

# 「京」の利用拡大について

2017年4月26日

理化学研究所計算科学研究機構（AICS）

※この資料は、理化学研究所計算科学研究機構（AICS）、高度情報科学技術研究機構（RIST）、計算科学振興財団（FOCUS）で実施内容を検討したものである。

# 「京」の利用拡大の考え方とアプローチ

目標：新規利用者の増加、新規分野の利用拡大を目指す

## 1. 新規利用の促進

- i. 先駆性・革新性のある課題の選定
- ii. AICSソフトの普及活動を通じた新規利用者の発掘と育成
- iii. 企業訪問による新規利用の開拓の更なる推進

## 2. 利用環境の充実

- i. 利用ニーズが高いアプリおよび戦略的利用が期待されるアプリの利用環境を重点的に整備
- ii. データサイエンスやAI等の新規分野向け利用環境の充実
- iii. データ転送環境およびプレポスト環境の拡充

## 3. 新規利用のための資源創出

- i. 効率的な利活用のための利用者支援
- ii. 「京」の特性を活かした利用の効率化

# 1. 新規利用の促進 (1/3)

## i. 先駆性・革新性のある課題の選定

- 課題審査において、多様な専門分野にわたり、専門家間でも評価の分かれる研究課題の適切な評価方法を検討 (RIST)
- 既存の研究分野に縛られない価値基準、評価体制・基準を整備 (RIST)

### **凡例**

- 新規のアクション
- 既存のアクションを継続・発展・高度化

# 1. 新規利用の促進 (2/3)

## ii. AICSソフトの普及活動を通じた新規利用者の発掘と育成

- 4本の先行アプリ（GENESIS(分子動力学)・NTChem(分子科学計算)・SCALE(気象気候科学)・OASIS(離散事象))による最先端科学の成果を創出（AICS）
- 上記の成果をわかりやすくアピールすることで、当該アプリの新規利用者を増加させるとともに、その中から将来のビッグユーザーを発掘（AICS）
- 高度化研究の予算・計算資源等を活用し、利用を手厚く支援することで、ビッグユーザーに育成するとともに、当該アプリ開発にフィードバックし、完成度の向上を促進（AICS）

# 1. 新規利用の促進 (3/3)

## iii. 企業訪問による新規利用の開拓の更なる推進

- 利用報告書のダウンロード履歴を評価・分析し、統計データを公開・更新 (RIST)
- 上記の情報等も参考にして企業訪問等を行い、HPCI資源の利活用を訴求することで、新規利用者、新規分野を開拓 (FOCUS)

## 2. 利用環境の充実 (1/2)

- i. 利用ニーズが高いアプリおよび戦略的利用が期待されるアプリの利用環境を重点的に整備
  - 利用ニーズが高いオープンソースアプリ等の利用環境を充実させることで、新規利用者に訴求 (RIST、AICS)
  - 国プロ等で開発されたアプリの利用環境を整備することで、戦略的な利用を支援 (RIST、AICS)
  - 商用ISVアプリから、国プロアプリ、オープンソースアプリへの移行を慫慂 (エンカレッジ) (FOCUS、AICS)

## 2. 利用環境の充実 (2/2)

### ii. データサイエンスやAI等の新規分野向け利用環境の充実

- PythonやPerl等の新規分野において必須とされているオープンソースの言語環境やツールを重点的に整備 (AICS)

### iii. データ転送環境およびプレポスト環境の拡充

- 計算結果を外部に転送するための環境を改善することで、ワークフローにおけるボトルネックを解消 (RIST、FOCUS、AICS)
- クラウド技術を活用し、入力データおよび計算結果を高速に処理できる環境を拡充することで、多様なニーズに対応すると共にターンアラウンドタイムを短縮 (AICS)

