

「京」を中核とする HPCI システムにおける RIST の利用支援とアプリケーション・ソフトウェア利用環境整備計画

吉澤 香奈子¹⁾, 役 誠雄¹⁾, 小林 清二¹⁾, 増田 典雄¹⁾, 宮内 敦¹⁾,
野口 孝明¹⁾, 新宮 哲¹⁾, 高津 英幸¹⁾, 奥田 基¹⁾

1) 高度情報科学技術研究機構 神戸センター

yoshizawa@rist.or.jp

User Support Services and Application Software Usability Improvement Project by RIST in the HPCI System Including K computer

Kanako Yoshizawa¹⁾, Shigeo Eki¹⁾, Seiji Kobayashi¹⁾, Norio Masuda¹⁾, Atsushi Miyauchi¹⁾,
Takaaki Noguchi¹⁾, Satoru Shingu¹⁾, Hideyuki Takatsu¹⁾, Motoi Okuda¹⁾

1) Kobe Center, Research Organization for Information Science & Technology

概要

登録施設利用促進機関及び文科省委託事業「HPCI の運営」代表機関である一般財団法人高度情報科学技術研究機構 (RIST) は、「京」を中核とする HPCI システムにおいて、多様な分野の研究者による、高度かつ先端的な利用が円滑に行われるように利用支援を行っている。この利用支援の一環として、平成 29 年度から RIST のこれまでの利用支援から得られた知識や技術を活かし、HPCI 利用成果の最大化や、資源の効率的利用、国の資産としてのアプリソフトの活用・普及などを目指し、アプリケーション・ソフトウェアに対する利用環境整備業務を実施している。

1 はじめに

特定高速電子計算機施設（「京」）は、理化学研究所により設置、運用される極めて高度な演算処理を行う電子計算機である。その「京」を中核とする革新的高性能計算環境（HPCI）では、「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「最終報告」に基づき、理化学研究所、9 大学（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）、および 2 研究機関（海洋研究開発機構、統計数理研究所）が、計算機資源の一部を供出し、全国の幅広い利用者に HPC 環境を提供する体制と仕組みを提供している。

「京」の利用にあたっては、中立・公正な利用者選定が要求されるため、「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を設け、利用促進業務（利用研究課題の公募・選定、計算機資源の配分、利用支援、成果の普及等）を実施することが特定先端大型研究施設の共用の促進に関する法律に定められている。一般財団法人高度情報科学技術研究機構（RIST）は、平成 23 年 10 月に文部科学省より「京」の登録機関に認定

され、平成 24 年 4 月より神戸にて登録機関業務を開始した。平成 29 年 4 月からは登録施設利用促進機関の登録更新を受け、第二期の業務を実施している。「京」を除く HPCI の利用にあたっては RIST が文部科学省の委託を受け、「京」とともに HPCI として一括して利用促進業務を実施している。さらに平成 29 年度からは RIST が「HPCI の運営代表機関」として「京」を除く HPCI の運営を行っている。

利用促進業務においては、利用者からの一括した問い合わせの窓口（ヘルプデスク）の運用、計算機資源等に関する情報提供、産業利用促進のための HPCI アクセスポイント東京の運用および利用支援実施、研究成果のデータベース（DB）化などにより利用者の利便性を図っている。

平成 29 年度から RIST では、この利用支援業務の一環として「HPCI で利用されるアプリケーション・ソフトウェア（アプリソフト）の利用環境整備（移植、実行環境整備、最適化、利用支援体制構築、等）」を実施している。これは、HPCI におけるアプリソフトの利用状況や、アプリソフトに関して利用者に行った調査から判明したオープン

ソースソフトウェア (OSS)¹の利用・支援への期待や、HPCI コンソーシアム (HPCI コンソ)²やスーパーコンピューティング技術産業応用協議会 (産応協)³などの利用者を代表するコミュニティからの OSS や商用ソフトの利用環境の整備・最適化推進・利用支援とアカデミアが開発している先進的・革新的アプリソフトの産業界での利用拡大に向けた支援と継続的な整備についての要望、などが背景になっている。

