

物性研スーパーコンピュータ利用者アンケートの集計結果（2013年度）

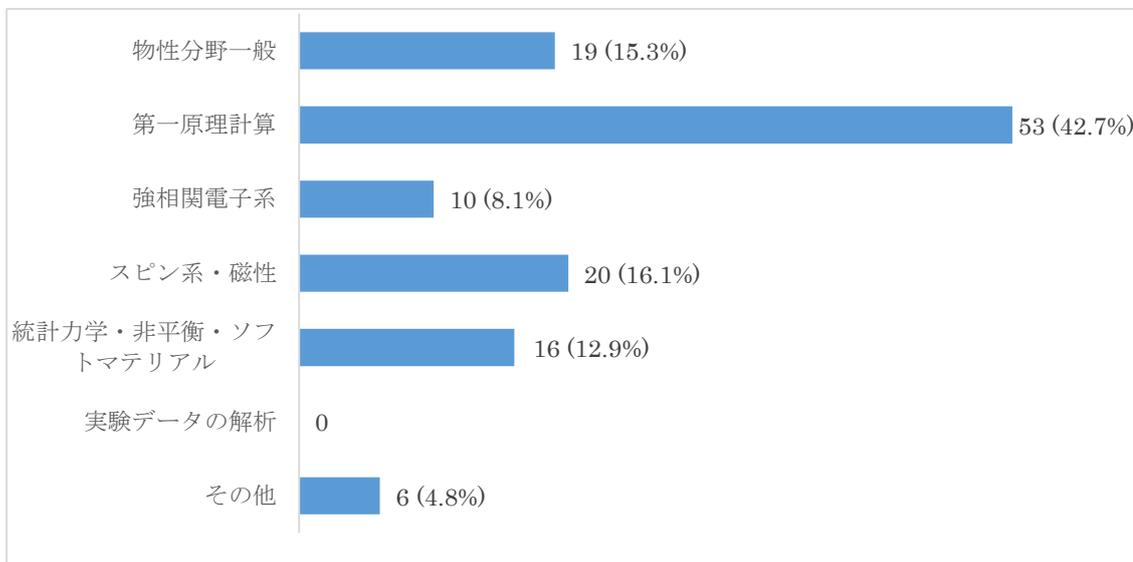
1 アンケートの実施について

2013年1月10日-11日の物性研共同利用・CCMS・元素戦略合同研究会「計算物性物理学の展開」にて紙ベースのアンケートを実施しました。これに加えて、2013年4月1日-26日の間、同内容のウェブアンケートを実施しました。周知は **cmp-ml**, 物性研スパコンユーザメーリングリストで行いました。以下の内容は以上2つのアンケートを合わせたもので、回答者数は124(紙28、ウェブ96)でした。

2 アンケート結果

A. 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) 主な研究分野をひとつだけお答えください。



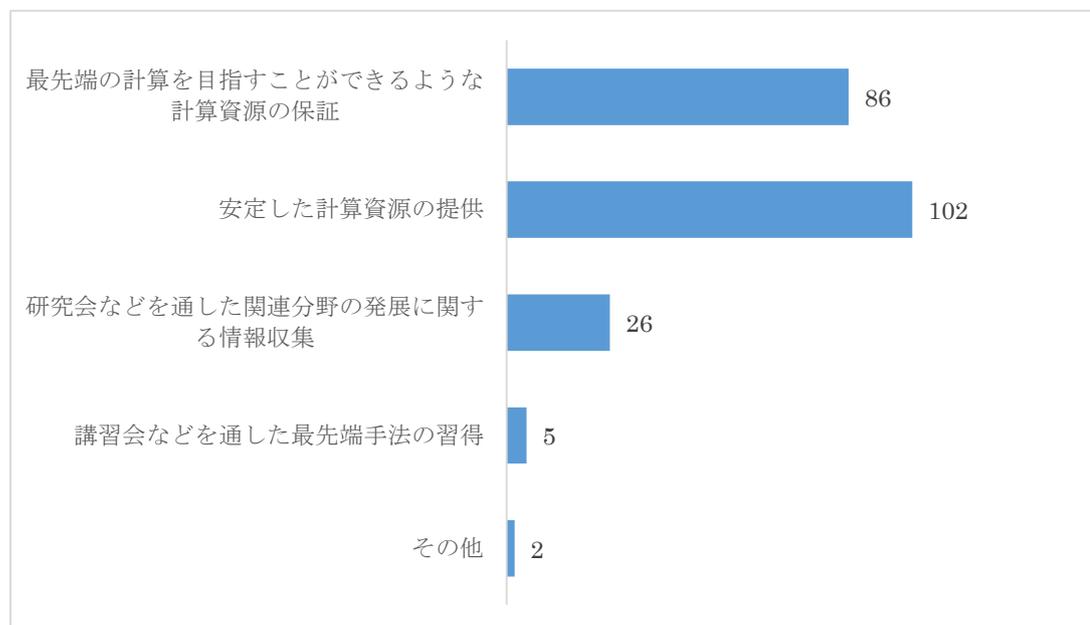
研究分野に関しては、第一原理計算、強相関電子系などの電子状態の計算が全体の約半分、残りがスピン系や非平衡・ソフトマテリアルの統計力学であり、2008年から変動はほとんどありませんでした。

