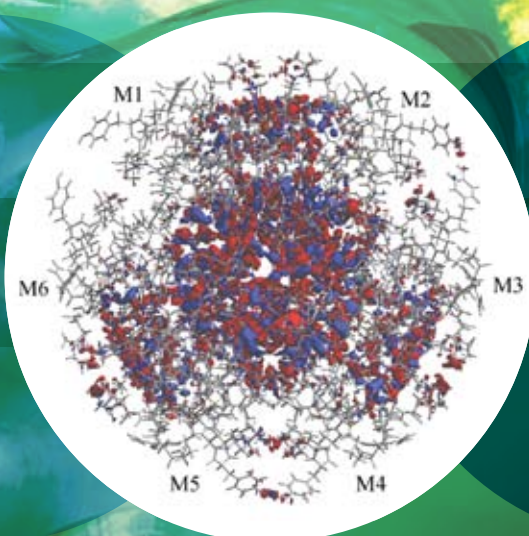


BioSupercomputing Newsletter

Vol.2 2010.3

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
Next-Generation Integrated Simulation of Living Matter



ProteinDFの成果の例：
インスリンの凝集に伴う電子の再分布
6量体と単量体の全電子分布の差を描いたもの。
* ProteinDFについては3ページと10ページを参照

CONTENTS

● SPECIAL INTERVIEW	○次世代スーパーコンピュータの性能を最大限に活かし ライフサイエンス分野で世界のトレンドセッターをめざす！ 次世代計算科学研究開発プログラム 副プログラムディレクター 姫野 龍太郎	2-3
● LEADER'S TALK	○あるがままの生きた細胞を再現して細胞のシミュレーション実現をめざす 細胞スケール研究開発チーム チームリーダー 横田 秀夫	4-5
	○脳神経系の機能の解明をめざしてスーパーコンピュータ上に脳を創る 脳神経系研究開発チーム チームリーダー 石井 信	6-7
	○次世代スパコンの可能性を最大限に引き出すため高性能計算環境のさらなる充実を図る 生命体基盤ソフトウェア開発・高度化チーム チームリーダー 泰地 真弘人	8-9
● 研究報告	○全電子計算に基づくタンパク質反応シミュレーション 東京大学生産技術研究所 佐藤 文俊／平野 敏行／上村 典子／恒川 直樹／松田 潤一	10
	○オイラー型流体・構造連成手法 東京大学大学院工学系研究科 杉山 和靖	11
	○大脳皮質局所神経回路網モデルの大規模シミュレーション Cortical Microcircuit Developed on NEST 脳神経系研究開発チーム 五十嵐 潤	12
	○次世代の分子動力学シミュレーションプログラム開発 生命体基盤ソフトウェア開発・高度化チーム 小山 洋／大野 洋介／舩本 現／長谷川 亜樹／森本 元太郎	13
● 参画機関map／研究開発体制		14
● 異分野研究者を横断 バイオスーパーコンピューティング研究会の誕生		15
● イベント報告／イベント情報／ロゴマークについて		16

ライフサイエンス研究分野の未来を切り拓くバイオスーパーコンピューティング 次世代スーパーコンピュータの性能を 最大限に活かしライフサイエンス分野で 世界のトレンドセッターをめざす！

次世代計算科学研究開発プログラム
副プログラムディレクター

姫野 龍太郎



次世代スーパーコンピュータ・プロジェクトのグランドチャレンジアプリケーション開発におけるライフサイエンス分野の研究開発拠点として、理化学研究所は「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研究」に取り組み、新たな学問領域「バイオスーパーコンピューティング」を提唱。現在、理化学研究所とこれに参画する14機関の研究者らにより、ペタフロップス・スケールの次世代スーパーコンピュータの性能を最大限に活用するソフトウェア開発が進められている。ライフサイエンス分野に高度な計算科学に基づく新しい方法論を確立し、世界をリードしていこうとする「バイオスーパーコンピューティング」に大きな期待が寄せられている。

■ 計算科学的アプローチで生命現象解明に挑む

これまでライフサイエンス分野の王道は、何といても実験でした。コンピュータは、主に実験データの整理などに使われるに過ぎませんでした。そして、ハイスループット実験機器、超高速シーケンサー、遺伝子組み換え技術、1分子イメージングなど、実験的な技術や手法は急速に進歩し、たくさんの方が分かってきました。しかしその一方で、細かく、いろいろな要素が見えてきたがゆえに、逆に生命現象を本質的に理解することから遠くなりつつあることを、実験的な研究に取り組む研究者たちは意識するようになりました。そこで、生命現象を理解するためにコンピュータを使えないだろうかという発想が生まれたわけです。

スーパーコンピュータの計算性能は、この20年ほどを見ると、およそ5年で10倍というスピードの向上を維持しています。性能の向上に伴い、実用化される研究の分野も変化しています。まずは建築物などの構造の問題が解けるようになり、次に流体の問題が解けるようになりました。ナノ材料の計算や、ヒトゲノムの解析など大量の実験データも処理できるようになっています。そして今、ペタフロップスという計算性能を持つ次世代スーパーコンピュータの登場によって、ようやく原子・分子の物理方程式に基づいて、生体内でおきているさまざまな現象を解明したり、説明できる、そうした時代がやって来ようとしています。

実験的な研究の発展によって分かったのは、生命現象は人間の頭では理解できないくらい複雑であるということでした。ならば、今までに観察され、理解してきた生命現象のルールをコンピュータに入れて整理整頓し、そこでいろいろなことを試してみればいい。そうすれば、さまざまな生命現象のどれが説明できて、どこが説明できないのかが分かります。それだけでなく、予測したり、予測に基づいて制御することだってできる——そうした生命現象に関する計算科学的なアプローチのツールとしてスーパーコンピュータを使っていこうという発想が出てきた、それが今なのです。「現象を記述する生物学」から「新たな現象を予測できる生物学」への発想の転換といってもいいでしょう。これまでのオーソドックスな工学や物理学などの分野で行われてきた

スーパーコンピュータの使い方とは大きく異なる、新しいスーパーコンピュータの使い方の提案でもあります。

■ 新しい発想で世界をリードできる

今、私たちは次世代スーパーコンピュータを活用して、次の3つのことに挑戦しようとしています。一つは、これまでお話ししてきたように、生命現象をトータルに理解するために、私たちが手に入れた知識・情報を再構成して整理し、何が分かっていないのかを理解し、さらに予測し、制御できるようにしていくことへのチャレンジ。もう一つは、人間の身体の内側でおきているいろいろな現象を、原子や分子の物理法則によってどこまで説明できるかということへのチャレンジ、3つ目は、人体をコンピュータ上に再現して、自動車の衝突シミュレーションや地震波動シミュレーションと同様に、人体をその物性から見たり、心臓などの各器官そのものを取り扱うようにして、手術の方法を考えるなど、医療に結び付けていくというチャレンジです。

大規模並列用MDコアプログラム

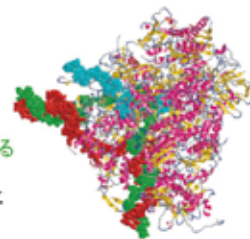
開発責任者：秦地 真弘人(理化学研究所)

世界最速の分子動力学計算でGordon Bell賞を目指す

— タンパク質の機能を高速で長時間シミュレーションするための計算技術 —

ソフトウェアの特徴

- 分子動力学計算ソフトウェア：10万コア以上の超並列化(100万-1000万原子系で) 10Petaflopsで1億原子級のシミュレーションを実現し、実効性能で最速を目指す
- 生体分子の運動の長時間シミュレーション
100万原子系のサブミリ秒シミュレーションを目指す
(対象例) 細胞膜構造、核膜輸送、ウイルスなど
【従来の100倍以上の時間スケール】
- これまで不可能だった時間スケールで、生理的に意味のあるタンパク質の大きな構造変化を捉えることにより生命システムの原子レベルでの構成原理を理解すると共に創薬に必要なレベルの計算精度を実現する



大規模分子動力学シミュレーション

ライフ・グランドチャレンジ開発アプリ第一・第二走者(一部) 説明資料

ライフ・グランドチャレンジ開発アプリケーション・ソフト“第一走者”

アプリケーション名	開発責任者	内 容	狙 い
大規模並列用MDコアプログラム (cppmd)	泰地 真弘人 (理化学研究所)	タンパク質の機能を高速で長時間シミュレーションするための計算技術	世界最速の分子動力学計算で「ゴードン・ベル賞」をめざす
密度汎関数法に基づくタンパク質全電子波動関数計算 (ProteinDF)	佐藤 文俊 (東京大学)	タンパク質の電子レベルでの反応を正確に解明するための計算科学技術	世界最大のタンパク質全電子計算をめざす
マルチスケール・マルチフィジックス心臓シミュレーション	久田 俊明 (東京大学)	世界でも前例のないバーチャル心臓を世界最大規模でコンピュータ上に再現	心筋細胞レベルからの心臓全体シミュレーションをめざす
全身ボクセルシミュレーション (ボクセル構造流体連成解析プログSPH3D)	高木 周 (理化学研究所)	医療応用に向け、やわらかな人体の解析・予測に適した計算科学技術	血栓の形成、輸送、梗塞の同時シミュレーションをめざす
大脳皮質局所神経回路シミュレーター	Marcus Diesmann (理化学研究所)	単純な神経細胞モデルから実際の脳の活動が説明できるかを解明	世界最大規模の大脳皮質神経回路の活動シミュレーションをめざす
粗視化モデル計算 (CafeMol)	高田 彰二 (京都大学)	細胞核内でのDNAのヒストンへの巻き付きと、ほどくメカニズムの解明	膨大な長さのDNAが核のなかに収納され、必要なときに読み出せる謎に挑む
ハプロタイプ関連解析に於ける統計検定ソフトウェア (ParaHaplo)	鎌谷 直之 (理化学研究所)	個人の遺伝情報と疾病、薬物反応性の関連を明らかに	47疾患に対し、遺伝子や環境要因によって決まる疾病や薬物の効き方などの関連を明らかにする