我々は、これらの要望に応え、今後のポスト「京」のプロジェクトを見据え、これまで個々の利用者からの要請に応じて行って来たアプリソフトの利用環境整備を先行的・継続的に行うことにより、HPCI 利用成果の早期の最大化、HPCI 資源の効率的利用・支援の効率化、さらに、国の資産としてのアプリソフトの活用・普及とスパコンの新しい応用の開拓等を行い、将来の HPCI 及びポスト「京」を利用したアカデミアにおける研究と産業界における研究開発の加速への貢献を目指している。

本稿では、HPCI におけるアプリソフトの利用状況や、RIST の利用支援活動、さらに、それらの調査、分析に基づくアプリソフトに対する利用環境整備業務について紹介する。

2 HPCI におけるアプリソフトの利用状況

HPCI におけるアプリソフト利用の現状を把握するために、最近 2 年間 (平成 27 年度～平成 28 年度) の利用研究課題について調査を行った。調査したアプリソフトは、平成 27 年度は利用報告書で記述された利用ソフトウェア、平成 28 年度は課題申請書 (不採択課題等を含む) に記述された利用予定ソフトウェアをそれぞれ対象とした。

HPCI の 4 課題以上で利用対象となったアプリソフトについて、アカデミア課題と産業課題に分

けてまとめたものをそれぞれ、表 2-1、表 2-2 に示す。なお、(一般/産業) トライアル・ユースと成果非公開の産業利用課題 (個別利用) は調査対象から除き、平成 28 年度は定期募集課題のみを調査対象としている。開発種別については、OSS、国プロ、商用、独自開発に分類し、それぞれ背景色を青、緑、赤、白に色分けした。ここで、国が実施または実施中の戦略ソフトプロジェクトや重点課題プロジェクト等のプロジェクトを国プロと略し、国プロで開発されたまたは開発中のアプリソフトを国プロアプリソフトと呼ぶ。国プロアプリソフトは、オープンソースであっても HPCI 戦略プログラムとポスト「京」重点課題など国のプロジェクトで開発されたものとして OSS と区別している。独自開発というのは、自主開発に加えて、外部の大学や研究機関等が独自開発した非公開のアプリを共同研究等で利用しているものも含めて分類した。

表 2-1 のアカデミア課題の利用対象となったアプリソフトの順位を見ると、

- 材料・バイオ分野のアプリソフトが、上位を占めている。
- 商用アプリでは、4 位の VASP のみが一覧に入っている。

がわかる。

一方、表 2-2 の産業課題では、

- Computer Aided Engineering (CAE) 分野のアプリソフトが、上位を占めている。
- 商用のみのアプリソフトは、5 位の LS-DYNA だけである。

がわかる。

これらの結果から、アカデミア課題と産業課題のそれぞれで需要の高い材料・バイオ分野と CAE 分野のアプリソフトの利用環境整備を優先的に行う必要があると判断し、以降の国内外のアプリソフトの状況調査では、この 2 つの分野に限定した。

3 RIST の利用支援—アプリソフト利用の視点から—

RIST は、「京」の登録施設利用促進機関として、利用者選定業務に加えて、利用支援業務として (1)申請前の事前相談、(2)利用相談、(3)技術支援、(4)情報提供、(5)利用講習会の実施、の 5 つの支援を実施している。特にこの中で「技術支援状況」と「利用講習会の実施状況」について分析した。

1 オープンソースソフトウェア (Open Source Software) とは、ソースコードが公開され、無償で利用でき、また、変更したソースコードを自由に配布できるもので、正式な定義は The Open Source Initiative Definition (<https://opensource.org/osd>) 参照。

2 2017 年度 今後の HPCI 第二階層計算資源の整備とその活用に関する提言

3 2016 年 2 月 18 日 ポスト「京」への期待、2016 年 3 月 11 日 「京」の共用に関する評価および「京」の今後に向けた意見・要望、2017 年 5 月 16 日 産応協からの提言「HPCI の産業界活用促進に向けて (I)」

表 2-1 HPCI の 4 課題以上で利用対象となったアプリソフト（アカデミア課題）

課題数	学術	産業	アプリ名称	応用分野	計算手法・対象	開発種別
27	24	3	GROMACS	バイオ／物質材料	古典MD	OSS
16	14	2	MODYLAS	バイオ／物質材料	古典MD	国プロ
11	11	0	GENESIS	バイオ／物質材料	古典MD	国プロ
10	9	1	VASP	物質材料	第一原理MD	商用
9	9	0	NTChem	バイオ／物質材料	量子化学	国プロ
9	9	0	SCALE	気象防災	気象	国プロ
9	8	1	LANS3D	CAE	流体解析	独自開発
8	8	0	NICAM	気象防災	気象	国プロ
8	8	0	TOMBO	物質材料	第一原理MD	独自開発
10	7	3	Quantum Espresso	物質材料	第一原理MD	OSS

