

文部科学省 先端研究施設共用促進事業 東京工業大学 『みんなのスパコン』TSUBAMEによるペタスケールへの飛翔

平成24年度 課題公募状況報告

平成24年9月20日 東京工業大学 学術国際情報センター 共同利用推進室 佐々木 淳



- 文部科学省 先端研究施設共用促進事業
- ・東工大の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
 - 産業利用の種別、タリフ、利用フロー
 - 産業利用の採択実績
 - 産業利用トライアルユース
 - 商用アプリバンドル型トライアルユース
 - 今年度の公募スケジュール
 - これまでの採択課題一覧



文部科学省 先端研究施設共用促進事業

- 大学・独立行政法人等の研究機関等の保有する先端研究施設の共用を促進し、基礎研究からイノベーション創出に至るまでの科学技術活動全般の高度化を図るとともに国の研究開発投資の効率化を図るため、文部科学省が平成21年度から開始した事業であり、平成24年度は全国28の施設を採択し事業を実施。
- 東京工業大学のTSUBAMEは、本事業の前身である平成19年度に文部 科学省が開始し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】制度より採択されたのを始まりに、既に6年にわたり、本学の計算 機資源を、文部科学省の補助を得て先進的企業に提供。



http://kyoyonavi.mext.go.jp/



文部科学省 先端研究施設共用促進事業

IL No. 140



北海道大学 創成研究機構オープンファシリティ 同位体顕微鏡システム



北海道大学 創成研究機構 スピンイメージング支援室 スピン偏極走査電子顕微鏡



室蘭工業大学 環境・エネルギーシステム材料研究開発機構 複合環境効果評価施設(FEEMA)

宮城県



東北大学 ^{流体科学研究所} 低乱熱伝導風洞装置



ススレステ エネルギー安全科学国際研究センター 先端的経年損傷計測・評価と破壊制御システム

群馬県



日本原子力研究開発機構 高崎重子応用研究所 イオン照射研究施設等(TIARA等)

