

# SCLS計算機システムのご紹介と利用公募のご案内

理化学研究所

HPCI計算生命科学推進プログラム

副プログラムディレクタ 江口至洋

yeguchi@riken.jp

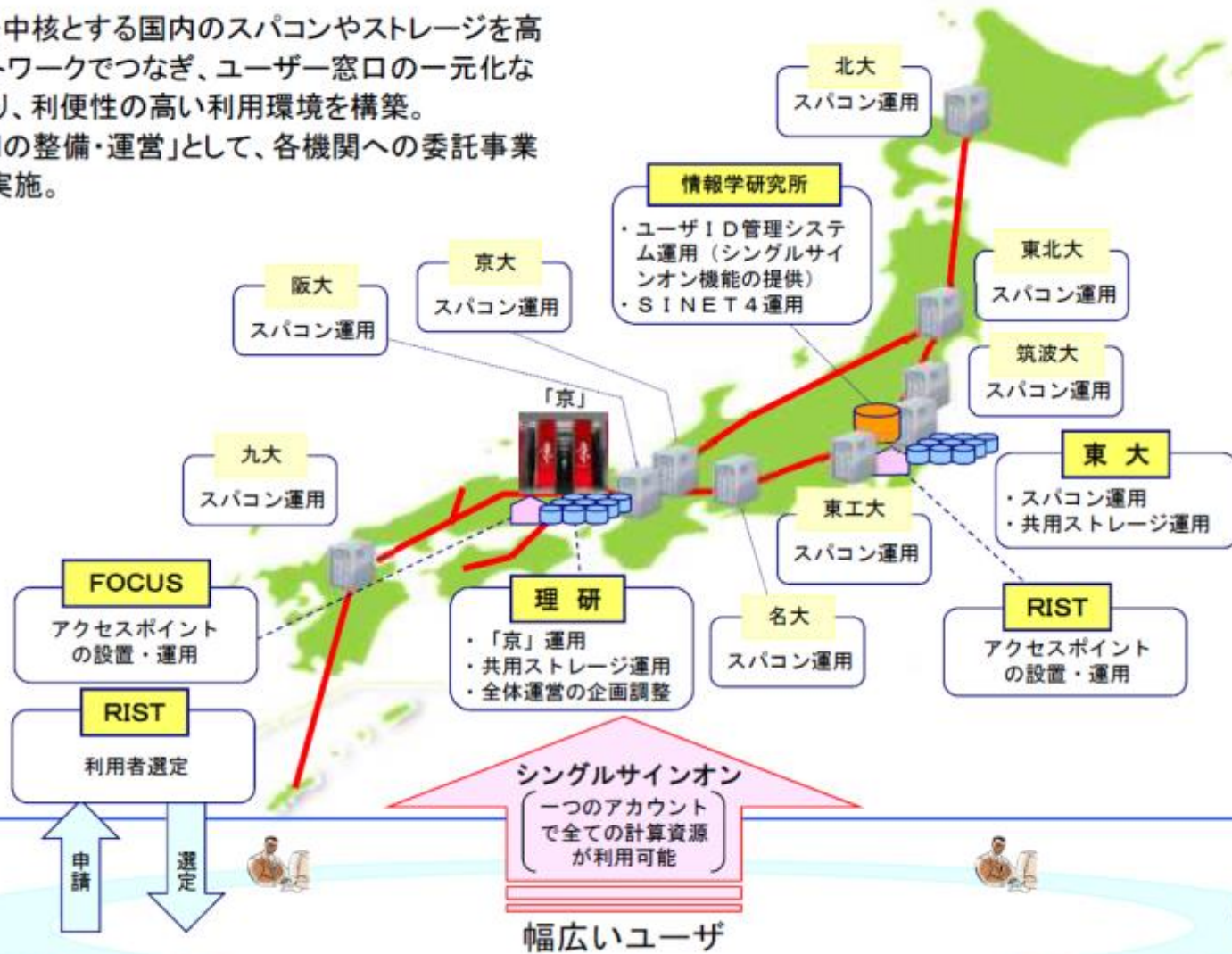
# 今日お話しすること

- はじめに -HPCIについて-
- 戦略分野1のご紹介
- 生命科学におけるHPCIへのご勧誘
- SCLS計算機システムへのご勧誘

# はじめに -HPCIについて-

# HPCIの枠組み

- 「京」を中核とする国内のスパコンやストレージを高速ネットワークでつなぎ、ユーザー窓口の一元化などにより、利便性の高い利用環境を構築。
- 「HPCIの整備・運営」として、各機関への委託事業により実施。



