

2017年9月14日（木）10時～11時
名古屋大学情報基盤センター4F演習室

スーパーコンピュータシステム 利用説明会

名古屋大学情報基盤センター



プログラム

2017年9月14日(木)

▶ 10:00~10:30

システム概要、利用法、課金説明

▶ 10:30~11:00

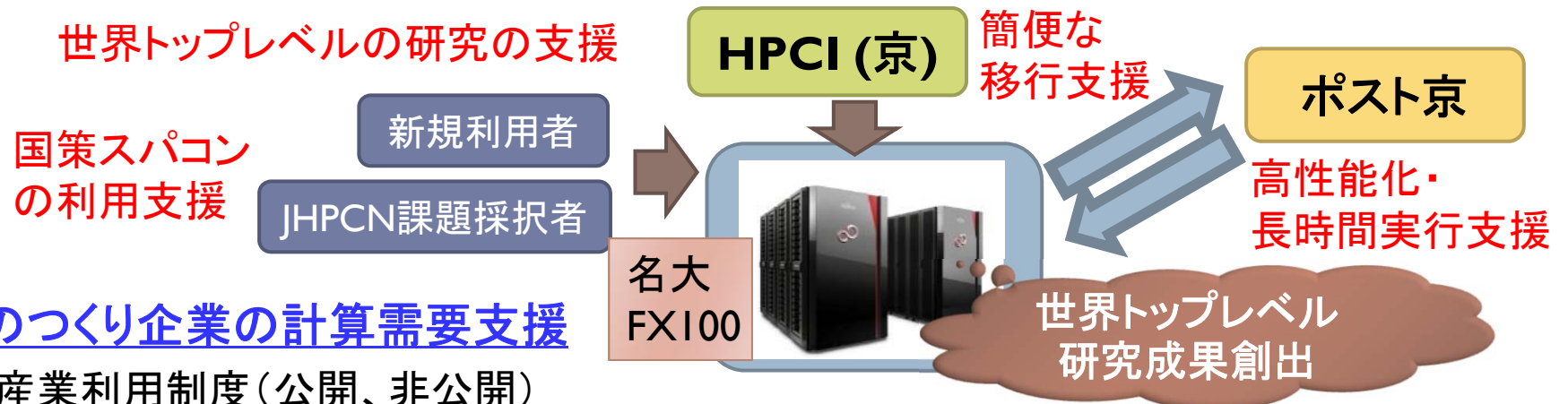
質疑応答、および個別相談会

名大ITCにおけるスパコン提供の役割

1. ポスト京開発までの全国のHPCユーザに向けた資源提供

▶ 京コンピュータ同型の最先端機種FX100

- ▶ HPCIと連携し、京コンピュータ運用終了からポスト京コンピュータ稼働の2022年まで、「京」を用いた全国の研究者の世界トップレベルの研究を強力に支援



2. ものづくり企業の計算需要支援

- ◆ 産業利用制度(公開、非公開)
- ◆ 計算機利用型講習会による並列処理・大規模計算普及(地域特有の中小企業支援)

