

BioSupercomputing Newsletter

Vol.4 2011.2



生命体統合シミュレーション ウィンタースクール
2011の参加者 (本文、10,11ページ参照)

CONTENTS

| | | |
|---------------------|----------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|-----|
| ● SPECIAL INTERVIEW | ○ 経験重視の観察型医療から予測型医療への転換を図り、理論医学の基盤を構築するために 東海大学医学部内科学系(循環器内科)教授 東海大学医学研究科バイオ研究医療センター代謝疾患研究センター長 東海大学総合医学研究所代謝システム医学部門長 後藤 信哉 | 2-3 |
| | ○ シミュレーション科学の活用で栄養学や健康管理の新たな可能性が拓かれることに期待 味の素株式会社 ヘルスインフォマティクス班 グループ・エグゼクティブ・プロフェッショナル員 安東 敏彦 | 4-5 |
| ● 研究報告 | ○ 多剤排出トランスポーターの機能を粗視化分子シミュレーションで実証 (分子スケールWG) 京都大学理学研究科 高田 彰二/姚 新秋/榎崎 博生 | 6 |
| | ○ 時空間を考慮した細胞シミュレーション (細胞スケールWG) 理化学研究所 次世代計算科学研究開発プログラム 須永 泰弘 | 7 |
| | ○ 強力集束超音波による低侵襲治療のためのHIFUシミュレータの開発 (臓器全身スケールWG) 理化学研究所 VCADシステム研究プログラム 沖田 浩平 | 8 |
| | ○ 大規模数理モデル構築を目的とした共有モデル開発プラットフォーム: PLATO (脳神経系WG) ①理化学研究所 次世代計算科学研究開発プログラム ②理化学研究所 脳科学総合研究センター 稲垣 圭一郎 ①/観音 隆幸 ②/ Nilton L. Kamiji ②/ 榎村 浩司 ②/ 白井 支朗 ①② | 9 |
| | ○ BMB2010 (第33回日本分子生物学会年会 第83回日本生化学会大会、合同大会) における ワークショップ開催報告 | 10 |
| ● 報告 | ○ 生命体統合シミュレーション ウィンタースクール2011 理化学研究所 次世代計算科学研究開発プログラム 石峯 康浩 (臓器全身スケールWG) 東京大学医学研究所 浦久保 秀俊 (脳神経系WG) 理化学研究所 次世代計算科学研究開発プログラム 須永 泰弘 (細胞スケールWG) 理化学研究所 次世代計算科学研究開発プログラム 舛本 現 (開発・高度化TG) 理化学研究所 次世代計算科学研究開発プログラム 三沢 計治 (データ解析WG) 理化学研究所 次世代計算科学研究開発プログラム 宮下 尚之 (分子スケールWG) | 11 |
| | ● 参画機関map / イベント情報 / イベント報告 | 12 |

経験重視の観察型医療から 予測型医療への転換を図り、 理論医学の基盤を構築するために

東海大学医学部内科学系（循環器内科）教授
東海大学医学研究科バイオ研究医療センター代謝疾患研究センター長
東海大学総合医学研究所代謝システム医学部門長

後藤 信哉



■ 予測的、個別的な“前向き”の医療へ向けて

— 今日の治療は経験主義的で、論理性、予測性に乏しいということ、よくお話しになられていますが。

● 後藤（敬称略） 臨床の医師として数多くの循環器疾患の診療に携わっている私がこんなことをいうと、患者さんたちにはショックかもしれませんが、医師が医療を行う場合、例えば物理学的な理解に基づいて原子力発電所を制御するように、人体の仕組みや疾病について科学的に完全に認識し、確実な予測に基づいて医療を行っているわけではないのが現状です。生命現象についての本質的で精緻な理解に基づく医療介入はできないのです。それは、医療の進歩の歴史を見れば明らかです。医師は、病気の人に何もしないとうなってしまうかを経験的に知っています。そこで、そのまま放置せず、有効と思われる何らかの介入を行い、予後（病後の経過）がよいか悪いかを観察することによって、その介入の是非を評価することを繰り返しています。さらに、別の介入を行った場合には結果はどうなるか、との比較を繰り返しながら医療は進歩してまいりました。経験の評価は医師個人の感覚で行われる場合もあり、多数の症例を集めて数値データベースとして評価する場合があります。数値データベースを一定の基準に基づいて評価する後者の方法はEvidence Based Medicineとも呼ばれています。しかし、いかに科学的な方法論を取り入れたEvidence Based Medicineであっても、過去の経験の蓄積を数値化するという方法論であることには変わりはありません。数値データベース化されているとはいえ、常に“後ろ向き”の経験に基づいて未来の方向性を決めるのが今までの医療であることには本質的に差はありません。

物理学の発展の歴史に置き換えてみるなら、今日の治療は、まだガリレオの時代にあるといってもいいでしょう。ガリレオは高い場所から重い球と軽い球を同時に落として、落下にかかる時間は物の重さに関係がないことを明らかにしました。実験によって力学の基礎を開いたわけですが、その先にある統一的な原理、つまり地球の重力、さらには天体の運動さえも支配する万有引力の法則を導き出すことはできませんでした。やがてニュートンは、ガリレオらが見つけた物体の運動を数学的に論じるなかから万有引力の法則を導き出し、近代物理学の基盤を築きました。今日の治療も、人体を支配している生命現象の普遍的な法則が分からない状況で行われています。医師たちは生命現象の変化として現れる患者の症候と治療介入の有無によるその変化を単に記述して、経験を積み重ねているだけなのです。「医療介入を受けた場合と受けなかった場合の結果」しか分からないのですから、医療介入の善悪も患者集団に対する評価しかできません。医療の世界に現代の物理学、化学と同様の科学を導入するためには生命現象の本質を理解し、さらに個人差を規定する要素を明確にした上で構成論的な前向きの「理論医学」のような学問を構築する必要があります。そのためには、生命現象を要素に還元し、その要素と要素の間の因果関係を緻密に数式化して理解することが必要です。医療の世界にも「論理的予測」や「個別化」を可能とする学問体系が必要です。そうでなければ、過去の経験の蓄積により評価された医療から一歩も先へ進めません。

— なぜ、経験主義的な医療しかできないのでしょうか。

● 後藤 一言でいえば、人体を構成する生命現象があまりにも複雑で、疾病の発症、進展に関与する因子が多過ぎるため、私たちの頭脳ではそれらの因子間の因果関係を精密に理解できないことが問題の本質であると思います。個別の患者さんにとって最適の治療を行うためには、生命現象の本質、さらに個人差を規定している因子とそれらの因果関係を精緻に理解しなければなりません。個人の設計図である遺伝子は個人毎に異なるし、個々の患者さんの環境への曝露、生活習慣も異なります。ある遺伝子を持つ人が、ある条件のなかで成長するとどんな疾病を起こしやすい人体になるかといった、分子から細胞を経て人体までを構成論的理解ができるようにならないと、未来予測可能な医療、個別医療を科学的に行うことはできません。また、膨大な遺伝子のわずかな部位の差異の組み合わせが、個別的に最適な治療法を規定する仕組みを理解するためには、遺伝子情報、環境への曝露の情報、生活習慣情報、症候情報などの時間変化を包括した膨大な情報を同時に扱っていく必要があります。臨床医学を緻密な21世紀の未来型医学の基盤となる情報学として再構成するためには、高速スーパーコンピュータが絶対に必要です。私たちは、すでにパーソナルゲノムという個人差を規定している人体の設計図の情報を知っています。その設計図が蛋白質をつくる仕組みについても理解しています。しかし、産生された蛋白質が細胞を構成する仕組みは理解できていません。分子である薬剤を投与したとき、生体分子の機能がいかに変化するかは理解できても、その変化がどのように細胞応答、人体スケールの生体応答に構成されるかの仕組みが理解できていないのが実態です。多数分子の物理的、化学的相互作用により細胞、人体が構成される仕組みを理解すれば生命現象を正確に理解できるかも知れません。それができると、初めて真の意味で科学的な医療が可能になるのだと思います。

