

スーパーコンピューティング ニュース

Vol.23 No.4, 2021.7



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(2021 年 5 月 14 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		
一般申込	【Wisteria-O/A】 申込 1 セット当り 60,000 円 (8,640 トークン)		グループ 1 セット当り /work 2TB 利用者当り /home 50GB	【Wisteria-O】 最大ノード数 2,304 ノード 【Wisteria-A】 最大 GPU 数 64
公募制度による申込 (Wisteria-A における 「GPU 専有申込」,「ノード 固定」も可能)	【Wisteria-O】 申込 1 セット当り 60,000 円 (8,640 トークン)	【Wisteria-O】 申込 1 セット当り 72,000 円 (8,640 トークン)	グループ 1 セット当り /work 2TB 利用者当り /home 50GB	
	【Wisteria-A】 申込 1 セット当り 180,000 円 (25,920 トークン)	【Wisteria-A】 申込 1 セット当り 216,000 円 (25,920 トークン)	グループ 1 セット当り /work 6TB 利用者当り /home 50GB	
GPU 専有申込 (Wisteria-A のみ, 公募 制度による申込可能)	【Wisteria-A】 申込 1 セット当り 270,000 円 (25,920 トークン)	【Wisteria-A】 申込 1 セット当り 324,000 円 (25,920 トークン)	グループ 1 セット当り /work 6TB 利用者当り /home 50GB	1, 2, 4GPU のみ申込可, 申込単位は下表参照, 利 用期間は 1 ヶ月単位で設 定可
ノード固定 (Wisteria-A のみ, 公募 制度による申込可能)	【Wisteria-A】 申込 1 セット当り 2,160,000 円 (207,360 トークン)	【Wisteria-A】 申込 1 セット当り 2,592,000 円 (207,360 トークン)	グループ 1 セット当り /work 48TB 利用者当り /home 50GB	1 ノード 8GPU 1 年分, 1 セ ットのみ申込可, 利用期間 は 1 ヶ月単位で設定可
トークン追加	5,000 円 (720 トークン)	6,000 円 (720 トークン)		
ディスク追加	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。

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

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

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

※公募制度による申し込み、ノード固定の申し込みには審査を要する。

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

※GPU 専有申込の申込単位

GPU 数	トークン量	大学・公共機関等	企業
1	25,920	270,000 円	324,000 円
2	51,840	540,000 円	648,000 円
4	103,680	1,080,000 円	1,296,000 円

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-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-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-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-H	申込 1 セット当り 公募制度 180,000 円 (21,600 ノード時間)	申込 1 セット当り 公募制度 216,000 円 (21,600 ノード時間)	グループ 1 セット当り /lustre 4TB 利用者当り /home 2GB	最大ノード数 32 ノード
	公募制度・ ノード固定 Reedbush-L	申込 1 セット当り 公募制度 300,000 円 ノード固定 450,000 円 (34,560 ノード時間)	申込 1 セット当り 公募制度 360,000 円 ノード固定 540,000 円 (34,560 ノード時間)	グループ 1 セット当り /lustre 4TB 利用者当り /home 2GB	最大ノード数 16 ノード
トークン追加		6,300 円 (720 ノード時間)	7,500 円 (720 ノード時間)		
ディスク追加		6,480 円/(1TB*年)			1TB 単位で申込可 (/lustre のみ)

※トークン消費係数は下記の通りである。

Reedbush-H: 2.50, Reedbush-L: 4.00

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

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

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

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

※公募制度・ノード固定の申し込みには審査を要する。

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

トークン移行におけるノード時間積の換算表

移行元 \ 移行先	Reedbush-H/L システム	Oakforest-PACS システム	Oakbridge-CX システム	Wisteria/BDEC-01 システム
Reedbush-H/L システム	—	1.5	0.75	1.2
Oakforest-PACS システム	0.6	—	0.5	0.8
Oakbridge-CX システム	1.3	2	—	1.6
Wisteria/BDEC-01 システム	0.8	1.2	0.6	—

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 (Wisteria/BDEC-01, 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。

