

○ 計算科学技術推進体制構築

I 高度化推進（統括:泰地 真弘人・理化学研究所）

実施計画に基づき、戦略機関、協力機関、他の戦略分野、特定高速電子計算機施設の運営主体である計算科学研究機構等との協力体制の整備を進めるため、業務実施に必要な体制を構築した上で、業務を実施する。具体的には、戦略分野1に関連する多くの研究者が特定高速電子計算機施設を中核とする 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とり進める。また、他の戦略分野・特定高速電子計算機施設の運営主体である計算科学研究機構・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特定高速電子計算機施設を中核とする 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-1 計算機資源の効率的なマネジメント

I-1-1 実施計画

戦略分野1における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(含む、医療、製薬関連企業等の研究者)が京コンピュータを中心とする HPCI 環境を効果的に利用するために必要とされる計算機環境を整備・運用する。

整備・運用方針は、運営委員会等で検討の上で決定する。

I-1-2 実施内容（成果）

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の構築

HPCI 戦略プログラム分野1内に統括責任者、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行った。

具体的には、高度化推進グループによるアプリケーションソフトウェアの調査およびその進捗状況をもとに計算資源の利用比率の重みづけを行った。また、分野別作業部会のコメント等を踏まえ、計画的、効率的な優先順位をつけたアプリ登録を行った。

2) HPCI 環境利用のための分野内計算機環境の整備、運用体制の構築

京を利用する前段階としての計算機環境（ソフトウェア環境および実行環境）を整備した。具体的には、ゲノム解析に必要となる大規模データ保存のためのストレージの導入、ソフトウェア高度化のための計算機システムの導入を行った。また、京コンピュータ向けコンパイルシステムを導入し、コンパイル環境の整備を行った。

I-2 「京」利用に際しての研究支援協力

I-2-1 実施計画

京コンピュータの利用を効果的に進めるため、高度化推進とユーザー支援を行う。京コンピュータ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ある。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・活用を行う。具体的には、5名の支援要員(技術専門員)を配置し、3名は超並列化支援、1名はDB設計・開発支援、1名は可視化ソフトウェア開発支援とするが、詳細については、今後計算科学研究機構や他戦略機関における支援体制との連携を考慮し、決定する。支援要員は戦略分野1で開発される独自のソフトウェアとともに、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の研究開発(プロジェクト)」で開発中あるいは開発されたアプリケーションソフトウェアの利活用の検討・準備・環境整備等を連携して行う。また、高度なHPCI環境を使いこなす人材(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、グランドチャレンジ等とも連携し、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する。

I-2-2 実施内容(成果)

1) 高度化推進グループの設置と利用者支援

H23年度の支援要員の配置については、ソフトウェア開発の進捗状況を踏まえ、4名の超並列化支援、1名のDB設計・開発支援要員を配置し、高度化推進、ユーザー支援を行った。

理化学研究所・京コンピュータ開発実施本部により運営される京コンピュータは、本年度は試験利用期間であった為はその利用は流動的・限定的であった。その中で京コンピュータの利用アカウントの配分として利用期間IからIIIでは5月よりMP-CAFEE、GHOST-MPのユーザーを登録した。また利用期間VIでは1月よりGENESIS、SCUBA、EX-Throm、BENIGNの4アプリを登録し利用を促進した。試験利用期間については、高度化推進グループが京コンピュータの連絡窓口となり、アナウンス等の周知や開発実施本部への京利用に対する要望などを調整した。中でも、バイオ系の計算の際に重要となる、MPI-Spawn、ディスクアクセスのストライピングなどの要望に対してアプリ開発者と京開発実施本部との橋渡しをしたことで効率が向上した。また並列実行の許可申請ではGHOST-MP、BENIGNが12,288ノード達成、MP-CAFEE、SCUBAが3,840ノード、GENESISが2,048ノードの利用を許可されている。

また、リモート接続がまだ許可されていない試験利用期間に京利用の為に神戸計算科学研究機構に滞在した各アプリ開発者へサイトサポートも行った。

また、「京」の利用に関する調整や計画の立案を行うために、利用・開発するソフトウェアとその利用状況に関する調査を8月より実施、9月21日(水)には「意見交換会」を開催し、

- ・京に関する情報と、利用状況調査およびソフトウェア調査のまとめ
- ・京を利用している現状と課題等の情報

をテーマに情報提供および意見交換をし、利用者支援を行った。

さらに、高度なHPCI環境を使いこなす人材の育成については、計算科学研究機構が初心者向けに開催したサマースクールへの参加、および戦略プログラム合同研究交流会を6月、10月に計算科学研究機構と他のHPCI戦略プログラムと共同開催した。

2) 登録アプリの進捗状況

ア) 創薬研究に欠かすことのできない自由エネルギー計算を可能とするMP-CAFEEは、古典分子動力学計算を多数実行するアプリケーションである。そのカーネルコードの性能を評価し

た結果は最適化がほぼ効いていない結果となった。スレッド並列化されていない本アプリケーションは今後の京大規模利用を見据えて、大幅な改変が見込まれ、現在その計画中である。