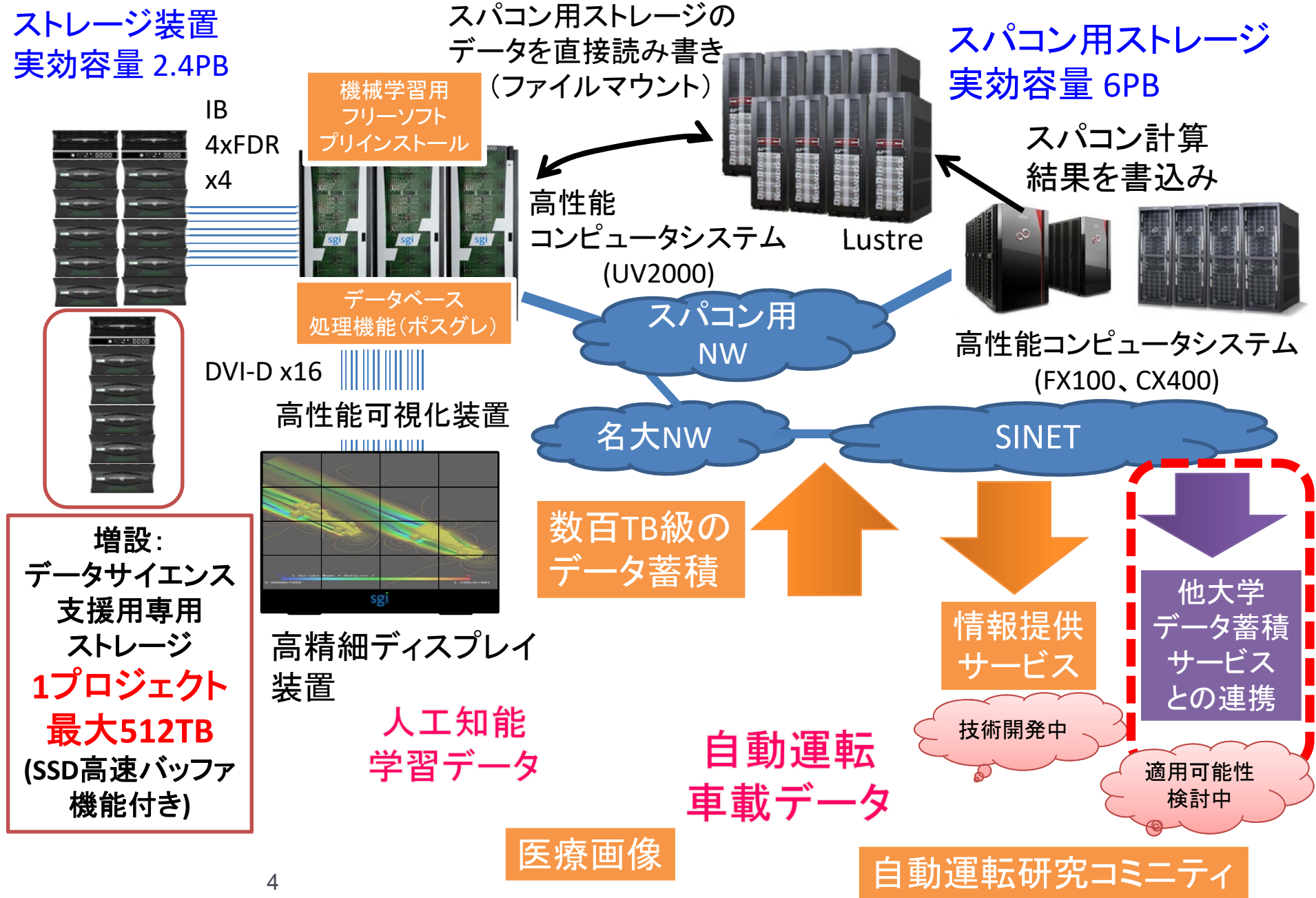
3. 新しい計算需要に向けたサービス開拓

- ◆ データサイエンス(ビッグデータ)、機械学習に対応する新サービスの開拓

- 継続した世界トップレベルの成果創出支援と、企業利用・教育利用による社会貢献

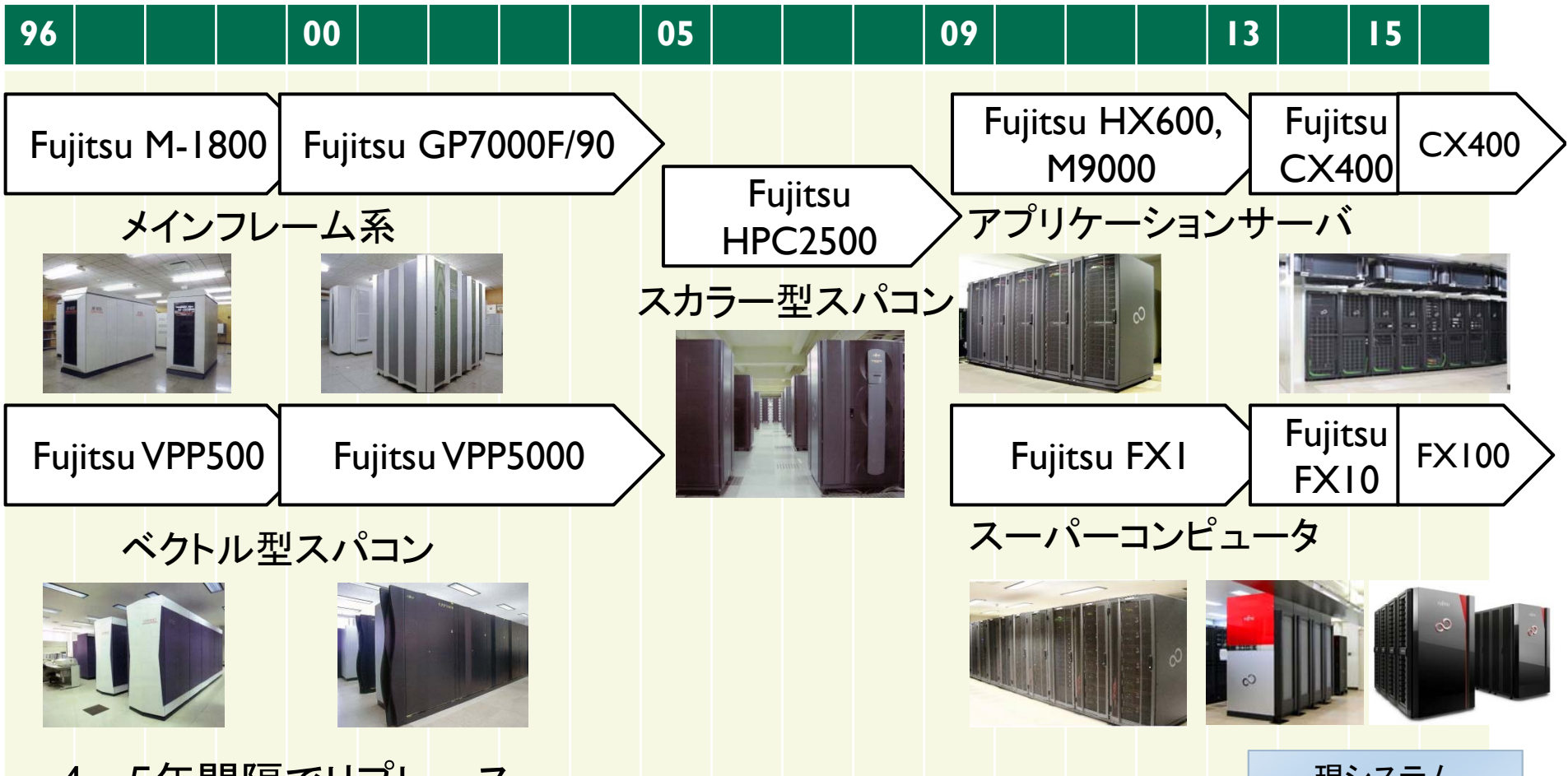


名大データサイエンス支援サービス(試行)概要



名大情報基盤センターの スパコンのご紹介

名大情報基盤センターのスパコン変遷



- 4～5年間隔でリプレース
- 2005年にベクトル型からスカラー型に転換
- 超並列型、クラスタ型、大規模共有メモリ型などで様々な計算需要に応える

現システム



中間レベルアップ方式の活用

▶ 導入計画



▶ 中間レベルアップの活用

- ▶ プロセッサ開発ロードマップやエクサスパコン計画を考慮
- ▶ 「利用したくなる」環境を提供し続ける
- ▶ その時代に適した対消費電力性能により、エネルギーを有効活用する(エコな計算機システム)

システムの概要 (Phase I)

複合現実大規模可視化システム
(2014年3月, HPCI補正予算)

ピーク性能 0.58 PF

ストレージ 7 PB

高性能コンピュータシステム
Phase 1 (2013年10月～)

ピーク性能 0.56 PF

ストレージ 4 PB



大規模SMP型
演算サーバ

ストレージ装置

可視化装置



Fujitsu PRIMEHPC
FX10



Fujitsu PRIMERGY
CX400



ストレージ装置 8



バーチャルリアリティ装置



8K 高解像度
モニター

HMD(MR)

Domeモニター

システムの概要 (Phase 2 (最終フェーズ))

高性能コンピュータシステムPhase 2
(2015年9月～2019年3月(予定))

ピーク性能 4.0 PF

ストレージ 11 PB

複合現実大規模可視化システム
(2014年3月, HPCI補正予算)

ピーク性能 0.58 PF

ストレージ 7 PB

高性能コンピュータシステム
Phase 1 (2013年10月～)

ピーク性能 0.56 PF

ストレージ 4 PB



Fujitsu PRIMEHPC FX100へ更新



Fujitsu PRIMERGY CX400を更新



ストレージ装置を増設



大規模SMP型
演算サーバ



ストレージ装置

可視化装置



Fujitsu PRIMEHPC
FX10



Fujitsu PRIMERGY
CX400



ストレージ装置



バーチャルリアリティ装置



8K 高解像度
モニター

HMD(MR)

