

Oakforest-PACS の導入・運用を振り返って

埴 敏博¹⁾, 中島 研吾^{1,3)}, 建部 修見²⁾, 朴 泰祐²⁾, 梅村 雅之²⁾, 中務 孝²⁾,
高橋 大介²⁾, 額田 彰²⁾, 多田野 寛人²⁾, 小林 諒平²⁾, 藤田 典久²⁾, 田浦 健次朗¹⁾, 中村 宏¹⁾,
下川辺 隆史¹⁾, 星野 哲也¹⁾, 三木 洋平¹⁾, 芝 隼人¹⁾, 河合 直聡¹⁾, 石川 裕⁴⁾, 佐藤 三久^{3,2)},
大島 聡史⁵⁾, 伊田 明弘⁶⁾, 近藤 正章^{7,3)}, 宮寄 洋¹⁾, 山本 和男¹⁾, 小林 弘幸²⁾, 田川 善教¹⁾,
前田 光教¹⁾, 小川 大典¹⁾, 坂井 朱美¹⁾, 佐島 浩之¹⁾, 安部 達巳¹⁾, 佐藤 孝明¹⁾, 福沢 秋津¹⁾,
中張 遼太郎¹⁾, 下條 清史¹⁾, 山田 新¹⁾

1) 東京大学 情報基盤センター / 最先端共同 HPC 基盤施設 (JCAHPC)

2) 筑波大学 計算科学研究センター / 最先端共同 HPC 基盤施設 (JCAHPC)

3) 理化学研究所 計算科学研究センター

4) 国立情報学研究所 アーキテクチャ科学研究系

5) 九州大学 情報基盤研究開発センター

6) 海洋研究開発機構 付加価値情報創成部門

7) 慶應義塾大学 情報工学科

hanawa@cc.u-tokyo.ac.jp

Retrospective of Introduction and Operation of Oakforest-PACS

Toshihiro Hanawa¹⁾, Kengo Nakajima^{1,3)}, Osamu Tatebe²⁾, Taisuke Boku²⁾,
Masayuki Umemura²⁾, Nakatsukasa Takashi²⁾, Daisuke Takahashi²⁾, Akira Nukada²⁾,
Hiroto Tadano²⁾, Ryohei Kobayashi²⁾, Norihisa Fujita²⁾, Kenjiro Taura¹⁾,
Hiroshi Nakamura¹⁾, Takashi Shimokawabe¹⁾, Tetsuya Hoshino¹⁾, Yohei Miki¹⁾,
Hayato Shiba¹⁾, Masatoshi Kawai¹⁾, Yutaka Ishikawa⁴⁾, Mitsuhisa Sato^{3,2)},
Satoshi Ohshima⁵⁾, Akihiro Ida⁶⁾, Masaaki Kondo^{7,3)}, Hiroshi Miyazaki¹⁾,
Kazuo Yamamoto¹⁾, Hiroyuki Kobayashi²⁾, Yoshiyuki Tagawa¹⁾, Mitsunori Maeda¹⁾,
Daisuke Ogawa¹⁾, Akemi Sakai¹⁾, Hiroyuki Sajima¹⁾, Tatsumi Abe¹⁾, Takaaki Satoh¹⁾,
Akitsu Fukuzawa¹⁾, Ryotaro Nakahari¹⁾, Kiyofumi Shimojo¹⁾,
Hajime Yamada¹⁾

1) Information Technology Center, The Univ. of Tokyo / Joint Center for Advanced HPC (JCAHPC)

2) Center for Computational Sciences, Univ. of Tsukuba / Joint Center for Advanced HPC (JCAHPC)

3) Center for Computational Science, RIKEN

4) Information Systems Architecture Science Research Division, National Institute of Informatics

5) Research Institute for Information Technology, Kyushu Univ.

6) Research Institute for Value-Added-Information Generation, JAMSTEC

7) Dept. of Information and Computer Science, Keio Univ.

概要

Oakforest-PACS は、筑波大学計算科学研究センターと東京大学情報基盤センターが共同で調達・運営する最先端共同 HPC 基盤施設 (JCAHPC) によって導入された、メニーコア型大規模スーパーコンピュータシステムである。2016 年 10 月に一部の運用開始、2016 年 12 月に全系運用を開始し、5 年 6 ヶ月経過した 2022 年 3 月に運用を終了した。

本報告では Oakforest-PACS 導入の経緯や JCAHPC の活動、Oakforest-PACS によって得られた研究成果等について紹介する。

1 はじめに

Oakforest-PACS システムは、筑波大学計算科学研究センター [4] と東京大学情報基盤センター [5] が共同でスパコンシステム調達・運営を行う最先端共同 HPC 基盤施設 (JCAHPC)[6] によって導入された、メニーコア型大規模スーパーコンピュータシステムである [1, 2, 3]。2016 年 10 月に一部の運用開始、2016 年 12 月に全系運用を開始し [2]、5 年 6 ヶ月の運用ののち、2022 年 3 月に運用を終了した。

