

# スーパーコンピュータ「京」で シミュレーションする生命科学 ～SCLS計算機システムへの期待～

理化学研究所

HPCI計算生命科学推進プログラム

企画調整グループ パブリックアウトリーチ担当

神内 衣里香

(HPCI戦略プログラム 分野1)



# 内容

- 「京」
- 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
  - HPCI戦略プログラム
  - 分野1
  - HPCIシステム利用研究課題公募
- SCLS計算機システム(京互換機)

- 「京」
- 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
  - HPCI戦略プログラム
  - 分野1
  - HPCIシステム利用研究課題公募
- SCLS計算機システム(京互換機)



# 「京」の構造は？

システムラック(筐体: きょうたい)

864台



CPUをつなぐケーブルの総延長: 約1000 km



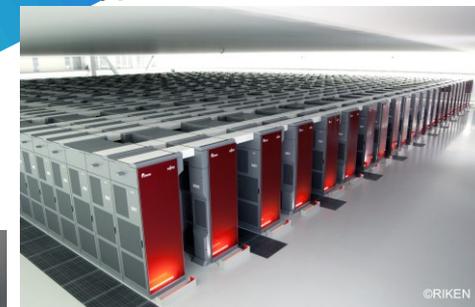
# 「京」のハードウェア構成

システム全体

計算ラック × 864

計算ラック群

計算ラック × 8  
ディスクラック × 2



1京回/秒 = 10ペタフロップス  
1.27TB

計算ラック

システムボード × 24  
IOシステムボード × 6



