

「京」を中核とする革新的高性能計算環境(HPCI)の現状

一般財団法人高度情報科学研究機構
平山 俊雄

1. はじめに

スーパーコンピュータによるシミュレーションは、理論、実験と並ぶ第3の科学技術の研究手法として注目されて久しく、スーパーコンピュータの性能の優劣はその国の最先端の科学技術の成果や産業競争力に決定的な影響を及ぼしている。その点で、ToP500に占める各国のスーパーコンピュータの台数は、その国の科学技術競争力を示す一つの指標とも考えられている。日本についてみると、地球シミュレータが2002年にToP500の1位を占めてから5期2年半の間1位の座を維持したものの、その後は後退の一途をたどってきた。2010年6月のToP500に占める国別の台数では、日本は、英国の2分の1、米国の実に16分の1に過ぎないだけでなく、中国、フランス、ドイツに及ばない。さらに、国別のスーパーコンピュータのトップ性能でも、ロシア、韓国にも及ばない状況となっており、日本の地盤沈下は、目を覆うばかりの状況となっていた。

このような状況を打開するため、国は2005年に10PFlops級スーパーコンピュータの開発計画を決定し、独立行政法人理化学研究所(以下「理化学研究所」という)が2006年度より開発を進めて来た。10PFlopsの単位から「京」と名付けられたスーパーコンピュータは完成前ではあったが、2011年の2期にわたりToP500の一位の座を獲得した。今年の6月には、全システムが完成し、9月末には共用が開始される。

スーパーコンピュータの開発計画は、2010年度より「京」を中核として、多様なユーザーニーズに応える革新的な計算環境を実現する計画となった。各大学の情報基盤センターは、その計算機資源の一部を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)として提供し、「京」の共用開始時期に合わせその共用を開始する。

計算科学を実施するうえで、計算機能力が飛躍的に向上するこの機会に「京」を中核とするHPCIを活用した我が国の科学の進展、産業競争力の強化が大いに加速されることが期待されている。

2. 「京」を中核とするHPCIの構築

「京」は、理化学研究所により設置され、今後様々な分野において幅広く利用されることにより、計算科学技術を通じた研究開発及び国際競争力の飛躍的な進展に大きく貢献することが期待されている。「京」の利用にあたっては、中立・公正な利用者選定が求められている。このため、特定先端大型研究施設の共用の促進に関する法律(以下「共用法」という)に基づき、「京」の設置者である理化学研究所とは別に、登録施設利用促進機関(以下「登録機関」という)を設け、「京」の課題選定と利用支援を実施することとなっている。

一般財団法人高度情報科学研究機構は、2011年10月に文部科学省より、「京」の登

録機関に認定され、2012年4月より神戸にて
利用促進業務を開始した。

「京」を高性能計算機の中核とした時、将来的に「京」の利用につながる研究開発も重要である。9大学の情報基盤センターでは、各センターが有する計算資源の一部を供出し、HPCIとして、全国の幅広い利用者に効率よく利用できる体制と仕組みを提供することになった（「HPCIとその構築を主導するコンソーシアムの具体化に向けて ー最終報告ー」参照）。2012年度に、HPCIを構成する機関と各機関が提供する計算機資源を図1 a), b)

に示す。

当財団は、文部科学省の委託業務「HPCI構築事業（HPCIの運営）」を、理化学研究所、東京大学及び国立情報学研究所と共同して受託した。具体的には、HPCI運用事務局として、HPCIの利用課題公募、申請受け付け、利用課題選定のための委員会の設置と審査を行うとともに、利用可能な計算資源等に関する情報提供を行う。

