

## 2-6 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】

センター長 渡辺 治

特任准教授 西川 武志

### 『みんなのスパコン』TSUBAMEによるペタスケールへの飛翔

#### 2-6-1 事業概要

平成 19 年度から文部科学省が新たに開始した事業「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ことを目指し、当初平成 23 年度末まで実施される予定であったが、補助事業として、先端研究施設共用促進事業に移管することとなり平成 20 年度末で終了となった。本学術国際情報センターが平成 19 年 7 月 1 日から採択された“『みんなのスパコン』TSUBAMEによるペタスケールへの飛翔”は、先端研究施設共用促進事業の採択機関として平成 21 年度以降も継続して採択されることとなった。本年度も東京大学が実施する「先端的な大規模計算シミュレーションプログラム利用サービス」と連携してした。先端研究施設共用促進事業でも東京大学事業との連携を継続する。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。

平成 20 年度は「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】として最後の実施年度となったが、当初目標の戦略分野利用推進課題 5 件程度、新規拡大 6 件程度を大きく上回る戦略分野利用推進課題 9 件、新規利用拡大課題 6 件の合計 15 件の課題を採択した。

表 2-6.1 平成 20 年度 課題採択・実施状況

種別	平成 20 年 度採択	平成 19 年 継続	合計
戦略分野利用推進課題「計算化学手法による創薬技術の開発」	1	4	5
戦略分野利用推進課題「大規模流体－構造連成解析技術の開発」	0	1	1
戦略分野利用推進課題「シミュレーションによるナノ材料・加工・デバイス開発」	4	設定無	4
戦略分野利用推進課題「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」	4	設定無	4
新規利用拡大	6	0	6
小計	15	5	20

「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



図 2-6.1 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



図 2-6.2 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

## 2-6-2 事業実施と成果

### 【課題採択】

平成 20 年度は 4 つの戦略分野利用推進課題（以下戦略）のうち「計算化学手法による創薬技術の開発（以下、計算創薬）」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（以下、ナノシム）」4 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（以下、基盤リスク）」4 件を採択し合計 9 件、新規利用拡大課題（以下、新規拡大）は 6 件を採択し、当初目標の戦略 5 件程度、新規拡大 6 件程度を大きく上回る採択数となった。平成 21 年度第 1 回公募を平成 20 年度中に行い「計算創薬」1 件、「大規模流体－構造連成解析技術の開発（以下、流体構造）」1 件、「ナノシム」2 件、「基盤リスク」1 件の合計 5 件、新規拡大は 2 件を採択した。

公募時期による分類では、定期公募では 4 月利用開始 8 件（「ナノシム」2 件、「基盤リスク」3 件、「新規拡大」3 件）、10 月利用開始 5 件（「ナノシム」2 件、「基盤リスク」1 件、「新規拡大」2 件）、随時公募では 7 月利用開始「計算創薬」1 件、1 月利用開始「新規拡大」1 件であった。

### 【課題実施】

TSUBAME が 1 年間に提供可能な計算資源、1 口 2,880 ノード時間換算で 1,916 口中 229 口約 12%を課題選定評価委員会の審査結果に応じて合計 20 課題に配分した。

平成 20 年度は前年度からの継続課題が 5 件と年度当初の採択課題が 8 件と順調な滑り出しのため、年間を通じて全ての配分計算資源を実施課題が消費した。

### 【広報活動】

広報活動では、日本機械学会 2008 年度年次大会、日本応用数理学会 2008 年度年会、日本化学学会年会出展料、HPCS2009、電気学会全国大会 2009 に出展し、来場者に事業周知を図った。また第 11 回理論化学討論会、CompSys2008、第 22 回数値流体シンポジウム、2008 年日本バイオインフォマティクス学会年会に参加し、参加者に事業の周知を図った。蔵前工業会誌蔵前ジャーナル新年号に広告を出稿した。その際に東京大学の事業「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、互いに双方を紹介した。成果報告会として平成 20 年 6 月 11 日(水)に 100 名の出席者を得てシンポジウムを開催し、関係者からの説明を行うとともに平成 19 年採択の終了課題から 1 件、継続課題から 1 件ずつ計算資源利用量首位の課題に利用報告を行って貰った。シンポジウムの模様とともに終了課題の報告書は Web に掲載し公開した。

### 【利用者支援】

利用者支援では施設共用技術指導研究員等によるプログラム開発、チューニング、並列化等の指導、支援を行った。施設共用技術指導研究員等がイノベーション創出のための技術指導力を向上させる調査活動を行い、広報活動でも述べた第 11 回理論化学討論会、CompSys2008、第 22 回数値流体シンポジウム、2008 年日本バイオインフォマティクス学会年会に参加し本事業における施設利用の高度化を図れる課題を調査した。TSUBAME の