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 (2021 年 5 月 14 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
		正式運用 期間	試験運用 期間			
debug-o	1 ～ 144 (6,912)	30 分	30 分	28	○	○
short-o	1 ～ 72 (3,456)	8 時間	4 時間	28	○	○
(regular-o)						
small-o	1 ～ 144 (6,912)	48 時間	12 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	6 時間	"	○	○
priority-o	1 ～ 288 (13,824)	48 時間	12 時間	28	○	○
challenge-o	1 ～ 7,680 (368,640)	24 時間	-	28	★	★
(interactive-o) ※4						
interactive-o.n1	1 (48)	30 分	30 分	28	○	○
interactive-o.n12	2 ～ 12 (576)	10 分	10 分	"	○	○
prepost	1 (56)	6 時間	3 時間	340	○	○
prepost1.n1 ～ prepost4.n1	1 (56)	1～6 時間	1～3 時間	340	○	○
prepost1.n4	1 ～ 4 (224)	1～6 時間	1～3 時間	340	○	○
prepost1.n8	1 ～ 8 (448)	1～6 時間	1～3 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
		正式運用 期間	試験運用 期間					
debug-a	1 ノード (8)	30 分	30 分	448	○	○	○	○
short-a	1 ～ 2 ノード (16)	2 時間	1 時間	448	○	○	○	○
(regular-a)								
small-a	1 ～ 2 ノード (16)	48 時間	12 時間	448	○	○	○	○
medium-a	3 ～ 4 ノード (32)	"	"	"	○	○	○	○
large-a	5 ～ 8 ノード (64)	24 時間	6 時間	"	○	○	○	○
share-debug	1, 2, 4 GPU	30 分	30 分	56	○	○	○	○
share-short	1, 2, 4 GPU	2 時間	1 時間	56	○	○	○	○
(share)								
share-1	1 GPU	48 時間	12 時間	56	○	○	○	○
share-2	2 GPU	"	"	"	○	○	○	○
share-4	4 GPU	24 時間	6 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	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"

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	"	○	○	○

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

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

※2 トークンの消費係数は 1.00

※3 1ノード当りの利用者が利用可能なメモリー容量

※4 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-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 (2020 年 4 月 1 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							
l-interactive_1	1 (4)	24 時間	244	○	○	○	○
l-interactive_2	2 (8)	6 時間	"	○	○	○	○
l-interactive_4	3 ~ 4 (16)	1 時間	"	○	○	○	○
(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

2021 年 7 月下旬からの計算機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【 5 月 14 日～7 月 29 日 試験運用期間、8 月 2 日～ 正式運用開始 】

○ Wisteria/BDEC-01 スーパーコンピュータシステム試験運用開始のお知らせ

2021 年 5 月 14 日（金）10:00 に試験運用を開始しました。8 月 2 日（月）10:00 より正式運用を開始します。
なお、10 月以降、Wisteria/BDEC-01 スーパーコンピュータシステムにおいても大規模 HPC チャレンジを実施する予定です。
募集等につきましては、8 月以降ウェブページ(<https://www.cc.u-tokyo.ac.jp/guide/hpc/>)でご案内する予定です。

○ Wisteria/BDEC-01 スーパーコンピュータシステム サービス休止のお知らせ

日 付	利用者サービス	センター内作業
7 月 29 日（木）～ 8 月 2 日（月）	7/29 9:00 ～ 8/2 10:00 までサービス休止	月末処理
8 月 20 日（金）～ 8 月 24 日（火）	8/20 13:00 ～ 8/24 17:00 までサービス休止	特別高圧受変電設備点検・二次変電設備点検、月末処理
9 月 22 日（水）	9:00 ～ 22:00 までサービス休止	月末処理

- ・ Wisteria/BDEC-01 システムは、原則 24 時間サービスを行っています。
ただし、月末処理日（原則として毎月最終金曜日）はサービスを停止します。