「京」を中核とするHPCI全体の一括した課題選定を当財団は、高い透明性をもって中立・公正に実施していく所存である。



図 1-a) HPCIを構成する機関

機関名	装置名	提供装置
1 理化学研究所 計算科学研究所	京	計算機 32ノード、32.62Tops
2 北海道大学 情報基盤センター	スーパーコンピュータ HITACHE S818000-M1 クラウドシステム HITACHI S82300A1	計算機 最大128ノード、126Tflops 計算機 600コア相当
3 東北大学 サイバーサイエンスセンター	SX-8 Express800	計算機 26.4 Tflops、16ノード(208GPU/16Tflopsで1) 計算機 1.16 Tflops、6ノード(162GPU、216コアで1)
4 筑波大学 計算科学研究所	T2E-Tsukuba	計算機 24 Tflops、108ノード(2580core)
5 岡山大学 情報基盤センター	HITACHI H8600 スーパーコンピュータ	計算機 512ノード、35.687Tflops
6 岡山工業大学 学術国際情報センター	クラウド型サーバシステム FSUBARM2.0j 仮想ソフトウェア環境基盤/分散 ストレージシステムサーバ FREDONE-VMJ	計算機 202ノ、9口は3080Ti3840MBポイント、208口は4コア208ノード(3272 GPUコア 38.27TFops + 768 GPU 386.8TFlops)の2ヶ月利用に相当
7 名古屋大学 情報基盤センター	M9000 H8600 FX1	計算機 3ノード(284コア) 計算機 144ノード(3304コア) 計算機 768ノード(3072コア)
8 京都大学 学術情報メディアセンター	スーパーコンピュータ S8600node 20E2F (A4960コア8台)	計算機 全装置利用: 90.8 TFops、32ノード 高利用率: 48.96 TFops、128ノード、196個
9 大阪大学 サイバースディアセンター	SX-8R SX-9 P2クラウド	計算機 9.3 Tflops、26ノード 計算機 16 Tflops、16ノード 計算機 9.1Tflops、128ノード
10 九州大学 情報基盤研究開発センター	FX10 2018 70人用(70クラウド 38071コア)他(後者も有る) スーパーコンピュータシステム	計算機 約70TFops相当(386ノード) 計算機 約10TFops相当(100ノード)

図1-b) 各機関が提供する計算機資源 (2012年)

3. 登録機関業務とHPCI運用事務局

共用法では、登録機関が「京」の利用促進業務として、

- 1) 基礎的、応用的及び開発的な研究等に対する利用時間の配分
- 2) 研究等を行う者の募集及び選定と利用時間の設定
- 3) 利用支援
- 4) 利用支援業務の充実のための一元的共通窓口の運営

に関する事項を行うこととなっている。

(1) 利用枠と資源配分

2012年9月末からの共用開始では、2014年3月末までの18ヶ月について、その間の「京」の利用枠の30%程度を一般利用枠として利用研究課題を募集した。一般利用枠の内数として、産業利用及び若手人材育成にそれぞれ5%程度の利用枠が配分されている。

「京」を利用して重点的に行うべき研究等の分野には、50%程度の利用枠が配分されている。重点的利用枠として、国の方針等を踏まえ以下の課題が設定された。

1) 戦略プログラム利用課題

文部科学省が選定した戦略プログラム課題

2) 成果創出・加速課題

一般課題及び戦略プログラム利用課題の中から、計算資源量を追加配分することにより早期の成果創出が期待される課題

3) 重点化促進課題

文部科学省が決定した政策的に重要かつ緊急な課題

残りの15%程度は、理化学研究所が実施する「京」の安定運転のためのシステム調整、幅広い分野のユーザの利用に資するための高度化研究の利用枠として配分された。

図2に、「京」の利用枠ごとの資源配分比率を示す。なお、重点化促進課題は、重要かつ緊急な課題として設定されるため、図2には

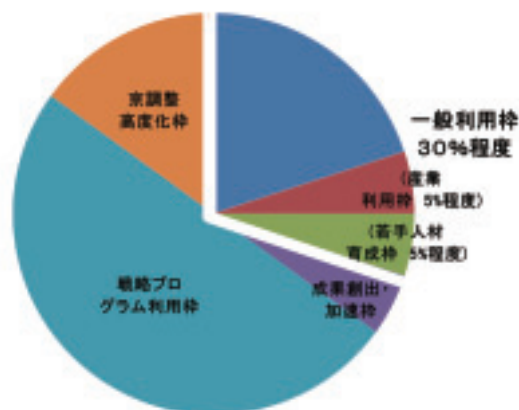


図2 「京」の利用枠資源配分比率

示されていない。

(2) 利用研究課題の募集と選定

一般利用枠30%に対して、登録機関は利用研究課題の募集と選定を行う。

「京」の利用は広く研究開発の進展や産業競争力の強化に貢献することが目的で、成果の公開を原則とし無償で利用できる。ただし、企業が機密性の高い課題を実施する場合、成果を非公開とすることができ、有償での利用となる。図3に、「京」における有償、無償の利用区分の一覧を示す。

