

# 令和6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。

事務局よりご連絡

質問方法： 挙手 > 口頭で質問可能です。所属とお名前が全参加者へ見えてしまいます。

Q&A > 文章にてご質問ください。こちらで代読し、回答します。

録画させていただきます。

令和6年3月1日 令和6年度 TSUBAME共同利用 公募説明会

# 令和6年度 TSUBAME共同利用 公募説明会



本日の予定

1. 公募説明(全体)  
TSUBAME4.0の紹介  
TSUBAME4.0の利用制度  
TSUBAME4.0の利用可能なアプリなど
2. 個別相談(希望者のみ)

事務局よりご連絡

質問方法: 挙手 > 口頭で質問可能です。所属とお名前が全参加者へ見えてしまいます。

Q&A > 文章にてご質問ください。こちらで代読し、回答します。

録画させていただきます。

令和6年3月1日 令和6年度 TSUBAME共同利用 公募説明会

# 令和6年度 TSUBAME共同利用 公募説明会



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](mailto:kyoyo@gsic.titech.ac.jp)

# 本日の概要


---

- **TSUBAME4.0** の紹介 (17シート)
- **TSUBAME4.0** の利用制度 (7シート)
- **TSUBAME4.0** 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

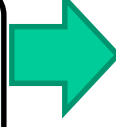


アジアNo.1 !!  
「みんなのスパコン」



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



2012年 HPCI開始

2013/9  
**TSUBAME2.5**  
5.7PFlops/7.1PB



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)



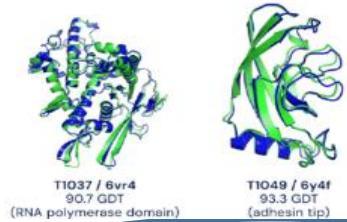
2024/4  
**TSUBAME4.0**  
66.8PFlops / 44PB

# TSUBAME4.0:

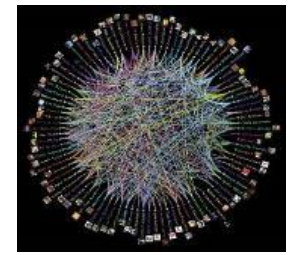
データ・計算科学・AI融合のための「もっと」みんなのスパコン  
により、コンバージェンス・サイエンスの中核インフラへ



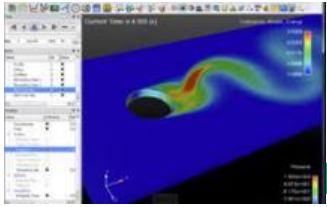
対話的データ解析



深層学習との融合による  
シミュレーション革新



SNSのフォロー関係解析

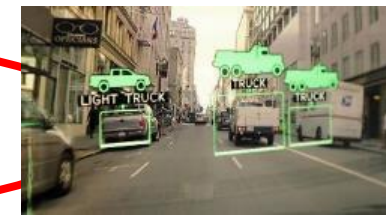


シミュレーションと  
リアルタイム可視化

## ビッグデータ解析

## 計算科学・ シミュレーション

## AI・深層学習



深層学習による  
画像等認識



**TSUBAME4.0**  
**2024/4運用開始**

大学統合後の  
東京科学大学(2024年10月～)  
においても重要な研究教育インフラ

# TSUBAME4.0の特徴

- **現行TSUBAME3と比べ、5倍以上の演算**

**速度** ※倍精度・行列演算にて

- AI・シミュレーションにおいてさらに増大する計算量への対応
- 混雑の緩和へ

- **対話的利用・コンテナ技術の拡充**


- ビッグデータ解析や可視化を容易化、研究のPDCAを加速
- 各ユーザの欲しいソフトウェア環境を迅速に準備
- 待ち時間を短縮するスケジューリングにより、ライトユーザへも恩恵

- **GPUの大幅利用による加速**

- TSUBAMEシリーズではGPUの利用により、演算速度効率が数倍に
- 投資あたりの研究成果の増大

「GPU利用には工夫が必要」という課題に対しては、以下の対応

- 東工大の長年のGPUに関する教育・研究コミュニティの実績
- 深層学習分野ではGPUがデファクトスタンダードになっており、急速に整備



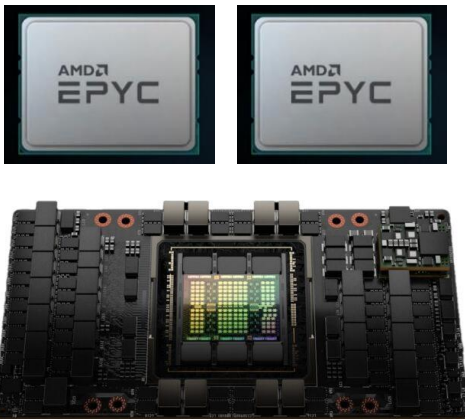
**データ・計算科学・AIを中心とした  
研究成果創出の支援を大幅強化**

# TSUBAME4.0 概要

## Compute Node

CPU: AMD EPYC 9654 (96 core) × 2  
GPU: NVIDIA H100 SXM5 HBM2e × 4

Performance: 278.5 TFLOPS  
Memory: 768 GB(CPU)  
94 GB(GPU)



