

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, 七澤 洋平, 近山 英輔, 伊藤 俊, 鈴木 良彦  
理研での所属研究室名 :

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、細胞内小器官や細胞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、京速コンピュータ「京」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、富士通コンパイラへの対応や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、細胞内の反応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可能となる。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、膜間輸送、血液による移流、膜電位興奮・伝播、疑似小胞輸送機能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

本年度は、E-Cell 最新版の3.2.2をRICC上にインストールするとともに、システム全体の安定性を向上させた。膜電位や移流などの様々な細胞機能を追加し、これらをRICCで問題なく動作させることができた。特に赤血球細胞の複雑な細胞内生化学反応を安定して計算することができた。

週末運用による8192並列までの大規模実行にも挑戦し、並列度99.95%を達成することができた。

4. まとめ

RICSに実装した細胞機能をRICCの富士通コンパイラで動作させることができ、京速コンピュータ「京」でのRICSのインストールが順調に行うことができた。運用の皆様の対応に感謝申し上げたい。

5. 今後の計画・展望

血小板や赤血球、肝細胞など様々な細胞の生化学反応のシミュレーションモデルが作られている。細胞形状内での反応をRICC上で計算したい。場合によっては一般利用への移行を考えている。

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

## 平成 23 年度 RICC 利用報告書

RICC で、安定して RICS は動作しており、細胞形状内で簡単な反応をシミュレーションすることができた。現在様々なモデルを作成しており、これらを RICC を用いて計算したいと考えている。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。

### 7. 利用研究成果が無かった場合の理由

本年度は、細胞機能の新規追加、京速コンピュータ「京」での動作と並列度の向上を第一目標に開発を行ったため、実際の細胞シミュレーションを行うことができなかった。