

ペタコンピューティングのユニバース (森羅万象)

戎崎 俊一

理化学研究所 情報基盤研究部

ebisu@atlas.riken.go.jp

1秒間に 10^{15} 回浮動小数点演算をするような超高速 (PFLOPS) 計算機を自由自在に使えたら何ができるだろうか。このようなペタマシンによって、分子の世界から、宇宙の大規模構造まで宇宙に満ちる森羅万象 (ユニバース) の理解が大きく進む。生体内の反応をつかさどる生体高分子、つまりDNAやRNA、タンパク質、脂質、糖鎖などの分子のダイナミクス、相互の結合の強さなどが明らかにされ、生命原理の解明が大幅に進む。ビッグバンに始まり、次第に冷えてできた物質、それが集まって形成される恒星、それらがさらに集まってできた銀河、その中で作られる超巨大ブラックホール、広大な宇宙の150億年の歴史が、ペタマシンにより明らかになる。

ペタマシンは教育や娯楽の面でも大きな役割を演ずる。物理法則に則って人間の反応速度と同程度のビデオレート (1秒間に30回の更新) でシミュレーションできるからである。人間の反応速度と同程度もしくはそれ以上のスピードでシミュレーションし、仮想現実感技術を使って視覚だけでなく、触覚などを通して脳空間とシミュレーション空間を直接結合する。このような双方向シミュレーションシステムにより、複雑な形状が激しく動く現象の直感的な把握が、飛躍的に容易になる。それは教育法に革命を起こし、高速計算機の娯楽への応用の道を開く。

本稿では、そのようなペタコンピューティングの世界について論ずる。まず、いつ頃どのようにしてそれが実現しそうなかを議論した後で、それを使った分子世界と宇宙世界の解明について述べる。最後に、ペタマシンの教育・娯楽応用への可能性について論ずる。

ペタマシンは実現する

私たちはペタマシンを2006年までに完成したいと思っている。機能を特定用途に限った専用計算機ならばそれが十分に可能である。

私たちは、この10年間超高速専用計算機GRAPE (Gravity Pipe) の開発を進めてきた。もともとは、たくさんの星でできた星団や銀河の衝突や熱的な進化をシミュレーションするために開発された³⁾。これらのシミュレーションでは、星どうしの間に働く重力の計算に最も時間がかかる。というのは、重力は、逆二乗法則に従うので、遠くのたくさんの粒子の影響もすべて考慮しなければならないからである。このような場合は、粒子の位置の情報から、個々の粒子に働く重力を計算して積算する演算器をたくさん並列接続することによってシミュレーションを大幅に加速できる。実際に、重力計算パイプラインをたくさん詰め込んだLSIを並列接続することにより、最初のTFLOPSマシンGRAPE-4が1995年に完成している

