

# 「京」を中核とするHPCIにおける アプリケーションソフトウェア利用環境整備について



2017.6.29

一般財団法人高度情報科学研究機構

## アプリソフト利用環境整備の概要

- RISTではこれまで個々のユーザからの要望に応じてアプリケーションソフトウェア(以下アプリソフトと呼ぶ)の移植、最適化、利用支援等を「京」及びHPCIの利用支援業務の一環として、実施してきた。
- アプリソフトの利用状況分析結果、及びHPCIコンソ・産応協等のユーザからの要望を受け(添付資料.1-4 参照)、今年度より「京」・HPCI、及びポスト「京」時代に向け、利用者ニーズの多い、国の資産として重要な、スパコンの新しい応用を担う等のアプリソフト<sup>\*1</sup>を先行的・継続的に **Ready to Use**<sup>\*2</sup> の状態に整備し、成果の早期最大化、スパコン利用分野の開拓等を狙うアプリソフト利用環境整備を開始した。

### \*1 対象とするアプリソフト

- **カテゴリ1ソフト** : 「京」・HPCI、及びポスト「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<sup>\*3</sup>、商用ソフト、国産アプリ等のアプリソフト。
- **カテゴリ2ソフト** : 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。

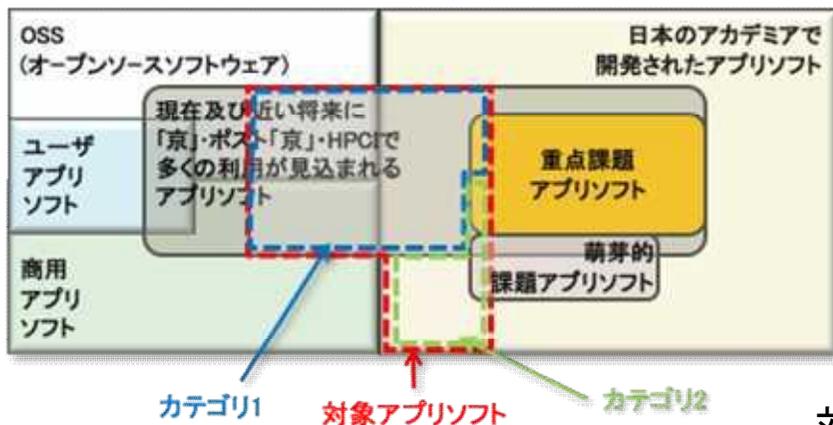
### \* 2 **Ready to Use** :

アプリソフトの最新版を移植・移植支援、最適化、実行環境整備(インストール、実行手順の準備等)、利用支援体制整備等を行い、ユーザがデータを持ち込めばスムーズに利用が可能で、また、必要な支援を受けることができる状態にする。

<sup>\*3</sup> OSS : 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、定義は The Open Source Initiative Definition 参照(<https://opensource.org/osd>)。

# 整備対象のアプリソフトと狙い

分類	整備の狙い
<p><b>カテゴリ1:</b> 利用者ニーズの多い、または近い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ソフト。</p>	<p>利用者ニーズに対応し、<u>成果の早期の最大化・計算機の効率的な利用</u>を狙う。 【例えば】</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>• 利用者が使いたいアプリソフトが「京」・HPCIにインストールされ容易に使える状態になっていることで、成果が早期に得られるとともに、最適化されていることで計算機資源の効率的利用を実現。</li> </ul>
<p><b>カテゴリ2:</b> カテゴリ1には含まれないが、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。</p>	<p><u>国の資産として重要なソフトの継続的な活用・普及を図るとともに、スパコン利用によりR&amp;Dの加速が期待できる新しい分野への貢献</u>を狙う。 【例えば】</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>• 国プロ等で開発された重要なアプリソフトであるが高並列化・最適化等の「京」・HPCIに向けた対応が十分でないものを整備することで、超大規模計算・超精密計算・超大量計算などの高度な利用を促進し、国の資産としてのアプリソフトの活用・普及を図る。</li> <li>• HPCへの適用が現時点では十分に進んでいないAIやデータサイエンス等の新しい分野のアプリソフトを「京」・HPCIへ整備し高度な利用を実現することで、当該分野のR&amp;Dを加速。</li> </ul>



