
2. 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 説明資料

独立行政法人理化学研究所

目的:背景と目指す方向(1)

背景

ライフサイエンスの研究手法

生命現象のトータルな理解に迫る
新しいアプローチの必要性

実験に基づく実証的アプローチでは、遺伝子・タンパク質の役割を個別に解明するにとどまり、生命のトータルな理解が課題。

技術的制約

ライフサイエンスのシミュレーション
に必要な計算量の増大

複雑な生命現象をシミュレーションで再現するためには、現状の計算量をはるかに凌ぐコンピュータが必要



次世代スパコンを用いてライフサイエンスの
新しい研究分野の開拓に挑戦
(グランドチャレンジ)



次世代生命体統合シミュレーション

目指す方向

ペタスケールの次世代スパコンを駆使して、生命現象を統合的に理解するシミュレーションソフトウェアを開発。ライフサイエンス分野に仮説 - 検証型アプローチに基づく新たな研究手法を提供。

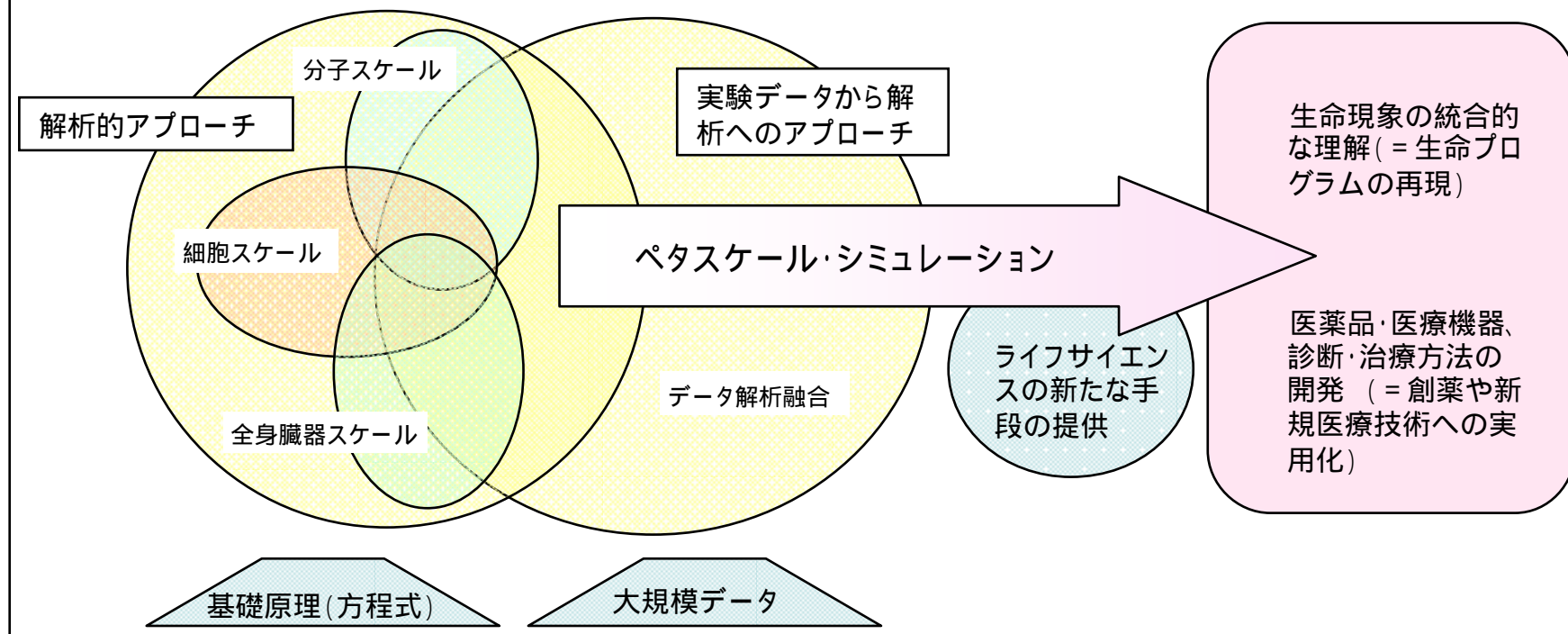
最終目標

生命プログラムの理解・再現・予測を実現
創薬・ヘルスサイエンスへの貢献、新規医療技術の実用化

目的:背景と目指す方向(2)

