

○計算科学技術推進体制構築

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、業務を円滑に実施する。具体的には、HPCI 戦略プログラム 分野 1（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継続して進める。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 高度化推進（統括:泰地 真弘人・理化学研究所）

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 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、平成 23 年度に引き続き計算機環境（ソフトウェア環境および実行環境等）を整備、運用する。また、計算機利用経験の少ない関連する研究者（医療、製薬関連企業等を含む）が効率的な HPCI 環境の利用を可能とするため、HPCI 環境を使う前段階として既存のコード確認等が可能な HPCI 環境と互換性のある計算機環境を整備・運用する。

I-1-2 実施内容（成果）

1) 計算機資源の効率的なマネジメント

1-1) 試験利用期間 V-VI

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スーパーコンピュータ「京」向けの最適化が進んでいるアプリケーション（HI-Muscle, AMBER）を選定し、試験利用対象アプリケーションとした。

1-2) 共用開始後の計算資源の効率的な利用計画、資源量の再配分

共用開始後のスーパーコンピュータ「京」の運用方針と、戦略分野 1 の各課題のアプリケーションの進捗状況を踏まえ、計算資源量の利用目標を設定し課題参加者に効率的な利用を促した。スーパーコンピュータ「京」の運用方針として、割り当てられて計算資源量は、稼働率、充填率が 100% として算出されているが、現状のジョブの充填率が 60~70% のため、実際に使用できる資源量は割り当てられた資源量の約 60% と推定し、平成 24 年度の利用期間（平成 24 年 9 月 28 日～平成 25 年 3 月 31 日）での利用目標を 10%/月を設定した。「図 1 計算資源量の利用状況（平成 24 年 10 月末）」は、平成 24 年 9 月 28 日～平成 24 年 10 月 30 日での利用状況を表している。課題間で利用のばらつきはあるが戦略分野 1 全体では、約 20% の利用率で、10%/月の目標を達成している。

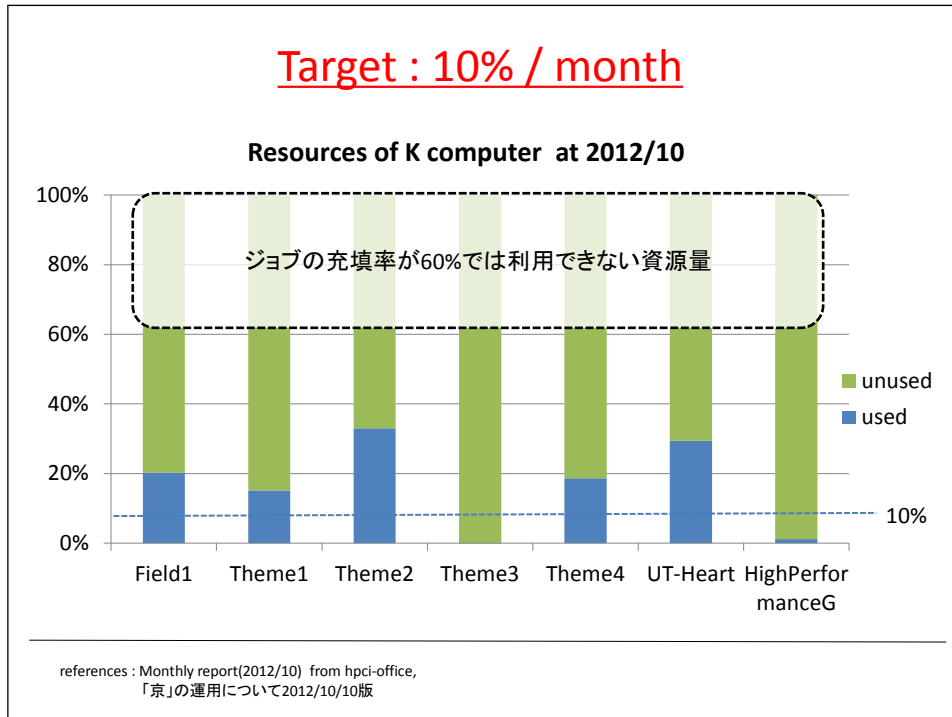


図1 計算資源量の利用状況 (平成24年10月末)

戦略分野に割り当てられた計算資源量は次年度に持ち越すことができないため、年度内に利用する必要があるが、年度末は、スーパーコンピュータ「京」の利用が混み合うことが予想されたので、できるだけ前倒しでの利用を促進するため、「図2 計算資源利用スケジュール」を作成した。図では各課題のアプリケーションの進捗状況を考慮して本格的な利用期間を赤い矢印で示し、特に開発の進んでいるアプリケーションについては、年度末までに割り当て資源量を使い切っていただくようお願いした。

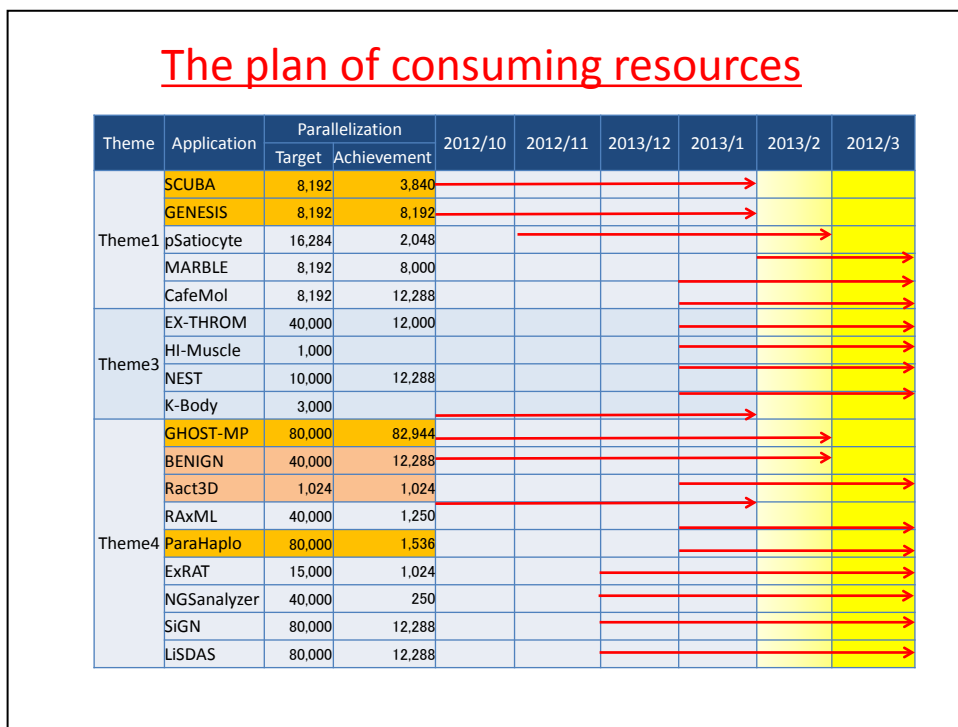


図2 計算資源利用スケジュール

平成 24 年 12 月時点で、課題間で計算機資源量の消費にバラツキがあったため、計算資源の分野内再配分を行った。また、平成 25 年 2 月で、資源量を使い切ってしまった課題もあったため、例外的な措置ではありましたが、分野内再配分を行った。

以上のように月単位での計算資源量の利用目標の設定、開発の進んでいるアプリケーションの前倒しでの「京」の利用の推奨、分野内再配分の実施等の効果もあり、平成 25 年 3 月末時点で、戦略分野 1 に割り当てられた計算資源の約 70%を利用できた。当初の目標である 60%を達成でき、割り当てられた計算機資源は有効に利用できたと考えている。「図 3 計算資源量の利用状況(平成 25 年 3 月末)」に各課題の計算資源量の利用状況を示す。

