

|              |                                                                                   |
|--------------|-----------------------------------------------------------------------------------|
| Title        | 計算機資源の整備                                                                          |
| Author(s)    | 宮下, 夏苗                                                                            |
| Citation     | 国立大学法人北陸先端科学技術大学院大学技術サービス部業務報告集 : 平成24年度: 55-60                                   |
| Issue Date   | 2013-08                                                                           |
| Type         | Others                                                                            |
| Text version | publ isher                                                                        |
| URL          | <a href="http://hdl.handle.net/10119/11905">http://hdl.handle.net/10119/11905</a> |
| Rights       |                                                                                   |
| Description  |                                                                                   |

# 計算機資源の整備

宮下 夏苗

情報社会基盤研究センター

## 概要

当情報社会基盤研究センター（以下情報センター）が 2010 年 2 月より、それ以前にサービスしていた Windows ターミナルサーバシステムに大幅な改良を加え、ターミナルサーバクラウド環境として全学的サービスを開始、運用を続けていることを、2011 年の業務報告集に述べ、このターミナルサーバクラウド環境を含む統合常用情報インタフェースの改良の履歴と、運用および改修について翌 2012 年の業務報告集に述べた。しかしターミナルサーバクラウド環境は、メールを読む、ブラウザ、オフィスツールを利用するなどユーザの日常的な研究活動を支援すべく設計された環境であり、大規模な計算、実験を行うために必要な計算リソースをも備えているわけではない。本稿では情報センターがユーザに提供する計算リソースとしての計算環境の整備、運用、およびそれらの環境をシームレスにターミナルサーバクラウド環境のユーザから利用させるための試みについて述べる。

## 1 コンピューテーションサポート

情報社会基盤研究センターは従来、組織内の教職員、学生の日常的利用に充てる情報インタフェースとして、“いつでも”、“どこからでも”利用できる、個人用統合デスクトップ環境を構築、提供してきた。本環境は優秀な個人用の文房具であると共に、本学の有するあらゆる情報資産にシームレスにアクセスできること、個人が日常の情報インタフェースとして利用するに十分なスペックを有することが求められる。

しかし先端的科学技術教育・研究のあらゆる分野において、研究教育活動の基盤となる情報インタフェースが必須であるとともに、個々の研究の基本となる実証、計算、実験をサポートする計算機資源もまた不可欠なリソースと言えよう。

膨大な計算量、計算パラメータを変えた大量の計算結果を必要とする研究領域に対して個々の研究の正当性を確かに裏付ける実験結果を得られる計算リソースを提供することは情報センターの重要な役割のひとつである。実際に近年、現実の事象をモデルとした複雑系のシミュレーションから大規模データを利用した解析実験など、計算リソースを要求する研究の割合は高く、十分な計算リソースが得られないことは不完全な検証、研究結果に対する正確性の不足、全体的な研究レベルの低下にも繋がる。

だがこのような大規模な実験、計算を可能とするリソースを、ユーザが日常的に利用する文房具としての情報インタフェースに統合してしまうことは、得策とはいえない。すべてのユーザが毎日そのような実験を行っているわけではなく、実験に利用されない間もユーザに文房具としてのみ利用される場合には、多くのリソースが無駄に電力のみ消費することとなる。また、仮に実験のためにリソースがフル稼働されることともなれば、そこで研究活動を行うユーザプロセスがリソースを取得できずユーザインタフェースの体感速度遅延、使用感の低下を招くこととなる。

このため情報センターは従来、情報環境の一環として専用の計算サーバを調達段階から選定、運用し、多数の高性能 CPU を同時に駆動することで高い処理能力を得られる様々な並列アーキテクチャを持った超並列計算機を含め、多様な計算機群をユーザの研究リソースとして提供してきた。また、これらの運用、サービスの提供形態が現在のユーザの要求、利用形態に合うよう常に改善を続けている。次に、2012 年以降の一年間について、計算機のサービス向上のための試みについて述べる。

## 2 ソフトウェア

近年の計算リソース利用において特に顕著に見られる傾向として、特定ソフトウェアの利用が増えたことがある。

元々、研究において複雑な事象をシミュレート、解析するために最適化されたソフトウェアを利用することは、コード開発にかかる時間の大幅な短縮となり、やり方によっては客観性の保証ともなる。

