

Oakbridge-CX OBCX

大規模超並列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 (OBCX) (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



Oakbridge-CX (OBCX)

世界第60位 2020年6月現在



Fujitsu PRIMERGY CX2550 M5



Fujitsu PRIMERGY CX400 M1
シャーシ当たりCX2550 M5 × 4搭載

計算ノード

Chassis: PRIMERGY CX400 M4 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



x10

FUJITSU Server
PRIMERGY CX2560 M5 x 10

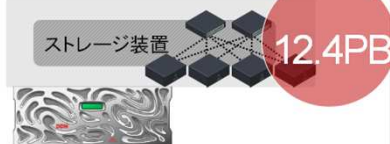
管理サーバ群



x15

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

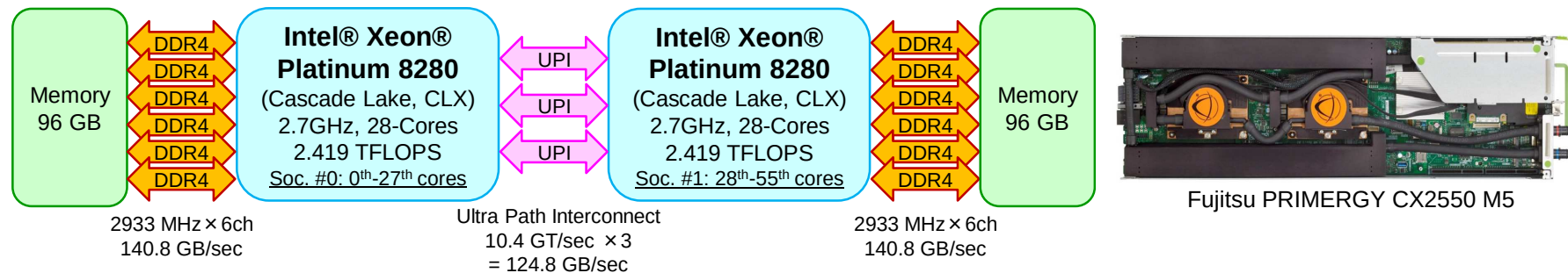


12.4PB

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)

Intel Xeon Platinum 8280 (Cascade Lake, CLX)

現在: Intel Xeon Scalable Processor (SP)



- 1CPU当たり28コア, 1ノード56コアのマルチコアプロセッサ(並列処理)
- 2.7 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⇒ $2.7 \times 32 = 86.4$ GFLOPS (1秒間に864億回の倍精度実数演算)
 - 1CPU 28コア, 2,419.2 GFLOPS = 2.419 TFLOPS (1秒間に2兆4,192億回演算)
 - 1ノード 56コア, 4,838.4 GFLOPS = 4.838 TFLOPS (1秒間に4兆8,384億回演算)
- 全系1,368ノード: 6.618 PFLOPS (1秒間に6,618兆3,840億回演算)



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



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



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



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



Oakbridge-CX (OBCX)

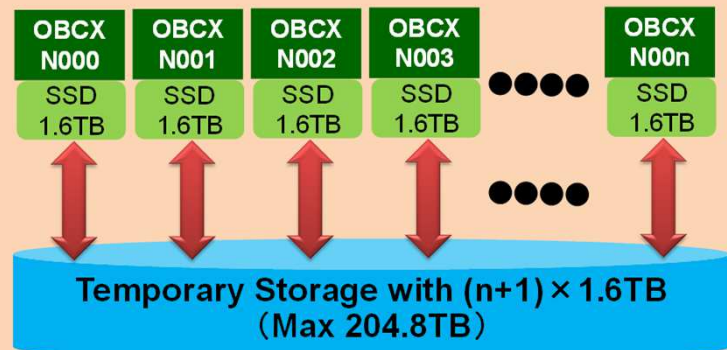
計算ノード: ラック当たり最大68ノード, 合計21ラック



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

BeeGFS on Demand (BeeOND)



