

内容に関する質問は

katagiri@cc.nagoya-u.ac.jp

まで

2023年9月6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



第4回不老ユーザ会



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力に支援

世界トップレベル
研究の支援

国策スパコン
利用支援

HPCI (High Performance Computing Infrastructure) 利用者

名大拠点利用者

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. ものつくり企業支援(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「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)
- ▶ 年間隨時募集 (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

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

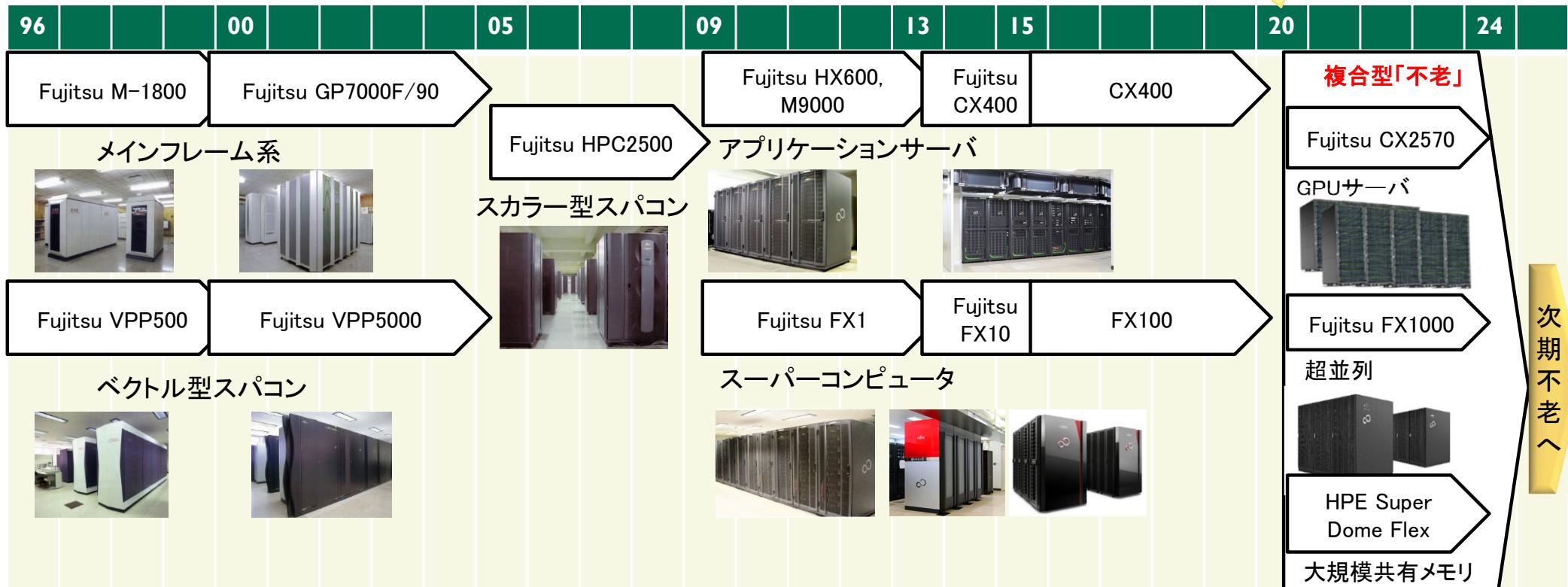
3. 「富岳」向けチューニングと「富岳」への移行支援

- ▶ 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



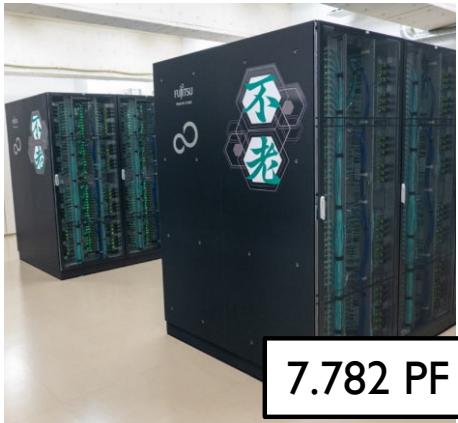
- ◆これまで約5年間隔でリプレイス
- ◆「不老」も5年弱(4年9ヶ月)の稼働を予定



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)