「京」の利用研究課題の審査は、図4で示すプロセスを経て行われる。まず、選定委員会では、登録機関の業務計画、選定の基本方針等を審議する。この選定の基本方針に基づき課題審査委員会では、一般利用課題についてレビューによるピアレビュー結果に基づき審査する。産業利用課題については、課題審査委員会のもとに設置された産業利用WGが、成果公開の課題について審査する。成果非公開の有償利用課題については、情報を管理するため、課題審査委員会委員長が審査をする。課題審査委員会が全ての審査結果を確認し、選定委員会に報告し了解を得る。実質的には利用課題の選定はこの段階で確定する。登録機関は、このプロセスを経て選定された課題を最終的に決定し、利用者への通知や広報を行う。

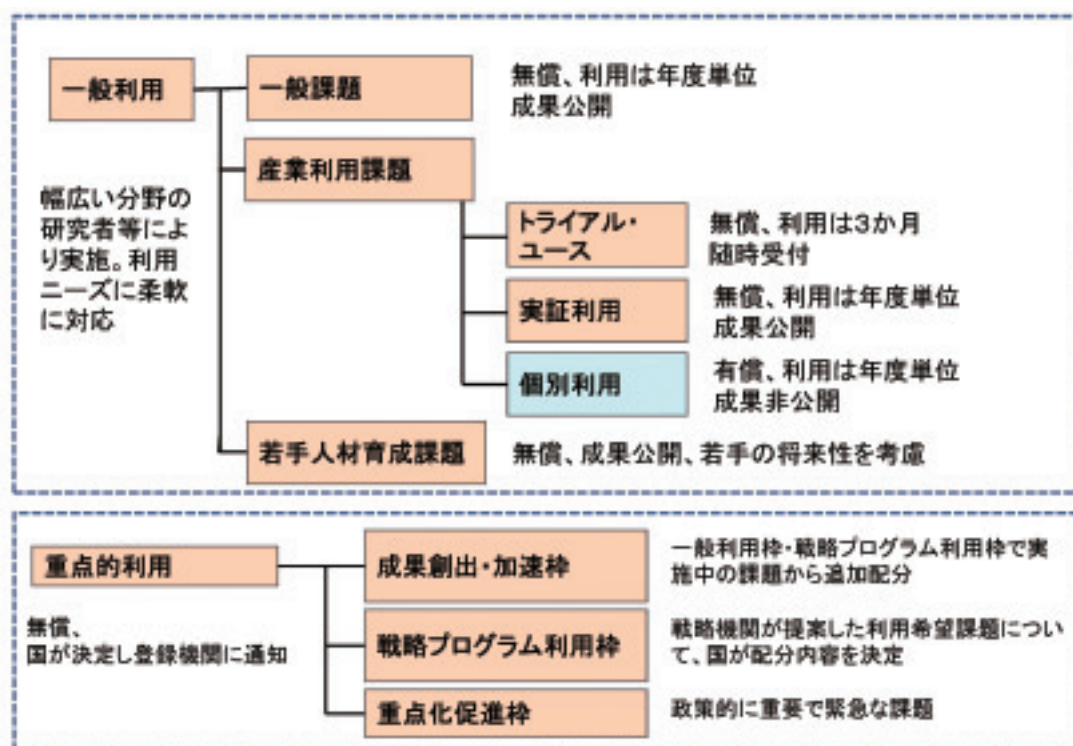


図3 「京」における有償、無償の利用区分

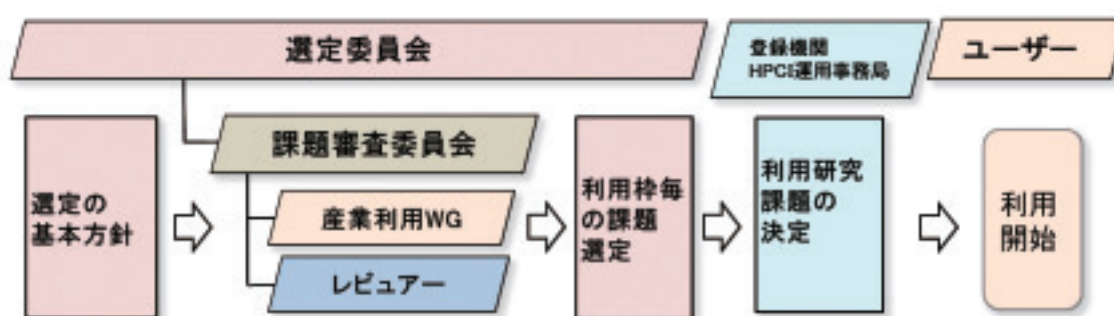


図4 利用研究課題の審査のプロセス

「京」を除くHPCIの利用研究課題の審査プロセスも、上記「京」の審査プロセスと同じであるが、利用課題選定基準はそれぞれに若干異なっている。

(3) 利用支援と一元的共通窓口

登録機関は、多様な分野の研究者等が円滑に「京」を利用できるとともにより先端的、革新的な要求にも対応できるよう、利用支援業務を行う体制を整えている。具体的には、利用支援業務の一元的な窓口を設け、利用者

の多岐にわたる利用相談に対し、利用者の利便性を図るためにワン・ストップ・サービスとして、各種の情報提供及び利用相談、アプリケーションの調整・高度化の支援、利用研究課題についての技術相談を実施する。

ただし、「京」を除くHPCIの利用支援は、各大学の情報基盤センターが実施するので、登録機関は一元的な情報の提供を行う。図5に「京」に関する利用支援の全体像を示した。



図5 「京」に関する利用支援の全体像

4. 利用研究課題の分類