Total: 1,368 nodes

128 nodes
with SSD

16

OBCXの16ノード(外部接続ノード)
SINET経由で外部計算機資源に直接接続,
BDECにおけるデータ・学習ノード群と同様の
役割

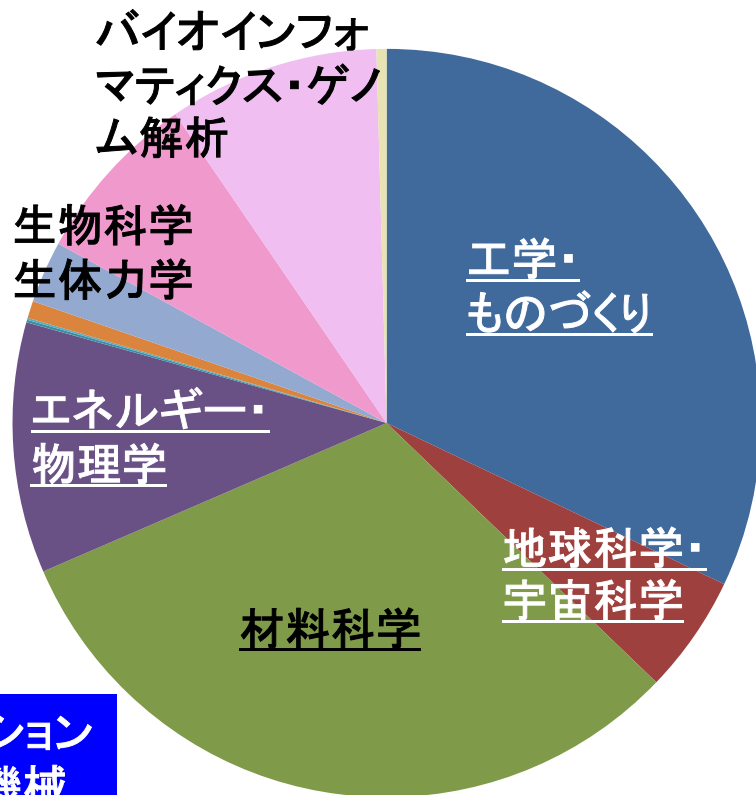


OBCX: ソフトウェア構成

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)



研究分野別利用CPU時間割合 (2019.10～2020.9)

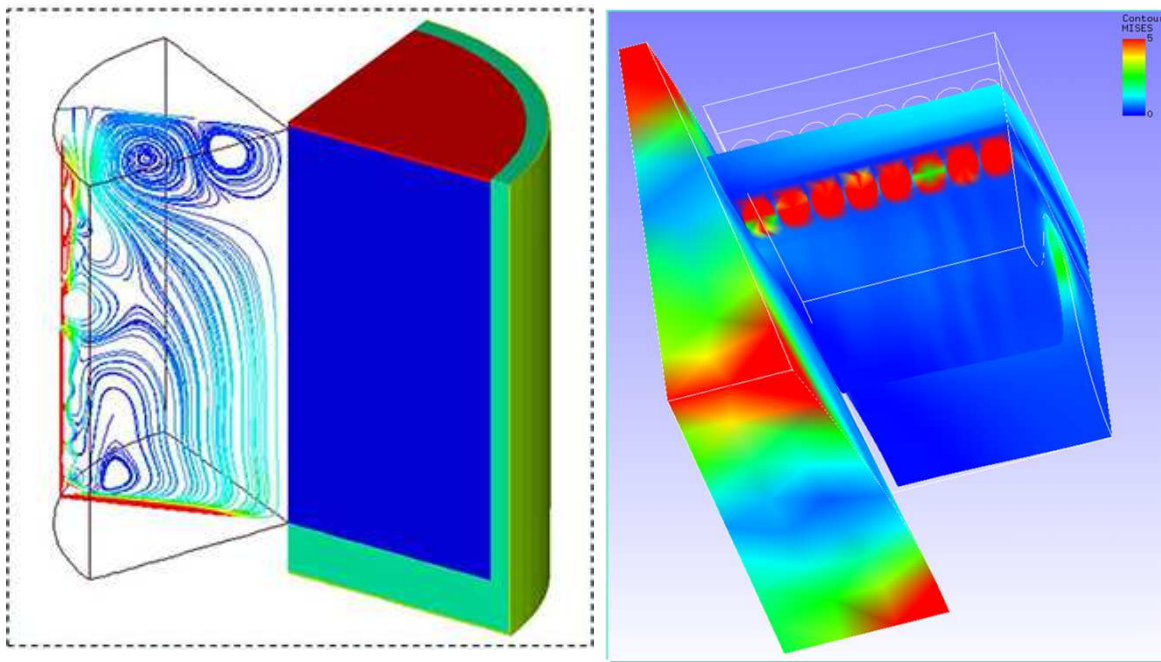


- 工学・ものづくり
- 地球科学・宇宙科学
- 材料科学
- エネルギー・物理学
- 情報科学: システム
- 情報科学: アルゴリズム
- 情報科学: AI
- 教育
- 産業利用
- 生物科学・生体力学
- バイオインフォマティクス・ゲノム解析
- 社会科学・経済学
- データ科学・データ同化

