

「先端研究施設共用イノベーション創出事業」

【産業戦略利用】

『みんなのスパコン』

TSUBAMEによる

ペタスケールへの飛翔

平成20年度第2回公募説明会

スーパーコンピューティングキャンパスグリッド基盤システム

東京工業大学

学術国際情報センター

センター長 渡辺 治

特任准教授 西川武志



平成20年度 第2回公募日程

8月1日(金) 第2回公募 受付開始

8月4日(月) 第2回公募 説明会

9月5日(月) 第1回公募 受付締め切り(当日必着)

9月8日(月)～12日(金) 第2回公募 一次審査

9月22日(月)～26日(金) 第2回公募二次審査

9月29日(月) 第2回公募 採択通知、利用手続き開始

10月 1日(火) 第1回公募 利用開始

先端研究施設 共用イノベーション創出事業

大学、独立行政法人等の研究機関が保有する
先端的な研究施設・機器の共用を進め、
イノベーションにつながる成果の創出が目的

平成19年度から文部科学省が新たに開始

本事業を通じて、産学官の研究者による戦略的かつ効率的な研究開発や、研究機関や研究分野を越えた横断的な研究開発活動を推進することにより、継続的に産学官の知の融合によるイノベーションを加速していくことを目指します。

共用ナビ

<http://kyoyonavi.mext.go.jp/>

The screenshot shows the homepage of the Kyoyonavi website. At the top left is the logo '共用ナビ' (Kyoyonavi) with the subtitle '研究施設共用総合ナビゲーションサイト' (Research Facility Shared Comprehensive Navigation Site). At the top right is the logo for the Ministry of Education, Culture, Sports, Science and Technology (MEXT). Below the header is a blue banner with white text explaining the site's purpose: to promote the shared use of research facilities for university and independent administrative agency researchers, and to provide necessary information to industry, academia, and government researchers. Below the banner are three main sections: 1. '施設をさがす' (Find facilities) with a search bar and a '施設検索' (Facility search) button. 2. 'トピックス' (Topics) with a link to '平成20年度地球シミュレータ産業戦略利用プログラム課題募集開始' (Start of application for research topics for the 20th year of the Earth Simulator Industrial Strategy Utilization Program). 3. '研究施設ピックアップ' (Research facility pickup) featuring a 'TSUBAME Grid Cluster' with 56.48 TFLOPS, located at the University of Tokyo, International Information Science Center, Tsubame Grid Cluster, 2-12-1 Ohtsuka, Bunkyo-ku, Tokyo. A large white box with black text is overlaid on the bottom left of the screenshot, containing the text: '共用イノベーション創出事業の総合的な案内、他施設の紹介、各種情報提供' (Comprehensive guidance for the shared innovation creation project, introduction of other facilities, and provision of various information).

共用ナビ
研究施設共用総合ナビゲーションサイト

文部科学省
Ministry of Education, Culture, Sports, Science and Technology
MEXT

研究施設共用総合ナビゲーションサイトは、
大学や独立行政法人等の研究機関が有する研究施設の共用（広範な分野の外部の利用）を促進するため、
産学官の利用者に対し必要な情報の収集・提供を行いつつ、研究開発活動に適切な研究施設までご案内するものです。

施設をさがす
設備名や所在地などフリーワードで研究施設をさがせます

施設検索

トピックス
共用施設や関連事業の最新情報をお届けします！

募集・採択情報
平成20年度地球シミュレータ産業戦略利用プログラム課題募集開始

研究施設ピックアップ
本サイトで利用可能な研究施設をランダムに表示しています

TSUBAME Grid Cluster
56.48 TFLOPS

東京工業大学 学術国際情報センター TSUBAME Grid Cluster
東京都目黒区大岡山 2-12-1

共用イノベーション創出事業の総合的な案内、他施設の紹介、各種情報提供

施設概要

「先端研究施設共用イノベーション創出事業」【産業戦略利用】

採択機関・研究施設



合計17件

※1 及び ※2 はそれぞれ連携して実施

『みんなのスパコン』TSUBAMEによるペタスケールへの飛翔

事業概要

提供資源: TSUBAME スーパーコンピュータ

2007年11月時点TOP500四連続日本No.1

103TFlops/22TByte RAM, 1.6PByte Disk

x86PCクラスタとの高い連続性

戦略分野利用推進: 48,960ノード時間/課題

「計算化学手法による創薬技術の開発」(継続、既存5件)

