３．グランドチャレンジでの取り組み

1）ライフサイエンスの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ソフトウェアの研究開発

期間：平成18年度（10月）～平成24年度

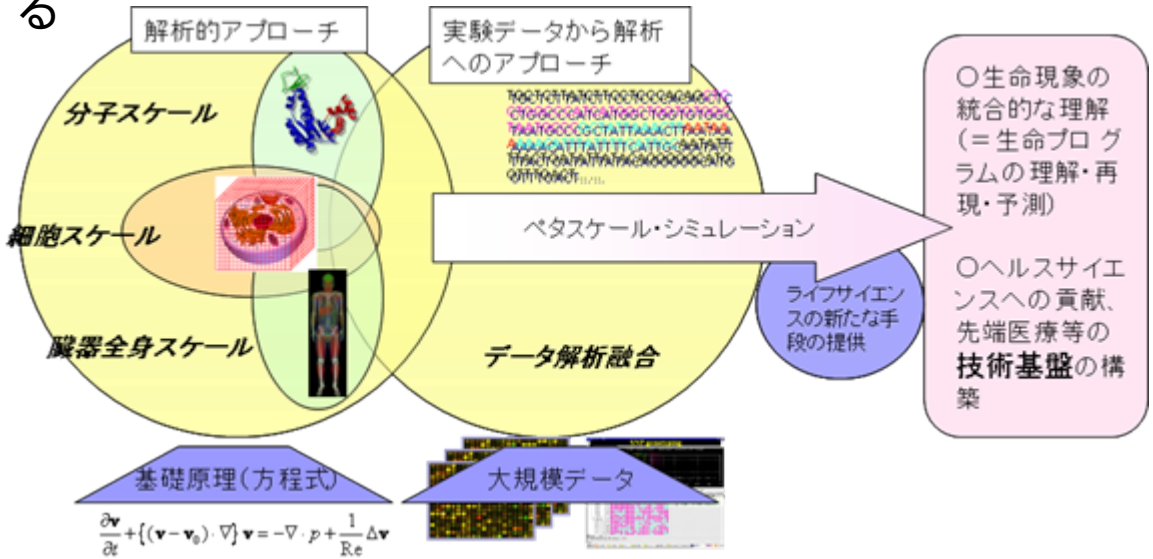
参画機関：理研を中核拠点に13機関

研究開発の目的：

・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る

・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統合的に理解し、医療に貢献するためのソフトウェアを開発する

バイオスーパーコンピューティング　2008



2）研究開発体制

2008年10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

・理研と連携し研究開発を実施。

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
- 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　ﾁｰﾑﾘｰﾀﾞｰ：泰地　真弘人

企画調整グループ　グループディレクター：堤 精史

分子スケールWG
池口満徳（横浜市大）
木寺詔紀・杉田有治（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）

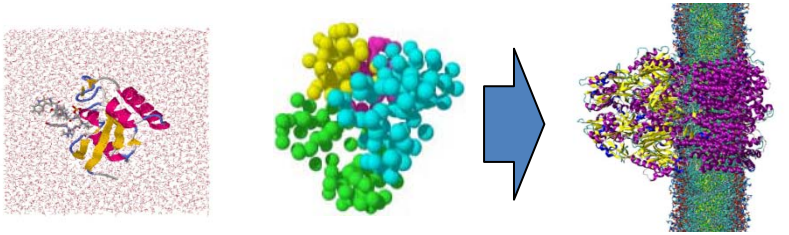
臓器全身スケールWG
松本洋一郎・大島まり・
久田俊明（東大）
高木周（理研）
山口隆美（東北大）
松澤照男（北陸先端大）
野村泰伸・和田成生（阪大）
劉浩（千葉大）
岡澤重信（広島大）
天野晃（京大）

