

趣旨説明とシステムの概要

SQUID
Supercomputer for
Quest to
Unsolved
Interdisciplinary
Datascience

大阪大学サイバーメディアセンター
応用情報システム研究部門 伊達 進

スーパーコンピュータ利用説明会(スーパーコンピュータ未経験者向け)
2021.05.25

スーパーコンピュータ利用説明会(初めてスパコンのご利用を検討される方)



利用説明会の位置付け※ SQUIDに興味・関心のある方はどなたでも参加いただけます。

初めて大阪大学サイバーメディアセンター(CMC)のスーパーコンピュータの利用を検討されている方向けに、産業利用制度、(学術機関向け)一般利用制度について紹介・説明

本日の利用説明会の趣旨

CMCの役割、ミッションを理解していただき、スーパーコンピュータのご利用をご検討いただくきっかけとしていただけること

利用説明会での達成目標

- CMC
 - 大阪大学CMCとはどのような組織か（なぜスーパーコンピュータによる計算サービスを提供しているのか）を理解する
 - 大阪大学CMCのスーパーコンピュータ概要について理解する。
 - スーパーコンピュータの利用資格と利用負担金についてを理解する。
 - スーパーコンピュータの利用種別についてを理解する。
- 利用申請と利用者支援
 - 大阪大学CMCでスーパーコンピュータを利用するための利用申請方法について理解する。
 - 大阪大学CMCが提供する利用者支援の概要について理解する。
- 利用方法
 - スーパーコンピュータの利用方法(ログイン、ジョブ投入・実行、ジョブ確認の基本)を理解する。

スーパーコンピュータ利用説明会(スーパーコンピュータ
未経験者向け) 2021.05.25

本日のプログラム



13:30-13:50 趣旨説明とシステムの概要



サイバーメディアセンター応用情報システム研究部門
伊達 進

13:50-14:10 利用申請と利用者支援

サイバーメディアセンター応用情報システム研究部門
山下 晃弘

14:10-15:10 利用方法

情報推進部 情報基盤課
技術職員

15:10-15:30 個別相談会 （事前申し込みいただいた方）

大阪大学サイバーメディアセンター



吹田CMC 本館



ITコア棟

- 大阪大学の計算機センター

- 役割とミッション

- 大阪大学の研究・教育を支える情報基盤の整備・運用を担うとともに、大規模計算、情報通信、および、ICT技術を活用した教育に関する最先端の研究開発を推進。
- 学内だけでなく学外の教育・研究組織や産業界と密接に連携したセンターとして機能することが求められた全国共同利用施設でもあり、その一環として、全国の大学の研究者が学術研究・教育に伴う計算及び情報処理を行うことができるよう、種々の高性能な大規模計算機システム(スーパーコンピュータ)を提供。

企業の方もお使いになれます！

POINT



2007年度より文部科学省の「先端研究施設共用イノベーション創出事業」（2009年度から「先端共用施設共用促進事業」として2010年度まで実施。）の支援を受け、大規模計算機システムの利用を民間企業等へ開放してきました。2011年度からは社会貢献の一環として、有償で大規模計算機システムを産業利用に開放しています。