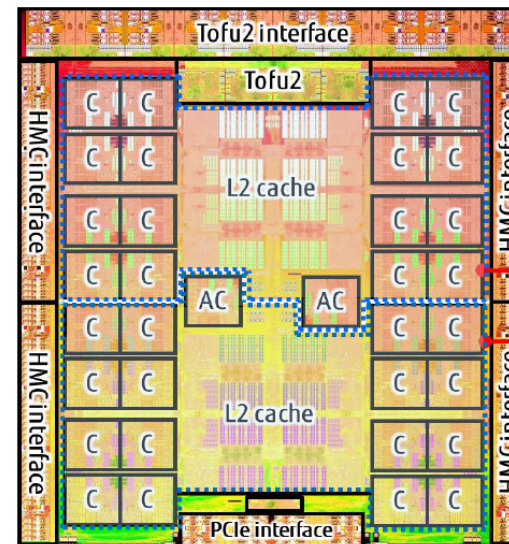
Domeモニター

FX100システムのハードウェア概要

全体構成	計算ノード数	2,880
	理論演算性能	3.2 PFLOPS
	メモリ容量	90 TiB
CPU	プロセッサ	SPARC64 XIfx
	アーキテクチャ	SPARC9 + HPC-ACE
	コア数	32 + 2アシスタントコア
	共有L2キャッシュ	24 MB
	動作周波数	2.2 GHz
	理論演算性能	1,126 GFLOPS
	ノード	アーキテクチャ
10	メモリ容量	32 GB (HMC)
	メモリ理論帯域	240 GB/s (read) + 240 GB/s (write)
	インターコネクタ	Tofu Interconnect 2
	インターコネクタ理論帯域	リンクあたり 12.5 GB/s x 2 (双方向)



ラックイメージ



プロセッサ
イメージ

□ Compute core □ AC Assistant core



メインユニット
イメージ

CX400システムのハードウェア概要

CX2 (CX400/270)

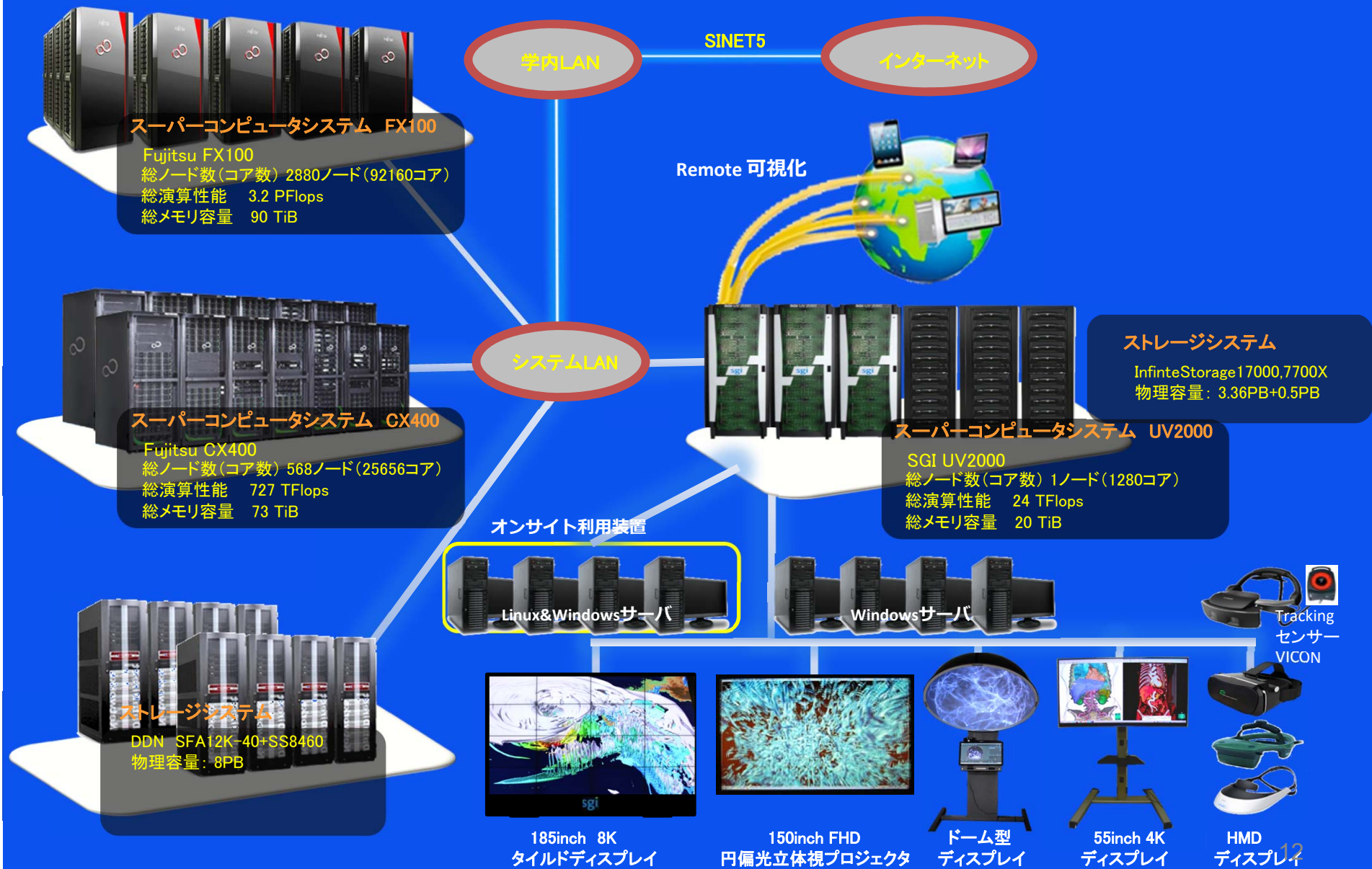
CX1 (CX400/2550) **中間レベルアップ**

全体構成	計算ノード数	184
	理論演算性能	279.9 TFLOPS
	メモリ容量	23 TiB
プロセッサ	モデル	Xeon E5-2697v2 (2.7 GHz)
	マイクロアーキテクチャ	IvyBridge
	コア数	12
コプロセッサ	モデル	Xeon Phi 3120P (1.1GHz), 57コア
	アーキテクチャ	Intel MIC
ノード	構成	2 CPU + 1 コプロセッサ
	理論演算性能	1,521.6 GFLOPS
	メモリ容量	128 GiB
	メモリ理論帯域	119 GB/s

