2013年10月28日（月）12:30～13:20
生物物理学会ランチョンセミナー「生命科学と計算科学がみる未来」
場所：国立京都国際会館 Room B-1

スーパーコンピュータ「京」とHPCIへのご勧誘

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

はじめに
-「京」とHPCIについて-

スーパーコンピュータ「京」

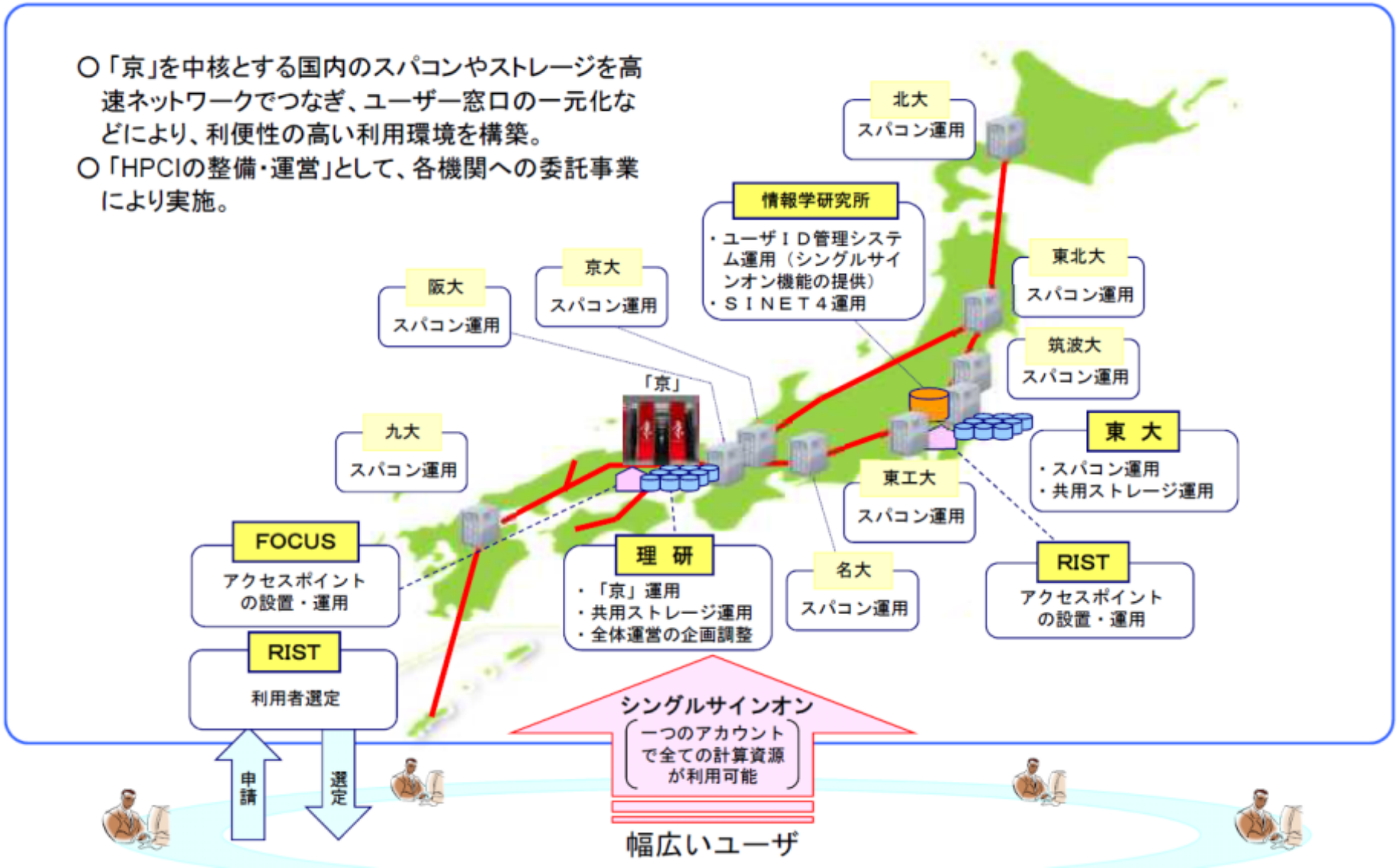
約9万個のCPUが、50m×60mの部屋に鎮座しています

世界のスパコン計算性能ランキング

順位	システム名称	設置場所／ベンダー	国名	速さ（PFLOPS）
1	天河2号	国防科学技術大学/Intel	中国	33.9
2	Titan	オークリッジ国立研究所／Cray	米国	17.6
3	Sequoia	ローレンス・リバモア国立研究所／IBM	米国	17.2
4	京	理研AICS／富士通	日本	10.5
5	Mira	アルゴンヌ国立研究所／IBM	米国	8.6

