

## ○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、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、戦略分野 1 に関連する多くの研究者がスーパーコンピュータ「京」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、他の戦略分野および計算科学研究機構、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 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。

#### 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実施した。

「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 26 年度の資源配分と利用状況

###### ①資源配分

平成 26 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、分野別作業部会で配分を決定した。

重点課題については、平成 26 年度は以下の 2 課題であった。

「課題 1 細胞内分子ダイナミクスのシミュレーション」

「課題 2 創薬応用シミュレーション」

毎月の運営委員会で利用状況を確認しつつ、再配分、加速枠の申請、追加配分を行い、以下のような資源配分を計画した（表 1）。

表 1 「京」 計算資源配分（平成 2 6 年度）

| 課題名                          | 平成26年度上期<br>(4月～9月) |           |            |            | 平成26年度下期<br>(10月～3月) |           |           |           |            | 平成26年<br>度<br>通期 |
|------------------------------|---------------------|-----------|------------|------------|----------------------|-----------|-----------|-----------|------------|------------------|
|                              | 分野配分枠               | 追加配分枠     | 再配分        | 合計         | 配分資源量                | 追加配分枠     | 加速枠       | 追加配分      | 合計         | 配分資源量            |
| 課題1 細胞内分子ダイナミクスのシミュレーション【重点】 | 6,103,018           | 4,400,407 |            | 10,503,425 | 5,338,536            | 4,320,300 |           | 1,000,000 | 10,658,836 | 21,162,261       |
| 課題2 創薬応用シミュレーション【重点】         | 6,101,898           | 4,400,407 | 1,400,000  | 11,902,305 | 5,339,161            | 4,400,407 | 2,560,000 | 400,000   | 12,699,568 | 24,601,873       |
| 課題3 予測医療に向けた階層統合シミュレーション     | 5,515,177           |           |            | 5,515,177  | 4,825,780            |           |           |           | 4,825,780  | 10,340,957       |
| 課題4 大規模生命データ解析               | 5,515,177           |           | -1,400,000 | 4,115,177  | 4,825,780            |           |           |           | 4,825,780  | 8,940,957        |
| 計算科学推進体制構築<br>(高度化)          | 234,688             |           |            | 234,688    | 205,352              |           |           |           | 205,352    | 440,040          |
| 戦略分野1 合計                     | 23,469,957          | 8,800,814 |            | 32,270,771 | 20,534,609           | 8,720,707 | 2,560,000 | 1,400,000 | 33,215,316 | 65,486,087       |

## ②平成 2 6 年度の利用状況

平成 2 6 年度の上期、下期および通年での利用量、ジョブ数は以下の通りであった（表 2）。

表 2 「京」 利用状況（平成 2 6 年度）

| 課題    | 平成26年度上期      |               |        |       | 平成26年度下期      |               |        |        | 平成26年度通年      |               |       |        |
|-------|---------------|---------------|--------|-------|---------------|---------------|--------|--------|---------------|---------------|-------|--------|
|       | 利用<br>(ノード時間) | 配分<br>(ノード時間) | 使用率    | ジョブ数  | 利用<br>(ノード時間) | 配分<br>(ノード時間) | 使用率    | ジョブ数   | 利用<br>(ノード時間) | 配分<br>(ノード時間) | 使用率   | ジョブ数   |
| 課題1   | 7,816,225     | 10,503,425    | 74.4%  | 1,444 | 10,646,841    | 10,658,836    | 99.9%  | 4,146  | 18,463,066    | 21,162,261    | 87.2% | 5,590  |
| 課題2   | 12,005,714    | 11,902,305    | 100.9% | 1,436 | 12,591,707    | 12,596,158    | 100.0% | 801    | 24,597,421    | 24,498,463    | 100%  | 2,237  |
| 課題3   | 3,375,501     | 5,515,177     | 61.2%  | 1,481 | 4,491,941     | 4,825,780     | 93.1%  | 4,918  | 7,867,442     | 10,340,957    | 76.1% | 6,399  |
| 課題4   | 4,120,246     | 4,115,177     | 100.1% | 895   | 4,845,878     | 4,820,710     | 100.5% | 1,647  | 8,966,124     | 8,935,887     | 100%  | 2,542  |
| 体制構築  | 235,682       | 234,688       | 100.4% | 70    | 191,618       | 204,357       | 93.8%  | 46     | 427,300       | 439,045       | 97.3% | 116    |
| 分野1全体 | 27,553,370    | 32,270,772    | 85.4%  | 5,326 | 32,767,985    | 33,105,841    | 99.0%  | 11,558 | 60,321,353    | 65,376,613    | 92.3% | 16,884 |

## 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、表3）を整備し、2013年3月より運用を開始した。2014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、171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講習会用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）。

ユーザーからの質問、要望への対応も随時行っており、新規ユーザーへの利用に関するサポートやオープンソースソフトウェアの利用支援などを行った。また、大規模な計算を行うユーザーに対しては、適宜必要な計算リソースの割り当てを行って対応している。その他、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。

2014年度はSCLS計算機システムを設置している建屋の工事のため2014年10月から2015年1月初旬まで運用を停止したが、それ以外は常時ジョブが実行されている状況となっており、全稼働時間に対して70%~90%の高い使用率となっている。

表 3 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<br>のメモリ | 32GB (全体<br>1.5TB)    | 16GB (全体<br>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（隔月開催）

- ・スーパーコンピュータ「京」運用懇談会（第3回 2014年6月4日、第4回 2014年10月1日、第5回 2015年3月31日）（宮野グループリーダー参加）

システムの運用に関する事案以外にも、戦略分野1で開発したソフトウェアを「京」で実行するにあたり緊急性の高い事案が発生した場合は、随時ヘルプデスクと連絡をとって対応している。具体的な事案としては、並列処理性能の改善や、高並列処理実行時の異常終了の原因の特定などである。

## II-3 高度化支援の実施

2014年度は、pSpatocyteの高度化を実施した。

### a) pSpatocyte

2014年度上期には、計算時間の大部分を占める拡散処理部に対する改良を行った。同じ拡散速度を持つ化学種を一括して処理することで化学種の数が増加した時に問題となる並列性能低下が著しく改善された。上期から下期にかけてはOpenMPによるスレッド並列化の改良を行った。従来は一般的なcritical構文を用いたアクセス競合回避法を採っていたが、3スレッド以上では並列性能が激しく劣化し実用に耐えなかった。そこで制御の観点をスレッド側からオブジェクト側に移しlock変数を用いる独自の方法を考案した。これをpSpatocyteに実装した結果、8スレッドまで速度向上が可能になった。さらに改良したプログラムを実際に「京」で32768ノードまで実行し、大規模並列時においても有効であることを確認した。また下期には、顕微鏡画像から3次元の細胞構造データを構成する手順を整備し、これを用いて細胞膜・核膜・核小体を考慮した入力データの作成まで行った。

## II-4 利用者講習会の開催

2014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(表4、5)。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。

表 4 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  |
|---------------|-----------------|------|
| CafeMol       | 2014 年 5 月 21 日 | 11 名 |
| $\mu^2$ lib   | 2014 年 7 月 24 日 | 10 名 |
| GHOST-MP      | 2015 年 3 月 20 日 | 6 名  |

表 5 受講者の所属の内訳

|      |      |
|------|------|
| 研究機関 | 6 名  |
| 教育機関 | 13 名 |
| 民間企業 | 8 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 に関連した研究の普及を大学等の研究機関および民間企業の研究者・技術者を対象に、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。

#### 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 ゲノム情報研究センター）

#### 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 26 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 講習会」を行う。広く一般に向けた「HPCI ワークショップ」を開催する（HPCI 戦略プログラム 分野 1 との共催）。

#### 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）ゲノム情報研究センター（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Ⅰ」（2014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（H26年10月17日～H27年1月23日 毎週金曜日14:50～16:30 ただし、11月7日のみ10:30～12:10に変更 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4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（表6）。また、複数の講義をビデオ撮影し、これをもとに新たなe-ラーニング教材を準備中である（表6に e-learning 表示のある講義）。

全12回のHPCIセミナー参加者は延べ413名（うちTV会議システムによる東大側での受講者109名、産総研他地域センターの受講者9名）であった。

表6 HPCI セミナー 講義一覧

| 講義日           | 講師（所属）                                    | 講演題目                                                                                                           |
|---------------|-------------------------------------------|----------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
| 第1回<br>10月17日 | 後藤 真孝（産総研 情報技術研究部門）                       | 音楽情報処理のフロンティア <span style="border: 1px solid black; padding: 0 2px;">e-learning</span>                         |
| 第2回<br>10月25日 | 下平 英寿（大阪大学大学院 基礎工学研究科）                    | ネットワーク構造の統計解析と信頼度計算                                                                                            |
| 第3回<br>10月31日 | 富井 健太郎（産総研 CBRC）                          | 新規アミノ酸置換行列の考案とその効果                                                                                             |
|               | 後藤 修（産総研 CBRC）                            | 真核生物遺伝子構造の進化                                                                                                   |
| 第4回<br>11月7日  | 中津井 雅彦（神戸大学大学院 工学研究科）                     | スーパーコンピュータ「京」を用いた超並列MD計算によるインシリコ・スクリーニング                                                                       |
| 第5回<br>11月14日 | Charles Plessy（理化学研究所 ライフサイエンス技術基盤研究センター） | Single-cell transcriptome analysis<br><span style="border: 1px solid black; padding: 0 2px;">e-learning</span> |
| 第6回<br>11月21日 | 藤渕 航（京都大学 iPS 細胞研究所）                      | 幹細胞インフォマティクス                                                                                                   |
| 第7回<br>12月5日  | 三浦 史仁（九州大学医学研究院 基礎医学部門）                   | DNA メチローム解析                                                                                                    |

|                    |                                                |                                                                                                         |
|--------------------|------------------------------------------------|---------------------------------------------------------------------------------------------------------|
| 第 8 回<br>12 月 12 日 | 津田 宏治（東京大学大学院<br>新領域創成科学研究科 / 産<br>総研 CBRC）    | 生命科学におけるデータマイニング                                                                                        |
|                    | 加藤 和貴（大阪大学 免疫<br>学フロンティア研究センタ<br>ー / 産総研 CBRC） | 多重配列アラインメント                                                                                             |
| 第 9 回<br>12 月 13 日 | 山下 雄史（東京大学 先端<br>科学技術研究センター）                   | 大規模分子動力学計算で見る分子認識と創薬応<br>用への試み <span style="border: 1px solid black; padding: 0 2px;">e-learning</span> |
| 第 10 回<br>1 月 9 日  | 浅井 潔（東京大学大学院<br>新領域創成科学研究科 / 産<br>総研 CBRC）     | RNA 情報解析の新展開                                                                                            |
| 第 11 回<br>1 月 16 日 | 長崎 正朗（東北メディカ<br>ル・メガバンク機構）                     | スーパーコンピュータを用いた数千人の日本人<br>の全ゲノム解析の現状と課題                                                                  |
| 第 12 回<br>1 月 23 日 | 清水 佳奈（産総研 CBRC）                                | 加法準同型暗号を利用したデータベースの秘匿<br>検索                                                                             |
|                    | 藤 博幸（産総研 CBRC）                                 | レトロエレメントの配列解析                                                                                           |