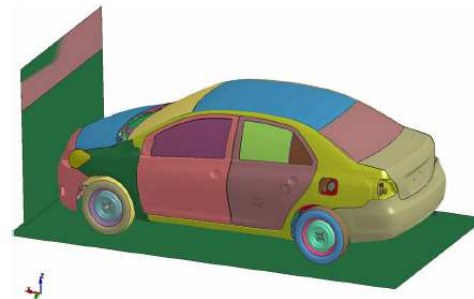
計算科学シミュレーション
の他, データ解析, 機械
学習分野にも利用

ものづくり分野(流体シミュレーション, 構造解析など)

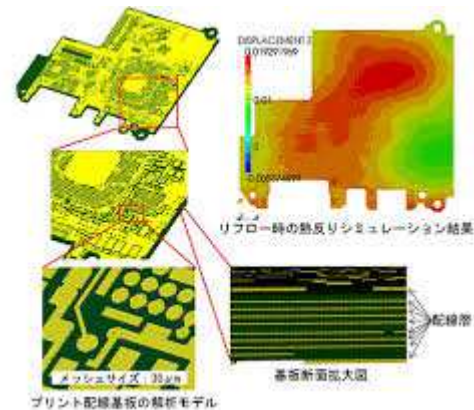
様々な大学・研究機関・企業



〔画像提供: 奥田洋司教授(東京大学新領域創成科学専攻)〕

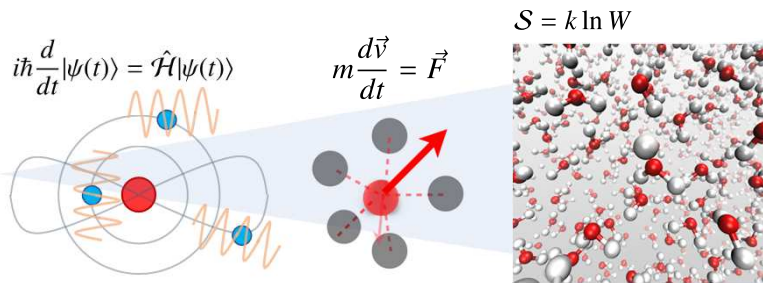


〔画像提供: 日本自動車工業会(JAMA)〕

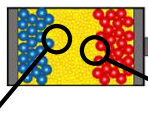


材料科学・物性科学・分子科学

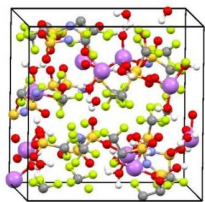
東大工, 阪大基礎工, 物質・材料研究機構 他 様々な大学・研究機関



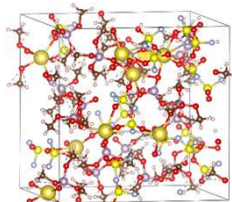
DFT-MDによる蓄電池用新型
電解液のミクロ物性解明



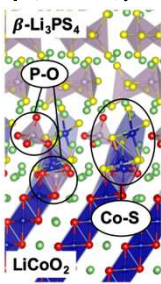
全固体電池の電極-電解質
界面のDFTミクロ解析



高濃度水系電解液
Nature Energy 2016



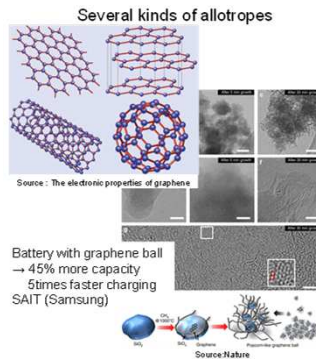
高濃度消火性電解液
Nature Energy 2018



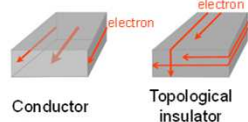
Chem. Mater. 2020

[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・トポジカル絶縁体のtight-binding計算



A new material which has special properties
Inside: insulation Outside: Conduction

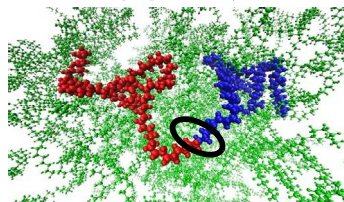


Sample of the topological insulator (SmB6)



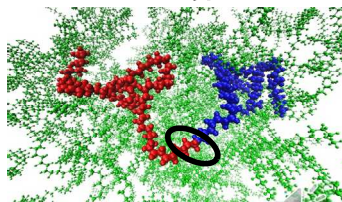
[画像提供: Gerhard Wellein教授 (FAU, Germany)]

