

スーパーコンピュータ「富岳」の ソフトウェア環境

理化学研究所 計算科学研究センター (R-CCS)
運用技術部門 ソフトウェア開発技術ユニット
村井 均

2022/12/5

PCCC22

1



はじめに

・スーパーコンピュータ「富岳」

- ・ 2021年4月に共用開始。
- ・ 主な成果:
 - ・ 2021年 ゴードン・ベル賞 COVID-19研究特別賞
 - ・ 2022年 ゴードン・ベル賞
 - ・ 現在、Top500第2位、HPCG1位、HPL-AI第3位、Graph500第1位

・ソフトウェア開発技術ユニットのミッション:

- ・ 富岳のソフトウェア環境の高度化
 - ・ プログラミング環境
 - ・ チューニング技術
 - ・ オープンソース & 商用ソフトウェア
 - ・ etc.
- ・ 上記に関するユーザサポート



アジェンダ

- 富岳のプログラミング環境
- AIフレームワーク
- オープンソースソフトウェア (OSS)
- 商用ソフトウェア
- Continuous Benchmarking



富岳のプログラミング環境

• ベンダ製 (富士通) プログラミング環境

- Fortran 2008
- C11
- C++14 & C++17サブセット
- OpenMP 3.1 & 4.0/4.5/5.0サブセット
- MPI 3.1 & MPI 4.0サブセット
- 数学ライブラリ: SSL2
- 性能プロファイラ
 - 基本プロファイラ
 - 詳細プロファイラ
 - CPU性能解析レポート
- デバッガ



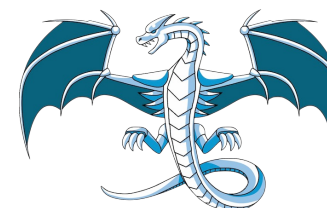
機能不足や性能の問題が報告されており、主にOSSを用いた強化や拡張を進めている。



コンパイラの強化

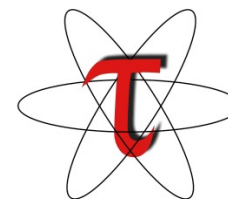
- ベンダ製コンパイラ (特にC++) の性能について、いくつかの問題が報告されている。
- ベンダと共同でA64FX向け *Clang/LLVM* コンパイラを開発中。
 - 2022年度
 - 最新版のClang/LLVM※をベースに、A64FX向けソフトウェアパイプライン (SWPL) 機能 (*MachinePipeliner*) を実装中。
 - ループ正規化
 - 繰り返し型モジュロスケジューリング
 - レジスタ割付け
 - 2023年度以降
 - ベクトル化機能の強化
 - SWPLのためのループ融合/分割
 - LLVM本体へのアップストリームを目指す。

※ LLVM 14以降はSVEをサポート済み。



ツールの強化（一部）

- **Score-P/Scalasca (JSC)**
 - オープンソースの性能プロファイラ。
 - ポーティング中。
- **TAU (U. Oregon)**
 - オープンソースの性能プロファイラ。
 - ポーティング完、公開準備中。
- **VeloC (ANL)**
 - オープンソースのチェックポイントニングツール。
 - 公開中。
- **Arm DDT**
 - GUIデバグ。
 - 動作確認済み。



AI framework

We installed the AI frameworks, TensorFlow, PyTorch on the Fugaku. In addition, the latest version is released on the GitHub and can be used. These AI frameworks use the customized libraries for the Fugaku.

● Task

- Fugaku does not have GPUs, so the libraries made for GPUs cannot be used.
 - It is necessary to release more documentations such as construction and usage of training examples, and so on, from the user perspective on the Fugaku.
- In order to take advantage of the Fugaku, the key is massive parallelization on the many CPUs.
 - The data parallelism has a problem with convergence.
 - The model parallelism requires to develop the codes for each training.
 - The collaboration of trainings and simulations by workflow will be a key in the future use.
- The user uses various versions of AI framework for each training. In order to respond to this problems, the following environment is being prepared.
 - Version control by Spack including related many python modules
 - Providing container environments

