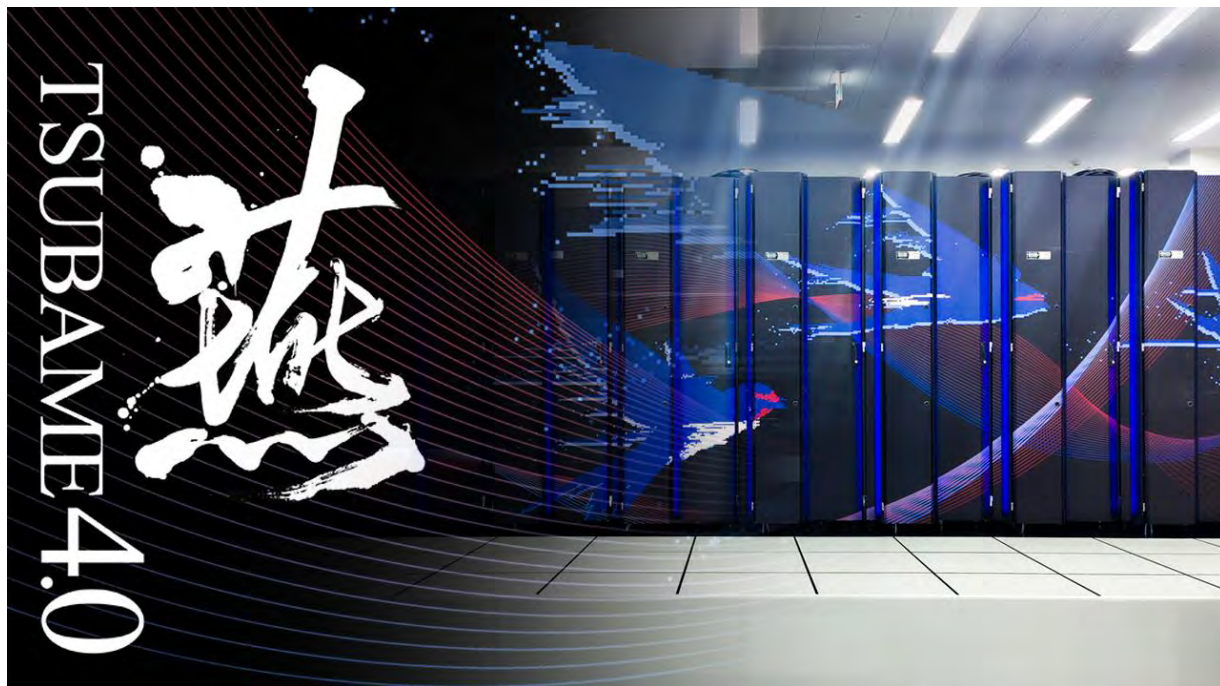
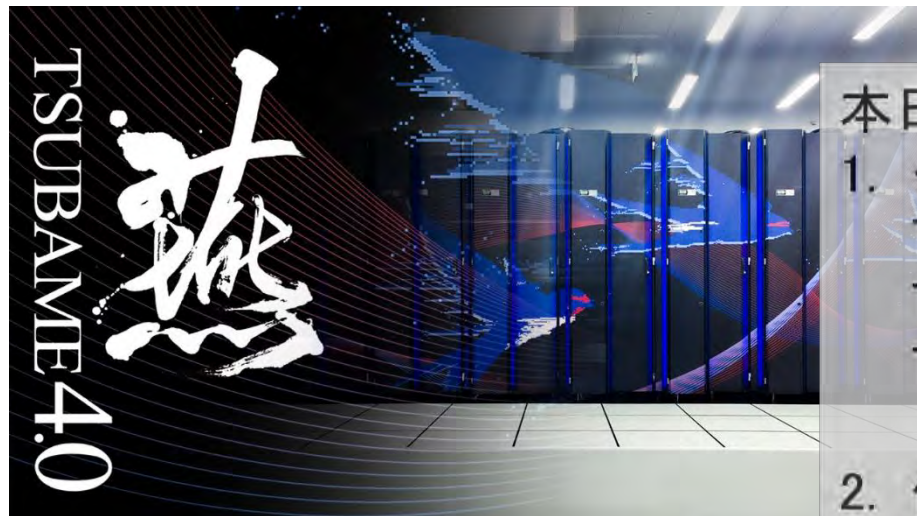


