

Oakforest-PACSによる研究成果の概要

中島 研吾
東京大学情報基盤センター
JCAHPC (研究開発部門長)



今日の
OFP

第11回 JCAHPCセミナー(OFP運用終了記念シンポジウム)
「ありがとうOFP:京から富岳への狭間で咲いた大輪の花」
2022年5月27日(ハイブリッド: 柏 & オンライン)

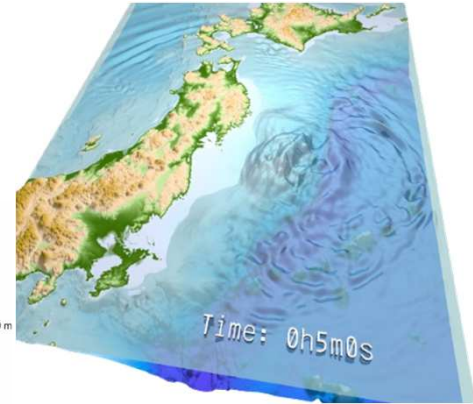
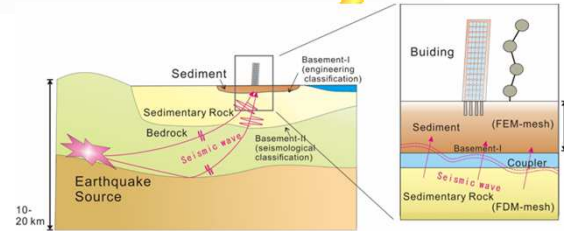
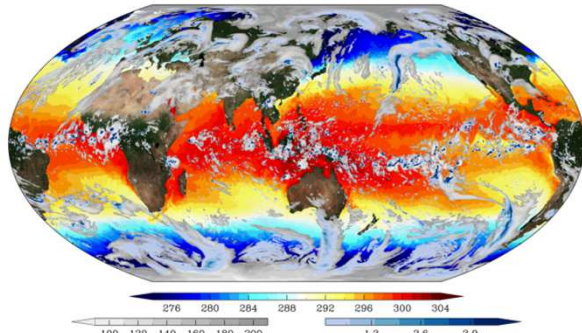
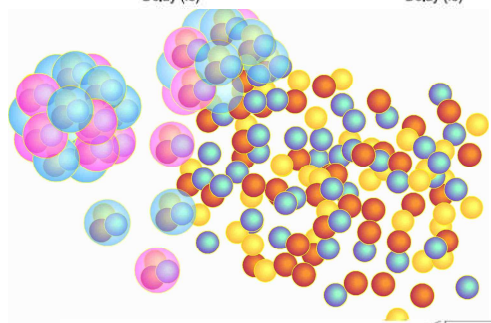
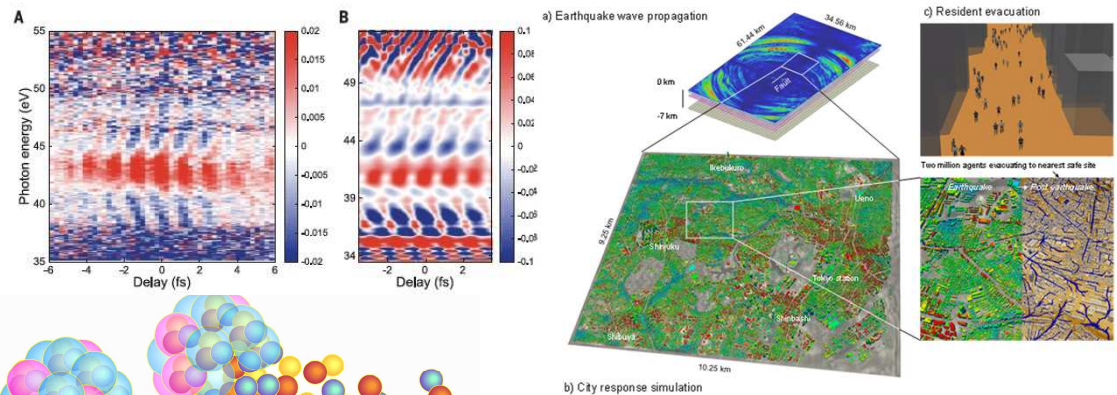
Oakforest-PACSによる研究活動・成果

- 計算科学シミュレーション
 - 筑波大:物理学, 基礎科学, 東大:地球・宇宙科学, ものづくり, 材料科学
 - 国際共同研究も含めた様々な成果
 - 2019・2020年度はNational Flagship Systemとしての役割を果たす
- HPCチャレンジ
 - <https://www.cc.u-tokyo.ac.jp/guide/hpc/>
 - 8,192ノードを24時間占有, 普段はなかなか使えない規模のリソース
 - 一ヶ月に一回実施, 公募制, ユーザー以外も受け入れる
 - 合計18回(2020年度は実施せず, 2021年度は時間短縮)
- JCAHPCセミナー(11回実施)
 - 当初はチュートリアル的なものが中心, 利活用報告会, Future Perspective
- ゲリラ豪雨リアルタイム予測
 - 計算・観測融合型, リアルタイム, 新しいスタイルの計算(このあと三好さんから発表)
- COVID-19(2020年)
- McKernel

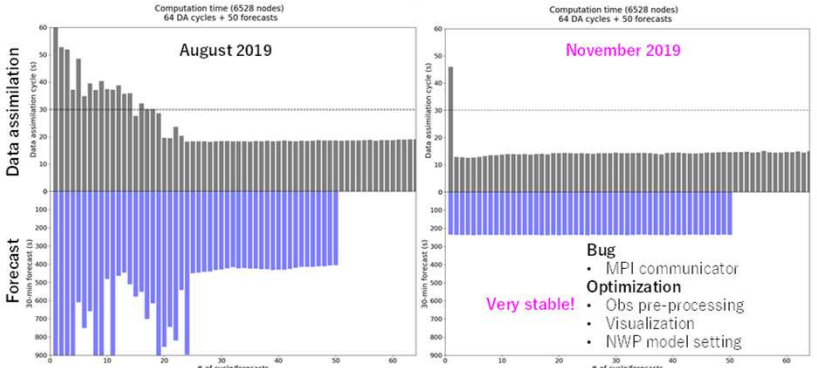
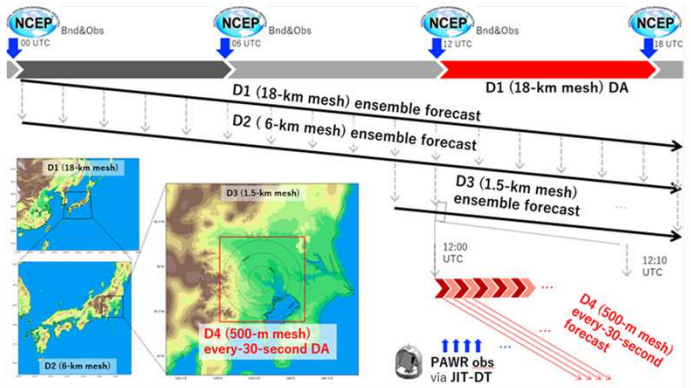
Applications on OFP (初期)

筑波大: 物理学, 東大: 地球科学

- **ARTED/SALMON**
 - Ab-initio Electron Dynamics
- **Lattice QCD**
 - Quantum Chrono Dynamics
- **NICAM & COCO**
 - Atmosphere & Ocean Coupling
- **GAMERA/GHYDRA**
 - Earthquake Simulations
- **Seism3D**
 - Seismic Wave Propagation

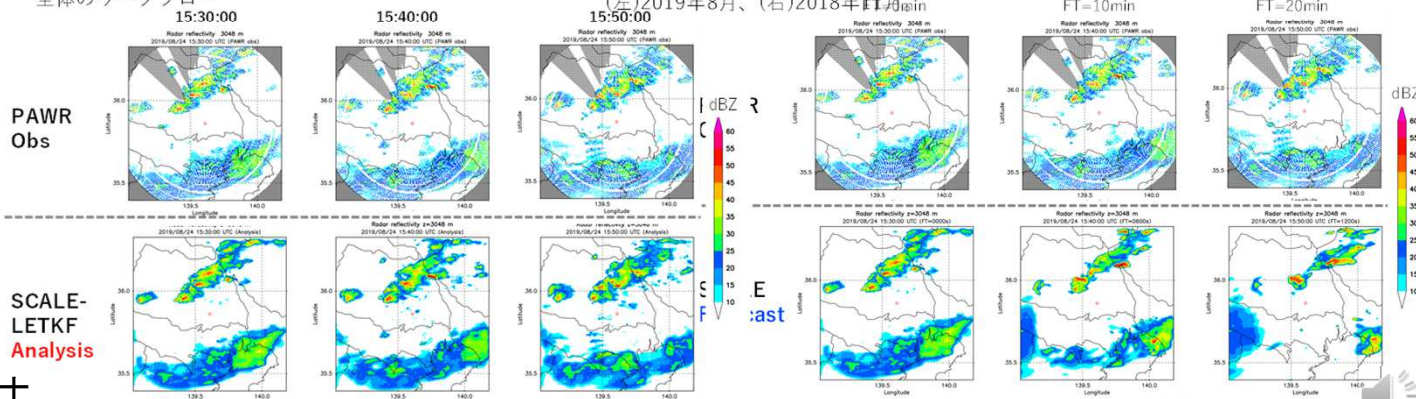


ゲリラ豪雨予測のリアルタイム実証実験 (理化学研究所)



全体のワークフロー

計算性能の向上。上段はデータ同化、下段は30分予報にかかった時間(秒)。(左)2019年8月、(右)2018年11月

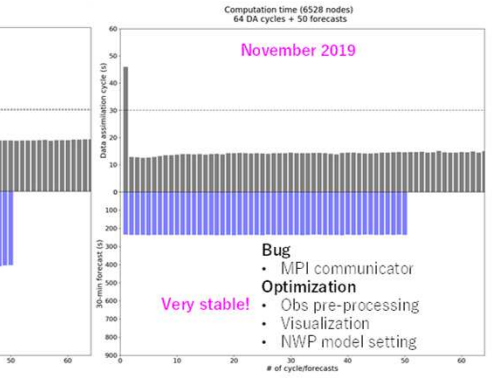
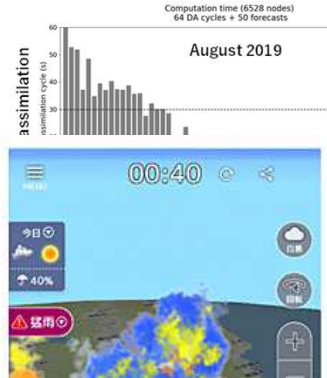
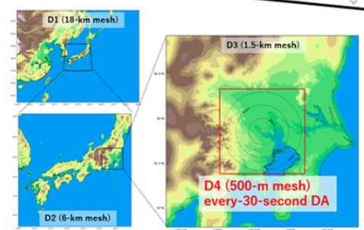