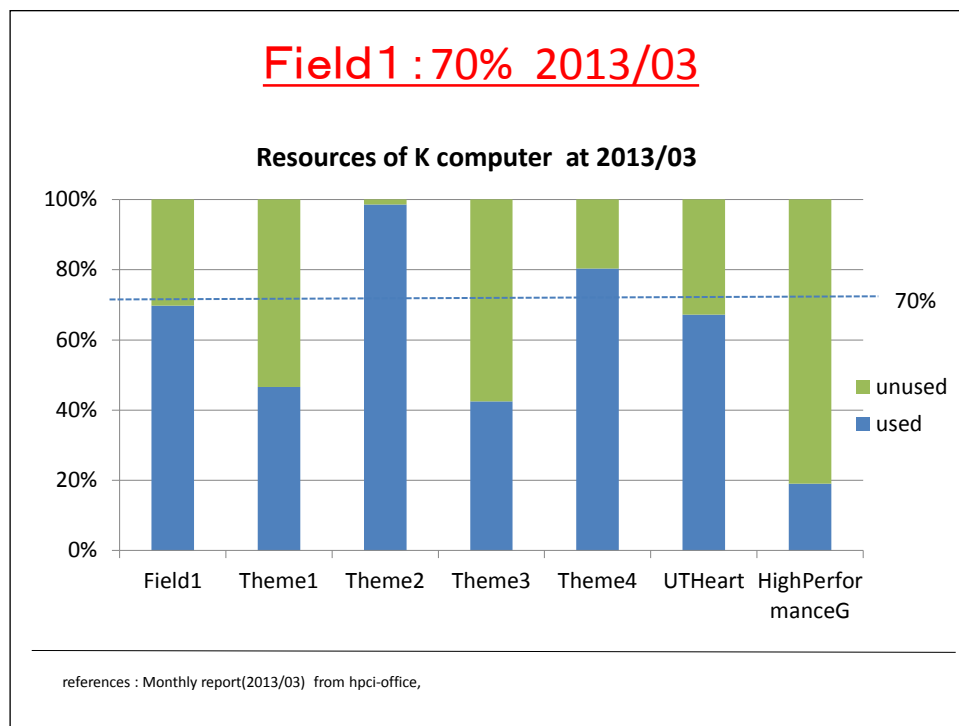


図 3 計算資源量の利用状況(平成 25 年 3 月末)

2) HPCI 環境利用のための分野内計算機環境の管理

昨年度、「京」を利用する前段階としての整備した計算機環境（ソフトウェア環境および実行環境）の運用を引続き行った。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システム、ソフトウェア高度化のための計算機システムの運用を行った。

I-2 HPCI 利用に際する研究支援協力

I-2-1 実施計画

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、並列化プログラミング等の講習会やセミナー等を他の戦略分野、協力機関、計算科学研究機構等と協力して進める。

I-2-2 実施内容（成果）

1) 「京」利用に際しての研究支援協力

1-1) 研究支援体制の構築

研究支援を行うために、「図4 高度化チームの体制」に示すような高度化推進チームの体制を構築した。高度化推進チームは、計算科学研究機構プロセッサ研究チーム、次世代生体統合シミュレーションソフトウェアの研究開発（グランドチャレンジ・アプリケーション・プロジェクト）からの助言を受け、各課題で開発しているアプリケーションの高度化支援を行う体制を構築し、サポートを行った。

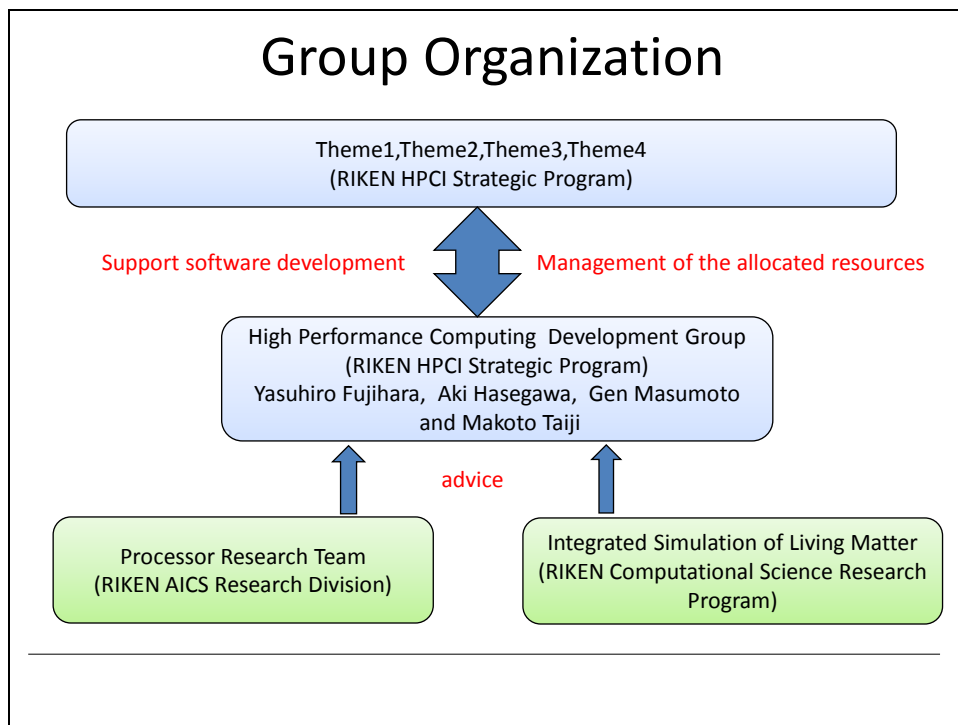


図4 高度化チームの体制

また、各アプリケーションに担当者を配置し、アプリケーションのニーズをくみ取りサポートできる体制をとした。アプリケーションと担当者の対応を「図5 アプリケーションと担当者の関係」に示す。

Your contact person

Theme	Application	High Performance Computing Development Group
Theme1 (Sugita Group)	SCUBA	Hasegawa
	GENESIS	Fujihara
	pSpatioocyte	Fujihara
	MARBLE	Masumoto
	CafeMol	Masumoto
Theme2 (Fujitani Group)	MP-CAFEE	Hasegawa
	AMBER	Hasegawa
Theme3 (Takagi Group)	EX-THROM	Hasegawa
	UT-Heart	Fujihara
	HI-Muscle	Hasegawa
	NEST	Masumoto
	K-Body	Hasegawa
Theme4 (Miyano Group)	GHOST-MP	Fujihara
	BENIGN	Masumoto
	Ract3D	Fujihara
	RAxML	Fujihara
	ParaHaplo	Masumoto
	ExRAT	Fujihara
	NGSanalyzer	Fujihara
	SIGN	Masumoto
LiSDAS	Masumoto	

図5 アプリケーションと担当者の関係

京コンピュータの試験利用期間Vにおいて、アプリケーション担当者からの報告を受け、「京」向けに準備の進んでいるアプリケーション HI-Muscle、AMBER を利用登録した。試験利用期間 I～IV までに登録した MP-CAFEE、GHOST-MP、GENESIS、SCUBA、EX-Throm、BENIGN と合わせて、8 アプリケーションが京コンピュータで利用可能となった。また、トライアル枠に 10 名の利用者を登録し、「京」の利用を促進した。試験利用期間中は、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」利用に対する要望を伝える等、利用者と開発実施本部との橋渡しの役割を果たした。供用開始後は、2012 年 9 月 27 日、2012 年 10 月 10 日に開かれた「京」の利用者講習会等に参加し、情報共有に努めた。2013 年 3 月 7 日に開催された「運用に関する検討会」に参加し、戦略分野 1 の「京」の運用に関する要望を HPCI-OFFICE、運用技術部に伝え、意見交換を行った。

1-2) 講習会・意見交換会の実施

平成 25 年 1 月 31 日に、主に戦略分野 1 の参加者に対して、「図 6 利用者講習会」に示すような利用者講習会を実施した。講習会では、「京コンピュータでのチューニング技法」というタイトルで、富士通株式会社様に「京」での全般的なチューニングについての考え方、「京」で集団通信と FFT ライブラリの利用方法と性能について重点的に講義を行った。また、計算科学研究機構 プログラム構成モデル研究チームの松田元彦先生に「京コンピュータ上の MapReduce ライブラリ (KMR) の紹介」のタイトルでご講演していただき、MapReduce の概要、KMR の開発状況等についてご説明いただいた。

利用者講習会

- 利用者講習会・
 - 日時: 2013年1月31日
 - 場所: 東京、神戸(TV会議)
 - 内容
 - チューニング技法
 - 京での集団通信について
 - 京でFFTライブラリについて
 - 計算科学研究機構の研究内容の紹介
 - 松田 元彦(計算科学研究機構 プログラム構成モデル研究チーム)
「京コンピュータ上のMapReduceライブラリ(KMR)の紹介」
 - 参加者13名
 - 他の戦略分野の開発者も参加(戦略分野間の交流)




図 6 利用者講習会

また、他の戦略分野で、「京」で開発を行っている方にもご参加していただき、情報共有をはかった。

1-3) 開発支援

A) pSpatioocyte

ParallelSpatioocyte(pSpatioocyte)は、細胞内の環境における 1 分子粒度の精密なシミュレーションを行うアプリケーションで、六方最密格子で離散化された空間上の格子点の状態として分子を表現し、これをさらに空間分割により各プロセッサに分担させ並列化し、計算を行うものである。大規模並列化を行うと、MPI 通信時間のロードインバランスが顕著となり、4096 プロセス以上の大規模並列が困難であった。そこで、ロードインバランスが顕著になる原因を調査し、それに対する改善策を検討し、実施した。

原因としては、プロセス間で bcast のインバランスがあり、待ちが発生していた。bcast の通信アルゴリズムが最適になるように、送信データのデータ構造を見直し、bcast のインバランスが改善し、並列のスケーラビリティも向上した。

