

○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 計算機資源の効率的なマネジメント

A 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、計算機環境（ソフトウェア環境および実行環境等）を整備、運用するとともに、高度化推進支援を行う。また、広く生命科学研究者（医療、製薬関連企業等を含む）が HPCI 環境、および戦略分野 1 などの計算生命科学研究成果を活用していくことを支援するため、HPCI 環境と互換性のある計算機環境を引き続き整備、運用していく。

特に補助事業の目的である「性能を最大限発揮させ、戦略目標である「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」に向け、世界最高水準の研究成果を創出する」ため、利用制度に従って、利用状況も踏まえた計算機資源の効率的な配分調整を行う。

B 実施内容（成果）

I-1 「京」の効率的・効果的な資源配分と利用状況

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

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ている。

高度化推進グループにおいて、「京」に関する技術上、運用上の情報を AICS、RIST を通じて研究開発者に提供するとともに、各アプリケーションソフトウェアの高度化等の支援を実施している。試験利用期間から、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確認し、効率的な資源配分の計画立案をしている。

2) 平成 25 年度の資源配分と利用状況

①当初計画

平成 25 年度の資源配分を行うにあたって、運営委員会で検討を行い、分野別作業部会で以下のように分野配分枠を決定した。

課題名	総ノード時間積 (ノード数時)	分野内の分野配 分枠全体に対す る割合(%)
課題1 細胞内分子ダイナミクスのシミュレーション	10,237,934	19.7%
課題2 創薬応用シミュレーション	10,237,440	19.7%
課題3 予測医療に向けた階層統合シミュレーション	15,449,748	29.7%
課題4 大規模生命データ解析	15,431,000	29.7%
計算科学推進体制の構築(高度化支援)	600,000	1.2%
合計	51,956,122	100.0%

重点課題については、平成25年度は以下の2課題である。

「課題3 予測医療に向けた階層統合シミュレーション」

「課題4 大規模生命データ解析」

②重点課題追加枠、戦略加速枠（下期）

重点課題の追加枠については、「課題3 予測医療に向けた階層統合シミュレーション」が高く評価され、3,091,151ノード時間積が認められた。

また、下期における戦略加速枠については、申請時点（7月末）での利用率が最も高く、研究の進捗の著しかった「課題1 細胞内分子ダイナミクスのシミュレーション」の申請を行い、3,091,151ノード時間積が認められた。

③計算資源の再配分

平成25年度1月に資源再配分(課題3から課題4に3,510,000ノード時間積)を実施した。課題4でコンパイルエラーのため、大幅な計算のやり直しが必要となり計算資源が不足したことに対応した。

④平成24年度の利用状況

重点課題追加枠、戦略加速枠も含めた資源配分と使用量は以下の通りである。

課題	平成25年度上期				平成25年度下期				平成25年度通年			
	利用量	配分	利用率	job数	利用量	配分	利用率	job数	利用量	配分	利用率	job数
課題1	4,629,744	5,460,864	84.8%	773	4,884,225	7,868,221	62.1%	434	9,513,969	13,329,085	71.4%	1,207
課題2	9,541,126	9,541,126	100.0%	719	799,857	696,313	114.9%	181	10,340,983	10,237,439	101.0%	900
課題3	4,415,003	12,749,748	34.6%	1,371	5,180,077	8,190,000	63.2%	1,344	9,595,080	20,939,748	45.8%	2,715
課題4	5,788,814	8,235,000	70.3%	1,454	10,647,210	10,706,000	99.5%	2,827	16,436,024	18,941,000	86.8%	4,281
体制構築	56,799	300,000	18.9%	676	246,049	300,000	82.0%	637	302,848	600,000	50.5%	1,313
分野1全体	24,431,486	36,286,738	67.3%	4,993	21,757,420	27,760,534	78.4%	5,423	46,188,906	64,047,272	72.1%	10,416

II 「京」およびHPCI 利用に際しての研究支援

A 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、計算機環境（ソフトウェア環境および実行環境等）を整備、運用するとともに、高度化推進支援を行う。また、広く生命科学研究者（医療、製薬関連企業等を含む）がHPCI環境、および戦略分野1などの計算生命科学研究成果を活用していくことを支援するため、HPCI環境と互換性のある計算機環境を引き続き整備、運用していく。

B 実施内容（成果）

II-1 効率的にHPCIを活用するための計算機環境の整備・運用

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ため、SCLS計算機システム（「京」互換機）を整備し、2013年3月より運用を開始した。2013年度は2回の公募で採択された課題の参加者などを加え、167名のユーザー（管理者含む）に利用されている（SCLS計算機システムによる生命科学研究者・技術者への利用および支援については、「II-4-2 SCLS計算機システム（「京」互換機システム）公募利用の推進」参照）。また、SCLS計算機システムを使用する講習会の受講者のために、講習会開催日前後1週間程度使用可能なアカウントを発行している（SCLS計算機システムを使用した講習会については、「II-4 利用者講習会の開催」参照）。

ユーザーの利便性向上については、ログイン方法の改善、ログインノード・ストレージ増強、ユーザーが要望するプログラムを実行するためのカーネルパラメータ変更などを行った。ユーザーからの質問、要望への対応も随時行っており、大規模な計算を行うユーザーには適宜計算リソースの割り当てを行っている。また、利用可能なソフトウェアとして、「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されたソフトウェアおよび戦略分野1で開発されたソフトウェアをインストールし、ユーザーに提供している。

SCLS 計算機システムの主な仕様

		SCLS計算機システム	京コンピュータ
CPU	名前	SPARC64 IXfx	SPARC64 VIIIfx
	理論性能	211 GFLOPS (1.65 GHz)	128 GFLOPS (2GHz)
	コア数	16	8
システム全体	ノード数	48	88,128
	理論性能	10.1 TFLOPS	11.28 PFLOPS
	ノード当たりのメモリ	32GB (全体 1.5TB)	16GB (全体 1.5PB)

II-2 「京」の利用支援

計算科学研究機構等が開催する会合に出席し、「京」を利用する上で重要な情報について、戦略分野1の「京」ユーザーに提供するとともに、ユーザーからの要望を運用サイドに伝えている。

- ・「京」ユーザブリーフィング（月次開催）

- ・スーパーコンピュータ「京」運用懇談会（第1回 2013年9月9日、第2回 2014年1月14日）（杉田グループリーダー参加）

会合に出席する以外にも、戦略分野1に対して緊急性の高い事案が発生した場合は、直接運用サイドと連絡をとって対応している。具体的な事案としては、「京」のC/C++コンパイラの結果異常の問題、HPCI 共用ストレージ利用の個別申請などである。

II-3 高度化支援の実施

2013年度は、pSpatioocyte、MARBLE、GHOST-MP、およびグランドチャレンジ・ライフで開発された mu2lib（マルチコピー・マルチスケール分子シミュレーション法開発の基盤となるクラスライブラリ）の高度化を実施した。また、大規模データ解析に必須のツールであるRの「京」への移植を実施した。

a) pSpatioocyte

2013年度上期には、拡散処理部の並列化における計算結果不一致の不具合を解消するために通信手順の改良を実施した。これに加え、「京」の実行環境に適合させるため、OpenMPを用いた主ループの分割による拡散処理部のハイブリッド並列化を実装した。また、direct methodを用いた化学反応の並列化実装を行った。2013年度下期には前記した通信手順の変更によって発生した並列性能の低下を解消するために通信の前処理と後処理のコーディング改良を行った。この処置により、数百プロセス程度で飽和していた並列スケーリングを数万プロセスまで回復させた。また検証のために、拡散と反応について理論値や逐次プログラムであるSpatioocyteとの比較を行い妥当であることを確認した。さらに実計算へ向けた取り組みとして、代表的なシグナル伝達経路であるMAPKの簡略化モデルを対象にして、実時間で30秒に相当する計算を実施した。猶、この計算には「京」の2千プロセスを用いて16時間程度を要した。

b) R

統計解析に広く利用されているRであるが、「京」ではconfigureオプションの変更といった簡単な対応では実行環境を構築できないため、ジョブの投入方法を含め移植作業を行った。

まず基本パッケージのコンパイルを行うためにソースコードの修正を行い、次にRの分散処理パッケージsnowとRmpiのインストール手順と実行手順を作成して、計算ノード上で分散処理を行う方法を確立した。さらに、利用者毎に

異なる拡張パッケージのインストール手順を作成し、ジョブとして実行できることを確認した。作業の過程で「京」に最適化された SSL2/LAPACK が使用できないことが判明したため、利用者には R 同梱の BLAS/LAPACK を使用する場合の実行手順を提供したが、別途 NetlibLAPACK/ATLAS の利用が可能なのも確認した。

c) MARBLE

2012 年度に RIST に高度化支援を要請し、並列化効率に関して悪化の原因と改善についての報告書を受けており、この報告書の内容をもとに性能改善を行った。

2013 年度上期には短距離 (cut-off) の性能改善を、下期には長距離 (PME) の性能改善を行った。性能改善の手法としては、非通信部分のスレッド並列化の促進と、MPI の集団通信への Tofu Barrier Interface の適用を主とした。この性能改善作業により、処理時間で約 1.7 倍、演算性能で約 2.5 倍の性能向上を達成した。

d) GHOST-MP

これまで GHOST-MP は、Master-Worker 2 階層方式が実装されていた。2 階層方式では、「京」での数万ノード以上の並列分散実行において、数万個の worker でのファイル I/O の競合が発生し、並列効率が悪くなる現象が見受けられていた。このため、Master と Worker の間に数十～数百個の Submaster を設け、worker のファイル I/O を Submaster で代表して処理する方式へ変更を行った。

負荷分散の状況などを確認しつつソースコードの修正や実行パラメータの調整を行い、20736 ノード使用で最大 24% の高速化を達成した。

e) mu2lib

長時間シミュレーションに対する安定性の向上、空間分割法に対応した PME ルーチンの実装、インタフェースの改良を実施した。

長時間シミュレーションに対する安定性の向上については、作業着手時点では以前発生していたエラーは再現しなくなっていたが、予防措置として実装が簡潔になるようソースコードを見直した。空間分割法に対応した PME ルーチンの実装については、一連の処理を行う Ewald クラスと付随するクラスの実装が完了した。インタフェースの改良については、クラス間で重複している実装について再設計を行い、呼び出すプログラムのソースコードの記述を簡素化できるようにした。

