

ISSN 1344—9567

スーパーコンピューティング ニュース

Vol.22 No.3, 2020.5



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

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

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

※トークン消費係数は 1.00 である。

※括弧内のノード時間は付与するトークン量。実行したジョブのノード時間積と消費係数に応じてトークンが消費される。

付与したトークンは、利用期間内に全量が使用できることを保証するものではない。

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

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

※ノード固定の申し込みには審査を要する。

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

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

コース		負担金額(税込)		ディスク容量	備考
		大学・公共機関等	企業		
パーソナルコース		申込 1 セット当り, 最大 6 セットまで 50,000 円 (8,640 ノード時間)		申込 1 セット当り /work 1TB 利用者当り /home 50GB	最大ノード数 2,048 ノード
グループコース		申込 1 セット当り 50,000 円 (8,640 ノード時間)	申込 1 セット当り 60,000 円 (8,640 ノード時間)	グループ 1 セット当り /work 1TB 利用者当り /home 50GB	最大ノード数 2,048 ノード
トークン追加		4,200 円 (720 ノード時間)	5,000 円 (720 ノード時間)		
ディスク追加		6,480 円/(1TB*年)			1TB 単位で申込可 (/work のみ)

※トークン消費係数は 1.00 である。

※括弧内のノード時間は付与するトークン量。実行したジョブのノード時間積と消費係数に応じてトークンが消費される。

付与したトークンは、利用期間内に全量が使用できることを保証するものではない。

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

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

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

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

コース		負担金額(税込)		ディスク容量	備考
		大学・公共機関等	企業		
パーソナルコース		申込 1 セット当り, 最大 2 セットまで 75,000 円 (8,640 ノード時間)		申込 1 セット当り /lustre 1TB 利用者当り /home 2GB	Reedbush-U 最大ノード数 128 ノード Reedbush-H 最大ノード数 32 ノード Reedbush-L 最大ノード数 16 ノード
グループコース	一般申込	申込 1 セット当り 75,000 円 (8,640 ノード時間)		グループ 1 セット当り /lustre 1TB 利用者当り /home 2GB	Reedbush-U 最大ノード数 128 ノード Reedbush-H 最大ノード数 32 ノード Reedbush-L 最大ノード数 16 ノード
	公募制度 Reedbush-U	申込 1 セット当り 公募制度 75,000 円 (8,640 ノード時間)	申込 1 セット当り 公募制度 90,000 円 (8,640 ノード時間)	グループ 1 セット当り /lustre 1TB 利用者当り /home 2GB	最大ノード数 128 ノード
	公募制度 Reedbush-H	申込 1 セット当り 公募制度 180,000 円 (21,600 ノード時間)	申込 1 セット当り 公募制度 216,000 円 (21,600 ノード時間)	グループ 1 セット当り /lustre 4TB 利用者当り /home 2GB	最大ノード数 32 ノード
	公募制度・ ノード固定 Reedbush-L	申込 1 セット当り 公募制度 300,000 円 ノード固定 450,000 円 (34,560 ノード時間)	申込 1 セット当り 公募制度 360,000 円 ノード固定 540,000 円 (34,560 ノード時間)	グループ 1 セット当り /lustre 4TB 利用者当り /home 2GB	最大ノード数 16 ノード
トークン追加		6,300 円 (720 ノード時間)	7,500 円 (720 ノード時間)		
ディスク追加		6,480 円／(1TB*年)			1TB 単位で申込可 (/lustre のみ)

※トークン消費係数は下記の通りである。

Reedbush-U: 1.00, Reedbush-H: 2.50, Reedbush-L: 4.00

※括弧内のノード時間は付与するトークン量。実行したジョブのノード時間積と消費係数に応じてトークンが消費される。

付与したトークンは、利用期間内に全量が使用できることを保証するものではない。

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

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

※公募制度・ノード固定の申し込みには審査を要する。

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

トークン移行におけるノード時間積の換算表

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

移行先に追加されるトークン量(ノード時間) = 移行トークン量 × 係数

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

- ・「大学・公共機関等」は大学、高等専門学校及び大学共同利用機関、文部科学省所管の独立行政法人、学術研究及び学術振興を目的とする国又は地方公共団体が所管する機関、並びに文部科学省科学研究費補助金の交付を受けて学術研究を行う者に適用する。
- ・「企業」の申し込みには、企業利用申込書添付書類の提出および審査を要する。
- ・利用期間は、利用開始月から終了月の末日またはサービス休止前までとする。利用期間内に計算機利用を中止した場合であっても利用負担金額の変更は行わない。年度の途中で利用開始または終了する場合の負担金額は月数別利用負担金表 (Web ページ) を参照すること。
- ・前掲の利用負担金表は基本セットの内容であり、最小セットについては Web ページを参照すること。
- ・パーソナルコース (ただし、本センターのスーパーコンピュータシステムに初めて登録された利用者) においてのみ、利用開始月の翌月末日までに利用を中止することができる。利用負担金はパーソナルコースの利用期間1ヶ月の金額を適用し、請求する。
- ・利用負担金は、原則として利用開始月に応じ、以下の月の初旬に一括して請求する。
 - － 利用開始月が 4 月から 7 月までは 10 月、8 月から 9 月までは 12 月、10 月から 12 月までは 3 月、1 月から 3 月までは 3 月末。
 - － 前年度内に事前申込をした分については、利用開始月に関わらず、7 月初旬の請求となる。
- ・利用負担金額が減額となる変更はできない。
- ・コース間の変更については、利用負担金が増額になる場合のみ別途相談に応じる。(ただし、利用者番号変更の場合がある。)
- ・グループコースのディスク量は、グループ全体の上限值である。

スーパーコンピュータシステム ジョブクラス制限値

Oakbridge-CX スーパーコンピュータシステム ジョブクラス制限値(2019 年 7 月 1 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 (GB) ※3	パ ー ソ ナ ル コ ー ス	グループ コース		
					申 込	一 般	ノ ー ド 固 定
debug	1 ~ 16 (896)	30 分	168	○	○	○	○
short	1 ~ 8 (448)	8 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 ※4	168	×	×	×	○
(interactive) ※5							
interactive_n1	1 (56)	2 時間	168	○	○	○	○
interactive_n8	2 ~ 8 (448)	10 分	"	○	○	○	○

※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 申込ノード数の合計以内ならば, キュー名・制限時間(原則 48 時間以内)は相談の上, 任意に設定可能

※5 インタラクティブジョブの起動は次のとおり (トークン消費なし)

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

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

キュー名※1	ノード数※2 (最大コア数)	制限時間 (経過時間)	メモリー 容量 (GB) ※3	パ ー ソ ナ ル コ ー ス	グ ル ー プ コ ー ス
debug-cache	1 ~ 128 (8704)	30 分	82	○	○
debug-flat	1 ~ 128 (8704)	30 分	96	○	○
(regular-cache)					
small-cache	1 ~ 128 (8704)	48 時間	82	○	○
medium-cache	129 ~ 512 (34816)	"	"	○	○
large-cache	513 ~ 1024 (69632)	"	"	○	○
x-large-cache	1025 ~ 2048 (139264)	24 時間	"	○	○
(regular-flat)					
small-flat	1 ~ 128 (8704)	48 時間	96	○	○
medium-flat	129 ~ 512 (34816)	"	"	○	○
large-flat	513 ~ 1024 (69632)	"	"	○	○
x-large-flat	1025 ~ 2048 (139264)	24 時間	"	○	○
challenge	1 ~ 8208 (558144)	24 時間	82 / 96	★	★
(interactive-cache) ※4					
interactive_n1-cache	1 (68)	2 時間	82	○	○
interactive_n16-cache	2 ~ 16 (1088)	10 分	"	○	○
(interactive-flat) ※4					
interactive_n1-flat	1 (68)	2 時間	96	○	○
interactive_n16-flat	2 ~ 16 (1088)	10 分	"	○	○
prepost	1 (28)	6 時間	222	○	○

★ 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-cache/flat, debug-cache/flat を小文字で指定する
regular-cache/flat キューはノード数の指定("#PJM -L "node=ノード数" ")でノード数別のキューに投入される

※2 トークンの消費係数は 1.00

※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, pjsub --interact -g グループ名 -L "rscgrp=キュー名,node=ノード数"
(キュー名は interactive-cache/flat, トークン消費なし)

Reedbush スーパーコンピュータシステム (Reedbush-U) ジョブクラス制限値 (2020 年 2 月 28 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 (GB) ※3	パーソ ナル コ ー ス	グループコース		
						一 般 申 込	公 募 制 度	ノ ー ド 固 定
u-debug	1	16 (576)	30 分	244	○	○	○	○
u-short	1	8 (288)	4 時間	244	○	○	○	○
(u-regular)								
u-small	4	16 (576)	48 時間	244	○	○	○	○
u-medium	17	32 (1152)	"	"	○	○	○	○
u-large	33	64 (2304)	"	"	○	○	○	○
u-x-large	65	128 (4608)	24 時間	"	○	○	○	○
任意	申込数		任意 ※4	244	×	×	×	×
u-challenge	1	420 (15120)	24 時間	244	★	★	★	★
(u-interactive) ※5								
u-interactive_1	1	(36)	30 分	244	○	○	○	○
u-interactive_4	2	4 (144)	10 分	"	○	○	○	○
(u-regular-low) ※6								
u-small-low	4	16 (576)	12 時間	244	▲	▲	▲	▲
u-medium-low	17	32 (1152)	"	"	×	▲	▲	▲
u-large-low	33	64 (2304)	"	"	×	▲	▲	▲
u-x-large-low	65	128 (4608)	6 時間	"	×	×	▲	▲
u-small-ext ※7	4	16 (576)	6 時間	244	○	○	○	○
prepost	1	(28)	6 時間	500	○	○	○	○

▲ パーソナルコースは 最大 4 ノード、グループコースは申込ノード数まで実行可

※1 キューの指定("#PBS -q キュー名") は、u-short, u-regular, u-debug を小文字で指定する

u-regular キューはノード数の指定("#PBS -l select=ノード数")でノード数別のキューに投入される

※2 トークンの消費係数は 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 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)

qsub -l -q u-interactive -l select=ノード数 -l walltime=XX:XX -W group_list=グループ名

※6 非優先ジョブクラス(低プライオリティキュー)は、トークンの追加申込が締め切られ、ジョブ実行に必要なトークン残量が不足した場合のみ実行可

※7 混雑緩和のため設置、Reedbush-H のノードを割当

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

キュー名※1	ノード数※2 (最大 GPU 数)		制限時間 (経過時間)	メモリー 容量 (GB) ※3	パーソ ナル コ ー ス	グループコース	
						一 般 申 込	公 募 制 度
h-debug	1	4 (8)	30 分	244	○	○	○
h-short	1	4 (8)	2 時間	244	○	○	○
(h-regular)							
h-small	1	4 (8)	48 時間	244	○	○	○
h-medium	5	8 (16)	"	"	○	○	○
h-large	9	16 (32)	"	"	○	○	○
h-x-large	17	32 (64)	24 時間	"	○	○	○
h-challenge	1	120 (240)	24 時間	244	★	★	★
(h-interactive) ※4							
h-interactive_1	1	(2)	2 時間	244	○	○	○
h-interactive_2	2	(4)	30 分	"	○	○	○
(h-regular-low) ※5							
h-small-low	1	4 (8)	12 時間	244	▲	▲	▲
h-medium-low	5	8 (16)	"	"	×	▲	▲
h-large-low	9	16 (32)	"	"	×	▲	▲
h-x-large-low	17	32 (64)	6 時間	"	×	×	▲

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

★ 審査による課題選定の上、月 1 回の一定期間のみ利用可能(原則として月末処理日前日の朝～翌日朝)

※1 キューの指定("#PBS -q キュー名") は、h-short, h-regular, h-debug を小文字で指定する

h-regular キューはノード数の指定("#PBS -l select=ノード数")でノード数別のキューに投入される

※2 トークンの消費係数は 2.50

※3 1ノード当りの利用者が利用可能なメモリー容量

※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)

qsub -l -q h-interactive -l select=ノード数 -l walltime=XX:XX -W group_list=グループ名

※5 非優先ジョブクラス(低プライオリティキュー)は、トークンの追加申込が締め切られ、ジョブ実行に必要なトークン残量が不足した場合のみ実行可

Reedbush スーパーコンピュータシステム (Reedbush-L) ジョブクラス制限値 (2019 年 11 月 29 日)

キュー名※1	ノード数※2 (最大 GPU 数)	制限時間 (経過時間)	メモリー 容量 (GB) ※3	パーソ ナル コ ー ス	グループコース		
					一 般 申 込	公 募 制 度	ノ ー ド 固 定
l-debug	1 ~ 4 (16)	30 分	244	○	○	○	○
(l-regular)							
l-small	1 ~ 4 (16)	168 時間	244	○	○	○	○
l-medium	5 ~ 8 (32)	"	"	○	○	○	○
l-large	9 ~ 16 (64)	"	"	○	○	○	○
任意	申込数	任意 ※4	244	×	×	×	○
l-interactive ※5	1 (4)	24 時間	244	○	○	○	○
(l-regular-low) ※6							
l-small-low	1 ~ 4 (16)	12 時間	244	▲	▲	▲	▲
l-medium-low	5 ~ 8 (32)	"	"	×	▲	▲	▲
l-large-low	9 ~ 16 (64)	"	"	×	▲	▲	▲

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

※1 キューの指定 ("PBS -q キュー名") は、l-debug, l-regular を小文字で指定する

l-regular キューはノード数の指定 ("PBS -l select=ノード数") でノード数別のキューに投入される

※2 トークンの消費係数は 4.00

※3 1ノード当りの利用者が利用可能なメモリー容量

※4 申込ノード数の合計以内ならば、キュー名・制限時間 (原則 168 時間以内) は相談の上、任意に設定可能

※5 インタラクティブジョブの起動は次のとおり (トークン消費あり)

qsub -l -q l-interactive -l select=ノード数 -l walltime=XX:XX -W group_list=グループ名

※6 非優先ジョブクラス (低プライオリティキュー) は、トークンの追加申込が締め切られ、ジョブ実行に必要なトークン残量が不足した場合のみ実行可

センターから

サービス休止等のお知らせ

2020 年 5 月下旬からの計算機サービス予定は以下のとおりです。

Oakbridge-CX スーパーコンピュータシステム

○ 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
5 月 29 日 (金)	9:00 ～ 20:00 までサービス休止	月末処理
6 月 26 日 (金)	9:00 ～ 20:00 までサービス休止	月末処理
7 月 31 日 (金)	9:00 ～ 20:00 までサービス休止	月末処理

- ・ Oakbridge-CX システムは、原則 24 時間サービスを行っています。
ただし、月末処理日（原則として毎月最終金曜日）はサービスを停止します。

○ 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
5 月 28 日 (木) 9:00 ～ 5 月 29 日 (金) 9:00 まで 6 月 25 日 (木) 9:00 ～ 6 月 26 日 (金) 9:00 まで 7 月 30 日 (木) 9:00 ～ 7 月 31 日 (金) 9:00 まで

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

Oakforest-PACS スーパーコンピュータシステム

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

日 付	利用者サービス	センター内作業
5 月 29 日 (金)	9:00 ～ 22:00 までサービス休止	月末処理
6 月 26 日 (金)	9:00 ～ 22:00 までサービス休止	月末処理
7 月 17 日 (金)	9:00 ～ 22:00 までサービス休止	月末処理

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

○ Oakforest-PACS スーパーコンピュータシステム サービスノード縮退 のお知らせ

サービスノード縮退 実施期間
5 月 28 日 (木) 9:00 ～ 5 月 29 日 (金) 9:00 まで : 約 3,000 ノード運転 6 月 25 日 (木) 9:00 ～ 6 月 26 日 (金) 9:00 まで : 約 3,000 ノード運転 7 月 24 日 (金) : 約 4,000 ノード運転 7 月 25 日 (土) ～ 7 月 31 日 (金) まで : 約 7,000 ノード運転

- ・ 上記期間中、東京オリンピック・パラリンピック 期間中に実施予定の、関東地区における「ゲリラ豪雨」リアルタイム予報と情報通信の動作確認のための実験を実施いたします。
各キュー及びログインノードは利用できますが、縮退運転となります。

Reedbush スーパーコンピュータシステム

○ Reedbush-U スーパーコンピュータシステム サービス終了のお知らせ

2020 年 6 月 30 日 (火) 9:00 に Reedbush-U スーパーコンピュータシステムのサービスを終了する予定です。詳細については、本誌別記事「システム変更等のお知らせ」やスーパーコンピューティング部門の Web ページをご覧ください。

○ Reedbush スーパーコンピュータシステム (Reedbush-U) 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
5 月 29 日 (金)	9:00 ～ 17:00 までサービス休止	月末処理
6 月 30 日 (火)	9:00 サービス終了	システム停止

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

○ Reedbush スーパーコンピュータシステム (Reedbush-U) 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	
5 月 28 日 (木) 9:00 ～ 5 月 29 日 (金) 9:00 まで 6 月 29 日 (月) 9:00 ～ 6 月 30 日 (火) 9:00 まで	

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

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

日 付	利用者サービス	センター内作業
5 月 29 日 (金)	9:00 ～ 17:00 までサービス休止	月末処理
6 月 30 日 (火)	9:00 ～ 17:00 までサービス休止	月末処理
7 月 31 日 (金)	9:00 ～ 17:00 までサービス休止	月末処理

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

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

大規模 HPC チャレンジ 実施期間	
5 月 28 日 (木) 9:00 ～ 5 月 29 日 (金) 9:00 まで 6 月 29 日 (月) 9:00 ～ 6 月 30 日 (火) 9:00 まで 7 月 30 日 (木) 9:00 ～ 7 月 31 日 (金) 9:00 まで	

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

【注意事項】

- ・サービス休止等の計画は原稿作成時の予定です。やむを得ずサービスを変更したり、休止したりする場合がありますので、最新の情報は login 時のメッセージ及びスーパーコンピューティング部門の Web ページの運用スケジュール (<https://www.cc.u-tokyo.ac.jp/supercomputer/schedule.php>) をご確認ください。
- ・平日の 9:00～17:00 以外、休日 (土・日・祝日等) は、システム障害等でサービスが停止した場合、運転を継続できない場合があります。その場合は、その時間をもってサービスを中止しますのでご了承ください。

システム変更等のお知らせ

(2020.3.7 - 2020.5.7 変更)

1. ハードウェア

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

2. ソフトウェア

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

Julia	1.4.0	(2020.04.24)
Quantum ESPRESSO	6.4	(2020.04.24)
visit	2.13.3	(2020.04.24)

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

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

Julia	1.4.0	(2020.04.24)
Quantum ESPRESSO	6.4	(2020.04.24)
visit	2.13.3	(2020.04.24)