「大規模流体－構造連成解析技術の開発」(継続、既存1件)

「シミュレーションによるナノ材料・加工・デバイス開発」(新設2件)

「社会基盤のリスク管理シミュレーションへのHPC応用技術の開発」(新設3件)

新規利用拡大: 5,760ノード時間/課題

これまでTSUBAMEでやったことが無い分野の課題

東工大事業の特徴

- 企業のパソコン・クラスタ上の所有ソフトがそのまま、数十倍の速度や規模で動作
単にCPUパワーだけでなく、メモリ・ストレージ・ネットワークも
- 消耗品、旅費等は利用者の実費負担
- 数千CPUのスパコンを、既存シミュレーション利用者以外(ICT、金融、流通、サービス業界等)にも開放
例: クライアント1万台問題解決研究への資源提供、
1,024CPUコアで、900時間分(戦略分野) 90時間分(新規利用拡大)



Perl

Java



Struts



東京工業大学 学術国際情報センター TSUBAME Grid Cluster



655 nodes

Sun Fire X4600

CPU : AMD Opteron(Dual-Core)
5,240CPU / 10,480Core
メモリ : 21.4TB
演算性能 : 50TFlops(Peak)
38.18TFlops(Linpack)



648 slots

ClearSpeed CSX600 SIMD accelerator

総演算性能: 53TFlops(Peak)
TSUBAME導入システム 29TFlops
分子動力学アクセラレータ 24TFlops

TSUBAME Grid Cluster

総合演算性能:

103TFlops(Peak)

56.43TFlops(Linpack)



100ギガビット級ネットワーク装置



InfiniBand Network Voltaire ISR 9288 × 8

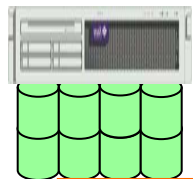
4x10Gbps(片方向)

24x1Gbps
(片方向)

SX-8i:porting

Internet

SuperTitanet

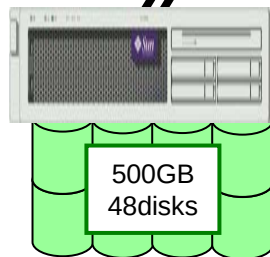


20台

Sun Fire X4500

高度研究用大規模ストレージ基盤

総物理容量: 0.5PB



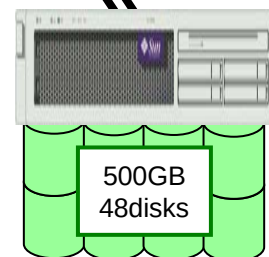
42台

Sun Fire X4500

物理容量: 1PB

ペタバイト級ストレージサーバ

総物理容量: 1.1PB



NEC iStorage S1800AT

物理容量: 100TB

8

総計
1.6PB

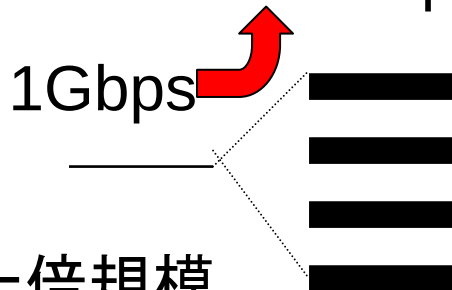
SINET3
40Gpbs
JGN2
10Gpbs
WIDE
10Gpbs
APAN
1Gbps

