

スーパーコンピューティング ニュース

Vol.26 No.1, 2024.1



東京大学情報基盤センター
INFORMATION TECHNOLOGY CENTER, THE UNIVERSITY OF TOKYO

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	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-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	
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 2 TB 利用者当り /home 50 GB	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。

※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

注意事項

- 「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

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"

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		
	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)		
	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。

巻頭言：「計算・データ・学習」融合とその先にあるもの

中 島 研 吾

東京大学情報基盤センター

新しい年，2024 年の初めにあたって，皆さまとご家族，ご友人，周囲の皆さまのご健康，そして世界の平和を心からお祈り申し上げるとともに，2024 年 1 月の能登半島地震で被災された皆様にお見舞い申し上げます。

2023 年度は，電力単価の高騰により，計算機利用負担金の一律 50%引き上げ，という苦渋の決断をせざるを得ませんでした。Wisteria/BDEC-01 (Odyssey) も年度当初は 25%停止，という状況でしたが，電力単価の減少もあり，幸い 7 月から Odyssey は全系運用に戻すことができました。ただ，2023 年秋頃から再び上昇傾向に転じていることもあり，2024 年度の計算機利用負担金は現状維持（2022 年度水準の 50%増し）とさせていただきます。利用者の皆様には引き続き大変なご迷惑とご不便をおかけすることになりますが，何卒ご理解，ご丁承のほどをお願いいたします。

2023 年は，新型コロナウイルス感染症の 5 類感染症への移行もあり，3 年ぶりにほぼコロナ前の状況に戻り，海外との往来も盛んになりました。当センターの ASE 研究会も海外からの参加者を交えてハイブリッド形式で既に 4 回開催することができました。

2023 年 9 月末には，4 年余りにわたって運用され，日本と世界の計算科学の発展に貢献した大規模超並列スーパーコンピュータシステム「Oakbridge-CX (OBCX)」¹が退役しました。OBCX は，非常に使いやすいシステムとして大変好評でしたが，高速 SSD を搭載し，外部に直接接続するノード群を有するなど，東京大学情報基盤センター（当センター）の推進する「計算・データ・学習（Simulation・Data・Learning，S+D+L）」融合の先駆けとなる記念碑的なシステムでもありました。

そして，2025 年 1 月に運用を開始する新しい仲間，筑波大学と共同で運営する JCAHPC（最先端共同 HPC 基盤施設）²による「OFP-II」についても 2023 年 11 月 9 日に開札があり，富士通製のシステムとなることが決定しました。詳細は本号の記事に記載されているように，Intel Xeon Max 9480（HBM2e 搭載）を 380 基搭載した汎用 CPU ノード群，NVIDIA GH200 Grace Hopper™ Superchip という最新の CPU-GPU を 1,120 基搭載した演算加速ノード群から構成されるヘテロジニアスなシステムで，合計物理ピーク性能は 79.5PFLOPS です。革新的ソフトウェア基盤 h3-Open-BDEC³の一環として整備されたソフトウェア群を活用して，引き続き「計算・データ・学習」融合を推進します。OFP-II 導入に向けた「第二軍の大輸送」⁴はようやく折り返し点に達しましたが，アプリケーション群への移行は関係各位のたゆまざる努力により順調に進んでおります。年 4 回開催している GPU ミニキャンプも徐々にハイブリッド開催に移行しつつあります。詳細は「GPU 移行ポータルサイト」⁵をご覧ください。ミニキャンプの他，講習

¹ <https://www.cc.u-tokyo.ac.jp/supercomputer/obcx/service/>

² <https://www.jcahpc.jp/>

³ <https://h3-open-bdec.cc.u-tokyo.ac.jp/>

⁴ https://www.cc.u-tokyo.ac.jp/public/VOL25/No1/02_202301prefatory-2.pdf

⁵ https://www.cc.u-tokyo.ac.jp/supercomputer/gpu_porting.php

会、毎月の「相談会」など様々な催しがあります。これからアプリケーションの移植に取り組んでみようと考えておられる皆様も是非お気軽に参加、ご相談ください。2023 年 10 月末には、OFP-II のプロトタイプである Wisteria-Mercury (NVIDIA H100 を 16 基搭載) も導入されました。

2021 年 5 月 14 日に運用を開始した「計算・データ・学習」融合のためのプラットフォームである「Wisteria/BDEC-01⁶」は、革新的ソフトウェア基盤 h3-Open-BDEC とともに、「計算・データ・学習」融合 3 年を迎えました。シミュレーションノード群 (Odyssey) とデータ・学習ノード群 (Aquarius) を連携させて「計算・データ・学習」融合を実現する試みは、引き続き世界から注目されており、ドイツ、フランス、クロアチア、アメリカ、ノルウェーなどの諸研究機関との国際協力が進められています。「学際大規模情報基盤共同利用共同研究拠点 (JHPCN)⁷」の共同研究課題でも、当センターがサポートして「計算・データ・学習」融合を推進しています。図 1 は JHPCN において当センターのシステムを使用した共同研究課題の分野別推移です。

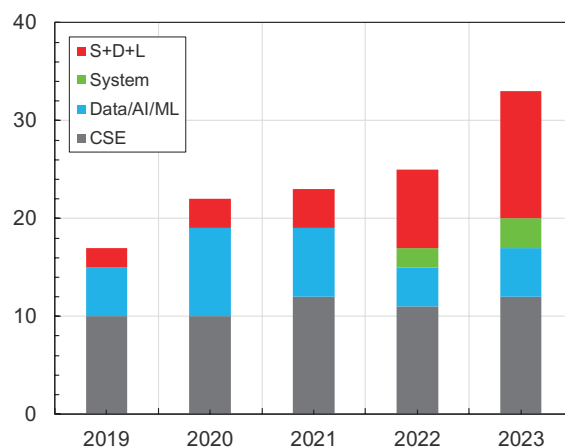


図 1: JHPCN における東大システム利用課題数の分野別推移, ■CSE (計算科学・工学), ■Data/AI/ML (データ・AI・機械学習), ■System (計算機システム関連), ■(S+D+L) (計算 (Simulation)・データ (Data)・学習 (Learning) 融合型)

計算科学・工学系のシミュレーション (CSE) は安定的に推移していますが、昨今はそれ以外のデータ、学習、計算機システムに関連した課題、特に「計算・データ・学習 (S+D+L)」融合課題が激増していることがわかります。「計算・データ・学習」融合 4 年となる 2024 年は更に「計算・データ・学習 (S+D+L)」融合の推進につとめて参ります。

2023 年は「ChatGPT⁸」に代表される「生成 AI (Generative AI)」が大きな話題となりました。生成 AI は自然言語処理、翻訳にとどまらず、様々な研究分野、業務への活用が期待されています。図 2 は 2022 年度の Wisteria/BDEC-01 の, Aquarius, Odyssey 各ノード群の利用分野を計算機資源使用量に応じて分類したものです。シミュレーションノード群 (Odyssey) は伝統的な計算科学 (工学・ものづくり, 地球科学・宇宙科学, 材料科学, エネルギー・物理学) が中心ですが, GPU クラスタであるデータ・学習ノード群 (Aquarius) は, AI, バイオインフォマティクス (ゲノム解析, 医療画像処理等), データ科学・データ同化の割合が多くなっていることがわかります。

図 3 は, 2023 年 12 月末までの 9 ヶ月の統計ですが, AI, バイオインフォマティクス, データ科学・データ同化の割合が増加し, 特に AI 関連の利用が全体の 25% 程度を占めていることがわかります。AI 関連利用の多くは「大規模言語モデル (Large Language Model, LLM)」に関係したもので, 2023 年度になって急激にこの分野での利用が増加しました。ChatGPT に伍する

⁶ <https://www.cc.u-tokyo.ac.jp/supercomputer/wisteria/service/>

⁷ <https://jhpcn-kyoten.itc.u-tokyo.ac.jp/ja/>

⁸ <https://chat.openai.com>

ような言語モデルの構築には Aquarius は非力ではありますが、少しでも関連分野の研究開発に貢献したく、積極的に協力を継続していく予定です。

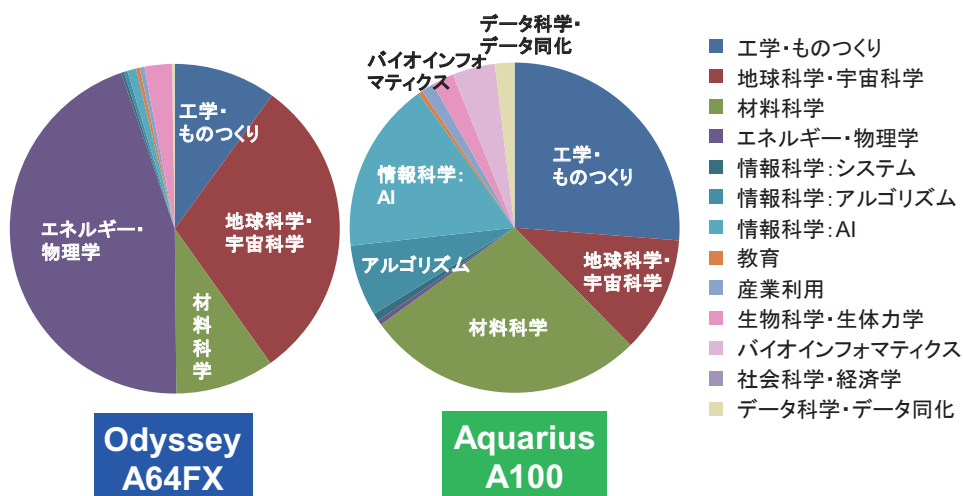


図 2 : Wisteria/BDEC-01 の利用分野 (2022 年度)

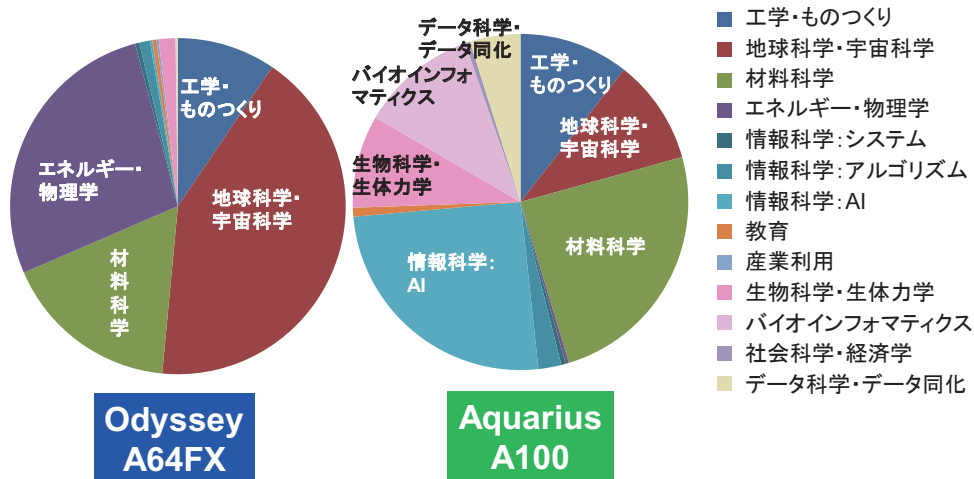


図 3 : Wisteria/BDEC-01 の利用分野 (2023 年度 (2023 年 12 月末時点))

「生成 AI」の例にも見られますように、昨今、情報科学・情報技術の発展と進化はめまぐるしいものがありますが、当センターは最新の計算機資源、インフラを提供することにとどまらず、計算機科学、高性能計算 (High Performance Computing, HPC) 分野における将来の動向を見据えた最先端の研究開発を継続して実施し、その知見・経験を次世代システムの設計、導入に反映させるとともに、利用者の皆様へ適切な情報を発信していくことも重要なミッションと位置付けています。

そのような活動の一つとして、2023 年秋から新しい取り組みを開始しています。経済産業省、新エネルギー・産業技術総合開発機構 (NEDO) 「ポスト 5G 情報通信システム基盤強化研究開発事業／ポスト 5G 情報通信システムの開発」における開発テーマ「(g1) 量子・スパコンの統

合利用技術の開発」として、理化学研究所、ソフトバンク株式会社が提案する「計算可能領域の開拓のための量子・スパコン連携プラットフォームの研究開発⁹」に当センターは、大阪大学とともに共同実施者として参加しています。デジタルトランスフォーメーション（DX）や AI などが急激に進化する中、人類の計算可能領域の拡大は喫緊の課題であり、量子コンピュータの実用化を待つことなく、量子コンピュータ・HPC 連携ソフトウェアの開発に取り組むことが極めて重要です。本プロジェクトでは、量子コンピュータとスパコンを連携するための汎用性の高い量子・HPC 連携システムソフトウェアの研究開発と、これを用いた量子・スパコン連携プラットフォームの構築、ポスト 5G 時代のネットワークで提供されるサービスとして展開する技術の実現に取り組んでいきます。当センターは Wisteria/BDEC-01, h3-Open-BDEC を使用した「計算・データ・学習」融合の推進で培った知見に基づき、量子・スパコン連携プラットフォーム構築のためのソフトウェアの開発を実施いたします。

2025 年度中には、試験的ではありますが、Wisteria/BDEC-01 や OFP-II と量子コンピュータを連携させた計算が可能となるように研究開発を進めてまいります。「計算・データ・学習」融合の先にある、更に新しい世界を利用者の皆さまと体験することができれば幸いです。

2024 年もよろしくお願いいたします。

⁹ https://www.riken.jp/pr/news/2023/20231122_1/index.html

センターから

サービス休止等のお知らせ

2024 年 1 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
1 月 26 日 (金)	9:00 ～ 22:00 までサービス休止	月末処理
2 月 22 日 (木)	9:00 ～ 22:00 までサービス休止	月末処理
3 月 29 日 (金) ～ 4 月 3 日 (水)	3/29 9:00 ～ 4/3 17:00 までサービス休止	年度末処理