令和7年度 TSUBAME共同利用 公募説明会



14時より開始予定です。
今しばらくお待ちください。

令和7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

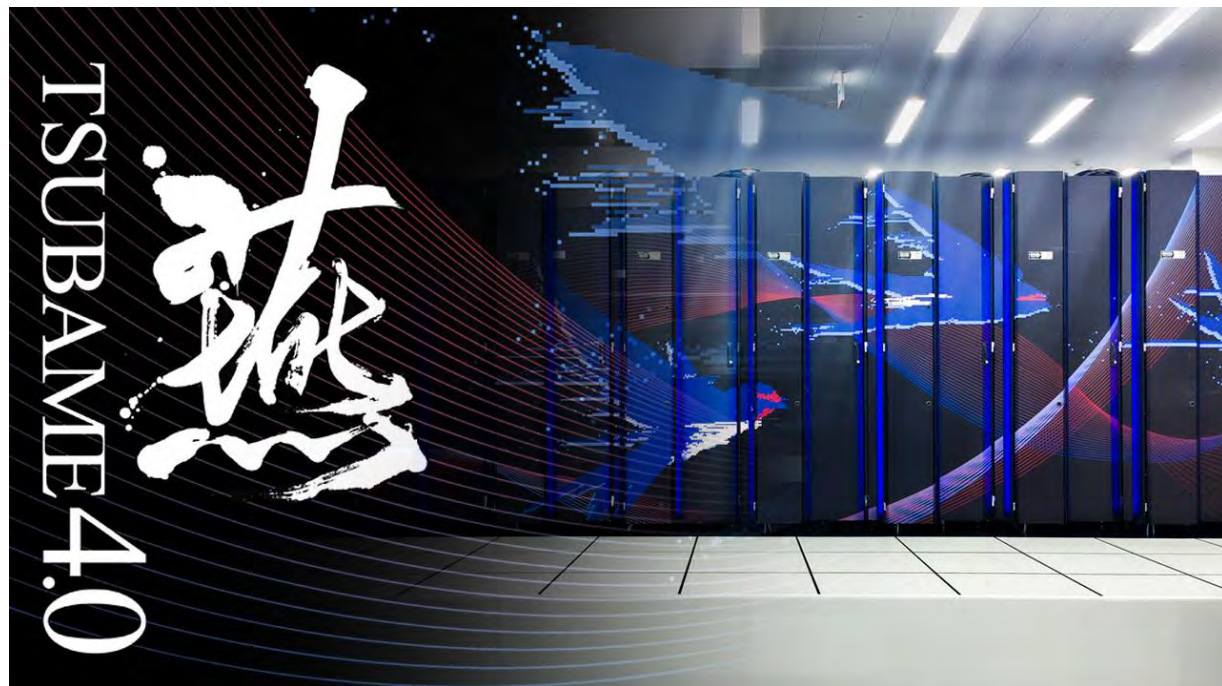
質問方法： 挙手 > 口頭で質問可能です。所属とお名前が全参加者へ見えてしまいます。

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7年3月7日 令和7年度 TSUBAME共同利用 公募説明会

