



東京大学
THE UNIVERSITY OF TOKYO

東京大学スーパーコンピュータの 企業による利用制度のご紹介

東京大学情報基盤センター

スーパーコンピューティング研究部門

<http://www.cc.u-tokyo.ac.jp/>

問合せ先: uketsuke@cc.u-tokyo.ac.jp

- 東大情報基盤センターについて
- サービス概要
- 企業による利用制度
 - 制度概略と利用提案
 - 申込・審査・成果報告
 - スパコン利用への道
 - ①お試しアカウント付き並列プログラミング講習会
 - ②トライアルユース制度
 - ③ 企業利用制度
- スーパーコンピュータシステム概要
 - Reedbush
 - Oakforest-PACS
 - Oakbridge-CX
 - Wisteria/BDEC-01
 - 運用
- ご質問は

東京大学情報基盤センター

- 沿革
 - 東京大学大型計算機センター(1965-1999)
 - 東京大学情報基盤センター(1999-)
 - 日本最古の学術大型計算機センター
- 学際大規模情報基盤共同利用・共同研究拠点の中核
 - 8大学の基盤センター群からなるネットワーク型の中核拠点
 - 大規模情報基盤(最先端スパコン、大容量ストレージ)の活用により、学際研究を発展、産業応用への展開
 - ・ 分野: 計算科学(素粒子物理、宇宙物理、物性、生命科学、地球環境)
計算工学(構造物解析、材料・・)、バイオ、経済
 - シミュレーションベース + データサイエンス
- 日本のHPCI(High-Performance Computing Infra)の中核



東京大学情報基盤センター

スーパーコンピューティング部門 (1/2)

- 研究

- 教員数11名(兼任・客員含む)
- システムソフトウェア, 数値アルゴリズム, 自動チューニング
- 利用者との共同研究, JHPCN(共同利用・共同研究拠点)
- 国内・国際プロジェクト(次ページ)

- 普及・人材育成

- 学際計算科学・工学人材育成プログラム, 計算科学アライアンス
 - 全学的なHPC(High-Performance Computing)教育
- お試しアカウント付き講習会(Reedbush, Oakforest-PACS)
- 若手・女性育成制度
- RIKEN AICS Summer/Spring School 共催

- 広報活動

- スーパーコンピューティングニュース(年6回＋特集号)

東京大学情報基盤センター

スーパーコンピューティング部門(2/2)

- 研究プロジェクト
 - Framework and Programming for Post Petascale Computing (FP3C) (JST-ANR, 2010-13)
 - 日仏共同プロジェクト, T3K(T2K+東工大)
 - 将来のHPCIシステムのあり方の調査研究(文科省, 2012-13)
 - ppOpen-HPC(JST-CREST, 2011-15)
 - ESSEX-II (JST/DFG-SPPEXA, 2016-2018) 日独共同
 - 理化学研究所共同研究(ポスト京)(2014-)
- 国内
 - 学際大規模情報基盤共同利用・共同研究拠点(JHPCN)(中核拠点)(2010-)
 - HPCIコンソーシアム(資源提供機関)(2012-)
- 国際協力(非居住者:利用手続き簡略化, ホワイト包括)
 - Lawrence Berkeley National Laboratory (USA)
 - 國立臺灣大學(2015・2016年冬季講習), 國立中央大學(台湾)
 - Intel Parallel Computing Center (IPCC)

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)

文部科学省委託事業

<http://www.hpci-office.jp/>

情報基盤センター群以外の会員リスト

- 使命: 我が国における
 - 計算資源(スパコン,
大規模ストレージ(東西拠点))
 - 計算科学推進(HPCI戦略プログラム
⇒ポスト京重点課題)
- HPCIコンソーシアム(2012～)
 - HPCI計算資源運用
 - 産官学
 - 資源提供者・利用者によるコミュニティ
 - 2012年度発足

一般社団法人日本流体力学会
財団法人計算科学振興財団
特定非営利活動法人バイオグリッドセンター関西
自然科学研究機構核融合科学研究所
スーパーコンピューティング技術産業応用協議会
神戸大学
東京大学物性研究所計算物質科学研究センター計算物質科学イニシアティブ(分野2「新物質・エネルギー創成」)
東京大学生産技術研究所(分野4「次世代ものづくり」)
計算基礎科学連携拠点(分野5「物質と宇宙の起源と構造」)
名古屋大学 太陽地球環境研究所
独立行政法人宇宙航空研究開発機構宇宙科学研究所
独立行政法人海洋研究開発機構
一般社団法人日本計算工学会
計算生命科学ネットワーク
国立研究開発法人理化学研究所計算科学研究機構
高エネルギー加速器研究機構 共通基盤研究施設・計算科学センター
情報・システム研究機構 国立情報学研究所
一般財団法人高度情報科学技術研究機構
筑波大学 計算科学研究センター
大阪大学 核物理研究センター
国立研究開発法人産業技術総合研究所 情報技術研究部門
東京大学 物性研究所
東北大学 金属材料研究所
情報・システム研究機構 統計数理研究所
自然科学研究機構分子科学研究所 計算科学研究センター
独立行政法人宇宙航空研究開発機構 情報計算工学センター

HPCI第2階層システム 運用 & 整備計画 (2020年11月時点)

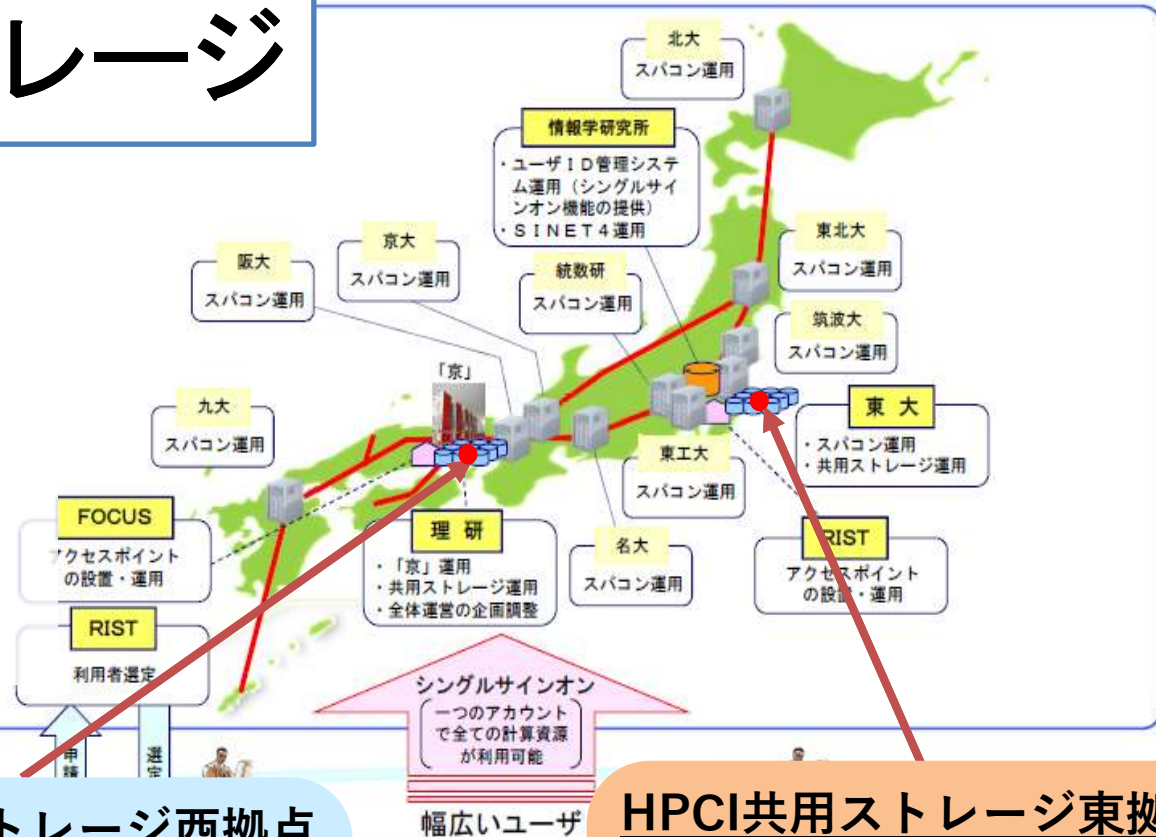
Fiscal Year	2016	2017	2018	2019	2020	2021	2022	2023	2024	2025	2026	2027	
Hokkaido	 HITACHI SR16000/M1 (172TF, 22TB) Cloud System BS2000 (44TF, 14TB) Data Science Cloud / Storage HA8000 / WOS7000 (10TF, 1.96PB)	High performance inter cloud Fujitsu CX2550 M4, CX400 M4 (3.08PF, 377TB) Fujitsu CX1640 M1, CX600 M1 (0.87PF, 32TB) Fujitsu CX2550 M4, CX400 M4, RX2540 M4 (0.24PF)				4.2PF 1MW		35 PF (UCC + CFL-M) 2MW					
Tohoku		SX-ACE(707TF,160TB, 655TB/s) LX406e(31TF), Storage(4PB), 3D Vis, 2MW				~30PF, ~15PB/s Mem BW (CFL-D/CFL-M) ~3MW			SX-Aurora TSUBASA(1.5PF,46.1TB, 910.7TB/s) LX406Rz-2(278.5TF), Storage(2PB)		1.8PF, 0.5MW		100+ PF (CFL-D/CFL-D) ~4 MW
Tsukuba		HA-PACS(1166TF)	PPX1 (62TF)	Cygnus 2.4PF (TPF) 0.2MW				PACS-XI 100PF (TPF)					
Tokyo		COMA (PACS-IX) (1001 TF)		Oakforest-PACS (OFF) 25 PF (UCC + TPF) 3.2 MW			Post OFF 100+ PF 4.5-6.0MW (UCC + TPF)						
		Fujitsu FX10 (Oakleaf/Oakridge) (1.27PF/s, 168TB, 460 TB/s)		Oakbridge-CX (UCC) 6.61 PF 0.95MW			mdx 17+ PF (FAC/UCC+ TPF) 2.0MW				200+ PF (FAC+TPF) 6.5-8.0MW		
		Reedbush-U/H: 1.92 PF (FAC) 0.7MW (Reedbush-UIは2020年6月末まで)		Reedbush-L1.4 PF (FAC) 0.2 MW			BDEC 30+ PF (FAC/UCC+ TPF) 4.5MW						
		Hitachi SR16KM1 (54.9 TF, 10.9 TB, 28.7 TB/s)											
Tokyo Tech.		TSUBAME 3.0 (12.15 PF, 1.66 PB/s) 0.9MW				TSUBAME 4.0 (30 PF, 4PB/s) (UCC+TPF+CFL-D) 0.9~1.5MW							
		TSUBAME 2.5 (5.7 PF, 110+ TB, 1160 TB/s), 1.4MW											
Nagoya		Fujitsu FX100 (2.9PF, 81 TiB)		Fujitsu CX400 (774TF, 71TiB)		(542TF, 71TiB)		~20 PF (FAC/UCC + CFL-M) up to 3MW		100+ PF (FAC/UCC+CFL-M) up to 3MW			
		2MW in total											
Kyoto		Cray XE6 + GB6K XC30 (983TF)		Cray XC40(5.5PF) + CS400(1.0PF) 1.33 MW			15-20+ PF (FAC/TPF + UCC) 1.7 MW			80-150+ PF (FAC/TPF + UCC) 2 MW			
		Cray XC30 (584TF)											
Osaka		NEC SX-ACE NEC Express5800 (423TF) (22.4TF)		OCTPUS 1.463PF (UCC)			10~20Pflop/s, 1.0-1.5MW (CFL-M)		25.6 PB/s, 50-100Pflop/s (TPF) 1.5-2.0MW				
									OCTOPUS NEXT 5Pflop/s				
Kyushu		HA8000 (712TF, 242 TB) SR16000 (8.2TF, 6TB) FX10 (272.4TF, 36 TB) CX400 (966.2 TF, 183TB)		2.0MW		Fujitsu PRIMERGY CX subsystem A + B, 10.4 PF (UCC/TPF) 2.7MW		100+ PF (FAC/TPF + UCC/TPF) ~3MW					
				FX10 (90.8TFLOPS)									
JAMSTEC		SX-ACE(1.3PF, 320TiB) 3MW				~100PF, ~3MW							
ISM		UV2000 (98TF, 128TiB) 0.3MW					2PF, 0.3MW						

電力は最大供給量(空調システム含む)

HPCI共用ストレージ

- 文科省委託費
- 東拠点(東京大学
柏キャンパス)50PB
- 西拠点(理研R-CCS)
50PB

ストレージ



HPCI共用ストレージ西拠点 理研R-CCS・神戸

- データストレージ (総容量 50 PB)
- メタデータサーバ 2 台
- メタデータサーバ 2 台



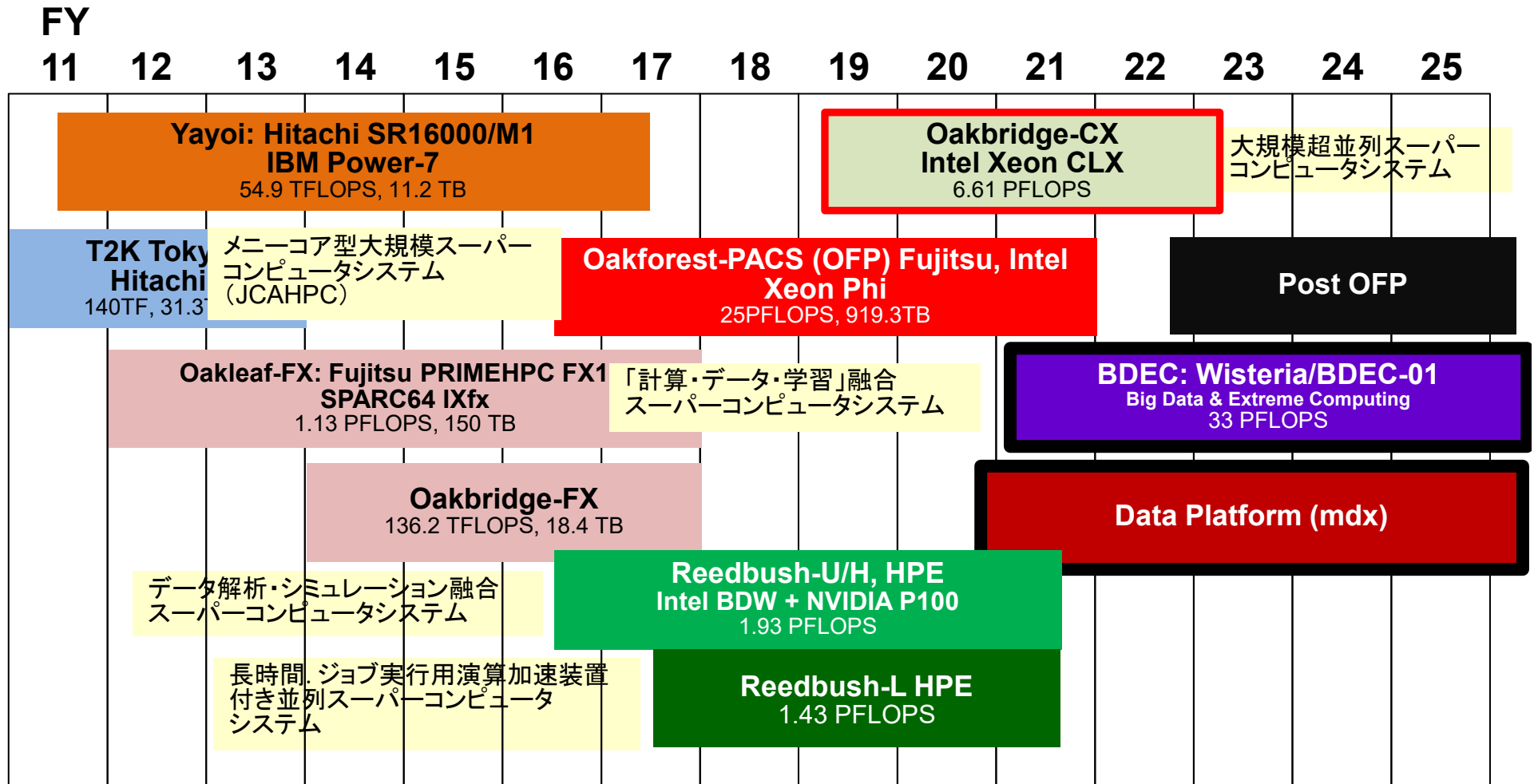
HPCI共用ストレージ東拠点 東京大学・柏キャンパス

- データストレージ (総容量 50 PB)
- メタデータサーバ 2 台
- 大容量メモリサーバ、GPUサーバ等



東大センターのスパコン

2基の大型システム, 6年サイクル(?)



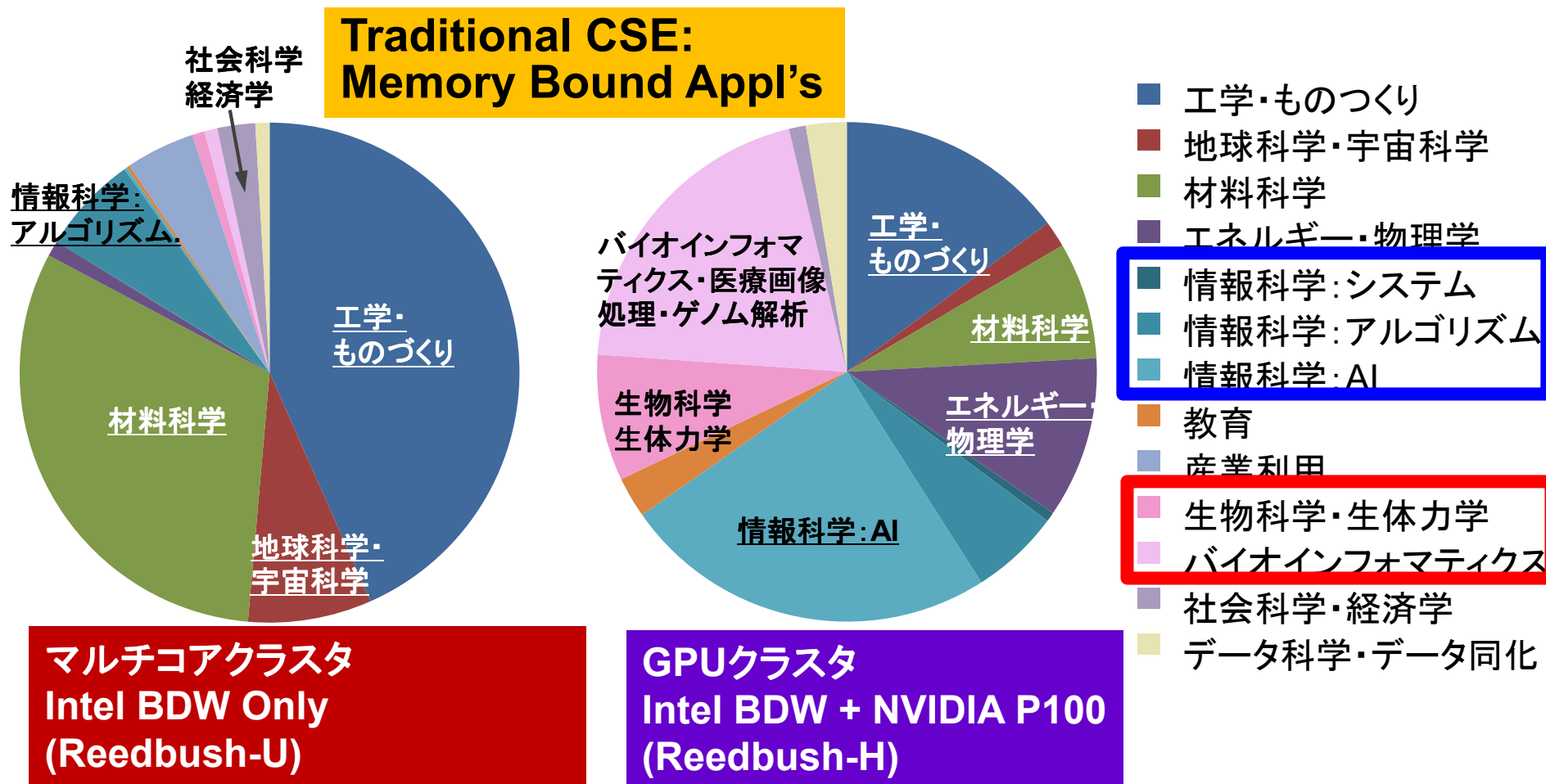
3システム：利用者2,600+, 学外55+%

- Reedbush (HPE, Intel BDW + NVIDIA P100 (Pascal))
 - データ解析・シミュレーション融合スーパーコンピュータ
 - 3.36 PF, 2016年7月～2021年11月末(予定)
 - Reedbush-U (CPU only, 2020年6月30日で退役)
 - Reedbush-H (2GPU's/n), Reedbush-L (4GPU's)
 - 東大ITC初のGPUシステム (2017年3月より), DDN IME (Burst Buffer)
- Oakforest-PACS (OFP) (富士通, Intel Xeon Phi (KNL))
 - JCAHPC (筑波大CCS & 東大ITC)
 - 25 PF, **TOP500で22位(日本4位)(2020年11月)**
 - Omni-Path アーキテクチャ, DDN IME (Burst Buffer)
- Oakbridge-CX (富士通, Intel Xeon Platinum 8280)
 - 大規模超並列スーパーコンピュータシステム
 - 6.61 PF, 2019年7月～2023年6月, **TOP500で69位(2020年11月)**
 - 全1,368ノードの内128ノードにSSDを搭載



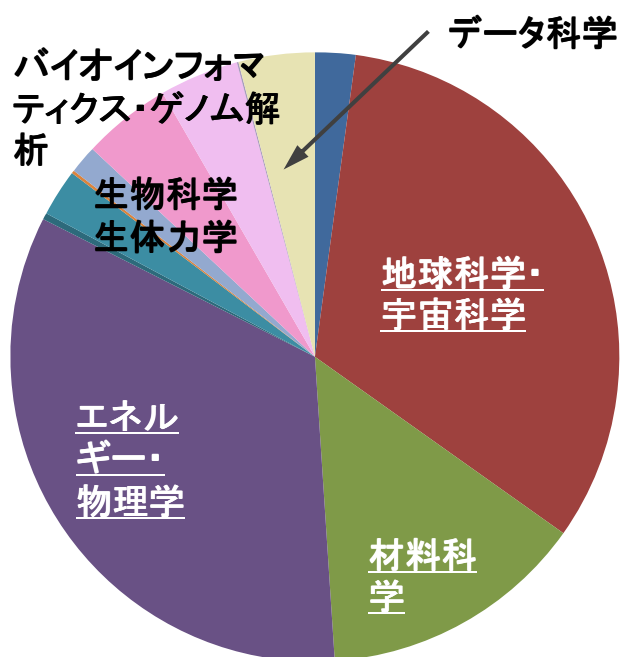
研究分野別利用CPU時間割合 (2019年度)

11

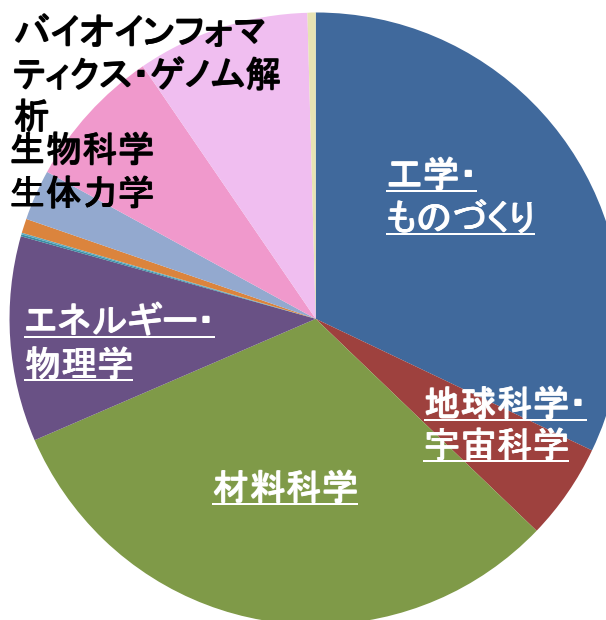


研究分野別利用CPU時間割合 (2019年度)

OBCXは2019年10月～2020年9月末(12ヶ月)



メニコアクラスタ
Intel Xeon Phi
(Oakforest-PACS)



マルチコアクラスタ
Intel CLX
(Oakbridge-CX)

- 工学・ものづくり
- 地球科学・宇宙科学
- 材料科学
- エネルギー・物理学
- 情報科学:システム
- 情報科学:アルゴリズム
- 情報科学:AI
- 教育
- 産業利用
- 生物科学・生体力学
- バイオインフォマティクス
- 社会科学・経済学
- データ科学・データ同化

Traditional CSE:
Memory Bound Appl's

Society 5.0: 日本が提唱する未来社会のコンセプト

13

- デジタル革新・イノベーション(IoT, AI, ビッグデータ等)により,
サイバー空間(仮想)とフィジカル空間(現実)を高度に融合させ
たシステムを構築し, 経済発展と社会的課題の解決を両立する,
超スマートな人間中心の社会



スーパーコンピューティングの 今後の動向

- ワークロードの多様化

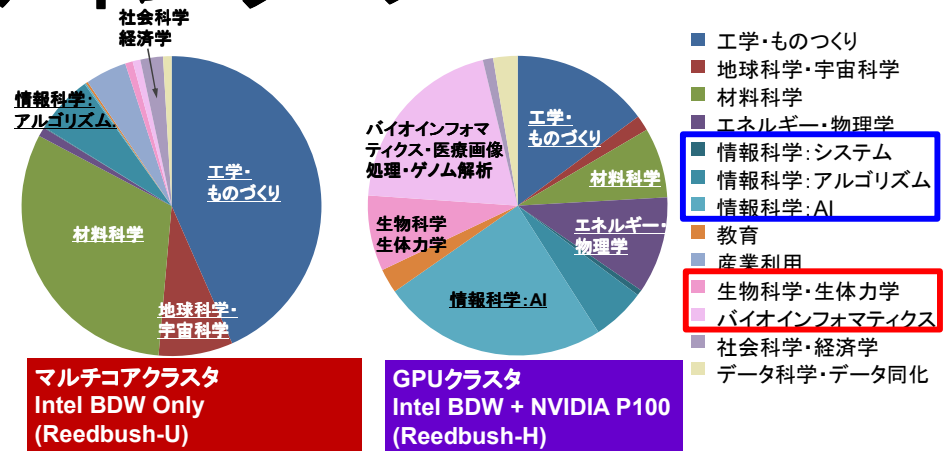
- 計算科学, 計算工学:
Simulations
- 大規模データ解析
- AI, 機械学習

- (シミュレーション(計算) + データ + 学習) 融合
⇒ **Society 5.0** 実現に有効

- サイバー空間とフィジカル空間の融合
- **AI for HPC**

- 柏第IIキャンパスに新しい
プラットフォームを導入(2021年春)

- BDEC (Big Data & Extreme Computing): スパコン
- Data Platform (mdx): Cloud的



BDEC: **S** + D + L

mdx: s + **D** + L

建物

- 浅野キャンパス

- Reedbush(2021年11月末退役予定)
- 2021年3月で情報基盤センターは柏川に移転(改築)

- ・ 柏キャンパス(第二総合研究棟)

- 1F: Oakbridge-CX
- 2F: Oakforest-PACS

- 柏川キャンパス

- 情報基盤センター(2021年4月～、国立情報学研究所と合築)
 - 学術高速大容量ネットワーク 拠点整備構想知識集約型社会に向けた基盤整備
 - NIIと東大センター(スパコン・ネットワーク)による拠点形成
- mdx: データ活用社会創成プラットフォーム(2021年3月以降運用開始)
- Wisteria/BDEC-01システム(2021年5月以降運用開始)
 - 両者は同じ「部屋」に設置



- 東大情報基盤センターについて
- サービス概要
- 企業による利用制度
 - 制度概略と利用提案
 - 申込・審査・成果報告
 - スパコン利用への道
 - ①お試しアカウント付き並列プログラミング講習会
 - ②トライアルユース制度
 - ③ 企業利用制度
- スーパーコンピュータシステム概要
 - Reedbush
 - Oakforest-PACS
 - Oakbridge-CX
 - Wisteria/BDEC-01
 - 運用
- ご質問は

教育・人材育成(1/2)

