

ライフサイエンス分野での ペタフロップス級スーパーコンピュータの可能性

GSC システム情報生物学研究グループ

高速分子シミュレーション研究チーム

泰地 真弘人

taiji@gsc.riken.jp

これまでの生命科学においては、高性能計算機シミュレーションが活躍してきたとはあまりいえないであろう。1990年代初頭に唱えられた`Grand Challenge`において生物系で挙げられていた課題はヒトゲノム、タンパク質のフォールディング、光合成といったところであった。ヒトゲノム解読では計算機が役に立ったとはいえ高性能シミュレーションとはちょっと違うものであったし、フォールディングについてはその物理はともかく普通のタンパク質が折り畳める見通しは今もない。光合成などもまだこれからといった感じである。何れにせよこうした「生物物理」的なトピックが中心に据えられており、分子生物学の本流に十分な貢献をしてきたとは言えないであろう。

これは、計算機が非力で大規模な計算ができなかったこと、また実験生物学のほうでもシミュレーションが可能になるような十分な定量的情報を提供するのが難しかったことなどが原因と考えられる。生命系は参加する要素の数が多く、単純なモデル化も難しい。しかし近年の生命科学の発展によって、高性能計算を生命科学に活かす素地が整いつつある。筆者の領域である分子シミュレーションでは、タンパク質の構造がわからないと手も足も出ない場合がほとんどであるが、タンパク 3000 プロジェクトなどによりタンパク質の構造が次々と解明されてきたことで研究の対象が飛躍的に拡大している。また計測技術の進歩により RNA やタンパク質が迅速に定量できるようになりつつあり、生体分子ネットワークのシミュレーションも今後重要な課題になるであろう。そのほか今後のイメージング技術の向上にも要注目である。

こうした進歩を活かし、それに見合った結果を高性能計算で出すためには、ペタフロップス級の性能をもつ計算機が必須であると考えている。講演では我々の取り組みを紹介すると共に展望を論じたい。