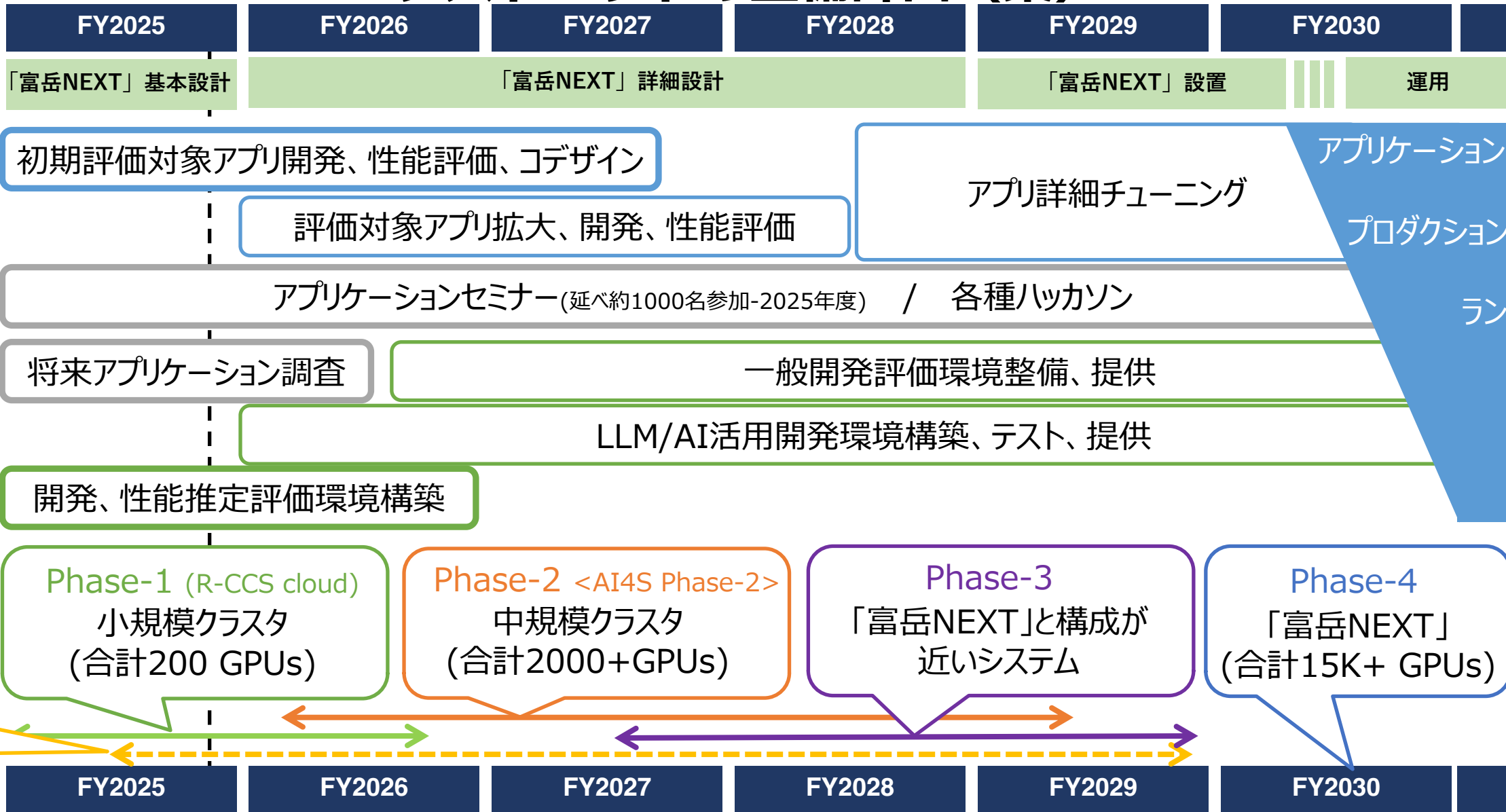


# ～富岳NEXTの開発状況について～ 開発環境の紹介 – アプリケーションエリアより

2026年3月6日

**青木保道 / Yasumichi Aoki**  
理化学研究所 計算科学研究センター  
次世代計算基盤アプリケーション開発ユニット

# 「富岳NEXT」 アプリ開発ロードマップ/コデザイン テストベッドの整備計画 (案)



- コミュニティ
- HAIRDESC
- RIKEN
- Fujitsu
- NVIDIA
- DOE

- RIKEN

- RIKEN 富岳NEXT テストベッド

アプリケーション  
プロダクション  
ラン

# 「富岳NEXT」 アプリ開発 – 継続的開発環境構築 (2025年度)

## 初期評価対象アプリ開発、性能評価、コデザイン

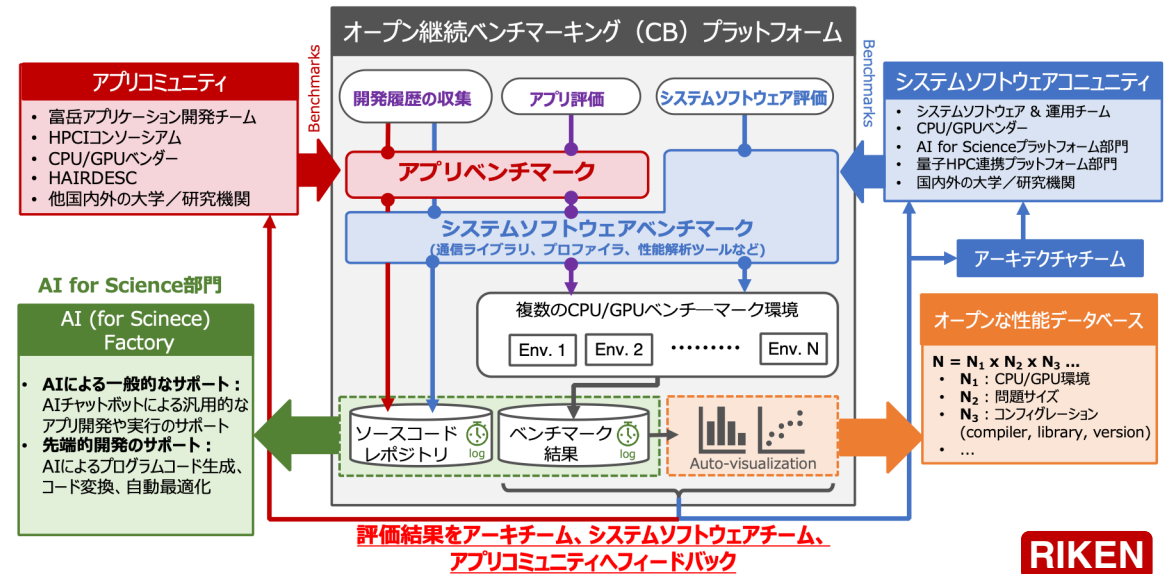
- 8サブWG 開発者調査 + 富岳運用統計情報活用
- 7+1分野 13 アプリケーションを初期評価対象に
- 内6点を開発評価 **コミュニティ** **RIKEN** **Fujitsu** **NVIDIA**

Block	Application	Description	GPU対応	GPU性能評価proxyコード	計算カテゴリ
SubWG1 – Life Science	Genesis	Molecular Dynamics Simulation 分子動力学シミュレーション	✓ (CUDA)		3
SubWG2 – New Material, Energy	SALMON	Scalable Ab-initio Light-Matter simulator for Optics and Nanoscience	✓ (OpenACC) - new implementation.	SPARC	5 (stencil, small matrix, sometimes 6 (fft).
SubWG3 – Weather/Climate	SCALE-LETKF	Coupled weather simulation(WS) and data assimilation (DA) application	The simulation part has been implemented (with insufficient optimization), and the data assimilation part is currently under consideration	simulation part: EAMxx	5: weather simulation dynamics part (FVM) 4: weather simulation physical process 1: data assimilation (many small-sized dgemm)
SubWG4 – Earthquake/Tsunami Disaster Mitigation	E-Wave	Earthquake Simulation	✓ (OpenACC) Fully Optimized		6 (Note that algorithmic improvements to reduce the B/F value are being worked out)
SubWG5 – Manufacturing	FrontFlow/blue	CFD	✓ (OpenACC)		6 (FEM)
SubWG6 – Fundamental Science	LQCD-DWF-HMC	Hybrid Monte-Carlo algorithm of domain wall fermions in Lattice QCD	Partly Done	Grid, QUDA	5

## 将来アプリケーション調査

- 各アプリケーション分野代表者へのヒアリング
- 7分野、10課題
- 生命, 新物質/エネルギー, 気候/気象, 地震津波/減災, ものづくり, 基礎科学, スマートシティ

