

計算科学研究部会(平成25年12月5日)

HPCIコンソーシアム 報告

堀内利得
核融合科学研究所

一般社団法人HPCIコンソーシアム関連の動き(1)

- 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
- 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
- 平成25年3月4日: HPCI臨時総会 → 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)についての議論
(「京」は設置から6年 → ポスト「京」の準備: H26年度の概算要求)

一般社団法人HPCIコンソーシアム関連の動き(2)

- 平成25年5月27日 **第2回一般社団法人HPCIコンソーシアム社員総会** → 将来のスーパーコンピューティングへ向けた活動方針
- 平成25年6月10日 **次期システムに係わる拠点候補**の計画案の確認に関する意見交換会 → 理化学研究所からのプレゼン
- 平成25年6月17日 **HPCI臨時総会**
- 平成**26年度**(4月1日開始予定)の**研究課題の募集**開始:平成25年9月2日(詳細: https://www.hpci-office.jp/pages/h26_boshu)

課題募集説明会:9月6日(神戸)、9月13日(東京)、9月20日(東京)、9月26日(神戸)

課題募集開始	:	平成25年9月2日(月)
受付開始	:	平成25年10月1日(火)
電子申請受付終了	:	平成25年10月31日(木)17時(JST)
押印済申請書の郵送期限	:	平成25年11月7日(木)必着
課題選定結果通知	:	平成26年2月初旬

一般社団法人HPCIコンソーシアム第2回総会次第

日時:平成 25 年 5 月 27 日(月) 17 時 00 分～19 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】

議案第 1 号 平成 24 年度事業報告

議案第 2 号 平成 24 年度会計報告および監査報告

議案第 3 号 平成 25 年度事業計画

議案第 4 号 平成 25 年度予算

議案第 5 号 理事の交代

【3. 報告事項】

報告第1号 会員状況

報告第2号 将来のスーパーコンピューティングのあり方の検討状況について

報告第3号 HPCI コンソーシアムワーキンググループの設置について

報告第4号 役員選出方法について

報告第5号 HPCI課題利用の状況と平成25年度の予定

報告第6号 今後のスケジュールについて

【4. 閉会宣言】

1. 法人全般に関わる事項

1.1. 役員

役名	氏名	就任年月日	理事別	職
設立時代表理事	宇川 彰	2012. 02. 03	理事長	国立大学法人筑波大学副学長・理事
設立時理事	藤井 孝藏	2012. 02. 03	副理事長	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・教授
〃	石川 裕	2012. 02. 03	理事	国立大学法人東京大学情報基盤センター長
設立時監事	小林 広明	2012. 02. 03	監事	国立大学法人東北大学サイバーサイエンスセンター長

役名	氏名	就任年月日	理事別	職（代表する機関）
代表理事	宇川 彰	2012. 06. 06	理事長	国立大学法人筑波大学副学長・理事 (筑波大学計算科学研究センター)
理事	藤井 孝藏	2012. 06. 06	副理事長	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・教授 (一般社団法人日本流体力学会)
〃	石川 裕	2012. 06. 06	理事	国立大学法人東京大学情報基盤センター長 (東京大学情報基盤センター)
〃	加藤 千幸	2012. 06. 06	〃	国立大学法人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	2012. 06. 06	〃	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	2012. 06. 06	〃	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	2012. 06. 06	〃	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	2012. 06. 06	〃	国立大学法人京都大学学術情報メディアセンター教授 (京都大学学術情報メディアセンター)
〃	米澤 明憲	2012. 06. 06	〃	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	2012. 06. 06	〃	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	2012. 06. 06	監事	国立大学法人東北大学サイバーサイエンスセンター長 (東北大学サイバーサイエンスセンター)

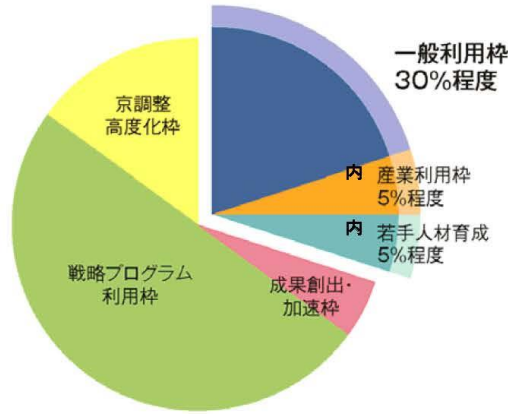
1.5. 会員数

年月日	正会員		アソシエイト 会員	合計
	ユーザコミュ ニティ機関	システム構成 機関		
2012. 04. 02	12	19	4	35
2012. 06. 06	11	21	5	37
2013. 03. 31	15	22	13	50

