

令和 4 年度

「次世代計算基盤に係る調査研究」

(運用技術調査研究)

委託業務成果報告書

令和 5 年 5 月

国立大学法人 東京大学

本報告書は、文部科学省の科学技術試験研究委託事業による委託業務として、東京大学が実施した令和4年度「次世代計算基盤に係る調査研究」（運用技術調査研究）の成果を取りまとめたものです。

目次

I.	委託業務の目的	4
II.	令和4年度の実施内容	4
1.	実施計画	4
2.	実施内容	7
2.1	プロジェクトの総合的推進	7
2.2	施設・設備	7
2.2.1	データセンター設備事例調査	7
2.2.2	省電力運用実験基盤の整備	8
(a)	東京大学における整備状況	8
(b)	東京工業大学・理化学研究所 R-CCS における導入状況	9
2.3	カーボンニュートラル	9
2.3.1	グリーンデータセンターの事例	11
2.3.2	排熱再利用の事例	12
2.3.3	ホワイトペーパー	13
2.3.4	カーボンニュートラルの実現に向けて	14
2.4	資源管理	15
2.4.1	情報共有、運用制御技術に関する現状把握	16

2.4.2	利用者に対する統一 I/F 調査、一部動作検証.....	18
2.4.3	スパコンとクラウドの連携についての現状調査.....	19
2.4.4	セキュリティ課題抽出	20
参考文献.....		20
2.5	データ利活用	22
2.5.1	スパコンのストレージと外部接続ネットワークの調査	22
2.5.2	HPC アプリケーションが必要としているデータ入出力性能の調査	23
2.5.3	ワークフローツールなどの調査	23
2.5.4	データ利活用の障害となる問題の洗い出し、改善策検討.....	23
2.6	Society5.0 運用	24
2.6.1	mdx 利用調査.....	24
2.6.2	他機関との連携運用の調査	25
2.6.3	ドメインに特化したシステムとの連携	25
2.7	HPCI 運営	26
2.7.1	ユーザの利便性向上	27
2.7.2	センター間連携に向けた調査.....	28
2.7.3	HPCI システムの機能拡充に向けて	29
III.	次年度以降の計画	33
1.	プロジェクトの総合的推進.....	33
2.	施設・設備.....	33

3.	カーボンニュートラル.....	33
4.	資源管理.....	34
5.	データ利活用.....	34
6.	Society5.0 運用.....	34
7.	HPCI 運営.....	35

I. 委託業務の目的

ポスト「富岳」時代の次世代計算基盤実現を目指し、国内主要スパコン、データ基盤、ネットワークが一体となって、デジタルツイン技術の進化を支え、Society 5.0の推進、SDGsの達成に貢献するプラットフォームを実現するにあたり、次期システム群の設計・運用、それに伴う施設整備・管理、ソフトウェア管理、利用者サービス、ネットワーク整備、セキュリティ対応など、運用技術の観点から調査研究を実施することを目的とする。

このため、国立大学法人東京大学を代表機関として、参画機関である国立研究開発法人理化学研究所、大学共同利用機関法人情報・システム研究機構国立情報学研究所、国立大学法人東京工業大学と密接に連携し、再委託により研究開発を実施する。

II. 2022 年度の実施内容

1. 実施計画

2022 年度には以下の項目について実施する。

1. Society5.0 運用

解決したい課題について、必要な処理と適切なプラットフォームについて整理し、その開発手法や、複雑な処理内容をスマートに実現するワークフローなど、機能要件、実現手法を検討する。

2. 資源管理

次期フラッグシップシステム（FS）、国内主要スパコン、リアルタイムデータおよび蓄積データ基盤、これらを接続する学術情報ネットワーク SINET、さらにクラウドとも連携し、一体運用する基盤の構築・運用の技術的要件を調査・検討することを目的とする。特に、利用効率、高可用性や耐故障性、電力需給バランス調整によるスパ

コン・クラウド間連携によるカーボンニュートラル化への貢献、セキュリティリスクを重視する。

3. 施設・設備

次世代計算基盤の運用を行う上で考慮すべき、省電力運用、冷却設備等、次世代の運用技術について調査検討する。高温温水冷却を中心とした冷却設備の利害得失・運用例を調査するとともに、過去・既存システムの運用履歴や、既存システムまたは今後新規設置されるシステムにおけるリアルタイムな消費電力のモニタリング等により、省電力運用に向けた分析を行う。

4. カーボンニュートラル

カーボンニュートラルグループは、HPC およびデータセンターのカーボンニュートラルの実現に向けた調査研究を実施する。

日本の CO₂ 排出削減目標としては、「2050 年カーボンニュートラル、脱炭素社会の実現を目指す」としており、2030 年時点では、「温室効果ガスを 2013 年度から 46% 削減することを目指し、さらに、50%の高みに向けて挑戦を続けていく。」とあり、カーボンニュートラルの実現が必須となっているわけではないが、諸外国の先端事例ではすでにカーボンニュートラルを実現していることや、次世代 HPC データセンターとしては先導して脱炭素技術を積極的に活用していく観点からカーボンニュートラルの実現に向けた検討が求められる。

本調査検討の目的は、次世代計算基盤においてカーボンニュートラルを実現するための指針を定めることであり、以下の 2 点を幅広く調査する。

- 国内外での再生可能エネルギー活用、低炭素排出発電技術、蓄電技術・熱再利用技術等の利用動向を調査、日本の国土における適用可能性
- 施設・設備調査検討グループの省電力技術と組み合わせを念頭に、カーボンニュートラル・カーボンネガティブに向けた要素技術の体系化

5. データ利活用

NII が運用する研究データ基盤をハブとして活用しながら、各種のストレージや計算基盤を連携させるための調査検討を実施する。大規模データを移動することなく、

適切なセキュリティを維持しながら、データ保全やデータ連携、アーカイブも含めて効率的に行う仕組みについて検討する。

6. HPCI 運営

計算資源を提供している各センターにおける運用ポリシー、サービスレベルの考え方、利用負担金の考え方について調査を行う。共通にインストールされたアプリケーションについて調査を行う。

7. プロジェクトの総合的推進

プロジェクト全体の連携を密としつつ円滑に運営していくため、本調査研究全体の運営委員会や技術検討会に参加し、参画各機関との連携・調整にあたる。

特に、プロジェクト全体の進捗状況を確認しつつ計画の合理化を検討し、必要に応じて調査或いは外部有識者を招聘して意見を聞くなど、プロジェクトの推進に資する。

プロジェクトで得られた成果については、積極的に公表し、今後の展開に資する。

2. 実施内容

2.1 プロジェクトの総合的推進

プロジェクト全体の連携を密としつつ円滑に運営していくため、本調査研究全体の運営委員会や技術検討会に参加し、参画各機関との連携・調整にあたった。

提案の際には、前述の通り 6 つのワーキンググループにおいて個々の調査研究を実施するとしていたが、プロジェクト全体の進捗状況を確認しつつ計画の合理化を検討した結果、ワーキンググループの体制は残しつつ、以下の 3 つのグループで議論を進めた。

1. 施設・設備、カーボンニュートラルなどのインフラに関する議論
2. 資源管理、Society5.0 運用、データ利活用などのシステム設計・システムソフトウェアの開発に関する議論
3. HPCI 等の運用ポリシー、センター間連携、ユーザの利便性向上などの運用やユーザ視点での改善に向けた議論

プロジェクト全体での打ち合わせは月に 1 度、ワーキンググループのリーダーを中心とした幅広いメンバーで実施し、令和 4 年 9 月から令和 5 年 3 月まで 7 回実施した。内容は、プロジェクト全体の進め方、ワーキンググループ間での情報共有、本調査研究全体の運営委員会や評価委員会に向けた報告のまとめやフィードバック、マイルストーンを踏まえた進捗管理を中心に実施した。

2.2 施設・設備

2.2.1 データセンター設備事例調査

データセンターの配電・冷却設備に関する事例調査として、本調査研究に参画している各大学・機関のスパコンの配電・冷却設備の状況・展望をまとめた。加えて、米国 Intel 社のデータセンターを訪問し、サーバ管理・電力管理・冷却設備に関してのヒアリングを行い、データセンター設備の発展状況およびリプレース戦略に関する情報を得た。気候(特に夏季の湿球温度)や電力源の供給状況(再生可能エネルギーへのアクセス容易性)が異なるため海外の事例をそのまま適用することはできないものの、電力系統・冷却設備の最適パラメータを念頭に立地を含めて施設をデザインし、電力・

冷却の制約をもとにサーバを設計する点や、冷却をサーバ内だけで考えずにデータセンター全体で熱設計のデザインを行っている点など、日本における設備設計に大いに参考にできる情報が得られた。

2.2.2 省電力運用実験基盤の整備

スパコンの消費電力を主とする環境データを運転にフィードバックする基盤の開発を目的として、東京大学 Wisteria/BDEC-01 Aquarius, Mercury および、東工大 TSUBAME4.0 をテストベッドとし、電力計測設備等の整備を行い、それらの情報を一括で収集する基盤を開発する。

(a) 東京大学における整備状況

今年度東京大学においては、Wisteria/BDEC-01 Aquarius, Wisteria-Mercury 向けの電力計測機材の導入を行った。実際に導入した機材は図 1 に示す、横河電機デジタルパワーメーター WT333E-C1-D/C7 3 台である。サーバの電力評価試験 SPECpower の要求事項に適合しており、Green500 の測定に求められる EEHPC (Energy Efficient High Performance Computing) Power Measurement Methodology の Level 3 にも適合している。本測定器は Ethernet インタフェースを備え、遠隔地からリアルタイムにデータを収集することも可能である。

