

スーパーコンピュータ・システム

利用のための運用実施手順

第 3.0 版 2024 年 4 月

情報システム部

第1章 趣旨

この運用実施手順（以下「手順」という。）は、理化学研究所（以下「研究所」という。）情報システム部（以下「システム部」という。）のスーパーコンピュータ・システム利用規約（以下「利用規約」という。）第4条に規定するスーパーコンピュータ・システム（以下「システム」という。）の運用実施手順を定めるものである。特に利用者がシステムを利用する上で必要になる、システム構成や課題について定め、この手順に従ってシステムの運用を行うこととする。

第2章 システム構成

システム名は HOKUSAI BigWaterfall2(HBW2)であり、計算資源は以下の通りである。

第1節 計算ノード

1. 超並列計算システム (MPC)

- 312 ノード (34,944 コア)
- CPU: Intel Xeon Max 9480 1.9 GHz、112 コア/ノード、128 GiB/ノード

第2節 ストレージ

1. オンライン・ストレージ・システム (9.8 PB)

第3節 サブシステム

1. 和光大容量メモリサーバ (WLMS)

- 2 ノード (192 コア)
- CPU: Intel Xeon Gold 6418H 2.1 GHz、96 コア/ノード、3 TiB/ノード

2. GPU サーバ (GPUS)

- 4 ノード (448 コア)
- CPU: Intel Xeon Platinum 8480+ 2.0 GHz、112 コア/ノード、512 GiB/ノード

- GPU: NVIDIA H100(SXM5)、4枚/ノード
- 3. FPGA サーバ (FPGAS)
 - 2ノード (160 コア)
 - CPU: Intel Xeon Platinum 8380 2.3 GHz、 80 コア/ノード、512 GiB/ノード
 - FPGA : IA-840F(Intel Agilex AGF027)、2枚/ノード
- 4. 神戸大容量メモリ演算サーバ (KLMS) /横浜大容量メモリサーバ(YLMS)
 - 1ノード (96 コア) /1ノード (96 コア)
 - CPU: Intel Xeon Gold 6418H 2.1 GHz、 96 コア/ノード、8 TiB/ノード
 - 付属ストレージ (100TB)

第3章 課題の利用者と管理

第1節 理研内課題と HPCI 課題

課題には理研内課題と HPCI 課題の 2 種類がある。理研内課題は利用規約第 3 条(5)以外で定められた利用資格を持つものが利用できる課題であり、HPCI 課題は利用規約第 3 条(5)で定められた HPCI 課題利用者が利用できる課題である。この手順では、特に指定しない場合、理研内課題についての記述を行う。HPCI 課題については、10 章で理研内課題と異なる点を記述する。

第2節 課題代表者と課題代表者代理

利用規約第 4 条に基づく課題代表者は課題全体について管理をする責任があり、課題メンバーの管理を行う必要がある。また、課題代表者と同じ権限を持つものとして、課題代表者代理を登録することができる。

第3節 課題メンバー

利用規約第 3 条によって定められた利用資格を持つものを課題メンバーとして登録できる。また、課題メンバーとして、実際にシステムにログインしプログラムやジョブを直接操作する者と、課題において利用状況を管理する者（以下「オブザーバ」という。）を登録することができる。

第4節 安全保障輸出管理

課題メンバーが非居住者であるなど研究所の安全保障輸出管理の審査対象である場合は、事前に審査票を起票し研究インテグリティ・経済安全保障本部の承認を得る必要がある。

第5節 倫理規定

人を対象とする生命科学・医学系研究の実施など所属機関での審査対象となる研究については、所属機関の倫理規定などに従うこと。事前にシステムの利用について倫理審査などで許可を受けておくこと。

