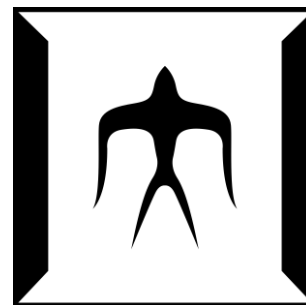
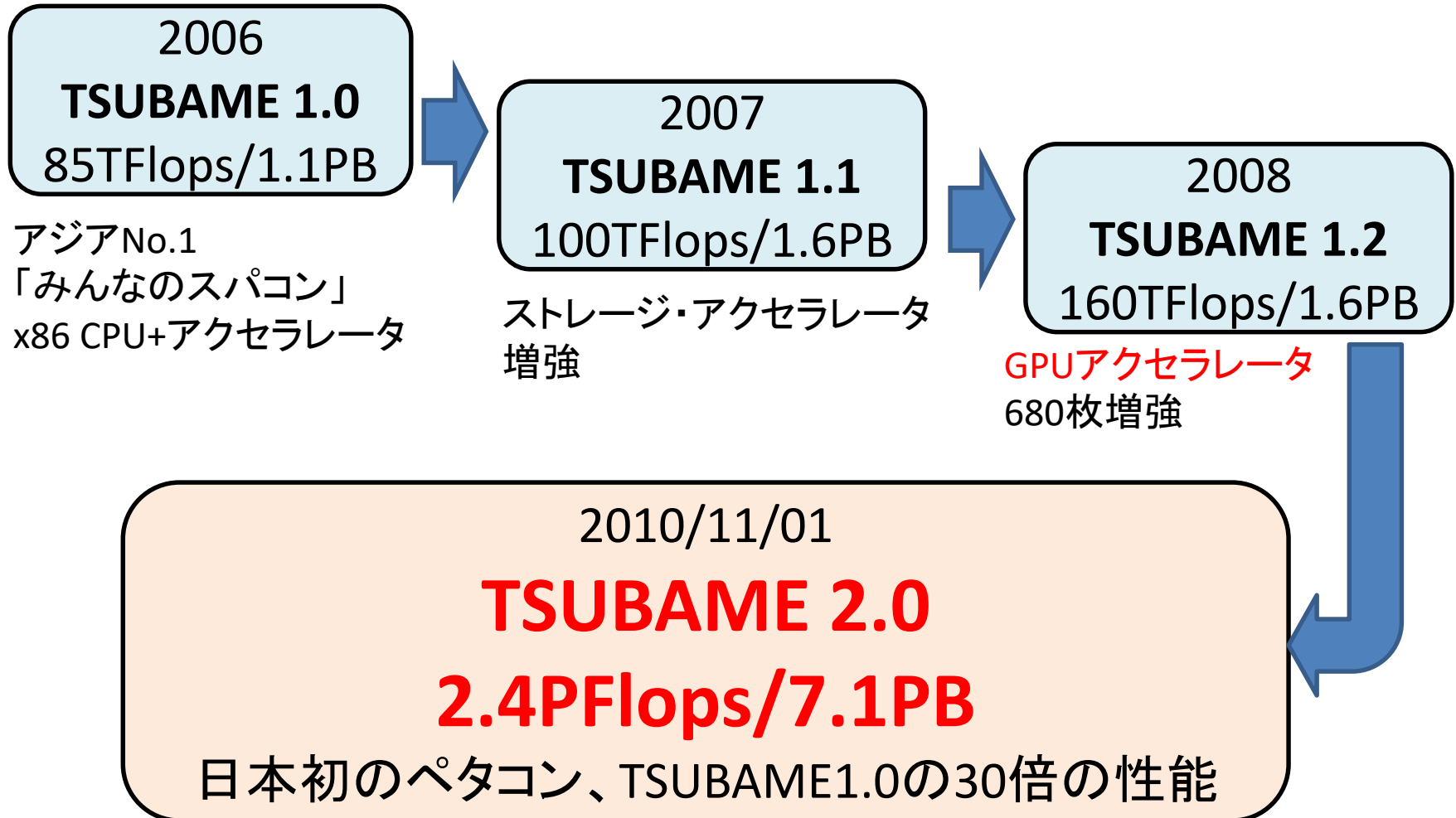


# 新スーパーコンピュータ TSUBAME 2.0利用ガイドンス

東京工業大学  
学術国際情報センター



# TSUBAMEの歴史



- TSUBAME初の完全リプレイス

TSUBAME 2.0 ガイダンス

# TSUBAME2.0の特徴(1)

- 理論値2.4PFlopsのばく大な演算性能
  - CPU合計性能: 220TFlops ...4.4倍 (TSUBAME1.2比)
  - GPU合計性能: 2.18PFlops ...20倍
- 合計容量7.1PByteの巨大ストレージ
  - T1.2の4.5倍の容量
- バイセクションバンド幅200Tb/sの高速光ネットワーク