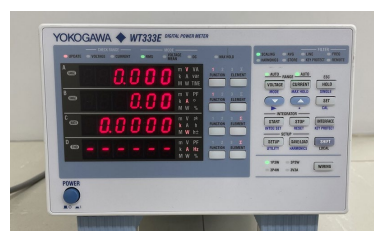


図 1 電力計測装置 WT-333E

今年度末の時点では、Wisteria/BDEC-01 Aquarius (GPU クラスタ) に接続している。計測を行う構成は図 2 に示す通りである。既存の 1 台では分電盤 1 にしか対応し

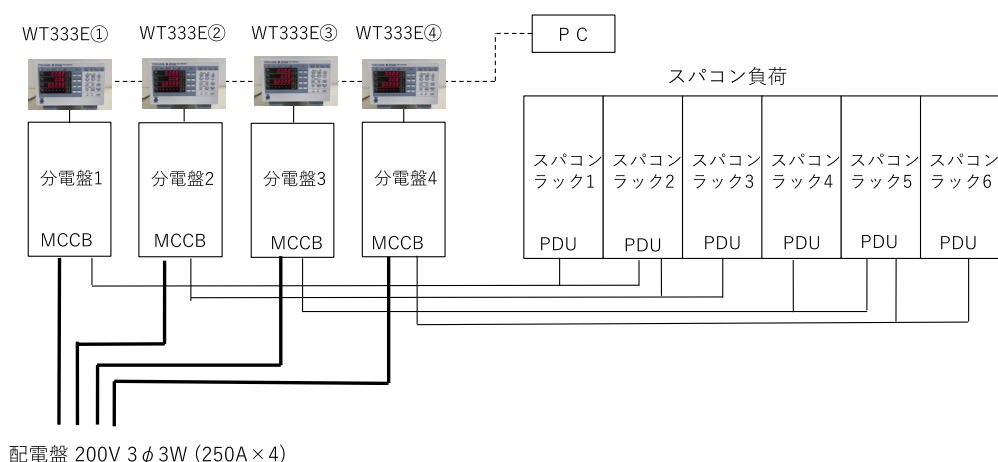


図 2 Aquarius における計測の構成

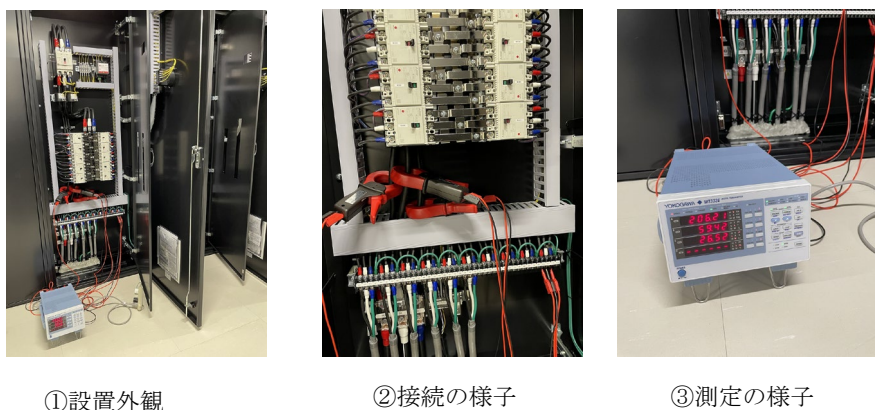


図 3 電力計測装置の設置状況

ていなかったため、全系で同一のジョブを動かし、それを 4 倍することで全体の電力を得ることしかできなかったが、新たに導入した 3 台を使用して、あらゆる状況で全系の測定を精密に行えるようになった。

実際の設置状況は図 3 に示す通りである。クランプを用いて測定をしており、システムが稼働中でも取り付け・取り外しが容易に可能である。

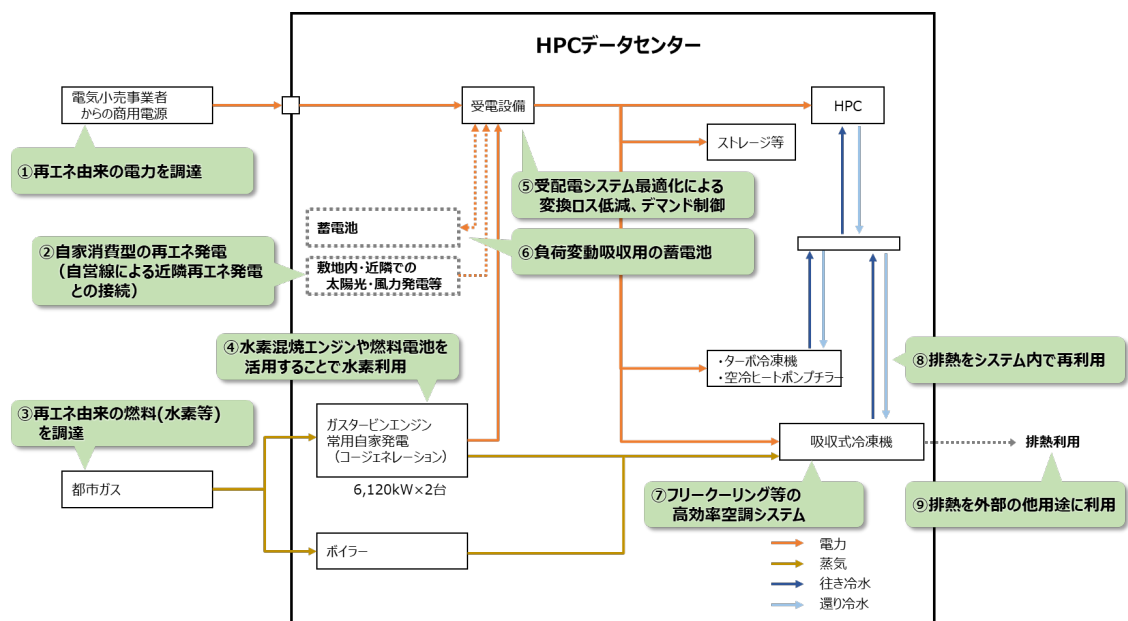
(b) 東京工業大学・理化学研究所 R-CCS における導入状況

東京工業大学 TSUBAME4.0 向けの電力計測機材の機材選定を行った。機材選定にあたっては、EEHPC 2.0 Level3 相当の粒度・精度での計測を目指すとともに、業界標準となっているプロトコル (Modbus TCP 等) による情報収集が行えることと、将来の導入のテンプレートとできるよう生産終了およびメーカーの撤退が見込まれていない機材を選定した。東工大 TSUBAME4.0 については、提案時の想定よりもスパコンの運転開始時期が後ろ倒しになり、2024 年 4 月運用開始となった点および、選定した電力計機材の在庫が確保できず年度内調達が困難であったことから、今年度実施予定であった調達を 2023 年度に延期した (本報告書執筆時点で在庫の引き当てに成功し、調達は無事に完了している)。電力以外の入力情報として、気象情報の収集を目的に、東京工業大学および理化学研究所 R-CCS においてネットワーク接続型の気象センサ装置の調達を行った。次年度以降にこれらの計測機器から収集する環境データを Grafana 等のオープンソースデータ収集基盤にまとめ、運用フィードバック用のデータソースとする基盤を開発する予定であり、そのデータ整理方法の検討を行っているところである。

2.3 カーボンニュートラル

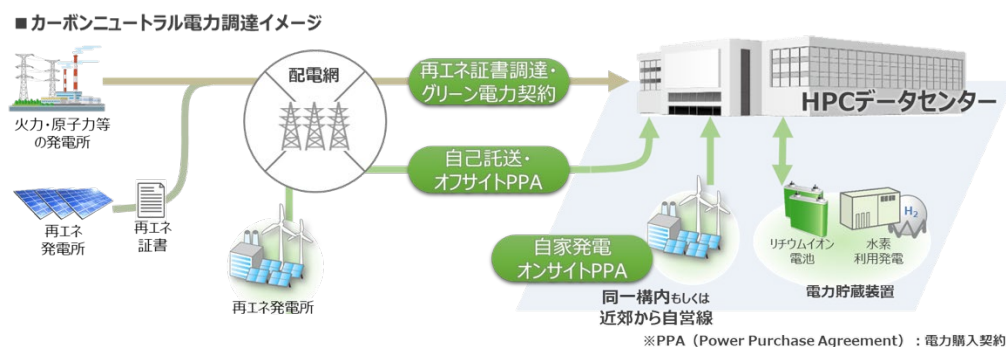
本年度はカーボンニュートラルに関する動向を概観した上で、HPC やデータセンターに関連する調査項目を9項目に整理した。また、その整理した調査項目に沿って、現時点における事例や動向を調査した。

整理した調査項目を以下の図に示す。下記検討事項の1から7は、エネルギーの調達方法・割合および、カーボンニュートラル化実現可能性の検討事項である。8と9はHPCの排熱の再利用・他用途への利用可能性に関する検討事項で、カーボンネガティブに資するものである。



HPC データセンタをモデルとしたカーボンニュートラル観点での検討事項

1 と 2 の再生エネ電力調達については以下の評価軸を設定し、それぞれのメリット・デメリットを踏まえて次世代 HPC データセンターへの適用可能性を検討した。その他の検討事項 3 から 9 についても同様に評価軸を設定し、適応可能性について調査した。



