

Wisteria/BDEC-01 試験運用のお知らせ

スーパーコンピューティングチーム

プレスリリース「東京大学情報基盤センターが Society 5.0 実現へ向けた「計算・データ・学習」融合スーパーコンピュータシステムの導入を決定」(<https://www.cc.u-tokyo.ac.jp/public/pr/pr-wisteria.php>)にてお知らせした「計算・データ・学習」融合スーパーコンピュータシステム(Wisteria/BDEC-01)につきまして、2021年5月14日(金)より、試験運用を開始する予定です。ここでは、本システムの基本的な仕様並びに、試験運用での概要についてお知らせいたします。

なお、試験運用期間中は、システムの設定変更等のため、予告なく運転の停止、運用仕様の変更を行う場合がありますので予めご了承ください。

1. システム構成

1.1 ハードウェア構成

Wisteria/BDEC-01 のシステム構成は以下の通りです (図 1、表 1、表 2)。

図 1. システム構成図

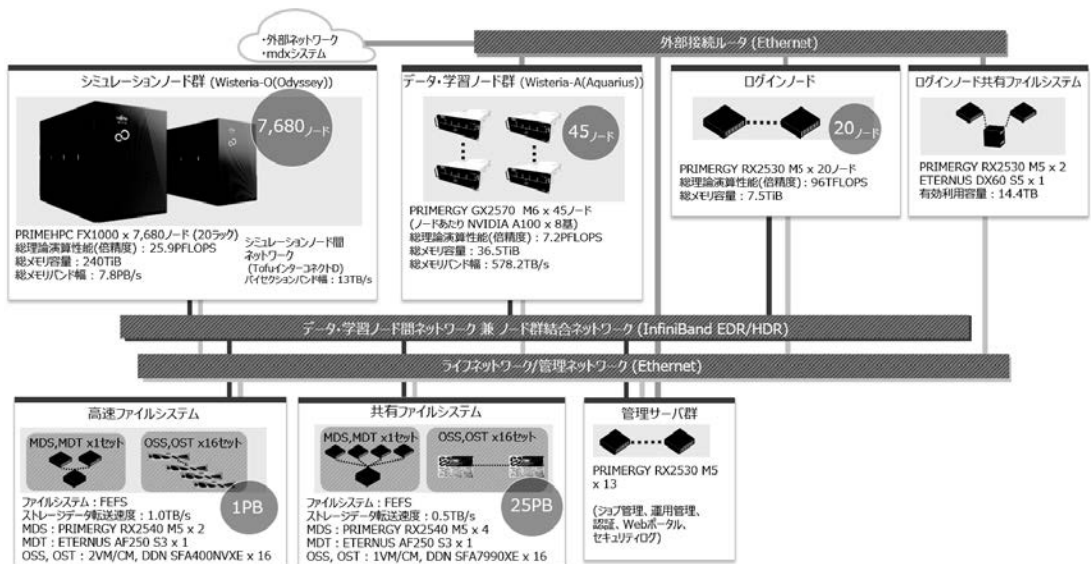


表 1. 全体構成

- ※ Wisteria-O (Odyssey): Wisteria/BDEC-01 のシミュレーションノード群
- ※ Wisteria-A (Aquarius): Wisteria/BDEC-01 のデータ・学習ノード群

項目		Wisteria-O (Odyssey)	Wisteria-A (Aquarius)
総理論演算性能		25.9 PFLOPS	7.2 PFLOPS
総ノード数		7,680	45
総主記憶容量		240.0 TiB	36.5 TiB
ネットワークポロジ		6次元メッシュ / トーラス	Full-bisection Fat Tree
共有ファイルシステム	ファイルシステム	FEFS (Fujitsu Exabyte File System)	
	サーバ(OSS)	DDN SFA7990XE	
	サーバ(OSS)数	16	
	ストレージ容量	25.8 PB	
	ストレージデータ転送速度	504 GB/s	

高速ファイルシステム	ファイルシステム	FEFS (Fujitsu Exabyte File System)
	サーバ(OSS)	DDN SFA400NVXE
	サーバ(OSS)数	16
	ストレージ容量	1.0 PB
	ストレージデータ転送速度	1.0 TB/s

