

一般社団法人HPCIコンソーシアム平成 25 年 3 月 4 日臨時総会次第

日時:平成 25 年 3 月 4 日(月) 16 時 00 分～18 時 00 分

場所:東京大学 生産技術研究所 D 棟 6 階 Dw601 会議室

(東京都目黒区駒場4丁目6番1号)

<http://www.iis.u-tokyo.ac.jp/access/access.html>

【1. 定足数の確認・開会宣言】

【2. 審議事項】

第1号 将来のスーパーコンピューティングのあり方についての提言(中間報告案)について(資料1、補足資料)

【3. その他】

第1号 HPCI 利用促進活動状況について(資料2)

第2号 前回総会後の HPCI コンソーシアムの主な活動について(資料3)

第3号 会員の交替手続きについて(資料4)

【4. 閉会宣言】

【審議事項第1号】

将来のスーパーコンピューティングのあり方についての提言(中間報告案)について

標記の件、国に対して資料1のとおり提言を行いたい。

平成 25 年3月4日提出

一般社団法人HCPIコンソーシアム
理事長 宇 川 彰

将来のスーパーコンピューティングのあり方についての提言
－中間報告案－

平成25年3月4日

一般社団法人HPCIコンソーシアム

目次

はじめに	1
1. 計算科学技術振興のための計算資源のあり方	3
2. システムを開発、設置、運用する拠点のあり方	4
3. 将来の計算資源提供体制	6
4. 頂点に立つ次期システム	7
5. 今後の検討課題	10
参考資料	12
○ 審議経緯	
○ 文部科学省委託業務「HPCIの運営」の「今後の運営の在り方に関する調査検討」を行うためのWGの検討項目と構成員について(理化学研究所計算科学研究機構)	
○ 同WGの審議経過	

はじめに

「将来のスーパーコンピューティングのあり方」に関する基本方針の策定は、今後の計算科学・計算機科学の振興に大きな影響を与えるものであり、その議論に計算科学技術関連コミュニティの幅広い意見を反映させることの重要性は言うまでもない。

このため、文部科学省においては、有識者による検討の場である「HPCI計画の推進のあり方についての調査検討ワーキンググループ」を設置し、また、関係機関にフィージビリティスタディである「将来のHPCIシステムのあり方の調査研究」による検討を進めている。

我が国の計算科学技術分野における主要なコミュニティである一般社団法人HPCIコンソーシアムにおいても、HPCIシステムの構築、運用に資する将来のスーパーコンピューティングのあり方について、計算科学技術関連コミュニティの意見の収集・集約を平成24年7月から開始した。

意見の収集・集約に当たっては、理化学研究所計算科学研究機構が文部科学省からの委託を受けて実施している、HPCIコンソーシアムの運営に必要な「今後の運営の在り方に関する調査検討」業務において設置された二つのワーキンググループ(※)(以下総じて「AICS WG」という。)と連携し、国におけるHPCI計画の推進のあり方についての調査検討や将来のHPCIシステムのあり方の調査研究等の状況も視野に入れつつ、多くのコミュニティ関係者との意見交換などを行った。これらを通じ、今後の10年間程度を見据えた計算科学技術推進体制に関する考え方や我が国の計算科学技術を先導する次期システムのあり方などについて、意見を収集してきたところである。

※「将来のスーパーコンピューティングの在り方に関する調査検討ワーキンググループ」及び「将来のスーパーコンピューティングの体制の在り方に関する調査検討ワーキンググループ」。HPCIコンソーシアムの会員や計算資源の利用に携わっている専門家を構成員とする。

本提言は、以上の経緯の下に、将来のスーパーコンピューティングの推進体制のあり方や次期システムについて、HPCIコンソーシアムにおけるこれまでの意見収集・集約結果を中間報告案として取りまとめたものである。

将来のスーパーコンピューティングのあり方については、今後、5月末を目途に検討内

容の明確化を進めたうえで国に対する提言の中間報告として取りまとめる。さらに必要に応じて詳細な検討を進め、平成25年度中に提言の最終報告として取りまとめ、国に提出する予定である。

1. 計算科学技術振興のための計算資源のあり方

我が国における計算資源の利用環境は、特定高速電子計算機施設(共用施設)による共用促進やHPCI計画の推進により、より多様なユーザーニーズに応える計算科学技術推進体制への転換が行われた。このような変化に対応し、計算科学技術をさらに発展させていくためには、オールジャパン体制による推進体制の構築を目指し、計算科学技術関連コミュニティが中心となって、自律的な取組みを進めることが一層重要である。

我が国の計算科学技術の振興には、計算資源の維持・拡充によって様々なユーザーニーズに応えることが必要であり、計算資源利用を支えるネットワーク環境のもと、①多様な計算資源の提供、②計算資源間の連携利用、③先進的な計算資源へのゲートウェイ機能の実現を図ることが重要と考える。

このためには、我が国の計算科学技術を先導し世界トップレベルの性能(※1)を有するシステムを頂点に、大学の情報基盤センターや附置研究所・大学共同利用機関、独立行政法人の計算センターといった大学や公的研究機関が整備するスーパーコンピュータを第二階層とし、さらに研究室レベルのシステムが裾野を支えるピラミッド型の計算資源構造による利用環境を実現すべきである。また、頂点に位置するシステムを一定頻度で継続的に導入し、かつこのシステムを孤立させることなく、下の階層のシステムもあわせた総体として幅広く計算科学技術関連コミュニティに提供することで、最大のHPCI成果につなげることが必要である。

頂点に立つシステムは世界トップレベルの演算能力を有するものであり、これによってのみ実現可能な利用によって本来の目的である世界に誇れる成果を挙げていくことが求められる。ピラミッド構造の第二階層は、頂点に位置するマシンと同様なアーキテクチャを持つなど最先端研究の基盤として計算科学技術の研究全般への資源提供を志向するシステムに加え、トップに位置するシステムとは異なるアーキテクチャを有するが一定規模以上の研究コミュニティを支えるシステムや、将来の計算科学技術の振興につながるチャレンジングなシステムなど、それぞれの特徴をもつシステム群から構成される。

第二階層においては、頂点に立つシステムや既存のシステムでは賅いきれない多様なユーザーニーズに応えるシステムの開発と将来の計算科学技術の振興に向けたチャレンジングなシステムの開発(※2)がともに重要であり、頂点のシステムに併せてこれらのシステムを整備するとともに、頂点のシステムと第二階層のシステムの連携によって、現

在開発が進められているソフトウェア資産等を継続して活用することが必要であり、複数機関の連携などによりさらなる強化を促進することも重要である。計算科学技術分野への予算投入規模等の諸般の情勢を考慮すると、ここで述べたようなピラミッド構造におけるHPCIシステムによる計算資源提供環境強化が当面の最善の方法と考える。

※1 世界トップレベルの性能のシステム

最先端の研究開発装置として、圧倒的な演算性能により様々な最先端の成果創出を可能とする総合性能を有するシステムであり、利用者コミュニティや開発者コミュニティの要望等を踏まえ、国が戦略的に定めるもの

※2 多様なユーザーニーズに応えるシステムやチャレンジングなシステム

計算資源の多様性確保等の観点から、頂点に立つシステムとは異なる特徴を有するものとして、利用者コミュニティや開発者コミュニティの要望等を踏まえ、国の戦略に基づいて厳選されるシステム

本報告では、今後の10年間程度を見据えた今後の計算科学技術推進体制に関する考え方や我が国の計算科学技術を先導する次期システムのあり方として、HPCIシステムの充実によってピラミッド型の計算資源構造の維持、拡充を図り、産業利用も含めた計算科学技術振興の裾野を拡げるべきであることを改めて強調したい。また、その頂点に圧倒的な性能を有する最先端システムを置くことによって、より多くの利用者に安定的な高度シミュレーション環境を提供し、計算科学技術における様々な成果を先導すべきと考える。

当然のことながら、ピラミッド型の計算資源構造を利用の観点から維持・発展させるためには、各階層の計算資源を維持・管理する機関の不断の努力と全体としての継続的なHPCIシステムの充実がともに重要であり、国は、HPCIシステムの構築とその運営について利用者視点からの取組みを継続していくべきである。

2. システムを開発、設置、運用する拠点のあり方

(1) 頂点に立つシステムを担う拠点

拠点には、①世界トップレベルの性能を有するシステム開発のために、計算科学と計算機科学の密接な連携のもと、必要な計算機技術開発を着実に進める能力と人的体制、②設置・運用のために、電力確保や設置スペースといった外的要件の提供、高い信頼性に基づく高度なシステムの安定的な維持・運用能力の保持、③運用拠点として、

スーパーコンピューティングに関する研究機能や分野連携、人材育成や人材交流への取組、アプリケーション開発支援といった環境構築の提供といった要件を実現する能力と体制を有することが求められる。

開発は設置・運用の拠点と同一の機関が担当し、我が国の計算科学技術の中核としての機能を担っていくことが望ましいと考えるが、効率性などを考慮し、必要に応じて、設置・運用拠点を中核とし、関係機関の協力を得る体制の構築も選択肢として考える。

このような拠点については、開発・設置・運用主体が限られることから、国が戦略に基づいて決定し、システムの開発・設置・運用や必要に応じて拠点機能の充実のため、相当の規模の国費投入を行うべきである。また、我が国の計算科学技術に関するコミュニティであるHPCIコンソーシアムは、国の決定にあたり、拠点が示すシステム構成や想定する拠点機能の内容を確認する。

(2) 第二階層において、システムを開発、設置、運用する拠点

第二階層において、頂点に立つシステムでは賄いきれない多様なユーザーニーズに応えるシステムや、将来の計算科学技術の振興に向けたチャレンジングなシステムを担う拠点には、頂点に立つシステムの拠点との相互補完関係を意識し、かつ、開発するシステムのアーキテクチャや利用環境に様々な形態や機能が期待される現状を踏まえ、開発とその設置・運用の双方の機能を備えることが必要と考える。

これらの拠点には、頂点に立つシステムや第二階層として整備されるシステムとの相互補完の観点から、それぞれが自律的かつ特徴的な存在意義を持つことが期待されており、その範囲内において、頂点に立つシステムの拠点に類する能力と体制を有する機関がこれらの拠点を担当するものとする。

これらの拠点については、国が、我が国の計算科学技術に関するコミュニティであるHPCIコンソーシアムの意見を踏まえ、国が戦略的に定めたシステム要件等を基に、競争原理を働かせることにより開発・設置・運用主体を選定し、適切な規模の国費投入を行うべきである。