生命現象の統合的な理解へのチャレンジは、21世紀のサイエンスにとって最も重要な課題の一つです。また、ライフサイエンス分野における計算科学的なアプローチの必要性が、世界中で叫ばれています。こうした状況のなか、今、私たちがやらなければならないのは、これまでのライフサイエンス分野の研究の方法論を変えてしまうような、大きな転換を図ることです。これにいち早く取り組み、先端を走ること、世界に大きな波及効果をもたらす研究ができると考えています。日本は次世代スーパーコンピュータという優れたツールを得ることによって、世界に先駆けてスタートを切ろうとしています。しかも、大きな目標に向かって、オールジャパン体制で研究者らが協力して取り組んでいます。「バイオスーパーコンピューティング」は、この分野で世界をリードできる大きな可能性を秘めています。少なくとも、新しい方向性のトレンドセッターの役割は果たせるに違いありません。

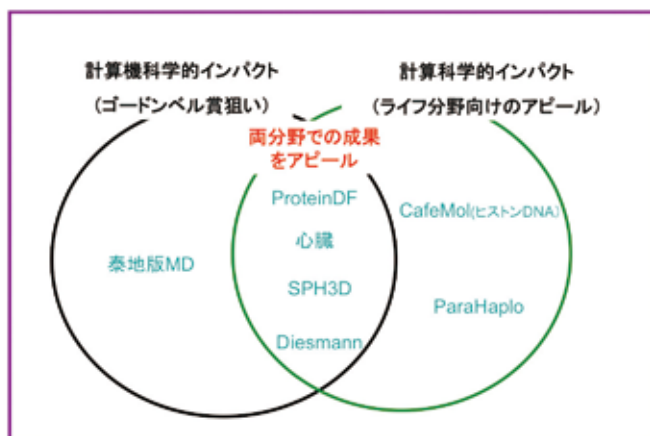
■ 稼働に向けたソフトウェア開発

次世代スーパーコンピュータのフル稼働（2012年）に向けて、現在、ライフサイエンス分野で三十数課題のアプリケーション・ソフトウェア開発が進められています。さらに、そのなかから7課題を“第一走者”として絞り込み、フル稼働と同時に華々しい結果を出していきたいと考えています。そのため、“第一走者”は、次世代スーパーコンピュータの能力によって初めてできる計算であること、ライフサイエンス分野で科学的、あるいは応用として価値が高いこと、さらに稼働後直ちにインパクトのある結果が出せることといった観点から選ばれています。サイエンティフィックな意味の重さに順番をつけようというわけではありません。どちらかという、プログラムの完成度であるとか、次世代スーパーコンピュータの性能をフルに活用する計算になっているかといったことが重要です。

例えば、「大規模並列用MDコアプログラム (cppmd)」は、タンパク質の機能を原子や分子の世界で成り立つ物理法則に従って、高速で長時間シミュレーションするための計算技術です。世界最速の分子動力学計算を実現して、ぜひ「ゴードン・ベル賞」を狙いたいと考えています。この「ゴードン・ベル賞」は、並列計算機を実用的な科学計算に利用して最も優れた成果を達成したものに与えられる賞です。

この他に6つの“第一走者”が選ばれています。このなかにも、やはり「ゴードン・ベル賞」を狙える可能性のあるものや、世界的に見て日本の研究が進んでおり、大きな成果が期待できるものが含まれています。“第一走者”には、次世代スーパーコンピュータ稼働とともに、その優れた計算性能を実証し、「バイオスーパーコンピューティング」によって得られる高い成果と今後の可能性をアピールしてもらいたいです。そして、“第一走者”に続き、“第二走者”として12のアプリケーションが控えています。このなかには、医療医薬品の開発に大きな成果が期待できるものや、日本独自のユニークな研究が入っています。最後に“第三走者”が控えていて、さらに広い範囲で世界的な成果を目指めざしています。

第一走者の分類



ライフ・グランドチャレンジにおけるアプリケーション・ソフトウェアのチューニング、マシン時間確保のためのカテゴリー分け案

あるがままの生きた細胞を再現して 細胞のシミュレーション実現をめざす

細胞スケール研究開発チーム
チームリーダー

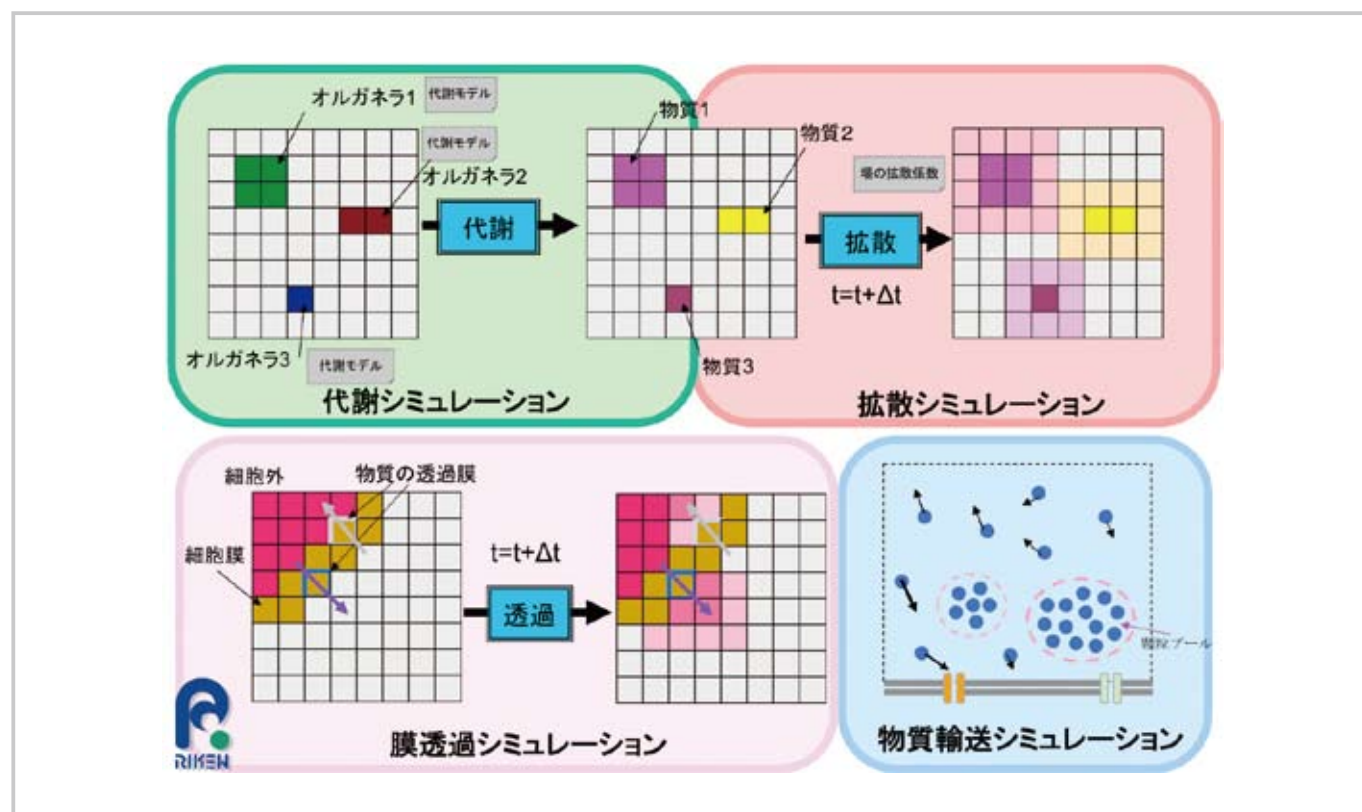
横田 秀夫



理論生物学にはいろいろなアプローチがあります。分子動力学計算に基づくミクロ的な視点からのアプローチもあり、マクロ的な視点からの力学シミュレーションもあります。私たちは、どちらかといえばマクロ的な視点から細胞にアプローチしていこうと考えています。これまで生物の形の情報をデジタル化するという研究をやってきて、すでにマウスの全身の形状データを10 μ mの分解能で取れるようになっていました。さらに、生きたままの細胞の映像を記録するライブ・セル・イメージングの技術が発達したことにより、今では生きている細胞をデジタルデータ化して、さらにそれが動いていくデータも得られるようになりました。つまり、形状を含めた細胞の現象を、そのまま4次元的にデジタルデータ化することができるわけです。しかし、イメージングによって見えるものは限られており、細胞内部では、理解できない現象が数多くあります。そこで、バーチャルな細胞の形状モデルを構築し、そこで何がおきているのかをシミュレーションによって明らかにしていきたいと考えています。

細胞のなかでおきている現象を理解するための重要なファクターは何か。その一つは細胞のなかの化学反応のネットワーク、もう一つが構造的なものとして機能している膜です。化学反応（代謝）は、将来的には

分子動力学ベースで計算できるかもしれませんが、とてつもなく計算コストがかかります。そこで、細胞のなかで支配的と思われる化学反応によって擬似的に表現することによりシミュレーションしようとしています。実はこの分野には、例えば「E-CELL」（慶応義塾大学先端生命科学研究所）や「Cell Illustrator」（東京大学ヒトゲノムセンター）をはじめ、すでに先行研究があります。しかし、これらは細胞を均一な物体が入った閉じた袋と考えたり、極端に単純化されたものとして化学反応のシミュレーションを行っています。つまり、細胞内の場を考慮しないシミュレーションです。しかし、実際の細胞には形状があり、オルガネラ（細胞小器官）があり、このオルガネラで機能を分担しています。ゴルジ体やミトコンドリアなど、それぞれの場所でおこる反応には違いがあります。ですから、その空間を入れたシミュレーションが必要であり、そうすることによって、あるがままの細胞をコンピュータ上につくり出したいと考えています。そのためには、細胞のなかでおこる化学反応とともに、物質が細胞のなかで広がっていく拡散や細胞骨格によって運ばれる能動輸送を記述することが求められます。さらに、もう一つ重要なのが膜の機能です。細胞膜には特定のイオンを透過させるチャネル、ATPというエネルギーを使って物質を運ぶポンプ、細胞外からのシグナルを受け取る受容体など