長野県



信州大学 カーボン科学研究所 ナノカーボン・デバイス試作・評価装置群

茨城県



日本原子力研究開発機構 原子力科学研究所 研究用原子炉JRR-3



高工ネルギー加速器研究機構 物質構造科学研究所 放射光科学研究施設



坑波大学 研究基盤総合センター応用加速器部門 マルチタンデム静電加速器システム

東京都



東京工業大学 学術国際情報センター クラウド型グリーンスパコンTSUBAME2.0



F.乗県 -



東京理科大学 総合研究機構赤外自由電子レーザー研究センター 赤外自由電子レーザー

神奈川県



理化学研究所 横浜研究所生命分子システム基盤研究領域 NMR立体構造解析パイプライン・NMR基盤施設



横浜市立大学 大学院生命ナクシステム科学研究科生体超分子システム科学専攻 NMR装置



海洋研究開発機構 地球シミュレータセンター 地球シミュレータ





愛知県



名古屋大学 エコトピア科学研究所 超高圧電子顕微鏡施設



名古屋工業大学 大型設備基盤センター 表面分析装置

滋賀県



立命館大学 SRセンター 放射光利用実験装置

京都府



京都大学 エネルギー理工学研究所

複合ビーム材料照射装置及びマルチスケール材料評価基盤設備



京都大学 防災研究所

分散並列型強震応答実験装置

大阪府



へw、ヘ子 レーザーエネルギー学研究センター 激光 X II 号名はじめとする高強度レ ーザ ー装置群



大阪大学 蛋白質研究所 NMR装置群

丘庙坦



兵庫県立大学 高度産業科学技術研究所 ニュースバル放射光施設

徳島県



徳島大学 疾患酵素学研究センター プロテオミクスファシリティ

広島県



広島大学 自然科学研究支援開発センター 生命科学分析システム

佐賀県



佐賀県地域産業支援センター カ州シンクロトロン光研究センター 放射光光源及びビームライン設備



九州大学 九州大学クリーン実験 ステーション クリーン実験ステーション



東工大の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







東工大の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

「みんなのスパコン」TSUBAME利用料金タリフ

TSUBAME共同利用における利用課金

利用区分	利用者	審査等	制度や利用規程等	カテゴリー	利用課金											
学術利用	他大学または 研究機関等	審査免除 共同利用推進室による 実施規定の確認	共同利用の 利用規程に基づく	成果公開	1口: 100,000円											
			Γ / 	成果公開	トライアルユース(無償利用)											
産業利用	民間企業を中心 としたグル ー プ	課題選定 委員会で審査											「先端研究施設 共用促進事業」 制度に基づく	工工工工工工工工工工工工工工工工工工工工工工工工工工工工工工工工工工工工	以 未厶用	1口: 100,000円
			制反に至りて	成果非公開	1口: 400,000円											
社会貢献利用	非営利団体		共同利用の	成果公開	1口: 100,000円											
江云县队们用	公共団体等	利用規程に基づく	成果非公開	1口: 400,000円												

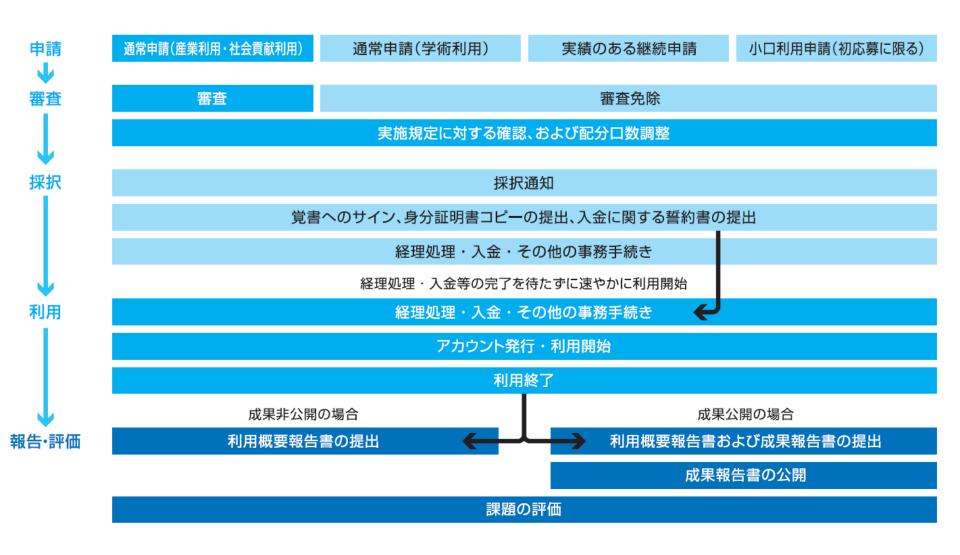
- ✓ 前払いの従量制課金
- ✓ 1口は 3,000 TSUBAMEポイント
- ✓ 1 TSUBAMEポイントで Thin 計算ノードを1 時間利用可能
- ✓ Thin 計算ノードは、2.93GHz 12CPUコア、 メモリ54GB、GPU (Tesla M2050) 3基搭載

1口で計算できる量は?

- ✓ 1ノード×4ヵ月間連続使用
- ✓ 4ノード×1ヵ月間連続使用
- ✓ 1,000CPUコア並列×1日半
- ✓ 100GPU並列×4日間
- ✓ 1,000CPUコア並列×1h/day×36日間



TSUBAME利用申請フロー





東工大の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

共用促進事業の採択状況 (平成24年9月20日現在)

ートライアルユース 戦略分野利用推進5分野

- トライアルユース 新規利用拡大

一 産業利用(有償)

延べ35件採択 (H24:4件) 延べ34件採択 (H24:6件)

述べ42件採択(H24:11件)

	課題種別	応募数	採択数	H24 実施数	H23 実施数	H22 実施数	H21 実施数	H20 実施数	H19 実施数	
戦	計算化学手法による創薬技	11	7	1	0	2(2)	6(5)	5(4)	4	
略分	大規模流体一構造連成解析	技術の開発	2	2	0	0	1(1)	2(1)	1(1)	1
野利	シミュレーションによるナノ ・デバイス開発	16	16	4(1)	7(6)	10(8)	10(4)	4	設定無	
用推	社会基盤のリスク管理シミュレー 応用技術の開発	7	7	1(1)	2(1)	3(3)	6(4)	4	設定無	
進	アクセラレータ利用技術	3	3	3(3)	3	0	設定無	設定無	設定無	
	新規利用拡大		34	34	6	5	6	5	6	6
	トライアルユース小計			69	15(5)	17(7)	22(14)	29(14)	20(5)	11
	成果公開 産業利用(有償) 成果非公開			23	7	7	6	3	=n, ⇔ ánn.	=11. 亡 細
				19	4	6	7	2	設定無	設定無
	合計	115	111	26(5)	30(7)	35(14)	34(14)	20(5)	11	

