

「富岳」とHPCIの利用について

～利用手続き、支援サービス、利用可能なアプリ～

Introduction to Supercomputer Fugaku and HPCI

～Using Procedures, User Support, Available Applications～

浅見 暁¹⁾

Akira Azami

1) 一般財団法人高度情報科学技術研究機構

(〒105-0013 東京都港区浜松町住友浜松町ビル7階, E-mail: a-azami@rist.or.jp)

This paper introduces the use of the Fugaku and HPCI supercomputer systems. The HPCI project includes Fugaku installed at RIKEN and other supercomputer systems at 14 research institutions. They are basically available free of charge. There are two types of calls for proposals, one is regular calls to be done once or twice a year (the second call is applicable to Fugaku only), and the other is calls opening throughout the year. The calls opening throughout the year include both trial access proposals and Fee-based access proposals for highly confidential projects. Fugaku trial access includes first-touch option (1000NH. 3months) available with easy application for use. Several types of user support are available for the use of these supercomputer systems. For example, “Program Tuning support” provides supports for application porting, serial and scalability optimization. “Accompanying support” for industrial use is available when it is difficult for the company to solve the problem by itself. Pre-installed software for Fugaku is available by spack, and please check for the latest information as it is updated from time to time. For more information, please visit <https://www.hpci-office.jp/>.

Key Words : HPCI, Fugaku, user support, OSS, spack

1. HPCIとは

HPCIとは、High Performance Computing Infrastructure (革新的ハイパフォーマンス・コンピューティング・インフラ)の略称である。国内の大学や研究機関の最先端のスーパーコンピュータやストレージを高速ネットワークで接続した共用計算環境基盤を利用することにより、科学技術や産業界の競争力強化を目的とした文部科学省のプロジェクトとなっている。各計算機資源については図1を参照されたい。このHPCIの制度を利用すれば、理化学研究所で運用されているスーパーコンピュータ「富岳」と「富岳」以外の様々なアーキテクチャの計算機資源(全14機関、以降HPCI(第二階層))を基本的に無料(無償)で利用できる仕組みとなっている。私の所属しているRIST(一般財団法人高度情報科学技術研究機構)は「特定先端大型研究施設の共用の促進に関する法律(共用法)」に基づき、登録施設利用促進機関(登録機関)、また文部科学省委託事業「HPCIの運営」の代表として、HPCI利用の際のヘルプデスク等の窓口業務、利用者選定、利用支援等の利用促進業務を担当している。

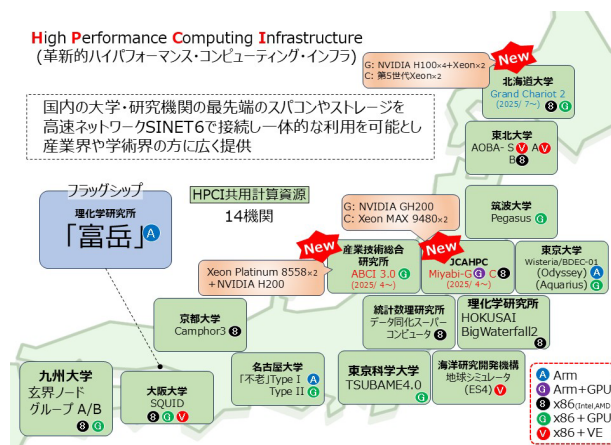


図 1 Fugaku and HPCI (2nd layer) computing resource

2. 「富岳」とHPCI(第二階層)の利用制度

「富岳」とHPCI(第二階層)では、大きく分けて定期募集(「富岳」は年2回、HPCI(第二階層)は年1回)と随時募集に分かれ、「富岳」の随時募集についてはさらにお試し利用の試行課題、大規模シミュレーションの有効性の実証のための機動的課題、機密性の高いテーマを扱う場合に有効な有償課題に分けられる(課題と

は利用申請時の単位をいう)。以降、「富岳」の利用、主に企業向けの産業利用についてより詳しく述べる。課題の種類については図2を参照されたいが、「富岳」試行課題のファーストタッチオプションは簡単な申請で3か月間・1000NH¹をお試し利用できる制度となっており、プログラムの実行確認などに最適である。このファーストタッチオプションは利用報告書もアンケート形式の簡単なものであること、また同じテーマで繰り返し利用が可能となっているため、多くの方に利用されている。プログラムの動作確認が終わり、もう少しじっくりと計算をしてみたい方には10万NHまで利用可能な試行課題、本格的に利用したい方には機動的課題や定期課題という形でステップアップが可能である。機動的課題や定期課題では、査読付き論文や電子ジャーナル等での成果公開が必要だが、試行課題と有償課題ではこの成果公開の義務は免除される²。また有償課題ではジョブ優先実行といった付加サービスが漏れなく利用でき、利用報告書の非公開が選択できる。なお「富岳」有償課題の利用料金については利用報告書の公開/非公開などで単価が変わるため、「産業利用の広場」のサイト³の電卓マークから計算していただきたい。(100万円でおおよそ48ノード×300時間(単価約66円/NH)の計算資源となる(定額制、利用報告書・非公開の場合))

