

東京工業大学TSUBAME3.0の紹介



東京工業大学
学術国際情報センター
共同利用推進室
渡邊寿雄

kyoyo@gsic.titech.ac.jp

本日の概要

- **TSUBAME3.0** のご紹介 (5シート)
- **TSUBAME3.0** の利用制度 (2シート)
- **TSUBAME3.0** で利用可能なアプリ (4シート)



TSUBAMEの歴史

2006
TSUBAME1.0
85TFlops/1.1PB

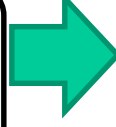


アジアNo.1!!
「みんなのスパコン」



2007
TSUBAME1.1
100TFlops/1.6PB

2007年 文科省 先端研究施設
共用イノベーション創出事業



2008
TSUBAME1.2
160TFlops/1.6PB

2009年 TSUBAME 共同利用開始



2010/11/01
TSUBAME2.0
2.4PFlops/7.1PB
日本初のペタコン



2010年 JHPCN 開始

2012年 HPCI 開始

2013/9
TSUBAME2.5
5.7PFlops/7.1PB



2016年 HPCI 産業利用開始
(実証利用、トライアル・ユース)

2017/8/1
TSUBAME3.0
12PFlops / 16PB



TSUBAME3.0 Green500 List 1位

2017年8月から稼働開始
Green500 List(2017年6月版)
にて世界1位！



The
GREEN
500 CERTIFICATE

Tsubame 3.0, a modified HPE ICE XA System at the
GSIC Center, Tokyo Institute of Technology

is ranked

No. 1 in the Green500

among the World's TOP500 Supercomputers
with 14.1 GFlops/Watt Linpack Power-Efficiency
on the Green500 List published at ISC High Performance, June 19, 2017

Congratulations from the Green500 Editors


Wu Feng
Virginia Tech


Kirk Cameron
Virginia Tech

- コンピュータと冷却の双方が、世界トップクラスの省エネ性能
冷却効率を示す指標のPUEは1.033(推定値)
- より少ない電力での計算が可能

TSUBAME3.0

クラウド型ビッグデータ、
グリーンスパコン **TSUBAME3.0**



計算ノード (540台)

高性能計算ノード:

2基のCPUと4基のGPU

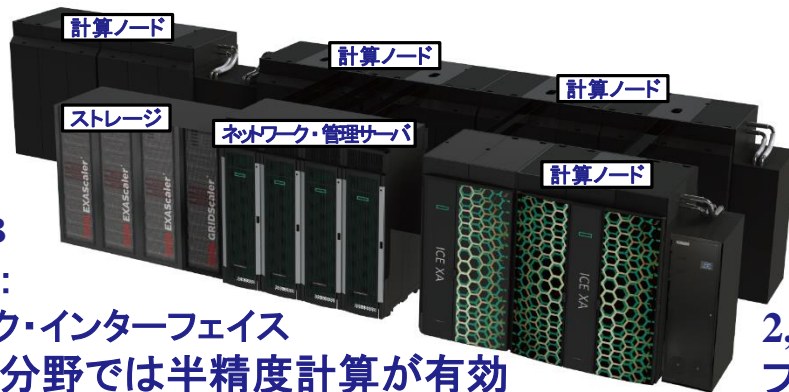
メモリ256GB、高速SSD 2TB

高速ネットワークで相互接続:

4本のOmni-Pathネットワーク・インターフェイス

人工知能(AI)やビッグデータ分野では半精度計算が有効

TSUBAME3.0はこの精度にて国内最大級の性能



ストレージ(15.9PB)

