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

東京大学 情報基盤センター
北海道大学情報基盤センター
東北大学情報シナジーセンター
名古屋大学情報連携基盤センター
京都大学学術情報メディアセンター
大阪大学サイバーメディアセンター
九州大学情報基盤研究開発センター

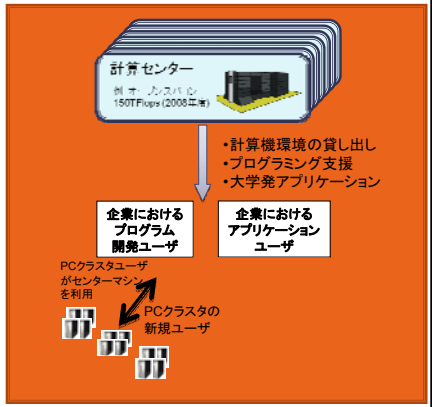
問い合わせ先： kyoyo@itc.u-tokyo.ac.jp
WEB: http://kyoyo.itc.u-tokyo.ac.jp/

概要

- 文部科学省「先端研究施設共用イノベーション創出事業」プログラムから支援を受けた事業
  - 平成19年6月下旬採択、5年間事業
  - 2つの利用形態（戦略分野利用推進、新規利用拡大）
  - 戦略分野（ライフサイエンス、ものづくり、情報通信、社会基盤、環境・エネルギー分野）の中から具体的課題を設定
- 全国共同利用施設スーパーコンピュータを有する大学
  - 北海道大学、東北大学、東京大学、名古屋大学、京都大学、大阪大学、九州大学、の7大学による共同事業
  - 代表： 東京大学
- 特徴
  - 大学発アプリケーション利用（RSS21等）
  - 企業の持つプログラム利用、あるいは新規開発支援
  - 専門研究員を雇用（アプリケーション支援、プログラム支援）
  - ASP (Application Service Provider) との連携によるサービス(将来)

概要

- **大学**
  - 計算機環境の貸し出し
  - ユーザが開発するソフトウェアに対する並列プログラミングおよび最適化支援
  - 大学発アプリケーション提供
- **民間企業**
  - 大学資源を利用
  - イノベーション創出
  - 新規利用拡大



研究施設の概要

- 大型計算機を運用管理するとともにその整備を図る。
- 学術研究等の共同利用に供する。
- 計算機の高度利用に関する研究および開発を行う。

平成19年度：総理論演算性能 99Tflops
平成20年度：総理論演算性能 300Tflops

利用課題

戦略分野利用推進

- 分野
  - タンパク質機能シミュレータによる創薬開発
  - ナノマテリアルシミュレータによる新材料開発
  - 音・熱・力の解析シミュレータによるものづくり
  - 機器・システムレベルのシミュレータ開発・利用実験による次世代情報通信技術開発
  - 地盤と拡散物質・構造物解析シミュレーション技術の開発
- 利用形態
  - 大学発アプリケーションの利用
  - 企業が利用しているアプリケーション実行
  - 企業による新規開発
- 募集要領
  - 1年間(最大2年間)の利用提案を受付
  - 計算機利用料は試作まで無料

新規利用拡大

- 分野と趣旨
  - 分野は特定しない。産業界の潜在的高性能計算需要を掘り起こし、大学とASPとの連携によるサービス、ソフトウェア、ハードウェアを有償で利用して頂く下地を作る
- 利用形態
  - 大学発アプリケーションの利用
  - 企業が利用しているアプリケーション実行
  - 企業による新規開発
- 募集要領
  - 6か月の利用提案を受付
  - 計算機利用料は、2回の提案まで無料

戦略分野
タンパク質機能シミュレータによる創薬開発

- タンパク質の物性や機能を解明するための計算機シミュレーションを対象とする「タンパク質電子構造解析シミュレーション」
  - 利用可能ソフトウェア
    - RSS21
  - 利用可能計算機
    - 各大学所有の計算機
- タンパク質と化合物の相互作用解析などの計算機シミュレーションを対象とする「タンパク質化合物相互解析シミュレーション」
  - 利用可能ソフトウェア
    - Presto/AMOSS
  - 利用可能計算機
    - 大阪大学所有の計算機

