スーパーコンピューティング ニュース

Vol.23 No.2, 2021.3



スーパーコンピュータシステム 利用負担金表

	7-7	負担金額	潁(税込)	ディフク容量	
		大学・公共機関等	企業	フィスク谷里	順方
パーソナルコース		申込 1 セット当り, 最大 3 セットまで 100,000 円 (8,640 ノード時間)		申込 1 セット当り /work 4TB 利用者当り /home 50GB	最大ノード数 256 ノード
グループ	一般申込	申込 1 セット当り 100,000 円 (8,640 ノード時間)	申込 1 セット当り 120,000 円 (8,640 ノード時間)	グループ 1 セット当り /work 4TB	最大ノード数 256 ノード
フロース	ノード固定	申込 1 セット当り 150,000 円 (8,640 ノード時間)	申込 1 セット当り 180,000 円 (8,640 ノード時間)	利用者当り /home 50GB	
トークン追加		8,400 円 10,000 円 (720 ノード時間) (720 ノード時間)			
ディスク追加		6,480 円/	イ(1TB*年)		1TB 単位で申込可 (/work のみ)

Oakbridge-CX スーパーコンピュータシステム 利用負担金表(2020 年 4 月 1 日)

※トークン消費係数は 1.00 である。

※括弧内のノード時間は付与するトークン量。実行したジョブのノード時間積と消費係数に応じてトークンが消費される。 付与したトークンは、利用期間内に全量が使用できることを保証するものではない。

トークンは利用期間内に限り有効とし、利用終了後に残量がある場合でも繰越や利用負担金の返還は行わない。

トークンの他のシステムへの移行については、「トークン移行におけるノード時間積の換算表」を参照。

※ノード固定の申し込みには審査を要する。

※/home のディスク容量はパーソナルコースやグループコースに複数所属していても利用者当り 50GB 固定。

Oakforest-PACS スーパーコンピュータシステム 利用負担金表(2020 年 4 月 1 日)

	負担金額	頁(税込)	ゴノフタの星	備考	
	大学・公共機関等	企業	ティスク谷里		
	申込1セット当り、		申込1セット当り		
パーソナル コーフ	最大 6 セットまで		/work 1TB		
	50,000 円		利用者当り	取入ノート致 2,048ノート	
	(8,640 ノ ー ド時間)		∕home 50GB		
グループコース	申込 1 セット当り 50,000 円 (8,640 ノード時間)	申込 1 セット当り 60,000 円 (8,640 ノード時間)	グループ 1 セット当り /work 1TB 利用者当り /home 50GB	最大ノード数 2,048 ノード	
トークン追加	4,200 円 (720 ノード時間)	5,000 円 (720 ノード時間)			
ディスク追加	6,480 円/	(1TB*年)		1TB 単位で申込可 (/work のみ)	

※トークン消費係数は 1.00 である。

※括弧内のノード時間は付与するトークン量。実行したジョブのノード時間積と消費係数に応じてトークンが消費される。 付与したトークンは、利用期間内に全量が使用できることを保証するものではない。

トークンは利用期間内に限り有効とし、利用終了後に残量がある場合でも繰越や利用負担金の返還は行わない。

トークンの他のシステムへの移行については、「トークン移行におけるノード時間積の換算表」を参照。

※/home のディスク容量はパーソナルコースやグループコースに複数所属していても利用者当り50GB 固定。

Reedbush スーパーコンピュータシステム(Reedbush-H/L)利用負担金表(2020 年 4 月 1 日)

コース		負担金額	頁(税込)	ブ	/# *	
		大学•公共機関等 企業		アイスク谷重	偏考	
パーソナルコース		申込1 セット当り, 最大2 セットまで 75,000 円 (8,640ノード時間)		申込 1 セット当り /lustre 1TB 利用者当り /home 2GB	Reedbush-H 最大ノード数 32 ノード Reedbush-L 最大ノード数 16 ノード	
	一般申込	申込 1 セット当り 75,000 円 (8,640 ノード時間)		グループ 1 セット当り /lustre 1TB 利用者当り /home 2GB	Reedbush-H 最大ノード数 32 ノード Reedbush-L 最大ノード数 16 ノード	
グループコース	公募制度 Reedbush-H	申込1セット当り 公募制度 180,000円 (21,600ノード時間)	申込 1 セット当り 公募制度 216,000 円 (21,600 ノード時間)	グループ 1 セット当り /lustre 4TB 利用者当り /home 2GB	最大ノード数 32 ノード	
	公募制度・ ノード固定 Reedbush-L	申込 1 セット当り 公募制度 300,000 円 ノード固定 450,000 円 (34,560 ノード時間)	申込1セット当り 公募制度 360,000円 ノード固定 540,000円 (34,560ノード時間)	グループ 1 セット当り /lustre 4TB 利用者当り /home 2GB	最大ノード数 16 ノード	
トークン追加		6,300 円 (720 ノード時間)	7,500 円 (720 ノード時間)			
ディスク追加		6,480 円/	´(1TB*年)		1TB 単位で申込可 (/lustre のみ)	

※トークン消費係数は下記の通りである。

Reedbush-H: 2.50, Reedbush-L: 4.00

※括弧内のノード時間は付与するトークン量。実行したジョブのノード時間積と消費係数に応じてトークンが消費される。 付与したトークンは、利用期間内に全量が使用できることを保証するものではない。

トークンは利用期間内に限り有効とし、利用終了後に残量がある場合でも繰越や利用負担金の返還は行わない。

トークンの他のシステムへの移行については、「トークン移行におけるノード時間積の換算表」を参照。

※公募制度・ノード固定の申し込みには審査を要する。

※/homeのディスク容量はパーソナルコースやグループコースに複数所属していても利用者当り2GB固定。

トークン移行におけるノード時間積の換算表

移行先 移行元	Reedbush-H/L システム	Oakforest-PACS システム	Oakbridge-CX システム
Reedbush-H/L システム	_	1.5	0.75
Oakforest-PACS システム	0.6	-	0.5
Oakbridge-CX システム	1.3	2	_

移行先に追加されるトークン量(ノード時間)=移行トークン量×係数

注意事項(Oakbridge-CX, Oakforest-PACS, Reedbush,スーパーコンピュータシステム 共通)

- 「大学・公共機関等」は大学、高等専門学校及び大学共同利用機関、文部科学省所管の独立行政法人、学術研究及び学術振興 を目的とする国又は地方公共団体が所管する機関、並びに文部科学省科学研究費補助金の交付を受けて学術研究を行う者に 適用する。
- ・「企業」の申し込みには、企業利用申込書添付書類の提出および審査を要する。
- 利用期間は、利用開始月から終了月の末日またはサービス休止前までとする。利用期間内に計算機利用を中止した場合であっても利用負担金額の変更は行わない。年度の途中で利用開始または終了する場合の負担金額は月数別利用負担金表(Web ページ)を参照すること。
- ・前掲の利用負担金表は基本セットの内容であり、最小セットについては Web ページを参照すること。

 パーソナルコース(ただし、本センターのスーパーコンピュータシステムに初めて登録された利用者)においてのみ、利用開始月の 翌月末日までに利用を中止することができる。利用負担金はパーソナルコースの利用期間1ヶ月の金額を適用し、請求する。
利用負担金は、原則として利用開始月に応じ、以下の月の初旬に一括して請求する。

利用間には、旅駅にして利用用用に応じ、後下の月の初期に、回しに調子する。
利用間始月が4月から7月までは10月、8月から9月までは12月、10月から12月までは3月、1月から3月までは3月末。
前年度内に事前申込をした分については、利用開始月に関わらず、7月初旬の請求となる。

・利用負担金額が減額となる変更はできない。

コース間の変更については、利用負担金が増額になる場合のみ別途相談に応じる。(ただし、利用者番号変更の場合がある。)
グループコースのディスク量は、グループ全体の上限値である。

スーパーコンピュータシステム ジョブクラス制限値

Oakbridge-CX スーパ	パーコンピュータシスラ	テム ジョブクラス制限	え値(2019 年 7月1日)

+- 2**	ノード数 ※2				制限時間	メモリー 容量	귀ᇇ	グループ コース	
イユ [—] 石 ※ I	(最大コア数)			(経過時間)	(GB) ※3	よ ナ ル	申一込般	夏 / 見してい しんしょう しんしょ しんしょ	
debug	1	~	16	(896)	30 分	168	0	0	0
short	1	~	8	(448)	8 時間	168	0	0	0
(regular)									
small	1	~	16	(896)	48 時間	168	0	0	0
medium	17	~	64	(3584)	"	"	0	0	0
large	65	~	128	(7168)	"	"	0	0	0
x-large	129	~	256	(14336)	24 時間	"	0	0	0
challenge	1	~	1368	(76608)	24 時間	168	*	*	*
任意			申込数		任意 ※4	168	×	×	0
(interactive) %5									
interactive_n1			1	(56)	2 時間	168	0	0	0
interactive_n8	2	~	8	(448)	10 分	"	0	0	0

※1 キューの指定("#PJM -L "rscgrp=キュー名"")は, regular, debug, short を小文字で指定する regular キューはノード数の指定("#PJM -L "node=ノード数"")でノード数別のキューに投入される

※2 トークンの消費係数は 1.00

※3 1ノード当りの利用者が利用可能なメモリー容量

※3 「ノード当りの利用る」が利用り席はメモリー谷里
※4 申込ノード数の合計以内ならば、キュー名・制限時間(原則 48 時間以内)は相談の上、任意に設定可能
※5 インタラクティブジョブの起動は次のとおり(トークン消費なし)
pjsub ---interact -g グループ名 -L "rscgrp=interactive,node=ノード数"

Oakforest-PACS スーパーコンピュータシステム ジョブクラス制限値(2018 年 4月1日	(E
---	----

キュー名※1	ノード数 ※2 (最大コア数)			制限時間 (経過時間)	メモリー 容量 (GB) ※3	パーソナル	グループコース
debug-cache	1 -	~ 128	(8704)	30分	82	0	0
debug-tlat	1 -	~ 128	(8704)	30 分	96	0	0
(regular-cache) small-cache medium-cache large-cache x-large-cache (argulee flat)	1 - 129 - 513 - 1025 -	~ 128 ~ 512 ~ 1024 ~ 2048	(8704) (34816) (69632) (139264)	48 時間 <i>"</i> 24 時間	82 '' ''	0000	0000
(regular-flat) small-flat medium-flat large-flat x-large-flat	1 - 129 - 513 - 1025 -	~ 128 ~ 512 ~ 1024 ~ 2048	(8704) (34816) (69632) (139264)	48 時間 <i>"</i> 24 時間	96 '' ''	0000	0000
challenge	1 -	~ 8208	(558144)	24 時間	82 / 96	*	*
(interactive-cache) %4 interactive_n1-cache interactive_n16-cache (interactive-flat) %4	2 -	1 ~ 16	(68) (1088)	2 時間 10 分	82 ″	00	00
interactive_n1-flat interactive n16-flat	2 ~	1 ~ 16	(68) (1088)	2 時間 10 分	96 //	00	00
prepost		1	(28)	6 時間	222	Ó	0

★ 審査による課題選定の上,月1回の一定期間のみ利用可能(原則として月末処理日前日の朝~翌日朝) ※1 キューの指定(**PJM -L "rsogrp=キュー名" ")は、regular-cache/flat, debug-cache/flat を小文字で指定する regular-cache/flat キューはノード数の指定(**#PJM -L "node=ノード数" ")でノード数別のキューに投入される ※2 トークンの消費係数は 1.00

※2 1/-ビージの利用者が利用可能なメモリー容量
※3 1/-ビ当りの利用者が利用可能なメモリー容量
※4 インタラクティブジョブの起動は、 pjsub ---interact -g グループ名 -L "rscgrp=キュー名,node=ノード数" (キュー名は interactive-cache/flat, トークン消費なし)

Readbush スーパーコンピュータシステム(Readbush-H) ジョブクラス制限値(2018 年 9 日 27 日)

キュー名※1		。 (最	′ード数 ※2 大 GPU 数)	制限時間 (経過時間)	メモリー 容量 (GB) ※3	パーソナル	グルー 一般 申込	プコース 公 募 制 度
h-debug	1	2	4	(8)	30 分	244	0	0	0
h-short	1	~	4	(8)	2 時間	244	0	0	0
(h-regular)									
h-small	1	~	4	(8)	48 時間	244	0	0	0
h-medium	5	~	8	(16)	11	"	0	0	0
h-large	9	~	16	(32)	"	"	0	0	0
h-x-large	17	~	32	(64)	24 時間	"	0	0	0
h-challenge	1	\$	120	(240)	24 時間	244	*	*	*
(h-interactive) ※4									
h-interactive_1			1	(2)	2 時間	244	0	0	0
h-interactive_2			2	(4)	30 分	"	0	0	0
(h-regular-low) ※5									
h-small-low	1	~	4	(8)	12 時間	244			A
h-medium-low	5	~	8	(16)	11	"	×		A
h-large-low	9	~	16	(32)	"	"	×		A
h-x-large-low	17	~	32	(64)	6 時間	"	×		
▲ パーソナルコース	よ 最ス	ŧ١.	ノード,グル	・ープコー	・スは申込ノード数	枚の4分の1	まで実行	可(公募	制度による

 ∧ ハーソナルコースは 最大1/-ト, クルーフコースは甲込ノート数の4分の1まで実行可(公募制度によ 申し込みの場合は申込ノード数まで実行可)
★ 審査による課題選定の上, 月1回の一定期間のみ利用可能(原則として月末処理日前日の朝~翌日朝)
※1 キューの指定("#PBS -q キュー名")は, h-short, h-regular, h-debug を小文字で指定する h-regular キュー(よノード数の指定("#PBS -l select=ノード数")でノード数別のキューに投入される ※2 トークンの消費係数は 2.50

※3 1ノード当りの利用者が利用可能なメモリー容量

 ▲ インタラクティブジョブの起動は次のとおり(トークン消費なし) qsub -I -q h-interactive -I select=ノード数 -I walitime=XX:XX -W group_list=グループ名
※5 非優先ジョブクラス(低プライオリティキュー)は、トークンの追加申込が締め切られ、ジョブ実行に必要なトークン 残量が不足した場合のみ実行可