[画像提供: 三好建正博士 (理化学研究所)]

2019年8月24日の事例についてのテスト結果。(上)レーダー観測と(下)SCALE-LETKFによる解析で得られたレーダー反射強度(dBZ)を示す。

2019年8月24日の事例についてのテスト結果。(上)レーダー観測と(下)SCALE-LETKFによる予報で得られたレーダー反射強度(dBZ)を示す。

ゲリラ豪雨予測のリアルタイム実証実験 (理化学研究所)

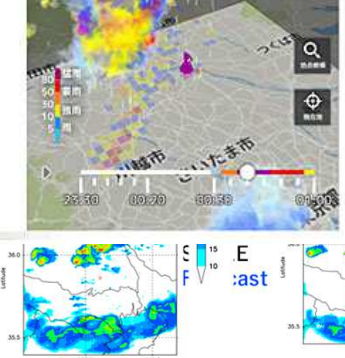
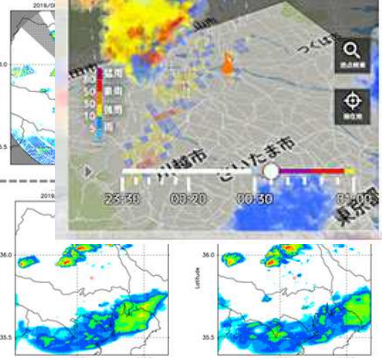


全体のワークフ

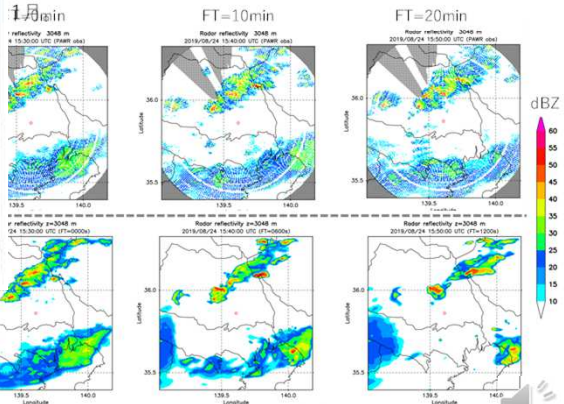


PAWR Obs

SCALE-LETKF Analysis



夕同化、下段は30分予報にかかった時間(秒)。



[画像提供: 三好建正博士 (理化学研究所)]

2019年8月24日の事例についてのテスト結果。(上)レーダー観測と(下)SCALE-LETKFによる解析で得られたレーダー反射強度(dBZ)を示す。

2019年8月24日の事例についてのテスト結果。(上)レーダー観測と(下)SCALE-LETKFによる予報で得られたレーダー反射強度(dBZ)を示す。

COVID-19とHPC(1/2)



- 現在, 人類と地球は新型コロナウイルス感染症 (COVID-19) という未曾有の危機に直面しています(2020年当時の文章)。
- 問題解決に向けては「防疫」, 「治療」, 「創薬」など広範囲にわたり様々な手法による研究開発が急務であり, スーパーコンピュータの有する高速な計算能力, データ処理能力の貢献が期待されております。
- このような状況の下, HPCI(革新的ハイパフォーマンス・コンピューティング・インフラ) においては, 関係機関の協力のもと, 関連する研究が必要とする計算資源を提供する臨時の課題募集「新型コロナウイルス感染症対応HPCI臨時公募課題」がおこなわれています。
 - https://www.hpci-office.jp/pages/adoptionlist2020_25

COVID-19とHPC (2/2)



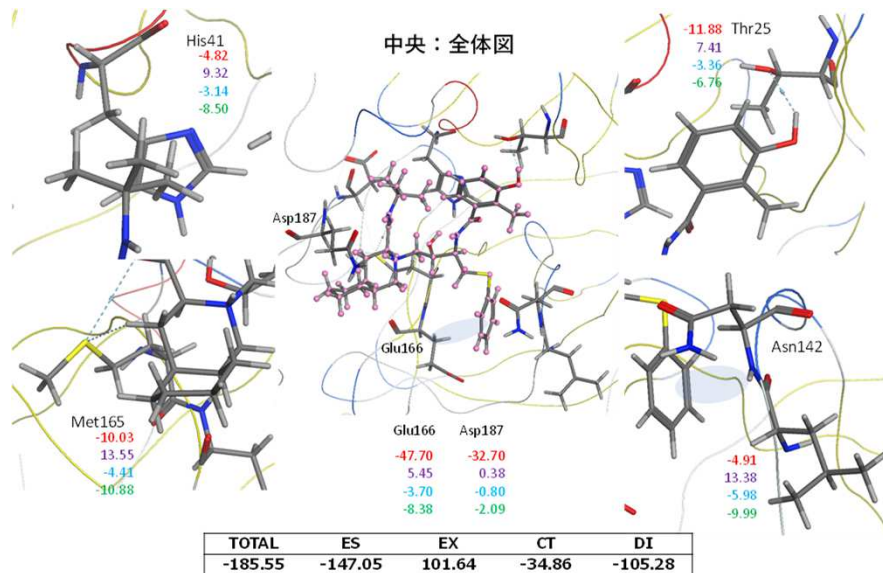
- 筑波大・東大両センターとJCAHPCは、HPCIシステム構成機関として「臨時公募課題」に計算資源を提供、新型コロナウイルス感染症関連研究を支援
- 2020年度は、合計14課題採択、うち3課題が最先端共同HPC基盤施設（JCAHPC）のOakforest-PACSを使用、2課題が筑波大学計算科学研究センターのCygnus、3課題が東大情報基盤センターのOakbridge-CX（OBCX）、50%以上の課題が筑波大・東大関連のシステムを利用して実施
 - JCAHPC 3課題（Oakforest-PACS（OFP））
 - 筑波大 2課題（Cygnus）
 - 東大 3課題（Oakbridge-CX（OBCX））
 - 東工大（Tsubame-3）:3、産総研（ABCI）:2、九大（ITO）:1
- 各利用グループのスケジュール、必要資源に応じて柔軟に運用
- 2021年度以降は各HPCI課題に移行（臨時課題は年1-2件）

課題名	代表者(所属)	使用システム
新型コロナウイルスの主要プロテアーゼに関するフラグメント分子軌道計算	望月 祐志(立教大学)	Oakforest-PACS OFF JCAHPC
COVID-19治療の候補薬: chloroquine、hydroxychloroquine、azithromycinの催不整脈リスクの評価ならびにその低減策に関する研究	久田 俊明(株式会社UT-Heart研究所 / 東大)	
新型コロナウイルス表面のタンパク質動的構造予測	杉田 有治(理化学研究所)	
計算機解析によるSARS-CoV-2増殖阻害化合物の探索	星野 忠次(千葉大学)	Oakbridge-CX OBCX 東大
室内環境におけるウイルス飛沫感染の予測とその対策: 富岳大規模解析に向けたケーススタディ	坪倉 誠(神戸大学)	
Spreading of polydisperse droplets in a turbulent puff of saturated exhaled air	Marco Edoardo Rosti (OIST)	
分子動力学計算に基づく新規作用機序を示すCOVID-19治療薬の同定	奥野 恭史(京都大学)	Cygnus 筑波大
Covid-19関連タンパクに対する統合的インシリコリポジショニング	重田 育照(筑波大学)	

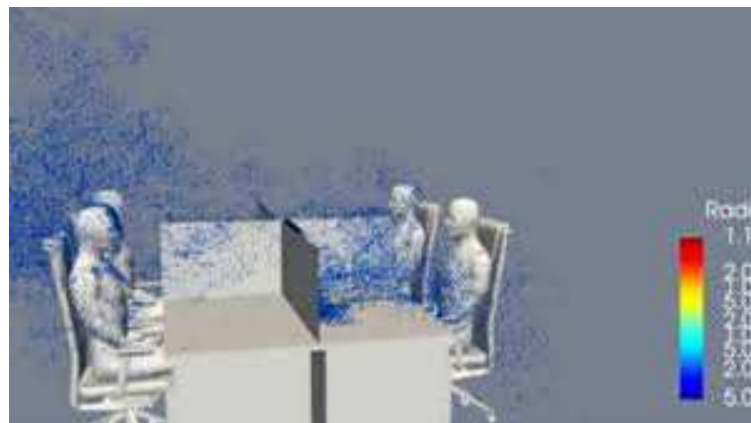
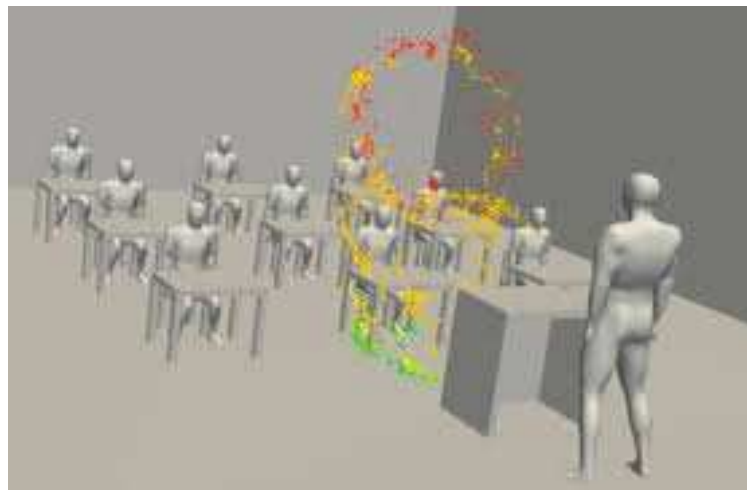
課題名	代表者(所属)	使用システム
新型コロナウイルスの主要プロテアーゼに関するフラグメント分子軌道計算	望月 祐志(立教大学)	Oakforest-PACS OFFP
COVID-19治療の候補薬としてhydroxychloroquineの効果を評価ならびにその低減策に関する研究	社UT- ()	JCAHPC
新型コロナウイルス表面のタンパク質動的構造予測	杉田 有治(理化学研究所)	
計算機解析によるSARS-CoV-2増殖阻害化合物の探索	星野 忠次(千葉大学)	
室内環境におけるウイルス飛沫感染の予測とその対策:富岳大規模解析に向けたケーススタディ	坪倉 誠(神戸大学)	Oakbridge-CX OBCX 東大
Spreading of polydisperse droplets in a turbulent puff of saturated exhaled air	Marco Edoardo Rosti (OIST)	
分子動力学計算に基づく新規作用機序を示すCOVID-19治療薬の同定	奥野 恭史(京都大学)	Cygnus 筑波大
Covid-19関連タンパクに対する統合的インシリコリポジショニング	重田 育照(筑波大学)	