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経路と法則に迫る実験的アプローチにより、異なるスケールの研究とデータ解析を統合的かつ有機的に進め、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結びつけるためのソフトウェアを開発する。



具体的な達成目標

分子スケール

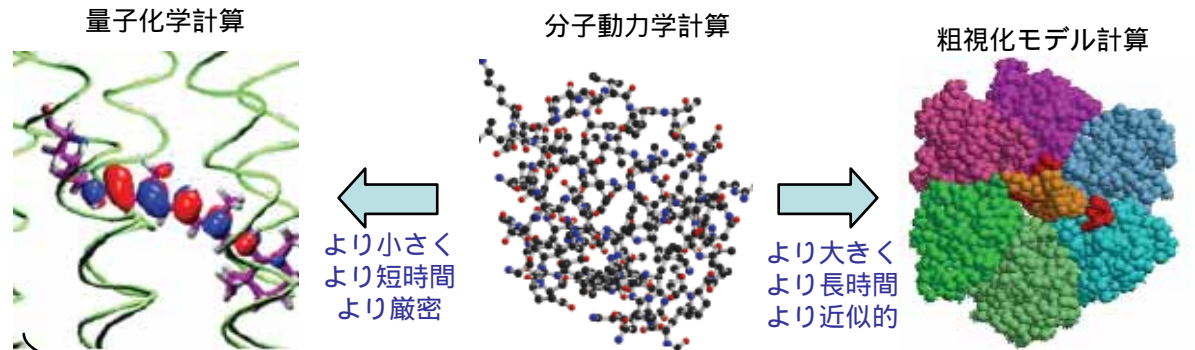
・具体的(定量的)な達成目標

～平成22年度

量子化学計算・分子動力学計算・粗視化モデル計算を総合化する技術を開発する。

～平成24年度

作成した分子シミュレーションを次世代スパコンに実装し、薬剤設計に関わる計算科学技術手法を提供するとともに、タンパク質や細胞の機能発現過程のシミュレーションを構築して細胞スケールとの有機的な連携を図る。



