

「第8回 大型実験施設とスーパーコンピュータとの連携利用シンポジウム」一次世代二次電池・燃料電池の開発に向けて—
2022年9月30日
秋葉原UDX

施設と登録機関の紹介

HPCI、富岳

一般財団法人 高度情報科学研究機構
利用支援部 吉澤香奈子



- 「富岳」、HPCI

- ◆ HPCIポータルサイト(「富岳」、HPCIの情報)

- 「富岳」、HPCI利用研究課題の募集(現在募集中の定期募集)

- 「富岳」試行課題(随時募集の1つ)

- 利用支援

- ◆ 高度化支援例

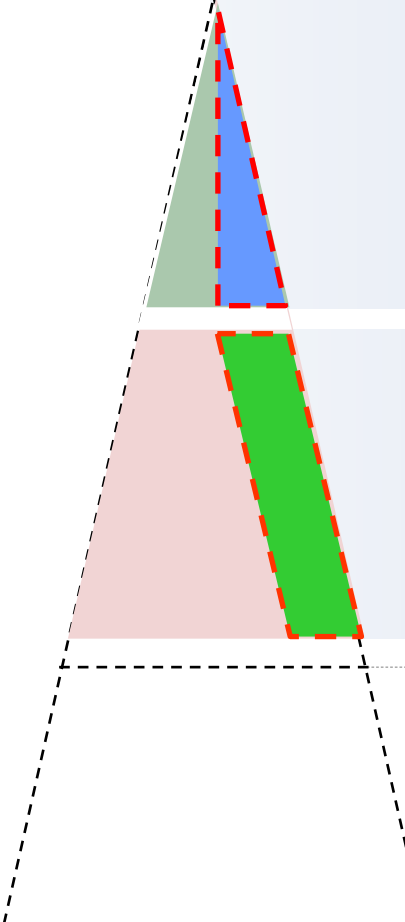
- ◆ RISTが「富岳」、HPCIに整備しているアプリソフト

- 講習会、ワークショップの開催

- ◆ 今後(2022年度)のイベントの予定

High-Performance Computing Infrastructure (HPCI) システムとは

- 「富岳」を中核として国内の高性能なコンピュータを、学術的な研究から産業界の研究開発まで、広範な用途に利用できるように整備している計算基盤システム



フラグシップシステム

- 世界トップの計算能力を有し、幅広い研究分野に活用できるシステム



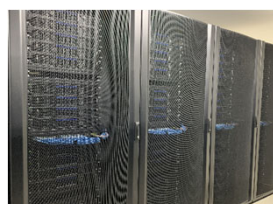
第2階層計算機システム

- 多様なアーキテクチャーのシステムを有し幅広いニーズに対応
- フラグシップへの橋渡しを担う
- 将来のHPC基盤に向けた先端システム

大学研究室、企業等の計算機システム

- 様々な研究・技術開発に個別に利用されている計算資源

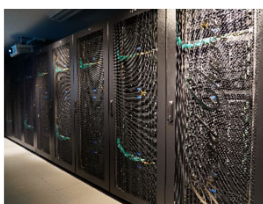
HPCI第2階層計算機システム



東北大学

AOBA-A

AOBA-B



北海道大学

Grand Chariot

Polaire



筑波大学

Cygnus

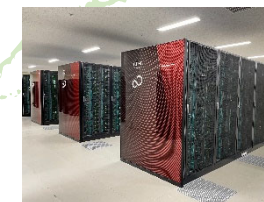


名古屋大学

不老 Type I

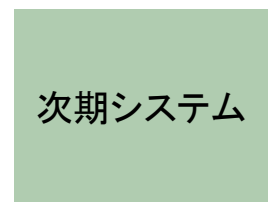
不老 Type II

・全国**12**機関が
様々なタイプの
計算資源を提供
・高速ネットワーク
SINET6で接続
(400Gbps)



JCAHPC

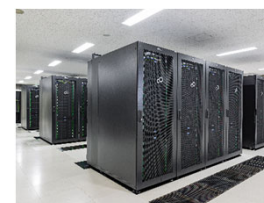
Wisteria/BDEC-01



次期システム

京都大学

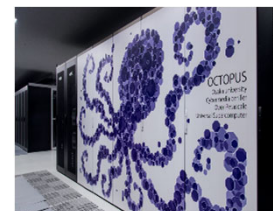
次期システム



東京大学

Wisteria/BDEC-01

Oakbridge-CX



大阪大学

SQUID

OCTOPUS

Xeon/EPYC

A64FX

GPU搭載

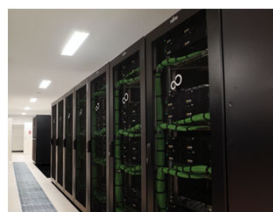
KNL

ベクトル搭載



東京工業大学

TSUBAME3.0



九州大学

ITO-A

ITO-B



産業技術総合研究所

ABCI



海洋研究開発機構

地球シミュレータ(ES4)