イ) GHOST-MP は、接尾辞配列 (SuffixArray) を用いることによって、配列検索を高速かつ高感度に行うものである。単体性能は、スレッド並列の改良がおこなわれ向上したが、SuffixArray の特徴上、メモリへのランダムアクセスがあり、キャッシュの再利用が効かないため、ボトルネックとなっていた。現在、メモリアクセスを少なくするような改良を行っており、今後の改善が期待される。当初、大規模並列化は、配列解析の特徴上、大量のファイルにアクセスするため、ファイル I/O がボトルネックとなり、困難と思われたが、ファイルストライプの利用、ランクディレクトリを活かした実装を行うことで、12,288 ノードまでスケールした。また、ファイル I/O を少なくするアルゴリズムを検討しており、さらなる大規模化が見込める。

ウ) 多数のレプリカにより探査を可能にする分子動力学ソフト SCUBA は Fortrtan90 によって書かれている為に最適化は容易であると予想された。しかし、性能調査の結果、データ構造の間接参照のままでは、キャッシュミスにより性能が伸び悩むことが予想された。そのため、他の分子動力学ソフトのように連続アクセス化の検討、SIMD 化を促進するようなアルゴリズムの検討等を行ったところ、性能向上することが確認できた。現在、検討した結果を実装すべく、開発が進められている。

エ) 遺伝子発現のネットワークをシミュレートする BENIGN はそのホットスポットとなる密行列演算の要素数が小さい為に性能向上が頭打ちになる仕様になっている。同様の計算を一度に複数実行する仕様に改変すれば劇的に性能が向上するはずである。

なお京コンピュータ上での性能については、次世代スーパーコンピュータ開発実施本部からの秘密保持要請のため、本報告書では具体的な数値の明言を避けた。

II. 企画調整（統括:富田 悟・理化学研究所）

II-1 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、当該戦略分野1に関連した研究開発、教育を大学、研究機関、民間企業で行う中核的人材の育成を目指し、並列化プログラミングやソフトウェアの利用法等について講習会を開催する。さらに、大阪大学、産業技術総合研究所等と連携し、人材育成プログラムを推進する。

II-1-1 人材養成・教育プログラムの実施（産業技術総合研究所 生命情報工学研究センター）

1) 実施計画

「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」において教育プログラムを編成・実施し、他の参画機関等との連携協力の上で、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。また、上記の事業を行う上で、関連する研究者と必要な協議等を行うとともに、本格実施に必要な体制の整備を行う。

平成23年度は、業務従事者を雇用したうえで、OJTによる社会人・学生の技術研修、第一線の研究者による最先端セミナーを毎月1~2回企画・実施する。また広く一般に向けた「HPCI 人材養成ワークショップ（仮称）」を1回開催する。業務参加者は人材養成のカリキュラムを検討し、初学者から中級者を対象とした「HPCI チュートリアルセミナー（仮称）」を行う。

2) 実施内容（成果）

①業務従事者を雇用

カリキュラム・講義資料の作成・外部講師依頼、実習用ソフトウェア環境の整備など、本コースにおける教育システムの整備と養成プログラムの実行にあたる担当者、ならびに運営全体を支援する補助者を雇用した。

②第一線の研究者による最先端セミナー

・HPCI セミナー

生命情報工学研究センターで毎週1回程度実施している「生命情報科学研究セミナー」の一部を「HPCI セミナー」として一般公開、また東京大学柏・本郷両キャンパスにTV会議システムを通じて配信した。東京大学大学院新領域創成科学研究科情報生命科学専攻の協力により、このセミナーは「情報生命科学特別講義 I」（2011年度冬学期）という単位取得科目となった。

HPCI セミナー（H23年10月7日~H24年1月13日 毎週金曜日14:45~16:25 全12回）は、生命科学における計算機の利用推進のため、計算機を利用した生命科学の最先端の話題を提供することを目的としている。講師はCBRCに所属する研究者らが担当し、学生にも理解できるよう平易に始まり、最先端の研究成果まで丁寧に講義した。

全12回のHPCI セミナー参加者はのべ401名（うちTV会議システムで受講した学生159名）であった。

・e-ラーニング教材準備

人材養成は課題実施期間に関わらず継続的に実施する必要があるが、そのために重要となるのが、いつでも使える教材の開発である。そのため本課題では、なるべくセミナー等の記録をとり公開を進める方針である。初年度である今年度はHPCI セミナーの講義をビデオ撮

影し、これをもとに e-ラーニング教材を開発した。

e-ラーニング教材は H24 年度早々に公開し、広く一般より利用可能となる計画である。

③HPCI ワークショップ

H24 年 1 月 26 日 (木) 11:00~17:00、広く一般に向けた「HPCI ワークショップ」を開催した。今年度は、生命科学における計算機の利用を考えるうえで避けられない最先端の話題「次世代シーケンサーのデータ解析」をテーマとし、黒川顕講師 (東京工業大学大学院生命理工学研究科 生命情報専攻、教授)、町田雅之講師 (産業技術総合研究所 生物プロセス研究部門 生物システム工学研究、グループリーダー)、佐々木裕之講師 (九州大学生体防御医学研究所 ゲノム機能制御部門 エピゲノム学分野、教授)、Carsten Daub 講師 (理化学研究所 オミックス基盤研究領域 LSA 情報基盤施設、施設長) による 4 件の招待講演を行った。125 名の参加者を集めた。

