数値計算とAIを融合するスーパーコンピュータ「不老」

名古屋大学　情報基盤センター
片桐孝洋

SS研HPCフォーラム2020 富岳スペシャル～システムから応用～
2020年8月27日(木) フォーラム 16:25-17:25（講演 40分　Q&A 20分）
オンライン開催（ZOOM予定）

まとめ

- **スパコン「富岳」ベース**
  - 2020年6月のTOP500で世界一 (415PFLOPS) の
    スーパーコンピュータ「富岳」の同型機を
    正式運用開始（2020年7月1日～、Type Ⅰ サブシステム）
- **スーパーコンピュータ「不老」の特徴**
  1. 敷居が低い
     （研究目的等に問題無なら有資格者が誰でも利用可）
  2. **AI/機械学習**研究を加速するGPU（Type Ⅱ サブシステム）
  3. 100年データ保存可能な最大6PBの光ディスクストレージ
  4. 充実した可視化システム
  5. 湧水を用いたエコ冷却、夏季電力を制御するシステム

まとめ

- 異常気象解析、津波シミュレーション、
  遺伝子解析、医療診断支援、自動運転から
  宇宙の仕組みの解明まで**幅広い研究**をサポート

- スーパーコンピュータ「不老」特有のアプリケーション例
  - 台風のメカニズム解析
  - 医用画像処理
  - 自動運転
  - プラズマシミュレーション
  - 高精細可視化

システム紹介

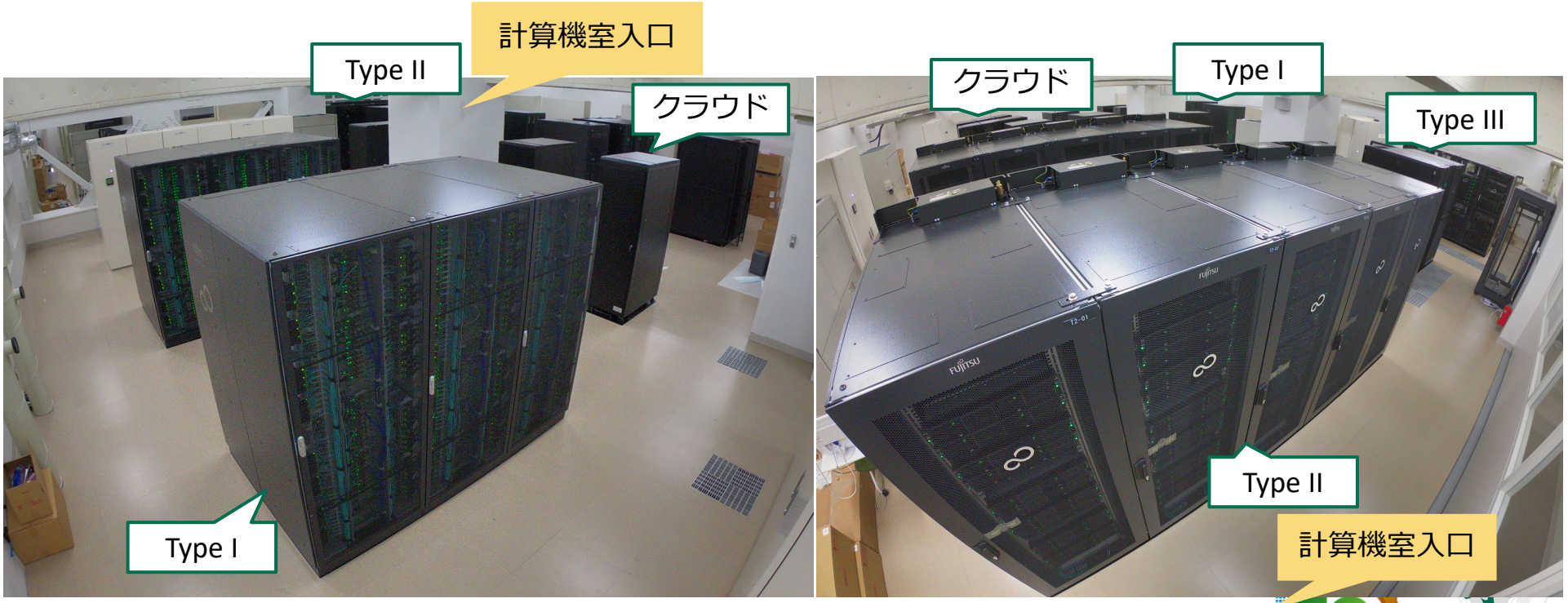
導入の背景

- **研究のデジタル化 (デジタルサイエンス)**
  - コンピューティングを活用した研究の広まり
- **AI/機械学習研究の増大**
  - 自動運転、医療、創薬
- **シミュレーション研究の増加**
  - 異常気象、津波など国民の安全に密接にかかわる現象
  - 生命・宇宙などの基礎科学
- **データの爆発的増大**
  - 元データ、解析結果、AI学習結果など

- 従来のスパコンでは**明らかな能力不足**

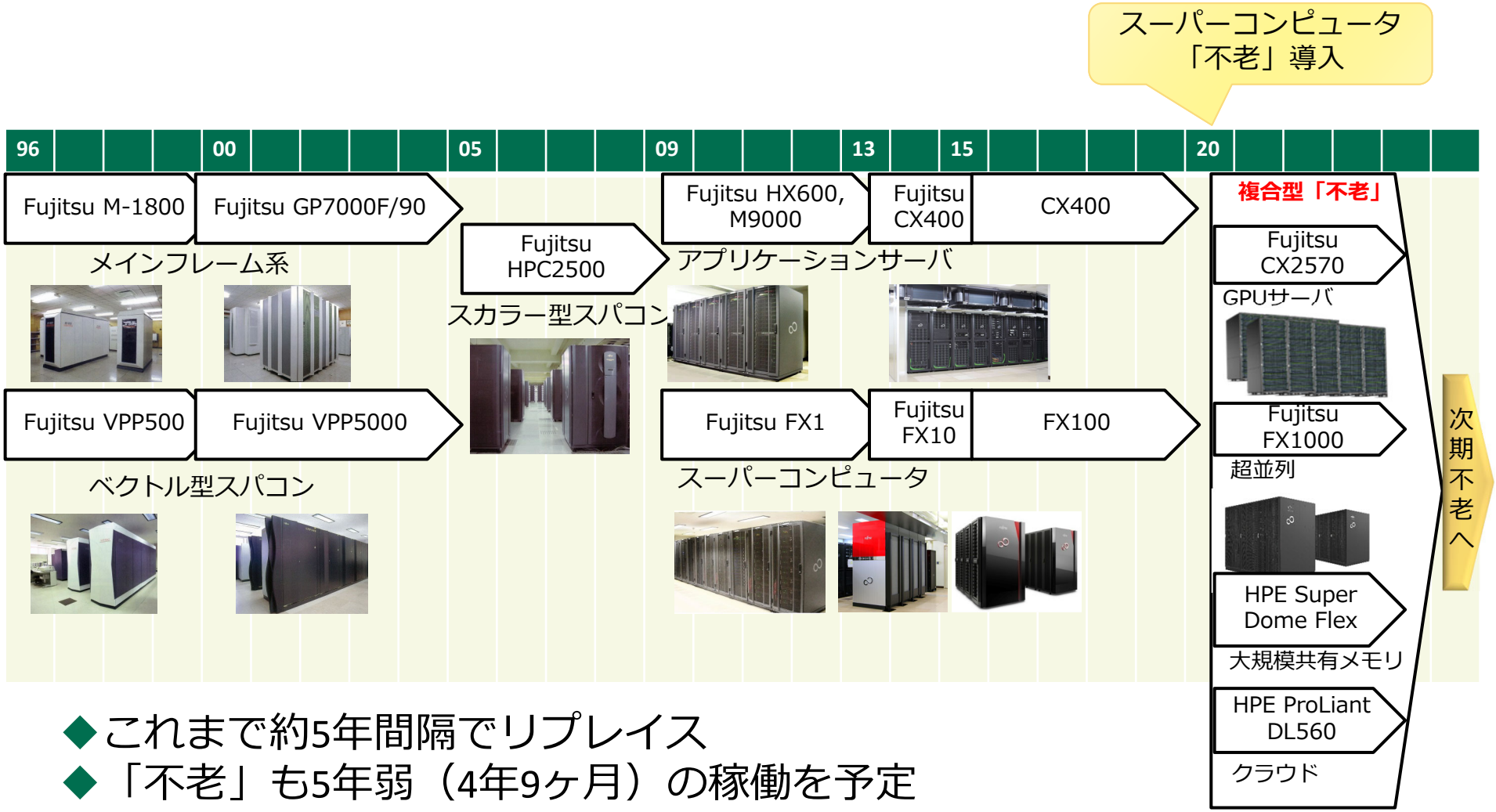
設置状況

- 2020年7月1日、スーパーコンピュータ「不老」が稼働開始しました。現在も順調に稼働中です。
- 名古屋大学 情報基盤センター 本館地下1階の様子



スーパーコンピュータ「不老」
全体図

名古屋大学情報基盤センターのスパコンの歴史



- これまで約5年間隔でリプレイス
- 「不老」も5年弱（4年9ヶ月）の稼働を予定

実際に入ったもの（主な構成要素）

Type I, II, III, クラウドの合計で15.886PFLOPS
（旧システムの約4倍）

7.782 PF

Type Iサブシステム
FUJITSU Supercomputer FX1000
「富岳」型

7.489 PF

Type IIサブシステム
FUJITSU Server PRIMERGY CX2570 M5
GPUスパコン

77.414 TF

Type IIIサブシステム
HPE Superdome Flex
大容量メモリ・可視化

537.6 TF

クラウドシステム
HPE ProLiant DL560
バッチ＆インタラクティブ

30 PB

ホットストレージ
FUJITSU PRIMGERY RX2540 M5
FUJITSU ETERNUS AF250 S2
DDN SFA18KE
DDN SS9012

484 TB → 6 PB

コールドストレージ
SONY PetaSite Library
↓2020年2月更新
SONY PetaSite 拡張型 Library

性能諸元（主要サブシステム群）

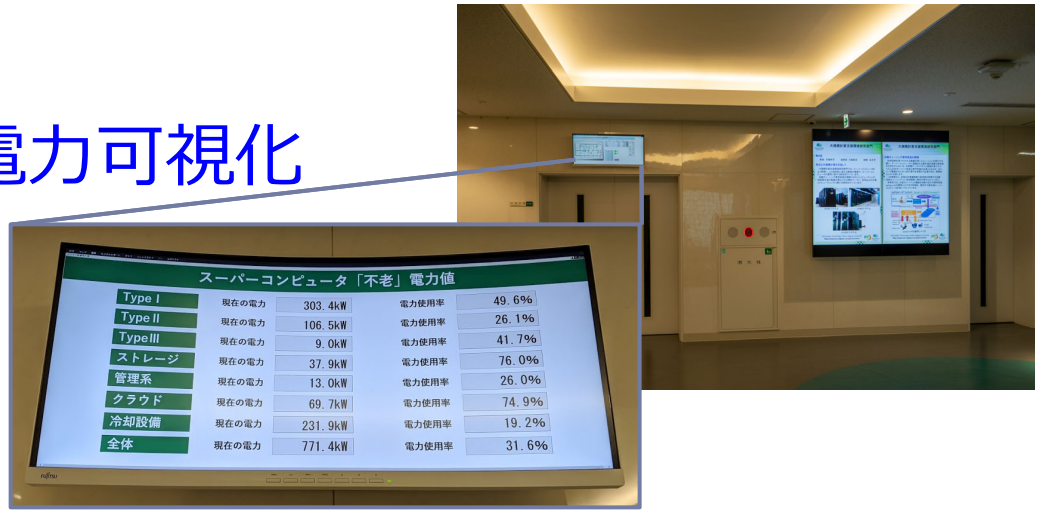
		Type I	Type II	Type III	クラウド
ノードあたり	CPU	A64FX ×1 (Armv8.2-A + SVE) 48+2コア、2.2GHz	Xeon Gold 6230×2 (Cascade Lake) 20コア、2.10-3.90 GHz	Xeon Platinum 8280M×16 (Cascade Lake) 28コア、2.70-4.00 GHz	Xeon Gold 6230×4 (Cascade Lake) 20コア、2.10-3.90 GHz
	メインメモリ	HBM2, 32GB	DDR4, 384GB	DDR4, 24TB	DDR4, 384GB
	GPU	-	Tesla V100×4 (Volta) HBM2, 32GB	Quadro RTX6000×4 (Turing) GDDR6, 24GB	-
	理論性能	3.3792 TFLOPS(DP) 1,024 GB/s	・CPU 1.344 TFLOPS(DP)×2 140.784 GB/s×2 ・GPU 7.8 TFLOPS(DP)×4 900 GB/s×4	・CPU 2.4192 TFLOPS(DP)×16 140.784 GB/s×16	1.344 TFLOPS(DP)×4 140.784 GB/s×4
ノード数		2,304	221	2	100
ノード間接続		TofuインターコネクトD	InfiniBand EDR ×2	InfiniBand EDR	InfiniBand EDR
総理論性能		7.782 PFLOPS(DP) 2.359 PB/s	7.489 PFLOPS(DP) 857.8 TB/s	77.414 TFLOPS(DP) 2.253 TB/s	537.6 TFLOPS(DP) 56.314 TB/s
冷却方式		水冷	水冷	空冷	空冷

消費電力・省電力対策

最大消費電力

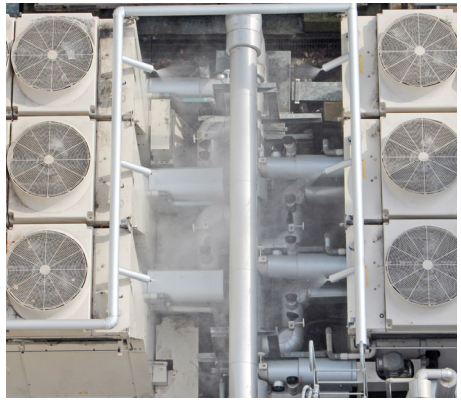
サブシステム名	消費電力
TypeIサブシステム	628.1kVA
TypeIIサブシステム	393.5kVA
TypeIIIサブシステム	21.6kVA
クラウドシステム	93.0kVA
ストレージ	49.9kVA
フロントエンド	19.6kVA
運用管理システム他	52.3kVA
冷却設備	641.9kVA
合　計	1,899.9kVA

