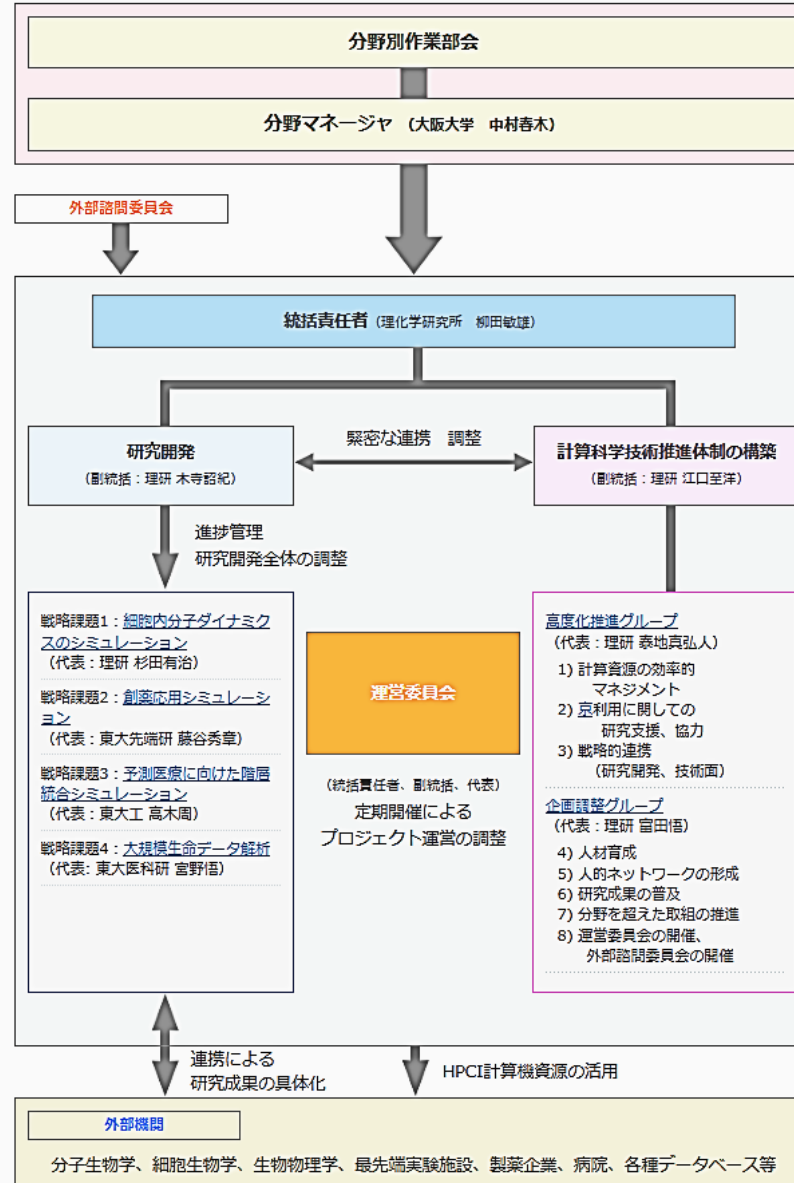
※ 京連コンピュータ「京」で、社会的・学術的に大きなブレイクスルーが期待できる分野を「戦略分野」(5分野)とする。  
 ※ 各戦略分野の研究開発、分野振興等を牽引する機関を「戦略機関」とする。

## 計算科学技術推進体制

HOME > 計算科学技術推進体制 > 運営体制

[ English ]

- 概要
- 計算科学技術推進体制
- 運営体制**
- 事業内容
- 研究開発体制
- 研究成果の紹介
- Q&Aと用語解説
- アウトリーチ活動
- リンク
- お問い合わせ  
senyaku@nriken.jp



# 人材育成

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」

プロジェクト詳細

- ご挨拶
- 委担担当者
- 教育内容
- シンポジウム
- セミナー

最新情報

hpcite  
hpcite

hpcite ワンショップを東京国際フォーラムで開催！  
hpcite@me.es.osaka-u.ac.jp hpcite@me.es.osaka-u.ac.jp

hpcite hpcite.me.es.osaka-u.ac.jpにてWebページをオープンしました！

AmSocBiomech CALL FOR ABSTRACTS - 26th Annual Meeting of the American Society of Biomechanics (August 15 to 18, 2012). <http://ufi.edu/apk/cas/ASB2012>

AmSocBiomech The December 2011 edition of the American Society of Biomechanics newsletter now available: [asweb.org/html/newslette...](http://asweb.org/html/newslette...)