Reedbush スーパーコンピュータシステム(Reedbush-L)	ジョブクラス制限値(2020年4月1日)
-------------------------------------	----------------------

					メモリー	18	グノ	ループコー	-ス
キュー名※1	(ノード数 ※ 最大 GPU	2 数)	制限時間 (経過時間)	容量 (GB) ※3	ハーソナル	一般申込	公募制度	ノ 固 定 ド
l-debug	1~	4	(16)	30 分	244	0	0	0	0
(I-regular) I-small	1~	4	(16)	168 時間	244	0	0	0	0
I-medium	5~	8	(32)	"	"	0	0	0	0
I-large	9~	 	(64)	//	"	0	0	0	0
仕息		甲込剱		仕恵 ※4	244	×	×	×	0
(I-interactive) ※5									
I-interactive_1		1	(4)	24 時間	244	0	0	0	0
I-interactive_2		2	(8)	6 時間	"	0	0	0	0
I-interactive_4	3~	4	(16)	1 時間	"	0	0	0	0
(I-regular-low) ※6									
I-small-low	1~	4	(16)	12 時間	244		▲		
I-medium-low	5~	8	(32)	"	"	×	▲		
I-large-low	9~	16	(64)	"	"	×			

▲ パーソナルコースは 最大1ノード, グループコースは申込ノード数の4分の1まで実行可(公募制度・ノード固定に よる申し込みの場合は申込ノード数まで実行可)

※3 ー 0 (1) (**PBS - q キュー名 **) は、 l-debug, l-regular を小文字で指定する l-regular キューはノード数の指定(**PBS - l select=ノード数")でノード数別のキューに投入される ※2 トークンの消費係数は 4.00

※3 1ノード当りの利用者が利用可能なメモリー容量 ※4 申込ノード数の合計以内ならば、キュー名・制限時間(原則 168 時間以内)は相談の上、任意に設定可能

※4 中シノート数の合計以内ならは、キュー右・制限時间(原則 108 時間以内)は相談の上、任意に設定可能
※5 インタラクティブジョブの起動は次のとおり(トークン消費あり) qsub -I -q l-interactive -I select=ノード数 -I waltime=XX:XX -W group_list=グループ名
※6 非優先ジョブクラス(低プライオリティキュー)は、トークンの追加申込が締め切られ、ジョブ実行に必要なトークン 残量が不足した場合のみ実行可

ヤンターから

2021 年3月下旬からの計算機サービス予定は以下のとおりです。

Oakbridge-CX スーパーコンピュータシステム

○ 0akbridge-CX スーパーコンピュータシステム サービス休止のお知らせ

日付	利用者サービス	センター内作業		
3月31日(水)~ 4月2日(金)	3/31 9:00 ~ 4/2 17:00 までサービス休止	年度末処理		
4月23日(金)	9:00 ~ 20:00 までサービス休止	月末処理		
5月28日(金)	9:00 ~ 20:00 までサービス休止	月末処理		

・ Oakbridge-CX システムは, 原則 24 時間サービスを行っています。

ただし、月末処理日(原則として毎月最終金曜日)はサービスを停止します。

○ 0akbridge-CX スーパーコンピュータシステム 大規模 HPC チャレンジ のお知らせ (*)

3月30日(火)9:00 ~ 3月31日(水)9:00まで 4月22日(木)9:00 ~ 4月23日(金)9:00まで 5月27日(木)9:00 ~ 5月28日(金)9:00まで

・上記期間中, Oakbridge-CX の debug, short, regular, interactive, prepost, ノード固定 および 講義用キューのサービスを 休止します。

大規模 HPC チャレンジ 実施期間

ログインノードは通常どおり利用できます。

Oakforest-PACS スーパーコンピュータシステム

○ Oakforest-PACS スーパーコンピュータシステム サービス休止のお知らせ

日 付	利用者サービス	センター内作業
3月31日(水)~ 4月2日(金)	3/31 9:00 ~ 4/2 17:00 までサービス休止	年度末処理
4月23日(金)	9:00 ~ 22:00 までサービス休止	月末処理
5月26日(水)	9:00 ~ 22:00 までサービス休止	月末処理

• Oakforest-PACS スーパーコンピュータシステムは、原則 24 時間サービスを行っています。 ただし、月末処理日(原則として毎月最終金曜日)はサービスを停止します。

○ Oakforest-PACS スーパーコンピュータシステム 大規模 HPC チャレンジ のお知らせ (*)

大規模 HPC チャレンジ 実施期間			
3月30日(火)9:00 ~ 3月31日(水)9:00まで			
4月22日(木)9:00 ~ 4月23日(金)9:00まで			
5月25日(火)9:00 ~ 5月26日(水)9:00まで			

・上記期間中, Oakforest-PACS の regular-flat, regular-cache, debug-flat, debug-cache, interactive-flat, interactive-cache および 講義用キューのサービスを休止します。ログインノード, prepost キューは通常どおり利用できます。

Reedbush スーパーコンピュータシステム

○ Reedbush スーパーコンピュータシステム (Reedbush-H, Reedbush-L) サービス休止のお知らせ

1		, , , , , , , , , , , , , , , , , , , ,	
	日付	利用者サービス	センター内作業
	3月31日(水)~ 4月 5日(月)	3/31 9:00 ~ 4/5 17:00 までサービス休止	年度末処理
	4月23日(金)	9:00 ~ 17:00 までサービス休止	月末処理
	5月28日(金)	9:00 ~ 17:00 までサービス休止	月末処理

・Reedbush-H, Reedbush-L スーパーコンピュータシステムは、原則 24 時間サービスを行っています。 ただし、月末処理日(原則として毎月最終金曜日)はサービスを停止します。

○ Reedbush スーパーコンピュータシステム (Reedbush-H) 大規模 HPC チャレンジ のお知らせ (*)

大規模 HPC チャレンジ 実施期間				
3 月 30 日 (火) 9:00 ~ 4 月 22 日 (木) 9:00 ~ 5 月 27 日 (木) 9:00 ~	3 月 31 日 (水) 9:00 まで 4 月 23 日 (金) 9:00 まで 5 月 28 日 (金) 9:00 まで			

・上記期間中, Reedbush-H の h-debug, h-short, h-regular, h-interactive および 講義用キューのサービスを休止します。 Reedbush-L, ログインノード および prepost キューは利用可能です。

【注意事項】

- サービス休止等の計画は原稿作成時の予定です。やむを得ずサービスを変更したり、休止したりする場合がありますので、最新の情報は login 時のメッセージ及びスーパーコンピューティング部門の Web ページの運用スケジュール (https://www.cc.u-tokyo.ac. jp/supercomputer/schedule.php)をご確認ください。
- ・ 平日の9:00~17:00以外,休日(土・日・祝日等)は、システム障害等でサービスが停止した場合、運転を継続できない場合がありま す。その場合は、その時間をもってサービスを中止しますのでご了承ください。
- * 新型コロナにかかわる現状に鑑みて、当面の間大規模 HPC チャレンジを中止いたします。再開、再募集等の際は Web ページ (https://www.cc.u-tokyo.ac. jp/guide/hpc/)で適宜お知らせいたします。

システム変更等のお知らせ

(2021.1.5 - 2021.2.26 変更)

1. ハードウェア

1.1	Oakbridge-CX スーパーコンピュータシステム	… なし
1.2	Oakforest-PACS スーパーコンピュータシステム	… なし
1.3	Reedbush スーパーコンピュータシステム (Reedbush-H/L)	… なし

2. ソフトウェア

2.1 Red Hat Enterprise Linux 7, CentOS 7 (Oakbridge-CX)

Intel 開発環境 2020 (update4)		(2021.01.29)
ftw/mpi-fftw	3.3.8	
hdf5/phdf5	1.12.0	
netcdf/pnetcdf	4.7.4	
netcdf-fortran/pnetcdf-fortran	4.5.3	
netcdf-cxx	4.3.1	
parallel-netcdf	1.12.1	
GNU Octave	6.1.0	(2021.02.26)
インコー コナウケーナーナー 利田十次に ついてい	11田十坂山 ちょのわたい	チャット

インストールを実施しました。利用方法については、利用支援ポータルのお知らせ、または ドキュメント閲覧より利用手引書をご覧ください。

2.2 RedHat Enterprise Linux 7, CentOS 7 (Oakforest-PACS)

Intel 開発環境 2020 (update4)		(2021.01.29)
ftw/mpi-fftw	3.3.8	
hdf5/phdf5	1.12.0	
netcdf/pnetcdf	4.7.4	
netcdf-fortran/pnetcdf-fortran	4.5.3	
netcdf-cxx	4.3.1	
parallel-netcdf	1.12.1	
a state a state a state of the		

インストールを実施しました。利用方法については、利用支援ポータルのお知らせ、または ドキュメント閲覧より利用手引書をご覧ください。

2.3 RedHat Enterprise Linux 7 (Reedbush-H/L)

PGI版 Open MPI (CUDA 10.2.89, GPUDirect 対応版)	2.1.2	(2021.01.29)
CUDA	10.1.105	(2021.02.26)
PGI版 Open MPI	2.1.2	(2021.02.26)
(CUDA 10.1.105, GPUDirect 対応版)		

インストールを実施しました。利用方法については、利用支援ポータルのドキュメント閲覧より 利用手引書または各資料をご覧ください。

- 3. その他
 - 3.1 Oakbridge-CX におけるジョブ情報表示コマンドへの SSD 利用状況表示機能の追加について

ジョブ状況を表示するコマンド (pjstat wrapper) で、SSD の利用状況が確認できるようになりました。詳しくは、利用支援ポータルのドキュメント閲覧より利用手引書をご覧ください。

※実行例

\$ pjstatnodeuse			
RSCGRP		Ratio	Used/Total
debug/interactive	**	7%	9/128
short	*****	58%	42/72
regular	******	*-93%	985/1063(SSD:1/56)
			※追加 : SSD 利用数/SSD ノード数

スーパーコンピューティングチーム

プレスリリース「東京大学情報基盤センターが Society 5.0 実現へ向けた「計算・データ・学習」融合スーパーコンピュー タシステムの導入を決定」(https://www.cc.u-tokyo.ac.jp/public/pr/pr-wisteria.php)にてお知らせした「計算・データ・学習」 融合スーパーコンピュータシステム(Wisteria/BDEC-01)につきまして、2021 年 5 月 14 日 (金) より、試験運用を開始する 予定です。ここでは、本システムの基本的な仕様並びに、試験運用での概要についてお知らせいたします。

なお、試験運用期間中は、システムの設定変更等のため、予告なく運転の停止、運用仕様の変更を行う場合がありますので 予めご了承ください。

1. システム構成

1.1 ハードウェア構成

Wisteria/BDEC-01 のシステム構成は以下の通りです (図 1、表 1、表 2)。

図 1. システム構成図



表 1. 全体構成

※ Wisteria-O (Odyssey):Wisteria/BDEC-01 のシミュレーションノード群

※ Wisteria-A (Aquarius): Wisteria/BDEC-01 のデータ・学習ノード群

項目		Wisteria-O (Odyssey)	Wisteria-A (Aquarius)	
総理論演算性能		25.9 PFLOPS	7.2 PFLOPS	
総ノード数		7,680	45	
総主記憶容量		240.0 TiB	36.5 TiB	
ネットワーク	トポロジー	6 次元メッシュ / トーラス	Full-bisection Fat Tree	
	ファイルシステム	FEFS (Fujitsu Exabyte File System)		
	サーバ(OSS)	DDN SFA7990XE		
共有ファイ	サーバ(OSS)数	16		
ルシステム ストレージ容量		25.8 PB		
ストレージ データ転送速度		504 GB/s		

	ファイルシステム	FEFS (Fujitsu Exabyte File System)
	サーバ(OSS)	DDN SFA400NVXE
高速ファイ	サーバ(OSS)数	16
ルシステム	ストレージ容量	1.0 PB
	ストレージ データ転送速度	1.0 TB/s

表 2. ノード構成

項目		Wisteria-O (Odyssey)	Wisteria-A (Aquarius)
マシン名		FUJITSU Supercomputer	FUJITSU Server PRIMERGY
		PRIMEHPC FX1000	GX2570 後継機
	プロセッサ名	A64FX	Intel 第3世代 Xeon スケーラブル
			プロセッサ(開発コード名: Ice Lake)
	プロセッサ数(コア数)	1 (48)	_
CPU	周波数	2.2 GHz	—
	理論演算性能	3.3792 TFLOPS	—
	メモリ容量	32 GB	—
	メモリ帯域幅	1,024 GB/s	—
	プロセッサ名		NVIDIA A100
	SM 数 (単体)		108
	メモリ容量 (単体)		40 GB
	メモリ帯域幅 (単体)		1,555 GB/s
CDU	理論演算性能 (単体)		19.5 TFLOPS
GPU	搭載数		8
	CPU-GPU 間接続		PCI Express Gen4 x 16 $V-V$
			(1 レーンあたり片方向 32 GB/s)
	GPU 間接続		NVLink x 12 本
			(1 本あたり片方向 25 GB/s)
インタ	ーコネクト	Tofu インターコネクトD	InfiniBand HDR (200Gbps) x 4

1.2 ソフトウェア構成

Wisteria/BDEC-01のソフトウェア構成は、以下の通りです(表 3)。

	Wisteria-O (Odyssey)	Wisteria-A (Aquarius)						
OS	Red Hat Enterprise Linux 8	Red Hat Enterprise Linux 8						
	GNU コンパイラ							
	富士通社製コンパイラ	Intel コンパイラ						
	Fortran77/90/95/2003/2008	Fortran77/90/95/2003/2008						
	C、C++	C、C++						
		NVIDIA HPC SDK						
コンパイラ		Fortran77/90/95/2003/2008						
		C、C++						
		OpenACC 2.7						
		NVIDIA CUDA SDK						
		CUDA C						
		CUDA C++						
メッセージ通信ライブラリ	富士通社製 MPI	Intel MPI、Open MPI						