全体構成	計算ノード数	384
	理論演算性能	447.2 TFLOPS
	メモリ容量	48 TiB
プロセッサ	モデル	Xeon E5-2697v3 (2.6 GHz)
	マイクロアーキテクチャ	Haswell
	コア数	14
ノード	構成	2 CPU
	理論演算性能	1,164.8 GFLOPS
	メモリ容量	128 GiB
	メモリ理論帯域	136 GB/s



システム構成



SGI UV2000のハードウェア構成

ハードウェア構成

機種名	SGI UV2000
プロセッサ	Intel Xeon E5-4650 (2.4 GHz, 8 コア) (Ivy Bridge)
総CPU数(総コア数)	160 CPU(160ソケット) (1,280 コア)
総演算性能	24 TFlop/s
総メモリ容量	20 TiB

ccNUMA (Cache Coherent Non-Uniform Memory Access)方式により、
大規模共有メモリを実現
【128GB/ソケット】



主な利用可能ソフトウェア(1/3)

▶ FX100システム

- ▶ 富士通コンパイラ
- ▶ MPI(富士通), BLAS, LAPACK, ScaLAPACK, SSL II(富士通)
- ▶ 構造解析 LS-DYNA、計算化学 Gaussian、可視化AVS、
OpenFOAM



「京」後継の超並列型

- 利用者開発ソフトウェア利用
(超並列実行)
- ISVアプリ、フリーソフトの移植も推進中



主な利用可能ソフトウェア(2/3)

▶ CX400システム

- ▶ 富士通Fortran/C/C++/ XPFortran, Intel Fortran /C/C++, **Python (2.7, 3.3)**
- ▶ MPI(富士通,Intel), BLAS, LAPACK, ScaLAPACK, SSLII(富士通), C-SSL II, SSL II/MPI, MKL(Intel), NUNPAC, FFTW, HDF5, IPP(Intel)
- ▶ LS-DYNA, ABAQUS, ADF, AMBER, GAMESS, Gaussian, Gromacs, LAMMPS, NAMD, HyperWorks, OpenFOAM, STAR-CCM+, Poynting, 富士通Technical Computing Suite 4 (HPC Portal).



使いやすいIntelクラスタ型

- 利用者開発ソフトウェア利用
- ISVアプリ、フリーソフトも充実
- 最新Xeon (Haswell)
- メニーコア(MIC, Xeon Phi (KNC))



主な利用可能ソフトウェア(3/3)

大規模共有メモリ型

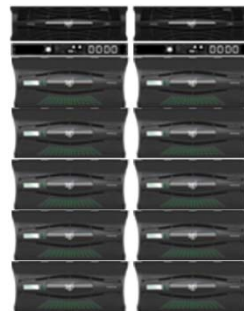
- 計算結果を可視化するISVアプリが充実
- リモートデスクトップ利用も可能

▶ UV2000システム

- ▶ Intelコンパイラ, Intel Fortran/C/C++, Python (2.6, 3.5)
- ▶ MPT(SGI), MKL(Intel), PBS Professional, FFTW, HDF5, NetCDF, scikit-learn, TensorFlow
- ▶ AVS/Express Dev/PCE, EnSightHPC, FieldviewParallel, IDL, ENVI (SARscape), ParaView, 3DAVSplayer, POV-Ray, NICE DCV(SGI), ffmpeg, ffplay, LS-prepost, osgviewer, vmd (Visual Molecular Dynamics)

▶ 可視化システム

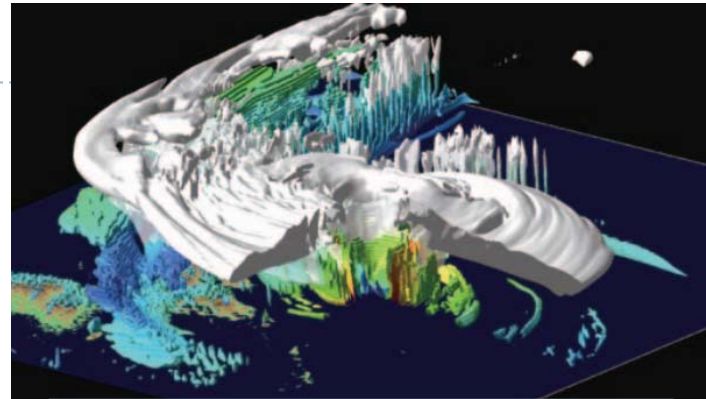
- ▶ AVS/Express Dev/PCE, EnshightHPC, 3DAVSPlayer, IDL, ENVI(SARscape), ParaView, osgviewer, EasyVR, POV-Ray, 3dsMAX, 3-matic, VMD, ffmpeg, ffplay, LS-prepost



大規模ストレージと高精細可視化装置

▶ 本センターの強み

- プラズマ流体、地球流動現象、生体分子、医療分野などに対する高効率な可視化技術の開発、可視化装置の構築



気象系シミュレーション可視化例



医用画像データ可視化例

▶ システム導入の目的

- ▶ 数値シミュレーション等による超大規模データから高精細な3次元可視化映像の生成を実現
- ▶ シミュレーションデータと実世界の映像を融合することで、新しい知見を深めることを支援