Join the conversation

大阪大学大学院基礎工学研究科  
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」教育プログラム

最新情報

[第三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を開催](#)

2012年12月19日(水)13:00-17:00

大阪 梅田センタービル16F H会議室

連絡先

大阪大学大学院基礎工学研究科機能創成専攻生体工学領域 野崎一彦  
Email: hpci@me.es.osaka-u.ac.jp

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」  
人材養成プログラム  
戦略機関 独立行政法人理化学研究所

実施機関 独立行政法人産業技術総合研究所 生命情報工学研究センター



(独)産業技術総合研究所 生命情報工学研究センター が実施する人材養成プログラムのホームページです。

- ▶ top
- ▶ outline
- ▶ seminar
- ▶ workshop
- ▶ tutorial
- ▶ e-learning
- ▶ links
- ▶ contact
- ▶ faq

ユーザー名:

パスワード:

パスワード紛失

<b>tutorial</b>	2012年7月4日(水)～ 受講申込受付中～ 生命情報工学研究センターで1人1台のPCを用いた実習付きのチュートリアルを開催します。	<a href="#">詳細はこちら</a>
<b>e-learning</b>	2012年4月16日受付開始・通年開講 ～ 開講中～ どなたでもお好きな時間インターネット経由で学べるe-ラーニング	<a href="#">詳細はこちら</a>
<b>seminar</b>	2012年10月12日～2012年1月25日 ～ 各回の講演タイトルおよびキーワードを公開中～ 毎週金曜日 全12回の講演シリーズです。	<a href="#">詳細はこちら</a>
<b>workshop</b>	2012年11月1日(木)～ 講演者決定!! 参加登録受付中～ HPC(High Performance Computing)を用いた生命科学の最先端の話題にフォーカスしたワークショップを開催します。(このワークショップはBIWO 2012の一環として開催します。)	<a href="#">詳細はこちら</a>

## お知らせ

- 2012.09.07 2012年度セミナーのタイトル・キーワードが発表となりました。  
[詳細はこちら](#)
- 2012.07.04 2012年度の創薬コース日程が決定、受講申込受付を開始しました。  
[詳細はこちら](#)
- 2012.07.03 2012年度のセミナースケジュールが決定しました。  
[詳細はこちら](#)
- 2012.05.31 2012年度の各プログラムをご案内するポスターができました。  
[ポスターをダウンロードする](#) スクショするとPDF(約900KB)が閲覧できます。

# SCLS: Supercomputational Life Science



## (京互換機) 計算機システム導入

### 目的

「京」での実行に向けた大規模並列ソフトウェア開発のための計算資源を提供することにより、国内外の多くの生命科学研究者が「京」を中心とするHPCIに参入し、効果的な活用を促す。

### SCLS計算機システムの仕様

#### システム全体

- 理論ピーク演算性能 10 TFLOPS
- 総主記憶容量 1.5 TByte

#### ノード

- 1プロセッサあたりの理論ピーク演算性能 200 GFLOPS

#### 主記憶

- 1ノードあたり 32GByte

「京」が採用しているアーキテクチャに準ずる

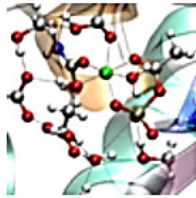
# SCLS計算機システムの利用について



- ・ 公募制
- ・ 公募申請要領
  - 成果公表を前提で無料提供
  - 利用申請書の提出
- ・ スケジュール
  - 2013年2月下旬：供用開始予定

詳細：<http://www.kobe.riken.jp/stpr1-life/>（随時更新）





### 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

細胞質中の分子混雑、生体膜環境、膜を介した物質及び信号伝達など細胞環境を強く意識した分子および細胞スケールシミュレーションの実現を目指し、細胞内信号伝達経路の1分子粒度計算、膜タンパク質による物質輸送の解明、核内DNAタンパク質複合体の構造予測と機能解明を行う。

高橋 恒一（理化学研究所）  
太田 元規（名古屋大学）  
石谷 隆一郎（東京大学）  
河野 秀俊（日本原子力研究開発機構）



### 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

分子動力学を用いた生体高分子解析のために、「京」やHPCIの計算能力を活用するとともに、最新の計算アルゴリズムによる創薬プロセスの革新を目指し、革新的な薬の活性予測シミュレーションを行う。

沖本 恵明（理化学研究所）



### 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

これまで別々に開発が進められてきた各種生体シミュレータ(血栓症、心臓、筋骨格、脳神経系等)を統合し、心筋梗塞やパーキンソン病等、様々な疾患に対してより複雑なプロセスを再現する。そのために、基盤ツールを整備するとともに、「京」やHPCIを活用することで病態予測と治療支援を目指す。