B) AMBER

AMBER は世界的に広く用いられている分子動力学シミュレーションのソフトウェアであるが、京コンピュータ上に AMBER は移植されておらず、アカデミアの研究者だけでなく、民間企業から利用の要望があり、京コンピュータへの移植と高速化の支援を行った。AMBER のパッケージには、多くのツールが含まれており、すべてを京コンピュータに移植するのは困難であるため、分子動力学シミュレーションプログラムの sander と pmemd の 2 つのプログラムに対して行った。

- 移植

configure ファイルを修正し、AMBER11 と AMBER12 の sander と pmemd をコンパイルするのに必要なソースコードだけコンパイルした。

- 性能測定・高速化支援

sander と pmemd に対してコスト分析を行い、主要コストモジュールを抽出し、主要コストモジュールの演算性能を評価したところ、どちらも、演算ピーク比が数パーセント、バンド幅も実効性能と比較して低く、SIMD が促進されず、キャッシュのミス率が高かった。まずは、sander に注力して単体性能の改善に取り組んだ。具体的には、主要コストの関数のループ部分で、if 文をループ外に出すような最適化をおこない、SIMD 化・ソフトウェアパイプライン化が促進され、演算性能の改善が見られた。

C) MARBLE

登録機関に高度化支援を要請し、並列化効率の改善をお願いした。並列数が数千ノードになるとウィークスケーリングが悪化する問題があり、その原因調査と改善についての助言を得た。具体的には、全セルから有効なセルを選ぶループ文と MPI 通信に原因があった。MPI の集団通信に関しては、京コンピュータで最適な Tofu-barrier collective 通信が適用されておらず、そのため、大規模並列化すると、通信時間が増大している。Tofu-barrier collective 通信が適用されるように、データ構造等を検討する必要があり引き続き支援を行っていく。

D) BENIGN

遺伝子発現ネットワークをシミュレートする BENIGN に関しては、単体性能評価と、ウィークスケーリングを測定し並列性能評価を行った。また、大規模並列化で発生問題に対して助言を行った。

E) SCUBA

多数のレプリカにより探索を可能にする分子動力学シミュレーションである SCUBA は、昨年度から引き続き高度化支援を行った。昨年度の調査で高コストルーチンの SIMD 化を促進するようなチューニングを行うことが有効であると思われたので、2 通りの SIMD 化を促進する方法を試みた。一つは、ループ内の if 文を外に出し、SIMD 化を促進する方法と、もう一つは、ループ内にある case 文を無くし代わりにマスク変数を導入し、すべての場合について計算を行い、最後に mask 変数を掛けて計算結果を得るようにすることで SIMD 化を促進する方法を試みた。

どちらの方法もこれまでより、SIMD 化率は大幅に改善したが、ピーク性能に対する実行効率は、小幅な改善に留まった。

F) GENESIS

GENESIS は、分子レベルから細胞レベルまでの様々なスケールでの生命現象を、分子動力学シミュレーションにより解析できるプログラムパッケージで、その一部である空間分割法で並列化を行ったモジュールについて、並列実行時のスケーラビリティ (ストロングスケーリング)、ロードバランス等の並列性能測定を行い、大規模並列化に向けた情報提供を行った。

G) GHOST-MP, MP-CAFEE 等のアプリケーションについては、スーパーコンピュータ「京」でのコンパイル、JOB 実行等に関する助言を行った。

謝辞

本報告書の一部は、理化学研究所のスーパーコンピュータ「京」を利用して得られたものです (課題番号 : hp120310)。

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、大学、研究機関、民間企業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。

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24年度は、業務従事者を雇用し、以下を行う。第一線の研究者による最先端セミナー「HPCI セミナー」を毎月1~2回企画・実施し、セミナーの一部はTV会議システムによって配信するとともに、講義ビデオをeラーニングコンテンツとし広く一般に公開する。初学者から中級者を対象とした「HPCI チュートリアル」を行う。OJTによる社会人・学生の技術研修、また広く一般に向けた「HPCI ワークショップ」を1回開催する。

2) 実施内容 (成果)

2-1) HPCI セミナー

CBRCでは最先端の研究者による研究セミナーを毎週1回程度実施している。この「生命情報科学研究セミナー」の一部を「HPCI セミナー」として一般公開した。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、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「情報生命科学特別講義 II」(2012年度冬学期)という単位取得科目となった。

HPCI セミナー (H24年10月12日~H25年1月25日 毎週金曜日14:50~16:30 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外部から招待した6名の研究者とCBRCに所属する11名の研究員らが担当した。学生にも理解できるよう平易に研究背景を説明して始まり、最先端の研究成果までを丁寧に講義した。また、複数の講義をビデオ撮影し、これをもとに新たなeラーニング教材を開発した。(表1に e-learning 表示のあるものは今年度公開済み。ほかは次年度公開予定。)

一般公開した全12回のHPCIセミナー参加者はのべ324名(うち東京大学柏・本郷両キャンパスで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「情報生命科学特別講義 II」としてTV会議システムにて受講した学生115名)であった。

表 1 平成 24 年度 HPCI セミナー スケジュール

講義日	講師 (所属)	講演題目
第 1 回 10 月 12 日	甘利 俊一 (理化学研究所 脳科学総合研究センター)	生命系は素早くて頑健な決定をする e-learning
第 2 回 10 月 19 日	清水 佳奈 (CBRC)	加法準同型暗号を用いた化合物データベースのプライバシー保護 検索
	マーティン フリス (CBRC)	Pairwise sequence alignment by probabilistic models: from simple, to non-linear, to giga-scale
第 3 回 10 月 26 日	岩田 洋佳 (東京大学大学院 農学生命科学研究科)	ゲノム情報と遺伝資源の戦略的活用により植物育種を加速する e-learning
第 4 回 11 月 9 日	今井 賢一郎 (CBRC)	ミトコンドリアおよびミトコンドリア由来オルガネラに局在す るタンパク質の予測
	末永 敦 (CBRC)	リガンド結合親和性の計算科学的手法
第 5 回 11 月 16 日	後藤 修 (CBRC)	転写産物マッピングと多重配列アラインメントによる遺伝子構 造予測
第 6 回 11 月 30 日	小林 徹也 (東京大学 生産技術研究所)	確率的生命システムへの情報論的アプローチ
第 7 回 12 月 7 日	浜田 道昭 (東京大学大学院 新領域創成科学研究科)	不確実性と格闘: バイオインフォマティクスにおける本質的問 題 e-learning
第 8 回 12 月 14 日	河野 秀俊 (日本原子力研究 開発機構)	核内分子動態と機能発現メカニズム
第 9 回 12 月 21 日	広川 貴次 (CBRC)	創薬支援のための分子シミュレーション技術
	藤 博幸 (CBRC)	相同タンパク質の機能差関連サイトの予測
第 10 回 1 月 11 日	富永 大介 (CBRC)	細胞の状態変化と時系列データ解析
	油谷 幸代 (CBRC)	構造方程式モデリングによる遺伝子ネットワーク推定
第 11 回 1 月 18 日	富井 健太郎 (CBRC)	タンパク質の既知及び推定基質結合部位の網羅的類似探索
	堀本 勝久 (CBRC)	オミックスデータ数理解析による表現型変化の要因となる分子 候補の検出
第 12 回 1 月 25 日	岩崎 渉 (東京大学 大気海洋研究所)	生命科学データの表現と解釈

2-2) HPCI ワークショップ

H24 年 11 月 1 日 (木) 11:00~16:00、広く一般に向けた「HPCI ワークショップ」を開催した。「ハイ・パフォーマンス・コンピュータはライフサイエンスにどんな未来を開くか?」というテーマのもと、臓器レベルから分子レベルまで、各スケールの生命現象について進められている HPC を用いた研究成果に関する 4 件の招待講演を行った。のべ約 80 名の参加者を集め、各講演ごとに熱心な質疑応答が行われた。

臓器レベル：高木 周 講師（東京大学大学院工学研究科）

「大規模並列計算に適した流体構造連成手法の開発と血流シミュレーションへの適用」

細胞レベル：高橋 恒一 講師（理化学研究所 生命システム研究センター（QBiC））

「スーパーコンピュータがもたらす細胞シミュレーションの新時代」

配列レベル：大川 恭行 講師（九州大学大学院医学研究院）

「遺伝子を全て見る研究への試み -多様化するエピゲノム解析-」

分子レベル：藤谷 秀章 講師（東京大学先端科学技術研究センター）

「スーパーコンピュータを活用した薬開発」

このワークショップは BiW02012 (Bioinformatics Week in Odaiba 2012) の一環として開催し、関連するサテライトセミナーとしてワークショップ直前の時間帯に「京」を使って研究している CBRC の研究者 3 名(末永 敦、亀田 倫史、山崎 智)による研究発表(H24 年 11 月 1 日 10:00~11:00) も行った。



