

次世代スーパーコンピューター開発プロジェクトとライフサイエンスのグランドチャレンジ： 生命体統合ソフトウェア開発



RIKEN

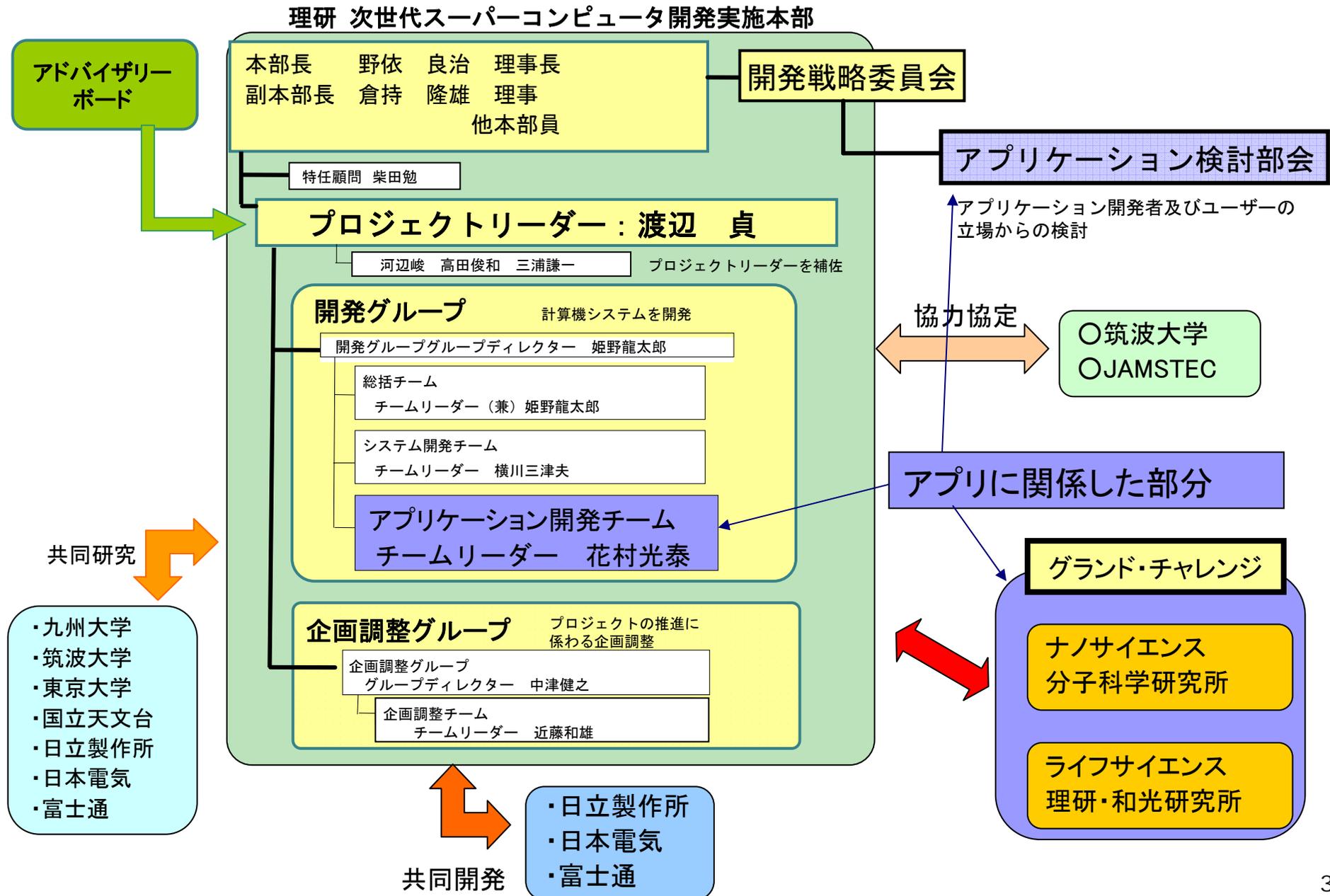
Next-Generation Supercomputer R&D Center