利用のための手続きの流れは図3の通りで、「富岳」試行課題のファーストタッチオプションの場合、最短10日程度でアカウントが発行される。

HPCI(第二階層)利用する場合も試行課題、定期課題、有償課題の3つの課題の種類から選ぶことができる。近年、最新のGPUを搭載したマシンも各センターで導入されつつあるので、機械学習系のGPUを利用するアプリケーションの場合には、HPCI(第二階層)も選択肢とすることができるだろう。

課題の種類(産業利用を中心に説明)	利用料金 計算資源・利用期間	利用後の報告
ファーストタッチ オプション お試し利用に最適 ・Webで簡単に申請 ・最短1週間でアカウント発行	無償 1,000NH・3か月	成果公開・義務なし 利用報告書は アンケート程度を Webで入力するだけ
試行課題 小規模利用や 本格利用に向けた準備	無償 10万NH・6か月	成果公開・義務なし 利用報告書は A4版2枚程度の簡易版
機動的*1課題 定期*2課題 大規模シミュレーション の有効性の実証 機動的: 2025年10月からの利用の 応募は 5/8まで 定期: 2025年10月からの利用の 応募は 5/8まで	無償 100万NH・1年(機動的) 500万NH*3・1年(定期)	成果公開 利用報告書は公開
試行有償課題 有償課題 機密性の高いテーマ	有償 10万NHの月別(有償) 500万NH*1年(有償)	成果公開・義務なし 利用報告書は 公開/非公開を選択可

*1: 随時受付・年4回審査 *2: 年2回定期募集 *3: 企業 5社以上のコンソーシアム型は800万NHまで

図2 Fugaku Industrial Access Projects

¹ NH : Node Hour (1ノードを1時間利用する単位)
² 成果公開とは別に利用報告書は全ての課題で提出が必要

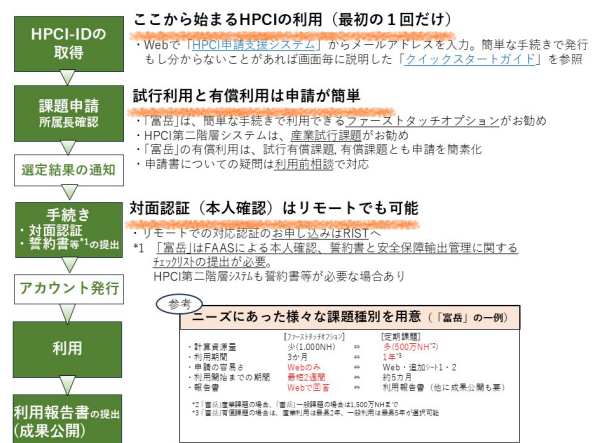


図3 Procedures for using the HPCI

3. 利用支援

「富岳」やHPCIの計算機資源を利用する場合、サポートが不可欠である。RISTでは利用前の支援として利用前相談(申請手続きや利用相談)や利用前技術支援(プログラム移植の支援)、利用中の支援としては、高度化支援や伴走型利用支援といった支援を受けることができる。高度化支援は随時受付しており、支援の期間はおよそ4か月、プログラムの移植や性能分析、高速化、可視化などについて対応可能である。伴走型利用支援は自社だけでは達成困難な研究・開発に対し自立することを目標に伴走的に支援を行うものとなっている。定期型(6か月)、随時型(2か月)のコースが選択可能で、定期型については年2回の募集のタイミングがある。高度化支援、伴走型利用支援の支援は無料(無償)で、対象は「富岳」とHPCI(第二階層)の計算機資源となる。また、このような支援以外に「HPCプログラミングセミナー」、「富岳」利用セミナー(入門編/中級編)といった講習会も開催している。

4. 利用可能なアプリケーションソフトウェア

「富岳」において利用者の多いアプリケーションソフトウェア(OSS)は、理研やRISTで整備を行っており、spackと呼ばれるパッケージ管理ツールを利用することで利用できる。導入済みのアプリは日々更新されているため最新の情報を確認⁴していただきたいが、2025年2月の時点で図4に示されるソフトウェアが利用可能となっている。インストールされていないソフトウェアについては利用者がインストールする必要があるが、利用支援にて移植サポートが可能である。

