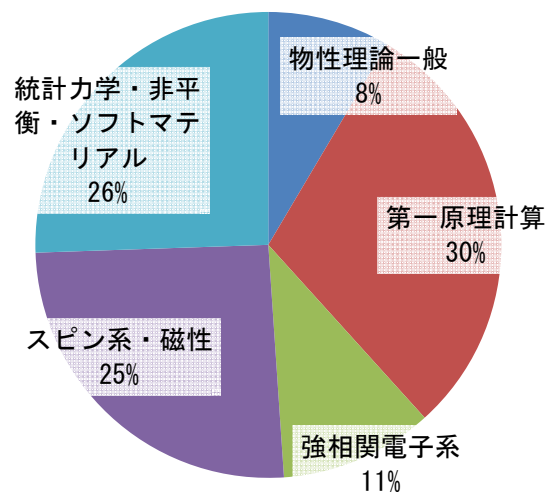


物性研究所スーパーコンピュータシステムの 活用状況に関するアンケートの集計結果（2008年） （回答数 47 グループ）

1、属性とシステム利用全般

A. 最初にあなたの研究グループ利用についてご記入ください。年によって変動する場合には、平均的な数をご記入ください。

（1）主な研究分野



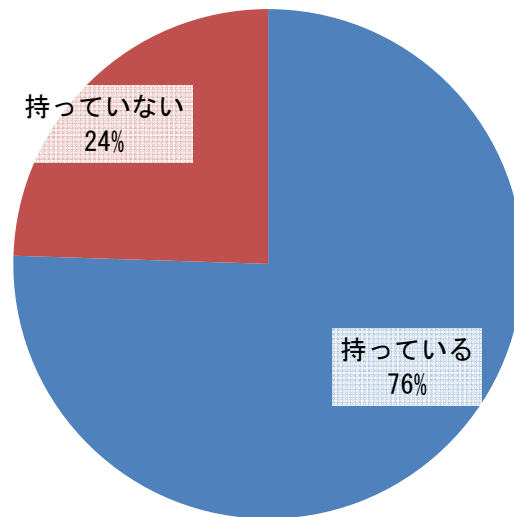
研究分野に関しては、第一原理計算、強相関電子系などの電子状態の計算が全体の約半分、残りがスピン系や非平衡・ソフトマテリアルの統計力学です。

（2）グループの規模

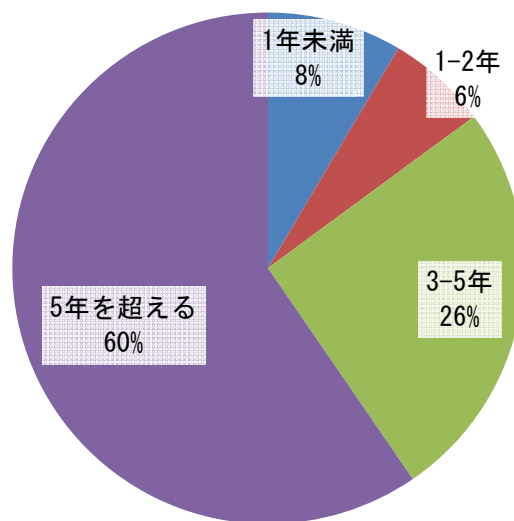
設問の定義があいまいだったため、有意な結果をお示しすることができません。
申し訳ございません。

B. 利用の全般に関する以下の質問について、近いものを選んでください。

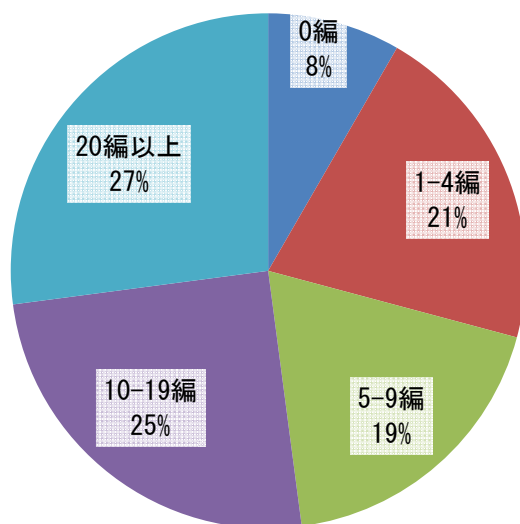
- (1) 現在あなたは物性研究所スーパーコンピュータシステム（以下、物性研システムと略称）の有効なユーザアカウントをお持ちですか？



- (2) 物性研究所スーパーコンピュータシステム（以下、物性研システムと略称）を利用した研究を累積で何年間ご利用になりましたか？



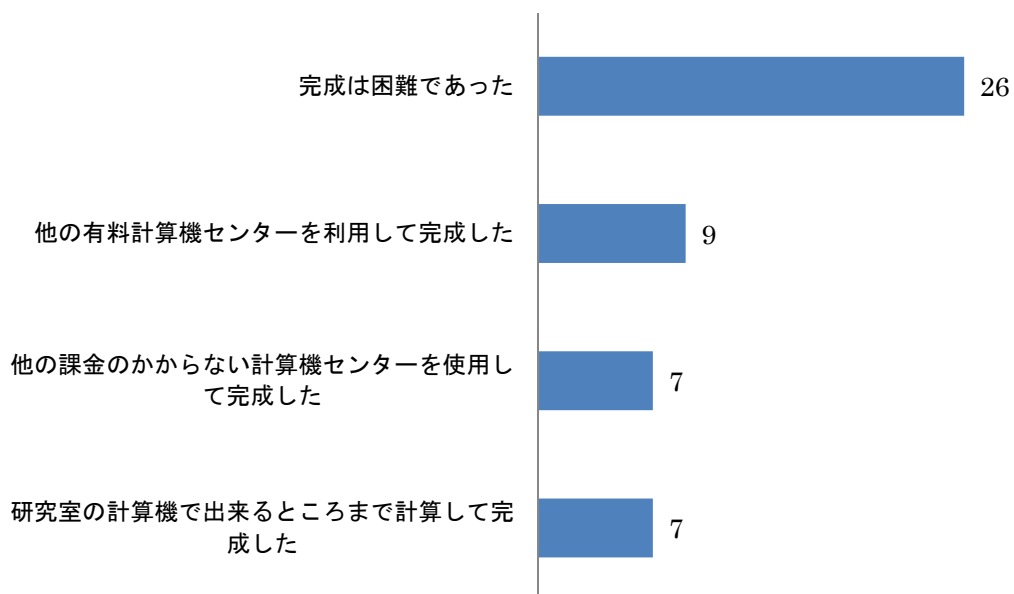
(3) 物性研システムを利用した研究を行い、研究論文を何編（累積論文数）
発表されましたか？