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）

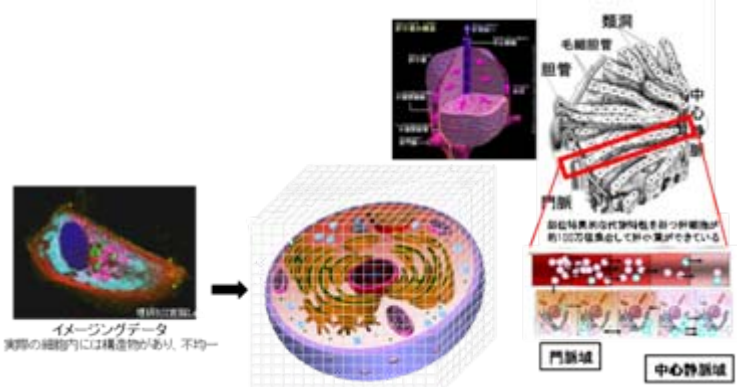
脳神経系WG
石井信（京大）、銅谷賢治（沖縄科技大）、神崎亮平・黒田真也（東大）、　深井朋樹・臼井支朗・Markus Diesmann（理研）

3）研究開発内容（概要）

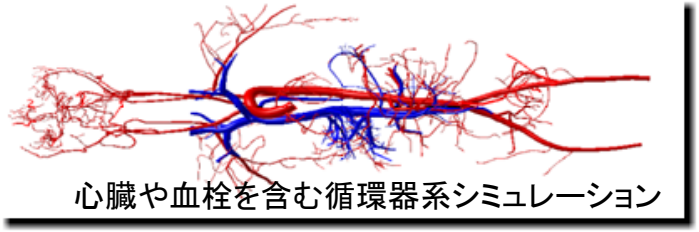
- **分子スケール研究開発**：量子化学計算・分子動力学計算・粗視化モデル計算を組み合わせ、膜タンパクと代謝酵素の機能を解明する
- **細胞スケール研究開発**：細胞を100万ボクセルに分割、細胞内小器官の機能と物質輸送を考慮した代謝と輸送をシミュレーション、肝細胞から肝小葉まで再現を狙う
- **臓器全身スケール研究開発**：心臓から動静脈系、毛細血管に至るシミュレーションシステムを構築、脳梗塞や心筋梗塞の治療までを検討可能とする。同時に重イオン粒子や超音波を使った治療手法の検討シミュレーションも開発する
- **データ解析融合研究開発**：大量の実験データやヒトSNPデータ等から、疾病に至る原因を解析し、薬剤の開発につながる基礎ソフトウェアを開発、ガンに適用する
- **脳神経系研究開発**：神経細胞で構成されるネットワークが判断し、環境適応するメカニズムをシミュレーションで解明、学習障害の克服やロボット等への応用も狙う



