

Thailand's National e-Science Infrastructure Consortium

Dr Chalee Vorakulpipat

National Electronics and Computer Technology Center

National Science and Technology Development Agency

e-Science in Thailand

- Founded in 2011 as The National e-Science Infrastructure Consortium by five institutes.
- The objective is to develop computing, data storage and fundamental datasets as a sustainable infrastructure to support research in Thailand.

Project Areas

- Computational Science and Engineering
- Computer Science and Engineering
- Water Resource
- Energy and Environment Management
- Climate Change
- High Energy Particle Physics

Members

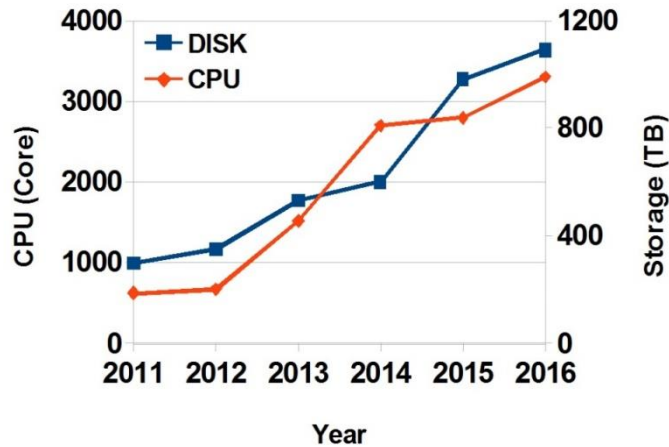
- Chulalongkorn University (CU)
- Electronic Government Agency (EGA)
- Hydro and Agro Informatics Institute (HAI)
- King Mongkut's University of Technology Thonburi (KMUTT)
- National Astronomical Research Institute of Thailand (NARIT)
- National Science and Technology Development Agency (NSTDA)
- Suranaree University of Technology (SUT)

Total Resources

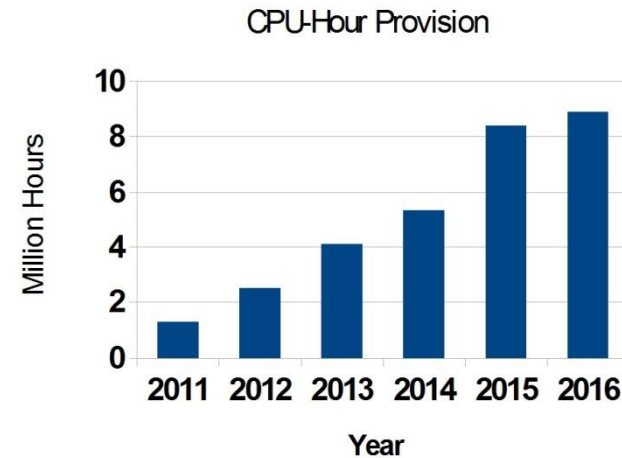
Sites	CPU (cores)	Storage (TB)	Application
HAI	896	112	Chem, Bio, Hydrology, Eng, Design
NSTDA	688	660	Weather, Water resources
SUT	656	150	HEP (CMS), Comp, Chem, Bio
CU	340	106	HEP (ALICE), Chem
KMUTT	224	30	Comp, Eng
NARIT	540	100	Comp. Astrophysic & Cosmology
EGA	80	13	Big Data
Total	3,424	1,171	