スーパーコンピュー
未經

CMCとスパコンの役割

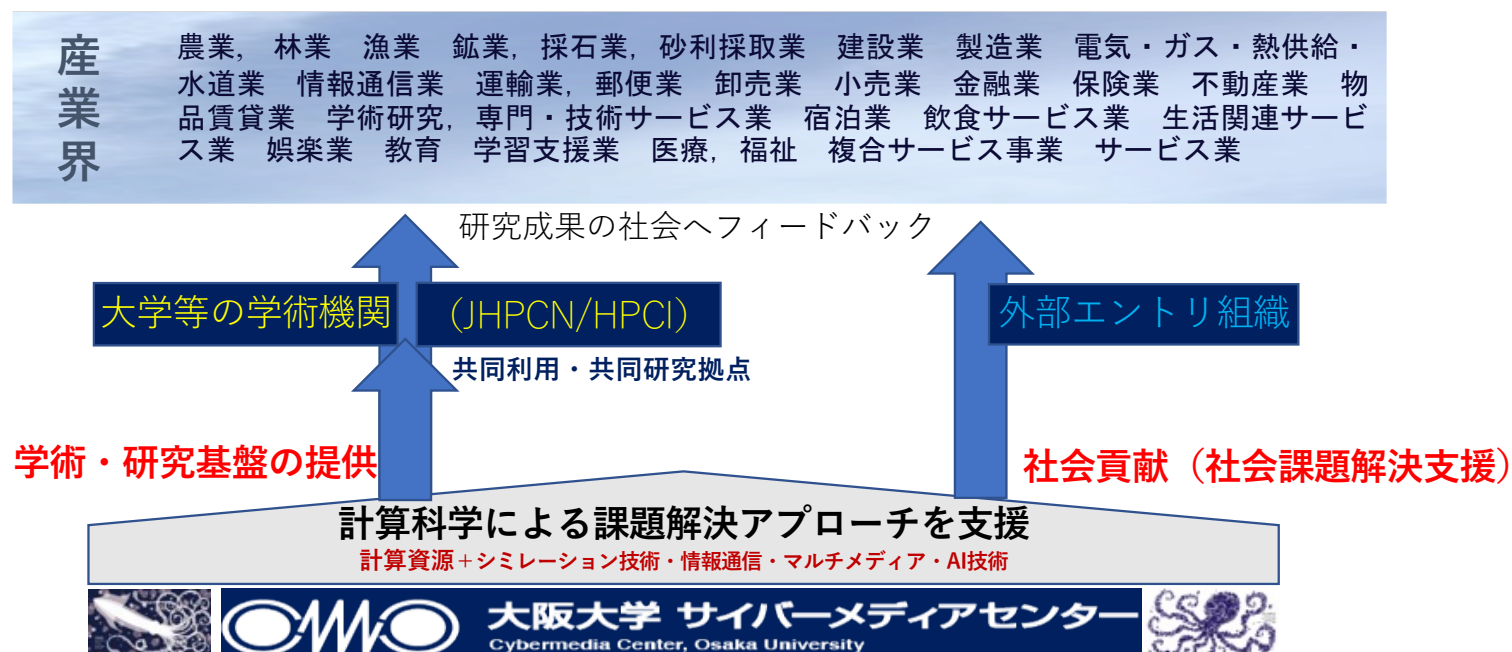


最先端のスーパーコンピュータは、「日本の科学技術が世界の先端にあるため」に整備されています

①研究
科学の進展

②教育
人材育成

③社会貢献



- 計算科学（数値計算技術、大規模シミュレーション技術など）の学術基盤としての貢献
- 総合大学としての幅広い科学分野に学内連携で対応

大阪大学CMCの大規模計算機システム事業（スパコン事業）



CMCのスーパーコンピュータをご利用できる環境を整備するとともに、利用者の皆様がスーパーコンピュータを利活用できるよう支援しています。

• 体制

応用情報システム研究部門、情報推進部情報基盤課スパコン班の教職員が中心となり、CMC教職員が連携しつつ、スパコン事業を推進しています。

<http://www.hpc.cmc.osaka-u.ac.jp/>

スーパーコンピュータ利用説明会(スーパーコンピュータ
未経験者向け) 2021.05.25

CMCの提供するスーパーコンピューティング環境

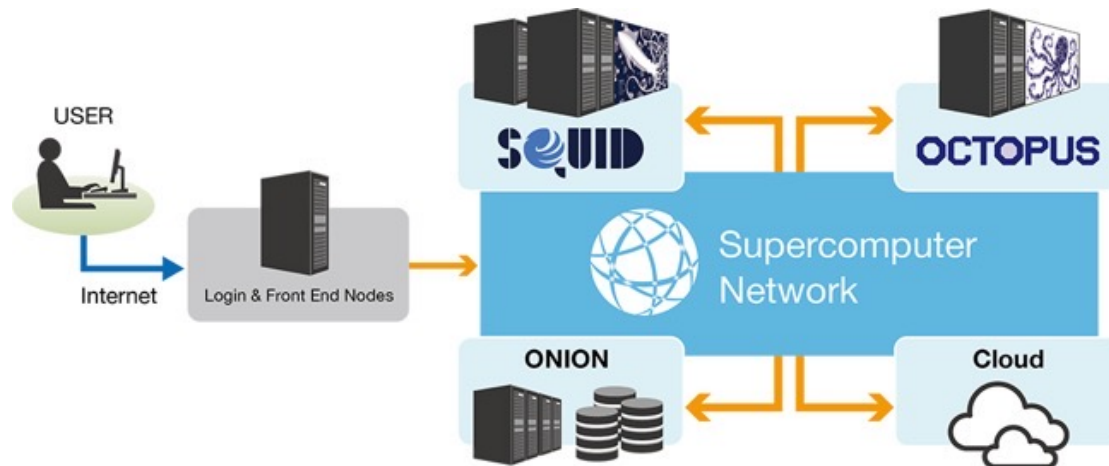


1 全国の研究者が
利用可能

2 多様な計算
ニーズへの対応

3 ペタフロップス級
大規模計算能力

4 安定した
動作環境の提供



POINT 2 系統のスーパーコンピュータが利用可能！

大阪大学サイバーメディアセンターでは、2021年度現在、SQUID (16.59 PFLOPS) とOCTOPUS (1.4 PFLOPS) の2系統のペタフロップス級スーパーコンピュータをお使いいただけます。

