



OpenCAE symposium 2011

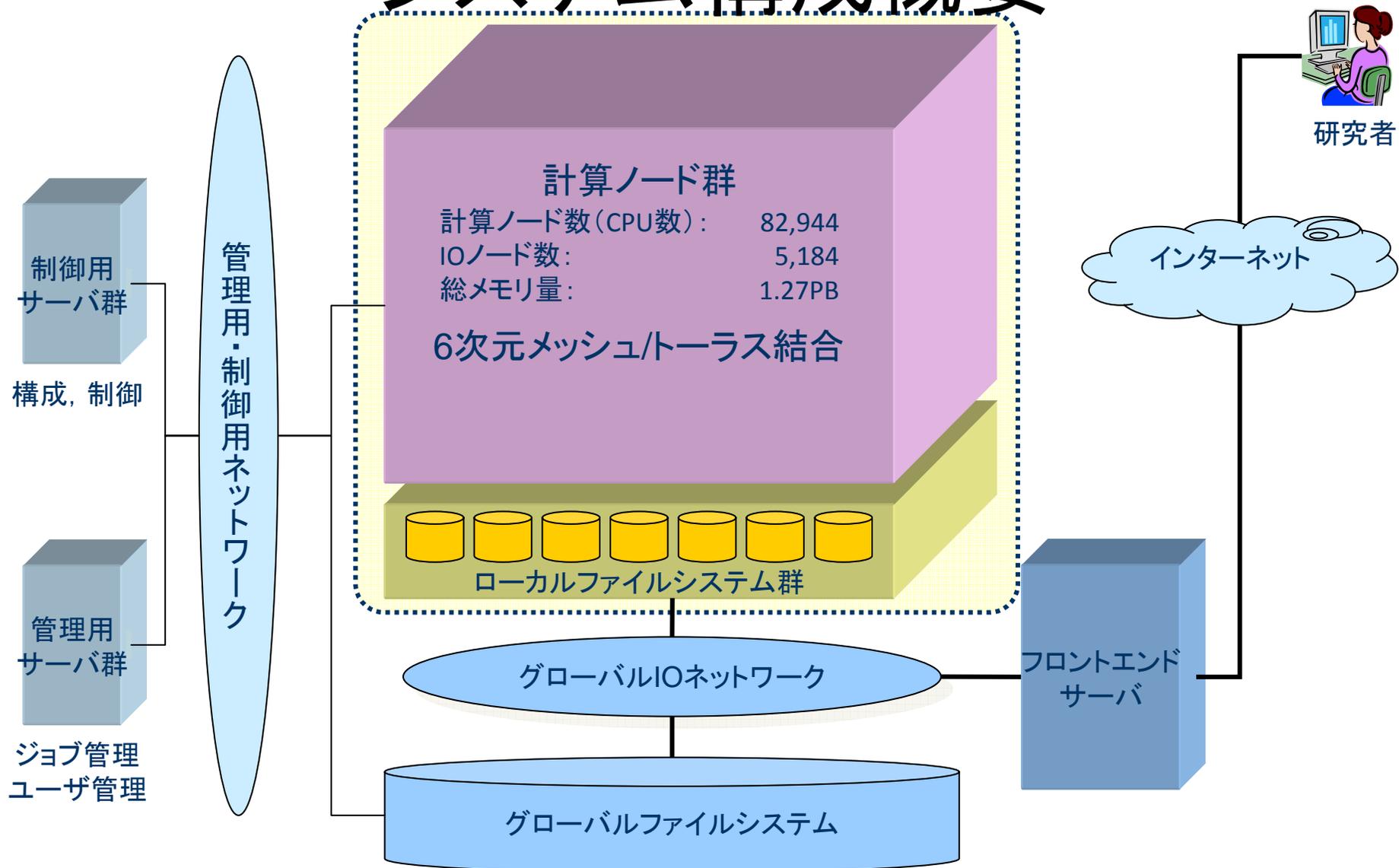
OpenFOAMによる「京」計算機施設 のシミュレーション

独立行政法人理化学研究所
計算科学研究機構 運用技術部
峯尾 真一



「京」計算機の概要

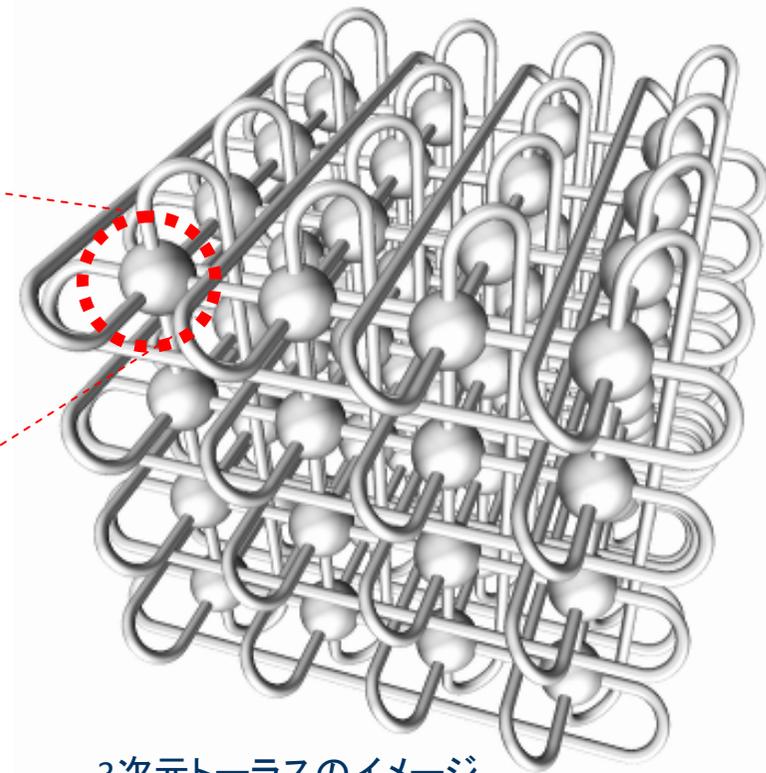
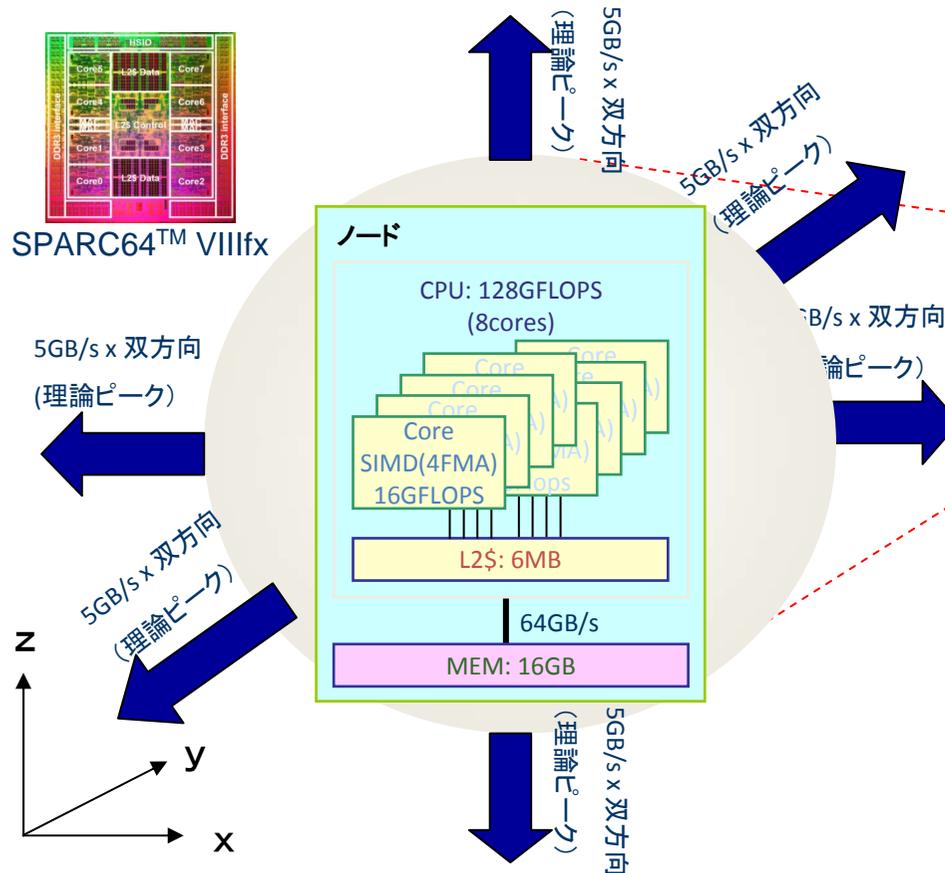
システム構成概要



計算ノード群の構成

- 計算ノード数(CPU数): 82,944
- ピーク演算性能: 10.6PFLOPS
(IOノードを含み11.3PFLOPS)
- メモリ総容量: 1.27PB(ノード当り16GB)

