



東京大学情報基盤センター のスーパーコンピュータ



- スーパーコンピュータ(スパコン)とは？
- 東大情報基盤センターの現状
 - ✓ スパコンシステム紹介
 - ✓ 様々な利用分野
 - ✓ COVID-19に対する取り組み



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)



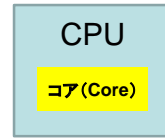
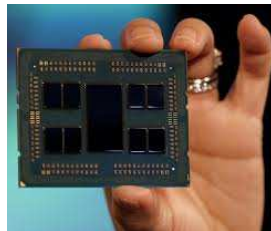
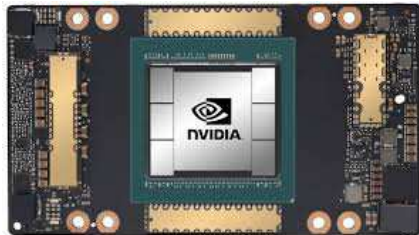
• Oakbridge-CX (OBCX) (富士通, Intel Xeon Platinum 8280) (柏)

- 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

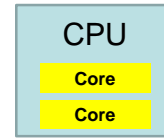


スーパーコンピュータ(スパコン)とは？

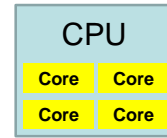
- CPU(Central Processing Unit, 中央演算装置)のマルチコア化, メニコア化
 - 並列計算が基本:PC, スマホも同様
- GPU(Graphic Processing Unit)
 - 描画用途⇒高いデータ転送能力を計算に利用
 - 数百のコアを有する「メニコア」
- **マルチコア・メニコアCPU(GPU)を高速ネットワークで接続した並列計算機(Parallel Computer)が「スパコン」**



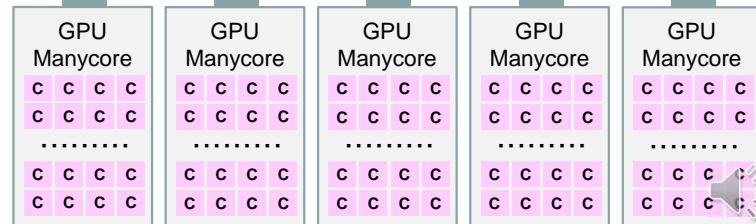
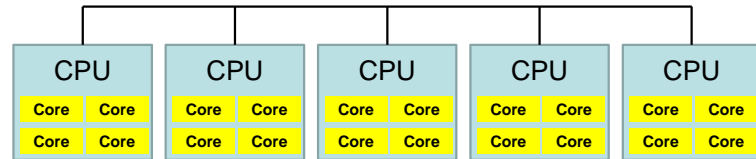
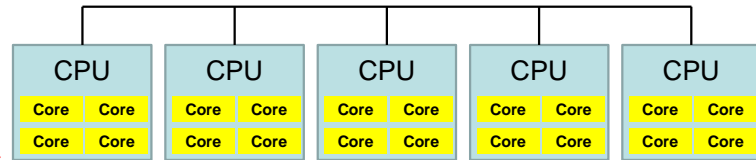
シングルコア
1 cores/CPU
Single



デュアルコア
2 cores/CPU
Dual



クアドコア
4 cores/CPU
Quad



スーパーコンピュータ(スパコン)の性能

- FLOPS値 (Floating Point Operations per Second, 浮動小数点演算)

- 1秒当たりの実数演算性能

- 10^6 FLOPS = 1 Mega FLOPS = 1 MFLOPS (百万)

- 10^9 FLOPS = 1 Giga FLOPS = 1 GFLOPS (十億)

- 10^{12} FLOPS = 1 Tera FLOPS = 1 TFLOPS (兆)

- 10^{15} FLOPS = 1 Peta FLOPS = 1 PFLOPS (千兆)

- 10^{18} FLOPS = 1 Exa FLOPS = 1 EFLOPS (百京)

- 東大センターの「Oakbridge-CX」

- Intel Xeon Platinum 8280, 1コアの性能は86.4GFLOPS

- 1秒間に864億回の倍精度実数演算

- 1ノード: 56コア

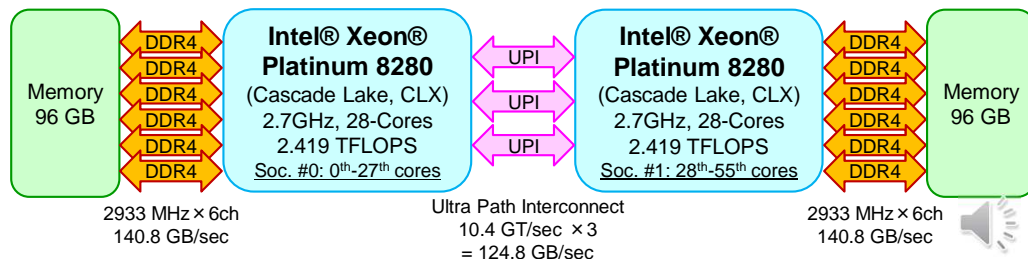
- 4,838.4 GFLOPS = 4.838.TFLOPS

- 4兆8,384億回

- 全システム: 1,368ノード

- 6.618 PFLOPS

- 6,618兆3,840億回



TOP 500

- <http://www.top500.org/>
- 世界のスパコンのランキング(1993年から年2回(6月・11月)更新)
- HPL(High-Performance Linpack)という大規模な連立一次方程式を解くベンチマークの性能(FLOPS値)でランク付け(iPhone・Android版もある)
 - iPhone・Androidも一種のマルチコアCPU: 並列処理可能
- 現在の1位は「富岳(理化学研究所)」(415.53 PFLOPS, 物理ピーク性能 514 PFLOPS)
 - HPL計測時の消費電力は約28MW
 - 日本の原発の最大出力は1基1,000MW級(100万キロワット)



55th TOP500 List (June, 2020)