中村 仁彦（東京大学）  
銅谷 賢治（沖縄科学技術大学院大学）  
野村 泰伸（大阪大学）



### 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

「京」やHPCIに最適化した最先端・大規模シーケンズデータ解析基盤を整備した上で、生命プログラムの複雑性・多様性や進化をゲノムによって理解する研究と同時に、ゲノムを基軸とした生体分子ネットワーク解析研究を行う。それにより、薬効・副作用予測、毒性の原因の推定、オーダーメイド投薬、予後予測などへの応用に貢献することを目指す。

秋山 泰（東京工業大学）  
浅井 潔（産業技術総合研究所）  
松田 秀雄（大阪大学）  
五條堀 孝（国立遺伝学研究所）

# 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

実験情報の解釈  
(予測：内挿、観測不能な微視的自由度)

実験系に対応する時空間規模への拡大  
計算精度の向上

未実験情報の産生  
(予測：外挿、観測可能な巨視的自由度)

対象  
ヒト  
疾病関連  
創薬ターゲット  
：

階層接続（統合）

# 分子スケール

## 課題1：細胞内分子ダイナミクス

### 局所場での細胞機能

#### 分子機械の作用機序／操作

転写：DNA                      Nucleosome and Epigenetics

膜輸送：細胞膜                Pump, Transporter, Channel

### シグナル伝達

#### 細胞環境

Crowding: 原子粒度



Diffusion

Coarse-graining: 分子粒度

# 分子スケール

## 課題2：創薬応用

結合自由エネルギー  
高精度計算

Error level      5kcal/mol



1kcal/mol

Alchemical Free Energy Calculations  
MP-CAFEE (massively parallel  
computation of absolute binding free  
energy)

### C. MP-CAFEE

With the well equilibrated structure we performed massively parallel calculation of absolute binding free energy. Keeping the native intramolecular interaction within the ligand, the intermolecular interactions between the ligand and other molecules were annihilated using the soft-core potential [37] as shown by the equation:

$$U(\lambda^C, \lambda^{LJ}) = \sum_{ij} \left[ (1 - \lambda^C) \frac{q_i q_j}{r_{ij}} + 4(1 - \lambda^{LJ}) \epsilon_{ij} \left( \frac{1}{[\alpha^{LJ} \lambda^{LJ} + (r_{ij}/\sigma_{ij})^6]^2} - \frac{1}{\alpha^{LJ} \lambda^{LJ} + (r_{ij}/\sigma_{ij})^6} \right) \right]. \quad (8)$$

We first turned off Coulomb interaction ( $\lambda^C: 0 \rightarrow 1$ ) and then van der Waals interaction ( $\lambda^{LJ}: 0 \rightarrow 1$ ) with 0.5 for  $\alpha^{LJ}$ . The  $\lambda$  spacing was chosen as the result became the same as that with closer  $\lambda^C$  and  $\lambda^{LJ}$  spacing [45]. Closer  $\lambda$  spacing is required to accurately calculate a free energy difference [46]. We used the 32  $\lambda$  points: 11  $\lambda^C$  (0.0, 0.1, 0.25, 0.4, 0.55, 0.65, 0.725, 0.8, 0.875, 0.95, and 1.0) and 21  $\lambda^{LJ}$  (0.0, 0.1, 0.2, 0.3, 0.4, 0.475, 0.55, 0.6, 0.65, 0.675, 0.7, 0.725, 0.75, 0.775, 0.8, 0.825, 0.85, 0.875, 0.9, 0.95, and 1.0). For each  $\lambda$  state we performed 12 molecular dynamics simulations with different initial momentum distributions. Therefore we performed  $32 \times 12 = 384$  molecular dynamics simulations to obtain one free energy.



# 臓器・全身・脳

## 課題3：予測医療に向けた階層統合

### 様々な臓器のシミュレーション手法：規模の拡大と統合化

連続体力学・構造力学： 循環器系、筋骨格系

ロボティクス： 筋骨格-神経系

計算神経科学： 脳神経系

全身スケールの  
運動、流動

その制御



### 統合化による全身レベルの病理のシミュレーション

正常と異常の差を再現する

心筋梗塞

パーキンソン病

# 生命情報

## 課題4：大規模生命データ解析

大量の配列データ（NGS）解析の京での基盤構築

Genome

SNP

Epigenome

Transcriptome



拡大された規模の解析

遺伝子ネットワーク解析

全ゲノムワイド関連解析

RNA相互作用予測

系統解析



医療、創薬基盤