

BioSupercomputing Newsletter

2013.9

Vol.9

CONTENTS

Open Up SPECIAL TALK 座談会

計算生命科学の新たな可能性をひらく

「京」で読み解く“多要因”かつ“動的”で複雑な生命現象

柳田 敏雄 / 木寺 詔紀 / 江口 至洋 理化学研究所 2

ZOOM IN SCLS研究開発に迫る

課題1 細胞内分子ダイナミクスのシミュレーション

シグナル伝達経路の細胞まるごとシミュレーション

岩本 一成 理化学研究所 4

課題2 創薬応用シミュレーション

シミュレーションで見る分子認識のメカニズムと薬のデザイン

山下 雄史 東京大学 5

課題4 大規模生命データ解析

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

角田 将典 東京工業大学 6

SCLS Gotcha!

2013年度 第1期 SCLS計算機システム利用課題公募審査結果 7

岡山大学とシンポジウムを開催 7

計算生命科学の新たな可能性をひらく

「京」で読み解く“多要因”かつ“動的”で複雑な生命現象

理化学研究所 HPCI計算生命科学推進プログラム 統括責任者 柳田 敏雄
 理化学研究所 HPCI計算生命科学推進プログラム 副統括 木寺 詔紀
 理化学研究所 HPCI計算生命科学推進プログラム 副統括 江口 至洋

ゲノム、生体分子、細胞、臓器などの多様な階層によって担われる複雑な生命システムを、「京」を中核とする日本の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)を活用して解き明かすことを目指す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」(略称SCLS)がスタートして2年半が過ぎようとしている。多くの研究者らが分野を越えて結集し、計算生命科学によって、生命現象の予測・制御の可能性を探るとともに、その成果を医療・創薬への貢献に結び付けるといった目的に向けて、研究はどこまで進んでいるのか。統括責任者・柳田敏雄氏、副統括・木寺詔紀氏、江口至洋氏にお話しいただいた。

多要因で複雑な生命システムを理解するには計算科学が必要

柳田 この2年半の間に、4つの課題いずれも研究の方向性がより具体的にフォーカスされてきました。まずは順調に進んでいると思っています。高度な計算機を使う手法が成熟していなかった生命科学の分野で、ようやくその道筋ができようとしています。

木寺 2013年3月に終了したライフサイエンス・グランドチャレンジ(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)によって基礎が確立され、このHPCI戦略プログラムで、実際に「京」という高度な計算資源を用いた研究が全面的に動き始めたことは、たいへんに素晴らしいことだと思います。

江口 研究成果の普及という側面から見ても、「京」と計算生命科学への注目度は高まっています。製薬企業など十数社が集まり、課題2で開発を進めてきた、コン

ピュータ創薬のための超並列結合自由エネルギー計算プログラム「MP-CAFFEE」を、創薬現場の視点から評価するプロジェクトも昨年から動き出しました。参加している方々は、本当に真剣そのものです。「京」を活用して、計算生命科学を自分たちの会社でも役立てたい、そうした思いが伝わってきます。

木寺 医療・創薬に貢献する成果を目指すという意味においても、SCLSは画期的なプロジェクトです。計算生命科学は研究領域として始まったばかりで、未だに定まった価値観ができあがっていない未成熟なところがあります。そのなかで、このSCLSが主導して、医療、創薬という社会的に開かれた価値観に基づいた研究を行うという方向に分野を形づくらうとしています。

江口 その方向で、人的なネットワーク

形成も進んでいます。課題3などでは、臨床医の先生方と協力するといった広がりも生まれています。今まで、計算生命科学に臨床医が協力するという例は、あまり見られませんでした。

柳田 分子生物学者らも、最近は計算機を使った研究の必要性について、理解が深まっているように思います。環境に応じてふらふらと揺れ動くような状態が見られるなど、生物の世界は、一要因ではなく多要因であることが明らかになってきたことも、その理由の1つです。多要因であるということは複雑系であり、今までのように遺伝子解析だけでは先に進めません。複雑なものを取り扱っていく新しい手法、すなわち計算科学の力を借りながら実験を進めていくことが必要であると分かってきたのだと思います。