Flops（フロップス）一秒間に処理できる浮動小数点計算の数

HPCIの枠組み



文部科学省の資料から

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年度は開発に係る経費含む

（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）

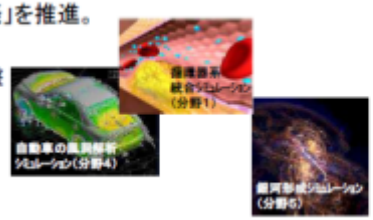
多様な利用者のニーズに応じ、我が国の計算資源を最適に活用するとともに、データの共有や共同分析などを可能とするための研究基盤を構築する。平成25年度は、平成24年9月28日に共用開始したHPCIのシステムの着実な運用を行う。また、将来のHPCIのシステムのあり方の調査研究を行う。

(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

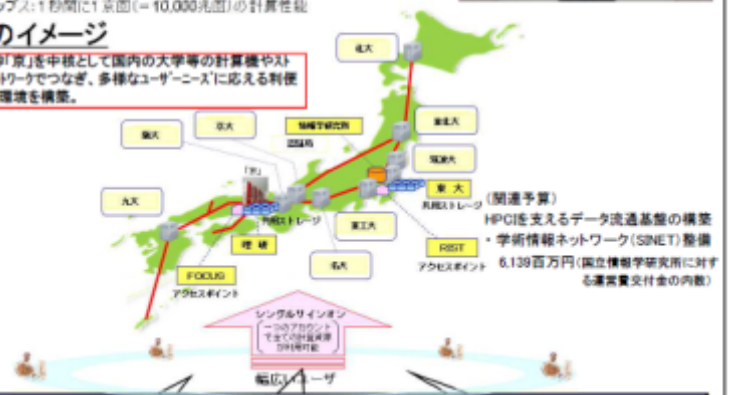


○スーパーコンピュータ「京」の概要

◆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ストレージを高速ネットワークでつなぎ、多様なユーザニーズに応える利便性の高い利用環境を構築。



（関連予算）
HPCIを支えるデータ流通基盤の構築
・学術情報ネットワーク（SINET）整備
6,139百万円（国立情報学研究所に対する運営費交付金の内数）

最先端の計算環境を利用し、重要課題に対応

心臓シミュレーション

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

シミュレーションによる地震津波の被害予測

50m単位（ブロック単位）での予測から地盤液状化や液状化現象等の影響も加味した10m単位（家単位）の詳細な予測を可能とし、都市整備計画への活用による災害に強い街作りやきめ細かな避難計画の策定等に貢献

シミュレーションによる創薬開発

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

文部科学省の資料から

来年度HPCI利用の公募

- 募集開始：2013年（平成25年）9月2日
- 申請受付締切: 平成25年11月11日（月）17時
- 押印済申請書の郵送期限: 平成25年11月18日（月）必着
- 課題選定結果通知: 平成26年2月初旬
- 利用開始：平成26年4月1日
- 募集対象:
  - 「京」一般利用（一般課題、産業利用課題、若手人材育成課題）
  - 「京」を除くHPCI計算資源一般利用（一般課題、産業利用課題）
  - HPCI共用ストレージ
  - HPCIシステム構成機関の独自ルールで共通運用される計算機

