



ペタフロップス級の苦悩

冬野いち子（サイエンスライター）

プロジェクトを牽引する理化学研究所の姫野龍太郎博士と次世代スーパーコンピュータ施設の模型。

世界最速をめざす日本の次世代スーパーコンピュータ。3年後の一部稼働に向けて神戸市で建設が始まった。ライフサイエンスへの応用を大きな挑戦の1つとして議論が重ねられているが、医学・生物学と計算物理学の融合への壁は高い。最適な使い方を模索する研究者たちの姿を報告する。

安友藤博

肌寒さが残る2008年3月の終わり、「Endless Debate」と野心的なタイトルをうたったシンポジウムが神戸市で開催された。計算学と生物学・医学の第一線の研究者十数名が円卓を囲み、2日間にわたって次世代スーパーコンピュータの使い方に関して議論をぶつけ合った。毎秒10ペタフロップス（1ペタ＝1000兆）回の演算を繰り返すこの「ペタフロップス・コンピュータ」は、完成時には最近世界最速を達成した米IBMモデル「ロードランナー」の約10倍、日本の地球シミュレータの250倍の速さを誇ることになる（図1）。地球

環境変動の予測を主な目的とした地球シミュレータとは異なり、次世代スーパーコンピュータにはライフサイエンスへの応用に関心が集まる。

「次世代スーパーコンピュータは格段の性能をもっているのに、ライフサイエンスに使いやすくないことができる、という期待ばかりが先行して、具体的にどんなことができるのか、あるいはできないのかについては、私も含め皆さんわかっていませんでした」と、シンポジウムを主催した先端医療振興財団・クラスター推進センターのコーディネーター、根来尚温氏という。「このシン

ポジウムでは、ライフサイエンスとコンピュータの専門家の方々に集まってもらい、大いに議論することで方向性を見いだすことを目的としました」。

しかし、会場から聞こえてきた声の歯切れは悪い。「ライフサイエンスの人にはできると思っているものも、なかなかむずかしいことがあります」と計算機学出身の参加者はいう。「自分たちとは異なる意思のコミュニケーションが必要」とは生物学者の感想。ほかにも「チームワークとしての研究がうまく取れる体制が必要だが、そのような融合研究は日本ではむずかしい」など、出席者や傍

聴者からは今後予想されるさまざまな問題に関する意見が相次いだ。

巨大国家プロジェクト

この神戸シンポジウムは、次世代スーパーコンピュータの開発が始動した2006年前後から日本各地で繰り返されている利用方法に関する議論の一端である。次世代スーパーコンピュータは、第3期科学技術基本計画（2006～2010年度）の中で、日本が技術開発の世界競争力を回復するために必要だと位置づけられた巨大国家プロジェクト。2011年春に部分稼働、2012年春に本格稼働が予定されている。日立・NEC・富士通が共同で開発し、研究開発費は国の予算だけで1156億円、各メーカーもコストの一部負担する。文部科学省は、主な利用目的の1つにライフサイエンスを挙げ、「次世代生命体統合シミュレーション・プロジェクト」として、理化学研究所（以下、理研）が主体となって動いている（ちなみにナノサイエンスももう1つの目玉で、こちらは自然科学研究機構分子科学研究所が主体）。

現在、神戸の人工島ポートアイランドの4万平方メートルもの広い空き地に着々と建設が進められおり、地階となる部分の土がきれいに掘り下げられている。近隣には、理研の発生・再生総合科学研究センターや分子イメージング研究拠点などに加え多くの医療研究機関

があり、アジアを代表する先端医療都市をめざす神戸市は、これらの施設との相乗効果をねらっている。

1ペタフロップスの壁はコンピュータ界の1つの目標であったが、今年5月にIBMが米ロスアラモス国立研究所、米国家核安全保障庁と共同で開発した「ロードランナー」によって打ち破られた。このマシンは主に安全保障の強化のために使われるが、科学にも間口を広げる。まず手始めに複雑な神経プロセスにテーマを定め、10億個以上の視覚神経や数兆個のシナプスのふるまいを再現し始めた。「ライフサイエンス研究の多くは、大量のデータから選択する情報を必要としています。つまり、この作業に強いマシンをデザインするという、最先端のコンピュータサイエンスでもあるのです」とロスアラモス国立研究所アソシエイト・ディレクターのテリー・ウォレス博士は語る。「10ペタフロップス・コンピュータがライフサイエンスに革命をもたらすかどうかは、そのマシンがどう設計されるかにかかっているでしょう」。

