

2-9 TSUBAME 共同利用サービス

副センター長 青木 尊之
共同利用推進室 特任准教授 渡邊 寿雄

【TSUBAME共同利用サービスの概要】

学術国際情報センターでは、スパコンTSUBAME2.5の計算資源を学内のみでなく、学外の利用者へも広く提供するTSUBAME共同利用サービスを行っている。学外からのTSUBAMEの利用は本稿で述べるTSUBAME共同利用サービスの他にも、別稿にて説明しているJHPCN、HPCI、そして先端研究基盤共用・プラットフォーム形成事業トライアルユースでも可能であり、平成26年度はTSUBAMEの全提供可能計算資源の37%を上限として学外向け資源提供サービスを行った。上限については、共同利用専門委員会において審議され決定している。

【TSUBAME共同利用サービスのカテゴリ】

TSUBAME共同利用サービスには、「学術利用」、「産業利用」、「社会貢献利用」の3つの利用区分と「成果公開」と「成果非公開」のカテゴリがあり、それぞれ下記のように分類される。なお、産業利用の詳細は「2-10 TSUBAMEの産業利用サービス」を参照のこと。

学術利用：学術的な貢献を目的とし、「成果公開」のカテゴリの課題のみ公募する。利用課題責任者は、大学・大学共同利用機関・国立研究所・高等専門学校、独立行政法人・公設試験研究機関・特殊法人（非株式会社形態のもの）、財団法人又は社団法人等（以下「大学・研究機関等」）、特定非営利活動促進法に規定される特定非営利活動法人等のいずれかに所属する者でなければならない。

産業利用：産業界でのイノベーション創出、競争力向上のために企業では実施し難い規模の計算をTSUBAMEで行う課題であり、「成果公開」と「成果非公開」の両方のカテゴリの課題を公募する。利用課題責任者は、会社法等に規定される法人に所属する者でなければならない。

社会貢献利用：さまざまな社会貢献を目的として、「成果公開」と「成果非公開」の両方のカテゴリの課題を公募する。利用課題責任者は、特定非営利活動促進法に規定される特定非営利活動法人、または公共団体等のいずれかに所属する者でなければならない。

【採択課題数の推移】

平成21年7月より開始したTSUBAME共同利用サービスは平成26年度で6年目、またTSUBAME2.0/2.5での運用も6年目となり、1年間を通して安定したサービスを提供することができた。図1に示した採択課題数の推移から明らかなように、平成26年度の採択課題数の

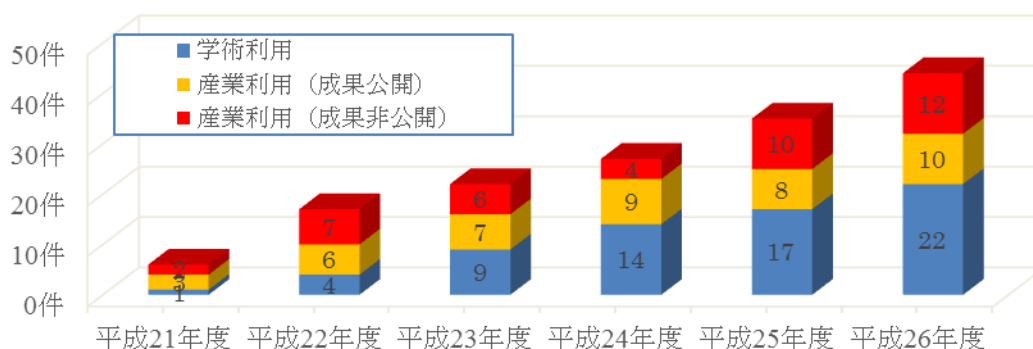


図1 Tsubame共同利用サービスの採択課題数の推移

合計 44 件 (内訳は学術利用 22 件、産業利用・成果公開 10 件、産業利用・成果非公開 12 件) は平成 21～25 年度までの 6, 17, 22, 27, 35 件から順調な増加となった。特に学術利用での採択課題数の増加 (平成 21～26 年度までそれぞれ 1, 4, 9, 14, 17, 22 件) が顕著であり、これは Tsubame2.5 の高い性能による利用希望者の増加に加え、他大学や研究機関に対する本サービスの周知が進んだことが要因と考えられる。平成 26 年度は Tsubame2.5 として初めて年間を通して資源を提供しており、Tsubame2.0 と比較して同じ利用口数であっても提供計算資源量が大幅に増加 (FLOPS 値で 2.4 倍、GPU 利用アプリケーションのベンチマークで 2 倍弱～3 倍) していることも、利用希望者の増加につながっている。