(カッコ内は内数で継続課題数)



トライアルユース課題区分

戦略分野利用推進

- 計算化学手法による創薬技術の開発
- 大規模流体 構造連成解析技術の開発
- シミュレーションによるナノ材料・加工・デバイス開発
- 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
- アクセラレータ利用技術の推進 (平成22年度より新設)
 - TSUBAMEに搭載されたGPGPU等の非常に多数の演算器を持ったアクセラレータを利用する技術、新アルゴリズム開発、アクセラレータコードのチューニングや応用分野の開拓に取り組む課題

新規利用拡大(利用は年度末まで)

● TSUBAME上でこれまで実施されたことがないHPC分野の利用課題のみならず、従来のHPC分野で試みられなかった用途の開拓

商用アプリバンドル型トライアルユース (利用は年度末まで)(平成24年度より新設)

● 一般的にスパコンで動作する商用ソフトウェアは非常に高価で、トライアルでのスパコン利用にも係わらず、高価な商用ソフトウェアの調達を利用者に強いている。本カテゴリではTSUBAME上で動作する特定の商用アプリケーションの利用権を、TSUBAMEの計算機資源とともに無償にて提供することで、企業でのスパコン利用の普及促進を目的とする



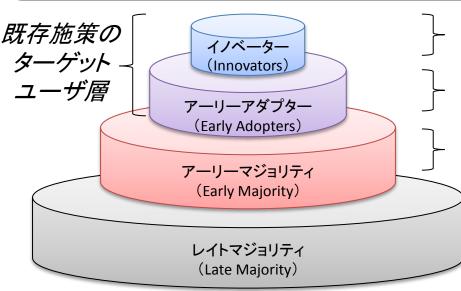
平成24年度共用促進事業の新たな施策とターゲット

新たな施策

商用アプリバンドル型トライアルユース

一般的にスパコンで動作する商用ソフトウェアは非常に高価で、トライアルでのスパコン利用にも係わらず、 商用ソフトウェアの購入は企業にとって大きな負担であるため、トライアルユース制度による新規ユーザ層の 開拓の大きな障壁となっている。

このため平成24年度の新たな取り組みとして、本事業にて新たなスパコンの利用促進が期待できる分野の商用アプリケーションソフトウェアの利用権を調達し、トライアルユースとして、TSUBAME2.0の計算機資源とともに、当該商用アプリケーションソフトウェアの利用も無償にて提供することにより、新たなユーザ層への事業の展開を行っていくとともに、新しい分野でのスパコンの産業利用を推し進める。



企業活動としてスパコンを活用しており、必要なソフトウェアを作成し保有するユーザ

企業活動としてスパコンを活用しており、必要な商用 ソフトウェアを保有するユーザ

新たな施策のターゲットユーザ層

企業活動としてパソコンで科学技術計算を行っており スパコンにより業務改革を行おうとしているユーザ等

> 平成24年度は 三次元電磁界解析ソフト CST MW STUDIOをバンドル

TSUBAME産業利用で想定するユーザ分類



トライアルユース公募スケジュール

平成24年度上期定期公募(利用中)

公募説明会 平成23年12月20日、平成24年 1月17日

公募締切り 平成24年 2月10日

採択通知 平成24年 3月30日

利用開始 平成24年 4月 9日

平成24年度下期定期公募(審查中)

公募説明会 平成24年 7月 6日、7月20日

公募締切り 平成24年 8月10日

採択通知 平成24年 9月20日

利用開始 平成24年10月 9日

随時公募(平成24年4月以降)

当月15日締切りで翌々月月初より利用可能



トライアルユース 採択課題一覧





平成24年度トライアルユース採択課題

	課題区分	課題名	企業名
1	創薬	リガンドベースの仮想スクリーニングシステムの 大規模システムによる実用実験	株式会社 ヒューリンクス
2	ナノシム	密度汎関数法を用いた エンジニアリングプラスティックの熱劣化反応解析	日立化成株式会社
3	新規拡大	個別要素法を用いた粉末充填の大規模シミュレーション	住友電気工業株式会社
4	新規拡大	企業研究における大型計算機活用の促進	旭硝子株式会社 中央研究所