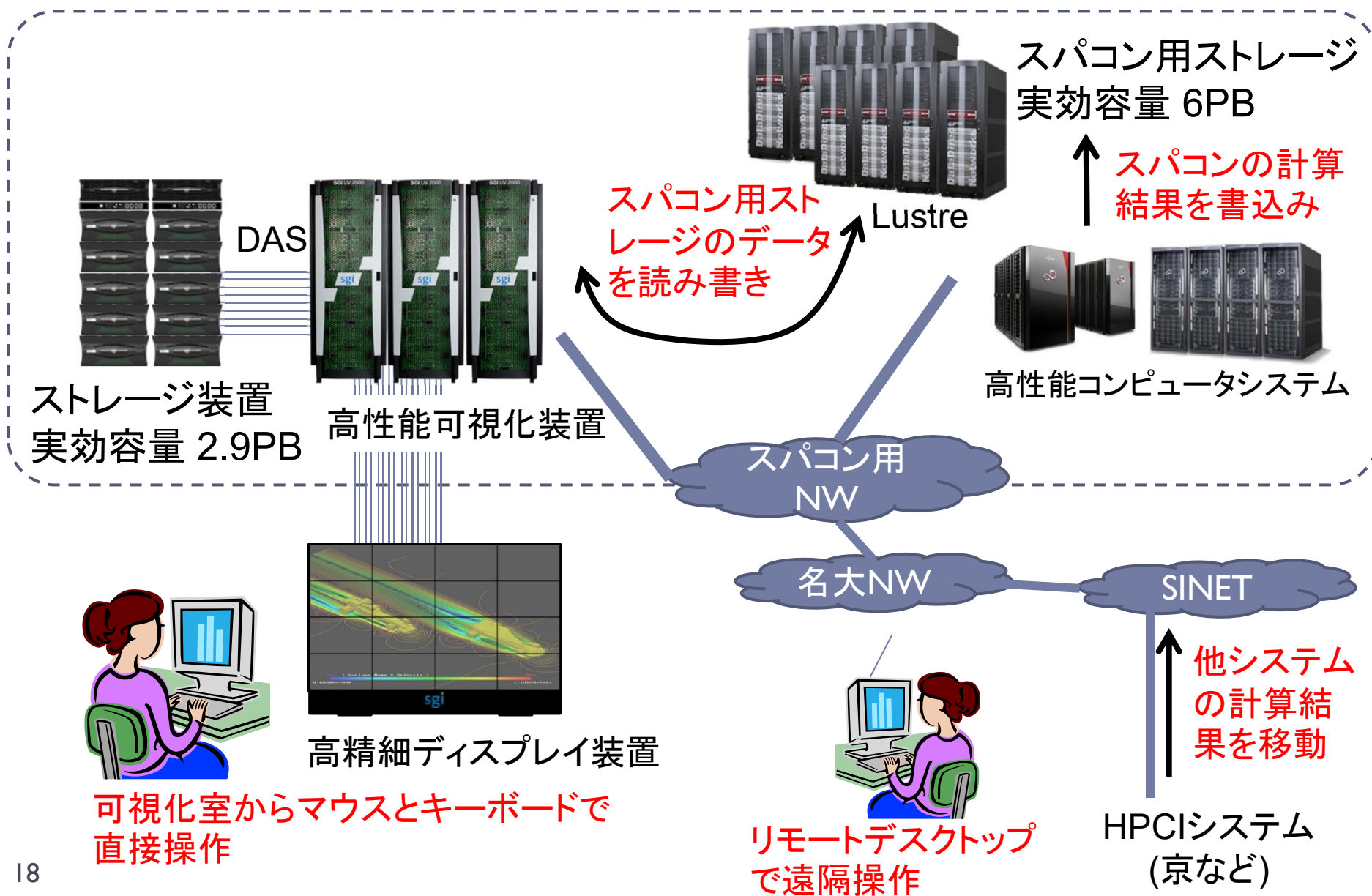
▶ 特徴

- ▶ スパコンからデータを移動させることなく高度な後処理が可能
- ▶ 可視化装置に大容量ストレージと高精細ディスプレイを直結させ、HPC利用に特化

▶ 新サービス開拓

- ▶ データサイエンスを支援するサービス
- ▶ ビッグデータ、機械学習など、新しい計算需要に対応
- ▶ 計算サービスと、大規模データ蓄積、機械学習用ツール、高性能ファイルシステム、および可視化の連結
- ▶ 遠隔大規模データの可視化

名大ITCの計算機システム概要



Fujitsu PRIMEHPC FX100 の計算機アーキテクチャ

FX10とFX100のアーキテクチャ比較

	FX10	FX100
演算能力／ノード	倍精度／単精度： 236 GFLOPS	倍精度：1.011 TFLOPS 単精度：2.022 TFLOPS
演算コア数	16	32
アシスタントコア	なし	2
SIMD幅	128	256
SIMD命令	浮動小数点演算、連続 ロード／ストア	右に加え、整数演算、ストラ イド&間接ロード／ストア
L1Dキャッシュ／コア	32KB、2ウェイ	64KB、4ウェイ
L2キャッシュ／ノード	12MB	24MB
メモリバンド幅	85GB/秒	480GB/秒

出典：https://www.sskn.gr.jp/MAINSITE/event/2015/20151028-sci/lecture-04/SSKEN_sci2015_miyoshi_presentation.pdf

FX100計算ノードの構成

2ソケット、NUMA
(Non Uniform Memory Access)

TOFU2
Network

HMC
16GB

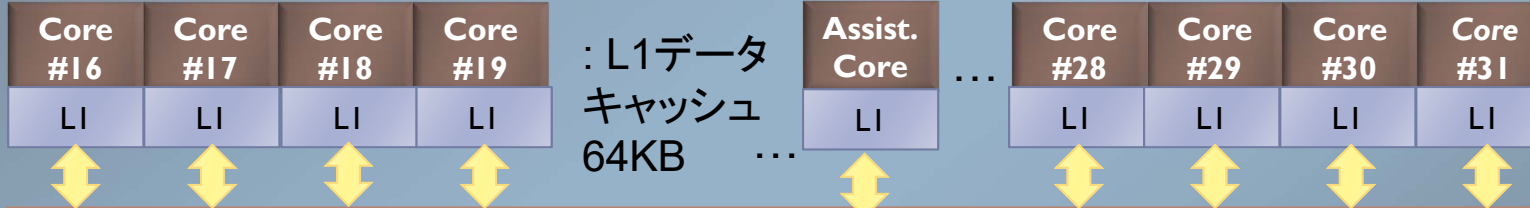
Memory

L2 (17コアで共有、12MB)



ICC

ソケット0 (CMG(Core Memory Group))



L2 (17コアで共有、12MB)

ソケット1 (CMC)