また表 1 には、採択課題一覧として課題代表者所属機関や課題名、そして利用口数を成果非公開の課題では、課題代表者の所属機関以外の情報は非公開である。成果公開の課題における利用口数の傾向を見ると、学術利用の利用口数が平均 5.1 口 (=113 口/22 課題) に対し、産業利用の利用口数は平均 16.2 口 (=162 口/10 課題) となり、産業利用は学術利用の 3.2 倍程度の大口利用であることが分かる。もちろん、どちらの利用区分においても利用口数の大小には大きな分布があるが、産業利用・成果公開では企業では実施し難い大規模な実応用計算に Tsubame2.5 が利用されていることを反映した結果であろう。

表 1 平成 26 年度 共同利用 学術利用 (有償利用) 採択課題一覧

	所属機関 (利用課題責任者) 申請課題名	利用口数
1	理化学研究所 計算科学研究機構 丸山直也 高性能・高生産性を達成する垂直統合型アプリケーションフレームワーク	2
2	独立行政法人海洋研究開発機構 吉川知里 福島原発事故由来の硫黄放射性同位体モデルを用いた硫酸塩エアロゾルの動態の解明	9
3	東京大学 情報理工学系研究科 須田礼仁 ポストペタ時代の大規模並列数値計算のための技術開発	3
4	九州大学 カーボンニュートラル・エネルギー国際研究所 辻健 多相流 LBM シミュレーションの大規模間隙モデルへの適用	6

表1つづき 平成26年度 共同利用 学術利用(有償利用)採択課題一覧

課題 番号	所属機関 (利用課題責任者) 申請課題名	利用 口数
5	都城工業高等専門学校 野地英樹 超電導電力ケーブルの交流損失解析	1
6	京都大学大学院 黒橋禎夫 知識に基づく構造的言語処理の確立と知識インフラの構築	23
7	京都工芸繊維大学 高木知弘 超大規模フェーズフィールド GPU 計算によるデンドライト競合成長メカニズムの解明 II	8
8	千葉工業大学 山本典史 結晶構造中における有機蛍光色素の光物性	2
9	大阪府立大学 須賀一彦 多孔体界面乱流の直接数値計算	5
10	首都大学東京 岡部豊 TSUBAME2 GPU によるスピン系のクラスターアルゴリズム・モンテカルロシミュレー ション	2
11	慶應義塾大学 理工学部機械工学科 泰岡顕治 仮想 GPU を用いた分子動力学シミュレーションコードの開発と評価	8
12	理化学研究所計算科学研究機構 八代尚 GPU を用いた気象・気候アプリケーションライブラリの開発	1
13	桐蔭横浜大学 川久保達之 ATP加水分解によって惹き起こされるミオシン分子モーターの偏った揺らぎ運動に 関する分子動力学シミュレーション	1
14	東京大学 情報理工学系研究科 田浦健次朗 高性能と高生産性を両立する並列分散ランタイムシステム	5
15	東京大学 地震研究所 古村孝志 不均質地球構造における地震波・津波伝播シミュレーション	1
16	大阪府立大学 須賀一彦 分子動力学法によるナノ間隙内流動性の解明	1
17	理化学研究所 計算科学研究機構 三上和徳 ミニアプリケーションの開発	2
18	大阪大学蛋白質研究所 中村春木 転写サイクルを制御する蛋白質複合体ダイナミクスの解析	24
19	東京医科歯科大学 石川俊平 低分子化合物とタンパクとの相互作用の計算	5
20	成蹊大学 緑川博子 高性能計算向け分散メモリ・ストレージ統合システムの研究	1
21	情報通信研究機構 チャカロタイ・ジェドヴィスノブ GPU クラスタを利用した詳細人体モデルの大規模電磁界計算	1
22	東京大学 工学系研究科 機械工学専攻 塩見淳一郎 ナノ構造界面における熱輸送特性の分子シミュレーション	2
	小計	113