- (2) 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？



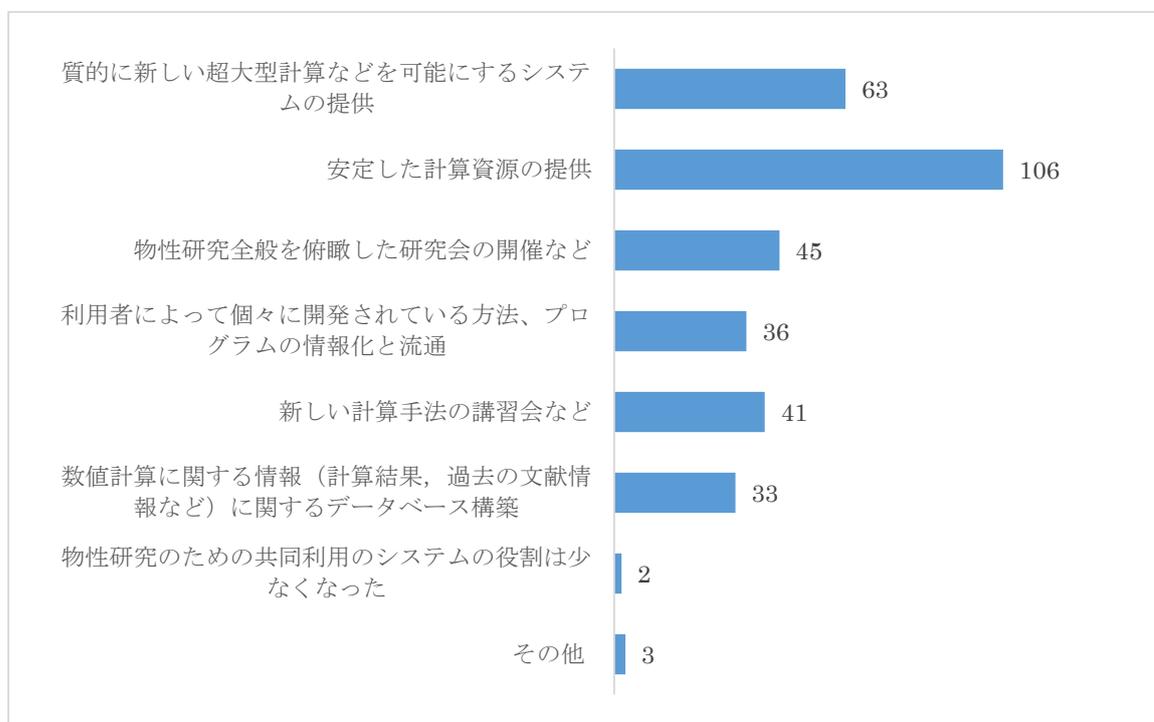
計算物質科学コミュニティの中にも、物性研アカウントを持っていない方が一定数いることがわかりました。

- (3) 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）



計算資源としての役割が多数を占めているが、情報収集のための役割も一部担っているようです。

(4) 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）



その他：

- 超大型計算などを可能にするシステムへのルートをも表示
- ときに、（他のリソースでは配分されないような）挑戦的かつ萌芽的な検討をすることが可能な計算資源の提供
- 磁性体の解析ソフトや既知の結晶のデータベース

計算資源の提供以外の役割への期待も一定数あり、超大型計算への期待は国策スパコンなどへある程度移行したと見なせそうです。

B. 物性研システムの利用の満足度に関して質問をします。

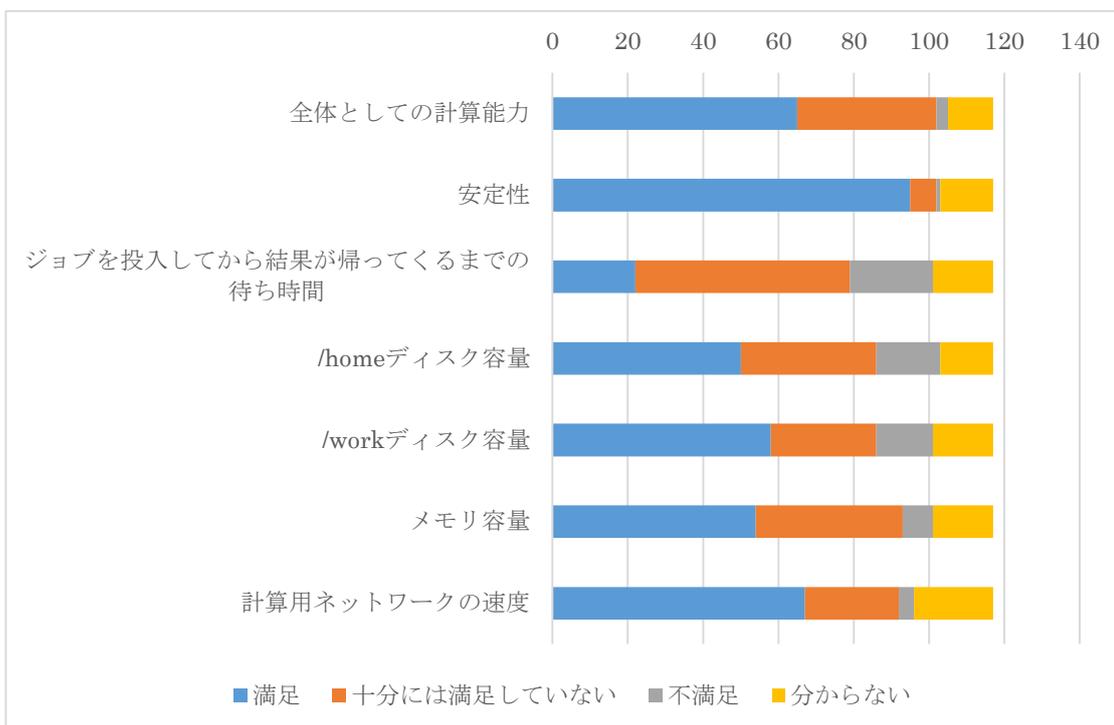
それぞれの項目について、[]の中に

1. 満足 2. 十分に満足はしていない 3. 不満足 4. 分からない

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（6）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。

