

兵庫県立大学 計算科学連携センター ニューズレター

第3号

平成31年4月1日発行

センター長挨拶



永野 康行（センター長, シミュレーション学研究科長 教授）

平成31年4月よりセンター長を拝命しました。この5月からは平成から令和となり、計算科学連携センターにとっても新しい幕開けとします。

平成26年4月、神戸情報科学キャンパス内に、兵庫県立大学の全学センターとして「計算科学連携センター」が設置され、5年目を迎えました。この間、計算科学連携センターは、スーパーコンピュータ「京」を有する隣接の理化学研究所計算科学研究センター（R-CCS）との共催事業の実施や、“計算科学連携センター学術会議”の定期開催等による教育交流を推進して参りました。また、計算科学振興財団（FOCUS）をはじめ、国内外の大学、研究機関及び民間企業と連携し、広範な分野での研究交流も実施してきたところです。

今後も、社会的要請のあるビッグデータ解析や多様な分野におけるシミュレーションを用いた予測等に資する人材育成を支援すべく、関係機関との教育交流を積極的に進めていくとともに、計算科学分野及び計算機科学分野における研究交流を一層深めていく所存です。また、大型放射光施設 SPring-8 や X線自由電子レーザー施設 SACLA、実大三次元震動破壊実験施設 E-ディフェンスに対する、情報科学に手法による高速化、高精度データ解析法や可視化技術の開発を進め、放射光科学や防災減災研究との連携もさらに一層進めていきます。

関係機関及び関係者の皆様のより一層のご支援をお願いいたします。

第1回計算科学連携センターシンポジウムを開催

安田 修悟（シミュレーション学研究科 准教授）

計算科学連携センターシンポジウム「生命・医療分野における数理・AI・計算科学の展望」が2018年11月14日(水)に兵庫県立大学神戸情報科学キャンパス大講義室において開催されました。今回は産業分野の教員(畑、鷺津、安田)が中心となり準備を進めました。本シンポジウムは計算科学振興財団(FOCUS)、理化学研究所計算科学研究センター(R-CCS)から後援を受けています。

はじめに、本学学長の太田勲先生から開会の挨拶を頂いたあと、特別講演として大阪大学栄誉教授の柳田敏雄先生に「ゆらぎでひも解く脳と AI」という講演タイトルで最先端の脳科学と AI について大変興味深いご講演を頂きました。さらに、北海道大学の根本知己先生からは、「非線形光学過程を用いた生体顕微イメージングの展開」という講演タイトルで最先端の生体顕微イメージング技術について、九州大学の岩見真吾先生からは、「多階層数理モデルに基づく経時的ゲノム進化動態の定量的解析基盤の構築に向けて」という講演タイトルで遺伝子進化動態の新しい解析基盤を構築する数理モデルについて、それぞれ生命・医療分野における最先端の技術と理論についてご講演を頂きました。

また、ご講演を頂いた 3 名の先生とシミュレーション学研究科長の畑豊がパネリストとして登壇し、参加者とのパネルディスカッションも開催いたしました。パネルディスカッションでは、これからの生命・医療分野への数理・AI・計算科学の重要性が認識されるような活発な議論が展開されました。

シンポジウムの参加者は 48 名でした。プログラムの最後に、講演者、参加者の交流を深めるための懇親会を開催しました。懇親会のはじめに本学副理事長の伊藤聡様から乾杯の挨拶を頂きました。プログラムは下記の通りです。

13:00～13:10 開会の挨拶 太田 勲 (学長)

13:10～14:10 特別講演 (司会 畑 豊)

柳田敏雄(大阪大学栄誉教授, 情報通信研究機構 脳情報通信融合研究センター長, 理研生命機能科学研究センター細胞動態計測研究チームリーダー)

「ゆらぎでひも解く脳と AI」 Fluctuation opens the new research direction of brain and AI

14:15～15:00 パネルディスカッション (司会 鷲津仁志)

「生命・医療分野における数理・情報・計算科学の展望」

パネリスト: 柳田敏雄, 畑 豊(シミュレーション学研究科長), 根本知己(北海道大学), 岩見真吾(九州大学)