Resources

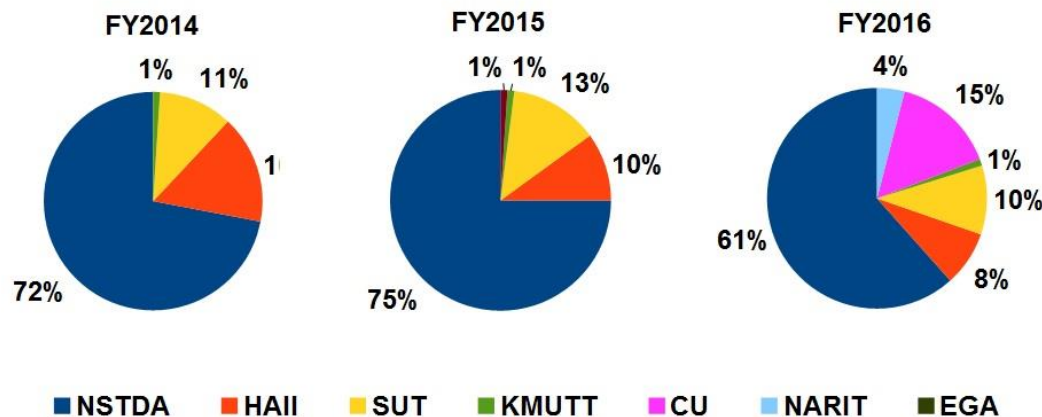
Resource Growth



CPU-Hour Provision



Member Contribution



Outputs

No. projects	99
Journal	32
Int. Conf.	16
Other publications	31
Undergrad.	4
Postgrad.	11

Collaboration with WLCG

- Joined WLCG in 2013.
- Two tier-2 sites

Site name	Status
T2-TH-CUNSTDA	Production in June 2014 260 Cores 300 TB Improving resources Acquiring more memories for LHC Run II Acquiring more infrastructures
T2-TH-SUT (formerly TH-SUT-NPP)	Production in October 2014 128 cores 100 TB Utilization 90% ALICE data 46 TB Planning to upgrade to 256 cores

Consortium Activities



(1) Workshop on e-Science and High Performance Computing (eHPC 2016)

in conjunction with JCSSE2016 :The 13nd International Joint Conference on Computer Science and Software Engineering in Khon Khan, Thailand

Highways Big Data for Traffic Management during Holidays

UBE Open Innovation: From Industrial UBE Group

CU Thai Monitoring Corpus

KMUTT Data Science

EGA Open Data

SUT CephFS on ARM: Running a Distributed File System

HAI WRF3DVAR Simulation of Precipitation in Southeast Asia

NARIT High-Resolution Modeling of Haze

NSTDA Phuket smart city

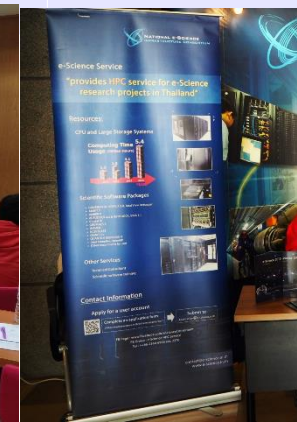
(2) Training on Material Science and Big Data



(3) Other activities

Introduced e-Science in universities

Exhibitions a



(4) Computational Chemistry Symposium



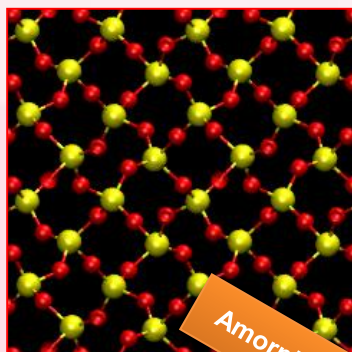
Project Examples

Development of a Scalable Reactive Molecular Dynamics Simulation on Many-Core Processor

Nanoscale Simulation Laboratory, NANOTEC, NSTDA



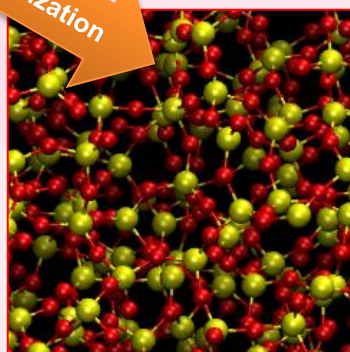
β -cristobalite SiO_2



Limitation:

- Large size-scale
- Long time-scale
- Complicated force fields (allow covalent bond breaking/formation)