- ・ 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	
1 月 25 日 (木) 8:30 ～	1 月 26 日 (金) 9:00 まで
2 月 21 日 (水) 8:30 ～	2 月 22 日 (木) 9:00 まで
3 月 28 日 (木) 8:30 ～	3 月 29 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。

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
3 月 29 日 (金) ～ 4 月 3 日 (水)	3/29 9:00 ～ 4/3 17:00 までサービス休止	年度末処理

- ・ 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 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

(2023.11.1 – 2023.12.31 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 … なし

1.2 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)

➤ Aquarius、ログインノード

NVIDIA HPC SDK	23.11	(2023.12.22)
----------------	-------	--------------

➤ Guacamole サーバ

Apache Tomcat	9.0.83	(2023.12.22)
---------------	--------	--------------

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 8 (Ipomoea-01) … なし

最先端共同 HPC 基盤施設スーパーコンピュータシステム(OFP-II)導入のお知らせ

スーパーコンピューティングチーム

Oakforest-PACS (OFP)システムの後継システムについて、「最先端共同 HPC 基盤施設スーパーコンピュータシステム (OFP-II)」として最先端共同 HPC 基盤施設(JCAHPC)において共同調達(筑波大学計算科学研究センター、東京大学情報基盤センター)を進めておりました。Web ページ「最先端共同 HPC 基盤施設が「OFP-II」の導入を決定」(https://www.cc.u-tokyo.ac.jp/supercomputer/ofp-II/service/introduction_OFP-II.php)でもお知らせしておりましたが、このたび納入システムが決まりましたので、お知らせいたします。

OFP-IIは、2つの計算ノード群(汎用 CPU ノード群、演算加速ノード群)、ログインノード群、共有ファイルシステム、管理サーバ群から構成されるシステムで、富士通株式会社 が構築を担当します。

OFP-IIの試験運用開始は、2025 年 1 月中を予定しております。サービス内容などの詳細は決まり次第、Web ページ、スーパーコンピューティングニュースなどでお知らせいたします。

1. システム構成

1.1 ハードウェア構成

OFP-II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

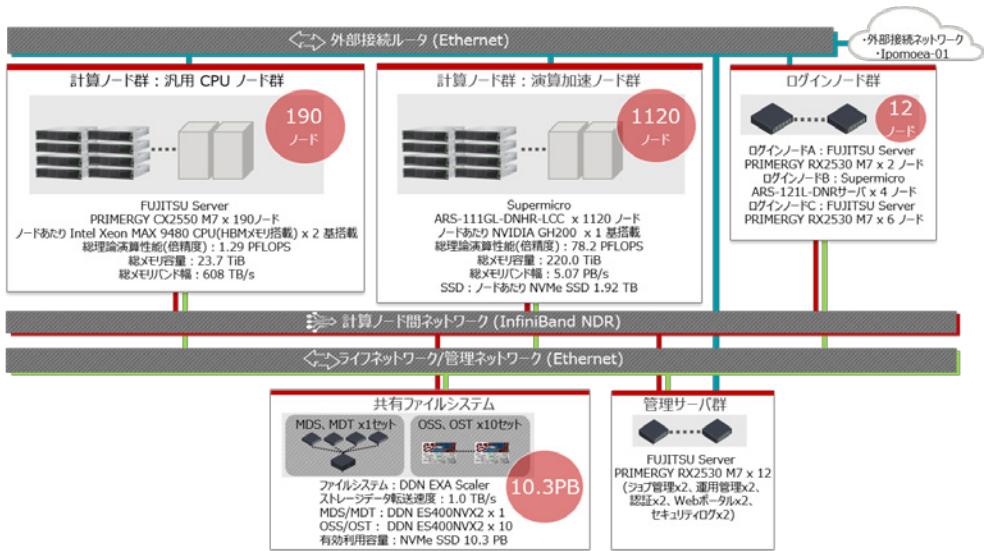


表 1. 全体構成

項目		汎用CPU ノード群	演算加速ノード群
総理論演算性能		1.29 PFLOPS	78.28 PFLOPS
総ノード数		190	1120
総メモリ容量		23.75 TiB	220.02 TiB
総メモリバンド幅		608 TB/s	5.07 PB/s
ネットワークポロジ		フルバイセクション Fat Free	フルバイセクション Fat Tree
共有ファイルシステム	ファイルシステム	Lustre (DDN EXAScaler)	
	サーバ(OSS)	DDN ES400NVX2	
	サーバ(OSS)数	10	
	ストレージ容量	10.32 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		汎用CPU ノード群	演算加速ノード群
マシン名		FUJITSU Server PRIMERGY CX2550 M7	Supermicro ARS-111GL-DNHR-LCC
CPU	プロセッサ名	Intel Xeon Max 9480	NVIDIA Grace CPU Arm Neoverse V2 CPU
	プロセッサ数(コア数)	2 (56 + 56)	1 (72)
	周波数	1.9 GHz	2.6 GHz
	理論演算性能	6.8096 TFLOPS	2.995 TFLOPS
	メモリ容量	128 GiB	111.7 GiB
	メモリ帯域幅	3.2 TB/s	512 GB/s
GPU	プロセッサ名	—	NVIDIA Hopper H100 GPU
	搭載数		1
	理論演算性能		66.9 TFLOPS
	メモリ容量		89.4 GiB
	メモリ帯域幅		4,022 GB/s
	CPU-GPU 間接続		NVLink Chip-2-Chip interconnect (片方向 450 GB/s)
SSD			NVMe SSD 1.92 TB (PCIe Gen4 x4)
冷却方式		水冷	水冷
インターコネクト		InfiniBand NDR200 (200Gbps)	InfiniBand NDR200 (200Gbps)

1.2 ソフトウェア構成

OFFP-IIのソフトウェア構成は、以下の通りです(表 3)。

表 3. ソフトウェア構成

	汎用 CPU ノード群	演算加速ノード群
OS	Rocky Linux 9 (ログインノードは Red Hat Enterprise Linux 9)	
ジョブスケジューラ	PBS Professional	
コンパイラ	GNU コンパイラ	
	Intel コンパイラ Fortran77/90/95/2003/2008 C、C++	NVIDIA HPC SDK Fortran77/90/95/2003/2008 C、C++ OpenMP、OpenACC NVIDIA CUDA Toolkit CUDA C CUDA C++
メッセージ通信ライブラリ	Intel MPI	Open MPI
ライブラリ	—	cuBLAS、cuSPARSE、cuFFT、 MAGMA、cuDNN、NCCL
	BLAS、CBLAS、LAPACK、ScaLAPACK、SuperLU、SuperLU MT、SuperLU DIST、METIS、MT-METIS、ParMETIS、Scotch、PT-Scotch、PETSc、Trillinos、FFTW、GNU Scientific Library、NetCDF、Parallel netCDF、HDF5、Parallel HDF5、OpenCV、Xabclib、ppOpen-HPC、MassiveThreads、Standard Template Library (STL)、Boost C++	
アプリケーション	OpenFOAM、ABINIT-MP、PHASE、FrontFlow/blue、FrontISTR、REVOCAP-	

	Coupler, REVOCAP-Refiner, OpenMX, MODYLAS, GROMACS, BLAST, R packages, bioconductor, BioPerl, BioRuby, BWA, GATK, SAMtools, Quantum ESPRESSO, Xcrypt, ROOT, Geant4, LAMMPS, CP2K, NWChem, DeepVariant, Paraview, VisIt, POV-Ray, TensorFlow, PyTorch, JAX, Keras, Horovod, MXNet, Miniforge, Kokkos
フリーソフトウェア	autoconf, automake, bash, bzip2, cvs, emacs, findutils, gawk, gdb, make, grep, gnuplot, gzip, less, m4, python, perl, ruby, screen, sed, subversion, tar, tcsh, tcl, vim, zsh, git など
	Julia, CMake, Ninja, Java JDK
	Grid Community Toolkit, Gfarm, FUSE
コンテナ仮想化	Apptainer, Singularity Community Edition,

2024 年度の利用申込（新規・継続）について

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

2024年度のスーパーコンピュータシステム利用申込（新規・継続）は下記のとおり取り扱い
ます¹。利用申込の内容によって、利用申込期限が異なりますのでご注意ください。

なお、この情報は本稿作成時点での内容のため、変更する場合があります。最新の情報につ
いては、スーパーコンピューティング部門Webページ（<https://www.cc.u-tokyo.ac.jp/>）でご
確認ください。

また、2024年4月からの利用に関する「利用登録のお知らせ」の送付については、2024年3月
末を予定しておりますので、予めご了承ください。

1. 新規利用申込

Wisteria/BDEC-01 【通常利用】

2024年1月下旬にスーパーコンピューティング部門Webページ

（<https://www.cc.u-tokyo.ac.jp/>）にて2024年度版の利用申込サイトを公開します。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になり、利用申込を行ってください。

申込は随時受け付けますが、2024年4月初めからのご利用を希望される場合は、利用申込期限
までに手続きを行ってください。

なお、申込状況により利用のお断りもしくは希望セット数どおりの提供ができない場合があります。

■利用申込期限：2024年2月9日（金）（早めに手続きを行ってください）

¹ 企業利用、若手・女性利用、教育利用、講習会、大規模 HPC チャレンジ、萌芽共同研究公
募課題「AI for HPC」、学際大規模情報基盤共同利用・共同研究拠点及び HPCI 等の公募制度
による利用を除きます。

2. 継続利用申込

Wisteria/BDEC-01 [通常利用]

2024年1月下旬に代表者の方に2023年度の登録内容を記載した「継続手続きの案内」を送付します。2024年度も継続利用される場合は、案内に従い、利用申込期限までに手続きを行ってください。

なお、申込状況により利用のお断りもしくは希望セット数どおりの提供ができない場合があります。

また、提供セット数の決定にあたっては、2023年度利用実績、研究成果登録状況等を参考にさせていただきます場合があります。

■利用申込期限：2024年2月9日（金）（早めに手続きを行ってください）

3. 問い合わせ先

〒277-0882

千葉県柏市柏の葉6-2-3（東京大学情報基盤センター内）

東京大学情報システム部

情報戦略課研究支援チーム

E-mail：uketsuke@cc.u-tokyo.ac.jp

東京大学柏キャンパス一般公開 2023

スーパーコンピューティング部門

2023 年度の東京大学柏キャンパス一般公開は 10 月 27 日(金)～28 日(土)に柏キャンパスにおいて、4 年ぶりとなる現地開催に戻し、開催されました。情報基盤センターは柏Ⅱキャンパスにおいて「柏Ⅱ(ツー)で情報通」をテーマに、スーパーコンピュータシステム「Wisteria/BDEC-01」とデータ活用社会創成プラットフォーム「mdx」の見学およびガイドツアーを実施し、各研究部門による講演やポスター展示、人工やまびこ装置「テレヤッホー」など多彩なイベントを実施しました。両日とも天候に恵まれ、初めての柏Ⅱキャンパス開催にも関わらず、多くの来場者がお越しくださいました。なお、講演とポスター展示には国立情報学研究所からもご参加いただきました。

【2 日間の参加者】

情報基盤センター来場者 392 名 1 日目 110 名、2 日目 282 名

ガイドツアー参加者 107 名 1 日目 33 名、2 日目 74 名



講演会の様子



柏Ⅱキャンパス正門



スパコン室見学ガイドツアー



人工やまびこ装置「テレヤッホー」

NSCC議長ら、柏 II キャンパスを訪問

大 林 由 尚

東京大学情報基盤センター

2023 年 11 月 10 日、シンガポール国立スーパーコンピューティングセンター（NSCC）の Quek Gim Pew 所長らが東京大学柏 II キャンパスを訪問、情報基盤センターのスーパーコンピュータや mdx、産業総合研究所（産総研）柏センターのスーパーコンピュータ ABCI などを視察するとともに東京大学、産総研の研究者らと意見交換を行った。

NSCC の一行は、11 月 12 日から米国で開催される国際会議 SC23 に出席するための渡米に先立って日本へ立ち寄り、兵庫県神戸市の理化学研究所計算科学研究センター（理研 CCS）、埼玉県和光市の理化学研究所本部、量子コンピュータ研究センターなどとともに、千葉県柏市の東京大学柏 II キャンパスを訪問した。

理研 CCS の松岡聡センター長に伴われて東大柏 II キャンパスに到着した NSCC 一行は、情報基盤センターの会議室で東大情報基盤センターの中島研吾 スーパーコンピューティング研究部門長と華井雅俊 特任助教、産総研情報技術研究部門の高野了成 サイバーフィジカルクラウド研究グループ長による情報基盤センターの計算機システム Wisteria/BDEC-01 や mdx、産総研柏センターの計算機システム ABCI とそれらを用いた研究についての説明を聞き、意見交換を行ったのちに情報基盤センター、産総研柏センターのシステムの視察を行ない、次の視察地である理研和光に向けて柏 II キャンパスを後にした。



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。

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部門

Supercomputing Division,
Information Technology Center,
The University of Tokyo

ENGLISH サイト内検索

お問い合わせ ● アクセス ● リンク ● サイトマップ

ホーム システム 利用案内 サポート FAQ 研究会・イベント 広報・刊行物 研究成果 研究部門について 研究活動・設備紹介 Wisteria/BDEC-01

研究成果の取扱い

国外での成果発表について

スーパーコンピュータを用いた研究成果を国内外に向けて発表される場合、技術を知知とするための行為については経済産業大臣の許可は不要とされていますが、特許関係などではならない場合には、特許申請が必要になることがありますので、学術誌等への論文の投稿や学会発表などにあたっては十分ご注意ください。
不明な場合は以下までお問い合わせください。

