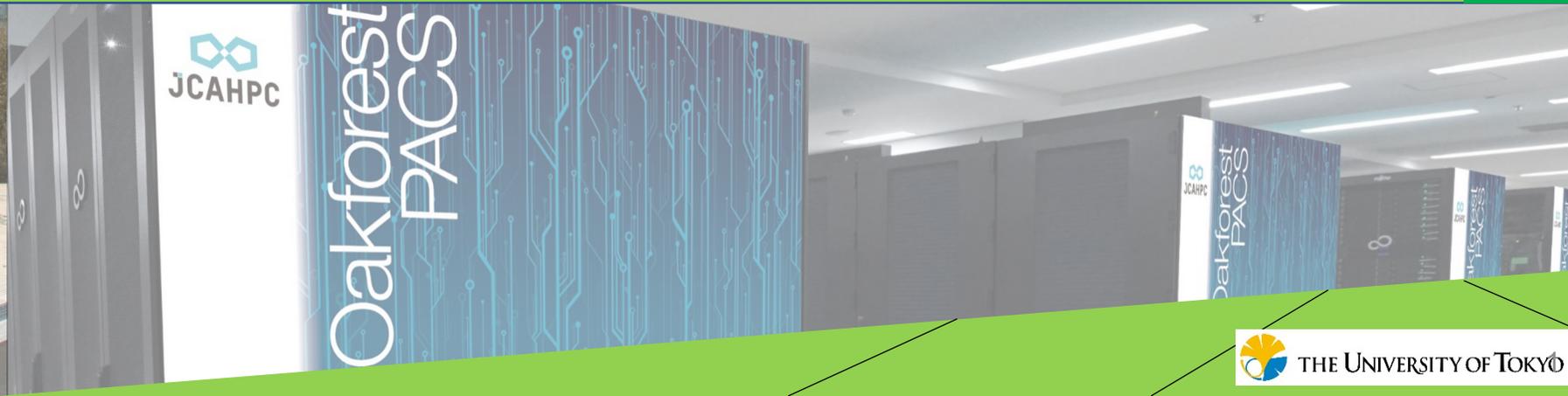




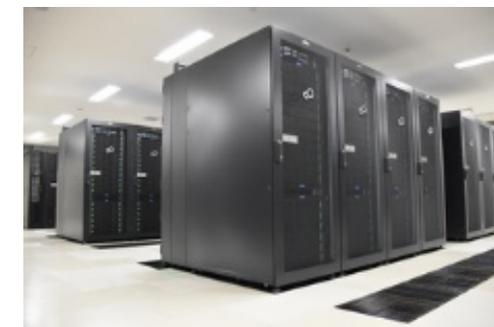
Oakforest-PACS OFP

メニーコア型大規模スーパーコンピュータシステム



3システム: 利用者2,600+, 学外55+%

- Reedbush (HPE, Intel BDW + NVIDIA P100 (Pascal))(本郷)
 - 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3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GPUクラスタ (2017年3月より), DDN IME (Burst Buffer)
- Oakforest-PACS (OFP) (富士通, Intel Xeon Phi (KNL))(柏)
 - JCAHPC (筑波大CCS & 東大ITC)
 - 25 PF, TOP500で18位(日本3位)(2020年6月)
 - Omni-Path アーキテクチャ, DDN IME (Burst Buffer)
- Oakbridge-CX (富士通, Intel Xeon Platinum 8280)(柏)
 - 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60位(2020年6月)
 - 全1,368ノードの内128ノードにSSDを搭載



最先端共同HPC 基盤施設 JCAHPC

Joint Center for Advanced High Performance Computing

- 平成25年3月、筑波大学と東京大学は「計算科学・工学及びその推進のための計算機科学・工学の発展に資するための連携・協力推進に関する協定」を締結

- 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
THE UNIVERSITY OF TOKYO



筑波大学
University of Tsukuba

- 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>



JCAHPC

Oakforest-PACS (OFP)

Top500: 世界第18位

HPCG: 世界第11位

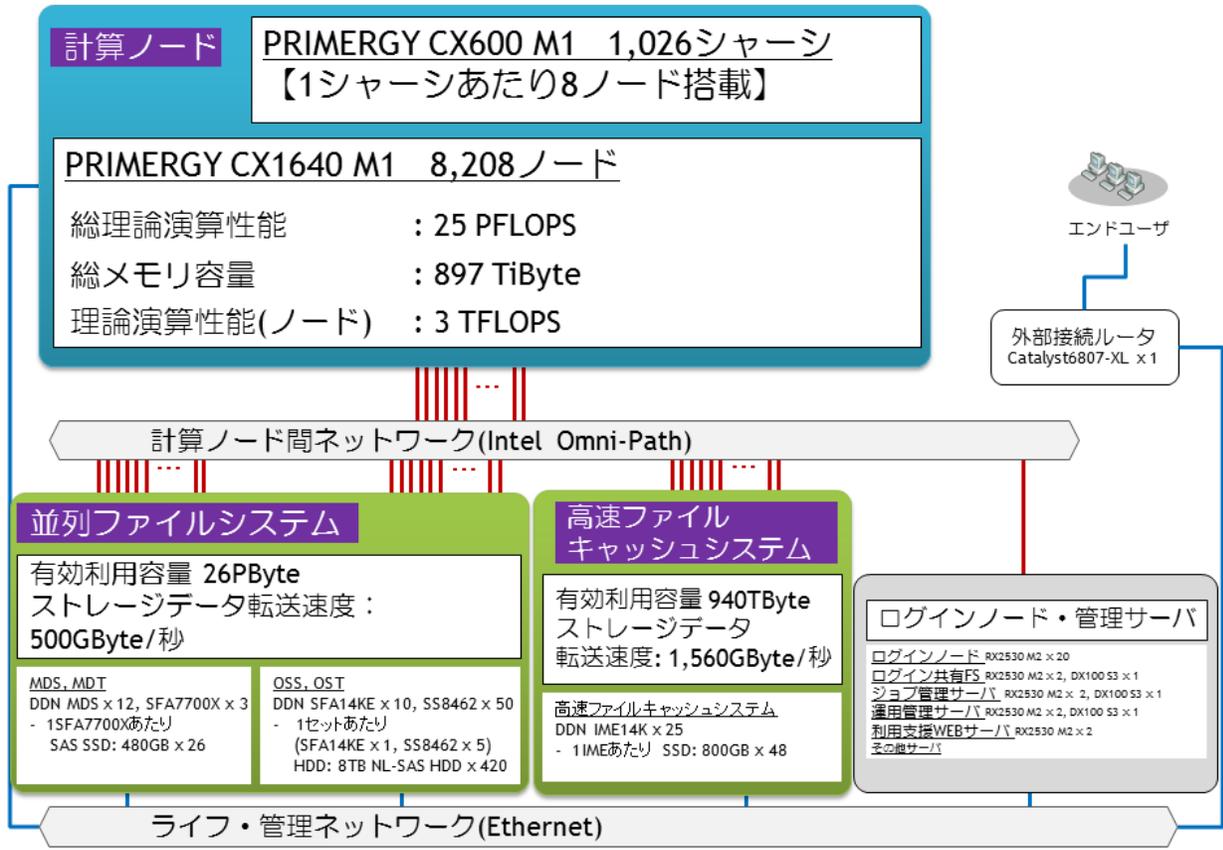
(2020年6月現在)



