

# CAE(と財布)にやさしい スパコンの賢い使い方

-速い・大きい・便利 JAMSTECのスパコン産業利用-

JAMSTEC 国立研究開発法人海洋研究開発機構

地球情報基盤センター

小川道夫

# もっとメモリ、もっとCPU それがスパコン

メインメモリ **16GB**

**8個**のコア



こんな小さなメモリ  
じゃ、直ぐに落ち  
ちゃうよ。

もっと沢山CPU使  
えれば、一度に実  
験できるのに。。。



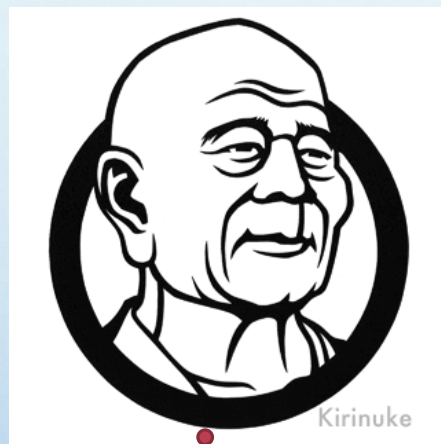
メインメモリ **32TB**

**2,560個**のコア

それなら、スパコン  
を買いなさい

# もっとメモリ、もっとCPU それがスパコン

そんな高いもの  
買えません!



JAMSTECの  
スパコン産業利用

ならば、かりれば良  
いのです。



# JAMSTECの スカラ型スパコン

- 大規模共有メモリシステム(SGI製 UV-2000)



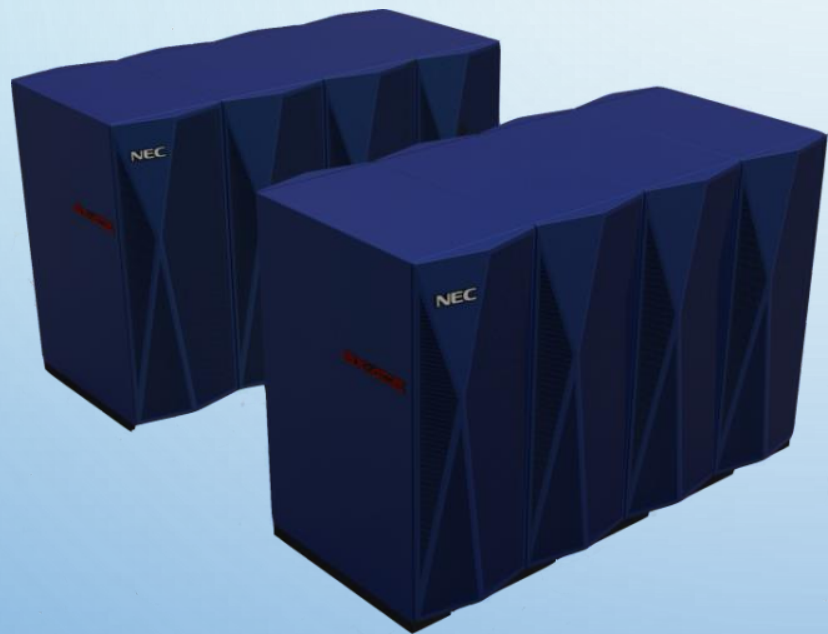
- ◎ 32TBメモリが共有メモリとして利用可能
- ◎ 互換性の高い Intel Xeon プロセッサ (2,560コア)
- ◎ SUSE Linux Enterprise 11 SP3
- ◎ 多くの市販プログラム検証済み
- ◎ もちろんオープンソース系ソフトとの相性も抜群

大量のメモリを搭載した、2,560コアのワークステーションのように扱える

※バッチ利用になりますが...

# JAMSTECのベクトル型スパコン

- 地球シミュレータ (NEC製 SX-ACE)



- ◎ 1.31 PFのピーク性能(5,120ノード)
- ◎ 実行効率が高いベクトル型プロセッサ
- ◎ 地球温暖化研究や気候変動研究などに実績あり
- ◎ 第一原理計算なども
- ◎ 市販プログラムは動作しない
- ◎ ソースコードを持っている事が前提