Oakforest-PACS は Intel 社のメニーコア CPU, Intel Xeon Phi 7250 (開発コード: Knights Landing, 68 コア, 1.4 GHz) を搭載した 8,208 ノードからなるクラスタ型のシステムである。2 大学の共同調達により、導入時点で国内最高性能である理論ピーク性能 25 PFLOPS, HPL 性能 13.55 PFLOPS を達成、また 2017 年 11 月に開始されたファイルアクセス性能のベンチマーク IO500 でも 1 位を獲得した。

本稿では、Oakforest-PACS の導入から運用終了まで、その経緯や JCAHPC における活動、OFP を使用して得られた研究成果等について述べる。

2 導入の経緯

2013 年 3 月、国立大学法人筑波大学と国立大学法人東京大学は、「計算科学・工学及びその推進のための計算機科学・工学の発展に資するための連携・協力推進に関する協定」を締結した。本協定の下で、筑波大学計算科学研究センター (センター長 (当時): 佐藤 三久)[4] と東京大学情報基盤センター (センター長 (当時): 石川 裕)[5] は、最先端共同 HPC 基盤施設 (JCAHPC: Joint Center for Advanced High Performance Computing) [6] を設置した。両センターはそれぞれ、これまで国内有数のスパコンを導入し、独自の運用方針に基づき共同利用を実施する一方で、HPC に関する最先端技術の研究開発に関して、意見交換および研究者個人レベルでの共同研究を進めてきた。2008 年には、京都大学学術情報メディアセンター [7] も含めた 3 機関により T2K Open Supercomputer Alliance を結び、共通の基本アーキテクチャを持つ T2K-Todai (導入当時、性能国内第 1 位) および T2K-Tsukuba (同国内第 2 位) という 2 つのスパコンをそれぞれ導入し、クラスタ型 HPC プラットフォームの共通化を試みた。T2K が PC クラスタベースのセンターマシンの先鞭をつけたと言え、この経験から、最先端技術を採用しつつ、価格性能比の高いシステムを実現するノウハウを共有できた。

JCAHPC は、東京大学柏キャンパス・東京大学情報

基盤センター内に両センターが共同調達するスーパーコンピュータシステムを設置し、最先端の大規模高性能計算基盤を構築・運営するための組織である。本施設を連携・協力して運営することにより、最先端の計算科学を推進し、我が国の学術及び科学技術の振興に寄与するべく、大学等の広範囲にわたる学術研究に対して大規模かつ超高速の演算処理機能を提供することを目指したものである。

具体的には、共同調達によって以下の実現を目指しており、OFP の導入により目的は達せられたと考えている。

- 国立大の予算で国内最高性能システムを構築
- スケールメリットを活かし価格性能比の高いシステムの調達
- 一般ユーザーに馴染みのあるクラスタ型スパコンで超大規模計算を手軽に始められる機会の提供
- 複数センターによる超大規模システム運用の実証実験

3 導入までのスケジュール

2013 年 7 月に資料招請を開始した。調達開始の段階から一体運用を目指していたが、両大学での取り扱いを模索している段階であったため、両センターから同時に官報公示を行った。この段階から、システムの規模は東大と筑波大の比率を 2:1 と定めた。

当初より、メニーコアプロセッサを要素技術としたクラスタシステムが有望なアーキテクチャと考え仕様の検討を始めた。東京大学情報基盤センターでは T2K-Todai の後継機種に関する検討を 2010 年度から開始し、当時まだ構想段階であった Intel の MIC アーキテクチャ (Many Integrated Core) に注目し、2010 年 8 月の段階では、既に Intel-MIC (後の Intel Xeon Phi) を念頭に置いた検討を始めていた。筑波大学計算科学研究センターでも、Intel-MIC に基づく Knights Corner (KNC) を搭載した COMA システムを 2014 年 4 月から運用を始めた。しかし次の製品では全く新しいアーキテクチャが想定されたため、情報収集に時間をかけ、資料提供まで約半年をかけて実施した。

その後スケジュールの変更等もあったが、設置場所でもある東大が窓口となることで完全に一本化した上で、2015 年 1 月に仕様書原案説明会を実施、2016 年 1 月の入札広告を経て、2016 年 4 月に富士通 (株) が落札した。

構築は 2 期に分けて実施し、2016 年 10 月までに、計算ノードの 1/20 以上を設置して稼働を開始し、その後 2016 年 12 月までに全システムが設置された。4 ヶ