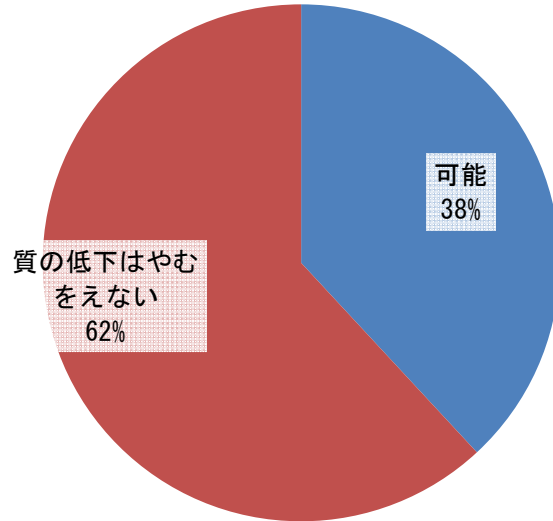
5年を超えるユーザが半数以上を占めています。

また50%を超えるユーザが10編以上の論文を物性研システムを利用して発表しています。

(4) それらの論文は、もし物性研システムの利用ができなかったらどうなっていたとお考えですか？

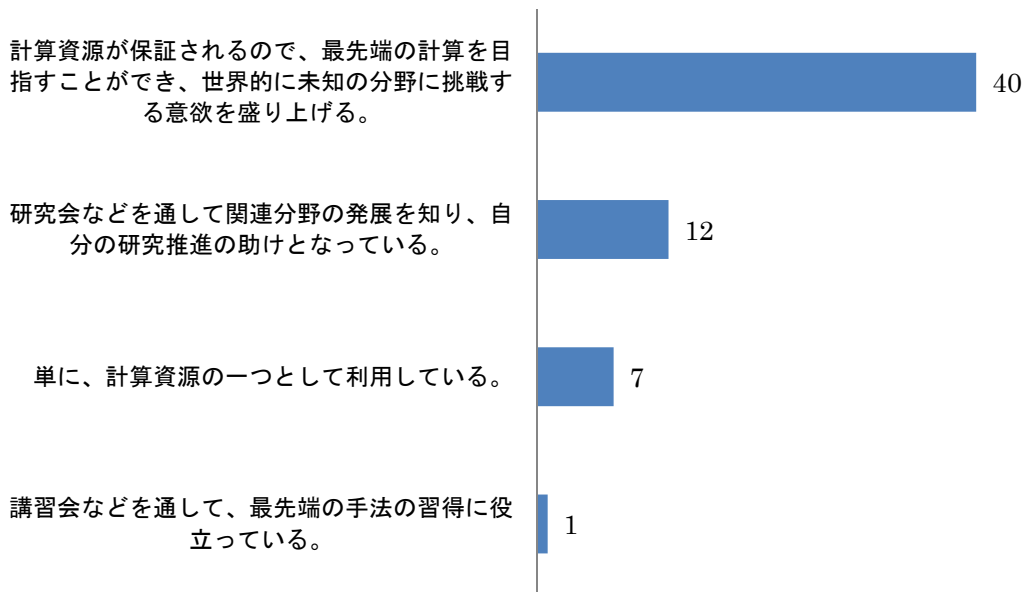


(5) (4) で 1, 2, 3 と答えられた場合、同質の計算は可能でしょうか？

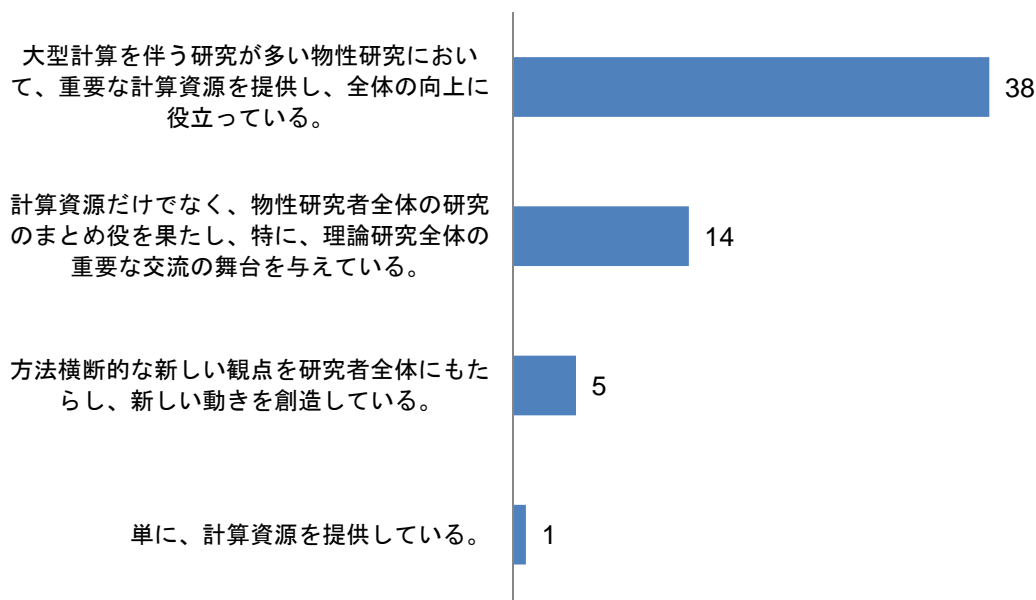


ほとんどのユーザが物性研システム無しでは論文の完成は困難、もしくは質の低下をやむをえないと回答しています。

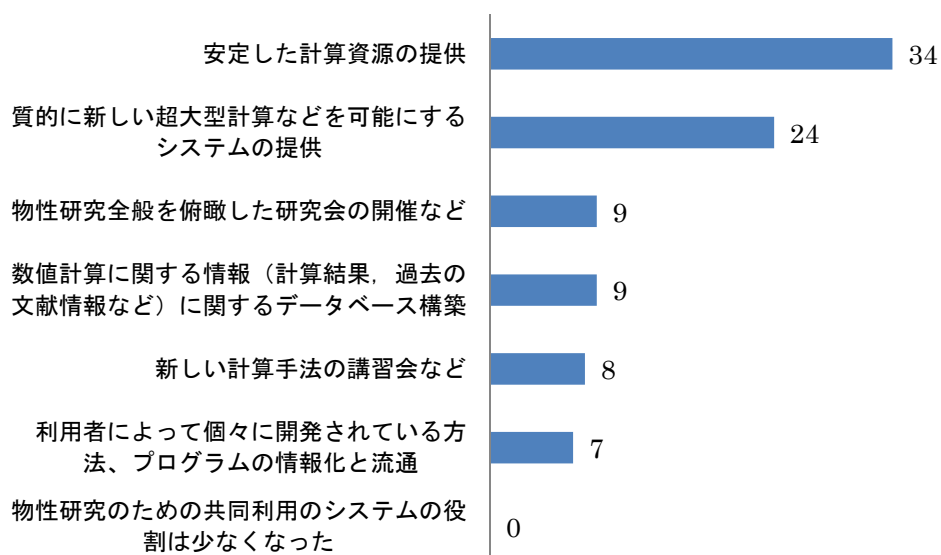
(6) あなたが研究を進められる上で、物性研システムはどのような役割を果たしていますか？（複数の選択肢を選んでいただいて結構です）