4つの課題で順調に進展する研究

木寺 多要因かつ複雑で動的な構造を持つ生命を、計算科学によって明らかにしようとするSCLSの4つの課題は、大きく2つに分かれます。課題1から3は、明らかに物理的な実体を持ったシミュレーションです。生体分子、細胞、臓器がどう働くのかを明らかにしていこうとするアプローチです。これに対して課題4は、生命システムの背後にあるゲノム配列というシステムのネットワークを、物理モデルではなく大規模データ解析という方法論を用いて明らかにしようとしています。方向性が大きく異なる2つの手法が、今後どのように結びつけていくのが、大き

な課題です。

柳田 生命の実体にダイナミクスや揺らぎが加わったときに、制御ネットワークがどのように働くのか、非常に面白いですね。あれほど複雑な実体が、実は簡単に制御されてしまうということも、将来、見えてくるかもしれません。

江口 計算生命科学の研究者だけで、課題1から4までが一気通貫に繋がるというわけにはいきません。生物学者や臨床医など、いろいろな人たちの力が必要です。そのためにも、私たちは「SCLSに近づくと何か面白いことがあるだろう」と思えるような魅力的な成果を出していくことが求

められるのではないのでしょうか。

柳田 そうした成果は、すでに各課題から出始めていますね。

木寺 課題4「大規模生命データ解析」では、すでに巨大なゲノムデータを「京」で解析するためのソフトウェア技術を完成させています。一方で、原子・分子レベルから、狭い空間にたくさんの分子が詰め込まれている細胞のなかを見ていこうとする課題1「細胞内分子ダイナミクスのシミュレーション」では、細胞のなかでのタンパク質などの働きの解析・予測のための計算が進んでいます。

江口 「京」をフル活用して、細胞を丸で

柳田 敏雄

多要因で複雑な生命システムを明らかにするためには、実験から得られるビッグデータを解析する巨大な計算資源が欠かせません。実験と計算科学を融合させることによって、生命科学の新たな世界を切り拓くことが、SCLSの重要な役割です。

江口 至洋

将来、計算科学が医療を変えるかもしれない。多くの医療従事者がそう実感できるような成果を出していきたい。そして製薬企業や臨床医など、いろいろな人たちに計算生命科学を支えていきたいという気持ちを育ててもらいたい。

木寺 詔紀

HPCI戦略プログラムは、成果を社会に還元し、医療や創薬に役立つものを生み出すために、「京」の計算資源を活用する方向へ進んでいます。今後は、さらに大量の計算を行う環境を整えていく必要があります。SCLSは、そのためのトリガーでもあるのです。

とシミュレーションしようとする、非常にチャレンジングな取り組みです。

柳田 細胞の機能に近づこうとしていますが、階層のジャンプがあるため、何をどこまで再現するかが、今後の大きな課題ですね。

木寺 課題2「創薬応用シミュレーション」では、約300種類の新規化合物について高精度な計算を行い、がん治療に関する新薬の候補となる化合物を見つけ出すことに成功しています。

柳田 課題3「予測医療に向けた階層統合シミュレーション」も、パーキンソン病

を理解するために進められている研究で、神経が信号をつくり出すシミュレーションと、信号によって骨格筋が収縮するシミュレーションを統合することに成功するなど、順調に進んでいます。

木寺 分子・心筋細胞・心臓全体という3つの階層を接続した心臓シミュレーションでも、肥大型心筋症のシミュレーションを行い、その病態の再現に成功しつつあります。そしてその成果は臨床現場での治療に生かされようとしています。さらに、心筋梗塞への医療応用を目指して、心臓シミュレーターと血管のシミュレー