令和7年度 TSUBAME共同利用 公募説明会



東京科学大学
情報基盤センター
共同利用支援室
渡邊寿雄

tsubame-kyodo@cii.isct.ac.jp

令和7年3月7日 令和7年度 TSUBAME共同利用 公募説明会

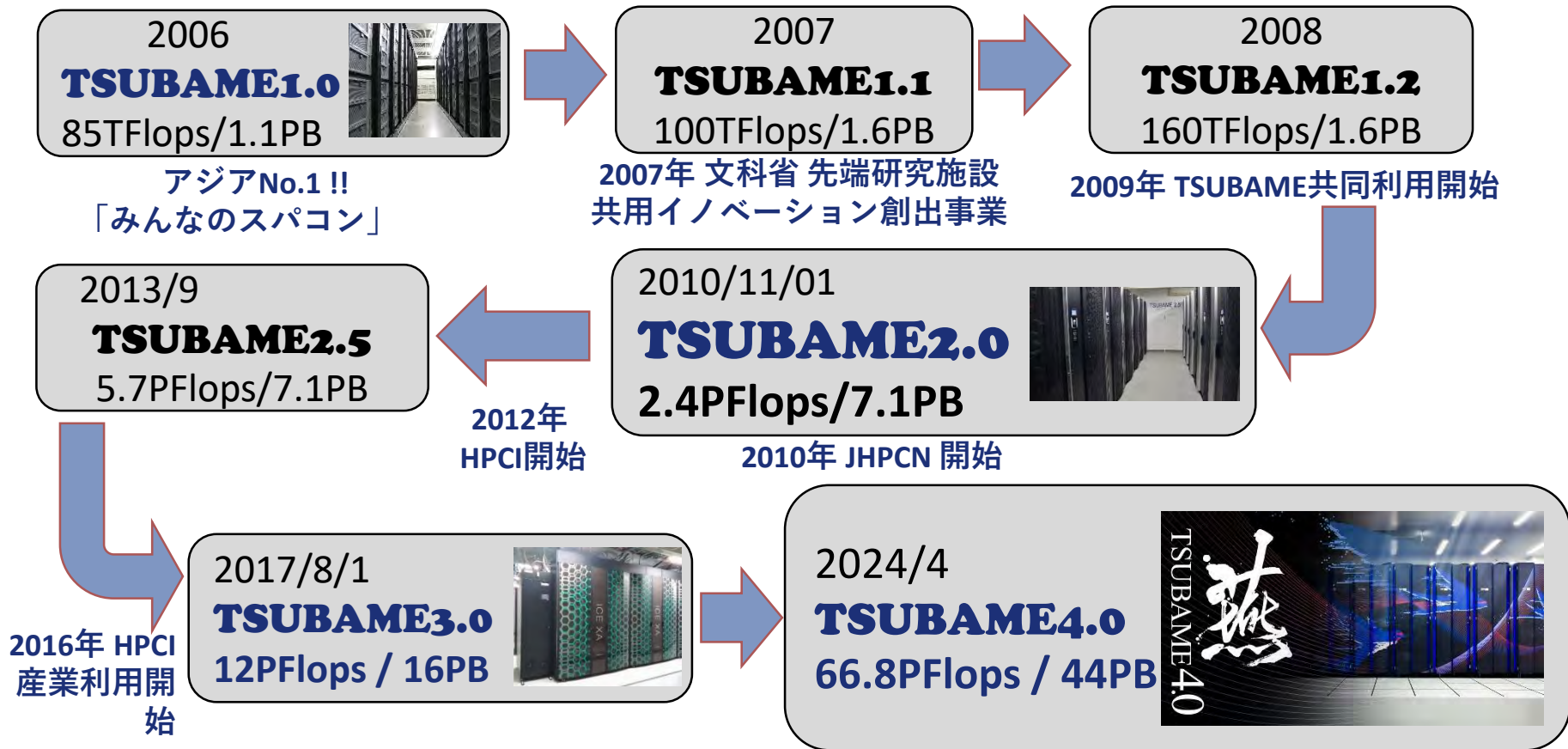
本日の概要

- ・ **TSUBAME4.0** の紹介 (11シート)
- ・ **TSUBAME4.0** の利用制度 (8シート)
- ・ **TSUBAME4.0** 利用可能なアプリ
やその他 (9シート)

事務局よりご連絡

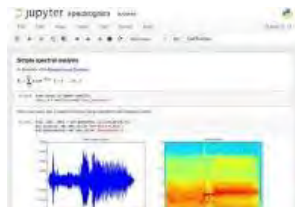
本プレゼン資料については、後日提供します。

TSUBAME性能向上と共同利用サービスの歴史

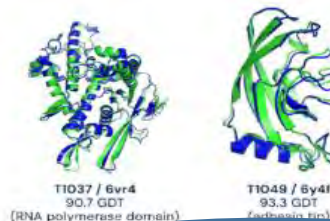


TSUBAME 4.0:

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

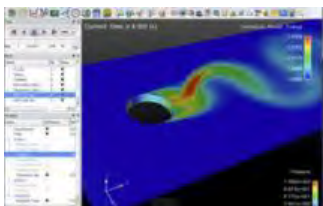
ビッグデータ解析

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



シミュレーションと
リアルタイム可視化

TSUBAME 4.0
2024/4運用開始

TSUBAME4.0の概要

2024/4/1稼働開始

計算ノード：

HPE Cray XD665 × 240台
H100 GPU 計960台

総演算性能：

- **66.8 PFlops** (倍精度)
- **952 PFlops** (半精度)

共有ストレージ：

HPE Cray ClusterStor E1000

総容量：

- 44 PByte (ハードディスクベース)
- 327 TByte (SSDベース)

30ラックに格納

- 計算ノード 23ラック
- ストレージ・管理 7ラック

すずかけ台キャンパスG4-A棟に設置

構築業者：Hewlett Packard Enterprise

2024/5 ランキング

Top500: No. 31 (25.46PFlops)

Green500: No. 25 (34.8GFlops/W)

TSUBAME4.0の全体性能・諸元

	TSUBAME3.0(2017-2024)	TSUBAME4.0(Apr 2024-)
総演算性能 倍精度(FP64)	12PFlops	66.8PFlops (行列演算)
半精度(FP16)	47PFlops	952PFlops
ノード数	540 Nodes	240 nodes
各ノード	HPE/SGI ICE XA	HPE Cray XD665
CPU	Xeon E5-2680 (14c) x 2	EPYC 9654 (96c) x 2
Main Memory	DDR3-2400 256GiB	DDR5-4800 768GiB
GPU	P100 (16GB) x 4	H100 (94GB, HBM2e) x 4
Interconnect	OmniPath 100Gbpsx4	InfiniBand NDR 200Gbpsx4
システム冷却・水温(inlet)	Free Cooling with Cooling Tower 32°C	Chiller 20°C
消費電力 (冷却含む)	1080kW (設計値) 500~600kW(通常運用中)	1820kW (設計値) 600~800kW(通常運用中)

*: TSUBAME4のH100はメモリ94GB, HBM2eの特殊版

TSUBAME4.0ノード構成

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

※通常のH100製品(80GB, 3.3TB/s)とメモリ性能が異なる

「もっとみんなのスパコン」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・・・

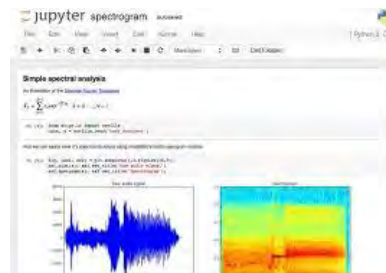
拡がる計算資源の利用法への対応

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)