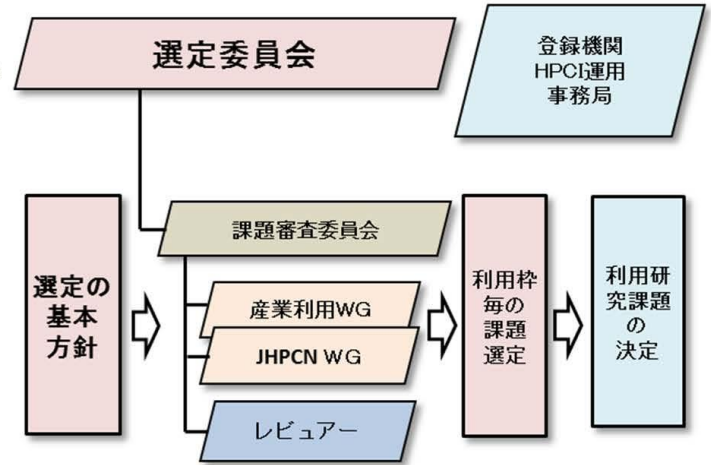
1. 「京」における利用枠の配分、利用者選定と選定結果

- ・平成24年4月11日、第1回選定委員会を開催し、利用者選定等の枠組みを決定。
- ・平成24年7月3日、第1回課題審査委員会を開催し、審査基準等を決定。
- ・平成24年9月3日「京」及びHPCIの利用者選定結果を公表。
- ・平成24年9月28日「京」及びHPCIの共用開始。
- ・「京」の利用者1,091名及びHPCIの利用者928名のアカウントを発行。

① 計算資源量の配分枠



② 透明、公正な課題選定のプロセス



③ 申請件数と選定件数

・「京」以外の資源のみを利用する課題と「京」と「京」以外の両方を利用する課題の合計。HPCI利用研究課題の申請総数としては、261件。

* これに加え、「京」準備のための課題20件を選定。

** 平成25年3月8日時点

申請件数

京 一般利用	138
京 若手人材育成利用	58
京 産業利用 (トライアルユース)	4
京 産業利用 (実証利用)	22
京 産業利用 (個別利用非公開)	5
合計	227

HPCI資源(京以外)	67
-------------	----

JHPCN **	51
----------	----

選定件数・選定率

(平成24年9月3日)

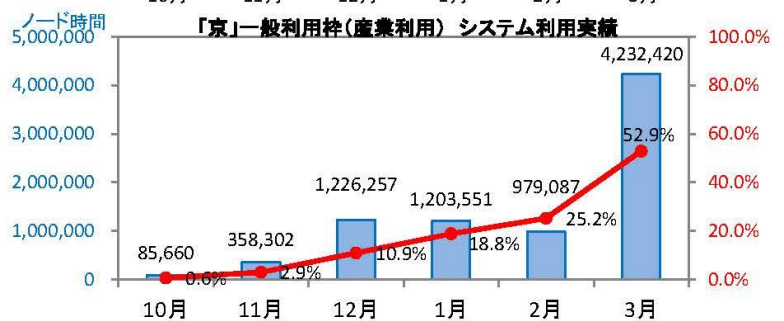
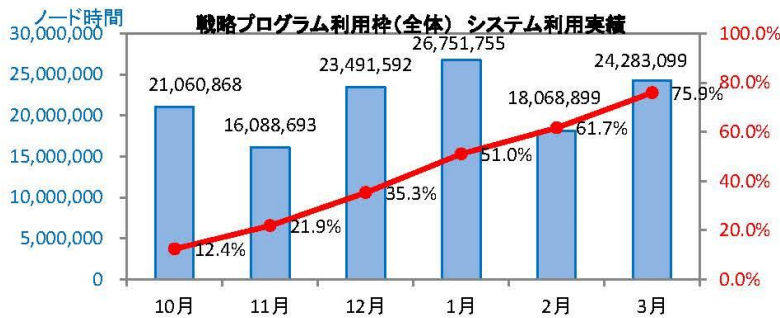
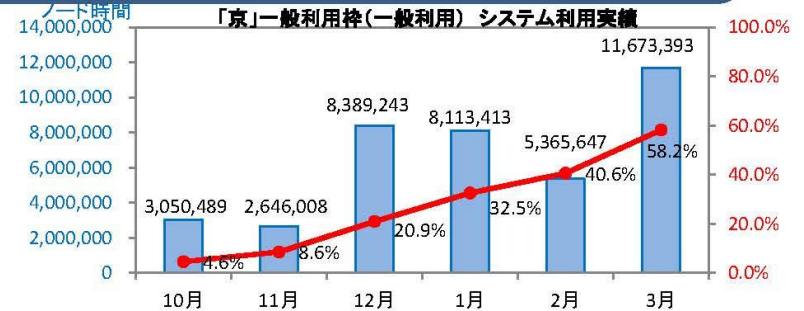
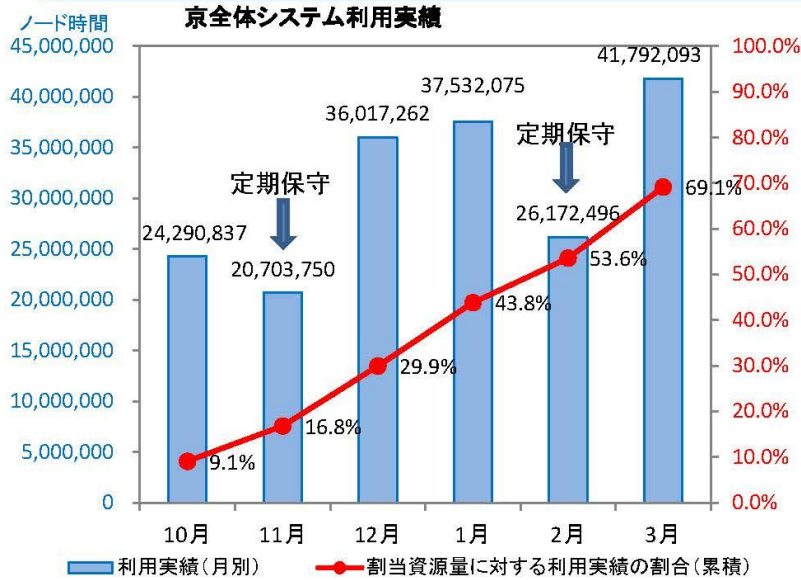
京 一般利用 (*)	29	21%
京 若手人材育成利用	8	14%
京 産業利用 (トライアルユース)	3	75%
京 産業利用 (実証利用)	17	77%
京 産業利用 (個別利用非公開)	5	100%
合計	62	27%

