

# RIST による「京」を中核とする HPCI システムの利用支援

山岸 孝輝<sup>1)</sup>, 野口 孝明<sup>1)</sup>, 草間 義紀<sup>1)</sup>, 奥田 基<sup>1)</sup>

1) 高度情報科学技術研究機構

takateru.yamagishi@rist.or.jp

## User Support Services in the HPCI System Including K computer by RIST

Takateru Yamagishi<sup>1)</sup>, Takaaki Noguchi<sup>1)</sup>, Yoshinori Kusama<sup>1)</sup>, Motoi Okuda<sup>1)</sup>

1) Research Organization for Information Science and Technology

### 概要

特定高速電子計算機施設の登録施設利用促進機関及び文部科学省委託事業「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、多様な分野の利用者による、高度かつ先端的な利用が円滑に行われるよう、また、利用者からのより先端的、革新的な要求に対応できるよう利用支援体制を整えている。具体的には、利用支援の一元的な窓口を設け、ワンストップサービスとして各種情報提供、利用相談及び技術相談など、利用者の多岐にわたる問い合わせに対応するとともに、ユーザアプリケーションの調整・高度化の支援等を実施している。また、利用支援の一環として、HPCI 利用成果の最大化、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・ソフトウェアの利用環境整備を進めている。

## 1 はじめに

特定高速電子計算機施設は、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（「京」）を使用して研究等を行う施設である。その「京」を中核とする革新的ハイパフォーマンス・コンピューティング・インフラ（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）及び 1 研究機関（海洋研究開発機構）が、計算機資源の一部を供出し、全国の幅広い利用者に HPC 環境を効率良く利用できる体制と仕組みを提供している。

「京」の利用にあたっては、登録施設利用促進機関（登録機関）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 月より神戸センターにおいて登録機関業務を開始した。平成

29 年 4 月からは登録機関の登録更新を受け、第二期の業務を実施している。また、「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」と共に、HPCI として一括して利用促進に関わる業務を実施している。平成 29 年 4 月から、RIST が「HPCI の運営に係る代表機関」として「京」を除く HPCI の運営を行っている。

利用支援においては、利用者からの一元的な問い合わせの窓口（ヘルプデスク）を通して各種の相談に対応するとともに、計算機資源等に関する情報提供を行っている。また、研究成果のデータベース化やその公開、産業利用促進のための HPCI アクセスポイント東京の運用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。ここでは、利用者の利便性の大幅な向上、成果の早期創出、システムの効率的な利用、利用者の裾野拡大、さらには国プロアプリの普及等の効果を狙い、「利用者が多いまたは見込まれるアプリソフト」や「国で開発された重要なアプリソフト並びに新しい分野として利用が見込まれるアプリソフト」（国プロアプリ等）を

HPCI の利用者が直ぐに利用できる環境を整備している。

本稿では、RIST の利用促進業務の内、利用支援及びその一環として行なっているアプリソフトの利用環境整備について紹介する。

## 2 RIST の利用支援

### 2.1 利用支援の目的と概要

利用支援の主な目的は、「京」を中核とする HPCI に関し、利用の促進、計算機資源の円滑な利用、更には、資源の効率的な利用並びに計算科学技術研究を支える人材の育成や利用者の裾野の拡大である。これらを実現するため、RIST は、一元的な窓口を担い、関連する各種情報をポータルサイト等で適時に、かつ、的確に情報提供するとともに、利用相談や技術相談に応じている。また、要請に応じてアプリソフトの調整・高度化の支援等を行うとともに、講習会等を定期的開催している（図 1）。RIST は、これらの利用支援を効率的・効果的に実施するための体制を構築し、運用している。

#### 2.1.1 一元的相談窓口（ヘルプデスク）

HPCI システムの利用者（HPCI システム利用研究課題への申請を検討している人を含む）からの全ての問い合わせを一元的に受け付ける窓口としてヘルプデスクを設置し、ワンストップサービスによる利用支援を実施することで、利用者の利

便性を高めている。相談者からの問い合わせは、専用に構築したヘルプデスクシステムを用いることで大量の問い合わせに対して迅速な対応が可能となっている。また、ヘルプデスクにおいて問題点を的確に切り分け、利用相談、技術相談、情報提供等の各種支援に誘導することで効果的な支援ができる体制を RIST 内に構築している。

