

未来の社会を守るハイパフォーマンス コンピューティング

Protecting Future Society through High-Performance Computing

あらまし

社会は、地球温暖化による気候変動、高騰する新薬のコスト、ウイルスの世界的蔓延^{まん}の脅威など、多方面からの課題に直面している。ハイパフォーマンスコンピューティングは、これらの課題の解決を支援して社会を守るという重要な役割を担う。欧州富士通研究所 (FLE) は、富士通の次世代ハイパフォーマンスコンピューティング技術をこれらの切迫した社会問題に集中させるために、主要な欧州の研究機関との戦略的協力関係を確立している。

本稿では、インペリアル・カレッジ・ロンドンとの協力による海洋力学のマルチスケールモデリング、EUが資金提供するpreDiCTプロジェクトでの心臓シミュレーション、オックスフォード大学などとの協力によるウイルスタンパク質シミュレーションについて紹介する。

Abstract

Society is facing challenges from many directions, such as climate change through global warming, the spiralling cost of new medicines, and the threat of viral pandemics. High-performance computing will play a vital role in tackling these challenges to protect society. Fujitsu Laboratories of Europe Ltd. (FLE) has established strategic collaborations with leading European institutions to bring Fujitsu's next-generation computing technologies to bear on these pressing societal problems. In this article we describe collaboration with Imperial College London for multi-scale modelling of ocean dynamics, the European Union funded preDiCT project for heart simulation, and collaboration with Oxford University and others for virus-protein simulation.



Elena Akhmatkaya

欧州富士通研究所
所属
現在、分子シミュ
レーションモデル
およびアルゴリズム
の開発に従事。



Peter Chow

欧州富士通研究所
所属
現在、科学技術計
算分野での研究開
発に従事。



Ross Nobes

欧州富士通研究所
所属
現在、ハイパフォー
マンスコンピュータ
用アプリケーション
ソフトウェアの開発に従事。



James Southern

欧州富士通研究所
所属
現在、ハイパフォー
マンスコンピュータ
を用いた心臓シ
ミュレーションの研究に従事。



Nicholas Wilson

欧州富士通研究所
所属
現在、ハイパフォー
マンスコンピュータ
を用いた科学技術
ソフトウェアの研究に従事。

まえがき

ハイパフォーマンスコンピューティング(HPC)は、自動車や航空機の設計と試験、およびそれらの燃料となる石油の発見に使用することから日々の天気予報を提供することまで、長年にわたって我々の日常生活に影響を与えてきた。今後ますます多くの科学技術問題にコンピュータシミュレーションが適用されるようになるため、この影響は今後何年にもわたって劇的に増大していくだろう。

最も強力なHPCシステムは、最近まではCPU周波数を上げ続けることによって、現在では各プロセッサ内のコア数を増やすことによって、およそ18箇月ごとに性能を倍加し続けている。2008年には、まずローレンス・リバモア国立研究所のIBM Roadrunnerシステムによって、つぎにオークリッジ国立研究所のCray Jaguarシステムによって、ペタフロップスの壁(註)が破られた。日本の次世代スーパーコンピュータやIBMのSequoiaシステムなど、今後のコンピュータは、トップエンドのシステムの性能を更に10~20倍引き上げることが見込まれる。

富士通およびそのほかのベンダは、電力消費と設置面積を管理可能なレベルに保つなど、これらのコンピュータシステムの構築にかかわる重大なエンジニアリング上の課題に直面している。その中でも、おそらく最大の課題は、ハードウェアを効率的に利用できる科学技術アプリケーションソフトウェアの開発にある。しかし、地球温暖化からの気候変動の影響の予測と緩和、新しい低炭素エネルギー源の開発、高騰するヘルスケアのコストとの戦い、地球規模でのウイルス蔓延への対処など今日の社会が直面する切迫した課題を解決する上でHPCがその支援のための重要なツールとなるため、緊急にアプリケーションソフトウェアの開発を行う必要がある。

欧州富士通研究所(FLE)は、ペタスケール級のコンピュータシミュレーションを現実のものとする数値解析/ソフトウェア技術を開発するため、著名な欧州の研究機関との協力を開始している。

本稿では、その三つのプロジェクト、すなわち、

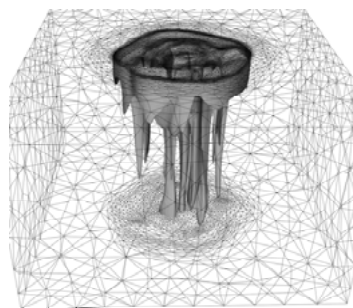
(注) 1ペタフロップスは、 10^{15} (千兆)浮動小数点演算/秒であり、100,000台のラップトップコンピュータの総合パワーとほぼ同等である。