II-4 利用者講習会の開催

2013 年度は、人材育成と研究成果の普及の観点から、戦略分野 1 以外の研究機関、教育機関、民間企業を対象に、戦略分野 1 開発ソフトウェアと「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)のソフトウェアについて、SCLS 計算機システムを使用した講習会を開催した。なお、SCLS 計算機システムのシステム規模の制限により、講習会の募集人数は 10 名程度としている。

開催した講習会の一覧

講習会名(ソフトウェア名)	開催日	受講者
SCLS 計算機システム基礎 分子動力学基礎	2013 年 8 月 6 日	11 名
RICS-K	2013 年 9 月 27 日	3 名
ParaHaplo	2013 年 11 月 1 日	3 名
NGSAnalyzer	2013 年 11 月 6 日	2 名
SiGN-BN (1 回目)	2013 年 12 月 12 日	8 名
REIN-K	2014 年 2 月 26 日	13 名
SiGN-BN (2 回目)	2014 年 3 月 18 日	11 名

受講者の所属の内訳

研究機関	17 名
教育機関	14 名
民間企業	20 名

SCLS 計算機システムのアカウントを取得していない受講者については、講習会の受講と受講後の復習のために、講習会開催日の前後 1 週間程度使用可能な講習会受講者用アカウントを発行した。

Ⅲ 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、高等学校等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。

A 実施計画

(イ)「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、計算生命科学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、以下の人材育成プログラムを推進する。

- HPCI 戦略プログラムにおける人材養成プログラムの実施(浅井潔・産業技術総合研究所)
- HPCI 戦略プログラムにおける教育プログラムの実施(田中正夫・大阪大学大学院基礎工学研究科)

(ロ) 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、戦略分野1の研究活動内容を題材とした高校生向け広報活動を行う。また、海外の機関と教育プログラムの連携を図っていく。

B 実施内容(成果)

Ⅲ-1 社会人、大学院生への人材養成・教育プログラムの実施

Ⅲ-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)

A) 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25年度は、業務従事者を雇用し、以下を行う。「HPCI e-ラーニング」を年間を通じて運営し、広く一般に公開する。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PC実習付きの「HPCI チュートリアル」を行う。広く一般に向けた「HPCI ワークショップ」を開催する。

B) 実施内容(成果)

1) HPCI セミナー

産業技術総合研究所（以降、産総研）生命情報工学研究センター（以降、CBRC）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・白金台キャンパスに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 IV」（2013年度冬学期）という単位取得科目となった。また、産総研内の他地域センターからの聴講希望に対しても、TV会議システムを通じて配信した。

HPCIセミナー（H25年10月11日～H26年1月17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。本年度は、CBRC外部から招待した11名の研究者とCBRCに所属する5名の研究員らが講師を担当し、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** 表示のある講義で、一部は今年度公開済みである。）

全12回のHPCIセミナー参加者は延べ391名（うちTV会議システムによる東大側での受講者94名、産総研他地域センターの受講者6名）であった。

表1 HPCIセミナー 講義一覧

講義日	講師（所属）	講演題目
第1回 10月11日	近藤 滋（大阪大学大学院 生命機能研究科）	Turing pattern formation in biological systems
第2回 10月18日	ポール ホートン （産総研 CBRC）	Perl による fastq, fasta 形式データの処理
	末永 敦（産総研 molprof ^{*1} ）	分子シミュレーションの創薬への応用： リガンド結合親和性予測の計算科学的手法
第3回 10月25日	市瀬 夏洋（京都大学大学院 情報学研究科）	グレイコードによる DNA 配列の表現 e-learning
第4回 11月1日	有田 正規 （国立遺伝学研究所）	マスペクトルからの構造予測 e-learning
第5回 11月8日	本野 千恵 （産総研 molprof ^{*1} /CBRC）	化合物スクリーニングと創薬インフォマティクス
	加藤 和貴 （大阪大学 IFR ^{*2} / CBRC）	多重配列アラインメントと進化解析
第6回 11月15日	林 重彦（京都大学大学院 理学研究科）	生体分子機能の分子シミュレーション e-learning

第7回 11月22日	亀田 倫史 (産総研 CBRC)	生体系への分子動力学法の適用
	浜田 道昭 (東京大学大学院 新領域創成科学研究科)	バイオインフォマティクスにおけるモデル選択
第8回 11月29日	田中 良夫 (産総研 情報技術研究部 門)	高性能計算最前線 -高性能計算クラウドとエク サスケールプログラミング- e-learning
第9回 12月13日	光山 統泰 (産総研 CBRC)	国際ヒトエピゲノム連携の現状と DNA メチル 化情報解析の手法 e-learning
第10回 12月20日	渋谷 哲朗 (東京大学 医科学研究所)	これからの生命科学を切り拓く次世代検索アル ゴリズム e-learning
第11回 1月10日	津田 宏治 (産総研 CBRC)	生命科学データからの組合せ効果発見 e-learning
	後藤 修 (産総研 CBRC)	粗視化に基づく配列比較の高速化と省スペース 化
第12回 1月17日	奥野 恭史 (京都大学大学院 薬学研究科)	スパコン「京」が拓く次世代インシリコ創薬 e-learning

*1 創薬分子プロファイリング研究センター

*2 免疫学フロンティア研究センター

2) HPCI ワークショップ

H25年9月11日(木) 10:00~12:00、広く一般に向けた「HPCI ワークショップ」を開催した。「HPC が可能にした次世代創薬 ~ビッグデータの活かし方~」というテーマのもと、招待講演を3件行い、約120名の参加者を集めた。



講師：玉田 嘉紀 (東京大学大学院 情報理工学系研究科)

演題：京を用いた超並列アルゴリズムによる大規模遺伝子ネットワーク推定手法の研究開発とその応用

概要：京に合わせて新たに開発された超並列化可能な大規模ベイジアンネットワーク推定アルゴリズムと、ガンなどの遺伝子発現データに適用した実例についてご講演いただいた。



講師：池口 満徳 (横浜市立大学大学院 生命医科学研究科)

演題：生体超分子の分子シミュレーション

概要：京の実用化によって可能となった、巨大分子(多数のタンパク質の複合体である AcrB 多剤排出トランスポーターなど)の分子動力学シミュレーションとその応用などについてご講演いただいた。



講師：田中 成典（神戸大学大学院 システム情報学研究科）

演題：第一原理シミュレーションと創薬

概要：第一原理シミュレーションは、分子力場によるシミュレーションとは異なり厳密な量子化学計算を行う。これを実際の創薬に役立つ相互作用解析に応用するために残された課題などについてご講演いただいた。

参照 <https://hpci.cbrc.jp/modules/workshop/index2013.html>

2-3) HPCI チュートリアル

HPCI チュートリアルの特徴は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修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。HPCのような高度な計算機を使いこなせる研究者はライフサイエンス分野においてはまだ少数であるので、裾野を広げるには地道な人材養成が重要である。H25年度は、H25年7月よりH26年3月までの期間に、2コース計11講座を開催した。

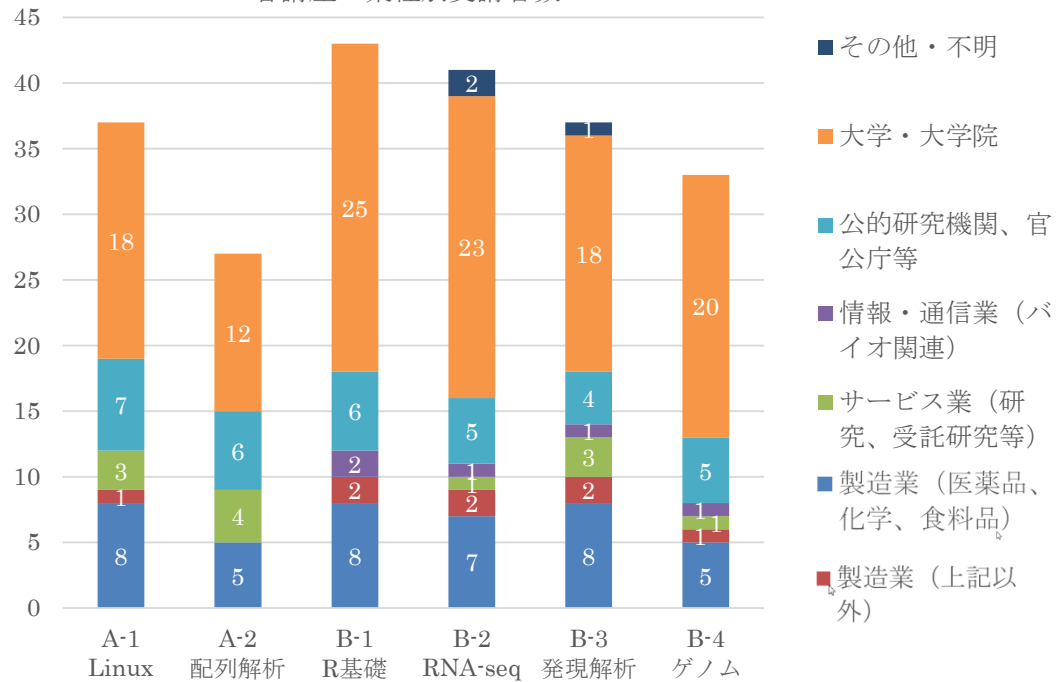
3-1) バイオインフォマティクス実習コース

バイオインフォマティクス実習コースは、計算機による解析を日常の主な業務としない実験研究者の受講を想定している。そのため開催日程は、解析対象・手法別に 11 月、12 月、3 月の 3 グループに分け、基礎に続けて実践を学べるよう工夫した。またホームページを活用し、実践講座受講希望の初心者は同時に基礎講座も申し込むよう誘導した。各講座の定員は 40 名（会場備え付け PC の台数）だが、B-1「R 基礎」はその後の B-2、B-3 の 2 講座の基礎であるため、定員を超えた分について実習環境を事前準備したノートパソコン持参による参加を認めた。また希望者が殺到した B-2、B-3 はキャンセル待ちを受け付けて、できるだけ欠席による空席を減らすよう対応した。