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

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

chainer	7.2.0	(2020.04.03)
pytorch	1.4.0	(2020.04.03)
Horovod	0.15.2	(2020.04.24)
Open MPI (CUDA 9.0.176, PGI 17.10, GPUDirect 対応版)	2.1.2	(2020.04.24)

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

3. その他

3.1 Reedbush-U サービス終了について

Reedbush-U スーパーコンピュータシステムは2020年6月30日 9:00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。なお、Reedbush-H/Lは2020年度について運用を継続します。追加情報について決まり次第 Web ページ、メール、スーパーコンピューティングニュースにて順次ご連絡致します。

Reedbush-U サービス終了にあたっては以下の点にご注意ください。

- 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 Oakbridge-CX、Oakforest-PACS、Reedbush-H/L をご検討ください。

- 一般利用にて Reedbush-U をご利用の方は「トークン移行」を行うことが可能です。Oakbridge-CX、Oakforest-PACS 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.u-tokyo.ac.jp/guide/application/transfer_token.php)をご参照ください。
- 6 月 30 日 9:00 の時点にて、Reedbush-U のキューに残存するジョブはすべて削除致します。
- 利用期間が 6 月 30 日までの利用者様のアカウントにつきましては、7 月 31 日 9:00 までを利用者様による移行及びバックアップ期間として利用可能と致します。
- 上記期間におきましては、該当の各利用者様は各自のアカウントを用いてログインノードにログインし、ファイルにアクセスすることができますが、ジョブを実行し、残トークンを消費することはできません。なお、ログインノード上におきましてジョブを実行した場合は予告無く削除致しますのでご了承ください。
- 上記期間以降に利用期間が 6 月 30 日までの利用者様のアカウントの削除作業を実施致します。これ以降ファイルの復旧はできませんのでご注意ください。
- 6 月 30 日以降 Reedbush-H/L もご利用の利用者様につきましては、移行及びバックアップ期間やファイル削除処理の対象とはなりません。

3.2 Reedbush におけるモジュール変更のお知らせ(2020 年 4 月～)

Reedbush システムにおいて、3 月 31 日(火) 9:00 からの年度末作業において Infiniband ドライバの更新を実施しました。これに伴い旧ドライバを使用して作成された MPI ライブラリ(Open MPI、MVAPICH2、HPC-X)及び、それらを利用してビルドされたアプリケーションを廃止し、新しく構築し直されています。

3 月以前に上記の MPI ライブラリを利用してビルドされたプログラムは、新しい MPI ライブラリで再ビルドしていただくようお願いいたします。

廃止及び追加モジュール等の詳細は Reedbush 利用支援ポータルをご覧ください。

- Reedbush 利用支援ポータル「ドキュメント閲覧」-「Reedbush システムモジュール変更のお知らせ」(<https://reedbush-www.cc.u-tokyo.ac.jp/>)

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

Oakbridge-CX、Oakforest-PACS、Reedbush-H 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占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計算ノードを最大 24 時間占有利用することができます。

- 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)
- Oakforest-PACS スーパーコンピュータシステムの計算ノード 8,208 ノード
- Reedbush-H スーパーコンピュータシステムの計算ノード 120 ノード (GPU 240 基)

2. 利用案内

- 1 ヶ月に 1 回、原則として月末処理前の木曜日 9:00～金曜日の 9:00 までの最大 24 時間、提供資源を占有利用することが可能です。
(Oakbridge-CX につきましては、大規模 HPC チャレンジの当日に、チャレンジ用の設定に変更いたします。この変更は 1 時間程度の作業時間が見込まれるため、大規模 HPC チャレンジのご利用時間は 10 時頃開始、翌日 9 時終了となります。)
- (Oakforest-PACS のメモリモードにつきましては、通常サービス中は、全計算ノードの約半分を flat モード、もう半分を cache モードに設定して、利用者の皆様にご利用いただいておりますが、大規模 HPC チャレンジの当日に、チャレンジ実施者の希望に沿って全計算ノードをどちらかのモードに変更いたします。この変更は 3 時間程度の作業時間が見込まれるため、大規模 HPC チャレンジのご利用時間は 12 時頃開始、翌日 9 時終了となります。)
- 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、およ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または最先端共同 HPC 基盤施設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。
- センターまたは最先端共同 HPC 基盤施設の主催、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。

3. 実施日程

2020 年度の今後の「大規模 HPC チャレンジ」実施日程は表 1～3 のとおりです。

表 1. 2020 年度 Oakbridge-CX 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
2020 年 8 月 27 日(木) 10:00 ～ 8 月 28 日(金) 9:00 2020 年 9 月 24 日(木) 10:00 ～ 9 月 25 日(金) 9:00 2020 年 10 月 29 日(木) 10:00 ～ 10 月 30 日(金) 9:00 2020 年 11 月 26 日(木) 10:00 ～ 11 月 27 日(金) 9:00	2020 年 6 月 29 日(月) 17:00【締切】	7 月上旬	7 月中旬
2020 年 12 月 17 日(木) 10:00 ～ 12 月 18 日(金) 9:00 2021 年 1 月 28 日(木) 10:00 ～ 1 月 29 日(金) 9:00 2021 年 2 月 25 日(木) 10:00 ～ 2 月 26 日(金) 9:00 2021 年 3 月 30 日(火) 10:00 ～ 3 月 31 日(水) 9:00	2020 年 10 月 26 日(月) 17:00【締切】	11 月上旬	11 月中旬

表 2. 2020 年度 Oakforest-PACS 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
2020 年 8 月の実施日程はありません 2020 年 9 月 24 日(木) 12:00 ～ 9 月 25 日(金) 9:00 2020 年 10 月 29 日(木) 12:00 ～ 10 月 30 日(金) 9:00 2020 年 11 月 26 日(木) 12:00 ～ 11 月 27 日(金) 9:00	2020 年 6 月 29 日(月) 17:00【締切】	7 月上旬	7 月中旬
2020 年 12 月 17 日(木) 12:00 ～ 12 月 18 日(金) 9:00 2021 年 1 月 28 日(木) 12:00 ～ 1 月 29 日(金) 9:00 2021 年 2 月 25 日(木) 12:00 ～ 2 月 26 日(金) 9:00 2021 年 3 月 30 日(火) 12:00 ～ 3 月 31 日(水) 9:00	2020 年 10 月 26 日(月) 17:00【締切】	11 月上旬	11 月中旬

表 3. 2020 年度 Reedbush-H 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
2020 年 8 月 27 日(木) 9:00 ～ 8 月 28 日(金) 9:00 2020 年 9 月 24 日(木) 9:00 ～ 9 月 25 日(金) 9:00 2020 年 10 月 22 日(木) 9:00 ～ 10 月 23 日(金) 9:00 2020 年 11 月 26 日(木) 9:00 ～ 11 月 27 日(金) 9:00	2020 年 6 月 29 日(月) 17:00【締切】	7 月上旬	7 月中旬
2020 年 12 月 17 日(木) 9:00 ～ 12 月 18 日(金) 9:00 2021 年 1 月 28 日(木) 9:00 ～ 1 月 29 日(金) 9:00 2021 年 2 月 25 日(木) 9:00 ～ 2 月 26 日(金) 9:00 2021 年 3 月 30 日(火) 9:00 ～ 3 月 31 日(水) 9:00	2020 年 10 月 26 日(月) 17:00【締切】	11 月上旬	11 月中旬

- ・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。

¹ 「大規模 HPC チャレンジ」
<https://www.cc.u-tokyo.ac.jp/guide/hpc/>

4. 研究課題

「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 (Oakforest-PACS については筑波大学計算科学研究センターの教職員も含む)、および、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。

応募課題は、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。

なお、申込者は「国内の大学、公共機関に所属する研究者、および民間企業に所属する者」とします。また、研究グループのメンバー又は申込者が企業の方の場合は、以下の書類のいずれかを提出していただく必要があります。

- ・「**共同研究契約書の写し**」
(申込者の所属機関と共同研究契約を結んでいる研究組織に所属する者)
- ・「**適切に監督を行うことを記した誓約書及び請負契約書の写し**」
(申込者の所属機関と請負契約を結んでいる企業の従業員)
- ・「**利用規定にある利用目的を遵守することを記した誓約書**」
(民間企業に所属している者)

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 (Oakforest-PACS については筑波大学計算科学研究センターの教職員も含む)、および、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) 提供する最大ノード数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、加算評価される場合があります。

7. 利用申込

募集要項、スーパーコンピューターシステム利用規程等をよくお読みの上、利用申込書に必要事項をご記入ください。ご記入頂いた利用申込書は以下の提出先まで、電子メールに添付してお送りください。

申込書類に必要な項目は以下の通りです。

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（メール添付または郵送）
※別刷りを郵送される場合は、「大規模 HPC チャレンジ 別刷」と朱記し、申込書の1ページ目を印刷して同封ください。提出先は「問い合わせ先」をご覧ください。
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（氏名、所属、職名、研究課題における役割）

8. 問い合わせ先

利用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）。

申込書提出先：

E-Mail : koubo@cc.u-tokyo.ac.jp

〒113-8658

東京都文京区弥生 2-11-16

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

2020年度 前期 東京大学情報基盤センター「若手・女性利用者推薦」採択課題

スーパーコンピューティングチーム

東京大学情報基盤センター（以下、センター）では、若手研究者（2020年4月1日時点において40歳以下、学生を含む）及び女性研究者（年齢は問わない）による、スーパーコンピュータ、大規模ネットワーク機器などの大型計算資源を使用した研究を対象とした公募型プロジェクトを実施しています。センターの教員による審査の上、年間で数十件の優れた研究提案課題を採択する予定です。採択された課題では申請した計算資源を無料で使用することができます。

前期・後期に募集を行う一般枠と、学部学生・大学院生を対象とし、主に夏期における利用を想定したインターン制度があります。一般枠（前期・後期）では、1人で行う研究課題を募集します。一般枠の課題は、1年または半年単位（後期は半年のみ）の実施となります。インターン制度では、1人で行う研究課題または2人以上のメンバーで構成された研究グループで行う研究課題を募集します。

一般枠で新規に採択された課題のうち、特に優れた課題で「学際大規模情報基盤共同利用・共同研究拠点（JHPCN）」の萌芽型共同研究課題の条件を満たすものについては、本センターより同拠点萌芽型共同研究課題として推薦する予定です。同拠点共同研究課題審査委員会で審査の上、JHPCNの萌芽型共同研究課題としても採択された場合、毎年7月に開催されるJHPCNのシンポジウムにて発表の機会が与えられる場合があります。本制度に採択された課題は終了後、得られた成果をもとに、「学際大規模情報基盤共同利用・共同研究拠点（JHPCN）」の公募型共同研究（一般課題、国際課題、企業課題）等へと進展することが大いに期待されます。なお、インターン制度で採択された課題はJHPCN萌芽型共同研究課題としての推薦は行いません。

このたび、以下の基準による厳正な審査のうえ、2020年度前期は28件の課題を採択いたしました。

- 本制度が提供する計算機システムを利用することで、学術的にインパクトがある成果を創出できると期待される提案を積極的に採択します。
- スーパーコンピュータの利用環境の改善に寄与すると期待されるソフトウェア開発に関する提案も歓迎します。
- 現状の環境にとどまらず、メニーコア、10万コアを超える超並列環境など、将来の先端的なスーパーコンピュータ環境を目指した提案は特に歓迎します。

本制度の詳細は、以下のHPをご覧ください。

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

■ 2020年度 前期 採択課題

課題名	内側円筒が回転する同心円筒間環状流路内の熱伝達と摩擦抵抗に Taylor 渦の移流が与える影響の LES 解析
代表者名（所属）	大竹 啓太（東京農工大学大学院 工学府）
利用システム名	Oakbridge-CX
実施期間	1 年
近年、省エネルギーのために電気モータやガスタービンなどの回転機械では冷却効果向上・摩擦抵抗低減が求められており、それらの実現のためには、回転機械内の流れにおける熱伝達および周・軸方向の摩擦抵抗の理解が重要となる。本研究では、回転機械内の流れを内壁が回転する同心二円筒間環状流路内の流れ（Taylor-Couette 流れ）に単純化し、軸方向の流れ（貫流）のある場合について熱および運動量輸送の Large EddySimulation（LES）解析を OpenFOAM により行う。そして、熱伝達および周・軸方向の摩擦抵抗に対し、先行研究が提案した、貫流がある場合の Taylor-Couette 流れの熱伝達および周・軸方向の摩擦抵抗に対する移流、分子拡散、乱流拡散の 3 項の寄与度を求める方法で評価を行う。内側円筒が回転する場合は Taylor 渦という渦が形成されるが、貫流がある場合の Taylor 渦の移流が流れ場に及ぼす影響を評価できていない。そこで、本研究では Taylor 渦を追跡し、Taylor 渦の移流の影響を評価する。	

課題名	ペアリング暗号に適した楕円曲線の探索
代表者名（所属）	照屋 唯紀（産業技術総合研究所 サイバーフィジカルセキュリティ研究センター）
利用システム名	Oakbridge-CX
実施期間	1 年
ペアリング暗号とは、特別な性質を満たす楕円曲線の上に構成できるペアリングと呼ばれる演算を利用した暗号技術を指す。ペアリングを用いると、有用な機能と高い効率性を持った暗号方式を構成可能であることが理論上示されている。しかし、実際に安全かつ実用的な性能を持つ実装を行うためには、十分な安全性強度を持ち高速に計算可能な「ペアリング暗号に適した楕円曲線」を使用する必要がある。本課題では、ペアリング暗号に適した様々な楕円曲線を大規模に探索するプログラムを開発し、実際に探索を行う。これにより、最良の楕円曲線の選択に貢献する事を目指す。	

課題名	クライオ電子トモグラフィーによる in situ 構造生物学
代表者名 (所属)	小田 賢幸 (山梨大学大学院 総合研究部医学域)
利用システム名	Reedbush-L
実施期間	1 年
超解像光学顕微鏡とクライオ電子顕微鏡によるタンパク質の三次元構造解析は近年、目覚ましい発達をしている。しかし両者の境界領域である、解像度 1~10 nm 程度の構造情報は、未だ古典的な解析方法に依存している現状がある。本研究ではクライオ電子トモグラフィーによる構造解析を主軸とする “in situ クライオ構造生物学” の方法論を確立することで、この情報ギャップを補完し、タンパク質複合体や細胞小器官の構造をより生理的な条件下で明らかにすることを目的とする。クライオ電子トモグラフィーを用いて撮影した画像データは試料あたり 2TB 以上となり、大量の二次元画像から分子の三次元構造を再構成するためには、大きなマシンパワーが必要となる。本研究では GPU の活用により画像処理速度を大幅に向上させたオープンソフトウェア Relion を Reedbush-L システム上で走らせることにより、より多くの画像データからより高い解像度の再構成像を得ることを目指す。	

課題名	動的膜の分子動力学計算
代表者名 (所属)	小山 志穂里 (株式会社 豊田中央研究所)
利用システム名	Oakbridge-CX
実施期間	1 年
環境に対する関心が高まる中、省エネルギーな分離を達成する手段として分離膜が注目されている。通常、分離膜は海水の淡水化や気体分離などに利用されるが、これまでの研究で、分離膜の考え方を応用することにより空間の非対称に起因する歩行者の自己組織化現象が説明できることがわかった。これによりこれまで議論されてきた以外の分野でも分離膜とのアナロジーが考えられることが示唆され、分離のプロセスに影響する因子を詳細に調べることは膜工学のみでなく他の分野で見られる現象の理解にも寄与する可能性がある。分離特性に関する先行研究の一つに膜の特性が時間変動する動的分離膜の研究があり、この研究では臨界周波数の前後で膜を介した物質の浸透の速さが変化することがわかっている。しかし、先行研究は濃度に対する偏微分方程式を解いたものであり粒子系での解析は行われていない。また浸透の特性は対象となる粒子の特性、熱揺らぎの大きさ等、他の様々な要因にも影響を受けるため、これらのより詳細な研究が必要である。したがって、本研究では分子動力学のアプローチにより、粒子系でも同様の現象が見られるかどうか研究を行う。	

課題名	南極海における棚氷融解のフィードバック現象の解明
代表者名（所属）	木村 仁（海洋研究開発機構）
利用システム名	Oakforest-PACS
実施期間	1 年
地球温暖化に関連して氷床が注目されて久しいが、その動態は不明な部分が多い。その理由の一つに、棚氷・海洋の相互作用の理解が容易でないことが挙げられる。棚氷は氷床が陸から海洋へと突き出た部分で、海に浮いており、海洋との接触面で融解されるので、新しい水塊（融解水）が形成され、この融解水は既存の水塊と混合しながら外洋へ放出される。そして、棚氷の減少は上流部から流動してくる氷床の海洋流出を促進し、海面上昇を引き起こす。棚氷融解の増減は、全地球的な気候変動の重要な要因の一つである。本課題では、南極海のモデルを使い棚氷の下面に流入する海水の温度が融解水の動態に与える影響を解析するとともに、融解水の鉛直分布が次年度の棚氷融解に及ぼす役割を明らかにする。これらの知見を気候モデルに反映させることにより海面上昇及び海面上昇に伴う気候変動の予測精度向上が見込まれ、地球環境への適応政策の実現性の向上が期待される。	

課題名	分子動力学シミュレーションによる自己炎症性疾患に関わるタンパク質の研究
代表者名（所属）	大滝 大樹（長崎大学大学院 医歯薬学総合研究科）
利用システム名	Reedbush-H
実施期間	1 年
自己炎症性疾患は主に自然免疫系の異常により発症し、周期的な発熱や関節・皮膚・骨・眼などの部位に炎症を伴う比較的新しい疾患群である。近年、原因遺伝子、炎症に関わる分子の構造や機能、炎症のメカニズムが少しずつ明らかにされてきたが、不明な点も多く残されている。本研究では、自己炎症性疾患について分子論的な知見を得ることを目的とし、自己炎症性疾患に関わるタンパク質について分子動力学計算を行う。野生型・変異型のモデルについて計算し、変異が疾患に及ぼす影響を調べる。	