## 2) HPCI ワークショップ／生命医薬情報学連合大会 2014 スポンサーセッション

H26 年度の HPCI ワークショップは、HPCI 戦略プログラム 分野 1 (SCLS) との共催で生命医薬情報学連合大会 2014 のスポンサーセッションとして「生命科学におけるビッグデータマイニング – 医療への実践を目指して」というテーマのもとで開催し、4 件の招待講演を行った。

生命医薬情報学連合大会 2014 は、東北メディカル・メガバンク機構 (ToMMo) の山本雅之機構長が大会長となり、日本バイオインフォマティクス学会 (JSBi)・日本オミックス医療学会・情報計算法学生物学会 (CBI 学会) の 3 学会共催により仙台で開催されたもので、日本において計算機を用いてライフサイエンス研究を行っている研究者が集合する国内最大の大会となる。生命医薬情報学連合大会 2014 全体の参加者は 398 名 (主催者発表)、うち本スポンサーセッションには 121 名の参加者を得ることができた。たいへん盛況となり、計算ライフサイエンスの研究者の間での HPCI への関心の高さを感じることができた。

またスポンサーセッションの終了後には、引き続き生命医薬情報学連合大会 2014 のチュートリアルセッションを開催した。スポンサーセッション、チュートリアルセッションを同時に共催することは我々にはチャレンジングだったが、SCLS と HPCI 人材養成プログラムが同時に注目を浴び、実際に多数の参加者を得ることができたことから、試みは成功したと考えられる。チュートリアルセッションの内容は後述する。



開催日時 10月4日(土) 9:00~10:30 参加者 121名

内容(講演4件、講演順)

1. ビッグデータ解析と R

門田 幸二(東京大学大学院農学生命科学研究科)

2. スーパーコンピュータが実現する大規模メタゲノム機能解析

石田 貴士(東京工業大学大学院情報理工学研究科 計算工学専攻)

3. がんの進化と腫瘍内不均一性を理解するためのゲノム解析とシミュレーション

新井田 厚司(東京大学医科学研究所ヒトゲノム解析センター)

4. 脂肪細胞の遺伝子解析・白色脂肪細胞の寒冷刺激による褐色化の機構解明・

松田 秀雄(大阪大学大学院情報科学研究科 バイオ情報工学専攻)

参照 <https://hpci.cbrc.jp/modules/workshop/index2014.html>

### 3) HPCI 講習会

HPCI 講習会の特徴は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する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。H26年度は、H26年7月よりH27年3月までの期間に、2コース 計10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10~11月、3月の2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(表7)。またウェブページを活用し、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、A-1「Linux, Perl 基礎」はその後のA-2、A-3の2講座の基礎であり、多数のキャンセル待ちが発生した。その多くがLinux利用未経験者だったことから、開催回数を増やして対応した。同様に受講希望者が殺到したB-1、B-2、B-2は各講座でキャンセル待ちを受け付けて対応し、できるだけ欠席による空席を減らすようにした。特にB-2は2日目だけの受講となる場合でも、1日目の実習内容を実行した実習環境を用意して受講希望者を受け入れた。

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約半数を占め(図1)、職種別では研究に従事している受講者が約半数を占めており、全講座で教職員が参加していることがあげられ

る（図 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。また、全講座で医師の参加が一定数以上あったことも印象深かった。実習は配布資料だけでなく実習サイトを立ち上げ、コマンド入力操作が不慣れな受講者もコピー＆ペーストで実行できるようにし、進度のばらつきを抑える工夫をした（表 7）。この実習サイトはどこからでもアクセスでき、受講者が職場や自宅に戻ってからも自習・活用できるようにした。

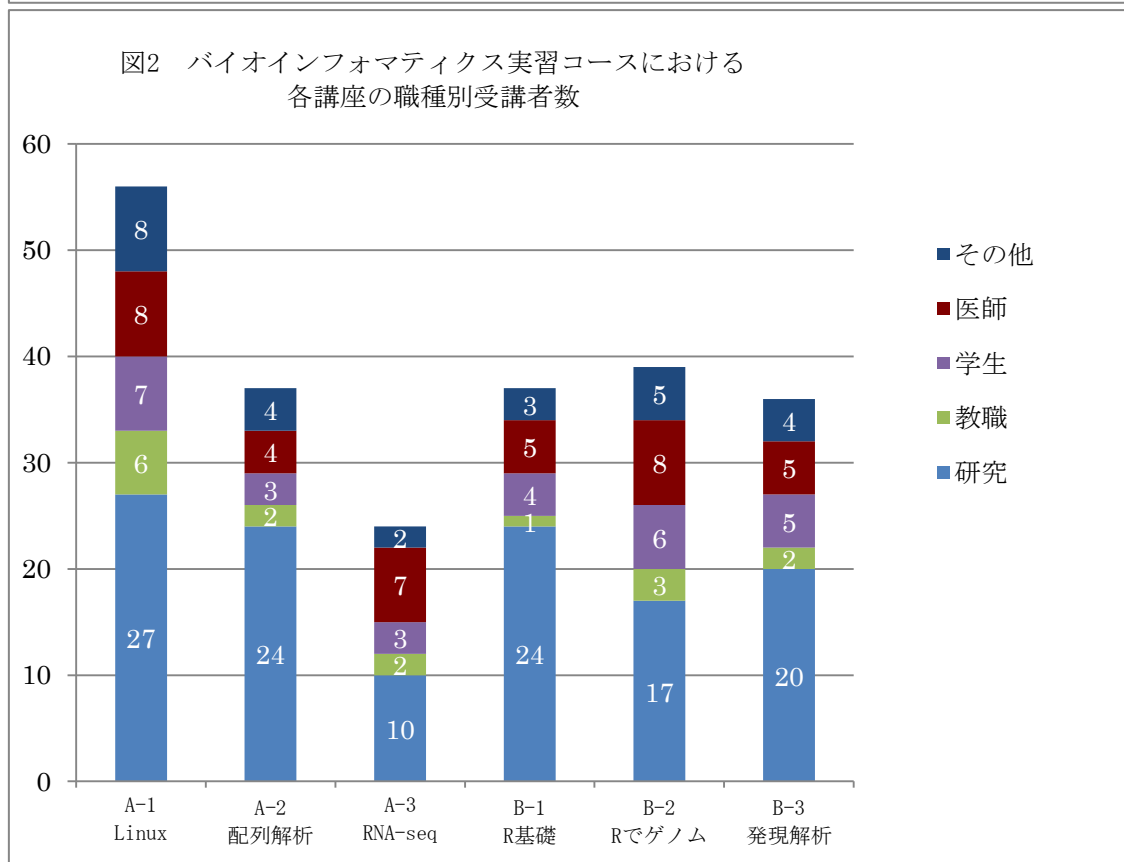
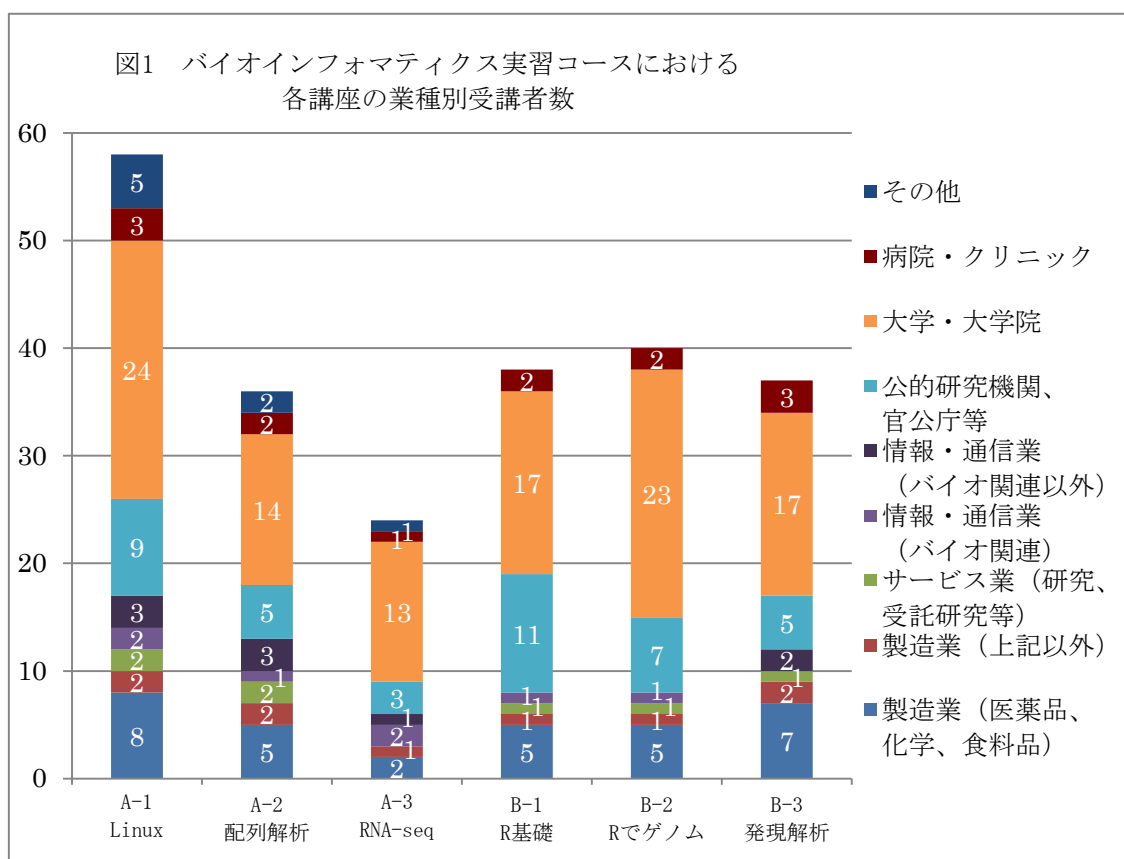
受講者からの感想では「新しいことを色々知ることができて有益だった」「非常に勉強になった。実際のデータを手を動かして扱えるのはとても良い」「所属大学ではバイオフィンフォマティクスに関する授業がほぼないので、とても勉強になった。自分で勉強するきっかけとなった」という者もあり、データ解析への教育ニーズの高さ、本コースの意義を示す結果であると言える。また「資料と Wiki（実習ウェブサイト）がしっかりしていて、復習しやすくて助かります。」という感想からも、受講後まで見据えた実習環境の工夫は良かったと言える。ほとんどの講座で「期待通りだった」「大変参考になった」という声が非常に多く聞かれ、実践講座では「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、大半の講座で 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 3.0～3.89 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 7）。

