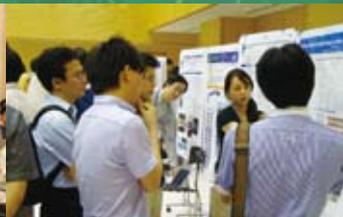


BioSupercomputing Newsletter

Vol.1 2009.10

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
Next-Generation Integrated Simulation of Living Matter



2009年7月9日・10日開催、第2回計算科学合同ワークショップの様子

CONTENTS

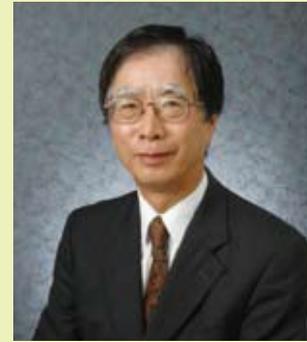
●ご挨拶	次世代計算科学研究開発プログラム プログラムディレクター 茅 幸二	2
●SPECIAL INTERVIEW	○生命現象の本質に迫る革新的なアプローチ バイオスーパーコンピューティングによる挑戦が始まる 次世代計算科学研究開発プログラム副プログラムディレクター 姫野 龍太郎	2-3
●LEADER'S TALK	○生命活動の基礎となる生体高分子が担う機能をシミュレーションによってとらえる 分子スケール研究開発チーム チームリーダー 木寺 韶紀	4-5
	○三次元的に人体の全身モデルを構築して生体内で起こる現象を理解し、医療に役立てる 臓器全身スケール研究開発チーム チームリーダー 高木 周	6-7
	○第4の方法論「データ解析融合」によってバイオロジーを予測可能な科学へと導く データ解析融合研究開発チーム チームリーダー 宮野 悟	8-9
●研究報告	○レプリカ交換分子動力学法によるアミロイド前駆体蛋白質の膜貫通部位の二量体構造予測 分子スケール研究開発チーム 宮下 尚之 / 理化学研究所 基幹研究所 杉田 有治	10
	○重粒子線治療シミュレーション 臓器全身スケール研究開発チーム 石川 顕一	11
	○ゲノムワイド関連解析と遺伝的、非遺伝的要因による治療後予測の展望 理化学研究所ゲノム医学研究センター 鎌谷 直之	12
	○ベタスケールコンピューティングを支える基盤技術 生命体基盤ソフトウェア開発・高度化チーム 小野 謙二 / 伊東 聡 / 渡邊 大介	13
●参画機関map / 研究開発体制		14
●ワークショップ報告	○VPHとのジョイントワークショップを開催	15
●ロゴマークについて / イベント情報 / 表紙写真について		16

BioSupercomputing Newsletter

ご挨拶

次世代計算科学研究開発プログラム
プログラムディレクター

茅 幸二



21世紀は「予測の時代」といわれ、その基盤を担う計算科学の重要性は世界中で指摘されています。計算科学は理論を基底としつつも、実験計測データに裏打ちされることで、実験と理論に並び、今後の科学技術の発展に欠かせないものです。

「次世代生命体統合シミュレーションソフトウェアの研究開発」プログラムは、2006年10月より、理化学研究所を中核拠点として始まりました。基礎原理（方程式・モデル）に基づいて現象に迫る「解析的アプローチ」と大量の実験データから未知の経路と法則に迫る「データ駆動型アプローチ」により、ミクロからマクロまで、異なるスケールの研究と実験データを統合的かつ有機的に結びつけ、2012年に完成する10ペタFlops級の計算性能を有する「次世代スーパーコンピュータ」の性能を最大限に発揮するベタフロップス・スケールのシミュレーションソフトウェアの開発に挑戦しています。これらの取り組みを通じて、生命の神秘に迫るとともに、医薬品や医療機器の開発に役立て、ライフサイエンスの分野に計算科学という新たな方法論を確立し、ブレークスルーをもたらす決意です。

今般、このプロジェクトの成果を広く発信するために、ニューズレターを刊行することに致しました。このニューズレターでは、各プログラムで得られた成果を中心に、みなさまにホットな話題をお伝えしていきたいと考えています。

SPECIAL INTERVIEW

ライフサイエンス研究分野の未来を切り拓くバイオスーパーコンピューティング 生命現象の本質に迫る革新的なアプローチ バイオスーパーコンピューティングによる 挑戦が始まる

次世代計算科学研究開発プログラム
副プログラムディレクター

姫野 龍太郎



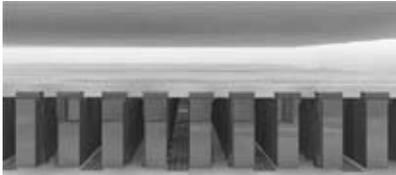
世界最先端・最高性能の次世代スーパーコンピュータの研究開発と同時に、この次世代スーパーコンピュータの優れた性能を最大限に活用するアプリケーションソフトウェアの開発も着々と進んでいる。理化学研究所は、次世代スーパーコンピュータ・プロジェクトのグランドチャレンジアプリケーション開発におけるライフサイエンス分野の研究開発拠点として、「次世代生命体統合シミュレーションソフトウェアの研究開発」を担い、新たな学問領域となる「バイオスーパーコンピューティング」を提唱し、多くの研究者とともにこれを推進している。「バイオスーパーコンピューティング」によって、生命科学の世界はどのように発展し、進化していくのか、姫野副プログラムディレクターにお話をうかがった。

これまでライフサイエンス分野において、スーパーコンピュータを必要とする研究は限られた領域でしか行われていませんでした。しかし、例えばタンパク質のさまざまな変化や血液の循環などに関して、スーパーコンピュータによる非常に高度なシミュレーションが可能になりつつあります。一方で、この10年ほどの間に実験装置の性能は飛躍的に向上し、その膨大な実験データの解析には、より大きな計算機資源と優れた

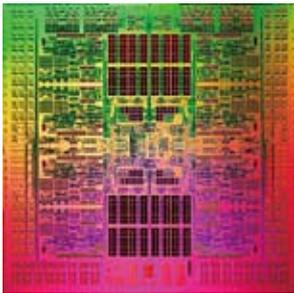
ソフトウェアが求められるようになってきました。こうした領域では、高度な計算能力を持つ次世代スーパーコンピュータを活用することによって、より高い成果が得られるはずですが、さらには、私たちはこの次世代スーパーコンピュータ・プロジェクトを機会に、ライフサイエンス分野でこれまでスーパーコンピュータを必要としてこなかった領域にも裾野を広げ、新しい種をまきたいと考えています。



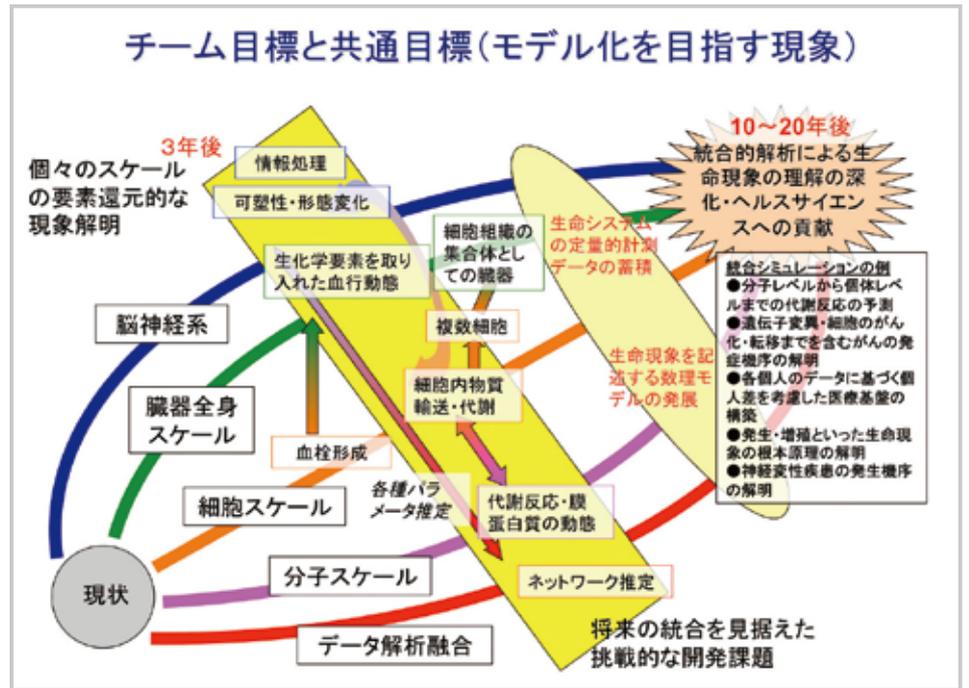
次世代スーパーコンピュータ施設（完成予想図）



計算機室に設置される次世代スーパーコンピュータ（イメージ図、画像提供：富士通株式会社）



次世代スーパーコンピュータのCPU（SPARC64™VIIIfx、画像提供：富士通株式会社）



一般に研究者は、ひとつの現象に対して先端的に細かく鋭く迫っていく傾向があります。ライフサイエンスでも、タンパク質や遺伝子を追いかけるというように、これまで生命現象の一つ一つの要素に着目して、そのメカニズムを解明していく方向に進化してきました。ただ、それだけでは生命現象を明らかにすることはできません。例えば、原子や分子の動きは基本的に物理法則に従っています。これらは量子化学や分子動力学の方程式によって完璧に記述することができるはずですが、しかし、細胞のなかの現象になると、非常に複雑にたくさんの分子が関係していて、しかも細胞内の場所によって同時に違う反応が起きたりするので、一筋縄ではいきません。私たちが生命現象と呼んでいるのは、個々の細かい反応や要素ではなく、細胞が分裂して新しい組織や臓器をつくったり、必要な機能を果たしている現象です。それが生命です。ジグソーパズルのピースをただ並べるだけでは生命の絵は完成しません。全体を眺め渡し、階層を超えてそれぞれの要素を統合しながらピースをつないでいくアプローチが必要だと思うのです。要素分析から生命体の包括的な理解へ、しかもそれは経験的なモデルではなく、不変性のある法則に基づいたモデル化によって、今、私たちはそうした新しい取り組みにチャレンジしています。

このプロジェクトでは、自分たちが一生懸命に取り組んで見いだしたピースを持ち寄って、他のピースとつないでいく、そうした出会いの場を提供していきたいのです。例えば、これまで分子生物学者と医療現場の医師が出会い、ディスカッションする機会はほとんどありませんでした。それぞれの階層で、それぞれの研究を深めていったがゆえに、逆にアイソレート（分離）していた、そんな人たちにひとつの大きなテーブルに集まってもらい、そこから新たな発見や新しい方法論の創出へとつなげていきたいと思っています。その大きなテーブルを、私たちは「バイオスーパーコンピューティング」と名付けました。「バイオスーパーコンピューティング」というアイデンティティーのもとに幅広い人たちに集まってもらい、「自分たちは同じ場所にいるんだ」という認識を深めてもらうことで、これまで無かった新しい分野を共に開拓し、発展させていきたいのです。こうしたことを実現するにはライフサイエンス分野の研究者だけでは難しいのは言うまでもありません。コンピュータサイエンス分野の研究者ともコラボレーションしなければ実現しない世界です。

