

# 次世代生命体統合シミュレーション 進捗状況報告

2008. 9. 17

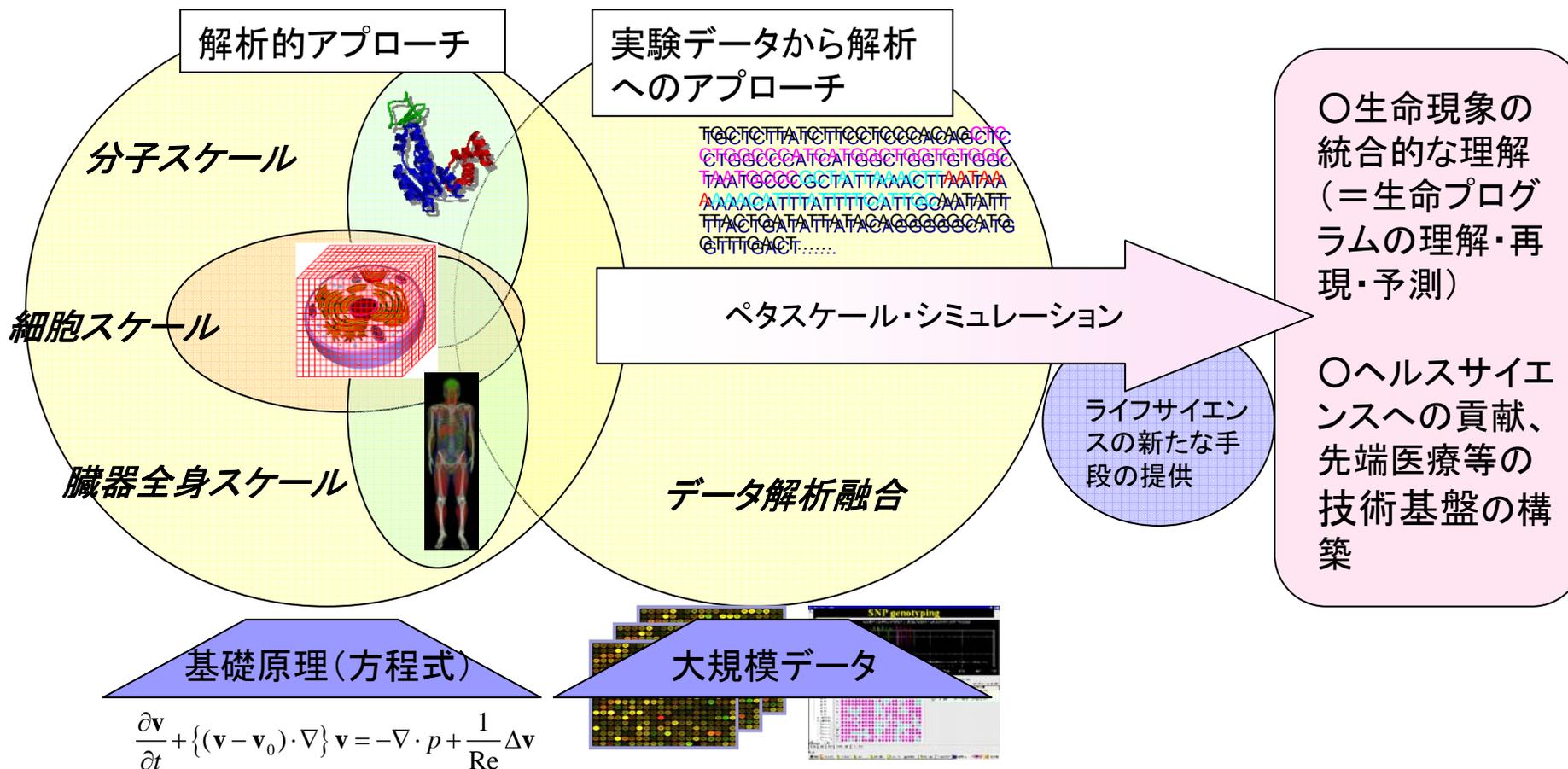
独立行政法人理化学研究所

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

# 研究開発の概要と達成目標

基礎方程式に基づく解析的アプローチと、大量の実験データから未知の法則に迫る実験データから解析へのアプローチにより、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、ペタスケールという桁違いの性能を持つスーパーコンピュータの性能をフルに発揮し、生体で起こる種々の現象を理解し医療に貢献するためのソフトウェアを開発する。