ヘルプデスクでは、利用相談、技術相談など、年間約 1600 件に上る問い合わせに対応している。それらの中で、高度な技術とノウハウを持った専門家・技術者が対応する必要がある技術相談は、後述するように「高度化支援」（アプリケーションの性能分析・性能改善等の支援）として対応している。

ヘルプデスクの対応に対する満足度調査では「役立つ」との評価を 90%以上から頂いており、ヘルプデスクを通して利用者の円滑な計算機利用を支援することにより、早期の成果創出に貢献していると考えている。

#### 2.1.2 利用相談・技術相談

利用相談としては、「HPCI においてどのような計算機資源が利用出来るのか」、「どの計算機資源を利用するのが適切か、それらを利用するためにはどのような準備が必要なのか」、「どのような HPC 技術を適用すれば問題を解決できるか」、といった相談に対応する、いわゆるコンシェルジュ的対応を行っている。

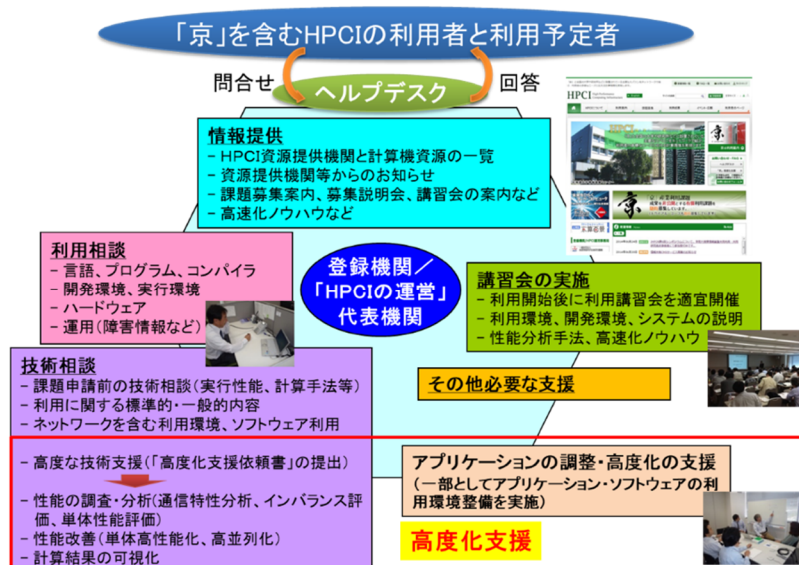


図 1 RIST が実施している利用支援の全容

具体的には、利用相談、技術相談として以下のような相談に対応している。

(1) 技術的内容に関する相談

- ・ システム運用
- ・ ハードウェアやベーシックソフトウェア及びミドルウェア
- ・ プログラム言語
- ・ プログラム開発環境や実行環境
- ・ 各種ツール
- ・ HPCI 共用ストレージ

(2) 利用時のトラブル相談

- ・ 利用者プログラムとハードウェアやソフトウェアの各コンポーネント等のシステムとの問題の切り分け
- ・ 代替策検討支援の実施等

(3) 各種手続きに関する相談

- ・ 課題参加者の変更等の手続き

(4) 利用終了時の相談

- ・ 利用研究課題の終了時の手続き（利用報告書の提出、「京」共用ストレージにおける計算データ保管等）
- ・ 次年度利用研究課題への継続手続き

## 2.2 高度化支援

### 2.2.1 高度化支援の概要

ヘルプデスクに問い合わせがあった技術相談の内、高度な技術とノウハウを持った専門家・技術者が対応する必要がある相談については、高度な技術相談として研究実施相談者（法定数：14名）と支援補助技術者が対応している。具体的には、構造、流体、量子、粒子の分野の専門家が、これまでに蓄積した高度化ノウハウを活用しながら、問題の解決を支援している（高度化支援）。また、「京」と「京」以外の HPCI、アカデミアと産業利用の一体的支援（情報共有）により、効率的に高度化支援を実施している。

高度化支援には、性能の分析（通信特性分析、インバランス評価、単体性能評価）、性能改善（単体高性能化、高並列化）、計算結果の可視化に関わる支援に加え、アプリケーションの調整・高度化

の支援が含まれる。後述するアプリケーション・ソフトウェアの利用環境整備は、アプリケーションの調整・高度化の支援の一部として実施している。

高度化支援は、「高度化支援依頼書」を提出して頂くことにより随時受け付け、無償で実施している。案件にもよるが、「京」では1件当たり平均4ヶ月程度の作業となっている。作業において、必要な場合には、利用者の課題に配分された計算機資源を使用している。