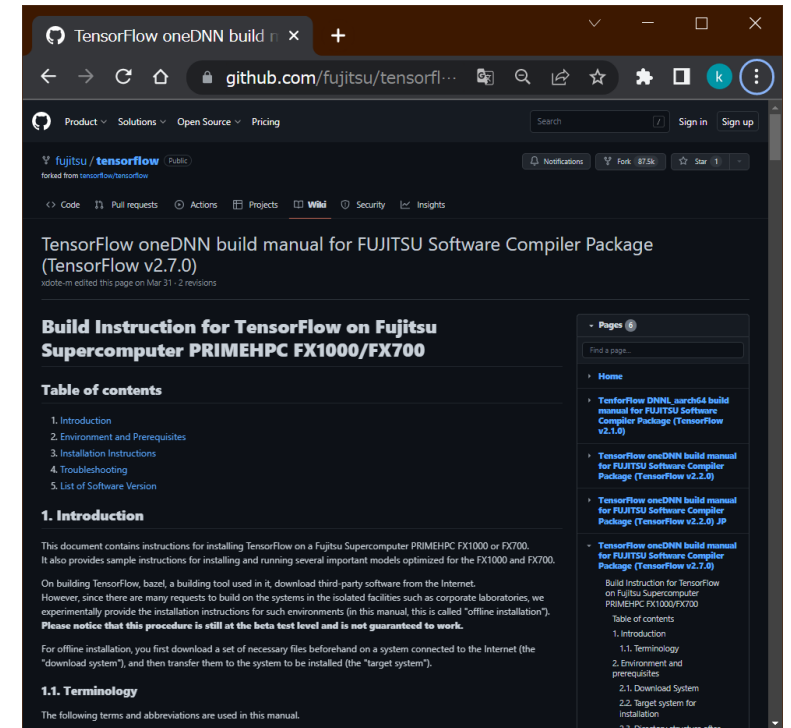


Fig. GitHub of AI Frameworks for A64fx systems



富岳におけるOSS

• 基本方針:

- 広く用いられているOSSを中心に提供する (ユーザからの要望に基づく)。
- 必要に応じて、各ユーザも自身でOSSをインストールできる。
- Spack (米Exascale Computing Project (ECP) が開発するHPC向けソフトウェア管理ツール) を用いる。

• サポート方針: ベストエフォート

- 原則として、個別のOSSのサポートは行わない。
- as-isによる提供 (一部の重要パッケージ (e.g. FFTW) は、最適化済み)。
- とはいえ、要望次第で対応。



Spack (1)

• 特徴:

- 「レシピ」に基づく、半自動的な処理。
- 6700以上のOSSのレシピが公開済み (最新 v0.19)。
- 富岳 (A64FX) 対応状況: <https://spack-mirror.r-ccs.riken.jp/oss/public/>
- ソフトウェア間の依存関係を適切に処理。
- 複数のvariant (バージョン、コンパイラ種別、ライブラリ種別……) を共存可能。



github.com/spack/spack



Spack (2)

• 基本的な使い方:

```
$ git clone git@github.com:spack/spack.git
```

// Spackをインストール

```
$ . spack/share/spack/setup-env.sh
```

// 環境設定 ←

```
$ spack install openblas
```

// パッケージopenblasをインストール

```
$ spack load openblas
```

// パッケージopenblasをロード ←

パブリックインスタンスのパッケージを利用する場合
(通常の使い方)

• 「システムSpack (パブリックインスタンス)」 + 「ユーザSpack (プライベートインスタンス)」

- 重要度が高い / 一般的な / 広く使われているOSSは前者によりR-CCSが提供。
- 各ユーザは、個別のOSSを後者でインストールできる。
- 両者は、Spackの「chain」機能により連携できる。



提供済みOSSのリスト (計算ノード)

名称	バージョン
adios2	2.6.0
alps	2.3.0
bcftools	1.10.2
bedtools2	2.27.1
blitz	1.0.1
boost	1.74.0
bwa	0.7.17
cblas	2015-06-06
cmake	3.18.4
dssp	3.1.4
eigenexa	2.6
fujitsu-fftw	master
fujitsu-mpi	4.6.1
fujitsu-ssl2	4.6.1
gcc	10.2.0
genesis	1.5.1
grads	2.2.1
gromacs	2020.6 / 2021.3
hdf5	1.10.7
htslib	1.10.2
julia	1.5.2
kokkos	3.1.01
lammps	20201029
lis	2.0.27
llvm	12.0.1