— 京速コンピュータ「京」に最も期待されているのは、どのようなことでしょうか。

● 後藤 私たちが生命現象を理解するためには、その生命現象を再現することが重要と考えています。ひとつの細胞を構成する全ての物質を、実際の細胞と同じように空間的に配置すれば細胞再構成は原理的に可能ではないでしょうか。現時点では細胞を構成する物質があまりに多く、その情報を再構成できる基盤技術もありません。しかし、細胞を構成する物質の配置情報を精緻に計測する技術を確認し、その情報を高速スーパーコンピュータ上に仮想的に配置すれば仮想的な細胞が再現できるはず。細胞同士が集積して組織、臓器を構成する様子は顕微鏡レベルで観察できます。そうしたアプローチこそがシミュレーション生物学の基本であり、京速コンピュータは、それを実現させるための重要なツールです。

もうひとつ、私たちが最も期待しているのは、私たちが京速コンピュータを使って予測可能な医療、個別医療ができることの事例を示していくことによって、これまでの医療や医学というものが経験の積み重ねに過ぎず、全く本質を理解していないのだということ、多くの医師や医療関係者に理解してもらうことです。さらに、「未来の生命科学、将来の医療や医学は、こういう方向に進んでいくのか」ということが分かるといえると思うのです。いくら私が「今はガリレオの段階だ」と話しても、

現場の人たちにはなかなか分かってもらえません。しかし、具体的な例を示すことができれば、「これからは発想の転換をしていかなければいけないのだ」ということが伝わるはずと期待しております。

■ 血小板細胞シミュレーターの研究開発

—— 現在取り組んでおられる血小板細胞シミュレーターとは、どのようなご研究ですか。

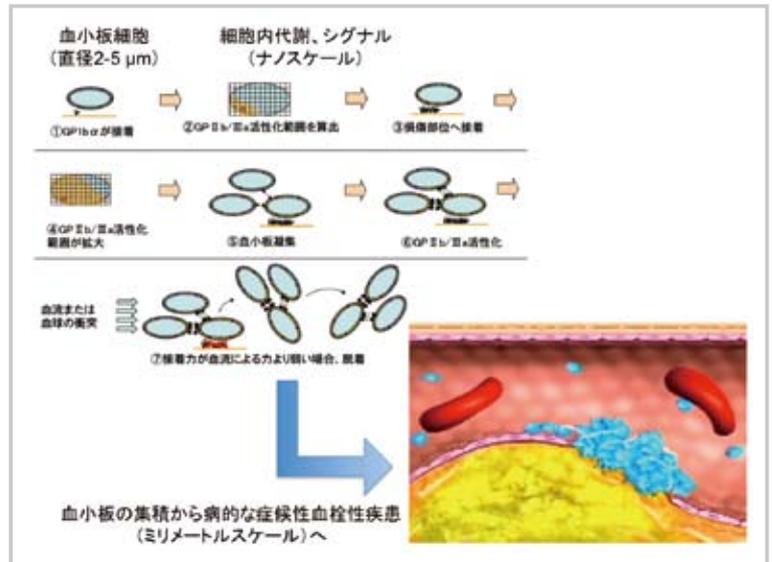
● 後藤 血小板細胞をボクセルで分割して、各ボクセルに細胞内小器官、膜蛋白などの性質を入れて血小板細胞を再構成しております。分割数を増やせば、単一分子まで還元できると期待しています。現時点でも、細胞膜の接着蛋白については、分子スケールの構造解析で得られた接着性の情報との連成をめざしています。われわれが臨床医として、心筋梗塞の再発予防に行う抗血小板薬による治療は、血小板内のCyclo-oxygenase、血小板膜蛋白、受容体蛋白などの分子に対する介入なので、薬剤による分子スケールの介入が血小板細胞の挙動を如何に変化させるかのシミュレーションをめざしています。最終的には、多数の血小板細胞の集積により心臓、脳などの重要臓器を灌流する臓器灌流動脈が血栓性に閉塞するか、その閉塞を分子スケールの薬剤介入により阻止することができるかをシミュレーションしたいと思っています。

また、血小板細胞を構成する分子には、特殊な接着様式を有する接着蛋白など生物学的特徴の明確な分子があります。そこで、血小板細胞シミュレーターは、分子スケールと細胞スケールの連携に役立つと考えています。さらに、多数の血小板細胞の集積が心筋梗塞などの原因になることも分かっていますので、細胞スケールと臓器・全身スケールの連携にも役立つと見込んでいます。分子と血小板細胞の間の関連をシミュレーションで論理的に連成させ、さらに、マイクロメートルスケールの血小板細胞がミリメートルスケールの血管の閉塞にいたる過程、つまり細胞が臓器・全身に与えるインパクトの定量的なシミュレーションを行うことによって、分子スケールと細胞スケール、細胞スケールと臓器・全身スケールという2段階の連成基盤を、血小板細胞を軸として作成していく取り組みでもあるのであります。

血小板細胞は核がなく、分裂しません。また、新たな物質の産生も少ない。機能も止血、血栓の形成に特化しています。構造や機能が比較的単純であるため、シミュレーションによる再現に向いていますので、血小板細胞を用いてひとつの実例を示したいと考えています。また、血小板細胞が心筋梗塞や脳梗塞の発症に重要な関わりを持っていること、血小板細胞の機能を低下させると心筋梗塞や脳梗塞の発症が抑えられることも臨床試験で明らかです。臨床医学の観点では薬剤による分子スケール介入と臓器、全身スケールのアウトカムの関連は明確です。あとは、物理学や工学の視点からも誤りのないシミュレーションができるかどうかです。とはいえ、生体細胞は非常に複雑で、精緻なシミュレーションを行うのは極めて難しい。実際の生体のなかの情報を取ってくることで、コンピュータ上にモデルをつくることを、まさに車の両輪のように合わせて進めなければなりません。コンピュータに入れ込む情報も質的にまだ十分とはいえませんし、その定量性も低いといった課題もあります。血小板細胞は比較的容易とは言ってもプロジェクトとしては非常に難しいチャレンジです。

—— シミュレーターを開発していく上で、いちばんのご苦労は。

● 後藤 私たちが全体像を理解していないことが最大の課題と認識しています。京が利用可能となったとしても、まだ複雑な生体の全てを再現することはできません。何らかの単純化が必須です。全体像をつかんでいないわれわれの行う単純化は、まったく的外れかも知れません。計算資源には限りがありますから、私たちは自分たちの頭のなかで、どの情報を切り捨てるかを選んでいきます。コンピュータという全て自動のよ



うですが、重要な情報を取り込んでモデルを作るのは人間の頭脳の働きです。モデル化が適切な情報選択によりできているのか否かが分からないというのが一番の悩みです。医学で求める人体の神秘を宇宙の神秘に例えるのであれば、現時点での私たちの悩みは広大な宇宙のうち、地球の周辺しか知らない故の悩みなのか、太陽系までしか知らないのか、銀河系まで知っているのか、それとも実はすでにかなりのことを知っているのか、それが分からないのです。太陽系しか分からなくても、宇宙を支配する基本原理は明らかにできるかもしれません。現時点では、確実に分かっている原理を使ってどこまで、人体の現象、病気の転帰を予測できるかやってみることで、そして、予測した結果の妥当性を実証していくことにより予測の妥当性が分かります。真実の姿が見えない対象に対するシミュレーション科学では予測と実証の繰り返しは必須です。真実が見えないなかで自分の行ったモデル化の妥当性を繰り返し明らかにする点ではチャレンジングな学術分野です。私は臨床の医師でもあり、実際の患者さんも診ています。臨床医学の多くが自分の経験と感触に依存していることが毎日体感できています。また、科学的根拠を見い出せないなかで、自分の経験と感触に基づいた個別化の医療を実践しています。多くの医師が経験的に行っている、科学に基づかない個別化医療を論理化、デジタル化するにはどうしたらよいか、その方向性の選択にいつも頭を悩ませています。

—— 取り組みに対する医療の現場の反応はいかがですか。

● 後藤 私が伝えたいことの意味は、みなさんにご理解いただけていると思っています。特に、学会のリーダー的な立場にある方々は「その通り、そういう方向に向かっていかなければいけない」といってくださいます。今日の経験の積み重ねの数値データベース化による医療の科学化という、われわれの世界でEvidence Based Medicineという方法が行き詰っていることも、世界学会のリーダー的な立場にある人が共通に認識していることです。