利用状況やサポート、アプリケーションに関する情報提供の Web の充実を図った。ログインノードやファイルサーバのセキュリティ対策の向上も行った。

#### 【プロジェクトの総合的推進】

本事業に関する利用規程や規則および様式を整備し Web にて公開した。

計算資源配分においては平成 19 年度の反省を踏まえて利用実績進捗に応じて計算資源の再配分を行う体制を整えた。平成 21 年度はさらに毎月再配分審査が実施可能な体制を構築することを平成 20 年度の課題選定評価委員会にて了承を得た。

課題選定評価委員会は、第一次審査を専門家の手に依るものとするため人員を平成 19 年度の 27 名から 53 名とほぼ倍増した。

平成 23 年度の本事業終了後に恒久的な企業利用を継続して実施することを視野に入れ新たな形態の全国共同利用基盤センターとしての組織作りの検討を行い、本事業を円滑に推進するため、東工大における本事業の指揮命令系統を含めた組織体制の整備し、外部利用ワーキンググループを設置した。

表 2-6.2 平成 20 年度採択課題一覧

戦略分野利用推進課題 1 計算化学手法による創薬技術の開発

申請課題名	会社名	申請代表者
タンパク質-化合物間の高精度結合自由エネルギー計算	富士通株式会社 バイオ IT 事業 開発本部 バイオケミカルプロ ジェクト室	勝山マリコ

戦略分野利用推進課題 3 シミュレーションによるナノ材料・加工・デバイス開発

申請課題名	会社名	申請代表者
ナノ炭素、ナノ窒化ホウ素の制御された加工方法を探るシミュレーション	日本電気株式会社 R&D ユニッ ト 中央研究所ナノエレクトロニ クス研究所	宮本良之
ナノ構造設計に基づく機能性無機材料の開発	住友化学 株式会社 筑波研究所	善甫康成
新規材料開発のための、オーダーN法による金属酸化物表面の第一原理シミュレーション	アクセルリス株式会社 モデリン グシミュレーション部	道賀康祐
希土類永久磁石材料の磁気特性解析	株式会社日立製作所 基礎研究所 ナノ材料・デバイスラボ N07 ユ ニット	北川功

戦略分野利用推進課題 4 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

申請課題名	会社名	申請代表者
高層ビルの大規模非線形地震応答解析	株式会社アライドエンジニアリン グ ADVC 事業部	秋葉博
日本全国の地震災害リスク評価	東京海上日動リスクコンサルティ ング株式会社	矢代晴実
大規模 ALM シミュレーションへの HPC 技術の適用	ニューメリカルテクノロジーズ株 式会社	鳥居秀行
大規模空間での高い周波数におけるアンテナ伝播・電磁界シミュレーション	アジレント・テクノロジー株式会 社 EDA アプリケーションエン 지니어リング	橋本憲良



## 新規利用拡大

申請課題名	会社名	申請代表者
3D CG レンダリング及び動画エンコーディングの分散処理技術の開発	ブランドダイアログ株式会社 グリッディ事業部	森谷武浩
環境調和型熱電半導体の材料設計	FDK 株式会社技術開発本部 先進技術開発部 CAE 開発課	加藤彰彦
3次元圧縮性流体コードによる高精度混相流シミュレーションコード超並列高速化	株式会社 計算流体力学研究所 混相流解析グループ	桑原諸兄
遷移金属錯体触媒を用いた C-C カップリング反応メカニズムの理論研究	住友化学株式会社 有機合成研究所	後藤文郷
生体高分子用シミュレーションソフトウェア DS CHARMM の大規模系における並列性能評価	サイエンス・テクノロジー・システムズ株式会社	福島信弘

表 2-6.3 平成 19 年度採択課題一覧

### 戦略分野利用推進課題 1 計算化学手法による創薬技術の開発

申請課題名	会社名	申請代表者
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	株式会社三菱化学科学技術研究センター	中村振一郎
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	ライフィクス株式会社	金澤光洋
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	株式会社アミンファーマ研究所	五十嵐一衛
CONFLEX を用いた配座探索および結晶多形解析	コンフレックス株式会社	大田一男

### 戦略分野利用推進課題 2 大規模流体一構造連成解析技術の開発

申請課題名	会社名	申請代表者
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	株式会社リコー	渡邊孝宏