課題名	構造ガラスにおける限界安定性の研究
代表者名（所属）	島田 真成（東京大学 総合文化研究科）
利用システム名	Oakbridge-CX
実施期間	1 年
液体を急冷すると、構成粒子の配置がランダムなまま固体のように固まり、ガラスとなる。ガラスは通常の固体（結晶）と異なり、微小な変形で破壊されてしまうという限界安定性と呼ばれる性質を持ち、その理解はガラス研究の最重要課題の一つである。近年の研究によって、限界安定性を特徴づける特異な力学応答がよく調べられてきているが、そもそもなぜガラスが限界安定なのかという問題はほとんど未解決である。本課題では、液体が急冷される過程を数値実験で直接追跡することによって、ガラスがいかにして限界安定性を獲得するかを調べる。そのためには、巨大なガラス配置を大量に用意し急冷過程を調べるという大規模シミュレーションが要求される。具体的には、急冷途中の粒子配置に対して振動モード解析を行い、配置の中でエネルギー的に不安定な場所、つまり壊れやすい場所の分布や構造を調べる。私はこれまで、凍結した後のガラス配置に対して振動モード解析を用いた数値的な研究を行ってきた。そこで培われた振動モードを調べる手法を本課題でも用いることによって、凍結した後のガラス配置とその直前の配置を比較し、それに基づいて液体がガラスとなる過程を理解する。	

課題名	コミュニケーションにおける情報量と音声的余剰性の関係
代表者名（所属）	橋本 大樹（東京大学 教養学部）
利用システム名	Oakbridge-CX
実施期間	1 年
語の音声実現は様々に変化する。同じ単語であっても丁寧に発音され、その持続時間が長くなることがあれば、粗雑に発音されて持続時間が短く発音されることもある。こうした音声実現の変化は、語の持つ情報量に影響されることが知られている。具体的には“情報量の高い語は丁寧に発音される一方で、情報量の低い語は粗雑に発音される”ということが示されてきた。語の持つ情報量と発音の丁寧さは、多くの場合持続時間の長短を議論することが多かった。本研究では語の持つピッチ値とフォルマント値が、情報量にどのような影響を受けるかを明らかにする。これにより Information Theory の仮説を検証し、話者が言語産出においてどのように情報を処理しているかを明らかにすることができる。	

課題名	第一原理計算と機械学習を用いた新物質の合成条件予測
代表者名（所属）	倉田 伊織（東京大学 工学系研究科）
利用システム名	Reedbush-H Reedbush-L
実施期間	半年
本研究では、計算による物質設計を実現するために、化学式と合成条件から熱力学的に安定な結晶構造を予測する。このことは物性研究における長年の目標であったが、$O(N^3)$ 程度の第一原理計算によるエネルギー及び力の評価が多数回必要であるため、これまで実現してこなかった。しかし近年、機械学習による第一原理計算結果の高精度高速な予測が可能になったため、効率よく安定構造を探索できると期待される。本課題では GPU を活用し、第一原理計算自体も高速に行いつつ、アクティブラーニングにより上記事項を実現する。また、遷移金属ペロブスカイト AMO3 系列を対象とすることで、既知物質で手法の正当性を確認しつつ、新物質の開拓も行う。	

課題名	磁気単極子秩序形成の有限温度解析
代表者名（所属）	奥村 駿（東京大学 工学系研究科）
利用システム名	Reedbush-H Reedbush-L
実施期間	半年
近年、ある種の金属磁性体において、有効的に磁気単極子の規則配列と見做すことができる特異な磁気テクスチャが実験的に観測され注目を集めている。磁気単極子の持つ粒子的な性質から、不揮発性メモリなど次世代型デバイスへの応用が期待されているが、その安定性についてはいまだ明らかにされていない。申請者はこれまで、金属中を電子が運動する効果を取り入れた理論模型を数値的なアプローチによって解析することで、磁気単極子を伴う磁気秩序を得ることに成功している。本研究課題では、この研究を発展させ、有限温度における磁気単極子の安定性を調べることを目的として、十分に大きなシステムサイズをもった系に対して GPU を活用した大規模並列計算を行う。特に、磁場下において磁気単極子の数がどのように変化するかを定量的に解析し、単極子と反単極子の対消滅によるトポロジカルな相転移現象を含めた詳細な有限温度相図を解明する。また、磁気異方性や反対称交換相互作用を取り入れた、より現実的な模型に対してもシミュレーションを行うことで、磁気単極子の変形や安定性の変化などについて明らかにする。	

課題名	実機単段遠心ブロワで生じるサージ点近傍非定常失速現象の大規模圧縮性 LES 解析
代表者名（所属）	塚本 和寛（日立製作所 研究開発グループ機械イノベーションセンタ）
利用システム名	Oakbridge-CX
実施期間	1 年
遠心圧縮機やブロワは、石油精製プラントなどの各種プラントの心臓部として、プロセスガスの圧縮や過給機として用いられており、工業上極めて重要なターボ機械のひとつである。一般的にターボ機械を含むシステムでは、システムの作動流量が減少すると、流れの不安定現象である旋回失速やサージングと呼ばれる非定常脈動現象が生じる。非定常脈動現象が生じると、システム内を流れる流速や圧力が非定常的に大きく変動するため、圧縮機を構成する羽根車やその周囲の配管に流体力が作用し、ターボ機械の運転が不可能となる。そのため、これらの脈動現象は回避することが不可欠である。しかし、これらの現象は非定常な複雑な流れ場において生じる現象であり、未だに数値解析によるその予測精度は低く、モデル機による実験計測での評価が主である。そこで本研究では、実機の単段遠心ブロワを対象に大規模非定常圧縮性 LES（Large Eddy Simulation）解析を行い、旋回失速に起因する圧力脈動が発生した場合においてブロワ内で生じる羽根車逆流の非定常流動メカニズムを解明し、圧縮機空力設計の高度化を実現することを目的とする。	

課題名	全ゲノム配列情報と画像クラスタリング技術の融合による希少難治性疾患の層別・分類手法の開発
代表者名（所属）	川口 修治（京都大学大学院 医学研究科附属ゲノム医学センター）
利用システム名	Reedbush-H
実施期間	1 年
希少難治性疾患の多くは遺伝的要因がその発症に起因することが知られている。しかしながらゲノム情報のみを用いた解析では発症要因となる遺伝子やその変異を同定できないことが多い。その原因の一つに症例数の少なから十分な研究が進まず、明確な診断基準が確立せず、疾患分類や定義が不明瞭なままの疾患が多いことにある。これらの問題に対して、ゲノム情報に、診断に用いる画像情報等を加味して解析することで疾患をより詳細に分析することが期待できる。そこで、本課題では deep learning による画像クラスタリングとゲノム解析手法を組み合わせることで、原因遺伝子やその変異を基準とした疾患の再層別・再分類を可能とする手法の開発を目指す。指定難病の一つである網膜色素変性をモデル疾患に、眼底画像とその全ゲノム解析情報を用いて開発を遂行する。開発モデルは汎用的に設計することで、多くの難治性疾患への適用を広げ、得られた結果を通じて遺伝子診断率の向上や疾患発症機序の解明に繋げる。	

課題名	革新的抗血小板薬創製に向けた第 XI 因子・トロンビンと血小板膜糖蛋白 GPIb α および von Willebrand 因子複合体の結合エネルギー計算
代表者名 (所属)	中山 正光 (東海大学 内科学系)
利用システム名	Oakforest-PACS
実施期間	1 年
抗血小板薬は、血栓イベントを抑制するため血小板の機能を阻害するが、その効果が強すぎるため出血の副作用が問題となっている。申請者は、実証実験にて血小板接着に必須な血小板膜糖蛋白 GPIb α と von Willebrand 因子 (VWF) の相互作用に血液凝固因子の第 XI 因子 (FXI) とトロンビンが影響を与え、血栓形成に寄与するという知見を得た。本研究では、GPIb α-VWF の MD モデルに FXI、トロンビンをそれぞれ組み込み、その結合エネルギーを分子動力学シミュレーションで予測することを目的とする。すでにそれぞれの再安定構造の計算は完了しており、本課題では Potential Mean of Force (PMF) の計算を行なう。PMF のピーク位置や各拘束点における安定構造から抗血小板薬の創薬標的モデルを決定する。本課題を通じて設定した創薬標的モデルは、低分子化合物の in silico スクリーニングに使用する。申請者が実証実験を行い、低分子化合物を探索する予定である。	

課題名	汎関数繰り込み群による量子スピン液体候補物質の物性解明
代表者名 (所属)	福井 毅勇 (東京大学大学院 理学系研究科)
利用システム名	Reedbush-H Oakbridge-CX
実施期間	1 年
本研究課題では、2006 年に提案された Kitaev 模型で予言された量子スピン液体状態が実現している候補物質の物性や、候補物質の実験結果を、汎関数繰り込み群法を用いることで解き明かす。Kitaev 模型は可解模型であり、厳密に基底状態が量子スピン液体であり、Majorana 粒子的な励起があることが示されている。2018 年に Kitaev 模型の候補物質で、Majorana 粒子的励起の痕跡が実験で明確に捉えられた。候補物質では Kitaev 模型で予言されたような量子スピン液体が実現している期待が大きく高まり、研究は次の段階を迎えている。今までは Kitaev 模型の可解性を利用した計算法や実験結果の解釈がなされてきたが、Kitaev 模型の候補物質には、実際は Kitaev 模型に含まれない非可解な効果が存在する。それらの効果により Kitaev 模型で予言された量子スピン液体状態の形成が阻まれていないか、また、どのような物質なら量子スピン液体状態が安定であるかを明らかにし、物質合成・物質探索の指針を明らかにする必要がある。本利用課題では、汎関数繰り込み群計算を大規模並列実行することで上述の問題に取り組む。	

課題名	FDPS を用いた土/水連成数値モデルの開発に関する研究
代表者名（所属）	平田 紗椰（神戸大学大学院 工学研究科）
利用システム名	Oakforest-PACS
実施期間	1 年
近年、豪雨や大雨による土砂災害が頻発している。土砂災害は生活に大きな被害をもたらす災害であるが、その被害を減らすために事前に危険箇所を特定するだけでなく、被害がどの程度起こるのかをシミュレーションできるようになるということが重要である。そのためには実斜面での規模でシミュレーションを行う必要があるが、実斜面を想定すると非常に大きなシミュレーションコストが掛かってしまい、従前では実験室模型の再現が限界であった。しかし大型計算機を使って並列計算を行うことで実スケールの大規模計算を図ることが可能となる。本研究では連続体を有限個の粒子によって表し、連続体の挙動を粒子の運動によって計算する粒子法を用いて、粒子数約 1000 万個の斜面崩壊シミュレーションを行う。さらに既往研究では土骨格と間隙水を完全に 2 つに分ける二相混合体で考えていたものを、二相を有する粒子群で考える土/水連成解析という手法を用いて斜面崩壊シミュレーションを行う。実地盤規模での土水連成シミュレーションを行うことで、これから起きるであろう土砂災害の被害想定を行うことができると見込まれる。	

課題名	微視的界面構造に基づくナノコンポジットの機械的特性の発現メカニズム
代表者名（所属）	屋山 巴（工学院大学 先進工学部）
利用システム名	Oakforest-PACS
実施期間	1 年
本研究の目的は、CNT/樹脂からなるナノコンポジットの機械的特性の発現機構を界面の原子配置および電子状態に基づいて解明することである。このために、①第一原理電子状態計算 (DFT)、②分子動力学手法 (MD)、③機械学習の、複数の理論計算手法を効果的に融合させた独自の研究を展開する。具体的には、CNT の引き抜きに必要な最大応力を MD で定量的に評価する。同時に、界面近傍の応力分布を可視化し、応力に大きく寄与する界面構造要素の微視的な構造を抽出する。この微視的構造に基づいて DFT による電子状態計算を行うことで、界面の化学結合状態を明らかにできる。機械学習は、DFT と MD を連携する役割に用いられる。以上のように、材料全体の強度が生じる機構を、微視的な構造と電子状態に基づいて明らかにすることによって、最終的にナノコンポジットの機械的特性の評価指針を確立、提案する。	

課題名	大質量星団形成シミュレーション
代表者名（所属）	藤井 通子（東京大学大学院 理学系研究科）
利用システム名	Oakbridge-CX
実施期間	1 年
星は分子雲と呼ばれる低温の星間ガスから生まれる。星の多くは星団（数千から数百万個の星の集まり）として集団で生まれるため、分子雲からの星団形成過程を明らかにすることは、星形成過程の解明に繋がる重要な研究テーマである。特に、大質量星団は、星の進化を経て、ブラックホール連星を形成し、これらが合体することで重力波を出すため、現在、非常に注目されている。これまでの星団の形成・進化のシミュレーションは、高分解能かつ、様々な物理現象（星間磁場や大質量星による輻射や質量損失によるフィードバックなど）をより精密に扱う方向に進んでいた。しかし、このような超高分解能シミュレーションでは、10^3 太陽質量程度の比較的小さな星団しか扱うことができない。その一方、10^4 太陽質量を超えるような大質量星団がブラックホール連星形成においては重要であり、さらに、そのような大質量星団の形成過程は、未だ謎が多い。本研究課題では、新規開発の流体+重力多体計算コードを用い、これまでより大質量の星団形成シミュレーションを星同士の近接遭遇を分解して行い、大質量星団の形成・進化過程を明らかにする。	

課題名	波形インバージョンによる地球マントル最下部の詳細構造推定
代表者名（所属）	鈴木 裕輝（東京大学大学院 理学系研究科）
利用システム名	Oakforest-PACS
実施期間	1 年
地球マントル（以下単にマントル）の最下部数 100 km は D'' 領域と呼ばれ、この領域は固体岩石のマントルと液体鉄合金の外核の境界（CMB）直上の熱的及び化学組成的境界領域である。地温勾配とマントル物質のソリダスが交わる可能性がある領域であるので、組成分化を起こすマグマが定常的に存在する可能性が高い。そのため D'' 領域は、マントルにおいて熱及び化学組成の不均質を生み出す主要な領域であると考えられている。従ってマントルのダイナミクスを観測情報から制約するためには、境界領域の一つである D'' の熱・化学組成不均質を地震学的不均質構造として定量的に推定することが重要である。しかし比較的強い低速度異常の詳細なサイズ及び低速度の程度は既存の構造推定手法では困難であった。また正確な理論地震波形の計算も必要であったが、短周期までの計算は計算資源の問題から困難であった。そこで本申請研究では地震波形に含まれる情報を余すことなく活用できる波形インバージョン手法と、スペクトル要素法による理論地震波形計算ソフトウェア SPECFEM3D_GLOBE を用いて D'' 領域の低速度異常の詳細な構造推定可能性を定量的に見積もる。	

課題名	Weather Forecasting: Physical Model Acceleration using Machine Learning and High-Performance Computing
代表者名 (所属)	Maha Mdini (RIKEN RCCS)
利用システム名	Reedbush-L
実施期間	半年
Weather forecasting relies on complex physical models allowing to simulate the evolution of climate variables. These models, however accurate they may be, have a high computational cost. To alleviate this cost, we apply simple physical models to predict low resolution data. Then, we use neural networks to map low resolution predictions to high resolution ones. In our implementation, we take advantage of the super-computing capabilities. We aim to apply this approach to QG and SCALE models.	

課題名	半古典輸送理論に基づいた電子・光融合シミュレーション
代表者名 (所属)	谷 水城 (東京大学大学院 工学系研究科)
利用システム名	Oakbridge-CX
実施期間	1 年
2018 年度のノーベル物理学賞を受賞した「高強度超短パルスが発生する方法」すなわちチャープパルス増幅の発明をきっかけとして、近年、高強度超短パルスレーザーの技術が進歩し、高強度場物理・アト秒科学・レーザー加工などの、物質と高強度レーザーの相互作用の解明および産業応用が進められている。しかしながらレーザー加工のプロセスなどの物質と高強度レーザーの相互作用は学理構築が未だ 途上であり、完全なシミュレーションを行うことはできない。これは、レーザー加工に伴う諸現象が、固体物理とプラズマ物理、流体力学等にまたがる非線形・非平衡の複雑なもので時空間的にもマルチスケールな現象だからである。本研究課題では、レーザー加工学理に基づいた新奇シミュレーション手法の開発により加工パラメータ予測を行う学理 CPS 型レーザー加工シミュレータのプロトタイプ開発を目指す。	

課題名	機械学習による時系列データの学習過程の解明
代表者名 (所属)	中井 拳吾 (東京大学大学院 数理科学研究科)
利用システム名	Reedbush-H
実施期間	1 年
時系列データからモデリングを行い、未来の時系列データを予想することは科学的にも実用上も重要である。例えば、ある期間の気象データから機械学習によりモデリングを行い、将来の天気を予想しようというものである。しかし、一般に深層学習などの機械学習ではその構造の複雑さゆえに学習そのものの考察が困難である。このため、機械学習では何を学習しているのか、また、どのように学習しているのかということの多くはいまだに明らかにされていない。一方で、申請者が用いる学習手法は内部構造がシンプルな構造であり、学習過程を考察することが容易である。そこで、本研究の目的は、機械学習ではどのようなことが学習可能で、どのように学習しているかという学習過程を調べることである。特に、力学系構造に注目して考察を行う。	

課題名	流動及び岩盤力学の逆解析により地層水理パラメータの推定
代表者名（所属）	張 毅（地球環境産業技術研究機構）
利用システム名	Oakbridge-CX
実施期間	1 年
浸透率（または透水係数）は、地下水の挙動を制御する、または地下水をモデリングする際の最も重要な係数の一つである。帯水層テストの地層の変形には、多孔質弾性体中の流動・変形連成過程による浸透率の情報が含まれる。本研究では帯水層の揚水試験において分布型光ファイバーひずみ検知（DFOSS）ツールによって測定したデータを使用し、多孔質弾性変形連成モデルを使用して、帯水層におけるファインスケールの浸透率を逆解析する。得られた浸透率情報は、地下水のモデリング、管理において有益である。	

課題名	Numerical simulation of deepwater oil blowout: crossflow effect
代表者名（所属）	Daniel Cardoso Cordeiro（大阪大学大学院 基礎工学研究科）
利用システム名	Oakforest-PACS
実施期間	1 年
Although ten years have passed since the Gulf of Mexico oil blowout, there is still a lack of consolidated information regarding deepwater blowouts due to the lack of experimental data. In order to further understand this flow and uncover the physics behind it, we will use numerical simulations to study the droplet size distribution in the case of an oil jet under water crossflow. Our objective is to develop a faster and accurate method to predict the oil droplet sizes and its fate underwater.	

