

スーパーコンピューティング ニュース

Vol.25 No.4, 2023.7



スーパーコンピュータシステム 利用負担金表

Wisteria/BDEC-01 スーパーコンピュータシステム 利用負担金表(2023年4月1日)

区分	負担金額(税込)		ディスク容量	備考
	大学・公共機関等	企業		
一般申込 (基本セット) Wisteria-O/A	申込1セット当り 90,000円 (8,640トークン)		申込1セット当り /work 2TB 利用者当り /home 50GB	
公募制度による申込 Wisteria-O	申込1セット当り 90,000円 (8,640トークン)	申込1セット当り 108,000円 (8,640トークン)	申込1セット当り /work 2TB 利用者当り /home 50GB	利用期間 12ヶ月の金額・トークン量 (利用期間は1ヶ月単位で設定可)
公募制度による申込 Wisteria-A	申込1セット当り 270,000円 (25,920トークン)	申込1セット当り 324,000円 (25,920トークン)	申込1セット当り /work 6TB 利用者当り /home 50GB	
GPU専有申込 (公募制度の申込可) Wisteria-A	申込1GPUセット当り 364,500円 (25,920トークン)	申込1GPUセット当り 437,400円 (25,920トークン)	申込1GPUセット当り /work 6TB 利用者当り /home 50GB	利用期間 12か月の金額・トークン量 (利用期間は1ヶ月単位で設定可) 1, 2, 4GPUのみ申込可, 申込単位は下表参照
ノード固定 (公募制度の申込可) Wisteria-A	2,916,000円 (207,360トークン)	3,499,200円 (207,360トークン)	/work 48TB 利用者当り /home 50GB	利用期間 12か月の金額・トークン量 (利用期間は1ヶ月単位で設定可) 1セットのみ申込可
一般申込 (最小セット) Wisteria-O/A	7,500円 (720トークン)		/work 2TB 利用者当り /home 50GB	利用期間は当該年度末まで
トークン量追加	7,500円 (720トークン)	9,000円 (720トークン)		
ディスク容量追加	6,480円/(1TB*年)			1TB単位で申込可 (/workのみ)

※Wisteria/BDEC-01 においてはパーソナルコースとグループコースの区分を廃止し、これまでのパーソナルコースは一般申込に統合した。

※Wisteria-Oのトークン消費係数は 1.00 (1ノード当り), Wisteria-Aのトークン消費係数は 3.00 (1GPU当り)である。

Wisteria-Oにトークン消費係数 1.50のノード群(優先利用向け)を全体の15%程度設ける。

※Wisteria-Oの1ジョブで利用可能な最大ノード数は 2,304ノード, Wisteria-Aの1ジョブで利用可能な最大GPU数は 64GPU

※括弧()内は付与するトークン量。実行したジョブのノード時間積またはGPU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トークン量の換算表」を参照。

※公募制度による申し込み、ノード固定の申し込みには審査を要する。

※/homeのディスク容量は複数のグループに所属している場合でも利用者当り50GB固定。

※GPU専有申込の申込単位

GPU数	トークン量	大学・公共機関等	企業
1	25,920	364,500円	437,400円
2	51,840	729,000円	874,800円
4	103,680	1,458,000円	1,749,600円

Oakbridge-CX スーパーコンピュータシステム 利用負担金表(2023年4月1日)

区分	負担金額(税込)		ディスク容量	備考
	大学・公共機関等	企業		
一般申込	申込1セット当り 75,000円 (4,320トークン)	申込1セット当り 90,000円 (4,320トークン)	グループ1セット当り /work 4TB 利用者当り /home 50GB	利用期間6ヶ月の金額・トークン量 (利用期間は1ヶ月単位で設定可)
ノード固定	申込1セット当り 112,500円 (4,320トークン)	申込1セット当り 135,000円 (4,320トークン)		
一般申込 (最小セット)	12,500円 (720トークン)	/	/work 4TB 利用者当り /home 50GB	利用期間は2023年9月末まで
トークン量追加	12,500円 (720トークン)	15,000円 (720トークン)	/	
ディスク容量追加	3,240円/(1TB*6ヶ月)		/	1TB単位で申込可 (/workのみ)

※Oakbridge-CXは2023年9月29日17:00をもってすべてのサービスを終了。

※Oakbridge-CXにおいてもパーソナルコースとグループコースの区分を廃止し、これまでのパーソナルコースは一般申込に統合した。

※トークン消費係数は1.00、ただしトークン消費係数1.50のノード群(優先利用向け)を全体の15%程度設ける。

※1ジョブで利用可能な最大ノード数は256ノード。

※括弧()内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トークン量の換算表」を参照。

※ノード固定の申し込みには審査を要する。

※/homeのディスク容量は複数のグループに所属している場合でも利用者当り50GB固定。

トークン移行におけるトークン量の換算表

移行元 \ 移行先	Oakbridge-CX システム	Wisteria/BDEC-01 システム
Oakbridge-CX システム	—	1.6
Wisteria/BDEC-01 システム	0.6	—

移行先に追加されるトークン量 = 移行トークン量 × 係数

注意事項(Wisteria/BDEC-01, Oakbridge-CX 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。
- ・利用負担金は、原則として利用開始月に応じ、以下の月に一括して請求する。
 - 利用開始月が4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、11月の請求となる。
- ・利用負担金額が減額となる変更はできない。
- ・ディスク量は、グループ全体の上限值である。

スーパーコンピュータシステム ジョブクラス制限値

Wisteria/BDEC-01 スーパーコンピュータシステム (Wisteria-O) ジョブクラス制限値 (2022 年 8 月 2 日)

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 (GiB)※3	一般申込	公募制度 による申込
debug-o	1 ~ 144 (6,912)	30 分	28	○	○
short-o	1 ~ 72 (3,456)	8 時間	28	○	○
(regular-o)					
small-o	1 ~ 144 (6,912)	48 時間	28	○	○
medium-o	145 ~ 576 (27,648)	"	"	○	○
large-o	577 ~ 1,152 (55,296)	"	"	○	○
x-large-o	1,153 ~ 2,304 (110,592)	24 時間	"	○	○
priority-o	1 ~ 288 (13,824)	48 時間	28	○	○
challenge-o	1 ~ 7,680 (368,640)	24 時間	28	★	★
(interactive-o) ※4					
interactive-o_n1	1 (48)	2 時間	28	○	○
interactive-o_n12	2 ~ 12 (576)	10 分	"	○	○
prepost	1 (56)	6 時間	340	○	○
prepost1_n1 ~ prepost4_n1	1 (56)	1~6 時間	340	○	○
prepost1_n4	1 ~ 4 (224)	1~6 時間	340	○	○
prepost1_n8	1 ~ 8 (448)	1~6 時間	340	○	○

★ 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 "rscgrp=キュー名" ") は、regular-o、debug-o、short-o を小文字で指定する
regular-o 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ノード当り1.00。ただし priority-o は優先利用ノード群のためトークン消費係数は1.50

※3 1ノード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次のとおり(トークン消費なし)

pjsub --interact -g グループ名 -L "rscgrp=interactive-o,node=ノード数"

Wisteria/BDEC-01 スーパーコンピュータシステム (Wisteria-A) ジョブクラス制限値 (2021 年 5 月 14 日)

キュー名※1	ノード数・GPU 数※2 (最大 GPU 数)	制限時間 (経過時間)	メモリー 容量 (GiB) ※3	一般申込	公募制度 による申込	GPU 専有申込	ノード固定
debug-a	1 ノード (8)	30 分	448	○	○	○	○
short-a	1 ~ 2 ノード (16)	2 時間	448	○	○	○	○
(regular-a)							
small-a	1 ~ 2 ノード (16)	48 時間	448	○	○	○	○
medium-a	3 ~ 4 ノード (32)	"	"	○	○	○	○
large-a	5 ~ 8 ノード (64)	24 時間	"	○	○	○	○
share-debug	1, 2, 4 GPU	30 分	56	○	○	○	○
share-short	1, 2, 4 GPU	2 時間	56	○	○	○	○
(share)							
share-1	1 GPU	48 時間	56	○	○	○	○
share-2	2 GPU	"	"	○	○	○	○
share-4	4 GPU	24 時間	"	○	○	○	○
challenge-a	1 ~ 39 ノード (312)	24 時間	448	★	★	★	★
任意	1 ノード (8)	任意 ※4	448	×	×	○	○
interactive-a ※5	1 ノード (8)	10 分	56	○	○	○	○
share-interactive	1 GPU	"	"	○	○	○	○

★ 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 "rscgrp=キュー名" ") は、regular-a、debug-a、short-a を小文字で指定する
regular-a 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1GPU 当り3.00

※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-a,node=ノード数"

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	一般 申込	ノード 固定
debug	1 ~ 16 (896)	30分	168	○	○
short	1 ~ 8 (448)	8時間	168	○	○
shm ※4	1 ~ 8 (448)	24時間	168	○	○
(regular)					
small	1 ~ 16 (896)	48時間	168	○	○
medium	17 ~ 64 (3584)	"	"	○	○
large	65 ~ 128 (7168)	"	"	○	○
x-large	129 ~ 256 (14336)	24時間	"	○	○
challenge	1 ~ 1368 (76608)	24時間	168	★	★
任意	申込数	任意 ※5	168	×	○
(interactive) ※6					
interactive_n1	1 (56)	2時間	168	○	○
interactive_n8	2 ~ 8 (448)	10分	"	○	○

★ 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 "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

※4 shared memory (/dev/shm)の利用上限値は、通常は各計算ノードに搭載される物理メモリー(192 GiB)の50%、shm キューを構成する計算ノードのみ 90%

※5 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

※6 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"

大規模共通ストレージシステム 利用負担金表

大規模共通ストレージシステム(第1世代、Ipomoea-01) 利用負担金表(2022年6月1日)

区分	負担金額(税込)																											
一般申込	【大学・公共機関等 7,200 円、企業 8,640 円】(1TB の場合、年額) (ディスク容量ごとの負担金額は下表参照、利用期間は1ヶ月単位で設定可) 利用者番号登録数 制限なし																											
	<table border="1"> <thead> <tr> <th>並列ファイルシステム ディスク容量</th> <th>大学・公共機関等</th> <th>企業</th> </tr> </thead> <tbody> <tr> <td>1 TB</td> <td>7,200 円/年</td> <td>8,640 円/年</td> </tr> <tr> <td>[10 TB まで 1 TB 追加当たり]</td> <td>[4,200 円/年]</td> <td>[5,040 円/年]</td> </tr> <tr> <td>10 TB</td> <td>45,000 円/年</td> <td>54,000 円/年</td> </tr> <tr> <td>[100 TB まで 1 TB 追加当たり]</td> <td>[3,000 円/年]</td> <td>[3,600 円/年]</td> </tr> <tr> <td>100 TB</td> <td>315,000 円/年</td> <td>378,000 円/年</td> </tr> <tr> <td>[1,000 TB まで 1 TB 追加当たり]</td> <td>[2,400 円/年]</td> <td>[2,880 円/年]</td> </tr> <tr> <td>1,000 TB</td> <td>2,475,000 円/年</td> <td>2,970,000 円/年</td> </tr> <tr> <td>[以降 1 TB 追加当たり]</td> <td>[2,100 円/年]</td> <td>[2,520 円/年]</td> </tr> </tbody> </table>	並列ファイルシステム ディスク容量	大学・公共機関等	企業	1 TB	7,200 円/年	8,640 円/年	[10 TB まで 1 TB 追加当たり]	[4,200 円/年]	[5,040 円/年]	10 TB	45,000 円/年	54,000 円/年	[100 TB まで 1 TB 追加当たり]	[3,000 円/年]	[3,600 円/年]	100 TB	315,000 円/年	378,000 円/年	[1,000 TB まで 1 TB 追加当たり]	[2,400 円/年]	[2,880 円/年]	1,000 TB	2,475,000 円/年	2,970,000 円/年	[以降 1 TB 追加当たり]	[2,100 円/年]	[2,520 円/年]
	並列ファイルシステム ディスク容量	大学・公共機関等	企業																									
	1 TB	7,200 円/年	8,640 円/年																									
	[10 TB まで 1 TB 追加当たり]	[4,200 円/年]	[5,040 円/年]																									
	10 TB	45,000 円/年	54,000 円/年																									
	[100 TB まで 1 TB 追加当たり]	[3,000 円/年]	[3,600 円/年]																									
	100 TB	315,000 円/年	378,000 円/年																									
	[1,000 TB まで 1 TB 追加当たり]	[2,400 円/年]	[2,880 円/年]																									
	1,000 TB	2,475,000 円/年	2,970,000 円/年																									
[以降 1 TB 追加当たり]	[2,100 円/年]	[2,520 円/年]																										
※ 東京大学情報基盤センターのスーパーコンピュータシステムのいずれかに利用者番号(教育利用、講習会を除く)を有する場合、利用者ごとにディスク容量 5 TB を無償で付与し、グループごとに登録されているシステム(トークン移行先のシステムを除く)で付与されているディスク容量の15%を無償で付与する。いずれも申込不要。																												
ディスク容量追加	申込時点のディスク容量に応じて、1 TB 追加当たりの負担金額は下表参照 (無償で付与されたディスク容量は「申込時点のディスク容量」に含まない)																											
	<table border="1"> <thead> <tr> <th>申込時点のディスク容量</th> <th>大学・公共機関等</th> <th>企業</th> </tr> </thead> <tbody> <tr> <td>1 TB 未満</td> <td>7,200 円/年</td> <td>8,640 円/年</td> </tr> <tr> <td>1 TB 以上 10 TB 未満</td> <td>4,200 円/年</td> <td>5,040 円/年</td> </tr> <tr> <td>10 TB 以上 100 TB 未満</td> <td>3,000 円/年</td> <td>3,600 円/年</td> </tr> <tr> <td>100 TB 以上 1,000 TB 未満</td> <td>2,400 円/年</td> <td>2,880 円/年</td> </tr> <tr> <td>1,000 TB 以上</td> <td>2,100 円/年</td> <td>2,520 円/年</td> </tr> </tbody> </table>	申込時点のディスク容量	大学・公共機関等	企業	1 TB 未満	7,200 円/年	8,640 円/年	1 TB 以上 10 TB 未満	4,200 円/年	5,040 円/年	10 TB 以上 100 TB 未満	3,000 円/年	3,600 円/年	100 TB 以上 1,000 TB 未満	2,400 円/年	2,880 円/年	1,000 TB 以上	2,100 円/年	2,520 円/年									
	申込時点のディスク容量	大学・公共機関等	企業																									
	1 TB 未満	7,200 円/年	8,640 円/年																									
	1 TB 以上 10 TB 未満	4,200 円/年	5,040 円/年																									
	10 TB 以上 100 TB 未満	3,000 円/年	3,600 円/年																									
100 TB 以上 1,000 TB 未満	2,400 円/年	2,880 円/年																										
1,000 TB 以上	2,100 円/年	2,520 円/年																										

※利用期間については利用開始月から当該年度のサービス終了月までとし、年度を超えないものとする。利用期間の指定がある場合は利用終了月までとする。

※ディスク容量は利用期間内に限り有効とし、利用終了後に残存しているデータは削除するものとする。

※ディスク容量追加の負担金額は追加単位額に追加する資源量および利用期間を乗じたものとする。

※ファイル、ディレクトリの総数制限についてはディスク容量に比例した値を別途定めるものとする。

センターから

サービス休止等のお知らせ

2023 年 7 月下旬からの計算機及びストレージシステムのサービス予定は以下のとおりです。

Wisteria/BDEC-01 スーパーコンピュータシステム

○ Wisteria/BDEC-01 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
7 月 28 日 (金)	9:00 ~ 22:00 までサービス休止	月末処理
8 月 18 日 (金) ~ 8 月 25 日 (金)	8/18(金)9:00 ~ 8/25(金)17:00 までサービス休止	月末処理、電力消費節減のための停止、柏 II キャンパスにおける特別高圧受変電設備 備点検・二次変電設備点検
9 月 22 日 (金)	9:00 ~ 22:00 までサービス休止	月末処理