Oakbridge-CX (OBCX) is 60th

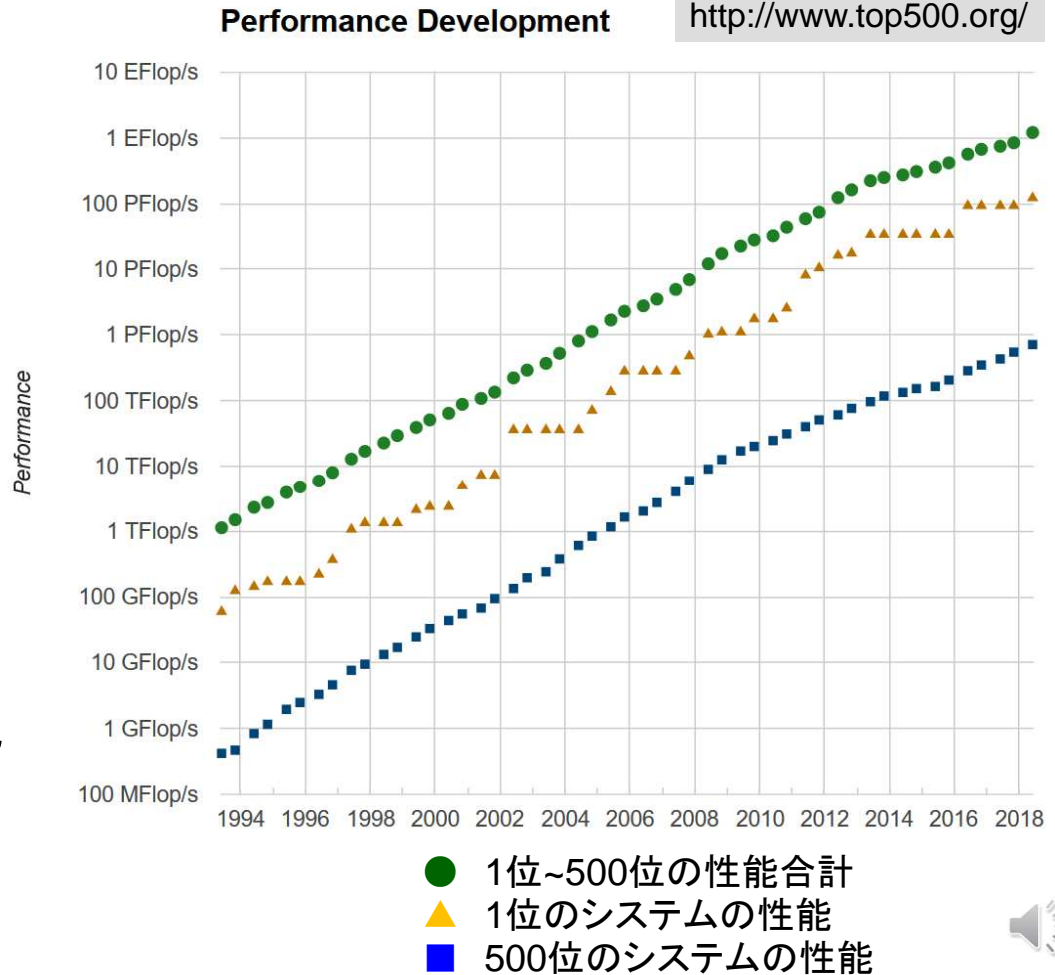
<http://www.top500.org/>

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	Supercomputer Fugaku, 2020, Japan RIKEN Center for Computational Science (R-CCS)	Supercomputer Fugaku, A64FX 48C 2.2GHz, Tofu interconnect D, Fujitsu	7,299,072	415,530 (= 415.53 PF)	513,854.7	28,335
2	Summit, 2018, USA 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	Sieera, 2018, USA 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	Sunway TaihuLight, 2016, China National Supercomputing Center in Wuxi	Sunway MPP, Sunway SW26010 260C 1.45GHz, Sunway	10,649,600	93,015	125,436	15,371
5	Tianhe-2A, 2018, China 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
6	HPC5, 2020, Italy 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
7	Selene, 2020, USA NVIDIA Corporation	DGX A100 SuperPOD, AMD EPYC 7742 64C 2.25GHz, NVIDIA A100, Mellanox HDR Infiniband	277,760	27,580	34,568.6	1,344
8	Frontera, 2019, USA Texas Advanced Computing Center	Dell C6420, Xeon Platinum 8280 28c 2.7GHz, Mellanox Infiniband HDR	448,448	23,516	38,746	
9	Marconi-100, 2020, Italy CINECA	IBM Power System AC922, IBM POWER9 16C 3GHz, Nvidia Volta V100, Dual-rail Mellanox EDR Infiniband	347,776	21,640	29,354	1,476
10	Piz Daint, 2017, Switzerland Swiss National Supercomputing Centre (CSCS)	Cray XC50, Xeon E5-2690v3 12C 2.6GHz, Aries interconnect, NVIDIA Tesla P100	387,872	21,230	27,154	2,384
18	Oakforest-PACS, 2016, Japan Joint Center for Advanced High Performance Computing	PRIMERGY CX1640 M1, Intel Xeon Phi 7250 68C 1.4GHz, Intel Omni-Path	556,104	13,556	24,913	2,715

TOP500の歴史 (1993年6月～)

- 10-12年毎に1,000倍性能向上, というペース
- 1位システムは5-6年で圏外
– 世界的な経済停滞によりこのペースは鈍りつつある
- 現在の世界最高システムは100PFLOPS級 (Peta= 10^{15})
- Exa-FLOPS (= 10^{18}) の出現は2021年以降か
- 消費電力はMW級⇒年間の電気代は1億円強/MW



- スーパーコンピュータ(スパコン)とは？
- 東大情報基盤センターの現状
 - ✓ スパコンシステム紹介
 - ✓ 様々な利用分野
 - ✓ COVID-19に対する取り組み



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)の役割

- スーパーコンピュータシステムの設計・導入・運用
- 利用者のサポート
 - 大学(教職員・学生), 研究機関, 企業
- スーパーコンピュータを利用した研究開発
 - ハードウェア
 - ソフトウェア
 - アプリケーション・アルゴリズム(解法)
 - 利用者との共同研究も多数実施
- 教育・人材育成等
 - 講義での利用, 講習会
 - 計算科学アライアンス



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



55th TOP500 List (June, 2020)