(7) 物性研究全体に対して、物性研システムの役割をどのように位置づけますか？
 (複数の選択肢を選んでいただいて結構です)

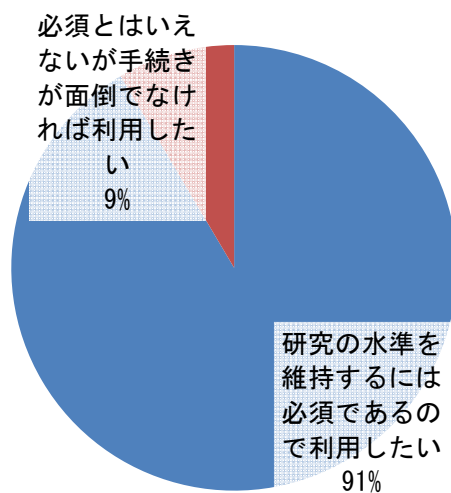


(8) これからの物性研システムの役割としてどのようなことを期待しますか？
 (複数の選択肢を選んでいただいて結構です)



物性研システムを計算資源としての期待が大きいことがわかります。また計算物性物理分野の向上、研究者全体の交流としての役割にも期待が寄せられています。

(9) これからも物性研システムを利用して行きたいとお考えですか？最も近いものを選びください。



91% の人が研究水準を維持するには物性研システムが必須であると回答しました。論文に発表する最終的なデータを計算するために物性研システムが利用されていることがわかります。

