

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 伊藤 俊
所属 : 社会知創成事業 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「京」を利用するグランドチャレンジのプログラムとして細胞シミュレーション統合プラットフォーム (RICS) を開発中である。

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 (コンパートメント) が脂質膜によって分けられており、膜を通した物質輸送や細胞内の位置によって異なる生化学反応が行われていることが知られている。

しかし、現在のシステムバイオロジーの研究で用いられているシミュレーションツールは、細胞内の空間構造や物質の分布を扱わないモデル・計算法が主である。

そこで、RICS では細胞内の空間構造を考慮し、場によって異なる生化学反応、物質拡散、膜機能を連成したシミュレーションを可能にし、細胞のメカニズムを解明することを目的として開発している。

2. 具体的な利用内容、計算法

これらのシミュレーションを行うには、空間を細密に分割する必要があるため、1細胞を100万のボクセルに区画するような、大規模なシミュレーションが可能なシステムを構築する必要がある。

RICS では、固定格子 (ボクセル) の空間に形状を配置し、細胞内の生化学反応と物質拡散を反応拡散方程式で定式化し、膜機能を追加した連成解析を可能にしている。更に実測データより得られた細胞内の構造、物質濃度、移動量などの情報を取り込んだシミュレーションを可能にしている。

RICSシステムは最終的には次世代スパコンを利用す

ることを想定し、事前準備として、富士通コンパイラを使用したテスト、超高並列化のテスト、問題点の発見、分析、評価を目的としてRICCを利用した。

RICSは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) を用いることにより、任意形状によるシミュレーションを可能にし、更に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。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の再利用が可能である。

3. 結果

昨年度、生化学反応ソルバ (E-Cell)、拡散・膜ソルバ、それぞれについて正常動作することを確認できた。しかし、連成 (動的リンク) した場合に実行時エラーが発生し正常動作することができなかった。

本年度は、大規模並列の動作確認と E-Cell 連成時の動作テストを行っている。

大規模並列の動作確認では拡散ソルバの高並列時 (1024 並列以上) のメモリ不足になる問題を発見することができた。

E-Cell 連成時の動作テストでは、原因調査とバージョンアップが並行して行われ、最新バージョン (E-Cell13.2.2) の RICC 上での単体の動作確認が終了し、RICS との連成計算の動作確認を行っている所である。

連成計算時のエラーの原因調査では情報基盤センターに情報提供、調査依頼を行い、コンパイラのバグが発見されている。

4. まとめ

個々のソルバの RICC 上での動作確認が終了し、課題の抽出を行うことができた。しかし、連成計算を行う場合の動作確認が不十分である。

5. 今後の計画・展望

平成 22 年度 RICC 利用報告書

今後、不足している反応・拡散・膜の連成シミュレーション、大規模並列の動作確認、及び性能測定・分析・チューニングを行う予定である。また、平成 21～22 年度に、膜電位ソルバ、移流反応拡散ソルバの追加開発を行っている。追加開発した各機能の RICC 上の動作確認、および大規模並列計算の実行、性能測定を行い、次世代スパコン「京」での動作に向けた準備をしていく予定である。更に様々なモデルを用いた細胞シミュレーションを行い、具体的な研究成果を発表していく予定である。

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、E-Cell の最新版(3.2.2)への対応、および富士通コンパイラへの対応による修正を行い、動作確認を行っている最中である。今後、その結果をふまえ、プログラムの改修や課題の抽出を継続して実施していく計画である。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）を排出していくために、来年度も引き続き RICC を利用させていただきたい。