TSUBAMEの産業利用の今後の方向性

東京工業大学　学術国際情報センター　副センター長
共同利用推進室　室長代理

青木尊之

AGENDA

- ペタスケールスーパーコンピュータ TSUBAME 2.0 の詳細
- 『みんなのスパコン』TSUBAME の外部利用制度
- 今後の産業利用の方向性
- まとめ

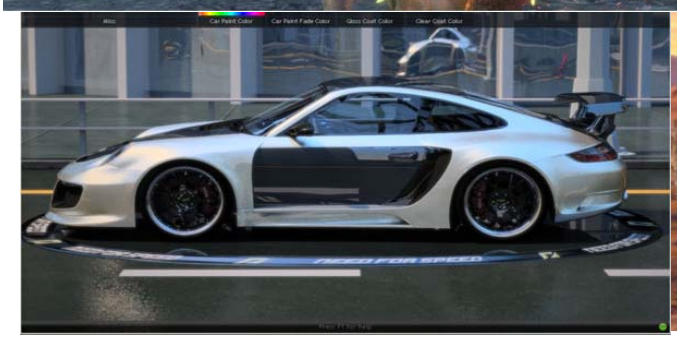
Supercomputer in the world

TOP500 SUPERCOMPUTER SITES

2011 June

Rank	Site	Computer/Year Vendor	Cores	R_{max}	R_{peak}	Power
1	RIKEN Advanced Institute for Computational Science (AICS) Japan	K computer, SPARC64 VIIIfx 2.0GHz, Tofu interconnect / 2011 Fujitsu	548352	8162.00	8773.63	9898.56
2	National Supercomputing Center in Tianjin China	Tianhe-1A - NUDT TH MPP, X5670 2.93Ghz 6C, NVIDIA GPU, FT-1000 8C / 2010 NUDT	186368	2566.00	4701.00	4040.00
3	DOE/SC/Oak Ridge National Laboratory United States	Jaguar - Cray XT5-HE Opteron 6-core 2.6 GHz / 2009 Cray Inc.	224162	1759.00	2331.00	6950.60
4	National Supercomputing Centre in Shenzhen (NSCS) China	Nebulae - Dawning TC3600 Blade, Intel X5650, NVidia Tesla C2050 GPU / 2010 Dawning	120640	1271.00	2984.30	2580.00
5	GSIC Center, Tokyo Institute of Technology Japan	TSUBAME 2.0 - HP ProLiant SL390s G7 Xeon 6C X5670, Nvidia GPU, Linux/Windows / 2010 NEC/HP	73278	1192.00	2287.63	1398.61

What is GPU ?



TSUBAME 2.0

System (58 racks)

1442 nodes: 2952 CPU sockets,
4264 GPUs

Performance: 224.7 TFLOPS (CPU) ※ Turbo boost
2196 TFLOPS (GPU)
Total: **2420** TFLOPS
Memory: 103.9 TB

