

4. グランドチャレンジからの 発展と将来

2) 計算性能の向上と生物学の限界突破に向けて

- 計算性能の向上は高並列化によってのみ達成可能
- 問題は演算の局所化と大域的通信の排除
 - ハードウェアに向けた計算アルゴリズムにも取組中
 - 生体高分子間の長距離力の計算に出てくるポアソン方程式: FFTから実空間計算
 - 薬剤の結合力の正確な予測: 量子化学計算でのオーダーN計算
- 次世代ではハードとアプリを一体的に開発する必要



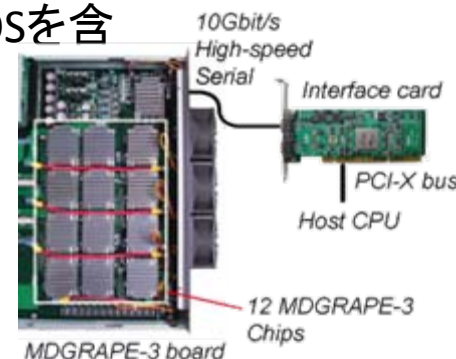
次世代

ベクトル計算機: キラーアプリ=流体
超並列計算機: キラーアプリ=MD

次世代

高並列プロセッサ
キラーアプリ=ライフサイエンス(MD・MO etc.)

- ハードウェアとしては革新的省電力・省スペース・高信頼性
- 通信のない並列大量ジョブに関してもIOやOSを含めて最適化し、並列効率を高める必要



RSCC



MDGRAPE-2

MDGRAPE-3

3) ライフサイエンス分野のさらなる展開

今後の生命科学が目指す重要課題

- a) 生命現象のシステムとしての**統合的理解**(実験も計算も)
- b) シミュレーションによる**予測**
- c) それに基づく**制御**
- d) 有用な生命システムの**設計**

これらの解決を**バイオスーパーコンピューティング**で挑む

具体的な研究開発領域としては、

- ・分子: **マルチスケールシミュレーション(例1)**、生命量子化学研究、構造生物情報学研究
- ・合成生物学: 細胞システムの制御・設計のためのシミュレーション
- ・細胞: **生化学ネットワークシミュレーション、構造・形体ダイナミクスのシミュレーション(例2)**
- ・大規模生命データ解析: 大規模な遺伝子発現データによるネットワーク解析、メタゲノム配列データ解析、XFELによる散乱イメージ解析による分子構造決定
- ・各種外科手術・内視鏡手術のシミュレーション、治療機器のシミュレーション、事故時の傷害等のシミュレーション(防護器具開発)
- ・脳の局所回路モデルの大規模シミュレーション、脳の構造決定機構の解明のためのシミュレーション(微細配線構造を決定するソフトウェア開発、神経細胞構造・回路形成のダイナミクスのシミュレーション、全脳レベルの情報処理・環境適応機構のシミュレーション: 例3)

2009年100T

具体例(1)次々世代計算機をめざした分子シミュレーション

現在: 全電子(QM)あるいはQM/MM計算に基づく蛋白質構造変化の解析(ナノ秒以上)

例) 蛋白質内での酵素反応サイクルの第一原理動力学計算

分子力場の改善
QM/MM法による長時間動力学
自由エネルギー評価法
1000倍の演算量の増加: 100倍の性能向上 + 計算方法の改良

2012年10Peta

次世代: 生体超分子複合体に関するミリ秒以上の分子動力学計算

例) 生体超分子複合体の長時間分子シミュレーションの実現

モデルの粗視化
系の大規模化
計算の長時間(秒から分)

2017年1Exa

1000倍以上の演算量の増加を100倍のスパコン性能向上と計算アルゴリズムの改良で実現

次々世代: 分子シミュレーションから細胞の動態解析へ(秒から分)

例) アルツハイマー病の原因と考えられているアミロイド凝集機構の解明

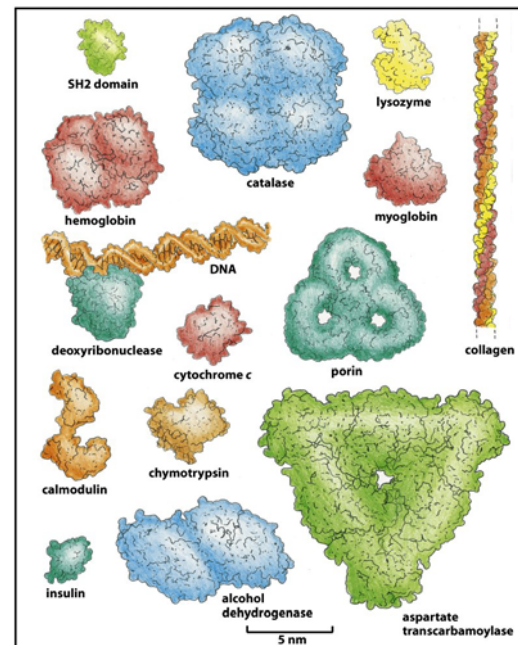
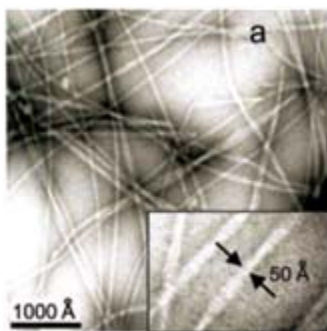
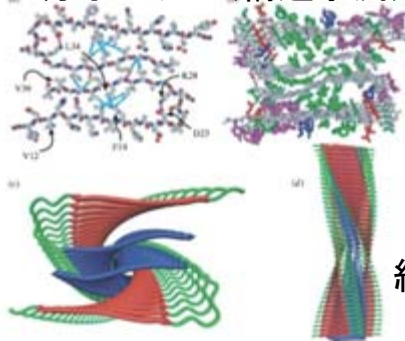
分子モデル(構造予測)