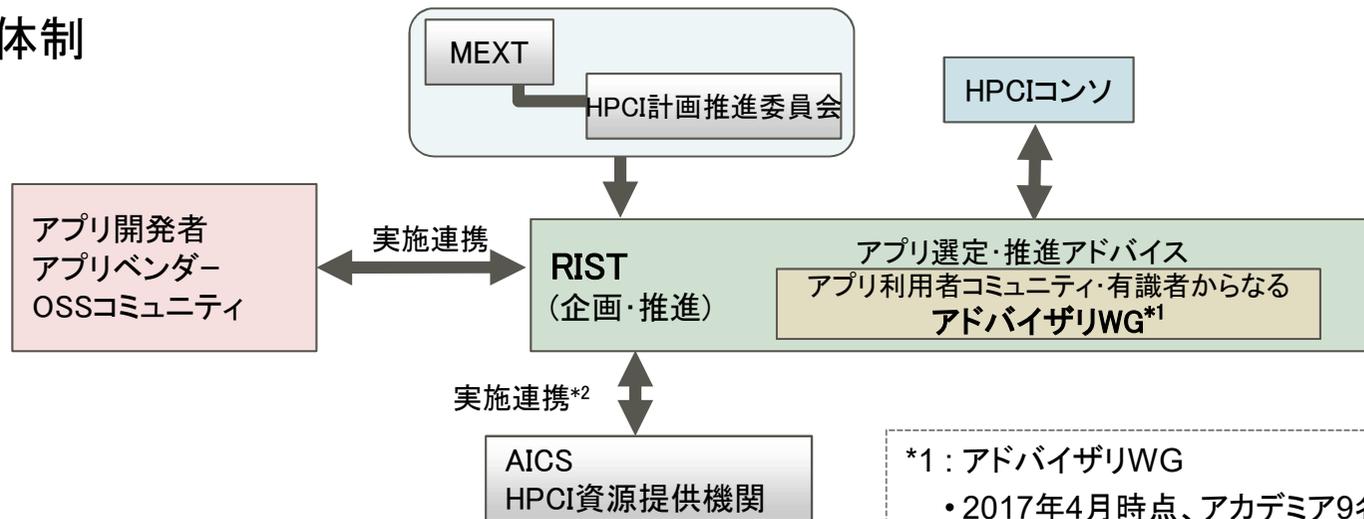
## 【注】

- 重点課題・萌芽的課題アプリは、ポスト「京」に向けたプロジェクトが進行中であるので、現時点ではこれら以外のアプリソフトに向けた整備に重点をおく。将来対応については、継続して関係者と検討。
- 本計画で整備したアプリは、原則としてオープン(利用者が希望すればソースまたは実行形式ソフトを利用できる)を前提とする。
- OSSや商用アプリへの対応については、国産アプリ振興の側面に留意しつつ利用者の便益を見極めた上で判断する。

## 対応アプリとそのカテゴリ

# 推進体制と利用環境整備中期計画

## ■ 推進体制



\*2: 関連機関との連携

- 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AICS・各資源提供機関と連携予定。
- 整備に必要な計算資源の提供等について今後、協議。「京」については、高度化調整枠の中の、RISTの利用資源から割り当てる予定。

\*1: アドバイザリWG

- 2017年4月時点、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)から構成
- 必要に応じて、他の分野の専門家への依頼も検討。

## ■ 中期計画

FY2016	FY2017	FY2018	FY2019	FY2020	FY2021～
	「京」				ポスト「京」
	他のHPCI計算機資源				
<b>実施準備</b>	<b>第1期</b>		<b>第2期</b>		<b>第3期</b>
<ul style="list-style-type: none"> <li>国内調査</li> <li>海外調査</li> <li>実施計画立案</li> </ul>	<ul style="list-style-type: none"> <li>カテゴリ1アプリの選択と整備・改善実施</li> <li>カテゴリ2アプリの調査・選択と整備</li> </ul>		<ul style="list-style-type: none"> <li>カテゴリ1、2のアプリ拡充</li> <li>ポスト「京」に向けて上記アプリ整備作業準備・一部実施</li> </ul>		<ul style="list-style-type: none"> <li>POST「京」に向けたアプリ整備作業</li> <li>カテゴリ1、2のアプリ対応継続</li> </ul>
..... アドバイザリWG開催(2回/年程度) .....					