# TSUBAME2.0の特徴(2)

- ソフトウェア資産の継続性と新規運用
  - 既存のMPI, OpenMP, CUDAプログラムの利用
  - 既存ISVアプリの大部分の利用
  - SUSE Linux Enterprise 11 (T1.2はSUSE10)
  - 新たにWindows HPC Serverの運用 (今回は説明対象外)
- GPU対応アプリも採用、ぜひ使ってください
  - CPUよりも計算が短時間で済む⇒課金も少なくてすむ
  - 現在はAMBER/Maple、今後も続々対応予定



# ハードウェア構成

# TSUBAME2.0 システム概念図

ペタバイト級HDD ストレージ: Total **7.13PB** (Lustre+ home)

並列ファイルシステム領域  
**5.93PB**

MDS,OSS  
HP DL360 G6 30nodes  
Storage  
DDN SFA10000 x5  
(10 enclosure x5)  
Lustre(5File System)  
OSS: 20 OST: 5.9PB  
MDS: 10 MDT: 30TB

OSS x20 MDS x10

ホーム領域  
**1.2PB**

Storage Server  
HP DL380 G6 4nodes  
BlueArc Mercury 100 x2  
Storage  
DDN SFA10000 x1  
(10 enclosure x1)

NFS,CIFS用 x4 NFS,CIFS,iSCSI用 x2

Sun SL8500  
テープシステム  
~8PB

Titenet3

E-Science  
Renkei-POP  
高速データ交換

Sinet3

管理サーバ群

ノード間相互結合網: フルバイセクション ノンブロッキング 光 QDRInfiniband ネットワーク

Core Switch



12switches

Voltaire Grid Director 4700 12switches  
IB QDR: 324port

Edge Switch



179switches

Voltaire  
Grid Director 4036 179switches  
IB QDR: 36 port

Edge Switch (10GbE port付き)



6switches

Voltaire  
Grid Director 4036E 6 switches  
IB QDR:34port  
10GbE: 2port

計算ノード: **2.4PFlops** (CPU+GPU), **224.69TFlops** CPU, ~100TBメモリ、~200TB SSD

Thin計算ノード



1408nodes (32node x44 Rack)

HP Proliant SL390s G7 1408nodes  
CPU Intel Westmere-EP 2.93GHz  
(Turbo boost 3.196GHz) 12Core/node  
Mem:55.8GB (=52GiB)  
103GB (=96GiB)  
GPU NVIDIA M2050 515GFlops,3GPU/node  
SSD 60GB x 2 120GB ※55.8GBメモリ搭載node  
120GB x 2 240GB ※103GBメモリ搭載node  
OS: Suse Linux Enterprise Server  
Windows HPC Server

CPU Total: 215.99TFLOPS (Turbo boost 3.2GHz)

CPU+GPU: 2391.35TFlops

Memory Total:80.55TB (CPU) + 12.7TB (GPU)

SSD Total:173.88TB

Medium計算ノード



HP DL580 G7 24nodes  
CPU Intel Nehalem-EX 2.0GHz  
32Core/node  
Mem:137GB (=128GiB)  
SSD 120GB x 4 480GB  
OS: Suse Linux Enterprise Server  
CPU Total: 6.14TFLOPS

Fat計算ノード



HP DL580 G7 10nodes  
CPU Intel Nehalem-EX 2.0GHz  
32Core/node  
Mem:274GB (=256GiB) ※8nodes  
549GB (=512GiB) ※2nodes  
SSD 120GB x 4 480GB  
OS: Suse Linux Enterprise Server  
CPU Total: 2.56TFLOPS

PCI-E gen2 x16 x2slot/node

GSIC:NVIDIA Tesla S1070GPU

# 計算ノード (1)

- Thinノード, Mediumノード, Fatノードの三種類
- Thinノード: 1408台 [一番良く使われる計算ノード]
  - HP Proliant SL390s G7
  - CPU: Intel Xeon 2.93GHz 6コア × 2 = 12コア
    - Hyperthreadingのために24コアに見える
  - GPU: NVIDIA Tesla M2050 3GPU
  - Memory: 54GB (一部は96GB)
  - SSD: 120GB (一部は240GB)
  - ネットワーク: QDR InfiniBand x 2 = 80Gbps





# 計算ノード(2)

- Medium/Fatノード:M24台 + F10台  
[大容量メモリが必要なジョブ向け]
  - HP Proliant DL580 G7
  - CPU: Intel Xeon 2.0GHz 8コア × 4 = 32コア
    - Hyperthreadingのために64コアに見える
  - Memory: 128GB (Medium), 256/512GB (Fat)
  - SSD: 480GB
  - ネットワーク: QDR InfiniBand x 1 = 40Gbps
  - GPUとして、TSUBAME 1.2で使っていたTesla S1070を利用可能