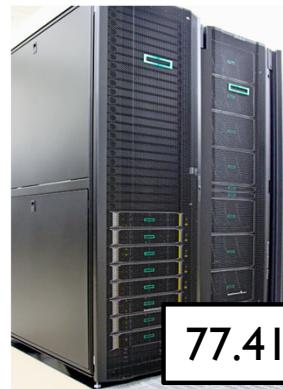
Type Iサブシステム

FUJITSU Supercomputer FX1000
「富岳」型



Type IIサブシステム

FUJITSU Server PRIMERGY CX2570 M5
GPUスパコン



Type IIIサブシステム

HPE Superdome Flex
大容量メモリ・可視化



クラウドシステム

HPE ProLiant DL560
バッチ＆インタラクティブ



ホットストレージ

FUJITSU PRIMERGY RX2540 M5
FUJITSU ETERNUS AF250 S2
DDN SFA18KE
DDN SS9012



コールドストレージ

SONY PetaSite 拡張型 Library



名古屋大学
NAGOYA UNIVERSITY

性能諸元（主要サブシステム群）

		Type I	Type II	Type III	クラウド
ノードあたり	CPU	A64FX × 1 (Armv8.2-A + SVE) 48+2コア、2.2GHz	Xeon Gold 6230 × 2 (Cascade Lake) 20コア、2.10-3.90 GHz	Xeon Platinum 8280M × 16 (Cascade Lake) 28コア、2.70-4.00 GHz	Xeon Gold 6230 × 4 (Cascade Lake) 20コア、2.10-3.90 GHz
	メインメモリ	HBM2, 32GB	DDR4, 384GB	DDR4, 24TB	DDR4, 384GB
	GPU	-	Tesla V100 × 4 (Volta) HBM2, 32GB	Quadro RTX6000 × 4 (Turing) GDDR6, 24GB	-
	理論性能	3.3792 TFLOPS(DP) 1,024 GB/s	・CPU 1.344 TFLOPS(DP) × 2 140.784 GB/s × 2 ・GPU 7.8 TFLOPS(DP) × 4 900 GB/s × 4	・CPU 2.4192 TFLOPS(DP) × 16 140.784 GB/s × 16	1.344 TFLOPS(DP) × 4 140.784 GB/s × 4
ノード数	2,304	221	2	100	
ノード間接続	TofuインターフェクトD	InfiniBand EDR × 2	InfiniBand EDR	InfiniBand EDR	
総理論性能	7.782 PFLOPS(DP) 2.359 PB/s	7.489 PFLOPS(DP) 857.8 TB/s	77.414 TFLOPS(DP) 2.253 TB/s	537.6 TFLOPS(DP) 56.314 TB/s	
冷却方式	水冷	水冷	空冷	空冷	

消費電力・省電力対策

▶ 最大消費電力

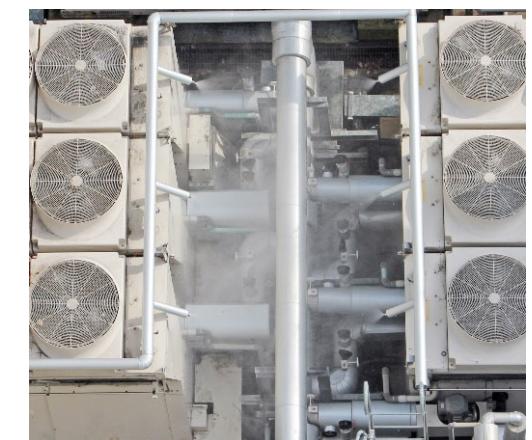
サブシステム名	消費電力
TypeIサブシステム	628.1kVA
TypeIIサブシステム	393.5kVA
TypeIIIサブシステム	21.6kVA
クラウドシステム	93.0kVA
ストレージ	49.9kVA
フロントエンド	19.6kVA
運用管理システム他	52.3kVA
冷却設備	641.9kVA
合 計	1,899.9kVA