毎秒150GBで読書可能

ネットワーク

2,160本の光ファイバーケーブル
ファットツリー構造



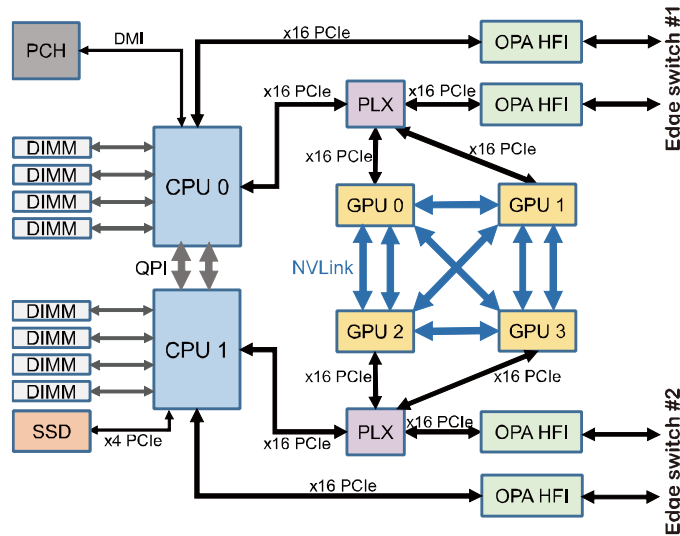
左図: 計算ノード内部
銅パイプで繋がれた4個の金属部品
がGPU用水冷ブロック。
発熱が多いCPUとGPUは水冷、そ
他のチップは空冷
冷却する水は屋上の冷却塔で生成
され、夏場では32度くらいだが、高
温なプロセッサを冷やすには十分



計算ノード以外も熱を発生します。
TSUBAME3.0ではラックの背面に
リアドアというラジエータを装着し、
機器の廃熱を水で冷やして室内に
戻す。室内のエアコンで冷やすより、
消費電力が少ない。

TSUBAME3.0 でのクラウド的ノードリソース分割

計算ノード

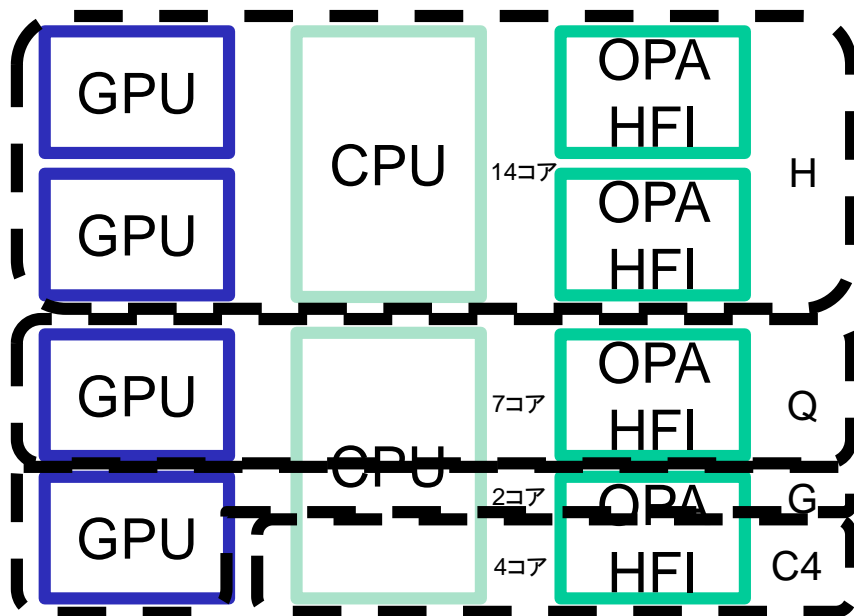


- 4 GPUs, 28 CPU cores
- 非常にパワフルな計算ノード

- TSUBAMEのユーザの様々な要望
 - **CPU&GPU User**: CPUもGPUもあるだけ使う
 - **GPU User**: GPUはあるだけ使うが CPUは最低限で十分
 - **1GPU User**: 1GPUは使えるが、1ノード複数 GPUは使わない(含ISVユーザ)
 - **CPU User 1**: GPUは使わない、CPU並列利用
 - **CPU User 2**: GPU未対応ISVを利用したい
 - **CPU User 3**: CPUのシリアルジョブをたくさん流したい
- 計算ノードを分割して共有すれば、
 - 運用側: 利用率向上
 - 利用者: 待ち時間の短縮
不必要な資源の課金負担が不要