なお、これらの拠点を運営する機関や法人においては、機関や法人本来の活動を基本とした拠点機能が発揮されていることから、それらの自由度や独自性を尊重すべきと考える。

(3) 既存機関の連携等による拠点

大学の情報基盤センターの積極的な連携などにより、稼働期間中の頂点に立つシステムの性能を凌駕するシステムが整備され、これが広く利用に供される形態となる可能性もある。このようなケースにおいては、国は、システム運用に関する必要な支援を講じることが重要である。

(4) 合意形成

拠点としての責務を果たす機関は、計算科学技術推進における重要な役割を担っていくことになるので、その活動に関して広範な計算科学技術分野のコミュニティからの理解を得ることが必要であり、例えば、HPCIコンソーシアムにおける合意形成を得ることに積極的に取り組むことが求められる。

3. 将来の計算資源提供体制

我が国の主要な計算資源をネットワークで結び、多様なユーザーニーズに応える計算科学技術の振興基盤として構築されたHPCIシステムは、平成24年9月末から運用を開始したところである。

我が国の計算科学技術の一層の振興を図るためには、各拠点の積極的な取り組みや既存機関による大規模システムの運用等により、HPCIシステムの計算資源量や計算資源(ネットワークや大規模ストレージ、大容量データのプリポスト処理を担う計算資源などを含む)の多様性を継続的に拡充していくことが必須であり、これにより、利用分野や利用者のさらなる拡大が可能になると考える。

将来は様々な計算資源提供機関における固有のミッションの相違による隘路を打開するため、国を交えて制度面での検討を進めることで、各計算資源提供機関の自由度や独立性も考慮しつつ、機関連携を積極的に進める。また、既存の計算資源提供機関の枠組みにとらわれないシステムの設置・運用体制構築を進めることにより、多くの利用者に、潤沢かつ多様な計算資源を提供し、利用に供せるよう持続的な環境を整備すべきものとする。

このような環境を整備するためには、具体的な姿を想定しながら進めていく必要があり、コミュニティの協力を得つつ、引き続き取組方法の検討を進めるべきであり、国においても、機関間連携等の促進に必要な施策を講じていくことが重要と考える。

4. 頂点に立つ次期システム

(1)開発の必要性、意義

「京」の利用によりさまざまな科学技術的ブレークスルーが成されつつあること、またサイエンスロードマップなどからエクサフロップス級の計算能力による多数の飛躍的な科学技術成果が期待されていることから、「京」の性能を大幅に上回るシステムが、世界をリードする科学技術成果を創出する最先端の研究開発装置として必要となることは明らかである。 またこれに加えて、今後10年程度の期間にわたって我が国の計算科学技術を先導し、さらに将来の計算科学技術関連分野を牽引するために、以下に示すような高性能計算の先駆的なハードウェア・ソフトウェアの技術を具現化するプラットフォームとして、このような超高性能システムを我が国において開発することが不可欠である。

すなわち大規模化・複雑化するアーキテクチャに対応するアプリケーションソフトウェアの開発技術とそれを支援するシステムソフトウェア技術、CPUを含む計算機システムのハードウェアやOSなどの基盤的システムソフトウェアの要素技術、システムの信頼性を担保・強化する運用技術は、将来の計算科学技術の発展の牽引、利用者の利便性の一層の向上、また新たなシミュレーション分野の確立といった裾野拡充の観点から、我が国において自立的・継続的に保有すべき技術である。またこれらの技術、特にソフトウェア技術の多くは、我が国での保有・利用に留まってはならず、海外との連携開発も適宜実施しつつ、国際的な標準利用・標準形成に向けてイニシアチブを発揮することが重要である。

また、計算科学技術による成果の社会還元については、次期システム利用による直接的な成果創出だけに捉われず、計算科学の先端的な技術・知識・経験を広く普及させることが将来的な産業競争力向上に繋がることを認識すべきであり、そのような観点から産業利用や産学官連携プロジェクトの推進を考えるべきである。

(2)システムの規模、性能

平成24年に本格稼働を開始した「京」の優位性が相対的に低下すること、また更新間隔をなるべく短くすること、具体的には最長でも6年程度とすることが望ましいため、頂点に立つ次期システムをできるだけ早期に開発・稼働させるべきであり、開発スケジュールの面で可能であれば平成29年度の、また遅くとも平成30年度の稼働開始を目指すべきである。

システムの規模と性能については、国が我が国の計算科学の発展・振興に関する長

期的なグランドデザインの議論を深めていく中で、すでに提示されている2種類の中長期的ロードマップ、すなわちシステム開発の第一目的である科学技術成果に関するものと、システム開発を支えるハードウェア・ソフトウェア技術に関するものの双方をより精緻なものとしながら、次期システム開発・稼働後の展開も視野に入れて設定すべきである。さらに、システムを開発する側では、グランドデザインとロードマップの精緻化の議論を踏まえつつシステムの達成目標とその評価指標を示し、システムの規模・性能を具体化すべきである。

基本的なシステム性能指標となる浮動小数点演算速度については、今後の技術トレンドを勘案すると平成29～30年度の時点での達成は容易ではないものの、エクサフロップスを目指すべきである。ただしこれは単にピーク性能の追求を意味するものではなく、科学技術成果に関する中長期的ロードマップから導かれるものでなければならない。

システム構成とアーキテクチャの選定、特に広い範囲のアプリケーションをカバーする単一のシステムとするか、それぞれ一定の範囲のアプリに適合する複数のシステムとするかについて、コミュニティの意見は必ずしも一致していない。しかし世界トップレベルのシステムを同時期に複数開発することは困難であるため、単一システムを選択することはほぼ必然であり、そのシステムが広範囲のアプリケーションに対して高い性能を発揮することを求めることも当然である。ただし、このようなシステムへの適合性が低いアプリケーションに対しても、それらに強く適合する第二階層システムを重点的に開発・整備する、適合性の強いメカニズムを次期システムに部分的に取り入れるなど、全体として多様なアプリケーションに対応する方策を検討すべきである。

また次期システムのアーキテクチャや上記のような多様なアプリケーションへの対応策は、中長期的ロードマップに沿った総合的な判断基準に基づき慎重に検討すべきである。具体的には、特性が異なるさまざまなアプリケーションの電力あたりの実効性能を基本としつつ、稼働初期に得られる科学技術成果とその実現コスト、開発および利用によって得られるハードウェア・ソフトウェア技術の継続性や波及効果、世界的な HPC の技術トレンド、1/10 スケールレベルへの技術展開、次期システムに続く高性能計算資源の開発・整備計画の観点などからの、総合的な判断が求められる。

なお、コモディティベースのシステム調達により、「京」と同等以上の性能を有するシステムの設置・整備計画が国内外で今後2～3年の内に進展するものと予想される。これらのシステム、特に国内のシステムをターゲットとして開発・改良されるアプリケーションには、次期システムをもターゲットとしうるものが多いと予想されるため、どのようなシステムが設置・整備されるかの動向にも注意を払うべきである。

(3)技術開発要素

開発すべきハードウェア要素技術(プロセッサ、メモリ階層、ネットワーク、ストレージなど)については、技術的優位性(絶対性能、性能電力比)や開発・製造コストのみならず、システムソフトウェアやアプリケーションソフトウェアの開発量・コストと開発着手が可能な時期、さらには国産技術の推進や将来的な発展性なども判断基準としつつ、それぞれについて明確な目標を定め、選択と集中の意識を強く持って開発対象を設定することが重要である。特に、コミュニティからは国産プロセッサ開発を期待する声が多く寄せられているが、その多くは同時に開発・製造コストに見合う性能を求めていることに留意すべきである。また国産開発の重要なメリットとして、詳細な技術情報やソフトウェア開発・評価環境が早期に得られることが挙げられるが、このメリットが真に生かされるような開発管理体制が求められることにも留意すべきである。

さらに、ハードウェア要素技術が次期システムにのみ使われるのではなく、利用目的や規模が異なる他のシステムにも展開可能となり、技術投資をいろいろな角度から回収できるように、開発項目の設定とともに展開方法についても併せて検討することが必要である。また開発においてアプリケーションを理解することは当然であるが、単に特定のコードの性能決定要因や実行過程を調べるだけでなく、解くべき問題やその解法・アルゴリズムの本質、さらにはソフトウェア生産性などコードを形成しているさまざまな要因に至るまで、深い理解をもって設計・実装を行うことが必要である。

ハードウェアとシステムソフトウェア、アプリケーションソフトウェアが三位一体で取り組むべき技術項目としては、Byte/FLOP 値(メモリバンド幅と演算性能の比)の低下、ハードウェア故障率の増加、および性能電力比の相対的な低下(向上率が性能価格比の向上を下回る傾向)に対応する技術が特に重要である。

Byte/FLOP 値の低下は、チップ内の CPU・演算器の高並列化に伴い避けがたいものであり、低下を抑えるためのアーキテクチャ新技術の導入とともに、コンパイラ等のシステムソフトウェアでの補償や、アプリケーションレベルでの要求メモリバンド幅を抑えたアルゴリズム開発など、ソフトウェア側からのアプローチが今後の重要なテーマである。耐故障および省電力については、ハードウェアとOSなどのシステムソフトウェアが協調して取り組む必要があることはもちろん、アプリケーションレベルでの対応を可能とするためにコンパイラやライブラリを含むソフトウェアスタック全体で問題解決にあたる必要がある。

アプリケーションプログラミングについては、既存のアプリケーションに対するアーキテクチャの進化・変遷の影響を最小限に留めるコンパイラ技術とともに、進化・変遷に対して

頑健なアプリケーションの開発技術やその支援技術、ハードウェアの飛躍的な並列性増加に対応するアルゴリズムレベルでの並列度拡張とその実装技術が重要である。特に、アーキテクチャに応じて最適化された数値計算や並列化のためのライブラリは重要であり、アプリケーション中の性能に直結する部分をライブラリに委ねたコーディングを容易化するためのライブラリ拡充やアプリ開発フレームワークの構築が必要である。

またこれらのシステムソフトウェアの開発は、システム開発の一環として行うべきであり、開発テーマや開発主体の設定を早期に実施すべきである。さらにハードウェア要素技術と同様あるいはそれ以上に、アプリケーションに関する深い理解・洞察に基づいて開発を実施すべきである。