さらに、もっと広い分野、例えば天文や素粒子研究などをやっている人たちにも参加してもらい、生命現象の階層を数学レベルでうまくつないで、新しい方向に牽引してもらえたら素晴らしいと思います。

今日のライフサイエンス分野で世界的に共通したキーワードが2つあります。それは「マルチスケール」と「統合」です。ミクロスケールからマクロスケールまでを橋渡しして、これらを結び付けるマルチスケール手法、そのために複数のスケールに分かれているものを互いのスケールでモデル化し、それを組み込むことで統合化していく、そうした方向性は世界共通です。しかし例えば脳科学のように、人体の一部で複数のスケールを統合的に取り扱うシミュレーション研究はあっても、生体内で起こる分子から全身までのさまざまな現象をすべて統合できるように取り組んでいる、我々の「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」は世界でも類のない初めての試みです。

これは非常に難しいチャレンジです。生命はあまりに複雑で多様だからです。本当は、生命現象のどれかひとつに焦点を当ててプロジェクトを推進した方が、サイエンティフィックにインパクトのある結果は出しやすいでしょう。しかし、このプログラムがねらいとしているのは、そのような目先の結果だけではありません。次世代スーパーコンピュータの開発プロジェクトは、この先まだまだ進んでいくものであり、ライフサイエンス研究もここで終わってしまうのではなく、その先へと引き継がれていくはずですが、今ここで特殊なものに特化したモデルをつくってしまうと、普遍性が失われ、そこから先の発展性がなくなってしまいます。そのため、今は分子スケール、細胞スケールなど6つのチームがいくつものソフトウェアといくつもの課題に並行的に挑戦し、ばらばらな目的に向かって進んでいるように見えるかもしれませんが、それは十分にデータが揃っていて、今すぐにモデル開発ができ、シミュレーションできるものから取り組んでいるからに過ぎません。近い将来、他のデータが揃ったときに、いろいろなスケールの研究開発チームが協力して、それぞれの成果を応用して取り組み、生命現象を包括的に理解することができる、そうしたものに仕上がっていくのだと思います。そのためには日本だけでなくワールドワイドで協力し合い、標準化できるソフトウェアを海外からも取り入れながら、人類全体の資産として蓄積していくことが重要だと考えています。

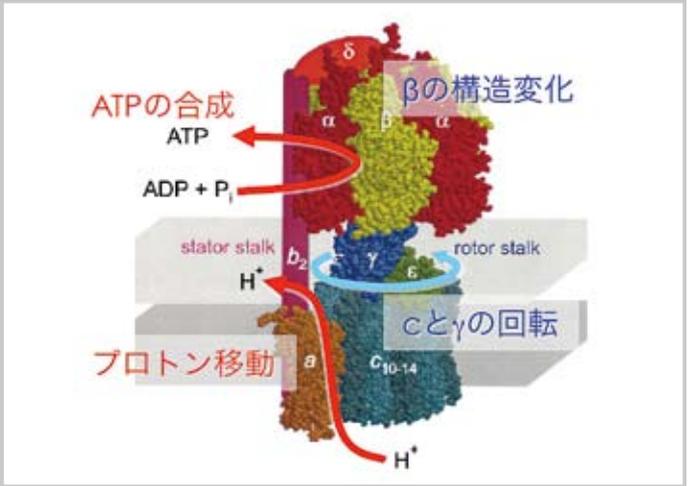
生命活動の基礎となる生体高分子が担う機能をシミュレーションによってとらえる



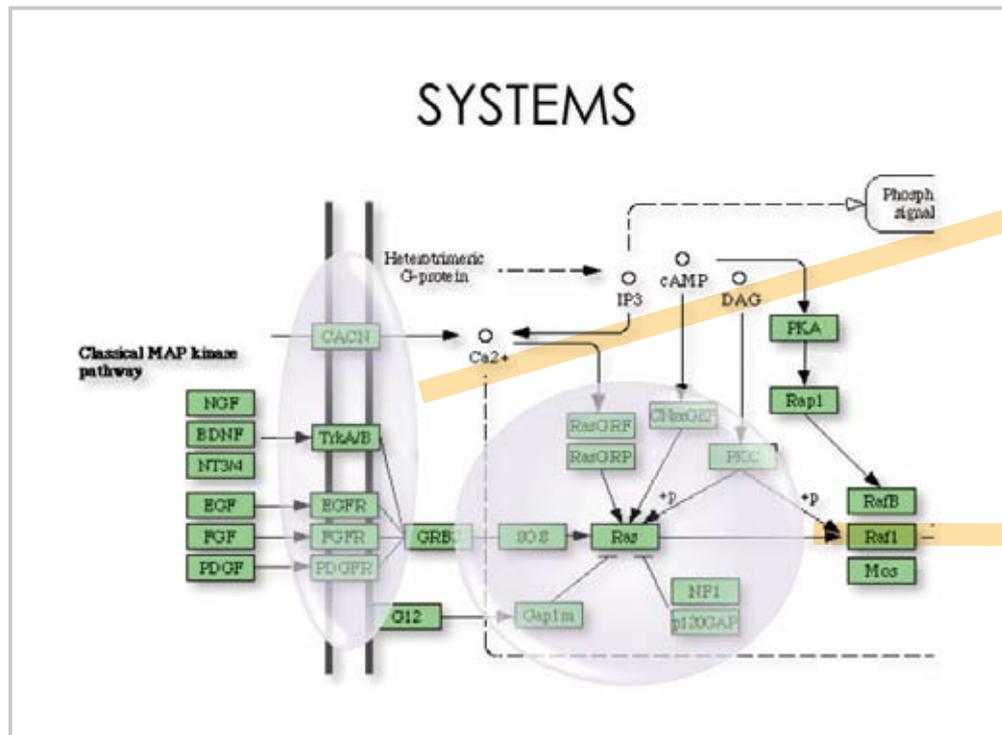
分子スケール研究開発チーム
チームリーダー
木寺 詔紀

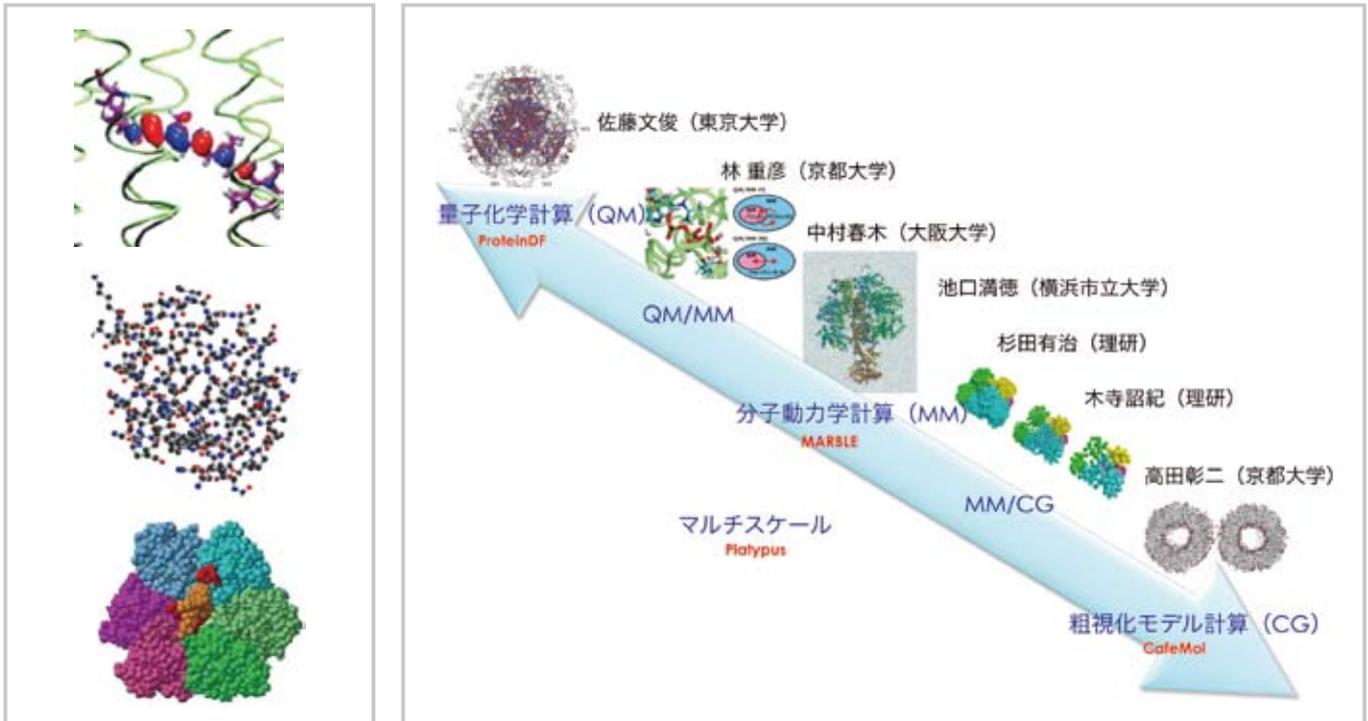
生命活動の最上層が生物個体レベルだとすると、最下層にあるのが遺伝子です。分子スケール研究開発チームが研究対象としているのは、この最下層に最も近い分子の世界です。遺伝子は、例えて言うなら数多くの情報が蓄積されたハードディスクのような存在であり、実際に生命活動を行うためには、そこから何か働くものに変換されなければいけません。そこで変換されてできるのがタンパク質です。分子には、遺伝子の実態であるDNAをはじめ、タンパク質に焼き直されるときに出てくるRNAやそこに関わるいろいろなものがすべて含まれますが、そのなかで最も中心となる分子がタンパク質です。このタンパク質がいくつも集まって、いろいろな仕事をしています。そして、その先には細胞があり、それが積み重なって組織・器官が形成され、個体レベルにつながります。では、こうした個体レベルの生命にとって、タンパク質はどんな役割を果たしているのでしょうか、それが大きな問題です。そこで、生命活動の最も基礎となる分子の世界を、できるだけ原理的なレベルで、スーパーコンピュータを使った分子シミュレーションという手法を駆使して、実際に働かせてみながら理解していこうというのが、私たちの取り組みです。