次世代計算科学プログラム 副プログラムディレクタ
姫野 龍太郎

次世代スーパーコンピュータ開発プロジェクト

- 2006年度からスタート、システム開発・施設建設・グランドチャレンジのアプリ開発までを総合したプロジェクト(文部科学省、総額約1150億円)
- スーパーコンピュータの開発とその応用は国家基幹技術(第3期科学技術基本計画)
- 理化学研究所では2006年1月に開発実施本部設立
 - 基本方針
 - シミュレーションにより、科学技術・産業の競争力を維持、高める
 - スパコンの開発力を国内に保持し、継続的な開発を可能とする
 - 完成時に世界最速レベルの性能を達成する
 - 目標
 - 理論性能やLINPACK性能を考慮しつつ、実効性能(アプリ性能)を重視したシステム構築を目指す。
 - 幅広い活用を促すため、低コストを実現しつつ、利便性の高い汎用機により目標性能を達成することを目指すとともに、アクセラレータの検討も行う。
 - 低消費電力CPUなど、新規性の高い技術をベースとした波及効果の高いハードウェア技術の開発を目指す。

プロジェクト全体の開発体制とグランドチャレンジ



全体スケジュール

		平成18年度 (2006)	平成19年度 (2007)	平成20年度 (2008)	平成21年度 (2009)	平成22年度 (2010)	平成23年度 (2011)	平成24年度 (2012)	
							稼動▲	完成▲	
システム	演算部 (スカラ部、ベクトル部)	概念設計		詳細設計		試作・評価		製造・据付調整	
	制御フロントエンド (トータルシステム ソフトウェア)		基本設計	詳細設計	製作・評価		性能チューニング・高度化		
	共有ファイル		基本設計	詳細設計	製造・据付調整				
ソフトウェア (グラフィックアプリケーション ソフトウェア)	次世代ナノ統合 シミュレーション	開発・製作・評価					実証		
	次世代生命体統合 シミュレーション	開発・製作・評価					実証		
施設	計算機棟	設計		建設					
	研究棟	設計		建設					
運用		方針・体制の検討				準備活動	運用		

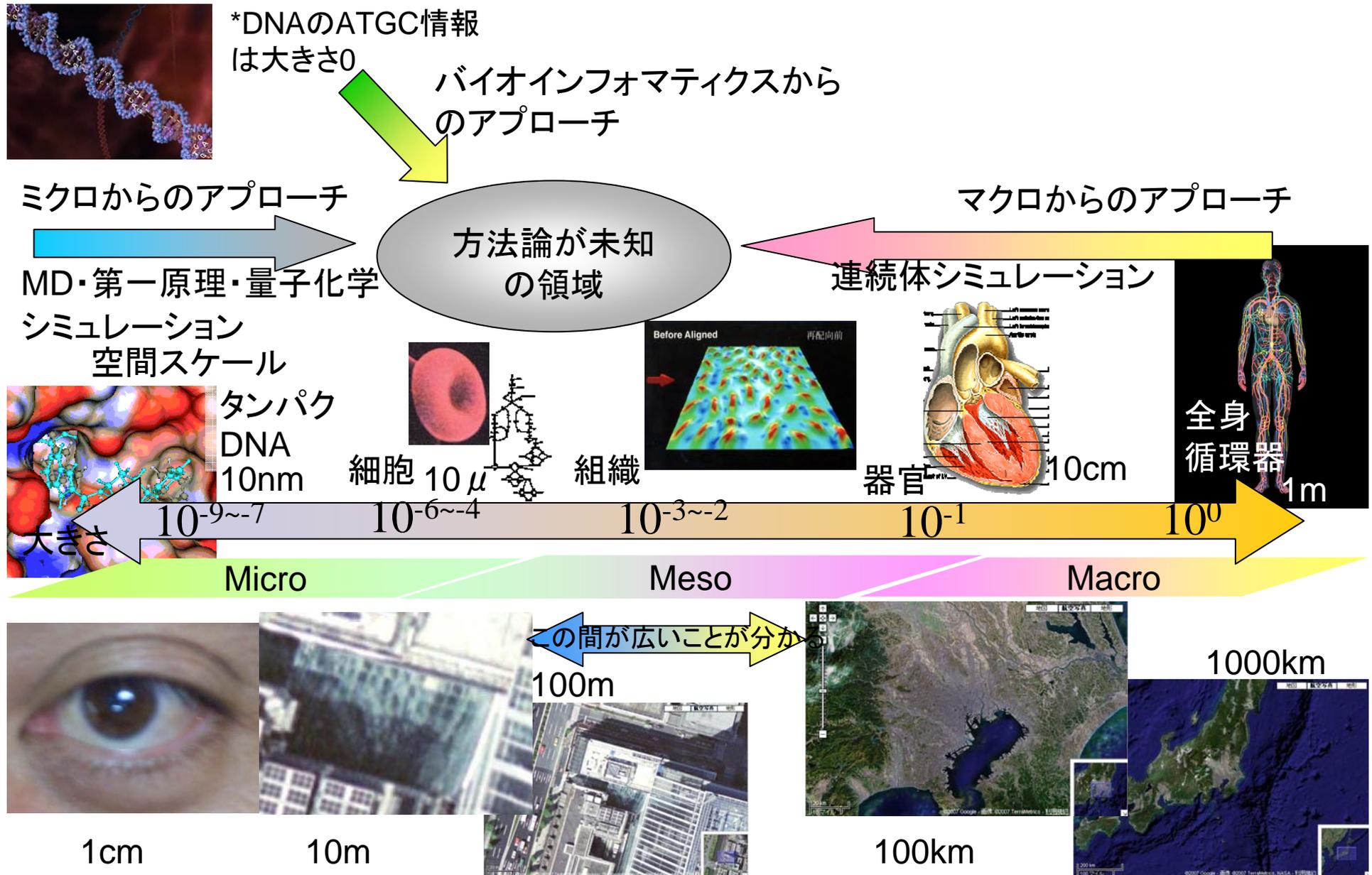
次世代スーパーコンピュータ利用に向けた 生命体統合シミュレーションソフトウェアの開発体制 の構築について