Oakbridge-CX (OBCX) is 60th

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

HPL
性能

物理
ピーク
性能

消費
電力

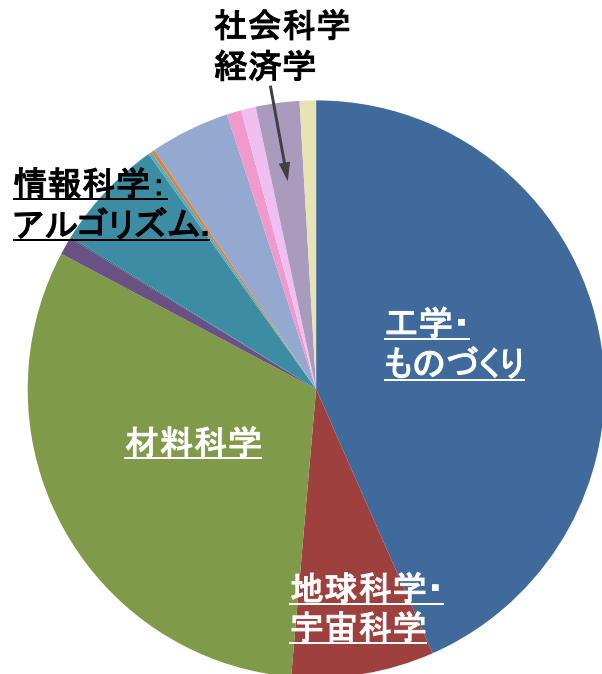
	Site	Computer/Year Vendor	Cores	R _{max} (TFLOPS)	R _{peak} (TFLOPS)	Power (kW)
1	Supercomputer Fugaku, 2020, Japan RIKEN Center for Computational Science (R-CCS)	Supercomputer Fugaku, A64FX 48C 2.2GHz, Tofu interconnect D, Fujitsu	7,299,072	415,530 (= 415.53 PF)	513,854.7	28,335
2	Summit, 2018, USA 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	Sieera, 2018, USA 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	Sunway TaihuLight, 2016, China National Supercomputing Center in Wuxi	Sunway MPP, Sunway SW26010 260C 1.45GHz, Sunway	10,649,600	93,015	125,436	15,371
5	Tianhe-2A, 2018, China 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
6	HPC5, 2020, Italy 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
7	Selene, 2020, USA NVIDIA Corporation	DGX A100 SuperPOD, AMD EPYC 7742 64C 2.25GHz, NVIDIA A100, Mellanox HDR Infiniband	277,760	27,580	34,568.6	1,344
8	Frontera, 2019, USA Texas Advanced Computing Center	Dell C6420, Xeon Platinum 8280 28c 2.7GHz, Mellanox Infiniband HDR	448,448	23,516	38,746	1,476
9	Marconi-100, 2020, Italy CINECA	IBM Power System AC922, IBM POWER9 16C 3GHz, Nvidia Volta V100, Dual-rail Mellanox EDR Infiniband	347,776	21,640	29,354	1,476
10	Piz Daint, 2017, Switzerland Swiss National Supercomputing Centre (CSCS)	Cray XC50, Xeon E5-2690v3 12C 2.6GHz, Aries interconnect, NVIDIA Tesla P100	387,872	21,230	27,154	2,384
18	Oakforest-PACS, 2016, Japan Joint Center for Advanced High Performance Computing	PRIMERGY CX1640 M1, Intel Xeon Phi 7250 68C 1.4GHz, Intel Omni-Path	556,104	13,556	24,913	2,715

HPL測定時のGFLOPS/W: 大きいほど高効率

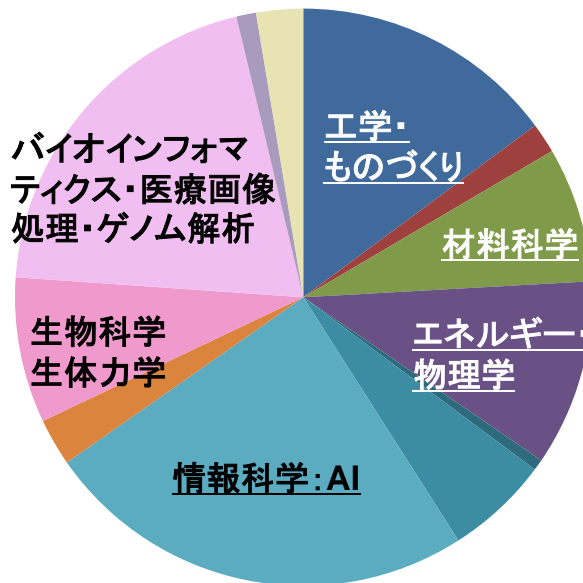
System	GFLOPS/W
Reedbush-U (HPE) (Intel Xeon Broadwell (BDW))	2.310
Reedbush-H (HPE) (Intel BDW+NVIDIA P100x2/node)	8.575
Reedbush-L (HPE) (Intel BDW+NVIDIA P100x4/node)	10.167
Oakforest-PACS (Fujitsu) (Intel Xeon Phi/Knights Landing)	4.986
Oakbridge-CX (Fujitsu) (Intel Xeon Cascade Lake (CLX))	5.076
富岳 (Fugaku) (Fujitsu/Arm A64FX)	14.66



研究分野別利用CPU時間割合(2019年度)



マルチコアクラスタ
Intel BDW Only
(Reedbush-U)



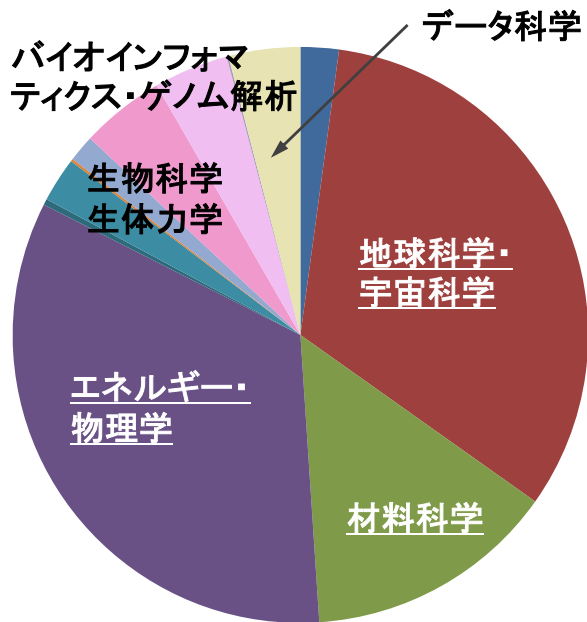
GPUクラスタ
Intel BDW + NVIDIA P100
(Reedbush-H)

- 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

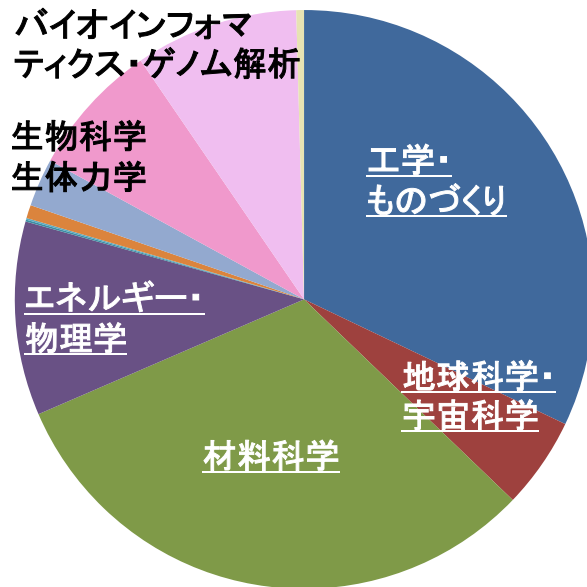


研究分野別利用CPU時間割合(2019年度)

