内容に関する質問は
katagiri@cc.nagoya-u.ac.jp
まで

2024年10月2日（水）13:35-13:55
現地（名古屋大学情報基盤センター2F演習室）
とオンライン（Zoom）のハイブリッド開催

「不老」運用状況報告

名古屋大学情報基盤センター　片桐孝洋

名古屋大学
NAGOYA UNIVERSITY

名大情報基盤センターのスパコンのご紹介

スーパーコンピュータ「不老」の役割

1. 全国共同利用・共同研究拠点として学内外へ計算資源提供
   - **全国共同利用・共同研究拠点**として国が位置づけ
     - 全国の研究者の世界トップレベル研究を強力に支援

世界トップレベル研究の支援

HPCI (High Performance Computing Infrastructure) 利用者

国策スパコン利用支援

名大拠点利用者

JHPCN利用者

名大「不老」Type I システム（富岳型ノード）

スーパーコンピュータ「富岳」

簡便な移行支援

導入支援／高性能化／特殊処理／長時間実行

世界トップレベル研究成果創出

2. ものつくり企業支援（地域イノベーションコア形成）
   - **産業利用制度（公開、非公開）**
   - 計算機利用型講習会による並列処理・大規模計算普及（地域特有の中小企業支援）
3. 新しい計算需要に向けたサービス開拓
   - **データサイエンス（ビッグデータ）、AI基盤の提供による新サービスの開拓**
4. 指定国立大学として重要な役割
   - **数理・データ科学教育**
   - 人材育成・研究力強化・社会との連携

- **数理データ科学分野の人材育成**
- **AI技術基盤提供（大規模AI計算基盤、大規模ストレージ、サイバーフィジカル）**
- **技術コンサルティング・・・等による社会貢献**

NAGOYA UNIVERSITY

スーパーコンピュータ「不老」の特徴

- 以下の新しいスパコン利用法を提供しています:
  - ①Type Ⅰサブシステム(「富岳」型)による超並列処理
  - ②Type Ⅱサブシステム(GPUクラスタ)による大規模機械学習
  - ③ 数値計算 ＋ AI 処理
  - ④ ①～③のシームレスなデータ可視化
  - ⑤ ①～④で必要な大規模・堅牢なデータ蓄積

- ④に必要なType Ⅲサブシステム(大規模共有メモリ(48TB))、精細／遠隔可視化装置が、伝統的に名古屋大学は充実
- ⑤のコールドストレージ(100年保存可能な光ディスク)搭載スパコンは業界初

名古屋大学情報基盤センターのスパコン利用の特徴

- **計画書提出なし／論文出版等の義務なく利用可能**
  - 名古屋大学拠点利用の場合（HPCI、JHPCN利用を除く）
  - 年間随時募集（ただし、提供資源がなくなった場合を除く）
  - アカデミックの方
    - 研究目的（平和利用）、予算確保（運営費、科研費等）が明確であれば、必ず利用承認されます
      - 研究目的の記載は数行
    - 成果報告書は１ページ
      - 事実上、発表・出版論文などの情報の登録をお願いするのみ
    - 申込書提出後、１週間程度で承認、アカウント発行
  - 民間利用の方
    - 課題の計画書提出が必要
    - 審査委員会で審議の上で承認（１～２週間程度）。その後、アカウント発行。
    - 報告書はアンケート程度

スーパーコンピュータ「富岳」との連携

1. 同型計算機・同一ソフトウェアスタック
   - 「不老」Type I サブシステムはCPUが「富岳」と同型
   - OS・コンパイラ等のソフトウェアスタックも同一と想定
     - ☞「不老」のほうがより進んだバージョンが提供される可能性があり
2. 国策ソフトウェアの「不老」Type I サブシステムのプリインストール・講習会実施
   - 国費開発ソフトウェアで「富岳」で動作するソフトウェアのいくつかを、一般財団法人　高度情報科学技術研究機構（RIST）の協力のもと、「不老」Type I で提供、ハンズオン講習会も実施
     - ☞講習会予定をご覧ください
3. 「富岳」向けチューニングと「富岳」への移行支援
   - コンサルティング・教員との共同研究で「富岳」向けと想定されるコードチューニング（☞「不老」Type I 向けと等価）を支援します

名古屋大学情報基盤センターのスパコンの歴史

スーパーコンピュータ「不老」導入

96 00 05 09 13 15 20 24

Fujitsu M-1800 → Fujitsu GP7000F/90 → Fujitsu HX600, M9000 → Fujitsu CX400 → CX400

メインフレーム系

Fujitsu HPC2500

スカラー型スパコン

アプリケーションサーバ

Fujitsu VPP500 → Fujitsu VPP5000 → Fujitsu FX1 → Fujitsu FX10 → FX100

ベクトル型スパコン

スーパーコンピュータ

複合型「不老」

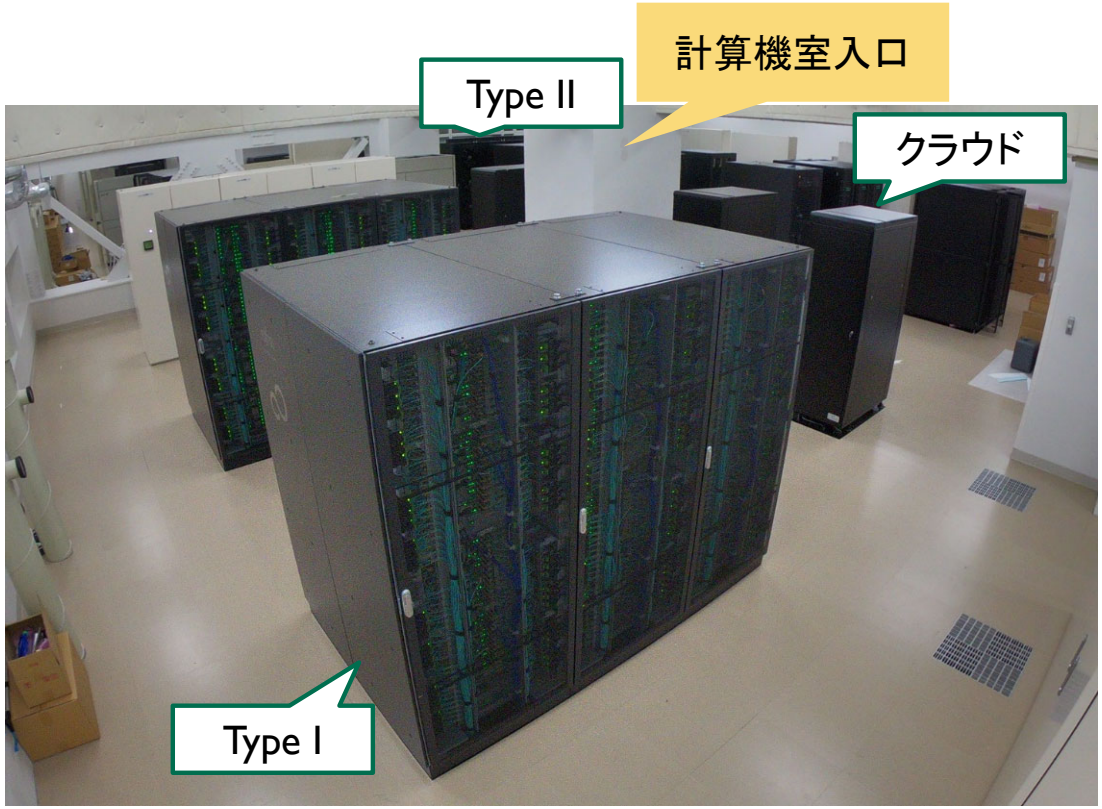
- Fujitsu CX2570 GPUサーバ
- Fujitsu FX1000 超並列
- HPE Super Dome Flex 大規模共有メモリ
- HPE ProLiant DL560 クラウド

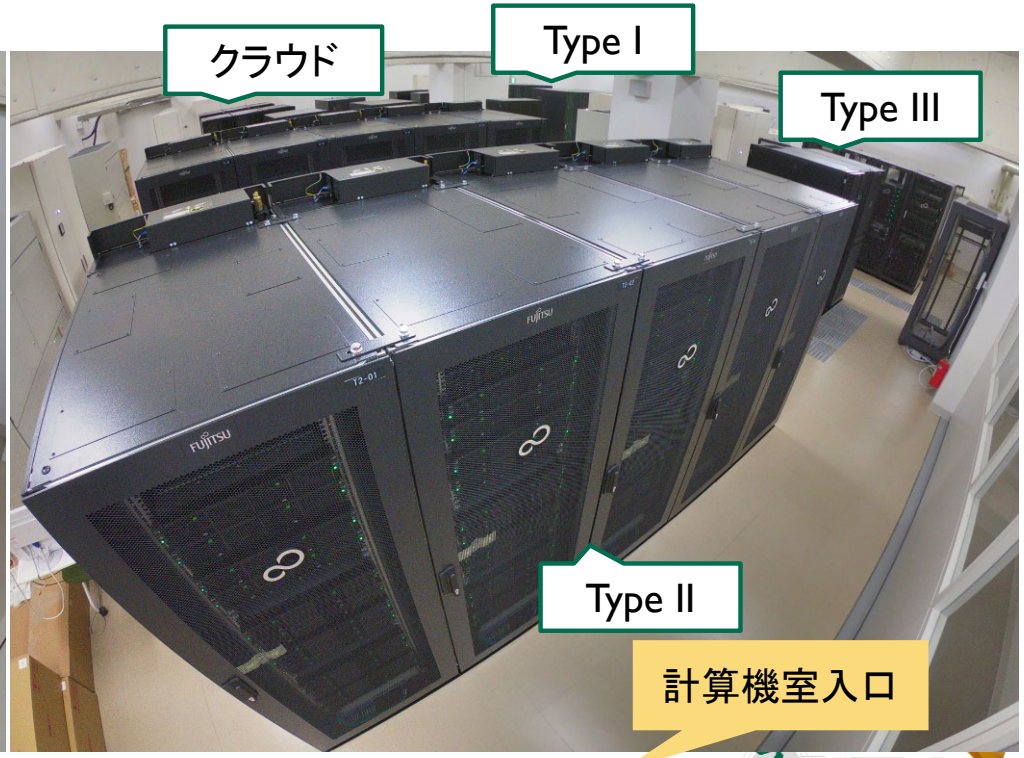
→ 不老NEXTへ

- これまで約5年間隔でリプレイス(1年延長で約6年運用)
- 「不老」も6年弱(5年9ヶ月)稼働を予定
  2024年4月～2025年3月：運用延長、2026年7月：「不老」NEXT稼働予定)