# 新旧ノードの性能比較

## TSUBAME 1.2ノードとTSUBAME 2.0 (Thin)ノードの性能比較

### 理論性能

	TSUBAME1.2	TSUBAME2.0
CPU	デュアルコアOpteron 2.4GHz × 8 = 16コア  76.8GFlops(*1)	Westmere- EP2.93GHz × 2 = 12コア(24スレッド)  <b>152.4GFlops (*3)</b>
RAM	32GB	<b>54GB</b>
IB	SDR × 2 (20Gbps)	QDR × 2 ( <b>80Gbps</b> )
Disk	HDD	SSDRAID-0
GPU	S1070 × 2GPU 172GFlops(*2)	M2050 × 3 <b>1545GFlops(*4)</b>
メモリ バンド幅	20GB/s以下 (*5)	<b>64GB/s</b>

\*1 2.4(GHz) \* 2 (FP) \* 2 (Core) \* 8(Socket) = 76.8GFlops

\*2 86(Gflops) \* 2 = 172GFlops

\*3 3.196(GHz) \* 4 (FP) \* 6(Core) \* 2(Socket) = 152.4GFlops

\*4 515(Gflops) \* 3 = 1545GFlops

\*5 CPUの制約のためメモリ単体の合算値より低い

### アプリ性能・ベンチマーク性能参考値 (\*6)

	TSUBAME1.2	TSUBAME2.0相当
SpecCINT2006	約 120~140	358.0
SpecCFP2006	(情報無し)	244.0
Gaussian (bzcycsich)	197.227 (秒)	97.55 (秒)
Gaussian (cycsi2b)	396.550 (秒)	98.20 (秒)
Gaussian (cycsi2c)	98.993 (秒)	32.60 (秒)
AMBER (hiv)	82.732 (秒)	39.5 (秒)
AMBER (pyp)	1131.835 (秒)	811.1 (秒)

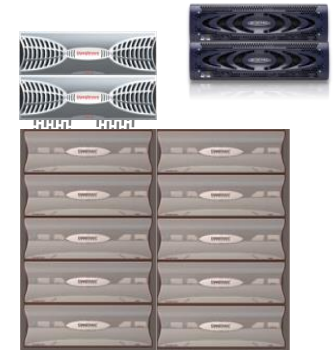
\*6 実際のTSUBAME2.0ノードと異なる測定環境  
なので参考値

# TSUBAME2.0のストレージ

- ホーム

- NFS, CIFS, iSCSI

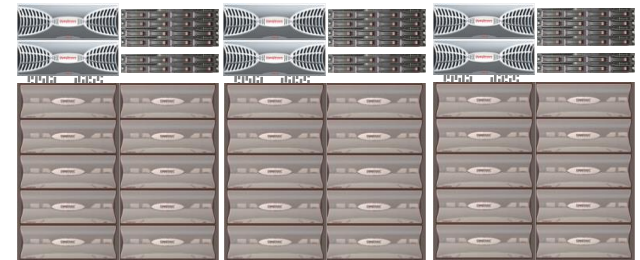
- BlueArc Mercury 100 (一部GridScaler)
    - DDN SFA 10K × 1, SATA × 600 disks



- 並列ファイルシステム

- Lustre

- MDS : HP DL360 G6 × 6
    - OSS : HP DL360 G6 × 20
    - DDN SFA 10K × 3, 2TB SATA × 3550 disks, 600GB SAS × 50 disks



- GPFSによる提供の予定あり

# 実際の利用について

- 利用開始までの流れ
- 課金とTSUBAMEグループについて

# TSUBAME2.0の利用開始

- 利用申請(必須)
  - 東工大ポータルにログインして、メニューからTSUBAME利用ポータルにシングルサインオン(SSO)で申請
  - メールで仮パスワード発行、TSUBAME利用ポータルで本パスワードを設定して利用開始
  - ペーパーレスで即日利用が可能
- TSUBAME2.0へのログイン
  - 従来通りにSSHによるログイン
  - 学外からは鍵認証のみでログイン可能とし、セキュリティを強化
- TSUBAME1.2からのデータ移行
  - TSUBAME1.2のユーザデータ(home, work等)はTSUBAME2.0に移行
  - 移行データは一定期間後に消去

# TSUBAME利用ポータル

- TSUBAMEアカウントでのログイン
- 東工大ポータルからのSSOも可能
- 以下のサービスが利用可能
  - アカウント新規利用申請、利用者情報の変更、利用停止  
(利用者自身)
  - TSUBAMEグループの作成、管理
  - 予算の追加、登録(予算管理者のみ)
  - Hキューの予約(グループ参加者)
  - 有償サービス利用履歴閲覧(利用者ごと、管理者)
  - 課金請求データの閲覧(予算管理者のみ)

# 利用できるサービス

- 無償サービス
  - インタラクティブ、デバッグ専用ノードの利用
  - 小規模の計算試験(2ノード10分間まで)
    - 11月は8ノード6時間に緩和
  - 個人用ストレージサービス(25GB、home領域、全学ストレージ、学内ホスティング)
- 有償サービス
  - 研究目的の大規模計算(従量制、定額制)
  - Work領域(グループ利用、月額制)
  - プリンタ利用サービス(予定)
  - 追加ISVアプリケーション利用(予定)