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)



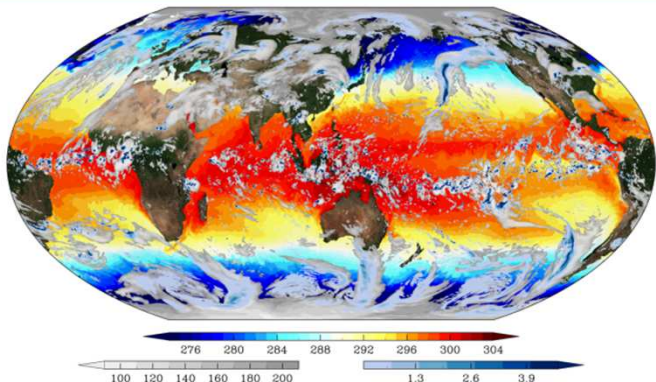
マルチコアクラスタ
Intel CLX
(Oakbridge-CX)

- 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

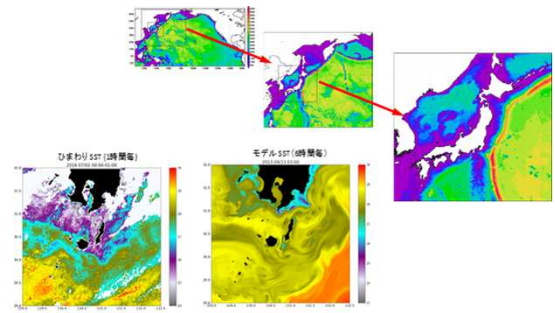
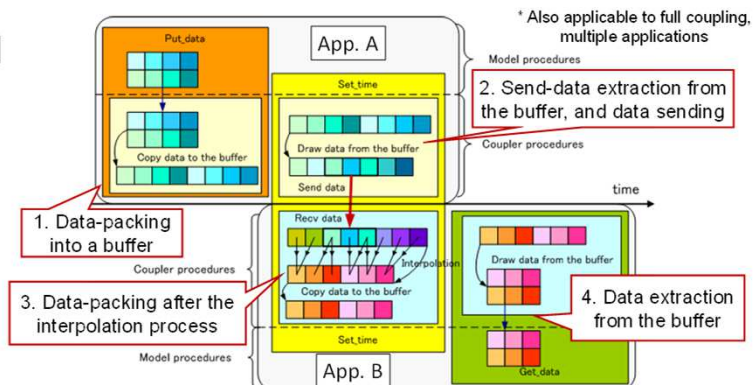
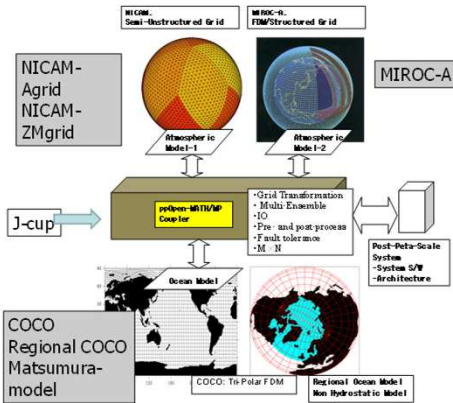
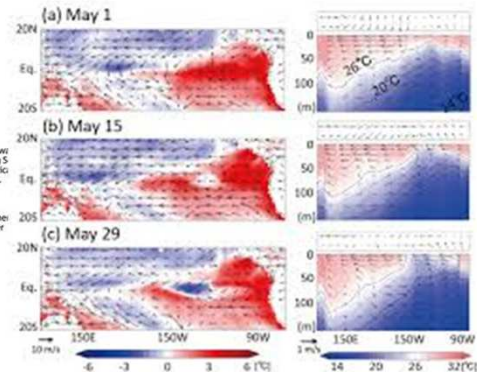
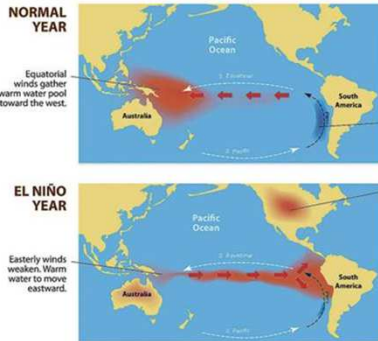


全地球大気環境シミュレーション

東大大気海洋研究所, 東大理学系研究科等



THE EL NIÑO PHENOMENON

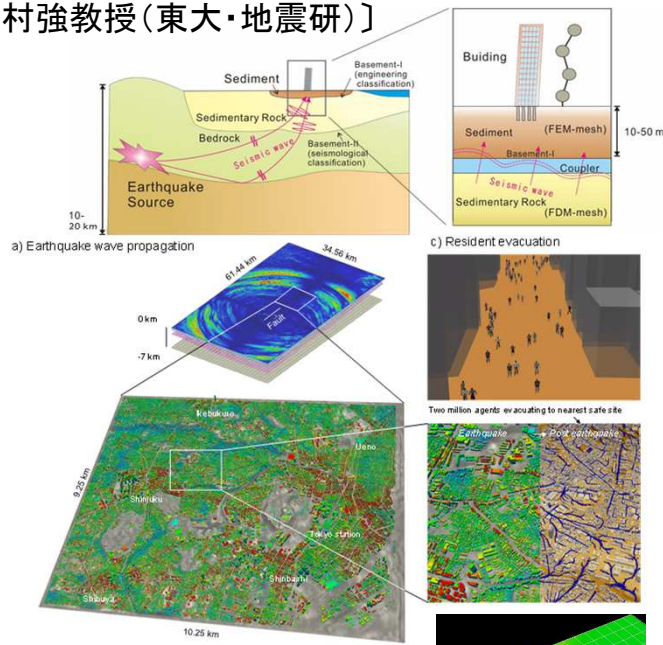
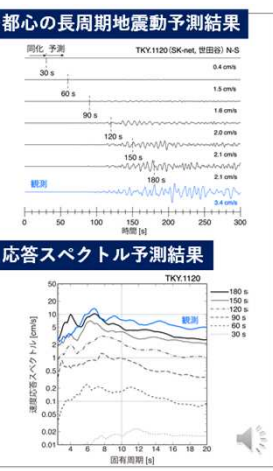
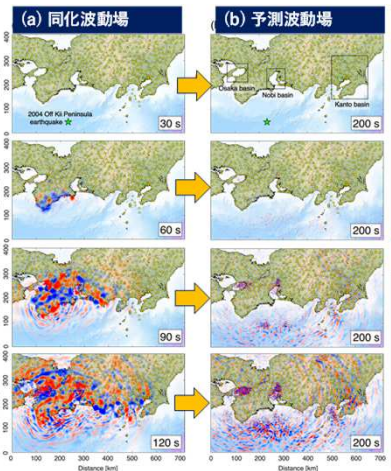
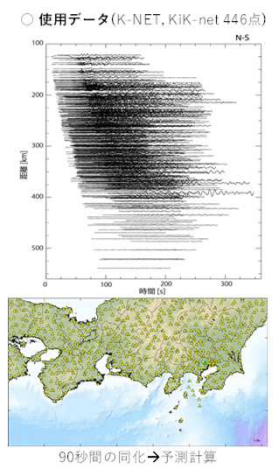