▶ 電力可視化

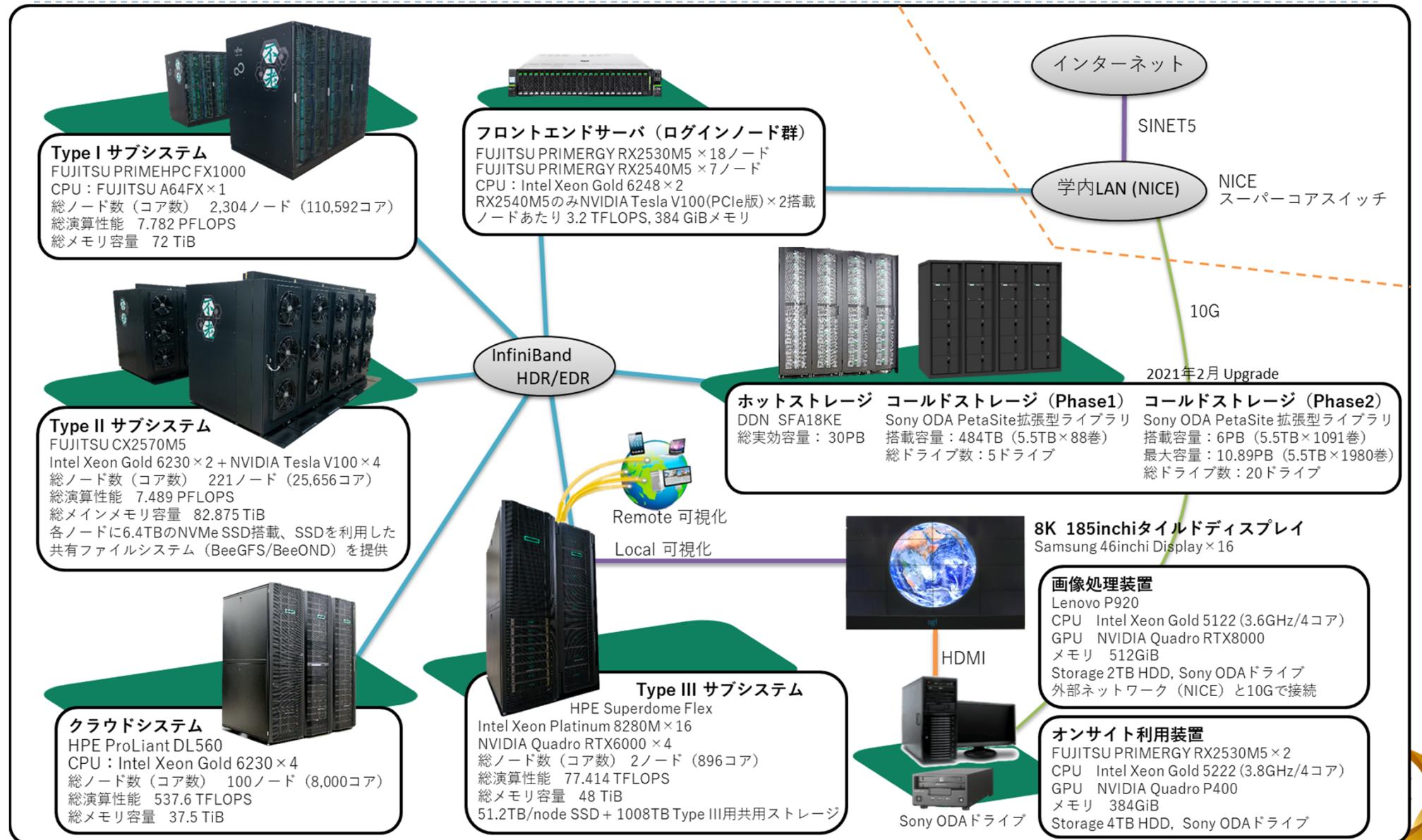


▶ 湧水を用いた冷却

- ▶ 地下の湧水を活用したら総合評価時加点
- ▶ 屋外チラーに散水して冷却



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



大規模共有メモリ:
24TiB × 2ノード

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)

8Kタイルドディスプレイ

185inch 8K高精細大画面タイルドディスプレイ
(総解像度: 7680 × 4320)
Samsung 46inch Display × 16



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



名古屋大学
NAGOYA UNIVERSITY

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	オンライン利 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
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	オンライン利用装置	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

		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	オンライン 利用装置	企業利用
リモート可視化	NICEDCV	○			○ ^{※1}				●
可視化 ソフトウェア	FieldView	○			○		○	○	×
	AVS/Express PyMOL VMD MeshLAB	○		○	○	○	○	○	●
	Paraview POV-Ray 3D AVS Player ffmpeg, ffplay	○			○ ^{※1}		○	○	●
	IDL, ENVI	○			○		○	○	×
	MicroAVS						○		●
	3dsMax Visual Studio Pro						○		×
	※1 Type IIIサブシステムの会話型ノード (Im01)で利用可。								

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 ⇒ 6,500 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 ⇒ 0.65 ポイント付加
 - ▶ 50万円以上: 1円あたり 1.25 ⇒ 0.8 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)

- ▶ TypeIサブシステム(「富岳」型ノード)消費ポイント
 - ▶ 計算課金: 利用ノード数 × 経過時間[s] × 0.0056
 - ▶ 基本負担金1万円 = 0.65万ポイント付加で利用可能な目安
 - 1ノードを 約21日 ⇒ 約13.7日
 - 4ノードを 約 5日 ⇒ 約 3.2日
 - ▶ 10万円(基本利用料金1万円、追加料金9万円) = 6.5万ポイント付加で利用可能な目安
 - 1ノードを 約207日 ⇒ 約135日
 - 4ノードを 約 52日 ⇒ 約 34日
 - 8ノードを 約 26日 ⇒ 約 17日
 - ▶ 1ノードの年間利用額: 約16万9000円 ⇒ 約25万8500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
= 0.65万ポイント付加で利用可能な目安
 - 1ノード(1GPU)を 約17日 ⇒ 約11.1日
 - 1ノード(4GPU)を 約 4日 ⇒ 約 2.6日
 - ▶ 10万円(基本利用料金1万円、追加料金9万円)
= 6.5万ポイント付加で利用可能な目安
 - 1ノード(1GPU)を 約165日 ⇒ 約108日
 - 1ノード(4GPU)を 約 41日 ⇒ 約 27日
 - 4ノード(16GPU)を 約 10日 ⇒ 約 7日
 - ▶ 1ノード(4GPU)の年間利用額: 約84万7000円
⇒ 約128万5000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