■カーボンニュートラル電力の調達手法の評価（太陽光発電の場合）

調達手法	特徴	評価軸（案）						
		コスト評価	電気料金	追加性	調達規模	エリアの制約	リスク	その他
再生エネルギー証書調達								
グリーン電力契約								
自己託送	調達手法の解説	発生するコスト	電気料金単価目安 (円/kWh)	新たな再生エネルギーが増加するか	大規模調達の容易さ	再生エネルギー発電所との立地の制約	発電量変動リスク 価格変動リスクなど	
オフサイトPPA								
自家発電								
オンサイトPPA								

太陽光発電の場合の調達手法の評価イメージ

導入事例の調査として、国内外のデータセンター事例および排熱利用事例を調査した。調査した事例を以下にまとめる。

2.3.1 グリーンデータセンターの事例

データセンターのカーボンニュートラル実現に向けて、データセンター事業を行う国内大手企業ではグリーン電力の導入などの再生可能エネルギーへの転換が進み始めている。実現の方法としては、小売電気事業者が提供する再生エネルギー由来の電力もしくは、再生エネルギー証書を購入する方法が殆どを占めているが、今後は再生エネルギーを自ら生み出す「追加性」の観点やエネルギーの地産地消など、より高いレベルでの再生エネルギー化の実現が求められている。

国内のデータセンター事業者として、以下の7社のデータセンターの特徴について調査した。

- さくらインターネット株式会社 間接外気冷却
- NTT コミュニケーションズ株式会社 間接蒸発冷却
- 株式会社ハイレゾ 間接外気冷却
- 株式会社インターネットイニシアティブ 外気冷却・壁吹き出し
- 京セラコミュニケーションシステム株式会社 地域再生エネルギー・自家発電・蓄電
- KDDI 株式会社 液浸冷却
- 株式会社NTT データ 液浸冷却

システムの冷却手法は間接外気冷却、直接外気冷却または液浸冷却に分かれる。株式会社インターネットイニシアティブではリチウムイオン蓄電池を利用したピークカット・ピークシフトを実現している。

海外の大規模なクラウドデータセンタ事業社として、以下4社のグリーンデータセンタの取り組みを調査した。

- Microsoft
- Apple
- Google
- Amazon

これらは大手企業であり、自社での発電設備のほか地域へのカーボンフリーエネルギーの供給と大規模なもので、発電手法も風力、太陽光、地熱、バイオマス、原子力、水力、揚水発電、蓄電池と多岐にわたる。

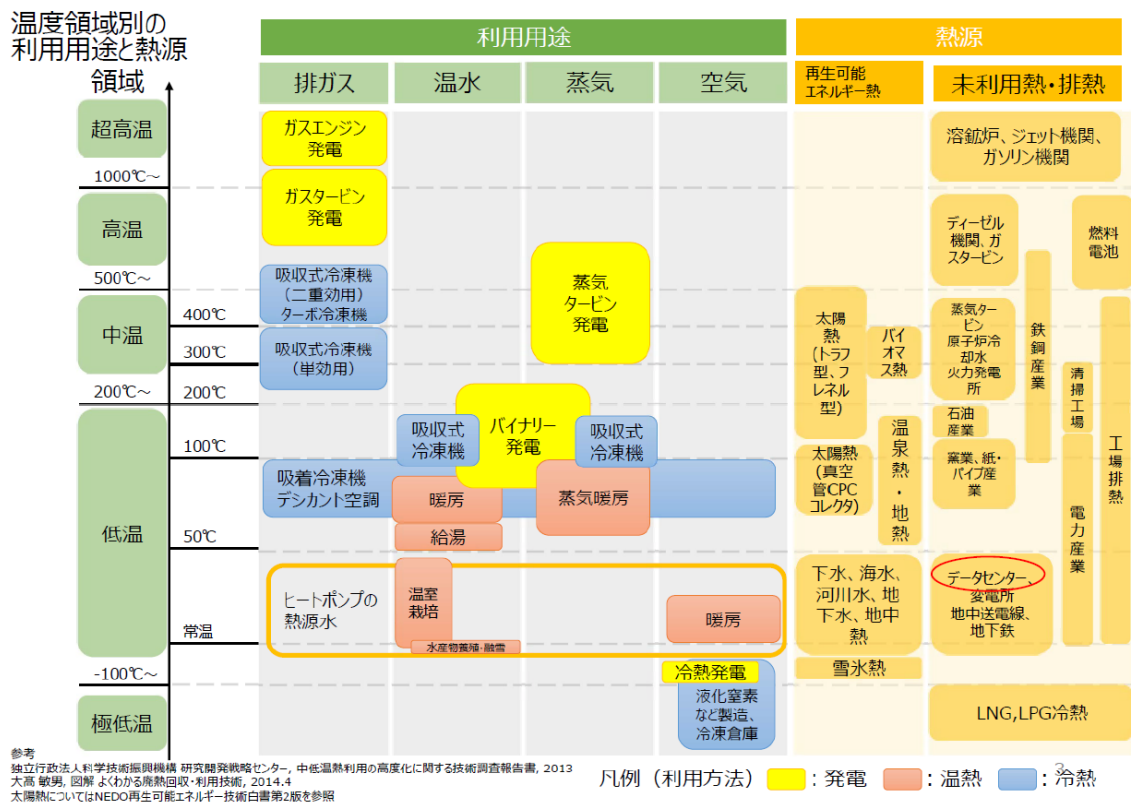
個々のデータセンターの技術的な事例としては、以下の6件の事例を調査した。

- Microsoft 燃料電池(水素発電)
- Google 蓄電池により発電機レス DC
- ECL グリーン水素利用
- テキサス大 高電圧直流給電(HVDC)
- NREL 温水液体冷却 PUE 1.036 排熱再利用
- LUMI (CSC) 100%水力発電・地域熱供給

特に LUMI はヨーロッパのフラグシップスパコンが設置されているデータセンターであり、100%のグリーン電力の利用のほか、HPC の排熱を近隣地域に供給することでカーボンネガティブを達成している。

2.3.2 排熱再利用の事例

カーボンネガティブの実現には HPC 排熱の再利用・有効活用が求められる。様々な未利用熱・排熱のなかでもデータセンターの排熱は低温排熱(40～100℃以下)に分類され、排熱利用用途は限られる。温度領域別の利用用途と熱源の関係性を以下に示す。



温度領域別の利用用途

出典:「中低温熱利用の高度化に関する技術調査報告書」

「図解 よくわかる廃熱回収・利用技術」をもとに作成

個々の排熱利用事例としては、以下の6件の事例を調査した。

- Facebook 地域熱供給
- Interxion 地域熱供給
- Ericsson 地域熱供給
- Telus 地点熱供給 (オフィス熱供給)
- Datadog 植物工場熱供給
- ホワイトデータセンタ 食糧生産施設熱供給

HPCの排熱は低温のため利用用途が限られ、ヒートポンプを利用した昇熱も考慮した検討が必要である。また、排熱の再利用のためには熱需要があることが必須であり、データセンタの設置場所も重要になってくる。

2.3.3 ホワイトペーパー

これまでに挙げた技術動向や事例調査の詳細はホワイトペーパーとして本FSの成果物としてまとめる予定であり、2022年度の内容として以下のドラフトを執筆した。技

術動向や政策動向については継続して調査を実施する予定である。

次世代HPCデータセンターにおけるカーボンニュートラル調査 (ホワイトペーパー概要)

カーボンニュートラル事例調査	
項目	内容
国内データセンター事例	さくらインターネット 間接外気冷却 / NTTコミュニケーションズ 間接蒸発冷却 / ハイレゾ 間接外気冷却・違い棚屋根 / インターネットイニシアティブ 外気冷却・壁吹き出し / 京セラコミュニケーションシステム 地域再エネ電源・自家発電・蓄電池 / KDDI 液浸冷却 / NTTデータ 液浸冷却
国外データセンター事例	Microsoft 燃料電池(水素発電) / Google 蓄電池により発電機レスDC / ECL グリーン水素利用 / テキサス大 高電圧直流給電(HVDC) / NREL 温水液体冷却 PUE 1.036 排熱再利用 / LUMI (CSC) 100%水力発電・地域熱供給
排熱利用事例	Facebook 地域熱供給 / Interxion 地域熱供給 / Ericsson 地域熱供給 Telus 地点熱供給(オフィス熱供給) / Datadog 植物工場熱供給 / ホワイトデータセンタ 食糧生産施設熱供給

カーボンニュートラル関連技術動向

項目	内容	今後の検討課題
RE100(Renewable Energy 100%)におけるエネルギー調達手法	電力供給: 自家発電・自己託送 / オンサイトPPA / 専用線供給 / オフサイトPPA / グリーン電力契約 / 再エネ電力証書の購入 エネルギー価格動向: 2030年を想定した電力・ガス価格動向/発電コスト動向 カーボンニュートラルの発電手法価格動向 (太陽光・陸上風力・洋上風力・水素燃焼)	発電コストやカーボンプライシングについては、最新のデータを用いて継続更新
水素・アンモニア等のCN燃料の動向	政府指針「グリーントランスフォーメーション(GX)実現に向けた基本方針」(2023.2)の動向調査 CN燃料の供給コスト動向・水素サプライチェーンの事例調査 カーボンニュートラルレポートの動向調査	カーボンニュートラルレポートの検討状況調査 HPCデータセンタでの利用を想定したCN燃料の調達/貯蔵方法の検討
発電・蓄電における脱炭素・低炭素化の動向	発電: 再エネ・自家発電・燃料電池などを対象に特徴・コスト・スペース・技術動向を調査 蓄電: 日本の蓄電池戦略、HPCデータセンタにおける活用方法、蓄電池の種類、取り組み事例を調査	HPCデータセンタに適用可能な技術の絞り込み、さらなる詳細調査
排熱の再利用検討	低温排熱(40～100℃程度)利用技術、排熱の利用用途調査 排熱利用に関する課題調査	低音排熱の昇熱による熱供給・カーボン削減量を継続検討 各技術のさらなる詳細調査・事例調査