情報センターもこれまで研究科から要望のあった Materials Studio, Gaussian09 など材料系の第一原理計算、電子状態解析に関するソフトウェアを中心に積極的に機器に導入し、ユーザが簡易に利用するためのスクリプトの提供などのサポートを行っていた。

しかし、近年とくに、計算機に投入される計算ジョブについて、C, Fortran など個々のユーザが開発したと思われるコードが激減し、代わってソフトウェアの利用が圧倒的に増えている。

以下に 2013 年 7 月のある一時点において、主要な計算機 3 台に投入されていたジョブのソフトウェア種別を数値化した。

表 1 計算ジョブのソフトウェア種別

| ソフトウェア           | 利用ジョブ数 |
|------------------|--------|
| CASINO           | 12     |
| Quantum Espresso | 14     |
| Gaussian09       | 4      |
| OpenMX           | 17     |
| Materials Studio | 7      |
| Matlab           | 6      |
| 不明               | 3      |

このように、既存のソフトウェアを利用していると判断されるジョブが利用されるリソースの大多数を占める。

このことは、少なくとも既存のソフトウェアを利用したいユーザにとって、これが利用できない計算機は有益な計算リソースとはなり難いこと。また、すべての計算リソースで C 言語, Fortran 等の基本言語はサポートしているにも関わらず独自コードの利用が非常に少ないことから、自力でコード開発可能な環境よりも、必要なソフトウェアが簡便に利用できる環境に対する需要がより高いことが考えられる。情報センターとしても、これまでのように独自コードの開発やライブラリの利用方法の公開のみでなく、ユーザの利用形態がソフトウェア中心にシフトしていることを踏まえたユーザサポートを実現していくことが求められているといえる。そこで、以下のような工夫を行った。

### 2.1 インストールサポート

各々のソフトウェアについてユーザごとにも利用したいリビジョンが異なっている可能性があり、個々のソフトウェア自身も各々のタイミングでアップデートがある。

これを踏まえて、ユーザ自身が自分の環境で各々のソフトウェアをコンパイル、利用できるようにコンパイル方法の検証と公開、情報共有を進める体制を整えた。Web サイトを準備し、各種ソフトウェアを各自コンパイルする方法を公開、順次コンテンツを追加している。

またサイトをユーザが編集することも可能であり、自分の得たノウハウを公開することもできるようになっている。

### 2.2 新規インストール

これまで、計算機に個別にインストールし使用方法までサポートしていたソフトウェアは、研究科から直接要望のあった Materials Studio のような材料系のソフトウェアのみであった。だが、前述のソフトウェ

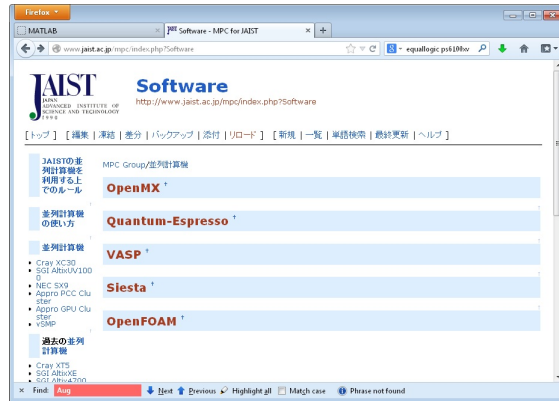


図1 ソフトウェアインストールサポートサイト

ア重視の利用パターンからすると、他分野のユーザも適切なソフトウェアが利用できれば、現在の計算機を計算リソースとして活用できるのではないかと考えた。そこで、各計算機の利用者向けに春秋に実施している講習会のアンケートを利用し、インストール希望のあったソフトウェアを検討した。検討に基づき以下のソフトウェアについて実際にインストール作業を行い、サンプルプログラムを作成した。また、ユーザが計算機上で実際にソフトウェアを利用するための利用手引きを作成した。

