

令和3年度 TSUBAME共同利用 公募説明会



本日の予定

1. TSUBAME3.0の紹介
2. 個別相談(希望者のみ)

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** の紹介 (6シート)
- **TSUBAME3.0** の利用制度 (5シート)
- **TSUBAME3.0** 利用可能なアプリ
やその他 (10シート)

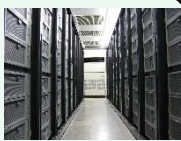


TSUBAME性能向上の歴史

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



2013/9

TSUBAME2.5

5.7PFlops/7.1PB

2012年 HPCI開始

2010年 JHPCN 開始

2017/8/1

TSUBAME3.0

12PFlops / 16PB

2016年 HPCI 産業利用開始
(実証利用、トライアル・ユース)



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

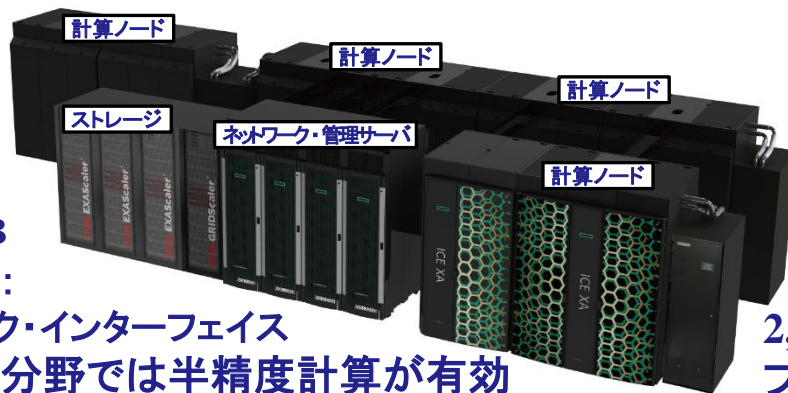
メモリ256GB、高速SSD 2TB

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



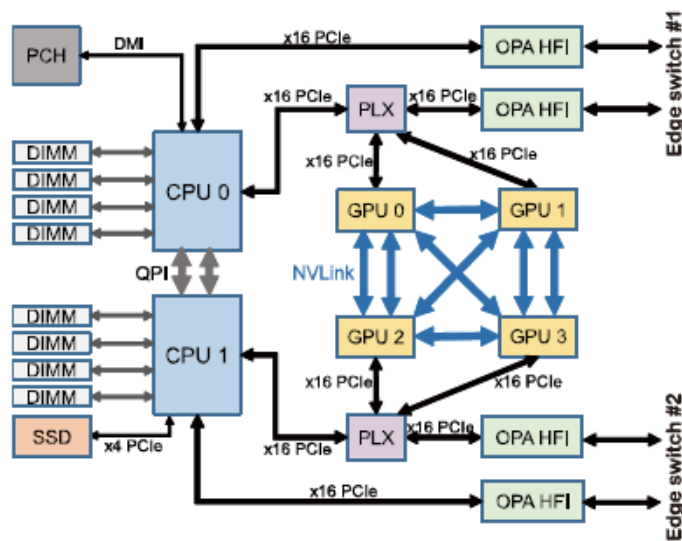
左図: 計算ノード内部
銅パイプで繋がれた4個の金属部品
がGPU用水冷ブロック。
発熱が多いCPUとGPUは水冷、そ
他のチップは空冷
冷却する水は屋上の冷却塔で生成
され、夏場では32度くらいだが、高
温なプロセッサを冷やすには十分



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

- **Expert:** 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: GPUは使えるが、1ノード複数台は使わない(含ISVユーザ)
 - **CPU User:** GPU使わない
GPU未対応ISVユーザ
- 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

「もっとみんなの・リアルクラウドスパコン」へ向けた取り組み



TSUBAME3.0 (2017~)

合計演算性能: 12ペタフロップス

ストレージ容量: 16ペタバイト

国内有数の学術情報基盤(1000CPU, 2000GPU)を、
学内外のユーザへ提供

- ・ 製薬シミュレーション、気象・気候...
- ・ ビッグデータ分析、ディープラーニング...