ロードランナーは、スカラ型とよばれる欧米で主流のスーパーコンピュータにCELLプロセッサをアクセラレータとして搭載している。CELLは、PlayStation3用に開発されたものを科学技術向けに強化した。スカラ型は、汎用プロセッサを並列接続しており、原

子や分子の動きの計算に強い。一方、日本の次世代スーパーコンピュータの設計は、スカラ型とベクトル型という異種の大きな計算機を接続して、同時に利用できるようにする。ベクトル型は専用プロセッサを搭載し、流体の問題や構造の計算などに長けている。計算機棟の1階にベクトル型、3階にスカラ型のコンピュータを多数配置し、研究者が必要だけ組み合わせるようになる。このハイブリッド式に決まったときは、それぞれの方式を主張するメーカー3社すべてに配慮した妥協の産物だと揶揄する声も聞かれたが、文部科学省や理研は、双方の強みを生かすことができると主張する。

「世界最速」になることが強調されがちだが、熾烈なコンピュータ開発の世界でそれを維持できたとしても一瞬のこと。それよりも重要なのは「日本が今後もスーパーコンピュータ開発を持続的に行い、技術とノウハウを蓄積することです」と東京工業大学大学院情報理工学研究科の秋山泰教授は話す。そのためには分断されていたさまざまな研究分野間の協調が必要で、「学際的な研究組織を作ることなしに巨大な計算機だけが存在しても、おそらく誰も有益に使いこなすことはできないと思います」と秋山教授はいう。「計算機作り自体よりも、日本が得意ではない人作りのチャレンジのほうが大きいでしょう」。

図1 世界の主なスーパーコンピュータ開発の比較

名前	導入主体	ベンダ	年度	ピーク性能 (PFLOPS)	費用 (億円)	PFLOPS当りの費用 (億円)	同2011年スケール (億円)
レンジャー	TACC (米)	Sun/AMD	07	0.5	38	76	12
ロードランナー	LANL (米)	IBM/AMD	08	1.6	124	78	19
ジャガー / ベーカー	ORNL (米)	Cray/AMD	06-08	0.1+1.0	247	~ 124	~ 20
ブルージーン / P	Argonne (米)	IBM	07-08	0.558	63 *	112 *	18
ブルーウォーターズ	NCSA (米)	IBM	11	10	258	26	26
T2K	筑波大 (日)	Appro/Cray	08	0.095	26	270	45
次世代スーパー	理研 (日)	富士通・NEC・日立	11	10 (Linpack)	700	70 (Linpack)	70 (Linpack)