分子シミュレーション手法の一例として、ATP合成酵素についてお話ししましょう。ATP（アデノシン三リン酸）は、生物体にとって最も重要なエネルギー源です。有機物から取り出したエネルギーをいったんATPというエネルギー化合物として蓄え、必要に応じてATPを分解するときのエネルギーをさまざまな生命活動に利用しています。このATP合成プロセスの過程にATP合成酵素が関わっています。この酵素は、言ってみればタンパク質が集まってできた分子機械です。ちょうど細胞膜に刺さったような状態で、外側から内側への水素イオンの移動（プロトン移動）を駆動力として回転運動が生じ、それがタンパク質の構造変化のエネルギーに変換され、そのエネルギーによってATPが合成されるという、かなり高度な機能を持っています。こうした機能は実験的に確認されているのですが、それを原理的なレベルで説明しようとするのが、分子シミュレーションです。どういう原理で理解するのかというと、大まかに2つの方法が用いられます。ひとつは化学反応を第一原理的に扱うことができる量子力学のレベルの量子化学計算（QM）、もうひとつは動



きを扱うことができる古典力学のレベルの分子動力学計算（MM）です。ATP合成酵素の場合、例えばプロトン移動は完全に量子化学で扱うべき反応です。高分子の回転という力学的な運動は分子動力学計算で理解できます。さらに、構造が変わることによってADPにリン酸が付いてATPが合成される過程は、量子化学計算が使えます。このように、2つの方法を用いることによって、ATP合成酵素の働きが原理的に理解できるわけです。そして、コンピュータ上に構築したATP合成酵素のようなタンパ





ク質複合体を動かしたり、反応を起こさせたりしながら、計算機実験をしていきます。そうすることにより、ある変化が起きたときにそのタンパク質複合体がどんな応答をするかといった、さまざまな条件下での振る舞いなども明らかになります。つまり、実験では困難な新しい発見や予測も可能になるのです。

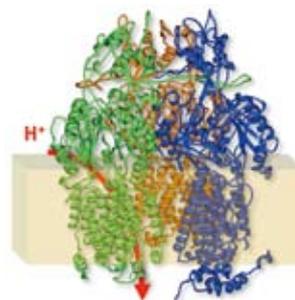
さて、ここで問題になるのが計算機資源の問題です。コンピュータ上でこうしたシミュレーションを行うためには、膨大な計算量が必要です。第一原理計算（量子化学計算）からすべてを計算しようとしたらスーパーコンピュータを使ってもなかなか追いつけません。そこで、タンパク質の機能発現の全体像を見ていくために、私たちが取り組んでいるもうひとつの方法が粗視化モデル計算（CG）です。例えば、タンパク質を構

成するアミノ酸ひとつひとつの動きをモデル化して、アミノ酸をひとつの球に置き換えてしまうのです。このような粗視化モデルを使うことで、分子レベルを3つの階層QM・MM・CGで表現しようとしています。粗視化モデル計算という方法は、分子シミュレーションの世界では新しい方法です。そのため、粗視化の方法論の確立や新しいソフトウェアの開発、さらに、QM・MM・CGの3つの方法を結合させることによるマルチスケールシミュレーション実現のための方法論の開発（階層接続）は、私たちのチームにとって非常に大きな課題となっています。そして最終的には、もうひとつ上の階層である細胞レベルにまでつなげていく、それが私たちの大きな目標です。言い換えれば、細胞レベルで起きていることを、分子のレベルから説明していこうとしているのです。

1. Networkの要となる情報・物質輸送膜タンパク質

分子機械の動作原理—Mechanistic

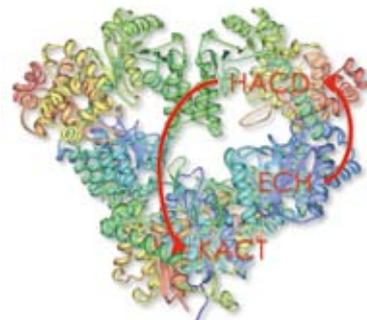
多剤排出トランスポーターAcrB



2. Networkの接続の実体を表現するマルチエンザイム複合体

相互作用とダイナミクス—Thermodynamic

脂肪酸代謝マルチエンザイム複合体



臓器全身スケール研究開発チーム

三次元的に人体の全身モデルを構築して
生体内で起こる現象を理解し、
医療に役立てる臓器全身スケール研究開発チーム
チームリーダー

高木 周

臓器全身スケール研究開発チームの基本的な方向性は、MRI、CT、超音波などによって取得された画像データをもとに、さまざまな臓器をはじめ、循環器系、呼吸器系、筋骨格系、神経系など、すべてを備えた人間の全身モデルを三次元的にコンピュータ上に構築し、再現された人体に対していろいろなシミュレーションを行うことにより、生命現象の理解を深めたり、病気メカニズムを追ったり、病気の予測を行ったりして、医療現場での診断や治療に役立てることです。言い換えれば、医用画像データの“静的な情報”に生命を吹き込んで、動的なものを生み出していくことといえるでしょう。そのために、オイラー型流体構造連成手法などの新しい解析手法の開発や適応にも力を入れています。固体解析で一般的に用いられるラグランジュ型（物質点によって方程式を記述）では臓器の変形とともに格子（メッシュ）の生成が必要となり、全身ボクセルデータと親和性が良くないという問題があるのに対して、流体解析で良く用いられるオイラー型（空間的に固定した点で方程式を記述）では、数学的には複雑になるものの、医用画像データを取り扱うには非常に都合のよい手法となります。

研究開発チームは、取り扱う現象や研究方法の違いによって、「全身ボクセルデータ作成の高度化と臓器全身力学モデルの構築」、「低侵襲治療法支援のための人体内超音波・重粒子線伝搬シミュレータの構築」、「心臓シミュレータの次世代スパコンへの実装」、「血管網の構築と血液循環統合シミュレーション」、「肺呼吸・肺循環統合シミュレーション」という5つのチームに分かれて研究開発を推進しています。とはいえ、プロジェクトの究極の目標の一つは、「生命とは何ぞや」を理解するということにありますから、人体をひとつひとつの臓器に分けて、見かけ上の全身としてとらえるのではなく、各臓器が互いに連携した全体としての全身を理解するという方向で研究を進めています。そのため、例えば各臓器を結び付け、それぞれの機能を持つ臓器を全体として有機的に連携させている血管網などは、非常に重要と考えています。この血管網に関しては、全身ボクセルデータを基に、心臓から動脈静脈血管系、毛細血管

までの血流循環に関する動的なモデルを構築し、循環器統合マルチスケールシミュレータの開発を行っていかようとしています。さらに循環器系では、血栓症や微小循環障害を対象とした血小板・赤血球の凝集、血管壁への接着などに関する血行力学的立場からの数値解析も行われています。循環器系の疾患として非常に重篤な影響をもたらす、血栓症に関する研究は特に重要です。心臓や脳の血管で血栓が詰まるという現象だけみると、局所的な現象のように思われがちですが、実は血小板があちこちの傷んだ血管で活性化され、それが積み積って血栓になるプロセスを見ていくと、これも循環器系全体に関わる問題なのです。

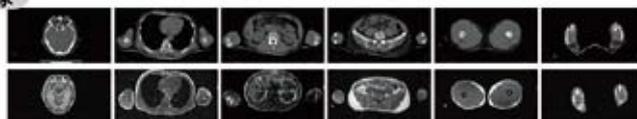
血液は生体内の物質輸送媒体として重要な働きを担っています。そのなかでも極めて重要なのが、酸素・二酸化炭素の輸送です。その意味では肺の働きに注目する必要があります。そこで、肺におけるガス交換プロセスのシミュレーションにも取り組んでいます。もうひとつ、心臓が生命活動にとって重要な臓器であることは言うまでもありませんが、この心臓については、すでに完成度の高い心臓シミュレータが開発されています。東京大学のマルチスケール・マルチフィジクス心臓シミュレータです。これを次世代スーパーコンピュータに実装すれば、それこそ心筋細胞ひとつひとつの運動から心臓全体の動きまでをシミュレーションすることが可能になり、心臓疾患に関する高度医療に大きく貢献するものとなるでしょう。

医療への応用という意味で特に力を入れているのは、超音波や重粒子

3D人体ボクセルデータの構築

断層画像

CT

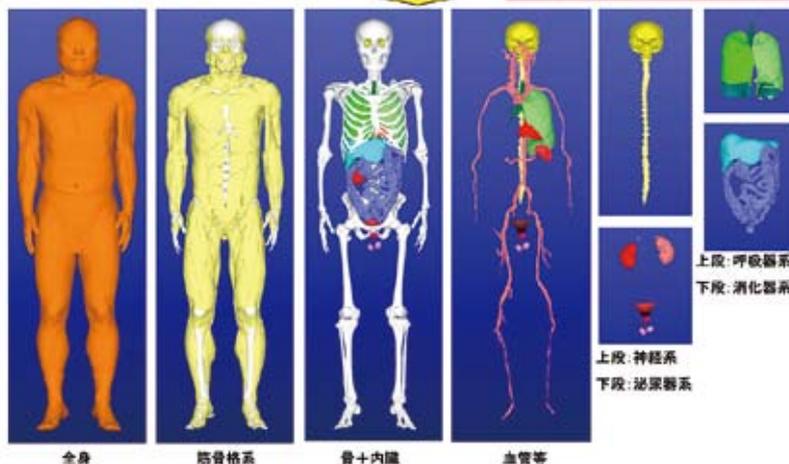


併CT撮影条件
分解能: 全身1mm voxel
データサイズ: 490×265×1687 voxel

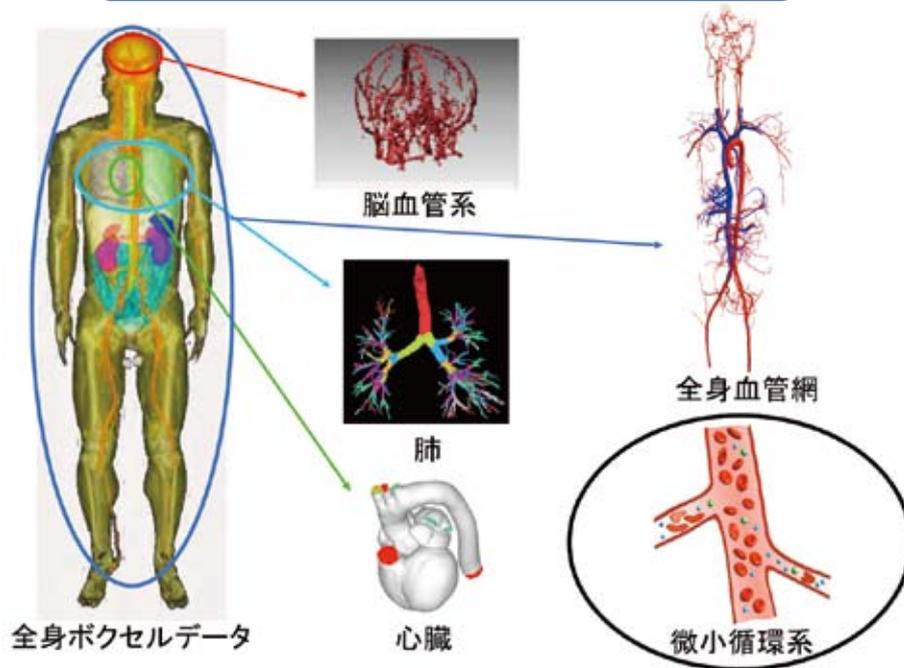
並MRI撮影条件
分解能: T1, T2撮影条件:
0.5, 0.9 (1mm×1mm×2mm)
データサイズ: 490×265×870 voxel

