

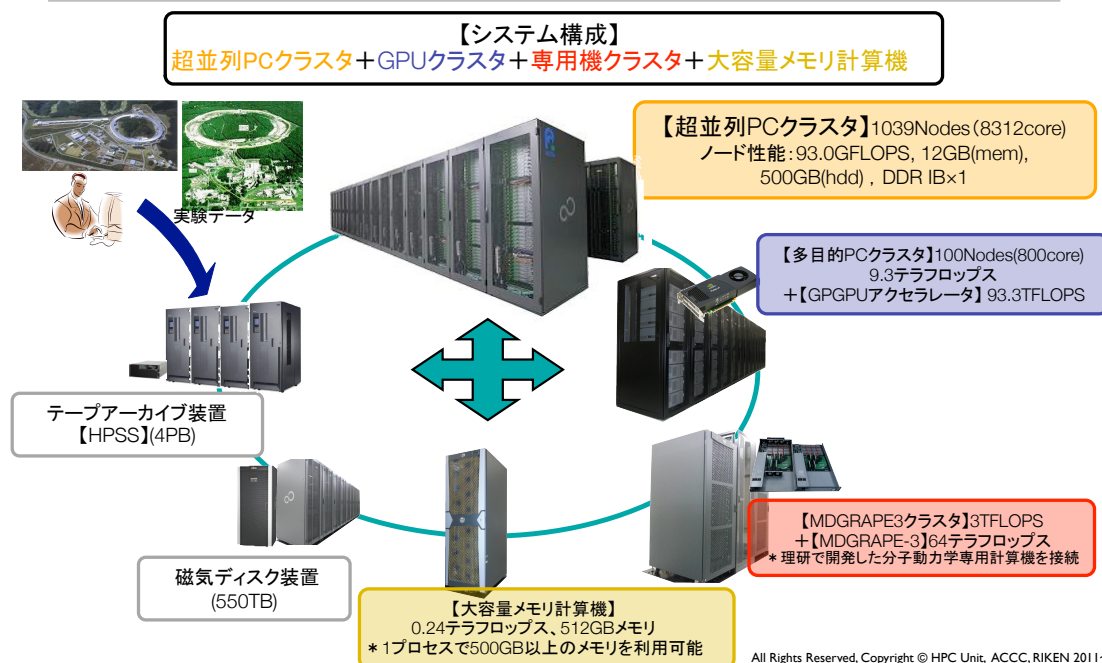
スーパーコンピュータRICCの現状と取組みについて

理化学研究所
情報基盤センター

野田 茂穂

All Rights Reserved, Copyright © HPC Unit, ACCC, RIKEN 2011~

RICCの概要(2009~)



各コンポーネントの特長 (利用手引書(簡易版): P2~3)

✳計算ノード

- 超並列PCクラスター MPC (8192)
 - ➡大規模並列計算用途
- 多目的PCクラスター UPC (800)
 - ➡商用・フリーアプリケーション実行
 - ➡GPUアクセラレータを搭載
- インタラクティブジョブクラスター (32)
- 占有利用課題クラスター (160)
- MDGRAPE-3クラスター MDG
 - ➡分子動力学専用計算機
- 大容量メモリ計算機 AX
 - ➡1プロセスで大量メモリを必要とする計算向け

✳フロントエンドシステム

- 磁気ディスク装置
 - ➡ホーム領域(/home) : 30TB (1ユーザあたり最大500GB)
 - ➡データ領域(/data) : 300TB
- テープアーカイブ装置(2 PB)