バイオインフォマティクス実習コースの受講者の特徴として、業種別ではいずれの講座においても大学・大学院からの受講者が半数以上を占め（グラフ 1）、職種別では研究に従事している受講者が半数以上を占めていることがあげられる（グラフ 2）。大学・大学院に所属するスタッフの学習機会が不十分であり、ニーズがあることが伺える。感想では「これまで意味がわからずにやっていたが、解説をしていただき解析の意味がよくわかりました」という者もあり、データ解析への教育ニーズの高さ、本コースの意義を示す結果であると言える。

受講後の感想としては、いずれの講座でも「期待通りだった」「大変参考になった」という声が非常に多く聞かれ、実践講座では「実践的でよかった」「期待以上の素晴らしい内容だった」という声も複数聞かれた。受講後のアンケート結果における理解度については、いずれの講座でも 5 段階評価（1 理解できなかった～2（1 と 3 の中間）、～3 だいたい理解できた、～4（3 と 5 の中間）、～5 よく理解できた）で平均 3.6 となり、概ね理解できたものと判断した。講座構成や各講座の内容、レベルが受講者のニーズやレベルに合ったものだったと言える（表 2）。

グラフ1 バイオインフォマティクス実習コースにおける
各講座の業種別受講者数



グラフ2 バイオインフォマティクス実習コースにおける
各講座の職種別受講者数

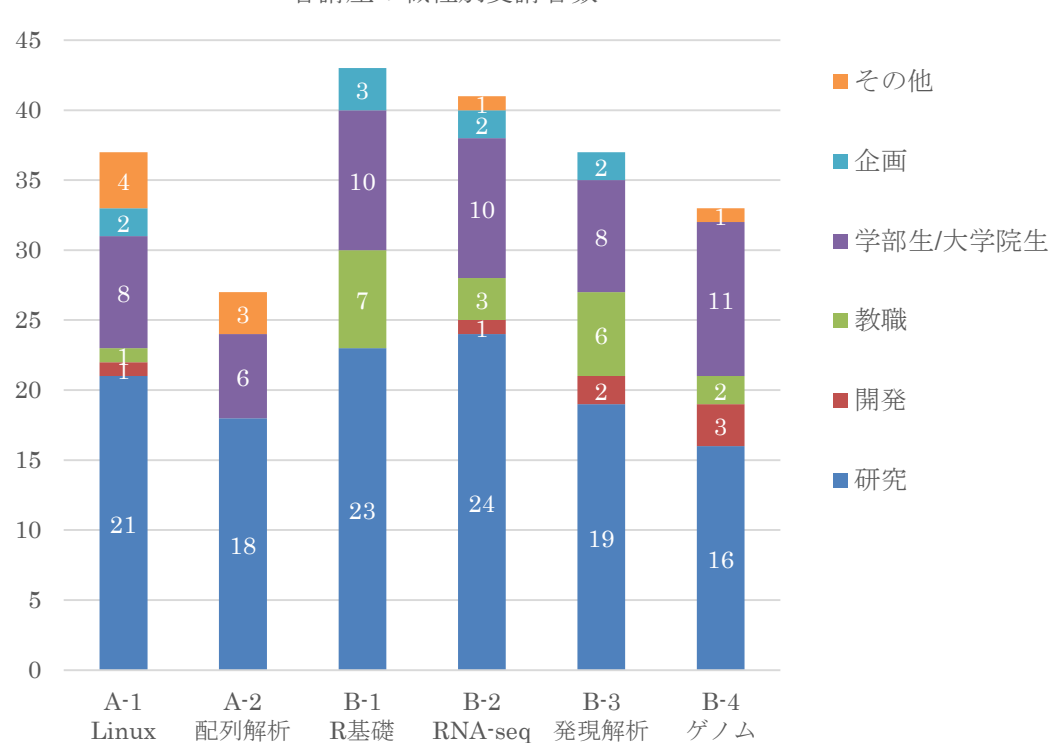


表2 HPCI チュートリアル バイオインフォマティクス実習コース 講座一覧および5段階評価による理解度アンケート結果

記号	講座名	講師 (所属)	実施日	受講者数	理解度アンケート結果*3	
					講義	実習
A-1	Linux, Perl 基礎	水谷 健太郎 (東京大学大学院新領域創成科学研究科)	11月13日	37	3.63	3.38
A-2	配列解析	今井 賢一郎 (産総研 CBRC)	11月14日	27	3.87	3.83
		マーティン・フリス (産総研 CBRC)	11月15日		3.58	3.65
B-1	R 基礎	水谷 健太郎 (東京大学大学院新領域創成科学研究科)	3月6日	43	3.21	3.37
B-2	R でゲノム・トランスクリプトーム解析	門田 幸二 (東京大学大学院 農学生命科学研究科)	3月7日	41	3.60	3.71
B-3	多変量データ解析/遺伝子ネットワーク解析	油谷 幸代 (産総研 CBRC)	3月13・14日	37	3.35	3.16
B-4	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)	12月16・17日	33	4.09	4.09

*3 理解度：1 理解できなかった,~2 (1と3の間),~3 だいたい理解できた,~4 (3と5の間),~5 よく理解できた、の5段階評価 (回答者数による平均値)

3-2) 創薬インフォマティクス実習コース

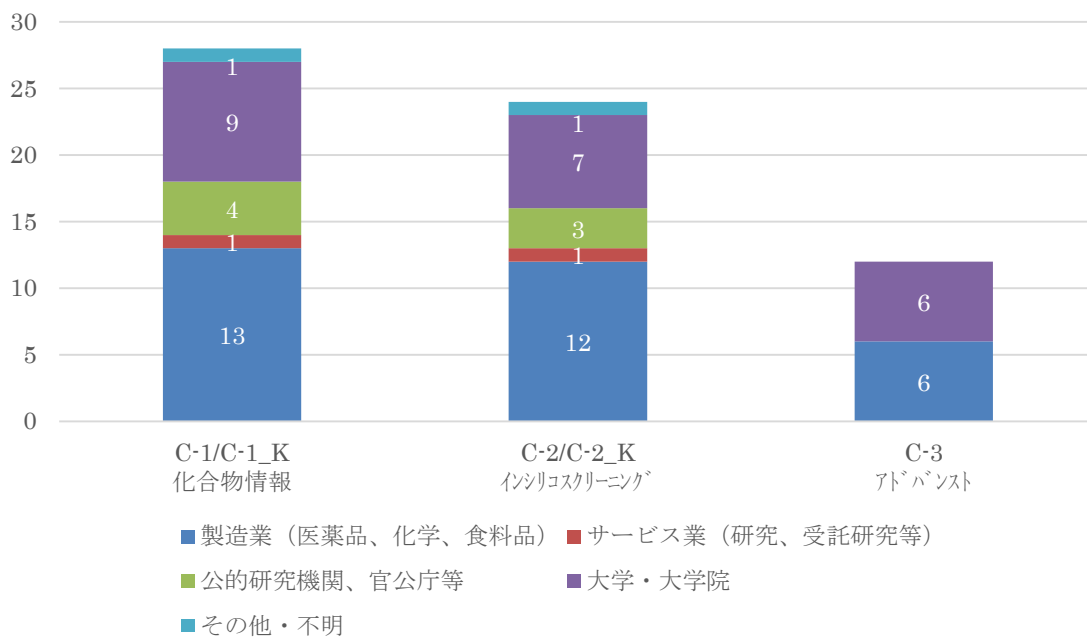
創薬インフォマティクス実習コースは、主に製薬会社などの研究者を想定した内容となっている。概論・実習 (C-1, C-1_K, C-2, C-2_K) コースは基礎的な概要を学ぶ概論、実際に体験する実習、現場での事例を紹介する特論の3本柱で構成した。アドバンストコース (C-3) は、概論・実習コースを終えた受講者が、主にホモロジーモデリング、バーチャルスクリーニング、分子シミュレーションについて、より具体的な事例を講義・実習により学ぶ内容となっている。

創薬インフォマティクス実習コースの受講者の特徴として、各講座いずれも約半数が企業からの参加であり (グラフ 3)、大半が研究に従事している人であったことがあげられる (グラフ 4)。基礎的な概要を学ぶ2講座は、東京・大阪の計2か所で開催し、いずれにおいても「思っていた以上に収穫があった」「期待以上に役立ちそう」といった感想が多く寄せられ、受講者の満足度の高さが伺えた。

基礎コースを受講した人が学ぶことを想定したアドバンストコースでは、「ソフトウェアを扱うのみではわからない点まで理解でき、大変勉強になった」「今の自分の研究の改善すべき点も多く学べた」といった感想のほか、「期待より深く教えて頂き、大いに参考になった」「期待通りで実際業務に役立つと思う」「とても参考になった」といった感想が寄せられ、概ね好評であった。

受講後のアンケート結果における理解度については、いずれの講座でも5段階評価 (1 理解できなかった~2, (1と3の間), ~3 だいたい理解できた, ~4 (3と5の間), ~5 よく理解できた) で平均3.2となり、概ね理解できたものと判断した。講座構成や各講座の内容、レベルが受講者のニーズやレベルに合ったものだったと言える (表3)。