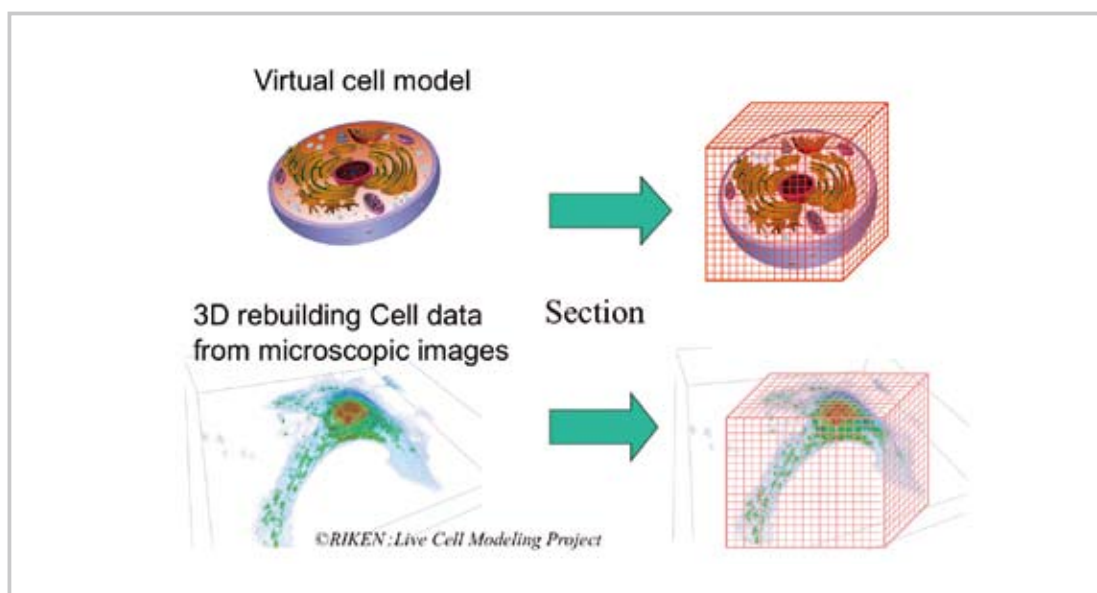
細胞シミュレーション統合プラットフォーム

どの機能があります。これらも合わせてシミュレーションしていきたいのです。場所を含めて、細胞でおきている現象を全部解いてしまう、これが私たちの取り組みです。

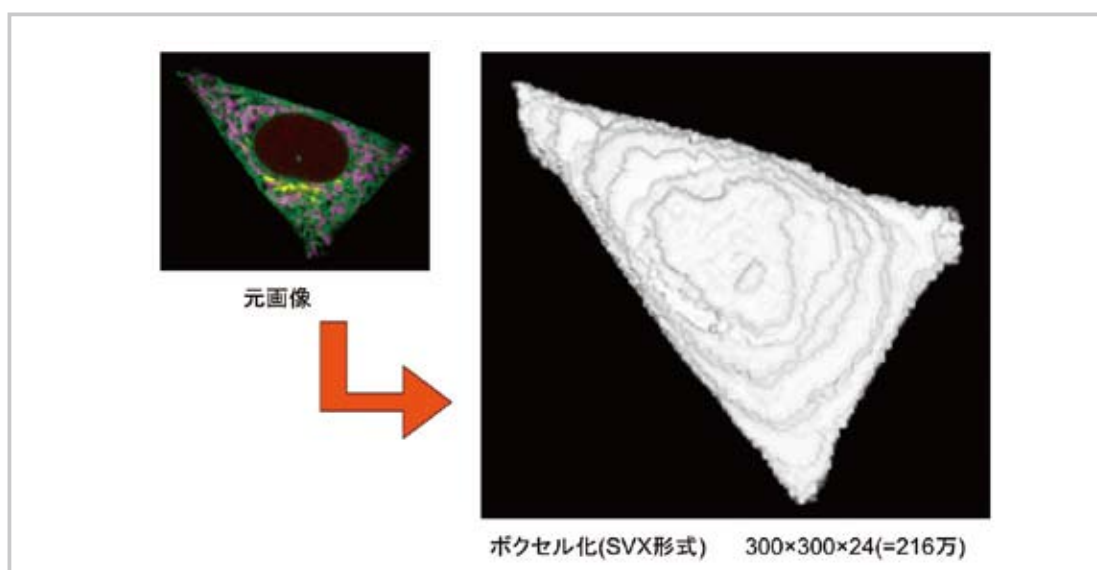
場については、もうひとつ重要なことがあります。細胞は単体で存在しているわけではありません。例えば肝臓なら肝臓という臓器の機能を果たすために、場所によってそれぞれの細胞が役割を分担しています。同じ肝臓の細胞でも、肝臓内の場所によって内部の反応は変わるのです。周囲の環境によって役割分担する細胞を再現するためには、場を入れないシミュレーションでは意味がありません。

あるがままの細胞を再現し、そのシミュレーションを行うために、私たちは細胞を100nmに区画された格子状の空間に置き、そこに細胞内現象の実測データから得られた情報を取り込み、100万ボクセル空間

(100³)で化学反応、拡散、膜透過の連成計算を行うためのアプリケーション・ソフトウェア(RICS)を開発しています。このシステムは、特定の細胞に特化したシミュレーションではなく、どのような細胞でもシミュレーションできる様に開発しています。このプロジェクトの中では、開発する細胞のターゲットを肝細胞におき、今後は肝小葉のシミュレーションを実現させていく計画です。ただ、シミュレーションは目的ではなく、生命現象や生命の機能を理解するための道具であり、さらに医学的にも意味のあるシミュレーションを行っていくことが大事です。そのために、例えば薬剤によって細胞がどのような反応を見せるかといったシミュレーション、癌や臓器切除時の解析にもつなげていきたいと考えています。さらに、場を入れた計算が不可欠な人工臓器や再生臓器の設計のためのシミュレーションとしても展開していきたいと考えています。



Section of a cell in voxels



細胞画像を3次元ボクセル化

脳神経系の機能の解明をめざして スーパーコンピュータ上に脳を創る

脳神経系研究開発チーム
チームリーダー

石井 信

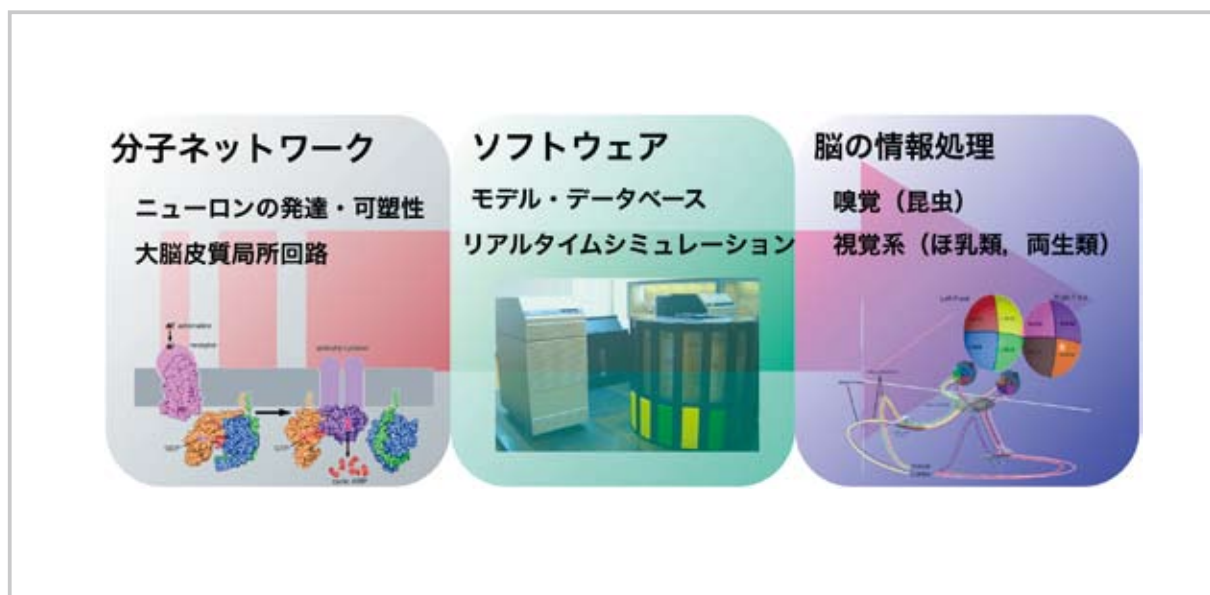


古代ギリシャの時代から、知性の源、つまり脳の機能は、私たち人類にとって最大の興味の一つです。そして、コンピュータの出現以来、コンピュータは幾度も脳と比較され、コンピュータによる知性の実現可能性について議論が繰り返されてきました。1952年にHodgkinとHuxleyはイカの巨大軸索の電気生理学実験に基づき、神経細胞膜のイオン透過性特性を電気回路（決定論的方程式）としてモデル化しました。膜電位固定実験を繰り返し、得られた定量データを説明するためにナトリウムチャンネルの不活性化などを仮定として導入しましたが、その後、実際にチャンネル分子の細胞内アミノ酸側鎖によって不活性化過程が実現されていることが示されました。これは世界初であり、かつ現在まで全く色あせないシステム生物学研究です。モデルの正当性を評価するために彼らが用いたのが、当時の最先端計算技術であった手回し計算機を用いたシミュレーションです。この成功研究は二つの点において示唆的です。第一に、仮説主導型の生物学研究、すなわちシステム生物学研究において、その時代における最先端計算技術が重要な役割を果たしたこと、第二に、歴史的には、計算機シミュレーションに基づく定量的生物学研究を脳神経系が主導してきたことです。

HodgkinとHuxleyのコンダクタンススペースの膜電位モデルは、その後、「NEURON」や「GENESIS」といったマルチコンパートメントモデルのシミュレーションを可能とするソフトウェアへと発展しました。さらに、「GENESIS」上で動作する、生化学シミュレーションのための