	富士通社製ライブラリ(BLAS、CBLAS、 LAPACK、 ScaLAPACK)	Intel 社製ライブラリ(MKL) (BLAS、 CBLAS、LAPACK、ScaLAPACK)、 cuBLAS、cuSPARSE、cuFFT、 MACMA、cuSPARSE、cuFFT、					
ライブラリ	SuperLU, SuperLU MT, SuperLU DIST, METIS, MT-METIS, ParMETIS, Scotch, PT-Scotch, PETSc, Trillinos, FFTW, GNU Scientific Library, NetCDF, Parallel netCDF, HDF5, Parallel HDF5, CMake, Anaconda, Xabclib, ppOpen-HPC, MassiveThreads, Boost C++, mpiJava						
アプリケーション	OpenFOAM、ABINIT-MP、PHASE、From Coupler、REVOCAP-Refiner、OpenMX、 packages、bioconductor、BioPerl、BioRu Quantum ESPRESSO、Xcrypt、ROOT、C NWChem、DeepVariant、Paraview、Vis PyTorch、Keras、Horovod、MXNet	tFlow/blue、FrontISTR、REVOCAP- MODYLAS、GROMACS、BLAST、R uby、BWA、GATK、SAMtools、 Geant4、LAMMPS、CP2K、 It. POV-Ray、TensorFlow、Chainer、					
フリーソフトウェア	autoconf、automake、bash、bzip2、cvs make、grep、gnuplot、gzip、less、m4、 subversion、tar、tcsh、tcl、vim、zsh、g —	、emacs、findutils、gawk、gdb、 python、perl、ruby、screen、sed、 jit など Globus Toolkit、Gfarm、FUSE					
コンテナ仮想化	Singularity						

2. 試験運用期間中のサービス内容及び利用申込みについて

サービス内容やご利用になるための利用申込み方法の詳細は決定次第、当センター Web ページにてお知らせいたします。

2.1 利用申込みについて

Wisteria/BDEC-01 をご利用になる場合には、利用申込み手続きが必要です(現在、当センターの計算機システムをご利用 になられている場合でも、新たに利用申込み手続きが必要です。また、ご利用までの流れについては、表 4 もあわせてご覧く ださい)。

2.2 利用負担金について

Wisteria/BDEC-01 をご利用になる場合の利用負担金について、試験運転期間中は、無料で利用可能とする予定です。 (正式サービスは 8 月からを予定しています)

2.3 コース別について

当センターの既存の各計算機システムのサービスにおいては、パーソナルコースとグループコース別のサービス運用を行っ ておりますが、パーソナルコースとグループコースについて、実質負担金当たりの資源量に変わりがないため、 Wisteria/BDEC-01 においてはコース別を設置しないサービス設計を行います。

	3 月	4 月	5 月	6 月	7 月	8月
システム	3 月中旬頃	4 月上旬	● 5/14(金) 10:00 試験運用開始		● 7/29 (木) 試験運用 期間終了	● ····· 8/2 (月) 正式サー ビス開始
利用者	サービス 案内開始	利用申込受付期間	・試験運転期 ・正式サービ 動作確認を	間中は無料で利用 スに向けて、プロ 行う	可とする グラム等の	-

表 4. Wisteria/BDEC-01 試験運用期間のご利用の流れ (予定)

2.3.1 ログインノードサービス

プログラムの編集、コンパイルやバッチジョブの投入などに利用するための環境として、ログインノードを複数台用意する 予定です。また、JupyterLab 環境(バッチジョブ連携含む)や Apache Guacamole を利用した仮想的な GUI デスクトップ 環境を提供する予定です。

ログインノードは、当センターでサービスを行っている他のスーパーコンピューターシステムと同様に、公開鍵認証方式に よる接続となります。鍵登録の方法や、接続ホスト名などの詳細については、当センター Web ページや Wisteria/BDEC-01 利用支援ポータルにてお知らせいたします。

2.3.2 インタラクティブジョブ/バッチジョブ/プリポストサービス

ジョブ実行方法、ジョブクラス制限値(経過時間制限、割り当てノード数、メモリ制限値)などの詳細については、当セン ター Web ページや Wisteria/BDEC-01 利用支援ポータルにてお知らせいたします。

Wisteria/BDEC-01 のご利用イメージは、おおよそ図2の通りです(ただし、以下の図は、スーパーコンピューティングニュース原稿作成時のものです。今後の検討状況によっては、変更する場合もあります)。



図2. システムのご利用イメージ

2.3.3 ファイルシステム

ファイルシステムは、システム構成図 (図 1、表 1) にある通り、ログインノード共有ファイルシステム、共有ファイルシ ステム、高速ファイルシステムの 3 ファイルシステムで構成されます。

共有ファイルシステム・高速ファイルシステムは富士通社製の並列分散処理ファイルシステム FEFS (Fujitsu Exabyte File System) で構築されます。FEFS は、Lustre ファイルシステムをベースに機能拡張されたファイルシステムで、複数 のノードから高速インターコネクトを利用した高いデータ転送機能や、1 つのファイルを一定のデータサイズに分割して書 き込むストライピング機能などを有するファイルシステムです。高速ファイルシステムについては、一定期間更新のないファイルが自動削除される一時領域と自動削除のない恒久領域(申込制)にて運用される予定です。

ログインノード共有ファイルシステムは主にホームディレクトリで利用するための NFS 領域です。ホームディレクトリは 共有ファイルシステムに変更を可能とする予定です。その他、各ファイルシステムの特徴・利用方法 (マウント先)などの詳 細については、当センター Web ページや Wisteria/BDEC-01 利用支援ポータルにてお知らせいたします。

2.3.4 大規模 HPC チャレンジ (公募制)

最大規模の計算資源を使った大規模 HPC チャレンジの募集については、新型コロナウイルスにかかる現状を鑑みて、現在 当面の間募集を停止している状況です。Wisteria/BDEC-01 における大規模 HPC チャレンジの試験運用期間中の実施につい ては、応募受付が再開される見通しとなった際に当センター Web ページにてお知らせいたします。

3. その他

最新の情報は、当センター Web ページ (https://www.cc.u-tokyo.ac.jp) にて随時ご案内いたします。メールによる問い合わせについては、事前に Web ページで情報がないかご確認の上、受付窓口 uketsuke@cc.u-tokyo.ac.jp までお願いいたします。

研究成果の登録のお願い

情報戦略課研究支援チーム

情報基盤センタースーパーコンピューティング部門

研究成果の登録は、本センターのスーパーコンピューターシステムを利用して得られた研究 成果のうち、論文、ロ頭発表、著書、受賞情報についてご報告いただくものです。研究成果の 登録は、本センタースーパーコンピューティング部門のWebサイト(https://www.cc.u-toky o.ac.jp/)から「研究成果登録」に進んでください。なお、ご報告いただいた内容は、研究 成果データベースへの登録、本センター発行の広報誌及びWebページに掲載させていただきま すので、ご了解ください。

研究成果は、東京大学におけるスーパーコンピューターシステムの整備・拡充につながるものとなりますので、利用者の皆様には何卒ご協力くださいますようお願い申し上げます。



12・1月のジョブ統計

1. Oakbridge-CX スーパーコンピュータシステムジョブ処理状況(Red Hat Enterprise Linux 7、CentOS 7)

				処理	里件数			ファイル使	用量 [GiB]	- 12 11	演算時間	[ノード時間] ()	経過時間)	平均/-ド	ノート゛
年月	登録者数	実利用者数	ログイン	プリポスト	インタラクティブ	バッチジョブ	接続時間 [時間]	/home	/lustre	ロクイン (実CPU)	プリポスト	インタラクティブ	バッチジョブ	利用数	利用率
					~ ~ ~ ~ ~ ~ ~ ~ ~ ~ ~ ~ ~ ~ ~ ~ ~ ~ ~ ~							212		(ノード)	(%)
2020年4月	1,092	147	5,802	20	789	16,434	24,146	647	16,881,212	1,745.43	20	354	233,086	379.9	27.9
5月	1,127	215	7,937	71	1,324	39,551	30,946	684	17,588,622	1,190.20	725	709	496,108	709.9	52.2
6月	1,298	217	8,669	156	1,242	132,825	39,950	1,000	24,529,271	2,673.80	627	936	607,896	898.9	66.1
7月	1,378	347	18,263	118	1,760	80,506	53,532	1,340	23,582,558	5,753.21	519	1,179	668,610	957.8	70.4
8月	1,371	295	8,780	67	1,450	63,090	27,508	1,350	25,301,247	9,448.79	136	949	498,413	938.4	69.0
9月	1,535	299	11,804	48	1,152	80,846	39,017	1,399	26,814,117	3,073.18	119	740	630,436	1,030.7	75.8
10月	1,250	254	13,972	102	1,841	87,992	72,162	1,468	28,961,173	6,384.71	519	829	732,192	1,052.0	77.4
11月	1,241	268	13,169	13	2,707	47,307	62,082	1,472	31,304,992	15,583.41	17	980	716,567	1,086.7	79.9
12月	1,214	241	11,452	56	1,475	75,087	43,511	1,467	30,959,739	9,074.40	253	860	768,743	1,127.9	82.9
2021年1月	1,105	215	10,238	49	1,601	64,441	53,307	1,302	29,461,688	3,322.22	253	982	754,704	1,110.5	81.7
2020年1月	562	117	5,831	0	377	32,698	43,594	495	15,790,227	3,237.89	0	141	294,689	410.2	30.2
2月	587	115	5,299	0	326	20,493	32,540	610	17,504,878	1,158.40	0	181	414,952	620.0	45.6
3月	588	98	4,785	1	464	26,064	28,456	586	16,978,662	1,903.42	11	317	680,984	961.4	70.7
合計			120,170	701	16,131	734,636	507,157			61,311.17	3,199	9,016	7,202,691		

・接続時間: ログイン時間の累計

・ノード利用数: インタラクティブおよびバッチジョブの経過時間を1ノードが100%動作したと仮定した場合の利用ノード数。
計算式=1ヶ月のインタラクティブおよびバッチジョブ経過時間合計÷1ヶ月の稼動時間

・ログイン(実CPU): コア時間単位
・2020年1分は合計に含まない

・ノード利用率: サービスノードに対する利用比率。 計算式=ノード利用数÷サービスノード数×100





2. Oakforest-PACSスーパーコンピュータシステムジョブ処理状況 (RedHat Enterprise Linux 7、CentOS 7)

				処理	件数			ファイル使	用量 [GiB]	- 5 11	演算時間	[ノード時間] (経過時間)	平均/-ド	/−ド
年月	登録者数	実利用者数	ログイン	プリポスト	インタラクティブ	バッチジョブ	接続時間 [時間]	/home	/work	ロクイン (実CPU)	プリポスト	インタラクティブ	バッチジョブ	利用数	利用率
			- / 12	2 201024	ジョフ			, nomo	,		2 201020	ジョブ		(ノード)	(%)
2020年4月	1,885	464	9,576	461	253	38,464	54,218	3,927	6,326,936	1,829.07	709	214	2,840,983	4,423.7	53.9
5月	1,802	446	9,554	247	254	59,496	64,493	3,220	5,455,455	2,698.20	502	152	3,571,465	4,885.8	59.5
6月	1,611	455	11,840	151	358	47,010	67,932	3,361	5,858,067	1,957.58	342	161	3,415,672	4,831.4	58.9
7月	1,622	410	12,928	343	327	52,585	64,608	3,446	5,996,751	2,262.33	492	163	4,121,263	5,909.8	72.0
8月	1,617	401	12,139	315	618	83,908	70,019	3,854	6,332,050	11,191.93	685	514	4,726,977	6,611.0	80.5
9月	1,732	420	9,811	293	795	52,222	56,925	3,964	6,299,074	3,237.18	667	1,390	4,125,115	6,447.3	78.5
10月	1,766	522	12,023	191	464	52,938	82,796	4,179	6,492,672	6,460.30	398	710	4,437,924	6,071.9	74.0
11月	1,822	461	13,149	251	256	65,413	74,790	4,107	6,618,475	3,297.48	516	125	4,468,068	6,400.5	78.0
12月	1,789	471	13,407	419	375	99,699	66,020	4,189	6,634,466	6,273.23	630	149	4,837,811	6,633.6	80.8
2021年1月	1,804	475	12,636	495	556	210,638	84,101	4,236	6,512,605	3,174.92	787	233	5,112,137	6,993.7	85.2
2020年1月	1,598	445	11,965	408	378	48,545	118,573	3,725	6,034,310	9,427.65	666	217	5,198,931	7,111.9	86.6
2月	1,629	424	10,772	359	401	47,509	78,624	3,850	6,253,958	12,649.16	768	192	4,977,581	7,321.7	89.2
3月	1,598	401	11,791	536	533	64,010	80,219	3,761	6,408,220	9,302.12	1,062	196	5,581,379	7,713.3	94.0
合計			139,626	4,061	5,190	873,892	844,745			64,334	7,558	4,199	52,216,375		

・接続時間: ログイン時間の累計

・ログイン(実CPU): コア時間単位

・2020年1分は合計に含まない

・ノード利用数: インタラクティブおよびバッチジョブの経過時間を1ノードが100%動作したと仮定した場合の利用ノード数。

計算式=ノード利用率×総ノード数(8208)