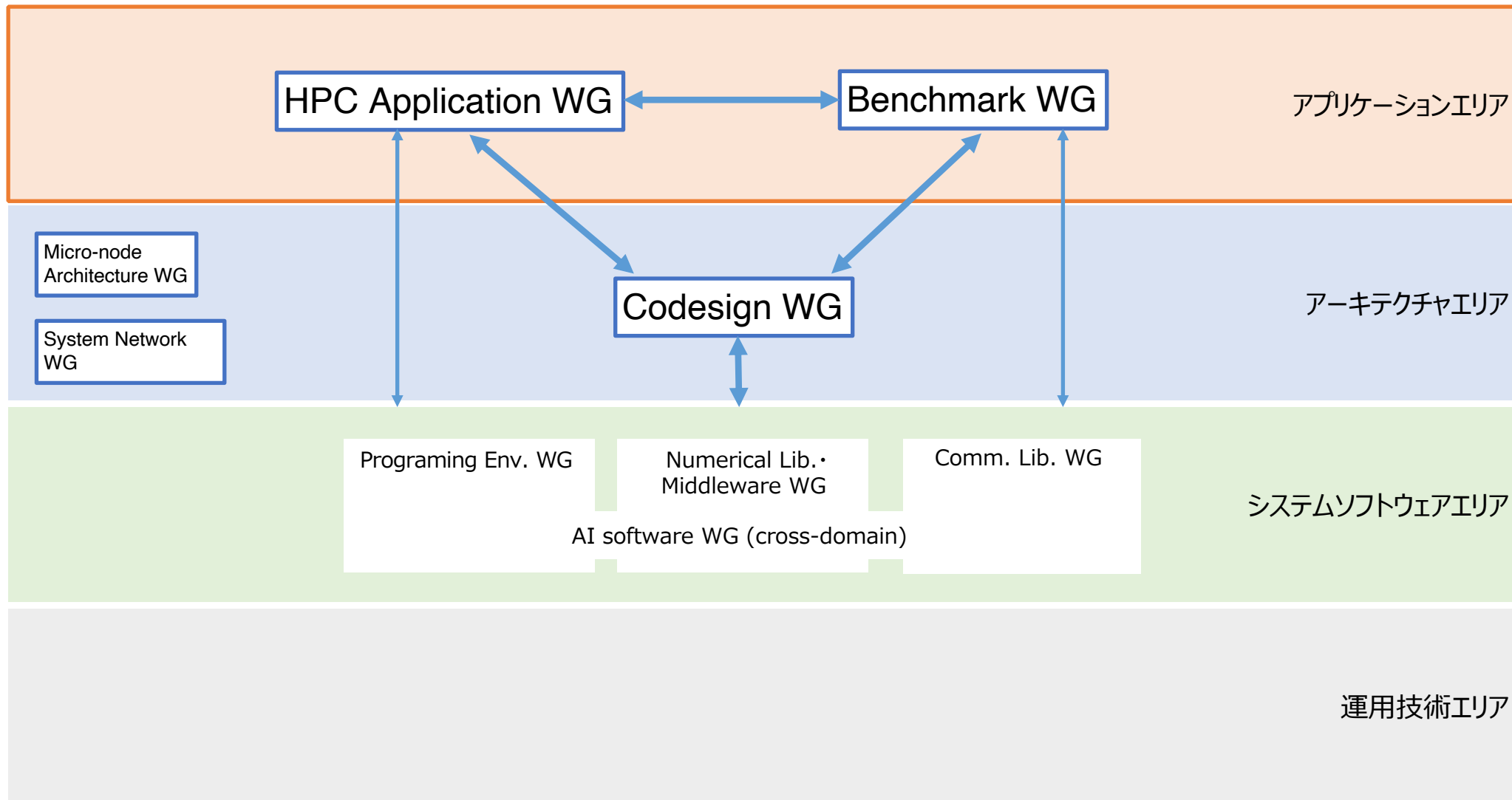
## 開発、性能推定評価環境構築

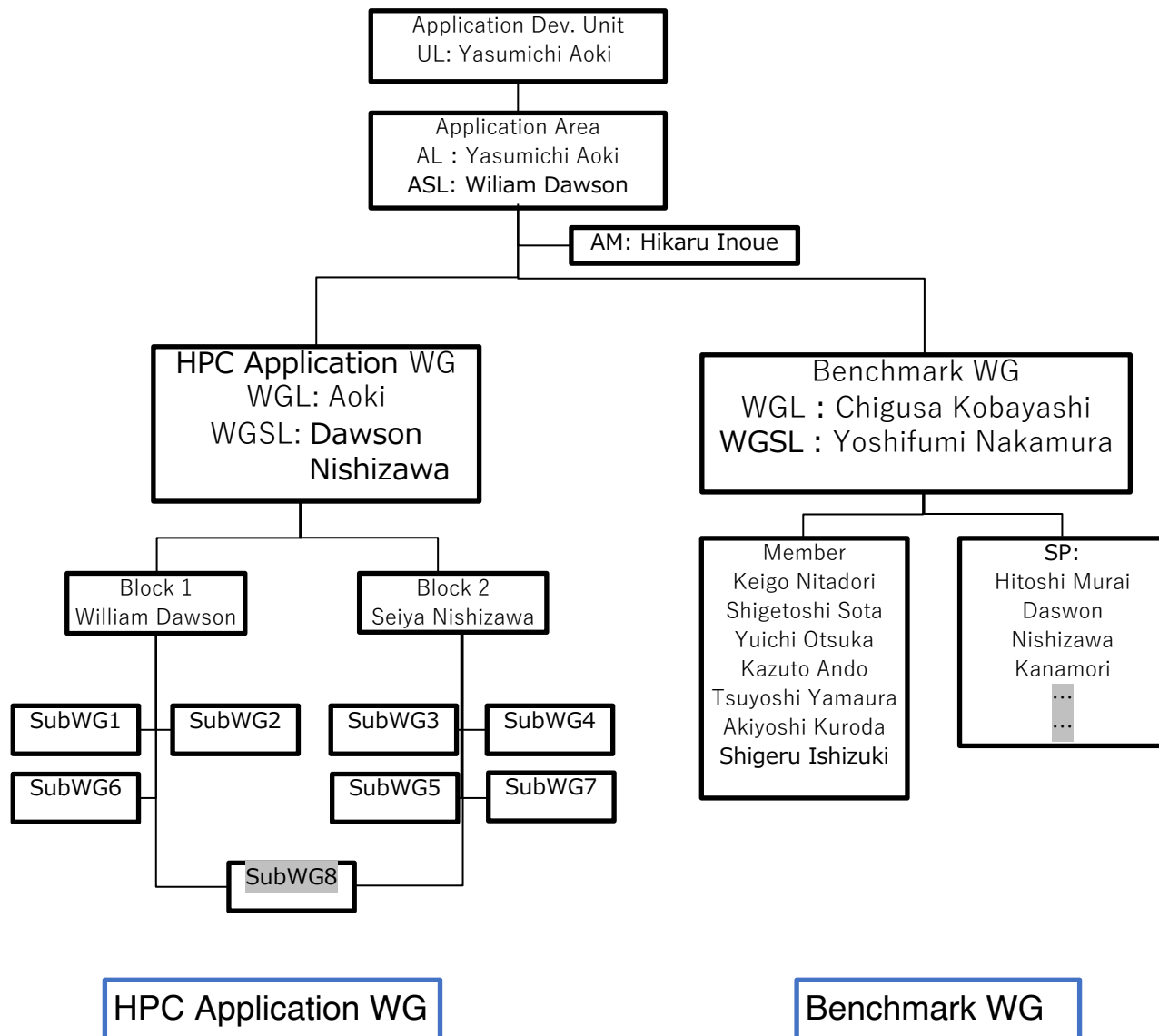


## アプリケーションセミナー / 各種ハッカソン

- 「富岳NEXT」アプリケーションセミナー 全14回(2025年度) のべ参加者 ~1000名
- GPU化 / AI活用 / 低精度演算活用 / 量子 / CX
- CI/CB: Benchpark ハッカソン **RIKEN** **DOE**

# コードデザイン関連 エリア連携





Block	Leadership
Block 1	BOG: William Dawson AD: Keiichiro Fukazawa, Kengo Nakajima
Block 2	BOG: Seiya Nishizawa AD: Takwshi Iwashita, Hirofumi Tomita

Roles in SubWG	description
OG	Organizer – R-CCS-original member (amap) * coordination, cooperation
LS	Liaison * community cooperation

