

計算科学の世界



京がつくる時代

K computer Newsletter
December 2012 No.4

Interview

生きた心臓を 「京」に再現。

心臓病の新たな治療に貢献する
心臓シミュレータ
「UT-Heart」

Research Teams

研究チーム紹介

プログラム構成モデル研究チーム
プロセッサ研究チーム



独立行政法人理化学研究所
計算科学研究機構



生きた心臓を 「京」に再現。 心臓病の 新たな治療に貢献する。 心臓シミュレータ「UT-Heart」

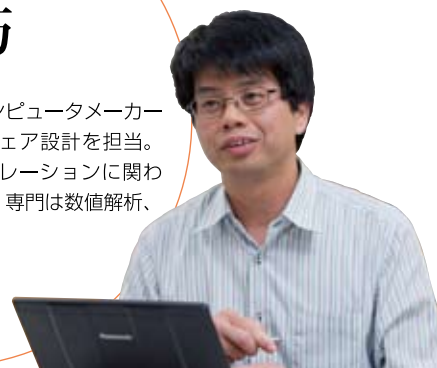
厚生労働省の統計によると、心臓の病気で死亡する人の数は、死因の第2位（2011年）。高齢化の進展などにより、ますます心臓病のリスクが高まっています。そこで新しい治療法や新薬の開発が進められてきましたが、実験から臨床試験に至るまでには膨大な時間と費用がかかります。それをコンピュータ上でシミュレーションできたら…。心臓シミュレータ「UT-Heart」は、こうした願いに応えるために開発中のシステムです。スーパーコンピュータ「京」の登場によって、急速に実用化に近づいています。

東京大学大学院
新領域創成科学研究科
研究員

鷺尾 巧

Takumi Washio

大学院は数学科。コンピュータメーカーに就職し、ハードウェア設計を担当。その後、心臓シミュレーションに関わるようになり、転職。専門は数値解析、計算生物学。



心臓のメカニズム

心臓は生きている限り働き続ける高性能で精密な「血液ポンプ」です。それがどのように動いているのか、ご存知ですか。

心臓には、ペースメーカーの役割をする細胞があり、約1秒に1回規則正しく電気刺激を発しています。それが心臓を形作る筋肉である心筋全体に伝わり、心筋が収縮します。これで心臓が1回転します。これを拍動といいます。この拍動によって全身に血液が送り込まれます。

ではこの心筋はどのようにして収縮するのでしょうか。心筋は心筋細胞（筋線維）の束から構成されています。この筋線維はさらにミオシンとアクチンという細長いタンパク分子が集まった筋原線

維からなりたっています。このミオシンとアクチンこそ筋肉が収縮するメカニズムの主役です。タンパク分子の大きさは、数nm(ナノメートル。1nmは10億分の1メートル)。小さなタンパク分子の収縮が心臓の力強い拍動を生んでいるのです。

マルチスケール・マルチフィジックス

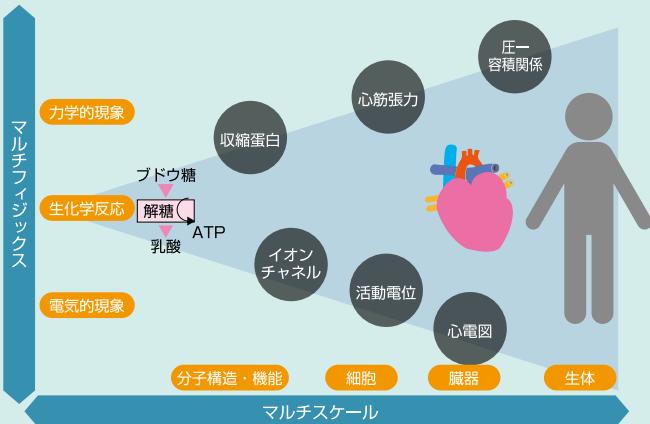
さて、心臓シミュレータ「UT-Heart」^{※1}とはそもそもどのようなものなのでしょうか。その開発に携わる東京大学の鷲尾巧研究員は次のように説明します。

「現在、京コンピュータ上に実現されているUT-Heartは、細胞内部のミオシン・アクチン分子の動きに始まり、ミオシン・アクチンによって構成される筋線維の伸縮、臓器としての心臓の収縮と弛緩、全身に血液を送り出すメカニズム、さらには心臓の活動の結果生まれる血圧や心電図まで、すべてを数値表現した“仮想の心臓”として構成されています」