Fujitsu PRIMERGY CX1640 M1



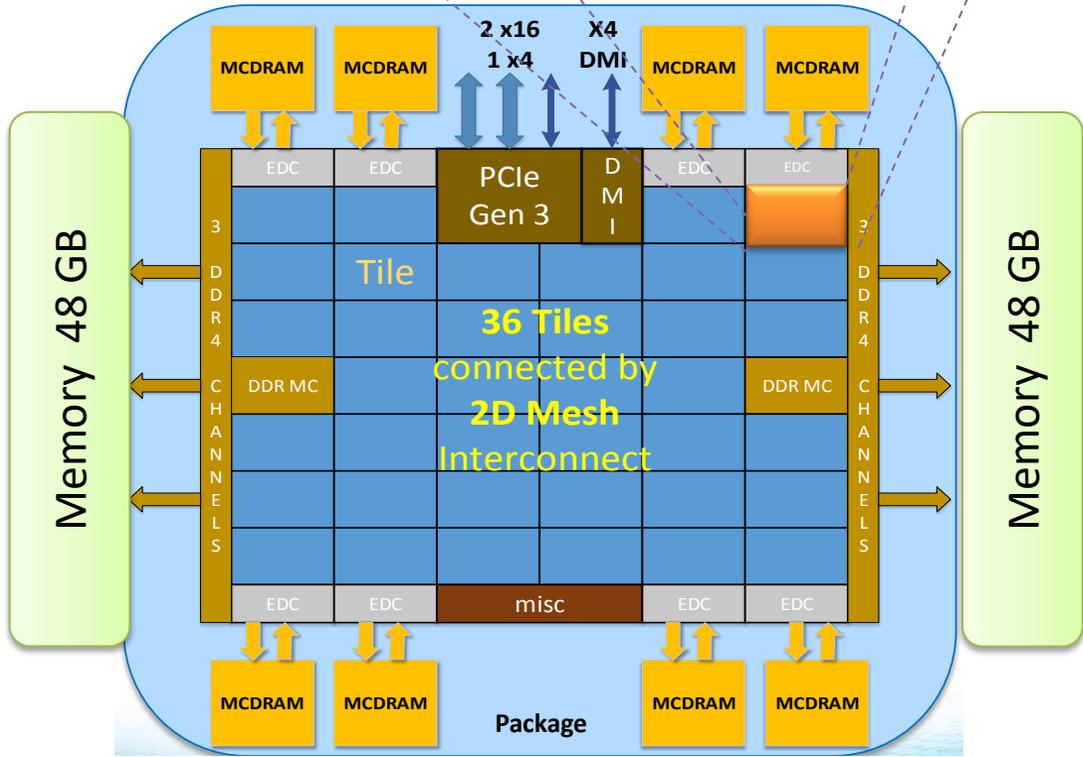
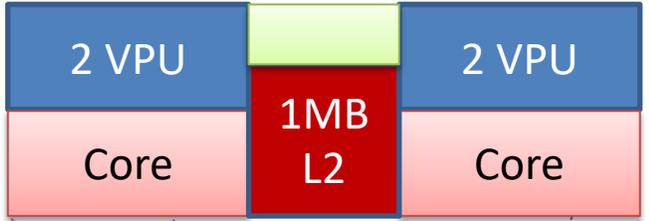
Fujitsu PRIMERGY CX600 M1
シャーシ当たりCX1640 M1 × 8搭載



Oakforest-PACS 計算ノード



HotChips27
KNLスライドより



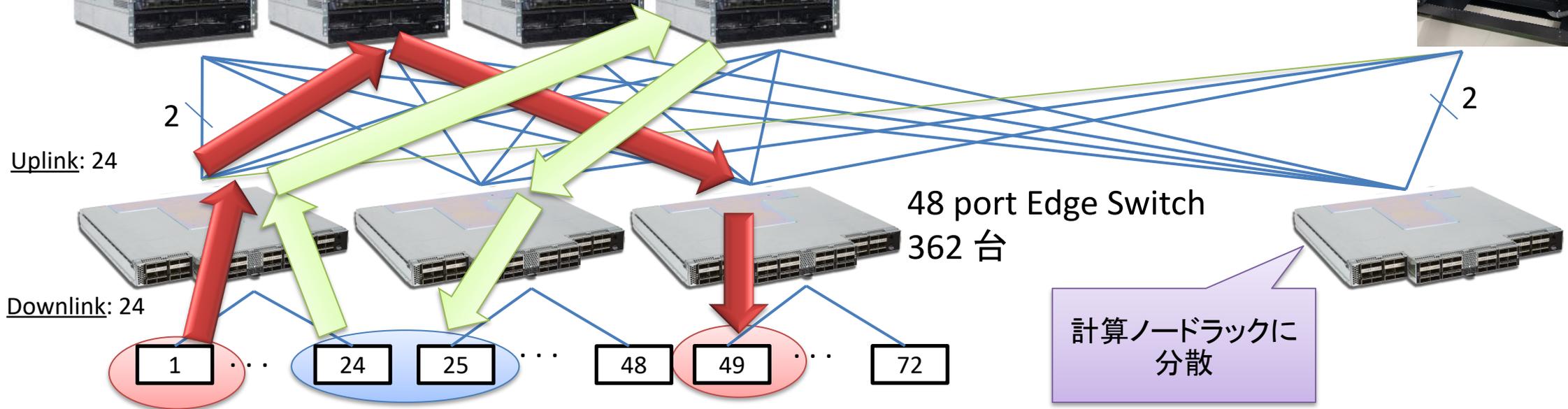
Intel Xeon Phi 7250 (Knights Landing)

- 1CPU(1ノード) 当たり68コアのメニーコアプロセッサ
- 1.4 GHz, クロック当たり32回の倍精度実数演算 (Double Precision, DP)
 - コア当たり最大性能⇒ $1.4 \times 32 = 44.8$ GFLOPS (1秒間に448億回の倍精度実数演算)
 - 1CPU 68コア, $3,046.4$ GFLOPS = 3.046 TFLOPS (1秒間に3兆464億回演算)
- MCDRAM: オンパッケージ高バンド幅メモリ搭載 16 GB, 490 GB/秒以上(実測)
 - DDR4 96 GB, 85 GB/秒(実測)
- 全系 8,208ノード: 25.004 PFLOPS (1秒間に2京5,004兆回演算)

Intel Omni-Path Architecture による フルバイセクションバンド幅Fat-tree網



768 port Director
Switch
12台
(Source by Intel)



フルバイセクションバンド幅を維持

- フルバイセクションバンド幅: 全ての計算ノードから同時に異なる計算ノードに通信しても性能が低下しない



計算ノードの物理配置を気にせずに
必要な数の計算ノードを確保できる

ファイルシステム (ストレージ)

並列ファイルシステム: Lustreファイルシステム

- 容量: **26.2 PB**
- バンド幅性能: **500 GB/秒**
 - サーバ当たり 50 GB/秒 x 10台
- 全10セット+メタデータ(管理)サーバで構成
 - 1セット当たり、サーバ兼コントローラ+5エンクロージャ
- 合計 4,200個の 8TB ハードディスク, 20%冗長化 (8D2P)

IO500 9位 (2018年11月), 15位 (2019年6月)



家庭用との比較

- 2020/10現在、家庭用HDDレコーダーの最大容量: 10TB
- 4K TVに必要なバンド幅: 2.25GB/秒

高速ファイルキャッシュ(バーストバッファ): Infinite Memory Engine (IME)

- 容量: **940 TB**
- バンド幅性能: **1.56 TB/秒 = 1,560 GB/秒**
- NVMe接続SSDを使用
 - 合計1,200枚の 800 GB SSD, 冗長化 (Erasure coding)
 - 単体 1.3 GB/s x 48本 x 25台 = 1,560 GB/s