- 2006(H18)年 8月 理化学研究所・和光研究所が「次世代生命体統合シミュレーションソフトウェア」の研究開発拠点に選定
- 10月 和光研究所に「次世代計算科学研究開発プログラム」を設置、プロジェクトスタート
- 2007(H19)年 1月 プロジェクト関係者によるワークショップを実施、H19年度以降の研究開発の本格稼働に向け、研究計画・新規課題等を検討
- 2007(H19)年 4月 各参画機関含め、本格的な研究を開始
- 11月 生命体基盤ソフトウェア開発・高度化チームを設置
- 12月 新規研究開発課題に関する外部調査を実施(～2008年3月)
- 理化学研究所に評価委員会を設置、研究開発目標・研究計画について評価(～2008年3月)
- 2008(H19)年 4月 評価結果を踏まえ、研究開発目標・研究計画の見直し案を検討(～6月)
- 6月 外部調査結果等を踏まえ、脳・神経系分野の新規課題の設置を運営委員会にて了承
- 文部科学省による中間評価、プロジェクトの進捗・開始後の状況変化への対応等を評価(～7月)



# 研究開発体制

2008年9月1日現在

## 独立行政法人理化学研究所

本所・各研究所

- ・次世代スーパーコンピュータ開発実施本部
- ・情報基盤センター 等

密接な連携

密接な連携

## 次世代計算科学研究開発プログラム(和光研究所)

(次世代生命体統合シミュレーション開発拠点)

プログラムディレクター(PD) 茅 幸二

運営委員会

アドバイザリー委員会

評価委員会

副プログラムディレクター: 姫野龍太郎

コーディネーター: 高田 俊和  
中野 明彦、望月敦史

次世代生命体統合シミュレーション研究推進グループ グループディレクター 梶谷 文彦

分子スケール研究開発チーム チームリーダー: 木寺 詔紀

細胞スケール研究開発チーム チームリーダー: 横田 秀夫

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

データ解析融合研究開発チーム チームリーダー: 宮野 悟

生命体基盤ソフトウェア開発・高度化チーム  
チームリーダー: 泰地 真弘人

企画調整グループディレクター 堤 精史

・理研と連携し研究開発を実施。

### 分子スケールWG

- 池口満徳(横浜市大)
- 木寺詔紀(理研)
- 高田彰二・林重彦(京大)
- 佐藤文俊(東大)
- 中村春木(阪大)

### 細胞スケールWG

- 末松誠(慶応大)
- 横田秀夫(理研)
- 倉智嘉久(阪大)
- 清野進(神戸大)
- 後藤信哉(東海大)

### 臓器全身スケールWG

- 松本洋一郎・大島まり・久田俊明(東大)
- 高木周(理研)
- 山口隆美(東北大)
- 松澤照男(北陸先端大)
- 野村泰伸・和田成生(阪大)
- 劉浩(千葉大)
- 岡澤重信(広島大)
- 天野晃(京大)

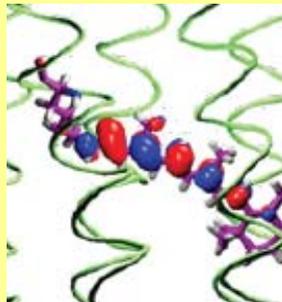
### データ解析融合WG

- 宮野悟(東大)
- 樋口知之(統数研)
- 秋山泰(東工大)
- 鎌谷直之(理研)