HPCI資源(京以外)	57	85%
-------------	----	-----

JHPCN**	31	61%
---------	----	-----

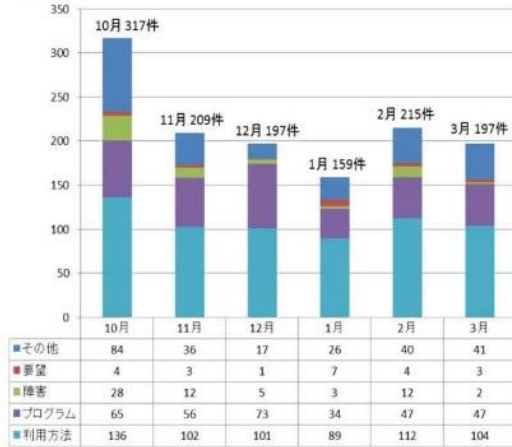
3. 「京」の利用実績

- ・全利用課題に割り当てられた資源の消化率は約70%と、「京」の規模では高い値を達成
- ・戦略プログラムの資源消化率は約80%
- ・一般利用枠の資源消化率は約50~60%、第4四半期には「京」の利用が本格化



5. 利用支援状況について

① ヘルプデスクの相談件数



- ① 9割強が「京」に関する相談
- ② 相談件数は10月が約300件、以降は約200件程度と横ばい傾向
- ③ 利用者からは的確、迅速、親切、満足等のコメント

② 「京」トライアル・ユース課題の状況 (件数が着実に増加)

No.	課題実施企業	利用結果等
1	三ツ星ベルト製	成果を得て1回目の利用終了。
2	東京ボム工業製	約8.5万並列までの大規模計算を実行し、1800並列まででは並列に計算速度が向上することを確認。
3	茨城日立物産サービス製	高度化課題1～12000並列を試し、良質な性能を確認。課題に適用した最適シミュレーションソフトの製品化を検討。
4	神中電機工学研究所製	1回目の利用で計算上の課題と対応方針を明確化でき、2回目に応募。
5	三ツ星ベルト製	ボムの解析のための技術検証という目的を達成して2回目の利用終了。
6	徳本興産研究所	3月より利用開始
7	昭和電工製	3月より利用開始
8	神中電機工学研究所製	4月より2回目の利用を開始。
9	住友ベークライト製	対面確認中。
10	創地工学研究所製	対面確認済み。アカウント発行待ち。
11	日本ゼオン製	対面確認中。
12	朝フオーブムエイト	対面確認中。
13	川崎重工製	対面確認中。
14	応用地質製	対面確認中。

平成25年5月7日 時点 ※No.1～5は終了した課題

③ 調整・高度化支援の状況 (抜粋)

高度化支援課題数14課題(内、一般利用5、産業利用2、戦略7) 調整支援課題数42課題(内、一般利用19、産業利用8、戦略15)

No.	利用枠	高度化支援の状況
1	戦略プログラム・分野2	(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)実行時間の異なる複数ケースの実行を 効率的に実行する方法を提案 。また、実行時間が変動する原因がI/Oにあることを特定し、その処理を回避することで実行時間の変動を安定化させ、高速化させた。
2	戦略プログラム・分野4	(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)行列解法部分を、OpenMPスレッド並列化でスケジューリングの最適化およびセクターキャッシュを適用し高速化した。次に前処理部分をマルチカラー化で並列化可能となったループに同様の最適化を行い、支援を終了。
3	戦略プログラム・分野3	(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ない。 (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 。
4	戦略プログラム・分野2	(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 性能分析を実施 。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 改善案を提案 し、支援を終了。

7. 募集中のHPCI利用研究課題

募集の種類	資源種別	新規・継続	資源量	実施時期	課題区分
追加募集	「京」	新規課題	1000万 ノード時間	H25下期	一般・若手・ 産業利用
	「京」以外の HPCI	新規課題	資源提供 機関による	H25下期	一般・ 産業利用
トライアル・ ユース	「京」	新規課題	5万ノード 時間/課題	随時 (6カ月)	産業利用
	「京」以外の HPCI	新規課題	資源提供 機関による	随時	産業利用