心臓シミュレータといってもコンピュータグラフィックスで描写するものではありません。心筋を構成するミオシン、アクチンというマイクロレベルの動きから再現しているのです。

「UT-Heartの特徴は、マルチスケールとマルチフィジックスを同時に実現したこと」と、鷲尾さんは強調します【図1】。

図1 マルチスケール・マルチフィジックス

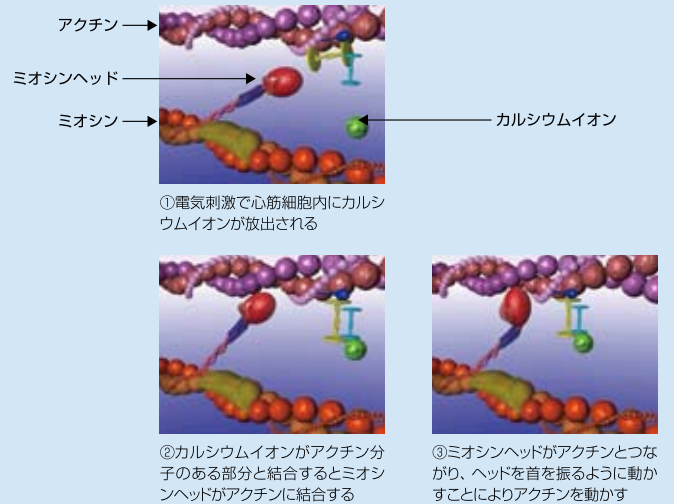


心臓はマルチフィジックス・マルチスケールという複雑なメカニズムを有しています。積み重ねられてきた心電図や血圧というマクロ現象の知見と、急速に発展している遺伝子・分子レベルのマイクロ現象の研究が、これまでつながっていませんでした。これを統合し、マイクロからマクロまで再現しようとするのが心臓シミュレータ「UT-Heart」なのです。

「まずマルチフィジックスとは、生化学反応、電気的現象、力学的現象という複数の物理現象を扱うということです。さらに、これらの物理現象がタンパク分子(～数nm)から細胞(～100μm)、組織(～mm)、臓器(～cm)をへて生体へとマイクロからマクロにわたって連続的に発現する。これがマルチスケールです」。

心臓にあるペースメーカー細胞から電気刺激が心筋に伝わりと筋線維内のカルシウムイオン濃度が高まります。そこでカルシウムイオンとアクチン分子が結合すると、ミオシンヘッド^{※2}と呼ばれるミオシンの先端部分がアクチンと結合しやすくなり、ミオシンヘッドが伸びてアクチンと結合します。このときミオシンヘッドが動き、アクチンを動かします【図2】。この動きが筋線維レベルで一斉におこ

図2 ミオシンとアクチンの動き



ると心筋が収縮し、心臓が拍動します。

鷲尾さんは、「京コンピュータが使えるようになって、これらのマイクロレベルでの個々のプロセスをすべて数値モデルで表現できるようになり、本物の心臓に近いシミュレーションが可能になった」と、研究の前進を振り返ります。

「京」の活用で実用化に接近

「京」以前は、コンピュータの計算能力に限界があるため、分子レベルからのシミュレーションが現実的には不可能でした。それが「京」の登場によって一挙に解決しました。

従来はミオシンとアクチンの動きを一つひとつ計算できないため、複数の分子の動きをまとめて平均化し、計算していました。しかしその方法ではどうしても心臓の実際の動きが再現できません。ところが「京」では単体の分子レベルから再現し、それらが複数集まったときに単体の分子同士が相互作用し、互いに影響しあってどのように振舞うかも再現できるようになりました。するとより自然な心臓の拍動が実現できたのです。

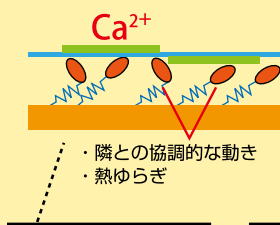
それは膨大な計算の積み重ねです。

「まず心臓を5万個の四面体からなるメッシュ(計算する際のまとまり)に分割します。その5万個のメッシュ一つひとつに64個の心筋細胞を埋め込みます。さらに心筋細胞の一つひとつに30個のミオシンとアクチンのペアを埋め込みます。分子レベルから