フラグシップシステム「富岳」



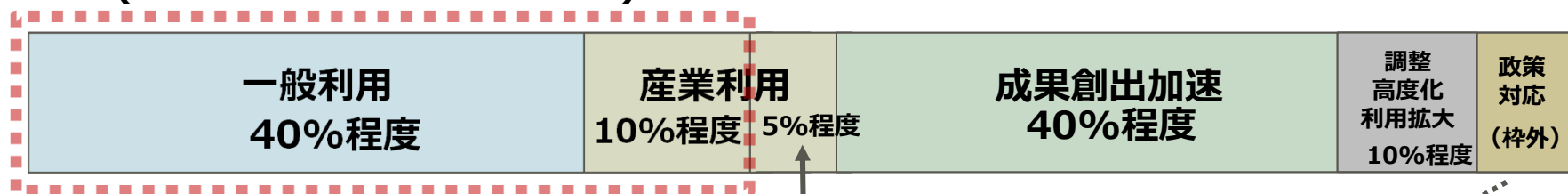
©RIKEN

スーパーコンピュータ「富岳」

- 「京」コンピュータの後継として、2020年度から一部を運用開始し、2021年 3月 9日から本格運用。
- 2020年6月のスーパーコンピュータの計算速度ランキングにおいて、TOP500、HPCG、HPL-AI、Graph500で1位、以後 2年間の4冠を維持
- 2022年5月現在も、HPCG、Graph500で1位

442.01 PFLOPS、15万8976ノード

登録機関による「富岳」の課題募集 （「富岳」の50%程度の資源量）



Society
5.0 推進枠
(仮称)

* : 政策対応枠(枠外)より5%程度をSociety 5.0推進枠(仮称)として検討。

「富岳」計算資源の配分割合

(R.2.7.17 文科省通知「スーパーコンピュータ「富岳」利活用促進の基本方針」より)

HPCIポータルサイト(「富岳」、HPCIの情報)



<http://www.hpci-office.jp>

HPCIポータルサイト

検索

◆HPCIの説明・利用案内

◆課題募集・課題申請

◆課題選定結果

◆高度化支援事例紹介

◆利用成果検索

- 「成果発表データベース」、
「利用報告書データベース」等

◆利用者向け情報

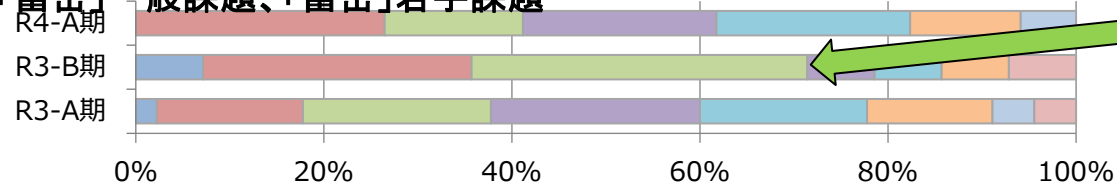
- 課題の開始・終了・参加者変更に関する手続き
- 利用研究成果の報告・公開の手続き
- HPCIシステム利用情報・マニュアル等
- プリインストールされたアプリケーションソフトウェア
- HPCI情報共有CMS
- 問い合わせ先(ヘルプデスク)
E-mail: helpdesk@hpci-office.jp

トップページ

HPCI関係の情報はこのサイトを
ご覧ください

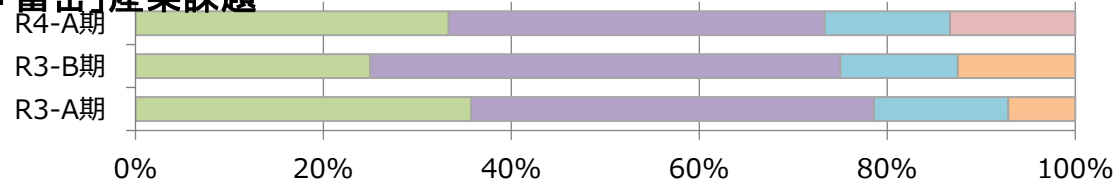
採択課題数の分野別分布(定期募集)