表 2-2 HPCI の 4 課題以上で利用対象となったアプリソフト（産業課題）

課題数	学術	産業	アプリ名称	応用分野	計算手法・対象	開発種別
18	5	13	OpenFOAM	CAE	流体解析	OSS/商用
14	5	9	FrontFlow/blue	CAE	流体解析	国プロ
12	5	7	FrontFlow/red	CAE	流体解析	国プロ/商用
10	4	6	LAMMPS	物質材料	古典MD	OSS
8	3	5	LS-DYNA	CAE	衝突解析	商用
6	2	4	CUBE	CAE	流体解析	国プロ
27	24	3	GROMACS	バイオ／物質材料	古典MD	OSS
10	7	3	Quantum Espresso	物質材料	第一原理MD	OSS
6	3	3	FrontISTR	CAE	構造解析	国プロ
4	1	3	SeanFEM	気象防災	地震応答解析	独自開発

3.1 技術支援状況

技術支援は、利用者の要望に基づいて利用者の計算プログラムの性能分析を行い、実行時間の短縮を図り、また、並列度を上げることを目的とする。「京」については、共用開始後の選定を経た課題が対象であり、HPCI については、開始当初の産業利用に加え、H27 年度より一般利用へ対象を拡大した。

例年、30 件程度の支援依頼を受け、様々なアプリソフトに対して支援を実施している。図 3-

1 に年度ごとの支援対象となったアプリソフトの種別、図3-2に OSS ごとの支援件数を示す。これらの調査により、近年 OSS の需要が伸びており、OSS 全体で見ても CAE 分野の OpenFOAM の支援件数が相対的に高く、材料分野では、Quantum Espresso に対する需要が上昇していることがわかる。

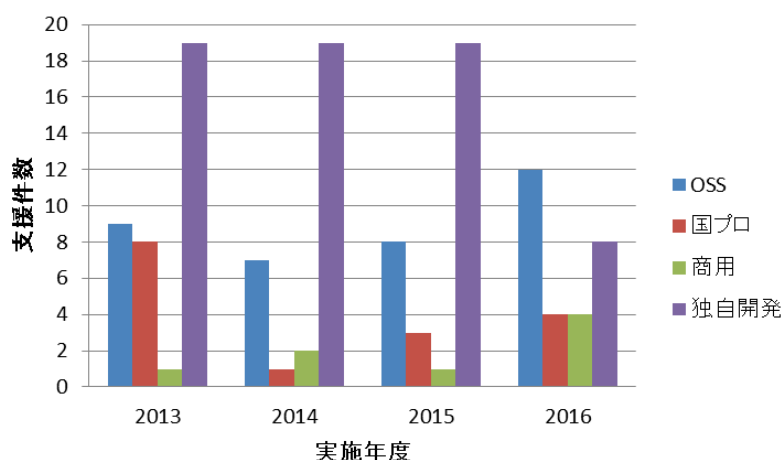


図3-1 技術支援件数内訳 (年度別)

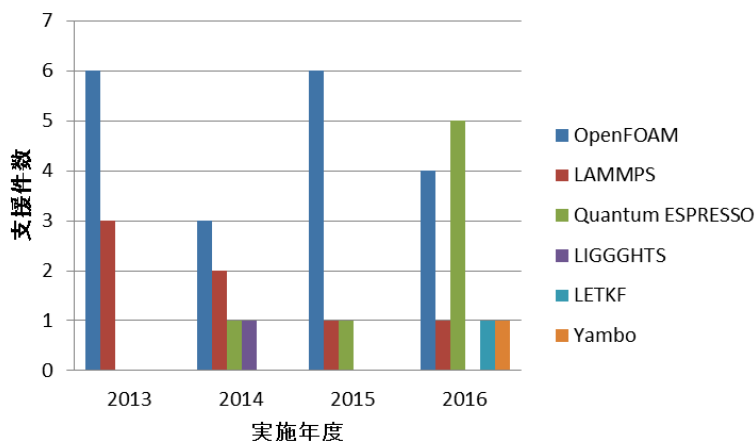


図3-2 OSSごとの支援件数推移

3.2 利用講習会の実施状況

RISTでは、京の利用者、および利用予定者を対象とした利用講習会を開催している。併せて、HPCの裾野拡大を目的とした、OpenMPやMPIのプログラミング入門、および、スカラーチューニング入門セミナーを開催している。このほかに、利用者が多く、またユーザ支援依頼も多いCAE分野と材料分野のOSSに特化したワークショップ

