

2-6 先端研究施設共用促進事業

『みんなのスパコン』TSUBAMEによるペタスケールへの飛翔

学術国際情報センター	センター長	渡辺 治
学術国際情報センター	副センター長	青木尊之
学術国際情報センター	特任准教授	西川武志
学術国際情報センター	特任准教授	渡邊寿雄

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委託事業「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平成20年度末で終了となり平成21年度からは補助事業に移管した。本学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「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”は同一の事業名で先端研究施設共用促進事業として平成21年度も実施した。

平成21年度の課題採択件数は15件（戦略分野利用推進課題10件、新規利用拡大課題5件）であり、実施件数は29件（戦略分野利用推進課題24件、新規利用拡大課題5件、平成20年度からの継続課題9件、平成19年度からの継続課題5件）であった。

平成21年1月末には平成19年度採択22機関に対して、文部科学省による共用体制整備状況評価が実施された。平成22年2月末に評価結果が公表され、本事業は最高の評点（区分4）と判断された。この評点は評価を受けた22機関のうち、本事業を含め3機関だけが得た評価であり、スーパーコンピュータ利用機関では本事業だけであった。本事業の評価結果に寄せられたコメントは以下の通りであった。

「HPCの分野や産業界で注目されているGPGPUをアクセラレータとした我が国最高級の性能をもつGPUハイブリッドスパコンを産業利用に提供し、これまで研究会や講習会の開催、共用促進リエゾンなどの活動により41件の課題を選定し、着実な成果をあげていることは高く評価できる。また、課題募集・選定・評価の体制や利用支援・利用者確保の体制も整備されていること、さらに今後の利用拡大や有償化の計画も評価できる。

今後、GPUと汎用CPUの混合利用技術を産業界に普及させていく積極的な活動が求められるとともに、ハイブリッドスパコンを効率的に使う課題を優先的に受け入れるなど、センターの特徴を生かす活動が求められる。そのためにも、他機関(地球シミュレータや七大学)との連携が必要である。」(なお評価結果の詳細については以下のURLを参照のこと。

http://www.mext.go.jp/b_menu/boshu/detail/1290895.htm)

2-6-2 【事業実施と成果】

【課題採択】

平成21年度は4つの戦略分野利用推進課題（以下、戦略利用）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、「大規模流体－構造連成解析技術の開発（以下、流体構造）」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）」6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）」2件を採択し、戦略課題合計10件を採択した。新規利用拡大課題（以下、新規拡大）は5件を採択し、当初目標の採択件数15程度の目標を達成する採択数となった。表1に平成21年度の課題採択・実施状況を示す。

表1 平成21年度の課題採択・実施状況

種別	平成19年度 採択件数	平成20年度 採択件数	平成21年度 採択件数	平成21年度 実施件数
戦略利用「計算創薬」	4	1	1	6（5）
戦略利用「流体構造」	1	0	1	2（1）
戦略利用「ナノシム」	設定無	4	6	10（4）
戦略利用「基盤リスク」	設定無	4	2	6（4）
新規利用拡大	6	6	5	5（0）
小計	11	15	15	29（14）

（）内は内数で前年度からの継続課題

【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）の約12%（238口）を課題選定評価委員会の審査結果に応じて合計29件のトライアルユース課題に配分した。1口は有償利用課題の補助に、1口は共用促進事業推進室での利用課題支援（動作検証等）のために配分した。

平成21年度は年度開始当初より各実施課題が順調に配分計算資源を消費し、平成22年3月2日時点で95%の利用率を達成した。これは、前年度からの継続課題が14件あったことと、学内需要繁忙期をトライアルユース課題の利用休止期間（12月中旬～平成22年2月中旬）と設定し、計画的な利用を呼び掛けたことによるものである。

【広報活動】

広報活動では、事業広報のブース出展、蔵前ジャーナルへの広告掲載、成果報告会等を実施した。

事業広報のブース出展を、日本コンピュータ化学会 2009 春季年会、2009 年秋季 第70 回応用物理学会学術講演会（富山大）、日本機械学会 2009 年度年次大会（岩手大）、第3回

分子科学討論会 2009 (名大)、日本応用数学会 2009 年度年会 (阪大)、第 22 回計算力学講演会 (金沢大)、日本コンピュータ化学会 2009 秋季年会 (東北大)、第 23 回分子シミュレーション討論会 (名古屋)、第 2 3 回数値流体力学シンポジウム (仙台)、2010 年ハイパフォーマンスコンピューティングと計算科学シンポジウム (HPCS2010) (工学院大)、日本物理学会第 65 回年次大会 (岡山大)、2010 年春季第 57 回応用物理学関係連合講演会 (東海大)、日本化学会第 90 春季年会(2010) (近畿大)、日本薬学会第 130 年会 (岡山) において行った。また東京大学の事業「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、当該事業がブース出展を行った第 8 回産学官連携推進会議 (京都) やイノベーションジャパン 2009 (東京) で出展協力を行った。