TSUBAMEを使うメリット

- 企業の標準的x86計算資源とTSUBAMEの比較 -

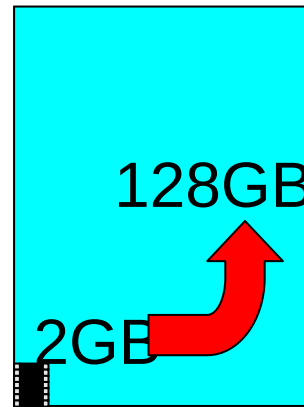
	CPUコア	Network	RAM	Disk(容量、速度)
企業	2~4(ノード)	1Gbps	2~8GB	500GB, 50MB/s
	32~128(ジョブ)	32Gbps	128GB	10TB(NAS), 100MB/s
TSUBAME	16(ノード) 1920(ジョブ)	20Gbps 2.5Tbps	32~128GB 3840GB	120TB, 3GB/s 120TB, 3GB/s

Network 20Gbps

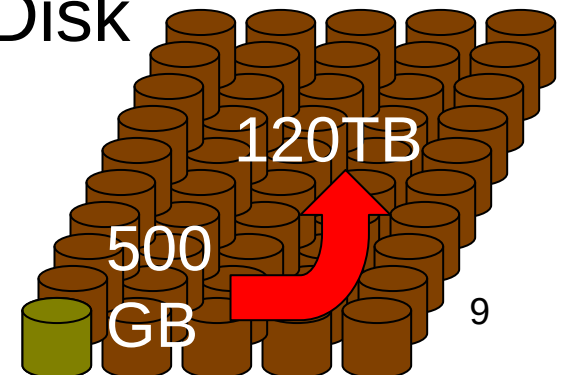


数十倍規模

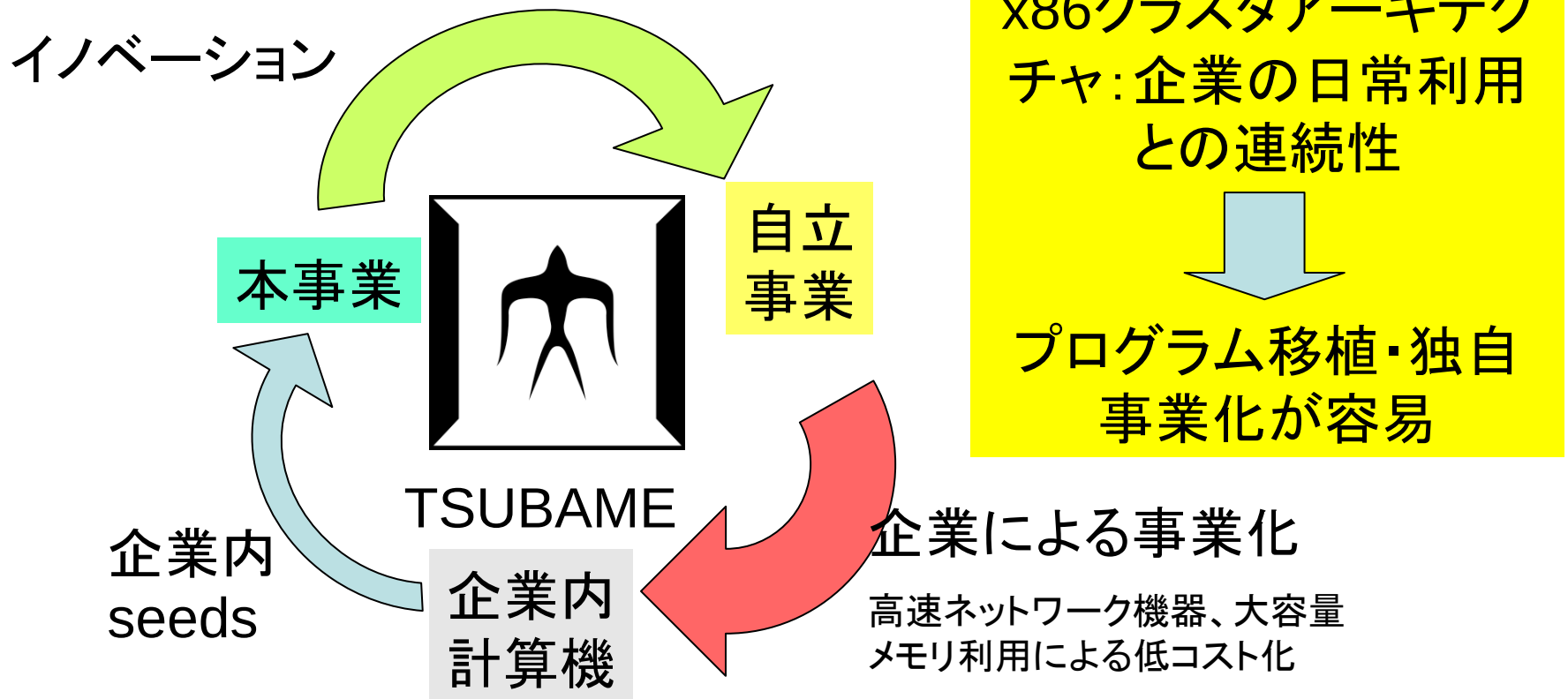
RAM



Disk



本事業での企業HPC利用のライフ サイクル確立





【戦略分野事例】

「計算化学手法による創薬技術の開発」

- 従来手法の10～100倍も大きな系を扱い、分子の規模を拡大したり、計算精度を向上したりして生体物質解析の質の向上を図る課題
- 大規模計算化学手法で得た結果をデータベース化する等、新薬をより安価に、高速に、安全に開発する技術を開発する課題
- Gaussian, GAMESS, NWChem, UTChem利用可
- 例：FMO法による巨大タンパクと薬剤分子のドッキング解析



【戦略分野事例】

「大規模流体-構造連成解析技術の開発」

- 東工大矢部教授等によって開発・発展されたCIP法やその他東工大教員が先端的に研究を進めている数値計算手法、これらの最先端の流体解析手法と構造計算を連成させる大規模流体-構造連成解析に取り組む課題等
- これまでになされたことの無い大規模流体または大規模構造解析に取り組む課題等
