

「京」におけるアプリケーション利用の 現状と利用促進

登録施設利用促進機関
一般財団法人高度情報科学技術研究機構

平成25年8月21日

1

「京」の産業利用枠の課題で使用されている主なソフトウェア

実証利用、個別利用、トライアル・ユースを含む

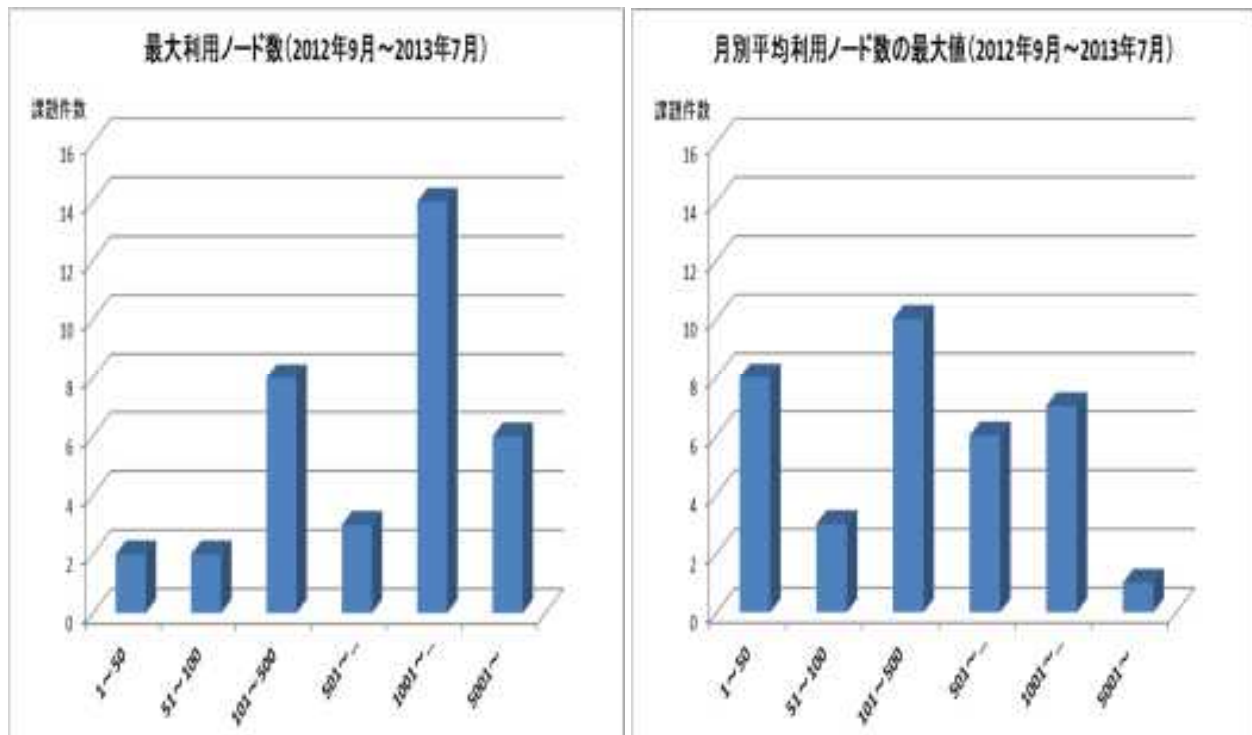
バイオ・ライフ	GROMACS、MP-CAFEE、 AMBER12、MP2-FMO、CGBVS
物質・材料・化学	LAMMPS(3)、modylas(2)、PHASE、 RSRT、VSOP、CPMD、RMC++、 OCTA/SUSHI、Wien2K
工学・ものづくり	FrontFlow/blue、FrontFlow/red、 FrontISTR、OpenFOAM、 ADSTEFAN、MuDIAN、LS-DYNA、 TITECH3DDNS-TCH、CHANL、 FINAS/CFD、PAM-MEDYSA、 HyENEXSS、自社コード(3)
防災・減災、その他	OpenFOAM、LuxRender、 自社コード(1)

2

「京」で利用されているソフトウェアの実行規模別グラフ

① 計算実行ジョブの最大ノード数
(平成24年9月～平成25年7月末までの最大)

② 計算実行ジョブの平均ノード数
(平成24年9月から25年7月度までの最大月)



3

ソフトウェアに関するユーザの要望

- 京では市販アプリが扱いにくい。
理由は、①ライセンスの問題(・数万並列に対応していない、・採算が立たないためベンダーに移植計画が無い、大規模並列時には極めて高額)、②移植作業は金銭的にも時間的にも困難。
- 市販アプリが京では動かないため、大学等のアカデミアと共同してやらざるを得ないので、実施出来るテーマが限定される。
- 京へのソフトウェア移植は個々の企業ではなく、業界としてまとめて実施すべき。自工会が自らソフトウェア移植を実施した例があるが、「京」の利用が優遇されるわけではない。民間活力の活用も含めて検討が必要。
- 産業界としてはソフト移植に要する労力を計算結果の活用に回したい。
そのためにはどれだけアプリケーションが充実しているかが重要。
- 高並列に対応した国産のアプリケーションソフトウェアの育成に繋げる方策を国が検討すべき。
- 業務に浸透しているソフトウェアをいきなり他に変えることは困難。しかし、産業界向けのPRを強化して、海外ISVから国産ソフトへ転換を促す仕組みの検討も必要。
- 大学で開発される国産ソフトを産業界の現場で活用するには、開発・保守を委託されているベンダーの果たす役割が重要。