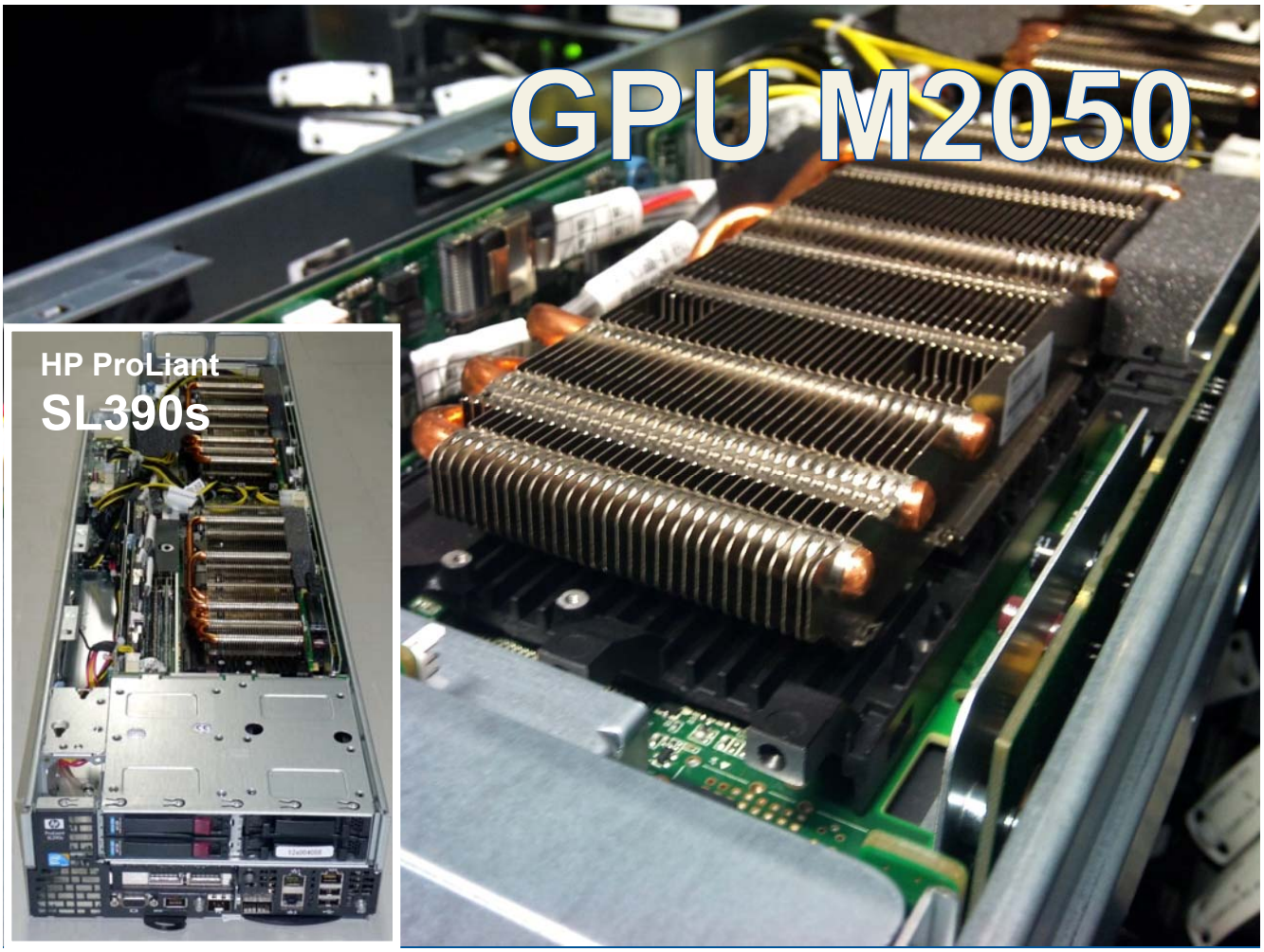
Rack (30 nodes)

Performance: 51.0 TFLOPS
Memory: 2.03 TB

Compute Node
(2 CPUs, 3 GPUs)

Performance: 1.7 TFLOPS
Memory: 58.0GB(CPU)
+9.7GB(GPU)