数万原子レベルで、ミリ秒オーダーの分子シミュレーションを目指す。これにより、薬剤設計の基盤となる計算科学的手法の構築につなげる。

細胞スケール

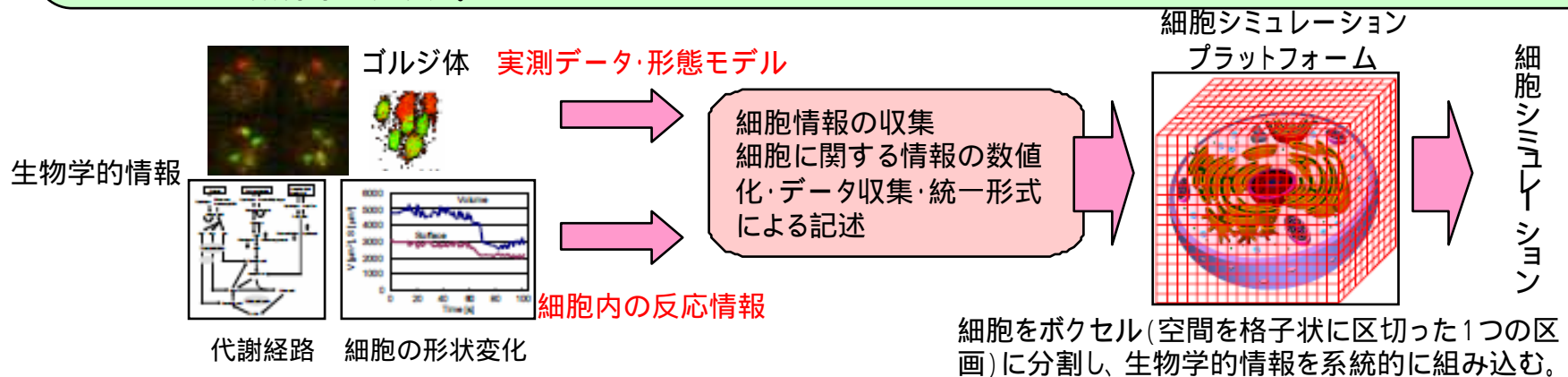
・具体的(定量的)な達成目標

～平成22年度

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。

～平成24年度

プラットフォームを次世代スパコンに実装すると共に、収集した各種実証データやモデルを組み込む。これにより、細胞局所レベルの実証データと分子集合レベルのデータの照合を実現。



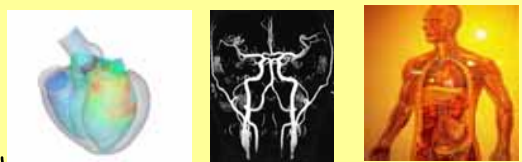
ペタフロップス級の計算力を活かして細胞を10万のボクセルに区画し、そこに包括的な実証データを組み込んだシミュレーションの実現を目指す。これにより、薬剤等の作用や副作用の予測を行うシミュレーションの開発につなげる。

臓器全身スケール

・具体的(定量的)な達成目標

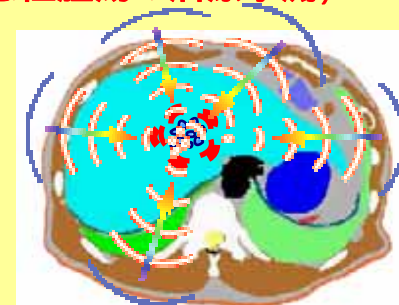