Amorphization

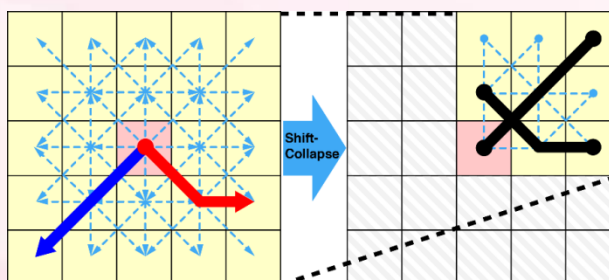


Amorphous silica

Solution:

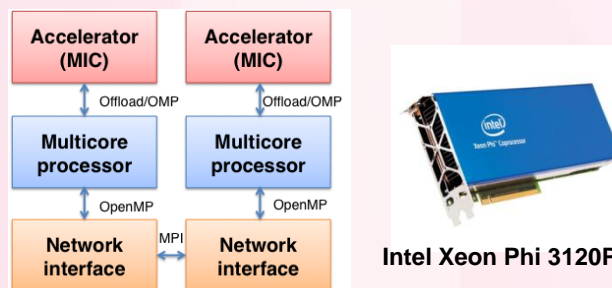
- Scalable performance (for parallel machines)
- Fast simulation (for long time dynamics)
- Algorithm compatible with dynamic n -body problem

Algorithmic approach: Shift-collapse algorithm on neighbor list



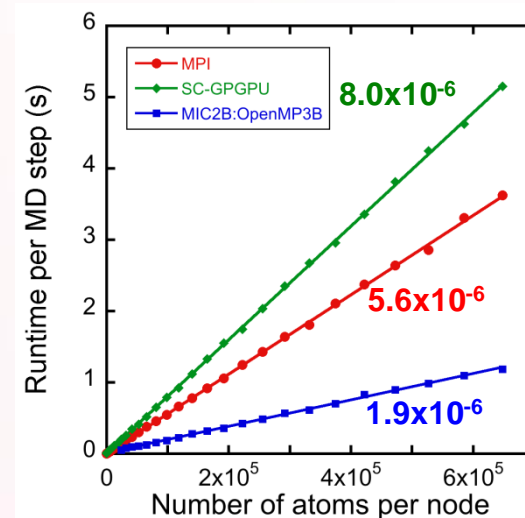
Shift/collapse algorithm (Kunaseth et al., SC13)

Systemic approach: Shift-collapse algorithm on neighbor list



Intel Xeon Phi 3120P

Benchmark: Computation time



3.1x performance speedup on hybrid MIC+OpenMP implementation

Research significance:

Nanoscale simulation of SiO_2 requires large spatio-temporal scale to study the physical phenomenon of such materials. This requires tremendous computation power to achieve such large and long time scale of reaction-enabled atomistic simulation.

Combining two approaches:

- (1) Algorithmic improvement via the utilization of shift-collapse algorithm on nearest neighbor data structure;
- (2) Systemic approach via the implementation on emerging GPGPU and many integrated-core platforms.

Achievements:

- (1) Scalable performance up to on large-scale computer clusters
- (2) 3.1x performance speedup over single-core MPI run

