

計算科学研究部会(平成24年11月29日、福岡県春日市)

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) コンソーシアム 報告

堀内利得
核融合科学研究所

経緯

- 平成22年度予算において、次世代スーパーコンピュータを中核とし、次世代スーパーコンピュータと国内の計算資源を連携して利用するための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）を構築していくことと、この構築を主導するコンソーシアムを形成することが決定されました。
- 文部科学省においては、本年3月、ユーザコミュニティの代表者、HPCIに計算資源を提供することになる主要機関の代表者等からなる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）検討ワーキンググループ（中川正春文部科学副大臣主宰。以下「HPCI検討ワーキンググループ」という。）を設置し、HPCIの在り方やコンソーシアムの在り方について検討を行うとともに、更にユーザー等から幅広いご意見をいただくため、意見交換会や意見募集を実施してきました。
- この結果を踏まえ、この度、文部科学省として「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）とこの構築を主導するコンソーシアムのグランドデザイン」を決定いたしました。

「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）とこの構築を主導するコンソーシアムのグランドデザイン」（平成22年5月26日、文部科学省）より抜粋

HPCI関連の動き(1)

◆準備段階コンソーシアムでの経過

- 平成23年7月5日: 第3回 HPCI検討総会 準備段階コンソーシアム-中間報告書- → 法人化を検討
- 平成23年9月26日 第4回HPCI 検討委員会-検討の状況-
→ 設立準備WGを設置
- 平成23年10月14日 設立準備WG
→ 法人の形態を「**一般社団法人**」として検討開始
- 平成23年11月1日 HPCI 検討委員会
→ 設立準備WG の検討内容を了承
- 平成23年12月14日 第5回HPCI 検討総会
→ **設立時社員**三名(石川先生、宇川先生、藤井先生)を決定
- 平成24年1月30日 第6回HPCI検討総会
→ **最終報告書**

HPCI関連の動き(2)

◆一般社団法人HPCIコンソーシアムとしての動き

- 平成24年3月5日: プラズマ・核融合コミュニティを代表して、核融合科学研究所(堀内)が一般社団法人HPCIコンソーシアム会員申請(小川雄一先生、福山淳先生、西村新先生から資料作成の援助)
- 平成24年3月30日: 設立時役員総会にて35法人を会員として承認。
- 平成24年4月2日 HPCIコンソーシアムを一般社団法人として登記申請、正式発足。
- 平成24年4月27日~5月17日: HPCI 共用計算機資源利用課題公募説明会(東京、神戸)
- 平成24年5月9日~6月15日: HPCI 共用計算機資源利用課題公募
- 平成24年6月6日 第1回一般社団法人HPCIコンソーシアム社員総会
→ 役員人事・予算・会費等の承認、
- 平成24年9月28日: 計算資源の共用開始

一般社団法人HPCIコンソーシアム定款 (抜粋)

(目的)

第 3 条 HPCIは、計算科学技術に関わるすべての者にかかれたものであり、特定高速電子計算機施設を中心として、当該施設と国内の計算資源を連携して利用するための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（以下、「HPCI」という。）の整備・運用の推進を通じて、我が国の計算科学技術振興の中心となり、世界最高水準の成果創出と成果の社会還元に寄与することを目的とする。

(活動)