(司会 安田修悟)

15:15～15:45 「非線形光学過程を用いた生体顕微イメージングの展開」

根本知己(北海道大学電子科学研究所教授, 北大ニコニイメージングセンター長)

15:45～16:15 「多階層数理モデルに基づく経時的ゲノム進化動態の定量的解析基盤の構築に向けて」

岩見真吾(九州大学理学研究院准教授)

16:15～16:20 閉会の挨拶 畑 豊(シミュレーション学研究科長)

17:00～19:00 懇親会

(会場: 神戸大統合拠点 ラウンジ)



会場の様子(パネルディスカッション)

「革新的中分子創薬技術の開発」プロジェクトのご紹介

肥後順一(シミュレーション学研究科 特任教授)

福田育夫(シミュレーション学研究科 特任教授)

我々は、国立研究開発法人日本医療研究開発機構(AMED)の次世代治療・診断実現を目的とする創薬基盤技術開発事業の中で、「革新的中分子創薬技術の開発」プロジェクトに関わり、中分子シミュレーション技術の開発に携わっています。ここでその紹介をします。

従来の創薬化学の対象である低分子の新規な創薬標的の発見は年々難しさを増していて、その開発費も莫大になっています。そこで近年、低分子あるいは抗体医薬品ではなく、中分子を用いた創薬を行う必要性が認識されています。低分子は構造変化(構造多型)の小さな分子ですので、作用する標的蛋白質の分子表面となるべく適合する低分子を発見することが研究の中心となります。一方、中分子が薬として機能するには、まず体の各細胞にある細胞膜を透過する必要があります。細胞膜は細胞を守っているわけですから、ある程度の大きさを持つ中分子を透過させることは自明ではありません。中分子は水溶液中そして膜中でそれぞれ異なる構造をとることで膜透過性を獲得していると考えられていますが、分子レベルの詳細なメカニズムには不明な点が多く、我々はこれを分子シミュレーション等によって明らかにしようとしています。そして膜透過の次には、中分子が標的蛋白質に特異的に結合する必要があります。つまり細胞内で特定の機能を有する蛋白質とうまく相互作用しなければ、想定する「薬」としての機能が発揮されません。細胞内蛋白質の構造はゆらいでいますが、ゆらぎの過程で一過的に形成される溝などを中分子の標的にできれば、創薬の対象範囲が広がると期待されています。つまり中分子創薬では中分子および標的蛋白質の構造多型の理解が不可欠です。しかし、実験から得られる構造多形の情報は不十分です。我々は、この課題に対し、分子シミュレーションを用い取り組んでいます。このような系を扱うには、高い構造自由度からくる困難を克服する必要があり、従来の計算技術では実用上不可能です。この解決のために我々の開発してきた効率的分子動力学の技術を用います。

以上の研究を含めた計算科学的研究を、産業技術総合研究所の福西快文博士が統括しています。その研究開発分担者として兵庫県立大学の神谷成敏特任教授が参画しており、そこで我々が研究を進めています。また実験サイドから電子顕微鏡解析グループ(統括:藤吉好則名古屋大学教授)と、核磁気共鳴法のグループ(嶋田一夫東京大学教授)が参画し、我々計算科学のグループと協力して研究を進めています。さらに、複数の製薬企業、バイオ、IT関連の企業が参画しています(全体総括:嶋田教授)。本プロジェクトにより、中分子創薬の基盤技術を確立し中分子創薬開発研究が加速することを目指しています。

セミナー等の開催

鷲津 仁志 (センター長代行, シミュレーション学研究科 教授)

LAMMPS 利用セミナー

昨年度、一昨年度に引き続き、LAMMPS 利用セミナーを計算科学振興財団 (FOCUS) 様との共催で 4 回開催しました。材料開発に用いる分子動力学シミュレータの LAMMPS は、京コンピュータで産業利用が最も多いアプリケーションであり、FOCUS スパコンでも多数の企業が利用しています。LAMMPS はオープンソースであり無料で使用できる反面、日本語マニュアルや文献、サポート体制は十分ではありません。そこで、大学院生や教員、企業研究者を対象に、「基礎的利用セミナー」を 7 月 12 日、11 月 21 日、応用編である「仮想実験セミナー」を 8 月 1 日、12 月 5 日に開催いたしました。会場および計算機は、FOCUS のものをお借りしました。講師および企画を担当いただきました防衛大 萩田先生、RIST 吉澤様、富山様、FOCUS 木下様はじめスタッフの皆様のご協力で実現できました。ありがとうございます。

