

ポスト「京」重点課題アプリソフト のHPCIセンターへのプリインストール について

「登録施設利用促進機関」及び
文科省委託事業「HPCIの運営」代表機関
高度情報科学技術研究機構（RIST）
吉澤香奈子

- 令和2年度HPCIシステム利用研究課題の募集開始について
課題申請書受付開始: 令和元年 9月19日(木)
課題申請書受付締切: 令和元年10月21日(月)17:00(JST)
- 第6回HPCIシステム利用研究課題成果報告会(11/1)の開催案内
- RISTの利用支援について
 - HPCIシステムにプリインストールされたポスト「京」重点課題アプリソフトの進捗状況
 - HPCIセンターでの講習会
 - 第8回材料系ワークショップ(10/18)の開催案内
 - 第9回材料系ワークショップ(2020/2/17, 18)の企画について

令和2年度HPCIシステム利用研究課題募集のスケジュール



課題募集開始・申請書配布開始:	令和元年 8月22日(木)
課題申請書受付開始:	令和元年 9月19日(木)
課題申請書受付締切:	令和元年10月21日(月)17:00(JST)
郵送物送付締切:	令和元年11月 5日(火)必着
課題選定結果発表:	令和2年 2月初旬ごろ
課題実施期間:	令和2年 4月 1日～令和3年 3月31日

募集説明会:(参加申込み必要)

[東京] 9月20日(金) 東京工業大学(大岡山) 学術国際情報センター(情報棟)
(東京工業大学との共同開催)

いずれの日程も14:00～16:00の開催です。

詳細はHPCIポータルサイトで順次ご案内しています。

http://www.hpci-office.jp/pages/r02_boshu/

令和2年度HPCIシステム利用研究課題の募集概要

募集対象資源	募集対象課題 / タイプ
HPCI共用計算資源	一般課題
	若手人材育成課題
	産業利用課題(実証利用)
HPCI共用ストレージ	CPU一体型
HPCIシステム構成機関の 独自ルールで共通運用さ れる計算資源	

詳しくは、

- HPCIポータルサイトを見る

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

- ヘルプデスクへ問い合わせる

〒650-0047 兵庫県神戸市中央区港島南町7丁目1番26

一般財団法人高度情報科学研究機構 神戸センター

TEL: 078-940-5795 FAX: 078-304-4959

E-mail: helpdesk@hpci-office.jp

HPCIポータルサイト

検索

第6回HPCIシステム利用研究課題成果報告会

第6回「京」を中核とする HPCIシステム利用研究課題

成果報告会

～スーパーコンピュータ「富岳」の胎動、計算科学、AIの融合に向けて～

2019年

11月1日(金) 10:00～17:40

THE GRAND HALL (東京・品川)

JR「品川駅」港南口より徒歩5分
〒108-0075 東京都港区港南 2-16-4 品川グランドセントラルタワー3階

同時開催
第2回
**HPCIコンソーシアム
シンポジウム**

「京」から「富岳」へ
何が変わり何ができるのか？

参加無料
[先着 300 名]

申込締切 10月23日(水) 17:00

下記 URL よりお申込みください。

http://www.hpci-office.jp/pages/project_report_meeting



主なプログラム

優秀成果受賞課題成果発表
ポスター展示

主催 一般財団法人 高度情報科学技術研究機構 (RIST)
共催 一般社団法人 HPCIコンソーシアム
国立研究開発法人 理化学研究所 計算科学研究センター (R-CCS)

協賛 協力
スーパーコンピューティング技術産業応用協議会
国立情報学研究所、北海道大学 情報基盤センター、
東北大学 サイバーサイエンスセンター、筑波大学 計算科学センター、
東京大学 情報基盤センター、東京工業大学 学術国際情報センター、
名古屋大学 情報基盤センター、京都大学 学術情報メディアセンター、
大阪大学 サイバーメディアセンター、九州大学 情報基盤研究開発センター、
海洋研究開発機構 付加価値情報創生部門地球情報基盤センター、
情報・システム研究機構 統計数理研究所、産業技術総合研究所
公益財団法人 計算科学振興財団、ホスト「京」重点課題実施機関

後援

■ 開催日時

令和元年11月1日(金) 10:00～17:40

■ 開催場所

THE GRAND HALL(東京 品川)

JR/京浜急行品川駅 港南口徒歩5分

■ プログラム概要(予定)