HPC データセンタにおけるカーボンニュートラル ホワイトペーパーの概要

2.3.4 カーボンニュートラルの実現に向けて

これまでの調査の過程で、スパコンセンターにおけるカーボンニュートラルの実現には、

1. 再生可能エネルギーの導入、または購入
2. 電力の価格変動を最小化するための蓄電装置の導入
3. 冷却の高効率化
4. 運用の最適化

といった点を考慮する必要があることがわかってきた。さらに、

5. 排熱の再利用

も検討の余地がある。フラッグシップシステムにおいて、1、5の実現については、ある程度地理的な要件が大きく、具体的な設置場所の検討を始めてから利用可能になるまでには3年以上が必要と考えられ、早い段階から調整を始める必要がある。

一方、基盤センター群については、フラッグシップシステムに比べて規模が小さく、効率を考えると例えば2や5については導入する必要はないかもしれない。

いずれにしても施設・設備と合わせて導入を検討すべきものであるが、従来のスパコンシステムと比べると、ランニングコストは幾分低下する可能性もあるが、導入コストは格段に大きくなる。特に基盤センターでは、毎年減少する大学運営交付金の中からシステム調達への予算を確保している現状では、カーボンニュートラル化に対応するための追加コストに対応する余裕はない。政府がカーボンニュートラルに積極的に対応する姿勢を示すためにも、カーボンニュートラルを実現するために必要な予算配分を別途行う必要があると考える。本プロジェクトとしては、そのために必要な予算を定量的に示す必要があると考えており、今後引き続き詳細を検討していく。

2.4 資源管理

次期フラッグシップシステム（FS）、国内主要スパコン、リアルタイムデータおよび蓄積データ基盤、これらを接続する学術情報ネットワーク SINET、さらにクラウドとも連携し、一体運用する基盤の構築・運用の技術的要件を調査・検討した。特に、利用効率、高可用性や耐故障性、電力需給バランス調整によるスパコン・クラウド間連携によるカーボンニュートラル化への貢献、セキュリティリスクを重視する。検討項目は以下の通り。

- A) 「フラッグシップシステム」と国内主要スパコンの資源管理連携
- B) 「フラッグシップシステム」他とリアルタイムデータ・蓄積データ基盤との連携
- C) 「フラッグシップシステム」他とクラウドとの連携
- D) 上記連携を可能にするためのネットワーク技術

なお、資源管理グループの報告で使用する用語の意味を以下に定義する。

- システム：単体で計算環境やストレージ環境を完結する、スパコン、サーバ、クラスタ、RAID ストレージなど。
- 計算インフラ：「HPCI」など、複数の計算機システムによる連携運用環境。特に断らない限り、複数のドメインの計算機システムで構成された連携運用環境を指す。

- データインフラ：「GakuNin RDM」など、任意のドメインの計算機システム、計算インフラ、端末（ネットワーク経由を含む）から利用可能なストレージ、蓄積データ基盤、データベースなど。複数のドメインが連携して形成する場合もある。
- インフラ、e-インフラ、サイバーインフラ：計算インフラ、データインフラ、もしくは両方を統合したインフラを指す。
- 研究インフラ：研究用の実験施設、計算インフラ、データインフラなどの総称。

2022 年度は、検討項目 A)、C)に重点を置き、A)では情報共有、運用制御技術に関する現状把握と、利用者に対する統一 I/F 調査・一部動作検証を、C)ではスパコンとクラウドの連携についての現状調査と、セキュリティ課題抽出の調査・検討を実施した。

2.4.1 情報共有、運用制御技術に関する現状把握

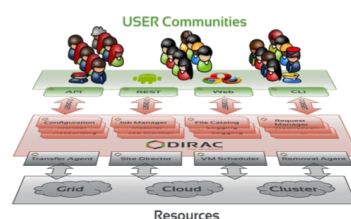
FS 一体運用の実現には、システム間の情報共有、システム間で統一されたインタフェース (I/F) とアカウント管理、スケジューラ連携などを検討する必要がある。2022 年度は、国際会議での最新研究動向、欧米のインフラの現状、ならびに国内の主要基盤センターの現状把握のためのアンケート調査を実施した。

国際会議 USENIX HotCarbon 2022 [1]の論文から、カーボンニュートラル化の手法とメトリクスを中心に調査した。手法として、データ転送の end-to-end での二酸化炭素排出量を推測できる情報の計測やコスト計算による動的制御、さらに複数のデータセンター連携によるワークロードの時空間的移動などを有効としている。これには、関連メトリクス、end-to-end のデバイス制御プロトコルなどが必要であるが、まだ標準化されていない。なお、電力グリッドで供給過多の場合、再生可能エネルギー発電から先に停止されるので、ワークロードの時空間移動では、これも考慮すべきであるとしている。また、デバイス製造時の二酸化炭素排出量などの潜在的排出量の分散償却も有効であり、ハードウェア更新時期延長、再利用、リサイクルなどを検討すべきとしている。また、国際会議 SC22 の Operational Data Analytics (ODA) BoF では、米国 SNL、NERSC、ORNL からデータセンターの運用関連の発表があった。これら研究所では省電力運用をしており、運用・ジョブ情報を 1 秒未満の高頻度で収集し、測定値の変化（速度）を基にした機械学習の推論による適応制御など新たな手法を試みている研究所もある。なお、研究所間連携運用についての発表はなかった。上記のよう

に、カーボンニュートラル化に関するメトリクスやプロトコル仕様はまだ標準化されておらず、広く採用されている運用方法もない。FS 一体運用の設計・開発では、標準化動向を注視する必要がある。

欧米のインフラの現状を Web ページや論文から調査した。欧米の計算インフラには HPC、HTC (High Throughput Computing)、データインフラには分散ストレージ、データ管理基盤、データベースなどおおよその属性があり、複数の属性を有するものもある。

計算インフラでは、HPC 属性の米国 ACCESS¹、欧州 PRACE²、HTC 属性の米国 OSG³、欧州 EGI⁴が代表的である。ACCESS は TeraGrid → XSEDE → ACCESS と、EGI は DataGrid → EGEE → EGI とグリッドコンピューティングから長年に渡り機能や運用方法の更新を継続している。FS 一体運用が同様なレベルの連携機能を持つには、多くの努力を要すると考える。なお、EGI は欧州を中心に世界中の約 300 のデータセンターと連携する非常に大規模なインフラであり、クラウド連携も実現している。



DIRAC: EGI のユーザ I/F の一つ

データインフラでは、米国 OSN⁵、欧州 EOSC⁶が代表的である。OSN は Science DMZ [2]による高スループットデータ転送を特長とする分散ストレージであり、EOSC はデータの検索可能性、アクセシビリティ、相互運用性、再利用性などを重視した研究クラウドデータベースである。米国は強力なインフラにより大規模データから意味ある結果を素早く導き出すことに注力した計算環境中心戦略を、欧州は知識や知見の実態であるデータの蓄積、管理、共有、再利用を容易にすることで、新たな発見や結果を導き出すことに注力したデータ環境中心戦略をとっている印象を受ける。欧州のデータ環境重視は、「欧州の研究インフラ [3]」で、EOSC を欧州研究インフラの上位イニシアチブのひとつに位置付けていること（他の e-インフラや実験施設は同列にはない）、EGI の戦略的ゴール [4]のひとつに「EOSC の認められた財団になる」とあることなどからも窺える。上記インフラでは、EGI と EOSC が最も機能豊かつ大規模な連

¹ Advanced Cyberinfrastructure Coordination Ecosystem: Services and Support, <https://access-ci.org/>

² Partnership for Advanced Computing in Europe, <https://prace-ri.eu/>

³ Open Science Grid, <https://osg-htc.org/>

⁴ EGI (当初は European Grid Initiative、現在は EGI が正式名称の模様), <https://www.egi.eu/>

⁵ Open Science Network, <https://www.openstoragenetwork.org>

⁶ European Open Science Cloud, <https://eosc.eu>, <https://eosc-portal.eu>

携運用を実現しており、企業利用として資源利用のみならず資源、機能、サービスの有償提供も認めている。FS 一体運用検討で最も参考になると考える。詳細な調査が必要である。また、欧米ともインフラの開発／運用は、HPC システム開発とは別プロジェクトであり独立したロードマップを持つ。インフラ機能を構成するソフトウェアは、HPC ハードウェアより長いライフサイクルを持つため当然のことであると考えられる。FS 一体運用も、長期的ビジョンに基づく機能開発ロードマップを検討する必要があると考える。

国内主要基盤センターの運用方法や状況を把握するために、「富岳」、9 大学基盤センター、ABCI、HPCI 共有ストレージ、SINET にアンケートを実施した。複数の基盤センターが同系統のアーキテクチャのスパコンを所有しており、「富岳」やベクター型も例外ではない。このため、各基盤センターは一体運用をシステム更新、故障、災害時などの BCP に組み入れることもできる。一体運用には、連携する基盤センターの運用状況、ジョブ状況などの情報共有が必要である。全ての基盤センターは既にこの種の情報を収集しているが、詳細内容、保存期間、公開ポリシーなどは基盤センターによって異なる。さらに、キュー構成、優先度制御、定期メンテナンスなどの運用方針、課金、セキュリティ、監査、インシデント補償などのポリシー、運用自動化などの取り組みも基盤センターによって異なる。このため、まず FS 一体運用のあり方を議論し、要件を調整する必要がある。