第4章 利用負担金

利用規約第 4 条に基づき、演算時間とオンライン・ストレージの利用について利用負担金が設定されている。

第1節 演算時間の利用負担金

MPC の演算時間は利用負担金の対象とする。有償利用の権利は年度末まで有効とし、未使用分の返金などは行わないものとする。

第2節 ストレージの利用負担金

第 8 章第 2 節のデータ領域は利用負担金の対象とする。課題で利用したい容量を申請するものとする。ただし、期間は原則年度末までとする。

第3節 支払責任者

支払責任者は原則、所属長（主任研究員、チームリーダーやユニットリーダー以上の管理職）とする。

第5章 課題の申請

第1節 HBW2 ポータル

課題に関する各種申請は HBW2 ポータルにより行う。ただし、HBW2 ポータルで取り扱えないものはメールなどを使って行うこともある。

第2節 HBW2 ポータルユーザ登録

HBW2 ポータルに最初にログインした際に、HBW2 ポータルユーザ登録を行える。HBW2 の課題メンバーになるためには、あらかじめ HBW2 ポータルユーザ登録を行う必要がある。ただし、研究所の所属を持たない利用者の場合は、システム部の運用チームが HBW2 ポータルユーザ登録を行う。

第3節 新規課題の作成

新たに課題を利用したいものは新規課題の作成を申請する。申請時には、代表者の情報、利用内容などを入力し、課題メンバーを登録する。

第4節 課題の申請

課題メンバーの追加変更や利用負担金の対象となるサービスへの申し込みなどは案内に従って申請する。

第5節 課題の継続

年度末に継続希望すると次年度に課題を継続することができ、利用しているストレージの領域も継続して使える。

第6章 演算時間の利用

第1節 演算時間の計算方法

システムの演算資源は (CPU) コア演算時間で計算し、全コア数×年度内で提供可能な時間とする。課題毎のコア演算時間は $\sum_{i=1, \{全ジョブ\}}(\text{利用コア数} \times \text{処理経過時間})$ とする。また、コアあたりの既定のメモリ量よりも大きなメモリ量を使用する場合には、使用メモリ量をコア数に換算してコア演算時間とする。例えば、MPC のノードで利用できる全メモリ量を利用する場合、1 コアしか利用していなくても 1 ノード (112 コア) 利用したものとする。

第2節 演算時間の無償枠

それぞれの課題は MPC の年間の演算資源の 1% までを上限として無償で利用できる。

第3節 演算時間の追加

それぞれの課題において、無償で利用できる MPC の演算時間の上限を超えた場合には、HBW2 ポータルから申請することで、有償で追加することができる。

第4節 低優先度実行

システムの有効利用のために、消費した MPC の演算資源が申請の上限に達した課題について、優先度を大きく下げてジョブの実行を許可する。このとき利用者は新たに申請を行う必要はない。

第5節 サブシステムの演算時間

それぞれの課題はサブシステムの演算資源の 1% を利用することができる。各課題は必要に応じて演算資源の追加申請を行うことができ、最大 20% までの利用を行うことができる。ただし、一部サーバについては、別途利用方法を定めるものとする。また、サブシステムの運用方法は状況によって臨機応変に変更するものとする。

第7章 ジョブ運用と優先度制御

各課題間におけるジョブ実行による計算資源の公正利用のため優先度制御を行うものとする。

第1節 優先度制御方法

課題の優先度は、各課題の計算資源の消費割合を調整するために、システム部の運用チームがジョブ運用において適切な設定を行う。また、課題内においても、計算資源を可能な限り公正に利用出来るように設定を行う。また、有償で演算時間を追加した場合は、利用期間を通じて計画的に利用する限りにおいて、演算時間を使い切れるように優先度の調整を行う。

第2節 システムの占有と緊急実行

運用期間中において、システムを占有する必要があるようなジョブ実行を行う必要がある場合、システム部と協議の上、課題として承認された演算時間の範囲内でシステム部の運用チームが必要な措置を行う。