ターを統合するシミュレーションも着々と準備が進んでいます。

柳田 誰もが健康でありたいと願っています。そのための医療や生命科学の発展に、大きな期待が寄せられています。計算生命科学はまだ始まったばかりですが、やはりその期待は大きなものがあると実感しています。SCLSは、そうした期待に応えるための重要な役割を担っている、そのことを常に頭に置きながら、残りの2年半、頑張っていかなければならないと思っています。

課題1 細胞内分子ダイナミクスのシミュレーション

シグナル伝達経路の細胞まるごとシミュレーション

理化学研究所 生命モデリングコア 生化学シミュレーション研究チーム 岩本 一成

細胞は様々な環境下で生き残るため、環境に対して適切に応答することが可能です。その応答は、「シグナル伝達」と呼ばれており、その役割を果たす経路をシグナル伝達経路と呼びます。シグナル伝達経路は、細胞内の多くのタンパク質同士の化学反応からなる一連の反応ネットワークで、細胞内には非常に多くの経路が存在します。シグナル伝達経路の破綻は、細胞のがん化を招くことが知られているため、シグナル伝達経路がどのような状況で破綻するかを明らかにすることは重要な課題です。

有名なシグナル伝達経路に、上皮成長因子 (Epidermal Growth Factor: EGF) シグナル伝達経路と呼ばれる経路があります。この経路は、外部からEGFタンパク質の刺激を受け取り、その情報を細胞内に伝達し、細胞の成長・分裂・分化を促す役割を持っています。近年、細胞内のタンパク質を一分子レベルで観察することが可能となり、EGFシグナル伝達経路の応答を観察したところ、遺伝子が全く同じ細胞を、同じ条件で培養し、同じ刺激を与えた場合でも、細胞ごとの応答が異なりました (図1左)。このような細胞間の応答のバラつき (応答不均一性) は、細胞のがん化や薬剤耐性などへの影響が示唆され

ており、応答不均一性の解明はそれらの影響を理解する上で非常に重要です。ところが、シグナル伝達経路には非常に多くのタンパク質が関与するため、従来の生化学・分子生物学的な実験手法だけでは、その解明が困難になりつつあります。そこで、コンピュータ上で仮想的に細胞をシミュレーションする、いわゆる細胞シミュレーションと呼ばれる方法が用いられるようになり、私たちはこの方法によりEGFシグナル伝達経路の応答不均一性を解明することを目指しています。

私たちの細胞シミュレーションの手法は、従来の手法と異なり、細胞内のタンパク質の一分子ごとのランダムな動き・衝突・反応 (ゆらぎ、ノイズとも呼ばれる) を全て表現しています。これまで、そうしたシミュレーションはコンピュータの計算能力的に困難でしたが、スーパーコンピュータ「京」の計算能力を利用することで、現在可能になりつつあります。私たちの研究チームでは、細胞シミュレーションソフトウェア「pSpatocyte」を開発しており、これを利用して研究を実施しています。

最新のシミュレーション結果を紹介します。EGFシグナル伝達経路では、主に「EGF→Raf→ERK」という流れで情報が伝



達され、ERKタンパク質は最終的に細胞核に蓄積します (図1中央)。図1右は、ERKタンパク質を可視化したシミュレーション結果で、2つの細胞は全く同条件であるにも関わらず、ERKの応答が異なっていることがわかります。EGF、Raf、ERK、3種類のタンパク質分子の数は、「EGF>Raf<ERK」と真ん中のRafが少なくなっています。一般的に、情報伝達に伴うノイズは分子数が少ないほど増幅します。そのため、Rafで増幅されたノイズがそのまま下流のERKへと伝わり、細胞間のバラつきを生んだと考えられます。実際の応答不均一性も全く同じしくみであるとは現時点では断言できませんが、こうした知見を明らかにしつつ、私たちのチームは、EGFシグナル伝達経路の細胞まるごと、つまり細胞全体でのシミュレーションを目指しています。