ツールボックス「Kinetikit」もBhallaによって開発されています。これを使って、シナプス可塑性という神経系の基本機能を、生体分子のシグナル伝達シミュレーションにより説明する先駆的な研究が行われました。こうした事実は、脳神経系が「シミュレーションに基づく生物学研究」の重要なターゲットであり続けてきた過去の歴史を物語っています。ときに、近年のライフサイエンスにおける計測技術の発達には膨大な実験データをもたらし、それによりモデル研究の対象を大きく広げつつあります。HodgkinとHuxleyの時代から、脳神経系のモデル研究は、計測実験によって現実に見えている数字の中から法則性を見出す「科学」の王道のなかにあったのだと思います。

時は現在に至り、欧米では脳神経系のシミュレーション研究の大規模化が進んでいます。スイスのEcole Polytechnique Federale de Lausanneでは、IBM社の全面協力の下で、2005年6月より「Blue Brain Project」を実施しています。2007年には、IBM Blue Gene計算機を4ラック、8,192個のCPUを繋ぐことで10,000個の神経細胞からなる大脳皮質機能コラムをシミュレーションすることに成功しています。米国では、Pittsburgh Supercomputing CenterとSalk Instituteが、神経細胞の詳細な三次元モデル化とシグナル伝達分子の1分子レベルでの動態をモンテカルロシミュレーションで評価する「MCell」プロジェクトを実施しています。残念ながらわが国は、これまで、計算科学に基づく脳神経系の研究はあまり注目されてきませんでした。そこで、世界



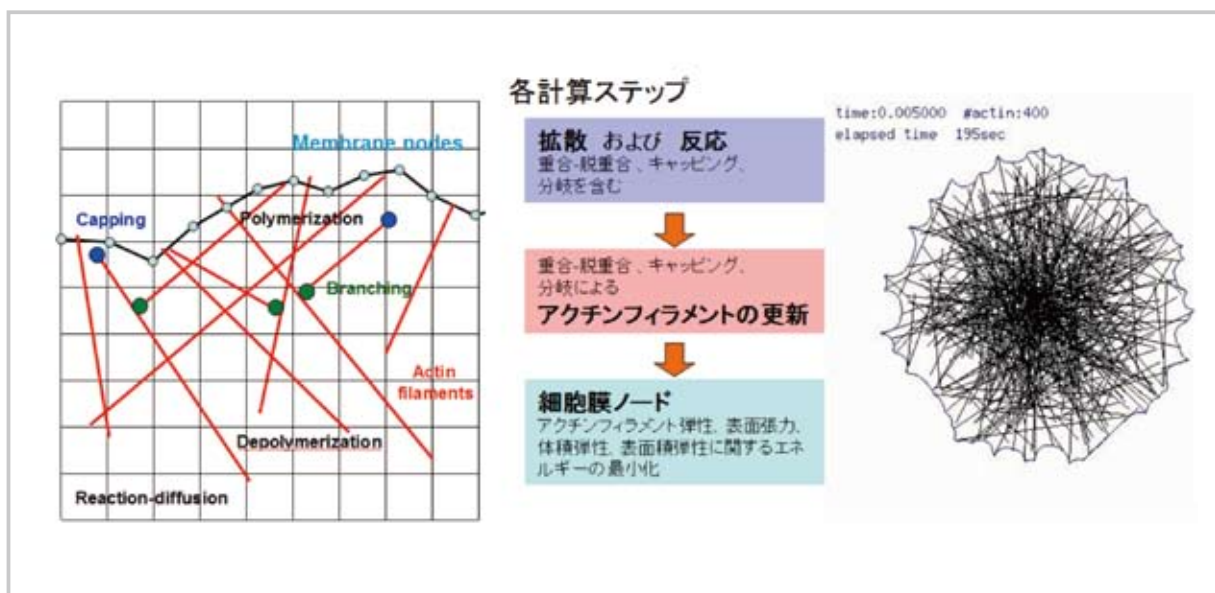
脳神経系研究開発チームにおける脳機能大規模シミュレーション

最速レベルの次世代スーパーコンピュータを利用することで、わが国独自の構想により、計算科学と大規模計算機シミュレーション技術を駆使した脳神経系研究を推進することが私たち脳神経研究開発チームのミッションです。

次世代スーパーコンピュータを利用した私たちの取り組みを紹介します。これまでの欧米における研究では、外界からの情報をいかに処理するのかという「脳のマクロな機能」である計算論をとりあえず無視し、「神経回路や神経細胞のミクロな動態」の再現こそが脳神経系における機能素子の役割の解明につながるというドグマの下で進められてきました。私たちのチームでは、まずこの構成論的な立場に立ったドグマを見直し、計算論的（帰納的）な立場を取り入れることが重要であると考えています。すなわち、脳は全体として、外界である環境との相互作用の下で動作し、かつ動的な環境に適応しながらその動作を変化させる情報処理・学習機械であることを念頭に置きます。そのなかにおいては、構成素子である神経回路や神経細胞は、環境との相互作用と適応の過程で動的に役割が決まります。つまり構成素子の挙動は、遺伝情報および外界からの情報に依存するものでなければなりません。

しかし、人間の脳は少なく見積もっても100億個の神経細胞で構成されています。それら細胞同士の神経線維による配線、各細胞での種々の機能分子の発現・活性の状態、といったパラメータはほとんどが未知です。このような複雑系のモデリング、およびそのモデルをリアルな外的

環境下でシミュレーションすることは事実上不可能であるため、対象に制約を加える必要があります。そこで、私たちのチームでは、ほ乳類（特にヒト）の視覚系と、無脊椎動物（特に昆虫）の嗅覚系に標的を絞って研究開発を進めています。次世代スーパーコンピュータの稼動時までに、 10^6 個の神経細胞と 10^9 個の細胞間結合からなる大脳皮質の局所回路の動態の再現、その局所的学習機能の再現、そして、単一神経細胞内で学習および発達に関わる分子群の時空間動態の再現を目標に、大規模並列ニューロンシミュレータである「NEST」、膜骨格系シミュレータである「NeuroMorphoKit」といったソフトウェア群の開発、および、そのための基礎技術に関する研究に取り組んでいます。また、並行して研究を進める網膜モデル、眼球運動モデルと関連付けることで、視覚系全体における環境との相互作用のシミュレーションをめざしています。こうしたシミュレーションでは多数の要素モデルの連成が必要となるため、そのための大規模モデル構築共有基盤プラットフォームである「PLATO」の開発を進めています。また、昆虫の嗅覚系は 10^6 個と比較的少数の神経細胞からなるため、当初より、マルチコンパートメントの神経モデルの結合系としてシミュレーションできるようなソフトウェア・データベース環境の構築を行っています。以上の研究開発は、理化学研究所を中核的研究機関、京都大学と東京大学を研究実施機関とし、沖縄科学技術大学院大学、奈良先端科学技術大学院大学とも連携したオールジャパンの研究体制により実施されています。



NeuroMorphoKitによる膜骨格系のシミュレーションの枠組み

次世代スパコンの可能性を最大限に 引き出すため高性能計算環境の さらなる充実を図る

生命体基盤ソフトウェア開発・高度化チーム
チームリーダー

泰地 真弘人



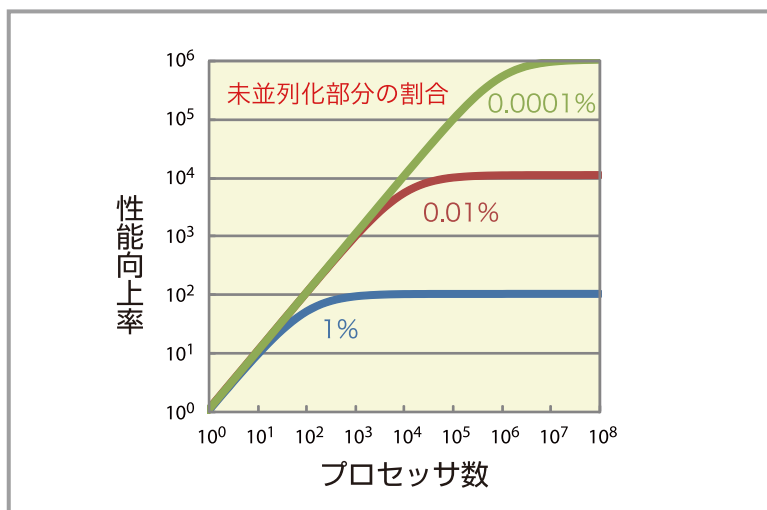
生命体基盤ソフトウェア開発・高度化チームの主要な機能は、高性能計算・数理工学の立場から、アプリケーションの高性能化と、産業利用に対応するための基盤整備に貢献していくことです。分かりやすく言えば、次世代生命統合シミュレーションソフトウェアの研究開発を推進する各チームで開発されたアプリケーションを、次世代スーパーコンピュータ上でうまく走らせて、最大限の成果があがるようにすること、それが私たちの仕事です。

次世代スーパーコンピュータは、おそらくプロセッサ数が8万個以上、コア数でいうと64万個以上、演算器の数は500万演算器という、これまでにない大規模な並列計算機です。その可能性を最大限に引き出すには、できる限り効率よく動かしていくためのソフトウェア開発が欠かせません。これまでの100個とか1,000個の並列とはけた違いのレベルが要求されます。並列コンピューティングで期待できる性能向上率を表わす最も単純なモデルとして、「アムダールの法則」が知られています。この法則では、プログラムを並列化できる部分とできない部分の2つに分け、その比率から性能向上率を推定します。当然、並列化できる部分の比率が少なければ、たくさんプロセッサを使っても、計算性能を上げることはできません。1,000個のプロセッサであれば、並列化できない割合が0.1%を超えてしまうと性能が落ちてしまいます。これが1万になれば0.01%、10万では0.001%。次世代スーパーコンピュータではさらに1けた上の0.0001%。つまり、99.9999という完璧に近い並列化が要

求されるわけです。これを達成するためには、コンピュータ科学の最先端知識を導入し、さらにアルゴリズム的なところまで踏み込むなど、あらゆることに取り組んでいかなければなりません。そこに、私たちのチームの存在意義があると考えています。