グラフ3 創薬インフォマティクスコースにおける
各講座の業種別受講者数



グラフ4 創薬インフォマティクスコースにおける
各講座の職種別受講者数

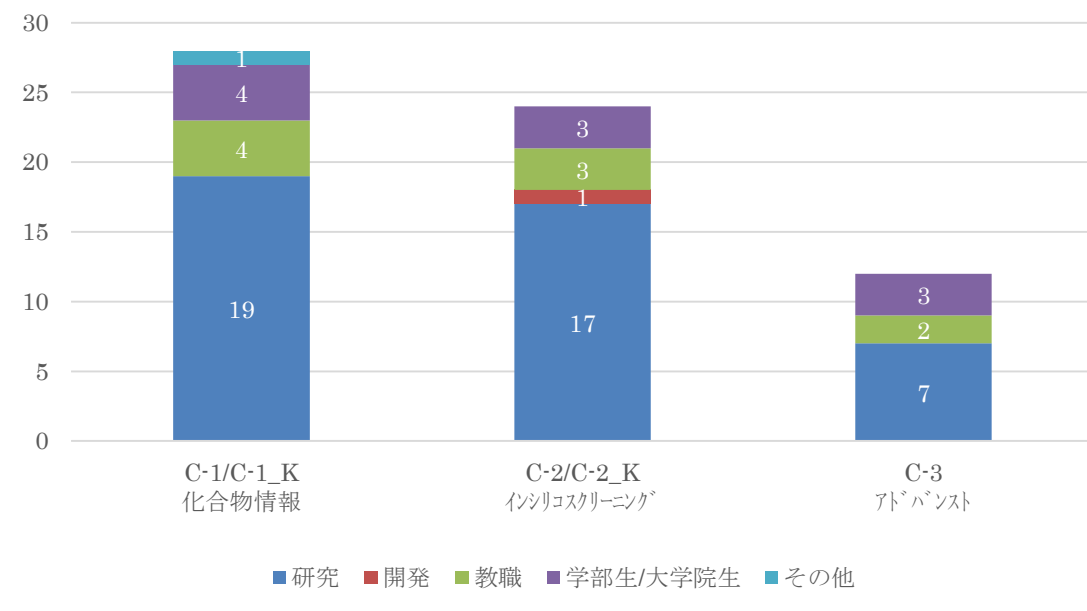


表 3 HPCI チュートリアル 創薬インフォマティクス実習コース 講座一覧および 5 段階評価による理解度アンケート

記号	講座名	講師 (所属)	実施日	受講者数	理解度アンケート*4		
					講義	実習	特論
C-1	化合物情報概論・実習	広川 貴次 (産総研 molprof ^{*1} /CBRC)	7月31 - 8月1日	23	3.00	3.22	3.22
C-1_K	化合物情報概論・実習 (大阪)	広川 貴次 (産総研 molprof ^{*1} /CBRC)	8月22 - 23日	5			
C-2	インシリコスクリーニング 概論・実習	広川 貴次 (産総研 molprof ^{*1} /CBRC)	8月7 - 8日	19	3.11	3.36	2.91
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 (産総研 molprof ^{*1} /CBRC)	8月29 - 30日	5			
C-3	アドバンストコース	広川 貴次 (産総研 molprof ^{*1} /CBRC)	9月26 - 27日 10月3 - 4日	12	3.18	3.23	

*4 理解度：1 理解できなかった～2、(1 と 3 の中間) ,～3 だいたい理解できた,～4 (3 と 5 の中間) ,～5 よく理解できた、の 5 段階評価
(回答者数での平均値)

3-3) その他 (他機関との連携)

HPCI 戦略プログラム戦略分野 1 との共催によるセミナー「誰にでもわかる拡張サンプリングシミュレーション – 長時間分子動力学シミュレーション –」(3月3日、木寺詔紀講師)と SCLS (京コンピュータ互換スーパーコンピュータシステム) を用いた実習会「遺伝子ネットワーク解析の講習会と実習会」(3月18日、土井淳講師)を開催し、CBRC ではこれらの会場提供、広報活動、配布資料の準備などを担当した。3月3日の木寺講師のセミナーには 50 名を超える参加者を得た (写真 1)。3月18日の土井講師の講習会・実習会には、申し込み受付開始直後に定員 10 名が満員となり急ぎよ定員を 2 名増やした。また、理化学研究所 情報基盤センター主催セミナーに協賛し広報活動に協力した。



写真 1 木寺講師のセミナー

4) HPCI e-ラーニング

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することができる効率的な独学ツールである。さらに、理解できなければ何度でも視聴できるといった長所も持ち合わせている。現在までに以下の 6 コース総計 59 本のビデオコンテンツがあり、登録をすれば誰でも無料で全コンテンツを繰り返し視聴できるようになっている。

コース名	コンテンツ数	合計ビデオ時間
HPCI セミナー e-ラーニングコース	24	約 24 時間
バイオインフォマティクス e-ラーニング準備コース	6	約 9 時間
バイオインフォマティクス e-ラーニングコース	14	約 21 時間
創薬インフォマティクス e-ラーニングコース	9	約 14 時間
創薬インフォマティクス アドバンスド e-ラーニングコース	3	約 4.5 時間
Graph Mining e-ラーニングコース	3	約 5 時間

4-1) バイオインフォマティクス e-ラーニングコース

バイオインフォマティクス e-ラーニングコースは、バイオインフォマティクスの基本に関する話題を広く集めている。平成 25 年度はバイオと情報技術の基礎科目を「準備コース」として分割した。

4-2) 創薬インフォマティクス e-ラーニングコース

創薬インフォマティクス e-ラーニングコースは、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。平成 25 年度はアドバンストコースのビデオも追加した。

4-3) HPCI セミナー e-ラーニングコース

HPCI セミナー e-ラーニングコースは、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。本年度の HPCI セミナーから市瀬 夏洋講師（京都大学）、有田 正規講師（遺伝研）、渋谷 哲朗講師（東京大学）、津田 宏治講師（CBRC）による 4 講義を e-ラーニング化し、公開した。さらに、林 重彦講師（京都大学）、田中 良夫講師（産総研）、光山 統泰講師（CBRC）、奥野 恭史講師（京都大学）による講義も e-ラーニング化し順次公開していく予定である。

4-4) e-ラーニングコース 受講者プロフィール

e-learning 受講者全 338 名の内訳は以下の通りとなっており、研究・開発者が過半数を占め、学生が約 28%超となっている。

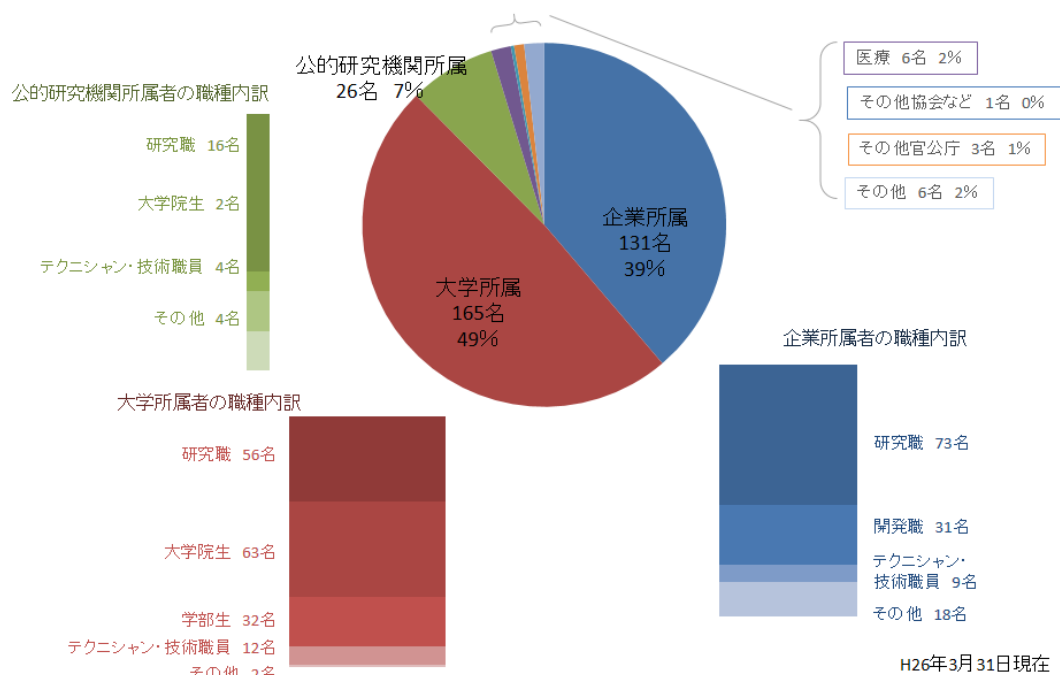


図 1 e-ラーニングコース 受講者プロフィール

5) 広報活動

被養成者の募集、成果普及のため、広報活動を重視し、力を入れた。

2-5-1) ホームページの整備 <http://hpci.cbrc.jp/>

2-5-2) ポスターとリーフレットの作成と配布

ポスター (A2 サイズ) にはワークショップとセミナーについて記載し、リーフレット (A3 両面印刷・2つ折り) には講習会と e-ラーニングについて記載した。

HPCI 2013
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
HPCIワークショップ2013
HPCIセミナー2013

10月11日~17日(全7日) 14:50~16:30
 参加無料 <http://hpci.cbrc.jp/>

第1回 平成25年10月11日(金)
 近藤 徹 大阪大学大学院 生命情報研究科
 Turing machine formation in biological systems

第2回 平成25年10月13日(日)
 永谷 啓 京都府立医科大学 創薬分子プロファイリング研究センター
 分子シミュレーションの進化の観点からシミュレーションの計算科学的アプローチ

第3回 平成25年10月15日(火)
 高橋 真洋 京都大学大学院 情報学研究科
 グレイコードによるDNA配列の表現

第4回 平成25年11月1日(金)
 菅野 正隆 大阪大学大学院 理学系研究科
 マスケットからDNA配列の表現

第5回 平成25年11月6日(日)
 本野 千重 産総研 創薬分子プロファイリング研究センター
 化合物スクリーニングと創薬インフォマティクス

第6回 平成25年11月15日(日)
 藤原 隆 京都大学大学院 理学研究科
 生体分子シミュレーション

第7回 平成25年11月22日(日)
 高田 謙郎 京都大学大学院 情報学研究所
 創薬研究におけるデータ解析

第8回 平成25年11月29日(日)
 田中 良夫 産総研 情報技術研究部門
 HPCクラウド・仮想化環境を用いた高性能計算プラットフォーム

第9回 平成25年12月13日(金)
 松山 健博 CBRC RNA翻訳工学生チーム
 翻訳ヒストグラム法を用いたDNAメチル化状態解析の手法

第10回 平成25年12月20日(金)
 渋谷 智樹 京都大学理学部 統計学センター
 2次元生体データを解析する次世代統計学

第11回 平成26年1月10日(金)
 海野 悠治 CBRC 創薬学研究室
 遺伝子発現データからの創薬候補発見

第12回 平成26年1月17日(金)
 奥野 義史 CBRC 比較ゲノム研究
 創薬ターゲット候補の高精度な予測と検証

第13回 平成26年1月17日(金)
 奥野 義史 京都大学大学院 理学研究科
 スパコンがもたらす次世代インシリコ創薬

図2 H25年度ポスター

HPCI e-ラーニングコース
 HPCI 人材養成プログラム 2013年度受講者募集

HPCI 講習会
 HPCI e-ラーニング
 HPCIワークショップ

図3 H25年度リーフレット (上段表面・下段内面)