第 4 条 HPCIは、前条の目的を達成するため、次の事項について意見集約を行い、またその実現を図ることを目的として国及び関係諸機関へ提言を行う。

(1) HPCIシステム（HPCIを構成し共通運用される計算資源及び共通運用の為の機能をいう。）の整備と運用に関わる次の事項

- ① HPCIシステムの整備と運用の基本方針
- ② 課題選定及び利用者支援の基本方針
- ③ 運用と利用の状況の把握と国に対する要望のとりまとめ

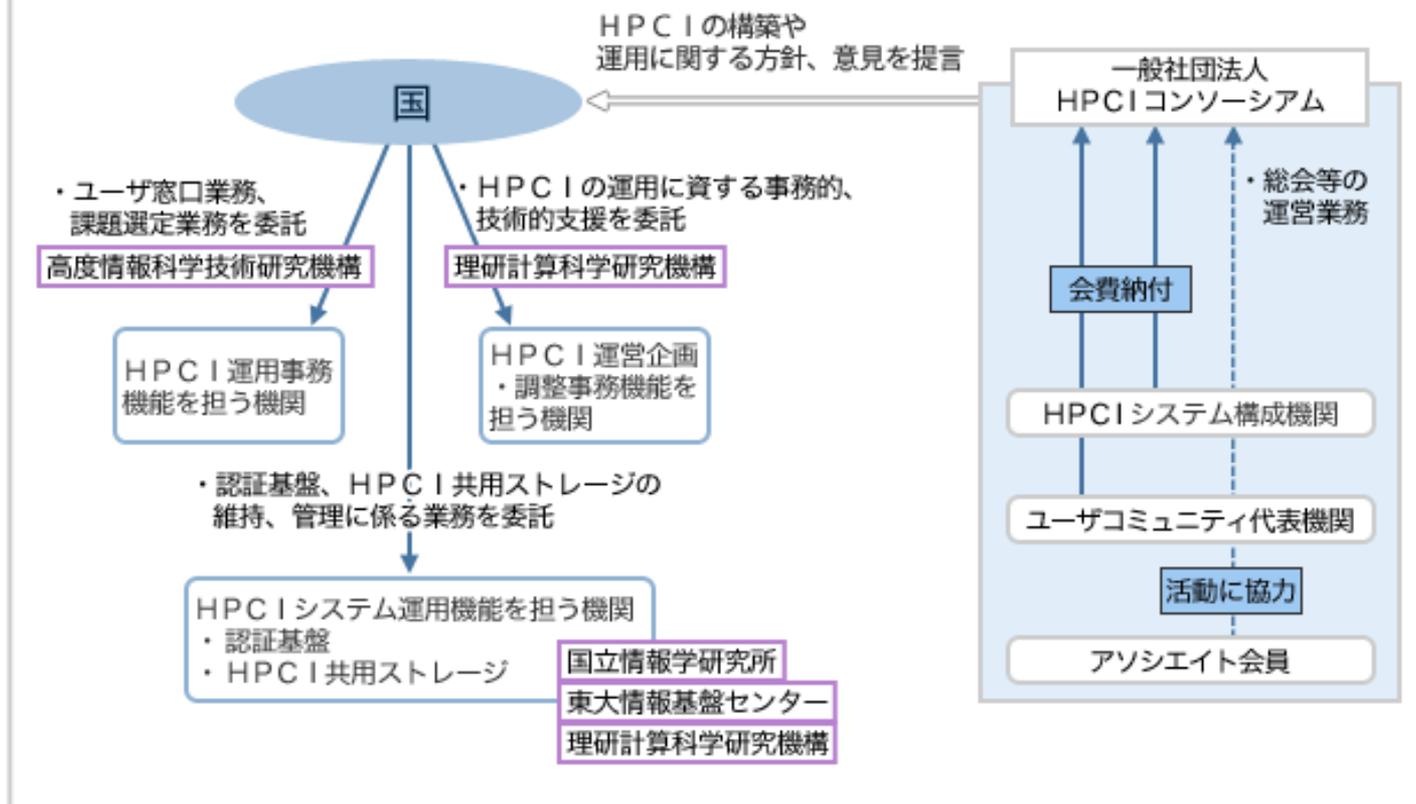
(2) 計算科学技術の振興に関わる次の事項

- ① 我が国全体の計算機資源の有効活用と整備の在り方の基本方針
- ② 計算科学技術及び応用技法の醸成・拡大
- ③ 新たな分野やコミュニティの開拓
- ④ 人材育成
- ⑤ 海外の関連組織との連携

(3) 将来のスーパーコンピューティング

HPCI計画推進の仕組み

～国・コンソーシアム・業務執行機関の関係～



一般社団法人HPCIコンソーシアム

社員総会 (意思決定)

- ・ 正会員により構成
- ・ 社員は各コミュニティの意見集約や計算資源の提供を履行
- ・ HPCIシステムの整備と運用、計算科学技術の振興及び将来のスーパーコンピューティングに係る意見集約

原則として社員の中から
理事及び監事を選任



活動に関する
検討事項を指示



検討内容を報告



理事会 (業務執行)