高度な計算メッシング技術を使用した気候変動モデリングアプリケーション、心臓全体の大規模モデルを使用したコンピュータシミュレーションによる新薬試験、およびウイルス・エンベロープ全体の生体分子モデリングについて説明する。

気候変動モデリング

大気中のCO₂の増加に対処する計画の策定を支援するためには、地球全体の炭素循環を理解することが不可欠である。海洋は、この循環の重要な構成要素である。FLEは、インペリアル・カレッジ・ロンドンのグランサム気候変動研究所と協力して、海洋力学と気候システムの科学を研究するための海洋モデルであるインペリアル・カレッジ海洋モデル(ICOM)⁽¹⁾を開発している。ICOMは海洋上部の混合層と深い対流の領域を正確にモデル化できることなど、海洋と大気の間での炭素の流動の正確なシミュレーションを行うために理想的な多くの特徴を持つ。

降雨量の大幅な減少により、ある地域が危険なほど温暖または不毛の地になるかどうかなどの質問に現在のモデルは確実に回答することができないため、気候変動の地域的な影響を予測するには次世代気候モデルが必要である。マルチスケールモデリングに対するアプローチの一つは、アダプティブメッシング、すなわち、高い分解能が必要な領域では細くなり、変化があまりない領域では粗くなるように適応する計算メッシュである。図-1は、アダプティブメッシングを使用した外洋での深い対流のシミュレーションの結果である。図では、密度の等値面とアダプティブメッシュを示している。海面の冷却に



提供:インペリアル・カレッジ

図-1 ICOMシミュレーション
Fig.1-ICOM simulation.

より起きる、理想化された領域における外洋での深い対流は、大規模な子午線循環で重要な役割を果たすが、今日のモデルによって表現されない比較的小さい空間スケールで発生するため、一様でない計算分解能が必要となる。

ICOMは、非構造グリッド上にアダプティブメッシングを組み込んでおり、次世代気候モデルのコンポーネントとなることを意図している。

しかし、アダプティブメッシングが海洋循環や天気予報だけでなく気候予測にも最適な方法となるには、解決すべき多くの科学的モデリングの問題がある。

FLEとインペリアル・カレッジとの共同研究では、数万または数十万のプロセッサへのICOMの拡張にフォーカスして、以下の課題に取り組んでいる。

- ・有限要素モデリングから生じる大規模で疎な連立方程式の解法など、主要な計算タスクにおけるハイブリッド・スレッド/タスク並列性
 - ・スレッド並列による行列アセンブリの新たな方法
 - ・アダプティブメッシング向けの高度な負荷分散方式
 - ・リソースを意識したパーティションマッピング
- また、これらの開発と並行して、FLEは次の二つの環境問題へのソフトウェアの適用に協力する。
- ・水温躍層の下から表面領域への栄養分の豊富な水の混合を増やし、海洋によるCO₂の取込みを増やす「オーシャンパイプ」による、大気中CO₂の減少に対する地球工学「ソリューション」⁽²⁾ もちろん、そのような大規模地球工学の潜在的に強烈な副作用⁽³⁾も調べる必要がある。このプロジェクトは、サウサンプトンの国立海洋センタと連携して実施される。
 - ・潮力堰⁽⁴⁾、渦およびタービンによる低炭素潮力発電。イングランドとウェールズの間にあるセバーン川河口は、世界で2番目に高い干満差を持ち、潮力堰と渦のいくつかを提案できる場所である⁽⁴⁾ これらを使用して英国の電力需要の大きな割合を生み出し、CO₂生成の削減という英国の目標にも大いに寄与することができるだろう。マルチスケール数値モデリングは、そのような潮力堰または渦の設計を支援し、構造物の環境への影響を調べるために必要になるだろう。

これらの適用領域は、最新の数値解析手法と次世

代のコンピュータプラットフォームを結び付けることができる、マルチスケール・マルチフィジックス問題を表している。その結果は、電力供給のセキュリティと持続可能性の向上を保証するだけでなく、気候変動の緩和および気候変動への適応に関する重要な質問に対する回答にも利用できるだろう。

コンピュータシミュレーションによる新薬試験

人口の高齢化と慢性病患者数の増加により、世界中で健康サービスへの需要が高まっている。これに伴い、高品質のヘルスケア、例えば、疾病の早期診断による効果的な治療、安全で高い効能を持つ新薬による治療への期待が高まっている。こうした高品質のヘルスケアを提供するコストは、制御できないほど上昇し始めている。