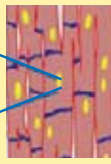
図3 「京」によって可能になった計算法

ひとつひとつのミオシンヘッドの動作を計算



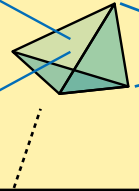
たんぱく質レベル：ひとつひとつのミオシンヘッドの動作を計算

心筋細胞の集合体



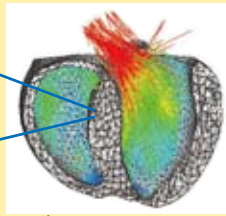
心筋細胞の動きからその集合体である心筋の伸縮を計算

要素



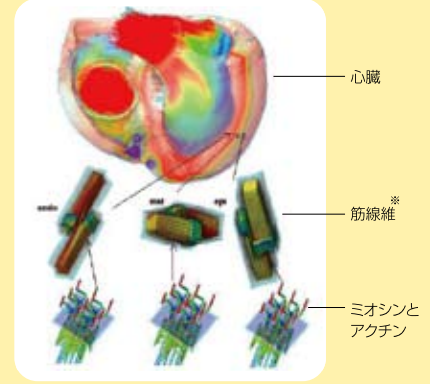
心臓を計算単位であるメッシュに分割

心室壁と血流との相互作用



臓器レベル：血液の拍出量や心筋の仕事量など心臓の性能をシミュレーション

「京」によるUT-Heartのシミュレーション画像



※筋線維
心筋を構成する筋線維は、心臓の内側・中・外側で線維の方向が異なっている。UT-Heartではその線維の方向も再現している

の計算とは、ミオシンとアクチンの動きの計算を心臓全体にわたって同時に一挙に行うことなのです。ちなみに心臓を1拍動かすのに、従来のスーパーコンピュータではおおよそ数日かかっていましたが、京コンピュータでは能力の10%だけを使っても1時間で計算できるようになりました。しかし、実はこれは未知の現象を大雑把に探索するための簡易モデルでの計算に過ぎません。この探索的研究の結果、次の研究の方向が定めれば、今度は心臓を5万個から60万個のメッシュへとさらに細かく分割し、また細胞のモデルもより実際の構造を反映するように自由度を増やして、本格的なシミュレーションを行います。ここで京コンピュータの本当の能力が発揮されます」。【図3】

心臓シミュレータは、文部科学省により平成24年8月、「京」の優先課題に選定され、重点的に「京」を使えるようになりました。そこから生み出される画期的な成果が期待されています。

「心臓シミュレータの将来イメージは、患者一人ひとりの心臓のCTデータを心臓シミュレータに入力し、その人の心臓を再現。心臓病のリスク予測から、最適治療法の導出など、さまざまな解決策を導き出すこと【図4】と、鷲尾さんはその将来像を説明します。

医療シミュレーション実用化への道

心臓シミュレータはすでに幾つかの場面で具体的な研究成果に

つながり始めています。

「たとえば肥大型心筋症という病気があります。この病気の人は遺伝子レベルでミオシンの異常があることがわかっていますが、それがどのように病気と関連するのかが不明でした。そこで心臓シミュレータでミオシンの動きからシミュレーションすることによって発症のメカニズムの解明に挑戦しています」。

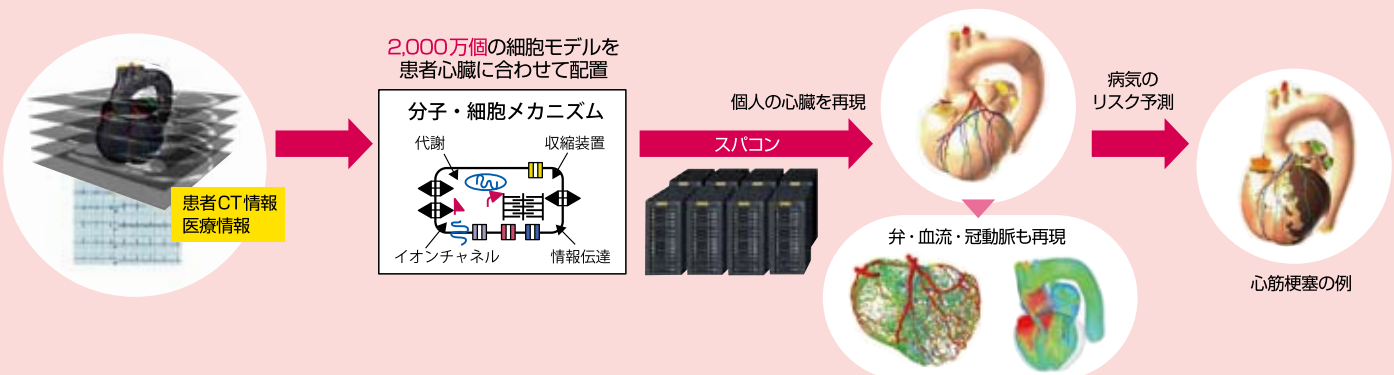
また不整脈の人が突然死を防ぐために利用する装置として「植え込み型除細動装置(ICD)^{※4}」があります。電極を心臓のどこに埋め込んだら最適なのか、また最適電圧は何ボルトのかなど決定するための研究も同僚の岡田講師^{※5}を中心にすすんでいます。

