

令和5年度 TSUBAME共同利用 公募説明会



14時より開始予定です。
今しばらくお待ちください。

令和5年度 TSUBAME共同利用 公募説明会



本日の予定

1. 公募説明(全体)
TSUBAME3.0の紹介
TSUBAME3.0の利用制度
TSUBAME3.0の利用可能なアプリなど
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 (7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



2010年 JHPCN 開始

2013/9

TSUBAME2.5

5.7PFlops/7.1PB

2012年 HPCI開始



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



2024春(予定)

TSUBAME4.0

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

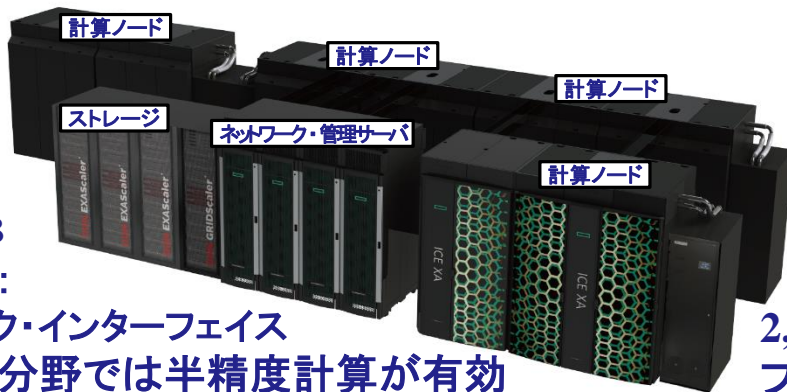
メモリ256GB、高速SSD 2TB

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



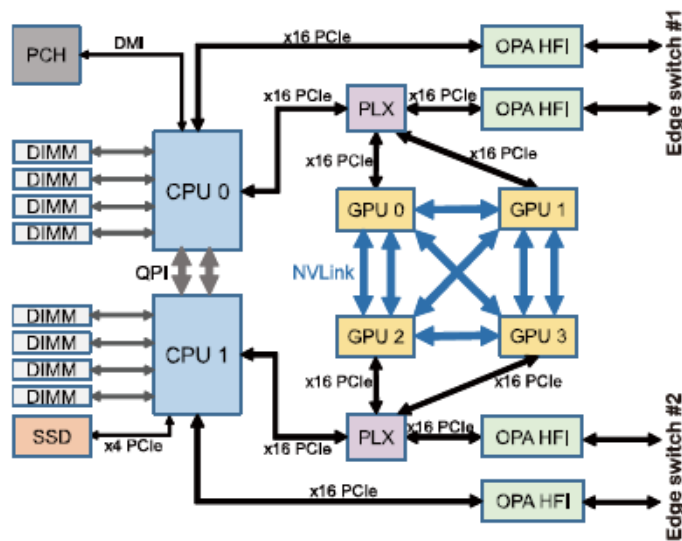
左図: 計算ノード内部
銅パイプで繋がれた4個の金属部品
がGPU用水冷ブロック。
発熱が多いCPUとGPUは水冷、そ
他のチップは空冷
冷却する水は屋上の冷却塔で生成
され、夏場では32度くらいだが、高
温なプロセッサを冷やすには十分



