TSUBAME: Supercomputers for Everybody's AI/Machine Learning

東京工業大学
遠藤 敏夫

2023/4/19 PCCC AI/ML ワークショップ

東工大TSUBAMEスパコンシリーズ

TSUBAME1.0～1.2
(2006～2010)

TSUBAME2.0/2.5
(2010～2017)

TSUBAME3.0
(2017～)

TSUBAMEシリーズは、世界に先駆けたGPUの採用など、先進的な取り組みを行ってきた

- アジアNo.1 スパコン認定 (2006)
- 世界初大規模GPUスパコン (2008)
- Top500:演算性能世界4位 (2010)
- ACMゴードンベル賞 (2011)
  - Peta-scale Phase-Field Simulation for Dendritic Solidification on the TSUBAME 2.0 Supercomputer
- 文部科学大臣表彰科学技術賞(開発部門)(2012)
  - 運用世界一グリーンペタスパコンの開発
- Green500:省エネ性能世界一 (2017)

東工大TSUBAMEの歴史

2006/4
TSUBAME 1.0
85TFlops/1.1PB

アジアNo.1
「みんなのスパコン」
AMD+ClearSpeed

2007
TSUBAME 1.1
100TFlops/1.6PB

ストレージ・アクセラレータ増強

2008
TSUBAME 1.2
160TFlops/1.6PB

GPUアクセラレータ増強
→ Top500で初GPUスパコン

2010/11
TSUBAME 2.0
2.4PFlops/7.1P

日本初のペタフロップス超

GPUをアップグレード