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
7 月 30 日（金）	9:00 ～ 20:00 までサービス休止	月末処理
8 月 10 日（火）～ 8 月 17 日（火）	8/10 9:00 ～ 8/17 17:00 までサービス休止	電力消費節減のため
8 月 27 日（金）	9:00 ～ 20:00 までサービス休止	月末処理
9 月 24 日（金）～ 9 月 27 日（月）	9/24 9:00 ～ 9/27 17:00 までサービス休止	月末処理、空調機メンテナンス、特別高圧受変電設備点検・二次変電設備点検

- ・ 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
7 月 29 日（木）8:30 ～ 17:30 まで
8 月 26 日（木）8:30 ～ 17:30 まで
9 月 22 日（水）8:30 ～ 17:30 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
7 月 28 日 (水)	9:00 ～ 22:00 までサービス休止	月末処理
8 月 10 日 (火) ～ 8 月 17 日 (火)	8/10 9:00 ～ 8/17 17:00 までサービス休止	電力消費節減のため
8 月 25 日 (水)	9:00 ～ 22:00 までサービス休止	月末処理
9 月 24 日 (金) ～ 9 月 27 日 (月)	9/24 9:00 ～ 9/27 17:00 までサービス休止	月末処理、空調機メンテナンス、特別高圧受変電設備点検・二次変電設備点検

- ・ 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水曜日）はサービスを停止します。

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

大規模 HPC チャレンジ 実施期間
7 月 27 日 (火) 8:30 ～ 17:30 まで
8 月 24 日 (火) 8:30 ～ 17:30 まで
9 月 22 日 (水) 8:30 ～ 17:30 まで

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

Reedbush スーパーコンピュータシステム

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

日 付	利用者サービス	センター内作業
7 月 30 日 (金)	9:00 ～ 17:00 までサービス休止	月末処理
8 月 10 日 (火) ～ 8 月 17 日 (火)	8/10 9:00 ～ 8/17 17:00 までサービス休止	電力消費節減のため
8 月 27 日 (金)	9:00 ～ 17:00 までサービス休止	月末処理
9 月 24 日 (金) ～ 9 月 27 日 (月)	9/24 9:00 ～ 9/27 17:00 までサービス休止	月末処理・二次変電設備定期点検

- ・ 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
7 月 29 日 (木) 9:00 ～ 7 月 30 日 (金) 9:00 まで
8 月 26 日 (木) 9:00 ～ 8 月 27 日 (金) 9:00 まで
9 月 21 日 (火) 9:00 ～ 9 月 22 日 (水) 9:00 まで

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

【注意事項】

- ・ サービス休止等の計画は原稿作成時の予定です。やむを得ずサービスを変更したり、休止したりする場合がありますので、最新の情報は login 時のメッセージ及びスーパーコンピュータ部門の 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。
- * Oakbridge-CX 及び Oakforest-PACS において、新型コロナウイルス感染症拡大防止に配慮し、一部条件を変更して実施しております。詳細は Web ページ (<https://www.cc.u-tokyo.ac.jp/guide/hpc/>) をご覧ください。なお Reedbush-H においては引き続き中止しております。

システム変更等のお知らせ

(2021.4.29 - 2021.6.30 変更)

1. ハードウェア

1.1 Wisteria/BDEC-01 スーパーコンピュータシステム

… 新規

全体構成

項目		Wisteria-O (Odyssey)	Wisteria-A (Aquarius)
総理論演算性能		25.9 PFLOPS	7.2 PFLOPS
総ノード数		7,680	45
総主記憶容量		240.0 TiB	36.5 TiB
インターコネクト		Tofu インターコネクト D	InfiniBand HDR (200Gbps) x 4
ネットワークポロジ		6 次元メッシュ / トーラス	Full-bisection Fat Tree
共有 ファイル システム	システム名	FEFS (Fujitsu Exabyte File System)	
	サーバ(OSS)	DDN SFA7990XE	
	サーバ(OSS)数	16	
	ストレージ容量	25.8 PB	
	ストレージデータ転送速度	193.9 GB/s	
高速 ファイル システム	システム名	FEFS (Fujitsu Exabyte File System)	
	サーバ(OSS)	DDN SFA400NVXE	
	サーバ(OSS)数	16	
	ストレージ容量	1.0 PB	
	ストレージデータ転送速度	1.0 TB/s	