・ノード利用率: サービスノードに対する利用比率。計算式=利用ノード時間÷サービスノード時間×100





				処理	里件数			ファイル使	用量 [GiB]	_ /* /.	演算時間	[ノード時間] (経過時間)	平均/-ド	/−ト*
年月	登録者数	実利用者数	ログイン	プリポスト	インタラクティブ ジョブ	バッチジョブ	接続時間 [時間]	/home	/lustre	ロクイン (実CPU)	プリポスト	インタラクティブ ジョブ	バッチジョブ	利用数 (ノード)	利用率 (%)
2020年4月	1,287	239	4,124	1	181	4,512	5,558	169	435,177	6.74	0	165	14,192	22.1	18.5
5月	1,287	204	4,724	1	230	6,950	7,699	133	300,576	9.43	0	293	28,184	38.6	32.2
6月	1,032	235	5,136	2	110	7,720	7,073	145	306,587	5.06	0	29	39,952	56.2	47.2
7月	1,069	188	4,736	8	1,053	7,234	7,653	148	299,291	6.06	5	1,024	41,261	57.4	47.8
8月	999	171	4,032	0	897	5,165	6,535	157	298,649	7	0	1,213	34,188	72.2	60.2
9月	986	161	4,364	0	742	6,403	8,054	159	321,098	12.18	0	1,077	26,655	43.3	36.1
10月	1,127	214	5,277	0	869	6,962	7,133	168	327,145	18.74	0	973	47,424	72.9	60.8
11月	1,070	188	4,943	0	717	13,502	6,705	168	337,922	7.48	0	675	28,402	40.8	34.0
12月	1,094	236	5,252	0	1,545	16,439	8,449	180	349,615	6.64	0	1,979	47,463	67.1	55.9
2021年1月	1,112	195	4,585	0	1,010	12,940	7,523	181	356,486	7.35	0	1,173	44,632	62.2	51.8
2020年1月	1,241	316	9,461	1	787	15,949	15,181	186	541,491	13.84	0	537	57,031	78.2	65.2
2月	1,237	273	5,826	0	515	25,272	9,731	183	616,806	11.83	0	323	42,821	62.7	52.2
3月	1,217	227	5,185	0	158	3,650	8,216	184	604,794	30.69	0	138	51,619	71.0	59.2
合計			58,184	12	8,027	116,749	90,329			128.91	5	9,062	446,793		

3. Reedbushスーパーコンピュータシステム(Reedbush-H) ジョブ処理状況 (RedHat Enterprise Linux 7)

・接続時間: ログイン時間の累計

・ノード利用数: インタラクティブおよびバッチジョブの経過時間を1ノードが100%動作したと仮定した場合の利用ノード数。

6月 7月 8月 日6 10月

ノード利用率

2021年1月

11月 12月 2月 3月

・ログイン(実CPU): コア時間単位

計算式=1ヶ月のインタラクティブおよびバッチジョブ経過時間合計÷1ヶ月の稼動時間

・2020年1月分は合計に含まない

・ノード利用率: サービスノードに対する利用比率。計算式=ノード利用数÷サービスノード数×100



4. Reedb	ushスーパ	(RedHat Enterprise Linux 7)					
	処理	!件数	演算時間[ノ-	・ド時間](経過時間)	平均/-ド	ノート・	
年日	インタラクティブ		インタラクティブ		利用数	利用率	

					1	
年月	インタラクティブ ジョブ	バッチジョブ	インタラクティブ ジョブ	バッチジョブ	利用数 (ノード)	利用率 (%)
2020年4月	54	1,484	37	7,332	11.4	21.0
5月	80	2,115	74	13,149	17.9	33.2
6月	91	2,807	79	14,764	20.8	38.6
7月	21	2,883	27	15,123	20.6	38.1
8月	58	1,551	64	10,739	25.6	47.4
9月	57	1,757	49	20,902	32.7	60.6
10月	156	2,427	53	16,400	24.8	45.9
11月	56	1,695	25	24,476	34.4	63.7
12月	105	2,734	106	21,208	28.9	53.6
2021年1月	100	3,171	46	26,404	35.9	66.7
2020年1月	133	2,560	158	32,196	44.0	79.9
2月	56	2,657	211	28,072	41.1	74.7
3月	16	727	24	34,927	47.9	87.2
승計	850	26 008	795	233 496		

・登録者数、実利用者数、ログイン件数、接続時間、ファイル使用量、

ログイン(実CPU)はReedbush-Hと共通。

・2020年1月分は合計に含まない

・ノード利用数: インタラクティブおよびバッチジョブの経過時間を1ノードが100%動作したと仮定した場合の利用ノード数。
計算式=1ヶ月のインタラクティブおよびバッチジョブ経過時間合計÷1ヶ月の稼動時間
・ノード利用率: サービスノードに対する利用比率。計算式=ノード利用数÷サービスノード数×100





メニーコア型スーパーコンピュータにおける

100 ナノメートル電子状態計算の強スケーリング性

星健夫・角田皓亮¹

鳥取大学

1. はじめに

スーパーコンピュータを利用した大規模電子状態計算は、次世代材料設計分野の基盤をなす. そのためには、アーキテクチャとアルゴリズムの両者を見据えての手法開発(コデザイン)が重 要となる.応用分野として筆者らは、有機デバイス材料系に注力している.有機デバイスは、フ レキシブル(薄くて柔らかく曲げたり巻いたりできる)光電子デバイスとして、トランジスタ・ 太陽電池・ディスプレー・生体センサーなどが、次世代 Internet-of-Things(IoT)の中核をなす [1-3].白川英樹(2000年ノーベル化学賞)らの研究など、伝統的に日本が強い.フレキシブルデ バイス は、有機(高)分子凝集体であり、構造乱れ(disorder)が本質である.こうした系を計 算するには、100 ナノメートルスケール電子状態計算が必須となる.上記を実現するためには、 従来型(第一原理)計算を超えた、大規模計算手法を開発する必要がある.筆者らは数理系研究 者と共同で、大規模電子状態計算法の基盤となる独自大規模疎行列計算アルゴリズムを複数開発 してきた[4-16].基本的戦略は、目的物理量ごとに、計算アルゴリズムを設計することである. 分子とデバイスのスケールについて、図1に模式図の例を示した.

本記事では、シフト型クリロフ部分空間理論を用いた超並列型電子状態計算について、 Oakforest-PACS 全ノード計算(大規模 HPC チャレンジ)の結果を中心に報告する.また、関連した数理手法についても、合わせて報告する.



図1 有機デバイスの例(トランジスタ. 模式図)[12].

2. 大規模電子状態計算の数理的基礎とこれまでの経緯

電子状態計算の基礎方程式は、シュレーディンガー方程式に由来する一般化固有値問題

 $A \mathbf{y}_k = \lambda_k \mathbf{B} \mathbf{y}_k \quad (1)$

¹ 現所属:昭和電工株式会社

が典型である.ここで行列A,BはN×Nエルミート行列(以下計算では実対称行列)であり,Bは正定値である. 行列A,Bはハミルトン行列,重なり行列,とそれぞれ呼ばれる.固有値(λ_k)は電子 1 つ 1 つのエネルギーであり,固有ベクトル(y_k)は電子波動関数の情報である.式(1)に密行列ソルバーを用いると,演算コストはN³に比例し,N=100万次元程度(以下の計算における,25万原子系程度に相当)が限界となる[9].原子基底などの局在基底を用いた場合は,行列A,Bは疎行列として扱え,疎行列(クリロフ部分空間)ソルバーが利用できる.具体的計算手法の1つは,一般化固有値問題の代わりに、一般化シフト型線形方程式

$(zB - A) \boldsymbol{x} = \boldsymbol{b} \quad (2)$

を基礎方程式とすることである.式(2)に,疎行列ソルバーの一種であるシフト型クリロフ部分 空間ソルバーを用いることで、大規模計算向けソルバーが構築できる[4-7,9].ここでzは(複素 数としての)エネルギーであり、**b**は与えられたベクトルである.グリーン関数 $G \equiv (zB - A)^{-1}$ を 用いると、解ベクトルxは形式的にx = Gbと書ける.そのため、式(1)に基づく計算法を波動関 数描像、式(2)に基づく計算法をグリーン関数描像、と考えることができる.グリーン関数と波 動関数には、

$$G(z) = \sum_{k}^{N} \frac{\boldsymbol{y}_{k} \boldsymbol{y}_{k}^{T}}{z - \lambda_{k}} \quad (3)$$

の関係がある.式(2)に対するシフト型クリロフ部分空間ソルバーとして、以下では、超並列型 の多重(multiple)アーノルディ法[6,9]を用いている.具体的には、独自計算コードELSES(Extra-Large-Scale Electronic Structure calculation)[17]に実装にされている.ELSESでは、第一 原理に基づくモデル化(強束縛型)電子状態理論が用いられている.プログラムは、MPI/OpenMP のハイブリッド並列を行っている.数理的概要は、目的物理量がある行列Xのトレース

$$Tr[X] = \sum_{i}^{N} X_{ii} \quad (4)$$

で書ける場合に、各ノードが式(4)右辺における部分和を計算することにより、並列計算が達成 できる(アルゴリズム詳細は[6,9]). したがって原理的な最大並列度数は行列次元数 Nとなる. 以下の計算では、行列次元数 Nは原子数 N_a の数倍である.現状ではプログラムコードの仕様で、 最大 MPI 並列度数は原子数 N_a となっている.上記より、MPI 並列度数 P_{MPI} より原子数 N_a が十分 大きい場合 ($N_a \gg P_{MPI}$)、高い強スケーリング性が期待できる.ただし、通信時間など、他要員 もあり、実際に強スケーリング性が達成されるかどうかは、実装にも依存する.これまで、京全 体を使った計算として、最大で、1 億原子系の電子状態計算が達成されている[9].構造乱れのあ る有機高分子 poly-(phenylene-ethynylene)集合体に対する約 200 ナノメートル立方領域に相当 する系であり、100 ナノメートルスケール計算が達成されたことになる.これら成果は、HPCI を 通じた住友化学との産学共同研究に発展した(最近の課題:HPCI 産業利用実証課題 hp200049「大 規模量子化学計算によるデータ生成と機械学習を統合した有機半導体材料設計」、利用計算機: Oakforest-PACS).

なお、ELSES で生成された行列*A*,*B*の一部データは、数値計算(疎行列ソルバー)研究者を想 定して、ELSES matrix library として公開している[12, 18].

3. メニーコア CPU 向けのプログラム改良

従来は京でプログラム開発を主に行っていたが、2018 年度より Oakforest-PACS に移行した.

アルゴリズムに変更はないが、実装において、メニーコア CPU 向け改良を行なった. 京は 1CPU が 8 コアであったのに対し、Oakforest-PACS は 68 コア(計算利用は 64 コア)からなるメニーコ ア CPU 機である. Oakforest-PACS は flat モードで動作しているノードと、cache モードで動作 しているノードがあるが、主には flat モードで利用している.メニーコア型 CPU では、CPU 内 でコアが複数ドメインに分かれるなどの事情があり、キャッシュ有効利用が(京以上に)重要と 予想された.これに対応するために、OpenMP thread 内部で working array を用意するなどして、 (メモリ量の増加になるが) キャッシュ有効利用化を促進させた。

ノード内 MPI 並列度数Qを変えてのベンチマークを、表1にまとめた.原子座標が与えられ てから電子状態計算が完了するまでの実行時間 Tを記した.計算系は、ダイヤモンド系であ り、周期セル内に $N_a = 524,288$ 原子系(約 52 万原子系)を含むスーパーセル系である.行列次元 は $N = 4N_a = 2,097,152$ (約 200 万)である.P = 4ノードを用い、ノード内 MPI 並列度数Qを、 Q = 1,4,16,64と変化させ、経過時間を比較した.それぞれの計算で、MPI 並列度数は $P_{MPI} =$ PQに、OpenMP スレッド数はR = 64/Qに設定した.Q = 64はフラット MPI に相当する.結果と して実行時間 Tは、ノード内 MPI 並列度数Qにほとんどよらなかった.このことから、キャッ シュ効率化が達成されていると考えられる.

表1 実行時間Tのノード内 MPI 並列数 Q依存性. ダイヤモンド約 52 万原子系.

ノード内 MPI 並列数 Q	1	4	16	64 (フラット MPI)
実行時間T(s)	371.13	371.10	370.25	371.06

P = 4/-ド計算. OpenMP スレッド数Rは, R = 64/Qに設定した.



図2 *P*=512, 1024, 2048, 4096, 8192 ノードでの強スケーリングテスト. ダイヤモンド約3 億原子系に対して,実行時間*T*(s)をノード数*P*の関数として描いた.理想スケーリング線(破 線)も描いた.

4. Oakforest-PACS でのベンチマーク

大規模 HPC チャレンジ制度を利用して、Oakforest-PACS 全ノード(8192 ノード)計算を行った. これまでの計算実績上限である1億原子系[9]の3倍に当たる約3億原子系計算を行った.

図2に、ダイヤモンド約3億(N_a = 314,136,576)原子系でのP=512, 1024, 2048, 4096, 8192 ノードでの強スケーリングベンチマークテスト結果を示した. 1ノードは1MPIプロセス・64 OpenMPスレッドに設定した.原子座標が与えられてから電子状態計算が完了するまでの実行時 間T = T(P)を測定した.強スケーリング型並列効率 $\alpha(P)$

$$\alpha(P) \equiv \frac{T(512) / T(P)}{P / 512} \quad (5)$$

は, $\alpha(1024) = 0.958$, $\alpha(2048) = 0.987$, $\alpha(4096) = 0.966$, $\alpha(8192) = 0.910$, であり, 非常に高 い強スケーリング性が得られた.

関連した数理手法

最後に,我々が開発してきた関連手法について概要を報告する.これらは電子状態計算以外 にも有用である;(i)シフト型クリロフ部分空間手法は複数あるが,その一部(シフト型 conjugate-gradient法,シフト型 conjugate-orthogonal conjugate-gradient法,シフト型 bi-conjugate gradient法)について,汎用数値計算ライブラリ $K\omega$ を開発・公開した[14,19]. 多体量子模型ソルバーH Φ [20,21]での動的グリーン関数の計算機能などに利用されている. (ii)式(2)に基づくグリーン関数計算法を補完する手法として,選択的中間固有対計算手法を開 発し,数値計算ライブラリk-ep として公開した[8,11,22].グリーン関数計算法では,固有 対(固有値・固有ベクトル)を計算することができない.しかし,デバイス性能(電気伝導・ 発光特性など)には,一部の(最高占有エネルギー・最低非占有エネルギー付近の)固有対が 必要であり,これらを選択的に計算する手法が当該手法である.(iii)実測前に強スケーリング 性能を予測する手法を開発した[13].ベイズ推定と性能モデルに基づき,実行時間Teノード数 Po関数(T = T(P))として外挿する($P \rightarrow \chi$)手法である.本研究では 0akforest-PACS 全ノード までの強スケーリング性ベンチマークを行ったが,このような大規模計算資源が利用できる機 会は限られている.そのため,少ないノード数でのベンチマークから,計算時間の外挿できる 手法への需要が大きい.