[画像提供: 佐藤正樹教授・羽角博康教授(東大・大気海洋研)]

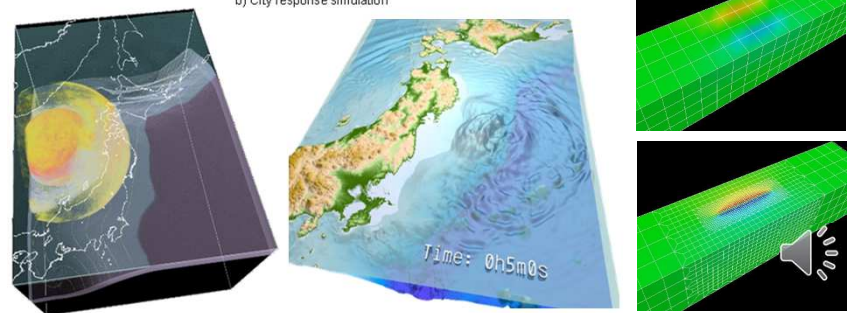
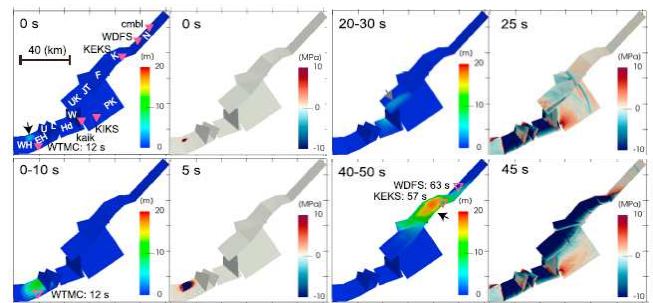
地震シミュレーション・地殻変動

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)]



[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)〕

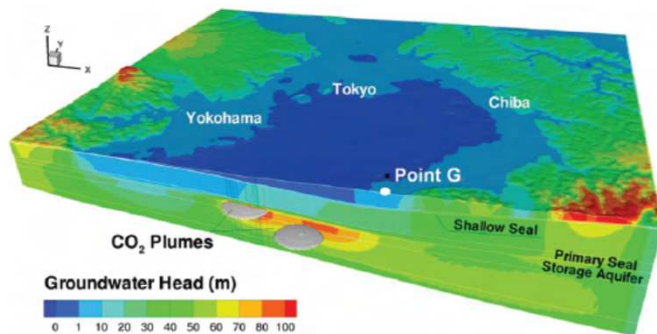
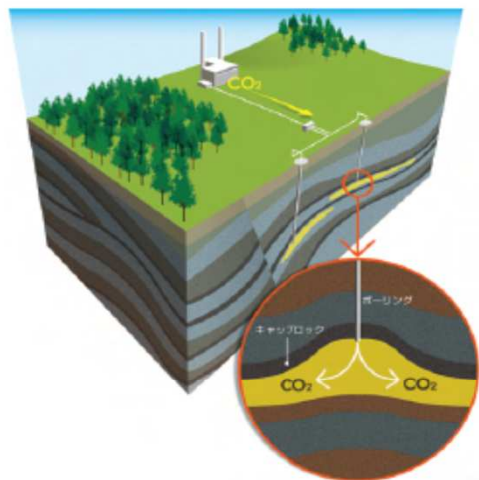
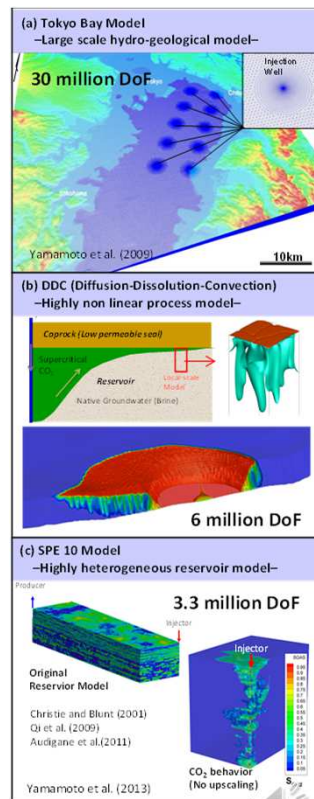
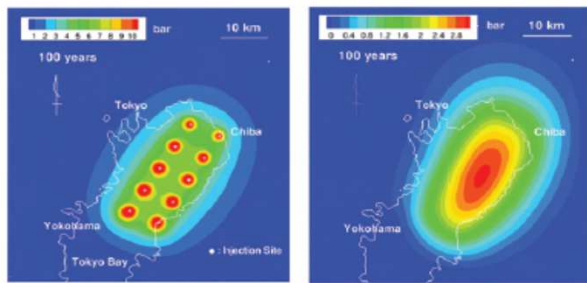


図-4 CO₂ 注入後の地下水圧 (全水頭換算) の分布 (100 年後)



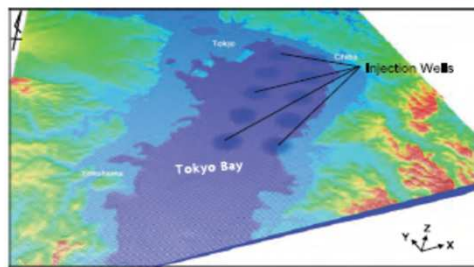
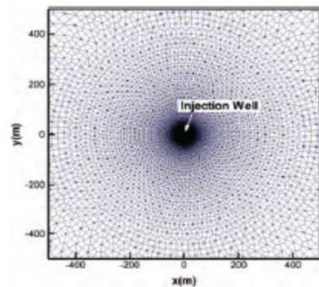
※:DOF: degrees of freedom