5. 今後の検討課題

コミュニティの意見集約をさらに進める当面の課題として、

- ① 将来の計算資源提供体制に関しては、大学の情報基盤センターなどの役割や機能の見直しを含め、機関連携による既存の計算資源提供機関の枠組みにとらわれないシステムの設置・運用体制構築のあり方に関する制度面での検討、提案があり、中間報告(平成25年5月末)までに検討を開始する体制を整え、最終報告(平成25年度中)までに提案
- ② 頂点に立つ次期システム等に関しては、拠点機関が示すハードウェア、システムソフトウェア、アプリケーションソフトウェアの開発に関する将来計画を踏まえ、システムの構成や拠点機能の内容確認があり、中間報告までに検討を開始する体制を整え、6月中に実施
- ③ 第二階層を構成するシステム等に関しては、拠点としての責務を果たそうとする機関が示すハードウェア、システムソフトウェア、アプリケーションソフトウェアの開発に関する将来計画、国が戦略的に定めたシステム要件や関係機関がまとめる今後10年間のシステム設置計画等を踏まえ、開発・設置・運用するシステムの構成や拠点機能の内容確認があり、中間報告までに検討を開始する体制を整え、頂点に立つ次期システムの開発状況を踏まえながら実施する必要がある。

その他、検討を要する課題として、

- ④ 計算資源の利用促進策に関しては、頂点に立つシステムを含むHPCIシステムの明確な利用目的を想定したアプリケーション開発やアプリケーション利用支援についての検討、提案があり、中間報告までに検討を開始する体制を整え、検討状況に応じて、中間報告、最終報告において言及する必要がある。
- ⑤ また、産業利用・振興策等に関する取り組みのあり方、計算資源の利用促進にとどま

らず計算科学技術全体の振興において重要な役割を担う計算機科学と計算科学の双方に精通したアプリケーション開発・維持に関する人材や計算アルゴリズムの開発などソフトウェア関係の開発を担う人材の育成方策、それらの人材のキャリアパス構築策などの検討、提案が重要な検討課題である。これらの検討にあたっては、検討対象を精査しつつ、具体的な提案となるよう中長期の検討を要するものと考えており、中間報告までに、検討対象の精査と検討を開始する体制を整え、検討状況に応じて最終報告において言及していくものとする。

参考資料

○審議等の経過

【第1回社員総会】平成24年6月6日

[審議事項]平成24年度事業計画

- ・ 「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などを含めた将来のスーパーコンピューティングの検討」を明記

【第7回理事会】平成24年7月23日

[議案]事業計画について

- ・ 「将来のスーパーコンピューティングの在り方に関する調査検討業務の進め方」を了承

【HPCIコンソーシアム会員に対する連絡】平成24年9月3日

- ・ 「HPCIコンソーシアムとしての将来のスーパーコンピューティングに関する意見集約について」担当理事を中心に活動を開始する旨、理事長からコンソーシアム会員全員に対して連絡

【HPCIコンソーシアム会員に対する連絡】平成24年10月16日

- ・ 「HPCI コンソーシアムとしての将来のスーパーコンピューティングの体制に関する意見集約について」担当理事を中心に活動を開始する旨、理事長からコンソーシアム会員全員に対して連絡

【第8回理事会】平成24年10月29日

[報告]計算科学技術の振興に関わる意見集約と活動報告

- ・ 人材育成に関する調査検討業務の進め方を検討

[報告]将来のスーパーコンピューティングに関わる意見集約報告

- ・ 将来のスーパーコンピューティング及び将来の体制に関する調査検討業務について進捗状況を報告

【文部科学省・今後のHPCI計画推進のあり方に関する検討ワーキンググループ(第8回)】平成24年10月31日

- ・ 理事長からHPCIコンソーシアムにおいて将来のスーパーコンピューティングのあり方について検討している旨発言

【文部科学省・今後のHPCI計画推進のあり方に関する検討ワーキンググループ(第10回)】平成24年12月6日

- ・ 理事長からHPCIコンソーシアムにおける将来のスーパーコンピューティングのあり方に関するコミュニティ側の意見集約の状況について発言

【第9回理事会】平成25年1月21日

[報告]将来のスーパーコンピューティングのあり方に関する提言

- ・ AICS WG 中間報告案の検討状況を紹介いただき意見交換

【HPCIコンソーシアム及びAICS WG共催意見交換会】平成25年2月7日(木)

- ・ 将来のスーパーコンピューティングに関する中間報告案について

【第10回理事会】平成25年2月13日

[議案]将来のスーパーコンピューティングのあり方についての提言-中間報告案-を決定

【第2回社員総会(臨時)】平成25年3月4日

[審議事項]将来のスーパーコンピューティングのあり方についての提言-中間報告案-を決定

【文部科学省・今後のHPCI計画推進のあり方に関する検討ワーキンググループ(第13回)】平成25年3月11日(予定)

- ・ 理事長から、HPCIコンソーシアムが纏めた「将来のスーパーコンピューティングのあり方についての提言-中間報告案-」について報告

○文部科学省委託業務「HPCIの運営」の「今後の運営の在り方に関する調査検討」を行うためのWGの検討項目と構成員について(理化学研究所計算科学研究機構の資料に一部追記)

- ① 将来のスーパーコンピューティングの在り方に関する調査検討WG(平成24年8月24日設置)
 - 検討項目:NFS の必要性、整備すべきシステム像、開発すべき要素技術、アプリケーション開発等
 - 委員構成

- 主査 中島 浩 京都大学学術情報メディアセンター長（一般社団法人 HPCI
コンソーシアム理事）
- 大西 慶治 独立行政法人理化学研究所計算科学研究機構
複雑現象統一的解法研究チーム リサーチアソシエイト
※平成 24 年 11 月より北海道大学大学院工学研究院機械
宇宙工学部門から所属が変更となりました。
- 川島 直輝 東京大学物性研究所 教授
- 高木 亮治 独立行政法人宇宙航空研究開発機構宇宙科学研究所
准教授
- 朴 泰祐 筑波大学大学院システム情報工学研究科 教授
- 堀 宗朗 東京大学地震研究所災害科学系研究部門 教授
- 南 一生 独立行政法人理化学研究所計算科学研究機構
運用技術部門ソフトウェア技術チーム チームヘッド
- 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（一般社団法人 HPCI コンソーシアム理事）

② 将来のスーパーコンピューティングの体制の在り方に関する調査検討WG(平成24年10月16日設置)

- 検討項目: 計算科学技術推進体制について、我が国の計算科学技術推進体制の全体像、HPCIシステム構築におけるコミュニティの合意形成のあり方、NFSの開発・設置・運用主体等

➤ 委員構成

- 主査 藤井 孝藏 独立行政法人宇宙航空開発機構宇宙科学研究所副所長
教授(一般社団法人 HPCI コンソーシアム副理事長)
- 青柳 睦 九州大学情報基盤研究開発センター長 教授
- 石川 裕 東京大学情報基盤センター長 情報理工学研究科 教授(一般社団法人 HPCI コンソーシアム理事)
- 木寺 詔紀 横浜市立大学生体超分子システム科学専攻 教授
- 沢田 龍作 トヨタ自動車(株)エンジンプロジェクト推進部
- 常行 真司 東京大学大学院理学系研究科 教授(一般社団法人 HPCI コンソーシアム理事)
- 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(一般社団法人 HPCI コンソーシアム理事)

○同 WG の審議経過

【将来のスーパーコンピューティングの在り方に関する調査検討WG】

第1回：平成24年8月28日(火)

- (1) 今後の進め方について
- (2) その他

第2回：平成24年10月15日(月)

- (1) 今後の進め方について
- (2) その他

第3回：平成24年11月20日(火)

- (1) 意見交換会(第1ラウンド)の報告について
- (2) 今後の進め方について
- (3) その他

第4回：平成25年1月17日(木)

- (1) 将来のスーパーコンピューティングに関する調査検討について
の中間報告案について
- (2) その他

【将来のスーパーコンピューティングの在り方に関する調査検討WG・意見交換会】

(第1ラウンド)

将来のスーパーコンピュータの技術開発、利用、運用等について、アンケート調査に基づき、様々なコミュニティとの意見交換を実施

平成24年9月14日(金) 戦略分野4を中心とした自動車空力コンソーシアムとの意見交換

平成24年9月18日(火) 戦略分野2を中心とした日本物理学会参加者との意見交換

平成24年9月18日(火) HPCIシステムへの計算資源提供機関との意見交換:

平成24年9月19日(水) 「将来のHPCIシステムのあり方の調査研究」におけるアプリケーション分野担当機関との意見交換会

平成24年10月1日(月) 戦略分野3を中心とした都市・構造グループとの意見交換会

平成24年10月22日(月) 戦略分野5運営委員会との意見交換会

平成24年10月25日(木) 戦略分野1運営委員会との意見交換

(第2ラウンド)

ナショナルフラッグシップシステムの必要性等について、パネルディスカッションなどにより、様々なコミュニティとの意見交換を実施

平成24年11月29日(木) 戦略分野1全体ワークショップ参加者との意見交換会

平成24年12月3日(月) 戦略分野2を中心とした CMSI 研究会参加者との意見交換会

平成24年12月7日(金) 戦略分野4を中心とした次世代ものづくりシンポジウム参加者との意見交換会

平成24年12月15日(土) 戦略分野5を中心とした QUCS 参加者との意見交換会

平成24年12月23日(日) 戦略分野5を中心とした理論天文学宇宙物理学懇談会シンポジウム参加者との意見交換会

平成24年12月27日(木) 「将来の HPCI システムのあり方の調査研究」におけるシステム担当機関との意見交換会

【将来のスーパーコンピューティングの体制の在り方に関する調査検討WG】

第1回:平成24年10月26日(金)

- (1) ワーキンググループの設置・運営について
- (2) 今後の進め方について
- (3) その他

第2回:平成24年11月28日(水)

- (1) 検討課題及び調査検討の進め方について
- (2) 将来のスーパーコンピューティングの体制の在り方について
- (3) その他

第3回:平成25年1月15日(火)

- (1) 我が国の計算科学技術推進体制等の検討に関するアンケート結果について
- (2) 将来のスーパーコンピューティングに関する中間報告案について
- (3) その他

【将来のスーパーコンピューティングの在り方に関する調査検討WG及び将来のスーパーコンピューティングの体制の在り方に関する調査検討WG合同WG】

平成25年2月4日(月)