なお、産業利用におけるトライアル・ユースについては、随時申請を受け付けます。

「京」で利用可能なOSS一覧

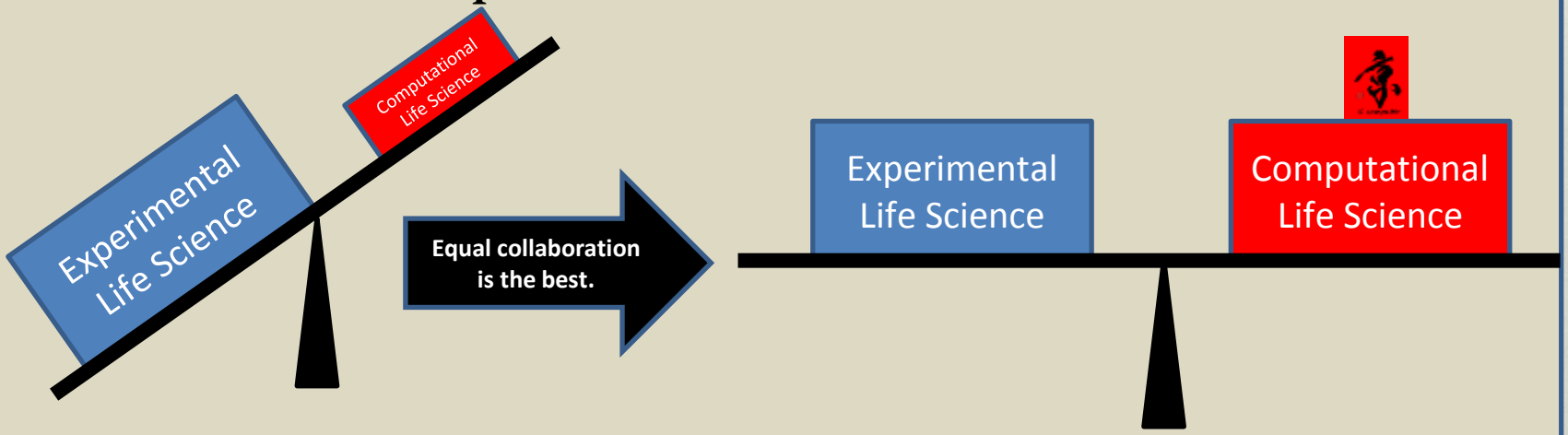
1	SuperLU	非対称疎行列ソルバー、複素値にも対応
2	UMFPACK	マルチ・フロンタル法を用いた非対称疎行列ソルバー
3	SuperLU_MT	非対称疎行列ソルバー(共有メモリ)、複素値にも対応
4	SuperLU_DIST	非対称疎行列ソルバー(分散メモリ)、複素値にも対応
5	ABINIT	第一原理計算コード(Ver. 5.4.4p)
6	ABINIT	第一原理計算コード(Ver. 5.8.3)
7	METIS	行列やグラフを分割したり、オーダリングしたりするためのライブラリ
8	HDF5	ファイル入出力インターフェイスライブラリ・ソフトウエア
9	NetCDF	ファイル入出力インターフェイスライブラリ・ソフトウエア
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の画像操作用ライブラリ
19	libpng	PNGの画像操作用ライブラリ
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