- 基調講演
- パネルディスカッション
- 優秀成果受賞課題による成果発表・表彰
- 一般利用枠課題によるポスター展示
- 協賛、協力、後援機関によるポスター展示
- 産業利用相談会等、利用促進活動も実施

利用者に限らず、どなたでも参加可能です。
(事前にお申込みが必要です。)

参加のお申込みはHPCIポータルサイトから。

プリインストールされているアプリケーション(1)

インストール済

アプリケーション名(分類)	インストールマシン名
MODYLAS(古典MD)	東北大(LX 406Re-2)
NTChem(量子化学)	JCAHPC(Oakforest-PACS)
SMASH(量子化学)	東大(Reedbush-U)
OpenMX(第一原理計算)	東工大(TSUBAME3.0)
SALMON(第一原理計算)	名大(CX400)
HΦ(物性物理)	京大(XC40)
ABINIT-MP(量子化学)	阪大(OCTOPUS)
PHASE/0(第一原理計算)	九大(ITO-A,ITO-B)
GENESIS(古典MD)	
FrontFlow/blue(CAE)	名大(CX400)
FrontISTR(CAE)	九大(ITO-A,ITO-B)
	東工大(TSUBAME3.0)

プリインストールされているアプリケーション(2)

今年度インストール作業中

アプリケーション名(分類)	インストールマシン名
MODYLAS(古典MD)	北大(Grand Chariot)
NTChem(量子化学)	
SMASH(量子化学)	
OpenMX(第一原理計算)	
SALMON(第一原理計算)	
HΦ(物性物理)	
ABINIT-MP(量子化学)	北大(Grand Chariot)
PHASE/0(第一原理計算)	東北大(LX 406Re-2)
FrontFlow/blue(CAE)	JCAHPC(Oakforest-PACS)
FrontISTR(CAE)	東大(Reedbush-U)
	京大(XC40)
GENESIS(古典MD)	阪大(OCTOPUS)
	北大(Grand Chariot)
	東北大(LX 406Re-2)
	筑波大(Cygnus)
	JCAHPC(Oakforest-PACS)
	東大(Reedbush-U)
	京大(XC40)
	阪大(OCTOPUS)

今後、アプリのバージョンアップにも対応を検討中

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のページ

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「京」*1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*2。

