



独立行政法人 理化学研究所

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

00010010100000100100100101000001001001
00001010000010010010010100000100100100
00010010100000100100100101000001001001
00010010000010010010010100000100100100
00010100000100100100101000001001001001
00001010000010010010010100000100100100
00010010100000100100100101000001001001
00010010100000010010010100000100100100

次世代スーパーコンピュータプロジェクト

(文部科学省「最先端・高性能汎用スーパーコンピュータの開発利用」プロジェクト)

TGCTCTTATCTTCCTGCCACAG
CTCCTGGCCCATCATGGCTGG
TGTGGOTAATGCCGOTATTA
ACTTAATAAAAAACATTTATTT
GATTGCAATATTTTACTGATATT
ATACAGGGGGCATGGTTTGAC

プロジェクト概要

文部科学省が平成18年度（2006年度）から始めた「次世代スーパーコンピュータ」プロジェクトでは、今後とも我が国が科学技術・学術研究、産業、医・薬など広汎な分野で世界をリードし続けるべく、

- ①世界最先端・最高性能の「次世代スーパーコンピュータ」の開発・整備
- ②次世代スーパーコンピュータを最大限活用するためのソフトウェア（＝グランドチャレンジ・アプリケーション）の開発・普及
- ③次世代スーパーコンピュータを中核とする世界最高水準のスーパーコンピューティング研究教育拠点の形成

を文部科学省のイニシアティブにより、開発主体（理化学研究所）を中心に産学官の密接な連携の下、一体的に推進しています。

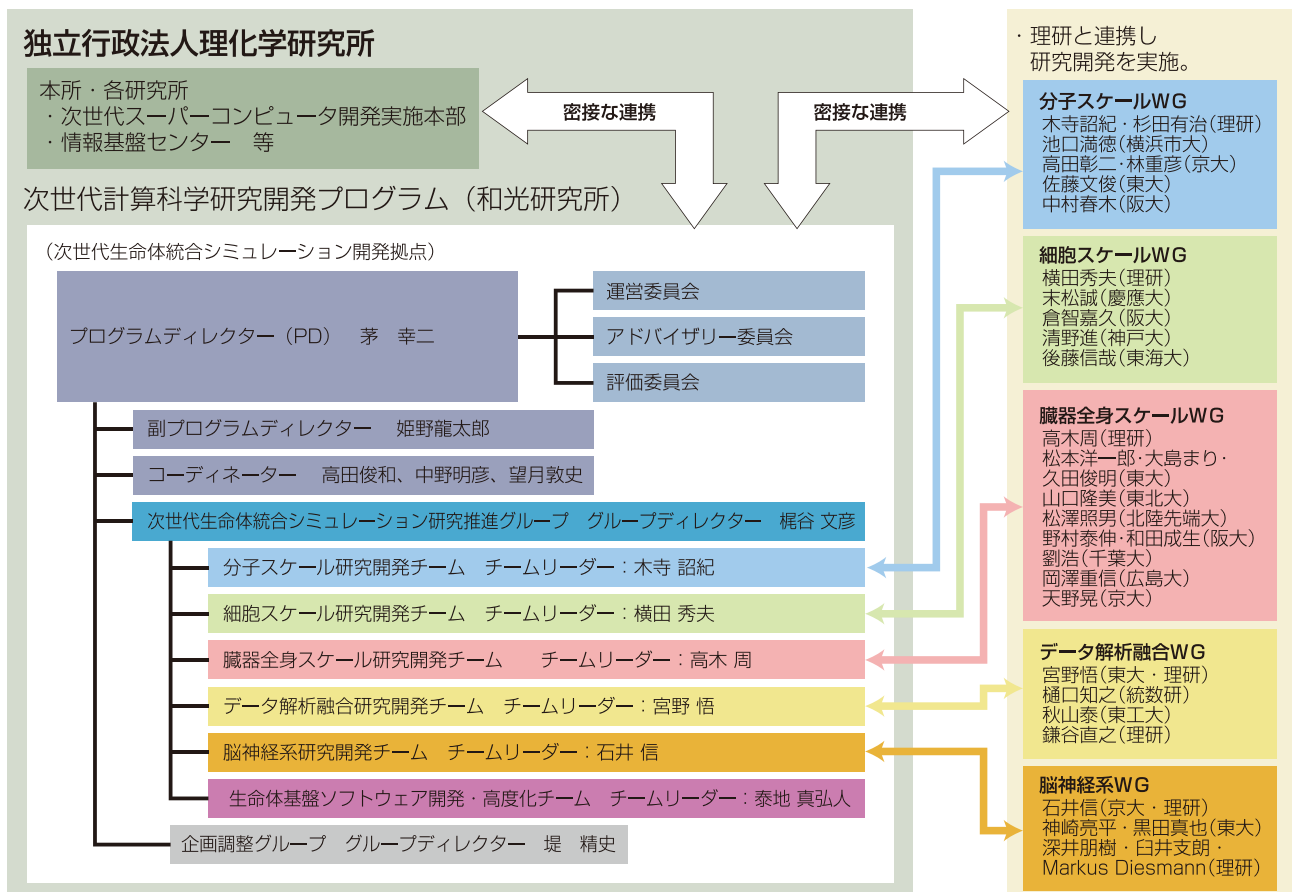
理化学研究所・和光研究所は、グランドチャレンジアプリケーションのライフサイエンス分野の研究開発拠点として選定され、「次世代生命体統合シミュレーションソフトウェアの研究開発」として研究開発を行っているものです。

