

内容に関する質問は
katagiri@cc.nagoya-u.ac.jp
まで

2022年9月13日13:35－13:55
Zoomによるオンライン開催

「不老」運用状況報告

名古屋大学情報基盤センター 片桐孝洋



名大情報基盤センターの スパコンのご紹介

スーパーコンピュータ「不老」の役割

1. 全国共同利用・共同研究拠点として学内外へ計算資源提供

- ▶ 全国共同利用・共同研究拠点として国が位置づけ
 - ▶ 全国の研究者の世界トップレベル研究を強かに支援

世界トップレベル
研究の支援

HPCI (High Performance
Computing Infrastructure) 利用者

名大拠点利用者

国策スパコン
利用支援

JHPCN利用者

名大「不老」
Type I システム
(富岳型ノード)



簡便な
移行支援

導入支援／高性能化／特殊処理
／長時間実行

世界トップレベル
研究成果創出

2. ものづくり企業支援(地域イノベーションコア形成)

- ▶ 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)、AI基盤の提供による新サービスの開拓

4. 指定国立大学として重要な役割

- ▶ 数理・データ科学教育
- ▶ 人材育成・研究力強化・社会との連携

- ・数理データ科学分野の人材育成
- ・AI技術基盤提供(大規模AI計算基盤、大規模ストレージ、サイバーフィジカル)
- ・技術コンサルティング...等による社会貢献

スーパー
コンピュータ
「富岳」

スーパーコンピュータ「不老」の特徴

- ▶ 以下の新しいスパコン利用法を提供しています:
 - ▶ ① Type I サブシステム(「富岳」型)による超並列処理
 - ▶ ② Type II サブシステム(GPUクラスタ)による大規模機械学習
 - ▶ ③ 数値計算 + AI 処理
 - ▶ ④ ①～③のシームレスなデータ可視化
 - ▶ ⑤ ①～④で必要な大規模・堅牢なデータ蓄積
- ▶ ④に必要なType IIIサブシステム(大規模共有メモリ(48TB))、精細／遠隔可視化装置が、伝統的に名古屋大学は充実
- ▶ ⑤のコールドストレージ(100年保存可能な光ディスク)搭載スパコンは業界初

名古屋大学情報基盤センターの スパコン利用の特徴

● 計画書提出なし／論文出版等の義務なく利用可能

- ▶ 名古屋大学拠点利用の場合（HPCI、JHPCN利用を除く）
- ▶ 年間随時募集（ただし、提供資源がなくなった場合を除く）
- ▶ アカデミックの方
 - ▶ 研究目的（平和利用）、予算確保（運営費、科研費等）が明確であれば、必ず利用承認されます
 - 研究目的の記載は数行
 - ▶ 成果報告書は1ページ
 - 事実上、発表・出版論文などの情報の登録をお願いするのみ
 - ▶ 申込書提出後、1週間程度で承認、アカウント発行
- ▶ 民間利用の方
 - ▶ 課題の計画書提出が必要
 - ▶ 審査委員会で審議の上で承認（1～2週間程度）。その後、アカウント発行。
 - ▶ 報告書はアンケート程度

スーパーコンピュータ「富岳」との連携

1. 同型計算機・同一ソフトウェアスタック

- ▶ 「不老」Type I サブシステムはCPUが「富岳」と同型
- ▶ OS・コンパイラ等のソフトウェアスタックも同一と想定
 - ▶ ➡「不老」のほうがより進んだバージョンが提供される可能性があります

2. 国策ソフトウェアの「不老」Type I サブシステムのプリインストール・講習会実施

- ▶ 国費開発ソフトウェアで「富岳」で動作するソフトウェアのいくつかを、一般財団法人 高度情報科学技術研究機構(RIST)の協力のもと、「不老」Type I で提供、ハンズオン講習会も実施
 - ▶ ➡講習会予定をご覧ください

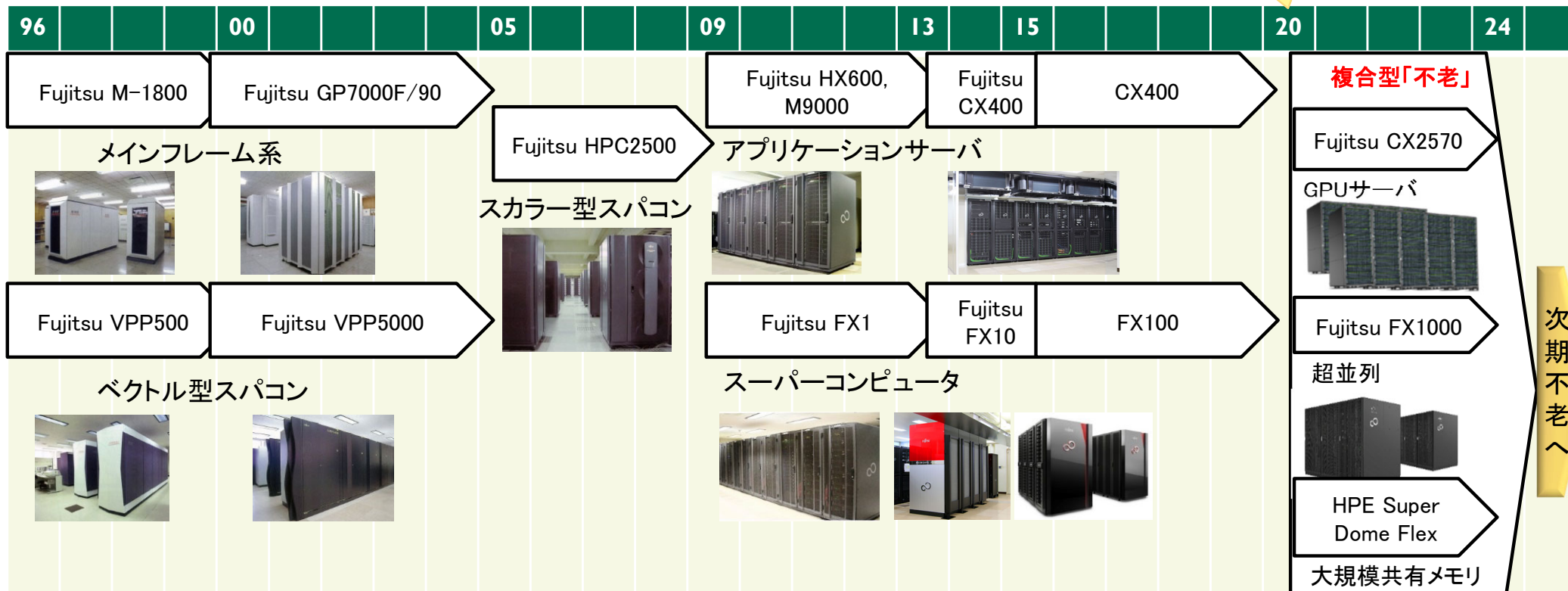
3. 「富岳」向けチューニングと「富岳」への移行支援

- ▶ コンサルティング・教員との共同研究で「富岳」向けと想定されるコードチューニング(➡「不老」Type I 向けと等価)を支援します



名古屋大学情報基盤センターの スパコンの歴史

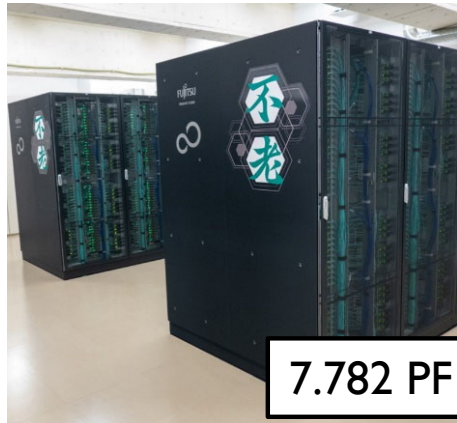
スーパーコンピュータ
「不老」導入



- ◆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

スーパーコンピュータ「不老」 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 PRIMERGY RX2540 M5
FUJITSU ETERNUS AF250 S2
DDN SFA18KE
DDN SS9012