採択方針：独自の疾患原因分子の同定に成功し、それをもとに低分子化合物の創薬へ向けた試作の提案を重視するが、先進的提案も積極的に採択する。

戦略分野
ナノマテリアルシミュレータによる新材料開発

- ナノ、物質、材料の構造、機能を高精度に解析することを対象とする「ナノ・物性・材料マルチスケール機能シミュレーション」
  - 利用可能ソフトウェア
    - RSS21
  - 利用可能計算機
    - 各大学所有の計算機
- 数万、数億の原子を含む複雑な分子からできているソフトマテリアルの統合的な物性の解明や材料としての機能性の向上を図るための「ソフトマテリアルシミュレーション」
  - 利用可能ソフトウェア
    - OCTA
  - 利用可能計算機
    - 名古屋大学所有の計算機
- 全電子、全ポテンシャルで芯電子の関与する超微細構造定数の精密算定や、高エネルギーでの原子衝突過程のシミュレーション、高速原子構造緩和などが可能な、ナノテクノロジー分野の新材料創製を目的にする「全電子第一原理計算プログラム」
  - 利用可能ソフトウェア
    - TOMBO
  - 利用可能計算機
    - 東北大学所有の計算機

採択方針：新しい物質構造と物性を予測・設計する提案を重視するが、先進的提案も積極的に採択する。

戦略分野
音・熱・力の解析シミュレータによるものづくり

- 乱流起因の多様な複合現象（燃焼、混相、騒音等）の解析を対象とする「マルチスケール連成流体解析シミュレーション」
  - 利用可能ソフトウェア
    - RSS21
  - 利用可能計算機
    - 各大学所有の計算機
- ガスタービン・蒸気タービンの多段静動翼列非定常流れを数値計算する「数値タービンシミュレーション」
  - 利用可能ソフトウェア
    - 東北大学超臨界流体シミュレータ
  - 利用可能計算機
    - 東北大学所有の計算機
- マッハ数0.2から3の範囲の圧縮性流れについ て、Navier-Stokesもしくは Euler方程式を非構造ハイブリッド格子上で解く「計算流体シミュレーション」
  - 利用可能ソフトウェア
    - TAS-code
  - 利用可能計算機
    - 東北大学所有の計算機

採択方針：設計対象の騒音量、燃焼効率、CO_2排出量などの性能評価に対して、野心的取り組みを行う提案を重視するが、先進的提案も積極的に採択する。

戦略分野
機器・システムレベルのシミュレータ開発・利用実験による次世代情報通信技術開発

- 超広帯域無線などを利用した超高速無線LANシステムおよび無線LANシステムなどの設計に必要な無線伝送路の推定および評価のための「大規模電磁界解析シミュレーション」
  - 利用可能ソフトウェア
    - デバイス時間領域差分法に基づく大規模電磁界解析ソフトウェア「JetFDTD」
  - 利用可能計算機
    - 北海道大学所有の計算機
- 超小型デジタル機器の雑音対策設計などのための計算機シミュレーションを対象とする「高精細電磁界解析シミュレーション」技術
  - 利用可能計算機
    - 京都大学所有の計算機
- 構造解析・電磁界解析シミュレーションおよびシミュレーション結果の可視化・解析を対象とする「シミュレーション設計支援」
  - 利用可能ソフトウェア
    - シミュレーション可視化システム「KVS」
  - 利用可能計算機
    - 京都大学所有の計算機

採択方針：先進的なシミュレーション技術開発や対象システムの大規模化を伴う試作で、スパコンでしか実現できない提案を重視する。

戦略分野
地盤と拡散物質・構造物解析シミュレーション技術の開発

- 地盤への汚染物質拡散・液状化現象や構造物との相互作用などを扱う計算機シミュレーションを対象とする「地盤と拡散物質や構造物の高度解析シミュレーション」の開発
  - 利用可能計算機
    - 九州大学所有の計算機