東京大学 情報システム部 情報戦略課 研究支援チーム
E-mail: uketsuke@cc.u-tokyo.ac.jp

検索/東京大学

▶ 新入・女性利用
▶ 本学環境 HPC チャレンジ
▶ トライアルユース

研究成果の登録について

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いております。以下の Web ページより研究成果の登録をお願いいたします。研究成果登録は、東京大学における本センターの大規模計算資源の整備・拡充につながるものと、今後の計算資源の確保に大変重要なものです。特報の提供には何卒ご協力の程宜しくをお願い申し上げます。

▶ 研究成果登録のページ

研究成果 FAQ

研究成果登録

研究成果の登録をお願いいたします。

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。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、センター発行の広報誌及び Web ページへの掲載に使用させていただきますことをご承諾ください。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の程宜しくをお願い申し上げます。

お客様のアカウント名と登録メールアドレスを入力し、登録しようとする業績を選択してください。

アカウント名
メールアドレス
登録したい業績
論文 ● 口頭・ポスター発表
著書 ● 受賞情報

ログイン

JavaScript を有効にしてください。
成果登録内容の削除などの依頼、登録メールアドレスが不明といった際のお問い合わせは
Email: kenkyu_shien.adm@gs.mail.u-tokyo.ac.jp までお問い合わせします。

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部門
Supercomputing Division, Information Technology Center, The University of Tokyo

10・11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
6月	2,214	697	14,341	482	1,018	99,350	67,039	2,712	3,115,214	7,363.70	1,016	519	2,342,234	4,367.8	56.9
7月	2,260	663	13,306	292	817	237,419	60,686	2,975	3,279,405	6,165.45	688	459	2,696,378	4,707.3	61.3
8月	2,305	562	10,539	264	968	171,053	37,527	3,231	3,469,397	7,280.53	804	505	2,185,461	3,851.7	50.2
9月	2,376	637	14,040	352	960	319,152	67,675	3,532	3,588,203	4,683.01	1,048	486	2,783,625	3,937.6	51.3
10月	2,453	766	17,688	647	1,077	259,646	109,709	3,832	3,793,773	6,342.43	3,314	608	2,904,633	4,032.3	52.5
11月	2,440	755	16,557	443	749	230,969	91,468	3,924	3,710,937	4,413.83	3,285	457	2,336,525	3,305.3	43.0
2022年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	3,817,548	5,222.5	68.0
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			163,577	4,770	10,229	2,360,615	889,345			61,900	15,613	5,628	33,006,837		

・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

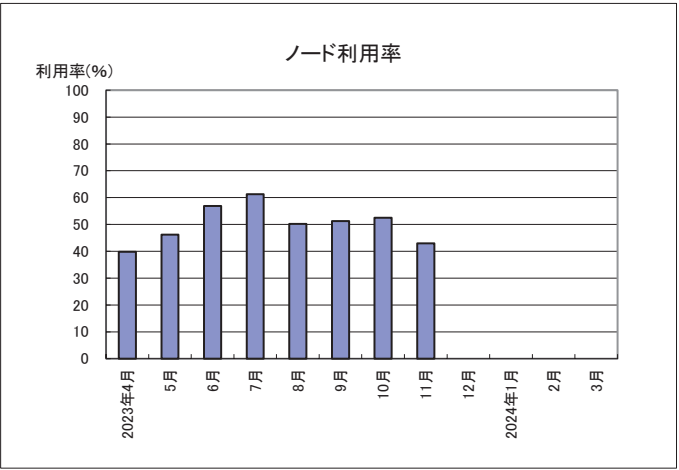
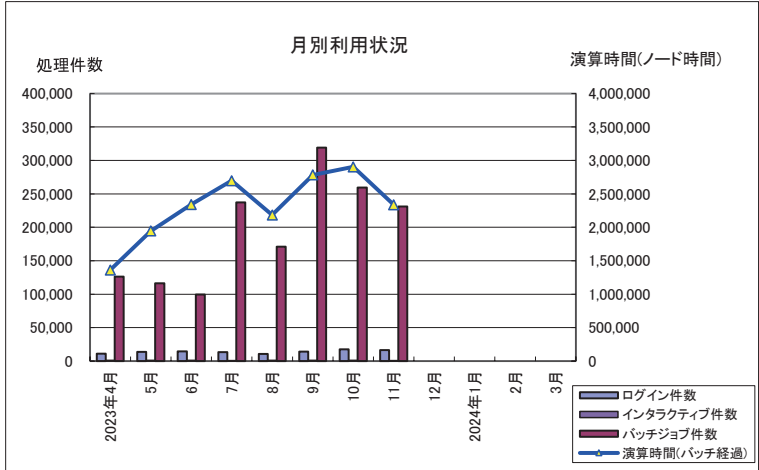
・ログイン(実CPU)： コア時間単位

・2022年11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
6月	1,605	12,148	847	101,998	145.5	40.4
7月	2,165	12,566	1,181	133,352	184.0	51.1
8月	1,151	8,399	555	101,555	177.3	49.2
9月	1,304	17,342	614	139,913	198.8	55.2
10月	1,021	15,063	817	146,559	206.1	57.2
11月	1,500	14,720	862	177,838	252.7	70.2
2022年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	16,014	155,272	10,789	1,638,413		

・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

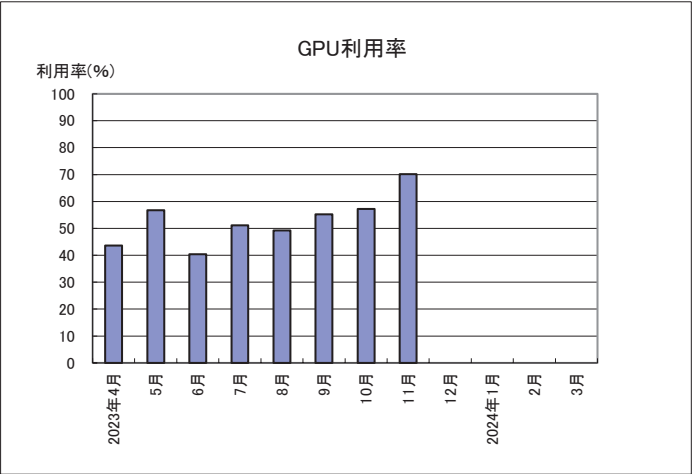
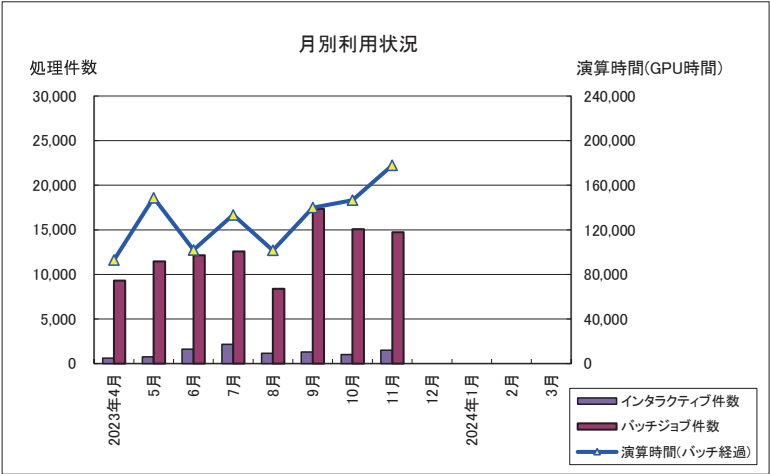
・登録者数、実利用者数、ログイン件数、接続時間、ファイル使用量、
ログイン(実CPU)はWisteira/BDEC-01(Odyssey)と共通。

・2022年11月分は合計に含まない

・GPU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

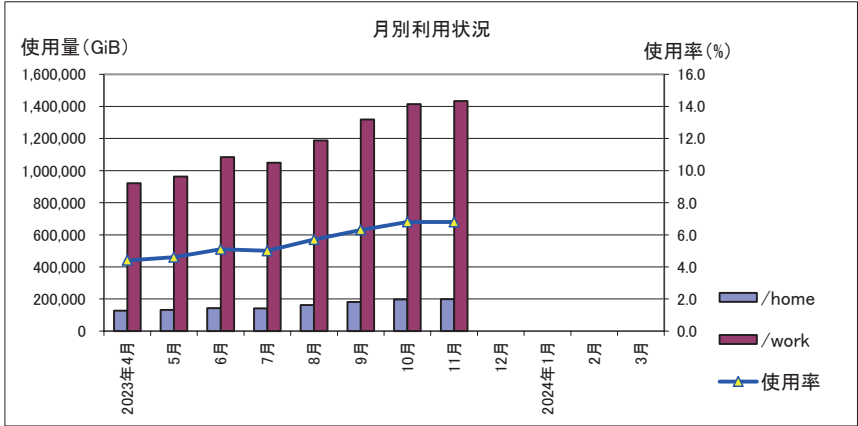
・GPU利用率: サービスGPUに対する利用率。 計算式=GPU利用数÷サービスGPU数×100



3. 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
6月	2,063	31	106	621	6.7	142,578	1,084,425	5.1	23,657,187.6
7月	2,118	32	229	570	35.3	140,976	1,049,941	5.0	23,657,187.6
8月	2,147	41	158	626	20.9	162,691	1,187,456	5.7	23,657,187.6
9月	2,206	46	222	986	36.9	181,450	1,318,998	6.3	23,657,187.6
10月	2,134	46	200	1,119	28.1	197,114	1,414,140	6.8	23,657,187.6
11月	2,189	46	253	886	71.7	198,291	1,433,127	6.8	23,657,187.6
2022年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			2,058	8,646	570				

- ・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
- ・2022年11月分は合計に含まない



第 43 回 ASE 研究会実施報告

中 島 研 吾

東京大学情報基盤センター

東京大学情報基盤センターASE 研究会 (Advanced Supercomputing Environment) は内外からの講演者をお招きして不定期に開催している。2022 年 2 月に COVID19 後初めてとなる研究会をオンラインで開催し、2023 年 4 月の第 42 回からは現地開催・オンラインのハイブリッドで実施している。第 43 回 ASE 研究会¹ (2023 年 8 月 28 日 (月)) は、2023 年 8 月 20 日～25 日に東京で開催された ICIAM 2023 (10th International Congress on Industrial and Applied Mathematics)²参加のために来日した Elaine Raybourn 博士³ (Sandia National Laboratories), Osni Marques 博士⁴ (Lawrence Berkeley National Laboratory) による講演の他、情報基盤センター教員による研究紹介も 3 件実施した。表 1 にプログラムを示す。会議は現地開催 (柏 II キャンパス)、オンラインのハイブリッドで開催され、申込数は合計 44 名、現地参加者は講演者も含め 8 名であった。

本研究会の様子は録画されており、東大情報基盤センターの YouTube チャンネル⁵から視聴することができる。

表 1 第 43 回 ASE 研究会プログラム

15:00 - 15:05	Kengo Nakajima (The University of Tokyo) Welcome
15:05 - 15:35	Elaine Raybourn (Sandia National Laboratories, USA) Sociotechnical aspects of code collaborations
16:03 - 16:35	Osni Marques (Lawrence Berkeley National Laboratory, USA) Parallel Eigensolvers Based on Minimization Strategies
16:40 - 17:00	Mitsuaki Kawamura (online) (The University of Tokyo) Data accumulation in advanced research infrastructure for materials
17:00 - 17:20	Shinji Sumimoto (The University of Tokyo) A System-wide Communication Library to Couple Multiple MPI programs using h3-Open-SYS/WaitIO
17:20 - 17:40	Kazuuya Yamazaki (The University of Tokyo) Porting an atmospheric simulator to GPUs using OpenACC
17:40 - 17:45	Kengo Nakajima (The University of Tokyo) Closing

¹ <https://www.cc.u-tokyo.ac.jp/events/ase/43/43.php>

² <https://iciam2023.org/>

³ <https://www.sandia.gov/-emraybo/staff/elaine-m-raybourn-ph-d/>

⁴ <https://crd.lbl.gov/divisions/amcr/applied-mathematics-dept/scalable-solvers/members/staff-members/osni-marques/>

⁵ https://www.youtube.com/watch?v=FXuL3Mg_C_4

SC23 参加報告

大林由尚，住元真司

東京大学情報基盤センター

1. SC23 について

東京大学情報基盤センターは 2023 年 11 月 12 日から 17 日までの間、米国コロラド州デンバーで開催された SC23(The International Conference for High Performance Computing, Networking, Storage, and Analysis)に参加し、研究展示を行った。本稿では、SC23 の開催概要と展示会場で行った研究展示の概要について報告する。

SC23 はデンバーの Colorado Convention Center で開催され、参加者は 14,295 名、展示参加は 438 機関であった。



会場の Colorado Convention Center

SC23 のプログラムは ACM A.M. Turing Award Lecture, Awards, Birds of a Feather, Early Career, HPC Accelerates Plenary, Invited Talks, Opening Session, Panels, Papers, Posters, Tutorial, Workshop と並行して多彩な構成となっているために全容を把握するのが困難である。SC21 より始まった録画を見ることにより並行して行われたプログラムを見ることができるようになったのは幸いなことである。

本稿では各種ランキングと Award について報告する。

各種ランキングについて

SC23 で発表される各種ランキングは ISC と同じで Top500, Green500, HPCG, Graph500 がある。

➤ Top500

Top500 は HPL (High Performance Linpack) の性能を競うベンチマークである。SC22 の Rank 1 は ISC23 と変わらず、US の Oak Ridge National Laboratory の Frontier システムで 1.1ExaFLOPS であった。Rank 2 は US の Argonne National Laboratory の Aurora システムがようやく半分程度の規模ながら 585.3PFLOPS でランク入りした、Rank 3 も新しいシステムで Microsoft Azure の Eagle システムが 561.0PFLOPS でランクインした。Rank 4 は理研-CCS の富岳で 442.0PFLOPS であった。東京大学柏 II キャンパスに設置されている産総研の ABCI は 22.21PFLOPS で Rank 32、同じく東京大学情報基盤センターの Wisteria/BDEC-01 (Odyssey) は 22.12PFLOPS で Rank 33 であった。