### 3. 新規利用のための資源創出

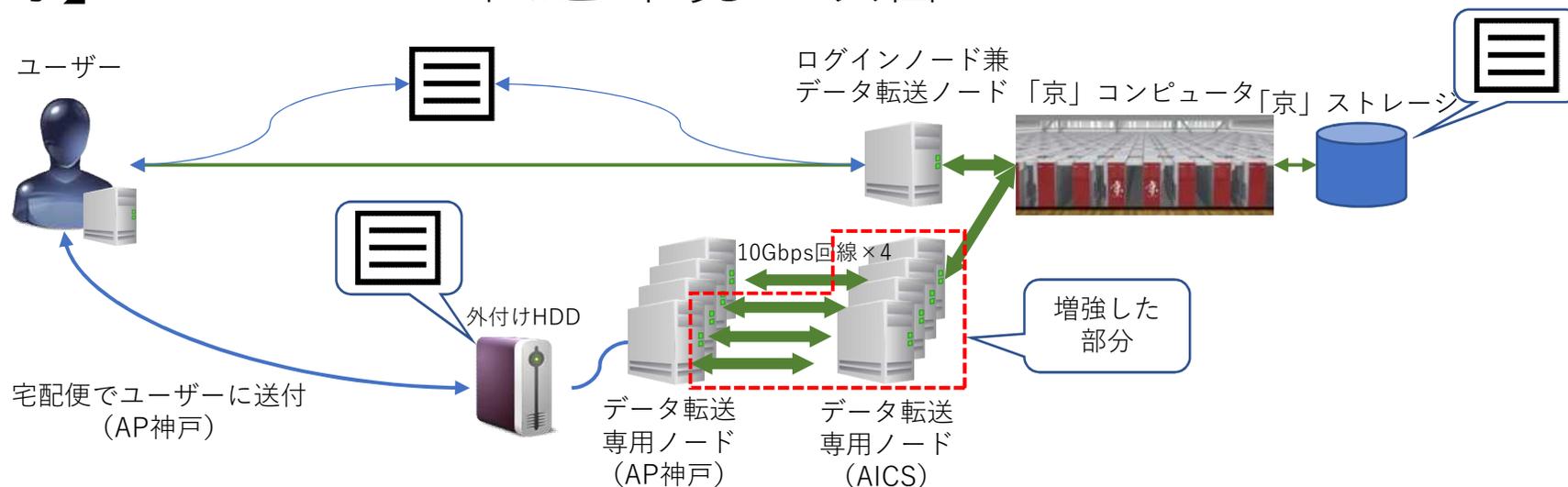
#### i. 効率的な利活用のための利用者支援

- 運用情報の分析により、改善の伸びしろが見込まれる利用者をリストアップし、能動的な支援を実施することで効率的な計算資源の更なる活用を実現（RIST、AICS）
- チケットシステムを統合することで、情報共有の更なる迅速化を図り、利用サービスの向上を推進（AICS、RIST）

#### ii. 「京」の特性を活かした利用の効率化

- 「京」の優位性（高メモリ帯域、高通信帯域、多数の最適化済アプリ）を明確化し、利用者に訴求（AICS）
- 上記の優位性がより活かされる利用者支援の推進（RIST）