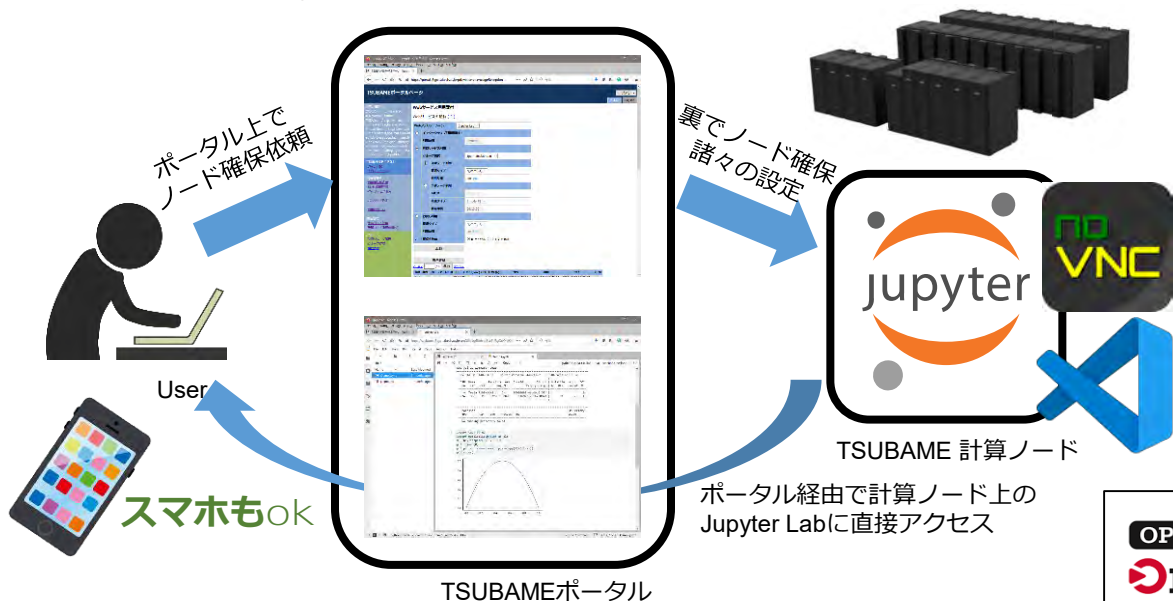


TSUBAME3.0で
2020年に導入
2022/4 Update

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**

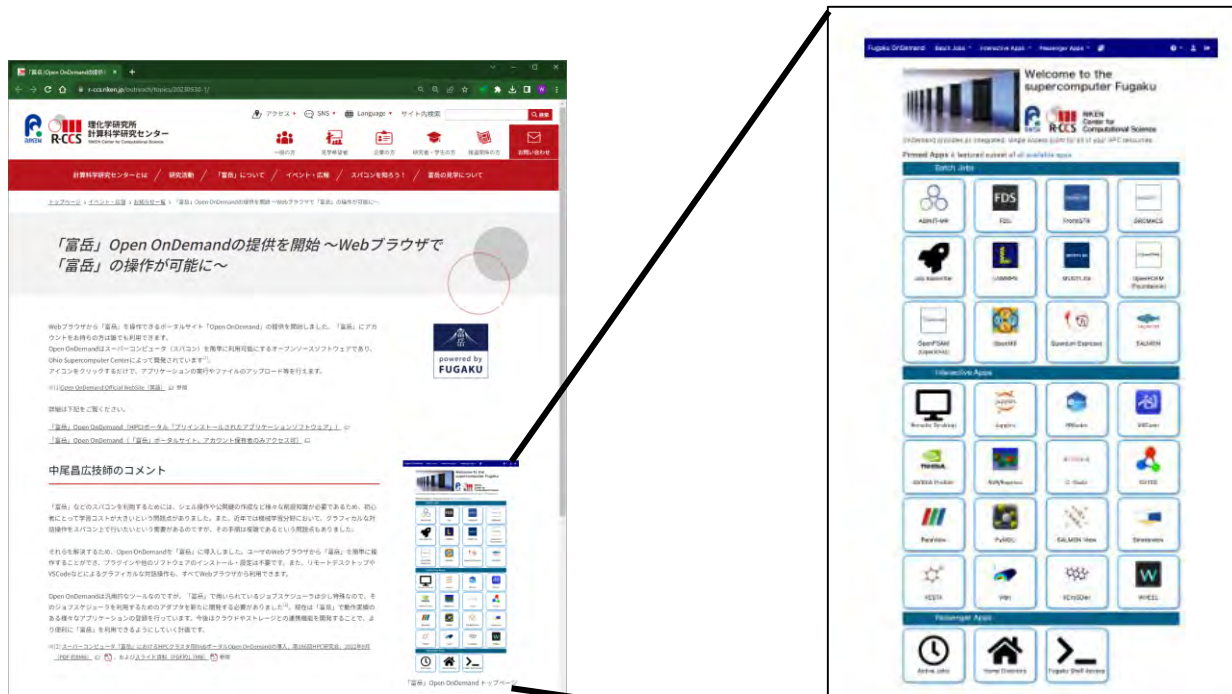
次期TSUBAME4.0において、
計算性能・使いやすさの両方を
さらに向上

TSUBAME4.0では
Open OnDemandを提供

OPEN

OnDemand

「富岳」でのOpen OnDemandの提供開始

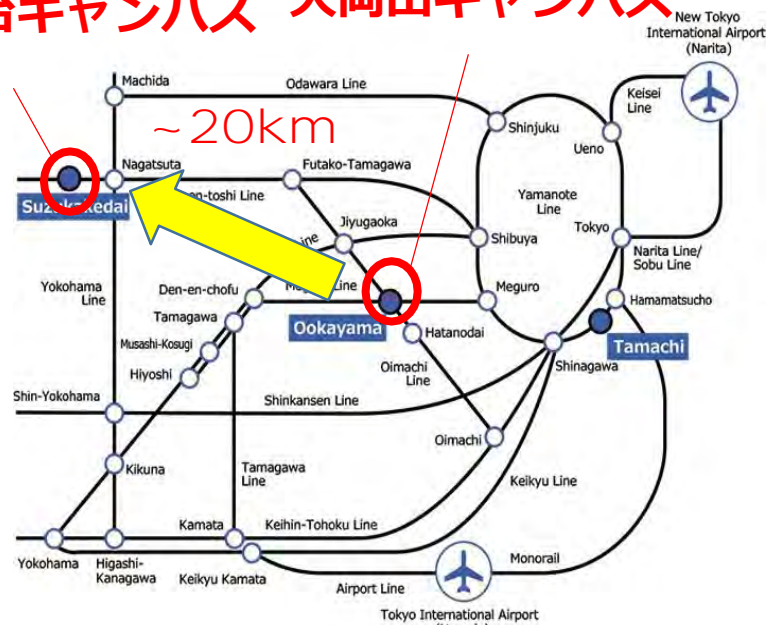