(図-1)²⁾。さらには、その後継機として100TFLOPSを超えるピーク速度を目指して、GRAPE-6が東京大学において開発中である。

この方式は、星を原子に、重力を静電力に置き換えても有効だ。重力と静電力は同じ逆二乗則に従っているか

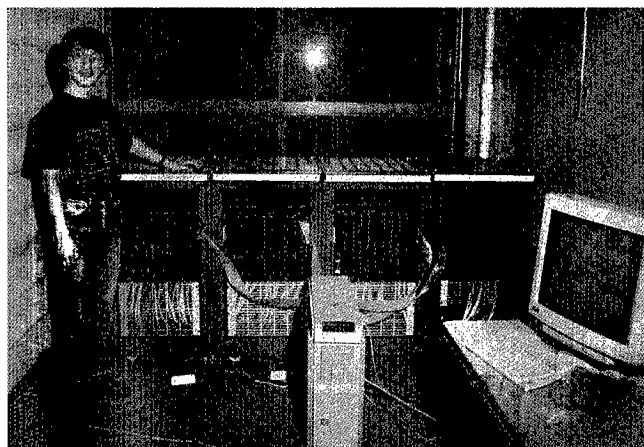


図-1 最初のTFLOPSマシンGRAPE-4と開発の中心となった牧野淳一郎氏

らである。遠方の粒子の影響を計算しなければならないことも同様である。原子を古典的な粒子として取り扱い、その周りの電子による相互作用による化学結合をバネで近似するような計算方法は分子動力学法と呼ばれ、分子のシミュレーションでは広く使われている。筆者らはこの分子動力学シミュレーションを加速する目的で専用計算機の開発に着手し、5年の歳月をかけて Molecular Dynamics Machine (MDM)⁴⁾を完成させた(図-2, 3)。そのピーク速度は、75TFLOPSである。その計算エンジンとなるのは、MDGRAPE-2チップである。これは0.3 μ mルールで設計され、100MHz動作、チップあたり15GFLOPSの速度で、クーロン力や分子間力、重力などの任意の二体力を計算できる。

このように、GRAPE方式の専用計算機に話を限れば、すでに100TFLOPS程度のピーク速度は達成されつつある。0.1 μ m程度の設計ルールの現在使える最新のテクノロジーを使えば、10倍程度の性能向上は十分可能である。単純なスケールリングをしてみると、同じ面積に約4倍の

ロジックを詰め込むことができ、クロックスピードは2倍にできる。これらの因子を合わせると1チップあたり、8倍の性能向上が見込めるからである。また、動作電圧を下げることにより、チップの単位面積あたりの発熱をこれまでと同程度まで抑え込むことも可能だろう。

一方で、二体力の計算という1つのことしかできないのでは困るという意見もある。「計算機たるもの、チューリングマシンのように何でもできなければならぬ」という考え方である。しかし、1つのことができるだけでも、まったくできぬよりはずっとましである。GRAPE型専用計算機は分子のナノメートル(10⁻⁹m)の世界から、宇宙の大規模構造の1億光年(10¹⁷m)を超える世界まで、実に26桁におよぶスケールの現象をカバーする。また、そこに含まれる物理現象は、生体高分子の働き、結晶の破壊(クラック伝播)や核生成、太陽系の起源、銀河形成、超巨大ブラックホール形成、宇宙大規模構造など非常に多様である。