「富岳」COVID-19 5課題のうち4課題

COVID-19利用事例



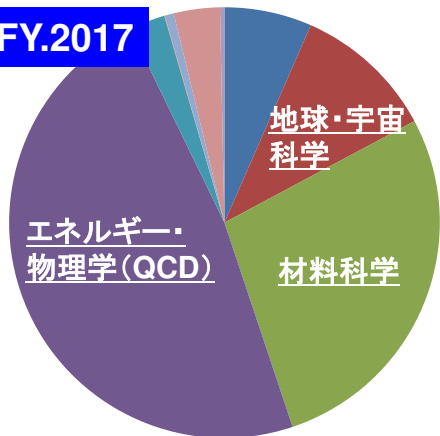
〔資料提供：望月祐志教授(立教大学)〕



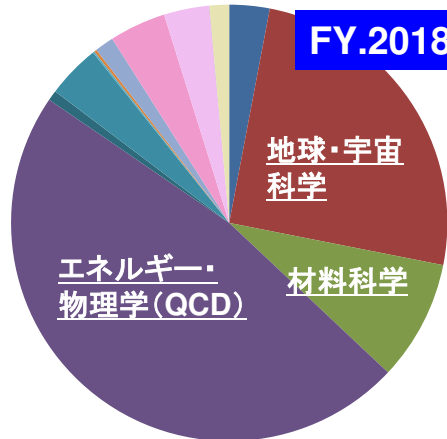
〔資料提供：坪倉誠教授(神戸大学)〕

研究分野別利用CPU時間割合

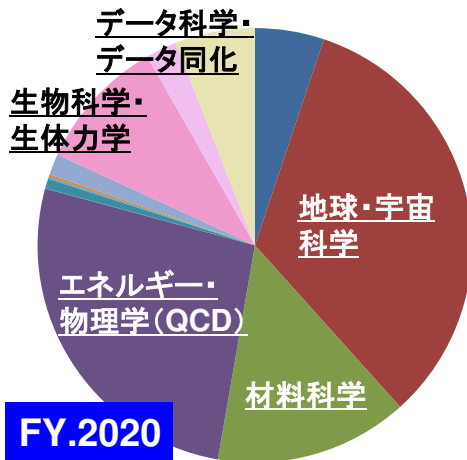
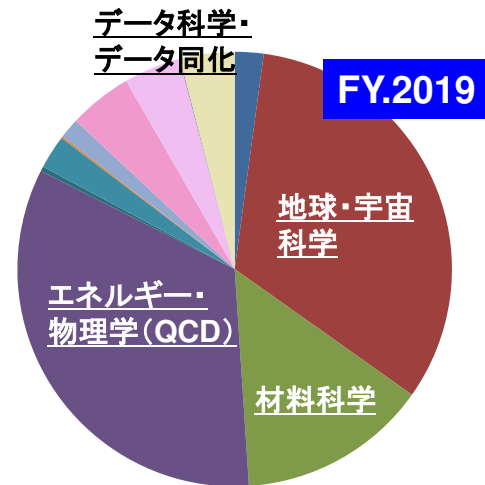
FY.2017



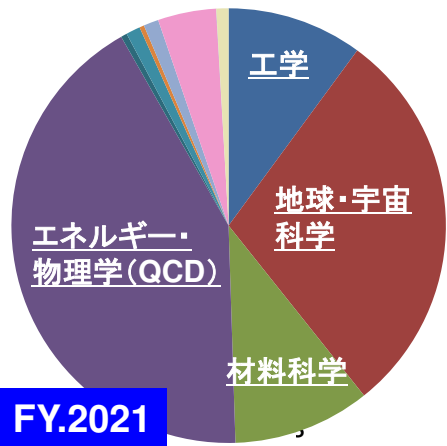
FY.2018



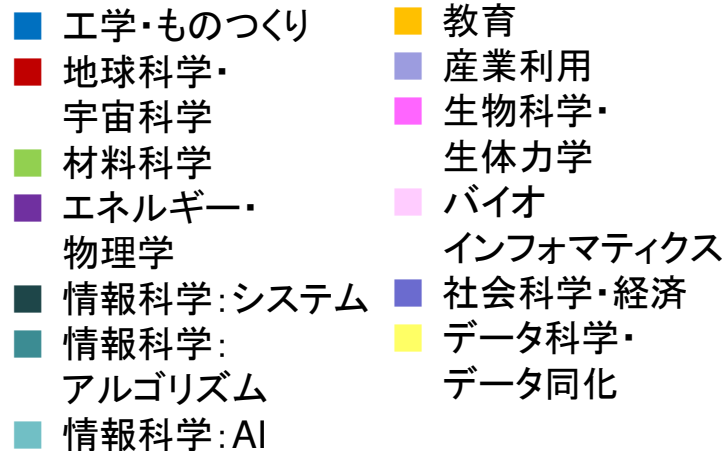
FY.2019



FY.2020



FY.2021



2001-2005

2006-2010

2011-2015

2016-2020

2021-2025

2026-2030

Hitachi SR8000
1,024 GF

Hitachi SR11000
J1, J2
5.35 TF, 18.8 TF

Hitachi SR16K/M1
Yayoi
54.9 TF

Hitachi
SR2201
307.2GF

Hitachi
SR8000/MPP
2,073.6 GF

OBCX
(Fujitsu)
6.61 PF

Hitachi HA8000
T2K Today
140 TF

Oakforest-
PACS (Fujitsu)
25.0 PF

OFP-II
100+ PF

Fujitsu FX10
Oakleaf-FX
1.13 PF

Wisteria
BDEC-01 Fujitsu
33.1 PF

BDEC-
02
250+ PF

東京大学情報基盤

センターのスパコン

利用者2,600+名

55%は学外

Reedbush-
U/H/L (SGI-HPE)
3.36 PF

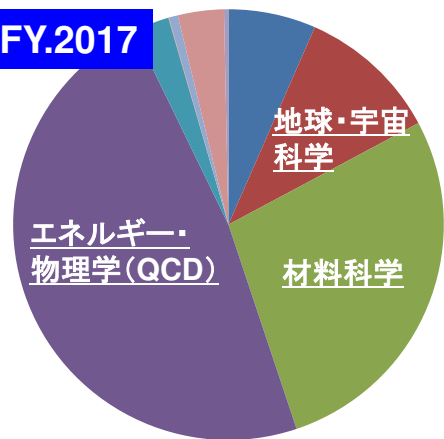
Ipomoea-01 25PB

Ipomoea-
03

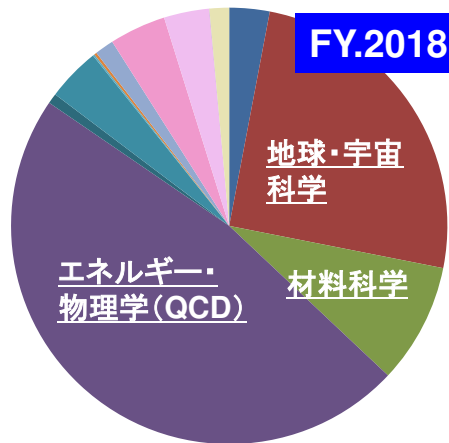
Ipomoea-02

研究分野別利用CPU時間割合

FY.2017



FY.2018

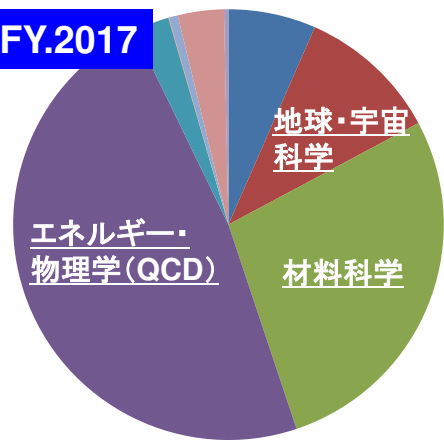


- ✓ 2016年10月運用開始, 2016年12月フル運用開始
- ✓ 2017・2018年度は半分くらいがQCD
- ✓ 徐々に地球・宇宙科学(大気海洋, 固体地球, 宇宙物理)が増加
 - ◆ Oakleaf-FX(FX10)から移行

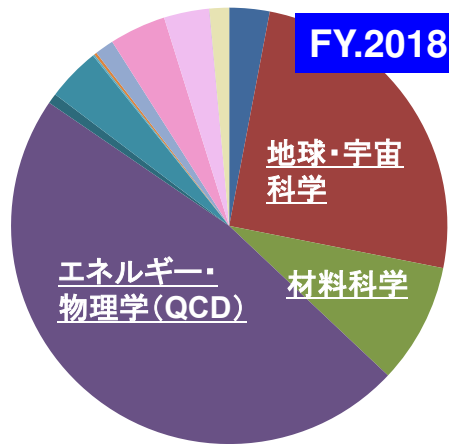
- | | |
|----------------|---------------|
| ■ 工学・ものづくり | ■ 教育 |
| ■ 地球科学・宇宙科学 | ■ 産業利用 |
| ■ 材料科学 | ■ 生物科学・生体力学 |
| ■ エネルギー・物理学 | ■ バイオ |
| ■ 情報科学: システム | ■ インフォマティクス |
| ■ 情報科学: アルゴリズム | ■ 社会科学・経済 |
| ■ 情報科学: AI | ■ データ科学・データ同化 |