## System

240 nodes: 480 CPU sockets, 960 GPUs  
Performance: 66.8 PFLOPS

## Operating System

RedHat Enterprise Linux 9

## Job Scheduler

Altair Grid Engine  
(UNIVA Grid Engine)



## Interconnect

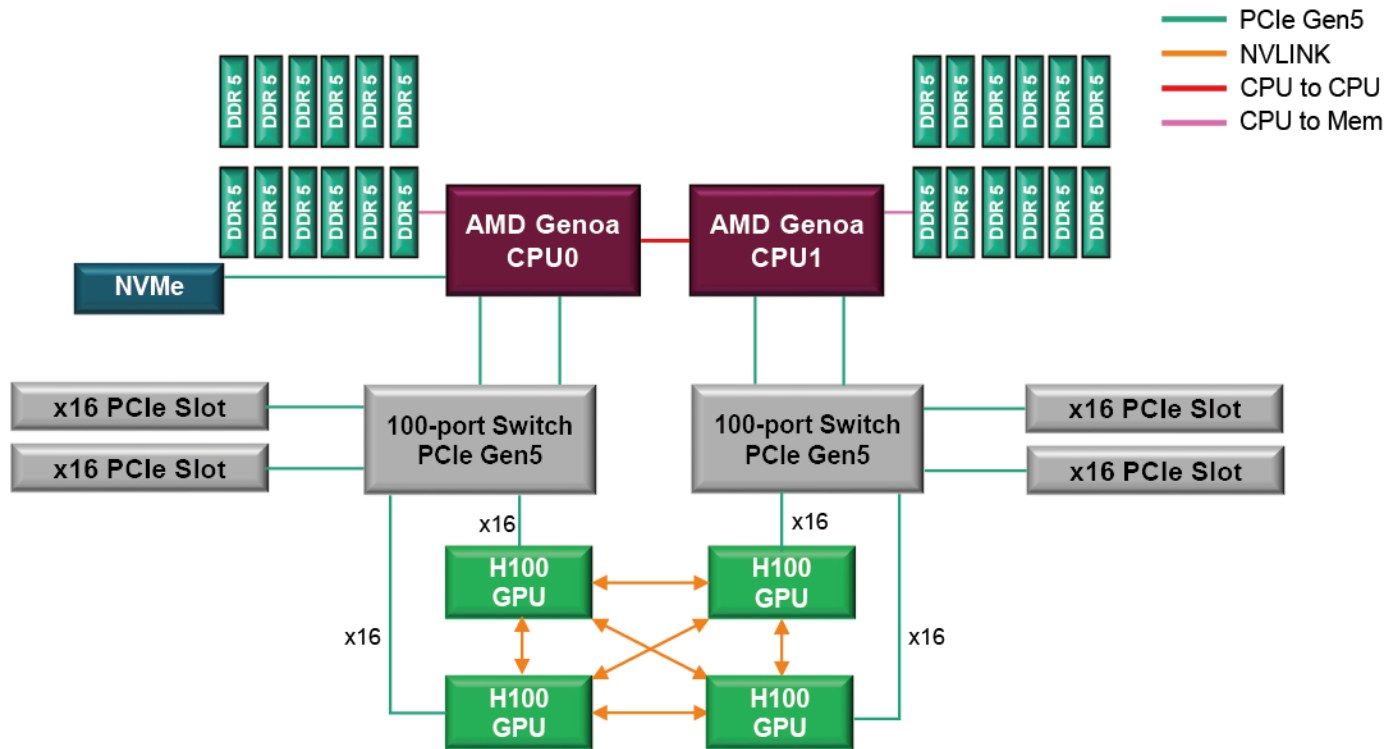
InfiniBand NDR 200Gbps × 4  
Topology: Fat-Tree



# TSUBAME4.0性能概略

	TSUBAME3.0	TSUBAME4.0
総演算性能		
• 倍精度演算	12PFlops	<b>66.8PFlops</b> (行列演算) <b>34.7PFlops</b> (汎用演算)
• 深層学習	47PFlops	<b>952PFlops (FP16)</b>
計算ノード数	540ノード (均一)	<b>HPE Cray XD665</b> <b>240ノード (均一)</b>
総GPU数	2160個	<b>960個</b>
共有ストレージ	DDN社 SFA	<b>HPE ClustreStor E1000</b>
• 容量	16 PByte	<b>44 PByte</b> <b>+ AllFlash 327 TByte</b>