第 8 回 計算科学連携セミナー

2018 年 3 月 15 日に、兵庫県立大学神戸情報科学キャンパス大講義室にて開催しました。本年度は、日本トライボロジー学会第三種研究会の第 25 回 分子シミュレーションのトライボロジーへの応用研究会との共催でした。題目は以下です。

大森 彩子 氏 (本田技術研究所)

「潤滑油の分子シミュレーション」

清水 陽平 氏 (ジェイテクト)

「大規模シミュレーションによるブレンド系ポリマーの比誘電率推定」

高田 真太郎 氏 (ミネベアミツミ)

「分子動力学法によるエステル油中の極圧添加剤の金属表面への吸着挙動」

座談会

「企業の研究開発における分子シミュレーション」

第 5 回工業高等専門学校との研究交流会

2018 年 3 月 8 日神戸情報科学キャンパス 3 階 313 セミナー室にて開催いたしました。昨年に引き続き、研究と教育に関する活発な議論が交わされました。題目は以下です。

白井 茉似那 (兵庫県立大学大学院シミュレーション学研究科・博士前期課程 2 年)

大谷 英之 (理化学研究所 R-CCS・研究員)

永野 康行 (兵庫県立大学大学院シミュレーション学研究科・教授)

「都市における複数規模の地震動による建物応答シミュレーションー建物応答結果を用いたドア枠と天井の被害予測ー」

永井 まゆ佳 (明石工業高等専門学校 建築・都市システム工学専攻・専攻科 1 年)

中川 肇 (明石工業高等専門学校 建築学科・准教授)

「話し合い・備える防災ー主体性を育む児童、共動性を目指した視覚・聴覚障がい者への防災出前講座の実践ー」

高田 一貴 (呉工業高等専門学校 機械工学科・教授)

澤井 源太郎 (呉工業高等専門学校 プロジェクトデザイン工学専攻・専攻科 1 年)

「攪拌装置の所要動力予測と高効率化に関する考察」

尾川 茂 (呉工業高等専門学校 機械工学分野・教授)

「縦渦から放射される空力騒音の発生機構」

佐伯 文浩(津山工業高等専門学校 総合理工学科 機械システム系・准教授)
「液膜のダイナミクスに関する数値計算」

若林 勇太(舞鶴工業高等専門学校 電子制御工学科・助教)
「キッキング作業支援ロボット KitPaDYーコンセプトと作業時間の計算」

畑 豊(兵庫県立大学大学院シミュレーション学研究科・研究科長、教授)
「今後の高専との連携について」

その他

計算科学連携センターは、兵庫県立大学の産学連携・研究推進機構 (<http://www.u-hyogo.ac.jp/research/>) に属する全学の組織です。2019年4月より、社会情報科学部 (<http://www.u-hyogo.ac.jp/sis/>) の1期生が入学しましたが、連携センターの教員も活躍しております。また、理化学研究所とのクロスアポイントメント制度を利用して、理化学研究所 計算科学研究センター 総合防災・減災研究チームの大谷 英之研究員がシミュレーション学研究科客員准教授に着任いたしました。宜しく願いいたします。

兵庫県立大学
計算科学連携センター
(神戸情報科学キャンパス経営部)

〒650-0047

神戸市中央区港島南町 7-1-28

Tel: 078-303-1901

Email: gim@sim.u-hyogo.ac.jp

<http://www.simulation-studies.org/ccwcs>

あとがき:

当センターでは、皆様からの投稿やお知らせを募集しております。研究紹介や関連学会の案内、参加報告や、ご提案、企画等がございましたらお知らせいただけますと幸いです。ご依頼: 関係企業等へご参加をお誘いいたしますようお願い申し上げます。