表 7 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 第 1 回                                      | 水谷 健太郎<br>（産総研 CBRC / 東京大学大学院新領域<br>創成科学研究科） | 10 月 23 日    | 39   | 3.18         | 3.0  |
| A-1 | Linux, Perl 基礎 第 2 回                                      | 水谷 健太郎<br>（産総研 CBRC / 東京大学大学院新領域<br>創成科学研究科） | 10 月 28 日    | 28   | 3.31         | 3.22 |
| A-2 | 配列解析                                                      | 今井 賢一郎（産総研 CBRC）                             | 10 月 29 日    | 40   | 3.89         | 3.81 |
|     |                                                           | 横田 恭宣（株式会社レベルファイブ）                           | 10 月 30 日    |      | 2.68         | 2.35 |
|     |                                                           | マーティン フリス（産総研 CBRC）                          |              |      | 3.61         |      |
| A-3 | ChIP-seq データ解析およ<br>び ENCODE プロジェクト<br>などによる既存のデータの<br>活用 | 須山 幹太<br>（九州大学 生体防御医学研究所）                    | 11 月 5 - 6 日 | 36   | 3.68         | 3.86 |
| B-1 | R 基礎                                                      | 水谷 健太郎<br>（産総研 CBRC / 東京大学大学院新領域<br>創成科学研究科） | 3 月 4 日      | 41   | 3.45         | 3.39 |
| B-2 | R でゲノム・トランスクリ<br>プトーム解析：CpG 解析か<br>ら機能解析まで                | 門田 幸二<br>（東京大学大学院 農学生命科学研究科）                 | 3 月 5 - 6 日  | 43   | 3.63         | 3.55 |

|     |                      |                 |          |    |  |      |
|-----|----------------------|-----------------|----------|----|--|------|
| B-3 | 多変量データ解析／遺伝子ネットワーク解析 | 富永 大介（産総研 CBRC） | 3 月 12 日 | 40 |  | 3.46 |
|     |                      |                 | 3 月 13 日 |    |  | 3.46 |

\*3 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おり、創薬研究の初期探索段階を効率化するための分子モデリング技術を学ぶ「化合物情報概論・実習」とバーチャルスクリーニング技術に焦点をあてた「インシリコスクリーニング概論・実習」の2講座を企画した。各講座は、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、東京会場（C-1、C-2）と大阪会場（C-1\_K、C-2\_K）の2か所で開催した。特論については医薬品開発の現場で活躍する講師を招聘して講義を行って頂き（表8）、大阪会場では特論のみ聴講希望者も受け入れて開催した。

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（図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（図4）。

受講後には「研究業務に役立ちそうな情報がたくさん得ることができた。実際に行われている研究のお話が大変興味深く、おもしろかった」「創薬の現場で用いられる多くの手法を教えて頂き、今後の研究に役立ちそうです」「今までツールとしてしか使っていなかったが、中身の部分を講義してくれて非常に良かった」「興味深い内容だった。勉強したことを今後の仕事に活かしたい」といった感想が寄せられ、実践的な内容であったことや、受講者の満足度の高さが伺えた。

受講後のアンケート結果における理解度については、いずれの講座の講義・実習・特論でも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3.0～3.91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9）。

表 8 特論

| 記号：<br>開催日   | 講師名（所属）                                                                                                                   | 講演タイトル                                    |
|--------------|---------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|-------------------------------------------|
| C-1：<br>8月1日 | 池口 満徳（横浜市立大学）<br>                      | 生命系の分子シミュレーション                            |
| C-2：<br>8月8日 | 本間 光貴（理化学研究所 横浜研究所 生命分子システム基盤研究領域）<br> | タンパク質構造情報とリガンド情報を最大限活用したインシリコスクリーニングを目指して |

|                     |                                                                                                     |                                         |
|---------------------|-----------------------------------------------------------------------------------------------------|-----------------------------------------|
| C-1_K :<br>8 月 22 日 | 白井 剛 (長浜バイオ大学)<br> | タンパク質複合体モデリングの<br>ためのデータマイニング法          |
| C-2_K :<br>8 月 29 日 | 千見寺 浄慈 (名古屋大学)<br> | 非ホモロジーモデリングによる<br>タンパク質立体構造予測の現状<br>と展望 |

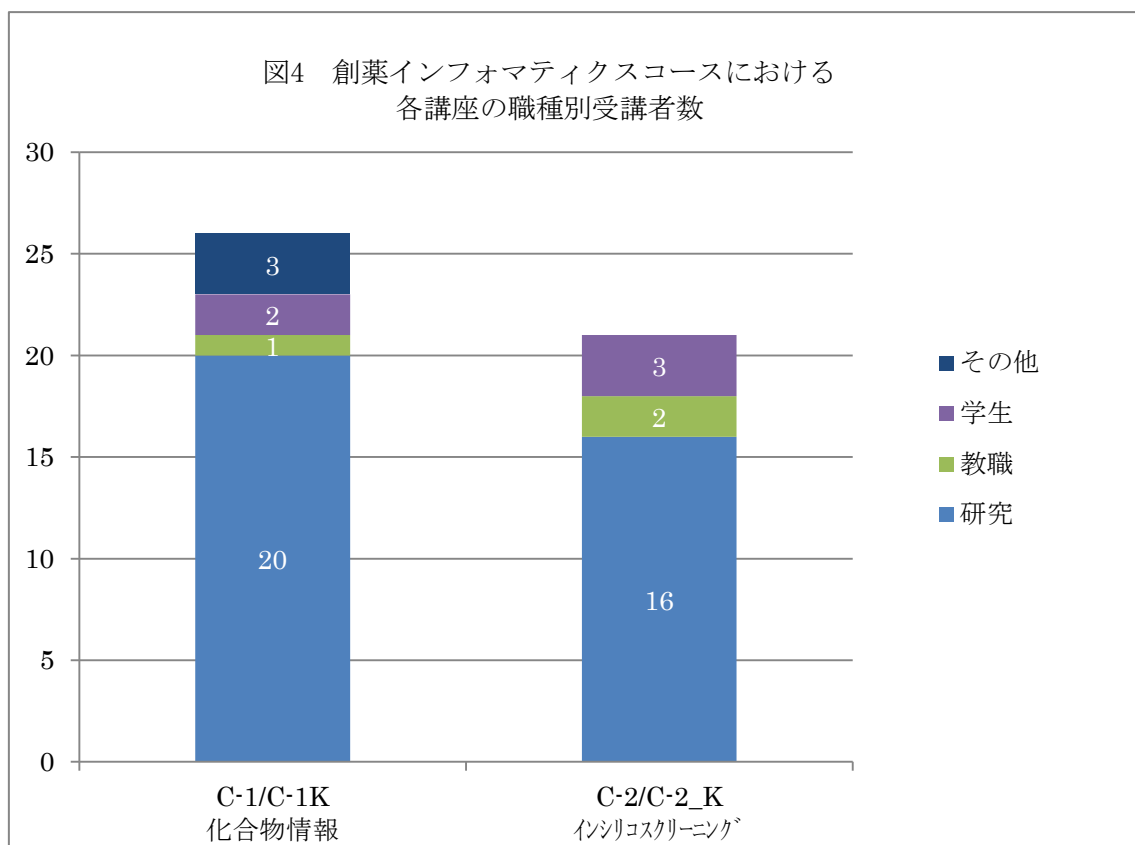
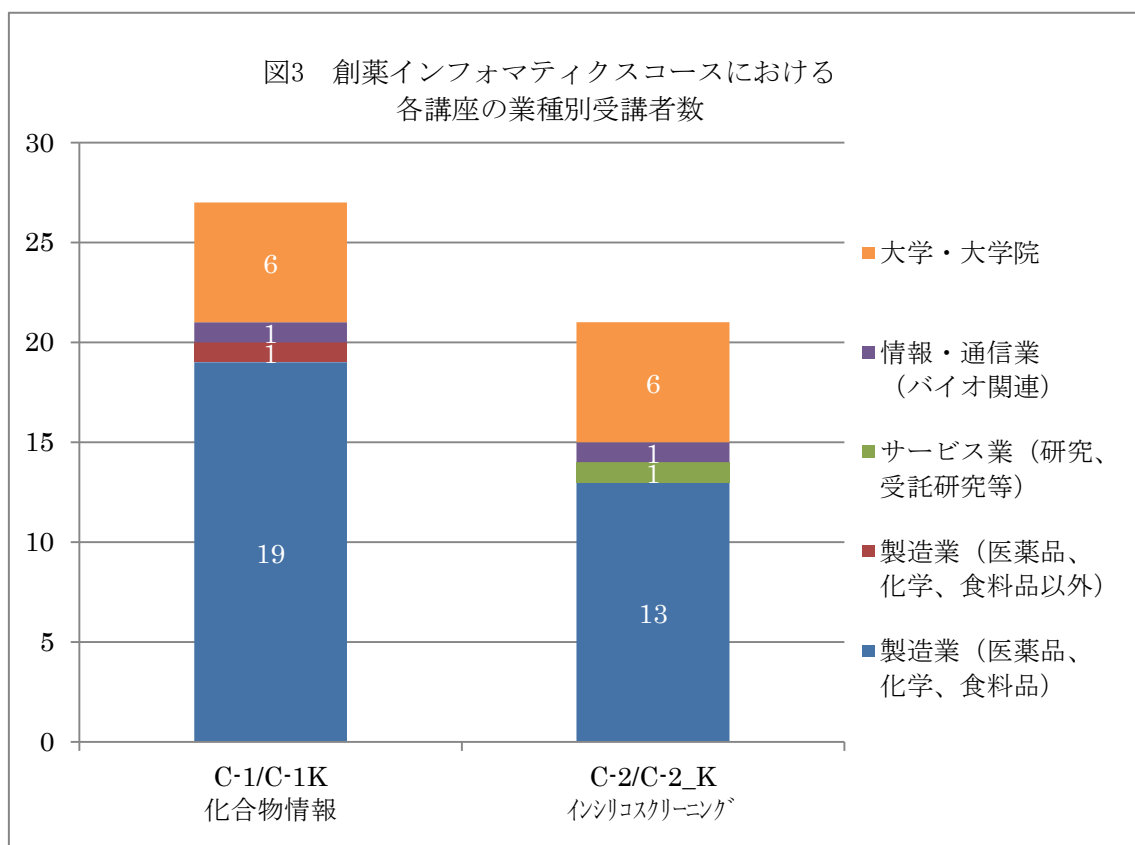




表 9 HPCI チュートリアル 創薬インフォマティクス実習コース 講座一覧および 5 段階評価による理解度アンケート

| 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<br>(産総研 molprof <sup>*1</sup> )<br>池口 満徳 (横浜市立大学)                         | 7 月 31 - 8 月 1 日 | 20   | 3.33       | 3.35 | 3.23 |
| C-1_K | 化合物情報概論・実習 (大阪)            | 広川 貴次<br>(産総研 molprof <sup>*1</sup> )<br>本間 光貴<br>(理化学研究所 横浜研究所 生命分子システム基盤研究領域) | 8 月 21 - 22 日    | 7    | 3.43       | 3.71 | 3.0  |
| C-2   | インシリコスクリーニング<br>概論・実習      | 広川 貴次<br>(産総研 molprof <sup>*1</sup> )<br>白井 剛 (長浜バイオ大学)                         | 8 月 7 - 8 日      | 16   | 3.59       | 3.91 | 3.07 |
| C-2_K | インシリコスクリーニング<br>概論・実習 (大阪) | 広川 貴次<br>(産総研 molprof <sup>*1</sup> )<br>千見寺 浄慈 (名古屋大学)                         | 8 月 28 - 29 日    | 5    | 3.4        | 3.0  | 3.25 |