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・・・

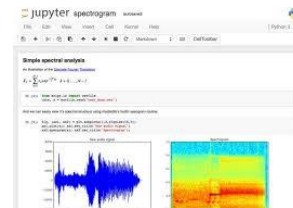
拡がる計算資源の利用法への対応

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



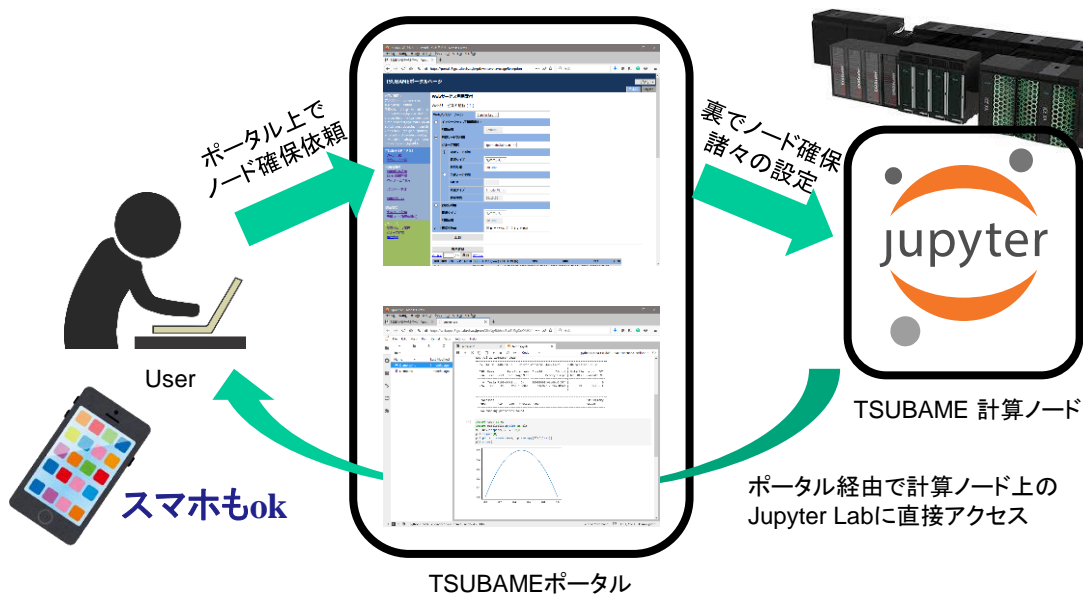
Webからの計算利用
(cf. Jupyter Lab)



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と覚える必要がない

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

TSUBAMEにおける、計算性能・
使いやすさの両方をさらに向上

2022/4 New

X環境やGUIアプリの利用も可能に！

本日の概要

- **TSUBAME3.0** の紹介 (6シート)
- **TSUBAME3.0** の利用制度 (7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	2021	2022	合計	
学術 利用	HPCI	-	-	-	-	-	6	5	10	14	5	9	12	16	14	8	10	109	
	JHPCN	-	-	-	4	6	5	11	10	10	12	11	15	14	8	7	6	119	
	有償利用	-	-	1	4	9	14	17	22	23	25	23	27	25	28	30	28	276	
産業 利用	無償/HPCI	11	15	15	8	10	12	21	17	13	15	8	3	3	1	1	1	154	
	有償 利用	公開	-	-	3	6	7	9	8	10	8	8	5	6	4	5	2	1	82
		非公開	-	-	2	7	6	4	10	12	10	13	16	19	19	20	14	12	164

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	一般課題	令和5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 110,000 円(税込)
		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	産業課題	令和5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
			産業試行課題 (旧 トライアル・ユース)	令和5年度利用 随時募集			
		JHPCN	企業共同研究課題	令和5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5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 110,000 円(税込) 1口 330,000 円(税込)

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 (税込)
TSUBAME 産業利用	R5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 R5/4～R6/3	成果公開 30口 成果非公開 (上限なし)	公開 非公開	1口 110,000円 1口 330,000円
HPCI 産業利用 産業課題	R5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: 145,000 Sクラス: 46,000 ノード時間	公開	無償
JHPCN 企業共同研究 課題	R5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 産業試行課題 (旧 産業利用 トライアル・ ユース)	R5年度 随時募集		通年利用可能	2口 2,000 ノード時間	公開	無償