2013/9
TSUBAME 2.5
5.7PFlops/7.1PB

2013/9
TSUBAME-KFC
0.2PFlops

液浸冷却による
小型実験スパコン
Green世界一

2017/8
TSUBAME 3.0
12PFlops / 15PB

省エネ型「ビッグデータ」スパコン
Green世界一

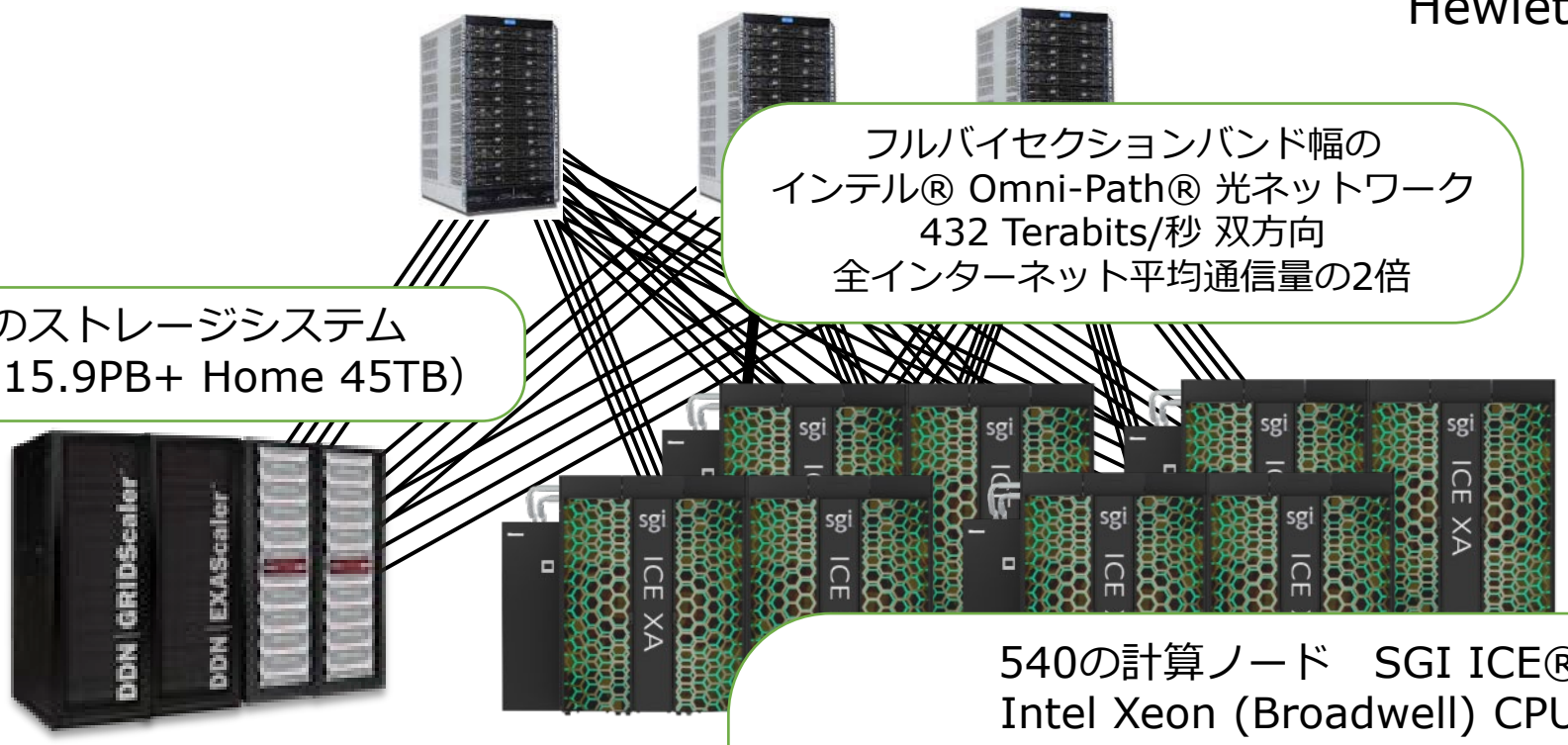
2024/4 予定
TSUBAME 4.0
>60PFlops/>38PB

おことわり：
本日時点ではまだ
TSUBAME4.0に関する情報
は仕様書ベースのものです

現行TSUBAME 3.0 のシステム概要

2017/8~

Integrated by
Hewlett Packard (HPE)



フルバイセクションバンド幅の
インテル® Omni-Path® 光ネットワーク
432 Terabits/秒 双方向
全インターネット平均通信量の2倍

DDNのストレージシステム
（並列FS 15.9PB+ Home 45TB）

540の計算ノード　SGI ICE® XA
Intel Xeon (Broadwell) CPU×２
＋NVIDIA P100 GPU×４
256GBメモリ、２TBのNVMe対応インテル®SSD
12PFlops (倍精度), 47PFlops (FP16)

- ユーザには学内・学外研究者・産業利用を含み、アクティブユーザ数1,400
- 東工大では200近くの研究室が利用
- 深層学習ユーザが大幅増加

TSUBAME3.0の特徴

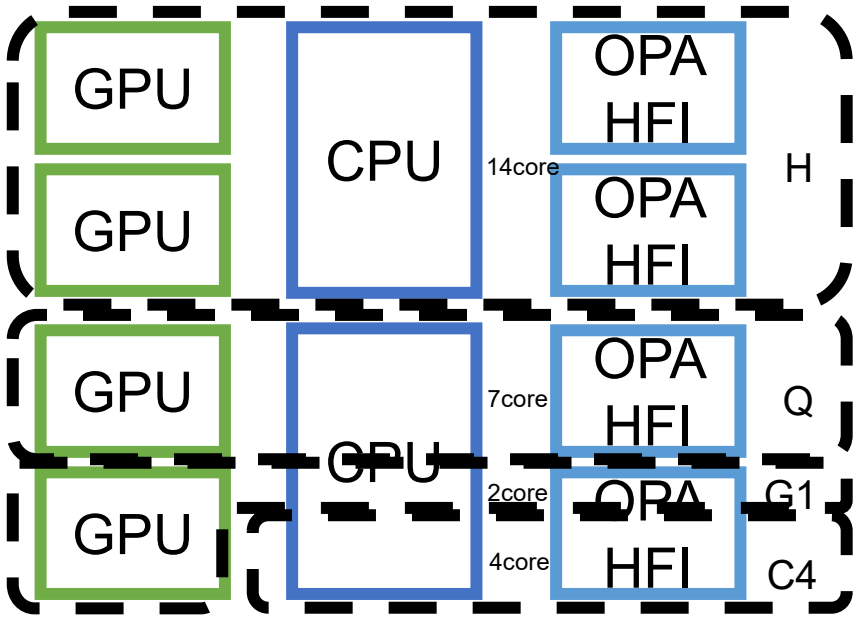
AI/機械学習を強力にサポートするためのTSUBAME3.0の方策：計算科学・シミュレーションとの共存