98.4兆回/秒  
12TB

12.3兆回/秒  
1.5TB

システムボード

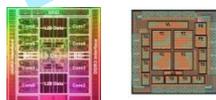
ノード × 4



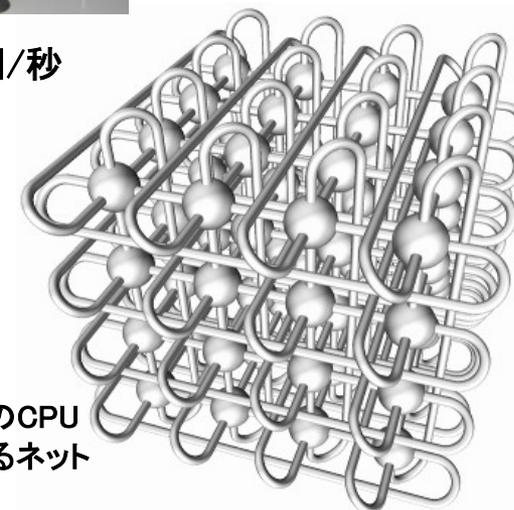
5120億回/秒  
64GB

ノード

CPU × 1  
ICC × 1  
メモリ × 8



演算性能: 1280億回/秒  
メモリ容量: 16GB



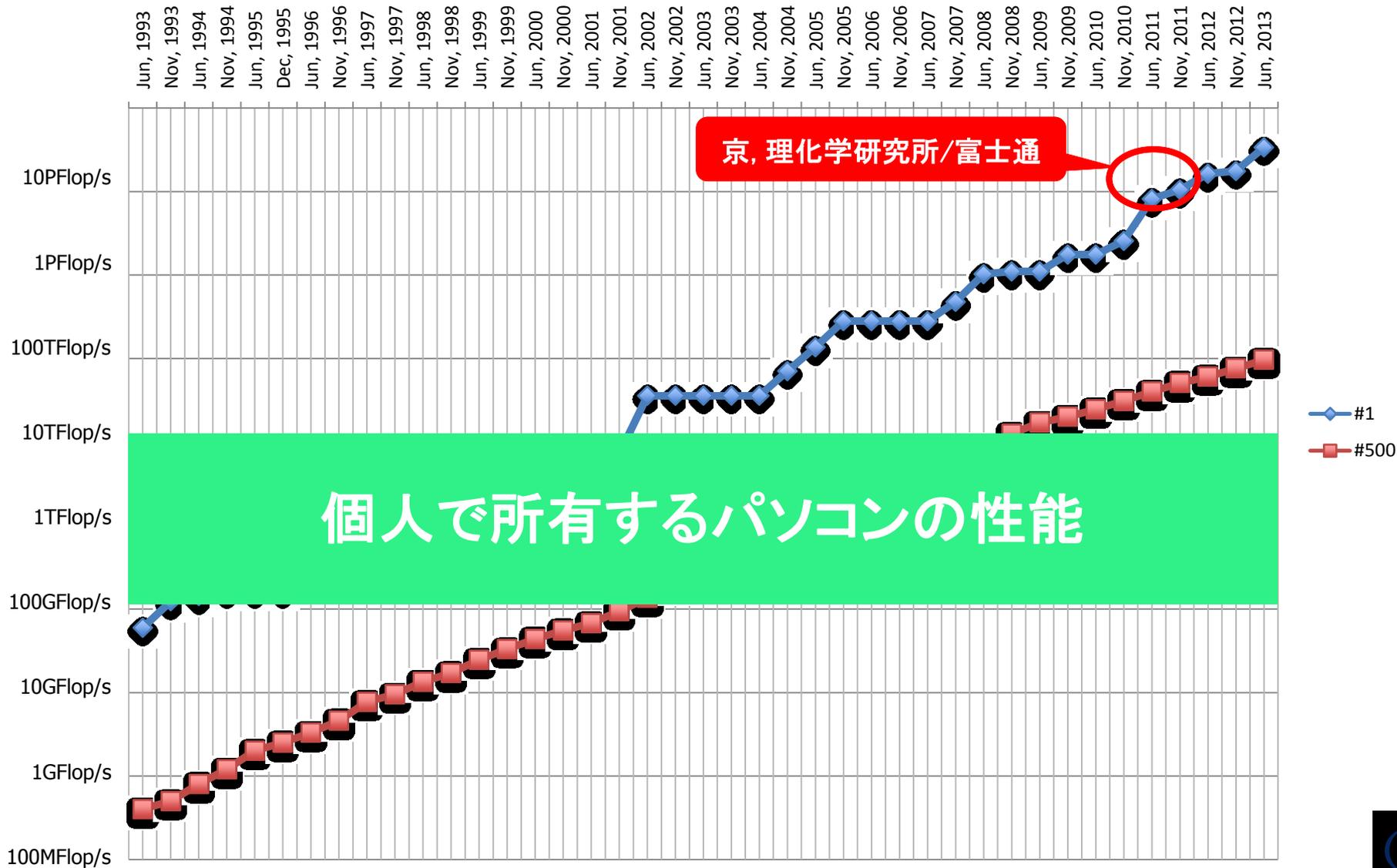
80,000個以上のCPU  
間を相互に接続するネット  
ワーク

写真提供: 富士通株式会社

# 「京」の超並列計算を支える人々



# スパコンの計算速度の向上

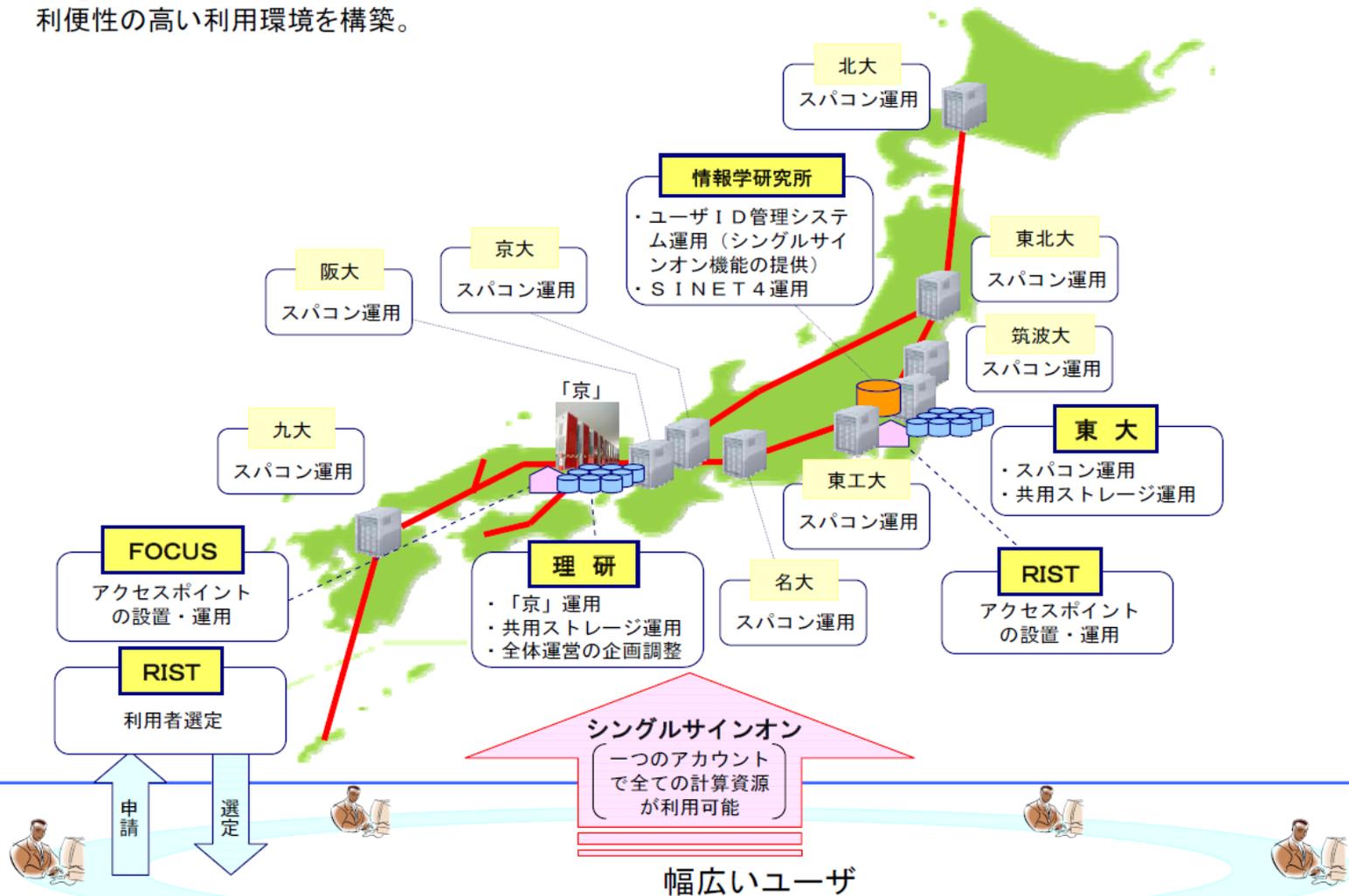


# 内容

- 「京」
- 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
  - HPCI戦略プログラム
  - 分野1
  - HPCIシステム利用研究課題公募
- SCLS計算機システム(京互換機)

# HPCIの構築

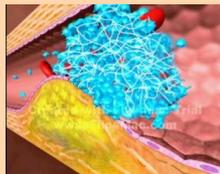
「京」を中核とする国内のスパコンやストレージを高速ネットワークでつなぎユーザー窓口の一元化などにより、利便性の高い利用環境を構築。