2.4.2 利用者に対する統一 I/F 調査、一部動作検証

利用者向けの Web ベースのデータ管理 I/F として、GakuNin RDM [5]を調査した。GakuNin RDM は、研究者が研究データや関連資料を管理・共有するための研究データ管理サービスであり、共同研究者とのデータ共有、ファイルのバージョン管理、アクセスコントロール、メタデータ管理ができ、研究証跡の記録機能、クラウドとの連携機能を持つ。2022 年度は、調査を兼ねて運用 FS 検討情報の管理に試用した。結果として、スパコンと連携するには、性能面に課題があることを抽出した。利用機能拡大と課題抽出を継続する。

また利用者向けのジョブ実行管理 Web ベース I/F として、Open OnDemand [6] + Jupyter [7]の組合せを候補として考えており調査した。Open OnDemand は HPC システムを利用するための Web ポータルであり、Jupyter はブラウザ上で動作するプログラムの対話型実行環境である。2022 年度は、「富岳」環境で簡易試用を行い、スパコンとのファイル共有に課題があることを抽出した。今後、さらなる調査を実施する。ま

た、コマンドベースのジョブ実行管理 I/F であるジョブスケジューラ I/F についても調査した。FS 一体運用で利用するには、遠隔からの統一されたコマンドでのジョブ投入と管理が必要となる。標準化された I/F として Open Grid Forum の DRMAA (Distributed Resource Management Application API) [8]が著名である。ジョブスケジューラの中には、固有の I/F に加え DRMAA をサポートしている製品 (Altair Grid Engine [9]など)があることが判明した。

ツール等向けの I/F として、RESTful I/F と S3 ベースの I/F の調査を実施した。RESTful API はその利便性から運用制御 I/F として採用される傾向にあり、クラウドプロバイダの CLI でも採用されている。HPC システムをアクセスする RESTful な API/Web サービスとして NERSC が開発した NEWT [10]が有名である。理研は「富岳」用の実装を開発、公開している。他に、HPC システムと統合する高性能で再利用可能なフレームワークである FirecREST [11]や、Slurm [12]などジョブスケジューラでも RESTful API を提供している。オブジェクトストレージの I/F として、AWS のオブジェクトストレージの I/F 仕様 [13]である S3 ベース I/F がデファクト的存在になっている。産総研の ABCI クラウドストレージ [14]が採用しており、理研も開発中の富岳ストレージ [15]で採用予定である。

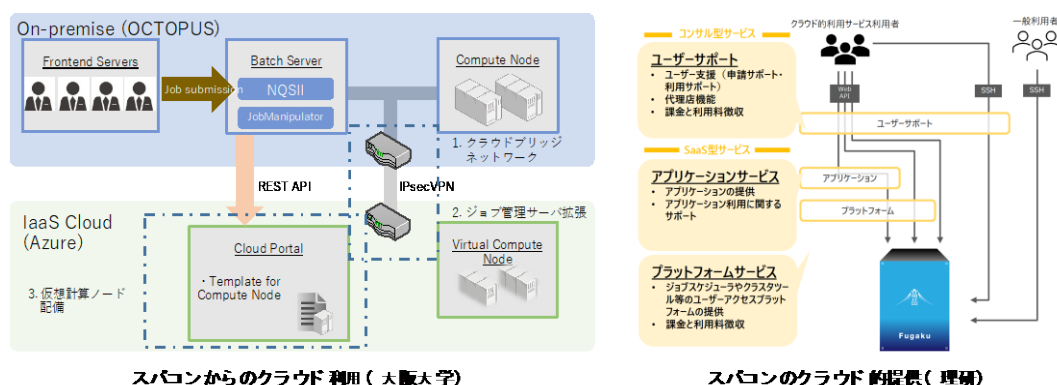
2.4.3 スパコンとクラウドの連携についての現状調査

スパコンとクラウドの連携には、どちらをクライアントにするか資源にするかの利用方向の違いと、資源構成やアクセス方法など利用方法の違いとの組合せによる複数形態がある。

スパコンからのクラウド利用: クラウドバースティングは、クラウド IaaS 資源をスパコンの追加ノードとして一時的に利用する方法で、ワークロード実行資源不足時に利用することでジョブ実行待ち時間を低減できる。専用ソフトウェア、サービス、ジョブスケジューラの機能 (例. IBM/LSF [16]、Slurm [17]) などで実現でき、大阪大学、九州大学、産総研が利用している。また、サーバホスティングは、クラウドプロバイダとの契約で長期間固定した IaaS 資源を確保する方法であり、一旦確保、設定すれば利用者はオンプレミスの資源と同様に利用することができる。東北大学が利用している。また、クラウドストレージには、ブロックストレージ、オブジェクトストレージ、コールドストレージがある。ブロックストレージは、IaaS 資源と組合せてネットワークストレージとしてスパコンから利用するケースが多い。オブジェクトストレージとコールドストレージは、プロバイダ独自の I/F を持つため既存アプリからは使いにくい、利便性やコストの優位性のため、利用目的やコスト要件に応じて使い分

けられている。クラウド利用には多くの利点があるが、いずれもクラウドプロバイダの利用料金が発生するため、基盤センターのビジネスモデルが難しい課題がある。これはFS 一体運用でクラウド連携する場合も同様であり、ビジネスモデルを検討する必要がある。

スパコンのクラウド的提供：計算資源の提供とストレージ資源の提供がある。計算資源のクラウド的提供を、理研、九大、産総研が実施もしくは予定している。提供形態はSaaS（理研、富岳クラウド [15]）、IaaS[ベアメタル/VM]（九大、対話型環境 [18]）、バッチ+コンテナ実行（産総研、CloudQ [19]）など様々であり、I/F 仕様も様々である。クラウド的なストレージ資源の提供は、主に S3 互換 I/F を持つオブジェクトストレージである。産総研が提供しており（ABCI クラウドストレージ）、理研も開発中である（富岳ストレージ）。



2.4.4 セキュリティ課題抽出

NIST Cyber Security Framework (CSF) [20]を基にしたサイバーセキュリティアセスメントを理研「富岳」、東大「Wisteria/BDEC-01」運用に適用し、課題を抽出した。CSFは、従来の境界防御を前提とした考え方（ISMS）だけでなく、侵入や内部不正を前提として被害を最小限に抑える「サイバーレジリエンス」も考慮した対処を前提としている。アセスメントを実施した両システムとも、性能を重視した構成であり、またデータの責任分界点がクラウドやエンタープライズシステムと異なることから、これらとは一部異なるアセスメントが必要であることが判明した。HPC 固有の脅威や安全な一体運用などへの考慮が必要である。さらに、最近の傾向である「サイバーレジリエンス」への取り組みを行うべきであり、当初予定していなかった詳細な検討が必要と考える。

参考文献

- [1] USENIX, “HotCarbon 2022: 1st Workshop on Sustainable Computer Systems Design and Implementation”, <https://hotcarbon.org>. [access: 2023/1/19].
- [2] J. Crichigno, E. Bou-Harb, N. Ghani, “A Comprehensive Tutorial on Science DMZ”, IEEE COMMUNICATIONS SURVEYS & TUTORIALS, VOL. 21, NO. 2, 2019.
- [3] European Commission, “European Research Infrastructures”, https://research-and-innovation.ec.europa.eu/strategy/strategy-2020-2024/our-digital-future/european-research-infrastructures_en. [access: 2023/4/27].
- [4] EGI, “EGI Federation Strategy 2020-2024”, https://cdn.egi.eu/app/uploads/2022/05/Federation-Strategy_2020-2024.pdf.
- [5] 国立情報学研究所, “GakuNin RDM”, <https://rcos.nii.ac.jp/service/rdm/>. [access: 2023/4/29].
- [6] Open OnDemand, “Open OnDemand”, <https://openondemand.org>. [access: 2023/5/2].
- [7] Project Jupyter, “Jupyter”, <https://jupyter.org>. [access: 2023/5/2].
- [8] OGF, “DRMAA Working Group”, <https://www.drmaa.org>. [access: 2023/4/29].
- [9] Altair Engineering, “DRMAA2 Guide”, <https://2022.help.altair.com/2022.1.1/AltairGridEngine/DRMAA2.pdf>, 2021.
- [10] NERSC, “NEWT NERSC Web Toolkit”, <https://newt.nersc.gov>. [access: 2023/5/4].
- [11] F. A. Cruz, A. J. Dabin, J. P. Dorsch, E. Koutsaniti, N. F. Lezcano, M. Martinasso, D. Petrusic, “FirecREST: a RESTful API to HPC systems”, IEEE/ACM International Workshop on Interoperability of Supercomputing and Cloud Technologies (SuperCompCloud), 2020.
- [12] SchedMD, “Slurm REST API”, <https://slurm.schedmd.com/rest.html>. [access: 2023/4/30].
- [13] Amazon Web Services, “Amazon S3 REST API Introduction”, <https://docs.aws.amazon.com/AmazonS3/latest/API/Welcome.html>. [access: 2023/5/4].
- [14] 産業技術総合研究所, “ABCI クラウドストレージ”, <https://docs.abci.ai/ja/abci-cloudstorage/>. [access: 2023/4/29].
- [15] 山本啓二, “「富岳」のクラウド利用に関する取り組み”, PC クラスタワークショップ in 神戸 2022 「クラウドと HPC」, 2022.
- [16] IBM, “IBM Spectrum LSF と IBM Cloud を使用した EDA ワークロードのクラウドバースト”, <https://www.ibm.com/blogs/solutions/jp-ja/cloud-bursting-an-eda-workload-with-ibm->

spectrum-lsf-and-the-ibm-cloud/. [access: 2023/4/30].

