

## フロンティア理工学研究所新CPU-GPGPUマシン導入について

畠山 唯達\*・牧 祥\*・桑木 賢也\*\*・上嶋 明\*\*  
河野 敏行\*\*\*・大熊 一正\*\*\*\*・廣田 雅晴\*\*\*

\*岡山理科大学フロンティア理工学研究所

\*\*岡山理科大学工学部

\*\*\*岡山理科大学情報理工学部

\*\*\*\*岡山理科大学基盤教育センター

2022年12月27日受理

### 1. はじめに

本学では、附属研究施設が主体となって、学内共用機器（上限5百万円）の導入と運用を行うプロジェクト機器導入事業が令和3年度よりはじまり、令和4年度の機器として、我々が提案するGPU計算機の導入が決定された。

本項では、令和4年9月に導入された新計算機について、目的、用途、機能、およびこれまでの作業と現状について報告する。

### 2. 導入の目的と用途

岡山理科大学では、2004年頃まで情報処理センターに汎用計算機（IBM Paragonシリーズ）が設置され、学内の大規模計算需要を請け負ってきた。このころには大多数の並列CPUの大型計算機が広く普及をはじめ、PentiumシリーズやPowerPCといったデスクトップPC用CPUとほぼ同等のものを並べたスーパーコンピュータも誕生し、大型計算機のスケラビリティがノード数とノード間伝送に強く依存する「大きければ速い」時代に突入した。そのため、小規模大学が専用CPUを使った小規模な大型計算機や大きな並列計算機を持つ利点が薄れてしまい、本学内ではParagonの後継機に関する議論が進まないまま運用を終了した。その後、多数の教育用計算機を授業時間外に並列計算に用いる構想などもあったが、実用レベルには至らなかった<sup>1)</sup>。いっぽう、世の中では2000年代後半より、従来グラフィック（リアルタイムな画像処理）を担当していたGPUの性能と並列化が高度に進化したのを機に、GPUを汎用計算に用いる、いわゆるGPGPUが普及を始めた。

このような経緯より、本学の研究者の中には自前で変える並列計算機を持ったり、外部の大型計算機のマシンタイムを獲得したり、あるいは有料のクラウドサービスを用いて大きな計算を行っていたりするものが

現状である。今回、学内有志が集まり、新設された「プロジェクト機器購入制度」を利用して汎用に用いることができるGPU/CPU計算機の整備を計画した。

本申請プロジェクトは「高性能計算機を活用した科学技術研究の包括的連携プロジェクト（代表：牧祥）」と題し、「医学、工学、情報学を横断する新たな研究ユニットを創設し、インフォマティクスを軸とする新たな医工連携と産学連携を推進させるプロジェクトを提案する」、「高性能計算機がなければ不可能と思えるような研究に果敢に挑戦し、研究競争を有利に展開しながら我国の科学技術の発展と本学知名度の向上に貢献する」という2本の目的で行われる。当初の主な計算目標は、熱対流の3次元シミュレーション、強化学習による生物行動の再現シミュレーション、薬剤のDrug Delivery Systemシミュレーション、素粒子現象の数値計算、GPU並列処理計算の高速化、ソーシャルメディアのビックデータ解析、等を予定しているが、参加研究者の増加により研究内容も広がる。教育面では、学部生・大学院生の研究に使用するための各種レクチャーの他、大学院教育での使用も検討している。

本申請は令和3年度の審査に2度目で通り、令和4年9月に実機（HPCテック社製HPCT WRSE31）が導入された。

### 3. 計算機の構成

本研究プロジェクトで導入した計算機は、GPUのみならず、CPU性能でもある程度の数値計算性能を持つもので、以下のような機器構成である。

CPU: AMD EPYC 7413<sup>2)</sup> (2.65-3.6GHz, 24 cores)

Main Memory: 512GB (DDR4-3200)

Storages: 2 SSDs (960GB + 1.92TB)

GPU: 2 NVIDIA A100 80GB PCIe<sup>3)</sup>

(他に冗長化電源、UPSなど)

OSにはLinux (Ubuntu 20.04 LTS) を使用し、導入ソ

ソフトウェアも無料のものを中心に以下のような計算用のツールをインストールしている。

Cコンパイラ：gcc-9.4

MPI：OpenMPI 4.0

GPU: CUDA 11.6 (v515)

仮想コンテナ：docker 20.10

Pythonは標準でv2.7/3.8がインストールされているが、後述するようにGPUを用いた深層学習等の計算には各自で環境を築いてもらう予定である。

本機はルーターを介して学内ネットワーク（OUS ネット）に接続し、学内のコンピュータからはSSHのみを通して接続できる（学外からの監視や接続は現在のところ考慮していないが、大学が提供するVPNサービスなどを将来導入する可能性がある）。また、今後、本体データ領域のバックアップとなるNASなどを接続する予定である。

