The University of Osaka
Institutional Knowledge Archive

Title	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」
Author(s)	野崎, 一徳; 田中, 正夫
Citation	サイバーメディアHPCジャーナル. 2013, 3, p. 5-7
Version Type	VoR
URL	https://doi.org/10.18910/70464
rights	
Note	

The University of Osaka Institutional Knowledge Archive : OUKA

https://ir.library.osaka-u.ac.jp/

The University of Osaka

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」

野崎一徳[†‡]　田中正夫[†]
[†]大阪大学　大学院基礎工学研究科　機能創成専攻
[‡]現在、大阪大学　歯学部附属病院

1. はじめに

HPCI 戦略プログラムは、スーパーコンピュータ「京」を中心とした HPCI（High Performance Computing Infrastructure）を最大限に活用することによって、戦略的に取り組むべき５つの研究分野において画期的な成果を産み出し、計算科学技術の飛躍的な発展を目指す文部科学省のプログラムであります。

2012 年 11 月 2 日に、京速コンピュータ「京」（理化学研究所計算科学研究機構、神戸市ポートアイランド）が、世界で初めて LINPAK による密行列演算のベンチマーク結果で 10 Peta Flops を達成しました。京速コンピュータを代表とするハイパフォーマンス・コンピューティングは、生命科学、医療ならび創薬研究において、コンピュータシミュレーションによる定量的な予測科学において大きな貢献をするものと期待されております。特に創薬研究・開発で必要不可欠となっている分子動力学計算等では、10 Peta Flops という性能を有効活用することで、今後わが国の製薬産業界にとって他に先駆けて新たな疾病に対応した薬剤の開発をタイムリーに提供できるような高循環型製薬プラットフォームの構築につながると考えられます。

こうした世界最高規模の高性能計算機も、製薬企業、あるいは大学、研究所ユーザにとって利用可能なシステムとなって、初めて意味が出てくることになります。HPCI は、スーパーコンピュータ「京」を広域分散大規模計算機環境の中心部に組み込み、全国の計算機資源とインターネットを介して結びつけることで、ユーザとスーパーコンピュータ「京」の距離を段階的に近づけるプロジェクトであります。そういった意味で、スーパーコンピュータ「京」だけでなく、それに必須な大規模記憶装置、ミドルウェア、アプリケーション、可視化装置等を一つの大きな計算機環境として捉えた時、HPCI の具体的な姿が現れると思われます。

このような HPCI 戦略プログラムの戦略分野 1「予測する生命科学・医療および創薬基盤」（http://www.kobe.riken.jp/stpr1-life/）における人材育成活動の一貫として、本学大学院基礎工学研究科と大学院情報科学研究科の教員がチームとして教育プログラムを担うこととなり、2011 年 4 月より活動を開始いたしました。本教育プログラムでは、大学院正規学生を主対象とした教育科目と、アウトリーチ活動としての産学連携セミナーとを両輪としています。

2. 大学院生向け教育科目

大学院生を対象とする正規科目としての教育は、本プログラムの主体と位置づけられており、2011 度より本人材育成プログラム科目として内容の改訂・充実を行った「バイオシミュレーション特論」、2012 年度より新たに正規科目とした「バイオインフォマティクス」は、いずれも基礎工学研究科科目部科目として開講していますが、後者については情報科学研究科の教員が主担当となっています。これらは、臨床医工学融合研究教育センターのスキルアップ講座の一部としても位置づけられており、少数ながら学外からの受講者（他大学学生や社会人）も受け入れています。

「バイオシミュレーション特論」の主な内容は、野村泰伸教授（基礎工学研究科）によるバイオシミュレーション特論、計算生理学概論、身体運動機能とその崩壊の数理シミュレーションや、中沢一雄招へい教授（基礎工学研究科・国立循環器病研究セン

ター）の心臓の興奮伝播シミュレーション、さらに、和田成生教授（基礎工学研究科）および筆者らのグループによる循環器，骨格系バイオメカニクスシミュレーションとその演習となります。演習では、心臓の興奮伝播シミュレーションや、骨のリモデリングシミュレーションなどを受講者が実際に実行・体験したり、並列計算を行うための基礎的な知識を習得した上で、実際にバッチキュー方式による計算実行を実地に体験したりしていただいております。

一方で、「バイオインフォマティクス」では、坂田恒昭特任教授（基礎工学研究科）による、計算科学による新しい創薬に関する講義、江口至洋講師（理化学研究所・当分野副プログラムディレクター）による細胞のシステム生物学と合成生物学、そして、松田秀雄教授（情報科学研究科）のグループによる遺伝子ネットワークの情報解析と実習、萩原兼一教授（情報科学研究科）のグループによる並列計算の医療への応用に関する講義と実習を実施しております。

