

令和4年度RIST事業計画

- ・「富岳」利用促進業務実施登録機関 実施計画
- ・HPCI運営代表機関 業務計画

2022年5月13日

一般財団法人高度情報科学技術研究機構（RIST）

1. 全体共通事項

- 利用裾野拡大、計算科学・計算機科学分野の人材育成の取組を強化

2. 利用促進業務/利用者選定業務

- 選定委員会による利用制度に係る方針等の審議
- 重点分野の設定・推進、バランスに配慮した利用時間を配分（柔軟に調整）
- 課題募集の広範な周知、課題選定の中立性・公正性の確保、利便性の向上 など

3. 利用促進業務/利用支援業務

- 一元的窓口機能（ヘルプデスク機能）による利用相談等対応
- 普及啓発媒体、Web等を活用した情報発信及び利用の裾野拡大・成果の普及
- アプリ利用環境整備
- 「富岳」利用技術の習得等を促進するための講習会等の実施
- 産業利用促進に特化した支援 など

4. HPCI運営業務

- 運営総合調整/HPCIシステムの今後の運営の在り方に関する調査検討
- 課題選定/共通窓口運用/利用支援/HPCI産業利用促進 など *登録機関業務と一体的に推進
- 分担機関への再委託
 - 共用ストレージ等（東西拠点）運用・保守（理化学研究所、東京大学）
 - 共用ストレージ大規模分散ファイルシステムの機能整備等（筑波大学）
 - HPCI認証基盤システム整備・運用（国立情報学研究所）
 - 産業利用等拡大（計算科学振興財団）

令和3年度の実績例（課題申請・採択等実績は別資料）

利用の裾野拡大

- ・「富岳」試行課題ファーストタッチオプション設定
- ・「富岳」OSSアプリ利用環境整備（累計5本移植）
- ・国プロアプリ利用環境整備（累計15本移植）
- ・産業利用向け伴走型利用支援（1課題）
- ・大型実験施設との連携利用促進 → P4参照
- ・はじめてのHPCI発行（No.7～8）
- ・産業展示会への出展（3件）
- ・メール配信拡大（非HPCI-ID保持者約1.3千人への情報配信）
- ・NSCC*国際連携課題設定（応募16課題/採択5課題）

P3
参照

* NSCC (National Supercomputing Centre Singapore) :
シンガポール国立スーパーコンピューティングセンター

人材育成

- ・プログラム移植調整・高度化等支援（27課題）
- ・「富岳」成果創出加速プログラム/研究交流会開催
- ・HPCプログラミングセミナー（6回）
- ・HPCアプリケーションソフトウェア講習会（13回）
- ・「富岳」利用セミナー（6回）
- ・A64FXチューニング技術検討会（3回）
- ・研究分野特化ワークショップ（3回）
- ・スパコンコロキウム（4回）
- ・スパコン「富岳」体験塾（1回）
- ・はじめてのプログラミング（1回）
- ・SSH研究課題支援（1校）
- ・JHPCNとの連携による計算機利用の促進

P5
参照

HPCI運営再委託先（FOCUS）が行う 産業利用裾野拡大・人材育成・普及啓発

- ・産業利用向けエントリースパコン活用によるスタートアップ支援（228法人）
- ・入門機（FX700）によるコーチング（38法人）
- ・産業利用促進セミナー/展示会（13回）
- ・企業等訪問（98法人）
- ・「富岳」OSSアプリ利用環境整備（1本/上記累計5本の内数）
- ・「富岳」アプリ講習会（2回）

- ・成果発表DB登録・公開（～2021末累計9,567件）
- ・利用報告書公開（～2021末累計1,892件、同DL約19万件）
- ・電子ジャーナル公開（～2021末累計81編、同DL約1.6万件）
- ・成果報告会（1回/優秀成果賞7課題）
- ・「富岳」成果創出加速プログラム/シンポジウム開催
- ・HPCI Webマガジン「富岳百景」発行（Vol.3～7）
- ・国際会議等出展/オンライン展示（3回）
- ・研究インタビューYouTube動画公開（4本）
- ・課題募集・成果発表等プレスリリース（40件）