- 3次元メッシュ/トラスネットワーク: Tofu
 - ユーザ・ビューは3次元トラス
 - 帯域: 3次元の正負各方向にそれぞれ 5GB/s x 2(双方向)【理論ピーク】
 - ケーブル: 約200,000本, 約1000km



3次元トラスのイメージ

提供: 富士通(株)

計算科学研究機構

RIKEN AICS

計算科学研究機構の立地

兵庫県神戸市中央区港島南町7丁目(ポートアイランド第2期内)
京コンピュータ前駅より徒歩約3分, JR新神戸駅から25分



東京から西に450km



計算科学研究機構全景



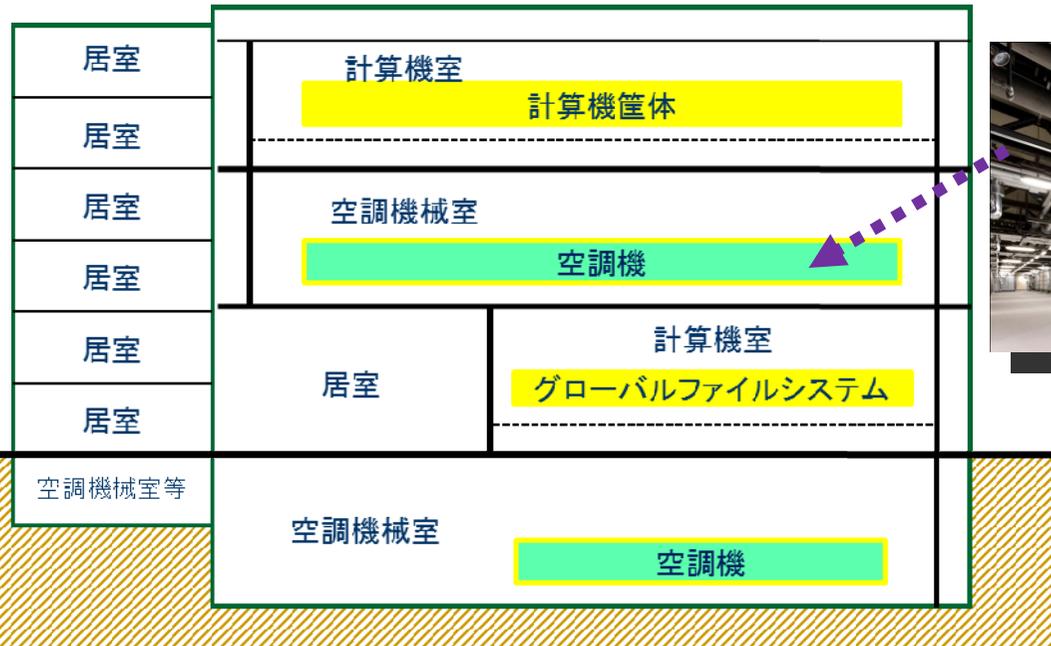
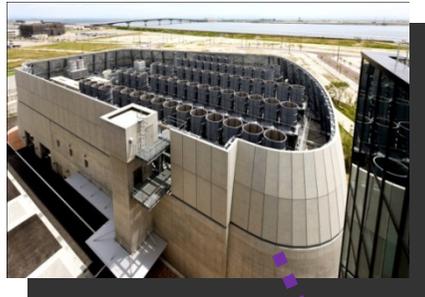
施設の概要

