

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中間評価票

(平成20年8月現在)

1. 課題名 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

2. 評価結果

(1) 全体評価

1. 総論

プロジェクト全体を俯瞰すると、概ね妥当な成果、計画をあげていると言える。次世代スパコンのハードウェア完成に連携した研究開発計画を立案していることについては十分に評価できる。

研究開発内容については、基本的な開発段階として順調に進行しており、また、研究推進体制についても、既存のマネジメント体制を強化し、生命科学の研究者をマネジメントに組み込むなど、生命科学と情報科学のバランスに配慮した体制が構築できつつあると評価できる。

また、今回新たに追加提案のあった脳・神経系スケールをプロジェクト全体の中に位置づけるに際して、開発対象の重点化による整理見直しが行われ、必要なスクラップアンドビルドが行われたことは高く評価できる。

一方で、プロジェクト全体として次世代スパコンの特長を活かして何をグランド・チャレンジとして達成するかという点が、まだ明確に見えない部分もあり、次世代スパコンが開発されたときにその性能を最大限に引き出すためのソフトウェア開発という観点で、ライフサイエンスが本来克服すべき本質的な問題点も見据えつつ、着実な成果を挙げていくことを期待する。

2. 進捗・達成度

本プロジェクトは、平成18年10月から開始されたプロジェクトであり、被評価期間として成果を見るには短期間ではあるが、基本的な開発段階としては順調に進捗していると考えられる。また、研究開発内容についても概ね整理されており、一定の成果が期待できると評価できる。

研究開発体制としては、全国から優れた研究者を集めており個別の研究レベルは高いと思われる一方で、全体としてのまとまりに問題が生じる可能性も否定しきれないことから、個々のテーマ内の具体的な共通課題の解決に向けた研究をコミットするような一層の取組が必要である。個々のテーマにおけるソフトウェアの開発は、テーマ内の方向性が定まり統一的な方法論についても検討が行われており、多大な進展がみられるが、現時点では、スケール別の研究に留まっている感もあり、プロジェクト全体を一つにまとめる今後の取組を期待する。

(2) 個別評価

1. スケール・チームごとの評価について

- ・分子スケールについては、順調に進んでいる。今後の生命科学研究に対するリソースの強化等を通じた「細胞スケールとの有機的連携」に期待したい。

- ・細胞スケールについて、肝細胞に焦点を当てた事は分子・細胞・臓器を統合する方向への対応として評価できる。生命科学研究に対するリソースの強化によって、実データに即した有用なものが出るよう、実験データと検証システムの整備に向けて、理論・実験研究者の協働研究を一層進めていくべきである。
- ・臓器全身スケールは、非常に実用的なプログラムができる可能性がある。特に、血液シミュレータは血栓症などの病気のシミュレーションにとって重要であり、適切な目標設定がなされていると評価できる。
- ・データ解析融合チームについては、チームとしての目標を「肺がん」として統一的に絞り込んだ事は評価できるが、プロジェクト全体としての相乗効果が得られるよう、意味のある成果が出されることを期待したい。また、ここで開発される成果は本研究以外の研究にも大いに役立つ可能性があるため、さらなる強化が望ましい。
- ・基盤ソフトウェア開発・高度化チームは、各スケールに対して、次世代を見据えた新規アルゴリズムを提供する役割を担っており高く評価できる。今後は、次世代スパコンの特徴であるスカラ部とベクトル部が並立しているという、特長を活かした開発を見据えて研究を進めていただきたい。

2. 脳・神経系スケールの追加について

脳・神経系スケールは、実験検証技術やモデル化の急速な進展や、海外における研究開発動向、さらにはスケールを超えたアプローチの観点でプロジェクト全体へもたらし得る効果や既存の研究開発課題との潜在的な相乗効果等を踏まえ、新たに追加すべきものであるとの提案が出された。これは、次世代スパコンの利用対象としては魅力的な提案である一方、難しいテーマであることからいささか唐突な印象を免れない。

他方で、3年後に完成を控えた次世代スパコンの世界最速の能力を最大限に引き出し、具体的な成果を限られた期間で示すためには、実験により検証できるテーマを選ばなければならないという制約下で、時間軸を意識した目標が立てられている点や、次世代スパコンで出来ることを示すとともに、次世代スパコンでの限界をも示すことが出来るという点でも、個別テーマとして本スケールを本プロジェクトに追加する意義は評価できる。

従って、新しいテーマの位置づけ及び他のスケールとの連携に関して、全体の構成としてアンバランスにならないよう、また、力が分散して相乗効果が発揮できないことにならないよう、関係者間での継続的な検討が必要である。