- ・ 理事の中から代表理事を選定
- ・ 主要業務毎に担当理事(業務執行理事)を決定
- ・ 業務執行理事の下にHPCIの運営業務との連携を図りながら活動

法人事務局

・ 法人の運営に関すること

役員体制

【理事長】

宇川 彰 筑波大学 副学長・理事

【副理事長】

藤井孝藏 独立行政法人宇宙航空研究開発機構 宇宙科学研究所 副所長

【理事】

- 石川 裕 東京大学情報基盤センター長
- 加藤千幸 東京大学生産技術研究所 教授(東京大学生産技術研究所)
- 関口智嗣 独立行政法人産業技術総合研究所 情報通信・エレクトロニクス分野 副研究統括
(独立行政法人産業技術総合研究所情報技術研究部門)
- 高田 章 旭硝子株式会社中央研究所 特任研究員 (スーパーコンピューティング技術産業応用協議会)
- 常行真司 東京大学大学院理学系研究科物理学専攻 教授(計算物質科学イニシアティブ)
- 中島 浩 京都大学学術情報メディアセンター長 (京都大学学術情報メディアセンター)
- 米澤明憲 独立行政法人理化学研究所計算科学研究機構 副機構長(独立行政法人理化学研究所計算科学研究機構)
- 渡邊國彦 独立行政法人海洋研究開発機構地球シミュレーターセンター長

【監事】

小林広明 東北大学サイバーサイエンスセンター長

一般社団法人HPCI コンソーシアム加入状況

◆（平成24年4月2日現在：法人設立時）

正会員	ユーザーコミュニティ代表機関	12 機関
	HPCI システム構成機関	19 機関
アソシエイト会員		4 機関

◆平成24年5月21日現在の加入状況

正会員	ユーザーコミュニティ代表機関	13 機関
	HPCI システム構成機関	20 機関
アソシエイト会員		4 機関

一般社団法人HPCIコンソーシアム会員名簿(平成24年6月5日現在)

ユーザコミュニティ代表機関(10機関)

【HPCI戦略プログラム】

常行 真司 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」)
 加藤 千幸 東京大学生産技術研究所(分野4「次世代ものづくり」)
 青木 慎也 計算基礎科学連携拠点(分野5「物質と宇宙の起源と構造」)
 ※1

【上記以外のユーザコミュニティ代表機関】

高田 章 スーパーコンピューティング技術産業応用協議会
 安井 宏 財団法人計算科学振興財団
 下條 真司 特定非営利活動法人バイオグリッドセンター関西
 堀内 利得 自然科学研究機構核融合科学研究所
 松見 豊 名古屋大学 太陽地球環境研究所
 武田 廣 神戸大学
 藤井 孝藏 一般社団法人日本流体力学会
 ※2

HPCIシステム構成機関(19機関)

【国立大学情報基盤センター等】

高井 昌彰 北海道大学 情報基盤センター
 小林 広明 東北大学 サイバーサイエンスセンター
 宇川 彰 筑波大学 計算科学研究センター
 石川 裕 東京大学 情報基盤センター
 佐伯 元司 東京工業大学 学術国際情報センター
 伊藤 義人 名古屋大学 情報基盤センター
 中島 浩 京都大学 学術情報メディアセンター
 中野 博隆 大阪大学 サイバーメディアセンター
 青柳 睦 九州大学 情報基盤研究開発センター

【国立大学附置研究所】

新家 光雄 東北大学 金属材料研究所
 家 泰弘 東京大学 物性研究所
 保坂 淳 大阪大学 核物理研究センター

【大学共同利用機関法人】

齊藤 真司 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
 金子 敏明 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
 中野 純司 情報・システム研究機構 統計数理研究所
 坂内 正夫 情報・システム研究機構 国立情報学研究所

【独立行政法人】

関口 智嗣 独立行政法人産業技術総合研究所 情報技術研究部門
 平尾 公彦 独立行政法人理化学研究所 計算科学研究機構
 ※3、※4

【上記以外のHPCIシステム構成機関】

中村 壽 財団法人高度情報科学技術研究機構

アソシエイト会員(5機関)