平成24年度トライアルユース採択課題

	課題区分	課題名	企業名
1	創薬	リガンドベースの仮想スクリーニングシステムの 大規模システムによる実用実験	株式会社 ヒューリンクス
2	ナノシム	密度汎関数法を用いた エンジニアリングプラスティックの熱劣化反応解析	日立化成株式会社
3	新規拡大	個別要素法を用いた粉末充填の大規模シミュレーション	住友電気工業株式会社
4	新規拡大	企業研究における大型計算機活用の促進	旭硝子株式会社 中央研究所
5	ナノシム	3次元ナノアーキテクチャの 各種光デバイスへの応用の為の光学的解析	サイバネットシステム株式会社
6	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
7	アプリバンドル	FPUの周波数移行に向けたアンテナの特性解析	日本放送協会 放送技術研究所
8	アプリバンドル	大規模アレイアンテナの電磁界解析への GPUクラスター応用	NEC東芝スペースシステム株式会社
9	アプリバンドル	超大規模三次元高周波電磁界シミュレータを用いた 民生電子機器から発せられる不要電磁波問題の研究	日本航空電子工業株式会社
10	アプリバンドル	静電気シミュレーションにおける モデルの簡略化に関する一考察	東芝テック株式会社



平成19年度トライアルユース採択課題

	課題区分	課題名	企業名
1	計算創薬	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
2	計算創薬	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
3	計算創薬	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
4	計算創薬	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
5	流体構造	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 研究開発本部 基盤技術研究所 解析シミュレーションセンター
6	新規拡大	銀行業・保険業におけるALM(Asset Liability Management) システムの開発	ニューメリカルテクノロジーズ株式会社
7	新規拡大	大規模分散検索エンジン製品の開発	ビジネスサーチテクノロジ株式会社
8	新規拡大	ワイドギャップナノ構造体精密加工のシミュレーション	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
9	新規拡大	機能性無機材料の光学的電子的物性と構造設計の研究	住友化学株式会社 筑波研究所
10	新規拡大	混相流シミュレーションコードの並列拡張性能の評価	株式会社 計算流体力学研究所 混相流解析グループ
11	新規拡大	高層ビルの大規模耐震構造解析	株式会社 アライドエンジニアリング ADVC事業部



平成20年度トライアルユース採択課題

	課題区分	課題名	企業名
1	計算創薬	タンパク質ー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
2	ナノシム	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
3	ナノシム	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
4	ナノシム	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
5	ナノシム	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
6	社会基盤	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
7	社会基盤	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 自然災害リスクグループ
8	社会基盤	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
9	社会基盤	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ジニアリング
10	新規拡大	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
11	新規拡大	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
12	新規拡大	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
13	新規拡大	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
14	新規拡大	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
15	新規拡大	淡水レンズ再現計算モデルの試作	株式会社 計算力学研究センター 第二技術部



平成21年度トライアルユース採択課題

	課題区分	課題名	企業名
1	計算創薬	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
2	流体構造	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 (採択時:株式会社 荏原総合研究所 機械研究室)
3	ナノシム	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
4	ナノシム	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
5	ナノシム	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
6	ナノシム	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
7	ナノシム	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
8	ナノシム	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	新日本製鐵株式会社
9	社会基盤	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
10	社会基盤	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
11	新規拡大	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
12	新規拡大	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
13	新規拡大	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
14	新規拡大	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
15	新規拡大	進化的映像符号化の高度並列シミュレーション	日本電信電話株式会社 NTTサイバースペース研究所