課題名	散開星団起源ブラックホール連星の形成と特徴
代表者名（所属）	熊本 淳（東京大学 理学系研究科）
利用システム名	Reedbush-L
実施期間	1 年
LIGO による初の重力波直接検出以降、連星ブラックホール合体による重力波検出が続いている。我々はこれまでの研究において、散開星団特有の連星ブラックホール形成過程として、星団内で重い主系列星の連星が形成され、連星ブラックホールに進化する過程を発見した。さらに 2019 年度までの我々の計算では、近傍での散開星団起源の連星ブラックホール合体の合体率を求めるために、金属量が異なる星団について、重力 N 体シミュレーションコード NBODY6++GPU を用いて星団の進化を計算した。また、各金属量の星団が形成される典型的な宇宙年齢における星形成率密度を考慮することで、近傍での連星ブラックホールの合体率を推定した。その結果、散開星団起源の連星ブラックホールの合体率は重力波観測の結果とよく一致していることを発見した。そこで、我々は次の課題として連星ブラックホールのスピンについて調べる。低質量星団起源の連星ブラックホールは観測で得られるブラックホール連星のスピン分布を説明できるかどうかについて、シミュレーションを行い、議論することを計画している。	

課題名	GPU 加速 DNS コードを用いた正方形ダクト乱流の直接数値計算
代表者名（所属）	関本 敦（大阪大学 基礎工学研究科）
利用システム名	Reedbush-L
実施期間	1 年
正方形ダクト内乱流の平均流には、主流に垂直方向の二次流れが生成する。これは、乱流中の大小さまざまなスケールの渦が側壁の影響を受け、それらの統計的振る舞いに異方性が生まれるためである。ナビエ・ストークス方程式をモデルを使わずに解く直接数値計算 (DNS) によって精度の良い検証データベースを作成することは、乱流の統計法則の基礎的研究、及びより高精度な乱流モデルの開発のために重要である。本研究では、GPU デバイスを利用して、高レイノルズ数のダクト乱流の高精度数値計算を行い、乱流渦の階層構造と二次流れの関連性について着目する。	

課題名	Couette-Poiseuille 流れにおける大規模構造の解析
代表者名（所属）	関本 敦（大阪大学 基礎工学研究科）
利用システム名	Oakforest-PACS
実施期間	1 年
逆圧力勾配のある壁面乱流は、飛行機やガスタービンなどの翼形上において見られ、その乱流統計法則に及ぼす圧力勾配の影響については未解明であり、乱流モデルの精度も良くない。本研究では、逆圧力勾配がある壁面乱流モデルとして、Couette-Poiseuille 流れに着目する。この流れは、壁面駆動の Couette 流れに圧力勾配をかけることで、一方の壁面で逆圧力勾配がかかり、流れが剥離する。これによって、剥離点付近での乱流構造と流れの剥離機構について詳細な知見が得られるものと考えられる。本研究では、Couette-Poiseuille 流れの直接数値計算 (DNS) を行い、様々な圧力勾配下での壁面乱流における大規模構造について解析する。	

課題名	随伴変数法とベイズ最適化による Top-Seeded Solution Growth 法を用いた SiC 結晶成長における断熱材分布最適化
代表者名（所属）	竹原 悠人（大阪大学大学院 基礎工学研究科）
利用システム名	Reedbush-H
実施期間	1 年
シリコンカーバイド (SiC) 結晶は高い熱伝導率、幅広いバンドギャップといった優れた性能から注目を集めるパワー半導体である。パワー半導体としての性能を保証するために、欠陥の少ない高品質 SiC 結晶を作製する必要があり、高品質 SiC 結晶の作製方法として Si と C から成る溶液から作製する Top-Seeded Solution Growth (TSSG) 法がある。我々のグループは TSSG 法において溶液表面における温度差より駆動されるマランゴニ対流が結晶近傍で支配的となり、結晶成長速度を不均一化させることを解明した。このマランゴニ対流を抑制するために溶液内温度分布を最適化する必要がある。温度分布を最適化するためのパラメータとしてはるつぽ周りに配置された断熱材の熱伝導率を選択した。しかし、熱伝導率の分布は無限自由度を持つパラメータであり最適化が困難である。そこで本研究では随伴変数法とベイズ最適化を組み合わせることで、無限自由度を持つパラメータの実現可能な大域的最適化に取り組む。	

課題名	渦電流-熱伝導連成解析システムの構築と包括的な高速化・高度化
代表者名（所属）	杉本 振一郎（八戸工業大学）
利用システム名	Oakforest-PACS
実施期間	1 年
並列電磁界解析ソルバ ADVENTURE_Magnetic (AdvMag) の高周波電磁界解析機能において医療応用を見据えた高速化・高度化に取り組み、2018 年度の Oakforest-PACS スーパーコンピュータシステム「大規模 HPC チャレンジ」にて 1、280 億自由度の数値人体モデル（解像度 0.25 mm）を 15 分で解析することに成功した。しかし、高周波電磁界解析に比べて収束性が非常に悪い渦電流解析ではいまだ 10 億自由度程度の解析実績しかなく、大規模な電磁界-熱伝導連成解析の応用範囲が狭かった。本課題では、渦電流解析に高周波電磁界解析で蓄積したノウハウを導入することで収束性の改善、および高速化に取り組み、計算時間の短縮と、扱える自由度を増やすことを目指す。また、AdvMag の渦電流解析機能と並列熱伝導解析ソルバ ADVENTURE_Thermal を用いた連成解析システムを構築してその高速化・高度化に取り組むことで、医療分野だけでなく工業分野などへも 1 億自由度規模の電磁界-熱伝導連成解析システムの応用分野を広げる。	

以上

7大学スーパーコンピュータ比較表

大学名	北海道大学	東北大学	東京大学	名古屋大学	京都大学	大阪大学	2020年4月現在	
							九州大学	
中央処理装置 (理論演算性能、 メモリーサイズ)	PRIMERGY CX2550 M4, PRIMERGY CX400 M4 (3.084PFLOPS, 376.5TB)	NEC SX-ACE (706.5TFLOPS, 160TB)	S&G Reedbush-U (508.03TFLOPS, 105TB)	(2020年7月現在) FUJITSU FX1000 (7.782PFLOPS, 72TiB)	CRAY XC40 (5.48PFLOPS, 196.9TB)	NEC SX-ACE (282TFLOPS, 64TB)	ITO サブシステムA (6.91PFLOPS, 384TB)	
	PRIMERGY CX1640 M1, PRIMERGY CX600 M1 (0.877PFLOPS, 31.5TB)	NEC LX 406Re-2 (31.3TFLOPS, 8.5TB)	S&G Reedbush-H (1418.2TFLOPS, 30TB)	FUJITSU CX2570M5 (7.489PFLOPS, 82.875TiB)	Cray CS400 2820XT (1.03PFLOPS, 106.3TB)	NEC OCTOPUS (1.463 TFLOPS, 72.9 TB)	ITO サブシステムB (3.05PFLOPS, 49TB)	
			S&G Reedbush-L (1435.3TFLOPS, 16TB)	FUJITSU CX2570M5 (7.489PFLOPS, 82.875TiB)	Cray CS400 4840X (42.4TFLOPS, 48.0TB)		ITO 基本フロンティア (0.42PFLOPS, 61TB)	
			FUJITSU Oakforest-PACS (25.004PFLOPS, 897TB)	HPE Superdome Flex (77.414TFLOPS, 48TiB)			ITO 大容量フロンティア (49.6TFLOPS, 48TB)	
総理論演算性能	3.96PFLOPS	737.8TFLOPS	34.976PFLOPS	15.886PFLOPS	6.55PFLOPS	1.75 PFLOPS	10.43 PFLOPS	
主メモリーサイズ計	408TB	168.5TB	1,305TB	240TiB	351.2TB	136.9 TB	542 TB	
ディスク容量	16PB	3PB	53.4PB	30.44PB	24PB	5.1 PB	24.6 PB	
2019年度 年間借料	約 7.6億円	約 12.4億円	約21億円	約7.0億円	約 8.5億円	約 10.7億円	約 11.1億円	

7 大学スーパ一コンピュータ利用負担金表1 (北海道大学)

大学名	北海道大学	2020年4月現在
中央処理装置 (メモリーサービス)	スーパーコンピュータ PRIMER5 C2550 M4, PRIMER5 C3000 M4 (750, 570) PRIMER5 C3160 M4, PRIMER5 C3000 M4 (31, 570) インターネットクラウド PRIMER5 C2550 M4 (2,560×8) PRIMER5 C3000 M4 (2,560×8) PRIMER5 C2550 M4 (2,560×8×4)	スーパーコンピュータ 年額 24,000円 月額 2,000円 年額 84,000円 月額 7,000円 年額 108,000円 月額 9,000円 年額 20,000円 月額 1,667円 年額 50,000円 月額 4,167円 年額 12,500円 月額 1,042円 年額 22,680円 月額 1,890円 年額 500円 月額 41.67円 年額 1,667円 月額 138.89円 年額 3,996円
基本サービス	大規模計算システム利用申請書の利用者を登録において ただし、学生においては 1台につき スーパーコンピュータ利用によるバッチ処理において 利用モード (標準) サブシステムA Aコース : 演算時間 3,000,000秒まで Bコース : 演算時間 150,000,000秒まで Cコース : 演算時間 250,000,000秒まで サブシステムB Bコース : 演算時間 3,000,000秒まで Cコース : 演算時間 150,000,000秒まで Dコース : 演算時間 250,000,000秒まで Eコース : 演算時間 500,000,000秒まで サブシステムC Cコース : 演算時間 3,000,000秒まで Dコース : 演算時間 150,000,000秒まで Eコース : 演算時間 250,000,000秒まで Fコース : 演算時間 500,000,000秒まで サブシステムD Dコース : 演算時間 3,000,000秒まで Eコース : 演算時間 150,000,000秒まで Fコース : 演算時間 250,000,000秒まで Gコース : 演算時間 500,000,000秒まで Hコース : 演算時間 1,000,000,000秒まで Iコース : 演算時間 2,000,000,000秒まで Jコース : 演算時間 4,000,000,000秒まで Kコース : 演算時間 8,000,000,000秒まで Lコース : 演算時間 16,000,000,000秒まで Mコース : 演算時間 32,000,000,000秒まで Nコース : 演算時間 64,000,000,000秒まで Oコース : 演算時間 128,000,000,000秒まで Pコース : 演算時間 256,000,000,000秒まで Qコース : 演算時間 512,000,000,000秒まで Rコース : 演算時間 1,024,000,000,000秒まで Sコース : 演算時間 2,048,000,000,000秒まで Tコース : 演算時間 4,096,000,000,000秒まで Uコース : 演算時間 8,192,000,000,000秒まで Vコース : 演算時間 16,384,000,000,000秒まで Wコース : 演算時間 32,768,000,000,000秒まで Xコース : 演算時間 65,536,000,000,000秒まで Yコース : 演算時間 131,072,000,000,000秒まで Zコース : 演算時間 262,144,000,000,000秒まで AAコース : 演算時間 524,288,000,000,000秒まで ABコース : 演算時間 1,048,576,000,000,000秒まで ACコース : 演算時間 2,097,152,000,000,000秒まで ADコース : 演算時間 4,194,304,000,000,000秒まで AEコース : 演算時間 8,388,608,000,000,000秒まで AFコース : 演算時間 16,777,216,000,000,000秒まで AGコース : 演算時間 33,554,432,000,000,000秒まで AHコース : 演算時間 67,108,864,000,000,000秒まで AIコース : 演算時間 134,217,728,000,000,000秒まで AJコース : 演算時間 268,435,456,000,000,000秒まで AKコース : 演算時間 536,870,912,000,000,000秒まで ALコース : 演算時間 1,073,741,824,000,000,000秒まで AMコース : 演算時間 2,147,483,648,000,000,000秒まで ANコース : 演算時間 4,294,967,296,000,000,000秒まで AOコース : 演算時間 8,589,934,592,000,000,000秒まで APコース : 演算時間 17,179,869,184,000,000,000秒まで AQコース : 演算時間 34,359,738,368,000,000,000秒まで ARコース : 演算時間 68,719,476,736,000,000,000秒まで ASコース : 演算時間 137,438,953,472,000,000,000秒まで ATコース : 演算時間 274,877,906,944,000,000,000秒まで AUコース : 演算時間 549,755,813,888,000,000,000秒まで AVコース : 演算時間 1,099,511,627,776,000,000,000秒まで AWコース : 演算時間 2,199,023,255,552,000,000,000秒まで AXコース : 演算時間 4,398,046,511,104,000,000,000秒まで AYコース : 演算時間 8,796,093,022,208,000,000,000秒まで AZコース : 演算時間 17,592,186,044,416,000,000,000秒まで BAコース : 演算時間 35,184,372,088,832,000,000,000秒まで BBコース : 演算時間 70,368,744,177,664,000,000,000秒まで BCコース : 演算時間 140,737,488,355,328,000,000,000秒まで BDコース : 演算時間 281,474,976,710,656,000,000,000秒まで BEコース : 演算時間 562,949,953,421,312,000,000,000秒まで BFコース : 演算時間 1,125,899,906,842,624,000,000,000秒まで BGコース : 演算時間 2,251,799,813,685,248,000,000,000秒まで BHコース : 演算時間 4,503,599,627,370,496,000,000,000秒まで BIコース : 演算時間 9,007,199,254,740,992,000,000,000秒まで BJコース : 演算時間 18,014,398,509,481,984,000,000,000秒まで BKコース : 演算時間 36,028,797,018,963,968,000,000,000秒まで BLコース : 演算時間 72,057,594,037,927,936,000,000,000秒まで BMコース : 演算時間 144,115,188,075,855,872,000,000,000秒まで BNコース : 演算時間 288,230,376,151,711,744,000,000,000秒まで BOコース : 演算時間 576,460,752,303,423,488,000,000,000秒まで BPコース : 演算時間 1,152,921,504,606,846,976,000,000,000秒まで BQコース : 演算時間 2,305,843,009,213,693,952,000,000,000秒まで BRコース : 演算時間 4,611,686,018,427,387,904,000,000,000秒まで BSコース : 演算時間 9,223,372,036,854,775,808,000,000,000秒まで BTコース : 演算時間 18,446,744,073,709,551,616,000,000,000秒まで BUコース : 演算時間 36,893,488,147,419,103,232,000,000,000秒まで BVコース : 演算時間 73,786,976,294,838,206,464,000,000,000秒まで BWコース : 演算時間 147,573,952,589,676,412,928,000,000,000秒まで BXコース : 演算時間 295,147,905,179,352,825,856,000,000,000秒まで BYコース : 演算時間 590,295,810,358,705,651,712,000,000,000秒まで BZコース : 演算時間 1,180,591,620,717,411,303,424,000,000,000秒まで CAコース : 演算時間 2,361,183,241,434,822,606,848,000,000,000秒まで CBコース : 演算時間 4,722,366,482,869,645,213,696,000,000,000秒まで CCコース : 演算時間 9,444,732,965,739,290,427,392,000,000,000秒まで CDコース : 演算時間 18,889,465,931,478,580,844,784,000,000,000秒まで CEコース : 演算時間 37,778,931,862,957,161,689,568,000,000,000秒まで CFコース : 演算時間 75,557,863,725,914,323,379,136,000,000,000秒まで CGコース : 演算時間 151,115,727,451,828,646,758,272,000,000,000秒まで CHコース : 演算時間 302,231,454,903,657,293,516,544,000,000,000秒まで CIコース : 演算時間 604,462,909,807,314,587,033,088,000,000,000秒まで CJコース : 演算時間 1,208,925,819,614,629,174,066,176,000,000,000秒まで 	

7 大学スーパーコンピュータ利用負担金表 2（東北大学・東京大学）

大学名		東北大学		東京大学	
中央処理装置 (メモリーバス)	MD	SS-ACT(100TB)		SGI	Redshift C115-q98 (12600x9100x20ノード×20 Redshift-U)
	SGI	LX 4000-r2(0.5TB)		SGI	Redshift C115-q98 (12600x9100x20ノード×20 Redshift-U)
				SGI	Redshift C115-q98 (12600x9100x20ノード×20 Redshift-U)
				SGI	Redshift C115-q98 (12600x9100x20ノード×20 Redshift-U)
【大学・学部利用】		Redshiftスーパーコンピュータシステム (Redshift-H, Redshift-L)		Redshiftスーパーコンピュータシステム (Redshift-H, Redshift-L)	
演算装置	利用ノード数(1日あたり)	利用ノード数(1日あたり)	利用ノード数(1日あたり)	利用ノード数(1日あたり)	利用ノード数(1日あたり)
	利用ノード数(1日あたり)	利用ノード数(1日あたり)	利用ノード数(1日あたり)	利用ノード数(1日あたり)	利用ノード数(1日あたり)
	利用ノード数(1日あたり)	利用ノード数(1日あたり)	利用ノード数(1日あたり)	利用ノード数(1日あたり)	利用ノード数(1日あたり)
	利用ノード数(1日あたり)	利用ノード数(1日あたり)	利用ノード数(1日あたり)	利用ノード数(1日あたり)	利用ノード数(1日あたり)
出力装置	利用ノード数(1日あたり)	利用ノード数(1日あたり)	利用ノード数(1日あたり)	利用ノード数(1日あたり)	利用ノード数(1日あたり)
	利用ノード数(1日あたり)	利用ノード数(1日あたり)	利用ノード数(1日あたり)	利用ノード数(1日あたり)	利用ノード数(1日あたり)
	利用ノード数(1日あたり)	利用ノード数(1日あたり)	利用ノード数(1日あたり)	利用ノード数(1日あたり)	利用ノード数(1日あたり)
	利用ノード数(1日あたり)	利用ノード数(1日あたり)	利用ノード数(1日あたり)	利用ノード数(1日あたり)	利用ノード数(1日あたり)
ファイルシステム	利用ノード数(1日あたり)	利用ノード数(1日あたり)	利用ノード数(1日あたり)	利用ノード数(1日あたり)	利用ノード数(1日あたり)
	利用ノード数(1日あたり)	利用ノード数(1日あたり)	利用ノード数(1日あたり)	利用ノード数(1日あたり)	利用ノード数(1日あたり)
	利用ノード数(1日あたり)	利用ノード数(1日あたり)	利用ノード数(1日あたり)	利用ノード数(1日あたり)	利用ノード数(1日あたり)
	利用ノード数(1日あたり)	利用ノード数(1日あたり)	利用ノード数(1日あたり)	利用ノード数(1日あたり)	利用ノード数(1日あたり)
備考	利用ノード数(1日あたり)	利用ノード数(1日あたり)	利用ノード数(1日あたり)	利用ノード数(1日あたり)	利用ノード数(1日あたり)
	利用ノード数(1日あたり)	利用ノード数(1日あたり)	利用ノード数(1日あたり)	利用ノード数(1日あたり)	利用ノード数(1日あたり)
	利用ノード数(1日あたり)	利用ノード数(1日あたり)	利用ノード数(1日あたり)	利用ノード数(1日あたり)	利用ノード数(1日あたり)
	利用ノード数(1日あたり)	利用ノード数(1日あたり)	利用ノード数(1日あたり)	利用ノード数(1日あたり)	利用ノード数(1日あたり)

7 大学スーパードコンピュータ利用負担金表 3 (東京大学)

東京大学つづき

- ・Reedbusch スーパーコンピュータシステムでは、スーパーコンピュータを無償、または通常利用に比べて安価な利用負担金で、一定期間試用できるトライアルユースを実施している。負担金等は以下を参照。