SubWG	Members
①Life Science (Sugita team, TAMA team)	Kei Terayama[LS], Shingo Ito[OG], (Wenyang Zhao)
②New Material, Energy (Nakajima team, Yunoki tm)	Youhei Yamaji[LS], William Dawson[OG], Hidehiko Kohshiro, (Enhua Xu)
③Weather/Climet (Tomita team, Miyoshi team)	Chihiro Kodama[LS], Shigenori Otsuka[OG], Seiya Nishizawa, Sachiho Adachi, Yuta Kawai, Arata Amemiya, James Taylor, Yuta Tarumi, (Unashish Mondal)
④Earthquake/Tsunami disaster mitigation (Tomita team 2)	Kohei Fujita [OG, LS]
⑤Manufacturing (Tsubokura team)	Junya Onishi[OG], Ryoji Takaki[LS], Chisachi Kato[AD]
⑥Fundamental Science (Aoki Team)	Issaku Kanamori[OG, LS], Tomoya Takiwaki[LS]
⑦Smart City (Social Science, Digital Twin/Society5.0) (Yamaguchi team)	Hirozumi Yamaguchi[OG,LS], Fukuharu Tanaka, Takashi Shimokawabe[AD]
⑧ Numerical Computing Technology/Machine Learning Algorithm (Imamura team)	Daisuke Takahashi[LS], Rio Yokota, Atsushi Suzuki[OG], some more from system WG ?

# アプリケーションサブWG / 初期評価対象アプリ

SubWG	体制	初期評価対象アプリ
①生命科学	OG：伊東 真吾 LS：寺山 慧	Genesis UT-Heart
②新物質・エネルギー	OG：William Dawson LS：山地 洋平	SALMON mVMC
③気象・気候	OG：大塚 成徳 LS：小玉 知央	SCALE-LETKF
④地震・津波防災	LS/OG：藤田 航平、(西澤 誠也)	E-wave
⑤ものづくり	OG：大西 順也 LS：高木 亮治, AD：加藤千幸	FrontFlow/blue FFVHC-ACE
⑥基礎科学	OG：金森 逸作 LS：滝脇 知也、金森 逸作	LQCD-DWF-HMC MHD Turbulence
⑦スマートシティ、 デジタルツイン・Society5.0	LS/OG：山口 弘純 AD：下川辺 隆史	Sionna, Carla, SUMO, Pytorch, JuPedsim
⑧科学技術計算・機械学習アルゴリズム	OG：鈴木 厚 LS：高橋 大介	PETSc Megatron-DeepSpeed

# Applications for profiling and Co-design [NVIDIA]

Block	Application	Description	GPU対応	GPU性能評価proxyコード	計算カテゴリ
<b>SubWG1 – Life Science</b>	<b>Genesis</b>	Molecular Dynamics Simulation 分子動力学シミュレーション	✓ (CUDA)		3
<b>SubWG2 – New Material, Energy</b>	<b>SALMON</b>	Scalable Ab-initio Light-Matter simulator for Optics and Nanoscience	✓ (OpenACC) - new implementation.	SPARC	5 (stencil, small matrix), sometimes 6 (fft).
<b>SubWG3 – Weather/Climate</b>	<b>SCALE-LETKF</b>	Coupled weather simulation (WS) and data assimilation (DA) application	The simulation part has been implemented (with insufficient optimization), and the data assimilation part is currently under consideration	simulation part: EAMxx	5: weather simulation dynamics part (FVM) 4: weather simulation physical process 1: data assimilation (many small-sized dgemm)
<b>SubWG4 – Earthquake/Tsunami Disaster Mitigation</b>	<b>E-Wave</b>	Earthquake Simulation	✓ (OpenACC) Fully Optimized		6 (Note that algorithmic improvements to reduce the B/F value are being worked out)
<b>SubWG5 – Manufacturing</b>	<b>FrontFlow/blue</b>	CFD	✓ (OpenACC)		6 (FEM)
<b>SubWG6 – Fundamental Science</b>	<b>LQCD-DWF-HMC</b>	Hybrid Monte-Carlo algorithm of domain wall fermions in Lattice QCD	Partly Done	Grid, QUDA	5

# Applications for profiling and Co-design [Fujitsu]

Block	Application	Description	GPU対応	GPU性能評価proxyコード	計算カテゴリ
SubWG1 – Life Science	Genesis	Molecular Dynamics Simulation 分子動力学シミュレーション	✓ (CUDA)		3
SubWG2 – New Material, Energy	SALMON	Scalable Ab-initio Light-Matter simulator for Optics and Nanoscience	✓ (OpenACC) - new implementation.	SPARC	5 (stencil, small matrix), sometimes 6 (fft).
SubWG3 – Weather/Climate	SCALE-LETKF	Coupled weather simulation (WS) and data assimilation (DA) application	The simulation part has been implemented (with insufficient optimization), and the data assimilation part is currently under consideration	simulation part: EAMxx	5: weather simulation dynamics part (FVM) 4: weather simulation physical process 1: data assimilation (many small-sized dgemm)
SubWG4 – Earthquake/Tsunami Disaster Mitigation	E-Wave	Earthquake Simulation	✓ (OpenACC) Fully Optimized		6 (Note that algorithmic improvements to reduce the B/F value are being worked out)
SubWG5 – Manufacturing	FrontFlow/blue	CFD	✓ (OpenACC)		6 (FEM)
SubWG6 – Fundamental Science	LQCD-DWF-HMC	Hybrid Monte-Carlo algorithm of domain wall fermions in Lattice QCD	Partly Done	Grid, QUDA	5