IO-500 **1位** (2017年11月、2018年6月)
4位 (2018年11月), 3位 (2019年6月)

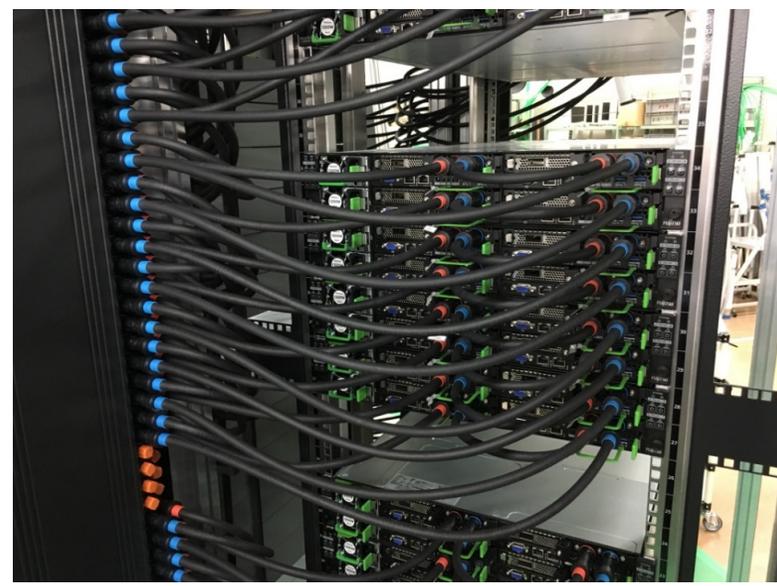
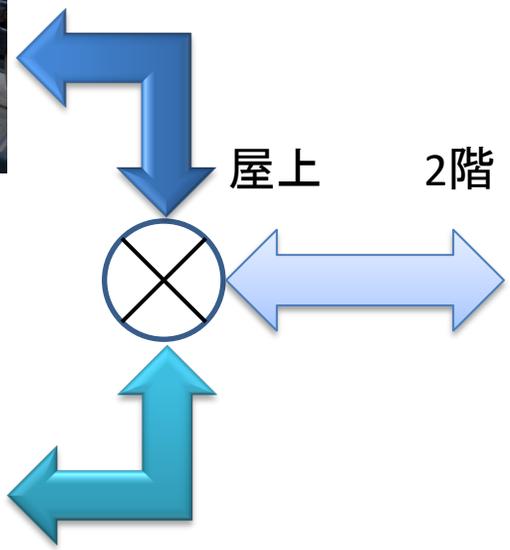


冷却



チラー
(冷凍機、冷水を作る)と
ポンプ

他の装置は空冷(冷房)



屋上の冷却塔
(気化熱で水を冷やす、
省エネ)

計算ノードのCPUのみ直接水冷、
計算ノードラックはリアドア水冷(ラジエター)

Oakforest-PACS 全景

9

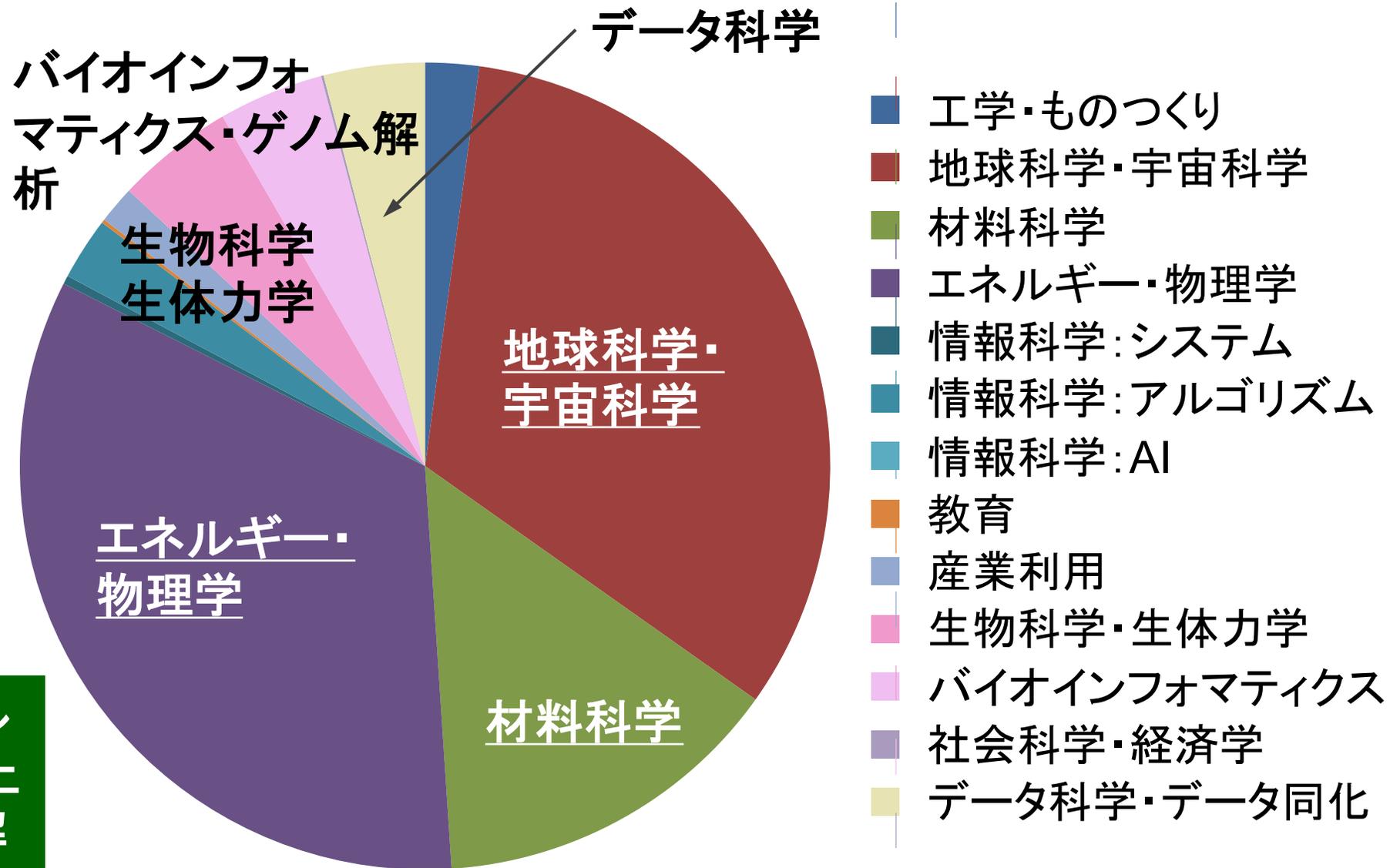


- 全体: **102ラック**
(6列: 計算x4列 + 他x2列)
- 計算ノード: **69ラック**
 - ・ 2ラックで1単位
(1箇所だけ3ラックで1単位)
- インタコネクト(OmniPath)
Director スイッチ: **12ラック**
- ファイルシステム: **16ラック**
 - ・ メタデータ(管理情報): 1ラック
 - ・ 並列ファイルシステム: 10ラック
 - ・ ファイルキャッシュ: 5ラック
- その他: **5ラック**
 - ・ 管理ネットワーク機器: 2ラック
 - ・ ログインノード+プリポスト+Webポータル: 1ラック
 - ・ 管理サーバ: 1ラック
 - ・ 外部接続ルータ: 1ラック
- 消費電力: **3.37 MW**
冷却含め **4.24 MW**
- 水冷 3.0 MW分程度,
残り 0.4 MW分程度は空冷