を開催している(図3-3参照)。これまで、CAE分野のOpenFOAMワークショップは、4年前から毎年1回、材料分野の材料系ワークショップ(古典)は平成27年度と平成28年度の2回、材料系ワークショップ(量子)は平成28年度に1回開催した。図3-3は、それぞれの参加人数を示している。このように、OSSのワークショップの参加人数は増加傾向にあることがわかる。

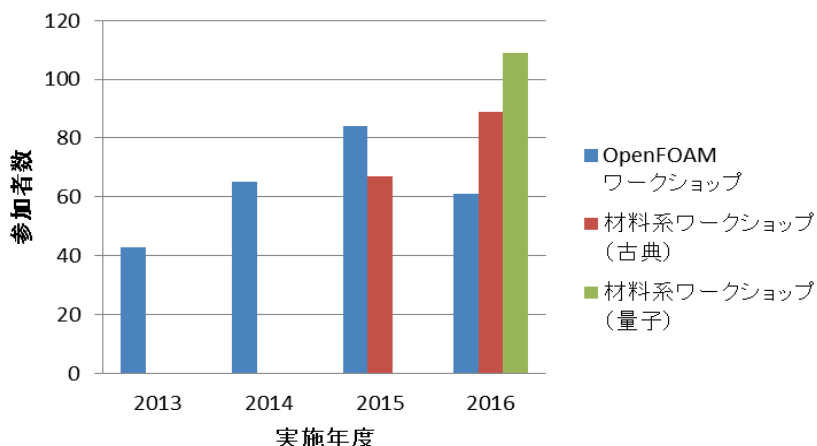


図3-3 OSSに特化したワークショップにおける1回あたりの参加者推移

3.3 ヘルプデスク(技術支援依頼も含む)への問い合わせ内容

RISTは、HPCIシステムの利用者、あるいは利用を検討している人のために一元的窓口としてヘルプデスクを設置し、利用者からの全ての問い合わせに対応することで利用者の利便性を高めている。図3-4に、平成26年~平成28年におけるヘルプデスクへの問い合わせ内容を示す。601件の問い合わせのうち、175件(全体の約1/3)は、OSSに関する問い合わせであった。

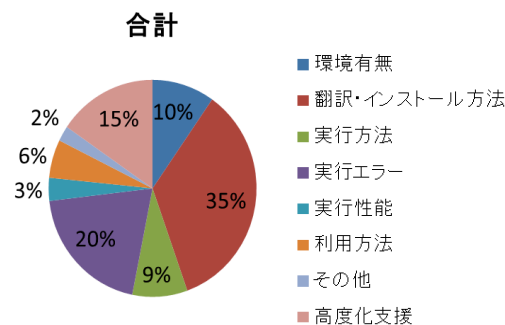


図3-4 ヘルプデスクへの問い合わせ内容

このように、ヘルプデスクには、事務手続き以外にも、各種 OSS に関する問い合わせも多く、その中で図3-4より、具体的な内容は、翻訳・インストール方法に関するものが全体の35%で一番多いことがわかる。

3.4 支援依頼に対する分析

3.1 節から 3.3 節による利用支援の実施状況の調査により、支援依頼の多いアプリソフトは、表 2-1、2-2 における利用されている課題数も多く、HPCI で需要の高いアプリソフトだと言える。また、これらの調査により、CAE 分野と材料・バイオ分野の OSS に対して、近年の HPCI での利用における需要の高まりがわかる。

さらに、詳細な支援依頼内容の分析により、支援の要件として下記のようにまとめられる。

- アプリ分野により利用の状況が大きく異なり、分野ごとの対応が必要。
- 翻訳・インストールに対する支援依頼に対応した実行環境整備(各システムですぐにアプリソフトを利用できるような環境の整備)が必要。