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に、基礎原理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「実験データから解析へのアプローチ」によって各研究開発を統合的に進め、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。

本プロジェクトではライフサイエンス分野への貢献を考え、このプロジェクトにおける目標を、次の2つの観点から設定しています。

- 1) 次世代スーパーコンピュータの完成時での利用を目指したアプリケーションソフトウェアの開発
- 2) 将来のライフサイエンス分野の基盤構築に向けた長期的なグランドチャレンジ
(実験とコンピュータシミュレーションが一体となって初めて可能となる、新しい知見の獲得に向けた着実な取り組み)

研究開発体制 2008年10月1日現在



ごあいさつ

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。

特にスーパーコンピュータの開発と利用は国際競争力を維持する上で必要不可欠なものとして、わが国の第3期科学技術基本計画において国家基幹技術に位置づけられており、次世代スーパーコンピュータプロジェクトが文部科学省を中心に推進されています。理化学研究所は、この「次世代スーパーコンピュータ」の設置責任機関として、この研究開発のみならず、これを基盤として計算機科学を推進する責務を負っています。

本プロジェクトでは、世界最高水準のハードウェア開発のみならずソフトウェアに関しても最先端の研究開発に取り組むこととされており、自然現象を統合的に理解するための計算科学の研究開発と応用ソフトウェア（グランドチャレンジ・アプリケーション）の開発を通じ、次世代スーパーコンピュータを最大限活用したシミュレーションの実現を目指しています。

特に、ライフサイエンス分野におけるグランドチャレンジについては、2006年10月より理化学研究所を中核拠点に「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」をスタートさせ、次世代スーパーコンピュータの性能を十分に引き出し、その性能を使って初めて可能となる革新的なシミュレーションを実現するべく、参画機関と密接に連携して研究開発に取り組んでいます。

これらの取り組みを通じて、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あります。同時に開発したソフトウェアの産業界への普及を図り、広く実社会で活用できるよう努め、次世代スーパーコンピュータプロジェクトの成功に貢献して参ります。



プログラムディレクター 茅 幸二



副プログラムディレクター
姫野 龍太郎



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



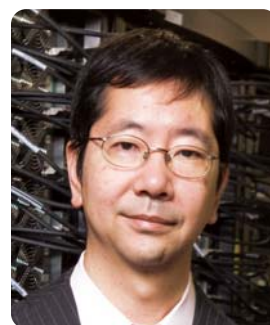
臓器全身スケール研究開発チーム
チームリーダー
高木 周



データ解析融合研究開発チーム
チームリーダー
宮野 悟



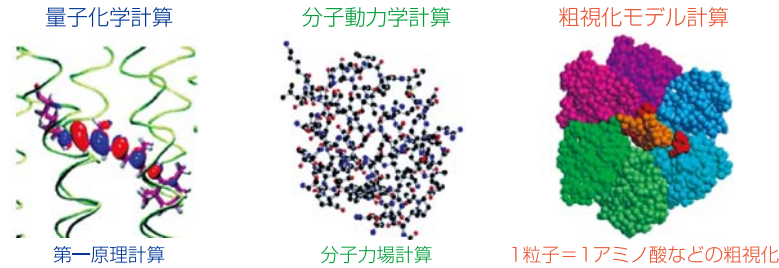
脳神経系研究開発チーム
チームリーダー
石井 信



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

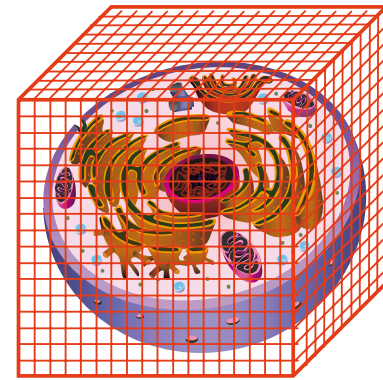
分子スケール研究開発チーム

生命活動の分子基盤であるタンパク質などの生体高分子が、生体内で担っている機能をシミュレーションによって捉えることにより、分子生物学・細胞生物学の課題を解明し、さらには新たな薬剤開発の基盤創出につなげることを目的としています。