ノード構成

項目		Wisteria-O (Odyssey)	Wisteria-A (Aquarius)
マシン名		FUJITSU Supercomputer PRIMEHPC FX1000	FUJITSU Server PRIMERGY GX2570 M6
CPU	プロセッサ名	A64FX	Intel Xeon Platinum 8360Y (開発コード名 : Ice Lake)
	プロセッサ数(コア数)	1 (48+アシスタントコア 2 or 4)	2 (36+36)
	周波数	2.2 GHz	2.4 GHz
	理論演算性能	3.3792 TFLOPS	5.53 TFLOPS
	メモリ容量	32 GB	512 GiB
	メモリ帯域幅	1,024 GB/s	409.6 GB/s
GPU	プロセッサ名	—	NVIDIA A100
	SM 数 (単体)		108
	メモリ容量 (単体)		40 GiB
	メモリ帯域幅 (単体)		1,555 GB/s
	理論演算性能 (単体)		19.5 TFLOPS
	搭載数		8
	CPU-GPU 間接続		PCI Express Gen4 x 16 レーン (1 レーンあたり片方向 32 GB/s)
	GPU 間接続		NVLink x 12 本 (1 本あたり片方向 25GB/s)

1.2 Oakbridge-CX スーパーコンピュータシステム

… なし

1.3 Oakforest-PACS スーパーコンピュータシステム

… なし

1.4 Reedbush スーパーコンピュータシステム (Reedbush-H/L) … なし

2. ソフトウェア

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

項目	Wisteria-O (Odyssey)	Wisteria-A (Aquarius)
OS	Red Hat Enterprise Linux 8	
コンパイラ	GNU コンパイラ	
	富士通社製 コンパイラ (Fortran77/90/95/2003/2008、C、C++)	Intel コンパイラ (Fortran77/90/95/2003/2008、C、C++) NVIDIA HPC SDK (Fortran77/90/95/2003/2008、C、C++、OpenACC 2.7) NVIDIA CUDA SDK (CUDA C、CUDA C++)
メッセージ通信 ライブラリ	富士通社製 MPI	Intel MPI、Open MPI
ライブラリ	SuperLU、SuperLU MT、SuperLU DIST、METIS、MT-METIS、ParMETIS、Scotch、PT-Scotch、PETSc、Trilinos、FFTW、GNU Scientific Library、NetCDF、Parallel netCDF、HDF5、Parallel HDF5、CMake、Miniconda、Xabclib、ppOpen-HPC、MassiveThreads、Boost C++、mpiJava	
	富士通社製ライブラリ (BLAS、CBLAS、LAPACK、ScaLAPACK)	Intel 社製ライブラリ(MKL)(BLAS、CBLAS、LAPACK、ScaLAPACK)、cuBLAS、cuSPARSE、cuFFT、MAGMA、cuDNN、NCCL
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、Chainer、PyTorch、Keras、Horovod、MXNet	
	—	Theano
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	
	—	Globus Toolkit、Gfarm、FUSE
コンテナ仮想化	Singularity	

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

VTune Amplifier XE	020.3.0.612611	(2021.05.28)
LAMMPS	29Oct2020	(2021.05.28)

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, CentOS 7 (Oakforest-PACS) … なし

2.4 RedHat Enterprise Linux 7 (Reedbush-H/L) … なし

pytorch	1.4.0	(2020.05.28)
	1.8.1	
chainer	7.2.0	(2020.05.28)
tensorflow	1.4.0	(2020.05.28)
	1.8.0	
keras	2.0.5	(2020.06.25)
	2.1.2	
horovod	0.15.2	(2020.06.25)
theano	0.8.2	(2020.06.25)
	0.9.0	

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 における Anaconda 社がサービス提供するリポジトリの利用規約改定に伴う作業

- 代替のツールとして Miniconda を導入しました。
Anaconda を利用していたアプリケーションは順次、Miniconda へ移行を行います。ライセンス条件については以下をご参照ください。
<https://www.anaconda.com/terms-of-service>
また、Miniconda で conda を使ってモジュールインストールする場合は Anaconda 以外のレポジトリ(conda-forge など)を利用する必要があります。