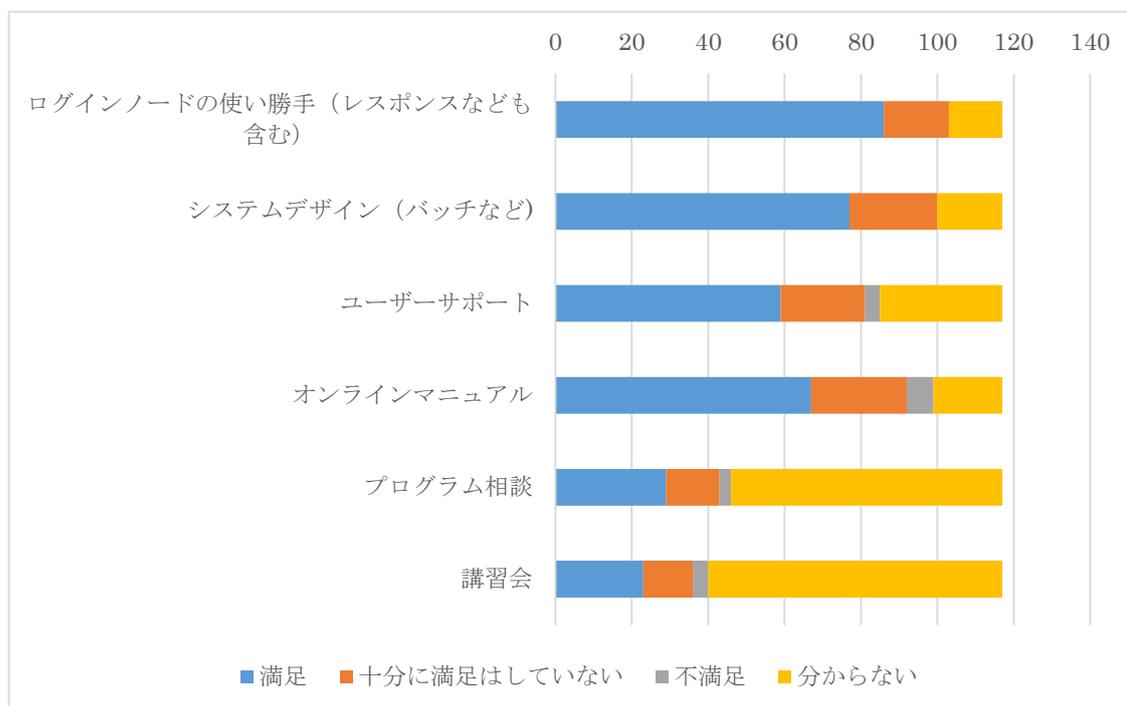
*ここで、紙ベースのアンケートでは【分からない】の選択肢を用意しなかったため、無回答のものを【分からない】と見なして集計しています。

(1) 物性研システムの計算能力に関連して



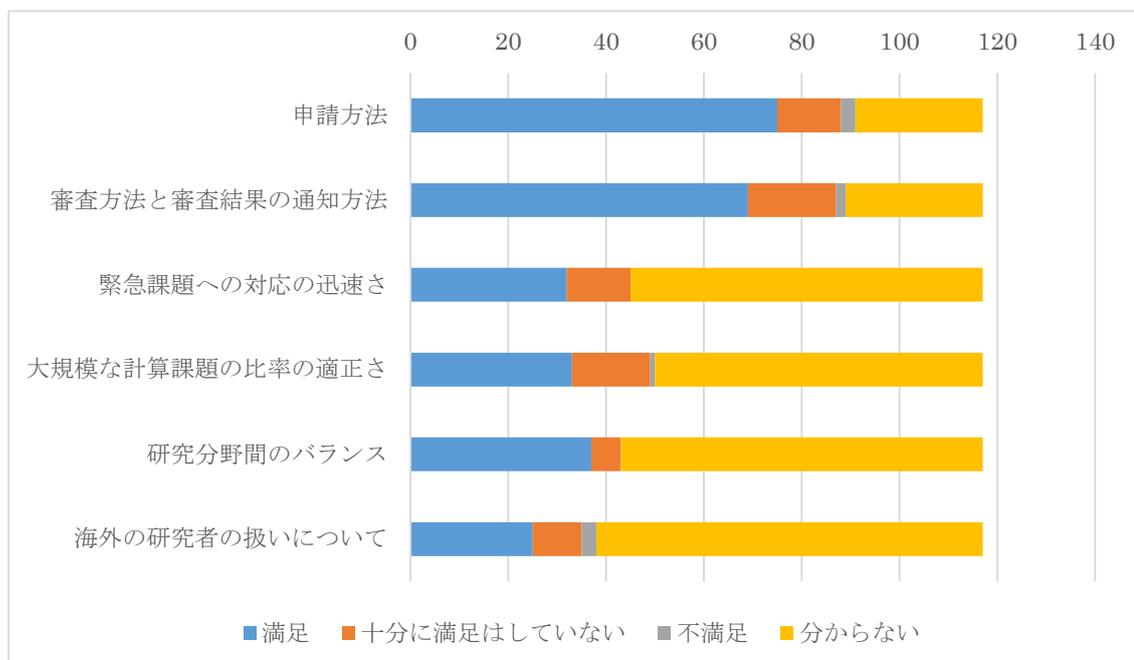
ジョブを投入してから帰ってくるまでの待ち時間に関して、不満足なユーザが多いことがわかりました。現状、利用率が90%に達しており、やむを得ないところではありますが、計算リソースの増強が望まれていることがわかります。

(2) 物性研システムの使い勝手に関して



使い勝手に関しては満足であるという回答が多数をしめしましたが、プログラム相談や講習会については、利用したことがないからか、分からないという回答を多く頂きました。より活用しやすくなるよう、方策を練って参ります。