- ▶ Type III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
= 0.65万ポイント付加で利用可能な目安
 - 1ソケットを 約58日 ⇒ 約37.9日
 - 4ソケットを 約14日 ⇒ 約 9.1日
 - ▶ 10万円(基本利用料金1万円、追加料金9万円)
= 6.5万ポイント付加で利用可能な目安
 - 4ソケットを 約145日 ⇒ 約95日
 - 32ソケットを 約 18日 ⇒ 約12日
 - ▶ 2ソケットの年間利用額: 約12万1000円
⇒ 約18万5000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。



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程度が売っています!
- 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。



名古屋大学
NAGOYA UNIVERSITY

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。

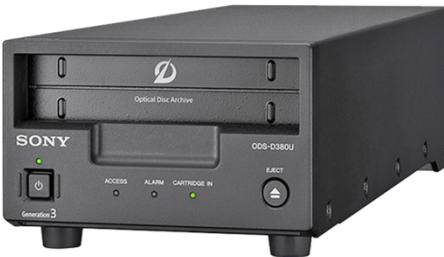


コールドストレージ内部

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：

³⁰
https://icts.nagoya-u.ac.jp/ja/sc/pdf/pamphlet_cold-202012.pdf

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 ⇒ **330,000円** (通常価格の約2.8倍)

- ▶ クラウドシステム：

- 62,000円 ⇒ **95,000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 ⇒ 約38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

売っています！

▶ グループ利用

- ▶ 1口10人まで、10万円で100,000 ⇒ **65,000** 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
 - ▶ **65,000** 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**6,500** 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 (値上前と同じ)
- ▶ 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(値上前と同じ)
- ▶ 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⇒65,000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。

- ▶ 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 ⇒65,000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）



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)