以下のアプリケーションが利用可能になりました。

Miniconda3/Python3.8_4.9.2、Miniconda3/Python3.9_4.9.2、Miniconda2/Python2.7_4.8.3

以下のアプリケーションが Miniconda 用に更新されました。

(2021/5/28) pytorch/1.4.0、pytorch/1.8.1、chainer/7.2.0、tensorflow/1.4.0、tensorflow/1.8.0

(2021/6/25) keras/2.0.5、keras/2.1.2、horovod/0.15.2、theano/0.8.2、theano/0.9.0

3.2 Wisteria/BDEC-01 スーパーコンピュータシステムの運用について

Wisteria/BDEC-01 スーパーコンピュータシステムは 2021 年 5 月 14 日から試験運用を開始し、8 月 2 日より正式運用を開始いたします。

本誌関連記事「Wisteria/BDEC-01 スーパーコンピュータシステム正式運用に関するお知らせ」、または、当センター Web ページ(https://www.cc.u-tokyo.ac.jp/supercomputer/wisteria/service/wisteria_test.php)をご覧ください。

3.3 Reedbush-H/L サービス終了について

Reedbush-H/L スーパーコンピュータシステムは 2021 年 11 月末をもってシステムを停止し、すべてのサービスを終了致します。詳細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-H/L 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 Wisteria/BDEC-01、Oakbridge-CX をご検討ください。
- 一般利用にて Reedbush-H/L をご利用の方は「トークン移行」を行うことが可能です。
Wisteria/BDEC-01、Oakbridge-CX 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。

「計算・データ・学習」融合スーパーコンピュータシステム 「Wisteria/BDEC-01」の特長

富士通株式会社
コンピューティング 事業本部
計算科学事業部) 坂口 吉生

1. システムの概要

2021年5月14(金)から試験運用を開始した、「計算・データ・学習」融合スーパーコンピュータシステム「Wisteria/BDEC-01^{*1}」のシステム概要について記載します。

Odyssey は 7,680 台の計算ノード「FUJITSU Supercomputer PRIMEHPC FX1000」で構成され、総理論演算性能(倍精度浮動小数点演算性能)は 25.9 PFLOPS です。FX1000 は高性能プロセッサ(A64FX)と高速メモリを採用し、1 ノードあたり 48 コア/CPU で 3.3TFLOPS(倍精度)の理論演算性能と 1,024GB/s の高いメモリバンド幅を有しています。

Aquarius は 45 台の計算ノード「FUJITSU Server PRIMERGY GX2570 M6」で構成され、総理論演算性能(倍精度浮動小数点演算性能)は 7.2 PFLOPS です。各ノードに NVIDIA A100^{*2}を 8 枚搭載し、複数 GPU 並列実行にも対応します。各ノードは InfiniBand HDR で接続し、ノード間インターコネクト通信とファイル共有を行ないます。

ストレージ環境は、全ての計算ノードとログインノードから、FEFS(Fujitsu Exabyte File System)によりファイル共有され、高速ファイルシステムが 1PB、共有ファイルシステムが 25.8PB で構成されています。以下「図 1」に Wisteria/BDEC-01 のシステム全体の概要を記載します。