物性研究所スーパーコンピュータシステムの 活用状況に関するアンケートの集計結果（2008年） （回答数 47 グループ）

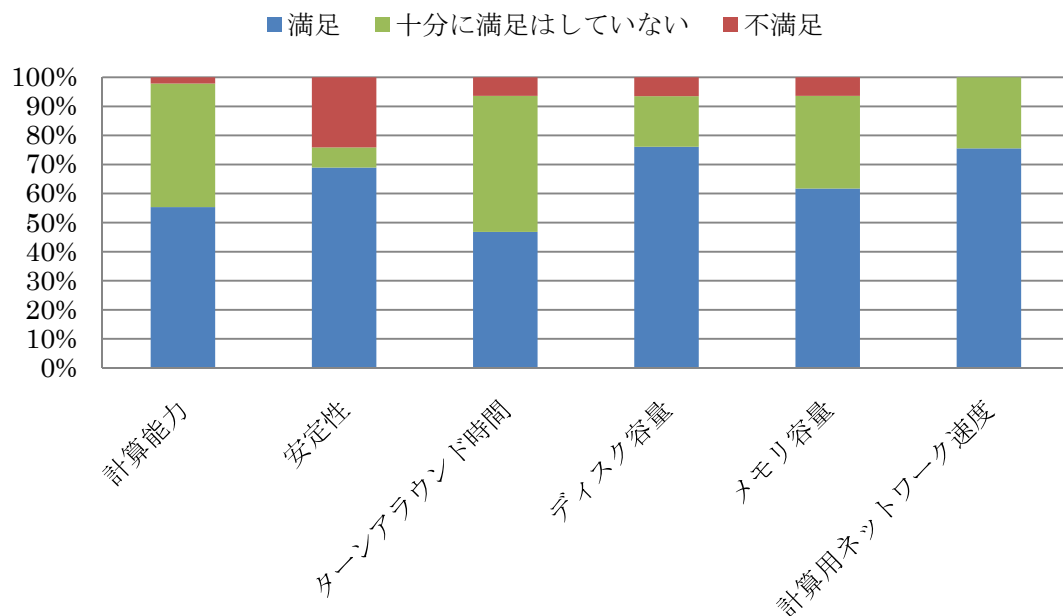
2、システム利用の満足度

C. 物性研システムの利用の満足度に関して質問をします。
それぞれの項目について、[]の中に

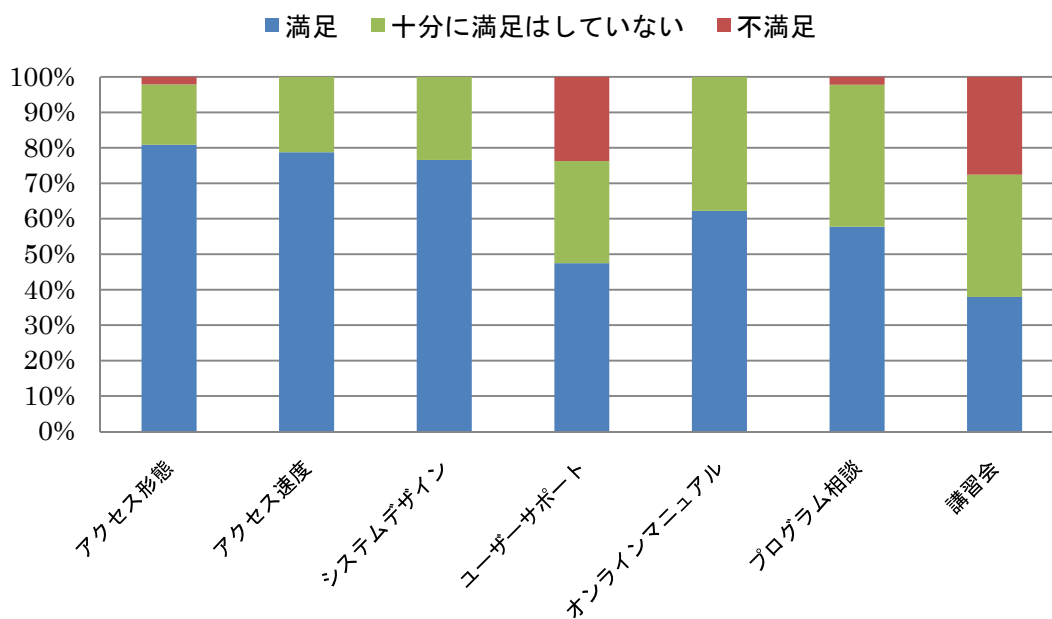
1. 満足
2. 十分に満足はしていない
3. 不満足

のいずれかを記入し、具体的な問題がある場合には、自由記入欄にお書きください。
特に、不満足な点については、主たる原因をご記入ください。

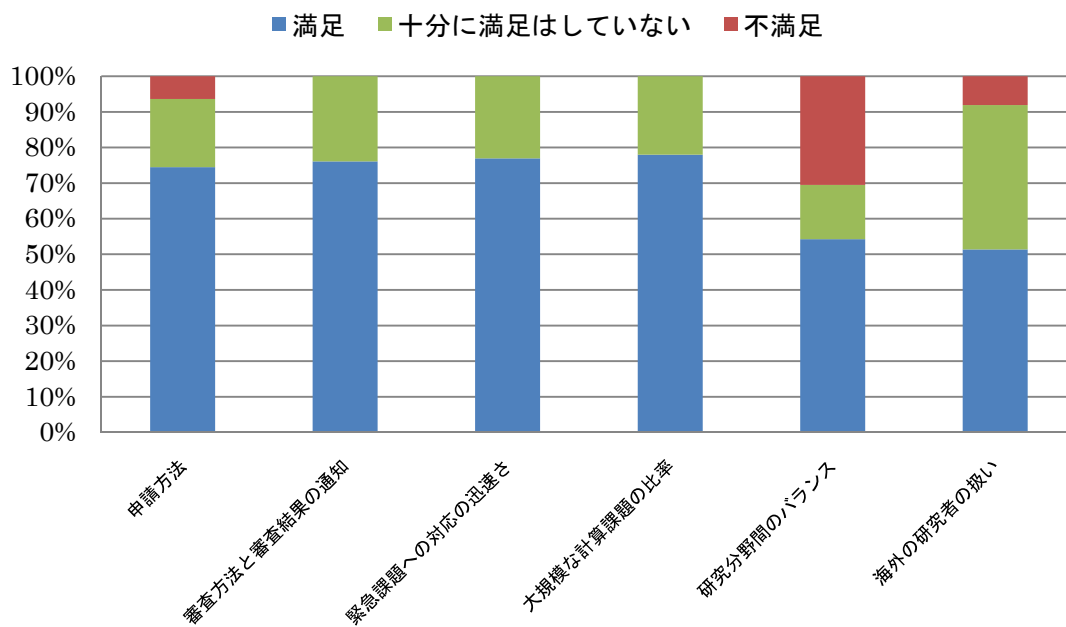
(1) 物性研システムの計算能力に関連して



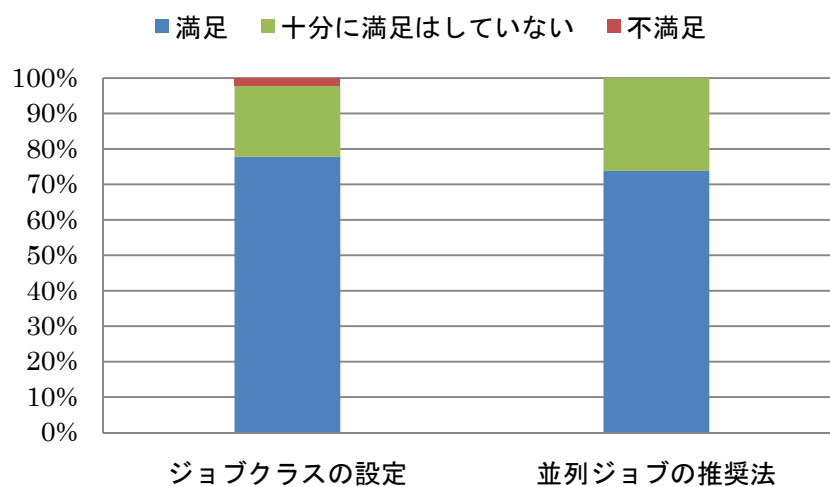
(2) 物性研システムの使い勝手に関連して



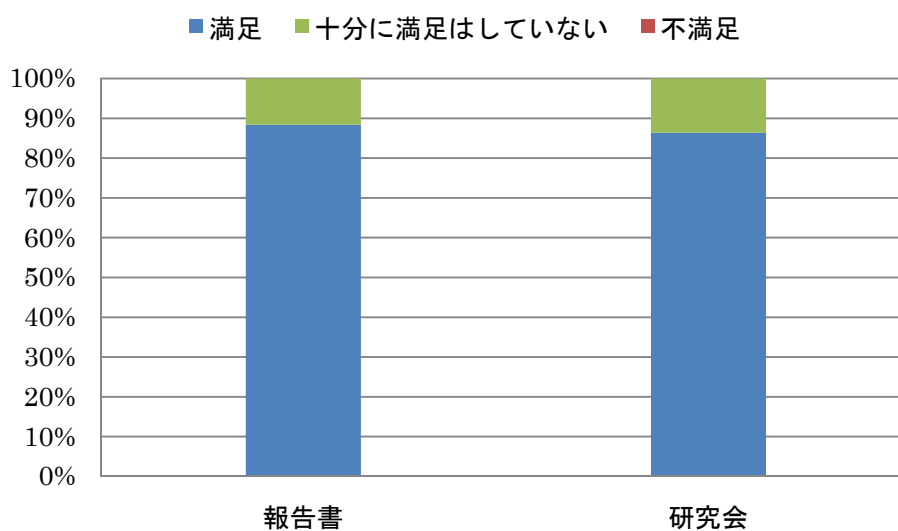
(3) 課題申請、採択に関連して



(4) システム運用に関連して



(5) 研究報告に関連して



自由記述

- システム B のマニュアルには、64 スレッドで実行することが必須であるかのように読める部分があります。しかし、スレッド数が増えると並列効率が落ちてしまうコードの場合、スレッド数を減らし、その分プロセスを並列して実行する方が効率が良い場合があるので、そういった可能性についてもマニュアルで言及していただければありがたいと思います。実際に、我々は、OMP_NUM_THREADS=64 として 64 並列のプロセスを 1 つ実行させるよりも、トータルでは同じ処理を行なうものを 4 プロセスに分割し、OMP_NUM_THREADS=16 として 16 並列のプロセスを 4 つ実行させた方が実時間が少ない、ということを経験しました。
- system B で、CPU 時間をもっと長い (100 時間程度) ジョブクラスを作って欲しい
- 概ね利用しやすいように整備されていると感じる。
- 分からないもの (緊急課題の対応など) は未記入としました。また、System B についてしか知りませんが、ユーザーサポートは特に良いほうだと思います。

システム利用に関して、全体として大きな不満は無いようです。

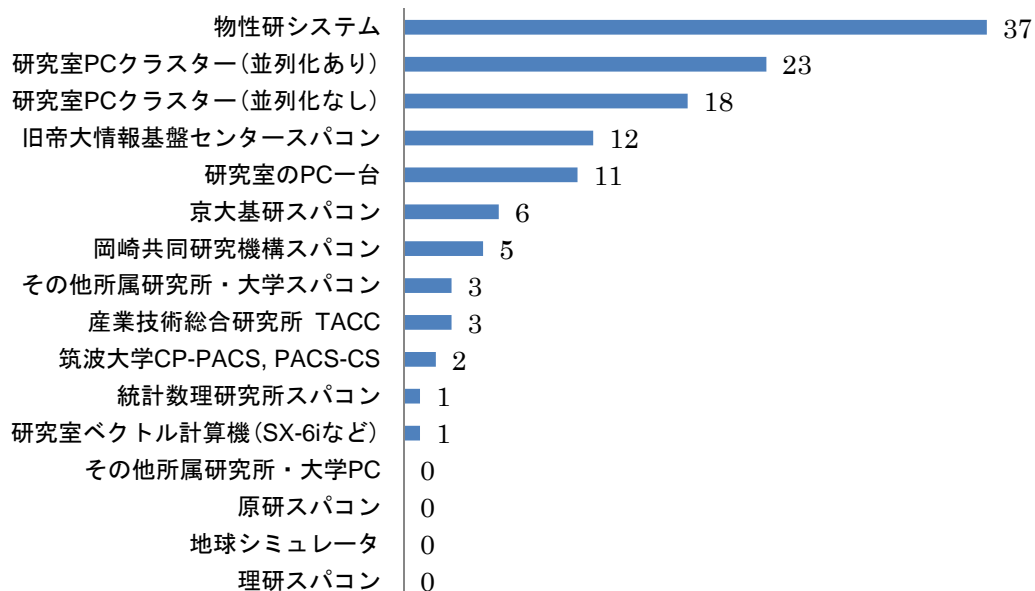
但し、計算能力・サポート・講習会・分野間のバランス・海外研究者の取扱いについて、相対的に満足度が低いようです。