5-3) その他

SCLS ニュースレター「BioSupercomputing Newsletter」Vol.10 (2014年3月発行) に本プログラムの取り組みについて寄稿した。

「現代化学」(東京化学同人) 2013年9月号 pp.71、PICK UP に HPCI ワークショップと HPCI セミナー2013年が取り上げられた。

関連する学会の HP ニュース欄に掲載された。

Ⅲ-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）

A) 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、平成25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）、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継続実施する。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。

B) 実施内容（成果）

1) 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16名、単位取得者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1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
	2013年11月30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
	2013年11月30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
	2013年12月7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7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 14 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 14 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 教授 田中正夫
特任助教 (常勤) 木田直樹
2011 年 12 月 21 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 特任助教 (常勤) 木田直樹
2011 年 12 月 21 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
特任助教 (常勤) 木田直樹
2012 年 12 月 21 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 特任助教 (常勤) 木田直樹
2012 年 12 月 21 日 (土) 15:30-17:00
大阪大学豊中キャンパス基礎工学 A 棟 A338 室
- =====

2) 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 の通り実施した。受講者数は、大学院学生 3 名、単位取得者 3 名であった。また、エクステンションとしての受講者数は 1 名であり、修了者は 1 名であった。

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
2014 年 1 月 18 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
2014 年 1 月 18 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
2014 年 1 月 25 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
2014 年 1 月 25 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
2014 年 1 月 25 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
2014 年 1 月 25 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
-
-

3) 創薬・医療の産学連携セミナー

第 5 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 10 月 2 日 (水) 13:30-16:40

グランフロント大阪 ナレッジキャピタル カンファレンスルーム

タワー C 8 階 C 0 1 - 0 2 (大阪市北区)

第 6 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 12 月 10 日 (火) 13:30-16:40

ステーションカンファレンス東京 6 0 5 (東京都千代田区)

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、79 名、73 名であった (図 3)。

第5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10月2日（水）13:30-16:40

場所：グランフロント大阪 ナレッジキャピタル カンファレンスルーム
タワー C8階 C01-02（大阪市北区大深町3番1号）

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）

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

13:40-14:20 計算力学シミュレーションによる未破裂脳動脈瘤の診断治療支援

大阪大学 大学院基礎工学研究科 生体工学領域 教授 和田成生 氏

14:20-15:00 分子標的がん治療薬のインシリコ創薬

神戸大学 大学院医学研究科 分子生物学分野 教授 片岡徹 氏

15:20-16:00 低分子化抗体の設計のためのX線構造

大阪大学 大学院工学研究科 構造物理化学分野 教授 井上豪 氏

16:00-16:40 「京」による薬物作動性の解析

大日本住友製薬株式会社 ゲノム化学研究所 インシリコ創薬グループ研究員 市川治 氏

問合せ先：大阪大学大学院基礎工学研究科 HPCIセミナー事務局 hpci@me.es.osaka-u.ac.jp

図1 第5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6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12月10日（火）13:30-16:40

場所：ステーションコンファレンス東京 605

（東京都千代田区丸の内1-7-12 サビアタワー6階）

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HPCI計算生命科学推進プログラム、（財）都市活力研究所、
大阪大学臨床医工学融合研究教育センター、NPO法人バイオグリッドセンター関西



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）

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

13:40-14:20 スーパーコンピュータ京に再現する心臓

東京大学 大学院新領域創成科学研究科 バイオメカニクス分野 特任教授 杉浦清了

14:20-15:00 パーキンソン病における運動障害の数値モデルシミュレーション

大阪大学 大学院基礎工学研究科 生体工学領域 教授 野村泰伸

15:20-16:00 医薬品開発におけるビッグデータの活用に向けて

塩野義製薬株式会社 医薬開発本部 解析センター 都地昭夫、北西由武

16:00-16:40 ひとつの薬を臨床に届けるまで - 抗悪性腫瘍薬TAS-102を例として

東京大学 創薬オープンイノベーションセンター（元大鵬薬品株式会社） 多田幸雄

問合せ先：大阪大学大学院基礎工学研究科 HPCIセミナー事務局 hpci@me.es.osaka-u.ac.jp

図2 第6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



図3 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（大阪会場）

4) 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」

生命医薬情報学連合大会日本バイオインフォマティクス学会 2013 年次大会において、
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」

平成 25 年 10 月 31 日（木） 10:00-11:30

タワーホール船堀 401 会議室（東京都江戸川区）

を企画・実施した。企画の詳細は図4の通りであり、約50名が出席した。

生命医薬情報学連合大会
日本バイオインフォマティクス学会2013年年会 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」

オーガナイザー：田中正夫、坂田恒昭
(大阪大学大学院基礎工学研究科 HPCI 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)

日時：平成 25 年 10 月 31 日 (木) 10:00-11:30
場所：タワーホール船堀 401 会議室 東京都江戸川区船堀 4-1-1

セッション概要

スーパーコンピューター「京」が 2012 年 6 月に完成して、ほぼ 1 年半になる。この間に「京」を用いての製薬産業への応用の試みが種々になされている。特に膨大な蛋白質と化合物のデータを用いての医薬品の標的ターゲットと医薬品のドッキングシュミレーションや、より精緻な分子構造に基づくドッキングシュミレーションが、今まで膨大な時間と資金を要していた創薬への新しい扉を開くものと期待されている。

本セッションでは、計算化学の世界を開くスーパーコンピューター「京」の産業利用、特に創薬分野における現状と今後について紹介する。

司会：坂田恒昭 (大阪大学 大学院基礎工学研究科 特任教授)
松田秀雄 (大阪大学 大学院情報科学研究科 教授)

プログラム

1) 10:05-10:30

「製薬コンソーシアムで挑むスパコン創薬」

京都大学大学院薬学研究科 システム創薬科学 教授 奥野恭史 氏

概要：スパコン「京」の始動をきっかけに、演者らは製薬会社 11 社と IT 会社 2 社との産学コンソーシアムを形成し、スーパーコンピューティングによる次世代創薬計算に挑戦しています。本講演では、我々の取り組みの紹介を通じて、医薬業界におけるスパコン「京」のインパクトをお示します。

2) 10:30-10:55

「インシリコ創薬に向けた標的タンパク質モデリングからのアプローチ」

三井情報株式会社 R&D センター バイオサイエンス室 佐藤美和 氏

概要：「京」の産業利用とインシリコ創薬基盤構築に向けて、奥野教授を代表とするプロジェクトが始動しています。本プロジェクトにおける、標的タンパク質のモデリングから化合物の活性値予測まで、具体的な取り組みと成果について紹介します。

3) 10:55-11:20

「創薬の現場からみたスーパーコンピューティングと計算化学」

塩野義製薬株式会社 創薬・探索研究所 創薬化学部門長 辻下英樹 氏

概要：弊社での創薬研究における計算化学の利用の現状と課題についてお話をさせていただき、そこから「京」をはじめとするスーパーコンピューティングの可能性、期待する点について議論させていただきます。

図 4 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」

Ⅲ－２ 学生、大学院生、高校教員、高校生を対象とした講義

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。

A 実施内容（成果）

Ⅲ－２－１ 計算生命科学 e-ラーニング教材の開発



HPCI の活用の促進と当該分野で開発したアプリケーションを多くの生命科学者が利用できるよう、プログラムで実施した講習会を収録し、ホームページ上に掲載するための e-ラーニング教材の開発を行った。

講義で使用しているスライド（図の左側）を見ながら、講義を視聴でき、表示サイズの大きさを逆にも可能である。

講義は 15-20 分ごとの長さで章立てとし、視聴者のストレスを軽減するような工夫を施した。

Ⅲ－２－２ 大学・大学院での講義およびセミナーの実施

・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』（2013年6月21日、6月28日）

講師：江口至洋（理研）

参加者：学部 1 年生、278 名

計算生命科学という学問を通して、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、コンピュータの発展とスーパーコンピュータ「京」が単にコンピュータ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。

Ⅲ－２－３ 高校生に対する教育とアウトリーチ活動

（１）高校生、高校教員を対象とした出張授業の実施

1) 岡山県高等学校教員生物部研修会（8月29日）

「スーパーコンピュータ「京」を用いた研究について」

「分子生物学モデル実験の紹介と講義」

参加者数：18名

スーパーコンピュータ「京」と計算生命科学に対し理解増進を深めるため、高校生だけでなく、高校教員に対しても実施をしている。戦略分野1の出張授業で行っている塩基配列のパズルやアミノ酸の分子模型を利用した脱水縮合反応でペプチド結合をつくる実習などを紹介した。また、当日はユスリカのパフの観察や岡山大学、妹尾昌治教授による「iPS細胞とその技術の医療への応用について」と題した講演も実施された。参加した教員からのアンケートには、塩基配列のパズルや分子模型モデルを使用した実習は、高校の授業での教材に取り入れたいとの感想が多く寄せられていた。

2) 西脇高校 (10月18日)

『生物学とスーパーコンピュータ「京」』

- 生物学は今激動期にあります。21世紀に入りスーパーコンピュータとの結びつきが深まってきています-』

参加者数：62名

塩基配列11個を並べるパズルを実習で行い、時間がかかる生徒も多かった。その作業を9億個こなすスーパーコンピュータ「京」の性能を知り、驚いたという感想が多く寄せられた。

3) 岡山県立玉島高等学校 (12月13日)

『生物学とスーパーコンピュータ「京」』

参加者数：理数科1年生36名

塩基配列を並べるパズルやアミノ酸の分子模型を使って構造を調べる実習を行った。実習に手間取り、時間がかかる生徒や中には途中であきらめてしまう生徒もいた。

4) 兵庫県立加古川東高等学校 (12月20日)

『生物学とスーパーコンピュータ「京」』

参加者数：理数科2年生39名

塩基配列を並べるパズルやアミノ酸の分子模型を使って構造を調べる実習を行った。担当以外の教員の参加も多く、関心の高さが伺えた。

(2) 高校生を対象とした科学イベント等への出展

1) 科学の広場 (8月8~9日、関西学院大(西宮))

- ・高校理科教員が集まる学会(全国理科教育大会、日本理化学協会総会)の併設イベントでパネルを出展した(参加者数約600名)。主に化学と物理を担当する教員が対象の大会であり、出張授業の案内についても関心を示していた。