P6
参照

成果公表、普及啓発

アンダーライン：
令和3年度からの新規実施

利用の裾野拡大例：「富岳」OSS及び国プロアプリ利用環境整備状況・計画

■ 整備状況

| | | R-CCS | 北大 | 東北大 | | 筑波大 | JCAHPC | 東大 | 東工大 | 名大 | | 阪大 | 九大 |
|----------------|------------------|-----------------|---------------|----------------------------------|---------------------|----------|--------------------|--------------|------------|-------------------|-----------|-----------|-----------|
| | | 「富岳」 (A64FX) | Grand Chariot | SX-Aurora TSUBASA (Vector) | LX 406Rz-2 (AMD) | Cygnus | Odyssey (A64FX) | Oakbridge-CX | TSUBAME3.0 | FX1000 (A64FX) | CX2570 | OCTOPUS | ITO-A/B |
| OSS | OpenFOAM | ● | | | | | | | | | | | |
| | LAMMPS | ● | | | | | | | | | | | |
| | GROMACS | ● | | | | | | | | | | | |
| | Quantum ESPRESSO | ● | | | | | | | | | | | |
| | FDS(*) | ● | | | | | | | | | | | |
| 国 プロ アプリ | ABINIT-MP | (●) | ● | | ● | | ● | ● | ● | ● | ● | ● | ● |
| | FrontFlow/blue | | ● | | ● | | | ● | ● | ● | ● | ● | ● |
| | FrontISTR | (●) | ● | | ● | | ● | ● | ● | ● | ● | ● | ● |
| | GENESIS | (●) | ● | | ● | ● (G) | ● | ● | ● (+G) | ● | ● (+G) | ● (+G) | ● (+G) |
| | HΦ | ● | ● | ● | ● | | ● | ● | ● | ● | ● | ● | ● |
| | MODYLAS | ● | ● | | ● | | ● | ● | ● | ● | ● | ● | ● |
| | NTChem | (●) | ● | | ● | | ● | ● | ● | ● | ● | ● | ● |
| | OpenMX | ● | ● | | ● | | ● | ● | ● | ● | ● | ● | ● |
| | PHASE/0 | ● | ● | ● | ● | | ● | ● | ● | ● | ● | ● | ● |
| | SALMON | ● | ● | | ● | | ● | ● | ● | ● | ● | ● | ● |
| | SMASH | ● | ● | | ● | | ● | ● | ● | ● | ● | ● | ● |
| | mVMC(**) | ● | ● | | ● | | ● | ● | ● | ● | ● | ● | ● |
| | Phonopy(**) | ● | ● | | ● | | ● | ● | ● | ● | ● | ● | ● |
| | ALAMODE(**) | ● | ● | | ● | | ● | ● | ● | ● | ● | ● | ● |
| AkaiKKR(**) | ● | ● | | ● | ● (G) | ● | ● | ● (+G) | ● | ● (+G) | ● (+G) | ● (+G) | |

【凡例】 黒：インストール済、赤：2021年度に新規インストール、赤括弧付き：開発グループ等が整備、緑：2021年度にバージョンアップ、
(G)：GPU版のみ、(+G)：CPU版に加えてGPU版を整備、(*)RISTからの委託によりFOCUSが整備、(**)新規に整備

■ 2022年度整備計画

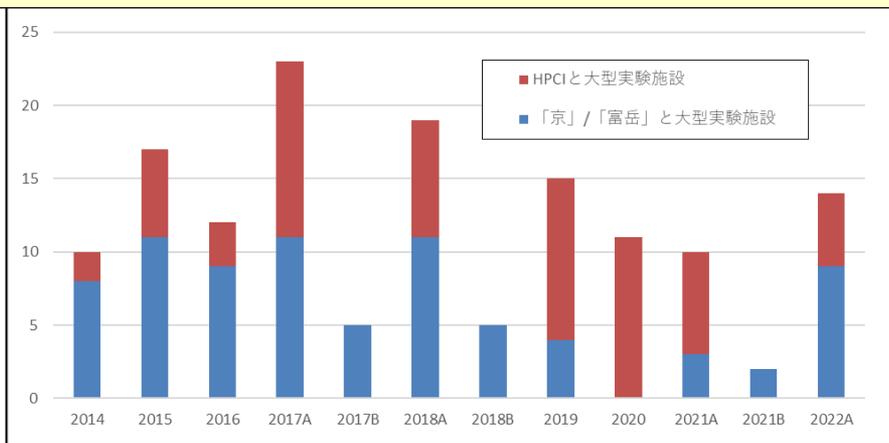
- ◆ OSSは適宜、国プロアプリは開発者の計画を基にバージョンアップを実施
- ◆ 新規整備アプリは、コミュニティの意見を伺って検討・実施
- ◆ 国プロアプリ開発者、各基盤センターと協力して整備したアプリのハンズオンを実施

利用の裾野拡大例：大型実験施設との連携利用促進

○大型実験施設（SPring-8/SACLA、J-PARC MLF等）との連携利用促進による新たな研究成果の創出

○3登録機関主催による連携利用シンポジウム、登録機関支援要員勉強会、実験施設主催のワークショップでの発表等を通じた、実験科学研究者と計算科学研究者との融合・連携促進

大型実験施設との連携利用課題の推移（申請課題数）



連携利用シンポジウム

| 年度 | サブテーマ | 参加者数 |
|------|----------------------------------|-----------------|
| 2014 | - | 103名 |
| 2015 | ソフトマター科学を中心として | 126名 |
| 2016 | 最先端電池材料 | 135名 |
| 2017 | 生体物質のダイナミクス | 125名 |
| 2018 | 熱電材料 | 82名 |
| 2019 | 構造物性の階層性とフォノン物性の理解 | 102名 |
| 2021 | 量子ビーム実験と理論計算の連携利用が拓く物質材料科学の可能性模索 | 229名 オンライン開催 |