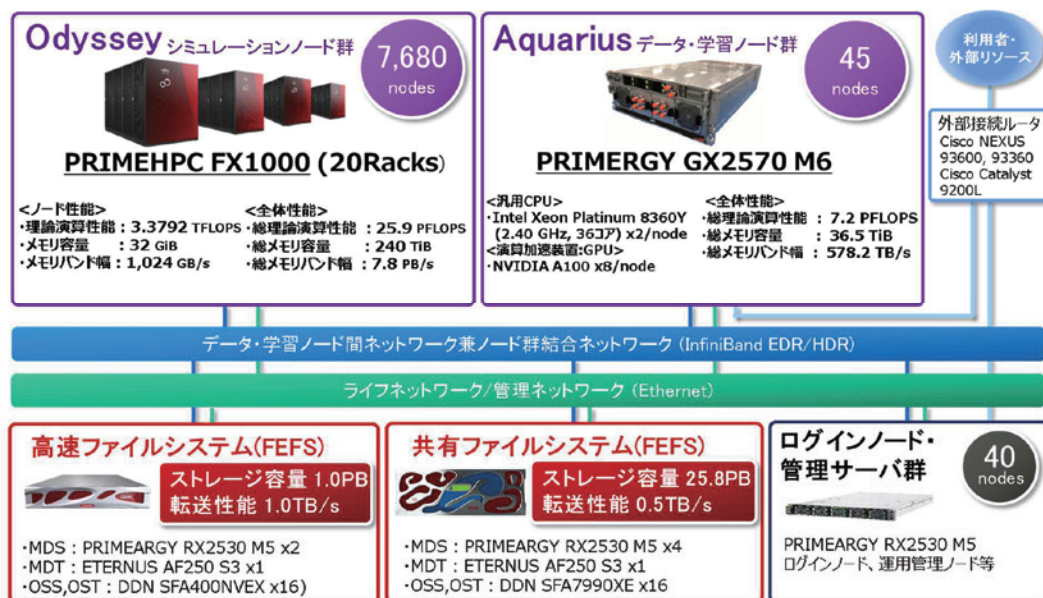


図 1 Wisteria/BDEC-01 システム概要

^{*1} <https://www.cc.u-tokyo.ac.jp/supercomputer/wisteria/service/>

^{*2} 文中に記載のシステム名、製品名等は、必ずしも商標表示(TM、®)を付記していません。

Wisteria/BDEC-01 のシミュレーションノード群の Odyssey および、データ・学習ノード群の Aquarius それぞれのシステム構成を「表 1」に記載します。

表 1 Wisteria/BDEC-01 のシステム構成

項目		Odyssey	Aquarius
機種名		FUJITSU Supercomputer PRIMEHPC FX1000	FUJITSU Server PRIMERGY GX2570 M6
冷却方式		水冷方式	
総理論演算性能		25.9 PFLOPS	7.2 PFLOPS
総ノード数		7,680	45
総メモリ容量		240 TiB	36.5 TiB
総メモリバンド幅		7.8 PB/s	578.2 TB/s
ネットワークトポロジ		6 次元メッシュ/トーラス	Full-bisection Fat Tree
CPU	プロセッサ名	A64FX	Intel Xeon Platinum 8360Y
	プロセッサ数	1	2
	コア数	48	72
	アシスタントコア数	2 (計算ノード), 4 (IO 兼計算ノード)	—
	周波数	2.2 GHz	2.4 GHz
	理論演算性能	3.3792 TFLOPS	5.53 TFLOPS
	メモリ容量	32 GiB	512 GiB
	メモリバンド幅	1,024 GB/s	409.6 GB/s
GPU	プロセッサ名	-	NVIDIA A100
	SM 数(単体)		108
	メモリ容量(単体)		40 GiB
	メモリバンド幅(単体)		1,555 GB/s
	理論演算性能(単体)		19.5 TFLOPS
	搭載枚数(ノードあたり)		8
	CPU-GPU 接続		PCI Express Gen4 x 16lane (1 lane 片方向 32 GB/s)
	GPU 間接続		NVLink x 12 本 (1 本あたり片方向 25GB/s)
共有 FS	ファイルシステム	FEFS (Fujitsu Exabyte File System)	
	装置名称	DDN SFA7990XE	
	サーバ数	16	
	ストレージ容量	25.8 PB	
	転送速度	0.5 TB/s	
高速 FS	ファイルシステム	FEFS (Fujitsu Exabyte File System)	
	装置名称	DDN SFA400NVXE	
	サーバ数	16	
	ストレージ容量	1 PB	
	転送速度	1 TB/s	

2. ハードウェアの特長

2.1 FX1000

2.1.1 高性能 Arm プロセッサ「A64FX」とハード構成

A64FX は、CPU チップあたり計算コア 48 個(アシスタントコア 2 or 4 個)、入出力に HBM2 インタフェース 4 組、TofuD インタフェース、PCIe インタフェースを備えます。(表 2 参照)