[17] SchedMD, “Cloud Scheduling Guide”, https://slurm.schedmd.com/elastic_computing.html. [access: 2023/4/30].

[18] 九州大学, “フロントエンド利用法”, <https://www.cc.kyushu-u.ac.jp/scp/system/IT0/frontend/>. [access: 2023/4/30].

[19] 産業技術総合研究所, “CloudQ”, <https://github.com/aistairc/cloudq/>. [access: 2023/4/30].

[20] NIST, “Framework for Improving Critical Infrastructure Cybersecurity Version 1.1”, <https://nvlpubs.nist.gov/nistpubs/cswp/nist.cswp.04162018.pdf>, 2018.

2.5 データ利活用

2022年度は、データ利活用に関する議論のための基礎データの収集と現状把握を開始し、また今後に向けた各種の検討を開始した。

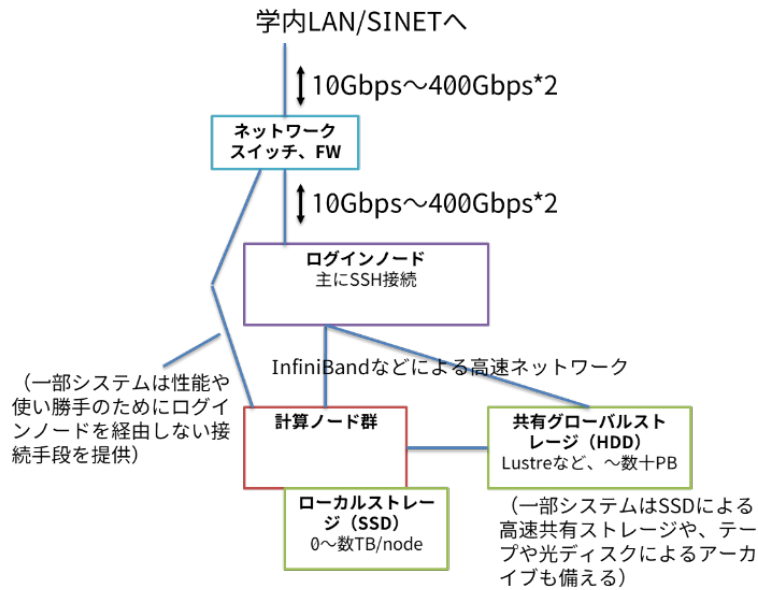
主な実施内容は以下の4点である。

1. 「富岳」やHPCI構成機関などのスパコンのストレージや外部接続ネットワークの調査
2. HPCアプリケーションが必要としているデータ入出力性能の調査（アプリFSと連携）
3. ワークフローツールなどの調査
4. データ利活用の障害となっている問題の洗い出しや改善策の検討

2.5.1 スパコンのストレージと外部接続ネットワークの調査

データの利活用について議論を深めるうえで、現在の「富岳」やHPCI構成機関等のスパコンの有するストレージや外部接続ネットワークの性能や仕様の把握は必須であるが、計算ノードの性能などと比べて十分に情報が共有されていない。そこで各機関の関係者に依頼して情報の収集を行った。今年度である程度の情報が収集できたため、基礎資料として今後の活動に活用する予定である。

下図は調査結果に基づく現在の典型的なセンタースパコンの構成である。データ利活用の観点では、複数のスパコンやデータ生成・供給拠点を繋いで利用する際に、スパコンと外部機関を繋ぐネットワークの速度が性能を律速し、想定した性能が得られない可能性が懸念される。



2.5.2 HPC アプリケーションが必要としているデータ入出力性能の調査

ストレージや外部接続ネットワークの調査と同様に、その上で実際に実行されるアプリケーションが現在必要としている・今後必要とするであろうデータについての情報もデータ利活用についての議論においては重要である。特に、1回の計算にどの程度の量のデータを入出力するのかといった情報だけではなく、どのような頻度で実行する必要があるのか、システム外部とのデータのやりとりがどの程度必要であるかといった情報もデータ利活用について考える上では重要となり得る。

こうした情報は他の調査研究チームでも重要となり得るであろうことから、合同でアプリケーション開発者や利用者に対してアンケート調査を実施した。(2023年度にかけて継続して実施、結果を取りまとめ中。)

2.5.3 ワークフローツールなどの調査

従来のスパコンでは「SSH 対話処理+バッチジョブ実行」の利用形態が一般的であったが、近年ではそれにとらわれないスパコンの利用が注目されつつある。スパコンにおいては主に海外を中心に Open OnDemand の利用が広がりつつあり、また多くのパブリッククラウドにおいては Web ブラウザを利用した計算資源の利用が一般的である。フラッグシップシステムや HPCI 資源においてもこれらの利用形態について検討するべきであると考え、調査を進めている。

2.5.4 データ利活用の障害となる問題の洗い出し、改善策検討

現在のスパコンにおいてデータ利活用の障害となっている問題にはどのようなものがあるかの調査を始めている。例えば大量のデータを扱う用途においては性能上の制限があると考えられるが、上記 1 や 2 の調査結果をさらに精査することで具体的なボトルネックの理解や改善案の検討が可能となることが期待される。また上記の調査対象以外にも、例えば多システムを連携して利用するには機関間のアカウント連携をどのように行うべきかなど運用上の課題は多く存在すると考えられる。

2.6 Society5.0 運用

本ワーキンググループでは、スパコンやパブリッククラウド、データセンターなど運用形態の異なるシステムをどのように課題ごとに使い分け、連携させるべきかを整理し、ワークフローの連携方法について調査検討を実施した。主な調査対象となるパブリッククラウドとしては、東京大学に設置されている mdx を対象とした。商用クラウドは運用に関する詳細情報がほとんど公開されていない一方、mdx は実際の運用に携わっているメンバーも多く、試用段階から本格的な運用開始時に移行する中で詳細なシステムの情報を得ることができ、フィードバックも可能なためである。なお次年度以降は、海外の機関も含め、調査対象を広げていく予定である。

2.6.1 mdx 利用調査

GPU などの計算資源を VM (Virtual Machine) にて提供・管理するパブリッククラウド mdx⁷ は、試用期間に伴い研究課題・プロジェクトごとに無料で利用できる計算資源が割り当てられているが、実運用に向けて利用料金⁸や利用規約などの運用ポリシーが策定され、2023 年 5 月 10 日から正式運用開始となる。mdx における運用ポリシーや VM のサービスレベル、VM テンプレートの利用方法、具体的なアプリケーションユーザの使用状況に関する調査を実施した。

VM のサービスレベル⁹として即時に VM のデプロイと起動が保証される「起動保証仮想マシン」と mdx システム全体の空き資源に応じて変動的に起動と実行が制限される「スポット仮想マシン」の 2 種類が実装されており、他システムとの比較、利用可能な資源量の傾向を考慮しながら、これらのサービスレベルの有効性、使い分け方法を

⁷ mdx とは - mdx: <https://mdx.jp/about/mdx>

⁸ 利用料金 (2023 年度) - mdx: <https://mdx.jp/guide/charge>

⁹ 7. サービスレベル - mdx ドキュメント: https://docs.mdx.jp/ja/main/service_lv.html

引き続き検証している段階である。また、mdx では VM ごとに割り当てられるローカルの仮想ディスクに加えて、S3 オブジェクトストレージ¹⁰、Lustre による共有ストレージ¹¹が提供されており、これらの構築・利用方法などを調査した。その結果、既存のブロックストレージと比較してより複雑な操作をユーザに求めるため、利用率が低い傾向にあることが分かった。大規模なデータセット、学習モデルをパブリッククラウドやスパコンなど高性能計算環境で取り扱う場合、これらのオブジェクトストレージ及び共有ストレージとの連携の必要性が高まることから、ユーザへの啓蒙活動に加え、簡単な操作で利用可能にするためのシステム側の改良が求められる。

2.6.2 他機関との連携運用の調査

現在、東京大学情報基盤センターで稼働中の mdx-1 を拡張し、大阪大学でも設置運用する (handai-mdx) 議論が進められており、ここでは他機関と連携するための方法についても調査と考察を実施した。運用管理体制やサービスレベル保証などの運用ポリシー、ハードウェアのアーキテクチャが異なる拠点同士でシステムを連携させるためには、ユーザ（グループ・認証）管理、VM 連携、データ連携それぞれについて、VM ハイパーバイザやハードウェアなどの制約条件の下で運用のための最適なアーキテクチャの比較検討が必要である。これは、次世代計算基盤においても、富岳 NEXT 及び各大学のスパコン連携に際して、技術面で検討が必要な項目であると考えられる。また、大阪大学の既存のシステムである、スパコン (Octopus¹²、Squid¹³)、データストレージ (Onion¹⁴) などを handai-mdx と連携・運用する方法の調査・考察も進められている。

2.6.3 ドメインに特化したシステムとの連携

¹⁰ 12. Tips - mdx ドキュメント: <https://docs.mdx.jp/ja/main/tips.html#id4>

¹¹ 11. FAQ - mdx ドキュメント: <https://docs.mdx.jp/ja/main/faq.html#lustre-fast-large>

¹² Cybermedia Center, Osaka University » Blog Archive » OCTOPUS:
<http://www.hpc.cmc.osaka-u.ac.jp/octopus/>

¹³ Cybermedia Center, Osaka University » Blog Archive » SQUID:
<http://www.hpc.cmc.osaka-u.ac.jp/squid/>