医療現場、医学教育は経験の数値データベースによる情報の洪水に苦しんでいます。予測的な医療、個別的な医療が必要であるという発想の転換を現場に求めるのは困難です。医療現場の人にわれわれの向かう方向の妥当性を理解いただくためにも、ひとつの例として、血小板細胞シミュレーターを用いた抗血小板治療の実例を示すことは重要です。生命現象であっても、究極的には物理・化学現象の集積であり、その記述言語は数学であるということをもっと多くの人たちに理解してもらいたいと思います。そして、若手の医師や研究者、学生たちがシミュレーション医学の分野に参入してくれることを期待しています。京速コンピュータは、そのための入り口でもあると思っています。

シミュレーション科学の活用で 栄養学や健康管理の新たな可能性が 拓かれることに期待



味の素株式会社 ヘルスインフォマティクス班
グループ・エクゼクティブ・プロフェッショナル

安東 敏彦

■シミュレーションから生まれる新しい視点

— スーパーコンピューティング技術産業応用協議会のライフサイエンス応用分科会でも中心的な役割を果たしておられますが、シミュレーションというものにもともとご関心を持っておられたのですか。

●安東（敬称略） 現状を申し上げますと、食品業界でシミュレーションを活用している事例というのは、非常に限られているといっていでしょう。例えば、冷凍食品を加熱する際に、最も熱効率のよいトレイの形状を開発するためにシミュレーションを行ったり、食品の製造プロセスの設計にシミュレーションを使うとか、その程度です。ただ、当社では、研究開発部門において、血中のアミノ酸濃度を測って健康管理に役立てるという「アミノインデックス」の研究開発に取り組んでいます。これは、代謝物ネットワークの中心的な存在であるアミノ酸の濃度パターン（アミノグラム）を指標として、健康状態を解析できるのではないかと考えたのもで、健康チェックや病気の診断に役立つ情報の提供、薬の効果や副作用の予測などといった新しい事業化の検討や、アミノ酸を利用した新商品開発への活用などをめざすというものです。私もこの研究開発に携わっており、そのなかで、もしかしたらシミュレーションというものがうまく活用できるのではないかと考えたのです。例えば、病気になると生体アミノ酸のパターンというのは変化します。なぜ変わるのかは、いまひとつははっきり分かっていませんが、確かにあるアミノ酸が多くなったり、別のアミノ酸が少なくなったりと、バランスが変わります。こうしたバランスの変化や、そのメカニズムを理解するのはすごく難しいのですが、シミュレーションを使えばうまくいくのではないかといいわけです。そうしたこともあって、現在、バイオスーパーコンピューティング分野で進められている細胞レベルの代謝シミュレーターの研究開発には、とても期待しています。

— 確かに、医学とは異なりますが、栄養学や健康食品の開発などにも、シミュレーションが活用できるかもしれませんね。

●安東 こんなことをいうと、栄養学の先生方に怒られるかもしれませんが、栄養学で教えることというのは、昔からあまり変わっていないように思います。栄養学の分野にシミュレーションによる新しい視点が増えるというのは、とても重要なことだと思います。

福岡伸一さんの著書『動的平衡』にも書かれていますが、人間の体は、だいたい3、4カ月で、全部が置き換わってしまいます。アミノ酸でいうと、まず食事でタンパク質を食べますよね。だいたい1日に70gくらいです。それが消化されて分解して血液に吸収されますが、それによって、1日に180gくらい筋肉などのタンパクに合成されます。その一方で、逆に180gくらいが分解して、アミノ酸になって、遊離アミノ酸として50gくらいが体内にプールされ、そのうちの45gくらいが細胞内、5gくらいが細胞間にあり、血中には1gくらいあります。だいたいそんなバランスになっています。また、血中を通じて70gが便や尿とともに排出されていく、こういうサイクルです（図参照）。そして、そのサイクルで考えると、3、4カ月でほぼ全部置き換わることになります。食べたアミ

ノ酸が、そのままアミノ酸として使われるのではなく、いろいろな代謝を受けて、有機酸になってみたり、アミンになったりしながら、体内に取り込まれているわけです。そんな、ものすごく早い代謝回転がありますが、それでも人間の形は変わりません。同じ形が維持できているということは、すなわち平衡状態を保っているわけです。それが動的平衡です。その動的平衡の中心にあるのがアミノ酸であると、私は勝手に思っているのですが、とにかく、タンパクのターンオーバーというのはすごく大事なわけです。それが体の平衡を支えているといってもよいと思います。実際に早い回転ですが、血中のアミノ酸は、わずか1gです。体重50kgの人は、10kgくらいの筋肉がありますが、それに対して血中には1gしかありません。1万分の1です。しかし、それでも一定の値を保ち、アミノ酸が平衡を保っているわけです。こうしたことをしっかり理解した上で、カロリー数だけでない栄養学というものがあった方がいいのではないのでしょうか。

もうひとつ、興味をもっているのはクロノニュートリション（時間栄養学）です。簡単にいうと、栄養はいつ摂取しても同じというわけではなく、タイミングが大事だという話です。薬では、薬の代謝パターンを考えながら、いちばん副作用が少なく効果があるのはいつか、夜寝る前がいいのか、朝起きたときがいいのか、といったことを研究している先生がおられます。同じように、食事でも、いつどのように食事をとるのが健康バランスを保つ上で効果的なのかを研究している栄養学の先生がおられます。こうした時間という概念を加えた新しい栄養学の分野で、シミュレーションが役に立ちそうな感じがしています。何かを食べるといふパータベーションをかけたときに、人間の代謝が時系列的に変わっていくというのをシミュレートすることができれば、どういった栄養をいつ摂取すれば最も効率的で体にいいか、その人に合った栄養管理に関する情報が提供できるようになるのではないのでしょうか。また、栄養とか代謝というのは超複雑系で、関与する分子も多いですから、なかなかコントロールするのが難しい。ちょっとしたことでバランスが変わってしまうけれど、それを維持するのが大事です。そういったことがシミュレーションで分かってくると、すごく役に立つことが多いのではないかと思います。

■健康シミュレーターも実現可能

— 栄養管理にシミュレーションを活用するというのも新しい視点ですね。

●安東 欧州を中心に世界中の栄養学会で取り組まれているのが、ファイト・アゲインスト・オール・マルニュートリション（すべての栄養不良との闘い）というキャンペーンです。栄養不良は、発展途上国の問題のように思われますよね。確かに、貧困や食料不足で食べられなくて、栄養不良になるケースは多いのですが、日本のような国には栄養不良がないのかというと、そうではないのです。ご高齢の方で栄養不良の方は、結構たくさんおられるのです。例えば消化機能の低下や、食べる気力がなくなるなど、いろいろなことで食べられなくなるケースがあります。また、生活習慣病の食事制限で栄養不良になってしまうケースもあります。

す。どういうパラメーターを管理すれば、栄養不良にならずに済むのか、そういう研究にも、もしかしたらシミュレーションが使えるかもしれません。

病気を治すことももちろん大切ですが、いつまでも健康な体を維持していくということも、とても重要なことだと思います。そのためにシミュレーションにできることが、何かあるように思います。例えば、健康パラメーターのようなパラメーターを見つけて、健康が維持できる方法を個別に提供していくというようなヘルスケアがあってもいいかもしれません。夢物語ですけれども、自分のパラメーターデータを、例えば3か月とか半年ごとに測っておき、そのデータを解析してもらって、自分の健康状態や健康を維持するためのさまざまな処方箋が返ってくるというようなシステムができたらいいですね。それが可視化できるようにしておけば、もっと面白いかもしれません。そんな健康シミュレーターはどうでしょうか。何千万人というたくさんの人たちが登録して、データを集めることができれば、健康のトレンドが明らかになって、将来はこんな病気に備えることが必要だといった「健康予報」なども出せるかもしれません。こうした試みに、産業界全体で取り組んでみるのも面白いかもしれません。