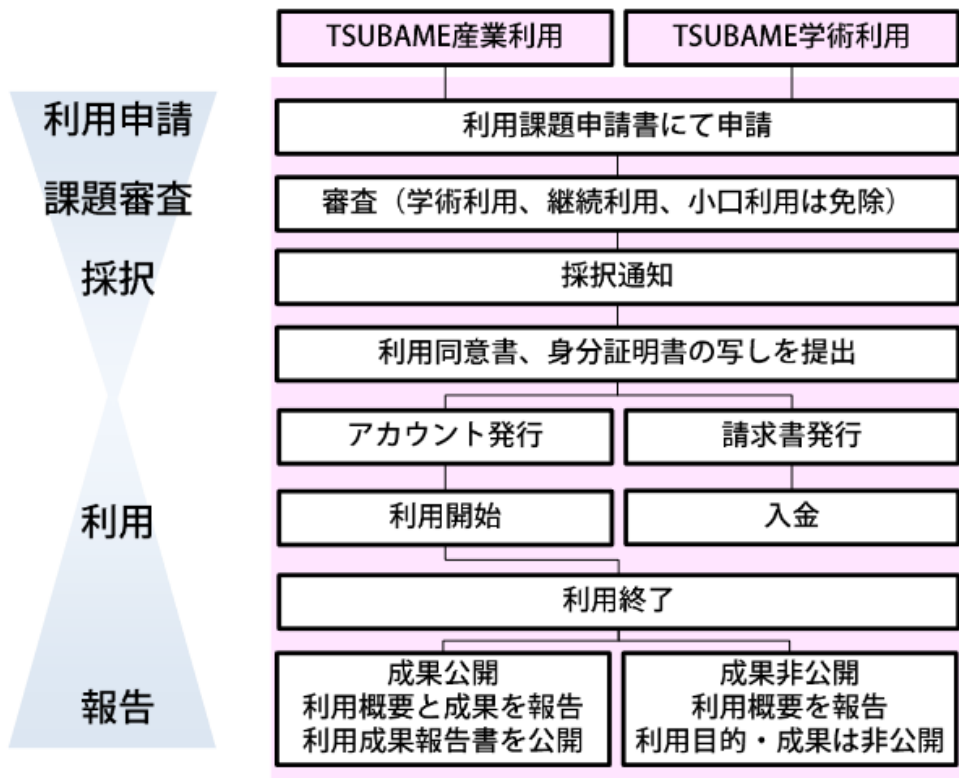
※提供システム: クラウド型ビッグデータ グリーンスパコン「**TSUBAME3.0**」

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 一般課題 (学術利用)	R5/4 ~R6/3	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145,000ノード時間 4Q 10,000 ノード時間
HPCI 産業利用 産業課題	R5/4 ~R6/3	※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。		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 産業試行課題 (旧 産業利用 トライアル・ ユース)	R5/4 ~R6/3		通年利用可能	30Unit (30,000 ノード時間)	利用は年度末まで: 2,000 ノード時間
<p>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</p>					

※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5年2月3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(2週間程度)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産業試行課題)

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29日～4月6日(火)(昨年度)

TSUBAME3.0 利用申請手続き日程

4月以降は随時申請受付(共同利用、HPCI産業試行課題)

メールにて利用申請書提出

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(2週間程度)を行います。

審査免除の場合

1週間以内に採択通知予定
利用開始(アカウント発行、口数設定など)
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29日～4月6日(昨年度)

※夏季メンテナンス 8月10日～8月17日(昨年度)