¹⁴ Cybermedia Center, Osaka University » Blog Archive » ONION:
<http://www.hpc.cmc.osaka-u.ac.jp/onion/>

mdx などのパブリッククラウドは、柔軟な VM 環境をユーザーに提供可能な一方で、提供可能なリソースはクラウドが持つものに限定される。そのため、クラウドが提供しないスペックのハードウェア（たとえば、次世代 GPU や超大規模ストレージ）をクラウドと密連携の形で利用することはできない。そこで、パブリッククラウドの内部ネットワークを安全な形でユーザーに解放し、独自のハードウェアを連携させる方法を調査・検討してきた。事例として、マテリアル先端リサーチインフラ事業（ARIM）の下、ペタスケールストレージを mdx ネットワークに連携させ、mdx から直接通信が可能なマテリアルデータ用ローカルストレージの構築を行っているものがある。今後、本ストレージシステムの設計・運用を通じて、他のドメインやユーザーに対して連携するための方法を継続して調査・検討する。

2.7 HPCI 運営

HPCI は、国内の大学や研究機関の計算機システムやストレージを高速ネットワークで結ぶことにより、全国の HPC リソースを全国の幅広い HPC ユーザー層が効率よく利用できる科学技術計算環境を実現することに加え、HPCI の運用を通じて多様なユーザーニーズに応えとともに画期的な研究成果を創出し、科学技術の発展や産業競争力強化に資するとともに、人材育成やスーパーコンピューティングの裾野の拡大にも貢献することを目的として、平成 24 年 9 月 28 日の共用開始から、多くの顕著な成果を上げてきた。

しかし、共用開始から 10 年以上が経過し、制度的な改善を求める声も少なくない。次世代計算基盤の検討を行う上で、HPCI システムのあり方についての課題について踏み込んだ検討を実施すべきである。

HPCI 運営における課題は、大きく分けると 2 つの側面がある。

- ユーザの利便性向上：各センターの異なるシステムにおいて共通化された利用方法の提供
- システム運用：上記を提供するための実現方法、計算資源の融通やポリシーの共通化

2022 年度は、ユーザの利便性向上について検討を開始した。また、システム運用についてはさまざまな検討課題の抽出を行った。

2.7.1 ユーザの利便性向上

従来のスパコンの利用方法は、いずれのシステムにおいても

- CUI ベースの利用：ssh を用いてターミナルソフトからシステムのログインノードにログイン
- バッチジョブ方式：ジョブスクリプトを記述しバッチジョブスケジューラにジョブを登録、ジョブ実行後に出力ファイルを確認

という点で共通していた。

しかし、既存のユーザに加え、幅広い分野のユーザへの対応を考えると、特にビッグデータ解析、機械学習等のユーザには、Jupyter Lab¹⁵などの Web UI が望まれている。これまでもスパコン上で Jupyter Lab を利用可能にしている例は、東工大 TSUBAME3.0 や東大 Wisteria/BDEC-01 などがあるが、前者では、ジョブを割り当てた後に計算ノード上で Jupyter Lab を起動する必要がある、後者では専用サーバを設けているがバッチジョブ実行との連携が困難であるなど、利便性の面では大きな問題があることがわかった。

スパコンシステム向けに Web UI を提供する Open OnDemand¹⁶もよく知られている。データ利活用の観点では、データセットを中心にさまざまなワークロードを組み合わせることを考えると、研究データ管理基盤を中心にした UI が自然である。

そこで、今後の議論においてユーザの利用形態の理想像を共有するために、図 4 のような将来の HPCI ユーザの利用イメージを定めた。

国内における研究データ管理基盤としては、国立情報学研究所が運用する GakuNin RDM¹⁷が整備されており、2.4.2 節「利用者に対する統一 I/F 調査、一部動作検証」で述べたように、GakuNin RDM をユーザのポータルとして活用することを念頭に検討を進めた。GakuNin RDM では、mdx や商用クラウドをはじめとした様々なストレージやレポジトリを登録してユーザが使い分けることができる他、計算資源と連携させることも可能である。

但し、さまざまなストレージ、計算資源で情報を共有するためには、各ユーザの認証情報を共通化する必要があることも明らかになった。現在の HPCI ではシングルサイ

¹⁵ Jupyter Lab: <https://jupyter.org>

¹⁶ Open OnDemand: <https://openondemand.org>

¹⁷ GakuNin RDM: <https://rcos.nii.ac.jp/service/rdm/> , <https://rdm.nii.ac.jp>

ンオンを実現してはいるが、共用ストレージの利用のために使われている程度である。また、既存の ssh を中心とした利用方法と、上述の Web UI に基づく利用方法とで統一された認証系が必要である。HPCI における次世代認証基盤の検討状況を踏まえると、各サービスを OpenID に基づく認証系に統一していくことが求められる。

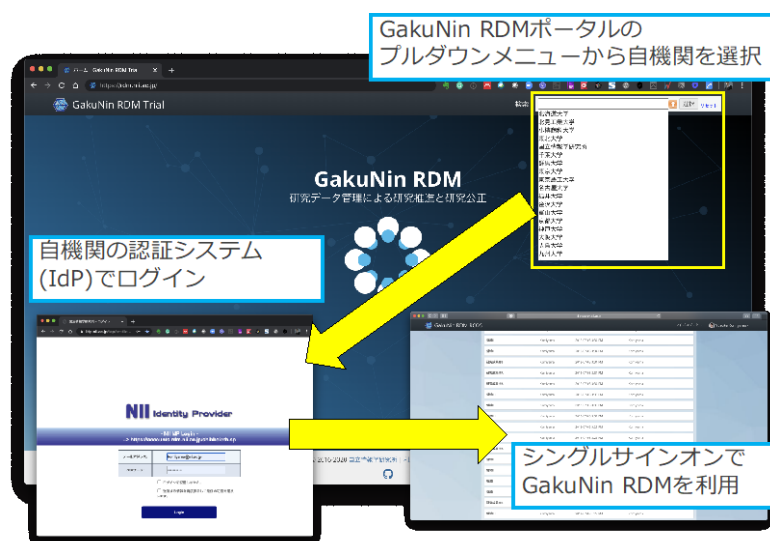


図 4 今後の HPCI システム利用イメージ

2.7.2 センター間連携に向けた調査

各センターの運用状況、消費電力、利用負担金等、相互利用の可能性を検討するために調査を実施した（Society5.0 グループと連携）。今年度は、東京大学の Wisteria/BDEC-01、および Oakbridge-CX についての調査を試行した。調査は以下の項目について行い、必要な調査項目を網羅しているか確認した。

- カーボンフットプリント
- 冷却方式
- 電気代推移（令和 4 年）
- 利用負担金によるコスト回収モデル

これを元に他の資源提供機関およびシステムへの調査に広げていく。パブリッククラウドについても Society5.0 運用グループ、資源管理グループとサービス内容、利用料金についての調査結果を共有した。

2.7.3 HPCI システムの機能拡充に向けて

今後の機能拡充に向け、これまでの HPCI システムの運用を評価することに加え、具体的には以下の 5 点について検討が必要と考える。

(a) HPCI 計算資源の整備

HPCI 計算資源の整備については、フラッグシップシステムについては、開発プロジェクトが立ち上げられ、その中において詳細な検討が行われる一方で、国立大学の基盤センター群を中心とする第 2 階層システムについては、大まかな整備計画の共有はあるにせよ、各資源提供機関が独自の方針に基づいて整備するケースがほとんどであった。結果的に、HPCI システム全体として見ると、機能や特徴が重複するシステムが存在することになり、全体的に最適化がなされているとは言い難い。これは、システム整備の財源が、フラッグシップシステムについては整備補助金、第 2 階層については各資源提供機関の運営費交付金であることに起因するもので、すぐに改善することは困難であろう。

一方で、筑波大学と東京大学とが連携して整備・運用した Oakforest-PACS システムや、北海道大学、東北大学、筑波大学、東京大学、東京工業大学、名古屋大学、京都大学、大阪大学、九州大学、NII、産総研が連携して整備した mdx システムは、機関間連携によって財政的な困難を克服しつつ、先進的な技術を積極的に取り込んだ野心的な試みであり、今後もこのような取り組みは国として積極的に支援していくべきであろう。

そのためには、フラッグシップと第 2 階層の中間に位置するようなシステム整備のためのプロジェクト公募を戦略的に実施することが効果的と考える。すなわち、今後 10 年程度において、各システム間での機能や役割の分担を考慮しつつ、いつどのようなシステムを整備するかといった大まかなロードマップを国として策定・共有し、それに基づいて整備する個別のシステムについては、都度開発・整備プロジェクトを公募し、解決すべきテーマや必要となる技術的な要素を明確にするとともに、機関間の連携を推奨する。これにより、機関間の連携協力を促進するとともに、我が国全体の計算資源配備の最適化・効率化が実現できる。

また、このような施策に必要な財源については、整備費用の一部を整備補助金で措置することも検討されるべきである。残りの部分については各資源提供機関の負担で実施することになるが、民間や地方自治体などからの出資も受け入れ可能であることが望ましい。それにより、システム開発のフェーズから産業利用、地域振興の視点が

より反映されやすくなり、システム整備後の産業利用や社会基盤整備の促進にも極めて有効であろう。参考までに、欧州において、上記のようなプロジェクトマネジメントを行う機関である EuroHPC JU の場合、整備費用の半額を補助（残りの費用は設置機関が調達）している。

加えて、スパコン調達の制度をより柔軟にすべきである。具体的には、企画競争を許容することを可能にする必要がある。現在のスパコン調達の制度は、市販製品を指定の納期に合わせて設置する、ということしか許されておらず、納入期限・検収条件を満たせないと最初からやり直しを求められる。サプライチェーン問題が顕在化している現在、規模、納期、予想金額、全てにおいてマージンを取る必要があり、極めて非効率であり、調達作業担当者にとっての負担も多大である。米国、欧州いずれのスパコン調達も、企画競争が基本となっており、日本の調達制度は極めて不利である。一方、mdx においては、サプライチェーン問題、セキュリティリスクが顕在化し、企画競争によって実施した経緯がある。当然ながら WTO の求める調達ルールにも合致しており、現状のスパコン調達ルールが時代錯誤であり不当に厳しいと言わざるを得ない。