- お試しアカウント付き並列プログラミング講習会
 - 現在Oakbridge-CX を利用した講習会を企画中
 - 既存利用者に限定せず，企業の技術者・研究者も受講可能
 - ✓ 受講者の3分の2以上は企業から受講：裾野拡大に大きな貢献
 - ✓ PCクラスタコンソーシアム(実用アプリケーション部会)と共催
 - 1～2日間の講習，1ヶ月有効な「お試しアカウント」
 - ✓ MPI基礎，MPI応用(並列有限要素法)，マルチコアプログラミング
 - ✓ ライブラリ利用(センター教員開発のライブラリ普及)，OpenFOAM
 - ✓ Altair HyperWorks実行，Altair ultraFluidX入門
- 学部・大学院・高専の講義での利用(学外含む)
 - 提案書ベース，無料，専用のバッチジョブキュー
 - 年10件程度(うち2～3は学外から)，センター教員の講義

講習会

<https://www.cc.u-tokyo.ac.jp/events/lectures/>

- 第150回 2021年3月2・9・22・26日
並列有限要素法で学ぶ並列プログラミング徹底入門
- 第149回 2021年1月19日
OpenFOAM中級
- 第148回 2020年12月22日
OpenACCとMPIによるマルチGPUプログラミング入門
- 第147回 2020年12月25日
GPUプログラミング入門
- 第146回 2020年12月1日
有限要素法で学ぶ並列プログラミングの基礎
- 第145回 2020年11月10日
一日速習:有限要素法プログラミング徹底入門
- 第144回 2020年11月6日
一日速習:並列有限要素法とハイブリッド並列プログラミング
- 第143回 2020年11月2日
OpenMPIによるマルチコア・メニコア並列プログラミング入門
- 第142回 2020年10月26日
MPI上級編

OBCX & OFP

OFP

Reedbush

教育・人材育成(2/2)

- 若手・女性支援
 - 40歳以下(女性は年齢制限無し): 無料でOakbridge-CX, Oakforest-PACS, Reedbush, Wisteria/BDEC-01 を使用可能
 - 公募型(年2回, 各半年間, 連続して2回応募可能⇒1年間無料)
 - 学生を対象とした「インターンシップ」制度, グループ制度
 - <https://www.cc.u-tokyo.ac.jp/guide/young/>
- 計算科学アライアンス(2014～)
 - 学際的研究の拠点, 全学的なHPC教育プログラムの策定
 - H28概算要求(正式に始動), 関連部局
 - Double Degreeを見据えた横断型・学際型プログラム
 - 情報理工学系・理学系・情基セの協力が元になっている
 - <http://www.compsci-alliance.jp/>

計算科学アライアンス: 自然・社会科学と情報科学の連携教育研究

背景

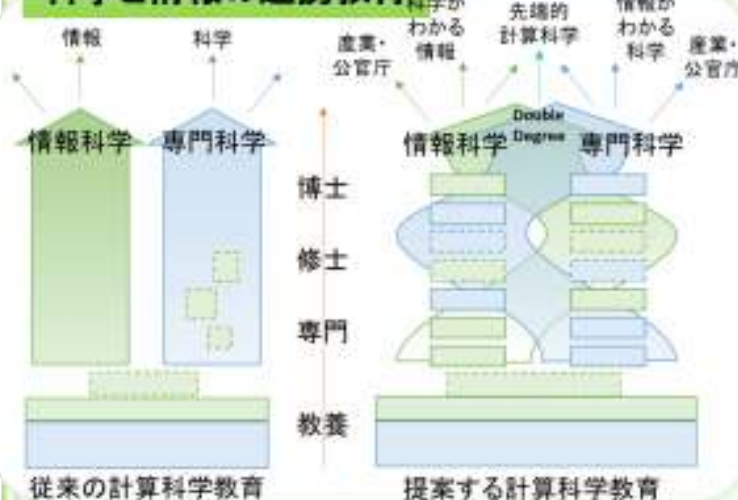
- 多数の社会活動・学術分野で計算科学・情報の知見の必要度が増大
しかし、計算科学、自然科学、情報科学が専門分化して俯瞰力が低下
- 計算科学ソフトウェアが高度化・大規模化する中、並列処理など
計算効率の原理が変化
- 海外ソフトの利用が多く、中国・ブラジルなど新興国も追い上げ、
ポスト京アプリ開発が始動するも、国産ソフト開発・競争力強化が必要
- 企業もシミュレーションを重要視しているが、企業内の専門家はわずか

目的

- 自然・社会科学と情報科学を俯瞰した標準教育体系を整備
- 大規模ソフトウェア、並列計算などの手法を教える
- 国産シミュレーションソフトの開発力・競争力を強化
- 企業のシミュレーション能力・活用を向上する人材を育成

提案: 計算科学アライアンス

科学と情報の連携教育



自然・社会科学と情報科学が連携して 計算科学の体系的教育・人材育成を行う

- 柔軟なコース設計: 4学期・国際化対応
- 学部から大学院まで、習熟度別・英才教育
- キャリアパス整備: 企業へのアピール

英才教育

- 自然・社会科学とソフト・ハード・計算を
横断・俯瞰して理解・活用できる人材育成
- ダブルディグリー制度を目指す
➢ 例: 物理博士・情報修士
➢ 入試や学位のありかた検討
- スーパーコンピュータ、ソフトウェア工学
などの新しい情報技術を教育

基礎教育

- 自然・モデル・計算の基礎教育
- バイリンガル教材 → 国際的に通用
- 社会人教育対応コース、
リテラシー教育

国際連携先端研究

- 海外トップ研究者を招聘
- 国際共同研究を促すWS
- 国際的に開かれた計算科学サマースクール、オンライン講座の提供
- 学生の留学・短期派遣支援
- 優秀な留学生・女性獲得活動
- 外国人・女性の教員・研究員採用

組織

大規模部局連携で
本学全体を底上げ

理学系研究科
工学系研究科
情報理工学系研究科
情報基盤センター
新領域創成科学研究科
数理科学研究科

外部連携

生産技術研究所 共同利用共同研究拠点
物性研究所 (7大学、筑波大、東工大)
地震研究所 理化学研究所 AICS
大気海洋研究所 官庁・自治体・企業等
海外大学・研究所等

資源

- IPMU 部局資源の活用・強みを集中
- 再配分されたポストを活用
- 基盤センターのスパコン利用

学術的必要性

- ポスト京の計算科学で突出した成果を挙げる
- 国際的な先導的立場を維持、発展させる
- あらゆる学問分野で高性能計算を活用

社会的必要性

- 日本の産業と科学を支える人物の輩出
- 我が国の国際社会における優位性
- 計算科学の力を活用する産学官リーダー

期待される成果

- 自然・社会科学と情報科学を俯瞰した
標準体系カリキュラムの整備
- 世界を先導する先端的成果と国際連携
拠点の形成
- 計算科学で世界的成果を挙げ日本の
科学・産業を先導する人材の育成
- ハード・ソフト・自然科学を横断して先導
できる人材の育成
- 本学のあらゆる専門学問領域において
計算機活用による高度化を促進
- 計算科学を理解し、強みを活かす企業
トップ、学術リーダー、官僚等の輩出
- 企業等においてシミュレーション等を駆
使して競争力を発揮する人材の輩出

本学・我が国の競争力強化

企業利用(詳細は後述)

<http://www.cc.u-tokyo.ac.jp/service/company/>

- 2008年度より開始
 - 大規模並列計算普及, 社会貢献
 - ビジネスへの萌芽的段階での支援, データセンターと競合しない
 - 成果は原則公開, 全資源の10%以下
 - アカデミック利用者と異なる審査基準(年2回募集), 負担金体系
 - ✓ HPCI企業利用枠へは2017年度から計算資源を拠出
- 様々な利用体系
 - 通常グループ利用(いわゆる「企業利用」)
 - ✓ 毎年3-4グループ, 基礎的な研究が多い
 - トライアルユース(グループ(有償, 無償), 個人)
 - ✓ お試しアカウント付き講習会を受講するとパーソナルトライアルユース可能
 - 大学等との共同研究(アカデミック料金で利用可能): 2-3件
 - オープンソース, 自作コードに限定(ISVアプリ無し)
 - ✓ 方針再検討も考えている: ご意見, ご要望をお聞かせください

大規模HPCチャレンジ

OFP, Reedbush-H, OBCXで実施中
(Wisteria/BDEC-01も実施予定)

- <https://www.cc.u-tokyo.ac.jp/service/challenge/>
- 月1回1日(24時間), 全計算ノードを1グループで占有して実行できる, 公募制, 無料。
- ユーザー以外も応募可能。
- 成果公開を義務づける
 - センター広報誌への寄稿
 - センター主催各種催しでの発表, 各種外部発表への情報提供
 - 速報結果の査読付国際会議への投稿等による迅速, 国際的な成果公開が望ましい。
- 企業からの申し込みも受け付ける(成果公開を義務づけ)
- 自作プログラム, オープンソースプログラム利用に限定

学際大規模情報基盤 共同利用共同研究拠点(JHPCN)

- <https://jhpcn-kyoten.itc.u-tokyo.ac.jp/ja/>
- 北大・東北大・東大・東工大・名大・京大・阪大・九大の各大型計算機センター
- 公募型共同研究によって, OFP, Reedbush-H/L, OBCX, Wisteria/BDEC-01を無料で使用可能
- 計算科学・計算機科学の分野型横断研究
- 各センター教員との共同研究が多い
- 国際共同研究, 企業共同研究等の制度もあり

YouTubeチャンネルのご紹介

研究事例紹介や、セミナー・講習会の録画などをご覧になれます。

- 「東京大学情報基盤センター」チャンネル

<https://www.youtube.com/channel/UC2CHaGp1AO-vqRIV7wmU0-w>

- 柏キャンパス一般公開

https://www.youtube.com/playlist?list=PLobjSv_ny85kr1lg2m-bUiMC2a9W6k53u

- JCAHPCセミナー:「人類と地球を護るスーパーコンピューティング」

https://www.youtube.com/playlist?list=PLobjSv_ny85l-z-VJCy690ZjIAA04xCRA

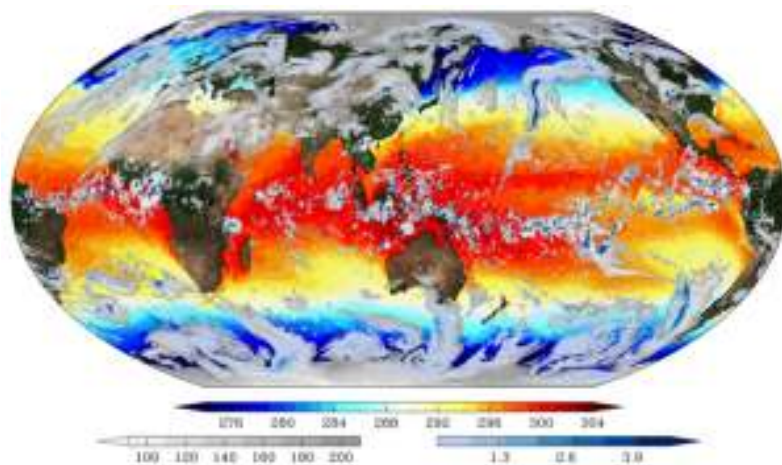
- お試しアカウントつき講習会

https://www.youtube.com/playlist?list=PLobjSv_ny85kXY2Mtnhn1k7pM-epQaD2y

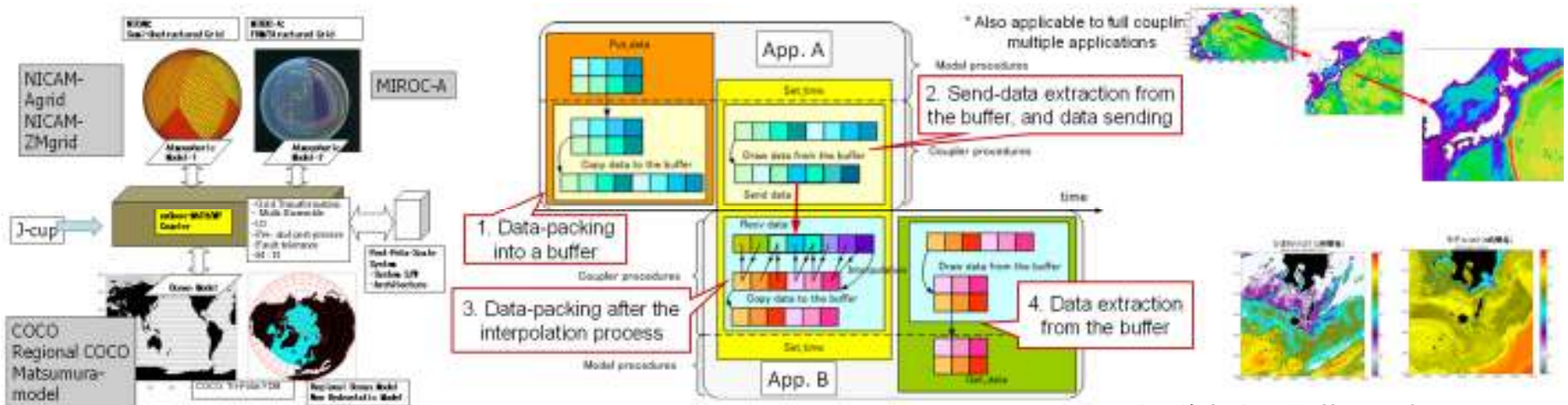
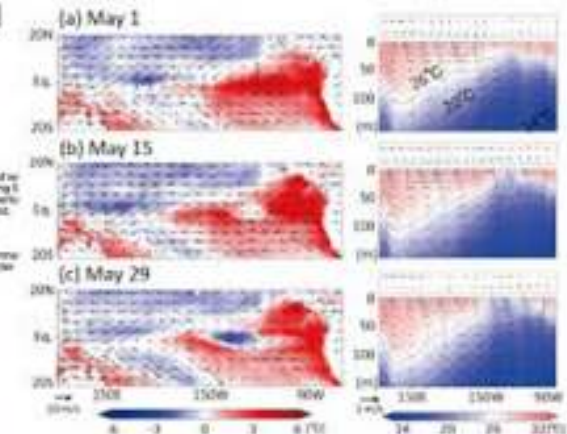
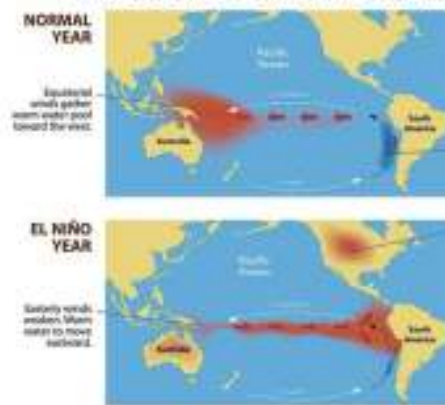
全地球大気環境シミュレーション

東大大気海洋研究所, 東大理学系研究科等

25



THE EL NIÑO PHENOMENON



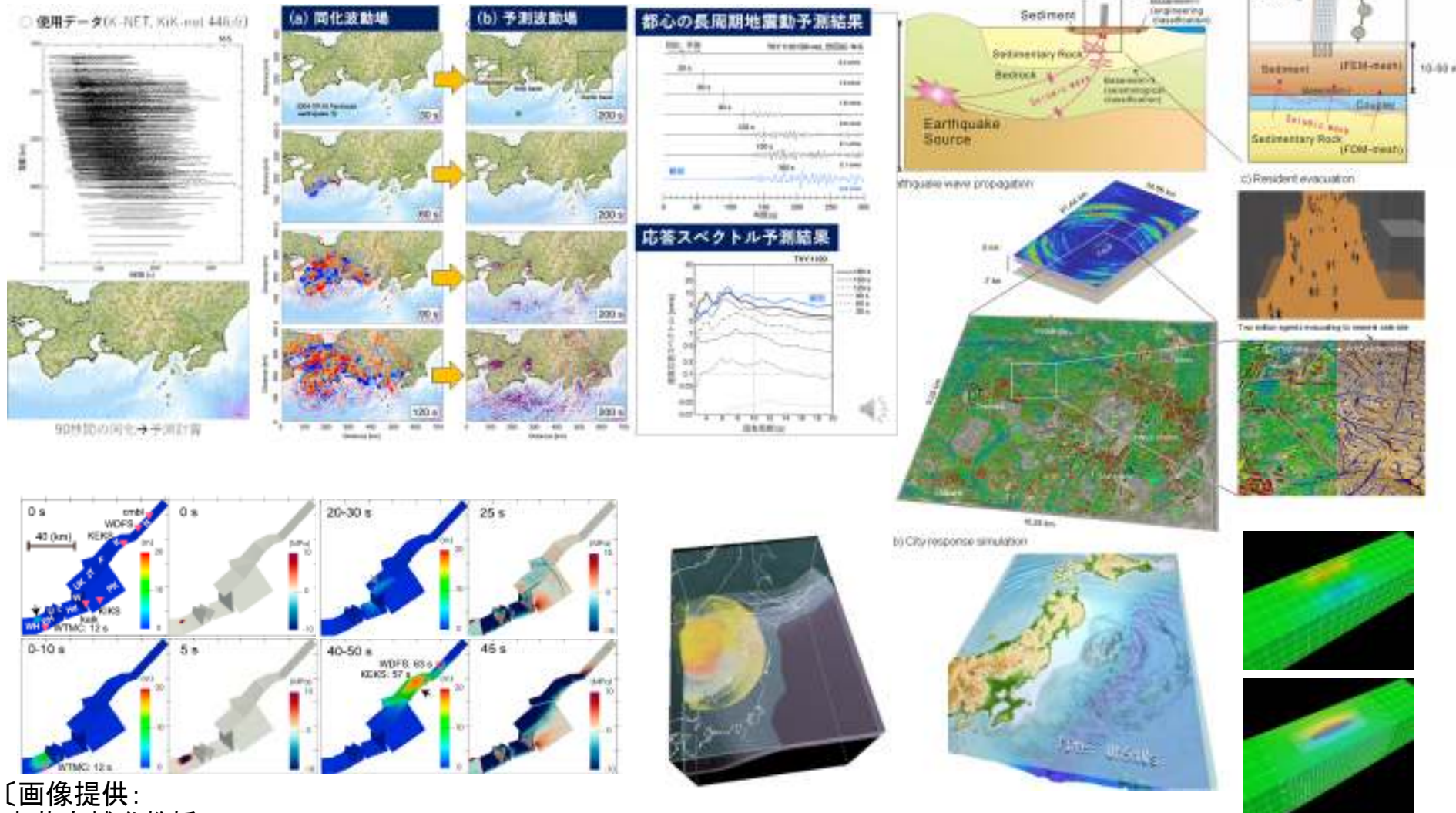
[画像提供: 佐藤正樹教授・羽角博康教授(東大・大気海洋研)]

地震シミュレーション・地殻変動

東大地震研究所，東大理学系研究科等

〔画像提供：古村孝志教授・市村強教授（東大・地震研）〕

26



〔画像提供：
安藤亮輔准教授
（東大・理学系）〕

二酸化炭素地下貯留シミュレーション 大成建設，理化学研究所等

〔画像提供：
山本肇博士（大成建設）〕

27

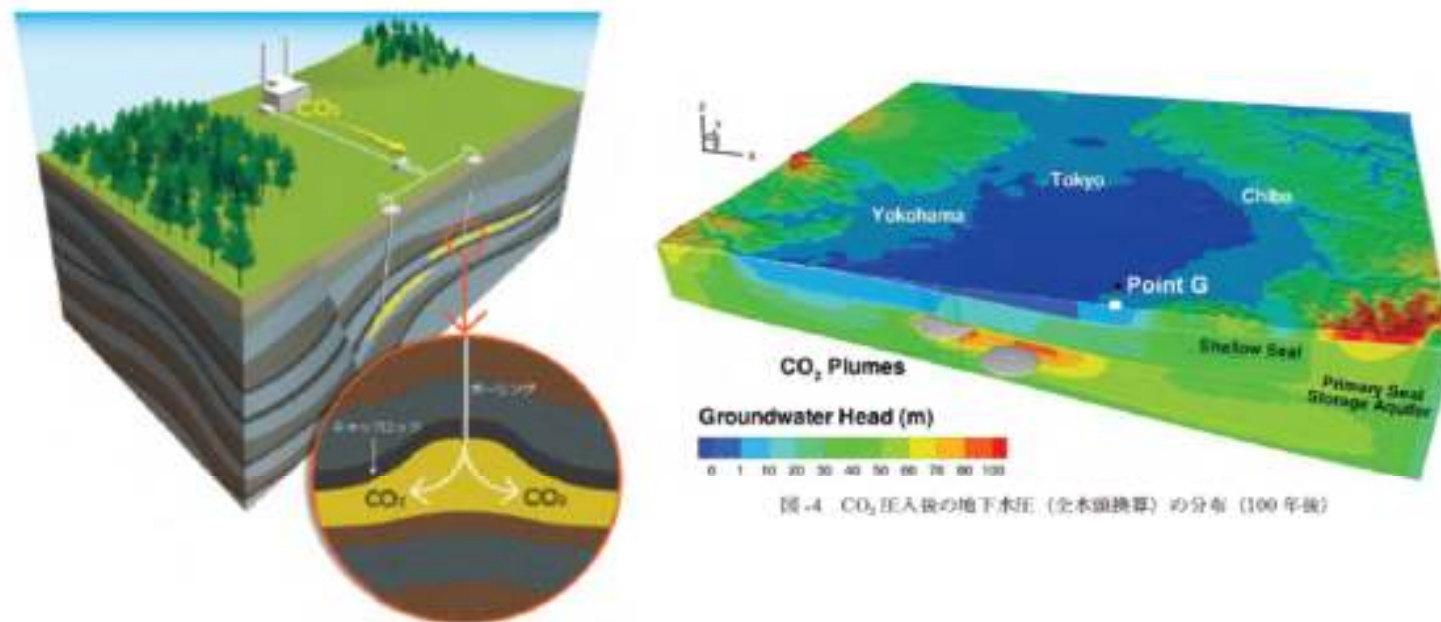


図-4 CO₂注入後の地下水圧（全水頭換算）の分布（100年後）

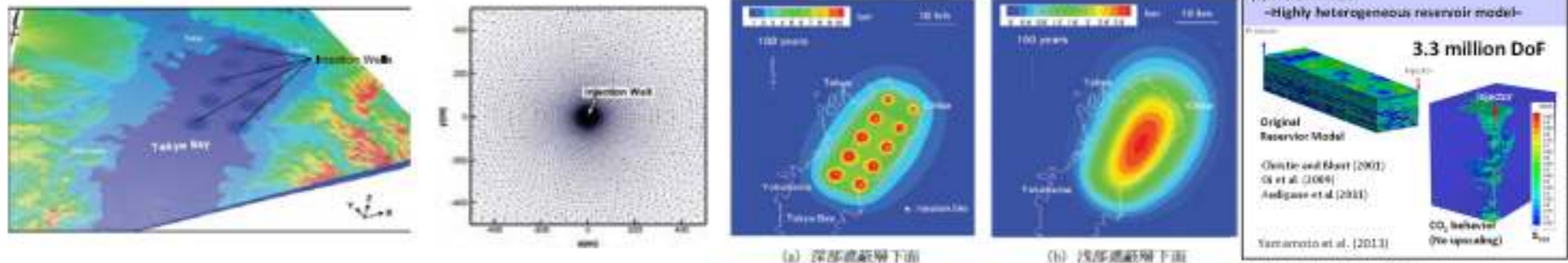
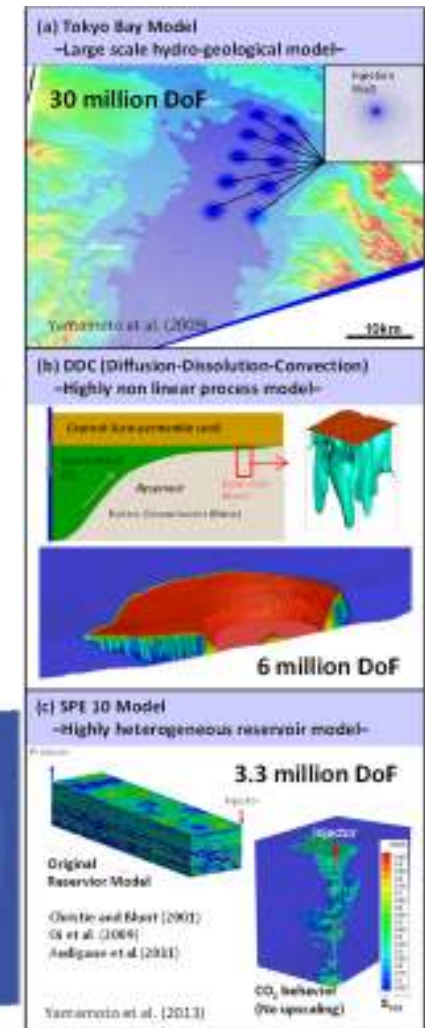


図-5 圧力上昇量の平面分布（初期状態からの増分，注入開始から100年後）

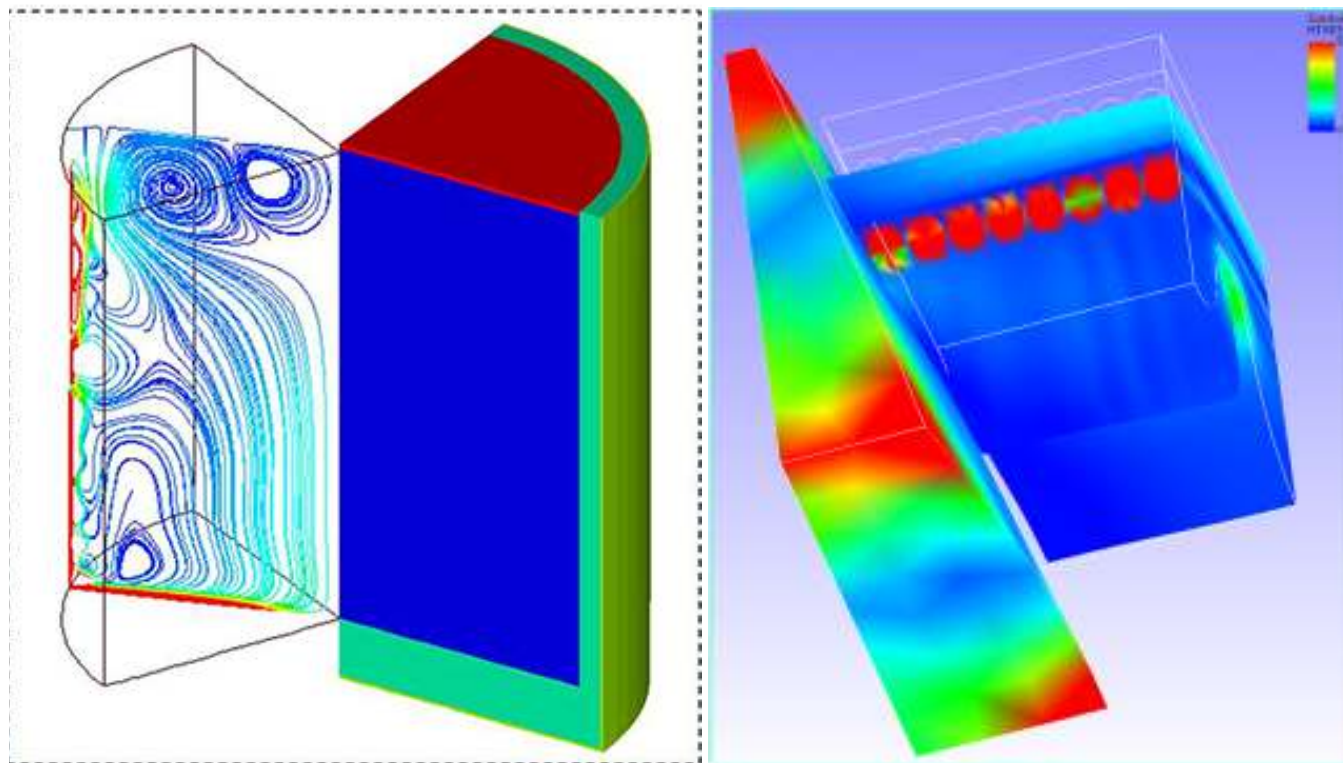


DoF: degrees of freedom

ものづくり分野(流体シミュレーション, 構造解析など)