並MRI撮影条件:
分解能(3,3,2) = (1mm×1mm×3mm)
データサイズ: 490×265×570 voxel

断層画像から3次元ボクセルデータへ



循環器系のシミュレーション



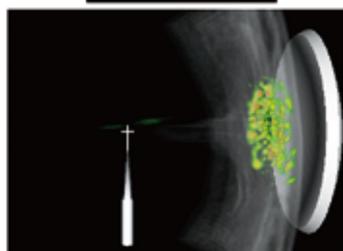
線を用いた低侵襲の照射型治療シミュレータの開発です。集束超音波を使って前立腺がんや乳がんの腫瘍を焼灼することは、すでに実際の医療現場で行われていますが、骨で囲まれていたり、身体の奥深いところにある臓器などでは、どのように照射するかが非常に難しいのです。人体の内部には音波の伝搬特性が大きく異なるさまざまな部位が存在しますから。照射の強度や集束域などを個人個人の身体の特성에合わせて予測できれば、医療現場で非常に役立ちます。将来的には、頭蓋骨越しに脳腫瘍を焼灼することなども可能になるはずで

生体のシミュレーションを行う際に、私たちが最も大切だと考えているのは、どこに曖昧さを持っているのかをクリアにしておくということです。例えば、全身ボクセルデータを構築するために使用する医用画像データは、正確に表面の位置を判別できるだけでなく、もともと誤差を

含んでいます。私がこれまでやってきた流体の基礎研究分野では、数パーセントの誤差を改善するために多くの研究者が議論を交わしますが、多くの場合、医療現場ではそこまで厳密な精度は求められていません。「人体は複雑で、それほど簡単にすっきりとメカニズムを説明できるものではない」という考え方が根本にあります。また、そんな複雑な人体をモデル化する過程で、どうしても曖昧さが含まれます。しかし、だからと言って数値計算手法に曖昧さが含まれていいということでは決していないのです。計算手法そのものは数理的に矛盾のない、誤差の少ないものを確立していかなければなりません。そして、その計算手法を用いると、どこで誤差が生じ、精度が減少していくのかをしっかりと把握した上で、曖昧さを含む生体モデルのシミュレーション結果を利用できるようにしておくことが非常に重要なのです。

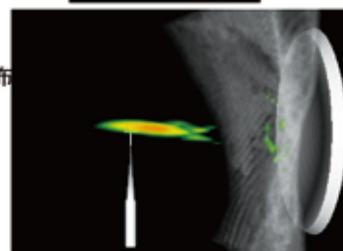
頭蓋骨越しの超音波照射の計算

頭部正面から照射



この条件ではターゲット部で十分な圧力振幅が得られず。

頭部側面から照射



ターゲット部で有意な圧力振幅の発生。

圧力振幅の分布
0 2
Pressure [MPa]

データ解析融合研究開発チーム

第4の方法論「データ解析融合」によって バイオロジーを予測可能な科学へと導く



データ解析融合研究開発チーム
チームリーダー
宮野 悟

こんなことを言うとお叱りを受けるかもしれませんが、実はバイオロジー（生物学）は、サイエンス分野で唯一サイエンティフィックな言葉を持っていない科学なのです。ほとんど原理と言えるものが見つからず、基本的にファクト、つまり数学で言えば定理に当たるようなものを常に書き続けているばかりなのです。例えば、「この遺伝子はこの遺伝子群を制御していて、その結果、このフェノタイプ（表現型）の原因になっている」ということを分子生物学的に証明して、ファクトを書き続けているわけです。それはそれなりに魅力的なことではあるのですが、これでは単に「あれが見つかった」、「これが見つかった」と言い続けているだけのことで、それを1000年続けても、ライフサイエンスは予測可能な科学にはなりません。

2003年に米国国立衛生研究所（NIH）が、ヒトゲノム解読後のバイオメディカルリサーチのロードマップを出しました。そのなかに「All of these techniques generate large amounts of data, and biology is changing fast into a science of information management.」という一文があります。当時、このメッセージは生物学や医学関係者にとって大きな驚きでした。しかし、今となっては誰もがそうなりつつあることを強く実感しています。つまり、データを出していくことはもちろん重要なことですが、バイオロジーはその大量のデータをどのように解析し、解釈していくかというサイエンスにならうとしているということで

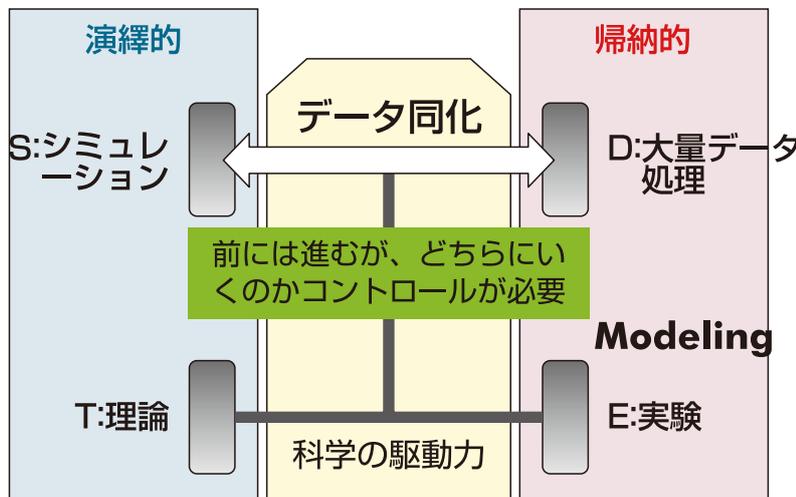
す。そうして、膨大な数のファクトをうまく使えるものにしていくとともに、バイオロジーを予測可能な科学にしていくことが求められています。ライフサイエンスにおける計算科学の重要性が認知されたのも、その現れだと思えます。ですから、次世代スーパーコンピュータを活用したライフサイエンス分野のソフトウェア開発においても、バイオロジーを予測可能な科学にするための情報の基盤を確立していくということが重要な課題であると考えています。

そこで、データ解析融合研究開発チームでは、「大規模遺伝子ネットワーク推定とその応用」、「大規模ゲノム多型データと表現型データを関連付ける新規アルゴリズムの開発と、妥当性、有用性の検討」、「大規模タンパク質ネットワーク推定とその応用」、「生命体シミュレーションのためのデータ同化技術の開発」という4つのグループに分かれて、各グループ間の相乗効果を発揮しながら、遺伝子の発現データなどから分子の相互作用のネットワークを解析し、その抽出モデルにダイナミクスを推定して加え、よりよいモデリングをするための方法を開発する研究開発に取り組んでいます。

研究開発のストーリーを簡潔に説明しておきましょう。まずは、遺伝子発現データなどから、大規模な分子のネットワークを計算で予測します。そして、それを「地図」として用いて、薬や病気に関係する遺伝子や、分子間相互作用を探索していきます。地球物理学に例えて言うと、人工

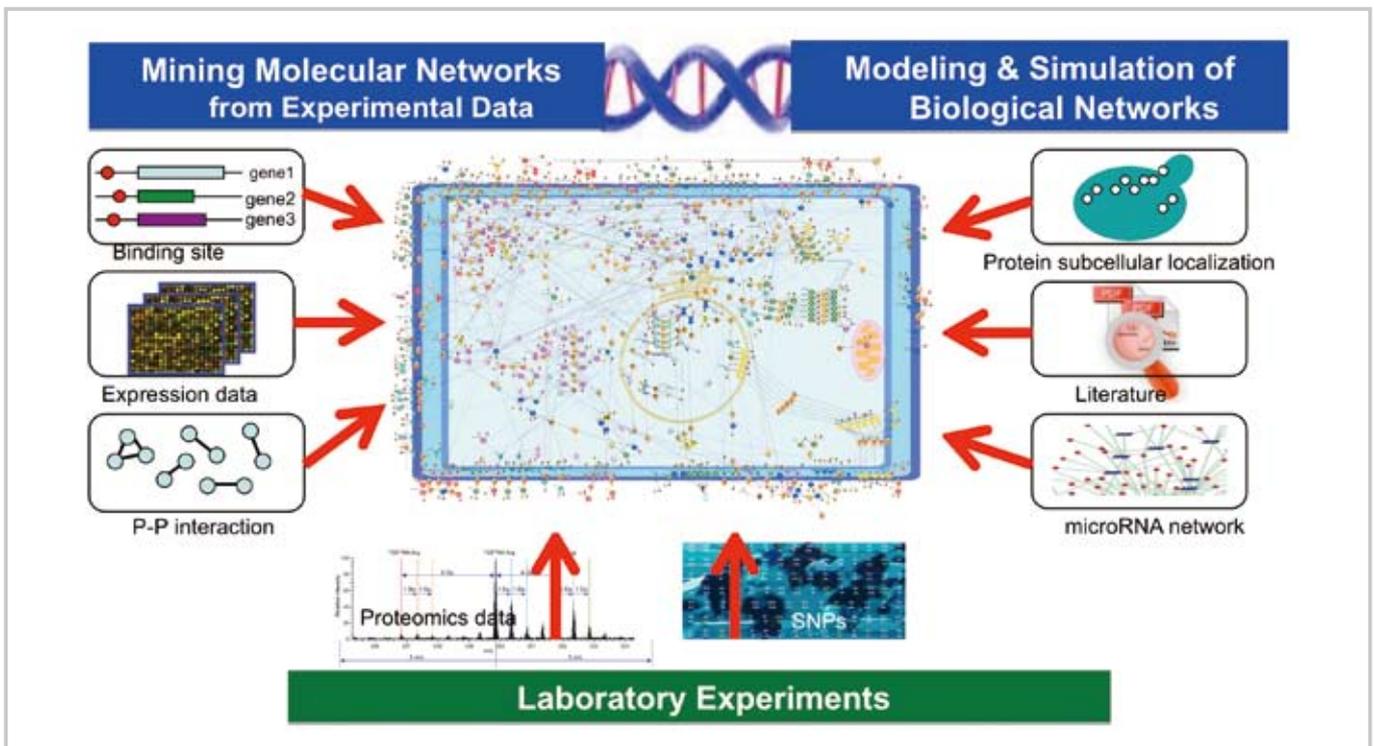
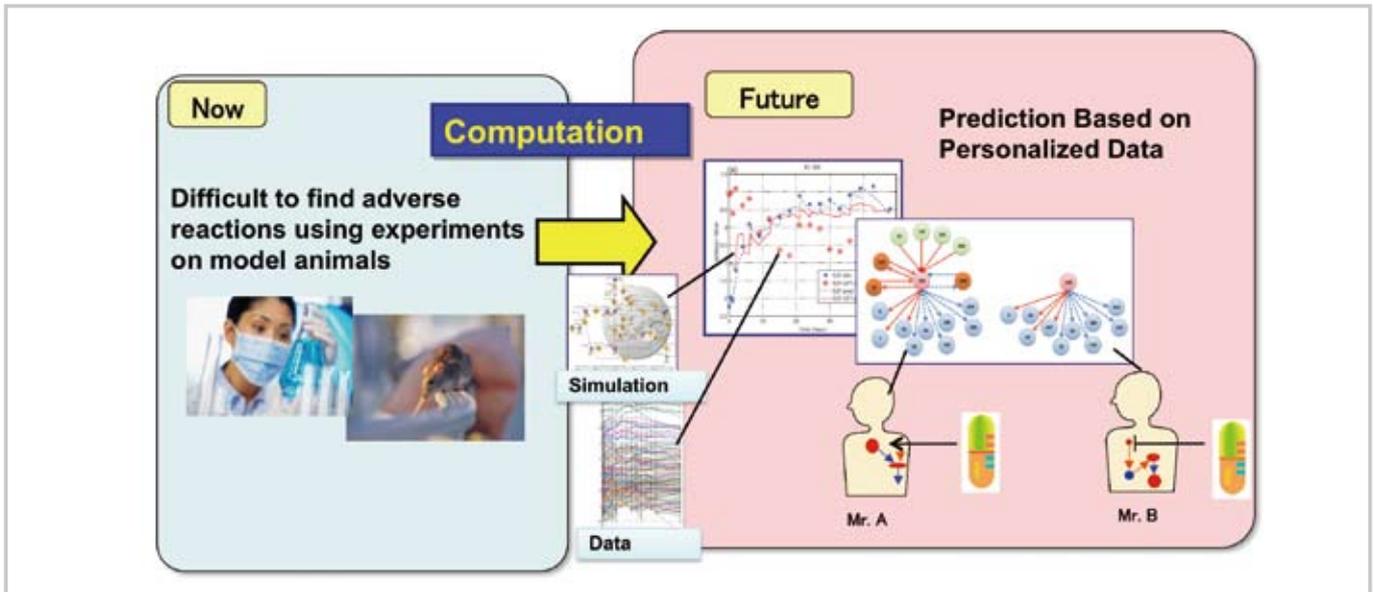
データ解析融合研究開発チーム