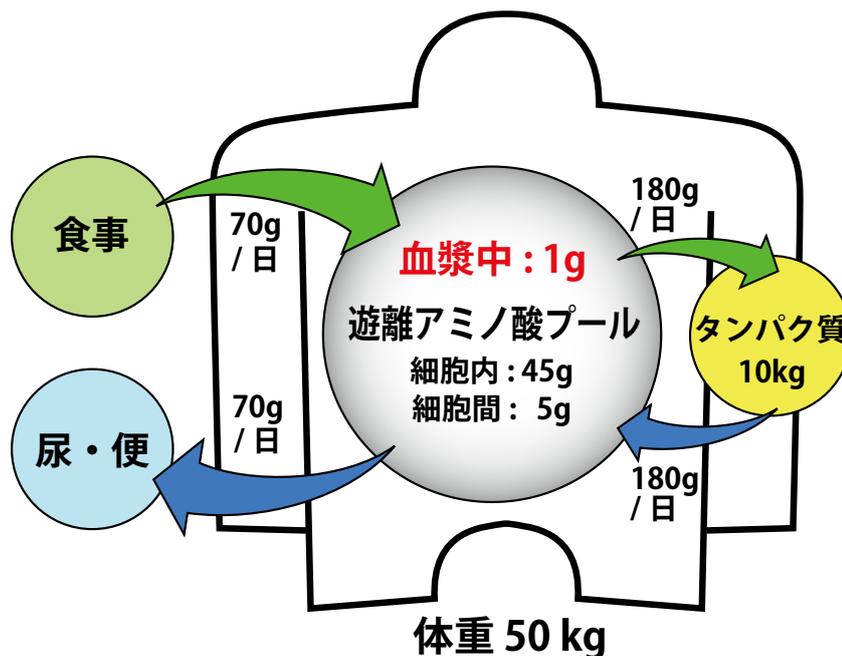
■ 成功事例が示せば産業界は動く

— シミュレーションに対する産業界の反応というのは、まだ弱いと感じてですか。

● 安東 そうですね。分野によっても違うと思います。ものづくりの分野では一生懸命やっておられる企業は多いですよ。ただ、一般的にいえるのは、産業界で活用してもらうためには、学術的なことだけでなく、経済的に大きな効果が得られるかどうかということがとても重要ではないかと思います。シミュレーションを活用すれば大成功するということのみならず、みんなが納得しないと、「使うのもたいへんそうだし」ということになるのではないのでしょうか。何か経済的に大成功した事例を示すことが必要だと思います。どのジャンルにも、それぞれのジャンルごとに成功ルールというものがあります。スパコンをこう使ったら、うまくいった勝ち組になれるといった成功事例、そういうパラダイムが提示できないと、スパコンを使う人は大きく増えないように感じます。成功事例は数多く必要なわけではありません。ただ、大成功した事例が1個あればいいと思います。そうした事例を、今回のライフサイエンス分野でもやってもらいたいと思います。広く浅く進めていくのではなく、可能性のあるものに集中して絞り込んで推進し、突破口となる結果を出してもらえると、産業界の意識も変わっていくのではないのでしょうか。

あとは、いきなりスパコンを使うというのも難しいかもしれません。ハードルが高すぎるように思います。ある種の「お試しシステム」のような仕組みがあるといいのではないのでしょうか。その意味では産・学の連携のあり方なども工夫する必要があります。シミュレーションは学に任せるなど、お互いの得意分野を活かす方法も、検討する必要があるでしょうね。

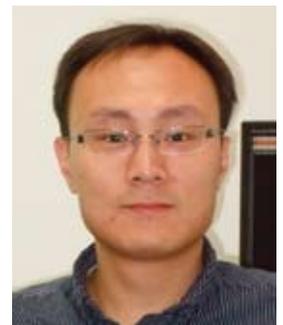
アミノ酸代謝の動的平衡：食事で摂ったアミノ酸等によって、数ヶ月で身体のタンパク質が置き換わってしまいます。



多剤排出トランスポーターの機能を粗視化分子シミュレーションで実証

京都大学理学研究科

(上から) 高田 彰二、姚 新秋、検崎 博生



ほとんどの薬が効かなくなる多剤耐性は、院内感染やがん化学治療などで重大な社会問題を引き起こしています。この多剤耐性化にはいくつかの異なる機構があります。院内感染で大きな問題となった緑膿菌の場合は、細菌膜に存在するRND型などの多剤排出トランスポーターの発現量が増え、抗生物質を菌外に排出してしまうことが主な原因となっています。RND型の多剤排出トランスポーターは、細胞内外の酸性度 (pH) の違いを利用してH⁺ (プロトン) が移動することによって駆動され、その力を利用して薬剤を排出します。大腸菌由来のRND型多剤排出トランスポーター「AcrB」の原子構造は、2002年および2006年に村上聡氏(現、東工大教授)らがX線結晶構造解析を使って解明しました。2002年の構造解析では、AcrBは、同じ分子が3つ集合した3回対称性をもつ3量体をとることが明らかになり、2006年の構造解析では、それぞれの分子が膜のプロトン輸送と薬剤排出の機能をもち、AcrB3量体は非対称な構造をしていることが分かりました。非対称なAcrB3量体構造の1つ目の分子では細胞内に向けた薬剤の入り口と思われる経路が開き(取込型)、2つ目の分子では薬剤が中央に結合し(結合型)、3つ目の分子では細胞外に向けた薬剤排出口が開いていた(排出型)。村上らは、AcrB3量体の3つの分子がこの3つの機能状態を順に経由することで薬剤を排出していると考えました。3つの分子が各々の状態を一段階変えていくことに、構造全体ではちょうど120度回転したように見えることから、この薬剤排出のメカニズムを「機能的回転機構」と名付けました。しかし実験系による検証実験が難しく、この仮説の実証はできていませんでした。

私たちは文部科学省の「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」プロジェクトの一環で、生体分子の粗視化分子シミュレーション技法の開発を独自に進めてきました。本研究では、この新しい技法を適用して、多剤排出トランスポーター AcrBのゆらぎに起因する機能シミュレーションを行いました。

- (1) AcrB3量体の機能的回転と薬剤排出:非対称なAcrB3量体構造のうち、薬剤が結合しているAcrB分子(図1左の青)に細胞外からプロトンが結合すると、薬剤が外側に排出され(図1中央)、それと前後して、ほかの2つのAcrB分子も状態を変化させて機能的回転が起こりました(図1右)。これによりプロトン結合をきっかけに機能的回転が起こり、薬剤排出が生じることが示されました。
- (2) AcrB3量体の休止状態:非対称なAcrB3量体構造から薬剤を取り除くと、3回対称性をもつ構造が安定になることが分かりました。この構造は2002年の構造に近いものです。すなわち2006年の構造解析で得た構造はAcrB3量体が薬剤を排出している途中のスナップショットで、2002年の構造は薬剤がないときの休止状態にそれぞれ対応していると考えられます。

参考文献

Xin-Qiu Yao, Hiroo Kenzaki, Satoshi Murakami & Shoji Takada, Drug export and allosteric coupling in a multidrug transporter revealed by molecular simulations" *Nature Communications*. **1**, 117 (8 pages) (2010)

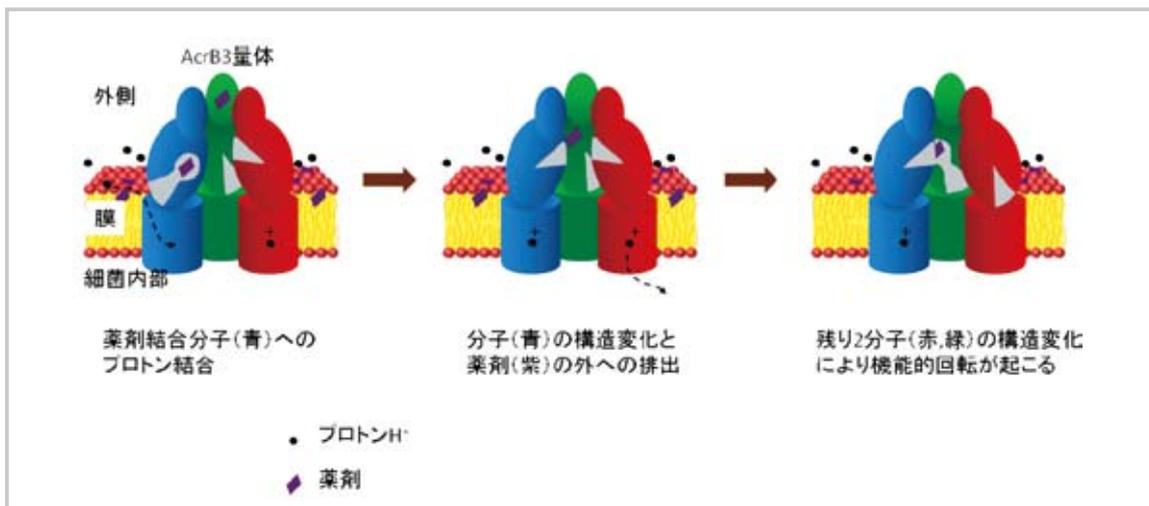


図1: プロトン結合によるAcrBの薬剤排出と機能的回転
AcrB3量体は非対称な構造をしています。1つ目の分子では細胞内に向けた薬剤の入り口と思われる経路が開き(左図の緑:取込型)、2つ目の分子では薬剤が中央に結合し(左図の青:結合型)、3つ目の分子では外側に向けた薬剤排出口が開いていました(左図の赤:排出型)。薬剤が結合している2つ目の分子に細胞外からプロトンが結合すると(左図の破線矢印)、この分子の薬剤は細胞外に排出され(中央図)、ほかの2つの分子も状態を変化させます(右図)。