- 追加募集の募集期間：平成25年3月14日～平成25年5月28日
- 追加募集の利用期間：平成25年10月1日～平成26年3月31日

HPCI コンソーシアムにおけるワーキンググループの設置について

HPCIコンソーシアム理事長 宇川彰
HPCIコンソーシアム副理事長 藤井孝蔵

1. 経緯

本総会の報告第2号の資料にある通り、AICS 設置の「将来のスーパーコンピューティングに関する調査検討WG」からの報告を踏まえ、コンソーシアムとして「頂点に立つシステムを担う拠点候補が示す計画案」を確認することが必要となる。

2. 趣旨・目的

一般社団法人 HPCI コンソーシアムは、平成25年3月4日付で文部科学省に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)を行った。その提言の中で、頂点に立つシステムを担う拠点について、「国が戦略に基づいて決定し、(中略)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」と明言したところである。

HPCI コンソーシアムは、想定される拠点機能が示すハードウェア、ソフトウェア技術に関する将来計画、システム構成拠点機能に関する計画案を確認するため、定款第25条2項5号に基づき、HPCI コンソーシアム内に「頂点に立つシステム拠点候補の適格性確認 WG(通称:システム拠点候補確認委員会)」を立ち上げたい。

- ※次期システムの構成や拠点機能の内容確認においては、NDA 情報は求めない
- ※拠点候補が現段階で想定している範囲での議論であること

3. HPCI コンソーシアム WG

➤ 構成メンバー

- ✓ 藤井孝蔵 (独立行政法人宇宙航空開発機構宇宙科学研究所)
- ✓ 青柳睦 (九州大学情報基盤研究開発センター)
- ✓ 沢田龍作 (トヨタ自動車(株)エンジンプロジェクト推進部)
- ✓ 関口智嗣 (独立行政法人産業技術総合研究所)
- ✓ 常行真司 (東京大学大学院理学系研究科)
- ✓ 中島浩 (京都大学学術情報メディアセンター)

4. 進め方

➤ スケジュール

- ✓ HPCIコンソーシアム理事会にて審議(5月9日(木))(承認済み)
- ✓ HPCIコンソーシアム内に「頂点に立つシステム拠点候補の適格性確認 WG(通称:システム拠点候補確認委員会)」を立ち上げ

- ✓ HPCI コンソーシアム総会にて報告(5月27日(月))(本日)
- ✓ 拠点候補と HPCI コンソ WG, HPCI コンソ会員で内容確認のための意見交換会(6月10日(月))
- ✓ HPCI コンソーシアム理事会に中間報告として報告(6月14日(金))
- ✓ HPCI コンソーシアム総会で中間報告として確定(6月17日(月))
- ✓ HPCI コンソーシアムから文科省へ中間報告の提言(6月18日(火)頃)