上手く移植できれば費用対効果は高くなる可能性あり

# 2つの利用制度

- 目的に合わせた利用制度が選べます

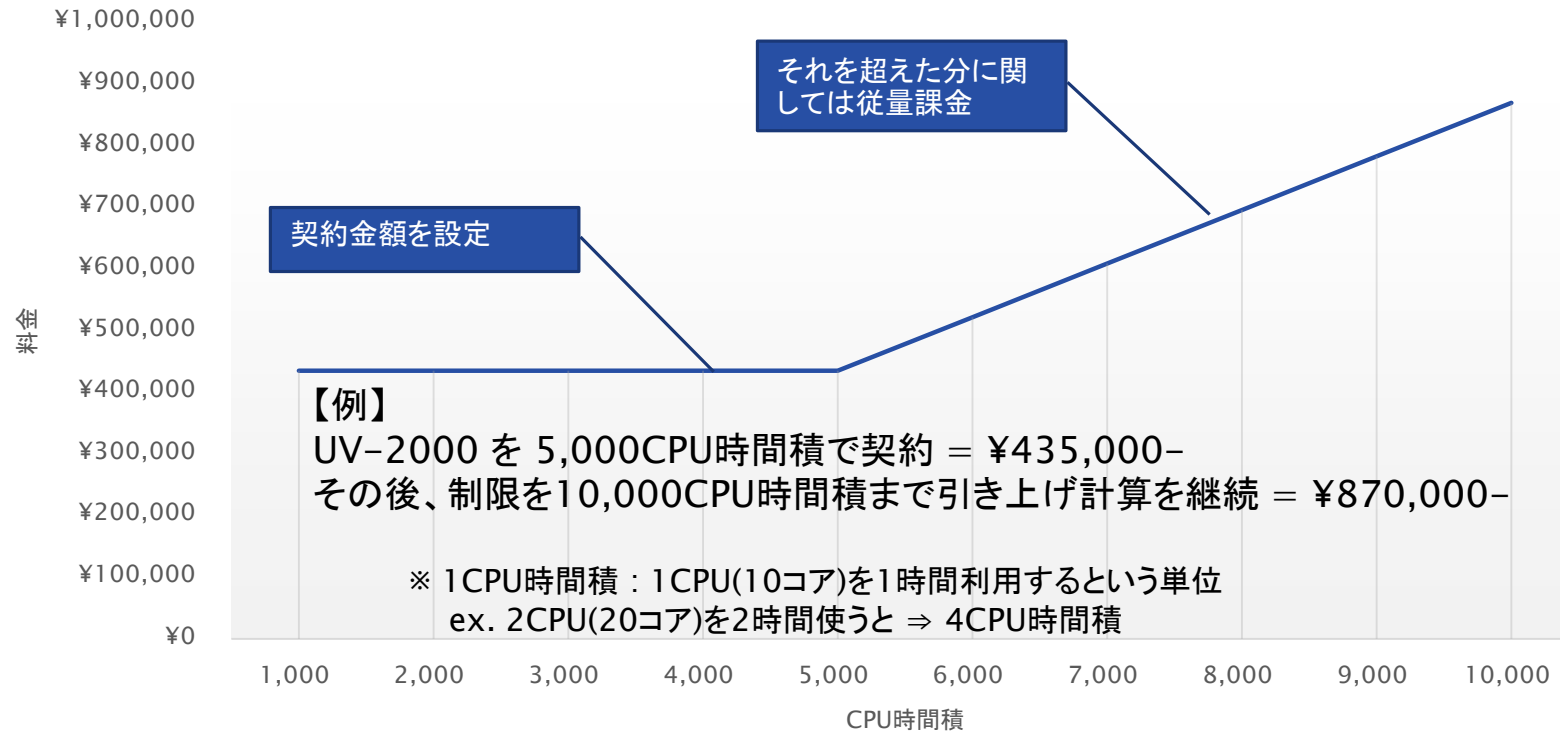
	成果専有型有償利用	産業戦略利用プログラム (文部科学省補助金事業)
利用対象	内国企業	企業(+大学)
成果公開	<b>非公開</b>	<b>公開</b>
分野	制限なし	環境負荷低減技術、防災、省エネルギー技術などが中心
形式	申請(随時)	公募(課題選定、随時追加公募)
成果報告	なし	報告書、口頭発表
利用期間	任意	年度単位
費用負担	<b>100%</b> 負担	<b>50%</b> 負担
無償試用	最長3カ月間 400ノード時間積 ※地球シミュレータのみ	平成27年度末まで
利用単価	地球シミュレータ：1ノード時間積(4CPU利用) 大規模共有メモリシステム：1CPU時間積(10コア利用)	<b>216円</b> (税込) <b>87円</b> (税込)

製品研究開発に

企業活動のアピールに

# 料金の説明 (成果専有型)

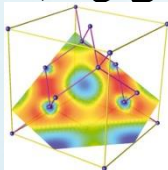
ご利用料金の考え方



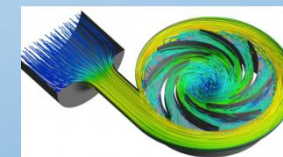
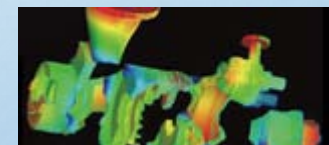


