

## SCLS 計算機システム利用成果報告書

### 1. 研究課題名と研究代表者の情報

研究課題名：融合遺伝子同定法の最適化

研究代表者名：竹内 賢吾

所属機関：公益財団法人 がん研究会 がん研究所

利用期間：平成 25 年 4 月 1 日～平成 26 年 3 月 31 日

### 2. 研究概要：

本研究の目的は、がんにおいて治療標的となる融合遺伝子の検出法の最適化である。対象とする融合遺伝子は大きく分けて 2 群を設定する。ひとつの群は既知の融合遺伝子であり、すなわち臨床応用に向けた実用的な実地診断法の開発あるいはバイオマーカーの同定を目指す。もうひとつの群は未知の融合遺伝子であり、現在申請者が携わっている新規融合遺伝子探索プロジェクトにおける同定システムの最適化を目指す。

# SCLS 計算機システム利用成果報告書

## 1. 研究課題名と研究代表者の情報

研究課題名：SBML, PHML 対応汎用シミュレーターFlint の「京」互換アーキテクチャへの対応開発

研究代表者名：浅井義之

所属機関：沖縄科学技術大学院大学

利用期間：平成 25 年 4 月 1 日～平成 26 年 3 月 31 日

## 2. 研究概要：

効率的な創薬や生理学の発展のために、生理機能を分子レベルから臓器、個体レベルまで多階層的なシステムとしてとらえモデル化し、動的にシステムの状態を解析するために *in silico* での実験（シミュレーション）を行うことが求められている。これらのモデルは複雑化・巨大化する傾向にあるため、標準化された記述方法で数理モデルにし、研究者間で共有し再利用できるようにすることが重要となっている。先駆的試みとして SBML, CellML といった XML でモデルを記述する技術が提案されている。特に SBML はシステム生物学の分野でモデル記述言語としてデファクトの標準となっている。

生体機能の多階層モデル構築・シミュレーションのプロセスをサポートするための基盤プラットフォーム PhysioDesigner, ならびにシミュレーターFlint の開発が新学術領域「多階層生体機能学」などの支援を受けて進められている。PhysioDesigner で作成されたモデルは、同時に我々が提案している PHML というモデル記述言語で記述される。本課題では Flint を「京」互換アーキテクチャに対応させることで、汎用的な大規模多階層生理機能モデルのハイパフォーマンスシミュレーション実行環境を構築する。Flint の機能はポータブルに Windows や Mac といったデスクトップ向けの OS に移植されることから、PhysioDesigner プロジェクトにおいて一般に無償で配布されているソフトウェアに改善がフィードバックされる。特に性能の面と安定性の面での改善が期待できる。これによって、幅広いユーザーに対し PHML や SBML といった標準化された XML 言語で記述された生体の構造と生理機能を表現するモデルを構築・シミュレーションをサポートすることにつながる。

## SCLS 計算機システム利用成果報告書

### 1. 研究課題名と研究代表者の情報

研究課題名：次世代シーケンサデータ解析のための情報処理システムの開発

研究代表者名：秋山泰

所属機関：国立大学法人 東京工業大学

利用期間：平成 25 年 4 月 1 日～平成 26 年 3 月 31 日

### 2. 研究概要：

近年、DNA シーケンシング技術の活発な開発により、短時間で大量の DNA 情報が得られるようになった。我々は、この大量データの処理に対応するため、大規模並列計算環境を利用した次世代シーケンサデータ解析のための情報処理システムの開発を行っている。平成 25 年度は、大規模並列計算環境として「京」を利用し、微生物集団のゲノム解析を行うメタゲノム解析パイプラインの開発を行い、その開発を円滑に進めるために「京」と互換性の高い SCLS 計算機システムを利用した。

## SCLS 計算機システム利用成果報告書

### 1. 研究課題名と研究代表者の情報

研究課題名：

分散メモリ型超並列計算機を用いたカノニカル分子軌道計算による創薬基盤技術の開発

研究代表者名：佐藤 文俊

所属機関：東京大学

利用期間：平成 25 年 4 月 1 日～平成 26 年 3 月 31 日

### 2. 研究概要：

コレスキー分解 (CD) 法による解析的カノニカル分子軌道計算法の基礎研究を完成し、分散メモリ型超並列計算機を用いたタンパク質シミュレーション基盤技術を構築した。クーロン項、Fock 交換項、また grid-free 法に基づく交換相関項に CD 法を適用し、SCF 繰り返し計算中は分子積分・数値積分を用いず行列演算のみにより電子状態を求める計算手法を開発した。これにより、分散メモリ型超並列計算機に適した CD 法に基づく密度汎関数プログラムを完成させた。