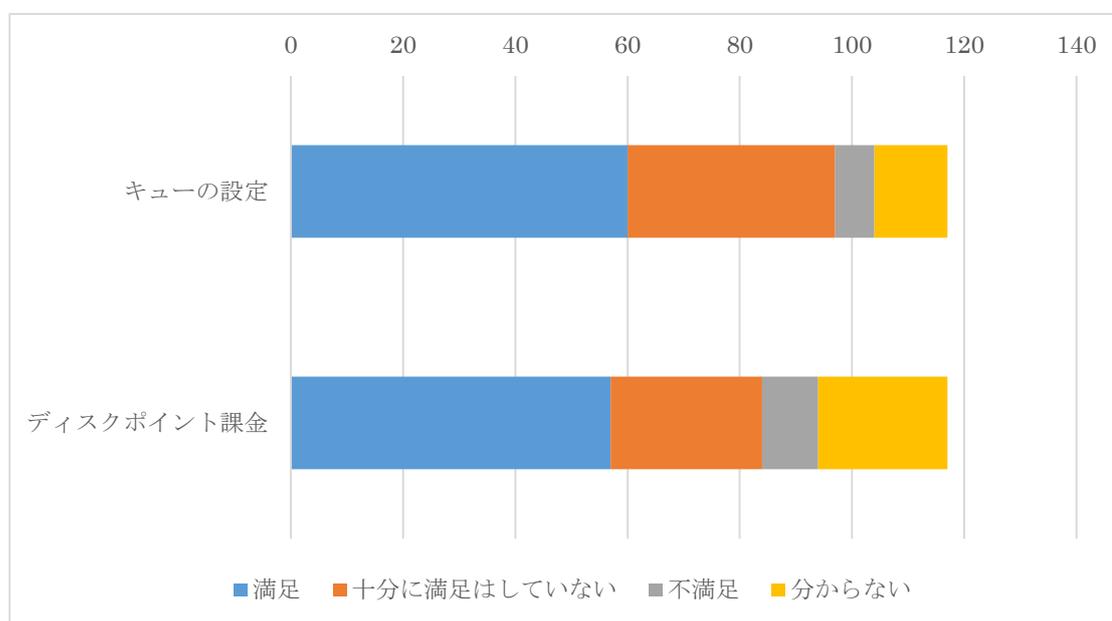
(3) 課題申請、採択に関連して



課題申請に関しては、研究代表者の方以外はあまり関わりがないことから、分からないという回答が多かったと考えられます。ただし、分からないという回答をした方以外では、多数の方が満足という回答でした。

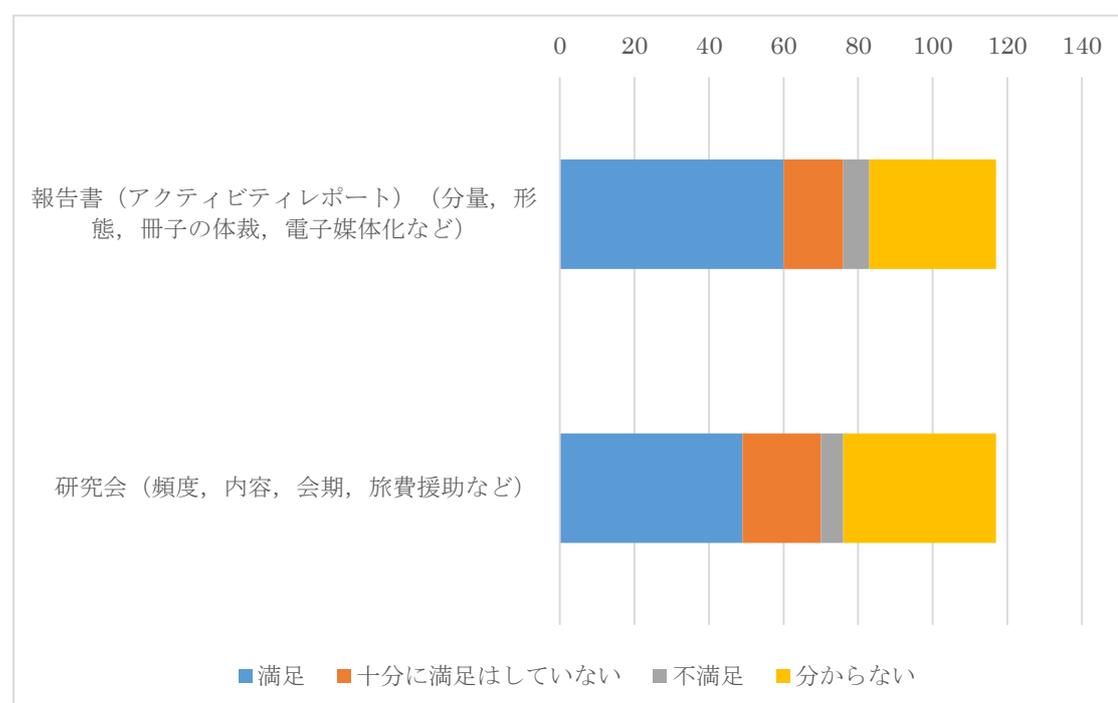
課題申請・採択については概ね適切に機能していると考えられそうです。

(4) システム運用に関連して



「満足」という回答数と、「十分に満足はしていない」、「不満足」を合わせた回答数がほぼ同数でした。利用者のスパコン利用の仕方に幅があるためであると考えられますが、利用状況に応じて随時見直して参ります。

