

「京」利用者向け公開ソフト

「京」に最適化したソフトウェア
「京」利用者向け公開ソフト一覧

注)これらのソフトウェアは富士通が提供・サポートする「京」向けソフトウェアとは異なり、計算科学研究機構が独自に提供・サポートするものです。

2016年1月現在、29件のソフトウェアを公開中。今後も順次公開予定。

システムソフトウェア研究チーム

NetCDF	プラットフォームに独立なファイルを扱うためのライブラリであり、Parallel netCDF、HDF5、Szip のライブラリを含む。Frontend、シリアル、MPIのそれぞれの環境でSzipありとなしの合計6環境を提供。
PRDMA (Persistent Remote DMA)	Remote DMA (RDMA)が利用可能なインターコネクト上で通信レイテンシや計算と通信の並行処理を改善するため、MPI標準の永続通信 (Persistent Communication) プリミティブの高速実装を提供するライブラリ。

プログラミング環境研究チーム

OmniXcalableMP	Fortran および C の拡張として定義された指示文ベースの並列言語 XcalableMP のコンパイラ。
Scalasca	MPI、OpenMP、MPI /OpenMPハイブリッドを使ったプログラムや並列プログラミング言語 (XcalableMP/C) のプログラムの性能最適化を支援するためのツールであり、特に通信や同期でのボトルネックになっているところを特定し、その原因を調査するために使用。
MUMPS	連立一次方程式を直接解法で解く高並列数学ライブラリ。

大規模並列数値計算技術研究チーム

EigenK	「京」コンピュータのアーキテクチャを意識して開発された標準固有値問題のための固有値計算ライブラリ。密対称行列を対象として大規模並列計算はもちろん小規模問題でも既存の固有値ソルバよりも高速に計算可能。
EigenExa	EigenKの後継として「京」コンピュータでの性能チューニングが施された標準固有値問題のための高性能固有値計算ライブラリ。EigenK同様に密対称行列を対象として大規模並列計算はもちろん小規模問題でも既存の固有値ソルバよりも高速に計算可能。
KMATH_RANDOM	高品質な乱数として知られるメルセンヌツイスター乱数生成器を並列分散環境で使用するための数学ライブラリ。Fortran90, C, C++から利用可能。

利用高度化研究チーム

Eclipse PTP for K and FX10 computers	Eclipse PTPという統合ソフトウェア開発環境を「京」コンピュータおよびFX10で使うために必要なソフトウェア。以下の2つのパッケージを含んでいる。 (1)「Target System Configurations」 Eclipse PTPから京やFX10でジョブを実行するときに必要なものである。 (2)「LML DA Driver for PJM」 京やFX10のユーザーのホームディレクトリーにインストールするもので、モニタリングに必要なものである。
TAU	Fortran, C, C++ で書かれた並列プログラムの性能解析ツール群。プログラムの性能測定、解析、可視化などの機能を持ち、総合的に性能解析を支援する。プロファイル機能を使用することによって、各関数の実行時間 (inclusive/exclusive)、関数呼び出し回数、一回の呼び出しにあたっての平均実行時間などを知ることができる。またトレース機能を使用することで、プログラム実行中の各イベント (MPI通信など)がいつ・どこで発生したか、プロセスやソースコード等の単位で知ることができる。
Xcrypt	並列ジョブ制御スクリプティング言語Xcryptを「京」上に実装。統一的で使いやすいユーザーインターフェイスを提供。

離散事象シミュレーション研究チーム

OACIS (Organizing Assistant for Comprehensive and Interactive Simulations)	MacやLinux系OSがインストールされた計算機上でウェブサーバとして動作するシミュレーション実行管理ソフト。ユーザが、シミュレーション条件を与えると、OACISは、実行スクリプトの生成、京コンピュータなどの計算ホストでの実行、そして、シミュレーション結果の取り込みを自動的に実施。そして、シミュレーション結果の取り込みを自動的に実施。
---	---

量子系分子化学研究チーム

事例紹介

NTChem	完全国産の第一原理的分子軌道計算ソフトウェア。相対論的効果、化学反応解析等の先端的な解析機能を実現するとともに、「京」をはじめとしたマルチコア並列計算機の能力を引き出す最新アルゴリズムを実装。
--------	--

粒子系生物物理研究チーム

GENESIS	高機能・超並列な分子動力学計算ソフトウェア。SPDYN、ATDYNという二つのプログラムが存在しており、SPDYNは超並列計算、ATDYNはマルチスケールシミュレーションやレプリカ交換分子動力学法が可能。
---------	--

粒子系シミュレータ研究チーム

FDPS (Framework for Developing Particle Simulators)	「京」のような超大規模並列計算機の上で効率的に実行できる粒子系シミュレーションソフトウェアを容易に開発できるようにするためのアプリケーション開発プラットフォームである。チューニングや並列化の経験がない人でも数万ノードまで性能がスケールする粒子系アプリケーションを開発できる。
--	---