研究棟

- 地上6階, 地下1階(鉄骨造り)
- 建築面積 ~1,800m², 延床面積 ~9,000m²

計算機棟

- 地上3階, 地下1階(鉄骨造り)
- 建築面積 ~4,300m², 延床面積 ~10,500m²



熱源機械棟(面積 1900m²)

吸収式冷凍機
x 4

ターボ型冷凍機
x 3

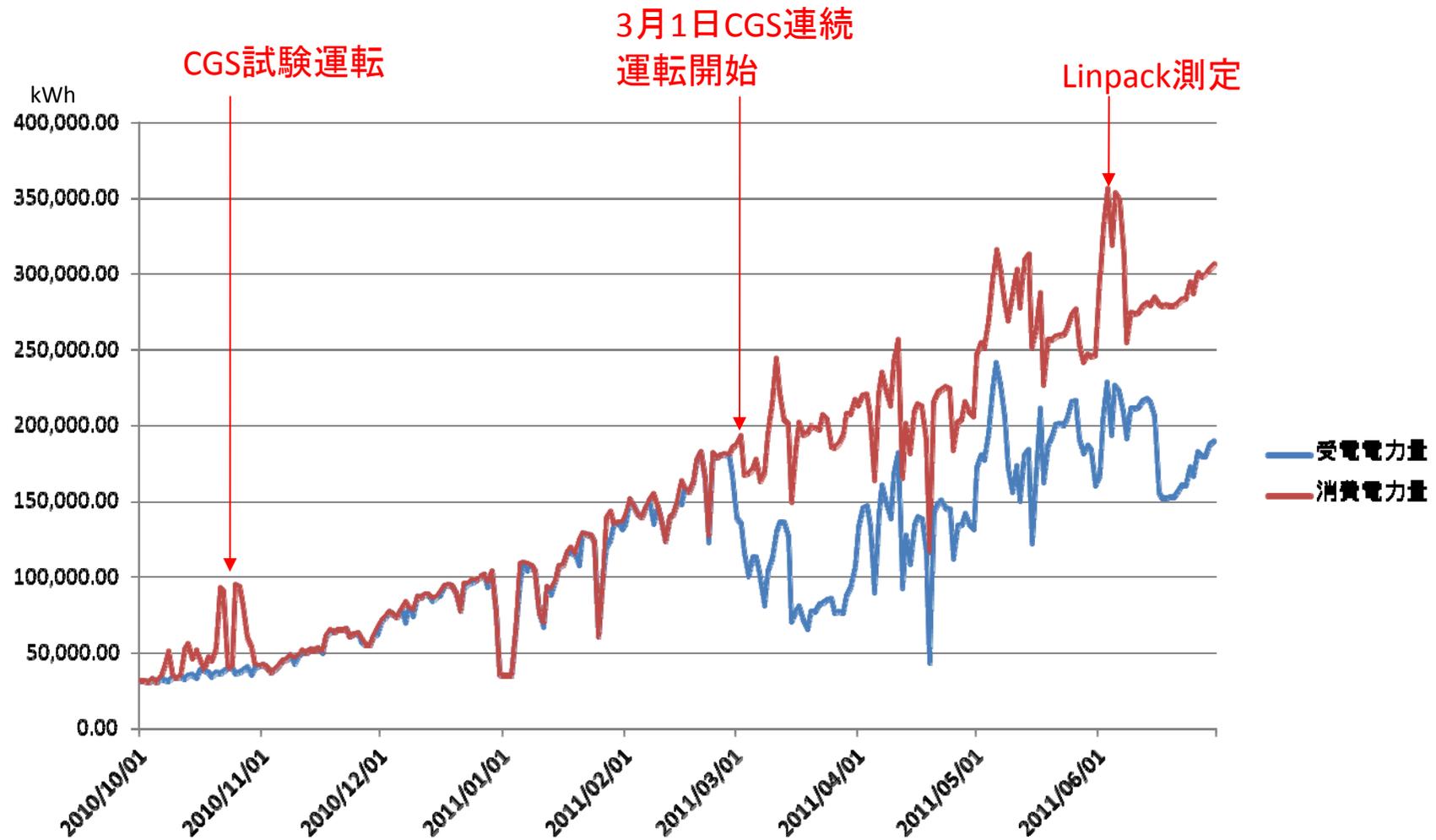
CGS
(6MW)
x 2

特別高圧変電施設(面積 200m²)

30MW
77,000V(受電)
→ 6,600V

AICS施設運転の歩み

日毎受電電力量推移



2011年6月「京」が世界最速達成

Rank	Site	Computer/Year Vendor	Cores	R _{max}	R _{peak}	Power
1	RIKEN Advanced Institute for Computational Science (AICS) Japan	K computer, SPARC64 VIIIfx 2.0GHz, Tofu interconnect / 2011 Fujitsu	548352	8162.00	8773.63	9898.56
2	National Supercomputing Center in Tianjin China	Tianhe-1A - NUDT TH MPP, X5670 2.93Ghz 6C, NVIDIA GPU, FT-1000 8C / 2010 NUDT	186368	2566.00	4701.00	4040.00
3	DOE/SC/Oak Ridge National Laboratory United States	Jaguar - Cray XT5-HE Opteron 6-core 2.6 GHz / 2009 Cray Inc.	224162	1759.00	2331.00	6950.60
4	National Supercomputing Centre in Shenzhen (NSCS) China	Nebulae - Dawning TC3600 Blade, Intel X5650, NVidia Tesla C2050 GPU / 2010 Dawning	120640	1271.00	2984.30	2580.00
5	GSIC Center, Tokyo Institute of Technology Japan	TSUBAME 2.0 - HP ProLiant SL390s G7 Xeon 6C X5670, Nvidia GPU, Linux/Windows / 2010 NEC/HP	73278	1192.00	2287.63	1398.61