(5) 研究報告に関連して



わからないという解答が3割程度あり、コミュニティの中で十分に活用されていないことが分かります。報告書や研究会のあるべき姿について、検討を進めて参ります。

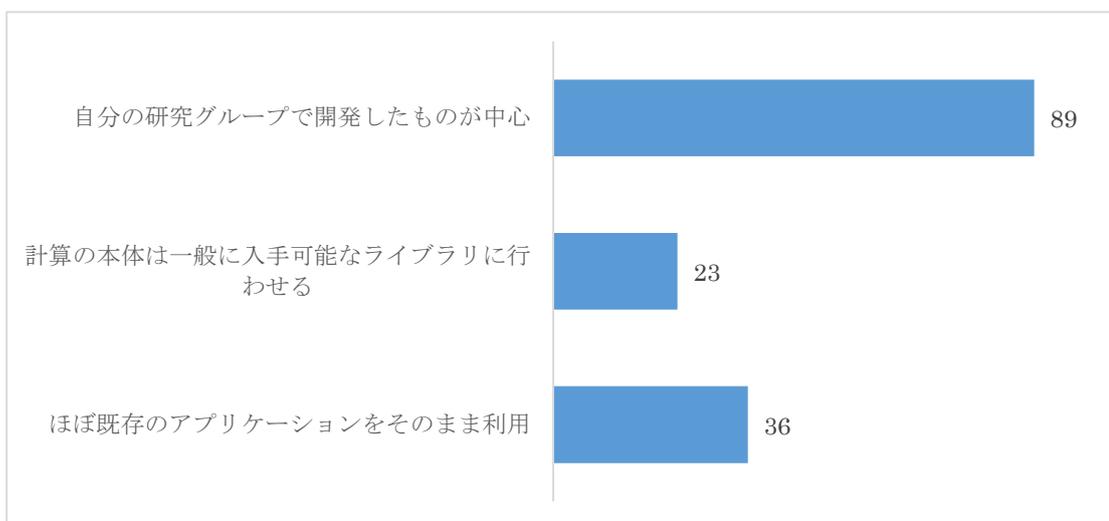
(6) 自由記入欄

- 他の計算機センターでは VASP や Wien2K などのバイナリや makefile が用意されている。コンパイルに時間を費やすぐらいなら別のシステムを使おうという形になっている。とくに System A。
- 並列化しない場合、12 時間しか使えないのが不便。待ち時間が長くても良いので、並列化しなくても長時間(2 日程度)使えるキューを作って欲しい。
- 大容量メモリノードが無い; 計算キューが細分化されすぎ; 計算ノードの状況が分かりづらい (bqueue と bj コマンドの統合・整理)。
- データ解析主体の研究にとってはディスクが小さい。
- スパコンシステムの講習会をもう少し精力的に開催し、利用者の裾野を広げる試みをお願いしたい。
- 具体的に物性研システムに即した、並列化の入門マニュアルのような物があると助かる。

これらの具体的な要望に対して、現在、対応を検討しています。

c. 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。

(1) 利用ソフトウェアについてお答えください。

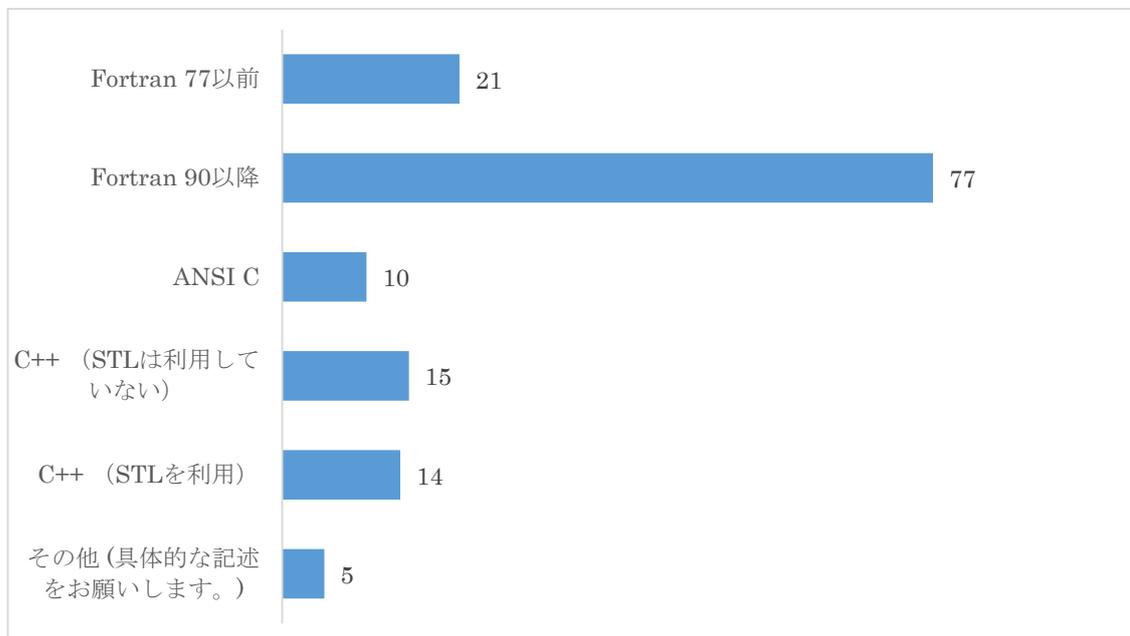


公開ソフトで使われているもの(複数回答者がいた場合は括弧内にその数を示す) :

VASP (9), WIEN2K (2), CPMD (2), TAPP (2), Quantum-espresso, abinit, OpenMX, Gaussian (3), NWChem, NAMD (2), CHARMM, LAMMPS, ALPS, TITPACK, Mathematica