図1 Oakforest-PACS の全景

表1 JCAHPC 運営委員会の変遷

	2013/4~	2015/4~	2018/4~	2019/4~
施設長	佐藤 三久 (筑波大)	中村 宏 (東京大)	田浦 健次朗 (東京大)	田浦 健次朗 (東京大)
副施設長	石川 裕 (東京大)	梅村 雅之 (筑波大)	朴 泰祐 (筑波大)	朴 泰祐 (筑波大)
研究開発部門長		中島 研吾 (東京大)	中島 研吾 (東京大)	中島 研吾 (東京大)
運用支援部門長 / 副部門長		朴 泰祐 (筑波大)	朴 泰祐 (筑波大)	塙 敏博(東京大) / 建部 修見(筑波大)
広報・企画部門長		建部 修見 (筑波大)	建部 修見 (筑波大)	高橋 大介 (筑波大)

月間の試験利用期間を経て、2017年4月から一般利用を開始した。

4 JCAHPC の体制

OFFP の運用に際しては、世界に例を見ない、複数組織で協働した単一システムの導入・運用を目指したものであり、筑波大学と東京大学両大学間の密な連携と協力が必須である。そこで、JCAHPC には両センターのスパコン運用に関連する全ての教員および技術職員が参加し、仕様の検討、システムの導入、運用等に携わってきている。JCAHPC には、施設長・副施設長を置くとともに、6~10名の両センター教員からなる運営委員会を設置した。表1に運営委員会の構成を示す。OFFP 運用開始に向けて、2015年度からは研究開発部門、運用支援部門、広報・企画部門を設置し、各部門長のもとで準備が始められ、運用開始以降も引き続き同様の体制を維持している。

5 OFFP の運用

5.1 OFFP の構成

OFFP の構成を表2に示す。Intel Xeon Phi (KNL)[8] 搭載システムとして、運用に当たって特に考慮を必要としたのがメモリモードの選択である。

KNL では、DDR4 メモリ 96 GB に加え、CPU パッケージ内に高バンド幅メモリとして 16 GB の MCDRAM が積層されている。この MCDRAM を利

表2 Oakforest-PACS の仕様 [1, 2, 3]

ノード	富士通 PRIMERGY CX600 M1 シャーシ + CX1640 M1 × 8 ノード
ノード数	8,208
総ピーク演算性能	25 PFLOPS
CPU	Intel Xeon Phi 7250 (開発コード: Knights Landing)
コア数	68 コア
動作周波数	1.4 GHz
理論ピーク性能	3.046 TFLOPS
メモリ	16 GB (MCDRAM; 実効 490 GB/sec) 96 GB (DDR4-2400×6ch, 実効 90 GB/sec)
インタコネク	Intel Omni-path (100 Gbps)
ファイルキャッシュシステム	DDN IME14K 940 TB (1,560 GB/sec)
並列ファイルシステム	DDN SFA14KE 26.2 PB (500 GB/sec)

用する手段として、KNL は以下のメモリモードを提供している。

Flat モード MCDRAM は DDR4 メモリ とは独立し、明示的にアクセスが可能

Cache モード MCDRAM を DDR4 メモリのキャッシュとして扱う (L3 キャッシュに相当)

上のモード切り替えには再起動が必要になるため、OFFP においては計算ノード群を Flat モードと Cache モードの2種類のジョブキューに分けて運用した。要求に基づき動的に再起動を実施することも検討したが、8,208 ノードの OmniPath アーキテクチャによる均一な Fat Tree 構成で、大規模に計算ノードの切り離し・組み込みが起こるとシステム全体が一時的に不安定になるために断念した。

ユーザに対しては、計算ノードあたり 16 GB 未満のメモリに収まる場合には Flat モードを、それを超える場合には Cache モードを使用するよう推奨した。

ここで強調しておきたいのは、計算ノードを両センターで物理的に分割しているわけではない点である。東大と筑波大の計算資源量の比率は、あくまでもユーザに配分するトークンの総量で制御している。一方、ユーザにとっては一体の大規模なシステムとして扱うことができ、常時、最大 2,048 ノードまでのジョブを実行することが可能であった。

5.2 OFFP 運用の経過

図2に、Oakforest-PACS 運用期間中の利用率の推移を示す。2017年4月の一般利用開始当初は、Flat モードと Cache モードを 1:1 の割合で運用を開始した。しかし、Flat モードの利用が Cache モードに比べて顕著に増加したため、2018年6月29日から、Cache モードのうち 1,000 ノードを Flat モードへ組み込み、通常利用キューとして Flat モードと Cache モードを 1.7:1 の比率に変更した。

他にも以下のような運用上の変更を実施した。

■CPU 水冷温度の調整 KNL では CPU 内に 68 コアを搭載しているだけでなく、MCDRAM という三次元積層メモリもパッケージに内蔵されているため、熱の影響を受けやすい構造であると考えられる。当初は冷却水温度 18°C で運用を開始したが、CPU の特性ばらつき等の影響で、コア周波数がノードによって大きく異なり、MPI ジョブに大きな影響があることがわかった。そのため、2017 年 6 月から 12°C に水温を下げて運用を行い、これによって性能が比較的安定するようになった。