# 2017年度実施計画

整備対象		実施内容																														
京	カテゴリ1	<ul style="list-style-type: none"> <li>• <u>OSSの環境整備から着手</u></li> <li>• 以下の候補アプリソフト*を対象に、詳細のバージョン、インストール状況等の詳細の現状調査を実施。</li> </ul> <table border="1" data-bbox="580 501 1480 826"> <thead> <tr> <th>No</th> <th>アプリソフト名</th> <th>評価ポイント</th> <th>開発国</th> <th>開発種別</th> </tr> </thead> <tbody> <tr> <td>1</td> <td>OpenFOAM</td> <td>19</td> <td>英国</td> <td>OSS/商用</td> </tr> <tr> <td>2</td> <td>LAMMPS</td> <td>18</td> <td>米国、他</td> <td>OSS</td> </tr> <tr> <td>2</td> <td>Quantum Espresso</td> <td>18</td> <td>イタリア、他</td> <td>OSS</td> </tr> <tr> <td>4</td> <td>GROMACS</td> <td>14</td> <td>スウェーデン</td> <td>OSS</td> </tr> <tr> <td>5</td> <td>LIGGGHTS</td> <td>8</td> <td>オーストリア</td> <td>OSS</td> </tr> </tbody> </table> <p data-bbox="1503 501 2022 762">* : これまでの調査とアドバイザリWGの意見等から選定。 評価ポイントは、利用されている課題数、ヘルプデスクへの質問数、高度化支援件数、支援可能なレベルで重みをつけて設定。</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>• 1-4のアプリソフトについて、最新版インストール、プログラム情報整備・チュートリアル整備、支援要員準備等の利用環境整備を実施予定。</li> </ul>	No	アプリソフト名	評価ポイント	開発国	開発種別	1	OpenFOAM	19	英国	OSS/商用	2	LAMMPS	18	米国、他	OSS	2	Quantum Espresso	18	イタリア、他	OSS	4	GROMACS	14	スウェーデン	OSS	5	LIGGGHTS	8	オーストリア	OSS
	No	アプリソフト名	評価ポイント	開発国	開発種別																											
1	OpenFOAM	19	英国	OSS/商用																												
2	LAMMPS	18	米国、他	OSS																												
2	Quantum Espresso	18	イタリア、他	OSS																												
4	GROMACS	14	スウェーデン	OSS																												
5	LIGGGHTS	8	オーストリア	OSS																												
	カテゴリ2	<ul style="list-style-type: none"> <li>• <u>上期</u> : これまでの調査やアドバイザリWGの意見から得られた候補アプリ・候補分野（CAE、データサイエンス・AI、計算化学、最適化等のツール等）についての調査と利用者コミュニティへのヒアリングを実施中。今年度対象とするソフトを1～2本選定（添付資料.5 参照）</li> <li>• <u>下期</u> : 選定したアプリソフトの利用環境整備作業に着手。</li> </ul>																														
他のHPCIシステム		<ul style="list-style-type: none"> <li>• <u>上期</u> : 各資源提供機関における詳細・最新のアプリソフト整備状況、利用状況等をヒアリング調査。</li> <li>• <u>下期</u> : この結果を元に各資源提供機関と連携し、来年度以降の整備計画を立案。</li> </ul>																														

---

# 添付資料

# 「京」・HPCIにおけるアプリケーションソフトの利用・支援状況

## ■ 分野別のアプリソフト利用状況。

\*1: H.27年度利用報告書及びH28年度の不採択課題を含む課題申請書(合計384課題)より集計

アカデミア利用(TOP10)