➤ Green500

Green500 は HPL を実行した時の電力対性能 FLOPS/Watts を競うベンチマークであり TOP500 にランクインしているシステムの中で競われる。SC23 における Rank 1 は US の Flatiron Institute の Henri システムであり、NVIDIA H100 GPU を用いて 65.395 GFLOPS/Watts であった。Rank 2 は変わらず US Oak Ridge National Laboratory の Frontier TDS システムであり、AMD Instinct MI250X を用いて 62.684 GFLOPS/Watts であった。日本の Preferred Networks の MN-3 は独自のアクセラレータを搭載して Rank 13 の 40.901 GFLOPS/Watts であった。東京大学情報基盤センターの Wisteria/BDEC-01 (Aquarius) は Rank 35 の 24.058 GFLOPS/Watts であった。

➤ HPCG

HPCG (High Performance Conjugate Gradient) は共役勾配法の処理速度を競うベンチマークであり HPL とは異なり疎行列を扱うベンチマークである。SC22 における Rank 1 は理研-CCS の富岳システムであり 16.0 PFLOPS の性能であった。Rank 2 は US の Oak Ridge National Laboratory の Frontier システムで 14.1 PFLOPS であった。東京大学情報基盤センターの Wisteria/BDEC-01 (Odyssey) は Rank 14 の 0.82 PFLOPS であった。

➤ Graph500

Graph500 ベンチマークは大規模グラフ解析を競うベンチマークである。SC22 における Rank 1 は理研-CCS の富岳システムであり昨年より性能を上げて 138.9 TTEPS であった。Rank 2 は中国の Wuhan Supercomputer システムであり 115.4 TTEPS であった。東京大学情報基盤センターの Wisteria/BDEC-01 (Odyssey) は Rank 6 の 16.1 TTEPS であった。

Award について

例年の SC ではいくつかの Award が発表される。



Award が開かれた Ballroom

以下、主要な SC23 の Award は以下のとおりである。理研-CCS の松岡先生、佐藤先生が受賞された。

- ACM/IEEE-CS Ken Kennedy Award: Keshav Pingali (University of Texas at Austin)
- ACM/IEEE-CS George Michael Memorial HPC Fellowship: J. Gregory Pauloski (University of Chicago), Rohan Basu Roy (Northeastern University)
- IEEE-CS Sidney Fernbach Memorial Award: Manish Parashar (Scientific Computing and Imaging (SCI) Institute and University of Utah)
- IEEE-CS Seymour Cray Computer Engineering Award: 該当者なし
- ACM Gordon Bell Prize: “Large-scale Materials Modeling at Quantum Accuracy: Ab Initio Simulations of Quasicrystals and Interacting Extended Defects in Metallic Alloys” (University of Michigan, Indian Institute of Science, ORNL)
- Gordon Bell Prize for Climate Modelling: “The Simple Cloud-Resolving E3SM Atmosphere Model Running on the Frontier Exascale System” (SNL, LLNL, LBNL, ANL, ORNL, HPE, PNNL)

2. 東京大学情報基盤センターによる展示

東京大学情報基盤センターは「ITC/JCAHPC, The University of Tokyo」名義によるブース展示を行った。SC22 と同様、コロナ禍以前と同様の規模で、情報基盤センターの提供する計算資源や研究事例を紹介するポスターの展示やムービーの上映、パンフレット、グッズの配布などを行った他、高度情報科学技術研究機構 (RIST) が HPCI の参加機関と共同開催した「HPCI Sticker Hunt」のステッカー配布も行い、期間全体で延べ 200 名以上の来場者があった。

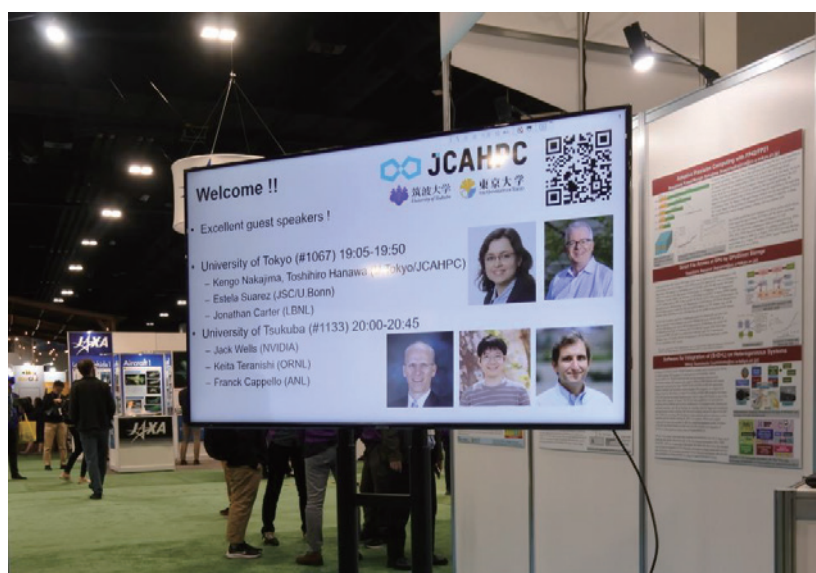
SC23 では特に JCAHPC として筑波大と共同で調達した OFP-2 の開札が SC23 開催直前にあったため、その開札結果の発表と合わせて 13 日の夕刻に開催した Gara Opening 直後に筑波大ブースと協調してプレゼンテーションを行った。

@Booth #1067 ITC/JCAHPC, The University of Tokyo

19:05	-	Kengo Nakajima (The University of Tokyo/JCAHPC, Japan)
19:20		<u>Long but "Straight" Road to OFP-II in JCAHPC</u>
19:20	-	Estela Suarez (Juelich Supercomputing Centre, Germany)
19:35		<u>Modular Supercomputing Architecture: from DEEP to JUPITER</u>
19:35	-	Jonathan Carter (Lawrence Berkeley National Laboratory, USA)
19:50		<u>Current and Future Computing at Berkeley Lab</u>

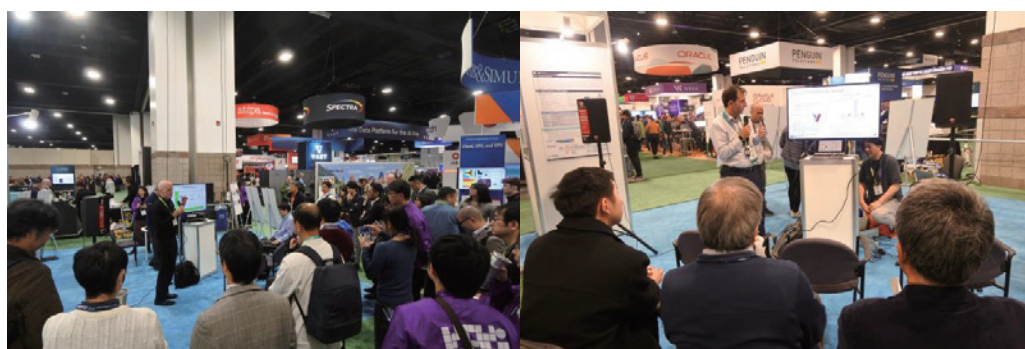
@Booth #1133 CCS/JCAHPC, The University of Tsukuba

20:00	-	Jack Wells (NVIDIA)
20:15		<u>NVIDIA Grace-Hopper superchips for accelerated performance, efficiency, and programmability</u>
20:15	-	Keita Teranishi (Oakridge National Laboratory, USA)
20:30		<u>Toward Extreme Heterogeneous Programming Environment with CHARM-SYCL</u>
20:30	-	Franck Cappello (Argonne National Laboratory, USA)
20:45		<u>AI-augmented SWARM based resilience for Integrate Research Infrastructures</u>





Gara Opening でのブースでの講演の様子 1



Gara Opening でのブースでの講演の様子 2



情報基盤センターの参加メンバーで集合写真



HPCI Sticker Hunt の配布物と記念品

次回の SC24 は 2024 年 11 月 17 日から 22 日まで米国ジョージア州アトランタのジョージアワールドコンgressセンターで開催される予定である。

次世代銀河分光観測に向けたフィールドレベル解析の確立

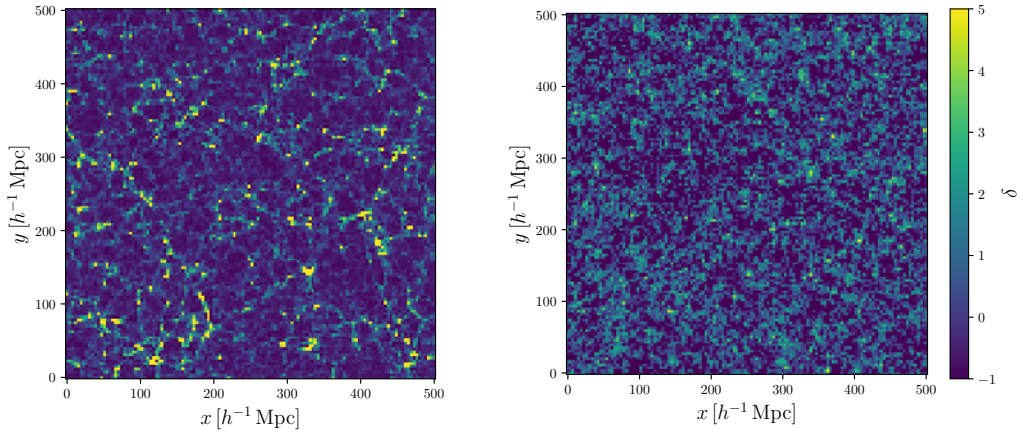
大里 健

千葉大学 先進科学センター

1. はじめに

現代の宇宙物理学は、電子や陽子といった通常の物質に加え、重力のみを通して相互作用する**ダークマター**と空間の加速膨張を引き起こすエネルギー源である**ダークエネルギー**が宇宙を構成し、**一般相対性理論**によって記述される重力によって星や銀河といった構造が形成されるという描像を確立した。一方で、ダークマターとダークエネルギーの物理的実体は未だ解明されておらず、一般相対性理論とは異なる重力理論の可能性も排除できていないのが現状である。これまで提唱されてきた多数の宇宙モデルの中から一つを決定する有効な手段は、現実の宇宙の観測結果と理論モデルによる予言とを統計的に照合することである。この研究分野は**観測的宇宙論**と呼ばれ、観測技術の向上も相まって近年急速な発展を遂げた。ダークマターは宇宙の物質の大部分を占めており、ダークエネルギーは宇宙膨張を加速させることで、重力による構造形成を妨げる働きがあるため、その性質もまた宇宙の物質分布(**宇宙の大規模構造**)に刻み込まれている。したがって、宇宙の大規模構造の観測は、重力の振る舞いや暗黒成分の物理的性質を解明する際に重要な役割を果たす。観測的宇宙論における最も基本的な観測とは、銀河の発する輝線の分光観測からその三次元位置を測定し、銀河の三次元地図を作成する**銀河分光観測**である。大規模構造は宇宙の構造形成史を色濃く反映しているが、大部分がダークマターによって構成されているため、光学望遠鏡では直接姿を捉えられない。一方で、銀河は密度の高い場所で形成されるため、その空間分布は背景にある物質分布を反映している。したがって、銀河の三次元地図を元に、物質分布の三次元構造を間接的に描き出すことが可能である[1]。

これまで銀河分光観測のデータ解析においては、銀河分布の情報を要約した**統計量**が広く用いられてきた。具体的な統計量として、二点相関関数やそのフーリエ変換に対応する**パワースペクトル**が挙げられる。統計量は理論的な取り扱いが容易である一方、統計量で表現できない情報が失われてしまうという問題がある。第1図に数値シミュレーションによって得られた現実的な宇宙モデルに基づいた宇宙の物質分布とそれと同じパワースペクトルを持つランダムな場(ランダムガウス場)を示す。シミュレーションで得られた物質分布は密度の濃淡がより明確であり、重力によって密度の濃いところにより物質が集積するという性質を反映している。これらの図は目で見て識別できるほど異なる形態を示しているが、パワースペクトルは完全に同一であり、パワースペクトルの情報だけでは両者を区別できないことを意味している。高次の統計量を考えることで、より多くの情報を引き出すことが可能であるが、情報の損失を防ぐには無限次の統計量が必要になる上、高次統計量の解析的な理論予言は計算量の観点から既に現実的ではない。そこで、場の持つ情報を最大限利用するため、**フィールドレベル解析**という手法が提唱された[2]。これは初期宇宙の密度場から出発し、重力による非線形進化を解くことで、観測された時点における銀河分布と直接比較する手法である。したがって統計量に頼らず場の持つ全ての情報を解析に取り入れるため、観測で得られた情報を余すことなく用いることが可能である。