[9] では、大規模 HPC チャレンジ中に水温を 9~18°C に変更して計算性能、エネルギー消費への影響を実際に計測している。

なお、OFP の水冷システムは、チラーとクーリングタワーのハイブリッドで構成され、気候に応じて自動的に使用割合が変わる。

■京運用終了に伴う提供資源の増量 2019 年度以降、「京」がシャットダウンされ、HPCI[10]における計算資源の枯渇が懸念された。そのため、OFP の資源提供を追加して実施した。2017、2018 年度は 1,600 ノード年 (約 20%) を提供していたのに対し、2019~2021 年度は 3,300 ノード年 (約 40%) を提供した。そのため、「京」から「富岳」への移行期にあたる 2019、2020 年度は、図 2 でも高い利用率を示し、年度末には月平均 90% を超える利用率に達している。

■ゲリラ豪雨予測に向けた対応 東京オリンピック・パラリンピック期間中のゲリラ豪雨リアルタイムシミュレーション [11, 12] を目指したものであり、詳細は 7.3 節で述べる。2020 年 4 月から 6 月にかけて、月末の大規模 HPC チャレンジとしてゲリラ豪雨予測の試験を実施した。コロナ禍での保守対応の制約の中、ゲリラ豪雨予測のプロジェクトに対して Cache モードの一般利用キューから 2,000 ノード強を割り当てることで対応した。2020 年 8 月 1 日から約 1 週間、約 1,200 ノードをゲリラ豪雨予測のプロジェクトに割り当て、事前試験を実施、8 月 25 日から再び約 1,200 ノードを割り当て、9 月 7 日までプロジェクト本番を実施した。

■新型コロナウイルス感染症対応 HPCI 臨時公募課題に向けた対応 詳細は 7.2 節で述べるが、2020 年度当初に実施された臨時公募課題 [13, 14] であり、通常の HPCI 課題採択とは異なり、緊急での実施が要請された。そこで、各利用グループには実行パターンに応じて優先度の高い専用キューを割り当て、円滑に遂行されるように工夫した [14]。

表 3 スパコン性能ランキングの推移

年月	Top500	Green500	HPCG	IO500
2016/11	6	6	3	-
2017/6	7	20	5	-
2017/11	9	22	6	1
2018/6	12	24	9	1
2018/11	14	29	9	2
2019/6	16	29	9	3
2019/11	15	40	8	(7)
2020/6	18	45	12	11
2020/11	22	48	16	10
2021/6	32	58	23	15
2021/11	39	65	23	21

6 OFP の性能ランキング

表 3 に、各種スパコン性能ランキングにおける OFP の順位を示す。

2016 年 11 月には、すでに全系の動作が可能になっており、Linpack 性能による Top500[15]、Linpack 測定時の電力効率による Green500[16]、共役勾配法の性能による HPCG[17] それぞれのベンチマークを実施した。その結果、Top500 では 13.55 PFLOPS で 6 位、Green500 では 4.985 GFLOPS/W で 6 位、HPCG では 0.3855 PFLOPS で 3 位となった。Green500 ではメニーコアプロセッサによる電力効率の良さ、HPCG では MCDRAM による高いメモリバンド幅を証明した。

2017 年 11 月からは、ストレージ性能による IO500[18] が始まり、OFP で高速ファイルキャッシュとして導入した IME (Infinite Memory Engine) の性能によって、1 位を獲得した。

運用終了直前 2021 年 11 月のランキングでは、Top500 39 位、HPCG 23 位、IO500 21 位であり、5 年 6 ヶ月に渡って上位に位置し続けたことになる。

7 研究活動・成果

7.1 概要

OFP を使用した研究活動・成果は多岐にわたっている。詳細については、2022 年 5 月 27 日に開催された「第 11 回 JCAHPC セミナー (OFP 運用終了記念シンポジウム)」[19] の講演資料・ビデオを参照されたいが、ここではいくつかの特筆すべき事例について紹介する。筑波大学計算科学研究センターは物理学を中心とした基礎科学、東京大学情報基盤センターは地球科学、計算工学の分野で我が国トップクラスの研究を推進してきたが、5 年余りの間にこれらの分野を中心に新しい利用分野も開拓されている。

OFP は 2016 年 12 月に全系運用を開始した時点では、国内で最大のシステムであり、2019 年度前半頃までの第 I 期では、計算科学の分野で特筆すべき成果が