TSUBAME3.0 でのリソース分割メニュー

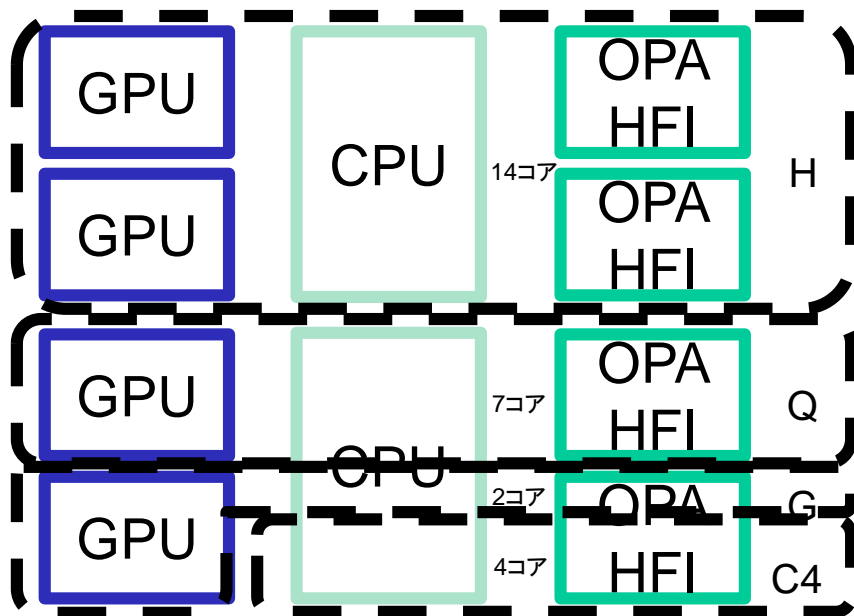
TSUBAME3.0の1ノードの模式図



- F: 計算ノード1台をそのまま使用
ノードを階層的に分割
- H: 1/2ノード ⇒ 課金も 1/2
- Q: 1/4ノード ⇒ 課金も 1/4
- G: 1 GPU + 2 CPU Core
- C4: 4 CPU Core
- C1: 1 CPU Core
- 運用側: 利用率向上
- 利用者: 待ち時間の短縮
必要最低限の資源への課金

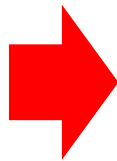
TSUBAME3.0 でのリソース分割メニュー

TSUBAME3.0の1ノードの模式図



- F: 計算ノード1台をそのまま使用
ノードを階層的に分割
- H: 1/2ノード ⇒ 課金も 1/2
- Q: 1/4ノード ⇒ 課金も 1/4
- G: 1 GPU + 2 CPU Core
- C4: 4 CPU Core
- C1: 1 CPU Core

- Singularityを利用可能
(HPC向けLinuxコンテナ)



利用者の環境(OS、アプリ、ライブラリ等)をスパコン上で再現可能

TSUBAME3.0 の利用制度

利用区分	利用者	制度		募集時期	申請および審査	成果	料金（税別）
学術利用	大学 または 研究機関等	HPCI	一般利用課題 若手人材育成課題	令和2年度利用 現在公募中	HPCI運用事務局 （高度情報科学技術研究機構）	公開	無償
		JHPCN		年1回 1月頃	JHPCN拠点事務局 （東京大学 情報基盤センター）	公開	無償
		TSUBAME学術利用		随時 募集中	東京工業大学 学術国際情報センター	公開	1口 100,000 円
		TSUBAMEグランドチャレンジ 大規模計算制度		年数回 （春期、秋期） 受付締切 9/27（金）17:00	東京工業大学 学術国際情報センター	公開	無償
		TSUBAME若手・女性・より若い 世代の利用者支援制度		年1回/随時募集中	東京工業大学 学術国際情報センター	公開	無償
産業利用	民間企業	HPCI	実証利用	令和2年度利用 現在公募中	HPCI運用事務局 （高度情報科学技術研究機構）	公開	無償
			トライアル・ユース	令和元年度利用 随時募集中			
		TSUBAME産業利用		随時 募集中	東京工業大学 学術国際情報センター	公開 非公開	1口 100,000 円 1口 200,000 円