6 PB

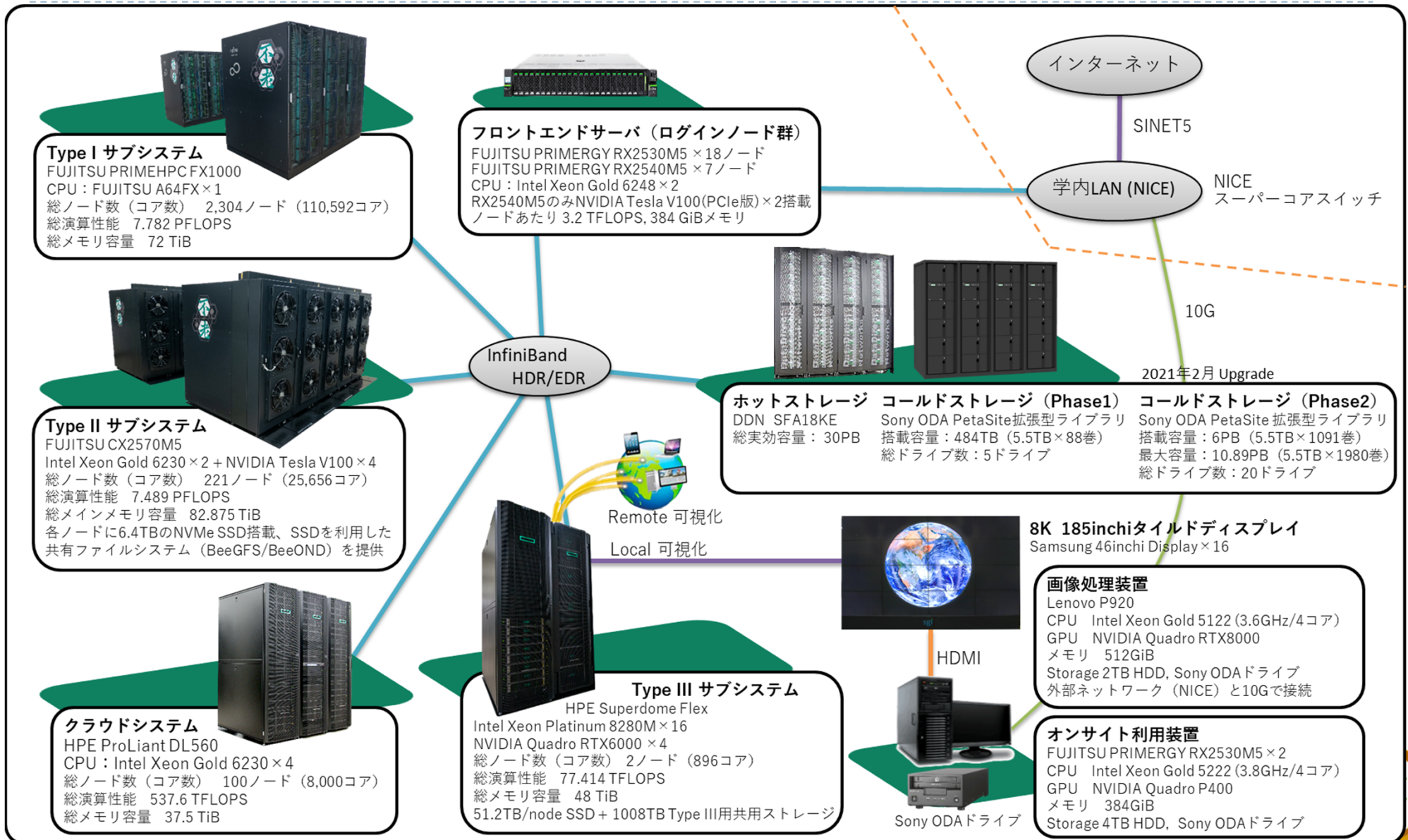
コールドストレージ

SONY PetaSite 拡張型 Library



名古屋大学
NAGOYA UNIVERSITY

全体システム構成



高精細可視化システム

Type IIIサブシステム (HPE Superdome Flex)

77.4TFLOPS/48TiB MEM

Intel Xeon Platinum 8280M(2.7GHz,28Core) × 16CPU × 2 24TiB × 2
 NVIDIA Quadro RTX6000 × 4 × 2
 HDD:実効容量500TB(RAID6) × 2, NVMe:51.2TB × 2



Quadro RTX6000



光ケーブル



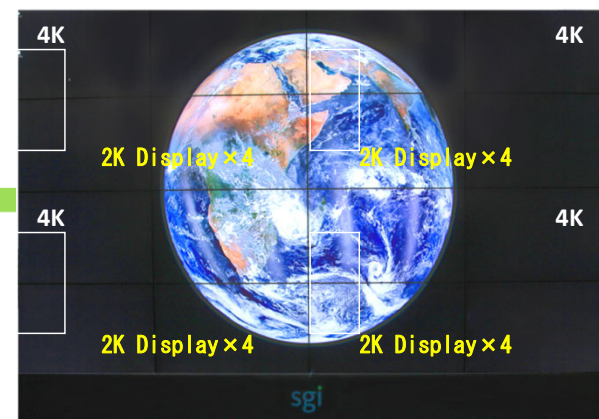
リモート可視化

大規模共有メモリ:
24TiB × 2ノード

8Kタイルドディスプレイ

185inchi 8K高精細大画面タイルドディスプレイ
 (総解像度:7680 × 4320)

Samsung 46inchi Display × 16



HDMI



4K Display × 4



画像処理装置
(Windows)
可視化サーバ

Intel Xeon Gold 5122
 3.6GHz 4 Cores, 512 GiB MEM
 NVIDIA Quadro RTX8000
 SATA SSD 2TB
 光Disk 5.5TBドライブ ODS-D380U

スーパーコンピュータ共有ストレージ



ホットストレージ
 DDN SFA18KE
 総実行容量: 30PB



コールドストレージ
 Sony ODA PetaSite 拡張型ライブラリ
 搭載容量: 6PB (5.5TB × 1091巻)
 最大容量: 10.89PB (5.5TB × 1980巻)



スーパーコンピュータ「不老」 ソフトウェア利用環境

プログラム開発環境など

| | | フロントエンドシステム | Type I サブシステム | Type II サブシステム | Type III サブシステム | クラウドシステム | 画像処理サーバ | オンサイト利用装置 | 企業利用 |
|---------------------------------------|----------------------------------------------------------------------------|-------------|---------------|----------------|-----------------|----------|---------|-----------|------|
| Intel Parallel Studio Computing Suite | コンパイラ (Fortran, C/C++), プロファイラ/デバッガ, MPI, 数値計算ライブラリ | ○ | | ○ | ○ | ○ | | | ● |
| NVIDIA HPC SDK | コンパイラ (Fortran, C/C++, OpenACC, CUDA Fortran), プロファイラ/デバッガ, MPI, 数値計算ライブラリ | ○ | | ○ | | | | | ● |
| FUJITSU Technical Computing Suite | コンパイラ (Fortran, C/C++), プロファイラ/デバッガ, MPI, 数値計算ライブラリ | ○ | ○ | | | | | | ● |
| Arm Forge Professional | プロファイラ/デバッガ/最適化 | ○ | | ○ | ○ | | | | ● |
| NVIDIA CUDA SDK | GPU統合開発環境 | ○ | | ○ | | | | | ● |
| Singularity | コンテナ環境 | ○ | | ○ | | | | | ● |
| その他 | GV, Gfortran, GCC, perl, Python, Ruby, R, Emacs, vi, nkf, etc. | ○ | ○ | ○ | ○ | ○ | | ○ | ● |
| | OpenGL | ○ | | ○ | ○ | ○ | | ○ | ● |

スーパーコンピュータ「不老」 ソフトウェア利用環境

ライブラリ利用環境

| | | フロントエンド システム | Type I サブシ テム | Type II サブシ ステム | Type III サブシ ステム | クラウド サブシ ステム | 画像処理 サー バ | オンサイト 利用 装置 | 企業利用 |
|----------------------------|---------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|-----------------|------------------|--------------------|---------------------|-----------------|--------------|----------------|------|
| 数値計算 ライブラリ | FFTW, SuperLU, SuperLU MT, SuperLU DIST, METIS, MT-METIS, ParMETIS, Scotch, PT- Scotch, PETSc, MUMPUS, Xabclib ppOpen-HPCライブラ リ: ppOpen-APPL, ppOpen-AT, ppOpen- MATH 精度保障ライブラリ: LINSYS_V, DHPMM_F | ○ | ○ | ○ | ○ | ○ | | | ● |
| 入出力 フォーマッ トライブラ リ | NetCDF, Parallel netCDF, HDF5, JHPCN-DF | ○ | ○ | ○ | ○ | ○ | | | ● |
| 画像処理 ソフトウェ ア | OpenCV, Geant4 | ○ | ○ | ○ | ○ | ○ | | | ● |
| 機械学習 ソフトウェ ア | Caffe, Chainer, Keras, PyTorch, TensorFlow, Theano, Mxnet, ONNX パッケージ: conda, Numpy, Scipy, scikit- image, pillow, matplotlib, jupyterlab | ○ | ○ | ○ | ○ | ○ | | | ● |