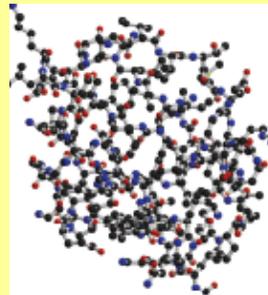
**開発目標:** 量子化学計算 (QM)・分子動力学計算 (MM)・粗視化モデル計算 (CG) を総合化する技術を開発、タンパク質や細胞の機能発現過程のシミュレーションにつなげ、細胞スケールとの有機的な連携を図る。

**開発計画:** QM、MM、CGの各スケールでプログラムの開発を進めるとともに、それらの手法を結合したQM/MM、MM/CG法によってマルチスケールシミュレーションを実現するためのプログラムを開発する。

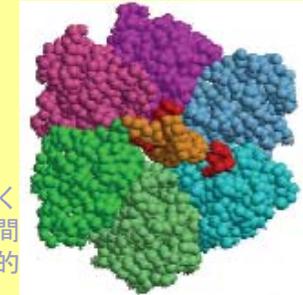
量子化学計算



分子動力学計算



粗視化モデル計算



←  
より小さく  
より短時間  
より厳密

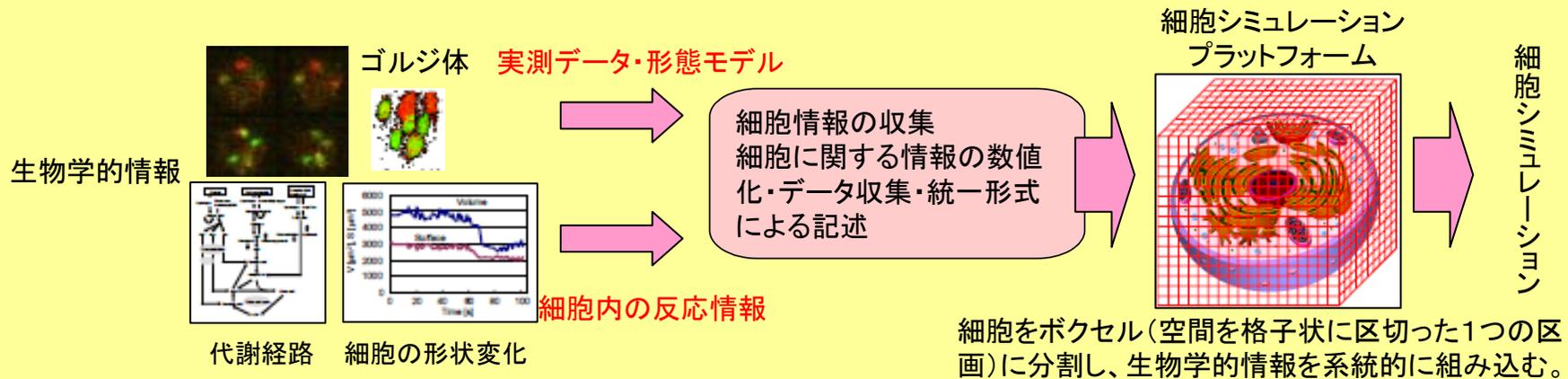
→  
より大きく  
より長時間  
より近似的

**進捗状況:** QM/MM/CGの3階層それぞれで計算方法をプログラム化し、テストを続けながら開発、基本的手法のプログラム化が終わり、128-512並列程度まで性能が出るまでになっている。

# 細胞スケール研究開発

**開発目標:** ペタフロップス級の計算力を活かして細胞を100万のボクセルに区画、そこに包括的な実証データを組み込んだシミュレーションの実現を目指す。これにより、薬剤等の作用や副作用の予測を行うシミュレーションの開発につなげる。

**開発計画:** 生物の空間的情報を入れ込むことが出来るプラットフォームの開発と平行して、プラットフォームに実装するためのデータ収集とモデルの構築を進める。また、プラットフォームと各種データ・モデルとの有機的連携を図る。



**進捗状況:** 細胞を約3万個のボクセルに分割、複数のオルガネラを表現し、移流拡散方程式による物質移動をシミュレーションできる細胞シミュレーションプラットフォームを開発、E-CELL3をベースにした代謝反応がオルガネラ間も含めてシミュレーションできるようになった