3. 産学連携・アウトリーチ活動

3.1　産学連携セミナー

アウトリーチ活動として、2011 年度の「京速コンピュータ「京」と創薬・医療の産学連携セミナー」を、大阪（阪急グランドビル）と東京（東京国際フォーラム）にて合計 2 回開催いたしました。2012 年度も「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」として、前年度と同様に、大阪（梅田センタービル）と東京（フクラシア東京ステーション）にて合計 2 回開催いたしました。いずれも当初想定しておりました参加人数を上回る参加をいただき、充実した交流を行うことができました。

本セミナーは、創薬に直接関係しておられる民間企業からのご講演を中心に構成している点が特徴のひとつであり、幅広い関連分野からご参加をいただいております。このことから、スーパーコンピュータ「京」の産業利用に貢献するための重要な情報交換の場として、本セミナーを利用いただけているのではないかと考えております。一方で、基調講演では、今井隆志氏（理化学研究所）による「インシリコ創薬の新機軸：3D-RISM 理論（溶媒和の統計力学）に基づくリガンドマッピング法」、泰地弘人氏（理化学研究所）による「スパコン「京」の設計思想と生命科学への展開」、杉本直己氏（甲南大学）による「核酸医薬品創製のためのスパコンへの期待」、奥野恭史氏による「スパコン京の創薬応用への期待：世界最大規模の化合物空間からのインシリコ創薬の実現へ」、そして北野宏明氏（システム・バイオロジー研究機構）による「システムズバイオロジーのための京コンピュータへの期待」といったトピックスを提供することができました。

また本セミナーでは、その時々における「京」利用に向けた進捗状況の紹介を組み入れることで、「京」稼働開始からは、実際に「京」利用をするために、ミニ「京」と呼ばれる同一アーキテクチャの小型スパコンの利用者募集なども行われました。このように、産業界からの「京」への期待の受け皿として、その一端を担うことができているのではないかと考えております。

3.2　シンポジウム・特別講演会

定期的に開催する産学連携セミナーとは別に、時々の企画として、2011 年度は、第 8 回大阪大学医工情報連携シンポジウム「スーパーコンピューティングと医療・バイオ」を大阪大学臨床医工学融合研究教育センターと共催しました。その際、所謂ビックデータを視野に入れた中村春木教授（大阪大学蛋白質研究所・当分野マネージャー）による「大量データと大規模計算機による蛋白質の分子シミュレーション」をはじめとする最先端の HPC 環境を駆使した話題提供をいただきました。

また関連学協会との連携活動として、「予測する生命科学・医療および創薬基盤」教育プログラム特別講演会・シンポジウムを開催し、特別講演として高木周教授（東京大学・戦略課題 3 予測医療に向けた階層統合シミュレーション代表）から「次世代スパコンの医療応用に向けて」を講演していただきました（図参照）

4. おわりに

HPC は計算科学の進歩に後押しされる形で、少し時間を置きながら徐々に一般的に利用されるようになってきていると思われます。先端研究においては、その計算科学のフロンティアで新たな道を開拓し、そこで活躍することの重要性はいうまでもないと思います。その一方で、HPC 環境を実問題の中での着実な普及を図るためには、大学院レベルの講義や実習に HPC のエッセンスを交えながらごく当たり前のこととして HPC 環境を活用できるような人材を着実に育成することが不可欠であると考えています。このような考え方のもとに、本教育プログラムを通じて、コンピュテーショナルフィジオロジー、バイオインフォマティクス、コンピュテーショナルバイオメカニクスなどを中心に、高度な計算機利用を踏まえた教育の推進に寄与することができれば幸いであります。

今後は、医療の世界もあらゆる情報の電子化がさらに進行し、それらの膨大なデータが検索可能な時代に突入します。こういった膨大なデータの処理と有効活用は、超高齢化社会に向かう我々の未来を左右する問題となってくることでしょう。この問題に立ち向かうことのできる人材を一人でも多く育成することは、今日的要請のひとつであるといえます。そのためには、HPCI という大規模な資源の統合利用・運用が可能な情報基盤が整備されつつある事は我が国の創薬・医療分野にとどまらず、ひろく産業界にとって喜ばしいことであります。

本教育プログラムの活動につきましては、http://hpci.me.es.osaka-u.ac.jp/ を通じて適宜にお知らせしてまいる予定でございます。幅広く皆様のご参加をお待ちいたしております。

図「予測する生命科学・医療および創薬基盤」教育プログラム特別講演会・シンポジウム