

生命科学・工学での利用に向けた 高性能計算環境の充実のために

理化学研究所 次世代計算科学研究プログラム
生命体基盤ソフトウェア開発・高度化チームTL
(GSCシステム情報生物学研究グループDPD)
泰地 真弘人

生命体基盤ソフトウェア開発・高度化チーム

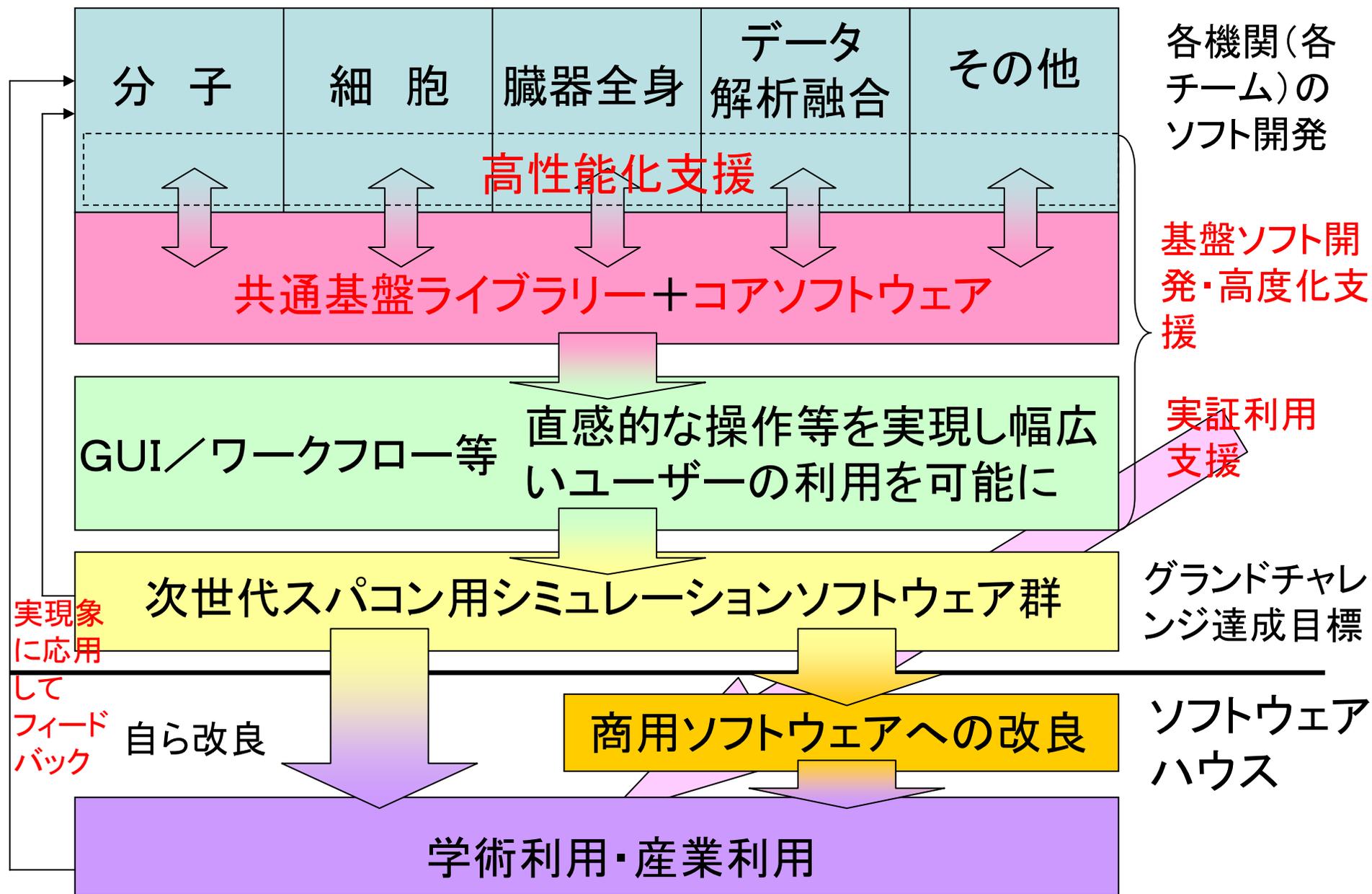
平成19年11月より活動開始

主な機能は2つ

- アプリケーションの高性能化
- 産業利用に対応するための基盤整備

これらにつき、高性能計算・数理工学の立場から寄与する

「生命体基盤ソフトウェア開発・高度化チーム」の位置付け



高性能計算の中長期的展望

大規模並列化

($> 10^5$)