量子化学計算 (QM)、分子力学計算 (MM)、粗視化モデル計算 (CG) 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の研究開発を行っています。個別に開発されてきた計算手法を融合させることにより、トランスポーターやイオンチャネルの高信頼性計算の実現に挑戦し、実験による測定が困難な原子レベルでの機能発現機構や反応速度の予測など、細胞現象の理解を視野に入れたマルチスケールシミュレーションの発展につなげます。

細胞スケール研究開発チーム



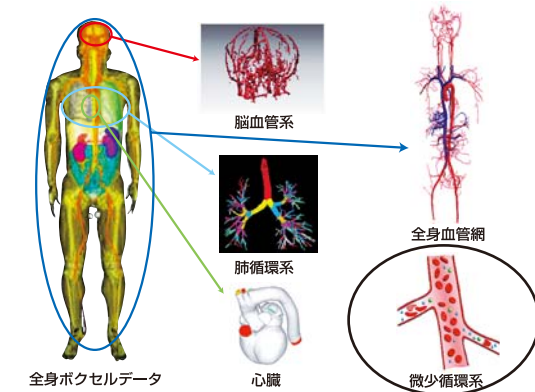
細胞内物質の局在、オルガネラ毎の代謝を再現

細胞スケール研究の要となる、細胞シミュレーション統合プラットフォームの開発を行っています。このプラットフォームは、細胞内の場や複数のシミュレーションの連成を考慮した共通基盤であり、固定格子の空間内に細胞のモデルを構築し、各種シミュレーションを実装していきます。細胞を100万のボクセルに区画し、そこに細胞内の現象の実測データより得られた物質の量・移動等の情報を取り込み、疾患等の理解へつなげるとともに、実測データを各スケールのモデルの妥当性の補強に活用し、プロジェクト全体に寄与します。開発する細胞の焦点を肝細胞に置き、細胞内の糖代謝、エネルギー代謝の変化を実測データに基づき再現し、医学的に意味あるシミュレーションの実現を目指しています。

細胞内の糖代謝、エネルギー代謝の変化を実測データに基づき再現し、医学的に意味あるシミュレーションの実現を目指しています。

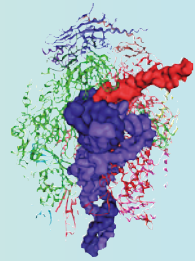
臓器全身スケール研究開発チーム

循環器系、筋骨格系、種々の臓器、呼吸器系などを備えた全身を3次的に再現した臓器全身モデルを構築し、生体内で起こる種々の現象を理解し医療に結びつけることを目指しています。

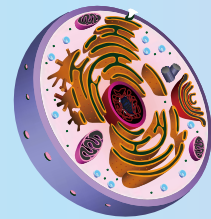


流体構造連成による複雑な形状の血管内における変形赤血球の流れを再現した連続体力学シミュレーションに、細胞レベルからの血小板の凝集による血栓形成モデルを結合した血栓症シミュレータを開発し、疾患及びその治療法を検討するためのシミュレーションツールの開発につなげます。

遺伝子



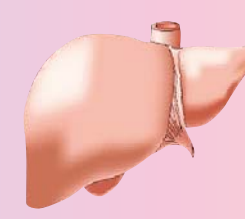
生体分子



細胞



組織



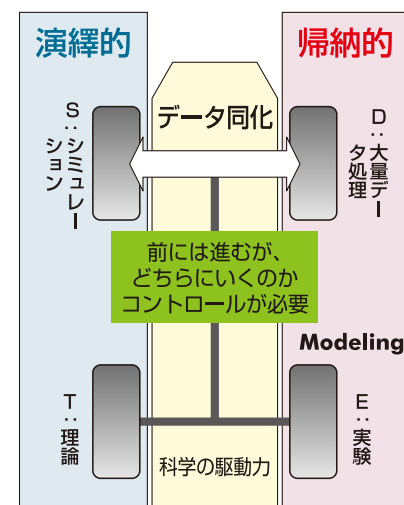
器官



人体

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ベ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々のモデルを創出する技術の開発に取り組んでいます。