・ フロントエンドノード（ログインノード）

・ 2系統のスーパーコンピュータ

- OCTOPUS (Osaka university Cybermedia cenTer Over-Petascale Universal Supercomputer)
- SQUID (Supercomputer for Quest to Unsolved Interdisciplinary Datascience)

・ データ集約基盤 ONION

- オブジェクトストレージ HyperStore (0.5 PB)
- SQUID 並列ファイルシステム ExaScaler (21PB)

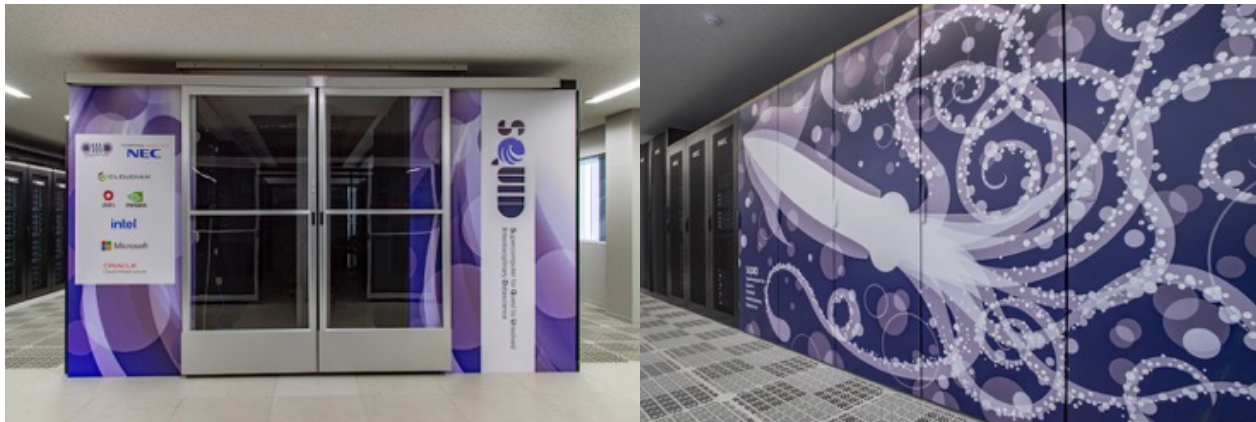
・ クラウドバースティング資源

- Microsoft Azure
- Oracle Cloud Infrastructure

SQUID since May 2021



- クラウド連動型高性能計算・高性能データ分析用スーパーコンピュータ
(Supercomputer for Quest to Unsolved interdisciplinary Datascience)
 - 総理論演算性能 16.591 PFlops



最新 3 種混合プロセッサ・アクセラレータ搭載！

POINT



SQUIDは、2021 年 4 月に発表されたばかりの Ice Lake 世代のプロセッサをはじめ、最新 GPU アクセラレータ NVIDIA HGX A100 8 GPU ボード、最新ベクトルプロセッサ NEC SX-Aurora TSUBASA Type 20A を搭載しています。汎用 CPU ノード群は、Ice Lake 世代のプロセッサを搭載する国際最大級となります。

スーパーコンピュータ利用説明会(スーパーコンピュータ
未経験者向け) 2021.05.25



SQUID システム構成

汎用 CPU ノード群

1,520 ノード x 理論演算性能 5,837 TFLOPS **8.871 PFLOPS**

プロセッサ Intel Xeon Platinum 8368 (Ice Lake / 2.40 GHz 38コア) 2基

主記憶容量 256 GB

GPU ノード群

42 ノード x 理論演算性能 161.836 TFLOPS **6.797 PFLOPS**

プロセッサ Intel Xeon Platinum 8368 (Ice Lake / 2.40 GHz 38コア) 2基

主記憶容量 512 GB

GPU NVIDIA HGX A100 8 GPU ボード (Delta)

ベクトルノード群

36 ノード x 理論演算性能 25,611 TFLOPS **0.922 PFLOPS**

プロセッサ AMD EPYC 7402P (2.8 GHz 24コア) 1基

主記憶容量 128 GB

Vector Engine NEC SX-Aurora TSUBASA Type 20A 8基

ノード間接続

ノード間接続 Mellanox InfiniBand HDR (200 Gbps)

データ集約基盤 ONION

S3 対応並列ファイルシステム **21.2 PB**

ファイルシステム DDN EXAScaler (Lustre)

HDD 20.0 PB

SSD 1.2 PB

S3 対応オブジェクトストレージ **500 TB**

オブジェクトストレージ CLOUDIAN HyperStore

HDD 500 TB

OCTOPUS since Dec. 2017



- ペタフロップス級ハイブリッド型スーパーコンピュータ

(Osaka university Cybermedia cenTer Over-Petascale Universal Supercomputer) OCTOPUS 1.46 PFlops