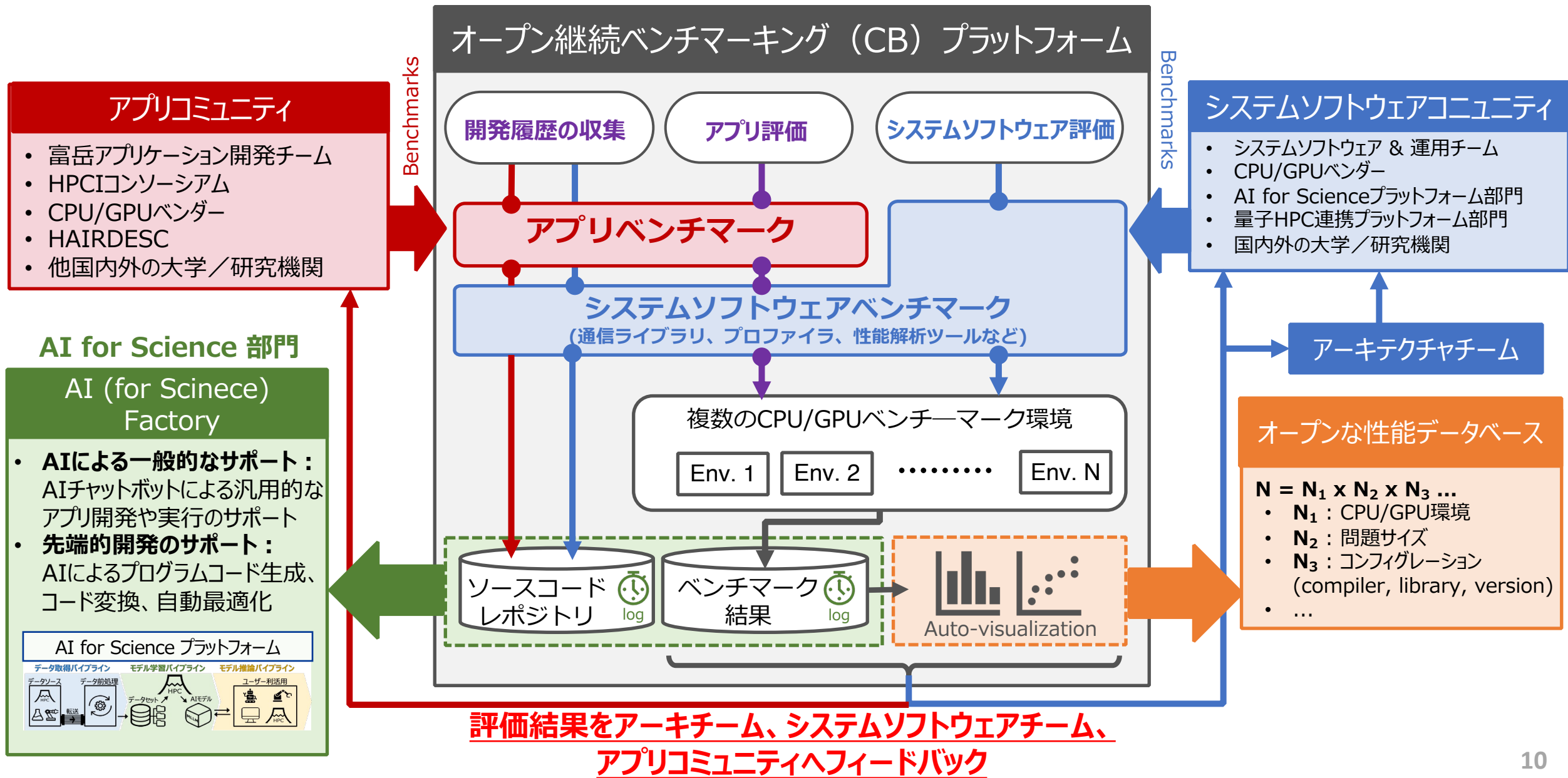
# アプリケーション開発とコデザイン

- HPCコミュニティとの協働
  - 「富岳NEXT」アプリケーションセミナー 全14回(2025年度), のべ 1000名参加
    - <https://www.r-ccs.riken.jp/fugaku-next/app-seminar/>
  - アプリケーションワーキンググループ → サブWGに各コミュニティから参加
    - コデザイン用7+1分野 13アプリケーション (初期評価用アプリケーション)
      - → 6アプリケーションを解析、チューニング → 評価へ
    - (継続)開発管理フレームワーク開発、活用
      - Benchkit 開発 <https://github.com/RIKEN-RCCS/benchkit>
      - Benchpark ( **DOE** ) ハッカソン (LLNLと協働) 実施
      - プロジェクト内参加者のみならず、プロジェクト外開発者も参加できるフレームワークとして整備
  - 富岳NEXTで達成しうる成果の調査 (7分野, 10課題)
- コデザイン2025年度
  - 「富岳」の統計情報を用いた フラッグシップスパコンの利用傾向の定量的理解
  - アプリ開発者むけ調査(アンケート)による、富岳NEXTコデザインに資する情報抽出
- 性能評価
  - プロジェクト開始時点での性能推定 → 現行機実測と性能モデルによる推定
- HAIRDESC 連携 - 体制構築 → 協働へ



} アーキコデザインに  
フィードバック





**アーキテクチャチーム**

**オープンな性能データベース**

**N = N<sub>1</sub> x N<sub>2</sub> x N<sub>3</sub> ...**

- N<sub>1</sub> : CPU/GPU環境
- N<sub>2</sub> : 問題サイズ
- N<sub>3</sub> : コンフィグレーション  
(compiler, library, version)
- ...

**AI for Science 部門**

AI (for Science) Factory

- **AIによる一般的なサポート** : AIチャットボットによる汎用的なアプリ開発や実行のサポート
- **先端的開発のサポート** : AIによるプログラムコード生成、コード変換、自動最適化