設置状況

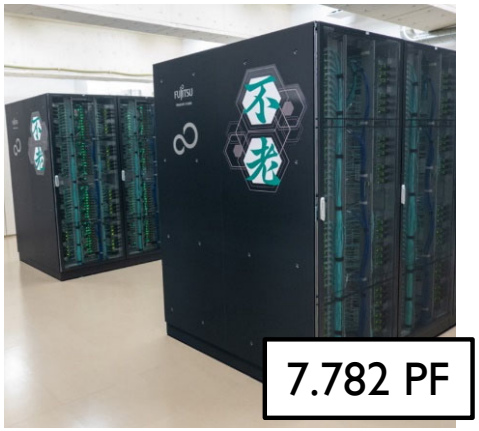
- 2020年7月1日、スーパーコンピュータ「不老」が稼働開始
- 名古屋大学 情報基盤センター 本館地下1階の様子





スーパーコンピュータ「不老」
主な構成要素

Type I, II, III, クラウドの合計で15.886PFLOPS
（旧システムの約4倍）



Type Iサブシステム
FUJITSU Supercomputer FX1000
「富岳」型

Type IIサブシステム
FUJITSU Server PRIMERGY CX2570 M5
GPUスパコン

Type IIIサブシステム
HPE Superdome Flex
大容量メモリ・可視化

クラウドシステム
HPE ProLiant DL560
バッチ＆インタラクティブ

ホットストレージ
FUJITSU PRIMGERY RX2540 M5
FUJITSU ETERNUS AF250 S2
DDN SFA18KE
DDN SS9012

コールドストレージ
SONY PetaSite 拡張型 Library

性能諸元（主要サブシステム群）

		Type I	Type II	Type III	クラウド
ノードあたり	CPU	A64FX ×1 (Armv8.2-A + SVE) 48+2コア、2.2GHz	Xeon Gold 6230×2 (Cascade Lake) 20コア、2.10-3.90 GHz	Xeon Platinum 8280M×16 (Cascade Lake) 28コア、2.70-4.00 GHz	Xeon Gold 6230×4 (Cascade Lake) 20コア、2.10-3.90 GHz
	メインメモリ	HBM2, 32GB	DDR4, 384GB	DDR4, 24TB	DDR4, 384GB
	GPU	-	Tesla V100×4 (Volta) HBM2, 32GB	Quadro RTX6000×4 (Turing) GDDR6, 24GB	-
	理論性能	3.3792 TFLOPS(DP) 1,024 GB/s	・CPU 1.344 TFLOPS(DP)×2 140.784 GB/s×2 ・GPU 7.8 TFLOPS(DP)×4 900 GB/s×4	・CPU 2.4192 TFLOPS(DP)×16 140.784 GB/s×16	1.344 TFLOPS(DP)×4 140.784 GB/s×4
ノード数		2,304	221	2	100
ノード間接続		TofuインターコネクトD	InfiniBand EDR ×2	InfiniBand EDR	InfiniBand EDR
総理論性能		7.782 PFLOPS(DP) 2.359 PB/s	7.489 PFLOPS(DP) 857.8 TB/s	77.414 TFLOPS(DP) 2.253 TB/s	537.6 TFLOPS(DP) 56.314 TB/s
冷却方式		水冷	水冷	空冷	空冷

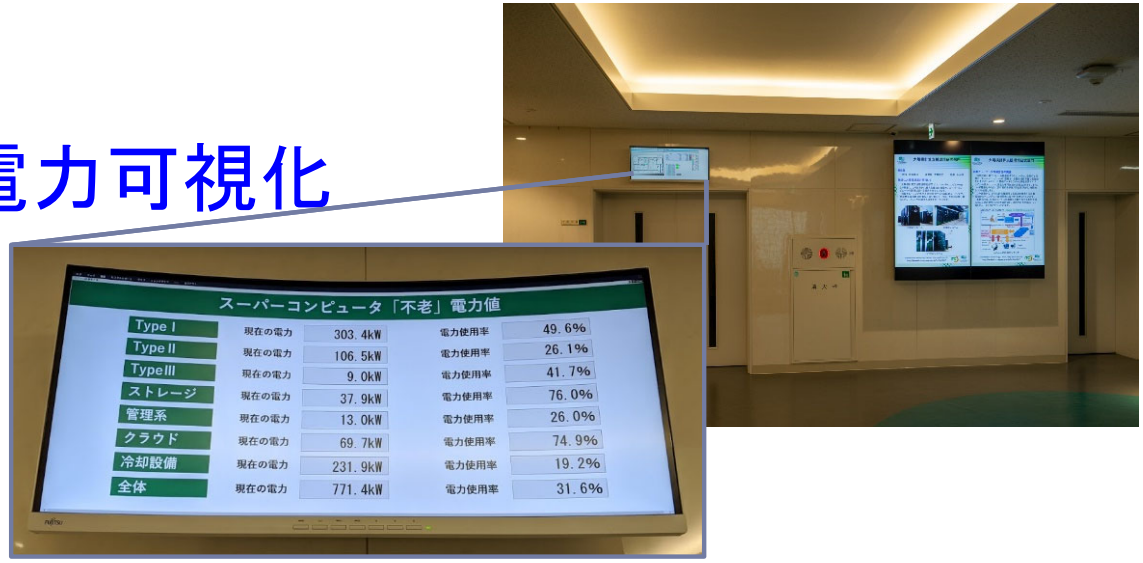
消費電力・省電力対策

最大消費電力

サブシステム名	消費電力
Typeⅰサブシステム	628.1kVA
Typeⅱサブシステム	393.5kVA
Typeⅲサブシステム	21.6kVA
クラウドシステム	93.0kVA
ストレージ	49.9kVA
フロントエンド	19.6kVA
運用管理システム他	52.3kVA
冷却設備	641.9kVA
合　計	1,899.9kVA

