

## トピックス

### 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】

学術国際情報センター長 渡辺 治

#### 『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】

「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】は、大学、独立行政法人等の研究機関が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を創出するために、平成19年度から文部科学省が新たに開始した事業である。

“『みんなのスパコン』TSUBAMEによるペタスケールへの飛翔”は、文部科学省の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】の17件のうち1件として採択され、東京大学が実施する「先端的大規模計算シミュレーションプログラム利用サービス」と連携して、平成19年7月1日から実施を開始した。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た。



図1 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

“『みんなのスパコン』TSUBAMEによるペタスケールへの飛翔”において、理論演算性能 85TFlops、22TB メモリ、1.6PB オンラインストレージディスクを有し、TOP500 リスト 2007 年 6 月にて国内・アジア共に 1 位を誇る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が 1 年間に供給可能な資源の最大 15%を提供した。

The screenshot shows the 'Kyoyonavi' website interface. At the top, there is a header with the logo '共用ナビ' and the text '研究施設共用総合ナビゲーションサイト'. To the right, it says '文部科学省 Ministry of Education, Culture, Sports, Science and Technology MEXT'. Below the header is a search bar with the text '施設をさがす' and a search button. The main content area displays search results for '施設情報' (Facility Information). The top result is for '東京工業大学 学術国際情報センター TSUBAME Grid Cluster'. The result card includes a thumbnail image of server racks with the text 'TSUBAME Grid Cluster 56.43 TFLOPS'. To the right of the card, contact information is listed: 〒152-8550 東京都目黒区大岡山 2-12-1, TEL (03)5734-2085, FAX (03)5734-3198, and a URL: http://www.gsic.titech.ac.jp/innovation/. Below the result card, there is a section titled '施設の概要' (Facility Overview) with a brief description of the center's capabilities and staff. On the left side of the page, there are several navigation menus: '施設をさがす' (Facility Search), '一覧表示' (List Display) with sub-items like '地図からさがす' (Search from map), '利用分野でさがす' (Search by field of use), '全施設一覧' (All facilities list), and '利用成果報告' (Usage results report); 'クイックアクセス' (Quick Access) with a button for 'お問い合わせやご相談はこちら' (Contact us here); and 'トピックス' (Topics) with sub-items like '募集・採択情報' (Recruitment/selection information), 'イベント情報' (Event information), and 'ニュース' (News).

図2 文部科学省 研究施設共用総合ナビゲーションサイト (<http://kyoyonavi.mext.go.jp/>) における東京工業大学学術国際情報センターTSUBAME Grid Cluster 施設情報ページ

## 【事業実施と成果】

〔安心安全利用環境の構築〕

本事業の利用者のために独立したデータ保存領域を恒久的なもの(ihome)および一時的なもの(iwork)を学内とは別に用意し、データセキュリティの向上を図った。ジョブ管理システムでは、本事業の利用者のジョブに関して利用者アカウント、ジョブ名等を匿名化するように改修を行い、各課題のグループ外の利用者に何をやっているかの情報が漏れない措置を施した。平成 20 年 3 月にはセキュリティラックを導入し、本事業用のファイルサーバを物理的に東工大内向けのサーバとは隔離した場所に設置するとともに VPN ルータの導入を行った。

#### 〔利便性の高い利用環境の構築〕

TSUBAME 利用にあたる基本的な質問回答を東工大内とは独立して行えるように平成 19 年 10 月に質問回答追跡システムの改修を行い、運用を開始した。計算機の利用にあたっては学内向けのマニュアルの他に本事業利用者向けの簡易ガイドを作成して採択利用者に送付した。

#### 〔平成 19 年度利用課題採択および実施〕

本事業の広報として日本機械学会年会予稿集、情報処理学会誌、日本薬学会誌に広告を出稿した。日本機械学会年会、HPCS2005、日本薬学会年会にブースを出展し、広報活動を行った。250 組織以上にコンタクトを取り、40 以上の組織から返信があり、30 以上の組織が応募を検討し、最終的に延べ 15 件の応募があった。

#### 〔定期公募〕

「戦略分野利用推進」枠および「新規利用拡大」枠に関して、7 月 17 日から 9 月 18 日まで課題募集を実施した。第 1 回（7 月末締切）、第 2 回（9 月 18 日締切）いずれも戦略分野利用推進枠 2 件、新規利用拡大枠 2 件の応募があった。

#### 〔随時公募〕

新規利用拡大枠では毎月 15 日を期限として募集し 10 月に 1 件、11 月に 1 件の応募があり、戦略分野利用推進枠は配分計算資源に余裕があったため追加公募を 10 月 9 日から 12 月 15 日まで行い延べ 4 件の応募があった。結局、新規利用拡大枠では 12 件程度の採択予定に対し、6 件の申請があり、審査の結果 6 件を採択した。戦略分野利用推進枠では、「計量化学手法による創薬技術の開発」および「大規模流体－構造連成解析技術の開発」、それぞれ 2 件程度の採択予定に対し、前者は延べ 8 件の応募に対し 4 件を採択し、後者は 1 件の応募に対し 1 件を審査の結果、採択した。

#### 〔利用課題実施〕

平成 19 年 8 月戦略分野利用推進 1 件、新規利用拡大 2 件、10 月戦略分野利用推進 1 件、新規利用拡大 2 件、12 月新規利用拡大 2 件、平成 20 年 1 月戦略分野利用推進 3 件が、それぞれ利用を開始した。利用に際しては施設共用技術指導研究員により利用に際しての技術指導、大規模並列化のチューニング指導、問題解決のための指導を行った。

#### 〔プロジェクトの総合的推進〕

施設共用技術指導研究員兼共用促進リエゾン員、施設共用技術指導研究補佐員を 10 月 1 日より採用し、施設共用の技術指導、企業利用者募集、利用進捗管理を行った。事業ホームページ開設整備、利用制度の整備、東京大学の事業との連携を行った。

表1 平成19年度採択課題一覧

番号	申請課題名	申請代表者	会社名	課題種別
1	巨大生体分子の非経験的分子軌道法による設計指針構築	中村振一郎	株式会社三菱化学科学技術研究センター	計算化学手法による創薬技術の開発
2	銀行業・保険業における ALM (Asset Liability Management) システムの開発	鳥居秀行	ニューメリカルテクノロジーズ株式会社	新規利用拡大
3	大規模分散検索エンジン製品の開発	清兼義弘	ビジネスサーチテクノロジー株式会社	新規利用拡大
4	タンパク質一次構造の網羅的解析による創薬技術の開発	金澤光洋	ライフィクス株式会社	計算化学手法による創薬技術の開発
5	ワイドギャップナノ構造体精密加工のシミュレーション	宮本良之	日本電気株式会社	新規利用拡大
6	機能性無機材料の光学的電子的物性と構造設計の研究	善甫康成	住友化学株式会社	新規利用拡大
7	混相流シミュレーションコードの並列拡張性能の評価	桑原諸兄	株式会社計算流体力学研究所	新規利用拡大
8	高層ビルの大規模耐震構造解析	秋葉博	株式会社アライドエンジニアリング	新規利用拡大
9	コンピュータ支援によるポリアミン誘導体医薬品の開発	五十嵐一衛	株式会社アミンファーマ研究所	計算化学手法による創薬技術の開発
10	CONFLEX を用いた配座探索および結晶多形解析	大田一男	コンフレックス株式会社	計算化学手法による創薬技術の開発
11	電磁場中大規模粉体挙動シミュレーションによる電子写真設計プロセス革新	渡邊孝宏	株式会社リコー	大規模流体一構造連成解析技術の開発