「さらに将来的には、心臓病の薬の効果をシミュレーションすることで、新薬の開発にも活用したい」と、鷲尾さんは夢を膨らませます。

- ※1 UT-Heart：東京大学が富士通(株)と共同で開発している心臓シミュレータの名称。UTはUniversity of Tokyoの意。東京大学久田・杉浦研究室のサイトで心臓シミュレータの動きを見ることができる。
<http://www.sml.k.u-tokyo.ac.jp/index.html>
- ※2 ミオシンヘッド：ミオシン分子の先端部。これがアクチン分子と結合して一定の角度に動き、運動が発生する。
- ※3 肥大型心筋症：主に心筋肥大による左心室の拡張障害。原因としてミオシンに関わる遺伝子異常が報告されている。
- ※4 植え込み型除細動装置(ICD)：体内植え込み型の除細動装置。心臓の異常を自動的に検知し、大きな電流を流すことによって心臓を正常な動きに戻す。
- ※5 岡田 純一 東京大学大学院新領域創成科学研究科 特任講師。心臓シミュレータの医療への実用化に関する研究を行っている。

図4 心臓シミュレータの活用イメージ

近い将来、患者さんの心電図、超音波エコー、MRI、CT、血液検査などのデータをもとにその患者さんのバーチャル心臓を作成し、様々なシミュレーションを行い、病気のリスクの予測や、最適な治療法を選択することが可能になります。

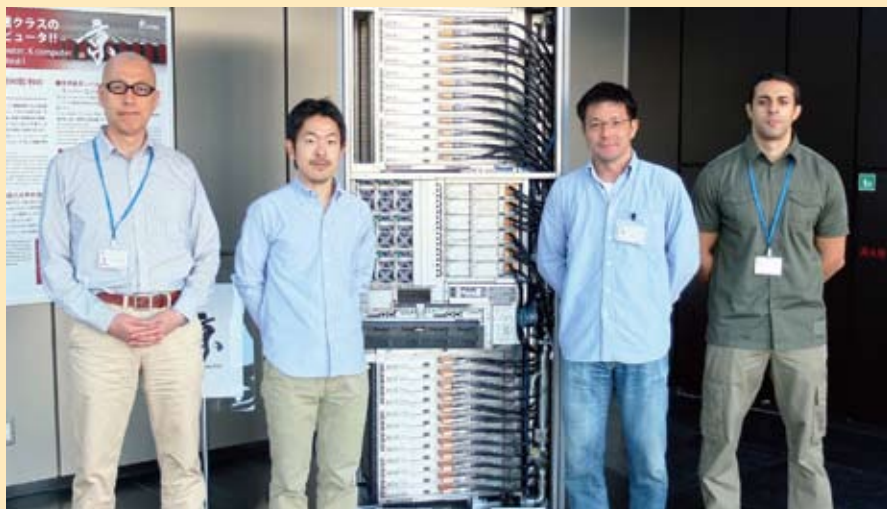


● プログラム
● 構成モデル
● 研究チーム

当研究チームでは主に「京」の大規模なデータストレージを活用するためのソフトウェアを開発しています。

普通のパソコンに搭載されているハードディスクの数千倍にもなる「京」の大規模なストレージには「京」を使ったシミュレーションの結果など、非常に多くの巨大なデータが日々生成されています。コンピュータを使ったシミュレーションは計算をするだけでなく、その計算結果であるデータを専門家が解析することによって初めて意味のあるものになります。これだけ巨大なスパコンによってシミュレーションが非常に高速にできるようになったため、解析しなければならないデータも非常に巨大なものになっています。そのような巨大データを解析するためにはこれまでと同じようにデータを扱っては効率が非常に悪くなってしまいますが、当研究チームでは「京」ならではの特色を生か