本日の概要

- **TSUBAME3.0** の紹介 (6シート)
- **TSUBAME3.0** の利用制度 (7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、oneAPI)	外部利用可能
NVIDIA HPC SDK (PGI)	PGIコンパイラ、NVIDIA HPC SDK (nvhpc)	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
Gaussian / Gauss View	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。
PyTorch	Pythonのオープンソース機械学習ライブラリ
TensorFlow	Google が開発しているDeep Learning フレームワーク。
AlphaFold2	タンパク質立体構造予測プログラム
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
NTChem	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
FrontFlow/blue	乱流変動などの非定常現象の高精度予測が可能な Large Eddy Simulation (LES) に基づいた乱流燃焼解析ソフトウェア
FrontISTR	オープンソースの大規模並列FEM非線形構造解析プログラム
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
PHASE/0	密度汎関数理論に則った平面波基底・擬ポテンシャル法電子状態計算プログラム
AkaiKKR	密度汎関数法の局所密度近似(LDA)あるいは一般化勾配近似(GGA)に基づく第一原理電子状態計算のためのプログラムパッケージ
ALAMODE	格子振動の非調和性を露わに考慮した原子間ポテンシャルを構築するプログラムパッケージ
mVMC	広汎な多体量子系の有効模型の基底状態の高精度な波動関数を変分モンテカルロ法によって数値的に求める有効模型ソルバーパッケージ