# TSUBAME4.0 ノード構成概要



<https://www.gsic.titech.ac.jp/sites/default/files/T4SpecJ.pdf>

# TSUBAME4.0ノード構成

	TSUBAME3.0	TSUBAME4.0
<b>CPU</b>	Intel Xeon 2680v4 × 2	<b>AMD EPYC 9654 × 2</b>
• 周波数、コア数	2.4GHz, 28コア (=14×2)	<b>2.4GHz, 192コア (=96×2)</b>
<b>メインメモリ</b>	DDR3-2400 4ch×2	<b>DDR5-4800 12ch×2</b>
• 容量	256GiB	<b>768GiB</b>
<b>ネットワーク</b>	OmniPath 100Gbps×4	<b>InfiniBand NDR 200Gbps×4</b>
<b>OS</b>	SUSE Linux Enterprise 12	<b>RedHat Enterprise Linux 9</b>
<b>GPU</b>	NVIDIA P100 SXM×4	<b>NVIDIA H100 SXM5 94GB HBM2e × 4</b>
以下、1GPUあたり		
• 演算性能(倍精度)	5.3TFlops	<b>66.9TFlops (行列), 33.4TFlops(汎用)</b>
• メモリ容量	16GB	<b>94GB</b>
• メモリ速度	0.73TB/s	<b>2.39TB/s</b>

※通常のH100製品(80GB, 3.3TB/s)とメモリ性能が異なる

# ノード構成バランス

TSUBAME3に比べて、ノード数44%

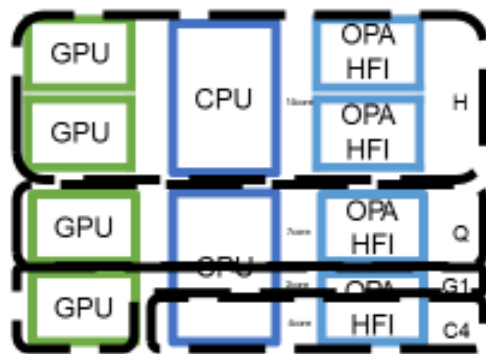
ノードあたりでは：

- GPU数: 4 → 4 (GPUあたり性能は>12倍)
- CPUコア数: 28コア → 192コア
- 主メモリ: 256GiB → 768GiB
  - コアあたりメモリは 9.1GiB → 4GiB で減少してしまう

ノード論理分割の重要度は増す一方

TSUBAME3の28コアに比べ、TSUBAME4の192コアノードでは、分割制度をより細やかにする必要

- GPU数も44%になり、「1GPU」がより貴重。システム側でのGPU分割(MIG機能)検討中



このような点含めて鋭意詳細運用設計中

# TSUBAME4.0 計算資源タイプ一覧

資源タイプ	タイプ名	CPUコア数	GPU数	メモリ(GB)	課金係数
F	node_f	192	4	768	1.000
H	node_h	96	2	384	0.500
Q	node_q	48	1	192	0.250
O	node_o	24	½(*)	96	0.125
G1	gpu_1	8	1	64	0.200
G2	gpu_h	4	½(*)	32	0.100
C1	cpu_160	160	-	512	0.600
C2	cpu_80	80	-	256	0.300
C3	cpu_40	40	-	128	0.150
C4	cpu_16	16	-	32	0.060
C5	cpu_8	8	-	16	0.030
C6	cpu_4	4	-	8	0.015

( > TSUBAME3.0 1ノード)

1口で400ノード時間相当の計算資源(400 TSUBAMEポイント)が利用可能。240ノードから各資源タイプを割り当てます。

(\*) 1/2GPU は H100 の MIG 機能により1つのGPUを半分に分割し利用します。

# 「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



**TSUBAME4.0 (2024~)**

合計演算性能: 66.8 ペタフロップス

ストレージ容量: 44.2 ペタバイト

国内有数の学術情報基盤(400CPU, 900GPU)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・・・

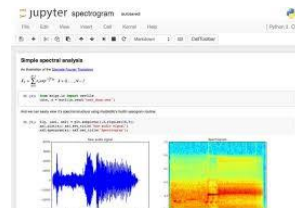
## 拡がる計算資源の利用法への対応

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,  
Open OnDemand)