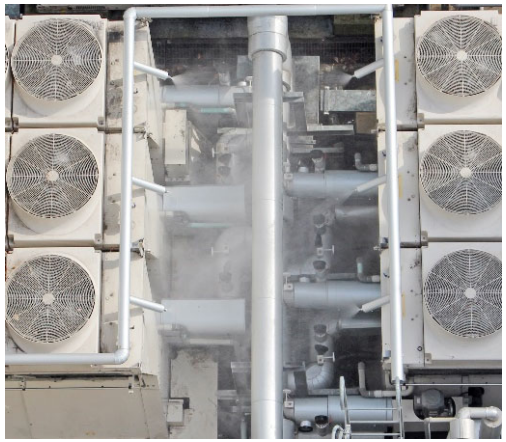
- 電力使用状況に応じた自動縮退運転の機能あり

電力可視化



湧水を用いた冷却

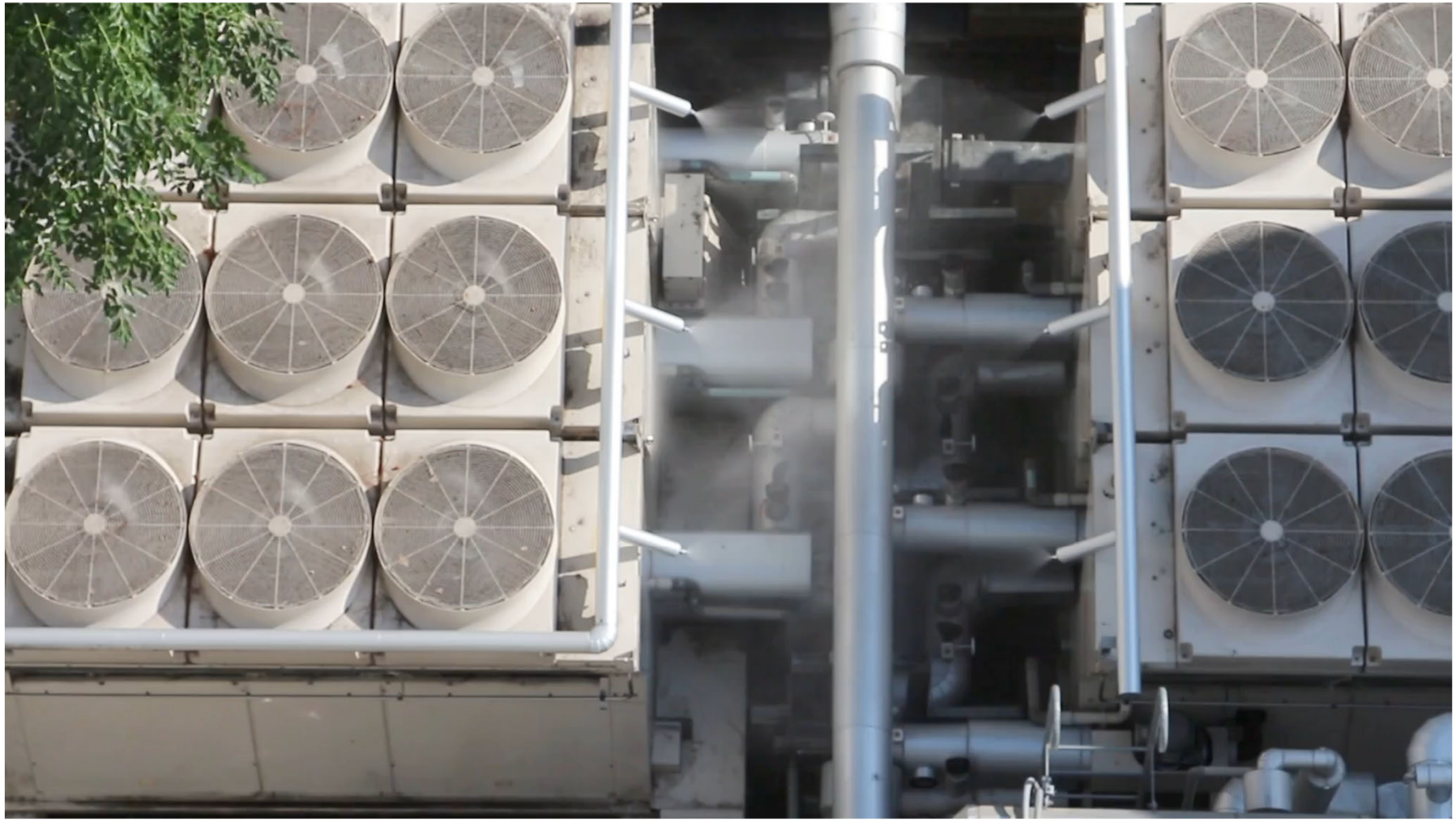
- 地下の湧水を活用したら総合評価時加点
- 屋外チラーに散水して冷却



湧水による冷却システム

- 情報基盤センターの地下は夏季でも18℃程度の湧き水が毎分30L程度湧く
- この湧き水は、地下からポンプで吸い上げて雨水扱いで捨てていた
- 今回の仕様で、湧き水を冷熱源として使用する場合は加点
  - 冷却水としての利用許可・水質検査済み

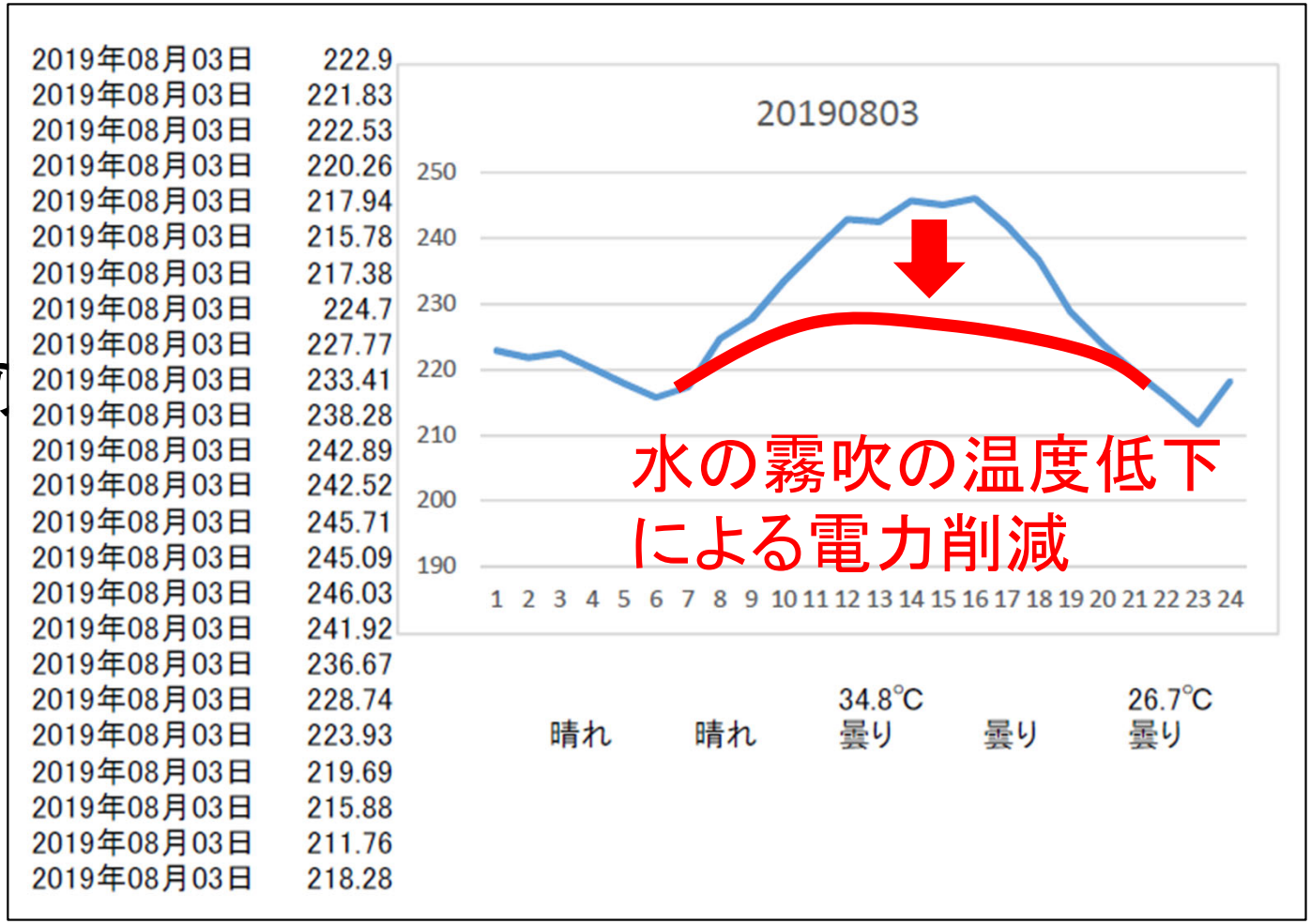
湧水による冷却システム



湧水による冷却システム

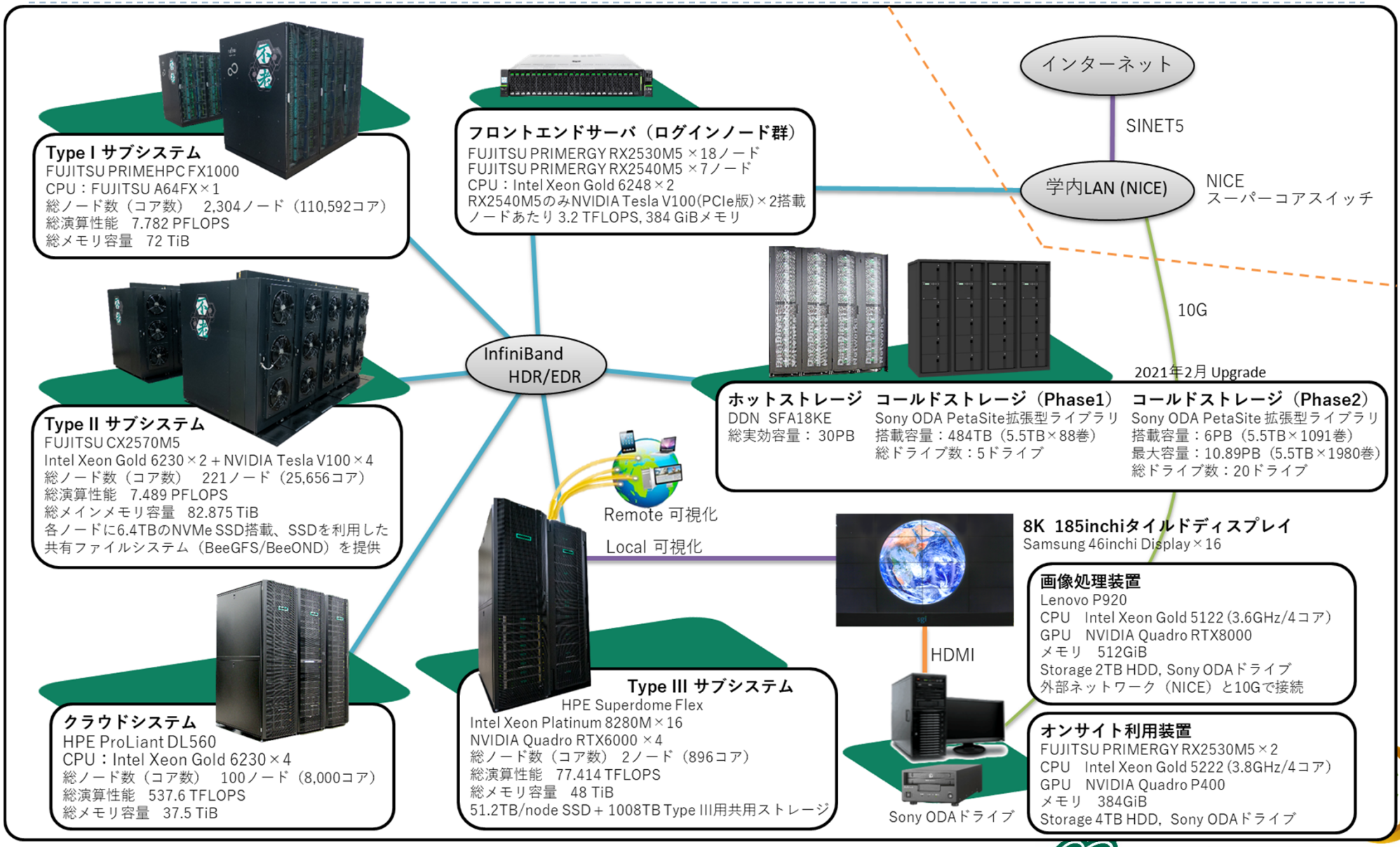
- 気温の高い4月から11月の間で利用
- 夏季の1日（2019年8月3日）の（旧）FX100システムの水冷チラーの電気使用量(KW)