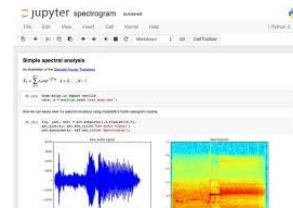
拡がる計算資源の利用法への対応

TSUBAMEは2006年にみんなのスパコンとして誕生
しかし、主な利用法は旧来の

- ・ コマンドラインベース
- ・ ジョブスケジューラ (固定的な計算資源割当)



利用のすそ野を広げ、人材育成への貢献が急務
→ Webベース機械学習を含む、多様な利用へ対応した
TSUBAMEの運用改善により推進



Webからの計算利用
(cf. Jupyter Lab)

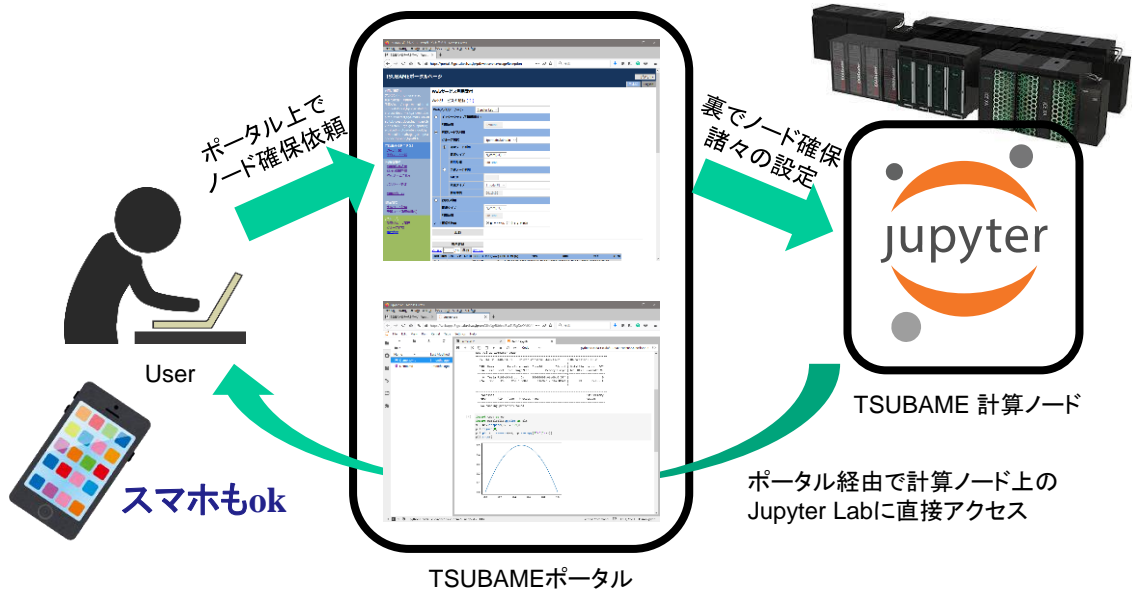


2020/4 New

TSUBAME + シングルサインオン + JupyterLab = みんなのビッグデータ利活用環境



ユーザはTSUBAMEポータルからWebアプリケーション(Jupyter Lab)を起動
→ ブラウザだけでTSUBAMEを直接利用できる



この図のどこにもSSH・公開鍵は出てこない→ 覚える必要がない

2020年度前半に150名以上の
利用実績
うち約50名は新規ユーザ
→ 新規発掘

次期TSUBAMEにおいて、計
算性能・使いやすさの両方を
さらに向上

本日の概要

- **TSUBAME3.0** の紹介 (6シート)
- **TSUBAME3.0** の利用制度 (6シート)
- **TSUBAME3.0** 利用可能なアプリ
やその他 (10シート)



TSUBAME学外利用の歴史

共同利用推進室の事業 TSUBAME学外利用の窓口として

2007年 文科省 先端研究施設共用イノベーション創出事業 としてスタート

2009年 TSUBAME共同利用開始

2010年 文科省 先端研究施設共用促進事業、JHPCN 開始

2012年 HPCI(革新的ハイパフォーマンス・コンピューティング・インフラ)開始

2013年 文科省 先端研究基盤共用・プラットフォーム形成事業

2016年 東京工業大学 学術国際情報センター 自主事業化、
HPCI 産業利用(実証利用、トライアル・ユース)開始

利用区分 / 年度		2007	2008	2009	2010	2011	2012	2013	2014	2015	2016	2017	2018	2019	2020	合計	
学術利用	HPCI	-	-	-	-	-	6	5	10	14	5	9	12	16	14	91	
	JHPCN	-	-	-	4	6	5	11	10	10	12	11	15	14	8	106	
	有償利用	-	-	1	4	9	14	17	22	23	25	23	27	25	28	218	
産業利用	無償利用/HPCI	11	15	15	8	10	12	21	17	13	15	8	3	3	1	152	
	有償利用	公開	-	-	3	6	7	9	8	10	8	8	5	6	4	5	79
		非公開	-	-	2	7	6	4	10	12	10	13	16	19	19	18	136