〔写真 1〕(左)
ワークショップの様子

〔写真 2〕(右)
休憩中の様子
休憩中も活発な質疑・意見
交換が行われた。

2-3)HPCI チュートリアル

HPCI チュートリアルの特徴の 1 つは、1 人 1 台の PC を用いた実習を行うことである。計算機を実際に使用方法の習得は独学では難しいため、実習付き講習会はとくに初学者には有効な人材養成手法である。H24 年度は、H24 年 7 月より H25 年 3 月までの期間に

- ・ バイオインフォマティクス実習コース (4 コース)
- ・ 創薬インフォマティクス実習コース (5 コース)
- ・ HPCI チュートリアルセミナー (1 コース)

を実施した。いずれの講義も教育経験豊富な第一線で活躍する研究者が講師となり、受講者のニーズを踏まえた内容となっていることも大きな特徴の 1 つである。

以上の他、H25 年 3 月 27 日 (水) に開催された SCLS (京コンピュータ互換スーパーコンピュータシステム) 利用者講習会 (木戸 善之 講師 (理化学研究所)、吉岡 祐二 講師 (富士通株式会社)) に際し、会場設備の提供をはじめとして協力した。

2-3-1) バイオインフォマティクス実習コース

バイオインフォマティクス実習コースは、主な受講者として日頃計算機による解析を主な業務と

していない実験研究者を想定している。そのため実践的な解析手法を学ぶ解析コース（B-1, B-2）の開催前に、関連する基礎的な知識や操作を学ぶ基礎コース（A-1, A-2）を実施した（表2）。実習に際しては操作に不慣れな受講者もスムーズに進められるよう、ウェブサイト（Wiki ページ）を用意した。受講者はウェブサイトからコマンドを copy、実行画面に paste することで入力ミスを防ぎ、初心者も円滑に実習を行うことができた。また、いずれのコースも研究職の受講者が最多数で、次いで学生（大学院生）が多かった。（以下、実施順）

表2 バイオインフォマティクス実習コース スケジュール

記号	コース名	講師（所属）	実施日	受講者数
A-1	R 基礎	水谷 健太郎（東京大学）	7月4日	24
B-1	多変量データ解析／遺伝子ネットワーク解析	油谷 幸代（CBRC） 富永 大介（CBRC）	7月5-6日	22
A-2	Linux, Perl 基礎	水谷 健太郎（東京大学）	10月4日	29
B-2	配列解析	今井 賢一郎（CBRC）	10月5日	22

2-3-2) 創薬インフォマティクス実習コース

創薬インフォマティクス実習コースは、主に製薬会社などの研究者を想定した内容となっている。基礎にあたる化合物情報概論・実習（C-1, C-1_K）、インシリコスクリーニング概論・実習（C-2, C-2_K）の両コースは、基礎的な概要を学ぶ講義、それを実際に体験する実習、現場での事例を紹介する特論の3本柱で構成した。また、東京会場（CBRC）の他、別途大阪会場（産総研関西センター（大阪府池田市））においても開催した。

アドバンストコース（C-3）は、概論・実習コースを終えた受講者を想定し、主にホモロジーモデリング、バーチャルスクリーニング、分子シミュレーションについて、より具体的な事例を学ぶ内容で実施した。

表3 創薬インフォマティクス実習コース スケジュール

記号	コース名	講師（所属）	実施日	受講者数
C-1	化合物情報概論・実習	広川 貴次（CBRC）	11月7-8日	9
C-1_K	化合物情報概論・実習（大阪）	広川 貴次（CBRC）	1月16-17日	2
C-2	インシリコスクリーニング概論・実習	広川 貴次（CBRC）	11月14-15日	8
C-2_K	インシリコスクリーニング概論・実習（大阪）	広川 貴次（CBRC）	1月23-24日	3
C-3	アドバンストコース	広川 貴次（CBRC）	1月30-31日 2月6-7日	15

2-3-3) HPCI チュートリアルセミナー

次世代シーケンサー 解析入門をテーマとして実施した。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、初日は講義と仮想環境 VMware Player 上で動作する Linux (Ubuntu) での実習、2 日目は統計解析ツール R を用いた実習、3 日目は講義およびウェブサイトや初日と同じ Linux (Ubuntu) での実習を行った。なお、受講者の負担を考慮し、初日は午後半日のみ開催した。

開講 3 か月前より定員 40 名で募集を行ったが、2 か月足らずでの満席後も受講希望者からの要望があり、キャンセル待ちの申込受付サイトを準備する程の盛況であった。昨年度に引き続き実施したテーマであったが、依然ニーズの高いテーマであるといえる。

表 4 HPCI チュートリアルセミナー スケジュール

記号・コース名	講義名	講師 (所属)	実施日	受講者数
D-1	ヒトの統合的ゲノム解析の実際	鈴木 穰 (東京大学 新領域創成科学研究科)	3月6日	41*
次世代シーケン サー解析入門	Large-scale sequence comparison with LAST	マーティン フリス (CBRC)		
	R でトランスクリプトーム解析	門田 幸二 (東京大学 農学生命科学研究科)	3月7日	
	ChIP-seq データ解析および ENCODE プロジェクトなどによる既存のデータの活用	須山 幹太 (九州大学 生体防御医学研究所 情報生物学分野)	3月8日	

※ のべ受講者数。申込者による 1 コース全日程参加を原則としているが、同一の所属からであれば、カリキュラムに支障の無い 1 日単位での異なる受講者による参加を認めた。

2-4) HPCI e-ラーニング

2-4-1) e-ラーニング制作 — HPCI セミナーの有効活用 P

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。そのため本プログラム開始時より、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。H24 年度も HPCI セミナーおよび生命情報科学研究セミナーで行われた複数の講義をビデオ撮影し、これをもとに新たに 4 本の e-ラーニング教材を開発した。これらの教材は H25 年 2 月より公開している。

2-4-2) e-ラーニングコース

e-ラーニングコースは、通学せずに自宅や勤務先での空き時間に学習でき、また関心のある話題を選択して聴講することができる効率的な独習ツールである。さらに、理解できなければ何度でも繰り返し視聴できるといった長所も持ち合わせている。年度途中でのコース及び講義の追加を行い、最終的に以下の 4 コース総計 52 本のビデオコンテンツを提供した。登録をすれば誰でも無料で全コンテンツを視聴できるようになっている。全受講者は 311 名にのぼり、過半数を研究・開発者が占め、学生が 2 割程度であった。

・バイオインフォマティクス e-ラーニングコース（全 20 講義）

バイオインフォマティクスの基礎に関する話題を広く集めている。全 20 講義中、バイオインフォマティクスの土台となる生物学、情報技術、確率・統計学の基礎について、合わせて 6 講義、バイオインフォマティクスの概要をはじめとした専門科目の基礎について 14 講義が用意されている。また、バイオインフォマティクス認定試験を想定した実力テストを用意し、習熟度をはかることが可能となっている。

・創薬インフォマティクス e-ラーニングコース（全 9 講義）

インシリコ創薬を行う上で必要な知識や手法を広く紹介している。化合物情報概論について 5 講義、インシリコスクリーニング概論について 4 講義を用意している。

・HPCI セミナー e-ラーニングコース（全 20 講義）

HPCI セミナーで行われた最新の研究に関する講演のビデオ化である。H24 年度の HPCI セミナーから甘利 俊一 講師（理研）、岩田 洋佳 講師（東大）、浜田 道昭 講師（東大）による 3 講義を新たに e-ラーニング化し、公開した。