- Wisteria/BDEC-01 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。

○ Wisteria/BDEC-01 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
7 月 27 日 (木) 8:30 ~ 7 月 28 日 (金) 9:00 まで 8 月 17 日 (木) 8:30 ~ 8 月 18 日 (金) 9:00 まで 9 月 21 日 (木) 8:30 ~ 9 月 22 日 (金) 9:00 まで

- 上記期間中、Wisteria/BDEC-01 の debug-o/a, short-o/a, regular-o/a, priority-o, interactive-o/a, prepost, share, share-debug, share-short, share-interactive, ノード固定及び講義用キューのサービスを休止します。
ログインノードは通常どおり利用できます。

Oakbridge-CX スーパーコンピュータシステム 【9月29日 17:00 サービス終了】

○ Oakbridge-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
7 月 26 日 (水)	9:00 ~ 20:00 までサービス休止	月末処理
8 月 8 日 (火) ~ 8 月 16 日 (水)	8/8(火) 9:00 ~ 8/16(水) 17:00 までサービス休止	電力消費節減のためサービス休止
8 月 25 日 (金)	9:00 ~ 20:00 までサービス休止	月末処理
9 月 15 日 (金) ~ 9 月 19 日 (火)	9/15(金)9:00 ~ 9/19(火)17:00 までサービス休止	月末処理、空調機メンテナンス、柏キャンパ スにおける特別高圧受変電設備点検・二次変 電設備点検
9 月 29 日 (金)	17:00 すべてのサービスを終了	サービス終了

- 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水曜日）はサービスを停止します。

○ Oakbridge-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 (*)

大規模 HPC チャレンジ 実施期間	
7 月 25 日 (火) 8:30	～ 7 月 26 日 (水) 9:00 まで
8 月 24 日 (木) 8:30	～ 8 月 25 日 (金) 9:00 まで
9 月 28 日 (木) 8:30	～ 9 月 29 日 (金) 9:00 まで

- ・上記期間中, Oakbridge-CX の debug, short, shm, regular, interactive, prepost, ノード固定 及び 講義用キューのサービスを休止します。ログインノードは通常どおり利用できます。

大規模共通ストレージシステム (Ipomoea-01)

○ Ipomoea-01 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
9 月 15 日 (金)～ 9 月 19 日 (火)	9/15(金)9:00 ～ 9/19(火)17:00 までサービス休止	月末処理、空調機メンテナンス、柏キャンパスにおける特別高圧受変電設備点検・二次変電設備点検

- ・ Ipomoea-01 は, 原則 24 時間サービスを行っています。
ただし, 月末処理等実施のためサービスを停止する場合があります。
- ・ Ipomoea-01 サービス休止期間中においては, 他システムからの Ipomoea-01 ストレージへのアクセスも行うことはできません。

【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。
- * Wisteria/BDEC-01 及び Oakbridge-CX における大規模 HPC チャレンジについて, 新型コロナウイルス感染症の状況次第で実施時間・実施条件の変更や, 中止となる可能性があります。詳細は Web ページ(<https://www.cc.u-tokyo.ac.jp/guide/hpc/>) をご覧ください。

システム変更等のお知らせ

(2023.5.1 - 2023.6.30 変更)

1. ハードウェア

1.1 Wisteria/BDEC-01 スーパーコンピュータシステム

縮退運転 (2023年4月1日から継続) ※縮退ノード数は今後変更する可能性があります

debug-o: 768 ノード -> 384 ノード (384 ノード停止)

priority-o: 1,152 ノード -> 384 ノード (768 ノード停止)

regular-o: 5,376 ノード -> 4,608 ノード (768 ノード停止)

1.2 Oakbridge-CX スーパーコンピュータシステム

… なし

1.3 Ipomoea-01 大規模共通ストレージシステム

… なし

2. ソフトウェア

2.1 Red Hat Enterprise Linux 8 (Wisteria/BDEC-01)

➤ Odyssey

FrontFlow/blue (富士通コンパイラ v1.2.37 で構築)	v9.0	(2023.6.23)
FrontISTR (富士通コンパイラ v1.2.37 で構築)	v5.4	
NTchem (富士通コンパイラ v1.2.37 で構築)	v2013_v12.3.0	
PHASE/O (富士通コンパイラ v1.2.37 で構築)	v2021.02	
SALMON (富士通コンパイラ v1.2.37 で構築)	v2.1.0	
SMASH (富士通コンパイラ v1.2.37 で構築)	v3.0.2	
AkaiKKR (富士通コンパイラ v1.2.37 で構築)	cpa2021v001	
GENESIS (富士通コンパイラ v1.2.37 で構築)	v2.0.0	
HΦ (富士通コンパイラ v1.2.37 で構築)	v3.5.1	
ALAMODE (富士通コンパイラ v1.2.37 で構築)	v1.4.2	
FFX (富士通コンパイラ v1.2.37 で構築)	v59.01	
FFVHC-ACE (富士通コンパイラ v1.2.37 で構築)	v0.1	

➤ Aquarius

NVIDIA ドライバ	525.60.13	(2023.5.26)
CUDA Toolkit	12.0	(2023.5.26)
CUDA Aware OpenMPI	v4.1.5 (GCC v8.3.1 + CUDA v12.0 + UCX v1.14.1rc1)	(2023.5.26)
NVIDIA HPC SDK	v23.3	(2023.5.26)
gfarm	2.7.23	(2023.5.26)
gfarm2fs	1.2.17	
oneAPI	v2023.1	(2023.5.26)

➤ ログインノード

gfarm	2.7.23	(2023.5.26)
gfarm2fs	1.2.17	
oneAPI	v2023.1	(2023.5.26)

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

gfarm	2.7.23	(2023.5.24)
gfarm2fs	1.2.17	

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 Red Hat Enterprise Linux 8 (Ipomoea-01)

… なし

3. その他

3.1 Wisteria/BDEC-01 における pjstat コマンド実行時の表示内容の修正について

pjstat コマンド実行時の --limit オプションで表示される BULK_ACCEPT (バルクサブジョブ投入本数) の項目について、現在投入されている本数としてバルクジョブの本数が表示されていたため、バルクサブジョブの本数を表示するように修正しました。

3.2 2023 年度 Wisteria/BDEC-01 の運用について (再掲)

昨今の電気料金高騰に伴い、2023 年度は各システムの電気料金が利用負担金収入を大幅に上回ることが見込まれます。収支を勘案し、2023 年度利用負担金について値上げを実施させていただくこととしましたが、値上げ幅を緩和するため、消費エネルギーの多い Wisteria/BDEC-01 Odyssey の計算ノードについて 2023 年度は一部を稼働停止とします。利用者皆様にはご負担をおかけすることになりますが、何卒ご理解賜りますようお願い申し上げます。2023 年度中に電気料金の状況が好転した場合は、Odyssey の計算ノードの稼働を増やす予定です。

縮退状況 (2023 年 7 月 1 日時点) ※縮退ノード数は今後変更する可能性があります

debug-o: 768 ノード -> 384 ノード (384 ノード停止)
priority-o: 1,152 ノード -> 384 ノード (768 ノード停止)
regular-o: 5,376 ノード -> 4,608 ノード (768 ノード停止)

3.4 Oakbridge-CX サービス終了について (再掲)

Oakbridge-CX スーパーコンピュータシステムは 2023 年 9 月末をもってシステムを停止し、すべてのサービスを終了致します。

Oakbridge-CX サービス終了にあたっては以下の点にご注意ください。

- 2023 年度の Oakbridge-CX のご利用は、最長でも 6 ヶ月間のご利用となります。
- サービス終了後のスーパーコンピュータのご利用につきましては Wisteria/BDEC-01 をご検討ください。
- 通常利用 (一般) にて Oakbridge-CX をご利用の方は「トークン移行」を行うことが可能です。Wisteria/BDEC-01 への移行をご検討の利用者様につきましては「トークン移行」も併せてご参考ください。「トークン移行」についての詳細は Web ページ (https://www.cc.utokyo.ac.jp/guide/application/transfer_token.php) をご参照ください。
- トークン移行をお申しいただく場合は、9 月 26 日 9:00 までにお申しください。期限後の申込はお受けいたしかねます。また、サービス終了時点で残トークンがあったとしても他システムへの移行や返金等はできません。
- ファイルの移行先については、前述の Wisteria/BDEC-01 以外に「大規模共通ストレージシステム (Ipomoea-01)」もご利用頂けます。「Ipomoea-01」についての詳細は Web ページ (<https://www.cc.utokyo.ac.jp/supercomputer/ipomoea01/service/application.php>) をご参照ください。なお、ファイルの移行作業は利用者様ご自身で実施願います。

スーパーコンピュータシステム「大規模 HPC チャレンジ」課題募集のお知らせ

Wisteria/BDEC-01、Oakbridge-CX スーパーコンピュータシステムでは、「大規模 HPC チャレンジ」を実施しています。「大規模 HPC チャレンジ」は、スーパーコンピュータシステムがもつ最大規模のノード数を、最大 24 時間・1 研究グループで計算資源の専有利用ができる公募型プロジェクトです。採択条件等については、以下をご覧ください。皆様からの課題応募をお待ちしております。

1. 提供資源

以下のスーパーコンピュータシステムのノードを最大 24 時間専有利用することができます。
(今後の状況次第で変更となる可能性があります)

- Wisteria/BDEC-01 スーパーコンピュータシステムのシミュレーションノード群 (Odyssey) 6,144 ノード (294,912 コア)、データ・学習ノード群 (Aquarius) 36 ノード (GPU 288 基)
- Oakbridge-CX スーパーコンピュータシステムの計算ノード 1,280 ノード (内 SSD 搭載 112 ノード)

2. 利用案内

- 1 ヶ月に 1 回、原則として月末処理前日の 9:00～翌 9:00 までの最大 24 時間、提供資源を専有利用することが可能です。
- 課題は公募制とし、現ユーザーに限定せず、広く課題を募集します。個人、及びグループによる応募が可能ですが、各月に 1 グループの採用 (*) を原則とします。
- **本制度により得られた成果については公開して頂きます。**成果公開には東京大学情報基盤センターのスーパーコンピュータシステムを利用し、「大規模 HPC チャレンジ」制度によって実施した旨を明記していただきます。また、「スーパーコンピューティングニュース」や広報誌等への成果報告記事の執筆などを行っていただきます。
- センターの主催、共催するセミナー、ワークショップ等でご発表いただく場合があります。
- 利用料金は無料です。

* Wisteria/BDEC-01 においては毎月 Odyssey で 1 件、Aquarius で 1 件、最大 2 件まで受入可能、ただし 1 グループで Odyssey、Aquarius 両方利用することも可能

3. 実施日程

2023年度の今後の「大規模 HPC チャレンジ」実施日程は表1のとおりです。

※ 新型コロナウイルス感染症の状況次第で、実施時間や実施条件の変更、中止となる可能性もあります。

表 1. 2023 年度 Wisteria/BDEC-01 大規模 HPC チャレンジ実施日程

	実施日時	募集締切	審査	採択通知
第 3 回	2023年12月21日(木)9:00～12月22日(金)9:00	2023年 10月30日(月) 17:00【締切】	11月上旬	11月中旬
	2024年1月25日(木)9:00～1月26日(金)9:00			
	2024年2月21日(水)9:00～2月22日(木)9:00			
	2024年3月28日(木)9:00～3月29日(金)9:00			

- メンテナンス等の都合により募集スケジュールが変更となることがあります。最新情報は Web Page¹をご覧ください。
- 年複数回を申し込むことも可能ですが、申込状況によりご希望に添えない場合もありますのであらかじめご了承ください。また、一回の申し込みで利用可能なのは一回のみです。
- 表に掲載されている以外の日程でも募集を行うことがあります。最新情報は Web Page¹をご覧ください。

4. 研究対象

「大規模 HPC チャレンジ」では、提供する最大ノードを使用する大規模計算を実施する研究に限定します。申込者及び研究グループのメンバーは、国内外の並列計算機を利用した大規模計算の実績があることを前提とし、以下のような「High-Performance Computing」に関連した幅広い分野の研究を対象としています。

- 大規模シミュレーション
- 大規模データ処理
- 大規模ベンチマーク、演算・通信システム性能評価
- その他、大規模計算に関係するソフトウェア実行

5. 利用資格

利用資格は、申込書を基に、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研究部門の教職員、及び、外部委員により構成される審査委員会において審査されます。現ユーザーである必要はありません。

なお、申込者は「国内の大学、公共機関に所属する研究者、及び民間企業に所属する者」とします。

¹ 「大規模 HPC チャレンジ」

<https://www.cc.u-tokyo.ac.jp/guide/hpc/>

6. 採択基準、審査方法

応募課題は、以下の基準により、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研究部門の教職員、及び、外部委員より構成される審査委員会により採択課題を選考し、できるだけ速やかに公表を行う予定です。

主な採択基準

- A) 計算・結果の詳細を論文等も含めて公表できること。
- B) 計算結果が科学的に有用、あるいは社会的なインパクトがあると考えられること。
- C) システムごとに決められたノード数 (Odyssey : 4,096 ノード、Aquarius : 36 ノード、Oakbridge-CX : 1,024 ノード) 以上の利用を目標としていること。
- D) 計画に実現性があり、短期間で効果を示すことが可能であること (一回の使用時間は最大 24 時間です)。
- E) 本システムの運用、ユーザーにとって有用な情報を提供すること。

※ 項目 A) ~ D)は、必須となります。項目 E)は必須ではありませんが、申込書に該当する記述がある場合、加点評価される場合があります。

※ 最大利用可能ノード数 : Odyssey : 6,144 ノード、Aquarius : 36 ノード、Oakbridge-CX : 1,280 ノード

7. 利用申込

募集要項、スーパーコンピュータシステム利用規程等をよくお読みの上、申込書及び研究グループメンバー情報に必要事項をご記入ください。ご記入頂いた申込書及び研究グループメンバー情報、論文は以下の提出先まで、電子メールにてお送りください。書類のご提出は PDF 形式 (研究グループメンバーの情報はエクセル) にてお願いいたします。

申込書に必要な項目・提出書類は以下の通りです。

1. 申込年月日
2. 利用希望時期
3. 申込者情報 (氏名、所属、職名、連絡先住所、E-mail、電話)
4. 研究課題名 (和文、英文)、概要
5. 研究課題の内容、目標
6. 申込者、研究グループメンバーの当該分野における研究業績のうち、大規模計算機利用の実績として代表的な論文 1 編の別刷り
7. プログラム情報、利用スケジュール等
8. 要望事項、特記事項
9. 研究グループメンバーの情報

8. 問い合わせ先

申込等ご不明な点は、電子メールでお問い合わせください。
(電話でのお問い合わせはご遠慮ください。なお、詳細は本センターWeb Page¹でもご案内しておりますので、あわせてご覧ください)。

【 提出先 】

E-Mail : koubo@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

【 問い合わせ先 】

E-Mail : 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

スーパーコンピュータシステム「大規模 HPC チャレンジ」採択課題のお知らせ

1. はじめに

Wisteria/BDEC-01、Oakbridge-CX では「大規模 HPC チャレンジ」を実施しています。「大規模 HPC チャレンジ」は、スーパーコンピュータシステムがもつ最大規模のノード数を、最大 24 時間・1 研究グループで計算資源の専有利用ができる公募型プロジェクトです¹。