④HPCI チュートリアル

H24 年 3 月 8 日 (木)・9 日 (金) の 2 日間にわたり、1 人 1 台の PC を用いた実習付き「HPCI チュートリアル」を実施した。今年度のテーマは、ワークショップと同様「次世代シーケンサーのデータ解析」とした。次世代シーケンサーを用いた研究では、読み取った配列データをどのように解析するかがポイントとなるので、現場の実験研究者に計算機を用いたデータ解析手法を普及させることを目的とした。先進的な事例や、誰でも使えるウェブツールやフリーソフトを用いたデータ解析テクニックを紹介するため、鈴木穰講師 (東京大学大学院新領域創成科学科、准教授)、小山芳典講師 (産業技術総合研究所生物プロセス研究部門、主任研究員) 両講師による講義と、須山幹太講師 (九州大学生体防御医学研究所情報生物学分野、教授/京都大学大学院医学研究科、非常勤講師)、マーティン フリス講師 (産業技術総合研究所生命情報工学研究センター、研究員)、門田 幸二 講師 (東京大学大学院農学生命科学研究科、特任助教) による講義と実習を行った。定員 30 名として受講者を公募したところ、希望者が殺到し募集開始からわずか 48 時間で満席となり、ニーズの高さを実感した。その後も希望者を調整し最終的に 33 名が受講した。受講者アンケートでは、ほとんどの受講者が満足しており、「よく理解できた」「実践したい」と高評価を得た。

II-1-2 人材養成・教育プログラムの実施(大阪大学大学院基礎工学研究科)

1) 実施計画

「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」において教育プログラムを編成・実施し、他の参画機関等との連携協力のうえで、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。また、上記の事業を行う上で、関連する研究者と必要な協議等を行うとともに、本格実施に必要な体制の整備を行う。平成23年度は、バイオシミュレーションに関する教育プログラムを編成し、実施する。

2) 実施内容 (成果)

① バイオシミュレーションシリーズ講義

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講義12回と実習4回からなるバイオシミュレーションに関する講義(2単位)を、表1のとおり編成・実施した。受講者数は、大学院学生11名、単位取得者数9名であった。またエクステンションとしての受講者数は2名であり、修了者数は2名であった。

表1 バイオシミュレーション 講義12回および実習4回の詳細

-
- 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
2011年12月10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部J棟1F共用セミナー室(J120)
 - 3)、4) 計算生理学概論
大阪大学 教授 野村泰伸
2011年12月10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部J棟1F共用セミナー室(J120)
 - 5)、6) 新しい薬創りとは
大阪大学 特任教授 坂田 恒昭
2011年12月17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部J棟1F共用セミナー室(J120)
 - 7)、8) 心臓の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
2011年12月17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部J棟1F共用セミナー室(J120)
 - 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
2011年12月24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部J棟1F共用セミナー室(J120)
 - 11)、12) バイオメカニクスシミュレーション(有限要素法入門)
大阪大学 教授 田中正夫
2011年12月24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部J棟1F共用セミナー室(J120)
 - 13)、14) バイオシミュレーション 実習1: 並列計算演習
大阪大学 教授 田中正夫、
特任講師(常勤)野崎一徳、特任助教(常勤)権 志妍
2012年1月28日(土) 11:00、11:15-12:45

大阪大学豊中キャンパス基礎工学部 A 棟 3F セミナー室 (A338)
15)、16) バイオシミュレーション 実習 2: Teddy
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,
非常勤講師 (国立循環器病センター研究所・研究員) 稲田 慎
2012 年 1 月 28 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部 A 棟 3F セミナー室 (A338)

②バイオインフォマティクス講義

大学院学生を主たる対象とした初学者向けのバイオインフォマティクスに関する講義を、表 1 のとおり編成・実施した。平成 23 年度の本講義は非正規科目であるが、大学院学生 5 名、エクステンションとして 2 名の受講があった。

表 2 バイオインフォマティクスの詳細

- 1) 遺伝子ネットワークの情報解析
松田 秀雄 (大阪大学大学院情報科学研究科・教授)
平成 24 年 1 月 21 日 (土) 1 限目 9:30~11:00
大阪大学吹田キャンパス 情報科学研究科 B 棟 4 階 411 室
 - 2) 遺伝子ネットワークの情報解析演習
竹中 要一 (大阪大学大学院情報科学研究科・准教授)
平成 24 年 1 月 21 日 (土) 2 限目 11:15~12:45
大阪大学吹田キャンパス 情報科学研究科 B 棟 4 階 411 室
 - 3) 並列計算の医療への応用
萩原 兼一 (大阪大学大学院情報科学研究科・教授)
平成 24 年 1 月 21 日 (土) 3 限目 13:45~15:15
大阪大学吹田キャンパス 情報科学研究科 B 棟 4 階 411 室
 - 4) 代謝反応調節と有用物質生産への応用
清水 浩 (大阪大学大学院情報科学研究科・教授)
平成 24 年 1 月 21 日 (土) 4 限目 15:30~17:00
大阪大学吹田キャンパス 情報科学研究科 B 棟 4 階 411 室
 - 5) 生命科学における大規模データ解析
木戸 善之 (大阪大学大学院情報科学研究科・特任研究員)
平成 24 年 1 月 28 日 (土) 1 限目 9:30~11:00
大阪大学吹田キャンパス 情報科学研究科 B 棟 4 階 411 室
 - 6) 生命科学における大規模データ解析演習
木戸 善之 (大阪大学大学院情報科学研究科・特任研究員)
平成 24 年 1 月 28 日 (土) 2 限目 11:15~12:45
大阪大学吹田キャンパス 情報科学研究科 B 棟 4 階 411 室
-

③京速コンピュータ「京」と創薬・医療の産学連携セミナー

第 1 回:平成 23 年 10 月 19 日 (大阪市)

第 2 回:平成 24 年 1 月 25 日 (東京都)