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	令和3年度利用 公募終了	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	東京工業大学 学術国際情報センター	公開	1口 100,000 円(税別)
		TSUBAMEグランドチャレンジ大 規模計算制度		年数回 (春期、秋期)	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	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3年度利用 公募終了	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3年度利用 随時募集			
		JHPCN	企業共同研究課題	令和3年度利用 公募終了	JHPCN拠点事務局 (東京大学 情報基盤センター)	公開	無償
		TSUBAME産業利用		令和3年度利用 募集開始	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(税別) 1口 300,000 円(税別)

TSUBAME3.0 民間企業への提供資源

利用区分	提供期間	利用形態 (共通)	利用形態 (個別)	申請上限資源	成果	料金 (税別)
TSUBAME 産業利用	R03年度 募集開始	共有利用 1口 1,000ノード時間相当	随時募集 当該年度末まで R3/4~R4/3	成果公開 30口 成果非公開 (上限なし)	公開 非公開	1口 100,000円 1口 300,000円
HPCI 産業利用 実証利用	R03年度 公募終了	ストレージ 課題あたり1~300TB	四半期単位 通年利用の場合は 四半期すべて申請	Lクラス: 75,000 Sクラス: 46,000 ノード時間	公開	無償
JHPCN 企業共同研究 課題	R03年度 公募終了	※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 レージ分を考慮に入れ て希望資源量を算出す ること。	通年利用 ただし四半期単位 での計算資源申請	27,000 ノード時間	公開	無償
HPCI 産業利用 トライアル・ ユース	R03年度 随時募集		最長6カ月	2口 2,000 ノード時間	公開	無償

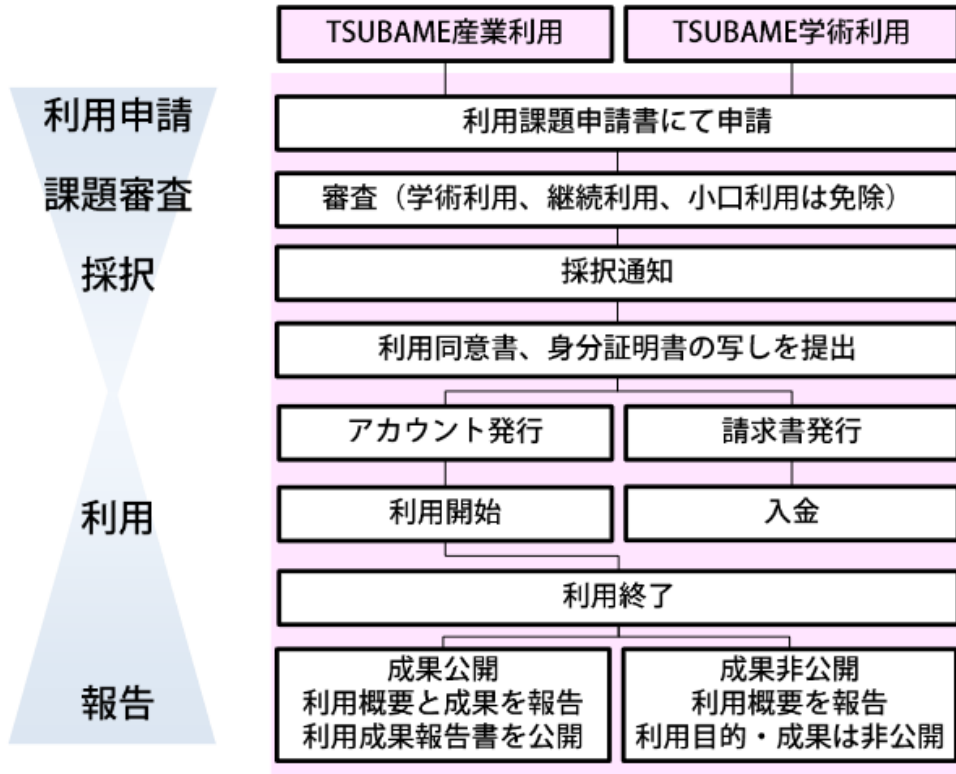
※提供システム: クラウド型ビッグデータ グリーンスパコン「**TSUBAME3.0**」