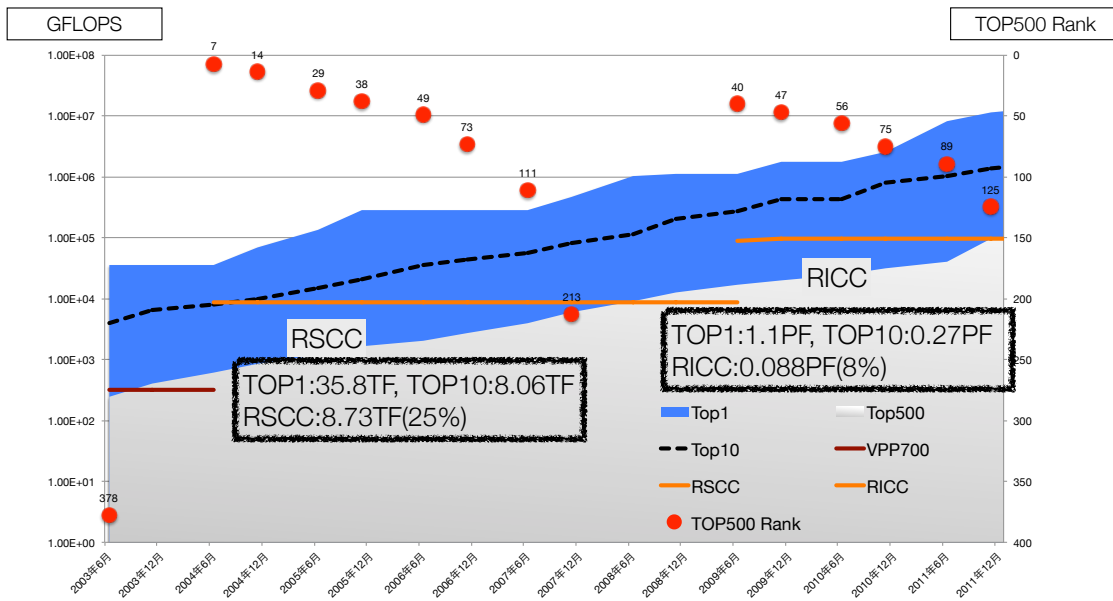
アプリケーション一覧										
Name	ricc	mpc	upc	mdg	ax	Install directory				
ADF			○			/usr/local/adt/2008.01				
ADF			○			/usr/local/adt/2008.01				
AMBER 8			○			/usr/local/amber/8				
AMBER 10			○			/usr/local/amber/10				
AMBER 11			○			/usr/local/amber/11				
ANSYS	○		○			/usr/local/ansys				
DALTON		○	○			/usr/local/dalton				
DMol3		○				/usr/local/dmol3				
GAMESS		○	○			/usr/local/gamess				
Gaussian03			○			/usr/local/gaussian/g03.E01				
Gaussian03NBO			○			/usr/local/gaussian/g03.E01				
Gaussian09			○			/usr/local/gaussian/g09.A.02				
GaussView	○					/usr/local/gaussian/gv				
GROMACS		○	○			/usr/local/gromacs				
GRRM			○			/usr/local/grrm				
molden	○					/usr/local/molden				
meep		○	○			/usr/local/meep-1.1				
NAMD		○	○			/usr/local/namd-2.7b1				
VMD	○					/usr/local/vmd-1.8.7				
Hermes		○				/usr/local/GOLD.Suite				
ROOT	○	○	○			/usr/local/root-5.26-00a				
VisIt	○					/usr/local/VisIt				
Smoldyn		○	○			/usr/local/smoldyn-2.12				

インストールされているアプリ/ライブラリ										
Name	ricc	mpc	upc	mdg	ax	Install Directory				
IMSL			○	○	○	/opt/vni/msl/fnl600/Inxin100e64				
IMSL			○	○	○	/opt/vni/msl/fnl600/Inxin110e64				
GSL			○	○	○	/usr/local/lib				
GSL			○	○	○	/usr/local/lib				
GSL			○	○	○	/usr/local/lib				
FFTW3			○	○	○	/usr/local				
FFTW2			○	○	○	/usr/local				
FFTW2-MPI			○	○	○	/usr/local				
HDF5			○	○	○	/usr/local				
ATLAS			○	○	○	/usr/local				
Harminv			○	○		/usr/local				
libctf			○	○		/usr/local				
Xerces-C++			○	○	○	/usr/local				
libxml2			○	○	○	/usr/local				

Python-2.4 ライブラリ										
Name	ricc	mpc	upc	mdg	ax	Install Directory				
nose	○	○	○	○		/usr/lib64/python2.4/site-packages				
numpy	○	○	○	○		/usr/lib64/python2.4/site-packages				
scipy	○	○	○	○		/usr/lib64/python2.4/site-packages				
Rodis		○	○	○		/usr/lib64/python2.4/site-packages				
mpi4py	○	○	○	○		/usr/lib64/python2.4/site-packages				
Matplotlib(Py Lab)	○	○	○	○		/usr/lib64/python2.4/site-packages				
pytz	○	○	○	○		/usr/lib64/python2.4/site-packages				
dateutil	○	○	○	○		/usr/lib64/python2.4/site-packages				