➤ 内容確認のための意見交換会の日時、場所

- ✓ 日時:6月10日(月)16時~18時
- ✓ 場所:東京大学 生産技術研究所 D 棟 6 階 Dw601 会議室

➤ 内容確認のための意見交換会の当日の確認方法

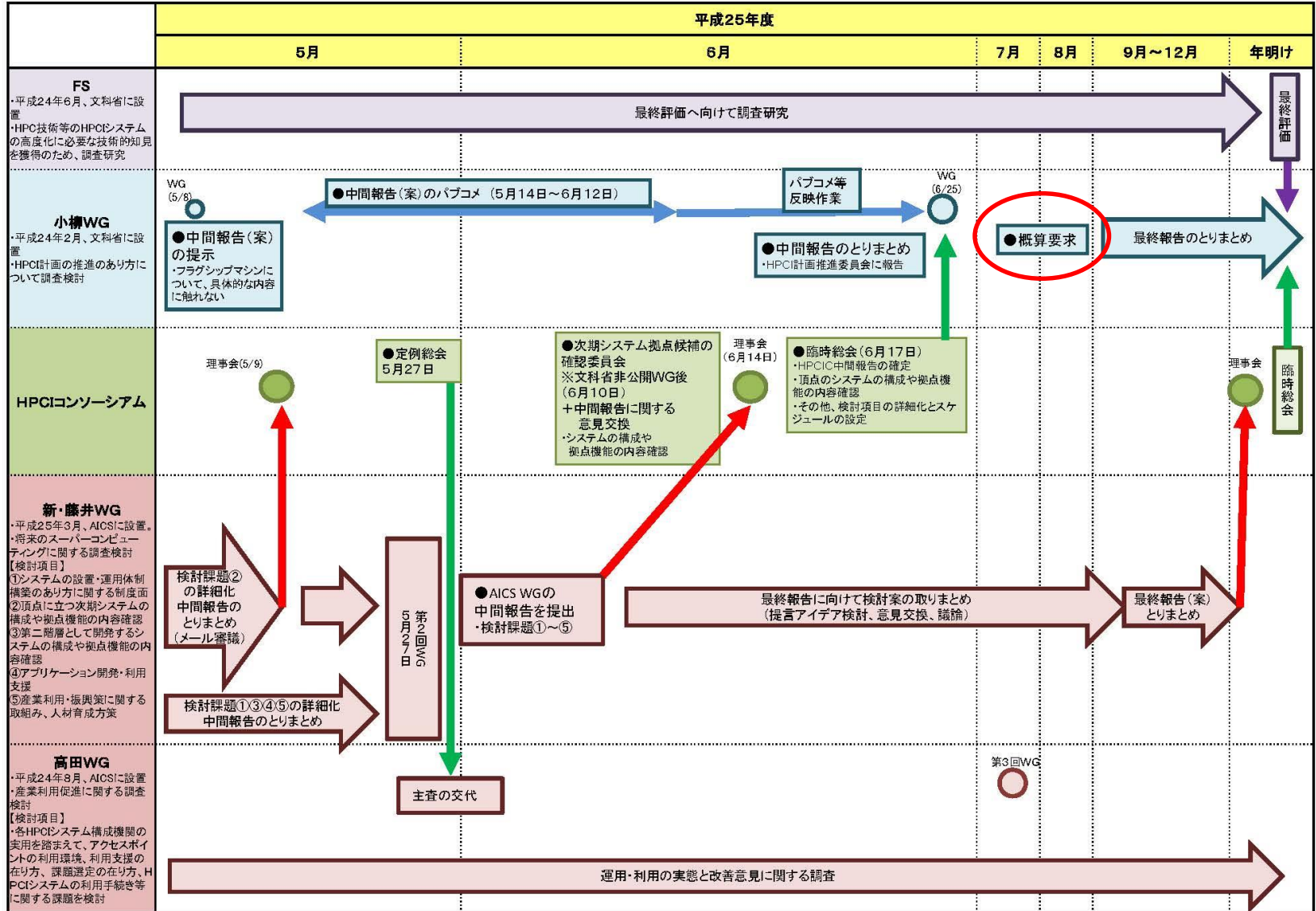
- ✓ 拠点候補からのプレゼンテーション
- ✓ 拠点候補の内容確認に関するコンソーシアム会員との意見交換
- ✓ 確認委員は、確認した内容についてのコメント、及び総合的な評価結果として「適当・不適当」の判断を評価シートに記入

5. 意見交換会のポイントとなる項目

- 現段階で想定しているポスト「京」の開発の意義と必要性
 - ✓ ポスト「京」で解決していこうと考えている科学的・社会的課題
 - ✓ ポスト「京」ならば実現できると考えている課題(「京」では実現できない課題)
 - ✓ ポスト「京」によって飛躍的に発展すると考えている分野の例
 - ✓ その他
- 現段階で想定しているポスト「京」の開発項目と開発・設置・運用体制
 - ✓ ポスト「京」として想定しているシステム構成案のイメージと選択理由
 - ✓ ポスト「京」として想定しているシステムのおおまかな性能
 - ✓ CPU の設計・製造を含め我が国として重点を置いたほうがよいと考えている技術
 - ✓ ハードウェア、ソフトウェアを含めたポスト「京」のおおまかな開発スケジュール
 - ✓ 現在のリーディングマシンである「京」の開発結果(「京」の事後評価結果)とそれを踏まえて考えている改善策
 - ✓ 現在のリーディングマシンである「京」の人員体制を踏まえて、ポスト「京」で想定している運用、保守、維持の人員体制
 - ✓ その他
- 現段階で想定しているポスト「京」を活用するための拠点としての体制