表 4-1 アプリソフト利用環境整備に求められる要件

項番	求められる要件	内容
1	実行環境整備と最新化	<ul style="list-style-type: none"> • HPCI の計算機環境において、OSS や商用など将来期待される幅広いアプリソフトが直ぐに使える状態にある、もしくは導入・構築手順が整備されている。 • 利用したい機能の動作確認がされている。 • 最新版に対応している。
2	実行環境での最適化	<ul style="list-style-type: none"> • 利用したい計算機環境において、実行性能が発揮されるよう最適化されている。 • 利用したい機能が最適化されている。
3	情報整備	<ul style="list-style-type: none"> • 利用マニュアル等のドキュメントが整備されている。 • HPCI で提供する計算資源または同一のアーキテクチャ上での実行性能情報が公開されている。 • 各 HPCI で動作実績のあるアプリソフトの情報が整備されている。 • 課題を解決するために利用可能なアプリソフトを案内する情報が入手できる。
4	利用講習会の開催	<ul style="list-style-type: none"> • 利用したいアプリソフトの利用講習会が受講可能。
5	利用支援体制の充実	<ul style="list-style-type: none"> • 利用支援体制が整っている。 • システムとアプリソフトの協調最適化技術など、計算機科学と計算科学の両方にまたがる利用支援を受けられる。
6	利用者が情報交換できる場がある	<ul style="list-style-type: none"> • アプリソフト開発者と利用者、または利用者間で情報交換ができるコミュニティが形成されている。

これまでには利用者からの支援依頼があった事項に対して断続的に作業を行ってきたが、これから

- OSS の利用者は、CAE 分野と材料・バイオ分野に比較的集中しているため、この2分野に対する支援体制の充実が重要。
- OSS 関連のワークショップにおける参加者の数や反応を見ても、OSS への期待は高く、さらなる OSS に関する情報提供が必要。

4 アプリソフト利用環境整備への取り組み

我々は、これまでの利用支援活動において蓄積した知識や技術に基づき、さらに調査、分析を行うことにより、利用成果の最大化や、HPCI 資源の効率的利用を目指すアプリソフト利用環境整備計画を立案し、整備するアプリソフト選定基準などの検討を行った。

4.1 アプリソフト利用環境整備の要件

我々は、ここまでの調査・分析や、アカデミアや産業界の利用者へのアプリソフトに対する要望調査を基に、アプリソフトの利用者から求められる要件を表 4-1 にまとめた。

は、利用者の需要を把握した上で、継続的・戦略的に整備を進める必要がある。

整備対象のアプリソフトについて、これらの要件に沿うように整備計画を立て、推進していく。

4.2 アドバイザリ WG の設置

アプリソフト利用環境整備にあたって、外部の有識者からのアドバイスをいただくため、平成 28 年 12 月にアプリケーション・ソフトウェア利用環境整備アドバイザー WG を設置した。本 WG では国内外のアプリソフトに関し、幅広い視点を持つ有識者から、整備対象のアプリソフトの選定と整備の推進計画に対して助言をいただいている。本 WG は、平成 29 年 10 月の時点で、本 WG はアカデミア 9 名（主査・副主査、流体、構造、物性・材料、バイオ医療、電磁場、燃焼）、産業界 3 名（重工、化学、製薬）により構成されている。また、必要に応じて、現在のメンバー以外の他の分野の専門家への助言を依頼する可能性もある。

4.3 アプリソフトの海外調査の実施

OSS の開発・利用が盛んな欧州の現状や今後の動向などを把握するため、平成 29 年 1 月末から 2 月初旬にかけて海外調査を実施した。CAE 分野と材料・バイオ分野の以下のアプリソフトや DB の開発等を行っている組織と計算資源提供機関である PRACE を調査対象とした。

- CAE 分野：OpenFOAM, RADIOSS, FORGE
 - 材料・バイオ分野：GROMACS, Quantum Espresso, ESPResSo++, VOTCA, NoMaD12
- 調査の結果、欧州のアプリソフト開発では以下の基本戦略をとっていることが判明した。
- HPC における世界戦略としてハードウェア開発競争には加わず、アプリソフト開発に主眼を置く。
 - 材料・化学、エネルギー、気象等の基礎科学的な分野では、アプリソフトの開発推進を目的とした公的資金による 9 つの CoE を設立。そこでは、アプリ開発だけでなく、開発者・ユーザ支援に的を絞った CoE も設立し、基礎科学・ソフト開発・サポートの役割分担を徹底した組織的な開発を行う。
 - 単独のアプリソフト開発ではなく、アプリソフトを中心とし、市場の拡大、人材育成・輩