AI for Science プラットフォーム

データ取得パイプライン

モデル学習パイプライン

モデル推論パイプライン

データソース

データ前処理

データセット

HPC

AIモデル

ユーザー利用

# アプリ開発のためのコデザインプラットフォーム



## HAIRDESC

連携体制

### アプリケーション

- 富岳NEXTアプリケーションエリア
- 富岳NEXT潜在ユーザ

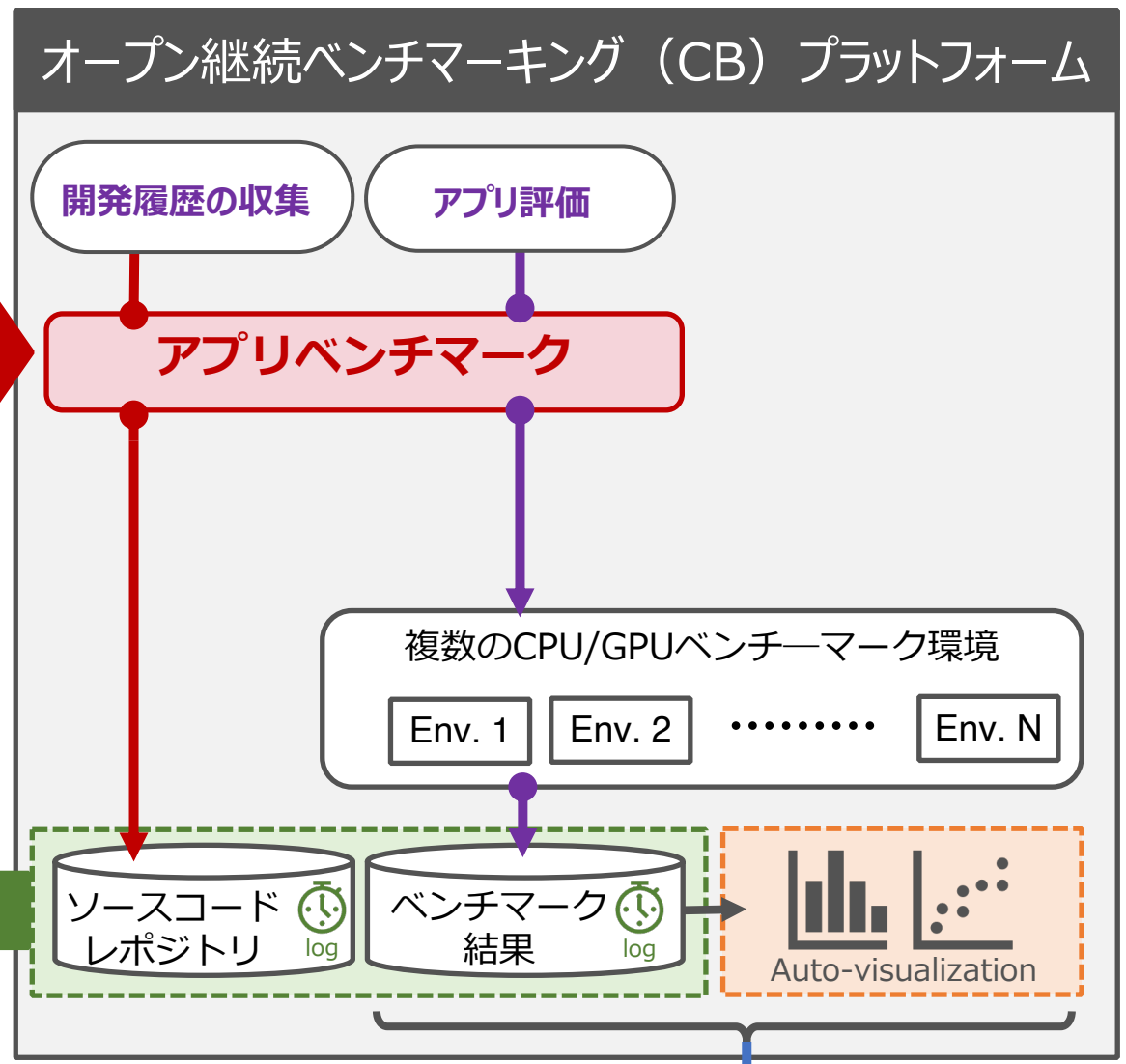
### AI for Science 部門

#### AI (for Science) Factory

- AIによる一般的なサポート：AIチャットボットによる汎用的なアプリ開発や実行のサポート
- 先端的開発のサポート：AIによるプログラムコード生成、コード変換、自動最適化

#### AI for Science プラットフォーム

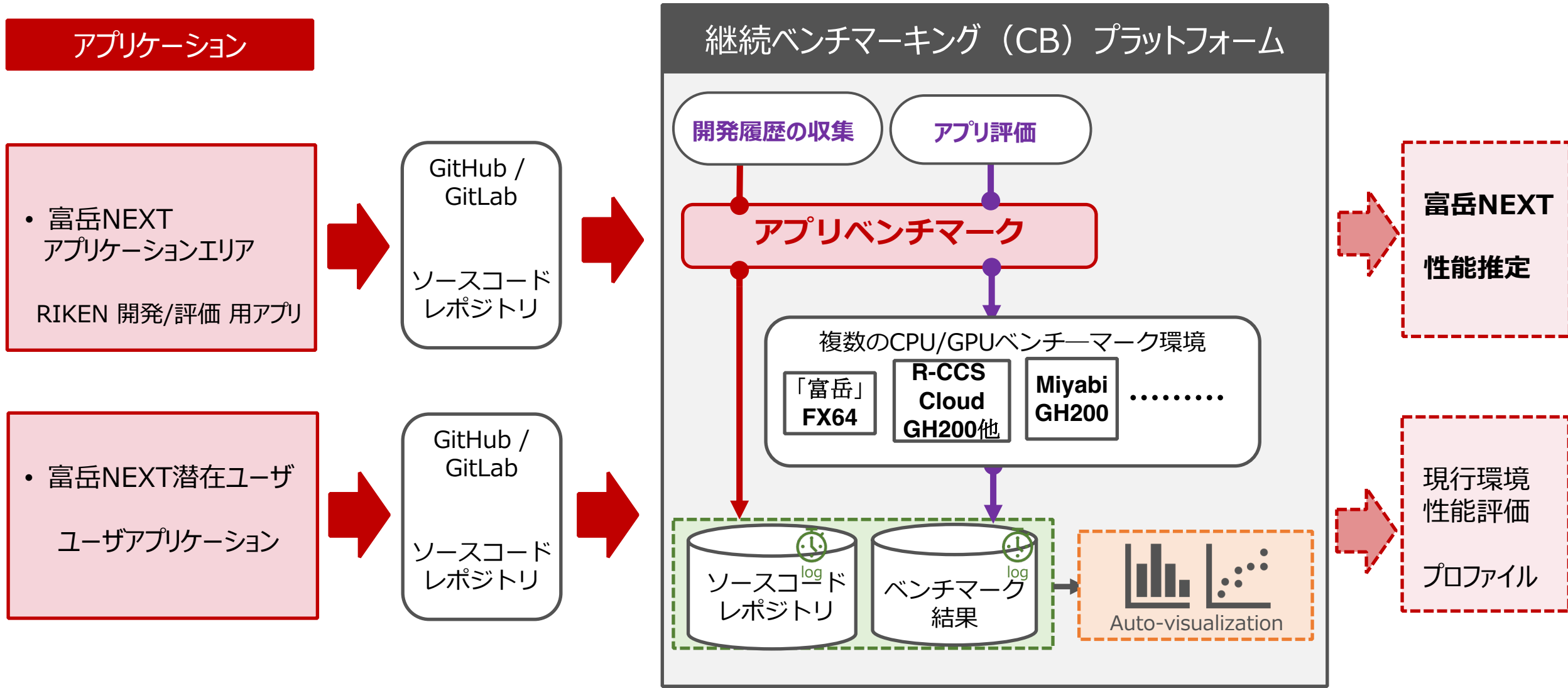
データ取得パイプライン    モデル学習パイプライン    モデル推論パイプライン