**開発目標:** ペタフロップス級の計算量を用いて、数時間で実行可能な臓器全身シミュレーションの構築を目指す。これにより、病態予測や治療予測等の医療支援ツールの開発につなげる。

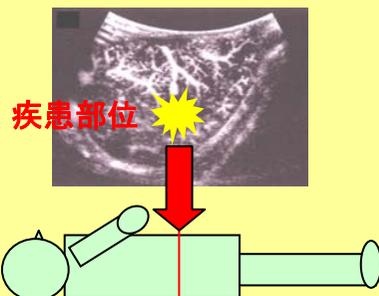
**開発計画:** 血管網、各種臓器、全身を3次元的に再現した臓器全身モデルを構築し、病態予測や治療予測を行う臓器全身モデルを次世代スパコンに実装、循環器系疾患を始めとする種々の病態のシミュレーションと治療支援シミュレーションにつなげる。



臓器全身モデルの構築



治療・診断の例(超音波を用いた悪性腫瘍の治療予測)



個別患者のモデルを作成



超音波伝搬シミュレーション

**進捗状況:** 1mm分解能の全身ボクセルモデルを開発すると同時に新しい構造流体連成手法と多媒質内の超音波伝搬解析手法を開発した。これらにより、外科手術シミュレーションや収束超音波によるガンの治療等へつなげる基盤を構築した。

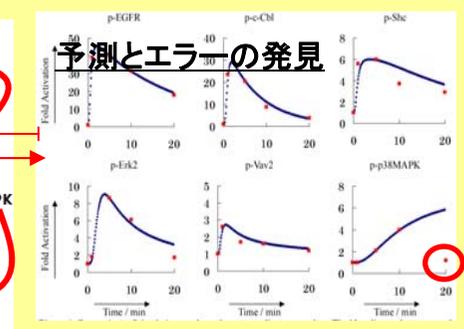
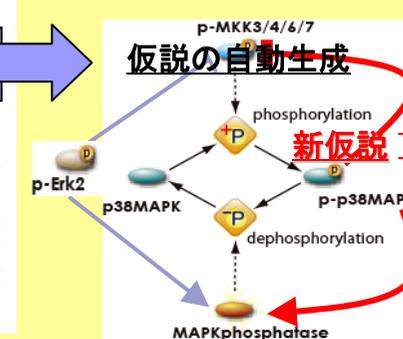
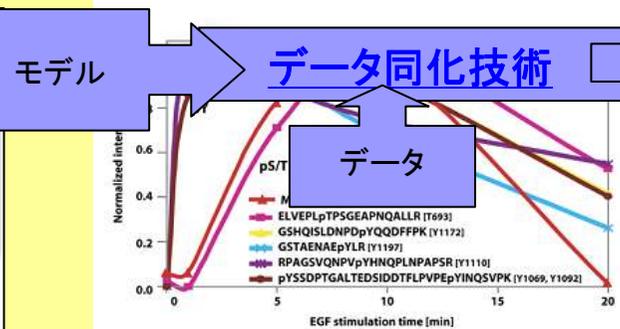
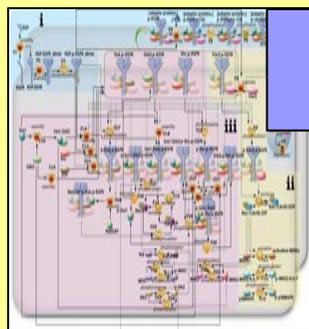
**達成目標:** ペタフロップス級の計算によって、創薬ターゲット探索や個人差を考慮した医療のための基盤情報技術の構築を目指す。これにより、ヒト全遺伝子を対象とした創薬ターゲット遺伝子探索の実現につなげる。

**開発計画:** 遺伝子ネットワーク推定・タンパク質ネットワーク推定・ゲノム多型解析技術等の研究、ならびにデータ同化技術の開発を進め、開発した解析法やデータ同化技術を次世代スパコンに実装し、データ解析とシミュレーションを融合した技術を開発する。

シミュレーションモデルの構築

関連するデータをモデルに同化

病気のシステムの理解による医療開発イノベーション



(癌などの病気に関わっているモデル)