を企画・実施した。詳細は、図 1 および 2 のとおりであり、参加者数はそれぞれ、63 名、102 名であった。なお、第 2 回セミナーについては、下記 website にてその概要が紹介された。

<http://www.nikkeibp.co.jp/article/dho/20120209/298744/>

<http://www.hummingheads.co.jp/reports/seminar/s0059.html>

④共同主催企画

第 8 回大阪大学医工情報連携シンポジウム「スーパーコンピューティングと医療・バイオ」：
2011 年 7 月 6 日（吹田市）

および、共催企画

「予測する生命科学・医療および創薬基盤」教育プログラム 特別講演会・シンポジウム：2012
年 1 月 8 日（豊中市）

を実施した。詳細は、図 3 および 4 のとおりであり、参加者はそれぞれ 109 名、200 名であった。

京速コンピュータ「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-

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）
共催：(独)理化学研究所、(財)都市活力研究所、NPO法人バイオグリッドセンター関西、
大阪大学臨床医工学総合研究教育センター
日時：10月19日（水）13:30-17:30
場所：阪急グランドビル26F 会議室
参加費：無料（事前登録をお願いいたします）



プログラム：

13:30-13:40 挨拶 田中正夫（大阪大学大学院基礎工学研究科）

セッション1：計算科学の世界を拓く「京」

13:40-14:20 「予測医学を志向するバイオメカニクスシミュレーション」
田中正夫（大阪大学大学院基礎工学研究科）

14:20-15:00 「インシリコ創薬の新機軸：3D-RISM理論（溶媒和の統計力学）に基づく
リガンドマッピング法」 今井隆志（理化学研究所）

セッション2：「京」の産業利用に迫る

15:20-15:55 「検査診断領域へのHPCI活用に向けた取り組み」
高地森浩（シスメックス（株）中央研究所）

15:55-16:30 「創薬研究におけるスパコン利用について」
山崎一人（大日本住友製薬（株）ゲノム科学研究所）

16:40-17:30 スーパーコンピュータ京への期待 - 製薬業界の産業利用ニーズと今後の展望 -
坂田恒昭（大阪大学大学院基礎工学研究科）、志水隆一（NPO法人バイオグリッドセンター関西）

事前登録方法：(1) 所属、部署、役職、(2) 氏名、(3) e-mail アドレスを下記までご連絡ください。
申込問合せ先：hpci@me.es.osaka-u.ac.jp 大阪大学大学院基礎工学研究科 野崎一徳

図1 第1回京速コンピュータ「京」と創薬・医療の産学連携セミナー

第2回京速コンピュータ「京」と創薬・医療の産学連携セミナー —HPC計算生命科学推進プログラム—

日 時：2012年 1月25日（水）13:30-17:40

場 所：東京国際フォーラム G701室（東京都千代田区丸の内3-5-1）

参加費：無料（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（HPC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）

共 催：(独)理化学研究所、(財)都市活力研究所、NPO法人バイオグリッドセンター関西、
大阪大学臨床医工学融合研究教育センター



プログラム：総合司会 坂田恒明(大阪大学大学院基礎工学研究科 特任教授)

13:30-13:40 挨拶 田中正夫(大阪大学大学院基礎工学研究科 教授)

計算科学の世界を拓く「京」

13:40-14:20 スパコン「京」の設計思想と生命科学への展開

理化学研究所 計算分子設計研究②グループディレクター 藤地真弘氏

14:20-15:00 「京」を活用した計算生命科学プロジェクト

横浜国立大学大学院生命ナノシステム科学研究科 教授 木寺昭紀氏

15:00-15:40 「京」による細胞分化解明のための大規模生体分子ネットワーク解析

大阪大学大学院情報科学研究科 教授 横田秀雄氏

「京」の産業利用に迫る

16:00-16:20 「京」に寄せる期待 —創薬の現場から—

第一三共(株) 創薬分子第2研究所 第5グループ 主任研究員 中尾直樹氏

16:20-16:40 創薬企業における計算化学の現状と今後への期待

塩野義製薬(株) 創薬・薬理研究所 先端創薬推進部門長 辻下英樹氏

16:40-17:00 創薬の現場がスパコンに期待すること

武田薬品工業(株) 医薬研究本部 薬理研究所 リサーチマネージャー 田中穂祐氏

17:00-17:40 「京」への期待と産業界、学界から「京」利用への道

-創薬業界の産業利用ニーズ調査結果を踏まえ-

NPO法人バイオグリッドセンター関西 理事 志水隆一氏(財)都市活力研究所)

事前登録方法：(1)所属、部署、役職、(2)氏名、(3)e-mailアドレスを下記までご連絡ください。

申込問合せ先：hpc@na.es.osaka-u.ac.jp 大阪大学大学院基礎工学研究科 野崎一徳

図2 第2回京速コンピュータ「京」と創薬・医療の産学連携セミナー

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
特別講演会・シンポジウム

2012年 1月8日 (日) 13:00-18:00
大阪大学豊中キャンパス基礎工学部大講義室
大阪府豊中市待兼山町1-3
(参加無料)