大目にみよう、力しか計算できなくても。

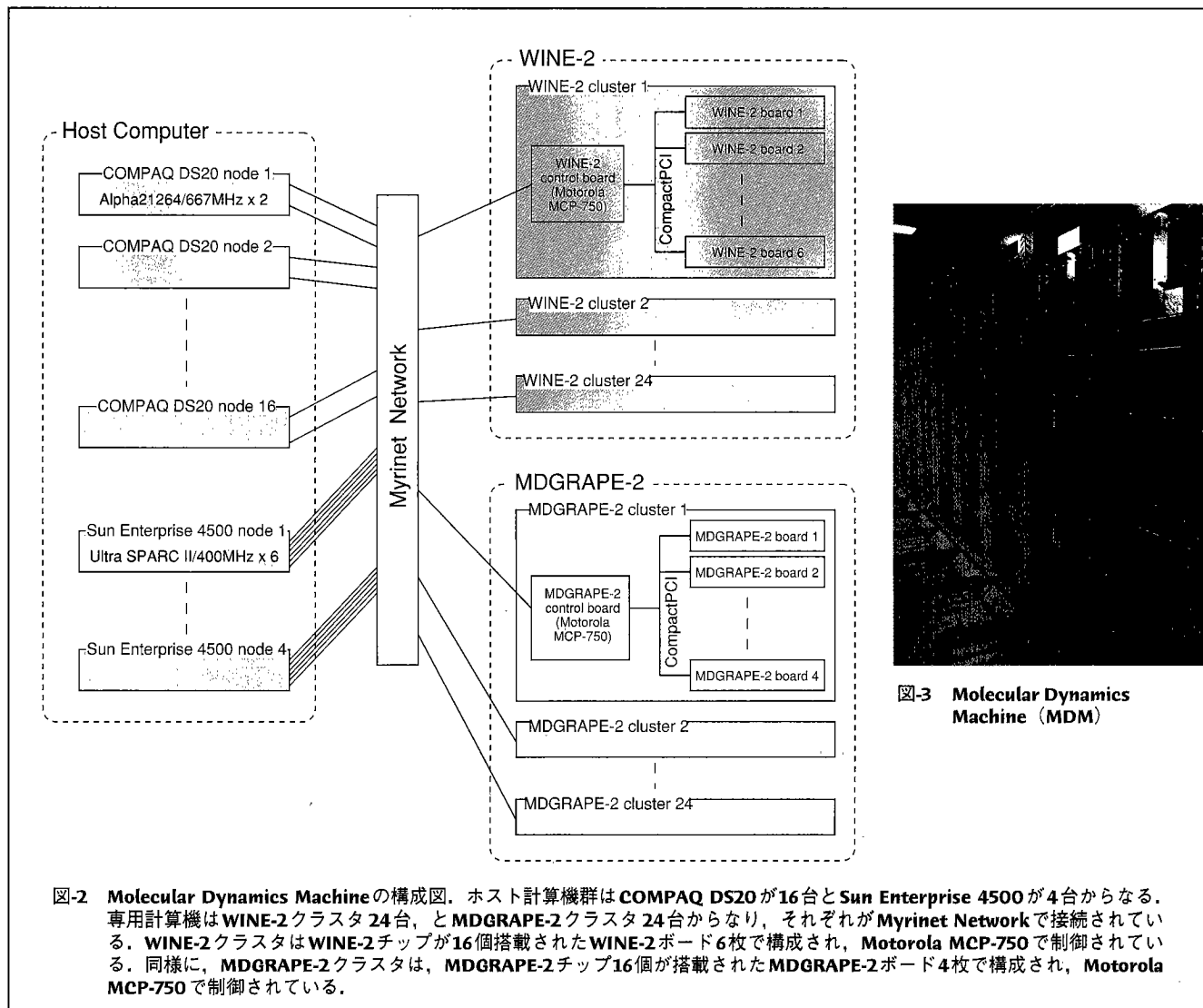


図-3 Molecular Dynamics Machine (MDM)

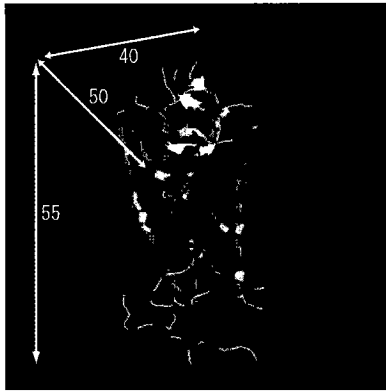


図-4 シグナル受容体の1つのロドプシン。光を感知すると発色団レチナールの異性化とそれに伴うプロトンの取り込みを行う。このような7回膜貫通型膜タンパク質はシグナル受容体によくみられる。タンパク質自身は約**2,800**個の原子からなる。

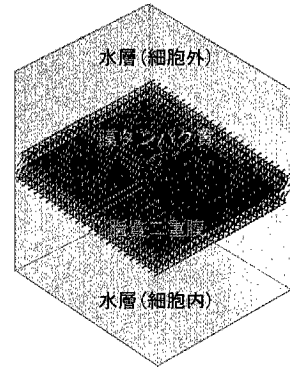


図-5 シグナル受容体（ロドプシンなど）やイオンチャネル（ポリンなど）は細胞膜内に存在する。膜タンパク質が埋め込まれるための細胞膜（脂質二重膜）およびその細胞膜の内外に存在する溶媒水分子を十分に考慮しなければならない。このようなシミュレーションでは**400～800**万個の原子のシミュレーションが必要である。