### 2.2.2 高度化支援の具体的内容

高度化支援は、主にアプリケーションに関わる支援であり、移植などの動作確認に関わるものと性能分析・性能改善に関わるものに大別される。前者としては、コンパイル環境の設定、コンパイルオプションの検討と選択、コンパイルエラーの対処、ノード内自動並列化等によるスレッド並列化の促進、ジョブスクリプトの設定、実行時オプションの検討、システム依存のライブラリ置換、ファイル配置の最適化、潜在バグの検出と修正が挙げられる。また、後者としては、ホットスポットの検出とボトルネックの見極め、ループレベルのSIMD化、ソフトウェアパイプラインの促進、並列実行の特性分析、ボトルネック分析とアルゴリズム変更の検討と評価、並列実行におけるインバランスの検出と原因分析並びに分割方向・軸・データ配置・データ入出力などの変更による高並列化の検討と評価、などがある。性能分析・性能改善に関わるものの中で、最後の2項目は、特に難易度が高く、時間も要する作業である。

### 2.2.3 高度化支援の実績と成果

年間で30件程度支援し、平成24年度から平成29年度までに合計で169件の高度化支援を実施した（図2）。「京」については、「京」全利用課題の内、約20%の課題に対して高度化支援を行ってきた。「京」以外の HPCI 一般利用課題については平成27年度から支援を開始し（平成26年度までは産業利用に対する利用支援）、平成29年度までの3年間で、「京」以外の HPCI 全一般利用課題の約10%に相当する21件に対して高度化支援を実施した。平成29年度においては、「京」で24件、「京」以外の HPCI では8件の高度化支援を行った。

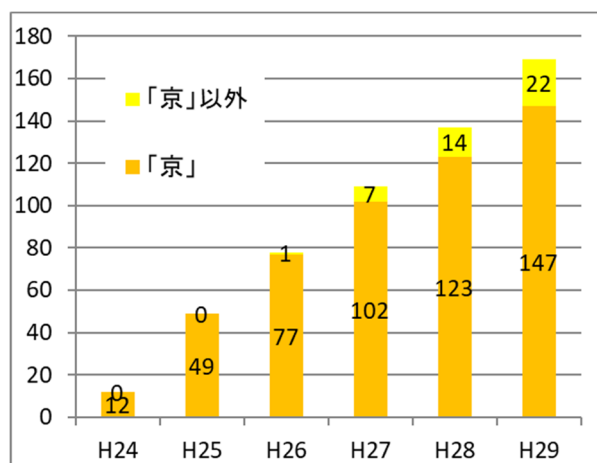


図 2 高度化支援実施件数（累積値）

高度化支援の中で、高並列化に関する支援では平均約 3 倍（約 3 倍の資源増に相当）の高速化を達成しており、質の高い支援と評価されている。また、支援全体への満足度調査（回答数 61）では、「満足」と「ほぼ満足」が 93%を占めるなど、高い評価を頂いている。

これらのアプリケーションに関わる高度化支援は、アプリケーションの高速化を通して資源の増加効果を生み、計算資源の効率的な利用および研究の加速に貢献していると考えている。

## 2.3 講習会・ワークショップの開催

計算科学技術研究を支える人材の育成や利用者の裾野の拡大のため、RIST では、利用者のニーズやレベルに合わせ、以下に示す様々な講習会、ワークショップを開催している。講習会では、利用支援を通して蓄積されてきた知識と経験、さらには高速化のノウハウを基に、幅広い内容を紹介している。一般向け講習会については、利用者個々の事情から参加が難しい場合には、要請があればオンサイトでの講習会も行っている。また、外部の専門家や RIST の職員による講演などから成るワークショップも開催している。大学、学界、関連団体の共催・協賛を得て、例年開催している材料系ワークショップは好評を頂いている。

一部の講習会会場では課題参加者・申請検討中の方のために利用相談窓口を設け、より直接的・具体的・即時的な対応を行っている。

これら RIST が主催した講習会・ワークショップには、昨年度（平成 29 年度）は 495 人、延べで 2701 人（平成 24 年度から 29 年度）の方に参加頂いている（図 3）。参加者の内訳は、大学・研究機関と産業界がほぼ半々である。また、ワークショップで扱う内容も利用者の要望や利用動向に応じて変えている。