時空間を考慮した細胞シミュレーション



理化学研究所 次世代計算科学研究開発プログラム

須永 泰弘

生物はすべて細胞という単位から構成されています。地球上には大腸菌のような単細胞生物から人間のような多細胞生物まで1000万種類以上の生物が存在しており、それぞれの生存に最適な状況になるように細胞の機能や形状は異なっています。しかし生物の基本的な細胞機能の仕組みには共通な部分が非常に多いことも知られています。

細胞は非常に複雑かつコンパクトな構造体であり、内部ではオルガネラと呼ばれるコンパートメントごとに様々な生化学反応が活発に行われています。これによって物質や反応を区分し、効率的に様々な生命活動をおこなっています。

これまで、生物の仕組みを理解し、疾患の治療法探索のために、細胞の集合体である臓器をすりつぶし、細胞を無視した研究が多くなされてきました。細胞内では生化学反応(代謝)やシグナル伝達などの複雑な現象によって生命が維持されています。この生化学反応の再現のために多くのシミュレーターが開発され、細胞内の代謝やシグナル伝達を再現することが可能となりました。しかし、これらのシミュレーターは無次元化した領域の計算であり、細胞内をいわば閉じた袋の中で均一に行われる化学反応を再現するものです。実際の細胞の中では、オルガネラ毎に生化学反応が異なり、細胞内の物質の移動、細胞の裏表、細胞内外との物質の出入により細胞の中が不均一な反応をしています。私達細胞スケール研究開発チームはこれらのことに着目し、細胞内の時空間シミュレーションの実現を目指した細胞シミュレーション統合プラットフォーム(RICS)を開発しています。本システムは、細胞内の生化学反応と物質拡散の連成解析を反応拡散方程式で定式化しました。本システムは空間表現に、理化学研究所のVCADシステム研究プログラムで開発されたボクセル解析フレームワークを用いており、細胞内の複雑な空間構造を表現出来るシミュレーションシステムです。

作成したシステムを用いて実際の顕微鏡データから得た細胞形状を用い、内部でのカルシウムイオン(Ca^{2+})の移動、反応、膜輸送担体をシミュレーションしました。細胞形状はヒト肝臓由来細胞であるHepG2細胞株を用い共焦点レーザー顕微鏡を使用して細胞形状および核とミトコンドリアの形状を取得しました。(図1)核は細胞内で一番大きい構造体でありDNAが梱包されています。ミトコンドリアは細胞活動のためのエネルギーを生産する機能を有しており代謝などの生化学反応に重要な場所で

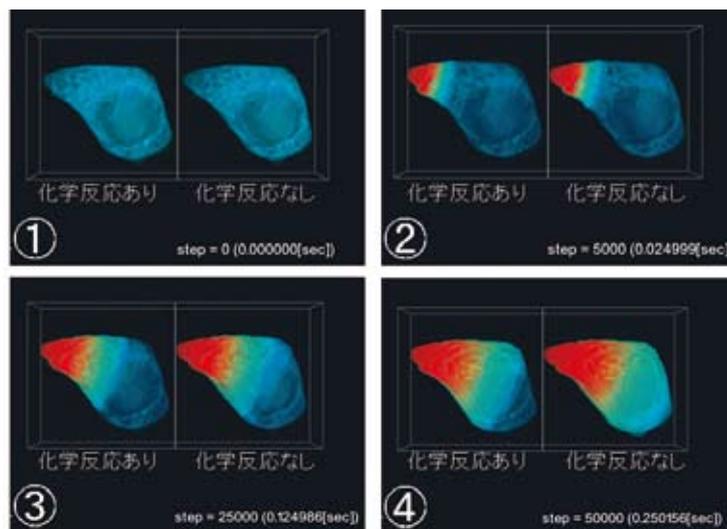


図3: Ca^{2+} 濃度の時間変化(ボリュームレンダリング)

す。顕微鏡画像から3次元Volumeデータを作成し今回の計算に用いました。(図2)細胞内の緩衝反応として10種類の物質と、24種類の生化学反応を設定しました。 Ca^{2+} だけを通過させるチャンネルを図2の矢印に示す細胞膜の一部に局在化させて Ca^{2+} を流入させてシミュレーションしました。

シミュレーション結果を図3に示します。細胞内の Ca^{2+} の緩衝反応を設定した場合(反応有で表示)は、生化学反応が無い場合(反応無で表示)に比べ細胞内 Ca^{2+} のみかけの拡散速度の低下がみられました。これにより実際の細胞内に近い Ca^{2+} の動態をシミュレーションできることが示唆されました。

このRICSは細胞内の生化学反応や拡散などの細胞内での現象を場を考慮して計算することが可能です。今後様々な細胞の機能をモデル化し、薬物反応や疾患の原因解明に活用可能なことを示していきたいと考えています。さらに複数の細胞の塊が組織として機能するシステムについても検討できるツールにしていきたいと思ひます。

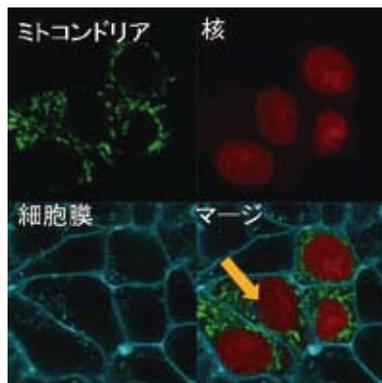


図1: 共焦点レーザー顕微鏡を使用して撮影した細胞の断面画像

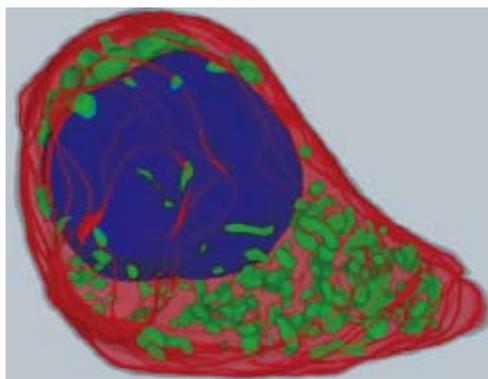


図2: 細胞の連続断面画像から3次元再構築した細胞形状

強力集束超音波による低侵襲治療のためのHIFUシミュレータの開発



理化学研究所 VCADシステム研究プログラム

沖田 浩平

超音波という耳で聞くことができない音を使って、目に見えない体の中を調べることができる超音波画像診断装置が医療の現場で広く用いられています。この超音波画像診断装置で用いられる超音波よりも強力な超音波を腫瘍等のターゲットに集束させ、加熱によって組織を壊死させる治療法があり、HIFU (High Intensity Focused Ultrasound: ハイフ) と呼ばれています。HIFUの一番の特徴は、切開することなく治療できることで、体への負担が少ないという大きな利点があります。このHIFUを用いた治療装置による子宮筋腫や前立腺肥大の治療は既に海外で認可されており、肝腫瘍等に対する治療においても認可に向けた臨床試験が実施されていますが、いくつかの問題点が残っています。例えば、体表から深いところにある肝腫瘍の治療の場合、HIFU装置から発信された超音波は、皮膚から脂肪、筋肉、骨、肝臓といった臓器を伝わって焦点に集束します(図1右)。このとき、超音波が各臓器を過ぎる間に吸収されて減衰したり、超音波が屈折して曲がったり、一部が反射したりということが起こります。このため、体表から深いところにある腫瘍をHIFUで治療する場合には、超音波の減衰によってターゲットを加熱するのに必要なエネルギーが足りなかったり、超音波の反射や屈折によって焦点がぼやけたり、焦点位置がターゲットから外れたりという問題が生じます。そこで、超音波がターゲットに集束するようにHIFU装置を制御するために体の中をどのように超音波が伝播しているかを知る必要があり、CTやMRIで得られる生体情報を利用して、生体中の超音波の伝播挙動をシミュレーションによって再現しようとしています^[1]。