\*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（他機関との連携による各種講習会の実施）

#### 3-3-1) SCLS との共催による出張講習会

##### 「生命医薬情報学連合大会 2014 チュートリアルセッション」

前述のとおり、HPCI ワークショップとして開催した生命医薬情報学連合大会 2014 スポンサーセッションに続けてチュートリアルを開催した。テーマはスポンサーセッションと関連する「フリーソフト R を用いたビッグデータ解析：塩基配列解析を中心に」であった。会場は机・椅子と無線 LAN 設備だけがある会議室だったため、実習を行うには参加者に PC を持参してもらう必要がある。そのため実習指導を受けたい方は事前に公募し、実習用に各自の PC をセットアップして持参するよう指導した。会場定員 36 席のうち半数は事前準備をすませた受講者用とし、残りは当日の参加希望者に開放した。参加者アンケートでは「当日は、大変興味深いセッションを聞かせていただいたうえに、事前予約をしていなかったのですが、門田先生のハンズオンも飛び込みで受講させていただき、大変有意義に過ごすことができました。」などの意見をいただいた。アンケート結果における理解度については、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 4.58 となり、概ねよく理解できたものと判断した。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。

開催日時 10 月 4 日（土）10:50～12:20 参加者 29 名（うち事前登録 12 名）

講師 門田幸二（東京大学大学院農学生命科学研究科）

会場 仙台国際センター 2 階 小会議室 4



写真 1 ほぼ満席の会場で実習を指導する門田講師

### 3-3-2) SCLS との共催による SCLS 計算機実習会

SCLS との共催による SCLS 計算機システム(京コンピュータ互換スーパーコンピュータシステム)を用いた実習会を 2 回開催し、CBRC では会場提供、広報活動、配布資料の準備などを担当した。

- 2014 年 7 月 24 日「誰にでもわかる拡張サンプリングシミュレーション - 実習編 -」  
講師 寺田 透(東京大学)・森次 圭(横浜市立大学・理化学研究所)  
参加者 10 名
- 2015 年 3 月 20 日「並列配列相同性検索プログラム「GHOST-MP」講習会」  
講師 秋山 泰・石田 貴士・角田 将典(東京工業大学)  
参加者 6 名

### 3-3-3)

9 月 1 日 - 12 日(土日を除く 10 日間)に行われた、科学技術振興機構 NBDC(バイオサイエンスデータベースセンター)と東京大学大学院農学生命科学研究科「アグリバイオインフォマティクス教育研究ユニット」主催の「バイオインフォマティクス人材養成カリキュラム(次世代シークエンサー)速習コース」の広報活動、募集などを共催として担当した。また、講習会には HPCI 人材養成のスタッフが TA として参加し協力した。

### 3-3-4) その他

理化学研究所 情報基盤センター主催の講習会および実習会を協賛し広報活動に協力した。

## 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 67 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(表 10)。

表 10 e-ラーニングコース 一覧

| コース名                          | コンテンツ数 | 合計<br>ビデオ時間 |
|-------------------------------|--------|-------------|
| HPCI セミナー e-ラーニングコース          | 32     | 約 36 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 アドバンスト 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集めている。これまで全ての e-ラーニングコースを講義形式のものだけで作成してきたが、普遍的な内容である実習講座について、初めてビデオ化を試みることにし、バイオインフォマティクス実習コース A-1 「Linux, Perl 基礎」について e-ラーニング化した。

#### 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 年度よりアドバンストコースも公開している。

#### 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。昨年度の HPCI セミナーから林 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）による講義を公開、浜田 道昭講師（講義当時東京大学／現早稲田大学）の講義を e-ラーニング化した。今年度の HPCI セミナーからは後藤 真孝講師（産総研）、山下 雄史講師（東京大学）、浅井 潔講師（東京大学）を e-ラーニング化した。

#### 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 346 名の内訳は以下の通りである（図 5）。昨年に比べると大学院生の受講者数の伸びが大きかった。

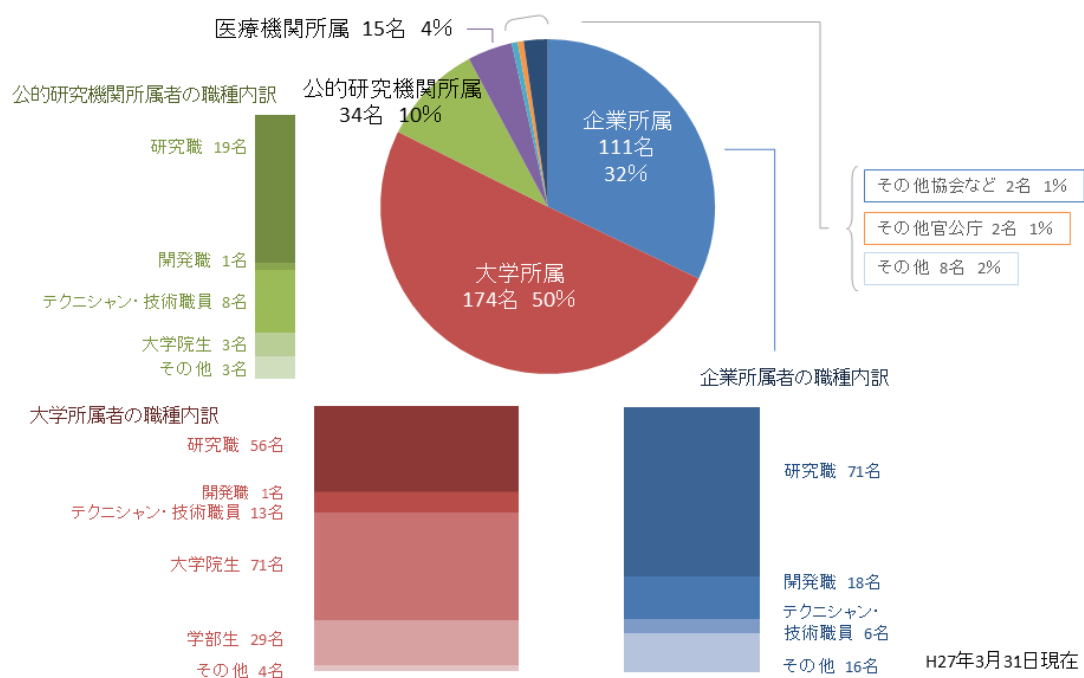


図5 e-ラーニングコース 受講者プロフィール

## 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。

5-1) ホームページの整備 <http://hpci.cbrc.jp/>

5-2) ポスターとリーフレットの作成と配布

ポスター（図6、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（図7、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。



### 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 26 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」を理研 HPCI 計算生命科学推進プログラムとの共催で開催する。

#### 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 11 の通り実施した。受講者数は、大学院学生 9 名、単位取得者 8 名であった。

表 11 バイオシミュレーション特論 講義 12 回および演習 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                                |
|       | 2014 年 11 月 29 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) | コンピューテーショナル生理学                              |
|       | 大阪大学 教授 野村泰伸                                |
|       | 2014 年 11 月 29 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) | 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                                |
|       | 2014 年 12 月 6 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) | 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                                |
|       | 2014 年 12 月 6 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) 新しい薬創りとは  
 大阪大学 特任教授 坂田 恒昭  
 2014 年 12 月 13 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) 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  
 2014 年 12 月 13 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)、14) コンピュータシヨナルバイオメカニクス演習 (骨のバイオメカニクス解析)  
 大阪大学 特任助教 (常勤) 木田直樹  
 2014 年 12 月 20 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
- 15) コンピュータシヨナルバイオメカニクス実習 (血管壁のバイオメカニクス解析)  
 大阪大学 教授 和田成生  
 2014 年 12 月 20 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) コンピュータシヨナルバイオメカニクス実習 (骨再構築シミュレーション)  
 龍谷大学 講師 田原大輔  
 2014 年 12 月 20 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 12 の通り実施した。受講者数は、大学院学生 5 名、単位取得者 5 名であった。

表 12 バイオインフォマティクス 講義 5 回および実習 3 回の詳細

- 1) 計算科学による新しい薬創りとはー創薬の基礎と現状  
 大阪大学 特任教授 坂田恒昭  
 2015 年 1 月 17 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 311
- 2) 計算科学による新しい薬創りとはー計算科学の応用事例  
 大阪大学 特任教授 坂田恒昭  
 2015 年 1 月 17 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 311



- 3) 細胞のシステム生物学と合成生物学 1  
理化学研究所 江口至洋  
2015 年 1 月 17 日 (土) 13 : 45-15 : 15  
大阪大学吹田キャンパス情報科学研究科 B 棟 311
- 4) 細胞のシステム生物学と合成生物学 演習  
理化学研究所 江口至洋、木戸 善之  
2015 年 1 月 17 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 311
- 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  
2015 年 1 月 24 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 311
- 6) 遺伝子ネットワークの情報解析演習  
大阪大学 准教授 竹中要一  
2015 年 1 月 24 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 311
- 7) 並列計算の医療への応用  
大阪大学 教授 萩原謙一、准教授 伊野 文彦  
2015 年 1 月 24 日 (土) 13 : 45-15 : 15  
大阪大学吹田キャンパス情報科学研究科 B 棟 311
- 8) 並列計算の医療への応用 演習  
大阪大学大学院情報科学研究科 置田 真生  
2015 年 1 月 24 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 311
- =====

### 3) バイオシミュレーション入門に関する基礎セミナー

学部初年度学生を対象とした、生体・生命における諸現象のコンピュータ上での実現と、コンピュータシミュレーションを通じた生体・生命現象の理解と予測へのアプローチについて学ぶ入門科目として、基礎セミナー「バイオインシミュレーション入門（2単位）」を表13の通り実施した。受講者数は理学部、薬学部、基礎工学部からの3名、単位取得者3名であった。

表13 バイオシミュレーション入門 講義12回の詳細

---

#### 1) ガイダンスとイントロダクション

大阪大学 教授 和田成生

2014年10月10日（金）16:20-17:50

大阪大学豊中キャンパス基礎工学A棟A338室

#### 2) シミュレーションと数学モデル

大阪大学 教授 田中正夫

2014年10月24日（金）16:20-17:50

大阪大学豊中キャンパス基礎工学A棟A338室

#### 3) 成長・減衰のモデルと間欠的投薬問題

大阪大学 教授 田中正夫

2014年11月7日（金）16:20-17:50

大阪大学豊中キャンパス基礎工学A棟A338室

#### 4) 骨密度と血中ミネラル濃度

大阪大学 教授 田中正夫

2014年11月14日（金）16:20-17:50

大阪大学豊中キャンパス基礎工学A棟A338室

#### 5) 生体力学シミュレーションによる医療支援

大阪大学 教授 和田成生

2014年11月21日（金）16:20-17:50

大阪大学豊中キャンパス基礎工学A棟A338室

#### 6) 生体システムで観測されるカオス

大阪大学 教授 野村泰伸

2014年11月28日（金）16:20-17:50

大阪大学豊中キャンパス基礎工学A棟A338室

#### 7) 蛋白質の分子シミュレーション

大阪大学 招へい准教授 神谷 成敏

2014年12月5日（金）16:20-17:50

大阪大学豊中キャンパス基礎工学 A 棟 A338 室

8) 蛋白質の立体構造と電気的性質

大阪大学 教授 中村春木

2014 年 12 月 12 日 (金) 16:20-17:50

大阪大学豊中キャンパス基礎工学 A 棟 A338 室

9) 弾性ネットワークモデル：基礎と生体への応用

大阪大学 教授 和田成生

2014 年 12 月 19 日 (金) 16:20-17:50

大阪大学豊中キャンパス基礎工学 A 棟 A338 室

10) サークロディアンリズムと非線形結合振動子

大阪大学 教授 野村泰伸

2015 年 1 月 9 日 (金) 16:20-17:50

大阪大学豊中キャンパス基礎工学 A 棟 A338 室

11) スパコンを使いこなす流体構造連成法

大阪大学 教授 杉山和靖

2015 年 1 月 23 日 (金) 16:20-17:50

大阪大学豊中キャンパス基礎工学 A 棟 A338 室

12) 「京」を使った血流シミュレーション

大阪大学 教授 杉山和靖

2015 年 1 月 30 日 (金) 16:20-17:50

大阪大学豊中キャンパス基礎工学 A 棟 A338 室

4) 創薬・医療の産学連携セミナー

第 7 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

2014 年 10 月 17 日 (金) 13:00 - 17:10

梅田センタービル 16 階 E 会議室 (大阪市北区)