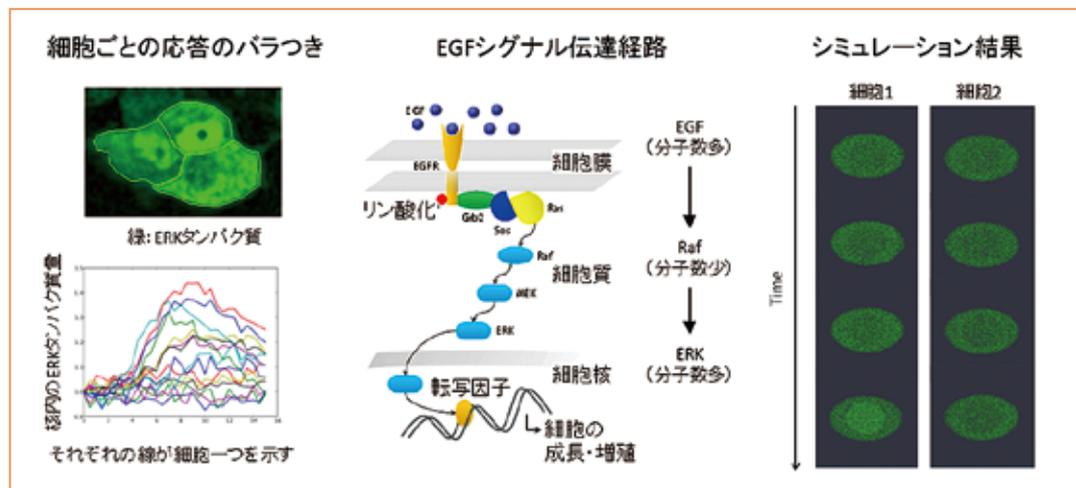


図1: 細胞ごとの応答がバラつく様子 (左)。EGFシグナル伝達経路の模式図 (中央)。シミュレーション結果の一例 (右)。



シミュレーションで見る分子認識のメカニズムと薬のデザイン

東京大学 先端科学技術研究センター 山下 雄史



子認識のメカニズムが理解できれば、従来の経験的な薬づくりを脱却し、もっと論理的な方法で簡単に薬をつくれる時代が来るのではないかと考えています。

分子シミュレーションの利点は、直接には見ることができない水中のタンパク質の様子を、高精度な顕微鏡を覗くように見ることが可能にする点でしょう。さらに面白いのは、本当は起こり得ないバーチャルな状況をつくるのが可能な点です。実は、このバーチャルな状況を上手く活用することで、現実の物理量をより高速に計算する工夫ができるのです。実際、我々の結合自由エネルギー計算の方法もこうしたアイデアを使っています。計算機だからこそ可能な方法を開発していくことも、この分野の大きな魅力です。

【参考文献】

- [1] H. Fujitani, Y. Tanida, and A. Matsuura: *Phys. Rev. E*, **79** 021914 (2009), H. Fujitani, K. Shinoda, T. Yamashita, and T. Kodama: *J. Phys. Conf. Ser.* **454** 012018(2013)

我々は、「スーパーコンピュータを使った薬づくり」の研究をおこなっています。病気の原因となるタンパク質に強く作用する分子を探すために、大規模な計算をスーパーコンピュータでおこない、解析して薬づくりに応用しています。また、そのための新しい解析手法や理論の開発をしています。創薬応用シミュレーションという分野の内容は、基礎的・学問的な側面から応用的・技術的な側面まで多岐に渡ります(図1)。

学問的な側面から見れば、薬のデザインは「分子を認識するメカニズムを知る」ということになります。多くの薬は、病気の原因となるタンパク質の機能を抑えることで、薬としての役割を果たします。もし薬が目標のタンパク質だけでなく、いろいろなタンパク質の機能に影響を及ぼすとしたら、どうなるでしょうか？これは致命的な副作用を引き起こす原因になってしまいます。したがって、薬は他のモノには目もくれず、目標のタンパク質だけを「認識」して攻撃できなければなりません(図2)。