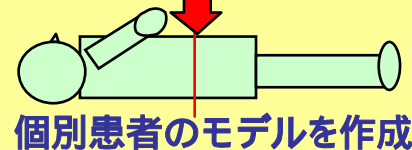
～平成22年度
血管網、各種臓器、全身を3次的に再現した臓器全身モデルを構築する。

～平成24年度
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し、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を構築する。



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)



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。

データ解析融合

・具体的(定量的)な達成目標

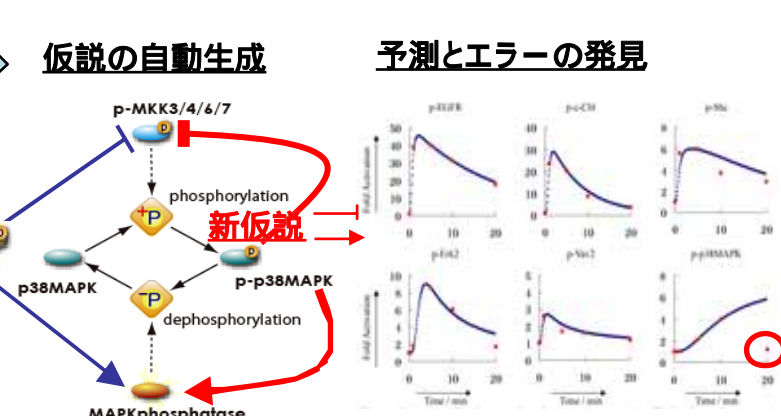
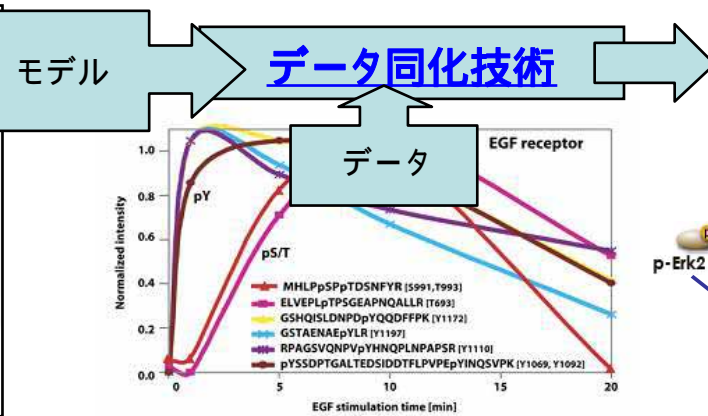
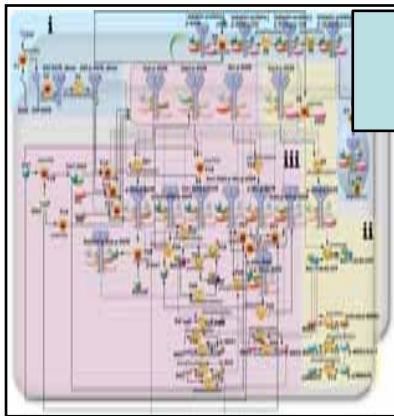
～平成22年度
 遺伝子ネットワーク推定・タンパク質ネットワーク推定・ゲノム多型解析技術等の研究、ならびにデータ同化技術の開発を行う。