2019年08月03日	222.9
2019年08月03日	221.83
2019年08月03日	222.53
2019年08月03日	220.26
2019年08月03日	217.94
2019年08月03日	215.78
2019年08月03日	217.38
2019年08月03日	224.7
2019年08月03日	227.77
2019年08月03日	233.41
2019年08月03日	238.28
2019年08月03日	242.89
2019年08月03日	242.52
2019年08月03日	245.71
2019年08月03日	245.09
2019年08月03日	246.03
2019年08月03日	241.92
2019年08月03日	236.67
2019年08月03日	228.74
2019年08月03日	223.93
2019年08月03日	219.69
2019年08月03日	215.88
2019年08月03日	211.76
2019年08月03日	218.28



年間数百万円程度の電気代削減を予想

全体システム構成


インターネット
SINET5
学内LAN (NICE)
NICE
スーパーコアスイッチ
10G
2021年2月 Upgrade
InfiniBand
HDR/EDR
Type I サブシステム
FUJITSU PRIMEHPC FX1000
CPU：FUJITSU A64FX×1
総ノード数（コア数） 2,304ノード（110,592コア）
総演算性能 7.782 PFLOPS
総メモリ容量 72 TiB
フロントエンドサーバ（ログインノード群）
FUJITSU PRIMERGY RX2530M5 ×18ノード
FUJITSU PRIMERGY RX2540M5 ×7ノード
CPU：Intel Xeon Gold 6248×2
RX2540M5のみNVIDIA Tesla V100(PCIe版)×2搭載
ノードあたり 3.2 TFLOPS, 384 GiBメモリ
Type II サブシステム
FUJITSU CX2570M5
Intel Xeon Gold 6230×2＋NVIDIA Tesla V100×4
総ノード数（コア数） 221ノード（25,656コア）
総演算性能 7.489 PFLOPS
総メインメモリ容量 82.875 TiB
各ノードに6.4TBのNVMe SSD搭載、SSDを利用した
共有ファイルシステム（BeeGFS/BeeOND）を提供
ホットストレージ
DDN SFA18KE
総実効容量： 30PB
コールドストレージ（Phase1）
Sony ODA PetaSite拡張型ライブラリ
搭載容量：484TB（5.5TB×88巻）
総ドライブ数：5ドライブ
コールドストレージ（Phase2）
Sony ODA PetaSite 拡張型ライブラリ
搭載容量：6PB（5.5TB×1091巻）
最大容量：10.89PB（5.5TB×1980巻）
総ドライブ数：20ドライブ
Remote 可視化
Local 可視化
8K 185inchiタイルドディスプレイ
Samsung 46inchi Display×16
画像処理装置
Lenovo P920
CPU Intel Xeon Gold 5122 (3.6GHz/4コア)
GPU NVIDIA Quadro RTX8000
メモリ 512GiB
Storage 2TB HDD, Sony ODAドライブ
外部ネットワーク（NICE）と10Gで接続
HDMI
Type III サブシステム
HPE Superdome Flex
Intel Xeon Platinum 8280M×16
NVIDIA Quadro RTX6000 ×4
総ノード数（コア数） 2ノード（896コア）
総演算性能 77.414 TFLOPS
総メモリ容量 48 TiB
51.2TB/node SSD＋1008TB Type III用共用ストレージ
クラウドシステム
HPE ProLiant DL560
CPU：Intel Xeon Gold 6230×4
総ノード数（コア数） 100ノード（8,000コア）
総演算性能 537.6 TFLOPS
総メモリ容量 37.5 TiB
オンサイト利用装置
FUJITSU PRIMERGY RX2530M5×2
CPU Intel Xeon Gold 5222 (3.8GHz/4コア)
GPU NVIDIA Quadro P400
メモリ 384GiB
Storage 4TB HDD, Sony ODAドライブ
Sony ODAドライブ

高精細可視化システム

Type IIIサブシステム（HPE Superdome Flex）

77.4TFLOPS/48TiB MEM

Intel Xeon Platinum 8280M(2.7GHz,28Core)×16CPU×2　24TiB×2
NVIDIA Quadro RTX6000×4×2
HDD:実効容量500TB(RAID6)×2, NVMe:51.2TB×2

Quadro RTX6000

光ケーブル

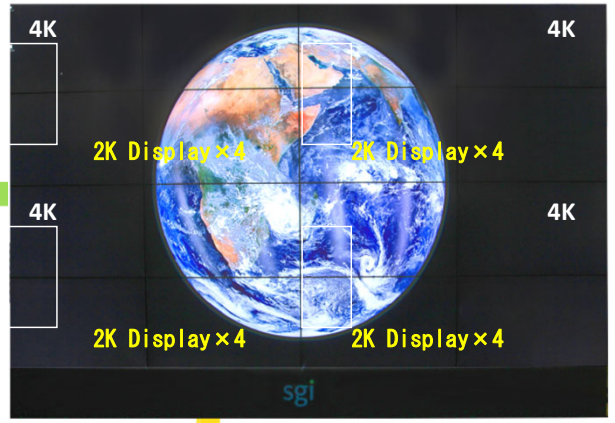
SINET

リモート
可視化

大規模共有メモリ:
24TiB ×2ノード

8Kタイルドディスプレイ

185inchi　8K高精細大画面タイルドディスプレイ
（総解像度：7680×4320）
Samsung 46inchi Display×16



HDMI

画像処理装置（Windows可視化サーバ）

Intel Xeon Gold 5122
　　3.6GHz 4 Cores, 512 GiB MEM
NVIDIA Quadro RTX8000
SATA SSD 2TB
光Disk 5.5TBドライブ　ODS-D380U

スーパーコンピュータ共有ストレージ

ホットストレージ
DDN　SFA18KE
総実行容量：30PB

コールドストレージ
Sony ODA PetaSite 拡張型ライブラリ
搭載容量：6PB（5.5TB×1091巻）
最大容量：10.89PB（5.5TB×1980巻）

名古屋大学
NAGOYA UNIVERSITY

課金体系

スーパーコンピュータ「不老」課金体系 (1/8)

- 前払い定額制(プリペイド形式)
  - 利用すべき資源の料金を前払いして利用
  - 利用ポイントに変換して利用
- 単年度会計(4月1日～翌年3月31日)
  - 年度途中で申込み可能だが、利用終了は年度末
  - 年度末に余った利用ポイントは没収
- 一度の申込みで全てのサブシステムと可視化システムを利用可能
  - Type I、Type II、Type III、クラウド　全て共通

スーパーコンピュータ「不老」課金体系 (2/8)

- アカデミックユーザ（大学、研究機関など所属）向けプラン
  - 基本負担金
    - 利用登録1名につき年額10,000円（登録料）
    - **6,500**利用ポイントを付加
      （他ユーザへの譲渡不可）
  - 追加負担金
    - 1,000円単位で追加が可能
    - 50万円未満：　1円あたり**0.65** ポイント付加
    - 50万円以上：　1円あたり**0.8125**ポイント付加

スーパーコンピュータ「不老」課金体系 (3/8)

- TypeIサブシステム(「富岳」型ノード)消費ポイント
  - 計算課金:利用ノード数×経過時間[s] × 0.0056
    - 基本負担金1万円＝0.65万ポイント付加で利用可能な目安
      - 1ノードを　約13．7日
      - 4ノードを　約　3．2日
    - 10万円(基本利用料金1万円、追加料金9万円)＝6.5万ポイント付加で利用可能な目安
      - 1ノードを　約135日
      - 4ノードを　約　34日
      - 8ノードを　約　17日
    - 1ノードの年間利用額:約25万8500円
      - 保守日等を考慮し年間350日利用できると仮定、以下同様

スーパーコンピュータ「不老」課金体系 (4/8)