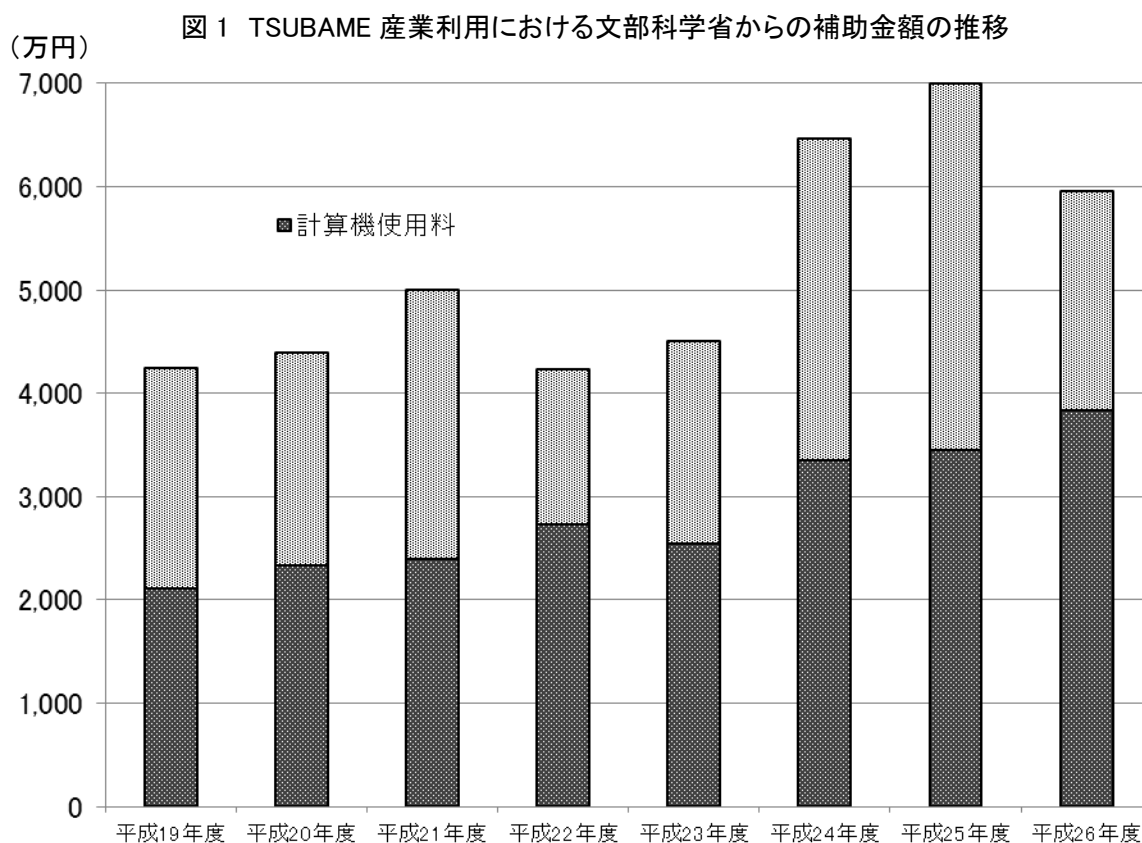
2-10 TSUBAME の産業利用サービス

共同利用推進室 副室長 佐々木 淳

【事業概要】

TSUBAME の計算資源を産業界に提供するサービスは、平成 19 年度から文部科学省「先端研究施設共用イノベーション創出事業」により開始し、平成 25 年度からは先端研究基盤共用・プラットフォーム形成事業として、本センター・共同利用推進室が主体的に実施している。

平成 26 年度末時点で延べ 192 件の課題に TSUBAME の計算資源を提供している。本補助事業の産業利用トライアルユースは、民間企業に TSUBAME の計算資源を無償で提供する制度であり、平成 26 年度の新規課題の採択件数は 17 件であった。また有償による企業での利用は 22 件（成果公開 10 件、成果非公開 12 件）であった。



【事業実施と成果】

【実施体制】

本センターでは共同利用推進室を組織し、共用促進リエゾン員 1 名、専従の施設共用技術指導員 1 名、施設共用技術指導研究員 1 名（特任准教授）、課題の受付・管理を行う事務員 1 名にて事業を実施している。

共同利用推進室の主な業務内容は、事業運営・実施業務、事業計画策定、事業広報、応募課題の発掘・渉外、課題選定評価支援業務、利用制度および環境整備、技術指導および支援等と広範であり、研究推進部情報基盤課、研究資金管理課、財務部契約課等から支援を受けている。