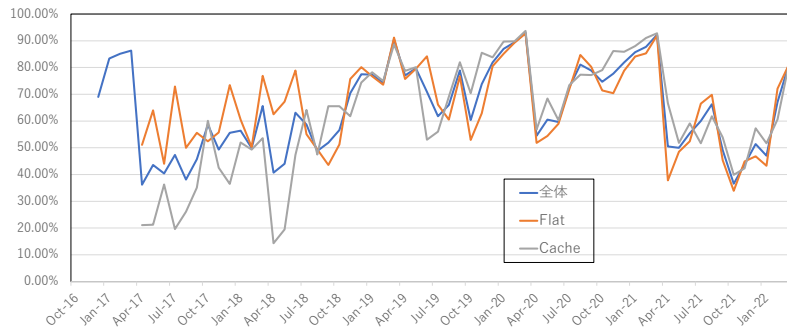


図2 Oakforest-PACS 利用率の推移

見られた。HPC Asia 2018 では地震シミュレーション [20], ISC-HPC 2018 では量子化学シミュレーション [21] の分野で最優秀論文賞, 最優秀論文候補となっている。それぞれ「京」, 「PizDaint」といった当時の世界最大級のシステムとの比較が実施されており, アプリケーションレベルでもこれらと同等あるいは凌駕するような高い性能が得られている。

「大規模 HPC チャレンジ」 [5, 19] は, OFP の全 8,208 ノードのうち 8,192 ノードを 24 時間専有できる, 原則毎月実施される公募型のプロジェクトであり, ここから様々な研究成果が創出された。最終的には全部で 18 回実施された。「大規模 HPC チャレンジ」は計算科学シミュレーションだけでなく, システム運用に関する研究にも活用されている。[9] は冷却水温度の計算性能, エネルギー消費への影響を実際に計測したものであり, 全系を専有可能な「大規模 HPC チャレンジ」ならではの研究であり, 他のセンターでは中々実施は困難であろう。

2019 年 8 月末に「京」がシャットダウンしてからは, OFP は HPCI 第二階層 [10] の最大システムとして, 「富岳」が運用を開始する 2021 年 3 月まで, 事実上の National Flagship System として, 我が国における計算科学関連研究の発展を支えて来た。この期間を第 II 期と位置付けることができる。

2020 年初頭に始まった新型コロナウイルス感染症 (COVID-19) の流行は, 我々の研究活動にも大きな影響を与えた。例えば, 上述の「大規模 HPC チャレンジ」は, 24 時間の保守体制が必要となるため, 2020 年度は中止せざるを得ず, 2021 年度は 9 時から 17 時までに短縮して実施した。「新型コロナウイルス感染症対応 HPCI 臨時公募課題」 [10], 東京オリンピック・パラリンピック期間中のゲリラ豪雨リアルタイムシミュレーション [12] は, 人類と地球を護る, というスーパーコンピューティングが果たすべき役割を再認識する契機ともなった。第 II 期とのオーバーラップはあ

表 4 JCAHPC セミナーの概要 [19, 22]

	日付	内容
1	2016 年 09 月 30 日	Intel 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 コンパイルチュートリアル (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)

るが, 2020 年以降の第 III 期は OFP による研究活動の総仕上げであり, 次世代システム, また計算科学とデータ科学, 機械学習の融合のような新しいパラダイムへ向けた準備期間, と位置付けられる。

5 年半の間, OFP の利用普及促進, 成果紹介を目的として, 11 回の JCAHPC セミナーが開催された [22]。表 4 はその概要である。当初はチューニング, IME, McKernel 等のチュートリアルが中心であったが, ユーザー利用事例などを中心とした「利活用報告会」となった。「COVID-19」関連が中心となった 2020 年度, 今後の展望に焦点を置いた 2021 年度は完全オンラインとなり, それぞれ 200 名程度の参加者があった。第 11 回シンポジウムは, 講演者, 両センター関係者のみがオンサイトで参加するハイブリッド方式で開催された。

以下の各節では, 「新型コロナウイルス感染症対応 HPCI 臨時公募課題」, 「ゲリラ豪雨予測のリアルタイム実証実験」について述べたあと, 最後に 5 年半の利用分野の変遷について振り返る。

7.2 新型コロナウイルス感染症対応 HPCI 臨時公募課題

2020 年初頭, 人類と地球が直面していた新型コロナウイルス感染症 (COVID-19) という未曾有の危機の

表5 新型コロナウイルス感染症対応 HPCI 臨時公募課題 (2020 年度) のうち、筑波大・東大・JCAHPC システムを利用した 8 課題 [13, 14, 19]

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 (JCAHPC)
COVID-19 治療の候補薬: chloroquine, hydroxy-chloroquine, 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)	Oakbridge-CX (東大)
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)	
Spreading of polydisperse droplets in a turbulent puff of saturated exhaled air	Marco Edoardo Rosti (OIST)	Cygnus (筑波大)
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)	
Covid-19 関連タンパクに対する統合的インシリコロボジショニング	重田 育照 (筑波大学)	