電力可視化



湧水を用いた冷却

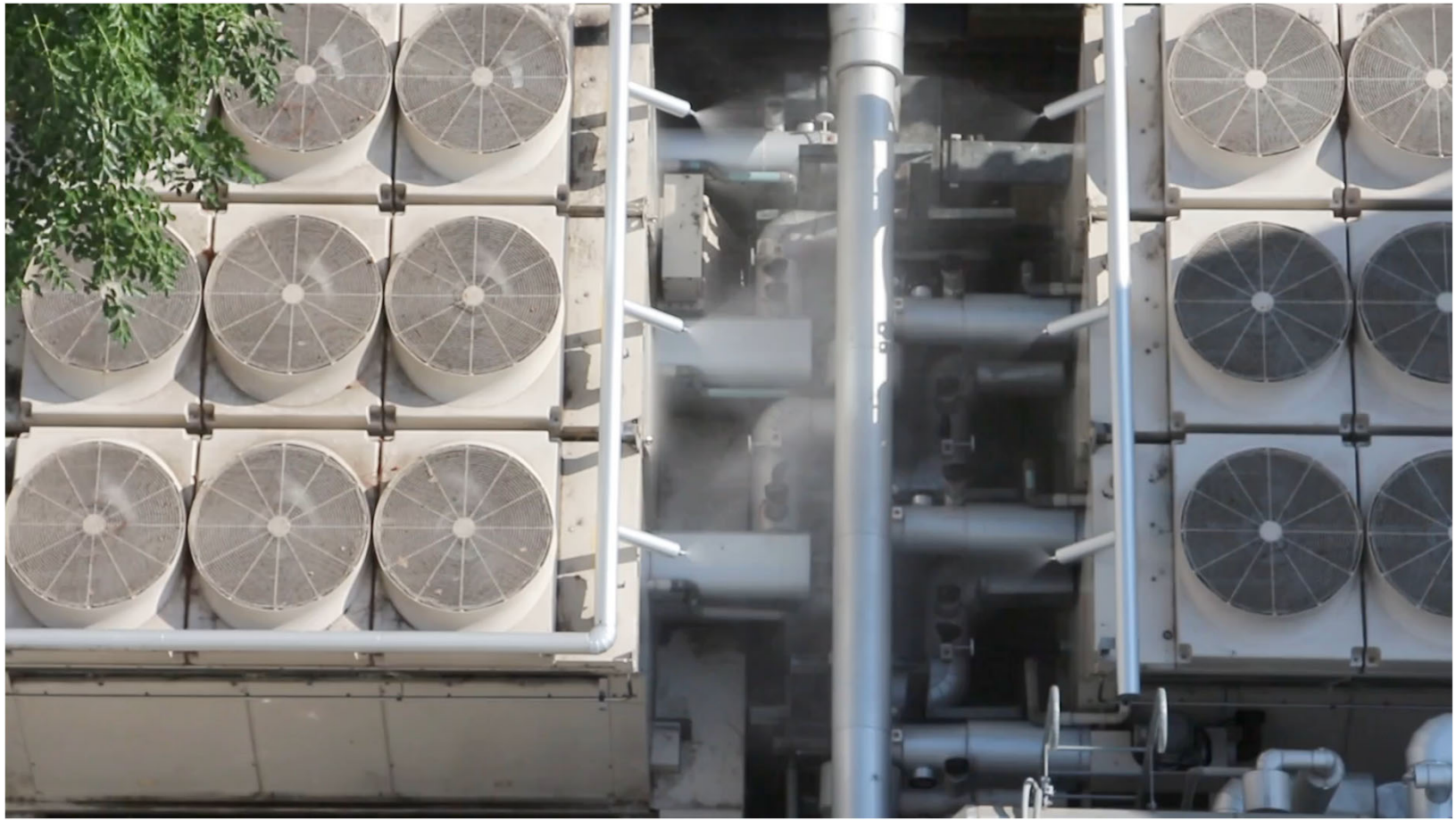
- 地下の湧水を活用したら総合評価時加点
- 屋外チラーに散水して冷却



湧水による冷却システム

- 情報基盤センターの地下は夏季でも18℃程度の湧き水が毎分30L程度湧く
- この湧き水は、地下からポンプで吸い上げて雨水扱いで捨てていた
- 今回の仕様で、湧き水を冷熱源として使用する場合は加点
  - 冷却水としての利用許可・水質検査済み

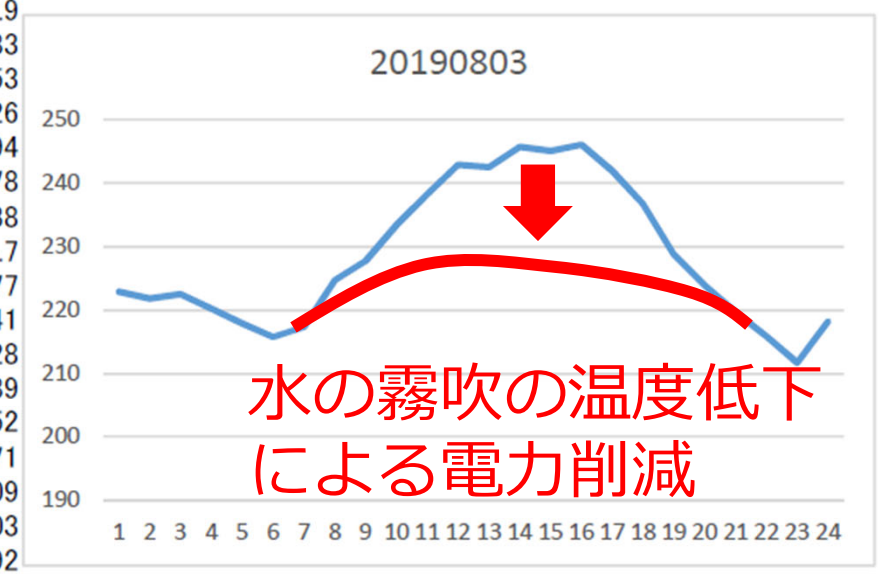
湧水による冷却システム



湧水による冷却システム

- 気温の高い4月から11月の間で利用
- 夏季の1日（2019年8月3日）の（旧）FX100システムの水冷チラーの電気使用量(KW)

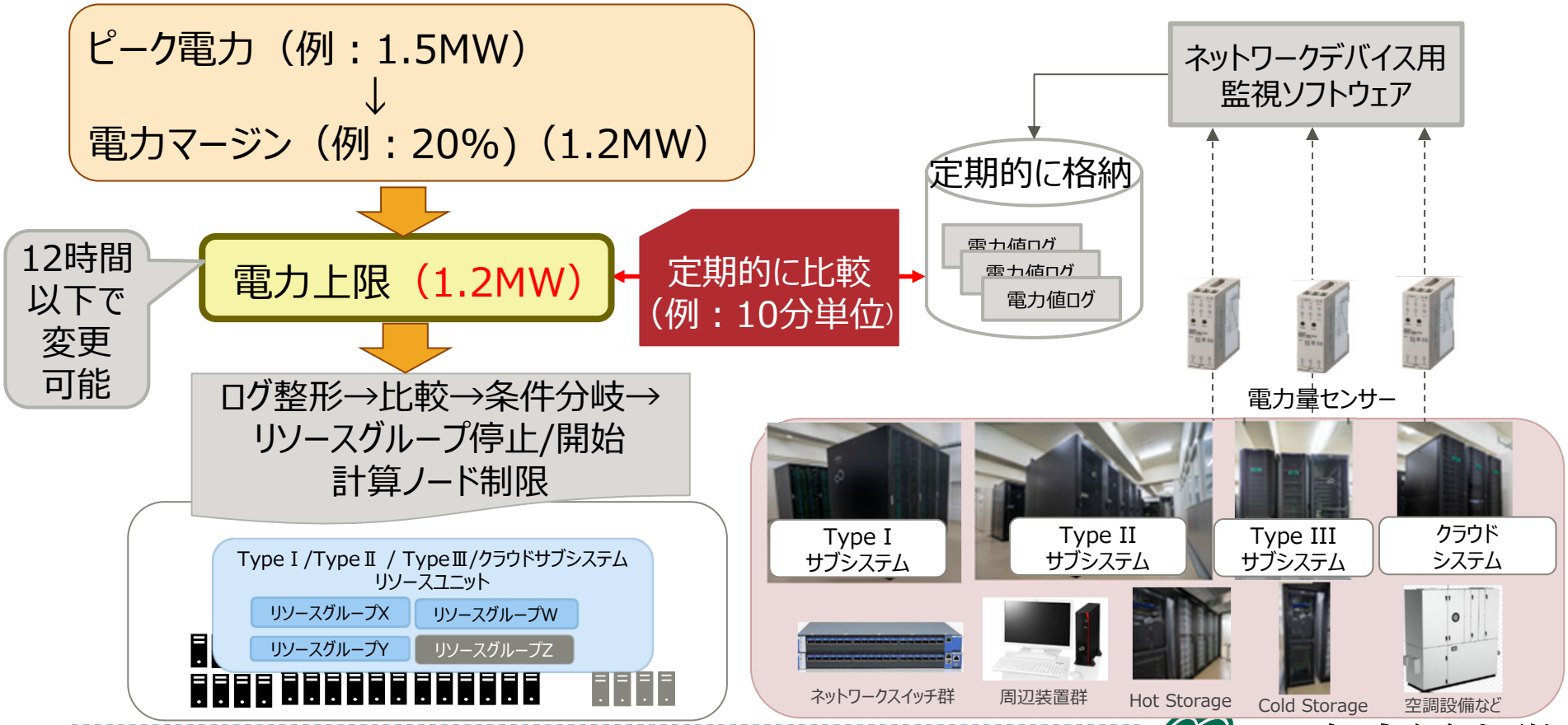
2019年08月03日	222.9
2019年08月03日	221.83
2019年08月03日	222.53
2019年08月03日	220.26
2019年08月03日	217.94
2019年08月03日	215.78
2019年08月03日	217.38
2019年08月03日	224.7
2019年08月03日	227.77
2019年08月03日	233.41
2019年08月03日	238.28
2019年08月03日	242.89
2019年08月03日	242.52
2019年08月03日	245.71
2019年08月03日	245.09
2019年08月03日	246.03
2019年08月03日	241.92
2019年08月03日	236.67
2019年08月03日	228.74
2019年08月03日	223.93
2019年08月03日	219.69
2019年08月03日	215.88
2019年08月03日	211.76
2019年08月03日	218.28



年間数百万円程度の電気代削減を予想

使用最大電力の動的制御機構

- 監視ソフトウェアから一定時間毎に電力値を取得
- 出力された電力値と、あらかじめ規定したシステム全体の使用最大電力の上限値を比較し、最大電力の上限を超えないよう、計算ノードやジョブ実行可能範囲を制限

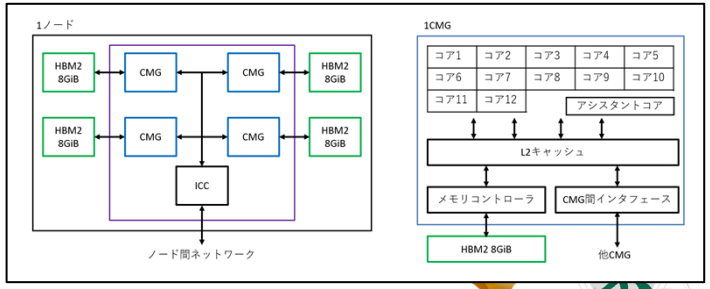


各サブシステムの仕様と特徴：Type I サブシステム

機種名		FUJITSU Supercomputer PRIMEHPC FX1000
計算ノード	CPU	A64FX (Armv8.2-A + SVE), 48コア+2アシスタントコア(I/O兼計算ノードは48コア+ 4アシスタントコア), 2.2GHz, 1ソケット
	メインメモリ	HBM2, 32GiB
	理論演算性能	倍精度 3.3792 TFLOPS, 単精度 6.7584 TFLOPS, 半精度 13.5168 TFLOPS
	メモリバンド幅	1,024 GB/s (1CMG=12コアあたり256 GB/s, 1CPU=4CMG)
ノード数、総コア数		2,304ノード, 110,592コア (+4,800アシスタントコア)
総理論演算性能		7.782 PFLOPS
総メモリ容量		72 TiB
ノード間インターコネクト		TofuインターコネクトD 各ノードは周囲の隣接ノードへ同時に合計 40.8 GB/s × 双方向で通信可能（1リンク当たり 6.8 GB/s × 双方向, 6リンク同時通信可能）
ユーザ用ローカルストレージ		なし
冷却方式		水冷

- 世界初正式運用のスーパーコンピュータ「富岳」型システム
- 自己開発のMPIプログラム向き
- 超並列処理用
- AIツールも提供

ノード内構成

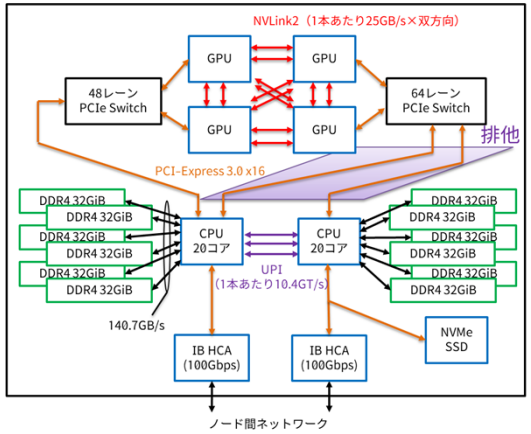


各サブシステムの仕様と特徴：Type II サブシステム

機種名		FUJITSU Server PRIMERGY CX2570 M5
計算ノード	CPU	Intel Xeon Gold 6230, 20コア, 2.10 - 3.90 GHz × 2 ソケット
	GPU	NVIDIA Tesla V100 (Volta) SXM2, 2,560 FP64コア, up to 1,530 MHz × 4ソケット
	メモリ	メインメモリ(DDR4 2933 MHz)：384 GiB (32 GiB × 6 枚 × 2 ソケット) デバイスメモリ(HBM2)：32 GiB × 4 ソケット
	理論演算性能	倍精度 33.888 TFLOPS　(CPU 1.344 TFLOPS × 2 ソケット, GPU 7.8 TFLOPS × 4 ソケット)
	メモリバンド幅	メインメモリ 281.5 GB/s (23.464 GB/s × 6 枚 × 2 ソケット) デバイスメモリ 900 GB/s × 4 ソケット
	GPU間接続	NVLINK2 (1GPUから他の3GPUに対してそれぞれ50GB/s×双方向)
	CPU-GPU間接続	PCI-Express 3.0 (x16)
ノード数、総コア数		221ノード、8,840 CPUコア + 2,263,040 FP64 GPUコア
総理論演算性能		7.489 PFLOPS (CPU 0.594 PFLOPS, GPU 6.895 PFLOPS)
総メモリ容量		メインメモリ 82.875 TiB、デバイスメモリ 28.288 TiB
ノード間インターコネクト		InfiniBand EDR 100 Gbps × 2, 200 Gbps
ユーザ用 ローカルストレージ		NVMe SSD 6.4TB, 一部ノードにて BeeGFS/BeeOND/NVMesh (ローカルストレージを使用した共有ファイルシステム) を提供
冷却方式		水冷