研究分野別利用CPU時間割合

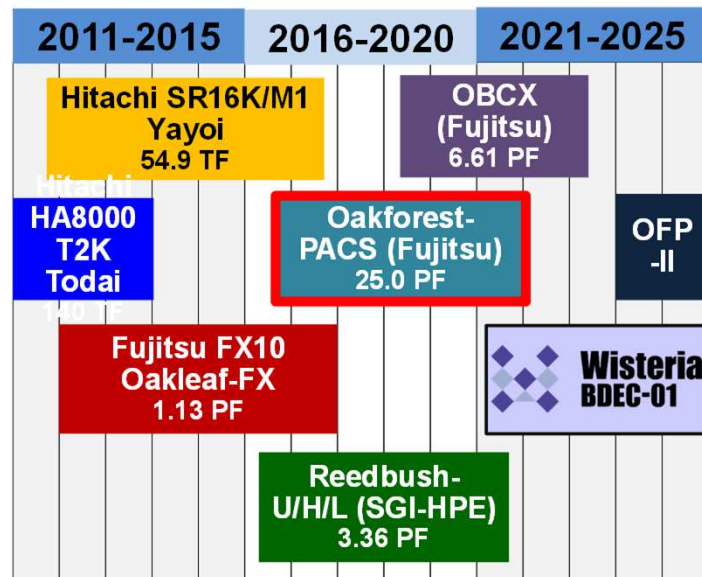
FY.2017



FY.2018

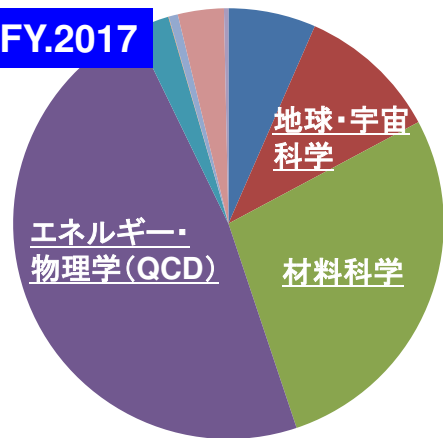


- ✓ 2016年10月運用開始, 2016年12月フル運用開始
- ✓ 2017・2018年度は半分くらいがQCD
- ✓ 徐々に地球・宇宙科学(大気海洋, 固体地球, 宇宙物理)が増加
 - ◆ Oakleaf-FX(FX10)から移行

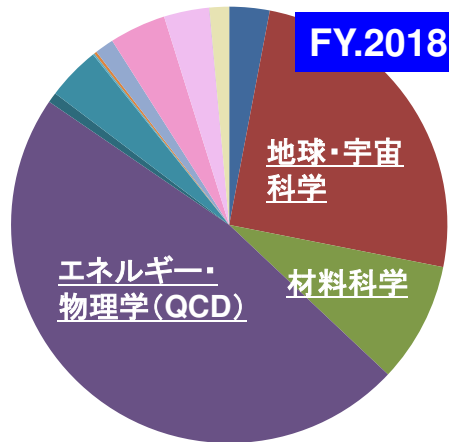


研究分野別利用CPU時間割合

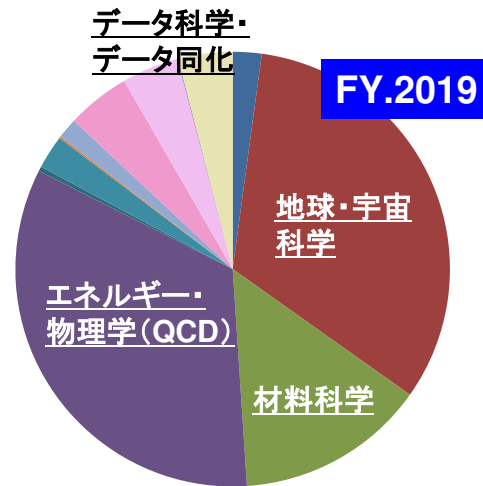
FY.2017



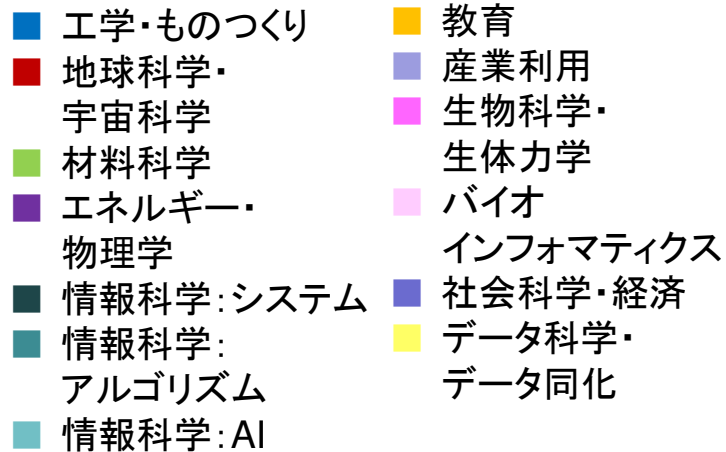
FY.2018



FY.2019



- ✓ 2019年度は地球科学がQCDをやや上回る(更に「京」利用者が移行か?)
- ✓ データ科学・データ同化(ゲリラ豪雨の試計算)が徐々に増え始める



研究分野別利用CPU時間割合

FY.2017

✓ 2020年度は、生物科学・生体力学
(COVID19), ゲリラ豪雨

物理学(QCD)

材料科学

FY.2018

エネルギー・
物理学(QCD)

材料科学

FY.2019

データ科学・
データ同化地球・宇宙
科学エネルギー・
物理学(QCD)

材料科学

工学・ものづくり

教育

地球科学・
宇宙科学

産業利用

材料科学

生物科学・

生体力学

エネルギー・
物理学

バイオ

インフォマティクス

情報科学:システム

社会科学・経済

情報科学:
アルゴリズム

データ科学・

データ同化

情報科学:AI

データ科学・
データ同化生物科学・
生体力学地球・宇宙
科学エネルギー・
物理学(QCD)

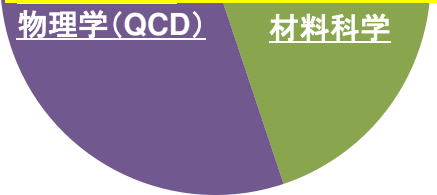
材料科学

FY.2020

研究分野別利用CPU時間割合

FY.2017

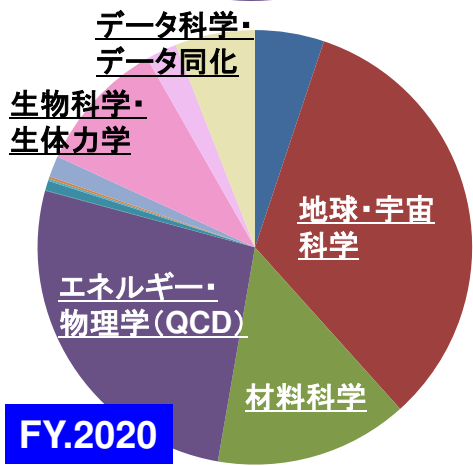
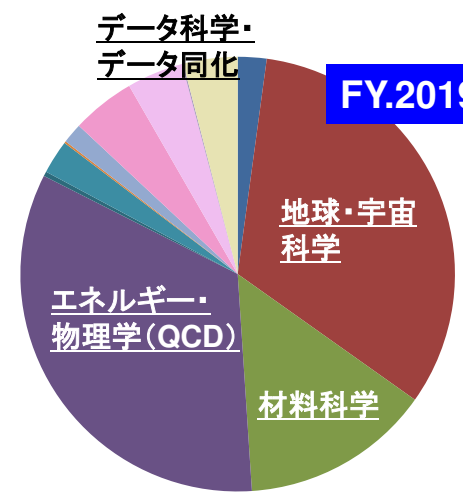
✓ 最終年度はQCDが復活
 ✓ 地球科学はWisteria/BDEC-01へ移行



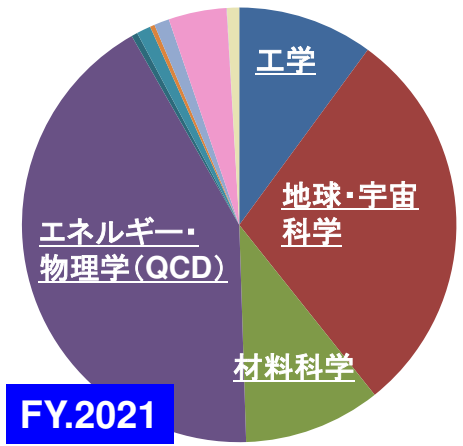
FY.2018



FY.2019



FY.2020



FY.2021

- 工学・ものづくり
- 地球科学・宇宙科学
- 材料科学
- エネルギー・物理学
- 情報科学:システム
- 情報科学:アルゴリズム
- 情報科学:AI
- 教育
- 産業利用
- 生物科学・生体力学
- バイオインフォマティクス
- 社会科学・経済
- データ科学・データ同化

研究分野別利用CPU時間割合

FY.2017

- ✓ 最終年度はQCDが復活
- ✓ 地球科学はWisteria/BDEC-01へ移行

物理学(QCD) 材料科学

FY.2018

エネルギー・物理学(QCD) 材料科学

データ科学・データ同化

生物科学・生体力学

地球・宇宙科学

エネルギー・物理学(QCD)

材料科学

FY.2020

工学

地球・宇宙科学

エネルギー・物理学(QCD)

材料科学

FY.2021

データ科学・データ同化

FY.2019

地球・宇宙科学

エネルギー・物理学(QCD)