～平成24年度
 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。遺伝情報の網羅的解析に基づく創薬ターゲット探索の確立を目指す。

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)

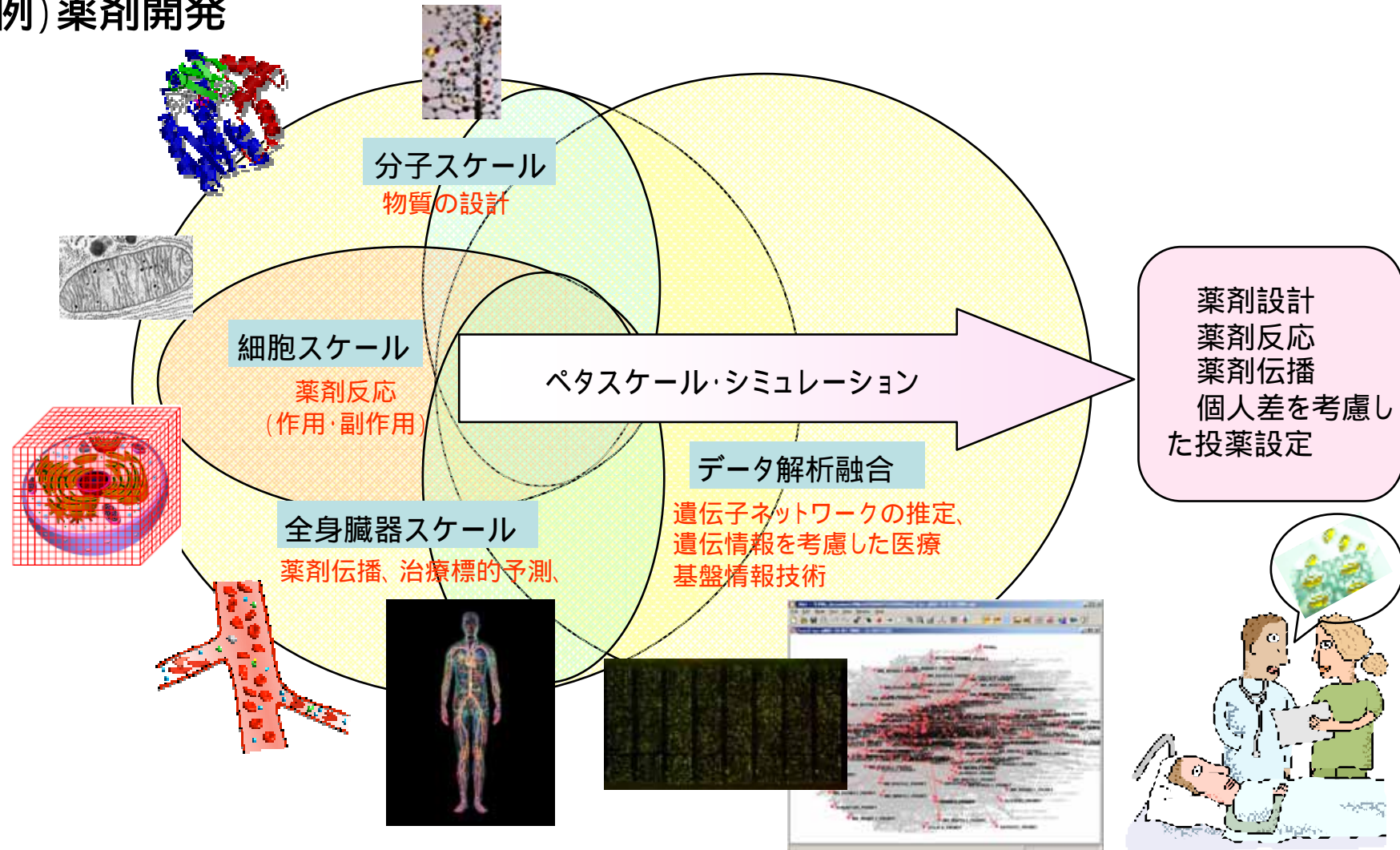
データエラーの発見

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(現行、全遺伝子の数%レベル)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。

期待される成果

薬剤・保健食品等の開発、医療に貢献するシミュレーションの構築

例) 薬剤開発



具体的な科学技術的な課題

計算量に見合うモデルの確立

ペタフロップス級の計算を実現するための(高並列化に対応した)プログラム開発が不可欠。

シミュレーションを補強する実験研究との連携

細胞の代謝過程を記述する統一的な方程式がなく、実験的な観察と計測結果に基づいてモデル開発を行うこと(実験研究との連携)が不可欠。

シミュレーション手法の連携・融合

より複雑な生命現象を解析するため、シミュレーションの連携・融合が不可欠。

解析技術の向上に伴う実験データ膨大化への対応

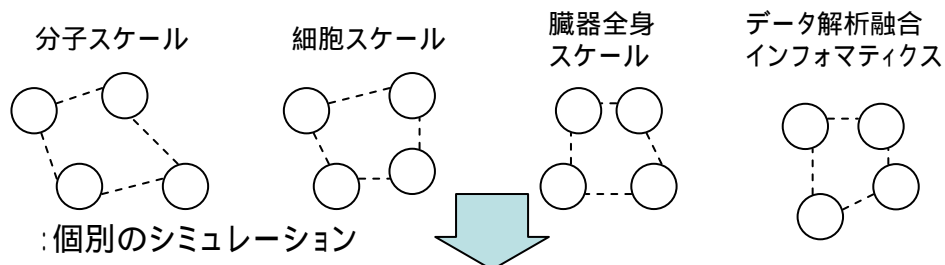
膨大な遺伝子データを高速に解析し、データ単独・シミュレーション単独からは得られない、データ駆動型の計算手法の確立が不可欠。

研究開発スケジュール(1)