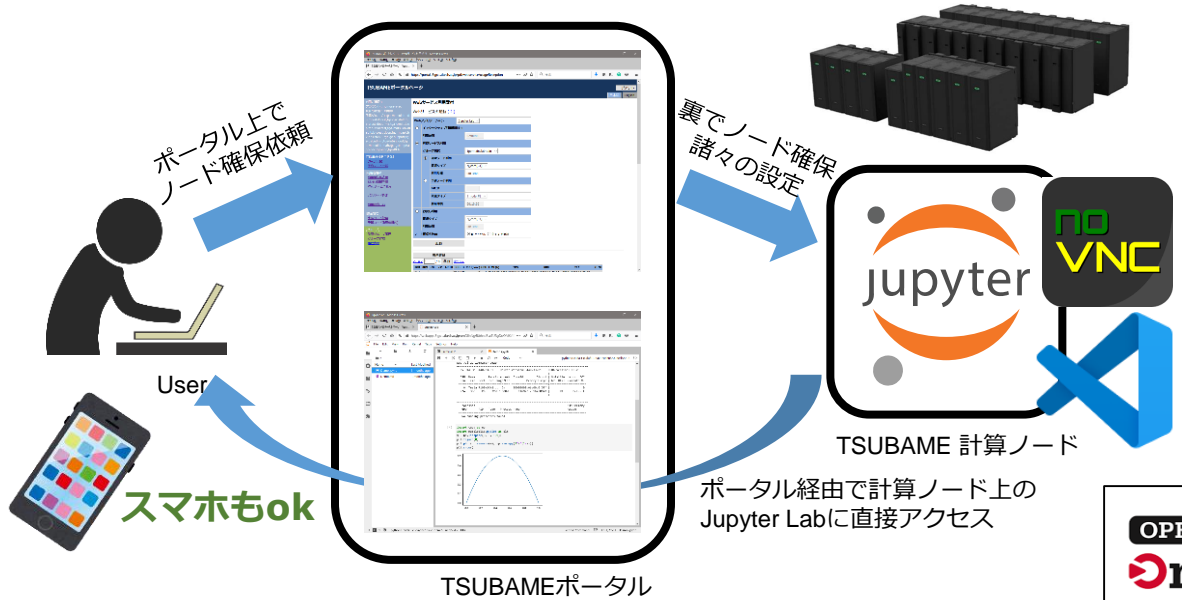


**TSUBAME3.0で**  
2020年に導入  
2022/4 Update

# TSUBAME3 + シングルサインオン + Jupyter = みんなのビッグデータ・AI/ML基盤

JupyterNoteBook(当時)をはじめ、Web上での計算資源利用が急激に普及

- TSUBAME上にWebインターフェースを実装: JupyterLab / CodeServer / noVNC
  - ブラウザだけでGPUを含めTSUBAMEを直接**インタラクティブ利用**できる
  - 注: OpenOnDemandがメジャーになる少し前だった



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

**2022年度に約240名の利用実績**  
うち1/3 (推定)は、Webのみ利用  
→ **スパコンユーザの新規発掘**

次期TSUBAME4.0において、  
計算性能・使いやすさの両方を  
さらに向上

TSUBAME4.0では  
**Open OnDemand**を提供



# 「富岳」でのOpen OnDemandの提供



**PC Cluster Consortium** コンソーシアムのご紹介

トップページ > イベント > イベント詳細 (2023年)

## PCCC Open OnDemand

年別	日時	現地会場	開催形式	主催	共催	参加費	参加登録締切
2024年 (1)							
2023年 (7)							
2022年 (7)							
2021年 (5)							
2020年 (3)							
2019年 (2)							
2018年 (6)							
2017年 (25)							
2016年 (17)							
2015年 (11)							
2014年 (7)							

**開催趣旨**

本ワークショップ「Open OnDemand」の活用事例の紹介です。

## プログラム

13:00-13:10	オープニング
13:10~13:30	「Open OnDemandの概要」 中尾 昌広 (理化学研究所R-CCS)
	<a href="#">▼ 講演概要を開く</a>
	<a href="#">PDF 発表資料 (1.64MB)</a>
13:30~14:00	「Open OnDemandハンズオン」 中尾 昌広 (理化学研究所R-CCS)
	<a href="#">▼ 講演概要を開く</a>
	<a href="#">PDF 発表資料 (1.02MB)</a>
14:00~14:30	事例紹介 1 「富岳」におけるOpen OnDemandの導入と運用 中尾 昌広 (理化学研究所R-CCS)
	<a href="#">▼ 講演概要を開く</a>
	<a href="#">PDF 発表資料 (3.88MB)</a>
14:30~14:45	休憩
14:45~15:00	事例紹介 2 「三菱ケミカルにおけるOpen OnDemandへの取り組み」 山本 肇 (三菱ケミカル株式会社)
	<a href="#">▼ 講演概要を開く</a>
	<a href="#">PDF 発表資料 (2.20MB)</a>
15:00~15:15	クラウド環境構築支援システムVCPによるOpen OnDemand環境の簡易構築 大江 和一 (国立情報学研究所)
	<a href="#">▼ 講演概要を開く</a>
	<a href="#">PDF 発表資料 (1.36MB)</a>
15:15~15:30	「JAXAにおけるOpen OnDemand導入の狙いと期待」 宇野 俊司 (宇宙航空研究開発機構)
	<a href="#">▼ 講演概要を開く</a>
	<a href="#">PDF 発表資料 (1.59MB)</a>
15:30~16:00	質疑応答
16:00~	富岳見学会 (現地参加者のみ)