TOP500 List – June 2011

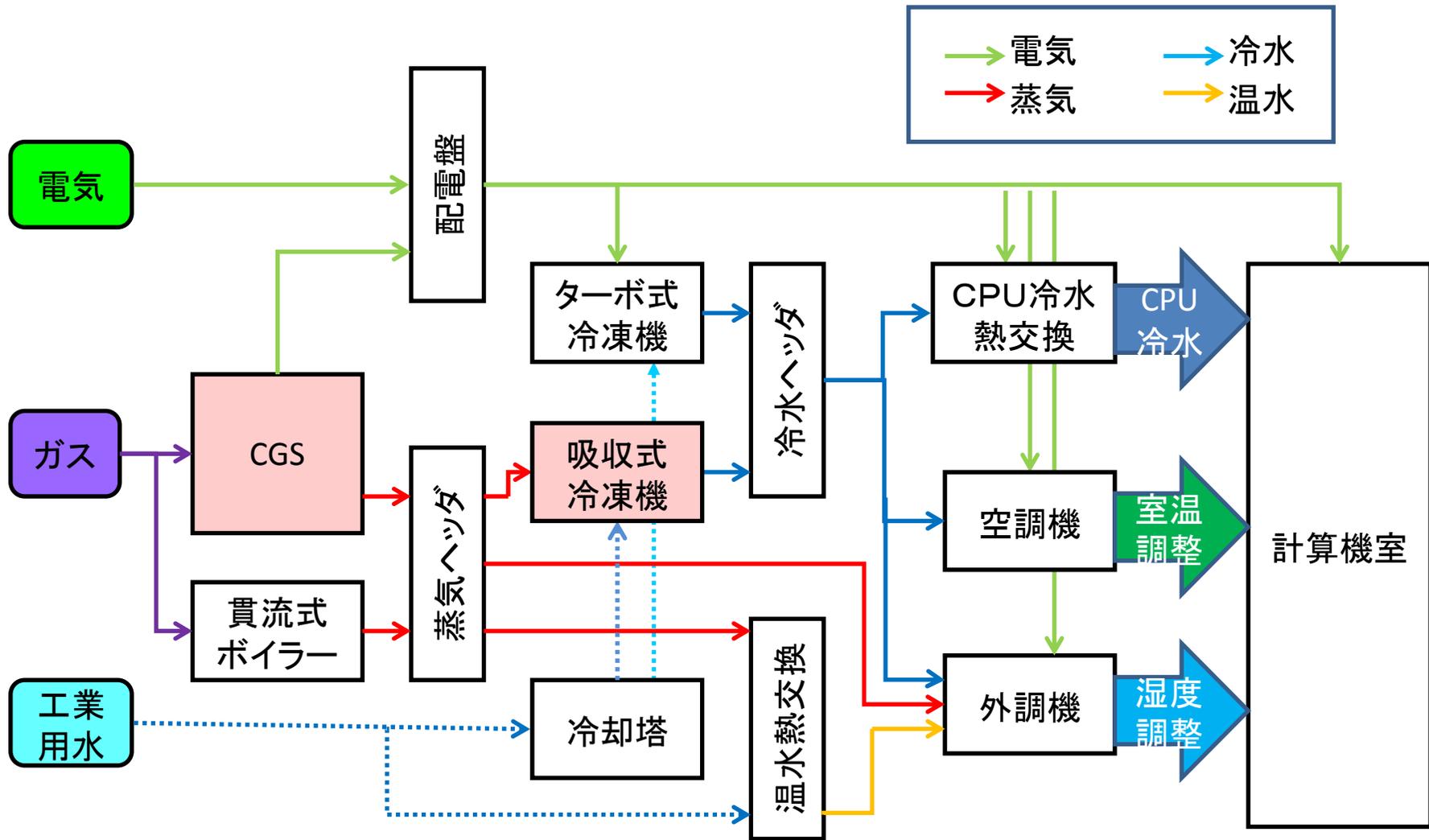
<http://www.top500.org/list/2011/06/100>

2011年11月「京」が再び世界最速

Rank	Site	System	Cores	Rmax (TFlop/s)	Rpeak (TFlop/s)	Power (Kw)
1	RIKEN Advanced Institute for Computational Science (AICS) Japan	K computer, SPARC64 VIIIfx 2.0GHz, Tofu interconnect Fujitsu	705024	10510.0	11280.4	12659.9
2	National Supercomputing Center in Tianjin China	Tianhe-1A - NUDT YH MPP, Xeon X5670 6C 2.93 GHz, NVIDIA 2050 NUDT	186368	2566.0	4701.0	4040
3	DOE/SC/Oak Ridge National Laboratory United States	Jaguar - Cray XT5-HE Opteron 6-core 2.6 GHz Cray Inc.	224162	1759.0	2331.0	6950
4	National Supercomputing Centre in Shenzhen (NSCS) China	Nebulae - Dawning TC3600 Blade System, Xeon X5650 6C 2.66GHz, Infiniband QDR, NVIDIA 2050 Dawning	120640	1271.0	2984.3	2580
5	GSIC Center, Tokyo Institute of Technology Japan	TSUBAME 2.0 - HP ProLiant SL390s G7 Xeon 6C X5670, Nvidia GPU, Linux/Windows NEC/HP	73278	1192.0	2287.6	1398.6

最適運用を目指して

AICS施設概念図



CGSを採用した理由

CGS:コジェネレーションシステム

- エネルギー源の多様化
 - 電気とガス(LNG)
 - LNGはSO_xを出さず地球環境にやさしい
- 常時自家発電による電力の安定供給
 - 最大6120kWx2台の発電能力
 - 大規模UPS不要
- エネルギー消費効率向上
 - 排熱利用の吸収式冷凍機1700USRTx4台
 - 実測最大総合効率83.2%