- 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

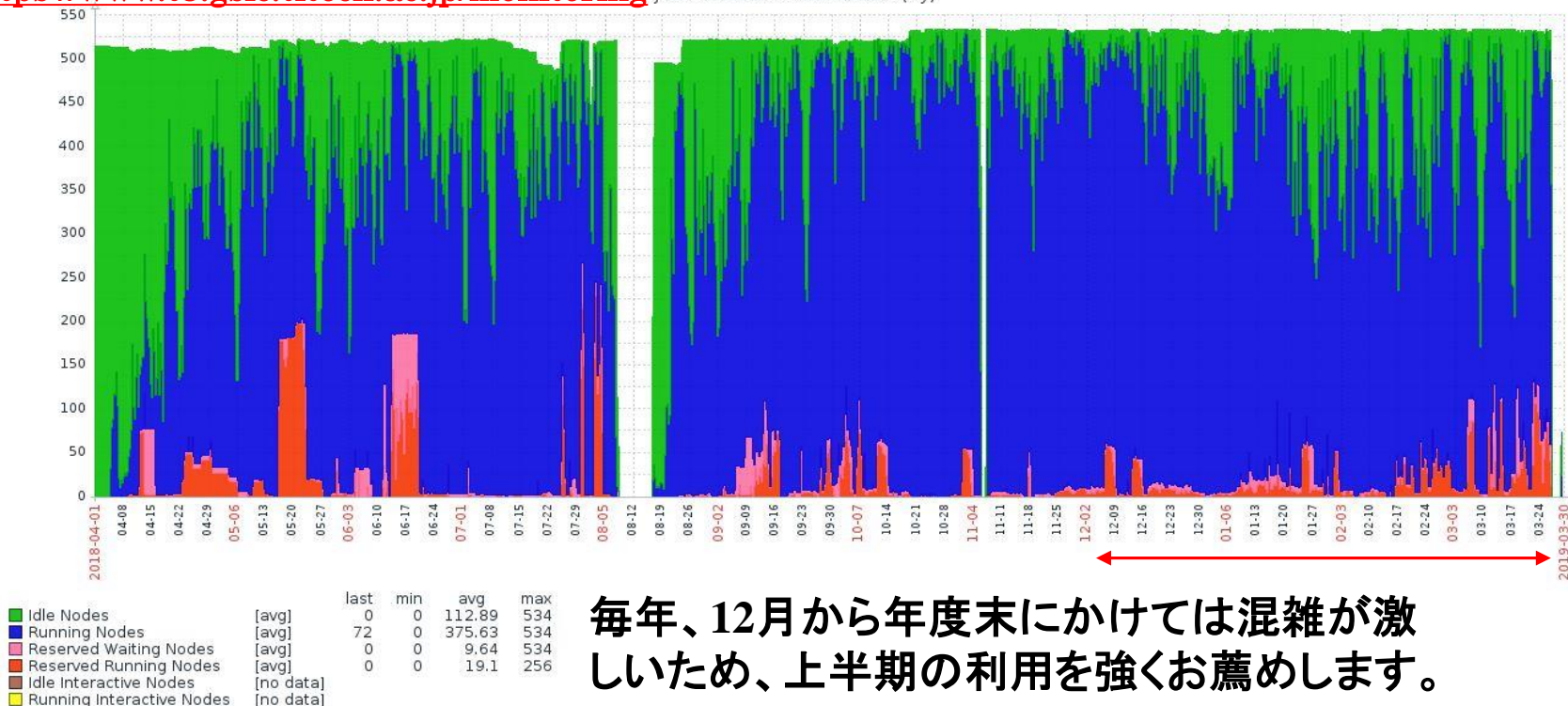
混雑状況1

いつでも見れます！ TSUBAME3.0 モニタリングページ

<https://www.t3.gsic.titech.ac.jp/monitoring>

Job Scheduler: node status (1y)

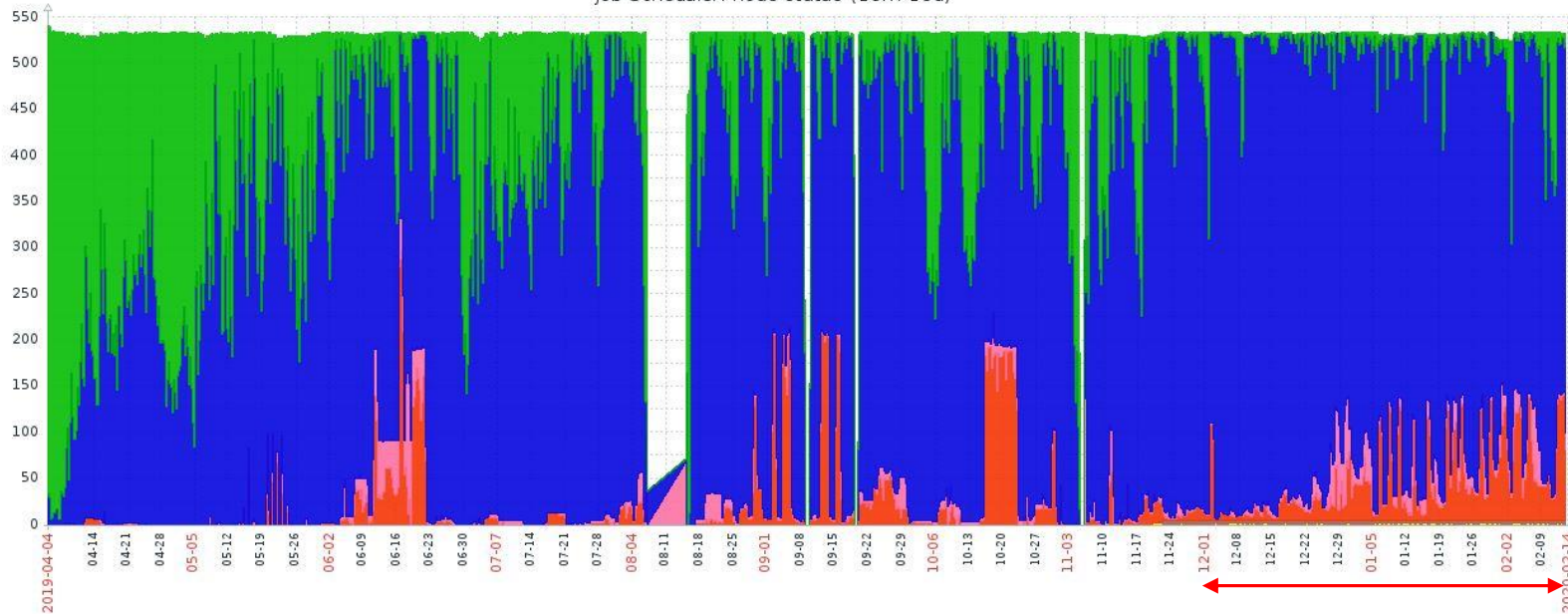
2018/4/1 ~ 2019/3/30



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。

2019/4/4~2020/2/14

Job Scheduler: node status (10m 16d)