なお、全ての講習会及びワークショップは無料で実施している。是非参加頂きたい（<http://www.hpci-office.jp/pages/seminar/>）。

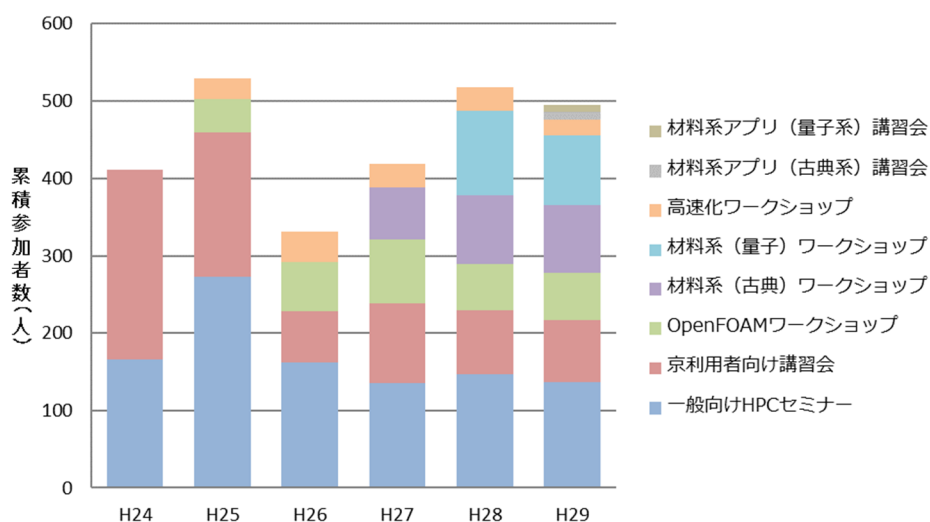


図 3 過去に開催された講習会及びワークショップの年度別参加者数

## 2.4 情報提供

HPCI ポータルサイト (<http://www.hpci-office.jp/>)において各種の情報を一元的に提供している。利用支援に関係が深いものでは、「利用支援」、「イベント・講習会」、「広報」、「利用者向け情報」の項目をタブに設け、容易に閲覧できるようにしている。これらのページでは、高度化支援の申込方法や講習会・セミナーの日程と概要などの利用者へのお知らせ情報から、データベース化された利用報告と研究成果、高度化支援の実施実績やそこから得られたノウハウを抽出した情報のように、専門性の高い情報まで幅広く提供している。

高度化支援に関する情報を HPCI 利用者と広く共有するため、これまでに実施した高度化支援の事例及び高度化支援によって得られた並列化・高速化のノウハウを、各々、HPCI ポータルサイトの以下のアドレスで公開している。

[http://www.hpci-office.jp/pages/support\\_past](http://www.hpci-office.jp/pages/support_past)

[http://www.hpci-office.jp/pages/tuning\\_knowhow](http://www.hpci-office.jp/pages/tuning_knowhow)

高度化支援の実施実績では、依頼内容、それに対して実施した支援項目、得られた効果をまとめた情報を現在 101 件公開している。高度化のノウハウについては、HPC における基本的な性能分析の流れを説明した資料や、高度化支援で実施した高速化手法の中から一般に効果が期待出来るものをわかりやすく抽出したもの、利用者の多いオープンソースソフトウェアに関する情報を集約したもの等、あわせて 38 編の資料を公開し、順次追加している。是非活用して頂きたい。

## 3 アプリソフト利用環境整備

### 3.1 アプリソフト利用環境整備の概要

平成 29 年度から RIST は、利用支援の一環としてアプリソフト利用環境整備を実施している。その整備の背景を含めた詳細については本会議の昨年度発表論文[1]を参照頂きたく、ここでは概要をまとめる。

この整備は、HPCI におけるアプリソフトの利用状況、利用者に行った調査、HPCI コンソーシアム[2, 3, 4]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）[5]などの利用者を代表するコミュニティから要望に基づくものである。これらのコミュニティからは、オープンソースソフトウェア (OSS) や商用ソフトの利用支援並びにアカ

デミアが開発している先端的・革新的アプリソフトのアカデミアのみならず産業界での HPCI における利用拡大に向けた支援と整備が求められている。

これらの要望に応え、これまで個々の利用者からの要請に応じて行ってき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、さらには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、アカデミアにおける研究や産業界における研究開発への貢献を目指している。