高並列プロセッサとの複合化

(GPUなど)

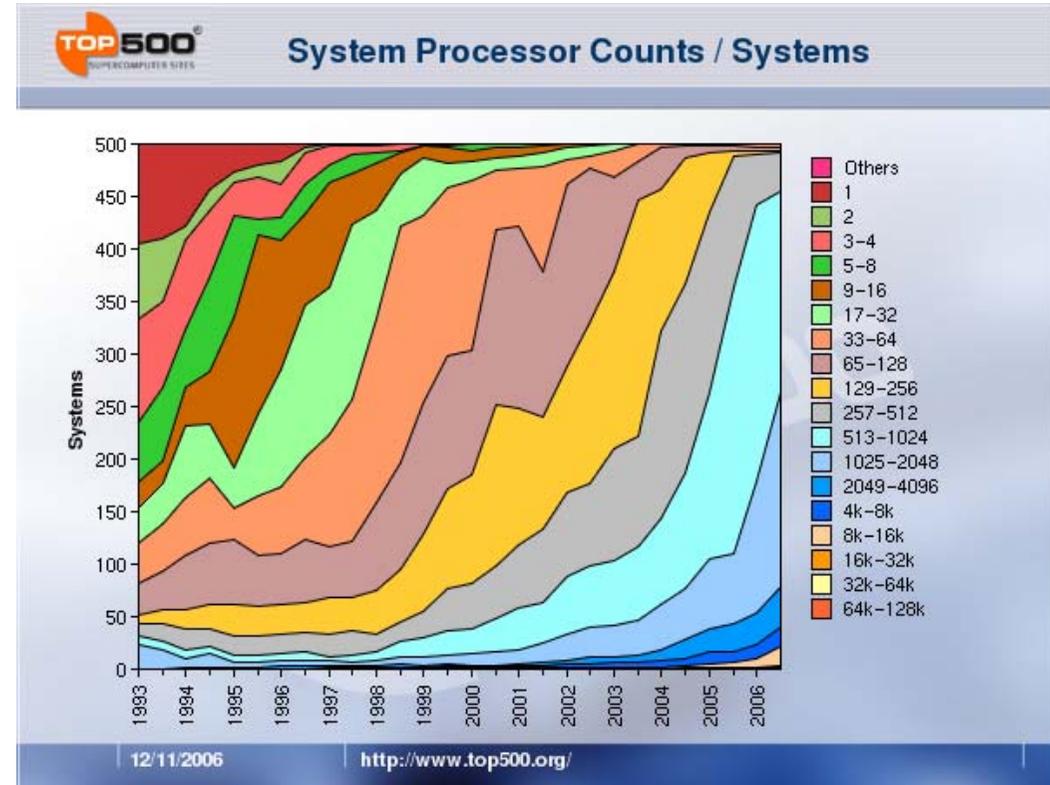


プログラミング上の困難増大



ミドルウェア的な中間層の
必要性増大

- コアソフトウェアの開発
- 共通基盤ライブラリの開発



アプリケーションの高性能化

アプリケーションの高性能化のため、以下の課題に取り組む

- 各アプリケーションの大規模並列化への対応
- コアソフトウェアの開発
- 共通基盤ライブラリの開発
- 可視化ソフトウェアの開発

コアソフトウェア開発

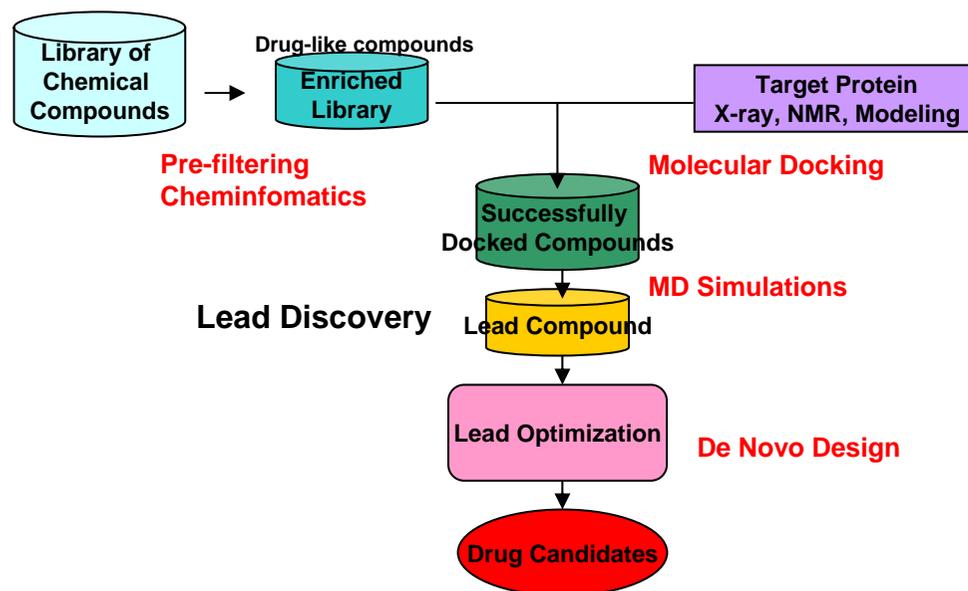
- 分子動力学計算と分子軌道法について、大規模並列化に対応するソフトウェア開発を行う
- コア部分のみを、再利用可能な形で開発する
- ハードウェアの相違を吸収しやすいライブラリ開発
- 新規アルゴリズム等は分子スケールで開発
- 今後の高性能計算：
 メガコア以上に対応する必要がある
- 例えば分子動力学計算では、粒子数とコア数が同等程度でも性能を出せるようなソフトウェアが必要
高性能計算からの寄与が必須

共通基盤ライブラリ

- 特にスケール間にまたがる連成シミュレーションの場合、ソフトウェアをコンポーネント化し、それらを結合して使えるようなソフトウェアの開発・実行環境が必要
- コンポーネント化された各種ソルバ等のライブラリ、コンポーネント間での標準化されたデータの受け渡し・I/Oなど