様々な大学・研究機関・企業

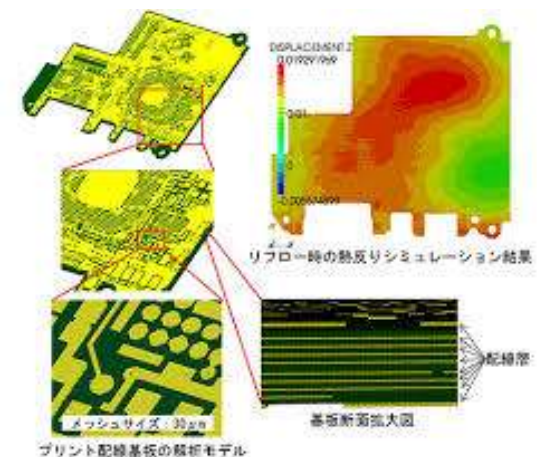
28



〔画像提供: 奥田洋司教授(東京大学新領域創成科学専攻)〕

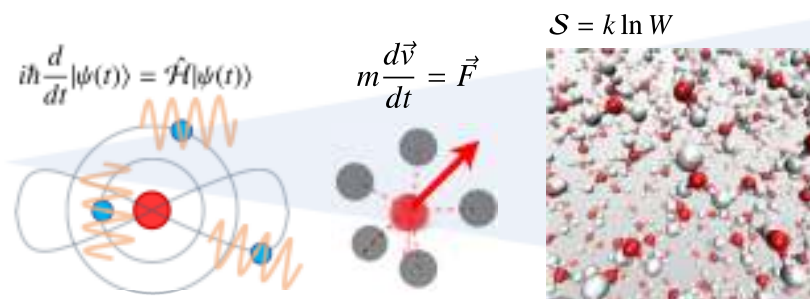


〔画像提供:
日本自動車工業会(JAMA)〕



材料科学・物性科学・分子科学

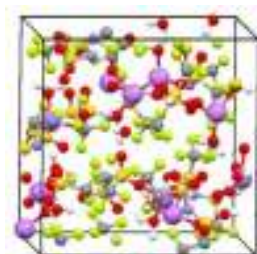
東大工, 阪大基礎工, 物質・材料研究機構 他 様々な大学・研究機関



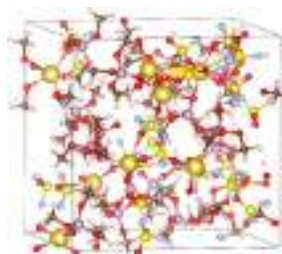
DFT-MDによる蓄電池用新型
電解液のミクロ物性解明



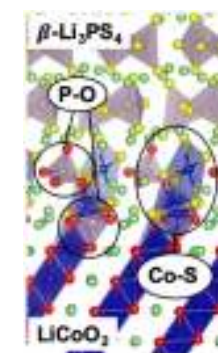
全固体電池の電極-電解質
界面のDFTミクロ解析



高濃度水系電解液
Nature Energy 2016



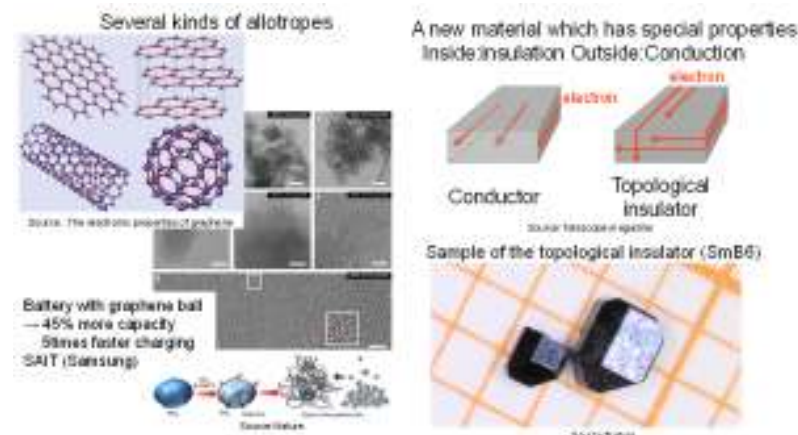
高濃度消火性電解液
Nature Energy 2018



Chem. Mater. 2020

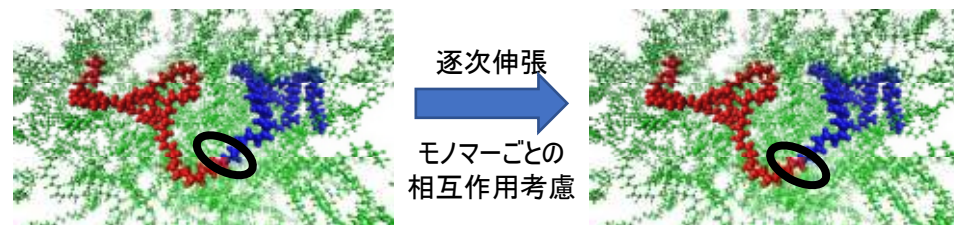
〔画像提供：山田研究室(東大工), 館山グループ(物材機構)〕

ディラック電子系・トポロジカル絶縁体のtight-binding計算



〔画像提供：Gerhard Wellein教授 (FAU, Germany)〕

ポリマーの相溶性判定のための全原子自由エネルギー計算



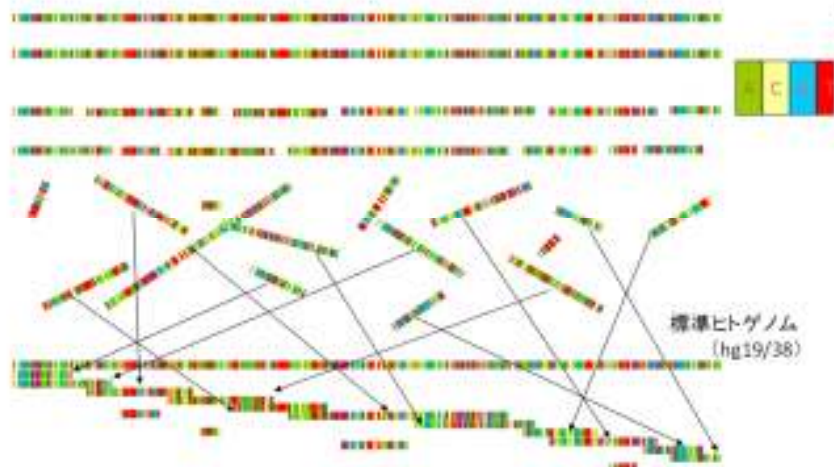
Macromolecules 2020

〔画像提供：松林研究室(阪大)〕

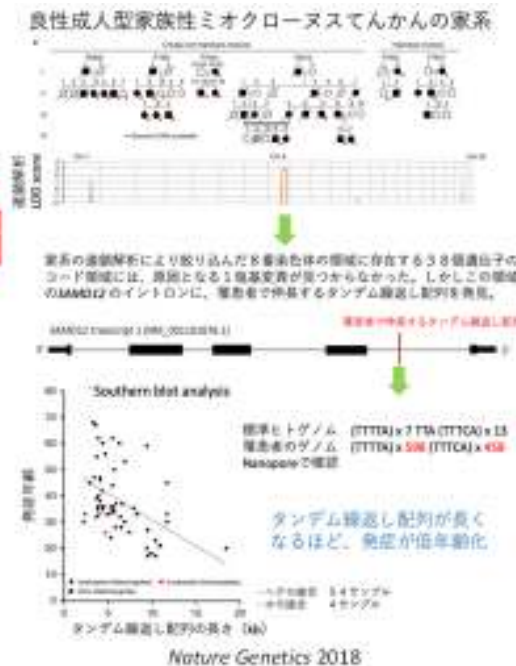
バイオインフォマティクス:ゲノム解析

東大新領域創成科学研究科 等

ヒト個人ゲノムはどのように再解読するか？

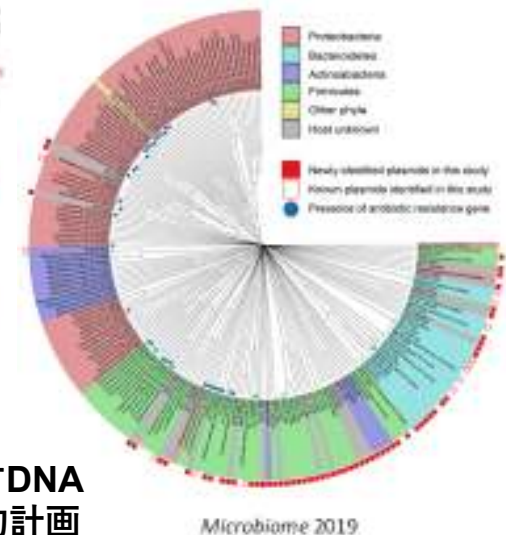


長さ100~150塩基のDNA断片を10~20億本収集(ヒト1人当たり)
接尾辞配列(suffix array), Burrows-Wheeler変換等が活用される



新たに発見された疾患を引き起こすDNAの繰返し配列伸長異常: 様々な動的計画法, de Bruijn グラフ探索等が活用

ヒト腸内細菌叢から発見された多様なプラスミド・ファージ配列の全貌



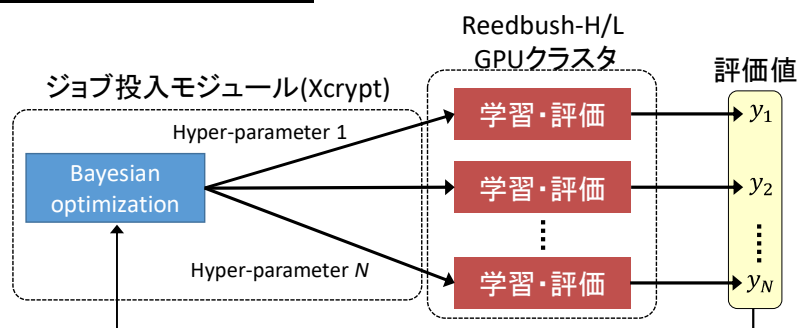
〔画像提供:
森下真一教授(東京大学新領域創成科学研究科)〕

バイオインフォマティクス：医療画像処理

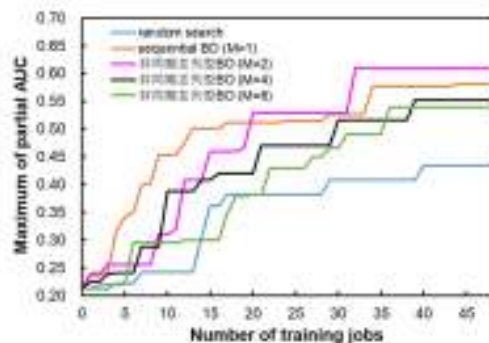
東大病院等

31

深層学習自動チューニング プラットフォーム



胸部X線写真の肺腫瘍検出



学習ジョブ数と評価値(partial AUC)の最大値との関係



上：元画像、下：検出結果
(黄、緑丸：病変領域)

開発中のソフトウェア

頭部造影MR画像の転移性脳腫瘍検出

村田, JAMIT2018

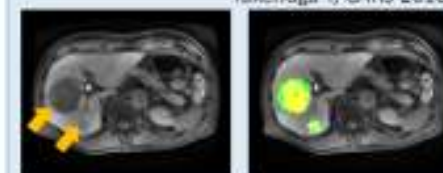


検出結果例

(左：元画像、右：検出結果(マゼンダ))

造影MR画像の肝結節性病変検出

Takenaga T, CARS 2018

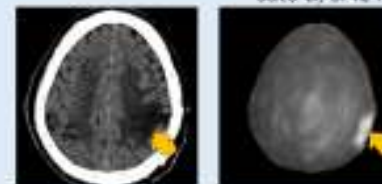


検出結果例

(肝細胞がん、左：元画像、右：検出結果)
●検出、●過検出、●未検出

頭部救急CT画像の異常検知

Sato D, SPIE MI 2018



脳梗塞症例

(左：元画像、右：異常度マップ)

胸部X線画像の異常強調

花岡, MAJAMI 2019, JSAIMI 2020



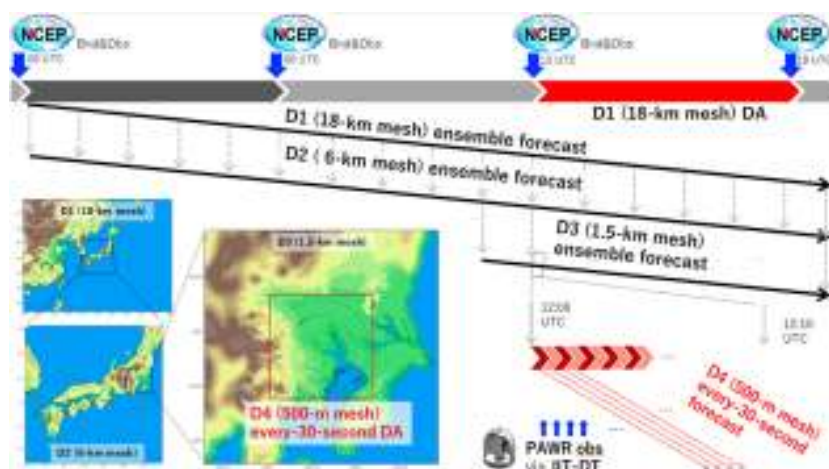
強調画像例

(左：元画像、右：強調結果、矢印：肺腫瘍)

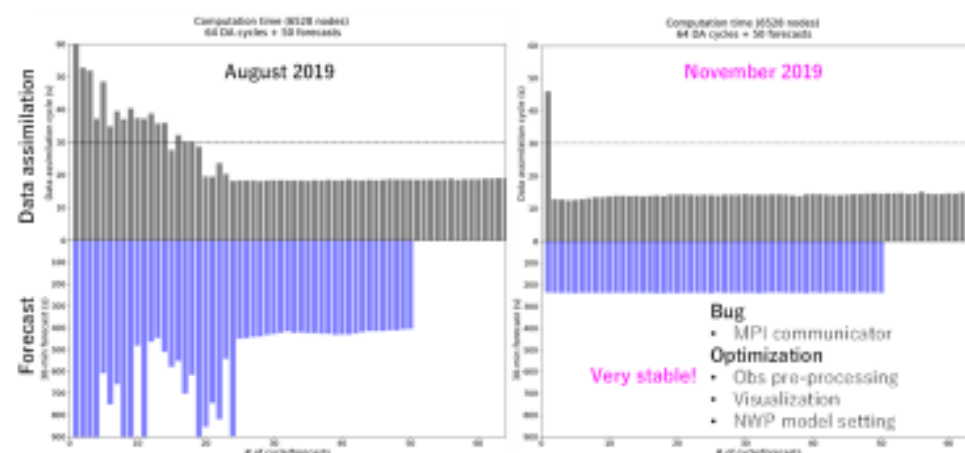
Nomura Y, J Supercomput. 20 Jan 2020 (Epub ahead)

ゲリラ豪雨予測のリアルタイム実証実験 (理化学研究所)

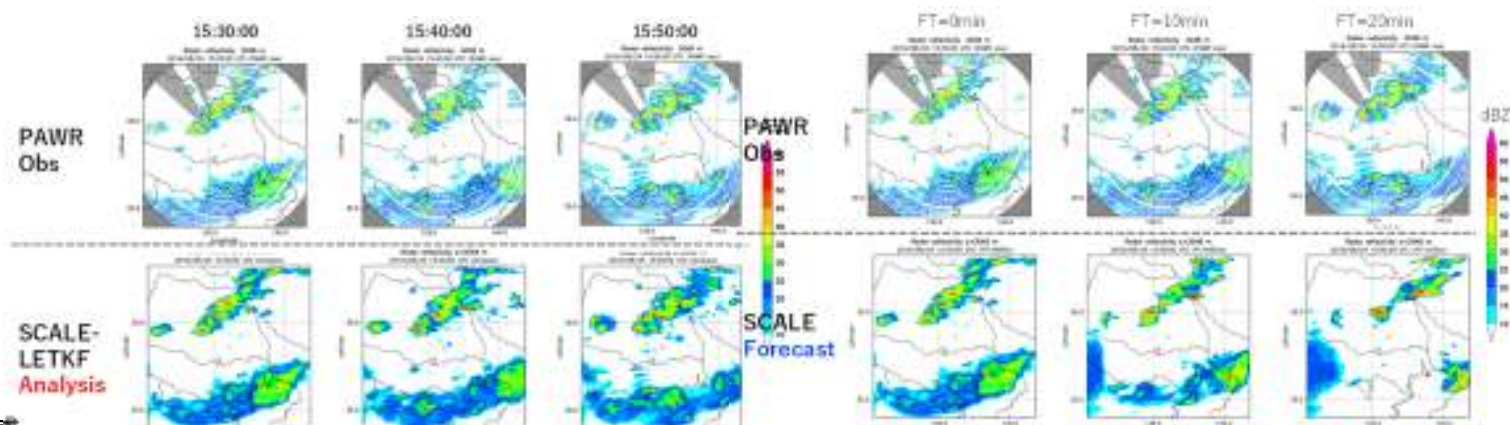
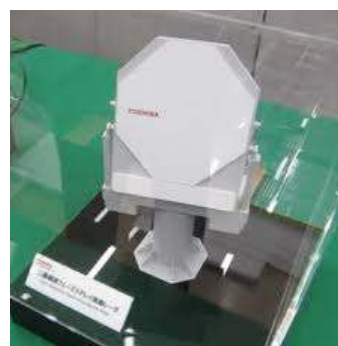
32



全体のワークフロー



計算性能の向上。上段はデータ同化、下段は30分予報にかかった時間(秒)。
(左)2019年8月、(右)2018年11月。



2019年8月24日の事例についてのテスト結果。(上)レーダー観測と(下)SCALE-LETKFによる解析で得られたレーダー反射強度(dBZ)を示す。

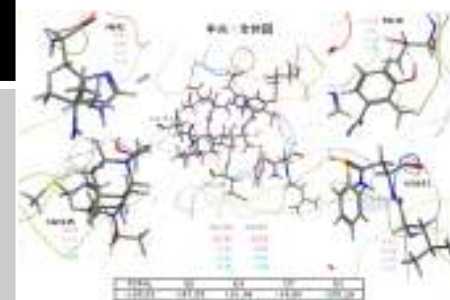
〔画像提供: 三好建正博士
(理化学研究所)〕

「COVID-19」対応 HPCI臨時公募課題

全14のうち6課題が東大システムを利用



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
COVID-19治療の候補薬: chloroquine、hydroxychloroquine、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)	
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)	Oakbridge CX
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)	



[資料提供: 望月祐志教授(立教大学)]



[資料提供: 坪倉誠教授(神戸大学)]

- 東大情報基盤センターについて
- サービス概要
- 企業による利用制度
 - 制度概略と利用提案
 - 申込・審査・成果報告
 - スパコン利用への道
 - ①お試しアカウント付き並列プログラミング講習会
 - ②トライアルユース制度
 - ③ 企業利用制度
- スーパーコンピュータシステム概要
 - Reedbush
 - Oakforest-PACS
 - Oakbridge-CX
 - Wisteria/BDEC-01
 - 運用
- ご質問は

東大スパコン使用のニーズ

① スパコンの利用価値を見極めたい

- ・スパコン導入に膨大なコストをかける前のFS
- ・自社ソフトのスパコン上での動作テスト・性能テスト

② スパコンでないと行えないような計算をしたい

(チャンピオンデータの取得)

- ・超大規模シミュレーション
- ・大規模かつ長時間シミュレーション

③ スパコンの持つ膨大な処理能力を利用したい

- ・既存ソフトを用いたプロダクトラン
- ・クラウドサービスの計算サーバとして利用

スパコン利用に関する本センターの理念

■以下のいずれかに寄与することが利用条件

1. 将来の科学技術発展
2. 大規模・高性能並列計算分野の発展
3. 大規模・高性能並列計算によるイノベーション

■自作コードかオープンソースであることが基本

- ・商用コードは要相談

■単なる計算機需要の肩代わりはNG

- ・前ページの③は理念に反する(但し、研究要素があればOK)
- ・企業によるスパコン利用に必要な事項
 - 事前審査
 - 結果報告

企業による利用が可能な計算資源

■ 全計算資源の10%以内を目途に提供しています

■ 2021年に提供予定のシステムは以下の通りです

2021年11月まで

・Oakbridge-CX
全資源: 1368ノード



・Oakforest-PACS
全資源: 5,472ノード (東大分)



・Reedbush-H
全資源: 120ノード

・Reedbush-L
全資源: 64ノード



2021年10月より

・Wisteria-Odyssey
全資源: 7,680ノード

2021年10月より

・Wisteria-Aquarius
全資源: 45ノード

Oakbridge-CXの利用提案

■スーパーコンピュータの調査・試験・入門用に最適

- Intel社CPUやIntel Omni-Pathなどシェアの高い要素を組み合わせた使い易い、良い意味で普通の構成
- パソコンや小規模クラスタからのプログラムの移植が比較的容易
- 一般的な構成要素を用いつつ高性能が発揮されるように調整されているため、スパコンの導入効果調査に最適

■Deep Learning, データ科学に利用

- 高速SSD群を単一イメージで使用可能

■機密性の高い研究・開発に利用

- ノード固定で申込めば、専用HDや専用線の導入に対応可能

Reedbushの利用提案

■Deep Learning, データ科学に利用

- 高性能GPUをノードあたり2ー4台搭載
- 従来の科学技術計算以外の新しい研究分野への利用も視野に入れ、様々な関連ツール, ソフトウェアを導入
TensorFlow, Torch, Caffe, Chainer, OpenCV, ROOT, GEANT4, Theano, Anaconda
- エンジニアリング等用に多様な大規模シミュレーションソフトも充実

■機密性の高い研究・開発に利用

- ノード固定(-L)で申込めば、専用HDや専用線の導入に対応可能

Oakforest-PACSの利用提案

■次世代並列計算機向けソフトウェア技術開発に利用

- ・最新の要素技術(Xeon Phi, Omni-path, Burst Buffer)
- ・コードを動作させるは容易(Intel コンパイラが利用可能)

■超並列計算の技術開発に利用

- ・豊富な計算資源(5742ノード×68コア)
- ・「京」とポスト京との橋渡しの存在として

■Deep Learning技術開発に利用

- ・Xeon Phi向けにチューニングされたライブラリが利用可能
 - Intel DAAL (Data Analytics Acceleration Library)
 - Intel MKL (Math Kernel Library)

Wisteria/BDEC-01の利用提案

■超並列計算の技術開発に利用(Odyssey)

- ・豊富な計算資源(7680ノード×48コア)
- ・「富岳」と同じ計算ノード

■データ解析, 機械学習の技術開発に利用(Aquarius)

- ・外部(ストレージ, センサーネットワーク他)に直接接続可能
- ・最新GPUをノードあたり8台搭載

■シミュレーション、データ科学、機械学習の融合利用

- ・機械学習によるシミュレーションの高度化
- ・大規模シミュレーション+データ同化

全システム共通の利用提案

■機械学習、データ科学

コンテナ仮想化

- Singularity

■大規模科学技術計算

スパコン向けに開発されたオープンソースコードが充実

- OpenFOAM

(Open source Field Operation And Manipulation)

<https://www.openfoam.com/>

OpenFOAM, ppOpen-HPC
を用いた講習会を実施

- ppOpen-HPC

(自動チューニング機構を有するアプリケーション開発・実行環境)

<http://ppopenhpc.cc.u-tokyo.ac.jp/ppopenhpc/>

- FrontISTR

(並列有限要素解析オープンソースソフト)

<https://www.frontistr.com/>

- FrontFlow

(乱流燃焼解析ソフトウェア)

<http://www.ciss.iis.u-tokyo.ac.jp/dl/>

- 東大情報基盤センターについて
- サービス概要
- 企業による利用制度
 - 制度概略と利用提案
 - 申込・審査・成果報告
 - スパコン利用への道
 - ①お試しアカウント付き並列プログラミング講習会
 - ②トライアルユース制度
 - ③ 企業利用制度
- スーパーコンピュータシステム概要
 - Reedbush
 - Oakforest-PACS
 - Oakbridge-CX
 - Wisteria/BDEC-01
 - 運用
- ご質問は

東大スパコン利用への道

易

難
易
度

難

① トライアルユース無料体験

- ・無償, 一カ月利用可能

① お試しアカウント付き並列プログラミング講習会

② トライアルユース制度

②-1 企業利用パーソナルコース

- ・有償(最長3ヶ月), ①の受講が必須, 成果報告義務あり

②-2 企業利用グループコース

- ・無償トライアルユース(最長3ヶ月)
- ・有償トライアルユース(最長9ヶ月)

- ・事前審査あり
- ・年2回募集
次回申込期限
2月17日(水)
- ・成果報告義務あり

③ 企業利用制度

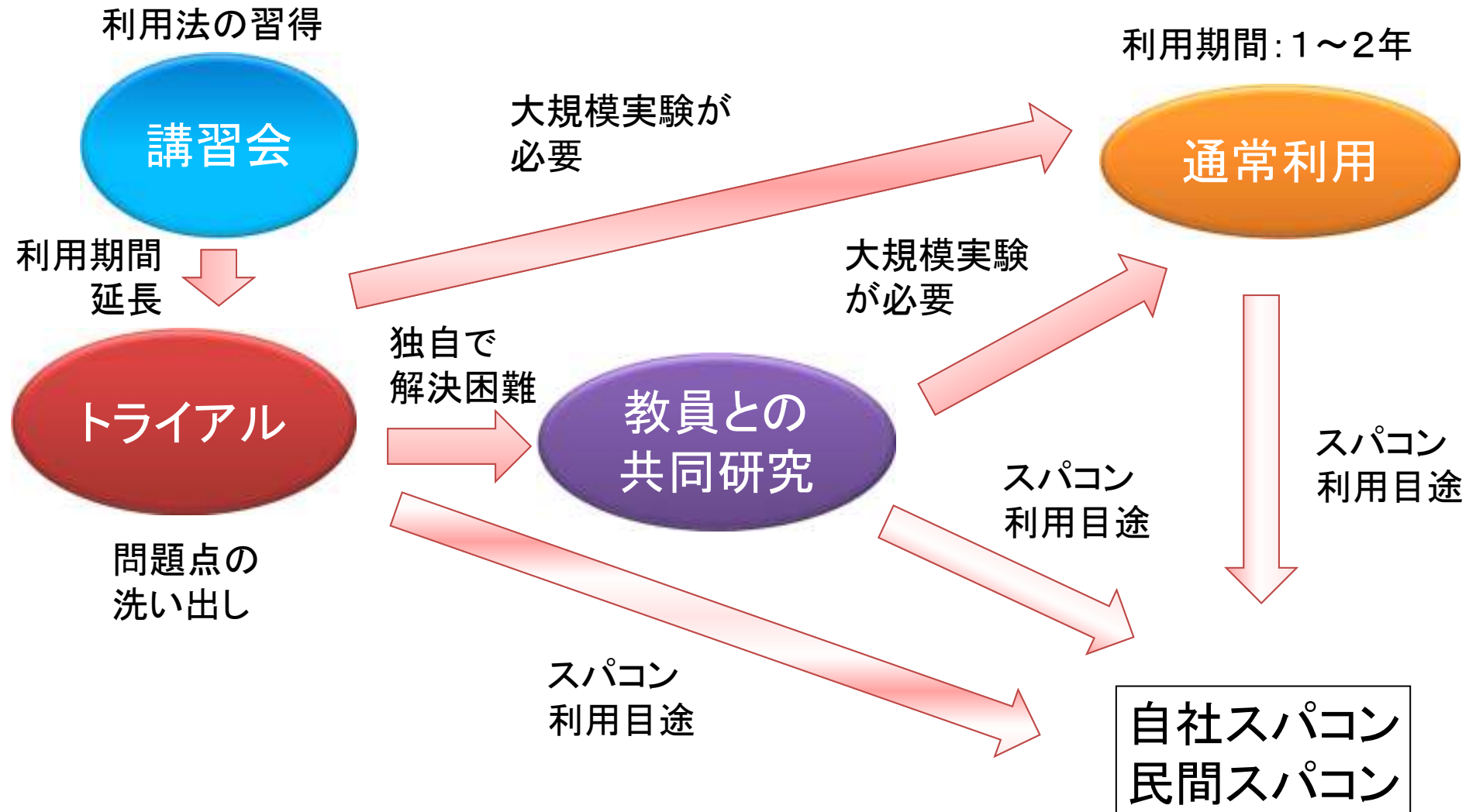
- ・有償, 最長12ヶ月

④ 学術機関との共同研究

- ・審査および報告の義務なし, 随時募集
- ・研究者への研究費, 知的財産権配分が必要

番外: JHPCN、HPCIから企業が利用可能な制度に応募

東大スパコン企業利用制度の展開イメージ



直近の申込日程

① お試しアカウント付き並列プログラミング講習会

③ 企業利用制度 および

②-2 トライアルユース企業利用グループコース

2021年度(第1回)公募日程

2月17日(水)申込書提出締切

3月上旬 応募に関するヒアリング※

4月1日(木)利用開始

※ 3月上旬に開催される審査委員会の席上で、ヒアリングを行う予定です。
ヒアリングの時間は1課題あたり20分程度を予定しています。

・第1回募集の利用期間は、最長で2022年3月までの1年間になります。

利用申請

■ 以下のような項目について記載が求められ、審査が行われます
(各項目についてA4に1ページ程度)