いちばん問題になるのは、計算するプロセッサ間でデータのやり取りをする通信部分でいかにして効率を高めるかということです。そのためには、ネットワーク構成などに合わせたプログラミングやアルゴリズムの開発が必要であり、細かいハードウェアの情報にまで遡って、最適なソフトウェアの開発を進めることを目指しています。具体的な課題としては、アプリケーションの高性能化を実現するために、大規模並列化への対応、コアソフトウェアの開発、共通基盤ライブラリの開発、可視化ソフトウェアの開発などに取り組んでいます（共通基盤ライブラリ、可視化については、Vol.1 研究報告参照）。

現在、各チームの代表的なアプリケーション（第一走者）の評価作業を進めているところです。大規模並列に向けて、それぞれ課題も見えてきました。評価とともに、どうすれば性能を高めることができるかについてもレポートし、今後開発者と一緒に取り組んでいきたいと考えています。また、ライフサイエンス分野では、次世代スーパーコンピュータの性能を最大限活用することと実際の問題を解くこととの間に、まだ少し距離があるようにも感じます。単に並列化を高めるだけでなく、どうすれば計算資源を最も効果的に活用しながらサイエンスとして最大の成



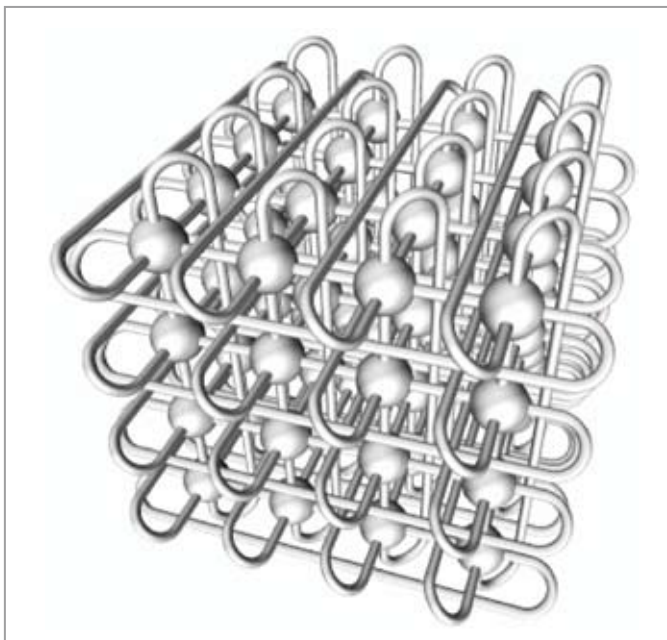
アムダールの法則：並列化度が上がるにつれ、わずかな未並列化でも性能に大きな影響を及ぼす

果が得られるかについても、プロジェクト全体で議論しながら考えていきたいと思っています。加えて、ハードウェアや運用上の制約についても、今後当チームで噛み砕いてわかりやすい形で開発者に伝えていくことも、私たちの大事な仕事であると考えています。特に、実際に次世代スーパーコンピュータが稼働してからは、どういう問題・解法であれば高い性能が得られるかをユーザー側にしっかりとフィードバックしながら、ターゲットをきちんと考えてもらうことも必要になってくるはずです。これくらい大規模な並列度になると、使ってみないと分からない部分も大きく、「使用感」のようなノウハウ的なものを伝えることも、私たちの役割のひとつと考えています。

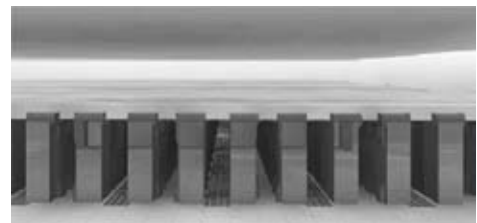
各アプリケーションへの対応とともに、現在、私たちのチームでは「大規模並列用のMD（分子動力学）コアプログラム」を先行して開発してい

ます。各チームのアプリケーションの高性能化はもちろん重要な課題ですが、その前に私たちもしっかりと大規模並列のノウハウを積み上げておかなければいけません。また、次世代スーパーコンピュータの並列性能を実証するという目的もあります。そうしたことから、タンパク質の機能を高速で長時間シミュレーションするための計算技術の確立をめざして、この課題に取り組んでいます。

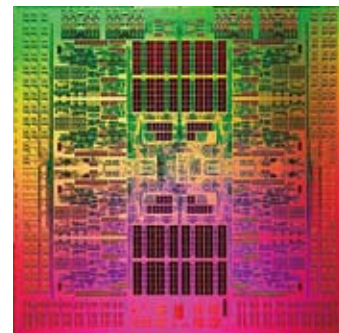
ほかの研究開発チームは、アプリケーションソフトウェアの開発を進めている今が本番であるといえるでしょうが、私たちのチームは実際に次世代スーパーコンピュータが動き始めるこれからが本番なのだと思います。想像したくはないですが、ここで話したこと以外にも、やらなければならない課題・思っても見なかった課題がたくさん出てくるに違いありません。



直接結合網・3次元トーラスネットワーク（概念図）



計算機室に設置される次世代スーパーコンピュータ（イメージ図、画像提供：富士通株式会社）



次世代スーパーコンピュータのCPU
(SPARC64™ Vfx, 画像提供：富士通株式会社)

全電子計算に基づく タンパク質反応シミュレーション

東京大学生産技術研究所
(分子スケールWG)

(上から) 佐藤 文俊、平野 敏行、上村 典子、恒川 直樹、松田 潤一

私たちは、生命活動のもっとも基礎となる分子世界の理解に取り組む分子スケール研究開発チームの中で、もっとも原理的な方法を担当しているグループです。チームについては、先号の木寺チームリーダーの記事をご参照下さい。

私たちのグループの研究内容を一言で言えば、次世代スーパーコンピュータの性能をいかに引き出すタンパク質の全電子シミュレーションソフトウェアを開発することです。選定されたターゲット・ソフトウェアは、標準的な電子状態計算法である密度汎関数法を用いて数々のタンパク質の全電子波動関数計算を達成した実績を持つProteinDFです。そのISLiM版への移植と超並列化チューニングは平野が担当しています。彼はProteinDFの能力と機能を拡張している中心メンバーであり、次世代スーパーコンピュータを駆使した驚くべきシミュレーションも彼が達成することでしょう。松田は多様なプロセッサで様々なプログラムをチューニングしてきたプロフェッショナルで、この11月1日付けで新しく仲間に加わりました。危うく2週間足らずで来年度の活動を仕分けされるところでしたが、計画通りVenusチップへのチューニング研究開発に才能を発揮できることになりました。電子状態の計算には、ハードウェアの性能を引き出すだけでなく、複雑な状況下で自己無撞着計算を成功させる技術が必要となります。いわばシャトルの発射から着陸までを制御するような作業で、大きな分子ほど困難です。これには専門家である上村が担当しています。彼女が新たに開発した方法の試金石として、ProteinDFロゴのモチーフともなっている、1つの身体に4つのヘム(鉄-ポルフィリン)を持つシトクロム c_3 分

子(図1)の計算に格闘中です。最後に、恒川は全電子計算による自由エネルギー計算に挑戦している研究者で、彼の戦略は異なるエネルギー(汎)関数を接続するというものです。これがうまく機能することを実証するためには、数百万点の量子化学計算もいとわない(そして実際に実行した)という兵です。

このような構成員のもと、次世代スーパーコンピュータならではの、電子状態からタンパク質分子の理解に貢献できるソフトウェアへと発展させています。基礎研究だけでなく、シトクロムP450 (CYP) (図2)の薬剤耐性シミュレーションといった実用性の高い応用研究も精力的に推進してゆきたいと考えております。RubisCoのCO₂固定、人工光合成、生体模倣工業触媒など、エネルギー・環境問題への応用も大いに期待できます。是非、共同研究いたしましょう。

ProteinDF_ISLiMは、すでにMPI/OpenMPハイブリッド並列計算構造の獲得に成功し、Cray XT-5を使用して2500並列の実績を挙げております。恐らく、この成果が評価されて、このたびファーストランナー・アプリケーションの一つに採択されました。現在、公開された次世代スーパーコンピュータの仕様に適化させる研究開発フェーズに進んでおります。理研、富士通のお知恵を拝借しながら、ハードウェア開発工程にキャッチアップする計画です。今後の私たちグループの活動にご注目下さい。

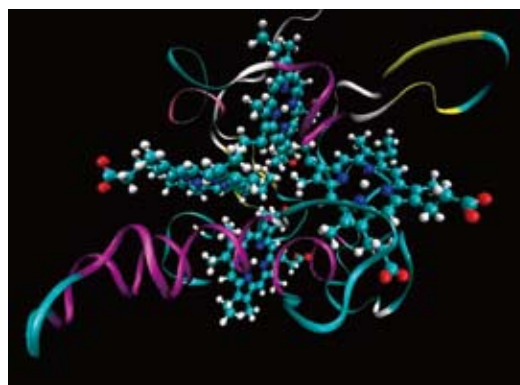


図1: 硫酸還元菌宮崎株(*Desulfovibrio vulgaris Miyazaki F*)のシトクロム c_3 の構造



図2: CYP51の構造



オイラー型流体・構造連成手法

東京大学大学院工学系研究科
(臓器全身スケール研究開発チーム)

杉山 和靖



人体の60%は水分で構成されています。臓器、血管、血球などの生体組織は柔らかい材質で構成されています。生命活動の維持には、体内の至る箇所において自律的で規則性のある様々な運動、輸送現象が関与しています。その中で、ミクロンオーダー以上の特性長さスケールを持つものは、連続体の運動とみなすことができ、流体力学、構造力学の基礎方程式に従います。応力特性の数理的表現は、流体と固体で大きく異なります。それらを一緒に扱い、力学的作用を結びつける解析を「連成」解析と呼びます。流体・構造連成シミュレーションは、医療現場において治療の効果を事前に予測し、治療の方針を与えることから、その活用への期待が高まっています。さらに、生命現象の本質の理解、病気のメカニズムの解明など、生命科学分野における貢献も期待できます。