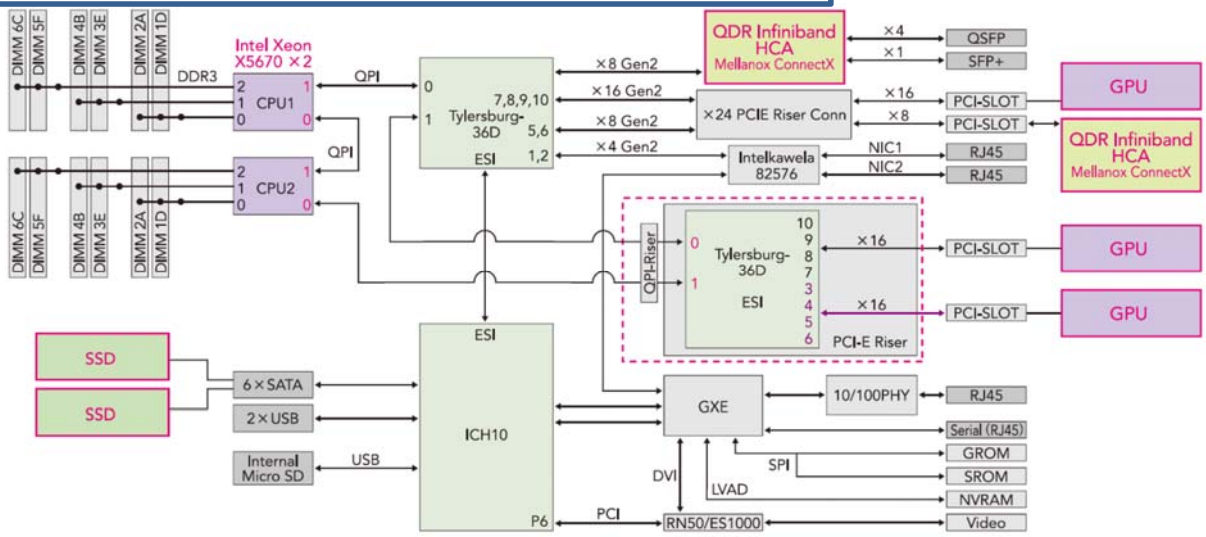
GPU M2050



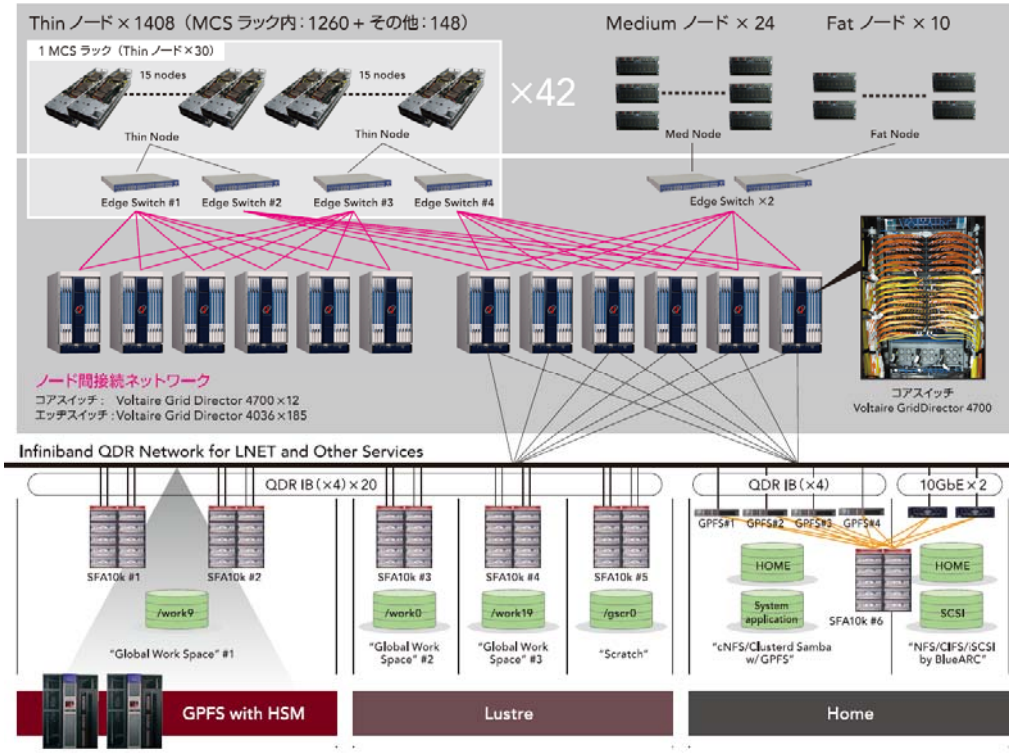
Details of Compute Node

HP ProLiant SL390s

GPU : NVIDIA Tesla M2050 (Fermi Core) ×3 515GFLOPS VRAM 3GB/GPU
CPU : Intel Xeon X5670 2.93Ghz ×2
6 core/socket 76.7 GFLOPS (12cores/node) ※ Turbo boost: 3.196GHz
Memory : 58GB DDR3 1333MHz 一部 103GB
SSD : 60GB ×2 (120GB/node) 一部 120GB ×2 (240GB/node)