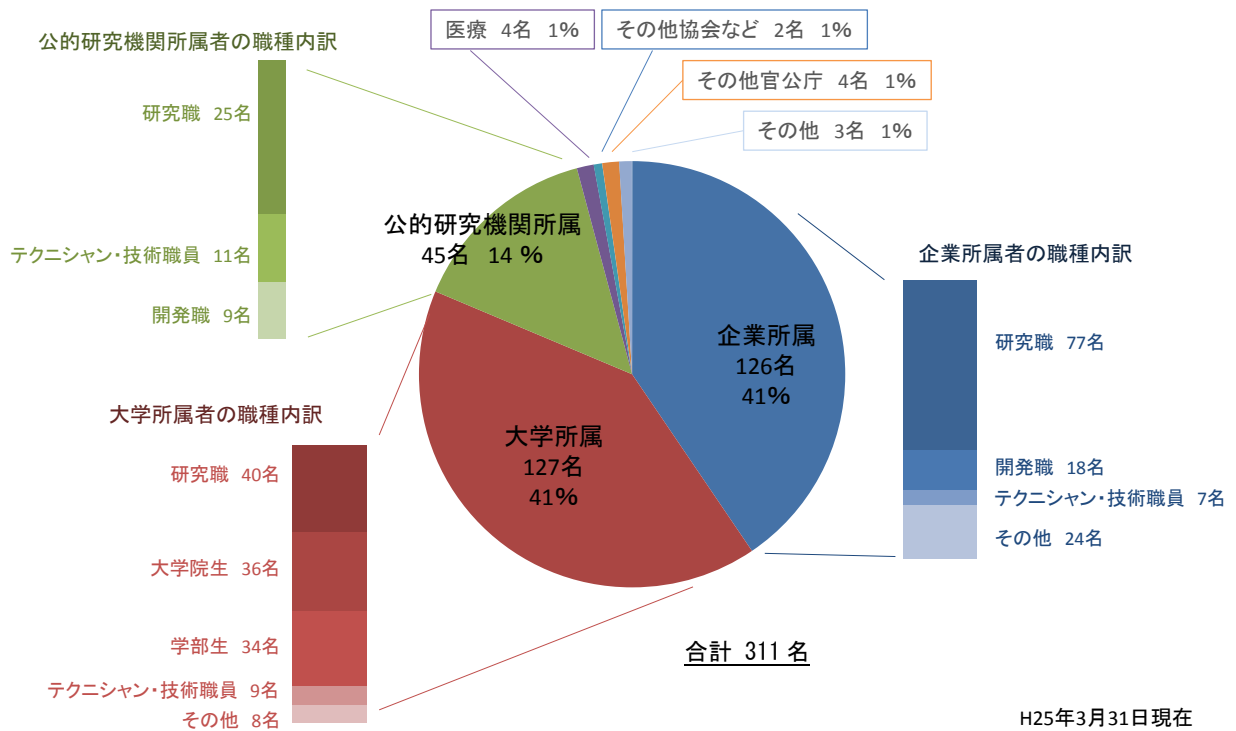
・Graph Mining e-ラーニングコース（全 3 講義） 新設

津田 宏治 講師（CBRC）による生命情報科学セミナーの Graph Mining に関する集中講義を新たに収録、公開した。

2-4-3) e-ラーニングコース 受講者プロフィール

e-ラーニングコース 受講者全 311 名の内訳は以下の通りとなっており、企業所属または大学所属の受講者がほぼ同数で 4 割ずつ占めている。また企業、公的研究機関とも研究・開発者が過半数を占め、大学では研究職と大学院生、学部生がほぼ同程度の約 20%超となっている。

図1 e-ラーニングコース 受講者プロフィール



2-5) 広報活動

被養成者募集とニーズ掘り起こしを行う必要がある。そのため広報活動は重視した。

ホームページの整備



図2 当課題ホームページ
<https://hpci.cbrc.jp>

各種プログラムの案内、受講者募集などを行う。戦略分野1のホームページと相互リンクしている。

リーフレットの作成と頒布

図 3 HPCI ワークショップ案内リーフレット兼ポスター

図 4 HPCI セミナー案内リーフレット兼ポスター

図 5 HPCI 人材養成プログラム案内リーフレット

アップデートしやすくするため自作

図 6 図 5 の裏面

e-ラーニング受講申込方法や内容、チュートリアル日程など詳細情報を記載

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24年度は、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（2単位）を継続するとともに、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（1単位）の教育プログラムを編成し、実施する。また、大学等研究機関と産業界が「京」を活用するための交流の場として関東および関西において「創薬・医療の産学連携セミナー」を開催する。

2) 実施内容（成果）

(a) 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「バイオシミュレーション特論（2単位）」を表1の通り実施した。受講者数は、大学院学生12名、単位取得者11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、修了者は1名であった。

表1 バイオシミュレーション特論 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

2012年12月1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) 計算生理学概論

大阪大学 教授 野村泰伸

2012年12月1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) 新しい薬創りとは

大阪大学 特任教授 坂田 恒昭

2012年12月8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) 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

2012年12月8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

2012年12月15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) 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

2012年12月15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) バイオシミュレーション実習1(骨のバイオメカニクス解析)

大阪大学 特任助教(常勤) 権志妍

特任講師(常勤) 野崎一徳

2011年12月22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) バイオシミュレーション実習2(スーパーコンピューター活用のための基礎演習)

大阪大学 特任講師(常勤) 野崎一徳

特任助教(常勤) 権志妍

2011年12月22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) バイオシミュレーション実習3(血管壁のバイオメカニクス解析)

大阪大学 教授 和田成生

特任講師(常勤) 野崎一徳

特任助教(常勤) 権志妍

2012年12月22日(土) 13:45-15:15

大阪大学豊中キャンパス基礎工学A棟A338室

- 16) バイオシミュレーション実習4(ボーンリモデリングシミュレーション)

龍谷大学 講師 田原大輔

大阪大学 特任講師(常勤) 野崎一徳

特任助教(常勤) 権志妍

2012年12月22日(土) (a)13:45-15:15、(b)15:30-17:00

大阪大学豊中キャンパス基礎工学A棟A338室

=====

- (b) 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 2 の通り編成実施した。なお、本講義は今年度より大学院基礎工学研究科における正規科目とした。受講者数は、大学院学生 3 名、単位取得者 2 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、修了者は 2 であった。

表 2 バイオインフォマティクス 講義 6 回および実習 2 回の詳細

-
-
- 1)、2) 計算科学による新しい薬創りとは
大阪大学 特任教授 坂田恒昭
2013 年 1 月 19 日 (土) 9 : 30-11 : 00、11 : 15-12 : 45
大阪大学吹田キャンパス情報科学研究科 B 棟 411 室
 - 3)、4) 細胞のシステム生物学と合成生物学
理化学研究所 江口至洋
2013 年 1 月 19 日 (土) 13 : 45-15 : 15、15 : 30-17 : 00
大阪大学吹田キャンパス情報科学研究科 B 棟 411 室
 - 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
2013 年 1 月 26 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 411 室
 - 6) 遺伝子ネットワークの情報解析 実習
大阪大学 准教授 竹中要一
2013 年 1 月 26 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 411 室
 - 7) 並列計算の医療への応用
大阪大学 教授 萩原謙一
2013 年 1 月 26 日 (土) 12 : 45-15 : 15
大阪大学吹田キャンパス情報科学研究科 B 棟 411 室
 - 8) 並列計算の医療への応用 実習
大阪大学 准教授 伊野文彦
2013 年 1 月 26 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 411 室
-
-

(c) 創薬・医療の産学連携セミナー

第 3 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

2012 年 12 月 19 日 (水) 13:00-17:00

大阪 梅田センタービル (16F 会議室H)

第 4 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

2013 年 1 月 25 日 (金) 13:00-17:00

東京 フクラシア東京ステーション(6F 会議室D)

を企画・実施した。詳細は図 1 および 2 の通りであり、それぞれの参加者数は、83 名 (事前申込 90 名)、73 名 (事前申込 80 名) であった。

第3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：2012年 12月19日（水）13:00-17:00

場 所：大阪梅田センタービル16階H会議室（大阪市北区中崎西2-4-12）

参加費：無料（<http://hpci.me.es.osaka-u.ac.jp/>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）

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



総司会 坂田恒昭（大阪大学大学院基礎工学研究科 特任教授）

13:00-13:10 挨拶 田中正夫（大阪大学大学院基礎工学研究科 教授）

13:10-14:00 核酸医薬品創製のためのスパコンへの期待

甲南大学先端生命工学研究所 所長 杉本直己氏

14:00-14:40 医薬化学研究者の抱える課題に「京」は応えられるか

塩野義製薬（株）創薬・疾患研究所 代謝性疾患・化学部門 部門長 塩田武司氏

15:00-15:40 化合物スクリーニング研究者よりみたインシリコスクリーニングへの期待

塩野義製薬（株）創薬・探索研究所 先端創薬推進部門 部門長 武本浩氏

15:40-16:20 スパコン京の創薬応用への期待：世界最大規模の化合物空間からのインシリコ創薬の実現へ

京都大学大学院薬学研究所 教授 奥野恭史氏

16:20-17:00 スパコン京と生命科学：計算生命科学の導入としてのSCLS計算機システム

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 研究企画担当 木戸善之氏

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

図1 第3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4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：2013年 1月25日（金）13:00-17:00

場 所：フクラシア東京ステーション6階会議室D（東京都千代田区大手町2-6-1朝日生命ビル）

参加費：無料（<http://hpci.me.es.osaka-u.ac.jp/>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）