- TypeIIサブシステム（GPUノード）消費ポイント
  - 計算課金：利用GPU数×経過時間[s] × 0.007
    - 基本負担金1万円
      ＝0．65万ポイント付加で利用可能な目安
      - 1ノード（1GPU）を　約11．1日
      - 1ノード（4GPU）を　約　2．6日
    - 10万円（基本利用料金1万円、追加料金9万円）
      ＝6．5万ポイント付加で利用可能な目安
      - 1ノード（1GPU）を　約108日
      - 1ノード（4GPU）を　約　27日
      - 4ノード（16GPU）を　約　7日
    - 1ノード（4GPU）の年間利用額：約128万5000円

スーパーコンピュータ「不老」課金体系 (5/8)

- Type III：1ソケット当たり28コア
- クラウド：1ソケット当たり20コア

- TypeIIIサブシステム（大規模共有メモリノード）、およびクラウドシステムの消費ポイント
  - 計算課金：利用ソケット数×経過時間[s] × 0.002
    - 基本負担金1万円
      ＝0．65万ポイント付加で利用可能な目安
      - 1ソケットを　約37．9日
      - 4ソケットを　約　9．1日
    - 10万円（基本利用料金1万円、追加料金9万円）
      ＝6．5万ポイント付加で利用可能な目安
      - 　4ソケットを　約95日
      - 32ソケットを　約12日
    - 2ソケットの年間利用額：約18万5000円

スーパーコンピュータ「不老」課金体系 (6/8)

- 会話型利用:
  ログインノード上での処理の消費ポイント
  - 課金:無料
    - 主にインストール作業での利用想定です。
      計算利用はご遠慮ください。

  - Type IIIサブシステム(会話型処理)の課金は
    ありますのでご注意ください。
  - 各計算ノードの備えるinteractiveジョブクラスは
    バッチジョブ扱いの課金です
    (fx-interactive, cx-interactive, cl-interactive)

スーパーコンピュータ「不老」 課金体系 (7/8)

- ホットストレージ
  - ファイル課金
    - 1TB 以下の場合(Home + Large) : 徴収しない
    - ファイルの使用容量が1TB を超えた場合 : 超えた容量について、1GB につき 1日当たり 0.01 ポイント
    - 例) 2TB(2000GB)利用 : 1000GBが課金対象
      ⇒ 10ポイント/日　⇒300円/30日、3，500円/350日
      （保守などで停止する日については徴収しない）

※128TBを超える場合は、全体容量を考慮して、削除依頼をさせていただくことがあります【予定】。
※128TBを超える容量が必要な場合は、事前に相談ください。

スーパーコンピュータ「不老」
課金体系 (8/8)

- コールドストレージ
  - ファイル課金
    - **1口：50TB**
      - 1回だけ書き込める（追記可能）の光ディスク×10枚（1枚約5TB）
    - ファイル負担経費（初回利用時のみ必要）：
      1口　190,000円
    - ファイル管理経費（毎年必要、基本負担金とは別）：
      1口　10,000円

●事前納入の光ディスク６PB売り切り後は、ユーザによる持ち込みのみなります（上限１０PBまで）。
●管理料１万円／年と格安です！
すでに、３PB程度が売れています！
●ご購入はお早めに！

※ユーザの利用終了時、もしくは、「不老」運用終了時に、光ディスクを持ち帰りいただけます。

スーパーコンピュータ「不老」新サービス：ノード準占有利用

- ノード準占有利用
  - 1時間以内のジョブ実行開始を保証
  - バッチ利用のみ
- 1ノード、1ヶ月間の利用負担金
  - Type IIサブシステム：
    330,000円（通常価格の約2.8倍）
  - クラウドシステム：
    95,000円（通常価格の約2.8倍）

提供資源量が無くなり次第、受付終了
→お早めに

スーパーコンピュータ「不老」新サービス：クラウドノード予約利用

- クラウドノード予約利用
  - 専用の予約システム「UNCAI」（Webブラウザで操作）でノードを予約して利用する
- 利用料金
  - 計算課金：利用コア数×経過時間[s] × 0.0001
    （ソケット当たりコア数を考えればバッチ実行と同等）
    - 1ソケット当たり20コア、10コア（0.5ソケット）から利用可能
    - 利用可能なメモリ容量もコア数に比例
    - 基本負担金1万円でXeon Gold 20コア1ソケットを**約38日間使用可能**

スーパーコンピュータ「不老」新サービス：グループ利用

売れています！

- グループ利用
  - 1口10人まで、10万円で **65,000**ポイント付与
  - 登録料なし
  - 個人利用（個別に1万円×10人が個別に基本負担金を払う）との違い
    - 65,000ポイントを10人で共有利用できます
    - 個人利用では、購入した6,500ポイントを他者と共有できません

お試し利用、リテラシー利用

- トライアルユース
  - ソフトウェアの動作確認などを、無料で行える制度です。
  - お1人様1回限りで申請できます。
  - 企業においては、同一の課で1回のみです。
  - アカデミックユーザ（無審査）、企業ユーザ（書類審査）
  - 10,000ポイント付加　（値上前と同じ）
  - 有効期限1ヶ月
- リテラシー利用（アカデミックユーザのみ）
  - 名大学内外の学部・大学院等の講義や演習で利用いただける制度です。
  - 利用登録25 件につき10,000 円、50,000ポイント付与（値上前と同じ）
  - 有効期限：上限6ヶ月（講義・演習実施期間に依存）

スーパーコンピュータ「不老」民間利用制度（産業利用）

- 書類での審査があります。追加負担金も同額です。
- 公開型
  - 10アカウントまで20万円
  - アカデミック利用の料金の2倍（20万円当たり65,000ポイント）
  - 企業名、課題名、報告書をWebで公開（延期制度あり）
- 非公開型
  - 10アカウントまで40万円
  - アカデミック利用の料金の4倍（40万円当たり65,000ポイント）
  - 外部に情報は非公開（ただし内部会議では情報が出ます）

申込み金額に応じたポイント優遇はございません。
詳しくは、産業利用のパンフレットをご参照ください。

優先ジョブクラス（アカデミック・民間）

- TypeI、TypeII、クラウドの各サブシステム
  - ポイントを通常の2倍消費することで利用可能なジョブクラス
  - 専用のキューにジョブを投げることで利用
  - 通常のジョブクラスが混んでいるときでも早く実行したい、
    というユーザの利用を想定

  - （優先ジョブクラスも混んでしまったらすいません）

可視化設備

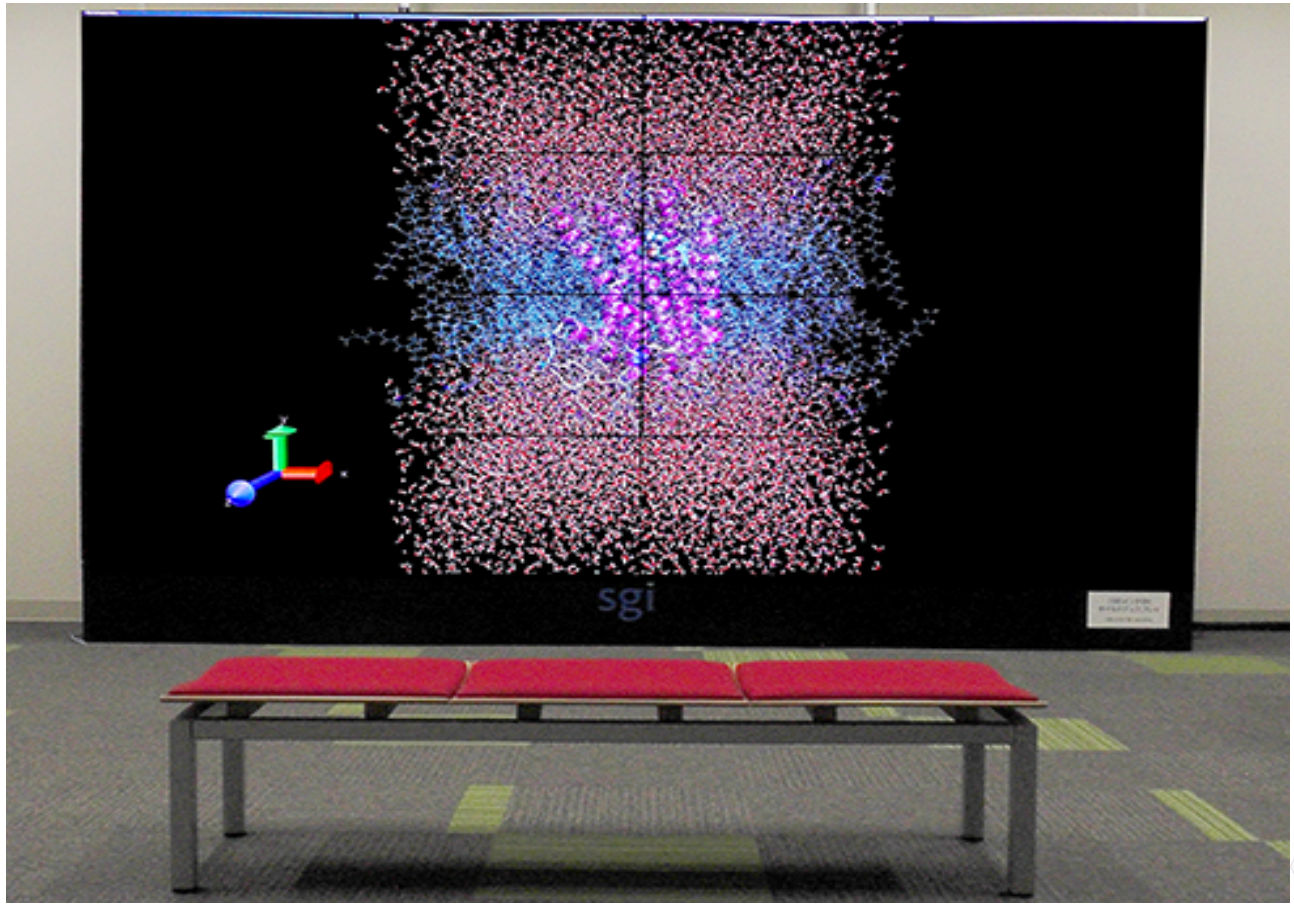
- 情報基盤センター可視化室（本館1階）
  - 可視化室の利用は予約制となります（無料）