- ・ 申込者の自社または関連会社内において大規模並列計算が行えない理由
※申込課題が企業の通常業務における計算需要負荷の肩代りになっていないこと。

- ・ 利用するプログラムについて
※複数ある場合は各プログラムに対してシートを複製してご使用ください。

- ・ 実施内容の概要
※大規模高性能並列計算に合致するテーマを支援するものであることから、
以下の項目に留意の上記載すること。
(1) 企業利用としての先端性を有すること。
(2) 将来の科学技術発展、大規模高性能並列計算分野の発展、
大規模高性能並列計算によるイノベーションにそれぞれ寄与すること。
(3) 大規模並列計算を目指した利用であること。

成果報告

■ 中間報告会

- ・9月上旬(予定)に60分(発表40分、質疑・相談20分)で行う予定です
- ・進捗報告ではなく、相談事項や改善要望を受け付ける趣旨です

■ 最終報告書(<https://www.cc.u-tokyo.ac.jp/guide/company/report/>)

- ・利用期間終了後 1 ヶ月以内に、利用成果報告書の提出が必要です
- ・利用成果報告書は公開該当項目について広報・Webで公開されます
- ・申し出により、最大で2年間の成果公開延期ができます

1. 利用の概略
1) 利用目的・内容 複雑地形および市街地を再現した計算格子を用意し、NaFlu/PostFlowRed を用いて数値計算を行うことにより、微環境、ヒートアイランド、有害物質の拡散等、都市環境における諸現象を予測することを目的とした。
2) 利用意義(産業利用の観点から) 都市開発の進展による風環境の変化、ヒートアイランド、有害物質の拡散等、都市環境における諸問題が顕在化しており、日射や輻射も考慮した複雑地形・市街地の大規模数値流体解析に対するニーズが高まっている。これまでは計算機能力の不足により、これらの数値解析の実現が難しかったが、実験等にて再現が難しかった大規模環境下における現象を予測可能とすることで、産業界への数値計算利用普及を旨とした。
3) スーパーコンピューターを利用する必要性 自社では今回課題の規模の計算を可能とする環境を確保することは非現実的であり、また他有償の計算機環境利用においても、一度に当該規模の系列数をこなすことは、環境確保および費用の観点からしても、困難であることが想定されたため実機可能な環境を利用する必要があった。
2. 成果の概要
1) 本利用で得られた成果(成果が得られなかった場合はその理由) ※ 内容を以下のうちから選択の上、計算機利用の観点から得られた知見を中心に記述してください。 [1. 計算科学、 2. コンピュータ・サイエンス、 3. プログラム・エンジニアリング、 4. その他] 1. 計算科学 本利用において、複雑市街地を対象に、NaFlu/PostFlowRed を用いた大規模数値流体解析を行い、環境による風環境に対する影響の評価を行った。 今回の解析対象の市街地には風速計が複数設置されており、数値流体解析の結果を予測値と比較することが可能であった。このため、格子形状や境界条件の差分スキーム等を中心に、解析手法のチューニングを行い、多くの知見を得ることができた。
2) 社会・経済への波及効果の見通し 近年、都市開発の進展による風環境の変化、ヒートアイランド、有害物質の拡散等、都市環境における諸問題が顕在化しており、より環境負荷の低い都市開発手法の開発が求められている。このため、気象条件や産業界等からの、複雑地形・市街地の大規模数値流体解析に対するニーズが高まっている。 本利用により、複雑地形・市街地の大規模数値流体解析における多くの知見を得ることができた。この知見を今後の業務に適用することにより、社会的ニーズに対しても応えていくことができると考えている。
3) その他の成果 特記事項なし。

1. 利用の概略

1) 利用目的・内容

2) 利用意義(産業利用の観点から)

3) スーパーコンピューターを利用する必要性

2. 成果の概要

1) 本利用で得られた成果

(成果が得られなかった場合はその理由)

2) 社会・経済への波及効果の見通し

- 東大情報基盤センターについて
- サービス概要
- 企業による利用制度
 - 制度概略と利用提案
 - 申込・審査・成果報告
 - スパコン利用への道
 - ①お試しアカウント付き並列プログラミング講習会
 - ②トライアルユース制度
 - ③ 企業利用制度
- スーパーコンピュータシステム概要
 - Reedbush
 - Oakforest-PACS
 - Oakbridge-CX
 - Wisteria/BDEC-01
 - 運用
- ご質問は

東大スパコン利用への道

易

難
易
度

難

① トライアルユース無料体験

- ・無償, 一カ月利用可能

① お試しアカウント付き並列プログラミング講習会

② トライアルユース制度

②-1 企業利用パーソナルコース

- ・有償(最長3ヶ月), ①の受講が必須, 成果報告義務あり

②-2 企業利用グループコース

- ・無償トライアルユース(最長3ヶ月)
- ・有償トライアルユース(最長9ヶ月)

- ・事前審査あり
- ・年2回募集
次回申込期限
8月17日(月)
- ・成果報告義務あり

③ 企業利用制度

- ・有償, 最長12ヶ月

④ 学術機関との共同研究

- ・審査および報告の義務なし, 随時募集
- ・研究者への研究費, 知的財産権配分が必要

番外: JHPCN、HPCIから企業が利用可能な制度に応募

① トライアルユース無料体験

https://www.cc.u-tokyo.ac.jp/guide/trial/free_trial.php

■ 東大スパコンを企業が利用する最も手軽な道

- ・ 利用料無料
- ・ 一ヶ月有効な「お試しアカウント」発行

・Oakbridge-CX:	・Oakforest-PACS:	・Reedbush:	・Wisteria-O:	・Wisteria-A:
- 最大8ノード (448コア)	- 最大16ノード (1088コア)	- 最大2ノード (4GPU)	- 最大12ノード (576コア)	- 最大1ノード (8GPU)
- 最長15分 × 1 Job	- 最長15分 × 1 Job	- 最長10分 × 1 Job	- 最長15分 × 1 Job	- 最長15分 × 1 Job

① お試しアカウント付き並列プログラミング講習会

<https://www.cc.u-tokyo.ac.jp/events/lectures/>

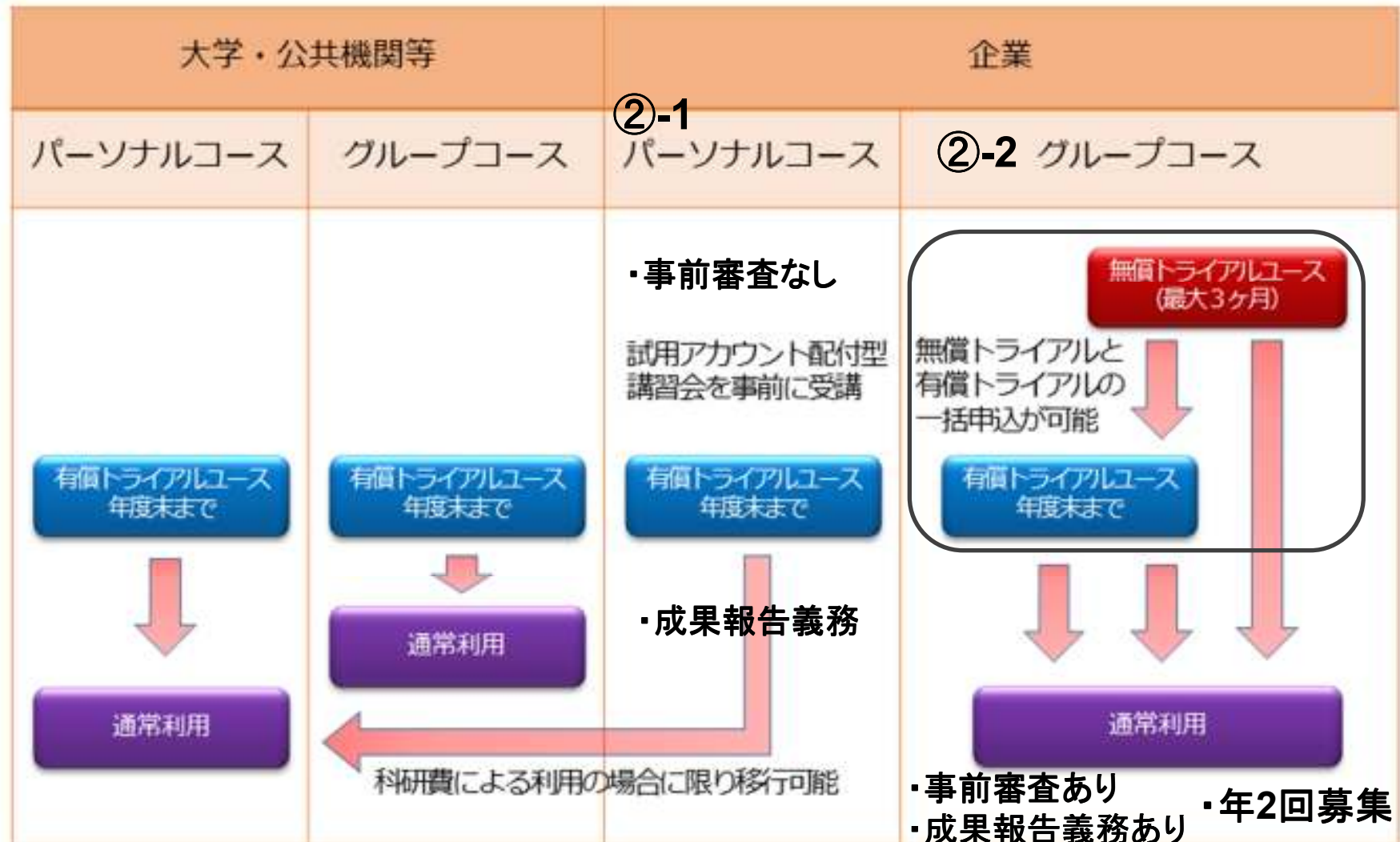
- 使用可能ノード数と計算時間は無料体験とほぼ同じ
- スパコンを効率的に利用するための並列計算の基礎を習得
- 講習会で使用されるシステムのアカウントを発行
- 年に20回程度開催を予定

- ・ 次回開催：3月2日「並列有限要素法で学ぶ並列プログラミング徹底入門」

② トライアルユース制度

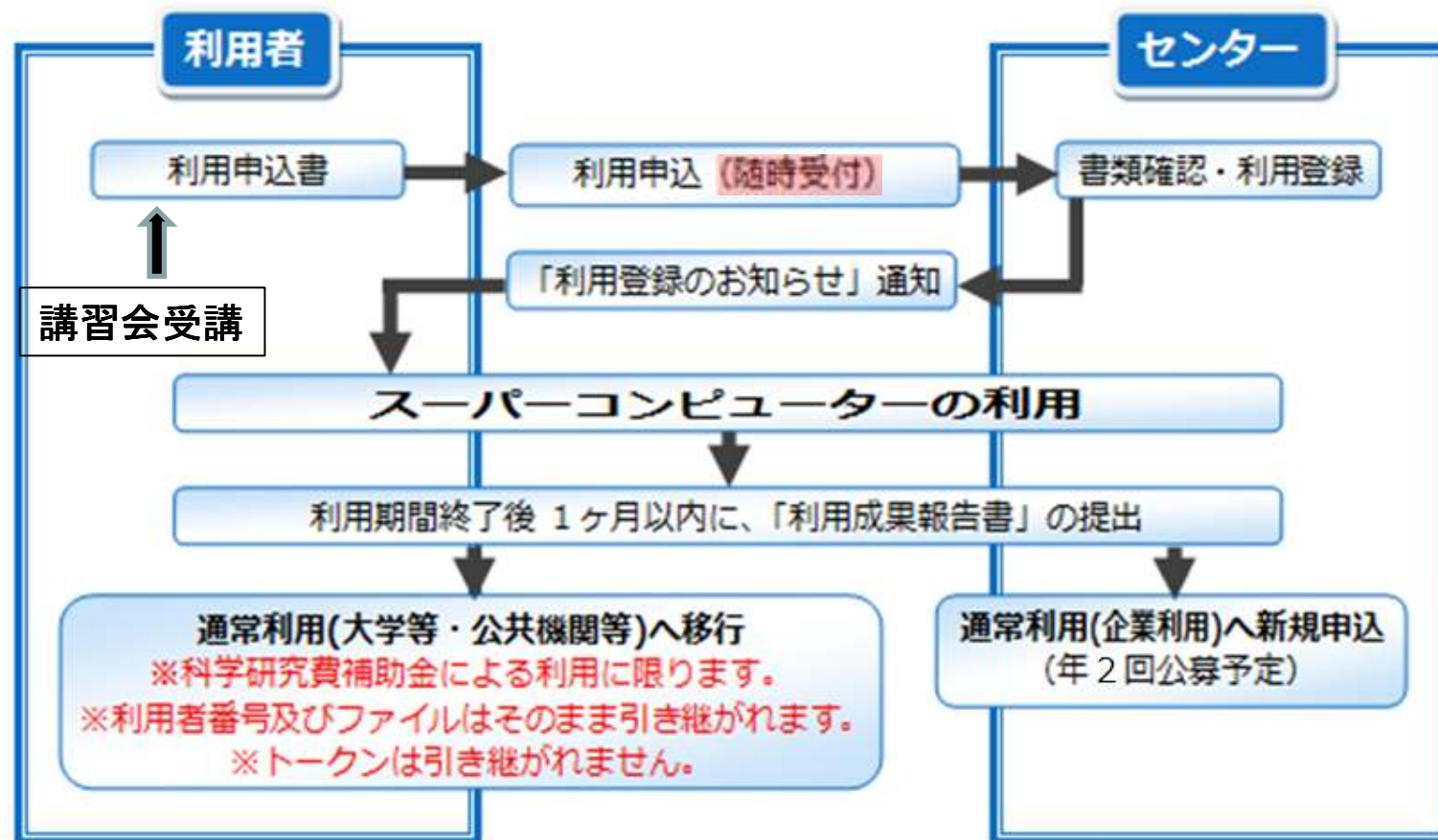
<https://www.cc.u-tokyo.ac.jp/guide/trial/company.php>

■ 本格的利用前にスパコンを試用し、見通しをつけるための制度



②-1 トライアルユース制度企業利用パーソナルコース(1/2)

- 本コースは個人単位でスパコンを利用するためのコースです
- 利用者本人が前述①の講習会を事前に受ける必要があります
- ご利用の流れ



②-1 トライアルユース制度企業利用パーソナルコース(2/2)

■提供資源および基本セット料金(下は3ヶ月分の料金)

- 1ヶ月単位で必要な資源量(上限12ヶ月分)を設定し、年度末まで利用可能

▪ **Wisteria: 対象外**

▪ **Oakbridge-CX(最大3セットまで)**

利用負担金(税込)	利用可能ノード数	トークン	ディスク量
9,000円/3ヶ月分	最大8(448コア)	2,160ノード時間	4TB

▪ **Oakforest-PACS(最大6セットまで)**

利用負担金(税込)	利用可能ノード数	トークン	ディスク量
4,500円/3ヶ月分	最大16(1088コア)	2,160ノード時間	1TB

▪ **Reedbush(最大2セットまで)**

	利用負担金(税込)	利用可能ノード数	トークン	ディスク量
Reedbush-H	6,800円/3ヶ月分	最大4(CPU+GPU)	2,160ノード時間	1TB
Reedbush-L				

■ 同一計算機システムに対して複数回の申込みはできません

トークン(token)

参考:

<https://www.cc.utokyo.ac.jp/supercomputer/reedbush/service/token.php>

<https://www.cc.u-tokyo.ac.jp/supercomputer/ofp/service/token.php>

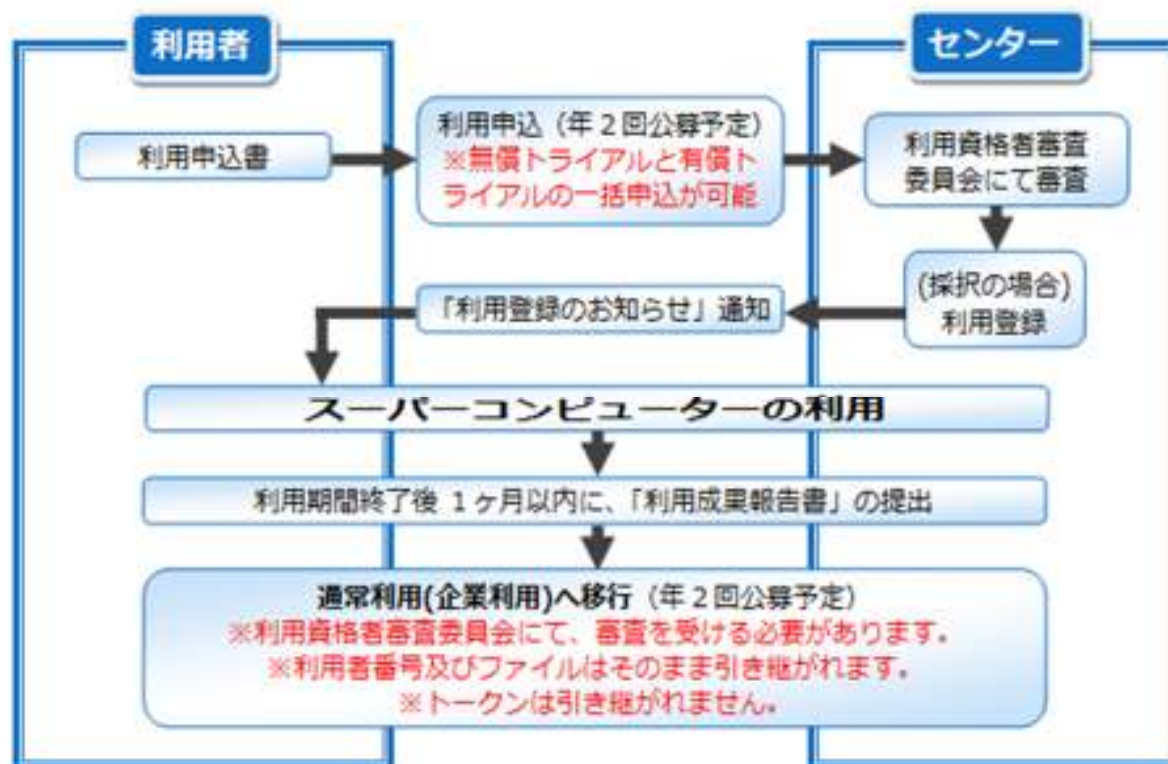
<https://www.cc.u->

[tokyo.ac.jp/supercomputer/obcx/service/token.php](https://www.cc.u-tokyo.ac.jp/supercomputer/obcx/service/token.php)

- トークンは、バッチジョブ実行ごとに消費。(インタラクティブノードを利用したバッチジョブを除く)
 - ノード時間積「経過時間 × ノード数」により消費
- トークンを使い果たすとジョブ実行不可: 1日単位モニター
 - トークン不足の場合, ジョブはsubmitできない
 - 計算資源に余裕がある場合にのみ, トークンを追加可能
- トークンは, 利用を許可された有効期間内に全量が利用できることを保証するものではありません。
- 利用を許可された期間のみを有効期間としているため, 次年度への繰り越しや返金等は不可。

②-2 トライアルユース制度企業利用グループコース(1/5)

- 本コースはグループでスパコンを利用するためのコースです
 - ・グループに登録できる利用者数は無制限
- 無償と有償の2つのコースがあります
- 一般の企業利用と同等の利用審査を受ける必要があります
- ご利用の流れ



②-2 トライアルユース制度企業利用グループコース(2/5) (有償トライアルユース)

■ 提供資源および基本セット料金

- 1ヶ月単位で必要な資源量(今年度の**上限8ヶ月**)を設定した場合

・ **Reedbush(最大4セットまで)**

	利用負担金(税込)	利用可能ノード数	トークン	ディスク量
Reedbush-H	18,000円/8ヶ月	最大32ノード (CPU+GPU)	5,760 ノード時間	1TB/ group 2GB/ 利用者
Reedbush-L		最大16ノード (CPU+GPU)		

* Reedbush-Hを使用した場合は、時間あたり2.5倍のトークンを消費します

* Reedbush-Lを使用した場合は、時間あたり4.0倍のトークンを消費します

■ 同一計算機システムに対して、
同一企業内の1部署あたり1回のみの申請が可能です

②-2 トライアルユース制度企業利用グループコース(3/5) (有償トライアルユース)

■ 提供資源および基本セット料金

- 1ヶ月単位で必要な資源量(上限12ヶ月分)を設定し、年度末まで利用可能
- 下は9ヶ月分を設定する場合です

・ Oakbridge-CX (最大4セットまで)

利用負担金(税込)	利用可能ノード数	トークン	ディスク量
27,000円/9ヶ月分	最大256ノード (14,336コア)	6,480ノード時間	4TB/group 50GB/利用者

・ Oakforest-PACS (最大8セットまで)

利用負担金(税込)	利用可能ノード数	トークン	ディスク量
13,500円/9ヶ月分	最大2,048ノード (139,264コア)	6,480ノード時間	1TB/group 50GB/利用者

- 同一計算機システムに対して、
同一企業内の1部署あたり1回のみの申請が可能です

②-2 トライアルユース制度企業利用グループコース(4/5) (有償トライアルユース)

■ 提供資源および基本セット料金

- 1ヶ月単位で必要な資源量(上限12ヶ月分)を設定し、年度末まで利用可能
- 下は9ヶ月分を設定する場合です

・ **Wisteria/BDEC-01(最大6セットまで)**

	利用負担金(税込)	利用可能ノード数	トークン	ディスク量
Wisteria-Odyssey	16,200円/9ヶ月	最大2,304ノード (110,592コア、予定)	6480 トークン	2TB/ group 50GB/ 利用者
Wisteria-Aquarius		最大8ノード (CPU+GPU) または 64GPU		

* Wisteria-Aquariusを使用した場合は、1時間**GPU1基**あたり**3倍**のトークンを消費します
1ノードではさらに**8倍**のトークンを消費します (Odysseyの24倍)

- ### ■ 同一計算機システムに対して、 同一企業内の1部署あたり1回のみの申請が可能です

②-2 トライアルユース制度企業利用グループコース(4/5) (無償トライアルユース)

■ 提供資源

ー 利用期間は最大3ヶ月です

ー **利用負担金は0円です**

ー 提供する全システムについて、利用可能ノード数,トークン量,ディスク量は、有償トライアルユースと同じです

▪ **Wisteria**

▪ **Oakforest-PACS**

▪ **Oakbridge-CX**

▪ **Reedbush-H**

▪ **Reedbush-L**

■ 同一計算機システムに対して、

同一企業内の1部署あたり1回のみの申請が可能です

■ 有償トライアルユースとの一括申込が可能です

▪ 無償3ヶ月＋有償申込で年度末までの利用が可能です

③企業利用制度(通常利用)

<https://www.cc.u-tokyo.ac.jp/guide/company/>

■東大スパコンを企業が利用するための最も一般的な制度

- グループ利用(いわゆる「企業利用」)
 - ー毎年3~4グループを採択, 基礎的な研究が多い
 - ーパーソナルコースはなし
- 原則はオープンソース, 自作コードに限定(ISVアプリ無し)
 - ーノード固定利用では柔軟な対応が可能
- アカデミック利用者と異なる審査基準(年2回募集), 負担金体系

■本制度の概要

- 大規模並列計算普及, 社会貢献
- ビジネスへの萌芽的段階での支援, データセンターと競合しない
- 成果は原則公開, 提供資源は全資源の10%以下
 - Reedbush-H: 12ノード, Reedbush-L: 6ノード,
 - Oakforest-PACS: 547ノード
 - Oakbridge-CX: 136ノード
 - Wisteria-Odeyssey: 768ノード, Wisteria-Aquarius: 5ノード
- 利用負担金は電気代をベースとする

③企業利用制度(一般グループ利用)(1/4)

■グループに登録できる利用者数は無制限

割り当てられたトークンをグループに登録された利用者で共有

■利用計算資源の申込単位

- ・全システム1セット単位
- ・申込セット数に応じた量のトークンが得られます
例) 36セット申込の場合

$$36 \times 360(\text{日}) \times 24(\text{時間}) = 311,040 \text{ トークン}$$

- ・申込セット数 ≠ 最大利用可能ノード数

■割り当てディスク容量

- ・Reedbush: 2GB/利用者, 1TB/グループ申込1セット
- ・Oakforest-PACS: 50GB/利用者, 1TB/グループ申込1セット
- ・Oakbridge-CX: 50GB/利用者, 4TB/グループ申込1セット
- ・Wisteria-O: 50GB/利用者, 2TB/グループ申込1セット
- ・Wisteria-A: 50GB/利用者, 6TB/グループ申込1セット

③企業利用制度(一般グループ利用)(2/4)

■提供資源および基本セット料金

- 利用期間は1ヶ月単位1～12ヶ月で設定されています
- 下は12ヶ月利用の場合です

▪ Oakbridge-CX

申込セット数	利用負担金(税込)	利用可能ノード数	トークン	ディスク量
1セットあたり	120,000円/12ヶ月	最大256ノード (14,336コア)	8,640 ノード時間	4TB/group 50GB/人

▪ Oakforest-PACS

申込セット数	利用負担金(税込)	利用可能ノード数	トークン	ディスク量
1セットあたり	60,000円/12ヶ月	最大2,048ノード (139,264コア)	8,640 ノード時間	1TB/group 50GB/人

③企業利用制度(一般グループ利用)(3/4)

■提供資源および基本セット料金

- 利用期間は1ヶ月単位1～12ヶ月で設定されています
- 下は8ヶ月利用の場合です(Reedbushは2021年11月運用終了)

▪Reedbush-H

申込セット数	利用負担金(税込)	利用可能ノード数	トークン	ディスク量
1セットあたり	144,000円/8ヶ月	最大32ノード (CPU+GPU)	14,400 ノード時間	4TB/group 2GB/人

▪Reedbush-L

申込セット数	利用負担金(税込)	利用可能ノード数	トークン	ディスク量
1セットあたり	240,000円/8ヶ月	最大16ノード (CPU+GPU)	23,040 ノード時間	4TB/group 2GB/人

③企業利用制度(一般グループ利用)(4/4)

■提供資源および基本セット料金

- 利用期間は1ヶ月単位1～12ヶ月で設定されています
- 下は12ヶ月利用の場合です

▪ Wisteria-Odyssey

申込セット数	利用負担金(税込)	利用可能ノード数	トークン	ディスク量
1セットあたり	72,000円/12ヶ月	最大2,304ノード (110,592コア、予定)	8640 トークン	2TB/group 50GB/人

▪ Wisteria-Aquarius

申込セット数	利用負担金(税込)	利用可能ノード数	トークン	ディスク量
1セットあたり	216,000円/12ヶ月	最大8ノード (CPU+GPU) または 64GPU (ノードあたりでは 8倍消費)	25,920 トークン	6TB/group 50GB/人

③企業利用制度(ノード固定利用)(1/4)

■企業から寄せられる様々な需要に対応可能

- 機密性を高めたい
 - 専用ログインノードの設置
 - 共用HDDから分離した専用HDDの設置
 - 共用回線から分離した専用線の引き込み
- 利便性を高めたい
 - ~~ノード占有によりジョブの即時実行を保証~~
 - 個別ソフトウェアのインストール可能：
ISVによる一般商用ソフト（NASTRAN等）の使用に対応

■非ノード固定利用との違い

- 学術機関および企業を合わせて、全体の15%程度が上限
- トークンがなくなった時点で占有ノードが解放される
(資源に余裕があれば占有ノード用トークンの追加購入可能)
- 専用バッチジョブキューを使用
(一般のバッチジョブキューを使用することも可能)

③企業利用制度(ノード固定利用)(2/4)

■提供資源および基本セット料金

- 利用期間は1ヶ月単位1～12ヶ月で設定されています
- 下は12ヶ月利用の場合です

▪ Oakbridge-CX

申込セット数	利用負担金(税込)	利用可能ノード数	トークン	ディスク量
1セットあたり (1ノード割当)	180,000円/12ヶ月	最大256ノード (14,336コア)	8,640 ノード時間	4TB/group 50GB/人

▪ Reedbush-L

申込セット数	利用負担金(税込)	利用可能ノード数	トークン	ディスク量
1セットあたり (1ノード割当)	540,000円/12ヶ月	最大16ノード (CPU+GPU)	34,560 ノード時間	4TB/group 2GB/人

▪ Oakforest-PACS, Reedbush-H については、ノード固定利用制度はありません

③企業利用制度(ノード固定利用)(3/4)

■提供資源および基本セット料金

- 利用期間は1ヶ月単位1～12ヶ月で設定されています
- 下は12ヶ月利用の場合です

・ **Wisteria-Odyssey**については、ノード固定利用制度はありません

・ **Wisteria-Aquarius (ノード固定)**

申込セット数	利用負担金(税込)	利用可能ノード数	トークン	ディスク量
1セットあたり	2,592,000円/12ヶ月	最大1ノード (CPU+GPU)	207,360 トークン	6TB/group 50GB/人

③企業利用制度(ノード固定利用)(4/4)