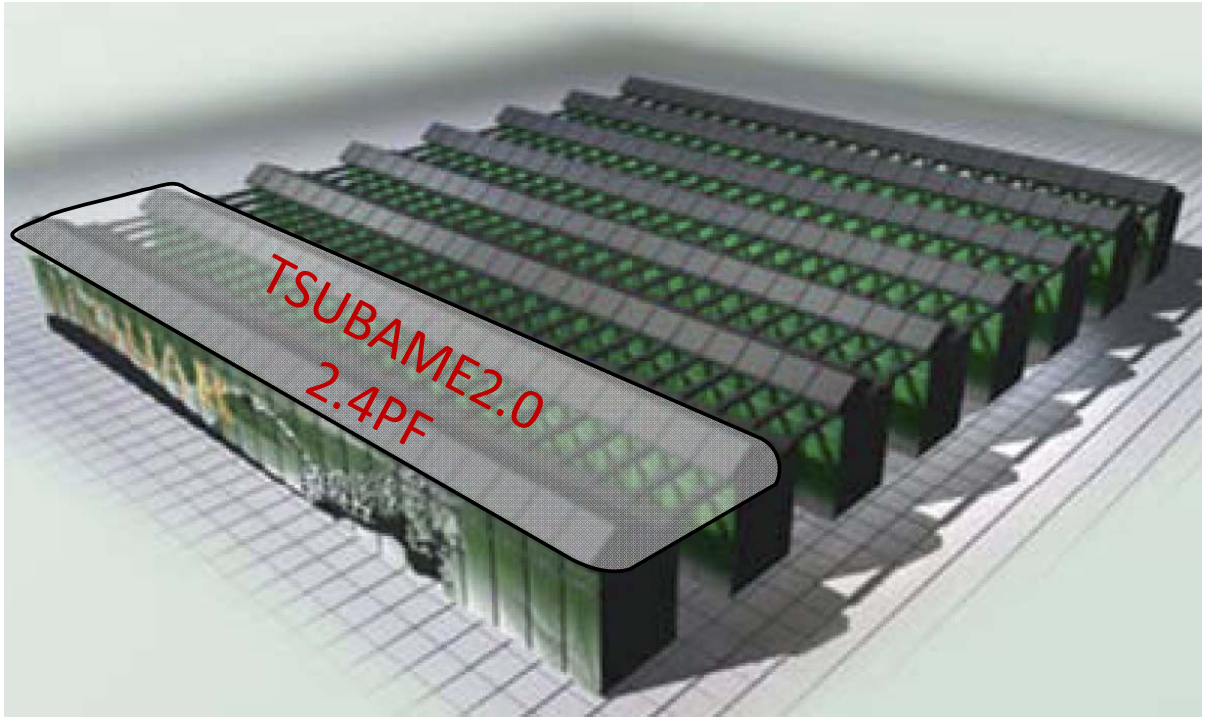


High-Speed Network and Reliable Storage System



ORNL Jaguar vs TSUBAME 2.0

Similar Peak Performance, 1/5 the Size and Power



Supercomputer in the world

The Green500 list, June 2011

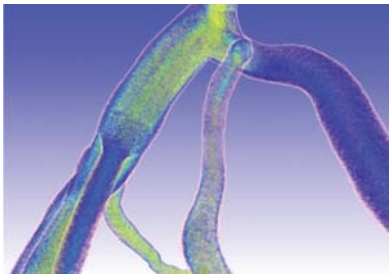
Green500 Rank	MFLOPS/W	Site*	Computer*	Total Power (kW)
1	2097.19	IBM Thomas J. Watson Research Center	NNSA/SC Blue Gene/Q Prototype 2	40.95
2	1684.20	IBM Thomas J. Watson Research Center	NNSA/SC Blue Gene/Q Prototype 1	38.80
3	1375.88	Nagasaki University	DEGIMA Cluster, Intel i5, ATI Radeon GPU, Infiniband QDR	34.24
4	958.35	GSIC Center, Tokyo Institute of Technology	HP ProLiant SL390s G7 Xeon 6C X5670, Nvidia GPU, Linux/Windows	1243.80
5	891.88	CINECA / SCS - SuperComputing Solution	iDataPlex DX360M3, Xeon 2.4, nVidia GPU, Infiniband	160.00
6	824.56	RIKEN Advanced Institute for Computational Science (AICS)	K computer, SPARC64 VIIIfx 2.0GHz, Tofu interconnect	9898.56
7	773.38	Forschungszentrum Juelich (FZJ)	QPACE SFB TR Cluster, PowerXCell 8i, 3.2 GHz, 3D-Torus	57.54

TSUBAME2.0 PUE = 1.2 (Power Usage Effectiveness)