- ・理化学研究所(和光研究所)は、次世代スーパーコンピュータ開発利用プロジェクトにおけるグランドチャレンジアプリケーションの一つである「次世代生命体統合シミュレーションソフトウェア」の開発拠点として選定され、平成18年10月に「次世代計算科学研究開発プログラム」を発足。
- ・平成18年度には、現体制によりH19年度以降の研究開発の本格実施に向けた準備を進め、平成19年4月より各機関で研究を開始。

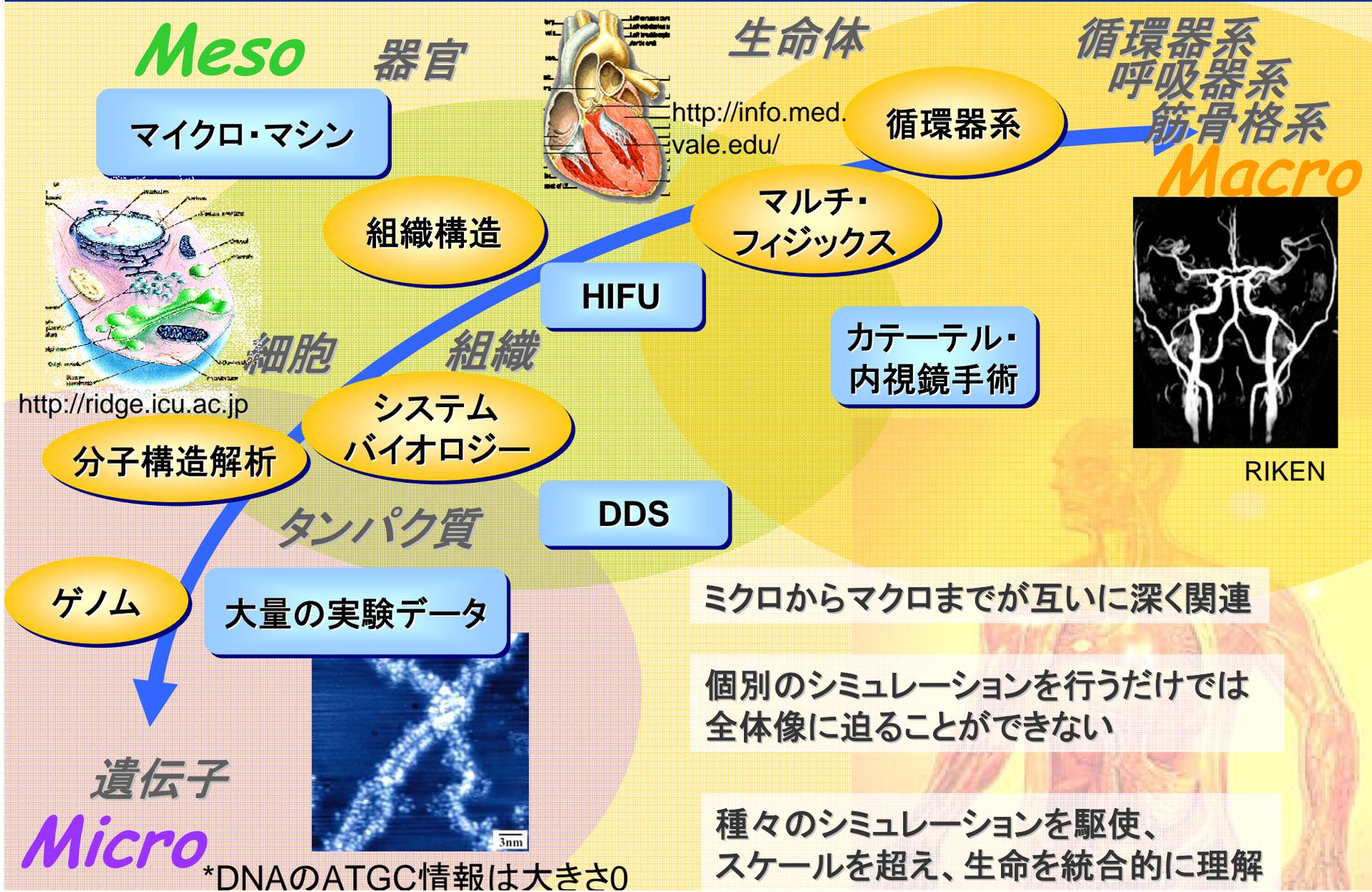
これまでの経緯と今後の予定

- 2006(H18)年 8月 和光研究所が「次世代生命体統合シミュレーションソフトウェア」の研究開発拠点に選定
- 10月 和光研究所に「次世代計算科学研究開発プログラム」を設置、プロジェクトスタート
- 2007(H19)年 1月 プロジェクト関係者によるワークショップを実施、H19年度以降の研究開発の本格実施に向け、研究計画を検討
- 2007(H19)年 4月 各協力研究機関含め、本格的な研究を開始(年額予算16億)
- 11月 アプリケーションの開発支援を行う新規チーム(生命体基盤ソフトウェア開発・高度化チーム)を設置。
- ～2010(H22)年度 各研究開発チームでシミュレーションソフトウェアを開発、平行して産業応用等に向けたアプリケーションの改良を検討
- 2011(H23)年度 開発したシミュレーションを次世代スパコンでチューニング
- 2012(H24)年度 チューニング完了、本格活用

生命のシミュレーションのスケールの広がり と 計算方法



生命体統合シミュレーションの狙い



ライフサイエンスにおけるグランドチャレンジ

背景

ライフサイエンスの研究手法

生命現象のトータルな理解に迫る
新しいアプローチの必要性

実験に基づく実証的・疫学的アプローチだけでは、部分的・個別な解明にとどまり、生命のトータルな理解が課題。

技術的制約

ライフサイエンスのシミュレーション
に必要な計算量が不足

複雑な生命現象をシミュレーションで再現するためには、現状の計算量をはるかに凌ぐコンピュータが必要



次世代スパコンを用いてライフサイエンスに
おける新しい研究分野の開拓に挑戦
(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