(a) 深部遮蔽層下面

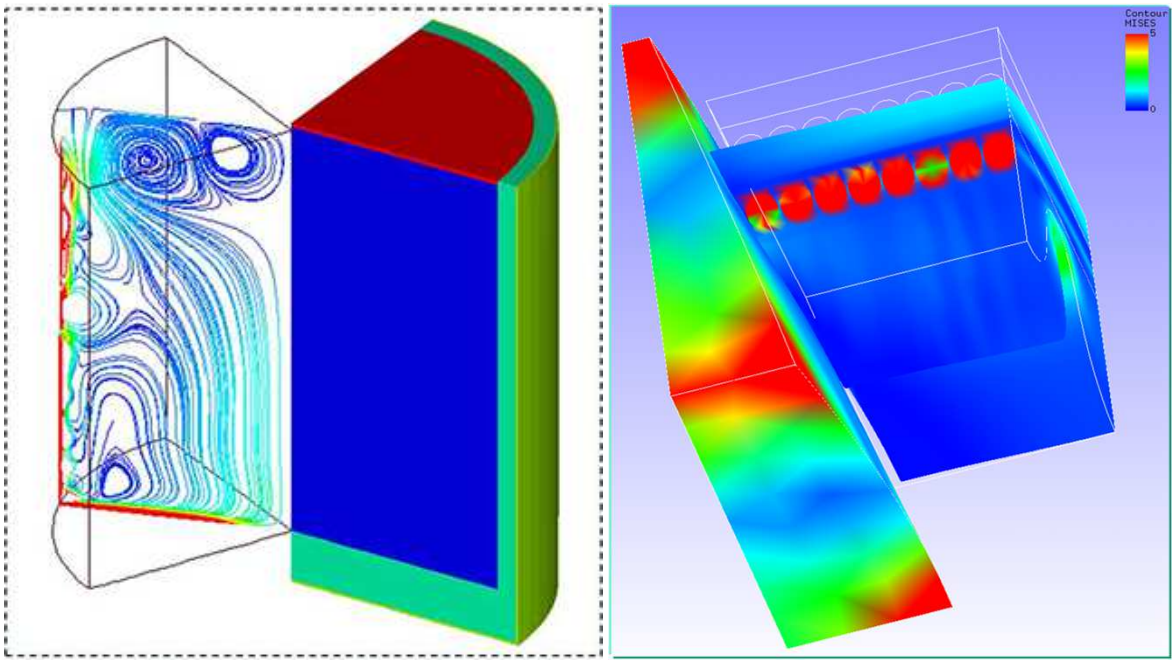
(b) 浅部遮蔽層下面

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

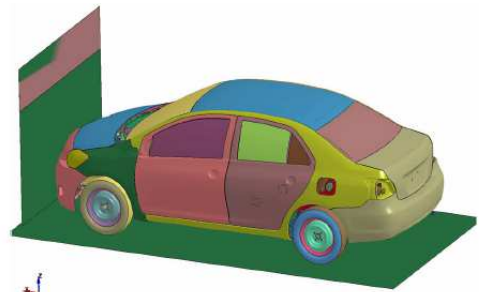


ものづくり分野(流体シミュレーション, 構造解析など)

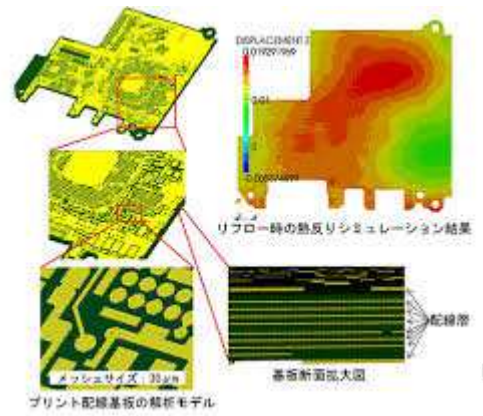
様々な大学・研究機関・企業



[画像提供: 奥田洋司教授(東京大学新領域創成科学専攻)]

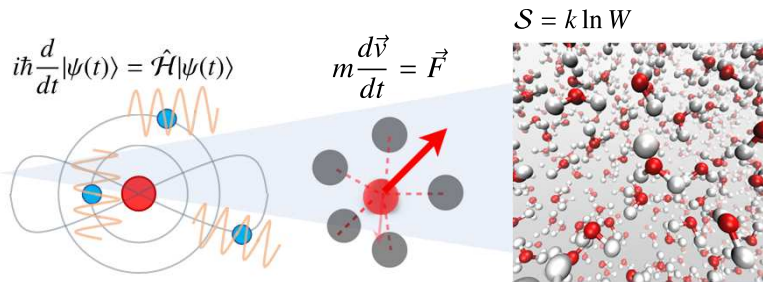


[画像提供: 日本自動車工業会(JAMA)]

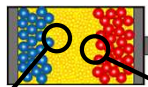


材料科学・物性科学・分子科学

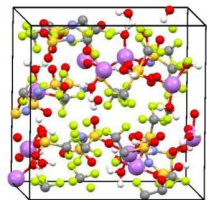
東大工, 阪大基礎工, 物質・材料研究機構 他 様々な大学・研究機関



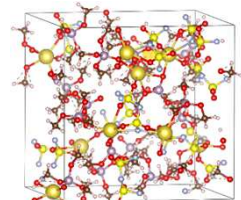
DFT-MDによる蓄電池用新型
電解液のマイクロ物性解明



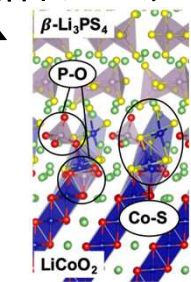
全固体電池の電極-電解質
界面のDFTマイクロ解析



高濃度水系電解液
Nature Energy 2016



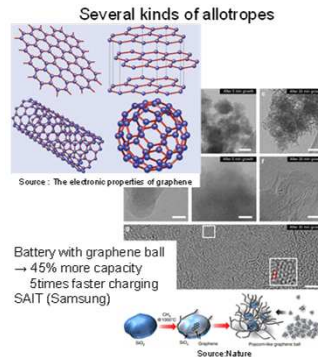
高濃度消火性電解液
Nature Energy 2018



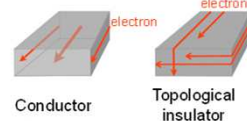
Chem. Mater. 2020

[画像提供: 山田研究室(東大工), 館山グループ(物材機構)]