A64FX を搭載する CPU メモリユニット(以降 CMU と表記)は、コールドプレートに冷水を循環させ、低温を保ち故障率を低く抑えます。BoB(Bunch of Blades)は、8 個の CMU で構成し、16 台の計算ノードとなり FX1000 システムの制御単位となります。また、3 個の BoB 構成をシェルフと呼び、8 シェルフを搭載したラックは、最大 384 ノード構成となります。(図 2 参照)

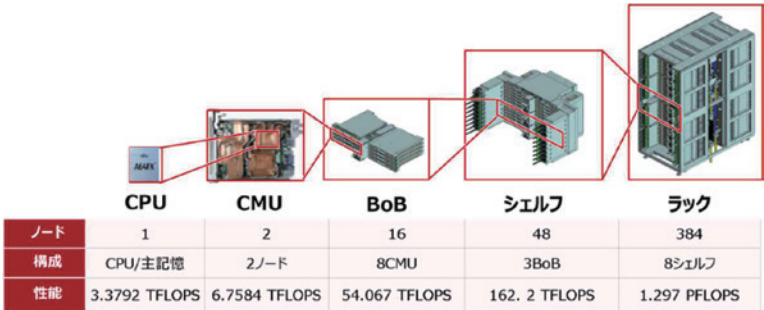


図 2 FX1000 ハードウェア階層と名称

表 2 A64FX 諸元

コア数	計算コア アシスタントコア	48 2 (計算ノード), 4 (IO 兼計算ノード)
ピーク性能		3.3792Tflops (倍精度),6.7584Tflops(単精度),13.5168Tflops(半精度)
L2 キャッシュ容量		32 MiB
メモリ容量		32 GiB
メモリ理論帯域		1,024 GB/s
インターコネクト理論帯域		68 GB/s x2 (in/out)
I/O 理論帯域		15.75 GB/s x2 (in/out)
プロセステクノロジー		7nm CMOS FinFET
トランジスタ数		約 90 億個

2.1.2 Arm 命令セットのベクトル拡張 Scalable Vector Extension

SVE は Armv8-A 命令セットにスケーラブルなベクトル演算を拡張します。SVE のデータ型は一般的な倍精度浮動小数点数、単精度浮動小数点数に加え、深層学習を加速する半精度浮動小数点数(FP16)をサポートします。

2.1.3 3 次元積層メモリ HBM2

A64FX が使用する HBM2 は 2.5 次元実装向けの 3 次元積層メモリです。HBM2 は TSV が形成されたメモリダイを最大 8 枚積層し、独立した 128 ビット幅のチャンネルを 8 つ搭載します。

HBM2 のデータ信号伝送速度は 2.0Gbps で、128 ビット幅のチャンネルあたりメモリ帯域は 32 GB/s です。1 スタックのメモリ帯域は 8 チャンネル合計で 256 GB/s です。HBM2 を 4 スタック使用する A64FX のメモリ帯域は 1,024GB/s、メモリ容量は 32 GiB となります。

2.1.4 ノード・プロセッサ構成

メニーコアプロセッサではコア、キャッシュ、メモリ間の接続方法は非常に重要な課題であり、A64FX では Core Memory Group (以降 CMG と表記) という 4 つのグループに分割する方式を採用しています。1 つの CMG は、12 個の計算コア、2 次キャッシュ、メモリコントローラ、アシスタントコア等で構成されます。4 つの CMG 間はキャッシュ一貫性が維持されており、システムソフトウェアは CMG を NUMA ノードとして扱うことができます。