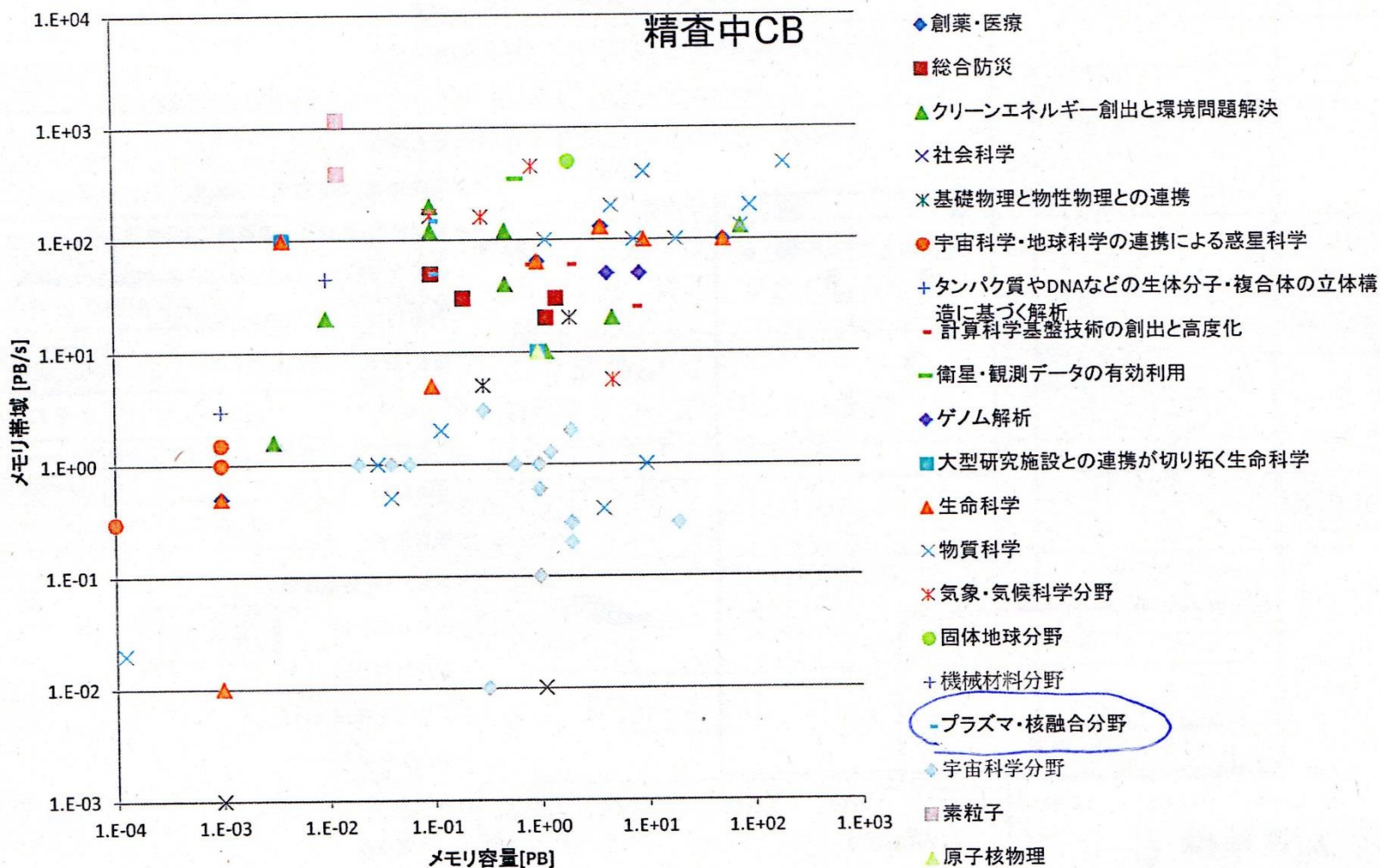
今後のHPCI計画に関する調査検討スケジュール（案）

平成25年5月17日



ポスト「京」に関する意見交換会より(その1)

メモリ容量とメモリ帯域の関係



ポスト「京」に関する意見交換会より(その2)

基本コンセプト・開発方針

2020年頃までに、電力・設置面積・予算等を勘案しつつ、エクサフロップス級の全体演算性能を目指し、幅広い計算科学プログラムをサポートできるシステムを開発し、計算科学による成果を達成する。また京アプリの移植性も重視する。

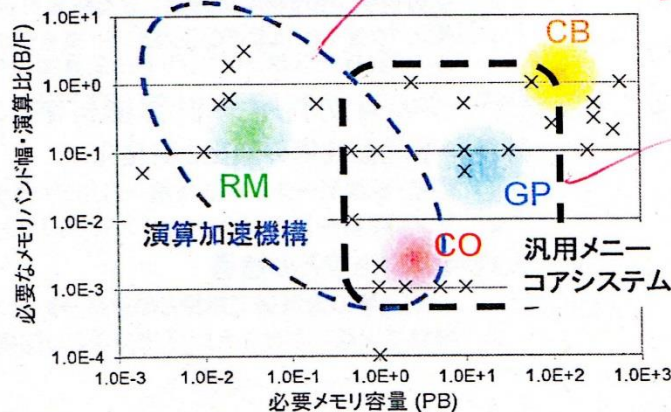
- 電力 約30MW、設置面積(京と同等)
- アプリFSIによるアプリ分類とそのカバー範囲を考慮し、全体メモリバンド幅を重視した汎用メニーコアプロセッサと、電力演算性能が優れた演算加速機構を組み合わせた大規模並列システム。
 - 汎用メニーコアプロセッサにより、幅広いアプリをカバー、GP:汎用プロセッサ型、およびCB:メモリ容量・バンド幅重視型の一部に対応
 - 演算加速機構により、大幅に電力効率を向上し、RM:メモリ容量削減型、およびCO:演算重視型に対応

移植: 京と同等

開発方針

- アプリケーションとアーキテクチャのco-designに基づく汎用メニーコアおよび演算加速機構部の開発
 - 汎用部: 企業が現有するアーキテクチャからの発展
 - 演算加速機構部: 理研計算科学研究機構が企業と共に新規開発
- 高信頼で、運用性の高いシステムを目指す。
- All Japan & International Collaboration
- コモディティクラスタからのシームレスな利用環境