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

逐次伸張
モノマーごとの
相互作用考慮

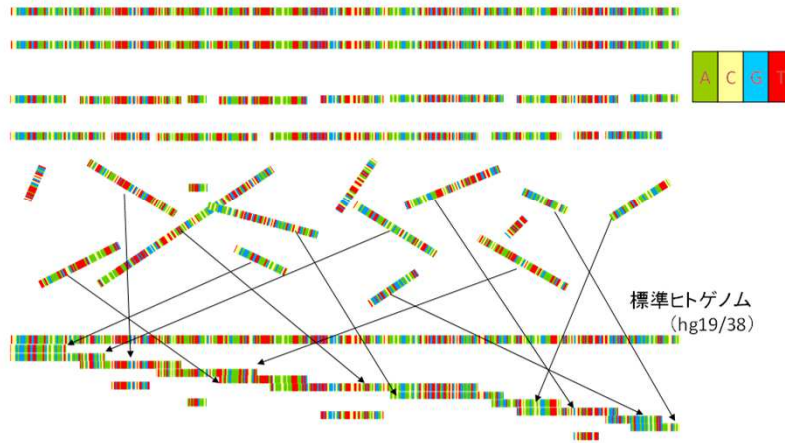


[画像提供: 松林研究室(阪大)]

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？

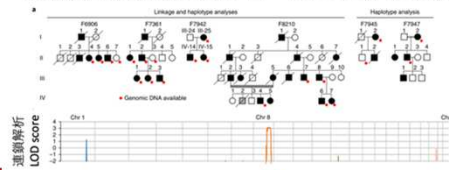


長さ 100～150 塩基の DNA 断片を 10～20 億本収集 (ヒト1人当たり)
 接尾辞配列 (suffix array), Burrows-Wheeler 変換等が活用される

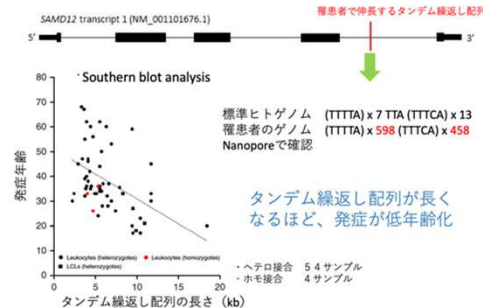
〔画像提供:

森下真一教授 (東京大学新領域創成科学研究科)〕

良性成人型家族性ミオクロームステんかの家系



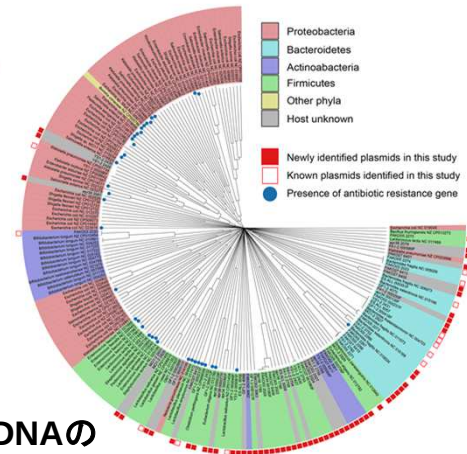
家系の連鎖解析により絞り込んだ 8 番染色体の領域に存在する 3 8 個遺伝子のコード領域には、原因となる 1 塩基変異が見つからなかった。しかしこの領域の *SAMD12* のイントロンに、罹患者で伸長するタンデム繰返し配列を発見。



Nature Genetics 2018

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



Microbiome 2019



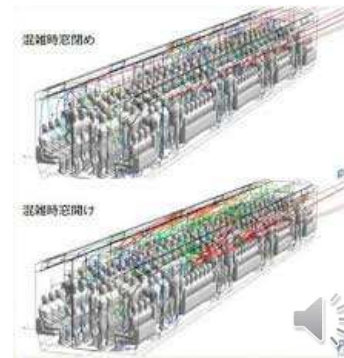
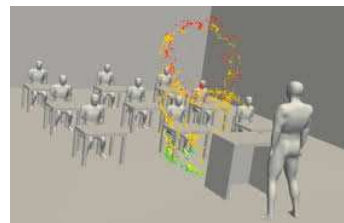
「COVID-19」対応臨時公募採択課題

全国9国立大学等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)	



- Oakbridge-CX（OBCX）の概要
 - システム構成
 - 強力なデータ解析能力
 - 利用分野， **COVID-19**感染対策への取り組み