理論、実験、シミュレーションに続く第4の科学、第4の方法論 データ解析融合



膨大化するゲノムや遺伝子関連データをペタスケールで解析するアルゴリズムなどの応用技術を開発すると共に、データ同化によるデータとシミュレーションモデルの融合を図るモデル構築技術を開発します。将来的に創薬ターゲット探索や個人差を考慮した医療のための基盤情報技術の構築を目指しています。これによりヒト全遺伝子を対象とした創薬ターゲット遺伝子探索の実現につなげます。

現在、「肺がん」と薬」をテーマにチーム内外での相乗効果を発揮させながら、生体におけるネットワーク構造と動的シミュレーションモデルの推定、データ同化技術の活用による一般モデルから個のモデルを創出する技術の開発に取り組んでいます。



衛星による探査が可能になってから、全地球的な地図が簡単に入手できるようになり、温度や湿度などの状態も常に把握できるようになりました。同じようにライフサイエンス分野でも、DNAチップによって、特定の細胞の遺伝子の発現状態が一目で理解できるようになりました。これを使って、どの分子が他のどの分子とどのような相互関係にあるのかというネットワークを明らかにしていきます。つまり、動的なネットワークの「地図」をつくっていくわけです。さらに、ある病気の遺伝子がこの「地図」のどこにあるか、分子間相互作用が「地図」のどこにあるかを見ていき、より詳しい動的ネットワークの「地図」をつくっていきます。そうすることで、より精緻なモデルが構築できるわけです。ただし、実際の人体ではバリエーションが非常に多く、常に一般的なモデルと合致するわけではありません。そこで、データ同化という技術を用います。分子生物学的に証明されたファクトや、膨大なデータからつくられたネットワークやダイナミクスを基に構築された一般モデルに、個人個人のデータを取り入れて、パーソナライズされた地図をつくり出そうというわけ

です。

大切なのは、バイオリジカルにきちんとした裏付けのある一般モデルが構築されていれば、たとえバリエーションがあっても、個人のデータを取り入れることによって、その人のモデルをつくるということです。個人のモデルを最初からテーラーメイドでつくろうとしたら何年かかるかわかりませんが、データ同化によってその人のモデルができれば、シミュレーションによって、どんな薬を投与すればよいかという治療の道も開けるわけです。

私たちは、こうしたシミュレーションという演繹的なものと大量データ処理という帰納的なものをデータ同化によって融合させた「データ解析融合」という新しい手法を、理論・実験・シミュレーションに続く「第4の科学」、あるいは「第4の方法論」と位置付けています。また現在は、「肺がんと薬」をテーマに取り上げて、確率変数をモデルに取り入れてシミュレーションを行う状態空間モデルと呼ばれる手法によって、一般モデルから個々のモデルを創出する新しい技術開発にも取り組んでいます。

レプリカ交換分子動力学法による アミロイド前駆体蛋白質の 膜貫通部位の二量体構造予測



理化学研究所 基幹研究所
(分子スケールWG)
分子スケール研究開発チーム
宮下 尚之 (左) 杉田 有治 (右)

アルツハイマー病は神経変性疾患の一つで認知機能の低下を主な症状とします。この病気の進行過程では脳神経細胞(ニューロン)死が生じますが、アミロイド前駆体蛋白質 (APP) の断片であるアミロイドベータ(Aβ)ペプチドが凝集し脳に蓄積されることが引き金になるというアミロイド仮説が最も有力な説として知られています。従って、Aβペプチドの生成に関する知見を深める事はアルツハイマー病を理解する上できわめて重要です。

APPは約700個(残基)のアミノ酸できておりニューロン表面の生体膜に存在します。Aβペプチドは、APPの細胞外から膜中に至る約40残基の部分で、上下2カ所がβ切断酵素とγ切断酵素という酵素によって順に切断されることにより生成されます。Aβペプチドとしては、40残基のアミノ酸でできているAβ₁₋₄₀が最も多く生成されますが、γ切断部位に幅がある為にしばしば老人班の主要成分であるAβ₁₋₄₂を生じます。私たちは異なる長さのAβペプチドがどのような分子機構で生体膜中から生じるのかを理解したいと考えました。しかし、APPの膜貫通部分の構造は生体膜中で大きく揺らいでいるせいか、未だにX線結晶構造解析によって決定された構造はありません。そこで、計算機を用いた分子シミュレーションを行うことによって、その構造を予測し、生化学実験データなどと比較することにしました。

本研究でターゲットとしたのは、APPの生体膜付近の重要な部分(Aβ₂₃₋₅₅)です。この部分には5つのグリシン (Gly) が並んでおり、生体膜中でペア (二量体) を作る可能性が示唆されていました。実際、野生型 (通常のアミノ酸配列を持つ) のAPPは生体膜中で二量体を形成していることが近年実験的に明らかにされました。ところが、興味深いことに5つのGlyのうちで2つのGly(Gly₂₉とGly₃₃)を疎水性残基^(注)であるロイシン (Leu) に置き換えると (変異型)、野生型と同様に二量体を形成するにも関わらず、γ切断酵素によって切断されなくなる(すなわち、Aβペプチドが生成されなくなる)ことが報告されました^[1]。たった2残基のアミノ酸変異がAPPの構造や機能にど

のような影響を与えたのでしょうか？

このような問いに答えるためには、通常、蛋白質内の分子間相互作用を考慮した分子動力学計算が有効です。しかし、X線結晶構造解析によって実験的に立体構造が得られていない蛋白質に関しては、多くの立体構造を計算機上で探索して得られた熱力学的に安定な構造を元に議論する必要があります。本研究で用いたレプリカ交換分子動力学法^[2]をはじめとする拡張アンサンブル法はそのような目的にきわめて適した方法であり、これまでに名古屋大学の岡本祐幸教授をはじめとする日本国内の研究者が多くの新しい方法を開発してきました。我々の計算結果^[3]は、図1に示すようにAPPの野生型と変位型では異なる二量体を形成すること、変位型では疎水性アミノ酸残基の数が増えたことによりAPPが膜に対してより傾いた構造になりAPPの切断部位がγ切断酵素の活性部位とすれすれを交差することを示唆しました[図2]。この計算結果は、これまでに得られている実験データをよく再現するだけでなく、新しい分子機構を提案したことにより国内外の多くの実験家からも興味を持たれています。

本研究では、現在利用可能な計算機能力の限界により、生体膜の寄与を露わに取り込むことをせず排除体積効果を用いて水や膜の効果を陰的に取り扱ったモデルを用いました。しかし、次世代スーパーコンピュータが利用可能になると、生体膜を構成する脂質分子を露わに取り込んだ計算が可能になり、より信頼性の高い結果が得られると期待されます。また、本研究で用いたレプリカ交換法を始めとする拡張アンサンブル法は、利用可能なCPUの数が増えれば増えるほど効率良い計算が可能になってくるため、より大きな蛋白質の構造変化や基質結合に関する計算が実現できるはずで、アルツハイマー病のみならず多くの疾患に関わる現象が生体膜中に存在する蛋白質の挙動と関わるということが知られていますので、我々の研究が将来、様々な疾患に関わる生命現象の理解に繋がり、いずれ病気の治療にも役立つことを期待しています。

(注)蛋白質を構成する20種類のアミノ酸は中心炭素原子(C_α)を持ち、その炭素原子に水素原子、アミノ基(NH₂)、カルボキシル基(COOH)が結合した主鎖と呼ばれる共通構造を持っている。アミノ酸の違いはC_α炭素原子に結合している側鎖で区別される。20種類の側鎖は水を好む親水性残基、水を嫌う疎水性残基に分類できる。

参考文献

- [1] P. Kienlen-Campard et al., *J. Biol. Chem.* 283, 7733-7744, (2008)
- [2] Y. Sugita and Y. Okamoto, *Chem. Phys. Lett.*, 314, 141-151, (1999)
- [3] N. Miyashita, J. E. Straub, D. Thirumalai and Y. Sugita, *J. Am. Chem. Soc.*, 131, 3438-3439, (2009)