課題審査委員会による厳正な審査の結果、以下の課題を採択しましたのでお知らせいたします。

2. 採択課題

システム：Oakbridge-CX

募集期間：2023 年度 第 1 回再募集 2023 年 4 月 26 日～5 月 22 日

1 件の応募があり、以下の課題を採択しました。

採択課題一覧

課題名	通信・計算オーバーラップによる並列多重格子法
代表者名(所属)	中島 研吾 (東京大学 情報基盤センター)
Krylov 部分空間法に基づく前処理付き反復法は、様々な科学技術計算で使用されている。大規模な並列計算機を使用する場合、ノード数の増加によって通信のオーバーヘッドは増加する傾向にあり、その削減は重要な課題である。並列有限要素法、差分法において、Halo 通信と計算のオーバーラップ (CC-Overlapping) は、OpenMP の動的ループスケジューリングの機能と組み合わせて広く使用されている。この手法は、主として疎行列ベクトル積 (SpMV)、陽解法に適用されてきた。著者等による先行研究では、ICCG 法などデータ依存性を含むプロセスに CC-Overlapping を適用するためのリオーダリング手法を提案し、Oakforest-PACS, Wisteria/BDEC-01 (Odyssey) で高い並列性能を得ることができたが、CC-Overlapping の適用は SpMV に留まっていた。最近の研究では、ICCG 法の前進後退代入に CC-Overlapping を適用する手法を提案し、並列 ICCG 法によって検証したのち、並列多重格子法を前処理とする MGCG 法へ適用し、性能改善を得ることができた。更に、Halo 通信を含む処理ではマスタースレッドに通信のみを実施させるマニュアルスケジューリング (Manual Scheduling) による最適化を適用した予備的計算では、更なる性能改善が得られている。大規模 HPC チャレンジでは、マニュアルスケジューリングを含むこれらの手法について、Oakbridge-CX の最大 1,024 ノードを使用した性能評価を実施する。	

¹ 「大規模 HPC チャレンジ」

<https://www.cc.u-tokyo.ac.jp/guide/hpc/>

システム：Wisteria/BDEC-01

募集期間：2023年度 第1回再募集 2023年4月26日～5月22日

1件の応募があり、以下の課題を採択しました。

採択課題一覧

課題名	通信・計算オーバーラップによる並列多重格子法
代表者名(所属)	中島 研吾 (東京大学 情報基盤センター)
<p>Krylov 部分空間法に基づく前処理付き反復法は、様々な科学技術計算で使用されている。大規模な並列計算機を使用する場合、ノード数の増加によって通信のオーバーヘッドは増加する傾向にあり、その削減は重要な課題である。並列有限要素法、差分法において、Halo 通信と計算のオーバーラップ (CC-Overlapping) は、OpenMP の動的ループスケジューリングの機能と組み合わせて広く使用されている。この手法は、主として疎行列ベクトル積 (SpMV)、陽解法に適用されてきた。著者等による先行研究では、ICCG 法などデータ依存性を含むプロセスに CC-Overlapping を適用するためのリオーダーリング手法を提案し、Oakforest-PACS, Wisteria/BDEC-01 (Odyssey) で高い並列性能を得ることができたが、CC-Overlapping の適用は SpMV に留まっていた。最近の研究では、ICCG 法の前進後退代入に CC-Overlapping を適用する手法を提案し、並列 ICCG 法によって検証したのち、並列多重格子法を前処理とする MGCG 法へ適用し、性能改善を得ることができた。更に、Halo 通信を含む処理ではマスタースレッドに通信のみを実施させるマニュアルスケジューリング (Manual Scheduling) による最適化を適用した予備的計算では、更なる性能改善が得られている。大規模 HPC チャレンジでは、マニュアルスケジューリングを含むこれらの手法について、Odyssey の最大 4,096 ノードを使用した性能評価を実施する。</p>	

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システムを利用して得られた研究成果のうち、論文、口頭発表、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-tokyo.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、ご了承ください。

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。

The screenshot shows the website's navigation bar with '研究成果の取扱い' circled in green. Below, the '研究成果の取扱い' page is shown with a blue arrow pointing to the '研究成果登録について' section, where '研究成果登録のページ' is circled in green. A third section shows the registration form with 'アカウント名' and 'メールアドレス' fields highlighted. A fourth section shows the 'ログイン' button highlighted. Numbered callouts 1-4 explain the steps: 1. Click '研究成果' in the menu. 2. Click '研究成果の取扱い' in the sub-menu. 3. Enter account name and email, and select the registration category. 4. Click 'ログイン' to reach the registration page.

4・5月のジョブ統計

1. Wisteria/BDEC-01スーパーコンピュータシステム(Odyssey) ジョブ処理状況 (RedHat Enterprise Linux 8)

年月	登録者数	実利用者数	処理件数				接続時間 【時間】	ファイル使用量 [GiB]		ログイン (実CPU)	演算時間【ノード時間】(経過時間)			平均ノード 利用数 (ノード)	ノード 利用率 (%)	
			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		/home	/lustre		プリポスト	インタラクティブ ジョブ	バッチジョブ			
2023年4月	2,490	609	10,918	199	1,015	126,222	52.135	2,287	3,249,272	2,972.28	374	590	1,362,467	3,059.4	39.8	
5月	2,120	642	13,766	417	1,129	116,362	81.229	2,501	2,896,836	3,647.63	1,078	710	1,944,613	3,548.2	46.2	
2022年5月	1,794	506	8,152	228	647	38,581	55.029	1,312	1,387,835	2,068.13	578	73	1,114,477	1,524.7	19.9	
6月	1,727	531	68,991	225	682	27,267	55.520	1,539	1,784,645	4,563.54	616	114	1,473,641	2,083.6	27.1	
7月	1,749	489	8,578	222	586	60,294	64.200	1,693	2,447,243	7,460.21	431	124	2,588,672	3,540.3	46.1	
8月	1,777	473	12,780	232	536	51,990	30.848	1,757	2,652,316	4,662.02	504	291	2,312,530	3,906.6	50.9	
9月	1,869	451	23,670	276	920	43,593	46.290	1,905	3,123,150	8,952.28	689	757	2,531,647	3,581.7	46.6	
10月	1,979	603	15,652	581	707	95,094	87.929	1,947	3,365,263	7,017.55	1,251	453	2,389,834	3,299.9	43.0	
11月	1,941	585	25,443	455	975	90,678	80.522	2,154	3,515,919	13,344.25	1,038	603	2,530,095	3,579.2	46.6	
12月	1,962	626	14,321	500	632	77,350	80.043	2,323	3,774,096	5,404.18	964	316	3,164,631	4,335.5	56.5	
2023年1月	2,021	609	14,159	471	535	163,311	99.128	2,421	3,932,926	3,854.64	1,103	257	3,814,549	5,217.6	67.9	
2月	2,038	581	11,857	359	754	202,793	76.333	2,483	3,693,712	5,734.78	826	363	3,593,710	5,453.6	71.0	
3月	1,984	542	12,085	344	575	356,988	66.373	2,668	3,696,232	4,037.06	1,113	358	3,875,012	5,316.0	69.2	
合計			232,220	4,281	9,046	1,411,942	820,550			71,650		9,987	4,936	31,581,401		

・試運転は、2021年5月14日より開始。正式サービスは、2021年8月2日より開始

・接続時間： ログイン時間の累計

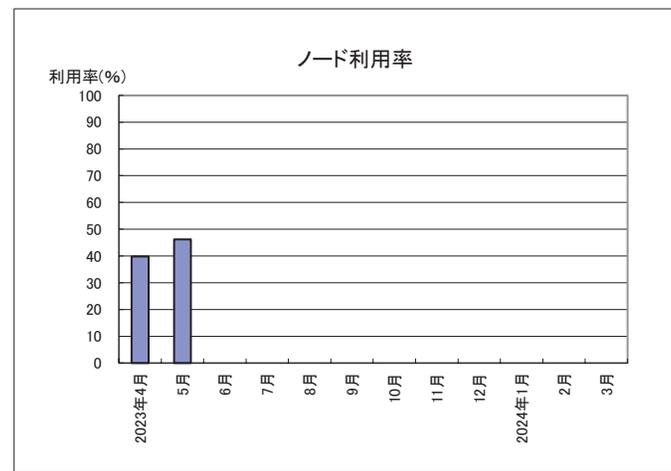
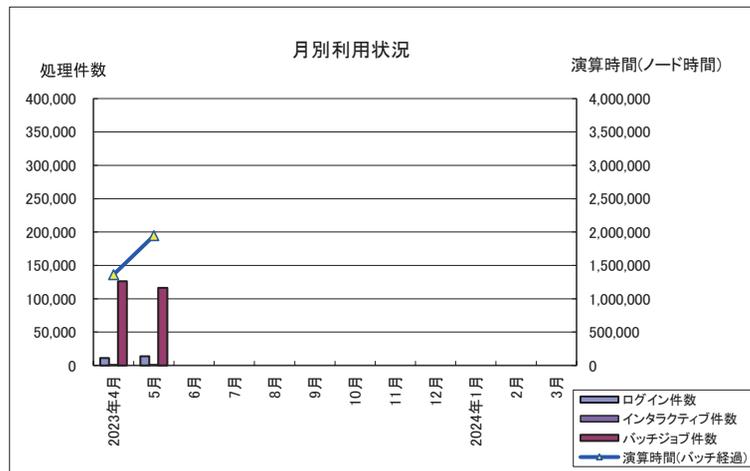
・ログイン(実CPU)： コア時間単位

・2022年5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ヶ月の稼働時間

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

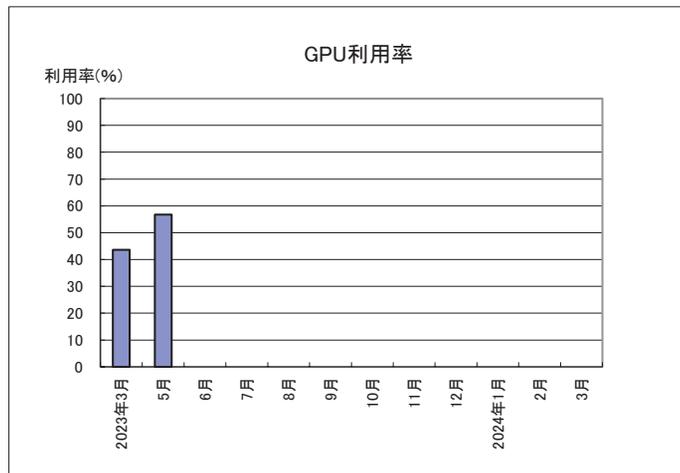
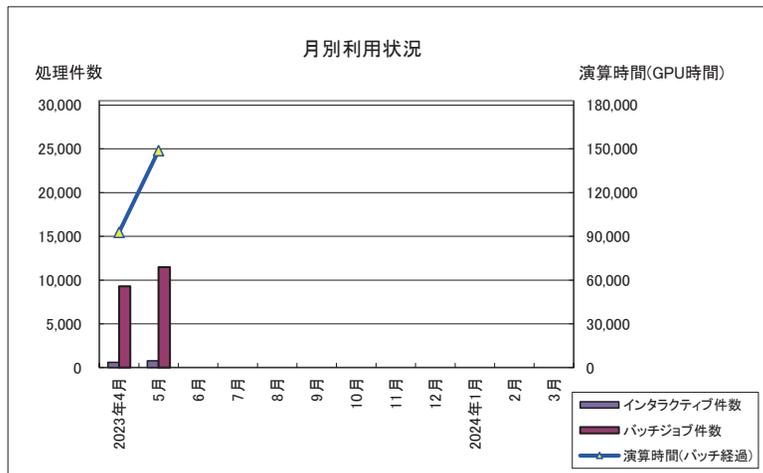


2. Wisteria/BDEC-01スーパーコンピュータシステム(Aquarius) ジョブ処理状況 (RedHat Enterprise Linux 8)

年月	処理件数		演算時間 [GPU時間](経過時間)		平均GPU 利用数 (GPU)	GPU 利用率 (%)
	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		
2023年4月	604	9,295	378	92,830	156.9	43.6
5月	757	11,461	453	148,834	204.2	56.7
5月	541	6,831	338	88,557	121.6	33.8
6月	955	5,330	837	82,946	118.5	32.9
7月	659	18,181	883	89,355	123.4	34.3
8月	740	21,165	651	52,512	89.8	24.9
9月	711	29,980	633	71,306	101.7	28.3
10月	965	6,389	865	102,722	141.7	39.4
11月	2,224	11,601	1,878	130,383	187.1	52.0
12月	3,271	15,738	3,041	148,889	207.8	57.7
2023年1月	971	18,776	953	167,789	230.8	64.1
2月	713	11,134	428	120,574	183.6	51.0
3月	952	8,630	660	158,282	218.0	60.6
合計	13,522	167,680	11,660	1,366,422		

- ・試運転は、2021年5月14日より開始。正式サービスは、2021年8月2日より開始
- ・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GPU)はWisteria/BDEC-01(Odyssey)と共通。
- ・2022年5月分は合計に含まない

- ・GPU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1GPUが100%動作したと仮定した場合の利用GPU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ヶ月の稼働時間
- ・GPU利用率: サービスGPUに対する利用率。 計算式=GPU利用数÷サービスGPU数×100



3. 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)

年月	登録者数	実利用者数	処理件数				接続時間 [時間]	ファイル使用量 [GiB]		ログイン (実CPU)	演算時間 [ノード時間] (経過時間)			平均ノード 利用数 (ノード)	ノード 利用率 (%)
			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		/home	/work		プリポスト	インタラクティブ ジョブ	バッチジョブ		
2023年4月	1,502	302	4,832	109	287	29,917	19,902	1,463	1,128,574	14,732.31	3,445	177	295,842	502.3	36.7
5月	1,163	261	5,516	37	245	49,563	29,742	1,494	1,126,349	4,033.16	1,447	108	398,187	548.5	40.1
2022年5月	1,185	324	12,165	0	850	248,400	40,747	1,465	1,423,688	2,470.79	0	254	597,464	818.0	59.8
6月	1,213	398	9,040	18	688	81,530	45,535	1,539	1,471,204	7,255.12	8	359	648,084	917.3	67.1
7月	1,258	397	8,977	0	621	65,475	48,152	1,587	1,615,433	2,141.06	0	433	733,409	1,004.2	73.4
8月	1,257	321	6,430	10	618	45,434	26,764	1,581	1,726,576	1,838.84	27	425	549,014	992.0	72.5
9月	1,272	341	7,722	0	801	51,870	39,136	1,708	1,792,729	1,968.39	0	562	638,117	1,042.9	76.2
10月	1,296	385	11,115	0	755	74,026	54,840	1,765	1,947,947	11,911.11	0	424	800,362	1,098.9	80.3
11月	1,345	390	12,505	0	1,064	77,586	49,303	1,933	2,141,452	2,616.03	0	582	820,444	1,161.4	84.9
12月	1,385	417	13,241	137	1,069	60,117	52,149	2,008	2,285,229	5,469.01	313	668	843,667	1,155.4	84.5
2023年1月	1,400	396	12,568	207	1,196	53,663	62,502	2,078	2,267,070	8,192.62	674	606	851,952	1,165.9	85.2
2月	1,446	402	10,235	242	557	38,386	44,910	2,125	2,175,157	4,861.32	3,501	344	787,522	1,195.2	87.4
3月	1,405	381	9,446	217	428	54,554	41,165	2,032	1,659,862	29,978.80	3,851	272	851,618	1,175.4	85.9
合計			111,627	977	8,329	682,121	514,100			94,998	13,266	4,960	8,218,218		