九後 太一 京都大学 基礎物理学研究所
 佐藤 哲也 兵庫県立大学大学院 シミュレーション学研究所
 小久保英一郎 自然科学研究機構国立天文台 天文シミュレーションプロジェクト
 姫野 龍太郎 独立行政法人理化学研究所 情報基盤センター
 鈴木 真二 一般社団法人日本航空宇宙学会

調整中

※1 戦略分野1「予測する生命科学・医療および創薬基盤」(統括責任者:柳田敏雄氏)及び戦略分野3「防災・減災に資する地球変動予測」(統括責任者:今脇資郎氏)からは、ユーザコミュニティの名称等について調整中との連絡をいただいております、本名簿には掲載していません。

※2、※3、※4 独立行政法人宇宙航空研究開発機構の宇宙科学研究所(代表:高木亮治氏)、情報・計算工学センター(代表:藤田直行氏)及び独立行政法人海洋研究開発機構の地球シミュレータセンター(代表:渡邊國彦氏)からは、参加する会員形態について調整中との連絡をいただいております、本名簿には掲載していません。

独立行政法人理化学研究所 関西12

スパコン性能ランク「TOP500」-米Titanが1位を 獲得、日本の「京」は3位に

- 今回の1位は前回(2012年6月)の米ローレンスリバモア国立研究所に設置されたIBMの「BlueGene/Q(BG/Q)」を157万2864コア用いた「Sequoia」(今回のLINPACKベンチマークは16.325PFlops)を1PFlop以上上回る17.590PFlopsを達成した米オークリッジ国立研究所(ORNL)の「Titan」が獲得し、米国勢が1位、2位と続いた。
- 3位には2011年6月版ならびに同11月版のTOP500¹⁰⁺ 件で1位を獲得した日本の「京」が10.510PFlopsでランクイン。4位には、米アルゴンヌ国立研究所(Argonne National Laboratory)の「Mira」が8.162PFlopsで、5位には前回(2012年6月版)8位であった独Forschungszentrum Juelich(FZJ)の「JUQUEEN」が4.141PFlops(前回は1.380PFlops)でそれぞれランクイン。

課題選定のあり方 —「京」の利用枠の配分方針と設定手順—

「京」の利用枠の配分方針と設定手順



- (1) 「京」の利用枠は、計画停止、保守時間を除く計算資源を利用可能な資源として設定。
- (2) 利用枠としては、一般利用枠(一般公募型)、戦略プログラム利用枠、重点化促進枠を、計算科学研究機構が大まかな目安として以下の手順により設定。

京調整高度化枠:15%程度

「京」の安定運転のためのシステム調整、ユーザ利用支援のための研究開発、幅広い分野のユーザーの利用に資する高度化研究を実施

一般利用枠:30%程度 (うち、産業利用枠5%・若手人材育成枠5%程度)

共用開始後の利用のニーズ等も踏まえ、柔軟に対応し、必要に応じて弾力的に見直し。

戦略プログラム利用枠:50%程度

利用枠50%程度について、文科省が配分内容を決定。50%程度の内、一定割合を留保し、進捗に合わせて重点的に配分する。

重点化促進枠:5%程度 (別途10%程度の追加の可能性あり)

- ①実施中の課題の中から早期の成果発出に向け、加速すべき課題への追加配分の枠として運用(5%程度を留保)
- ②政策的、重要かつ緊急な課題の実施(当初は留保せず、課題が設定されれば、他の枠より優先的に実施。10%程度を上限とする。)

H24年度一般枠採択課題数

表1 利用枠・区分ごとの採択件数と採択率、実施者数

枠・区分	応募件数	採択件数	課題採択率 (%)	課題実施者数 (延べ人数)
「京」一般利用	138	29(*3)	21.0	325
「京」若手人材育成利 用	58	8	13.7	8
「京」産業利用	31	25	80.6	153
合計	227(*1)	62	27.3	486

(*1) 一括募集後に受け付けた「京」のトライアル・ユース利用課題 2 件を含む。

(*2) <https://www.hpci-office.jp>

(*3) 「京」を本格利用する準備のための機会を提供し、「京」の利用促進と裾野拡大に資するため、この 29 課題のほか、20 課題を選定。

2. HPCIの運営の実施内容

①HPCIの運営企画・調整

○ 今後の運営の在り方に関する調査検討 (実施機関: 理化学研究所)