テーマ	18年度	19年度	20年度	21年度	22年度	23年度	24年度
(1)分子スケールに関する研究開発							
達成目標	酵素反応、構造変化、分子間相互作用、構造形成、超分子複合体の運動等のシミュレーションをするための課題を明らかにし、実施体制を確立する	既存ソフトの改良によって、酵素反応、構造変化、分子間相互作用、構造形成、超分子複合体の運動等のシミュレーションを、より大きくより長時間の現象へ拡張する	既存ソフトの改良の継続、酵素反応、構造変化、分子間相互作用、構造形成、超分子複合体の運動等のシミュレーションにおいて、より大きくより長時間の現象へ拡張する	新規ソフトウェアの開発により、高速計算を可能とし、新規方法論とあわせて、複合体形成過程、超分子複合体の動態などの巨大・長時間現象の過程のシミュレーションを行う	新規ソフトウェアの開発の継続、各種生物学的課題に関するシミュレーションにおいて、解析から予測・モデリング・デザインなどの応用へ展開する	新規ソフトウェアのテスト・改良、量子化学・分子動力学・粗視化モデルの3つの階層を接続する方法論を確立し、その方法論をソフトウェアに組み込み、生物学の多様な課題に適用する	開発されたスーパーコンピュータ上での実行テスト・改良とその応用によって、各種生物学的課題において、解析・予測からさらに制御にむけた研究に発展させる
(2)細胞スケールに関する研究開発							
達成目標	場(細胞分画の代謝情報、細胞膜を介した水・電解質移動等)考慮した統合シミュレーションに向けたフォーマットの検討	場を考慮したシミュレーションに向けたフォーマットの開発、シミュレータの拡張	細胞モデラに関する研究、分化細胞(赤血球細胞等)シミュレータの開発	オルガネラ追加モデルの構築、複数シミュレーション連携、疾患時のシミュレーション開発	複数シミュレーション連携の研究、多細胞モデル、オルガネラ追加モデル、肝細胞 ¹ 細胞シミュレーション等	複数システムシミュレーション連携に関する研究、改良と高速化	統合プラットフォームの開発、開発された最先端・高性能汎用スーパーコンピュータ上での実行テスト・改良
(3)臓器全身スケールに関する研究開発							
達成目標	2mm 刻み、全身ボクセルデータの構築、個人別、臓器・全身シミュレータの構築に向け、研究課題の抽出と役割分担	1mm 刻みボクセルデータの構築とその高度化、血液循環系の低次元モデルの構築、ボクセルデータ用、固体-流体連成および超音波伝播シミュレーション手法の開発。	高解像度ボクセルデータの構築とその自動化および高度化、血液循環系の高次モデルの構築、ボクセルデータ用、固体-流体連成および超音波伝播シミュレーション、肺循環系のマルチスケールボクセル計算	高解像度ボクセルデータの構築とその自動化および高度化、血液循環系の高次モデルの構築、ボクセルデータ用、固体-流体連成および超音波伝播シミュレーション、肺循環系のマルチスケールボクセル計算	リアルタイム診断・治療支援用、超音波伝播シミュレータ、全身筋骨格系シミュレータ、メソスケール血流循環、全呼吸器系シミュレータ等開発着手、心筋細胞からの心臓完全シミュレータの構築	リアルタイム診断・治療支援用、超音波伝播シミュレーション、全身筋骨格系シミュレータ、肺循環・血流循環の統合と呼吸器系疾患のシミュレーション、心臓完全シミュレーション、	個人別ボクセルデータに基づいた最先端・高性能汎用スーパーコンピュータ上での人体シミュレーション実行テスト・改良(病態のシミュレーションと医療支援シミュレータとしての利用)
(4)データ解析融合に関する研究開発							
達成目標	既存ソフトの改良により、疾患や薬物反応性などの個人表現型と配列情報を関連、データ同化によるパラメータ推定技術の開発着手。	「個」を対象として、ゲノム多型と表現型解析のアルゴリズムの設計・検討、中規模人工データ、実データによる妥当性の検証。 「一般」を対象として、ネットワーク推定とデータ同化技術の検討・開発及び、中規模データによる、妥当性の検証。	「個」を対象として、ベタフロップス級に向けた、ゲノム多型と表現型解析のアルゴリズムの最適化、実データによる妥当性の検証。 「一般」を対象として、ペタフロップス級に向けた、ネットワーク推定とデータ同化技術の開発・強化。 実データによる妥当性の検証。	「個」を対象として、ベタフロップス級に向けた、ゲノム多型と表現型解析のアルゴリズムの最適化、実データによる妥当性の検証。 「一般」を対象として、ペタフロップス級に向けた、ネットワーク推定とデータ同化技術の開発・強化。 実データによる妥当性の検証。	「個」を対象として、ペタフロップス級コンピュータを用いた、大規模ゲノム多型と表現型解析アルゴリズムの実行、問題点の発見と解決。 「一般」を対象として、ペタフロップス級コンピュータを用いた、ネットワーク推定・応用と、生命システムデータ同化技術の確立。	「個」と「一般」を融合し、創薬ターゲット探索および個人差を考慮した医療のための基盤情報技術の創出。	