6. まとめと展望

独自数理アルゴリズムを用いた大規模電子状態計算により、Oakforest-PACS 全ノードに至る 強スケーリング性能が確認された. 今後は,他の関連手法と合わせて,有機デバイス材料系の産 学連携研究を推進していきたい. また,開発された数理手法は汎用であり,電子状態計算以外の 計算科学分野への波及も期待できる.

謝辞

大規模 HPC チャレンジ (0akforest-PACS 全ノード計算) 実施に際し,東京大学情報基盤セン ター・富士通株式会社の関係者各位に,情報提供・サポートを受けた.

- T. Sekitani, T. Someya, Human-friendly organic integrated circuits. Mater. Today 14, 398-407 (2011).
- [2] 安達千波矢, 有機半導体のデバイス物性, 講談社 (2012).
- [3] H. Matsui, Y. Takeda, S. Tokito, Review: Flexible and printed organic transistors: From materials to integrated circuits, Organic Electronics 75 105432/1-17 (2019).
- [4] H. Teng, T. Fujiwara, T. Hoshi, T. Sogabe, S. -L. Zhang, S. Yamamoto, Efficient and accurate linear algebraic methods for large-scale electronic structure calculations with nonorthogonal atomic orbitals, Phys. Rev. B 83, 165103/1-12 (2011).
- [5] T. Sogabe, T. Hoshi, S.-L. Zhang, T. Fujiwara, Solution of generalized shifted linear systems with complex symmetric matrices, J. Comp. Phys. 231, 5669-5684 (2012).
- [6] T. Hoshi, S. Yamamoto, T. Fujiwara, T. Sogabe, S.-L. Zhang, An order-N electronic structure theory with generalized eigenvalue equations and its application to a ten-million-atom system, J. Phys.: Condens. Matter 24, 165502/1-5 (2012).
- [7] T. Hoshi, Y. Akiyama, T. Tanaka, T. Ohno, Ten-million-atom electronic structure calculations on the K Computer with a massively parallel order-N theory, J. Phys. Soc. Jpn. 82, 023710/1-4 (2013).
- [8] D. Lee, T. Miyata, T. Sogabe, T. Hoshi, S.-L. Zhang, An interior eigenvalue problem from electronic structure calculations, Jpn. J. Ind. Appl. Math. 30, 625-633 (2013).
- [9] T. Hoshi, H. Imachi, K. Kumahata, M. Terai, K. Miyamoto, K. Minami, F. Shoji, Extremely scalable algorithm for 10⁸-atom quantum material simulation on the full system of the K computer, Proc. ScalA16 in SC16, 33-40 (2016).
- [10] H. Imachi, T. Hoshi, Hybrid numerical solvers for massively parallel eigenvalue computations and their benchmark with electronic structure calculations, J. Inf. Process 24, 164-172 (2016).
- [11] D. Lee, T. Hoshi, T. Sogabea, Y. Miyatakea, S.-L. Zhang, Solution of the k-th eigenvalue problem in large-scale electronic structure calculations, J. Comp. Phys. 371, 618-632 (2018).
- [12] T. Hoshi, H. Imachi, A. Kuwata, K. Kakuda, T. Fujita, H. Matsui, Numerical aspect of largescale electronic state calculation for flexible device material Jpn. J. Indust. Appl. Math 36, 685-698 (2019).
- [13] K. Tanaka, H. Imachi, T. Fukumoto, A. Kuwata, Y. Harada, T. Fukaya, Y. Yamamoto, T. Hoshi, EigenKernel: A middleware for parallel generalized eigenvalue solvers to attain high scalability and usability, Jpn. J. Ind. Appl. Math. 36, 719-742 (2019).
- [14] T. Hoshi, M. Kawamura, K. Yoshimi, Y. Motoyama, T. Misawa, Y. Yamaji, S. Todo, N. Kawashima, T. Sogabe, Kω Open-source library for the shifted Krylov subspace method of the form (zI H)x = b, Comp. Phys. Comm. 258, 107536/1-10 (2021).
- [15] T. Hoshi, Y. Yamamoto, T. Sogabe, K. Shimamura, F. Shimojo, A. Nakano, R. Kalia, P. Vashishta, Numerical methods for large scale electronic state calculation on supercomputer, Chap. 15 of 21st Century Nanoscience - A Handbook: Nanophysics Sourcebook (Volume One), ed. K Sattler, CRC Press (2019).
- [16] T. Hoshi, S. Itoh, Recent progress in large-scale electronic state calculations and datadriven sciences, *Chap. 14 of Handbook of Silicon Based MEMS Materials and Technologies 3rd. Ed.*, ed. M. Tilli, M. Paulasto-Kröckel, M. Petzold, H. Theuss, T. Motooka, V. Lindroos, Elsevier (2020).
- [17] http://www.elses.jp/
- [18] http://www.elses.jp/matrix/
- [19] https://github.com/issp-center-dev/Komega/
- [20] M. Kawamura, K. Yoshimi, T. Misawa, Y. Yamaji, S. Todo, N. Kawashima, Comp. Phys. Commun. 217, 180-192 (2017).
- [21] http://www.pasums.issp.u-tokyo.ac.jp/hphi/
- [22] https://github.com/lee-djl/k-ep/

西太平洋下のマントル最下部における3次S波速度構造推定

鈴木裕輝

東京工業大学 理学院 地球惑星科学系

1. はじめに

本稿では 2019 年度前期・後期の若手・女性利用者課題「波形インバージョンによる地球マントル最下部における低速度異常の詳細推定」の成果報告を行う。なお、本課題によって得られた 成果の詳細は Physics of the Earth and Planet Interior 誌に掲載された論文(Suzuki et al., 2020)を参照されたい。

2. 研究の背景

不均質は対流システムの境界領域で発達する特徴である。地球マントルの最深部数 100 km は マントル対流の境界層の一つであり、熱的にも組成的にも不均質が発達する領域であるため、地 球の進化を理解するために重要な領域であると考えられている。これまでの全球的な地球内部構 造推定の研究によって、太平洋とアフリカ下の核-マントル境界(CMB)直上の2箇所に、数千km スケールの大規模な低速度領域(LLSVP)が存在することが確認されてきたが、CMB の表面積の約 30%を占める LLSVP の起源と組成は明らかになっていない(Garnero et al., 2016)。LLSVP は第 一義的には温かい領域であると解釈されるが、構造推定の解像度の問題から、小さな上昇流(プ ルーム)の集合体で構成されるのか巨大な温かい領域なのか議論が続いていた。前者はプルーム クラスターモデルとよばれ、後者はサーモケミカルパイルモデルと呼ばれる。マントルの対流に よって、沈み込んだプレートなどの化学的に不均質な物質がよくかき混ぜられてしまい均質にな れば小さな上昇流が複数生じ、プルームの集合(クラスター)を作ると考えられている。また、 対流によって不均質な物質が核とマントルの境界の上に集められる場合、それを核に大きな温か い化学不均質領域(サーモケミカルパイル)ができると考えられる。そのため、LLSVP がプルー ムクラスターモデルもしくはサーモケミカルパイルモデルで説明できる場合、マントル対流の様 式についてその候補となるモデルをさらに絞り込むことができる(Shubert et al., 2004)。2つ のモデルのいずれがもっともらしいかを明らかにするために、詳細な LLSVP 内部の構造推定を行 うことが期待されていた。そこで本研究では、局所的に高解像度が期待できる太平洋 LLSVP の西 端領域を対象に構造推定を行った。対象領域の西太平洋は地震イベント及び地震観測点の分布か ら、LLSVP 内部を方位角の広い分布を持って伝播する地震波データが取得できるため、LLSVP 内 部の構造推定に最適な領域である。

3.構造推定手法について

これまでの研究の多くは、まず観測データから波の到達時刻などを測定し、次にその二次デー タを分析して内部構造を推定するものであった。一方、本研究で用いる「波形インバージョン法」 は、理論地震波形を計算し、観測波形と直接比較し、それらの残差を最小化することによって(但 し、解像度に応じて拘束条件を付ける)、内部構造モデルを系統的に改善して推定する手法であ る。筆者が所属する研究グループは波形インバージョンを効率的に実行するための理論を導き、 その上で関連するソフトウェアを開発してきた(Geller & Hara, 1993; Kawai et al., 2014)。 近年この手法を応用して局所的に詳細な地球内部構造推定が実現され始めている(Kawai et al., 2014; Konishi et al., 2014; Suzuki et al., 2016; Borgeaud et al., 2017; Borgeaud et al., 2019)。



図1: 震源・観測点分布と構造推定対象領域。

日本付近の地震イベントをオーストラリアで観測した北一南方向のデータに加え、トンガ・フィジー付近の地 震イベントを東南アジアで観測した東一西の方位を持つ地震波データを取得してより広い方位角・震央距離を持 つデータセットを作成した。推定対象のマントル最深部 400km は右図に示すように、水平方向には角距離 5°、鉛 直方向に 100 km サイズのボックス状にグリッドを区切ってパラメータ化を行なった。

各震源観測点ペアに対する1次元理論地震波形の計算には、DSM(Geller & Ohminato, 1994; Kawai et al., 2006)を、推定対象領域の各グリッドの弾性定数に関する偏微分係数波形の計算 にはGeller & Hara (1993)の手法を用いた。さらに、既存の3次元全マントル速度構造モデル に対する理論地震波形を、スペクトル要素法に基づく計算プログラムである SPECFEM3D_GLOBE (Komatisch et al., 2002)を用いて計算した。理論地震波形、偏微分係数波形ともに周期^{~6}秒 まで計算し、周期 12.5 秒から 200 秒のバンドパスフィルタを適用して解析に用いた。図2 には 構造推定による理論地震波形の改善の結果の例を示す。



図 2: 観測地震波形と理論地震波形の例。

ここでは解析に用いた地震イベントのうち典型的なイベント2つを例として示す。各イベントの観測及び理論 地震波形を震央距離(角距離)1°毎にスタックして表示している。各パネルには、実際の観測データ(黒線)、標 準的1次元速度構造モデルPREMに対する理論地震波形(緑線)、Born近似を用いて計算した最終モデルに対す る理論地震波形(ピンク線)、SPECFEM3D_GLOBEを用いて計算した最終モデルに対する理論地震波形(青線)を示し ている。最終モデルに対する理論地震波形は、初期モデルに対する理論地震波形よりも観測波形を説明するよう 改善されていることがわかる。各波形は周期12.5秒から200秒のバンドパスフィルタをかけて、直達S波の走 時で揃えて表示している。カラー版はSuzuki et al. (2020)のFig. S7を参照。

4. 結果と解釈

推定した地震波(S波)速度構造(図3)から、以下の3つの特徴的な構造が明らかになった。(i) CMB 直上に直径約300 kmの小規模な低速度異常(平均的なマントル最深部の地震波速度と比べて 最大約3.5%の低速度)が複数存在することがわかった。(ii)また、その低速度異常は、300-400 km上まで鉛直方向につながった構造を有する。以上の(i, ii)の二つの推定された低速度異常の 構造は、これまで1つの巨大な低速度異常領域と考えられてきた太平洋LLSVPは、少なくともそ の西端においては、複数の小規模(約300 km)な低速度異常の集合体で構成されることを示唆し ている。(iii)さらに、フィリピン海の下には、CMB上400 kmからCMBまで垂直に伸びる顕著 な高速度異常(平均的なマントル最下部の地震波速度と比べて最大で約3.5%の高速度)があり、 その位置は約2億年前のイザナギプレート境界と概ね一致していることがわかった。一般的に、 高速度異常領域は温度が(平均より)低い領域であり、低速度異常領域は温度が(平均より)高い領 域と考えられるため、高速度領域は低温の過去に沈み込んだプレートと解釈できる。イザナギプ レートのマントル中での沈降速度を 1.4cm/年とした場合の、プレート運動復元モデルにおける 沈み込み位置の水平方向の変動と、本研究で推定した高速度異常の位置が調和的であることから も、推定された高速度異常が約2億年前に西太平洋で沈み込んだイザナギプレートの残骸である ことが示唆される。



図 3: 西太平洋下の最下部マントル 400 km の S 波速度構造モデル(平均的モデルに対する水 平不均質構造)。

4 枚のパネルは、CMB から 400km 上までの 4 つの層 (100 km 毎) の S 波速度構造モデルを示す。マントル中の平均 スラブ沈下速度を 1.4 cm/年と仮定すると、CMB では 2 億年 (200 Ma)、CMB から 100km 上では 1.9 億年 (190 Ma) となり、それぞれのパネルに示すように、復元されたイザナギスラブの沈み込み位置付近 (Young et al., 2019) に高速度異常が発見されていることが分かる。フィリピン海の下に垂直に連続する高速度異常 (青矢印)の位置は、 各深さのイザナギプレートの沈み込みの位置と調和的である。灰色の破線は、走時の解析 (相対走時差)に基づい て提案された LLSVP の境界を示している (He & Wen, 2009)。CMB 直上には直径約 300 km の低速度異常が複数存 在し、一部は少なくとも 400 km 上までつながっている。カラー版は Suzuki et al. (2020)の Fig. 3 を参照。



図 4: 本研究で得られた S 波速度構造モデルに基づく模式的な解釈図。 直径約 300 km の小規模な低速度異常が複数存在し、フィリピン海の下にある高速度異常は復元された 2 億年前 (200 Ma) のイザナギプレートの沈み込み位置(図中の黒及び藍色線; Young et al., 2019)と概ね一致する。カ ラー版は Suzuki et al. (2020)の Fig. 12 を参照。

5. まとめと今後の展望

本研究では西太平洋の D″領域を詳細に構造推定し、太平洋 LLSVP の西端領域が直径約 300 km の小規模な低速度異常の集合体であることがわかった(図 4)。

今後は、本研究によって示唆された「LLSVP の西側境界領域は小規模の低速度異常の集合体であ る」という仮説をさらに検証するために、例えば物質流動の情報に関連すると考えられる異方性 構造推定を、波形インバージョンによって推定することが期待される。また、本研究で推定した ようなマントル最深部の低速度異常の存在は、waveform annealing 効果(弾性波が低速度領域 を通過する際に波面がなまされる効果)や、マルチパス効果(弾性波の伝播経路上に強い低速度 異常が存在する場合に、周波数に応じて伝播経路が曲げられる効果)を引き起こすと考えられて おり、これらの効果が地震波形に与える影響を定量的に検証することも必要であり、今後の課題 としたい。