*Manuscript in preparation

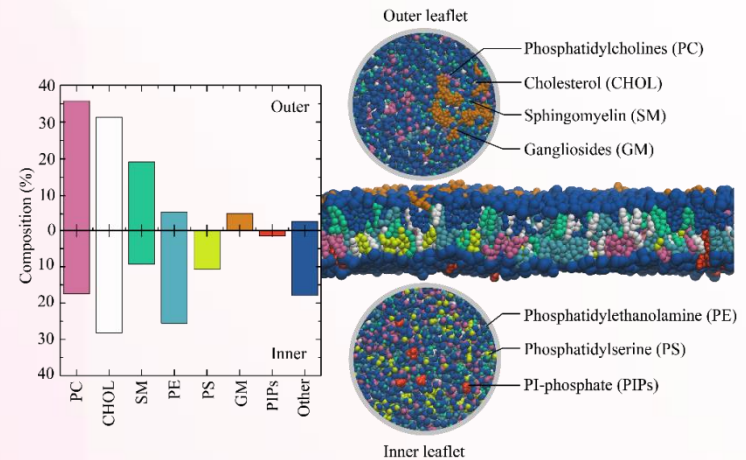
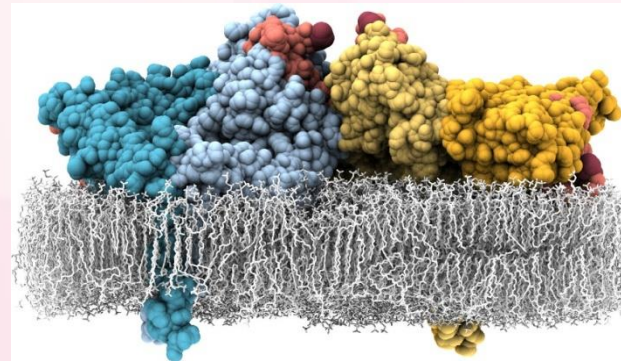
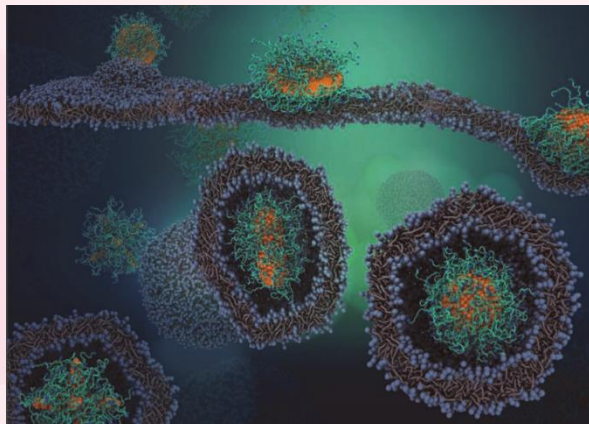
การศึกษาอันตรกิริยาระหว่างอนุภาคนาโนทองและเซลล์ สิ่งมีชีวิตเพื่อการออกแบบการนำส่งยาด้วยอนุภาคนาโน

NEC
a member of NS



หลักสูตรวัสดุศาสตร์และนาโนเทคโนโลยี ภาควิชาฟิสิกส์ คณะวิทยาศาสตร์
มหาวิทยาลัยขอนแก่น 40002

ผู้ช่วยศาสตราจารย์ ดร. ชีระพงษ์ พวงมะลิ



อันตรกิริยาระหว่างอนุภาคนาโนและเซลล์ของ
สิ่งมีชีวิตค่อนข้างมีความซับซ้อนมาก และปัจจุบัน
ยังไม่สามารถศึกษาได้ด้วยวิธีการเชิงการทดลอง
การจำลองอันตรกิริยาระหว่างอนุภาคนาโนทองและ
เซลล์สิ่งมีชีวิตด้วยคอมพิวเตอร์ จะทำให้เข้าใจ
กลไกการเข้าสู่เซลล์ของอนุภาคเหล่านี้ รวมถึง
เข้าใจแนวโน้มความเป็นพิษของอนุภาคนาโนต่อ
เซลล์ และนำไปสู่การออกแบบการนำส่งยาด้วย
อนุภาคนาโนได้อย่างมีประสิทธิภาพ

การจำลองอันตรกิริยาระหว่างอนุภาคนาโนและ
เซลล์สิ่งมีชีวิตสามารถศึกษาได้ด้วยการจำลอง
แบบทางพลวัตเชิงโมเลกุล (Molecular dynamic
simulation) ซึ่งระบบที่ศึกษานี้ประกอบด้วยอะตอม
เป็นจำนวนมาก คอมพิวเตอร์ประสิทธิภาพสูงจึงมี
บทบาทสำคัญต่อการจำลอง โดยสามารถศึกษา
อันตรกิริยาต่าง ๆ ที่เกิดขึ้นในช่วงระยะเวลา
นานมากพอที่จะทำให้เข้าใจกลไกการเข้าสู่เซลล์ของ
อนุภาคนาโน