出などの好循環を生み出すエコシステムの構築を目標とする。

また、この調査を通じて、欧州の CoE、OSS コミュニティとの情報交換チャンネルの構築と、日本発アプリソフトの普及に向けた欧州のアプリソフト・エコシステムに関する情報収集と分析を行うことができた。

4.4 利用環境整備方針

現在の利用環境整備に関するアプリソフト選定の方法論や判断基準などの方針は下記のとおりである。

1. 利用の需要の高い、または将来高くなると予想される OSS・商用ソフト・日本のアカデミアで開発されたアプリソフトを対象とする。
2. 更に、現時点では「京」等での利用は多くない、また将来の需要も明確ではないが、国の資産として重要、またはスパコンの新しい応用の開拓を担うと期待されるアプリソフトも対象とする。
3. 重点・萌芽的課題プロジェクトで開発中のアプリについては、現在もプロジェクトが進行中で開発段階にあるので、今後の対応については関係者と検討を続ける。
4. 整備したアプリソフトは、原則としてオープンつまり再配布可能を前提とする。

4.5 アプリソフトの分類

上記の方針に従い、下記のようにアプリソフトを分類し、そのカテゴリから整備対象となるアプリソフトの選定を行なった。近い将来の利用を想定して短期的に整備が必要なものはカテゴリ 1 に、一方、中期的に重要性を増してくると予想されるものをカテゴリ 2 に分類する。

- A) カテゴリ 1 - 「京」を中核とする HPCI・ポスト「京」で現在及び将来に多くの利用が見込まれるもの。
- B) カテゴリ 2 - 現時点では「京」および HPCI 等での利用は多くないが、将来の技術開発・社会応用面で戦略的に重要なもの。

4.6 平成 29 年度の実施計画および実施状況

平成 29 年度は、「京」については、(1) カテゴリ 1 のアプリソフトからは数本を選択して利用環境整備を実施しており、(2) カテゴリ 2 のアプリソフトについては、調査による候補リストの作成

と絞りこみを行っており、可能であれば利用環境整備に着手する予定である。他の HPCI システムに対しては利用環境整備に向けた資源提供機関の状況調査及びこれに基づく整備計画立案を行っている。また、アドバイザリ WG を開催し随時推進についてのアドバイスをいただいている。

カテゴリ 1 のアプリソフトに関しては、これまでの調査とアドバイザリ WG の意見等から、表 4-2 の 4 つのアプリソフトを選定し整備を行っている。選定された 4 つのアプリソフトは、HPCI における利用状況や RIST による支援状況の調査において需要の高かった、CAE 分野と材料バイオ分野の OSS である。材料・バイオ分野の OSS である LAMMPS、Quantum Espresso、GROMACS は、この分野のデファクトアプリと呼ばれ、既に日本

でも利用者が多いので、主として「京」での利便性の向上を目指した整備を行う。具体的には、「京」でのプリインストールや、利用者には有益な性能情報の公開などである。CAE 分野の OpenFOAM についても同様の方針で整備を行う予定である。

カテゴリ 2 のアプリソフト（将来の技術開発・社会応用面で戦略的に重要なアプリソフト）の候補については、平成 29 年度の上期はアプリソフトの開発者、アドバイザリ WG、有識者、HPCI 計算資源提供機関や学会等でヒアリングを実施し、それらの結果を参考に総合的に検討して整備アプリソフトを決定する。下期は決定した候補アプリソフトについて、開発状況やリリース状況、移植の難易度や最適化状況、需要等の調査を行い、「京」を対象に整備作業に着手する予定である。

表 4-2 平成 29 年度のカテゴリ 1 の整備対象アプリソフトと実施概要

アプリ名称	応用分野	開発種別	実施概要
OpenFOAM	CAE	OSS/商用	<ul style="list-style-type: none"> •プリポスト・計算ノードへのインストール •チュートリアル実行手順の作成 •ドキュメント整備 •並列性能情報の収集 •情報公開
LAMMPS	バイオ/物質材料	OSS	<ul style="list-style-type: none"> •最新版のコンパイル、インストール •サンプルデータによる実行性能分析・評価 •ドキュメント整備 •情報公開
Quantum Espresso			
GROMACS			