## SCLS 計算機システム利用成果報告書

### 1. 研究課題名と研究代表者の情報

**研究課題名**：好氣的条件下で水素製造反応を触媒するヒドロゲナーゼの分子設計

**研究代表者名**：田村 隆

**所属機関**：岡山大学大学院環境生命科学研究科

**利用期間**：平成 25 年 4 月 1 日～平成 26 年 3 月 31 日

### 2. 研究概要：

水素燃料は、バイオエタノールと並んで **21 世紀のエネルギー戦略**を描く上で、大きな選択肢の一つと期待されている。微生物の水素代謝に関わる酵素ヒドロゲナーゼ(**H<sub>2</sub>ase**)が、環境負荷の少ない水素製造法として有望視されてきた。しかしヒドロゲナーゼは本質的に酸素感受性が高く、触媒部位への酸素の結合によってその活性を失う。

本研究では、蛋白質の密度汎関数 **ProteinDF** を用いた **H<sub>2</sub>ase** の全電子計算により水素製造酵素の反応機構の解明及び酸素耐性の高い **H<sub>2</sub>ase** の精密分子設計を行い、好氣的条件下でも水素を製造し続ける **H<sub>2</sub>ase** の分子設計に取り組む。本研究により下水処理施設における水素ガス発電、水素で走る自動車、家庭用水素エネファームなど、来たるべき**水素社会の実現**に向けた水素製造技術の開発に展開できる。

## SCLS 計算機システム利用成果報告書

### 1. 研究課題名と研究代表者の情報

研究課題名：大規模並列計算機によるタンパク質相互作用および化学構造解析

研究代表者名：阿久津達也

所属機関：京都大学 化学研究所

利用期間：平成25年4月1日～平成26年3月31日

### 2. 研究概要：

本研究グループではこれまでにマルコフ確率場と相互情報量を用いたタンパク質結合部位予測、および、効率的な探索法に基づく化学構造の数え上げアルゴリズムを開発してきた。しかしながら、これらのアルゴリズムでは多大な計算機パワーを要するため、小規模なデータの解析にしか適用できないという難点があった。結合部位予測では、学習データからパラメータを推定し、予測ではそのパラメータを用いて尤度の最大化を行うが、いずれにおいても非常に大規模な最適化問題を解く必要があり、メモリー不足や多大な計算時間を要するなどの壁にぶつかり、大規模データに適用することができなかった。一方、化学構造の数え上げでは分子式から可能な構造式をすべて数え上げるなどの計算を行うが、探索空間が膨大であるため、20原子程度からなる化学構造の数え上げですら計算不可能な場合があった。そこでこれらの問題点を解決するために、両者に対し、これまで開発してきたアルゴリズムの大規模並列化を試みることを目標に研究を行った。

## SCLS 計算機システム利用成果報告書

### 1. 研究課題名と研究代表者の情報

研究課題名： 大規模モンテカルロ・シミュレーションによる核医学イメージングの研究

研究代表者名： 福地 知則

所属機関： 独立行政法人理化学研究所

利用期間： 平成 25 年 3 月 1 日～平成 26 年 3 月 31 日

### 2. 研究概要：

疾患を早期に発見する検査方法として、放射性同位体を用いて非侵襲的に薬剤の生体内分布を可視化する、核医学イメージングがある。核医学イメージングのための装置について、「京」を用いた大規模なモンテカルロ・シミュレーションを実行する技術基盤を構築することが本研究の目的である。大規模なモンテカルロ・シミュレーションを核医学イメージングに導入することにより、既存のイメージング装置の高度化を図るのみではなく、新規の核医学イメージング手法を創出し、生命科学および医療創薬の基礎研究から臨床応用までの広い範囲にブレークスルーをもたらすことが期待できる。