- 8K 185型タイルドディスプレイ
- 全天周映像視聴システム
- 円偏光立体視システム　など

可視化設備

- 情報基盤センター可視化室（本館1階）
  - 可視化室の利用は予約制となります（無料）

8K 185型
タイルド
ディスプレイ



利用者支援室（２部屋）

- 情報基盤センター利用者支援室（本館3階）
  - 利用者支援室の利用は予約制となります（無料）

スーパーコンピュータ「不老」講習会等 開催情報（2024年10月～）

2024年度「不老」利用型講習会 開催予定（オンライン開催）

2024年

- 10月2日：「不老」ユーザ会（ハイブリッド）
- 10月4日：数値計算ライブラリ
- **(新)10月18日13:00-：CUDA-Qハンズオン講習会**

- 2024年11月以降も、多数開催予定
- 最新状況は以下のHPをご覧ください
  https://www2.itc.nagoya-u.ac.jp/cgi-bin/kousyu/csview2.cgi

スーパーコンピュータ「不老」アプリケーション

センター独自開発ソフトウェア

(名大ITC独自開発)
3Dデータ加工ツール

対応３DデータFormat:
3ds, stl, ply, wrl, dxf, dae, xyz, x3d

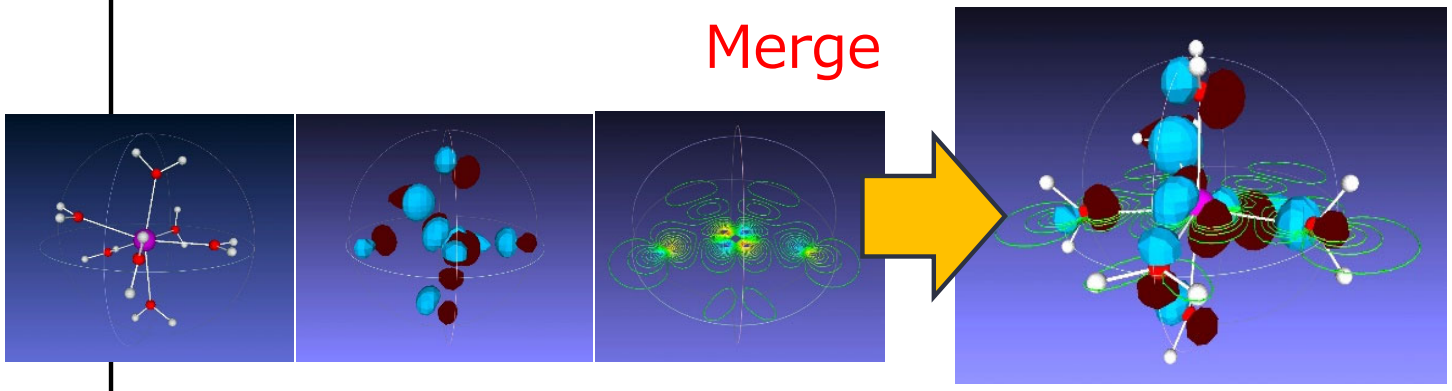
１）3Dデータの表示
meshlab@ in
【使用例】
meshlab@ abc.ply

2）データフォーマット変換
3dconv in out
【使用例】
3dconv abc.obj abc.ply

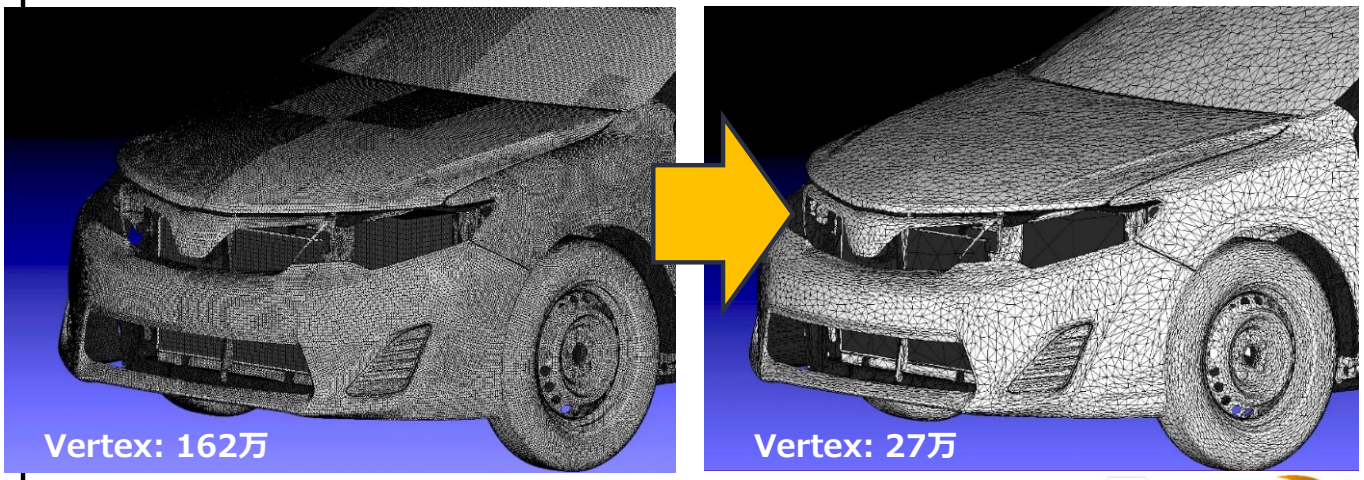
3）マージ処理
3dmerge in1 in2 out
【使用例】
3dmerge ball.ply stick.ply ballstick.ply

4）Surfaceメッシュ削減
3dmesh in out [faces_number]
… 省略値:200
【使用例】
3dmesh abc.x3d abc.ply 100

Merge



Surface Reduction

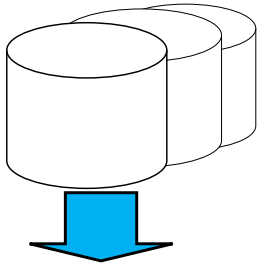


名古屋大学 NAGOYA UNIVERSITY

(名大ITC独自開発)

計算化学データの立体構造の可視化・解析システム

計算から可視化まで、すべて
スパコン上で実行、大規模データ
対応、企業利用可



X線結晶構造解析、電子顕微鏡解析、NMR
コンピュータ・シミュレーション（構造、トラジェクトリデータ等）

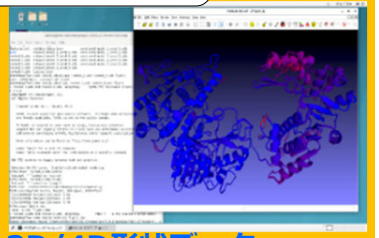
AlphaFold2, AMBER、VASP、Gaussian、GENESIS GAMESS、GROMACS、NAMD、LAMMPS等

スーパーコンピュータ

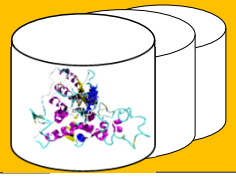
- AVS Express
- Babel
- VMD
- PyMol
- MeshLab

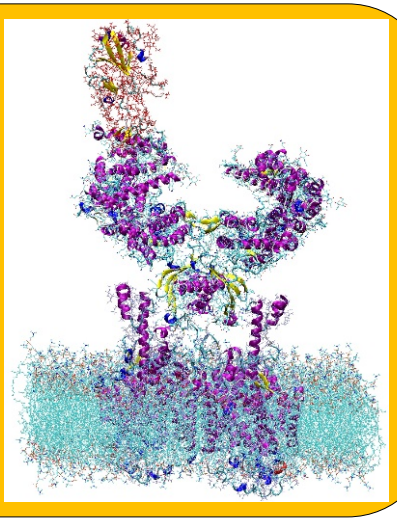
呼び出し

1) ジョブ投入支援
2) プリポスト処理
   - 操作の自動化
   - インタラクティブ実行 / バッチ実行
   - リモート可視化 / ローカル可視化
   - 可視化結果の保存　/　閲覧
3) 分析支援
   - RMSD計算,　重ね合わせ表示
   - マルチビューを使った比較
4) 分子データフォーマット変換