HMC
16GB

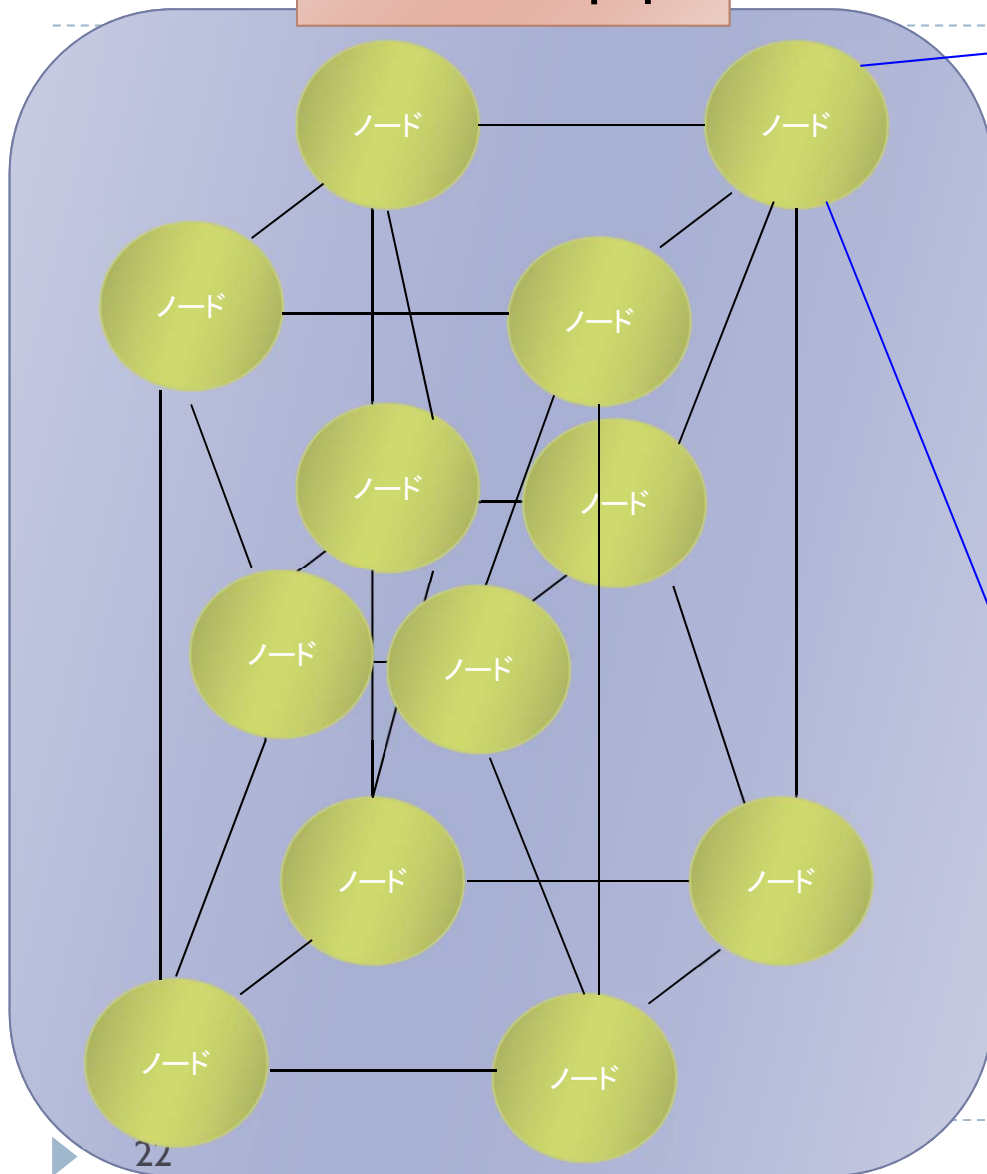
Memory

ノード内合計メモリ量: 32GB

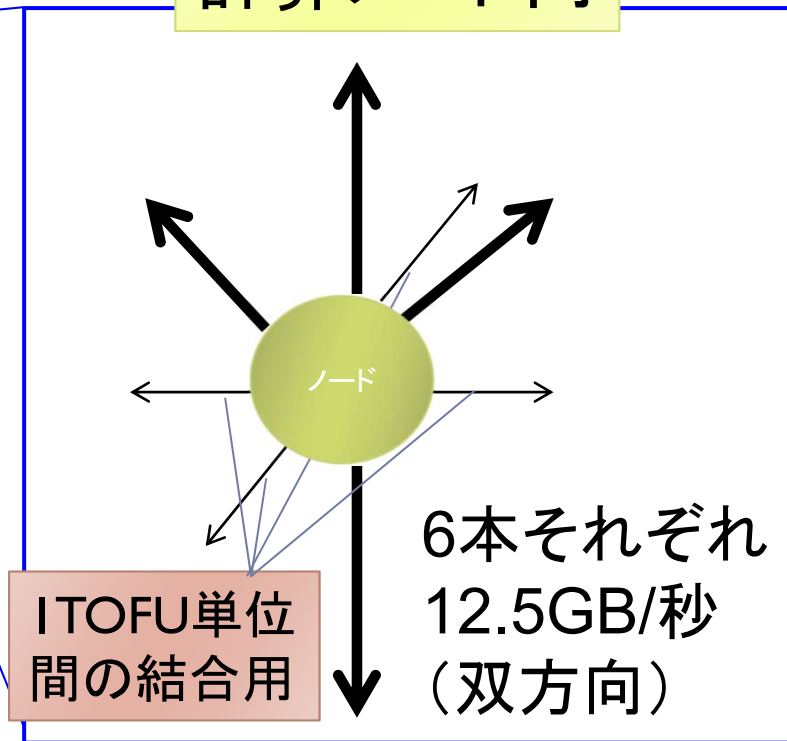
読込み: 240GB/秒
書込み: 240GB/秒=合計: 480GB/秒

FX100の通信網（1 TOFU単位）

1 TOFU単位

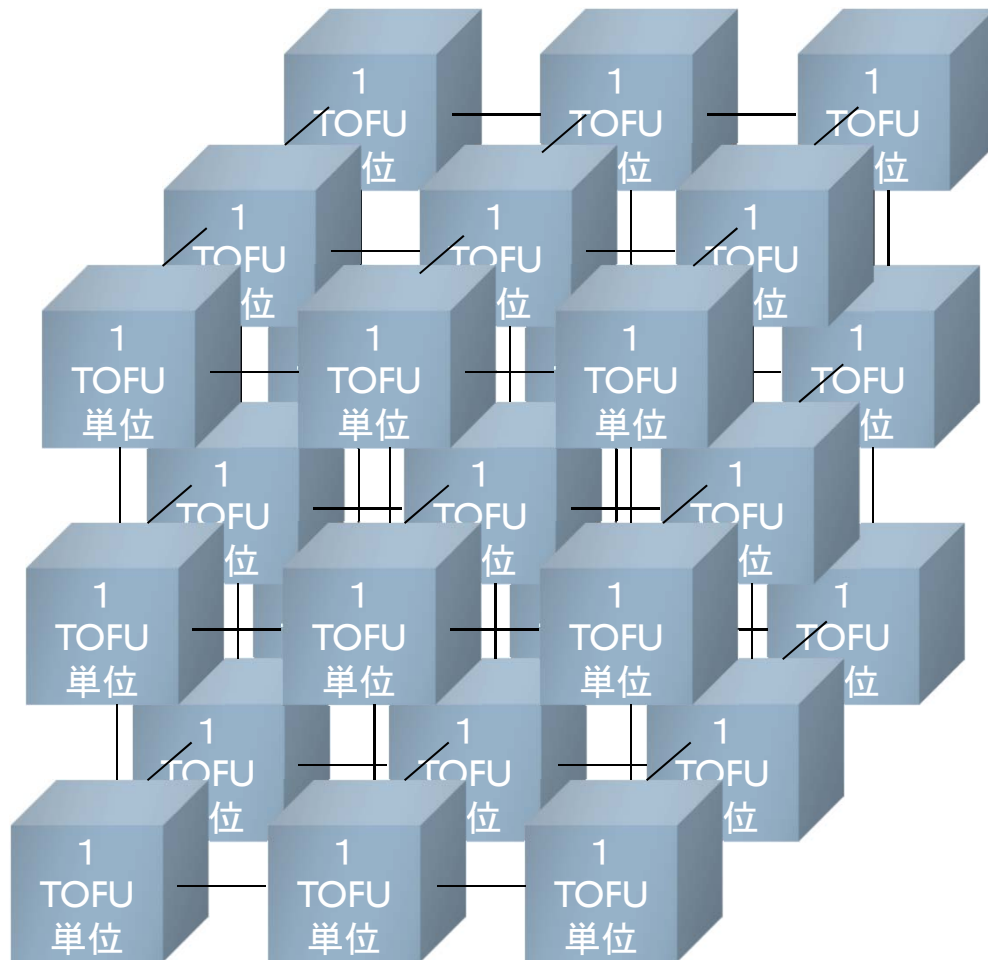


計算ノード内



FX100の通信網（1 TOFU単位間の結合）

3次元接続



- ユーザから見ると、X軸、Y軸、Z軸について、奥の1TOFUと、手前の1TOFUは、繋がって見えます（3次元トーラス接続）
- ただし物理結線では
 - X軸はトーラス
 - Y軸はメッシュ
 - Z軸はメッシュまたは、トーラスになっています

課金体系

名大スパコンの課金体系 (1/5)

- ▶ **前払い定額制(プリペイド形式)**
 - ▶ 利用すべき資源の料金を前払いして利用
 - ▶ 利用ポイントに変換して利用
- ▶ **単年度会計(本年4月1日～翌年3月31日)**
 - ▶ 年度途中で申込み可能だが、利用終了は年度末
 - ▶ 年度末に余った利用ポイントは没収
- ▶ **一度の申込みで、全てのスパコンと可視化システムを利用可能**
 - ▶ FX100、CX400、UV2000(可視化サーバ)



名大スパコンの課金体系 (2/5)

- ▶ **基本負担金 (アカデミックユーザのみ)**
 - ▶ 登録料1名につき10,000円、10,000ポイントの付加
- ▶ **追加負担金 (アカデミックユーザのみ)**
 - ▶ 100,000 円未満: 1円=1ポイント
 - ▶ 100,000 円以上500,000 円未満:
1 円当たり1.2 ポイント
 - ▶ 500,000 円以上1,000,000 円未満:
1 円当たり1.5 ポイント
 - ▶ 1,000,000 円以上:
1 円当たり2 ポイント

名大スパコンの課金体系 (3/5)

▶ 消費ポイント

▶ 計算課金

利用ノード数(ソケット数) × 経過時間[s] * 0.002

- ▶ 基本負担金1万円(1万ポイント付加)
 - 1ノードを約1,388時間(約2ヶ月)利用可能
- ▶ 追加負担金10万円(12万ポイント付加)
 - 2ノードを1年間利用可能、または、8ノードを3か月分利用可能
- ▶ 追加負担金50万円(75万ポイント付加)
 - 12ノードを1年間利用可能、または、48ノードを3か月分利用可能
- ▶ 追加負担金100万円(200万ポイント付加)
 - 32ノードを1年間利用可能、または、128ノードを3か月分利用可能
- ▶ 参考
 - FX100の8ノード: 256コア (理論演算性能9.0 TFLOPS)