[illegible]

和

Oakcrest+PMS スーパーコンピュータシステム				
コース	価格金額 (税込)		ディスク容量	備考
	大枠・公共機関等	企業		
パーソナルコース	申込に付上り 最大で5台まで 5,000円 (100台) (8,400ノード時間)	申込に付上り 最大で5台まで 5,000円 (100台) (8,400ノード時間)	ディスク1台あたり 7work, 1TB 利用容量50GB	最大ノード数 308ノード 消費付金 1.00
グループコース	申込に付上り 最大で5台まで 5,000円 (100台) (8,400ノード時間)	申込に付上り 最大で5台まで 5,000円 (100台) (8,400ノード時間)	グループに付上り 7work, 1TB 利用容量50GB	最大ノード数 5,048ノード 消費付金 1.00
トータル追加	4,200円 (720ノード時間)	5,000円 (720ノード時間)		
ディスク追加		6,480円 (110台分)		1TB 単位で申込可

價

- [illegible]

- ・Oakforest+ACS スーパーコンピュータシステムでは、スーパーコンピュータを無償、または通常利用に比べて安価な利用負担金で、一定期間試用できるトライアルユースを実施している。負担金等は以下を参照。

トラファルガーハウス	基本情報等	付帯トアーン	デザイン量
バウツェン・ハウス (11ヶ月前まで)	申込せしめトアーン 5,600円 申込せしめトアーン 4,500円	1.100円/1時間 消費残額:1.00	Work 1TB /100B
グループ・ハウス (2,048ノードまで)	招待付メンバーシップ 11,300円 申込せしめトアーン 13,500円	6.400円/1時間 消費残額:1.00	グループ・Work 8TB /100B 利用(大企業・公共機関等) 制限なし(Home) 500B
グループ・ハウス (2,048ノードまで)	招待付メンバーシップ 申込せしめトアーン 5,600円 申込せしめトアーン 4,500円	1.100円/1時間 消費残額:1.00	グループ・Work 1TB /100B 利用(大企業) 500B

水

[illegible]

2020.4.1

7 大学スーパーパーコンピュータ利用負担金表 5 (京都大学・大阪大学)

大学名

京都大学

備考

1 利用料は、利用開始から利用終了までの期間を示す。インターネット、グループウェアは利用料なし。グループウェアを、別途追加した場合は、利用開始から利用終了までの期間を示す。利用開始から利用終了までの

2020年4月現在

7 大学スーパーコンピュータ利用負担金表 6（九州大学）

大学名		九州大学			
		IT0	IT10	IT10	IT10
中央処理装置 (メモリーサイズ)		サブシステムA (1200×2560)	サブシステムB (5040×128)	基本フロントエンド (5040×128)	大規模フロントエンド (12768×4)
区分	4ノード	月額：3,000円	1ノード 月額：2,200円	5ノード(80コア時間額) 月額：4500円	8ノード(128コア時間額) 月額：6,280円
	16ノード	月額：12,000円	4ノード 月額：8,800円	8ノード(128コア時間額) 月額：6,080円	12ノード(192コア時間額) 月額：10,600円
共有タイプ	64ノード	月額：48,000円		32ノード(64コア時間額) 月額：2,300円	
	128ノード	月額：96,000円			
	256ノード	月額：192,000円			
	4ノード	月額：34,000円	1ノード 月額：17,000円		
ノード固定タイプ	16ノード	月額：96,000円			
	64ノード	月額：384,000円			
公衆型 フロントエンド		無料	無料	無料	無料
ストレージ		10TB 月額：750円 100TB 月額：3,500円			
備考		・上記の金額は消費税を含む。 ・1ヶ月未満の利用期間については、当該利用期間を1ヶ月とみなす。			
区分	4ノード	月額：3,000円	1ノード 月額：2,200円	5ノード(80コア時間額) 月額：4,200円	8ノード(128コア時間額) 月額：5,900円
	16ノード	月額：12,000円	4ノード 月額：8,800円	8ノード(128コア時間額) 月額：6,080円	12ノード(192コア時間額) 月額：10,500円
共有タイプ	64ノード	月額：48,000円		32ノード(64コア時間額) 月額：2,300円	
	128ノード	月額：96,000円			
	256ノード	月額：192,000円			
	4ノード	月額：34,000円	1ノード 月額：17,000円		
ストレージ	10TB	月額：750円	10TB 月額：750円		
	100TB	月額：3,500円	100TB 月額：3,500円		
備考		・上記の金額は消費税を含む。 ・1ヶ月未満の利用期間については、当該利用期間を1ヶ月とみなす。			
発行（更新） 年月日		2019.10.1			

スーパーコンピュータ利用による成果報告 (2019 年)

利用者の皆様には、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（論文、口頭発表、著書、受賞情報）の登録にご協力いただき、誠にありがとうございます。今回はその中の 2019 年分（2019 年 1 月～2019 年 12 月）を掲載いたします。

研究成果の登録は、Web ページ (<https://www.cc.u-tokyo.ac.jp/achievements/>) にある「研究成果登録」から行うことができます。何卒ご協力のほどよろしくお願い申し上げます。

－Oakforest-PACS－

● 口頭・ポスター発表

【応用物理学】

1. 長谷川諄, 島田和宏: Pna21-(InxM1-x)O3(M=Al,Ga) の弾性定数、圧電定数および自発分極の第一原理計算: 第 80 回応用物理学会秋季学術講演会, 第 80 回応用物理学会秋季学術講演会予稿集, 16-091.
2. Jun Hasegawa and Kazuhiro Shimada: First-principles calculation of piezoelectric and dielectric constants and spontaneous polarization of orthorhombic (InxM1-x)2O3 (M = Al, Ga): The 8th International Symposium on Materials Science and Surface Technology 2019, The 8th International Symposium on Materials Science and Surface Technology 2019 予稿集, pp.40-41.

－Reedbush－

● 口頭・ポスター発表

【機械工学】

3. 山田英助, 田村陽介: 高圧水素容器の火炎暴露試験の数値シミュレーション: 第 33 回数値流体力学シンポジウム, A03-1.
4. 山田英助, 田村陽介: 高圧水素容器の火炎暴露試験における燃焼と固体熱伝導の数値シミュレーション: オープン CAE シンポジウム 2019.

【総合工学】

5. Jinrong Cao, Yunfeng Liang, Yoshihiro Masuda, Hiroaki Koga, Hiroyuki Tanaka, Kohei Tamura, Sunao Takagi, Toshifumi Matsuoka: Molecular Simulation of Methane Adsorption Behavior in Kerogen Nanopores for Shale Gas Resource Assessment: International Petroleum Technology Conference IPTC 2019, IPTC-19216-MS.

【人間医工学】

6. Yukihiro Nomura, Toshihiro Hanawa, Issei Sato, Shouhei Hanaoka, Takahiro Nakao, Masaki Murata, Tomomi Takenaga, Tetsuya Hoshino, Yuji Sekiya, Naoto Hayashi, Osamu Abe: Development of training environment for deep learning with medical images on supercomputer system based on asynchronous parallel Bayesian optimization: ISC High Performance 2019.

【内科系臨床医学】

7. 古徳純一: 人工知能と放射線医学: 日本学術振興会 放射線科学とその応用第 186 委員会 第 30 回研究会および意見交換会.
8. Takeshi Takata, Hiroshi Kondo, Masayoshi Yamamoto, Shigeru Furui, Kenshiro Shiraishi, Takenori Kobayashi, Hiroshi Oba, Jun'ichi Kotoku: Mixed reality for interventional radiology: an intuitive real-time radiation visualization system: Cardiovascular and Interventional Radiological Society of Europe.

● 受賞情報

9. 曹金榮: Molecular Simulation of Methane and Methane/Ethane Mixture Adsorption Behavior in Kerogen Nanopores: Best Poster Award, PetroPhase 2019, The 20th International Conference on Petroleum Phase Behavior and Fouling.
10. Takeshi Takata, Hiroshi Kondo, Masayoshi Yamamoto, Shigeru Furui, Kenshiro Shiraishi, Takenori Kobayashi, Hiroshi Oba, Jun'ichi Kotoku: Mixed reality for interventional radiology: an intuitive real-time radiation visualization system: Cum Laude, Cardiovascular and Interventional Radiological Society of Europe.

研究成果の登録のお願い

情報戦略課研究支援チーム

情報基盤センタースーパーコンピューティング部門

研究成果の登録は、本センターのスーパーコンピューターシステムを利用して得られた研究成果のうち、論文、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、ご了解ください。

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

 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 

お問い合わせ • リンク • サイトマップ

ホーム スパコン 利用案内 サポート FAQ 研究会・イベント 刊行物 **研究成果** 研究部門について

ホーム > 研究成果 > 研究成果の取扱い

① 「研究成果」をクリック

② 研究成果ページの「研究成果登録」をクリック

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ー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ーシステムの整備・拡充につながるものとなりますので、利用の皆様には何卒ご協力の程宜しくお願い申し上げます。

お使い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

③ アカウント名(利用者番号)及びメールアドレスを入力し、登録したい業績を選択

④ 「ログイン」をクリックし、成果登録ページで研究成果の登録をお願いいたします

JavaScript を有効にしてお使いください。
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 までお願い致します。

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

2・3月のジョブ統計

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

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]			稼算時間 [ノード時間] (経過時間)			平均ノード 利用率 (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	ログイン [時間]	バッチジョブ [時間]	バッチジョブ [時間]	/home	/lustre	ログイン (実CPU)	プリポスト	インタラクティブ ジョブ	バッチジョブ		
2019年7月	263	64	4,195	-	368	85,669	21,926			95	415,334	620.18	-	121	262,062	364.8	26.8
8月	361	79	3,377	-	361	59,048	16,728			153	2,390,289	922.77	-	153	433,971	784.0	57.6
9月	337	83	4,634	14	301	91,667	25,096			99	4,135,511	1,591.27	12	83	488,727	843.3	62.0
10月	445	70	4,603	0	302	22,159	24,772			198	5,102,808	1,436.98	0	129	195,762	273.4	20.1
11月	480	95	4,759	2	379	20,085	34,108			185	5,891,232	3,037.14	1	162	261,169	372.9	27.4
12月	529	114	5,019	1	276	26,914	35,531			393	14,788,166	2,489.42	0	138	371,203	511.4	37.6
2020年1月	562	117	5,831	0	377	32,698	43,594			495	15,790,227	3,237.89	0	141	294,689	410.2	30.2
2月	587	115	5,299	0	326	20,493	32,540			610	17,504,878	1,158.40	0	181	414,952	620.0	45.6
3月	588	98	4,785	1	464	26,064	28,456			586	16,978,662	1,903.42	11	317	680,984	961.4	70.7
合計			42,502	18	3,154	384,797	262,751					16,397.47	24	1,425	3,403,519		

・試験運転は、2019年7月1日より開始。正式サービスは、2019年10月1日より開始

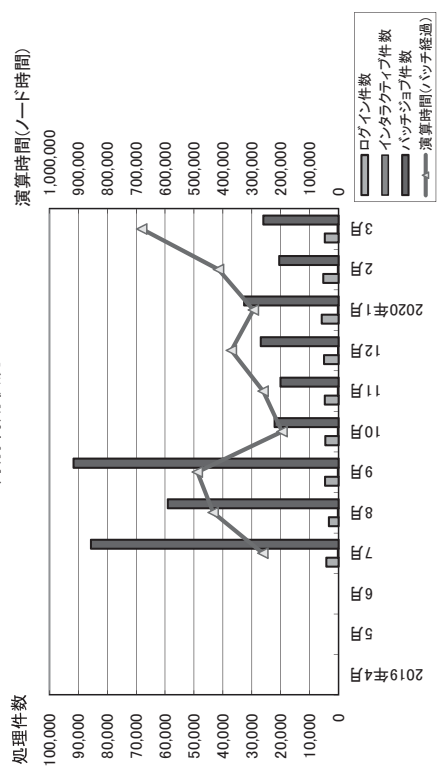
・稼算時間： ログイン時間の累計

・ログイン(実CPU)： コア時間単位

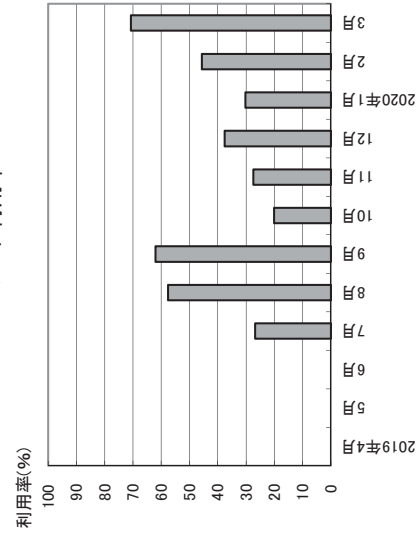
・ノード利用率： インタラクティブおよびバッチジョブの経過時間をノードが100%動作したと仮定した場合の利用ノード数。
計算式=1ヶ月のインタラクティブおよびバッチジョブ経過時間合計÷1ヶ月の稼算時間

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

月別利用状況



ノード利用率



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

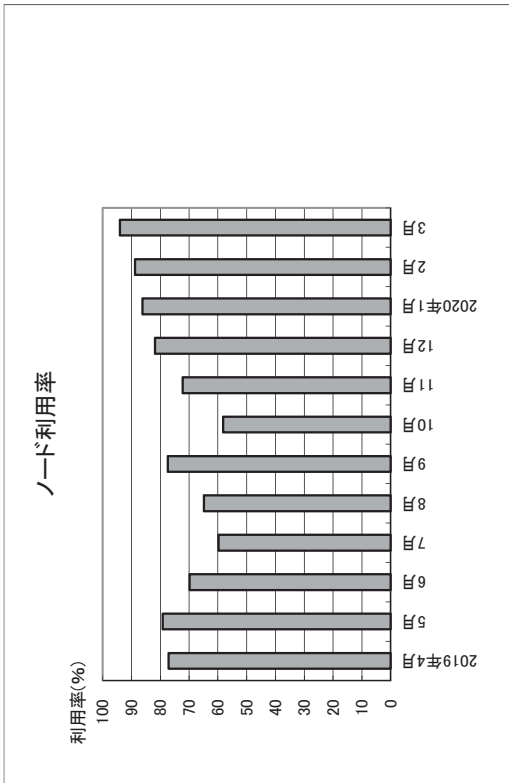
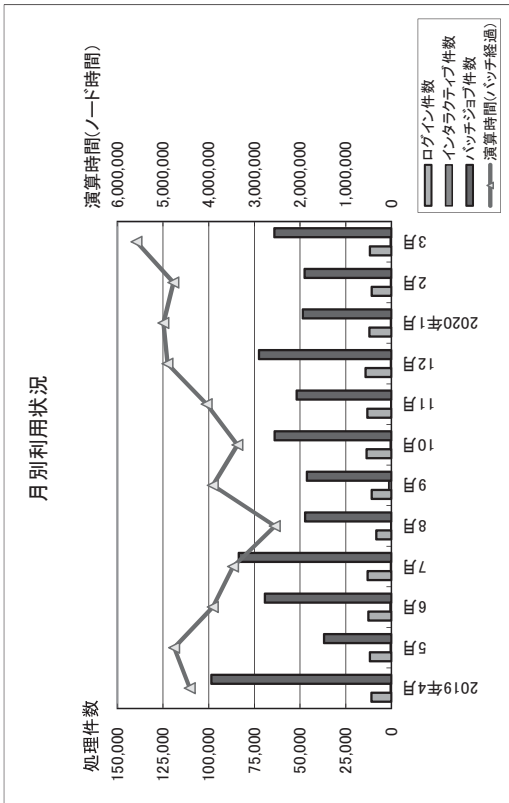
年月	登録者数	実利用者数	処理件数				接続時間 [時間]	ファイル使用量 [GiB]		ログイン (実CPU)	演算時間 [ノード時間] (経過時間)			平均ノード 利用数 (ノード)	ノード 利用率 (%)
			ログイン	プリポスト	インタラクティブ ジョブ	バッチジョブ		/home	/work		プリポスト	インタラクティブ ジョブ	バッチジョブ		
2019年4月	1,954	446	10,972	208	560	98,570	76,952	3,130	3,752,207	7,607.40	560	242	4,413,130	6,327.4	77.1
5月	1,875	454	11,762	146	525	36,800	79,362	2,962	3,549,322	26,100.88	265	156	4,752,681	6,501.5	79.2
6月	1,617	409	12,594	270	726	69,196	77,859	2,837	3,869,613	8,610.48	507	236	3,907,590	5,732.0	69.8
7月	1,576	423	13,070	321	411	83,528	89,282	3,043	4,437,448	22,625.24	496	131	3,466,098	4,911.4	59.8
8月	1,604	395	8,227	95	290	47,167	47,333	3,232	4,639,620	10,901.40	179	72	2,551,643	5,314.8	64.8
9月	1,666	468	10,804	249	1,338	46,191	60,950	3,377	4,839,917	15,410.42	341	215	3,905,966	6,353.2	77.4
10月	1,734	483	13,519	341	468	63,874	76,261	3,460	5,035,415	4,566.66	625	320	3,372,187	4,779.1	58.2
11月	1,616	456	13,103	457	208	51,790	103,507	3,683	5,277,714	9,000.08	956	151	4,040,952	5,927.7	72.2
12月	1,618	454	14,180	470	437	72,460	89,295	3,659	5,615,226	5,920.77	976	214	4,901,470	6,718.1	81.8
2020年1月	1,598	445	11,965	408	378	48,545	118,573	3,725	6,034,310	9,427.65	666	217	4,990,626	7,072.5	86.2
2月	1,629	424	10,772	359	401	47,509	78,624	3,850	6,253,958	12,649.16	768	192	4,770,095	7,287.5	88.8
3月	1,598	401	11,791	536	533	64,010	80,219	3,761	6,408,220	9,302.12	1,062	196	5,581,379	7,713.3	94.0
合計			142,759	3,860	6,275	729,640	978,217			142,122.26	7,401	2,342	50,653,817		

・接続時間：ログイン時間の累計

・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＝ノード利用率×総ノード数(8208)