第1図: 数値シミュレーションで得られた宇宙の物質分布 (左) と
それと同一のパワースペクトルを持つランダムガウス場 (右)。

明るい場所は密度が高く、暗い場所は密度が低い。実際の宇宙の物質分布は三次元場であるが、ここでは薄い二次元スライスを示している。

2. フィールドレベル解析

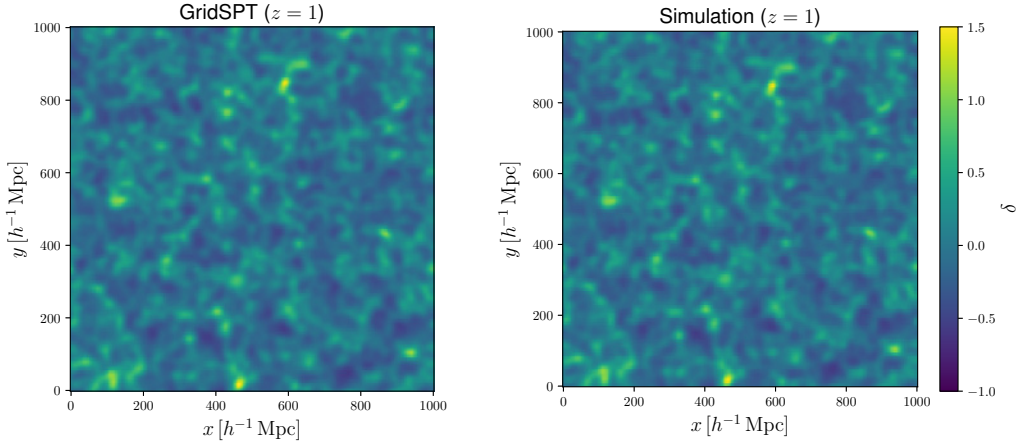
次にフィールドレベル解析の詳細を解説する。フィールドレベル解析で推定する宇宙モデルは一般的に**宇宙論パラメータ**というパラメータ (最大でも 10 個程度) で記述される。宇宙論パラメータの例として、ダークマターの総量や初期宇宙で生成された密度揺らぎの振幅などが挙げられる。統計量を用いた解析では主にこれら宇宙論パラメータのみを推定するが、フィールドレベル解析では同時に宇宙の初期密度場そのものについても推定する。観測データが与えられたときのこれらパラメータの確率分布は以下のように与えられる。

$$\log P(\mathbf{p}_{\text{cosmo}}, \delta_{\text{in}}(\mathbf{x}) | \delta_{\text{g,obs}}(\mathbf{x})) = -\frac{1}{2} \sum_{\mathbf{x}} \frac{[\delta_{\text{g,obs}}(\mathbf{x}) - \delta_{\text{g,fwd}}(\mathbf{x}; \mathbf{p}_{\text{cosmo}}, \delta_{\text{in}}(\mathbf{x}))]^2}{\sigma^2} + \text{const}$$

ここで $\mathbf{p}_{\text{cosmo}}$ は宇宙論パラメータセット、 $\delta_{\text{in}}(\mathbf{x})$ は初期密度場、 $\delta_{\text{g,obs}}(\mathbf{x})$ は観測された銀河個数密度場であり、 $\mathbf{x}$ は三次元座標である。フィールドレベル解析で重要な要素の一つが右辺に現れる非線形密度場 $\delta_{\text{g,fwd}}(\mathbf{x}; \mathbf{p}_{\text{cosmo}}, \delta_{\text{in}}(\mathbf{x}))$ であり、これは重力による初期密度場の時間発展を考慮し、観測された時点で理論予言した銀河個数密度場を表している。この時間発展を解く理論モデルは**フォワードモデル**と呼ばれ、フィールドレベル解析の計算コストの大部分を占める。本研究ではフォワードモデルの具体的なモデルとして **GridSPT** [3, 4] を採用する。この GridSPT モデルは既存の手法と比較して、微細な構造の重力進化を精度良くかつ高速に解くことが可能である (第2図)。右辺の意味するところは観測された場 ($\delta_{\text{g,obs}}(\mathbf{x})$) と予言された場 ($\delta_{\text{g,fwd}}(\mathbf{x}; \mathbf{p}_{\text{cosmo}}, \delta_{\text{in}}(\mathbf{x}))$) が近い値を持つモデルがより尤もらしいということである。 σ^2 は場の分散であり、ここでは簡単のため場所によらず一定とする。

フィールドレベル解析は場の持つ情報を余すことなく考慮するため、従来の統計量を元にした解析と比べ宇宙論パラメータに対する制限は改善することが見込まれる。一方で、フィールドレベル解析はフォワードモデルによる密度場の時間進化を計算する必要があり、統計量と比較するとより多くの計算量が必要となる。さらに、統計解析において初期密度場を推定するが、初期密度場は三次元グリッドとして定義されており、例えば観測した体積を空間一次元あたり 100 分割

したとすると、合計で $10^6=100$ 万個のパラメータを推定する必要がある。このような多次元のパラメータ空間において、現実的な時間の範囲内で確率分布をサンプリングするには工夫が必要となる。そこで、本研究では **Graphic Processing Unit (GPU)** を用いたフォワードモデルの高速化と **Hamiltonian Monte Carlo 法 (HMC 法)** による効率的なサンプリング手法の実装に着手した。



第2図: GridSPT (左) と数値シミュレーション (右) で予言した宇宙の物質分布。

数値シミュレーションは物質分布の重力進化を非常に精度良く解くことが可能な一方、計算コストが非常に高い (1 日程度)。一方で GridSPT では数秒である程度のスケールまでシミュレーションと遜色ない時間発展した物質場を予言することが出来る。

3. 統計解析の高速化

まず、GridSPT フォワードモデルについて解説する。宇宙の物質分布は大スケールにおいて流体描像が有効であり、以下の Vlasov-Poisson 方程式系でその進化がよく記述される。

$$\begin{aligned}\frac{\partial \delta}{\partial t} + \frac{1}{a} \nabla \cdot [(1 + \delta) \mathbf{v}] &= 0 \\ \frac{\partial \mathbf{v}}{\partial t} + H \mathbf{v} + \frac{1}{a} (\mathbf{v} \cdot \nabla) \cdot \mathbf{v} &= -\frac{1}{a} \nabla \psi \\ \frac{1}{a^2} \nabla^2 \psi &= 4\pi G \rho_m \delta\end{aligned}$$

ここで t は時間、 δ は密度場の平均からのずれ¹、 $\mathbf{v}$ は速度場、 a は宇宙の大きさを表すスケールファクター、 $H = \dot{a}/a$ は宇宙の膨張率を表すハッブルパラメータである。第三式は重力の Poisson 方程式であり、 ψ は重力ポテンシャル、 G は万有引力定数、 ρ_m は宇宙の平均物質密度である。初期の宇宙では密度揺らぎは小さく ($\delta \ll 1$)、重力による非線形成長が進んでいない場合、これらの式を摂動展開し解析的な表式を得ることができる。結果のみ示すと、非線形な密度場 $\delta(\mathbf{x}, t)$ と速度場の発散 $\theta(\mathbf{x}, t) \equiv \nabla \cdot \mathbf{v}(\mathbf{x}, t)$ の展開式は以下ようになる。

$$\delta(\mathbf{x}, t) = \sum_n \delta_n(\mathbf{x}, t), \quad \theta(\mathbf{x}, t) = \sum_n \theta_n(\mathbf{x}, t),$$

¹ 正確な定義は $\delta(\mathbf{x}) = (\rho(\mathbf{x}) - \rho_m)/\rho_m$ であり、 $\rho(\mathbf{x})$ は密度場である。今後、密度を表す物理量として $\delta(\mathbf{x})$ を主に用いるため、こちらを密度場とも呼称する。

$$\begin{pmatrix} \delta_n(\mathbf{x}, t) \\ \theta_n(\mathbf{x}, t) \end{pmatrix} = \frac{2}{(2n+3)(n-1)} \begin{pmatrix} n + \frac{1}{2} & 1 \\ \frac{3}{2} & n \end{pmatrix} \sum_{m=1}^{n-1} \begin{pmatrix} (\nabla \delta_m) \cdot \mathbf{u}_{n-m} + \delta_m \theta_{n-m} \\ \frac{1}{2} \nabla^2 (\mathbf{u}_m \cdot \mathbf{u}_{n-m}) \end{pmatrix}$$

ここで $\nabla \cdot \mathbf{u}_m \equiv \theta_m$ である。最低次の項は初期密度場で与えられる。

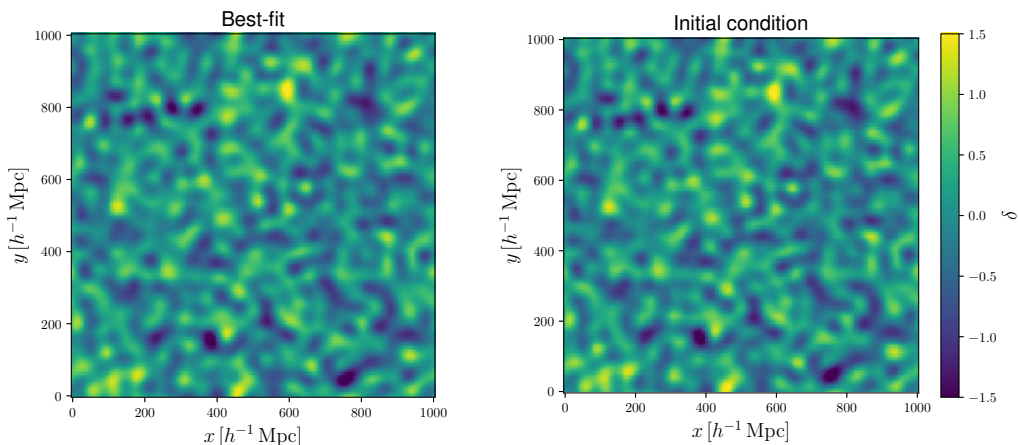
$$\begin{pmatrix} \delta_1(\mathbf{x}, t) \\ \theta_1(\mathbf{x}, t) \end{pmatrix} = D_+(t) \begin{pmatrix} \delta_{\text{in}}(\mathbf{x}) \\ \delta_{\text{in}}(\mathbf{x}) \end{pmatrix}$$

ここで $D_+(t)$ は線形成長率であり、宇宙論パラメータが与えられれば解析的に計算できる。したがって非線形な密度場 $\delta(\mathbf{x}, t)$ は無限級数として表現されるが、現実の計算ではある次数で打ち切る必要がある。以後、5 次の項まで計算する。5 次までの寄与で数値シミュレーションをパーセントレベルで精度良く再現できることが分かっている。

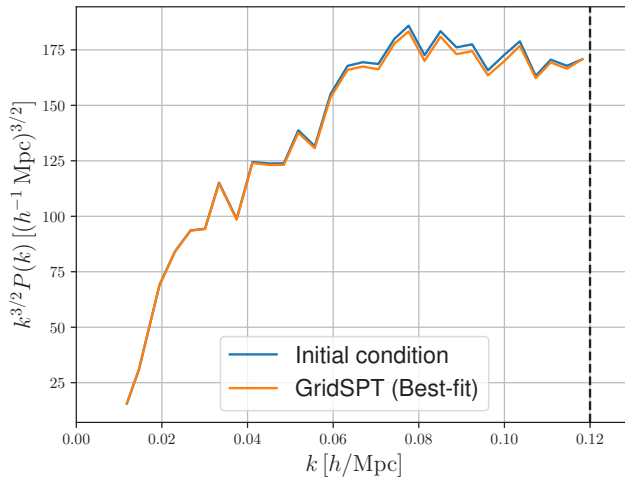
GridSPT の計算において、最も計算コストがかかる部分は多数回の三次元フーリエ変換である。上式において、微分演算子に関わる項は全てフーリエ空間で計算する必要がある。このフーリエ変換にかかる計算量を削減するため、本研究では GPU を用いて計算を行なった。具体的には Python ライブラリである **JAX** [5] を用いて GridSPT を実装した。Wisteria-A 環境 GPU (NVIDIA A100) 1 基で実行した結果、5 次までの GridSPT による非線形密度場の計算にかかる時間は 5 秒であった。一方、CPU (8 threads) を用いた場合 5 分程度時間を要しており、30 倍以上の高速化を実現した。JAX を用いる利点はもう一つあり、**自動微分** が実装されている点である。自動微分により確率分布のパラメータに対する勾配を自動的に計算し、HMC 法を利用することが可能になった。パラメータの次元が高次元となるフィールドレベル解析においては、HMC 法のような効率的な手法は不可欠である。

4. 結果

ここでは実装したフィールドレベル解析の結果について述べる。まず、実際の観測データに適用する前に、数値シミュレーションのデータをフィールドレベル解析の観測データとして入力する。数値シミュレーションを実行する際に仮定された宇宙モデルがフィールドレベル解析によって正しく復元されるかを確かめることで、解析手法の妥当性を検証する。まず、確率分布のサンプリングを行う前に、最良推定値、すなわち事後確率を最大化するパラメータが十分正解の値に近い検証を行った。



第 3 図: 推定された宇宙の初期密度分布 (左) と実際のシミュレーションで初期条件として用いた初期密度分布 (右)。



第 4 図: 推定された初期密度場（橙）と実際のシミュレーションで初期条件として用いた初期密度分布（青）のパワースペクトル。

黒い点線は解析で用いた最大の波数を示す。フォワードモデルにおいてあまりに大きい波数（小スケール）は摂動展開の近似が破れ精度が悪くなるため、一般に大きいスケールに限って解析に用いる。

第 3 図に推定された宇宙の初期密度分布、第 4 図に初期密度分布のパワースペクトルの比較を示す。視覚的にも正しく初期密度場が見積もられており、パワースペクトルについてもシミュレーションで用いた初期密度場から計算した値と矛盾がないことが示された。現状、最良推定値のみではなく、HMC 法を用いた確率分布のサンプリングについて計算を行っている段階である。

5. まとめ

宇宙物理学の最大の謎であるダークマター・ダークエネルギーの正体に迫るべく、大型の銀河分光観測が計画されている。その際、観測された銀河分布から如何に情報を引き出すか、ということが課題となっているが、フィールドレベル解析は原理的に場の持つ情報を余すことなく引き出せるという可能性を秘めている。本研究では、フィールドレベル解析で課題となっていた計算量の問題と高次元パラメータ空間での確率分布のサンプリングという問題に対して、GPU と自動微分を利用した HMC 法を用いて解決を試みた。実装した解析手法を数値シミュレーションで得られた現実的な宇宙の密度分布を基に初期密度場を推定した結果、正しい結果を復元できることを確認した。今後、HMC 法を用いた確率分布サンプリングを行い、既存の統計量と比較してフィールドレベル解析が宇宙モデルに対するより強い制限を与えられるかどうか検証を行う。また、今回用いたシミュレーションは宇宙の物質分布を直接用いているが、本来観測されるのは銀河の分布である。物質分布を元に銀河分布を予言する手法である銀河バイアス展開法[6]という方法が提唱されており、今後はこの手法を実装することで現実的な設定におけるフィールドレベル解析の実装、そしてその妥当性を検証する。