連成解析の数値手法は、主に工業製品を解析対象として大きく進歩してきました。それを基に、生体力学の数値的研究が数多く行われています。ただし、柔軟で、形状が複雑という生体組織の特徴に適した数値手法を追求することは、連成解析の合理化、汎用化を進める上で重要です。

既存の構造解析は、物体の形に応じてメッシュを生成し、その変形に従いメッシュを更新するラグランジュ型（物質点ののって方程式を記述）の手法に基づきます。工業製品のように設計図が与えられ、位置情報が正確にわかっている際には、メッシュ生成の自動化が可能な場合が多く、精度の高い計算を実現します。しかし、人体の場合には、設計図が存在せず、メッシュ生成の前に、まず、CTやMRIなどの診断装置から得られる医療画像を基に、血管や臓器の幾何情報を取得する必要があります。その形が複雑であるほど、また、計算で取り扱う系のサイズが大きいくほど、メッシュ生成の自動化は困難になります。患者毎の医療画像に基づく連成解析を医療現場へ浸透させるには、メッシュ生成の専門家を雇わずに済むような、特殊な知識を必要としない解析手法が望まれます。

そこで、臓器全身スケール研究開発チームでは、メッシュ生成のプロセスを必要としないオイラー型（空間的に固定した点で方程式を記述）の連成解析手法の開発を行っています^[1]。開発に際しては、基礎方程式の定式化から考えています。例を挙げると、固体の変形に関して、ラグランジュ法では、初期と現時点で、隣接する物質点の相対的な変化によってその程度を定量化することが可能（図1(a)）なのに対して、オイラー法では、物質点を追跡しないため、その定量化に工夫が必要となります。

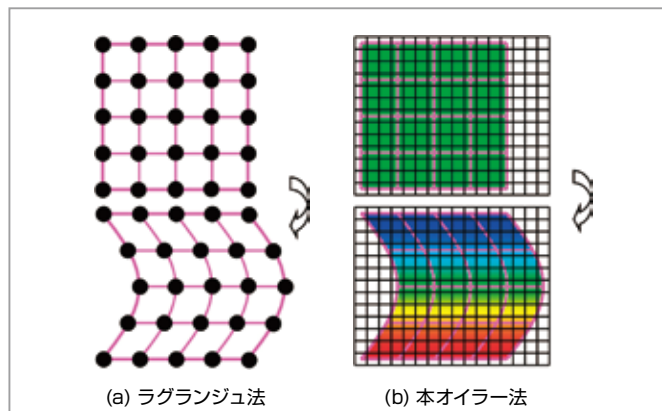


図1：固体変形の記述方法について

私達は、変形を記述するテンソル量を各メッシュ上で定義し、その輸送式を解くことで、固体の変形を捉えています（図1(b)）。

本オイラー型解析手法による解析例として、図2に示される多数の粒子を含む問題を取りあげます^[2]。流体・固体の境界が時間変化する系をラグランジュ的に解析する場合、メッシュ生成、更新アルゴリズムに大変な工夫を要することになります。それに対して、メッシュ生成、更新の不要な本オイラー法を用いると、複雑な境界を持つ問題であっても、初期の固体体積率（計算格子に占める固体の体積割合）の分布（図2(a)）が与えられていれば、連成解析を容易に実現します（図2(a)(b)(c)）。

現実的な系の解析を行おうとすると、大規模計算が不可欠です。本オイラー型解析手法は、非圧縮性流体の標準的な計算アルゴリズムを基に連成解析を容易に実現する点が特徴です。並列化に際しては、これまで流体解析の分野で培われてきたノウハウが活用できます。これは、超並列計算を実現する上での大きなメリットです。本計算手法を次世代スーパーコンピュータに導入し、超並列計算を行うことにより、生体力学分野において計り知れない成果が得られると考えられます。例えば、図2に示した計算の規模やモデルを拡張することで、多数の赤血球が存在する条件で、血小板の吸着から血栓の成長、離脱までのプロセスの解析が可能となり、血栓症における力学的影響の理解が深まると期待されます。

参考文献

- [1] 高木 周 (2009) “次世代スーパーコンピュータによる人体のシミュレーション,” 数学セミナー, 48, 58–64.
[2] Sugiyama, K., Ii, S., Takeuchi, S., Takagi, S. and Matsumoto, Y. (2010) “Full Eulerian simulations of biconcave neo-Hookean particles in a Poiseuille flow,” Comput. Mech. (accepted).

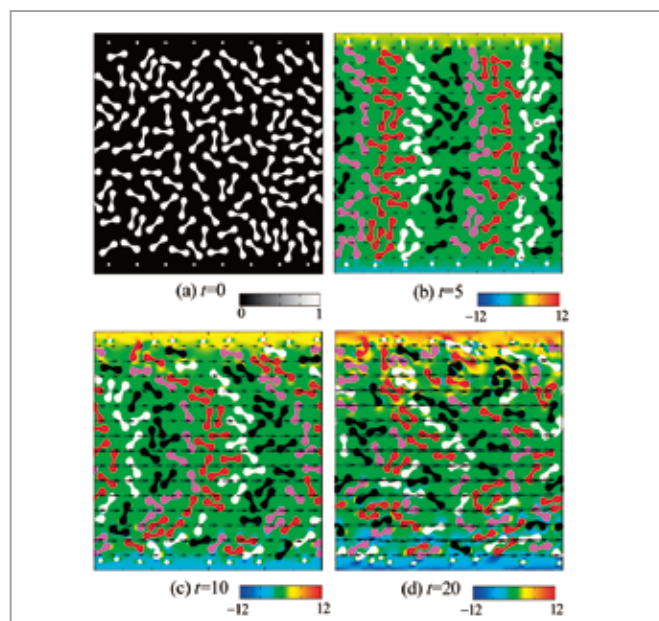


図2：二次元管内流中で赤血球を模擬した多数の粒子の分布^[2]。流れは左から右。(a): 時刻 $t=0$ における固体体積率分布。(b), (c), (d): それぞれ、時刻 $t=5$, $t=10$, $t=20$ における速度(矢印)、渦度(背景色)、粒子分布。粒子の色分けは、各粒子の位置の時間変化を表示する便宜上のため。

大脳皮質局所神経回路網モデルの大規模シミュレーション Cortical Microcircuit Developed on NEST

脳神経系研究開発チーム

五十嵐 潤



新皮質(大脳皮質)は、哺乳類の脳の中で大きな割合を占める部位で、感覚や知覚、随意運動、学習、認知などの高次機能の処理を行っています。新皮質の領域は、視覚、聴覚、嗅覚、体性感覚など、異なる感覚情報ごとに分かれ、そのほとんどの領域で、脳の表面から深部に向かって、6層の構造がみられます。各層ごとに神経細胞の性質には特徴があり、層内、層外の神経細胞間を結ぶシナプス結合は非常に複雑ですが、規則的に形成されています。新皮質の各層の神経細胞が密接に連携して情報処理を行っていることは確かですが、具体的にどのようなルールに従って、情報処理が実行されているのかはよく分かっていません。

この情報処理機構を考える上で、注目すべき現象が、 γ 波や θ 波と呼ばれる、特定周波数帯域の脳波です。動物がある認知行動を行うとき、新皮質では γ 波などの特定周波数帯域の脳波が発生し、さらに、連携する新皮質の領域間で脳波の相関が上昇することが報告されています。脳波は、脳の局所的な部位での電場電位の振動現象で、神経細胞の集団が同期して発生するシナプス電流が、その主な原因であるといわれています。そのため、脳波の原因である神経細胞集団の同期活動が、新皮質の情報処理機構において、何らかの役割を担っていると考えられていますが、詳細はよくわかっていません。神経細胞集団の同期活動が大脳皮質の各層のどのような神経メカニズムで発生し、層間の連携においてどのような役割を担うのかを明らかにすることが、大脳皮質局所回路の情報処理機構を理解するために必要です。また複雑な局所神経回路のシミュレーションを正しい方向に導くガイド役として、電気生理実験と直接比較できるような切り口が必要です。

我々は、共同研究者であるT. Potjans氏とM. Diesmann氏が開発し

ている大脳皮質局所神経回路網モデルを発展させて、新皮質の層構造における γ 周波数帯域の同期活動の役割の解明を目指して、シミュレーションによる研究を行っています(図1)。モデルは、解剖学実験によって得られた膨大な知見をもとに、新皮質の各層の神経細胞に形成されるシナプス結合のパターンを詳細に再現しています。一方、神経細胞モデルは計算量を抑えるために、これまで比較的簡単なモデルが採用されていましたが、我々は特に γ 周波数帯域の同期活動に関する振る舞いを再現する必要があるため、新たに、コンダクタンススペースの抑制性介在ニューロンモデルを導入しています(図2)。コンダクタンススペースのモデルは、神経細胞の細胞膜に存在するイオンチャネルを考慮し、電気生理学的性質をより忠実に再現します。ある種の抑制性介在ニューロンは、 γ 周波数帯域の閾値下膜電位振動の生成や、 γ 周波数帯の同期活動の誘導に関与していることが生理実験によって報告されており、 γ 周波数帯域の同期活動を調べる上で、その性質を詳細に再現する必要があります。

この大脳皮質局所神経回路網モデルは、約8万個の神経細胞と、約5億個のシナプス結合から構成され、シミュレーションにかかる計算量は、決して小さくありません。それでも、モデルの規模は脳の表面積に換算するとわずか 1mm^2 の範囲でしかなく、新皮質全体をシミュレーションするには、2~3ケタ、規模が足りません。このため、モデルの大規模化が必要になってきますが、現行の計算機では計算能力が足りません。そこで、我々は次世代スーパーコンピュータを用いた、大脳皮質局所神経回路網モデルの大規模シミュレーションに取り組んでいます。モデルの大規模化によって、新皮質のコラム構造の間で働く相互作用について、シミュレーション研究が可能になると考えています。