健康の分野は、情報通信技術にますます依存する、多くの情報を必要とする分野である。膨大な量の健康関連データをセキュアに管理する要件に加えて、シミュレーション環境によってヘルスケアの予測面と安全面を改善する必要がある。

心臓のシミュレーションは、とくに重要なものである。心臓疾患は、欧州では第一の死亡原因であり、日本では癌^{がん}に次いで2番目である。また、あらゆる種類の疾病をターゲットとする多くの有望な薬が、心臓への望ましくない副作用のために市場に到達していない。医薬品開発サイクルは、期間が極めて長く、膨大なコストが掛かる⁽⁵⁾ 実験室から商品棚までの新薬の開発は、10～13年を要する。試験した5000分子ごとに、250が臨床前試験に進み、臨床試験に進んだ10のうち、わずか一つが患者への使用を承認される。第3フェーズ臨床試験に進む薬の半分は、この段階で不合格になる。このため、新薬の研究開発コストは平均10億ユーロを超える。薬が試験プロセスの後期で不適合とされる主な理由は、心臓への副作用の発見である。とくに、薬は心臓障害を起こし死に至らせる可能性がある不整脈および細動を生じさせる可能性がある。ペタスケール心臓シミュレーションの最初の適用目的は、この問題に取り組み、不整脈を誘発させる薬のリスクを示す簡単なバイオマーカを特定し、より低コストで、不適切な医薬品候補を早期に除去し、成功した薬のより早期の承認を得ることである。

FLEは、EUが資金提供するpreDiCTプロジェク

ト⁶⁾のパートナーである。このプロジェクトは、心臓の拍動への薬理化合物の影響を、コンピュータモデルを使用してモデル化し、シミュレーションを行い、最終的には予測する、というミッションを持って2008年6月1日に開始された。このミッションを達成するためには、現在の最新技術を超える以下のような開発が必要となる。

- ・細胞がどのようにいつ収縮するかを制御する個別イオンチャネルの数学モデル
- ・心臓の化学プロセスおよび数百万もの個々の点の物理的関係を包含する組織モデル
- ・これらの関係を一連の複雑な式として計算して、拍動する心臓のリアルタイムより速いシミュレーションを可能にするコンピュータコード

心臓の電氣的活性化の最新技術シミュレーションの例を図-2に示す。心尖（心臓の尖端部）のシミュレーションに続いて心室メッシュを通過して広がる電氣的興奮の波面のコンピュータシミュレーションを示している。

preDiCTプロジェクトは、より幅広い“European Virtual Physiological Human initiative”に組み込まれている。

物理的な収縮と心臓の血管を流れる血液の送り出しを無視して電氣的活動に限定したとしても、心臓シミュレーションの計算要件は手ごわいものである。これはマルチスケール問題であり、小細胞レベルから器官全体のレベルまでのモデリングを必要とする⁷⁾複雑な細胞モデルは、各個別心臓細胞の機能状態を記述し、心臓組織を形成する繊維細胞の複雑な形状を記述するには数百万ものメッシュ点が必要である。

現在のコンピュータおよびシミュレーションコードでは、製薬あるいは臨床の観点から意味のある時間内に心臓の拍動1回でさえ実行できない。この技術は、高度な数値解析アルゴリズムの開発と超並列

ペタスケールコンピュータへのその実装を必要としている⁸⁾

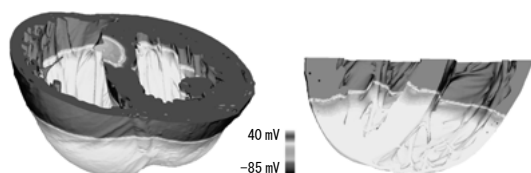
FLEは、この「ペタスケール心臓シミュレータ」を開発するためのpreDiCT作業パッケージを主導している。使用する数値解析技術の多くは、前章で説明した、ICOMで採用された技術に類似している。FLEは、比較的成熟した計算流体力学ドメインから計算生理学という新しい分野へのアダプティブメッシング有限要素技術の移転をリードしていく。

ウイルス感染の理解

インフルエンザなどの感染性疾患は、毎年何十万もの人を死に至らせている。（インフルエンザの一定の株の制御不能な蔓延など）ウイルスの世界的蔓延は、人類に真の危険をもたらす。ウイルス株の一部は既存の抗インフルエンザ治療に対する耐性を備えてくるため、新しい薬がどうしても必要となる。HPCは、完全なウイルスおよびウイルス変異のモデリングを通して、こうした世界的蔓延の効果的な制御方法の開発に寄与することができる。これは、感染プロセスへの洞察を与え、抗ウイルス薬の合理的な設計の進歩を加速させることができるだろう。