採択方針：地盤と拡散物質・構造物シミュレータ開発、またはそのシミュレータ開発を目指した技法やモデルの試作を重視する。

新規利用拡大

- 分野と趣旨
  - 分野は特定しない。産業界の潜在的高性能計算需要を掘り起こし、大学とASPとの連携によるサービス、ソフトウェア、ハードウェアを有償で利用して頂く下地を作る
- 利用形態
  - 大学発アプリケーションの利用
  - 企業が利用しているアプリケーション実行
  - 企業による新規開発
  - 募集要領
    - 6か月の利用提案を受付
    - 計算機利用料は2回の提案まで無料

京大の場合：非数値的応用（大規模離散シミュレーション、大規模文書処理など）へのスパコン利用拡大がメインターゲット

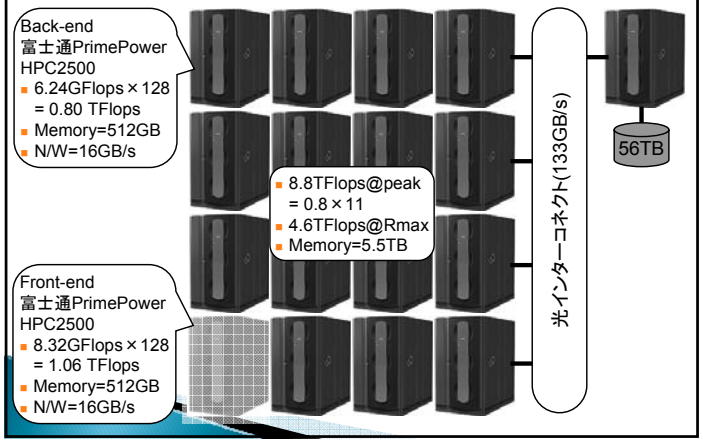
応募要領抜粋

- 応募資格
  - 日本企業であること
  - 日本国内で利用がなされること
  - 平和利用目的の提案であること
- 利用規定 — 京大の方針は後述
  - 施設の利用に関しては、利用するセンターが定めたスーパーコンピュータシステムに関する利用規程を遵守していただきます。
- 本募集における施設利用料金
  - 「戦略分野利用推進」課題に関しては、試作まで無料とします。試作については、付録1をご参照ください。
  - 「新規利用拡大」課題については、2回の提案まで無料とします。
- 利用報告書等
  - 利用報告書は、課題期間終了後30日以内に提出とし、原則公開させていただきます。
- 免責事項
  - 本事業に関連する事項に対し利用者に生じたいかなる不利益な事項に対しても、各センターは一切の責任を負いません。
- 知的財産等の取り扱い — 京大の方針は後述
  - 原則として、本事業で発生した知的財産は提案企業に帰属します。ただし、施設共用技術指導研究員などの共同研究の実施者における発明者の認定については、各大学の知的財産ポリシー等に基づき対応がなされることを想定しています。詳細やその他の例外的な事項の取り扱いにつきましては、各センターまでご相談ください。