# 有償サービス

- 研究室、研究プロジェクト単位でグループ作成 (TSUBAMEグループ)
- TSUBAMEポイントによるプリペイド従量制
  - 1ポイントで従来の1ノード・時間を利用できるポイント制
  - 従来: 1口=25000円/2880ノード・時間
  - 1口=5000円/600ポイント(時間単価はほぼ変わらず、性能は大幅に向上)
- 定額制の仮想ノード計算サービス(12月開始予定)
- グループ共有の大規模work領域サービス(2011年4月開始予定)



# TSUBAME1.2からの変更点(1)

- アカウント名の変更
  - 学生：東工大ポータルと共通(例.10B00001)
  - 教職員、その他：全学メールの@の前を変換したもの(例. 東工太郎なら toukou-t-aa)
- 東工大ポータルとの連携
  - 東工大ポータルからSSOでTSUBAME利用ポータルを利用可能
  - アカウント有効期間は東工大ポータルと連動するため、年度ごとの継続申請不要

# TSUBAME1.2からの変更点(2)

- 教育システムとの連携
  - アカountの共通化(認証サーバ、ストレージ、一部アプリケーションはTSUBAME2.0を利用)
  - TSUBAMEアカウントで演習室端末を利用可能
- 有償利用の利便性向上
  - TSUBAMEグループは年度を跨いで継続利用可能
  - TSUBAMEグループに複数の予算を紐付け可能
  - 1つのTSUBAMEグループで従量制と定額制を区別して利用可能
  - グループ共通で利用可能な大規模ストレージ
  - オンラインでの申請、ペーパーレス化

# TSUBAME1からTSUBAME2.0へ のデータ移行について

# TSUBAME1からTSUBAME2への データ移行について

- TSUBAME1(T1)上の古いデータは全て安全に保存されています.
- TSUBAME2(T2)で古いT1のデータを利用するためには、ユーザ自身でデータの移行を行う必要があります.
- 以降、ユーザによるデータ移行方法を説明します.

# 手順1：データ移行用ノードへのログイン

## 1. T2のインタラクティブノードにログインする

```
$ ssh -Y login-t2.g.gsic.titech.ac.jp -l USER-ID-T2
```

## 1. T2のインタラクティブノードから t2b010133～t2b010136のいずれかのノード に対して、**T1のアカウント**でログインする

```
$ ssh -Y t2b010133 -l USER-ID-T1
```

**TSUBAME1のアカウントを指定する**

# データ移行用ノード

## t2b010133～t2b010136

- T2のストレージ領域をマウントしている
- 以下のT1の領域が **/t1** 以下にマウントされている
  - home0～home5, home\_bk0
  - work10, work2, work\_bes, work\_bes2, work\_bes3
  - archive1, archive2
  - depot1, depot2
  - iwork1 ～ iwork4, ihome, iwork

例.) /home0/target\_dir → /t1/home0/target\_dir

## 手順2：データのコピー

- ユーザ自身で、scpによりデータをコピーする.

```
$scp -r /t1/archive2/target_dir USER-ID-T2@localhost:~/target_dir
```

転送元を指定

転送先を指定

TSUBAME2のアカウントを指定する

－ 後日、簡易スクリプトを提供する予定

詳細はTSUBAME2.0 WEBページ経由でお知らせします.

<http://tsubame.gsic.titech.ac.jp/>

# ソフトウェア構成と使い方

- システムソフトウェア・ストレージ
- バッチキューの構成と使い方
- アプリケーション



# System Software

	TSUBAME 1.2	TSUBAME 2.0
Linux OS	SUSE Linux Enterprise Server 10 SP2	SUSE Linux Enterprise Server 11 SP1
Windows OS	-	Windows HPC Server 2008 R2
Job Scheduler for Linux	Sun N1 Grid Engine	PBS Professional
Job Scheduler for Windows	-	Windows HPC Server

- Windows OSを新規にサポート
- ジョブスケジューラが変更されたため、バッチジョブ投入オプションが大きく変わります

# Compilers & Libraries

	TSUBAME 1.2	TSUBAME 2.0
Compiler	Intel Compiler 10 & 11 PGI CDK 6,7,8,9 & 10 gcc 4.1	Intel Compiler 11.1.072 (標準) PGI CDK 10.6 gcc 4.3.4
MPI	Voltaire MPI (標準) OpenMPI 1.2.6	OpenMPI 1.4.2 (標準) MVAPICH2 1.5.1
CUDA	2.3	3.1