- ◆ 我が国の計算科学の振興に必要な事項に係る調査検討を行うため、コンソーシアム等と連携し、計算科学技術関連コミュニティの意見集約・方向性をまとめるための基礎となる活動を実施
- ◆ 当面、調査検討を行う事項は次のとおり
 - ✓ HPCIシステムの整備と運用
 - ✓ 将来のスーパーコンピューティングの在り方
 - ✓ 人材育成方策
 - ✓ 産業利用促進策
- ◆ 調査検討項目については、コンソーシアムの担当理事とも協議して設定
- ◆ 必要に応じて、コンソーシアムの担当理事を主査としたWGを設置し、コンソーシアム会員が代表するコミュニティにとどまらず、関係コミュニティとの意見交換やコミュニティからのヒアリングにより意見収集
- ◆ 調査検討内容については、国のWGへ適宜報告するなどして調整し、コミュニティの意見を踏まえた検討内容を取りまとめ

○ 技術企画・調整 (実施機関: 理化学研究所)

HPCIシステムの運用環境を維持するため、HPCIシステム構成機関等が参加する調整の場を運営。調整の場を通じてHPCIシステムに生じる技術的不具合の原因究明・対応策の検討、HPCIシステム全体の運用に係るソフトウェア改良等の検討を実施

理化学研究所

計算科学研究機構 企画部



【活動】

- ・コミュニティの意見・情報収集、分析
- ・HPCIシステム全体の運用に係る予算の取りまとめ

- ・WG等の開催
- ・動向・状況調査
- ・コミュニティからの意見収集・集約
- ・シンポジウムの企画

計算科学研究機構 運用技術部

【活動】

- ・調整の場「HPCI連携サービス委員会」の運営
- ・HPCIシステムに係る対応策等の検討

- ・構成機関にまたがる運用、技術課題への対応
課題解決手順の策定、システム課題の把握、課題への対応、
全体監視、品質管理
- ・構成機関との連携
構成機関向け技術文書の作成・改訂、
新規構成機関の技術要件の評価、支援
- ・全体セキュリティの確保
脆弱性情報の共有、インシデント対応、システム全体の監査
- ・HPCI共用ストレージ(西拠点)の運用(H25~)(予定)



HPCI連携サービス委員会

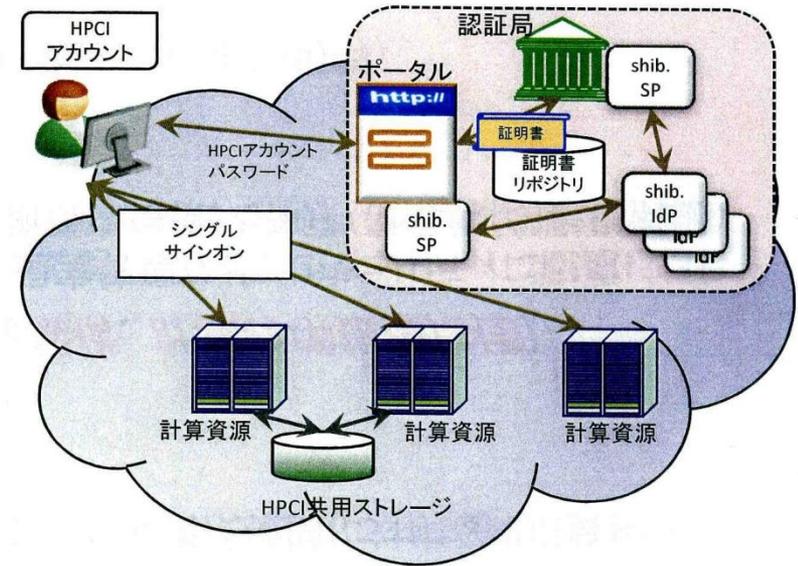
【検討事項】

- ・HPCIシステムの技術的不具合
- ・HPCIシステムに係るソフトウェアの改良等

②HPCIシステムの運用

○ 認証局の運用 (実施機関: 国立情報学研究所)

- ◆ HPCIシステムを利用するための電子証明書を発行する認証局の運用・保守。
- ◆ HPCI運用事務局およびHPCIシステム構成機関のシステムと連携して、ID連携によるシングルサインオン機能を提供する認証基盤システムの運用、保守。