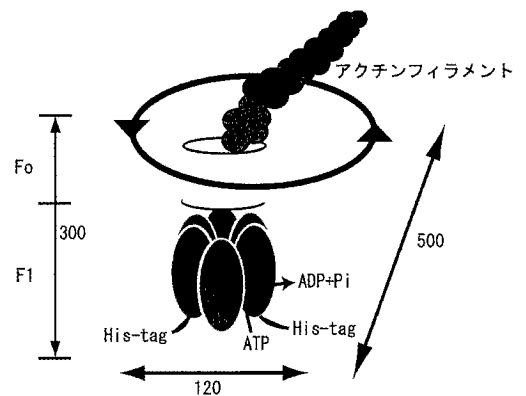
ペタマシンは役に立つ

上に述べたようなペタマシンは何の役に立つだろうか？ もちろん広範な科学の領域で役に立つ。しかし、ここでは誌面の都合で（本当は筆者の時間の都合で）、生体高分子の分子シミュレーションと重力多体シミュレーションで何ができるかを議論してみたい。

●DNAのタンゴ

2001年の春の時点では、生命科学の分野では、モデル生物の全遺伝子暗号が解読されつつあり、そのフロンティアはセントラルドグマの下流部分、すなわち遺伝子の翻訳や調節、タンパク質そのものの働きの解明に移っている。生命科学用の計算はこれまでの、暗号を解読したり一次元のパターンを認識したり、データベースにアクセスするといった情報学的なアプローチが主流であった。しかし、遺伝子に対応するタンパク質のアミノ酸配列が決まり、さらにはタンパク質の基本構造が解明されるこれからは、タンパク質や核酸分子の三次元構造とダイナミクスを追う物理化学的な手法、特に分子動力学シミュレーションが重要となる。

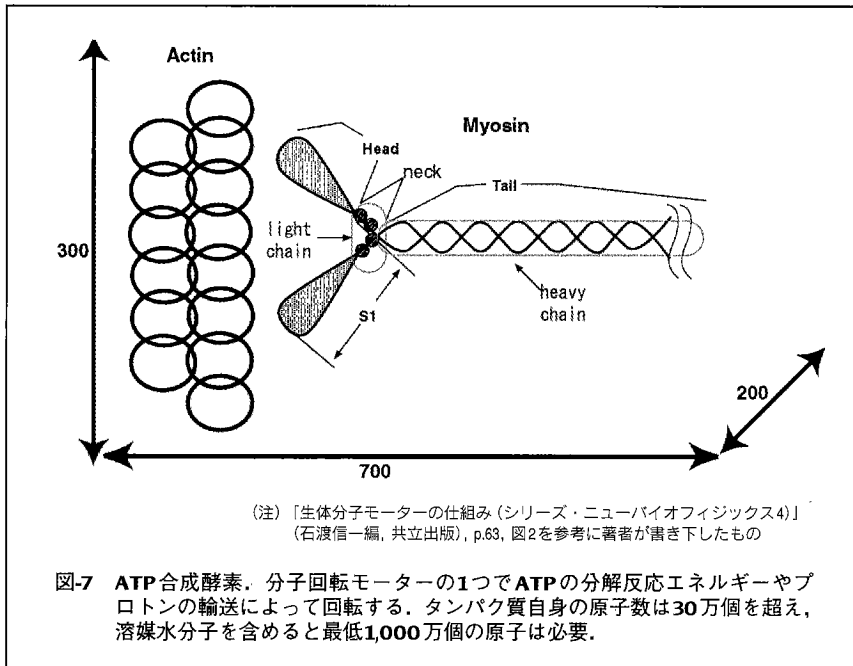
理化学研究所の私たちのグループでは、ピーク演算速度75TFLOPSの分子動力学専用計算機MDM⁴⁾を2001年3月に完成させた(図-2, 3)。現在、主要ソフトウェアの移植やチューニングを進めている。このMDMの主要ターゲットは、原子数が数万程度の液性タンパク質である。このタンパク質の分子の数十倍の数の水分子でこれを取り囲んで水に浸った状態を再現する。全体で100万原子程度を含むシミュレーションとなる。