(産業利用促進に関する調査検討WGにおける産応協の要望ヒアリングを参考に)

4

HPCIコンソ最終報告書では・・・

➤ 商用ソフトウェアの移植はユーザのニーズを受け、ソフトベンダーが行うことを原則とし、登録機関等は、技術支援(必要情報の提供など)を行うとともに移植情報を一元的に管理・提供する。(P30)

- 商用ソフトウェア等に関して、
- ・産業界で利用実績があるもの、利用が見込めるもの
 - ・技術的に高並列化対応可能なもの
 - ・ユーザとソフトベンダーの協力が十分得られるもの

を条件として、ライセンス環境を含めてHPCIシステム構成機関(*1)側で移植・整備を進める。(P30) (*1) 計算資源を提供する機関 (RISTは該当しない)

➤ 検討候補となる具体的なソフトウェアは

- ① 分子科学 Gaussian09, GAMESS
- ② 構造造解析 LS-DYNA, ABAQUS
- ③ 流体解析 Fluent, Star-CCM+ (P35)

⇒ LS-DYNAは、自工会、理研、富士通、LSTC社の努力で「京」版が市販されている。Gaussianは、ノード内の並列のみだが、「京」上で動作する版が市販されている。GAMESSは、RISTのヘルプデスクによる動作確認や課題の支援が実施されている。

5

登録機関としての取り組み

➤ 産業利用分野でニーズの高いソフトウェアの情報整備

- ① ヘルプデスクが基本的な動作確認を実施した21種のOSS情報を公開
- ② OpenFOAM等、ニーズが高いOSSの「京」への移植を実施中
- ③ ソースコードが入手可能なISVソフトを購入し、「京」への移植・動作確認実施中
Wien2K(課題支援中), Amber12(課題支援中), VASP, Molpro

利用者がソフトウェアの販売企業より必要なライセンスを購入し、利用者がインストールを実施する。RISTは、コンパイルの方法、実行スクリプトの例、ソースコードの改変方法等の情報を提供する。

➤ 利用支援用スパコン(FX-10)の活用(11月稼働予定)

- ① ベンダーと共同で移植作業を実施予定
 - I. リソースを無償で提供
 - II. 移植・高度化作業を支援
- ② 利用者が想定されるOSS/ISVソフトの動作確認

➤ プログラム高度化支援の実績(実施中も含む)

- ・ バイオ・ライフ: MARBLE, ABINIT-MP
- ・ 物質・材料・化学: PHASE, UVSOR, STATE, ALPS/looper
- ・ 工学・ものづくり: FrontFlow/red, FrontISTR

6

OpenFOAM®ワークショップ開催(案)

— OpenFOAM®を京で使おう —

登録機関としてOpenFOAMを推進する主旨:

課題採択された「京」の利用者、IT企業、大学などで個別に移植が試みられているが、順調に進んでいるとはいえない。「京」利用支援の観点で、移植の技術情報を一元的に登録機関が集約し、移植を加速する。

開催趣旨:

流体解析のオープンソースCAEツールとして、強いニーズが有るOpenFOAMについて、「京」での移植状況と計算事例を紹介する。一般的なPCクラスタでは実施できない大規模、高解像、広域の流体解析を「京」で可能とし、産業利用を推進する。

主催: RIST、共催: OpenCAE学会

開催日程: 2013年9月27日(金)13:00-17:30

開催場所: 東京 秋葉原 UDX南ウイング6F

講演概要:

OpenFOAMの紹介、建物風圧予測の事例、津波シミュレーションの事例、「京」での移植状況について

7

エクサに向けて (2種類の対応が必要)

■ 大規模並列実行(数千~数万)が必須の一部HPC先進企業

国プロソフト(グランドチャレンジ、イノベーション基盤ソフト等)、OSS、インハウスソフトを利用。

・ライセンス費用が高額になることやソフトが大規模並列に対応出来ていない等の理由から商用ソフトは考えにくい。

⇒ 国プロソフトにおいては、保守や操作性向上の継続的实施。

OSSにおいては、移植・チューニングに関わる情報の集約および実施。

■ ある程度の並列規模(~数百)で、使い慣れた商用ソフトを使いたい大多数の企業

新アーキテクチャの恩恵を受けつつ、アプリケーション側からは、Intel系PC clusterのように見える仮想システム機能を実装すればどうか。

⇒ ISVとの交渉や多額の費用と労力を要する移植・チューニングが一切不要。多少の性能低下は、このカテゴリの企業にはたいした問題ではないはず。

8