- 総理論演算性能 1.463 PFlops



汎用CPUノード: 236ノード

プロセッサ	Intel Xeon Gold 6126 (Skylake / 2.6 GHz 12コア) 2基
主記憶容量	192 GB
インターコネク	InfiniBand EDR (100 Gbps)

GPUノード: 37ノード

プロセッサ	Intel Xeon Gold 6126 (Skylake / 2.6 GHz 12コア) 2基
主記憶容量	192 GB
アクセラレータ	NVIDIA Tesla P100 (NVLink) 4基
インターコネク	InfiniBand EDR (100 Gbps)

Xeon Phiノード: 44ノード

プロセッサ	Intel Xeon Phi 7210 (Knights Landing / 1.3 GHz 64コア) 1基
主記憶容量	192 GB
インターコネク	InfiniBand EDR (100 Gbps)

大容量主記憶搭載ノード: 2ノード

プロセッサ	Intel Xeon Platinum 8153 (Skylake / 2.0 GHz 16コア) 8基
主記憶容量	6 TB
インターコネク	InfiniBand EDR (100 Gbps)

大容量ストレージ

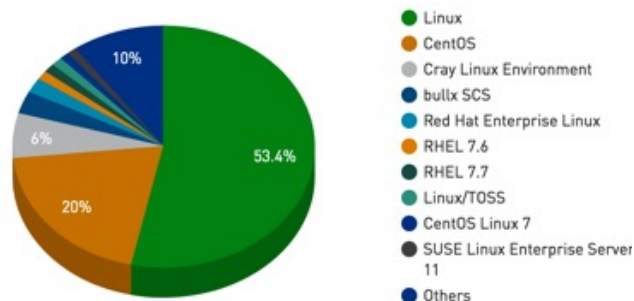
ファイルシステム	DDN EXAScaler
容量	3.1 PB

スーパーコンピュータ利用説明会(スーパーコンピュータ
未経験者向け) 2021.05.25

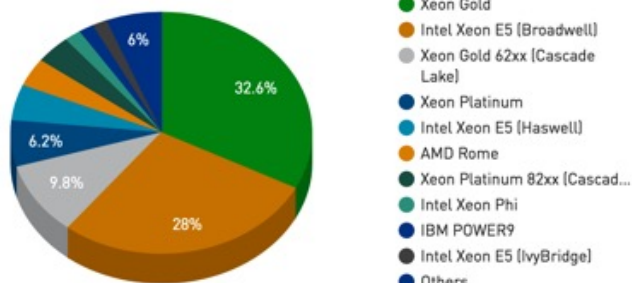
パソコンとスーパーコンピュータの違い（１）

	PC	Supercomputer
オペレーティングシステム	Windows, Mac, Linux, FreeBSD等	主としてLinux系OS
プロセッサ	Intel, AMD, ARM (コンシューマー向け)	Intel, AMD, ARM (サーバー向け)
ネットワーク	Ethernet(1Gbps) Wi-Fi (IEEE 802.11ax)	InfiniBand EDR/HDR (100/200Gbps) Omni-Path (100Gbps), Ethernet (10/25/40Gbps)
ノード	1 ノード	数十ノード～
利用方法	シングルユーザがインタラクティブ処理	マルチユーザがバッチ処理