- ハードウェア面 ➔ **GPU!!**
- ソフトウェア・運用面
  - 機械学習/深層学習フレームワークの提供 (TensorFlow, PyTorch, Chainer…)
  - ↑バージョンアップが早い。ユーザが必要なバージョンを入れられるよう、Singularityコンテナの用意
  - ばらばらな**ジョブの粒度**への対応：>100GPUのMPIジョブもあれば、1コア+1GPUで十分な場合、Pythonスクリプトが動けばよい場合・・・
  - **インタラクティブ利用**需要への対応：バッチスケジューラだけでなく、Webベース利用(2020～)

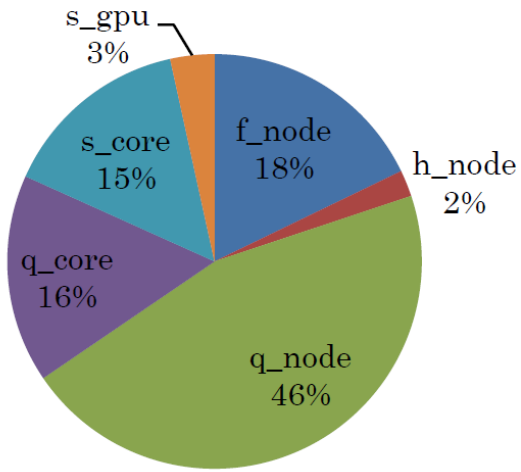
CPU・GPU資源を有効活用しつつジョブ粒度対応

TSUBAME3.0は「ファットノード」：28 core + 4 GPU + 256GB memory

- 「小さい」ジョブにノード丸ごとはもったいない ➔ **ノード分割**の導入
- TSUBAME3上で、複数の「インスタンスタイプ」を定義した
  - GSIC野村准教授(現在)が設計



- f_node: 分割しないノード丸ごと
- h_node: 14 core + 2GPU
- q_node: 7 core + 1GPU
- s_core: 1 Core
- q_core: 4 Core
- s_gpu: 2 Core + 1 GPU



ジョブ件数の統計(2023/3):
>80%が分割タイプ指定

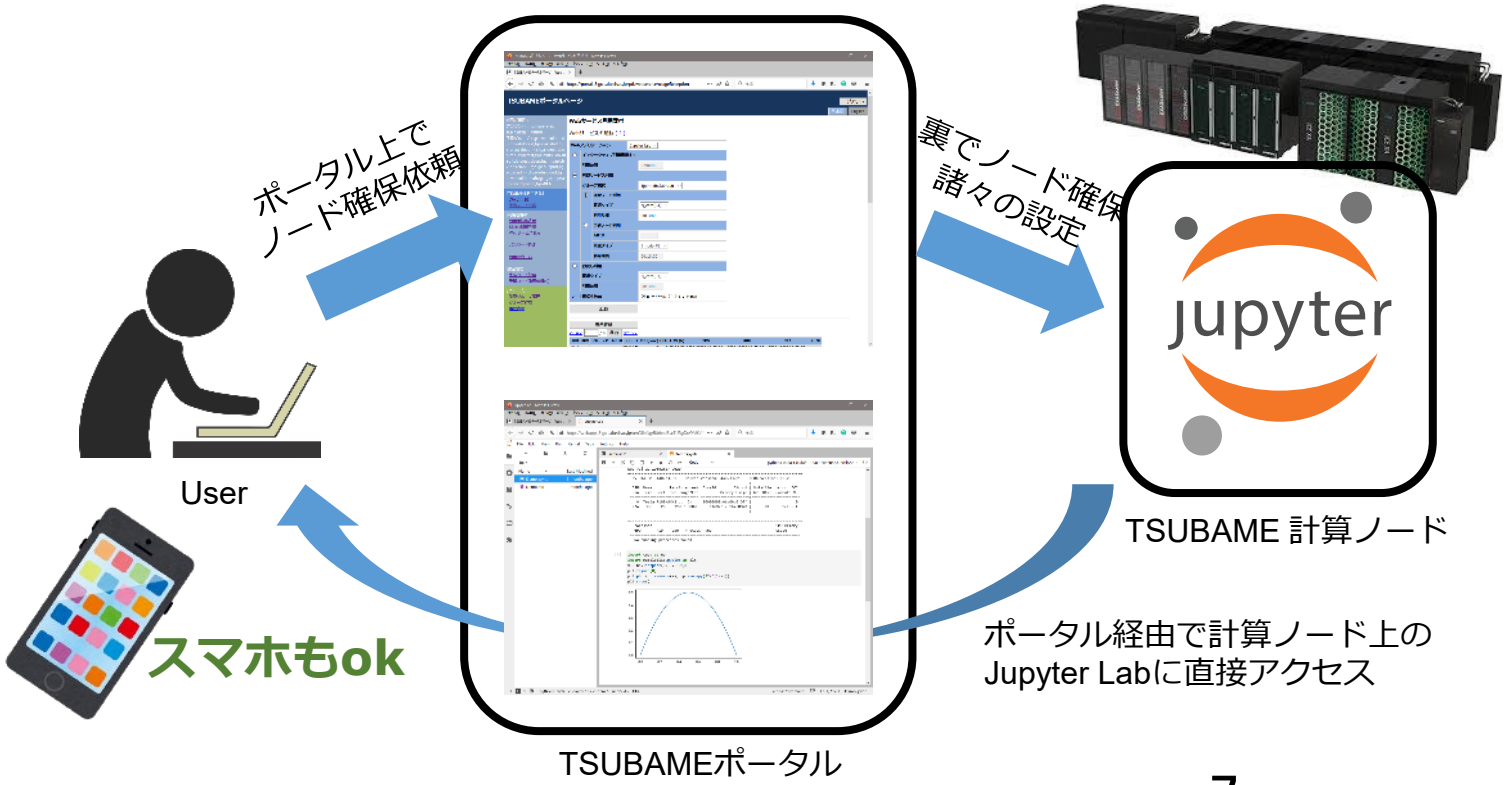
ユーザは、ジョブ投入時に「タイプ」×「インスタンス数」を指定
➔ ユーザは日常的にタイプを選んでいる