謝 辞

本研究は東京大学情報基盤センター 2022 年度若手・女性利用者推薦課題として、Wisteria/BDEC-01 Aquarius の利用支援を受けました。また科学研究費若手研究 22K14036「次世

代銀河分光観測に向けたフィールドレベル宇宙論解析の確立」(代表：大里 健)として支援頂きました。これらの援助に感謝いたします。

参 考 文 献

- [1] Aubourg E. et al., Physical Review D, 92, 123516 (2015)
- [2] Jasche J., Wandelt B. D., Monthly Notices of the Royal Astronomical Society, 432, p.894-913 (2013)
- [3] Taruya A., Nishimichi T., Jeong D., Physical Review D, 98, 103532 (2018)
- [4] Taruya A., Nishimichi T., Jeong D., Physical Review D, 105, 103507 (2022)
- [5] Bradbury J. et al., JAX: composable transformations of Python+NumPy programs, <http://github.com/google/jax>
- [6] Desjacques V., Jeong D., Schmidt F., Physics Reports, 733, p.1-193 (2018)

Key roles of hydrodynamic interactions in protein folding

Jiaxing Yuan

Research Center for Advanced Science and Technology, The University of Tokyo

1. Introduction

Protein folding is a vital cellular process, orchestrating the creation of a complex three-dimensional structure, known as the native state, through interactions among amino acids (1). Recent strides in artificial intelligence have facilitated precise predictions of the native structure formed by specific amino acid sequences (2, 3). Despite these advancements, unraveling the non-equilibrium folding pathways to access native structures remains a formidable challenge in biophysics research (4-8). Understanding folding pathways is crucial in protein folding, where significant kinetic barriers often impede proteins from reaching their global free-energy minimum state, leading to the formation of metastable non-native intermediates (8). Proper folding is indispensable for proteins' biological functions and human health, as misfolded proteins can aggregate to form amorphous clusters or amyloid fibrils, contributing to various neurodegenerative diseases (9).

Various experimental techniques, including X-ray crystallography, fluorescence spectroscopy, nuclear magnetic resonance, circular dichroism spectroscopy, atomic force microscopy, and magnetic tweezers, have been utilized to study protein folding kinetics. These techniques have successfully unveiled the complexities of protein folding dynamics, extending the observation time to hours and days. However, achieving high spatial and temporal resolution simultaneously in experimental folding studies remains challenging. Molecular dynamics (MD) simulations offer an alternative approach, providing a detailed view of protein structure and dynamics at an extremely high spatiotemporal resolution. Nevertheless, MD simulations can be computationally expensive and are limited to timescales from microseconds to milliseconds. In contrast to atomistic simulations, coarse-grained (CG) minimal models significantly reduce computational costs, capturing essential protein folding features without delving into microscopic details. This approach has significantly contributed to a profound understanding of the fundamental mechanisms involved in protein folding.

Hydrodynamic interactions (HI) induced by solvent flow could significantly impact protein folding, dynamically coupling the motion of amino acid residues. While the roles of HI in phase ordering kinetics of soft matter systems are well-established, less attention has been given to their effects on protein folding. Experimental investigation is challenging due to the inherent incorporation of HI, making computer simulations more suitable. However, most simulations have neglected momentum conservation, such as Langevin dynamics (LD) and Brownian dynamics (BD), leading to

varied reports on the effects of HI on protein folding. To date, all CG simulations of protein folding have employed the BD method incorporating the Rotne-Prager (RP) tensor for modeling HI. However, the RP tensor cannot accurately account for the short-range many-body aspects of HI due to fluid incompressibility, critical in preventing particles from forming closely packed arrangements during protein folding, known as the “squeezing flow effect.” This short-range contribution is essential for accurately modeling non-equilibrium phase ordering kinetics.

This project employs the fluid particle dynamics (FPD) simulation method [10] based on the direct computation of the Navier-Stokes equation to study the folding kinetics of a four- α -helices bundle protein. The findings suggest that HI plays a significant role in selecting fast folding pathways, preventing kinetic trapping, and accelerating folding kinetics. The directional flow expedites collapsing dynamics during protein folding, in line with prior knowledge. Importantly, incompressibility-induced squeezing flow plays a substantial role in establishing proper hydrophobic contacts, preventing the accumulation of non-native contacts and averting protein entrapment in local free-energy minima. The impact of HI is most significant for a biologically relevant quench depth, highlighting their crucial role in protein folding, beyond previous considerations based on CG simulations neglecting the short-range many-body part of HI.

2. Simulation method

Our coarse-grained (CG) model features a representative four- α -helices bundle protein positioned in a cubic three-dimensional (3D)-periodic box, incorporating many-body hydrodynamic interactions (HI) among particles using the fluid particle dynamics (FPD) method. The four- α -helices bundle protein comprises four interconnected α -helices, represented by beads of diameter σ , symbolizing three types of amino-acid residues: hydrophobic (red), hydrophilic (blue), and neutral (yellow) (Fig. 1).

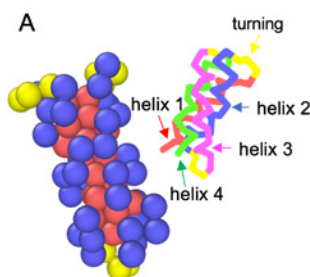


Fig1: The native conformation of four- α -helices bundle protein.

Spherical beads interact through the Lennard-Jones (LJ) potential V_{LJ} , incorporating energy coupling ϵ , harmonic bond potential V_{bond} , harmonic angle potential V_{angle} , and dihedral potential V_{dihedral} . The folding temperature T_f is defined as $k_B T_f / \epsilon \approx 0.7$, where k_B is the Boltzmann constant. In Figure 1, the native structure is illustrated, obtained by gradually quenching the system to zero temperature. Folding simulations are conducted as follows: an initial configuration is prepared through equilibrium simulations under

the temperature $k_B T_{\text{init}} / \epsilon = 1$, followed by an immediate quenching of the system to $T < T_f$.

3. Simulation Results

As a reference system, we explore the folding kinetics using BD simulations without incorporating HI (Fig. 2). We find only 3 out of 14 trajectories produce the correct folded state, characterized by $\chi \approx 0$, before $t \approx 1.2 \times 10^5 \tau_{\text{BD}}$ (Fig. 2). We classify these successful folding pathways into two types, depending on the chronological order of folding and collapse: The collapse and folding occur almost concurrently for the type I pathway (f1 in Fig. 2), whereas in the type II pathway (f2–f3 in Fig. 2), folding is completed much later than the collapse. In the majority of instances, proteins are trapped in unfolded intermediates with $\chi \approx 0.2 - 0.4$ despite being collapsed. Among all the simulations we conducted, the quickest folding pathway has a folding time of approximately $t_f \approx 2 \times 10^4 \tau_{\text{BD}}$. Even though the native structure of the four- α -helices bundle protein appears to be simple, the selection of indirect folding pathways with slow relaxation dynamics is quite common.

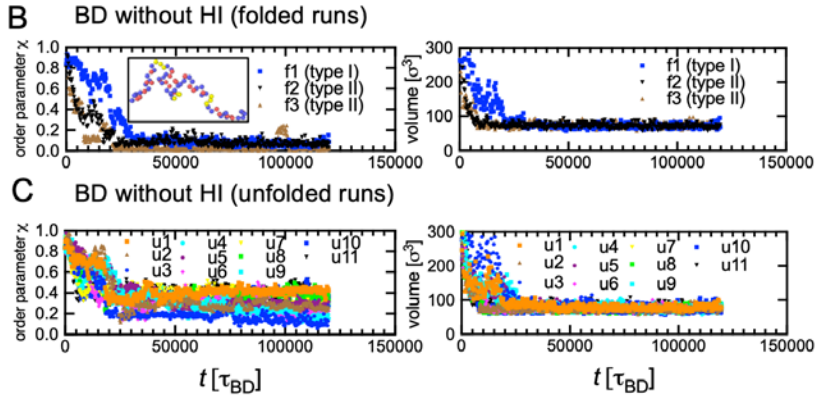


Fig2: Temporal change of order parameter χ and protein volume for folded and unfolded trajectories in BD simulations. Here the protein volume is determined by calculating the convex hull of amino-acid residues.

The situation becomes far more different when HI is included. Remarkably, we now observe that 7 of the 14 trajectories show the correct folded state. In the remaining simulations, the proteins have remained misfolded until the end of the simulation. Note, however, that due to the available computational cost, the simulation time in FPD is $7 \sim 8$ times shorter compared to BD. Thus, it is possible that some of the unfolded states eventually fold after waiting the same amount of time as in BD. Thus, our results collectively show that HI helps select fast folding pathways to the native state without being kinetically trapped, speeding up the folding kinetics compared to its absence.

4. Conclusion and Outlook

In summary, we have unveiled the crucial roles of hydrodynamic interactions (HI) in the folding kinetics of a four- α -helices bundle protein employing the fluid particle dynamics (FPD) method (10). Our findings demonstrate that HI plays a pivotal role in selecting fast folding pathways, significantly accelerating folding kinetics compared to its absence.

In living cells, our findings suggest that cells could leverage HI to favor faster folding pathways, potentially reducing the likelihood of protein aggregation. Considering that many proteins and other biomolecules, such as RNA (73), have charged components influencing folding kinetics through electrostatics, it is conceivable to extend our study to charged biomolecules using the FPD method incorporating electrostatic interactions and ion dynamics. The intriguing question of how organisms have utilized HI during evolution remains, reflecting the remarkable adaptability and creativity of life that has withstood natural selection.

References

1. Lesk A (2010) Introduction to protein science: architecture, function, and genomics. (Oxford university press).
2. Jumper J, et al. (2021) Highly accurate protein structure prediction with AlphaFold. *Nature* 596(7873):583-589.
3. Roney JP, Ovchinnikov S (2022) State-of-the-art estimation of protein model accuracy using AlphaFold. *Phys. Rev. Lett.* 129(23):238101.
4. Dobson CM (2003) Protein folding and misfolding. *Nature* 426(6968):884-890.
5. Thirumalai D, O' Brien EP, Morrison G, Hyeon C (2010) Theoretical perspectives on protein folding. *Annu. Rev. Biophys.* 39(1):159-183.
6. Freddolino PL, Harrison CB, Liu Y, Schulten K (2010) Challenges in protein-folding simulations. *Nat. Phys.* 6(10):751-758.
7. Gershenson A, Gierasch LM (2011) Protein folding in the cell: challenges and progress. *Curr. Opin. Struct. Biol.* 21(1):32-41.
8. Englander SW, Mayne L (2014) The nature of protein folding pathways. *Proc. Natl. Acad. Sci.*
9. Dobson CM (2002) Protein-misfolding diseases: Getting out of shape. *Nature* 418(6899):729-730.
10. Tanaka H, Araki T (2000) Simulation method of colloidal suspensions with hydrodynamic interactions: Fluid particle dynamics. *Phys. Rev. Lett.* 85(6):1338-1341.

計算科学概論

(工学部物理工学科・理学部物理学科共通開講科目)

藤 堂 眞 治

東京大学大学院理学系研究科

本稿では、2023 年度 S セメスターに実施した、計算科学概論（工学部物理工学科・理学部物理学科 4 年生対象、月曜 3 限）の内容について紹介する。東京大学では、計算物理学などの計算科学・工学から情報科学まで様々な学問領域の英知を結集した学際的研究教育プログラム「計算科学アライアンス¹」が 2016 年 4 月より開始されている。本講義は、計算科学アライアンスの認定講義として 2017 年度より開講されているものである。

本講義では、計算科学の様々な分野で行なわれている研究やシミュレーション手法の概要を複数の教員によるオムニバス形式で紹介することで、計算科学の現状を俯瞰し、最先端の研究と手法についての知識を得ることを目的としている。また、学生の理解を深める工夫として、座学と実習をセットで行うことで、計算科学の各手法について実際に手を動かして体験できる場を準備している。表 1 に講義日程と各回の担当者、内容を示している。計算科学の幅広い分野に加えて、計算機科学分野も扱い、計 6 テーマのオムニバス形式で実施した。座学 1 回と実習 1 回の計 2 回を基本とし、第 2 回のみ、その内容から、座学 1 回のみとしている。

2020 年度、2021 年度は、新型コロナウイルスの感染拡大の影響により、完全オンライン講義となったが、2022 年度からは再び対面で実施している。本講義は最先端の計算科学の現状を知ることが目的としている。そのためにもスーパーコンピュータを使ったシミュレーションを体験することは重要であり、情報基盤センターの教育利用制度を利用してスーパーコンピュータ（Oakbridge-CX）を利用させて頂いた。実習では、学生が自身の PC から Oakbridge-CX にログインして行った。ほとんどの学生にとって、スーパーコンピュータの利用は初めてである。第 1、3 回で、スーパーコンピュータの特性や並列プログラミングの基礎の学習と、Oakbridge-CX の利用方法、及び、OpenMP、MPI プログラミングの実習を行い、第 2 回で高性能計算機のアーキテクチャについて学んだ。第 4 回以降では、Oakbridge-CX も使用できることを前提として、各教員がテーマに沿った座学・実習を展開した。第 4、6 回では、有限要素法を例とした大規模疎行列ソルバー、地震シミュレーションの紹介と有限要素法の SIMD 化、第 5、9 回では、高性能プログラミングの実践として、ベクタ intrinsics 関数による演算の SIMD 化や、OpenMP によるマルチコア並列化を扱った。また、第 7、8 回では、密度汎関数電子状態計算により物質科学シミュレーションを、第 10、11 回では、並列化構造解析アプリケーションを扱った。