- データサイエンス研究、機械学習用のGPUクラスタ型
- 最新GPU (Volta) 4台／ノード
- 充実したAIツール
- 高速SSDローカルディスク

ノード内構成

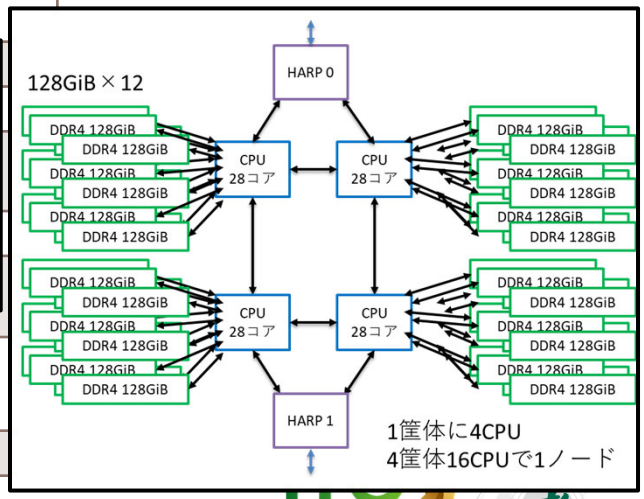


各サブシステムの仕様と特徴：Type III サブシステム

機種名		HPE Superdome Flex
計算ノード	CPU	Intel Xeon Platinum 8280M, 28コア, 2.70 - 4.00 GHz × 16 ソケット
	GPU	NVIDIA Quadro RTX6000 × 4
	メモリ	メインメモリ(DDR4 2933 MHz)：24 TiB (128 GiB × 12枚 × 16ソケット) デバイスメモリ(GDDR6)：24 GiB × 4
	理論演算性能	倍精度 38.7072 TFLOPS (CPU 2419.2 TFLOPS × 16 ソケット)
	メモリバンド幅	メインメモリ 2252.544 GB/s (23.464 GB/s × 12枚(6チャネル) × 16ソケット)
	CPU-GPU間接続	PCI-Express 3.0 (x16)
ノード数		2
総理論演算性能		77.414 TFLOPS (38.7072 TFLOPS × 2 ノード)
総メインメモリ容量		48 TiB
ノード間インターコネクト		InfiniBand EDR 100 Gbps
ユーザ用 ローカルストレージ		一方のノードに102.4 TB SSD、 もう一方のノードに1008 TB 共有ストレージを接続
冷却方式		空冷

- 大規模共有メモリ（24TiB）
- プリポスト処理用・可視化処理用
- NICE DCVを用いたリモート可視化

ノード内構成

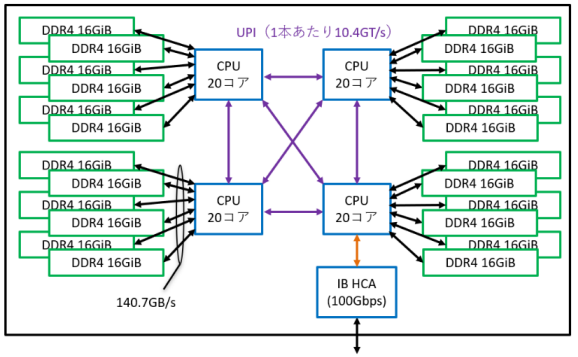


各サブシステムの仕様と特徴：クラウドシステム

機種名		HPE ProLiant DL560
計算ノード	CPU	Intel Xeon Gold 6230, 20コア, 2.10 - 3.90 GHz × 4 ソケット
	メモリ	メインメモリ(DDR4 2933 MHz) 384 GiB (16 GiB × 6 枚 × 4 ソケット)
	理論演算性能	倍精度 5.376 TFLOPS (1.344 TFLOPS × 4 ソケット)
	メモリバンド幅	メインメモリ 563.136 GB/s (23.464 GB/s × 6枚 × 4 ソケット)
ノード数		100
総理論演算性能		537.6 TFLOPS (5.376 TFLOPS × 100 ノード)
総メインメモリ容量		37.5 TiB
ノード間インターコネクト		InfiniBand EDR 100 Gbps
ユーザ用ローカルストレージ		なし
冷却方式		空冷

- 研究室クラスタから移行しやすい Intel CPU搭載システム
- 高いノードあたりCPU性能（４ソケット）
- 時刻を指定してのバッチジョブ・インタラクティブ利用が可能

ノード内構成



ホットストレージの仕様と特徴

メタデータサーバ(MDS)	
機種名	FUJITSU PRIMERGY RX2540 M5
CPU	Intel Xeon Gold 5222 (3.80GHz, 4コア) × 2
メインメモリ	DDR4 192 GiB
HDD	SAS 900 GB 10krpm × 2 (RAID1)
Interconnect	InfiniBand EDR × 2
SAN	FibreChannel 32 Gbps &tiems; 2
OS	RedHat Enterprise Linux
ノード数	4台
メタデータストレージサーバ(MDT)	
機種名	FUJITSU ETERNUS AF250 S2
SSD	RAID1+0 [4D+4M] × 2 + 2HS RAID1+0 [3D+3M] × 1 + 2HS
ノード数	1台

データストレージ(OSS/OST)	
機種名	DDN SFA18KE × 1台 DDN SS9012 × 10 台
HDD	NL-SAS 14TB 7.2krpm × 730、 RAID6 [8D+2P] 30 Device × 24 DCR Pool + 10HS
Interconnect	InfiniBand EDR × 8
搭載セット数	4
総容量	
物理容量	40.32 PB (Global Spareを除く)
実効容量	約30.44PB

- HDD RAID
- 大容量：30.44 PB （実効容量）
- 超高速アクセス性能：384 GB/s

コールドストレージの仕様と特徴

フェーズ1: 2020年7月1日より稼働開始

機種名	PetaSite Library
総スロット数 （最大搭載可能カートリッジ数）	88巻
総物理容量 / 最大搭載可能容量	484 TB / 484 TB
総ドライブ数	6
ODAサーバ数	1

フェーズ2: 2021年2月1日より稼働開始予定

機種名	PetaSite拡張型 Library
総スロット数 (最大搭載可能カートリッジ数)	1,980巻
総物理容量 / 最大搭載可能容量	6 PB / 10.89 PB
総ドライブ数	20
ODAサーバ数	4

- １度書き込み（追記）のみの光ディスクストレージ
- 実験データ等の長期データ保存用
- 理論上100年データ保持可能
- 水にぬれても読み出せる
- サービス終了後ユーザに光ディスクを返却

その他の構成要素

- フロントエンドシステム（ログインノード群）
  - 合計25ノード
  - Type I用も含めて全てXeon Gold 6248(Cascade Lake)×2、一部にTesla V100(PCIe)搭載
- オンサイト利用装置・画像処理装置
  - センター内の利用者支援室・可視化室に設置、訪問者が利用できる機器
  - SINETやIBでシステムに接続、持ち込みUSB機器（ハードディスク）を利用してデータの出し入れが可能
  - 画像処理装置はSINET(10G)と可視化設備に接続
  - オンサイト利用装置はコールドストレージ単体ディスクドライブを装備

運用形態

- **TypeI～TypeIII、クラウドの４サブシステムは１つの申込で利用可能、かつ、共有ファイルシステム（ホットストレージ）で連結**⇒シームレスなデータ移動
- Type I, IIサブシステムは完全にバッチ処理運用
- Type IIIサブシステムはノード毎に別の運用形態
  - 1ノードはバッチ処理運用
  - 1ノードは可視化室の機器に接続
    - 可視化室で直接操作、SSH接続、NICE DCVによるリモートデスクトップ接続
- クラウドシステム
  - 一部ノードはバッチ処理運用、一部ノードはUNCAIによる時刻指定利用
    - 利用状況にあわせて割合を調整していく予定
- コールドストレージ
  - 専用ログインノードから専用コマンドで操作、ホットストレージとのデータコピーが可能
- バッチ処理システム運用上の工夫
  - ノード共有（1/4ノード）キュー、優先キュー（消費係数2倍）、インタラクティブキュー、節電時の縮退運用時には止まるextraキュー

利用制度・課金制度の特徴

- 課金制度の特徴
  - 前払い、システム共通の利用ポイント制度
    - 購入した利用ポイントを全システムで利用できる、消費係数がシステムごとに異なる
    - 初期費用は1ユーザ10,000円　※登録料という扱いだが利用ポイントに変換される
    - 一度に50万円以上購入すると1.25倍のポイントになる
  - 優先キュー：ポイント消費2倍で投げられるキュー
    - 旧システム運用後半は優先キューすら混む事態
  - ログインノードの利用も課金対象、ストレージは一定量を超えたら課金対象
- 「不老」の利用制度
  - 基本的には従来の制度を継承、いくつかの新制度を導入
  - グループ利用：20アカウントまでで1グループ、グループ内のポイント融通が可能
  - 準占有制度：1時間以内の実行を保証、空き時間はdebugキューで活用
  - クラウドノード予約利用：Web（UNCAI）で予約を行い実行時間帯を確定させての利用
    - 自動的にバッチが起動する時刻指定バッチジョブと
      sshでログインして利用する時刻指定インタラクティブ実行

ベンチマーク結果

スーパーコンピュータ「不老」ベンチマーク結果

ベンチマーク名	性能	旧システムからの速度向上
TOP500（HPL） 連立一次方程式の求解	**6.617 PFLOPS** **(世界 36位)（国内5位）** **(2020年6月Type Ⅰ サブシステム)**	2.27倍 2.910 PFLOPS (FX100)
HPCG 産業利用で多い疎行列反復解法	**0.231 PFLOPS** **(世界 16位)（国内4位）** **(2020年6月Type Ⅰ サブシステム)**	2.65倍 0.087 PFLOPS (FX100)
GKVカーネルベンチ 名大独自開発のプラズマ シミュレーションベンチマーク	0.258 [秒] (kernel2_intgrl) Type Ⅰ サブシステム	**9.16倍** 2.36[秒](FX100)
Modylas 分子動力学ソフトウェア	20.72 [秒] Type Ⅰ サブシステム	2.99倍 61.9[秒] (FX100)
VOLR ボリュームレンダリング	1.29 [秒] TypeⅢサブシステム	**9.79倍** 12.6[秒](UV2000)

大島聡史准教授提供

各種ベンチマークによる性能評価

- FX1000、Cascade Lake、V100それぞれの性能自体は既知の部分が多いため、同じ問題を各サブシステムで実行した場合の性能など、「不老」ならではの比較結果を紹介する
- 主要ベンチマーク
  - Stream, HPL, HPCG
- 通信性能
  - OSU Micro-Benchmarks
- ストレージ
  - 自作の単純なテストプログラム

コンパイラなど（特に断りのない限り）
- Type Iサブシステム：TCS 1.2.26
- Type IIサブシステム：Intel 2019.5.281, CUDA 10.2, PGI 20.4
- クラウドシステム：Intel 2019.5.281

Type IIのPCIe/NUMA構成は先に示したとおり
（「片寄せ」で「SNC無効」）

主要ベンチマーク性能：

大島聡史准教授提供

Stream Triad (N=20,000,000)

- A64FXのHBM2の速さが良くわかる結果
- 4CPUのクラウドシステムは2CPUのType IIの倍は出ない

- Type Iサブシステム
  - 1ノード：826 GB/s
    - コンパイル時オプション -Kfast,openmp,zfill
    - 実行時環境変数 XOS_MMM_L_PAGING_POLICY=demand:demand:demand
    - 特にzfillとdemand設定が大きく影響、CとFortranの差はなし
- Type IIサブシステム
  - 1ノード 2CPU：202 GB/s　(-xHost -qopenmp -qopt-zmm-usage=high)
    - -qopt-streaming-stores は
      変更しても向上せず（デフォルトはauto）
  - 1ノード 1GPU：777 GB/s
    ※streamベンチコードにOpenACC指示文を入れて測定
- クラウドシステム
  - 1ノード 4CPU：338 GB/s　（〃）

主要ベンチマーク性能：

大島聡史准教授提供

HPL

- GPUの性能の高さと
  A64FXの効率の良さがよくわかる結果

- Type Iサブシステム
  - 1ノード：2.4849 TFLOPS： 2.4849/3.3792=73.5%
  - 全系：6.6178 PFLOPS： 6.6178/7.782=85.0%
    - TOP500 2020年6月版で世界36位・国内5位（「富岳」、ABCI、OFP、TSUBAME3.0の次）
    - メモリサイズが小さめ＝大きな問題を解けないため1ノードの効率は控えめ、
      大規模では高効率
- Type IIサブシステム（GPU利用）
  - 1ノード：24.440 TFLOPS： 24.440/33.888=72.1%
  - 全系：4.880 PFLOPS（測定時期の都合でTOP500未登録、〃51位相当）：
    4.880/7.489=65.2%
- クラウドシステム
  - 1ノード：3.25 TFLOPS：3.250/5.376=60.5%
  - Type I, II は富士通による最適化・測定
  - クラウドはIntelコンパイラ2019.5.281（のMKL）に
    付属のmp_linpack

主要ベンチマーク性能：

大島聡史准教授提供

HPCG

- HPL同様に、GPUの性能の高さとA64FXの効率の良さがよくわかる結果

- Type Iサブシステム
  - 1ノード：105.956 GFLOPS： 105.956/3379.2=3.14%
  - 全系：230.594 TFLOPS： 230.594/7782=2.96%
    - HPCG 2020年6月版で世界16位・国内4位、「不老」以上の性能で2%以上は「富岳」の2.6%のみ
    - 富士通による最適化・測定
- Type IIサブシステム（GPU利用）
  - 1ノード：550.6 GFLOPS： 550.6/33888=1.62%
  - 100ノード：48.2544 TFLOPS： 48.2544/33888=1.42%
    - 全系では100 TFLOPS程度か？
    - HPCG Webサイトにて配布されているHPCG3.1バイナリ(2019.12.05版)で測定、60秒試行
- クラウドシステム
  - 1ノード 1CPU（1MPIプロセス）：16.6079 GFLOPS： 16.6079/1344=1.24%
  - 1ノード 4CPU（4MPIプロセス）：61.7766 GFLOPS： 61.7766/5376=1.15%
    - Intelコンパイラ2019.5.281（のMKL）に付属のベンチマークにて測定、60秒試行

通信性能比較：
OSU Micro-Benchmarks

測定項目

- Type IとType IIの通信性能比較
  - latency
  - allreduce, alltoall
  - 今回はCPU間通信のみ
  - TypeIのノード割り当てポリシー：
    mesh と torus
  - Type IIのMPIの違い：
    Intel MPI と OpenMPI