(注)「生体分子モーターの仕組み(シリーズ・ニューバイオフィジックス4)」(石渡信一編, 共立出版), p.73. 図1を参考に筆者が書き下したもの

図-6 筋肉の収縮などにかかわるタンパク質であるアクター-ミオン複合体。タンパク質自身は約**20**万個の原子からなるが、その周りの水分子を含めると**700**万個の原子数になる。

これに対し、ペタマシンではシグナル伝達などをつかさどる膜タンパク質(図-4, 5)、ミオシンやキネシンのような分子モーター(図-6, 7)、遺伝子の翻訳・調節をつかさどるDNA/RNA/結合タンパク質複合体(図-8)をターゲットにする。これらは脂質二重膜に埋め込まれていたり、繊維状になっているので、液状タンパク質より一桁上の1,000万原子程度のシミュレーションをする必要がある。また、これらの物質は、細胞内におけるタンパク質の動態を網羅的に調べるプロテオーム研究において主要な研究対象である。また、生体のバランスが崩れた状態である病気の状態からの回復を手助けする低分子化合物、つまり薬の直接のターゲットである。



ースエンジニアリングの典型例である.

リバースエンジニアリングのよいところは, 最初から考えるよりずっと簡単であることである. 一方で, その欠点は製品の修理やマイナーな改良には有効だが, まったく新しい製品を生み出すのは難しいことである. そのためには, その製品の動作原理を最初から再構築して理解する過程を経ねばならない. 生物が複雑すぎて手も足も出なかった状況ではリバースエンジニアリングも仕方なかったかもしれない. しかし, その設計図となる遺伝子情報が解読されつつある現在, リバースエンジニアリングに発想をとどめるのは馬鹿げている.

では, リバースエンジニアリングを超えた, 新しい生命科学は何なのだろう

か? 多分それは, 生命というものを頭の中で, もしくは計算機の中で, さらにには実際に再構築することから始まるのではないか. それは, 自ら歩き, 悪に怒り, 友情に涙する鉄腕アトムのようなロボットを作ることかもしれないし, タンパク質分子やDNA分子を1つの素子とした新しい原理の計算システムを作ることかもしれない. DNA分子は電流を流すことが実験で明らかになった¹⁾. 分子モータをスイッチとし, DNA分子を電線として基板の上に配列した, バイオともエレキともいえないような計算システムを夢想することはあながち的外れではあるまい. 最近では, 化学の分野でも微細反応器を使った並列大量処理が重要になっているらしい. ここではガラス基板上にたくさんの小さな反応器を並べた反応器アレイチップは驚くほど計算用のLSIに似ている. 実際, たくさんの化学反応を同時に行うことを, 「パラレルプロセッシング」というらしい. 両者の差は, 言葉同様にほとんど存在しないように思われる. このように考えると, 物理, 化学, 生物が渾然一体となった豊穡な分野がちらりと見える. そこで, 鍵を握るのは物理法則に基づきボトムアップで這い登ってゆく, 大規模な分子動力学シミュレーションである. それを可能にするペタマシンは, まさにこの新しい分野へのドアを開ける鍵である.

そのドア向こうに見えるかもしれない, DNAが踊るタンゴが.