*1 「京」は2019年8月16日に計算資源の共用を終了致しました。

*2 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。

■ 整備され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。

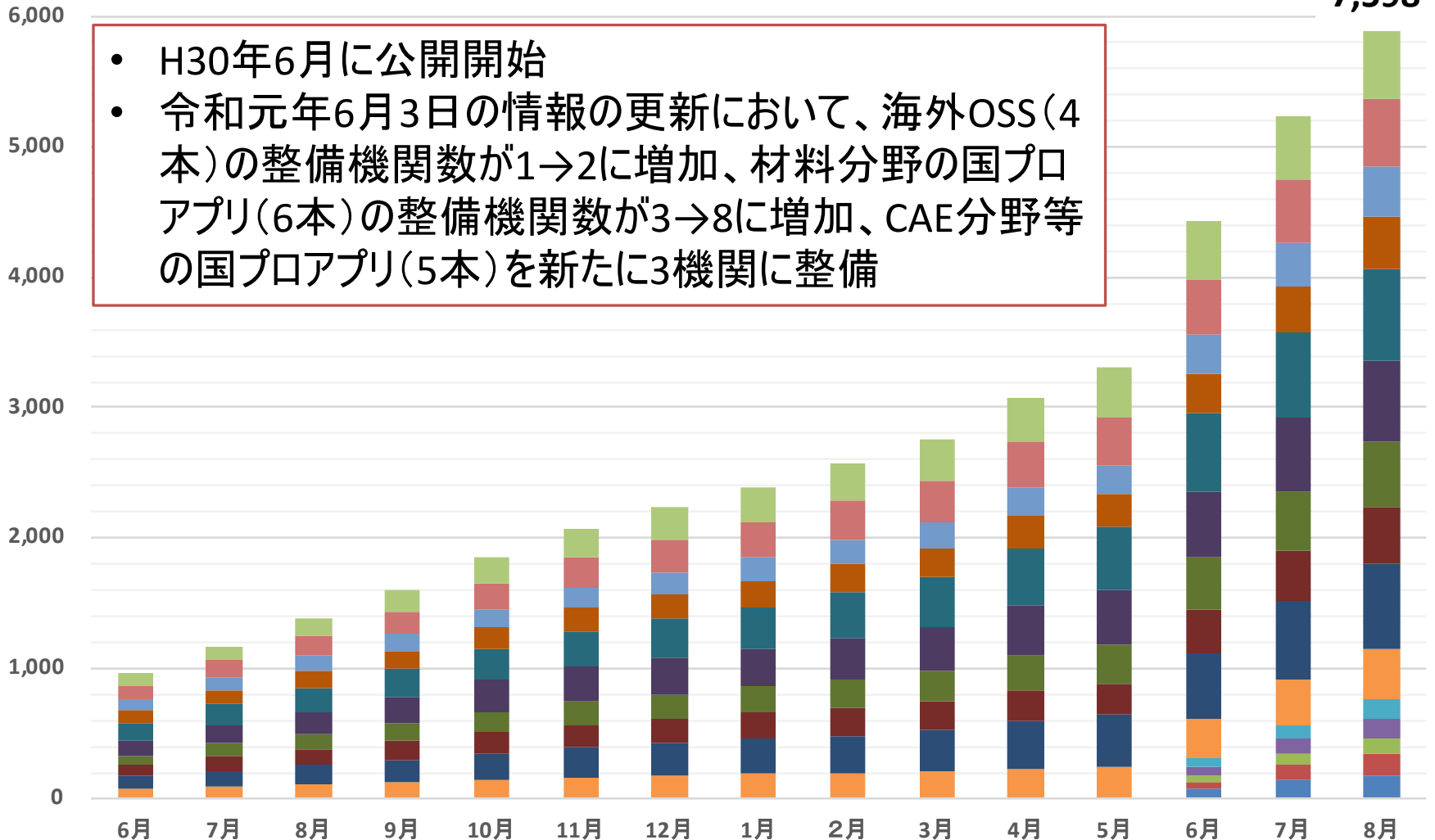
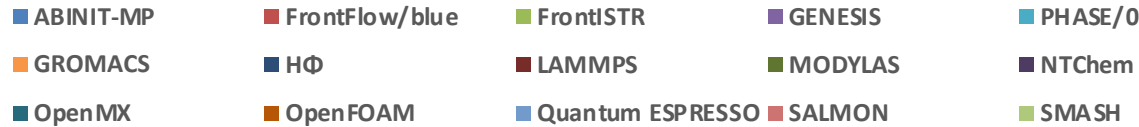
● 材料バイオ分野

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

● CAE分野

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

アプリのページの総アクセス数



HPCIセンターでの重点課題アプリのハンズオン講習会

開催日	アプリ名	会場
2019/10/16	HΦ	大阪大学
2019/11/25	PHASE/0	東京工業大学
2019/11/28	SALMON	東北大学
2019/12/2	OpenMX	京都大学
2019/12/3	FrontISTR	九州大学
2019/12/6	ABINIT-MP	名古屋大学
2020/1/30	ABINIT-MP	東京工業大学

HPCI 講習会・セミナー

検索

「共催する講習会・セミナー」

第8回材料系ワークショップ

～「富岳」時代の材料系シミュレーションの最前線～



第8回 材料系ワークショップ

参加費 無料

HPCI 利用
相談コーナー
あります

日時
2019年10月18日(金)
10:00~17:30 (受付9:30開始)

場所
東京・秋葉原 UDX NEXT-1

- 「富岳」時代の新しいスーパーコンピュータにおける材料系シミュレーションの活用に向けて、材料計算に対する量子コンピュータの活用の展望や、機械学習を用いた新しい計算手法の紹介
- 「富岳」の開発状況
- 新しいスーパーコンピュータにおける材料系シミュレーションのより良い利用環境を構築するために、情報交換、意見交換を行うパネルディスカッション

- 2016年2月に第1回を開催し、2019年10月18日で8回目の開催
- 企業や研究機関などの材料系分野の研究・開発者に、計算シミュレーションの有効性を知ってもらうために、材料系アプリケーションの使い方や研究活用事例、大規模計算を行うためのノウハウ、チューニング手法などの話題を取り上げている。

→ 主に企業の研究者をターゲットにし、実際に企業の参加者が多い。

- これまでの参加者数
全7回の合計618名（うち企業参加者416名）
毎回80名程度の参加者で、うち企業参加者は6, 7割程度

★第9回の企画案

- 2日間の開催
- 重点課題の次のPjにおける産官学連携、計算物質科学コミュニティのあり方
- 重点課題7、萌芽的課題の成果発表
- 「富岳」開発の進捗
など