「富岳」一般課題、「富岳」若手課題

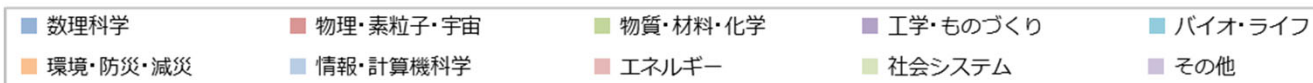
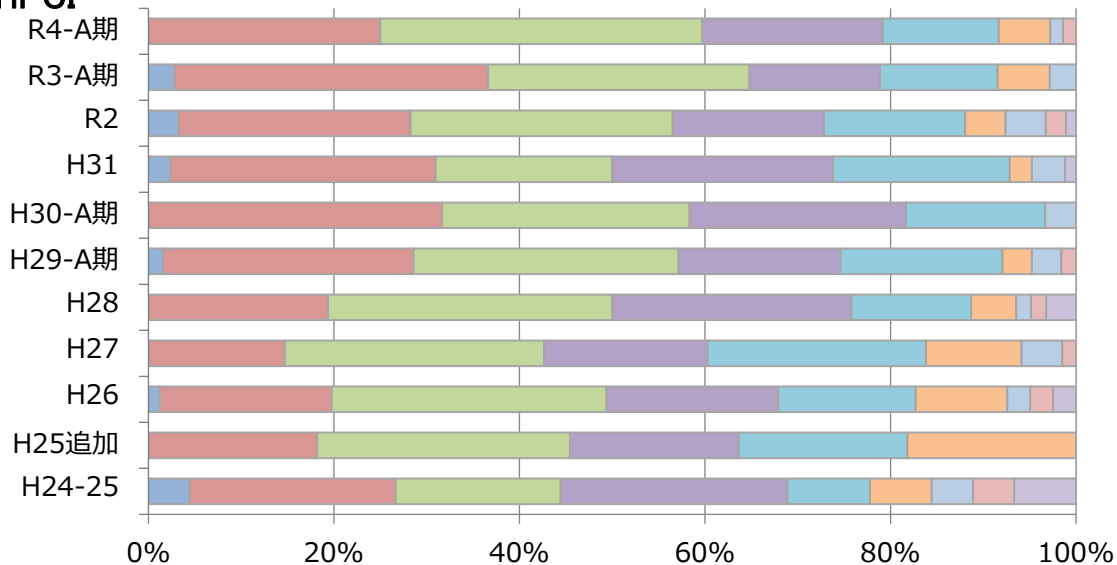


「**物質・材料・化学**」の
分野の課題も多い

「富岳」産業課題



HPCI



「富岳」、HPCI利用研究課題の募集(現在募集中の定期募集)



■ 令和5年度A期「富岳」を中核とするHPCIシステム利用研究課題の募集

申請書配布開始: 2022年 9月1日(木)

電子申請受付開始: 2022年10月5日(水)

電子申請受付締切: 2022年11月2日(水)17時(JST)

所属機関承認期限 2022年11月10日(木)

課題選定結果通知: 2023年 2月中旬

課題実施期間: 2023年 4月1日 ~ 2024年 3月31日(1年間)

「富岳」の定期募集は課題実施期間が10月から1年間のB期募集もあり。さらに、随時募集が多数あり。

◆ 募集説明会(予定)

第1回 9月15日(木) 15:00 ~ 16:30 (終了)

第2回 10月12日(水) 15:00 ~ 16:30

開催方法: オンライン開催(BlueJeansを使用予定)