講義の成績は、各テーマ担当の教員が、講義・実習内容に関連したレポート課題を設定し、学生は合計 6 つの課題のうちから 3 つを選んで提出することで評価した。また、4 つ以上の課題を提出した場合はその内容に応じて加点することとした。35 名の学生が Oakbridge-CX のアカウントを取得し実習に取り組んだ。

¹ <https://www.compsci-alliance.jp/>

本講義の座学と実習を通じて、計算科学・計算機科学の最先端の研究に関する知識を得るだけでなく、実際に手を動かして、アプリケーション利用やプログラミングの実践的な実習ができたことが、学生にとって貴重な経験になっていれば幸いである。

表 1 講義日程・担当者・内容

回数	日付	担当者	内容
1	4月10日(月)	吉本芳英 ¹	スーパーコンピュータと並列プログラミング(座学)
2	4月17日(月)	中村 宏 ²	高性能計算機のアーキテクチャ (座学のみ)
3	4月24日(月)	吉本芳英 ¹	スーパーコンピュータと並列プログラミング (実習)
4	5月8日(月)	市村 強 ³ 藤田航平 ³	大規模疎行列ソルバー入門 (実習)
5	5月15日(月)	田浦健次朗 ⁴	高性能プログラミングと性能測定 (座学)
6	6月5日(月)	市村 強 ³ 藤田航平 ³	大規模疎行列ソルバー入門 (実習)
7 8	6月12日(月) 6月19日(月)	尾崎泰助 ⁵	第一原理計算による物質科学研究 (座学・実習)
9	6月26日(月)	田浦健次朗 ⁴	高性能プログラミングと性能測定 (実習)
10 11	7月3日(月) 7月10日(月)	奥田洋司 ⁶	並列 FEM と CAE (Computer Aided Engineering) (実習)

1. 大学院情報理工学系研究科コンピュータ科学専攻
2. 大学院情報理工学系研究科システム情報学専攻
3. 地震研究所計算地球科学研究センター
4. 大学院情報理工学系研究科電子情報学専攻
5. 物性研究所附属物質設計評価施設
6. 大学院新領域創成科学研究科人間環境学専攻

大学院工学系研究科電気系工学専攻修士実験

MPI による並列プログラミング入門

下川辺隆史・埴敏博

東京大学情報基盤センター

本稿は 2023 年 S1 タームに実施された大学院工学系研究科電気系工学専攻修士実験「MPI による並列プログラミング入門」について紹介する。修士実験は同専攻の修士課程（1 年）の学生が 2 人または 3 人が 1 組となって、1 ターム（約 2 ヶ月）のうちに、各教員が提供する課題に基づき実習を行うもので、原則として受講者の専門とは異なる分野の課題を選択することとなっている。

科学技術シミュレーションにおいて大規模並列システムが広く使用されるようになったが、そのためには、並列計算プログラミングに関する知識と経験が必須である。本実験では、分散並列システムにおいて広く使用されている MPI（Message Passing Interface）による並列プログラミングについて講義、実習を行う。実習では情報基盤センターの Wisteria/BDEC-01 スーパーコンピュータのシミュレーションノード群 (Odyssey) を使用する。Wisteria/BDEC-01 は 2021 年に導入されたシステムであり、昨年度に引き続き、本年度も本実験で使用した。

本年度は 1 組、2 名の受講者があり、Zoom を用いてオンラインで実施した。下記内容について座学及び演習を行なった：

- Wisteria/BDEC-01 へのログイン
- MPI 並列プログラミング
- SPMD (Single Program Multiple Data) 型パラダイムの習得
- MPI プログラムによる数値積分

RIKEN International HPC Summer School 2023 : Society5.0 に向けて (RIKEN International HPC Summer School 2023 - Toward Society 5.0)

中島研吾

東京大学情報基盤センター
理化学研究所計算科学研究センター

2023年9月11日(月)～15日(金)、「RIKEN International HPC Summer School 2023」¹をオンライン配信にて開催した。このスクールは計算科学技術分野の学生、若手研究者等の人材育成プログラムとして2018年度より実施、今回5度目の開催となる(2019年度はIHPCSS(International HPC Summer School)を神戸で開催したため、開催なし)。学生(大学院生)や研究者、民間企業の方、合計47名(うち海外から23名)の受講があった。

スクールでは、並列有限要素法、機械学習理論などに関連した並列計算機を使いこなすためのプログラミング手法の習得を目指した講義を受けながら、「Wisteria/BDEC-01 (Odyssey) (東京大学情報基盤センター)」を用いた演習を行った。表1にスケジュールを示す。

参加者からは「インストラクターの詳しい説明とわかりやすい実習がとても良かった。」「講義の内容はとても興味深く、実習もとても役に立った。このサマースクールの参加者同士の意見交換の場が充実しているとさらに良いと思う。」「この研究所を訪れ、スパコンについて詳しく説明をしてもらいたい。」「このようなスクールは地域社会にとって非常に重要である。」などの意見が寄せられた。

表1 講義・演習スケジュール

September 11 (Mon)		
09:00-12:00	Introduction, 1D FEM	Nakajima
13:30-17:00	3D FEM	Nakajima
17:00-18:00	Fugaku Virtual Tour, Overview of Fugaku	Imamura
September 12 (Tue)		
09:00-12:00	Road to Parallel FEM, Introduction to MPI (1/4)	Nakajima
13:30-18:00	Introduction to MPI (2/4)	Nakajima
September 13 (Wed)		
09:00-12:00	Introduction to MPI (3/4)	Nakajima
13:30-15:00	Introduction to MPI (4/4)	Nakajima
15:00-18:00	Parallel FEM (1/2)	Nakajima
September 14 (Thu)		
09:00-12:00	Parallel FEM (2/2)	Nakajima
13:30-15:00	Parallel Visualization	Nakajima
15:00-18:00	OpenMP/MPI Hybrid	Nakajima
September 15 (Fri)		
09:00-12:00	PETSc	Imamura
13:30-17:30	CNN	Imamura
17:30-	Closing	All

¹ <https://www.r-ccs.riken.jp/en/outreach/schools/20230911-1/>

第 1 回 Wisteria/BDEC-01(Odyssey)を使った

「富岳」講習会（実習付き） 教育利用報告

小林 寛

高度情報科学技術研究機構神戸センター

1. はじめに

2023 年 12 月 12 日（火）、東京大学情報基盤センター共催、理化学研究所計算科学研究センター協力の下、「第 1 回 Wisteria/BDEC-01(Odyssey)を使った「富岳」講習会（実習付き）」をオンラインで開催した。本講習会の目的は、講義と東京大学情報基盤センターの Wisteria/BDEC-01(Odyssey:シミュレーションノード群、以下「Odyssey」)を用いた実習を通し、A64FX を搭載したシステムの利用への理解を深め、大規模システムである Odyssey および「富岳」を効率良く利用するための技術的知見を習得することにある。

2. 開催状況

本講習会には 16 名の受講申し込みがあり、受講者は 13 名（大学・研究機関教職員：7 名、大学院生：3 名、企業の方：3 名）であった。

プログラムは、前半（160 分）は簡単なデモを交えた講義、後半（80 分）は Zoom のブレイクアウトルームを使った少人数による実習を行った。なお、実際に実習まで参加した受講者は 10 名であった。

内容は、以下の項目について講義・実習を行った。

- 単一プロセッサコアの効率的な利用
- キャッシュの有効利用
- 共有メモリと OpenMP によるスレッド並列
- MPI によるノード間通信の特性
- ハイブリッド並列（MPI + OpenMP）

各項目の中では、RIST で準備したサンプルコードや著名なオープンソースのベンチマークコードの題材とし、A64FX を搭載システムにおける最適化手法、数値計算ライブラリの利用、そして性能評価について講義した。

Odyssey を用いた、最大 12 ノードの利用を想定した実習では、受講者を 3 つのブレイクアウトルームに分け（ルームあたり 3-4 名）、各ブレイクアウトルームに TA を配置し、きめ細かなサポートができるよう工夫した。

なお、本講義で使用した資料およびサンプルコードは、講習会の開催案内ページ (https://www.hpci-office.jp/events/seminars/seminar_odyssey_231212) で公開

している。

3. アンケート結果

講習会終了後に実施した受講者アンケートの結果を表1に示す。

表1 アンケート結果（有効回答数 9）

質問	回答				
所属機関	大学等	研究機関	民間企業	その他	—
区分	7	0	2	0	—
満足度	満足	やや満足	やや不満	不満	—
	5	3	1	0	—
レベル	高すぎた	やや高い	ちょうど良い	やや低い	低すぎた
	1	6	2	0	0
理解度	よく理解できた	まあまあ理解できた	どちらとも言えない	あまり理解できなかった	ほとんど理解できなかった
	0	6	1	2	0
コメント等	● ハンズオンのサポート体制に感動しました。この度はありがとうございました。 ● 色々勉強になりました。複雑な点も結構ありますが担当様たち説明して下さったので助かりました。 ● 内容が非常に面白く、より深く理解したいので、時間が足りなかったように感じます。より長丁場なものもあれば嬉しいです。また、全テーマの講義を行ってからハンズオンを行う形式でしたが、2～3テーマ分の講義とハンズオンを交互に行う形式だとより理解がしやすいようにも感じました。				

受講者の満足度（「満足」と「やや満足」の占める割合）は89%と高いものであった。内容のレベルについては、やや高いと感じている人が多かった一方、理解度は67%の受講者が「まあまあ理解できた」という回答で、全般的に難しい内容ながらも、満足度・理解度が高い結果となっている。

コメントから、内容や実習（ハンズオン）については非常に好意的な評価だと考えている。一方、開催時間やプログラム構成（講義と実習の順番）については、工夫の余地があるとの指摘があった。これらの結果を今後の RIST における講習会運営に活かしたいと考えている。

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

開催日	内容	区分	人数	満足度※
第215回	2023年10月13日 20日 「第9回GPUミニキャンプ」 ¹ Wisteria/BDEC-01 (Aquarius) 下川辺 隆史	事前登録者	11	4.29
		参加者	大学・研究機関教職員	2
			企業の方	4
			学部学生	3
			大学院生	1
			その他	0
			合計	10
第216回	2023年10月17日 「一日速習：有限要素法プログラミング徹底入門」 ² 中島 研吾	事前登録者	5	4.67
		参加者	大学・研究機関教職員	1
			企業の方	1
			学部学生	1
			大学院生	0
			その他	0
			合計	3
第217回	2023年10月19日 「異種システム間連成アプリケーション開発を学ぶ ：WaitIO/MP講習会」 ³ Wisteria/BDEC-01(Odyssey,Aquarius) 住元 真司	事前登録者	5	5.00
		参加者	大学・研究機関教職員	0
			企業の方	2
			学部学生	0
			大学院生	2
			その他	0
			合計	4
第218回	2023年10月31日 「A64FXプログラミング入門」 ⁴ Wisteria/BDEC-01 (Odyssey) 下川辺 隆史	事前登録者	16	4.22
		参加者	大学・研究機関教職員	2
			企業の方	4
			学部学生	2
			大学院生	3
			その他	0
			合計	11
第219回	2023年11月10日 「MATLABの実行方法」 ⁵ Wisteria/BDEC-01(Aquarius) MathWorks Japan	事前登録者	14	4.50
		参加者	大学・研究機関教職員	7
			企業の方	0
			学部学生	3
			大学院生	2
			その他	0
			合計	12

※「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/215/>

² <https://www.cc.u-tokyo.ac.jp/events/lectures/216/>

³ <https://www.cc.u-tokyo.ac.jp/events/lectures/217/>

⁴ <https://www.cc.u-tokyo.ac.jp/events/lectures/218/>

⁵ <https://www.cc.u-tokyo.ac.jp/events/lectures/219/>

第 217 回お試しアカウント付き並列プログラミング演習「異種システム間連成アプリケーション開発を学ぶ:WaitIO/MP 講習会 -シミュレーションと機械学習融合編-」開催報告

住元真司, 荒川 隆
東京大学情報基盤センター

1. 講習会概要

本稿は、2023 年 10 月 19 日 (木) 13:00 - 17:30 にオンライン会議システム Zoom を用いて開催された行われた第 191 回お試しアカウント付き並列プログラミング演習「異種システム間連成アプリケーション開発を学ぶ:WaitIO/MP 講習会-シミュレーションと機械学習融合編-」の開催報告である。

本講習会では、今後のアプリケーション開発で重要になる異種システム間の連成アプリケーション開発について、Wisteria/BDEC-01 システムに新しく導入されたソフトウェアである h3-OpenSYS/WaitIO(WaitIO)と h3-Open-UTIL/MP(MP)を利用した異種システム間連成アプリケーション開発について学ぶことを目的に開催された。今回は特に特にシミュレーションと機械学習融合の手法を目標として、連成計算の基本から WaitIO と MP を用いることにより Odyssey と Aquarius を用いてどのように異種システム間連成アプリケーションを開発することができるのかを中心に、WaitIO についてはファイルを用いた弱連成アプリケーション記述を MPI ライクな通信 API を用いて書き換える方法、MP についてはシミュレーションと機械学習融合、特に Fortran/C で書かれた物理モデルと Python で書かれた機械学習ライブラリの連成を通じて、シミュレーションモデル同士の連成にとどまらない Wisteria/BDEC-01 の特性を生かしたプログラム連携について講習を行った。講習会の詳細 (教材と講習会録画) については以下を参照されたい。

