

計算のプロフェッショナルが求める性能と品質をお約束します ソフトウェアセットアップの職人技、「ビルド」。

ソースコード配布されている科学技術計算ソフトウェアをサーバー/ワークステーションで高速に動作可能にするには適切に「ビルド」する必要があります。これは、-O3といった最適化オプションを使うだけに留まりません。最適化を攻めつつも数値精度を遵守するように数値表現の粗さを調節したり、動作試験をして異常が見られたら原因を推定してコンパイラやライブラリを見直すといった、繊細で、経験がものを言う作業です。弊社では、長年の経験でこの職人技を身に着けた、高性能と高品質に徹底したこだわりをもつ技術陣が、お客様の安定した計算環境を支えます。

Skillful

20年以上継続してビルドの経験を積んできた、トラブル対処に長けた弊社技術者にビルドをお任せください。

Proven

実際に動作試験を行い、必要な数値精度と最高速度を両立するバイナリを編み出して納品します。

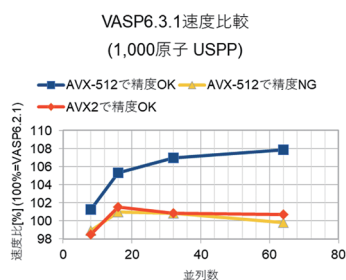
Turnkey

システムごとの構成に合わせてバイナリと起動用スクリプトを調製し、確実に動作する一式をご提供します。

事例紹介

必要な数値精度と計算速度を両立

VASP 6.3.1ではAVX-512を活用して高速化したかったのですが、コンパイルオプションを色々振ってみても、どうやっても数値精度がNGになりました。そのため数値精度と計算速度を両立できるAVX2バイナリを採用しました。



エラー対処に手間のかかるアプリのビルドを弊社におまかせ

LAMMPSでは外部ライブラリの最新バージョンを常に使用できるとは限りません。例えばpaceのv2021.10.25はLAMMPSで使う場合に致命的なバグがある為、v2021.4.9を採用しました。vtkでは9.1は互換性に問題があり、LAMMPSのビルド手順に手を加えて8.2を採用しました。こうした動作チェックやトラブル対処を弊社が代わりに実施することで、お客様は研究と計算に集中できます。



安定したコンパイラバージョンを注意深く選定

弊社ではコンパイラを使うとき、マイナーバージョンの違いであっても、まず、HPL等で過去のバージョンとの違いを調べ、さらに多数のプログラムを実際にコンパイルして動作をチェックし、異常挙動や不安定な動作になりがちなバージョンを排除しています。例えばifort 17は、様々なプログラムで相性問題が生じたため不採用としました。他にも、ifortのOpenMPの仕様が19.0と19.1と異なっており、古い仕様のOpenMPを扱うアプリではエラーとなるためOpenMPを無効にしたビルドを行う対応を行いました。

対応実績

Gaussian★、GAMESS★、Amber★、GROMACS★、LAMMPS★、VASP★、Quantum ESPRESSO★、ABINIT-MP★、ABINIT、BAGEL、CPMD、DALTON、DeepMDkit-LAMMPS、DFTB+、DL_POLY、GENESIS、GULP、Molpro、myPresto、NAMD、NWChem、OpenMOLCAS、OpenMX、ORCA、PHASE/0、Pymol、WIEN2k、WRF、XCrySDen
(★:経験多数)

その他の事例は
HPCシステムズ
Tech Blog