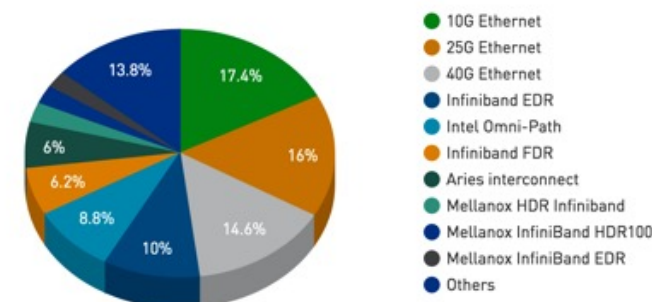
Operating System System Share



Processor Generation System Share



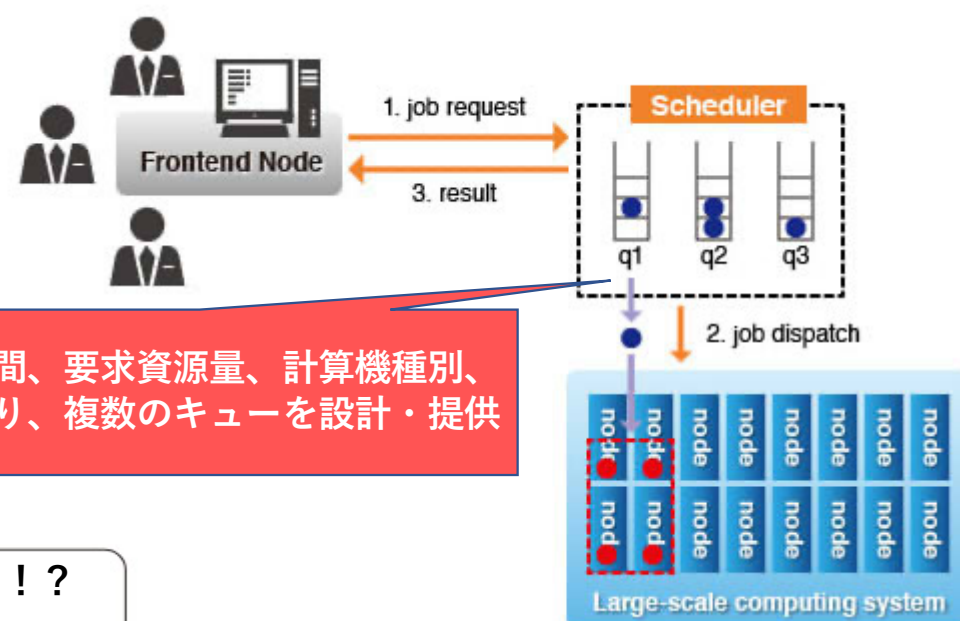
Interconnect System Share



パソコンとスーパーコンピュータの違い（２）

・ スケジューラ

- a.k.aジョブ管理システム、キューイングシステム
- スーパーコンピュータを多数の利用者で使うための資源管理の仕組み。
- スーパーコンピュータ全体のジョブスループット(単位時間あたりの仕事量)を向上させる仕組み。



スケジューラが分かれば、スパコンもわかる！？

POINT



複数の利用者が共用する大学や研究機関のスーパーコンピュータでは、スケジューラが導入されています。スケジューラは、スーパーコンピュータのプロセッサやアクセラレータ等の空き資源の空き状況を監視し、利用者からのジョブ要求を受け付け、投入されたジョブを実行するための計算資源をジョブ要求に割り当てます。スケジューラへのジョブ要求の方法を理解することが、スパコンを使いこなすことへの第一歩となります。

スケジューラへのジョブ要求

1. ジョブスクリプト (job script) の作成例

```
1 #!/bin/bash
2 #----- qsub option -----
3 #PBS -q SQUID           #バッチリクエストを投入するキュー名の指定
4 #PBS --group=G01234      #所属するグループ名
5 #PBS -m b               #バッチリクエスト実行開始時にメールを送信
6 #PBS -l cpunum_job=76    #使用するCPUコア数の要求値
7 #PBS -l elapstim_req=01:00:00 #ジョブの最大実行時間の要求値 1時間の例
8 #----- Program execution -----
9 module load BaseCPU/2021 #ベース環境をロードします
10 cd $PBS_O_WORKDIR        #qsub実行時のカレントディレクトリへ移動
11 ./a.out > result.txt     #プログラムの実行
```

2. スケジューラへのジョブ要求

スケジューラへのジョブ要求

スケジューラへのジョブ要求は、スケジューラが提供するコマンドqsubを用いて下記のように行います。

```
% qsub [スクリプトファイル名]
```

投入したジョブの状況を確認するには、qstatコマンドを用いて下記のように行います。

```
% qstat
```


利用状況 (1)