登録機関支援要員勉強会

| 年度 | テーマ | 参加者数 |
|------|--------------------------------------|------|
| 2017 | 強相関電子物性と格子物性の関わり ～鉄系超伝導体を中心に～ | 22名 |
| 2018 | 放射光・中性子線と理論計算との融合による精密構造解析の新展開 | 28名 |
| 2019 | 放射光・中性子線・理論計算によるクラスレート化合物の格子・電子物性の解明 | 34名 |

<課題>

- 実験系研究者の積極的な取り込み
- 研究者間のマッチングをはかり、施設間連携利用研究を促進するための仕掛け/仕組みづくり

人材育成例：セミナー・講習会等の概要及び対象者層

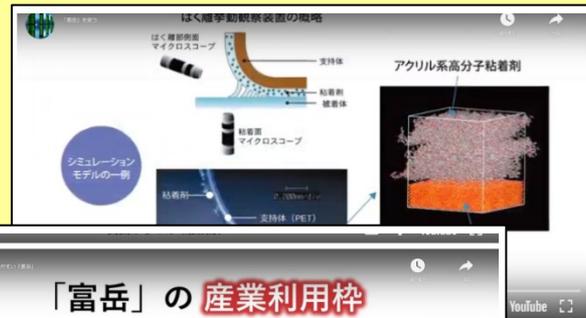
| 項目 | 概要 | 対象者層 |
|-----------------------------|---|--|
| HPCプログラミングセミナー | HPC向けプログラミング技法の習得 | HPCI利用者、HPCI利用予定があるまたは利用を検討している方 |
| HPCアプリケーションソフトウェア講習会 | 「富岳」・HPCIでRISTが利用環境を整備したアプリケーションソフトウェアの座学/ハンズオン講習による利用技術習得 | HPCI利用者、HPCI利用予定があるまたは利用を検討している方。整備先のHPCIシステム構成機関の利用者、HPCIシステム構成機関利用予定があるまたは利用を検討している方 |
| 「富岳」利用セミナー (入門編/中級編) | 「富岳」の運用環境や基本的な利用方法など実際に利用する際に役立つ情報をオンライン講義で提供 | 「富岳」アカウント保持者 |
| A64FXチューニング技術検討会 | 「富岳」を含むA64FXシステムにおいて、アプリケーションソフトウェアを更に効率的に利用することを目的に、チューニング技術を共有 (理研・R-CCSと共同開催) | (興味のある方はどなたでも可) |
| 研究分野特化ワークショップ (材料系/CAE等) | 「富岳」・HPCI利用を含む各研究分野における最新動向・アプリケーション活用事例・並列計算ノウハウ等の提供 | 企業・大学・研究機関の当該分野研究者、アプリケーション開発者 |
| スパコンコロキウム | 計算の研究事例やその研究に利用可能なアプリケーションの紹介等 | 実験研究者、計算の初心者から中級者、計算やスパコンに興味を有する方 |
| スパコン「富岳」体験塾 | 具体的に進路を決める前の中高生のうちから、実際にスパコン「富岳」を体験 | C言語の基本を理解している中高生・高専生 |
| はじめてのプログラミング | スパコン疑似体験、数値シミュレーションの意義、スパコンのしくみや処理の速さを体験 | プログラミングに興味のある高校生・高専生 |
| SSH研究課題支援 | SSH課題研究でスパコン資源を利用したシミュレーションを行う高校生への資源提供・技術サポート | 地元（兵庫県下）のSSH校の高校生 |

成果公表、普及啓発例：広報活動の拡充

HPCIポータル特設サイト「富岳百景」の開設



利用事例動画



利用制度動画



- 動画 (YouTube) による利用事例・利用制度紹介 (計14本)
- トピック情報 (例：COVID-19対策への取り組み) の提供 等

「富岳」成果創出加速プログラム 研究交流会・シンポジウムの開催

- (1) 研究交流会 2022.3.14-15 研究者向けオンライン開催
研究分野ごと「富岳」性能最適化事例紹介、運用・高速化の取り組み紹介、オープンディスカッション次世代研究者賞授与・記念公演
■ピーク参加 (視聴) 者数：1日目 227名、2日目 188名
- (2) シンポジウム 2022.3.29 一般向けオンライン開催
「富岳」成果創出加速プログラムの概要及び研究成果紹介、ポスター展示
■参加 (視聴) 者数：460名



今後の新たな取り組み検討の方向性

1. 利用の裾野拡大

課題：新規利用者および利用分野の拡大

- 利用ニーズを踏まえた利用制度の見直し、利用手続きの簡素化、更なる利便性向上を適宜検討・実施
- 利用支援サービスの充実化
(例：伴走型支援対象分野の拡大)
- 広報・普及啓発コンテンツ・媒体の拡充
(例：YouTube PR動画の拡充)

2. 人材育成の推進

課題：次世代計算科学/計算機科学を担う人材の育成

- HPCIコンソーシアムとの連携による学生をエンカレッジする施策・制度・仕組みづくり（施設利用、運営・支援の両面で）の検討
(例：学生を課題代表者とする利用枠・利用制度の新設)
- 大学等との交流・連携による人材育成
(例：クロスアポイントメントの導入)