

生命科学のグランドチャレンジ： 次世代生命体統合シミュレーションのソフトウェア開発

姫野龍太郎^{†1}

次世代スーパーコンピュータの研究開発プロジェクトの一環として、生命科学分野のグランドチャレンジとして次世代生命体統合シミュレーションの研究開発が2006年10月から開始した。このプロジェクトでは分子スケールから細胞、臓器・全身、脳神経系、データ解析、HPC可視化など、多岐にわたる分野で34本のソフトウェアを京に向けて開発した。現在そのうち13本は京の1万ノード以上までの性能向上が確認できた。さらに構造流体連成コードZZ-EFSIでは4.5PFLOPS、分子動力学コードcppmdでは4PFLOPS、心臓シミュレータUT-Heartでは2.9PFLOPSという高い実効性能を達成した。今後、これらのソフトを使った研究成果が出てくるものと期待している。

Grand Challenge in Life Science: Software Development of Next generation Integrated Simulation of Living Matter

RYUTARO HIMENO^{†1}

We started a life-science grand challenge called the next generation integrated simulation of living matter in October, 2006, included in the next generation supercomputer R&D project. In this project, we have developed 34 codes for K computer from molecular scale and cell scale to organ/whole body scale as well as brain and neural system, data analysis, visualization tools and HPC middleware. 13 codes out of 34 show good scalability over 10,000 nodes of K. ZZ-EFSI: flow-structure coupled code achieved 4.5 PFLOPS, cppmd: molecular dynamics code achieved 4.0 PFLOPS and UT-Heart: human heart simulator achieved 2.9PFLOPS, respectively. We are now estimating those code will produce innovative scientific results soon.

1. はじめに

2006年10月に次世代スーパーコンピュータ開発実施プロジェクトの中で、生命科学分野のグランドチャレンジとして開始された次世代生命体統合シミュレーションの研究開発プロジェクトでは、京の性能を十分に引き出すソフトウェアを開発することで、京の威力を示すとともに、生命科学でのスーパーコンピュータ利用を促進することを目標にした。

2. ソフトウェア開発の現状

生命科学の広い範囲、すなわち分子・細胞・臓器全身、脳神経系、実験データ解析、可視化、HPCという多岐にわたる34本のソフトウェアの開発を行った。このソフトウェアのうち27本は京の上で使う予定で開発を行ってきたが、そのうちの24本で京での動作を確認している。また、13本では京の1万ノードを超える性能向上を果たしている。構造流体連成コードZZ-EFSIでは4.5PFLOPS、分子動力学コードcppmdでは4PFLOPS、心臓シミュレータUT-Heartでは2.9PFLOPSという高い実効性能を達成した。今後、これらのソフトを使った研究成果が出てくるものと期待している。

ここで開発してきたソフトウェアの多くは自由にダウン

ロード可能で、現在マニュアルなどの整備を進めている。このプロジェクトは今年度末で終了するが、今後も開発したソフトウェアは整備し、サポートしてゆく予定であり、安心して使っていただきたい。

参考文献

- 1) <http://www.csrp.riken.jp/index.html>

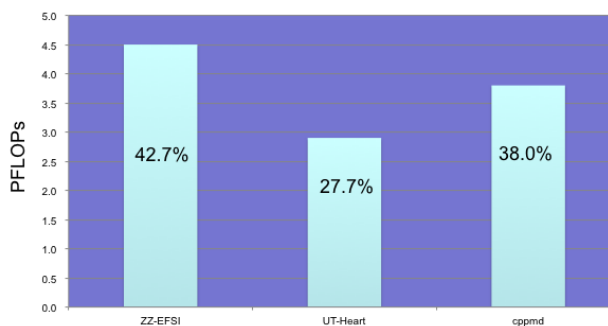


図1 京全体を使った場合の実効性能と理論性能比

^{†1} 理化学研究所
RIKEN