2011-2015

2016-2020

2021-2025

Hitachi SR16K/M1 Yayoi
54.9 TF

OBCX (Fujitsu)
6.61 PF

HA8000 T2K Today

Oakforest-PACS (Fujitsu)
25.0 PF

OFP -II

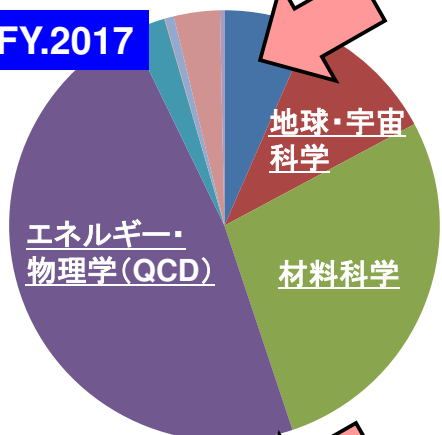
Fujitsu FX10 Oakleaf-FX
1.13 PF

Wisteria BDEC-01

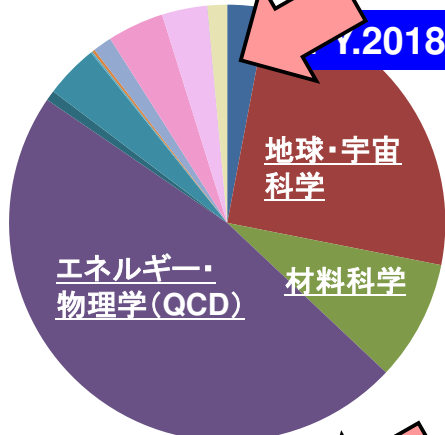
Reedbush-U/H/L (SGI-HPE)
3.36 PF

研究分野別利用CPU時間割合

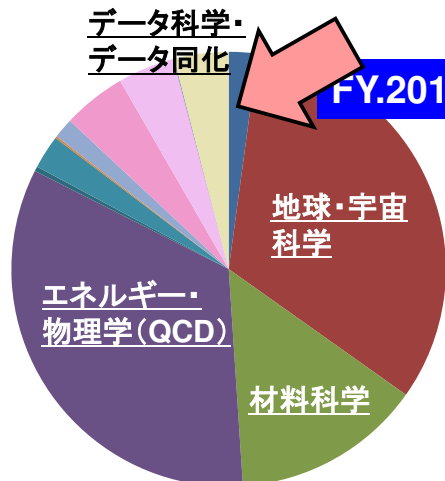
FY.2017



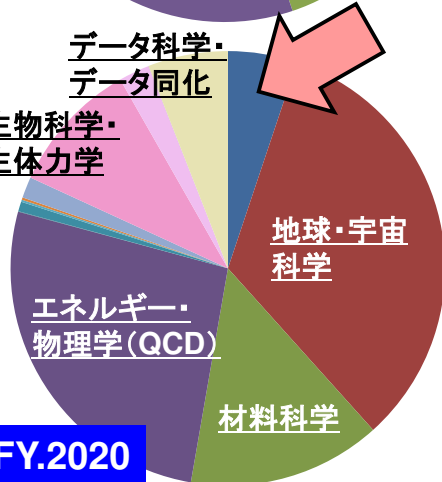
FY.2018



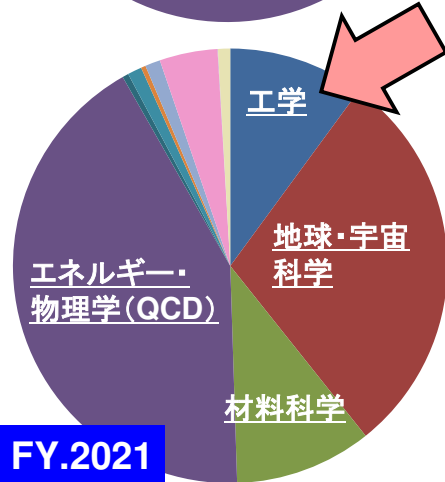
FY.2019



FY.2020



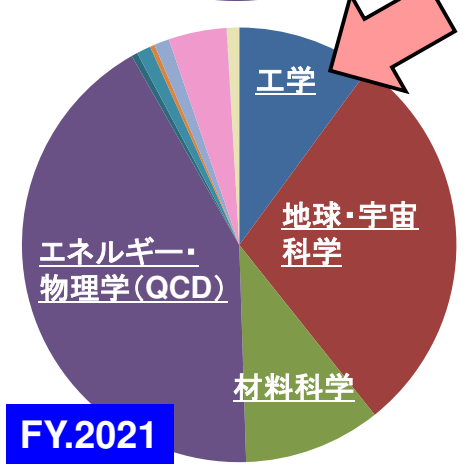
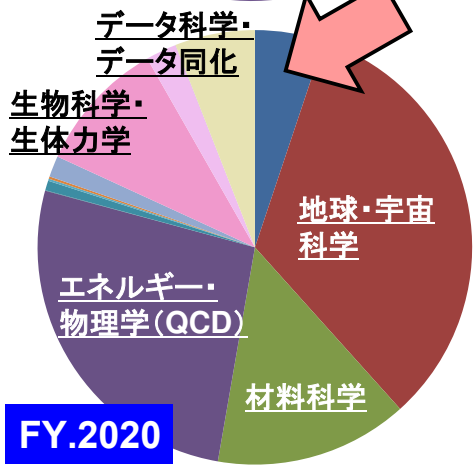
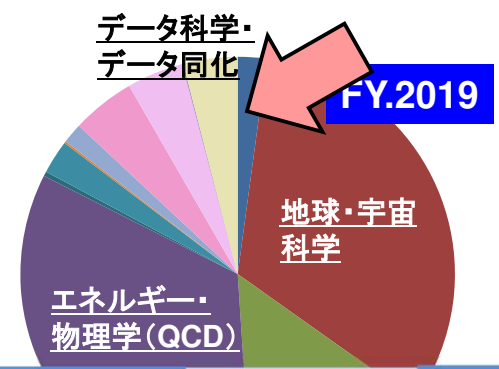
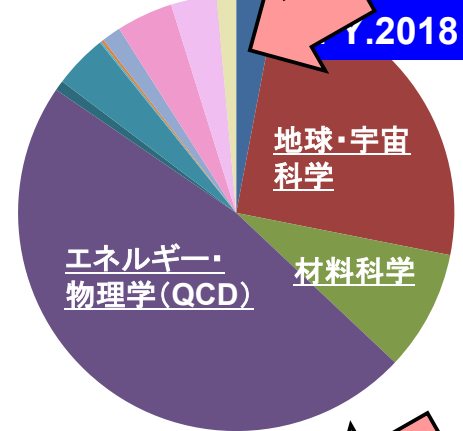
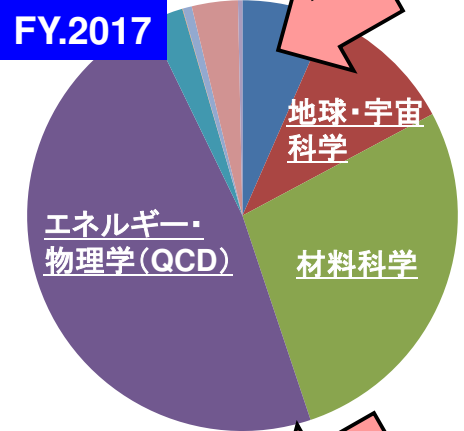
FY.2021



✓ 工学・ものづくりは全般的に利用率低い(Oakleaf-FX, Reedbush-U, OBCX)

- エネルギー・物理学
- 情報科学: システム
- 情報科学: アルゴリズム
- 情報科学: AI
- インフォマティクス
- 社会科学・経済
- データ科学・データ同化

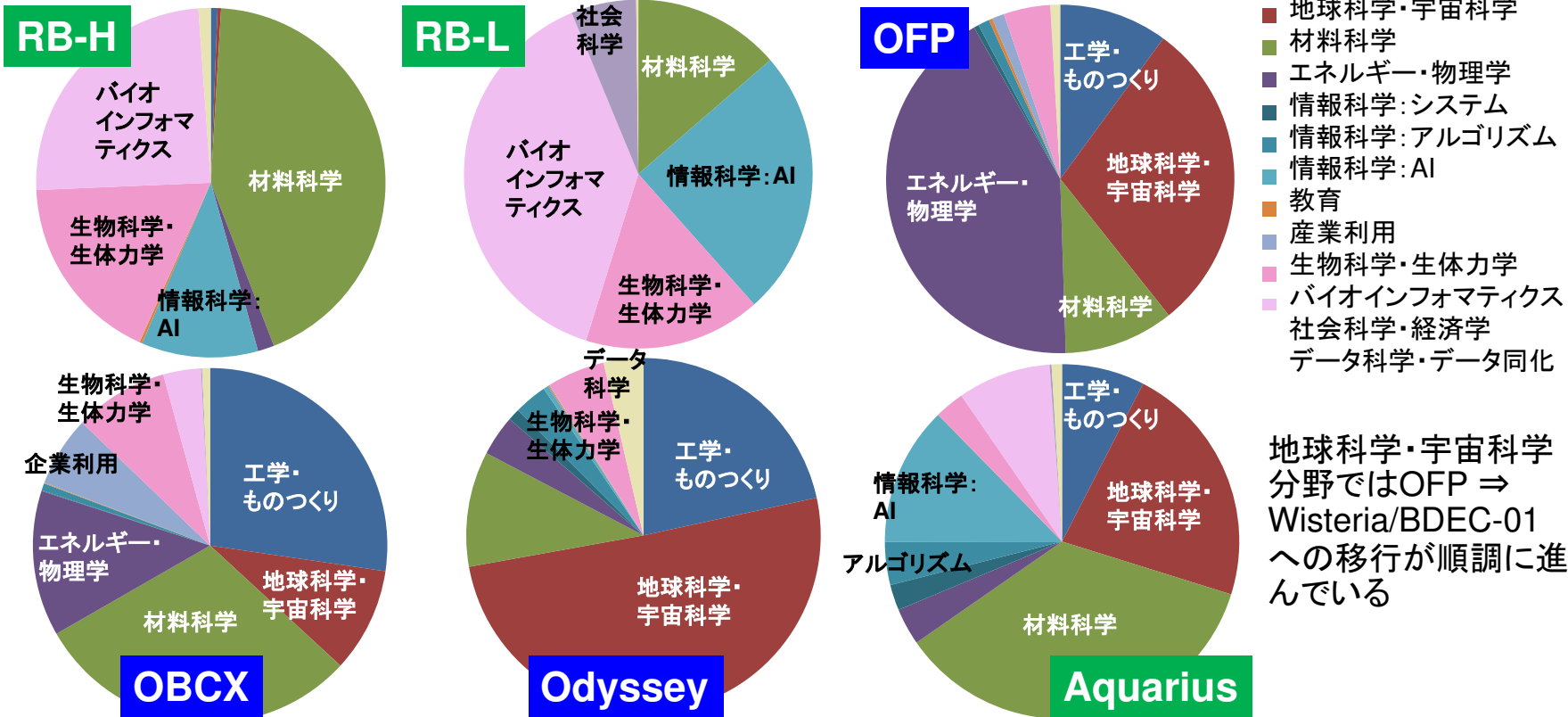
研究分野別利用CPU時間割合



2011-2015	2016-2020	2021-2025
Hitachi SR16K/M1 Yayoi 54.9 TF	OBCX (Fujitsu) 6.61 PF	
HA8000 T2K Today	Oakforest-PACS (Fujitsu) 25.0 PF	OFP -II
	Fujitsu FX10 Oakleaf-FX 1.13 PF	Wisteria BDEC-01
	Reedbush-U/H/L (SGI-HPE) 3.36 PF	