OFP: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, Intel Omni-Path Fabric Software, MVAPICH2
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, omnicompiler, 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等
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)

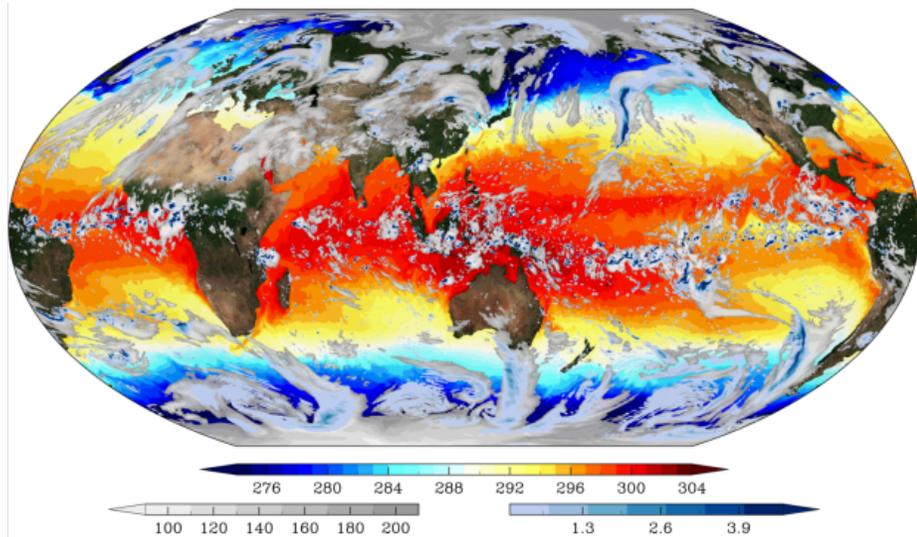
研究分野別利用CPU時間割合(2019年度)



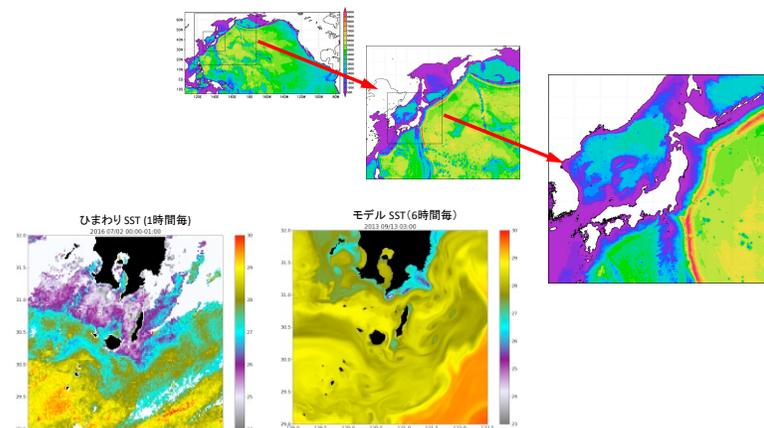
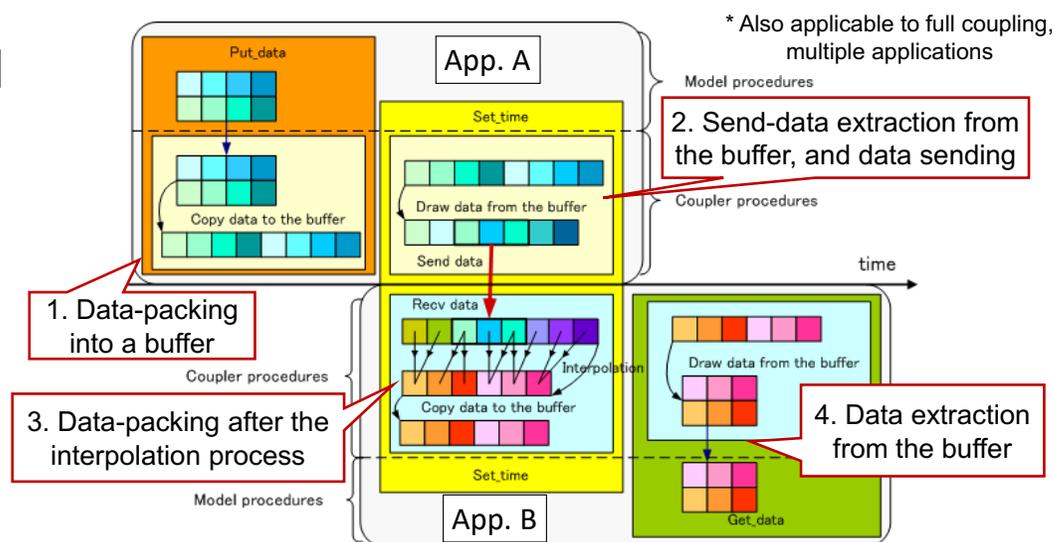
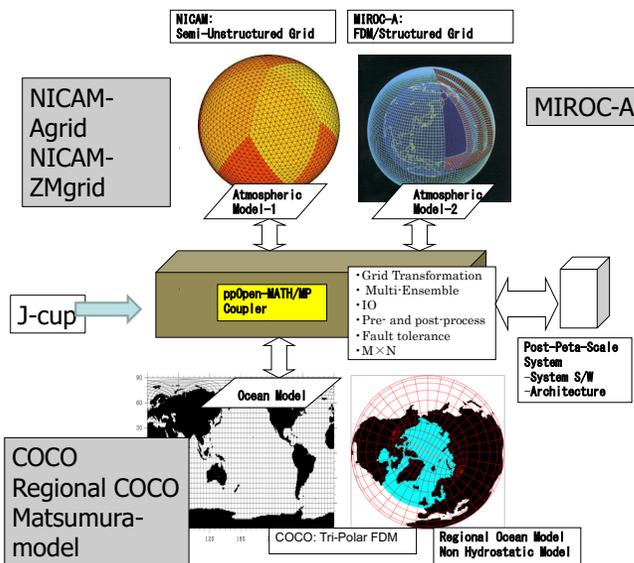
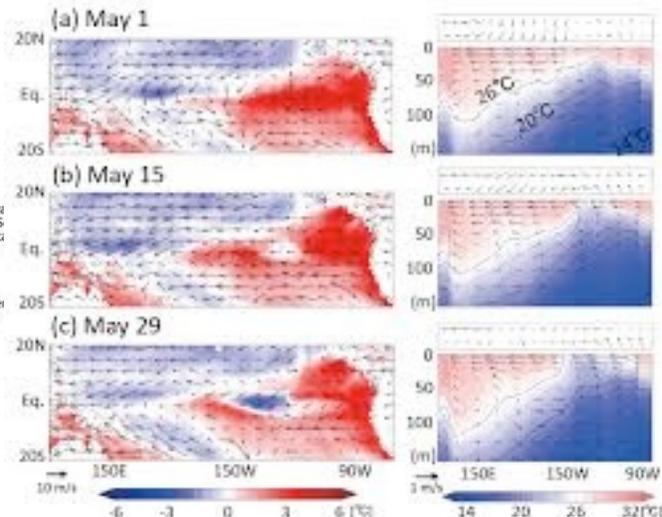
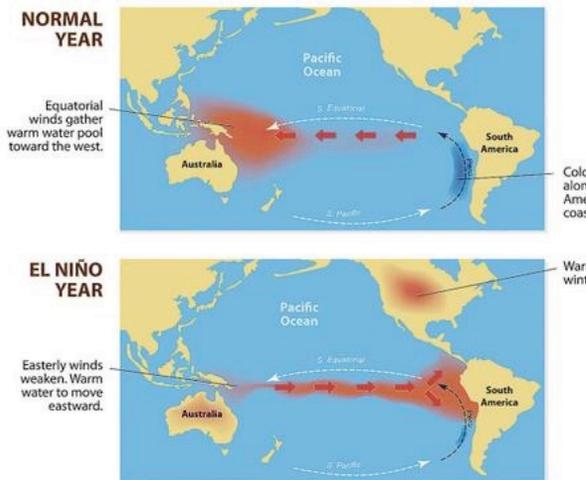
地球・宇宙科学とエネルギー・物理学で半分以上を占める一方、データ解析にも利用