# HPCI事業の概要

## 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 (HPCI) の構築

資料 6

平成25年度予算案 : 16,416百万円  
(平成24年度予算額 : 19,941百万円)

### 事業概要

今後とも我が国が科学技術・学術研究、産業、医・薬など広汎な分野で世界をリードし続けるため、スーパーコンピュータ「京」を中核とし、多様な利用者のニーズに応える革新的な計算環境(HPCI: 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)を構築するとともに、この利用を推進し、地震・津波の被害軽減や、グリーン・ライフイノベーション等に貢献。

### (1) HPC(ハイパフォーマンス・コンピューティング)基盤の運用 13,802百万円 (16,866百万円)

(i) 「京」の運営 11,484百万円 (15,009百万円) ※H24年度は開港に係る経費含む

(内訳) ・「京」の運用等経費 10,587百万円 (9,653百万円)  
・特定高速電子計算機施設利用促進897百万円 (897百万円)

我が国の高性能計算環境の中核となるスーパーコンピュータ「京」の運用を着実にすすめる。

(ii) HPCIの運営 2,318百万円 (1,856百万円)

多様な利用者のニーズに応じ、我が国の計算資源を最適に活用するとともに、データの共有や共同分析などを可能とするための研究基盤を構築する。平成25年度は、平成24年9月28日に共用開始したHPCIのシステムの着実な運用を行う。また、将来のHPCIのシステムのあり方の調査研究を行う。

### (2) HPCI利用の推進 2,614百万円 (3,075百万円)

(i) HPCI戦略プログラム 2,614百万円 (3,075百万円)

「京」を中核とするHPCIを最大限活用し、①画期的な成果創出、②高度な計算科学技術環境を使いこなせる人材の創出、③最先端計算科学技術研究教育拠点の形成を目指し、戦略機関を中心に下記の戦略分野における「研究開発」及び「計算科学技術推進体制の構築」を推進。

#### <戦略分野>

- 分野1: 予測する生命科学・医療および創薬基盤
- 分野2: 新物質・エネルギー創成
- 分野3: 防災・減災に資する地球変動予測
- 分野4: 次世代ものづくり
- 分野5: 物質と宇宙の起源と構造



### ○スーパーコンピュータ「京」の概要

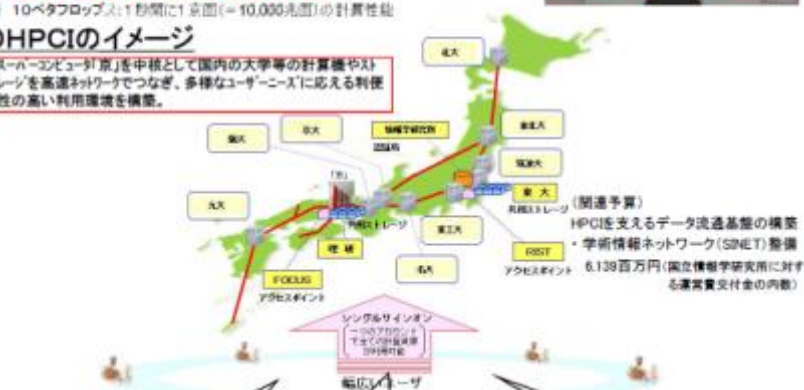
- ◆平成23年11月に性能目標のLINPACK 10ペタフロップス\*達成。平成24年6月システム完成。
- ◆平成23年6月、11月と連続で世界スパコン性能ランキング(TOP500)において1位を獲得。
- ◆平成24年9月28日に共用開始。