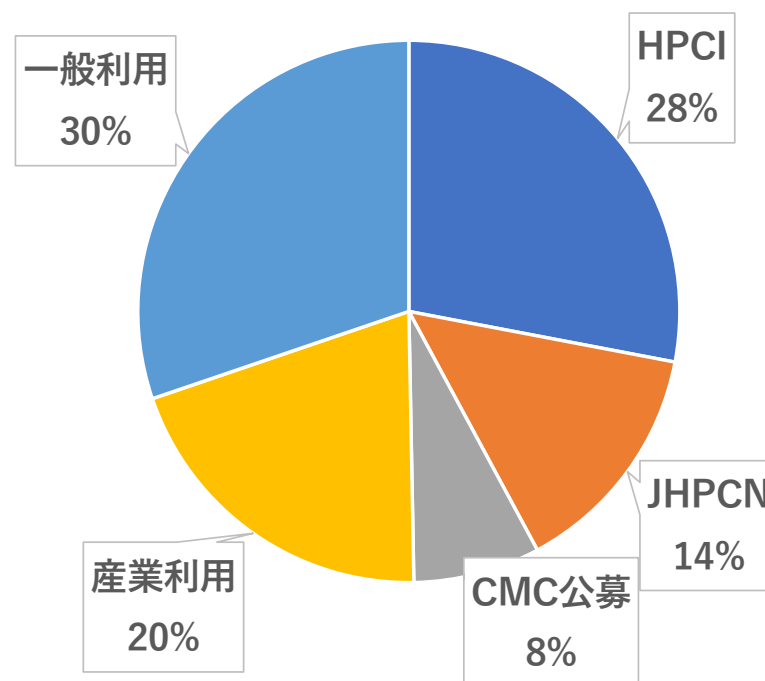
• 50%

- 一般利用 30%
- 産業利用 20%

産業利用は、2019年度（約9%）から大幅に伸びている

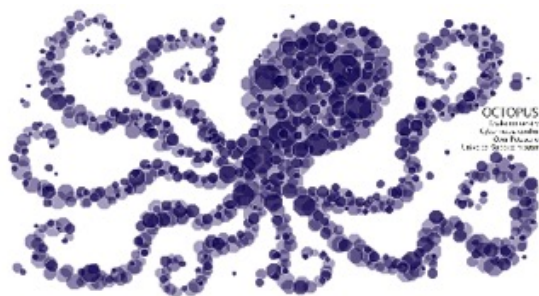
OCTOPUS
Osaka university Cybermedia center
Over-Petascale Universal Supercomputer

2020年度利用制度別 計算ノード時間の割合



(注)産業利用の利用者の方は、年間を通じてきちんと配分資源をご利用される傾向がある。

利用状況 (2) 利用者数とその所属期間



Since Dec,2017

■ > 1,000 人

- 累計利用者数

■ 286 機関

分類詳細	機関数
国立大学	47
公立大学	8
私立大学	44
大学共同利用機関	6
独立行政法人	19
民間	114
他省庁	1
外国	28
その他	19
合計	286

R1年5月1日

国立大学数：86

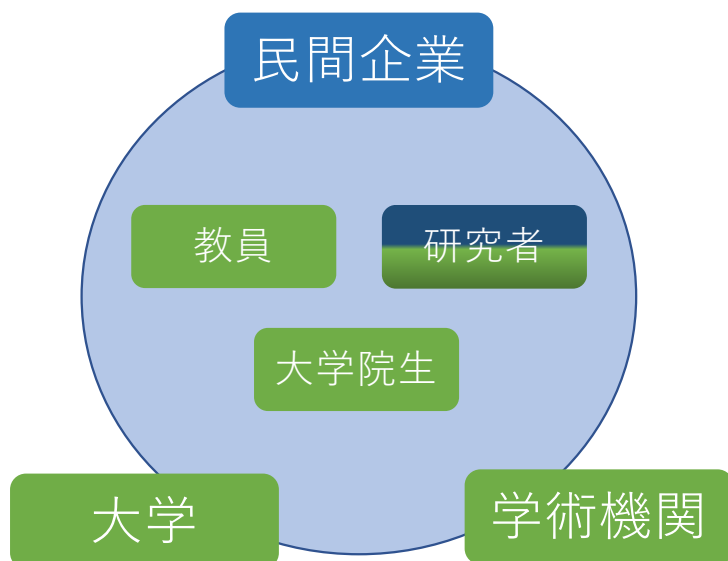
公立大学数：93

私立大学数：607

(文部科学省)

利用制度の対象者

□ 誰が利用できる？



大規模計算機システム利用資格

1. 大学、短期大学、高等専門学校又は大学共同利用機関の教員（非常勤講師を含む。）及びこれに準ずる者
2. 大学院の学生及びこれに準ずる者
3. 学術研究及び学術振興を目的とする国又は地方公共団体が所轄する機関に所属し、専ら研究に従事する者
4. 学術研究及び学術振興を目的とする機関（前号に該当する機関を除く。）で、センターの長（以下「センター長」という。）が認めた機関に所属し、専ら研究に従事する者
5. 科学研究費補助金の交付を受けて学術研究を行う者
6. 第1号、第3号又は第4号の者が所属する機関との共同研究に参加している民間企業等に所属し、専ら研究に従事する者
7. 日本国内に法人格を有する民間企業等に所属する者（前号に該当する者を除く。）で、別に定める審査に基づきセンター長が認めたもの
8. 各号のほか、特にセンター長が適当と認めた者

産業利用(成果公開型・非公開型)の応募資格

• 平和利用であること • 研究利用であること

- 企業内のオペレーション実行やプロダクション実行のみの利用はできません。
新たなオペレーションやプロダクト開発のためにシミュレーションを研究開発する場合は対象になることがあります。

備考：不明な場合は申請前に個別相談をお願いします。

産業利用応募資格

1. 大阪大学サイバーメディアセンターが定める利用規程に従うこと
2. 日本国内で利用がなされること
3. 採択課題の目的にのみ利用すること
4. 平和利用のみに限ること
5. 人権および利益保護への配慮を行うこと
6. 文部科学省「生命倫理・安全に対する取組」に適合すること
7. 経済産業省「安全保障貿易管理」に適合すること
8. 利用期間終了後、課題報告書が速やかに提出できること

産業利用（成果公開型と成果非公開型）[2]