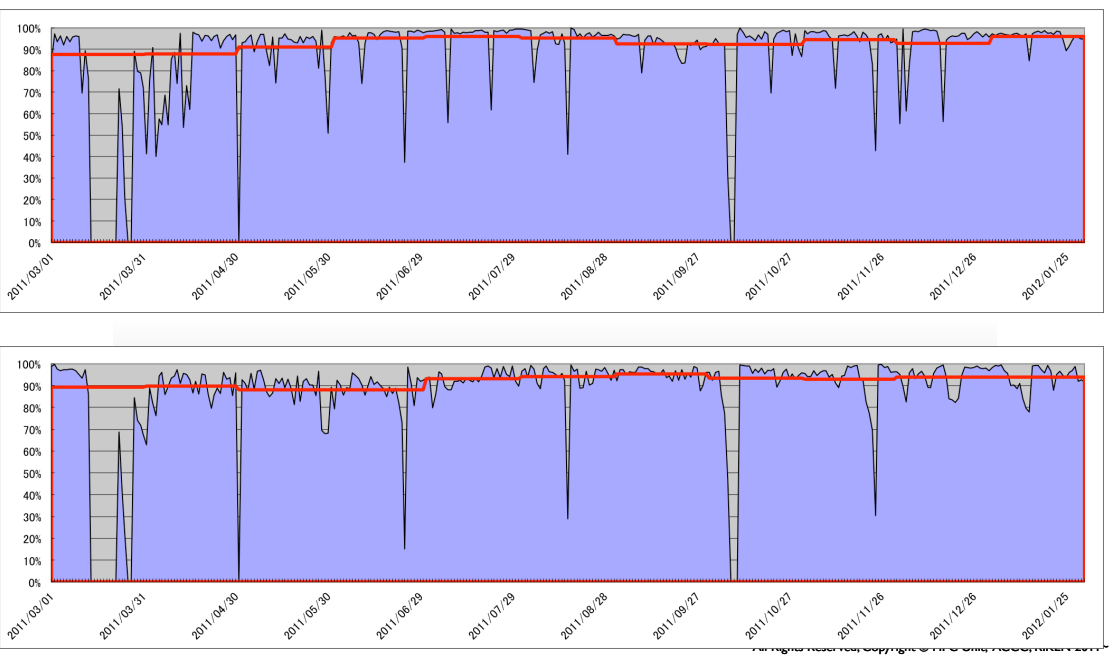
Python-2.6.5 ライブラリ										
Name	ricc	mpc	upc	mdg	ax	Install Directory				
nose	○	○	○	○		/usr/local/python-2.6.5/lib/python2.6/site-				
numpy	○	○	○	○		/usr/local/python-2.6.5/lib/python2.6/site-				
scipy	○	○	○	○		/usr/local/python-2.6.5/lib/python2.6/site-				
mpi4py		○	○			/usr/local/python-2.6.5/lib/python2.6/site-				

RIKENスパコンとTOP500

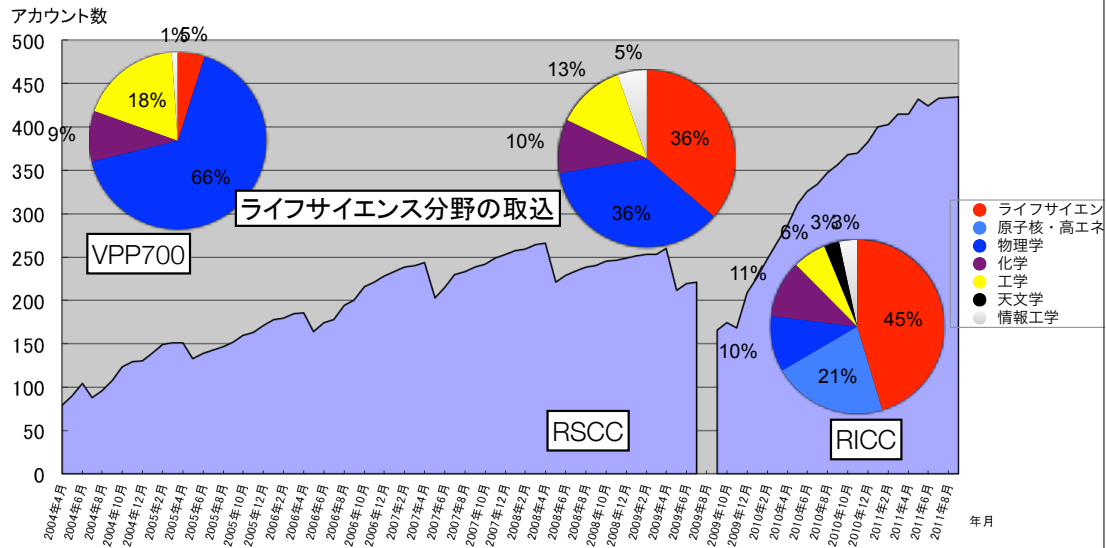


All Rights Reserved, Copyright © HPC Unit, ACCC, RIKEN 2011~

稼働率(mpc, upc)