「京」の一般利用に応募した利用研究課題の選定基準は、一般利用課題、産業利用課題、トライアルユース課題及び若手人材育成課題の4つの利用区分に対して、6項目からなる。選定基準の内「京」が有する計算資源を必要とすること、ソフトウェアの準備ができていること、及び利用が平和目的に限定されることは、4つの利用区分に対して共通である。

産業利用については、利用成果が産業応用に結びつく等の出口戦略が明確であることを求めている。また、企業が「京」を使用して自社の産業応用に適用できるか否かを事前に評価するためのトライアルユースを設けている。トライアルユースでは、利用課題を随時受け付け、迅速な選定審査を受けることができる。選定されれば、3ヶ月間、最大5万ノード・時間積まで無償で利用できる。企業は、トライアルユースを活用して、「京」の利用が

自社にとって有効であると評価・検討したのち、個別利用や実証利用に移ることができる。

若手の人材育成は、将来の計算科学を担う人材を育成していくうえで重要である。そのため、一般利用では、39歳以下の利用者が将来の発展が期待できる優れた着想を持った課題を一人で行う研究計画に対して、若手の優先枠を設けている。

5. 利用研究課題の募集及び選定結果

「京」を中核とするHPCIの情報を一括して提供するため、図6に示すHPCIポータルのホームページ (<http://www.hpci-office.jp/>) を開設し、5月9日より6月15日までの期間で、HPCIの利用研究課題を募集した。この間、事前説明会を含め都合6回の応募説明会を、また3回の産業界向け説明会を全国で開催し、広く情報の周知に努めた。その結果、募集要項と課題申請書のダウンロード件数



図6 HPCIポータルホームページ

は、それぞれ2,200件と2,046件に達し、大学、研究機関及び産業界から高い関心を得ることができた。

1) 課題申請結果

図7に、申請件数とその要求資源量を示す。「京」の一般利用課題数は227件、「京」以外のHPCIの利用研究課題数は34件となり、「京」の利用が全体の申請件数の約75%に達した。産業利用課題については、有償による本格利用も含め、申請課題数の約12%にのぼり、産業界からの「京」の利用に対する高い関心が改めて示された。