スーパーコンピュータ「不老」 ソフトウェア利用環境

解析ソフトウェア利用環境

•*1 Type III サブシステムの会話型ノード(lm01)で利用可。

•*2 CPU並列版の他にGPU対応版が利用可。

| | | フロントエンドシステム | Type I サブシステム | Type II サブシステム | Type III サブシステム | クラウドサブシステム | 画像処理サーバ | オンサイト利用装置 | 企業利用 |
|----------|-----------------------------------------|-------------|---------------|----------------|-----------------|------------|---------|-----------|------|
| 流体解析 | OpenFOAM, FrontFlow blue/red | | ○ | ○ | ○ | ○ | | | ● |
| 構造解析 | LS-Dyna | | | ○ | | | | | |
| | FrontISTR | | ○ | ○ | ○ | ○ | | | ● |
| 計算化学解析 | AMBER | | ○ | ○*2 | | ○ | | | |
| | Gaussian, Gamess, Gromacs, LAMMPS, NAMD | | ○ | ○*2 | | ○ | | | ● |
| | Modylas | | ○ | ○ | | ○ | | | ● |
| メッシュャー | Pointwise | ○ | | | ○*1 | | | | |
| 統合ソフトウェア | HyperWorks | | | ○*2 | | ○ | | | |

スーパーコンピュータ「不老」 ソフトウェア利用環境

可視化ソフトウェア利用環境

*1 Type III サブシステムの会話型ノード(lm01)で利用可。

| | | フロント エンド システム | Type I サブシス テム | Type II サブシス テム | Type III サブシス テム | クラウド サブシス テム | 画像処理 サーバ | オンサイト 利用装置 | 企業利用 |
|---------------|--------------------------------------------------|---------------------|----------------------|-----------------------|------------------------|--------------------|-------------|---------------|------|
| リモート可 視化 | NICE DCV | ○ | | | ○*1 | | | | ● |
| 可視化ソ フトウェア | FieldView | ○ | | | ○ | | ○ | ○ | |
| | AVS/Expre ss, Paraview, POV-Ray, VMD | ○ | | | ○ | | ○ | ○ | ● |
| | 3D AVS Player, ffmpeg, ffplay | ○ | | | ○*1 | | ○ | ○ | ● |
| | IDL, ENVI | ○ | | | ○ | | ○ | | |
| | MicroAVS | | | | | | ○ | | ● |
| | 3dsMax, Visual Studio Pro | | | | | | ○ | | |

課金体系

スーパーコンピュータ「不老」 課金体系 (1/8)

- ▶ **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(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サブシステムと可視化システムを利用可能**
 - ▶ Type I、Type II、Type III、クラウド 全て共通

スーパーコンピュータ「不老」 課金体系 (2/8)

- ▶ アカデミックユーザ(大学、研究機関など所属)向けプラン
 - ▶ **基本負担金**
 - ▶ 利用登録1名につき年額10,000円(登録料)
 - ▶ 10,000利用ポイントを付加(他ユーザへの譲渡不可)
 - ▶ **追加負担金**
 - ▶ 1,000円単位で追加が可能
 - ▶ 50万円未満: 1円あたり1ポイント付加
 - ▶ 50万円以上: 1円あたり1.25ポイント付加

スーパーコンピュータ「不老」 課金体系 (3/8)

- ▶ Type1サブシステム(「富岳」型ノード)消費ポイント
 - ▶ 計算課金: $\text{利用ノード数} \times \text{経過時間[s]} \times 0.0056$
 - ▶ 基本負担金1万円=1万ポイント付加で利用可能な目安
 - 1ノードを 約21日
 - 4ノードを 約 5日
 - ▶ 10万円(基本利用料金1万円、追加料金9万円)
=10万ポイント付加で利用可能な目安
 - 1ノードを 約207日
 - 4ノードを 約 52日
 - 8ノードを 約 26日
 - ▶ 1ノードの年間利用額: 約16万9000円
 - 保守日等を考慮し年間350日利用できると仮定、以下同様

スーパーコンピュータ「不老」 課金体系 (4/8)

▶ TypeIIサブシステム(GPUノード)消費ポイント

▶ 計算課金: **利用GPU数 × 経過時間[s] × 0.007**

▶ 基本負担金1万円

=1万ポイント付加で利用可能な目安

□ 1ノード(1GPU)を 約17日

□ 1ノード(4GPU)を 約 4日

▶ 10万円(基本利用料金1万円、追加料金9万円)

=10万ポイント付加で利用可能な目安

□ 1ノード(1GPU)を 約165日

□ 1ノード(4GPU)を 約 41日

□ 4ノード(16GPU)を 約 10日

▶ 1ノード(4GPU)の年間利用額: 約84万7000円

スーパーコンピュータ「不老」

課金体系 (5/8)

- ◆ Type III: 1ソケット当たり28コア
- ◆ クラウド: 1ソケット当たり20コア

▶ TypeIIIサブシステム(大規模共有メモリノード)、 およびクラウドシステムの消費ポイント

▶ 計算課金: **利用ソケット数 × 経過時間[s] × 0.002**

▶ 基本負担金1万円

= 1万ポイント付加で利用可能な目安

□ 1ソケットを 約58日

□ 4ソケットを 約14日

▶ 10万円(基本利用料金1万円、追加料金9万円)

= 10万ポイント付加で利用可能な目安

□ 4ソケットを 約145日

□ 32ソケットを 約 18日

▶ 2ソケットの年間利用額: 約12万1000円

スーパーコンピュータ「不老」 課金体系 (6/8)

- ▶ **会話型利用:**
ログインノード上での処理の消費ポイント
 - ▶ **課金: 無料**
 - ▶ 主にインストール作業での利用想定です。
計算利用はご遠慮ください。
 - ▶ **Type IIIサブシステム(会話型処理)の課金はありますのでご注意ください。**
 - ▶ **各計算ノードの備えるinteractiveジョブクラスはバッチジョブ扱いの課金です**
(fx-interactive, cx-interactive, cl-interactive)



スーパーコンピュータ「不老」 課金体系 (7/8)

▶ ホットストレージ

▶ ファイル課金

- ▶ 1TB 以下の場合(Home + Large): 徴収しない
- ▶ ファイルの使用容量が1TB 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) 2TB(2000GB)利用: 1000GBが課金対象
⇒ 10ポイント/日 ⇒ 300円/30日、3,500円/350日
(保守などで停止する日については徴収しない)

※128TB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【予定】。

※128TBを超える容量が必要な場合は、事前に相談ください。



名古屋大学
NAGOYA UNIVERSITY

スーパーコンピュータ「不老」

課金体系 (8/8)

▶ コールドストレージ

▶ ファイル課金

▶ **1口: 50TB**

□ 1回だけ書き込める(追記可能)の
光ディスク×10枚(1枚約5TB)

▶ **ファイル負担経費(初回利用時のみ必要):**

1口 190,000円

▶ **ファイル管理経費(毎年必要、基本負担金とは別):**

1口 10,000円

- 事前納入の光ディスク6PB売り切り後は、ユーザによる持ち込みのみとなります(上限10PBまで)。
- 管理料1万円/年と格安です！
- **すでに、3PB程度が売れています！**
- **ご購入はお早めに！**

※ ユーザの利用終了時、もしくは、「不老」運用終了時に、
光ディスクを持ち帰りいただけます。



コールドストレージ サービス紹介

2021年2月より光ディスクを使ったコールドストレージサービスを開始していますが、2021年5月に光ディスクカートリッジが利用できる単体ドライブの貸し出しサービスも開始しました。

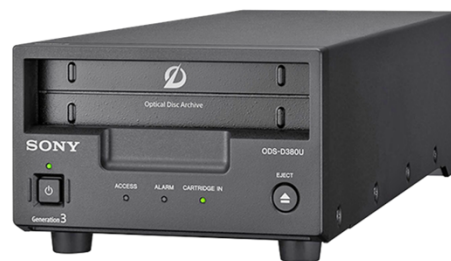


コールドストレージ内部

Windows/Mac OSを搭載したPCに、USB3.2又はUSB3.0で単体ドライブを接続して、専用のFilerソフトを使って利用できます。



光ディスクカートリッジ



単体ドライブ

輸送には専用のジェラルミンケースをご用意しています。



輸送用ジェラルミンケース

コールドストレージシステム概要:

詳細は、以下をご覧ください:

25
<https://icts.nagoya-u.ac.jp/ja/sc/pdf/pamphlet-cold-202012.pdf>



名古屋大学
NAGOYA UNIVERSITY



スーパーコンピュータ「不老」 新サービス：ノード準占有利用

- ▶ ノード準占有利用
 - ▶ 1時間以内のジョブ実行開始を保証
 - ▶ バッチ利用のみ
- ▶ 1ノード、1ヶ月間の利用負担金
 - ▶ Type IIサブシステム：
210,000円（通常価格の約2.8倍）
 - ▶ クラウドシステム：
62,000円（通常価格の約2.8倍）

提供資源量が無くなり次第、受付終了
→お早めに

スーパーコンピュータ「不老」 新サービス：クラウドノード予約利用

▶ クラウドノード予約利用

- ▶ 専用の予約システム「UNCAI」(Webブラウザで操作)でノードを予約して利用する

▶ 利用料金

- ▶ 計算課金：**利用コア数 × 経過時間[s] × 0.0001**
(ソケット当たりコア数を考えればバッチ実行と同等)
 - ▶ 1ソケット当たり20コア、10コア(0.5ソケット)から利用可能
 - ▶ 利用可能なメモリ容量もコア数に比例
 - ▶ **基本負担金1万円でXeon Gold 20コア1ソケットを約58日間使用可能**

スーパーコンピュータ「不老」 新サービス：グループ利用

売られています！

▶ グループ利用

- ▶ 1口10人まで、10万円で100,000ポイント付与
- ▶ 登録料なし
- ▶ 個人利用(個別に1万円×10人が個別に基本負担金を払う)との違い
 - ▶ 100,000ポイントを10人で共有利用できます
 - ▶ 個人利用では、購入した10,000ポイントを他者と共有できません

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)

- ▶ 名大学内外の学部・大学院等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)

スーパーコンピュータ「不老」 民間利用制度（産業利用）

▶ 書類での審査があります。追加負担金も同額です。

▶ 公開型

▶ 10アカウントまで**20万円**

▶ アカデミック利用の料金の

2倍(20万円当たり100,000ポイント)

▶ 企業名、課題名、報告書をWebで公開(延期制度あり)

▶ 非公開型

▶ 10アカウントまで**40万円**

▶ アカデミック利用の料金の

4倍(40万円当たり100,000ポイント)

▶ 外部に情報は非公開(ただし内部会議では情報が出ます)

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。

優先ジョブクラス（アカデミック・民間）

- ▶ **Typel、Typell、クラウドの各サブシステム**
 - ▶ ポイントを**通常の2倍**消費することで利用可能なジョブクラス
 - ▶ 専用のキューにジョブを投げることで利用
 - ▶ 通常のジョブクラスが混んでいるときでも早く実行したい、
というユーザの利用を想定
- ▶ （優先ジョブクラスも混んでしまったらすいません）

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（※ZOOMによる遠隔面談も可）
 - ▶ 実際に画面を見ながらなど、電話やメールでは伝えにくいご質問やご相談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てください。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から

可視化設備

- ▶ 情報基盤センター可視化室（本館1階）
 - ▶ 可視化室の利用は予約制となります（無料）

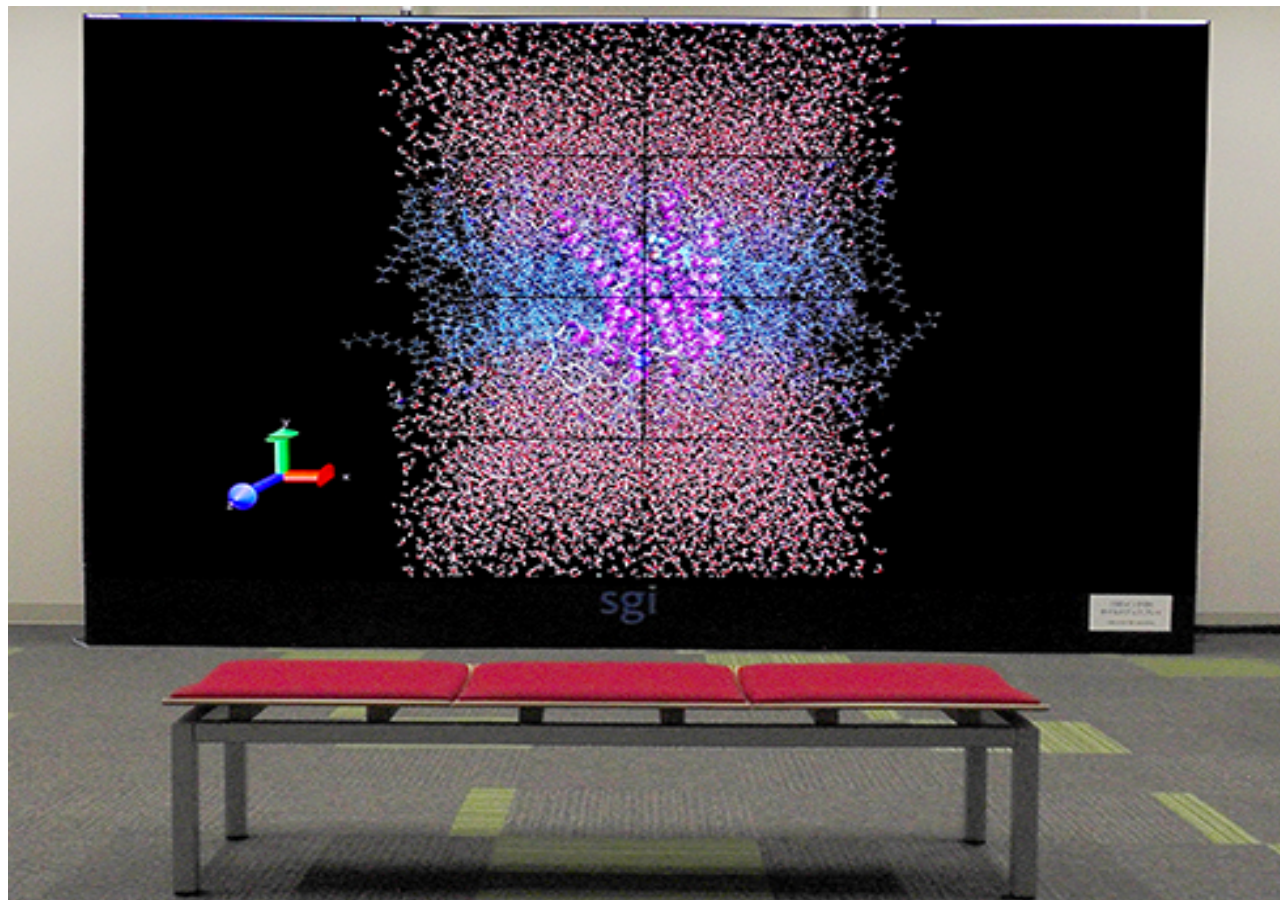


- 8K 185型タイルドディスプレイ
- 全天周映像視聴システム
- 円偏光立体視システム など

可視化設備

- ▶ 情報基盤センター可視化室（本館1階）
 - ▶ 可視化室の利用は予約制となります（無料）

8K 185型
タイルド
ディスプレイ



利用者支援室（2部屋）

- ▶ 情報基盤センター利用者支援室（本館3階）
 - ▶ 利用者支援室の利用は予約制となります（無料）



訪問者が現地で利用可能な機材

▶ 画像処理装置 (IF可視化室)

- Windows10が動作するデスクトップパソコン(1台)
- 対話型のプリ・ポスト処理や共有ファイルストレージの大容量ファイル取り扱い用
- 10Gbps SINETによる高速インターネットが利用可能
- USB外付けHDDやディスクメディア (Blu-rayディスク) を持ち込んでホットストレージに対するデータの読み書きが可能
- 可視化室に設置された185インチ8K高精細ディスプレイに接続、大規模データの高品位なプリポスト処理やコンテンツ生成に活用可能

画像処理装置



ODA単体ドライブ



- コールドストレージの光ディスクアーカイブと互換性のあるUSB接続ドライブ
- 画像処理装置・オンサイト利用装置に接続して利用可能

▶ オンサイト利用装置 (3F利用者支援室)