 - CX400/2550の8ノード: 224コア (理論演算性能9.3 TFLOPS)

名大スパコンの課金体系 (4/5)

▶ 消費ポイント

▶ ファイル課金 (非データ蓄積ユーザ)

▶ 300GB 以下の場合: 徴収しない

▶ ファイルの使用容量が300GB を超えた場合:
超えた容量について、1GBにつき
1日当たり 0.01 ポイント

▶ 例) 1TB 利用: 700GB課金 ⇒ 7ポイント/日
⇒ 217円/月、2604円/年

▶ ※60TBを超える場合は、全体容量を考慮して、削除依頼を
させていただくことがあります。

▶ ※60TBを超える容量が必要な場合は、事前にご相談ください。



名大スパコンの課金体系 (5/5)

(平成29年度改訂)

データ蓄積利用者とは、**10TB以上のファイル**を保持し、かつ、判定時において過去3月間の間に消費されたポイントのうち**演算負担ポイントの割合が5%以下**となっている利用者のことをいう。この場合において判定時とは、利用開始から3月毎の期日をいう。

▶ 消費ポイント

▶ ファイル課金(データ蓄積ユーザ)

- ▶ 300GB 以下の場合: 徴収しない
- ▶ ファイルの使用容量が300GB を超えた場合: 超えた容量について、1GBにつき **1日当たり 0.024 ポイント**
- ▶ 例) 1TB 利用: 700GB課金 ⇒ 16.8ポイント/日 ⇒ 521円/月、6250円/年
- ▶ ※60TBを超える場合は、全体容量を考慮して、削除依頼をさせていただくことがあります。
- ▶ ※60TBを超える容量が必要な場合は、事前にご相談ください。



大規模ファイルシステム課金制度 (平成29年度改訂)

- ▶ アカデミックユーザのみ
- ▶ 1口:
1パーティション(64TB)につき
年額 540,000 円
- ▶ 2口以上で、
支払金額 * 10%
のポイント付加の特典付き

お試し利用、リテラシー利用

▶ トライアルユース

- ▶ ソフトウェアの動作確認などを、無料で行える制度です。お1人様1回限りで申請できます。
- ▶ 企業においては、同一の課で1回のみです。
- ▶ アカデミックユーザ(無審査)、企業ユーザ(書類審査)
- ▶ 10,000ポイント付加
- ▶ 有効期限1ヶ月

▶ リテラシー利用(アカデミックユーザのみ)

- ▶ 学部・大学院の講義や演習で利用いただける制度です。
- ▶ 利用登録25件につき10,000円、50,000ポイント付与
- ▶ 有効期限: 上限6ヶ月(講義・演習実施期間に依存)



産業利用（平成29年度改訂）

▶ 公開型

- ▶ 10アカウントまで15万円
- ▶ アカデミック利用の料金の2.5倍（15万円当たり60,000ポイント）
- ▶ 4月～6月の利用のみ、1口当たり15,000ポイントを付与の特典付
- ▶ 利用報告の義務有り（最大2年間延長可能）