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



3. Redbushスーパーコンピュータシステム (Redbush-U) ジョブ処理状況 (RedHat Enterprise Linux 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 利用率 (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	
2019年	4月	1,523	312	6,023	47	72	10,057	7,887	133	528,956	15.01	16	19	158,355	225.4	61.2
	5月	1,651	350	6,549	36	99	14,367	9,146	110	298,182	22.28	4	30	218,602	297.1	80.7
	6月	1,368	415	7,091	86	221	10,640	9,373	122	309,531	6.92	37	53	138,002	193.0	52.0
	7月	1,377	448	8,803	39	207	18,790	12,456	131	335,883	12.72	20	40	174,021	236.0	64.0
2020年	8月	1,356	262	5,850	0	221	8,738	8,173	138	361,872	6.43	0	61	121,728	217.1	59.0
	9月	1,378	258	5,870	1	135	8,078	8,238	145	404,288	7.97	0	23	183,405	297.5	80.9
	10月	1,256	312	7,778	0	305	10,210	11,357	153	423,068	12.62	0	82	184,602	277.9	75.5
	11月	1,294	333	8,566	21	321	10,305	11,653	168	460,973	17.58	17	44	178,090	250.2	68.0
	12月	1,254	324	8,563	0	240	12,750	13,520	176	520,955	18.00	0	36	203,904	277.1	75.3
	1月	1,241	316	9,461	1	325	12,649	15,181	186	541,491	13.84	0	23	227,303	308.9	83.9
	2月	1,237	273	5,826	0	91	9,846	9,731	183	616,806	11.83	0	26	209,897	304.9	82.9
	3月	1,217	227	5,185	0	131	11,844	8,216	184	604,794	30.69	0	45	216,745	297.4	80.8
	合計			85,565	231	2,368	138,274	124,931			176	94	482	2,214,654		

・接続時間：ログイン時間の累計

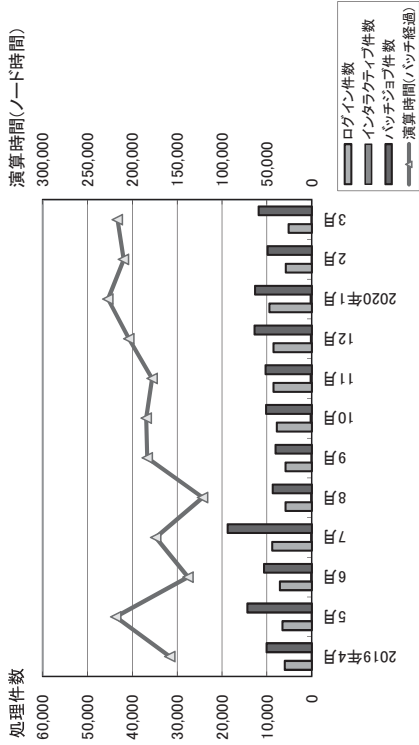
・ログイン(実CPU)：コア時間単位

・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。

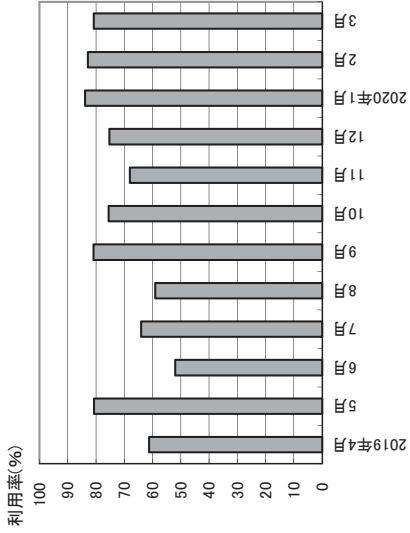
計算式＝1ヶ月のインタラクティブおよびバッチジョブ経過時間合計÷1ヶ月の稼働時間

・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

月別利用状況



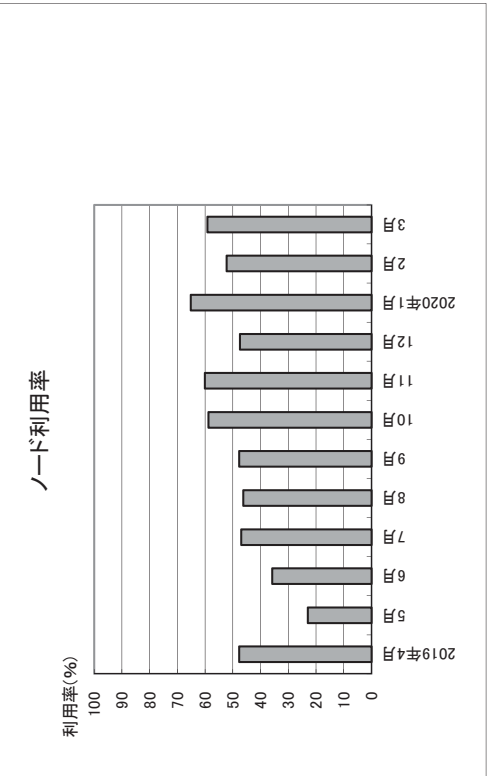
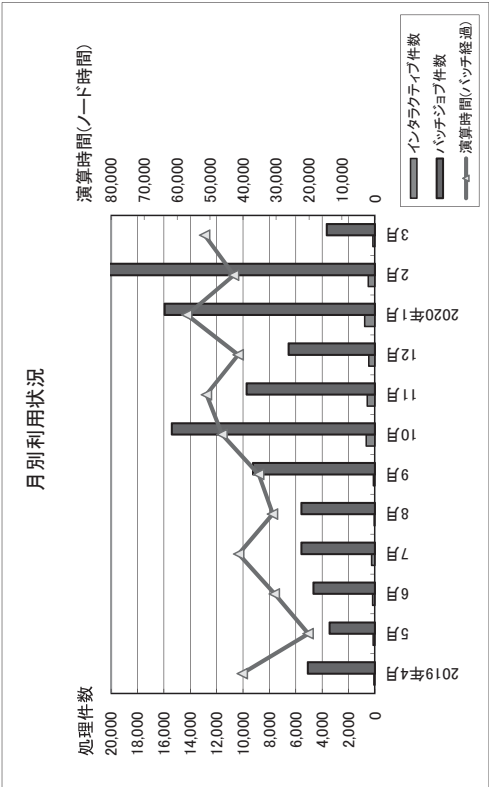
ノード利用率



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

年月	処理件数		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 (%)	
	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			
2019年	4月	78	5,094	37	40,225	57.3	47.7
	5月	138	3,433	78	20,238	27.6	23.0
	6月	184	4,659	96	30,493	42.9	35.8
	7月	253	5,579	239	41,317	56.4	47.0
	8月	72	5,576	59	31,020	55.4	46.2
2020年	9月	114	9,254	55	35,234	57.2	47.7
	10月	661	15,397	493	46,355	70.5	58.8
	11月	589	9,721	247	51,108	72.1	60.1
	12月	472	6,545	386	41,445	56.8	47.4
	1月	787	15,949	537	57,031	78.2	65.2
2020年	2月	515	25,272	323	42,821	62.7	52.2
	3月	158	3,650	138	51,619	71.0	59.2
合計		4,021	110,129	2,688	488,906		

- ・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Redbush-Uと共通。
- ・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



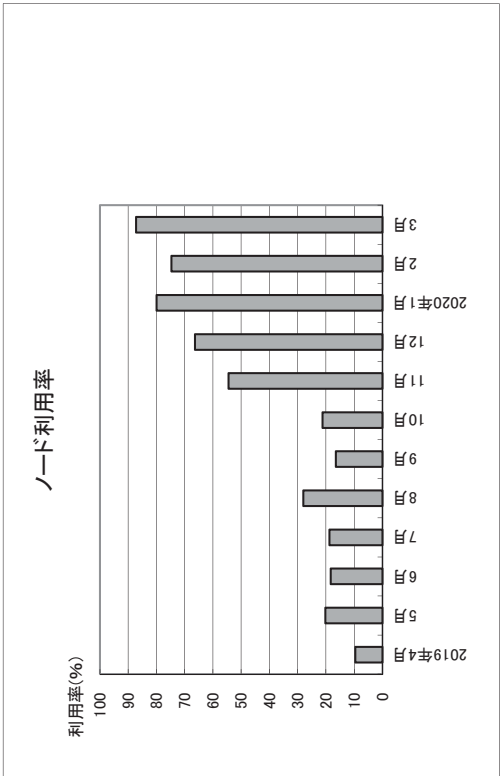
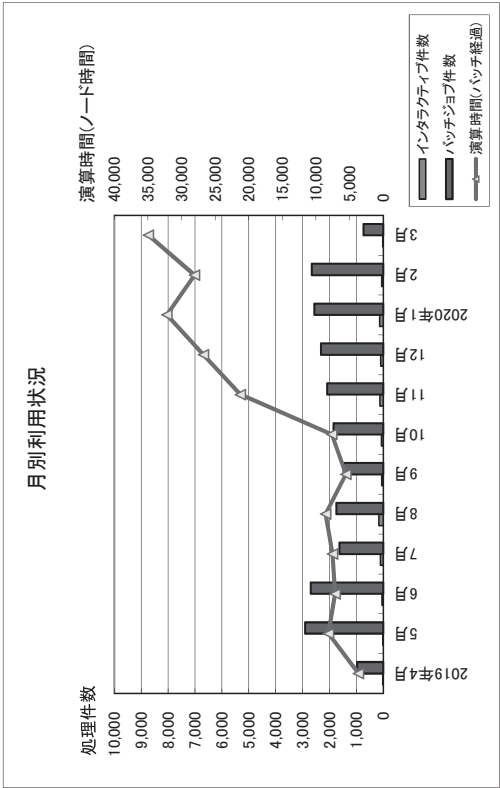
5. Redbushスーパーコンピュータシステム (Redbush-L) ジョブ処理状況 (RedHat Enterprise Linux 7)

年月	処理件数		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 (%)
	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		
2019年4月	15	971	11	3,682	5.3	9.6
5月	6	2,902	3	8,153	11.1	20.2
6月	43	2,693	26	7,158	10.1	18.3
7月	99	1,625	82	7,517	10.3	18.8
8月	158	1,738	95	8,553	15.4	28.0
9月	55	1,474	49	5,542	9.1	16.5
10月	61	1,847	90	7,640	11.6	21.2
11月	118	2,083	91	21,247	30.0	54.5
12月	93	2,313	80	26,748	36.5	66.3
2020年1月	133	2,560	158	32,196	44.0	79.9
2月	56	2,657	211	28,072	41.1	74.7
3月	16	727	24	34,927	47.9	87.2
合計	853	23,590	920	191,435		

・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Redbush-Uと共通。

・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



brucite の (0001) 面における摩擦特性の決定

奥田花也

東京大学大学院理学系研究科地球惑星科学専攻

1. 研究の背景

層状鉱物は天然断層に局在して多く見られ(Chester et al., 2013), 一般的な鉱物に比べて低い摩擦係数を持つことが実験的に知られている(Byerlee, 1978)。一般的な岩石が岩石種によらず 0.6 から 0.8 の摩擦係数をとるのに対し(Byerlee 則と呼ばれる), 層状鉱物は一般的な岩石よりも低い 0.2 から 0.6 の幅で鉱物ごとに異なる摩擦係数を示す。この低い摩擦係数は層状鉱物の層間結合が弱く, 層間をせん断面に配向することによって低い応力でせん断が可能であることによると考えられており(Kawai et al., 2015; Moore & Lockner, 2004), こうした層状鉱物が断層強度を制約していると考えられている。そのため, 断層挙動の理解には層状鉱物の摩擦特性の理解が不可欠であるが, どのような要因で層状鉱物の異なる摩擦係数が決定されているのかはこれまでよくわかっていない(Sakuma & Suehara, 2015)。本研究では層間のナノスケール摩擦に着目し, せん断による結晶構造の変化に伴うエネルギー変化から層状鉱物の摩擦特性を調べる手法について検討した。なお, 本研究の成果は Journal of Geophysical Research: Solid Earth 誌に掲載されている(Okuda et al., 2019)。

2. 対象物質, 計算手法, 計算条件

接触する二層は見かけの接触面に比べて非常に小さいナノスケールの真の接触面で, 非常に高い垂直応力を受けながら接触している。この真の接触面におけるミクロなせん断の挙動がマクロな層同士の摩擦特性を支配していることが知られている。このようなナノスケールでの摩擦挙動は原子配置の相対的な変化による結晶構造変化に伴うポテンシャルエネルギーの変化から記述可能であることが知られている(Zhong & Tománek, 1990)。本研究ではこの手法を層状鉱物の一種である水酸化マグネシウムの鉱物 brucite に適用した。Brucite は単位格子当たりの原子数が 5 個と少ないため計算コストが低いため本研究に用いた。

まず理想的な brucite の二層を仮定し, 層に対して鉛直方向に層間距離を構造最適化した層間距離に対して $-0.5 \text{ \AA}$ から $1.2 \text{ \AA}$ まで $0.05 \text{ \AA}$ 刻みで変化させて, これら 35 点それぞれの層間距離に対応する層間に蓄えられるエネルギー

$$E_{ad}(z) = E_{2layers}(z) - 2 \times E_{1layer} \quad (1)$$

を計算する。ここで $E_{2layers}(z)$ はある層間距離 z における二層のエネルギー, E_{1layer} は一層のみの場合に得られるエネルギーである。このエネルギー $E_{ad}(z)$ の層間距離に対する微分係数の負値が垂直荷重 $f_{normal}(z)$ を表す。

$$f_{normal}(z) = -\frac{dE_{ad}}{dz} \quad (2)$$

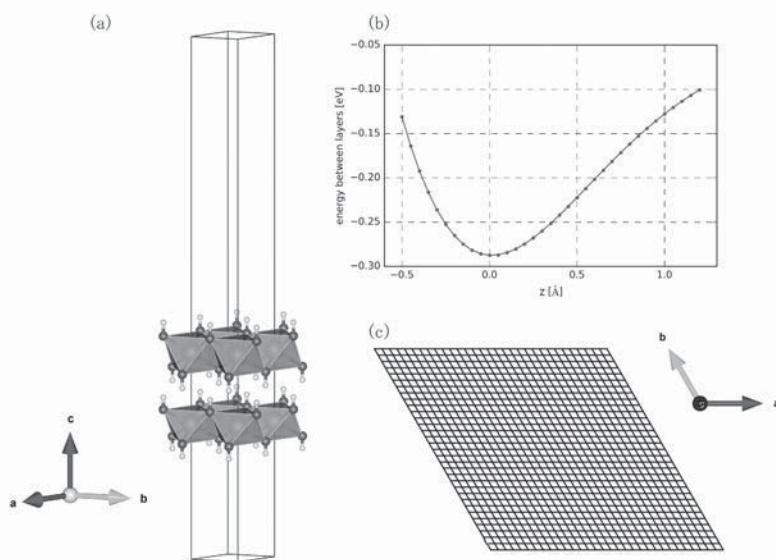
これにより, ある垂直荷重 f_{normal} 下での層間距離 $z_{f_{normal}}$ とこれに対応するエネルギー $E_{ad}(z_{f_{normal}})$ を求めることが可能となる。ポテンシャルエネルギー $V(f_{normal})$ はこのエネルギーと垂直荷重に逆らって層を層間距離分押し広げるのに必要な仕事の和で表される。

$$V(f_{normal}) = E_{ad}(z_{f_{normal}}) + f_{normal} \times (z_{f_{normal}} + c) \quad (3)$$

ここで c は構造最適化したときの層間距離に対応し、本研究では $4.6461 \text{ \AA}$ を構造最適化の計算により得ている。せん断面(brucite の場合(0001)面に対応)上でおよそ $0.1 \text{ \AA}$ の格子を作り(brucite の場合 32×32 点), 35 点の鉛直方向のエネルギー変化をすべての格子点上で求めることにより, ある垂直荷重下での層の相対的な位置関係によるポテンシャルエネルギーの変化をせん断面全体で求めることが可能となる(第1図)。

ポテンシャルエネルギーの計算には密度汎関数法(DFT)に基づいた第一原理電子状態計算をもちい, すべての計算は Quantum ESPRESSO 第一原理電子状態計算ソフトウェア(Giannozzi et al., 2009)で交換相関汎関数にPBE(Perdew et al., 1996), ファンデルワールス力の補正にDFT-D2法(Grimme, 2006), 擬ポテンシャルにはGBRVポテンシャル(Garritty et al., 2014)を用いて行い, カットオフエネルギーは 40.0 Ry を波動関数, 320.0 Ry を電子密度に対して採用, K点メッシュ(Monkhorst & Pack, 1976)は $6 \times 6 \times 4$, エネルギーの収束条件は 0.01 mRy , 力の収束条件は 0.1 mRy/Bohr を用いた。

天然の層状鉱物は単位格子当たりの原子数が多くなるため, 計算コストが大きくなるので剪断面全体でのポテンシャルエネルギーの変化を計算することはこれまで困難であった。本研究では天然の層状鉱物のなかでも原子数の少ない brucite を用い, さらにスーパーコンピュータを用いることによって大量の計算($35 \times 32 \times 32 = 35,840$ 点)を行うことを可能にした。計算に当たっては Reedbush-U システムおよび Oakforest-PACS システムを用い, 1 計算点に対し 2 ノード 64 コア並列環境をあてて 3 次元の電子密度の FFT 計算を並列化した。



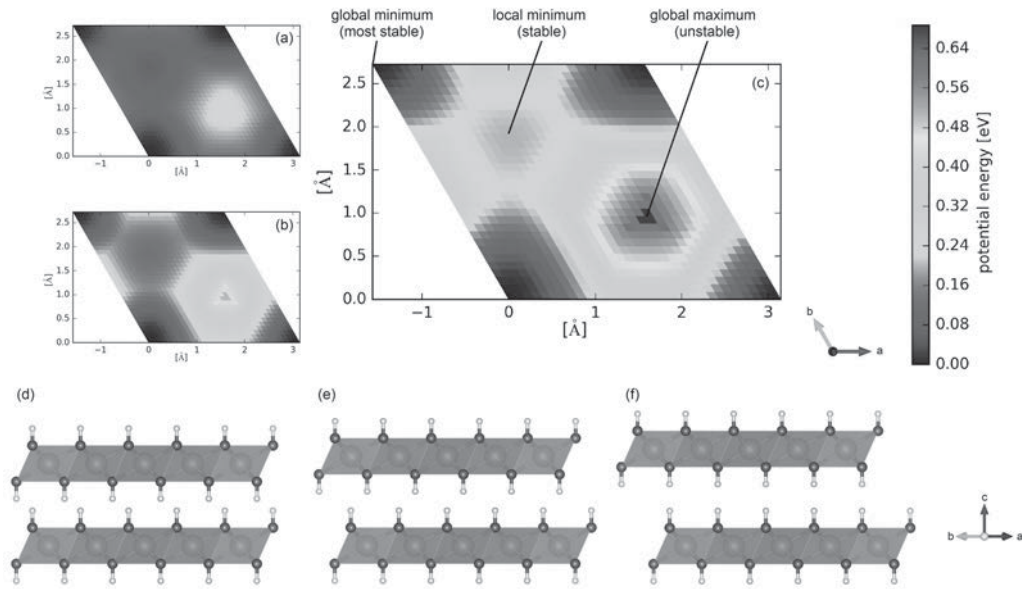
第1図：(a) 計算におけるスーパーセル。(b) 層間距離を変化させたときのエネルギー変化。