これまでに、図1のような肝腫瘍に対するHIFU治療に対するシミュレーションの結果が得られています^[2]。HIFU装置から発信された超音波が図2のように複雑に伝播して、ターゲットより手前に超音波が集束していることがわかります。この場合には治療したい腫瘍がある部分ではなく、正常な部分が加熱されてしまいます。そこで、発信する超音波を制御して超音波をターゲットに集束させるために、時間反転法^[3]という方法を用います。時間反転法は、ターゲットとなる点に配置した音源から超音波を発信し、その超音波をHIFU装置で受信、受信した信号を時間反転して発信するという方法です。この時間反転法によってHIFU装置を制御してシミュレーションした結果が図3で、超音波がターゲットに適切に集束していることがわかります。このように生体中を複雑に伝播する場合にも、HIFU装置を制御することで体の深いところにある腫瘍をより精度良く治療できることが期待できます。現実には、ターゲットである体の深い部分に音源を置くことが難しいため、HIFU装置の制御パラメータをシミュレーションによって予め求めておくことで、時間反転法を利用した高精度なHIFU治療を行うことが可能になります。したがって、精度の高いHIFUシミュレーションが求められるため、実験との比較によるシミュレーション結果の検証とより高度な物理モデルの導入によってHIFUシミュレータの精度をさらに高めていく予定です。そして、高精度で低侵襲なHIFU治療の近い将来の実現に向けて、HIFU装置の設計および制御から認可に向けた臨床試験、術前の治療計画の検討等にHIFUシミュレータを用いて貢献していきたいと考えています。

参考文献

1. Okita K., Ono K., Takagi S., Matsumoto Y., "Development of High Intensity Focused Ultrasound Simulator for Large Scale Computing", *Int. J. Numer. Meth. Fluids*, Vol.65, pp.43-66, 2011.
2. Okita K., Ono K., Takagi S., Matsumoto Y., "Numerical Simulation of the Tissue Ablation in High Intensity Focused Ultrasound Therapy with Array Transducer", *Int. J. Numer. Meth. Fluids*, Vol.64, pp.1395-1411, 2010.
3. Fink M., Montaldo G., Tanter M., "Time-reversal acoustics in biomedical engineering", *Annu. Rev. biomed. Eng.*, Vol.5, pp.456-497, 2003.

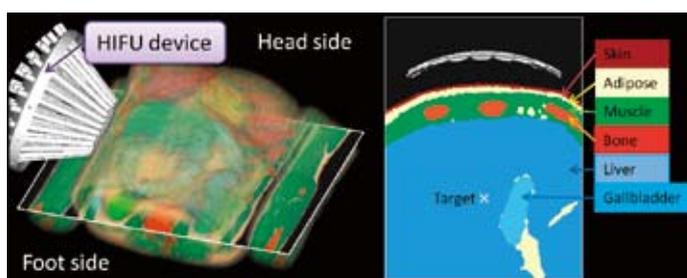


図1: 数値人体モデルを用いた肝腫瘍に対するHIFUシミュレーション
右図は超音波の伝播経路に存在する組織の分布

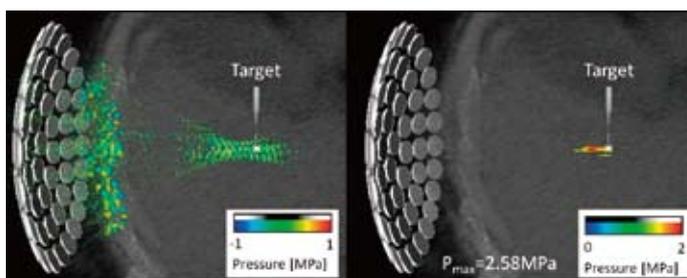


図2: HIFU装置の制御を行わない場合の超音波伝播の様子(左)と焦点の位置(右)

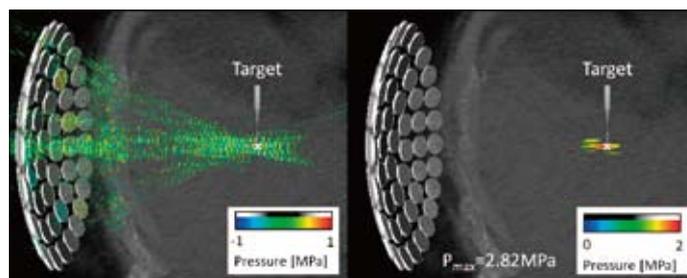


図3: 時間反転法によるHIFU装置の制御を行った場合の超音波伝播の様子(左)と焦点の位置(右)

脳神経系WG

大規模数理モデル構築を目的とした 共有モデル開発プラットフォーム： PLATO

稲垣 圭一郎 ①

観音 隆幸 ②

Nilton L. Kamiji ②

榎村 浩司 ②

臼井 支朗 ①②

① 理化学研究所 次世代計算科学研究開発プログラム

② 理化学研究所 脳科学総合研究センター



脳により営まれている情報処理の解明は、自然科学における最難題に位置付けられています。脳では、約1000億個の神経細胞が約10兆にのぼるシナプスと呼ばれる結合により、ネットワークを形成しています。視覚や聴覚など外界から得られる様々な情報は、こうした脳のネットワークで柔軟かつ適切に処理されていると考えられています。こうした脳における複雑な情報処理は、主として電気生理実験により、その機能が明らかにされつつあります。また、近年の計算科学の飛躍的な進歩に伴い、脳の一部を詳細に数理モデルとして構築しシミュレーションを行うことで、計算科学の立場から脳機能を解明しようとする研究も行われています。しかしながら、未だに脳全体を一つの大型数理モデルとして記述しシミュレーションすることは簡単ではありません。

脳の大規模モデルの構築には、膨大な知識や技術が必要であることから、一人の研究者単独で成し遂げることは困難であり、むしろ多くの研究者の共同作業により、得られた知識を集約・蓄積し、その本質をコンピュータ上で動作する大規模モデルとして統合していくことが重要であると考えられます。我々は、脳の大規模モデルを構築する新しいアプローチとして、従来の生理学的ならびに計算論的研究によって得られた脳の各部位に関する知識や数理モデルを統合して大規模化する方法を研究しています。我々のアプローチでは、データベースサーバ(エール大学のModelDBやNeuroinformatics Japan Nodeの各プラットフォームなど)に登録されている数理モデルや開発に必要なデータの収集・管理ツール、シミュレータなどのモデル開発環境とシミュレーションサーバ、および結果の描画ツールからなる統合モデル開発環境の構築を進めています(図1)。特に、複数のモデルを簡単に結合できるように、モデルの入出力を標準化してデータの受け渡しを可能にするデータフォーマットとその利用支援ライブラリについても研究・開発しています。標準化されたフォーマットは、プログラミング言語を問わない仕組みになっており、例えば、C言語で作られた数

理モデルとPythonで作られた数理モデルというように異なる言語で構築されているモデルの結合も可能にしています。さらに、モデル入出力が標準化されていることから、大規模モデルに統合したモデルの変更・更新、ならびに新しい数理モデルの統合に対してもプラグイン形式で対応が可能です。標準化されたフォーマットにより結合されたモデルのシミュレーションでは、Agentというシステムによって、統合した各数理モデルを一つの大規模モデルとして同時並列に実行することを可能にしています。実行時には各モデルの実行ステップ間隔を考慮した実行管理により、モデル間のデータ通信についても自動的に調整されます。こうした標準フォーマットの利用やAgentによるモデル実行に関するライブラリを提供することで、モデルの作成者は独自のコードをほとんど変更することなく他のモデルと結合可能な数理モデルの開発が可能になるものと考えています。