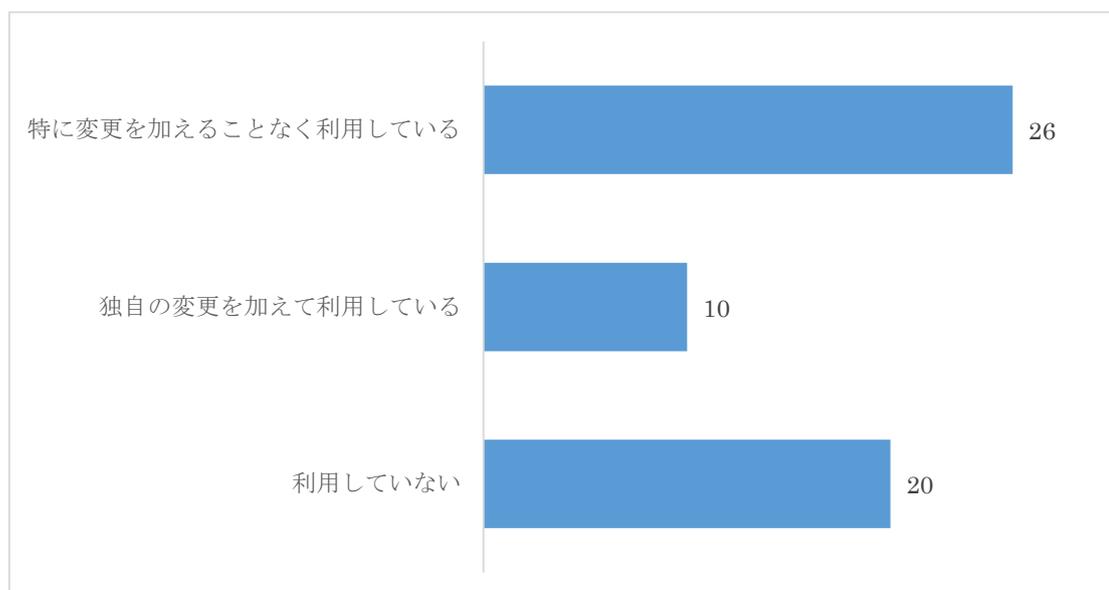
一定数、既存のアプリケーションの利用があるが、独自に開発しているソフトウェアの比率が極めて高いことが分かります。

- (2) 1.で「自分の研究グループで開発したものが中心」または「計算の本体は一般に入手可能なライブラリに行わせる」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(複数の選択肢を選んでいただいて結構です)。



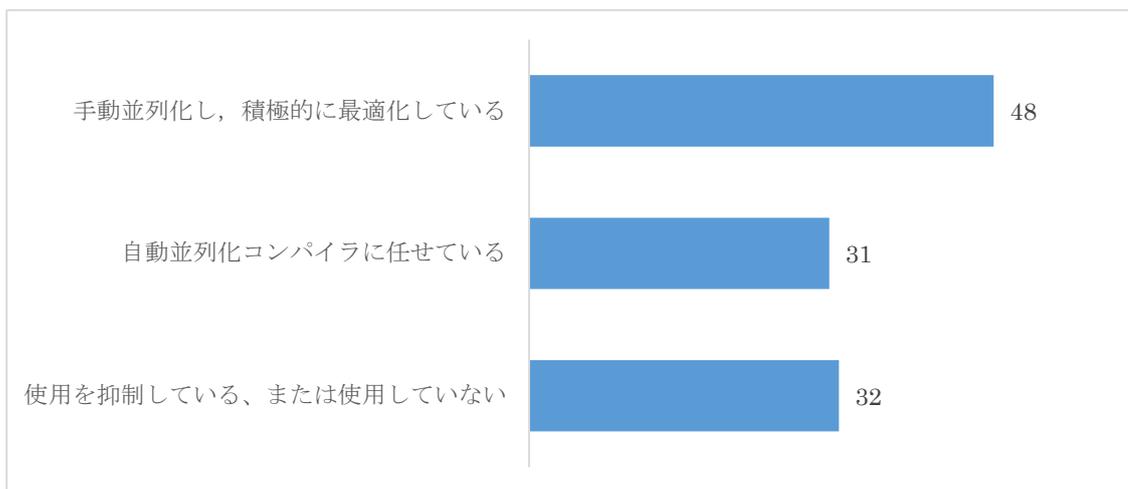
Fortran 90 が半数以上を占めていること、C++の利用率が2008年に比べて上昇していることが分かりました。

- (3) 1.で「ほぼ既存のアプリケーションをそのまま利用」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？