- Linuxが動作する計算サーバ(2台)
- 対話型のプリ・ポスト処理、スーパーコンピュータシステムとの大容量ファイル取り扱い用
- USB外付けHDDや光ディスクメディア (Blu-rayディスク) を持ち込んでホットストレージに対するデータの読み書きが可能
- 予約制の部屋貸し切りで、ハードディスク持ち込みで大規模データの入力、回収が可能

オンサイト利用装置



- ODA単体ドライブの貸し出し
できます (宅配便で郵送できる
専用ケースも有)
- ご相談ください

スーパーコンピュータ「不老」 講習会等 開催情報（2022年4月～）

2022年度「不老」利用型講習会 開催予定 （オンライン開催）

- 9月20日：OpenACC（初級）
- 9月21日：OpenFOAM（初級 自動車空力解析）
- 10月3日：数値計算ライブラリ（初級）

▶ 2022年11月以降も、多数開催予定

▶ 最新状況は以下のHPをご覧ください

<https://www2.itc.nagoya-u.ac.jp/cgi-bin/kousyu/csview2.cgi>



スーパーコンピュータ「不老」 アプリケーション

スーパーコンピュータ「不老」： 利用されているアプリケーション例

■ 大規模数値計算 (Type I サブシステム)

- ▶ 名大 坪木和久 教授：スーパー台風解析 雲解像モデルCReSS
- ▶ 名大 渡邊智彦 教授：プラズマシミュレーション GKV

■ AI/GPUコンピューティング (Type II サブシステム)

- ▶ 名大 森健策 教授：AIによる医用画像診断支援技術 (AI)
- ▶ 名工大 本谷秀堅 教授：医用画像処理 LDDMM (GPU Comp.)
- ▶ 防衛大 萩田克美 講師：全原子MD計算による結晶化挙動の解明 (GPU Comp.)
⇒第三部で発表

■ 大規模数値計算+AI (Type I サブシステム+Type II サブシステム連携)

- ▶ 立教大 望月祐志 教授：フラグメント分子軌道計算 ABINIT-MP ⇒第三部で発表
- ▶ 山梨大 相馬一義 准教授：機械学習による気象予測

■ 名古屋大学情報基盤センター 独自開発ソフトウェア

- ▶ 名大 高橋一郎 特任主任技師：可視化ツール VisPlus、コールドストレージ操作ツール ODAPLUS (Type III サブシステム+ホット/コールドストレージ)
- ▶ 名大 片桐孝洋 教授：精度保証数値計算ライブラリ VNC-HPC (東女大 萩田武史教授、芝工大 尾崎克久教授との共同研究成果物) (Type I /Type II /クラウド)

センター独自開発ソフトウェア

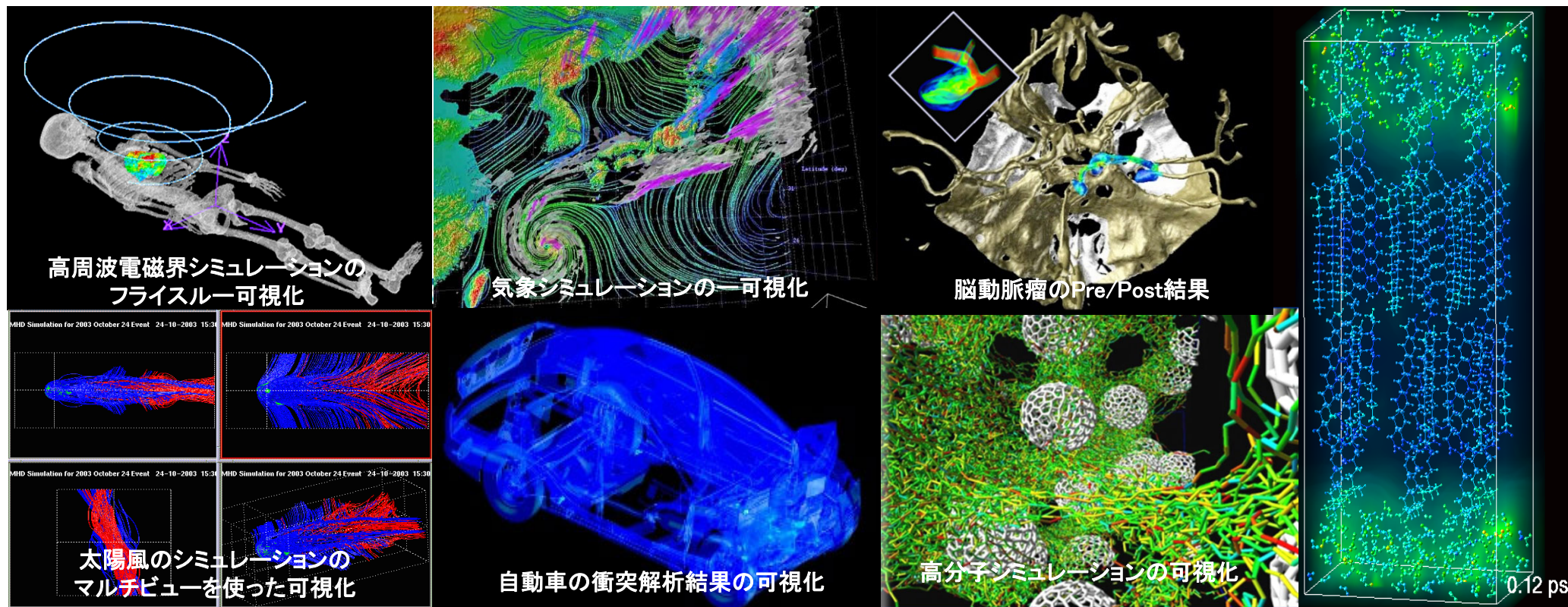
プログラム名: VisPlus

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タマイズしてオープンプラットフォ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(専用コマンド、**現在運用中**)

利用者端末



— ODA単体ドライブ & ライブラリ装置の利用方法 —

学内Network, SINET

情報基盤センター

スーパーコンピュータ「不老」

フロントエンド・サーバ

スパコン用ログインノード

データ転送用ODAログインノード

スーパーコンピュータ

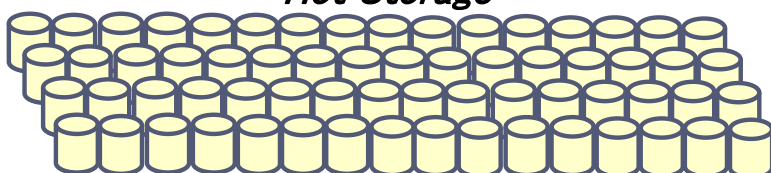
Type I Type II Type III クラウド
サブシステム サブシステム サブシステム サブシステム

利用者支援室



ODA単体ドライブ装置

Hot Storage



DDN 共有ストレージ(/home,/largeファイルシステム)

データ転送

アーカイブ



リコール

Cold Storage



ODAライブラリ装置

センター内・センター外での
利用、研究室で保管



カートリッジの
収容 / 搬出

「不老」プリインストール: VNC-HPCライブラリ

- ポスト「京」萌芽的課題1 基礎科学のフロンティアー極限への挑戦ー:
「極限の探究に資する精度保証付き数値計算学の展開と超高性能計算環境の創成」
(代表: 荻田武史 東京女子大学 教授、~2019年度終了)で開発
- 2021年度JHPCN課題で実施: (jh210002-NAHI)「Developing Accuracy Assured High Performance Numerical Libraries for Eigenproblems」(片桐孝洋(名古屋大学・情報基盤センター))
- 演算精度が保証された計算結果を、実用的時間で得られる超高性能計算環境を構築
- **スーパーコンピュータ「不老」プリインストールソフトウェア**
- 以下のライブラリのソースコードを公開中

HP: <http://www.math.twcu.ac.jp/ogita/post-k/index.html>

1. **OzBLAS: Accurate and Reproducible BLAS based on Ozaki scheme** (尾崎スキームに基づく高精度基本線形計算ライブラリ) [for PC, GPU]
2. **GEMMTC: GEMM using Tensor Cores** (Tensorコアを用いた行列積プログラム) [for GPU]
3. **DHPMM_F for GPU: High-precision Matrix Multiplication with Faithful Rounding** (高精度行列積プログラム) [for GPU]
4. **PDDOTK: K-fold Precision Dot Product** (分散並列版高精度内積計算プログラム) [for PC, FX100]
5. **BLAS-DOT2: Higher-precision BLAS based on Dot2** (高精度内積計算アルゴリズムDot2に基づく基本線形計算ライブラリ) [for GPU]
6. **LINSYS_VR: Verified Solution of Linear Systems with Directed Rounding** (連立一次方程式に対する精度保証プログラム(丸めモードの変更機能付き)) [for K Computer, FX100]
7. **LINSYS_V: Verified Solution of Linear Systems** (連立一次方程式に対する精度保証プログラム) [for PC, K Computer, FX100]
8. **DHPMM_F: High-precision Matrix Multiplication with Faithful Rounding** (高精度行列積プログラム) [for PC, K Computer, FX100]