物性研究所スーパーコンピュータシステムの 活用状況に関するアンケートの集計結果（2008年） （回答数 47 グループ）

3、計算全般について

D. 計算の取り組みに関連して、以下の項目についてお答えください。

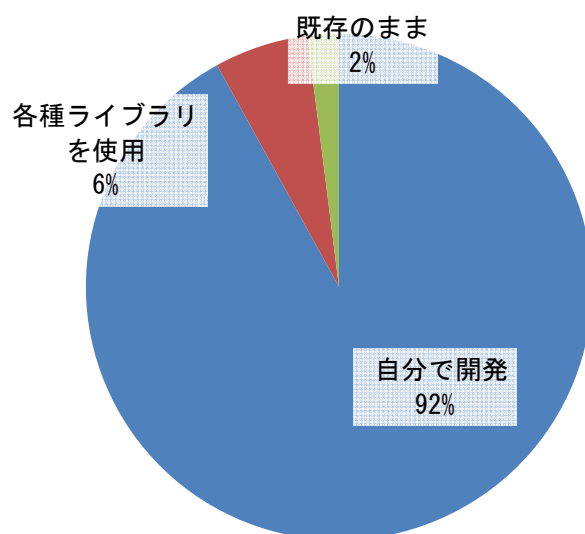
a. 現在お使いの計算資源を利用頻度の高いものから順に番号でお答えください。



前回のアンケート結果から大きな変化はなく、研究室のワークステーションで準備計算をし、物性研のシステムでプロダクションを行うのが一般的のようです。

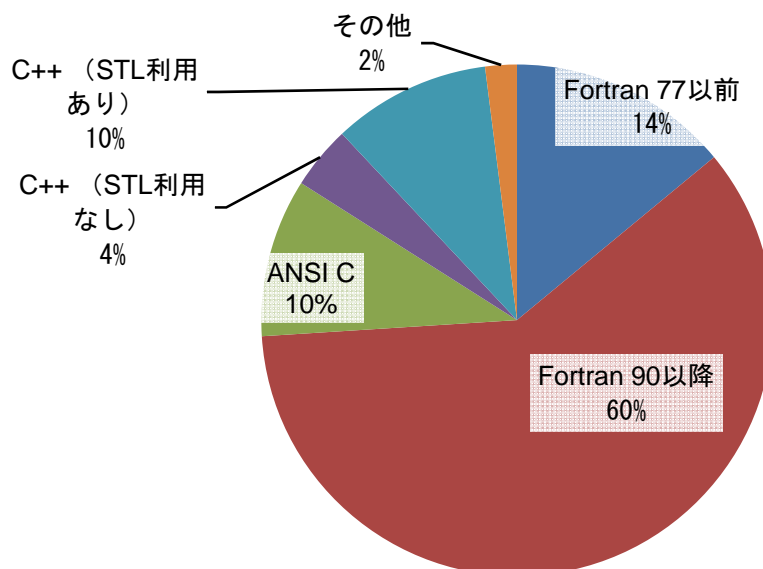
物性研システム以外のシステムも利用しているユーザも存在していますが、ほとんどのユーザは物性研システムをメインとして利用しています。

