

「シミュレーション技術の革新と実用化基盤の構築」

平成16年度採択研究代表者

富田 勝

(慶應義塾大学先端生命科学研究所 所長 環境情報学部 教授)

「システムバイオロジーのためのモデリング・シミュレーション環境の構築」

1. 研究実施の概要

生物や細胞をシステムとしてとらえてその全体のしくみや振る舞いを理解する新しい学問分野は「システムバイオロジー」と呼ばれ、国内外で注目を集めている。システムバイオロジーにおいてはコンピュータシミュレーションが不可欠であり、中心的な役割を果たすことが期待されている。

細胞モデリングは、細胞内の多様な生理現象を対象とするため、そのシミュレーション実行時間に比して、モデリングの工程が他分野のシミュレーション研究とは異なり、目的に応じてのチューニングなど、かなりの時間的コストがかかる。このことは、本質的な細胞のシステムの複雑性と、そのモデリングにおいてある程度の抽象化をせざるを得ない、コンピュータリソース面での制限に起因するものであって、この分野の成功はいかに目的に則ったモデリングを効率よく行うか、ということにある。

そこで、本研究では、システムバイオロジーのための、統合化されたモデリング・シミュレーション環境を開発する。これは、知識ベースで統合されたデータベースを用いたシミュレーションモデルの構築、シミュレーション計算の実行、結果の解析に基づくモデルの評価をGUIベースの統合ソフトウェアでインタラクティブに行え、直感的かつ実用的なモデリングとシミュレーション環境を、コンピュータに精通したユーザだけでなく、一般的な生物学者まで幅広く提供するものである。また、このモデリング・シミュレーション環境の一部として、細胞シミュレーション用のアルゴリズムモジュール群の開発、大規模化するシミュレーションモデルを並列計算機上で高速に計算するためのコアエンジンの開発、そして、生化学シミュレーションと物理シミュレーションなど異なるスケールの現象の統合と解析を可能にするコアエンジンも開発する。

本研究の成果として完成される実用的なモデリング・シミュレーション環境によってシステムバイオロジー研究が進展した結果として、バイオテクノロジーや創薬研究の進展、さらにこれからの生物学研究に対するシミュレーション技術の一般化が期待できる。

2. 研究実施体制

慶應義塾大学グループ

- ① 研究分担グループ長：富田 勝（慶應義塾大学環境情報学部、教授）
- ② 研究項目：統合環境フレームワークの開発，モデル構築用のGUI環境の開発（研究課題A），細胞モデル解析・デバッグ環境の開発（研究課題B, B1），知識ベース駆動型モデリング環境（研究課題C），シミュレーションアルゴリズム群の開発（研究課題D），大規模モデルに対応したシミュレーション計算の高速化（研究課題E），マルチスケールモデルに対応するマルチフィジックスシミュレーションコアエンジンの開発（研究課題F）

3. 主な研究成果の発表

(1) 論文発表

- “Sustained MAPK activation is dependent on continual NGF receptor regeneration” Qiu, D., Mao, L., Kikuchi, S. and Tomita, M.; Development, Growth & Differentiation 46:5 393-403(2004)
- “A multi-algorithm, multi-timescale method for cell simulation” Takahashi, K., Kaizu, K., Bin, H., Tomita, M.; Bioinformatics 20(4): 538-546 (2004)
- “Toward large-scale modeling of the microbial cell for computer simulation” Ishii, N., Robert, M. Nakayama, Y., Kanai, A. and Tomita, M.; Journal of Biotechnology 113:1-3, 281-294 (2004)
- “A general computational model of mitochondrial metabolism in a whole organelle scale” Yugi, K. and Tomita, M.; Bioinformatics 20 1795-1796 (2004)