

課題名 (タイトル) :

細胞内代謝・拡散・膜連成シミュレータの開発

利用者氏名 :

○須永 泰弘*
小山 隆司*

所属 :

*和光研究所 次世代計算科学研究開発プログラム
次世代生命体統合シミュレーション研究推進グループ 細胞スケール研究開発チーム

1. 本課題の研究の背景、目的、関係するプロジェクトとの関係

次世代計算科学研究開発プログラム細胞スケール研究開発チームでは、次世代スーパーコンピューター向けのグランドチャレンジとして細胞シミュレーション統合プラットフォーム(RICS)の開発を行っている。細胞内部は細胞内小器官(オルガネラ)とよばれる非常に複雑な構造物が脂質膜によって分けられ、場所によって細胞内の反応が異なる。現在までに細胞内の生化学反応をシミュレーション可能なソフトは存在するが、細胞内小器官や脂質膜間の物質移動を考慮してシミュレーション可能なシステムは存在しない。RICSは固定格子の空間内に細胞のモデルを構築し、拡散、生化学反応など様々な細胞反応のシミュレーションを実装している。具体的には細胞を100万のボクセルに区画し、そこに実測データより得られた細胞内の物質質量・移動量などの情報を取り込み、細胞内の現象をシミュレーションする。

RICSは、空間を細密に分割し、かつ大規模な計算を行う必要がある。そのため、次世代スパコンでの大規模並列な環境をターゲットとし、高い並列性能を達成するシミュレーションシステムを構築する必要がある。次世代計算研究開発プログラムで所有している計算機では2048並列計算が限界であり、RICC上で超高並列化のテストと問題点の発見、分析、評価を目的としてRICCを利用した。

2. 具体的な利用内容、計算方法

RICSでは、細胞内の代謝と物質移動の連成解析を反応拡散方程式で定式化した。空間の表現に、理化学研究所で開発されたボクセル解析フレームワーク(V-Sphere)を用いており、任意形状を表現可能なシステムである。これにより細胞内の複

雑な空間構造を表現することができる。さらに、ボクセルを用いることによって、非構造計算格子を用いた場合より領域分割が容易で分散並列計算に適したシステムである。本プラットフォームでは拡散、生化学反応、膜輸送を連成してシミュレーションを行なう。生化学反応の計算には外部モジュールとしてE-Cellを用いており、既存の生化学反応モデルが再利用可能である。

3. 結果

次世代計算科学研究開発プログラムが保有している1024ノードの計算機(Quest)上では動作を確認している。今年度はこれをRICCに移植することを試みた。

拡散ソルバ、膜ソルバは安定してRICC上で動作した。E-Cellシステムは3.1系を使用しており、平成22年2月6日にE-Cell13.1.108が公式リリースされ、これをRICCにインストールし、動作を確認した。

拡散・膜ソルバとE-Cellソルバの連成計算を試みたところデータの受け渡し等リンクはできているようだが、E-Cell内代謝計算が実行されなかった。この原因に関して現在調査中である。

4. まとめ

細胞を対象とした新しい計算手法を用いたシミュレーションシステムの研究開発を行っている。現在のところ、個々のプログラムはRICC上での動作を確認しているが、連成した計算を行うための環境構築に時間が必要状況である。本年度だけでは実際の計算を終了させ、評価を行う事は時間的に困難なため、来年度も引き続き簡易利用としてRICCの継続利用をさせていただきたい。

5. 今後の計画・展望

RICC上でRICSを動作させ、大規模計算を実行させ、様々な細胞の生化学反応のシミュレーションを行う。さらに、超並列計算時のRICSの問題点を洗い出し、次世代スーパーコンピューターでの計算に向けた対応を行う。

6. RICCの継続利用を希望の場合は、これまで利用した状況（どの程度研究が進んだか、研究においてどこまで計算出来て、何が出来ていないか）や、継続して利用する際に行う具体的な内容

現在、コンパイルに関する調査を実施中である。その結果をふまえ、プログラムの改修や問題点のつぶし込みを来年度も継続して実施していく計画である。さらにFX1への移植作業も行う予定である。引き続き、来年度もRICCを利用させていただき、更に効率のよいシミュレーションシステムを構築し、より多くの計算結果（研究成果）を排出していきたい。