代表者から緊急にジョブ実行を行う必要がある旨を、然るべき対応依頼としてシステム部の運用チームが受け付けた場合、全体のジョブ実行状況を勘案し、依頼課題の優先度制御を変更することが出来る。

第8章 ストレージ利用

第1節 ホーム領域

ホーム領域としてアカウント毎に一律4TBのオンライン・ストレージ領域を付与する。利用者が複数課題に所属している場合、アカウントと付与される4TBのホーム領域は共通とする。

第2節 データ領域

データ領域は課題単位で利用可能なオンライン・ストレージ領域である。TB単位に必要な容量を申請できるが、大容量になる場合は他の課題と調整を行う可能性がある。

第3節 ストレージの管理

利用容量を適時集計し、申請量に対する利用が少ない課題に対しては利用予定の確認を行い、必要容量以上は削減することがある。ただし、削減されても必要に応じて拡張の再申請を受け付ける。

課題番号を有さない利用者のデータは、課題失効後6ヶ月間はデータを削除しない。ただし、利用負担金の対象となるストレージの領域は、継続利用の意思を示さない限り、利用後のデータの保存を保証しない。

システム移行期など、利用者のデータを異なるシステム間で移行する必要がある場合、システム部は利用者および利用者が属する代表者にデータの削除、圧縮や単一ファイルへの纏めなどの依頼を行う。ただし、利用者および代表者への再三の個別依頼メールに対して、応答が無い場合には、システム部側でデータの削除や操作などを行う。

第9章 報告

利用規約14条に基づき、利用者は報告書を提出する必要がある。

第1節 利用報告書

理研内課題の代表者は利用報告書を提出すること。提出時期は、原則として年度末までの決められた期日あるいは利用終了時とする。利用報告書には、システムを利用して行なった計算・研究の内容、得られた知見、考察などを記載し、「研究成果リスト」と「論文別刷など」を添付すること。

研究成果リストは、システムを利用した成果である論文、口頭発表などを著者、タイトル、ジャーナル名、年月などを記載したリストとすること。論文別刷などは、研究成果リストに記載した研究成果の論文別刷、口頭発表資料、予稿集などとする。

第10章 HPCI 課題

HPCI 課題における手順は理研内課題に準じるが、異なる点については以下になる。

第1節 HPCI 課題の利用者管理

HPCI 課題における利用者管理は利用規約第 3 条(5)にある一般財団法人高度情報科学技術研究機構（以下「機構」という。）に示された方法によって行うこと。課題代表者代理やオブザーバの登録はできない。安全保障輸出管理については課題代表者に別途案内を行う。

第2節 HPCI 課題の申請と管理

HPCI 課題における課題についての申請や報告書の提出などは、機構に示された方法によって行うこと。HPCI 課題として採択された課題については、システム部の運用チームが HBW2 ポータルに課題と利用者の登録を行う。

第3節 HPCI 課題の演算時間

HPCI 課題において申請された演算時間が 720 コア時間単位で割り切れない場合には、演算時間を 720 コア時間単位で割り切れるよう切り上げて割り当てを行う。演算時間の無償枠と追加、低優先度実行は対象外とし、MPC 以外の演算資源は利用対象外とする。

第4節 HPCI 課題の優先度制御

利用期間を通じて計画的に利用する限りにおいて、HPCI 課題で割り当てられた演算時間を使い切れるように優先度の調整を行う。

第5節 HPCI 課題のストレージ

利用者が理研内課題や他の HPCI 課題に所属している場合、アカウントと付与される 4 TB のホーム領域は共通とする。HPCI 課題において申請されたデータ領域が TB 単位で割り切れない容量の申請があった場合には、容量を TB 単位で割り切れるよう切り上げて割り当てる。利用終了後のデータの保管については機構が提示する規定等に従う。

第6節 HPCI 課題の報告

利用報告書の提出は、機構に示された方法によって行うこと。

第11章 その他

この手順に定めるもののほか、システムの利用や運用に関し必要な事項は部長が別に定める。