

「京」コンピュータと計算生命科学

理化学研究所
HPCI計算生命科学推進プログラム
江口至洋

計算科学の飛躍的進歩 —スーパーコンピュータ—



計算科学の飛躍的進歩 —スーパーコンピュータ—

計算科学の成果の活用 —スーパーコンピュータの成果を社会に繋げる—



観測分野及び観測環境	<観測分野>	<観測環境>
分野1	予測する生命科学・医療および創薬基盤	理化学研究所
分野2	新物質・エネルギー創成	理化学研究所 理研物質科学研究所
分野3	防災・減災に資する地球変動予測	JAMSTEC
分野4	次世代ものづくり	理研物質科学研究所
分野5	物質と宇宙の起源と構造	理研物質科学研究所

計算生命科学誕生の背景

- 分子生物学の興隆
 - さまざまな生命現象に対する理解を分子レベルまで掘り下げていく。
 - Watson「遺伝子の分子生物学」→Alberts「細胞の分子生物学」
- 計算科学の進歩
 - パソコンの性能向上(例:理論性能51.2GF)。
 - 世界トップのスパコン「京」は8 PetaFLOPSにもなる。
- 計測技術の進歩
 - 一分子計測技術: 動的挙動の解析、反応素過程の解析
 - 質量分析装置: タンパク質が飛んだ(1988年) → 一細胞内の分析
 - シークエンサー: 数千bp/日(1980年頃) → 数十億bp/日
 -

計算生命科学を媒介にした3つの生命科学の鼎立



計算生命科学のめざすもの

戦略分野1 予測する生命科学・医療および創薬基盤



柳田 敏雄 統括責任者

極めて複雑な生命を研究対象に、洗練された数理モデルを構築し、京速コンピュータ「京」を用い、生命を理解し、予測する。さらに、生命に潜む法則を見出す。

7

計算生命科学の研究課題



細胞内分子ダイナミクスのシミュレーション

～細胞環境における分子および細胞スケールシミュレーション～

代表: 杉田 有治 理化学研究所



創薬応用シミュレーション

～革新的な薬の活性予測シミュレーション～

代表: 藤谷 勇章 東京大学先端科学技術研究センター



予測医療に向けた階層統合シミュレーション

～循環器系および筋骨格系・神経系の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



大規模生命データ解析

～生命プログラムとその多様性の理解～

代表: 吉野 信 東京大学医科学研究所



8

パブリック・アウトリーチ活動の取り組み

人材育成: 生命科学において高度な計算科学技術環境を使いこなせる人材の育成

①人材育成プログラムの実施
大阪大学や産業技術総合研究所等と連携し、学生、大学院生、社会人を対象とした人材育成プログラムを推進する。ここでは、将来にわたり継続していく仕組みを構築する(→HPCT研究教育拠点の形成)。

②大学等研究機関での出張講義
全国の大学等研究機関で実施されている生命科学、医療、農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頂く。

③若者(高校生)への出張講義、セミナー
若い段階から、生命科学分野における高度な計算科学環境の重要性を理解して頂くため、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。

9