■ 利用例: Oakbridge-CXに16セットで申し込んだ場合

- 16ノード x 360日分=138,240ノード時間のトークン
- 専用に割り当てられたバッチジョブキューを使用
 - グループ内合計で同時に利用できるノード数は最大16
 - 例えば, 8ノードのジョブを同時に2本実行することも可能
 - 使用ノード時間分のトークンが消費されます
- 専用のバッチジョブキューで既に16ノード使用中の場合
 - 同じキューを指定すると、必要なノードが空くまで待たされる
 - 同時に計算を実行したい場合, バッチジョブキュー(グループ利用(一般)用)で計算を実行することも可能
 - 使用ノード時間に応じてトークンは消費, ノード固定分に使えるトークンはそれだけ減少
- 16ノード以上の計算をしたい場合
 - バッチジョブキュー(グループ利用(一般)用)で計算を実行することも可能
 - mediumジョブキュー等で実行可能(regularキューを指定)

③企業利用制度(GPU専有申込)

■ **Wisteria-Aquarius**にのみ設定

- GPUジョブを随時実行可能(固定ノードのGPU)
- GPU数1～7まで申し込み可能(8GPUはノード固定に申請)

■ 提供資源および基本セット料金

- 利用期間は1ヶ月単位1～12ヶ月で設定されています
- 下は12ヶ月利用の場合です

申込セット数	利用負担金(税込)	利用可能ノード数	トークン	ディスク量
1セットあたり	324,000円/12ヶ月	1GPU	25,920 トークン	6TB/group 50GB/人

③企業利用制度（追加ディスク、トークン）

■追加ディスク、トークン

以下の料金を負担することでディスクおよびトークンを追加できます

■トークンの追加には、別途、審査が必要です

・追加ディスク

システム名	料金	追加量
Reedbush	6,480円	1TB/年
Oakforest-PACS	6,480円	1TB/年
Oakbridge-CX	6,480円	1TB/年
Wisteria/BDEC-01	6,480円	1TB/年

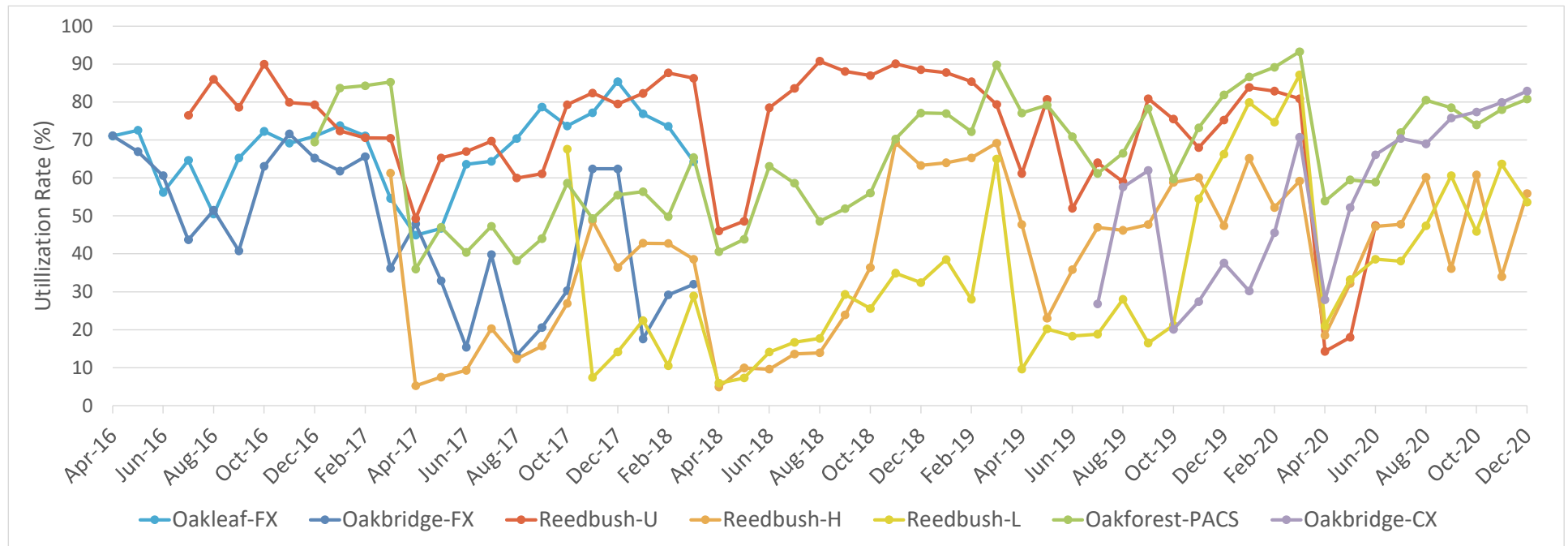
・追加トークン

システム名	料金	追加量
Reedbush-H	7,500円	288ノード時間 (RB-H換算で)
Reedbush-L		180ノード時間 (RB-L換算で)
Oakforest-PACS	5,000円	720ノード時間 (1ノード×30日)
Oakbridge-CX	10,000円	720ノード時間 (1ノード×30日)
Wisteria/BDEC-01 (共通)	6,000円	720ノード時間 (Odyssey1ノード×30日)

- 東大情報基盤センターについて
- サービス概要
- 企業による利用制度
 - 制度概略と利用提案
 - 申込・審査・成果報告
 - スパコン利用への道
 - ①お試しアカウント付き並列プログラミング講習会
 - ②トライアルユース制度
 - ③ 企業利用制度
- **スーパーコンピュータシステム概要**
 - **Reedbush**
 - **Oakforest-PACS**
 - **Oakbridge-CX**
 - **Wisteria/BDEC-01**
 - 運用
- ご質問は

各システムの月平均利用率履歴

73



各種ベンチマーク

- TOP 500 (Linpack, HPL)
 - 連立一次方程式ソルバー(直接法), 計算速度(FLOPS値)
 - 規則的な密行列: 連続メモリアクセス
 - 計算性能
- HPCG
 - 連立一次方程式ソルバー(反復法), 計算速度(FLOPS値)
 - 有限要素法から得られる疎行列(ゼロが多い)
 - 不連続メモリアクセス
 - 実アプリケーションに近い
 - メモリアクセス性能, 通信性能
- Green 500
 - HPL (TOP500) 実行時のFLOPS/W値

56th TOP500 List (November, 2020)

<http://www.top500.org/>

				HPL 性能	物理 ピーク 性能	消費 電力
	Site	Computer/Year Vendor	Cores	R _{max} (TFLOPS)	R _{peak} (TFLOPS)	Power (kW)
1	<u>Supercomputer Fugaku, 2020, Japan</u> RIKEN Center for Computational Science (R-CCS)	Supercomputer Fugaku, A64FX 48C 2.2GHz, Tofu interconnect D, Fujitsu	7,630,848	442,010 (= 442.01 PF)	537,212	29,899
2	<u>Summit, 2018, USA</u> DOE/SC/Oak Ridge National Laboratory	IBM Power System AC922, IBM POWER9 22C 3.07GHz, NVIDIA Volta GV100, Dual-rail Mellanox EDR Infiniband	2,414,592	148,600	200,795	10,096
3	<u>Sieera, 2018, USA</u> DOE/NNSA/LLNL	IBM Power System S922LC, IBM POWER9 22C 3.1GHz, NVIDIA Volta GV100, Dual-rail Mellanox EDR Infiniband	1,572,480	94,640	125,712	7,438
4	<u>Sunway TaihuLight, 2016, China</u> National Supercomputing Center in Wuxi	Sunway MPP, Sunway SW26010 260C 1.45GHz, Sunway	10,649,600	93,015	125,436	15,371
5	<u>Selene, 2020, USA</u> NVIDIA Corporation	DGX A100 SuperPOD, AMD EPYC 7742 64C 2.25GHz, NVIDIA A100, Mellanox HDR Infiniband	555,520	63,460	79,125	2,646
6	<u>Tianhe-2A, 2018, China</u> National Super Computer Center in Guangzhou	TH-IVB-FEP Cluster, Intel Xeon E5-2692v2 12C 2.2GHz, TH Express-2, Matrix-2000	4,981,760	61,445	100,679	18,482
7	<u>JUWELS Booster Module, 2020, Germany</u> Forschungszentrum Juelich (FZJ)	Bull Sequana XH2000, AMD EPYC 7402 24C 2.8GHz, NVIDIA A100, Mellanox HDR Infiniband	277,760	27,580	34,568.6	1,344
8	<u>HPC5, 2020, Italy</u> Eni S.p.A (Ente Nazionale Idrocarburi)	PowerEdge C4140, Xeon Gold 6252 24C 2.1GHz, NVIDIA Tesla V100, Mellanox HDR Infiniband, Dell EMC	669,760	35,450	51,720.8	2,252
9	<u>Frontera, 2019, USA</u> Texas Advanced Computing Center	Dell C6420, Xeon Platinum 8280 28c 2.7GHz, Mellanox Infiniband HDR	448,448	23,516	38,746	
10	<u>Dammam-7, 2020, Saudi Arabia</u> Saudi Aramco	Cray CS-Storm, Xeon Gold 6248 20C, 2.5GHz, NVIDIA V100 SXM2, Infiniband HDR 100, HPE	387,872	21,230	27,154	2,384
22	<u>Oakforest-PACS, 2016, Japan</u> Joint Center for Advanced High Performance Computing	Fujitsu PRIMERGY CX1640 M1, Intel Xeon Phi 7250 68C 1.4GHz, Intel Omni-Path	556,104	13,556	24,913	2,719

HPCG Ranking (Nov., 2020)

	Computer	Cores	HPL Rmax (Pflop/s)	TOP500 Rank	HPCG (Pflop/s)
1	Fugaku	7,630,848	442,010	1	16.004
2	Summit	2,414,592	148.600	2	2.926
3	Sierra	1,572,480	94.640	3	1.796
4 (6)	Selene	555,520	63,460	5	1.622
5	JUWELS Booster Module	449,280	44,120	7	1.275
6	Dammam-7	672,520	22,400	10	0.881
7 (4)	HPC5	669,760	35,450	8	0.860
8	TOKI-SORA (JAXA, Japan)	276,480	16,592	19	0.614
9	Trinity	979,072	20,158	13	0.546
10	Plasma Simulator (NIFS, Japan, SX-Aurora TSUBASA)	34,560	7,892	33	0.529
16 (11)	Oakforest-PACS	556,104	13.555	19	0.385

Green 500 Ranking (Nov., 2020)

<http://www.top500.org/>

	TOP 500 Rank	System	Accelerator	Cores	HPL Rmax (Pflop/s)	Power (kW)	GFLOPS/ W
1	172	NVIDIA DGX SuperPOD, USA	NVIDIA A100	19,840	2,356	90	26.195
2 (1)	332	MN-3, Preferred Networks, Japan	MN-Core	1,664	1,653	65	*26.039
3	7	JUWELS Booster Module, Germany	NVIDIA A100	449,280	44,120	1,764	25.008
4	148	Spartan2, France	NVIDIA A100	23,040	2,566	106	24.262
5 (7)	5	Selena, NVIDIA, USA	NVIDIA A100	555,520	63,460	2,646	23.983
6 (4)	241	A64FX Prototype, Fujitsu, Japan		36,864	1.999	118	16.876
7 (5)	29	AiMOS, USA	NVIDIA V100	130,000	8.339	512	16.285
8 (6)	8	HPC5, Italy	NVIDIA V100	669,760	35.450	2,252	15.740
9 (7)	460	Satori, USA	NVIDIA V100	34,040	1.464	94	15.574
10 (9)	1	Fugaku, Fujitsu, Japan		7,630,848	442,010	29,899	*15.418
(13)	Nov.'17	Reedbush-L, U.Tokyo, Japan	NVIDIA P100	16,640	806	79	10.167
(19)		Reedbush-H, U.Tokyo, Japan	NVIDIA P100	17,760	802	94	8.576

HPL測定時のGFLOPS/W(ピーク性能換算): 大きいほど高効率

78

System	GFLOPS/W
Reedbush-U (HPE) (Intel Xeon Broadwell (BDW), すでに引退)	2.310
Reedbush-H (HPE) (Intel BDW+NVIDIA P100x2/node)	8.575
Reedbush-L (HPE) (Intel BDW+NVIDIA P100x4/node)	10.167
Oakforest-PACS (Fujitsu) (Intel Xeon Phi/Knights Landing)	4.986
Oakbridge-CX (Fujitsu) (Intel Xeon Cascade Lake (CLX))	5.076
富岳(Fugaku) (Fujitsu/Arm A64FX)	14.78

3システム：利用者2,600+, 学外55+%

- **Reedbush (HPE, Intel BDW + NVIDIA P100 (Pascal))**
 - データ解析・シミュレーション融合スーパーコンピュータ
 - 3.36 PF, 2016年7月～2021年11月末(予定)
 - Reedbush-U (CPU only, 2020年6月30日で退役)
 - Reedbush-H (2GPU's/n), Reedbush-L (4GPU's)
 - 東大ITC初のGPUシステム (2017年3月より), DDN IME (Burst Buffer)
- **Oakforest-PACS (OFP) (富士通, Intel Xeon Phi (KNL))**
 - JCAHPC (筑波大CCS & 東大ITC)
 - 25 PF, TOP500で22位(日本4位)(2020年11月)
 - Omni-Path アーキテクチャ, DDN IME (Burst Buffer)
- **Oakbridge-CX (富士通, Intel Xeon Platinum 8280)**
 - 大規模超並列スーパーコンピュータシステム
 - 6.61 PF, 2019年7月～2023年6月, TOP500で69位(2020年11月)
 - 全1,368ノードの内128ノードにSSDを搭載



Reedbush (1/2)

- システム構成・運用: SGI => HP
- Reedbush-U (CPU only, 2016年7月～2020年6月運用終了)
 - Intel Xeon E5-2695v4 (Broadwell-EP, 2.1GHz, 18core) x 2ソケット (1.210 TF), 256 GiB (153.6GB/sec)
 - InfiniBand EDR, Full bisection BW Fat-tree
 - システム全系: 420 ノード, 508.0 TF
- Reedbush-H (with GPU, 2017年3月～)
 - CPU・メモリ: Reedbush-U と同様
 - **NVIDIA Tesla P100** (Pascal世代 GPU: 5.3TF, 720GB/sec, 16GiB) x 2 / ノード
 - InfiniBand **FDR x 2ch**, Full bisection BW Fat-tree
 - 120 ノード, 145.2 TF(CPU)+ 1.27 PF(GPU)= 1.42 PF
- Reedbush-L (with GPU: 長時間ジョブ用, **2017年10月～**)
 - CPU・メモリ: Reedbush-U と同様
 - **NVIDIA Tesla P100** (Pascal世代 GPU: 5.3TF, 720GB/sec, 16GiB) x 4 / ノード
 - InfiniBand **EDR x 2ch**, Full bisection BW Fat-tree (U, Hとは少し遠い)
 - 64 ノード, 76.8 TF(CPU)+ 1.35 PF(GPU)= 1.43 PF

Reedbush (2/2)

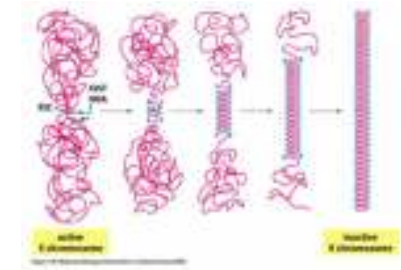
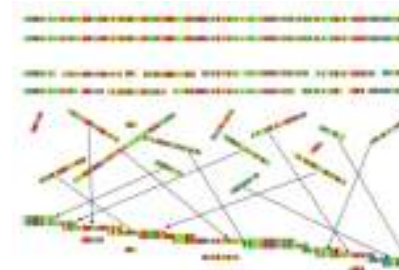
- ストレージ/ファイルシステム
 - 並列ファイルシステム (Lustre)
 - 5.04 PB, 145.2 GB/sec
 - 高速ファイルキャッシュシステム: Burst Buffer (DDN IME (Infinite Memory Engine)) : SSDによるキャッシュ
 - Reedbush-U,H: 230.4 TB, 385.2 GB/sec
 - Reedbush-L: 153.6 TB, 166.4 GB/sec
- 電力, 冷却, 設置面積
 - 空冷, 368 kW (RB-U,H) + 134 kW (RB-L) (冷却除く)
 - < 90 m²
- データ解析、ディープラーニング向けソフトウェア・ツールキット
 - OpenCV, Theano, Anaconda, ROOT, TensorFlow, Torch, Caffe, Chainer, GEANT4

Reedbush仕様

	Reedbush-U	Reedbush-H	Reedbush-L
	Integrated Supercomputer System for Data Analyses & Scientific Simulations		Supercomputer System with Accelerators for Long-Term Executions
CPU/node	Intel Xeon E5-2695v4 (Broadwell-EP, 2.1GHz, 18core) x 2 sockets (1.210 TF), 256 GiB (153.6GB/sec)		
GPU	-	NVIDIA Tesla P100 (Pascal, 5.3TF, 720GB/sec, 16GiB)	
Infiniband	EDR	FDR × 2ch	EDR × 2ch
Nodes #	420	120	64
GPU #	-	240 (=120 × 2)	256 (=64 × 4)
Peak Performance (TFLOPS)	509	1,417 (145 + 1,272)	1,433 (76.8 + 1,358)
Total Memory Bandwidth (TB/sec)	64.5	191.2 (18.4+172.8)	194.2 (9.83+184.3)
since	2016.07 (retired)	2017.03	2017.10

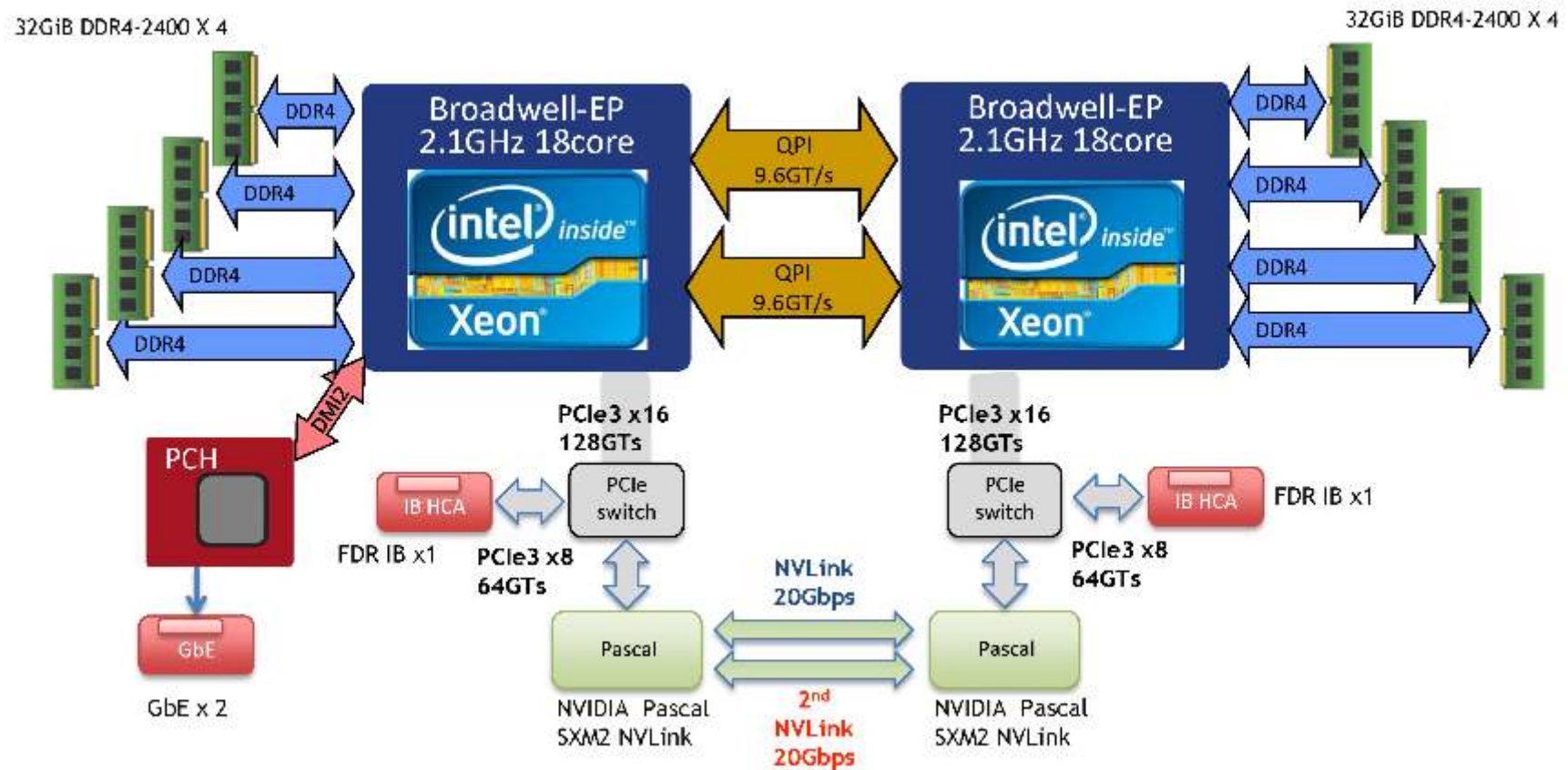
GPUの導入

- OpenACC
 - OpenMPと類似したインタフェース: 使いやすいが性能悪かった
⇒ 昨今の性能向上, CUDAとそれほど大きな差がなくなった
 - NVIDIA研究者との共同研究
 - OpenACC専門家など、GPUに詳しい人材の情報基盤センターへの加入
- データ科学, 深層学習 (Deep Learning)
 - 従来の計算科学, 計算工学分野とは異なった分野の新規ユーザー開拓が急務: 電気代 = 負担金
 - 東京大学ゲノム医科学研究機構
 - 東京大学病院
 - 医療画像処理への深層学習適用



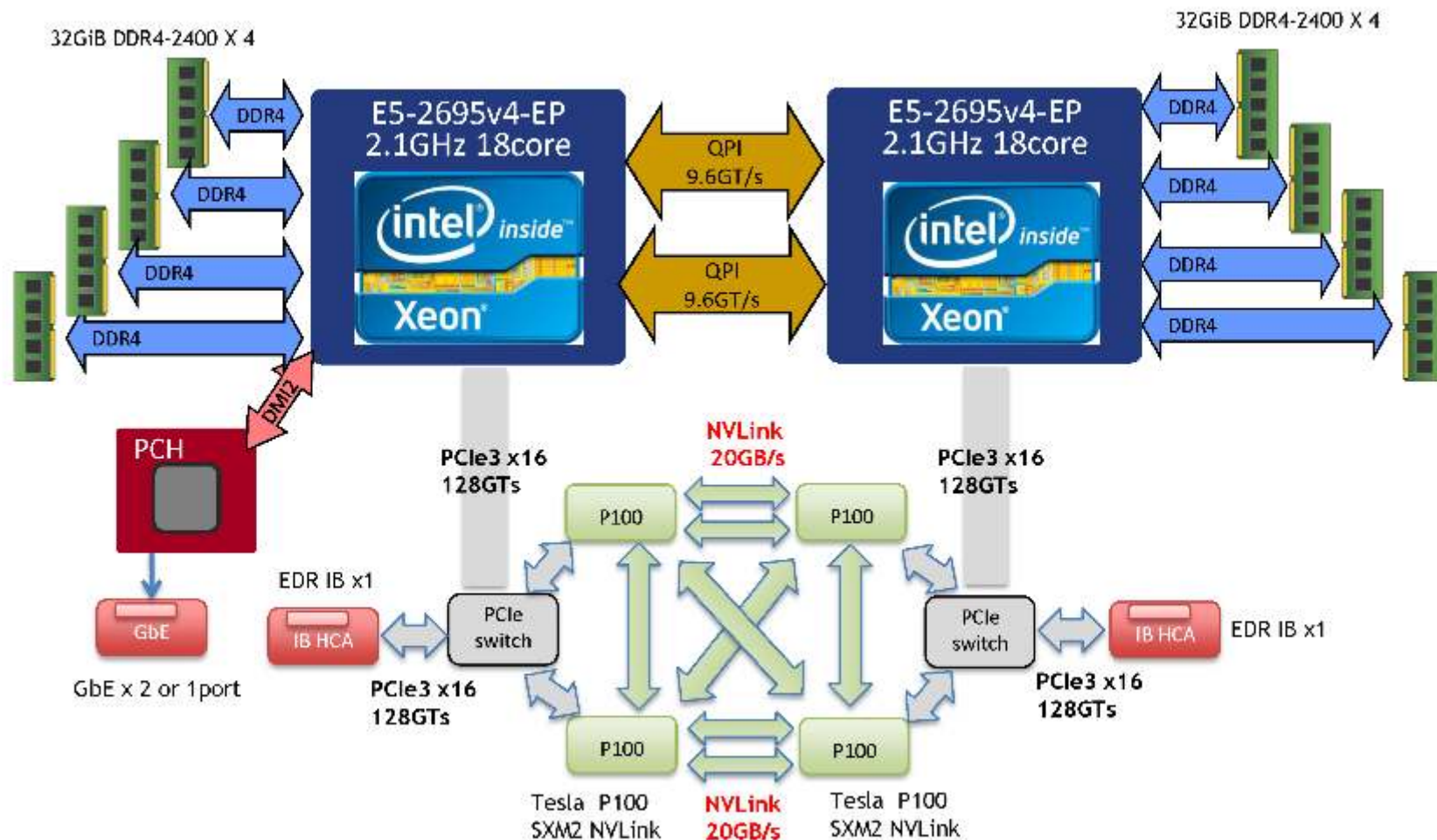
Compute Node of Reedbush-H

Reedbush-L: 各ソケットにPascal 1個=>2個ずつ, FDR=>EDR

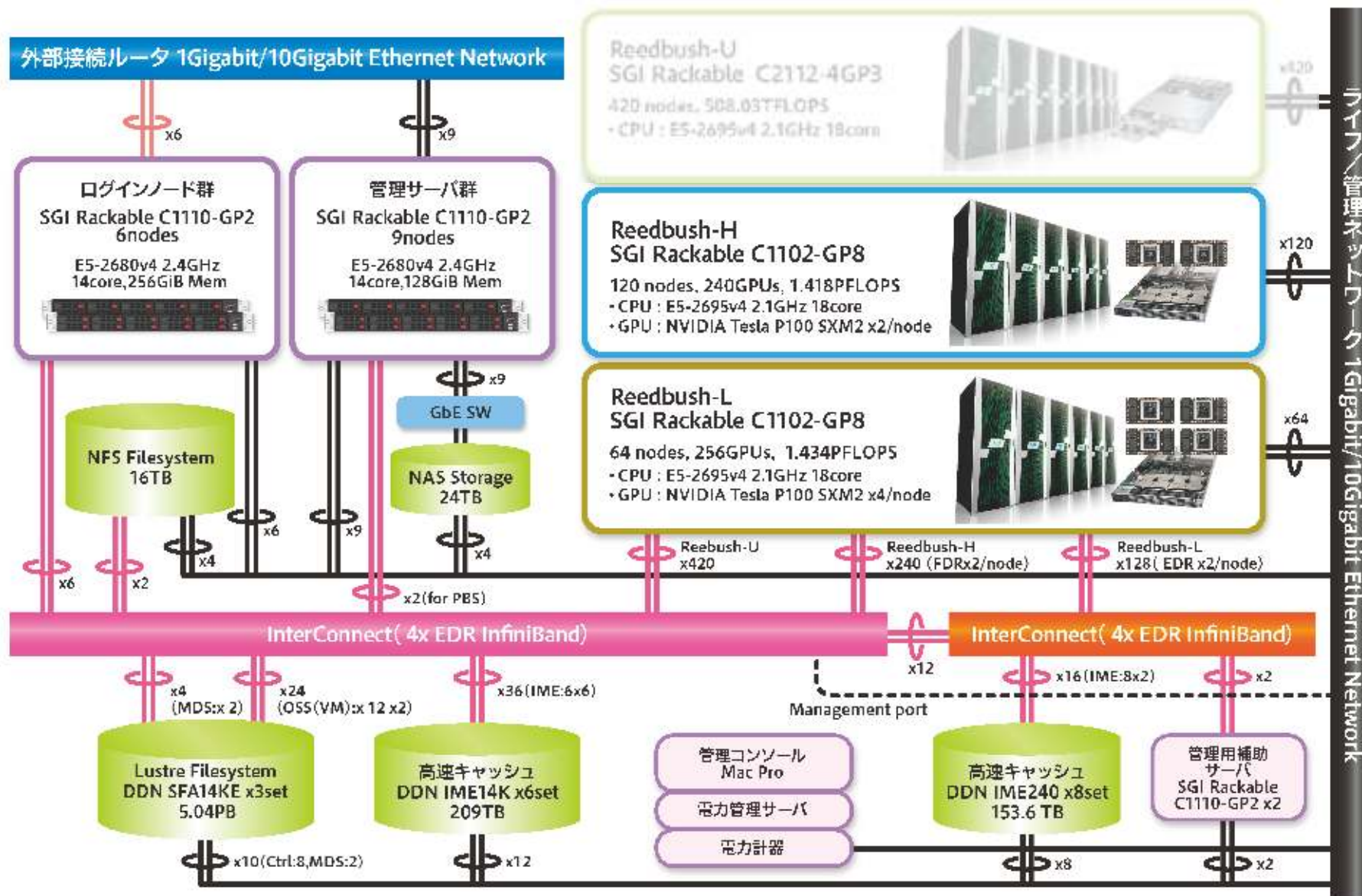


Compute Node of Reedbush-L

Reedbush-L: 各ソケットにPascal 1個=>2個ずつ, FDR=>EDR



Reedbushシステム概要



ソフトウェア構成

項目	Reedbush-U	Reedbush-H, L
OS	Red Hat Enterprise Linux 7	
コンパイラ	GNU コンパイラ Intel コンパイラ (Fortran77/90/95/2003/2008、C、C++)	
		PGI コンパイラ (Fortran77/90/95/2003/2008、C、C++、OpenACC 2.0、 CUDA Fortran) NVCC コンパイラ (CUDA C)
メッセージ通信ライブラリ	Intel MPI, SGI MPT, Open MPI, MVAPICH2, Mellanox HPC-X	
		GPUDirect for RDMA: Open MPI, MVAPICH2-GDR
ライブラリ	Intel 社製ライブラリ(MKL): BLAS、LAPACK、ScaLAPACK その他ライブラリ: SuperLU、SuperLU MT、SuperLU DIST、METIS、MT-METIS、ParMETIS、 Scotch、PT-Scotch、PETSc、FFTW、GNU Scientific Library、NetCDF、PnetCDF など	
		cuBLAS、cuSPARSE、cuFFT、MAGMA、OpenCV、ITK、 Theano、Anaconda、ROOT、TensorFlowなど
アプリケーション	OpenFOAM、ABINT-MP PHASE、FrontFlow、FrontISTR、REVOCAP、ppOpen-HPC など	
デバッガ、プロファイラ	Total View, Intel VTune, Trace Analyzer & Collector	

