

10PetaFLOPSは生命科学で何を実現できるか

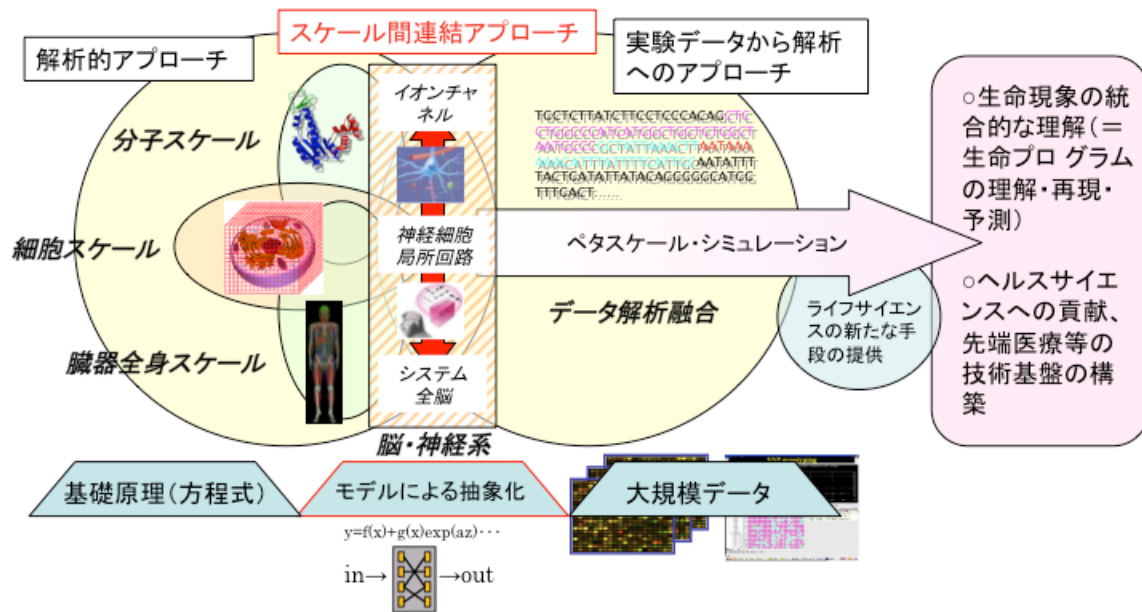
理化学研究所 次世代生命体統合シミュレーション研究グループ
 グループディレクタ 姫野龍太郎

Keywords

スーパーコンピュータ、生命科学、シミュレーション、分子、細胞、臓器、全身、脳神経系、マルチスケール

1. はじめに

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とも呼ばれ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) が、2006 年秋から理研を中核拠点として行われている。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、ライフサイエンスに仮説・検証型の新たな研究手段を提供し、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。



2. 推進体制とソフトウェア開発の状況

このような目的の実現のため、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チームを設置して取り組んでいる。

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。

3. 現在の見通し

昨年から開発中のソフトウェアの並列性能などの開発状況を眺みながら、10PetaFLOPSの次世代スーパーコンピュータを使ってどんな問題を解くかを検討してきた。また、どの問題をどの時期に解いてゆくか、問題間の優先順位をどのようにつけるかを検討した。その結果、それぞれのソフトウェアを3つに分類、計算を行う時期に合わせて、第一走者、第二走者、第三走者として、波状的に成果を出してゆくこととした。開発中のソフトウェアの数が多いので、第一走者と第二走者の一部について、そのソフトウェアの概要と解こうとしている問題を紹介する。