- 標準のコンパイラ・バージョンが変わっているので、独自アプリはTSUBAME 2.0用に**再コンパイル**が必要
- コンパイラの切り替えは環境変数の設定で可能
  - 利用の手引をご参照ください
- T1.2同様、CUDA C/Fortranによる**GPUプログラミング**可能
  - CUDA+MPIの場合はコンパイラの組み合わせについてご相談を

# ユーザが利用可能なストレージ構成

## Home領域

- 用途
  - 計算ノード(Linux,Win)のホーム(NFS)
  - 学内ストレージサービス(CIFS)
  - 学内ホスティングサービス(iSCSI)
- 利用方法
  - 1ユーザあたり25GBまで無料
  - /home

## Work領域

- 用途
  - 大規模データ格納
  - Linux計算ノードからアクセス可能(Lustre)
  - グループ単位で利用可能
  - 実行時の中間データなどに対するScratch領域
- 利用方法
  - 1TB/月でTSUBAMEグループ単位で課金(2011年度より)
  - ただし, 2011年4月までは10TBまで無料
  - /work0と/gscr0 (scratch用)

将来的にはテープライブラリと連携した階層型ファイルシステム(GPFS)も提供予定

# Work領域の利用方法

- TSBAMEグループを登録、ディスクオプションを有効にした段階で、/work0以下にグループ名のディレクトリが生成
- 生成されたディレクトリ内に自分の作業ディレクトリを作成する

/work0/group-name/USER01, USER02, ....

- 2011年4月までは10TBまで無料
- 2011年4月以降は1TB/月で課金

# 主要サービス・キュー一覧

- インタラクティブノード
  - i: インタラクティブ専用ノード
  - t: Tesla(GPU)デバッグ専用ノード
- バッチキュー
  - [S] ノード占有系: 12CPUコア、3GPUのノード利用
  - [H] 予約系: Thinノードをノード数、期間を予約して利用
  - [V] 仮想マシン共有系: 8CPUコア(16hyperthread) の仮想ノード利用
  - [G] GPU系: 4CPUコア、3GPUのノード利用
- 超大規模並列
  - 数千～万の超大規模並列計算のための利用(要審査、年に数回)

# ノード占有系：Sキュー・Lキュー

- Sキュー：12CPUコア, 3GPU, 54GBメモリを持つノードを利用
  - 従来のSLAキューに相当
  - 多数CPUまたはGPUによる並列性や、I/O(ディスク・通信)性能が必要なジョブ向け
  - ノード内のジョブ混在は起こらない
  - 従量制課金
- 大容量メモリが必要なジョブには、S96, L128, L256, L512キュー
  - 数字はメモリ容量(GB)
  - Sに比べ1.5倍、2倍...の課金
  - L系はMedium/Fatノードなので、CPUが多く、GPUが古い

# 予約系：Hキュー

- 予約した期間ノードを占有して利用
  - 従来のHPCキューに相当
  - 1000CPUコアレベルの並列性が必要なジョブ向け
  - Webから日程・ノード数を予約
  - バッチキューを介さない利用も可
  - 従来よりも、柔軟な予約が可能
    - ノード数は16以上自由、期間は一日単位で最大7日

# 仮想マシン内共有系:Vキュー (12月運用開始)

- ノードあたり8CPUコアを利用
  - 従来のBESキューに近い
  - 逐次ジョブや比較的小規模なジョブ向け
  - KVM仮想マシン技術により、以下のようなノードに見える
    - 8CPUコア (hyperthreadingで16コアに見える)
    - 32GBメモリ
    - TSUBAME 1.2ノード相当、GPUは無し
  - ノード内にジョブは混在しうる (BESキューのように)
  - I/O速度は他キューより下がるので注意
  - MPI並列計算対応、ただしMVAPICH2のみ
  - 定額制課金



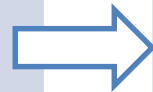
# GPU系：Gキュー (12月運用開始)

- ノードあたり3GPU+4CPUコアを利用
  - GPUジョブに適している
  - 以下のようなノードに見える
    - 4CPUコア
    - 3GPU
    - 22GBメモリ
  - Vキュージョブと仮想マシン技術によりノードを共有
  - 従量制課金、Sに比べ0.5倍 (お買い得)
  - GPU講習会近日予定

# 主要サービス比較

## TSUBAME1.2

性能保証サービス(SLA) [sla1,sla2,ram64,ram128]	254台
ベストエフォートサービス(BES)	234台
予約制大規模サービス	98台



## TSUBAME2.0

<b>S</b> ノード占有系 S96, L128など	従量	300台	並列度・I/O速度重視 演算性能2倍,メモリバンド幅3倍(T1.2比)を占有 GPUジョブもOK
<b>V</b> 仮想マシン内 共有系	定額	440台 (Linux) 40台 (Windows)	比較的小規模ジョブ向け T1.2に近い性能、ただし I/Oはやや弱め
<b>H</b> 予約系	従量	420台	大規模並列向け 1日単位1ノード単位で予約が可能に
<b>G</b> GPU系	従量	480台 (Vと共有)	GPUジョブ向け GPU+MPIもOK
超大規模		700~1000台	超大規模ジョブ向け 審査制、年数回予定