細胞外でのアミロイド繊維の蓄積

大規模計算

モデル粗視化

蛋白質の変化が細胞に及ぼす影響



具体例(2)細胞シミュレーションの展開

2009年 ~20Giga FLOPS

現在:細胞を1つの均一な空間と捉えたシミュレーション

例)代謝シミュレーション

1細胞あたり約200酵素反応、400代謝物、数秒間の反応を計算
PC1台で数分間

10⁶倍以上の演算量の増加:~10⁶倍の性能向上+並列化、効率化

2012年 ~10Peta FLOPS

次世代:細胞内の不均一な場を考慮したシミュレーション

例)細胞小集団(肝小葉)の代謝シミュレーション

100x100x100ボクセル空間(100nm分解能)

代謝反応、拡散反応、膜透過反応、物質輸送反応

1時間の反応を計算

1000倍以上の演算量の増加:100倍の性能向上+計算アルゴリズムの改良
生化学反応、構造・形態のダイナミクスに関する基礎方程式の確立

2017年 ~Exa FLOPS

次々世代:細胞内の不均一な場の中での単分子のダイナミクス、細胞の構造・形態のダイナミクスを考慮したシミュレーション

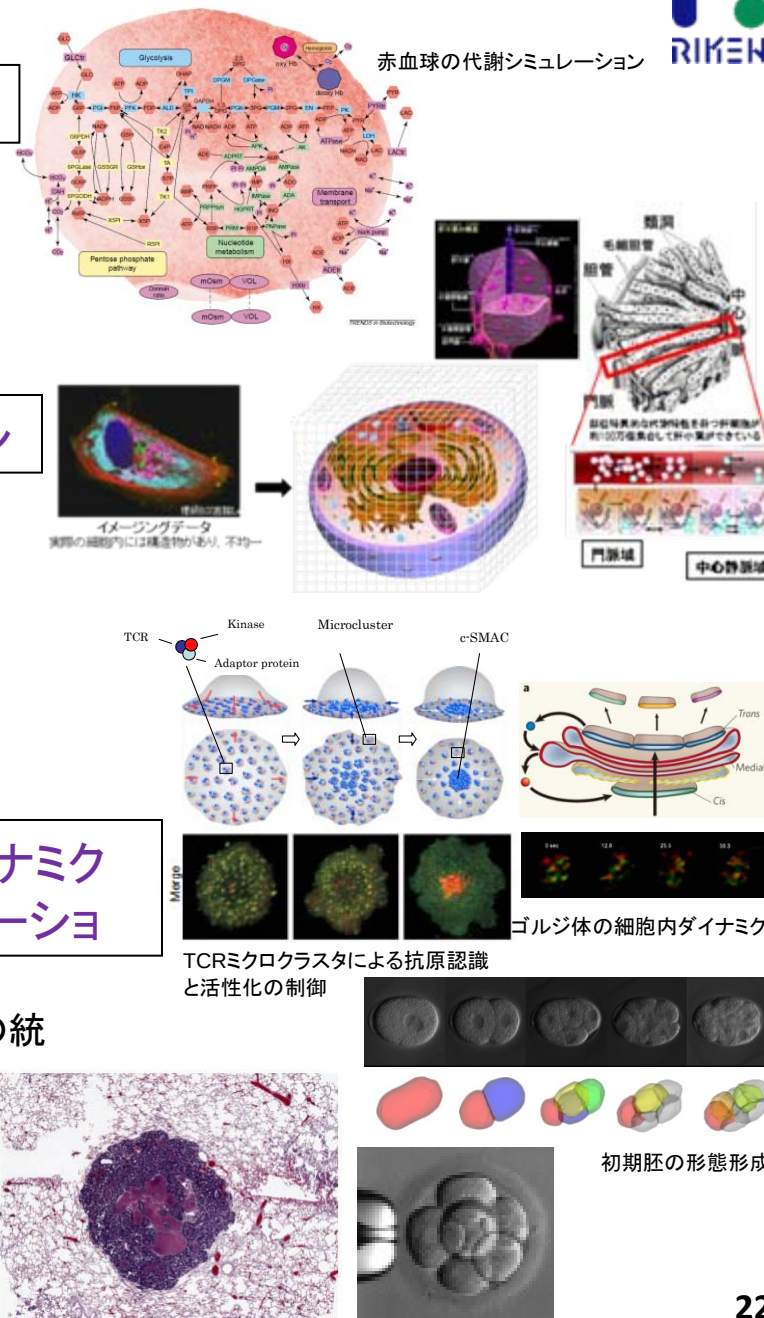
例)生化学統合シミュレーション、胚発生のシミュレーション

生化学反応ネットワーク(代謝反応、シグナル伝達、転写制御)の統合、初期胚の形態形成

生化学ネットワークシミュレーションと構造・形態制御のシミュレーションの統合

代謝病、ガン、免疫疾患、再生医療などへの応用

例)ガン化のシミュレーション、組織再生のシミュレーション
シミュレーションを利用した予測、制御、設計



4) 戦略分野としての連携体制の構築

ライフサイエンスにおける計算科学研究の先導・開拓

○中核となる機関を設置、中核機関が国内外の大学等と連携・協働、**戦略分野としての連携体制を構築**して機能を果たす。