整備に先立って、RIST 理事長の下に設置した専門家から成る「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・ワーキンググループ」（アドバイザー WG）の意見も参考にし、調査と分析を行い、「京」を中核とする HPCI に向け整備するアプリソフト利用環境整備の方針を定め、それを基にアプリソフト利用環境整備計画を立案した。アプリソフトをその性質と将来の重要度を元に二つのカテゴリに分類した上で、整備するアプリソフトの選定を行った。加えて、追加で整備対象となる事が見込まれるアプリソフトの調査を行った。これらの方針と計画を基に、平成 29 年度から整備を進めている。

### 3.2 アプリソフト利用環境整備の方針・とアプリソフトの選定

利用者を代表するコミュニティやアドバイザー WG の意見を基に、整備するアプリソフトの選定方法や判断基準などの方針は以下とした。

1. 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. 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. 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。

上記の方針に従い、まず、アプリソフトを下記の 2 つのカテゴリに分類した。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、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 とした。

・ カテゴリ 1 - 「京」・HPCI 並びにポスト「京」

において利用ニーズが多い、または今後多くなると予想される OSS、商用ソフト、国産アプリ等のアプリソフト。

- ・ カテゴリ 2 - カテゴリ 1 には含まれないが、国の資産として重要なアプリソフトや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。

アドバイザリ WG からのアドバイス、関連分野の動向調査、さらにはポスト「京」重点課題（重点課題）代表者等の有識者へのヒアリングを参考に、「京」については、特に利用の多い OSS を整備することとし、国プロアプリ等については、ポスト「京」重点課題（以下、重点課題）各分野からの推薦をもとに整備することとした。

### 3.3 平成 29 年度の実施状況

平成 29 年度においては、カテゴリ 1 のアプリソフトとして特に需要の高い 4 本の OSS を選定し、「京」に整備した（表 1、表 2）。また、カテゴリ 2 のアプリソフトについては、「京」以外の HPCI システムの一部に、重点課題分野から推薦された 6 本の国プロアプリを整備した（表 3）。RIST が整備したアプリソフトのインストール状況及び利用に関する情報は、HPCI 資源提供機関が整備しているアプリソフト共に、HPCI ポータルサイトに掲載しているので参照願いたい。

表 1 平成 29 年度のカテゴリ 1 における「京」での CAE 分野アプリソフト利用環境整備状況

| 整備対象     | 整備状況                                  | 情報公開（HPCIポータルにて）                                                                                            |
|----------|---------------------------------------|-------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
| OpenFOAM | OpenCFD版<br>v1612+, v1706, v1712：公開済み | <a href="http://www.hpci-office.jp/pages/appli_openfoam">http://www.hpci-office.jp/pages/appli_openfoam</a> |
|          | Foundation版<br>2.4.0, 4.1, 5.0：公開済み   |                                                                                                             |

表 2 平成 29 年度のカテゴリ 1 における「京」での材料・バイオ分野アプリソフト利用環境整備状況

| 整備対象             | 整備状況                             | 情報公開（HPCIポータルにて）                                                                                          |
|------------------|----------------------------------|-----------------------------------------------------------------------------------------------------------|
| LAMMPS           | 11-Aug-17：公開済み                   | <a href="http://www.hpci-office.jp/pages/appli_lammps">http://www.hpci-office.jp/pages/appli_lammps</a>   |
| Quantum ESPRESSO | v6.1, v6.2.1：公開済み                | <a href="http://www.hpci-office.jp/pages/appli_qe">http://www.hpci-office.jp/pages/appli_qe</a>           |
| GROMACS          | 5.1.5, 2016.4, 2016.5, 2018：公開済み | <a href="http://www.hpci-office.jp/pages/appli_gromacs">http://www.hpci-office.jp/pages/appli_gromacs</a> |

表 3 平成 29 年度にカテゴリ 2 において整備したアプリソフト

| 名称      | 開発者（敬称略）             |
|---------|----------------------|
| NTChem  | 中嶋隆人（理研R-CCS）        |
| MODYLAS | 岡崎 進、安藤 嘉倫（名古屋大学）    |
| SMASH   | 石村 和也（分子研）           |
| OpenMX  | 尾崎 泰助（東大物性研）         |
| SALMON  | 矢花一浩（筑波大学）、信定克幸（分子研） |
| HΦ      | 山地洋平（東京大学）           |