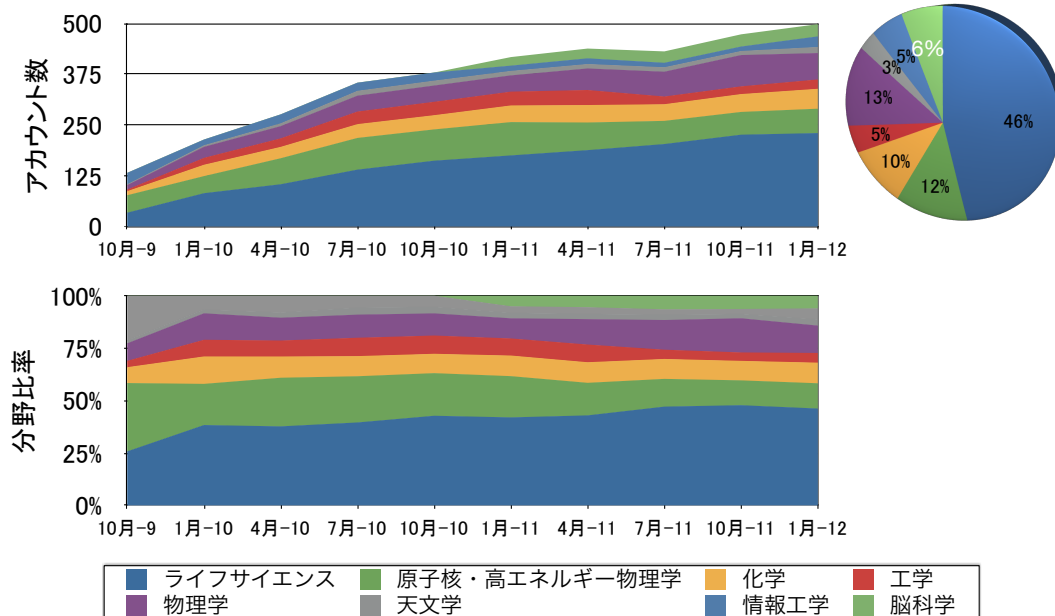


RIKENスパコンの状況(ユーザ数)



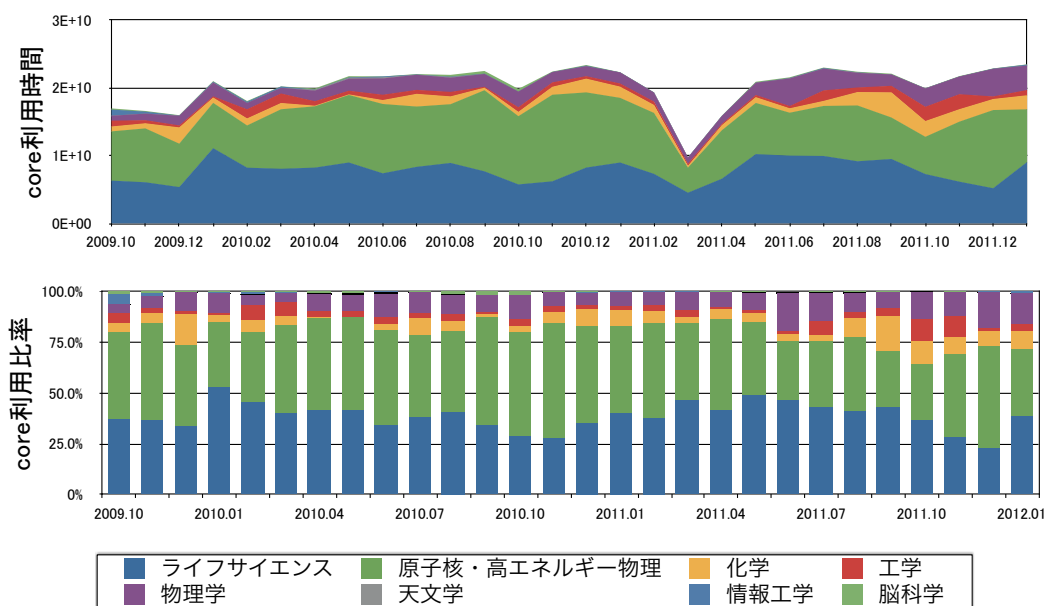
All Rights Reserved, Copyright © HPC Unit, ACCC, RIKEN 2011~