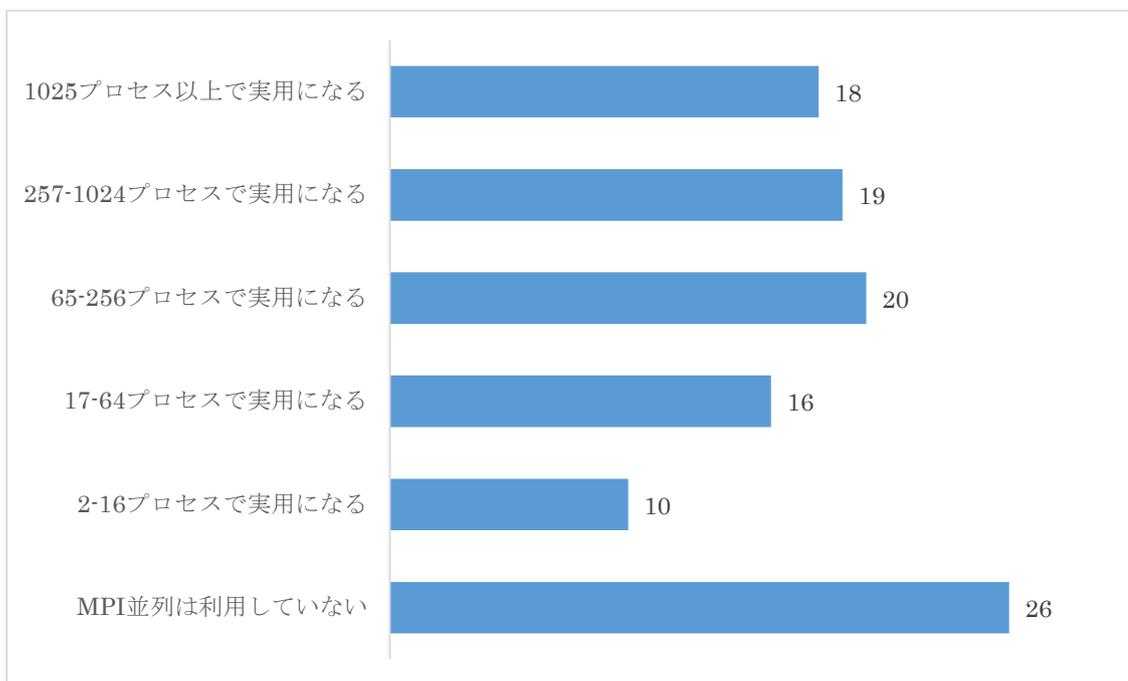


既存のソフトウェアを利用する場合でも、3割近くのユーザは独自の変更を加えて利用していることが分かりました。

(4) 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？

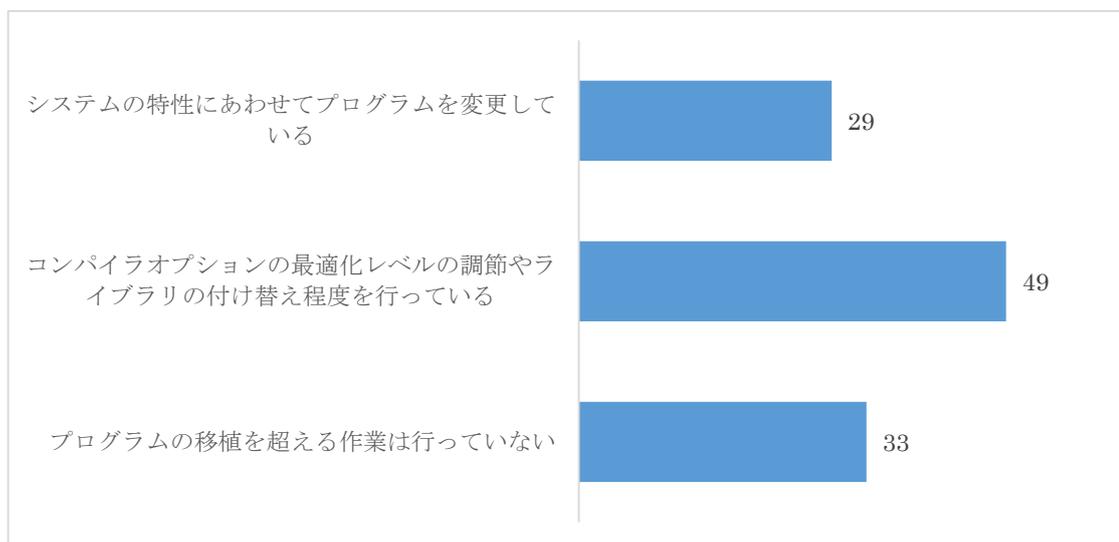


(5) MPI 並列化の実績はいかがでしょう？

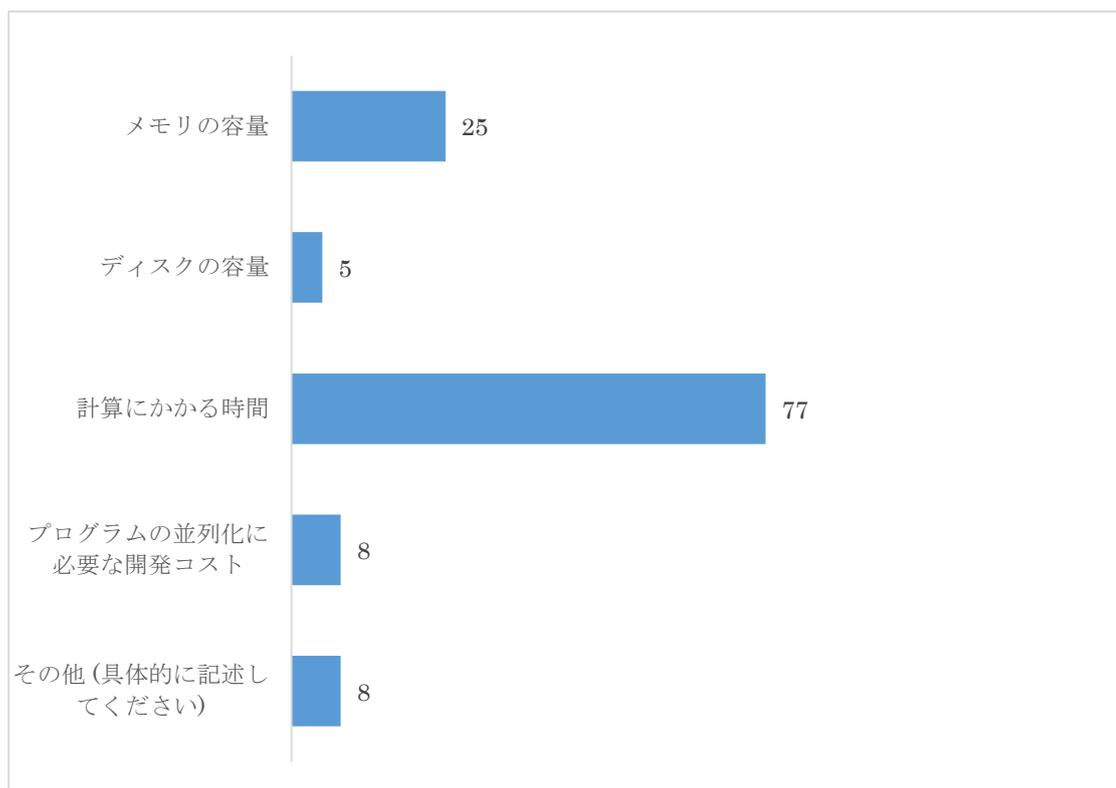


並列化度に関しては、ユーザが2極化していることが分かりました。調達やキュー構成、講習会などにどのように反映していくか検討して参ります。

(6) プログラムの最適化の実績をお答えください。



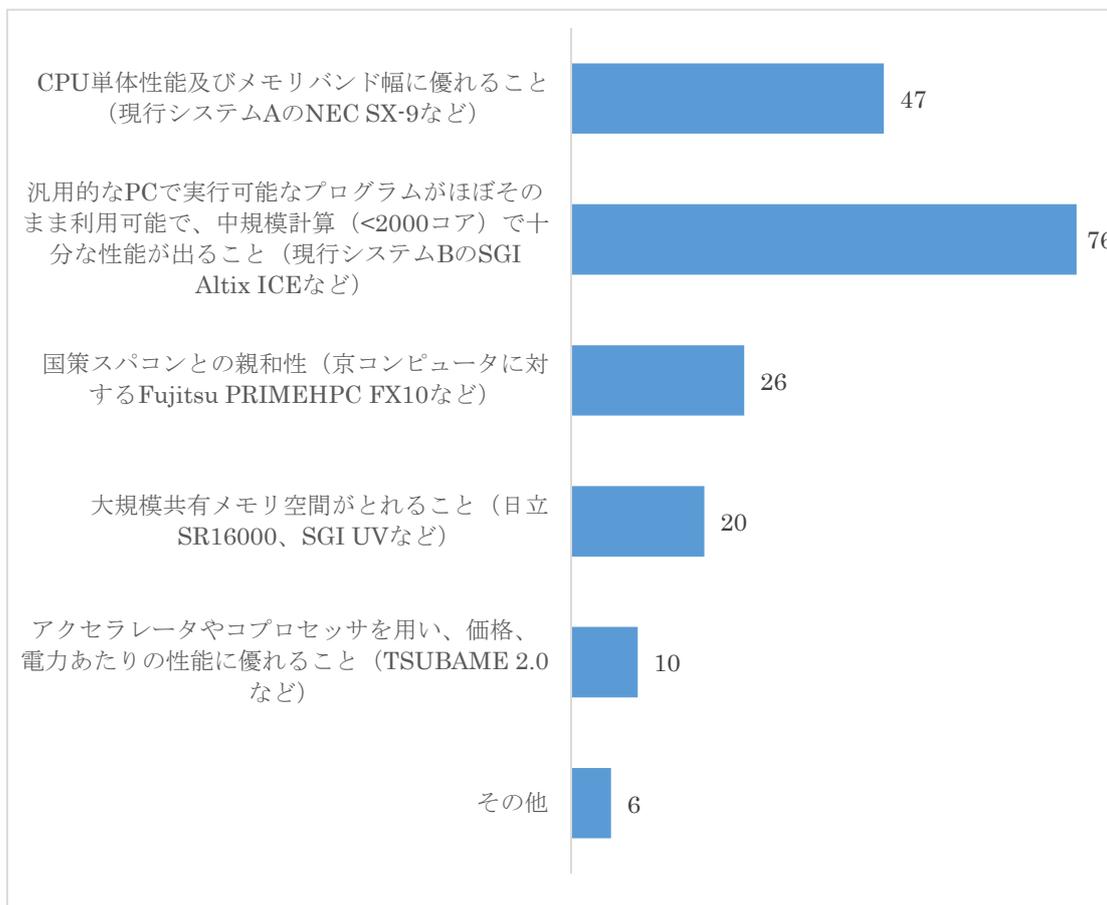
(7) 現在可能な計算規模を制約しているのは何でしょうか？



計算にかかる時間がボトルネックになっていることから、計算機の高高速化が求められていることが分かりました。また、メモリ容量への不満も一定数見受けられます。

D. 次期物性研スパコンシステムに望むことについてお答えください。

(1) 次期物性研スパコンとして重視すべきであるとするシステムの特徴を2つまでお選びください。



現行システムに近いシステムがユーザの支持を得ているようです。

- (2) 【自由記入欄】今後の物性研システムに望むことを、以下の点などについて自由にご記入ください。
1. どのようなマシンを望むか
 2. OS、ジョブ制御言語はどのようなものが適当か
 3. 重点的に取り組むべき研究分野、研究手法などについて