詳細はHPCIポータルサイトで順次ご案内しています。

https://www.hpci-office.jp/pages/r05a_boshu

HPCI課題申請

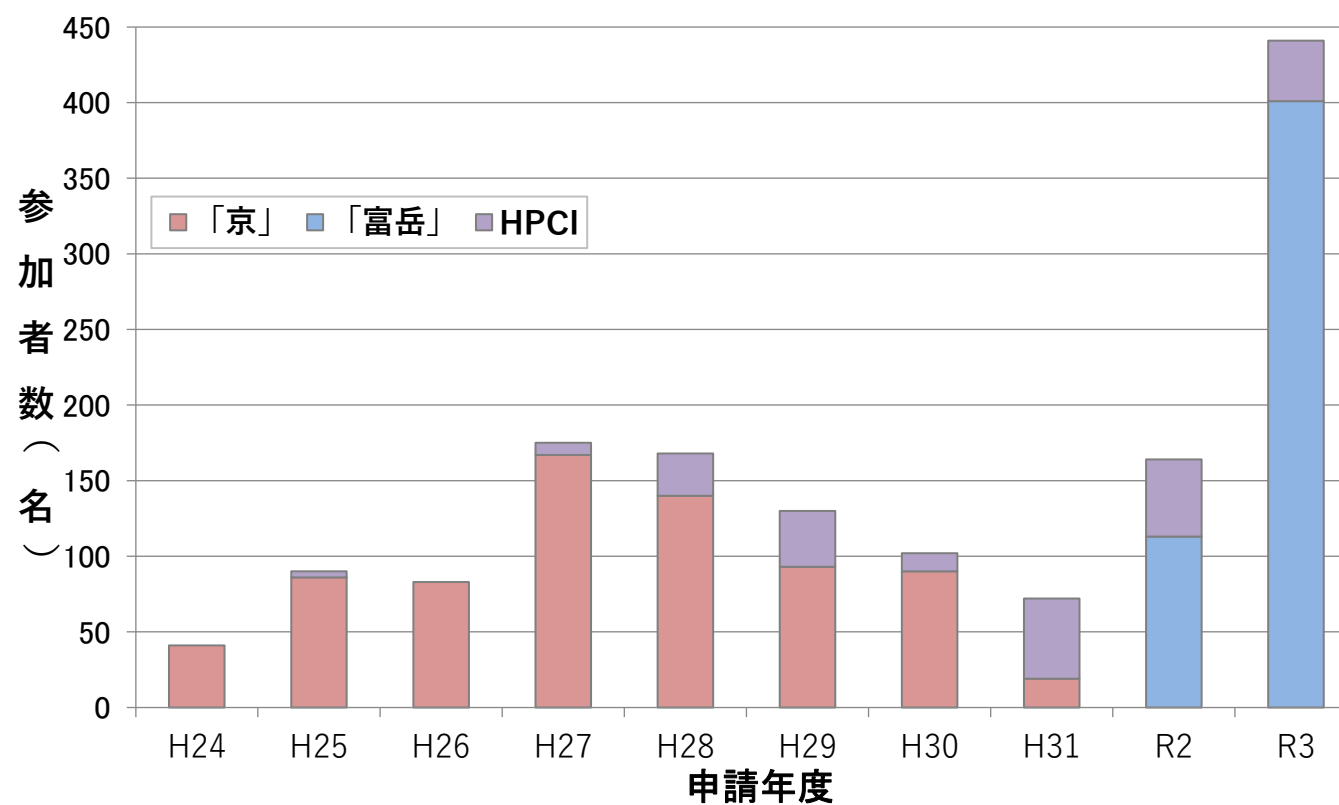
検索

「富岳」試行課題(随時募集の1つ)

- はじめて「富岳」を利用される方には試行課題(ファーストタッチオプション)がお勧め

「富岳」		
	試行課題	ファーストタッチオプション
申請受付	随時受付	
計算資源量	最大100,000 ノード時間	1,000 ノード時間(固定)
利用期間	最長6カ月	最長3カ月
利用回数	同一テーマで複数回の利用が可能	
課題申請	Web入力	Web入力
課題申請書	簡易版(A4・2ページ程度)	なし
審査期間	1～2週間程度	1週間程度
利用報告書	簡易版(A4・2ページ程度)	アンケート形式で Webから回答するだけ
成果公開	論文発表等による成果公開義務なし	
利用料金	無料	

課題参加者数の推移(随時募集)



随時募集の課題数が急増

利用支援体制の概要

RIST では、利用をお考えの方から利用中の方まで、ご相談や高度化のお手伝い等、幅広い支援を**無償**で行っています。

- ・「富岳」成果創出加速プログラムと連携し、専門分野個別支援を実施
- ・ポスト「京」重点課題や成果創出加速プログラムのアプリ、ノウハウおよび事例等を紹介
- ・利用者からの高度化支援の依頼
- ・重点的に支援するプログラムをピックアップ
- ・プログラム性能情報の採取
- ・ボトルネック調査（通信特性分析、インバランス評価、単体性能評価）等
- ・高度化支援

研究相談
全利用課題の
約**20%**が
高度化支援を利用
高度化支援へのユーザー満足度
93%
「満足」「ほぼ満足」と回答
利用講習会
高度化支援



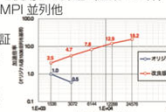
- ・利用開始に合わせた講習会の開催
- ・OSS の利用促進
- ・性能分析手法、高速化のノウハウ
- ・他システムからの移行
- ・ライブラリ、ツール等
- ・性能情報採取
- ・実行結果不正
- ・コンパイルエラー、実行時エラー等

高度化支援の事例

利用中の方の研究がスムーズに進むよう、計算環境を改善するお手伝いを無償で行っています。実行効率が良くない、並列化がうまくいかない等、お困りのことがありましたら、ヘルプデスクを通してご連絡下さい。ポータルサイトでは発表多数の事例を紹介しています。 HPCI 高度化

課題：高分子複合材料の粗視化 MD 解析の京スケール・コンピューティングの基盤的研究（若手）
支援内容：
・演算性能最適化
・SIMD 化
・ソフトウェアパイプラインの適用
・スレッド並列化
・組込関数最適化
ロードインバランス解消
出典：hp130122 坂田亮典（防衛大学校）
支援成果：**14 倍の高速化**