蔵前ジャーナルへの広告掲載は 2009 春号 (No.1012)、2009 初夏号 (No.1013)、2009 盛夏号 (No.1014)、2009 秋号 (No.1015)、2009 冬号 (No.1016) に投稿した。

成果報告会として平成 21 年 6 月 25 日 (木) に約 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 20 年採択の戦略利用と新規拡大からそれぞれ 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事業 Web ならびに文科省共用ナビに掲載し公開した。

【利用者支援】

利用者が社内で日常的に利用している OS、コンパイラ、並列ライブラリ等の開発・利用環境と TSUBAME の環境との差異に由来する問題を解消するため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。

一例として、民間企業内で行った数十～百数十並列程度では問題にならなかったことが、TSUBAME での数百～千を超える並列計算ではエラーとなり、データの配置や通信に必要なバッファメモリ容量等の改善によって問題が解決された。他の例では TSUBAME では収束判定が正常に行われない計算条件やモデル選択の設定を変更するよう指導し問題を解決した。また別の例では、電子状態理論に基づくアプリケーションにおいて、設定したモデルが不適切であることを指摘し問題を解決した。

【プロジェクトの総合的推進】

昨年度設置された外部利用ワーキンググループがもととなり、平成 21 年 4 月から共同利用専門委員会が設置され、本事業を含む共同利用体制の整備等の検討・審議がされることとなった。また共用促進事業推進室が設置され、本事業に関する業務を担当することとなった。これにより共用促進事業推進室が利用規程や規則および様式の整備、事業運営計画策定等を行い、共同利用専門委員会での承認を受け、事業を実施する体制が整備された。

平成 21 年 7 月 28 日から本事業における有償利用サービスを開始し、同時に TSUBAME の共同利用も開始した。

従前は採択課題毎に共同利用契約を個別に締結していたが、利用約款を定めたことで約

款の遵守と言う手続きに変更し、採択企業と東工大の両方における事務コストを軽減した。

計算資源配分においては平成19年度、平成20年度の反省を踏まえて、学内繁忙期となる12月中旬から2月中旬まで本事業による計算ジョブのバッチキューでの実行休止期間とした。利用実績進捗に応じて、ほぼ毎月配分見直しを実施し、平成22年3月2日時点で95%の利用率を達成した。

課題選定評価委員会は、平成22年度から1名増員し54名となった。

表2 平成21年度採択課題一覧

表2-1 戦略利用「計算化学手法による創薬技術の開発」

申請課題名	会社名
拡張アンサンブルシミュレーションによるタンパク質とリガンドの結合構造予測法の開発	武田薬品工業株式会社 医薬研究本部 探索研究センター

表2-2 戦略利用「大規模流体-構造連成解析技術の開発」

申請課題名	会社名
流体構造連成シミュレーションによるターボ機械流体関連振動解析技術の実用化	株式会社 荏原製作所 開発統括部 技術開発室

表2-3 戦略利用「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
遷移金属錯体触媒を用いた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
機能性有機分子の安定性に関する最適化設計の研究	太陽誘電株式会社 開発研究所 技術企画統括部
排ガス浄化触媒材料開発における第一原理シミュレーション	日産自動車株式会社
酸化物分散強化鋼の密度汎関数理論による界面エネルギー計算	株式会社コベルコ科研
リチウムイオン二次電池正極の材料設計	アドバンスソフト株式会社
鋼材強化に資する微細析出物成長の計算機シミュレーション	新日本製鐵（株）

表2-4 戦略利用「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
淡水レンズ再現・予測計算ツールの整備	株式会社 計算力学研究センター 第二技術部
アジアモンスーン地域の津波・高潮メガリスクに関する防災シミュレーション	日本工営株式会社

表 2-5 新規利用拡大

申請課題名	会社名
複数車体の移動を考慮した電着塗装シミュレーション技術の開発	株式会社 ディライト
素反応過程を考慮した燃焼のシミュレーション技術の開発	株式会社 爆発研究所
新概念による大規模並列電磁界解析技術研究	ソニー 株式会社
One to One データマイニングシステムの開発と評価	ソフィア総合研究所株式会社
進化的映像符号化の高度並列シミュレーション	NTT サイバースペース研究所