表 2. ノード構成

項目		Wisteria-O (Odyssey)	Wisteria-A (Aquarius)
マシン名		FUJITSU Supercomputer PRIMEHPC FX1000	FUJITSU Server PRIMERGY GX2570 後継機
CPU	プロセッサ名	A64FX	Intel 第3世代 Xeon スケーラブルプロセッサ(開発コード名: Ice Lake)
	プロセッサ数(コア数)	1 (48)	—
	周波数	2.2 GHz	—
	理論演算性能	3.3792 TFLOPS	—
	メモリ容量	32 GB	—
	メモリ帯域幅	1,024 GB/s	—
GPU	プロセッサ名	—	NVIDIA A100
	SM数 (単体)		108
	メモリ容量 (単体)		40 GB
	メモリ帯域幅 (単体)		1,555 GB/s
	理論演算性能 (単体)		19.5 TFLOPS
	搭載数		8
	CPU-GPU 間接続		PCI Express Gen4 x 16 レーン (1 レーンあたり片方向 32 GB/s)
	GPU 間接続		NVLink x 12 本 (1 本あたり片方向 25 GB/s)
インターコネク	Tofu インターコネク	InfiniBand HDR (200Gbps) x 4	

1.2 ソフトウェア構成

Wisteria/BDEC-01のソフトウェア構成は、以下の通りです(表 3)。

表 3. ソフトウェア構成

	Wisteria-O (Odyssey)	Wisteria-A (Aquarius)
OS	Red Hat Enterprise Linux 8	
コンパイラ	GNU コンパイラ	
	富士通社製コンパイラ Fortran77/90/95/2003/2008 C、C++	Intel コンパイラ Fortran77/90/95/2003/2008 C、C++ NVIDIA HPC SDK Fortran77/90/95/2003/2008 C、C++ OpenACC 2.7 NVIDIA CUDA SDK CUDA C CUDA C++
メッセージ通信ライブラリ	富士通社製 MPI	Intel MPI、Open MPI

ライブラリ	富士通社製ライブラリ(BLAS、CBLAS、LAPACK、ScaLAPACK)	Intel 社製ライブラリ(MKL) (BLAS、CBLAS、LAPACK、ScaLAPACK)、cuBLAS、cuSPARSE、cuFFT、MAGMA、cuDNN、NCCL
	SuperLU、SuperLU MT、SuperLU DIST、METIS、MT-METIS、ParMETIS、Scotch、PT-Scotch、PETSc、Trillinos、FFTW、GNU Scientific Library、NetCDF、Parallel netCDF、HDF5、Parallel HDF5、CMake、Anaconda、Xabclib、ppOpen-HPC、MassiveThreads、Boost C++、mpiJava	
アプリケーション	OpenFOAM、ABINIT-MP、PHASE、FrontFlow/blue、FrontISTR、REVOCAP-Coupler、REVOCAP-Refiner、OpenMX、MODYLAS、GROMACS、BLAST、R packages、bioconductor、BioPerl、BioRuby、BWA、GATK、SAMtools、Quantum ESPRESSO、Xcrypt、ROOT、Geant4、LAMMPS、CP2K、NWChem、DeepVariant、Paraview、VisIt、POV-Ray、TensorFlow、Chainer、PyTorch、Keras、Horovod、MXNet	
	—	Theano
フリーソフトウェア	autoconf、automake、bash、bzip2、cvs、emacs、findutils、gawk、gdb、make、grep、gnuplot、gzip、less、m4、python、perl、ruby、screen、sed、subversion、tar、tclsh、tcl、vim、zsh、git など	
	—	Globus Toolkit、Gfarm、FUSE
コンテナ仮想化	Singularity	

2. 試験運用期間中のサービス内容及び利用申込みについて

サービス内容やご利用になるための利用申込み方法の詳細は決定次第、当センター Web ページにてお知らせいたします。

2.1 利用申込みについて

Wisteria/BDEC-01 をご利用になる場合には、利用申込み手続きが必要です(現在、当センターの計算機システムをご利用になられている場合でも、新たに利用申込み手続きが必要です。また、ご利用までの流れについては、表 4 もあわせてご覧ください)。

2.2 利用負担金について

Wisteria/BDEC-01 をご利用になる場合の利用負担金について、**試験運用期間中は、無料で利用可能とする予定**です。(正式サービスは 8 月からを予定しています)

2.3 コース別について

当センターの既存の各計算機システムのサービスにおいては、パーソナルコースとグループコース別のサービス運用を行っておりますが、パーソナルコースとグループコースについて、実質負担金当たりの資源量に変わりがないため、Wisteria/BDEC-01 においてはコース別を設置しないサービス設計を行います。

表 4. Wisteria/BDEC-01 試験運用期間のご利用の流れ (予定)

	3 月	4 月	5 月	6 月	7 月	8 月
システム			● 5/14(金) 10:00 試験運用開始		● 7/29(木) 試験運用 期間終了	● 8/2(月) 正式サー ビス開始
利用者	● サービス 案内開始	● 利用申込 受付期間	● ・試験運用期間中は無料で利用可能とする ・正式サービスに向けて、プログラム等の 動作確認を行う			