課題：OpenFOAM を使用する課題（産業 14 件）
計算規模：24.576MPI 並列他
支援内容：移植、ジョブ実行方法の検証、最適ノード形状調査、性能調査、パッチ提供、メモリ使用量の削減
出典：hp150070 近藤広二（直島建設株式会社）
支援成果：**2.5 倍高速化（1,536 並列時）**
最大 MPI 並列数を 3 千から 24 万まで改善



平均約 **4.5 倍**の高速化、資源の**効率的利用**に貢献！

RISTが「富岳」に整備したアプリケーションソフトウェア

RIST では、
●「富岳」を中核とした HPCI において、利用が多い OSS（オープンソースソフトウェア）
●利用が多いまたは今後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
を対象として、プリインストールや利用者に有益な情報を公開しています。 HPCI プリインストール

材料系・生物系分野

- ・ GENESIS
- ・ ABINIT-MP
- ・ GROMACS
- ・ LAMMPS
- ・ MODYLAS
- ・ NTChem
- ・ OpenMX
- ・ Quantum ESPRESSO
- ・ mVMC
- ・ AkaiKKR
- ・ ALAMODE
- ・ HΦ
- ・ Phonopy
- ・ PHASE/0

CAE 系分野

- ・ FDS
- ・ FrontFlow/blue
- ・ FrontISTR
- ・ OpenFOAM

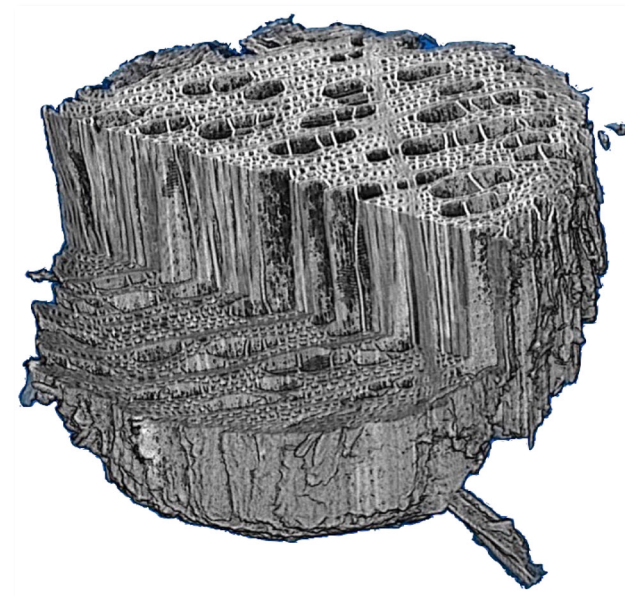
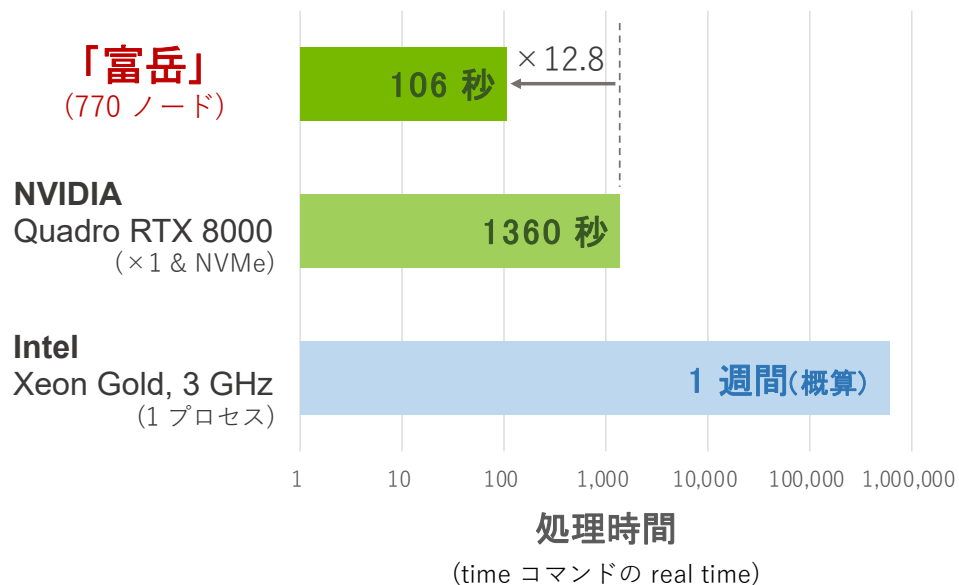
理化学研究所が整備した各種のライブラリや Python、機械学習等のアプリケーションもすぐに利用可能です。