3D/4D形状データ





リモート可視化
（データ転送不要）

インターネット

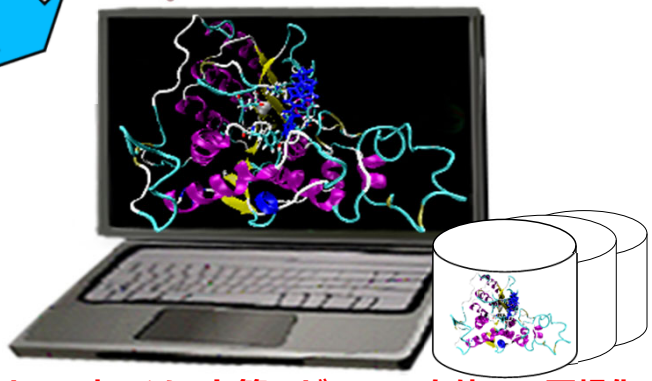
リモートDesktopツールを使って可視化

多彩な表示装置に対応

高精細大画面・大画面立体視等

ローカル可視化
（描画データを転送）

インターネット

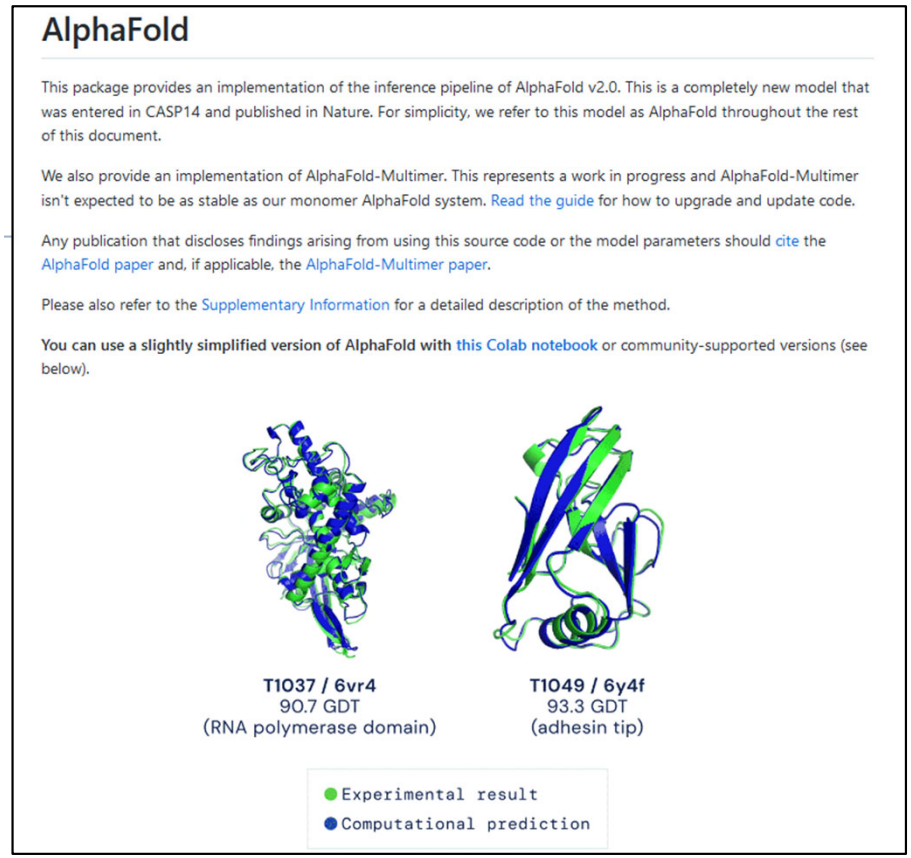


フリーの表示ソフト等のビューワを使って可視化

OSS活用事例

- タンパク質構造予測ソフト **AlphaFold2** を TypeⅡ サブシステム上で簡単に利用できるように整備 (2022年2月2日)

https://icts.nagoya-u.ac.jp/ja/sc/news/maintenance/2022-01-28-alphafold.html



(source: https://github.com/deepmind/alphafold)

- AlphaFoldの利用規約が更新され民間利用のユーザも利用可能
- 分散ノードのSSDを利用可能とするNVMESHにデータベース配置

⇒10時間以上かかるHHblits処理が10分に短縮

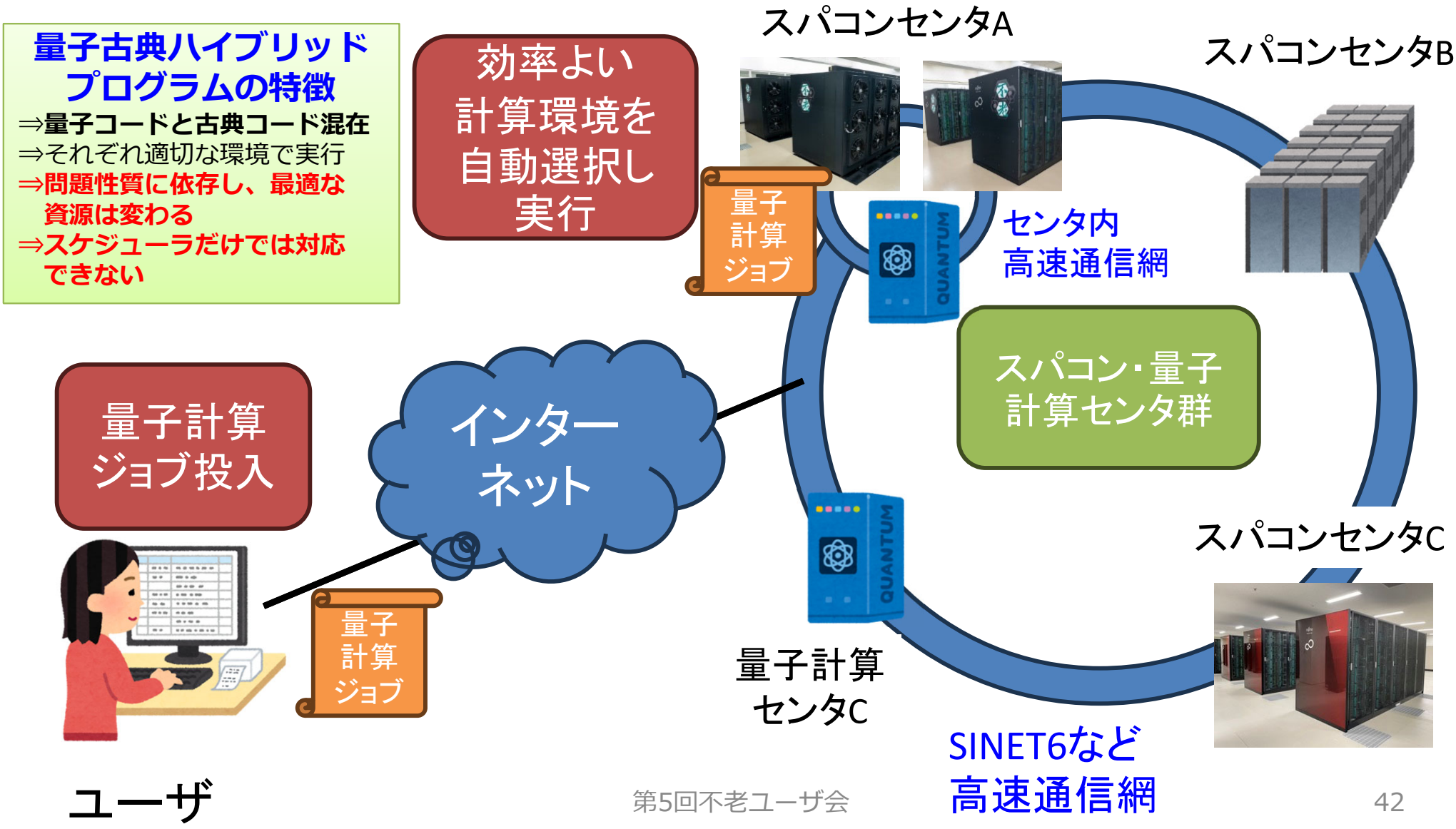
量子古典ハイブリット計算環境とスーパーコンピュータ

HPC-Centric Quantum Computing

- FTQC実用化までは、HPC技術中核とし量子研究の支援をする **HPC-Centric Quantum Computing** を行う

Source: T. Katagiri, HQCC-AT: An Application Programming Interface for Hybrid Quantum-Classical Computing with Auto-tuning Facility, 7th September 2024. DOI: 10.13140/RG.2.2.18404.39043

量子古典ハイブリッドプログラムの特徴
⇒量子コードと古典コード混在
⇒それぞれ適切な環境で実行
⇒問題性質に依存し、最適な資源は変わる
⇒スケジューラだけでは対応できない