# 動作実績のあるアプリ UV-2000

- ✓ 東京大学 奥田研 FrontISTR
- ✓ ESI OpenFOAM
- ✓ ANSYS Fluent, CFX, Mechanical
- ✓ LSTC LS-Dyna
- ✓ Convergent Science CONVERGE
- ✓ NUMECA FINE/Turbo, FINE/Open
- ✓ MSC Nastran, MARC, Actran
- ✓ ソフトウェアクレイドル STREAM, SCRYU/Tetra
- ✓ CD-Adapco STAR-CCM+, HEEDS



- ✓ COMSOL Inc. COMSOL Multiphysics
- ✓ アドバンスソフト Advance/PHASE
- ✓ ESI OpenFOAM
- ✓ AMBER Molecular Dynamics Package
- ✓ GROMACS
- ✓ OpenMX
- ✓ PHASE/O
- ✓ VASP
- etc.



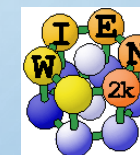
など多数動作実績があります。お問い合わせください。

※ 有料ソフトは別途ライセンス料金がかかります。



# 動作実績のあるアプリ 地球シミュレータ

- ✓ FrontISTR (東京大学 奥田研)
- ✓ LS-DYNA
- ✓ VASP (The Vienna Ab initio Simulation Package)
- ✓ PHASE/O (物質・材料研究機構)
- ✓ QUANTUM ESPRESSO
- ✓ OpenMX
- ✓ Abinit
- ✓ WIEN2k
- ✓ Gaussian
- ✓ ABINIT-MP



etc.

ベクトル機でもなどの動作実績があります。お問い合わせください。

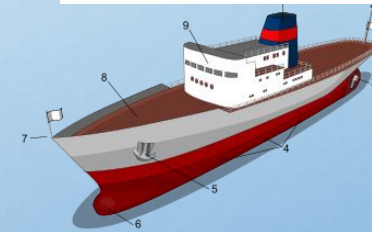
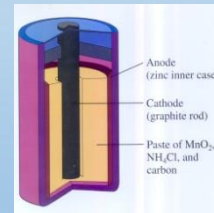
※ 有料ソフトは別途ライセンス料金がかかります。

# ご利用頂いている業種

- ◎ 自動車
- ◎ 重工
- ◎ 発電
- ◎ 建築
- ◎ 材料分析
- ◎ データ解析



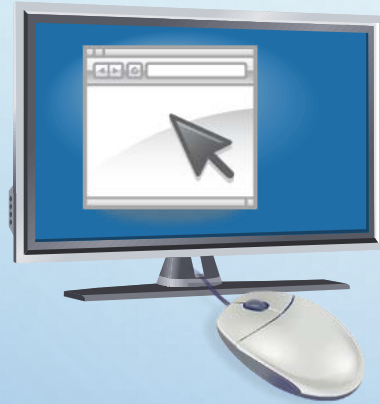
- ◎ 電機・電子系
- ◎ プラント系
- ◎ 船舶系
- ◎ 受託計算
- ◎ 大学
- ◎ 官公庁系