第 8 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

2014 年 12 月 5 日 (金) 13:00-16:45

ステーションカンファレンス東京 503 (東京都千代田区)

を企画・実施した。詳細は図 8 および 9 の通りであり、それぞれの参加者数は、80 名、94 名であった (写真 2)。

## 第7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：2014年10月17日（金）13:00-17:10

場 所：梅田センタービル 16階 E会議室 （大阪市北区中崎西2丁目4番12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HPCI計算生命科学推進プログラム、  
大阪大学臨床医工学融合研究教育センター



### ポスト「京」への期待

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）

13:00-13:05 はじめに 田中正夫（大阪大学 大学院基礎工学研究科 教授）

13:05-13:55 ポスト京コンピュータ開発概要

理化学研究所 計算科学研究機構 チームリーダー  
筑波大学 計算科学研究センター 教授 佐藤 三久 氏

13:55-14:45 生命科学における計算と「京」とその先

理化学研究所 HPCI計算生命科学推進プログラム 副プログラムディレクター  
横浜市立大学 生命医科学研究所 教授 木寺 詔紀 氏

15:00-15:50 全脳シミュレーションに向けて：大規模計算技術と大規模構造マップ

京都大学 大学院情報科学研究科 教授 石井 信 氏

15:50-16:40 High Performance Computing は創薬の救世主になりうるか  
－ ポスト「京」への期待 －

塩野義製薬株式会社 フロンティア医薬研究所 所長 塩田 武司 氏

16:40-17:00 クロージングリマーク

大阪大学 蛋白質研究所 所長 中村 春木 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](mailto:hpci@me.es.osaka-u.ac.jp)

図 8 第7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8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：2014年12月5日（金）13:00-16:45

場 所：ステーションコンファレンス東京 503

（東京都千代田区丸の内1-7-12 サピアタワー5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、  
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



### ビッグデータのライフサイエンスへの応用

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 はじめに 田中正夫（大阪大学 大学院基礎工学研究科 教授）

13:10-14:00 ビッグデータのゲノムオミックス医療への応用

東京医科歯科大学 難治疾患研究所 生命情報学分野 教授 田中 博

14:00-14:50 未来医療に向けたスーパーコンピュータの活用

富士通株式会社 未来医療開発センター エグゼクティブリサーチャー 松本俊二

15:05-15:55 any data の統計解析

塩野義製薬株式会社 グローバル医薬開発本部 解析センター 藤原正和、豊泉樹一郎

15:55-16:45 ビッグデータを用いた疫学研究とアメリカ臨床研究における  
臨床研究IT支援システム

大阪大学 大学院医学系研究科 臨床統計疫学寄付講座 教授  
未来医療開発部データセンター 副センター長 新谷 歩

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](mailto:hpci@me.es.osaka-u.ac.jp)

図9 第8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



(大阪会場)



(東京会場)

写真2 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



### 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、神戸大学計算科学教育センターと連携し、生命科学と理工学の接点をなす計算生命科学の基礎の講義配信を実施する。

#### A 実施内容（成果）

##### Ⅲ－２－１ 大学・大学院での講義およびセミナーの実施

###### （１）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が仲介する生物学と物理学、化学、数学の融合を例に』（2014年6月20日、6月27日）

開催場所：神戸大学発達科学部（兵庫県）

講師：江口至洋（理化学研究所 HPCI 計算生命科学推進プログラム、副プログラムディレクター）

参加者：学部１年生、314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、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。

###### （２）神戸大学連携講座 大規模シミュレーション概論Ⅱ

「第２回 分野１ 予測する生命科学・医療及び創薬基盤」（2014年10月9日）

開催場所：神戸大学大学院システム情報学研究科

講師：木寺詔紀（理化学研究所 HPCI 計算生命科学推進プログラム副プログラムディレクター）

###### （３）大阪大学臨床医工学・情報学スキルアップ講座

「細胞のシステム生物学と合成生物学」（2015年1月17日）

開催場所：大阪大学大学院情報科学研究科

講師：江口至洋（理化学研究所 HPCI 計算生命科学推進プログラム副プログラムディレクター）

###### （４）遠隔インタラクティブ講義『「計算生命科学の基礎」生命科学と理工学の接点から社会への応用まで』（2014年10月7日～2015年2月3日）

開催場所：神戸大学工学部（学外からはWebEX、ポリコムによる受講可能）

主催：神戸大学計算科学教育センター

共催：理化学研究所 HPCI 計算生命科学推進プログラム

受講登録者数 262 名（大学生・大学院生：31 大学 75 名、民間企業：80 社 187 名）

神戸大学計算科学教育センターと連携し、「ゲノムから見る生命科学」、「タンパク質から見る生命科学」、「医療・創薬における計算生命科学」の 3 編からなる 15 回の配信講義を実施した（図 9、10；表 14）。計算生命科学を体系的にかつ最新分野について講義を受けることができたと多くの感想が寄せられ好評であった。



図 9 ポスター

表 14 「計算生命科学の基礎」 講義 15 回の詳細

|                       |                                                                  |
|-----------------------|------------------------------------------------------------------|
| 10 月 7 日（火）           | はじめに：計算生命科学の概要<br>江口至洋（理化学研究所 HPCI 計算生命科学推進プログラム、副プログラムディレクター）   |
| 第 1 編 ゲノムから見る生命科学     |                                                                  |
| 10 月 14 日（火）          | 1.1 ゲノムに記された大規模生命情報の解析<br>奥野恭史（京都大学大学院医学研究科、教授）                  |
| 10 月 21 日（火）          | 1.2 バイオメディカル・インフォマティクス<br>奥野恭史（京都大学大学院医学研究科、教授）                  |
| 10 月 28 日（火）          | 1.3 遺伝子ネットワーク解析：遺伝子間の相関と因果関係を見る<br>土井淳（株式会社セルイノベーター研究開発部、部長）     |
| 11 月 4 日（火）           | 1.4 細胞のシステム生物学<br>江口至洋（理化学研究所 HPCI 計算生命科学推進プログラム、副プログラムディレクター）   |
| 第 2 編 タンパク質からみる生命科学   |                                                                  |
| 11 月 11 日（火）          | 2.1 計算生命科学のための量子化学基礎<br>佐藤文俊（東京大学生産技術研究所、教授）                     |
| 11 月 18 日（火）          | 2.2 タンパク質の量子化学計算<br>福澤薫（日本大学松戸歯学部、助教）                            |
| 11 月 25 日（火）          | 2.3 分子動力学計算と生体高分子の機能解析：タンパク質の動的構造と機能<br>中津井雅彦（神戸大学大学院工学研究科、特命助教） |
| 12 月 2 日（火）           | 2.4 分子動力学計算における拡張サンプリングシミュレーション<br>中津井雅彦（神戸大学大学院工学研究科、特命助教）      |
| 12 月 9 日（火）           | 2.5 タンパク質の生物学的機能と化学反応<br>林重彦（京都大学大学院理学研究科、教授）                    |
| 第 3 編 医療・創薬における計算生命科学 |                                                                  |



|           |                                                                                                |
|-----------|------------------------------------------------------------------------------------------------|
| 12月16日（火） | 3.1 創薬におけるビッグデータ<br>都地昭夫（塩野義製薬株式会社解析センター、グループ長）<br>北西由武（塩野義製薬株式会社解析センター、サブグループ長）               |
| 1月13日（火）  | 3.2 創薬における計算生命科学：分子動力学計算を中心に<br>広川貴次（産業技術総合研究所創薬分子プロファイリング研究センター、研究チーム長）                       |
| 1月20日（火）  | 3.3 創薬における計算生命科学：量子化学計算を中心に<br>福澤薫（日本大学松戸歯学部、助教）                                               |
| 1月27日（火）  | 3.4 医療におけるビッグデータ<br>田中博（東京医科歯科大学大学院 疾患生命科学研究部、教授）                                              |
| 2月3日（火）   | 3.5 医療における計算生命科学：不整脈における心臓興奮伝播現象を中心に<br>中沢一雄（国立循環器病研究センター研究所、室長）<br>稲田慎（国立循環器病研究センター研究所、特任研究員） |

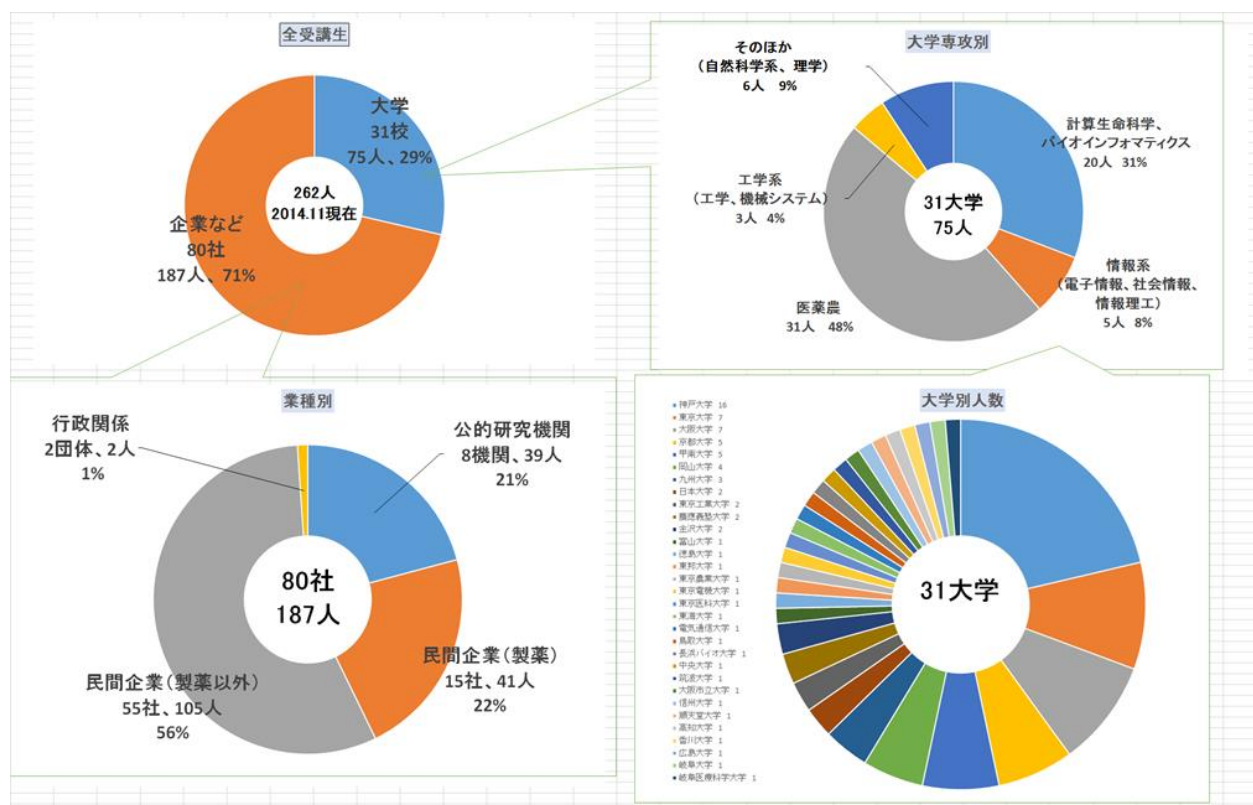


図 10 「計算生命科学の基礎」 受講登録者の内訳

### Ⅲ－２－２ 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) 平成 26 年度沖縄県高等学校物理教育研究会 (11 月 7 日)

開催場所：健康文化村 カルチャーリゾト カルチャーリゾト フェストーネ (沖縄県)