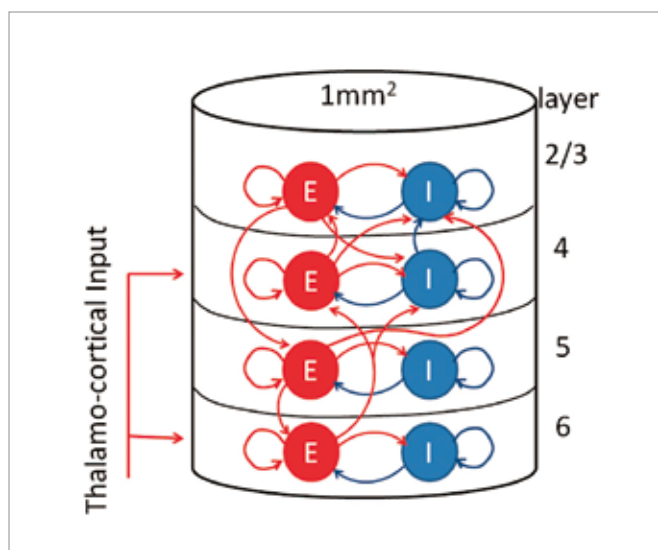


図1: 大脳皮質局所神経回路網モデルの模式図
大脳皮質局所神経回路網モデルは、4つの層構造から構成され、各層は興奮性(赤)と抑制性(青)の2種類の神経細胞を持つ。矢印は神経細胞間の主なシナプス結合を示している。

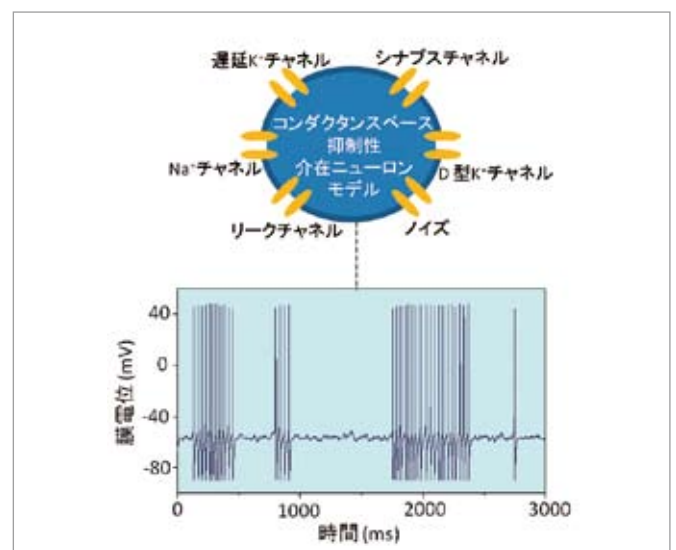


図2: コンダクタンススペースの抑制性介在ニューロンモデルの模式図と発火パターン
介在ニューロンモデルは、細胞膜に数種類のイオンチャネルを持ち、雑音を受けて γ 周波数帯域の閾値下膜電位振動を発生する性質を持つ。

次世代の分子動力学シミュレーションプログラム開発

生命体基盤ソフトウェア開発・高度化チーム

(上から) 小山 洋、大野 洋介、舛本 現、長谷川 亜樹、森本 元太郎

生命体基盤ソフトウェア開発・高度化チームでは現在次世代スパコン用の基本アプリケーションとして分子動力学シミュレーションプログラムを開発しています。分子動力学とはたばく質などの分子の動きを古典力学におけるニュートンの運動方程式を解くことにより明らかにするための計算手法です。もちろん分子の振る舞いは原理的には量子力学に従うはずですが、しかし多体量子力学の計算は次世代スパコンを持ってもまだまだ計算量が膨大であること、古典力学の問題に置き換えることで動的な性質を理解しやすいことから分子動力学はまだ現役として活躍しています。この分子動力学シミュレーションはライフサイエンスの中での基礎的な伝統的研究手法の一つと言えるでしょう。

それでは今なぜ新たにプログラム開発をする必要があるのでしょうか。その一つの理由はスケーラビリティの深刻さです。スケーラビリティとは一言で言うと「2台の計算機を使うと2分の1の計算時間に短縮される」ことです。当たり前のように聞こえるかもしれませんが、この2台が100台、1000台になっても性能を出し続けられることが大規模計算にとって必要不可欠なのです。これは安価なパソコンを繋いでもスパコンにはなりえないことを意味します。さらにここからが重要ですが、スケーラビリティを決めているのはハードウェアやソフトウェアの完成度だけではなく、究極的にはその計算アルゴリズムによって決定されることです。なぜなら科学計算は解を求めることが目的だからです。

図1に私たちの開発した分子動力学プログラムによる3つの異なる規模のシミュレーションの実行時間を示しました。この図から並列数と共に計算時間が減少していること、すなわちスケーラブルであることが見て取れます。一方で、どの線も並列数の増加によって下げ止まり(plateau)が見えています。これは通信時間が演算時間を超えていることが原因で、各々の計算規模でも共通し

ておおよそ1CPUコア辺り100原子で起きていることが分かります。この限界はCPUの演算性能とデータ通信ネットワークの性能のバランスを示しています。次世代スパコンの並列数は、同じ図中の矢印に示す通り、さらに100倍近く大きなものになります。100倍速く計算するためには、通信を100倍速くするか、通信量を100分の1にするか、問題の規模を100倍にしなければなりません。通信はハードウェアの性能によって決まるので、ソフトウェアの改良には限界があります。通信量を減らすのはプログラムの問題ではなくアルゴリズムとしての数学の問題ですので新しい方法を模索しなければなりません。これは困難を極めますが、逆にやりがいのある面白い挑戦と言えるでしょう。

ところで次世代スパコンでの大規模な分子動力学シミュレーションが可能になると何が出来るようになるのでしょうか。その応用例として創薬をあげてみたいと思います。薬は標的とするタンパク質の表面(鍵穴)にぴったりと結合して化学的な活性を発揮する物質(鍵)です。この候補を選び探すことを「創薬スクリーニング」と呼びます。従来のスクリーニングに使用されている化合物データは800万化合物程度が一般的な規模でした。既に新規の有望な骨格を見出しにくくなっていることが指摘されているのです。理論的な見積もりによると 10^{63} 規模もの化合物が薬らしさ(Drug Likeness)を満たすといわれているため、そのごく一部しかスクリーニングされていないことになるのです。これがもし10億化合物数の新規骨格を多く含む仮想薬剤ライブラリになれば新しい薬の発見の可能性が飛躍的に向上するはずです。この作業を加速し可能にするのが次世代スパコンと次世代分子動力学プログラムです。新規ライブラリは多様性、新規性、Drug Likenessについての評価指標を算出し、既存のライブラリでの評価と比較し有用性の検証を行う必要があります。これに向けて現在は1千万から1億化合物規模のプロトタイピングを行っています(図2)。

最後に本発表における数値シミュレーションの実行は、理化学研究所情報基盤センターのRIKEN Integrated Cluster of Clusters (RICC) システムを用いて行われましたので、この場を借りてお礼申し上げます。

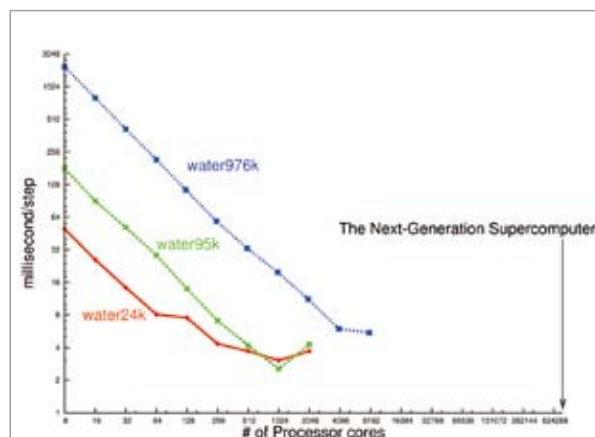


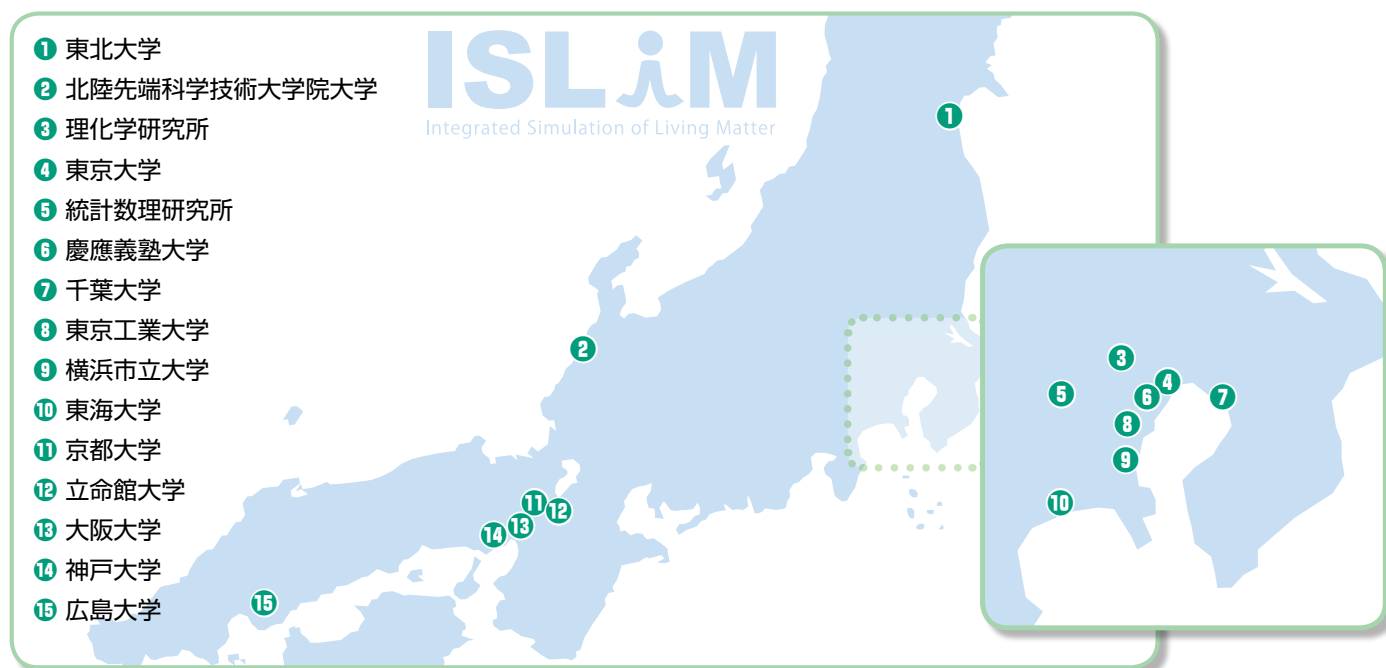
図1: Water benchmark (see text)