参考文献

- Borgeaud, A.F.E., Konishi, K., Kawai, K., Geller, R.J., 2017. Imaging paleoslabs in the D" layer beneath Central America and the Caribbean using seismic waveform inversion. Sci. Adv. 3 (11), e1602700. https://doi.org/10.1126/sciadv.1602700.
- Borgeaud, A.F.E., Kawai, K., Geller, R.J., 2019. 3-D S-velocity structure of the mantle transition zone beneath Central America and the Gulf of Mexico using waveform inversion. J. Geophys. Res.: Solid Earth 124. https://doi.org/10.1029/ 2018JB016924.
- Garnero, E. J., McNamara, A.K., Shim, S.-H., 2016. Continent-sized anomalous zones with low seismic velocity at the base of Earth's mantle. Nat. Geosci. 9 (7), 481-489. https://doi.org/10.1038/ngeo2733.
- Geller, R. J., Hara, T., 1993. Two efficient algorithms for iterative linearized inversion of seismic waveform data. Geophys. J. Int. 115 (3), 699-710. https://doi.org/10.1111/ j.1365-246X.1993.tb01488.x.
- Geller, R. J., Ohminato, T., 1994. Computation of synthetic seismograms and their partial derivatives for heterogeneous media with arbitrary natural boundary conditions using the direct solution method. Geophys. J. Int. 116, 421-446. https://doi.org/10. 1111/j.1365-246X.1994.tb01807.x.
- Kawai, K., Takeuchi, N., Geller, R. J., 2006. Complete synthetic seismograms up to 2 Hz for transversely isotropic spherically symmetric media. Geophys. J. Int. 164, 411-424. https://doi.org/10.1111/j.1365-246X.2005.02829.x.
- Kawai, K., Konishi, K., Geller, R. J., Fuji, N., 2014. Methods for inversion of bodywave waveforms for localized three-dimensional seismic structure and an application to D" structure beneath central America. Geophys. J. Int. 197 (1), 495-524. https://doi. org/10.1093/gji/ggt520.
- Komatitsch, D., Tromp, J., 2002. Spectral-element simulation of global seismic wave propagation-II. Three-dimensional models, oceans, rotation and selfgravitation. Geophys. J. Int. 150, 303-318. https://doi.org/10.1046/j.1365-246X.2002.01716.x.
- Konishi, K., Kawai, K., Geller, R.J., Fuji, N., 2014. Waveform inversion for localized three-dimensional seismic velocity structure in the lowermost mantle beneath the western Pacific. Geophys. J. Int. 199, 1245-1267. https://doi.org/10.1093/gji/ggu288.
- Schubert, G., Masters, G., Olsen, P., Tackley, P., 2004. Superplumes or plume clusters? Phys. Earth Planet. Inter. 146, 147-162. https://doi.org/10.1016/j.pepi.2003.09. 025.
- Suzuki, Y., Kawai, K., Geller, R.J., Borgeaud, A.F.E., Konishi, K., 2016. Waveform in- version for 3-D S-velocity structure of D" beneath the northern Pacific:

possible evidence for a remnant slab and a passive plume. Earth Planets and Space 68, 198. https://doi.org/10.1186/s40623-016-0576-0.

- Suzuki, Y., Kawai, K., Geller, R.J., Tanaka, S., Siripunvaraporn, W., Boonchaisuk, S., Noisagool, S., Ishihara, Y., Kim, T., 2020. High-resolution 3-D S-velocity structure in the D" region at the western margin of the Pacific LLSVP: Evidence for small-scale plumes and paleoslabs, Phys. Earth Planet. Inter. 307, 106544. https://doi.org/10.1016/j.pepi.2020.106544.
- Young, A., Flament, N., Maloney, K., Williams, S., Matthews, K., Zahirovic, S., Müller, R. D., 2019. Global kinematics of tectonic plates and subduction zones since the late Paleozoic Era. Geosci. Front. 10, 989–1013. https://doi.org/10.1016/j.gsf.2018.05. 011.

複雑ネットワーク科学に基づくエラストマーの構造物性相関

天本 義史

九州大学先導物質化学研究所

1. はじめに

エラストマーは、弾性を持った高分子であり、ウレタンフォームやタイヤなどのゴム材料をは じめとして身の回りの様々な所に用いられている。ゴム材料は、金属やセラミックス、プラスチ ックとは異なり特異な力学的性質(物性)を示す。例えば、大変形が可能である、変形後も元の形 に戻る、比較的小さな力で変形するなどが挙げられる。これは、エラストマーの弾性を発現する 機構に由来する。金属やセラミックスなどは、原子・分子間の相互作用に基づくエネルギー弾性 によって弾性挙動が説明される。一方、エラストマーは高分子鎖の配置によるエントロピー弾性 の寄与が大きく、ゴム弾性として理論体系が構築されている¹。エラストマーは、分子スケール において、鎖状の高分子を架橋させたネットワーク構造を有するため、分子鎖の繋がりがエント ロピー弾性に影響するが、ネットワーク構造の定量化が困難であり、未だに議論が続いている²。

複雑ネットワーク科学は、「もの」(ノード)と「もの」の繋がり(リンク)に関するネットワー ク構造の特徴を研究する研究分野であり、データサイエンスの手法の一つとしても挙げられる。 社会や経済、バイオ、感染症など、様々な領域で適用例があり、ネットワーク構造の特徴を抽出 する事で、各ノードの役割などが議論できる。最近では、材料分野においても、複雑ネットワー クの観点から、材料中の繋がりに関する構造の特徴量が抽出され、物性に対する影響が見出され ている³。しかしながら、複雑な架橋構造を有するエラストマーに複雑ネットワーク科学を用い た例は、筆者が知る限り、報告されていない。

本研究では、複雑ネットワーク科学の観点から、エラストマーの繋がりに関する構造特徴量の 抽出とエントロピー弾性の記述を目的とする (図 1)。具体的には、複雑ネットワークの指標で ある近接中心性と初期の架橋点間距離を用いて、エントロピー弾性を決定付ける伸長下の架橋点 間距離と架橋点の揺らぎとの相関を議論する。さらに、修正中心性という指標を独自に定義し、 エントロピー弾性の統一的な記述を試みる。



図1:エラストマーの繋がりに関する不均一性と一軸伸長。

(a-b) 均一(a)、及び、不均一(b)な繋がりを持つエラストマーと近接中心性。ノードの大きさが近接中心性に 対応。 (c)一軸伸長における架橋点間距離 $r_{vvz}(\lambda)$ 。図は、原著論文⁵より転載。カラー版は原図を参照のこと。

2. 手法

2.1. 分子シミュレーションによるエラストマーの構築

分子動力学シミュレーションを用いて、エラストマーの構築と一軸伸長を行なった。シミュレ ーターとして OCTA を用い、粗視化シミュレーションであるバネ-ビーズモデルに基づき、エラス トマーを構築した。均一ネットワークとして、分岐数が 4 となるように、ダイヤモンド型のエラ ストマーを構築した。合成型エラストマーとして、Tetra-PEG ゲル⁴を模倣して、エラストマー を調製した(図 2a 左)。2 種類の 4 分岐の星形高分子をそれぞれ 50 本ずつシミュレーションのセ ルの中に配置し、空間的に近接した高分子の末端が存在する際に、結合を形成させる事で、架橋 反応を行った。相補的かつ 98%以上の反応率であったため、ループ構造や未架橋によるネットワ ーク構造の欠陥は、ほとんど無視できる。架橋反応の濃度 (c/c*, c*は重なり合い濃度)を変える 事で、繋がりの異なるエラストマーが得られた。

ランダムネットワークに関しては、ノード間にランダムに繋げたリンクの組み替えにより構築 した(図 2a 右)。架橋点(ノード)をランダムに配置した後、一つの架橋点のリンク数(分岐数)が 4になるように高分子鎖(リンク)を架橋点間ヘランダムに繋いだ。その後、任意の二つのリンク について、交換前後の距離の和が、大きくなる場合は「Far」、小さくなる場合は「Near」とし、 分岐数を4に保ちつつリンクを交換する事で、様々な繋がりを持つエラストマーを構築した。

2.2. 近接中心性、及び、修正中心性の算出

Rのパッケージである「igraph」を用いて、複雑ネットワークにおける繋がりに関する指標の 一つである近接中心性 *C*。を算出し、エラストマーのネットワーク構造に関する特徴量とした。 近接中心性は、ネットワーク全体に対して、あるノードがどの程度繋がりに関して中心にいるか 表し、下記の式で定義される。

$$C_{c,i}(\lambda_0) = \frac{1}{\sum_{i=1}^{n} d_{ij}}$$
(1)

ここで、 d_{ij} は、ノード i とノード j の最短パス長である。最短パス長は、二つのノードについ て、他のノードを通して辿る際に最小となるリンク数である。近接中心性は、他の全てのノード に対する最短パス長の和の逆数である。あるノード i において、最短パス長が大きくなるノード が増えると、(1)の分母が大きくなるため、近接中心性が小さくなり、そのノードが繋がりに関 してネットワークの端に存在する事を示す。逆に言えば、繋がりに関して中心にいるノードほど、 d_{ij} が小さいノードが増えるため、近接中心性が大きくなる。 λ は、一軸伸長における伸長比であ り、 $\lambda = L_z/L_{z0}$ (図 lc)と定義され、 λ_0 は、伸長前である事を表す。

伸長前の距離を取り入れた修正中心性を下記のように定義した。

Modified centrality(i) =
$$\frac{1}{\sum_{j=1}^{n} \min_{path} \sum r_{ij}^{-1}(\lambda_0)}$$
 (2)

ここで、*r*_{ij}(*λ*₀)は、伸長前の架橋点(ノード)間のユークリッド距離である。通常の近接中心性で は、最短パスを辿る際に、それぞれのリンクの重みを1として最短パス長を算出するが、修正中 心性では、距離の逆数の和を最小化し、算出される。ネットワークとして中心に存在するほど、



図 2: エラストマーの調製と一軸伸長下の応力-歪曲線、架橋点間距離のアフィン変形。 (a) 合成的エラストマー(左)とランダム架橋エラストマー(右)の調製。(b) 各エラストマーの応力-歪曲線。 (c) 架橋点間距離 r_{xyz}(λ)のアフィン変形を仮定した場合(r_{xyz, affine}(λ))との比較。図は、原著論文⁵より転載。

カラー版は原図を参照のこと。

かつ、隣接する架橋点と空間的な距離が離れるほど、修正中心性が大きくなる。つまり、修正中 心性は、トポロジー的な繋がりと空間的な距離を同時に反映した指標である。

3. 一軸伸長における力学物性

ゴム弾性では、材料全体の変形によって、架橋点間にある高分子鎖も同様に変形する事で、高 分子鎖のエントロピーが減少し、材料全体の応力を決める。材料全体と架橋点間距離が相似的に 変化する場合、アフィン変形すると言う。代表的なゴム弾性モデルであるファントムネットワー クモデルを下記に示す。

$$\sigma = vk_B T(1 - \frac{1}{f})(\lambda^2 - \lambda^{-1})$$
(3)

ここで、応力σは材料を変形させた際の単位面積あたりの力、vは単位体積あたりの高分子鎖の数、 f は架橋点の分岐数を示す。この弾性モデルでは、単位体積あたりの高分子鎖の数と分岐数が決 まれば、応力と伸長比の関係が一意に決まる事を表す。また、架橋点間距離のアフィン変形は仮 定されていないが、分岐数の増加により架橋点のゆらぎが抑制されるため、高い応力を示すと考 えられている。つまり、ゴム弾性において、架橋点間距離と架橋点の揺らぎは、応力を決定付け るパラメータとして扱うことができる。今回用いたエラストマーは、単位体積あたりの高分子数 と分岐数がほとんど同一にしているため、ファントムネットワークモデルにおいて、同じ応力-歪曲線になる。

様々な架橋構造を有するエラストマーを計算機の中で一軸伸長する事で、応力-歪曲線を求めた。 歪は、変形した長さを変形前の長さで除した値であるが、式(1)-(3)と合わせ、歪に1を足した 伸長比えを用いた。図 2b に示すように、多様な応力-歪曲線が得られた。合成的エラストマーに ついては、架橋濃度が高いほど、高い応力を示し、ランダム架橋エラストマーでは、「Far」>「Random」 >「Near」の順に、高い応力となった。図 2c に伸長下の架橋点間距離の伸長比依存性を示す。縦 軸は、初期の架橋点間距離からアフィン変形を仮定して求めた値で規格化しており、値が1であ れば、アフィン変形に対応する。アフィン変形からのズレが図 2b の応力の違いが一致しており、 応力の多様性がアフィン変形からの逸脱によって説明される事がわかった。つまり、ファントム ネットワークで考慮される以外のネットワーク構造がアフィン変形からのズレを引き起こし、応 力を決めていると考えられる。

4. 近接中心性と架橋点間距離、及び、架橋点のゆらぎの相関

ネットワーク構造の特徴量として、近接中心性 $C_{c}(\lambda_{0})$ と伸長前の初期の架橋点間距離 $r_{xyz}(\lambda_{0})$ を用いて、応力の記述を試みた。架橋点間のそれぞれの分子鎖の応力に対する寄与を直接求める 事が難しいため、伸長下の架橋点間距離 $r_{xyz}(\lambda)$ と架橋点のゆらぎに対応する平均二乗変位 $MSD_{xyz}(\lambda)$ を応力に対応するパラメータとした。図3に、それぞれの相関関係を示す。図3bに見 られるように、伸長前の架橋点間距離は、伸長下の架橋点間距離と強い相関があり、応力を決定 付ける一つの因子である事がわかった。伸長前後の架橋点間距離に相関があるのは、一見当然の ようだが、ダイヤモンド型の均一ネットワークではこのような相関が見られなかったため、ネッ トワーク構造の不均一性に由来する。一方で、架橋点のゆらぎに関しては、近接中心性が部分的 に相関関係が認められるものの、二つの特徴量では、統一的な記述が困難であった(図3c-d)。