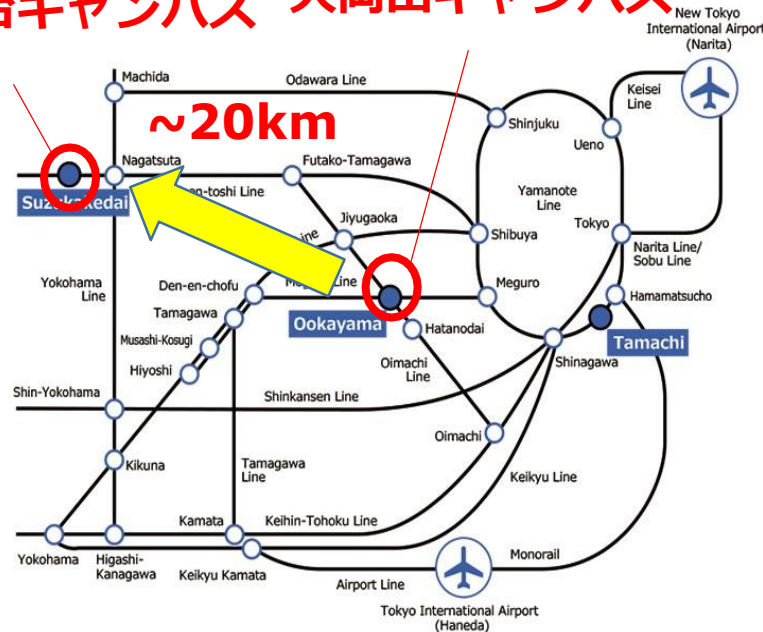
1. 中尾昌広 *et al.* 「スーパーコンピュータ「富岳」における第186回HPC研究発表会, 2022年9月
2. 中尾昌広 *et al.* 「スーパーコンピュータ「富岳」における第191回HPC研究発表会, 2023年9月



# TSUBAME4.0の導入状況

2024/4 TSUBAME4は東工大すずかけ台キャンパスで稼働

**TSUBAME 4:** すずかけ台キャンパス  
**TSUBAME1, 2, 3:** 大岡山キャンパス



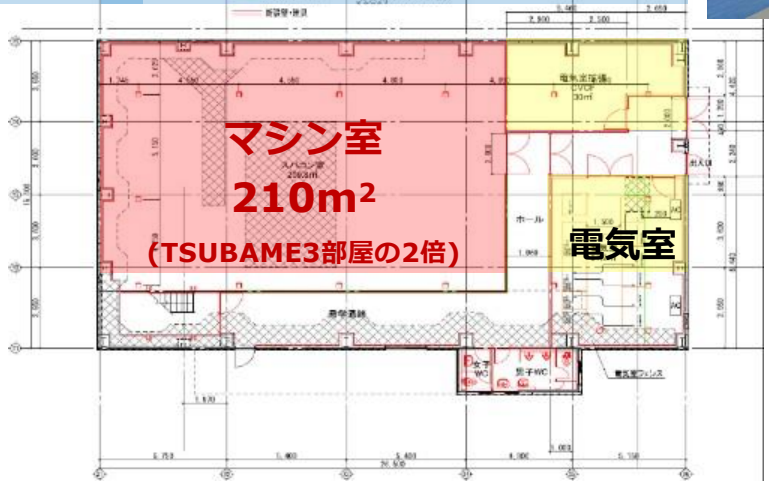
**すずかけ台  
(横浜市緑区)**

## すすかけ台キャンパス

G4A棟(旧MHD棟)を  
新データセンターとして改修



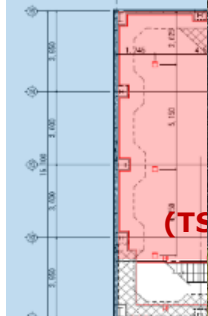
### 屋外冷却設備等



2024/4

TSUBAME  
TSUBAME  
を新データ

屋外冷却



泰山  
木



# TSUBAME4.0 Instratic (2024/01/17)



# TSUBAME4.0 ラックデザインコンテスト

## TSUBAME4ラックデザインコンテスト 結果発表

<https://www.t4.gsic.titech.ac.jp/design>



TSUBAME計算サービス

TSUBAME4.0

[ホーム](#)

メニュー

[トップ](#)

▼ [特設ページ](#)  
[ラックデザインコンテスト](#)

▼ [利用規約・利用料など](#)  
[利用料について](#)

▼ [システム構成](#)  
[ハードウェア構成](#)

▼ [リンク](#)  
[グランドチャレンジ制度](#)

▼ [学術国際情報センター](#)  
[広報・出版物](#)

[教育システム](#)

[東工大ポータル](#)

[X\(Twitter\) @Titech\\_TSUBAME](#)

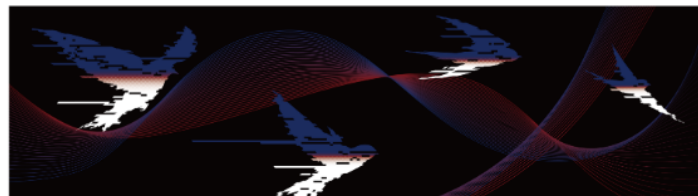
## スーパーコンピュータ TSUBAME4.0 ラックデザインコンテスト

### TSUBAME4ラックデザインコンテスト 結果発表

2024年4月のTSUBAME4.0運用開始に先立ち、計算機ラックのデザインをコンテスト形式で公募いたしました。  
[コンテスト募集要項はこちら](#)

学術国際情報センターにおける選考の結果、受賞作品を以下の通り選出させていただきました。  
運用開始にむけて、受賞作品をベースに最終デザインを制作いたします。TSUBAME4.0のお披露目までお待ちください。

最優秀賞: はばたき  
だみ さん



4.0にアップデートされた新しいスパコンが持つ様々な可能性や用途の広がりイメージして4羽のつばめが自由な流線を描きながらどこまでも無限に広がる世界を羽ばたいていく様子をイラストで表しました。カラーも実際のつばめから連想したブラック、ネイビー、レッド、ホワイトでまとめました。スパコンとしてより一層親しまれるよう、愛称とわかりやすく結びつくようなデザインを意識しました。