▶ 非公開型

- ▶ 10アカウントまで25万円
- ▶ アカデミック利用の料金の5倍（25万円当たり50,000ポイント）
- ▶ 申込み金額に応じたポイント優遇はございません。
- ▶ 詳しくは、産業利用のパンフレットをご参照ください。



講習会

- ▶ 並列化など、各種講習会を実施しております
 - ▶ <http://www.icts.nagoya-u.ac.jp/ja/center/service/course.html>
- ▶ 平成28年11月から、FX100システムを利用した演習付きの「MPI講習会(初級)」が試行実施されています。
 - ▶ 日程が変更されることがあります。詳しくは、以下のスーパーコンピュータシステムのページをご参照ください。
 - ▶ 参加費は無料です
 - ▶ 企業の方の参加も可能です
 - ▶ <http://www.icts.nagoya-u.ac.jp/ja/sc/>
- ▶ 平成29年度関連講習会(予定)
 - ~~第4回 6月15日(木)MPI講習会(初級)~~
 - ~~第5回 9月11日(月)MPI講習会(初級)~~
 - 第6回 9月25日(月)ライブラリ利用講習会(新設)
 - 第7回 12月7日(木)MPI講習会(初級)
 - 第8回 3月12日(月)ライブラリ利用講習会



コンサルティング

- ▶ 並列化、利用高度化、ISVアプリの利用方法などに関するコンサルティングを行っています。
- ▶ 本センター教職員や学内外の専門家で構成される専門分野相談員によるコンサルティング(面談)ができます。
 - ▶ **Web受付 Q&A SYSTEM**
 - ▶ 各種ご質問、ご相談等は下記Webサイトからお問合せください。
 - ▶ <https://qa.icts.nagoya-u.ac.jp/>
 - ▶ **面談相談**
 - ▶ 実際に画面を見ながらなど、電話やメールでは伝えづらいご質問やご相談には面談でも受け付けています。
 - ▶ 事前にお約束の上、本センター3階図書室内のIT相談コーナーにお越しください。または、相談員が訪問させていただくことも可能です。
 - 連絡先: 052-789-4366 (IT相談コーナー直通)、
または、上記のQ&A SYSTEM

スパコン利用の方法

スパコン利用の流れ

1. 申請書の提出
2. アカウント発行
3. 専用ポータル
(<https://portal.cc.nagoya-u.ac.jp/>)
にログインし、公開鍵を登録
4. ssh で、センタースパコンへログイン
5. プログラミング、コンパイル、実行
6. 年度末に利用報告書の提出



ログイン先のアドレス

▶ FX100システム

fx.cc.nagoya-u.ac.jp

▶ CX400システム

cx.cc.nagoya-u.ac.jp

▶ UV2000システム

uvf.cc.nagoya-u.ac.jp

利用ファイルシステム

- ▶ 共有ファイルシステム
- ▶ /home : 約0.5PB、ホーム領域
(個人は500GBまで)
- ▶ /center : 約1.0PB、ISV、OSS (ソフトウェア) 領域
- ▶ /large : 約1.5PB、データ領域
- ▶ /large2 : 約3.0PB、データ領域
- ▶ /large は10TB 以内、/large2 は50TB以内でのご利用を想定しております。これ以上を利用される方は、事前にご連絡ください。
- ▶ 料金改定後、データ蓄積ユーザと判定されると、値上げ料金となります
- ▶ ファイル・ステージング無し



名大情報基盤センタースパコンの バッチキュー構成 (1/3)

▶ FX100システム

リソースグループ名	最大ノード数	最大CPUコア数	最大経過時間 (標準値)	最大経過時間 (制限値)	最大メモリ容量 (*)	割当方法 (Tofu)	割当方法 (離散)	備考
fx-interactive	4	128	1時間	24時間	28GiB x 4	不可	可	会話型バッチ
fx-debug	32	1,024	1時間	1時間	28GiB x 32	不可	可	デバック用
fx-small	16	512	24時間	168時間	28GiB x 16	不可	可	
fx-middle	96	3,072	24時間	72時間	28GiB x 96	可	可	
fx-large	192	6,144	24時間	72時間	28GiB x 192	可	可	
fx-xlarge	864	27,648	24時間	24時間	28GiB x 864	可	可	
fx-special	2,592	82,944	unlimited	unlimited	28GiB x 2,592	可	可	事前予約制

* ユーザープログラムが使用可能な最大メモリ容量はノードあたり28GiBです。
スレッドのスタック領域も含まれます。



名大情報基盤センタースパコンの バッチキュー構成 (2/3)

▶ CX400/2550システム

リソース グループ名	最大ノード 数	最大CPU コア数	最大経過 時間 (標準値)	最大経過 時間 (制限値)	最大メモリ容 量(*)	備考
cx-debug	4	112	1時間	1時間	112GiB x 4	デバック用
cx-share	1(共有)	14	24時間	168 時間	56GiB x 1	ノード共有
cx-small	8	224	24時間	168 時間	112GiB x 8	
cx-middle	32	896	24時間	72 時間	112GiB x 32	
cx-large	128	3,584	24時間	72 時間	112GiB x 128	
cx-special	384	10,752	unlimited	unlimited	112GiB x 384	事前予約制

* ユーザープログラムが使用可能な最大メモリ容量はノードあたり112GiBです。



名大情報基盤センタースパコンの バッチキュー構成 (3/3)

▶ CX400/270システム (Xeon Phiノード)

リソースグループ名	最大ノード数	最大CPUコア数	最大Phi数	最大経過時間 (標準値)	最大経過時間 (制限値)	最大メモリ容量 (*)	備考
cx2-debug	4	96	1 x 4	1時間	1時間	112GiB x 4	デバック用
cx2-single	1	24	1 x 1	24時間	336時間	112GiB x 1	
cx2-small	8	192	1 x 8	24時間	72時間	112GiB x 8	
cx2-middle	32	768	1 x 32	24時間	72時間	112GiB x 32	
cx2-special	150	3,600	1 x 150	unlimited	unlimited	112GiB x 150	事前予約制

* ユーザープログラムが使用可能な最大メモリ容量はノードあたり112GiBです。



名大情報基盤センタースパコンの バッチキュー構成 (3/3)

▶ UV2000システム

リソース グループ 名	並列数 (標準値)	並列数 (制限値)	メモリ容量 (標準値)	メモリ容量 (制限値)	最大経過 時間 (標準値)	最大経過 時間 (制限値)
uv-middle	64	128	0.9 TiB	1.8 TiB	24 時間	168 時間
uv-large	256	512	3.6 TiB	7.2 TiB	12 時間	168 時間