HPCIコンソーシアム臨時総会資料(3月4日)から

生命科学における HPCIへのご勧誘

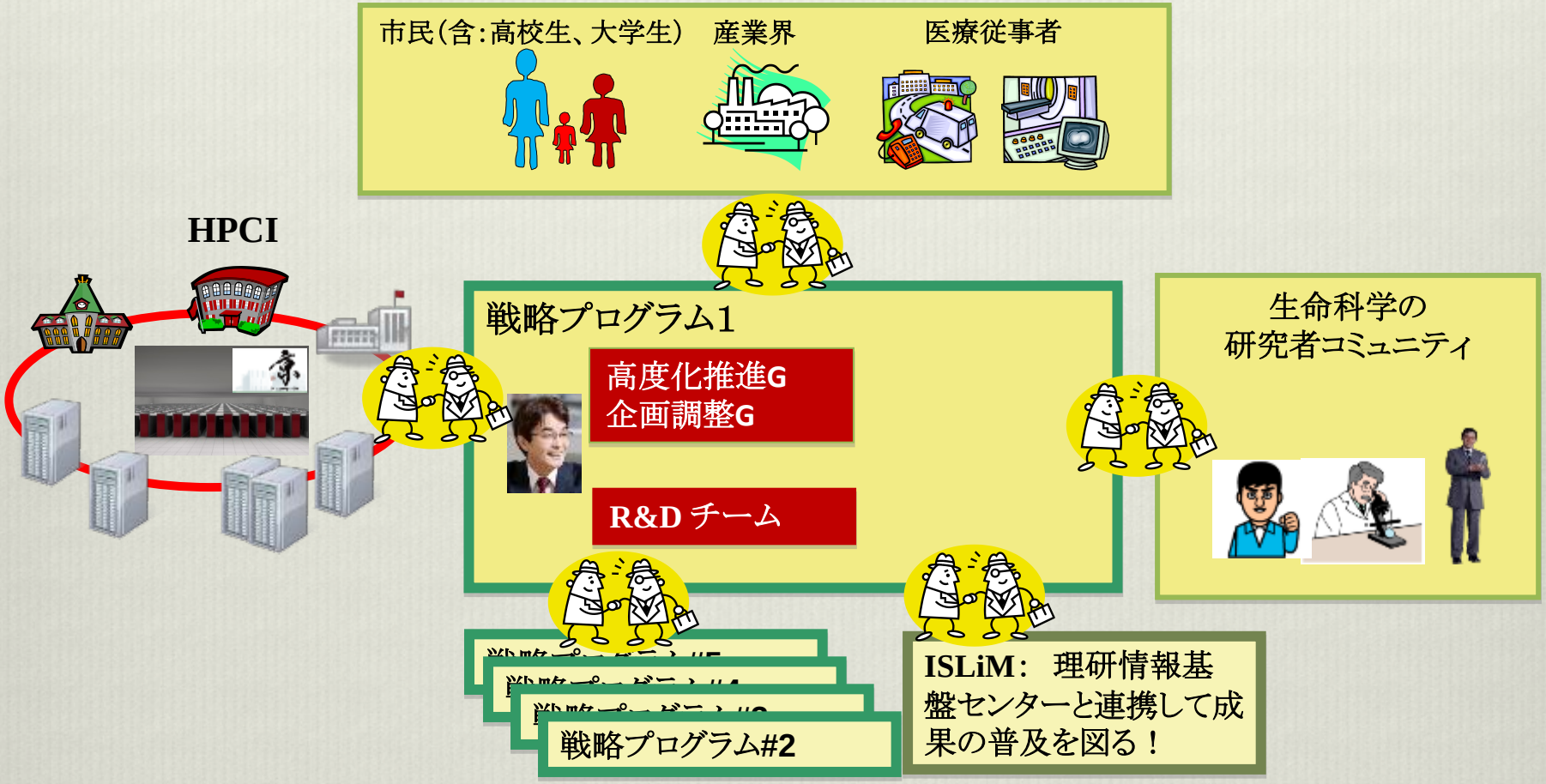
計算生命科学の進展と「京」

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
生命科学の
研究者コミュニティ
戦略プログラム#2
ISLiM： 理研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）：
　アスビオファーマ，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

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 1.5TB)	16GB (全体 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

- 利用目的
  - 無料で提供することにより、計算生命科学を広く振興する
  - 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5TB
  - 利用可能計算機使用量: 1回のジョブの実行時間の上限は3時間。ただし、申請によりこの制限は外せる。

SCLS計算機システムの利用現況

利用課題：27
利用者数：108名（13大学、4国立研究所、3民間企業、１NPO法人）

課題代表者		課題内容
所属	氏名	課題名
横浜国立大学	百武　徹	テーラーメイド型人工赤血球の酸素運搬効果の予測評価に関する解析技術の確立
早稲田大学高等研究所	滝沢　研二	Development of Computer Modeling Techniques for Patient-Specific Cardiovascular FSI
独立行政法人　医薬基盤研究所	水口　賢司	蛋白質複合体の相互作用予測に基づく薬剤候補分子のスクリーニング手法の構築
NPO法人バイオグリッドセンター関西	志水　隆一	並列計算機を用いた創薬関連ソフトウェアの利用と創薬現場での利用可能性の検討
塩野義製薬株式会社	安尾　和也	量子化学を取り入れた結合親和性予測能の改善
岡山大学大学院環境生命科学研究科	フィンクァンフイ ヴィェト	血流の数値シミュレーションにおける非圧縮性ナビエストークス方程式の並列解法と評価
東京大学大学院総合文化研究科	陶山　明	一本鎖核酸の塩基スタッキングの安定性
理化学研究所ライフサイエンス技術基盤研究センター	林　拓也	高速並列演算による非侵襲的脳画像の機能的脳内ネットワーク解明

2013年度第１期採択課題

注：利用課題、利用者数には2013年10月1日からの利用予定課題等を含む。

来年度SCLS計算機システムの公募概要

- 応募資格
  - 民間、大学等研究機関の生命科学者、技術者
  - 国内居住者に限る
- 次年度公募の予定
  - 公募期間　2014年2月3日～3月3日
  - 審査結果の連絡　2014年3月下旬
  - 利用期間　2014年4月1日～2015年3月末日

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