TSUBAME3.0 HPCIへの提供資源

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 (学術利用)	R03.4 ~R04.3	共有利用 1Unit 1,000 ノード時間相当 ストレージ 課題あたり1~300TB	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 700 Unit 若手 100 Unit (800,000 ノード時間)	Lクラス上限量: 年間75,000 ノード時間 4Q 10,000 ノード時間
				100Unit (100,000 ノード時間)	Sクラス上限量: 年間46,000 ノード時間 4Q 6,000 ノード時間
HPCI 産業利用 実証利用	R03.4 ~R04.3	※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 レージ分を考慮に入れ て希望資源量を算出 すること。	最長6ヶ月	30Unit (30,000 ノード時間)	最長6カ月: 2,000 ノード時間
				利用料無料 申請先はHPCI事務局、申請前に東工大にもご相談ください。 1システムに対しては利用は1回のみ	

※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**」

TSUBAME3.0 利用申請手続きの流れ



・新規申し込みの産業利用では2口までは小口利用で審査免除、3口以上は審査が必要です。

・あらかじめ申請時に身分証も提出いただくと申請がスムーズに行えます。

・採択後にアカウントを発行し利用開始となります。利用料金は支払期日申請書に従ってお支払いいただきます。希望者には利用講習会を開催します。

TSUBAME3.0 利用申請手続き日程

令和3年1月22日 公募説明会

3月中頃 利用申請書提出

申請書をワードファイルにて送付いただき内容を確認します。
新規申請で3口以上の課題は審査を行います。

3月末頃 採択通知予定(審査課題の場合は4月中頃)

4月初～ 利用開始(アカウント発行、口数設定など)

4月以降、随時受付(共同利用、HPCI産業利用トライアル)

利用料金の支払い日程につきましては、
支払期日申請書の設定日にてお願いします。

※年度末メンテナンス 3月25日～4月7日(火)(昨年度)

本日の概要

- **TSUBAME3.0** の紹介 (6シート)
- **TSUBAME3.0** の利用制度 (5シート)
- **TSUBAME3.0** 利用可能なアプリ
やその他 (10シート)

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)	外部利用可能
PGI Compiler	PGIコンパイラ	外部利用可能
Arm 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)	外部利用可能
CuDNN	NVIDIA CUDA® Deep Neural Network library (CuDNN)	外部利用可能
NCCL	NVIDIA Collective Communications Library (NCCL)	外部利用可能
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	外部利用可能
AMBER	分子動力学プログラム	外部利用可能(学術利用のみ)
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