図 3: 近接中心性 *C*_c(λ₀)と伸長前の架橋点間距離 *r*_{xyz}(λ₀)による応力に対応する パラメータの記述。

(a-b) 伸長下の架橋点間距離 $r_{xyz}(\lambda)$ に対する $C_c(\lambda_0) \ge r_{xyz}(\lambda_0)$ のプロット。(c-d) 伸長下の架橋点のゆらぎ $MSD_{xyz}(\lambda)$ に対する $C_c(\lambda_0) \ge r_{xyz}(\lambda_0)$ のプロット。各点とエラーバーは、約 1250 個の架橋点に対する平均値と標準 偏差に対応。図は、原著論文⁵より転載。カラー版は原図を参照のこと。

5. 修正中心性の導入

近接中心性と架橋点間距離の単独では、応力を決定づけるパラメータの部分的な相関関係に留 まったため、修正中心性を用いる事で、統一的な記述を試みた。図4に修正中心性を説明変数と した架橋点間距離、及び、架橋点のゆらぎのプロットを示す。伸長下の架橋点間距離に対して直 線的に増加し、架橋点のゆらぎに関しては、MSDの対数プロットが直線的に低下した。また、ダ イヤモンド型の均一ネットワークを除き、いずれの構造のエラストマーが同じ直線上にプロット された⁵。これより、今回導入した修正中心性は、応力に対して、エラストマーの繋がりに関す る優れた特徴量になることが明らかとなった。



図 4:修正中心性を用いた応力に関連するパラメータの記述。

(a) 伸長下の架橋点間距離 *r*_{xy2}(*λ*)に対する修正中心性のプロット。(b) 伸長下の架橋点のゆらぎ *MSD*_{xy2}(*λ*)に対 する修正中心性のプロット。各点とエラーバーは、約 1250 個の架橋点に対する平均値と標準偏差に対応。図は、 原著論文⁵より転載。カラー版は原図を参照のこと。

今回用いた近接中心性は、各架橋点に対して定義されるため、エラストマー中に存在するたく さんの架橋点のそれぞれに対して、ゴム弾性に対する役割を明確化できる。ネットワーク全体に 対して繋がりに関して中心に存在し、かつ、隣接する架橋点との距離が離れる架橋点は、ゴム弾 性に対しての寄与が大きい。一方で、材料全体を伸長しているにも関わらず、ゴム弾性に対して さほど貢献しない架橋点も存在する。これらの架橋点の総和として、材料全体の応力が決定付け られる。また、本稿では取り上げないが、修正中心性を用いる事で、応力が集中する分子鎖を予 測できる事を明らかにしている。つまり、ネットワークの繋がりに関する特徴量から、エラスト マーの応力や破壊などの諸物性を明らかにできる可能性が示唆された。

6. まとめ

本稿では、複雑ネットワークの観点からエラストマーの繋がりに関する構造物性相関を議論し た。近接中心性と初期の架橋点間距離が、エントロピー弾性を決定付ける伸長下の架橋点間距離 と架橋点のゆらぎに重要な特徴量であった。初期の架橋点間距離を近接中心性に導入した修正中 心性を用いることで、伸長下の架橋点間距離と架橋点のゆらぎを統一的、かつ、線形的に記述で きた。このように複雑ネットワークの観点から材料の構造に関する特徴を評価することで、新た な観点から、エラストマーに留まらず様々な材料の構造物性に関する知見を得ることができると 期待される。

謝辞

本研究は、東京大学情報基盤センター若手・女性利用制度のほか、学際大規模情報基盤共同利用・共同研究拠点(課題番号: jh200016-NAH)による支援を受けて行われました。本研究は JSPS 科研費、基盤研究(B) JP20H02800、新学術研究領域(材料離散幾何解析) JP20H04644 の助成を受けたものです。また、立教大学の大西 立顕 教授と共同で推進しました。シミュレーションでの分子構造構築と一部の解析は J-0CTA を用いました。この場を借りて、厚く御礼申し上げます。

参考文献

1) 久保亮五『ゴム弾性』, 裳華房, 1947.

2) Zhong, M.J., Wang, R., Kawamoto, K., Olsen, B.D., and Johnson, J.A. "Quantifying the impact of molecular defects on polymer network elasticity", *Science* **353**, 1264–1268 (2016).

3) Yao H., Hsieh Y.-P., Kong J., and Hofmann M. "Modelling electrical conduction in nanostructure assemblies through complex networks", *Nat. Mater.* **19**, 745-751 (2020).

4) Sakai, T., Matsunaga, T., Yamamoto, Y., Ito, C., Yoshida, R., Suzuki, S., Sasaki, N., Shibayama, M., and Chung, U.I. "Design and fabrication of a high-strength hydrogel with ideally homogeneous network structure from tetrahedron-like macromonomers", *Macromolecules* **41**, 5379–5384 (2008).

5) Amamoto, Y., Kojio, K., Takahara, A., Masubuchi, Y., Ohnishi, T. "Complex Network Representation of the Structure-Mechanical Property Relationships in Elastomers with Heterogeneous Connectivity", *Patterns* 1, 100135 (2020).

東京大学工学部・工学系研究科共通科目「スパコンプログラミ

ング(1)および(I)」

塙 敏博

東京大学情報基盤センター

1. はじめに

工学部および工学系研究科の共通科目「スパコンプログラミング(1)および(I)」を通年科目(S セメスター、A セメスター共通)として開講している。前任者から引き継いで 2016 年度から実 施しているものであり、2020 年度 A セメスターで連続 28 回の開講を数える。後期教養教育科目 にも登録されており[1]、後で述べるように、工学部や工学系研究科以外の学生も数多く受講し ている。また、2017 年度より計算科学アライアンスの認定講義にもなっている[2]。

2020 年度は、本講義の受講生に対して 0akforest-PACS (2016 年 12 月運用開始)を用いた演習 を行った。さらに、2017 年 3 月に導入された Reedbush-H スーパーコンピュータシステムも講義 で利用した。受講生にとって、最新、最先端のスパコン環境を使用できることで、より高い動機 付けになると考えている。

0akforest-PACS では 16 ノード(68 コア×16 ノード=1088 コア)、Reedbush-H では 2 ノード計 4 GPU が利用可能であり、教育利用であっても十分に高い並列数を扱うことができている。

2020 年度については、コロナ禍により、S セメスターの開始時点から、全て Zoom を用いたオ ンライン講義とした。アカウント情報の受け渡しや、機材やネットワークのトラブルにより一部 混乱もあったが、概ね順調に進めることができた。これまでも講義資料は Web に掲載していたが、 加えて、Zoom の録画を LMS に掲載することで、学生からは復習ができて良いと好評であった。 演習の際に、Zoom 共有画面での操作のデモと、自分の端末とを見比べて作業がしやすいとのコ メントがあった。以上を踏まえて、来年度も引き続きオンラインでの講義を想定している。

2. 講義内容

本講義で行った講義内容を表1に示す。内容については、Aセメスターからは、Pythonを用いた並列処理や機械学習フレームワークの使用方法についても紹介することにした。用いたアプリケーションは、行列-ベクトル積、べき乗法(行列-ベクトル積を応用した固有値・固有ベクトルの初等的な数値計算法)、行列-行列積、LU分解法の4種類である。

加えて、講義の一環として、受講生が参加できる「プログラミングコンテスト」を開催した。 すべての出題を解答できるプログラムを提出したコンテストの参加者には、成績に加点した。さ らに、コンテストにおける入賞者(1位~3位)においては、無条件で「優」以上を与えた。

演習には、表2に示す11本のサンプルプログラムを教材として用いている。受講者はこれら をダウンロードした上で、動作確認した上で演習を実施する。表2最後のPythonによるものを 除いて、それぞれ、C言語版とFortran版を用意している。

表1 講義内容

講義回数	講義内容
ガイダン	初回ガイダンス、高性能計算の基礎
ス	
第1回	並列数値処理の基本演算
第2回	スパコンを利用しよう : スパコン (Reedbush-U)を用いた実習
第3回	高性能プログラミング技法の基礎(1): 階層メモリ、パイプライン処理、ループ
	アンローリング、キャッシュヒット率
第4回	高性能プログラミング技法の基礎(2): キャッシュブロック化、OpenMP 超入門
第5回	行列ーベクトル積
第6回	べき乗法
第7回	行列-行列積(1): ループ交換法、ブロック化(タイリング)法、 Cannon のアルゴ
	リズム、Fox のアルゴリズム、簡単な並列化
第8回	行列-行列積(2):完全な並列化
第9回	LU 分解法(1):LU 分解法(ガウス・ジョルダン法、ガウス消去法、枢軸選択、LU
	分 解法(外積形式、内積形式、クラウト法、ブロック形式ガウス法、縦ブロック
	ガウス法、前進・後退代入))、コンテスト課題発表
第10回	LU 分解法(2):LU 分解のアルゴリズム詳細
第11回(S)	LU 分解法(3): 非同期通信、LU 分解の並列化
第11回(A)	GPU プログラミング(1): OpenACC
第12回(S)	GPU プログラミング(OpenACC による Reedbush-H の利用、性能比較)
第12回(A)	Python & 機械学習

表2 サンプルプログラム一覧

	サンプルプログラム内容
Samples-ofp	並列版 Hello プログラム、並列円周率計算プログラム、 逐
(第2回)	次転送方式による並列総和演算プログラム、二分木通信方式
	による並列総和演算プログラム、時間計測方法の並列プログ
	ラム
Mat-Mat-noopt-ofp	行列-行列積の逐次プログラム(逐次チューニング用)
(第3回)	
Mat-Mat-openmp-ofp	行列-行列積の逐次プログラム(OpenMP 並列化用)
(第4回)	
Mat-vec-ofp	行列-ベクトル積の逐次プログラム
(第5回)	
PowM-ofp	ベキ乗法の逐次プログラム
(第6回)	
Mat-Mat-ofp	行列-行列積の逐次プログラム(お手軽並列用)
(第7回)	

Mat-Mat-d-ofp	行列-行列積の逐次プログラム(完全分散並列用)
(第8回)	
LU-ofp	LU 分解法による連立一次方程式の求解の逐次プログラム
(第9~11回(S), 9,10回	
(A))	
Isend-ofp	非同期通信の並列プログラム
(第11回(S),第10回(A))	
Mat-mat-acc	行列-行列積の逐次プログラム(OpenACC 並列化用)
(第12回(S),第11回(A))	
Python	Python による並列プログラム、機械学習サンプル
(第12回(A))	

3. 受講者についての統計データ

(1) 受講者数

2020 年度の S セメスターの履修登録者は 36 名 (学部:18 名、大学院:18 名)、A セメスター の履修登録者は 24 名 (学部:13 名、大学院:11 名) であった。そのうち、単位取得者は、22 名 (学部:12 名、大学院:10 名) であった。

(2) 受講者の所属

今年度の履修登録者について、以下の通りである。

- 工学部: 30 名
 - ▶ 工学部社会基盤学科 3
 - ▶ 工学部機械工学科: 1
 - ▶ 工学部機械情報工学科:5
 - ▶ 工学部航空宇宙工学科:6
 - ▶ 工学部電子情報工学科: 4
 - ▶ 工学部電気電子工学科: 1
 - ▶ 工学部計数工学科: 1
 - ▶ 工学部マテリアル工学科:3
 - ▶ 工学部化学システム工学科:1
 - ▶ 工学部システム創成学科:5
- 教育学部:1名
 - ▶ 教育学部総合教育科学科:1
- 総合文化研究科:3名
 - ▶ 総合文化研究科広域科学専攻: 3
- 工学系研究科: 15 名
 - ▶ 工学系研究科社会基盤学専攻:1
 - ▶ 工学系研究科機械工学専攻:1
 - ▶ 工学系研究科航空宇宙工学専攻:2

- ▶ 工学系研究科システム創成学専攻: 3
- ▶ 工学系研究科電気系工学専攻: 3
- ▶ 工学系研究科物理工学専攻:1
- ▶ 工学系研究科マテリアル工学専攻:3
- ▶ 工学系研究科化学生命工学専攻:1
- 新領域創成科学研究科: 2 名
 - ▶ 新領域創成科学研究科メディカル情報生命専攻:1
 - ▶ 新領域創成科学研究科先端エネルギー工学専攻:1
- 情報理工学系研究科:9名
 - ▶ 情報理工学系研究科システム情報学専攻:5
 - ▶ 情報理工学系研究科数理情報学専攻:1
 - ▶ 情報理工学系研究科知能機械情報学専攻:3

以上から、工学系・情報系を中心に、学内の多様な学部・学科から受講生が集まっていること がわかる。

本講義を通じて、本センターのスーパーコンピュータシステムの利用者を育成するだけでなく、 スーパーコンピュータの活用を通じて学際領域分野に貢献できる人材を輩出していると考えら れる。また、スパコン利用の経験が多くの学生に広がることにより、学界のみならず、産業界に おいてスパコンを利活用できる人材育成につなげていけるものと考えている。

来年度は、5月中旬より稼働を始める Wisteria/BDEC-01 を、なるべく早い段階で使用できる よう移行したいと考えている。

参考文献

[1] 東京大学 後期教養教育科目について

http://www.u-tokyo.ac.jp/stu04/koukikyouyou.html

[2] 東京大学 計算科学アライアンス http://www.compsci-alliance.jp/

第147回お試しアカウント付き並列プログラミング講習

「GPU プログラミング入門」

星野哲也

東京大学情報基盤センター

本稿は、2020年12月15日にオンライン会議システムZoomを用いて開催された『第147回お 試しアカウント付き並列プログラミング講習会:GPUプログラミング入門』の開催報告である。 近年では演算のアクセラレータとして GPUを搭載した計算ノードを有するスーパーコンピュタ ーが増えてきている。GPUを利用したシステムは電力性能に優れる特徴があり、Green500の上 位を占めている。本センターで2017年3月より運用を開始した、Reedbush-Hスーパーコンピュ ータシステムにもTesla P100 GPUが搭載されている。また GPUはAIやビッグデータ、機械学 習といった分野において活用されており、GPUプログラミングの需要も高まってきている。 本講習会では、GPUを用いるために必須である、GPUのアーキテクチャの特性やプログラミン グ手法に関する講義および実習を行う。対象 GPUとしては主に NVIDIA 社のTesla GPU (Pascal アーキテクチャ)を、GPU向けの並列化プログラミング環境としては主に OpenACCを用いる。 実習では行列積などの基本的な計算問題を題材として、GPU向けのプログラムを作成する方法 や、GPUプログラミングを行う上で役に立つツールの使用方法、GPU向けの最適化を適用する までの手順を学ぶ。本講習会は Reedbush-Hを用いて実習を行なった。受講者には1ヶ月有効な