- (1) 将来のスーパーコンピューティングに関する中間報告案について
- (2) 両WGの今後の活動について
- (3) その他

以 上

平成24年度HPCI利用促進活動報告

平成25年3月4日
HPCIコンソーシアム総会

登録施設利用促進機関
一般財団法人 高度情報科学技術研究機構

1

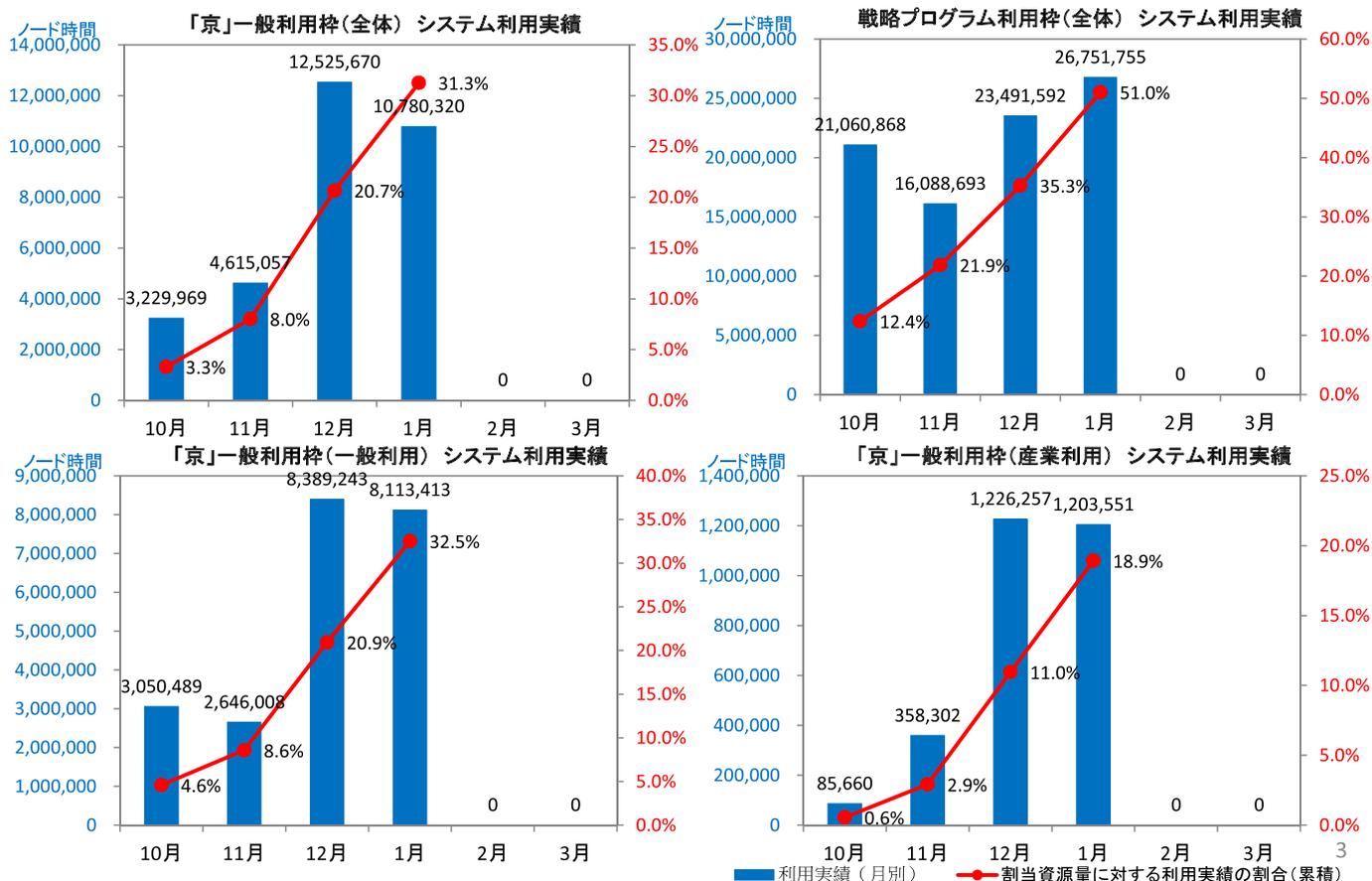
内容

1. HPCIシステム資源の利用状況
 - ① 「京」の利用実績
 - ② 「京」を除くHPCIシステムの利用実績
2. 利用支援状況について
 - ① 一元的な窓口
 - ② 産業利用支援
 - ③ 高度化支援
3. 利用者ニーズの把握
4. 追加募集等
 - ① 「京」利用課題の追加募集
 - ② 「京」を除くHPCI利用課題の追加募集
 - ③ 赤資源利用課題の募集
 - ④ JHPCN課題の選定
5. 予定
 - ① 募集スケジュール等
 - ② 中間報告会プログラム
 - ③ 利用支援環境の整備

HPCIシステム資源の利用状況

(1) 「京」の利用実績

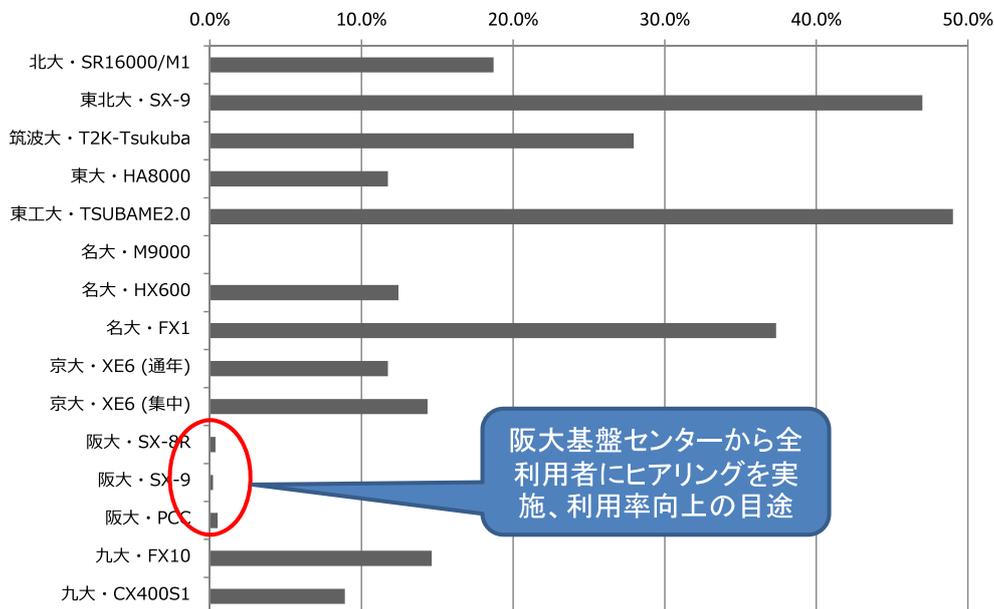
利用率は、12月以降大きく伸展



HPCIシステム資源の利用状況

(2) 「京」を除くHPCIシステムの利用実績

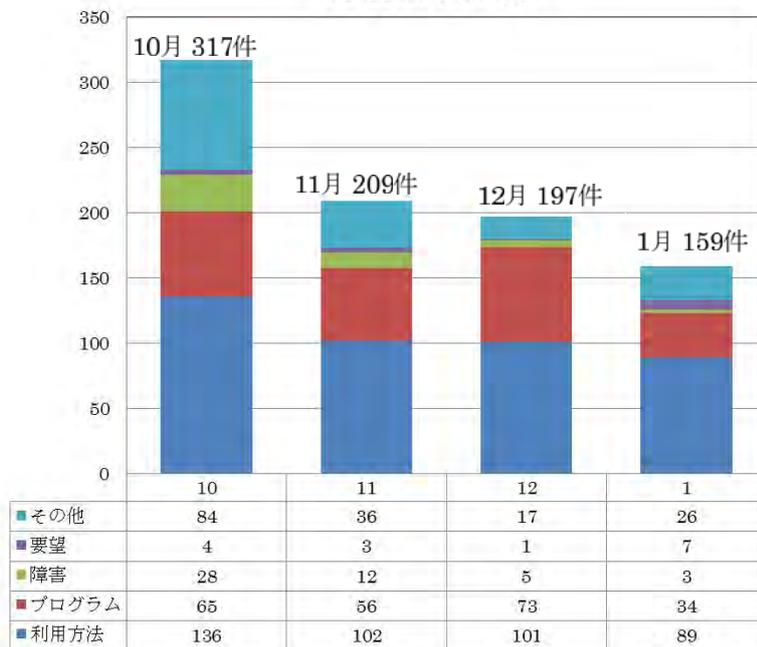
- ・平成24年度下半期の割当て資源量を100%として、平成24年10月から12月までの利用量の比率を示す。
- ・各々の計算機を利用する複数の課題の合計利用量の利用率を示す。
- ・利用の少ない計算機も見受けられる。年度末に向けて利用率の向上を図る。



2. 利用支援状況について

① 一元的な窓口(1/2)

月別相談件数



- ① 9割強が「京」に関する相談
- ② 共用開始時に比べ、相談件数は漸減傾向
- ③ 相談内容が複雑・高度化し、解決までに日数を要する
- ④ 調査中 45件

5

① 一元的な窓口(2/2)

利用が進んでいない課題への対応

(1) マンスリーレポートを分析し、利用率が低い(10%未満)課題を抽出し、利用状況のヒアリングや利用支援の必要性などの問合せを継続実施中。

利用率が10%未満の課題件数(1月末)

	採択件数	10%未満	割合
一般利用	29	8	28%
一般利用(条件付き選定)	20	9	45%
若手人材育成利用	8	3	38%
産業利用	26	9	35%
	83	29	35%

(2) 個別の問題について、きめ細かくフォローを実施中。

- 例：① コンパイル方法、ジョブ投入方法のサンプルを送付
 ② 「京」で利用可能な数値計算ライブラリを紹介
 ③ 高速化支援を実施

②「京」産業利用の平成24年度重点実施項目

1. 利用開始後の課題進捗フォロー

理研の資源利用実績データにおいて、利用実績が無い課題、資源消費率が低い全課題について、10月より毎月状況ヒアリングを行い、必要な支援を実施。

社内許可(外部利用、ネットワーク接続)を得るのに時間を要したため、一般課題に比べスタートは遅れたが、その後順調に進行している企業が増加(10月末 8.5万ノード時間 ⇒11月末 35.8万 ⇒12月末 122万)

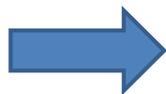
2. 「京」のソフトウェアの情報提供と利用環境整備

ニーズおよび評価の高いOSSソフト21種(別紙1参照)を選定、コンパイル・リンクを行い、OSSの「京」上での動作実績、ソフトの入手方法、コンパイル方法やジョブスクリプトの例などの情報整備を実施。

3. 利用促進活動

共用促進のため、セミナーを開催、展示会に出展し、利用技術講習会を開催。(詳細は別紙2参照)

平成25年度重点項目



1. 26件の課題進捗率のさらなる向上・加速に向けた支援
2. 「京」のソフト情報提供と利用環境の整備
3. 「京」産業利用に関する一層の認知度向上

「京」上で利用可能なOSS一覧(別紙1)