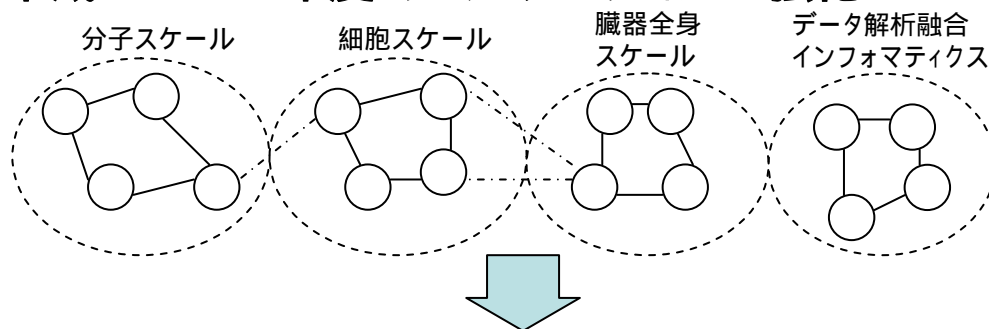
研究開発スケジュール(2)

平成18～20年度:シミュレーションの構築



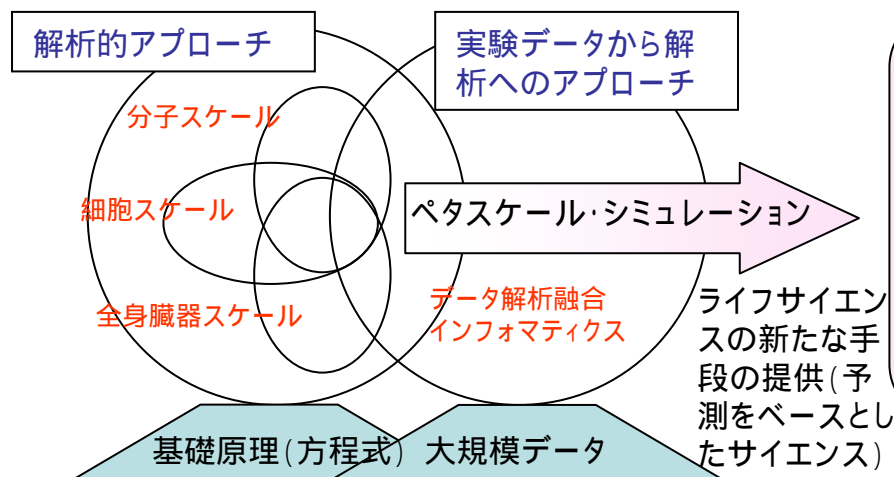
分子 / 細胞 / 臓器 / データ解析 個別のシミュレーションの計算量・解析力を向上させるとともに、各階層内でシミュレーションの連携を実施。

平成21～22年度:シミュレーションの強化



各シミュレーションをペタFLOPS級に近づけるとともに、スケール内のシミュレーションを充実、スケール間の連携を視野に。

平成23～24年度:次世代生命体統合シミュレーションの実現



生命現象の統合的な理解 (= 生命プログラムの理解・予測・再現)

医薬品・医療機器、診断・治療方法の開発 (= 創薬や新規医療技術への実用化)

次世代スパコンにシミュレーションソフトウェアを実装し、ペタFLOPS級のシミュレーションを行う。

各シミュレーションを統合的かつ有機的に結びつけ、次世代生命体統合シミュレーションの実現につなげる。

平成18年度の進捗状況

「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」についての、当初計画に対する研究開発の進捗状況(平成18年度の進捗状況等)

後年度のシミュレーションソフトウェア開発の準備期間と位置づけ、各スケールのソフトウェアの研究開発に向けた課題抽出を実施。また、今後の研究開発に必須な大型計算機の整備も実施。

(1) 分子スケールに関する研究開発

平成18年度は各種分子動力学・量子化学計算シミュレーションソフトウェアの並列性能・計算時間・計算モデルの現状の限界等を調べ、平成19年度以降の改良や開発計画を立案。

(2) 細胞スケールに関する研究開発

平成18年度はシミュレーションに必要な機能を洗い出し、実験精度と今後の発展性を考慮した、ソフトウェアの設計について検討。

(3) 臓器全身スケールに関する研究開発

平成18年度は、利用できる数種のソフトウェアをベースに、現状の性能を分析し、並列性能や高速化の改良計画を立案。

(4) データ解析融合に関する研究開発

平成18年度は、現在利用可能なこの分野のソフトウェアの性能の性能分析を行い、来年度からのソフトウェア開発の設計に向けて検討。