【広報活動】

TSUBAME 産業利用の認知向上のため、また利用課題を広く公募するために広報・渉外活動を行っている。平成 26 年度の広報活動の実績を表 1 に提示する。

表 1 平成 26 年度 広報アクティビティ実績一覧

行事名	開催日	場所	目的	参加者
MSC ソフトウェアユーザカンファレンス	5 月 28 日	品川カンファレンスセンター	出展	500 名
日本コンピュータ化学会 2014 春季年会	5 月 29、30 日	東京工業大学	出展	150 名
設計・製造ソリューション展	6 月 25～27 日	東京ビックサイト	出展	80606 名
GTC JAPAN 2014	7 月 16 日	東京ミッドタウン	出展	2400 名
国際スパコン産業応用ワークショップ	10 月 2、3 日	東洋大学	出展	80 名
TSUBAME 産業利用シンポジウム	10 月 17 日	東京工業大学蔵前会館	主催	133 名
地球シミュレータシンポジウム	10 月 23 日	学術総合センター	出展	100 名
日本コンピュータ化学会 2014 秋季年会	10 月 17、18 日	日本大学工学部	出展	150 名

平成 26 年 6 月の設計・製造ソリューション展は、平成 22 年度から 6 期続けて出展しており、本補助事業の最大のプロモーションとなっている。また本学 TSUBAME の最大の特徴である GPU の活用に強く訴求するため、GPU ベンダの主催するカンファレンスに出展し認知向上に努めるとともに、商用アプリバンドル型トライアルユースで利用しているアプリケーションのベンダー・イベントにも参加し、本事業の取組みを紹介した。

本補助事業の利用成果報告会とし平成 26 年 10 月 17 日に産業利用シンポジウムを開催した。文部科学省 科学技術・学術政策局 研究開発基盤課 渡辺課長を迎え、本学 TTF 蔵前ホールにて開催した。133 名の参加があり、株式会社豊田自動織機、株式会社構造計画研究所からの口頭発表と、13 件のポスター発表にて平成 25 年度終了課題および実施課題の成果報告があり、盛況なシンポジウムとなった。本シンポジウムの模様および終了課題の報告書を本事業

業の Web ページならびに文部科学省の共用ナビに掲載し公開した。 共用ナビ：
<http://kyoyonavi.mext.go.jp/>

産業利用シンポジウム開催報告：<http://www.gsic.titech.ac.jp/H26SympReport>

【トライアルユース課題公募】

平成 26 年度の 4 月利用開始課題は平成 26 年 1 月から定期公募を開始し、10 月利用開始課題は平成 26 年 7 月から公募を開始した。開催した公募説明会の日程と出席者数を表 2 に提示する。公募説明は本学の WEB ページおよび文部科学省 共用ナビの WEB ページへの掲載とメールでの案内を行っている。

表 2 公募説明会の実績

開催日	公募説明会	出席者
平成 26 年 1 月 15 日	平成 26 年度上期 産業利用トライアルユース公募説明会(1 回目)	7 名
平成 26 年 1 月 24 日	平成 26 年度上期 産業利用トライアルユース公募説明会(2 回目)	12 名
平成 26 年 7 月 28 日	平成 26 年度下期 産業利用トライアルユース公募説明会(1 回目)	4 名
平成 26 年 8 月 1 日	平成 26 年度下期 産業利用トライアルユース公募説明会(2 回目)	16 名
平成 27 年 1 月 23 日	平成 27 年度上期 産業利用トライアルユース公募説明会(1 回目)	18 名
平成 27 年 1 月 28 日	平成 27 年度上期 産業利用トライアルユース公募説明会(2 回目)	17 名

【商用アプリバンドル型トライアルユース】

「商用アプリバンドル型トライアルユース」とは、アプリケーションソフトウェアの利用権をセンター側で調達し、トライアルユースとして計算資源とともに無償にて提供する制度である。平成 26 年度では、平成 24 年度補正予算にて整備した電磁界解析シミュレーション基盤(3 次元電磁界解析ソフト「CST STUDIO SUITE」)のほか、汎用流体解析ソフト(CD-adapco Star-CCM+)と汎用構造解析ソフト(MSC Nastran/Marc)のライセンスを提供した。

平成 26 年度の商用アプリバンドル型トライアルユースでの利用課題は 6 件で、その内訳は、電磁界解析シミュレーション基盤 4 件、汎用流体解析ソフト 1 件、汎用構造解析ソフト 1 件であった。