TSUBAME3.0 のHPCIへの提供資源

提供システム：クラウド型ビッグデータ グリーンスパコン「**TSUBAME3.0**」

利用区分	提供期間	利用形態 (共通)	利用形態 (個別)	提供総資源量	課題あたり申請上限
HPCI 一般利用課題 若手人材育成課題 (学術利用)	R02.4 ~R03.3	共有利用 1Unit 1,000 ノード時間相当	四半期(3ヶ月)単位 通年利用を希望する 場合は、全ての四半 期(第1~4 四半期)を 申請すること。	一般 850Unit (850,000 ノード時間)	第1~3四半期:制限なし Lクラス 年間合計上限量: 75,000 ノード時間 第4四半期: 10,000 ノード時間
		ストレージ 課題あたり1~300TB ※ストレージの確保には 1TB 1年あたり120 ノード 時間の計算資源を消費 するため、ストレージ申 請分を計算資源に換算/ 加算して希望資源量を 算出すること。		若手100Unit (100,000 ノード時間)	
HPCI 産業利用 実証利用	R02.4 ~R03.3	ストレージ 課題あたり1~300TB ※ストレージの確保には 1TB 1年あたり120 ノード 時間の計算資源を消費 するため、ストレージ申 請分を計算資源に換算/ 加算して希望資源量を 算出すること。	最長6ヶ月 もしくは12月末まで 令和元年度利用 随時募集中	150Unit (150,000 ノード時間)	
HPCI 産業利用 トライアル・ ユース	R01.9 ~R01.12			100Unit (100,000 ノード時間)	最長6カ月: 5,000 ノード時間

TSUBAME3.0 で利用可能なアプリ (ISV)

アプリケーション名	概要	ライセンス
開発環境、ライブラリ		
Intel Compiler	Intel 開発環境 (Intel Parallel Studio XE Cluster Edition)	HPCIで利用可能
PGI Compiler	PGIコンパイラ	HPCIで利用可能
Allinea FORGE	統合開発環境(デバッグ、プロファイル、最適化、コーディング、ビルド)	HPCIで利用可能
CuDNN	NVIDIA CUDA® Deep Neural Network library (CuDNN)	HPCIで利用可能
NCCL	NVIDIA Collective Communications Library (NCCL)	HPCIで利用可能
数値解析/可視化ソフトウェア		
Mathematica	数式処理システム	東工大所属者のみ
Maple	数式処理システム	東工大所属者のみ
MATLAB	インタプリタ型 数値解析ソフトウェア	東工大所属者のみ
AVS/Express (PCE)	汎用可視化ソフトウェア、およびクラスター対応並列可視化ソフトウェア	東工大所属者のみ
シミュレーション ソフトウェア		
ANSYS	有限要素法CAEを中心とする解析ソフトウェア群	東工大所属者のみ
ABAQUS & ABAQUS CAE	有限要素解析ソフトウェア & ABAQUS専用のプリ・ポストツール	東工大所属者のみ
MSC One	有限要素法を中心とする解析ソフトウェア群	東工大所属者のみ
Gaussian16 & Gauss View6	分子軌道法プログラム & Gaussian専用のプリ・ポストツール	HPCIで利用可能
AMBER	分子動力学プログラム	HPCIで利用可能(学術利用のみ)
CST MW-Studio	電磁界解析プログラム	東工大所属者のみ
Materials Studio	材料科学向けモデリング/シミュレーション環境	東工大所属者のみ
Discovery Studio	ライフサイエンス向けモデリング/シミュレーション環境	東工大所属者のみ
LS-DYNA	汎用非線形構造解析ソフトウェア	東工大所属者のみ
COMSOL Multiphysics	有限要素法(FEM)ベースの汎用工学シミュレーションソフトウェア	東工大所属者のみ
Schrodinger Small-Molecule Drug Discovery Suite	低分子創薬向けモデリング/シミュレーションソフトウェア群	東工大所属者のみ