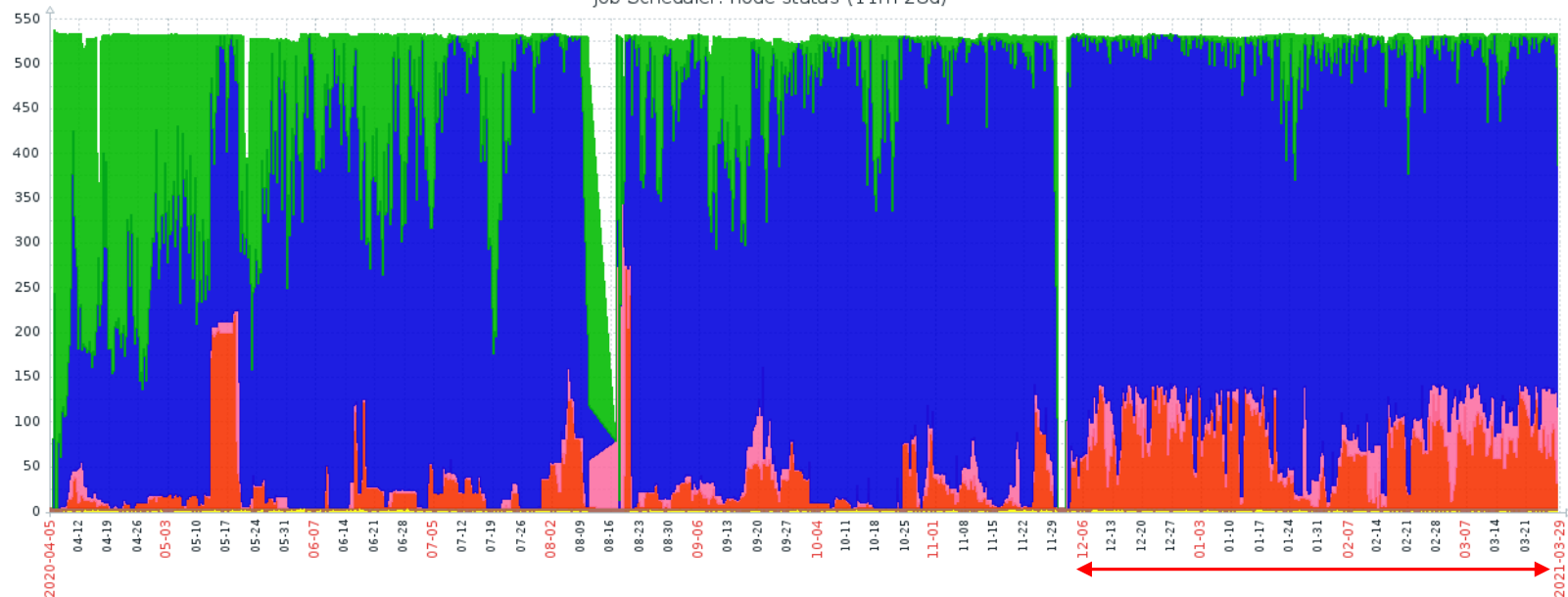


	last	min	avg	max
Idle Nodes	[avg] 10.33	0	101.23	540
Running Nodes	[avg] 421.33	0	385.86	534
Reserved Waiting Nodes	[avg] 18.33	0	9.87	540
Reserved Running Nodes	[avg] 76.67	0	27.34	314
Idle Interactive Nodes	[avg] 4	0	3.47	4
Running Interactive Nodes	[avg] 0	0	0.2166	4

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 ~ 2021/3/29

Job Scheduler: node status (11m 28d)