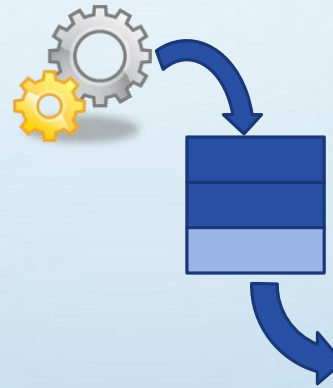
多数の業種の方々に利用されています。

# JAMSTECのスパコンはバッチ利用

パソコンではクリックすると直ぐ実行



スパコンでは待ち行列順に実行



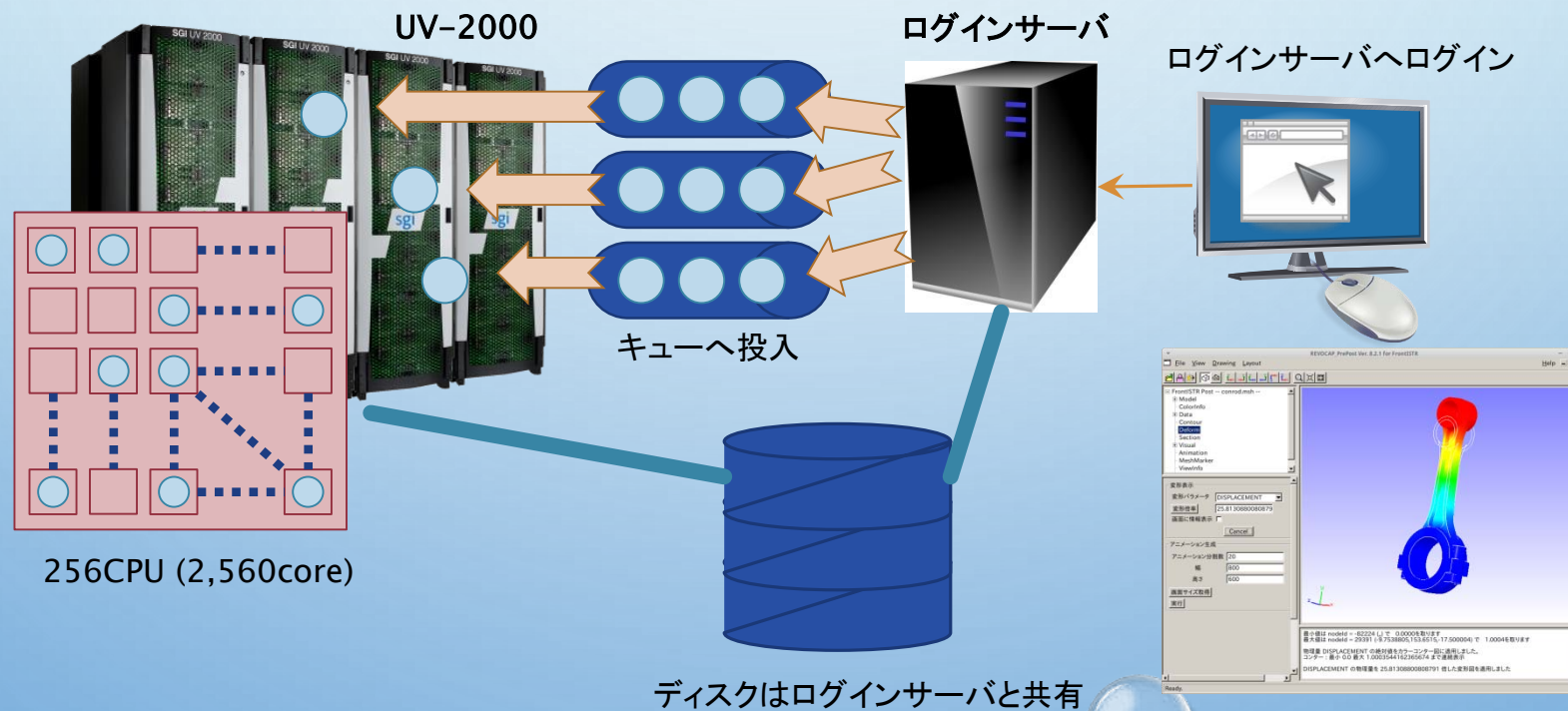
- インタラクティブ式 (即実行)
- 直ぐに反応があるが、割り込みのためCPUを100%計算に利用できない。
- 小規模の計算向き

- ◎ バッチ式 (順次実行)
- ◎ 場合によっては待ちが発生するが、計算中は100%CPUを利用する事が出来る。
- ◎ 待ち時間が長い計算や多数ケースを実行するのに向いている。



# 実行イメージ

- UV-2000は計算専用のサーバ
- ログイン端末から操作するUV-2000へ実行スクリプトを投げるイメージです。





# 手順 (FrontISTRを例に)

1. プログラム・設定ファイルを用意 (fistr1)
2. データを用意 (メッシュファイル)
3. バッチスクリプトを記述 (NQS-IIスクリプト)

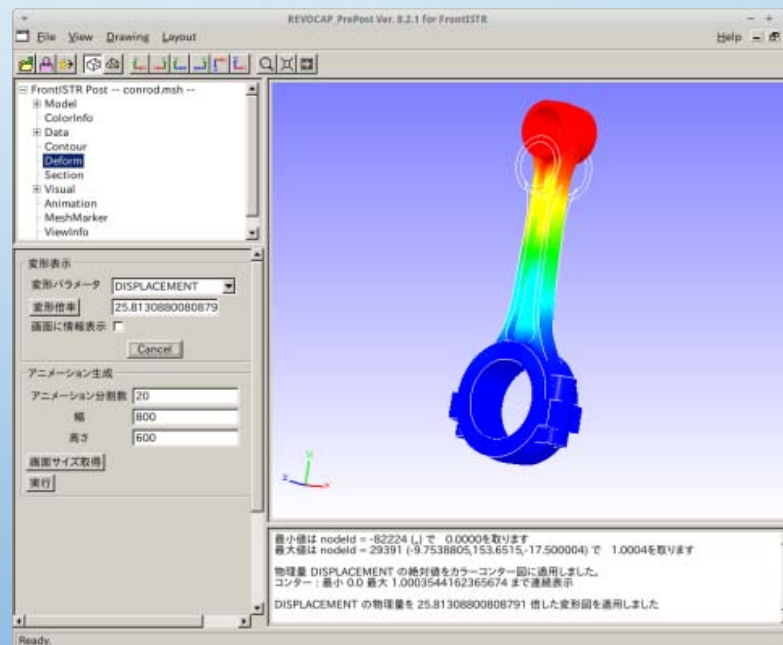
```
#!/bin/sh
#PBS -q uv2k_ind
#PBS -l elapsetim_req=1:00:00
#PBS -l socknum_job=2
#PBS -l memsz_job=230gb
cd /XXXX/prog/frontistr
mpirun -np 20 fistr1
```