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



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）

13:00-13:10 挨拶 田中正夫（大阪大学大学院基礎工学研究科 教授）

13:10-14:00 システムズバイオロジーのための京コンピュータへの期待

特定非営利活動法人システム・バイオロジー研究機構・学校法人沖繩科学技術大学院大学 教授 北野宏明氏

14:00-14:40 創薬化学研究におけるスパコンへの期待

アステラス製薬株式会社 研究本部 化学研究所 リード化学研究室 主管研究員 片山直子氏

15:00-15:40 大規模スーパーコンピュータを活用した医薬候補低分子化合物の設計

富士通株式会社 バイオIT事業開発室 シニアディレクター 松本俊二氏

15:40-16:20 スパコン京の創薬応用への期待：世界最大規模の化合物空間からのインシリコ創薬の実現へ

京都大学大学院薬学研究科 教授 奥野恭史氏

16:20-17:00 スパコン京と生命科学：計算生命科学の導入としてのSCLS計算機システム

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 研究企画担当 木戸善之氏

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

図2 第4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

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）

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、スーパーサイエンスハイスクール指定校および理系特別クラスを設けている高等学校にて、特定高速電子計算機施設や当該戦略分野1の研究活動内容を題材とした高校生向け授業を行う。また、海外の機関と教育プログラムの連携を図っていく。

1) 実施内容（成果）

1-1) 大学・大学院での講義およびセミナーの実施

- ・京都大学大学院薬学部「基礎バイオインフォマティクス」

「システム生物学と合成生物学」（2012年5月2日）

講師：江口至洋（理研）

参加者：15名

- ・大阪大学 MEI センター

「医用工学情報工学入門コース」（2012年5月12日）

講師：木戸善之（理研）

参加者：9名

- ・神戸大学発達科学部「発達科学への招待」

『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-』（2012年6月29日、7月13日）

講師：江口至洋（理研）

参加者：学部1年生、293名

計算生命科学という学問をとおして、全ての「学問が陸続き」という概念の講義に多くの学生が驚き、とても新鮮なものとして映ったようであった。また、学生たちは、計算機の発展とスーパーコンピュータ「京」が単に計算機というものでなく自分たちの生活に大きく関わっていることへの理解と関心を示した意見が寄せられた。

- ・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』（2012年7月2日、9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

- ・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』（2012年12月18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、15名

- ・大阪大学 MEI センター

「スキルアップ講座」（2013年1月19日、26日）

「細胞のシステム生物学と合成生物学」

社会人向けの総合的な医工学に関する人材育成を目的として開講された講座にて、講義と MATLAB を使用した実習を実施した。

参加者：4名

1-2) 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

計算機がどのように発展してきたのか、また生物学を学ぼうと、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。計算機がわたしたちの生活に非常に密着していることに驚く感想が多く寄せられた。

- ・福岡県立福岡高等学校 (2012年7月21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)

参加者：福岡県立福岡高等学校、修猷館高等学校の1年生を主として47名

- ・栃木県立宇都宮高等学校 (2012年8月24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)

参加者：1、2年生を主として56名

- ・兵庫県立西脇高等学校 (2012年10月19日)

『スパコン「京」と計算生命科学』

講師：木戸善之 (理研)

参加者：科学教育類型 (特色選抜) 2年生を主として約65名



図1 宇都宮高校での授業の様子

イ) その他の高校生を対象としたアウトリーチ活動

- ・福岡県生物部会での講義 (2012年7月1日)

『スーパーコンピュータ「京」生物学に吹き込む新たな風』

講師：江口至洋 (理研)

参加者：40名

若い人材を育成するために、教員に対し科学への増進を深める教育が欧米では盛んに実施されている。当プログラムに於いても、より多くの若い世代に計算生命科学に対する理解と関心を深めてもらうため、教員への教育に取り組んでいきたい。

- ・第5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の発表を行い、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5回は2013年1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38校が参加し、企業団体を含め約1,200名が参加した。今年は「Open your eyes 無限に広がる科学の世界」、今まで知らなかったことに視界を広げるということ統一テーマに開催された。高校生とは思えない、よく観察された研究や工夫された研究が多く見られた。

当プログラムでは、塩基配列パズルやヘモグロビンの立体パズルを利用した参加型のプレゼンテーションを実施した。

・第2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代表校が出場し、高校生の域を超えたハイレベルに取り組む。

「第2回 科学の甲子園全国大会」は2013年3月23-25日、兵庫県立総合体育館(兵庫県西宮市)にて開催された。第2回で出題された実技問題にはこれまでのものづくりの問題に加え、プログラミングを使用して問題解決型の総合能力が試される構成となっていた。24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6,000名(うち競技参加者数:358名)

1-3) 海外の機関と教育プログラムの連携

EUのFP7プロジェクト(欧州全体の国際競争力・技術力を向上させることを目的に、ヨーロッパにおける研究活動を助成する欧州委員会(EC))の主要な政策プロジェクト、ScalaLifeに参画しているPDC Center For High Performance Computing, KTH Royal Institute Technology (Sweden)とHPCにおける人材育成について2013年2月20日TV会議による情報交換を行った。PDCでは大学院生、ポスドク、そして研究者を対象とした人材育成活動の一つとしてSummer Schoolを1996年から実施し、Summer Schoolで履修した単位はEUの単位互換システムとして認定するなどの取り組みを行っている。今後も適宜情報交換を継続していきたい。

II-2 人的ネットワークの形成

II-2-1 実施計画

生命科学コミュニティにおける HPCI 環境での計算生命科学の理解増進および人的ネットワーク形成を進めるため、平成 23 年度に引き続き学会におけるシンポジウムの開催や発表・展示・セミナーを行うとともに、全国を北海道・東北、関東、東海、関西、中国・四国、九州・沖縄の 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、HPCI 環境を使う前段階としての計算機環境を整備し、プロジェクト外部の利用者への高度化支援を行う。

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、国内の各種関連学会でシンポジウムを実施した。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等の開催を実施した。

1) シンポジウム、セミナー等の開催

- ・東北大シンポジウム (2012 年 5 月 10 日)

『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―』

開催場所：東北大学良陵会館

主催：東北大学大学院医学系研究科、東北大大学院情報科学研究科、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：これまでの計算生命科学は多くの計算量が必要な研究がスパコン利用の中心であった。これに対して、次世代シークエンサーを初めとする実験技術の進歩により、大規模な生命データが出てくる時代となり、これまでの CPU 駆動型ではなくデータ駆動型の生命科学研究でもスパコンに匹敵するような大規模計算機が必要になってきている。しかし、従来のスパコンのデザインは CPU 駆動型研究が念頭にあるため、データ駆動型の生命科学研究で必ずしも使い勝手が良いわけではない。シンポジウムでは、バイオインフォマティクスやシステム生物学的なデータ駆動型の生命科学研究を行っている研究者を招いて、世界最速のスーパーコンピュータ「京」と生命科学の接点を探り、今後のますます増えてくる生命関連データ活用に必要なスパコンの未来像の議論を行った。

また、大学院生を対象とした「学生 5 Minutes Session」を公募開催し、参加した学生には旅費を支給した。当プログラムを介し、東北大学医学部産科医研究

室と学生との交流が、後日開始された。

参加者数：102名

- ・岡山大学シンポジウム（2012年6月1日）

『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』

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：計算生命科学を軸に異分野の研究者、技術者が（民間企業も含めて）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、またスーパーコンピュータ「京」を核にした HPCI (High Performance Computing Infrastructure) の本格稼働を控え、生命科学と計算機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開催した。シンポジウムでは計算科学と生命科学の境界領域で研究に取り組んでいる 14 名の研究者による研究成果の発表、そして将来に向けたパネルディスカッションが行われた。全体を通して「京」の有効活用の方法としてどのようなものが考えられるか、また生命科学を対象に異分野の融合はどのように迫れるのかなどの議論を行った。

参加者数：225名

- ・九州大学シンポジウム（2012年8月3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：「生命科学の世紀」とされる 21 世紀に入り、急速に進歩する計測技術から多様でかつ膨大な生命科学データが生み出されてきている。それら Bio Big Data を解析し、新しい知識を創造する営みは個々の研究室の守備範囲を越え、学際的取り組みを必要としている。世界最先端のスーパーコンピュータ「京」の本格稼働が目前に迫り、生物学分野でも「京」を利用した新しい融合的分野の開拓が可能になりつつあるなか、シンポジウムではこの現状をふまえて計算科学をも巻き込んだ新たな生命科学分野の開拓をともに議論し推進することを目的に、関連各分野の研究者による研究成果やアイデアの発表を行った。

参加者数：81名

- ・第 50 回日本生物物理学会年会シンポジウム（2012年9月23日）

『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』

主催：日本生物物理学会

開催場所：名古屋大学東山キャンパス

趣旨と内容：K computer (the ten Peta FLOPS supercomputer installed in Kobe)

provides an enormous enhancement of the capability in computational life science. This symposium intends to bring forth the possibility of supercomputing in life science fully utilizing K computer. Particularly, it focuses on the multi-scaled descriptions of molecular networks and cellular dynamics by integrating the molecular and the cellular simulation methods.