(c) (0001)面上で設定した格子。

周期境界条件による上下の層の影響を取り除くため, 層の上下に真空を配置したスーパーセルを用いて計算することで, 理想的な二層のせん断状態を再現した(a)。層間距離を $0.05 \text{ \AA}$ 刻みで変化させ 35 点でエネルギーを計算することで垂直荷重とエネルギーと層間距離の関係を導き(b), これをせん断面全体に配置した 32×32 の格子点上で計算することでせん断時の構造変化に伴うエネルギー変化を求めることができる(c)。

3. 結果

Brucite の (0001) 面全体でのポテンシャルエネルギーの変化を第 2 図に示した。本研究では一定垂直荷重下での (0001) 面全体でのポテンシャルエネルギーの変化を Potential Energy Surface (PES) と呼ぶ。



第 2 図：Brucite の (0001) 面上での PES。

それぞれ垂直荷重 0.0 nN (0.00 GPa) (a), 0.5 nN (5.84 GPa) (b), 1.0 nN (11.67 GPa) (c) の場合に対応する。PES の最小点に当たる最もエネルギーが低い所は最安定で Mg 原子同士が垂直に直列する結晶構造 (d), 極小点に当たる所は OH 基と Mg 原子が垂直に直列する結晶構造 (e), 極大点では OH 基が垂直に直列する結晶構造 (f) を示す。

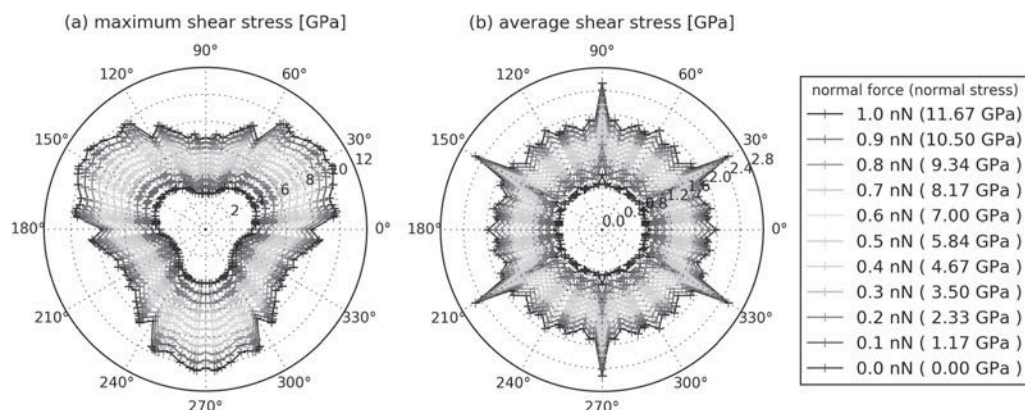
PES により結晶構造がせん断により変化したときのエネルギー変化を定量的に求めることが可能となる。一定垂直荷重 f_{normal} における摩擦力 f_{shear} は

$$f_{shear} = \frac{\partial}{\partial x} PE(x, f_{normal}) \quad (4)$$

で求められる。ここで $PE(x, f_{normal})$ はあるすべり経路を指定したときの変位に対するポテンシャルエネルギーの変化を表す。このうち、 f_{shear} の最大値を最大摩擦力、 f_{shear} の正の値の平均値を平均摩擦力と定義する。これらを用いて、摩擦力のすべり方向依存性、および非直線経路について考察を行った。

4. Brucite におけるすべり方向依存性

本研究では brucite の γ 角に対応する 120° を 48 方向に分割し、それぞれの方向に対して最大摩擦力および平均摩擦力を求めた。せん断経路は直線を仮定、周期境界条件を満たすよう経路を設定している。その結果を第 3 図に示す。



第3図：すべり方向による摩擦力の変化。

最大摩擦力(a)と平均摩擦力(b)の方位依存性を示した。ただし摩擦力を brucite の単位格子の底面積で割ることによりせん断応力で示している。ここでは計算した 120° の範囲を 360° に拡張して表示している。

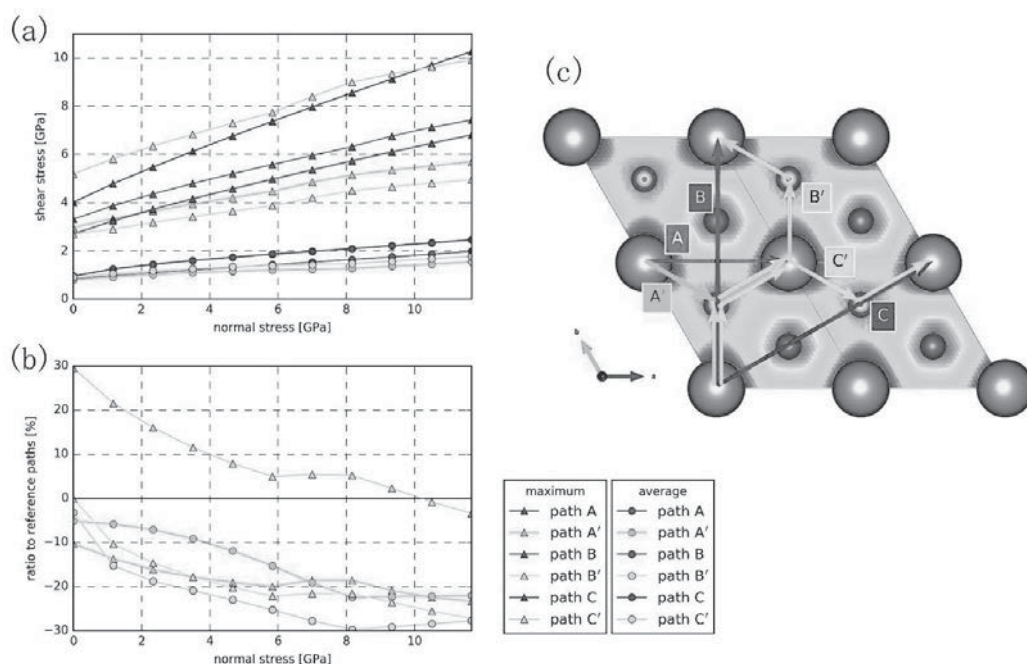
最大摩擦力の結果では、30° 付近で高い摩擦力、0° 及び 60° 付近で中間の摩擦力、90° 付近で低い摩擦力を示すことが分かった。これは 30° 方向の場合 PES の極大点を登るために大きな摩擦力が必要になるのに対し、90° 方向の場合、PES の極小点を最初に登るため、そののちの極大点への勾配が小さくなることにより、低い摩擦力が得られている。

平均摩擦力の結果では 30° 及び 90° を除いて概ね一定の摩擦力が得られた。30° および 90° では PES の極大点を通るため、局所的に高い摩擦力を示している。

最大摩擦力が方位依存性を示すのに対し、平均摩擦力が方位依存性をほとんど示さないことにより、層状鉱物の摩擦が天然の断層の運動の中で、非連続的な運動を示すか連続的な運動を示すかによって考察すべき摩擦力が変わってくることが予想され、仮に brucite が非連続的な運動を示す場合、せん断方向が 90° の方向を向いている鉱物粒子が選択的にすべる可能性が示唆され、マクロな運動が低い摩擦力を示すせん断方向の摩擦特性に依存する可能性がある。

5. 非直線経路

前章では直線経路の方位依存性を見たが、本章では直線経路と非直線経路を比較する。せん断面全体での PES を計算したことにより、PES の極小点を通るようなエネルギー的に安定な非直線すべり経路を考察することが可能である。今回簡単のため、第4図に示した6種類のすべり経路について考察する。直線経路と非直線経路を比較するにあたり、本研究では直線経路の方向を力の向きとし、非直線経路のすべり方向と内積をとることによって非直線経路を直線経路に投影して、エネルギー変化とその傾きから摩擦力を比較した。その結果、最大摩擦力では経路 C と C' では直線経路 C の方が低い摩擦力でせん断可能であることを除き、非直線経路の方が低い摩擦力でせん断可能であることが分かった。また経路 C' も垂直応力が 10GPa を超えると非直線経路の方がより効率的であることも示された。平均摩擦力ではすべての経路において非直線経路の方が低い摩擦力ですべることが可能であることが分かった。これらの結果は固体潤滑剤の研究においても示唆されており (Matsushita et al., 2005), 層状鉱物の摩擦に関しても非直線経路が摩擦係数を低くする要因の一つであることが示唆される。



第 4 図：直線経路と非直線経路の比較。

垂直応力と最大せん断応力(最大摩擦力を brucite の底面積で割ったもの)及び平均せん断応力との関係(a)。非直線経路と直線経路との比を表したもの。非直線経路の方が直線経路より低いせん断応力でせん断可能であることを示している(b)。本研究で対象にした 6 種類のすべり経路(c)。

6. まとめ

本研究では層状鉱物を対象に層間のナノスケール摩擦を構造変化に伴うエネルギー変化から摩擦特性を見積もる手法について検討した。水酸化マグネシウムの brucite の(0001)面を例に、せん断面上でのポテンシャルエネルギーの変化を計算し PES を求め、すべり経路を決定したうえで変位微分を取ることで摩擦力を見積もることが可能であることを示した。これらから最大摩擦力は方位依存性を持ち、平均摩擦力は方位依存性がほとんどなく、非直線すべり経路が直線経路よりも効率的であるという摩擦特性を得ることができた。今後実験との比較などにより、層状鉱物のせん断が連続か非連続かなどを検討する必要があるが、本研究による手法をほかの層状鉱物に適用し摩擦特性を求めることにより、断層の挙動の理解を断層物質から行うことが可能になると期待される。

謝 辞

本研究は東京大学情報基盤センターの Reedbush-U システムを用い、東京大学情報基盤センター「若手・女性利用者推薦」平成 28 年度後期及び平成 29 年度前期課題、学際大規模情報基盤共同利用・共同研究拠点(JHPCN)「萌芽型研究課題」EX1633 及び EX17303 によって行われた。また河合研志准教授(東京大学理学系研究科地球惑星科学専攻)、佐久間博主任研究員(国立研究開発法人物質・材料研究機構 NIMS)には多くの指導、助言をいただいた。

参考文献

- Byerlee, J. (1978). Friction of rocks. *Pure Appl. Geophys.*, 116(4-5), 615-626.
doi:10.1007/BF00876528
- Chester, F. M., Rowe, C., Ujiie, K., Kirkpatrick, J., Regalla, C., Remitti, F., ... Toczko, S. (2013). Structure and Composition of the Plate-Boundary Slip Zone for the 2011 Tohoku-Oki Earthquake. *Science*, 342(6163), 1208-1211. doi:10.1126/science.1243719
- Garrrity, K. F., Bennett, J. W., Rabe, K. M., & Vanderbilt, D. (2014). Pseudopotentials for high-throughput DFT calculations. *Comput. Mater. Sci.*, 81, 446-452.
doi:10.1016/j.commatsci.2013.08.053
- Giannozzi, P., Baroni, S., Bonini, N., Calandra, M., Car, R., Cavazzoni, C., ... Wentzcovitch, R. M. (2009). QUANTUM ESPRESSO: a modular and open-source software project for quantum simulations of materials. *J. Phys. Condens. Matter*, 21(39), 395502. doi:10.1088/0953-8984/21/39/395502
- Grimme, S. (2006). Semiempirical GGA-type density functional constructed with a long-range dispersion correction. *J. Comput. Chem.*, 27(15), 1787-1799. doi:10.1002/jcc.20495
- Kawai, K., Sakuma, H., Katayama, I., & Tamura, K. (2015). Frictional characteristics of single and polycrystalline muscovite and influence of fluid chemistry. *J. Geophys. Res. : Solid Earth*, 120(9), 6209-6218. doi:10.1002/2015JB012286
- Matsushita, K., Matsukawa, H., & Sasaki, N. (2005). Atomic scale friction between clean graphite surfaces. *Solid State Commun.*, 136(1), 51-55. doi:10.1016/j.ssc.2005.05.052
- Monkhorst, H. J., & Pack, J. D. (1976). Special points for Brillouin-zone integrations. *Phys. Rev. B*, 13(12), 5188-5192. doi:10.1103/PhysRevB.13.5188
- Moore, D. E., & Lockner, D. A. (2004). Crystallographic controls on the frictional behavior of dry and water-saturated sheet structure minerals. *J. Geophys. Res.*, 109(B3), B03401. doi:10.1029/2003JB002582
- Okuda, H., Kawai, K., & Sakuma, H. (2019). First-principles Investigation of Frictional Characteristics of Brucite: An Application to Its Macroscopic Frictional Characteristics. *J. Geophys. Res. : Solid Earth*, 124(10), 10423-10443.
doi:10.1029/2019JB017740
- Perdew, J. P., Burke, K., & Ernzerhof, M. (1996). Generalized Gradient Approximation Made Simple. *Phys. Rev. Lett.*, 77(18), 3865-3868. doi:10.1103/PhysRevLett.77.3865
- Sakuma, H., & Suehara, S. (2015). Interlayer bonding energy of layered minerals: Implication for the relationship with friction coefficient. *J. Geophys. Res. : Solid Earth*, 120(4), 2212-2219. doi:10.1002/2015JB011900
- Zhong, W., & Tománek, D. (1990). First-principles theory of atomic-scale friction. *Phys. Rev. Lett.*, 64(25), 3054-3057. doi:10.1103/PhysRevLett.64.3054

教育活動報告：計算科学プログラミング II

(大学院情報理工学系研究科コンピュータ科学専攻開講科目)

松 本 正 晴

東京大学大学院情報理工学系研究科コンピュータ科学専攻

本稿では、2019 年度 A セメスターに実施された大学院講義、計算科学プログラミング II (大学院情報理工学系研究科開講科目, 金曜 1 限@情報基盤センター大演習室 2) 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が、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。

計算科学とは、科学技術上の様々な問題に対して数値的なモデル化を施し、計算機シミュレーションによる評価を行う学問分野であるが、本講義では、座学とスーパーコンピュータ (データ解析・シミュレーション融合スーパーコンピュータシステム Reedbush) による実習を通じて、計算科学についての実践的な知識やプログラミング技術を身につけることを目的としている。東京大学情報基盤センターに設置されている Reedbush では、演算アクセラレータとして GPU を搭載したノード (Reedbush-H/L) が利用できる一方で、本学では GPU を演算ツールとして活用するために必要となる実践的な諸知識 (ハードウェア・ソフトウェア、プログラミング技術等) を取得するための講義があまり開講されていないことに鑑み、本講義では特に GPU を搭載する計算機上での並列計算に関する講義・実習を行っている。すなわち、GPU 上で計算を行うために必要となる知識である、CPU を GPU で補うヘテロジニアスアーキテクチャとヘテロジニアス並列プログラミングへのパラダイムシフト、GPU をはじめとするアクセラレータ、メニーコアアーキテクチャの特性、並列計算のための OpenACC や CUDA C/CUDA Fortran などのプログラミング手法、GPU アクセラレーションライブラリ、MPI+OpenACC, MPI+CUDA などのマルチ GPU プログラミング手法などである。

講義で扱うプログラミング言語は、ハイパフォーマンスコンピューティング分野でよく用いられる C 言語と Fortran の 2 種類とし、それぞれの言語に対応する教材を用意し、履修者がどちらか一方を選んで実習を行うこととした。ローカル端末は情報基盤センターの教育用計算機システム (ECCS) を利用させていただいた。また、大学院の講義であることから履修する上で、UNIX の基本的な知識 (ファイル構造、コマンド、ログイン方法、エディタの操作など) と経験、C 言語、または Fortran の基本的な知識と経験があること、を前提条件とした。

表 1 に講義日程と内容を示す。3 回目の授業から Reedbush の利用を開始し、6 回目まではディレクティブベースの標準並列プログラミングモデルである OpenACC について、また 7 回目以降は、NVIDIA 社の GPU 向けではあるが OpenACC よりも詳細なプログラミングが可能となる CUDA C/CUDA Fortran についての講義・実習を主に行った。基本的には講義は毎回、座学に 30 分～1 時間程度の時間を割り、残りの時間を実習時間とすることが多かった。

¹ <http://www.compsci-alliance.jp/>

履修登録者数は合計 52 名であり、本講義の開講所属である大学院情報理工学系研究科コンピュータ科学専攻の学生は 10 名で、他 42 名の内訳は、情報理工学系研究科の他専攻から 13 名、工学系研究科から 19 名、理学系研究科から 6 名、総合文化研究科から 1 名、新領域創成科学研究科から 3 名と、他専攻・研究科のさまざまな学生が履修したという点が本講義の特徴の一つと言える。このうち、実際に講義に出席して、単位を取得したのは 42 名であった。

本講義は開講から 3 年が経過し、履修者数も年々増加し続けており、高性能計算に関する講義の重要性も年々高まっているように感じている。一般に、学生がスーパーコンピュータを自由に利用できるという機会は限られているが、本講義で（情報基盤センターのスーパーコンピュータの教育利用を通じて）、学生に並列プログラミングの基礎知識から、実践的な科学技術アプリケーションへ向けた並列プログラムの実装までを（計算資源は限られているが、）経験させたことは、学生にとって非常に貴重な体験で有意義なものであったならば本望である。

表 1 講義日程・内容（2019 年度 A セメスター@情報基盤センター大演習室 2）

回数	日付	時間	内容
1	09 月 27 日（金）	08:30 – 10:15	ガイダンスとイントロダクション （座学のみ） 計算科学とは？スーパーコンピュータとは？
2	10 月 04 日（金）	08:30 – 10:15	OpenACC 入門 （座学のみ） OpenACC の概要、OpenMP との相違点
3	10 月 11 日（金）	08:30 – 10:15	スーパーコンピュータ（Reedbush）の利用 アカウント発行、ログイン方法、ジョブ投入方法
4	10 月 18 日（金）	08:30 – 10:15	OpenACC プログラムの実行 行列-行列積、熱伝導プログラムの OpenACC 化
5	10 月 25 日（金）	08:30 – 10:15	並列プログラミングと MPI の基礎 （座学のみ） アムダールの法則、台数効果、プロセス並列化
6	11 月 01 日（金）	08:30 – 10:15	MPI + OpenACC マルチ GPU プログラミング、CUDA-aware MPI
7	11 月 08 日（金）	08:30 – 10:15	CUDA C/CUDA Fortran 1 CUDA プログラミングモデル、基礎的な実装手法
8	11 月 29 日（金）	08:30 – 10:15	（休講）
9	12 月 06 日（金）	08:30 – 10:15	CUDA C/CUDA Fortran 2 論理的コンポーネントとハードウェアの対応
10	12 月 13 日（金）	08:30 – 10:15	CUDA C/CUDA Fortran 3 GPU のメモリ階層構造、シェアードメモリ
11	12 月 20 日（金）	08:30 – 10:15	CUDA C/CUDA Fortran 4 （座学のみ） CUDA ストリーム、GPU 向けライブラリ
12	12 月 27 日（金）	08:30 – 10:15	CUDA C/CUDA Fortran 5 Warp シャッフル、リダクション
13	01 月 10 日（金）	08:30 – 10:15	MPI + CUDA マルチプロセスサービス (MPS), CUDA-aware MPI