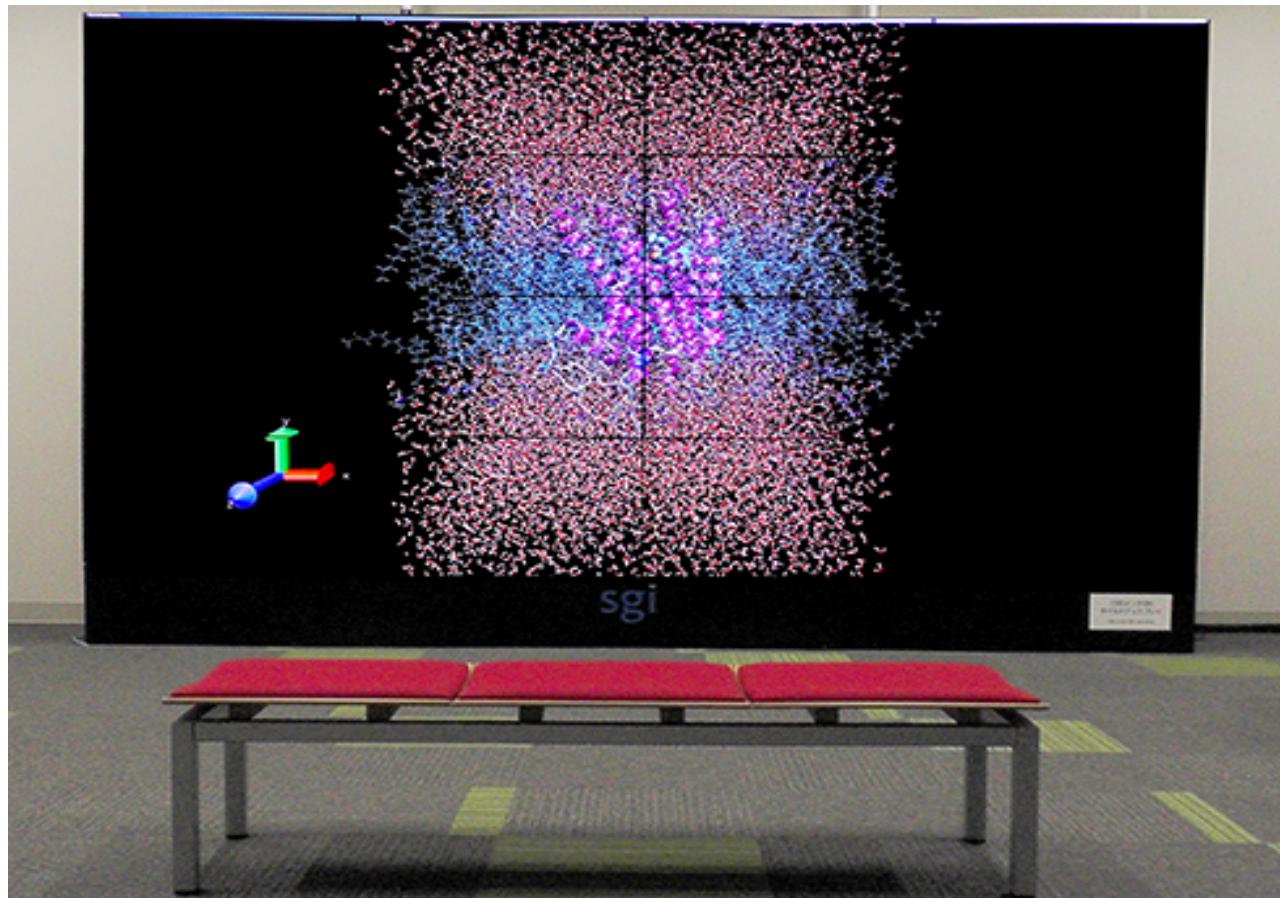


- 8K 185型タイルドディスプレイ
- 全天周映像視聴システム
- 円偏光立体視システム など

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(1F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 (2023年4月~)

2023年度「不老」利用型講習会 開催予定 (オンライン開催)

- 2023年9月22日 MPI (初級)
- 2023年9月28日 超初心者利用 【新設講習会】
- 2023年10月2日 数値計算ライブラリ (初級)
- 2023年10月18日 OpenFOAM講習会
(中級・ミルククラウン解析)

- ▶ 2023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/csvview2.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（導入時）

■ 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.)

■ 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

▶ 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
(早大 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

(名大ITC独自開発) 3Dデータ加工ツール

対応 3DデータFormat:
3ds, stl, ply, wrl, dxf, dae, xyz,
x3d

1) 3Dデータの表示

meshlab@ [in](#)

【使用例】

meshlab@ abc.ply

2) データフォーマット変換

3dconv [in](#) [out](#)

【使用例】

3dconv abc.obj abc.ply

3) マージ処理

3dmerge [in1](#) [in2](#) [out](#)

【使用例】

3dmerge ball.ply stick.ply

ballstick.ply

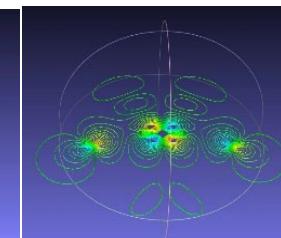
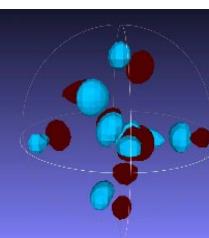
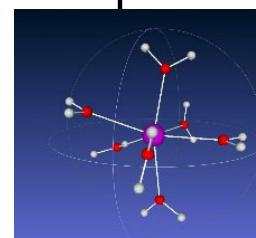
4) Surfaceメッシュ削減

3dmesh [in](#) [out](#) [faces_number]