複合系気候科学研究チーム

SCALE	気象シミュレーション用のライブラリおよびそれを利用した気象ラージエディターシミュレーションモデル。超並列計算機システムで性能を出せるよう、計算科学と計算機科学の専門家とのコデザインにより設計。
-------	--

プログラム構成モデル研究チーム

事例紹介

KMR (K MapReduce)	ポスト処理等のデータ処理を容易に記述するためのライブラリ。定評のあるデータ処理ツールmap-reduceを「京」上で提供。
-------------------	---

可視化技術研究チーム

Polylib	物体の形状情報等のライブラリで、シミュレーション入力データ作成および結果の可視化に使用。
Cutlib	Polylibと併用して、シミュレーション入力データ作成および結果の可視化に使用。
CPMlib	領域分割型のアプリケーションを記述するためのミドルウェアで、データ領域確保、並列領域管理、通信などの機能を提供。
FFV-C	直交格子を用いて、短時間で複雑な形状まわりの流れをシミュレートできる三次元非定常熱流体シミュレータ。流体解析における困難な課題である格子生成を自動化し、大規模な計算を短時間で実行できることが特徴。また、「京」の全てのプロセッサを用いて90%以上の弱スケール性を達成するチューニングが施され、工学分野の実設計課題を支援できるように様々な機能開発を行っている。
KFoundation	AICSで開発された汎用C++APIを収集。
libKnoRBA	KnoRBAエイジェント作成のためのC++ライブラリ。知識リクエスト・ブローカー・アーキテクチャ又はKnoRBA (ソルバ) 技術は汎用コンポーネント・モデルとして「オブジェクト」の代わりに「エイジェント」が使う世界初の分散システム開発プラットフォーム。高度な抽象化レベルでの自律性、ポータビリティ、柔軟性、拡張性、および安定性の提供を目的としている。このライブラリで作成したエイジェントはKnoRBA Agent Runtime Environment (ARE)を使用し、クラスターや他の分散システムでの実行が可能。
HIVE	HIVEは、大規模並列環境で高い性能を発揮する利便性の高い可視化システムで、「京」の上で多数のノードを用いた並列レンダリングが可能。「京」以外にも多くの計算プラットフォームで動作し、リモート/ローカル動作、高並列性能、機能拡張性、移植性、メンテナンス性を考慮して開発されています。現在、ベータ版で、Mac, Linux向けのバイナリパッケージを配布している。
TextParser	Polylib, Cutlib, CPMlib等のAPIで、階層構造のライブラリに対して対応するAPIであり、単体でも動作。
PMLib	プログラムの性能測定と統計情報を表示するツールで、被測定ルーチンは利用者が指定可能。
CIOLib	直交等間隔格子の分散並列ファイルの管理機能を提供。

ソフトウェア技術チーム

K-scope	Fortran向けプログラム解析ツールで、本ツールを用いることでコードの全体把握が容易に可能。(本ソフトは「京」上ではなくユーザの端末上で動作。)
---------	---

システム運転技術チーム

Kを待ちわびて	ジョブが実行されるまでの予想待ち時間を計算、表示するツール群。
---------	---------------------------------

「京」利用者向け公開ソフト 活用事例紹介

量子系分子科学研究チーム

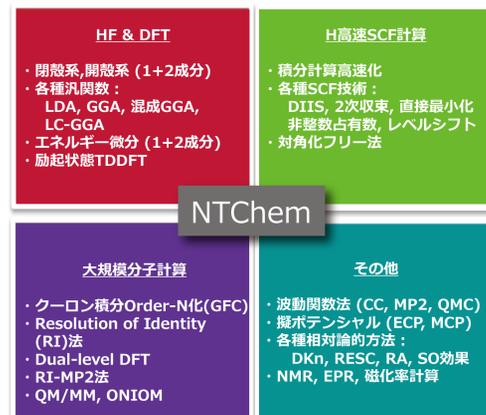
ソフト公開 2013年8月~

01

「京」の超並列環境に資する国産分子科学計算ソフトウェア 「NTChem」

超並列環境を十分に活用する純国産分子科学計算ソフトウェア

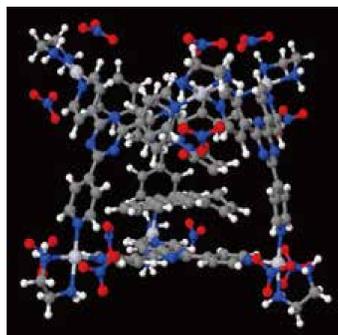
- 「標準的な量子化学計算法に加え、独自に開発した理論・方法が実装されており、他プログラムでは計算することのできない様々な化学現象の解明に利用可能。
- 相対論的効果の取り込み、化学反応解析等を高配列化アルゴリズムで実装。
- 大規模高精度分子計算のために、「京」全ノード規模までスケールすることのできる新規計算アルゴリズムが実装されており、「京」8,911ノードを用いて実行効率43.3%で世界最大の電子相関計算を「京」で実現。