\* 10ペタフロップス: 1秒間に1京回 (= 10,000兆回) の計算性能



### ○HPCIのイメージ

スーパーコンピュータ「京」を中核として国内の大学等の計算機やネットワークを高速ネットワークでつなぎ、多様なユーザーニーズに応える利便性の高い利用環境を構築。



最先端の計算環境を利用し、重要課題に対応

<h4>心臓シミュレーション</h4> <p>細胞・組織・臓器を部分ではなく心臓全体をありのままに再現し、心臓病の治療法の検討や薬の効果の評価に貢献</p>	<h4>シミュレーションによる地震津波の被害予測</h4> <p>50m単位(ブロック単位)での予測から地震波下や液状化現象等の影響も加味した10m単位(家単位)の避難生活予測を可能とし、都市整備計画への活用による災害に強い防災計画や余裕的な避難計画の策定等に貢献</p>	<h4>シミュレーションによる創薬開発</h4> <p>新薬の候補物質を絞り込む期間を半減(約2年から約1年)し画期的な新薬の開発に貢献</p>
--	--	--

# HPCI利用公募今後の予定

- **2013年8月中旬**
  - 来年度の課題募集プレアナウンス
- **2013年8月下旬から**
  - 来年度の募集説明会
- **2013年9月下旬から**
  - 来年度の課題募集受付

# 「京」で利用可能なOSS一覧

1	SuperLU	非対称疎行列ソルバー、複素値にも対応
2	UMFPACK	マルチ・フロンタル法を用いた非対称疎行列ソルバー
3	SuperLU_MT	非対称疎行列ソルバー(共有メモリ)、複素値にも対応
4	SuperLU_DIST	非対称疎行列ソルバー(分散メモリ)、複素値にも対応
5	ABINIT	第一原理計算コード(Ver. 5.4.4p)
6	ABINIT	第一原理計算コード(Ver. 5.8.3)
7	METIS	行列やグラフを分割したり、オーダリングしたりするためのライブラリ
8	HDF5	ファイル入出力インターフェイスライブラリ・ソフトウェア
9	NetCDF	ファイル入出力インターフェイスライブラリ・ソフトウェア
10	GROMACS	分子動力学シミュレーション
11	LAMMPS	並列計算機のために設計された古典的な分子動力学シミュレータ
12	GAMESS	原子、分子の量子化学計算をハートリーフォック近似をベースに行なうソフトウェア
13	Frontflow/Red	流体解析ソフトウェア
14	FrontISTR	非線形構造解析ソフトウェア
15	CMAKE	メイクツール
16	gsl	数学ライブラリ
17	ImageMagick	画像処理ツール
18	libjpeg	JPEGの画像操作作用ライブラリ
19	libpng	PNGの画像操作作用ライブラリ
20	Zlib	データの圧縮および伸張を行う
21	Parallel-NetCDF	NetCDFの機能にMPI-IO によるParallel IOを実現

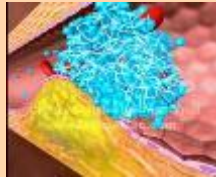
# 戦略分野1のご紹介



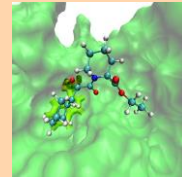
# 「京」で取り組まれている5つの戦略分野

予測する生命科学・  
医療および創薬基盤

## 予測医療と革新的創薬



血栓成長による血管  
閉塞シミュレーション



薬候補のタンパク質への  
結合シミュレーション

## 新物質・エネルギー創成

### 世界に先駆けた次世代デバイスを提唱



原子レベル  
で精密計算

省エネ・  
高速動作



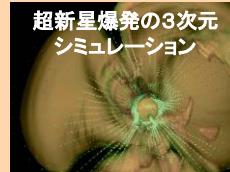
「超高性能」、  
「超低消費電力」



次世代ナノスケールデバイス

## 物質と宇宙の起源と構造

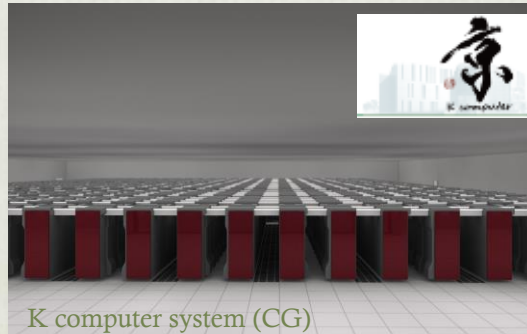
### 大質量星の超新星爆発の解明



超新星爆発の3次元  
シミュレーション



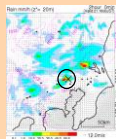
爆発時の密度分布



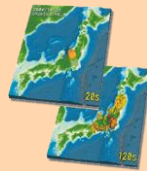
K computer system (CG)