基本的な運用方針

- 計算機環境を適切に保ちつつ、光熱費コストを出来る限り削減する
- 通常期
 - 電力はCGS1台最大出力＋残りを電力事業者から
 - 吸収式冷凍機2台で冷熱源を賄う
- Linpack試験等の高負荷時および節電時
 - 受電電力一定制御＋残りをCGS2台で分担
 - 吸収式冷凍機3台で冷熱源を賄う

光熱費コスト削減の課題

1. 電気とガスの使い分けの難しさ

➤ 電気のコスト

- ① 電気料金=契約電力(最大需要電力)課金+従量課金
- ② 単価の変動(燃料費調整等)
- ③ 夏季の節電

➤ ガスのコスト

- ① ガス料金=契約単価の従量課金
- ② 契約単価= f{最大使用量,年間使用量,需要期使用量}

2. 変動要素の存在

- ① ジョブによる計算機の電力・熱負荷変動
- ② 外気(季節・日変化)によるCGS,冷却塔の効率変動

最適運転の課題

– 組み合わせの複雑性

- CGS2台、吸収式冷凍機4台、ターボ冷凍機3台、スクルーチラー1台、貫流式ボイラー1台の組み合わせによる最適な運転パターンを計算により求めたい。
- 「京」計算機用に50台ある空調機を最適稼働させたい。

– 機器連携の予測

- 夏季において、CGS1台に対して吸収式冷凍機2台を稼働すると蒸気不足になりターボ式の追加運転が必要となるので、その予測を行いたい。

– 運用手順の難しさ

- 吸収式冷凍機4台のローテーションを行う時に、冷水の循環量が不足し重故障警報が発生した。バイパス量を手動で調整し運転しているが、バイパスを多くすると送る冷水の温度が上昇してしまう。その日の条件で最適な運転切替シナリオを作成したい。

– 外気変化への対応

- CGSの送気蒸気量は十分あったが、吸収式冷凍機の冷却水の温度が、外気の温度・湿度条件で高くなったため、取り込む蒸気を自動的に絞ってしまい、冷却能力が足りなくなってプリアラームが発生した。この問題の予知を行い、ターボ式冷凍機の事前投入準備をしておきたい。

課題解決に必要なことは何か？

- 光熱費削減
 - 変動要素(外気・計算機負荷)を与えて、消費エネルギーとコストを簡単に計算できること
 - 最適運転
 - CGSと吸収式冷凍機の連携予測を正確に行うこと
 - 計算機室空冷の無駄を無くすために、計算機と空調機の運転パターンによるホットスポット解析を可能とすること
- 統合施設シミュレータ開発計画

統合施設シミュレータ

統合施設シミュレータ

- 統合施設シミュレータとは
 - 計算機と設備(冷却・空調・電源系)を含む全体を1つのエコシステムとして統合した施設のシミュレータ
 - プロセス制御と数値流体力学のシミュレーション技術を同時に活用
- その目的は
 - 運転計画の最適化
 - 運用ノウハウの蓄積
 - 設備不具合の解析と対処方法の検討
 - (将来的には)故障予測
 - 将来の計算センターの最適設計