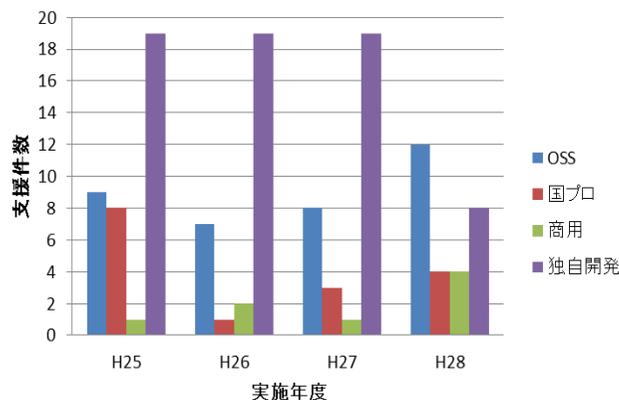
課題数	学術	産業	アプリ名称	応用分野	計算手法・対象	開発種別
27	24	3	GROMACS	バイオ/物質材料	古典MD	OSS
16	14	2	MODYLAS	バイオ/物質材料	古典MD	国プロ
11	11	0	GENESIS	バイオ/物質材料	古典MD	国プロ
10	9	1	VASP	物質材料	第一原理MD	商用
9	9	0	NTChem	バイオ/物質材料	量子化学	国プロ
9	9	0	SCALE	気象防災	気象	国プロ
9	8	1	LANS3D	CAE	流体解析	独自開発
8	8	0	NICAM	気象防災	気象	国プロ
8	8	0	TOMBO	物質材料	第一原理MD	独自開発
10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

産業利用(TOP10)

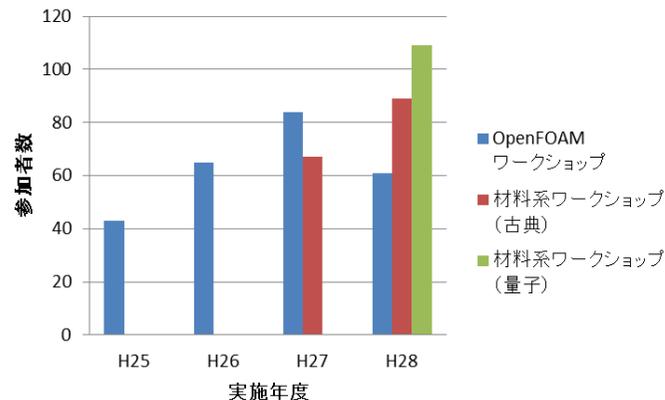
課題数	学術	産業	アプリ名称	応用分野	計算手法・対象	開発種別
18	5	13	OpenFOAM	CAE	流体解析	OSS/商用
14	5	9	FrontFlow/blue	CAE	流体解析	国プロ
12	5	7	FrontFlow/red	CAE	流体解析	国プロ/商用
10	4	6	LAMMPS	物質材料	古典MD	OSS
8	3	5	LS-DYNA	CAE	衝突解析	商用
6	2	4	CUBE	CAE	流体解析	国プロ
27	24	3	GROMACS	バイオ/物質材料	古典MD	OSS
10	7	3	Quantum Espresso	物質材料	第一原理MD	OSS
6	3	3	FrontISTR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

【注】 OSS：オープンソースソフト、国プロ：戦略ソフト、重点課題等の国のプロジェクトで開発された/開発中のソフト

## ■ アプリソフトへの支援状況。

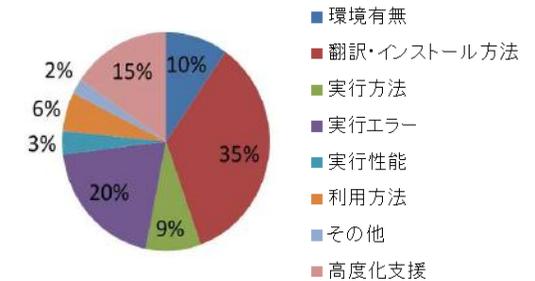


アプリタイプ別技術支援件数



アプリ・ワークショップ参加者

ヘルプデスクへの問合せの  
約1/3はOSS関連\*1



OSS問合せ内容分析

\*1: 2014～16年のヘルプデスクへの601件の問い合わせのうちOSSに関する問い合わせは175件

## 「京」・HPCIにおけるアプリケーションソフトへの要望状況

### ■ HPCIコンソ：第二階層計算機システムにおけるアプリソフト利用環境整備への要望<sup>\*1</sup>

<sup>\*1</sup>：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

- 国プロ開発アプリやオープン・ソース・ソフトウェアを第二階層計算機においても最適な状態で利用できるような整備し、広くユーザに提供していく仕組みを検討していくべきである。
- 商用アプリケーションの移植や最適化を進めたり、ライセンスの相互認証ができるようにしたりするための環境を整備していくべきである。このことによって、課題採択後にユーザが直ちに計算を開始できるようになり、HPCIの産業利用が加速されることが期待される。