- 例：ポンプ、ガスタービン、ビルと風の相互作用などの流体-構造連成問題に対する大規模数値解析

【戦略分野事例】

「シミュレーションによるナノ材料・加工・デバイス開発」

- 「物性・機能発現指向のシミュレーション・デザイン技術」、「革新的ナノ計測・加工技術」としての「シミュレーションによるナノ材料・加工・デバイス開発」技術の確立を目的とする課題を募集
- 文部科学省 先端研究施設共用イノベーション創出事業 ナノテクノロジーネットワークプログラム、東京工業大学量子ナノエレクトロニクス研究センター「電子ビームによるナノ構造造形・観察支援」で造形したり観察したりする構造に関連するシミュレーション提案も募集
- その他、実験と連携、あるいは実験や加工に先行するナノ技術関連シミュレーション課題も募集



【戦略分野事例】

社会基盤のリスク管理シミュレーションへの HPC応用技術の開発

- 社会の抱えているリスクを軽減する研究開発
- 国民の利便性を向上させ、質の高い生活を実現するための研究開発
 - 防災、テロ対策・治安対策、都市再生・生活環境、ストックマネジメント、国土の管理・保全、交通・輸送システム、ユニバーサルデザイン等、国民生活を支える基盤的分野で、豊かで安全・安心、快適な社会を実現する研究開発を推進する課題を募集
- 社会基盤のリスク管理シミュレーションにおいて、これまで利用することが少なかったHPCインフラを提供
 - 大規模化、詳細化、適用範囲の拡大を目的とする課題を募集
 - 利用可能な計算資源量の制約から簡略化されたり、適用を見送られてきたりしてきた手法をHPCインフラにより詳細化、適用を図る課題を募集
- 例
 - 金融資産ポートフォリオのリスク評価
 - 自然災害リスク評価
 - 巨大地震発生時の経済リスク管理・避難誘導・支援ロジスティクス立案
 - 交通渋滞防止
 - 新型インフルエンザの感染大流行防止