目指す方向

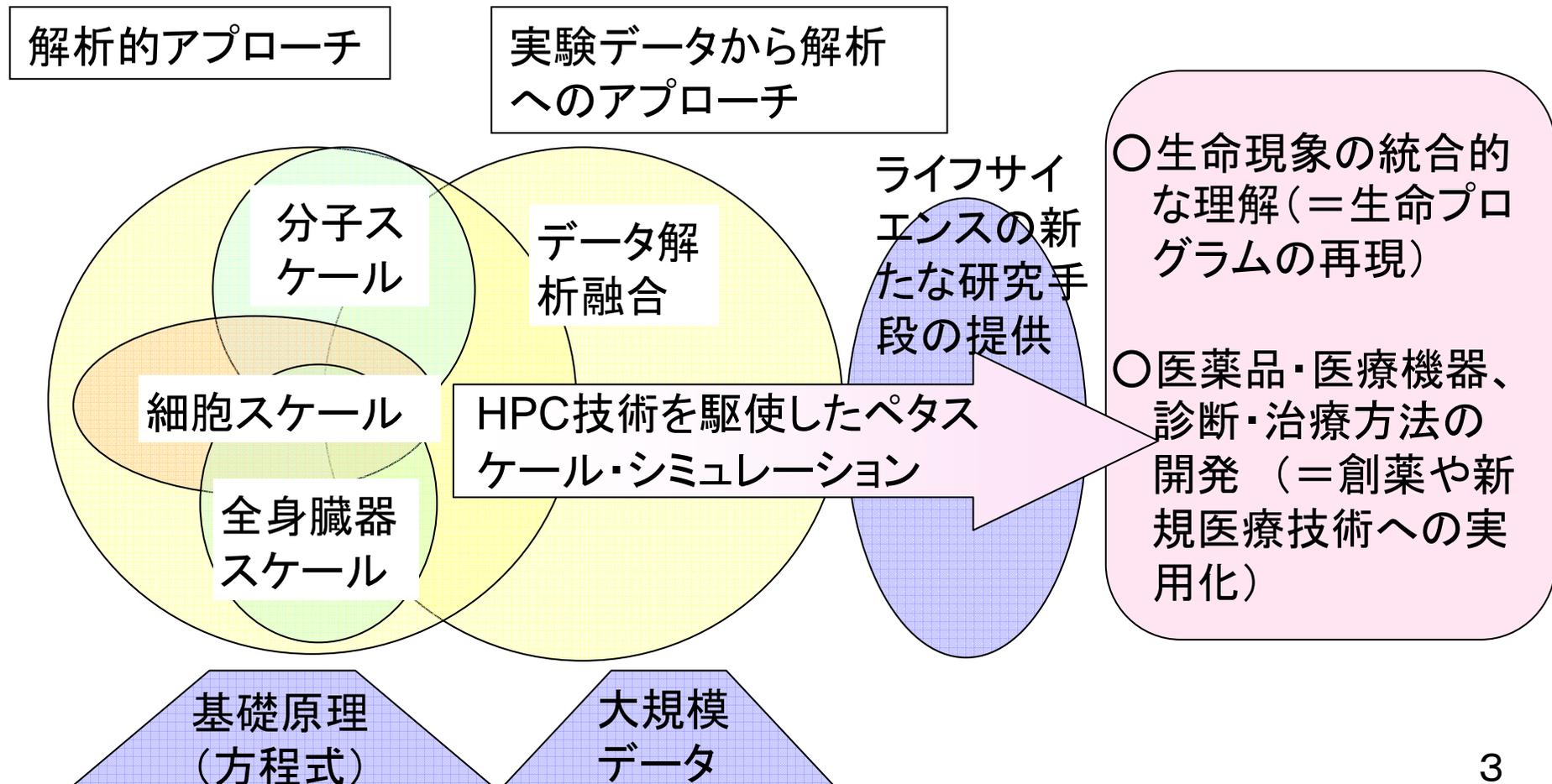
ペタスケールのシミュレーション技術によって、ライフサイエンスの諸課題解決にブレークスルーをもたらす新たな手段を提供し、計算科学により生命現象を統合的に理解・予測・解明する。

最終目標

- 生命科学に仮説－検証型の新たな研究手法を提供
- 生命プログラムの理解・再現・予測を実現
- 創薬・ヘルスサイエンスへの貢献、新規医療技術の実用化

次世代生命体統合シミュレーション

研究開発の概要と達成目標



研究開発項目の互いの関連

生命プログラムの再現・理解・予測

人体シミュレーターによるヘルスサイエンスへの貢献

生体分子

タンパク質

細胞

組織

器官

人体

分子スケール研究開発

細胞スケール研究開発

臓器全身スケール研究開発

生命活動の分子基盤であるタンパク質などの生体高分子が生体内で担っている機能をシミュレーションによって捉えることにより、分子生物学・細胞生物学の課題を解明し、さらには新たな薬剤開発につなげることを目的とする。