オーガナイザー：木寺詔紀（横浜市大、理研）、杉田有治（理研）

参加人数：1,500名（大会総数）

・CBI/JSBi/Omix2012 生命医薬情報学連合大会（2012年10月16日）

「生命科学におけるスパコン京の活用」

主催：日本

開催場所：タワーホール船堀

趣旨と内容：現在、スーパーコンピュータ「京」の研究開発者の研究課題の取組とそれらを応用した計算生命科学の将来にみえるものを議論した。また、当プログラム戦略分野1（代表機関：理化学研究所）が導入したSCLS計算機システムの認知度を上げるための紹介を行った。

参加者数：621名（大会総数）

2) SCLS 計算機システム（「京」互換機システム）の導入

趣旨：多くの生命科学研究者によるHPCI環境の活用を促進するためにSCLS計算機システム（「京」互換機システム）を当プログラムに導入し、理化学研究所情報基盤センターに設置した。

[システム構成]

計算ノード：PRIMEHPC FX10

CPU：SPARC64TM IXfx

[システム全体]

ノード数：48

総理論演算性能：10.1 TFLOPS（1ノードあたり211 GFLOPS）

総主記憶容量：1,536 GB（1ノードあたり32GB）

共有ファイル容量：128 TB

2-1) SCLS 計算機システム利用公募

2012年度第1回利用公募を2012年12月3日に開始し、約1ヶ月間の応募期間を経て、2013年1月23日に開催されたSCLS利用公募委員会の審査の結果、14件の課題を採択した（応募数：14件）。3月1日より利用提供の開始を行った。

公募委員会メンバー：

金久實委員長（京都大学化学研究所、特任教授）

和田成生委員（大阪大学大学院基礎工学研究所、教授）

木寺詔紀委員（理研、副プログラムディレクター）

江口至洋委員（理研、副プログラムディレクター）

利用者数：51名（2013年3月1日付）

2-2) 利用者講習会の実施

SCLS 計算機システムの利用者の利用支援のために初心者向け「入門コース」の講習会を開催した。

日時：2013年3月27日

開催場所：産業技術総合研究所生命情報工学研究センター（東京）、理化学研究所
計算科学研究機構（神戸、TV 中継）

参加者数：8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、平成24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・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、研究者向け紹介冊子と、国民への理解増進を図るための紹介冊子、ニューズ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。

II-3-2 実施内容（成果）

1) HPCI 戦略プログラム 分野1の情報発信と理解促進

1-1) ホームページの拡充

戦略分野1の活動の拡充にともない、サイト構成を見直しコンテンツを充実させた。また機能性や閲覧のしやすさ、更新作業のしやすさを重視しバナーやサイト分析ツールの追加をするなどホームページの改良作業を行った。



図2 日本語版トップページ

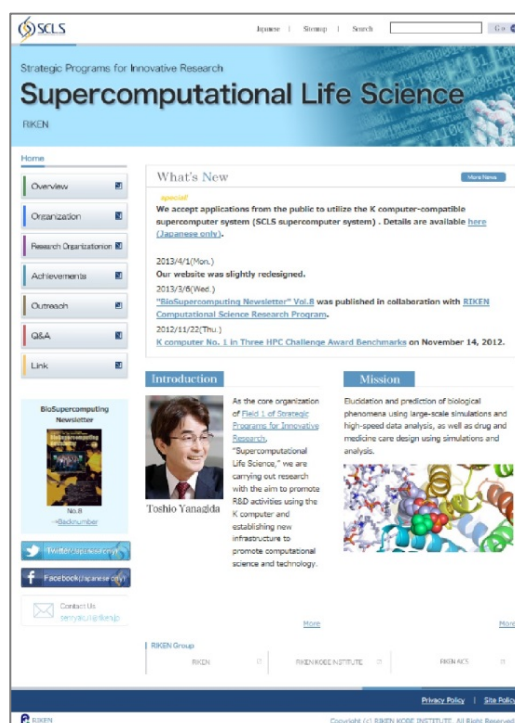


図3 英語版トップページ

1-2) Facebook (2012年10月15日)、Twitter (2012年11月20日) の設置
 ホームページを通じて発信する戦略分野 1 を中心とした情報に加え、Twitter や
 Facebook から計算科学研究機構や他 4 分野、計算生命科学に関する情報などを発信
 しネットワークの拡大を目指した。



図 4 Facebook ページ



図 5 Twitter ページ

1-3) Newsletter の発行

2011 年度に引き続き、次世代計算科学研究開発プログラムと連携し、以下の
 Newsletter の発行を行った。

- BioSupercomputing Newsletter Vol.7 (2012年12月発行)
- BioSupercomputing Newsletter Vol.8 (2013年3月発行)

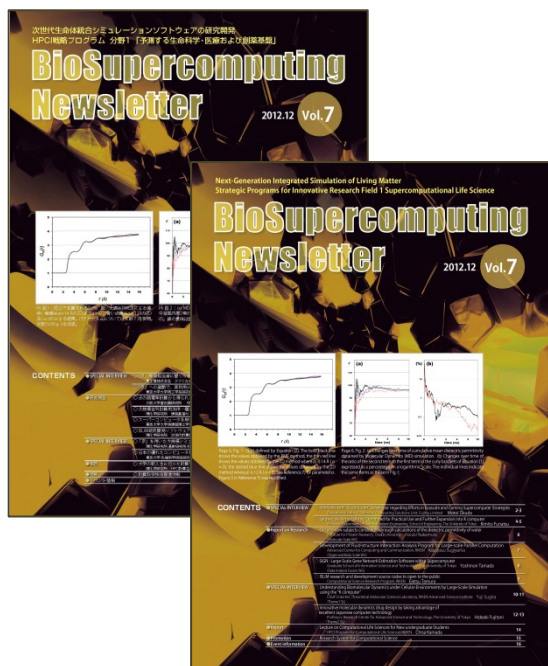


図 6 BioSupercomputing
 Newsletter Vol.7 表紙
 (日本語版、英語版)



図 7 BioSupercomputing
 Newsletter Vol.8 表紙
 (日本語版、英語版)

1-4) 一般向け紹介冊子の発行

戦略分野1の研究開発および活動を、一般向け(主として高校生以上を対象とした)に平易に紹介をした紹介冊子(日本語版)を2012年10月に発行した。英語版はホームページ掲載用にデータのみを制作した。



図8 紹介冊子表紙(左から日本語版、英語版)

1-5) 研究者向け紹介冊子の改訂

研究開発内容の進捗に合わせ、2013年2月28日改訂版を発行した。



図9 紹介冊子表紙(左から日本語版、英語版)

1-6) 「科学と工業」への寄稿

発刊元: 社団法人大阪工研協会

趣旨と内容: 社団法人大阪工研協会が毎月発行している学術雑誌「科学と工業」(2013年1月号)において、スーパーコンピュータ「京」を駆使した生命科学の研究について、戦略分野1の活動を中心に紹介をし、計算科学による創薬の可能性について概説した。読者対象は、大学をはじめとする研究機関、企業の開発担当技術者や研究者。

発行部数：1200～1300部

執筆者：木寺詔紀（独立行政法人理化学研究所）、杉田有治（独立行政法人理化学研究所）、藤谷秀章（東京大学先端科学技術研究センター）、高木周（東京大学大学院工学系研究科）、宮野悟（東京大学医科学研究所）

1-7) 理化学研究所神戸研究所・計算科学研究機構一般公開（2012年10月20日）での成果普及

趣旨と内容：理化学研究所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。戦略分野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：3,500名

これに加え、理化学研究所各事業所で開催された理研一般公開に於いても、ポスター、ニューズレター、プログラム紹介冊子で当プログラムを紹介する活動を実施した。筑波事業所（4月20日）、和光本所（4月21日）、播磨事業所（4月30日）、仙台偉業所（8月4日）、横浜事業所（9月29日）実施。

1-8) 学会やイベントなどでの展示発表

・Bio Japan 2012 ブース展示（2012年10月10-12日）

開催場所：パシフィコ横浜（神奈川）

主催：一般財団法人バイオインダストリー協会、公益財団法人ヒューマンサイエンス振興財団他7社

趣旨と内容：Bio Japan 2012は国内最大級のバイオ関連イベントで、1986年の初開催から成長を続け、15回目の開催となる。ライフ、グリーン、機能性食品、バイオクラスター&ベンチャーを中心とし、国内外から25ヶ国・地域を超える600社以上の多数のバイオ関連企業関係者が参加する。来場者や出展企業との交流により人的ネットワークの拡大を図り、また国内・海外に向けて研究成果を広くPRすることを目的とし、理化学研究所と戦略分野1が協力をしてブースを出展した。