また、将来検討されるであろう、さらなる次の世代のスパコンのプロジェクトにつなげるためにも本スケールの追加は重要であり、その点を意識した成果をあげていただきたい。

3. 研究推進体制について

(1) マネジメントの強化への取組

生命科学を専門とする2名の主任研究者をコーディネーターとして新たに組み込む計画は、情報科学とのバランスを適切に保つための対応として十分評価される。コーディネーターの能力が十分に活かせるように、責任体制を明確にし、確実に力を発揮できるような環境が作られることを期待する。

また、プロジェクトディレクターによる機動的な資源配分や体制の見直しといったトップダウンのマネジメントを強化したことは評価できる。本プロジェクトの着実な推進のためには、

プロジェクトディレクターのみならず、コーディネーター、各リーダー間の相互の連携協力を期待する。

(2) スケール間の連携について

分子、細胞、臓器をつなぐテーマとして肝臓を中心とする代謝機能や血流解析等のテーマの絞込みが行われたこと、スケールごとの連携を深めるための仕組みが種々設定されたことは評価できるが、全体としての統一感、あるいはスケール別に研究して全体を一つにまとめるという方向性や共通目標の設定に関しては不十分な面がある。

各スケールで、具体的な共通課題を明示し、その課題の解決をコミットする体制や複数のスケールを縦に統合した具体的な課題設定により、一層のスケール間連携が強化されることを期待する。

(3) プロジェクト全体について

研究目標を長期目標と短期目標とに分け、本プロジェクトの実施期間である3年後までを短期研究と位置付けて、個別チームでの計算パフォーマンスをあげることに注力する一方で、中長期目標としてはライフサイエンス研究への貢献といった観点に力を向けるという方針を立てたことは評価できる。

各スケールの課題の重点化に向けた努力はなされているが、今後はさらにこれをプロジェクト全体としてまとめて、統合された成果の創出を期待する。

産業界との連携に向けた検討も深まり、画像診断等比較的短い時間で実用化も期待できる。本プロジェクトの成果を産業界が利活用するためにも、産業化に向けて研究者の視点ではなくニーズ側や社会からの視点をもつことで、具体的な計画を見据えつつ検討を進めて欲しい。

(3) その他

- ・ 今後、全ての領域においてコンピュータ技術は必須であり、本プロジェクトは国際競争力のある基盤構築の観点からも非常に重要なプロジェクトと認識される。一方で、ライフサイエンス分野において、シミュレーションを用いて生命現象を統合的に理解しようとする試みはまさに緒に就いたところであり、次世代スパコンの計算性能での限界突破に留まらず、将来検討されるであろう、さらなる次の世代のスパコンのプロジェクトも見据えて、長期的な視野で戦略的に捉えた対処策が取られることを期待する。
- ・ 本プロジェクトの実施に当たっては、生命科学の観点から、生命現象の複雑さや特殊性を顧みて、次世代スパコンありきではなく、ライフサイエンス分野のニーズ側からの視点でどのような性能のコンピュータが必要かといったことから議論すべきであろう。今後、同種プロジェクトの立ち上げに当たっては、そうした議論を経た上で、どこまでを達成目標とし、どのような成果を出して次につなげるかという全体像を予め定めるとともに、様々な生命科学研究との有機的な連携も図りつつ、個々の研究の課題の焦点を絞り込むようなプロジェクトの推進が図られることを期待する。

第4期ライフサイエンス委員会 構成員一覧

主査	中西 重忠	大阪バイオサイエンス研究所 所長
	飯島 貞代	三菱ケミカルホールディングス ヘルスケア戦略室 部長
	磯貝 彰	奈良先端科学技術大学院大学 特任教授
	岩柳 隆夫	情報・システム研究機構 国立遺伝学研究所 特任教授
	甲斐 知恵子	東京大学医科学研究所 教授
	門脇 孝	東京大学大学院医学系研究科 教授
	鎌谷 直之	理化学研究所ゲノム医科学研究センター グループディレクター
	小原 雄治	情報・システム研究機構 理事、国立遺伝学研究所 所長 兼任
	榊 佳之	豊橋技術科学大学 学長
	笹井 芳樹	理化学研究所 発生・再生科学総合研究センター グループディレクター
	定藤 規弘	自然科学研究機構 生理学研究所 教授
	末松 誠	慶應義塾大学 医学部長
	田中 紘一	先端医療振興財団 先端医療センター長
	丹治 順	玉川大学 脳科学研究所 所長
	長洲 毅志	エーザイ株式会社 CEO オフィス 理事・研究開発担当付 担当部長
	中村 祐輔	東京大学医科学研究所 教授
	垣生 園子	順天堂大学医学部 客員教授
	廣橋 説雄	国立がんセンター 総長
	南 砂	読売新聞東京本社 編集委員