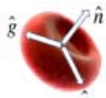
Multiphysics Biofluidics Simulation

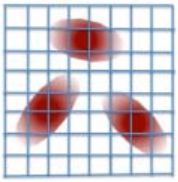
S. Matsuoka (Tokyo Tech), Massimo Bernaschi (IAC, National Resource Counsil, Italy)

Simulation of blood flows that accounts for from red blood cells to endothelial stress



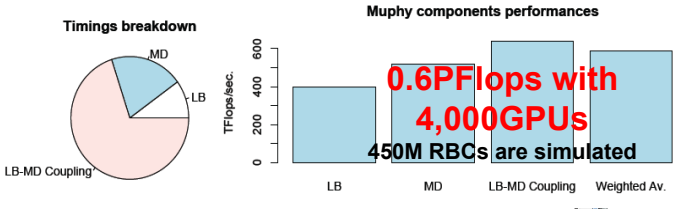
Multiphyics simulation with *MUPHY* software





Fluid: blood plasma : Lattice Boltzmann(LB)

RBC Extended MD



Fastest LBM ever?

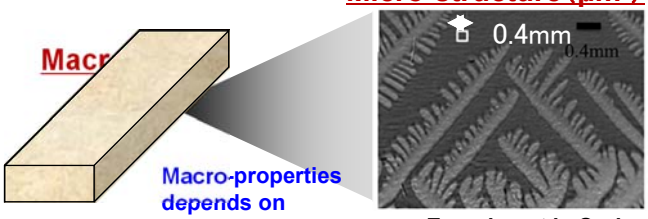
x3 faster than Julich BG/P

Dendritic Solidification

東京工業大学 ○ 青木尊之, 東京工業大学 下川辺隆史, 京都工芸繊維大 高木知弘, 東京工業大学 額田 彰, 東京工業大学 山中晃徳

Micro-structure（μm ）

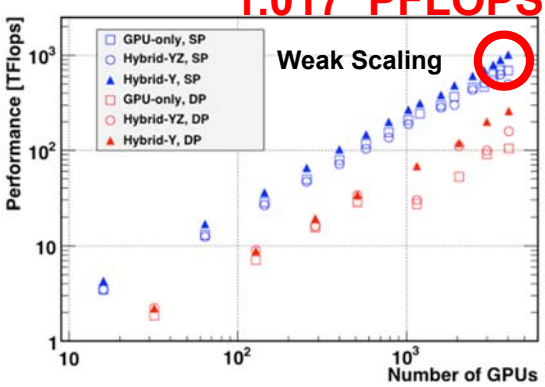
8000×8000×256格子 TSUBAME 2.0

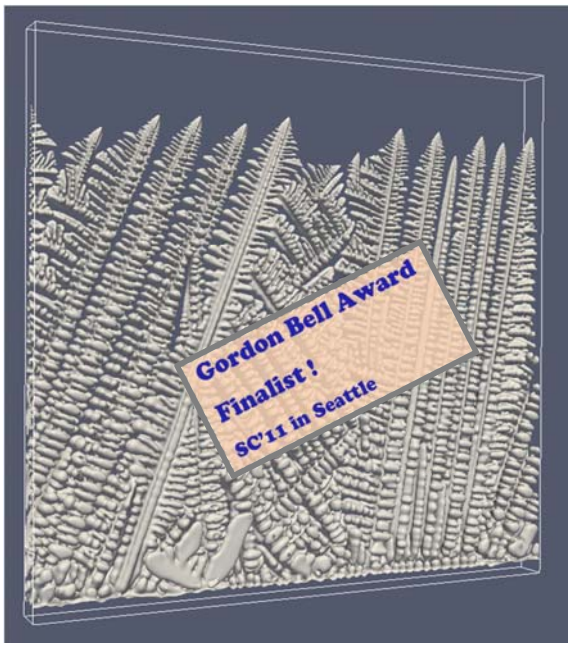


Macro-properties depends on micro-structure

Experiment in Spring-8

1.017 PFLOPS





AGENDA

- ペタスケールスーパーコンピュータ TSUBAME 2.0 の詳細
- **『みんなのスパコン』TSUBAME の外部利用制度**
- 今後の産業利用の方向性
- まとめ