問題解決に向けて、「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いた。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) [10] 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的課題募集「新型コロナウイルス感染症対応 HPCI 臨時公募課題」が開始された [13]。

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」の趣旨に賛同し、これに計算資源を提供、新型コロナウイルス感染症関連研究の支援を実施した。2020 年度は合計 14 課題が採択されたが、このうち 3 課題が OFP を利用、2 課題が Cygnus (筑波大学) [4]、3 課題が Oakbridge-CX (OBCX, 東京大学) [5] を使用した。実に 14 課題のうち 8 課題が両センター関連システムによって実施されたことになる (表 5)。各課題は 2021 年度以降は HPCI 課題へと移行した。

7.3 ゲリラ豪雨予測のリアルタイム実証実験

本研究は三好建正博士 (理化学研究所計算科学研究センター) の研究チームとの共同研究であり、「ビックデータ同化」の技術革新を創出し、ゲリラ豪雨に代表される局地的な気象予測に応用して、30 秒毎に更新するリードタイム 30 分の天気予報という画期的なシステムを、フェーズドアレイ気象レーダーおよび国内トップクラスのスーパーコンピュータである OFP という次世代技術を駆使して実証実験し、広く防災・減災に資するとともに、気象学的ブレークスルーをもたらすものである [11, 12]。

超高解像度渦解像気象モデル SCALE に局所アンサンブル変換カルマンフィルタ LETKF を適用し、フェーズドアレイ気象レーダーのデータを同化して、ゲリラ豪雨のリアルタイム予測実証を行う。本研究成果は、近年増大する突発的なゲリラ豪雨などの降水リ

スクに対して、コンピュータ上の仮想世界と現実世界をリンクさせることで、超スマート社会 Society5.0 の実現に貢献すると期待できる。研究では、スパコン上での大規模 I/O 削減、予報モデル計算の高速化により、従来 10 分要していた計算時間を 20 秒程度にまで短縮し、約 30 倍の高速化に成功した。更に、2017 年にさいたま市に設置された世界初の実用型「マルチパラメータ・フェーズドアレイ気象レーダー (MP-PAWR)」の観測データを即時にスパコンに転送するデータ転送ソフトウェア、米国国立環境予測センターの全球数値天気予報システムの予報結果をリアルタイムに取得し境界条件として使用する 4 重入れ子モデルを含む、超高速降水予報システムを開発し、雲の発生・発達・衰弱・消滅などの気象学的なメカニズムを考慮したシミュレーションによって、短時間で発達するゲリラ豪雨の急激な変化を捉えることに成功した [12]。

本研究の成果は、2020 年 8 月 25 日～9 月 5 日 (Tokyo2020 パラリンピック期間中) に首都圏において 30 秒ごとに更新する 30 分後までの超高速降水予報のリアルタイム実証実験を行い、スマフォアプリ「3D 雨雲ウォッチ」でも公開した。図 3 は本研究の各実施項目の概要を示したものである。2021 年 8 月～9 月に実施された Tokyo2020 オリンピック・パラリンピック本番では「富岳」を使用したリアルタイム実証実験が実施された。三好博士には第 11 回 JCAHPC セミナーでご講演いただいた [19] が、2020 年に OFP を使用して実施した実証実験の成果を踏まえ、計算モデルの改良を実施し、2021 年の実証実験では更に良い成果が得られたとのことである。

本研究の実施に当たっては、2019 年 4 月頃から検討を開始し、前述の「大規模 HPC チャレンジ」に何回かトライし、必要計算資源量の見積もり、運用体制の構築等、綿密な準備を実施した。本研究における経験から得られた知見は緊急時におけるシステムの運用等様々な局面で役だっている。

7.4 OFP 利用の変遷

OFP は 2016 年 10 月に運用開始、同 12 月に全系運用開始となった。図 4 は 2017～2021 年度の各年度に利用分野を実行ノード時間に基づいて算出したものである。2017, 2018 年度は半分くらいが「エネルギー・物理学」が半分程度を占めている。実質的には、QCD (Quantum ChromoDynamics: 量子色力学) の利用者である。2017 年度末に Oakleaf-FX (東大, Fujitsu PRIMEHPC FX10, 「京」の商用版) が運用を終了したことにより、東大の地球科学・宇宙科学 (大気海洋, 固体地球, 宇宙物理) の利用者が 2018 年度以降 OFP に移行し、徐々に利用時間が増えている。ここまでが

第 I 期である。

2019 年度からは、第 II 期に入り、「地球・宇宙科学」が「エネルギー・物理学 (QCD)」を上回っている。2019 年 9 月以降「京」の利用者が移行していることも影響していると考えられる。「データ科学・データ同化」が徐々に増えているのは、前節で述べた「ゲリラ豪雨予測」の試計算が始まっていることと関連している。