# 本日の概要

---

- **TSUBAME4.0** の紹介 (17シート)
- **TSUBAME4.0** の利用制度 (7シート)
- **TSUBAME4.0** 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	2023	合計	
学術 利用	HPCI	-	-	-	-	-	6	5	10	14	5	9	12	16	14	8	10	10	119	
	JHPCN	-	-	-	4	6	5	11	10	10	12	11	15	14	8	7	6	7	126	
	有償利用	-	-	1	4	9	14	17	22	23	25	23	27	25	28	30	28	26	302	
産業 利用	無償/HPCI	11	15	15	8	10	12	21	17	13	15	8	3	3	1	1	1	0	154	
	有償 利用	公開	-	-	3	6	7	9	8	10	8	8	5	6	4	5	2	1	0	82
		非公開	-	-	2	7	6	4	10	12	10	13	16	19	19	20	14	12	10	174

# TSUBAME4.0 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6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共同利用（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6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6年度利用 随時募集			
		JHPCN	企業共同研究課題	令和6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共同利用（産業利用）		令和6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 440,000 円(税込)

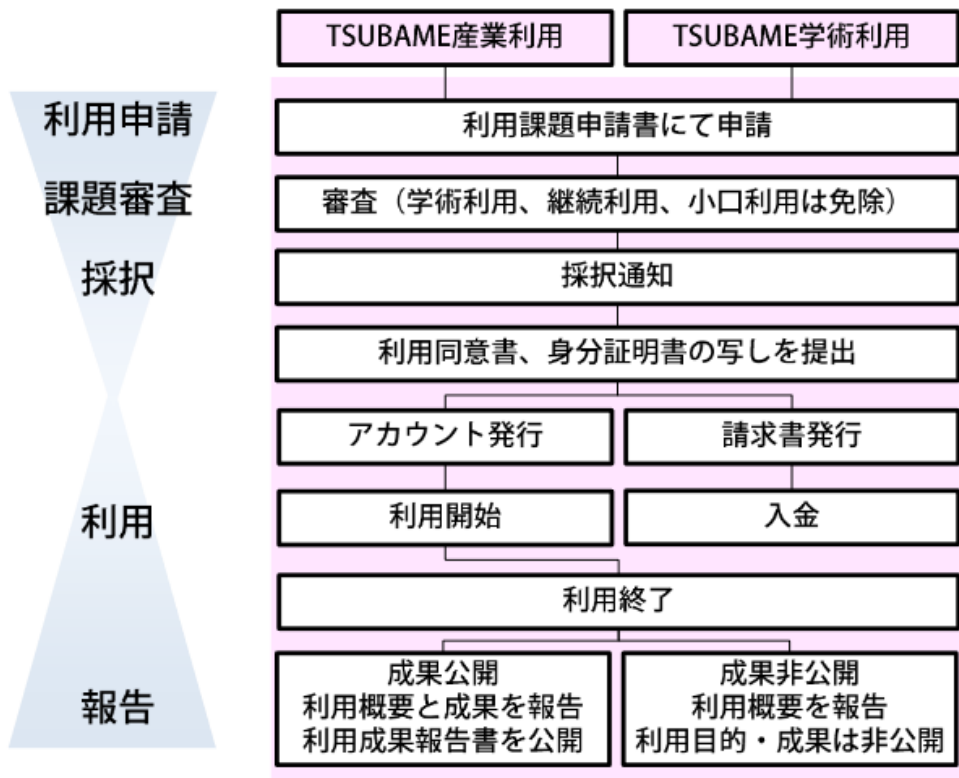


# TSUBAME4.0 民間企業への提供資源

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 共同利用 (学術/産業)	R6年度 募集開始	共有利用  1口 400ノード時間相当	随時募集 当該年度末まで R6/4~R7/3	30口(産業) 60口(学術)	公開  非公開	1口 110,000円 (学術は公開のみ) 1口 440,000円
HPCI 産業利用 産業課題	R6年度 公募終了	ストレージ(HDD) 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: 135口 Sクラス: 40口	公開	無償
JHPCN 企業共同研究 課題	R6年度 公募終了	※ストレージ(HDD)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口 10,800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)	R6年度 随時募集	※ストレージ(SSD)もあり	随時募集 通年利用可能 HPCI事務局へ申請	2口 800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「**TSUBAME4.0**」

# TSUBAME4.0 共同利用 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。

# TSUBAME4.0 利用申請手続き日程

令和6年2月2日、3月1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月初旬～ 利用開始(アカウント発行、口数設定など)

テスト運用中は継続利用者に限る

新規利用者は正式運用後の利用開始

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。

## TSUBAME4.0 運用予定

4月初～中旬 テスト運用 開始

4月中旬 TSUBAMEグランドチャレンジ  
大規模計算制度 全ノード占有利用

4月下旬 正式運用 開始

# TSUBAME4.0 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、大岡山キャンパス)

※すずかけ台キャンパスの法定点検の停電は2025年3月9～10日

# 本日の概要

---

- **TSUBAME4.0** の紹介 (17シート)
- **TSUBAME4.0** の利用制度 (7シート)
- **TSUBAME4.0** 利用可能なアプリ  
やその他 (10シート)