・接続時間：ログイン時間の累計

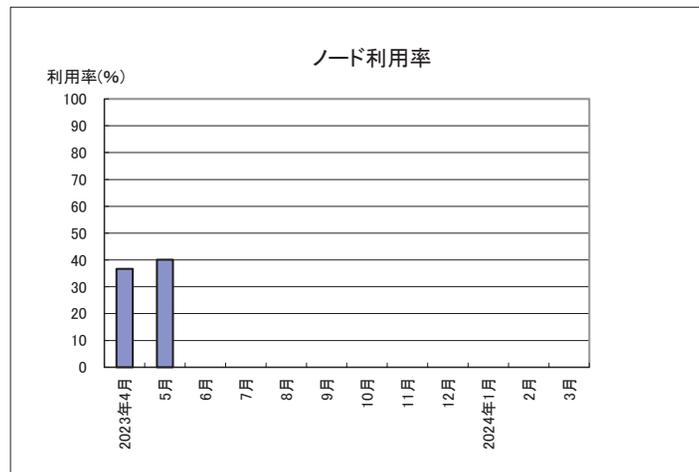
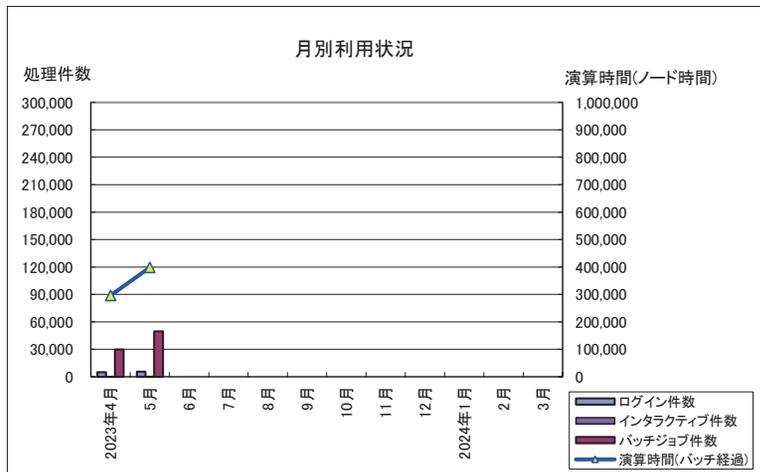
・ログイン(実CPU)：コア時間単位

・2022年5月分は合計に含まない

・ノード利用率：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ヶ月の稼働時間

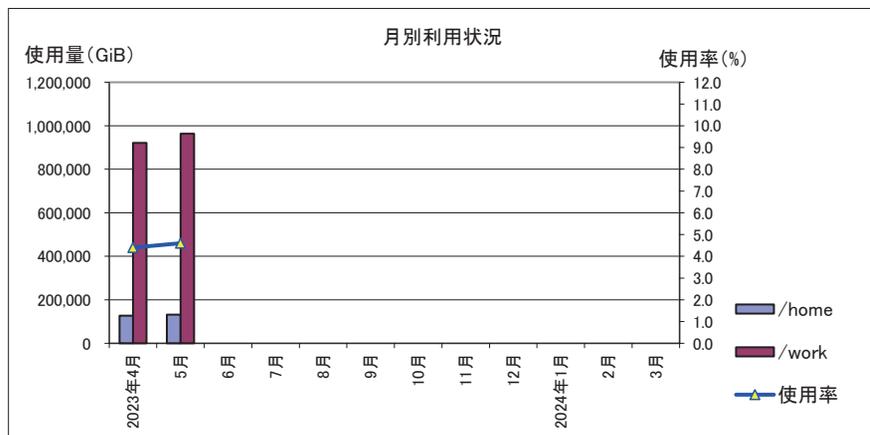
・ノード利用率：サービスノードに対する利用率。計算式=ノード利用数÷サービスノード数×100



4. Ipomoea-01大規模共通ストレージシステム使用状況

年月	登録者数	実利用者数	ログイン数	接続時間 [時間]	ログイン (実CPU)	ファイル使用量 [GiB]		使用率 (%)	実効容量 (GiB)
						/home	/work		
2023年4月	2,074	52	176	1,339	17.7	126,821	920,839	4.4	23,657,187.6
5月	2,066	36	155	660	17.5	132,266	963,614	4.6	23,657,187.6
2022年6月	2,056	80	345	4,119	179.4	947,117	203,168	4.8	23,657,187.6
7月	2,117	45	152	4,258	19.4	962,711	207,333	4.9	23,657,187.6
8月	2,166	30	120	338	10.5	959,300	213,839	4.9	23,657,187.6
9月	2,241	36	140	452	262.5	960,684	213,876	4.9	23,657,187.6
10月	2,332	46	155	947	95.5	891,698	223,457	4.7	23,657,187.6
11月	2,403	58	194	618	63.8	671,496	489,011	4.9	23,657,187.6
12月	2,295	25	68	246	0.3	108,139	370,835	2.0	23,657,187.6
2023年1月	2,353	31	101	385	5.1	114,720	359,196	2.0	23,657,187.6
2月	2,371	35	178	618	272.5	118,832	609,324	3.0	23,657,187.6
3月	2,352	29	212	591	57.1	122,422	807,757	3.9	23,657,187.6
合計			1,996	14,569	1,001.3				

- ・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
- ・使用率：実効容量に対する使用比率。計算式=ファイル使用量÷実効容量×100



磁気単極子秩序形成の基底状態解析

奥村 駿

東京大学大学院工学系研究科物理工学専攻

1. はじめに

物性物理学の分野では、多くの電子が集まってあたかも一つの粒子のように振る舞う複合準粒子が精力的に研究されている。この複合化は、電子の持つ電荷・スピン・軌道といった自由度が強く相互作用することで現れる量子多体効果のひとつであり、長年にわたって強相関電子系における中心的な研究対象となっている。近年では、磁性体において磁気スキルミオンと呼ばれる渦状の磁気構造が実験的に観測されたことを皮切りに、スピン自由度に着目した複合準粒子の研究が盛んに行われてきた。磁気スキルミオンは2次元の面で定義される磁気構造であり、非自明なトポロジーによって保護されているため、渦の一つ一つが粒子的に振る舞うことが知られている[1]。また、3次元のトポジカル磁気構造の例としては、本研究で取り扱う**磁気単極子**が挙げられる。磁気単極子は真空中では存在し得ないとされる一方で、物質中においては、**磁気ヘッジホッグ**と呼ばれる特異な磁気テクスチャの生み出す**創発磁場**を考えることによって実効的に存在しうる。この磁気単極子は3次元方向に積層された磁気スキルミオンが成す弦の端点に現れる点欠陥としても考えることができる[図1]。

磁気ヘッジホッグが周期的に並んだ構造は**磁気ヘッジホッグ格子**と呼ばれ、主に空間反転対称性の破れたキラルな磁性体において調べられている。とりわけ、B20型の結晶構造をもつMnGeでは、3つの波数で特徴づけられる磁気ヘッジホッグ格子(3Q-HL)が低温かつゼロ磁場で観測されている[2]。この3Q-HLでは、非共面的なスピントクスチャの生み出す創発磁場が磁気単極子と反磁気単極子の対を形成し、**トポジカルホール効果**などの特異な量子輸送現象を引き起こす[3]。また、同様の結晶構造をもつMnSi_{1-x}Ge_xにおいて、4つの波数で特徴づけられる磁気ヘッジホッグ格子(4Q-HL)が発見されている[4]。さらに、キラルな磁性体だけではなく、空間反転対称性があるSrFeO₃という物質においても4Q-HLが観測されており[5]、トポジカルホール効果を示すことが知られている[6]。これらの3次元の磁気テクスチャは、非常に短い磁気周期を持つことから高密度の不揮発性磁気メモリとしての応用が期待されているが、その安定性については未解明な点が多く残されている。

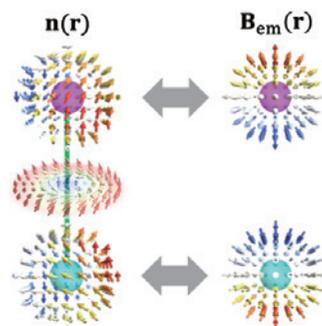


図1: 電子スピン $\mathbf{n}(\mathbf{r})$ で表される磁気ヘッジホッグ(左上)と反磁気ヘッジホッグ(左下)が磁気スキルミオンの弦で繋がれている。創発磁場 $\mathbf{B}_{em}(\mathbf{r})$ で書き表すとそれぞれ磁気単極子(右上)と反磁気単極子(右下)とみなすことができる。

2. これまでの研究

磁気ヘッジホッグ格子に関する理論研究は、磁気スキルミオン格子の発見以前から長年の間続けられてきた。キラルな磁性体においては、現象論的なGinzburg-Landau理論[7]から3Q、4Qのい

ずれのヘッジホッグ格子も基底状態として安定化することが予言されていたが、微視的な安定化機構を与えてはいない。また、局在スピン模型を用いた変分計算[8]やモンテカルロ法による数値計算[9]では、4Q-HLのみが磁場中においてだけ安定化することが見出されているが、 $\text{MnSi}_{1-x}\text{Ge}_x$ において3Q-HLと4Q-HLの両方がゼロ磁場で安定に存在するという実験事実が説明できていない。さらに、連続体近似を用いて、磁気単極子と反磁気単極子の磁場中での振る舞いも調べられているが[10]、現実には磁気周期が格子定数の数倍程度と短いため、離散的な格子の影響を取り込んだ解析が必要と考えられる。このように、従来の理論では3次元的な磁気単極子秩序の発現や振る舞いを十分に説明できていなかった。

そこで我々は、対象とする物質が金属的な性質を持つことに着目し、従来の研究では注目されていなかった遍歴電子の効果とスピン軌道相互作用を取り入れた有効スピン模型の解析を行ってきた。これまでの研究では、空間反転対称性が破れたキラルな系に着目し、後述の焼きなまし法による数値シミュレーションを行うことによって、ゼロ磁場での基底状態において3Q-HLや4Q-HLが発現しうることを見出した[図2]。また、それぞれの場合について基底状態相図を解明することにより、短周期の磁気ヘッジホッグ格子の安定化には伝導電子が媒介するRuderman-Kittel-Kasuya-Yosida(RKKY)相互作用だけではなく、高次のスピン電荷結合による双二次相互作用や、スピン軌道結合によるDzyaloshinskii-Moriya(DM)相互作用が重要であることを明らかにした[11]。本研究では、これまでの計算を発展させ空間反転対称性がある場合にも拡張することで、より広い物質群に対する磁気単極子の設計指針を与えることを目的としている。

3. 模型・手法

本研究ではこれまでの研究[11]と同様な立場で、スピン電荷結合を通じて電子の持つ遍歴性を取り込んだ以下の模型から出発する。

$$H = \sum_{\mathbf{k}\sigma} (\epsilon_{\mathbf{k}\sigma} - \mu) c_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger c_{\mathbf{k}\sigma} - J_K \sum_{\mathbf{k}\mathbf{q}\sigma\sigma'} c_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger \boldsymbol{\sigma}_{\sigma\sigma'} c_{\mathbf{k}+\mathbf{q}\sigma'} \cdot \mathbf{S}_{\mathbf{q}} - \sum_l \mathbf{h} \cdot \mathbf{S}_{\mathbf{r}_l}$$

ここで、 $c_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger$ ($c_{\mathbf{k}\sigma}$)は波数 \mathbf{k} とスピン σ をもった遍歴電子の生成(消滅)演算子であり、第1項の $\epsilon_{\mathbf{k}\sigma}$ は飛び移り積分を含むエネルギー分散、 μ は占有電子数に関する化学ポテンシャルである。第2項はスピン電荷結合を表す。 $\boldsymbol{\sigma} = (\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z)$ は遍歴電子のスピンを表す 2×2 のパウリ行列、 $\mathbf{S}_{\mathbf{q}} = (S_q^x, S_q^y, S_q^z)$ は古典的な局在磁気モーメントのフーリエ成分であり、それらが定数 $J_K > 0$ で結合している。第3項は外部磁場 \mathbf{h} と位置 \mathbf{r}_l の局在磁気モーメント $\mathbf{S}_{\mathbf{r}_l}$ が結合したゼーマン項である。

一般に、遍歴電子系のエネルギーを厳密対角化法で求めるためには、サイト数 N に対し $O(N^3)$ の計算コストを要するため、そのままの取り扱いでは3次元的な周期的構造を持った磁性の解析

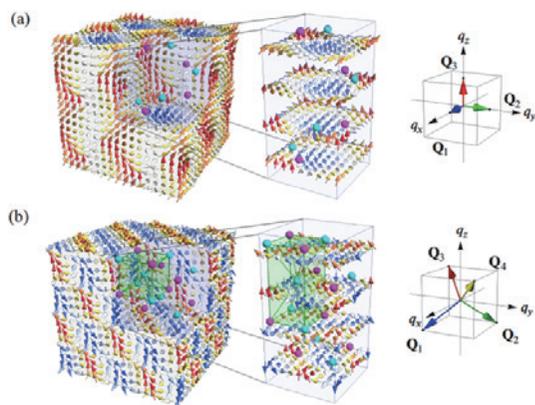


図2: (左) 焼きなまし法によって得られたゼロ磁場での(a)3Q-HL、(b)4Q-HLのスピン構造[11]。桃色(水色)の球は図1の(反)磁気ヘッジホッグに対応し、矢印の色はスピンの z 成分を表す。(中)磁気単位胞の拡大図。(右)それぞれの磁気構造を特徴づける3つまたは4つの波数ベクトル。

は困難である。そこで本研究では、スピン電荷結合 J_K に対する摂動計算を行うことで、近似的に遍歴電子系の効果を取り入れた以下の有効スピン模型を考える。

$$H_{\text{eff}} = 2 \sum_{\eta} \left[-J \mathbf{S}_{\mathbf{Q}_{\eta}} \cdot \mathbf{S}_{-\mathbf{Q}_{\eta}} + \frac{K}{N} (\mathbf{S}_{\mathbf{Q}_{\eta}} \cdot \mathbf{S}_{-\mathbf{Q}_{\eta}})^2 \right] - \sum_l \mathbf{h} \cdot \mathbf{S}_{\mathbf{r}_l}$$

第1項は J_K についての二次摂動から導出される、波数空間での双線形相互作用である。これはRKKY相互作用とも呼ばれ、空間変調された周期的な磁気構造を安定化させる。第2項は J_K の四次で与えられる4スピン間の双二次相互作用で、スピンの波の重ね合わせを誘起する。以下では、 $J > 0$ 、 $K > 0$ とする。また、ここでは波数 \mathbf{q} について、伝導電子のフェルミ面におけるネスティングベクトル以外の寄与は無視することとし、図2(b)の右下に表されているような4つの波数 \mathbf{Q}_{η} のみに限定している。これらの近似によって、系のエネルギーを求めるために必要な計算コストは $O(1)$ となり、システムサイズ N に依存しなくなる。また、基底状態は必ず波数 \mathbf{Q}_{η} の周期性を持ったスピン配置となるため、システムサイズは各方向に1つ分の磁気周期を含む $N = (2\pi/|\mathbf{Q}_{\eta}|)^3$ を考えれば十分である。さらに、この模型はスピン空間で等方的であるため磁場 \mathbf{h} の向きに依らず、 $\mathbf{h} = (h, h, h)/\sqrt{3} \parallel \mathbf{Q}_4$ として一般性を失わない。

上の有効スピン模型 H_{eff} の基底状態を求めるために、数値的焼きなまし法を用いた計算を行った。まず、ランダムな初期状態を用意し、うち1つのスピン $\mathbf{S}_{\mathbf{r}_l}$ を適当な方向に回転させたベクトルを $\mathbf{S}'_{\mathbf{r}_l}$ とする。そのとき、系全体の新しいエネルギー E' は

$$E' = 2 \sum_{\eta} \left[-J \left\{ \mathbf{S}_{\mathbf{Q}_{\eta}} + (\mathbf{S}'_{\mathbf{r}_l} - \mathbf{S}_{\mathbf{r}_l}) e^{-i\mathbf{Q}_{\eta} \cdot \mathbf{r}_l} \right\} \cdot \left\{ \mathbf{S}_{-\mathbf{Q}_{\eta}} + (\mathbf{S}'_{\mathbf{r}_l} - \mathbf{S}_{\mathbf{r}_l}) e^{i\mathbf{Q}_{\eta} \cdot \mathbf{r}_l} \right\} \right. \\ \left. + \frac{K}{N} \left(\left\{ \mathbf{S}_{\mathbf{Q}_{\eta}} + (\mathbf{S}'_{\mathbf{r}_l} - \mathbf{S}_{\mathbf{r}_l}) e^{-i\mathbf{Q}_{\eta} \cdot \mathbf{r}_l} \right\} \cdot \left\{ \mathbf{S}_{-\mathbf{Q}_{\eta}} + (\mathbf{S}'_{\mathbf{r}_l} - \mathbf{S}_{\mathbf{r}_l}) e^{i\mathbf{Q}_{\eta} \cdot \mathbf{r}_l} \right\} \right)^2 \right] - \sum_l \mathbf{h} \cdot (\mathbf{S}'_l - \mathbf{S}_l)$$