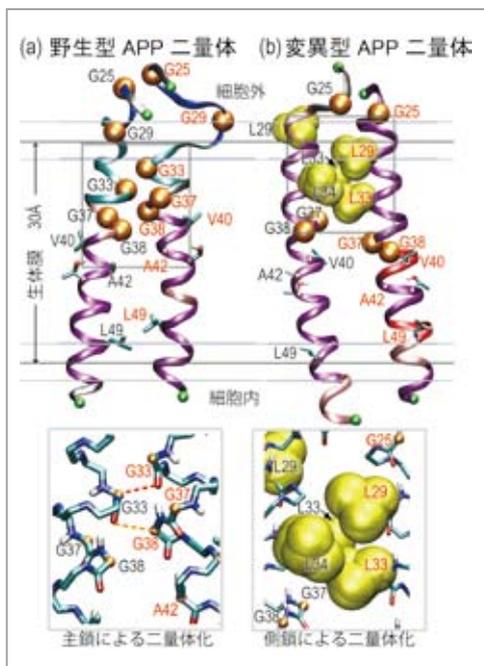


図1: 予測した構造

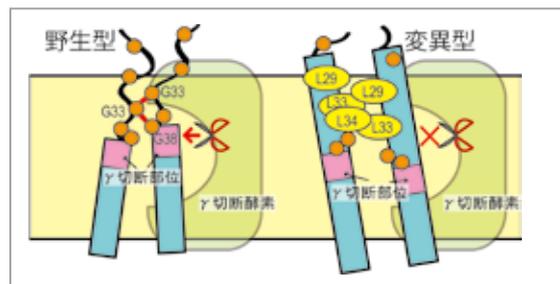


図2: γ切断部位とγ切断酵素の関係

重粒子線治療シミュレーション



臓器全身スケール研究開発チーム

石川 顕一

がんの重粒子線治療とは、重粒子線（炭素などのイオンを加速してできるビーム）を病巣に集中的に照射することによって、非侵襲に（切らずに）がんを治す最先端の治療法です。放射線治療で用いられているエックス線は、がん病巣で止まらずに進み、通り道にまんべんなく影響をあたえます。これに対して、図1に示すように、重粒子線は停止する直前に最も影響を与えるため、エネルギーを適切に選べば重粒子線はちょうどがん病巣の位置で止まり、ピンポイントにがんを攻撃できます。現在、重粒子線治療は高度先進医療として認可されており、急速に注目度が上がっています。

外科手術の場合には、どの部位を切っているか目で見て確認することができます。ところが、重粒子線治療の最中には、ビームがどこに当たっているのかモニターすることができません。そのため、あらかじめどのような条件のビームを照射すれば効率よく線量（放射線の量や影響）を病巣に集中させることができるか計算する必要があります。つまり、シミュレーションの高度化によって、治療の効果をますます向上させることができるのです。

重粒子線は、人体に含まれる原子と衝突して、イオン化・原子核反応などの様々な現象を引き起こします。色々な組織からなる体の中のどの位置でどのような反応をするのかは複雑で確率的です。私たちは、多数の入射粒子の輸送・反応過程を、乱数を用いてなるべくそっくりそのまま追跡するモンテカルロシミュレーションを用いて、重粒子線による線量を従来よりも正確に計算する手法の開発に取り組んでいます。

現在の治療では、通常、がん病巣とその周辺への効果だけを計算しています。しかし、重粒子線は放射線の一種ですから、がんがなおって何年、

何十年もたってから二次的ながんを引き起こす可能性があります。人間とは欲張りなもので、治療成績が高いがゆえに数十年先の二次的ながんのリスクまで考えた治療計画が必要であると考えられるようになってきました。そのために、重粒子線による線量の全身の分布を計算する研究を進めています。全身を小さな立方体（ボクセル）の集合として表現したボクセルファントムに対して全身の線量を計算した結果の例を図2に示します。このような計算を通して、私たちが開発しているシミュレーターは、がん病巣から遠い部位での線量にどのような反応や粒子が寄与するのかを明らかにし、リスクがより少ない安全な治療の実現につながると期待されます。

人の体は呼吸とともにうごきます。だからといって、CTを何回も撮るとX線の被ばくが増えてしまいます。そこで、肺の動きもコンピューターでシミュレーションし、呼吸がおよぼす影響を調べる研究を進めています。大阪大学の和田成生教授の研究室で開発された肺運動モデル（スプリングネットワークモデル）と組み合わせ、重粒子線の線量が呼吸によってどう変わるかを計算した結果を図3に示します。息を吸った時と吐いた時では、線量分布が違ってきます。このような効果も考えれば、より精密な治療ができると期待されます。

私たちが取り組んでいるシミュレーションは、膨大な計算量を必要とします。次世代スーパーコンピュータを活用して、1回のCTスキャンにもとづいて完全にシミュレーションベースで、臓器の運動や二次的ながんのリスクまで考慮した精密な治療計画を行うシステムを開発することを夢んでいます。

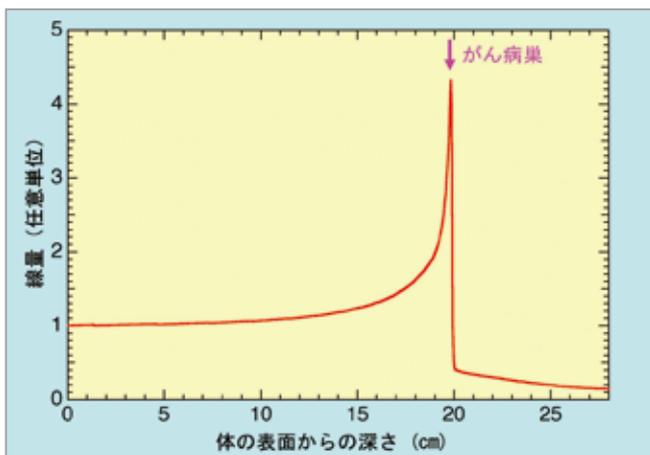


図1: 重粒子線の線量と深さの関係

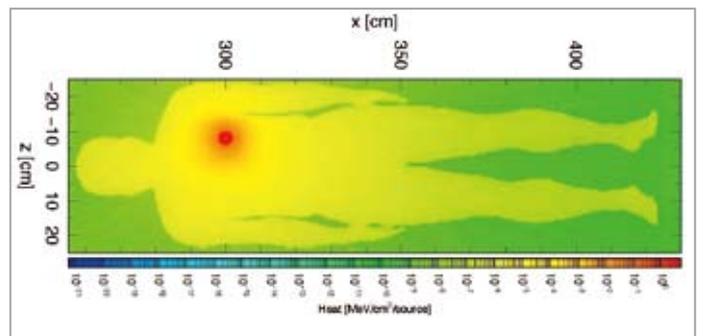


図2: 人体ボクセルファントムに対して計算した全身線量(核子あたりのエネルギー140 MeV/uの炭素ビームが肺に入射した場合)

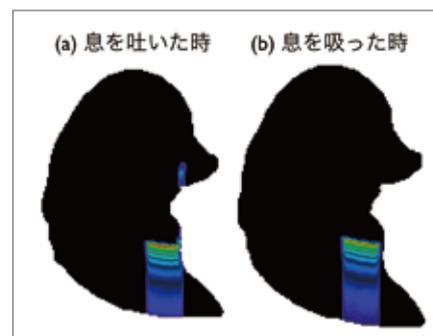


図3: 核子あたりのエネルギー70MeV/u、直径2cmの炭素ビームが肺に入射した場合について計算した、(a)吐出時と(b)吸入時における線量の、ある水平面上での分布

ゲノムワイド関連解析と 遺伝的、非遺伝的要因による 治療予後予測の展望



理化学研究所ゲノム医科学研究センター
(データ解析融合WG)
鎌谷 直之

ヒトゲノムが2003年に解明されて以来、ゲノム配列の個人差と形質との関連についての研究が急速に進んでいます。形質とは、「ある病気になる、ならない」、「ある薬が効く、効かない」など、個人ごとに異なって観察される性質のことです。メンデル型遺伝病では、十分な家系情報さえあれば、ほぼ確実に原因遺伝子が特定できる「連鎖解析」という手法が確立しました。最初の連鎖解析は、フィッシャーが自身の開発した最尤法という数学的手法を用い1922年に発表しましたが、ヒトゲノム上の多数のマーカの開発と、コンピュータの性能の向上とともに瞬く間に遺伝病の解明に応用されました。

研究者の興味は、次に多因子形質に向かいました。多因子形質は、メンデル型の遺伝形式を取らず、複雑な遺伝形式をとる形質であり、複数の遺伝子と環境が形質に影響すると考えられています。形質には質的形質（多くは二つの表現型を持つ）と量的形質がありますが、複数の遺伝子と環境が量的形質、質的形質に与える影響の形式は、1918年にフィッシャーにより相加的ポリジーンモデルとして定式化されています。これに基づき、現在、ヒトゲノム上の多数のマーカ（50万-100万）のデータを用いた関連解析が進行中です。この手法はゲノムワイド関連解析（genome-wide association study ; GWAS）と呼ばれ、多因子形質の遺伝的原因を解明する有力な手法です。GWASは2002年に理化学研究所ゲノム医科学研究センター（当時は遺伝子多型研究センター）が世界で最初に成功させた方法です。

GWASで、第一に重要な作業はデータのクリーニングです。個人で数十万、それが数百、数千の人々から得られる。そのデータのクリーニングは大変な作業です。第二に重要な作業は形質とゲノム多様性との関連

の有無を調べる、検定ですが、数十万回の検定を行うため、多重比較の問題が生じます。通常の $P < 0.05$ では十分とは言えず、 $10^{-7} - 10^{-8}$ レベルのP値が必要です。我々は連鎖不平衡を考慮して多数のマーカを用いて関連解析を行うためのアルゴリズムを構築し発表しました（図1）。また、集団の構造化が存在し、それが偽陽性を与える場合があるため、その解析が重要です。我々は、主成分分析により、日本人が明確な2つのクラスター（本土と琉球クラスター）に分かれること、本土に住む人々の間でも、住む地域により大きな遺伝的違いがあることを発表しました（図2）。第三に重要な作業は種々のパラメータの推定と結果の解釈です。最終的に、種々の解析データを用いて疾患の発症予測、薬物反応性の予測を行うアルゴリズムを作成し、その評価を行います。

以上の各ステップはそれぞれ重要ですが、かなり計算時間がかかるステップが多いのが特徴です。しかも対象人数、対照マーカの数が増えるほど計算時間がかかります。通常は、各遺伝子、環境因子の影響を独立と仮定して計算を行いますが、ここに相互作用を考慮すると計算時間は更に延長します。最近では超高速シークエンサーが現れ、一人から得られるゲノムデータの大きさは更に飛躍的に拡大しています。つまりデータはあるが計算に時間がかかりすぎて問題が解決しないのです。ベタフロップスコンピュータが使えるようになれば、現在見つからない病気の遺伝的原因も見つかるようになることは間違いありません。

このように膨大な数のデータが得られても通常、予測精度はそれほど高くなりません。その理由は、確率が安定していないからです。しかし、遺伝継承法則における確率は極めて安定しており、それがゲノムデータを用いた治療予後予測の精度を支えています。