## SCLS 計算機システム利用成果報告書

### 1. 研究課題名と研究代表者の情報

研究課題名：細胞環境中の分子シミュレーションとその為の新規手法開発

研究代表者名：宮下 尚之

所属機関：理化学研究所 生命システム研究センター

利用期間：平成25年 4月1日～平成26年 3月31日

### 2. 研究概要：

我々のチームでは細胞環境シミュレーションや超巨大分子のシミュレーションを高速に行なう為に、京コンピュータなどで従来のプログラムより高速なシミュレーションが実現できる分子動力学プログラム GENESIS を開発している。細胞環境シミュレーションや超巨大分子のシミュレーションを実現するには、京コンピュータの様な大規模な計算機資源が必要とされる。しかし、その様な大きなシステムのシミュレーションを一度失敗すると、短時間の計算であっても多大な CPU 時間を消費する事になる。従って計算をなるべく失敗させない必要があるが、その為には念入りの準備が必要となる。事前準備には2つあり、一つはシステムのテスト計算、もう一つはプログラムの準備である。本チームでは主に、プログラムの準備の為に本 SCLS 計算機システムを利用した。更に、京コンピュータ用に開発したソフトウェア (GENESIS, REIN など) のメンテナンスおよび、テスト利用として使用した。ISLiM ソフトウェアの講習会の為の準備・検証にも利用した。



## SCLS 計算機システム利用成果報告書

### 1. 研究課題名と研究代表者の情報

研究課題名：分子動力学計算コアプログラムの検証

研究代表者名：大野 洋介

所属機関：理化学研究所

利用期間：平成 25 年 4 月 1 日～平成 26 年 3 月 31 日

### 2. 研究概要：

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) で「京」用に開発した大規模並列用 MD コアプログラム (cppmd) を SCLS 計算機システム用に修正し、FX10/「京」対応分子動力学プログラムの開発者へ提供する。

## SCLS 計算機システム利用成果報告書

### 1. 研究課題名と研究代表者の情報

研究課題名：細胞内分子ダイナミクスのシミュレーション

研究代表者名：杉田 有治

所属機関：理化学研究所

利用期間：平成 25 年 4 月 1 日～平成 26 年 3 月 31 日

### 2. 研究概要：

#### 1) 膜輸送タンパク質の動力学計算

近年実験により膜タンパク質の立体構造が明らかになっており、構造揺らぎや反応状態間の構造変化がその機能発現に重要なことが認識されつつある。本研究では実験から得られた立体構造を基にしてイオンポンプやトランスポータの構造ダイナミクスと機能の関係についてシミュレーションを用いて明らかにする。

#### 2) 生体系に対する非調和振動理論の開発と応用

近年の振動分光法の発達により、タンパク質のサイトを特定した振動スペクトルの取得が可能になってきた。しかし、そのスペクトルの解釈は一般的に容易ではないため、理論的な支援が待ち望まれている。一方、凝縮相・生体系に対し振動スペクトルを計算する方法は確立されていない。本研究では、生体系を対象とする、新しい分子振動状態理論を開発し、応用計算を展開する。

## SCLS 計算機システム利用成果報告書

### 1. 研究課題名と研究代表者の情報

研究課題名：衝撃波による脂質膜構造変化の MD シミュレーション

研究代表者名：越山顕一郎

所属機関：大阪大学大学院基礎工学研究科

利用期間：平成 25年 4月 1日～平成 26年 3月 31日

### 2. 研究概要：

衝撃波による細胞膜の基本構造である脂質膜の構造変化を分子レベルで理解することは衝撃波を用いた医療技術開発の基礎となる。従来の衝撃波 MD シミュレーションでは計算機性能の問題から系が非常に小さい場合に限られていた。本研究では、FX10 を利用することで系のサイズを拡張し、それに伴い新たな衝撃波発生アルゴリズムを開発し、より現実に近い状態で衝撃波による分子レベルの脂質膜構造変化を明らかにする。

## SCLS 計算機システム利用成果報告書

### 1. 研究課題名と研究代表者の情報

研究課題名：細胞シミュレーション統合プラットフォームの開発

研究代表者名：須永 泰弘

所属機関：独立行政法人理化学研究所 情報基盤センター

利用期間：平成25年 4月 1日～平成26年 3月31日

### 2. 研究概要：

次世代計算科学研究開発プログラムでは「京」コンピュータで動作する細胞シミュレーション統合プラットフォーム(RICS)を開発しました。RICSは細胞内の空間構造を考慮し、場によって異なる生化学反応、物質拡散、膜機能を連成した計算が可能です。