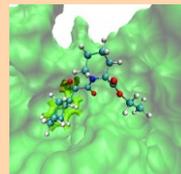
# HPCI戦略プログラム 5つの戦略分野

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



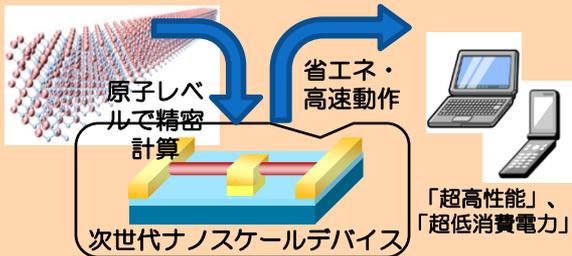
血栓成長による血管閉塞シミュレーション



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



物質と宇宙の起源と構造

## 大質量星の超新星爆発の解明

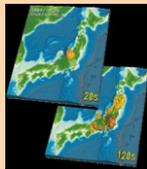


防災・減災に資する地球変動予測

## 集中豪雨や地震の予測



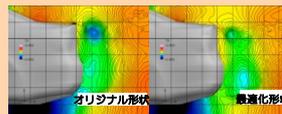
集中豪雨の再現実験



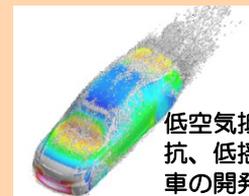
新潟県中越地震による強い揺れの広がり

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

# HPCI戦略プログラム 分野1の使命

社会

- ◆研究成果の普及
- ◆人材育成

一般

産業界

医療従事者



- ◆研究開発
- ◆HPC計算機資源の効率的活用

HPCI



生命科学の  
研究者コミュニティ  
(医療、創薬含む)