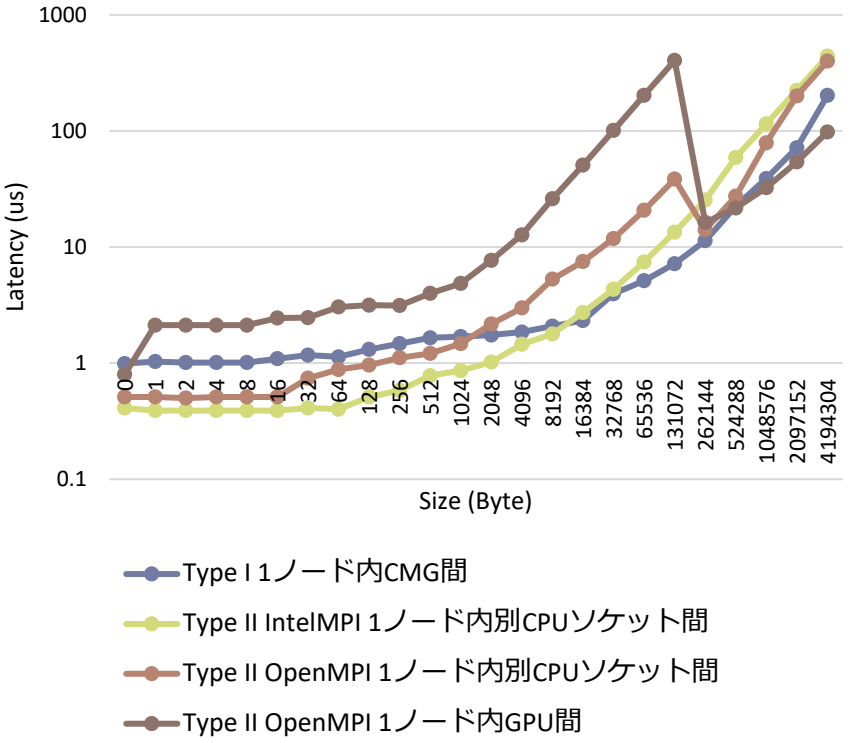
通信性能比較：

大島聡史准教授提供

OSU Micro-Benchmarks：latency

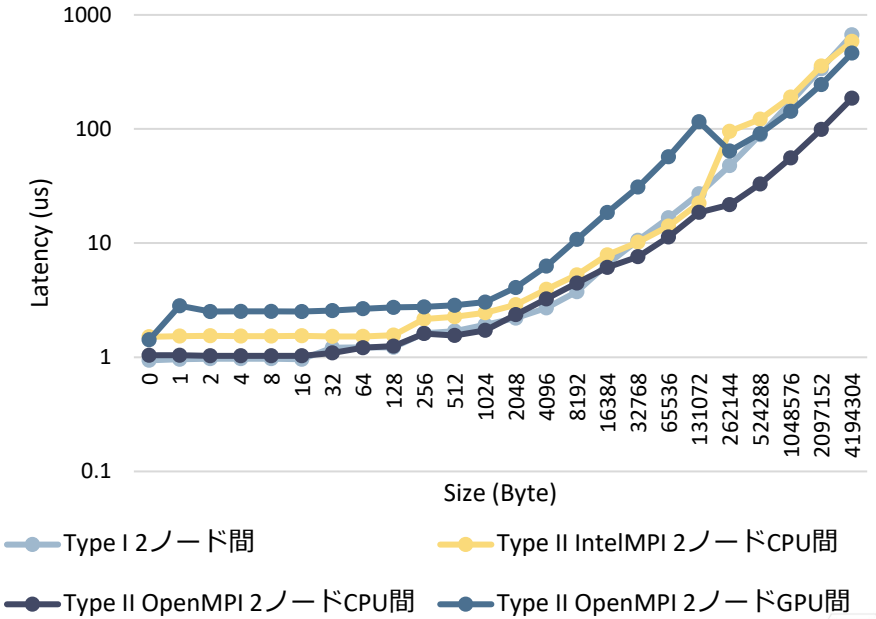
●ノード内

- サイズ小
  - Type IIのCPUソケット間（特にOpenMPI） が速い
- サイズ大
  - Type IのCMG間が速い、TypeIIの GPU間も速い



●ノード間

- Type IIのOpenMPIが速い
- Type Iもサイズ小では速いが、サイズ大はやや遅い
- GPU間は他より遅い

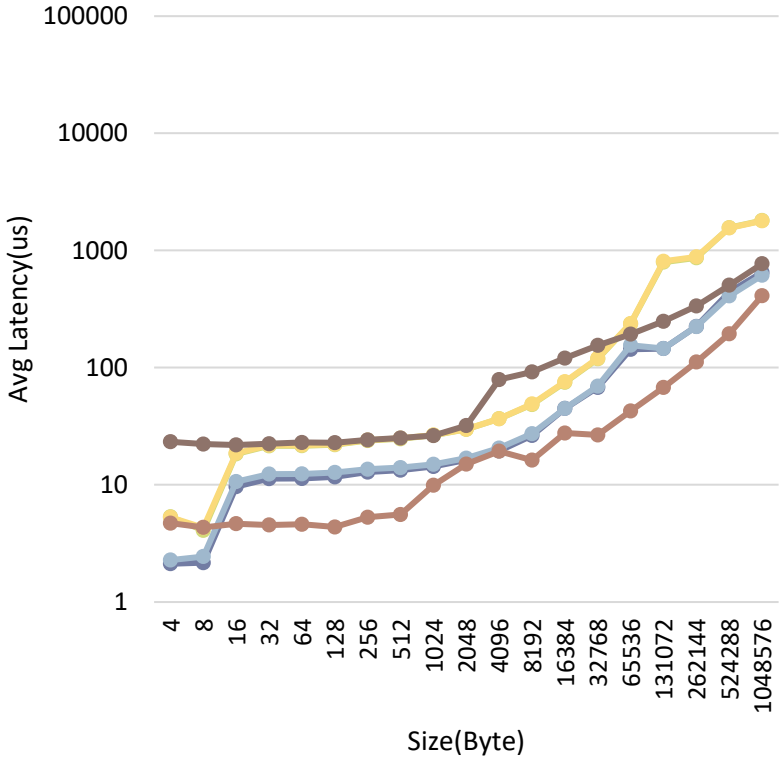


通信性能比較：

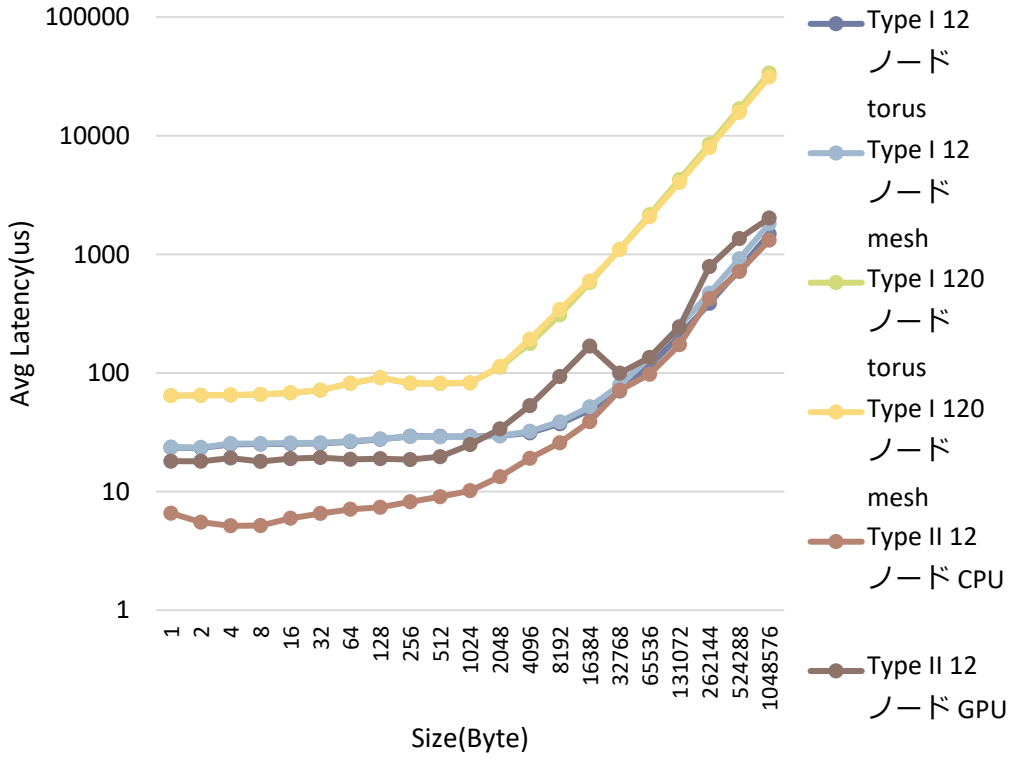
大島聡史准教授提供

OSU Micro-Benchmarks：allreduce, alltoall

● allreduce



● alltoall



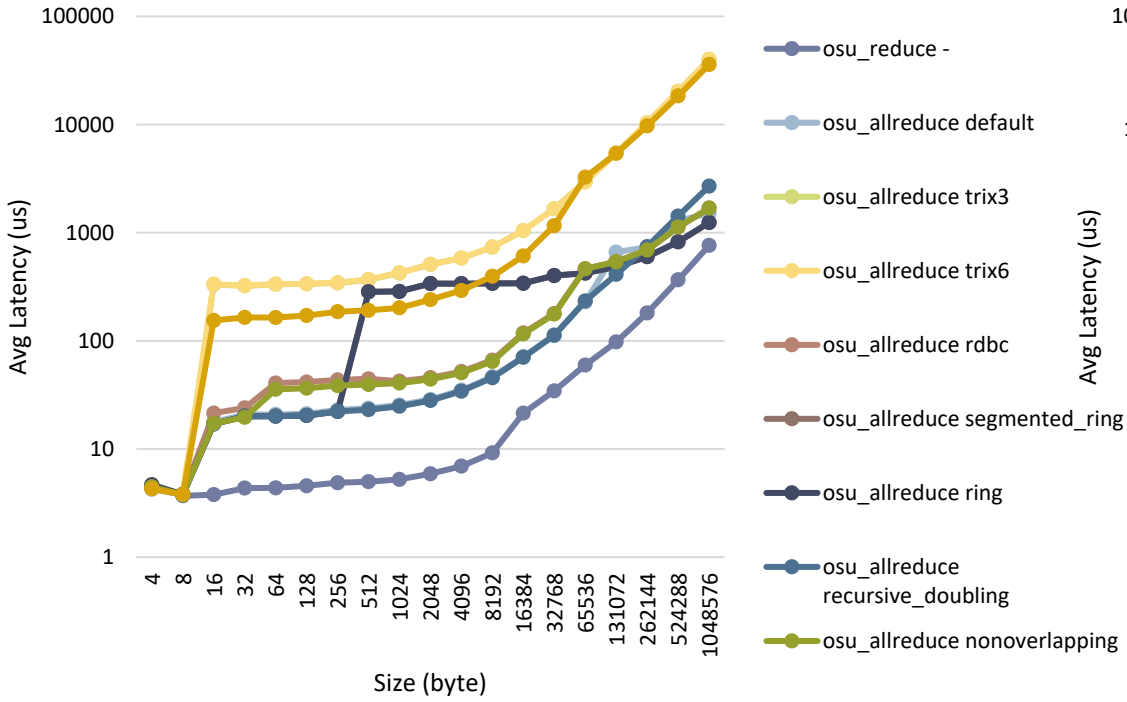
- 全体的にはType IIの方が低レイテンシの傾向
- Type Iについてはより多くのノードでも実験するべきであったか

- GPU to GPUの通信性能はパラメタ等精査中……

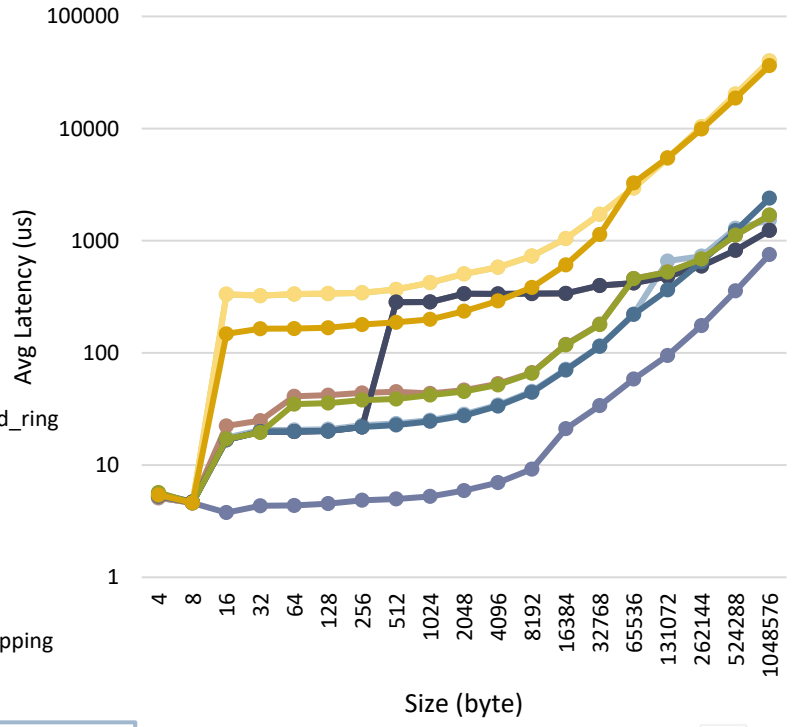
Type IのallreduceアルゴリズムTuning：96ノード（Type Ⅰ）