生命

医療

京
K computer

工学

予測

生体

特別講演

13:00-14:00 次世代スパコンの医療応用に向けて

東京大学 大学院工学研究科 教授 高木 周 氏

シンポジウム「ハイパフォーマンスコンピューティングと生命医療工学」

14:10-15:00 京速コンピュータ「京」のアーキテクチャとその活用について

理化学研究所 次世代スーパーコンピュータ開発実施本部
システム開発チームリーダー 庄司 文由 氏

15:00-15:40 京による “予測する生命科学・医療及び創薬基盤” の確立にむけて

理化学研究所、横浜市立大学 大学院生命ナノシステム科学研究科
教授 木寺 詔紀 氏

15:40-16:20 京で実現するライフサイエンスのグランドチャレンジとバイオエンジニアリング

理化学研究所 次世代生命体統合シミュレーション研究推進グループ
ディレクター 姫野 龍太郎 氏

16:20-17:00 ハイパフォーマンスコンピューティングが拓く不整脈研究

国立循環器病研究センター研究所 研究情報基盤管理室・室長 中沢一雄 氏

17:00-17:40 大規模数値流体シミュレーションによる全部床義歯の下顎位推定手法の開発

大阪大学 大学院基礎工学研究科 特任講師 野崎 一徳 氏

17:40-18:00 総合討論

共同主催：日本機械学会第24回バイオエンジニアリング講演会
問合せ先： 大阪大学 田中正夫 (hpci@me.es.osaka-u.ac.jp)

図3 「予測する生命科学・医療および創薬基盤」教育プログラム
特別講演会・シンポジウム

第8回 大阪大学医工情報連携シンポジウム

スーパーコンピューティングと 医療・バイオ

日時 2011 7/6 wed
13:15-17:00

場所 大阪大学吹田キャンパス
銀杏会館 3階
阪急電鉄 三和銀行ホール

主催
●大阪大学臨床工学融合研究教育センター

共催
●SCCRE In-silico Human研究会
●未来医療交流会
●大阪大学臨床工学融合研究教育センター・グローバルCOEプログラム
●HPC/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

後援
●一般社団法人臨床工学情報学コンソーシアム関西
●大阪商工会議所 ●近畿経済産業局
●大阪府 ●大阪市
●財団法人大阪市都市型産業振興センター (ロボットラボトリー)

問合せ先
大阪大学臨床工学融合研究教育センター
e-mail: mei-sec@mei.osaka-u.ac.jp
Tel: 06-6879-6577 Fax: 06-6879-6567

申込方法
上記メールアドレスにお名前、ご勤務先、情報交換会のご出欠をお知らせください。

司会 萩原 兼一 (大阪大学臨床工学融合研究教育センター副センター長 / 大阪大学大学院情報科学研究科)

13:15 開会の挨拶
~13:20 八木 哲也 (大阪大学臨床工学融合研究教育センター副センター長 / 大阪大学大学院工学研究科)

13:20 大量データと大規模計算機による蛋白質の分子シミュレーション
~14:00 中村 春木 (大阪大学蛋白質研究所)

14:00 生命システム解明のための大規模生体分子ネットワーク解析
~14:40 松田 秀雄 (大阪大学大学院情報科学研究科)

14:40 休憩
~14:50

14:50 呼吸・循環系のマルチスケールバイオメカニクス
~15:30 和田 成生 (大阪大学大学院基礎工学研究科)

15:30 人工股関節自動手術計画システムAutoImPlan: 計算解剖学と
~16:10 シミュレーションに基づくアプローチ
佐藤 嘉伸 (大阪大学大学院医学系研究科)

16:10 医用画像の可視化 / 可覚化
~16:50 大城 理 (大阪大学大学院基礎工学研究科)

16:50 閉会の挨拶
~16:55 野村 泰伸 (大阪大学臨床工学融合研究教育センター・グローバルCOEリーダー / 大阪大学大学院基礎工学研究科)

17:00 情報交換会 (2階 ミネルバ)
~18:30

図4 第8回大阪大学医工情報連携シンポジウム
「スーパーコンピューティングと医療・バイオ」

II-1-3 人材養成・教育プログラムの実施（企画調整グループ）

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などを行う。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う。

1) 実施内容（成果）

①大学・大学院での講義およびセミナーの実施

ア) 東京理科大学大学院薬学系研究科

薬品物理化学特論「スーパーコンピュータと生命科学」（5月23日）

講師：泰地真弘人（理研）

「スーパーコンピュータと創薬ターゲットの探索」（5月30日）

講師：江口至洋（理研）

「スーパーコンピュータと創薬」（6月6日）

講師：沖本憲明（理研）

参加者：大学院博士前期課程1年生、97名

イ) 東京医科歯科大学大学院

生命システムモデリング特論「細胞のシステム生物学」（2011年6月29日）

講師：江口至洋（理研）

参加者：大学院博士前期課程1年生、10名

ウ) 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

『スパコン「京」と計算生命科学』（2011年12月8日）

講師：江口至洋（理研）

参加者：教職員、大学生、および大学院生、63名

②高校生に対する教育とアウトリーチ活動

ア) 高等学校での出張授業の実施

生物学を学ぶうえで、数学、物理学、化学の必要性を理解してもらい、計算生命科学においてスーパーコンピュータ「京」がどのように研究で活用されているのかという内容の講義を実施した。スーパーコンピュータのイメージが講義受けることによって変わった、というコメントが実施した2校から多く寄せられた。