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



THE EL NIÑO PHENOMENON



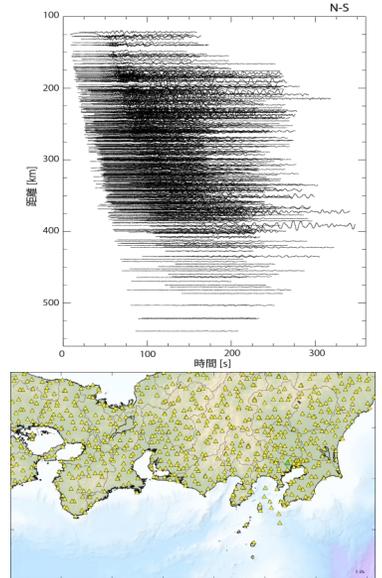
〔画像提供: 佐藤正樹教授・羽角博康教授(東大・大気海洋研)〕

地震シミュレーション・地殻変動

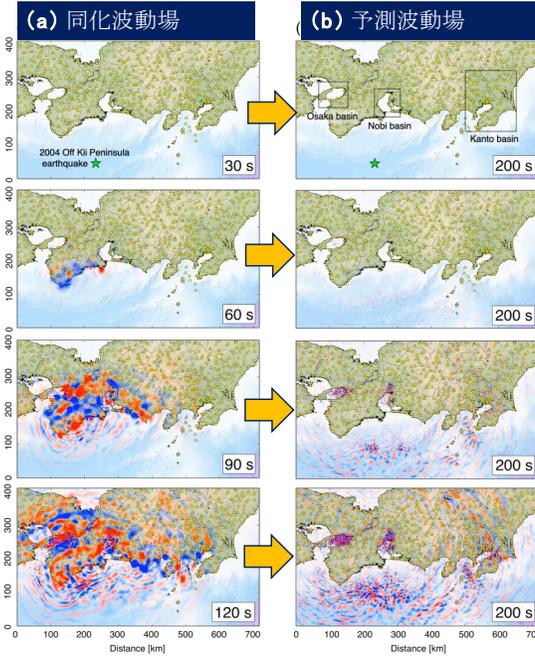
東大地震研究所, 東大理学系研究科等

[画像提供: 古村孝志教授・市村強教授(東大・地震研)]

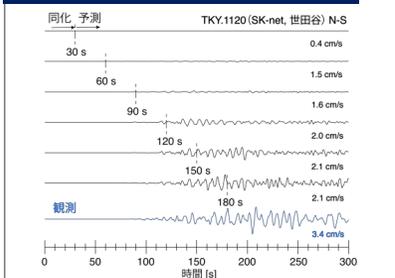
○ 使用データ(K-NET, KiK-net 446点)



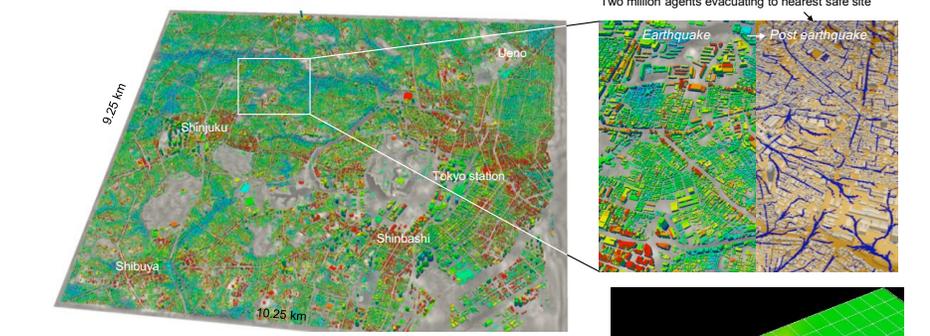
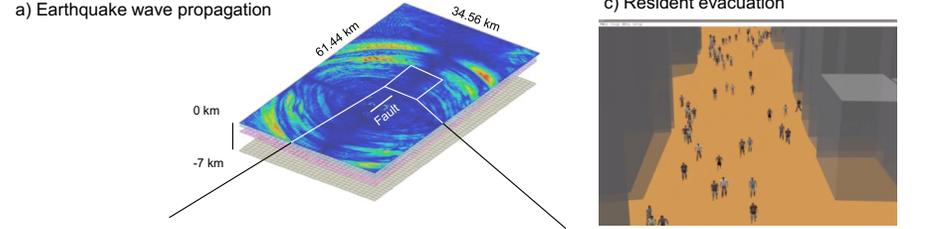
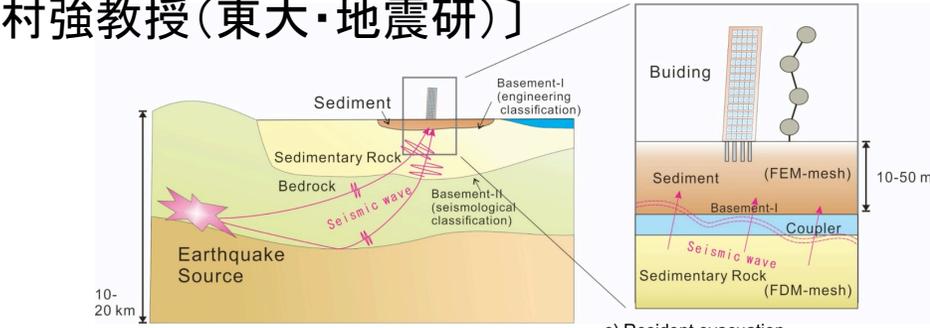
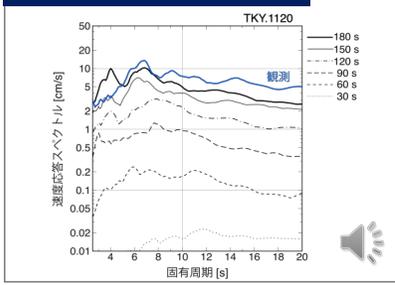
90秒間の同化→予測計算