### ■ 産応協：多様なソフトが利用できる環境、先端・革新的ソフトへの対応などの要望<sup>\*2</sup>

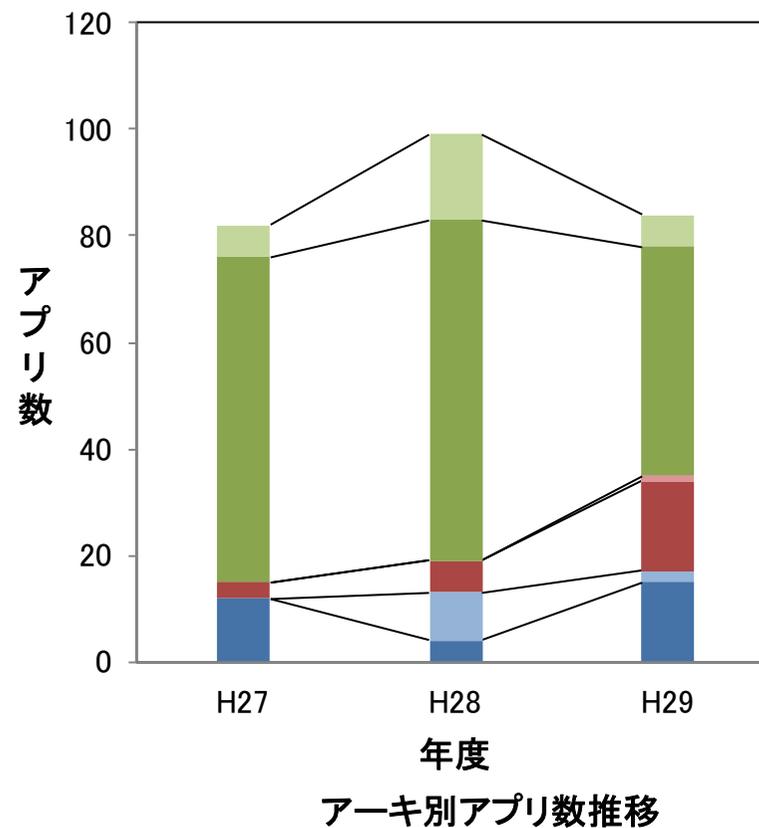
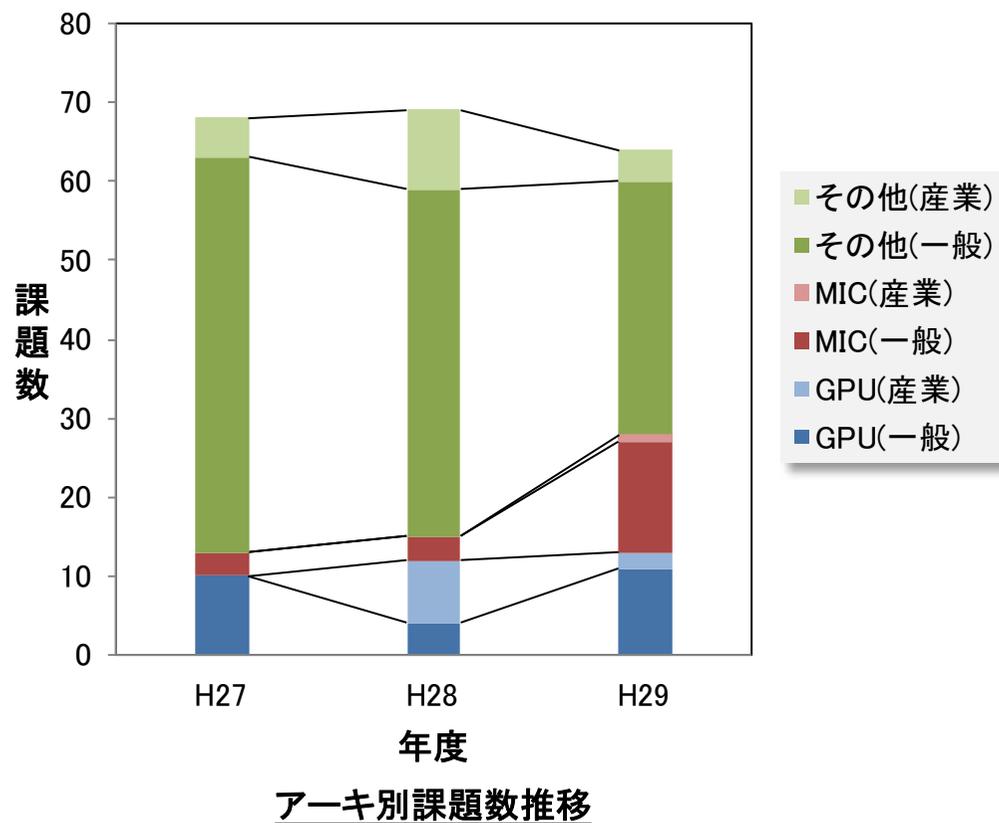
<sup>\*2</sup>：2016年2月18日 ポスト「京」への期待、2016年3月11日 「京」の共用に関する評価および「京」の今後に向けた意見・要望、2017年5月16日 産応協からの提言「HPCIの産業利活用促進に向けて(I)」