※ 各キューへの配分ノード数は今後の利用状況に応じて調整します  
 ※ ノード占有Windowsなどは検討中です

# バッチキューの使い方

## t2subコマンドの基本

- 既存のN1GEからPBS Proに変更になり、使い方も変わります
- ~/testにあるmyprogというプログラムを、Sキューで実行する場合

(1) スクリプトファイルを作っておく (たとえばjob.shというファイル)

```
#!/bin/sh  
cd $HOME/test  
./myprog
```

job.shファイル

(2) t2subコマンドで投入

```
t2sub -W group_list=xxx -q S ./job.sh
```

-q xxx: キュー名を指定

-W group\_list=xxx: TSUBAMEグループ番号を指定

# バッチキューの使い方

## MPI並列ジョブの場合

(1) myprogがMPIプログラムとする。スクリプトは以下のよう:

job.shファイル

```
#!/bin/sh
cd $HOME/test
mpirun -n 並列数 -hostfile $PBS_NODEFILE ./myprog
```

(2) t2subコマンドで投入

```
t2sub -q S -W group_list=xxx -l select=10:mpiprocs=12
¥
```

-l place=scatter ./job.sh

- この場合、ノードあたり12並列 × 10ノード = **120並列**で実行

# バッチキューの使い方

## SMP並列(スレッド,OpenMP)ジョブ

(1) myprogがプログラムとする。スクリプトは以下:

```
#!/bin/sh  
cd $HOME/test  
./myprog
```

job.shファイル

(2) t2subコマンドで投入

```
t2sub -W group_list=xxx -l select=1:ncpus=8 -q S ./job.sh
```