2020~

TSUBAME + シングルサインオン+ Jupyter = みんなのビッグデータ・AI/ML基盤 [野村 SWoPP2020]

JupyterNoteBook(当時)をはじめ、Web上での計算資源利用が急激に普及

➔ TSUBAME上にWebインタフェースを実装: JupyterLab / CodeServer / noVNC
- ➔ ブラウザだけでGPUを含めTSUBAMEを直接**インタラクティブ利用**できる
- ➔ 注：OpenOnDemandがメジャーになる少し前だった



この図のどこにもSSH・公開鍵は出てこない→ 覚える必要がない

2022年度に約240名の利用実績
うち1/3 (推定)は、Webのみ利用
➔ スパコンユーザの新規発掘

次期TSUBAMEにおいて、計算性能・使いやすさの両方をさらに向上

7

TSUBAME4.0:

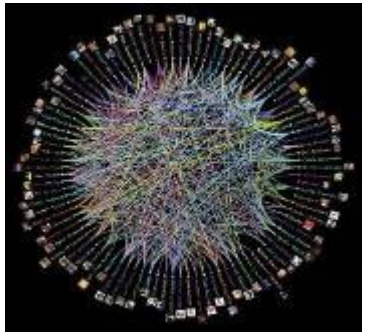
データ・計算科学・AI融合のための「もっと」みんなのスパコン により、コンバージェンス・サイエンスの中核インフラへ

対話的データ解析

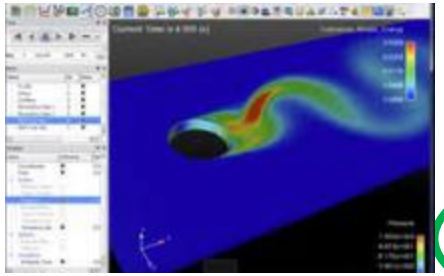
T1037 / 6vr4
90.7 GDT
(RNA polymerase domain)

T1049 / 6y4f
93.3 GDT
(adhesin tip)