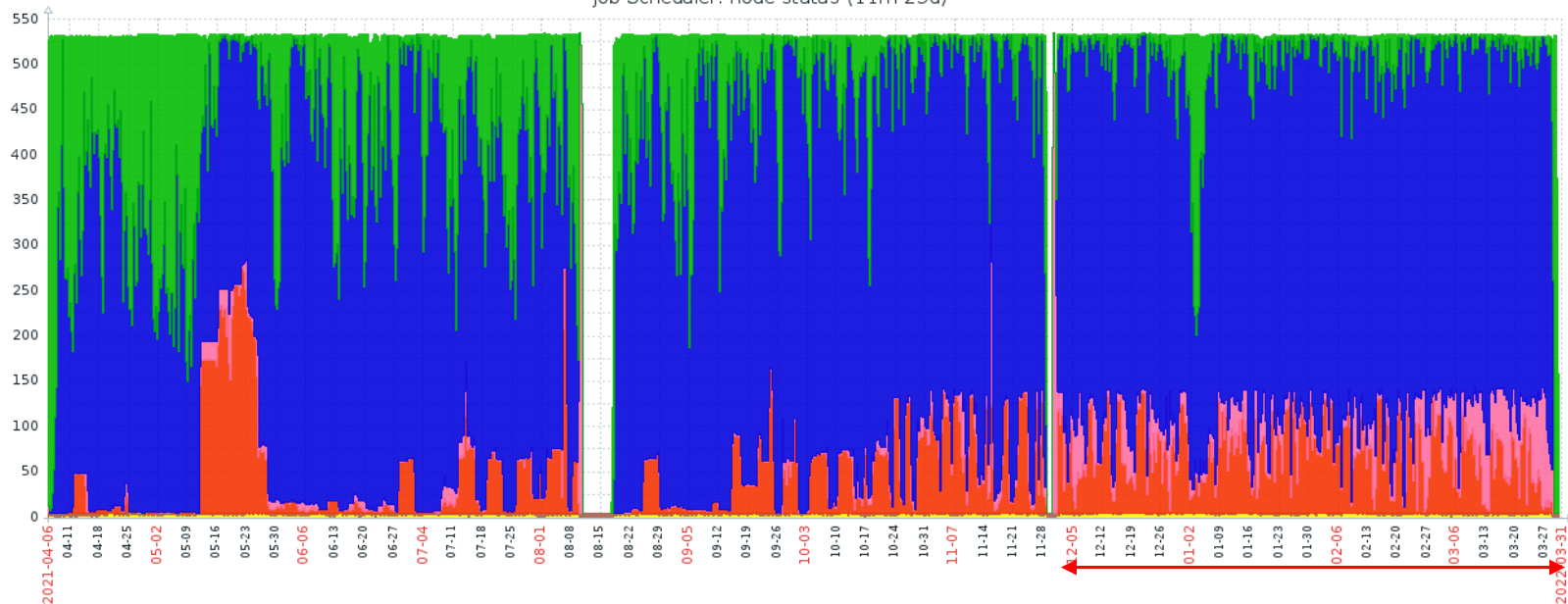


	last	min	avg	max
Idle Nodes	[avg] 147	0	72.61	536
Running Nodes	[avg] 269.33	0	391.75	536
Reserved Waiting Nodes	[avg] 83.67	0	15.83	533
Reserved Running Nodes	[avg] 29	0	39.78	270
Idle Interactive Nodes	[avg] 3	0	2.92	4
Running Interactive Nodes	[avg] 1	0	0.6882	4

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。

2021/4/5 ~ 2022/3/30

Job Scheduler: node status (11m 29d)