- Mathworks Matlab
- Wolfram Mathematica

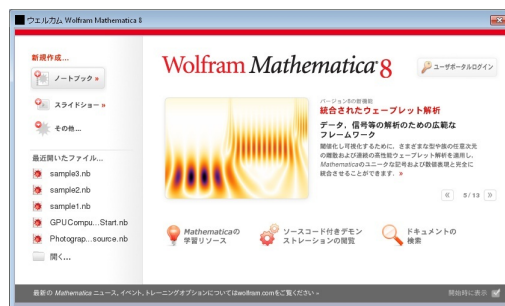


図2 リモート計算機上での計算ソフトウェア実行

このようにしてユーザにアナウンスしたソフトウェアのひとつ、Matlab はアナウンス直後から活用され、インストール後の計算機ではこのソフトウェアに関するジョブが時には全ジョブ数の 1/3 を占める数、動作するようになった。

### 3 システム構成，設定変更

#### 3.1 ハードウェア構成の見直し

ベクトル計算機 SX-9 は、当初から一システム内の計算リソース (CPU, メモリ) をユーザがインタラクティブに利用できる量とバッチジョブとよばれる登録型のユーザジョブで利用できる量に分割していた。だがバッチジョブが常時利用されているわけではなく、むしろ時間の制限なく利用できるインタラクティブジョブが常用される傾向にあった。

このためシステムメンテナンスの際にリソース配分を調整し、インタラクティブ用のリソースを多めに設

計変更を行った。

### 3.2 キューシステム設定の見直し

大容量共有メモリ型の SGI Altix において、ジョブが実行中に突然サスペンドされ、キューイングされていた他のジョブが開始されてしまう障害が発生した。障害対策の一環として、サスペンドを起こさないためのキューシステム設定を検討し、ベンダーと打ち合わせの上設定値を変更した。

*preempt\_prio : "starving\_jobs, normal\_jobs" preempt\_queue\_prio : 151*

## 4 イベント

### 4.1 計算機講習会

従来、毎年春と秋には計算機の講習会を開催している。一シーズンにつき 4 回前後の講習会を企画し、その都度講習内容の選定から日程調整、広報、資料チェック等の作業を行っている。ここで、従来とは異なる試みとして、昨年秋には前項で述べたソフトウェア利用者の増加を鑑みた、ソフトウェア主体の講習会を通常の講習会とは別途 2 件企画した。利用率の高いソフトウェアの専門家に講師を依頼し、定期講習会と同様に日程調整、広報、資料のチェックを担当した。

結果として、これらのソフトウェア講習会は従来の講習会の参加者に比べて 3 倍以上の参加者を得た。このことでもソフトウェア需要の高さがはっきり示されたといえる。

### 4.2 MPC ワークショップ

昨年 10 月に、初の試みとして情報社会基盤研究センター、シミュレーション科学研究センター、MPC 管理グループ(並列計算機コアユーザグループ)の共催により、計算機ユーザが各々の研究内容を発表するワークショップを開催した。

このワークショップにおいて、発表者を集めるための計算機ユーザの利用統計準備、広報および当日のプログラム作成を担当した。

当日は発表者 14 名、聴講者 20 名弱のユーザが集まった。聴講者の多くが計算機リソースに興味のあるユーザ、または発表者の研究に何らかの関連を持つテーマを研究課題にしているユーザと想定すると、彼らの研究にも今後計算機リソースが役立つ可能性は低くない。

## 5 運用とメンテナンス

ここまでの項で、計算機の利用向上のために実施した試みについて述べた。次に、計算機リソースをユーザに提供するうえでの日常的な運用、メンテナンス業務について述べる。

### 5.1 障害

当センターにてサポートする主要な計算機 3 台について、2012 年 7 月以降の一年間に発生した機器障害、システム障害の件数を以下に記載する。

表 2 障害件数

| 機器           | 障害件数 | 本学から問い合わせた件数 |
|--------------|------|--------------|
| A 機 1536Core | 28   | 20           |
| B 機 5760Core | 4    | 1            |
| C 機 704Core  | 8    | 6            |

すべての計算機は保守契約のもとに運用している。このため、基本的な機器障害はメール等なんらかの形でサポートベンダーにも通知が届き、情報センターの調査依頼がなくとも状況の確認と調査が行われる。

しかし、数値を見てわかるように、実際の障害については情報センターが症状を発見し、問い合わせる例がかなり多い。

単純な機器故障であれば検出やアラート通知が可能であるが、これらの機器がいずれも、システム的に通常のサーバ機よりも複雑であるために一部の機能のみが利用できなくなる、動作異常を起こすといった例が非常に多いためだと考えられる。