(b) HPCI 計算資源の運用

HPCI の各提供資源の運用は、原則として資源提供機関の責任で実施されているが、運用に関する機関間の連携は、AXIES(大学 ICT 推進協議会)、情報処理学会 HPC 研究会、個別の機関間連携（東京大学、名古屋大学、JAXA、富士通、R-CCS が参加する、富岳に類似するシステムの運用に関する検討会など）など、極めて限定的である一方で、日々の運用を支え、高度化を担う人材は、民間を含め、常に払底しており、安定的かつ最新の計算サービスの提供を維持するためには、HPCI 全体としての運用体制の改善が喫緊の課題である。

多くの資源提供機関は、少数のプロパーのスタッフに加えて、システムを開発・製造したベンダが提供する保守サービスを受けているケースがほとんどであるが、民間側も人材の確保に苦慮している状況もあり、現場の感覚としては保守サービスのレベル低下が急速に進行していることは否めず、今後ベンダに依存した保守体制は維持できなくなる可能性が高いと考えている。一方で、米国の HPC センターのように、保守作業を内製で行うための体制を今から構築することも現実的ではない。

一案として、民間も含めた運用・保守の人材をひとつの組織に集約し、HPCI の各計算資源の保守を一元的に行うような体制づくりを検討すべきと考える。HPC システムの運用は、システムそれ自体だけではなく、冷却設備、電源設備など、多岐に渡り、

省エネルギーや低炭素排出等の観点での効率的な運用に関する高度な知見・ノウハウの蓄積をひとつの機関で行うことは不可能になってきている。多数の HPCI システムや関連設備を並行して運用することで、運用技術そのものの高度化が促進されるとともに、運用を担う人材獲得と育成も格段にやりやすくなると期待できる。

(c) HPCI 計算資源の高度化

HPCI システムによる成果創出を促進するには、より使いやすく、より高度な機能を継続して開発し、提供していくことが不可欠である。

そのためには、HPCI システムを透過的に利用するための統一的な認証・認可機能、ソフトウェア利用環境の共通化、クラウド機能の整備やアプリケーションのプラットフォーム化も必要である。加えて、HPCI システム全体を統括するメタスケジューラの導入による HPCI 全体の利用の最適化・効率化、利便性向上を目指すべきであろう。また、統一的な利用サポートの提供も極めて重要である。利用者から問い合わせが来てから対応するのではなく、利用者が知りたい情報に到達しやすくすることで自己解決を促進する対応を志向すべきである。

(d) 国プロで開発したアプリケーションの保守および高度化

これまでも国プロで開発されたアプリケーションが、プロジェクトが終了した後に保守体制が維持できず、ソフトウェアとしての価値が失われるケースが多々あった。現在は RIST が中心となって、HPCI システムに国プロアプリを整備する取り組みがあるが、アプリをインストールするのみで、利用サポートや計算サービスとしての付加価値を高めるという観点では不十分であると言わざるを得ない。アプリケーションの高度化などの開発タスクについては研究プロジェクトで措置されるべきだが、その後のバグフィックスなどの保守、新アーキテクチャへのポーティング、チューニング、利用者対応、計算プラットフォーム化、マネタイズなどについては、開発者とは別の者が長期的に担うべきである。結果的にそれがソフトウェアの価値を高めることになり、間接的に HPCI システムの価値も高め、成果創出の促進につながる。

(e) 上記を実現するための体制

ここまですとまとめると、以下の機能の強化が必要であると考えます。

- ① HPCI システムの開発・設置に関するプロジェクトの公募をマネジメントし、HPCI システムの全体最適化を促進する機能

- ② HPCI システムの運用を集約し、安定的なサービス提供と高度化に資する機能
- ③ 国家プロジェクトで開発されたアプリケーションの保守および高度化を推進する機能

これまでも HPCI の高度化に向けた取り組みは進められて来てはいるが、スピード感の不足や責任の所在が曖昧なことから、十分な進捗には程遠いと感じている。組織を一元化し、責任を付与することで、HPCI の高度化に向けたさまざまな改善の取り組みが促進されると期待する。

一方で、上記の機能は多岐に渡っており、ひとつの者がすべてを担うことは稀であろう。組織間の連携を密にすることは重要だが、それぞれに強みを持つ複数の者でこれらの機能を分担するのが現実的ではないか。

欧州では EuroHPC JU が上記の一部を担う機関として整備・機能していると見受けられる。このような先行事例を詳細に分析し、我が国における制度の中に、これらの機能をどのように実装していくのか、踏み込んで検討すべきである。

III. 次年度以降の計画

1. プロジェクトの総合的推進

今年度と同様に、プロジェクト全体の連携を密としつつ円滑に運営していくため、本調査研究全体の運営委員会や技術検討会に参加し、参画各機関との連携・調整にあたる。特に次年度後半には、システム調査研究チームと連携して、アーキテクチャの検討に対してフィードバックを行う。

2. 施設・設備

データセンターの設備の事例について調査を継続し、次年度は欧州の事例についても事例調査を行う。今年度の内容も踏まえて、カーボンニュートラルの観点も含めた冷却等の設備設計の利害得失表をまとめる予定である。

省電力運用実験基盤については、次年度に東工大 TSUBAME4.0 向けの電力計機材を調達し、気象センサを含めて計測環境に設置し、データ収集基盤のプロトタイプ作成を当該年度に開始する。データ収集基盤については、入力・出力ともにオープンなプロトコルやデファクトスタンダードとなっている OSS をインタフェースとすることにより、サイト・機種依存性を最少化し、他のサイト・システムへの適用が容易となるように留意する。

次年度後半にシステム調査研究チームと情報交換・協議を行い、施設・設備の観点からのシステム全体に求める境界条件・技術要件をまとめ、フィードバックを行う。調査研究期間終了時までには、これらをまとめたうえで、現在および近い将来に適用できる技術と電力削減目標を示し、その中から利用すべき技術を同定する。

3. カーボンニュートラル

カーボンニュートラルに関する技術動向や政策動向については次年度も継続して調査を実施する。今年度は技術動向の概要についての調査は完了したため、次年度は HPC およびデータセンターに適用可能な技術の絞り込みと、その技術のさらなる詳細調査を実施する。またこれら技術や政策動向を考慮した HPC データセンター設置シナリオを検討する。技術動向や政策動向の調査内容、国内外の事例、および検討したシナリオについては最終的にホワイトペーパーとしてまとめる。

4. 資源管理

「フラッグシップシステム」他とリアルタイムデータ・蓄積データ基盤との連携、および「フラッグシップシステム」と他のシステムの連携を可能にするネットワーク技術に重点を置いた調査を実施する。また、「フラッグシップシステム」と国内主要スパコンの資源管理連携、「フラッグシップシステム」他とクラウドとの連携も一部調査を継続する。

「フラッグシップシステム」一体的運用における資源管理の構成や機能などのたたき台を作成する。

たたき台を基に他グループ、他チーム、ベンダと協議・調整し、FS 一体運用案を作成する。

5. データ利活用

次年度は、今年度を実施を開始した各種の調査（ストレージと外部接続ネットワークの調査とまとめ、アプリケーション調査およびヒアリング、ワークフローツールなどの調査と試験運用、等）を継続して実施する。さらに、具体的なシナリオに基づくデータ利活用シナリオを想定したボトルネックの調査分析を行う。加えて、調査・ヒアリング結果を元に、ストレージ・外部接続ネットワークの調査結果と照らし合わせて分析や改善策の検討を実施する予定である。

6. Society5.0 運用

今年度は、運用中のパブリッククラウドを中心にアプリケーションおよび他システムへの連携可能性について調査を進めてきた。調査によって得られた技術上、運用上の課題を踏まえて、次年度以降は、アプリケーションに対する計算環境の要件を精査するため、海外を含めた他機関の計算プラットフォームへ調査の幅を広げる。ソフトウェアアーキテクチャなど技術調査に加え、可能であれば同一のアプリケーションによる比較評価実験を実施する。

また、Society5.0 にて目標とするアプリケーションについて、複数の異なるプラットフォームを想定したプロトタイプを設計し、運用可能性を精査する。各プラットフォームのデータ基盤、GPU などの高性能計算資源を連携させるために必要なフレーム

ワーク、ワークフローの開発、評価実験を繰り返すことで、最適な要素技術を提案する。

7. HPCI 運営

JupyterLab、Open OnDemand 等の Web UI によるユーザビリティの統一、ワークフローツールについて次年度以降も詳細な検討を継続する。特に、HPCI での資源融通に関して議論を深め、提言をまとめる。

現在、HPCI においては次世代認証基盤の導入が進められている。既存の HPCI からの移行をスムーズに進める必要がある一方で、既存の ssh を中心とした利用方法と、上述の Web UI に基づく利用法で統一された認証系が必要である。国立情報学研究所が運用する GakuNin を中心に構成することが基本方針として確認されているが、各サービスを OpenID に基づく認証系に統一していくことが求められる。

さらに、ユーザの利便性を改善するためには、ユーザの利用申請、ユーザ管理、輸出管理等の共通化・効率化に向けた検討が必要である。

今後の富岳からポスト「富岳」への移行期においては、明らかに計算資源が不足することが見込まれる。各センターの導入計画を精査した上で、計算資源量の不足に対してどのような対応が可能か検討する。