項番	ソフトウェア名	ソフトウェア概要
1	SuperLU	非対称疎行列ソルバー、複素値にも対応
2	UMFPACK	マルチ・フロントル法を用いた非対称疎行列ソルバー
3	SuperLU_MT	非対称疎行列ソルバー(共有メモリ)、複素値にも対応
4	SuperLU_DIST	非対称疎行列ソルバー(分散メモリ)、複素値にも対応
5	ABINIT	第一原理計算コード(Ver. 5.4.4p)
6	ABINIT	第一原理計算コード(Ver. 5.8.3)
7	METIS	行列やグラフを分割したり、オーダリングしたりするためのライブラリ
8	HDF5	ファイル入出力インターフェイスライブラリ・ソフトウェア
9	NetCDF	ファイル入出力インターフェイスライブラリ・ソフトウェア
10	GROMACS	分子動力学シミュレーション
11	LAMMPS	並列計算機のために設計された古典的な分子動力学シミュレータ
12	GAMESS	原子、分子の量子化学計算をハートリーフォック近似をベースに行なうソフトウェア
13	Frontflow/Red	流体解析ソフトウェア
14	FrontISTR	非線形構造解析ソフトウェア
15	CMAKE	メイクツール
16	gsl	数学ライブラリ
17	ImageMagick	画像処理ツール
18	libjpeg	JPEGの画像操作作用ライブラリ
19	libpng	PNGの画像操作作用ライブラリ
20	Zlib	データの圧縮および伸張を行う
21	Parallel-NetCDF	NetCDFの機能にMPI-IO によるParallel IOを実現

(注)「京」のためのコンパイル・リンクが完了したOSSソフトウェア

産業利用推進の平成24年度実績(別紙2)

セミナー・シンポジウム	内容	開催日	会場
地域ICT推進協議会総会	講演	2012/5/11	ホテルモントレ神戸
オープンCAEワークショップ2012	講演	2012/6/8~9	国立オリンピック記念青少年総合センター
京コンピュータ・シンポジウム2012	共催	2012/06/14~15	神戸大 統合研究拠点コンベンションホール
RIKEN AICS HPC Summer School 2012	後援	2012/8/6~8/10	理化学研究所計算科学研究機構(神戸)
「京」共用開始式典	共催	2012/9/21	神戸ポートピアホテル
HPC産業利用スクール「京」特別コース	共催、講演	2012/11/1	東大生産技術研究所
第24回産業応用協議会スパコンセミナー	講演	2012/11/20	トスラブ市ヶ谷
オープンCAEシンポジウム2012	講演	2012/12/14~15	岐阜ハートフルスクエア-G
展示会出展		開催日	会場
国際フロンティア産業メッセ	理研と共同	2012/9/6~9/7	神戸コンベンションセンター
SC12	理研と共同	2012/11/10~11/16	米国ソルトレークシティ コンベンションセンター
HPCS2013	単独出展	2013/1/15~1/16	東京工業大学
国際ナノテクノロジー総合展・技術会議	単独出展	2013/1/30~2/1	東京ビッグサイト
講習会		開催日	会場
「京」利用者向け講習会 第1回	実施済	2012/9/27~9/28	理化学研究所計算科学研究機構(神戸)
「京」利用者向け講習会 第2回	実施済	2012/10/3~10/4	理化学研究所計算科学研究機構(神戸)
「京」利用者向け講習会 第3回	実施済	2012/10/10~10/11	理化学研究所計算科学研究機構(神戸)
チューニング技法編入門	実施済	2012/11/5	理化学研究所計算科学研究機構(神戸)
並列プログラミング入門(MPI編)	実施済	2012/11/6	理化学研究所計算科学研究機構(神戸)
「京」利用者向け講習会 第4回	実施済	2012/11/26~11/27	トラスト・シティー・コンファレンス(東京)
チューニング技法編入門	実施確定	2013/2/21	理化学研究所計算科学研究機構(神戸)
並列プログラミング入門(MPI編)	実施確定	2013/2/22	理化学研究所計算科学研究機構(神戸)

備考：講習会における**企業参加者は、延べ377名の参加者の約1/3**

9

トライアル・ユースの利用状況

3社に利用結果をヒアリング：いずれも課題実施に十分な意義があったとの評価

No	課題実施企業	利用結果等
1	三ツ星ベルト	成果を得て1回目の利用終了。やり残した一部の計算を実施するため、2回目の利用に応募。 <u>実証利用にも応募予定。</u>
2	東洋ゴム工業	約2.5万並列までの大規模計算を実行し、1500並列までの線形な計算速度向上を確認。 <u>必要とする規模の計算が京で可能であることを確認。</u>
3	茨城日立情報サービス	高並列化(数十→2000)を達成し、良好な性能を確認。課題に適用した <u>鋳造シミュレーションソフトの製品化を検討。</u>
4	半導体理工学研究センター	1回目の利用で計算上の問題と対応方針を明確化でき、2回目の利用に応募。
5	三ツ星ベルト	1月より2回目の利用を開始、順調に進行中。
6	本田技術研究所	3月より利用開始
7	昭和電工	3月より利用開始

募集段階の申請

応募に関する具体的な相談対応中の企業
 機械企業A社(複数部門から)、化学企業B社及びC社、
 製薬企業D社、防災関連企業・研究所E社及びF社

③ 高度化支援の状況(1/2)

支援件数12件(うち、支援中10件、支援終了2件、平成25年2月27日現在)

No.	課題ID	利用枠	アプリケーション名	調整・高度化支援の状況	ステータス
1	hp120283:	戦略プログラム・分野2	ALPS/looper	(問題点)ステージング環境での効率的なジョブの流し方と性能向上の方策がわからない。 (状況)実行パラメータによって、実行時間が異なる複数のケースを同時実行し、1つのジョブの中で最適なスケジューリングする方法と、さらに、長時間にわたる実行を自動的に連続投入する方法を提案。実行時間が変動する原因がI/Oにあることを特定。その処理を削減することで726秒前後で変動していた実行時間が、267秒に高速化され安定化した。	支援中
2	hp120289:	戦略プログラム・分野4	FrontISTR	(問題点)自動並列を適用してもその効果が出ていない (状況)当該ループを分析し、スレッド間の演算を均等に処理するよう最適なサイズでブロックサイクリックを行うOpenMP指示行を指定し、さらにセクタキャッシュを有効にする指定を行うことで、行列解法部分のループを169秒(1ノード1コア)から22秒(1ノード8コア)へと7.7倍高速化する方法を提案。 ・引き続き、2番目にコストの高いソルバーの前処理部分に対して、スレッド並列の最適化方法を調査中。	支援中
3	hp120282:	戦略プログラム・分野3	CReSS	(問題点)「京」での高速化方法がわからない。「京」で実行するたびに計算結果が異なる原因が特定できず困っている。 (状況)計算コストが大きい上位5つのサブルーチンについて調査分析し、高速化案を提案。また、プログラム全体に対して、スレッド並列対象の軸を変更した方が効率上がることを提案。 計算結果が異なる件については、原因を特定し、修正案を提示。	支援中
4	hp120299:	戦略プログラム・分野2	STATE	(問題点)高速化の余地がないか知りたい (状況)計算コストのホットスポット、並列実行のばらつき等の分析結果を報告。SIMD化の促進、ループ融合、OpenMPの効率的な指定、自動並列の有効活用、入力パラメータに対する最適な実行条件、高速な通信処理を有効にする方法などの改善提案により、主要な計算部分(SCF計算)が330秒から246秒と1.3倍高速化。	支援終了

11

③ 高度化支援の状況(2/2)

No.	課題ID	利用枠	アプリケーション名	調整・高度化支援の状況	ステータス
5	hp120310:	戦略プログラム・分野1	MARBLE	(問題点)思うように高速化されない (状況)ウィークスケーリング性能を関数別・ループ別に分析。スケールンク悪化の主要因をOpenMP化されていない関数の一つに特定。その他の関数でもMPI_Bcastにスケールンク悪化が認められたことを指摘。最も処理の重いループ(全体の20%)に対し、ループ圧縮、変数置換等を施し、当該ループを13%高速化。	支援中
6	hp120295:	戦略プログラム・分野4(優先課題)	FrontFlow/rend	(問題点)ウィークスケーリングでの性能が低下する原因が不明 (状況)性能低下原因がI/O部分にあると特定し、I/O部分の高速化方法を提案。スレッド並列のスケールンク調査を実施し、改善方法を検討中。	支援中
7	hp120305:	戦略プログラム・分野2	tdgga_PP_code	(問題点)計算精度の問題、高速化方法 (状況)計算精度の問題を解決するコンパイラオプションを提案。 ・「京」で高速化されたFFTWの利用を提案し、実装方法について支援。 ・スレッド並列の指定方法を変更し、496secから351secと約1.4倍性能向上。さらにFFTWの利用で、185secとなり、全体で2.6倍高速化。	支援終了
8	hp120222:	一般利用	電磁プラズマ粒子コード em2dsk	(問題点)思うように高速化されない (状況)利用者側で実施されたSIMD化での性能低下原因を分析し、改善案を試行したが、ループの回転数が不足しSIMD化での性能向上は困難と判断。別の方策を検討中。	支援中
9	hp120028: (S社)	産業利用(実証利用)	RSRT	(問題点)性能ボトルネックの特定 (状況)第1回の打合せで、状況確認を実施。	支援中
10	hp120119: (B社)	産業利用(実証利用)	FrontISTR	(問題点)PCクラスタ環境だと収束する計算が、「京」では収束しない。 (支援中)第1回の打合せでヒアリングを実施。	支援中
11	hp120028:	一般利用【条件付き】	プラズマ電磁粒子コード	(問題点)非同期通信が機能しているか、もっと良い方法がないか知りたい。 (状況)実行環境一式の入手待ち	支援中
12	hp120011:	一般利用	GT5D	(問題点)MPI-IO機能が正常に動作しない (状況)MPI-IOのシステム障害調査対応中。その後、高速化支援を実施予定。	支援中

12

3. 利用者ニーズの把握(別紙3参照)

1. 利用者支援関連

利用支援業務の一元的な窓口としてヘルプデスクを設け、以下を実施

- 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
- 課題についての技術相談

2. 「京」のシステム運用関連

- 幅広い分野における利用者のニーズの把握に努め、理化学研究所と協力してそれを施設の運営に反映

3. 「京」を除くシステム運用関連

- 利用者ニーズを各機関センターに紹介

13

4. 追加募集等

1. 「京」利用課題の追加募集

- ① 募集枠は、1000万ノード時間(NH)、平成25年度下期頃利用開始
 - 一般利用12課題程度(50万NH×7+100万NH×5)
 - 産業利用3課題程度(50万NH×3)
- ② 公表等
 - プレアナウンス:2月8日
 - 課題申請書のダウンロード開始:3月14日
 - 募集説明会:3月14日(東京)、3月26日(神戸)、4月12日、19日(東京)
 - 課題申請書受付:4月8日~5月28日