アカウント数 (分野比率)



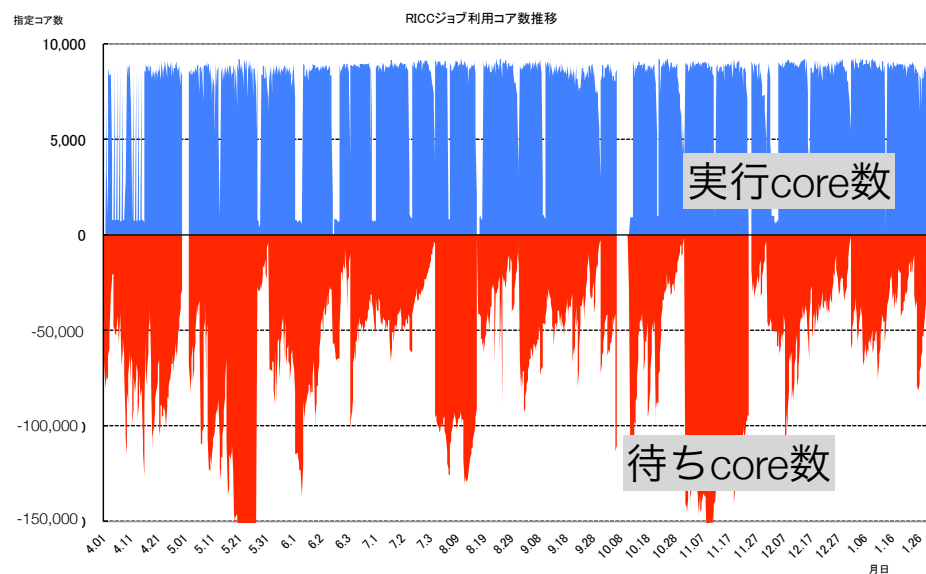
All Rights Reserved, Copyright © HPC Unit, ACCC, RIKEN 2011~

core時間利用数（分野別）



All Rights Reserved, Copyright © HPC Unit, ACCC, RIKEN 2011~

RIKENスパコンの状況（演算能力）



All Rights Reserved, Copyright © HPC Unit, ACCC, RIKEN 2011~

震災時の対応

● 3月11日

RICCシステムに地震の影響は無し。
年度内最終の大規模並列ジョブ実行を予定通り実施。その後システムを停止。

● 3月15日

利用者の利便性を考え、ログインノードとファイルシステムへのアクセスを確保。

● 3月22日

テープ・アーカイブ装置の利用も断続的に再開

● 3月23日

夜間に一部の計算ノード（UPC および MPC の半分の規模）を起動し 4 時間以内の短時間ジョブの実行を再開。

● 4月1日

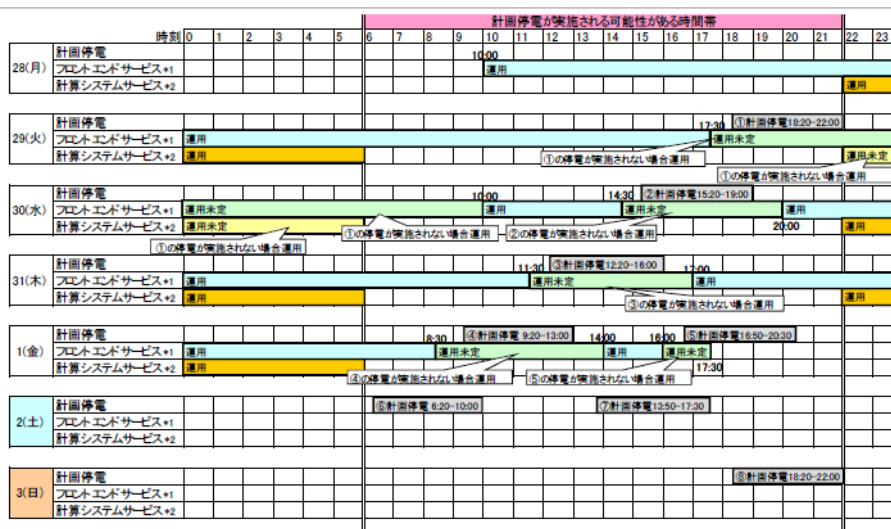
夜間にMPCの全計算ノードを起動し金曜日の夜間運用では大規模並列ジョブ（8192並列）実行を再開。また UPC のみ常時運転を再開しジョブの最大経過時間24 時間までに拡大。