2) 第6回サイエンスフェア in 兵庫 (2014年2月2日、神戸国際展示場)

高校 兵庫県内40校、県外(大阪)1校、参加生徒1076名、企業・大学・研究機関等 49団体、147名、一般参加(見学) 160名、来賓 6名。

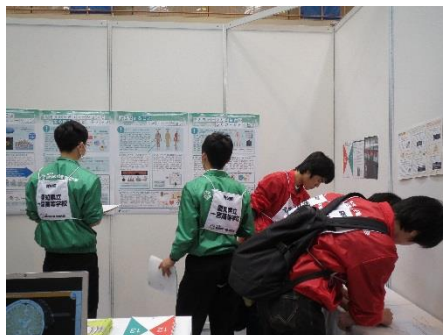
神戸地区、播磨地区の研究6拠点(CDB、CLST、QBIC、Spring・8、AICS、SCLS)が理研ブースとして一堂に会して出展した。

SCLS 単独では、理系進路に悩む高校生らが、すでに理系生活を送っている先輩たちに悩みや不安に思っていることなどについて気軽に話ができるサイエンスカフェを実施した。



3) 第3回科学の甲子園全国大会 (2014年3月23日、兵庫県立総合体育館)

全国から6,704名のエントリーがあり、選抜された47校、366人の高校生が参加し、理数系の分野について競技した。SCLSは高校生対象に内容を構成した研究紹介ポスターを展示。高校生らは研究内容について丁寧にポスターを読んでいた。高校教員からは、ポスターを校内に展示することや教材として利用したいといった感想をいただいた。



(3) 海外の機関と教育プログラムの連携

2013年8月12日、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)と互いに実施しているHPCにおける人材育成についてTV会議による情報交換を行った。

IV 人的ネットワークの形成

A 実施計画

計算生命科学分野における 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、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との連携を強化する。平成 25 年度は、成果の普及のみならず人的ネットワークの形成を進めるため、学会等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等と連携しシンポジウムの開催を行う。

B 実施内容（成果）

IV-1 学会や全国の拠点大学と連携したシンポジウムの開催

1) 岡山大学シンポジウム（2013 年 7 月 19 日）

『生命科学に取り組む異分野の融合と交流の推進 第 2 回 スーパーコンピュータ「京」と生命科学』

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 12 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。昨年に引き続き、「京」の計算速度を利用すると生命科学ではどのような課題が解決できるのかを考えるという企画であった。全体を通して「京」の有効活用とはどのようなものか、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、の議論を行った。

参加者数： 105 名

2) 北大ー理研ジョイントシンポジウム（2013 年 8 月 1 日）

「未来を拓く生体予測シミュレーションーハイパフォーマンス・コンピュータの医療応用への挑戦ー」

開催場所：北海道大学 学術交流会館講堂

主催：北海道大学 創成研究機構、理化学研究所計算生命科学推進プログラム

趣旨と内容：医療応用をめざしスーパーコンピュータ「京」を活用した最先端研究を行っている研究者とバイオメカニクス、生体システム、生理機能の研究者とでハイパフォーマンス・コンピュータを用いた医療技術・予測医療の可能性をテーマとしたシンポジウムを実施した。

参加者数：103名

また、全国の学部生、大学院生を対象に『学生 5 Minutes Session-スパコン「京」を利用できたら、どんな医療応用を目指した研究をしますか?』というテーマで公募を行い、6名の大学院生による発表がなされた。直ぐに「京」での利用も見込めそうな優秀な発表もあり、会場にいた研究者から感心するコメントが寄せられ、会場は大いに刺激を受けた。



発表いただいた6名の大学院生

【学生 5 Minutes Session 発表者演題】

「予防医学に向けた循環器疾患進行予測シミュレーション」

八幡健太（埼玉大学大学院 理工学研究科、博士前期課程）

「医用計測と数値解析とのデータ同化による病態力学特性の推定にむけて」

大谷智仁（大阪大学大学院 基礎工学研究科、博士後期課程1年）

「有限要素解析による MRE 数値計算」

富田直（北海道大学大学院 人間機械システムデザイン専攻、修士2年）

「血管内皮細胞の運動メカニズム解明に向けて」

荒井雅貴（九州大学大学院 工学府、博士後期課程）

「微小流路を用いたがん細胞分離デバイスの最適設計」

武石直樹（東北大学大学院 工学研究科、博士前期課程1年）

「A cell simulator for the evaluation of new medical treatments」

Stephanie Nix（東北大学大学院 工学研究科、博士前期課程2年）

3) 九州大学シンポジウム（2013年9月19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生み出されてくる多様でかつ膨大な生命科学データを解析し、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。「京」では、すでに計算生命科学研究者がゲノムから細胞、器官、個体にいたる生命の理解、そして医療および創薬基盤の確立をめざし研究を進めている。ただ、計算生命科学はあくまでも生命科学に根差しており、かつ学際性をますます強めつつある。そのようななか、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共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：90名

4) HPCI 戦略プログラム分野 1×分野 2 シンポジウム in 名大(2013年12月17日)

「生体高分子複合体を計算する－相互作用で何が起きるのか」

開催場所：名古屋大学 IB 電子情報館 大講義室

主催：理化学研究所計算生命科学推進プログラム (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」、HPCI 戦略プログラム 分野 2「新物質・エネルギー創成」計算物質科学イニシアティブ)

趣旨と内容：ハイパフォーマンスコンピューティングの進展により、大規模な生体分子シミュレーションが実施可能となった。特に生体分子の相互作用は分子機能に直結するので重要である。シンポジウムでは相互作用が誘起する分子機能発現メカニズムに焦点をあて、ハイパフォーマンスコンピューティングがもたらす生命分子科学研究について、生体分子複合システムのシミュレーションを行っている分野 1 と分野 2 に所属する研究者らによって展望された。

バックグラウンドは異なるが、研究対象が同じ研究者が演者にも参加者にも多く、議論が大変活発に行われた。

参加者数：60名

5) 第 51 回日本生物物理学会年会 (2013年10月28日～30日)

セミナー「生命科学と計算科学がみる未来」

開催場所：国立京都国際会館

主催：日本生物物理学会

趣旨と内容：戦略プログラム分野 1 の研究対象が多く所属する日本生物物理学会会員に対し、これからの生物物理学及び生命科学にスーパーコンピュータ「京」のような大規模計算機の必要性とどのように寄与できるかについて講演を行い、より多くの生命科学者の HPCI への参加を呼び掛けるため、SCLS 計算機システムと利用公募の紹介を行った。

参加者数：1,670名 (年会参加者総数)

6) 第 36 回日本分子生物学会年会 (2013年12月4日)

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」

開催場所：ポートピアホテル (神戸)

主催：日本分子生物学会

趣旨と内容：生命は極めて複雑なシステムであり、生命システムの異常である疾患の新規診断・治療法を創出するためには、生命の階層的、システムの理解が不可欠である。「京」に代表されるスーパーコンピュータの進歩は、次世代シーケンサーや質量分析装置など近年の計測技術の飛躍的進歩と相まって、その階層的、システムの理解を可能としてきている。ワークショップではがんと心疾患に焦点を当て、それら疾病を御するための研究戦略をテーマに議論がなされた。

参加者数：7,836名（年会参加者総数）

IV-2 シンポジウム等でのポスター発表および展示参加

1) Bio Japan 2012 ブース展示（2013年10月9-11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、
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 2013 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、16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出展をした。地方自治体、大学、研究機関、製薬・医薬企業、医療機器メーカー、IT企業、製造・運搬企業などのビジネス関係者から、一般では高校生から高齢者まで老若男女、幅広い来場者があった。高校生は学校の授業の一環として参加しており、戦略分野1の説明に熱心に聞き入っていた。

参加者数：12,487人

戦略分野1ブースへの来場者：約300名

2) 理化学研究所一般公開

- ・横浜地区(2013年9月28日)

一般来場者数 3,045人。

SCLSの研究内容を紹介した一般向けパネルの出展。

- ・神戸地区（2013年10月19日）

神戸第2地区一般来場者数 2,150人。

SCLSの研究内容を紹介した一般向けパンフレットを引き伸ばしたパネル展示とDNA二重螺旋のペーパークラフト工作を実施。はさみを使わず紙1枚を折るだけの工作で親子の参加が多かった。生命科学への関心をうながすため、DNAにつ

いて解説したハンドアウトも提供した。200 枚用意したペーパークラフトはすべて配布。



3) サイエンスアゴラ 2013 (2013 年 11 月 9 日-10 日、日本科学未来館)

2 日間延べ来場者数 5,796 人。

科学と社会をつなぐ場として市民との科学コミュニケーション活動に取り組む人たちが集う科学交流イベントに神戸地区の発生・再生科学総合研究センター、ライフサイエンス技術基盤研究センター、生命システム研究センター、HPCI 計算生命科学推進プログラムの 4 つのセンターで合同出展。

4 つのセンターが生命科学分野の研究成果を楽しく紹介するというので、細胞同士をくっつけるカドヘリンや、体の中の分子の動きを観察する分子イメージング、体内時計、心臓シミュレータについてパネルと、動画で紹介した。さらに、来場するこどもたちを対象に、細胞の中にあるさまざまな働きをもった部品 (小器官) について理解してもらおうと、大きな細胞断面のパネル展示と、小器官をかたどったスタンプを押してコースターをつくる体験も行った。コースターは 2 日間で約 600 枚がなくなるほど盛況であった。



4) SC13(Supercomputing Conference 2013) ブース展示及びショートレクチャー (2013 年 11 月 17-22 日)

開催場所: Colorado Convention Center (デンバー、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 25 回目となる。計算科学研究機構と 5 分野が協力し、利活用に重きを置いたブース出展となった。3 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、昨年に好評であったショートレクチャーを引き続き行った。情報発信のさらなる強化、共同研究や教育・アウトリーチ活動においてグローバルな連携を築くことを目的としてレクチャーを行った。

Short Lecture Title: Collaboration of Education and Outreach Activities (RIKEN SCLS)

参加者数: 10,550 人

5) 第 27 回「理化学研究所と産業界との交流会」(2014 年 2 月 13 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 32 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った。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。