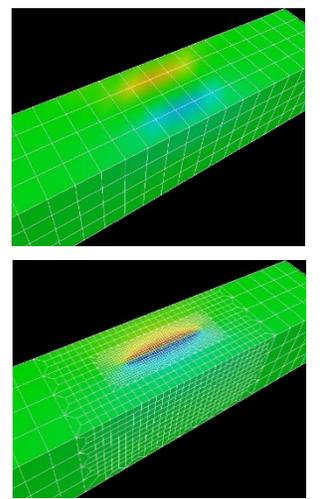
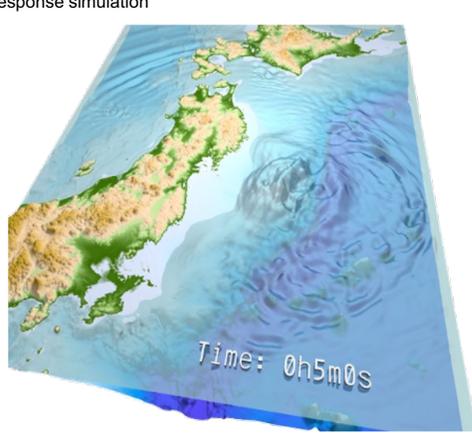
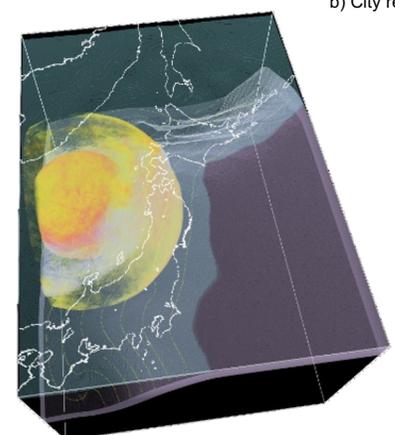
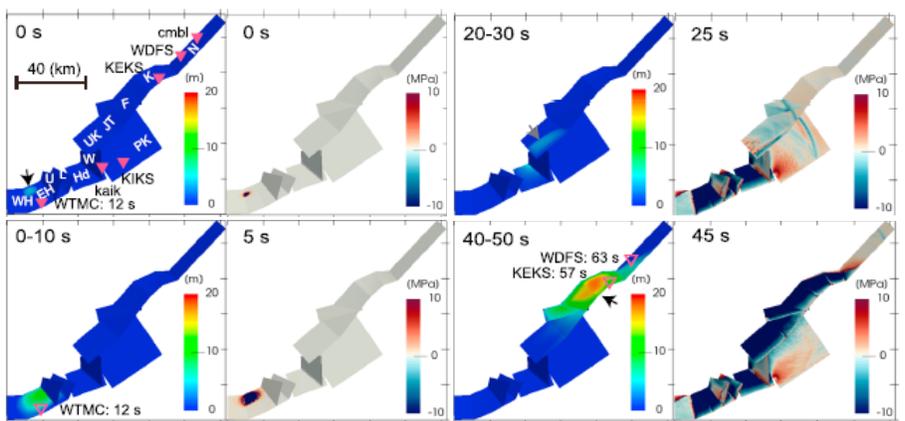
都心の長周期地震動予測結果



応答スペクトル予測結果



[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)]

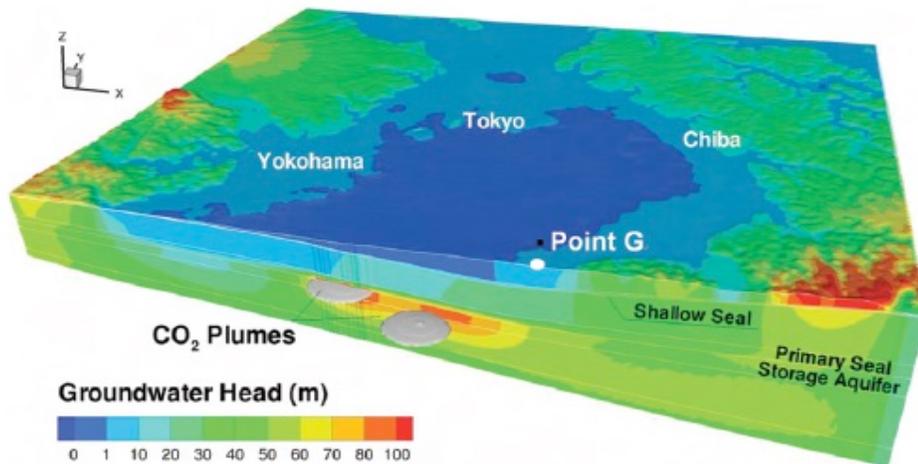
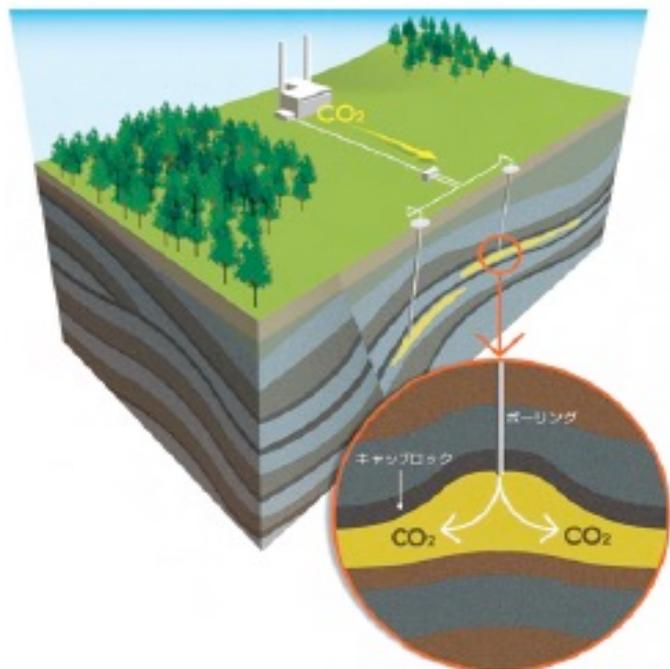
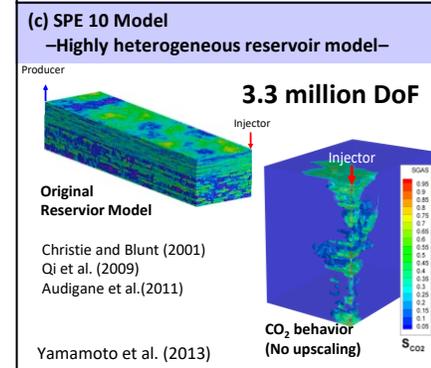
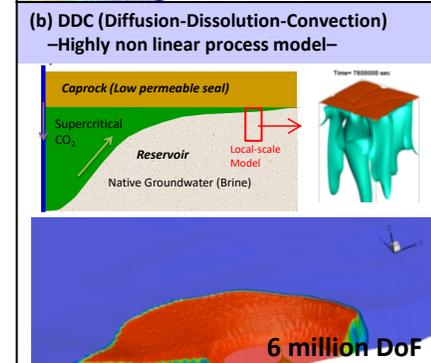
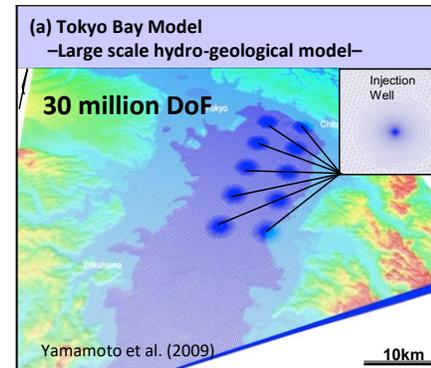
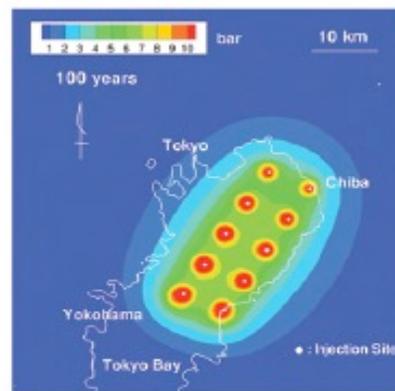
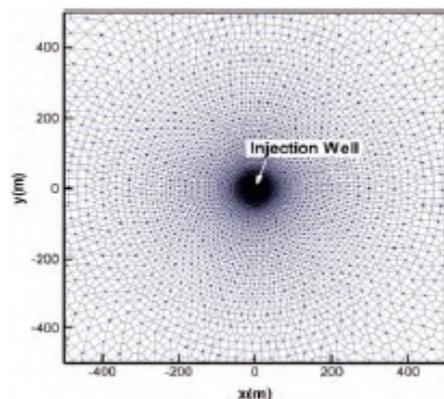