大島聡史准教授提供

● 96nodes:　torus



● 96nodes:　mesh

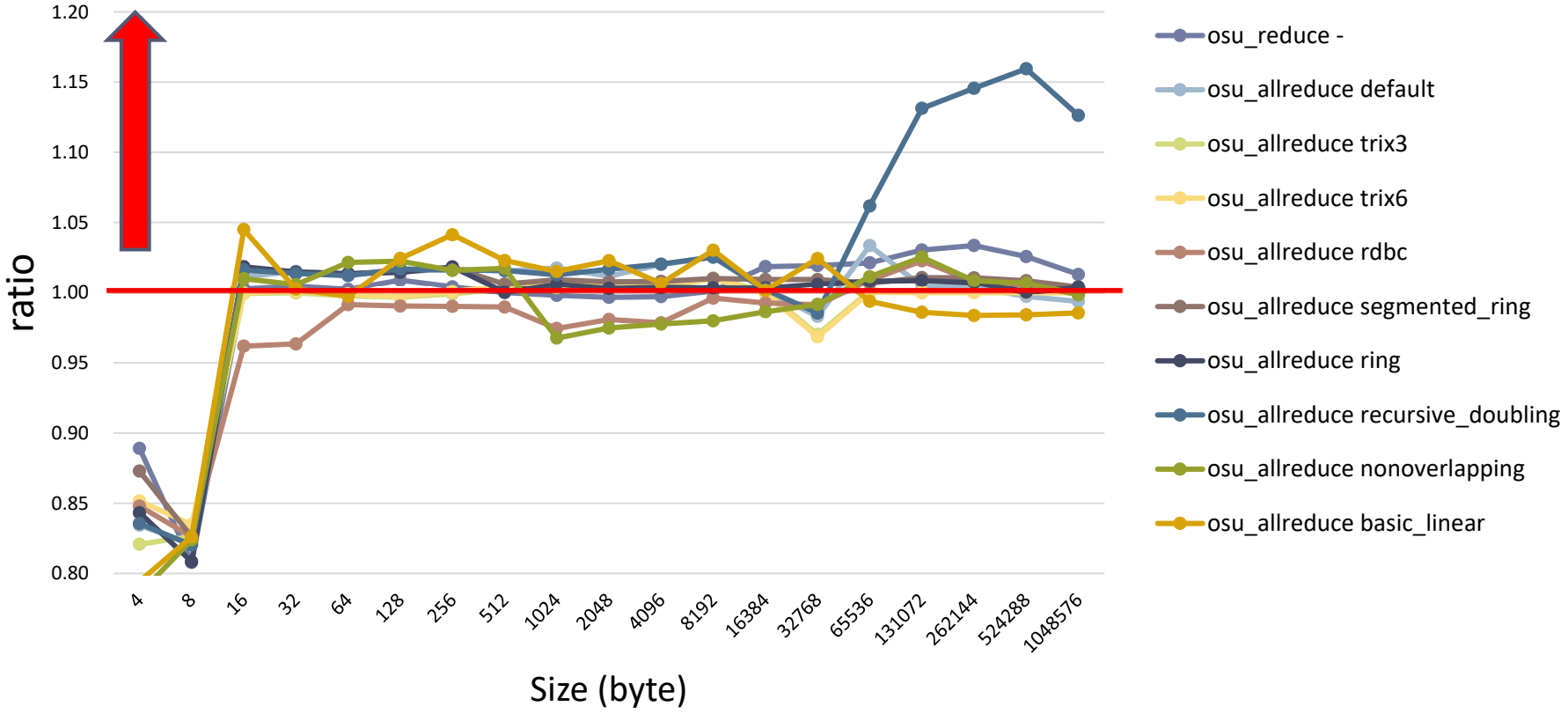


- デフォルト（未指定）でほぼ最速、ただし128KBが若干遅い

Type IのallreduceアルゴリズムTorus 対 mesh（Type Ⅰ）

meshが高速　　96nodes, torus/mesh

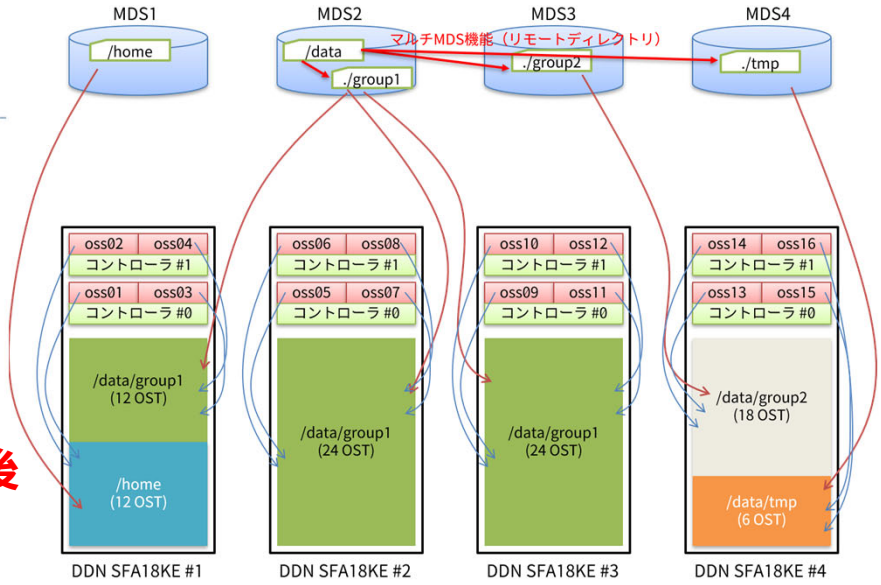
大島聡史准教授提供



- 4Byte, 8Byteはtorusの方が明らかに高速、16byte以上ではあまり変わらない（±5%）
- recursive_doublingだけはサイズが大きな時にmeshが高速

ストレージ性能：
IOR（運用時性能）

大島聡史准教授提供



- IORベンチマーク性能
  - 一般的なバッチジョブで利用が推奨されている/data/group1に対してType Iサブシステムから読み書き
    - **File Per ProcessでR/Wともに100GB/s前後**
    - **Single Shared FileでR/Wともに80GB/s強**

		File Per Process 性能		Single Shared File 性能	
操作対象	OST	write 平均値	read 平均値	write 平均値	read 平均値
ディレクトリ	クライアント数	[MiB/sec]	[MiB/sec]	[MiB/sec]	[MiB/sec]
/data/group1	576	93130.36	106612.15	84112.94	83286.16
/data/group2	288	33770.22	38685.99	32984.10	36369.85
/home	144	17928.59	22037.02		
/data/tmp	144	12697.28	13242.41		
		write+read 合計値	169052.000	write+read 合計値	118381.525

ストレージ性能：
自作のテストプログラム

大島聡史准教授提供

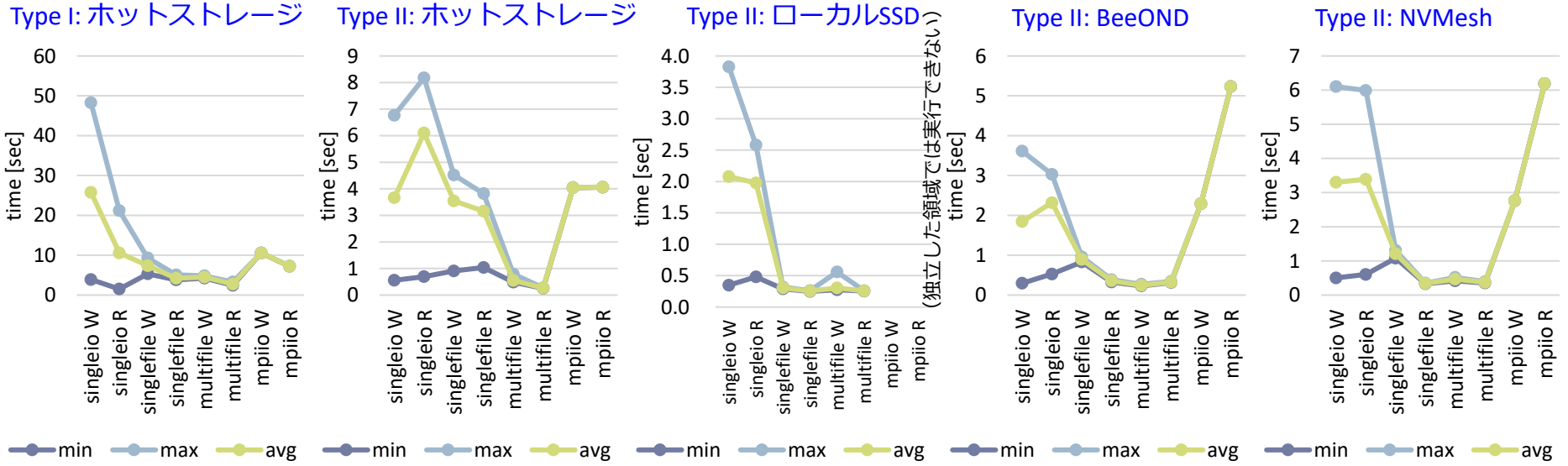
- 実際の使い方を想定したテストプログラムを作成し運用中に測定
- プログラム内容（いずれもファイルのopen/close時間を含む）
  1. **singleio**：マスタープロセスのみがファイル操作、配付と集約はMPI通信
     - ノード数が増えた場合に全プロセス分を持てないことを想定し、逐次的に1対1通信
  2. **singlefile**：全プロセスがfread/fwriteで1ファイルを読み書き
  3. **multifile**：全プロセスが個別の1ファイルをfread/fwrite
  4. **mpiio**：MPI-IOで1ファイルを読み書き（MPI_File_set_view, MPI_File_write/read_all)
- 問題設定（プロセス数と容量）
  - 12プロセス、1プロセス/1ノード
    （Tofu-Dを考慮（12:mesh）、比較のためType IIも12ノード）
  - {1M,10M,100M,1G}elements/processで測定、今回は100M版を提示（10M以上は同様の傾向）
  - データ型は全てdouble型（8byte）
    - 100M elements/processはプロセス当たり800MB、1秒で終了すれば9600MB/sec相当
- **githubに公開してあるため興味がある人はご自由にお試しください**
  - **https://github.com/exthnet/iotest**

テスト結果：12ノード、1プロセス/1ノード、プロセスあたり100M要素

大島聡史准教授提供

一発測定、 min, max, avgは12ノード中のmin, max, avg

※1秒=9600MB/sec



- multifileが良い性能：max値（R/W）を比較すると、左から順に
  W/R = 4.82/3.27, 0.79/0.28, 0.56/0.26, 0.27/0.34, 0.52/0.39
  - 実はType IがType IIよりかなり遅い、ただしホットストレージは計算ノードとストレージ両方の負荷の影響を受けるため測定タイミングの影響もあるかもしれない？
- mpiioの性能が今ひとつ、特にBeeOND・NVMeshが遅い
- SSDによる劇的な性能向上は観測できていないが、singlefileでも高性能、他のジョブの影響も受けない利点有。

アプリケーション性能

スーパーコンピュータ「不老」で動かすアプリケーション例

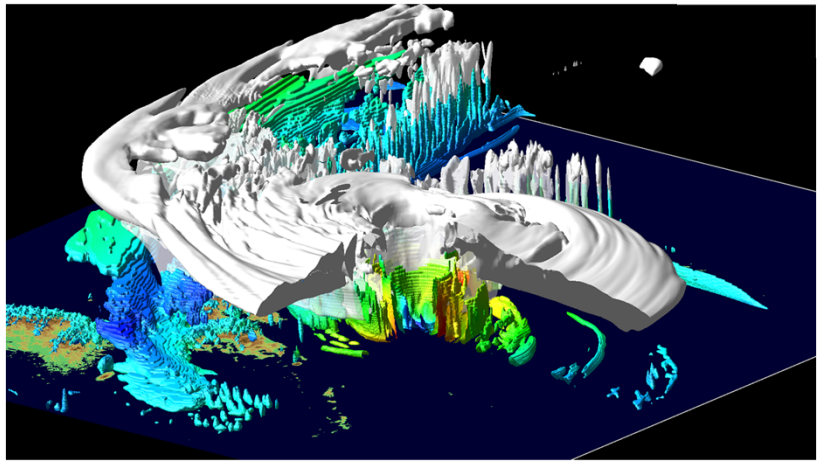
- 名大 坪木和久教授研究室 (Type I)
  - スーパー台風解析 (雲解像モデル CReSS)
- 立教大 望月祐志教授研究室 (Type I)
  - COVID-19解析、フラグメント分子軌道計算（ABINIT-MP）
  - 理研R-CCS: 新型コロナウイルス対策を目的としたスーパーコンピュータ「富岳」の優先的な試行的利用採択課題
- 名大 森健策教授研究室 (Type II GPU大規模AI計算)
  - AIによる医用画像診断支援技術
- 名工大 本谷秀堅教授研究室 (Type I 大規模GPU計算)
  - 医用画像処理 LDDMM
- 名大 渡邉智彦教授研究室 (Type I)
  - プラズマシミュレーションGKV
- 名大 高橋一郎 技術職員 (Type III)
  - 可視化ツール VisPlus
  - コールドストレージ操作ツールODAPLUS

実施済み
アプリケーション

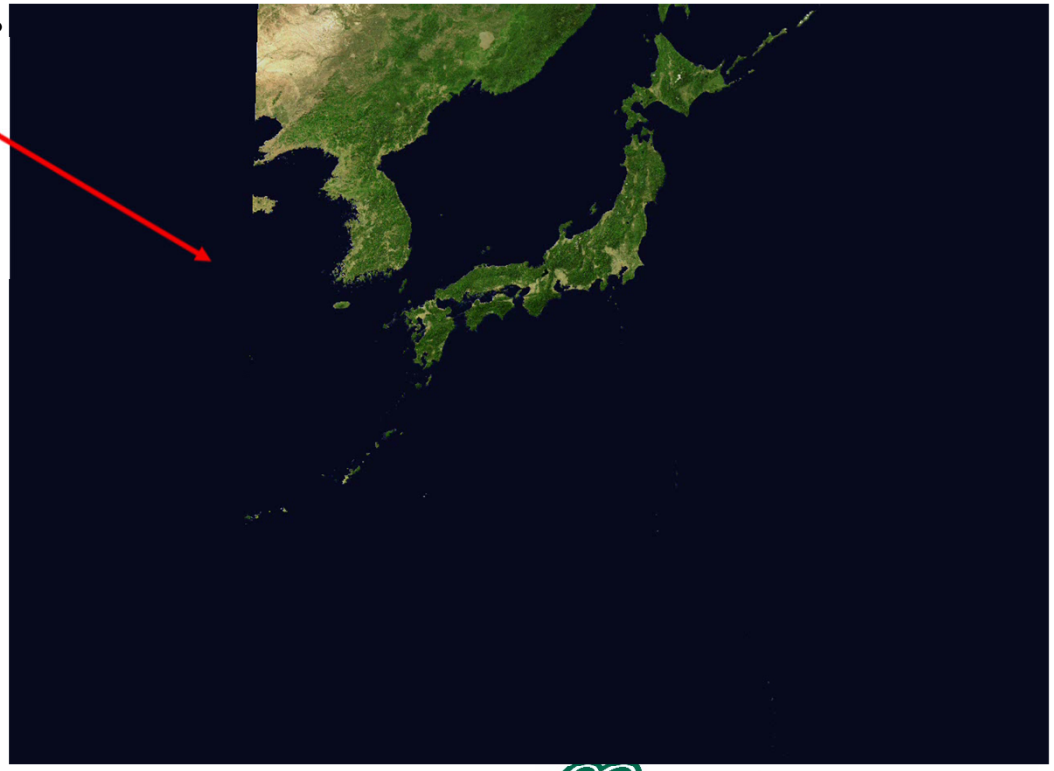
スーパー台風のメカニズム解析

（坪木和久教授提供）

- **名古屋大学 坪木和久教授 開発による 雲解像モデルCReSS**
  (Cloud Resolving Storm Simulator)によるシミュレーション
- **未来の台風（2076年09月に発生）**に伴う雲を立体的表示
  この台風は太平洋上を北上し、日本に上陸する直前でも中心気圧880 hPa以下を維持。
  台風が太平洋上にあるとき、中心気圧870～860 hPa、最大地上風速70～80 m/sを4日間維持し、
  ほぼその強度のまま関東地方に上陸する。