分子がどれくらい強く目標のタンパク質を認識できるかを表す物理量の1つに

「結合自由エネルギー」というものがあります。結合自由エネルギーの値が大きい分子は、標的のタンパク質を強く認識して攻撃できるため、薬として非常に有望なものになります。我々は、この結合自由エネルギーを正確に予測することができれば、薬開発の大きな武器になると考えています。そこで、我々は藤谷ら^[1]が提案している結合自由エネルギー計算法を用いて、実際のがんの原因タンパク質に適用を試みています。この手法では、1つの分子と標的タンパク質の結合自由エネルギーを評価するだけでも大きな計算資源を必要とします。薬として適した分子を探すためには、多くの分子を計算する必要がありますが、従来のコンピュータでは非常に難しいことでした。それが、スーパーコンピュータ「京」の登場により、ある程度、実行可能な時代に入りました。

実際に、「京」を用いた超大規模計算を始めてみると、想定外の問題に直面したりもしましたが、徐々に新しい知見が蓄積されてきています。こうした知見を積み上げていくことで、分子認識のメカニズムを「より深く」、「より正しく」理解していくことができると考えています。分

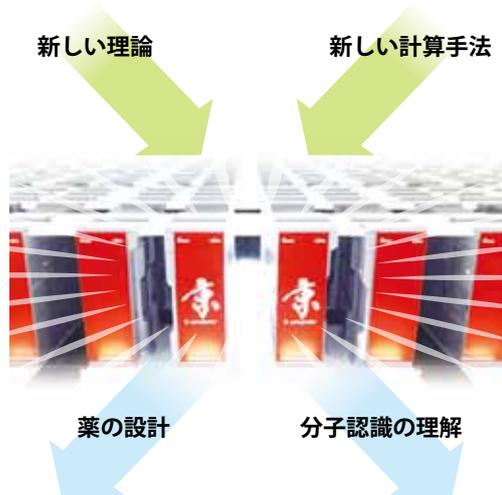


図1：創薬応用シミュレーション分野のイメージ

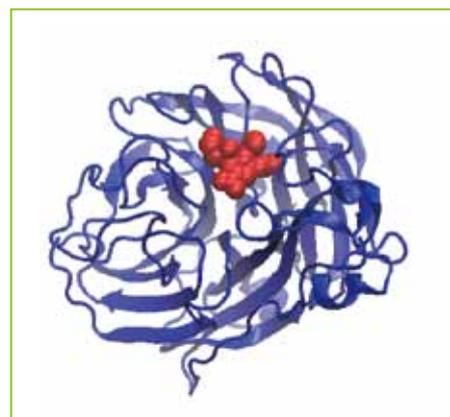


図2：インフルエンザウィルスのタンパク質(青色で表示)に結合しているリレンザという薬(赤色で表示)