- ・兵庫県立神戸高等学校（2011年12月2日）

『スパコン「京」とは何？生物学は変わるの？』

講師：鷹野優（阪大）

参加者：総合理学科一年生を主として47名

- ・兵庫県立西脇高等学校（2011年12月16日）

『スパコン「京」とは何？生物学は変わるの？』

講師：江口至洋（理研）



図5 Newsletter (Vol.6) に掲載した高校での出張授業記事

参加者：科学教育類型（特色選抜）2年生を主として約90名。

イ) その他の高校生を対象としたアウトリーチ活動

・SuperCon2011

趣旨と内容：東京工業大学と大阪大学サイバーメディアセンターが主催する高校生のためのプログラミング・コンテスト。予選を通過した11組のチーム（1チーム2～3名）が、数日間かけて本選課題の問題を解くプログラムを作成し、最終日に提出されたプログラムの正確さ・速度を審査委員会が評価し、コンテスト最終日の成果報告会で発表がなされる。

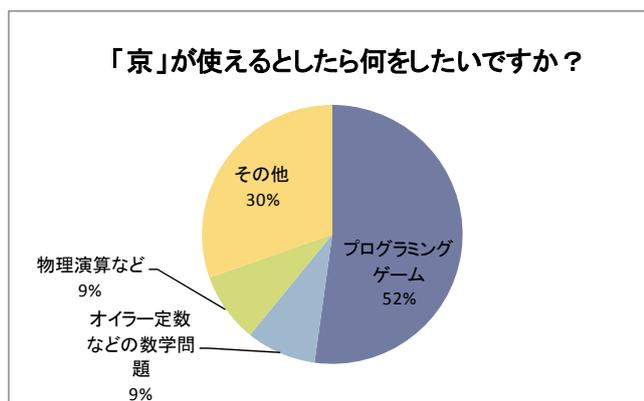


図6 アンケート結果例

H23年度は、2011年8月22 - 26日に、大阪大学で開催され、計算理論を応用した「落ち物ゲーム」の問題が出題され、参加者はスパコンの性能を活かして、それを解くプログラムを4日間かけて取り組んだ。計算科学推進体制チームでは、今後のアウトリーチ活動に反映するため、参加者に対しプログラミングや、スーパーコンピュータを利用したプログラミング・コンテストに興味を持った動機などを尋ねるアンケート調査を行った。競技参加者数30名。

・第4回サイエンスフェア in 兵庫

趣旨と内容：「サイエンスフェア in 兵庫」は、兵庫県教育委員会とスーパーサイエンスハイスクール(SSH)の県内指定校がつくる「兵庫咲いテク事業推進委員会」が主催し、高校生が普段取り組んでいる研究課題を発表を行い、プレゼンテーション能力の育成や、生徒、教員、大学、企業や研究機関との交流を持つことを目的としている。

第4回は2012年2月5日に神戸国際展示場（神戸市）に於いて開催され、兵庫県下の高等学校72校と他府県から10校が参加した。スペシャルレクチャーとして、『スーパーコンピュータ「京」～生命科学に吹き込む新しい風～』と題した講演を江口至洋副統括責任者が行った。また、「京」の紹介と塩基配列パズルゲームおよびアスパルテムのジペプチド結合分子模型を作るゲームを展示ブースにて実施した。参加者数約1,500名。

・第1回 科学の甲子園全国大会

趣旨と内容：独立行政法人科学技術振興機構（JST）が主催し、高等学校等（中等教育学校後期課程、高等専門学校を含む）の生徒チームが、理科・数学・情報における複数分野の競技を行う大会。全国の各都道府県の代表選考を経た47代表校と全国予選を勝ち抜いた特別枠1校が出場する。

「第1回 科学の甲子園全国大会」は2012年3月24-26日、兵庫県立総合体育館（兵庫県西宮市）にて開催された。25日にスーパーコンピュータ「京」のポスター展示と計算生命科学を題材としたパズルゲームを実施した。参加者数：約5,000名（うち競技参加者数：363名）

II-2 人的ネットワークの形成

II-2-1 実施計画

特定高速電子計算機施設を中核とする 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、特定高速電子計算機施設を中核とする HPCI 環境の普及を促進するため、プロジェクト外部の利用者からの支援希望へ応えることを目指す。平成 23 年度は、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・展示を行うとともに、潜在的な利用者である研究者を対象に、ミニシンポジウムまたは特定高速電子計算機施設を中核とする HPCI の紹介と利用ニーズ調査を目的とした会合を行う。

II-2-2 実施内容（成果）

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、2012 年秋より実施される 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実施した。

また、全国の研究者の協力を得て、計算生命科学のシンポジウム、セミナー等の開催を実施した。

①シンポジウム、セミナー等の開催

- ・『世界最速スーパーコンピュータ「京」と生命科学』（2011 年 10 月 6 日）

開催場所：九州大学医学部百年講堂

主催：九州大学大学院システム生命科学府、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：九州、沖縄地方の研究機関、および企業の研究者を対象に HPCI 戦略プログラム分野 1 に参加している研究者や、九州・沖縄地区の生命科学者が、世界最速スーパーコンピュータ「京」の生命科学分野における展開をテーマに講演を行い、「バイオ分野で京を使うために」と題した総合討論を行った。

分野 1 講演者：

高木周（東大）「予測医療に向けた階層統合シミュレーション」

泰地真弘人（理研）『超並列計算機「京」の設計思想と生命科学への展開』

参加者数：約 70 名

- ・第 4 回 JSBi 応用システムバイオロジー研究会

第 1 回「細胞環境の測定とモデリング」ワークショップ（2011 年 11 月 7 日）

開催場所：理化学研究所計算科学研究機構

主催：日本バイオインフォマティクス学会（JSBi）

共催：HPCI 戦略プログラム分野 1、理化学研究所生命システム研究センター（QBiC）

趣旨と内容：細胞レベルおよび分子レベルでのモデリングに取り組む研究者、1 分子計測の一线で活躍される実験科学者と参加者とで、今後発展が期待される細胞環境の研究にどのように取り組むべきか、実験、理論、計算の多方面から幅広く議論を行った。