* Forschungszentrum Jülichでの価格をもとに計算。
 (注) 費用は計算機ハードウェアのみの概算で、一部推定を含む。

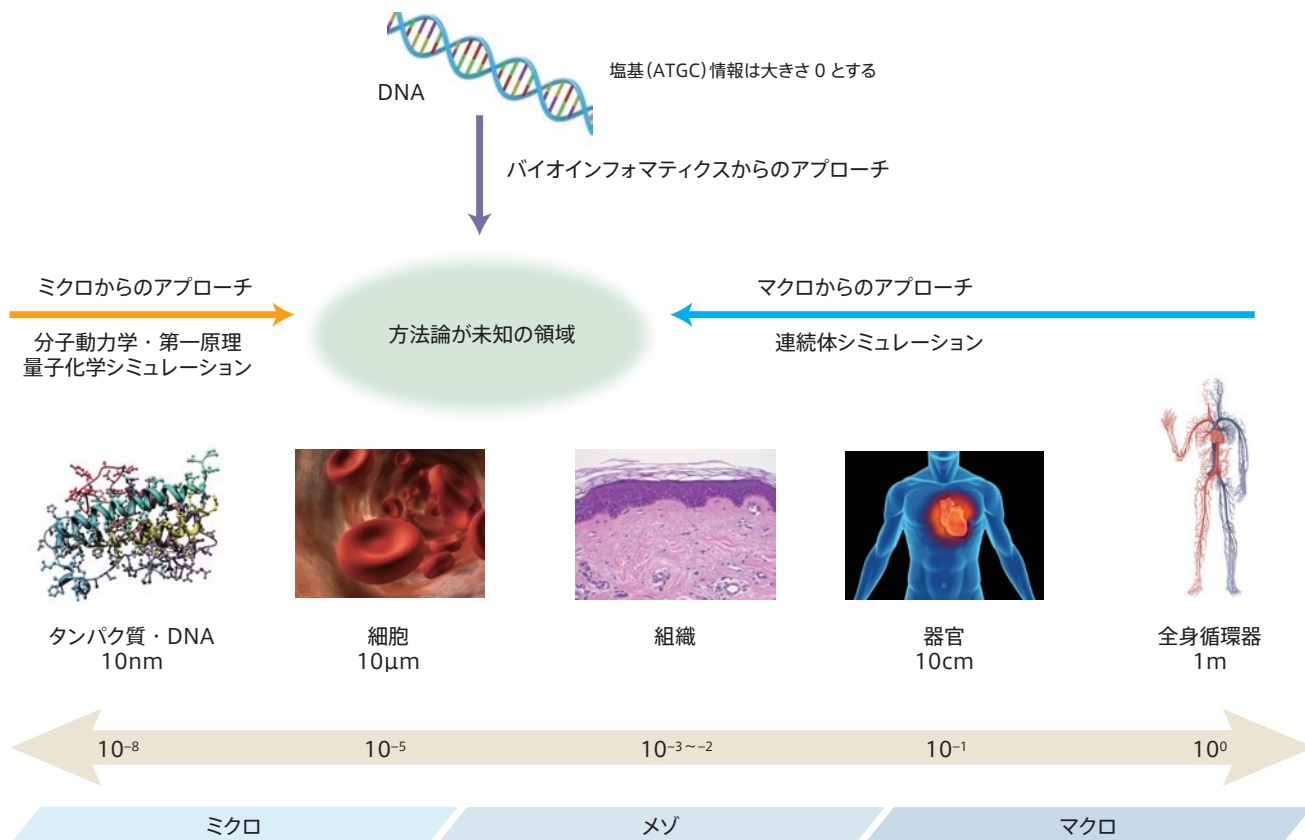


図2 生命シミュレーションのスケールの広がりや計算方法。次世代コンピュータの超高速の演算処理は、原子・分子のふるまいから細胞や臓器機能の確かな動きまであらゆる生体現象の計算を可能にし、薬剤の効果的な開発や疾病の分析に役立つと期待されている。

生命科学への可能性

これまでスーパーコンピュータといえば、気象・海洋予測や材料科学など物理・化学分野のシミュレーションに使われることが多かった。血流や臓器のシミュレーションなどは欧米でも一部見受けられるが、大規模計算機のライフサイエンス分野でのまとまった活動は欧米にもなく、神戸の拠点が世界初になるだろうと関係者はいう。

次世代コンピュータの超高速の演算処理は、原子・分子のふるまいから細胞や臓器機能の細かい動きまであらゆる生体現象の計算を可能にし、薬剤の効果的な開発や疾病の分析に役立つと期待されている(図2)。例えば、個々の人の遺伝子の差異によって薬の効果に差が出る理由をコンピュータで探る、といった具合だ。ここ数年で高性能コン

ピュータを使って細胞モデルを形成し、実験で再現する「システム生物学」も盛んになってきたが、細胞内の小器官や核などでの物質の局在や、その内部で起こる特有の反応を区別できていない。よって、観測される現象を因果関係に沿って記述する学問から抜けきれておらず、「試験管の中で均質な溶媒としての細胞を見ている感じに近い」と、理研の次世代スーパーコンピュータ開発実施本部グループディレクターである姫野龍太郎博士はいう。「実際の生体はより複雑で予測不可能な動きをします。実態を明らかにするためには、原子・分子に立ち戻ったところから、時間の経過に伴って濃度拡散や膜透過など連続体の現象がどのように起こるか、ということを見ないといけません」。