深層学習との融合による
シミュレーション革新



SNSのフォロー関係解析



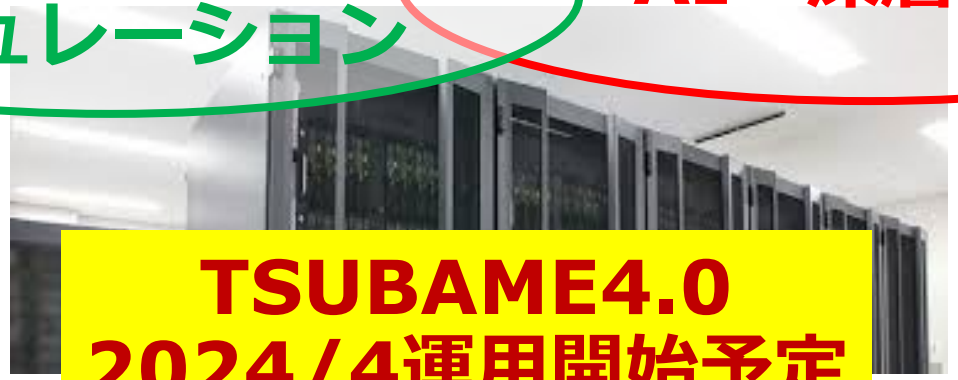
シミュレーションと
リアルタイム可視化

ビッグデータ解析

計算科学・
シミュレーション

AI・深層学習

深層学習による
画像等認識



TSUBAME4.0
2024/4運用開始予定
(写真はイメージ図)

TSUBAME4.0の特徴

- **現行TSUBAME3と比べ、5倍以上の演算速度** ※倍精度・行列演算にて
  - ➔ AI・シミュレーションにおいてさらに増大する計算量への対応
  - ➔ 混雑の緩和へ
- **対話的利用・コンテナ技術の拡充**
  - ➔ビッグデータ解析や可視化を容易化、研究のPDCAを加速
  - ➔ 各ユーザの欲しいソフトウェア環境を迅速に準備
  - ➔待ち時間を短縮するスケジューリングにより、ライトユーザへも恩恵

- **GPUの大幅利用による加速**
  - TSUBAMEシリーズではGPUの利用により、演算速度効率が数倍に
  - ➔ 投資あたりの研究成果の増大

「GPU利用には工夫が必要」という課題に対しては、以下の対応

- 東工大の長年のGPUに関する教育・研究コミュニティの実績
- 深層学習分野ではGPUがデファクトスタンダードになっており、急速に整備

データ・計算科学・AIを中心とした研究成果創出の支援を大幅強化

TSUBAME4.0の性能概要

下記は仕様書時点の情報

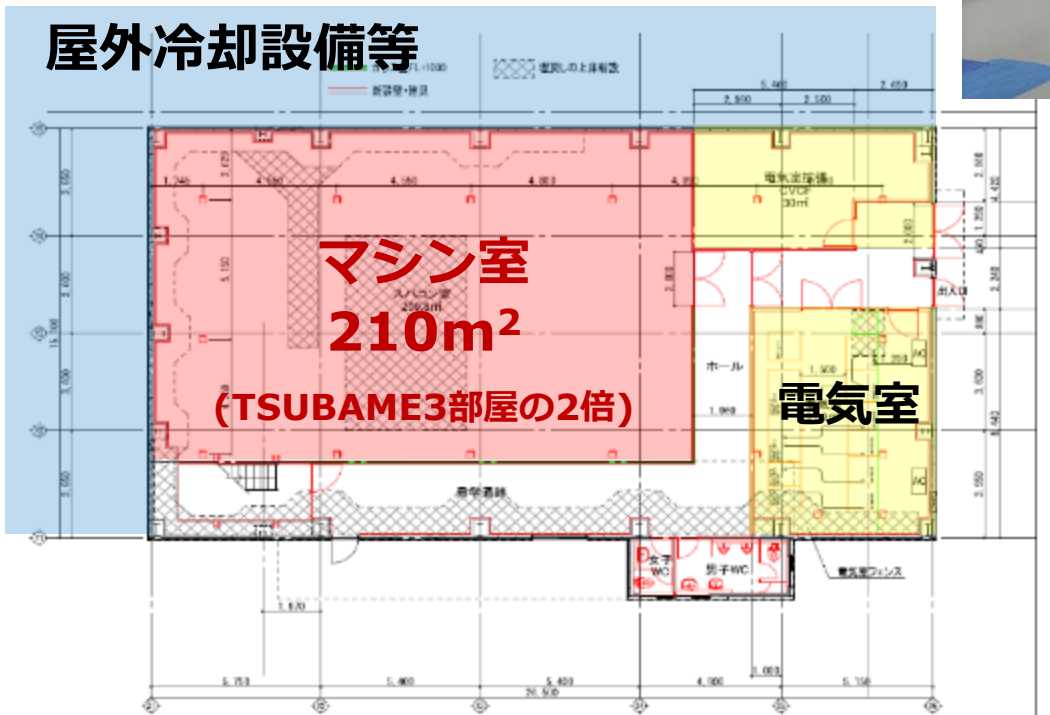
- 総演算性能
  - 倍精度: ≧60PFlops
  - 半精度: ≧ 240PFlops