例として以下のようなものがある。

- 特定のノードに計算が割り振られた場合のみ、計算が開始しない
- 特定のノードに計算が割り振られた場合のみ、計算が失敗する
- MPI を用いた計算のみが動作しない

このような障害は、発見後原因の特定に時間を要する場合も多い。また同様の障害と見受けられても、実際の原因は異なっている場合も多々ある。

原因が単純なパーツ故障に留まらないため、障害アラートによる単純な障害検知は困難である。しかも、多くの場合はユーザの計算ジョブが不正終了し、にも関わらずユーザには原因が分からないため、自分の計算パラメータに原因があるものかと悩みかねない。

このような状況を可能な限り早く検出し、一次対応に当たれるように、計算機担当者として日常的に計算機の動作状況を視認している。また、わずかでも計算ジョブフロー、動作状況に異常が見受けられる場合は早急に自身で確認が取れるよう、各機器で動作するテスト計算や基本的なジョブシステムの設定を常に頭に置いている。

## 5.2 メンテナンス

障害対応、修理、アップデート等、保守ベンダーと必要な作業について打ち合わせ、メンテナンス日程を調整すること、必要に応じてユーザにメール、Web アナウンスを行うことは情報センターの重要な職務である。

障害に基づく修理やバグフィックスについては、それがシステム全体に影響する場合には影響範囲に応じてユーザに影響の少ない日程を調整する必要がある。また、とくにライブラリやコンパイラなどにアップデートが出ている場合は、自身で情報を収集して、作業の必要を見極めてこちらから希望を申し入れる必要もある。

## 6 今後の目標

本項では、これまでに運用してきた計算機の提供形態に加え、今後より多くのユーザに資するために検討している試みについて述べる。

### 6.1 統合環境

JAIST は開学当初から築かれてきた文房具としての統合情報インタフェースを全ユーザに提供している。計算機リソースについても、この情報インタフェースからシームレスに接続できるよう、工夫がされている。

ユーザのホームディレクトリを情報インタフェースと共通化すること、情報インタフェース上に計算機への接続に利用すべきターミナルツールを完備することがそれにあたる。

しかし、現時点でユーザにできる利用法はターミナルツールから計算機にログインし、必要な計算を行う、というものでしかない。ターミナルツールの CUI に慣れていれば、むしろその方が使いやすい場合が多くある。しかし、全ユーザがこのような CUI に慣れているものではなく、Windows 環境から Matlab の GUI を立ち上げて利用する方法にのみ馴染んでいるケースも多々ある。

このようなユーザがより簡易に計算リソースを取得できるよう、たとえば統合情報インタフェースにおいてデスクトップに置かれた Matlab のアイコンをクリックすると、自動的に外部の計算機に接続し、情報インタフェースには負荷をかけずにすべての計算を専用計算機上で行うようなシステムを検討している。

## 6.2 ジョブ登録システム

学内に常時接続できるユーザは、自分の自由な時間に計算ジョブを実行することができる。しかし、社会人学生や出張、帰省中など、必ずしも常時計算機とのアクセスを開いていられない場合も多い。

本学の大型計算機はおおむねバッチシステムを有し、事前にジョブを登録しておくことでそれらが順に実行されるようなシステムとなっているが、特に小型機などはそのような形態はとっていない。

これらの機器を JAIST の外部から利用しようと思うと、計算結果が出るまで自分の端末を閉じないまま、JAIST とのネットワークアクセスを継続し続ける必要がある。

このような不利益をなくすための方策を検討し、JAIST のユーザであれば 24 時間どこからでもストレスなく利用できる計算機環境を作りたい。

## 7 まとめ

本稿では、JAIST においてユーザの研究、実験の基となる計算リソースを提供するための計算機環境について、新たに試みたことと日常的な運用に関わる業務について述べ、今後の目標について述べた。

計算機リソースの運用担当者としては計算機の状況と今後の課題、なによりも計算機を利用するユーザの希望につねに敏感であることがもっとも重要な課題と考える。実際にユーザと会話し、利用状況を確認し、どのような機能を実現すればよりユーザに資することができるか、常に考えていきたいと思っている。