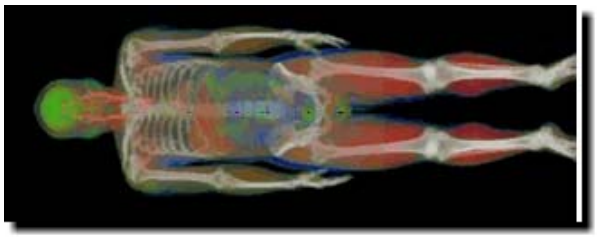
QM-MM　　粗視化モデル　　多剤排出トランスポータ



10^6ボクセルを使った肝細胞シミュレーション



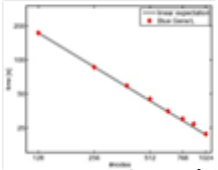
心臓や血栓を含む循環器系シミュレーション



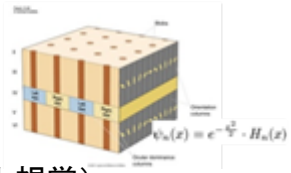
人体モデルを使った超音波・重粒子線治療シミュレーション

神経細胞シミュレーション

局所回路シミュレーション



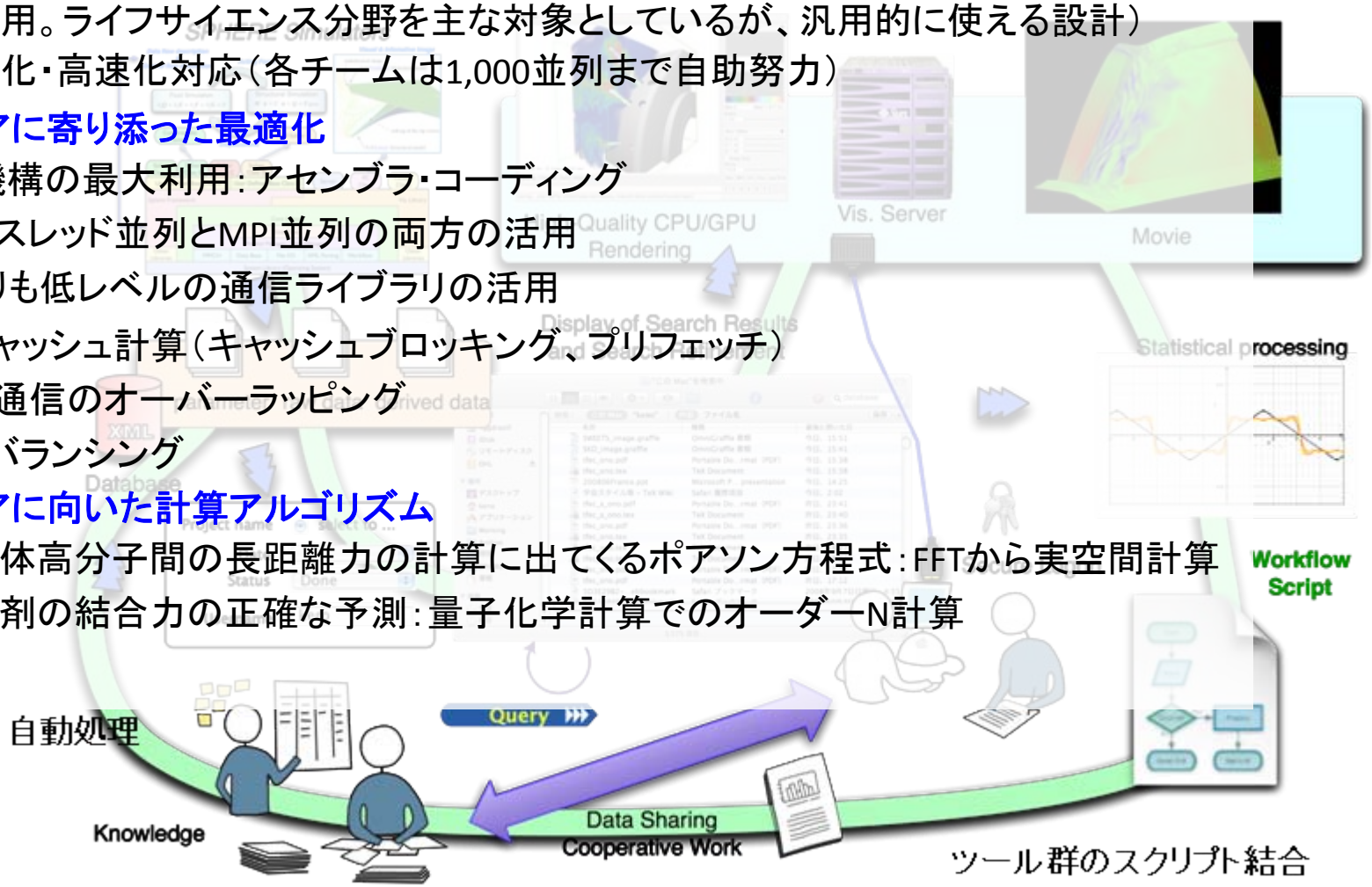
脳全体シミュレーション



脳神経系シミュレーション（昆虫の嗅覚、人視覚）

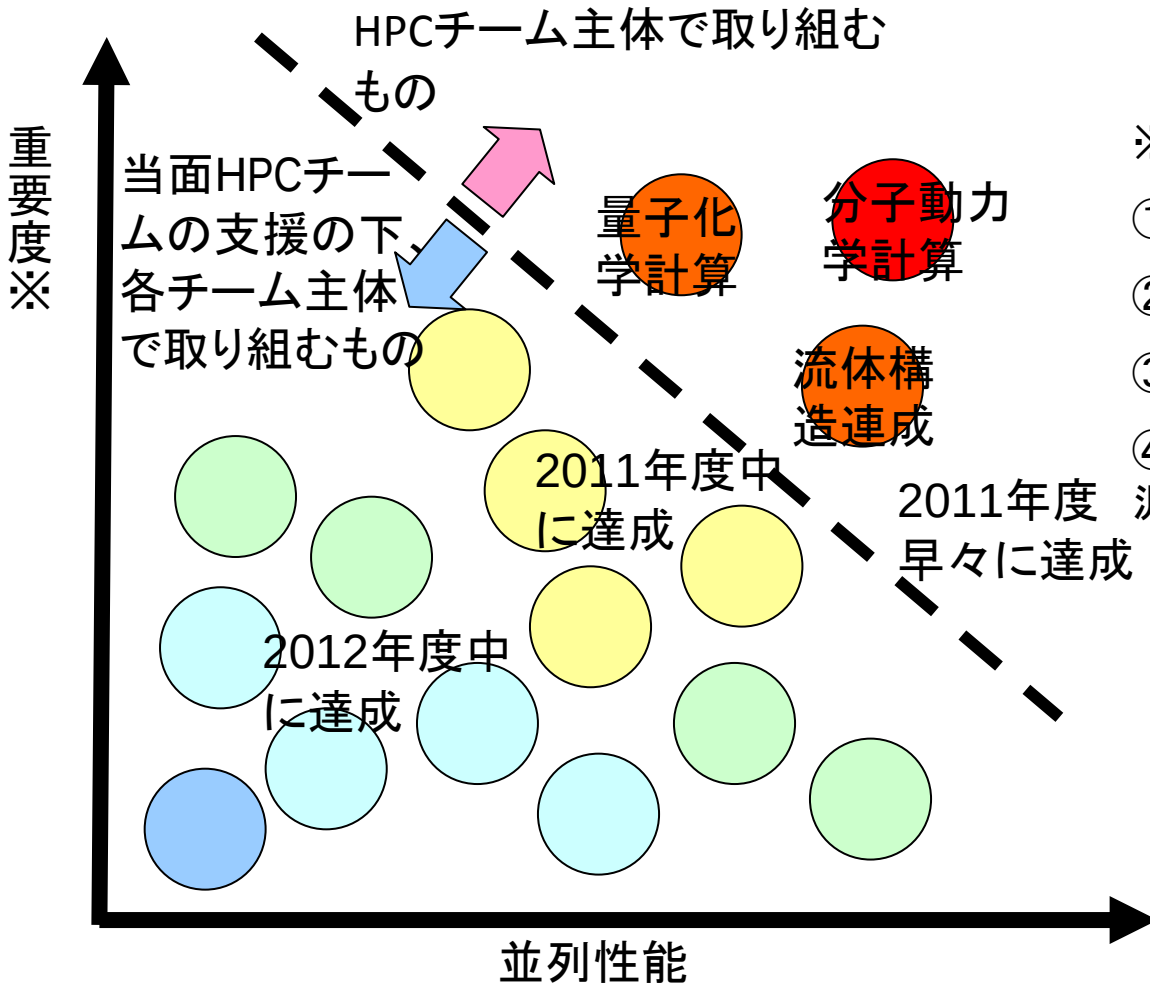
4）生命体基盤ソフトウェア開発・高度化チーム（HPCチーム）

- **役割**
  - 分子動力学や量子力学用ソフトの高速コアライブラリーの開発
  - 並列ミドルウェア・超大規模データ処理可視化システム開発（領域型解法、粒子ベースの解法用。ライフサイエンス分野を主な対象としているが、汎用的に使える設計）
  - 高並列化・高速化対応（各チームは1,000並列まで自助努力）
- **ハードウェアに寄り添った最適化**
  - SIMD機構の最大利用：アセンブラ・コーディング
  - マルチスレッド並列とMPI並列の両方の活用
  - MPIよりも低レベルの通信ライブラリの活用
  - オンキャッシュ計算（キャッシュブロッキング、プリフェッチ）
  - 計算と通信のオーバーラッピング
  - ロードバランシング
- **ハードウェアに向いた計算アルゴリズム**
  - ➢ 生体高分子間の長距離力の計算に出てくるポアソン方程式：FFTから実空間計算
  - ➢ 薬剤の結合力の正確な予測：量子化学計算でのオーダーN計算



5）次世代スパコンでの高速化

優先順位をつけ、その高い順にHPCチームが主体となって、高速化を行う。なお、高速化に関してHPCチームが対応する場合であっても、高速化したソフトウェアを用いた計算による成果の創出に関しては、各チームが責任を持つ。