2. 「京」を除くHPCI利用課題の追加募集

平成25年度予算が確定した後、追加募集枠を決定し、「京」利用課題の追加募集に併せて実施

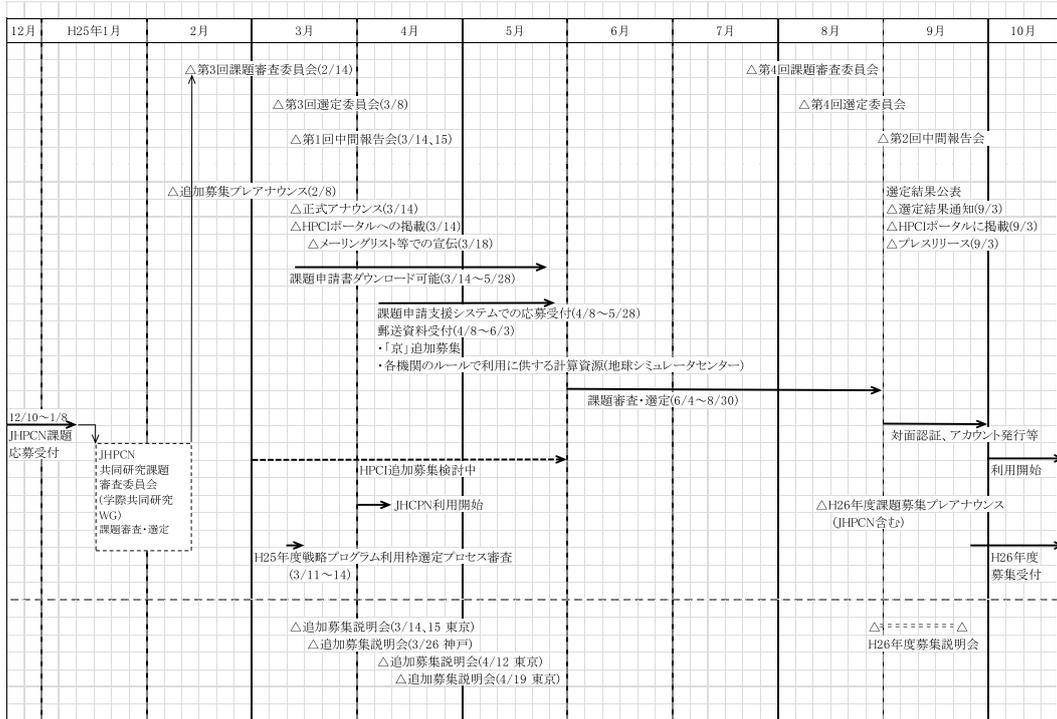
3. 赤資源利用課題の募集

機関独自ルールで運用されるHPCIシステム資源(地球シミュレータ)利用課題の募集を、「京」利用課題の追加募集に併せて実施

4. JHPCN利用課題の選定

学際共同研究WGにて31課題を選定し、課題審査委員会にてそのプロセス審査を実施

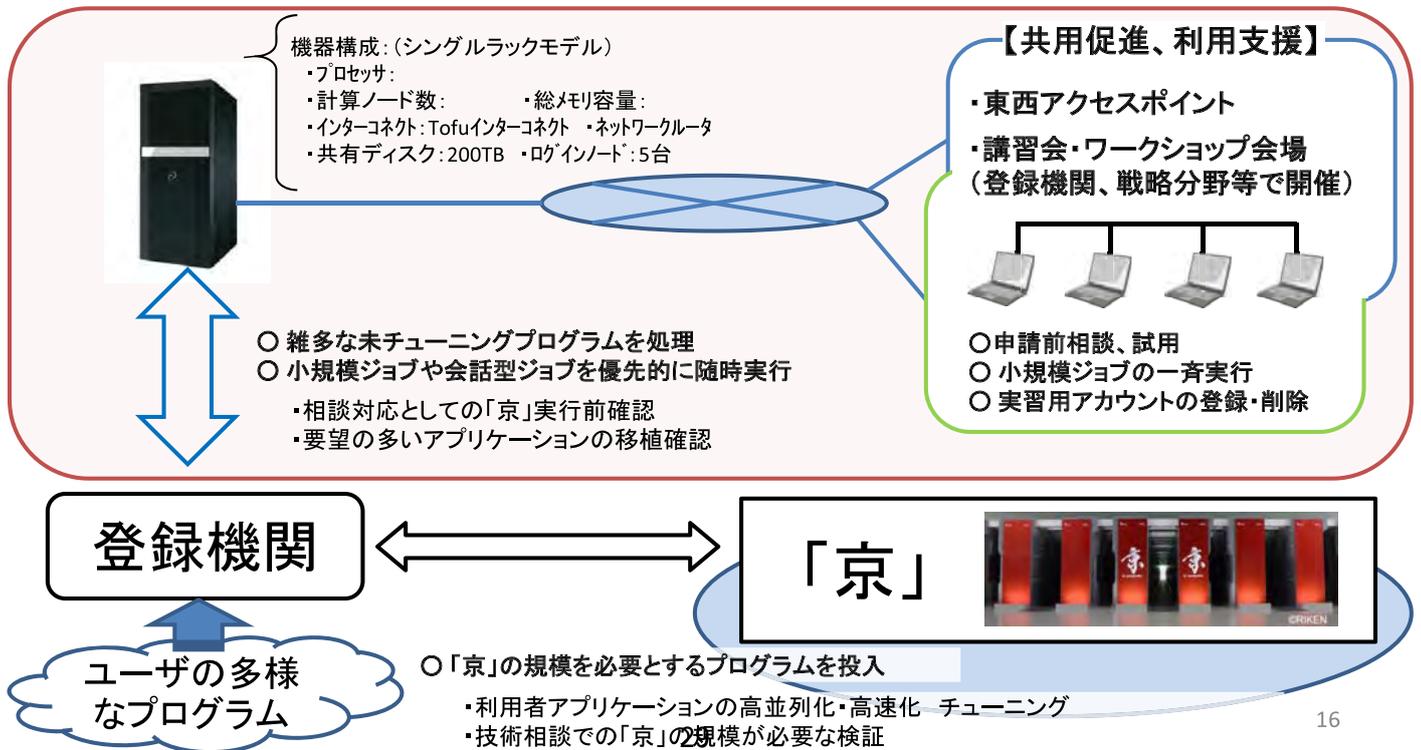
今後の予定



15

利用支援環境整備

- ◎ 東西のAPからの利用により、小規模ジョブの随時実行による効率的利用支援を強化
- ◎ 講習会等での実習利用による共用の促進



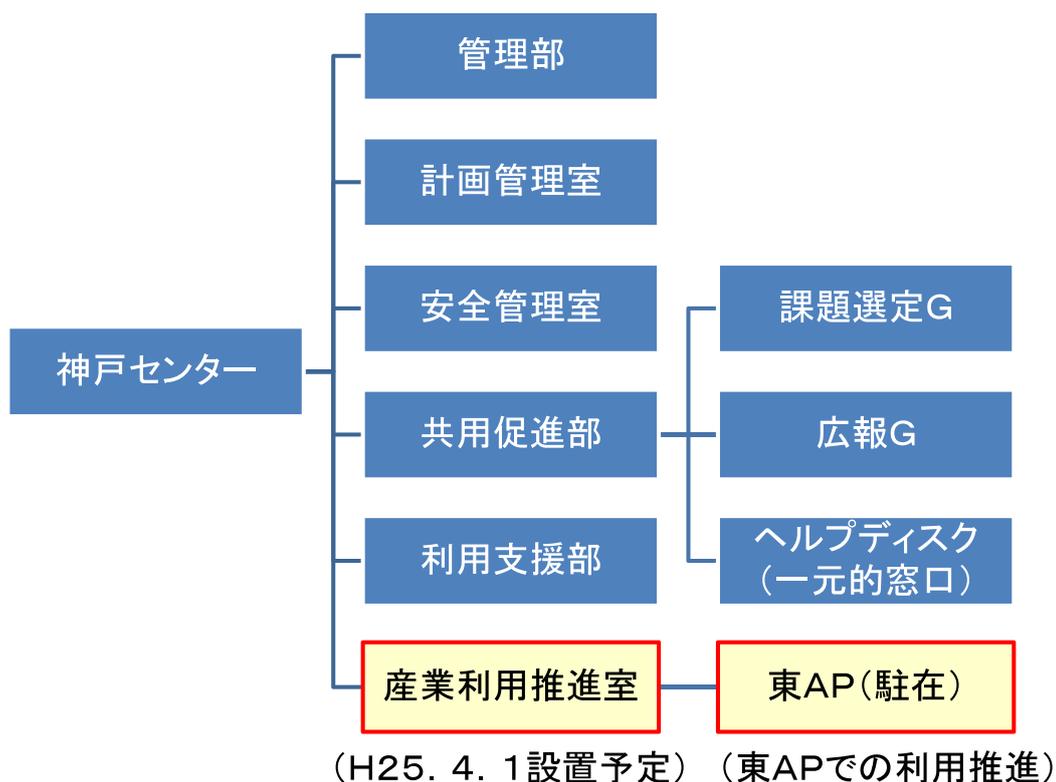
16

産業利用の平成25年度重点実施項目

1. 課題進捗率のさらなる向上・加速に向けた支援
 - ① 未利用・資源利用率が低い全課題への状況ヒアリングによる問題点把握と必要な支援のタイムリーな提供。
 - ② 必要に応じ、利用者との定期的な進捗検討会を開催。
 - ③ 企業ごとに担当をアサインし、十分な支援体制を構築
2. 「京」のソフト情報提供と利用環境の整備
 - ① ソフト情報や利用ノウハウを収集、HPCIポータルへ掲載し、迅速に更新。
対象は、OSS, ISV, AICS開発ソフト, グランドチャレンジ, 戦略プロなど
 - ② 登録機関自ら、評価の高い有用なOSSの移植や動作確認を実施支援
 - ③ ISVベンダーにソフトの移植や動作確認が可能な環境の提供および技術支援
3. 「京」産業利用に関する認知度の一層の向上
 - ① 産業利用展示会・関連学会への出展(バイオ系、材料系、CAE系)
 - ② 産業利用事例や「京」で利用可能な産業ソフトを紹介するセミナーを開催
 - ③ 登録機関の広報誌において産業利用事例を紹介
 - ④ 産業利用に関係する雑誌媒体等への広告宣伝上記をFOCUS, アクセスポイント(東・西)、理研等とも連携して実施。