細胞膜上の生体高分子
エネルギー代謝系の電子移動

細胞に関するシミュレーションのプラットフォームを開発し、細胞内の現象の実測データより得られた物質の量・移動等の情報を取り込み、疾患等の理解へつなげるとともに、実測データを各スケールのモデルの妥当性の補強に活用、プロジェクト全体に寄与する。

代謝・循環システムの動的理解と疾患制御

循環器系、筋骨格系、種々の臓器、呼吸器系などを備えた人体モデル化技術の開発を行い、生体内で起こる種々の現象を理解し医療に結びつけることを目指す。

- 人体モデル構築に向けた5つの課題
- 全身ボクセルデータ、臓器全身力学モデル
 - 人体内超音波伝播シミュレータの構築
 - 心臓全体完全シミュレータの開発
 - 血管網の構築と血液循環統合シミュレーション
 - 肺呼吸・肺循環統合シミュレーション

- 分子シミュレーションの3つの計算手法
- 量子化学計算：酵素反応、エネルギー代謝
 - 分子動力学計算：タンパク質の分子機能の解明
 - 粗視化モデル：タンパク質のフォールディング

- 細胞スケールの研究開発とレベル統合に向けた3つのカテゴリー
- 細胞下・細胞スケールシミュレーションの基盤構築と応用
 - シミュレーション基盤情報収集
 - マルチレベルシミュレーション

データ同化によるモデルの精緻化

ターゲット分子の推定

薬剤設計に関わる計算科学手法の提供

代謝経路の推定

創薬・薬剤副作用の予測

成人病の病態制御方法の開発

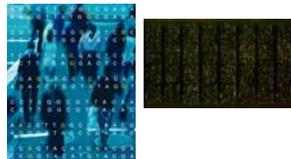
診断技術・治療技術の確立

データ解析融合研究開発

膨大化するゲノムや遺伝子関連データをペタスケールで解析するアルゴリズムなどの応用技術を開発すると共に、データ同化によるデータとシミュレーションモデルの融合を図るモデル構築技術を開発する。

- データ解析融合研究開発の4つの研究課題
- 生命体シミュレーションのためのデータ同化技術の開発
 - 遺伝子ネットワークの推定とその応用
 - タンパク質間相互作用ネットワークの推定とその応用
 - ゲノム多型データと表現型