b. 利用ソフトウェアについてお答えください。

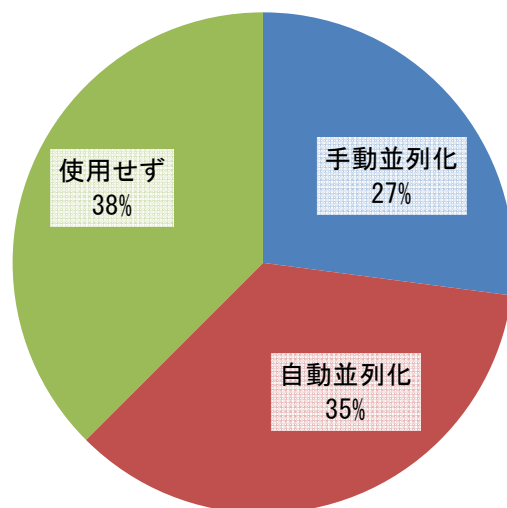


ほとんどのユーザは自分で開発したプログラムにより計算を行っているようですが、少数ながら既製のソフトウェアによって計算を行っているユーザもいるようです。

c. bで1または2とお答えになった方はプログラム開発に主として用いている言語をお答えください

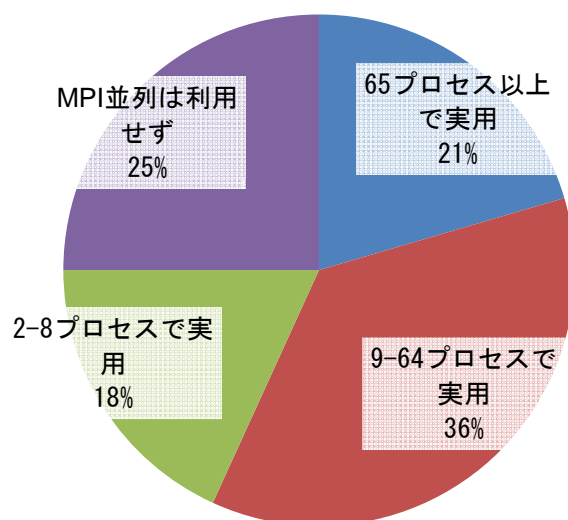


d. 共有メモリ並列化 (OpenMP および自動並列化) の実績はいかがでしょうか



手動並列化、自動並列化をあわせると半分以上のユーザが共有メモリの並列化を行っているようです。

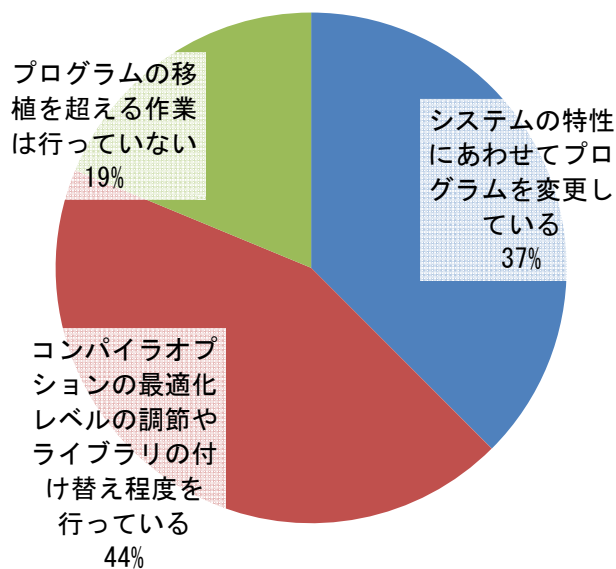
e. MPI 並列化の実績はいかがでしょうか



全体の 75%のユーザが MPI 並列を行っています。

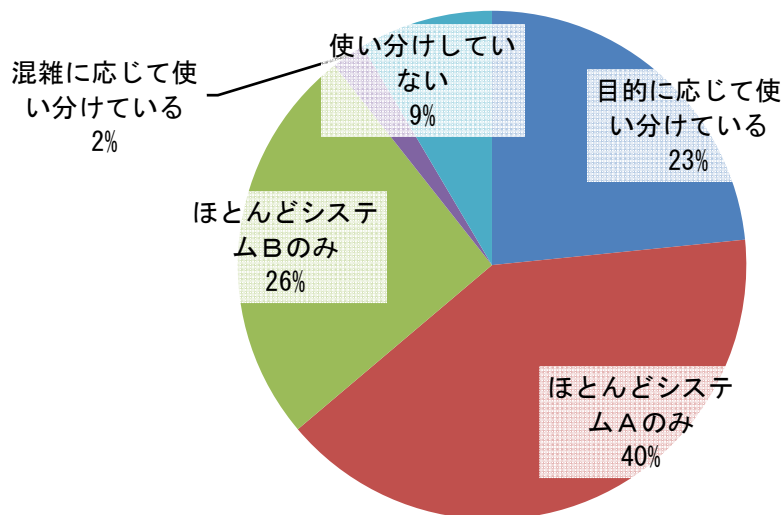
前回のアンケート結果にくらべると、並列化に取り組んでいるユーザの数は確実に増加しています。（前回は 40%強のユーザが並列化を行っていませんでした。）

f. プログラムの最適化の実績をお答えください



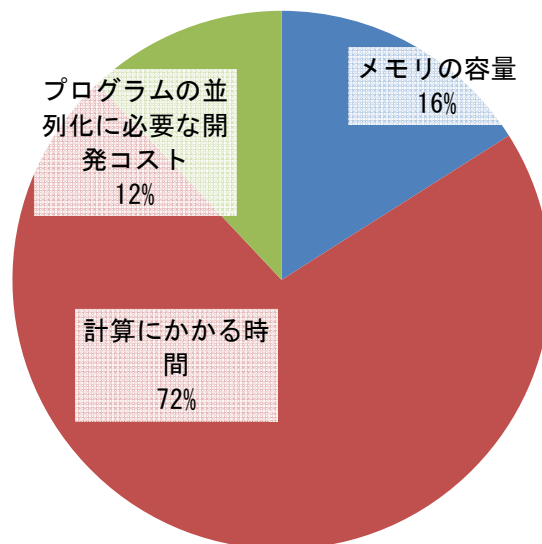
全体の 80%のユーザが何らかの方法でプログラムの最適化を行ってシステムを利用しているようです。

g. 研究目的に応じて、システムAとシステムBの有効な使い分けがなされていますか？



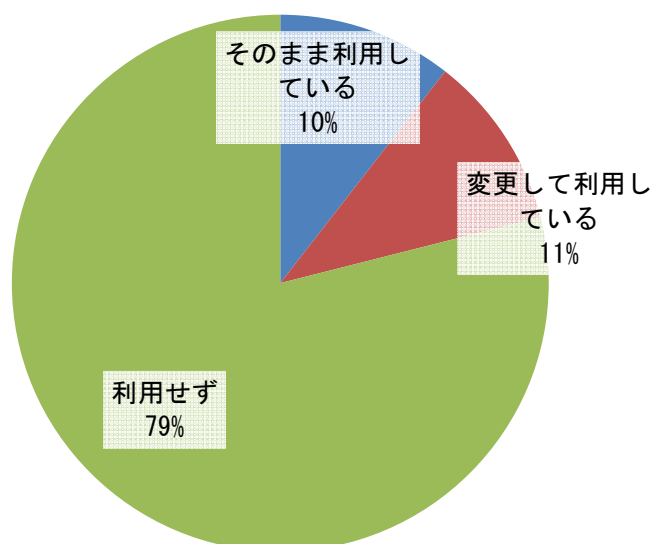
使い分けをしていないユーザが 10%ほどと、前回に比べだいぶ減りました。
(前回のアンケートで使い分けをしていなかったユーザは 40%強)

h. 現在可能な計算規模を制約しているのは何でしょうか？



メモリ容量よりも計算スピードに強い制約を感じているユーザが多いようです。

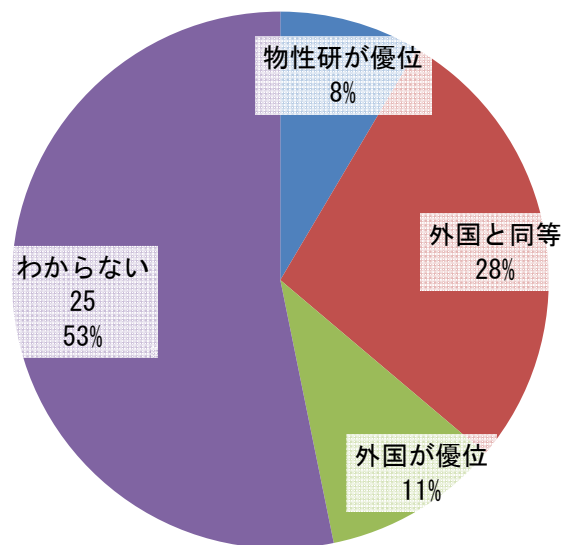
i. bに3と答えた人にうかがいます。一般向けに公開または販売されているパッケージソフトウェア (Gaussian, abinit, ALPS など) をご利用でしょうか？