ขณะนี้โครงการวิจัยนี้กำลังอยู่ในช่วงคำนวณและวิเคราะห์
ผลการคำนวณ และกำลังเตรียมบทความวิจัยเพื่อเผยแพร่
ในวารสารวิจัยในระดับนานาชาติ และพยายามสร้าง
แบบจำลองเพื่อรองรับการทดลองที่นักทดลองสนใจ โดยที่
ผ่านมากลุ่มวิจัยสามารถถ่ายทอดความรู้เกี่ยวกับการศึกษา
ด้วยการจำลองเชิงคอมพิวเตอร์ให้กับนักศึกษาระดับ
ปริญญาตรี โท และ เอก และในปีที่ผ่านมา นักศึกษาระดับ
ปริญญาตรีในกลุ่มวิจัยสามารถคว้ารางวัลชนะเลิศการ
ประกวดโครงงานค้นคว้าอิสระระดับปริญญาตรี สาขาฟิสิกส์
และได้รับมอบโล่รางวัลถ้วยพระราชทานสมเด็จพระเจ้าพี่นางเธอ เจ้าฟ้ากัลยาณิวัฒนา กรมหลวงนราธิวาสราชนครินทร์



การค้นหายาต้านวัณโรคชนิดใหม่ที่มีศักยภาพสูงด้วยระเบียบวิธี

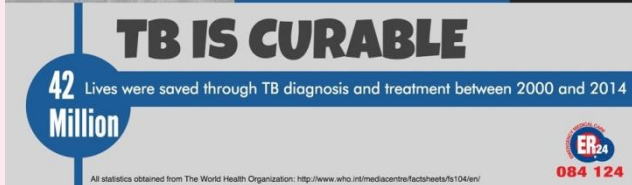
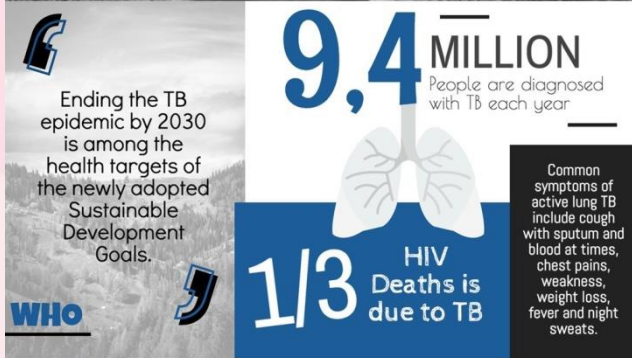
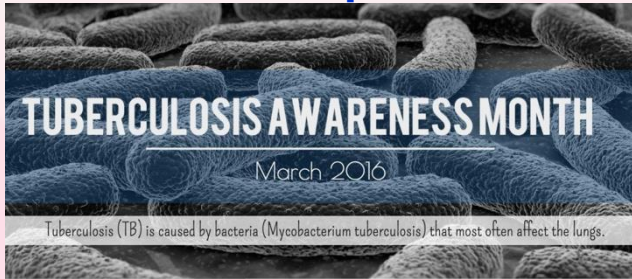
วิธี