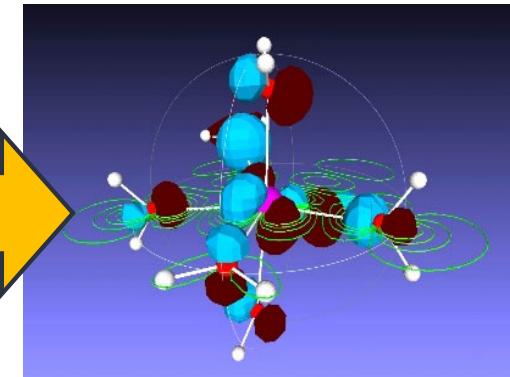
… 省略値:200

【使用例】

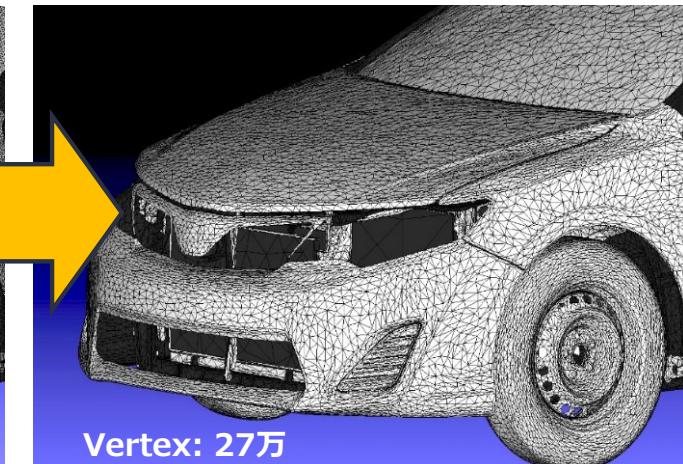
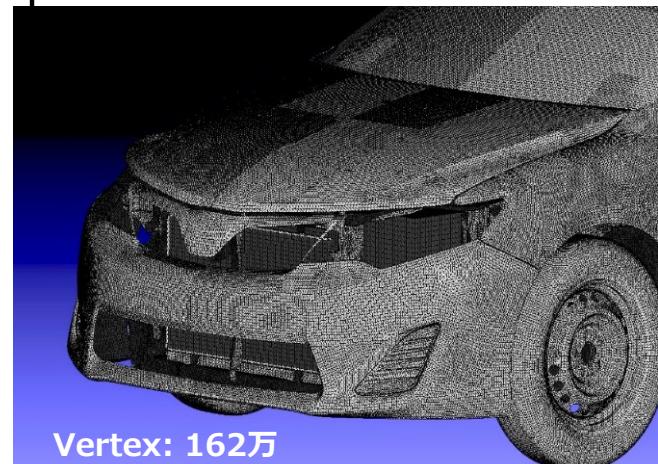
3dmesh abc.x3d abc.ply 100



Merge



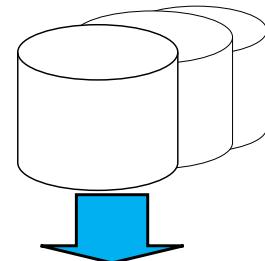
Surface Reduction



(名大ITC独自開発)

計算化学データの立体構造の可視化・解析システム

計算から可視化まで、すべて
スパコン上で実行、大規模データ
対応、企業利用可



X線結晶構造解析、電子顕微鏡解析、NMR

コンピュータ・シミュレーション（構造、トラジェクトリ
データ等）

AlphaFold2, AMBER, VASP, Gaussian, GENESIS
GAMESS, GROMACS, NAMD, LAMMPS等

スーパーコンピュータ

AVS Express

Babel

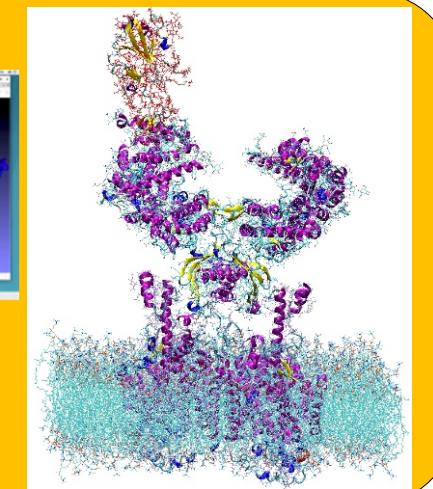
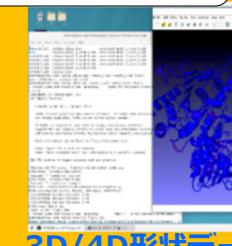
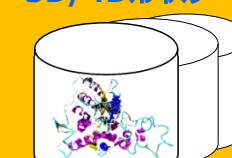
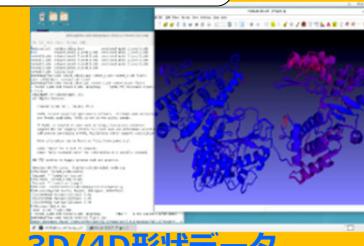
VMD

PyMol

MeshLab

呼び出し

- 1) ジョブ投入支援
- 2) プリポスト処理
 - ・操作の自動化
 - ・インタラクティブ実行 / バッチ実行
 - ・リモート可視化 / ローカル可視化
 - ・可視化結果の保存 / 閲覧
- 3) 分析支援
 - ・RMSD計算, 重ね合わせ表示
 - ・マルチビューを使った比較
- 4) 分子データフォーマット変換

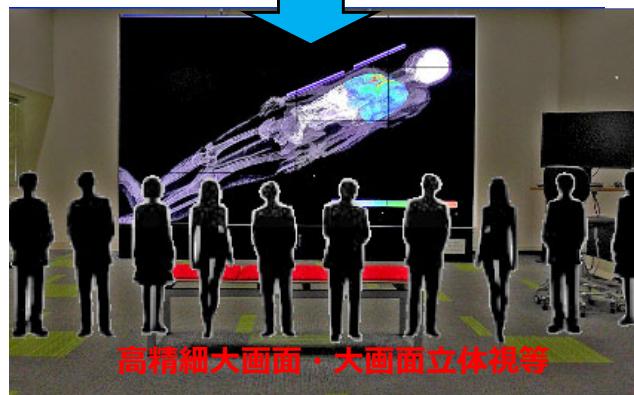


リモート可視化
(データ転送不要)