### アーキテクチャ エリア

- システム設計パラメタ決定

評価結果をアーキチーム、システムソフトウェアチーム、アプリコミュニティへフィードバック



## 目的

- 複数のコード（10～50程度）を複数の拠点・システム（10～30程度）で継続ベンチマーク実行
- ビルドと実行の分離・統合に対応（クロスコンパイルやJacamar-CI利用）
- サイト依存の環境条件への対応
- ベンチマーク結果の保存・可視化・性能推定

## プロジェクト構成

```

benchkit/
├── programs/
│   └── <code名>/
│       ├── build.sh      # システム別ビルドスクリプト
│       ├── run.sh       # システム別実行スクリプト
│       └── list.csv      # ベンチマーク実行条件定義
├── result_server/
│   ├── routes/
│   │   ├── receive.py   # ベンチマーク結果(JSON)受信
│   │   ├── results.py  # ベンチマーク結果表示
│   │   └── upload_tgz.py # 詳細データ(TGZ)受信・UUID連携
│   ├── templates/      # Webテンプレート
│   ├── utils/          # システム情報管理
│   └── app.py           # Webサーバメイン
├── scripts/
│   ├── matrix_generate.sh # CI YAML生成スクリプト
│   ├── job_functions.sh  # 共通関数定義
│   ├── result.sh         # 結果JSON変換
│   ├── send_results.sh  # 結果転送
│   ├── wait_for_nfs.sh  # NFS同期待機
│   └── test_submit.sh   # テスト実行用
├── .gitlab-ci.yml       # メインCI定義
├── system.csv           # 実行システム定義
├── queue.csv            # キューシステム定義
└── README.md

```

## アプリ追加手順（開発者向け）

このドキュメントは、BenchKit に新しいアプリ（プログラム）を追加する手順を開発者向けにまとめたものです。サンプルアプリ `qws` を参考に、新しいアプリ `<code>` を追加して PR を作成するまでを説明します。

### 目次

1. [リポジトリの準備](#)
2. [アプリの基本構成](#)
3. [設定ファイルの作成](#)
4. [ビルドスクリプトの作成](#)
5. [実行スクリプトの作成](#)
6. [ローカルテスト](#)
7. [バッチジョブテスト](#)
8. [PR作成](#)