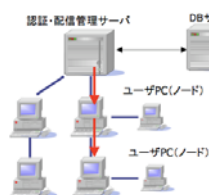
新規利用拡大課題

これまでTSUBAMEでなされたことが無い課題を募集

- 次世代ネットワークアプリケーション
– クライアント1万台問題の解決法の開発
- 第2、第3のGoogle開発試験プラットフォーム

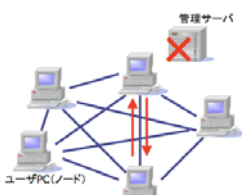
Ocean Grid と P2Pファイル交換システムとの相違点

● Ocean Grid

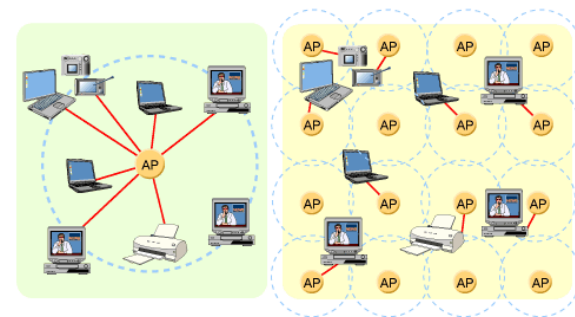


認証管理サーバの指示に従って、サーバと各ノードで通信のやり取りを行う。
→いつ、誰が閲覧したか把握可能。
ライブ映像データのみ中継するので、利用者PCの情報流出は原理的に発生しない。
→情報流出の原因にはならない。

● Pure-P2Pのファイル交換



管理者を介さず、各ユーザPCの間で直接ファイルをやり取りする
→無秩序なファイル交換/情報流出の危険





実施体制(1)

利用課題の公募・選定・評価

- 年2回公募: 4・10月の利用開始の2～3ヶ月前
- 年間予定採択件数: 16件→19件に増加予定
 - 戦略分野利用推進12件(既存5件、新規7件[5件採択済])
+新規利用拡大7
 - (配分資源に余裕があれば、追加随時公募実施予定)
- 課題選定委員会による公平な公募審査
 - 分野に通じた東工大教員・研究員
 - 産学官連携部門教職員
 - 将来は外部や競合しない本事業利用者からも



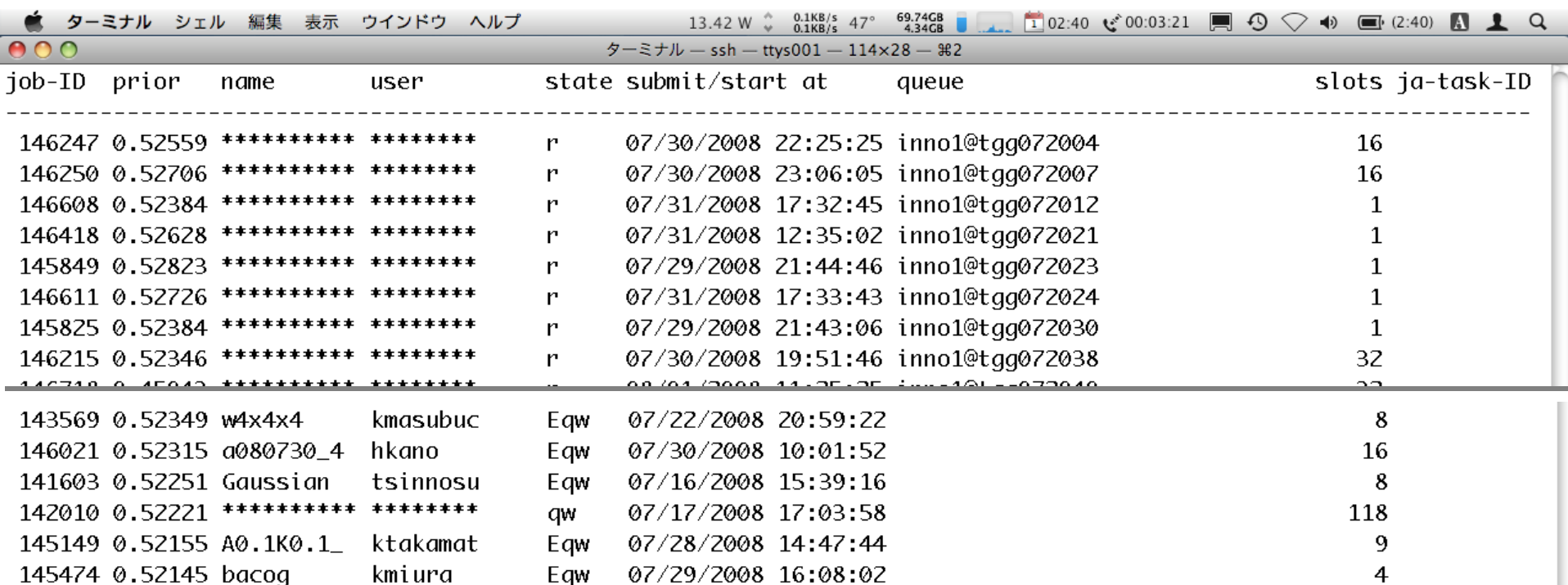
実施体制(2)