プログラム委員：高橋恒一（理研、慶大）、上田昌宏（理研、阪大）、杉田有治（理研）

分野 1 講演者：

石谷隆一郎（東大）「がんの転移浸潤に関わるオートタキシンの分子動力学シミュレーション」

河野秀俊（原研）「シミュレーションからみるタンパク質 - 核酸の分子認識機構」

参加者数：約 60 名

- ・「第 3 回新たな創薬パラダイムの創出」（2012 年 1 月 12 日）

主催：システム薬学研究機構、バイオインフォマティクス・ジャパン

開催場所：東京大学医科学研究所

趣旨と内容：創薬の新しいパラダイム創出をめざし、産業界、学界の研究者が集まり、研究発表と意見交換を行うシンポジウムにおいて、HPCI 戦略分野 1 の活動と「京」の紹介を行った。

分野 1 講演者：江口至洋（理研）『スパコン「京」を用いた計算生命科学研究』

参加人数：約 70 名

②シンポジウム等でのポスター発表および展示参加

- ・PDB40 Symposium, " Supercomputational life science in Japan" ポスター発表（2011 年 10 月 28-30 日）

開催場所：Cold Spring Harbor Laboratory (NY, USA)

主催：Worldwide Protein Data Bank

趣旨と内容：世界各地から Protein Data Bank を利用する構造生物学、バイオインフォマティクスの研究者が集まる Protein Data Bank40 周年シンポジウムにて、スーパーコンピュータ「京」の紹介と HPCI 戦略プログラム分野 1 の活動紹介を行った。

分野 1 発表者：鎌田知佐（理研）、神内衣里香（理研）

参加者数：267 人

- ・CBI/JSBi2011 合同学会ブース展示（2011 年 11 月 8-10 日）

開催場所：神戸国際会議場

主催：情報計算法学生物学会（CBI 学会）、日本バイオインフォマティクス学会

趣旨と内容：NPO 法人バイオグリッドセンター関西と協力して HPCI 戦略プログラム分野 1 の活動紹介を行った。

参加者数：626 人

- ・SC11(Supercomputing 2011)ブース展示（2011 年 11 月 12-18 日）

開催場所：Washington State Convention & Trade Center

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 23 回目となる。世界一となった京の性能だけでなく、計算科学分野に於いて最先端の研究成果を創出するプログラムが始動したことを広く普及するため、スーパーコンピュータ「京」と HPCI 戦略プログラム分野 1 の紹介をブース展示にて行った。

参加者数：約 11,000 人

・第24回「理化学研究所と産業界との交流会」（2012年2月14日）

開催場所：ホテルオークラ東京（東京）

趣旨と内容：理研の役員、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、理化学研究所と親しむ会の主催により毎年2月に開催されており、毎回多様な業種の企業が参加している。同会場にてHPCI戦略プログラム分野1のパネルを展示し、参加企業に研究内容や京互換機システムの利用について説明を行った。

参加人数：459名

II-3 研究成果の普及

II-3-1 実施計画

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、産業界や国民に対し広く理解を得るための活動を行う。具体的には、Web ページやメーリングリスト等による情報発信。パンフレットの作成と配布等を実施する。

II-3-2 実施内容（成果）

①HPCI 戦略プログラム分野1の情報発信と理解促進

ア) ホームページの再構築と拡充

- ・日本語版 2011 年 7 月 1 日改変
- ・英語版 2011 年 11 月 1 日開設



図7 日本語版トップページ

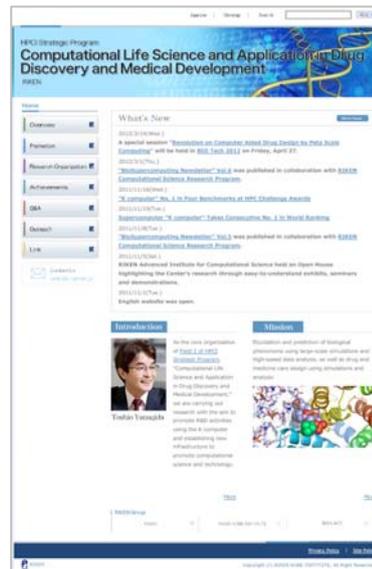


図8 英語版トップページ

イ) Newsletter 発行

次世代計算科学研究開発プログラムと連携し Newsletter の発行を行った。

- ・BioSupercomputing Newsletter vol.5 (2011 年 11 月発行)
- ・BioSupercomputing Newsletter vol.6 (2012 年 3 月発行)