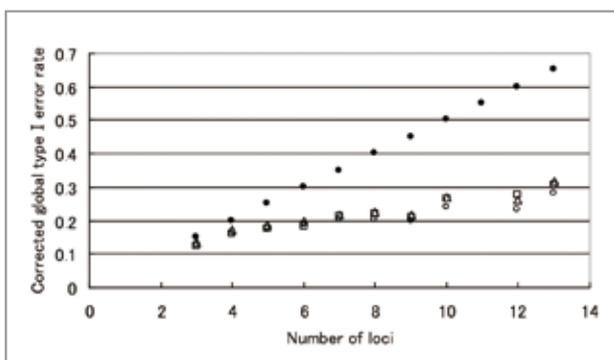


図1：膨大な計算時間が必要な、連鎖不平衡を考慮した複数のSNPと質的形質の関連の検定

連鎖不平衡の存在する複数のSNP座位の遺伝子型を用い、関連解析を行った後に、従来のBonferroniの方法により多重比較の補正を行うか、我々が新たに提唱する方法により多重比較を行った。Bonferroniの補正法では、座位数が増えるにつれ直線的にタイプIの過誤率は増加するが、我々の方法ではアレル頻度を用いる方法（Allele frequency）、優性モードを用いる方法（Dominant mode）、劣性モードを用いる方法（Recessive mode）のいずれでもタイプIの過誤率は増加が抑えられる。即ち、検定は非保守的になる。

- Allele frequency、△ Dominant mode、□ Recessive mode、● Bonferroni's correction

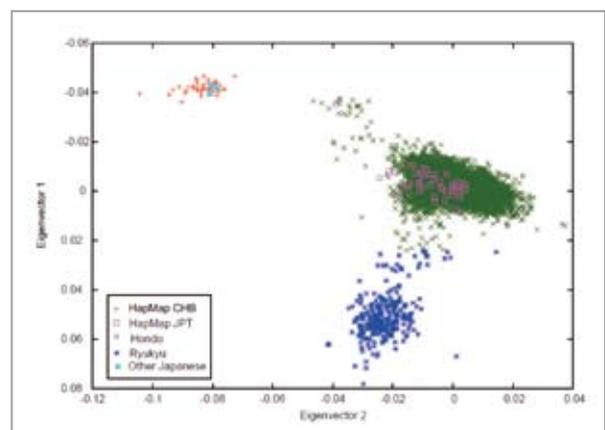


図2：約14万のマーカを用い、主成分分析を用いた日本人約7000人と中国人のクラスタリング

日本人約7000人とHapMapの中国人より、一人当たり14万のSNP遺伝子型情報を得た。主成分分析により解析し、第一成分（Eigenector 1）と第二成分（Eigenector 2）により二次元に個人をプロットした結果、中国人、本土日本人、沖縄日本人に特徴的な3つのクラスターに別れた。

HapMap CHB: HapMapの漢中国人、HapMap JPT: HapMapの日本人、Hondo: 本土日本人クラスター、Ryukyu: 琉球日本人クラスター、Other Japanese: その他の日本人

ペタスケールコンピューティングを支える基盤技術

生命体基盤ソフトウェア開発・高度化チーム

小野 謙二 (左)
伊東 聡 (中)
渡邊 大介 (右)



生命体基盤ソフトウェア開発・高度化チームでは、高性能なアプリケーションを開発するための要素技術やソフトウェア開発の枠組みなどの研究開発を行っています。これらの技術は、次世代生命体統合シミュレーションソフトウェアの研究開発プロジェクトで開発されるアプリケーションの高性能化やソフトウェア開発の効率化に貢献しています。また、大規模なシミュレーションの計算結果を効率的・効果的に可視化し、結果に含まれる情報を分かり易く表現する可視化システムを開発中です。

現在のスーパーコンピュータはすべて複数のCPU/コアで構成される並列計算機です。並列計算機を用いるにはソフトウェアの並列化（インプットデータの分割やデータ通信）と最適化が必要です。並列化は純粋にプログラミングの問題であり、ソフトウェアの開発者にとって大きな負担となっています。最適化されていないソフトウェアは並列計算機の性能を数%程度しか引き出せないため、並列最適化は並列計算機の利用に必須な処理です。しかし、最適化は計算機ごとに処理内容が異なり移植性を著しく低減させてしまいます。大規模なシミュレーションシステムの開発で生じるこのような問題点を緩和するために、アプリケーション・ミドルウェアSPHEREを開発しています（図1）。SPHEREは、ソフトウェアの開発と運用の両面をサポートし、データの入出力や内積などの代数処理、境界条件処理などの機能が提供されており、ソフトウェアの効率的な開発に役立ちます。各機能はすべて並列化されており、開発したソフトウェアはそのまま並列計算機で実行が可能になります。各機能は各種計算機用に最適化されているので、高い実行性能も期待できます。今後、自動チューニング技術を導入し、最適な解法やパラメータを実行時に自動選択し、高い実効性能を狙います。運用に関しては、XMLファイルを用いたパラメータ記述や実行管理をしており、複数のソフトウェ

アに対して統一フォーマット（解析条件設定、ファイル名指定など）が適用され、運用に関する負荷が大幅に軽減されます。また、各種ユーティリティ（XMLファイル作成補助、境界条件およびデータ分割、可視化）も充実しており、解析全体を通しての運用効率が高められます。このようなSPHEREの機能は、産業利用向けアプリケーションの開発効率化を意図しており、数千並列程度の高性能化を目標としています。

次世代スーパーコンピュータでは極めて大規模な数値シミュレーションが行われ、その計算結果は巨大なファイル群として出力されます。それらのデータを効率的に理解・解析するために、私たちは数百TBにおよぶと予想される大規模データを対象として、機能的なデータマネジメントと可視化システムの研究開発を行っています。この可視化システムでは、大規模なデータに対するインタラクティブな可視化環境を提供することが目標です（図2）。ユーザが観察したい領域や可視化パラメータを対話的に操作し、データの視覚的な調査をリアルタイムに繰り返すことにより、現象理解を支援します。可視化システムはサーバ/クライアント型で設計されており、並列分散処理を行います。可視化画像の描画に、各ノードでGPUが使用できる場合はより高速・高品質な可視化を行います。また、大規模データのロードや転送のコストを削減するために、単純な領域選択やダウンサンプリングに加え、データの必要な部分だけを適宜ロードするOut-of-Core技術や、データの高速・高圧縮技術の開発にも取り組んでいます。さらに、汎用的な利用形態を考慮し、ユーザPC単体でのローカル可視化や、予め定義したシナリオに基づいて可視化するバッチ処理といった機能を提供します。開発する可視化システムにより、大規模なシミュレーションの結果から新しい物理化学現象や有用な情報を引き出し、科学的な発見へ貢献します。

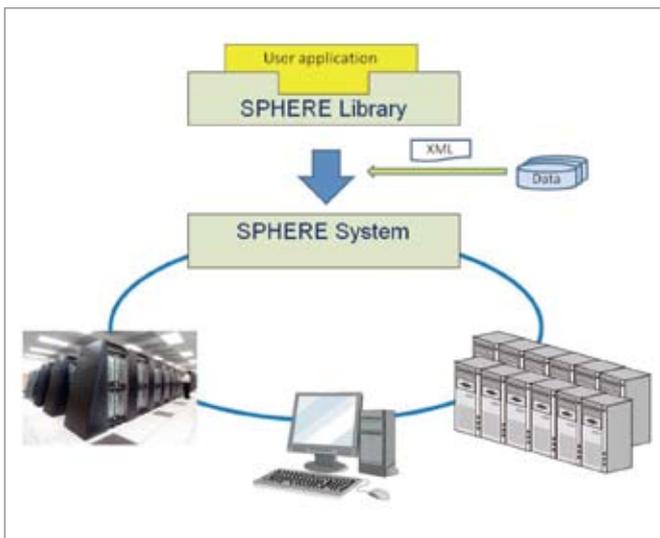


図1：SPHEREフレームワーク

SPHEREで提供される各機能を利用してソフトウェアを開発します。開発されたソフトウェアは利用する計算機にインストールされたシステムと接続することで最適化された状態で実行されます。

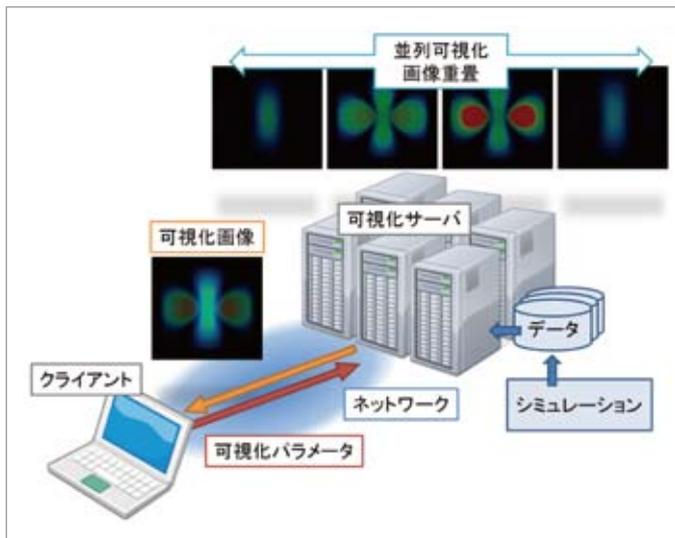
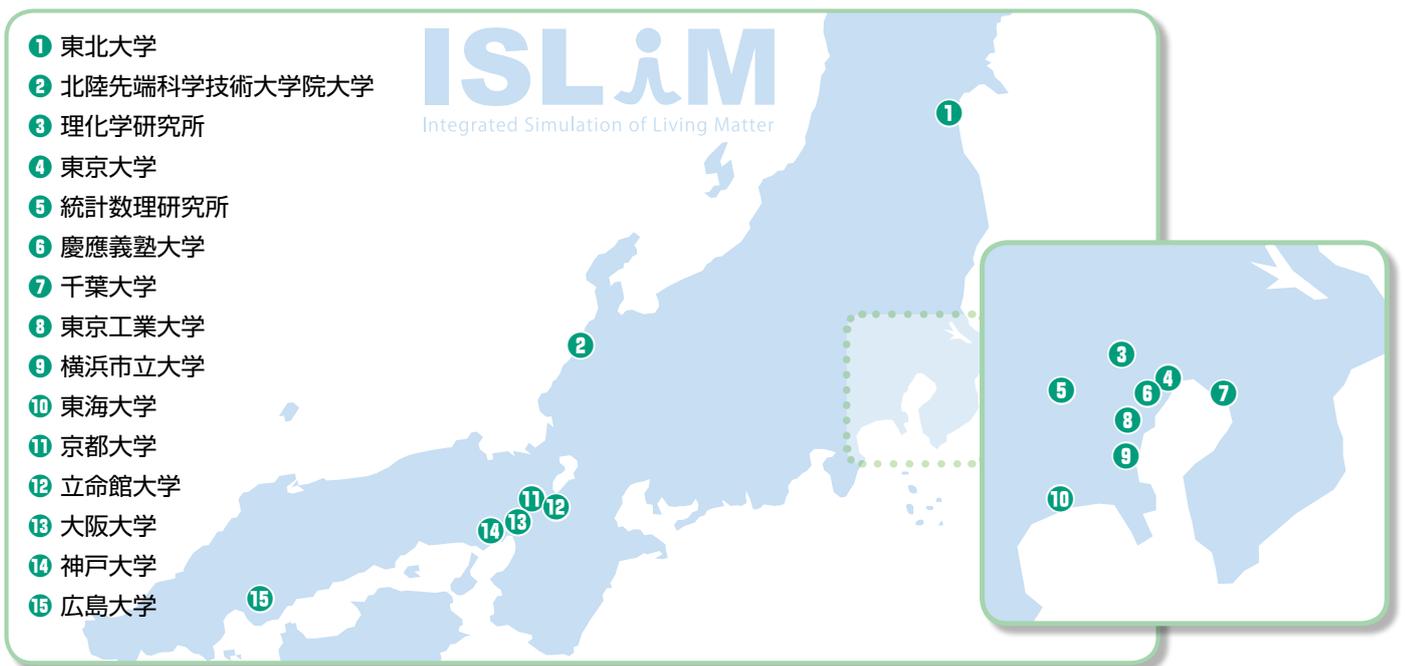