●ブラックホール連星のワルツ

宇宙は約150億年前に起こったビッグバンに始まった. 宇宙が冷えるにつれて, 物質が生まれ, それが集ま

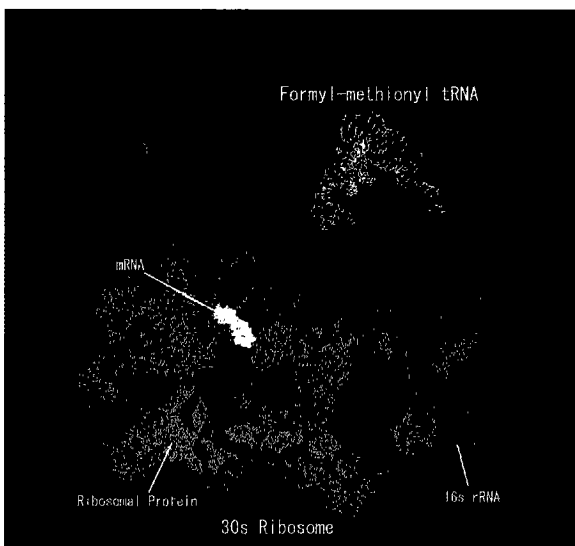


図-8 遺伝情報翻訳 (蛋白タンパク合成) システム. 30s-リボソーム-mRNA複合体とアミノアシル-tRNAのドッキングシミュレーション. タンパク質とDNAの原子数は, 約10万個の原子からなる. ドッキングのための溶媒水分子を含めると1,000万原子程度の大規模な反応システムが必要である.

さてここで話は少し跳ぶ. ある研究会で私は現在の生物学で使っている種々の手法が, 要するに生物という製品を対象とする単なるリバースエンジニアリングであることに気づいて愕然とした. リバースエンジニアリングは, 完成した製品にいろいろな操作を加えたり, 部品を壊してみても, それで何が起るかを解析し, その製品の動作を理解していく技術である. 生物の設計図である遺伝子をあちこち壊して何が起るかを解析するとか, いろいろな刺激を与えてその反応を見るとかということと成立する生物学は, 生物という製品を解析するリバ

って恒星が形成された。それらが集まって銀河ができる。その中で超巨大ブラックホールが生まれる。これらの形成過程を知るのになくはないのが重力多体シミュレーションである。ここでは、ペタマシンで解明できそうな3つの現象、宇宙元素合成、および超巨大ブラックホール形成について手短かに紹介しよう。

現在最も流行している宇宙論シナリオによると、宇宙で最初に形成されたのは、太陽質量の1億倍程度の質量を持つ矮小銀河である。その中で、第一世代の星が作られた。この矮小銀河がたくさん衝突・合体して、普通の銀河となった。生まれただけの矮小銀河で作られた第一世代の星の中で、短寿命の重たい星は、誕生から数百万年で、寿命がつき超新星爆発を起こす。この際、星の内部に蓄えられたヘリウムより重い元素（金属元素という）が星間空間に放出される。これらの元素は、次世代の星の形成に再利用される。このようにして、宇宙の中で金属元素量は次第に増えてくる。このような化学組成比の進化を化学進化と呼ぶ。私たちの身体を構成している、酸素や窒素、地球を形作る珪素や鉄は、宇宙初期には存在せず、星の中心で起こる核融合反応で次第に増えてきた。その記録は、私たちが住む天の川銀河の中に今でも生き延びている長命の暗い星に残っており、それが巨大望遠鏡による分光観測によって明らかにされようとしている。考古学者が地中から出てきた遺物から過去のことを推定するように、何が過去に起こったかをかなり正確に推定できるようになってきた。

ペタマシンの実現により、矮小銀河における最初の星形成を化学進化と力学進化をカップルさせて正確にシミュレーションすることが初めて可能になる。これまでの数万個程度の粒子数では、質量分解能が荒すぎて、超新星爆発によって放出された運動エネルギーの熱化のプロセスの正確な記述が不可能であった。この本質的な過程が、外部パラメータであったので、シミュレーション結果がそれに強く依存するという困った事態になっていたのである。ペタマシンでは、10億個もの粒子を扱って銀河のシミュレーションを実行できる。つまり、この1億太陽質量の矮小銀河のシミュレーションにおいては、質量分解能は0.1太陽質量である。銀河の化学・力学進化シミュレーションにおいて、超新星爆発とその残骸における熱化過程が初めて正確に追いかけるようになる。この段階をもって初めて、予言性があり、観測と対等の比較ができるようになる。