  } *TSUBAME3.0の5倍以上*
- 計算ノード(少なくとも一部)は、x86互換CPU + CUDA対応GPU
  - 現行機との連続性
  - 単体GPUは、少なくとも以下の性能
    - 倍精度 ≧36TFlops　※A100は要件を満たさない
    - メモリ容量 ≧64GB
- ストレージ
  - 共有ストレージ ≧38PB
  - 一部、SSDベースの高速共有ストレージ

2024/4 TSUBAME4はすずかけ台キャンパスで稼働

TSUBAME1~3は大岡山キャンパスに設置

TSUBAME4: **すずかけ台キャンパス**G4A棟(旧MHD棟)
を**新データセンター**として設置予定



TSUBAME4.0のもう少し先へ向けて

HPCシステムへの期待の高まりから、計算資源利用法も広がる

- 機械学習などの対話利用 (LLMも含む)
- リアルタイム高速可視化
- IoTデバイス・エッジからのデータ解析

- **現状の多くのスパコンでは、バッチスケジューラによる固定的な運用がほとんど**
  - ユーザはジョブスクリプトを前もって作成し、システムに実行依頼（投入）
  - システムがすでに満杯だったら待たされる

  ➔ **対話利用・リアルタイム可視化×**
  (2020年から一部TSUBAME3で対応)
  - 各ジョブは有限時間で終わり、計算資源を明け渡す
  (**時間方向に固定**)

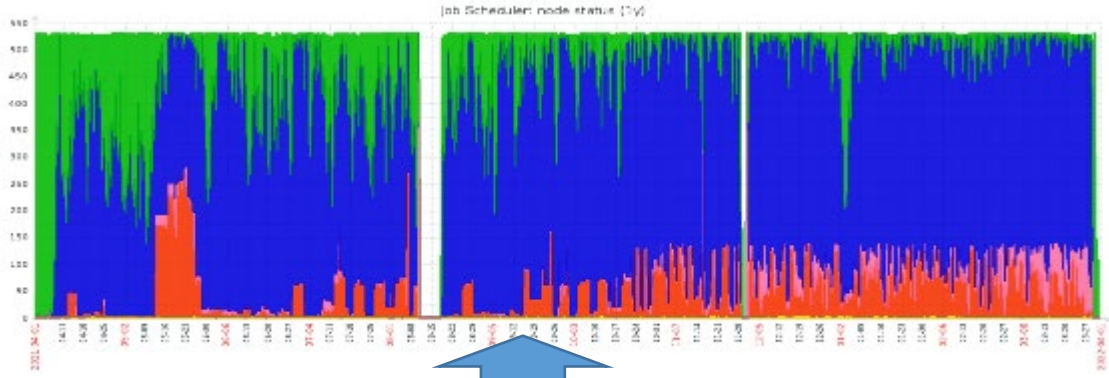
  ➔ **外部データの継続的解析 ×**
  - 各ジョブ投入前に、資源量(コア数・GPU数...)指定
  (**空間方向に固定**)