参加人数：延べ12,369人

・計算物理国際会議2012（CCP2012）ブース展示（2012年10月14-18日）

開催場所：ニチイ学館 神戸ポートアイランドセンター（兵庫）

主催：IUPAP、大阪大学、京都大学、神戸大学、兵庫県立大学、日本物理学会、応用物理学会

趣旨と内容：CCP2012(Conference on Computational Physics)は、プラズマ物理学、

流体力学、物性物理学、応用物理学・物理応用、生物物理学・分子生物学関連及びその応用分野の第一線の科学者、技術者が集う国際会議で、2012年で24回目になる。HPCI戦略プログラムの5分野がブースを出展し、戦略分野1は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）との共催での展示を行い、会場において研究活動の説明などを行った。

参加人数：404名（37ヶ国）

- ・ SC12(Supercomputing Conference 2012)ブース展示（2012年11月12-15日）

開催場所：Salt Palace Convention Center（ソルトレイク、USA）

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24回目となる。計算科学研究機構と5分野が協力し、共用開始後を意識し利活用に重きを置いたブース出展となった。2回目となる今回は、計算科学研究機構およびHPCI戦略プログラムによるブース展示に加え、情報発信のさらなる強化を目的としスーパーコンピュータ「京」を利用した研究開発のショートレクチャーを行った。非常に好評であったため、SC13にて引き続きショートレクチャーを実施する予定である。

Short Lecture Title: Life Science Simulations on the K computer (RIKEN SCLS)

参加者数：延べ9,822人

- ・ 第26回「理化学研究所と産業界との交流会」（2013年2月14日）

開催場所：ホテルオークラ東京（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30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う。戦略分野1のパネルを展示し、参加企業に研究内容やSCLS計算機システム(互換機システム)の利用について説明を行った。

参加人数：445名

- ・ TUT-CMSI 見える化シンポジウムでのブース展示（2013年3月5日）

開催場所：秋葉原UDX4階（東京）

主催：計算物質科学イニシアティブ（CMSI）、豊橋技術科学大学（TUT）

協力：理化学研究所計算科学研究機構・HPCI計算生命科学推進プログラム、海洋研究開発機構、東京大学生産技術研究所、計算基礎科学連携拠点

趣旨と内容：目に「見えない」ナノの科学を「見える」科学としてわかりやすく伝えるにはどうしたらいいのか、をテーマに分野2CMSI拠点によるシンポジウムが開

催され、計算科学研究機構と5分野が協力して、広報戦略および研究成果の可視化映像のブースを出展した。研究内容の紹介を行い、また広報戦略のための情報を収集した。

参加人数：136名

2) 市民講座の開催

・千里振興財団D1セミナー(2012年4月20日)

『スーパーコンピュータ「京」の医療・創薬分野への応用』

主催：公益財団法人千里振興財団

開催場所：千里ライフサイエンスセンタービル

趣旨と内容：スーパーコンピュータ「京」がどのような設計思想に基づいて開発されてきたのか、そして「京」の試験利用実績も踏まえ、スーパーコンピュータを用いた医療および創薬分野における研究開発事例と研究計画の紹介をし、医療と創薬の現場から「京」への期待を議論し、「京」が社会へ果たす役割を一般市民へ紹介した。

参加者数：116名

3) 産業界との連携

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開始した。

趣旨と内容：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(11社)：

アスピオファーマ(株)、エーザイ(株)、小野薬品工業(株)、キッセイ薬品工業(株)、参天製薬(株)、塩野義製薬(株)、大日本住友製薬(株)、田辺三菱製薬(株)、日本新薬(株)、科研製薬(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、(独)産業技術総合研究所、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

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・「京」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。具体的には、H24年度は計算科学研究機構と他の戦略5分野との合同シンポジウムと合同研究会の開催を行う。

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、スーパーコンピュータ「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4回 HPCI 戦略プログラム合同研究交流会（2012年7月9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3

戦略分野1 演者：

石田恒(日本原子力研究開発機構)「生体分子動力学シミュレーションプログラム SCUBA の開発とタンパク質-核酸複合体の大規模シミュレーション」

山下雄史(東京大学先端科学技術センター)「スーパーコンピュータを活用した結合自由エネルギー予測方法および創薬応用」

参加者数：83名

- ・第5回 HPCI 戦略プログラム合同研究交流会（2013年1月16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4

戦略分野1 演者：

宮野悟(東京大学医科学研究所)「ゲノムワイド遺伝子ネットワーク解析」

清水和弥(東京大学大学院)「骨格筋のマルチスケールシミュレーション」

参加者数：73名

2) 計算科学研究機構と5分野との連携授業

神戸大学発達科学部2012年度後期「自然化環境科学特論D」の枠を利用し、戦略分野1がアレンジをし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を実施した。

2012年度後期「自然環境科学特論D」

～スーパーコンピュータ『京』が拓く新しい科学～

11/17: 「社会における計算機とスーパーコンピュータ『京』」

前田俊行チームリーダー (理化学研究所)

大塚孝教授 (東京大学原子核科学研究センター)

12/1: 「エネルギー問題の深刻さ、いかにそれを乗り越えていくか」 <戦略分野 2>

杉野修教授 (東京大学物性研究所物性理論研究部門)

「ヒトとともに存在する微生物の謎」 <戦略分野 1>

石田貴士助教 (東京工業大学大学院情報理工学研究科)

12/15: 「人が作り出した環境、その安全性と健全性」 <戦略分野 4>

中島憲宏次長 (日本原子力研究開発機構システム計算科学センター)

「京コンピュータが担う海溝型巨大地震研究と減災の役割」 <戦略分野 3>

金田義行プロジェクトリーダー (海洋研究開発機構)

参加者数: 22 名

3) 連携推進会議

計算科学研究機構、5 分野間連携にて、スーパーコンピュータ「京」の運用状況、連携の会議が開催され、H24 年度は以下の会議に参加した。

- ・ 第 9 回連携推進会議 (2012 年 7 月 4 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 10 回連携推進会議 (2012 年 10 月 18 日)

開催場所: 理化学研究所計算科学研究機構

- ・ 第 11 回連携推進会議 (2013 年 1 月 22 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)

4) 「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。H23 年度に引き続き、H24 年度も BioSupercomputing Newsletter の (2012 年 12 月、2012 年 3 月) 共同発行を行った。さらに、計算物理国際会議 2012 (CCP2012) では、協力しブース展示を行い双方の研究紹介を実施した。さらに H24 年度で研究成果の普及の一環として、次世代計算科学研究開発プログラムで開発されたアプリケーションソフトウェアを SCLS 計算機システムへの移植を開始した。また、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は、毎月開催している戦略分野 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。

5) 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による、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の中間報告書が2012年度3月に作成され、5月25日の第5回ワーキンググループの開催より日本学術会議小員会との合同開催となった。2013年6月21日には、日本学術会議総合工学委員会・機械工学委員会合同計算科学シミュレーションと工学設計分科会を主催として、科学者の自律的な情報発信をテーマとしたシンポジウムが開催される予定である。

6) 広報情報連絡会 (2012年5月15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、情報共有をする目的で開催された。第2回となる5月15日は、広報情報連絡会の位置づけと今後の運用や、取材・見学等対応の実務者レベルのガイドラインなどについて議論し今後の方針を固めた。今後も定期的な開催を予定している。

参加者：17名

7) 広報・記者勉強会 (2012年11月6日、2013年2月6日)

開催場所：理化学研究所計算科学研究機構

趣旨と内容：連携推進会議のもとに、スーパーコンピュータ「京」成果の一般向け情報発信の強化について、計算科学研究機構がHPCI戦略プログラム5分野および高度情報科学技術研究機構と協力・連携し、開催した。マスメディア（新聞・テレビ）の活用を念頭に、成果創出の際に最大限の取り上げ方をしてもらうため、まずは成果創出へのプロセスから説明を行ない、理解度を徐々に上げていくことを目的とする。研究内容、期待される成果、スケジュール、スーパーコンピュータの有用性、「京」活用による優位性などについて計算科学研究機構、高度情報科学技術研究機構、HPCI戦略プログラムの研究者が説明を行った。

参加者：

・第1回：約40名

(プレス12社、神戸市/兵庫県、AICS/RIST/戦略機関等、講演者4名)

新聞：日本経済新聞社、朝日新聞、毎日新聞、読売新聞、日刊工業新聞、産経新聞、神戸新聞社

通信社：時事通信社、共同通信社

放送局：NHK、ラジオ関西、サンテレビジョン

・第2回：43名

(プレス10社12名、神戸市/兵庫県5名、AICS/RIST/戦略機関等22名、講演者4名)

新聞：日本経済新聞社、朝日新聞、読売新聞大阪本社(2名)、日刊工業新聞

通信社：時事通信社、共同通信社

放送局：NHK(2名)、朝日放送、ラジオ関西

その他：ワークスジャパン