

(5) ポスター発表

HPCI システムの利用支援

P49 User Support Services in the HPCI System

吉澤 香奈子 yoshizawa@rist.or.jp

高度情報科学技術研究機構 (RIST)

特定高速電子計算機施設は、理化学研究所により設置、運用される極めて高度な演算処理を行う電子計算機(「京」; 令和元年 8 月 16 日に共用を終了)を使用して研究等を行う施設である。その「京」を中核とする革新的ハイパフォーマンス・コンピューティング・インフラ (HPCI)では、「HPCI とその構築を主導するコンソーシアムの具体化に向けて -最終報告-」に基づき、理化学研究所、9 大学(北海道大学、東北大学、筑波大学、東京大学、東京工業大学、名古屋大学、京都大学、大阪大学、九州大学)、筑波大学と東京大学が設置・運営する JCAHPC 並びに研究機関(海洋研究開発機構、産業技術総合研究所)が、計算資源の一部を供出し、全国の幅広い利用者に HPC 環境を効率良く利用できる体制と仕組みを提供している。RIST は、特定高速電子計算機施設の登録機関及び「HPCI の運営」の代表機関として、HPCI の利用支援を担っている。

RIST の利用支援の主な目的は、HPCI の利用の促進、計算資源の円滑な利用、更には、資源の効率的な利用並びに計算科学技術研究を支える人材の育成や利用者の裾野の拡大である。これらを実現するため、RIST は、関連する各種情報を HPCI ポータルサイト[1]等で適時に、かつ、的確に情報提供するとともに、利用相談や技術相談に応じている。また、要請に応じてアプリケーションの調整・高度化の支援等を行うとともに、講習会等を定期的に開催している。

RIST の利用支援においては、利用者からの一元的な問い合わせの窓口(ヘルプデスク)を設けて各種の相談に対応しているが、高度な技術的相談は、利用者からの依頼を受けて「高度化支援」として実施している。高度化支援は、主に利用するアプリケーションに対して、プログラム性能情報の採取、ポトルネツク調査(通信特性分析、インバランス評価、単体性能評価)、性能改善の支援、計算結果の可視化などである。

平成 29 年度から RIST では、この利用支援の一環として「HPCI で利用されるアプリケーション・ソフトウェア(アプリソフト)の利用環境整備(移植、実行環境整備、利用支援体制構築、等)」を実施している。この整備では、利用者の利便性の大幅な向上、成果の早期創出、利用者の裾野拡大、さらには国プロアプリの普及等の効果を狙い、「HPCI において、利用が多い OSS(オープンソースソフトウェア)や、「利用が多いまたは今後利用が期待される日本で開発されたアプリケーションソフトウェア」(表を参照)を HPCI の利用者が直ぐに利用できる環境を整備している。この整備したアプリソフトに対して、HPCI ポータルサイトの「プリインストールされたアプリケーションソフトウェア」のページ[2]での情報公開を行っており、これらのアプリソフトが利用しやすい

ように計算機ごとにバッチジョブのスクリプトサンプル等も掲載している。なお、アプリソフト利用環境整備においては、有識者や開発者からの意見・推薦を元に整備するアプリソフトを選定し、また、整備先の各センターの要望を踏まえながら進めている。

アプリケーション名(分類)	インストールマシン名
OpenFOAM(CAE)	「京」 ※「京」は令和元年 8 月 16 日に計算資源の共用を終了しました。 名大(FX100)
LAMMPS(古典 MD)	
GROMACS(古典 MD)	
Quantum ESPRESSO (第一原理計算)	
MODYLAS(古典 MD)	東北大(LX 406Re-2) JCAHPC(Oakforest-PACS)
NTChem(量子化学)	東大(Reedbush-U) 東工大(TSUBAME3.0)
SMASH(量子化学)	名大(CX400) 京大(XC40)
OpenMX(第一原理計算)	阪大(OCTOPUS) 九大(ITO-A, ITO-B)
SALMON(第一原理計算)	北大(Grand Chariot)※準備中 東大(Oakbridge-CX)※準備中
HΦ(物性物理)	
ABINIT-MP(量子化学)	名大(CX400) 九大(ITO-A, ITO-B) 東工大(TSUBAME3.0)
PHASE/0(第一原理計算)	北大(Grand Chariot)※準備中 JCAHPC(Oakforest-PACS)※準備中 東大(Oakbridge-CX)※準備中 京大(XC40)※準備中 阪大(OCTOPUS)※準備中
FrontFlow/blue(CAE)	
FrontISTR(CAE)	
GENESIS(古典 MD)	名大(CX400) 九大(ITO-A, ITO-B) 東工大(TSUBAME3.0) 北大(Grand Chariot)※準備中 筑波大(Cygnus)※準備中 JCAHPC(Oakforest-PACS)※準備中 東大(Oakbridge-CX)※準備中 京大(XC40)※準備中 阪大(OCTOPUS)※準備中

表 RIST が利用支援の一環として整備したアプリケーションソフトウェア一覧

[関連 WEB]

[1] <https://www.hpci-office.jp/>

[2] https://www.hpci-office.jp/pages/appli_software