参加者数: 505 名

IV-3 SCLS 計算機システム（「京」互換機システム）公募利用の推進

医療および創薬を含む生命科学分野において、広く研究者・技術者が HPCI を積極的に活用していくことを支援するため、SCLS 計算機システム（京互換機システム）を整備し、利用公募の実施を行なっている。また、SCLS 計算機システムの利用促進の一環として講習会やセミナーなどの開催にも取り組んでいる。

(1) SCLS 計算機システム利用公募

生命科学の広い領域をカバーするため、異なるバックグラウンドの有職者によって構成。

利用公募委員会メンバー：

金久實委員長（京都大学、特任教授）

和田成生委員（大阪大学、教授）

木寺詔紀副プログラムディレクター

江口至洋副プログラムディレクター

利用公募委員会は以上の委員会メンバー所属機関との TV 会システムにより開催。

1) 2013 年度 1 期利用公募委員会（2013 年 6 月 14 日）

採択課題 8 件：

- ・「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」（課題代表者：百武徹、横浜国立大学大学院工学研究院）
- ・「Development of Computer Modeling Techniques for Patient-Specific Cardiovascular FSI」（課題代表者：滝沢 研二、早稲田大学高等研究所）
- ・「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」（課題代表者：水口賢司、(独) 医薬基盤研究所）
- ・「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」（課題代表者：志水隆一、NPO 法人バイオグリッドセンター関西）
- ・「量子化学を取り入れた結合親和性予測能の改善」（課題代表者：安尾和也、塩野義製薬（株））
- ・「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」（課題代表者：Huynh Quang Huy Viet、岡山大学大学院）
- ・「一本鎖核酸の塩基スタッキングの安定性」（課題代表者：陶山明、東京大学大学院総合文化研究科）

利用者数：33 名（うち外国籍 1 名、民間企業：20 名）

2) 2013 年度 2 期利用公募委員会（2013 年 10 月 15 日）

採択課題 5 件：

- ・「遺伝子発現制御の理解に向けたクロマチンの特徴の包括的解析」（課題代表者：須山幹太、九州大学生体防御医学研究所）
- ・「血栓症バイオメカニクスの大規模計算機シミュレーション」（課題代表者：坪田健一、千葉大学大学院工学研究科）
- ・「発達障害のメカニズムの解明のための精緻な胎児シミュレータの開発」（課題代表者：國吉康夫、東京大学情報理工学系研究科）
- ・「数値解析と実験的解析を融合させた細胞内タンパク質移動メカニズムの検討」（課題代表者：世良俊博、九州大学大学院工学研究院）

- ・「大量のマイクロアレイデータを用いた遺伝子ネットワークの推定とデータベース化」(課題代表者：土井淳、(株)セルイノベーター)
利用者数：14名(うち民間企業1名)

2012年度からの継続利用課題14件を含め、2014年3月31日時点に於いて利用課題27件、利用者数167名(うち外国籍7名、民間企業34名)。うち、18課題が2014年度継続利用を希望。

(2) HPCI 活用の促進と利用者支援

HPCI の活用の促進と利用者支援を行うため、戦略プログラム分野1主催、及び ISLiM (次世代生命体統合シミュレーションソフトウェア) との共催による SCLS 計算機システム、アプリケーション・ソフトウェアの講習会とセミナーを実施した。

1	2013年5月29日	(理化学研究所 東京連絡事務所、東京)
	ParaHaplo/ NGS analyzer 講習会	参加者：22名
2	2013年7月30日 ¹⁾	(理化学研究所 東京連絡事務所、東京)
	RICS-K 講習会	参加者：17名
3	2013年7月30日 ¹⁾	(理化学研究所、和光)
	RICS-K 実習会	参加者：3名
4	2013年8月6日	(都市活力研究所、大阪)
	SCLS 講習会 (Linux 基礎、分子動力学基礎、Gromacs 実習)	参加者：11名
5	2013年11月1日 ¹⁾	(理化学研究所、和光)
	ParaHaplo 実習会	参加者：3名
6	2013年11月6日 ¹⁾	(理化学研究所、和光)
	NGS Analyzer 実習会	参加者：2名
7	2013年12月12日	(都市活力研究所、大阪)
	SiGN-BN 講習会	参加者：8名(うち、民間企業4名)
8	2014年2月26日 ¹⁾	(都市活力研究所(大阪))
	RICS-K 実習会	参加者：13名(うち、民間企業6名)
9	2014年3月3日	(産業技術総合研究所、東京)
	mu2-lib セミナー	参加者：53名(うち、民間企業23名)
10	2014年3月18日	(産業技術総合研究所、東京)
	SiGN-BN 講習会	
11	2014年3月25日 ¹⁾	(都市活力研究所、大阪)
	cppmd 講習会	

注 1) ISLiM 主催による講習会

V 研究成果の普及

A 実施計画

計算生命科学の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、産業界や国民から広く理解を得るための活動を行う。具体的には、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 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、研究者向けと一般向けの紹介冊子、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。

B 実施内容（成果）

V-1 広報活動

V-1-1 広報コンテンツ

(1) パンフレット

一般向けパンフレット「より良い健康のために」(A5判・8ページ)のコンテンツを基にして、登場するキャラクターや研究素材(DNA・細胞・タンパク質・臓器)などがモーションを使っていきいきと動作することにより、科学に詳しくない閲覧者でも楽しく読み進められ、パンフレットに勝る理解増進へと繋がる「動きのある絵本」のようなアニメ版広報コンテンツを制作した。



アニメ版一般向けパンフレット
(日本語版)

(2) ニューズレター発行（日本語版、英語版）

2012年度に引き続き Newsletter の発行を行った。(次世代計算科学研究開発プログラムは2013年3月31日に終了したため2013年度は単独にて発行。)

- BioSupercomputing Newsletter Vol.9 (2013年9月発行)
- BioSupercomputing Newsletter Vol.10 (2014年2月発行)



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



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

(3) ホームページ

プログラムの活動拡充にともないサイトコンテンツの充実及び拡充を図るため、また HPCI 利用に際する研究支援協力に関して、「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されたソフトウェアや戦略分野 1 で開発しているソフトウェアの提供を行うため、ホームページのデザイン及び構成についてリニューアルを行った。



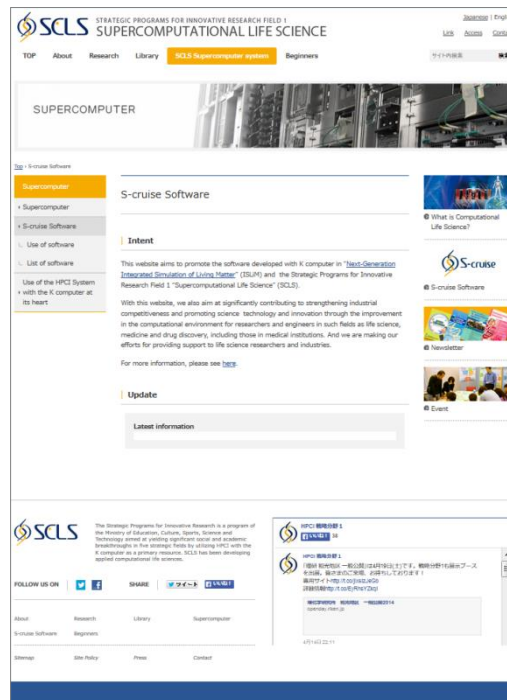
日本語版トップページ



英語版トップページ



開発ソフトウェアのポータルサイト
「S-cruise」(日本語版)



開発ソフトウェアのポータルサイト
「S-cruise」(英語版)



研究内容、研究者紹介動画 (日本語版・英語版)

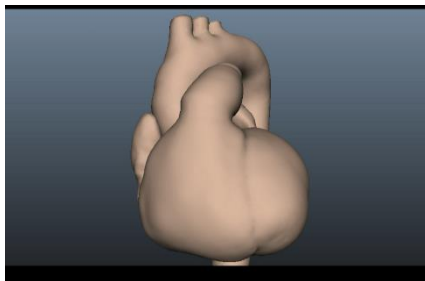
(4) 研究紹介コンテンツ制作

SCLS の研究内容について全国の高校や科学館、科学イベントの会場などに展示することで若い人への計算生命科学分野の人材育成と研究について普及を図るため、理数系に関心のある高校生以上を対象とした研究紹介パネルを制作した。



(5) 心臓シミュレータ可視化コンテンツ制作

一般市民への研究成果の普及と医療従事者への医学界へのシミュレータ応用の普及を図るために計算結果に基づき心臓シミュレータ (UT-Heart) を可視化した動画を制作した。



V-1-2 メディア（TV・新聞・雑誌など）での報道、プレスリリース

(1) 報道機関への説明会の開催（2013年9月9日）

『「京」が切り拓くライフサイエンス最前線！』記者勉強会

開催場所：理化学研究所計算科学研究機構

主催：HPCI 戦略プログラム 分野1、分野2、計算科学研究機構

趣旨と内容：研究成果の一般向け広報強化の一環として、HPCI 戦略プログラム 分野2及び計算科学研究機構と連携し、開催した。マスメディアの活用を念頭に、新聞やテレビ等のメディア担当者に対し研究内容の進捗や今後の見通しなどの説明を行ない、理解を深めてもらうことを目的とする。これまで「京」で得られた成果に加え、最前線で進めている研究を紹介した。また「京」が生命現象の理解、さらには医療や創薬の現場にどのように寄与するのかについて研究者が説明を行った。

参加者数：60名

（プレス7社13名、研究者ほか16名、関係者25名、講演者6含む）

なお、新聞・雑誌、テレビ放映、プレスリリース等の一覧については参考資料参照。

V-1-3 「京」見学および講義の実施

計算生命科学の理解促進を図るため「京」施設の見学、HPCI 戦略プログラムの概要や研究課題の説明を、計算科学研究機構と連携し実施した。

参加団体名：株式会社シグマキス、株式会社サイアメント、近畿大学、九州大学、岡山大学、大塚製薬株式会社（順不同）

参加者数：約40名

V-2 産業界との連携

(1) 新薬開発を加速する「京」インシリコ創薬基盤の構築

研究成果の普及と「京」の利用を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平成24年度に設立し、「京」の産業利用枠にて、新薬開発を加速するためのインシリコ創薬事業の支援を行った。

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」の産業利用枠に採択され、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（14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)、杏林製薬(株)、マルホ(株)、協和発酵キリン(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、神戸大学大学院工学研究科、(独)産業技術総合研究所、理化学研究所理研 HPCI 計算生命科学推進プログラム企画調整グループ