■ 「富岳」一般試行課題(ファーストタッチオプション)

hp210308: 高輝度光科学研究センター(JASRI) 高垣昌史様の支援

◆ 支援内容

- 実験データのCT断層画像再構成を行う自作プログラムにおいて、プログラムの並列実装のアドバイス
- このプログラムで用いるboost, libtiff, libgc などの外部ライブラリと一緒に「富岳」でのコンパイル、動作確認、性能評価(ジョブスクリプトの最適化支援)



3D 再構成結果 (試料: 爪楊枝)

GPU (NVIDIA Quadro RTX 8000: 4,608 CUDAコア) マシンと比べて**12.8倍**速く実行可能

RISTが「富岳」、HPCIに整備しているアプリソフト

HPCIポータルサイト「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

https://www.hpci-office.jp/pages/appli_software

HPCI プリインストール

検索

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

▼ HPCI共用計算資源提供機関が整備したアプリケーションソフトウェア

各HPCI資源提供機関がHPCI共用計算資源にインストールしたアプリケーションソフトウェアは[ソフトウェア検索システム](#)や[資源一覧](#)から確認できます。

▼ 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

RISTでは「富岳」を中核とした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、ポスト「京」重点課題アプリケーション開発に関するプロジェクトなどより推薦された、利用が多いまたは今後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を対象として、プリインストールや利用者に有益な情報を提供し、容易に利用いただけるように整備しています。今後、対象ソフトウェア、整備システムを拡充する計画です*。

* 今後の整備計画検討のため、整備したアプリケーションソフトウェアについては、ユーザが特定できない統計情報として、利用者数、利用回数等の利用実績情報を収集し、アプリソフトが実行されたHPCIシステム構成機関、RIST及び当該アプリソフトの開発者が共有し、研究会や報告書などで公表することがあります。

■ RISTが整備しているアプリケーションソフトウェア

各アプリケーションソフトウェアに関する情報は、下のアプリケーションソフトウェア名をクリックしてご覧ください。

● 材料バイオ分野

- [ABINIT-MP](#)
- [LAMMPS](#)
- [PHASE/O](#)
- [mVMC](#)
- [GENESIS](#)
- [MODYLAS](#)
- [Quantum ESPRESSO](#)
- [AkaiKKR](#)
- [GROMACS](#)
- [NTChem](#)
- [SALMON](#)
- [ALAMODE](#)
- [HΦ](#)
- [OpenMX](#)
- [SMASH](#)
- [Phonopy](#)

● CAE分野

- [FDS](#)
- [FrontFlow/blue](#)
- [FrontISTR](#)
- [OpenFOAM](#)

2022年7月8日に、新規に下記の情報をHPCIポータルサイトで公開しました。

- 4つの計算機 [「富岳」、東北大AOBA-A (SX-Aurora TSUBASA)、JCAHPC Wisteria/BDEC-01(Odyssey)、名大「不老」Type II サブシステム (CX2570)]に国プロアプリを追加
- 「富岳」にOSS1本[FDS]を追加
- 上記以外のHPCIシステムにも、国プロアプリ4本 [mVMC、AkaiKKR、ALAMODE、Phonop]と、他の国プロアプリのバージョンを追加

「富岳」、HPCIで利用できるアプリケーション

「ソフトウェア検索ページ@HPCIポータルサイト」で検索

https://www.hpci-office.jp/pages/hardware_software

▼ HPCIシステムで利用可能なソフトウェアの検索

ウィンドウサイズに拡大
この条件で検索する >

計算機資源の選択と検索範囲

すべての計算機資源

☐ 過去に利用可能であったソフトウェアと計算機資源の情報を含める

ソフトウェア名

入力された単語でソフトウェアを絞り込みます。入力がない場合は他の条件に該当するすべてのソフトウェアを表示します。

☒ すべてを含む (AND) ☐ いずれかを含む (OR)

ソフトウェア分類

☒ すべての分類

☒ シミュレーション

☒ 分子動力学 ☒ 量子化学 ☒ 物性物理 ☒ 計算生物学 ☒ 流体解析 ☒ 構造/衝突解析

☒ 電磁界解析 ☒ マルチフィジックス ☒ 粒子系 ☒ 気象/気候 ☒ 地震動

☒ データサイエンス

☒ 機械学習 ☒ 統計解析/データ分析 ☒ バイオインフォマティクス ☒ 分散データ処理

☒ プリポスト

☒ 汎用可視化ソフトウェア ☒ メッシュ操作

☒ ライブラリ等

☒ MPI通信 ☒ 数値計算 ☒ 数式処理 ☒ 画像処理 ☒ データ圧縮 ☒ データ形式 ☒ Python関連

☒ その他のライブラリ等

☒ 開発環境

☒ コンパイラ/インタプリタ ☒ 性能分析 ☒ デバッガ ☒ その他の開発環境

☒ システム基盤

☒ OS ☒ ジョブ管理 ☒ クラウド基盤

検索機能

- ソフトウェア名による検索
- ソフトウェアの分類を選択してソフトウェア情報を絞り込み
- 過去に利用可能であったソフトウェアと計算機資源の情報を含めた検索
- 特定の資源提供機関及び計算機資源を選択したソフトウェア情報の絞り込み