4. バッチ投入

```
% qsub run.sh
% qstat
```

5. 計算終了

6. 結果回収



# NQSスクリプト

- UV-2000でアプリを実行するには、NQSスクリプトを書きます (中身は単なるシェルスクリプト)。

```
% vi run.sh
```

```
#!/bin/sh
```

```
#PBS -q uv2k_ind
```

```
#PBS -l elapsetim_req=1:00:00
```

```
#PBS -l socknum_job=2
```

```
#PBS -l memsz_job=230gb
```

```
cd /XXXX/prog/frontistr
```

```
hecmw_part1
```

```
mpirun -np 20 fistr1
```

利用する実行キュー名を指定します。

予想される実行時間を書きます。

利用するCPU数を指定します。

利用するメモリ容量を指定します。

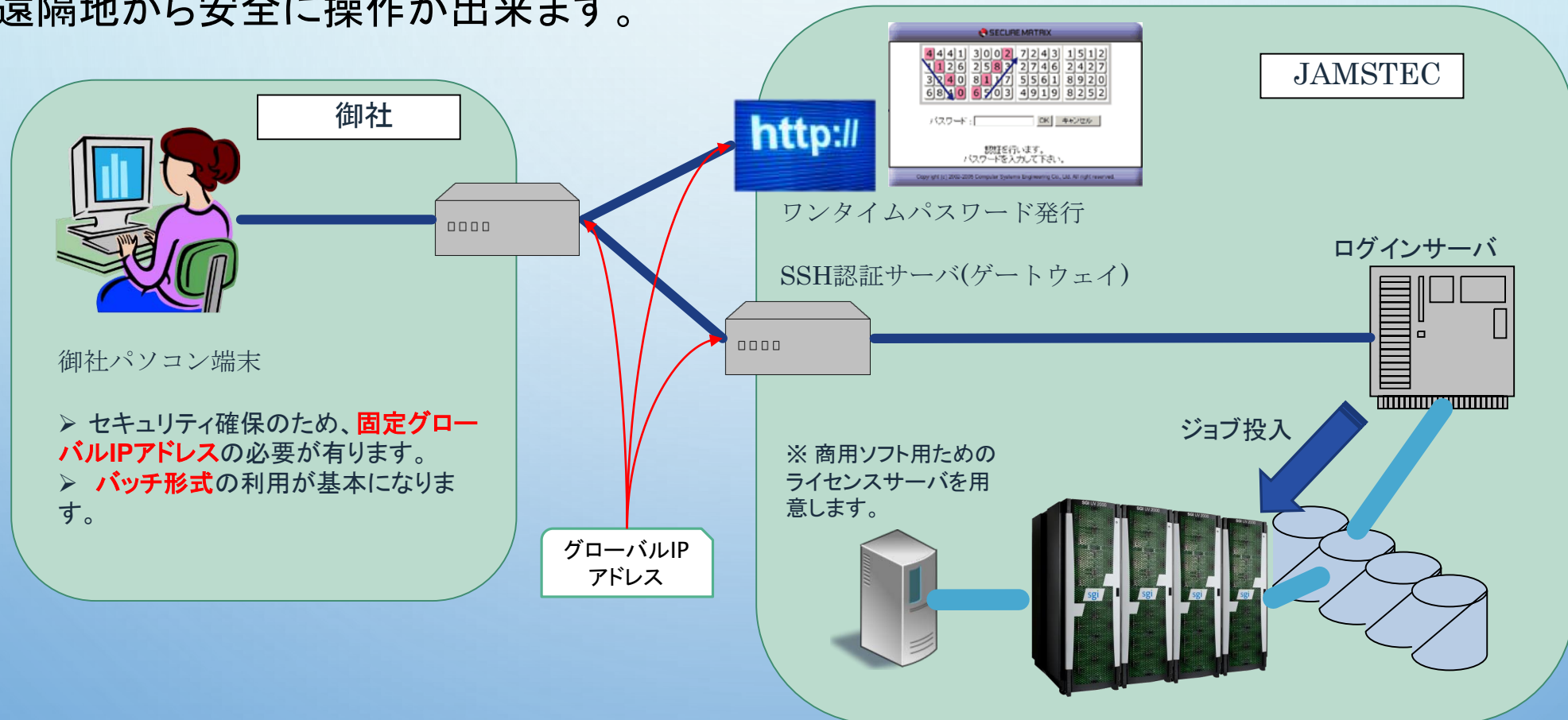
スクリプト本体

- ◎ NQSスクリプトをキューに投入し、実行を待ちます。

```
% qsub run.sh
```

# 安全なリモートアクセス環境

- 遠隔地から安全に操作が出来ます。





## UV-2000のスペック

- CPU: Intel Xeon IvyBridge 2560コア
- OS: SUSE Linux Enterprise 11 SP3
- **32TB**のメモリ空間が利用可能
- 1CPU (10コア) × 1時間 = 87円
- ディスク使用量は無料
- 先着順で無料居室・ラックスペースあり
- ハードディスクでの無料データキャリーサービスあり
- 技術サポート無料