• 成果公開型と成果非公開型の共通点

- 応募資格を満たし、大阪大学CMCが定めた大規模計算機システム利用規程を遵守しなければならない。（誓約書の提出が求められる）
- 課題申請書を提出し、大阪大学CMCが設置する高性能計算機システム委員会の審査に合格する必要がある。
- 利用報告書及び研究成果報告書を提出しなければならない。（報告の義務）

• 成果公開型と成果非公開型の違い

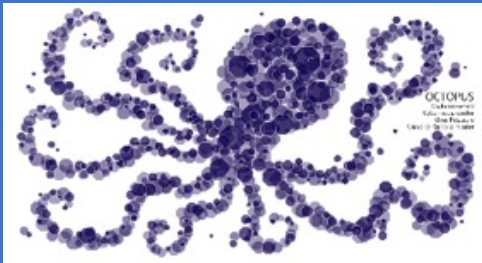
- 成果公開型の場合は、提出された利用報告書及び研究成果報告書は原則公開とし、大阪大学CMCの広報等に掲載される場合がある一方、成果非公開型の場合は大阪大学CMC外部へ公開することはない。
- 成果公開型の場合は利用負担金は一般利用（学術利用）の場合と同じとなるのに対し、成果非公開型の場合は利用負担金が一般利用（学術利用）の 5 倍となる。



成果非公開でも CMC への報告は必要です。

大阪大学 CMC では、産業利用（成果非公開型）でも成果報告書の提出を求めています。CMCのスーパーコンピュータ利用が、その前提となる応募資格や利用規程に反しないことを確認することがねらいです。成果非公開型の場合は、提出された報告書を当該目的以外の用途で利用したり、CMC外部に公開することはありません。

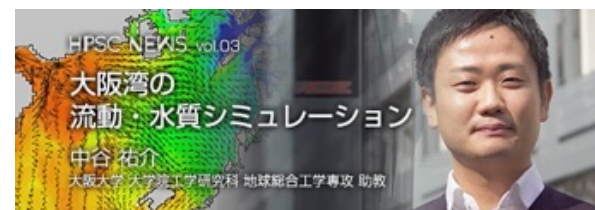
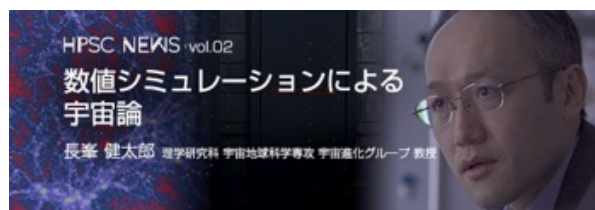
利用可能なシステム

利用可能なシステム と計算資源	 1.463 PFLOPS	 16.591 PFLOPS
汎用CPUノード	2 3 6 (12cx2S)	1 5 2 0 (38cx2S)
GPUノード	3 7 x 4 GPGPU(P100)	4 2 x 8 GPGPU(A100)
ベクトルノード	—	3 6 x 8 VE
Xeon Phiノード	4 4 (64c)	—
大容量主記憶搭載ノード	2 (3TB/N)	—

産業利用へ提供する計算資源は、各システムの計算資源の15%までです（先着申請順）。

研究成果

- 研究成果の紹介
 - 研究成果一覧
 - <http://www.hpc.cmc.osaka-u.ac.jp/researchlist/>
 - HPSC (High Performance Scientific Computing News)
 - <http://www.hpc.cmc.osaka-u.ac.jp/hpsc-news/>