2) 利用研究課題の選定と共用の開始

利用課題審査委員会は、申請された261件に対し各課題3名のレビューを指名してピアレビューを実施、その結果を踏まえて利用課題の審査を行った。審査結果を選定委員会に報告し了承を得て平成24年9月末

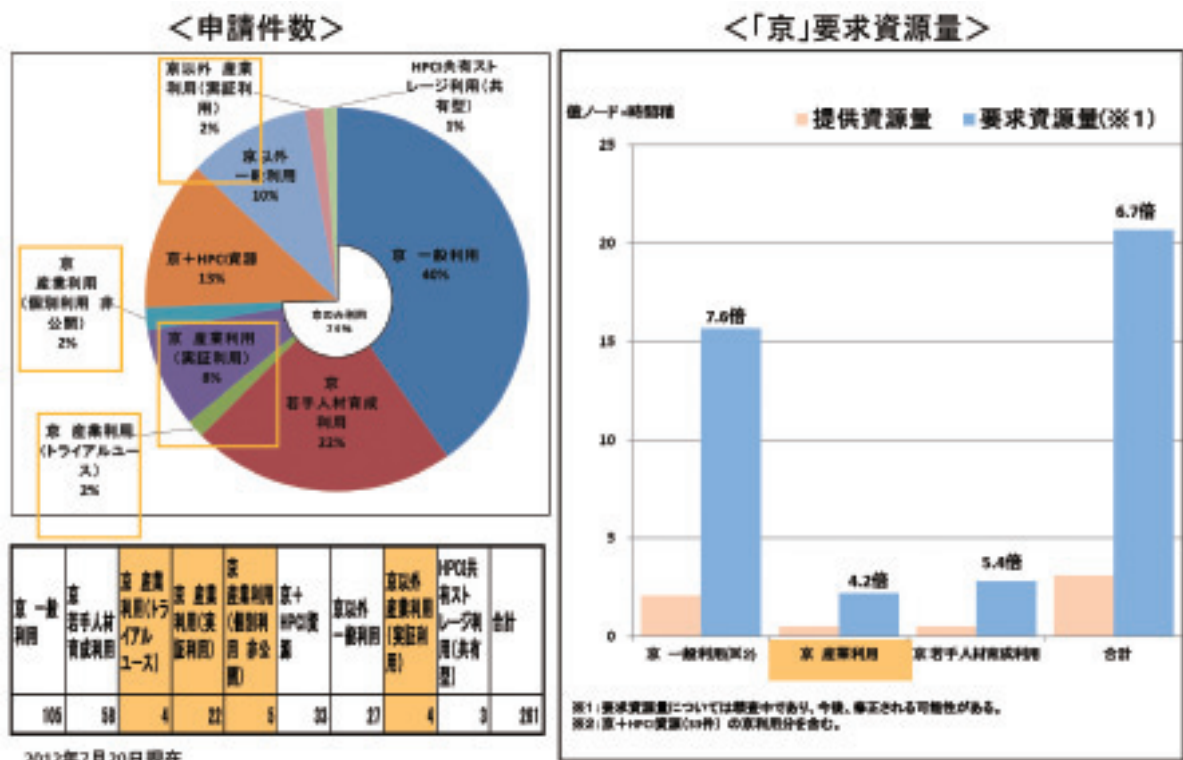


図7 申請件数とその要求資源量

から平成25年度末までを利用期間とするHPCIの利用課題が決定された。「京」を利用する課題は62件で採択率は27.3%で、内訳は一般利用課題が29件、若手人材育成課題が8件、産業利用課題が25件である。表1に利用区分別の審査対象件数、採択件数の詳細を、図8に利用分野と機関別の選定比率を整理して示す。

なお、これらの研究課題のほか、初めて「京」を利用する学術的意義の高い利用研究

課題20件を選定した。これらの課題については、「京」の本格利用に移行する準備を行う機会を提供することにより、「京」の利用促進と裾野拡大に資するものと期待される。

今後、本人確認のための対面認証をした後アカウントが発行され、9月末には、「京」の供用が開始される。また、「京」を除くHPCIの利用についても、9月末から開始される。

表1 利用区分別の審査対象件数、採択件数

枠・区分	申請数	選定数	選定率
「京」一般利用	138	29	21.0%
「京」若手人材育成利用	58	8	13.8%
「京」産業利用	31	25	80.6%
合 計	227	62	27.3%