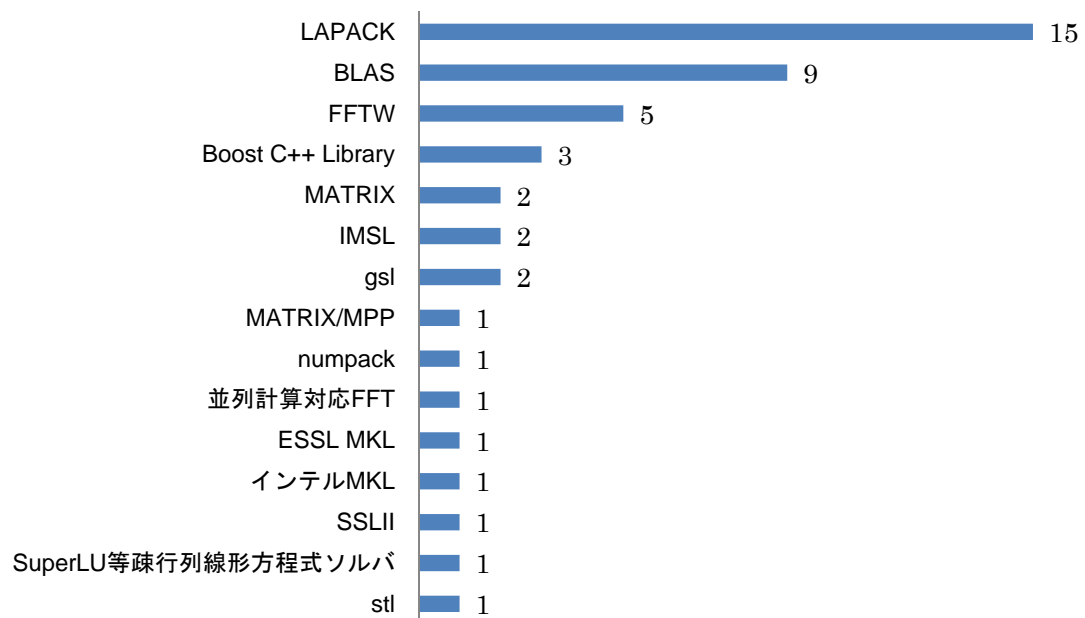
パッケージの名前

- ALPS
- Gaussian
- TITPACK
- 第1原理計算コード PHASE (webにて公開) : 開発プロジェクトに加わっております。インストール時に makefile を書き直して、コンパイル、リンクしていますが、PHASE 公開時に物性研用の makefile をあらかじめ用意しておくと思っております。(同じ SR マシンでも、環境によって makefile を書き換える必要があります)。コードは SR 用に高速化されています。

- j. 競合する研究課題に関して、海外の研究者が利用している計算システムの現状と比較して、物性研システムの計算能力はどうでしょうか？



k. 現在ご利用の数値計算ライブラリをお答えください。また、あれば使いたいと考えているライブラリがあればお答えください。



物性研究所スーパーコンピュータシステムの 活用状況に関するアンケートの集計結果（2008年） （回答数 47 グループ）

4、物性研システムに望むこと

E. 今後物性研システムに望むことを、以下の点について自由形式でご記入ください。

a. どのようなマシンを望むか？

- 計算処理速度とメモリ、ディスク容量のバランスが重要と思われま。
- 現システム同様、CPU 数重視のシステムと SMP マシンのシステム
- ベクトル計算機を希望します。
- 速くて大メモリ（当たり前でしょうが）現在のように特性の異なる2種のシステムを併用することは優れた選択だと思います。
- Fujitsu/Hitachi を強く希望
- 高パフォーマンスだけを追求するのではなく、省エネルギーの軸も考えてバランスのとれたマシンを取り入れるべきであるとする。
- SharedSystem は、大容量メモリを使用する計算にとって貴重であるため、今後ともさらなる拡張をぜひ進めて頂きたい。小さなメモリ容量で済む計算については、QuadCore 以上が出現する今後において、かなり研究室レベルであっても対応できつつある。物性研では特に、大容量メモリ利用の大規模計算に対して、寛容であって頂きたいと願っています
- とにかくCPUの数を確保してほしい
- ベクトル・要素並列など、スパコンならではのアーキテクチャを望む（2件）
- 安定度とコア数の差が研究室規模のシステムとの差であると思います。その点をさらに増強して常に研究室規模ではできないような計算も可能であるようなシステムでありつづけてもらいたいと思います。
- 計算速度の速いマシンを希望する。できれば申請課題回数を年1回にしてほしい。
- 研究室単位で購入できるPCクラスターでは実行できない大規模計算を受け付けて欲しい。できれば、ジョブ投入・キャンセルコマンドなどを他の計算機センターと統一してほしい。
- 第1原理計算が高速で動くマシン。

メモリ重視のユーザとCPU数重視のユーザの2極に分かれているようです。

b. OS、ジョブ制御言語はどのようなものが適当か？

- 現状のバッチジョブの実行制御には、若干の不満があります。長いジョブを連続して投入している人のジョブは、途中サスペンドして他のジョブを先に実行し、暇なときにレジュームするといった、賢いバッチジョブ制御システムはないものではないでしょうか？
- Linux or Unix
- 現在のLinux, LSF, nqs で特に不便を感じていないのでそれで良いのではないかと思います
- 現在のままで良い(Fortran8X以降があれば)
- ジョブの時間制限はある方がよい。一部の人が資源を独占することがないように配慮願いたい

OSについては現行のシステムに満足していただいているようです。

ジョブ制御に関しては満足という回答と不満という回答を数件いただきました。

c. 重点的に取り組むべき研究分野、研究手法などについてご意見は？

- 個人的にはあまり特定の重点分野にウエイトをかけるという方向は好ましくないと考えます。強いて言うなら新しい計算手法の開発などには優先的に利用してもらって、その成果をユーザの利用に供していただけるような方策をとればと思います。
- 巨視系のダイナミクスは是非残してほしい
- 重点化を図るべき分野があるのも理解できるが、一方で排他的になるべきではない。
- 現状のまま、幅広い分野の課題に門戸を開き続けていただければ、と思います。

現状のままでよいという意見がほとんどでした。

特定の分野を排斥することに関する危惧も寄せられました。

d. 研究室規模のワークステーションとのすみわけをどう考えるか？

- 研究室規模の計算機では全く実行不能なジョブをセンターで実行するという形ですみわけされるべきですが、研究室規模の計算機の性能向上に比して、センターの計算機の実効的な性能向上が遅い様に感じます。実効的な性能とは、並列計算の行ない易さなどを含めた性能です。ノード間の並列化に対するさらなる支援を導入することが(例えば、ノード間でOpenMPが使えるようにするなど。MPIのようなものを使うと、数理的アルゴリズムとは無関係な、並列計算のハンドリングのためのコードが多くなって使いづらいのです)、実効的な性能を改善する唯一の道と思えます。
- 研究室規模のワークステーションではほぼ不可能に近い、または、なかなか終わらないような大型計算をベクトル計算機で行う。

- 計算機センターとして研究室規模のワークステーションにないサービスを行うとすれば、大規模（GPU 数、メモリ、ネットワーク）なシステムを用意することでしようか。
- いくらハードウェアが進歩しても研究室レベルで買えるワークステーションとスーパーコンピュータの能力の間には常に一定の開きがありますので、いわゆる計算物理においてはスパコンの必要度は一定の割合で存在し続けるのではないかと思います。
- 研究室規模のワークステーションでは並列化 CPU の数に限界があるので、並列化で時間が稼げるような計算をするのにシステム B のようなスーパーコンピュータシステムの必要性を感じる。