● 4月15日

全ノード通常運用の再開

計画停電実施期間中の運用スケジュール

2011/3



*1 フロントエンドサービスは以下のサービスを含みます。
+ /home、/data でのファイル操作
+ バックアップ投入
+ テープアーカイブ装置 (HPSS) 操作

*2 計算システムサービスは以下のシステムでジョブが実行可能です。
システム
+ 超並列PCクラス 512ノード 4096コアシステムの半分)
+ 多目的PCクラス 100ノード 800コアシステム全体)
+ 大容量メモ/計算サーバ 32CPU(システム全体)
ジョブ実行条件 (最大)
(一般/特別利用) 1-1024コア 4時間
(簡易利用) 1-128コア 4時間

ユーザへの影響

- 全停止をした期間はほとんどなく利用者側の事情の理解もあり混乱は生じなかった
 - 海外の利用者からは、事情が把握できないため、質問が相次いだ。
- 大規模構成クラスタのシステム停止時間にあわせて大規模時並列ジョブを実行したため通常より多くの実行ができた。
 - 利用できる電力を活用し効率よくジョブ実行ができたと考える。
- 新年度の開始を5月に延期し2010年度利用者の演算時間不足を若干補った

New Service：データデポジトリシステム d2s.riken.jp

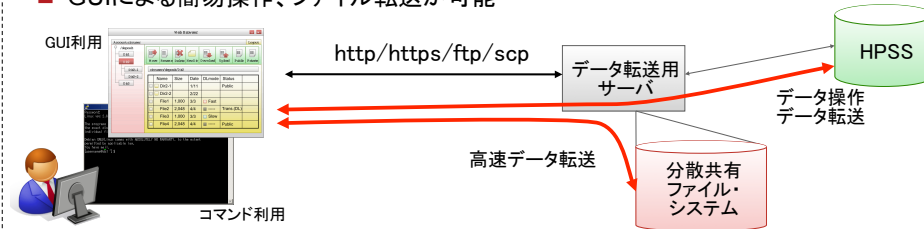
概要：

- ・ 大量の実験データが生成され、ストレージ容量が不足
 - 演算資源を使わないがHPSSテープアーカイブのみを利用
- ・ HPSSを利用するには複数のコマンド実行が必要
 - GUIを開発する事により、利便性の高いシステムを開発

利用者アクセスイメージ

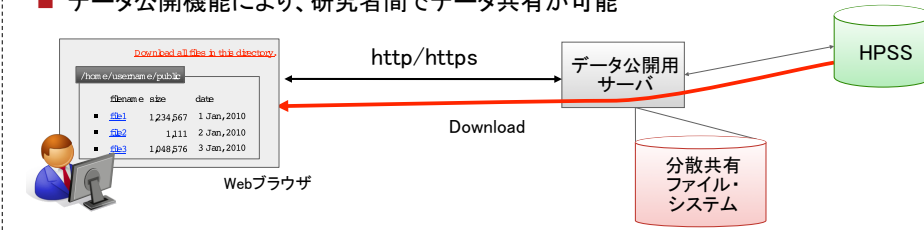
① データ操作・転送

- GUIによる簡易操作、ファイル転送が可能



② 公開データDownload

- データ公開機能により、研究者間でデータ共有が可能



All Rights Reserved, Copyright © HPC Unit, ACCC, RIKEN 2011~

その他の取り組み

チューニング

単体性能、並列性能

講習会

研究の状況に応じた柔軟な対応

緊急の場合、一時的にJobの優先度をコントロール。

簡易利用でも一時的に使用可能core数制限を解除

アプリケーション／ライブラリのインストール

All Rights Reserved, Copyright © HPC Unit, ACCC, RIKEN 2011~

まとめ

RICCは非常に高い稼働率

- より多くのジョブが実行できるよう運用に努める
- プログラムのチューニング支援により効率的な実行を支援

ご意見、ご要望等：hpc@riken.jp