การออกแบบโมเลกุลด้วยการคำนวณ

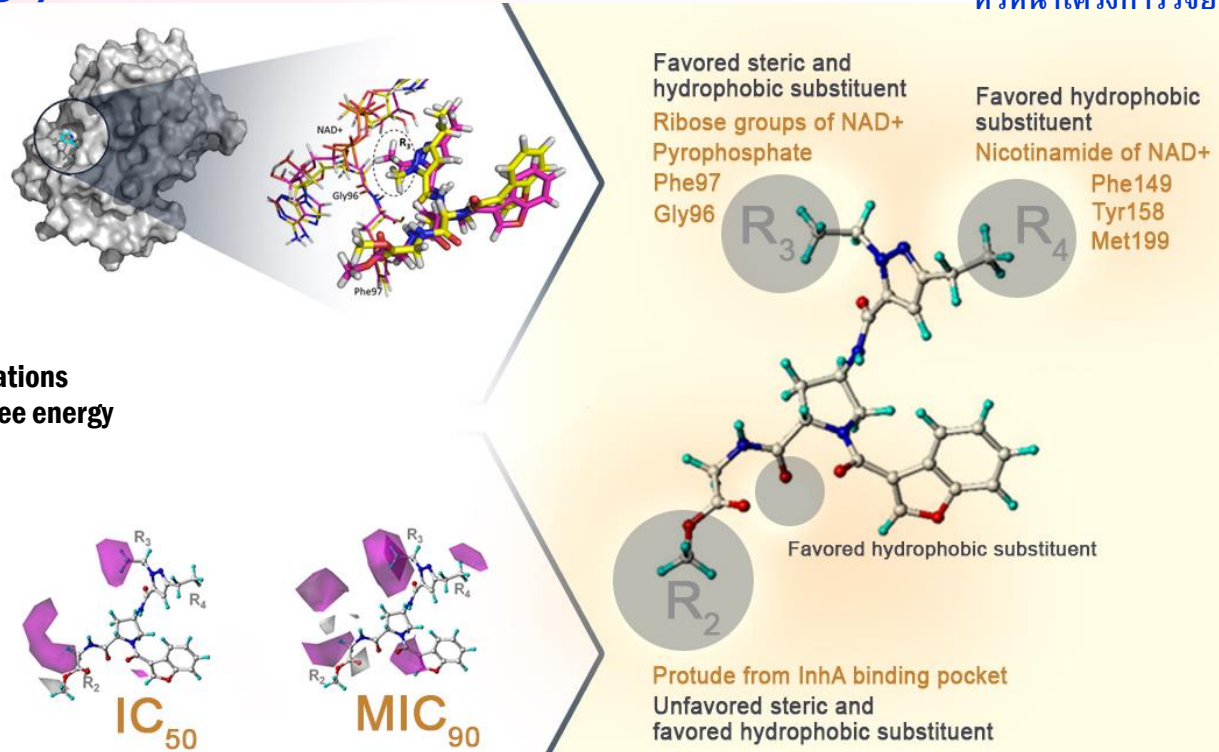
(Discovery of new and highly potent anti-TB drug based on computer aided molecular design)



รศ.ดร.พรพรรณ พึ่งโพธิ์
หัวหน้าโครงการวิจัย



ยาศาสตร์



วัณโรค เป็นโรคติดต่อที่เกิดจากการติดเชื้อแบคทีเรีย *M. tuberculosis* ซึ่งเป็นโรคที่เป็นปัญหาที่สำคัญในกลุ่มประเทศที่มีประชากรเป็นจำนวนมากและกลุ่มประเทศที่กำลังพัฒนารวมทั้งประเทศไทย ปัญหาหลักในการรักษาโรค วัณโรคคือการดื้อยาและ
เกิดร่วมกับโรคเอดส์ ทำให้ยาเดิมที่ใช้ในการรักษาไม่สามารถใช้ในการรักษาได้อีกต่อไป

ในงานวิจัย เป็นการนำเอาระเบียบวิธีการออกแบบโมเลกุลด้วยการคำนวณบนพื้นฐานการออกแบบยาโดยอาศัยโครงสร้างของเอนไซม์และการออกแบบยาบนพื้นฐานของโครงสร้างลิแกนด์ โดยนำมาใช้ในการศึกษาลักษณะโครงสร้างและอันตรกิริยาที่สำคัญของสารยับยั้งโรค วัณโรคกับเอนไซม์ เป้าหมายและเชื้อ *M. tuberculosis*

ผลการศึกษาที่ได้นำไปสู่ความเข้าใจความต้องการทางโครงสร้างและอันตรกิริยาในการยับยั้ง ซึ่งนำไปสู่การออกแบบและค้นหาสารออกฤทธิ์ต้านวัณโรคชนิดใหม่ ร่วมกับการสังเคราะห์และทดสอบฤทธิ์ทางชีวภาพเพื่อพัฒนาเป็นสารต้านวัณโรคที่มีศักยภาพในการยับยั้งสูง

Main Challenges

- Building capacity in HPC and cloud computing
- Outsourcing HPC services
- Migration from HPC to cloud-based systems

Thank you