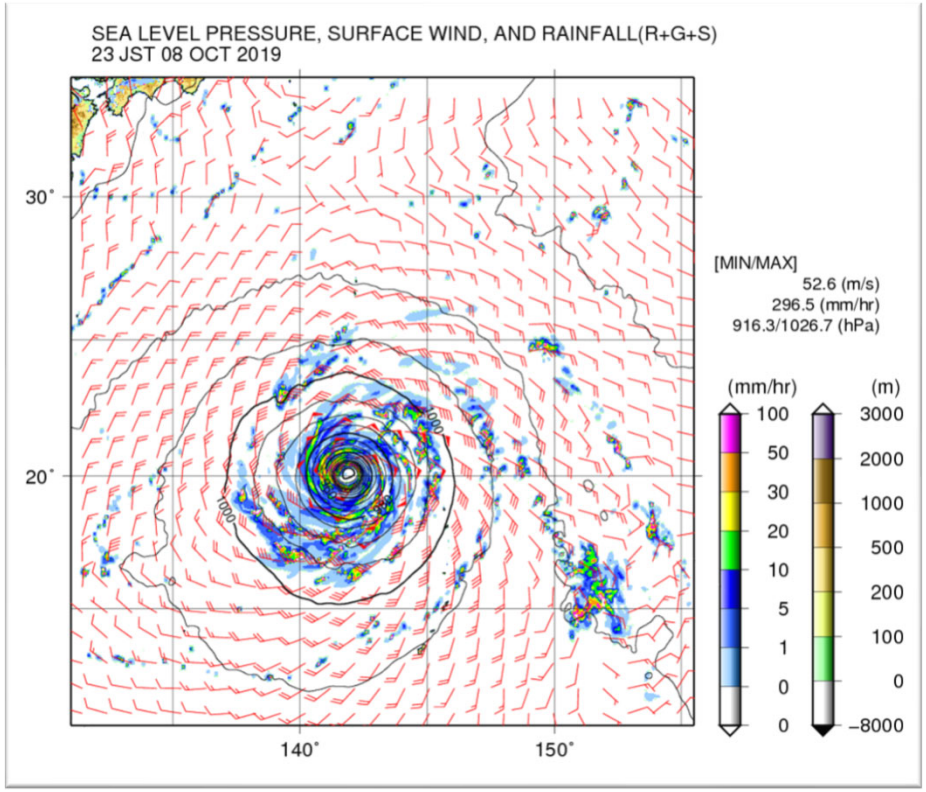
伊勢湾台風のシミュレーション結果

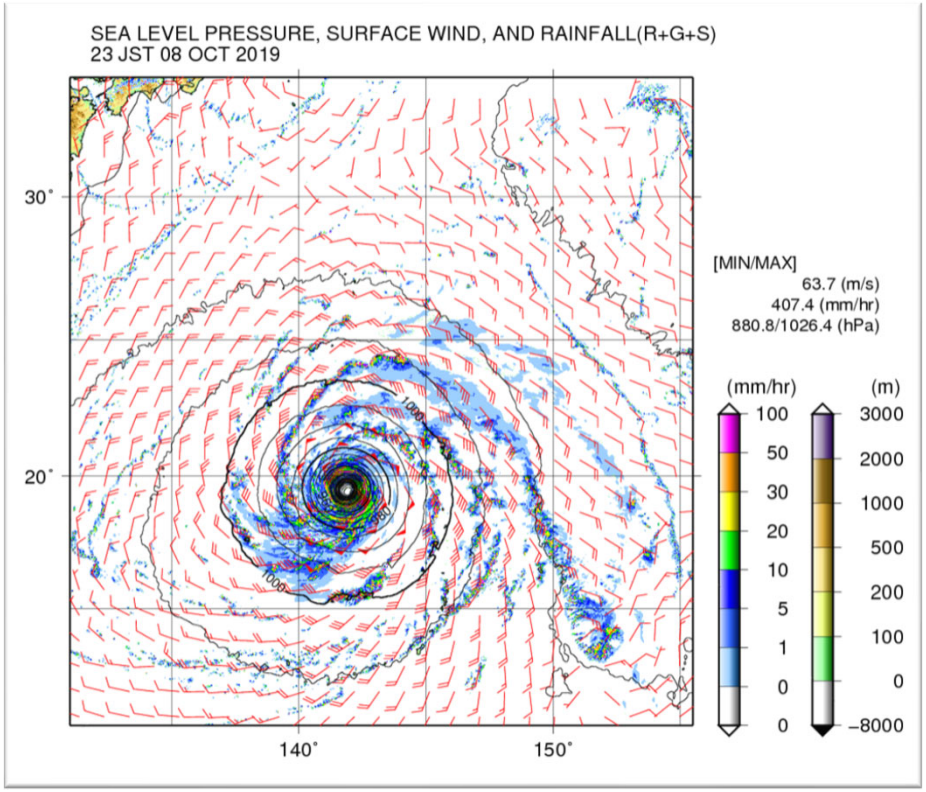


台風のメカニズム解析
：スーパーコンピュータ「不老」でのターゲット

- 旧システム（FX100）
  - 水平間隔 2 km 格子、東西・南北それぞれ1000～2000格子、
    鉛直は地上から上空約20 km まで 100層、
    積分時間数日程度の計算
  - 数日の実行時間を必要
- スーパーコンピュータ「不老」によって
  - より細かく短時間に
  - 水平1 kmあるいは 500 m 、かつより広い領域で、
    台風の急発達のメカニズムや詳細な構造が明らかになる
  - 数100 m 格子でより詳細な地形を考慮した
    シミュレーションにより豪雨の詳細な構造を明らかにし、
    豪雨に伴う被害の詳細な予測が可能に

台風のメカニズム解析
：スーパーコンピュータ「不老」での計算結果





従来：水平格子間隔約2.5km

水平格子間隔約1.0km

スーパーコンピュータ「不老」で計算

1600ノード、24時間程度
現在計算中・結果検証中

医用画像処理　名工大　本谷秀堅　教授

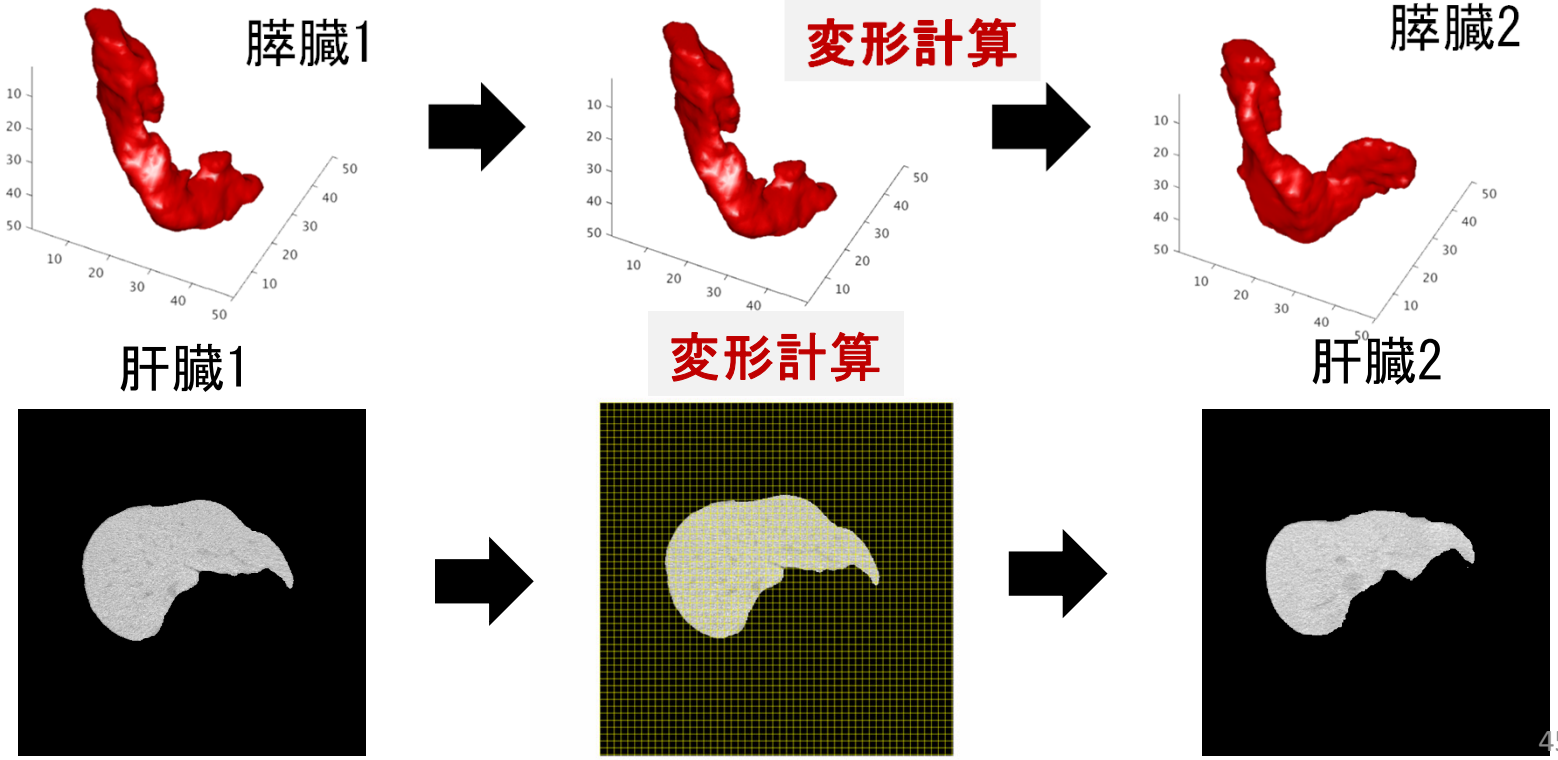
人の臓器形状の滑らかな補間のための高速計算

- 人工知能の学習には多数のデータが必要
- 人の臓器の形のサンプルを多数揃えるのは大変

大量データ/大規模計算
→スパコンで高速化

形の違う臓器二つの間を自然に**高速変形**させることで学習データを多数獲得

→病気の自動診断システム開発へ

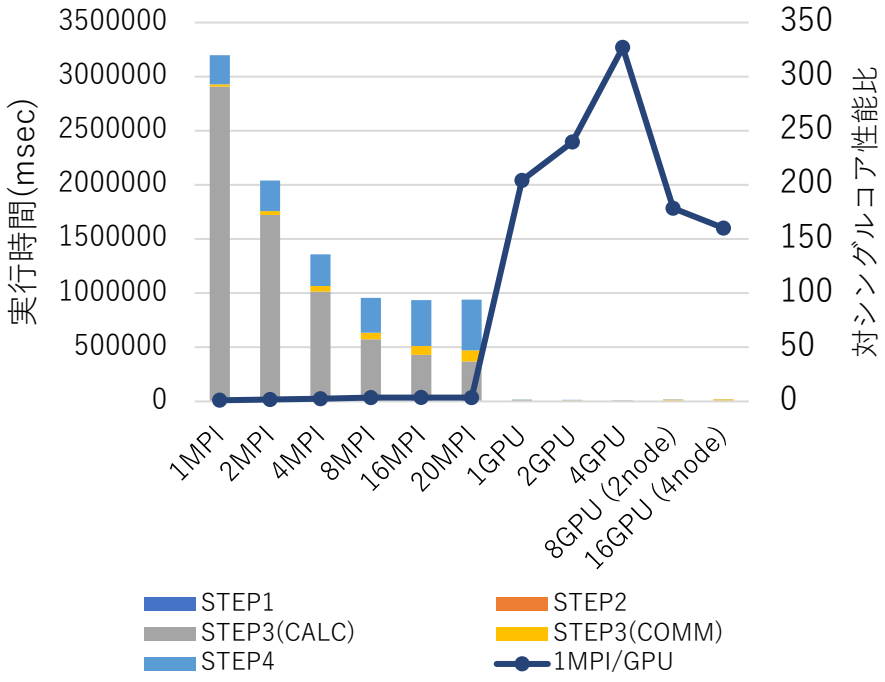


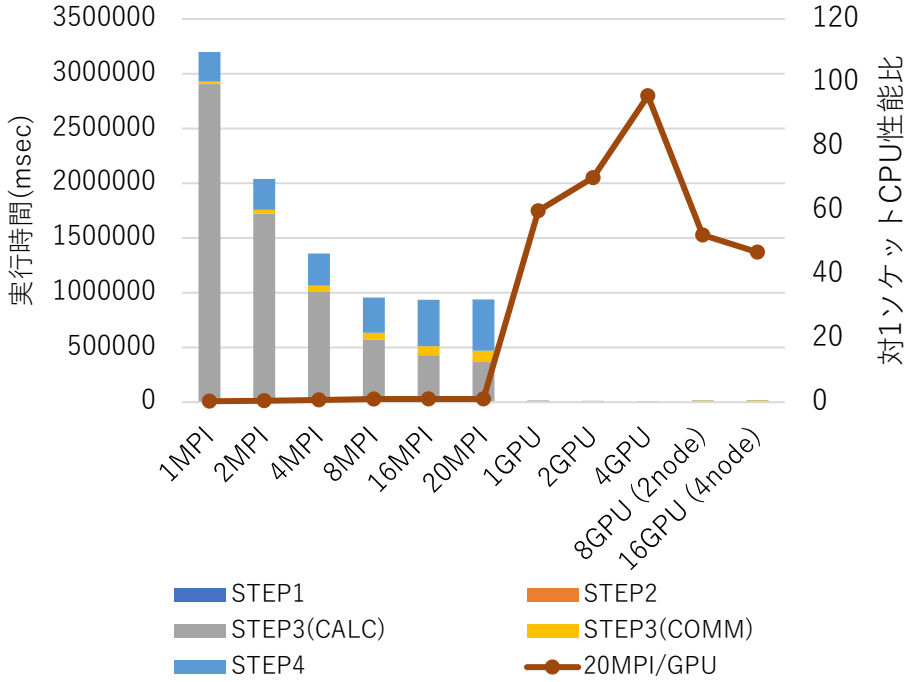
（本谷秀堅教授提供）

医用画像処理　名工大　本谷秀堅　教授

スーパーコンピュータ「不老」TypeⅡサブシステム（GPU）

- 大変形微分同相写像（Large Deformation Diffeomorphic Metric Mapping,LDDMM)法によるプログラム（本谷研究室開発）
- プログラムをGPU化（OpenACC）