しかし、「ライフサイエンス分野のシミュレーションはそう簡単ではありません」と秋山教授はいう。気象・海洋予測や材料科学などでは基礎となる方程式がほぼ解明されており、強力なコンピュータを導入すればより質の高いシミュレーションが可能になるが、ライフサイエンスでは基礎となるモデル自体が研究されている途中である、というのがその理由だ。「たった1つの細胞内の遺伝子やタンパク質のふるまいですら、数10万種類もの異なる“要素部品”が複雑な機能的システムを作っているのですから、巨大な化学プラントの動作シミュレーションや大都市における通勤ラッシュのシミュレーションに近い感じになると思います」と秋山教授は続ける。「ライフサイエンスへの応用は、乗り越

えるべき大きな課題の1つです。世界で誰かが必ずやるべきことであり、挑戦しがいのあるテーマです」。

変わる兆し

ライフサイエンスへのスーパーコンピュータの応用のむずかしさは研究者も十分認識しており、当初は懐疑的な見方が多かった。2005年に姫野博士が理研の会議で「10ペタフロップス・コンピュータができれば生命現象をシミュレーションできる」と語ったときは、生物学者の反応はとて冷ややかだったという。しかし「この1年で風向きがずいぶん変わってきた」と姫野博士は感じている。「今までは、自分の従来の研究の延長上に未来があると皆さん思っていたようですが、ここへきて、新しい学問が生まれつつあるのを理解してきています」。

研究者の考えが前向きになってきた背景の1つには、理研内での静かだが大胆な動きがある。理研は12の研究センターからなる総合科学研究所だが、スーパーコンピュータに関しては「初めてできる計算、新しい時代を築ける分野に大きな資源を割り振っていく」という考えに基づき、ライフサイエンス分野を第一に各センター長が連携し動いている。今年4月、理研は先端計算科学研究領域を立ち上げ、そこに3月末に解散された理研のゲノム科学総合研究センターから5研究チームを移した。現在、理研全体で200名弱の研究者がスーパーコンピュータの開発・応用に携わっており、3年後にはこの研究者たちを中心として、神戸に拠点ができあがる。このように醸成する雰囲気が出てきたことで、やってみようかという心意気がみえ始めた。「10年、20年のスパンで考えると、必ず生命現象のいろいろなことをコンピュータ上で再現し、役に立つものができると思うのです。振り返ってみれば、あのとき始めてよかったと思うはずですよ」と姫野博士はいう。

理研はこの国家プロジェクトの旗振り役として、すでに研究開発体制のブラッ

トフォームも形成している。研究分野を分子・細胞・臓器全身・データ解析・ソフトウェア開発の5つに分け、それぞれチームリーダーを選定した。外部から選ばれたリーダーは理研を兼務する。各チームが、異なるバックグラウンドをもつ研究者を束ねながら補完的な成果を生み出し、それらを総合的に集結することで生命体統合シミュレーションを実現する、というシナリオだ。

次世代スーパーコンピュータは、運転費用だけでも年間50億円以上かかる試算されている。多額の税金を使うので、有益な成果を出さないといけないうプレッシャーが研究者にかかっている。そこで、日本の知力を最大活用するため、ソフトウェア分野を除く4分野には、それぞれの分野を代表する研究者で構成されるワーキンググループが設置された。例えば、臓器・全身スケール・ワーキンググループの一員である立命館大学生命科学部の野間昭典教授は、根気よく医工連携プロジェクトをまとめあげた経験をスーパーコンピュータにも生かせると考えている。野間教授が今年3月まで在籍していた京都大学は、文部科学省の「細胞・生体機能シミュレーション・プロジェクト」の4拠点のうちの1つで、2002年度から5年間をかけて心筋細胞のモデルを作り、心室の収縮の動きを計算した。心臓は世界で最も進んでいるシミュレーション対象だが、野間教授のように心室を構成する多数の機能要素をもとに細胞モデルを作り、さらにそれをもとに臓器モデルを構築し、その中の細胞ブロック相互の力関係を計算して拍動をシミュレーションするという精巧なモデルを提示した例はほかにない。