## 防災・減災に資する地球変動予測

### 集中豪雨や地震の予測



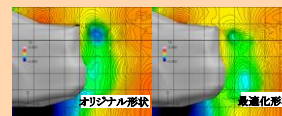
集中豪雨の再現実験



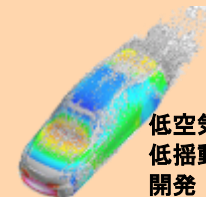
新潟県中越地震による  
強い揺れの広がり

## 次世代ものづくり

### 設計プロセスの革新



車体後部周りの超精緻解析  
による最適形状の究明



低空気抵抗、  
低揺動車の  
開発

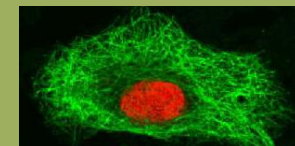
# 戦略分野1の研究課題



## 細胞内分子ダイナミクスのシミュレーション

～細胞環境における分子および細胞スケールシミュレーション～

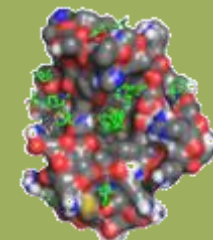
代表：杉田 有治 理化学研究所



## 創薬応用シミュレーション

～革新的な薬の活性予測シミュレーション～

代表：藤谷 秀章 東京大学先端科学技術研究センター



## 予測医療に向けた階層統合シミュレーション

～循環器系および筋骨格系・神経系の階層統合シミュレーション～

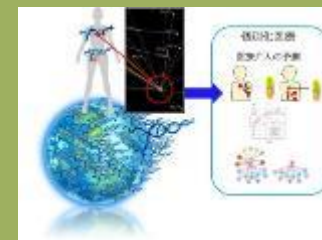
代表：高木 周 東京大学大学院工学系研究科



## 大規模生命データ解析

～生命プログラムとその多様性の理解～

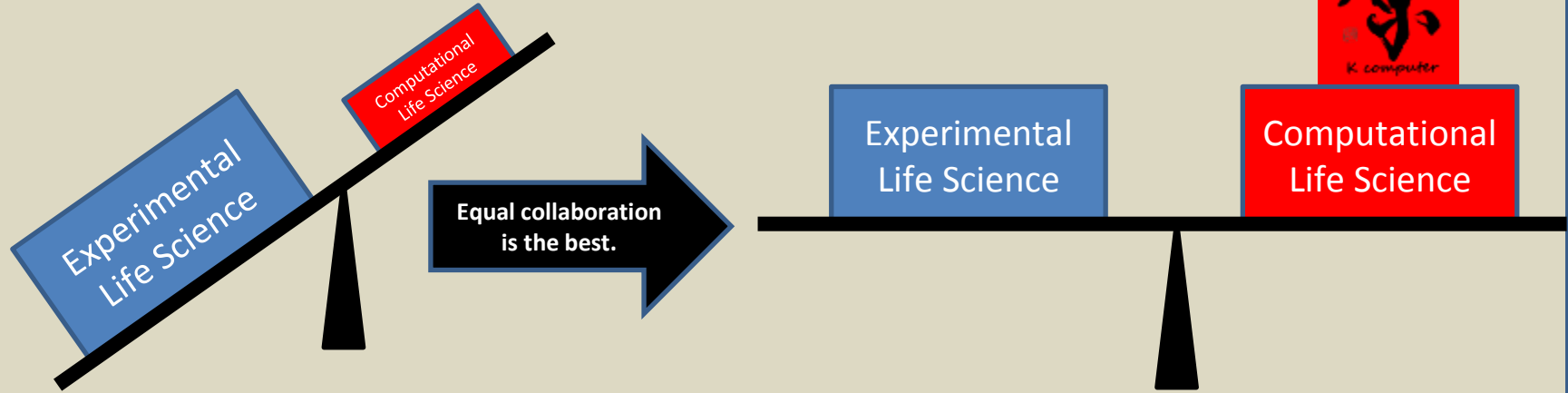
代表：宮野 悟 東京大学医科学研究所



# 生命科学における HPCIへのご勧誘

# 計算生命科学における「京」

The advent of **K computer** has been shifting the balance toward Computational Life Science!