遺伝子のスイッチを切る細胞内のタンパク質を観察するために、少なくとも1ミリ秒間、大きなウイルス全体をシミュレーションすることが求められているが、ウイルス全体のシミュレーションは、現在までに一例が報告されているに過ぎない⁹⁾ わずか 2×10^{-11} 秒間のサテライトタバコモザイクウイルス（非常に単純なウイルス）のシミュレーションである。さらに、コンピュータシミュレーションでのスクリーニングは、潜在的な新薬候補を正確で速やかに選択しなければならないが、既存の技術では、不正確または遅過ぎる。

そのため、高度なシミュレーション手法とペタスケールコンピュータへの極めて効率的な実装の研究が必要である。FLEはポツダム大学と協力して、一般化シャドーハイブリッドモンテカルロ(GSHMC)¹⁰⁾と呼ばれる高度なシミュレーション技術を開発している。脂質二重層でのクモ毒の正しい位置を予測するシミュレーション法の能力を調べるオックスフォード大学との研究¹¹⁾では、伝統的な分子動力学アプローチに勝るGSHMCの優位性を



提供: オックスフォード大学

図-2 心臓の電氣的興奮のシミュレーション
Fig.2-Simulation of electrical excitation of heart.

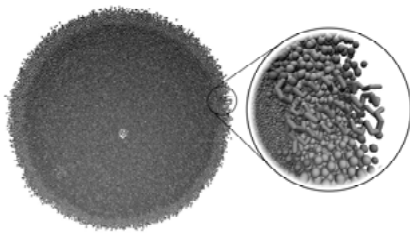


図-3 挿入されたタンパク質分子を含む
ウイルス・エンベロープのモデル
Fig.3-Model of a virus envelope including
inserted protein molecules.

実証した。ポツダム大学およびオックスフォード大学との更なる研究開発では、(複数タイムステップアプローチの使用などの) シミュレーション技術の開発、手法の効率的な並列化、および図-3に示すような大規模ウイルスモデルへの適用に取り組んでいく。

む す び

本稿では、欧州富士通研究所が関与する三つの協力プロジェクトを説明した。これらのプロジェクトには、二つの共通する側面がある。第一に、それぞれが地球規模での人類への脅威をターゲットにしていること。つまり、気候変動の影響の緩和または対処、より効率的なコンピュータベースの新薬試験によるヘルスケアのコストの制御、およびウイルスの世界的蔓延の理解と制御である。二つ目の共通点は、「シミュレーションには、富士通によって開発されるような次世代スーパーコンピュータシステムに結合されるプロセッサが数千に及ぶ規模のシステムでも極めて性能が高い数値解析手法の開発を必要とする」ことである。

参考文献

- (1) Applied Modelling and Computing Group : ICOM.
<http://amcg.ese.ic.ac.uk/index.php?title=ICOM>
- (2) J. Lovelock et al. : Ocean pipes could help the earth cure itself. *Nature*, 447, p.403 (2007).
- (3) J. Shepherd et al. : Geo-engineering might cause, not cure, problems. *Nature*, 449, p.781 (2007).
- (4) C. Clery : Renewable energy — U. K. ponders world's biggest tidal power scheme. *Science*, 320, p.1574 (2008).
- (5) EFPIA : The Pharmaceutical Industry in Figures : 2008 Edition.
<http://www.efpia.eu/Content/Default.asp?PageID=559&DocID=4883>
- (6) preDiCT : <http://www.vph-predict.eu/>
- (7) J. Southern et al. : Multi-scale computational modelling in biology and physiology. *Progress in Biophysics and Molecular Biology*, 96, p.60 (2008).
- (8) R. Bordas et al. : Simulation of cardiac electrophysiology on next-generation high-performance computers. *Philosophical Transactions of the Royal Society A*, in press.
- (9) P. L. Freddolino et al. : Molecular dynamics simulations of the complete satellite tobacco mosaic virus. *Structure*, 14, p.437 (2006).
- (10) E. Akhmatkaya et al. : An efficient method for molecular simulations. *Journal of Computational Physics*, 227, p.4934 (2008).
- (11) C. Wee et al. : Improved sampling for simulations of interfacial membrane proteins : Application of GSHMC to a peptide toxin/bilayer system. *Journal of Physical Chemistry B*, 112, p.5710 (2008).