TSUBAMEの外部利用制度

TSUBAMEを利用するには（http://www.gsic.titech.ac.jp/tsubame）

- TSUBAME 共同利用
- 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
- 学際大規模情報基盤共同利用・共同研究拠点

TSUBAME 共同利用

文部科学省 先端研究施設共用促進事業

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23年度は全国30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5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

文部科学省 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
平成23年度 東京工業大学 TSUBAME 共用促進シンポジウム

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 （9月末日現在）

- トライアルユース　戦略分野利用推進5分野　延べ31件採択（H23:5件）
- トライアルユース　新規利用拡大　延べ28件採択（H23:5件）
- 産業利用（有償）　述べ24件採択（H23:6件）

課題種別		応募数	審査数	採択数	H23 実施数	H22 実施数	H21 実施数	H20 実施数	H19 実施数
戦略分野利用推進	計算化学手法による創薬技術の開発	10	10	6	0	2 (2)	6 (5)	5 (4)	4
	大規模流体ー構造連成解析技術の開発	2	2	2	0	1 (1)	2 (1)	1 (1)	1
	シミュレーションによるナノ材料・加工・デバイス開発	13	13	13	7 (6)	10 (8)	10 (4)	4	設定無
	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	7	7	7	2 (1)	3 (3)	6 (4)	4	設定無
	アクセラレータ利用技術の推進	3	3	3	3	0	設定無	設定無	設定無
新規利用拡大		28	28	28	5	6	5	6	6
トライアルユース小計		63	63	59	17 (7)	22 (14)	29 (14)	20 (5)	11
産業利用（有償）	成果公開	12	12	12	3	6	3	設定無	設定無
	成果非公開	12	12	12	3	7	2		
合計		87	87	83	23 (7)	35 (14)	34 (14)	20 (5)	11

（9月末日現在）　（カッコ内は内数で継続課題数）

トライアルユース 採択課題一覧

平成19年度
11件

	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[illegible]設計プロセス[illegible]	[illegible]本部 基盤技術研究所
6	新規拡大	銀行業・保[illegible]システムの開発	[illegible]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[illegible]	[illegible]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[illegible]構造[illegible]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
15件

	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、ナノ量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	希土類ネク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NOTユニット
6	社会基盤	高層ビルの大[illegible]震応答解析	株式会社 アライドエンジニアリング [illegible]
7	社会基盤	日本全国の地[illegible]評価	[illegible]ティング株式会社
8	社会基盤	大規模ALMシミュレ[illegible]ション	[illegible]ズ株式会社
9	社会基盤	大規模空間での高[illegible]波数における[illegible]電磁界シミュレーション	[illegible]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[illegible]	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	[illegible]DK株式会社技術開発本部先進技術開発部 [illegible]AE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[illegible]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O-O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	液体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22年度
8件

	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[illegible]	株式会社 フィアラックス
4	新規拡大	建築物の[illegible]連成[illegible]の高速[illegible]技術の[illegible]発	[illegible]株式会[illegible]
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
6	新規拡大	移流/抵抗/放電を考慮した3次元電[illegible]の[illegible]計への適用	[illegible]株式会社 リコー
7	新規拡大	乗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21年度
15件

	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	大陽誘電株式会社 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[illegible]関[illegible]	[illegible]
7	ナノシム	リチウムイオ[illegible]の[illegible]	[illegible]
8	ナノシム	鋼材強化に資する[illegible]析出物[illegible]ション	[illegible]本製鐵
9	社会基盤	液体レンズ再現・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[illegible]関[illegible]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[illegible]ション	株式会社 ディライト
12	新規拡大	乗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	NTTサイバースペース研究所

TSUBAME産業利用（有償）採択課題一覧

採択年度	申請課題名	所属機関
H21	CUDAを用いたGPUによるフ[illegible]の高速[illegible]	株式会社 クロスアビリティ
	（非公開）	コニカミノルタテクノロジーセンター株式会社
	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	株式会社 数値フローデザイン
H22	（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
	（非[illegible]	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[illegible]の水[illegible]分子拡散挙動[illegible]研究	日東電工株式会社
	（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GP[illegible]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化のための研究	株式会社 数値フローデザイン
	（非公開）	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
H23	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[illegible]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
	（非公開）	コニカミノルタテクノロジーセンター株式会社
	（非公開）	株式会社 リコー
	（非公開）	日東電工株式会社