AT技術による量子・古典計算環境

● 将来実現するFTQCへのシームレスな移行を支援

古典計算機

古典アルゴリズム

GPU並列　　マルチコア並列

スーパーコンピュータ

アニーラ型（疑似量子）

- 日立CMOSアニーリングマシン
- 富士通デジタルアニーラ
- NEC Vector Annealing

疑似量子コンピュータ（クラウド）

全自動で
ジョブ（プログラム）
が移動

自動チューニング

問題規模・特性等
に応じ
適する環境を
自動選択

量子計算機（実機）

回路型

NISQ

アニーラ型

D-waveほか

量子回路シミュレータ

回路型
（シミュレータ）

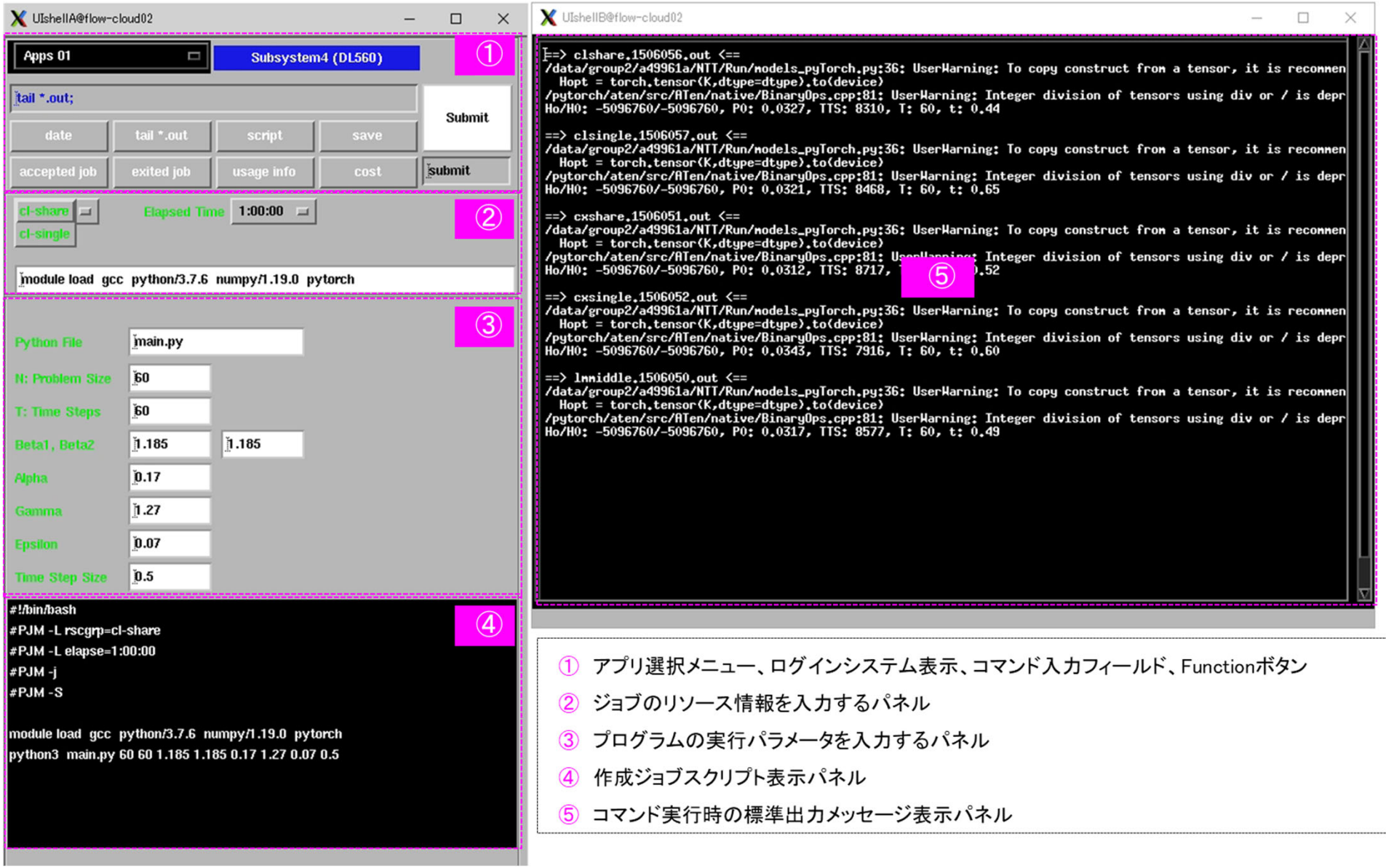
GPU並列

スーパーコンピュータ

(名大ITC独自開発)

コヒーレントイジングマシン（CIM）用GUI（概要）

※光量子コンピュータによるイジングマシン。NTT Researchとの共同研究



① アプリ選択メニュー、ログインシステム表示、コマンド入力フィールド、Functionボタン

② ジョブのリソース情報を入力するパネル

③ プログラムの実行パラメータを入力するパネル

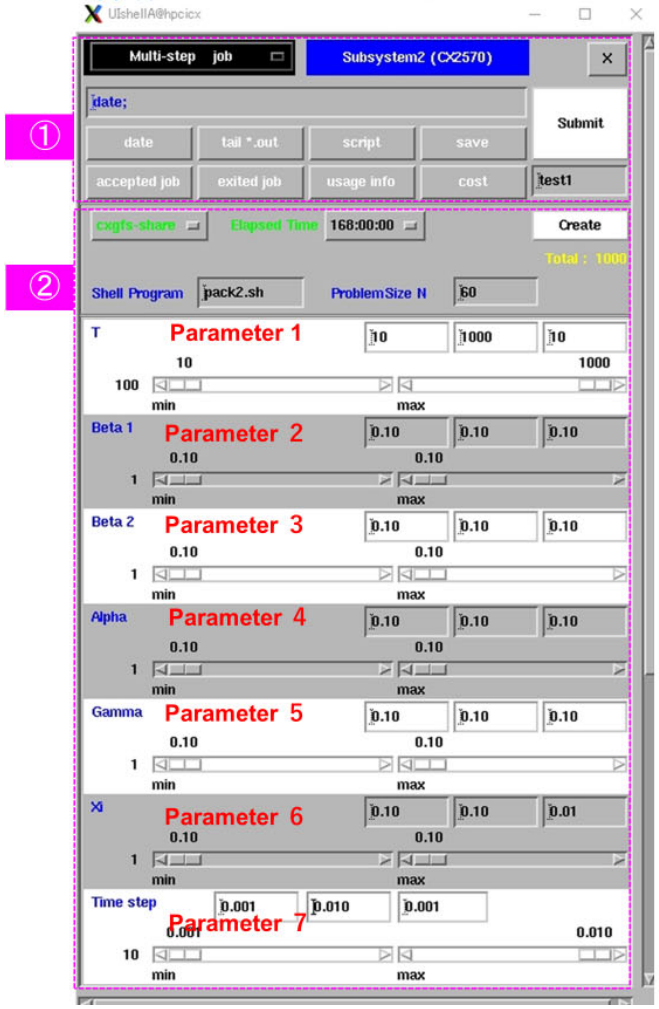
④ 作成ジョブスクリプト表示パネル

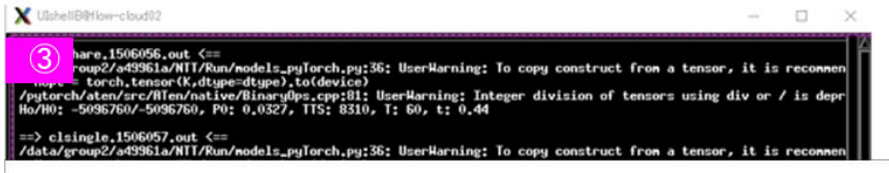
⑤ コマンド実行時の標準出力メッセージ表示パネル

(名大ITC独自開発)

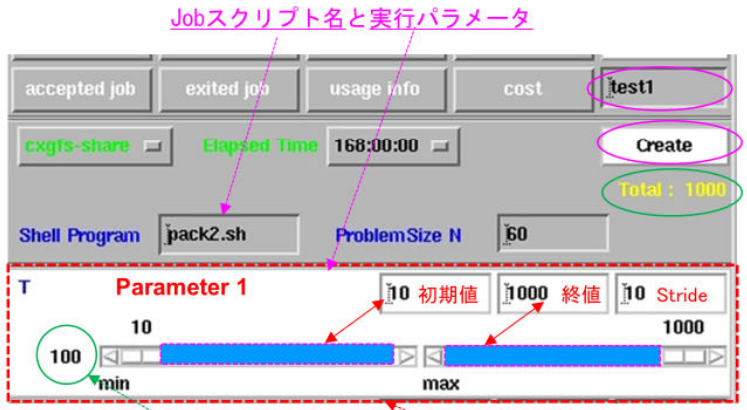
コヒーレントイジングマシン（CIM）用GUI（パラメタサーベイ用API）

〈操作パネルのレイアウト〉





① アプリ選択メニュー、ログインシステム表示、コマンド入力フィールド、Functionボタン
② ジョブのリソース情報とプログラムの実行パラメータを入力するパネル
③ コマンド実行時の標準出力メッセージ表示パネル



繰り返しパラメータ FORTRANの Do文の
制御パラメータに相当
フィールド入力またはスライダー入力対応
スライダーバーの青色の部分を押し続けると
Strideパラメータ値で増加します。
算出した繰り返し回数が表示されます 100steps

※現在、パラメタ探索空間を効率的に探索する自動チューニング機能を実装中

量子・古典ハイブリッド計算とHPC

- 量子アルゴリズム研究では、商品化されたNISQコンピュータなど**量子コンピュータ実機が十分にアクセスできない現状**では量子回路シミュレーションが重要

【理由】

- 期待されているエラー訂正可能なFTQCの実用化は、最低でも10年レベルの開発期間が必要と予想される。技術的にもFTQC実現は容易ではない。
- しかし量子関連の**基礎研究は継続**して行う必要がある
- 一方、量子・古典ハイブリッド計算の**古典部分**は、**スーパーコンピュータの利活用が前提**

  ⇒**HPC技術が必須**

- FTQC実用化までは、実機は十分に存在しないか、利用できない。**GPUによる高速な量子回路シミュレーションが必須**

  ⇒量子コンピュータ実機とスーパコンピュータを組合せた環境下で簡便な利用インターフェース提供が鍵

  →本ユーザ会講演の「QUDA-Q」は1つの方法