# 最新情報

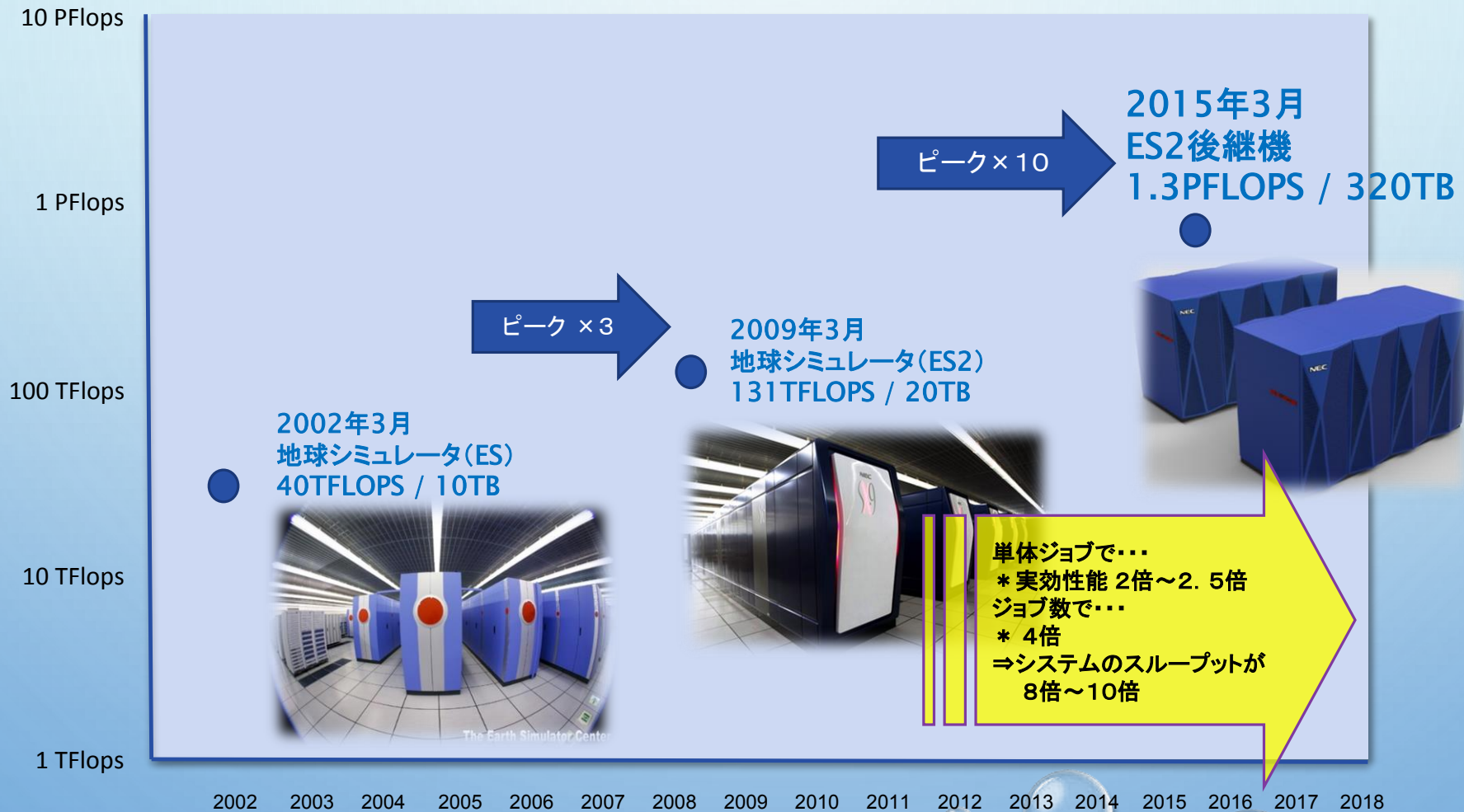
- 2015年6月から、新型ベクトル型スパコン

三代目に当たる

## 新しい「地球シミュレータ」

の運用が始まりました。

# 地球シミュレータ (ES3)



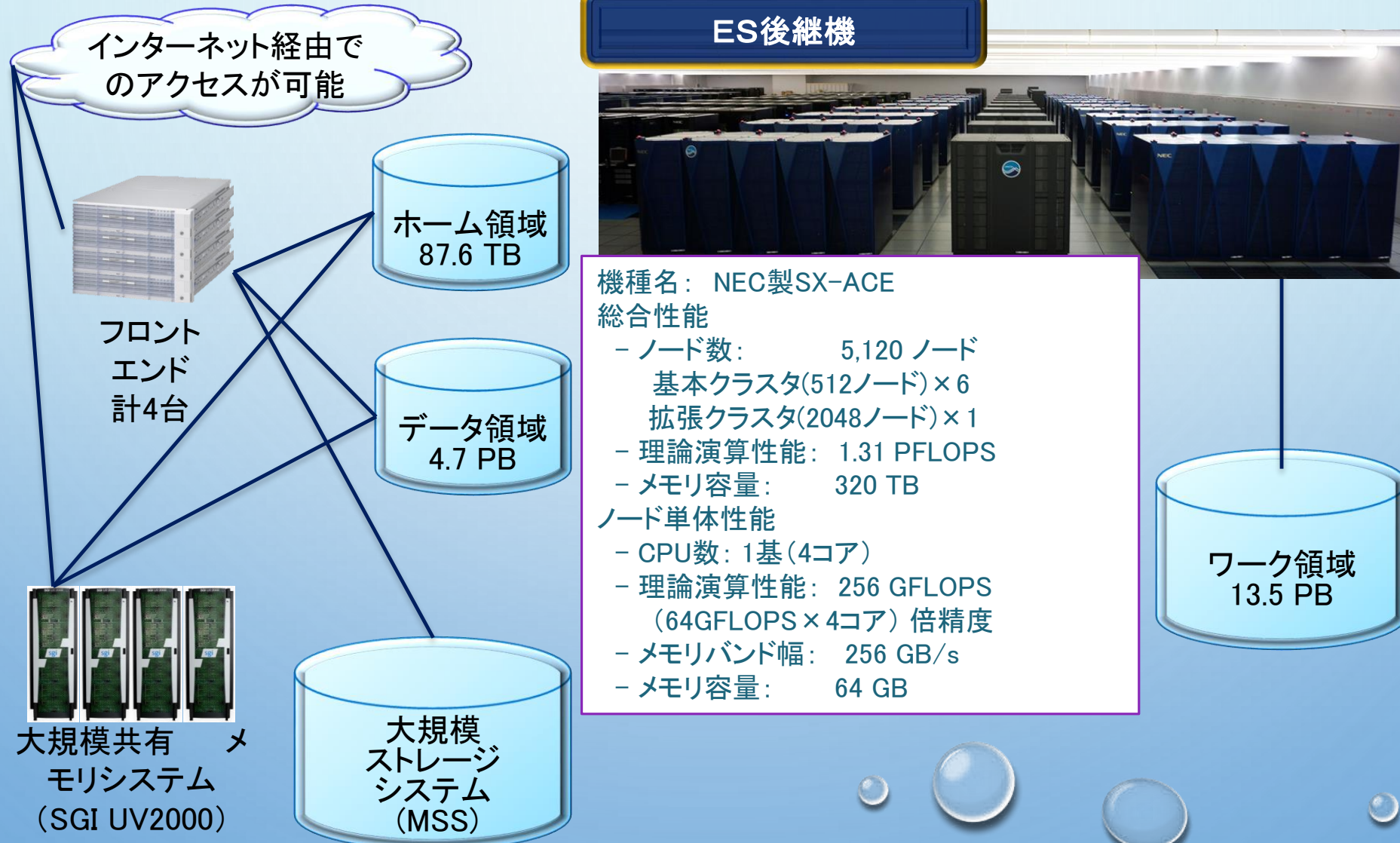
# 地球シミュレータとは

- 2002年3月、初代地球シミュレータ完成
  - 2002年6月TOP500で世界最速、2位の約5倍の速度
  - 2年半、世界第一位を維持
- 2009年3月、システムを更新(ES2、NEC製SX-9)
  - HPC CHALLENGE AWARD (G-FFT)で2010年世界第一位
  - 世界4位の理研「京」コンピュータの約4.7倍の実行効率
- 2015年6月、後継機が稼働開始予定
  - 世界最大級のベクトル型スーパーコンピュータ (NEC製SX-ACE)
  - 同CPU数でES2の2倍以上の速度×4倍のジョブ数投入可能