講演：「ロボットの学習と脳科学」

講師：銅谷賢治 (沖縄科学技術大学院大学先行的研究事業神経計算ユニット)

参加者数：20 名

SCLS では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 の研究活動である脳神経ネットワークのシミュレーションについて紹介した。スーパーコンピュータ「京」を用いてヒトの脳の構造を数理的なアプローチで解明しているということに感銘され、授業を通して高校生に最先端の意研究がどのように行われ、その研究を行う上で様々な分野の研究者が統合的に取り組んでいることを話すきっかけになると感じた高校教員らからの感想が寄せられた。

##### 2) 岡山県立玉島高等学校 (12 月 13 日)

開催場所：岡山県立玉島高等学校 (岡山県)

主催：岡山県立玉島高等学校

講義：『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 33 名

アミノ酸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。講義後の感想文の中でもスーパーコンピュータや生命科学に関する質問が多く寄せられ関心の高さがうかがえた。



写真 3 講義の様子

#### (2) 高校生を対象とした科学イベント等への出展

##### 1) 第 7 回サイエンスフェア in 兵庫 (2015 年 2 月 1 日)

開催場所：神戸国際展示場 (兵庫県)

主催：兵庫「咲いテク」事業推進委員会

参加者数：高校 兵庫県内 39 校、県外（大阪）2 校、参加生徒 1147 名、企業・大学・研究機関等 181 名、一般参加（見学） 164 名、来賓 13 名

科学技術分野の研究活動に取り組む高校生の発表の場であり、研究・開発に取り組む企業、研究機関との交流や若者の科学技術分野への期待と憧れの増大を図ることを狙いとして行われている。

神戸地区、播磨地区の研究 6 拠点（CDB、CLST、QBIC、Spring・8、AICS、SCLS）が出展した。

SCLS では展示のほかに前年度も実施したサイエンスカフェ『おしえてセンパイ「理系進路と大学生活」』の規模を拡大し、高校生らの研究意欲を高め、科学技術関係への進路希望へ導くことに貢献した。

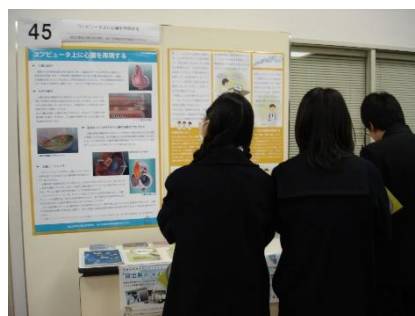


写真 4 サイエンスカフェの様子

## 2) 第 38 国高等学校総合文化祭いばらき大会自然科学部門（2014 年 7 月 28 日～31 日）

開催場所：つくば国際会議場（茨城県）

参加者数：525 名

33 都道府県 163 校の代表校から 525 名の高校生が科学技術に関する研究発表、ポスター発表を行った。SCLS は『生命のしくみを「京」で再現—人体の複雑さに挑み、新しい医療をめざす—』のパネルを展示した。高校生らは研究内容について丁寧にパネルを読んでいた。次回開催地の実行委員の高校教員からは、第 39 回全国高等学校総合文化祭びわこ大会における展示の要請を受けた。



写真 5 パネル展示の様子

3) 第 61 回岩手県高等学校理科学研究発表会並びに第 37 回岩手県高等学校総合文化祭自然科学部門発表会 (2014 年 12 月 10 日)

開催場所：岩手県立総合教育センター (岩手県)

参加者：教員 41 人、高校生 188 人

第 38 回全国高等学校総合文化祭いばらき大会自然科学部門に見学に来られていた岩手県の事務局の教員より、高校生への科学技術啓蒙のために当時と同じパネル展示の要請がありパネルの貸し出し展示を行った。最先端の科学にふれることができたという声が多かったとの感想が寄せられた。

#### 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 26 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・セミナーなどを行う。また、大学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 (2014 年 6 月 13 日)

『生命科学に取り組む異分野の融合と交流の推進 第 3 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。本年度開催のシンポジウムでは、5 名のシンポジストにより、「京」を利用、または利用を想定した計算科学と生命科学の境界領域での最新の取り組みについて講演が行われた。講演者と大学研究者によるパネルディスカッションでは、計算科学、生命科学にとどまらず、現在の日本における科学のあり方、科学教育にまでわたり畏憚なき意見交換がなされた。

また、中国・四国地域のスーパーサイエンスハイスクール指定高校 (SSH 高校、3 校) によるポスター発表も開催し、各高校の取り組みと研究について高校生が紹介し、研究者や大学院生を交えた自由で活発な討論が行われた。

高校生から教員や研究者、さらには一般まで幅広い分野からの参加者が集ったことから、計算科学と生命科学の融合領域が、今後のサイエンスの研究領域として、

如何に注目されているか、さらには一般から如何に大きな期待を寄せられているかを実感したシンポジウムであった。

参加者数： 160 名

(2) 九州大学シンポジウム (2014 年 9 月 16 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、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：DNA シークエンサーなどの計測技術の進歩もあり、個々人のゲノムの塩基配列データが臨床現場で日常的に活用される時代もそう遠くない未来のこととして語られてきている。

世界的動向としては、ゲノム情報だけでなく、臨床情報をも含めた医療ビッグデータをいかに構築し、いかに臨床現場で活用していくかが大きな課題となってきた。その課題に取り組むためには、計算生命科学者を含む生命科学者と医療現場で医療を支えられている医療者との幅広い連携が重要となっている。

本年度開催のシンポジウムでは、スーパーコンピュータ「京」に続く、次世代のスーパーコンピュータの開発計画について現状を紹介した。そして、ゲノム情報をいかに読み解くか、医療現場で医療ビッグデータをいかに構築し、活用していくのかを、東北メディカル・メガバンク機構、京大病院 Cancer Biobank & Informatics プロジェクト、そして九州地方における大規模医療情報データベースという医療現場での取り組みを踏まえ、意見交換を行った。

参加者数：約 90 名

(3) 第 14 回日本蛋白質科学会年会 (2014 年 6 月 25 日～27 日)

ランチョンセミナー 「スーパーコンピューティング創薬—これまでとこれから—」

開催場所：ワークピア横浜 3 階いちょう (神奈川県)

大会主催：日本蛋白質科学会

参加者数：100 名

趣旨と内容：創薬研究者が多い日本蛋白質科学会においてスーパーコンピュータ「京」のような大規模計算機でのシミュレーションを利用した創薬研究に携わる研究者は少数派である。スーパーコンピュータ「京」、次世代スーパーコンピュータの振興を図り、創薬にハイパフォーマンスコンピューティング及びスーパーコンピュータ「京」が大きく寄与できる可能性を伝えることを目的とし、スーパーコンピュータ「京」の利用者による実際の研究事例を紹介した。

(4) 第 52 回日本生物物理学会年会 (2014 年 9 月 25 日～27 日)

ランチョンセミナー

「スーパーコンピューティング—計算科学と情報科学の接点—生命科学と計算科学がみる未来」

開催場所：札幌コンベンションセンター (北海道)

大会主催：日本生物物理学会

参加者数：100 名

趣旨と内容：近年、生物学の世界では、ゲノム情報に加えて計測技術の飛躍的進歩により個体レベルから一細胞レベルまで、日常的に莫大な実験データが蓄積されてきている。今、情報科学ではそれらビッグデータから効果的に知識を取り出す必要に迫られている。これらの必要性にこたえていく一つの手段としてスーパーコンピューティングが考えられる。セミナーでは計算科学と情報科学の接点における最新の研究成果と将来の方向性について紹介した。

(5) 第 3 回生命医薬情報学連合大会 (2014 年 10 月 2 日～4 日)

オーガナイズドセッション

「生命科学におけるビッグデータマイニング—医療への実践を目指して」

チュートリアルセッション

「フリーソフト R を用いたデータ解析：塩基配列解析を中心に—ソフトウェア R (Ver. 3.1.0) と Bioconductor (Ver. 2.14) を用いた実習中心の講習会—」

開催場所：仙台国際センター (宮城県)

大会主催：日本バイオインフォマティクス学会、オミックス医療学会、情報計算科学生物学会

参加者数：スポンサーセッション：121 名、チュートリアルセッション：29 名

趣旨と内容：ゲノム・ビッグデータに見られる大規模な医療情報化の流れに対応した新たな医療基盤の構築を目標に掲げ、医療現場で貢献できる研究基盤としてスーパーコンピュータ「京」を中心とする HPCI が果たす役割を明らかにするため—医療への実践を目指して—と題して、ビッグデータ解析と医療に焦点を当てた研究成果を発表した。また、ハイパフォーマンスコンピュータ応用の振興を目指し、次世代シーケンサーデータの解析をする講習会を実施した。

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 2014 ブース展示 (2014 年 10 月 15-17 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 2014 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、17 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 30 ヶ国・地域を超える 750 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、海外機関などのビジネス関係者から一般まで幅広い来場者があった。

参加者数：延べ 12,734 名

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

- ・筑波地区（2014 年 4 月 18 日）

SCLS の研究内容を紹介した一般向けパネル展示。

- ・和光地区（2014 年 4 月 19 日）

SCLS の研究内容を紹介した一般向けパネル展示と成果動画の上映。

- ・播磨地区（2014 年 4 月 27 日）

SCLS の研究内容を紹介した一般向けパネル展示。

- ・横浜地区（2014 年 9 月 6 日）

SCLS の研究内容を紹介した一般向けパネル展示と成果動画の上映。

- ・神戸地区（2014 年 10 月 25 日）

神戸第 2 地区一般来場者数 2,500 人。

SCLS の研究紹介パネル『生命のしくみを「京」で再現—人体の複雑さに挑み、新しい医療をめざす—』の展示と生命の階層システムについてイラストで分かりやすく理解できるペーパークラフトを実施。紙 1 枚からできるからくりペーパークラフトの工作は親子の参加が多かった。ペーパークラフトは 280 枚の体験があった。マルチスケール・マルチフィジックス心臓シミュレータ UT-Heart の動画の上映も行った。



写真 6 神戸地区一般公開の様子

(3) サイエンスアゴラ 2014 (2014 年 11 月 7 日-9 日、日本科学未来館)