他の戦略機関

- ◆分野を超えた取り組みの推進

- ◆人的ネットワークの形成

# SCLSって何？

## ■ SCLS？

- 我々(分野1)の通称です！
- 英語名 : Computational Life Science and Application in Drug Discovery and Medical Development

長い！

\* Supercomputational Life Science = SCLS(えすくるす)



# HPCI戦略プログラム SCLSの使命

社会

- ◆研究成果の普及
- ◆人材育成

一般

産業界

医療従事者



- ◆研究開発
- ◆HPC計算機資源の効率的活用

HPCI



生命科学の  
研究者コミュニティ  
(医療、創薬含む)

他の戦略機関

- ◆分野を超えた取り組みの推進

- ◆人的ネットワークの形成

研究開発(R&D)

R&Dチームによる最終目標達成を支援する。  
教育とアウトリーチ活動を含め、多くの関係者との連携を強化する。



# SCLSの研究開発



課題1

細胞内分子ダイナミクスのシミュレーション

代表: 杉田 有治



課題2

創薬応用

代表: 藤谷 秀章



課題3

予測医療

代表: 高木 周



課題4

大規模生

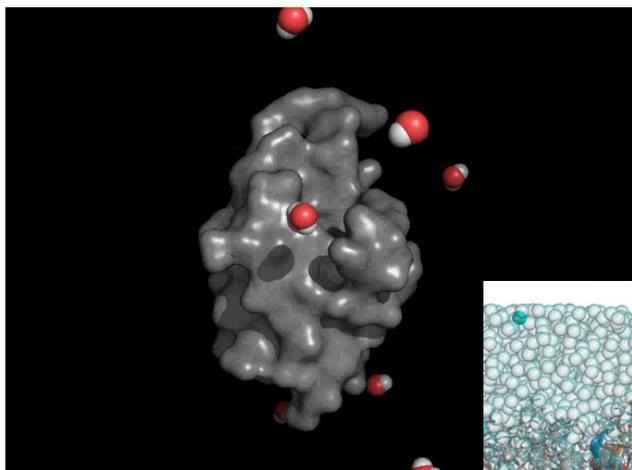
代表: 宮野 悟 東京大学医科学研究所



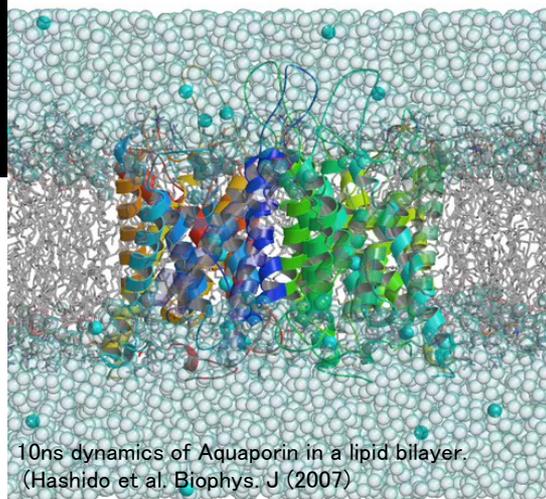
# 細胞内分子ダイナミクスのシミュレーション

「京」を用いた大規模計算で、細胞内環境をリアルに再現する