創薬ターゲット探索および個人差を考慮した医療のための基盤情報技術の創出



アプリケーション研究開発支援

産学連携

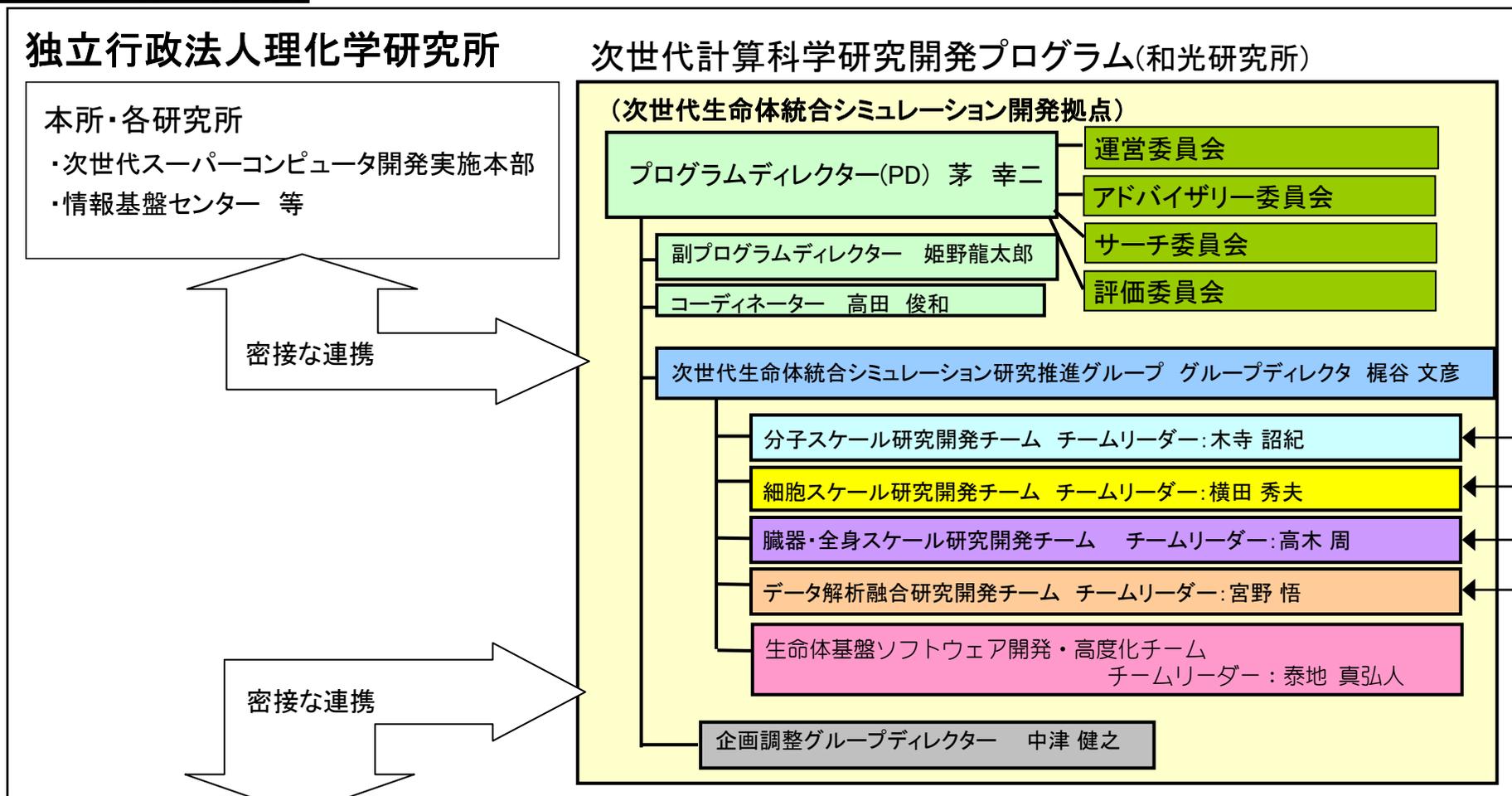
ソフトウェアを次世代スーパーコンピュータで利活用するため、ソフトウェアの並列化・高性能化の支援、基盤ソフトウェアのとりまとめを行う。また、研究成果から得られた、創薬ターゲットの探索などの、ソフトウェアの実用化に向け、産業界と連携した研究開発体制の構築も進める。

次世代スーパーコンピュータの利活用に向けたアプリケーションの整備

医療応用、産業応用に向けたアプリケーションの開発

生命システムに対する予測と発見の基盤情報技術の構築

研究開発体制



今日のシンポジウム

- 理研・和光研がグランドチャレンジ・ライフ拠点に選定されて生命体統合シミュレーションの研究開発を開始して1年3ヶ月。
- 目標、研究開発体制と開発するソフトウェアの計画概要を紹介
網羅的に全てを紹介する代わりに、特に2つの話題に絞って、議論することとした
 1. 階層を超えるモデリング
 2. 医療を通じての社会貢献
- セッション1:階層を超えるモデリング
 - 開発するソフトウェアに使う方法(特に階層を超える部分)とサイエンスへの取り組み
 - 他のスケールとの関係・連携
- セッション2:医療を通じた社会への貢献
 - 開発されるソフトウェアと想定している利用
 - 利用にあたっての人材育成や実際に役立つことを理解してもらう活動など

生命現象は広く、既存チームではとてもカバーできない領域や、我々の視点が狭いことによって見落としている部分があると予想される。それを具体的に指摘していただき、今後探求すべき方向を考えるセッション3を用意した。

- 実験を元にした新たなモデル化のアプローチ:理研・神戸研・上田先生
- 脳科学の立場から:脳科学研究センター・甘利センター長
- 産学連携の見地から:大正製薬・北村先生