研究室では用意できないメモリ量・ネットワーク性能・CPU 数を用意すべきという意見で占められました。

e. 他の共同利用センターとの連携（ネットワーク化、申請の一本化、使用法の統一など）についてのご意見は？

- そうやって事務手続きを一本化しても、ジョブ制御などの利用法を一本化するのとなければ、結局のところ使い勝手を向上させることはできないと思います。あるいは、各センター間でことなる性格付けのマシンを用意するならば、事務手続きの一本化に意味があるかも知れません。たとえば、センターAにはノード間の通信は遅いが、その分ノード当たりのコストが安く、トータルの FLOPS は非常に大きいマシン（トリビアルな並列計算向け）、センターBには速い（疑似）ベクトルマシン、センターCにはノード間通信が非常に速くて、OpenMP でノード間並列ができるようなマシン、といった個性のはっきりしたマシンを導入しておいて、それらの利用申請が一本化されているならば、中途半端なマシンな規模／性能のマシンが各センターにあるよりは、よほどユーザーの使い勝手は良いと思います。
- 物性研究のための計算資源を確保する意味で、他の共同利用センターとの連携には消極的です。連携による計算リソースの分割、計算機センターの合併・吸収などが心配です。
- 本郷の情報基盤センターのスパコンも少し使っていますが、物性研に比べると使いにくさが目立ちます。あまり、他センターと統一化するとかえってフットワークが悪くなるのではないかと思います。また、課金も統一されて、本郷のスパコン並みの課金が科されると、現在の地方国立大の研究費の状況では科研費がなければまず利用不可能です。
- ネットワーク化、申請の一本化等は不必要である。現在のわが国の大学に課された状況同様、〔原文ママ〕

使い勝手や課金などの理由により連携には消極的な意見がほとんどでした。

連携することで物性分野の計算資源の減少を心配する意見もありました。

F. 最後に、そもそも物性研システムを今後も是非とも維持すべきかどうかについてもご意見をお寄せ下さい。

- 物性研のシステムは、性能面で使い勝手が良く、是非維持していただきたいと思えます。OpenMP でノード間並列計算ができるようになれば、なおさらありがたいと思えます。
- 物性研究のための計算機資源を物性研が提供していくことは今後とも必要だと考えています。是非とも維持すべきです。
- ある程度の大規模な計算システムは計算物性科学にとって不可欠であり、どれを物性研がもつことは妥当と考える
- いい申請課題があれば、いつでも使えるスーパーコンピュータとして物性研究には不可欠である
- やはり研究室単位では時間的、メモリの制限が大きい。その制限を緩和し、研究の質と量を保つためには物性研システムは維持すべきだ。
- 是非とも維持すべき、今後とも維持すべき 等(17 件)
- 維持すべき。次世代スパコンがすべての計算を賄える訳ではない。挑戦的な課題を迅速に行なえる使いやすいシステムを維持する必要があると考えられる。
- 言うまでもなく、今後とも飛躍的な拡張を期待します
- 是非とも維持すべき。他のシステムに比べてとっつきやすいので、学生が利用することで計算物理の裾野を広げる役割も期待。
- 大学の独法化以降、中小の大学が独自に大型の計算機資源を維持することは困難になっています。埼玉大学でも2年ほど前に、自前のスーパーコンピュータの更新は見送られました。現在は、それを補うために大学として東大本郷のスパコンのグループコースのアカウントをとり、個人研究費の負担なく利用できるようになっていますが、これがいつまで維持できるかも、大学の財政状況を考えると樂觀視できません。このような状況の中で、物性コミュニティの研究者が安定して最先端の計算機資源を利用できる環境を維持していただくことは日本の物性研究の中心である物性研究所の役割として今後一層重要になってくると考えます。
- 大規模な計算資源は共有したほうが費用対効果は高くなると思えます。その点で物性研究に関する計算資源としてぜひ継続すべきであると思えます。
- 地方の大学には、予算もなく大きな計算がやりにくい状況にある。物性研のシステムは、そのような環境的に弱い立場にある研究者に、世界の競合研究者と対等の資源を与えてくれるので、今後とも是非維持するべきだと思う

- 年ごとの研究資金のあたりはずれに左右されず、安定した研究活動を行う上で大きな助けになっております。是非維持していただきたいです。
- 物性研システムがなくなれば当方も今の職にある必要がない。ファシリティ、マンパワー等のリソース、研究アクティビティの貧弱な地方大学で一個人が世界をフィールドに戦うために是非物性研システムは存続して頂きたい！
- 物性研システムは物性物理学研究において重要な役割を果たしていると考えています。是非とも維持すべきと考えます。
- 物性研究や利用者が続く限り維持すべきと思う。
- 今後も継続して最先端の計算機資源を提供していただくことを望みます

すべての回答で維持すべきという意見が寄せられました。

物性研システムの意義として

- ・ 物性研究専用計算機が集約されていることは不可欠
- ・ 次世代スパコンのような超大規模計算機だけでは時宜にかなった研究の遂行が困難
- ・ 所属する大学の規模、年毎の研究資金の多寡に依らず利用できる安定した計算機資源を提供する

という意見が寄せられました。

G. その他、お気づきの点、ご意見をご自由にお書きください。

- フロントエンドで負荷の高い処理を行う人がいるのを抑制していただきたいです。
- 今回のアンケートも含めて、日常の運営に携わっているスタッフの皆様に感謝しております。
- SR系またはLinux ClusterでOSはそれに対応したもの。物性研システム自体が重点分野を指定するのはちょっとそぐわない感じがする。出口の見えないものをやれるところに物性研システムの良さがあると思われる。最適化のサポートさえしっかりしていれば研究室WSよりは遥かに色々なことができると考えられる。他のセンターにはない使いやすさがあるので、そのような存在としても今後もシステムを維持していくことを希望する。
- workディレクトリのデータ保持期間の延長
- 現状で特に不満は無い
- 現状の二種類の計算機の構成は並列機への移行措置としての意味があったように考えていたが、現状ではベクトル機はベクトル機ではないので、本当にシステムA相当の計算機が必要なのかは疑問が残る。研究室規模の計算機との棲み分けを考えたときに、もう少し大規模並列のクラスが複数レベルあるとうれしい。また、他の共同利用センターとの連携は何が目標なのかかわかりにくく、申請の一本化等のユー

ザ側の利便性の改善が主な目的だとすると、個人的には賛成しない。現状のサービスで満足しているし、連携することで、計算機資源の提供以外のサービス(計算物理の分野の振興等)が欠けてしまうことを心配している。物性研独自の文化を上げることが大事かと思われる。

- 最新の計算環境を「常に」整えるのは単独の研究室では無理なので、大規模計算については物性研システムに期待いたします。予備計算を各研究室で十分に行うことはできる状況にあると思います。