企業向け利用支援: 高いセキュリティの確保

- SSHによるログイン環境、ジョブ名、ユーザー名を隠蔽するジョブ管理
- 東工大内の通常サポートとは独立したサポート体制(tracシステム)
- 学内と分離したファイルシステム(/ihome, /iwork)
- 利用者群毎の専用の仮想計算機ログイン環境の提供も可能(有償)
- 独立したファイルシステム(ペタバイト級Diskにより可能)も提供可能(有償)

利用課題のJob名とuserは隠蔽

- 誰が何をやっているかが漏れません



job-ID	prior	name	user	state	submit/start at	queue	slots	ja-task-ID
146247	0.52559	*****	*****	r	07/30/2008 22:25:25	inno1@tgg072004	16	
146250	0.52706	*****	*****	r	07/30/2008 23:06:05	inno1@tgg072007	16	
146608	0.52384	*****	*****	r	07/31/2008 17:32:45	inno1@tgg072012	1	
146418	0.52628	*****	*****	r	07/31/2008 12:35:02	inno1@tgg072021	1	
145849	0.52823	*****	*****	r	07/29/2008 21:44:46	inno1@tgg072023	1	
146611	0.52726	*****	*****	r	07/31/2008 17:33:43	inno1@tgg072024	1	
145825	0.52384	*****	*****	r	07/29/2008 21:43:06	inno1@tgg072030	1	
146215	0.52346	*****	*****	r	07/30/2008 19:51:46	inno1@tgg072038	32	
146718	0.45042	*****	*****	r	08/01/2008 11:25:25	inno1@tgg072040	32	
143569	0.52349	w4x4x4	kmasubuc	Eqw	07/22/2008 20:59:22		8	
146021	0.52315	a080730_4	hkano	Eqw	07/30/2008 10:01:52		16	
141603	0.52251	Gaussian	tsinnosu	Eqw	07/16/2008 15:39:16		8	
142010	0.52221	*****	*****	qw	07/17/2008 17:03:58		118	
145149	0.52155	A0.1K0.1_	ktakamat	Eqw	07/28/2008 14:47:44		9	
145474	0.52145	bacog	kmiura	Eqw	07/29/2008 16:08:02		4	

トラッキングシステムによるサポート

- 各利用課題毎に独立したtracページ



Integrated SCM & Project Management



Integrated SCM & Project Management

[検索実行](#)

[中](#) | [ログアウト](#) | [ユーザ設定](#) | [ヘルプ/Guide](#) | [Trac について](#) | [My Account](#)

[タイムライン](#) | [チケットを見る](#) | [チケット登録](#) | [検索](#)

[スタートページ](#) | [ページ一覧](#) | [最近更新されたページ](#) | [このページの最終更新](#)

■ Trac とは

Trac とは、プロジェクトにおける構
ドキュメント管理には Wiki が利用

チケット

Trac ではバグや課題の情報はチケッ
チケットは Web ブラウザから Trac
これらの情報はデータベースで管理さ

Wiki

Wiki は、Web ブラウザからページ
Wiki の活用により、Trac は単なる

レポート一覧

登録されているレポートの一覧です。

Report	Title
{1}	未解決チケット
{2}	未解決チケット(バージョン別)
{3}	未解決チケット(マイルストーン別)
{4}	担当者別アサイン済みチケット
{5}	担当者別アサイン済みチケット(説明文付き)
{6}	マイルストーン別全チケット(解決済みチケットを含む)
{7}	私の未解決チケット
{8}	未解決チケット(私のチケットを優先して表示)