4.7 平成 29 年度推進体制

アプリソフト利用環境整備計画における RIST 内における整備体制と、関連する機関との連携体制を、図 4-1 に示す。

インストール及び基本ライブラリ・言語系等の整備に関して理化学研究所計算科学研究機構（理研 AICS）や、各 HPCI 資源提供機関と連携して作業を進めている。

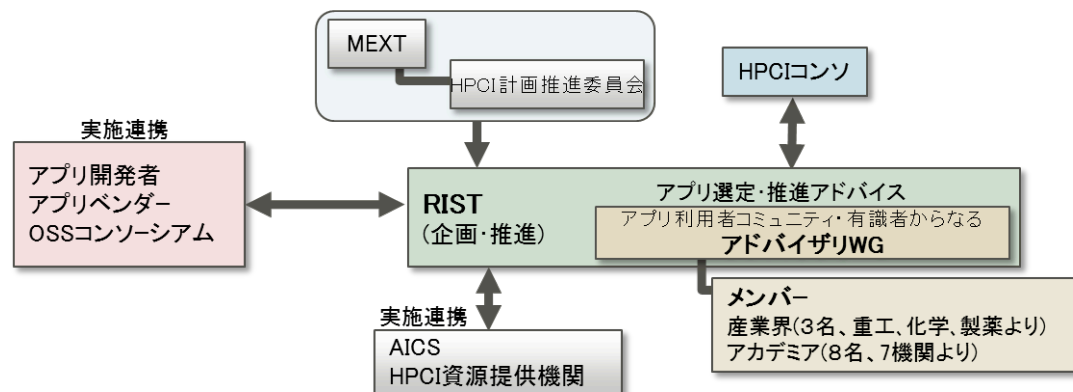


図4-1 アプリソフト整備推進体制

5 まとめ

RIST は、登録施設利用促進機関 / 文科省委託事業「HPCI の運営」代表機関として利用支援業務を行っている。さらに、我々は、HPCI コンソや産応協などの外部組織や、HPCI の利用者からの要望を受け、HPCI、今後のポスト「京」を見据えて、利用が多い、またはこれから多くの利用が見込まれる OSS や商用アプリ(カテゴリ 1 アプリソフト)と国の資産として重要なまたはスパコンの新しい応用の開拓を広げることが期待されるアプリソフト(カテゴリ 2 アプリソフト)について、先行的かつ継続的に利用環境整備を行っている。この整備の推進にあたっては、RIST のこれまでの利用支援において蓄積された知識、技術に基づき、また、有識者から構成されるアドバイザリ WG の意見も参考とし、

- アプリソフトの利用環境について調査、分析
- 欧州のアプリソフト開発に関する調査、分析
- 利用環境整備の要件のまとめ
- 整備対象とするアプリソフトの選定方針と候補リストの作成
- 整備対象とするアプリソフトの選定
- 整備項目と整備計画の立案
- 整備計画推進体制の構築

などを実施した。

平成 29 年度においては、「京」を対象とし、カテゴリ 1 のアプリソフトとして、HPCI において需要の高い 4 本の OSS を選定し、主に利用者の利便性を高めるための整備作業を行っている。また、HPCI システム構成機関における状況を調査し、平成 30 年度以降、対象を他の HPCI システムに広げていくこととした。カテゴリ 2 のアプリソフトについては調査、選定作業を継続し、「京」を対象に整備に着手する予定である。

この利用環境整備計画の実施においては、継続してアドバイザリ WG などの有識者の意見を参考にするとともに、関連する機関(理研 AICS、HPCI システム構成機関等)との連携を進める。また、欧州のアプリソフト調査によって得られた関係諸機関とのコミュニティも維持していく。

RIST としては、これらの計画の推進により、アプリソフトの利用による HPCI における成果の早期の最大化・計算機資源の効率的利用・支援の効率化、国のアプリソフト資産の活用・普及とスパコンの新しい応用の開拓を実現し、将来の HPCI

及びポスト「京」を利用したアカデミアにおける研究と産業界における研究開発の発展への貢献を目指している。