(関連たんぱく質の時系列データ)

データエラーの発見

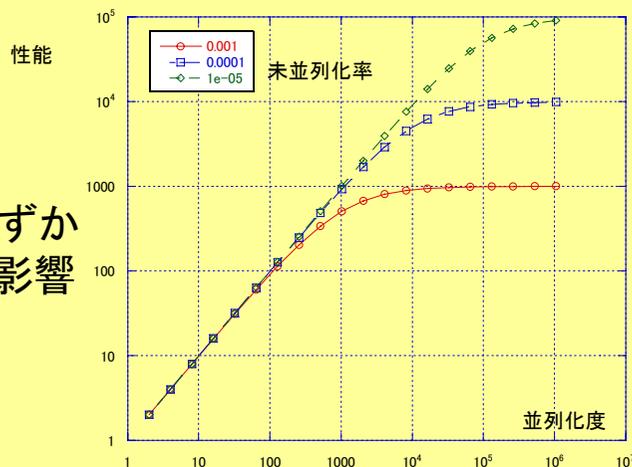
**進捗状況:** 分子のネットワークを地図として抽出するための方式として、大規模遺伝子ネットワーク探索及びタンパク質構造に基づく相互作用予測の研究を行い、新たな技術開発の成功と新たな並列プログラムの開発により、これらのプログラムが128~512CPUで稼動するようになった。

**開発目標:** プロジェクトで開発される各種ソフトウェアの高性能化、特に次世代スーパーコンピュータ向けの最適化を行い、次世代スーパーコンピュータの生命科学への応用を促進すると同時にグランドチャレンジを実現する。

**開発計画:** コアソフトウェア・基盤ライブラリの開発と他チームアプリケーションの調査・高速化に向けた検討を進め、次世代スーパーコンピュータ実機でのアプリケーションの高速化、チューニングを行う。

## アムダールの法則

並列化度が上がるにつれ、わずかな未並列化でも性能に大きな影響を及ぼす



**進捗状況:** 本チームは2007年11月に発足、これまでに分子動力学計算ソフトウェアの解析・開発、量子化学計算ソフトウェアの高性能化についての調査、基盤ライブラリ・可視化ソフトウェアの調査・開発を進めた。

# 中間評価を受けての見直し

## 整理前

計算手法

計算対象

計算対象

プログラム

分子スケール	QM/MM	共通的な 開発対象 の設定	分子スケール	QM/MM	膜タンパク・代謝酵素 <small>リドメチルメチル</small>	長期目標 に向けた課題
	全電子量子化学計算			全電子量子化学計算		
	ハイブリッドQM/MM法			粗視化シミュレーション		
	分子動力学計算法			粗視化シミュレーション		
	粗視化シミュレーション			粗視化シミュレーション		
	蛋白質の構造サンプリング技術			蛋白質の構造サンプリング技		
細胞スケール	細胞シミュレーション統合プラットフォーム	開発対象の 重点化による 整理見直し	細胞スケール	細胞シミュレーション統合プラットフォーム	長期目標 に向けた課題	
	肝細胞(代謝)			肝細胞・肝小葉 (代謝)		
	膵臓β細胞					
	イオンチャネル					
	血小板					
臓器全身スケール	血流シミュレーション	共通的な 開発対象 の設定	臓器全身スケール	循環器系シミュレーション (血球・血小板・血流・血管網・心臓)	長期目標 に向けた課題	
	心臓シミュレーション			全身ホクセルデータ・全身力学モデル		
	全身ホクセルデータ・全身力学モデル			超音波伝搬シミュレーション		
	超音波伝搬シミュレーション					
	肺シミュレーション					
データ解析融合	大規模遺伝子ネットワーク探索ソフトウェア	共通的な 開発対象 の設定	データ解析	大規模遺伝子ネットワーク探索ソフト	長期目標 に向けた課題	
	生命体データ同化プログラム			生命体同化プログラム		
	タンパク質ドッキング解析プログラム			タンパク質ドッキング解析プログラム		
	大規模SNP解析ソフトウェア			大規模SNP解析ソフトウェア		
脳神経		共通的な 開発対象 の設定	脳神経	神経細胞・局所回路シミュレーション	長期目標 に向けた課題	
				脳全体シミュレーション		