17

RIST神戸センターの体制強化策(案)



利用者からの意見・要望について

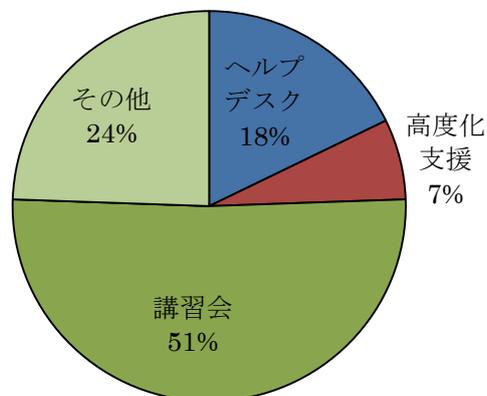
1. 利用支援関連

(1)概要

進捗状況報告書に記述された利用者からの意見・要望の内、利用支援に関するものを整理した。

<件数一覧>

要望	45 件 (32 課題)
コメント	16 件 (14 課題)
合計	61 件 (46 課題)



※要望については、「ヘルプデスク」、「高度化支援」、「講習会」に関するものと「その他」に分類した。分類毎の要望件数の割合は右のグラフを参照。

(2)主な要望事項・コメント

利用支援業務の一元的窓口機能を果たすヘルプデスクについては、その対応に感謝する声（的確、迅速、親切/親身、期待、満足等）が多く寄せられた。その例を以下に示す。

- 大変親切にアドバイス頂いております。特に最初使い方を理解するまでのサポートはありがたかったです。このような親切かつ迅速なサポートはこれまであまり体験したことが無い程でした。HPCIの趣旨が反映されていることを実感いたしました。

以下に分類毎の主な要望を示す。

特に2件以上要望があったものを抽出し、列挙した。

(ア) ヘルプデスクに関する内容 (全8件)

- ① ヘルプデスクの顔を見せてほしい (返信メールに記名。Skype等のTV会議活用) (3件)
- ② 同じ課題IDや質問IDには同じ人が対応する仕組みがほしい (2件)

(イ) 高度化支援に関する内容 (全3件)

- ① どこまでのサポートが可能なのかが不明 (3件)

(ウ) 講習会に関する内容 (全23件)

- ① 個別テーマの講習会希望（「京」特有のチューニング方法(SIMD化、Tofu等)、「京」固有アプリケーション(Phase,可視化ソフト等)、共用ストレージ、ステージング方法等) (9件)
- ② 東京(関東地区)開催希望 (6件)
- ③ 講習会の追加開催希望(スパコン活用事例、成果事例、ケーススタディ情報、動作確認プログラム、システム利用上のノウハウ等) (4件)
- ④ 講習会に不参加または不要 (2件)

(エ) その他 (全11件)

- ① 事例紹介の要望 (4件)
- ② 利用者同士やヘルプデスクとの情報交換の場(掲示板、FAQ等)設置の要望 (3件)

2. 「京」のシステム運用関連

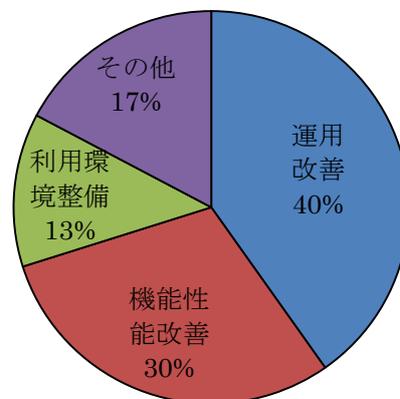
(1)概要

進捗状況報告書に記述された利用者からの意見・要望の内、「京」のシステム運用関係に関するものを整理した。

<件数一覧>

要望	87件 (62課題)
コメント	5件 (5課題)
合計	92件 (67課題)

※要望については、「運用改善」、「機能性能改善」、「利用環境整備」に関するものと「その他」に分類した。
分類毎の要望件数の割合は右のグラフを参照。



(2)主な要望事項

以下に分類毎の主な要望を示す。

特に2件以上要望があったものを抽出し、列挙した。

(ア) 運用改善に関する内容 (全 35 件)

- ジョブ実行時間の上限値 (24 時間制限) の緩和 (7 件)
- リソースグループの見直し (少数ノード・短時間ジョブの優先化、大規模ジョブの優先化等) とジョブスケジューリングの改善 (効率化、スケジューリング時間の短縮) (7 件)
- デバッグ用・テスト用ジョブキューの設置 (6 件)
- ログインノードからの `gfarm` 利用 (連携強化) (2 件)
- ステージングファイル数の上限、ステージイン・ステージアウトの時間制限の緩和 (2 件)

(イ) 機能性能改善に関する内容 (全 26 件)

- ステージングの改善 (イン/アウトの自動化、ステージング時間の見積) (5 件)
- システム提供ライブラリ (BLAS, LAPACK, FFTW, SuperLU, ParMetis 等) の高速化 (3 件)
- ジョブ開始・終了時のメール通知 (3 件)
- `k_accounj` コマンドの機能改善 (時間単位表示、消化率の計算方法改善等) (3 件)
- コンパイラの改善 (コンパイル環境整備 (gnu/intel コンパイラとの互換性を踏まえたライブラリ整備等)、コンパイラの最適化性能改善等) (3 件)

(ウ) 利用環境整備に関する内容 (全 11 件)

- マニュアルの拡充、維持改訂、品質向上 (4 件)
- 利用者向け通知の充実 (英文での通知、使用状況/運用情報の通知先追加) (3 件)
- ヘルプデスク問い合わせ内容、対応状況等の公開 (2 件)

(エ) その他 (全 15 件)

- 計算資源割当て希望 (「京」の資源割当て、計算資源追加等) (5 件)
- 障害調査依頼と障害情報の早期開示 (3 件)
- 持ち込みサーバ室の設置スペース拡張 (2 件)
- 参加者の追加削除 (アカウント発行までの時間短縮等) (2 件)

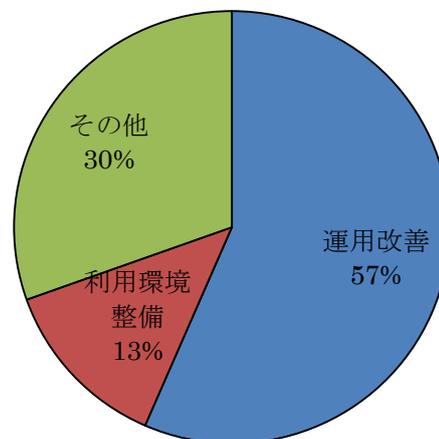
3. 「京」以外のシステム運用関連

(1)概要

進捗状況報告書に記述された利用者からの意見・要望の内、「京」以外のシステム運用に関するものを整理した。

<件数一覧>

要望	23 件 (18 課題)
コメント	3 件 (3 課題)
合計	26 件 (21 課題)



※要望については、「運用改善」、「利用環境整備」に関するものと「その他」に分類した。
分類毎の要望件数の割合は右のグラフを参照。

(2)主な要望事項

以下に分類毎の主な要望を示す。

特に 2 件以上要望があったものを抽出し、列挙した。

(ア) 運用改善に関する内容 (全 13 件)

- 認証基盤への要望 (プロキシ証明書の有効期限延長 (現状最大 7 日間)、SSHTerm の利便性改善、ログイン方式改善 (認証の層が厚い)、利用環境の安定化、HPCI 電子証明書のダウンロード機能の提供等) (7 件)
- ログインノードからの **gfarm** 利用 (連携強化、性能改善) (2 件)

(イ) 利用環境整備に関する内容 (全 3 件)

- マニュアルの拡充 (3 件)

(ウ) その他 (全 7 件)

以上

平成24年度「京」を中核とするHPCIシステム利用研究課題 中間報告会 プログラム案

- 日時：2013年3月14日(木)～15日(金)
- 場所：イノカンファレンスセンター（東京都千代田区内幸町2-1-1）
- 参加費：無料（定員200名）

調整中

		ルームA	ルームB
1 目 目 3 月 1 4 日 (木)	9:30 - 10:00	受付	
	10:00 - 10:20	開会 ～開会の挨拶・来賓挨拶～	
	10:00 - 10:05	開会の挨拶 関 昌弘（一般財団法人高度情報科学技術研究機構 理事長）	
	10:05 - 10:10	ご来賓挨拶 下間 康行（文部科学省 研究振興局 情報課長）	
	10:10 - 10:15	ご来賓挨拶 宇川 彰（一般社団法人HPCIコンソーシアム 理事長）	
	10:15 - 10:20	ご来賓挨拶 青山 伸（独立行政法人理化学研究所計算科学研究機構 副機構長）	
	10:20 - 12:00	Session 1：HPCI戦略プログラム利用枠課題（5分野） ～これまでの成果と今後の展望～	
	10:20 - 10:40	戦略分野 1	} 発表者確認中
	10:40 - 11:00	戦略分野 2	
	11:00 - 11:20	戦略分野 3	
	11:20 - 11:40	戦略分野 5	
	11:40 - 12:00	戦略分野 4	
	12:00 - 12:20	第1回「京」利用研究課題 追加募集説明会(20分)	
		＜昼食(60分)＞	
	13:20 - 14:50	Session 2：「京」を除くHPCIシステム利用研究課題 ～中間報告(6課題)～	
	13:20 - 13:35	ソフト分子集団系における物質分配・輸送機能の解析 (hp120093) 松林 伸幸（京都大学 化学研究所）	
	13:35 - 13:50	レプリカ交換法によるタンパク質の立体構造予測 (hp120258) 榮 慶文（名古屋大学・大学院理学研究科/分子科学研究所）	
	13:50 - 14:05	マウス細胞分化の大規模トランスクリプトーム解析 (hp120225) 松田 秀雄（大阪大学・大学院情報科学研究科）	
	14:05 - 14:20	HPCI共用ストレージ・JLDG連携 HPCI共有ストレージ利用(共有型) (hp120108) 吉江 友照（筑波大学・計算科学研究センター）	
	14:20 - 14:35	外部放射線治療用の水吸収線量標準および電離箱線量計の補正係数導出 (hp120020) 清水 森人（独立行政法人産業技術総合研究所計測標準研究部門）	
	14:35 - 14:50	アカデミッククラウドを活用した大規模流体関連シミュレーションのためのHPCIロジスティックスの構築と実証 (hp120042) 大島 伸行（北海道大学工学研究院）	
		＜休憩(20分)＞	
	15:10 - 16:55	Session 3：「京」一般・若手人材育成・産業利用研究課題 ～中間報告(7課題：バイオ・ライフ分野)～	
	15:10 - 15:25	大規模古典分子動力学における遠距離相互作用計算手法 (hp120068) 大野 洋介（理化学研究所 生命システム研究センター(QBiC)）	
	15:25 - 15:40	昆虫嗅覚系全脳シミュレーション (hp120263) 加沢 知毅（東京大学先端科学技術研究センター）	
	15:40 - 15:55	新薬開発を加速する「京」インシリコ創薬基盤の構築 (hp120048) 奥野 恭史（京都大学大学院 薬学研究科）	
	15:55 - 16:10	生体高分子生化学的機能解析のための分子計算技術の開発 (hp120019) 中村 春木（大阪大学蛋白質研究所・蛋白質情報解析研究室）	
	16:10 - 16:25	大規模タンパク質間ネットワーク推定に関する研究 (hp120131) 松崎 由理（東京工業大学大学院 情報理工学研究科 計算工学専攻）	
	16:25 - 16:40	最小自由エネルギー経路探索法による多剤排出トランスポーターの薬剤排出機構の解明 (hp120027) 松永 康佑（理化学研究所・計算科学研究機構）	
	16:40 - 16:55	LipA等有用酵素の産業利用を目指した反応機構の解明と改変 (hp120033) 阿部 幸浩（東洋紡株式会社）	
	＜休憩(20分)＞		
17:15 - 18:30	Session 4：「京」一般・若手人材育成・産業利用研究課題 ～中間報告(5課題：数理学・工学・ものづくり・原子力分野)～		
17:15 - 17:30	ポストベタスケールへむけたアプリケーションとアルゴリズムの統合的研究開発 (hp120115) 中村 宣文（理化学研究所 計算科学研究機構）		
17:30 - 17:45	光格子中における冷却中性原子気体の量子ダイナミクス：時間依存密度行列繰り込み群法による解析 (hp120246) 曾田 繁利（理研計算科学研究機構・量子系物質科学研究チーム）		