脳神経系研究開発チーム

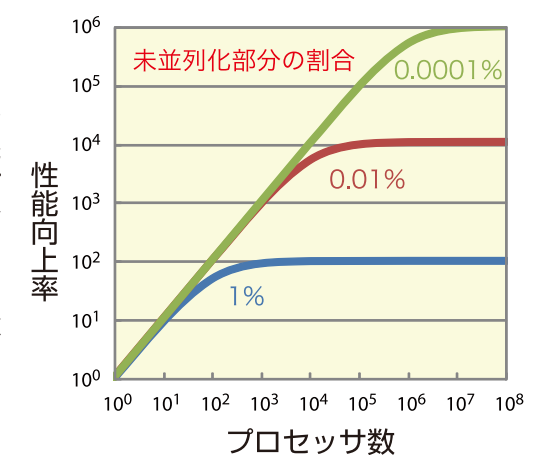
脳は、分子の集合体という物質基盤の上に知性という情報基盤を創り出した臓器です。神経細胞の発達・可塑(学習)、神経細胞集団の活動、昆虫の嗅覚系やほ乳類の視覚系の活動など、単一神経細胞から脳全体にわたるシミュレーションを行うことで、脳神経系の機能の解明、さらには発達・学習障害など機能障害の機序の理解につなげることを目的としています。



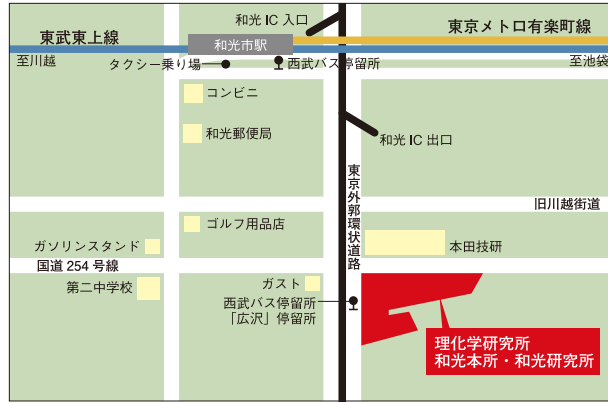
脳神経系の基本的な情報処理単位の役割解明を目指して、神経細胞の発達・可塑に関する分子ネットワークと大脳皮質局所領域における細胞集団をシミュレーションするためのモデルとソフトウェアを開発しています。また、昆虫の匂い感知から匂い源探索行動まで(嗅覚系)、ほ乳類の視覚刺激提示から眼球運動まで(視覚系)を対象として、脳における入出力情報処理の実時間シミュレーションを行うために、モデルとデータベースの構築およびソフトウェア開発を行っています。

生命体基盤ソフトウェア開発・高度化チーム

次世代スーパーコンピュータの持つ可能性を最大限引き出すためには、超並列に対応したソフトウェアを開発しなければなりません。各研究開発チームとともに開発するアプリケーションの大規模並列計算化に取り組むとともに、その性能をフルに発揮させるための可視化ライブラリ、高並列計算コア、共通基盤ライブラリ(並列化ミドルウェア)、ワークフローツールの開発を行います。



上図: 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

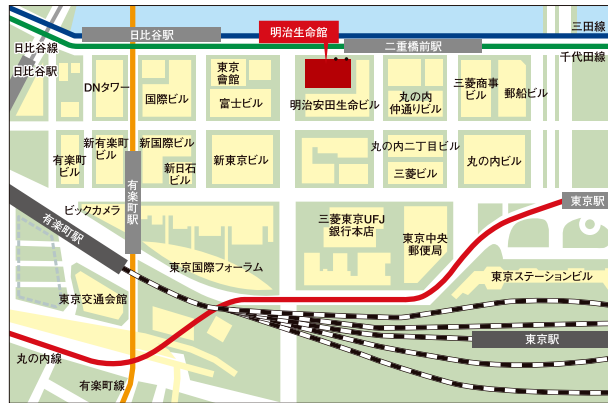


独立行政法人 理化学研究所 和光研究所

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

<http://www.csrp.riken.jp/>



問い合わせ先

〒100-0005 東京都千代田区丸の内2-1-1 明治生命館6F

次世代スーパーコンピュータ開発実施本部(丸の内拠点)内

TEL.048-462-1488 FAX.03-3216-1883

参画機関

横浜市立大学	京都大学	東京大学	大阪大学
慶應義塾大学	神戸大学	東海大学	東北大学
北陸先端科学技術大学院大学	千葉大学	広島大学	
東京工業大学	統計数理研究所		