V-3 ソフトウェアの普及

V-3-1 ソフトウェア・ダウンロードサイト

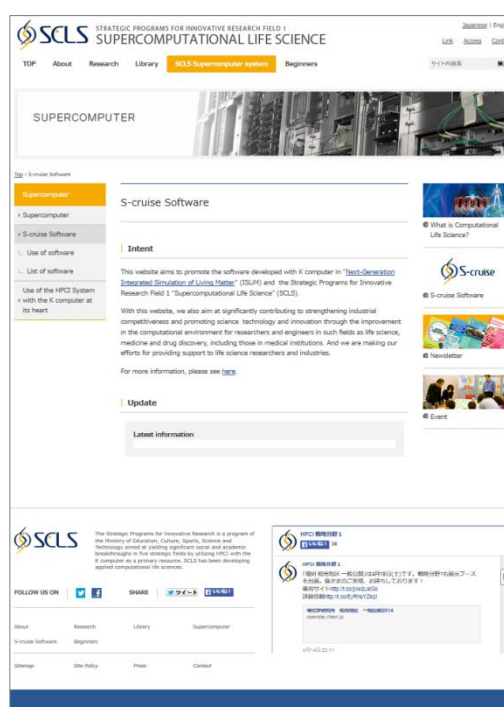
(1) ポータルサイト「S-cruise」の開設

「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)およびHPCI戦略プログラム 分野1において「京」で開発されたソフトウェアの成果を普及することを目的に、分野1のホームページ内に作製した。

生命科学研究者や医療、創薬系産業界(含む医療機関)の研究者、技術者などの利用者にとってより一層利用しやすい環境を整備し、生命科学研究者や産業界等への利用支援・裾野拡大に取り組むことにより、産業競争力の強化、科学技術・イノベーション推進に大きく貢献することを目的としている。



開発ソフトウェアのポータルサイト
「S-cruise」(日本語版)



開発ソフトウェアのポータルサイト
「S-cruise」(英語版)

V-3-2 (=「II-3 利用者講習会の開催」参照)

VI 分野を超えた取組の推進

A 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、計算科学研究機構、HPCI コンソーシアムとの連携を進める。

B 実施内容（成果）

VI-1 シンポジウムや合同研究交流会等の開催（研究ノウハウの共有促進）

（3）分野2とのシンポジウムの開催

- 1) HPCI 戦略プログラム分野1×分野2 シンポジウム in 名大
(2013年12月17日)

「生体高分子複合体を計算するー相互作用で何が起きるのか」
(=>IV-14) 参照

- 2) 分野2(CMSI) ニュースレターへの寄稿

上記1)のシンポジウムについての記事を分野2(CMSI)が発行するニュースレターへ寄稿を行なった。



CMSI Newsletter No. 9

VI-2 計算科学研究機構および戦略5分野との連携（教育とアウトリーチ活動）

VI-2-1 会議、委員会等

（1）連携推進会議

計算科学研究機構、RIST、5分野間連携にて、「京」の運用状況や連携活動に関する会議が開催され、H25年度は以下の会議に参加した。

- ・ 第12回連携推進会議（2013年4月16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13回連携推進会議（2013年7月18日）
開催場所：理化学研究所東京連絡事務所
- ・ 第14回連携推進会議（2013年11月8日）
開催場所：理化学研究所計算科学研究機構
参加者：江口至洋（理研）
- ・ 第15回連携推進会議（2014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：江口至洋（理研）

(2) 広報情報連絡会 (2013年4月10日、7月4日)

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1回は、成果の情報共有やプレスリリースでの対処、成果を「わかりやすく」伝えるための取り組みや連携推進会議の議案について議論した。第2回では、成果の情報共有のための仕組みや体制、連携推進会議の議案について議論した。各分野からの報告や今後の予定を情報共有し協力体制を強化した。今後も定期的な開催を予定している。

第1回(参加者数:18名)、第2回(参加者数:20名)

(3) 計算科学シミュレーションの情報発信検討小委員会

「計算科学から社会への情報発信のあり方に関する検討ワーキンググループ」が2011年5月に計算科学研究機構とHPCI戦略プログラム実施機関の連携推進会議のもとに設置され、準備会を含め計5回検討会が開催された。2014年4月には日本学術会議第三部会総合検討会・機械工学委員会合同による計算科学シミュレーションと工学設計分科会のもとに先述の「計算科学から社会への情報発信のあり方に関する検討ワーキンググループ」の活動を兼ねた「計算科学シミュレーションの情報発信検討小委員会」が新たに設置され、計7回にわたり検討会が持たれ、2013年5月22日に報告書の公開がなされた。報告書では「二層からなる科学情報発信の組織と体制」を整備する必要性が述べられた。また、6月21日に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の主催として、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た。

(4) 広報責任者会議

計算科学研究機構、RIST、5分野間連携にて、広報に関する会議が開催され、H25年度は以下の会議に参加した。

・第1回広報責任者会議(2013年9月26日)

開催場所:理化学研究所計算科学研究機構(テレビ会議)

・第2回広報責任者会議(2013年10月31日)

開催場所:理化学研究所計算科学研究機構(テレビ会議)

・第3回広報責任者会議(2014年3月14日)

開催場所:理化学研究所計算科学研究機構(テレビ会議)

VI-2-2 教育・アウトリーチ活動

(1) 大学での共同講義

神戸大学大学院システム情報科と計算科学研究機構とでオムニバス形式による大規模計算科学講座（連携講座）：大規模シミュレーション概論 II が開かれた。大規模シミュレーションによる応用研究と計算機科学のハードウェアとソフトウェアの技術開発の応用研究をテーマとして、神戸大学大学院システム情報科、計算科学研究機構、各戦略分野の研究者による講義がなされた。分野1からは木寺詔紀副プログラムディレクターが10月10日に「予測する生命科学・医療および創薬基盤」の講義を行なった。

Ⅶ プロジェクトの総合的推進

A 実施計画

研究開発と計算科学技術推進体制構築の推進にむけ、関係機関との連携を強化する。また、プロジェクト全体の連携を密とし、円滑に運営していくために、当該分野1の運営委員会を毎月開催し情報共有を継続して行う。また、研究開発課題関係者の会議や成果報告会、参画各機関の関係者による会議、外部諮問委員会の開催を行っていく。

B 実施内容（成果）

Ⅶ-1 運営に関する委員会等

Ⅶ-1-1 運営委員会

プロジェクト全体の運営に関する意志決定を行うため、運営委員会を実施している。メンバーは統括責任者・副統括責任者・グループリーダーなどで構成し、「研究開発」と「計算科学技術推進体制の構築」が常時情報共有をはかり、協調してプロジェクトの推進を行っている。この運営委員会において、プロジェクトの進捗管理、計算資源の配分、予算配分、新規課題についての調整などを行った。本年度は以下の日程で開催した。

平成 23 年 4 月 26 日	第 23 回運営委員会
平成 23 年 5 月 24 日	第 24 回運営委員会
平成 23 年 6 月 28 日	第 25 回運営委員会
平成 23 年 7 月 30 日	第 26 回運営委員会
平成 23 年 9 月 18 日	第 27 回運営委員会
平成 23 年 11 月 12 日	第 28 回運営委員会
平成 23 年 12 月 3 日	第 29 回運営委員会
平成 23 年 12 月 24 日	第 30 回運営委員会
平成 24 年 1 月 29 日	第 31 回運営委員会
平成 24 年 2 月 24 日	第 32 回運営委員会

Ⅶ-1-2 外部諮問委員会

HPCI 戦略プログラム分野1の適切、かつ最良な推進を目的とし、国内の有識者、海外の専門家からなる外部諮問委員会を2011月に設置し、2012年1月に第1回外部諮問委員会を開催した。2013年9月29日、30日に開催した第2回外部諮問委員会では、第1回外部諮問委員会からのRecommendationに対し、プロジェクト全体及び各課題の対応と活動報告を行なった。外部諮問委員会からはプロジェクトの中間評価、最終年度目標に向けた助言とプロジェクト終了後の今後の計算生命科学の長期的展望についての助言がなされた。

外部助言者委員氏名：

委員長 Peter Kohl (Chair in Cardiac Biophysics and Systems Biology,
Imperial College, National Heart and Lung Institute, The Heart Science
Centre, Professor)

郷 通子 (情報・システム研究機構、理事)

金岡 昌治 (株式会社住化分析センター、代表取締役社長)

VII - 2 研究ワークショップ、連携に向けた打合せ等

VII - 2 - 1 全体ワークショップ

プロジェクトの参加者が、個々の研究の進捗状況と今後の計画について発表し、互いに理解を深め、議論を行うことでより良い成果に繋げ、プロジェクト全体の今後の方向性を検討し、次年度の計画立案、資源配分に反映させることを目的として、二日間に渡り実施した。

今回は若手研究者からポスター発表を募り、参加者の投票により優秀なポスター発表を選出する企画を実施した。

ベストポスター賞：「パーキンソン病の振戦再現を目指した皮質-視床モデルの開発」五十嵐潤（沖縄科学技術大学院大学）

開催日時：2013年1月6日、7日

開催場所：理化学研究所計算科学研究機構 1階セミナー室

参加者数：58名

VII - 2 - 2 課題間連携に向けた検討

中間評価での「各研究開発課題を融合させるような一段ステップアップした方向性への発展が必要」との指摘を踏まえ、以下の方策を実施した。

- ・ 課題1と課題3の連携によるサルコメアの分子レベルモデルの構築とその心臓シミュレータへの応用を目的として、新たな研究者の雇用による連携ユニットを来年度に設置し、研究を開始した。
- ・ 個別の問題に関して、プロジェクト終了後の展開も見据え、少人数の関係者による議論をする場をもうけ、対話を重ねることで、新たな研究方向を探り、解決すべき問題点を明らかにしていく。

平成25年度には以下の議論を開始した。

課題1-課題3：神経細胞シミュレーション

(一分子粒度シミュレーションと脳神経系シミュレーション)

課題1-課題4：脂肪細胞の褐色化

(一分子粒度シミュレーションとネットワーク解析)

課題2-課題4：エピゲノム創薬

(自由エネルギー計算と網羅的エピゲノム解析)