<https://www.cc.u-tokyo.ac.jp/events/lectures/217/>

講習会のプログラムは以下であり、2 回目の開催であるが、実習に時間がかかる場合があるので比較的時間に余裕を持たせたものとした。

13:00 - 13:10	受講イントロダクション
13:10 - 13:50	Wisteria/BDEC-01 の概要
13:50 - 14:00	システム利用制度案内
14:00 - 14:10	h3-Open-BDEC ソフトウェア概要
14:20 - 15:40	h3-Open-SYS/WaitIO, h3-Open-UTIL/MP の概要とプログラミング
15:50 - 17:30	h3-Open-SYS/WaitIO と h3-Open-UTIL/MP を使ってみよう

参加者は 4 名であり、アンケートでは内容的に高度であるとの意見を頂いた。連成アプリケー

ション自体が広く知られていないため、連成アプリケーション自体の認知を広めていく必要があると考えている。講習についても、様々な応用を含め、身近な例を含めた簡単な事例を組み込むなどの工夫が必要であると考えている。

2. h3-Open-SYS/WaitIO

今回は、連成アプリケーション実行の h3-Open-UTIL/MP 主体として h3-Open-SYS/WaitIO については、簡易なファイルを用いた連成アプリケーションを WaitIO 利用のアプリケーションに書き換えるものを選択した。講習の中で説明の部については時間通り終えることができたが、実際の異種実行の実習においては、実行が待たされるケースがあった。今後の改善が必要である。

今後も WaitIO が広く認知されることを念頭に講習会プログラムを改善していきたい。

3. h3-Open-UTIL/MP

h3-Open-UTIL/MP に関しては、連成ライブラリおよびこのライブラリを用いた機械学習アプリケーションの連成計算について講習を行った。はじめに理論編として連成計算の概要と h3-Open-UTIL/MP の連成方法、具体的な利用手順について説明し、次いで実践編として事前に準備したサンプルプログラムを受講者にコンパイル・実行していただいた。サンプルプログラムはシミュレーションモデルを模した Fortran プログラムと Python(PyTorch)を用いた AI アプリケーションで、Odyssey で実行している Fortran プログラムの結果を逐次 Aquarius 側の Python アプリケーションに送信し学習計算するというものである。なお、当初は Python 環境の構築も実習内容に含める予定だったが、構築に必要なインタラクティブジョブをゲストアカウントでは利用できなかったためこのプロセスは割愛せざるを得なかった。ただし実習に要した時間を考えると環境構築をスキップしたことはむしろ適切だったと言える。今回は連成計算と AI という異なる 2 つの要素を同時に実習したが、その分内容が散漫になった感は否めない。今後は焦点を絞り受講者の必要性に即したより具体的で高度な内容の講習についても検討してゆきたい。

異機種間連成はアーキテクチャの異なる複数のノード群で構成される Wisteria-BDEC01 のハードウェア構成に基づいたきわめて先進的な機能であるが、今のところその機能が広く認知されているとはいいがたい。一方、今回講習した機械学習との連成あるいはビッグデータの活用など異機種間連成の潜在的なニーズは増加してゆくであろう。今後も講習会等を通じて h3-Open-UTIL/MP の周知・普及に務めたい。

参考文献

- [1] Arakawa T., Yashiro H., Nakajima K., Development of a coupler h3-Open-UTIL/MP, ACM Proceedings of the International Conference on High Performance Computing in Asia-Pacific Region (HPC Asia 2022), 2022
- [2] Sumimoto S. et al., A System-Wide Communication to Couple Multiple MPI Programs for Heterogeneous Computing, Proceedings of the 23rd International Conference on Parallel and Distributed Computing, Applications and Technologies (PDCAT '22), 2022 (Best Paper Award)

第 218 回お試しアカウント付き並列プログラミング講習会

「A64FX プログラミング入門」

下川辺 隆史

東京大学情報基盤センター

2023 年 10 月 31 日 (火) に、第 218 回お試しアカウント付き並列プログラミング講習会「A64FX プログラミング入門」が開催されました。本講習会では、A64FX という 48 コア搭載された CPU において、性能を引き出す手法を学びます。A64FX のアーキテクチャ、プロファイラを使った性能ボトルネックの推定、簡単な最適化手法の説明と実習を行います。

本講習会は、東京大学情報基盤センター、PC クラスタコンソーシアム（実用アプリケーション部会）の共催で開催され、富士通株式会社の福本尚人氏、本田巧氏に講師を務めていただきました。本講習会は Zoom によるオンライン講習会として実施され、情報提供や質問対応など、コミュニケーションツールとして Slack を利用しました。実習には、東京大学情報基盤センターに設置されたスーパーコンピュータ Wisteria/BDEC-01 を利用しました。本講習会のスケジュールは表 1 の通りです。受講者には実習で使用した Wisteria/BDEC-01 を受講後も利用できるお試しアカウントが与えられます。

表 1 スケジュール

日付	時間	内容
10 月 31 日	13:00 - 13:30	スパコンの使い方など
	13:30 - 14:20	A64FX アーキテクチャと並列プログラミング (座学)
	14:20 - 14:30	(休憩)
	14:30 - 15:40	OpenMP を活用した並列プログラミング演習 3 重ループを含むプログラムで、OpenMP の指示文挿入によるスレッド並列や SIMD 演算を活用するコードを取り扱います。また、Intrinsic (ACLE) を使って SIMD 化する例も取り上げます。
	15:40 - 15:50	(休憩)
	15:50 - 17:00	プロファイラを活用したチューニング演習

今回の講習会では、合計 16 名の事前申込があり、11 名が参加しました。参加者の内訳は、大学・研究機関教職員：2 名、大学院学生：3 名、学部学生：2 名、企業の方：4 名でした。講習会終了後に実施したアンケートの質問項目と回答の人数分布は表 2 の通りです。自由回答では、下記の回答をいただきました。

- ACLE など ARM 特有の機能については外部の人間なので今後使う機会もなくてあまり興味ありませんでした 一般的な OpenMP の演習項目を増やしてほしいです
- 「入門」なのになかなか玄人向けの説明が多いなと思います。CPU の構造がいかにすごいかをあれこれ言われても、エンドユーザーサイドとしては理解できない。テクニカルタームはざっくりいうとこういうことですと簡単な解説をつけるか、不要なら説明しなくていいのでは。3 つ目のチュートリアルでは講師の先生がご苦労されていました。先生がそうなら、受講者は難しすぎて誰もできないと思います。こういう入門コースでは、普段はみんな全然別の領域の研究をしている、コンピューターが専門ではない人たちが集まっているわけなので、もっと易しいレベルと説明で十分ではないでしょうか。要望ですが、最後のプロファイルのところにあった深層学習の例で、こういう普段は C ではなく（例えば）Python で書かれたモデルをどのようにして C にして並列計算するのか、というところがあるとエンドユーザーとしては嬉しいです。
- より基礎的なところから解説を始めるなど参加者のレベルに応じた講習会があると良いと感じた。
- Fortran 版のコードもあれば嬉しいです。
- 演習の際に資料を手元で確認できると、演習を進めやすかったと思います。

自由回答を見ると、内容が難しいと感じた受講者が多かったようです。今回の講習会は新規のもので過去資料の掲載がなく、かつ「入門」という名称を付けていたため、並列プログラミングの初歩的内容も期待して参加された受講者が多かったようです。とはいえ、アンケート集計結果を見ると、多くの方に概ね満足してもらえたようで、講習会タイトルの変更など検討し、次回以降の開催を考えたいと思っています。本講習会でもオンライン開催を望む声が多いことがわかりましたので、オンラインまたはハイブリッド開催を進めていこうと思います。

表 2 アンケート集計結果の人数分布と平均

	あり			なし			
並列プログラミング経験	6			3			
	評点	1	2	3	4	5	平均
講習会時間	短い <-> 長い		3	4	2		2.9
講習会講義内容（プレゼン）	簡単 <-> 難		1	3	4	1	3.6
配布資料内容	簡単 <-> 難			5	3	1	3.6
サンプルプログラム内容	簡単 <-> 難			6	1	2	3.6
満足度	不満 <-> 満足			2	3	4	4.2

第 219 回お試しアカウント付き並列プログラミング講習会 「MATLAB の実行方法」 実施報告

東京大学情報基盤センター

本稿では、2023 年 11 月 10 日（金）にオンライン開催した第 219 回お試しアカウント付き並列プログラミング講習会「MATLAB の実行方法¹」（共催：東京大学情報基盤センター、MathWorks Japan、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））について報告する。

東京大学情報基盤センター（以下、当センター）では 2007 年からスーパーコンピュータを使用した「お試しアカウント付き並列プログラミング講習会」を開催しているが、新型コロナウイルス感染症対策のため、2020 年 4 月から全ての講習会を Zoom 使用による「オンライン」講習会として開催する試みを実施してきた。2023 年 12 月現在は、現地会場と Zoom による「ハイブリッド」講習会も一部開催しているが、本講習会を含む多くの講習会を「オンライン」講習会として実施している。

MATLAB² は MathWorks 社が提供する数値解析ソフトウェアである。当センターでは、MATLAB におけるスーパーコンピュータ利用者の自作あるいはオープンソースのプログラムから関数として呼び出す機能を特に重要と考え、アカデミックユーザ（国公立大学・高専等の教育機関に所属する教職員・学生・研究生等、学位取得プログラムのある機関の教職員等）を対象として、2022 年 2 月 25 日より Wisteria/BDEC-01 Aquarius³ と Oakbridge-CX⁴ において MATLAB の提供を開始した⁵。データ解析、機械学習系に関連する MATLAB の豊富な機能は、利用者の計算科学シミュレーションコードを高度化し、研究の幅を広げることには貢献するものと期待している。

MATLAB の提供開始を受けて、MATLAB 概要と高速化手法の講義に加えて Wisteria/BDEC-01 Aquarius において MATLAB を実行する演習を行う講習会を 1 日で実施した。本講習会のプログラムを表 1 に示す。

¹ <https://www.cc.u-tokyo.ac.jp/events/lectures/219/>

² <https://jp.mathworks.com/products/matlab.html>

³ <https://www.cc.u-tokyo.ac.jp/supercomputer/wisteria/service/>

⁴ <https://www.cc.u-tokyo.ac.jp/supercomputer/obcx/service/>

⁵ <https://www.cc.u-tokyo.ac.jp/guide/application/introduction-matlab.php>

表 1 本講習会のプログラム

第一部 MATLAB 入門とその高速化入門	
13 : 00 - 14 : 00	MATLAB 概要と高速化入門 - MATLAB 概要 - 高速化のためのコードの書き方
第二部 スパコンで MATLAB を動かすハンズオン実習	
14 : 00 - 14 : 15	Wisteria/BDEC-01 概要とログイン
14 : 15 - 14 : 30	休憩
14 : 30 - 17 : 00	MATLAB を起動してサンプルデータを用いた演習 - スーパーコンピュータでの MATLAB 実演 - GPU を使った処理の実演 - Fortran, C のプログラムから MATLAB を呼び出す実演

事前登録者は 14 名、出席者は 12 名（大学・研究機関教職員 7 名、大学院学生 2 名、学部学生 3 名）となった。講習会終了後にアンケートを実施し、12 名中 6 名の出席者から回答を得ることができた。質問項目と回答（5 段階評価）の人数分布を表 2 に示す。平均満足度は 4.50 であった。

表 2 アンケート集計結果

	評点	1	2	3	4	5
(a) 講習会時間	短い⇔長い			3	2	1
(b) 講習会講義内容（プレゼン）	簡単⇔難		2	4		
(c) 配布資料内容	簡単⇔難		1	4	1	
(d) サンプルプログラム内容	簡単⇔難		2	3	1	
(e) 満足度（平均 4.50）	不満⇔満足				3	3

アンケートの自由記述欄のコメントを以下に示す。

- 序盤に実施された、高速化のための tips が勉強になりました。
- Odyssey でシミュレーションして、MATLAB で機械学習する使い方ができればいいなと思います。
- 文系の学生も受講する可能性がある機械学習の講義を担当しており、Python ではやや敷居が高い。MATLAB のほうが適切な場面もあるかと思った。

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://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/#SODAN

【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※1 wisteria0{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※1 i01login{1-2}.cc.u-tokyo.ac.jp

※1 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

巻頭言

巻頭言：「計算・データ・学習」融合とその先にあるもの	1
----------------------------	---

センターから

サービス休止等のお知らせ	5
システム変更等のお知らせ	6
最先端共同HPC基盤施設スーパーコンピュータシステム (OFP-II)	
導入のお知らせ	7
2024年度の利用申込（新規・継続）について	10
東京大学柏キャンパス一般公開2023	12
NSCC議長ら、柏IIキャンパスを訪問	13
研究成果の登録のお願い	14
10月・11月のジョブ統計	15

研究報告

第43回ASE研究会実施報告	18
SC23参加報告	19

ユーザーから

次世代銀河分光観測に向けたフィールドレベル解析の確立	25
Key roles of hydrodynamic interactions in protein folding	31

教育活動報告

計算科学概論（工学部物理工学科・理学部物理学科共通開講科目）	35
大学院工学系研究科電気系工学専攻修士実験	
MPIによる並列プログラミング入門	37
RIKEN International HPC Summer School 2023:Society5.0に向けて (RIKEN International HPC Summer School 2023-Toward Society 5.0)	38
第1回Wisteria/BDEC-01(Odyssey)を使った「富岳」講習会 (実習付き) 教育利用報告	39
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	41
第217回お試しアカウント付き並列プログラミング演習 「異種システム間連成アプリケーション開発を学ぶ:WaitIO/MP講習会 -シミュレーションと機械学習融合編-」開催報告	42
第218回お試しアカウント付き並列プログラミング講習会 「A64FXプログラミング入門」	44
第219回お試しアカウント付き並列プログラミング講習会 「MATLABの実行方法」実施報告	46

原稿募集	48
------	----