京都大学のプロジェクトには情報学、工学、医学分野から約30名の研究者が参加した。当初、工学系の研究者はプログラムを書いて入力する際に発生する知的財産権を気にする傾向があり、契約形態に関してずいぶん議論したという。「心配も多かったのですが、5年間やって事実上何も問題は生じませんで

した」と医学博士である野間教授は話す。研究そのものに関しては、工学系の専門性はモデル構築に大いに貢献した。「橋の構造の中でどこに力がかかっているかを調べるとき、小さいブロックに分けて計算するように、心筋細胞をベースにして心臓のポンプ機能を非常に正確に再現してくれました」と野間教授は語る。

乗り越えるべき壁

目的は共有しつつも、分野の異なる研究者同士の共同作業はむずかしい。それが、前例のない巨大マシンの利用方法となっておさらだ。「同じ略語でも違うことを指していることがよくあります」という姫野博士は、異分野研究者同士のスムーズな対話を作り出すため、積極的に飲み会を開いている。先端計算科学研究領域が所属する理研の基幹研究所は、今年4月から月に2回ランチオンミーティングを開催し、物理・化学から医科学まで多岐にわたる研究内容を紹介し、新たなコラボレーションを生むきっかけを作っている。また、6月から神戸の発生・再生科学総合研究センターと合同で「Bridging the Gap: Wet & Dry」と題するワークショップを開き、若手研究者を中心に生物学における計算機研究と実験研究のギャップを埋めるべく議論を重ねている。

対話が進むにつれ、共通の課題も認識され始めている。京都大学は精密な心筋細胞モデルを構築したが、細胞レベルのシミュレーションは依然困難であり、「理研で議論が白熱する問題の1つです」とソフトウェア開発のチームリーダーを務める理研基幹研究所の泰地真弘人博士はいう。システム生物学の発展により部分的には解明が進んできたが、細胞内の構成物質や化学反応など、細胞全体を把握するための情報量は不足している。泰地博士は、次世代スーパーコンピュータの性能をもってしても実験の必要性がなくなることはないという。「これは、理研の中でも共有されている問題です」。

実験をする段階になって、生物学と計算物理学の求めるレベルの違いから研究に支障が出る可能性がある。「計算機学の人、計算機に乗せるに値する精密で詳細なレベルのデータを出すよう求めますが、生物実験のむずかしさをわかっているかというそうではない。一方、生物学の人は、アイデアが先行して計算をやらせたがる傾向があります。アプリケーションとコンピュータサイエンスをきちんとつなぐ役割を定義して、それがわかる人を育成することが必要です」と泰地博士は語る。

ヘッドハント

このように少しずつ議論が活発化するなかで、泰地博士が指摘するように、人材育成はプロジェクトリーダーたちの前に立ちだかる大きな問題だ。システム生物学

分野でも、日本の研究者の数は欧米に比べると圧倒的に少なく、さらに高度なスキルが求められるスーパーコンピュータを使いこなせる研究者を早急に養成する必要がある。1つの対策として、神戸大学と兵庫県立大学は昨年、地球シミュレータを保有する海洋研究開発機構とともに次世代スーパーコンピュータの活用に向けた教育研究に関する包括協定を結んだ。両大学には新学科も設立される。

一方、理研の姫野博士は、天文学や数学、原子核物理などで優秀な人がライフサイエンスに比べて安定したポジションを得るのに苦労していることに目をつけた。ニューヨーク州にある理研BNL研究センターの杉原崇憲博士をはじめ、数名の若手・中堅物理学研究者を引き抜いてきたのだ。若い人ほど研究分野を変えるのに抵抗するが、杉原

博士は素粒子研究から分子モデリングに研究対象が変わることを「おもしろうだと思った」という。今後、生物学者たちと一緒に仕事をしていくなかで、「物理・応用数学で蓄積した考えや技術、理論をライフサイエンス研究に生かすための橋渡しができれば」と抱負を語る。

これまでも物理学からライフサイエンスに専攻を変え、大成した人は日本にもいる。成功のかぎは、自分が移ってきた研究分野が萌芽期であることだ。「新しい道は、その分野にどっぷりついている人からよりも、複数の分野の融合から生まれてきているので、その創成期にあたるとほかの分野からうまい具合に移ってこられます」と姫野博士は語った。「今がまさにその創成期なのです」。