のように局所的な変更のみで求められる。この E' と回転前のエネルギー E の差に対し、標準的なメトロポリス法を用いて詳細釣り合いを満たすようにスピン $\mathbf{S}_{\mathbf{r}_l}$ を更新していく。システムサイズのみでこの操作を繰り返すことを1回のモンテカルロスイープとすると、1モンテカルロスイープあたり $O(N)$ の計算コストでスピン配置を更新することが可能となる。元々の遍歴電子系を厳密対角化法によって直接取り扱う場合には、1モンテカルロスイープあたり $O(N^4)$ の計算コストがかかるため、有効スピン模型を用いるほうがはるかに効率的である。

焼きなまし法では、基底状態を求めるために高温の状態から徐々に温度 T を下げていく。本研究では、初期温度を $T_0 = J$ とし、 10^4 モンテカルロスイープ毎に $T_n = 10^{-0.1n} J$ として温度を変化させていった。これを各ランダムシードにおいて $n = 50$ まで繰り返し、もっともエネルギーが低いスピン配置を基底状態として採用した。以下の計算では、エネルギー単位を $J = 1$ とし、システムサイズは $N = 16^3$ ($|\mathbf{Q}_{\eta}| = 2\pi/16$)とした。

4. 計算結果

上記の有効スピン模型 H_{eff} に対して焼きなまし法を行うことで得られた基底状態相図を図3に示す。まず、ゼロ磁場($\mathbf{h} = 0$)において、双二次相互作用 K がないときには双線形相互作用 J の効果によって最も基本的ならせん磁性相(1Q-H)が現れる。有限の $0 < K \lesssim 0.13$ においては、それぞれ異なる方向に伝搬するらせん波と正弦波を重ね合わせた2Q chiral stripe相(2Q-CS)が見られる。

さらに、より大きな $K \geq 0.13$ の領域では、本研究の目的である $4Q$ -HL 相が安定化することがわかる。図4 (a)に示すように、この $4Q$ -HL 相は4方向に伝搬するらせん波の重ね合わせによって実現しており、磁気単位胞内に8つずつの磁気ヘッジホッグ・反磁気ヘッジホッグを有する。この計算結果は、一般の周期 $|Q_\eta|$ をもった磁気ヘッジホッグ格子が空間反転対称な系においても安定化しうることを初めて示したものである[12]。

$4Q$ -HL に外部磁場を印加すると、 $K \geq 0.19$ においては、すべてのらせん面が磁場と垂直な方向に揃った $4Q$ コニカル磁性相($4Q$ -C I)[図4 (b)]が見れる。このときの相転移は一次転移となっているが、すべての磁気ヘッジホッグ・反磁気ヘッジホッグが一斉に消滅するトポロジカル転移とみなすこともできる。また、 $K \leq 0.19$ にお

いては、 $4Q$ -HL 相は図4 (c)、(d)のような中間相を経たのち、 $1Q$ コニカル磁性相($1Q$ -C)[図4 (e)]に移り変わる。同様に $2Q$ -CS 相[図4 (f)]や $1Q$ -H 相も磁場中で $1Q$ -C 相に転移する。最終的には、 K の値によらずすべての状態が $h = 2$ で自明な強制強磁性相へと連続的に移行する。

キラルな系における先行研究[11]では、空間反転対称性の破れに由来する DM 相互作用が磁気異方性の役割を果たすため、磁場方向に依存した非常に複雑な相図が得られていた。本研究では、各相のスピンの配置について、磁場依存性を含めた網羅的な解析を行うことができた。一方で、キラルな系では磁場下において有限となっていた創発磁場が、等方的な系では全体で打ち消し合うという結果が得られた。これは、キラルな系では4つのらせんのキラリティが一様に定まるが、空間反転対称な系では右巻きと左巻きのらせんが同じ割合で存在するためと考えられる。

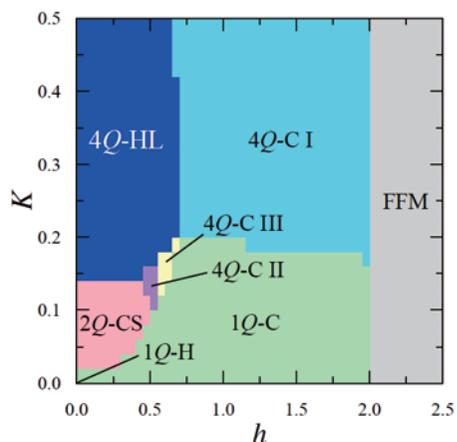


図3: 空間反転対称な系の有効スピン模型 H_{eff} における双二次相互作用 K と外部磁場 h の基底状態相図。青い領域で $4Q$ -HL が安定的に存在している。

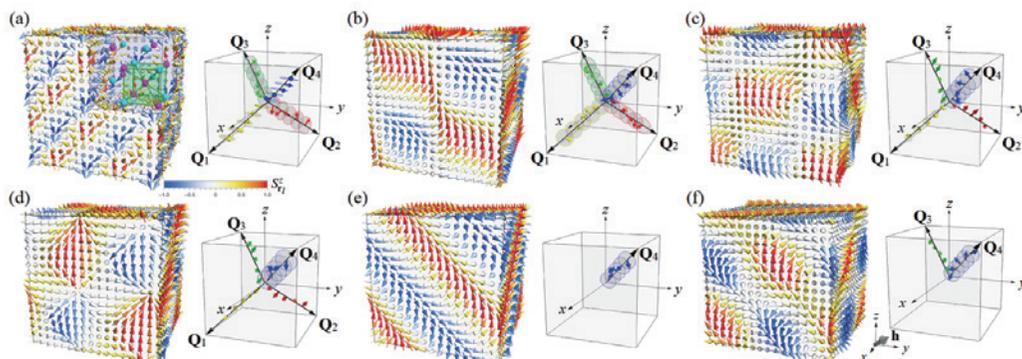


図4: 各状態のスピンの配置(左)とそれを構成するスピンの波(右)。(a) $4Q$ -HL ($K = 0.3, h = 0$)、(b) $4Q$ -C I ($K = 0.3, h = 1$)、(c) $4Q$ -C II ($K = 0.14, h = 0.5$)、(d) $4Q$ -C III ($K = 0.14, h = 0.6$)、(e) $1Q$ -C ($K = 0.06, h = 0.7$)、(f) $2Q$ -CS ($K = 0.06, h = 0.2$)。図2と同様の表記で、灰色の楕円はスピンの波のらせん面を表す。

5. まとめと展望

遍歴電子系の自由度を取り入れた有効スピン模型を用いることで、長周期磁気構造が発現する系に対して高効率な数値シミュレーションを行った。先行研究[11]では磁気ヘッジホッグ格子が現れる一つのパラメタセットに絞って磁場中の振る舞いを調べたが、本研究では潤沢な計算資源を使って広範なパラメタ領域における磁場依存性の計算が可能となった。それによって、トポロジカルな $4Q$ -HL 相を含む多彩な磁気秩序の磁氣的性質と、それらの間の移り変わりを系統的に調べ上げることができた[12]。

空間反転対称性を有する SrFeO_3 の磁気相図[5]と本研究で得られた結果を比較すると、低温で観測されている $2Q$ - $1Q$ 転移が図3の $K \sim 0.1$ における振る舞いとよく一致している。さらに、4スピン相互作用である K の大きさが温度に比例して大きくなり得ることから、中間温度相の $4Q$ - $1Q$ 転移も図3の $K \sim 0.16$ における磁場依存性で定性的にうまく再現できているといえる。ただし、本研究ではあくまで有効模型の基底状態を取り扱っているため、有限温度効果による熱ゆらぎまで考慮した厳密な計算には最近開発された文献[13]の手法を適用するのがよい。また、本研究で得られた結果では磁場中においても創発磁場が全体で打ち消し合ってしまうため、実験[6]で観測されているようなトポロジカルホール効果が現れない。この点を解決するためには、先行研究[13]のように磁気異方性を導入した有効模型を解析する必要があると考えられる。

本研究を含む一連の成果は、計算コストの面からこれまであまり研究がなされてこなかった3次元的なトポロジカル磁気構造の物性現象の解明に大きな進展をもたらすものである。我々は特に、磁気スキルミオン格子や磁気ヘッジホッグ格子が多重 Q 磁気構造というスピンの波の重ね合わせであることに着目し、波の数や形状、振幅、双対角、位相などの多彩な自由度を変化させることでトポロジカルな性質を制御する「スピンモアレエンジニアリング」の研究を推進している[14]。今後の展望としては、磁気ヘッジホッグ格子の特徴的なスピン波励起がもたらす磁化ダイナミクスの実時間シミュレーションや、遍歴電子による金属的な性質をあらわに考慮した電子状態や電気伝導度の計算を行いたい。

参 考 文 献

- [1] N. Nagaosa and Y. Tokura, *Nat. Nano.* **8**, 899 (2013).
- [2] N. Kanazawa *et al.*, *Phys. Rev. B* **86**, 134425 (2012).
- [3] N. Kanazawa *et al.*, *Phys. Rev. Lett.* **106**, 156603 (2011).
- [4] Y. Fujishiro *et al.*, *Nat. Commun.* **10**, 1059 (2019).
- [5] S. Ishiwata, *et al.*, *Phys. Rev. B* **101**, 134406 (2020).
- [6] S. Ishiwata, *et al.*, *Phys. Rev. B* **84**, 054427 (2011).
- [7] B. Binz and A. Vishwanath, *Phys. Rev. B* **74**, 214408 (2006).
- [8] J.-H. Park and J. H. Han, *Phys. Rev. B* **83**, 184406 (2011).
- [9] S.-G. Yang, Y.-H. Liu, and J. H. Han, *Phys. Rev. B* **94**, 054420 (2016).
- [10] X.-X. Zhang, A. S. Mishchenko, G. De Filippis, and N. Nagaosa, *Phys. Rev. B* **94**, 174428 (2016).
- [11] [S. Okumura](#), S. Hayami, Y. Kato, and Y. Motome, *Phys. Rev. B* **101**, 144416 (2020).
- [12] [S. Okumura](#), S. Hayami, Y. Kato, and Y. Motome, *J. Phys. Soc. Jpn.* **91**, 093702 (2022).
- [13] Y. Kato and Y. Motome, *Phys. Rev. B* **105**, 174413 (2022).
- [14] 清水宏太郎, [奥村駿](#), 加藤康之, 求幸年, 日本物理学会誌 第78巻, 第6号(2023).

大規模分散並列環境におけるコレスキーQR 型アルゴリズムによる縦長行列の列ピボット付き QR 分解の性能評価

深谷 猛

北海道大学 情報基盤センター

1. はじめに

対象の行列を都合のよい行列の積に分解する行列分解は、様々な科学技術計算において利用されている基盤技術である。本稿では、基本的な行列分解の一つである QR 分解に関して、特に、縦長 (Tall and Skinny) の行列に対する列ピボット (Column Pivoting) を伴う QR 分解、通称「列ピボット付き QR 分解 (QRCP: QR factorization with Column Pivoting)」[1]を扱う。QRCP に対する数値計算アルゴリズムとしては、列ピボット付きハウスホルダーQR 分解[2, 3]が広く知られている。これに対して、最近、著者らは、通常 (列ピボットがない場合) の縦長行列に対する QR 分解におけるコレスキーQR 型アルゴリズム[4]の有効性に注目し、QRCP に対するコレスキーQR 型のアルゴリズムの研究開発を行っている。本稿では、2023 年の 1 月に東京大学情報基盤センターのスーパーコンピュータシステム「Wisteria/BDEC-01 (Odyssey)」および「Oakbridge-CX」を利用して実施した大規模 HPC チャレンジにおいて、著者らが開発しているコレスキーQR 型の QRCP アルゴリズムの大規模分散並列環境における性能を評価した結果を、アルゴリズムの概要とともに報告する。

2. 列ピボット QR 分解 (QRCP) の概要

本稿で取り扱う QRCP の概要を述べる。QRCP では、与えられた行列 A に対して

$$AP = QR = (Q_1 \quad Q_2) \begin{pmatrix} R_{11} & R_{12} \\ 0 & R_{22} \end{pmatrix}$$

の分解を行う。ただし、 A は $m \times n$ 行列 ($m \geq n$) で、本稿では特に縦長 ($m \gg n$) の場合を考える。また、 A の数値ランクを r ($r \leq n$) とする。具体的には、 A の特異値を $\sigma_1 > \sigma_2 > \dots > \sigma_n$ としたときに、 σ_r と σ_{r+1} の間に大きな差があり、同時に、 σ_i/σ_1 ($i = r+1, \dots, n$) が非常に小さい (例: 倍精度の場合で $O(10^{-16})$) 場合を考える。一方、 P は $n \times n$ 置換行列、 Q は $m \times n$ 列直交行列 ($Q^T Q = I_n$ を満たす)、 R は $n \times n$ 上三角行列である。なお、 I_n は n 次単位行列である。

次に QRCP の特徴である P の選び方について述べる。 k を整数 ($1 \leq k \leq n$) として、 Q_1 を $m \times k$ 、 R_{11} を $k \times k$ とする。このとき、 $\kappa_2(R_{11})$ ができるだけ小さく (良条件)、かつ、 $\|R_{22}\|_2$ もできるだけ小さくなるように、 P, k を選ぶ。ここで $\kappa_2(\cdot)$ は行列の 2 ノルム条件数である。なお、理想的には、 $k = r, \kappa_2(R_{11}) \approx \sigma_1/\sigma_r$ である。

QRCP は行列のランク情報を考慮した QR 分解 (RRQR: Rank Revealing QR 分解) の一種であり、計算コストは特異値分解より一般的に小さい。そのため、様々な科学技術計算の中で使用され、行列の低ランク近似、行列のランク推定、線形従属に近いベクトル群に対する正規直交基底の計算、などの応用例がある [3, 5, 6]。

QRCP を計算する代表的な数値計算アルゴリズムとしては、列ピボット付きハウスホルダーQR

分解 (HQR-CP : Householder QR with Column Pivoting) のアルゴリズムが知られている。HQR-CP では、通常のハウスホルダーQR 分解の手順 (ハウスホルダー変換により A の列を左から順番に上三角化する) において、毎回、すでに選択された列ベクトルが張る空間の直交補空間におけるベクトルの成分が最大である列ベクトルを探索し、貪欲法的に選択することでピボットを決定する。RRQR や HQR-CP の詳細については、例えば、文献[7]などを参照されたい。

3. コレスキーQR 型アルゴリズム

本節では、(列ピボットがない) 通常の QR 分解に対するコレスキーQR 型アルゴリズムの概要を述べる。コレスキーQR 型アルゴリズムの基本 (以下、CholQR) は、1) $A^T A \rightarrow W$ 、2) $W \rightarrow R^T R$ (W のコレスキー分解)、3) $AR^{-1} \rightarrow Q$ であり (文献[8]の Theorem 5.2.3 参照)、Triangular Orthogonalization 型の QR 分解アルゴリズム[9]の一種である。縦長行列に対しては、計算コストの主要部は手順の 1 と 3 になり、どちらも Level-3 の BLAS ルーチンで実行可能である。そのため、現在の計算機環境では (Intel MKL のような高性能な BLAS ライブラリの恩恵もあって) 高い実行性能を得ることができる。また、分散並列計算の場合、(A に関して列方向の 1 次元ブロック分散を仮定すれば) 手順 1 の途中で 1 度だけ集団通信 (MPI_Allreduce) が必要で、所謂、通信回避 (CA : Communication Avoiding) 型アルゴリズム[10]となる。さらに、(分散並列版も含めて) アルゴリズムの実装が非常にシンプルであるという、実用において大きな特徴も持つ。