「富岳」や他大学のスパコンと同様な
利用方法の採用による利用者の利便性向上

TSUBAME4.0@すすかけ台キャンパス

2024/4 TSUBAME4はすすかけ台キャンパスで稼働開始

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



すすかけ台
(横浜市緑区)

大岡山
(東京都目黒区)

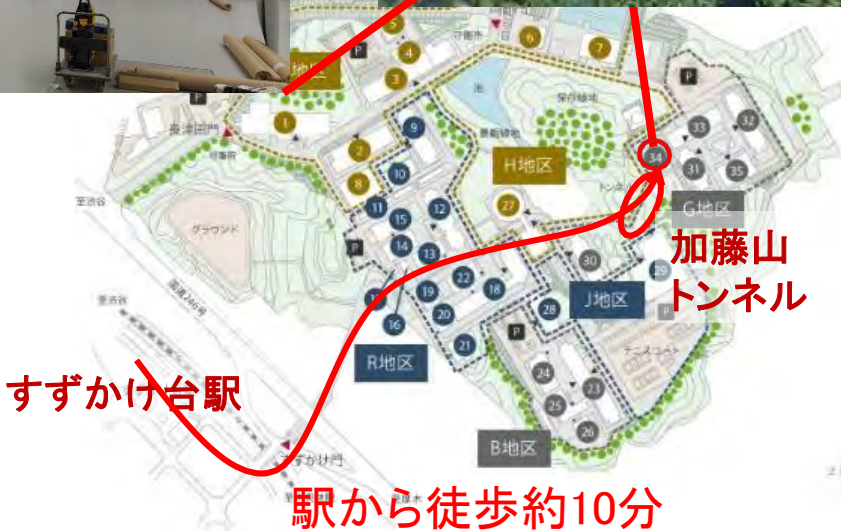
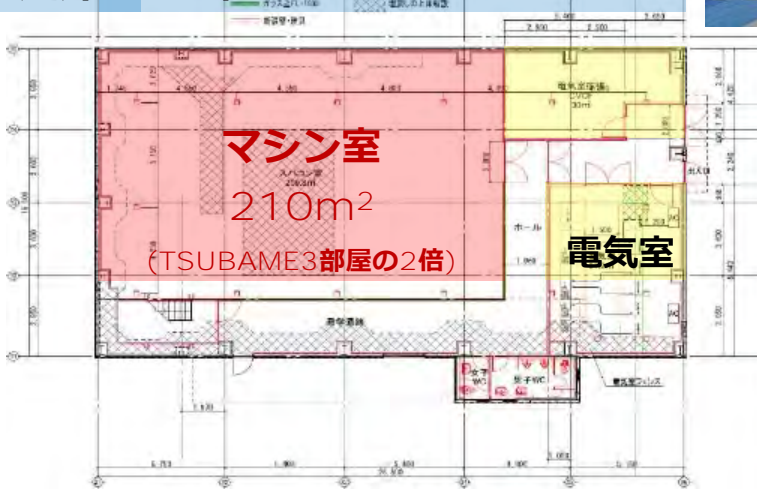
2024/4 TSUBAME4は すすかけ台キャンパスで稼働開始 すすかけサイエンスデイ2025(5月17,18日)で見学会を実施予定