【トライアルユース課題実施】

平成 26 年度 産業利用トライアルユースの課題採択件数は 17 件で、内訳は戦略分野利用推進課題が 8 件、新規利用拡大課題が 3 件、商用アプリバンドル型トライアルユースが 6 件であった。

平成 26 年度の産業利用トライアルユース実施件数は、平成 26 年度採択課題 17 件と平成 25 年度採択の継続課題 7 件と合わせて 24 件の実施となった。実施計画でトライアルユース課題に予定していた年間総口数 320 口の全てを配分した。平成 26 年度の産業利用トライアルユースの実施課題と企業名を表 3 に示す。

表 3 平成 26 年度 産業利用トライアルユース 実施課題一覧

番号	課題区分	課題名	企業名
過年度採択 継続課題			
1	戦略分野 ナノシム	企業の材料開発における計算化学の活用促進	株式会社豊田自動織機
2	戦略分野 流体構造連成	格子ボルツマン法による航空機離着陸形態の 空力特性予測と空力騒音予測法の改良に関する研究	エクサ・ジャパン株式会社
3	戦略分野 ナノシム	リチウムイオン二次電池正極材料の第一原理計算	古河電気工業株式会社 次世代電池開発センター
4	戦略分野 ナノシム	無機材料開発への第一原理計算の活用	株式会社ニコン
5	戦略分野 アクセラレータ	GPU クラスタを利用した 電子写真システム設計における電磁場計算の高速化	株式会社リコー
6	戦略分野 ナノシム	大規模・大領域 TCAD への HPC 応用技術の開発	株式会社 半導体理工学研究センター
7	戦略分野 ナノシム	ファイラー充填ゴムの多目的設計探査	横浜ゴム株式会社
平成 26 年度 採択課題			
8	新規利用拡大	ホモジナイザーを用いた攪拌混合による 乳液製造のスケールアップに関する解析	株式会社 資生堂
9	アプリバンドル型 トライアルユース	LTE-Advanced における 大型車両内電磁界特性に関する基礎検討	パナソニックシステムネット ワークス開発研究所
10	アプリバンドル型 トライアルユース	大規模シミュレーションによるレーダの車両搭載時の特性把握	古河電気工業株式会社 自動車電装技術研究所
11	戦略分野 ナノシム	塗料や塗膜における大規模シミュレーションの検討	関西ペイント株式会社
12	戦略分野 ナノシム	第一原理計算による熱電変換材料の特性評価	古河電気工業株式会社 解析技術センター
13	戦略分野 社会基盤リスク	極稀地震時における軟弱地盤上の 高層建物に想定される被害の検討	株式会社竹中工務店
14	戦略分野 ナノシム	量子化学計算による光学物性評価	日本ゼオン株式会社
15	新規利用拡大	超大規模行動データを用いた 広告出稿最適シミュレーション高速化実験	株式会社 電通国際情報サービス
16	新規利用拡大	減衰を考慮した高周波数領域までの 音響構造連成シミュレーション大規模化技術の検討	フォスター電機株式会社
17	アプリバンドル型 トライアルユース	数値振動台開発を目的とした 大規模 FEM 解析のフィージビリティスタディ	清水建設株式会社 総合解析技術センター
18	アプリバンドル型 トライアルユース	広域都市環境の大規模計算による検討	清水建設株式会社 環境総合シミュレーション P
19	アプリバンドル型 トライアルユース	三次元電磁界シミュレータを用いた静電気放電イミュニティ 試験に於ける PCB/Package/Chip のイミュニティ解析	ルネサスエレクトロニクス 株式会社
20	戦略分野 ナノシム	アミンと CO ₂ の反応の第一原理分子動力学計算	関西電力株式会社 電力技術研究所
21	戦略分野 創薬	創薬研究における大規模FEP計算	シュレーディングー 株式会社
22	戦略分野	電子写真システム設計のための	富士ゼロックス株式会社

番号	課題区分	課題名	企業名
	ナノシム	並列シミュレーション技術の開発	基盤技術研究所
23	戦略分野 アクセラレータ	大規模画像データセットの 機械学習のための分散コンピューティング	株式会社 デンソーアイティラボラトリ
24	アプリバンドル型 トライアルユース	ワイヤレス電力伝送による漏えい電波の 環境解析技術の研究開発	パナソニックシステムネット ワークス開発研究所

【有償利用（産業）の実施】

平成 26 年度 TSUBAME 産業利用において、有償にて採択した課題件数は 22 件で、成果公開が 10 件、成果非公開が 12 件であった。TSUBAME 産業利用（有償）実施課題の一覧を表 6 に提示する。