※重要度の基準

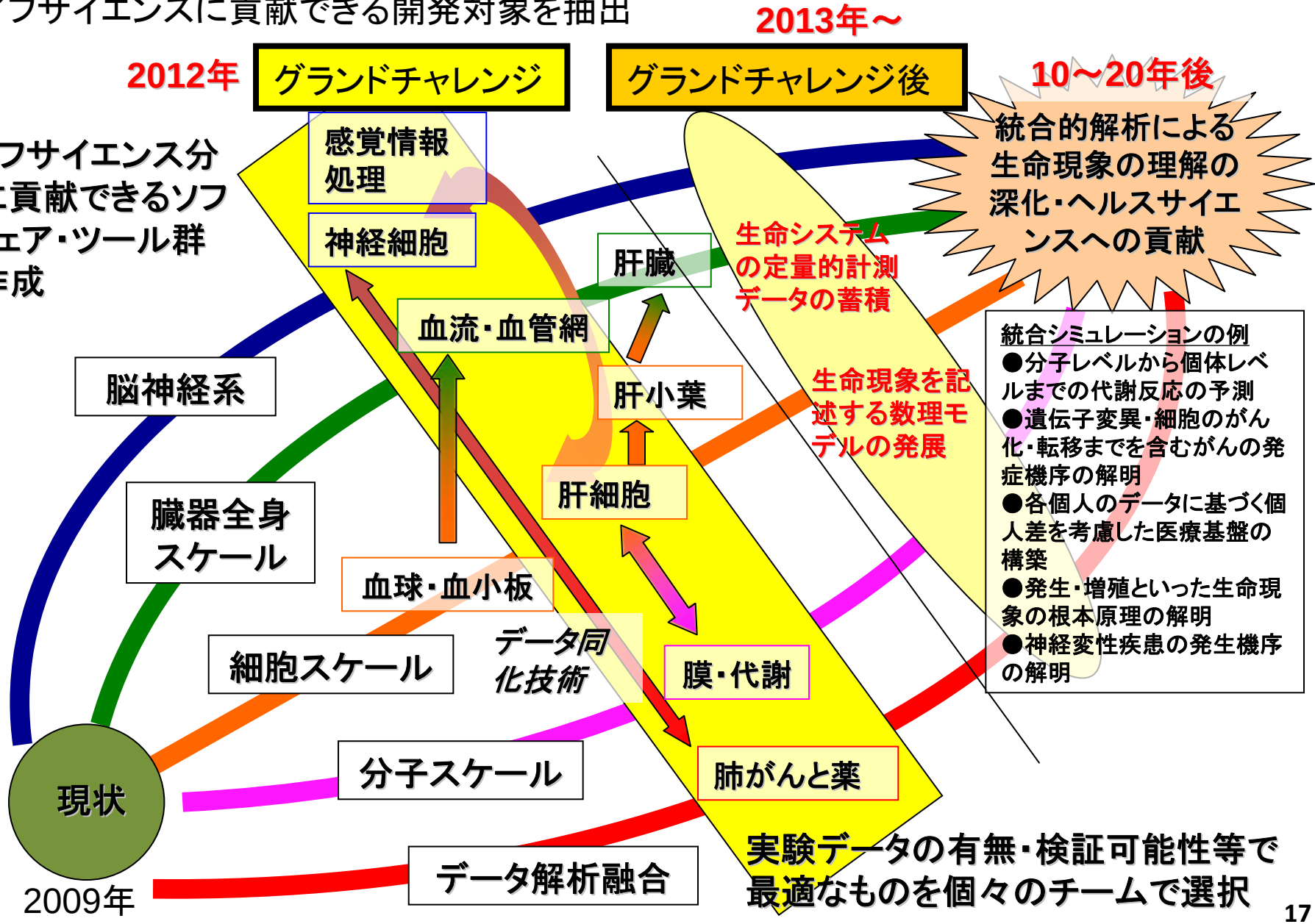
①科学的なインパクト

②並列化の難易度

③ソフトウェアの完成度

④アルゴリズム・ソフトウェアの汎用性

各プロジェクトの進捗を見極めながら優先順位を決定、優先順位に応じてHPCチームが活動を支援

6)チーム目標と共通目標（対象による目標設定）

開発課題に基づき、現時点でのシミュレーションの検証可能性や定量データの有無、ライフサイエンスに貢献できる開発対象を抽出