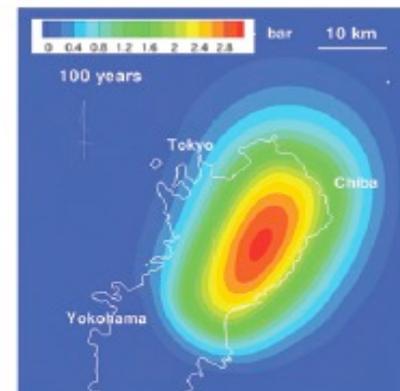
図-4 CO₂ 圧入後の地下水圧 (全水頭換算) の分布 (100 年後)



※DOF: degrees of freedom

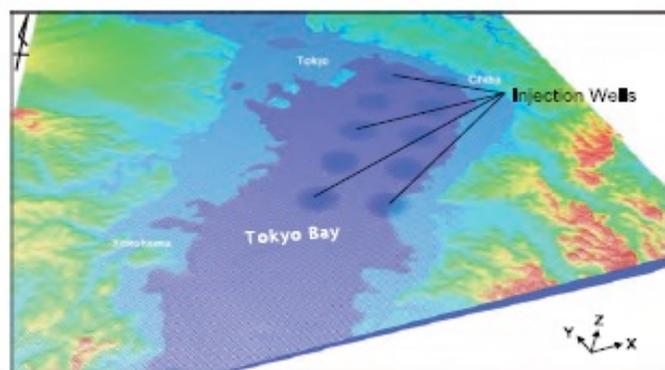


(a) 深部遮蔽層下面



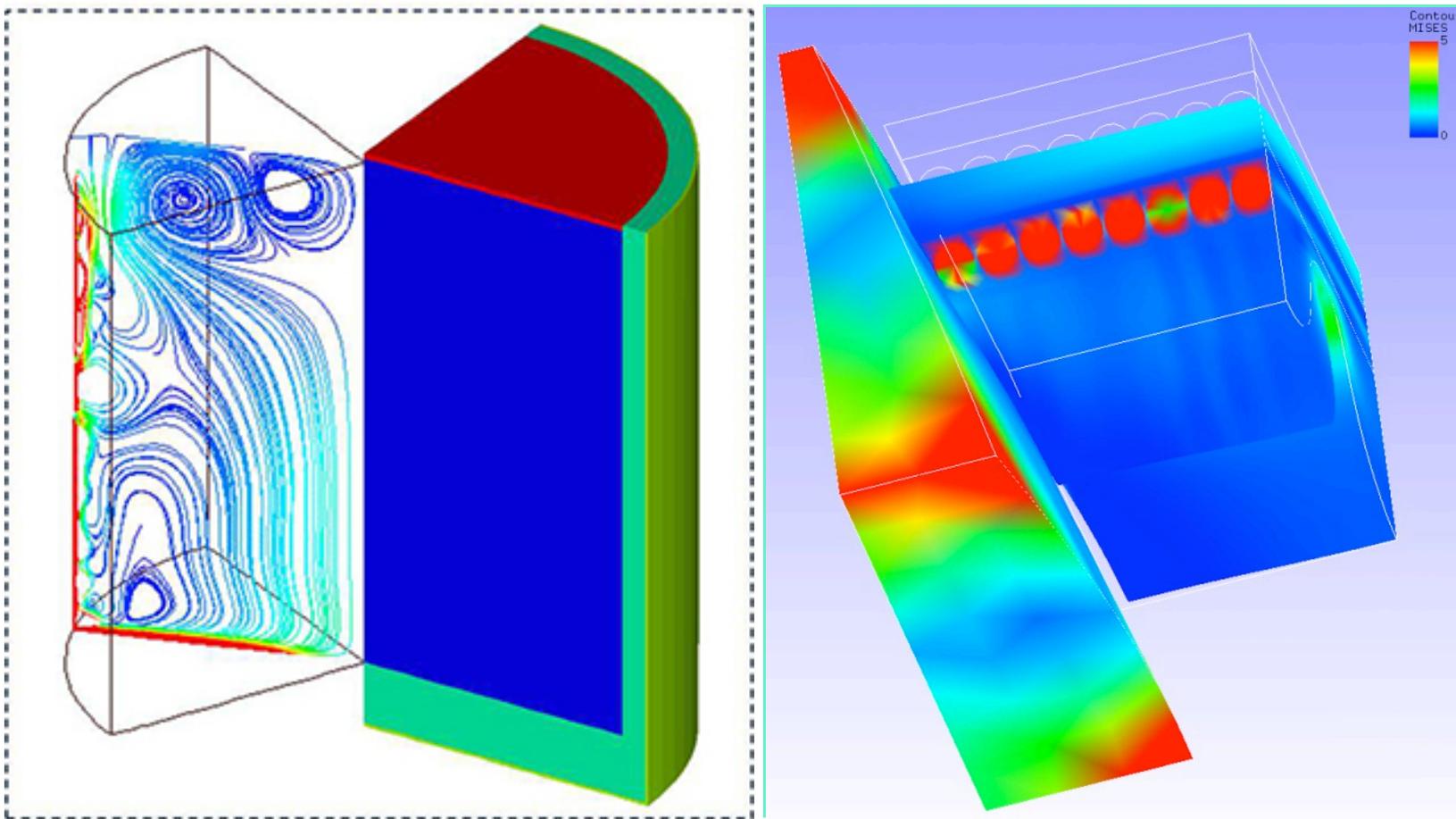
(b) 浅部遮蔽層下面

図-5 圧力上昇量の平面分布 (初期状態からの増分、圧入開始から 100 年後)