次に、重要なのが銀河中心超巨大ブラックホールの起源である。最近のハッブル宇宙望遠鏡などの観測によると、一人前の銀河はすべて中心に100万太陽質量を超え

る超巨大ブラックホールを持っていることが分かってきた。しかし、これがどのような過程で作られるのかまったくの謎であった。最近、筆者を中心に新しい形成シナリオが提案されている。それは二段階からなる。まずその第一段階では、爆発的星形成で作られた星の数密度が高い星団において、重い星が次々と合体を繰り返す。太陽の数百倍から1,000倍くらいの星が作られる（図-9）。それが重力崩壊して中間質量ブラックホールができる。第二段階は、この中間質量ブラックホール付きの星団が、銀河の中心に落下することにより始まる。こうして銀河中心付近に運ばれた中間質量ブラックホールは、さらに中心に落下して、ブラックホール同士で連星系を作る。それは、周りの星を弾き飛ばしながら、次第に近づき最後には合体して1つになる。このような過程が1,000回くらい起こって、100万太陽質量を超える超巨大ブラックホールが作られた。

ペタマシンは100万個くらいの粒子の重力散乱によるエネルギー緩和過程を計算する能力を持つ。これにより、星団の銀河中心への落下と潮汐力による分解、それに引き続くブラックホール連星の形成、両者の合体に至る道筋のシミュレーションを実行できる。銀河中心のブラックホール連星は、お互いの周りを回りつつ、周りの星との相互作用により複雑な運動を示すはずだ。

君は、ブラックホール連星のワルツを見たくないか？

ペタマシンは楽しい

なぜ、人間、特に若者はビデオゲームに夢中になってしまうのだろうか。答えは単純である。自分が行った行為に対する反応がすぐ返ってくるからである。人間は双方向的な相互作用があるとき特に楽しく、夢中になってしまう。スポーツや囲碁や将棋などの対戦ゲームも双方向性を持つから楽しい。逆に、一方的な講演やテレビはよっぽどうまく構成されてないとすぐ大いびきをかいて寝てしまう（少なくとも私は）。

今までの数値シミュレーションは、ジョブを投げて結果を数時間待つ。その後で、やはり数時間以上かけてゆっくり可視化して結果を見るということが多かった。これではいかにもまだるっこしい。計算している端から可視化し、その結果を見て、その場でパラメータを動かす。欲をいえば、計算空間に自分の腕を突っ込んで、そのシミュレーションに直接介入したい。初期条件の設定もいちいち数字を通して入れるのは、まるで、靴の上から足を搔くようなものではないか。何とか、鉄のパネルとシ



図-9 爆発する銀河 M82. この中で中間質量ブラックホールが作られている。それはやがて中心に落ちて合体し、超巨大ブラックホールとなる (画像提供: 国立天文台広報普及室。
<http://www.nao.ac.jp/pio/Messiers/m82rgb.jpg>).

リコンの基板を突き破り、計算空間に直接手をつつめないだろうか？

実は、ベタフロップスの計算速度があれば、100万粒子ぐらいの系のシミュレーションがビデオレート (1秒間に30回更新) で、つまり、人間にとって違和感がないスピードで進行する。なぜ、テレビゲームがあんなに面白いのか？ それは、リアルタイムで自分が行った操作に対する反応が返ってくるからである。でも、今は悲しいかな計算量が確保できないので、それらしいモデルに反応させているに過ぎない。だが、それでは物理的な根拠が薄弱なので、遊びにしか使えない。しかし、物理法則に則った数値シミュレーションがリアルタイムで人間についてくるようになったら、バーチャルリアリティ技術で、脳空間とシミュレーション空間を直接つなぎ遊び以外の目的に適用できるようになる。