このように、CholQR は、性能 (実行時間) の面で大きな利点を持つが、一方で、計算精度の面で致命的な弱点がある。具体的には、 $\kappa_2(A)$ の二乗に比例して、 Q の直交性が悪化し、かつ、 $\kappa_2(A)$ が一定以上 (倍精度の場合で $\kappa_2(A) \geq 10^8$) の場合にアルゴリズムが破綻する。そのため、CholQR 単体では、計算は高速でも、実用可能な場面は非常に限られる[11]。

上述の計算精度面の課題に対して、まず、CholQR を 2 回繰り返すことで Q の直交性が十分な精度 (ハウスホルダーQR 等と同程度) まで改善することが報告されている[11, 12]。これは、再直交化を行うことと解釈可能であり、アルゴリズムはコレスキーQR2 と呼ばれる。ただし、 $\kappa_2(A)$ が一定以上の場合にアルゴリズムが破綻する問題は残っている。

悪条件 ($\kappa_2(A)$ が一定以上) の行列に対しては、CholQR の手順 2 で、 $W' := W + sI_n$ として、 W' のコレスキー分解を行い、得られた R を用いて、(QR 分解にはならないが) A の条件数を下げることが可能であることが示されている。ここで、 s はシフトと呼ばれ、十分に小さく、かつ W' のコレスキー分解が数値的に実行可能となる (破綻しない) ように設定する。また、この手順は、シフト付きコレスキーQR[4] と呼ばれ、これを前処理として用いた上で、前述のコレスキーQR2 を行うことで、悪条件の行列に対しても十分な精度の QR 分解を得ることが可能となる。これらの詳細については、文献[4]などを参照されたい。

上述した、CholQR の改良版では、演算回数や分散並列計算時の通信回数・通信データ量が、CholQR の 2 倍または 3 倍と増加する。一方で、大部分の演算は Level-3 BLAS で実行可能、通信回数が行列サイズに依存しない ($O(n)$ ではなく $O(1)$)、既存ライブラリを容易に利用可能 (実装がシンプル)、という CholQR が持つ利点は維持している。そして、実際の計算機上で性能評価を行うと、依然として、ハウスホルダーQR をはじめとする他のアルゴリズムよりも高速となる場合が多いことが分かっている[13, 14]。この事実は、現在の計算機環境では、演算量以外の部分が計算速度に与える影響が極めて大きい、ということを改めて示しており、高速なアルゴリズムを開発する際の重要な指針となる。

4. QRCP に対するコレスキーQR 型アルゴリズムの概要

前節で紹介したように、通常の QR 分解に対するコレスキーQR 型アルゴリズムが持つ現在の計算機環境との親和性は注目に値するものであり、QRCP に対して同様の特徴を持ったアルゴリズム、すなわち、コレスキーQR 型 QRCP アルゴリズムの開発を目指すのは自然な流れである。

数学的（丸め誤差がない場合）には、CholQR の手順 2 で行うコレスキー分解を完全ピボット（Complete Pivoting）付きコレスキー分解： $P^TWP \rightarrow R^TR$ [15]に置き換えることで、QRCP を計算できる。しかし、数値計算において丸め誤差の影響を無視することはできず、単純にこの手順を実行した場合、誤ったピボットの選択とコレスキー分解の破綻（通常の QR 分解の場合と同じ問題）が起きる。

以下、我々が開発している QRCP に対するコレスキーQR 型アルゴリズムの要点を述べる。なお、アルゴリズムの詳細については、現在、論文を執筆中であるため、本稿で詳細を述べず、論文（もしくはそのプレプリント版）に委ねる。

上述のように、 A のグラム行列 W に対して完全ピボット付きコレスキー分解を行うと、丸め誤差の影響を受ける。ただし、数値実験を行った結果から、完全ピボット付きコレスキー分解の計算の途中までは丸め誤差の影響が小さく、正しいピボットが得られることが確認できた。そこで、完全ピボット付きコレスキー分解の計算における特定部分の値の大きさをチェックし、これがある条件を満たした場合に、以降のピボットが信頼できないとして、計算と途中で止めることを考える。そして、それまでに得られたピボット（置換行列に相当）と上三角行列を用いて、CholQR の手順 3 を行う。以上の手順を繰り返すことで、正しいピボットを段階的に得ることができ、（再直交化に似た構造があるため） Q の直交性も十分な精度となる。以降、本アルゴリズムを Ite-CholQR-CP（Iterative CholeskyQR with Column Pivoting）と呼ぶ。

Ite-CholQR-CP と CholQR との主要な違いは、CholQR の手順 2 のコレスキー分解の変更であり、手順 1 と 3 に違いはない。つまり、目標としている「CholQR の高性能計算への親和性の維持」は達成されている。また、名前が示すように、反復型のアルゴリズムであり、反復回数は完全ピボット付きコレスキー分解を停止する際の条件に依存する。計算量などは、CholQR のそれを反復回数倍にしたものとなるが、適切な条件を設定することで、高々数回（4 回もしくは 5 回程度）となることを見込んでいる。よって、前節の最後で述べたように、演算回数等が数倍に増えたとしても、計算機環境との親和性を有することで、既存アルゴリズムとの計算時間の比較において、十分なポテンシャルを持っていることが期待できる。

5. 性能評価

5. 1. 実装の概要

Ite-CholQR-CP の分散並列実装の概略を示す。 A のデータは列方向の一次元ブロック分散を採用する。具体的には、

$$A = \begin{pmatrix} A_1 \\ \vdots \\ A_p \\ \vdots \\ A_p \end{pmatrix}$$

と分割した際に、 p 番目のプロセスが A_p を保持する分散方法である（ P ：プロセス数）。また、 Q についても同様の分散を採用する。一方、 P と R は全てのプロセスが冗長にデータを保持する実

装とする。

$A^T A \rightarrow W$ の計算は、まず、各プロセスが独立に $W_p \rightarrow A_p^T A_p$ を計算 (DGEMM を利用) し、次に、MPI_Allreduce を使い、すべてのプロセスが $W = \sum_{p=1}^P W_p$ を得る。部分的な完全ピボット付きコレスキー分解は各プロセスが独立に実行する。その後、得られた置換行列に従って、自分が保持する A_p の列の交換を行う (列の交換のためプロセス間通信は不要)。最後に、 $(AP)R^{-1} \rightarrow Q$ の計算 (DTRSM を利用) と R の更新の計算 (DTRMM を利用) を各プロセスが独立に行う。以下、この手順を必要な回数だけ反復する。

今回の性能評価では、Fortran90 と倍精度を用いて上記のアルゴリズムを実装した。上述の通り、密行列の基本演算は BLAS、プロセス間通信は MPI を用いた。なお、 $W_p \rightarrow A_p^T A_p$ の計算は、対称性から DSYRK ルーチンを利用する方が演算量は少なくなるが、 A_p が縦長の場合には DGEMM の方が高速であることが多く、今回の環境でもその傾向が確認されたために DGEMM を使った。

5. 2. テスト問題

数値実験で使用するテスト行列の生成方法を簡単に紹介する。行列生成時の入力として、 $m, n (\leq m), r (\leq n), \sigma (0 < \sigma < 1)$ を与えると、

$$\sigma_i = \begin{cases} \sigma^{\frac{i-1}{r-1}} & (1 \leq i \leq r) \\ 10^{-16} & (r+1 \leq i \leq n) \end{cases}$$

とした上で、 $\Sigma := \text{diag}(\sigma_1, \dots, \sigma_n)$ として、 $A := U\Sigma V$ と生成する。ただし、 U, V はそれぞれ $m \times n, n \times n$ のランダムに生成した直交行列である。なお、テスト行列の生成も倍精度で行った。

5. 3. 評価環境と設定

以下で報告する性能評価は、東京大学情報基盤センターが運用しているスーパーコンピュータシステム「Wisteria/BDEC-01 (Odyssey)」および「Oakbridge-CX」を用いて実施した。以下、前者を BDEC-0、後者を OBCX と呼ぶ。これらのシステムの構成については、東京大学情報基盤センターが提供している公式情報[16, 17]に委ねる。一方、今回の性能評価における設定については表 1 の通りである。なお、表 1 に示した設定は、これらのシステムの講習会の資料等を参考にした。

表 1：性能評価実施時の設定。

略称	BDEC-0	OBCX
システム名	Wisteria/BDEC-01 (Odyssey)	Oakbridge-CX
コンパイラ オプション	Fujitsu mpifrtpx (ver. 4.8.1) -Kfast -Kopenmp -Nfjomplib	Intel mpiifort (ver. 19.1.3.304) -O3 -qopenmp -axCORE-AVX512
BLAS/LAPACK	Fujitsu BLAS/LAPACK (ver. 1.2.36), -SSL2BLAMP	Intel MKL (ver. 2020.0.4), -mkl=parallel
MPI	Fujitsu MPI	Intel MPI
プロセス配置	4 プロセス/ノード	2 プロセス/ノード
スレッド配置	12 スレッド/プロセス	12 スレッド/プロセス
使用ノード数	8 ノード~4096 ノード	8 ノード~1024 ノード

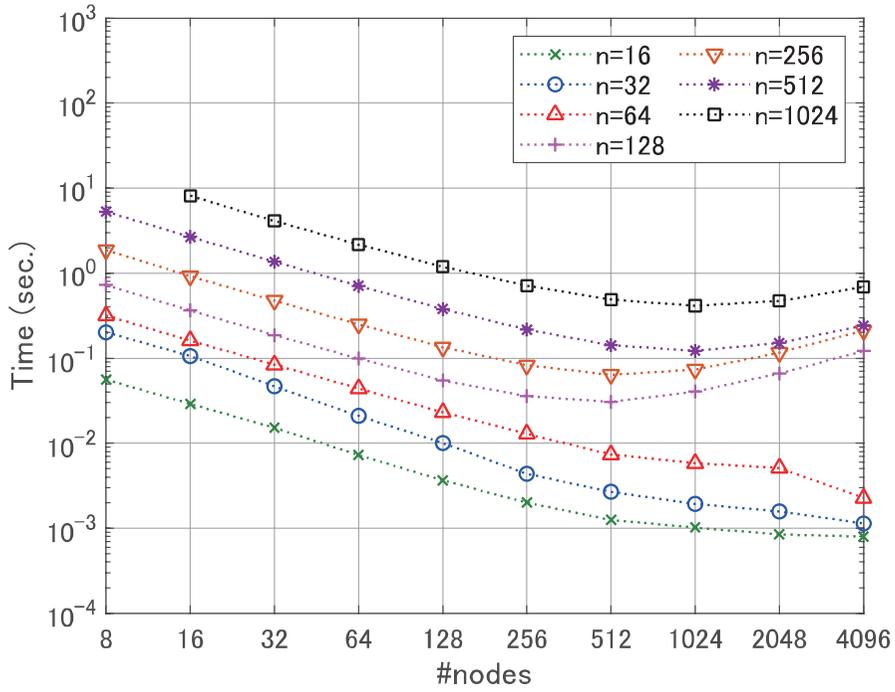
5. 4. 結果

$m = 16777216 (= 2^{24})$ と行数を固定した上で、 $n = 16$ から $n = 1024$ まで変化させてテスト行列を生成し、プロセス数（ノード数）を変えて、強スケーリングの観点から Ite-CholQR-CP の実行時間を測定した。なお、 $r = 0.8n$ （四捨五入で整数に丸める）とした。

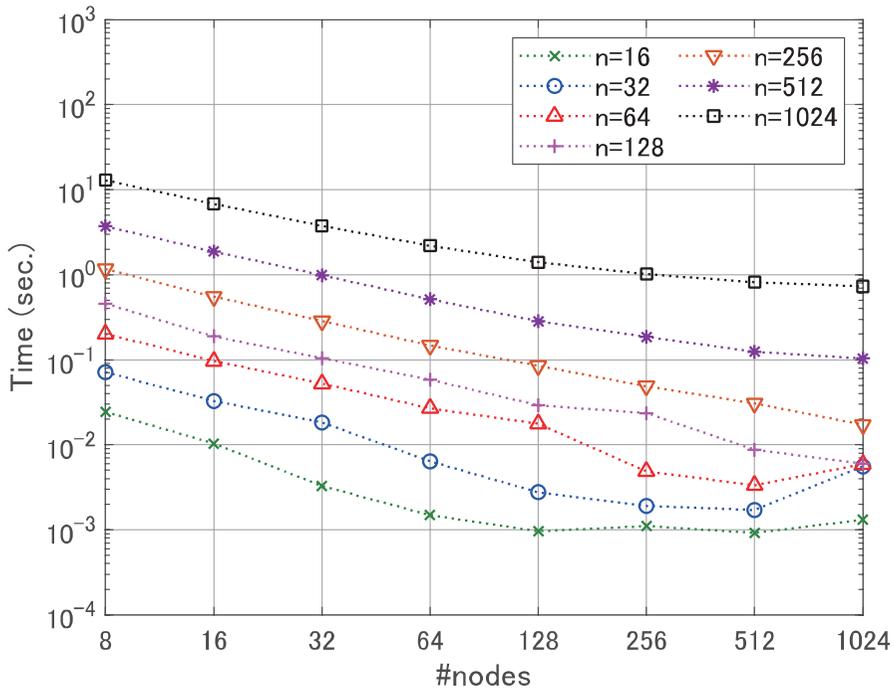
Ite-CholQR-CP の実行時間に関する測定結果を図 1 に示す。BDEC-0（図 1(a)）では、 n に関わらず、256 ノードまでは良好に計算時間が短縮していることが分かる。一方、512 ノード以上では、 $n \leq 64$ については引き続き計算時間が短縮しているが、 $n \geq 128$ の場合には、計算時間の増加が起きている。 n が大きくなるほど、コレスキー分解をはじめとする $n \times n$ の行列に関する計算部分の占める割合が増加するため、その影響があると思われる。さらに、プロセス当たりの行数が、プロセス数に反比例して小さくなるため、上記の影響が増加し、ノード数が多い場合に全体の実行時間の増加という形で現れていると推測できる。また、別の理由として、MPI の集団通信の性能（実行バンド幅）がノード数やデータサイズに応じて異なることで、特定のサイズやノード数で挙動が大きく変わっていることも考えられる。現時点では、詳細は不明のため、今後の課題として原因の調査を行う必要がある。一方、OBCX（図 1(b)）では、概ね良好な計算時間の短縮が得られていることが確認できる。 n が小さくなるほど、少ないノード数で計算時間の短縮が止まっているのは、並列化による演算時間の削減が、問題サイズが小さい場合ほど早く限界に達しやすい、という強スケーリングで一般的に生じる傾向であり、自然な結果であると考えられる。

次に、我々が実装した HQR-CP の簡易版との性能比較の結果を報告する。なお、簡易版というのは、教科書等に記載されている HQR-CP のアルゴリズムをそのまま実装すると、実際にはピボット選択を誤る場合が多く、追加の工夫が必要となるからである[18]。なお、追加の工夫に伴い、集団通信のコストが増加するため、以下で示す結果は、HQR-CP の実行時間の下限と Ite-CholQR-CP の実行時間を比較したものであると解釈して構わない。結果は図 2 の通りで、値が 1.0（Baseline）よりも上であれば、Ite-CholQR-CP が HQR-CP よりも高速であることを意味する。

BDEC-0（図 2(a)）では、ノード数が少なく n が大きい場合、および、ノード数が多く n が小さい場合に、Ite-CholQR-CP が高速となっている。一方、OBCX（図 2(b)）では、いずれの条件でも、Ite-CholQR-CP が高速であり、BDEC-0 と比べて、高速化率が大きい。以上の結果から、大規模分散並列環境における Ite-CholQR-CP の有効性が十分に確認できたと言える。なお、上述のように、BDEC-0（図 2(a)）と OBCX（図 2(b)）の結果を比べると、傾向が大きく異なっていることが分かる。その理由については、まだ不明であり、今後の調査が必要である。いくつか要因を考えてみると、例えば、HQR-CP は計算の大部分が Level-2 BLAS によるため、両システムのメモリスステムの違いが影響している可能性は高い。また、ネットワークの特性と MPI ライブラリの実装も異なるため、その影響もあり得る。さらに、行列サイズや形状に対する Level-3 BLAS の実行性能の挙動も異なることが考えられ、その影響も十分にあり得る。