Verified Numerical Computations
VNC - HPC
High-Performance Computing

ポスト「京」萌芽的課題1
基礎科学のフロンティアー極限への挑戦
極限の探究に資する精度保証付き数値計算学の展開と超高性能計算環境の創成

| トップページ Top | 課題概要 Abstract | 研究体制 System | 研究内容 Contents | 成果公開 Results |
|---------------|------------------|----------------|------------------|-----------------|
|---------------|------------------|----------------|------------------|-----------------|

リンク

- トップページ
- 課題概要
- 研究体制
- 研究内容
- 成果公開

課題概要

本研究課題の目的は、ポスト「京」において、精度が保証された計算結果を実用的に得られるような超高性能計算環境を構築することです。具体的には、ポスト「京」で実行される様々な数値シミュレーションにおいて、数値計算による計算誤差の問題が解消されることによって、シミュレーションサイエンスの品質を向上させ、さらに想定外の現象が発生する可能性を低減することが可能となります。すなわち、本研究課題の遂行は、人が安心して生活できる社会基盤の構築に直結します。

たとえば、産業界における製品開発や非破壊検査等のための計算工学シミュレーションや、地震や津波などの災害シミュレーションは、日本に限らず世界中で盛んに行われていますが、計算誤差の観点から高精度なシミュレーションの実現をしている例は皆無です。これは、計算機によって問題の近似的な解を得ることよりも、その近似解の検証のほうがかかると困難かつ計算資源を必要とする、と考えられており、それが高性能計算分野の常識であるからです。実際、これは1990年代までは事実でしたが、本研究グループが2000年代から切り拓いてきた高速で実用的な精度保証付き数値計算法やエラーフリー変換に基づく高精度数値計算法をベースとして、今、ポスト「京」によって、この常識を打ち破る時期が到来しています。すなわち、ポスト「京」において、高速性と高精度性を融合した超高性能計算環境の創成を世界に先駆けて達成することは、スーパーコンピュータに質的転換をもたらす、我が国の高い科学技術力を国内外に示すこととなります。

精度 (高信頼性)
本研究課題

エネルギー効率(省エネ)
Green500,
Green Graph500, ...

速度 (高速性)
Top500, Graph500, ...

性能 = 速度 × 精度

大規模数値計算を行う高性能計算分野においては、問題の大規模化に伴って計算誤差が累積しやすくなり、これが今後、大きな問題となってきます。たとえば、計算機上で標準的に用いられる32ビットの浮動小数点演算では、100万次元程度の密行列系線形問題に対して数値計算を行うと、問題自身は比較的良条件下で解きやすい問題であったとしても、誤差解析の結果から理論的には1桁も正しくないような計算結果が得られることが分かっています。また、計算誤差の単なる累積だけでなく、問題の困難さが条件数として

スパコン「不老」の今後の展開

～Type II (GPU) 利活用を中心に～

OSS活用事例

- ▶ タンパク質構造予測ソフト **AlphaFold2** を Type II サブシステム上で簡単に利用できるように整備 (2022年2月2日)

<https://icts.nagoya-u.ac.jp/ja/sc/news/maintenance/2022-01-28-alpha-fold.html>

- ▶ AlphaFoldの利用規約が更新され **民間利用のユーザも利用可能**
- ▶ 分散ノードのSSDを利用可能とするNVMESHにデータベース配置
⇒ 10時間以上かかるHHblits処理が10分に短縮

AlphaFold

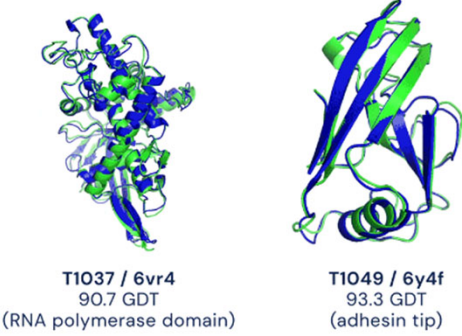
This package provides an implementation of the inference pipeline of AlphaFold v2.0. This is a completely new model that was entered in CASP14 and published in Nature. For simplicity, we refer to this model as AlphaFold throughout the rest of this document.

We also provide an implementation of AlphaFold-Multimer. This represents a work in progress and AlphaFold-Multimer isn't expected to be as stable as our monomer AlphaFold system. [Read the guide](#) for how to upgrade and update code.

Any publication that discloses findings arising from using this source code or the model parameters should [cite the AlphaFold paper](#) and, if applicable, the AlphaFold-Multimer paper.

Please also refer to the [Supplementary Information](#) for a detailed description of the method.

You can use a slightly simplified version of AlphaFold with [this Colab notebook](#) or community-supported versions (see below).



T1037 / 6vr4
90.7 GDT
(RNA polymerase domain)

T1049 / 6y4f
93.3 GDT
(adhesin tip)

● Experimental result
● Computational prediction

(source: <https://github.com/deepmind/alphafold>)

機械学習の利用促進

- ▶ AIモデル学習、AIモデルの向上のための、
実行時間が増加
- ▶ 実行時間を短縮したい
⇒ 解決法) AI処理 (GPU) の並列実行

- ▶ 例) ディープラーニング実行時の
ハイパーパラメタチューニング

第184回ハイパフォーマンスコンピューティング研究発表会
2022/5/11

超解像のための機械学習プログラムの ハイパーパラメータ最適化に対する 自動チューニングの適用

楊暄(ヨウケン)¹⁾, 藤家空太郎¹⁾, 矢島 雄河¹⁾, 秋田 和俊²⁾,
藤井 昭宏¹⁾, 田中 輝雄¹⁾, 浮田 宗伯²⁾, 大島 聡史³⁾

1)工学院大学, 2)豊田工業大学, 3)名古屋大学

研究目的

- 機械学習プログラムでは、より良い学習をするためにハイパーパラメータを最適化が必要
- 機械学習(超解像)プログラムに自動チューニングを適用
 - ▶ 学習プログラムを繰り返し実行するため、必要実行時間の大幅に削減が必要