- CPUシングルコアに対し：326倍
- CPU（1ソケット）に対し：96倍

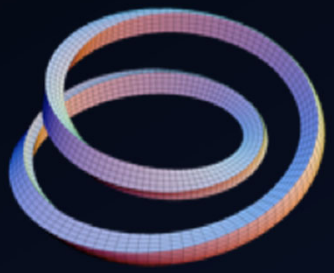
核融合プラズマ乱流コードGKVの概要

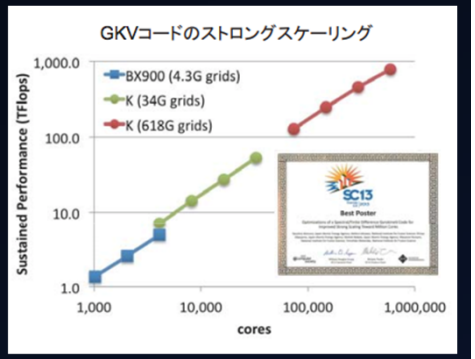
GyroKinetic Vlasov code

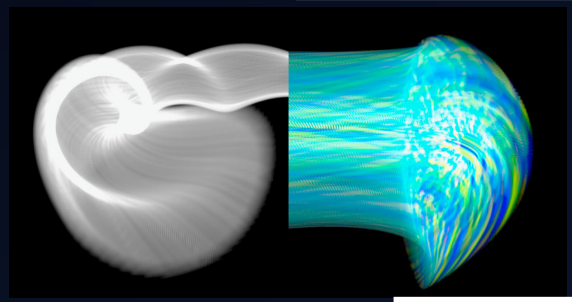
- ジャイロ運動論モデルに基づく核融合炉心プラズマ乱流の第一原理シミュレーション
- 5次元位相空間上の移流・拡散
  - MPI/OpenMPハイブリッド並列
  - FFTスペクトル法(x, y)+差分法$(z, v_{\parallel}, \mu)$
  - 時間積分：陽的ルンゲクッタ法+陰解法衝突項
- フラックスチューブ配位による局所乱流の高精度・高解像度計算
  - 電子・イオン系マルチスケール乱流
  - 多粒子種プラズマ乱流

開発者：
Tomo-Hiko Watanabe (Nagoya Univ.)
Shinya Maeyama (Nagoya Univ.)
Masanori Nunami (NIFS)
Motoki Nakata (NIFS)
Akihiro Ishizawa (Kyoto Univ.)
Yuuichi Asahi (JAEA)

Flux tube







スーパーコンピュータ「不老」Type I サブシステム全系（2304ノード（11万コア））ベンチマーク

スーパーコンピュータ「富岳」想定規模：格子点数：2048*2048*48*96*48*3=1.3×10^12、
MPI並列数：16*4*8*6*3=9216 = (2304ノード×4MPI / ノード)、OpenMP並列数: 12

本研究の一部は，文部科学省「富岳」成果創出加速プログラム「核燃焼プラズマ閉じ込め物理の開拓」の一環として実施したものです。

GKVフルアプリ結果（その１）

- スーパーコンピュータ「不老」Type I サブシステム（富岳型ノード）
  - 288ノードジョブ（13,824コア）
  - 理論性能：973 TFLOPS
- **演算効率：6.78%（ 66.06 TFLOPS ）**

- 問題サイズ
  - 512 * 256 * 48 * 96 * 48 * 3 = 8.7×10^{10} 格子点
  - 2 * 4 * 8 * 6 * 3 = 1,152 MPI (= 288node * 4MPI/node)
- ラージページ指定効果
  - export XOS_MMM_L_PAGING_POLICY=demand:demand:demand
  - 適用前：77.66 [秒] → 適用後：75.44 [秒] （2.9%高速化）

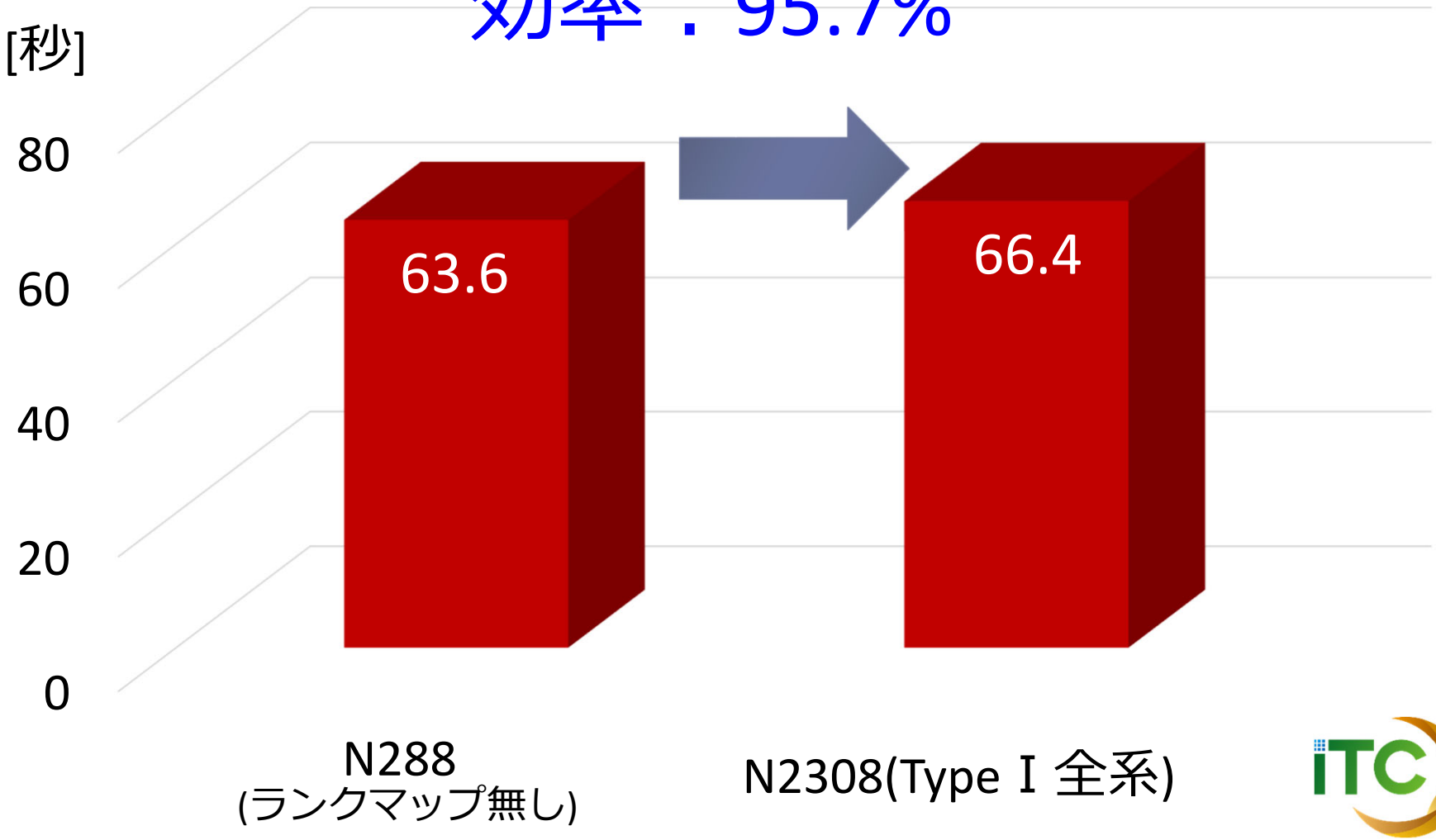
GKVフルアプリ結果（その２）

- スーパーコンピュータ「不老」
  Type I サブシステム（富岳型ノード）
  - 全系ジョブ
  - 2304ノードジョブ（110,592コア）
  - 理論性能：7.782 PFLOPS
- **演算効率：6.67%（519 TFLOPS）**
  - ランクマップなし：76.7[秒] → あり：66.4[秒] (15.5%高速化)

- 問題サイズ
  - 1024 * 1024 * 48 * 96 * 48 * 3 = 7.0×10^{11} 格子点
  - 16 * 4 * 8 * 6 * 3 = 9,216 MPI (= 2,304 node * 4MPI/node)

GKVフルアプリ
弱スケーリング結果

効率：95.7%



GKVフルアプリ
ランクマップの効果（２３０４ノード）

- ランクマップなし

MPI	%	Communication (s)	Start	End		
847695	1.1740	84764.0938	--	--	Application	
847672	1.1739	84761.7969	976	1032	gkv_bndry.bndry_zv_sendrecv_	

- ランクマップあり

MPI	%	Communication (s)	Start	End		
472885	0.7353	47284.8438	--	--	Application	
472847	0.7353	47281.0430	976	1032	gkv_bndry.bndry_zv_sendrecv_	

実施・開発予定アプリケーション

ABINIT-MP

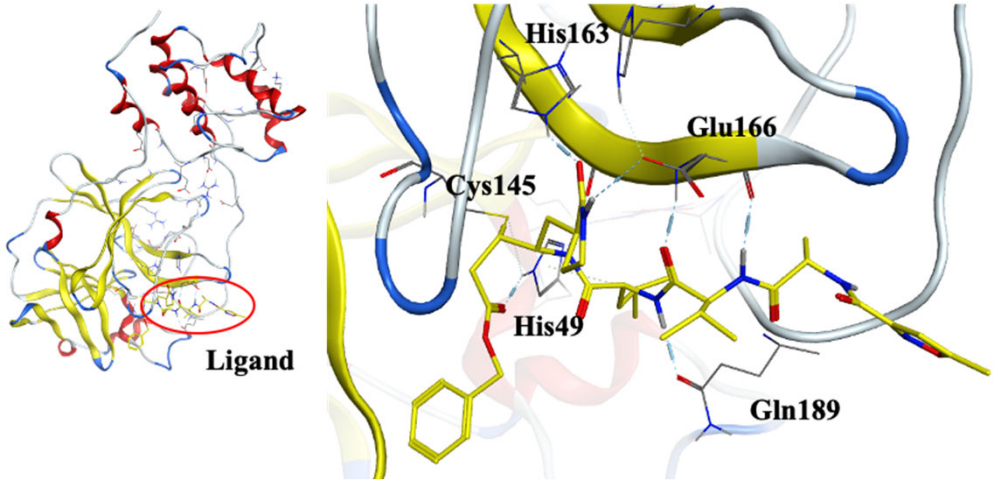
（望月祐志教授提供）

コロナウイルスのメインプロテアーゼとN3阻害剤の複合構造に関するフラグメント分子軌道計算

畑田崚, 奥脇弘次, ○望月祐志（立教大学）, 福澤薫 （星薬科大学）
古明地勇人（産業技術総合研究所）, 沖山佳生（国立医薬品食品衛生研究所）,
田中成典（神戸大学院）

●SARS-CoV-2 メインプロテアーゼとN3阻害剤の結晶構造

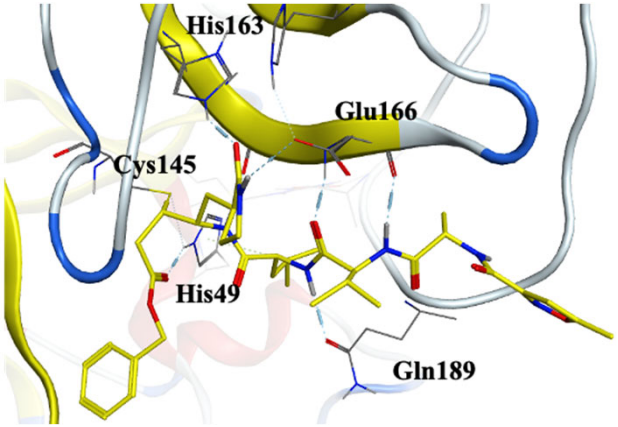
- 2020年2月に、Liuらによって SARS-CoV-2のメインプロテアーゼと、阻害能を有する化合物の複合体の結晶構造が発表された (PDB ID: 6LU7)



本研究では、フラグメント分子軌道法と6LU7結晶構造を用いてメインプロテアーゼ-N3阻害剤間の相互作用解析を行った

●研究内容はChemRxivで2020/3/17に公開 (https://bit.ly/3f67nlc)
●アメリカ化学会の専門誌に採録：Fragment molecular orbital based interaction analyses on COVID-19 main protease - inhibitor N3 complex (PDB ID:6LU7), J. Chem. Inf. Model. 2020, June 15, 2020 (https://doi.org/10.1021/acs.jcim.0c00283)

フラグメント分子軌道法を用いた相互作用解析



- **解析方法**

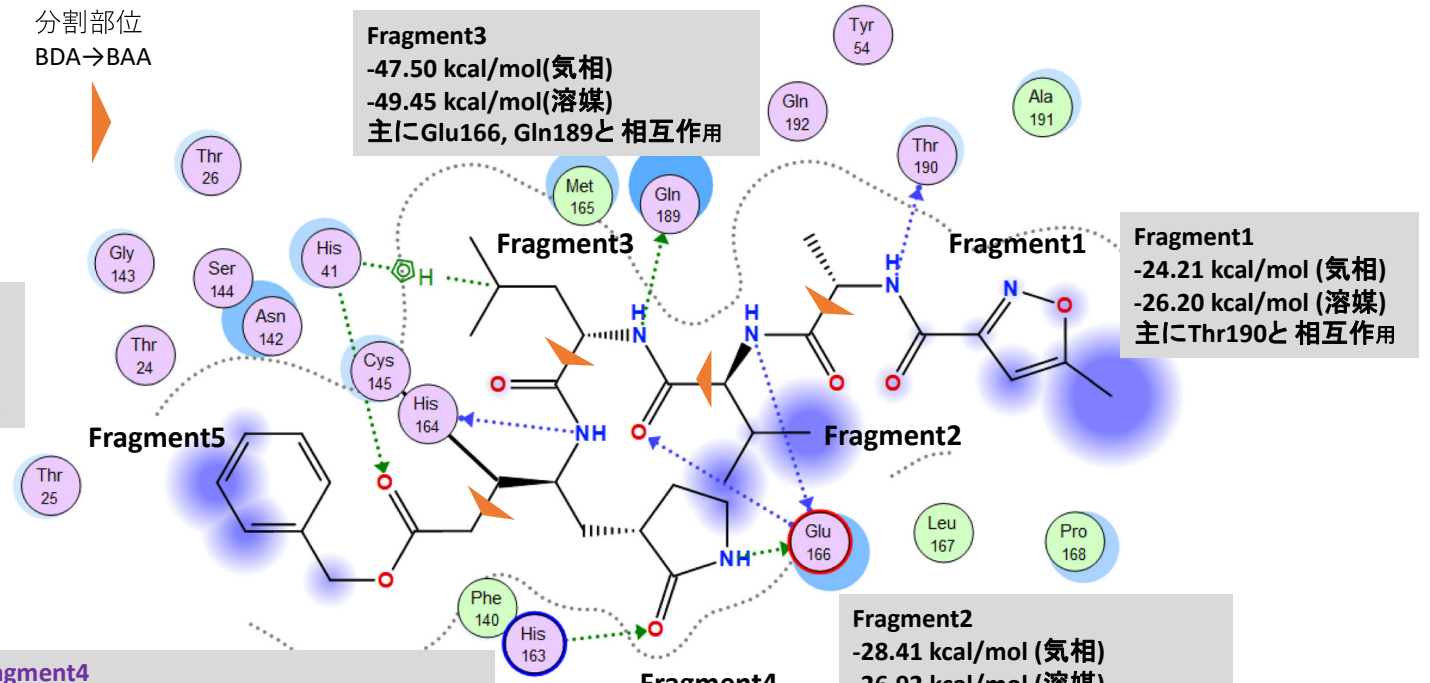
N3阻害剤を5つの部位に、
タンパク質をアミノ酸単位にフラグメント分割し、
フラグメント間の相互作用エネルギー(IFIE)を算出
気相条件・溶媒条件下で各々MP2/6-31G*レベルで計算