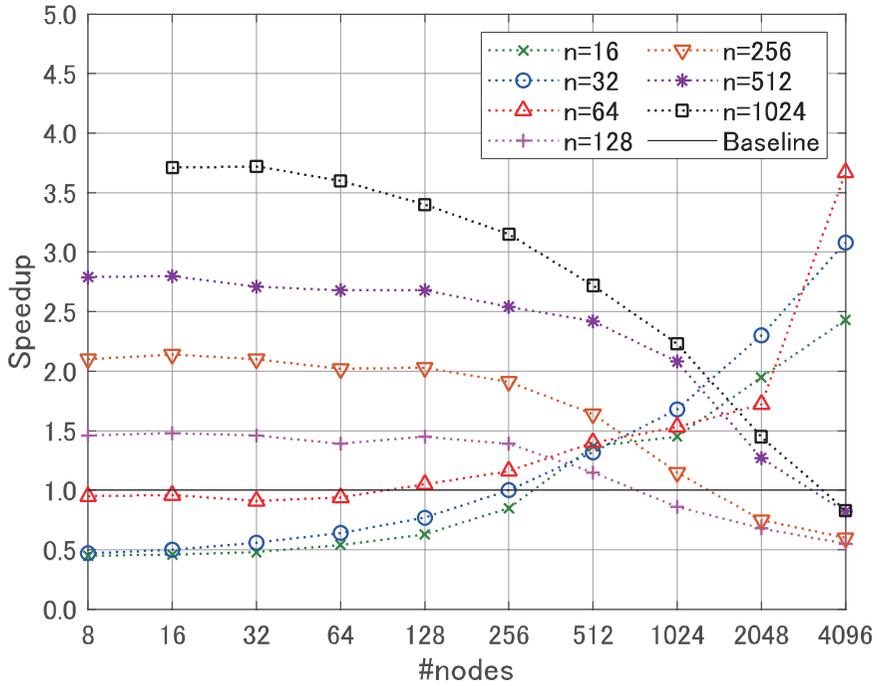


(a) BDEC-0

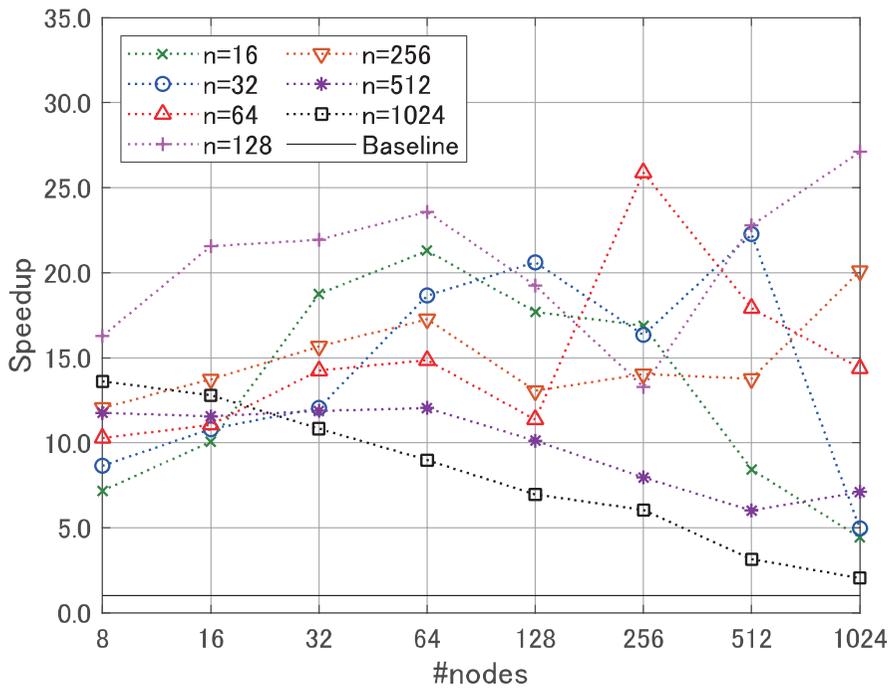


(b) OBCX

図1: Ite-CholQR-CPの実行時間(強スケーリング、 $m = 16777216$)。



(a) BDEC-0



(b) OBCX

図 2 : HQR-CP に対する Ite-CholQR-CP の速度向上 (強スケーリング、 $m = 16777216$)。

6. おわりに

本稿では、我々が開発しているコレスキーQR型のQRCPアルゴリズム (Ite-CholQR-CP) に関して、BDEC-0 および OBCX 上で性能評価を行った結果を報告した。Ite-CholQR-CP は、計算の大半が Level-3 BLAS で実行可能かつ通信回避型アルゴリズムである、といったコレスキーQR型アルゴリズムが持つ高性能計算への親和性を継承しており、本稿で示した性能評価の結果からも、その効果が確認できた。また、本稿では紹介していないが、マルチコア CPU 環境における有効性も確認できており、計算精度の面でも従来法と同程度となることが数値実験を通して検証できている。以上のことから、Ite-CholQR-CP は QRCP に対する有効な計算手法になり得ることが期待される。

一方、非縦長の行列に対する通信回避型の QRCP アルゴリズム[19]が提案されており、これとの使い分け (アルゴリズム選択) の検討が今後の課題の一つである。また、近年、Randomized アルゴリズムと呼ばれるアルゴリズムが活発に研究されており、QRCP に対する Randomized アルゴリズム[20]との比較は重要な課題である。最後に、縦長行列の QRCP は、通常の QR 分解を行った後に、得られた上三角行列に対して QRCP を行う手法が有効であることが分かっている[21]。したがって、この手法と Ite-CholQR-CP の性能を比較することは、Ite-CholQR-CP の有効性をより明確にするために不可欠である。

謝 辞

大規模 HPC チャレンジの実施に関してお世話になりました、東京大学情報基盤センターの関係者の皆様に深く感謝いたします。本稿は、山本有作 教授 (電気通信大学) および中務佑治 准教授 (University of Oxford) との共同研究に基づいた内容であり、両氏に感謝いたします。本研究の一部は、JST さきがけ (課題番号: JPMJPR20M8)、JSPS 科研費 (課題番号: JP21K11909)、学際大規模情報基盤共同利用・共同研究拠点 (JHPCN)、および、革新的ハイパフォーマンス・コンピューティング・インフラ (HPCI) (課題番号: jh230010) の支援を受けています。

参 考 文 献

- [1] T. F. Chan, Rank revealing QR factorizations, *Linear Algebra Appl.*, Vol. 88-99 (1987), pp. 67-82.
- [2] P. Businger and G. H. Golub, Linear least squares solutions by Householder transformations, *Numer. Math.*, Vol. 7 (1965), pp. 269-276.
- [3] G. Golub, Numerical methods for solving linear least squares problems, *Numer. Math.*, Vol. 7 (1965), pp. 206-216.
- [4] T. Fukaya, R. Kannan, Y. Nakatsukasa, Y. Yamamoto, and Y. Yanagisawa, Shifted Cholesky QR for Computing the QR Factorization of Ill-Conditioned Matrices, *SIAM J. Sci. Comput.*, Vol. 42 (2020), pp. A477-A503.
- [5] S. Chandrasekaran and I. C. F. Ipsen, On Rank-Revealing Factorizations, *SIAM J. Matrix Anal. Appl.*, Vol. 15 (1994), pp. 592-622.
- [6] Y. P. Hong and C.-T. Pan, Rank-Revealing QR Factorizations and the Singular Value Decomposition, *Math. Comp.*, Vol. 58 (1992), pp. 213-232.
- [7] M. Gu and S. C. Eisenstat, Efficient Algorithms for Computing a Strong Rank-

- Revealing QR Factorization, *SIAM J. Sci. Comput.*, Vol. 17 (1996), pp. 848-869.
- [8] G. H. Golub and C. F. Van Loan, *Matrix Computations*, 4th ed., The Johns Hopkins University Press, 2012.
- [9] L. N. Trefethen and I. David Bau, *Numerical Linear Algebra*, SIAM, 1997.
- [10] J. Demmel, L. Grigori, M. Hoemmen, and J. Langou, Communication-optimal Parallel and Sequential QR and LU Factorizations, *SIAM J. Sci. Comput.*, Vol. 34 (2012), pp. A206-A239.
- [11] T. Fukaya, Y. Nakatsukasa, Y. Yanagisawa, and Y. Yamamoto, CholeskyQR2: A Simple and Communication-Avoiding Algorithm for Computing a Tall-Skinny QR Factorization on a Large-Scale Parallel System, *Scala' 14*, pp. 31-38, 2014.
- [12] Y. Yamamoto, Y. Nakatsukasa, Y. Yanagisawa, and T. Fukaya, Roundoff Error Analysis of the CholeskyQR2 Algorithm, *ETNA*, Vol. 44 (2015), pp. 306-326.
- [13] 深谷 猛, 縦長行列のQR分解に対する各種アルゴリズムの比較: Oakforest-PACS 上での性能評価, *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. 22, No. 6 (2020), pp. 28-39.
- [14] T. Fukaya, Distributed Parallel Tall-Skinny QR Factorization: Performance Evaluation of Various Algorithms on Various Systems, *PDCAT 2022 (LNCS Vol. 13798)*, pp. 275-287, 2022.
- [15] N. J. Higham, *Accuracy and Stability of Numerical Algorithms*, 2nd ed., SIAM, 2002
- [16] 東京大学情報基盤センター, Wisteria/BDEC-01 スーパーコンピュータシステムの紹介, <https://www.cc.u-tokyo.ac.jp/supercomputer/wisteria/system.php>
- [17] 東京大学情報基盤センター, Oakbridge-CX スーパーコンピュータシステムの紹介, <https://www.cc.u-tokyo.ac.jp/supercomputer/obcx/system.php>
- [18] Z. Drmač and Z. Bujanović, On the Failure of Rank-Revealing QR Factorization Software - A Case Study, *ACM TMS*, Vol. 35 (2008), pp. 12:1-12:28.
- [19] J. Demmel, L. Grigori, M. Gu, and H. Xiang, Communication Avoiding Rank Revealing QR Factorization with Column Pivoting, *SIAM J. Matrix Anal. Appl.*, Vol. 36, (2015), pp. 55-89.
- [20] J. A. Duersch and M. Gu, Randomized Projection for Rank-Revealing Matrix Factorizations and Low-Rank Approximations, *SIAM Rev.*, Vol. 62 (2020), pp. 661-682.
- [21] R. D. da Cunha, D. Becker, and J. C. Patterson, New Parallel (Rank-Revealing) QR Factorization Algorithms, *Euro-Par 2002 (LNCS Vol. 2400)*, pp. 677-686, 2002.

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)」

埴 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、2022年度Aセメスターで連続32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]。

2022年度は、本講義の受講生に対して、2021年5月に運用を開始したWisteria/BDEC-01を用いた演習を行った。また、講義の終盤には、Intel Xeon IceLake, NVIDIA A100 GPUを搭載したWisteria-Aquariusを用いた演習も行った。受講生にとって、スーパーコンピュータ富岳と同じアーキテクチャを持つA64FX CPUなど、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。

Wisteria-Odysseyでは12ノード(48コア×12ノード=576コア)、Wisteria-Aquariusでは4GPUまで1ジョブで利用可能であり、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。

2022年度については引き続き、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。同様の形式になって3年目であり、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、今後も引き続きオンラインでの講義を想定している。さらに今年度は、AセメスターからUTokyo Slackが利用可能になり、質問対応や情報共有がやりやすくなった。

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、C, Fortranに加えて、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した。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
ガイダンス	初回ガイダンス、高性能計算の基礎
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(Wisteria-Odyssey)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-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	GPU プログラミング(1)：(OpenACC による Wisteria-Aquarius の利用、性能比較)
第 12 回	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-wo (第 2 回)	並列版 Hello プログラム、並列円周率計算プログラム、逐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-wo (第 3 回)	行列-行列積の逐次プログラム(逐次チューニング用)
Mat-Mat-openmp-wo (第 4 回)	行列-行列積の逐次プログラム(OpenMP 並列化用)
Mat-vec-wo (第 5 回)	行列-ベクトル積の逐次プログラム
PowM-wo (第 6 回)	べき乗法の逐次プログラム
Mat-Mat-wo (第 7 回)	行列-行列積の逐次プログラム(お手軽並列用)

Mat-Mat-d-wo (第 8 回)	行列-行列積の逐次プログラム (完全分散並列用)
LU-wo (9, 10 回)	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
Isend-ofp (第 10 回)	非同期通信の並列プログラム
Mat-mat-acc (第 11 回)	行列-行列積の逐次プログラム (OpenACC 並列化用)
Python (第 12 回)	Python による並列プログラム、機械学習サンプル

3. 受講者についての統計データ

(1) 受講者数

2021 年度の S セメスターの履修登録者は 65 名 (学部 : 31 名、大学院 : 34 名)、A セメスターの履修登録者は 67 名 (学部 : 28 名、大学院 : 39 名) であった。そのうち、単位取得者は、58 名 (学部 : 26 名、大学院 : 32 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: 46 名+
 - 工学部機械工学科: 7
 - 工学部機械情報工学科: 1
 - 工学部航空宇宙工学科: 4
 - 工学部精密工学科: 4
 - 工学部電子情報工学科: 8
 - 工学部電気電子工学科: 1
 - 工学部物理工学科: 1
 - 工学部計数工学科: 3
 - 工学部マテリアル工学科: 5
 - 工学部応用化学科: 4
 - 工学部化学システム工学科: 2
 - 工学部システム創成学科: 6
- 文学部: 1 名
 - 文学部人文学科: 1
- 理学部: 7 名
 - 理学部情報科学科: 1
 - 理学部物理学科: 1
 - 理学部天文学科: 1
 - 理学部地球惑星物理学科: 3

- 理学部生物情報科学科：1
- 農学部：1名
 - 農学部環境資源科学課程：1
- 経済学部：3名
 - 経済学部金融学科：3
- 教養学部：1名
 - 教養学部学際科学科：1
- 経済学研究科：1名
 - 経済学研究科経済専攻：1
- 総合文化研究科：3名
 - 総合文化研究科広域科学専攻：3
- 理学系研究科：15名
 - 理学系研究科物理学専攻：2
 - 理学系研究科天文学専攻：4
 - 理学系研究科地球惑星科学専攻：9
- 工学系研究科：41名
 - 工学系研究科社会基盤学専攻：6
 - 工学系研究科機械工学専攻：2
 - 工学系研究科精密工学専攻：2
 - 工学系研究科航空宇宙工学専攻：7
 - 工学系研究科システム創成学専攻：4
 - 工学系研究科電気系工学専攻：6
 - 工学系研究科物理工学専攻：3
 - 工学系研究科マテリアル工学専攻：2
 - 工学系研究科応用科学専攻：1
 - 工学系研究科化学システム工学専攻：1
 - 工学系研究科化学生命工学専攻：1
 - 工学系研究科先端学際工学専攻：2
 - 工学系研究科バイオエンジニアリング専攻：1
 - 工学系研究科技術経営戦略学専攻：3
- 新領域創成科学研究科：6名
 - 新領域創成科学研究科先端エネルギー工学専攻：1
 - 新領域創成科学研究科複雑理工学専攻：2
 - 新領域創成科学研究科人間環境学専攻：3
- 情報理工学系研究科：7名
 - 情報理工学系研究科システム情報学専攻：4
 - 情報理工学系研究科電子情報学専攻：1
 - 情報理工学系研究科知能機械情報学専攻：1
 - 情報理工学系研究科創造情報学専攻：1