2020 年度からは第 III 期に入るが、この年度は他と比べて「生物科学」の割合が多いのが特徴である。これらは全て、「新型コロナウイルス感染症対応 HPCI 臨時公募課題」である。2021 年度は「エネルギー・物理学 (QCD)」が再び半分近くを占めている。これは、「地球科学・宇宙科学」特に地球科学 (大気海洋, 固体地球) 分野の利用者が、2021 年 5 月に運用を開始した Wisteria/BDEC-01(東大)[5] のうち Odyssey へ移行したためと考えられる。図 5 は 2021 年度の東京大学情報基盤センターの各システムの分野別利用率であり、Odyssey では、「地球科学・宇宙科学」分野の利用が約 50% を占めていることがわかる。また、全体的に見て、OFP では「工学・ものづくり」分野の利用が少なかった。

8 おわりに

二大学センターの協力の下、最先端共同 HPC 基盤施設では Oakforest-PACS を 5 年 6 ヶ月運用し、2022 年 3 月に無事運用を終了した。その間、事実上の National Flagship System として HPCI における計算資源提供に貢献し、我が国における計算科学関連研究の発展を支えて来た。

現在は、次期システム “Oakforest-PACS II” (OFP-II) の 2024 年 4 月稼働開始に向けて、仕様策定を始めの一方、東京大学情報基盤センターの Wisteria/BDEC-01 Odyssey ノードを JCAHPC として HPCI への資源提供を続けている。

OFP-II については、システムのオープン性に加えて、導入時点のトレンドを見据えた先端アーキテクチャの採用といった、OFP 導入の際の理念を継承し、これまでと同様に大規模アプリケーションのユーザを支えると共に、AI for HPC / Science といった AI を活用する計算科学手法の推進、計算・データ・学習の融合による Society 5.0 を支えるプラットフォームなど幅広い応用に資することを目的としている。目標性能とシステム規模、電力効率を勘案すると、GPU などの演算加速装置を取り入れたシステムが有望である一方で、汎用 CPU のみの計算ノードも、一定程度の規模が必要であると考えており、OFP-II はこれらの

計算ノードを一体として構築したものになると考えている。

参考文献

- [1] スーパーコンピュータシステム Oakforest-PACS (メニーコア型大規模スーパーコンピュータシステム) <https://www.cc.u-tokyo.ac.jp/supercomputer/ofp/service/>
- [2] 宮寄 洋 他、Oakforest-PACS スーパーコンピュータシステムの運用、AXIES2017 年次大会論文集、https://axies.jp/_files/report/publications/papers/papers2017/TC1-5.pdf
- [3] 埴 敏博、JCAHPC のスパコン Oakforest-PACS システム、原子核研究、Vol. 63, No. 1, pp. 102–113, 2018 年 10 月
- [4] 筑波大学計算科学研究センター <https://www.ccs.tsukuba.ac.jp>
- [5] 東京大学情報基盤センター <https://www.itc.u-tokyo.ac.jp>
- [6] 最先端共同 HPC 基盤施設 (JCAHPC) <http://jcahpc.jp>
- [7] 京都大学学術情報メディアセンター <https://www.media.kyoto-u.ac.jp/>
- [8] Intel Xeon Phi <https://ark.intel.com/content/www/jp/ja/ark/products/series/75557/intel-xeon-phi-processors.html>
- [9] J. Nonaka, T. Hanawa, F. Shoji, Analysis of Cooling Water Temperature Impact on Computing Performance and Energy Consumption, Proceedings of IEEE Cluster 2020, 2020
- [10] 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 (HPCI) <https://www.hpci-office.jp/>
- [11] 30 秒ごとに更新するゲリラ豪雨予報 — 首都圏でのリアルタイム実証実験を開始 — (2020 年 8 月 21 日) http://jcahpc.jp/files/release_200821.pdf
- [12] T. Miyoshi, T. Honda, A. Amemiya, S. Otsuka, Y. Maejima, J. Taylor, H. Tomita, S. Nishizawa, K. Sueki, T. Yamaura, Y. Ishikawa, S. Satoh, T. Ushio, K. Koike, E. Hoshi, K. Nakajima, Big Data Assimilation: Real-Time Demonstration Experiment of 30-s-Update Forecasting in Tokyo in August 2020, American Meteorological Society 101st Annual meeting, 2021