開催場所：日本科学未来館 (東京都)

主催：独立行政法人科学技術振興機構

参加者数：10,142 名

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が東京・お台場で3日間行われ、来場者数は7,378人、出展者を含めると10,142人が参加した。

理研神戸地区からは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3センターが合同で出展した。

それぞれのセンターが生命科学分野の研究成果をパネルや映像を使ってわかりやすく紹介した。SCLS はマルチスケール・マルチフィジックス心臓シミュレータの紹介パネル展示と UT-Heart の動画を上映した。会場は家族連れや理科に関心のある小中学生、研究に興味のある高校生、大学生、他分野の研究者や学校教員など幅広い来場者でにぎわっていた。

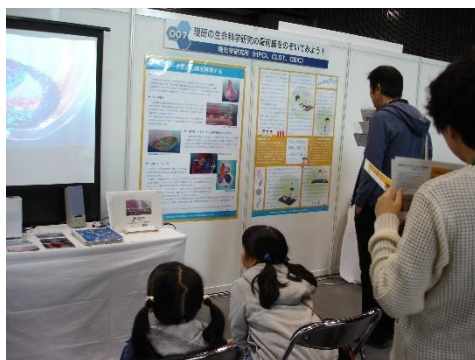


写真7 サイエンスアゴラの様子

(4) SC14(Supercomputing Conference 2014)ブース展示 (2014 年 11 月 16-21 日)

開催場所：Ernest N. Morial Convention Center (ニューオリンズ、USA)

趣旨と内容：ハイパフォーマンズ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 26 回目となる。計算科学研究機構と 5 分野が協力し、「京」成果を中心に、利活用に関する情報や取り組みについて紹介するブースを出展した。4 回目となる今回は「京」の成果、「京」のシステム、ポスト「京」に向けた展望を軸として、ポスター展示やショートレクチャー、成果動画の上映がなされた。

参加者数：延べ 11,000 人



(5) 第27回「理化学研究所と産業界との交流会」(2015年2月17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31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のパネルや映像を展示し、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。

パネル名：エネルギー消費に貢献する褐色脂肪細胞の機能の解明と制御に向けて

参加者数：457名

(6) サイエンスカフェ神戸/対話型パブコメ「次のスパコンポスト『京』の『使い方』を考える」(2014年5月2日)

開催場所：神戸大学統合研究拠点

主催：神戸大学サイエンスショップ

参加者：20名

ゲスト：江口至洋（理化学研究所 HPCI 計算生命科学推進プログラム、副プログラムディレクター）

講演：「スーパーコンピュータの過去、現在、未来」

神戸大学サイエンスショップとPESTI（JST/RISTEX 科学技術イノベーション政策のための科学研究開発プログラム「STI（科学技術イノベーション）に向けた政策プロセスへの関心層別関与フレーム設計」）の共催により、スパコンを使ってどのような社会の課題、科学の問題に取り組むべきか、文部科学省が求めているパブリックコメントについてゲストの話をききながら参加者同士が話し合い考えるという対話型ワークショップが開催された。

(7) 子ども霞が関見学デー（2014年8月6日、7日）

開催場所：文部科学省第一講堂（東館3F）

主催：文部科学省

参加者数：

「子ども見学デー」は、文部科学省をはじめとした府省庁等が連携して、業務説明や省内見学などを行うことにより、親子のふれあいを深め、子どもたちが夏休みに広く社会を知る体験活動の機会として実施しており、研究機関などにおいても同様の趣旨で展示することとなっている。SCLSは計算科学研究機構と連携し、スーパ

ーコンピュータってなんだろう？どんなことができて、どんなところにつかわれているの？と問いかけ、「京」の紹介を通じて、スーパーコンピュータの概要や最先端の研究成果をポスター、映像、ゲーム体験を通して紹介した。



写真8 「子供見学デー」の様子

(8) 文部科学省東館2階エントランス広報スペース展示(2015年1月31日～4月22日)

開催場所：文部科学省2階エントランス広報スペース(東京都)

スーパーコンピュータ「京」を使って研究が進められている計算生命科学の世界とその研究活動についてわかりやすく紹介した『生命のしくみを「京」で再現—人体の複雑さに挑み、新しい医療をめざす—』のパネル展示を実施し、文部科学省を訪れる科学技術や教育関係者の方々にも広く紹介することができた。



写真9 文部科学省2階エントランス広報スペースの様子

(9) バイオスーパーコンピューティング東北2014(2014年6月2日)

開催場所：東北大学 流体化学研究所

口頭発表：予測する生命科学・医療および創薬基盤「京」を用いた計算生命科学

演者：木寺詔紀(理化学研究所 HPCI 計算生命科学推進プログラム、副プログラムディレクター)

- (10) 第 52 回 C B I 学会研究講演会「H P C の創薬・医療分野への応用における成果と今後の展望」(2014 年 7 月 11 日)

開催場所：東京大学山上会館

口頭発表：「H P C の生命科学へのインパクト」

演者：木寺詔紀（理化学研究所 HPCI 計算生命科学推進プログラム、副プログラムディレクター）

- (11) 学術フォーラム「生命情報ビッグデータ時代における新しい生命科学」(2014 年 8 月 29 日)

開催場所：日本学術会議講堂

主催：日本学術会議

口頭発表：スパコンを用いたビッグデータ解析の生命科学における役割

演者：木寺詔紀（理化学研究所 HPCI 計算生命科学推進プログラム、副プログラムディレクター）

#### 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) 2014 年度 1 期利用公募委員会（2014 年 3 月 14 日）

採択課題 5 件： 利用期間 2014 年 4 月 1 日～2015 年 3 月 31 日

- ・「電子状態計算に立脚した構造ベース創薬支援技術プラットフォームの構築」（課題代表者：田中成典、神戸大学システム情報学研究科）
- ・「緑色蛍光蛋白質の蛍光機構等の解明および機能改変を目指した大規模並列マルチレベル分子動力学シミュレーションプログラムの開発整備」（課題代表者：米澤康滋、近畿大学先端技術総合研究所）
- ・「分子動力学計算を用いたアロステリック部位の探索」（課題代表者：鷹羽健一郎、旭化成ファーマ株式会社）

- ・「エピゲノミクスとトランスクリプトミクスを統合した精神神経系疾患診断系の開発」（課題代表者：石井一夫、東京農工大学農学府農学部）
  - ・「アンチセンス核酸配列設計を指向した mRNA 三次元構造予測」（課題代表者：高木達也、大阪大学大学院薬学研究科）
- 利用者数：22 名（うち民間企業：4 名）

2) 2014 年度 2 期利用公募委員会（2014 年 8 月 8 日）

採択課題 3 件： 利用期間 2014 年 9 月 1 日～2016 年 1 月 31 日

※建屋の工事にともない SCLS 計算機システムが 2014 年 10 月～2015 年 1 月初旬まで運用を停止するため、2015 年度終わりまでを利用期間としている

- ・「変性状態における蛋白質構造の MD シミュレーション」（課題代表者：油谷克英、理化学研究所放射光科学総合研究センター）
  - ・「腓ランゲルハンス島の遺伝子ネットワーク推定」（課題代表者：南茂隆生、国立国際医療研究センター研究所）
  - ・「ドッキングと分子動力学シミュレーションを組み合わせた効率的バーチャルスクリーニング法の開発」（課題代表者：妹尾昌治、岡山大学大学院自然科学研究科）
- 利用者数：4 名（うち民間企業 0 名）

2013 年度からの継続利用課題 17 件を含め、2015 年 3 月 31 日時点に於いて利用課題 25 件、利用者数 122 名（うち民間企業 33 名）。うち、16 課題が 2015 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（表 15）。

表 15 講習会一覧

|   |                                |                     |
|---|--------------------------------|---------------------|
| 1 | 2014 年 5 月 21 日 <sup>1)</sup>  | （理化学研究所、和光）         |
|   | CafeMol 講習会                    | 参加者：13 名            |
| 2 | 2014 年 7 月 24 日                | （産業技術総合研究所、東京）      |
|   | $\mu^2$ lib 実習会                | 参加者：10 名            |
| 3 | 2014 年 9 月 5 日 <sup>1)</sup>   | （東京大学生産技術研究所、東京）    |
|   | ProteinDF 講習会                  | 参加者：11 名            |
| 4 | 2014 年 10 月 24 日 <sup>1)</sup> | （横浜市立大学、横浜）         |
|   | MARBLE-K 講習会                   | 参加者：11 名            |
| 5 | 2014 年 12 月 11 日 <sup>1)</sup> | （理化学研究所 東京連絡事務所、東京） |
|   | MEGADOCK 講習会                   | 参加者：10 名            |
| 6 | 2015 年 3 月 20 日                | （産業技術総合研究所、東京）      |
|   | GHOST-MP 講習会                   | 参加者：6 名             |

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や、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、ウェブサイトや、ニュース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

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」における研究活動について、研究者や企業などを対象として、その重要性を伝えることにより社会的な価値の理解を得るため研究内容を詳しく紹介するパンフレットを制作した（図11）。

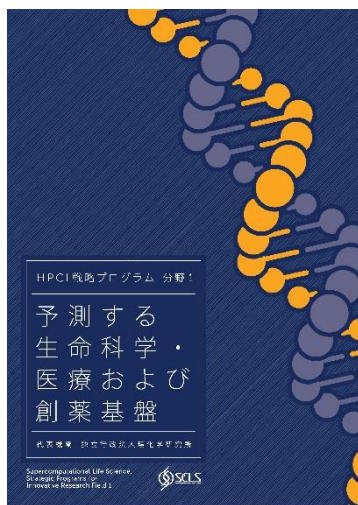


図11 パンフレット

##### (2) ニュースレター（日本語版、英語版）

##### 1) 冊子

2013年度に引き続き Newsletter の発行を行い、さらなる企画やコンテンツ内容の充実および向上を図った（図12、13）。今年度は、研究者インタビュー記事の内容拡充や、SCLIS が開発しているアプリケーション・ソフトウェア開発や共同研究を紹介するページを新たに設けた。また誌面読者を戦略分野1ウェブサイトへ惹き込む工夫を施しニュースレターWeb版との連動性を実現した。

- ・BioSupercomputing Newsletter Vol. 11 (2014年9月発行)
- ・BioSupercomputing Newsletter Vol. 12 (2014年3月発行)





図 12 Vol. 11 表紙（日本語版、英語版）



図 13 Vol. 12 表紙（日本語版、英語版）

## 2) ニュースレターWeb 版

ニュースレターWeb 版においては、デザインやレイアウトを刷新し、見やすさやアクセス性の向上等を行った（図 14、115）。また誌面では表現できない Web 版ならではの情報を掲載するなど誌面との差別化を行った。SCLS ウェブサイトのトップページに次ぐアクセス数を保ち、SCLS ウェブサイトのアクセス数を左右する主要コンテンツとなっている。



図 14 Web 版 研究者 Archive (21 名)  
(日本語版、英語版)



図 15 Web 版 若者たちとのフリートーク  
(日本語版、英語版)

## (3) ウェブサイト

2013 年度に引き続き、サイトコンテンツの充実及び拡充を行った。研究内容や研

研究者、講義内容を紹介した動画数の増加にともない、動画ギャラリーページを新しく制作した（図 16、17）。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引き続き行った。