課題4 大規模生命データ解析

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

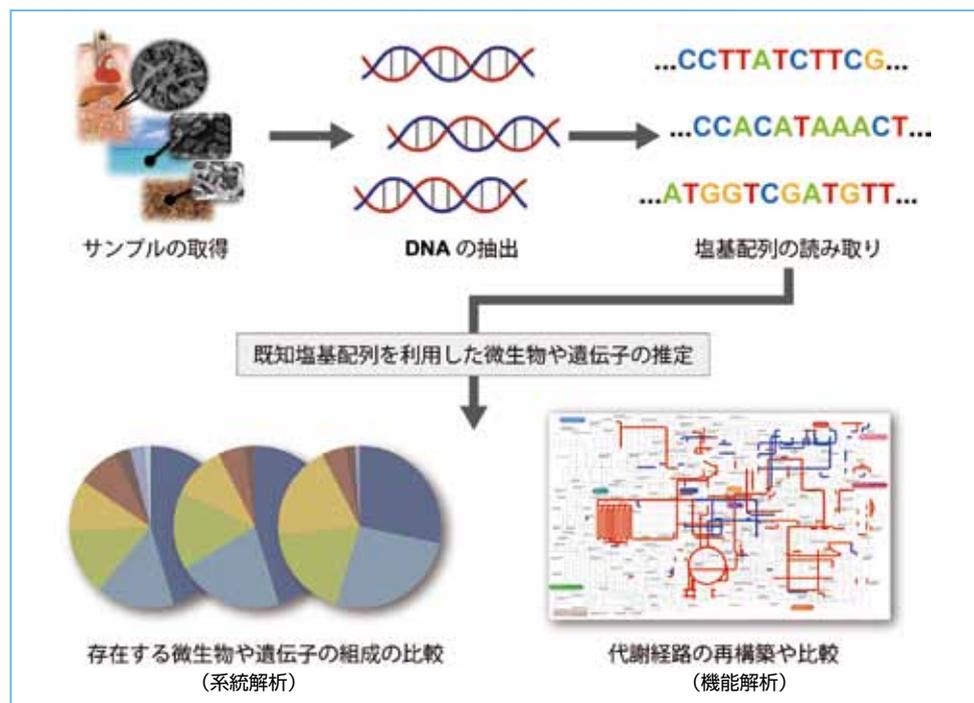
東京工業大学 大学院情報理工学専攻 秋山研究室 角田 将典



算に多くの時間が必要でした。

私たちは、検索アルゴリズムを改良することで、従来手法の100倍以上高速なGHOSTXを開発し、次いでGHOSTXを基に並列解析を行うGHOST-MPを開発しました。GHOSTXは、問い合わせ塩基配列と検索対象塩基配列群のそれぞれで接尾辞配列 (Suffix Array) と呼ばれるデータ構造を構築し、索引として利用することで、全塩基配列を走査 (逐次分析) することなく類似配列の探索を高速に行います。GHOST-MPは、複数の計算ノード間でデータの分配・収集と同時に検索を行うことで、検索時間を短縮します。スーパーコンピュータ「京」の多くの計算ノードと高速なノード間ネットワークを利用することで、短時間に大規模なメタゲノムデータを処理することが可能になりました。現在は、GHOST-MPを類似配列の検索手法として用いることで、微生物集団から得られた塩基配列に基づき系統解析及び機能解析までを高速に行う解析パイプラインの開発や、解析パイプラインを利用した実データの解析を進めています。

図1: メタゲノム解析の模式図



DNAは生物の遺伝情報を担い、ヌクレオチドと呼ばれる単量体が鎖状に結合して構成されています。ヌクレオチドの並び (塩基配列) が判明すると、DNAに基づいて作成されるRNAや、そのRNAに基づいて作成されるタンパク質が推測できるようになります。DNA、RNA、タンパク質は、お互いに影響しながらさまざまな生体内の機能や化学反応に関与しているため、塩基配列を決定することで、生体物質間の複雑な相互作用を解明する端緒が開けます。また、生物種内や生物種間に類似した塩基配列があり、これらを比較することで類似部分の機能や進化について多くの知見を得ることができます。

DNAの塩基配列を自動的に読み取る装置であるDNAシーケンサーの発展により、塩基配列の読み取り速度とコスト当たりの読み取り量が急速に向上しています。約1日で1000億塩基対を読み取るものも販売されています。ヒトゲノムが約30億塩基対であることと比較すると、非

常に高速であることが分かります。膨大なDNA情報を得ることが比較的容易になったため、現在はこれらの情報を高速に解析するシステムが求められています。そこで、私たちのチームでは、高速な解析アルゴリズムの開発と、複数の計算ノードを利用した並列計算により、膨大なDNA情報の解析を可能とする情報処理システムの開発を行っています。