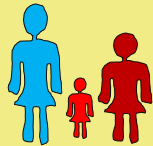
As a result, we will reveal **the design principles of life system**, and will obtain greater **prediction and control ability** of the system.

# 私達の使命

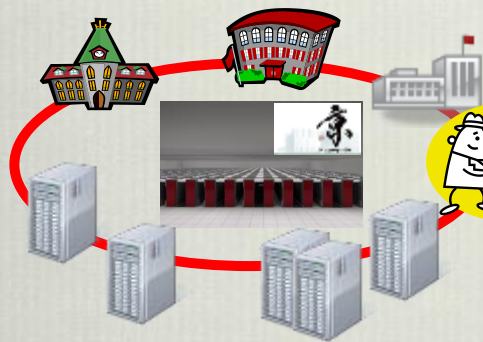
市民(含:高校生、大学生)

産業界

医療従事者



HPCI



戦略プログラム1

高度化推進G  
企画調整G



R&D チーム



戦略プログラム#1

戦略プログラム#2

戦略プログラム#2

生命科学(含:医療、創薬)の研究者コミュニティ



ISLiM: 情報基盤センターと連携して成果の普及を図る!

# 「京」産業利用枠：新薬開発を加速する「京」インシリコ創薬基盤の構築



**申請主体(事務局)：** NPO法人バイオグリッドセンター関西

研究代表 京都大学薬学研究科 奥野恭史

**製薬企業(11社)：**

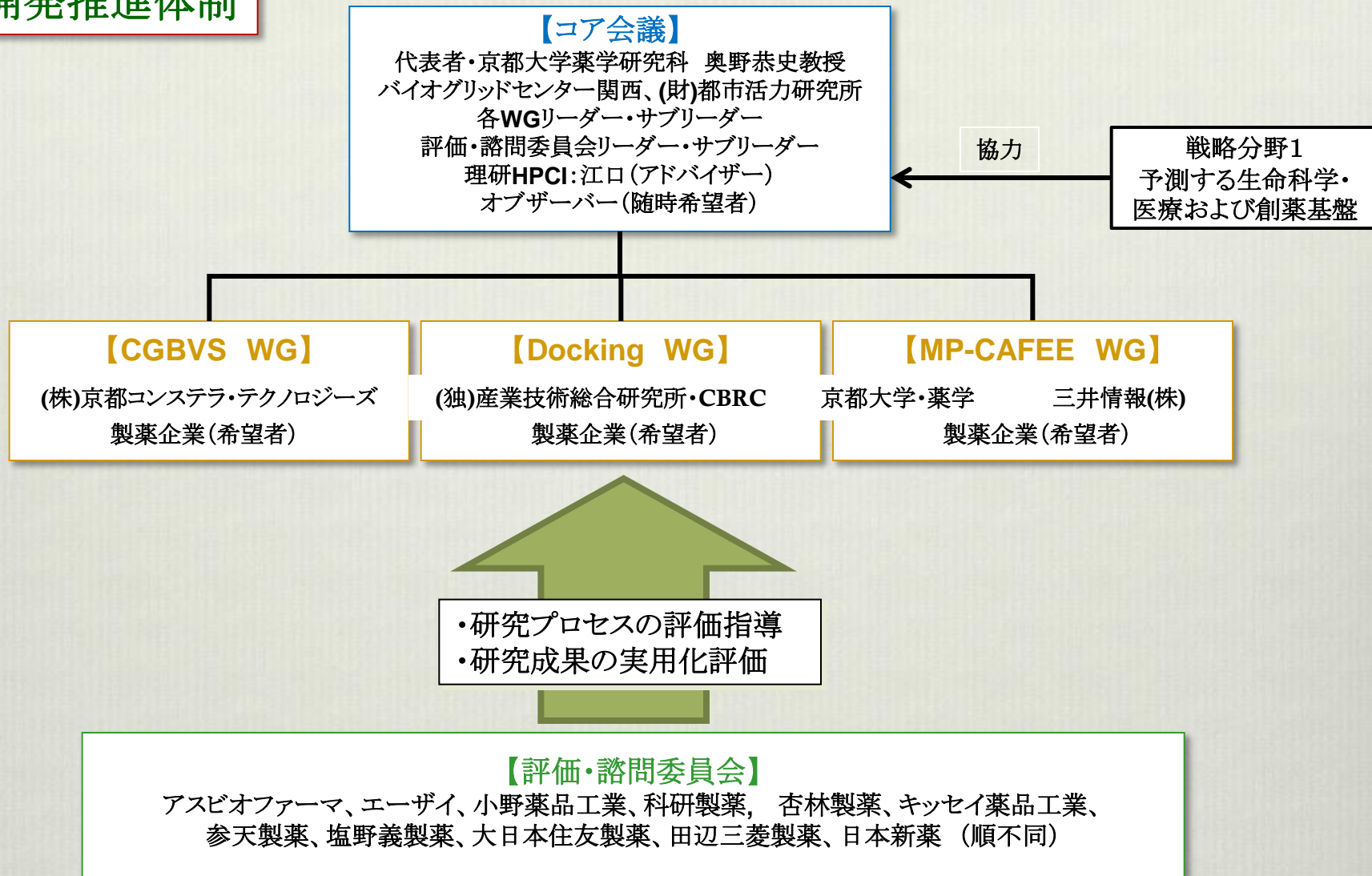
アスピオファーマ, エーザイ, 小野薬品工業, キッセイ薬品工業, 参天製薬, 塩野義製薬,  
大日本住友製薬, 田辺三菱製薬, 日本新薬, 科研製薬, 杏林製薬