2021年度分野別(東大) ■汎用CPU, ■GPU

Odyssey, Aquariusは8月以降, RB-H, RB-Lは11月末時点



主たる外部発表(センター教員が関連)(1/2)

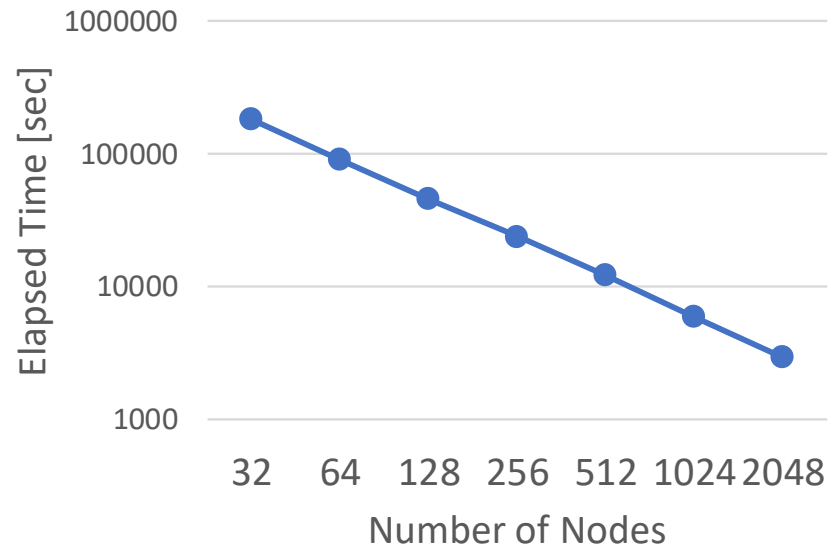
- Iwase, Futamura, Imakura, Sakurai, Ono, Efficient and scalable calculation of complex band structure using Sakurai-Sugiura method, **Technical Paper, SC17, 2017**
- Fujita, Ichimura, Horikoshi, Meadows, Nakajima, Yamaguchi, Koyama, Inoue, Naruse, Katsushima, Hori, Lalith, Accelerating time-history nonlinear implicit unstructured low-order finite-element method with concentrated computation, **HPC Asia 2018, 2018, Best Paper Award**
- Scamps, Simenel, Impact of pear-shaped fission fragments on mass-asymmetric fission in actinides, **Nature 564, 382–385, 2018**
– <https://www.ccs.tsukuba.ac.jp/release20181220/>
- Kreutzer, Ernst, Bishop, Fehske, Hager, Nakajima, Wellein, Chebyshev Filter Diagonalization on Modern Manycore Processors and GPGPUs, ISC-HPC 2018, 2018, **Hans Meuer Award (Best Paper) Finalist**

主たる外部発表(センター教員が関連)(2/2)

- Hirokawa, Boku, Uemoto, Sato, Yabana, Performance Optimization and Evaluation of Scalable Optoelectronics Application on Large Scale KNL Cluster, **ISC-HPC 2018, 2018**
– https://doi.org/10.1007/978-3-319-92040-5_11
- Nakajima, Gerofi, Ishikawa, Horikoshi, Parallel Multigrid Methods on Manycore Clusters with IHK/McKernel, **ScaIA19@SC19, 2019**
- Wen Kai, Optimal collective coordinate in nuclear collective dynamics, **ANPhA/AAPPS-DNP Award for Young Scientist 2019**
– <https://www.ccs.tsukuba.ac.jp/award-20190827/>
- Nonaka, Hanawa, Shoji, Analysis of Cooling Water Temperature Impact on Computing Performance and Energy Consumption, **IEEE Cluster 2020**
- Miki, Mori, Kawaguchi, Destruction of the central black hole gas reservoir through head-on galaxy collisions, **Nature Astronomy 5**, 478–484, 2021

大規模量子シミュレーション(SC17)

Efficient and scalable calculation of complex band structure using Sakurai-Sugiura method (Iwase, Futamura, Imakura, Sakurai, Ono)



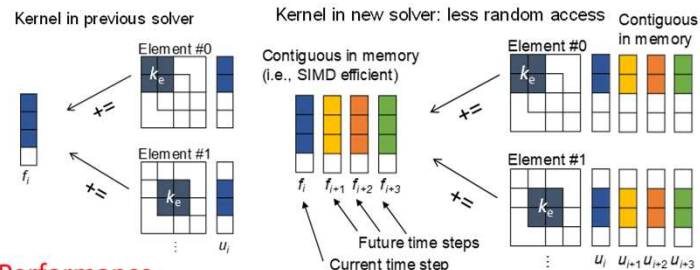
Complex band structures (CBSs) are useful to characterize the static and dynamical electronic properties of materials. Despite the intensive developments, the first-principles calculation of CBS for over several hundred atoms are still computationally demanding. We here propose an efficient and scalable computational method to calculate CBSs. The basic idea is to express the Kohn-Sham equation of the real-space grid scheme as a quadratic eigenvalue problem and compute only the solutions which are necessary to construct the CBS by Sakurai-Sugiura method. The serial performance of the proposed method shows a significant advantage in both run-time and memory usage compared to the conventional method. Furthermore, owing to the hierarchical parallelism in Sakurai-Sugiura method and the domain-decomposition technique for real-space grids, we can achieve an excellent scalability in the CBS calculation of a boron and nitrogen doped carbon nanotube consisting of more than 10,000 atoms using 2,048 nodes (139,264 cores) of Oakforest-PACS.

大規模地震シミュレーション (Best Paper Award, HPC Asia 2018)

Accelerating time-history nonlinear implicit unstructured low-order finite-element method with concentrated computation (Fujita, Ichimura, Horikoshi, Meadows, Nakajima, Yamaguchi, Koyama, Inoue, Naruse, Katsushima, Hori, Lalith)

Finite Element Method

- Nonlinear Dynamic Solid Mechanics, Tet. Elements (2nd Order)
- Mixed Precision, EBE-Operations
- K computer \Rightarrow OFP with Intel Xeon Phi (Knights Landing)
 - Lower B/F 0.50 \Rightarrow 0.16 (MCDRAM), Wider SIMD 128 \Rightarrow 512bit
- GAMERA (SC14 Gordon Bell Finalist)
 - multi-Grid method, Adaptive conjugate gradient method, Multi-precision arithmetic, Element-by-element method, pRedictor with Adams-Bashforth method
- GHYDRA (Proposed Method)**
 - Great-HYDRA, HYbird tempo-spatial-arithmetic multi-grID solver with concentrated computation
 - Predict solution of future time steps by solving several time steps together (Linear: HPC Asia 2018, Nonlinear: IPDPS 2018)
 - Higher Density of Computation with Continuous Memory Access
 - GAMERA \Rightarrow GHYDRA: 1.72x on K, 5.02x on OFP (Oakfire-PACS)

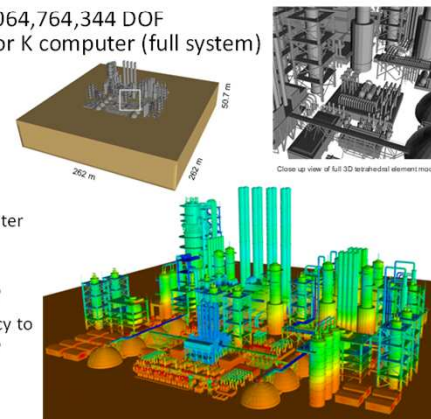
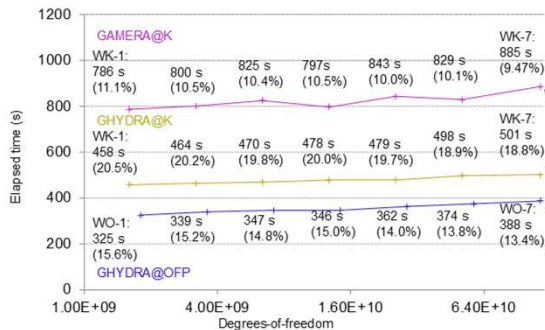
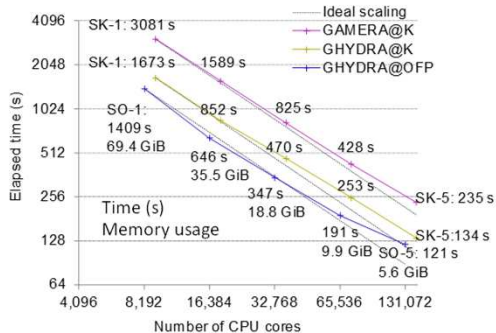


Performance

- 83.7% Weak Scaling Efficiency on OFP (128 \Rightarrow 8,192 nodes)
- GHYDRA is faster on OFP, although memory bandwidth is smaller (K: 5.3 PB/s, OFP: 4.0 PB/s)

Application

- 11,321,249,889 elements, 49,064,764,344 DOF
- 1.72 PFLOPS (16.2% of peak) for K computer (full system)



非対称核分裂をめぐる謎の解明 ～洋ナシ型原子核の出現～

“Impact of pear-shaped fission fragments on mass-asymmetric fission in actinides”

Nature volume 564, pages 382–385 (2018)