  ➔ **計算資源の有効活用 ×**

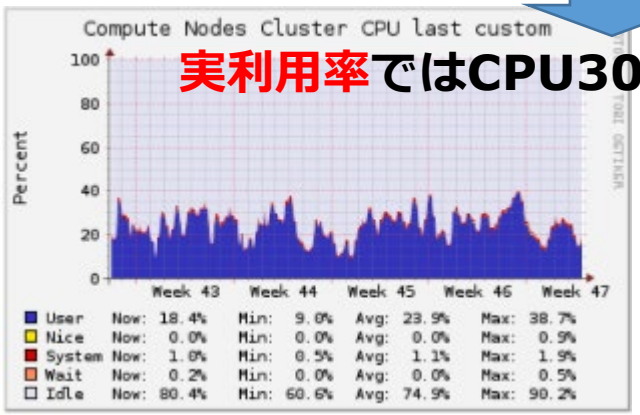
スパコンの利用率とは何か

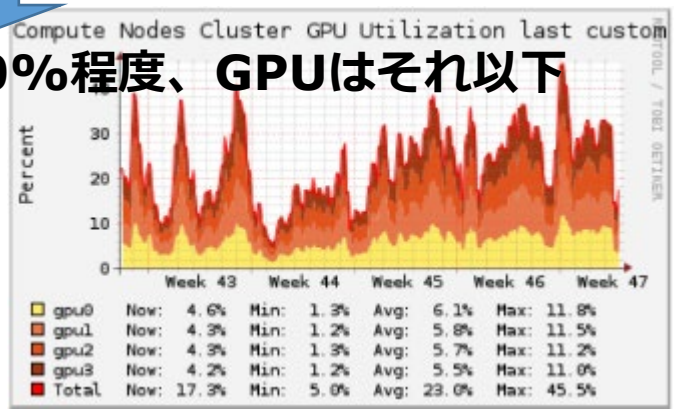
- 各ジョブが利用を宣言した資源と、時間ごとの実利用率にはギャップ

TSUBAME3の平均占有率85%
➔ 繁忙期は待ち時間>24時間も



実利用率ではCPU30%程度、GPUはそれ以下





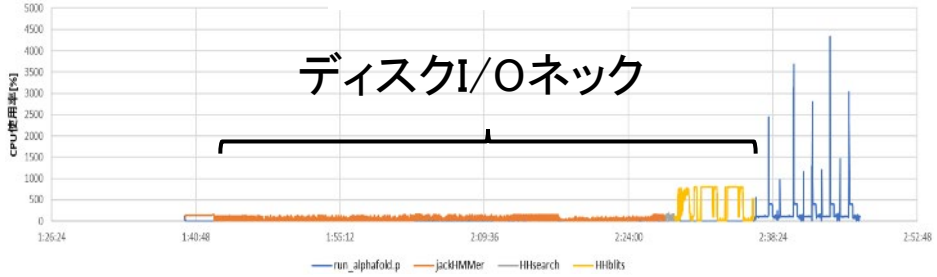
ムーア則が止まる時代に富豪的利用はふさわしいか・・・？

利用率のギャップの原因

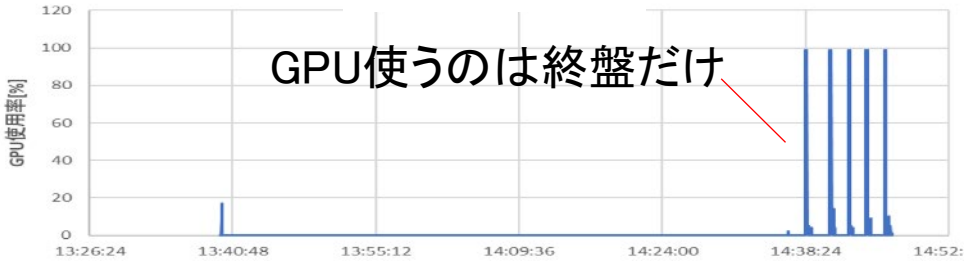
- AI/機械学習ジョブにおける実利用率の変動
  - ビッグデータのディスク読み込み
  - 複数の計算フェーズ
    - GPUメインの部分、CPUメインの部分・・・