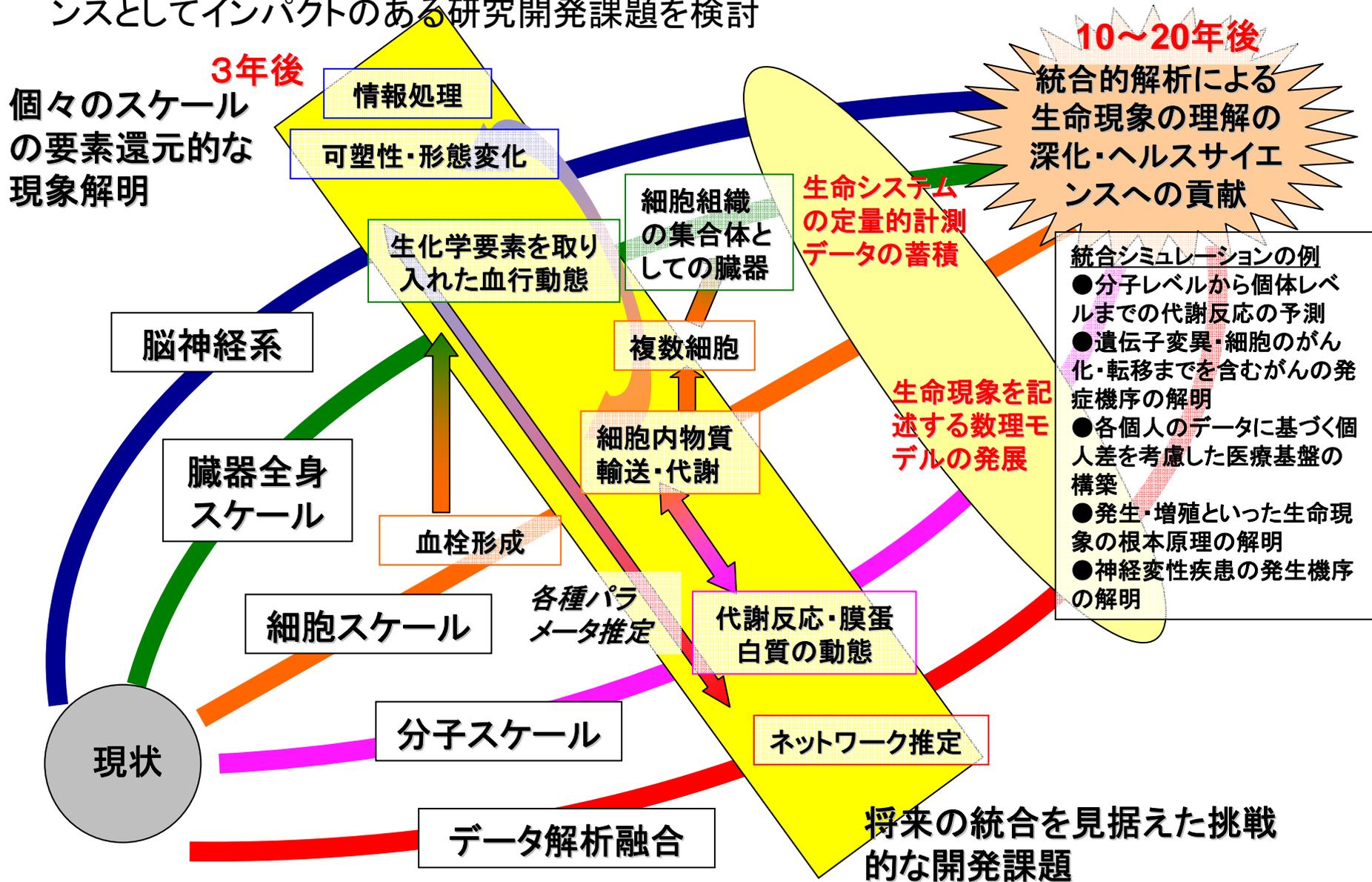
## 整理後

短期目標  
長期目標

他チームとの連携による効率化