丸山 直也チームリーダー（左から2人目）とチームのメンバー



した高速化を実現したソフトウェアを開発しており、これによってシミュレーション結果の解析を効率良く進められるようにすることを目標としています。

また「京」に限らず将来のスーパーコンピュータ実現に向けた様々な基礎的および応用的研究も計算科学研究機構内外の共同研究者とともに進めています。スーパーコンピュータはこれまで10年で1000倍という

非常に早いスピードで発展してきています。一方でこれまでの発展を支えてきた様々な技術が限界に近づいてきており、これまで以上に技術革新が必要とされています。当研究チームでも将来のスーパーコンピュータの実現につながるような研究開発を推進しています。

（丸山 直也）

*データストレージ：コンピュータ内でデータやプログラムを記憶する装置

Research
Teams
研究チーム紹介

メンバーからのメッセージムービーをホームページ版「計算科学の世界」で公開中！
<http://www.aics.riken.jp/newsletter/>

● プロセッサ
● 研究チーム

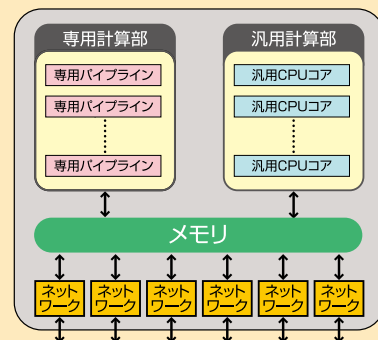
当チームでは、「京」のような高性能な計算システムを支えるカギとなる要素の一つであるプロセッサ（演算装置）の研究を行っています。また、「京」のプロセッサには、高速な計算に向けた特別な機能が入っています。「京」から性能を十分に引き出すためには、プロセッサの構造を熟知していることが必要です。これらの知識を活かして、「京」の上で動くアプリケーションの高性能化に貢献します。



泰地 真弘人チームリーダー（写真左）とチームのメンバー

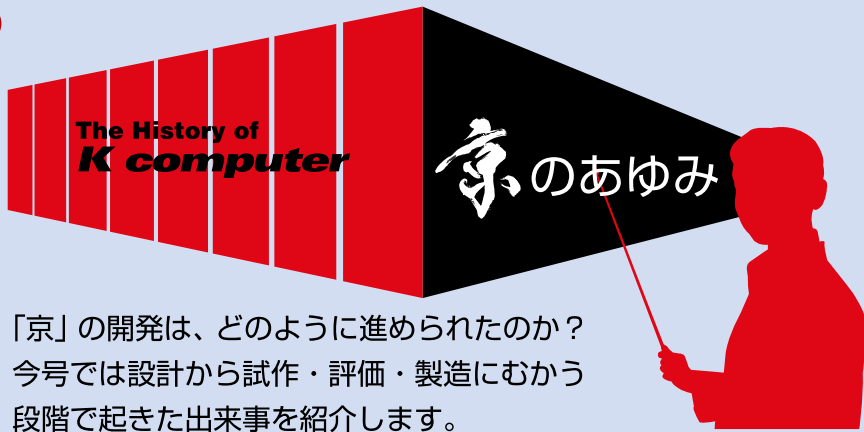
現代の半導体集積回路(LSI)では、一つのLSIに数十億個のトランジスタを詰め込むことが可能になっています。これらを全て計算に用いれば、理論的には数千回の計算を同時に行うことができます。しかし、実際のアプリケーションでは、数千個の演算器を並べたとしても同時に使うのは難しく、トランジスタ全てを計算に使うわけにはいきません。実際のプロセッサはこういったバランスを考えて性能を引き出せるように作られており、例えば「京」のプロセッサSPARC64 VIIIfxでは、64回の計算を同時に行える程度です。これをさらに向上させるためには、データを動かすための半導体回路の電力、時間、面積を下げていくことが重要です。当チームでは、例えばタンパク質の動力学シミュレーションなどの限られた応用分野に限定することでこうした問題を解決し、トランジスタをなるべく多くを計算に割り当てて性能の限界に挑戦するための技術開発を行っています。特に、今後はこれまでコンピュータ上に別々の部品として搭載されていたネット