我々は、脳機能の一つである視覚、つまり「ものを見る」ことに焦点をあて、視覚に関する脳の大規模モデル構築を前述のアプローチにより進めています。ヒトの視覚は、眼球、眼光学系、網膜、脳皮質により構成されており、外界情報が、これらの部位で多層的に処理されることで、物の認識や視線の移動といった機能が実現されています。こうした脳の各部位に関する数理モデルを構築し、前述の方法で統合しシミュレーションを行うことで、ヒトがものを見ている際の脳内情報処理の可視化を目指しています(図2)。今後、次世代スーパーコンピュータを用いて、「視覚」に関わる様々な研究者との共同作業によって、視覚に関わる全脳部位を詳細に記述し、さらに、我々の提案するアプローチによってそれらを統合し、一つの大規模視覚系モデルとして計算機シミュレーションを行うことで、脳内で行われている視覚情報処理の解明が促進されていくものと考えています。

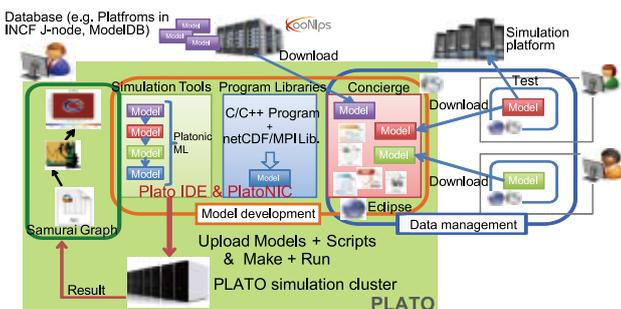
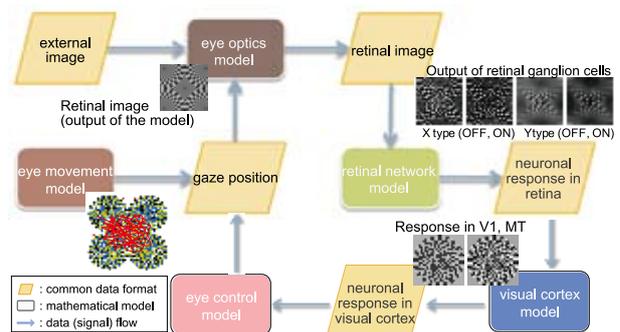


図1: PLATOシステム環境
PLATOはデータ管理ツール(<http://conciierge.sourceforge.jp/>)、モデル開発環境、シミュレーションサーバ、結果の描画ツールの4つの環境から構成されている。

図2: 大規模視覚モデルの構成図
眼球運動、眼光学、網膜、皮質を構成した視覚系の数理モデルとシミュレーション時の各モデル出力のサンプル画像。各脳部位の数理モデルは、それぞれ個別のモデルとして記述されており、標準化されたフォーマット(Common data format)により各モデルが結合されています。



BMB2010 (第33回日本分子生物学会年会 第83回日本生化学会大会、合同大会) における ワークショップ開催報告

日本分子生物学会と日本生化学会は、どちらも1万人を超える会員を擁する、日本の生物学を代表する大きな学会です。殊に2010年においては、両学会の年会在BMB2010と銘打たれ、合同大会として開催されました。我々「生命体統合シミュレーション」プロジェクトとしても、生物学分野へ向けて成果のアピールを図るべく、この大会でワークショップを開催しました。

本プロジェクトは、計算科学の領域から生命科学の諸問題へ向けた挑戦ですが、一方で生物学分野においても計算科学への期待が近年非常に高まっています。このワークショップは、それら双方向からの期待を受けたタイムリーな企画となりました。

プログラムの構成は、企画の趣旨および、プロジェクト全体の概要が

説明された後、生命現象のマルチスケールに渡る研究を、ミクロからマクロまで順に紹介する形となっています。

ワークショップ当日は、100人を超える収容人数をもつ会場に立ち見が出るほどの盛況で、当プロジェクトに対する生物学分野の関心の高さがうかがえました。質疑応答も活発に行われ、プロジェクトメンバーも生物学者からの有意義な意見を得ることができました。

今後、生命科学における、計算科学的方法是、ますます重要性を増していくと考えられます。今後の生命科学においては、実験的方法と計算科学的手法の交流は必須のものとなっていくでしょう。本ワークショップは、そのような双方向の交流を作る一翼を担ったといえます。

生命体統合シミュレーション ウィンタースクール2011

理化学研究所 次世代計算科学研究開発プログラム 石峯 康浩 (臓器全身スケールWG)

東京大学医科学研究所 浦久保 秀俊 (脳神経系WG)

理化学研究所 次世代計算科学研究開発プログラム 須永 泰弘 (細胞スケールWG)

理化学研究所 次世代計算科学研究開発プログラム 舛本 現 (開発・高度化T)

理化学研究所 次世代計算科学研究開発プログラム 三沢 計治 (データ解析WG)

理化学研究所 次世代計算科学研究開発プログラム 宮下 尚之 (分子スケールWG)

2011年1月6日7日両日に渡り、兵庫県神戸市にあるニチイ学館神戸ポートアイランドセンターにおいて、「次世代生命体統合シミュレーションソフトウェア研究開発(ISLiM)」生命体統合シミュレーションウィンタースクール2011が開催されました。ISLiMは、普段は、分子スケール、細胞スケール、臓器全身スケール、データ解析融合、脳神経チーム高度化というチームから成り立っています。ISLiMでは、創薬や治療法開発へと繋がる研究を目指し、京速コンピュータ「京」の性能をフルに発揮することで、生物の様々な時空間スケールに渡る生命科学関連の数値シミュレーションや大規模データ解析研究を行うためのソフトウェアを開発中です。

このウィンタースクールは、ISLiMのプロジェクトに参加する若手研究員が中心となり企画・運営を行い、参加者は48名でした。開会に当たって、茅幸二プログラムディレクターからの挨拶がありました。次に、姫野龍太郎副プログラムディレクターから今後のISLiMがどう運営されていくかについての講演がありました。

次のセッションでは、高速計算の専門家からなる高度化チームから話してもらいました。似鳥啓吾さんは、長崎大学の濱田さんとともにGPUからなるコンピュータで2009年のSCのprice/performance部門でGordon Bell賞を受賞された時のエピソードを語ってもらいました。大野洋介さんは、Gordon Bell賞でfinalistまで行った経験から、Gordon Bell賞の審査の過程などを解説してもらいました。また高度化チームの小山洋さんからは、「京」でハイパフォーマンスコンピューティングを行う上での厳しい意見をもらいました。

次のセッションは、参加者を4つの分科会に分けて行いました。各分科会は、それぞれ分子動力学、血流、脳、ゲノムの4分野から最近の研究論文を選び、その論文を叩き台にしたブレインストーミングを行いました。普段は顔合わせできないチーム間の垣根を乗り越えるため、分科

会をあえて普段のチームを越えるようにメンバーを配分しました。高性能計算という視点から活発な議論を行いました。

その後、懇親会があり、さらにポスター発表があり、全員の研究発表に触れる機会を設けることができました。議論は深夜、部屋の使用期限が切れるまで熱く続けました。

翌日、朝一番で、分科会での議論をまとめ、各々15分ほどで発表する機会が設けられました。分子動力学分科会では、ウイルスキューブシドたんぱくを例にとり、細胞環境をできるだけ考慮したタンパク質の研究へと進むことを議論しました。血流分科会は、血小板もシミュレーションに含めることで血栓形成をシミュレーションの主題とし、血栓形成による梗塞という結果を目指す案がありました。脳分科会は実時間で、ネコ科の動物、たとえばライオンの挙動を操作することを考え、脳活動の多チャンネルデータの実時間処理や、ニューロンネットワークを含む内部モデルの構築とその実時間処理を議論しました。「京」の敷地にライオンを飼う場所を探さなければならないという冗談も飛び出しました。ゲノム分科会は、ゲノム配列解析に関して、突然変異などでゲノム配列同士の不正確な一致しか得られない場所を探すアルゴリズムを探ることなどが議論されました。各分科会とも、計算手法については高度化チームと密接に連携するということを目指します。

最後のセッションは、ISLiMの第一走者ソフトウェアの一つとして昨年末に公開された(<http://www.cafemol.org/>)「生体分子粗視化シミュレーションプログラムCafeMol」について京都大学の検崎博生さんに話していただきました。さらに、ゲノム医科学研究センターの藤本明洋さんからは、Nature Genetics誌に公表された、「超並列シークエンサーを用いた日本人ゲノム配列決定と包括的解析」というタイトルで講演いただきました。この研究はいくつかの新聞でも取り上げられていました。