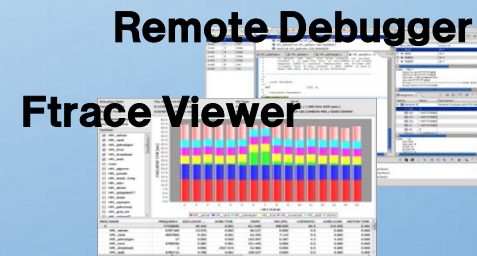
# ES後継機 概念図





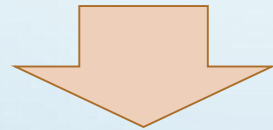
# 地球シミュレータ (ES3)

- ◆ 短ベクトル性能が強化されました。
- ◆ リストベクトル性能が強化されました。
- ◆ スカラ性能が強化されました。
- ◆ メモリ性能が強化されました
  - キャッシュに相当するADBの容量が拡張され、利用はコンパイラ任せで殆どOK。
- ◆ Fortranコンパイラ
  - Fortran95と Fortran2003の2本立て、Fortran2008順次サポート
  - 自動ベクトル化、自動並列化、OpenMPサポート
- ◆ C/C++コンパイラ
  - C99準拠, C++03準拠。C++11順次サポート、GCC互換サポート
  - 自動ベクトル化、自動並列化、OpenMPサポート
- ◆ MPIライブラリ
  - MPI3.0対応
- ◆ 開発支援GUIツール
  - Ftrace Viewer, Remote Debugger



# 地球シミュレータ 事前評価制度

- 世界最大規模のベクトル型スパコンを



◎400ノード時間

◎3カ月間

◎無料でお使いいただけます

- ※ 利用終了後、事前評価レポートを提出していただく必要があります。
- ※ プログラムを実行して得た成果を製品開発目的には利用できません。

# 大容量共有メモリ型スパコン UV-2000



UV-2000上のプログラムからは  
1つの大きなワークステーションの様に  
見えます。

共有メモリ型 UV-2000

PCクラスタや地球シミュレータ

# 共有メモリ型スパコンの利用シーン

- アプリケーションからは、32TBのメモリを搭載した、2,560コアのSMPマシンとして見えます。
- MPI化されてないマルチスレッドプログラムやOpenMPでスレッド並列化されたプログラムが動きます(効率を無視すれば)
  - ◎ 巨大メッシュの領域分割 (そもそも大きなメモリが必要)
  - ◎ MPI並列化する前のプログラム検証
  - ◎ プログラムをMPI並列化する手間をかけられない場合に有効
    - プログラムの移植には年単位の時間がかかる。
    - 多少実行時間がかかっても、結果を得られる。
  - ◎ もちろん、Intel Xeonプロセッサ・Linux OSであるため、既存ソフトウェアの互換性は高い
    - コンパイルせずにバイナリを動作させることも可能。



# ベクトル型スパコン 地球シミュレータ

世界一のメモリ帯域  
256GB/秒

59.7GB/s  
キャッシュの利用率が肝

少ないプロセッサ数で高性能

1コアあたりの性能が高い  
レジスタレベルでの並列化

コアの数で性能を  
稼ぐ

地球シミュレータ

UV-2000やPCクラスター

# ベクトル型スパコンの利用シーン

- メモリバンド幅が大きい
  - SX-ACE 256GB/s
  - Xeon E5-4650 v2 59.7GB/s
  - メモリを頻繁にアクセスするアプリケーションでは実行速度が向上する
- 効率よくベクトル型スパコンを利用するには
  - ベクトル化チューニングが必須 (プロセッサ単体性能を活かすため)
  - ただし、複数ノードを使う場合、MPI並列化が必須
- ◎ ソースコードを所有していて、その中身を理解している場合、スカラ型スパコンに比べ、性能を引き出すことが比較的簡単。
- ◎ 反面、ベクトル化(ループの中身を大きくする)によって、ソースコードが分かりづらくなる傾向がある。

# お問い合わせ

〒236-0001

神奈川県横浜市金沢区昭和町3173-25

独立行政法人海洋研究開発機構

地球情報基盤センター

産業利用担当 小川道夫

E-mail : [es\\_apply@jamstec.go.jp](mailto:es_apply@jamstec.go.jp)

TEL : 045-778-5456

Web : <http://www.jamstec.go.jp/es/jp/senyu/index.html>



ご清聴ありがとうございました。