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。

Wisteria/BDEC-01 については、導入直後のタイミングから使用を開始したが、Fortran と C 言語でコンパイラの違いによる性能差が時折見られるものの、安定して利用できた。関係諸氏に深く感謝する。

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

第 201 回お試しアカウント付き並列プログラミング講習会

「Optuna を用いた実アプリケーションにおける パラメータ最適化～OpenFOAM を例に～」

埜 敏博

東京大学情報基盤センター

2023 年 3 月 10 日（金）に、第 201 回お試しアカウント付き並列プログラミング講習会「Optuna を用いた実アプリケーションにおけるパラメータ最適化～OpenFOAM を例に～」が開催されました。新型コロナウイルス感染症対策のため、講師のみが現地に集まり、受講生に対しては Zoom を用いたオンライン講習会として実施されました。

本講習会は、東京大学内および学外における当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、技術者の方が参加可能になっております。特に今回は、PC クラスタコンソーシアム・実用アプリケーション部会が中心となって計画したものです。Preferred Networks が開発している自動最適化フレームワーク Optuna を使い、実際に OpenFOAM におけるパラメータのベイズ最適化を目指したもので、Preferred Networks からお二人(王 允卓、福田圭祐の両氏)、客員研究員の今野 雅氏を講師にお迎えしました。

受講者は、学部学生：3 名、大学院学生：1 名、大学・研究機関教職員：4 名、企業の方：6 名の計 14 名の方にご参加いただきました。

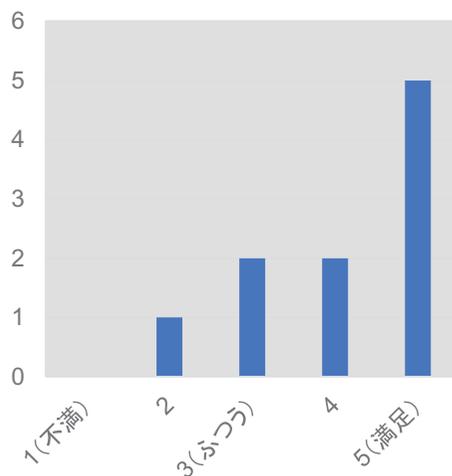
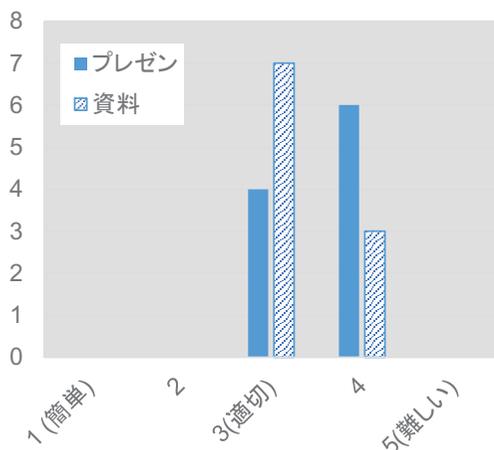
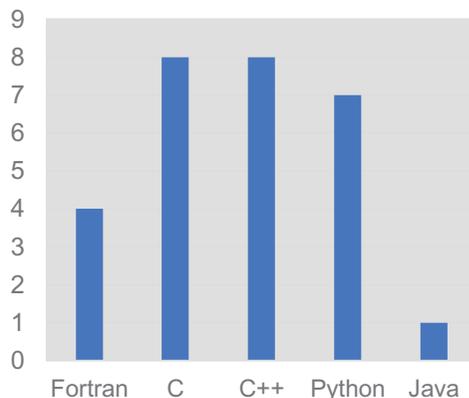
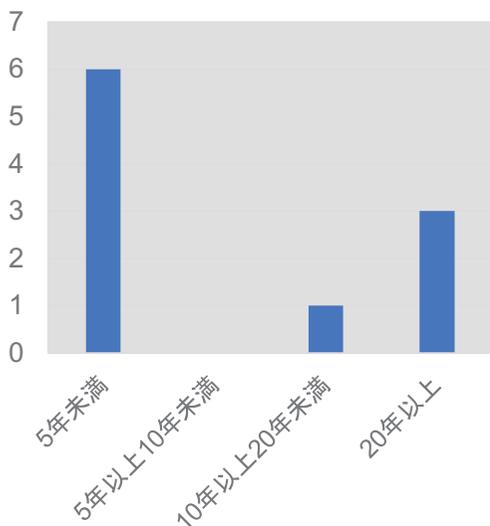
1 ヶ月有効となるお試しアカウントが与えられ、Wisteria/BDEC-01 スーパーコンピュータシステムのうち Odyssey を用いて、スパコンの概要や利用法概説に始まり、Optuna の概要説明をした後、Optuna を用いた OpenFOAM パラメータのベイズ最適化を中心に、講義と演習が以下の日程で行われました。

当日のプログラムを、以下に掲載します。

- 3 月 10 日（金）
 - 10:00 - 12:00 スパコンの概略と利用法、Optuna の概略
 - 13:00 - 18:00 Optuna の使い方、Optuna を使った OpenFOAM のパラメータ探索の実例、全体質疑

10 名の参加者について、講習会に関するアンケートをご提出いただきました。主要な項目の集計結果を以下に示します。

プログラミング経験については、40 年という方もいらっしゃいました。使用しているプログラミング言語については、C, C++が 8 名と多く、Python が 7 名（複数回答可）でした。



講義内容や配布資料については高評価で、講習会の満足度は 4.1 でした。

受講生からいただいた感想は以下の通りでした。

- 大変勉強になりました。ありがとうございます。
- 【CFD 解析やプログラミング、並列プログラミングの知識・経験は必要ありません。】とこの講習会の案内に書いてあったが、プログラミングの知識は必要かと思いました。
- Optuna はもっと深いテーマでもう一度やってほしい
- 本講習会の内容は私の研究にとっても使えると思います。まだ勉強しています。教習の先生たちに「どうもありがとうございました」を言いたいです。

同様の講習会があれば、「また受けたい」という回答が 4 名で、感想からもその他の講習会にも期待されていることが伺えます。

また、講師からのコメントは以下の通りでした。

- Optuna の導入を Google Collab で実施でき、Optuna を手軽に導入する意味では良かった。
- OpenFOAM と Optuna の組み合わせは我々も勉強になった。

- 運悪く Optuna のバージョンアップと重なり、動作確認に時間を要した。
- 簡単な演習問題を用意するのが良かったかもしれない。
- 講師の音声聞き取りにくかったようなので、環境を考える必要がある。

本講習会資料、録画データも公開しております。復習に役立てたり、参加が適わなかった方に自習に使っていただければ幸いです。

オンライン講習会にはオンサイト講習会にない利点があることも分かってきたので、今後オンサイト開催が可能になってもオンラインを考慮しながら内容を検討していく予定です。

以上

2023年度 お試しアカウント付き並列プログラミング講習会 開催状況

回数	開催日	内容	区分		人数	満足度※
			事前登録者	参加者		
第203回	2023年4月26日	「MPI基礎：並列プログラミング入門」 ¹ Wisteria/BDEC-01 (Odyssey) 三木 洋平	事前登録者		21	4.23
			参加者	大学・研究機関教職員	6	
				企業の方	5	
				学部学生	0	
				大学院生	2	
				その他	1	
合計	14					
第204回	2023年5月31日	「OpenFOAM入門・キャビティ解析」 ² Wisteria/BDEC-01 (Odyssey) 今野 雅	事前登録者		20	3.93
			参加者	大学・研究機関教職員	2	
				企業の方	6	
				学部学生	2	
				大学院生	6	
				その他	0	
合計	16					
第205回	2023年6月8日	「Wisteria実践」 ³ Wisteria/BDEC-01(Odyssey,Aquarius) 埴 敏博	事前登録者		10	4.33
			参加者	大学・研究機関教職員	2	
				企業の方	1	
				学部学生	0	
				大学院生	3	
				その他	0	
合計	6					
第206回	2023年6月16日	「GPUプログラミング入門」 ⁴ Wisteria/BDEC-01(Aquarius) 星野 哲也	事前登録者		22	4.66
			参加者	大学・研究機関教職員	3	
				企業の方	7	
				学部学生	2	
				大学院生	2	
				その他	0	
合計	14					

※「満足度」は講習会参加後に提出されたアンケート（「参加した満足度」の項目）から、その平均値を算出している。1 不満 ↔ 満足 5 の5段階評価。

¹ <https://www.cc.u-tokyo.ac.jp/events/lectures/203/>

² <https://www.cc.u-tokyo.ac.jp/events/lectures/204/>

³ <https://www.cc.u-tokyo.ac.jp/events/lectures/205/>

⁴ <https://www.cc.u-tokyo.ac.jp/events/lectures/206/>

第 204 回お試しアカウント付き並列プログラミング講習会 「OpenFOAM 入門・キャビティ解析」実施報告

今野 雅

東京大学情報基盤センター客員研究員

2023 年 5 月 31 日 (水), 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 204 回お試しアカウント付き並列プログラミング講習会「OpenFOAM 入門・キャビティ解析」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 25 回目の OpenFOAM の講習会である。受講者は、大学・研究機関教職員 2 名、大学院学生 6 名、学部学生 2 名、企業の方 6 名であり、事前申込者 20 名、受講者合計は 16 名であった。センターが運営するスパコン Wisteria/BDEC-01 を用い、Wisteria/BDEC-01 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(Wisteria-0, 最大ノード数 12, 最大実行時間 15 分)が受講者に与えられた。

表 1 講習会プログラム

【2023 年 5 月 31 日 (水)】
10:00 - 12:00 講習会の準備・概要説明
イントロダクション
Wisteria/BDEC-01 概要
OpenFOAM 概要
13:00 - 18:00 3次元ダムブレイク解析演習
講習会の準備
module による OpenFOAM の環境設定
解析対象
解析ケース
blockMesh による格子生成
格子の可視化
解析条件の設定
ソルバ実行
解析結果の可視化
解析結果の検証
並列計算
演習課題
チュートリアルの実行
質疑応答

講習会終了後のアンケート集計結果(回答数 15)を表 2 に示すが、参加した満足度の平均は 5 点満点中 3.97 と概ね高かった。また、参加者から表 3~5 に示すご意見を頂いたので、今後の講習会の参考にしたい。

表 2 アンケート集計結果

評 点	講習会の時間		講習会の講義内容 (プレゼン)		配布資料の内容		サンプルプログラム 内容		参加した満足度	
1	短い	1	簡単	0	簡単	0	簡単	1	不満	0
2		0		2		3		3		1
3	適切	4	適切	6	適切	6	適切	7	普通	3
4		8		5		5		3		7
5	長い	2	難	2	難	1	難	1	満足	4
	平均	3.67	平均	3.47	平均	3.27	平均	3.00	平均	3.93

表 3 Zoom によるオンライン講習会で良かったこと(原文ママ)

- 今回はなかったが、困ったときに画面を映しながら説明を受けることができるのは良いと思った。
- 遅れている人に対して丁寧に対応していた
- 講習会会場の往来時間が短縮できることです。
- 人の目を気にしない
- 東大まで出向かなくて良かった。
- 出張なしで受講出来ました。
- 講師の先生のコマンドを直接拝見しながら、演習できたことです。
- Distance is not a factor, no travelling needed. 距離は要因ではありません、旅行は必要ありません。

表 4 Zoom によるオンライン講習会で悪かったこと(原文ママ)

- 途中で出遅れたときに取り戻すのが大変でした。
- 長丁場になり集中力が切れる場面があった。
- ログインしている 1 つの画面集中するため、疲れがたまりやすく感じた
- zoom 自体が重くターミナルでの操作がとても遅い
- 特に、ありません。
- 質問しづらい
- 2 画面でギリギリだった。モニターを複数用意することを推奨すると思う。
- 特にないが、こちらのネットワーク環境の関係で通信が切れたりしてました。
- やや時間が押したのが残念でしたが、開催者様方の運営が決して悪いわけではございません。

表 5 本講習会に対するご意見(原文ママ)

-
- OpenFOAM の講習というより Linux の講習のような時間があつたのが少し残念だった(講習者というよりも参加者の問題かとは思いますが)
 - スーパーコンピュータの利用方法について非常に勉強になった。今後も利用していきたいと感じた。
 - OpenFOAM を使ったことがない者で、今回はじめて参加しました。事前準備が不十分で、実習が十分にできませんでした。OpenFOAM についてかなり学習することができました。
 - 1 か月間使用できるようでしたら、本日学んだ例題、またチュートリアル例題を実行したいと思っています。本日は、有難うございました。”
 - 業務に追われて、事前準備が十分できなかった事を反省しています。膨大な説明内容を 1 日でできるのは素晴らしいと思いました。1 か月間で Tutorial でもちゃんとできるようになりたいので、引き続き、よろしく願いいたします。
 - あまりにも参加者側の意識が低い人おり、事前設定など、やっていない人が多いことが残念でした。講師の先生が苦勞されてらっしゃったのが、申し訳なく存じます。
 - It will be great to earn CPD points from these courses. これらのコースで CPD ポイントを獲得できるのは素晴らしいことです。
-

最後に、本講習会の資料や演習用ケースファイル、動画については講習会の WEB ページ (<https://www.cc.u-tokyo.ac.jp/events/lectures/204/>) から閲覧できるので参照頂きたい。

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 原稿枚数には特に指定はありませんが、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、A4 サイズで、ページの余白は上下 20mm、左右 26mm、ヘッダー15mm、フッター10mm に設定してください。詳しくは原稿様式をご参照ください。PDF 形式（フォント埋め込み）の完全原稿を電子メールにて uketsuke@cc.u-tokyo.ac.jp までご提出願います。
- 8 採用された原稿は、本センターの Web ページに掲載いたします。
<https://www.cc.u-tokyo.ac.jp/public/news.php>

【スーパーコンピュータシステム・ストレージシステム利用案内】

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://wisteria-www.cc.u-tokyo.ac.jp/ (Wisteria/BDEC-01) https://obcx-www.cc.u-tokyo.ac.jp/ (Oakbridge-CX) https://ipomoea-www.cc.u-tokyo.ac.jp/ (Ipomoea-01)

お問い合わせ内容	お問い合わせ先
利用申込関係	スーパーコンピュータシステム・ストレージシステム 利用申込書提出先 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
Wisteria/BDEC-01 スーパーコンピュータシステム (Odyssey/Aquarius)	wisteria.cc.u-tokyo.ac.jp 以下のホストの何れかに接続します※ wisteria0{1-6}.cc.u-tokyo.ac.jp
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
Ipomoea-01 システム (大規模共通ストレージシステム(第1世代))	ipomoea01.cc.u-tokyo.ac.jp 以下のホストの何れかに接続します※ i01login{1-2}.cc.u-tokyo.ac.jp

※どのホストに接続しても同じです。

【編集】

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研究部門
 東京大学情報システム部情報基盤課スーパーコンピューティングチーム
 // 情報戦略課研究支援チーム

【発行】

東京大学情報基盤センター
 〒277-0882 千葉県柏市柏の葉6-2-3
 (電話) 04-7133-4663 (ダイヤルイン)

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
スーパーコンピュータシステム 「大規模HPCチャレンジ」 課題募集のお知らせ	5
スーパーコンピュータシステム 「大規模HPCチャレンジ」 採択課題のお知らせ	8
研究成果の登録のお願い	10
4月・5月のジョブ統計	11

ユーザーから

磁気単極子秩序形成の基底状態解析	15
大規模分散並列環境におけるコレスキーQR型アルゴリズムによる 縦長行列の列ピボット付きQR分解の性能評価	20

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)」	29
第201回お試しアカウント付き並列プログラミング講習会 「Optunaを用いた実アプリケーションにおけるパラメータ最適化 ～OpenFOAMを例に～」	34
2023年度 お試しアカウント付き並列プログラミング講習会 開催状況	37
第204回お試しアカウント付き並列プログラミング講習会 「OpenFOAM入門・キャビティ解析」 実施報告	38

原稿募集	41
------	----