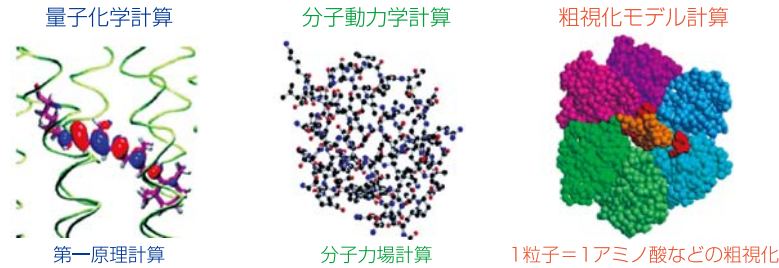


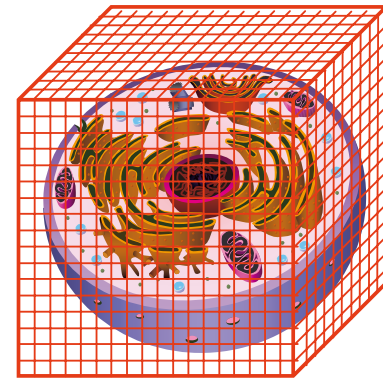
分子スケール研究開発チーム

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



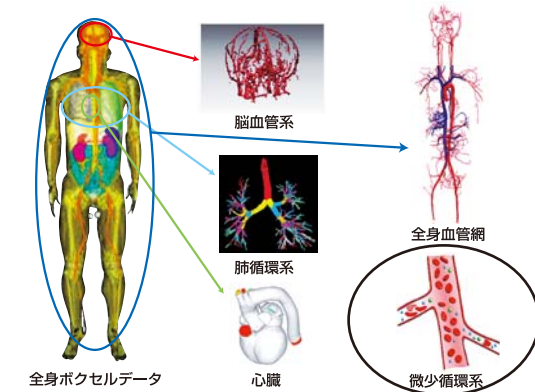
細胞内物質の局在、オルガネラ毎の代謝を再現

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。

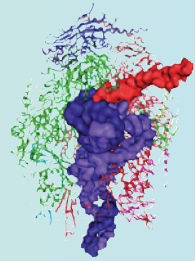
臓器全身スケール研究開発チーム

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。

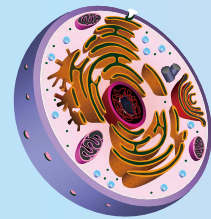


流体構造連成による複雑な形状の血管内における変形赤血球の流れを再現した連続体力学シミュレーションに、細胞レベルからの血小板の凝集による血栓形成モデルを結合した血栓症シミュレータを開発し、疾患及びその治療法を検討するためのシミュレーションツールの開発につなげます。

遺伝子



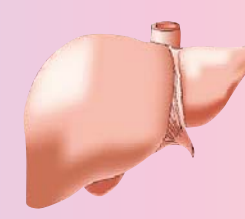
生体分子



細胞



組織



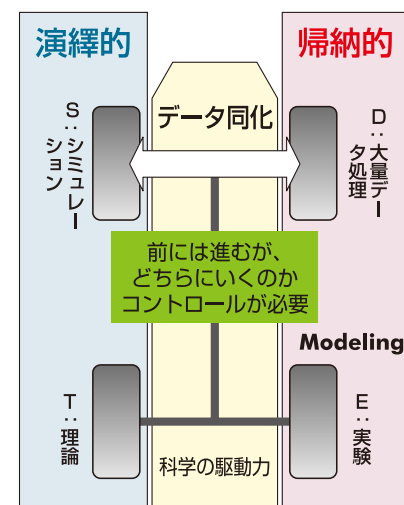
器官



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

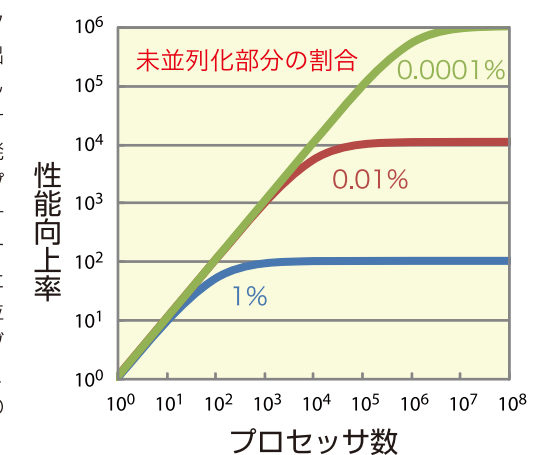
脳は、分子の集合体という物質基盤の上に知性という情報基盤を創り出した臓器です。神経細胞の発達・可塑(学習)、神経細胞集団の活動、昆虫の嗅覚系やほ乳類の視覚系の活動など、単一神経細胞から脳全体にわたるシミュレーションを行うことで、脳神経系の機能の解明、さらには発達・学習障害など機能障害の機序の理解につなげることを目的としています。



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