平成25年度は共同研究者と同一の環境であるSCLSを用いて不具合の解消や、機能の軽微な修正を行い、機能を持った細胞を表現することを目的とした。

## SCLS 計算機システム利用成果報告書

1. 研究課題名と研究代表者の情報

研究課題名：大規模生命データ解析

研究代表者名：宮野 悟

所属機関：東京大学医科学研究所

利用期間：平成25年4月1日～平成26年3月31日

2. 研究概要：

「京」に実装すべきプログラムの開発とテストを行った。

## SCLS 計算機システム利用成果報告書

### 1. 研究課題名と研究代表者の情報

研究課題名：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

研究代表者名：百武 徹

所属機関：横浜国立大学

利用期間：平成26年4月1日～平成27年3月31日

### 2. 研究概要：

現在開発中のナノカプセル型人工赤血球は単一の性能であるが、将来的には個々の循環器疾患に対応したテーラーメイド型へと発展することが予想される。そういった状況を見据えて、申請者は、微小血管網での赤血球および人工赤血球の組織への酸素供給過程に関して、血管内だけではなく血管外の組織までも含めた各成分の対流、拡散、反応の解析を行い、人工赤血球の性能を的確に予測評価できる解析技術の開発を目指す。

## SCLS 計算機システム利用成果報告書

### 1. 研究課題名と研究代表者の情報

研究課題名：Development of Computer Modeling Techniques for Patient-Specific Cardiovascular FSI

研究代表者名：滝沢研二

所属機関：早稲田大学

利用期間：平成25年 6月 14日～平成26年 3月31日

### 2. 研究概要：

血流解析において血管壁の変形を考慮することは不可欠である。申請者は、これまでに脳血管において、その計算を行ってきたが、流体と構造のモデルの性質の違いにより並列度を上げることはそれほど容易ではないことが分かっている。本研究では、京コンピュータとバイナリ互換のあるコンピュータを用い、大規模計算に向けた計算プログラムの適応範囲の調査及び、チューニングを行うことを目的とする。

## SCLS 計算機システム利用成果報告書

### 1. 研究課題名と研究代表者の情報

研究課題名：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

研究代表者名：水口 賢司

所属機関：独立行政法人 医薬基盤研究所

利用期間：平成 26 年 4 月 1 日～平成 27 年 3 月 31 日

### 2. 研究概要：

I 型インターフェロン (IFN) の刺激因子である蛋白質 STING は、細胞が細胞外病原体に感染した際に放出される低分子と結合することにより、STING 下流の蛋白質を刺激し、結果として IFN の産生を誘発する。よって、低分子リガンド結合による STING のシグナル伝達機構の解明、および、活性化リガンドの同定は、免疫賦活剤の開発などの創薬に有用な情報を与える。

本研究では STING 単体および低分子リガンドと結合した複合体構造の MD シミュレーションを実行し、シグナル伝達機構の解明を行う。



## SCLS 計算機システム利用成果報告書

### 1. 研究課題名と研究代表者の情報

研究課題名：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

研究代表者名：志水 隆一

所属機関：NPO 法人バイオグリッドセンター関西

利用期間：平成 25 年 6 月 14 日～平成 26 年 3 月 31 日

### 2. 研究概要：

グラントチャレンジなど国のプロジェクトで開発したアプリケーションで、ある程度ワークフローやマニュアルが整備され、実習ができる条件が整った段階で順次実習形式中心の講習会を製薬企業を主な対象に開催した。