○ HPCI共用ストレージの運用

(実施機関: 東京大学情報基盤センター、
理化学研究所)

- ◆ HPCI共用ストレージ(コミュニティによるデータ共有、HPCI利用時における大量データの格納、アーカイブ)及びプリ・ポスト処理のための計算機を東西2拠点で運用、保守。
- ◆ 共用ストレージでは、ネットワーク共有ファイルシステム Gfarm により相互利用性を確保。

西拠点

東京大学情報基盤センター(H24)
理研・計算科学研究機構(H25へ)

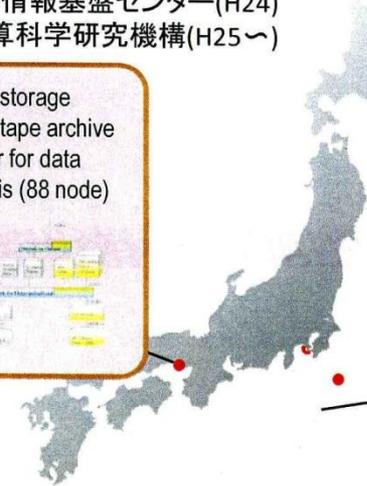
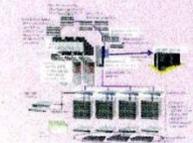
- 10 PB storage
- 60 PB tape archive
- Cluster for data analysis (88 node)



東拠点

東京大学情報基盤センター

- 13.5 PB storage
- 20 PB tape archive
- Cluster for data analysis (87 node)
- Accelerator (GPU Cluster) (32 node)



③HPCIの利用促進

○ 課題選定及び共通窓口の運用 (実施機関: 高度情報科学技術研究機構)

- ◆ HPCIシステム利用に向けて
 - 利用研究課題の公募及び課題申請の受付
 - 利用課題選定のための委員会の設置と運営
- ◆ 利用者に対する利便性の向上を目的として
 - ユーザ管理やヘルプデスク及び一元的な情報提供を行う共通窓口運用
 - HPCIシステムでの成果の広報活動
 - 選定された課題による計算資源の利用に伴うHPCシステム構成機関に対する利用負担金の支払い事務 等必要な事務

○ 産業利用促進 (実施機関: 高度情報科学技術研究機構、計算科学振興財団)

- ◆ 利用者の秘匿性を担保するため、ICカード鍵による入退室管理など、セキュリティに配慮した作業用個室(アクセスポイント)を品川(高度情報科学技術研究機構)と神戸(計算科学振興財団)の2拠点に設置
 - ◆ アクセスポイントを拠点として、
 - ◆ 技術的な利用相談やPR活動、高並列計算の指導・助言 (品川、神戸)
 - ◆ 講習会、大規模入出力データの転送 (神戸のみ)
- 等の利用支援を実施

課題選定のあり方 — 課題選定の一般的・共通の方針 —

課題選定の一般的・共通の方針

1. 課題選定

- 課題の公募回数は年1回(状況により、ニーズ等も踏まえ、追加応募の必要性を登録機関において検討。)
- 一般利用枠及び「京」以外の資源配分は年度単位で実施(利用期間は最長1年)。戦略プログラム利用枠の資源配分は、国が毎年度行う評価・点検結果をもとに、次年度の配分を弾力的に見直す。

2. 選定基準

- A) 科学的に卓越した課題、社会的に意義の高い課題、ブレークスルーが期待できる課題か
- B) 大規模計算機(当面は「京」中心)のリソースを真に必要としているか
- C) ソフトウェアの効率性(並列性)、計算処理、データ収集、結果の解析等がすでに十分検証済みか

- 「京」の選定基準はABCを基本とし、コンソーシアムの意見を聞いて選定委員会が決定。
- 「京」以外の選定基準は、Bが将来、「京」・大規模HPCIにつながること。
⇒ 設定される枠の内容に応じた基準の要否を、登録機関(選定委員会)において今後具体化

3. 計画的・効率的利用の仕組み

- 共用計算資源を効率的に運用するため、ユーザに利用を促す仕組みが必要
- 利用状況については、次年度の継続課題において課題選考の審査材料とする