ソフトウェアに関する情報

- ソフトウェアの概要説明
- 計算機資源毎のインストール情報や利用条件等
- 利用課題の多いソフトウェアを中心に関連情報を案内
- 各ソフトウェアを利用した課題の利用報告書へのリンク
- 各資源提供機関のソフトウェア関連ページへのリンク

HPCI ソフトウェア検索ページ

検索

HPCプログラミングWebセミナー

HPCIのユーザの方、HPCIを利用する予定がある または 利用を検討している方を対象に
プログラム高速化技法、並列化技法を説明します

- チューニング技法入門
- 並列プログラミング技法入門（共有メモリ編、分散メモリ編）
- アクセラレータ入門

「富岳」利用Webセミナー

- （入門） 「富岳」を使い始める際に役立つ情報
- （ハンズオン） 「富岳」を用いた実習
- （応用） チューニング技法に関する座学（計画中）

ワークショップ

材料系(古典) (例年) 10月

材料系(量子) (例年) 2月

CAE (例年) 3月

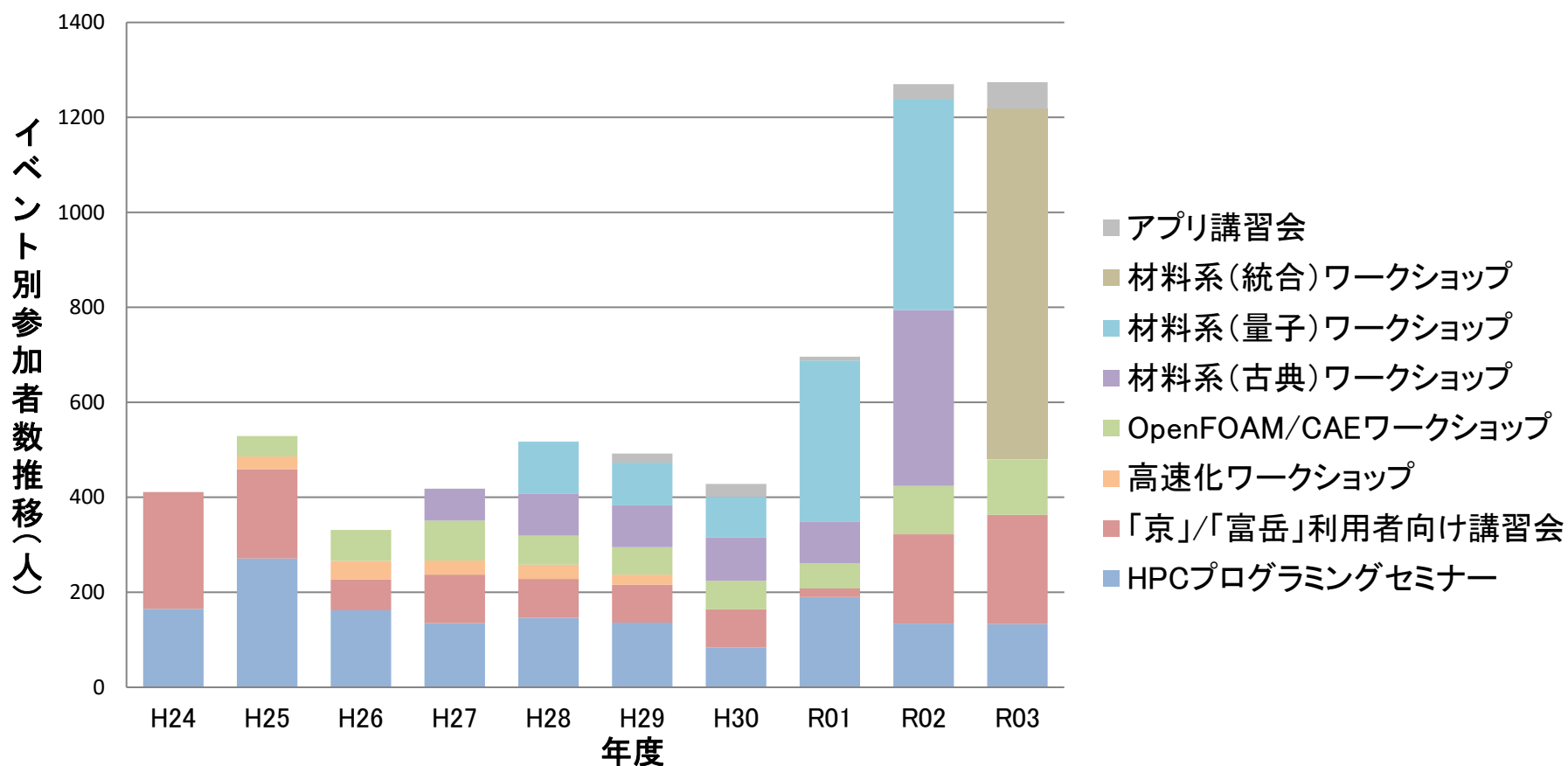
HPCアプリケーション講習会

LAMMPS@「富岳」

Quantum ESPRESSO@「富岳」

国プロソフト@第2階層計算機

講習会、ワークショップの参加者数



多くの方にご参加いただいています。

今後(2022年度)のイベントの予定

開催日	イベント名	定員
2022/10/6	第7回スパコンコロキウム	—
2022/10/26	第14回材料系ワークショップ@秋葉原UDX & 配信 (ハイブリッド開催の予定)	300名程度
2022/10/27, 28	第9回成果報告会	—
2022/11/10	量子化学計算アプリSMASH@東北大AOBA-B(LX 406Rz-2)	10名程度