2.3 試験運用期間中のサービスについて

2.3.1 ログインノードサービス

プログラムの編集、コンパイルやバッチジョブの投入などに利用するための環境として、ログインノードを複数台用意する予定です。また、JupyterLab 環境(バッチジョブ連携含む)や Apache Guacamole を利用した仮想的な GUI デスクトップ環境を提供する予定です。

ログインノードは、当センターでサービスを行っている他のスーパーコンピューターシステムと同様に、公開鍵認証方式による接続となります。鍵登録の方法や、接続ホスト名などの詳細については、当センター Web ページや Wisteria/BDEC-01 利用支援ポータルにてお知らせいたします。

2.3.2 インタラクティブジョブ/バッチジョブ/プリポストサービス

ジョブ実行方法、ジョブクラス制限値(経過時間制限、割り当てノード数、メモリ制限値)などの詳細については、当センター Web ページや Wisteria/BDEC-01 利用支援ポータルにてお知らせいたします。

Wisteria/BDEC-01 のご利用イメージは、おおそ図 2 の通りです(ただし、以下の図は、スーパーコンピューティングニュース原稿作成時のものです。今後の検討状況によっては、変更する場合があります)。

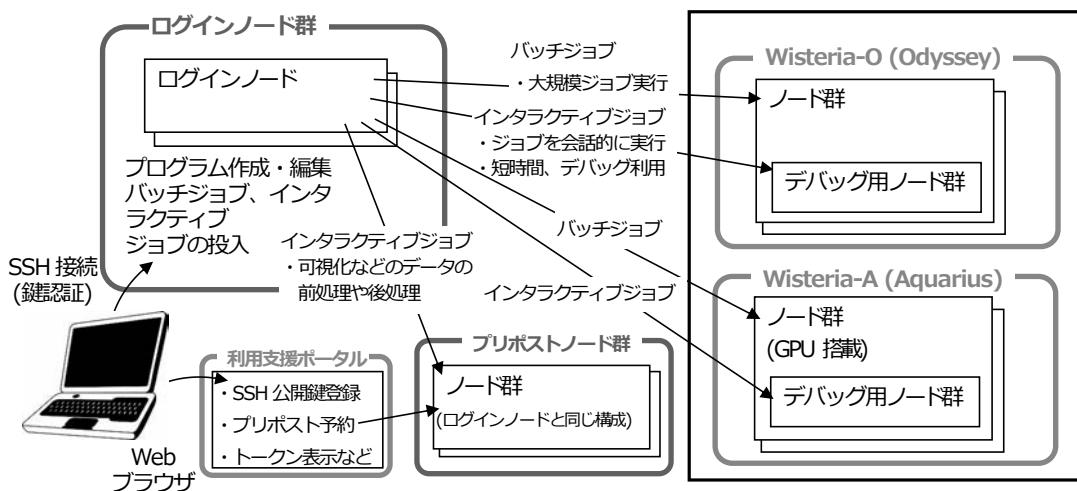


図 2. システムのご利用イメージ

2.3.3 ファイルシステム

ファイルシステムは、システム構成図(図 1、表 1)にある通り、ログインノード共有ファイルシステム、共有ファイルシステム、高速ファイルシステムの 3 ファイルシステムで構成されます。

共有ファイルシステム・高速ファイルシステムは富士通社製の並列分散処理ファイルシステム FEFS (Fujitsu Exabyte File System) で構築されます。FEFS は、Lustre ファイルシステムをベースに機能拡張されたファイルシステムで、複数のノードから高速インターコネクトを利用した高いデータ転送機能や、1 つのファイルを一定のデータサイズに分割して書き込むストライピング機能などを有するファイルシステムです。高速ファイルシステムについては、一定期間更新のないファイルが自動削除される一時領域と自動削除のない恒久領域(申込制)にて運用される予定です。

ログインノード共有ファイルシステムは主にホームディレクトリで利用するための NFS 領域です。ホームディレクトリは共有ファイルシステムに変更を可能とする予定です。その他、各ファイルシステムの特徴・利用方法(マウント先)などの詳細については、当センター Web ページや Wisteria/BDEC-01 利用支援ポータルにてお知らせいたします。

2.3.4 大規模 HPC チャレンジ(公募制)

最大規模の計算資源を使った大規模 HPC チャレンジの募集については、新型コロナウイルスにかかる現状を鑑みて、現在当面の間募集を停止している状況です。Wisteria/BDEC-01 における大規模 HPC チャレンジの試験運用期間中の実施については、応募受付が再開される見通しとなった際に当センター Web ページにてお知らせいたします。

3. その他

最新の情報は、当センター Web ページ (<https://www.cc.u-tokyo.ac.jp>) にて随時ご案内いたします。メールによる問い合わせについては、事前に Web ページで情報がないかご確認の上、受付窓口 uketsuke@cc.u-tokyo.ac.jp までお願いいたします。