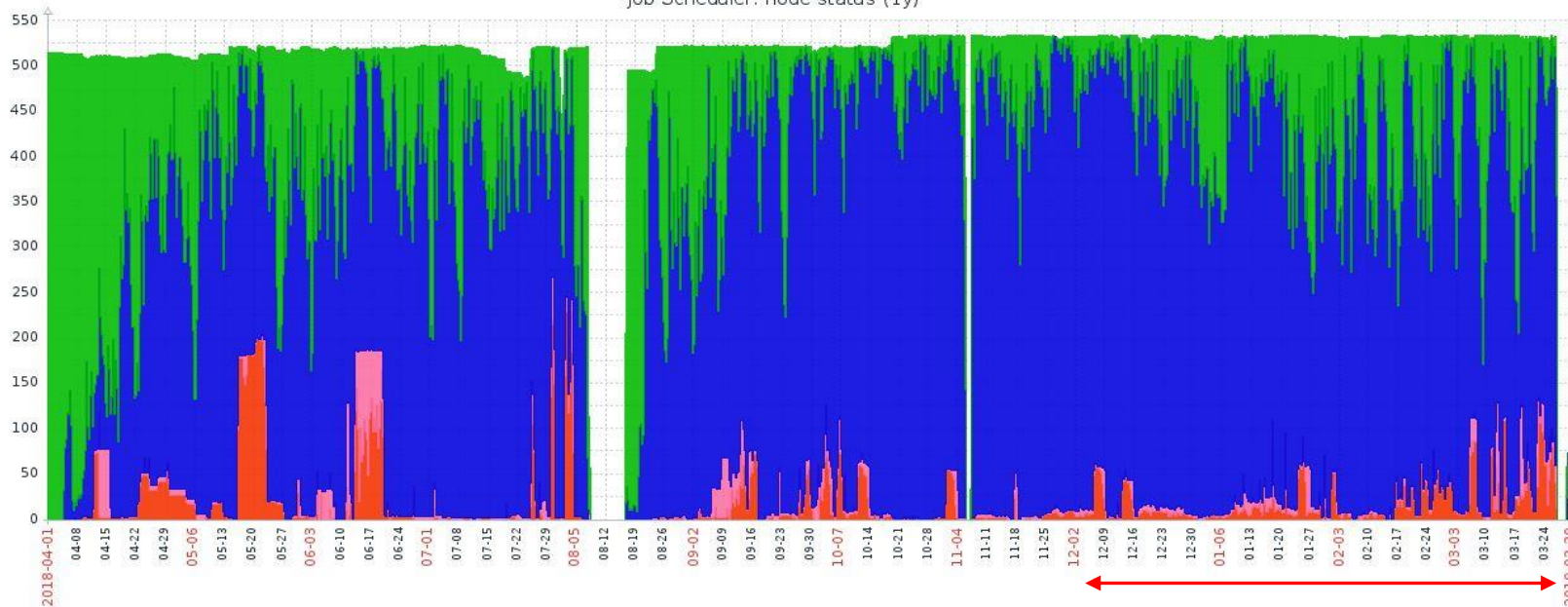
アプリケーション名	概要
HΦ	並列計算機に対応した数値厳密対角化法による有効模型ソルバーパッケージ。
MODYLAS	高並列汎用分子動力学シミュレーションソフト
NTCHEM2013	量子化学計算アプリケーション。既存アプリケーションの機能をカバーしつつ、他のプログラムでは利用できない多くの量子化学計算手法を実装。
OpenMX	原子局在基底と擬ポテンシャルを用いた第一原理計算プログラム。
SALMON	時間依存密度汎関数理論に基づく実時間・実空間グリッド法を用いた、光励起電子ダイナミクスシミュレータ。
SMASH	オープンソースの大規模並列量子化学計算ソフトウェア。ナノサイズ分子のエネルギ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
GENESIS	生体分子シミュレーション用 オープンソースの分子動力学アプリケーション。