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



駅から徒歩約10分

本日の概要

- **TSUBAME4.0** の紹介 (17シート)
- **TSUBAME4.0** の利用制度 (8シート)
- **TSUBAME4.0** 利用可能なアプリ
やその他 (9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	2024	合計	
学術利用	HPCI	-	-	-	-	-	6	5	10	14	5	9	12	16	14	8	10	10	13	132	
	JHPCN	-	-	-	4	6	5	11	10	10	12	11	15	14	8	7	6	7	18	144	
	有償利用	-	-	1	4	9	14	17	22	23	25	23	27	25	28	30	28	26	54	356	
産業利用	無償/HPCI	11	15	15	8	10	12	21	17	13	15	8	3	3	1	1	1	0	0	154	
	有償利用	公開	-	-	3	6	7	9	8	10	8	8	5	6	4	5	2	1	0	14	96
		非公開	-	-	2	7	6	4	10	12	10	13	16	19	19	20	14	12	10	24	198

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7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	東京科学大学 情報基盤センター	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)	東京科学大学 情報基盤センター	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	東京科学大学 情報基盤センター	公開	無償
産業利用	民間企業	HPCI	産業課題	令和7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7年度利用 随時募集			
		JHPCN	企業共同研究課題	令和7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7年度利用 募集開始	東京科学大学 情報基盤センター	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 (産業利用)	R7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 R7/4~R8/3	30口	公開	1口 110,000円
					非公開	1口 440,000円
HPCI 産業利用 産業課題	R7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: 135口 Sクラス: 40口	公開	無償
JHPCN 企業共同研究 課題	R7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)	R7年度 随時募集		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: 「TSUBAME4.0スーパーコンピュータ」

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7年 3月7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およびエクセルファイルにて提出いただき内容を確認します。
新規申請で3口以上の産業利用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月初旬～ 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。

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)

メールもしくは box にて利用申請書提出

申請書をワード、エクセルファイルにて提出いただき内容を確認します。
新規申請で3口以上の産業利用課題は審査を行います。

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。

※9月メンテナンス 9月2日～9月10日(2024年)

※すずかけ台キャンパス法定点検の停電による停止 3月7日～10日(2025年)

※年度末メンテナンス 3月31日～4月4日(2025年)

TSUBAME4.0最大利用口数について

2025年度のTSUBAME共同利用課題の最大利用口数は、

学術利用、産業利用ともに30口とします。

※同一研究室もしくは、一企業の同一部署あたり

年度内でも学外への提供資源上限(総資源の30%)を越えた場合、
共同利用への資源提供を中止する場合があります

「共同利用への資源提供を中止する可能性」は事前アナウンスをします。

TSUBAME共同利用 令和6年8月での課題申請受付終了について

TSUBAME4.0での課題申請数の急激な増加により、8月8日で課題申請受付を終了。×切直前の駆け込み申請が多く、希望口数の4割程度しか提供できなかった。

小口申請（2口以下）に限り、申請受付（1月末まで）

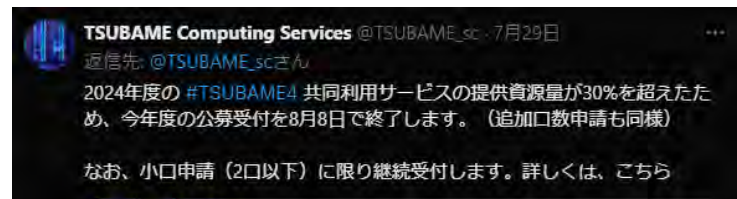
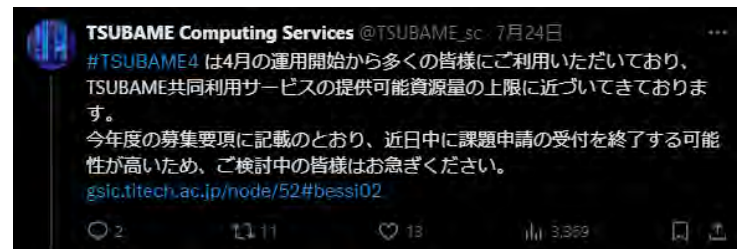
TSUBAME共同利用 募集要項 別紙