名称	バージョン
mapslice2	2.2.1
mesa	20.2.1
metis	5.1.0
mpich-tofu	master
mptensor	0.3.0
n2p2	2.1.1
netcdf-c	4.7.4
netcdf-cxx	4.2
netcdf-cxx4	4.3.1
netcdf-fortran	4.5.3
netlib-lapack	3.8.0
netlib-scalapack	2.1.0
openblas	0.3.12
openfoam	2012 / 2106
openfoam-org	8
openjdk	11.0.0-2020-01-01
parallel-netcdf	1.12.1
paraview	5.8.1
parmetis	4.0.3
petsc	3.14.1
pfpack	2014-09-17
picard	2.20.8
povray	3.7.0.8
process-in-process	2 & 3
py-ase	3.18.0

名称	バージョン
py-dask	2.16.0
py-h5py	2.10.0
py-jupyterhub	1.0.0
py-keras	2.2.4
py-mpi4py	3.0.3
py-netcdf4	1.5.3
py-numpy	1.19.4
py-pydm	0.3
py-pygps	1.3.5
py-pysam	0.15.2
py-scikit-learn	0.23.2
py-scipy	1.6.1
py-seaborn	0.9.0
py-xarray	0.14.0
python	3.8.6
quantum-espresso	6.5 / 6.6 / 6.7
r	4.0.3
raja	0.12.1
rdkit	2021_03_2
samtools	1.10
scale	5.4.3
scotch	6.1.0
screen	4.8.0
star	2.7.6a
tmux	3.1b
xios	2.5

- 実際には、これらが依存する多数のOSSもインストール済み。
- 動作は未検証。
- ログインノード、プリポストノードでも利用可能。
- 今後も、順次に拡充していく。



商用ソフトウェア

※ <https://www.fujitsu.com/downloads/JP/jsuper/Applications-for-PRIMEHPC-ja.pdf>

• 3種類の利用方式

A) サイトライセンス方式

- R-CCSが保有するライセンスにより、条件を満たしたユーザは無償で利用可能。
- R-CCSによるサポートあり。
- 2022年11月22日よりGaussian 16の提供を開始。



B) 持ち込みライセンス方式

- R-CCSがソフトウェアのインストールを行い、ユーザが保有するライセンスを登録して利用。
- R-CCSによるサポートあり。
- 近日中に、scFLOW、CONVERGE、LS-DYNA、Poyntingの提供を開始する予定。

C) 個別インストール方式

- Ansys Fluentなど多数が富岳で実証済み※ → ベンダ (富士通) へお問い合わせください。

• 上記のソフトウェアの「試用」も計画中。



Continuous Benchmarking (CB)

• 背景:

- GitLabによるCI/CDの動作を富岳で実証済み。
- 富岳の安定的運用のために、継続的/自動的な性能評価 (ベンチマーキング) が有用。
- 次期スーパーコンピュータの調査研究でも活用できる？

• 目的:

- ベンチマークセットの定義
- CBフレームワークの開発
 - Spackの *CI Pipelines* 機能と回帰テストツール *ReFrame* に基づくプロトタイプを検討中。
- (結果の公開) – 富岳以外のマシンにも広めたい (HPCIや海外のいくつかのサイトとの共同研究を遂行中)。
- etc.



おわりに

- **富岳のプログラミング環境の強化**

- A64FX向けLLVM/Clangを開発中。
- (LLVMに詳しい方、求む！)
- ツールのポーティング。
- 最適化済みのAIフレームワークを提供。

- **Spackを用いてOSSを提供。**

- (HPCシステムの管理者の方、Spackを使ってみませんか？)

- **Gaussianを始めとする商用ソフトウェアの提供を開始。**

- **Continuous Benchmarkingを計画中。**

- (HPCにおけるCI/CD/CBの活用について関心をお持ちの方、一緒に何かやりませんか？)