図2: 仮想薬剤ライブラリと創薬スクリーニング



ISLiM参画機関map



研究開発体制

2009年9月1日現在

独立行政法人理化学研究所

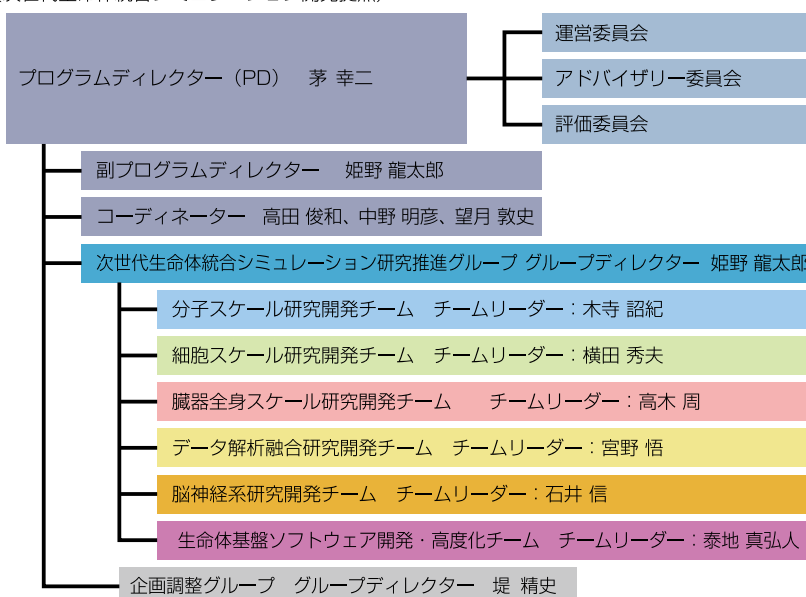
本所・各研究所
・次世代スーパーコンピュータ開発実施本部
・情報基盤センター 等

密接な連携

密接な連携

次世代計算科学研究開発プログラム（和光研究所）

（次世代生命体統合シミュレーション開発拠点）



・理研と連携し
研究開発を実施。

分子スケールWG
木寺韶紀・杉田有治(理研)
池口満徳(横浜市大)
高田彰二・林重彦(京大)
佐藤文俊(東大)
中村春木(阪大)

細胞スケールWG
横田秀夫(理研)
末松誠(慶應大)
倉智嘉久(阪大)
清野進(神戸大)
後藤信哉(東海大)

臓器全身スケールWG
高木周(理研)
松本洋一郎・大島まり・
久田俊明(東大)
山口隆美(東北大)
松澤照男(北陸先端大)
野村泰伸・和田成生(阪大)
劉浩(千葉大)
岡澤重信(広島大)
天野晃(立命館大)

データ解析融合WG
宮野悟(東大・理研)
樋口知之(統数研)
秋山泰(東工大)
鎌谷直之(理研)

脳神経系WG
石井信(京大・理研)
神崎亮平・黒田真也(東大)
深井朋樹・臼井支朗・
Markus Diesmann(理研)

異分野研究者を横断 バイオスーパーコンピューティング研究会の誕生

バイオスーパーコンピューティング研究会とは

現在国内外において、コンピュータ・シミュレーションや大規模データ解析によって生命体における個々の現象を統合的に理解し予測を行う計算生物科学が急速に進展しつつあります。このような動向を受け、特にペタフロップスを越える性能を持つスーパーコンピュータによって初めて大きく進展し得るこの研究領域を発展させるために、研究者有志が集まり発足させたのが「バイオスーパーコンピューティング研究会 (BSCRC: BioSuperComputing Research Community)」という研究会組織です。

「バイオスーパーコンピューティング研究会」は2008年12月に設立準備委員会による最初の提案が行われ、その後81名という大勢の設立発起人(2009年5月現在)により2009年7月1日に発足した生まれたばかりの研究会です。

研究会では、個体、器官、組織、細胞、分子の様々なレベルにおける計算生物科学の研究およびそれを統合する研究を対象とし、医学、細胞生物学、分子生物学、生化学、生物物理学、薬学、化学、物理学、工学、情報科学等さまざまな分野の産官学にわたる研究者が集い研究者間交流を図る場の醸成、さらには国際的や連携や情報発信を推進することを目的としています。すでに約100名の会員が参加しています。

研究会では「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」の進展を見据えながらも、より広い長期的な視点で、さまざまな分野の大学、研究機関、民間企業の専門家、特に若い研究者の力を結集

して、スーパーコンピュータを活用した新たな生命科学の学問文化の花を開かせるために活動することを目的としています。また、そのようなコミュニティの場を提供する役割を果たすために活動を進めていきたいとしています。研究会に参加ご希望の方はwebページの入会案内(URL: <http://www.bscrc.jp/apply.html>)をご覧ください。

バイオスーパーコンピューティング研究会 第一回総会研究会発足二ヶ月半後の2009年10月8日、台風による都心交通マヒのさなか多数の会員参加によって第一回総会が開かれ、設立準備委員の5名の方が次のとおり初代の研究会役員に選出されました。

会 長	中村 春木	大阪大学 蛋白質研究所 附属プロテオミクス総合研究センター長・教授
副会長	姫野 龍太郎	理化学研究所 次世代計算科学研究開発プログラム 副プログラムディレクター兼グループディレクター・情報基盤センター長
理 事	秋 山 泰	東京工業大学 大学院情報理工学研究科 教授
	木 寺 詔 紀	横浜市立大学 生体超分子システム科学専攻 教授
	末 松 誠	慶應義塾大学 教授、医学部長

第一回総会では、設立して間もないこともあり当面は年会費無料、研究会主催の講習会やセミナーについては参加費有料とする理事会案が承認されました。一方、年会費を有料化することで安定した研究会運営や研究会プログラムの充実を図ることの重要性についても第一回総会で議論されました。この件については引き続き理事会で検討が進められるということです。

バイオスーパーコンピューティング研究会 (URL: <http://www.bscrc.jp>)

総会の模様



今後の研究会の方針と予定について語る中村会長



各理事による自己紹介
左から司会の姫野龍太郎 副会長、末松誠 理事、木寺詔紀 理事、そして秋山泰 理事



台風による交通マヒのさなかにもかかわらず多数出席

イベント報告

■ 次世代スーパーコンピュータに向けた講習会(報告)

2009年12月24日、次世代スーパーコンピュータ開発実施本部において、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(以下、ISLiM)に参加している研究者向けに、現在開発中の次世代スーパーコンピュータ(以下、「次世代スパコン」)の諸元や次世代スパコンで効率の良い実行性能を出すためのアプリケーション開発の要点とチェックポイントについて、講習会が開かれました。

ISLiMでは次世代スパコンの性能をフルに活用するソフトウェアの開発をしていますが、次世代スパコンも現在開発中であり、開発中のソフトウェアを検証する環境が無いのが現実です。そのため、開発中の次世代スパコンの情報をもとに、ソフトウェアの開発をすることになります。

今回の参加者はおよそ70名、会議室に入りきらないため2回に分けて開催されました。講習会では、開発実施本部より次世代スパコンの構成、特徴、仕様が説明され、その後、プログラミングを行う上で必要となる情報、特に性能を引き出すために、どのような点について注意して開発を行えばよいのかなどについて説明がありました。

質疑応答では、整備されるライブラリ、利用できる言語・コンパイラ、開発支援ソフトなどについても質疑応答がなされ、ソフトウェア開発について具体的なイメージが持てたと思います。また、利用できる開発言語についてはISLiM側からの要望も出され、ハードウェア開発側で検討することになりました。

ソフトウェア開発者とハードウェア開発者が具体的な事項について意見交換ができた講習会でした。今後も積極的に連携を深め、次世代スパコンの性能をフルに引き出すソフトウェアの開発を行っていきます。



イベント情報

■ 第2回バイオスーパーコンピューティング・シンポジウム

研究の進捗状況を報告すると共に、海外からも第一線で研究をしている方々を招待し、それぞれの分野で講演をしていただきます。

● Keynote lecture

High performance and distributed computing in biomedical research

Prof. Peter Coveney

Centre for Computational Science, Department of Chemistry
University College London

開催日時: 平成22年3月18日(木)、19日(金) 10時~18時(懇親会、18日18時30分~20時)

開催場所: MY PLAZA ホール(東京都千代田区丸の内)

● プログラムおよび参加登録(Webページをご覧ください) http://www.csrp.riken.jp/2009/2ndBSCS_j.html

ロゴマークについて



「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」のロゴマークは、実は3種類あります(細かく言うと6種類)。3種類と言っても、略称が書いてある位置や大きさの違いです。表紙にあるロゴマークと左のロゴマークを見比べてみてください。

このデザインは「ゲノムを抽象化したイメージを、人体のシルエットのイメージと重ね合わせ、人体を解析していくというプロジェクト」を表現しています。また、略称として ISLiM と表示しましたが、2番目のiを小文字にし、人体をイメージしました。読み方は「アイ・スリム」です。

BioSupercomputing
Newsletter

Vol.2
2010.3

発行日: 平成22年3月15日

独立行政法人 理化学研究所和光研究所
次世代計算科学研究開発プログラム

〒351-0198 埼玉県和光市広沢2-1
TEL:048-462-1488 FAX:048-462-1220
<http://www.csrp.riken.jp/>