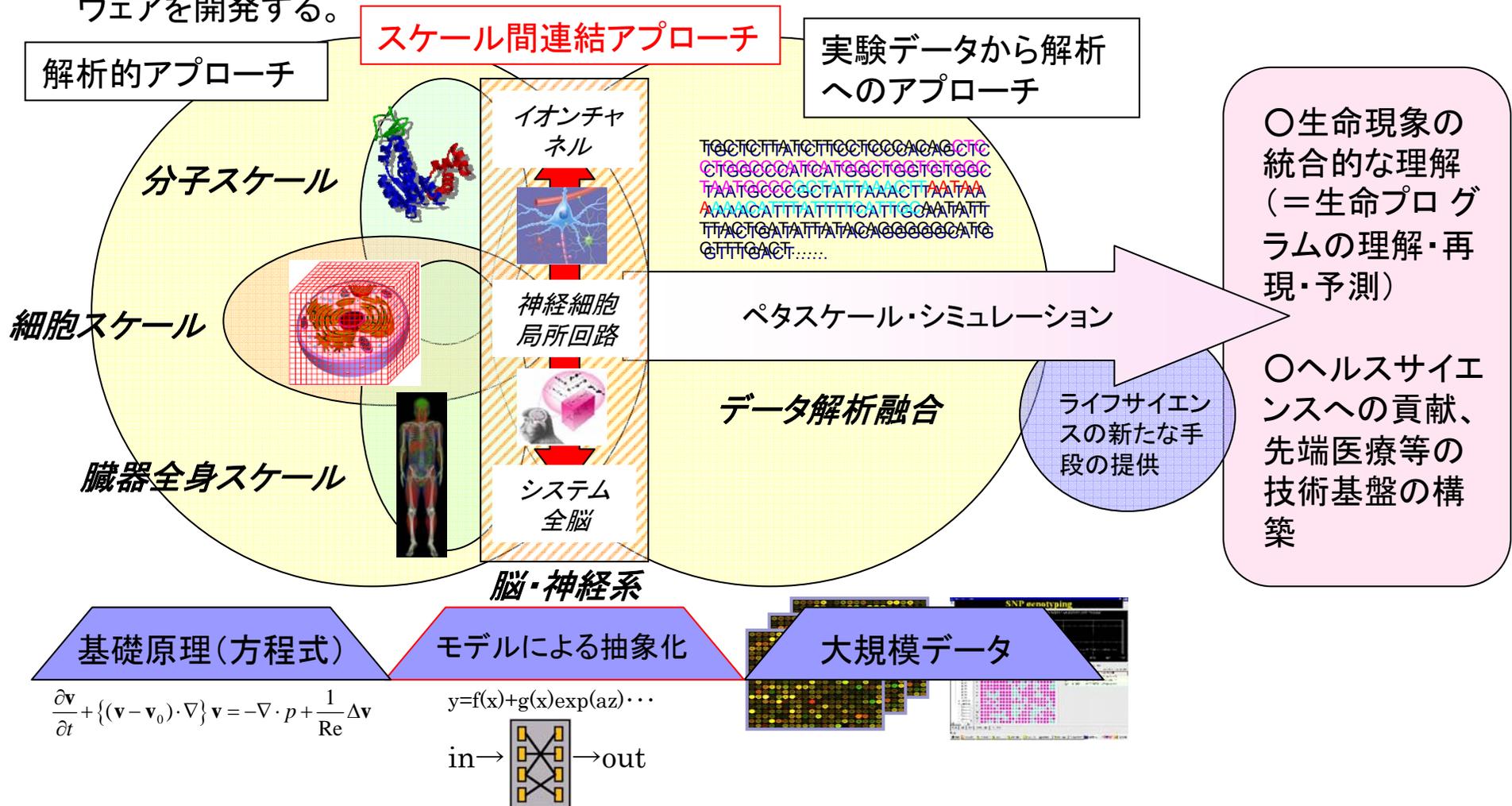
# チーム目標と共通目標(モデル化を目指す現象)