近年、DNAシーケンサーの発展から、環境中 (ヒトの体表・体内、土壌、水圏など) に存在する微生物集団のゲノム (メタゲノム) 解析が盛んになっています。環境中に存在する微生物の組成 (系統解析) や遺伝子の組成 (機能解析) を環境間で比較することで、微生物とヒトの健康との関係や、環境と微生物集団の相互作用、微生物同士の相互作用について知見を得ようという試みです。環境中に存在する微生物や遺伝子を推定するために、読み取った塩基配列と類似した塩基配列を既知の塩基配列群から検索しますが、従来はこの計



2013年度 第1期

SCLS計算機システム利用課題公募審査結果

HPCI戦略プログラム 分野1 (SCLS) は、医療および創薬を含む生命科学分野において、HPCIを活用した画期的成果の創出を推進するとともに、研究支援や人材育成等を通して、広く計算生命科学のユーザコミュニティの形成を目的としています。その目的達成をめざし、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一環として、スーパーコンピュータ「京」との互換性の高いSCLS計算機システムを利用する研究課題の公募を行っています。次回の公募は9月を予定しています。詳しくは、SCLS計算機システム利用公募情報(<http://www.kobe.riken.jp/stpr1-life/outreach/sclsuse/application.html>)をご覧ください。

SCLS課題番号	氏名	代表者所属	課題タイトル
201301101	百武 徹	横浜国立大学 大学院工学研究院	テーラーメイド型人工赤血球の酸素運搬効果の予測評価に関する解析技術の確立
201301102	滝沢 研二	早稲田大学 高等研究所	Development of Computer Modeling Techniques for Patient-Specific Cardiovascular FSI
201301103	水口 賢司	医薬基盤研究所	蛋白質複合体の相互作用予測に基づく薬剤候補分子のスクリーニング手法の構築
201301104	志水 隆一	NPO法人 バイオグリッドセンター関西	並列計算機を用いた創薬関連ソフトウェアの利用と創薬現場での利用可能性の検討
201301105	安尾 和也	塩野義製薬株式会社	量子化学を取り入れた結合親和性予測能の改善
201301106	フィンクアン フィ ヴィエト	岡山大学 大学院環境生命科学研究所	血流の数値シミュレーションにおける非圧縮性ナビエストークス方程式の並列解法と評価
201301107	陶山 明	東京大学 大学院総合文化研究科	一本鎖核酸の塩基スタッキングの安定性
201301108	林 拓也	理化学研究所 ライフサイエンス技術基盤研究センター	高速並列演算による非侵襲的脳画像の機能的脳内ネットワーク解明

岡山大学とシンポジウムを開催

SCLSでは、生命科学のコミュニティに対し、「京」を中核としたHPCI環境での計算生命科学の理解促進および人的ネットワーク形成を進めるため、全国を大きく6ブロックにわけ、各ブロックの拠点大学や関連学会と連携しシンポジウムの開催を実施しています。



脂肪細胞の褐色化を制御する生体分子ネットワークの解析結果を報告する松田教授

6月1日(金)に岡山大学と共催で、『生命科学に取り組む異分野の融合と交流の推進:スーパーコンピュータ「京」と生命科学』を開催しました。

今年で2回目となるこのシンポジウムは、計算生命科学を軸に異分野の研究者、技術者が意見交換でき、新しい研究分野および共同研究の創出ができる場を作ること、また生命科学と計算科学を結びつける分野でのHPCI利用について、その方法や内容を考えることを目的にして、計算科学と生命科学の境界領域で研究に取り組んでおられる12名の研究者にご講演いただきました。

課題1「細胞内分子ダイナミクスのシミュレーション」からは海津一成特別研究員(理化学研究所)が細胞環境を考慮したシグナル伝達経路の1分子粒度シミュレーションについて、そして課題4「大規模生命データ解析」からは松田秀雄教授(大阪