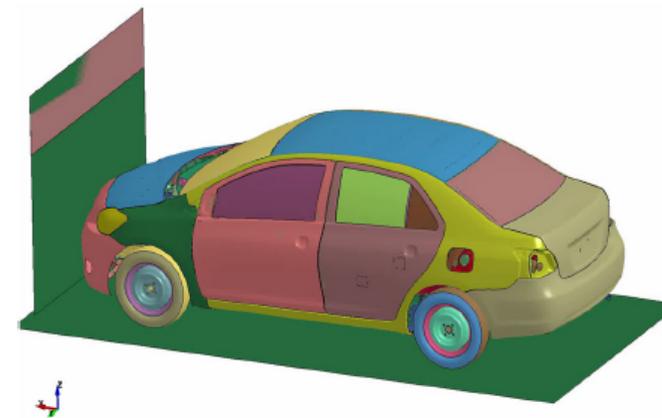


ものづくり分野（流体シミュレーション，構造解析など）

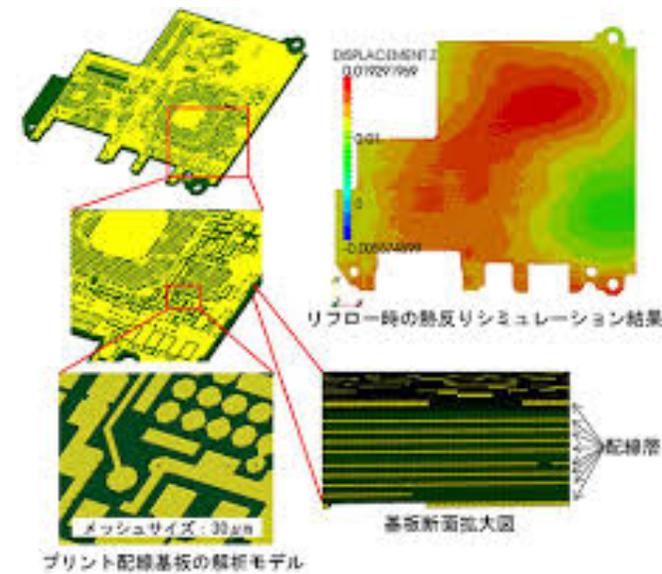
様々な大学・研究機関・企業



〔画像提供：奥田洋司教授（東京大学新領域創成科学専攻）〕

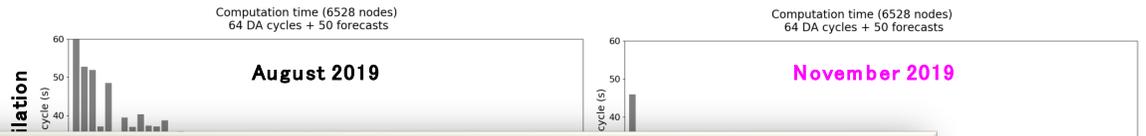
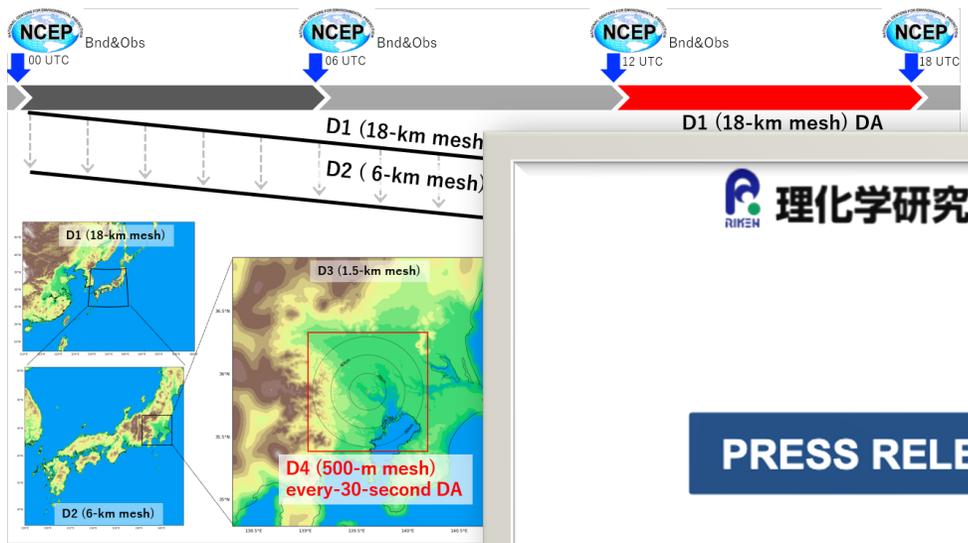


〔画像提供：日本自動車工業会（JAMA）〕



プリント配線基板の解析モデル

ゲリラ豪雨予測のリアルタイム実証実験 (理化学研究所)



PRESS RELEASE

2020年8月21日
 理化学研究所、情報通信研究機構
 大阪大学、株式会社エムティーアイ
 筑波大学、東京大学、科学技術振興機構

30秒ごとに更新するゲリラ豪雨予報

—首都圏でのリアルタイム実証実験を開始—

理化学研究所（理研） 計算科学研究センターデータ同化研究チームの三好建正チームリーダー、情報通信研究機構 電磁波研究所リモートセンシング研究室の佐藤晋介研究マネージャー、大阪大学 大学院工学研究科の牛尾知雄教授、株式会社エムティーアイ ライフ事業部気象サービス部の小池佳奈部長、筑波大学 計算科学研究センターの朴泰祐教授、東京大学 情報基盤センターの中島研吾教授らの共同研究グループ*は、2020年8月25日から9月5日まで、首都圏において30秒ごとに更新する30分後までの超高速降水予報のリアルタイム実証実験を行います。

本研究成果は、近年増大する突発的なゲリラ豪雨^[1]などの降水リスクに対して、

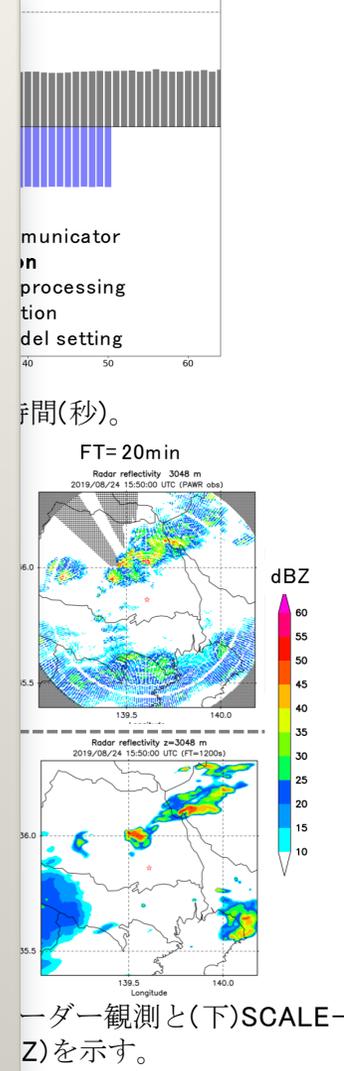


PAWR Obs

 SCALE-LETKF Analysis

〔画像提供: 三好建正博士 (理化学研究所)〕

2019 LETKF



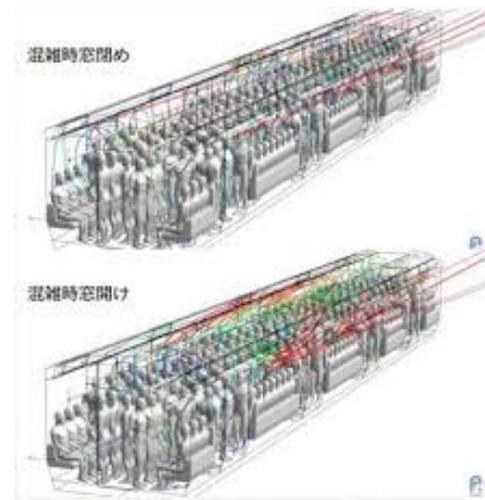
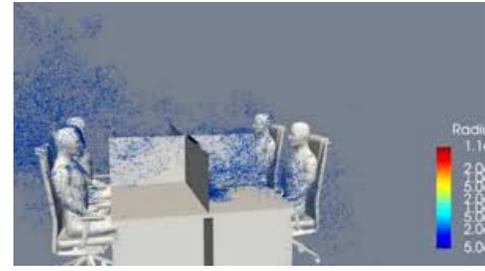
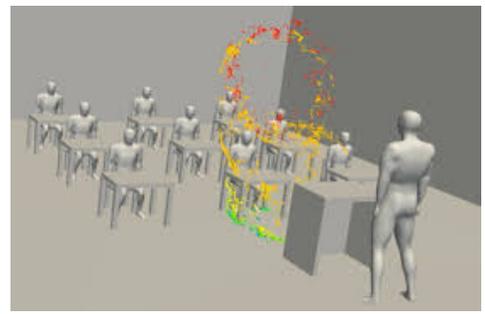
「COVID-19」対応臨時公募採択課題

全国9国立大学のスパコンによる課題

全13のうち6課題が東大システムを利用



課題名	代表者	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)	OFP
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)	OBCX
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)	



- Oakforest-PACS (OFP) の概要
 - システム構成
 - 利用分野
 - ゲリラ豪雨予測, COVID-19感染対策への取り組み