2022/11/29	第2回「富岳」を用いたLAMMPS入門講習会(ハンズオン)	20名程度
2023/2/16	第15回材料系ワークショップ@秋葉原UDX & 配信 (ハイブリッド開催の予定)	300名程度
2023/2予定	第3回「富岳」を用いたQuantum ESPRESSO入門講習会(ハンズオン)	20名程度
2023/3予定	第6回CAEワークショップ	200名程度

開催の決まったものから告知していきます。

HPCI 講習会・セミナー

検索

HPCI シンポジウム・ワークショップ・研究会等

検索

メーリングリストでのイベントの告知

■ HPCI Newsletter

https://www.hpci-office.jp/pages/hpci_newsletter

登録した方には(HPCI-IDを持たない方にも)情報を配信

- ◆ HPCIの募集情報
- ◆ HPCIの利用に関する情報
- ◆ HPCIの講習会やイベント、等



第14回 材料系ワークショップ

～ポスト「富岳」を見据えた
計算物質科学の未来～

参加費
無料

2022.

日時

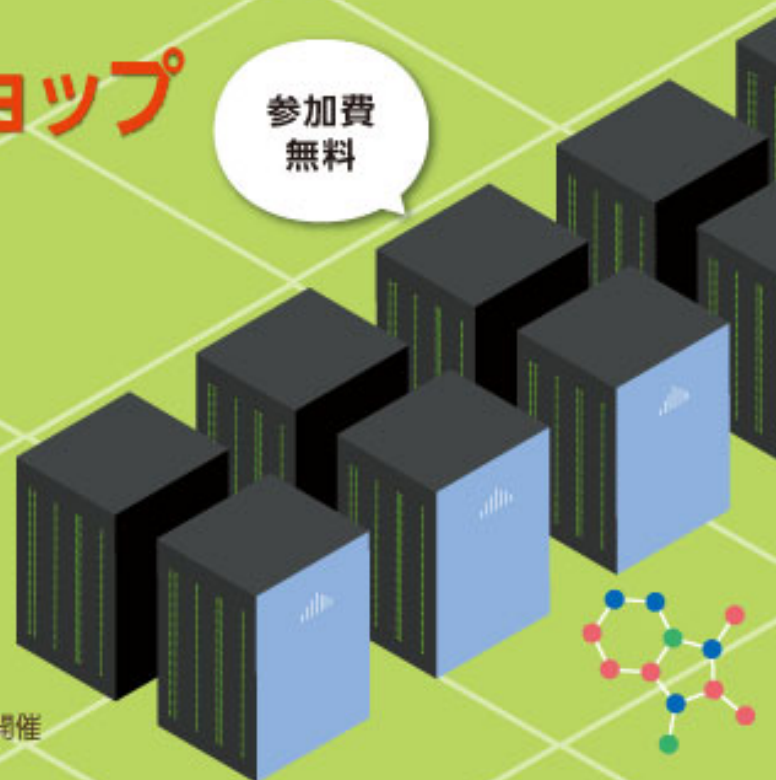
10.26 (水) 10:00 ▶ 17:30

会場

秋葉原UDX NEXT-1

開催形式

オンサイトとオンライン 両方のハイブリッド開催



https://www.hpci-office.jp/pages/ws_material_221026

第14回材料系ワークショップ

検索



「京」から「富岳」へ

紙から Web へ

広報誌「京算百景」は
HPCI広報サイト「富岳百景」に
変わりました。



fugaku100kei.jp

つぶやいています



@Fugaku_hpci



スーパーコンピュータ「富岳」(公式)