1.2 TSUBAME共同利用における提供資源上限

産業利用：一企業の同一部署の年間提供資源上限 30口
学術利用：同一研究室 の年間提供資源上限 30口

年度内でも学外への提供資源上限（総資源の30%）を越えた場合、共同利用への資源提供を中止する場合があります

- 「共同利用への資源提供を中止する可能性」は事前アナウンスをします。
- 提供可能資源量に対して、学術利用の1課題の上限口数を30口に削減します。



本日の概要

- **TSUBAME4.0** の紹介 (11シート)
- **TSUBAME4.0** の利用制度 (8シート)
- **TSUBAME4.0** 利用可能なアプリ
やその他 (9シート)

TSUBAME4.0 で利用可能なアプリ

- 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ISVアプリは学内のみ利用可能
- 一部のISVアプリは学外でも利用可能 (Gaussian, AMBER など)
アプリケーション課金を実施(ユーザごとに利用権の購入が必要)
 - 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



TSUBAME4.0 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 oneAPI)	外部利用可能
NVIDIA HPC SDK (PGI)	NVIDIA HPC SDK (nvhpc)	外部利用可能
AMD AOCC	AMD Optimizing C/C++ and Fortran Compilers (AOCC)	外部利用可能
Linaro Forge (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	本学所属者のみ
MATLAB	インタプリタ型 数値解析ソフトウェア	本学所属者のみ
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	本学所属者のみ
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	本学所属者のみ
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	本学所属者のみ
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	本学所属者のみ
ANSYS/LS-DYNA	汎用非線形構造解析ソフトウェア	本学所属者のみ
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	本学所属者のみ
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	本学所属者のみ

TSUBAME4.0 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	
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
GAMSS	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

TSUBAME4.0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(2024年度内に整備完了予定)

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。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
Phonopy	第一原理計算ソフトウェアの計算結果から固体のフォノンに関連する物理量を計算するソフトウェア
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計算できる
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
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
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
FrontFlow/X	格子ボルツマン法による流体解析ソフトウェア
FFVHC-ACE	圧縮性LES流体解析ソフトウェア
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
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

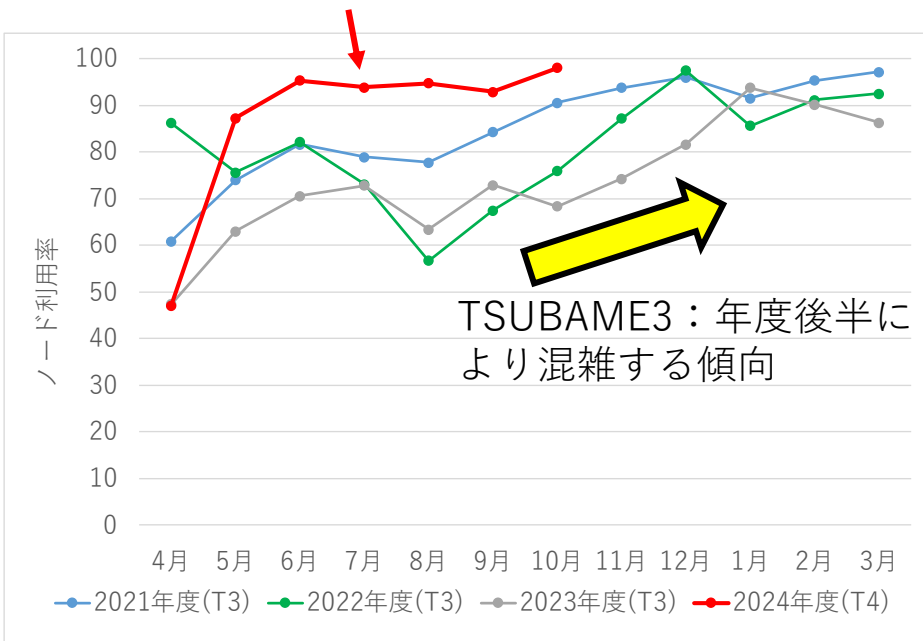
- 国プロで開発された国産アプリケーション
- TSUBAME4.0以外にも、多くのHPCI共用計算資源で利用可能に整備

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ありません。
ISVソフト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。
- 一部のISV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年度は安く価格設定、2025年度以降に再検討予定)
 - 学内向け ISV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
- VASPをご利用希望の方はライセンスの確認が必要です。

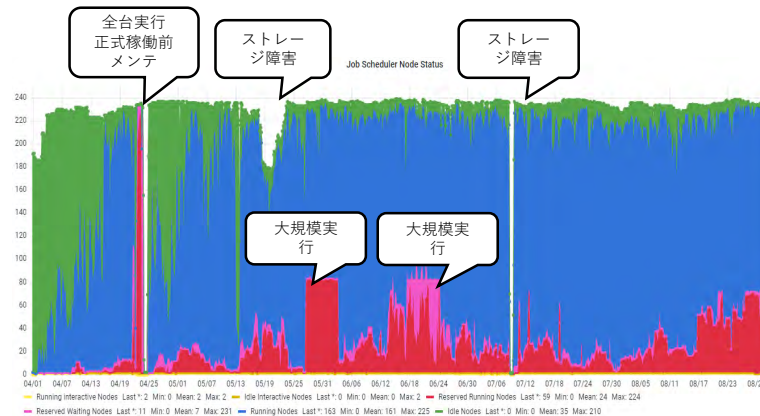
TSUBAME4.0 利用率の推移

TSUBAME4(赤)