平成21年度
5件

平成22年度
13件

平成23年度
6件

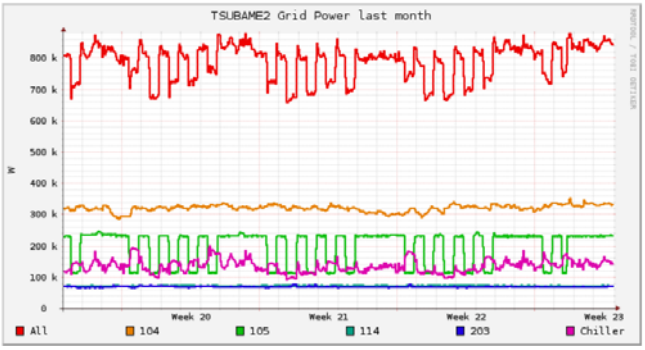
TSUBAME2.0の節電対応

3月	4月	5月	6月	7月	8月	9月
計画停電時 ほぼ運用停止	4/8～ 30%程度の 縮退運用	4/25～ 75%程度の 縮退運用	6/7～ 100%の 運用再開	7/1～24 ピークシフト 運用	7/25～ 100%運用	9/25～ 通常運用
	GSICで50%の 電力削減	ピークシフト 運用開始			緊急時強制 停止キュー15%	

TSUBAME 2.0 Power Monitoring System

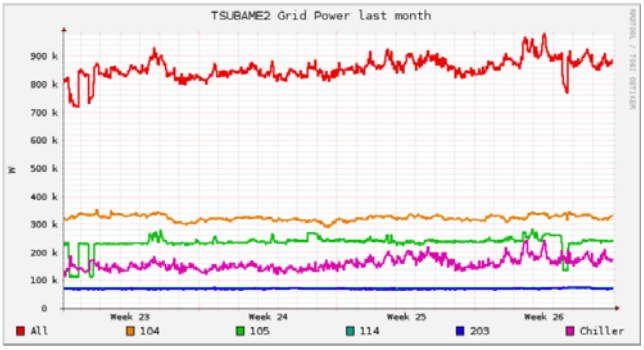
basedon 2011/6/10 0:00

TSUBAME 2.0 All Power Summary



TSUBAME 2.0 Power Monitoring System

TSUBAME 2.0 All Power Summary



AGENDA

- ペタスケールスーパーコンピュータ TSUBAME 2.0 の詳細
- 『みんなのスパコン』TSUBAME の外部利用制度
- **今後の産業利用の方向性**
- まとめ