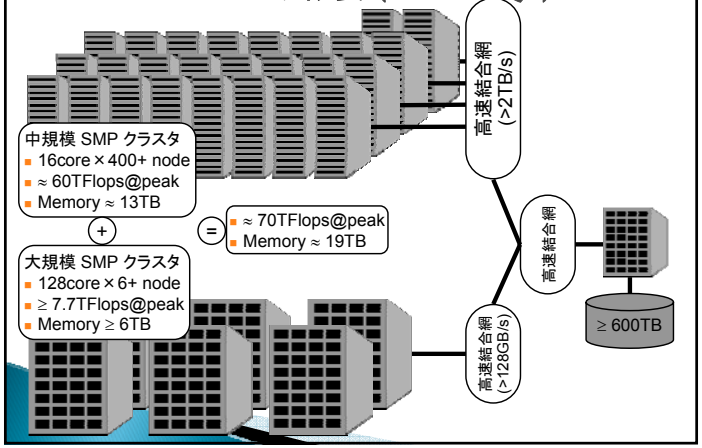
応募方法

- WEBページ(http://kyoyo.itc.u-tokyo.ac.jp/) による電子申込、および課題申込書を、東京大学情報基盤センターまで郵送してください。なお申込の詳細については、上記WEBページで確認してください。
- 応募の概略は、以下のとおりです。
  1. 上記WEBページから、課題申込書 (Wordファイル) をダウンロードし、課題申込書を作成してください。
  2. 上記WEBページにリンクされている、課題申込ページへアクセスし、必要事項を入力し、1. で作成した課題申込書(押印なし)をアップロードしてください。仮受付電子メールが課題申込ページで登録した電子メールアドレスに送信されます。
  3. 1.で作成した課題申込書に押印し、本募集要項の末尾の郵送先に郵送してください。
  4. 3. の課題申込書が郵便到着後、受付が完了した旨の電子メールを、課題申込ページで登録した電子メールアドレスに送信します。

京都大学学術情報メディアセンター(ACCMS) スーパーコンピュータ概要 (~2008.2Q)



京都大学学術情報メディアセンター(ACCMS) スーパーコンピュータ概要 (2008.2Q~)



ACCMSスーパーコンピュータ民間利用方針

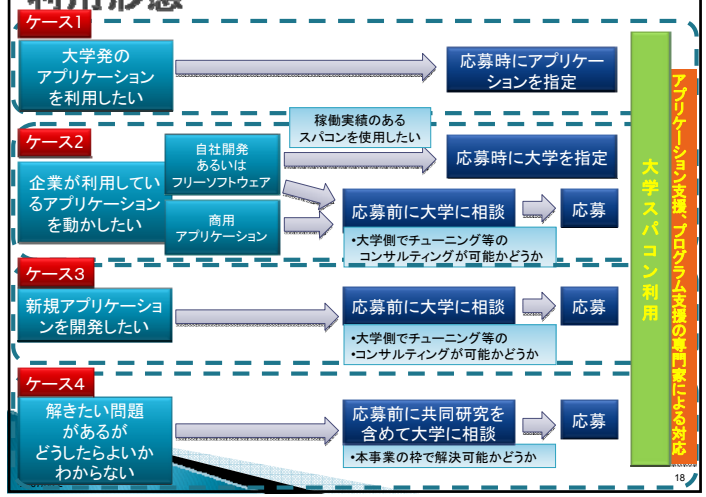
ACCMS規程として整備中
規程に基づく覚書等の締結も可能

- 形態＝共同研究
  - タイプ1：従来型
    - 「共通課題」の研究の一環としてスパコンを利用
  - タイプ2：スパコン利用型
    - 学術・技術の発展への貢献＋利用技術に関する知見
- ACCMS教員の役割
  1. 利用状況・成果の把握
  2. 利用支援・助言
  3. 「要請に基づく」知的貢献
- 知的財産の帰属等
  - 役割 1 & 2：大学の権利を主張しない
  - 役割 3：　大学の規程(10月改訂予定)に基づき決定

ACCMSスーパーコンピュータ利用規程など

- 利用資格＝「その他センター長が特に認めたもの」
  - 学術利用が基本であることにご理解を
- 利用可能資源（H19下半期のモデルケース）
  - CPU時間:　3000時間×16CPU
  - ファイル容量: 350GB
  - ユーザ数:　10
- 利用可能ソフトウェア
  - Fortran90/C/C++ & OpenMP/自動並列化
  - MPI 1.2
  - BLAS, LAPACK, ScaLAPACK
  - 科学技術計算ライブラリ SSL-II
  - ISV ライブラリ/アプリケーションはご利用いただけません

利用形態



今後のスケジュール

- 9月14日（金）　第1回応募締切
- 9月17日の週　ヒアリング　京大＝9月19日（水）
- 9月28日（金）　採択通知（電子メール）

第2回公募日程（予定）

- 10月15日（月）第2回公募アナウンス＆受付開始
- 11月31日（金）第2回応募締切
- 12月13日（金）採択通知（電子メール）