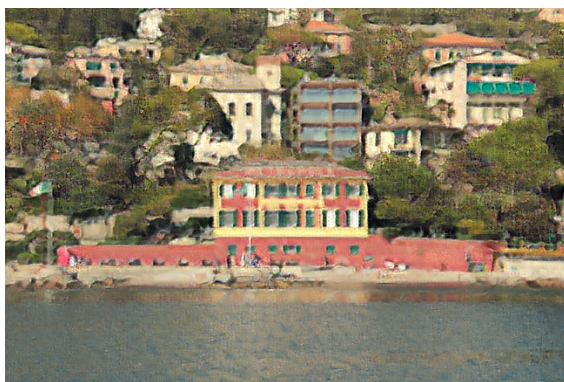
自動チューニング時間の大幅な削減

画像比較

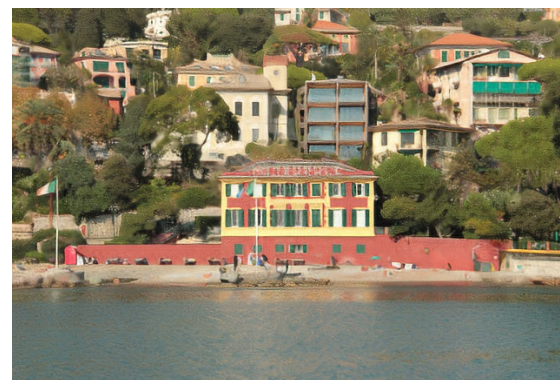
250回トレーニングした後の出力画像の画質を検証



↓ 各辺を4倍に拡大



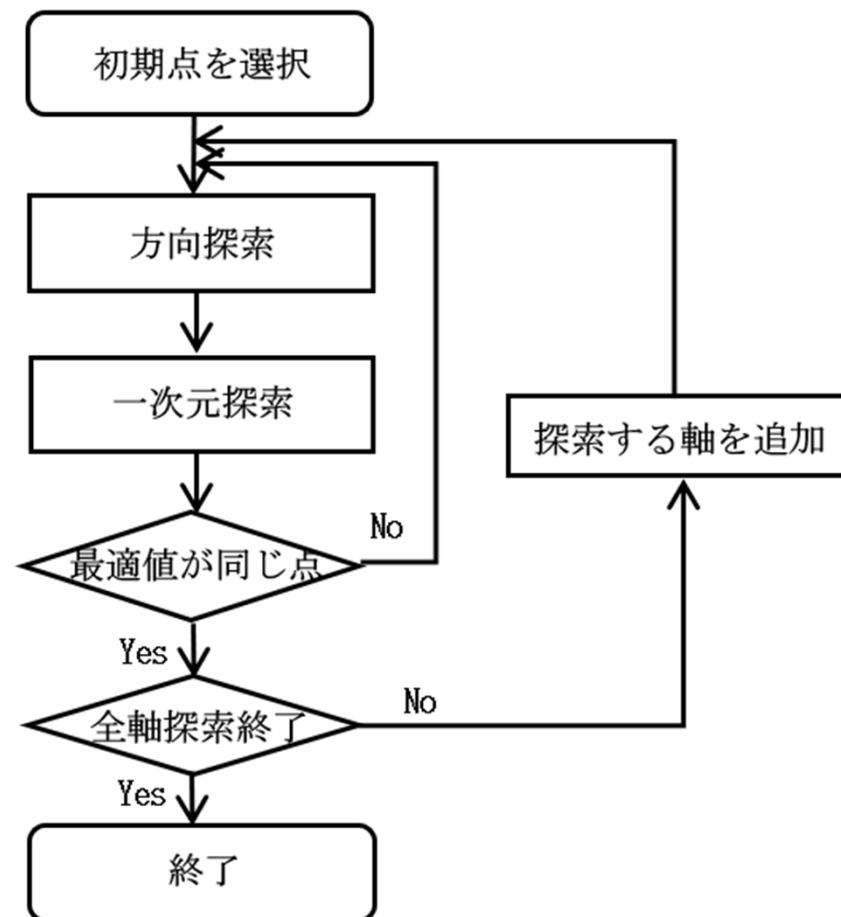
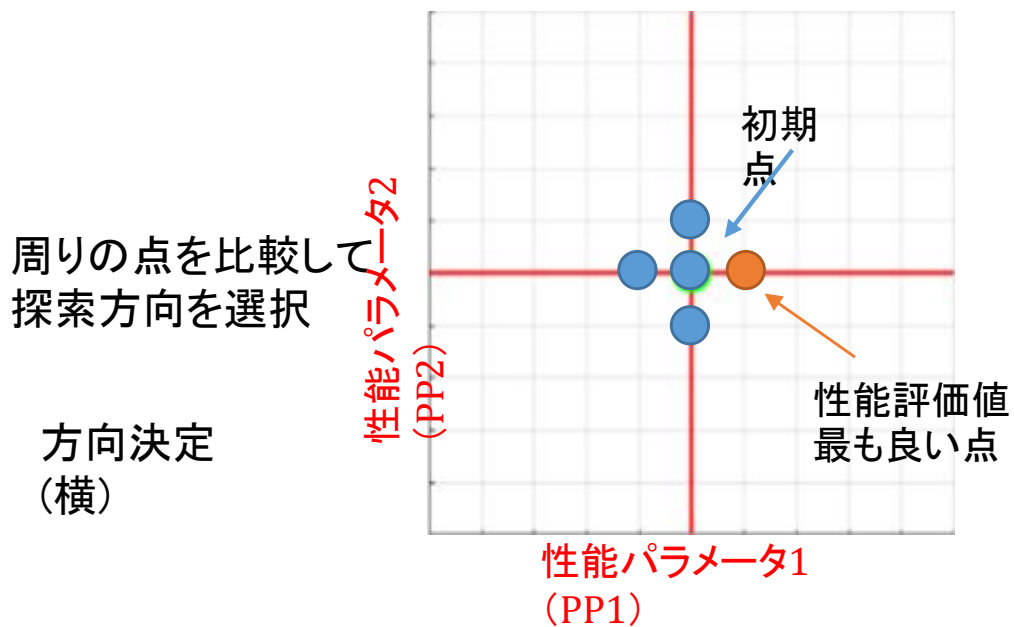
事前学習, ファインチューニングを用いて
250回トレーニングする(epoch=250)



事前学習を行わずに
2000回トレーニングする(epoch=2000)

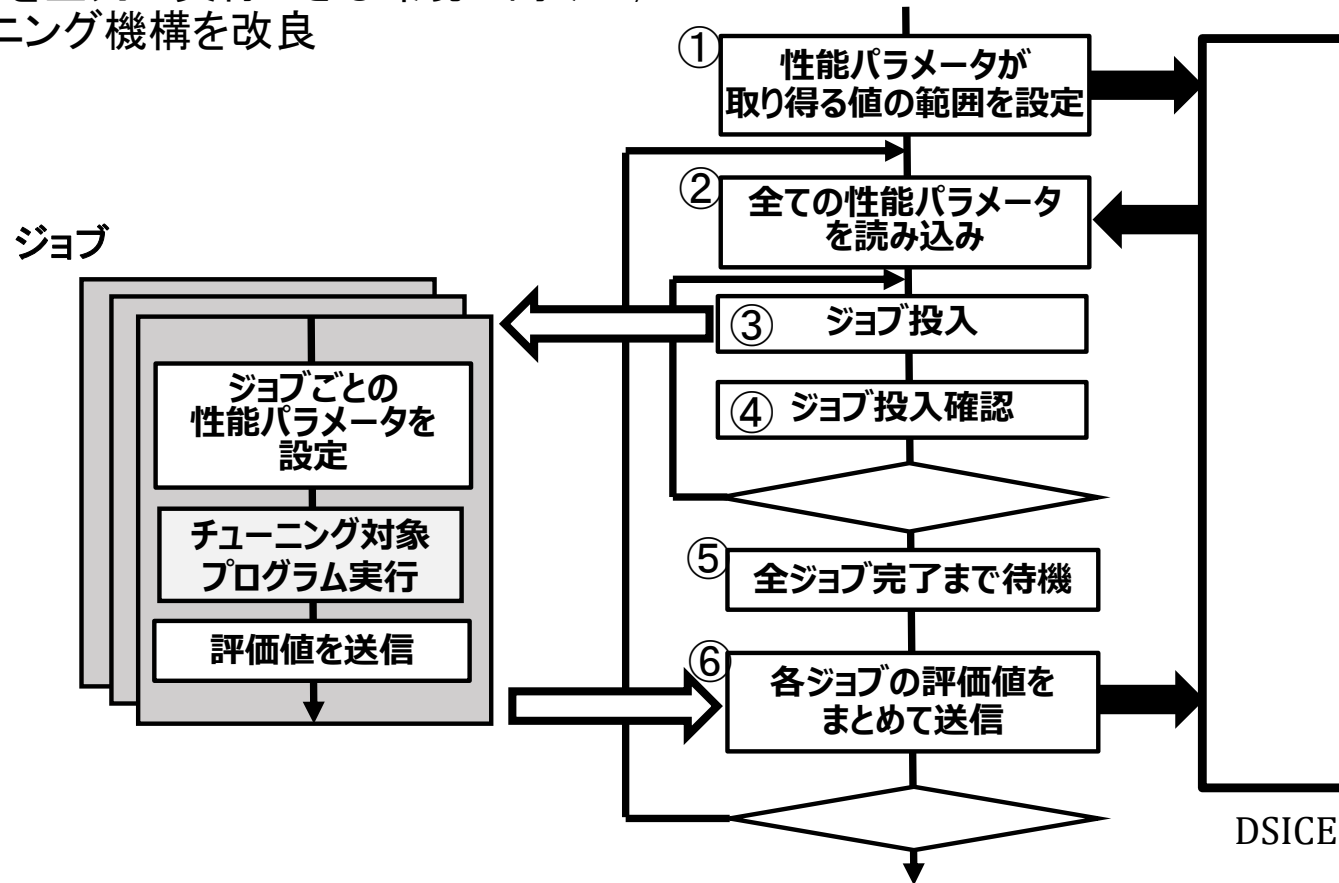
自動チューニング手法

- 方向探索と次元探索を繰り返す
方向探索:基準点に隣接する点を比較して, 探索方向を選択
次元探索:方向探索で見つけた方向にある点を全て調べ,
最も性能の良い点を新たな基準点とする