科学技術計算Ⅱ／コンピュータ科学特別講義Ⅱ／ハイブリッド分散並列コンピューティング：「並列有限要素法入門」

中 島 研 吾

東京大学情報基盤センター

本稿では、2019 年度冬学期に実施した、科学技術計算Ⅱ（大学院情報理工学系研究科数理情報学専攻）／コンピュータ科学アライアンス特別講義Ⅱ（同 コンピュータ科学専攻）／ハイブリッド分散並列コンピューティング（大学院工学系研究科電気系工学専攻）「並列有限要素法入門」¹について紹介する。

2014 年度までは、夏学期、冬学期に、科学技術計算Ⅰ・Ⅱ／コンピュータ科学特別講義Ⅰ・Ⅱ「科学技術計算プログラミング（有限要素法）」²を実施してきた。偏微分方程式の数値解法として、様々な科学技術分野のシミュレーションに使用されている有限要素法（Finite-Element Method, FEM）について、背景となる基礎的な理論から、実用的なプログラムの作成法まで、連立一次方程式解法などの周辺技術も含めて講義を実施し、プログラミングの実習を実施してきた。題材としては一次元及び三次元弾性静力学を扱い、プログラミング言語としては C 言語を使用していた。夏学期（Ⅰ）と冬学期（Ⅱ）に分けて、夏学期は有限要素法の理論とプログラミングの基礎、冬学期はその並列化についての講義・実習を行い、冬学期は東大情報基盤センターのスーパーコンピュータを使った実習を実施してきた。2011 年度までは T2K 東大を使用していたが、2012 年度からは Fujitsu PRIMEHPC FX10（Oakleaf-FX, 2012 年 4 月運用開始）、2016 年度からは「データ解析・シミュレーション融合スーパーコンピュータシステム（Reedbush）」³のうち、汎用 CPU（Intel Broadwell/EP）のみから構成される Reedbush-U（2016 年 7 月運用開始）を使用してプログラミング実習を実施してきた。更に、2019 年度冬学期からは、「大規模超並列スーパーコンピュータシステム（Oakbridge-CX, OBCX）」⁴を使用している。OBCX は 2019 年 7 月に運用を開始し、各々 2 基の Intel Xeon Platinum 8280 から構成される計算ノードを 1,368 ノード搭載している。

2014 年度までの講義では、冬学期（Ⅱ）の履修は夏学期（Ⅰ）の履修を前提としていたが、昨今の大学の国際化に伴い、10 月に入学する留学生が増加しており、そのような条件を満たさない履修者が増えてきた。そこで 2015 年度からは、方針を変更し、両者のある程度独立した科目として履修できるよう：

- 夏学期（Ⅰ）：計算ノード内のマルチスレッド並列化に関する内容⁵
 - 有限体積法によるポアソン方程式ソルバー、ICCG 法による求解
 - OpenMP によるスレッド並列化

¹ <http://nkl.cc.u-tokyo.ac.jp/19w/>

² <http://nkl.cc.u-tokyo.ac.jp/14s/>, <http://nkl.cc.u-tokyo.ac.jp/14w/>

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

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

⁵ <http://nkl.cc.u-tokyo.ac.jp/19s/>

- 依存性を含むプロセスにおけるカラーリング，リオーダーリングによる並列性抽出
- 冬学期（Ⅱ）：分散並列環境における並列化に関する内容
 - 有限要素法による定常熱伝導問題（一次元，三次元），前処理付き CG 法（点ヤコビ）による求解
 - OpenMP+MPI によるハイブリッド並列化
 - 分散並列環境における並列データ構造

のように実施することとした。留学生の受講，国際化に配慮して英語版教材のみを提供するとともに，**2017 年度からは英語で講義を実施している。**

表 1 に講義日程と内容を示す。上記のように，様々な分野で広く利用されている有限要素法を題材とし，一次元・三次元定常熱伝導方程式を扱った。一次元・三次元有限要素法，MPI（Message Passing Interface）による並列プログラミング，並列要素法の順番で講義・演習を実施した。また，ハイブリッド並列プログラミングモデルの重要性を考慮して，MPI+OpenMP ハイブリッド並列プログラミングに関する講義・演習を実施した。MPI による並列有限要素法のプログラムの各プロセスに OpenMP を適用して並列化を実施した。

登録者は 27 名（うち 17 名が留学生），常時出席者は 15 名程度，単位を取得したのは 12 名（留学生 7 名）であった。

表 1：講義日程，内容

	Date	Time	Title
1	Sep30(M)	0830-1015	Introduction, Introduction to FEM
2	Oct.07(M)	0830-1015	1D/3D FEM (1/3)
	Oct.14(M)		(National Holiday, No Class)
	Oct.21(M)		(No Class)
3	Oct.28 (M)	0830-1015	1D/3D FEM (2/3)
4	Nov.04 (M)	0830-1015	1D/3D FEM (3/3)
5	Nov.11 (M)	0830-1015	Introduction to Parallel FEM, Login to OBCX, MPI (1/4)
	Nov.18 (M)		(No Class)
6	Nov.25 (M)	0830-1015	MPI (2/4)
7	Dec.02 (M)	0830-1015	Report S1, MPI (3/4)
8	Dec.09 (M)	0830-1015	MPI (4/4)
9	Dec.16 (M)	0830-1015	Report S2, Parallel FEM (1/3)
10	Dec.23 (M)	0830-1015	Parallel FEM (2/3)
11	Jan.06 (M)	0830-1015	Parallel FEM (3/3)
	Jan.13 (M)		(National Holiday, No Class)
12	Jan.20 (M)	0830-1015	Hybrid OpenMP/MPI (1/2)
13	Jan.27 (M)	0830-1015	Hybrid OpenMP/MPI (2/2)

國家理論科學研究中心數學組 Taiwan Mathematics School 2020 : Parallel Finite Element Method using Supercomputer

中島 研吾

東京大学情報基盤センター

2020年2月21日（金）～25日（火）に國立臺灣大學（National Taiwan University, NTU）¹で開催された「國家理論科學研究中心數學組 Taiwan Mathematics School 2020 : Parallel Finite Element Method using Supercomputer」²（共催：國家理論科學研究中心（National Center for Theoretical Sciences）³，東京大学情報基盤センター他）について紹介する。

國立臺灣大學での集中講義は2015年2月から毎年この時期に開催しているが、受講者は東京大学情報基盤センターと研究交流協定覚書（Memorandum of Understanding, MOU）を取り交わしている國立臺灣大學と國立中央大學の学生、教職員に限定されていた。これは、両大学関係者しか東大センターのスパコンを利用できないためである。本集中講義は2017年から國家理論科學研究中心（National Center for Theoretical Sciences, NCTS）の主催となり、國立臺灣大學、國立中央大學以外の受講者も受け入れたいとの意向があったため、東大情報基盤センターとNCTSは2018年1月にMOUを締結した。

本講義の内容は2019年度冬学期に実施した、科学技術計算Ⅱ（大学院情報理工学系研究科数理情報学専攻）／コンピュータ科学アライアンス特別講義Ⅱ（同 コンピュータ科学専攻）／ハイブリッド分散並列コンピューティング（大学院工学系研究科電気系工学専攻）「並列有限要素法入門」⁴と同様の内容であり、2017年度から英語で実施しているため、特別な準備は無しに実施することができた。通常105分×14コマ（＝24.5時間）で実施している一学期分の講義を、表1に示すように5日間（50分×7コマ×5日＝約29.2時間）で実施した。できるだけ演習の時間を十分にとるようにしたが、実際には25日（火）の14:00で予定の内容を終了した。

偏微分方程式の数値解法として、様々な科学技術分野のシミュレーションに使用されている有限要素法（Finite-Element Method, FEM）について、一次元・三次元定常熱伝導問題を対象として、背景となる基礎的な理論から、実用的なプログラムの作成法まで、連立一次方程式解法などの周辺技術も含めて講義を実施し、プログラミングの実習を実施した。プログラミング実習には、当センターの「大規模超並列スーパーコンピュータシステム（Oakbridge-CX, OBCX）⁵」を使用した。OBCXは2019年7月に運用を開始し、各々2基のIntel Xeon Platinum 8280から構成される計算ノードを1,368ノード搭載している。実施した講義内容と資料は東大側で準備したHP⁶で見ることができる。

今回は、旧正月休み明けに新学期が2月17日（月）に開始されるのに合わせて、2月21日（金）～25日（火）に開催した。これは：

¹ <http://www.ntu.edu.tw/>

² <https://sites.google.com/site/school4scicomp/2020-a-nk>

³ <http://www.ncts.ntu.edu.tw/>

⁴ <http://nkl.cc.u-tokyo.ac.jp/19w>

⁵ <https://www.cc.u-tokyo.ac.jp/supercomputer/obcx/service/>

⁶ <http://nkl.cc.u-tokyo.ac.jp/NTU2020/>

- ① 学期中に開催すると、公式な集中講義となり、各大学の単位を取得できるため、出席者のモチベーションが上がる
- ② 土日を含むため、一般の講義への影響は最小限に抑えられる

という意図があった。最終的に 18 名の応募者があったが、受講者は 12 名に留まり、単位を取得したのは残念ながら 2 名だった。本文を執筆中の現在（2020 年 5 月 7 日）も続いている新型コロナウイルス感染症の影響で、台湾全土で新学期の開始が 2 月 17 日から 3 月 2 日に延長となり、「学期外」の開催となったが幸い正式な講義としては認められたようである。

表 1：講義日程・内容

Data	Hour	Content	Date	Hour	Content
Feb.21 (F)	09:10-10:00	Introduction (1/2)	Feb.24 (M)	09:10-10:00	MPI (6/6)
	10:10-11:00	Introduction (2/2)		10:10-11:00	Exercise
	11:10-12:00	FEM (1/6)		11:10-12:00	Exercise
	13:10-14:00	FEM (2/6)		13:10-14:00	MPI Practice (2/3)
	14:10-15:00	FEM (3/6)		14:10-15:00	MPI Practice (3/3)
	15:10-16:00	FEM (4/6)		15:10-16:00	Exercise
	16:10-17:00	Exercise (Optional)		16:10-17:00	Parallel FEM (1/4)
Feb.22 (Sa)	09:10-10:00	FEM (5/6)	Feb.25 (T)	09:10-10:00	Parallel FEM (2/4)
	10:10-11:00	FEM (6/6)		10:10-11:00	Parallel FEM (3/4)
	11:10-12:00	Exercise		11:10-12:00	Parallel FEM (4/4)
	13:10-14:00	Parallel FEM		13:10-14:00	Exercise
	14:10-15:00	Login to OBCX		14:10-15:00	OpenMP/MPI Hybrid (1/2)
	15:10-16:00	MPI (1/6)		15:10-16:00	OpenMP/MPI Hybrid (2/2)
	16:10-17:00	Exercise (Optional)		16:10-17:00	Exercise (Optional)
Feb.23 (Su)	09:10-10:00	MPI (2/6)			
	10:10-11:00	MPI (3/6)			
	11:10-12:00	Exercise			
	13:10-14:00	MPI Practice (1/3)			
	14:10-15:00	MPI (4/6)			
	15:10-16:00	MPI (5/6)			
	16:10-17:00	Exercise (Optional)			

台湾大学からは、事前に何回かわたくし自身にも「このような状況で本当に開催するか？」という確認があった。参加者には図 1 に示すような台湾中央流行疫情指揮中心の示す隔離・検疫・健康管理基準の通達を添付した e-mail が送られ、徹底した感染防止態勢の中で実施された：

- ① 受講者・教員全員マスク（Surgical Mask）を着用する
- ② 広い教室で、受講者間を十分に離して着席する
- ③ 教室の窓を開けて換気に留意する
- ④ 朝、午後の入室前には検温、手指のアルコール消毒を必ず実施する

というようなことが実際に行われていた。宿泊していた施設でも朝食時に入室の際に必ず検温された。筆者が台湾滞在中に、日本では感染が急速に広まり、2 月 24 日（月）には、台湾政府から、日本からの旅行者（台湾在住者も含む）に対して「14 日間の外出自粛、マスク着用、朝

タ2回の検温」が義務づけられた。もう少し入国が遅れていたら最低14日間台湾に留まることになったかも知れない。今回の新型コロナウイルス感染症対策において、台湾は世界で最も成功した国、として世界中から賞賛されている。短い滞在だったが、万事徹底して先手先手に対策を講じていくという強い意志のようなものを、色々なところで感じる事ができた。

本集中講義から3ヶ月弱が経過したが、年度末にあった多くの国内外の学会がキャンセルとなった。新学期を迎えて大学の講義やセンター主催の講習会もオンラインで実施されており、学会もオンライン化が進められている。思えば、10人以上の聴衆を相手にオフラインで講演をしたのは、本集中講義が最後であった。例年7月に台湾で開催していたマルチコア・メニィコア向け並列プログラミングの集中講義⁷も本年は中止となってしまった。これらの活動が再開される日が来ることを祈って、Staying Homeの毎日を送っている。

本集中講義の実施に当たっては王偉仲教授（国立台湾大学）を始め、関係者の皆様には大変お世話になった。この場を借りて深く御礼申し上げる次第である。

具感染風険民眾追蹤管理機制

資料更新日期 2020/2/5

介入措施	居家隔离	居家檢疫	自主健康管理
對象	確定病例之接觸者	具中港澳旅遊史者	對象1:申請赴港澳准准者 對象2:通報個案但已檢驗陰性且符合解除隔離條件者
負責單位	地方衛生主管機關	地方政府民政局/里長或里幹事	衛生主管機關
方式	居家隔离14天 主動監測1天2次	居家檢疫14天 主動監測1天1~2次	自主健康管理14天
配合事項	- 衛生主管機關開立「居家隔離通知書」。 - 衛生主管機關每日追蹤2次健康狀況。 - 隔離期間留在家中(或指定地點)不外出、亦不得出境或出國、不得搭乘大眾運輸工具。 有症狀者由衛生主管機關安排就醫。 - 如未配合中央流行疫情指揮中心防治措施、將依傳染病防治法裁罰、必要時進行強制安置。	- 主管機關開立「旅客入境健康聲明暨居家檢疫通知書」，配戴口罩返家檢疫。 - 里長或里幹事進行健康關懷14天，每日撥打電話詢問健康狀況並記錄「健康關懷紀錄表」。 - 檢疫期間留在家中(或指定地點)不外出、亦不得出境或出國、不得搭乘大眾運輸工具。 有症狀者將送指定醫療機構採檢送驗，衛生主管機關加入主動監測。 - 如未配合中央流行疫情指揮中心防治措施、將依傳染病防治法裁罰、必要時進行強制安置。	自主健康管理期間應盡量避免外出、如需外出應全程配戴外科口罩；落實呼吸道衛生及咳嗽禮節每日早/晚各量體溫一次；期間如出現不適症狀、請立即撥打防疫專線1922依指示就醫。
法令依據	傳染病防治法第48條	傳染病防治法第58條	傳染病防治法第36條

中央流行疫情指揮中心 關心您



www.cdc.gov.tw

疫情通報及諮詢專線：1922

圖 1

図1：台湾中央流行疫情指揮中心の示す隔離・検疫・健康管理基準



図2：受講者・教員全員マスク着用

⁷ <http://nkl.cc.u-tokyo.ac.jp/NTU2019S>

原 稿 募 集

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

執 筆 要 項

- 1 内容は、本センターのスーパーコンピューターシステムの利用者にとって有意義な情報の提供となる原稿とします。
- 2 掲載可否については当編集委員会で決定させていただきます。
- 3 掲載可とした投稿原稿に対して、加除訂正を行うことがあります。
- 4 原稿枚数には特に制限はありませんが、シリーズに分割することもあります。
- 5 プログラムの実例が大量になる場合(概ね1頁を超える)は、本文には一部のみを記述し、投稿者の Web ページ等に全体を掲載し、その URL を引用するようにしてください。
- 6 原稿は横書きにしてください。
- 7 原稿は、印刷出来上がり寸法がB 5判で文字の大きさ9ポイントを標準とし、印字部分は必ず左端を2.5cm以上空けて、縦21cm、横14cmになるようにしてください。A 4サイズの場合はB 5サイズに縮小した場合に上記のサイズになるようにしてください。
併せて、PDF 形式(フォント埋め込み)の完全原稿を電子メールにて uketsuke@cc. u-tokyo. ac. jp まで提出願います。
- 8 投稿原稿は返却しません。
- 9 採用された原稿は、本センターの Web ページ上でも掲載させていただきます。
希望がある場合は、1タイトルにつき50部の別刷を差し上げます。

【スーパーコンピュータシステム利用案内】

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

お問い合わせ内容	お問い合わせ先
利用申込関係	電子メール : uketsuke@cc.u-tokyo.ac.jp スーパーコンピュータシステム利用申込書提出先 〒113-8658 東京都文京区弥生 2-11-16 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
システムに関する要望・提案	voice@cc.u-tokyo.ac.jp

【IP ネットワーク経由時のホスト名】

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

※どのホストに接続しても同じです。

【編集】

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
 〒113-8658 東京都文京区弥生2-11-16
 (電話) 03-5841-2717 (ダイヤルイン)
 (FAX) 03-5841-2708

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」 採択課題のお知らせ	5
2020年度(前期)東京大学情報基盤センター 「若手・女性利用者推薦」採択課題	9
7大学スーパーコンピュータ比較表	23
7大学スーパーコンピュータ利用負担金表	24
スーパーコンピュータ利用による成果報告(2019年)	30
研究成果登録のお願い	31
部門の人事異動	32
2月・3月のジョブ統計	33

ユーザーから

bruciteの(0001)面における摩擦特性の決定	38
----------------------------	----

教育活動報告

東京大学情報理工学系研究科コンピュータ科学専攻開講科目 「計算科学プログラミングⅡ」	44
科学技術計算Ⅱ／コンピュータ科学特別講義Ⅱ ／ハイブリッド分散並列コンピューティング:「並列有限要素法入門」	46
國家理論科學研究中心數學組 Taiwan Mathematics School 2020: Parallel Finite Element Method using Supercomputer	48

原稿募集	51
------	----