- **計算環境： ABINIT-MPプログラム @ 名大FX-100**

気相条件 : 128ノード（16スレッド - 256プロセス） 1.4時間
溶媒条件 : 192ノード（ 16スレッド - 384プロセス） 30.5時間

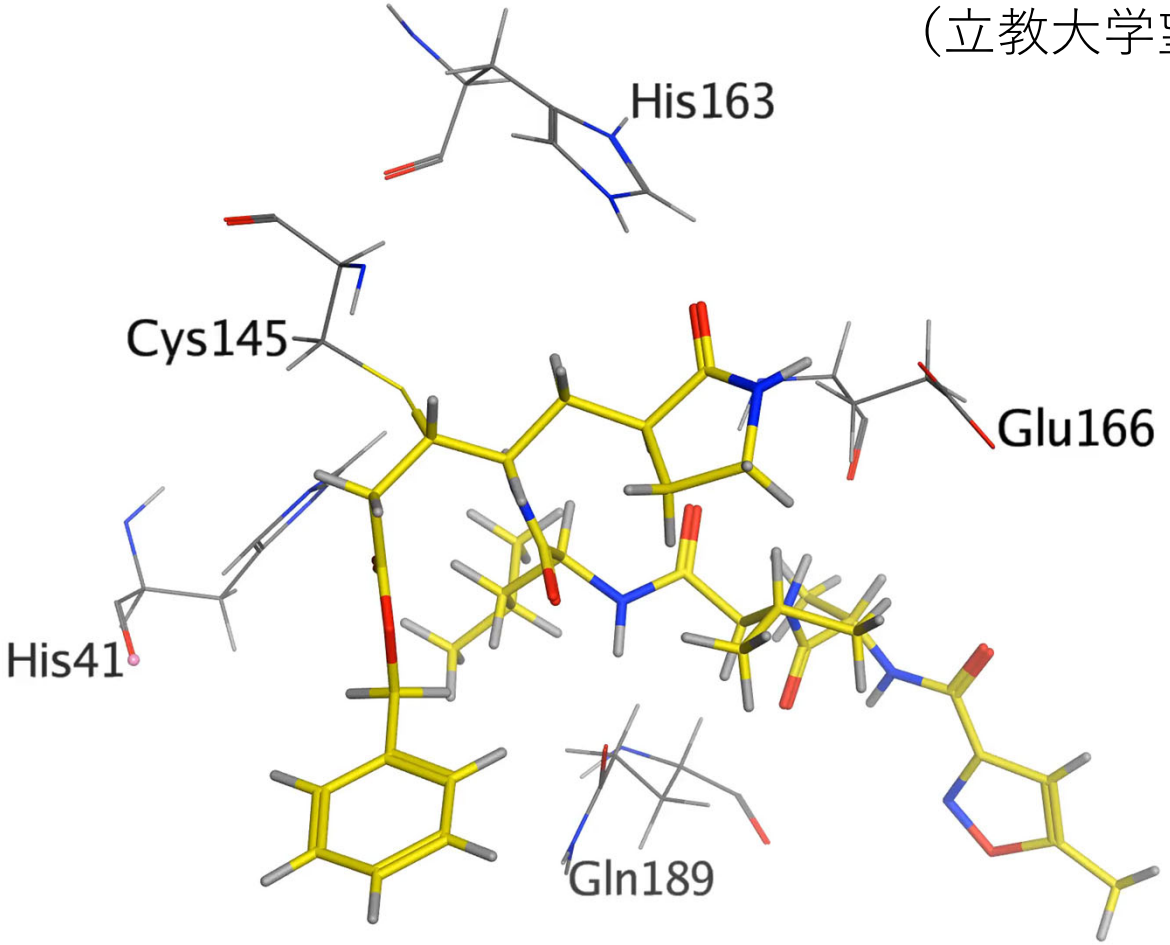
- **解析結果**

分割部位
BDA→BAA



新型コロナウイルスのメインプロテアーゼと結合した阻害剤N3の重要部位の構造ゆらぎ

（立教大学望月研究室提供）



スーパーコンピュータ「不老」で以下の研究開発を予定：

- **Type Ⅰサブシステム**：SIMD化強化等のコードチューニング
- **Type Ⅱサブシステム**：AI処理連携

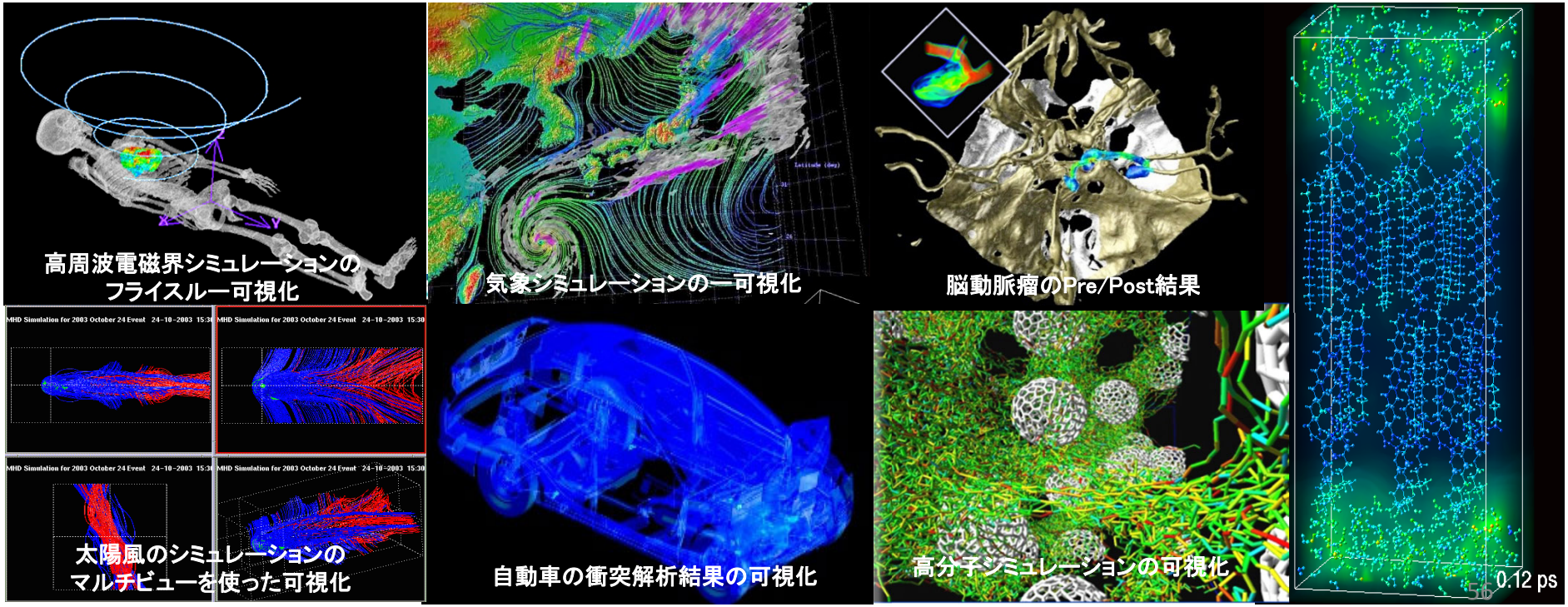
プログラム名： VisPlus

開発者： 名古屋大学　高橋一郎

概要　： 多くの大学や研究機関で利用されている可視化アプリケーション開発ツール”*AVS Express*”を使って開発した可視化アプリケーションプログラムとユーティリティプログラムの集合体である。

　可視化アプリケーションプログラムは、AVSのNetworkエディタを使ってカストマイズしてオープンプラットホームで利用することができる。
また、リモート可視化、ローカル可視化にも対応している。

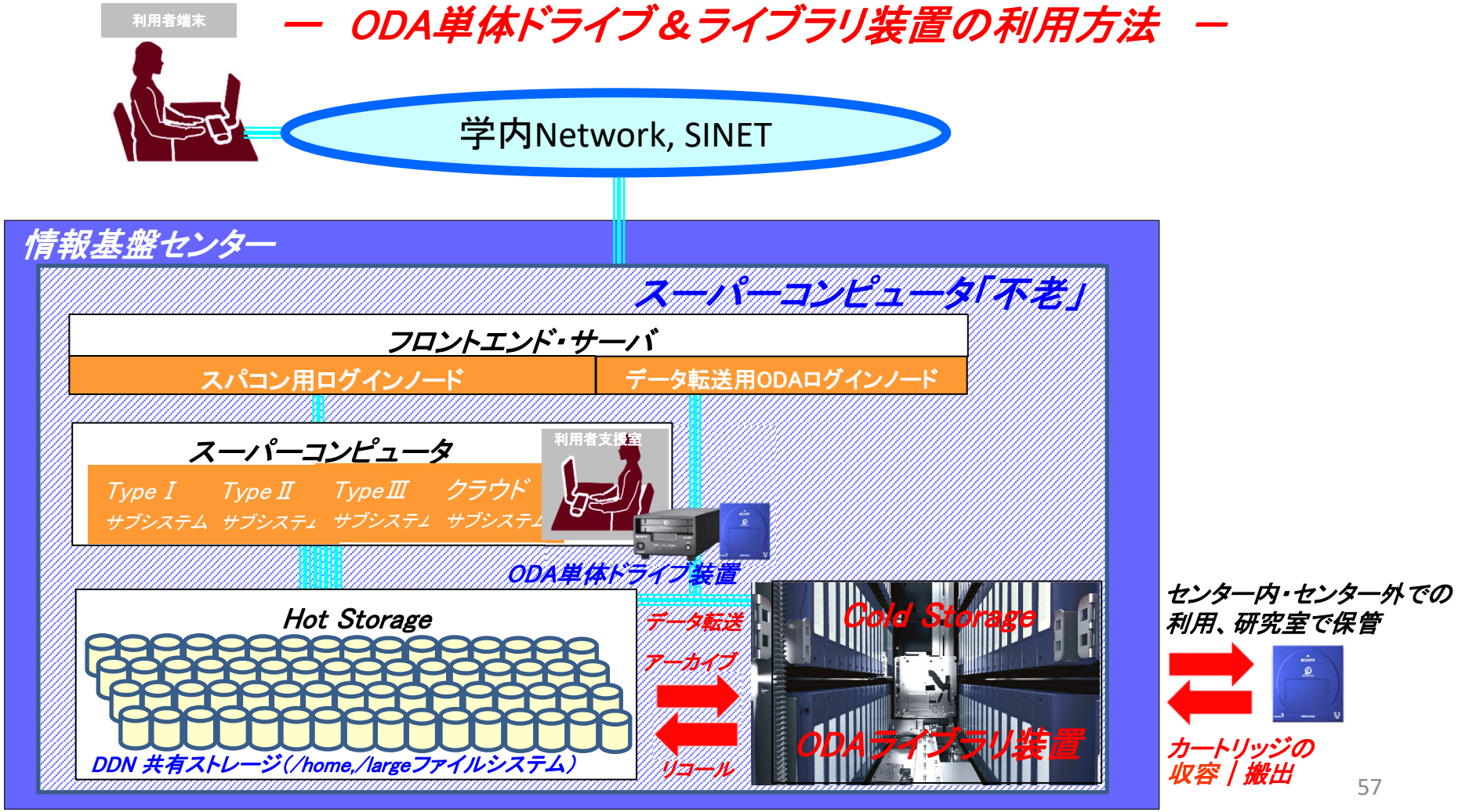
動作環境： Linux, Windows, Mac



プログラム名： ODAPLUS

開発者： Sony, 高橋一郎

概要 ： Sony社製コールドストレージ（光Diskライブラリ ODA)システムの管理・運用を行うプログラム(現在開発中）



正式運用で生じた問題

稼働開始から約２ヶ月の運用経験

- 運用初期は重大な障害や再起動をともなう設定変更がある可能性もあり
  利用者に迷惑をかけるかも知れない
  →7月の間だけは無料利用とした（一般ユーザ利用のみ）
  - 一般利用・グループ利用は、費用は支払うがポイントの減算はしない、という運用
- 結果的に全系障害など致命的な問題はまったく発生せず、HW的には安定運用
  - SW的には色々と不備・不足があり対応中
- 利用状況・混雑具合（7月中）
  - Type Iサブシステム：
    全然流れない状況まではいかないものの、タイミングによっては利用者多数
  - Type IIサブシステム：数ノードのジョブに1日待つほど混雑した日もあり
    - 各ジョブがどの程度GPUを使っていたのかは不明
  - Type IIIサブシステム：限定的な利用（そもそもノード数が少ないため評価が難しい）
  - クラウドシステム（バッチ）：大混雑、ノード使用率100%となっていることも
  - クラウドシステム（UNCAI）：使われていなかった
  - 無料期間ということもあり、思った以上に使っていただけたという印象
  - ノード利用率が高い割には消費電力は低いと予想
    （正確な統計情報を試算中）

これからの運用で取り組む課題

- 性能向上や使い勝手の調査・対応
  - 機械学習の性能（Type Ⅰ　vs. Type Ⅱ）
  - Type IIサブシステムのローカルストレージ（特にNVMESH）の積極的な活用
  - インストールはしてあるが性能が妥当なのかを確認できていないアプリも多い
- システム利用率を高く保つための調整
  - 全体的なキュー構成の再検討（最適化）
    - 各キューの埋まり具合によっては最長時間や最大ノード数などを調整する必要がある
  - クラウドシステムのバッチ・UNCAIの割合
- その他
  - コールドストレージ（2021年2月のアップグレード後が本番）

おわりに

おわりに

- 名古屋大学情報基盤センターで7月1日から
  正式サービス開始のスーパーコンピュータ「不老」
  - **数値シミュレーションとデータサイエンス（主に機械学習）を融合可能な設計と運用**
    1．TypeIサブシステム（「富岳」型ノード）
       ⇒超並列処理用、国策スパコン連結
    2．TypeⅡサブシステム　⇒機械学習、高速ローカルディスク
    3．TypeⅢサブシステム　⇒48TBの大規模共有メモリによる
       プレ／ポスト／可視化処理
    4．クラウド　⇒PCクラスタ利用、時刻指定予約
    5．可視化システム　⇒詳細可視化ディスプレイ連結、リモート可視化
    6．大規模共有ホットストレージ
       ⇒１～５に連結、シームレスなデータ移動
    7．コールドストレージ　⇒データを100年保存可能、
       サービス終了時に光ディスクを持ち帰り可能

謝辞

- ベンチマークの取得・資料提供に関して
  以下の皆様のご協力ありがとうございました。

  - 名古屋大学情報基盤センター　大島聡史　准教授
  - 名古屋大学情報基盤センター　永井亨　助教
  - 富士通社　SE各位