たとえば、原子を押ししたり、引いたり、熱運動を体感したりすることができる。また、薬の候補となる分子を反応中心近くに挿入して、両者の間の親和性を調べたり、親和性の向上のための指針を体感できる。あるタンパク質の側鎖が α 螺旋になりそうだったら、そのように手で巻いてやることもできる。鎖の強さを順々に手で曲げながら確かめて、曲がりやすそうな場所を調べれば、 β ターンの場所も発見しやすいかもしれない。そのような人間とシミュレータ (物理法則に則った) の協調により、三次元構造予測を実現する早道ではないかと私は思う。もちろん、同じことを星団や銀河でできる。分子の世界で遊び飽きたら、宇宙に飛び出して、銀河にブラックホールを投げつけてもいい。考えただけでも楽しい。楽し

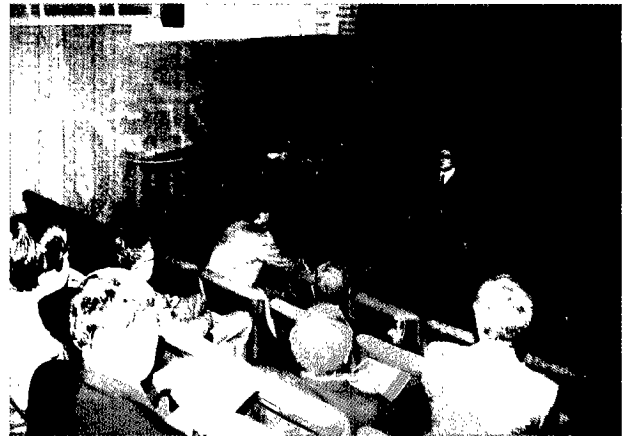


図-10 理化学研究所情報基盤研究棟1階の4Dシアター。シミュレーション結果を任意の時間で、任意の角度から、自由自在に立体視して見ることができる。

いときに人間の創造性は最も高くなる。

ベタマシンを使った双方向シミュレーションシステムは、教育や娯楽にも大きなインパクトを与える。私たちは北の丸公園にある科学技術館で毎週土曜日の午後、双方向性を重視した科学ライブショーをこの5年間開催している。リアルタイムシミュレーションで銀河がぶつかり、地球が舞い、分子が踊る。その前で、私のような科学者がその意味をお客さんに説明するという趣向である。これらの体験で、私は人間にとって双方向性が最も大事であることを認識した。理化学研究所の情報基盤棟の1階には、シミュレーション結果を任意の時間で、任意の角度から、自由自在に立体視してみる4Dシアターを作った (図-10)。公開日などは、絶大なる人気を博している。これらは、前面の平面スクリーンに投影する方式のものである。

この次は、シミュレーション画像をプラネタリウムドーム全体に投影する仕組みを開発したい。視野のすべてを使うので、没入感も臨場感もさらに格段によくなるはずだ。それをベタマシンと直結して、シミュレーション空間を自由自在に動き回る。ドームいっぱい広がって繰り広げられるDNAのタンゴやブラックホール連星のワルツを見てみたい。

参考文献

- 1) Porah, D., Bezryadin, A., de Vries, S. and Dekker, C.: Direct Measurement of Electrical Transport through DNA Molecules, *Nature*, 403, 635 (2000).
- 2) Makino, J., Tajji, M., Ebisuzaki, T. and Sugimoto, D.: GRAPE-4: A Massively Parallel Special-Purpose Computer for Collisional N-Body Simulations, *Astrophys. J.*, 480, 432 (1997).
- 3) Sugimoto, D., Chikada, Y., Makino, J., Ito, T., Ebisuzaki, T. and Umemura, M.: A Special-Purpose Computer for Gravitational Many-Body Problems, *Nature*, 345, 33 (1990).
- 4) Narumi, T., Susukita, R., Ebisuzaki, T., McNiven, G. and Elmegreen, B.: Molecular Dynamics Machine: Special-Purpose Computer for Molecular Dynamics Simulations, *Molecular Simulation*, Vol.21, pp.401-415 (1999).

(平成 13年 4月 26日 受付)