- ポスト「京」や第二階層の計算機環境を最大限に生かす、アカデミアの先端的・革新的なソフトウェアの開発とこのソフトウェアや産業向けソフトウェアの利用拡大に向けた支援環境。
- 「京」に最適化されたアプリケーションソフトの充実：「京」に最適化された、商用ソフト、OSS、アカデミアソフトの種類を更に増やし、アプリケーション利用環境を継続的に整備してほしい。
- 産業界が利用するソフトウェアの環境整備。
  - ✓ 商用ソフトウェアとオープンソースソフトウェアの利用環境整備、移植支援のさらなる対応。
- 産業界の問題解決に資する先端的ソフトウェアの充実。
  - ✓ 先進的な理論研究とこれに基づく計算手法の実現や、開発プロセスの改革につながるソフトウェア等の開発

## 「京」を除くHPCIにおける機種別利用申請状況(1)

### ■ アーキテクチャ別の課題数・アプリ数の推移 (H27～H29課題申請ベース)

- ◆ GPUはH27～H29でほぼ同数の申請。
- ◆ MICはH29のMICシステムの稼働に伴い、申請課題数が増加。



## 「京」を除くHPCIにおける機種別利用申請状況(2)

- GPGPUとMICの代表的なアプリケーションソフト名、アプリ分野、開発種別(H27～H29課題申請ベース)

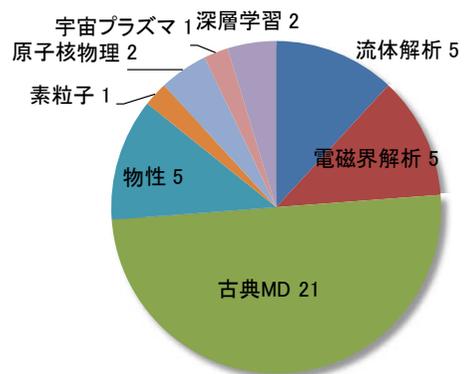
GPGPU

MIC

### ランキング5位までのアプリソフト名

No.	課題数	アプリ名	分野	開発種別
1	5	GROMACS	古典MD	OSS
2	3	AMBER	古典MD	商用
3	3	CST Studio Suite	電磁界解析	商用
4	3	GENESIS	古典MD	国プロ
5	3	myPresto/psygene-G	古典MD	国プロ
6	3	POLAS-3D GPX	流体解析	独自開発

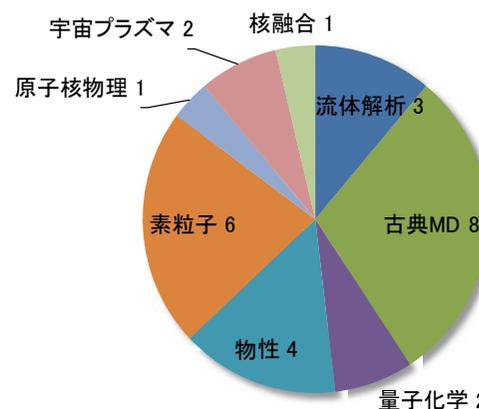
No.	課題数	アプリ名	分野	開発種別
1	3	IroIro++	素粒子	独自開発
2	3	GROMACS	古典MD	OSS
3	3	Ermod	古典MD	独自開発
4	3	LBM	流体解析	独自開発
5	2	SPINGRA	物性	独自開発