## SCLS 計算機システム利用成果報告書

### 1. 研究課題名と研究代表者の情報

研究課題名：量子化学を取り入れた結合親和性予測能の改善

研究代表者名：安尾 和也

所属機関：塩野義製薬株式会社

利用期間：平成 25 年 7 月 1 日～平成 26 年 3 月 31 日

### 2. 研究概要：

標的タンパクに対するリガンドの結合親和性を高精度で予測することは、創薬研究において活性化化合物の探索効率化に重要であるが、力場関数を用いた MM-PBSA などの簡便な手法では標的によって得られる予測精度にばらつきがあり安定した予測精度が得られていない。この予測能の改善を目的として、我々はリガンドにおける分極効果をより正確に見積もることが可能でありかつ溶媒効果も取り入れた量子化学的手法（FMO-PCM 法）による結合親和性評価を実施した。その結果、実験値との相関については MM-PBSA 法と同程度の精度にとどまった。これは FMO-PCM 法ではポケットに存在する水分子の個々の分子構造は無視し連続誘電体として取り扱うため、ポケット内で水素結合によりタンパク-リガンド間の架橋構造を取りリガンドの結合に重要な役割を演じているような特異な環境下にある溶媒分子(水分子)のエネルギー状態について十分に考慮できていない可能性が考えられる。改善点として *Int. J. Quant. Chem.*, 2006, **106**, 1943-1963 に述べられているようなポケット内の水分子を頭わに取り扱う手法を考慮する必要があると考える。

## SCLS 計算機システム利用成果報告書

### 1. 研究課題名と研究代表者の情報

研究課題名：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

研究代表者名：Huynh Quang Huy Viet

所属機関：岡山大学大学院環境生命科学研究科(環境理工学部 水藤寛研究室)

利用期間：平成 25年 7月 1日～平成 26年 3月 31日

### 2. 研究概要：

血流の解析・シミュレーションにおいて、ナビエストークス(NS)方程式を高速かつ正確に解くことは不可欠である。NS方程式を離散化することにより、得られるのは大規模連立一次方程式である。近年、大規模連立一次方程式の反復解法として Induced Dimension Reduction (IDR) 定理に基づく IDR(s)法が提案され、注目を集めているが、流体シミュレーションの分野ではまだまだあまり広く使われているとは言えない。本研究では IDR(s)法を用い、3次元 NS方程式の数値解法において計算時間を最も要する圧力 Poisson 方程式の並列化を行うことにより、血流の数値シミュレーションを高速化し、多くの症例に対する検討を効率化することを目的とする。

## SCLS 計算機システム利用成果報告書

### 1. 研究課題名と研究代表者の情報

研究課題名：一本鎖核酸の塩基スタッキングの安定性

研究代表者名：陶山 明

所属機関：東京大学

利用期間：平成25年7月1日～平成26年3月31日

### 2. 研究概要：

一本鎖核酸分子がハイブリダイゼーションにより二重鎖を形成する反応は、核酸が関与する生命現象、それを利用した創薬やバイオ・ナノテクノロジーにおいて最も基本的な反応である。しかし、その速度の塩基配列依存性については未だ不明なことが多い。最近、我々は一本鎖核酸の塩基スタッキング (SSBS) が速度に影響を与える可能性を見いだした。本研究では、分子動力学計算を用いて SSBS の安定性の配列依存性を調べる。

# SCLS 計算機システム利用成果報告書

## 1. 研究課題名と研究代表者の情報

研究課題名： 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

研究代表者名： 須山幹太

所属機関： 九州大学 生体防御医学研究所

利用期間： 平成 25 年 11 月 1 日～平成 26 年 3 月 31 日

## 2. 研究概要：

国際的なエピゲノムプロジェクトの進展に伴い、様々な組織におけるゲノム DNA のメチル化やヒストン修飾、遺伝子の転写に関するゲノムワイドなデータが得られるようになった。これらのデータ解析から、遺伝子の発現制御、すなわち転写の活性化やスプライシングがどのように制御されているかを、バイオインフォマティクス解析を駆使することで明らかにすることを大きな目的にしている。特に今回の研究課題においては、次世代シーケンサーを用いた ChIP-seq 法から得られるヒストン修飾のデータ解析と、RNA-seq 法により得られる網羅的な遺伝子発現情報から、遺伝子発現制御に直接関連したヒストン修飾部位の同定に的を絞った研究を行った。

ChIP-seq 法は、クロマチン免疫沈降 (ChIP) 法により特定された DNA-タンパク質相互作用領域を次世代シーケンサーで配列決定する技術である。ChIP-seq データを解析するために、リードが集積しているゲノム領域 (ピーク) を検出するプログラムがよく使われている。ピーク検出プログラムは、ピークを形成するリードが多いほど検出感度が高く、反対にピーク形成と無関係なリード (バックグラウンドノイズ) が多ければ検出感度は低くなる。実際の実験データでは、免疫沈降に使う抗体の種類や免疫沈降の条件の違い、また次世代シーケンサーに供するサンプル量やその調整法の違いなどから、様々なバックグラウンドノイズが頻繁に観察されることが経験的に知られている。このように、実際に得られるデータは多くのノイズが含まれるにも関わらず、ピーク検出プログラムがこのようなノイズにどれだけ影響を受けているかについての詳細な検討は少ない。そこで、ChIP-seq のデータに対し様々な割合で人工的なノイズを含ませることで、ピーク検出プログラムのロバスト性の評価を行った。