ソフトウェア構成：データ解析向け

- OpenCV
 - コンピューター・ビジョン・ライブラリ
- ROOT
 - ビッグデータ向けのライブラリ
- TensorFlow, Keras, Chainer, Horovod, ...
 - 機械学習向けライブラリ
- Singularity
 - Docker互換コンテナ

など...要望に応じて追加

Reedbushに関する情報

- 利用全般
 - <https://www.cc.u-tokyo.ac.jp/supercomputer/reedbush/service/>
- システム紹介
 - <https://www.cc.u-tokyo.ac.jp/supercomputer/reedbush/system.php>
- ジョブクラス
 - <https://www.cc.u-tokyo.ac.jp/supercomputer/reedbush/service/job.php>
- 利用申込・利用負担金
 - <https://www.cc.u-tokyo.ac.jp/guide/application/>
- FAQ
 - <https://www.cc.u-tokyo.ac.jp/faq/reedbush.php>

3システム: 利用者2,600+, 学外55+%

- Reedbush (HPE, Intel BDW + NVIDIA P100 (Pascal))
 - データ解析・シミュレーション融合スーパーコンピュータ
 - 3.36 PF, 2016年7月～2021年11月末(予定)
 - Reedbush-U (CPU only, 2020年6月30日で退役)
 - Reedbush-H (2GPU's/n), Reedbush-L (4GPU's)
 - 東大ITC初のGPUシステム (2017年3月より), DDN IME (Burst Buffer)
- Oakforest-PACS (OFP) (富士通, Intel Xeon Phi (KNL))
 - JCAHPC (筑波大CCS & 東大ITC)
 - 25 PF, TOP500で22位 (日本4位) (2020年11月)
 - Omni-Path アーキテクチャ, DDN IME (Burst Buffer)
- Oakbridge-CX (富士通, Intel Xeon Platinum 8280)
 - 大規模超並列スーパーコンピュータシステム
 - 6.61 PF, 2019年7月～2023年6月, TOP500で69位 (2020年11月)
 - 全1,368ノードの内128ノードにSSDを搭載



Oakforest-PACS (OFP)

- 2016年12月1日稼働開始
- 8,208 Intel Xeon/Phi (KNL), ピーク性能25PFLOPS
 - 富士通が構築
- TOP 500 22位(国内4位), HPCG 16位(国内5位)
(2020年11月)

- 最先端共同HPC 基盤施設(JCAHPC: Joint Center for Advanced High Performance Computing)

- 筑波大学計算科学研究センター
- 東京大学情報基盤センター



- 東京大学柏キャンパスの東京大学情報基盤センター内に、両機関の教職員が中心となって設計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

- <http://jcahpc.jp>



東京大学
THE UNIVERSITY OF TOKYO



筑波大学
University of Tsukuba

Oakforest-PACS 全景



時事通信
www.jiji.com

国内最高性能の新スパコン「オークフォレスト・パックス」の前で握手する
東大の中村宏情報基盤センター長(左)と筑波大の梅村雅之計算科学研究センター長
＝1日午後、千葉県柏市の東大柏キャンパス

Oakforest-PACSの特徴 (1/2)

- 計算ノード

- 1ノード 68コア,
3TFLOPS × 8,208ノード =
25 PFLOPS
- メモリ(MCDRAM(高速,
16GB) + DDR4(低速,
96GB))



- ノード間通信

- フルバイセクションバンド幅を持つFat-Treeネットワーク
- 全系運用時のアプリケーション性能に効果, 多ジョブ運用
- Intel Omni-Path Architecture



Oakforest-PACS の仕様

総ピーク演算性能		25 PFLOPS
ノード数		8,208
計算 ノード	Product	富士通 PRIMERGY CX600 M1 (2U) + CX1640 M1 x 8node
	プロセッサ	Intel® Xeon Phi™ 7250 (開発コード: Knights Landing) 68 コア、1.4 GHz
	メモリ	高バンド幅 16 GB, MCDRAM, 実効 490 GB/sec
		低バンド幅 96 GB, DDR4-2400, ピーク 115.2 GB/sec
相互結 合網	Product	Intel® Omni-Path Architecture
	リンク速度	100 Gbps
	トポロジ	フルバイセクションバンド幅Fat-tree網

Oakforest-PACS の特徴 (2 / 2)

- ファイルI/O

- 並列ファイルシステム:
Lustre 26PB
- ファイルキャッシュシステム
(DDN IME):
1TB/secを超える実効性能,
約1PB
 - 計算科学・ビッグデータ解析
 - 機械学習にも貢献



並列ファイル
システム

ファイルキャッシュ
システム



- 消費電力

- Green 500でも世界6位(
2016年11月)
- Linpack: 2.72 MW
 - 4,986 MFLOPS/W(OFP)
 - 830 MFLOPS/W(京)



ラック当たり120ノード
の高密度実装

Oakforest-PACS の仕様(続き)

並列ファイルシステム	Type	Lustre File System
	総容量	26.2 PB
	Product	DataDirect Networks SFA14KE
	総バンド幅	500 GB/sec
高速ファイルキャッシュシステム	Type	Burst Buffer, Infinite Memory Engine (by DDN)
	総容量	940 TB (NVMe SSD, パリティを含む)
	Product	DataDirect Networks IME14K
	総バンド幅	1,560 GB/sec
総消費電力		4.2MW(冷却を含む)
総ラック数		102

Oakforest-PACS のソフトウェア

- OS: Red Hat Enterprise Linux (ログインノード)、CentOS および McKernel (計算ノード、切替可能)
 - **McKernel**: 理研AICSで開発中のメニーコア向けOS
 - Linux互換、Linuxに比べ軽量、ユーザプログラムに与える影響なし
 - ポスト京コンピュータにも搭載される予定。
- コンパイラ: GCC, Intel Compiler, XcalableMP
 - **XcalableMP**: 理研AICSと筑波大で共同開発中の並列プログラミング言語
 - CやFortranで記述されたコードに指示文を加えることで、性能の高い並列アプリケーションを簡易に開発することができる。
- ライブラリ・アプリケーション: オープンソースソフトウェア
 - **ppOpen-HPC**, OpenFOAM, ABINIT-MP, PHASE system, FrontFlow/blue, LAPACK, ScaLAPACK, PETSc, METIS, SuperLU etc.

運用

- 計算資源は全系を共用(パーティション分けはしない)
 - 全8,208ノード(25PF)を常に全系で運用できるようにしておき, 国内最大の計算資源を有効に活用する

利用形態

- 各大学独自の利用コース
- HPCI
 - 全資源の20%を「JCAHPC」として拠出, 企業利用可能
- JHPCN(学際大規模情報基盤共同利用共同研究拠点)
 - 全資源の5%程度: 企業共同研究, 国際共同研究も含む(東大のみ)
- 教育(講義, 講習会)
- 大規模HPCチャレンジ: 全ノード占有

Oakforest-PACSに関する情報(1)

- JCAHPC
 - <http://jcahpc.jp>
- Oakforest-PACS がTop500で国内最高性能に認定[プレスリリース]
 - <http://www.jcahpc.jp/pr/pr-20161114.html>
- 運用開始に関する報道等(主なもの)
 - 日本経済新聞
http://www.nikkei.com/article/DGXLASDG01H23_R01C16A2CR0000/
 - 共同通信
<https://this.kiji.is/176995523516057077?c=39546741839462401>
 - ITMedia
<http://www.itmedia.co.jp/news/articles/1612/02/news116.html>
 - マイナビニュース <http://news.mynavi.jp/news/2016/12/02/035/>
 - 他

Oakforest-PACSに関する情報(2)

- 利用全般
 - <https://www.cc.u-tokyo.ac.jp/supercomputer/ofp/service/>
- システム紹介
 - <https://www.cc.u-tokyo.ac.jp/supercomputer/ofp/system.php>
- ジョブクラス
 - <https://www.cc.u-tokyo.ac.jp/supercomputer/ofp/service/job.php>
- 利用申込・利用負担金
 - <https://www.cc.u-tokyo.ac.jp/guide/application/>
- FAQ
 - <https://www.cc.u-tokyo.ac.jp/faq/ofp.php>

3システム: 利用者2,600+, 学外55+%

- Reedbush (HPE, Intel BDW + NVIDIA P100 (Pascal))
 - データ解析・シミュレーション融合スーパーコンピュータ
 - 3.36 PF, 2016年7月～2021年11月末(予定)
 - Reedbush-U (CPU only, 2020年6月30日で退役)
 - Reedbush-H (2GPU's/n), Reedbush-L (4GPU's)
 - 東大ITC初のGPUシステム (2017年3月より), DDN IME (Burst Buffer)
- Oakforest-PACS (OFP) (富士通, Intel Xeon Phi (KNL))
 - JCAHPC (筑波大CCS & 東大ITC)
 - 25 PF, TOP500で22位 (日本4位) (2020年11月)
 - Omni-Path アーキテクチャ, DDN IME (Burst Buffer)
- Oakbridge-CX (富士通, Intel Xeon Platinum 8280)
 - 大規模超並列スーパーコンピュータシステム
 - 6.61 PF, 2019年7月～2023年6月, TOP500で69位 (2020年11月)
 - 全1,368ノードの内128ノードにSSDを搭載



Oakbridge-CX (OBCX)

計算ノード

Chassis: PRIEMRGY CX400 M1 x342 <4node / Chassis>
Node: PRIMERGY CX2550 M5 x1,240, CX2560 M5 x128



x1,368 node



全体性能

理論演算性能: 6.61PF
主記憶容量: 256.5TiB
メモリバンド幅: 385.1TB/s
ラック数: 21ラック
SSD搭載: 128ノード

ノード単体

理論演算性能: 4.8384 TF
主記憶容量: 192GiB
メモリバンド幅: 281.6GB/s

計算ノード間ネットワーク (Omni-Path Architecture) 通信性能 100Gbps

ログインノード



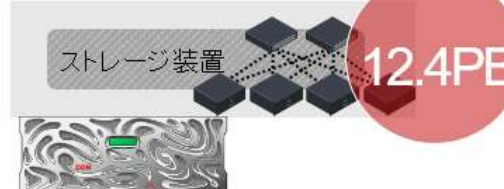
FUJITSU Server
PRIMERGY CX2560 M5 x 10

管理サーバ群



FUJITSU Server
PRIMERGY RX2530 M4 x 15
(ジョブ、運用、認証、Web、
セキュリティログ保存)

並列ファイルシステム



ストレージ装置: DDN ES18KE x2セット
ファイルシステム: DDN ExaScaler
(Lustreベースファイルシステム)

Oakbridge-CX (OBCX)

計算ノード: ラック当たり最大68ノード, 合計21ラック

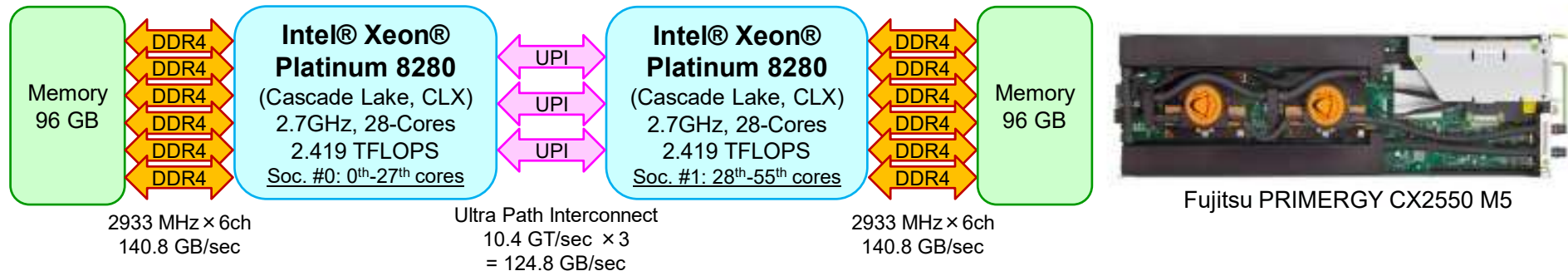
103



Oakbridge-CX

2019年7月1日運用開始

- Intel Xeon Platinum 8280 (Cascade Lake, CLX), 富士通
 - 1,368 nodes, 6.61 PF peak, 385.1 TB/sec,
 - **4.2+ PF for HPL**
- Network: Intel Omni-Path, 100 Gbps, Full Bi-Section
- Storage: DDN EXAScaler (Lustre)
 - 12.4 PB, 193.9 GB/sec
- Power Consumption:
 - 950.5 kVA



OBCX: 強力なデータ解析能力

- 全1,368ノードのうち128ノードにSSD (Solid State Drive) 搭載

- Intel SSD + BeeGFS

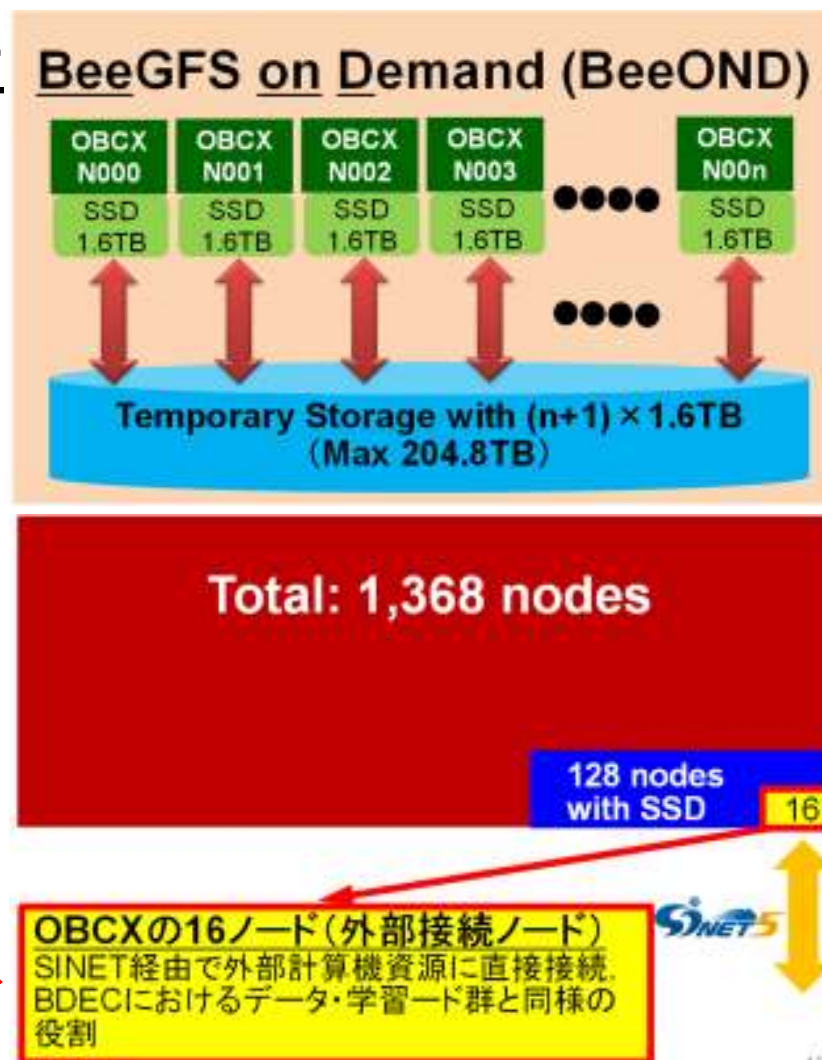
- 容量: 1.6 TB/node
- 読み書き性能: 3.20/1.32 GB/s/node
- BeeOND (BeeGFS-on-Demand) によって合計200+TB (128 × 1.6) の高速ファイルシステムとして使用可能

- データ科学アプリケーション

- ソフトウェア類も充実

- ステージング, チェックポイント

- 128ノードのうち16ノードはSINET経由で外部リソース(サーバー, ストレージ, センサーネットワーク)に直接接続⇒外部接続ノード



全体構成

項目		仕様
総理論演算性能		6.61 PFLOPS
総ノード数		1,368=1,240+112+16
総主記憶容量		256.5 TiB
ネットワークトポロジー		Full-bisection Fat Tree
並列ファイルシステム	システム名	Lustreファイル システム
	サーバ(OSS)	DDN ES18K
	サーバ(OSS)数	8
	ストレージ容量	12.4 PB
	ストレージデータ 転送速度	193.9 GB/s

ノードの構成

項目		仕様	
製品名		FujitsuPRIMERGY CX2550 M5	Fujitsu PRIMERGY CX2560 M5
ノード数		1240	112+16
CPU	プロセッサ名	Intel® Xeon® Platinum 8280 (開発コード名 : CascadeLake)	
	プロセッサ数(コア数)	2 (28+28)	
	周波数	2.7 GHz	
	理論演算性能	4.8384 TFLOPS	
Memory		192 GiB(DDR4)	
インターコネク		Intel ® Omni-Path ネットワーク (100 Gbps)	
SSD	容量	-	1.6 TB(NVMe)
	読み出し性能		3.20 GB/s
	書き込み性能		1.32 GB/s

ソフトウェア構成

項目	構成
OS	Red Hat Enterprise Linux 7, CentOS 7
コンパイラ	GNU コンパイラ Intel コンパイラ(Fortran77/90/95/2003/2008, C, C++)
メッセージ通信ライブラリ	Intel MPI, Open MPI, Intel Omni-Path Fabric Software
ライブラリ	Intel社製ライブラリ(MKL)(BLAS, CBLAS), その他(LAPACK, ScaLAPACK, SuperLU, SuperLU MT, SuperLU DIST, METIS, MT-METIS, ParMETIS, Scotch, PT-Scotch, PETSc, Trillinos, FFTW, GNU Scientific Library, NetCDF, Parallel netCDF, HDF5, Cmake, Anaconda, Xabclib, ppOpen-HPC, ppOpen-AT, MassiveThreads
アプリケーション	Mpijava, OpenFOAM, ABINIT-MP, PHASE, FrontFlow/blue, FrontISTR, REVOCAP-Coupler, REVOCAP-Refiner, OpenMX, xTAPP, AkaiKKR, MODYLAS, ALPS, feram, GROMACS, BLAST, R packages, Bioconductor, BioPerl, BioRuby, BWA, GATK, SAMtools, Quantum ESPRESSO, Xcrypt, Paraview, VisIt, POV-Ray
フリーソフトウェア	Autoconf, automake, bash, bzip2, cvs, emacs, nndutils, gawk, gdb, make, grep, gnuplot, gzip, less, m4, perl, ruby, sed, ubversion, tar, tcsh, tcl, zsh, FUSE, git 等
コンテナ仮想化	singularity (dockerイメージ利用可)

SSD搭載ノード

- Regularキューのみで使用可能
 - 最大 112ノード(一時的に数量は変更の場合あり)
 - Intel SSD: DC-P4600 (NVMe IF)
 - 容量: 1.6 TB
 - 性能: Read: 3.2 GB/s, Write: 1.32 GB/s



一時ファイルの置き場所として利用 利用方法

1. 各計算ノードのSSDを個別に使用
2. 単一の並列共有ファイルシステムを構成
([BeeGFS on Demand: BeeOND](#))
 - ステージングも可能

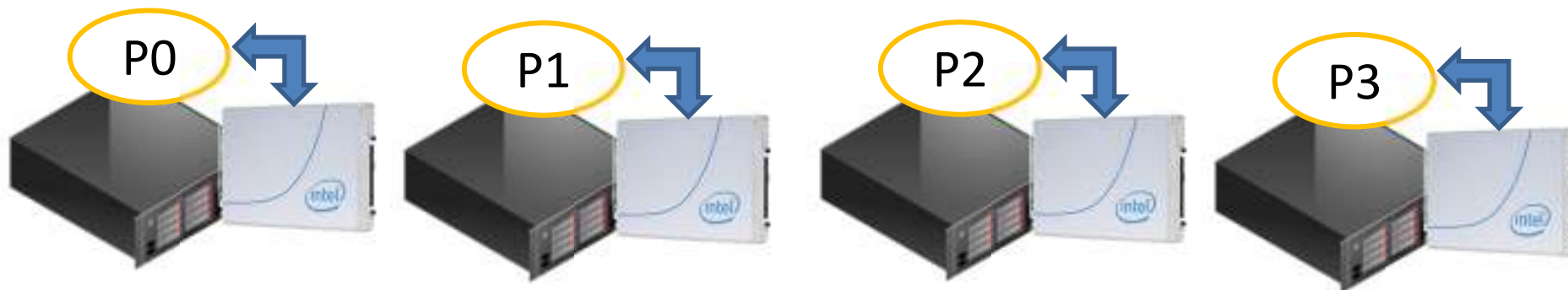


SSDノードの指定(個別に使用)

- 環境変数 PJM_SSDで搭載ノード数を指定
- ジョブ中では **PJM_SSDDIR** 環境変数で割り当てディレクトリ参照

```
$ pjsub -x PJM_SSD=4 run.sh
```

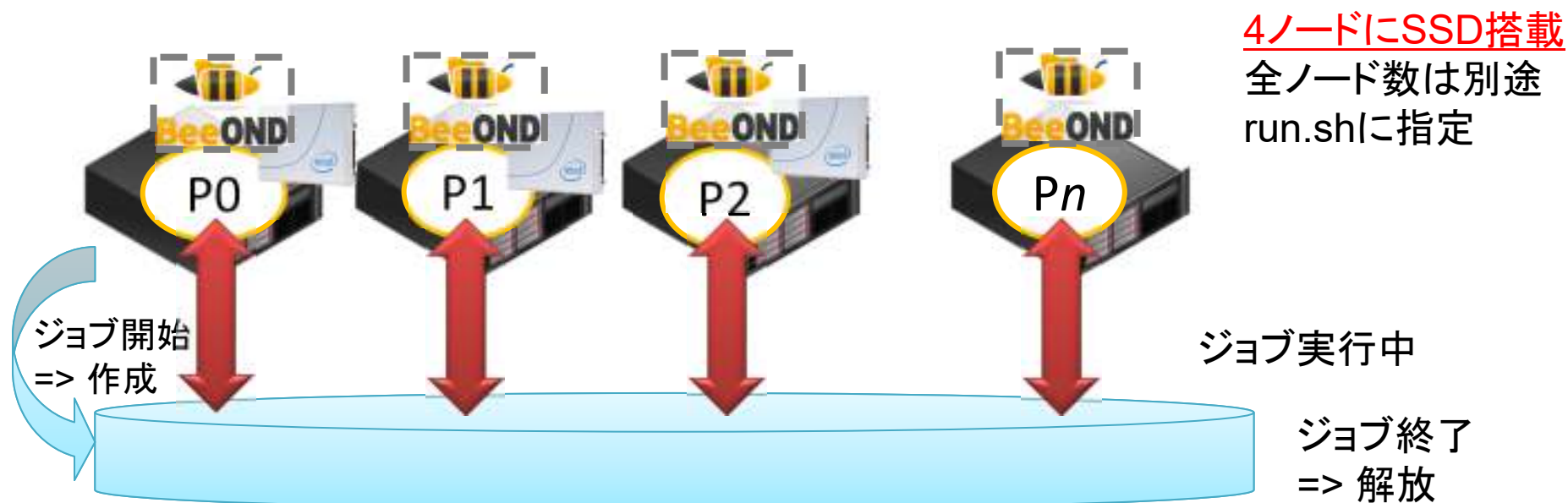
```
export TMPDIR=$PJM_SSDDIR
```



SSDノードの指定 (BeeOND)

- ジョブ内で単一の並列共有ファイルシステムを動的に構成
- 環境変数 PJM_BEEONDでBeeONDの使用を切り替え
 - 環境変数 PJM_SSDでSSD搭載ノード数を指定、SSD無しノードからも利用できる
 - PJM_BEEONDDIR 環境変数でディレクトリ参照

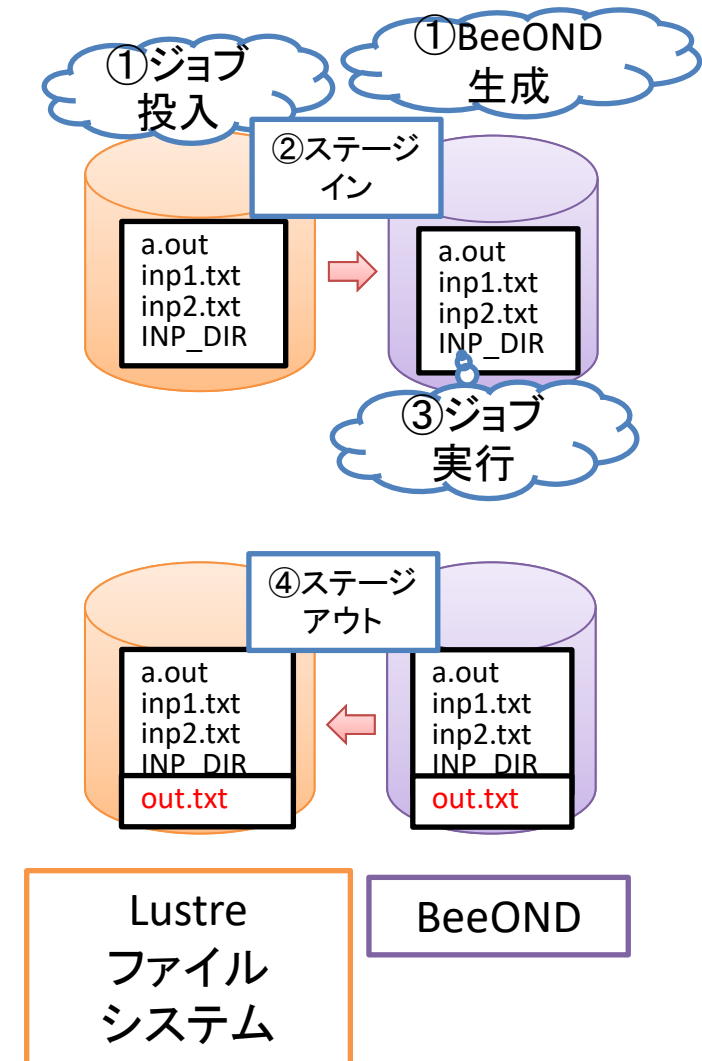
```
$ pjsub -x PJM_SSD=4 -x PJM_BEEOND=1 run.sh
```



BeeOND+ファイルステージング

ジョブスケジューラと連携、
高速ファイルキャッシュにステー
ジング

- ステージインリスト、ステージ
アウトリストをファイルに記述:
input_file.txt, output_file.txt
 - ⇒ ジョブ投入時: 並列ファイルシス
テム
ファイルキャッシュシステム
 - ⇒ ジョブ終了時: ファイルキャッ
シュシステム 並列ファイルシス
テム