- 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

混雑状況1

Job Scheduler: node status (1y) 2018/4/1~2019/3/30



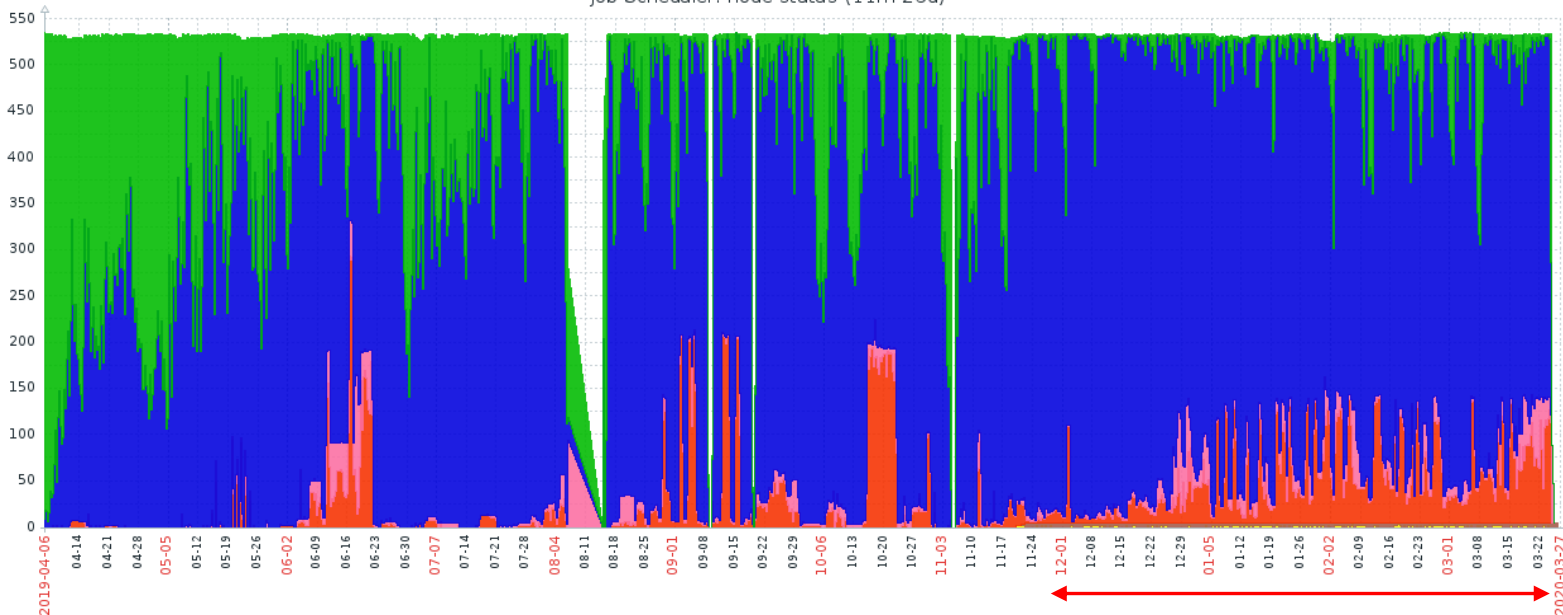
- Idle Nodes
- Running Nodes
- Reserved Waiting Nodes
- Reserved Running Nodes
- Idle Interactive Nodes
- Running Interactive Nodes

	last	min	avg	max
[avg]	0	0	112.89	534
[avg]	72	0	375.63	534
[avg]	0	0	9.64	534
[avg]	0	0	19.1	256
[no data]				
[no data]				

毎年、12月から年度末にかけては混雑が激しいため、上半期の利用を強くお勧めします。

2019/4/6~2020/3/27

Job Scheduler: node status (11m 26d)

