

# 10PetaFLOPS は生命科学で何を実現できるか



理化学研究所 情報基盤センター

姫野 龍太郎

## アブストラクト

次世代スーパーコンピュータは来年度から部分的に稼働が始まり、再来年度には全システムの稼働が予定されている。この稼働に合わせて、生命科学分野でのグランドチャレンジが2006年秋から理研を中心に行われている。次世代生命体統合シミュレーション研究開発プロジェクト (ISLiM) と名付けられたこの挑戦はいよいよ佳境に入る。このプロジェクトは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定量的解明にブレークスルーをもたらす仮説・検証型の新たな研究手段を提供し、計算科学により生命現象を定量的かつ統合的に理解・予測・解明することを目指すと共に、創薬・ヘルスサイエンスサイエンスへの貢献、新規医療技術の実用化を図るものである。この実現のため、分子・細胞・臓器全身という3つの階層に分かれた研究チームと、大量の実験データから法則に迫るデータ解析融合チーム、更に脳神経系チーム、全てのチームを支えるHPCチームの6チームで取り組んでいる。これらのチームで現在開発中のソフトウェアは量子化学や分子動力学から構造流体連成計算、脳の局所回路モデル、可視化ソフトウェア、並列化のためのミドルウェアなど、合計34本にのぼる。これまでの開発で、並列化に関して1,024を超えるところまでテストが終わったものが18本、8,000並列までのテストが終わったものは9本という状況である。今後は次世代スーパーコンピュータでの実効性能と実行時間の予測を行い、どの程度のモデルでどのくらいの計算をするかを検討してゆく予定である。

## 講演者プロフィール

### ◆ 略歴

1977年、京都大学工学部電気工学第二卒。  
1979年、同大学院修士課程修了。  
1979年、日産自動車(株)入社、中央研究所配属。流体の数値解析の研究開発に従事。  
1998年、理化学研究所入所、中央研究所・情報環境室・室長。  
2004年、情報基盤センター長となり現在に至る。  
東京大学大学院工学研究科客員教授(～2010年3月)  
2010年、神戸大学大学院工学研究科の客員教授。

### ◆ 研究分野、研究テーマ

流体力学、生体力学、情報工学、数値シミュレーション

### ◆ その他(所属学会、受賞歴、著書など)

・所属学会: 計算工学会、機械学会、情報処理学会、  
・受賞など: 日経サイエンス・第6回コンピュータ・ビジュアルリゼーション・コンテスト最優秀賞受賞(2000年)、日本機械学会・計算力学部門・業績賞受賞(1997年)  
・主な著書: 魔球をつくる、魔球の秘密、変化球の大研究