アプリの分類とサポートするアーキテクチャ



500 ~ 30
CO
200 ~ 30

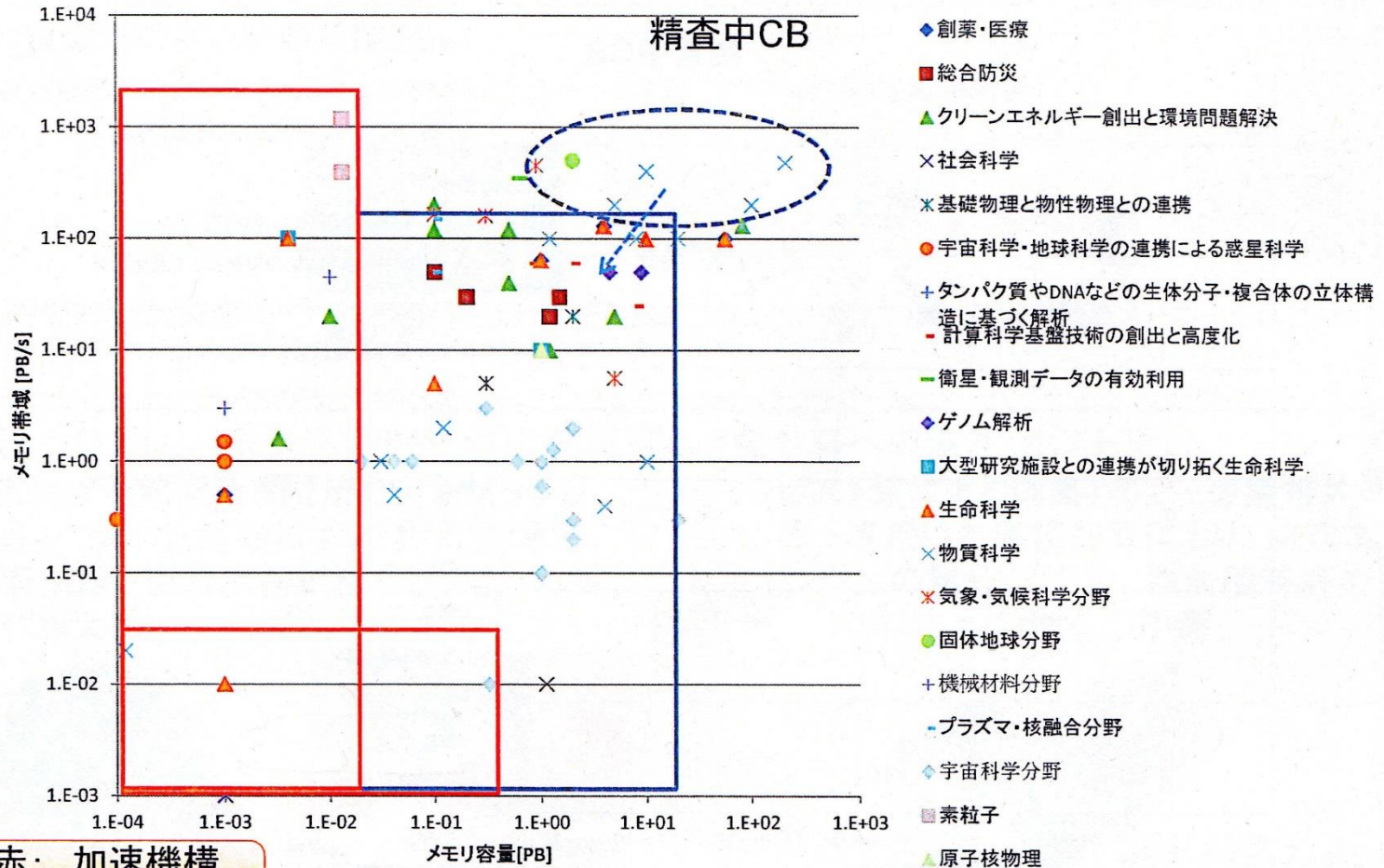
200 ~ 5
(5 ~ 10
GO -

memory

電力

ポスト「京」に関する意見交換会より(その3)