#### 4. テスト項目

2022年12月現在はまだ導入直後のテスト段階で、各ユーザーにテスト用アカウントを配布し、以下の各種のテスト計算を行ってきた。

##### ① CPU計算

単CPU用のCプログラム（倍精度浮動小数点で数値積分をして、約30MBのテキスト形式ファイルを出力）を走らせてみた。比較対象のXeon E-2126 (3.3-4.5GHz, 6コア<sup>4)</sup>)で1008秒 (timeコマンドにて計測。計算コアの速度は4.2GHz) にかかるのに対して473秒 (計算コアの速度は3.6GHz) と1コアでの性能としては一世代前のCPUと比べて約2倍の速さであった。

##### ② MPI (CPU)

個別要素法粒子シミュレーションコードLIGGGHTS<sup>5)</sup>を導入し、CPUメニーコアでのMPI計算をテストした。24CPUを全部使用した場合、Core i7の数倍程度の速度が出るようである。また、MPIのスケラビリティについてもテスト中である。

##### ③ GPU

CUDA環境はプレインストールされているが、ユーザーごとに使用環境が異なるため、ユーザーレベルで

Anaconda等をインストールして利用することにする。テスト環境として、miniconda3 + Pythorch<sup>6)</sup>のインストールと、multi-gpuでの動作テストを行った。

#### 5. まとめと今後

現在は、テスト計算の途中でストレージが不足するという不測の事態が起き、ユーザー用のディレクトリ構成の見直しをすると同時に、令和4年度中に本体内への増設、もしくは予備のストレージを導入する計画である。計算環境としては、今後OpenFOAM<sup>7)8)</sup>等の数値計算パッケージを用意するとともに、マシンタイム・ストレージ使用等のルール作りとマニュアル整備等をしてユーザビリティを高める。

また、学部生・大学院生を含む研究者への説明会・講習会の開催も計画し、ユーザーの開拓に努めていく予定である。

参考文献とノート（ウェブページは2022年1月現在閲覧可能）

- 1) 畠山唯達, 長谷輝章, 河野敏行, 既存の教育用計算機を用いたクラスタコンピューティング環境の構築: I. 起動に関する諸問題と解決, 岡山理科大学情報処理センター研究報告, 27, 9-16, 2006
- 2) AMD EPYC™ 7413 データシート, <https://www.amd.com/ja/products/cpu/amd-epyc-7413>
- 3) NVIDIA A100 Tensor コア GPU データシート, <https://www.nvidia.com/ja-jp/data-center/a100/>
- 4) インテル® Xeon® E-2126G プロセッサ, <https://www.intel.co.jp/content/www/jp/ja/products/sku/134863/intel-xeon-e2126g-processor-12m-cache-up-to-4-50-ghz/specifications.html>
- 5) CFDDEM® project, LIGGGHTS® Open Source Discrete Element Method Particle Simulation Code, <https://www.cfdem.com/liggghtsr-open-source-discrete-element-method-particle-simulation-code>
- 6) PyTorch webpage, <https://pytorch.org/>
- 7) The OpenFOAM Foundation, <https://openfoam.org/>
- 8) 最近 (2022年2月) の議論がこの程度ということからも、GPUによる (倍精度の) 流体計算はあまり現実的ではないのかも知れない。ただし、「A100は実用的」というコメントもある。“GPU acceleration in mainstream CFD solvers”, <https://www.cfd-online.com/Forums/hardware/241334-gpu-acceleration-mainstream-cfd-solvers.html>

## Installation of a new GPGPU machine in Institute of Frontier Science and Technology:

Tadahiro HATAKEYAMA<sup>\*</sup>, Syou MAKI<sup>\*</sup>, Kenya KUWAGI<sup>\*\*</sup>, Akira UEJIMA<sup>\*\*</sup>,  
Toshiyuki KONO<sup>\*\*\*</sup>, Kazumasa OHKUMA<sup>\*\*\*\*</sup> and Masaharu HIROTA<sup>\*\*\*</sup>

*<sup>\*</sup>Institute of Frontier Science and Technology, Okayama University of Science,*

*<sup>\*\*</sup>Faculty of Engineering, Okayama University of Science*

*<sup>\*\*\*</sup>Faculty of Information Science and Engineering, Okayama University of Science*

*<sup>\*\*\*\*</sup>Institute for the Advancement of Higher Education, Okayama University of Science*

*Ridai-cho, Kita-ku, Okayama-shi, Okayama 700-0005, Japan*

We have installed a new high performance computer in Insistute of Frontier Science and Technology, Okayama University of Science with involving a project of “General integration of science and engeneering with high performance computing” starting from 2022 FY. The machine has a 24 core CPU (AMD EPYC 7413) and two GPUs (NVIDIA A100) and now is in the test operations. We also plan to hold information sessions and workshops for researchers, including undergraduate and graduate students, in an effort to increase the users.

**Keywords:** high performance computing; GPGPU; AMD EPYC CPU; NVIDIA A100 GPU.