これまでの計算

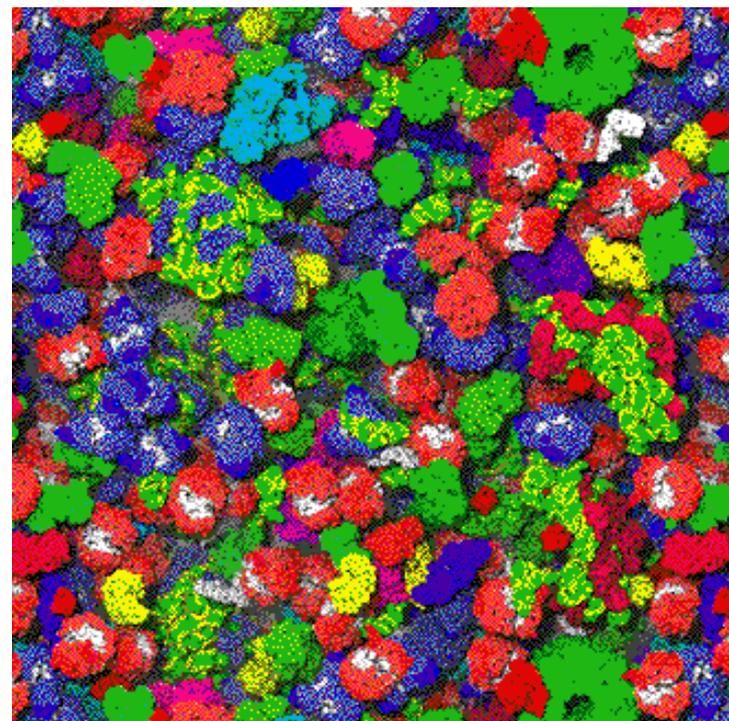


Imai and Sugita, JCPB (2010).  
1 $\mu$  秒の水中の計算により圧力変性と水分子の侵入の関係を解明



10ns dynamics of Aquaporin in a lipid bilayer.  
(Hashido et al. Biophys. J (2007))

細胞内分子ダイナミクス



McGuffee and Elcock, PLoS Computational Biology  
(2010)

大腸菌の細胞質内分子混雑環境をモデリング

# 内容

- 「京」
- 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
  - HPCI戦略プログラム
  - 分野1
  - HPCIシステム利用研究課題公募
- SCLS計算機システム(京互換機)

# HPCI利用公募

- 募集開始 9月2日(月)
- 受付開始 10月1日(火)
- 締め切り 10月31日(木)17時※電子申請
- 結果通知 平成26年2月初旬
- 利用開始 平成26年4月1日(火)
  
- 課題募集説明会
  - 東京 9月20日(金)※HPCI連携拠点とTV会議接続予定
  - 神戸 9月26日(木)

# 「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

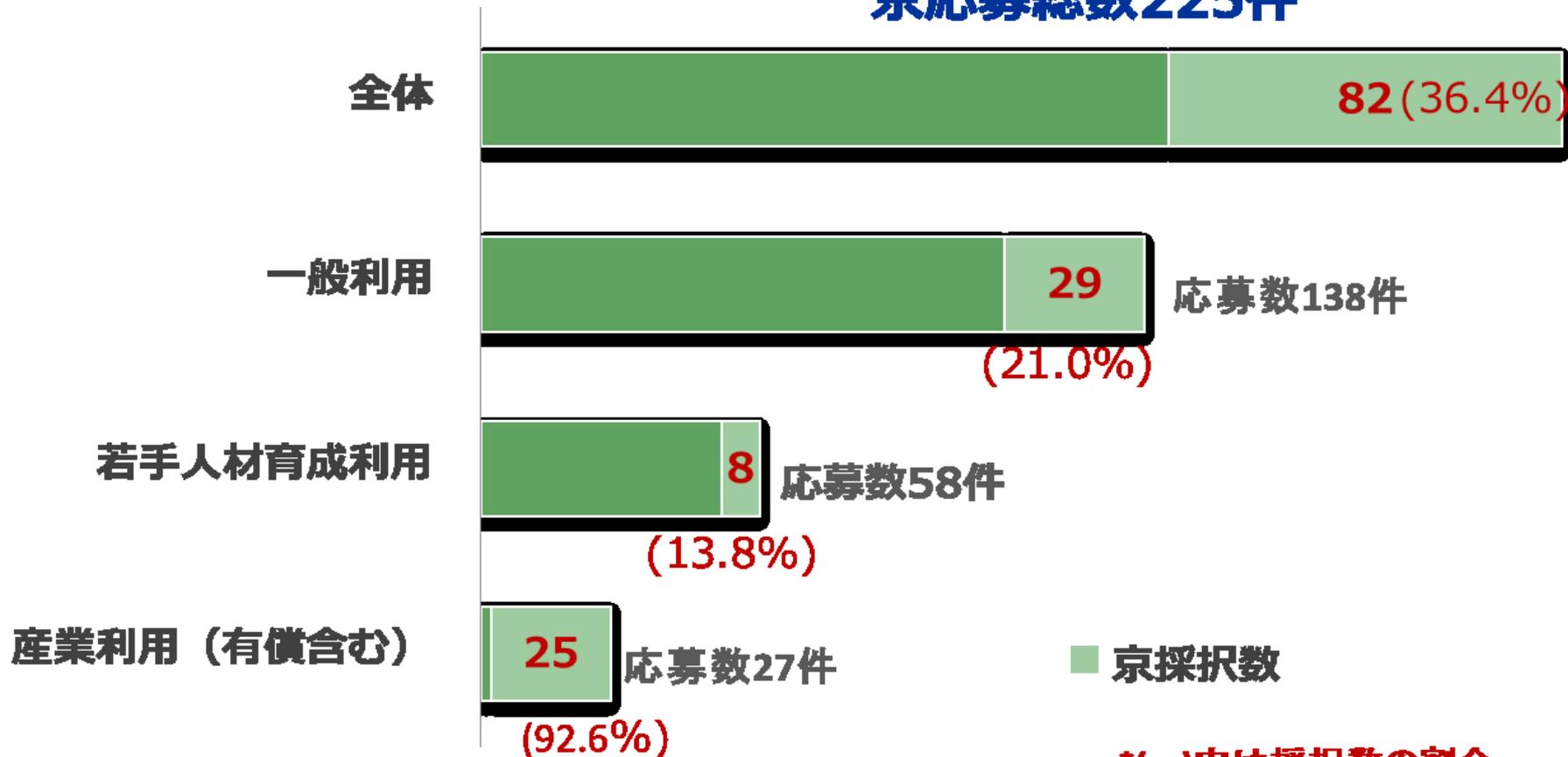
**IT企業(2社):** (株)京都コンステラ・テクノロジーズ, 三井情報(株)