- この場合、1ノードで、**8並列**で実行

# T2subのその他のオプション

- -l walltime=10:00:00

ジョブの最大実行時間。省略すると1時間

- -l mem=40gb

ジョブが利用するメモリサイズ(ノードあたり)。省略すると1GB

- -o /work0/xxx/yyy.txt

標準出力の出力先ファイル名

- -e /work0/xxx/yyy.txt

標準エラー出力の出力先ファイル名

詳細はweb上の「利用の手引」をご参照ください

# バッチキュー関係コマンド

- t2stat

ジョブの状態を確認。通常は自ジョブのみ

例) t2stat -a: 他ユーザのジョブも表示

例) t2stat V: 指定したキュー(V)の情報のみ表示

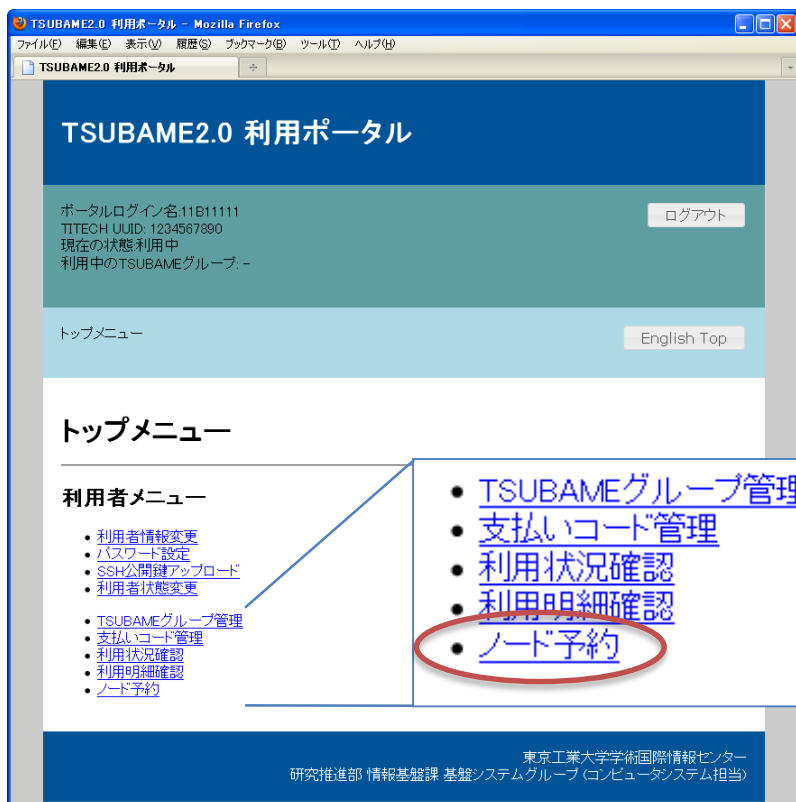
- t2del

ジョブの終了を待たずに削除

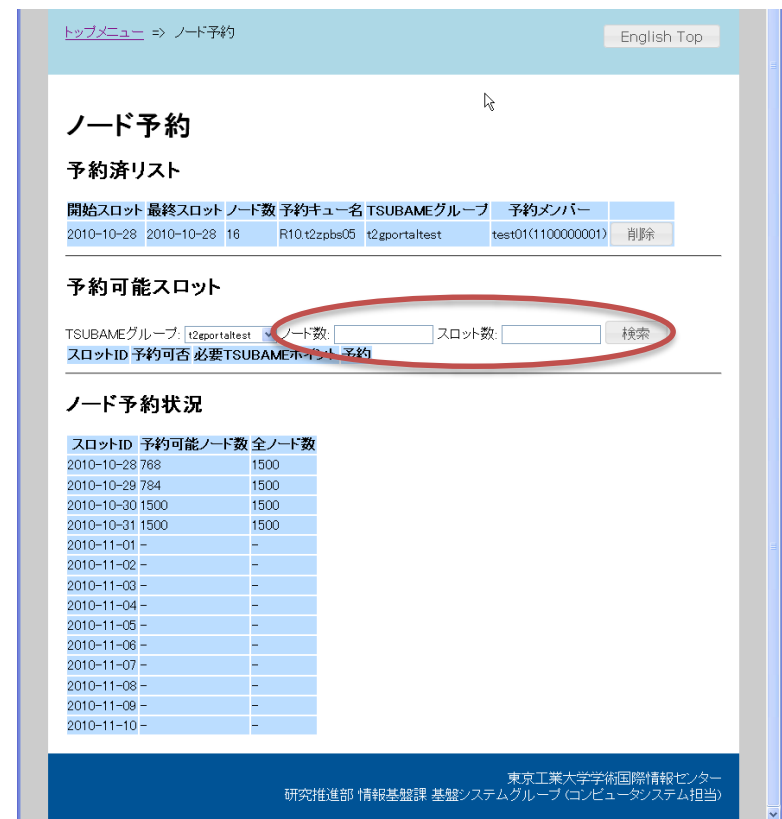
例) t2del 147.t2zpbs03

# Hキュー予約・利用方法 (1/2)

1. TSUBAME利用ポータルにログイン
2. ノード予約を選択



3. 予約状況の確認
4. 利用開始日(スロット)、ノード数を指定して空を検索



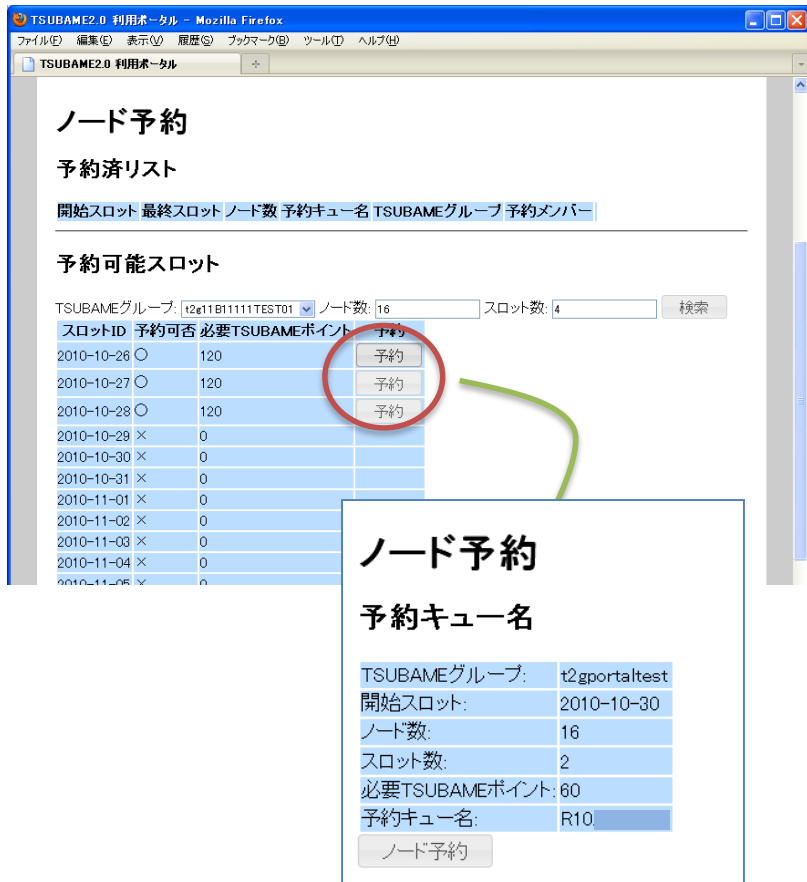
※ 画面は開発中の物です

TSUBAME 2.0 ガイダンス



# Hキュー予約・利用方法 (2/2)

## 5. 予約可能一覧より選択し、予約確定



ノード予約

予約済リスト

開始スロット 最終スロット ノード数 予約キュー名 Tsubameグループ 予約メニュー

予約可能スロット

Tsubameグループ: [t2g11B11111TEST01] ノード数: 16 スロット数: 4 検索

スロットID	予約可否	必要Tsubameポイント	予約
2010-10-26	○	120	予約
2010-10-27	○	120	予約
2010-10-28	○	120	予約
2010-10-29	×	0	
2010-10-30	×	0	
2010-10-31	×	0	
2010-11-01	×	0	
2010-11-02	×	0	
2010-11-03	×	0	
2010-11-04	×	0	
2010-11-05	×	0	