**IT企業(2社)：** (株)京都コンステラ・テクノロジーズ, 三井情報(株)

**大学等：** 京都大学大学院薬学研究科, (独)産業技術総合研究所, 理研HPCI計算生命科学推進プログラム

- コンピュータ創薬の根本課題に挑戦
- 製薬会社による現場利用に耐えうる計算フロー(計算精度と計算時間)の構築
- 我が国のコンピュータ創薬の中心拠点形成

# 研究開発推進体制



## 【備考】

- ・ コア会議は、代表者、事務局、各リーダー、サブリーダー、アドバイザー、オブザーバー等で構成し、執行、意思決定を行います。
- ・ 各WGは、具体的な計算実行を行う実務担当者から構成されます。実務を行わない方はオブザーバーとして登録参加できます。
- ・ 評価・諮問委員会は、参加製薬会社の全メンバーから構成されます。
- ・ 各WG、評価・諮問委員会は、選任されたリーダー、サブリーダーを中心に活動を行って頂きます。

# SCLS 計算機システム へのご勧誘



# SCLS計算機システム

		SCLS計算機システム	京コンピュータ
CPU	名前	SPARC64 IXfx	SPARC64 VIIIfx
	理論性能	211 GFLOPS (1.65 GHz)	128 GFLOPS (2GHz)
	コア数	16	8
システム全体	ノード数	48	88,128
	理論性能	10.1 TFLOPS	11.28 PFLOPS
	ノード当たりのメモリ	32GB (全体の1.5TB)	16GB (全体の1.5PB)



スーパーコンピュータ「京」との互換性があります。

# SCLS計算機システムの公募概要(1)

## ➤ 利用目的

- 生命科学者に無料で提供し、計算生命科学を知って頂く
- HPCI、特に「京」への橋渡し役を果たす

## ➤ 利用可能資源

- アカウント数: 研究課題の参加者1名あたり1アカウント
- ディスク容量: 研究課題につき2TB
- 利用可能計算機使用量: 1研究課題あたり200ノード・時間/月。1回のジョブの実行時間の上限は3時間。

# SCLS計算機システムの公募概要(2)

## ➤ 応募資格

- 民間、大学等研究機関の生命科学者、技術者

## ➤ 公募期間と今後の予定

- 電子メールによる応募書類の提出締切り 6月5日(水)
- 郵送での応募書類の提出 6月7日(金)当日消印有効
- 審査結果の連絡(予定) 6月末
- 利用期間 2013年7月1日～2014年3月末日
- 2013年度の公募 7月、10月に予定

詳細はこちらへ → <http://www.kobe.riken.jp/stpr1-life/outreach/sclsuse/application.html>  
またはgoogleで「戦略分野1」と検索



理化学研究所 HPCI計算生命科学推進プログラム  
のみなさんに感謝します