図2：リモートインタラクティブ可視化環境

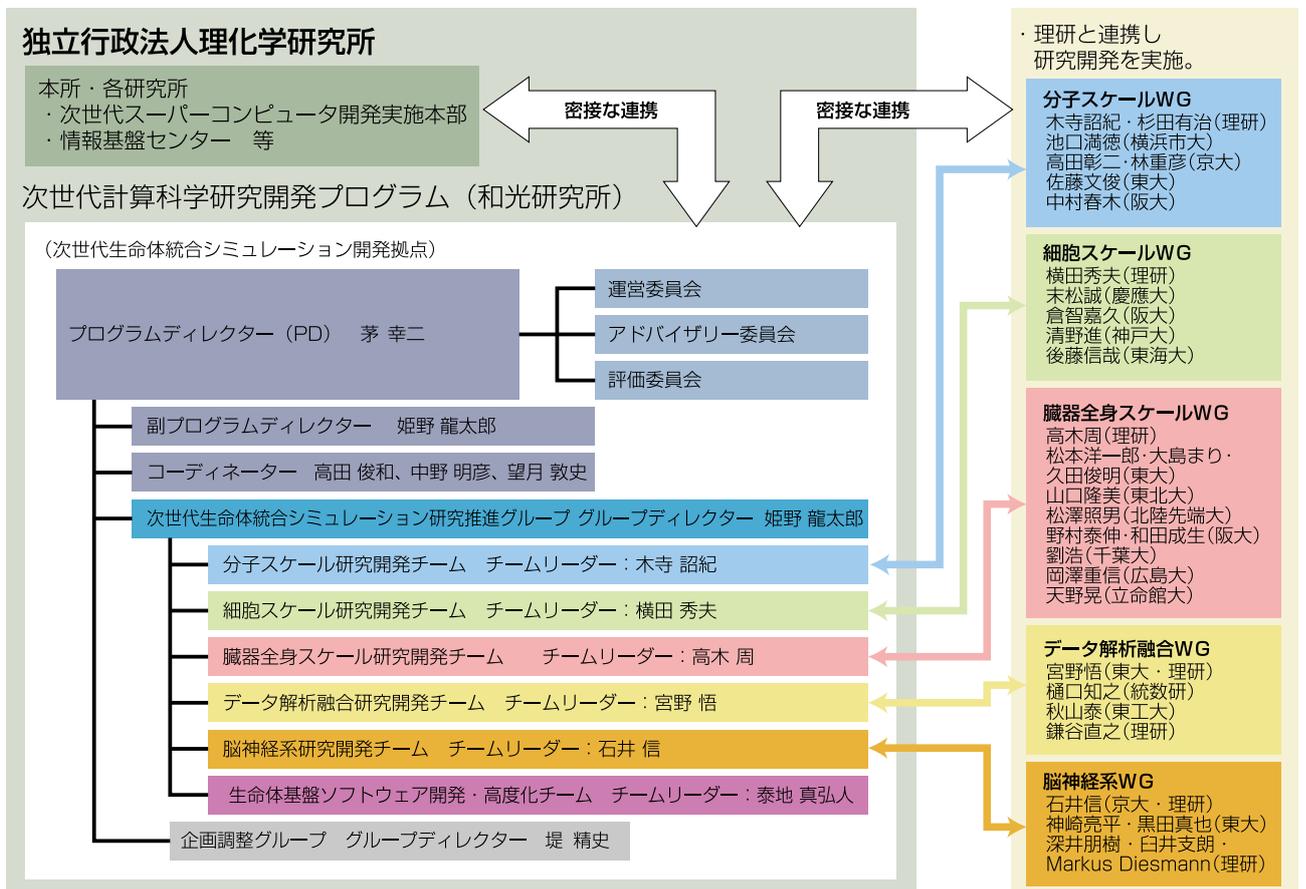
ネットワークを介して可視化パラメータと可視化画像を対話的に送受信します。可視化サーバでは大規模データを並列に可視化しています。

ISLiM参画機関map



研究開発体制

2009年9月1日現在



VPHとのジョイントワークショップを開催

ヨーロッパではEUのプロジェクトとしてVirtual Physiological Human (VPH) Projectが進行中です。このVPHプロジェクトではProf. Peter KohlとProf. Peter Coveneyの二人がプロジェクトリーダーとして活躍しています。今回京都で7月に開催された国際生理学会に出席するために来日したコール教授のグループと、我々の生命体統合シミュレーションの間で情報交換し、今後の共同研究の可能性について話し合うワークショップを7月31日理研(和光)で開催しました。コール教授のグループはVPHの中でOxford大学を中心とした研究者が集まり、心臓全体のシミュレーションによる医療貢献を目指しています。

今回理研を訪ねられたのはコール教授、スミスさん、マシンドラさん、クイーンさん、そしてつい最近までオックスフォードで研究員だった岡山大学の入部先生です。最初にまず、一行を理研の持つ3次元内部構造顕微鏡*や引っ張り試験器などの実験装置、および理研の新しいスーパーコンピュータRICCと4次元可視化システムに案内しました。3次元内部構造顕微鏡*とスーパーコンピュータには大きな興味を示されていました。その後、会議室に移り、茅プログラムディレクターの理研の紹介を含め、双方のプロジェクトを紹介し、議論を通じて内容の理解を進めました。今回は広い話題に議論が広がり発散気味となったため、次回10月頃英国で開催すること(場合によってはTV会議)、それまでに互いにEmailで連絡をとり、提案の検討を進めることが確認されました。その後、今後、互いに協力可能な事項の抽出・提案とともに、今後更に深く互いに共同で取り組めるテーマについて議論しました。なお、今回我々のプロジェクトからは茅プログラムディレクター、高木臓器全身スケール研究開発チームリーダーとチーム員他、北陸先端大の松澤先生、横田細胞スケール研究開発チームリーダーとチーム員、理研・情報基盤センター職員と姫野(レポーター)が参加しました。

*凍結包埋した生体試料を薄く削りながら断面を連続的に撮影し、最終的には試料全体の3次元映像を得る装置。顕微鏡、レーザーと組み合わせることでもミクロンの分解能で観察可能

Timetable

Time	min.	Subject	Speaker
11:00-11:50	50	Laboratory & RICC/4D Theatre Tour	
11:50-12:10	15+5	Brief Introduction to the VPH Initiative	P. Kohl
12:10-12:30	15+5	eu-Heart - Integrated Cardiac Care Using Patient-specific Cardiovascular Modeling	N. Smith
12:30-13:20	50	Lunch and Welcome Address	K. Kaya
13:20-13:40	15+5	preDiCT - Computational Prediction of Drug Cardiac Toxicity	A. Masindova
13:40-14:00	15+5	Integrated Cardiac Investigation into Mechano-Electrical Interactions: Macro to Micro	A. Quinn
14:00-14:20	15+5	Integrated Cardiac Investigation into Mechano-Electrical Interactions: Micro to Nano	G. Iribe
14:20-14:50	30	Q&A, Discussion	
14:50-15:05	15	Break	
15:05-15:25	15+5	Overview of Japan's Life Science Grand Challenge	R. Himeno
15:25-15:55	25+5	Research Activities of Organs and Whole Body Scale Research Team	S. Takagi
15:55-16:25	25+5	Research Activities of Cell Scale Research Team	H. Yokota
16:25-16:55	30	Q&A, Discussion	
16:55-17:10	15	Break	
17:10-18:10	60	Discussion on Collaboration	



ワークショップの様子



入部先生とコール教授



オックスフォード側メンバー

日本側メンバー



ワークショップ終了後の懇親会でのようす



ロゴマークについて



「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」のロゴマークが決まりました。

このデザインは「ゲノムを抽象化したイメージを、人体のシルエットのイメージと重ね合わせ、人体を解析していくというプロジェクト」を表現しています。また、略称として ISLiM と表示しましたが、2番目の i を小文字にし、人体をイメージしましたが、いかがでしょうか。読み方は「アイ・スリム」です。今後、印刷物やWebページなどでこのロゴマークを活用していきます。

イベント情報

■ 次世代スーパーコンピューティングシンポジウム2009

開催日：2009年10月7日（水）8日（木）

開催場所：MY PLAZAホール、会議室（東京都千代田区丸の内）

参加費：無料 *レセプションは有料（希望者のみ参加）

●詳細は <http://www.nsc.riken.jp/sympo2009/09/symposium2009.html> を参照してください。

■ バイオスーパーコンピューティング研究会 第1回総会

開催日時：2009年10月8日（木）12:00～13:00（予定）

開催場所：MY PLAZAホール（東京都千代田区丸の内）

●詳細は <http://bscsc.riken.jp/event.html> を参照してください。

■ バイオスーパーコンピューティングシンポジウム2010

開催日：2010年3月18日（木）19日（金）

開催場所：都内を予定

参加費：無料 *レセプションは有料（希望者のみ参加）

●詳細は決まりしだい <http://www.csrp.riken.jp/> で発表されます。

表紙写真について

2009年7月9日（木）10日（金）の2日間、理化学研究所横浜研究所において「計算科学合同ワークショップ」が開催されました。表紙の写真はその時の様子です。

このワークショップは次世代生命体統合シミュレーションソフトウェアの研究開発プログラムと基幹研究所先端計算科学研究領域が合同で開催しているもので、今回で2回目になります。生命体のシミュレーションを行うには、研究分野、研究手法を越えて連携し、推進する必要があることから、さまざまな分野の研究者が一堂に会して、お互いに今行っている研究を発表しあい、意見交換を行うことを目的としています。

- 参加者数：143名
- ポスター数：91件
- 講演数：13件