ノード利用率は運用3か月目ですでに95%
10月は98%

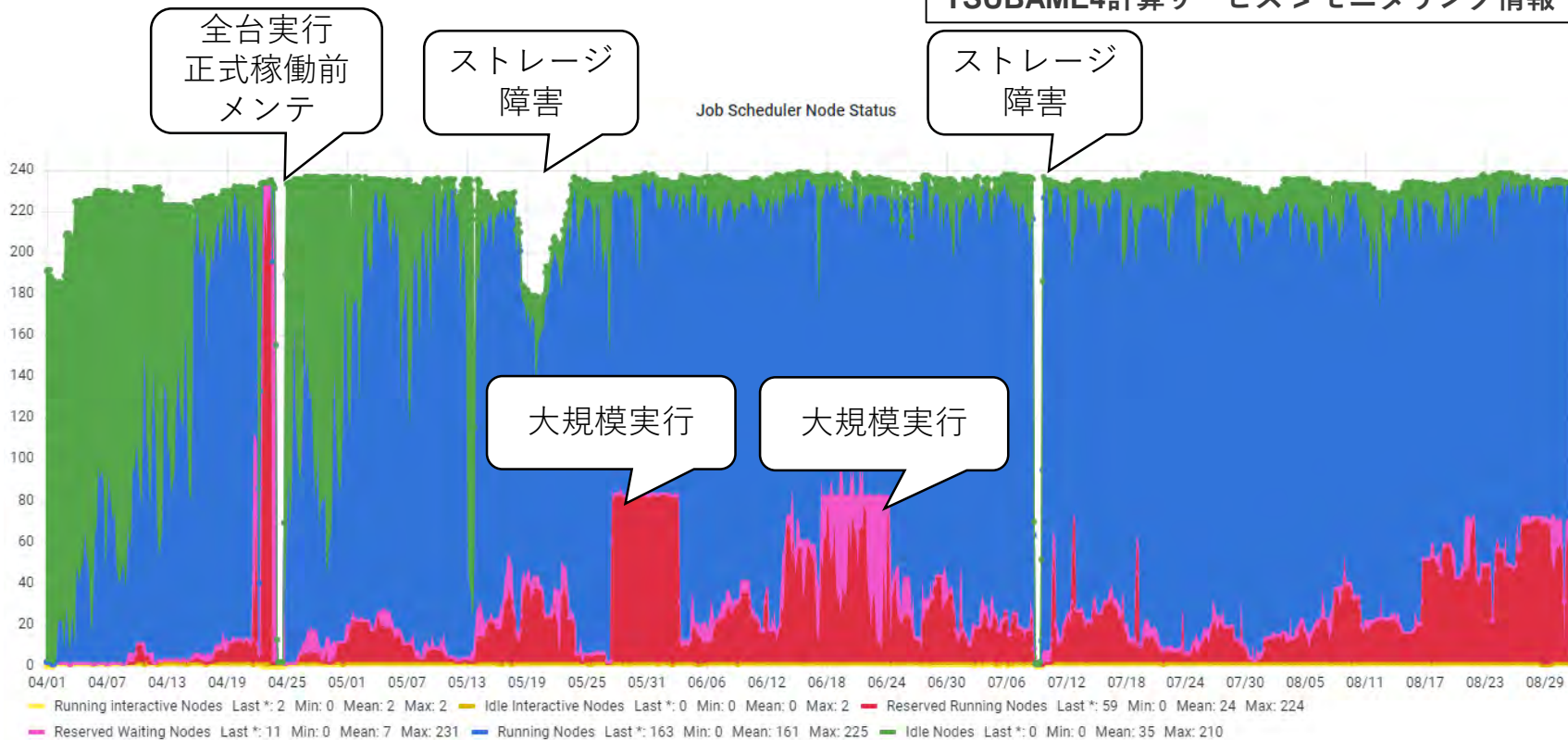
- 注：左図は、ノード上で一部の分割でも使われていれば「利用」とカウント
- ユーザからはキュー待ち時間が長いとの声
- 動的ノード分割・MIGを用いてもこの状況
⇒さらなる改善が必要となっている



混雑状況はWebにて公開しています。
TSUBAME4計算サービス > モニタリング情報

TSUBAME4.0 利用率の推移

混雑状況はWebにて公開しています。
TSUBAME4計算サービス > モニタリング情報



月別ノード利用率: 4月 47.06%, 5月 87.22%, 6月 95.31%, 7月 93.89%

TSUBAME4.0 ご利用にあたって

共同利用支援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

大学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.cii.isct.ac.jp/lectures>

東京科学大学 **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ください。

東京科学大学
情報基盤センター
共同利用支援室

tsubame-kyodo@cii.isct.ac.jp

<https://www.t4.cii.isct.ac.jp/tsubame-kyodo>