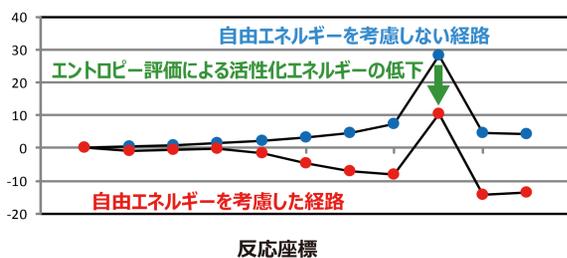
活用事例 「NTChem」

自由エネルギー評価による超分子中の化学反応経路解析

ケージ型超分子M₆L₄内でのディールス・アルダー反応は、ケージによる揺らぎのエントロピー効果で活性化エネルギーが低下し、反応しやすいことが判明。



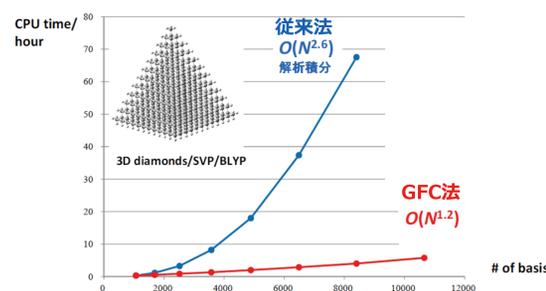
M₆L₄超分子中で起こるDiels-Alder反応



ホスト・ゲスト分子系に適合させたQM/MM 最小エネルギー経路法

Gaussian and Finite-element Coulomb (GFC) 法によるクーロン積分のオーダー N 評価

- 分子軌道計算におけるクーロン積分の評価はほぼ N³ に比例する。(N: 基底関数の数≒原子数)
- 新しい計算手法であるGFC法を用いるとNに比例する計算量で評価できるので、大規模系を扱うことが可能。



プログラム構成モデル研究チーム

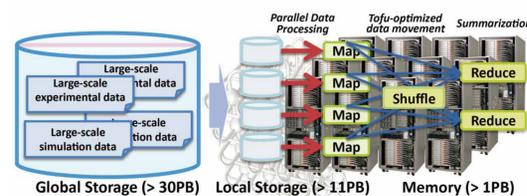
ソフト公開 2013年8月~

02

「京」でのデータ処理を加速するソフトウェア 「K MapReduce」

MapReduceを「京」コンピュータ上で高速かつ容易に実行するためのソフトウェア

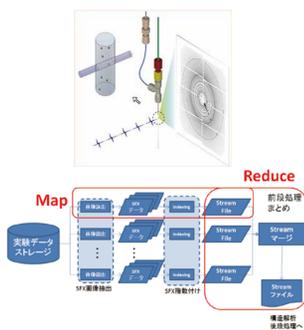
- 「京」コンピュータの4,160ノードを用いて、日本人男性一人のヒトゲノムデータ490GBの変異推定を行ったところ、4時間3分で解析完了し、従来手法の1.6倍の性能向上を達成。並列化はK MapReduceが自動化するため、コードサイズも1/7に削減。



K MapReduce

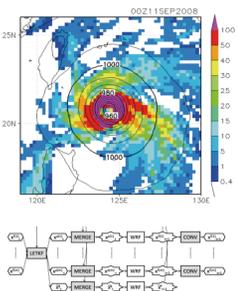
活用事例 「K MapReduce」

大規模データ処理、並列タスク実行等、粗粒度タスクのワークフロー実行を要求する計算科学アプリケーションの開発を加速し、成果の創出に貢献



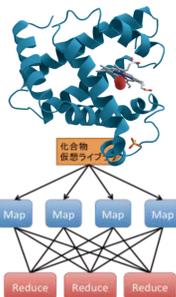
XFEL施設SACLAによる実験データの解析

個々の回折パターンをSFX解析を並列に実行して特徴量を抽出、結果を結合。典型的なMapReduceの計算パターンであり、ワークフロー処理の大部分をK MapReduceで自動化。



データ同化による気象予報

条件の異なる気象モデルを複数並列に実行。タスク管理の手間を無くし、ジョブスケジューラの最大同時実行数を超えての並列実行を実現。



創薬における、化合物の大規模仮想ライブラリの構築

40万ほどの種となる化合物から約50億件の新規性に富む化合物群を生成。典型的なMapReduceの計算パターンであり、ワークフロー処理の大部分をK MapReduceで自動化。



自動車交通等の社会シミュレーション

条件の異なる自動車交通流シミュレーションを複数並列に実行。タスク管理の手間を無くし、ジョブスケジューラの最大同時実行数を超えての並列実行を実現。