**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

# H24年度「京」利用研究課題 採択結果

京応募総数225件



■ 京採択数

\* ( )内は採択数の割合

## ■「京」の利用を希望しているユーザ 225 件

- 提供可能な計算資源量 < 要求計算資源量 (6倍以上)

京を使用したいのに使えない

京互換機でチューニングしてから京を使いたいなあ

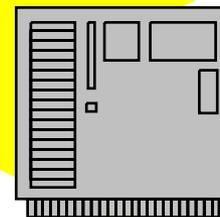
京(スパコン)を使用したいけれど、使う必要がある？

京で利用する前に試しに使いたいよ



生命科学分野

SCLS 計算機システム  
(京互換機)



# 内容

- 「京」
- 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
  - HPCI戦略プログラム
  - 分野1
- HPCIシステム利用研究課題公募
- SCLS計算機システム(京互換機)

# SCLS計算機システム

		SCLS計算機システム	「京」
CPU	名前	SPARC64 IXfx	SPARC64 VIIIfx
	理論性能	211 GFLOPS (1.65GHz)	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 1.5TB)	16GB (全体1.5PB)



# SCLS 計算機システム導入現場



# 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

- 9月17日(火) SCLS計算機システムの利用公募開始
- 10月4日(金) 締め切り
- 10月末ごろ 審査結果の連絡(予定)
- 11月1日 **SCLS計算機システム使用開始(予定)**

<http://www.kobe.rikenjp/stpr1-life/index.html>



# 戦略分野1

で検索!

戦略分野1さんにツイートする

@HPCI\_Senryaku1



## HPCI戦略分野1

@HPCI\_Senryaku1

HPCI戦略分野1は、「京」を中心としたスパコンリソースのインフラを利用した生命科学分野の研究を行っているプログラムです。理化学研究所HPCI計算生命科学推進プログラムを代表機関として、全国の大学や研究機関と研究を推進しており、こちらはその公式アカウントです。研究成果や「京」、計算生命科学の情報を発信していきます!