BDEC・DPに向けた実験システム OBCX+Mini-DP/Mini-EXN

Total: 1,368 nodes

128 nodes
with SSD

16



OBCXの16ノード

SINET経由で外部計算機
資源に直接接続
BDECにおける外部ノード
(EXN)と融合ノード(ITN)
の中間的役割

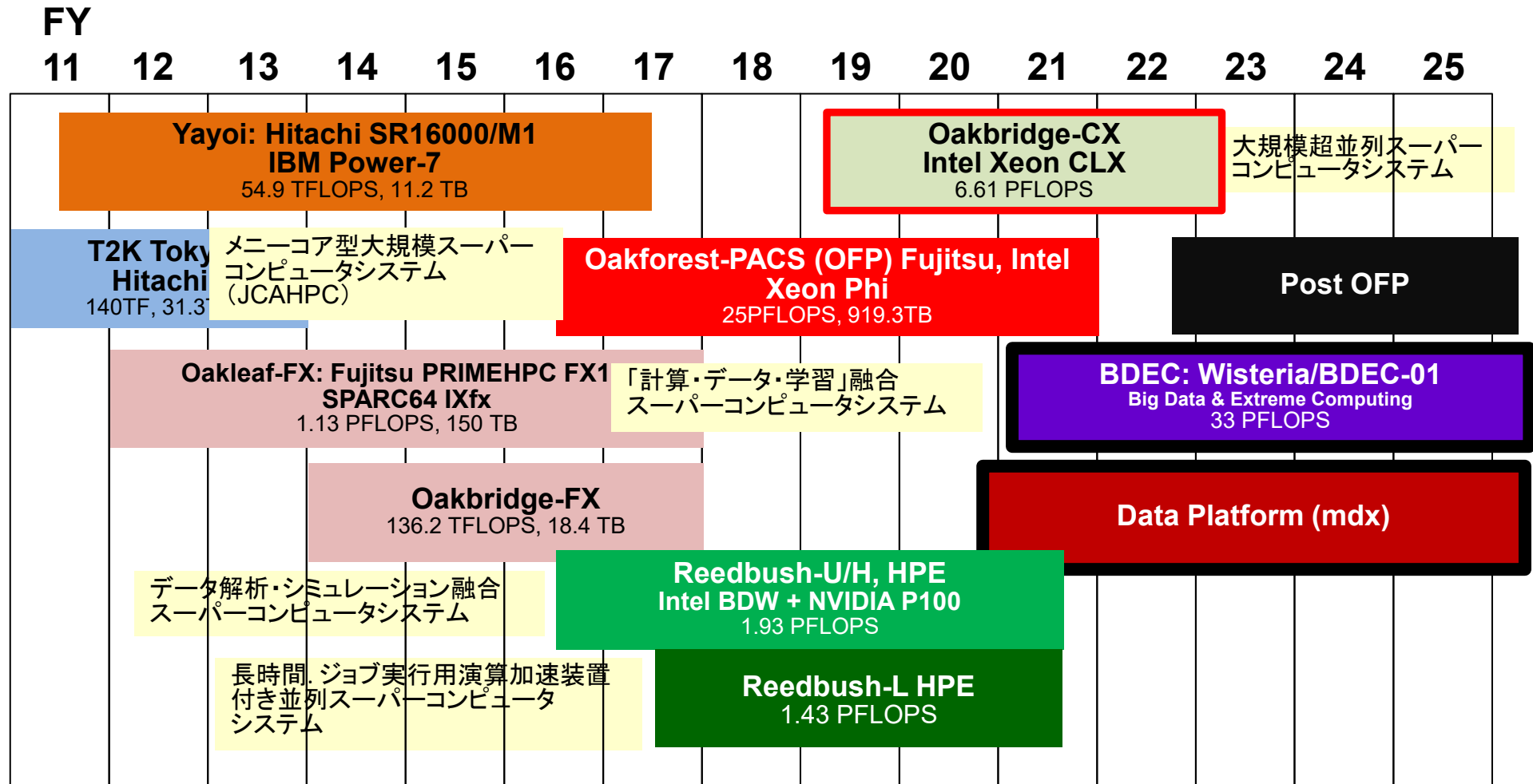
Mini-DP/Mini-EXN
小型GPUクラスター？
BDECの外部ノード(EXN)と
DPの中間的役割
2019年度中に導入

Oakbridge-CXに関する情報

- 全般
 - <https://www.cc.u-tokyo.ac.jp/supercomputer/obcx/service/>
- 利用コース
 - <https://www.cc.u-tokyo.ac.jp/supercomputer/obcx/service/course.php>
- ジョブクラス
 - <https://www.cc.u-tokyo.ac.jp/supercomputer/obcx/service/job.php>
- 利用申込・利用負担金
 - <https://www.cc.u-tokyo.ac.jp/guide/application/>
- FAQ
 - <https://www.cc.u-tokyo.ac.jp/faq/obcx.php>

東大センターのスパコン

2基の大型システム, 6年サイクル(?)



Wisteria/BDEC-01

- 2021年5月(以降)運用開始予定
- 33.1 PF, 8.38 PB/sec., 富士通製
 - ~4.5 MVA(空調込み), ~360m²
- Hierarchical, Hybrid, Heterogeneous (h3)

- **2種類のノード群**

- シミュレーションノード群 (S, SIM) : **Odyssey**

- 従来のスパコン, 汎用CPU with 高メモリバンド幅
- Fujitsu PRIMEHPC FX1000 (A64FX), 25.9 PF
 - 7,680ノード(368,640 コア), 20ラック

- データ・学習ノード群 (D/L, DL) : **Aquarius**

- データ解析, 機械学習
- Intel Xeon Ice Lake + NVIDIA A100, 7.2 PF
 - 45ノード(Ice Lake:90基, A100:360基)

- 一部は外部リソース(ストレージ, サーバー, センサーネットワーク他)に直接接続

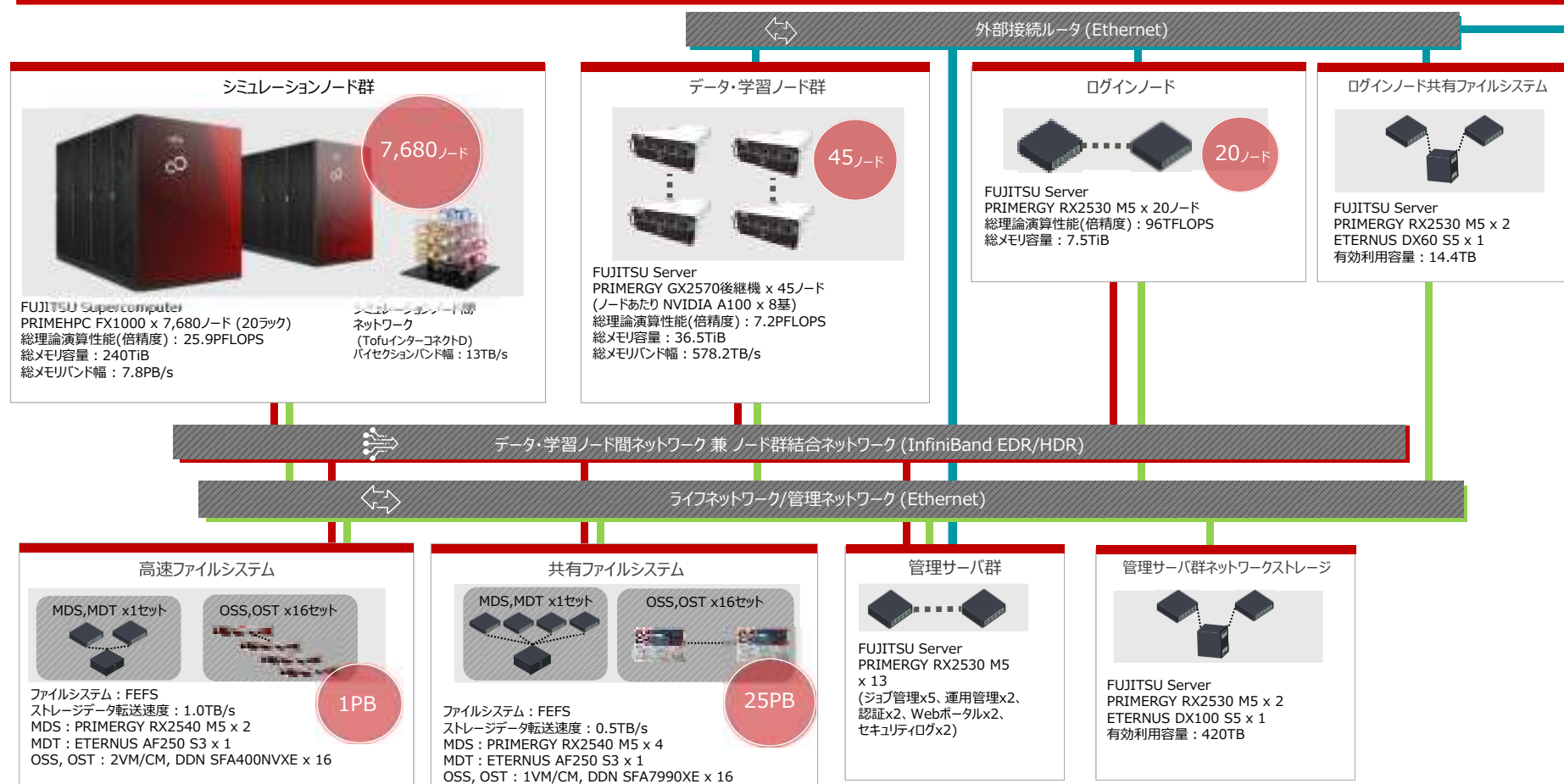
- ファイルシステム: 共有(大容量) + 高速

BDEC:「計算・データ・学習
(S+D+L)」融合のためのプラットフォーム
(Big Data & Extreme Computing)



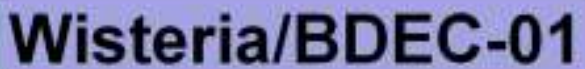
1.1 システム構成図

シミュレーションノード : 7,680ノード (総理論演算性能 25.9 PFLOPS、総メモリバンド幅 7.8 PB/s)
データ・学習ノード : 45ノード (総理論演算性能 7.2 PFLOPS、総メモリバンド幅 578.2 TB/s)



Wisteria/BDEC-01

(S+D+L)融合プラットフォーム



Shared File System
共有ファイルシステム (SFS)
25.8 PB, 500GB/s

シミュレーションノード群
Odyssey
Fujitsu/Arm A64FX
25.9PF, 7.8PB/s

データ・学習ノード群
Aquarius
Intel Ice Lake + NVIDIA A100
7.20PF, 578.2TB/s

Fast File System
高速ファイルシステム
(FFS)
1PB、1.0TB/s

800 Gbps

External Resources

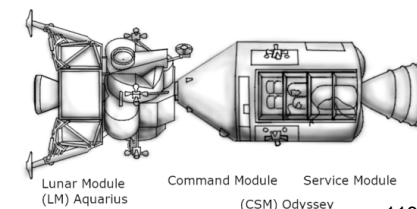
外部リソース

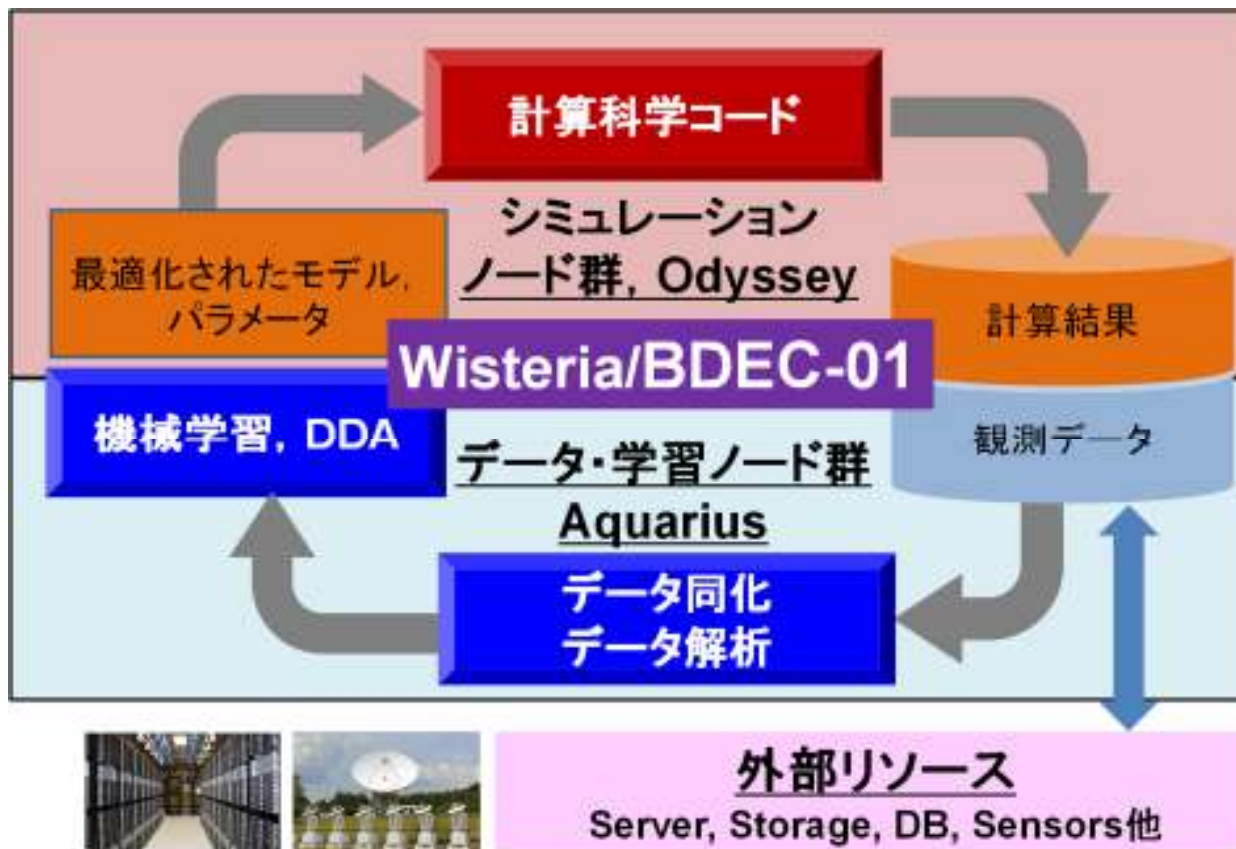
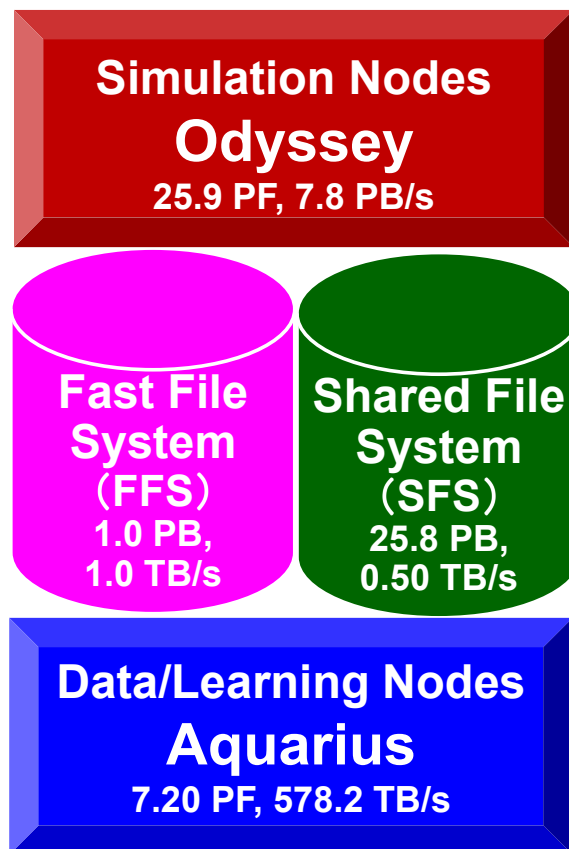
External Network
外部ネットワーク

－ 手賀沼(柏市)に伝わる「藤姫伝説」
にちなむ

– アポロ13号・司令船(Command Module, CM)のコールサイン

– アポロ13号・月着陸船(Lunar Module, LM)のコールサイン





シミュレーションのためのモデル・パラメータの
データ解析, AI/機械学習による最適化 (S+D+L)

(計算+データ+学習)融合によるエクサスケール時代の革新的シミュレーション手法

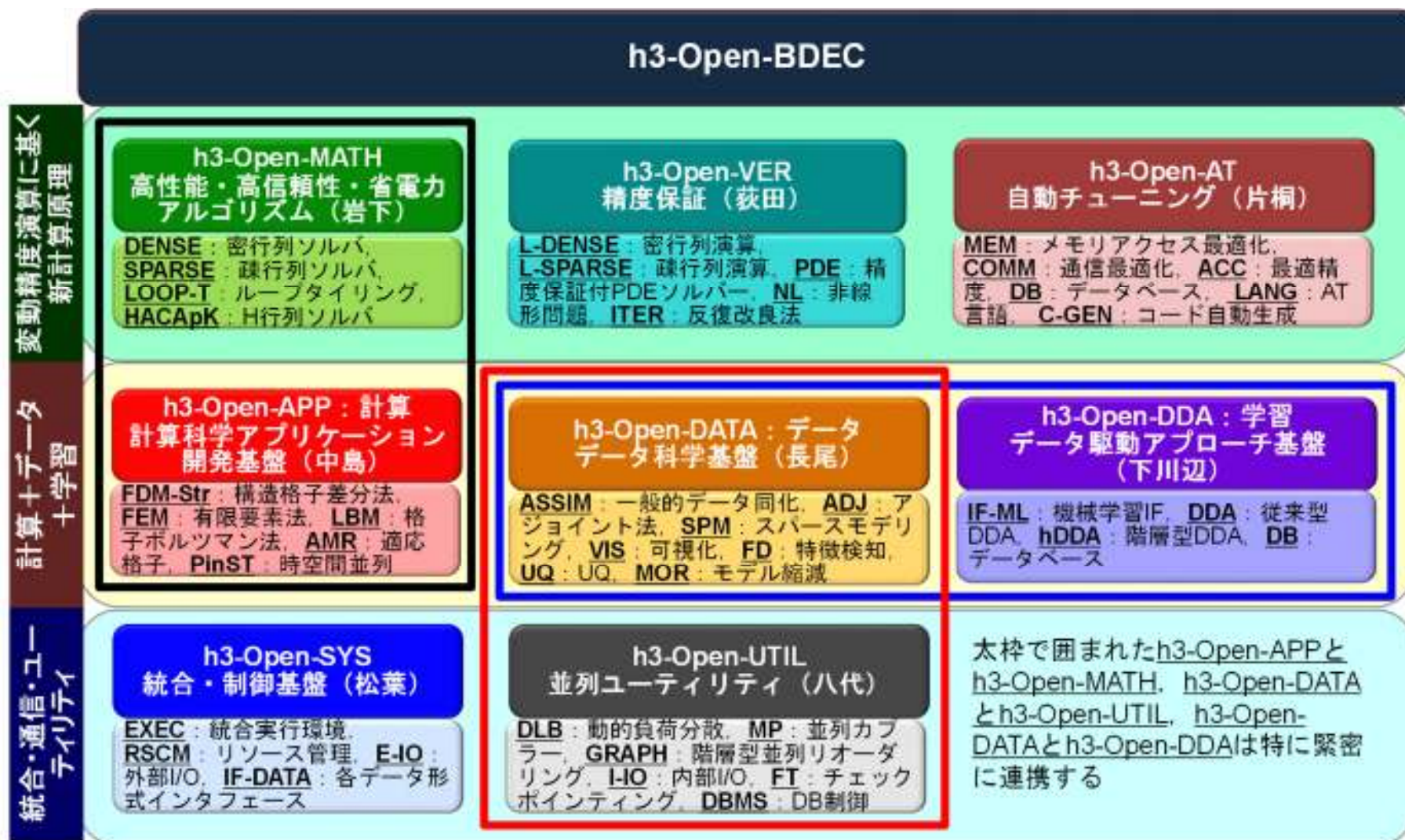
120

- エクサスケール(富岳+クラス)のスパコンによる科学的発見の持続的促進のため, 計算科学にデータ科学, 機械学習のアイデアを導入した(計算+データ+学習(S+D+L))融合による革新的シミュレーション手法を提案
- 革新的ソフトウェア基盤「h3-Open-BDEC」の開発: 東大BDECシステム(Wisteria/BDEC-01), 「富岳」等を「S+D+L」融合プラットフォームと位置づけ, スパコンの能力を最大限引き出し, 最小の計算量・消費電力での計算実行を実現するために, 下記2項目を中心に研究
 - 変動精度演算・精度保証・自動チューニングによる新計算原理に基づく革新的数値解法
 - 階層型データ駆動アプローチ(*hDDA*: Hierarchical Data Driven Approach)等に基づく革新的機械学習手法
- 科研費基盤研究S(2019~2023年度)
 - 代表: 中島研吾(東大・情報基盤センター)

h3-Open-BDEC

「計算＋データ＋学習」融合を実現するためのソフトウェアフレームワーク

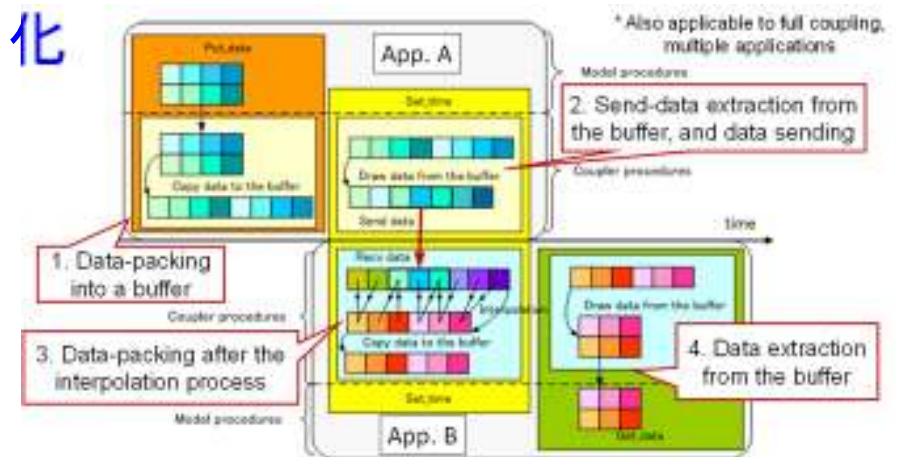
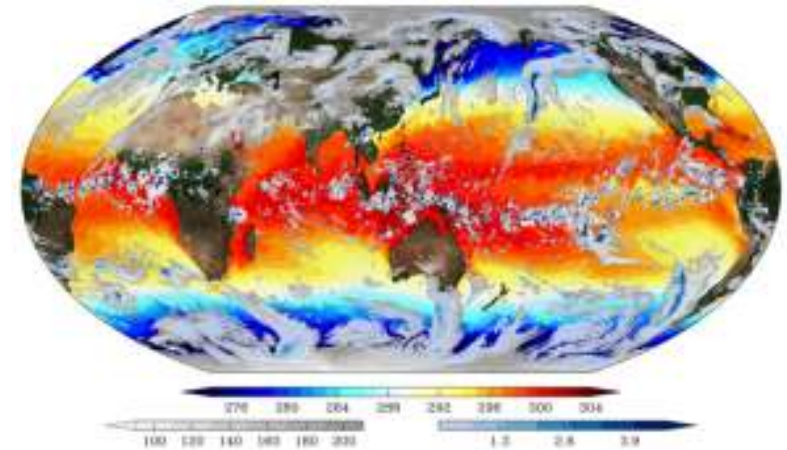
121



BDECにおける(S+D+L)融合

122

- 機械学習によるシミュレーションの高度化
 - 計算科学シミュレーションは非線形⇒多数のパラメータスタディが必要
 - 機械学習により最適パラメータが選択できれば、そのケース数を劇的に削減できる
 - OpenFOAM(数値流体力学)等のOSS
- 大規模シミュレーション+データ同化
 - 以前から実施されている(S+D+L)の典型的事例
 - 大気海洋連成シミュレーション+データ同化
- リアルタイム災害シミュレーション
 - 地震, 洪水, 津波
 - リアルタイム観測データとの同化



全体構成

項 目	Odyssey	Aquarius
総理論演算性能	25.9 PFLOPS	7.2 PFLOPS
総ノード数	7,680 (10x8x8x2x3x2)	45
総メモリ容量	240 TiB	36.5 TiB
総メモリバンド幅	7.8 PB/s	578.2 TB/s
ネットワークポロジ	6D Mesh Torus	Full-bisection BW Fat Tree
インタコネク	Tofu-D	InfiniBand HDR
バイセクションバンド幅	13 TB/s	4.5 TB/s
ノード群結合・ストレージネットワーク、バンド幅	InfiniBand HDR, 2.0 TB/s	

ノードの構成

項 目		Odyssey	Aquarius
製品名		Fujitsu PRIMEHPC FX1000	Fujitsu PRIMERGY GX2570 後継機
CPU	プロセッサ名	Fujitsu A64FX	Intel 次期 Xeon IceLake プロセッサ
	CPU数(コア数)	1 (48+2 or 4)	2 (未公表)
	周波数	2.2 GHz	未公表
	理論演算性能	3.3 TFLOPS	未公表
メモリ		32 GB, 1TB/s	512 GB, 409.6 GB/s
GPU	GPU名	-	NVIDIA A100 テンソルコア
	理論演算性能		19.5 TF (FP64 Tensor Core)
	メモリ		40 GB, 1.55 TB/s
	ノード内GPU数		8, NVswitch接続
インターコネクト		Tofu-D	InfiniBand HDR (200 Gbps) x4
外部接続		-	25 Gbps/ノード

ストレージ構成

項 目	高速ファイルシステム	共有ファイルシステム
ファイルシステム	FEFS	FEFS
実効容量	1 PB	25 PB
データ転送速度	1.0 TB/s	504 GB/s
サーバ(OSS)	DDN SFA400NVXE	DDN SFA7990XE
サーバ(OSS)数	16	16
ドライブ	NVMe SSD 3.84 TB x 23 x 16	NL-SAS HDD 12 TB x 178 x 16
メタデータサーバ数	2	4