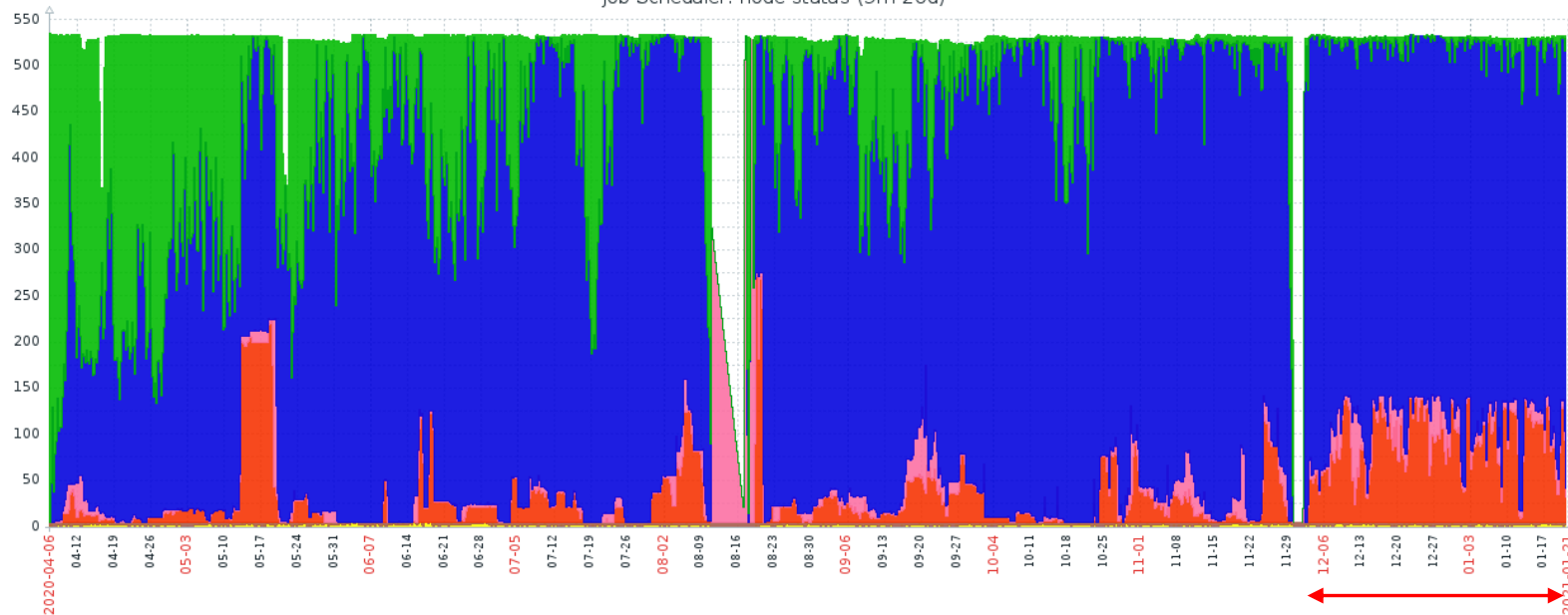


	last	min	avg	max
Idle Nodes	[avg] 0	0	91.4	532
Running Nodes	[avg] 0	0	389.7	534
Reserved Waiting Nodes	[avg] 0	0	11.02	540
Reserved Running Nodes	[avg] 0	0	31.65	314
Idle Interactive Nodes	[avg] 4	0	3.46	4
Running Interactive Nodes	[avg] 0	0	0.225	4

毎年、12月から年度末にかけては混雑が激しいため、上半期の利用を強くお勧めします。

2020/4/5 ~ 2021/1/21

Job Scheduler: node status (9m 20d)



	[avg]	last	min	avg	max
Idle Nodes	2.5	0	0	84.25	530
Running Nodes	488.5	0	0	387.82	530
Reserved Waiting Nodes	9.5	0	0	12.67	533
Reserved Running Nodes	27.5	0	0	35.4	270
Idle Interactive Nodes	2	0	0	2.83	4
Running Interactive Nodes	1	0	0	0.7615	4

毎年、12月から年度末にかけては混雑が激しいため、上半期の利用を強くお勧めします。

TSUBAME3.0 令和3年度より

TSUBAME共同利用(産業利用・成果非公開)課題の取り扱いについて

1口の利用料金を **300,000円(税別)** とします。

それに伴い、産業利用・成果非公開の課題の口数制限はなくなりました。
ただし、産業利用・成果公開の課題は従来どおり30口までとします。

TSUBAME3.0 年度別料金推移表

TSUBAME	年度	西暦	公開1口	税込料金	非公開1口	税込料金	ノード時間	備考
TSUBAME1.2	H21	2009	95,239	100,000	380,953	400,000	2880	※ 2880 = 8 × 30 × 12
	H22	2010	95,239	100,000	380,953	400,000	2880	※非公開は公開の4倍
TSUBAME2.0	H23	2011	95,239	100,000	380,953	400,000	3000	※ノード時間を変更
	H24	2012	95,239	100,000	380,953	400,000	3000	
TSUBAME2.5	H25	2013	105,000	110,250	391,000	410,550	3000	※電気料金値上げ
	H26	2014	120,000	129,600	480,000	518,400	3000	※電気料金+性能向上
	H27	2015	120,000	129,600	480,000	518,400	3000	
	H28	2016	120,000	129,600	480,000	518,400	3000	
	H29	2017	120,000	129,600	480,000	518,400	3000	
TSUBAME3.0	H30	2018	100,000	108,000	200,000	216,000	1000	※非公開を公開の2倍に
	R01	2019	100,000	110,000	200,000	220,000	1000	※消費税変更 8%→10%
	R02	2020	100,000	110,000	200,000	220,000	1000	
	R03	2021	100,000	110,000	300,000	330,000	1000	※非公開を公開の3倍に

TSUBAME3.0 ご利用にあたって

共同利用推進室による利用講習会

- ・ 新規利用課題の採択後、必要に応じて随時開催
利用の手引きの内容に準じて概略説明
ジョブ投入の方法など基本的な内容

https://www.gsic.titech.ac.jp/kyodou/beginners_course

東工大による春の利用講習会

- ・ 令和3年4月~5月に実施予定（一部、学内のみ対象）
外部利用可能なアプリケーションソフトについても開催
TSUBAME3.0の講習会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
共同利用に関してご不明
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

kyoyo@gsic.titech.ac.jp

<https://www.gsic.titech.ac.jp/tsubame>