ノード予約

予約キュー名

Tsubameグループ:	t2gportaltest
開始スロット:	2010-10-30
ノード数:	16
スロット数:	2
必要Tsubameポイント:	60
予約キュー名:	R10

ノード予約

## 予約確定後の利用方法

1. スロット開始日時を待つ
  - スロット開始は10:00
2. 利用開始
  - t2subによるジョブ投入

```
t2sub -W group_list=xxx ¥  
-q R10 ./job.sh
```

- インタラクティブ実行
  1. t2rstatコマンドで予約キューに属すノード一覧を取得

```
t2rstat
```

2. ノードにsshログイン可能

# ISV (Independent Software Vendor)

## アプリケーション(1/3)

	TSUBAME 2.0	学外者利用	TSUBAME 1.2
PGI CDK*	10.6	OK	6.x/7.x/8.x/9.x/10.0
Intel Compiler*	11.1.072	OK	10.1.011/11.0.074
ABAQUS Standard/Explicit	6.8.4		6.5.6/6.7.1/6.8.4
ABAQUS/CAE	6.8.4		6.5.6/6.7.1/6.8.4
MD NASTRAN	2010		R2.1
MD PATRAN	2010		R2.1
Gaussian	09 B.01	OK	03 Rev. C02/D02/E01 09 Rev. A02
GaussView	5.0.9	OK	3.0/4.1/5.0
Linda(Gaussian用)	8.2	OK	7.1/7.2/8.2

\* : Windows HPC 環境でも利用可能

# ISV (Independent Software Vendor)

## アプリケーション(2/3)

	TSUBAME 2.0	学外者利用	TSUBAME 1.2
Molpro	2010.1		2002.6
AMBER	11		8.0/9.0/9.0CS/10
Materials Studio	5.0.1		4.0/4.1/4.3/4.4/5.0
Discovery Studio	2.5.5		1.5/1.6/1.7/ 2.0/2.1/2.5
AVS/Express	7.3		7.0.1/7.1.1/7.2
AVS/Express PCE	7.3		7.0.1/7.1.1/7.2
EnSight	9.1.2(a)		8.0.7(k)/8.2.6(c)/9.0. 3(b)
Mathematica	7.0.1		5.2/6.0/7.0
Maple	14		11/12/13

# ISV (Independent Software Vendor) アプリケーション(3/3)

	TSUBAME 2.0	学外者利用	TSUBAME 1.2
ANSYS FLUENT	12.1		6.3.26/12.1
Total View Debugger	8.8.0-2	OK	-
MATLAB	導入予定		
LS-DYNA	導入予定		

- サポート外ISVアプリケーション
  - IMSL: 数値演算ライブラリ for Fortran & C
  - MOPAC: 量子化学計算
  - SAS: 統計解析

# ISVアプリケーションのGPU対応状況

Application	状況
PGI CDK	対応
AMBER	対応
Maple	対応
Total View Debugger	次期バージョンにて対応
ABAQUS Standard/Explicit	Nov. 2010 より対応予定

Application	状況
MD NASTRAN	Jun 2011 より対応予定
Gaussian	Q3 2011 より対応予定
Molpro	Q3 2011 より対応予定
Mathematica	Nov. 2010 より対応予定
ANSYS FLUENT	Nov. 2011 より対応予定

## ISVアプリケーションでのGPU使用例: AMBER

- AMBERでは、pmemdがGPU対応

```
t2sub <グループ, キュー指定> ./job.sh
```

job.sh

```
#!/bin/sh  
pmemd.cuda<pmemdと同等のオプション>
```

# Free Software (examples)

Software	Version
Platex	ptetex3-20090610+tetex-3.0
Tgif	4.2.2 free
Tinker	5.1.08
GROMACS	4.0.7
POV-Ray	3.6.1/3.50C
GAMESS	25 March 2010
ImageMagick	6.4.3.6
fftw	3.2.2
R	2.11.1
Ruby	1.8.7
Java	1.6.0
Subversion	1.5.7
Git	1.6.0.2

# サポート体制

- 利用の手引の公開
- メールによる技術的サポート
- FAQの整備
- 利用者向け講習会
  - 初心者向け講習会(年6回、英語も)
  - ISVアプリケーション講習会(年2回)
  - GPU講習会([GPUコンピューティング研究会](#)主催)

TSUBAME2.0 WWWサイト

<http://tsubame.gsic.titech.ac.jp/>

問い合わせ先

[soudan@cc.titech.ac.jp](mailto:soudan@cc.titech.ac.jp)