1分子粒度シミュレーションの並列計算手法を紹介する海津特別研究員
※本紙Zoom in(P.4)で紹介している岩本一成特別研究員と同じ研究チームに所属



大学)が「京」を使って得た生体分子ネットワークの解析結果を報告しました。

参加者は100名を超え、学生や教員などの大学関係者だけでなく公的研究機関や企業にまで幅広い分野に及びました。

計算生命科学における「京」やHPCI環境を利用した研究報告の場、そして情報交換や情報発信の場として、今後も同様なシンポジウムを行っていききたいと思います。

SP 9月19日(木) 13:00

新生命科学分野開拓とスーパーコンピュータ「京」

計算科学を巻き込んだ新たな生命科学分野の開拓をみなさんと共に考え議論します。●参加費無料

場所 九州大学医学部百年講堂(福岡県福岡市)

<http://www.agr.kyushu-u.ac.jp/sympk/>

RP 10月2日(水)～3日(木)

平成25年度「京」を中核とする HPCIシステム利用研究課題 中間報告会

場所 タイム24ビル(東京都江東区)

詳しくはWebページをご覧ください。
<https://www.hpci-office.jp/pages/858>

EX 10月9日(水)～11日(金)

Bio Japan 2013 -World Business Forum-

場所 パシフィコ横浜(神奈川県横浜市)

理研ブースにて出展

EX 10月19日(土)

理化学研究所 一般公開(神戸)

場所 計算科学研究機構(兵庫県神戸市)

5分野が集まり、パネル展示と体験ブース出展(6F「科学の広場」)



2012年一般公開

SM 10月28日(月) 12:30～13:20

第51回日本生物物理学会年会 ランチョンセミナー 生命科学と計算科学がみる未来

- 大規模計算って意外に重要かも?
- 計算生命科学における大規模計算の重要性
- スーパーコンピュータ「京」とHPCIへのご勧誘

場所 国立京都国際会館 Room B-1(京都府京都市)

SP 10月29日(火) 13:00～16:00

第51回日本生物物理学会年会 核内混み合い環境でのヌクレオソーム、 クロマチンの機能発現機構

- オーガナイザー 杉田 有治(理化学研究所)、高橋 恒一(理化学研究所)

場所 国立京都国際会館(京都府京都市)

SP 10月31日(木) 10:05～11:20

第2回生命医薬情報学連合大会 オーガナイズドセッション 京速スーパーコンピューティングと創薬

HPCI戦略プログラム 分野1 (SCLS) 教育プログラム

- オーガナイザー 田中 正夫(大阪大学)、坂田 恒昭(大阪大学)

場所 タワーホール船堀 401会議室(東京都江戸川区)

EX 11月9日(土)～10日(日)

サイエンスアゴラ

理化学研究所 神戸地域の研究センターが集まりSCLSと合同出展
ブース展示名「細胞だから!」

場所 日本科学未来館(東京都江東区)

EX 11月17日(日)～22日(金)

SC13

「京」ブースにてSCLSレクチャー実施予定

場所 Colorado Convention Center (Denver, Colorado, USA)

WS 12月4日(水) 13:15～15:45

第36回日本分子生物学会年会 疾患生物学ワークショップ 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に

- オーガナイザー 宮野 悟(東京大学)、小川 誠司(東京大学)

場所 神戸国際会議場 4階401+402(兵庫県神戸市)

SP 12月17日(火)

(仮題) HPCI戦略プログラム 分野1×分野2シンポジウム 生体分子複合システムを計算する — 相互作用は何をもたらすのか

- 参加費無料

場所 名古屋大学(愛知県名古屋市)

詳細は決まり次第、分野1 (SCLS) Webページでお知らせします。



文部科学省高性能汎用計算機高度利用事業
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

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。「予測する生命科学・医療および創薬基盤」は、理化学研究所を代表機関として、大規模シミュレーション・高度なデータ解析に基づく生命現象の理解と予測、およびそれを通じた薬剤・医療のデザインの実現を目指して研究を実施しています。

BioSupercomputing Newsletter Vol.9 2013.9

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

〒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研究棟3階R301
TEL: 078-940-5692 FAX: 078-304-8785 <http://www.kobe.riken.jp/stpr1-life>

発行: 平成25年9月

RIKEN 2013-070