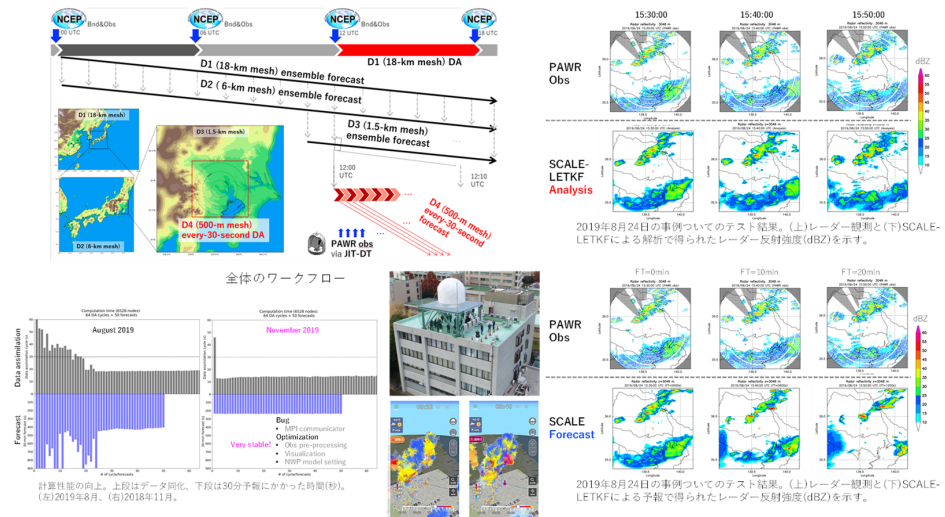


図3 ゲリラ豪雨予測のリアルタイム実証実験の概要 [11, 12, 23]

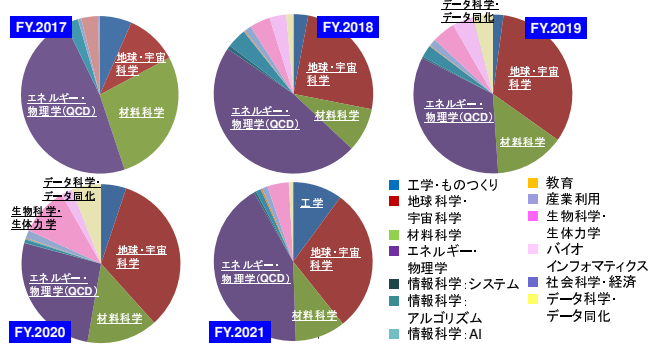


図4 Oakforest-PACS (OFP) の利用分野 (2016~2021年度): 各分野のノード時間をもとに算出

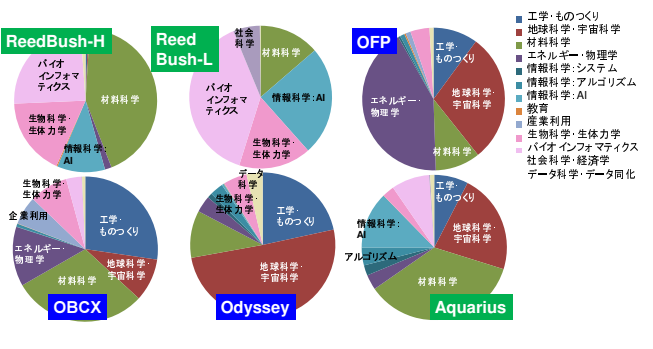


図5 東京大学情報基盤センター各システムの利用分野 (2021年度)

[13] HPCI: 新型コロナウイルス感染症対応 HPCI 臨時公募課題の募集について https://www.hpci-office.jp/pages/hpci_covid19

[14] 前田光教 他, 新型コロナウイルス (COVID-19) 感染拡大防止に向けたスーパーコンピュータの運用と対策, AXIES2020 年次大会論文集, https://axies.jp/_files/conf/conf2020/FA2-5.pdf

[15] Top500 <https://www.top500.org/>

[16] Green500 <https://www.top500.org/lists/green500/>

[17] High-Performance Conjugate Gradient (HPCG) Benchmark <https://www.top500.org/lists/hpcg/>

[18] IO500 <https://io500.org>

[19] 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) <https://www.cc.u-tokyo.ac.jp/events/jcahpc/11.php>

[20] K. Fujita, K. Katsushima, T. Ichimura, M. Horikoshi, K. Nakajima, M. Hori, and L. Madgededara, Wave Propagation Simulation of Complex Multi-Material Problems with Fast Low-Order Unstructured Finite-Element Meshing and Analysis, Proceedings of HPC Asia 2018, 2018 (**Winner of Best Paper Award**)

[21] M. Kreutzer, D. Ernst, A. R. Bishop, H. Fehske, G. Hager, K. Nakajima, and G. Wellein, Chebyshev Filter Diagonalization on Modern Manycore Processors and GPGPUs, Proceedings of ISC High Performance 2018, LNCS 10876, pp.329-349, 2018 (**Finalist of Hans Meurer Award**)

[22] JCAHPC セミナー <https://www.cc.u-tokyo.ac.jp/events/jcahpc/>

[23] 3D 雨雲ウォッチ <https://pawr.life-ranger.jp/>