インターネット



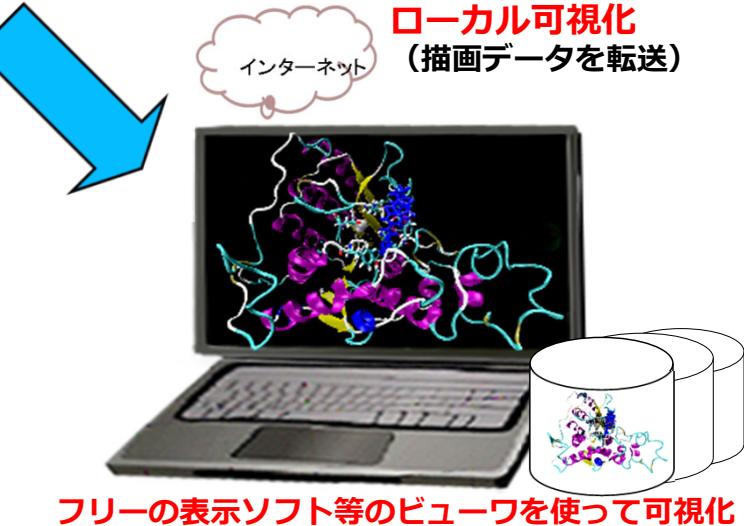
多彩な表示装置に対応



高精細大画面・大画面立体視等

ローカル可視化
(描画データを転送)

インターネット



リモートDesktopツールを使って可視化

フリーの表示ソフト等のビューワを使って可視化

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-alphafold.html>

AlphaFold

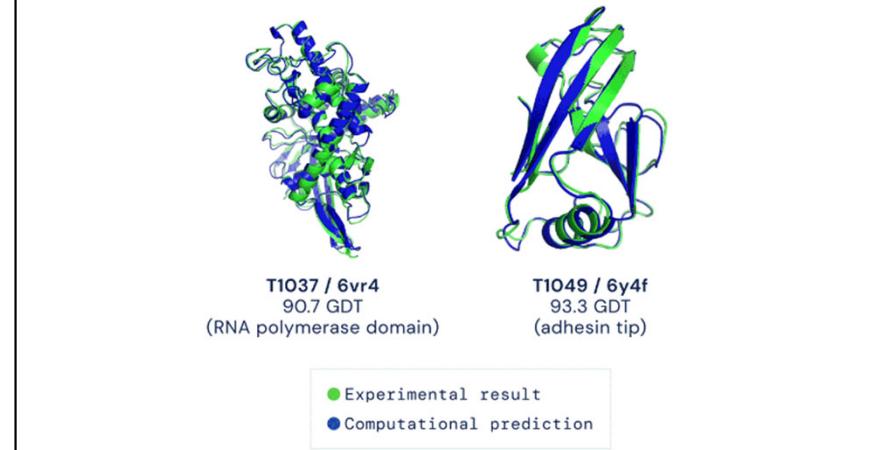
This package provides an implementation of the inference pipeline of AlphaFold v2.0. This is a completely new model that was entered in CASP14 and published in Nature. For simplicity, we refer to this model as AlphaFold throughout the rest of this document.

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).



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

- ▶ 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NVMECH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

2022年度（令和4年度）名古屋大学HPC計算科学連携研究プロジェクト採択課題

▶ 研究代表者：岡本祐幸（名大）

「AIと分子シミュレーションによる 新型コロナウィルスの 感染初期過程の研究」

AlphaFold2ブラウザ版と インストール版（名大「不老」）

岡本祐幸先生（名大）
提供

ブラウザ版

7E1C
355残基

1時間55分
RMSD:1.406 Å

インストール版(名大不老)

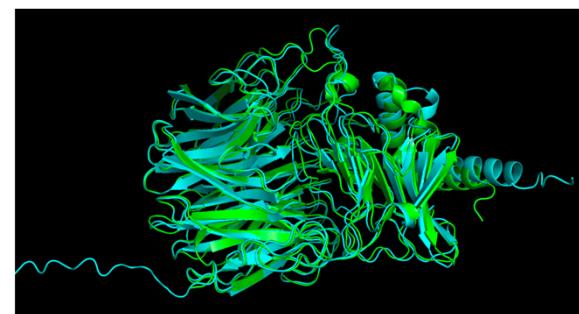
54分
RMSD:1.591 Å



7FH8
676残基

2時間32分
RMSD:0.914 Å

1時間34分
RMSD:0.854 Å



7WHP_A
1058残基

out of memory

1時間50分
RMSD:1.658 Å



結果 (7WHP_A, 名大「不老」を用いて)