TSUBAME3.0 で利用可能なアプリ(他)

アプリケーション名	概要
機械学習、Deep Learningフレームワーク	
Caffe	Berkeley AI Research (BAIR) が開発しているDeep Learning フレームワーク。
Chainer	Preferred Networks が開発しているDeep Learning フレームワーク。
TensorFlow	Google が開発しているDeep Learning フレームワーク。
開発環境、ライブラリ、ツール	
Apache Hadoop	大規模データの分散処理ミドルウェア
Java SDK	Java開発環境
PETSc	科学技術計算向けライブラリ群
fftw	離散フーリエ変換 (DFT) ライブラリ
Performance API (PAPI) ライブラリ	CPUやGPUのHardware counter解析用APIライブラリ
数値解析/可視化ソフトウェア、ツール	
ParaView	大規模データ分析、可視化アプリケーション
POV-Ray	可視化アプリケーション
VisIt	大規模データ分析、可視化アプリケーション
R	統計解析システム
GIMP	画像処理ソフト(ペイントソフト)
Gnuplot	グラフ作成ソフト
Tgif	2次元の描画ソフト
ImageMagick	画像表示と画像処理ソフト
シミュレーションソフトウェア	
CP2K	電子状態計算プログラム
GAMESS	分子軌道法プログラム
GROMACS	分子動力学プログラム
LAMMPS	分子動力学プログラム
NAMD	分子動力学プログラム
Tinker	分子動力学プログラム
OpenFOAM	流体/連続体シミュレーション

TSUBAME3.0で利用可能なアプリ(他2)

HPCIで整備されたアプリケーション

アプリケーション名	概要
HΦ	並列計算機に対応した数値厳密対角化法による有効模型ソルバーパッケージ。
MODYLAS	高並列汎用分子動力学シミュレーションソフト
NTCHEM2013	量子化学計算アプリケーション。既存アプリケーションの機能をカバーしつつ、他のプログラムでは利用できない多くの量子化学計算手法を実装。
OpenMX	原子局在基底と擬ポテンシャルを用いた第一原理計算プログラム。
SALMON	時間依存密度汎関数理論に基づく実時間・実空間グリッド法を用いた、光励起電子ダイナミクスシミュレータ。
SMASH	オープンソースの大規模並列量子化学計算ソフトウェア。ナノサイズ分子のエネルギー及び最適化構造を、分割せずにまるごと計算することが可能。
ABINIT-MP	フラグメント分子軌道法(FMO法)を実装した大規模並列量子化学計算ソフトウェア

- 国プロで開発された国産アプリケーション
- TSUBAME3.0以外にも、多くのHPCI共用計算資源で利用可能に整備

TSUBAME3.0での利用講習会

HPCIによる利用講習会

- PHASE/0
令和元年11月25日(月) 午後
- ABINIT-MP
令和2年1月28日(火) 午後

東工大による秋の利用講習会

- 令和元年10~11月に実施予定 (一部、学内向けのものもあります。)
TSUBAME3.0のウェブページをご参照ください。
TSUBAME計算サービス TSUBAME3.0 > 講習会
<https://www.t3.gsic.titech.ac.jp/lectures>

東京工業大学 **TSUBAME3.0** の紹介

TSUBAME3.0の
HPCI申請に関してご不明
な点がございましたら、
こちらまでお気軽にお問い合わせ
合わせください。



東京工業大学
学術国際情報センター
共同利用推進室
渡邊寿雄

kyoyo@gsic.titech.ac.jp