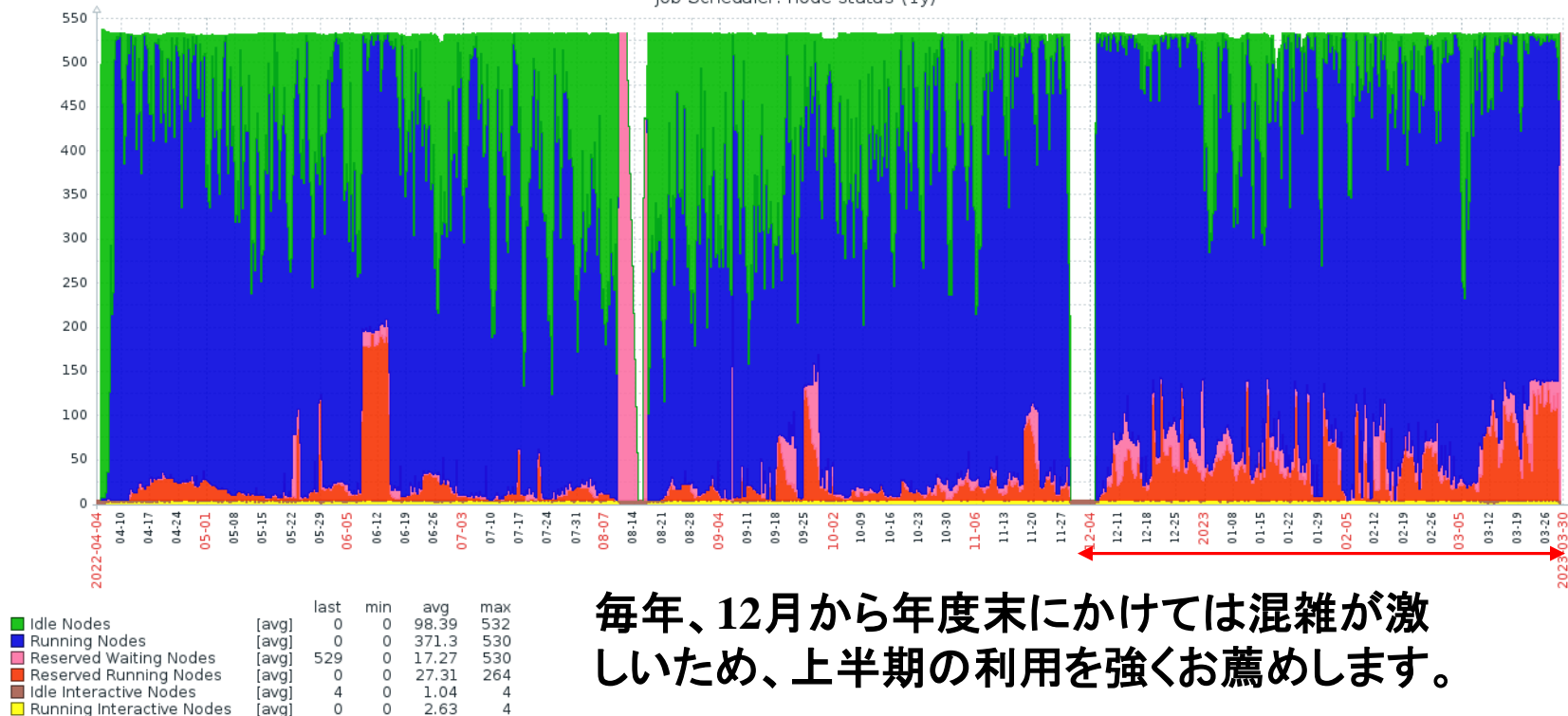


	last	min	avg	max
Idle Nodes	[avg] 144	0	76.52	530
Running Nodes	[avg] 0	0	374.19	529
Reserved Waiting Nodes	[avg] 0	0	18.88	530
Reserved Running Nodes	[avg] 0	0	51.85	275
Idle Interactive Nodes	[avg] 4	0	1.59	4
Running Interactive Nodes	[avg] 0	0	2.03	4

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。

2022/4/4~2023/3/30

Job Scheduler: node status (1y)



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

- ・ 毎年 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>