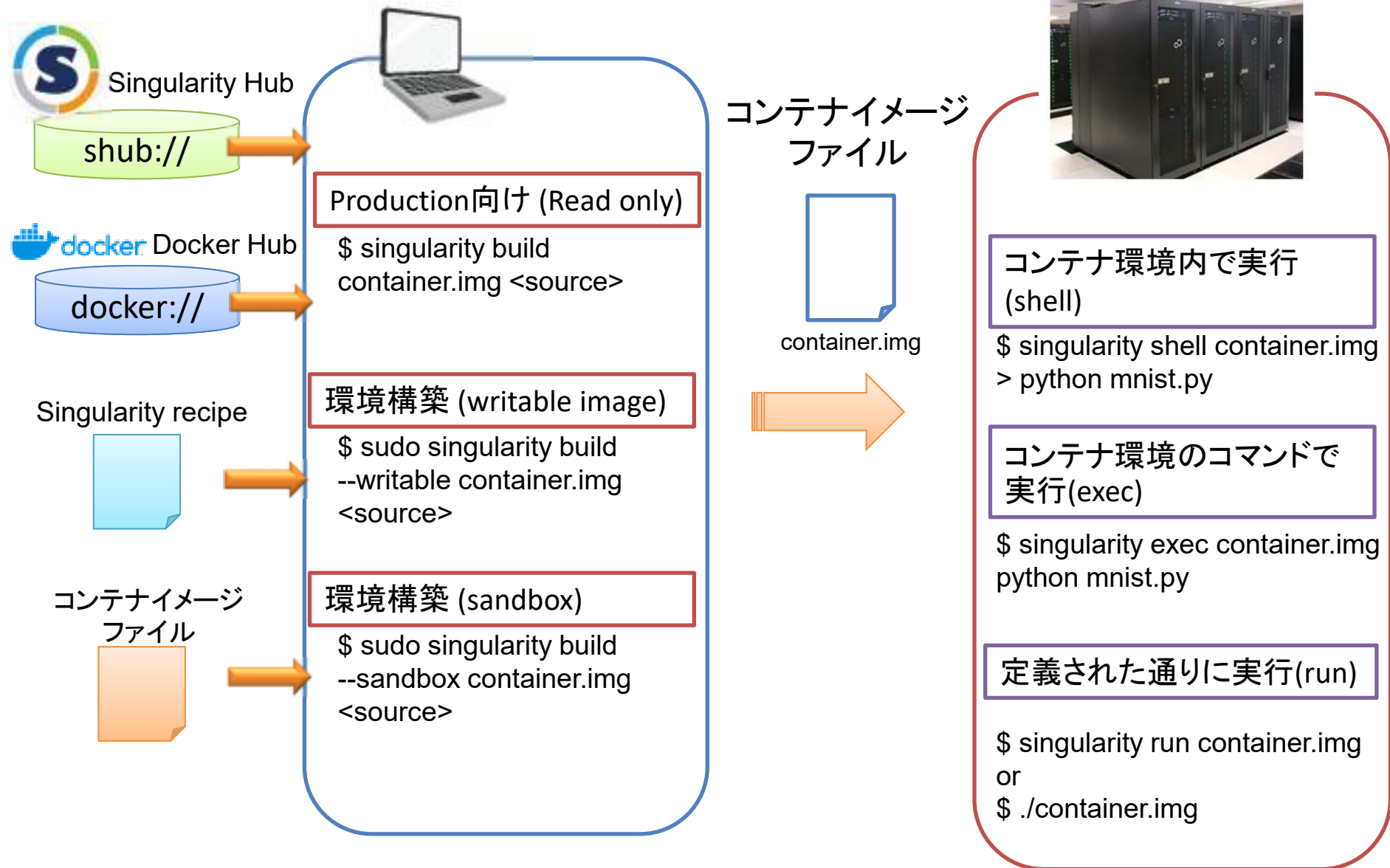
ソフトウェア構成

項 目	Odyssey	Aquarius
OS	Red Hat Enterprise Linux 8	Red Hat Enterprise Linux 8
コンパイラ	GNU コンパイラ 富士通 コンパイラ(Fortran77/90/95/2003/2008, C, C++)	GNU コンパイラ, Intel コンパイラ (Fortran77/90/95/2003/2008、C、C++) NVIDIA HPC SDK(旧PGIコンパイラ含む) (Fortran77/90/95/2003/2008、C、C++、OpenACC 2.0、CUDA C、CUDA Fortran)
メッセージ通信	富士通MPI (OpenMPI), uTofuインタフェース	Intel MPI, GPUDirect for RDMA: Open MPI, MVAPICH2-GDR
ライブラリ	富士通社製ライブラリ(SSL-II, BLAS, CBLAS), その他(LAPACK, ScaLAPACK, SuperLU, SuperLU MT, SuperLU DIST, METIS, MT-METIS, ParMETIS, Scotch, PT-Scotch, PETSc, Trillinos, FFTW, GNU Scientific Library, NetCDF, Parallel netCDF, HDF5, Cmake, Anaconda, Xabclib, ppOpen-HPC, ppOpen-AT, MassiveThreadsなど	Intel 社製ライブラリ(MKL): BLAS、LAPACK、ScaLAPACK その他ライブラリ: SuperLU, SuperLU MT, SuperLU DIST, METIS, MT-METIS, ParMETIS, Scotch, PT-Scotch, PETSc, Trillinos, FFTW, GNU Scientific Library, NetCDF, Parallel netCDF, HDF5, Cmake, Anaconda, Xabclib, ppOpen-HPC, ppOpen-AT, MassiveThreadsなど cuBLAS、cuSPARSE、cuFFT、MAGMA、OpenCV、ITK、Theano、Anaconda、ROOT、TensorFlowなど
アプリケーション	Mpijava, OpenFOAM, ABINIT-MP, PHASE, FrontFlow/blue, FrontISTR、REVOCAP-Coupler, REVOCAP-Refiner, OpenMX, xTAPP, AkaiKKR, MODYLAS, ALPS, feram, GROMACS, BLAST, R packages, Bioconductor, BioPerl, BioRuby, BWA, GATK, SAMtools, Quantum ESPRESSO, Xcrypt, Paraview, VisIt, POV-Ray	Mpijava, OpenFOAM, ABINIT-MP, PHASE, FrontFlow/blue, FrontISTR、REVOCAP-Coupler, REVOCAP-Refiner, OpenMX, xTAPP, AkaiKKR, MODYLAS, ALPS, feram, GROMACS, BLAST, R packages, Bioconductor, BioPerl, BioRuby, BWA, GATK, SAMtools, Quantum ESPRESSO, Xcrypt, Paraview, VisIt, POV-Ray
オープンソースソフト	Autoconf, automake, bash, bzip2, cvs, emacs, nndutils, gawk, gdb, make, grep, gnuplot, gzip, less, m4, perl, ruby, sed, subversion, tar, tcsh, tcl, zsh, FUSE, git 等	Autoconf, automake, bash, bzip2, cvs, emacs, nndutils, gawk, gdb, make, grep, gnuplot, gzip, less, m4, perl, ruby, sed, subversion, tar, tcsh, tcl, zsh, FUSE, git 等
コンテナ仮想化	singularity (dockerイメージ利用可)	singularity (dockerイメージ利用可)
デバッガ・プロファイラ	Arm Forge (DDT, map)	Intel Parallel Studio, Arm Forge (DDT, map)

Wisteria/BDEC-01に関する情報

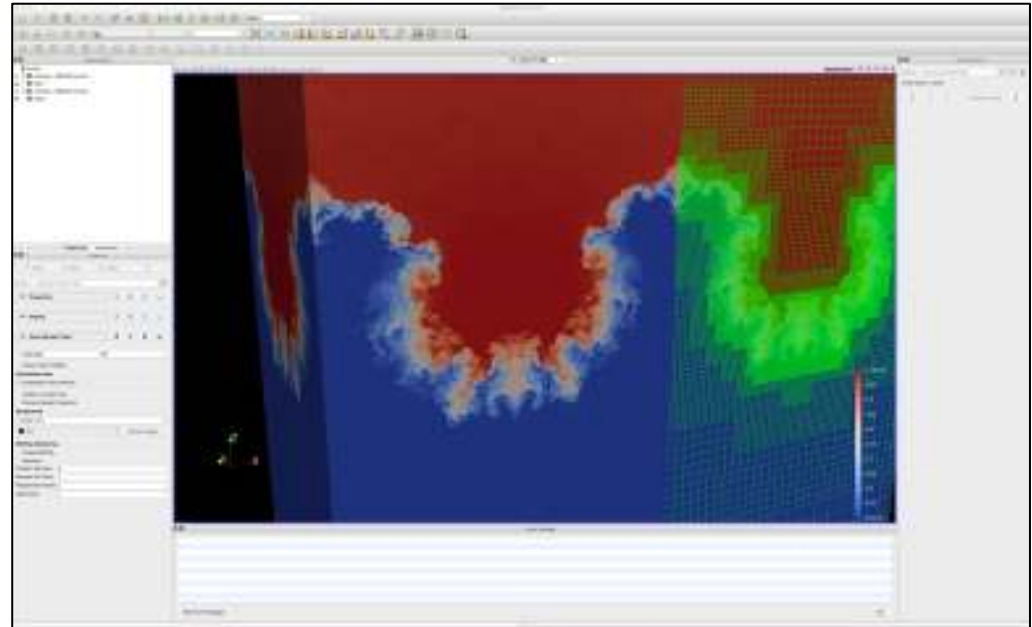
- 準備でき次第、ホームページに掲載いたします

Singularityの利用イメージ



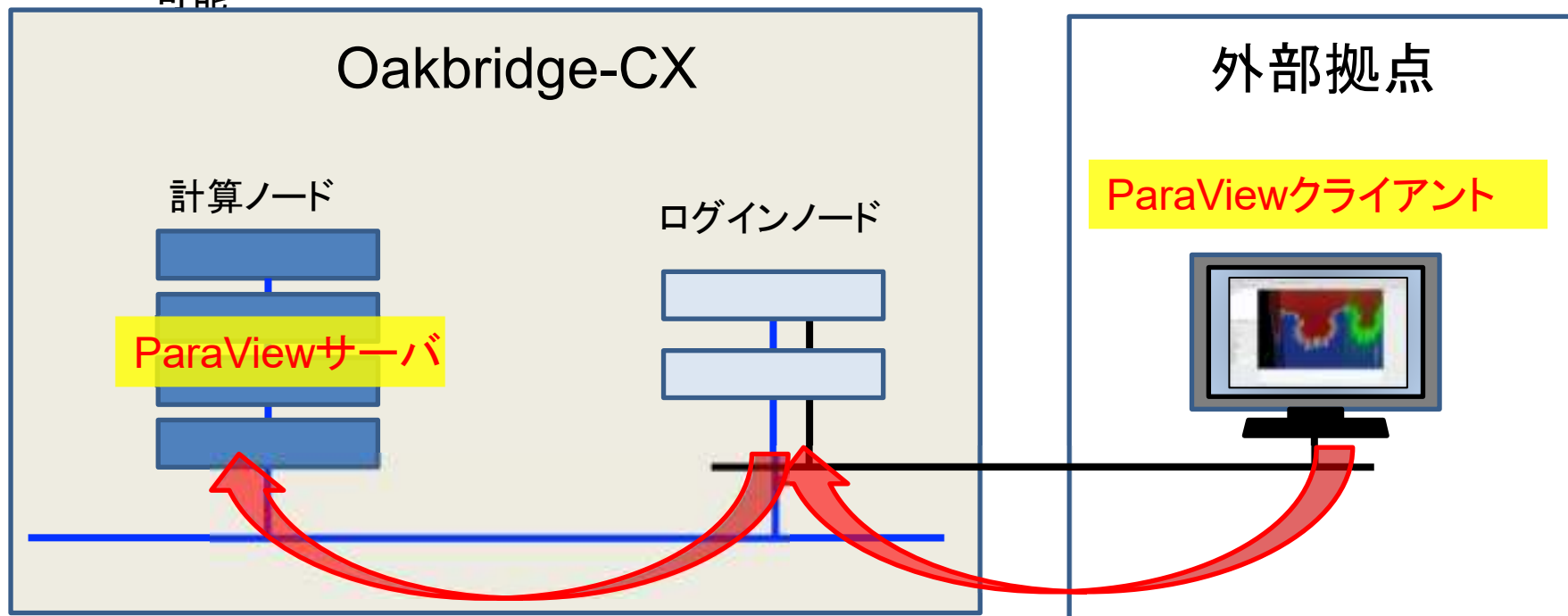
ParaView

- オープンソース、マルチプラットフォームの可視化アプリケーション
- 大容量データの可視化のための分散環境に対応
- クライアント・サーバモデルによるリモート可視化対応
- 様々なデータ形式に対応
- OpenFOAMデータ可視化などに利用される
- <https://www.paraview.org>



リモートからのParaView利用

- クライアント・サーバモデルによるリモート可視化対応
 - 手元のPCのクライアントからGUI操作によって、Oakbridge-CXのParaViewサーバを制御可能



科学技術計算用アプリケーション

■商用ソフト

・Altair HyperWorks

(総合CAEプラットフォーム)

<http://altairhyperworks.jp/>

HyperWorks, OpenFOAM,
を用いた講習会を実施

■スパコン向けオープンソースコードが充実

・OpenFOAM

(Open source Field Operation And Manipulation)

<http://www.openfoam.com/>

・ppOpen-HPC

(自動チューニング機構を有するアプリケーション開発・実行環境)

<http://ppopenhpc.cc.u-tokyo.ac.jp/ppopenhpc/>

・FrontISTR

(大規模並列有限要素解析オープンソースソフト)

<http://www.multi.k.u-tokyo.ac.jp/FrontISTR/>

・FrontFlow

(乱流燃焼解析ソフトウェア)

<http://www.ciss.iis.u-tokyo.ac.jp/dl/>

Altair HyperWorksのライセンス

■国内アカデミックユーザ(大学、短大、大学校、 高専等に所属の方)

- ・**ライセンス料:無料**(基盤センター所有のライセンスで利用可能)
- ・HyperMesh, HyperViewなどクライアントPCで動作するソフトも利用可能

■その他のスパコンユーザ(企業や研究機関に所属の方)

- ・基盤センター所有のライセンスは利用不可
- ・**ライセンス個別購入**により利用可能
(ご希望の方はuketsuke@cc.u-tokyo.ac.jpまで問い合わせ下さい)



- 東大情報基盤センターについて
- サービス概要
- 企業による利用制度
 - 制度概略と利用提案
 - 申込・審査・成果報告
 - スパコン利用への道
 - ①お試しアカウント付き並列プログラミング講習会
 - ②トライアルユース制度
 - ③ 企業利用制度
- スーパーコンピュータシステム概要
 - Reedbush
 - Oakforest-PACS
 - Oakbridge-CX
 - Wisteria/BDEC-01
 - 運用
- ご質問は

システムの利用方法

- カテゴリー
 - 一般(大学・公共機関), 公募(企業(有料), HPCI等(無料))
 - グループ, パーソナル
 - 通常, ノード固定(Reedbush-L, OBCX)
- 通常利用
 - パーソナル
 - 一般(大学・公共機関)のみ
 - グループ
 - 一般(大学・公共機関)
 - 企業(有料・審査あり)
 - その他公募(無料・提案書)
 - 若手・女性支援, HPCI
 - 学際大規模情報基盤共同利用共同研究拠点(JHPCN)

参考情報：利用方法

- ノード固定（グループのみ）
 - https://www.cc.u-tokyo.ac.jp/supercomputer/obcx/service/fixed_node.php
- 若手・女性支援
 - <https://www.cc.u-tokyo.ac.jp/guide/young/>
- HPCI
 - <http://www.hpci-office.jp/>
- 学際大規模情報基盤共同利用・共同研究拠点（JHPCN）
 - <https://jhpcn-kyoten.itc.u-tokyo.ac.jp/ja/>

計算資源配分のポリシー

- 利用するコース (パーソナル・グループコース),
利用申込したノード数に応じて, 計算ノードの利用可能時間である「トークン」を割当てます。
 - 割り当てられたトークン内であれば (一部のコース, サービスを除き) 利用できるノード数制限はなく, 最大利用可能ノード数まで, バッチジョブの実行を可能。
- 1つのシステムに申し込めば他のシステムへトークンを移し, 複数システムを使用可能な場合もある(トークン移行)
 - カテゴリーとしては「通常・一般(大学・公共機関)」の場合(グループ・パーソナル)

トークン(token)

参考: <https://www.cc.u-tokyo.ac.jp/supercomputer/reedbush/service/token.php>
<https://www.cc.u-tokyo.ac.jp/supercomputer/ofp/service/token.php>
<https://www.cc.u-tokyo.ac.jp/supercomputer/obcx/service/token.php>

- トークンは、バッチジョブ実行ごとに消費。(インタラクティブノードを利用したバッチジョブを除く)
 - ノード時間積「経過時間 × ノード数 × 消費係数」により消費
 - 消費係数は、申込ノード数までは 1.00
- トークンを使い果たすとジョブ実行不可: 1日単位モニター
 - トークン不足の場合, ジョブはsubmitできない
 - 計算資源に余裕がある場合にのみ, トークンを追加可能
- トークンは, 利用を許可された有効期間内に全量が利用できることを保証するものではありません。
- 利用を許可された期間のみを有効期間としているため, 次年度への繰り越しや返金等は不可。
- 1ヶ月単位の利用負担金は均等割(年額の1/12)になります。

トークン移行

- 対象システム
 - Oakbridge-CX
 - Oakforest-PACS
 - Reedbush-H/L
 - Wisteria/BDEC-01
- 1つのシステムに申し込めば他システムへトークンを移し、複数システム利用できる(換算表は次頁)
 - 通常・一般(大学・公共機関, グループコース, パーソナル)のみ
 - 公募型(企業, 若手・女性, HPCI, JHPCN等), ノード固定(Oakbridge-CX, Reedbush)は不可
 - 「通常かつ一般」の場合「以外」はReedbush-H, Reedbush-L も別々に申し込む必要がある。

トークン移行

参考: https://www.cc.u-tokyo.ac.jp/guide/application/transfer_token.php

1つのシステムに申し込めば他システムへトークンを移し、
複数システム利用可能(企業利用, 公募利用を除く)

現在ご利用のシステム	トークン移行先のシステム			
	Reedbush	Oakforest-PACS	Oakbridge-CX	Wisteria/BDEC-01
Reedbush	—	1.5	0.75	1.2
Oakforest-PACS	0.6	—	0.5	0.8
Oakbridge-CX	1.3	2.0	—	1.6
Wisteria/BDEC-01	0.8	1.2	0.6	—

- 移行先に追加されるトークン量(ノード時間) = 移行トークン量 × 係数

利用カテゴリーとトークン移行

	トークン移行
パーソナル(一般)(大学・公共機関等)	○
グループ(通常・一般)(大学・公共機関等)	○
グループ(ノード固定・一般)(大学・公共機関等)	×
グループ(通常・公募)(企業・HPCI等)	×
グループ(ノード固定・公募)(企業・HPCI等)	×

Reedbushのトークン(token)

- 各サブシステムによってトークンの消費係数が異なります
 - Reedbush-H(CPU+GPU×2) 2.50
 - Reedbush-L(CPU+GPU×4) 4.00
- 通常・一般(大学・公共機関, グループコース, パーソナル)利用ではReedbushに申し込めば, Reedbush-H,Lのいずれも使うことができます
 - 公募型(企業, HPCI, JHPCN等), ノード固定: 不可
 - 但し若手・女性では一部可能

Reedbush-L: グループコース(ノード固定)

■ 申込み

- ・ 1ノード以上 (Reedbush-L)
- ・ 審査制, 全体の15%程度が上限

■ 利用

- ・ 申込み分のノードを占有
- ・ 専用キュー: パーソナルコース, グループコース(通常)とは別
- ・ 占有外の計算機資源の利用も可能: その分トークンは減少
 - トークンがなくなった時点で占有ノードも使えなくなります
(資源に余裕があればトークン追加購入可能)

■ 設定のカスタマイズが可能

- ・ 個別のログインノード・ストレージ(データ隔離)等柔軟に対応

Reedbush: グループコース負担金(年)

(大学・公共機関)

	利用負担金 (年額、税込)	利用可能 ノード数	割当トークン量(年間) 及び消費係数	ディスク量 /lustre
一般 Reedbush- H/L基本 セット	大学・公共機 関: 75,000円	Reedbush-H : 最大32ノード Reedbush-L : 最大16ノード	8,640 ノード時間 (Reedbush-U 1ノード × 360日相当) Reedbush-H 消費係数 : 2.50 Reedbush-L 消費係数 : 4.00	1TB (グループ当り)

Reedbush: パーソナルコース負担金

一般(大学・公共機関)のみ(平成30年度より)

- 研究者が個人単位で使用
- Reedbush-H/L両方使用可能: トークン消費係数異

コース	利用負担金 (年額, 税込) 大学・公共機関 等	利用可能 ノード数	トークン	ディスク量 /lustre
パーソナル コース	75,000円/年	Reedbush-H : 最大32ノード Reedbush-L : 最大16ノード	8,640 ノード時間 (RB-U 1ノード × 360 日相当) Reedbush-H : 2.50 Reedbush-L : 4.00	1TB

Reedbush: グループコース負担金(年) (企業利用)

	利用負担金 (年額、税込)	利用可能 ノード数	割当トークン量(年間) 及び消費係数	ディスク量 /lustre
Reedbush-H セット 申込1ノード 以上 (1ノード当り)	企業: 216,000円	Reedbush-H: 最大32ノード	21,600 ノード時間 (Reedbush-U 2.5ノード × 360日相当) Reedbush-H 消費係数: 2.50	4TB (グループ当り)
Reedbush-L セット 申込1ノード 以上 (1ノード当り)	企業: 360,000円	Reedbush-L: 最大16ノード	34,560 ノード時間 (Reedbush-U 4ノード × 360日相当) Reedbush-L 消費係数: 4.00	

Reedbush: グループコース負担金(年)

ノード固定

	利用負担金 (年額、税込)	利用可能 ノード数	割当トークン量(年間) 及び消費係数	ディスク量 /lustre
ノード固定 Reedbush-L 申込1ノード 以上 (1ノード当り)	大学・公共機関: 450,000円 企業: 540,000円	Reedbush-L : 最大16ノード	34,560 ノード時間 (Reedbush-U 1ノード × 360日相当 × 4.00) Reedbush-L 消費係数 : 4.00	4TB (グループ当り)

バッチジョブキュー: Reedbush-H

- パーソナルユーザ, グループユーザ(一般)で共通
- h-interactive_1/2はトークンを消費しない

代表キュー名	キュー名	最大ノード数	実行制限時間 (経過時間)	ノード当 たりメモリ 量(GB)
h-interactive	h-interactive_1	1	2 h	244
	h-interactive_2	2	30 min	244
h-debug	h-debug	1-4	30 min	244
h-short	h-short	1-4	2 h	244
h-regular	h-small	1-4	48 h	244
	h-medium	5-8	48 h	
	h-large	9-16	48 h	
	h-x-large	17-32	24 h	

バッチジョブキュー: Reedbush-L

- パーソナルユーザ, グループユーザ(一般)で共通
- l-interactive_1/2/4はトークンを消費「する」

代表キュー名	キュー名	最大ノード数	実行制限時間 (経過時間)	ノード当 たりメモリ 量(GB)
l-interactive	l-interactive_1	1	24 h	244
	l-interactive_2	1	6 h	244
	l-interactive_4	3-4	1 h	244
l-regular	l-small l-medium l-large	1-4 5-8 9-16	168 h	244

Oakforest-PACS:

グループコース負担金(年)

利用負担金 (年額、税込)	利用可能 ノード数	割当トークン量(年間) 及び消費係数	ディスク量
基本セット 大学・公共機関: 50,000円 企業: 60,000円	最大2,048ノード	8,640 ノード時間 (1ノード×360日相当) 消費係数 : 1.00	1TB (グループ 当り)

Oakforest-PACS: パーソナルコース

大学・公共機関のみ

申込数1口あたり(最大6口)

コース	利用負担金 (年額, 税込) 大学・公共機関 等	利用可能 ノード数	トークン	ディスク量
パーソナル コース	50,000円/年	最大 2,048ノード (前頁参照)	8,640 ノード時間 (1ノード×360日相当) 消費係数: 1.00	1TB

バッチジョブキュー: Oakforest-PACS

- パーソナルユーザ, グループユーザ(一般)で共通
- 全てのキューでメモリモードの異なる -cache と -flat 2種類
 - 例: regular-cache, regular-flat
- **interactive_n1/n16はトークンを消費しない**

代表キュー名	キュー名	最大ノード数	実行制限時間 (経過時間)	ノード当たり メモリ量(GB)
interactive	interactive_n1	1	2 h	82 (-cache)
				96 (-flat)
	interactive_n16	2-16	10 min	82 (-cache)
				96 (-flat)
debug	debug	1-128	30 min	82 (-cache)
				96 (-flat)
regular	small	1-128	48 h	82 (-cache)
	medium	129-512	48 h	
	large	513-1024	48 h	96 (-flat)
	x-large	1024-2048	24 h	
prepost	prepost	1	6 h	222 (Xeon)

Oakbridge-CX: グループコース(ノード固定)

- グループコース(ノード固定)は, 研究グループ等で利用するためのコースで, **1ノード単位**で申込みます。
 - 申込み分のノードを占有できる
 - **パーソナルコース, グループコース(通常)とは別のバッチジョブキューを使います。**
 - グループコース(通常)と同じ計算機資源を使用することも可能: その分トークンは減る
 - **トークンがなくなった時点で占有ノードも使えなくなります(資源に余裕があればトークン追加購入可能)**
 - 審査制, 全体の10%程度を上限とする
- **設定のカスタマイズが可能となる**
 - **個別のログインノード・ストレージ(データ隔離)等柔軟に対応**

Oakbridge-CX

グループコース負担金(年)

- 研究グループ等で利用するコース

	利用負担金 (年額, 税込)	利用可能 ノード数	割当トークン量(年間) 及び消費係数	ディスク量 /work
一般 基本セット	大学・公共機関: 100,000円 企業: 120,000円	最大256ノード	8,640 ノード時間 (1ノード×360日相当) 消費係数: 1.00	4TB (グループ当り)
ノード固定	大学・公共機関: 150,000円 企業: 180,000円	最大256ノード	8,640 ノード時間 (1ノード×360日相当) 消費係数: 1.00	4TB (グループ当り)

※ 申込ノード数に関わらず、利用可能ノード数（256）までのジョブが実行可能です。

Oakbridge-CX

パーソナルコース負担金

一般(大学・公共機関)のみ

- 研究者が個人単位で使用
- 下記の基本セットを元に最大3口まで申込可能

コース	利用負担金 (年額, 税込)	利用可能 ノード数	トークン	ディスク量 /work
パーソナルコース (申込1口あたり)	100,000円/年	最大256ノード	8,640 ノード時間 (1ノード×360日相当) 消費係数 : 1.00	4TB

※ 申込口数に関わらず、利用可能ノード数（256）までのジョブが実行可能です。

バッチジョブキュー: OBCX

- パーソナルユーザ, グループユーザ(一般)で共通
- **interactive はトークンを消費しない**

代表キュー名	キュー名	最大ノード数	実行制限時間 (経過時間)	ノード当 たりメモリ 量(GB)
interactive	interactive_n1	1	2 h	168
	interactive_n8	2 ~ 8	10 min	168
debug	debug	1 ~ 16	30 min	168
short	short	1 ~ 8	8 h	168
regular	small	1 ~ 16	48 h	168
	medium	17 ~ 64	48 h	
	large	65 ~ 128	48 h	
	x-large	129 ~ 256	24 h	

Wisteria/BDEC-01のトークン(token)

- 各サブシステムによってトークンの消費係数が異なります
 - Odyssey(A64FX CPU) 1.0
 - Aquarius(CPU+GPU×8)
 - GPU当たり 3.0
 - ノード全体 24.0
- 通常・一般(大学・公共機関)利用ではWisteriaに申し込めば, Odyssey, Aquariusのいずれも使うことができます
 - 公募型(企業, HPCI, JHPCN等), ノード固定: 不可
 - 但し若手・女性では可能

Wisteria/BDEC-01 : Aquariusノード固定・GPU専有

■ 申込み

- ・ノード固定: **1ノード**
 - 審査制
- ・GPU専有: **1GPU**

■ 利用

- ・申込み分のノードを占有
 - 全体の15%程度が上限 (6ノード)
- ・**専用キュー: 他のユーザとは別**
- ・占有外の計算機資源の利用も可能: その分トークンは減少
 - **トークンがなくなった時点で占有ノードも使えなくなります**
(資源に余裕があればトークン追加購入可能)

■ 設定のカスタマイズが可能

- ・**個別のログインノード・ストレージ(データ隔離)等柔軟に対応**

Wisteria/BDEC-01: 一般利用負担金(年) (大学・公共機関)

- Wisteria以降はパーソナルコース廃止

	利用負担金 (年額、税込)	利用可能 ノード数	割当トークン量(年間) 及び消費係数	ディスク量 /lustre
一般 Wisteria/B DEC-01 基本セット	大学・公共機 関: 60,000円	Odyssey: 2048+ノード Aquarius: 8ノード	8,640 トークン (Odyssey 1ノード × 360日相当) Wisteria-O 消費係数: 1.00 Wisteria-A 消費係数: 3.00	2TB (グループ当り)

Wisteria: 企業利用負担金(年)

	利用負担金 (年額、税込)	利用可能 ノード数	割当トークン量(年間) 及び消費係数	ディスク量 /lustre
Wisteria-O 基本セット (1ノード当り)	企業: 72,000円	Wisteria-O : 最大2048+ノード	8,640 トークン (1ノード×360日相当) Wisteria-O 消費係数 : 1.00	2TB (グループ当り)
Wisteria-A 基本セット (1ノード当り)	企業: 216,000円	Wisteria-A : 最大8ノード	25,920 トークン (1GPU×360日相当) Wisteria-A消費係数 : 3.00	6TB (グループ当り)

Wisteria: Aquariusノード固定・ GPU専有負担金(年)

	利用負担金 (年額、税込)	利用可能 ノード数	割当トークン量(年間) 及び消費係数	ディスク量 /lustre
GPU専有 申込1GPU 当たり	大学・公共機関: 270,000円 企業: 324,000円	1 GPU	25,920 トークン (1 GPU × 360日相当)	6TB (グループ当り)
ノード固定 申込 1ノード当り	大学・公共機関: 2,160,000円 企業: 2,592,000円	1ノード	207,360 ノード時間 (1ノード × 360日相当)	48TB (グループ当り)

バッチジョブキュー: Wisteria/BDEC-01

- 詳細は追ってホームページに掲載します。

- 東大情報基盤センターについて
- サービス概要
- 企業による利用制度
 - 制度概略と利用提案
 - 申込・審査・成果報告
 - スパコン利用への道
 - ①お試しアカウント付き並列プログラミング講習会
 - ②トライアルユース制度
 - ③ 企業利用制度
- スーパーコンピュータシステム概要
 - Reedbush
 - Oakforest-PACS
 - Oakbridge-CX
 - Wisteria/BDEC-01
 - 運用
- ご質問は

ご質問・連絡先

- 東京大学情報システム部情報戦略課研究支援チーム
 - [uketsuke\(at\)cc.u-tokyo.ac.jp](mailto:uketsuke(at)cc.u-tokyo.ac.jp)