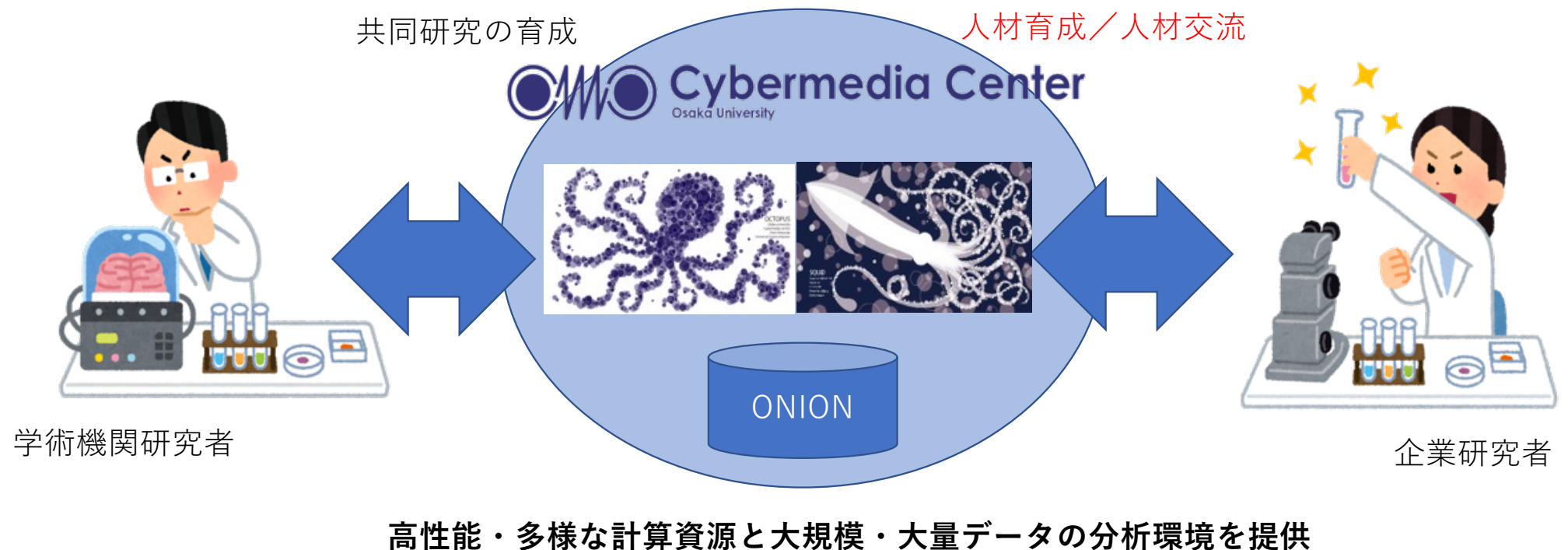


スーパーコンピュータ利用説明会(スーパーコンピュータ
未経験者向け) 2021.05.25

産学共創へ向けて



- 大阪大学サイバーメディアセンターは、学術と産業の共創の場



産学連携プロジェクトの一例

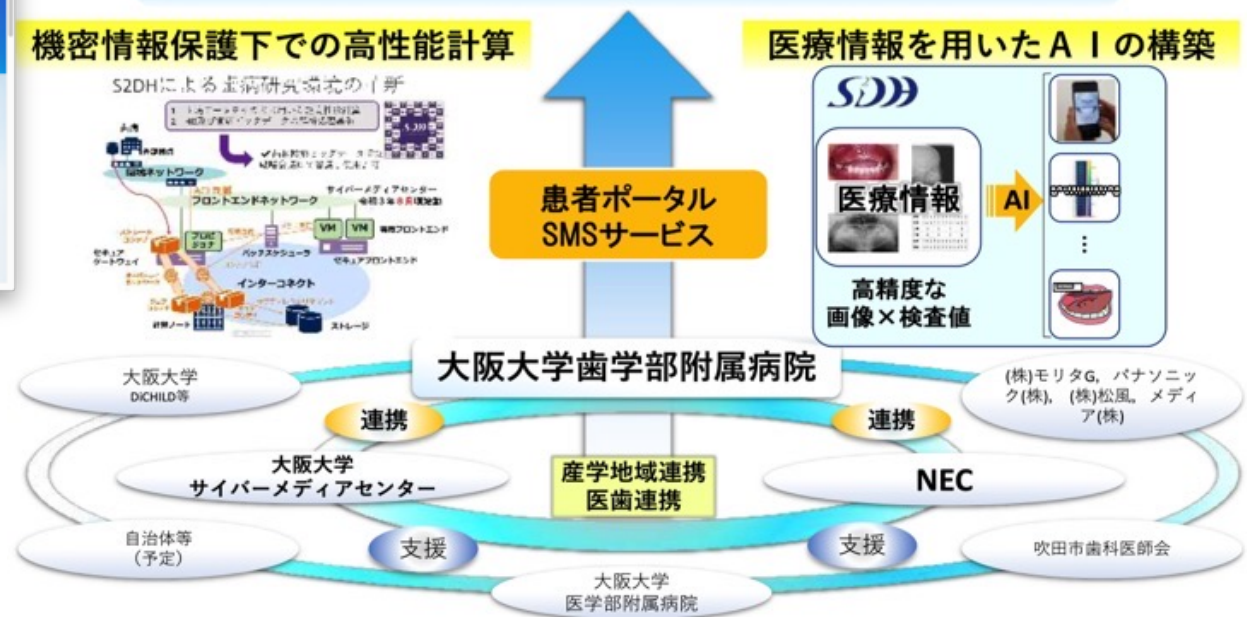
ソーシャル・スマートデンタルホスピタル
～歯科AIを実現するスーパーコンピューティング環境～

市民生活と口腔医療が超スマートに繋がる
Smart Oral Health Communityを構築



機密情報保護下での高性能計算

医療情報を用いたAIの構築



<https://s2dh.org/>

スーパーコンピュータ利用説明会(スーパーコンピュータ
未経験者向け) 2021.05.25

メッセージ

- 大阪大学サイバーメディアセンターのスーパーコンピュータのご利用をご検討ください。