Guillaume Scamps & Cédric Simenel

成果概要

原子力エネルギーの源である核分裂反応の数値理論的解析を用いて、分裂片として生成される核種にキセノン周辺の元素が大量に含まれている理由を解明した。

発展性

核分裂現象の観測事実を説明する新説としてだけでなく、水銀などの新しい領域の核分裂現象に関しても、重要な意味を持つ。

さらには、宇宙元素合成における核分裂の役割に関しても、多くの知見を提供すると期待される。

プレスリリース

<https://www.ccs.tsukuba.ac.jp/release20181220/>

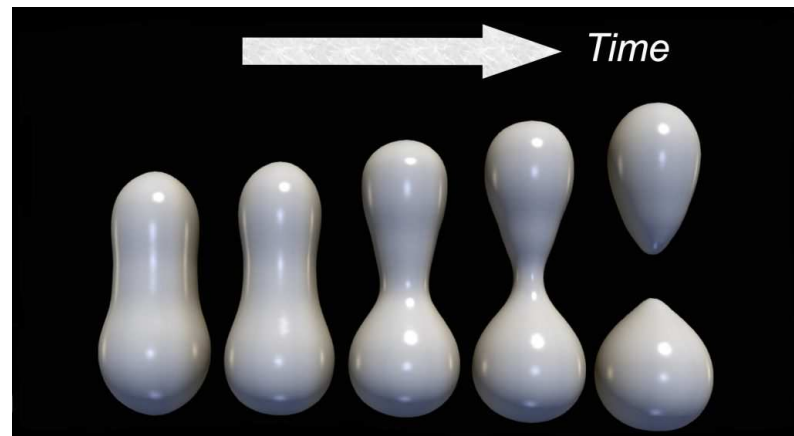


図 プルトニウム原子核(^{240}Pu)の核分裂シミュレーションの結果

分裂していく様子(核形状)を表している。左端から右端の状態まで、時間スケールはおおよそ 20 zs(zs: ゼプト秒、 10^{-21} 秒)。2つに分裂すると、重い分裂片(下部)の原子核が八重極変形をしているが、この形状が分裂して生成される核種に重大な影響を与えていることが分かった。

大規模量子シミュレーション (Best Paper Finalist, ISC 2018)

Chebyshev Filter Diagonalization on Modern Manycore Processors and GPGPUs (Kreutzer, Ernst, Bishop, Fehske, Hager, Nakajima, Wellein)

Chebyshev Filter Diagonalization on Modern Manycore Processors and GPGPUs (Kreutzer, Ernst, Bishop, Fehske, Hager, Nakajima, Wellein)

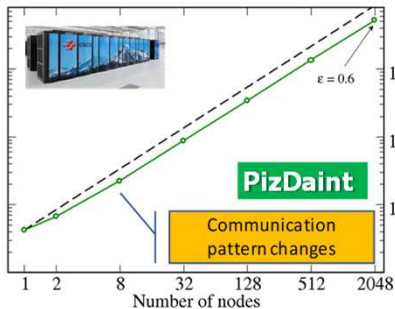
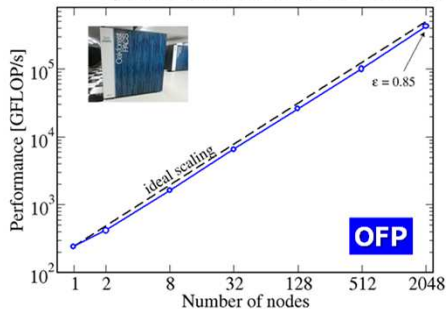
ISC-HPC 2018 Hans Meuer Award Finalist

Filter Diagonalization

- Computations of All Eigen-Pairs of Large Sparse Matrix
- ChebFD Scheme
 - Apply Chebyshev polynomial filter to search vectors
 - Orthogonalize filtered vectors, Compute Ritz-pairs and restart if necessary

Summary

- ChebFD polynomial filter for Intel KNL and Nvidia GPGPUs
- High Flop-rates for sparse matrix problems & large block vectors
- Subspace blocking allows for:
 - Easy & efficient usage of slow memories via transparent access and
 - Pipelining of communication and computation across subspaces
- Weak scaling: Approx. 0.5 PFLOPD on 2,048 nodes of OFP & PizDaint
- Full scale OFP system: 1.5+ PFLOPS for 100 inner eigenpairs of sparse matrix with 16 billion rows



Polynomial degree

Single kernel

Algorithm 1 Application of the ChebFD polynomial filter to block vectors.

```

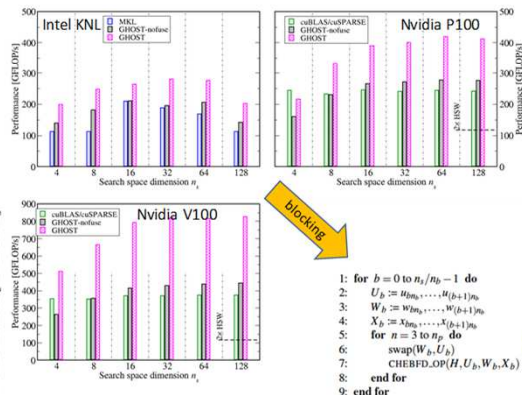
1:  $U := u_1, \dots, u_{n_b}$   $\triangleright$  define block vector
2:  $W := w_1, \dots, w_{n_b}$   $\triangleright$  define block vector
3:  $X := x_1, \dots, x_{n_b}$   $\triangleright$  define block vector
4:  $U \leftarrow (\alpha H + \beta I)U - X$   $\triangleright$  spmv()
5:  $W \leftarrow 2(\alpha H + \beta I)U - X$   $\triangleright$  spmv()
6:  $X \leftarrow g_0 c_0 X + g_1 c_1 U + g_2 c_2 W$   $\triangleright$  baxpy() + bscal()
7: for  $p = 3$  to  $n_p$  do
8: swap( $W, U$ )
9:  $W \leftarrow 2(\alpha H + \beta I)U - W$   $\leftarrow$  spmv
10:  $\eta_\mu \leftarrow (W, U)$ 
11:  $\mu_\mu \leftarrow (U, U)$ 
12:  $X \leftarrow X + 8\rho c_p W$ 
13: end for
  
```

Block vectors of size $n_b \cdot n$

Sparse matrix multiple vector multiplication

Optimistic Comp. Intensity

$$I(n_b) = \frac{146}{80 + 260/n_b} F/B$$

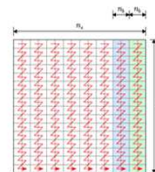


Vector subspace blocking

```

1: for  $b = 0$  to  $n_b/n_b - 1$  do
2:  $U_b := u_{b n_b}, \dots, u_{(b+1)n_b}$ 
3:  $W_b := w_{b n_b}, \dots, w_{(b+1)n_b}$ 
4:  $X_b := x_{b n_b}, \dots, x_{(b+1)n_b}$ 
5: for  $n = 3$  to  $n_p$  do
6: swap( $W_b, U_b$ )
7: CHEBFD.OP( $H, U_b, W_b, X_b$ )
8: end for
9: end for
  
```

Datalayout



Implementation:

- Intel KNL: SIMD Intrinsics
- Nvidia: CUDA+ opt. reduction

Bottleneck analysis:

- Intel KNL: Core execution
- Nvidia P100: L1 bandwidth
- Nvidia V100: HBM bandwidth (measured: 780 GB/s)

大規模KNLクラスタにおけるスケーラブル・オプトエレクトロニクス・アプリケーションの性能最適化および評価

“Performance Optimization and Evaluation of Scalable Optoelectronics Application on Large Scale KNL Cluster”

ISC High Performance 2018, pp 205–225

Yuta Hirokawa, Taisuke Boku, Mitsuharu Uemoto, Shunsuke A. Sato & Kazuhiro Yabana

成果概要

Intel のメニーコアプロセッサ KNL (Knights Landing) を搭載したOakforest-PACS 上で、電子ダイナミクスシミュレーションのための先進的なコード ARTED の最適化と性能評価を行った。
システムの 99.8% に相当する最大 8,192 ノードを使用し、ハミルトニアン計算において、理論ピーク値の 16%、最大 4PFLOPS という非常に優れた weak scaling 性能を達成。

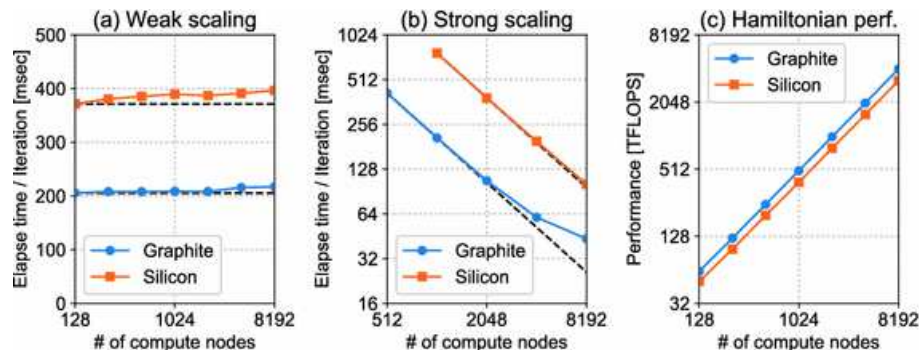
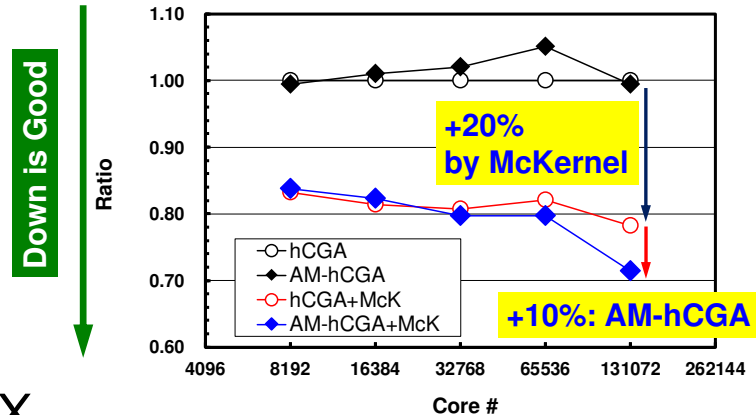
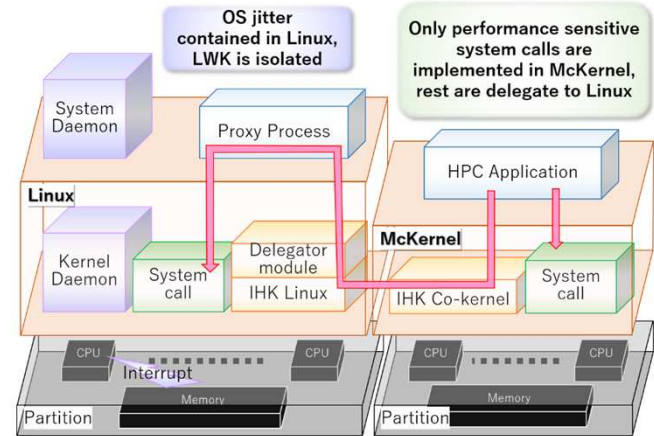