 4. 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
 5. 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
 6. そもそも物性研システムを今後もこれまでと同様に維持すべきかどうか
- 計算機科学の発展と一般研究の計算資源の確保
 - ▶ 計算機科学の進展と、一般研究の計算資源の確保の両方のバランスに留意すべき。
 - ▶ 我々は計算機科学をやっているわけではない; 計算機やシステムについて新しい試みを導入することで目的を見失ってはいけない。
 - ▶ 超並列計算(10000 コア以上)の可能なシステム。(京とは異なるアーキテクチャで超並列が可能になればうれしい。)
 - ▶ アクセラレータよりは CPU 資源を望む。ただしコストパフォーマンスにも留意して。
 - ワークステーションの代わり? 研究室クラスタの代わり? 大規模計算?
 - ▶ 審査の際にもっと丁寧な記述を求めて「外部計算機資源」を利用していることを意識してもらうのがよいと思う。超大規模計算などは別のリソースに誘導する等の仕組みがあっても良いのでは。
 - ▶ 最低でも 4~8 並列 2 週間、あるいは 16 並列くらいで 10 日くらい利用したいことがある。
 - ▶ 物性研システムは計算時間が多少制約されても計算規模が大ききな場合に対応する役割を果たしてほしい。
 - サービスとして
 - ▶ ライブラリについて利用しやすいこと(ライブラリがインストールされている・講習会など)が利点になるように

上にまとめた幾つかの論点に関して、様々なご意見を頂いております。調達、運用にどのように反映していくか、検討を進めて参ります。