### 3.3 平成 30 年度の実施計画

平成 30 年度のアプリソフト利用環境整備計画を表 4 にまとめる。「京」上の OSS に対する最新化を上半期に実施するとともに、平成 31 年度に予定されている「京」の運用停止に備え、「京」の代替資源としての HPCI システムへの OSS のインストールもしくはアップデートを行う。また、HPCI システムに対して、平成 29 年度に整備した対象となったシステム以外への拡大、整備する国プロアプリの拡大を図る。

表 4 平成 30 年度のアプリソフト利用環境整備計画

| 対象システム    | アプリ種別     | 2017 年度                                                                                                | 2018 年度                                                               |
|-----------|-----------|--------------------------------------------------------------------------------------------------------|-----------------------------------------------------------------------|
| 「京」       | 利用の多い OSS | OpenFOAM、GROMACS、LAMMPS、Quantum ESPRESSO                                                               | 整備済みアプリソフトのバージョンアップ                                                   |
| HPCI システム | 利用の多い OSS | —                                                                                                      | 名大 FX100 向けに以下の 4 ソフトを整備<br>OpenFOAM、GROMACS、LAMMPS、Quantum ESPRESSO  |
|           | 国プロアプリ等   | 重点課題 5,7 から推薦のあった、以下の 6 ソフトを 3 箇所(九大、名大、東工大)のシステムに整備。<br>NTChem、MODYLAS、SMASH、OpenMX、SALMON、H $\phi$ 。 | 重点課題 5,7 以外の分野にヒアリングし、数本のアプリを新規に整備するとともに、2017 年度整備アプリのインストール先を拡大する予定。 |

## まとめ

RIST は、特定高速電子計算機施設の登録施設利用促進機関及び文部科学省委託事業「HPCI の運営」代表機関として、体制を構築・運用し、「京」を中核とする HPCI において利用支援を担っている。

利用支援においては、一元的な問合せ窓口としてのヘルプデスクを設置して、様々な問い合わせに応じるとともに、利用相談、高度化支援を含めた技術相談、講習会・ワークショップの開催、情報提供等を行っている。高度化支援は、「京」の全利用課題の約 20%に対して行っている。また、RIST が主催する講習会・ワークショップには、平成 24 から 29 年度までに延べ 2701 人の参加を得ている。

さらに、利用支援の一環としてアプリソフトの利用環境整備を行っている。平成 29 年度においては、需要の高い 4 本の OSS の整備を「京」において行った。また、「京」以外の HPCI システムの一部に重点課題から推薦された 6 本の国プロアプリを整備した。平成 30 年度においても、平成 31 年度に予定されている「京」の共用終了も考慮し、引き続き整備を進めている。さらに、ポスト「京」への対応等についても検討を行っている。

RIST は、これらの計画の推進により、HPCI 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進展に引き続き貢献していきたい。

## 参考文献

- [1] 吉澤ら、「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、大学 ICT 推進協議会 2017 年度年次大会、2017 年
- [2] 一般社団法人 HPCI コンソーシアム、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、2017 年、[https://hpci-c.jp/news/file/170607\\_HPCIC\\_teigen.pdf](https://hpci-c.jp/news/file/170607_HPCIC_teigen.pdf)
- [3] スーパーコンピューティング技術産業応用協議会、ポスト「京」への期待、2016 年、<http://www.icscp.jp/wp-content/uploads/2016/09/teigen00007.pdf>
- [4] スーパーコンピューティング技術産業応用協議会、「京」の共用に関する評価及び「京」の今後に向けた意見・要望、2016 年、[http://www.mext.go.jp/b\\_menu/shingi/chousa/shinkou/042/attach/1370325.htm](http://www.mext.go.jp/b_menu/shingi/chousa/shinkou/042/attach/1370325.htm)
- [5] スーパーコンピューティング技術産業応用協議会、HPCI の産業利活用促進に向けて、2017 年、[http://www.mext.go.jp/b\\_menu/shingi/chousa/shinkou/020/shiryo/\\_icsFiles/fieldfile/2017/08/07/1388441\\_01.pdf](http://www.mext.go.jp/b_menu/shingi/chousa/shinkou/020/shiryo/_icsFiles/fieldfile/2017/08/07/1388441_01.pdf)