BMB2010 ワークショップ 「次世代生命体統合シミュレーション」

12月9日(木) 14:30 ~ 16:30 神戸国際展示場 2B会議室
 オーガナイザー：望月 敦史 (理研・基幹研)
 横田 秀夫 (理研・次世代計算科学)



| | |
|------------------------|---------------------------------------------------|
| 姫野龍太郎 (理研・次世代計算科学) | 次世代スーパーコンピュータと生命科学でのグランドチャレンジ |
| 杉田有治 (理研・基幹研) | 全原子分子動力学計算による膜輸送装置Secトランスロコンの構造変化の解析 |
| 高田彰二 (京大・理) | 分子シミュレーションによる多剤排出トランスポーターの作動機構研究 |
| 末松誠 (慶大・医) | 質量分析技術により強化された細胞内コンパートメントを勘案した肝細胞代謝シミュレーションの開発と応用 |
| 高橋恒一 (理研・基幹研) | 進む細胞シミュレーション - 京でどこまで行けるか |
| 高木周 (理研・次世代計算科学; 東大・工) | 循環系マルチスケールシミュレータの構築に向けて |



今回のウィンタースクールでの交流が、「京」の性能を引き出し、創薬や治療法開発へと繋がっていくことを願ってやみません。ウィンタースクールの最後に、京速コンピュータ「京」の設備を見学させていただきました。ライオンを飼う場所はなかったようです。(文責：三沢)

生命体統合シミュレーション ウィンタースクール2011 プログラム

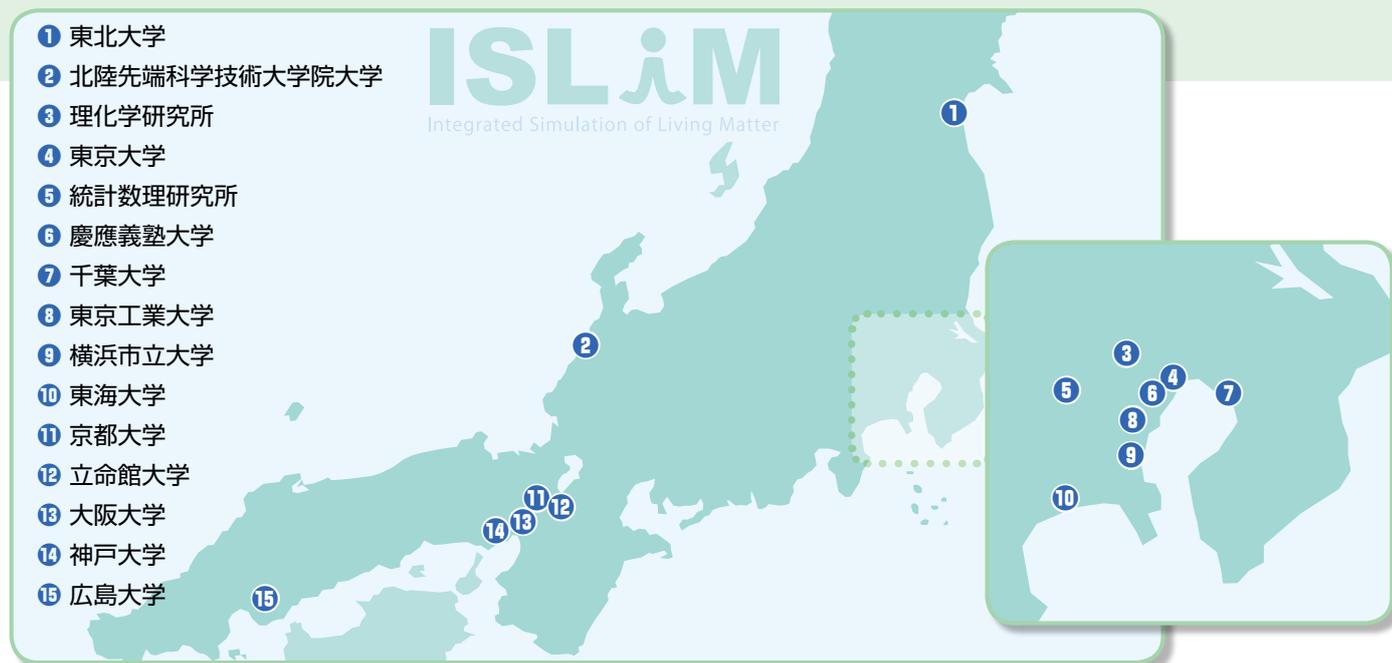
【1日目】1月6日(木)

| | |
|---------------|-----------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
| 13:15 ~ 13:45 | 開催挨拶 茅 幸二 (プログラムディレクター) |
| 13:45 ~ 15:15 | 今後のISLiM 姫野 龍太郎 (副プログラムディレクター) |
| 15:15 ~ 16:15 | 休憩とチェックイン |
| 16:15 ~ 17:15 | Gordon Bell 賞について 大野 洋介 (高度化チーム) 小山 洋 (高度化チーム) 似鳥 啓吾 (高度化チーム) |
| 17:15 ~ 19:15 | 生物学のための計算科学勉強会 分子動力学 司会：宮下 (分子スケール) 脳 司会：浦久保 (東大) 血流 司会：七澤 (東海大) 石峯 (臓器スケール) ゲノム 司会：三沢 (データ解析融合) |
| 19:15 ~ 19:30 | 休憩 |
| 19:30 ~ 24:00 | 懇親会&ナイトセッション ポスター発表 ポスターツアー |

【2日目】1月7日(金)

| | |
|---------------|---------------------------------------------------------|
| 8:00 ~ 9:00 | 朝食 |
| 9:00 ~ 10:15 | 生物学のための計算科学勉強会発表 分子動力学、脳、血流、ゲノムの各グループより |
| 10:15 ~ 10:30 | 休憩 |
| 10:30 ~ 11:00 | 生体分子粗視化シミュレーションプログラム CafeMol 検崎 博生 (京大理学研究所) |
| 11:00 ~ 11:30 | 超並列シーケンサーを用いた日本人ゲノム配列決定と包括的解析 藤本 明洋 (理研ゲノム医科学研究センター) |
| 11:30 ~ 12:00 | 総合討論 閉会挨拶 |
| 12:30 ~ 13:30 | 昼食 |
| 13:30 ~ 14:30 | 理研計算科学研究機構見学 |

ISLiM参画機関map



イベント情報

■ 大阪大学蛋白質研究所セミナー／（共催）バイオスーパーコンピューティング研究会

- 3月4日（金）：New Era of Biosimulations with Super Computers
- 3月5日（土）：講習会：分子シミュレーションと細胞内ネットワーク解析の実際
- 場 所：大阪大学蛋白質研究所本館1階セミナー室（吹田キャンパス） 〒565-0871 大阪府吹田市山田丘3-2
- 連絡先：中村春木 (harukin@protein.osaka-u.ac.jp)

イベント報告

■ 次世代スーパーコンピューティング・シンポジウム2010 および第1回戦略プログラム5分野合同ワークショップ

2011年1月17日、神戸市ポートアイランドにて「次世代スーパーコンピューティング・シンポジウム2010および第1回戦略プログラム5分野合同ワークショップ」が開催されました。京速コンピュータ「京」を運用する理研 計算科学研究機構と「京」を活用して研究に取り組む5つの研究分野の関係者が初めて一堂に会し、参加者はおよそ300名と大盛況でした。計算科学分野と計算機科学分野が連携・融合し、ブレクスルーを生み出すことで、社会や生活に貢献していこうとする姿勢が、活気にあふれた討議の様子から伝わってきました。



BioSupercomputing
Newsletter

Vol.4
2011.2

「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、文部科学省の委託事業で、京速コンピュータ「京」の性能を最大限活用するペタスケールのシミュレーションを実現するため、分子から全身まで生体内で起こる様々な現象を統合的に理解するためのシミュレーションソフトウェアの研究開発を進めています。

発行：平成23年2月

独立行政法人 理化学研究所社会知創成事業
次世代計算科学研究開発プログラム

〒351-0198 埼玉県和光市広沢2-1
TEL:048-462-1488 FAX:048-462-1220
<http://www.csrp.riken.jp>