## 【参考】 2. iii データ転送環境の改善

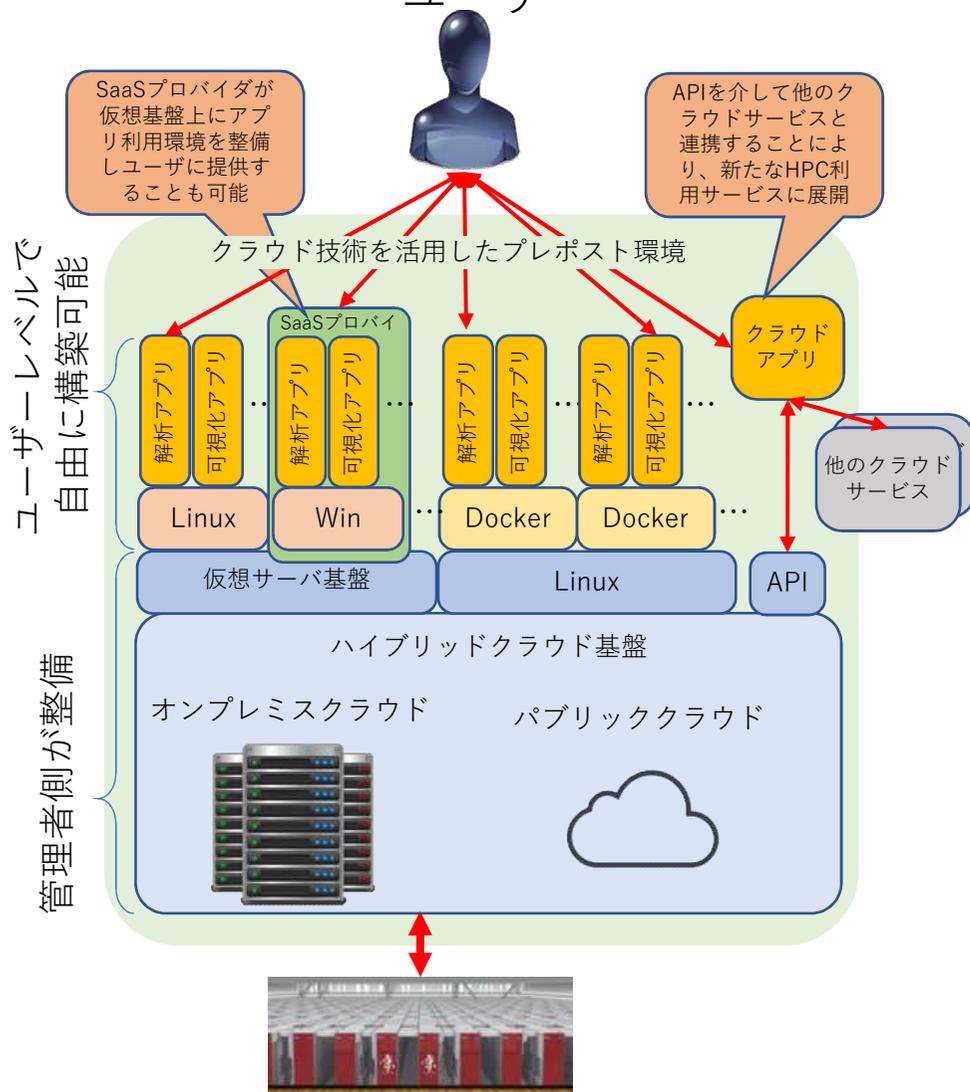


- データ解析を手元の計算資源で行うために、「京」の入出力データをネットワークで転送するユーザーは多いが、特定のデータ転送ノードに利用が集中したり、ネットワーク回線の品質等の問題から十分な転送速度が得られないことが多い
- それが原因で、「京」ストレージ上のデータを退避できず、計算を進められない状況に陥るケースも少なくない
- そのため、AICSとAP神戸間のダークファイバを活用し、帯域幅を合計40Gbpsに増速すると共に、AICS側のデータ転送ノードを増強し、AP神戸間とのデータ転送専用とした
- これにより、AP神戸が提供しているHDD郵送サービス（※）の利便性が格段に向上する見込み（増強部分については5月中の運用開始を予定）

（※）AP神戸が提供している有償サービス。ユーザーはリモートから「京」のストレージ上のデータをAP神戸の外付けHDDにコピーする。コピーが完了したHDDはAP神戸が宅配便でユーザーに送付する。ユーザーは神戸に出向く必要はない。

# 【参考】 2. iii クラウド技術を活用したプレポスト環境

ユーザー



- プレポスト環境に対するニーズは少量多品種のため、対応が極めて困難
- クラウドベースの仮想サーバ基盤環境を提供することにより、プラットフォームを含めたアプリ環境をユーザーレベルで自由に構築することが可能となることで、多様なニーズに対応可能に
- ハイブリッドクラウドを構成することで、TCOを抑えるとともに、利用量の変動に柔軟に対応可能
- SaaSプロバイダの参入を促し、多くのアプリ利用環境提供サービスを提供することで、非習熟者がより手軽に「京」を利用可能に
- APIを介して他のクラウドサービスと連携することにより、新たなHPC利用サービスに展開

「京」コンピュータ