## SCLS 計算機システム利用成果報告書

### 1. 研究課題名と研究代表者の情報

研究課題名：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

研究代表者名：坪田健一

所属機関：千葉大学

利用期間：平成25年 10月22日～平成26年 3月31日

### 2. 研究概要：

血栓症は、血流のうっ滞が原因の1つであるが、その詳しい仕組みは十分理解されていない。本研究では、血栓の形成／成長現象と投薬による抗血栓現象のバイオメカニクスモデリングおよびその大規模シミュレーション法を開発し、血流挙動と血栓症との関係の定量的な理解を目指す。

## SCLS 計算機システム利用成果報告書

### 1. 研究課題名と研究代表者の情報

研究課題名：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

研究代表者名：國吉康夫

所属機関：東京大学

利用期間：平成 25 年 10 月 21 日～平成 26 年 3 月 31 日

### 2. 研究概要：

近年明確な原因が見つからない発達障害を持つ新生児の増加が問題となっている。胎内における学習の不足や異常が注目されているが、胎児を対象とした実験は困難であり原因の究明は進んでいない。シミュレーションにより胎児の運動感覚経験の学習を再現することで、発達障害が起こるメカニズムの解明が進むことが期待できる。本研究ではこれを可能にするための精緻な胎児シミュレータを開発する。

## SCLS 計算機システム利用成果報告書

### 1. 研究課題名と研究代表者の情報

研究課題名：数値解析と実験的解析を融合させた細胞内タンパク質輸送メカニズムの検討

研究代表者名：世良俊博

所属機関：九州大学大学院工学研究院機械工学部門

利用期間：平成25年10月 1日～平成26年 3月31日

### 2. 研究概要：

細胞内タンパク質の1つPKC $\alpha$ は、実験的手法により細胞に刺激を与えると細胞内で偏った分布を示すことがわかったが、その輸送メカニズムは不明である。一方で、次世代計算科学研究開発プログラム細胞スケール研究開発チームで開発した細胞シミュレーション統合プラットフォーム(RICS)は、細胞内の代謝反応だけでなく、細胞の形状や細胞内の空間構造を考慮した物質の輸送シミュレーション可能である。本研究は、数値解析と実験的解析の両側面から細胞内タンパク質輸送メカニズムの検討を行う。



## SCLS 計算機システム利用成果報告書

### 1. 研究課題名と研究代表者の情報

研究課題名：多様な遺伝子セットによる遺伝子ネットワーク推定

研究代表者名：土井 淳

所属機関：株式会社セルイノベーター

利用期間：平成 25年 11月 1日～平成 26年 3月 31日

### 2. 研究概要：

パスウェイについては、KEGG や Reactome に代表されるようなパスウェイデータベースというものがある。PPI ネットワークの情報も EBI を中心に提供されている。しかしながら、遺伝子ネットワークのデータベースというものは、あまり例がない。遺伝子ネットワークの推定には、大量のマイクロアレイデータと、高度な計算機環境を必要とするという2つの課題があったためと考えられる。

近年、がんのほぼ1000サンプルのデータが CCLE プロジェクトの成果として公開されたように、大量のマイクロアレイデータが公開されるようになってきた。これにより、計算機環境の問題をクリアできれば、遺伝子ネットワークの推定が可能になった。

本研究では、公開されている大量のマイクロアレイデータを用いて、遺伝子ネットワークを推定し、データベース化する。そのとき、lipid metabolism や Wnt シグナルに関連する遺伝子といったように、生物学的な機能分類（遺伝子セット）ごとに遺伝子ネットワークを推定することで、それぞれの系ごとに影響力の高い遺伝子を発見する。

現在のマイクロアレイデータの解析では、どの生物学的な機能の遺伝子群がエンリッチされているかまでは分かる。本研究によって、そのエンリッチされた遺伝子群の中でも、どの遺伝子の影響力が強いかを予想できるようになる。