分野別アプリ数  
(H27～H29の42本についての調査)



開発種別ごとのアプリ数



分野別アプリ数  
(H27～H29の27本についての調査)



開発種別ごとのアプリ数

### 分野別・機種別アプリソフト本数

(添付資料.5)

## カテゴリ2アプリソフト候補リスト(1)

No	分類	アプリソフト名／分野／手法	開発元
1	環境科学	都市防災計画	
2	社会科学	都市におけるエネルギー・水資源の効率的運用	
3		モノ・ヒト・カネ(コト)の流れの効率的制御	
4	手法 (最適化等)	全体最適設計シミュレーション	
5		DAKOTA(全体最適化プラットフォーム)	サンディア研(OSS)
6		データ同化技術	
7		UQ(Uncertainty Quantification)技術	
8		複雑現象にまたがる解析(マルチスケール・マルチフィジックス)	
9	数学ライブラリ	高度並列化高精度高速数値計算ライブラリの整備	
10	データ解析	ビッグデータ解析、Deep learning等	
11		ビッグデータ・人工知能・機械学習等のデータ科学を活用したマテリアルインフォマティクス	
12	燃焼解析	HINOCA(自動車エンジン燃焼解析ソフトウェア)	国プロ
13		燃焼解析プラットフォーム構築	
14		複雑物理現象(燃焼、混相流等)の実スケール解析	
15	連成解析	対流と熱伝導を組み合わせたシミュレーション(ex. 炉)	
16		相変化・化学反応を含む問題	
17	流体解析	FrontFlow/violet-Cartesian(大規模並列計算にチューニングした非圧縮熱流体解析ツール)	国プロ(重6)
18		FrontFlow/violet-Hierarchical Cartesian(階層型の直交格子に最適化された熱流体解析システム)	国プロ
19		FFX(Lattice Boltzmann Methodソルバー)	国プロ(重8)

【注】 灰色は重点課題ソフト以外のソフト。 \* 印はアドバイザーWGからの意見

(添付資料.5)

## カテゴリ2アプリソフト候補リスト(2)

No	分類	アプリソフト名／分野／手法	開発元
20	計算化学	DMRG (Density Matrix Renormalization Group) 法 (密度行列繰り込み群法)	
21		GRRM (Global Reaction Route Map) (化学反応経路探索手法)	北大/東北大(重5)
22		GRACE (結晶構造予測)	Avant-garde Materials Simulation
23		蛋白質とリガンドとの近接効果を取り込んだ分子力場の構築	
24	材料	SMASH (大規模並列量子化学計算プログラム)	分子研(重5)
25		OpenMX (大規模第一原理計算プログラム)	東大物性研(重7)
26		feram (強誘電体薄膜の高速分子動力学シミュレーター)	東北大金研(重7)
27		ARTED (電子動力学シミュレーション)	筑波大(重7)
28		GCEED (ナノ構造体光励起ダイナミクス並列計算プログラム)	分子研(重7)
29		Ermod (エネルギー表示法による溶液系・ナノ不均一弱秩序系の全原子自由エネルギー計算)	阪大(重7)
30		Phonopy (第一原理計算結果からphononn計算)	京大
31		ALAMODE (原子間ポテンシャルを構築するプログラムPKG)	NIMS(重7)
32		CafeMol (粗視化分子モデル計算)	京大(重1,2)
33	バイオ	MP-Cafee (溶液中のタンパク質と化合物の結合自由エネルギーの分子動力学シミュレーション)	京大(重1)
34		MARBLE (タンパク質や核酸等の生体高分子のシミュレーション)	横浜市大(重1)
35		REIN (多次元レプリカ交換インターフェースプログラム)	理研/近畿大(重1)
36		Genomon (ヒトゲノムのExon領域データ解析よりMutation候補の一覧を解析するパイプライン・プログラム)	東大(重2)
37		MEGADOCK (構造情報に基づくタンパク質間相互作用予測システム)	東工大
38		ZZ-EFSI (全身ボクセルシミュレーション構造流体連成解析)	理研/東大
39		UT-HEART (マルチスケール心臓シミュレータ)	東大(重2)

【注】 灰色は重点課題ソフト以外のソフト。 \* 印はアドバイザーWGからの意見