- 複数のジョブで同時に実測

複数のジョブを並列に実行できる環境に向けて、
自動チューニング機構を改良



超解像プログラムの設定

• ハイパーパラメータ

- ▶ 4種類: 学習率, w2 (Perceptual損失ウェイト), w3 (Adversarial 損失ウェイト), w4(Style損失ウェイト)
- ▶ w1 (MSE損失ウェイト)を固定: 10^{-1}
- ▶ 組み合わせ13,310(= $10 \times 11 \times 11 \times 11$)通り

| | | |
|-------------------------|--------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|--------|
| 学習率 | $10^{-6}, 5 \times 10^{-6}, 10^{-5}, 5 \times 10^{-5}, 10^{-4}, 5 \times 10^{-4}, 10^{-3}, 5 \times 10^{-3}, 10^{-2}, 5 \times 10^{-2}$ | 10パターン |
| w2 (Perceptual損失ウェイト) | $0, 10^{-2}, 5 \times 10^{-2}, 10^{-1}, 5 \times 10^{-1}, 1, 5, 10^1, 5 \times 10^1, 10^2, 5 \times 10^2$ | 11パターン |
| w3 (Adversarial 損失ウェイト) | $0, 10^{-5}, 5 \times 10^{-5}, 10^{-4}, 5 \times 10^{-4}, 10^{-3}, 5 \times 10^{-3}, 10^{-2}, 5 \times 10^{-2}, 10^{-1}, 5 \times 10^{-1}$ | 11パターン |
| w4 (Style損失ウェイト) | $0, 10^{-2}, 5 \times 10^{-2}, 10^{-1}, 5 \times 10^{-1}, 1, 5, 10^1, 5 \times 10^1, 10^2, 5 \times 10^2$ | 11パターン |
| w1(MSE損失ウェイト) | 10^{-1} | 固定 |

• 計算機環境

名古屋大学のスーパーコンピュータ「不老」 Type II サブシステム

▶ リソースグループはcx-share

▶ **cx-share: 最大50のジョブを同時に実行できる**

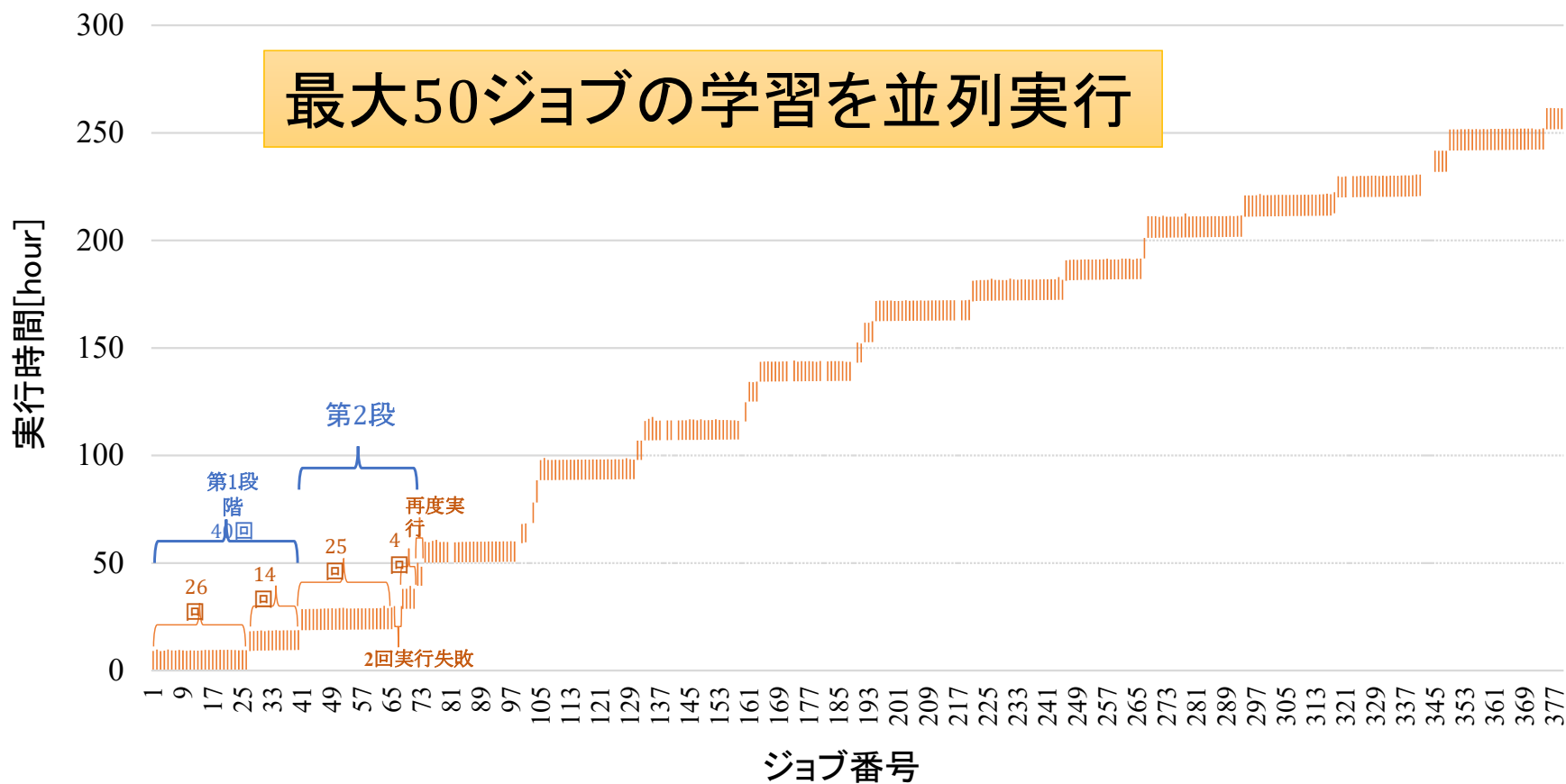
▶ 1ジョブにつき1GPU を使う

Matlab R2021 b

▶ 入力した画像から性能評価値(Perceptual Score)を計算

▶ PIRM(Perceptual Image Restoration and Manipulation)プログラムを実行

ジョブ実行状況



推定したハイパーパラメータ

| | DSICE並列化 | 従来値 |
|------------------------|----------------|--------|
| 所要時間 | 262時間 | — |
| 探索回数 | 363回 | — |
| 学習率 | 0.0001 | 0.0001 |
| w2(Perceptual損失ウェイト) | 50.0 | 2.0 |
| w3(Adversarial 損失ウェイト) | 0.01 | 0.001 |
| w4(Style損失ウェイト) | 0.01 | 1.0 |
| Perceptual Score:最適値 | <u>2.00053</u> | 2.04 |

量子コンピュータ回路シミュレータの展開

- ▶ **量子コンピュータの回路シミュレータ**が、アルゴリズムの進展に加え、GPUでの演算効率の良さから注目
 - ▶ 例) プログラミング プラットフォーム
「NVIDIA Quantum Optimized Device Architecture (QODA)」
(参考: <https://www.hpcwire.jp/archives/64737>)
- ▶ 「不老」Type II サブシステム:
量子回路シミュレータ **cuQuantum** が稼働中
- ▶ 「不老」を利用するJHPCN課題で活用中
 - ▶ 2022年度 JHPCN採択課題 : jh220010
「FMOプログラムABINIT-MPの高速化と超大規模系への対応」
望月祐志 教授(立教大学)
⇒ **第三部**で発表

cuQuantumによる量子回路の数値シミュレーション高速化

大阪公立大学 杉崎研司先生提供

| 量子ビット数 | CPU only | CPU + GPU | 加速 |
|-----------|------------------|----------------|---------------|
| 9 | 2093 秒 | 627 秒 | x 3.34 |
| 11 | 6736 秒 | 1947 秒 | x 3.46 |
| 17 | 67.51 時間 | 5.13 時間 | x 13.2 |
| 19 | 313.61 時間 | 9.75 時間 | x 32.2 |

[CPU only]

Linuxワークステーション

CPU: AMD EPYC 7713P (2.0 GHz, 64-core)

GPU: None

[CPU + GPU]

スパコン「不老」 Type IIサブシステム

CPU: Intel Xeon-Gold 6230 (2.10–3.90 GHz, 20-core)

GPU: **NVIDIA Tesla V100** (All simulations were executed by using one GPU (cx-share))