

【産業技術】

米国エネルギー省科学局は大規模科学計算のために 15 チームに 1800 万時間のスーパーコンピューティング時間を提供

米国エネルギー省長官は、より効率的なエンジン設計からパーキンソン病のよりよい理解までに及ぶプロジェクトを研究する政府研究所、大学および産業界の研究者を支援するために、エネルギー省(DOE)科学局が世界で最も強力ないくつかのスーパーコンピュータの合計 1,820 万時間の演算時間を提供すると発表した。

演算時間の割り当ては、DOE の理論および実験に関する革新的で斬新な計算インパクト (INCITE : Innovative and Novel Computational Impact on Theory and Experiment) プログラムの下で行われる。同プログラムは、国益に基づいた計算集約的な研究計画へ計算資源を提供しており、現在、その 3 年目にあたる。その最初の 2 年間で、科学者は INCITE によって先例がないシミュレーションを実行し、化学、燃焼、天体物理学、遺伝学および乱流の問題に対するより大きな洞察力を獲得することができた。

「INCITE プログラムを通して、DOE の科学計算資源はこれがないと可能でないかもしれない発見を科学者に可能にし続ける。研究者が潜在的にすべての我々を助けることができる進歩を達成するという、心躍るような時期に我々は暮している」とエネルギー長官は最新の INCITE グラントを発表する際に語った。

次年度の INCITE 支援プロジェクトは次のものを含んでいる、

- より効率的な航空機およびエンジンの設計
- パーキンソン病の分子基礎に関する研究
- 将来のエネルギー源として核融合を進めることを支援するシミュレーション
- 気候変化に影響する人間および生態的プロセスのより一層の理解
- 細胞破壊が疾病や感染が起こることをどのようにして可能にするかに関する研究のシミュレーション
- より強い先端材料の開発および材料特性についてのよりよい理解
- 広範囲の科学的な問題を研究するために使用できる分子衝突の改善されたシミュレーション
- コンピュータ可視化およびアニメーションを進歩させる計算ツールの開発
- 水についてのより一層の理解また光はどのように生物系で水に影響するかについての理解
- 原子レベルでタンパク質構造の計算
- 我々の宇宙の 9/10 以上を構成していると考えられる暗黒エネルギーや暗黒物質についてのさらなる理解

- 科学研究で使用される粒子加速器のシミュレーション

INCITE の3年間の歴史で初めての民間部門研究者からの提案には特に勇気づけられている。結果としての知識の多くは、そのお礼として、一般に利用可能となる。このINCITE プログラムは、ローレンス・バークレー国立研究所の一台のスーパーコンピュータ施設から、4カ所のDOE 国立研究所の5台のスーパーコンピュータに拡張された。

参加している研究所は、アルゴンヌ国立研究所、ローレンス・バークレー国立研究所、オークリッジ国立研究所およびパシフィックノースウエスト国立研究所である。これにより、DOE はグラントの数を過去2年の3件から15件に増加することを可能とした。

グラントを受ける提案のうちの4件は産業界からであった、ボーイング社、ドリームワークスアニメーション社、ゼネラルアトミック社およびプラット・ホイットニー社である。

計算時間を受け取る大学、研究所および会社は次のとおりである、

オーバーン大学、カリフォルニア工科大学、フィスク大学、ハーバード大学、ハワード・ヒューズ医学研究所、ロリンズ・カレッジ、テクノロジーX社、アラスカ大学フェアバンクス校、カリフォルニア大学バークレー校、カリフォルニア大学デービス校、カリフォルニア大学サンディエゴ校、コロラド大学、ストラスクライド大学、そしてワシントン大学。

エネルギー省ローレンス・バークレー国立研究所、ローレンス・リバモア国立研究所、ロスアラモス国立研究所およびオークリッジ国立研究所の研究者もまた計算時間を受け取る。

INCITE 提案の2005年5月の要請に応じて、43件の計算集約的で大規模な研究計画が、9,500万時間以上のプロセッサ時間を要求して提出された。その提案は、加速器物理学、天体物理学、化学サイエンス、気候研究、コンピュータ科学、エンジニアリング物理学、環境科学、核融合エネルギー、生命科学、材料科学および核物理学の11の科学分野をカバーしている。

受理した提案の60パーセントは米国の大学からであった。また、41パーセントがDOE 以外の調査機関に支援されていた。

全米エネルギー研究科学計算センター(NERSC : National Energy Research Scientific Computing Center)のINCITEの初年度に、超新星を研究するシカゴ大学およびアルゴンヌ国立研究所の科学者は、3次元の星の爆発の初めての完全な恒星シミュレーションをモデル化することができた。

また、カリフォルニア大学バークレー校およびローレンス・バークレー国立研究所のグループは、持続可能エネルギー源をよりよく理解するための光合成の重要な様相の研究に INCITE の割り当てを使用した。

3 番目のジョージア工科大学からのグループは、非常に優れた詳細さで乱流のシミュレーションを実行することができた。これはエンジニアリングプロセスを改善するために使用することができる。

現在、3つの研究グループがその割り当て時間を有意義に利用している。1番目のシカゴ大学のグループは、磁気回転不安定性を理解するためにプリンストンプラズマ物理学研究所で行われている実験のモデル化により、シミュレーションと実験によって、宇宙の増大についての理解を増加させようと努力している。

サンディアトリバモアからの別のグループは、将来の理論と実験のためのベンチマークとして役立つ、非混合乱流炎の直接数値シミュレーションを実行している。ワシントン大学からの3番目のグループは、系統的に広げることによりタンパク質の動的な形をカタログ化するために、NERSC の IBM スーパーコンピュータを使用している。

「INCITE プログラムに対する圧倒的な反響は、DOE の計算リーダーシップならびに科学的発見ツールとしての計算科学の広範囲の認識という両方を反映していると信じている。幸運にも、科学局はこの要求を満たすのを支援する施設および専門技術を持っている」と DOE サイエンス局々長のレイモンド L.オーバハ博士は語った。

プロセッサ時間は、スーパーコンピュータにどのように時間が割付けられるかを示す。5万時間を受取るプロジェクトは、50台のプロセッサに1,000時間、あるいは約42日間で走らせることができる。シングルプロセッサのデスクトップコンピュータ上で同じプロジェクトを実行すると、ほとんど6年間かかる。

INCITE から 2006 年に支援されるプロジェクトは、パーキンソン病の試験的研究のための 16,000 時間からタンパク質の折畳を研究するための 500 万時間までの範囲にわたる。プロジェクトのうちの 6 件は、100 万プロセッサ時間以上の時間を受取る。

DOE 科学局は、米国の自然科学基礎研究の単一で最大の支援機関であり、広範囲の科学分野を横切り米国の世界リーダーシップを保証する。DOE 科学局に関するより詳細ならびに INCITE プロジェクトの内容は、<http://www.science.doe.gov/>へ。

以上

(出典：<http://www.energy.gov/news/3139.htm>)