統合施設シミュレータ開発計画

Phase1:H22年度

1. シミュレーションの可能性調査
2. CGSモデルの開発

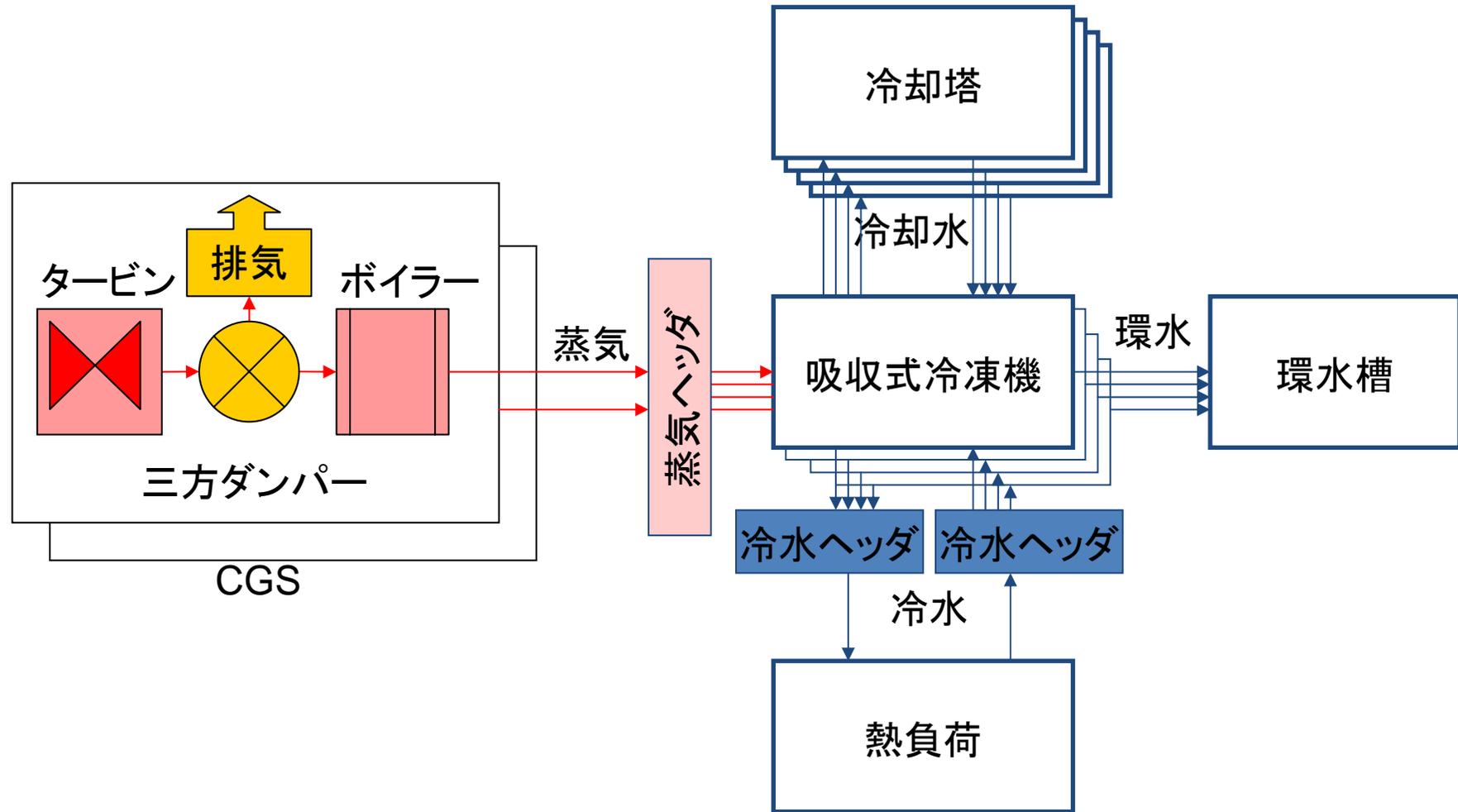
Phase2:H23年度

1. CGS-RH連携プロセスモデルの開発
2. 計算機室の数値流体力学モデルの開発

Phase3:H24年度以降

1. 施設全体プロセスモデルの統合とチューニング

CGS-RH連携プロセスモデル



MATLAB/Simulinkによる シミュレーション

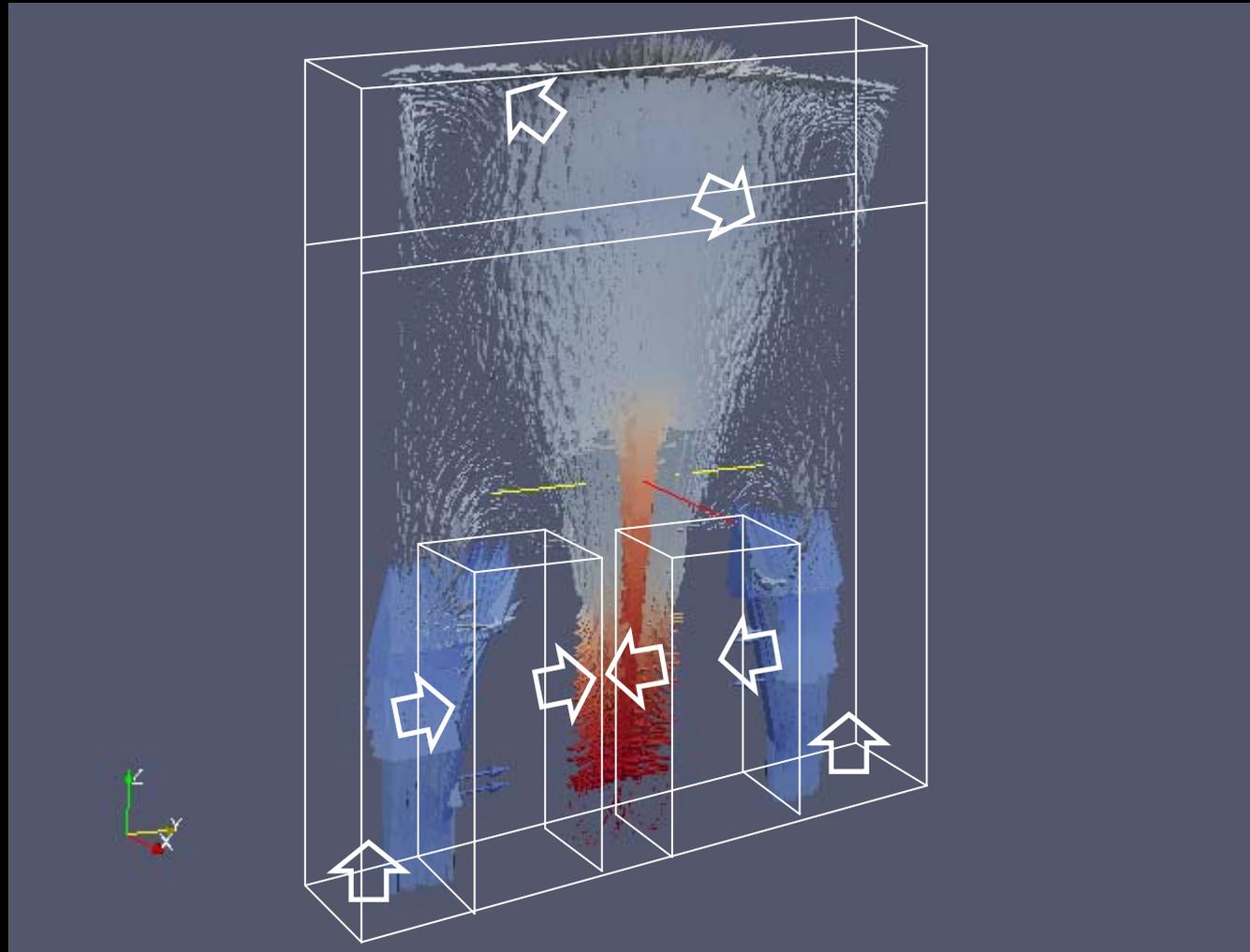
- CGSのモデル
 - 製造会社より入手
- 吸収式冷凍機のモデル
 - 一般的なLiBr溶液のサイクルでモデル化
- 冷却塔
 - 理論式からモデル化
- 時間応答シミュレーション
 - 蒸気や水の流路は時間遅れと無駄時間で模擬
 - 今後実際のデータを用いてチューニング予定
 - 運用計画のツールとしては、実時間シミュレーションである必要はなく、定常解を求めることができればよい

計算機室の数値流体力学モデル の開発

- 計算機室、床下空気チャンバー、空調機室の全てをモデル化
 - フロア面積3000m², 計算機ラック>800, 空調機50
 - Google Sketchupで形状入力
- 計算コードは目的別に二種類を用いる
 - バッチ処理用: OpenFOAM
 - リアルタイム処理用: LGM(開発中)

