

2024年10月2日（水）
第5回 スーパーコンピュータ「不老」 ユーザ会
最近の「不老」更新状況

星野哲也（名古屋大学 情報基盤センター 准教授）
hoshino@cc.nagoya-u.ac.jp

最近の「不老」更新状況



2023 - 2024 重要トピック

- ゲノムデータ解析ソフトウェア Clara Parabricks 利用開始
- ABINIT-MP新バージョン導入
- nuccメールのセキュリティ強化
- TypellサブシステムのCUDA Toolkit & OpenMPI 利用方法の変更
- 「CUDA-Qハンズオン講習会」開催（10/18、ハイブリッド）
- 「GPUミニキャンプ（機械学習）」開催（12/2 - 12/9）

- これらお知らせはWebに掲載しております
- 特に重要なお知らせはメールでも配信しています

スーパーコンピュータサービスに対する新

- スーパーコンピュータ「不老」は新型コロナウイルス追加処理、質問対応、その他が通常より

最新のメンテナンス・障害情報

- 現在、メンテナンス等の予定はありません。

お知らせ

- 2021年度の新規利用申請及び追加負担金申請
- 2021.08.03 講習会 「AVS/Express座学
- 2021.08.03 講習会 「第20回スーパーコンピュータ講習会」-9月13日開催
- 2021.08.03 イベント スーパーコンピュータ開催
- 2021.07.30 イベント 第2回スーパーコンピュータ
- 2021.07.29 重要 スーパーコンピュータ
- 2021.07.28 イベント 第2回スーパーコンピュータ
- 2021.07.16 その他 Type IIサブシステムに関する詳細資料を公開しました
- 2021.07.15 重要 TypeI サブシステム
- 2021.07.14 講習会 「第19回スーパーコンピュータ講習会」-8月23日開催
- 2021.05.20 その他 富士通MPIと組み合わせた
- 2021.04.27 重要 ポイントを使い切つ

ゲノムデータ解析ソフトウェア Clara Parabricks利用開始

- NVIDIA Parabricks (<https://docs.nvidia.com/clara/parabricks/latest/index.html>)
 - ゲノム解析のためのソフトウェア
 - 生殖細胞系や体細胞系の解析を含む、ゲノム解析における一般的な解析タスクのスループット時間を大幅に改善
- Type II サブシステムで利用可能
 - 2023年11月より
 - GPU及びSSDを使って高速処理
 - Type IIでの使い方

```
[USERID@flow-cx01 ~]$ cp -r /center/local/sample/parabricks .      #カレントディレクトリにコピー
[USERID@flow-cx01 ~]$ cd parabricks
[USERID@flow-cx01 parabricks]$ ls
cx.sh cx.sh.1331301.out in out
[USERID@flow-cx01 parabricks]$ pjsub cx.sh                        #ジョブ実行
```

ABINIT-MP新バージョン導入

- ABINIT-MP (https://www.cenav.org/abinit-mp-open_ver-1-rev-10/)
 - フラグメント分子軌道 (FMO) 計算を高速に行えるソフトウェア
 - 立教大学 望月祐志教授、名古屋大学情報基盤センター教職員および関連研究者の共同研究成果として、より高速に計算を行うことができる新しいバージョンが公開

- Type I 及び Type IIサブシステムで利用可能

- バージョン : Ver. 2 Rev. 8

- 使い方

- Type I

```
[USERID@flow-cx01 ~]$ cp -r /center/local/sample/abinit-mp-ver2rev8-fx .
```

- Type II

```
[USERID@flow-cx01 ~]$ cp -r /center/local/sample/abinit-mp-ver2rev8-cx .
```

nuccメールのセキュリティ強化

- 名古屋大学ではメールアカウントへの不正アクセスを防止するため、メールサーバに対するセキュリティ強化を実施
- nuccメールは2024年6月1日以降、学外からはメールソフトを利用しての送受信ができなくなりました
- 本学所属の方は全学VPNに接続してから送受信することにより、学外からでもメールソフトでの送受信が可能
- 学外所属の方は、学外からメールソフトを利用しての送受信ができなくなりますので、多要素認証化されたWEBメール（Active!Mail）をご利用ください

TypellサブシステムのCUDA Toolkit & OpenMPI利用方法の変更

- 2024年4月以降、TypellサブシステムのCUDA Toolkit & OpenMPIを使用する場合、サポートされているバージョンのGCCモジュールを、事前にロードする必要があります。
(例)
 - CUDA12を使用する場合:
`module load gcc/11.3.0 cuda/12.1.1`
 - CUDA11を使用する場合:
`module load gcc/11.3.0 cuda/11.8.0`
`module load gcc/10.3.0 cuda/11.8.0`
`module load gcc/8.4.0 cuda/11.8.0`
`module load gcc/4.8.5 cuda/11.2.2`
 - CUDA10を使用する場合:
`module load gcc/4.8.5 cuda/10.2.89`
 - さらにOpenMPIを使用する(CUDA support)場合：
`module load openmpi_cuda/4.0.5`
- 詳細につきましてはHPC-Portalの [Information] -> "Software updates" をご参照ください。

「CUDA-Qハンズオン講習会」開催（10/18、ハイブリッド）

- 「CUDA-Q」はNVIDIAが開発している量子古典ハイブリッド計算のためのオープンソースプラットフォーム
 - 量子コンピュータ向けのアルゴリズム研究やアプリケーション開発には、量子回路シミュレーションが大きな役割を果たしている
 - CUDA-Qは実機を含めたバックエンドを選択し量子計算を実行でき、古典（従来型）高性能計算と組み合わせたハイブリッド計算を実行できる
- 講師
 - エヌビディア合同会社 濱村、丹、古家
- 講習会では Type II のGPUを利用
 - 参加者一人 1 GPU以上を確保の予定
- 登録はこちら <https://icts.nagoya-u.ac.jp/ja/sc/news/event/20241018-CUDA-Q.html>
 - 「現地のみ」となっていますが、ハイブリッド開催となる予定です

「GPUミニキャンプ（機械学習）」開催（12/2 - 12/9）

- 「GPUミニキャンプ」とは？
 - 参加者が課題を持ち込み、メンターに相談しながら実装を進められる機会
- 「GPUミニキャンプ（機械学習）」を実施予定
 - 日程：12/2 - 12/9
 - 初日にZoom等に集まって方針を決める
 - 最終日にZoom等で簡単な成果発表
 - それ以外の日は各自実装を進め、Slack等で質問対応
 - 詳細は決まり次第HP等で今後お知らせします

まとめ

- 2023後半-2024年の「不老」の主な更新情報を紹介しました
- 「不老」は稼働から4年以上が経過し、とても安定してサービスを提供できていますが、今後も利便性を高めるための設定更新やソフトウェアのアップデートなどは行っていくため、メールやWebを用いて提供される情報にはご注意ください
- 不便に思った点などのご連絡ください
 - 全てに対応できるかはわかりませんが、可能な範囲で改善していく予定です