平成22年度トライアルユース採択課題

	課題区分	課題名	企業名
1	ナノシム	Li-グラファイト層間化合物のステージ構造変化に関する ハイブリッド量子古典シミュレーション	株式会社 豊田中央研究所
2	ナノシム	強誘電体電子材料の電子物性発現に関わるナノレベル構 造設計シミュレーション	太陽誘電株式会社
3	新規拡大	分子動力学計算ソフトウェアNAMDのGPGPU大規模並列環 境における性能評価	株式会社 フィアラックス
4	新規拡大	建築物の室内外環境の連成解析とその高速化技術の開発	清水建設株式会社
5	新規拡大	進化的映像符号化の高度並列シミュレーション	日本電信電話株式会社 NTTサイバースペース研究所
6	新規拡大	移流/抵抗/放電を考慮した 3 次元電界計算の電子写真設 計への適用	株式会社 リコー
7	新規拡大	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
8	新規拡大	GaussianとGAMESSの実行を支援するGUIソフトの開発	株式会社 テンキューブ研究所



平成23年度トライアルユース採択課題

	課題区分	課題名	企業名
1	ナノシム	量子化学計算を活用した企業研究の効率化	出光興産株式会社 先進技術研究所
2	社会基盤	大規模地震における強震動評価と屋内収容物の被害評価	株式会社 構造計画研究所 防災ソリューション部
3	アクセラ	メソ構造を持つ高分子材料のマルチスケール・シミュレー ション	日本ゼオン株式会社 総合開発センター
4	アクセラ	衛生陶器設計のための並列GPGPU気液二相流シミュレー ション	TOTO株式会社 技術開発センター
5	アクセラ	大規模三次元電磁界シミュレーションのトンネルモデルへの 適用	株式会社 構造計画研究所 情報・通信事業企画部
6	新規拡大	PCクラスタミドルウェア「HarmonyCalc」の、TSUBAMEでの 動作実証実験	株式会社 イマジオム
7	新規拡大	個別要素法を用いた粉末充填シミュレーションプログラムの 並列化とその評価	住友電気工業株式会社
8	新規拡大	建築物の室内外環境の連成解析とその高速化技術の開発	清水建設株式会社
9	新規拡大	移流/抵抗/放電を考慮した3次元電界計算の電子写真設 計への適用	株式会社リコー
10	新規拡大	GaussianとGAMESSの実行を支援するGUIソフトの開発	株式会社 テンキューブ研究所



TSUBAME產業利用(有償)採択課題一覧

採択年度	申請課題名	所属機関
	CUDAを用いたGPUによるフラマットに一声道。CE高ブロロ	株式会社 クロスアビリティ
		コニカミノルタテクノロジーセンター株式会社
H21	天然光合成の動作メカニズムに関する理論的研究	株式会社 地球快適化インスティテュート
	(非公開)	富士フイルム株式会社
	NuFD/FrontFlow Redの評価 4 💆 🗖	株式会社 数値フローデザイン
	(非公開)	株式会社 ブリヂストン
	天然光合成の動作メカニズムに関する理論的研究	株式会社 地球快適化インスティテュート
	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 筑波研究所
	大規模流体解析ソフトの開発	住友ゴム工業株式会社
		コニカミノルタテクノロジーセンター株式会社
	分子シミュレーションによる高分子とスペープン子を散了しての究 (非公開)	日東電工株式会社
H22	(非公開)	日東電工株式会社
	超大規模三次元高周波電磁界シミュレーションへのGPUクラスター適用検証	株式会社 エーイーティー
	複雑地形CFD シミュレーションコードの高度上のより 🔭 ∺究	株式会社 数値フローデザイン
	(非公開) [1]	株式会社 日立製作所
	(非公開)	株式会社リコー
	(非公開)	株式会社リコー
	(非公開)	株式会社 ブリヂストン
	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
	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 筑波研究所
	高分子中における低分子拡散挙動のシミュレーション	日東電工株式会社
		コニカミノルタテクノロジーセンター株式会社
		株式会社リコー
	(非公開)プラング	日東電工株式会社
H23	鋼材強化に資する微細析出物成長制御のための計算機シミュレーション	新日本製鐵株式会社
5	(非公開) 1 2 / 2 / 2 / 2 / 2 / 2 / 2 / 2 / 2 / 2	富士通アドバンスドテクノロジー株式会社
	超大規模三次元高周波電磁界シミュレーションへのJRUプラスー適用検証	株式会社 エーイーティー
	オープンソースコードによる風速の地形影響評価に関するLES	株式会社 風工学研究所
	(非公開)	株式会社 キヤノン
	(非公開)	日産自動車株式会社
	複雑地形を考慮した超大規模津波波力解析システムの開発	清水建設株式会社 技術研究所