- 高並列処理への対応、並列処理と計算処理の分離
- 可視化を含む
- SPHERE(理研VCAD:小野TL)を基に開発

次世代スーパーコンピューターの 産業・実応用を促進するには

- 例えば、創薬支援を考えた場合
 - シミュレーション以外の部分も重要
 - ケモインフォマティクスまで含め、商用を含む複数ソフトウェアを組み合わせてパイプライン化
(化合物の絞込み・立体構造・物性予測)



基盤ソフトウェアチームの計画

19年度～21年度

- ・コアソフトウェア、共通基盤ライブラリー（データ分析・可視化・高並化支援ツール）、ワークフローツールの開発
- ・産業利用に向けた調査・試験的开发

共通基盤ライブラリーの開発に注力（高並列化ノウハウの蓄積）



経験（ノウハウ）を活かした各チームの高速化支援～産業応用支援

22年度～24年度

- ・各研究チームが開発したシミュレーションソフトウェアの高度化
- ・ソフトウェアのコンポーネント化
- ・学術利用・産業利用等の実証利用支援

今年度・今後の具体的開発内容

- 全体で開発するもの
 - 高並列MDソフトウェア
 - 高並列対応量子化学計算コア
 - 創薬パイプライン
 - 並列クラスライブラリ
 - 汎用・流体系向け・粒子系向け
 - ソルバ
 - フレームワーク
 - 可視化
- 平成19年度予定
 - 高並列MDソフトウェア: 既存コードの解析
 - 創薬パイプライン: ソフトウェアの導入と評価
 - 並列流体ソルバの基本開発
 - 可視化ソフトウェアの基本開発