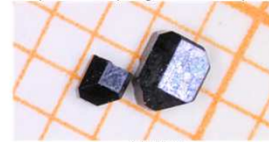
ディラック電子系・トポジカル絶縁体のtight-binding計算



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

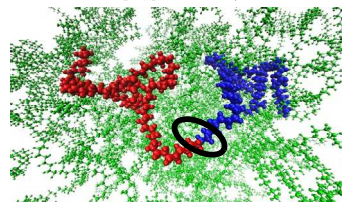


Sample of the topological insulator (SmB6)



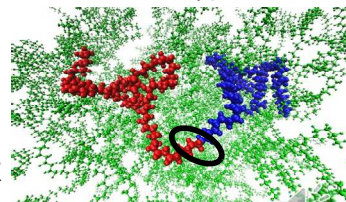
[画像提供: Gerhard Wellein教授 (FAU, Germany)]

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

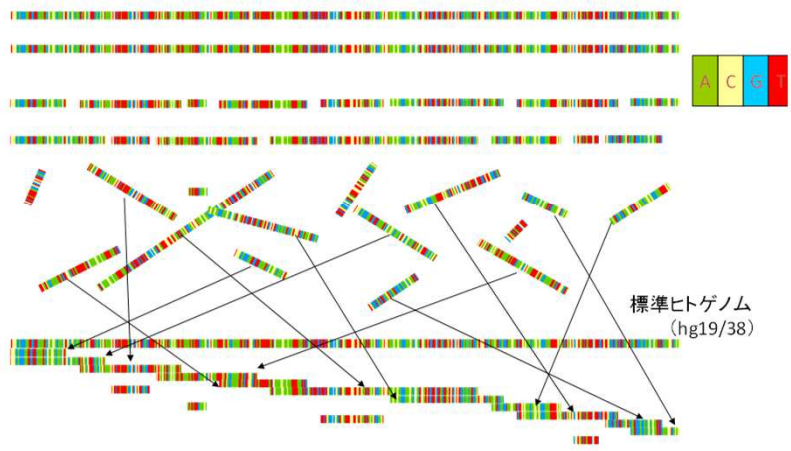


[画像提供: 松林研究室(阪大)]

バイオインフォマティクス:ゲノム解析

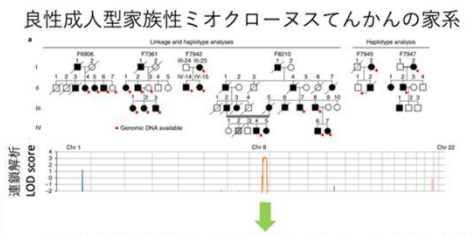
東大新領域創成科学研究科 等

ヒト個人ゲノムはどのよ
うに再解読するか？

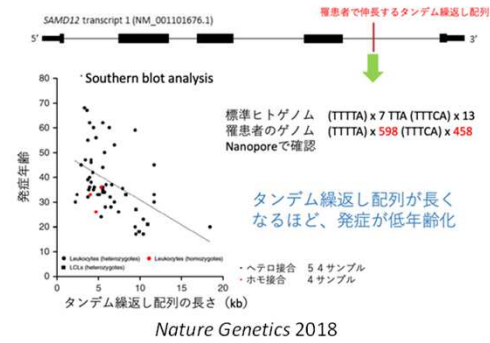


長さ 100~150 塩基のDNA 断片を 10~20億本収集(ヒト1人当たり)
接尾辞配列(suffix array), Burrows-Wheeler 変換等が活用される

[画像提供:
森下真一教授(東京大学新領域創成科学研究科)]

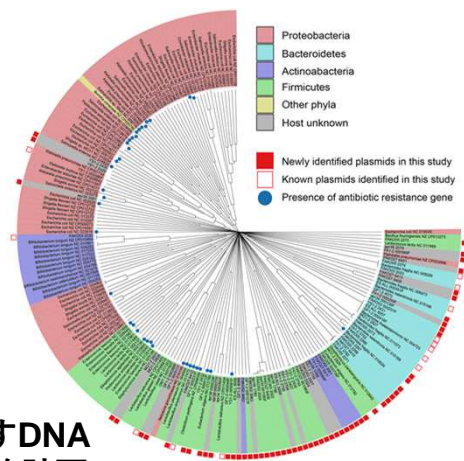


家系の連鎖解析により絞り込んだ8番染色体の領域に存在する38個遺伝子のコード領域には、原因となる1塩基変異が見つからなかった。しかしこの領域のSAMD12のイントロンに、罹患者で伸長するタンデム繰返し配列を発見。



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



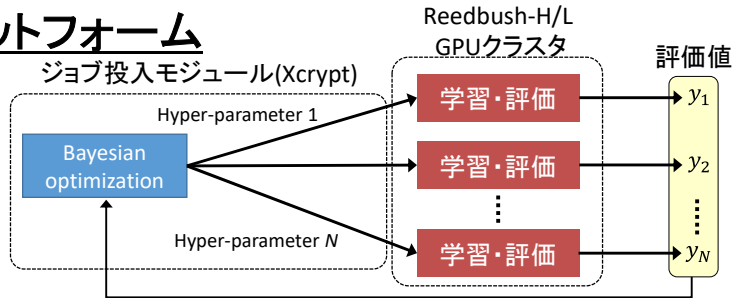
Microbiome 2019



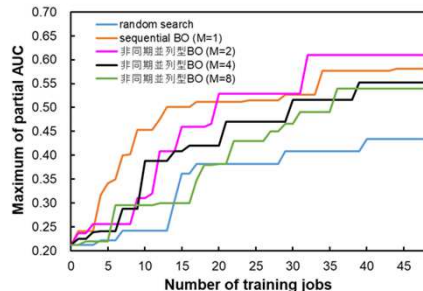
バイオインフォマティクス：医療画像処理

東大病院等

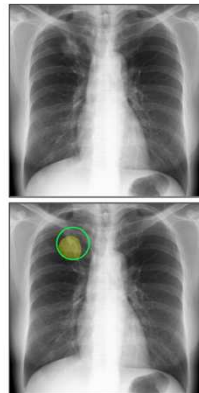
深層学習自動チューニング プラットフォーム



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

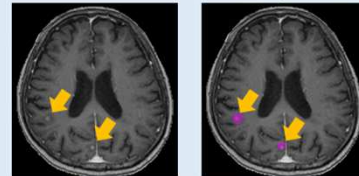


上：元画像、下：検出結果
(黄、緑丸：病変領域)