³ https://fugaku100kei.jp/industrial_user/
⁴ https://www.hpci-office.jp/using_hpci/hardware_software

「富岳」で無償で利用できるソフトウェア (2025/2/17時点)

ソフトウェア	データベース	力場ソフト	ソフトウェア	開発環境
分子シミュレーション • ERMol • GROMACS • LAMMPS • MOBYLAS • NAMD • OpenMM • CHARMM • GEMM • NEMO • SCALE • WRF • AMBER • GROMACS • LAMMPS • MOBYLAS • NAMD • OpenMM • CHARMM • GEMM • NEMO • SCALE • WRF	データベース • ChemDB • PubChem • CASREACT • CASREACT-2 • CASREACT-3 • CASREACT-4 • CASREACT-5 • CASREACT-6 • CASREACT-7 • CASREACT-8 • CASREACT-9 • CASREACT-10 • CASREACT-11 • CASREACT-12 • CASREACT-13 • CASREACT-14 • CASREACT-15 • CASREACT-16 • CASREACT-17 • CASREACT-18 • CASREACT-19 • CASREACT-20	力場ソフト • GROMACS • LAMMPS • MOBYLAS • NAMD • OpenMM • CHARMM • GEMM • NEMO • SCALE • WRF	ソフトウェア • ANSYS • COMSOL • MATLAB • SolidWorks • AutoCAD • Revit • Bentley • MicroStation • Bricsys • PTC • Siemens • Dassault • Oracle • SAP • Microsoft • Adobe • Autodesk • Intel • ARM • NVIDIA • AMD • Qualcomm • MediaTek • HiSilicon • Kirin • Kunpeng • Dragon • Kunlun • Kunlun-2 • Kunlun-3 • Kunlun-4 • Kunlun-5 • Kunlun-6 • Kunlun-7 • Kunlun-8 • Kunlun-9 • Kunlun-10 • Kunlun-11 • Kunlun-12 • Kunlun-13 • Kunlun-14 • Kunlun-15 • Kunlun-16 • Kunlun-17 • Kunlun-18 • Kunlun-19 • Kunlun-20	開発環境 • Anaconda • JupyterLab • Orange3 • Orange4 • Orange5 • Orange6 • Orange7 • Orange8 • Orange9 • Orange10 • Orange11 • Orange12 • Orange13 • Orange14 • Orange15 • Orange16 • Orange17 • Orange18 • Orange19 • Orange20

図4 Software available free of charge at Fugaku

一般的なクラウドサービスと比較すると手続きがやや煩雑なところもあると思われるが、基本的に計算機使用料や支援が無料(無償)で利用できるところが大きなポイントとなる。利用をご検討の方、ご質問のある方は、RISTのヘルプデスク窓口 (helpdesk@hpci-office.jp) まで連絡をお願いしたい。

5. 利用方法

「富岳」やHPCI (第二階層) の計算機のOSはLinuxベースのため、基本的にはターミナルソフトからsshで接続し、Linuxのコマンドを使いながら、プログラムの編集やジョブの実行を行う。ssh接続については、企業によっては接続許可申請が必要な場合もあり手間がかかることがあるが、最近では図5のようなOpen OnDemandと呼ばれるウェブブラウザ経由で利用できる環境が整備されている。ウェブブラウザであれば、どの企業からも比較的アクセスが容易であるため、sshの接続許可を取ることなく利用可能である。具体的には、ターミナル利用時と同じようなログインノードのシェルの起動やジョブの実行、ファイル転送、可視化アプリの起動が可能となっている。GUIを基本とした使い方になっているため、Linuxに不慣れな方でも利用できる。

■「富岳」のアカウントが発行されたら、RIKEN R-CCS発行の証明書を手順通りインポートするだけで、Webブラウザから「富岳」が利用可能

▼ shellも利用可能

▲ ファイルのアップロードやダウンロードも可能

◀ GUIで「富岳」が操作可能

図5 Fugaku OpenOnDemand

6. まとめ

「富岳」やHPCI (第二階層) の計算機資源や利用手続きについて、またRISTにおける支援制度、利用可能なアプリケーションソフトウェアの紹介を行った。紹介した内容については、HPCIポータルサイト (<https://www.hpci-office.jp/>) (「HPCIポータル」で検索) に情報を一元化しているため、より詳細についてはHPCIポータルサイトを参照されたい。「富岳」やHPCI (第二階層) の利用は一