# TSUBAME4.0 で利用可能なアプリ

- TSUBAME3.0 と同等のソフトウェアを提供予定
- コンパイラ・開発ツールなどは学外利用可能
- アカデミックライセンスの商用アプリは学内のみ利用可能
- 一部の商用アプリは学外でも利用可能 (Gaussian, AMBER など)
  - 量子化学/MD関連ソフトウェア
  - CFD関連ソフトウェア
  - GPU用数値計算ライブラリ
  - 機械学習、ビッグデータ解析関連ソフトウェア
  - 可視化関連ソフトウェア
  - HPCIで整備されたアプリケーション

# TSUBAME3.0で利用可能なアプリ(商用)

アプリケーション名	概要	ライセンス
<b>開発環境、ライブラリ</b>		
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
<b>数値解析/可視化ソフトウェア</b>		
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
<b>シミュレーション ソフトウェア</b>		
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
<b>機械学習、Deep Learningフレームワーク</b>	
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
<b>開発環境、ライブラリ、ツール</b>	
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
<b>数値解析/可視化ソフトウェア、ツール</b>	
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
<b>シミュレーションソフトウェア</b>	
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

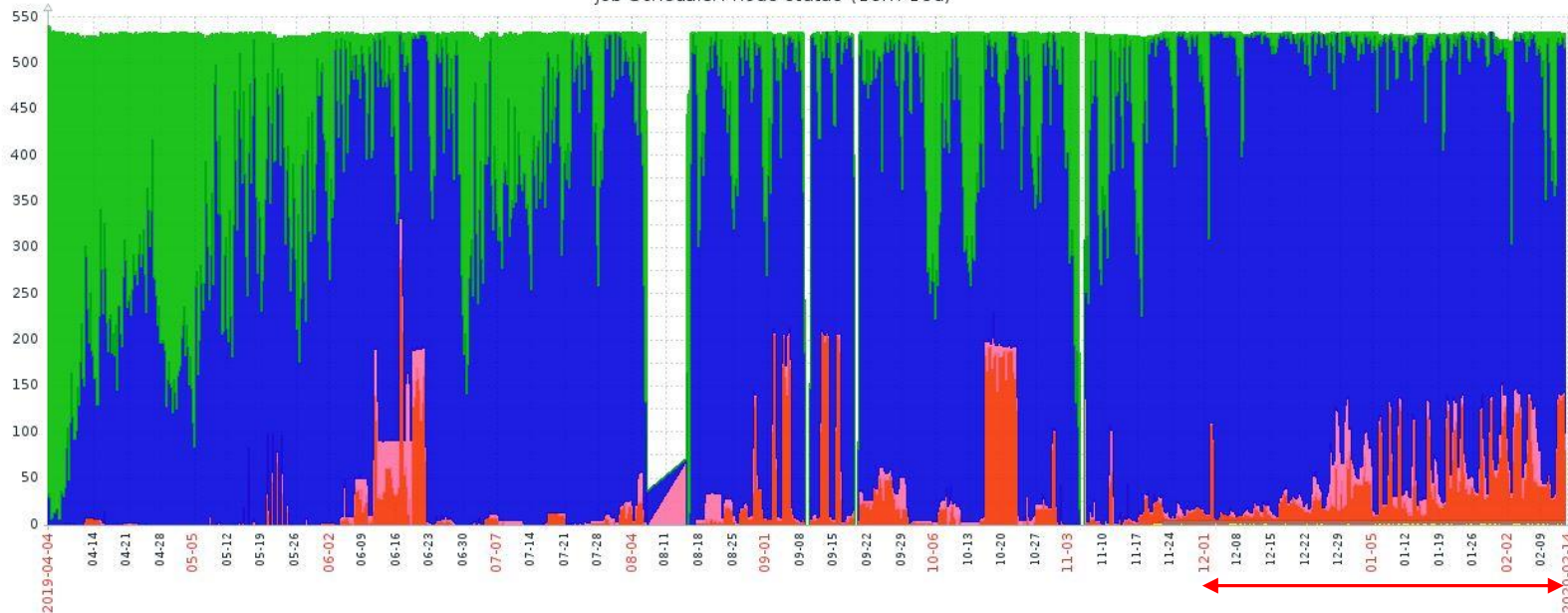
- 国プロで開発された国産アプリケーション
- TSUBAME以外にも、多くのHPCI共用計算資源で利用可能に整備

# TSUBAME4.0で利用可能なアプリその他

- ライセンスサーバー用のマシンはなくなりました。  
商用アプリを利用の際はご自身でライセンスサーバーをご用意ください。  
計算ノードから外部インターネットへのアクセスはT3と同様の予定です。
- 一部の商用アプリケーションを利用の際に課金が発生します。  
(導入開始の2024年度は低い価格設定、2025年度以降に価格は再検討)
  - 学内向け商用アプリケーション
  - AMBER 1ユーザ、1か月あたり、1ノード時間相当の課金
  - Gaussian 1ユーザ、1か月あたり、1ノード時間相当の課金