OpenFOAMによるシミュレーション(1)

2ラックの空気冷却



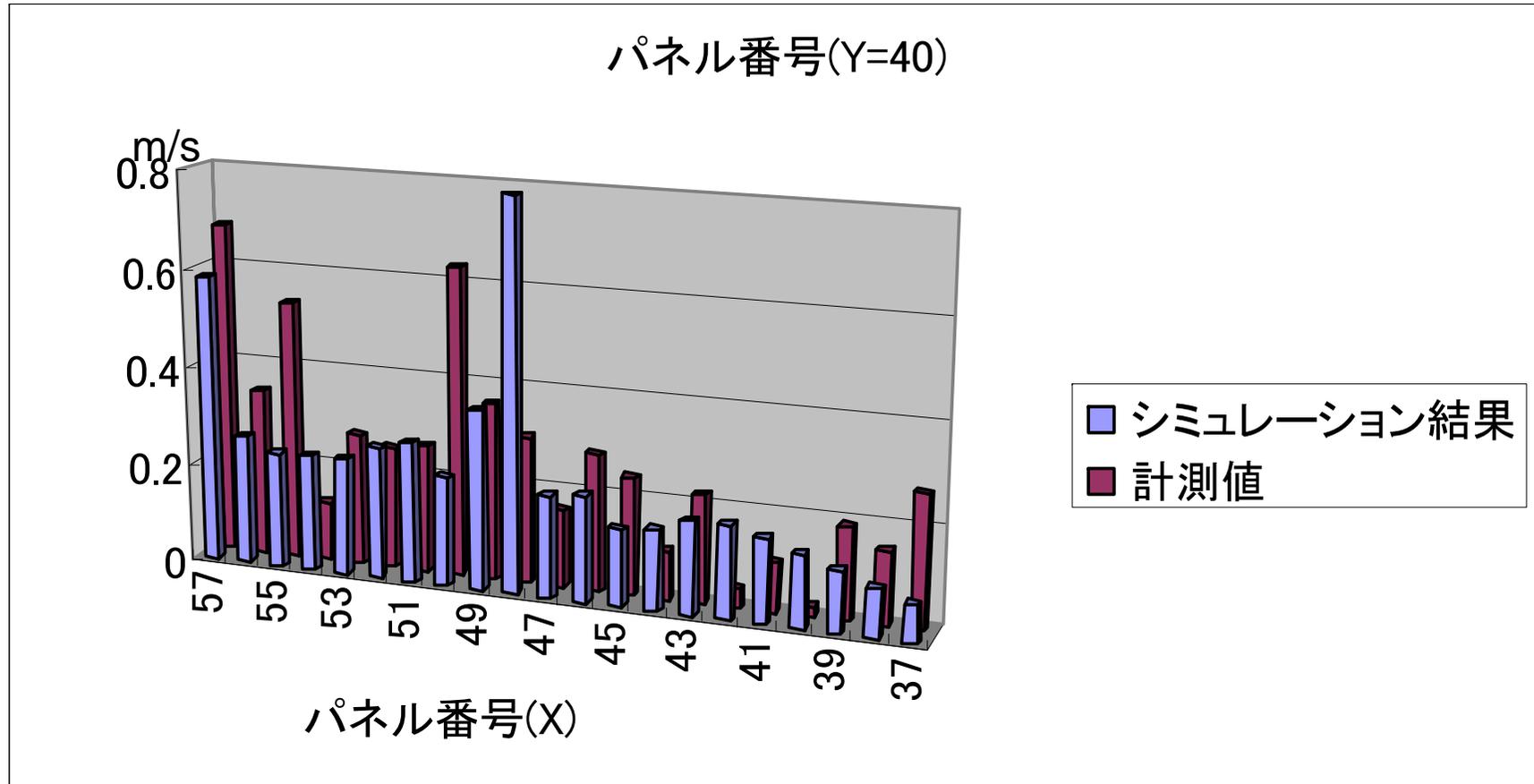
OpenFOAMによるシミュレーション(2)

搬入前の計算機室



2Fの空調機2台のみを稼動し、計算機室の空気の流れを計測した結果とシミュレーション結果を比較

シミュレーション結果と実測値の比較



OpenFOAMによるシミュレーション(3)