	17:45 - 18:00	磁気プラズマセイル宇宙機開発のための3次元プラズマ粒子シミュレーションによる推力特性の解明 (hp120084) 芦田 康将 (京都大学生存圏研究所)	
	18:00 - 18:15	高強度レーザーを使った新しい高出力ガンマ線源の提案 (hp120037) 中村 龍史 (日本原子力研究開発機構 量子ビーム応用研究部門)	
	18:15 - 18:30	核融合プラズマの乱流輸送シミュレーション (hp120011) 井戸村 泰宏 (日本原子力研究開発機構 システム計算科学センター)	
	19:00 - 20:00		懇親会 (60分)

		ルーム A	ルーム B
2 日 目 3 月 1 5 日 (金)	9:00 - 9:30	受付	
	9:30 - 10:45	Session5 : 「京」一般・若手人材育成・産業利用研究課題 ～中間報告(5課題:物質・材料・化学分野)～	
	9:30 - 9:45	超大規模固有値計算の階層型並列アルゴリズムとその高性能実装技術の開発 (hp120170) 櫻井 鉄也 (筑波大学システム情報系)	
	9:45 - 10:00	高強度THzレーザーによる超高速光スイッチ実現に向けた数値実験 (hp120065) 乙部 智仁 ((独)日本原子力研究開発機構 量子ビーム応用研究部門)	
	10:00 - 10:15	ナノ構造体における光誘起電子ダイナミクスと光・電子機能性量子デバイスの理論設計 (hp120035) 信定 克幸 (分子科学研究所 理論・計算分子科学研究領域)	
	10:15 - 10:30	第一原理計算によるLi電池SEI形成に果たす添加剤の機能解析 (hp120181) 奥野 幸洋 (富士フイルム(株) 解析技術センター)	
	10:30 - 10:45	密度行列繰り込み群法による二次元三角格子ハバード模型の解析 (hp120137) 白川 知功 (理化学研究所 計算科学研究機構 量子系物質科学研究チーム、理研基幹)	
		<休憩(20分)>	
	11:05 - 12:20	Session6 : 「京」一般・若手人材育成・産業利用研究課題 ～中間報告(5課題:物質・材料・化学分野)～	
	11:05 - 11:20	大規模第一原理電子状態計算手法の開発とシリコンおよび炭素ナノ物質への応用 (hp120245) 岩田 潤一 (東京大学大学院工学系研究科)	ポスター展示
	11:20 - 11:35	オリピンリン酸鉄におけるLiイオンの活性化エネルギー評価 (hp120191) 世木 隆 ((株)コベルコ科研)	
	11:35 - 11:50	粗視化分子動力学法を用いたゴムの大規模シミュレーション (hp120032) 坂牧 隆司 (住友ゴム工業株式会社)	
	11:50 - 12:05	第一原理電子状態計算法を用いた高温超伝導の機構解明 (hp120043) 三澤 貴宏 (東京大学工学系研究科物理工学専攻)	
	12:05 - 12:20	高性能蓄電デバイス開発に向けた理論的基盤研究 (hp120146) 大谷 実 (産業技術総合研究所・ナノシステム研究部門)	
	12:20 - 12:30	講評 (課題審査委員会・小柳委員長)	
	12:30 - 13:30	<昼食(60分)>	
13:30 - 13:40	閉会 ～閉会の挨拶～		
13:40 - 14:00	第2回「京」利用研究課題 追加募集説明会 (20分)		

		ルーム A	ルーム B (B3)
	14:10 - 15:30		「京」の運用・利用に関する意見交換会 (コーディネータ: 筑波大・佐藤三久先生)

第1回社員総会後のHPCIコンソーシアムの主な活動

- 文部科学省への提言
 - 1. 平成24年6月15日 「平成25年度HPCIシステムの整備と運用の方針について」
 - ※ 現状のシステム構成、運用方針を基本とし、運用上必要な改善にも対応できるようにすること等を提言。

- HPCI運営企画・調整業務への協力(理事、会員が委員として参加)
 - 1. 将来のスーパーコンピューティングの在り方に関する調査検討ワーキンググループ
 - 第1回:平成24年8月28日
 - 第2回:平成24年10月15日
 - 第3回:平成24年11月20日
 - 第4回:平成25年1月17日
 - 2. 将来のスーパーコンピューティングの体制の在り方に関する調査検討ワーキンググループ
 - 第1回:平成24年10月26日
 - 第2回:平成24年11月28日
 - 第3回:平成25年1月15日
 - 3. 1. 2. の合同ワーキンググループ
平成25年2月4日
 - 4. 1. 2. のワーキンググループとHPCIコンソーシアムの意見交換会
平成25年2月7日

- HPCI技術企画・調整業務への協力(理事、会員が協力)
 - 1. 平成25年1月9日 HPCIへ資源提供(共通運用)を行う場合の技術基準について決定

- 共催・後援・協賛・推薦事業
 - 1. 【共催】平成24年6月24日 「京コンピュータ・シンポジウム 2012」(主催:独立行政法人理化学研究所、ほか)
 - 2. 【推薦】平成25年1月28日 「スーパーコンピュータ『京』の開発、ならびに共用」(第42回日本産業技術大賞:日刊工業新聞社)

3. 【協賛】平成25年2月2日 「第8回戦略的高性能計算システム開発に関するワークショップ」(主催:東北大学サイバーサイエンスセンター、ほか)
4. 【共催】平成25年2月7日 「将来のスーパーコンピューティングのあり方に関する意見交換会」(共催:独立行政法人理化学研究所計算科学研究機構)
5. 【共催】平成25年3月12～13日 「第17回 Workshop on Sustained Simulation Performance」(主催:東北大学サイバーサイエンスセンター、ほか)
6. 【協賛】平成25年3月14～15日 「平成24年度『京』を中核とするHPCIシステム利用研究課題中間報告会」(主催:一般財団法人高度情報科学技術研究機構)
7. 【協賛】平成25年3月18～19日 「第1回戦略的高性能計算システム開発に関する国際ワークショップ」(主催:東北大学サイバーサイエンスセンター、ほか)

○ 理事会

- 第6回(6月15日) 於:独立行政法人理化学研究所 計算科学研究機構
- ・ 第1回社員総会で決議された事業計画に基づく「平成25年度HPCIシステムの整備と運用の方針について」の提言内容の決定、ほか
- 第7回(7月23日) 於:独立行政法人理化学研究所 東京連絡事務所
- ・ 会費の徴収及び予算執行に係る規則の制定、ほか
- 第8回(10月29日) 於:独立行政法人理化学研究所 東京連絡事務所
- ・ 会員拡充策に関する検討、ほか
- 第9回(1月21日) 於:独立行政法人理化学研究所 東京連絡事務所
- ・ 各理事からの第3四半期の事業報告、ほか
- 第10回(2月13日) 於:独立行政法人理化学研究所 東京連絡事務所
- ・ 「将来のスーパーコンピューティングのあり方についての提言ー中間報告案ー」の理事会案の決定

以上

会員の交替手続きについて

3月となり、各加盟機関におかれましては、所長等交替があると思われます。申込者を変更される場合は以下の交替に関する届け出書類の提出をお願いします。定款上は記載事項変更後4週間以内に届け出ることとなっています。5月初めの第11回理事会で交替の承認の手続きを行いますので、お早めに提出ください。

正会員用とアソシエイト会員用がございます。また、書式は当法人のホームページにも掲載しておりますので、ご利用ください。

<http://www.hpci-c.jp/admission/applicationform.html>

一般社団法人HPCIコンソーシアム正会員申込者変更用紙

一般社団法人HPCIコンソーシアム
理 事 長 殿

機関名

氏 名

印(私印)

このたび、入会申込書に記載した事項について変更を生じましたので、定款第7条第2項の規定により届け出ます。

記

申込者氏名（変更前）： _____

申込者氏名（変更後）： _____

申込者が代表している機関名： _____

機関の種別： ユーザーコミュニティ代表機関 HPCI システム構成機関

以 上

※本書式には、ユーザーコミュニティ代表機関または HPCI システム構成機関が発信した、申込者（変更後）が当法人に対する当該機関代表として選任された者であることを公的に示す書類（様式任意）を添付してください。

一般社団法人H P C I コンソーシアムアソシエイト会員申込者変更用紙

一般社団法人H P C I コンソーシアム
理 事 長 殿

機関名

氏 名

印(私印)

このたび、入会申込書に記載した事項について変更を生じましたので、定款第7条第2項の規定により届け出ます。

記

申込者氏名 (変更前) : _____

申込者氏名 (変更後) : _____

申込者が代表している機関名 : _____

以 上