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

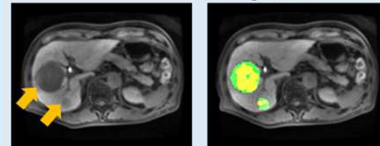
村田, JAMIT2018



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

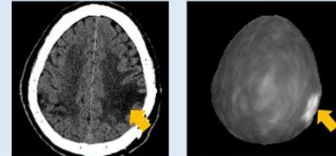
Takenaga T, CARS 2018



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)

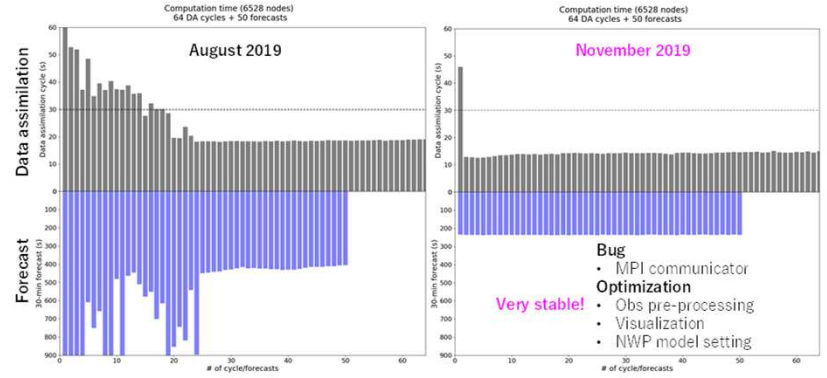
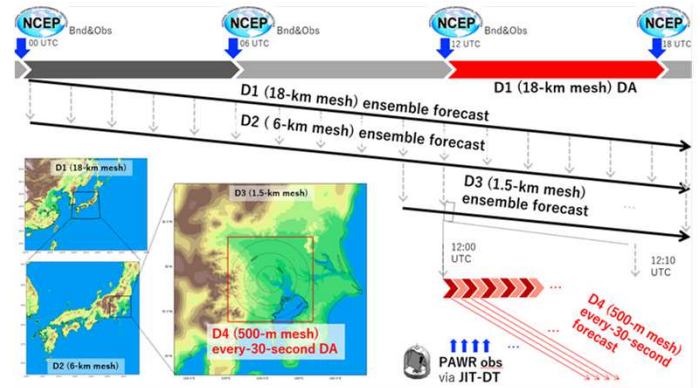
胸部X線画像の異常強調

花岡, MAIAMI 2019, JSAIMI 2020



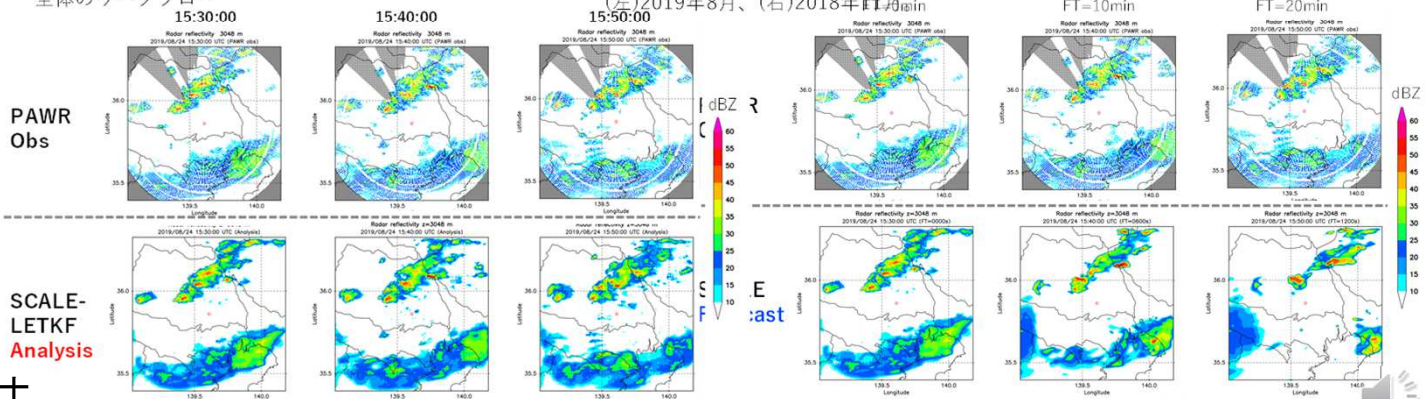
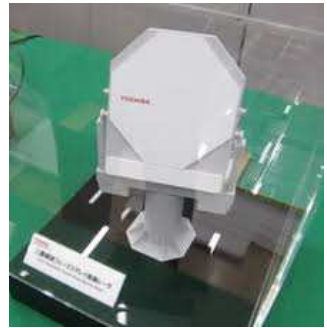
強調画像例
(左：元画像、右：強調結果、矢印：肺腫瘍)

ゲリラ豪雨予測のリアルタイム実証実験 (理化学研究所)



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



[画像提供: 三好建正博士 (理化学研究所)]

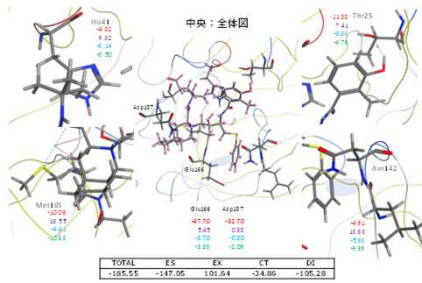
2019年8月24日の事例についてのテスト結果。(上)レーダー観測と(下)SCALE-LETKFによる解析で得られたレーダー反射強度(dBZ)を示す。 2019年8月24日の事例についてのテスト結果。(上)レーダー観測と(下)SCALE-LETKFによる予報で得られたレーダー反射強度(dBZ)を示す。

「COVID-19」対応臨時公募採択課題

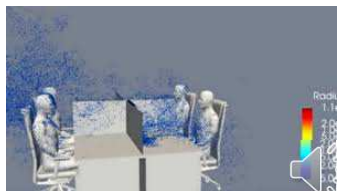
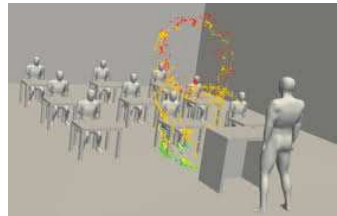
全国9国立大学等のスパコンによる課題
全13のうち6課題が東大システムを利用



課題名	代表者(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)	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)	OBCX
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)	
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)]

- スーパーコンピュータ（スパコン）とは？
- 東大情報基盤センターの現状
 - スパコンシステム紹介
 - 様々な利用分野
 - COVID-19に対する取り組み