2019/4/4~2020/2/14

Job Scheduler: node status (10m 16d)



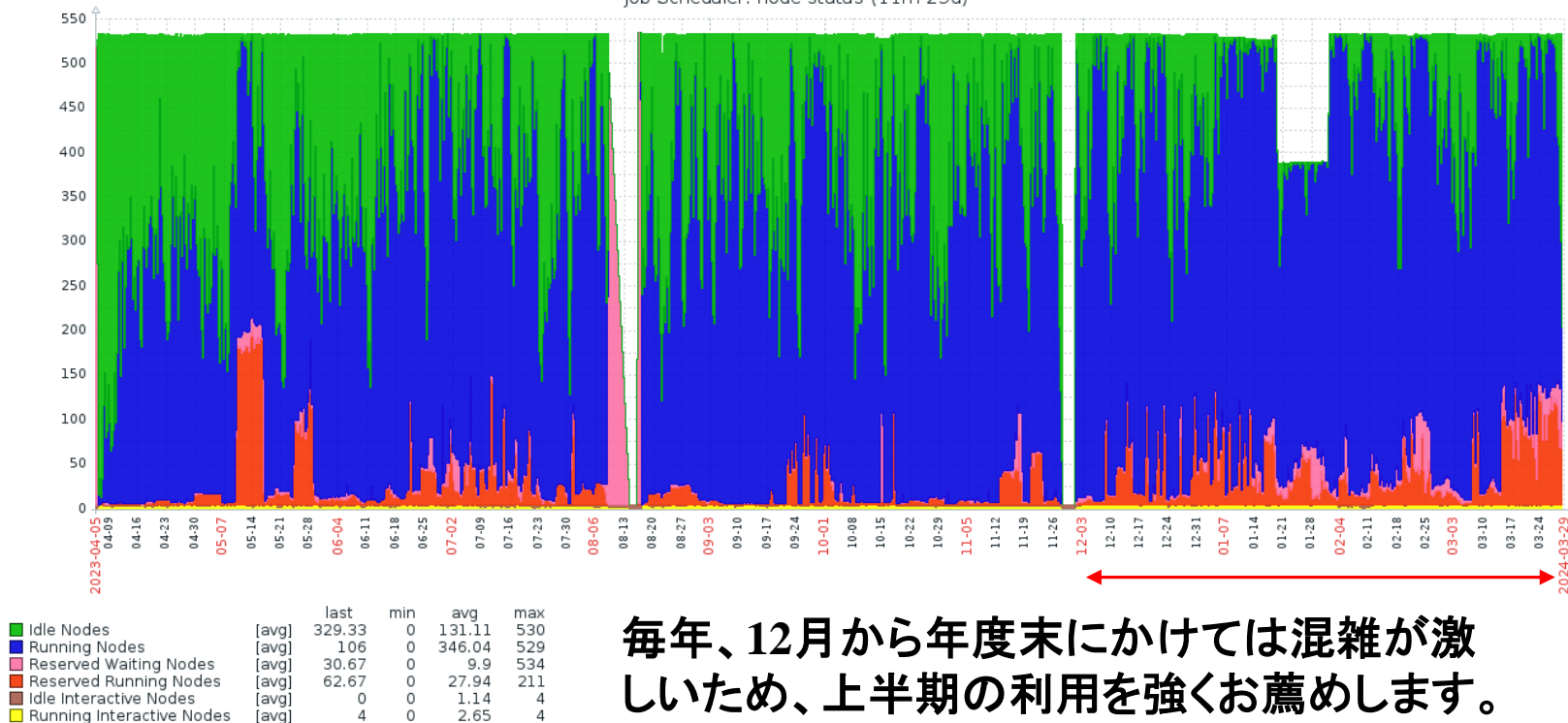
■ Idle Nodes  
■ Running Nodes  
■ Reserved Waiting Nodes  
■ Reserved Running Nodes  
■ Idle Interactive Nodes  
■ Running Interactive Nodes

	last	min	avg	max
[avg]	10.33	0	101.23	540
[avg]	421.33	0	385.86	534
[avg]	18.33	0	9.87	540
[avg]	76.67	0	27.34	314
[avg]	4	0	3.47	4
[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。

2023/4/5 ~ 2024/3/29

Job Scheduler: node status (11m 29d)



# TSUBAME4.0 最大利用口数について

---

## TSUBAME共同利用課題の最大利用口数について

産業利用課題の最大利用口数は**30口**

学術利用課題の最大利用口数は**60口**

# TSUBAME4.0 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、利用者の希望に応じて随時開催  
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](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  
TSUBAME4.0の講習会ページをご参照ください。

TSUBAME計算サービス TSUBAME4.0 > 講習会

<https://www.t4.gsic.titech.ac.jp/lectures>

# 東京工業大学 **TSUBAME4.0** の紹介

**TSUBAME4.0**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>