岡本祐幸先生(名大)
提供



7WHP_chainA
1058残基
RMSD...1.658 Å

計算時間1時間50分

青:AlphaFold2予測結果
緑:PDB構造

ユーザ活用事例：センター開発可視化ツール

- ▶ 佐藤友哉、後藤俊幸、渡邊威(名古屋工業大学)、高橋一郎(名古屋大学)

「室内における人体回りの 湿潤対流と熱輸送」

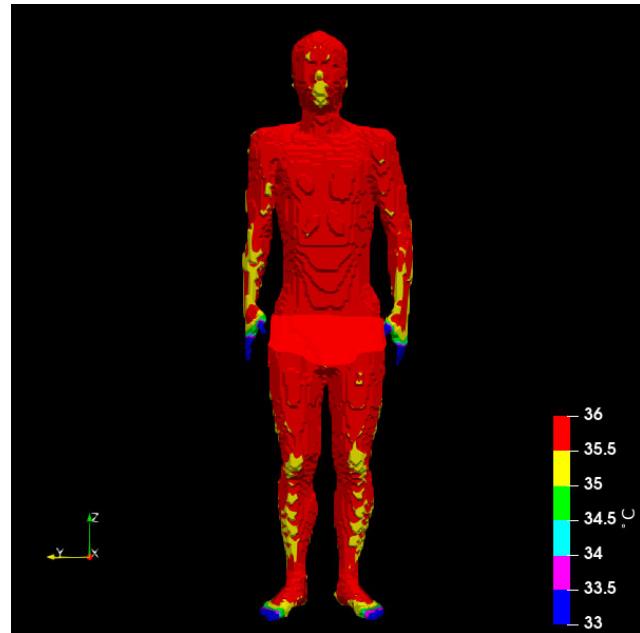
日本物理学会 2023年3月23日

計算結果 3

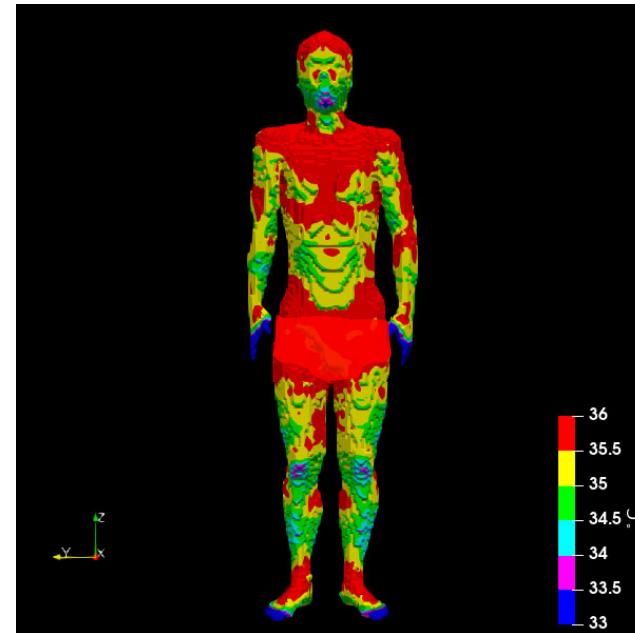
初期室温:25°C 初期湿度:50%
外壁温度:25°C

人体表面温度

発汗有の計算を60分行い,その後20分間
 $\begin{pmatrix} 1\text{発汗を止めた計算} \\ 2\text{発汗し続けた計算} \end{pmatrix}$ を行った



発汗無



発汗有

最終ステップ(80分後)の人体表面温度の比較

HPCによる量子関連技術の進展： GPUによる超高速量子回路シミュレータ活用

⇒第二部でNVIDIA社から紹介

- ▶ 超高速量子回路シミュレータが、量子アルゴリズムの進展を促す ⇒GPUでの演算効率の良さから注目
- ▶ **NVIDIA cuQuantum**
<https://developer.nvidia.com/ja-jp/blog/best-in-class-quantum-circuit-simulation-at-scale-with-nvidia-cuquantum-appliance/>
- ▶ 「不老」Type II サブシステムで量子回路シミュレータ **cuQuantum** が稼働中
- ▶ 「不老」を利用するJHPCN課題でも採択
- ▶ 2023年度 JHPCN採択課題：jh230001
「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）

cuQuantumによる量子回路の数値シミュレーション高速化

慶應大学 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))