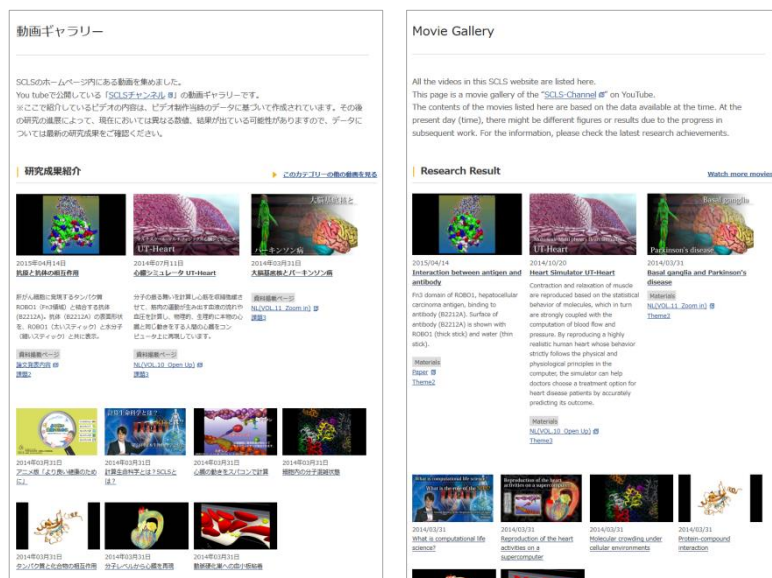


図 16 動画ギャラリーページ（日本語版、英語版）



図 17 研究者に聞く Vol.4（ロング版、ショート版）

#### 細胞内分子ダイナミクスシミュレーションの可視化コンテンツ制作

一般市民や理数分野に興味のある高校生以上の若い人、実験系生物学など異分野の研究者への研究成果の普及と研究内容の理解増進を図るため、計算結果に基づき「核内混み合い環境でのヌクレオソーム、クロマチンの機能と発現機構」について可視化した動画を制作した（図 18）。

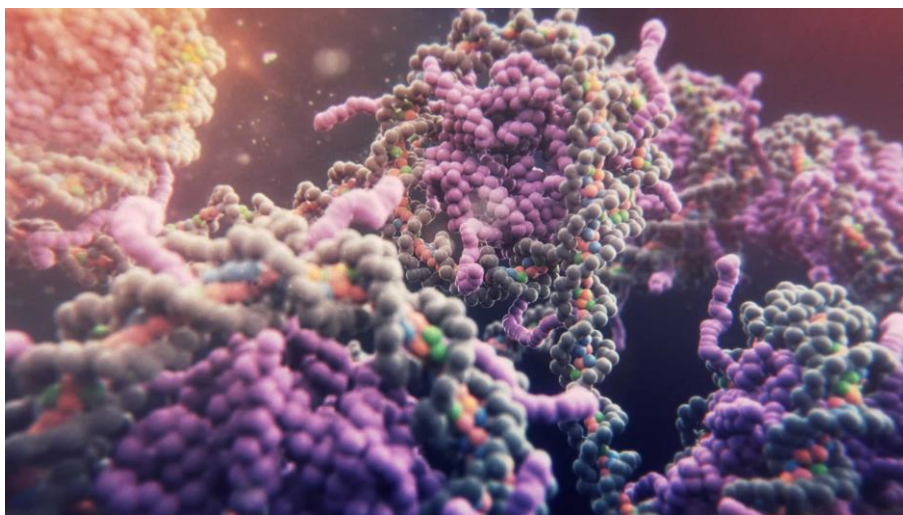


図 18 可視化動画の 1 シーン



## 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

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：クリフォード株式会社、大商学園高等学校、バイオグリッドセンター関西（順不同）

参加者数：72 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（23 社）：

アステラス製薬(株)、アスビオファーマ(株)、エーザイ(株)、小野薬品工業(株)、科研製薬(株)、(株)カネカ、キッセイ薬品工業(株)、協和発酵キリン(株)、杏林製薬(株)、参天製薬(株)、塩野義製薬(株)、千寿製薬(株)、大正製薬(株)、大日本住友製薬(株)、田辺三菱製薬(株)、帝人ファーマ(株)、東レ(株)、日本新薬(株)、日本たばこ産業(株)、日産化学工業(株)、マルホ(株)、Meiji Seika ファルマ(株)、持田製薬(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、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

2014 年度は、主にインシリコ創薬における標的タンパク質と候補化合物の複合体構造の推定方法について検討し、創薬研究者への情報の提供を行った。複合体構造の探索方法として分子動力学法、温度レプリカ交換分子動力学法、ハミルトニアン・レプリカ交換分子動力学法に着目し、それぞれの手法について実行までの手順、必要とする計算資源量、計算結果について比較、評価を行った。

### 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

##### ポータルサイト「S-cruise」

「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、戦略分野1 ウェブサイト内で2013年度に引き続き、ポータルサイト「S-cruise」の運営・管理を行った。

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。

## 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、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 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-1-1 会議、委員会等

###### (1) 連携推進会議

計算科学研究機構、高度情報科学技術研究機構、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、H26年度は以下の会議に参加した。

- ・第16回連携推進会議(2014年5月15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(理研)、江口至洋(理研)

- ・第17回連携推進会議(2014年8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(理研)、江口至洋(理研)

- ・第18回連携推進会議(2015年1月29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)

###### (2) 広報責任者会議

計算科学研究機構、高度情報科学技術研究機構、5分野間連携にて、広報に関する会議が開催され、H26年度は以下の会議に参加した。前年度まで開催していた広報情報連絡会の役割も兼ねて開催し、さらなる協力体制の強化、維持に努めた。

- ・第1回広報責任者会議（2014年4月23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（2014年5月28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7月24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4回広報責任者会議（2014年9月24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5回広報責任者会議（2015年1月7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6回広報責任者会議（2015年2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7回広報責任者会議（2015年3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）

## VI-1-2 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9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。

### （2）ISC14（International Supercomputing Conference 2014）

（2014年6月22日～26日）

開催場所：Congress Center Leipzig (CCL) , ドイツライプチヒ

趣旨と内容：1986年より毎年ヨーロッパで開催されているスーパーコンピューティングの国際会議にて、AICSが参加者を対象にブースを展示し、戦略分野1からは、研究活動の概要を紹介するポスター展示を行った。

参加者数：2,500名

### （3）未来をひらくスーパーコンピュータ ―「京」からその先へ 限りなき挑戦―

（2014年8月23日～24日 講演会23日、展示は両日開催）

開催場所：科学技術館（東京）

主催：計算科学研究機構、高度情報科学技術研究機構

共催：5 分野

後援：文部科学省、日本経済団体連合会、日本商工会議所ほか 5 機関

趣旨と内容：「京」の成果、およびポスト「京」プロジェクトの推進について、広く一般からの理解・支援を得ることを目的として開催された。戦略分野 1 からは課題 4 グループリーダー宮野悟が、「スパコンが加速するがん研究」と題し講演を行った。講演会と併設した展示ブースでは、各戦略分野による研究内容の紹介や研究に関連した映像が放映されたほか、体感型ゲームやカードゲームなどが行われた。科学技術館への来場者が多く立ち寄り好評であった。

参加者数：講演会 229 名、展示各日 700 名 計 1,400 名

#### (4) テクノオーシャン 2014 ～生命（いのち）の源、海～

(2014 年 10 月 2 日～4 日)

オーガナイズドセッション『スーパーコンピュータ「京」を知ろう！』

開催場所：神戸国際展示場（兵庫）

主催：テクノオーシャン・ネットワーク

趣旨と内容：将来を担う若者へのスーパーコンピュータを中心とした科学技術の理解増進を目的として開催された計算科学研究機構によるオーガナイズドセッションにて、HPCI 計算生命科学推進プログラム チーム員が『生命のしくみを「京」で解き明かす、今そして未来』と題した講演を行った。講演では、「京」を使った生命科学の研究を紹介し、戦略分野 1 での研究内容、将来はどのようなことに役立つのか、計算生命科学と社会とのかかわりなどをわかりやすく紹介した。

参加者数：164 名

#### (5) RIST 成果報告会 (2014 年 10 月 31 日)

開催場所：コクヨホール（東京）

主催：高度情報科学技術研究機構

後援：5 分野

趣旨と内容：HPCI 利用研究課題実施により生み出された研究成果の発表を通し、研究者間の情報交換や異分野の研究者間の交流および研究成果の普及を促進する目的で、HPCI システム利用研究課題の参加者および計算科学に関心を持つ一般の研究者を対象に開催された。一般利用枠課題では、成果を創出した課題の口頭発表やポスター展示が行われた。5 分野においては分野振興や分野間交流を図るべく、ポスター展示に加え、産業利用相談会や募集説明会等の利用促進活動も併せて行われた。

口頭発表：基礎医学とベッドサイドを繋ぐ心臓シミュレータ（杉浦清了）

ポスター展示：S-cruise ソフトウェアの紹介

参加者数：313名

- (6) 第29回日本医学会総会 2015 関西 一般公開展示「未来医 XP0' 15～あなたの暮らしと医の博覧会～」(2014年3月28日～4月5日)

開催場所：神戸国際展示場（兵庫）

主催：日本医学会

趣旨と内容：「あなたの暮らしと医の博覧会」をコンセプトとした、健康社会をつくる最新の医学・医療の成果と未来を体験できる参加型イベント「未来医 XP0' 15」にて、兵庫県（産業労働部）がブースを出展した。兵庫県COEプログラム推進事業、ヘルスケア産業振興事業で採択された研究プロジェクトで開発中の医薬品、医療機器・用具の現状の紹介、再生医療などの先端医療や予防医療の研究成果の実機展示、ヘルスケア分野での産業利用に向けた利活用を紹介するなど普及・啓発に資する目的で実施された兵庫県ブース展示にて、戦略分野1がポスターを出展しスーパーコンピュータ「京」の産業利用の可能性について紹介した。

参加者数：延べ292,500名

## 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の運営委員会を定期的に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、外部諮問委員との意見交換を行っていく。さらに、中間評価を踏まえ、京以外の計算資源の確保と利用、課題間および実験研究者の連携などの打合せを行っていく。

### 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 24 年 4 月 16 日  | 第 33 回運営委員会 |
| 平成 24 年 5 月 26 日  | 第 34 回運営委員会 |
| 平成 24 年 6 月 16 日  | 第 35 回運営委員会 |
| 平成 24 年 7 月 14 日  | 第 36 回運営委員会 |
| 平成 24 年 8 月 25 日  | 第 37 回運営委員会 |
| 平成 24 年 9 月 29 日  | 第 38 回運営委員会 |
| 平成 24 年 10 月 20 日 | 第 39 回運営委員会 |
| 平成 24 年 11 月 17 日 | 第 40 回運営委員会 |
| 平成 24 年 12 月 22 日 | 第 41 回運営委員会 |
| 平成 25 年 1 月 26 日  | 第 42 回運営委員会 |
| 平成 25 年 3 月 2 日   | 第 43 回運営委員会 |

## 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。

また、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：「有限要素筋骨格システムと脊髄と脊髄神経のスパイクニューロンネットワークのトータルシンセシス」武市一成（東京大学）

開催日時：2014 年 1 月 19 日、20 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：69 名