Linpack測定時

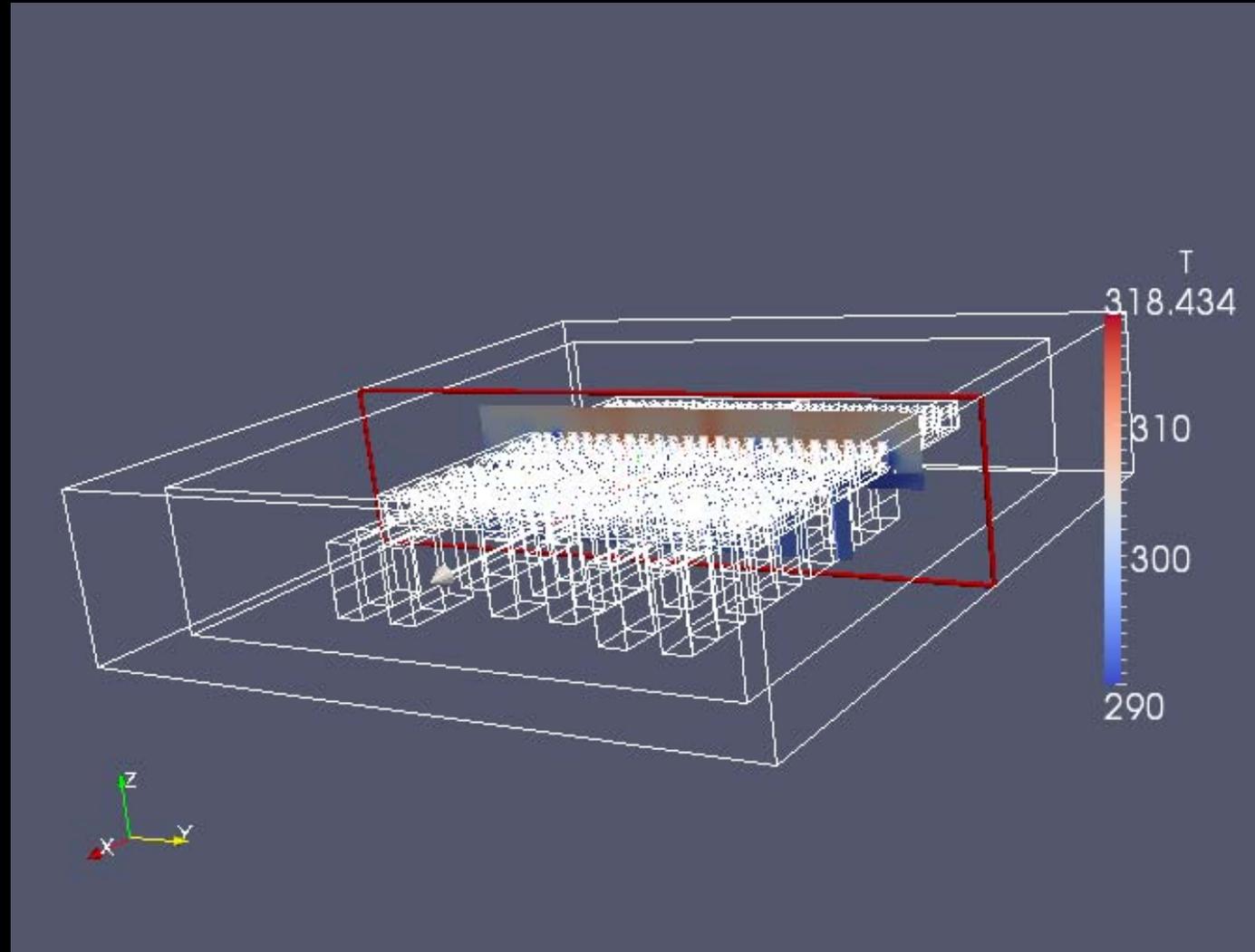


計算機棟3F計算機室

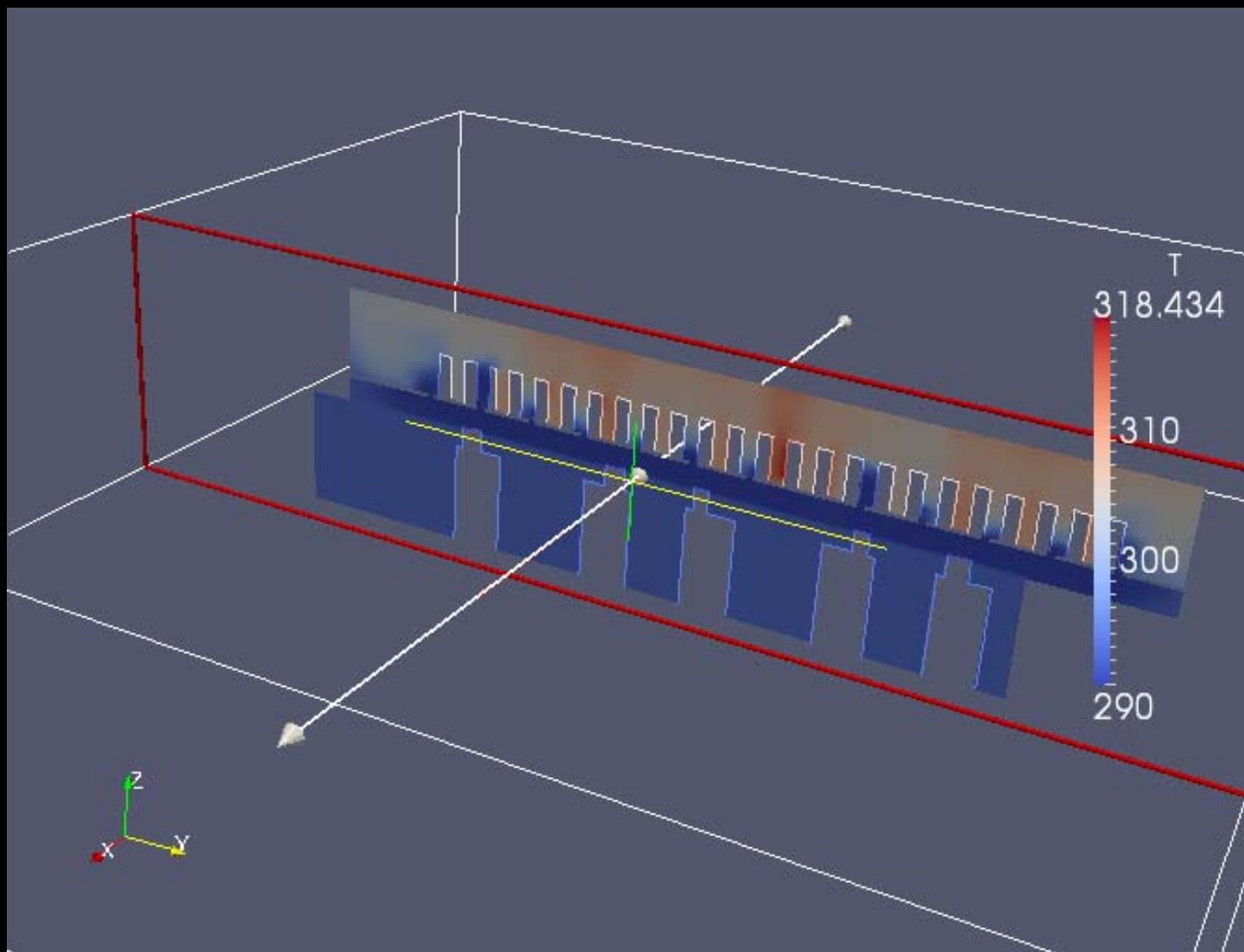
計算機棟2F空調機室



計算結果 Slice at x=16



計算結果 (温度分布)



ご清聴ありがとうございました