図 Oakforest-PACSのフルシステムでの性能スケーリング結果

McKernel (Scala19@SC19)

Parallel Multigrid Methods on Manycore Clusters with IHK/McKernel (Nakajima, Gerofi, Ishikawa, Horikoshi)

- Lightweight Multi-Kernel OS for HPC by RIKEN R-CCS [Gerofi et al. IPDPS 2016]
- McKernel implements only a small set of performance sensitive system calls and the rest of the OS services are delegated to Linux: (Linux+McKernel)
- Same binary on pure Linux can be used
- Lower Noise/Communication Overhead than the Pure Linux Environment
- **Significant improvement of MGCG solver (20%) on OFP with 131,072-cores**
- to be installed on Fugaku, Odyssey, OBCX



Analysis of Cooling Water Temperature Impact on Computing Performance and Energy Consumption

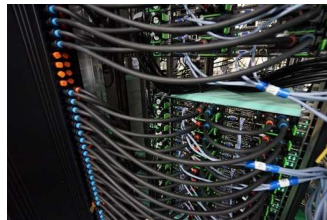
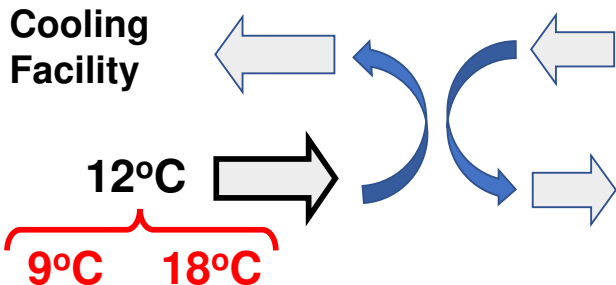
J. Nonaka (Riken R-CCS), T. Hanawa (U.Tokyo & JCAHPC), F. Shoji (Riken R-CCS)

IEEE Cluster 2020

• “Warm” / “Hot” water cooling

- One of the standard techniques to improve energy efficiency of modern HPC and Data Centers

Pros (Benefits)	Possible Cons
<ul style="list-style-type: none">• Cooling facility• Less use of chillers	<ul style="list-style-type: none">• Performance degradation• Power consumption



Cooling Distribution Unit

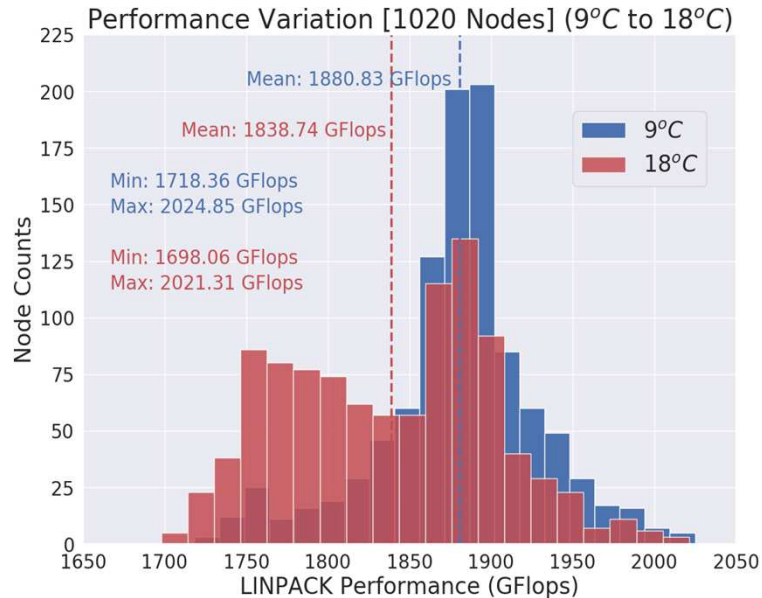


Compute Node

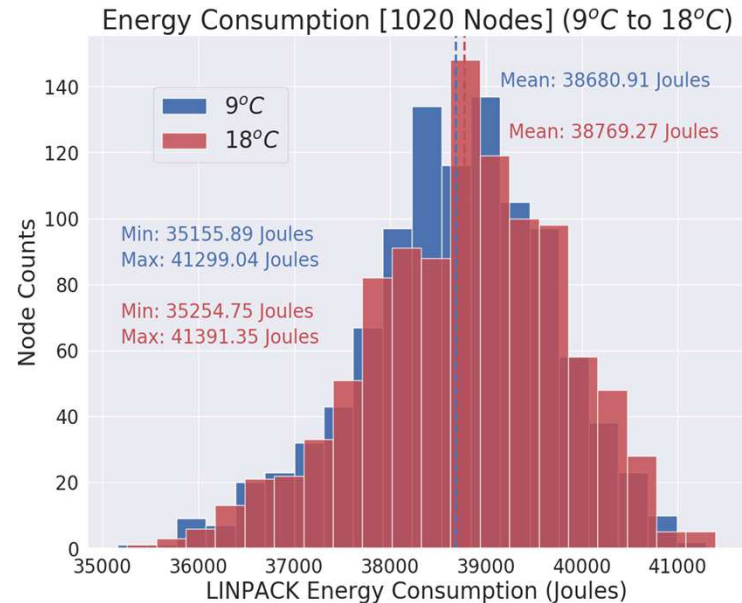
Rear door cooling

Impact of the temperature (9°C → 18°C)

Performance (Flops)



Energy consumption (J)



- The number of nodes with lower performance significantly increased
- Small impact on the energy consumption of the compute nodes

大規模HPCチャレンジ(1/2)

年度	課題代表者	課題名
2017	Balazs Gerofi(理研)	IHK/McKernel 軽量カーネルOS の大規模評価
	中島研吾(東大・情基セ)	SELL-C- σ 疎行列格納法による自動チューニング付き並列多重格子法ソルバーの最適化および性能評価
	中野博生(兵庫県立大)	磁性体を記述する疎行列の数値対角化における大規模並列計算の挑戦
	棕木大地(理研)	2.5次元アルゴリズムを用いた高性能PDGEMMの開発
	藏増嘉伸(筑波大・CCS)	2+1 フレーバー格子 QCD におけるマスターフィールドシミュレーション
	小野倫也(筑波大・CCS)	櫻井・杉浦法とシフトCG 法を用いた実空間差分法に基づく第一原理伝導計算の高速化
2018	井戸村泰宏(JAEA)	大規模原子力流体コードの性能評価
	Gerhard Wellein(FAU)	超大規模疎行列の固有値計算
	星健夫(鳥取大)	超並列 100 ナノメートル電子状態計算における極限的ストロングスケールリング性能調査
	杉本振一郎(八戸工大)	ADVENTURE_Magnetic による 1,000 億自由度数値人体モデルの高周波電磁界解析

大規模HPCチャレンジ(2/2)

年度	課題代表者	課題名
2019	中島研吾(東大・情基セ)	Oakforest-PACS システムにおける大規模疎行列ソルバーの最適化および性能評価
	三好建正(理研)	ゲリラ豪雨予測のリアルタイム実証実験
	庄司文由(理研)	温水冷却方式の効率に関する定量的評価に向けて
	深谷猛(北大)	大規模並列環境におけるシフト付きコレスキーQR 分解を用いた縦長行列の QR 分解計算の性能評価
2021	庄司文由(理研)	温水冷却方式の効率に関する定量的評価に向けて
	中島研吾(東大・情基セ)	並列多重格子法ソルバーの最適化および性能評価
	庄司文由(理研)	温水冷却方式の効率に関する定量的評価に向けて
	中島研吾(東大・情基セ)	並列前処理付き反復法ソルバーの最適化および性能評価

JCAHPCセミナー

<https://www.cc.u-tokyo.ac.jp/events/jcahpc/>

	日付	内容
1	2016年09月30日	Intellによる講演
2	2016年11月02日	ファイルキャッシュに関するチュートリアル(IME)
3	2017年02月17日	Intelコンパイラチュートリアル(午後PCCC-WS)
4	2017年08月29日	Mike Heroux博士(Sandia)講演, 数値アルゴリズム関連WS
5	2017年10月12日	第1回OFP利活用報告会
6	2018年10月17日	第2回OFP利活用報告会
7	2019年05月15日	McKernelチュートリアル
8	2019年10月11日	第3回OFP利活用報告会
9	2020年10月15日	第4回OFP利活用報告会「人類と地球を護るスーパーコンピューティング」 (COVID19関連課題)(オンライン)
10	2021年05月25日	(Wisteria/BDEC-01運用開始記念) 「JCAHPC 次の一手:Oakforest-PACSの先にあるもの」(オンライン)
11	2022年05月27日	(OFP運用終了記念シンポジウム) 「ありがとうOFP:京から富岳への狭間で咲いた大輪の花」(オンライン)

Oakforest-PACSによる研究活動・成果

- 計算科学シミュレーション
 - 筑波大:物理学, 基礎科学, 東大:地球・宇宙科学, ものづくり, 材料科学
 - 国際共同研究も含めた様々な成果
 - 2019・2020年度はNational Flagship Systemとしての役割を果たす
- HPCチャレンジ
- JCAHPCセミナー(11回)
- ゲリラ豪雨リアルタイム予測
 - 計算・観測融合型, リアルタイム, 新しいスタイルの計算(このあと三好さんから発表)
- COVID-19(2020年)
- **McKernel: 軽量マルチカーネルOS**
 - 常時使用には至らず, 富岳・OBCX・Odyssey等へ引き継いで行く

JCAHPCとしての研究活動

- 筑波大・東大両センターの協力関係は長く、個々の教員間では様々な共同研究が実施されている。
 - 筑波大⇒東大という教員も居る
- JCAHPCとしての研究活動はやや不活発であった
- 2022年度はOFP-IIを念頭においたJHPCN(学際大規模情報基盤共同利用・共同研究拠点)共同研究課題を2件新規で提案, 採択された。
 - 大規模アプリケーションの高性能な実用的アクセラレータ対応手法(jh220036)
 - 下川辺隆史(東京大学情報基盤センター)
 - <https://jhpcn-kyoten.itc.u-tokyo.ac.jp/abstract/jh220036>
 - 次世代演算加速装置とそのファイルIOに関する研究(jh220046)
 - 埴敏博(東京大学情報基盤センター)
 - <https://jhpcn-kyoten.itc.u-tokyo.ac.jp/abstract/jh220046>
 - OFP-II設計, アプリ移行等に反映, 外部資金獲得