課題区分ごとの利用口数は、成果公開の合計が 162 口、成果非公開が 21 口、合計 183 口であった。

表4 平成 26 年度 TSUBAME 産業利用(有償)実施課題一覧

番号	課題区分	課題名	企業名
1	有償利用 成果公開	気象イベントを考慮した建築環境の解析評価	清水建設株式会社
2	有償利用 成果公開	鋼中析出物の水素捕捉能の高精度計算	新日鐵住金株式会社
3	有償利用 成果公開	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
4	有償利用 成果公開	電子デバイス材料の計算機設計	太陽誘電株式会社
5	有償利用 成果公開	TSUBAME2.5 利用による大規模な光の波面伝搬計算	株式会社JVCケンウッド
6	有償利用 成果公開	理論計算に基づく有機半導体材料の開発	住友化学株式会社 先端材料探索研究所
7	有償利用 成果公開	衛生陶器混相流シミュレーションの商品設計および販促への展開	TOTO 株式会社 技術開発センター
8	有償利用 成果公開	塗エスラリーの分子シミュレーション	トヨタ自動車株式会社
9	有償利用 成果公開	ワイヤレス電力伝送による漏えい電波の 環境解析技術の研究開発	パナソニックシステムネット ワークス開発研究所
10	有償利用 成果公開	大容量データ伝送用ミリ波アンテナのレドームに関する 基礎検討	スタッフ株式会社
11	有償利用 成果非公開	(非公開)	富士通アドバンス テクノロジー株式会社
12	有償利用 成果非公開	(非公開)	株式会社 構造計画研究所
13	有償利用 成果非公開	(非公開)	信越化学工業株式会社
14	有償利用 成果非公開	(非公開)	コニカミノルタ株式会社

番号	課題区分	課題名	企業名
15	有償利用 成果非公開	(非公開)	株式会社 クレハ
16	有償利用 成果非公開	(非公開)	アイシン・エイ・ダブリュ 株式会社
17	有償利用 成果非公開	(非公開)	トヨタ自動車株式会社
18	有償利用 成果非公開	(非公開)	協和発酵キリン株式会社
19	有償利用 成果非公開	(非公開)	株式会社 リコー
20	有償利用 成果非公開	(非公開)	セイコーインスツル株式会社
21	有償利用 成果非公開	(非公開)	株式会社 豊田自動織機
22	有償利用 成果非公開	(非公開)	トヨタ自動車株式会社

【共用実績】

本補助事業の産業利用トライアルユースでは、TSUBAME 年間供給可能計算資源の 13%を上限に共用する計画に対し実績は 9.02%であった。また有償利用を含めた配分口数の総計は 503 口で、年間供給可能資源の 14.18%となった。

一方、共用率は全体提供時間に対する共用時間の割合であり、トライアルユースの共用率は 12.39%、有償利用を含めた全体の共用率は 19.40%となった。平成 26 年度の TSUBAME 産業利用での TSUBAME の計算資源の使用実績を表 5 に提示する。なお、TSUBAME 年間供給可能計算資源とは TSUBAME が 1 年間に提供可能な資源量を示しており、全体提供資源は 1 年間にユーザが実際に使用した TSUBAME の資源量を示している。

表5 平成 26 年度 共用時間、全体提供時間、共用率

	計算資源供給量		
	トライアルユース 実績値	全産業利用 実績値	トライアルユース 年度計画値
共用時間 (a)	693,231	1,085,885	960,000
全体提供時間 (b)	5,597,327	5,597,327	10,640,000
共用率 (a)/(b)	12.39%	19.40%	9.02%

(単位:ノード時間はマシンタイムの単位で、1ノード時間は1計算ノードを1時間占有利用に相当。)

【利用者支援】

スパコンの産業利用促進には継続的なユーザ教育の取組みが不可欠であり、TSUBAME2.5を初めて使うすべての課題従事者に対し、利用開始前の利用講習会への参加を義務づけ、平成

26年度は延べ18回の利用講習会を開催した。

共同利用推進室では、TSUBAME2.5の基本操作、プログラムの並列化やポーティングの支援、また商用アプリバンドル型トライアルユースで調達したアプリケーション利用の支援を行っている。また本事業のユーザが使用する有償アプリケーションをTSUBAME上で使えるようにするため、ライセンスサーバへの設定や登録等のサポートを行っている。