AlphaFold2実行中の利用率

CPU利用率

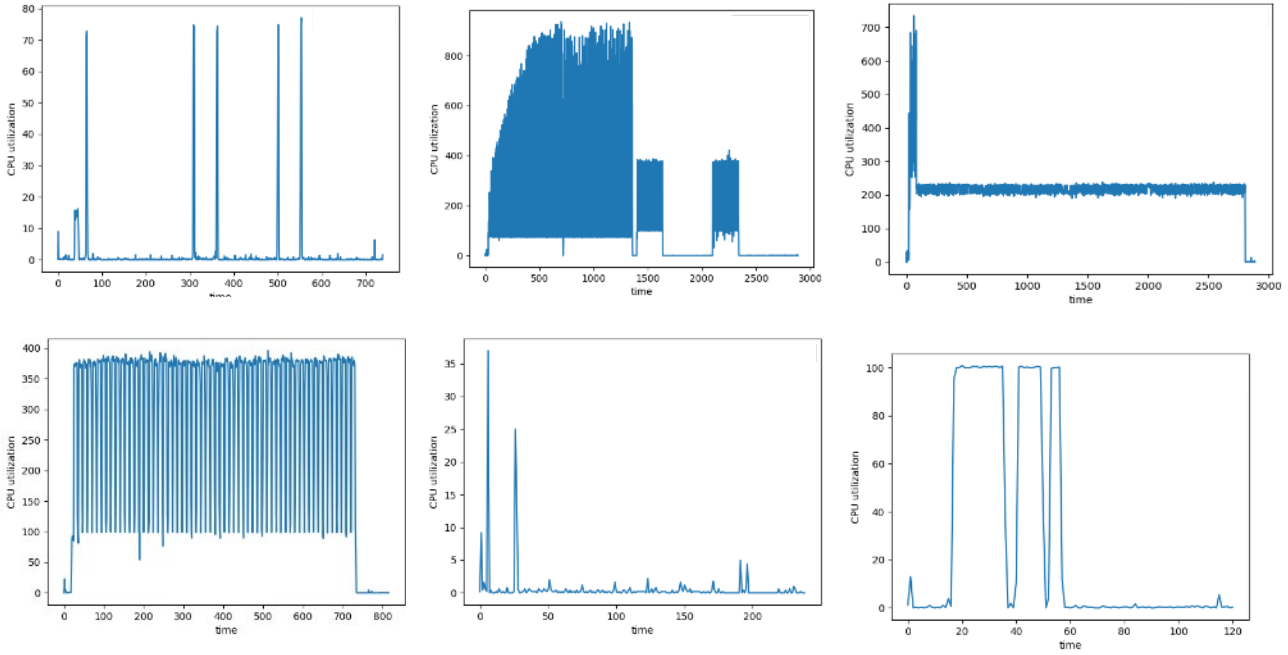


GPU使用 GPU利用率 [数:107]



- インタラクティブ利用ではさらに、「ユーザが考える」時間が入る

複数のインタラクティブ利用中のCPU利用率



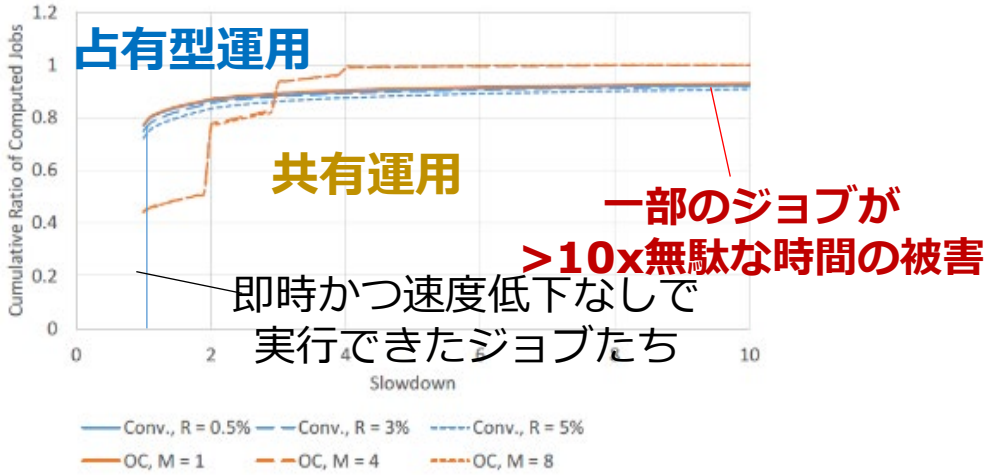
進行中の研究(一部)

- ノード分割よりもさらにアグレッシブに資源共有を行う試み

➔ 「Oversubscribing」スケジューリングの導入？

- コアレベルでも、複数ジョブが計算資源を共有

シミュレーションによる影響評価
Minami et al. HPCAsia23



課題は山積み

- (当然)各ジョブの速度は低下 ➔ 特に並列ジョブへの影響のアセスメント
- スケジューリングアルゴリズム提案
- 公平性・即時性とのトレードオフをどう考えるか
- GPUへの対応！
- 外部データ解析ジョブや、Microserviceとの親和性調査
- メモリ容量の不足をどうカバーするか (Pegasusすごい)

これらを含み、さらなる次世代高性能システムへ向け研究中

Tokyo Tech

ありがとうございました