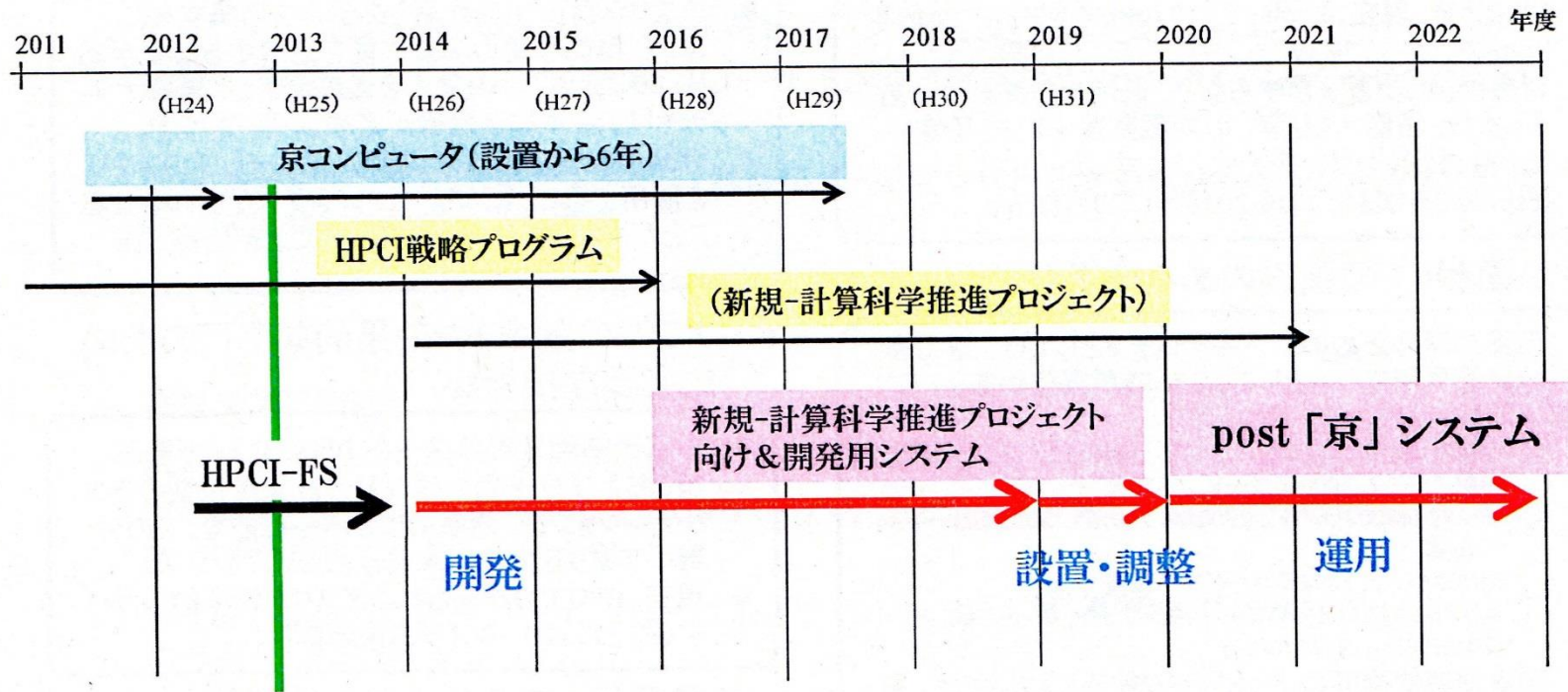
メモリ容量とメモリ帯域の関係



赤： 加速機構
青： 汎用機

ポスト「京」に関する意見交換会より(その4)

想定されるポスト「京」システム工程表



- 2014年 1月 開発本部準備室設置
- 2014年 4月 開発本部立ち上げ

ポスト「京」に関する意見交換会より(その5)

今後のHPCが貢献しうる社会的課題



分野連携による新しい科学の創出



生命科学・物質科学・地球科学・ものづくり・基礎物理学・社会科学におけるサイエンスの更なる深化

上記を効率よく実現する、計算科学基盤技術の創出と高度化
(大規模並列計算技術・データ同化技術・可視化技術)

ポスト「京」に関する意見交換会より(その5)

2.3 クリーンエネルギー創出と環境問題解決

1. 課題概要

社会的貢献 – エネルギー技術と環境との調和を目指して

社会的課題	計算科学からの貢献
再生可能エネルギーの創出技術の確立 (太陽光発電や風力発電、バイオマス利用)	量子力学に基づく複合材料の理解、微視的な物理機構の解明と、太陽電池・人工光合成・新エネルギーのための新物質設計
安定的かつ効率的な太陽光発電・風力発電のための立地の選定	高精度・高分解能な気象モデル計算による環境アセスメント・局地気候予測
核融合エネルギー開発にむけた基礎的研究開発	第一原理乱流計算による核燃焼プラズマ乱流現象の解明と次世代核融合実験炉の性能予測
二次電池や燃料電池など電力を効率的に貯蔵し取り出す技術の開発	大規模電子状態計算における電気化学過程の解明、触媒や電極のための希少元素の代替物探索
ポストシリコンデバイスや光・電子デバイスなどの次世代量子デバイスの開発	高精度第1原理計算による新たな設計方法の提供
ものづくりにおける革新的高性能製品(省エネルギー製品)	高信頼性シミュレーションによるモノづくりのための物理現象解明と理解、試行錯誤にもとづくアプローチから計算科学による設計最適化
地球環境を監視するための現状モニタリングシステム	高信頼性の気候システムモデルによる現況把握と近未来将来予測

2. 従来からの質的变化

従来	将来
<ul style="list-style-type: none">理論・実験中心での研究各分野で閉じたサイエンス: 物質科学・ものづくり分野、気象・気候分野が独立して研究	<ul style="list-style-type: none">マルチスケールマルチフィジックスシミュレーションによる革新的材料設計モノづくり設計(シミュレーションでしかわからない機構解明、コストダウンなど)分野間で計算科学シミュレーション技術を共有。多くの分野に共通する手法の共有や他分野における数理モデルに学びながらシミュレーション技術・データ同化技術の向上が図られる。この実践を通してエネルギーをつくり、変換し、使うという一連のサイクルを一つの大きな科学として総合的にとらえ、環境モニタリングの確立によりエネルギー使用と環境との調和を実現する。