産業利用できるスパコン

平成24年10月まで

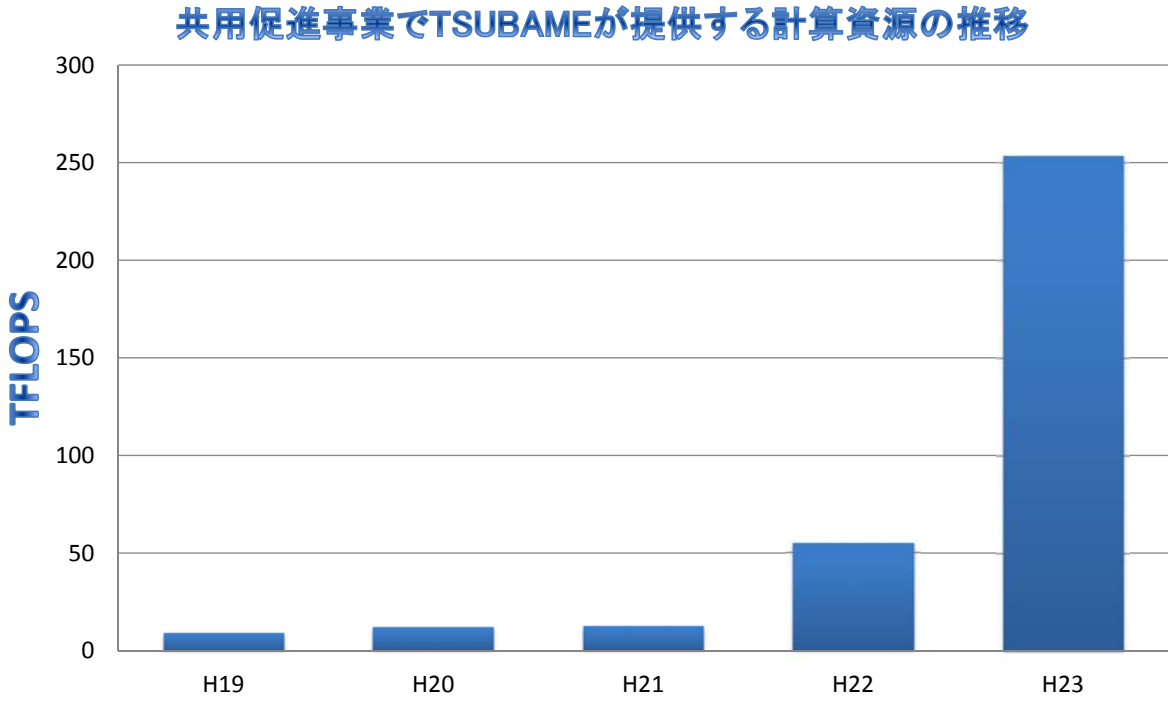
- 東京工業大学 TSUBAME 2.0
- 地球シミュレータ

平成24年11月以降

- 東京工業大学 TSUBAME 2.0
- 地球シミュレータ
- 京コンピュータ
- HPCI 資源提供機関
  （7基盤センター、筑波大、東工大、地球シミュレータ）

東工大では TSUBAME の年間供給可能計算資源の30%を上限として外部利用に提供

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



産業利用の観点からのスパコン比較

TSUBAME 2.0
特徴：GPUが演算性能の9割，Fat Tree ネットワーク
（NVIDIA Tesla M2050, Intel Xeon X5670）
電力効率：2.4PFLOPS/1.5MW

地球シミュレータ
特徴：ベクトル型スパコン（SX-9），Fat Tree ネットワーク
電力効率：0.13PFLOPS/6MW

京コンピュータ
特徴：SPARC64 VIIIfx 8万個，Tofu 6D トーラスネットワーク
電力効率：10PFLOPS/14MW

※ 企業のサイトに、同じマシンの小規模構成を導入できるか？

GPU コンピューティング研究会

東京工業大学・学術国際情報センターの中の研究会活動

活動内容:

- 月に一度の CUDA 講習会
- 2～3ヵ月毎にセミナー
- 国際ワークショップ
- 年一回シンポジウム
- ML を通じた情報交換

東工大の教員・学生だけでなく、他大学・研究機関、民間企業の方も参加（入会）可能。基本的に無料。

http://gpu-computing.gsic.titech.ac.jp/

※ 第10回CUDA講習会　9月28日（水）実施

東工大 共用促進事業実施体制

- 学術国際情報センター内に共同利用推進室を設置
  - 室長:　佐伯元司　（事業代表／センター長）
  - 室長代理:　青木尊之　（副センター長）
  - 施設共用技術指導研究員・支援員:　2名
  - 共用促進リエゾン:　2名
  - 共同利用推進室員:　4名
- 契約事務:研究推進部情報基盤課
- 他、必要に応じて東工大教員・研究員の支援
- 共同研究契約が必要になった場合は産学連携本部

まとめ

『みんなのスパコン』TSUBAME によるペタスケールへの飛翔

本学のTSUBAMEによる共用促進事業は、前身である先端研究施設共用イノベーション創出事業を通じ5年目となり、多くの先進的企業にご活用いただいている。昨年11月のTSUBAME2.0により、事業名であるペタスケールを実現し、その豊富な計算資源により、TSUBAME2.0が供給可能な計算資源の30%を外部利用に提供している。

特に共用促進事業のトライアルユースには10%（240 TFLOPS）以上を割当て、企業の高度化する利用ニーズに対応してきた結果、今年度においても新規のトライアルユースを活用する課題が再び増加傾向にある。またトライアルユースを活用した企業が、有償利用にてTSUBAMEを継続して利用するケースも散見され、産業界での先端的研究施設の共同利用が根付きつつあると感じている。

今後も産業利用枠は、さらに拡大して行くと予測されることから、計算資源の提供だけでなく、GPUコンピューティング研究会での講習会のような教育や、より利用しやすい環境の提供等も含め、『みんなのスパコン』の名前の通り、産業界の先進的ニーズに対応できるサービスを継続的に提供していきたい。