## 4. ビルドスクリプトの作成

### build.sh の基本構造

```

#!/bin/bash
set -e
system="$1"
mkdir -p artifacts

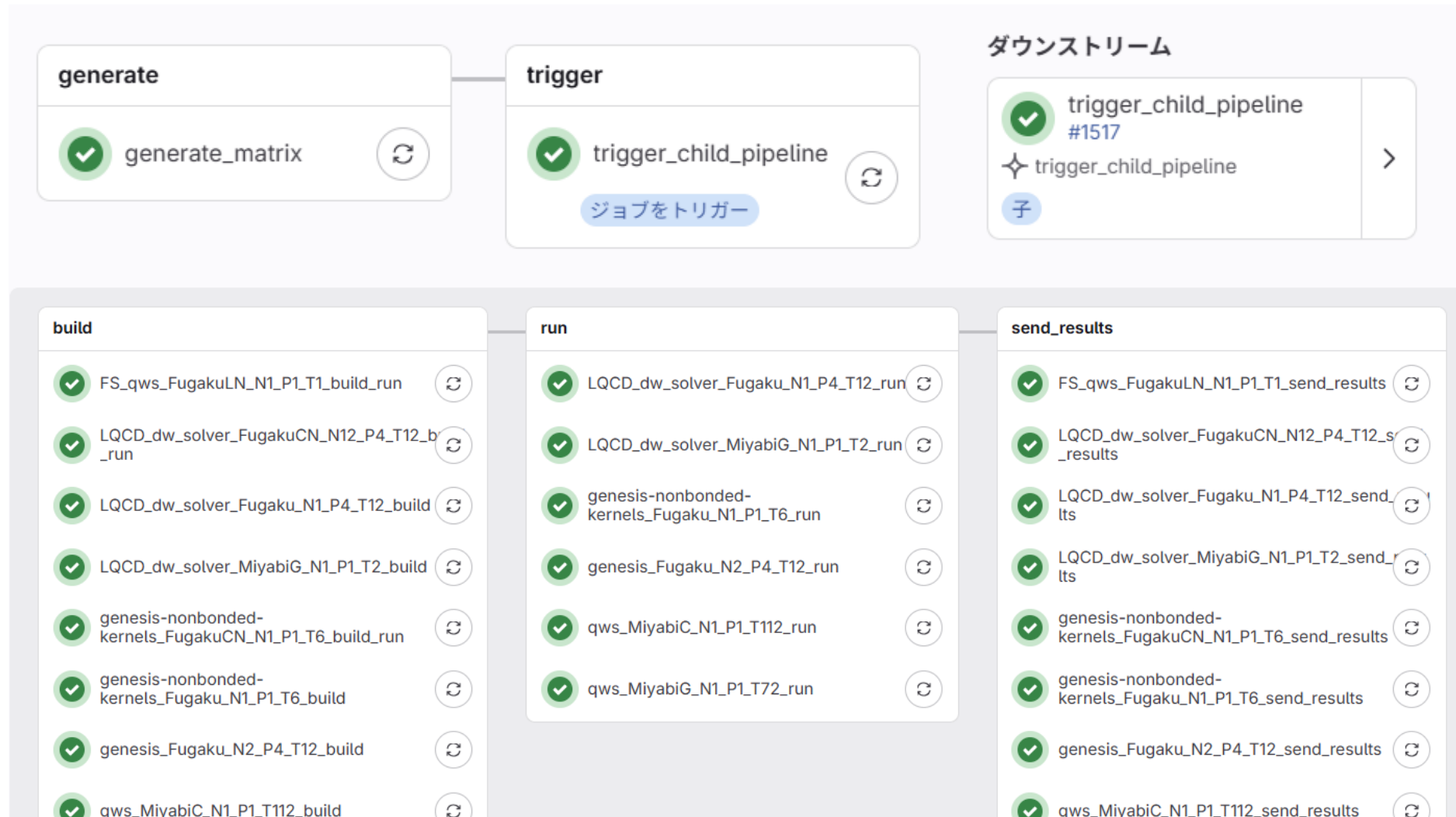
# ソースコード取得
git clone https://github.com/your-org/your-app.git
cd your-app

# システム別ビルド設定
case "$system" in
    Fugaku)
        # A64FX向けクロスコンパイル
        make -j 8 compiler=fujitsu_cross mpi=1
        ;;
    *)
        # (他システム)

```

- **多拠点開発基盤構築について: 中村宜文**

- 第203回ハイパフォーマンスコンピューティング・第17回量子ソフトウェア合同研究発表会  
2026年3月16日(月) - 3月18日(水)、北海道大学 学術交流会館/オンライン



## ● 自動実行結果リスト

[Results](#)
[Systems](#)
[Confidential Results](#)
[Estimated Results](#)

## Results

Search by multiple keyword

Timestamp	CODE	Exp	FOM	FOM version	SYSTEM	Nodes	JSON	PA Data
2026-01-09 11:15:34	LQCD_dw_solver	total	22.828	LQCD_dw_solver	FugakuCN	12	<a href="#">json</a>	-
2026-01-09 11:15:34	LQCD_dw_solver	solver	22.722338	LQCD_dw_solver	FugakuCN	12	<a href="#">json</a>	-
2026-01-09 11:13:24	LQCD_dw_solver	solver_CUCA	7.277896	LQCD_dw_solver	MiyabiG	1	<a href="#">json</a>	-
2026-01-09 11:13:24	LQCD_dw_solver	total_CUCA	7.479	LQCD_dw_solver	MiyabiG	1	<a href="#">json</a>	-
2026-01-09 11:13:24	LQCD_dw_solver	total_OpenACC	7.389	LQCD_dw_solver	MiyabiG	1	<a href="#">json</a>	-
2026-01-09 11:13:24	LQCD_dw_solver	solver_OpenACC	7.246475	LQCD_dw_solver	MiyabiG	1	<a href="#">json</a>	-
2026-01-09 11:09:23	LQCD_dw_solver	solver	11.358210	LQCD_dw_solver	Fugaku	1	<a href="#">json</a>	-
2026-01-09 11:09:23	LQCD_dw_solver	total	11.470	LQCD_dw_solver	Fugaku	1	<a href="#">json</a>	-
2026-01-09 08:41:49	scale-letkf	SC23_1280x1280	166.177	SCALE-LETKF	Fugaku	75	<a href="#">json</a>	-
2026-01-09 08:37:43	scale-letkf	SC23_128x128	29.847	SCALE-LETKF	Fugaku	3	<a href="#">json</a>	-
2026-01-09 08:25:48	scale-letkf	SC23_128x128	440.728	SCALE-LETKF	RC_GH200	1	<a href="#">json</a>	-

- **CX環境を利用した開発**
  - **BenchKit, Benchpark**
    - ユーザは実機を直接利用せず、CI/CDパイプラインによる自動実行からベンチマークデータ抽出
  - **利用申請 – 要件 有り – 当該システムを用いた開発履歴の富岳NEXTプロジェクト利用 など**
  - **2026年度半ばを目処に公開予定**
- **既存実機上での開発 – GPU化、チューニング**
  - **R-CCS 富岳NEXTテストベッド phase 1, phase 2(2026年度半ば～)**
  - **対象利用者 – 初期評価対象アプリケーション開発者**
    - 要件 有り – 当該システムを用いた開発履歴の富岳NEXTプロジェクト利用 など
    - **理研外の開発者: 2026年度半ば運用を目処に – 利用要件を含めて準備中**
  - **Phase1**
    - ai-l40s (AI4S) - AMD EPYC 9554 x 2 + NVIDIA L40S x 8, GH200 など
    - リスト: [https://riken-rccs.github.io/ondemand\\_rccs\\_cloud/resource\\_ja.html](https://riken-rccs.github.io/ondemand_rccs_cloud/resource_ja.html)
  - **Phase2**
    - **[AI4S phase2] GB200**
- **AI 活用による開発**
  - AI4S プロジェクト連携 - 理研内でテスト、情報蓄積 → 公開を目指した議論の推進