本講習会のスケジュールを表1に示す。講義内容の詳細については、ウェブページ¹から資料を ダウンロードできるのでそちらを参照いただきたい。合計17名の事前登録者があり、13名(学 生:6名,研究機関:5名,企業:2名)が受講した。講習会終了後にアンケートを実施した(12 名より回収)。表2は質問項目と回答(5段階評価)の人数分布である。

アカウントが与えられ、1ノード30分までのジョブが実行可能である。

	時間帯	内容	講師
12月15日	10:00~10:50	スパコンの使い方など	
	11:00~11:50	OpenACC 入門(座学)	
	13:30~14:20	OpenACC 演習 I	日眠折山
	14:30~15:20	OpenACC 演習 II	生野省也
	15:30~16:20	OpenACC 演習Ⅲ	
	16:30~17:00	質問など	

表1 GPU プログラミング入門 スケジュール

表2 アンケート集計結果

https://www.cc.u-tokyo.ac.jp/events/lectures/

	評点	1	2	3	4	5
(a) 講習会時間	短い⇔長い		2	8	2	
(b) 講習会講義内容 (プレゼン)	簡単⇔難		3	6	3	
(c) 配布資料内容	簡単⇔難		3	7	2	
(d) サンプルプログラム内容	簡単⇔難		1	10	1	
(e) 満足度(平均 4.55)	不満⇔満足			3	6	3

第148回お試しアカウント付き並列プログラミング講習

「OpenACC と MPI によるマルチ GPU プログラミング入門」

星野哲也

東京大学情報基盤センター

本稿は、2020 年 12 月 22 日にオンライン会議システム Zoom を用いて「OpenACC と MPI に よるマルチ GPU プログラミング入門」が開催されました。本講習会は、東京大学内および学 外における本センターのスーパーコンピュータの利用を考えているユーザに加え、社会貢献の 一環として、高性能計算や並列処理の技術習得を目的にした企業に所属する研究者や技術者の 方が参加することができます。本講習会では、GPU に焦点をあて、GPU 搭載スパコンで大規 模な数値計算を実現するために必須となるマルチ GPU プログラミングについて学びます。 GPU は、NVIDIA 社の Tesla GPU (Pascal アーキテクチャ)を対象とし、プログラミング環境 としては既存コードに指示文(ディレクティブ)を追加することで GPU 化できる OpenACC を用います。GPU 間の並列化は MPI を利用します。実習では、基礎的なプログラムを通して、 OpenACC による GPU コードの作成, OpenACC と MPI による複数 GPU を用いたプログラ ムの作成方法を学びます。最後に、より実践的な題材として複数 GPU を用いた FDTD 法に よる電磁波伝搬計算を取り上げ、これを通してマルチ GPU プログラミングの理解を深めます。 実習には、東京大学情報基盤センターに設置されている ReedBush(Reedbush-H)スーパーコンピ ュータシステムを使用します。本講習会は、2017年度より開催されており、今回が4回目の 開催になります。本講習会のスケジュール は表 1 の通りです。講習会の内容の詳細や講習会 で使用した資料は、講習会の Web ページ¹に掲載しておりますので、そちらをご覧ください。 受講者には実習で使用した Reedbush-H を受講後 1 ヵ月間利用できるお試しアカウントが与 えられます。 今回の講習会では、合計 16 名の事前申込者があり、そのうち 15 名が受講しま した。受講者の内訳は、学部学生:2名、大学院(修士)学生:1名、大学院(博士)学生:5 名,研究生:1名,助教:2名,技術職員:1名、企業の方:2名でした。講習会終了後にアン ケートを実施した質問項目と回答の人数分布 は表 2 の通りです。

時間	内容
10:30~10:30	スパコンの使い方など
10:30~12:40	GPU・OpenACC・MPI の復習
13:30~14:20	OpenACC 演習
14:30~15:20	OpenACC+MPI 演習 I
15:30~16:20	OpenACC+MPI 演習 II
16:30~17:00	質問など

表1 スケジュール

http://nkl.cc.u-tokyo.ac.jp/support/kosyu/124/

	評点	1	2	3	4	5
(a) 講習会時間	短い⇔長い		2	5	1	1
(b) 講習会講義内容(プレゼン)	簡単⇔難		1	4	3	1
(c)配布資料内容	簡単⇔難		1	6	2	
(d) サンプルプログラム内容	簡単⇔難		2	6	1	
(e) 満足度	不満⇔満足			2	4	3

表2 アンケート集計結果

第 149 回お試しアカウント付き並列プログラミング講習会

「OpenFOAM 中級」実施報告

今野 雅

東京大学情報基盤センター客員研究員

2021年1月19日(火), PC クラスタコンソーシアム (実用アプリケーション部会・HPC オ ープンソースソフトウェア普及部会)、オープン CAE 学会との共催で,第149回お試しアカウン ト付き並列プログラミング講習会「OpenFOAM 中級」がオンラインで開催された。本講習会は、 センターに設置されたスーパーコンピューター(以降,スパコン)の利用促進とスパコンを用い た数値流体解析の普及を目的として実施されたものである。なお,本講習会はセンターのお試 しアカウント付き並列プログラミング講習会として行われた18回目の OpenFOAM の講習会であ る。受講者は、学部学生5名、大学院学生(修士)1名、大学院学生(博士)4名、講師1名、助教 1名、企業の方6名であり、事前申込者20名、受講者合計は18名であった。センターが運営 するスパコン Oakbridge-CX を用い、Oakbridge-CX の概要、利用方法、OpenFOAM の演習が1 日終日の日程で行われた。当日のプログラムを表1に掲載する。なお、講習会終了後約1ヶ月 有効なお試しアカウント(Oakbridge-CX,最大ノード数8,最大実行時間15分)が受講者に与え られた。

【2021年1月19日 (火)】

- 10:00 10:35 講習会の準備 イントロダクション
 - 0akbridge-CX へのログイン 講習会レポジトリのクローン
- 10:35 13:00 3次元ダムブレイク流れ演習 I module による OpenFOAM の環境設定 解析対象(Kleefsman らによる段波・構造物衝突流れ実験) OpenFOAM の二相流ソルバ interFoam の基礎方程式 解析ケースの作成 damBreakWithObstacle チュートリアル 本演習の解析手順・実行コマンド・設定ファイル 解析ケースファイルのコピー blockMesh と snappyHexMesh による格子生成その1
 13:00 - 18:00 3次元ダムブレイク流れ演習 II
- 13.00 18.00 3 K 2 5 C 7 5 M 2 6 11 blockMesh と snappyHexMesh による格子生成その 2 ParaView による格子の可視化 解析条件の設定 初期値設定

表1 講習会プログラム

領域分割 ソルバ実行 圧力時系列の実験値との比較 並列計算結果の再構築 ParaViewによる解析結果の可視化 解析条件変更演習 Spackによる OpenFOAM のインストール より高度な設定

講習会終了後のアンケート集計結果(回答数16)を表2に示すが、参加した満足度の平均は5 点満点中、4.31と高かった。また、参加者から表3に示すご意見を頂いた。今後の講習会の参 考にしたい。

評	講習	冒会の時間	講習会の講義内容 (プレゼン)		西己ィ	垳資料の内容	サンプルプログラム 内容		参加	1した満足度
1	短い	0	簡単	0	簡単	0	簡単	0	不満	0
2		1		1		0		0		1
3	適切	11	適切	8	適切	12	適切	9	普通	0
4		3		7		3		6		8
5	長い	1	難	0	難	1	難	1	満足	7
	平均	3. 25	平均	3.38	平均	3. 31	平均	3.50	平均	4. 31

表2 アンケート集計結果

表3講習会に対するご意見(原文ママ)

• 講習会の開催、ありがとうございました。

- 分量が多く時間的制約もあるので、もし予習できる事前資料などがあればよりスムーズに進むかな とも思いました。
- 今回はありがとうございました。また参加させていただきたいです。
- 本日はわかりやすく説明していただき、ありがとうございました。講義は2日に分かれて行うことができたら素晴らしいと思います。途中で自己チェックすることが難しく、あんまり先まで進んでしまうと途中のミスを修正するのが難しくなってしまいました。よろしくお願いいしたします。
- 今後も OpenFOAM の講習会を開催していただけると嬉しいです。
- よく準備された資料やプログラムと丁寧な解説で大変満足です.プログラミングの他にも先生の Tips や解説(rsyncのオプションなど)が有難かったです.要望は強いて言えば、●1日で全てや らずに、日を分けるとその間に自習が出来そうと思いました.●例えば、年度はじめに「どの講習 会が自分に向いているか」の短い説明会・相談会があるとより有難いです.ありがとうございました.
- OpenFOAMの機能や詳細の調べ方について詳しく説明していただきよかったです。質問に対して、こちらの進捗状況やログファイルなど見ながら的確にアドバイスしていただけたのでと進めやすか

ったです。休憩のタイミングなども適切でした。

- •よりレベルの高い内容ものも受講したい。コードの説明など
- ダムブレーク以外のケースも取り上げて欲しい
- 丁寧な解説を聞くことができ、さらに資料以外にも口頭や別画面での補足を付けて頂けたため、参考になりました。今後の学習に役立てさせて頂きます。

原稿募集

本誌では利用者の皆様からの原稿を募集しています。以下の執筆要項に基づいて投稿してください。

執筆要項

- 1 内容は、本センターのスーパーコンピューターシステムの利用者にとって有意義な情報の 提供となる原稿とします。
- 2 掲載可否については当編集委員会で決定させていただきます。
- 3 掲載可とした投稿原稿に対して、加除訂正を行うことがあります。
- 4 原稿枚数には特に制限はありませんが、シリーズに分割することもあります。
- 5 プログラムの実例が大量になる場合(概ね1頁を超える)は、本文には一部のみを記述し、 投稿者の Web ページ等に全体を掲載し、その URL を引用するようにしてください。
- 6 原稿は横書きにしてください。
- 7 原稿は、印刷出来上がり寸法がB5判で文字の大きさ9ポイントを標準とし、印字部分は 必ず左端を2.5cm以上空けて、縦21cm、横14cmになるようにしてください。A4サイズの 場合はB5サイズに縮小した場合に上記のサイズになるようにしてください。

併せて, PDF 形式(フォント埋め込み)の完全原稿を電子メールにて uket suke@cc. u-tokyo. ac. jp まで提出願います。

- 8 投稿原稿は返却しません。
- 9 採用された原稿は、本センターの Web ページ上でも掲載させていただきます。 希望がある場合は、1タイトルにつき 50 部の別刷を差し上げます。

【スーパーコンピュータシステム利用案内】

お知らせ	Web ページ	
サービス案内、運転状況など	https://www.cc.u-tokyo.ac.jp/	
公開鍵登録、マニュアル閲覧など	https://obcx-www.cc.u-tokyo.ac.jp/ https://ofp-www.jcahpc.jp/ https://reedbush-www.cc.u-tokyo.ac.jp/	(Oakbridge-CX) (Oakforest-PACS) (Reedbush)

お問い合わせ内容	お問い合わせ先
利用申込関係	電子メール: uketsuke@cc. u-tokyo. ac. jp 東京大学情報システム部情報戦略課研究支援チーム
プログラム相談・システム利用に 関する質問	https://www.cc.u-tokyo.ac.jp/supports/contact/#SOUDAN
システムに関する要望・提案	voice@cc.u-tokyo.ac.jp

【IP ネットワーク経由時のホスト名】

システム	ホ ス ト 名
Oakbridge-CX スーパーコンピュータ システム	obcx. cc. u-tokyo. ac. jp 以下のホストの何れかに接続します [※] obcx0 {1-6}. cc. u-tokyo. ac. jp
Oakforest-PACS スーパーコンピュータ システム	ofp. jcahpc. jp 以下のホストの何れかに接続します* ofp0{1-6}. jcahpc. jp
Reedbush スーパーコンピュータシステム (Reedbush-H/L)	reedbush.cc.u-tokyo.ac.jp 以下のホストの何れかに接続します [※] reedbush-{u{1-4},h1}.cc.u-tokyo.ac.jp

※どのホストに接続しても同じです。

【編集】

【発行】

東京大学情報基盤センター 〒113-8658 東京都文京区弥生2-11-16 (電話) 03-5841-2717 (ダイヤルイン) (FAX) 03-5841-2708

東京大学情報基盤センター ・ スーパーコンピューティングニュース Vol.23 No.2(2021.3)

目 次

センターから

サービス休止等のお知らせ		1
システム変更等のお知らせ		3
Wisteria/BDEC-01 試験運用	のお知らせ ・・・・・・	5
研究成果登録のお願い ・・・		10
12月・1月のジョブ統計 ・		11

ユーザーから

メニーコア型スーパーコンピュータにおける	
100ナノメートル電子状態計算の強スケーリング性 ・・・・・・・・・・・	15
西太平洋下のマントル最下部における3次S波速度構造推定	20
複雑ネットワーク科学に基づくエラストマーの構造物性相関 ・・・・・	27

教育活動報告

東京大学工学部・工学系研究科共通科目	
「スパコンプログラミング(1)および(I)」・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・	33
第147回お試しアカウント付き並列プログラミング講習会	
「GPUプログラミング入門」(オンライン)実施報告 ・・・・・・・・・・・	37
第148回お試しアカウント付き並列プログラミング講習会	
「OpenACCとMPIによるマルチGPUプログラミング入門」	
(オンライン)実施報告 ・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・	39
第149回お試しアカウント付き並列プログラミング講習会	
「OpenFOAM中級」(オンライン)実施報告 ・・・・・・・・・・・・・・・・・・	41
医结节 体	
原稿券集	44