「生命現象の統合的解明」に向け、スケールを超えた連携を視野に入れつつサイエンスとしてインパクトのある研究開発課題を検討



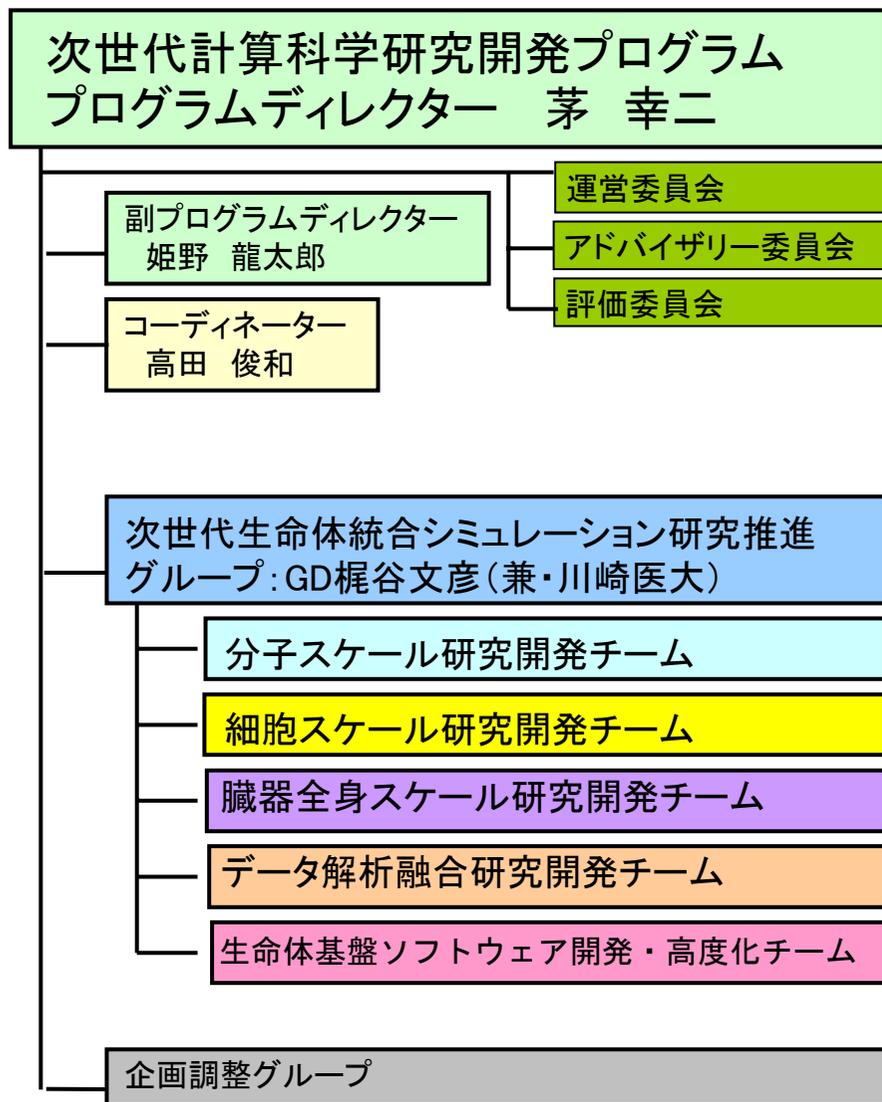
# 研究開発の概要と達成目標 (平成20年10月以降案)

基礎方程式に基づく解析的アプローチと、大量の実験データから未知の法則に迫る実験データから解析へのアプローチ、さらには多階層を連結するアプローチにより、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、ペタスケールという桁違いの性能を持つスーパーコンピュータの性能をフルに発揮し、生体で起こる種々の現象を理解し医療に貢献するためのソフトウェアを開発する。



# マネジメント・体制の強化

## 現状の組織



## 提案する組織