図9 BioSupercomputing Newsletter
Vol.5 表紙（日本語版、英語版）



図10 BioSupercomputing Newsletter
Vol.6 表紙（日本語版、英語版）

ウ) 紹介冊子発行

HPCI 戦略プログラム分野 1 の研究開発、および活動の紹介をした日本語版、英語版の紹介冊子を 2011 年 10 月に発行した。



図 11 紹介冊子表紙（左から日本語版、英語版）

エ) ロゴマーク作成

分野 1 研究開発、および計算科学技術推進体制の活動に統一感を持たすため、HPCI 戦略プログラム分野 1 のロゴマークを作成した。



図 12 戦略分野 1 ロゴマーク

オ) 理化学研究所神戸研究所・計算科学研究機構一般公開（2011 年 11 月 5 日）

趣旨と内容：神戸研究所および計算科学研究機構が取り組んでいる研究活動やその成果を一般参加者に紹介し、最先端の科学研究に親しんでもらうことを目的として、年に一度開催する。研究者による講演会や、最先端の研究を支える施設の見学、体験を通して学ぶ実験イベントなど、各種催しを実施した。HPCI 戦略プログラム分野 1 では、展示ブースにて研究紹介と「ウイルスをつくろう！！DNAをつくろう！！」と題した工作イベントを実施し、多くの来場者が訪れた。
来場者数：1,950 名

②市民講座の開催

スーパーコンピュータが医薬品や医療分野においてどのように産業に利用されているかを理解してもらうために、市民目線で実際にどのような場面で何を計算しているのかという解説講座を CBI/JSBi2011 合同学会のプログラムの一つとして神戸市と協力し開催した。

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」!!』

（2011 年 11 月 9 日）

開催場所：神戸国際会議場

主催：NPO 法人バイオグリッドセンター関西

共催：理化学研究所 HPCI 計算生命科学推進プログラム、計算科学振興財団、神戸市、都市活力研

研究所

分野 1 講演者：江口至洋（理研）『世界最速のスパコン「京」』

参加人数：56 名

II-4 分野を超えた取組の推進

II-4-1 実施計画

戦略的連携を進める。具体的には、研究開発における技術面を中心に、他の戦略分野・特定高速電子計算機施設の運営主体である計算科学研究機構・HPCI コンソーシアムとの連携を進める。他の戦略分野との合同シンポジウムの開催を企画運営する。

II-4-2 実施内容（成果）

①合同シンポジウムの開催

HPCI 戦略プログラム5分野にて、「京」利用における技術的情報を共有し、研究活動の促進を図るため研究会を開催した。

- ・第2回 HPCI 戦略プログラム5分野合同研究会（2011年6月22日）

開催場所：理化学研究所計算科学研究機構

事務局：HPCI 戦略プログラム分野1

分野1 演者：

松永康祐（理研）「ストリング法によるタンパク質構造変化解析」

高橋恒一（理研）「細胞内環境を考慮した信号伝達経路のモデリング」

参加者数：68名

- ・第3回 HPCI 戦略プログラム合同研究交流会（2011年10月3日）

開催場所：理化学研究所計算科学研究機構

事務局：HPCI 戦略プログラム分野2

分野1 演者：秋山泰（東工大）「次世代 DNA シークエンサデータの超高速解析」

パネラー：杉田有治（理研）

参加者数：77名

②連携推進会議

分野間連携の取り組みとして、他の HPCI 戦略分野、計算科学研究機構とグランドチャレンジ・ナノ/ライフとの分野間連携の会議が設置され、H23年度は以下の会議に参加した。

- ・第4回連携推進会議（2011年5月13日）

開催場所：理化学研究所計算科学研究機構

参加者：中村春木（阪大）、江口至洋（理研）

- ・第5回連携推進会議（2011年7月13日）

開催場所：理化学研究所東京連絡事務所

参加者：木寺詔紀（横浜市大）、江口至洋（理研）

- ・第6回連携推進会議（2011年10月20日）

開催場所：理化学研究所計算科学研究機構

参加者：木寺詔紀（横浜市大）、江口至洋（理研）

- ・第7回連携推進会議（2012年1月17日）

開催場所：理化学研究所東京連絡事務所

参加者：木寺詔紀（横浜市大）、江口至洋（理研）

- ・第8回連携推進会議（2012年3月28日）

開催場所：理化学研究所計算科学研究機構

参加者：木寺詔紀（横浜市大）、江口至洋（理研）

- ③「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（プロジェクト）」との連携
「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（プロジェクト）」と連携を行い、計算生命科学分野での研究活動の促進を図るため、2011年5月11日、6月13日に連携打合せを行った。また、協力してBioSupercomputing Newsletterの（2011年11月、2012年3月）共同発行を行った。さらに緊密な連携を図るため、次世代計算科学研究開発プログラム、姫野龍太郎副プログラムディレクターにHPCI戦略プログラム分野1運営委員会会議にもオブザーバーとして、参加いただいた。

- ④計算科学から社会への情報発信のあり方ワーキンググループへの参加

計算科学研究機構とHPCI戦略プログラム実施機関等で構成する連携推進会議のもとにワーキンググループが設置され、計算科学から社会への情報発信のあり方とそれに関連する課題について、分野1からは江口至洋副統括責任者が参加し、継続的に検討している。3月には、ワーキンググループメンバーによる中間報告書を作成した。

- ⑤広報情報連絡会（2011年9月29日）

開催場所：東京大学本郷キャンパス

趣旨と内容：HPCI戦略プログラム5分野と計算科学研究機構の広報担当者が集まり、分野間の連携推進、情報交換、共有をする目的で開催。今後も定期的な開催を予定している。

参加者：約15名

- ⑥神戸地域、神戸医療産業都市との連携（2011年11月29日、2012年2月29日）

開催場所：理化学研究所神戸研究所分子イメージング科学研究センター

趣旨と内容：神戸地域の企業、大学、科学館、医療産業都市構想を推進する神戸市などとともに、神戸地域と継続的に連携できる研究活動普及体制の構築をめざし連携打合せを行った。

参加者：23名（第1回）、14名（第2回）