み込まれています。



Powered by **Trac 0.10.4**
By Edgewall Software.
Translated by インタクト株式会社

物理的に隔離したサーバラック

- 利用者群毎の専用の仮想計算機ログイン環境（有償）
- 独立ファイルシステムの提供（有償）



遠隔監視装置付き、4パーティションセキュリティラック：個別に鍵をかけ、開閉を遠隔監視

実施体制(3)

企業向け利用支援:手厚い支援

採択前

- 施設共用技術指導研究員による提案支援
 - 応募を検討する企業の現場までヒアリングに参ります。
- 東工大教員・研究者とのマッチング
 - 東工大産学連携本部経由、GSIC直接
- 「みんなのスパコン」利用者間交流の促進
 - 東工大で運営の「みんなのスパコン」SNSへの招待

採択後

- TSUBAMEの使い方から、シリアル高速化、並列化の相談に乗ります。
 - 施設共用技術指導研究員による支援、TSUBAME運用SEによる支援、東工大教員・研究者による支援と幅広く対応します。
- 東工大教員・研究者とのマッチング
 - 利用課題での利用後に発生した問題解決のために役立つ東工大教員・研究者を紹介します。

支援例

- 全くバッチキューシステムを使ったことが無かった利用者に対するオンサイトでの利用指導
- 大規模並列化によるボトルネックの発見方法およびデータ配布方法の改善指導
- 異なるアーキテクチャによる計算精度の際に関する技術指導
- 異なるMPI実装での実行支援



実施体制(4)

本事業人員体制

- 施設共用技術指導研究員：1名
 - － 特任准教授 西川武志
- 共用促進リエゾン：(西川兼任)
- 施設共用技術指導支援員：1名
 - － 質問受付窓口、アカウント発行、利用者サポート
- 事務支援要員：1名



応募にあたって(1)

- 利用課題申請書
- 利用課題名(邦文、英文)
- 利用課題責任者
- 利用課題従事者
- 利用課題内容
- 課題種別(戦略分野or新規利用拡大)
- 利用課題概要(採択時、公開されます。)



応募にあたって(2)

- どのような国家的・社会的課題に対応した技術課題の解決に資するものか
- 利用課題の社会的意義について
- 利用課題の経済波及効果について
- イノベーション創出への貢献について
- 平和利用であるか
- 公序良俗に反していないか
- 文部科学省「生命倫理・安全に対する取組」に適合しているか
- 人権および利益保護への配慮を行っているか



応募にあたって(3)

- 人権および利益保護への配慮を行っているか
- 利用課題を実施するために必要な人員および予算の確保について
(利用課題に従事する人数、各自の経験、必要なソフトウェアのライセンス取得状況、費用について、特に具体的に記述してください。)
- 将来的な有償利用への移行の見込みについて
- 試作までに必要とする計算資源量の見積りについて
- 製品化までに必要とする計算資源量の見積りについて



応募にあたって(4)

- ビジネスプランについて
- 利用するコンピュータプログラムについて
- 利用課題の基礎となる査読付公刊論文の有無について
- 利用課題の基礎となる知的財産権の有無について
- 実施計画
- 将来計画

応募のメリット

- 有償利用制度の利用資格が得られます。

採択にあたって

- 利用規則、細則、条件を守るという覚書の提出をお願いします。
 - － 常識的な契約条項です。
- 東工大との共同研究契約の締結をお願いします。
 - － 産学連携本部が窓口となります。
 - － 契約書のひな形を提供しますが、協議により修正可能です。

利用終了後

- 成果報告書（A4にて2ページ程度）
一般公開されます。
- 成果報告会へのご協力

参考）平成19年度利用課題利用成果報告シンポジウム

<http://www.gsic.titech.ac.jp/innovation/H20SympoTop.html>

まとめ

- 大学としての特色である、研究と教育を担う組織の知識と経験を活かして本事業に取り組みます。
- 戦略分野、新規利用拡大、共にイノベーションを創出する環境を提供します。