■ 特定用途を加速するためのプロセッサの構成例。1つのLSI上にこれらの部品を搭載する。



ワーク、メモリ、演算装置などを一つのLSIに統合したシステムオンチップ(SoC)技術が高性能化のために重要です(図)。現在、理化学研究所生命システム研究センターで開発を進めている分子動力学計算専用計算機MDGRAPE-4の開発にも協力しており、その成果を基盤技術として展開していきます。これにより、コンパクト・安価でありながら「京」のような計算機でもできないような計算を実現していくことが目標です。

（泰地 真弘人）



「京」の開発は、どのように進められたのか？
今号では設計から試作・評価・製造にむかう
段階で起きた出来事を紹介します。

中間評価

設計から製造に移行する節目となる2009年4月から7月にかけて、文部科学省による「京」に関するプロジェクトの中間評価が実施されました。ここでは、プロジェクト発足時の目標であった

・ LINPACK で 10 ペタフロップスを達成する (2011年6月のスーパーコンピュータサイトTOP500^{※1} でランキング第1位を奪取)。

・ HPC チャレンジ賞^{※2} 4項目において最高性能を達成する。

が実現できるかどうかを確認されました。

前号でお話したように、「京」はスカラ部とベクトル部から構成される複合システムとして設計されていましたが、この中間評価では目標達成が困難であること、複合システムとして性能が十分でないことが指摘されました。これを受け、我々は最適なシステム構成の検討を始めました。

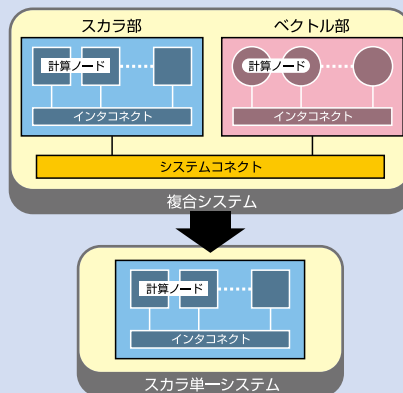
その矢先……

NEC・日立チームの撤退と設計変更

ベクトル部を担当していた NEC が、世界的な経済不況の影響を受け、本プロジェクトからの撤退を表明したのです (これに伴い NEC と共にベクトル部の開発を担当していた日立も撤退することになりました)。我々は、中間評価の指摘も踏まえてシステムの再検討を行い、スカラ部のみでも目標性能が達成できると考えました。そして、

複合システム構成からスカラ単一のシステム構成への変更を決めました。

■ 複合システムからスカラ単一システムへ



- 計算ノード：ここでは、独立した計算機システム。(計算ノードの一つ一つが計算機として動く。)
- インタコネク：計算ノードをつなぐネットワーク
- システム・コネク：システムをつなぐネットワーク

「2位じゃダメなんですか？」

2009年11月に行われた行政刷新会議の事業仕分けにおいて、「京」プロジェクトは「予算計上見送りに近い縮減 (事実上の凍結)」

と判定されました。その後、パブリックコメント等を経て、利用者側の視点に立つものとしてプロジェクトの見直しが行われた結果、「京」の開発が継続されることとなりました。新たに見直されたプロジェクトでは、

- ・ 利用者の視点に立ったスーパーコンピュータ開発を行う。
- ・ 全国のスーパーコンピュータを相互に接続することにより効率的なスーパーコンピュータ利用を推進する (革新的ハイパフォーマンス・コンピューティング・インフラの構築)。

が大きな柱となりました。

製造～搬入開始

2009年12月、システム製作を担当している富士通 (株) では、実機の約1000分の1規模のシステムを試作し、量産に向けてさまざまなテストを実施しました。そこで想定通りの性能が出ていることが確認され、2010年度から「京」の量産が開始されました。そして、2010年9月29日、ついに最初の筐体が計算科学研究機構に搬入されました (写真)。

(運用技術部門 システム運転技術チーム 村井 均)

※1 TOP500：巨大な連立一次方程式を解く速度を測定する「LINPACK」というプログラムの結果をランキングするもの。毎年2回 (6月・11月) に公表されている。2011年6月、「京」は第1位を獲得した。

(計算科学の世界 no.1 京のあゆみ番外編)

※2 HPC チャレンジ賞：スパコンの性能を、4つの異なる視点から評価するもの。2012年11月、「京」は4項目すべてで最高性能を達成した。(計算科学の世界 no.2 京のあゆみ番外編2)



最初に搬入された筐体