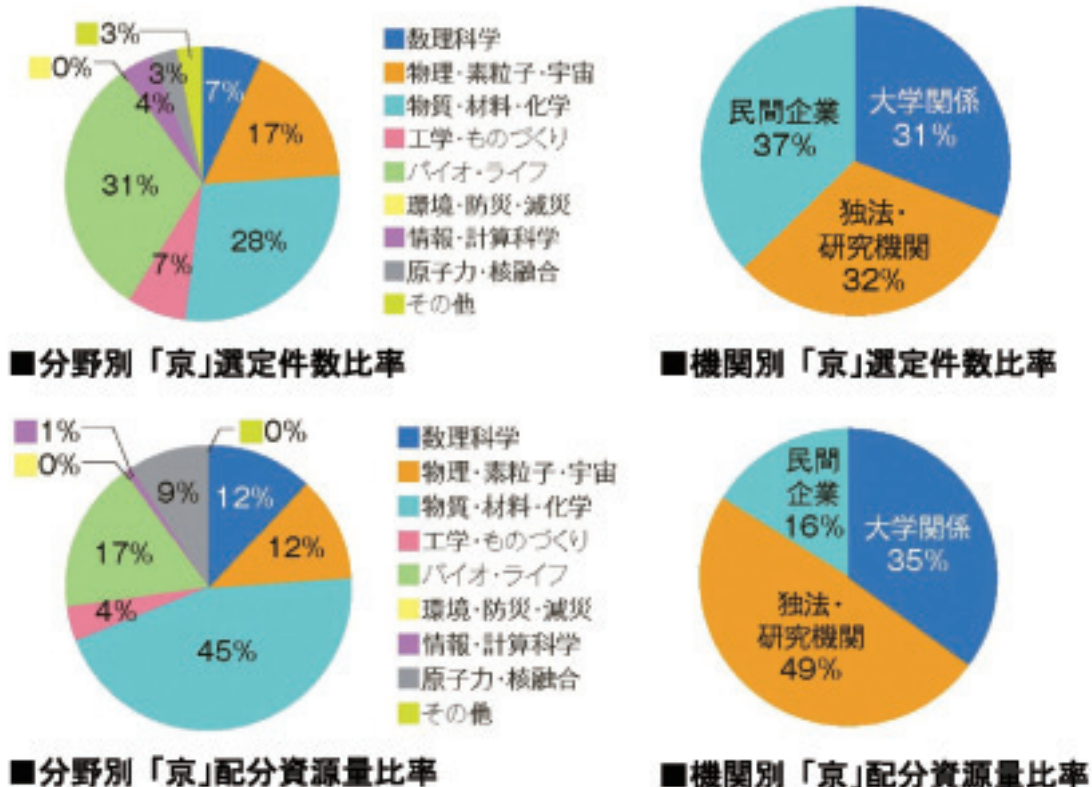


図8 利用分野と機関別の選定比率

6. おわりに

当財団が登録機関としての業務を平成24年4月5日に開始してから5ヶ月が経過し、9月末の共用開始に向け利用課題の選定業務も最初の1ラウンドを終了することができた。

この間、国際スーパー・コンピューティング2012 (ISC2012、ハンブルグ) では、6月19日、米国、ローレンスリバモア国立研究所の「セコイア」が、16.32PflopsでToP500リストの1位に返り咲いたとの報道があった。

「京」は世界2位のスーパーコンピュータとなったが、10Pflops規模の計算に対応できるアプリケーションの準備では、日本が最も進

んでいる。これからは、この優位性を最大限活用し、研究技術開発に産業利用に数多くの成果を挙げることが期待される。当財団も、登録機関としてまた、HPCI運用事務局としてHPCIを活用した成果の創出に貢献できるよう、総力を挙げて業務に邁進する所存である。

最後に、当財団が登録機関及びHPCI運用事務局業務を実施するに当たっては、理化学研究所をはじめ、HPCI情報基盤センター、計算科学コミュニティの多くの方々のご指導、ご支援、ご協力を賜った。ここに改めて御礼申し上げます。