13  
ツイート

10  
フォロー

7  
フォローワー

フォロー中

### ツイート



HPCI戦略分野1 @HPCI\_Senryaku1

22時間

「第2回 科学の甲子園全国大会」(3月23日-25日 兵庫県立総合体育館 兵庫県西宮市)に出展します。rikai.jst.go.jp/koushien/tourn...  
開く



HPCI戦略分野1 @HPCI\_Senryaku1

23時間

「京」に開発された創薬アプリの講演(東京2/13/8 大陸:2/20/12)を、理研とHPCI共同パーソナルクラウドスター関西が主催します。ご参加お待ちしております。biogrid.jp/pdf/insilicose...  
開く



HPCI戦略分野1 @HPCI\_Senryaku1

1月21日

高度情報科学技術研究機構が、「一般向けHPCセミナー第2回チューニング技法編」セミナーを、2月21-22日に理化学研究所 計算科学研究機構で開催します。詳細はWebへ。hpci-office.jp/k-computer/sem...  
開く



理化学研究所(理研) @RIKEN\_JP

1月10日

おすすめユーザー · 更新 · すべて見る



橋山由紀夫 @hatoyamayukio  
Yuuichi Teranishiさんと他のユーザーにフ...  
フォロー



堀義人/Yoshito Hori @Yoshito...  
河野太郎さんと他のユーザーにフ...  
フォロー



蓮舫 @renho\_sha  
Yuuichi Teranishiさんと他のユーザー...  
フォロー

カテゴリ別に見る · 友だちを見つける

トレンド · 変更する

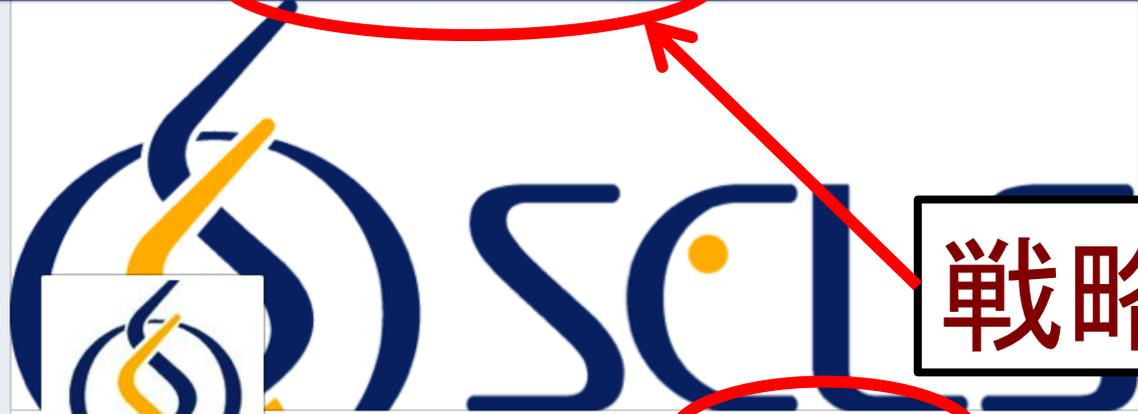
# @HPCI\_Senryaku1



facebook

友達、スポット等を検索

木戸 倫之 友達を検索 ご意見・ご提案 ホーム



HPCI 戦略分野 1  
いいね！ 2人 · 話題にしている人 2人

いいね！しました

戦略分野1

で検索！

団体  
HPCI戦略プログラム 分野1「予測する生命科学・医療および創薬基盤」



2



基本データ

投稿

何か書く...



HPCI 戦略  
22時間前

「第2回 科学の  
合体育館 兵庫県西宮市）に出展します。http://t.co/60ZOPnuF

科学の甲子園 | 全国大会について  
rikai.jst.go.jp

- ①主催 独立行政法人 科学技術振興機構 (JST) ②
- 共催 兵庫県、兵庫県教育委員会、高等学校文化連盟
- 全国自然科学専門部 ③後援 文部科学省 (予定) ④

HPCI 戦略分野 1  
23時間前

「京」用に開発された創薬プログラムの開発 (東京2/7-8日、大阪:2/20,3/12) を、理研とNPO法人バイオグリッドセンター関西が開催します。ご参加お待ちしております。http://t.co/TGmZZdtW

http://t.co/TGmZZdtW  
biogrid.jp

いいね！を取り消す · コメントする · @HPCI\_Senryaku1 on Twitter

あなたが「いいね！」と言っています。

チャット (5)



いいねボタンを押して下さい！