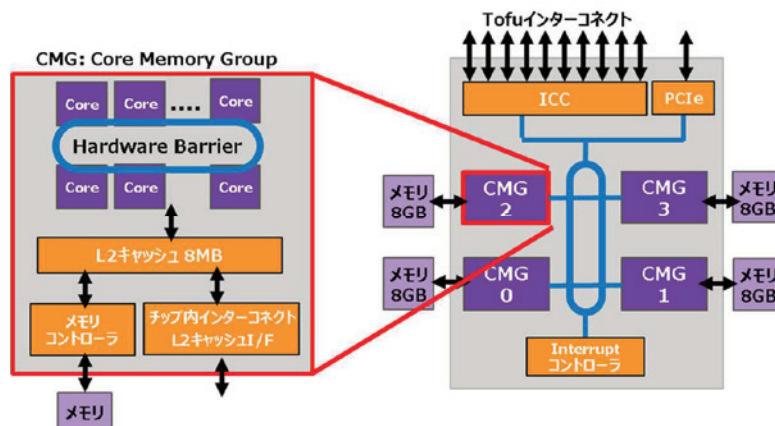


図 3 ノード・プロセッサの構成

2.1.5 Tofu インターコネクト D

TofuD は、A64FX に内蔵された、超並列システムを構築するインターコネクトです。6 次元メッシュ・トーラスのトポロジは、6 次元のうち X,Y,Z 軸はシステム構成により長さが可変で、Odyssey の場合 10,8,8 の形状で、残りの A,B,C 軸は長さが 2,3,2 に固定されています。

6 次元での相互接続のため、各ノードは 10 個の接続ポートを備えます。ユーザビューのトポロジは、1 次元/2 次元/3 次元の仮想的なトーラスです。バイセクションバンド幅は、XY 面、YZ 面、XZ 面で分割した場合の最小値となります。XY 面分割、YZ 面分割、XZ 面分割で、最小値となる XZ 面分割の場合で、 $10(X \text{ 軸}) \times 8(Z \text{ 軸}) \times 1(Y \text{ 軸メッシュ}) \times 12(\text{Tofu 単位リンク}) \times 6.8\text{GB/s} \times 2(\text{双方向}) / 1000 = 13.056 \text{ TB/s}$ となります。(図 4 参照)

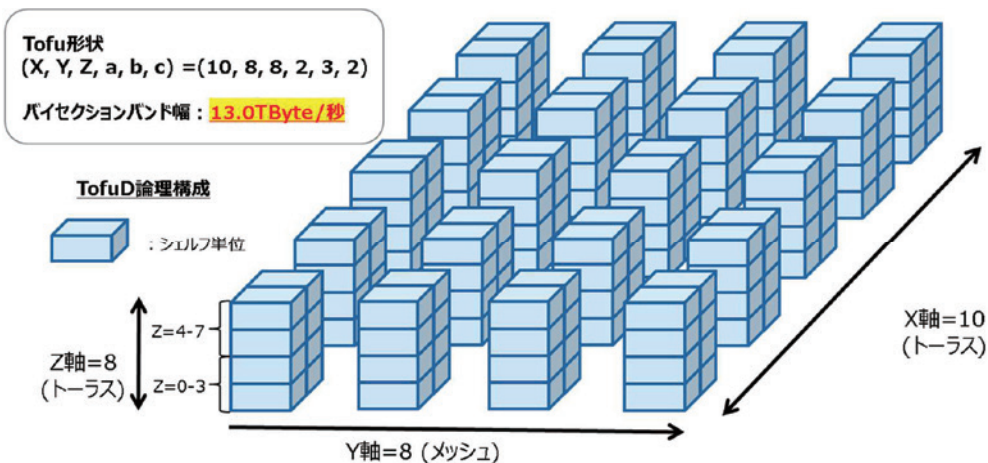


図 4 Odyssey の Tofu 形状とバイセクションバンド幅

2.2 GX2570M6

Aquarius は、8 基の GPU を搭載し、大規模な解析業務や人工知能(AI)/ディープラーニング用途に最適な 2WAY ラック型(4U)サーバ「FUJITSU Server PRIMERGY GX2570 M6」が 45 台で構成されています。GX2570 M6 は、Intel® Xeon Platinum 8360Y を 2 基、メモリ 512GiB、NVIDIA A100 を 8 基、InfiniBand HDR を 4 枚搭載した水冷方式の高密度実装サーバです。(図 5 参照)

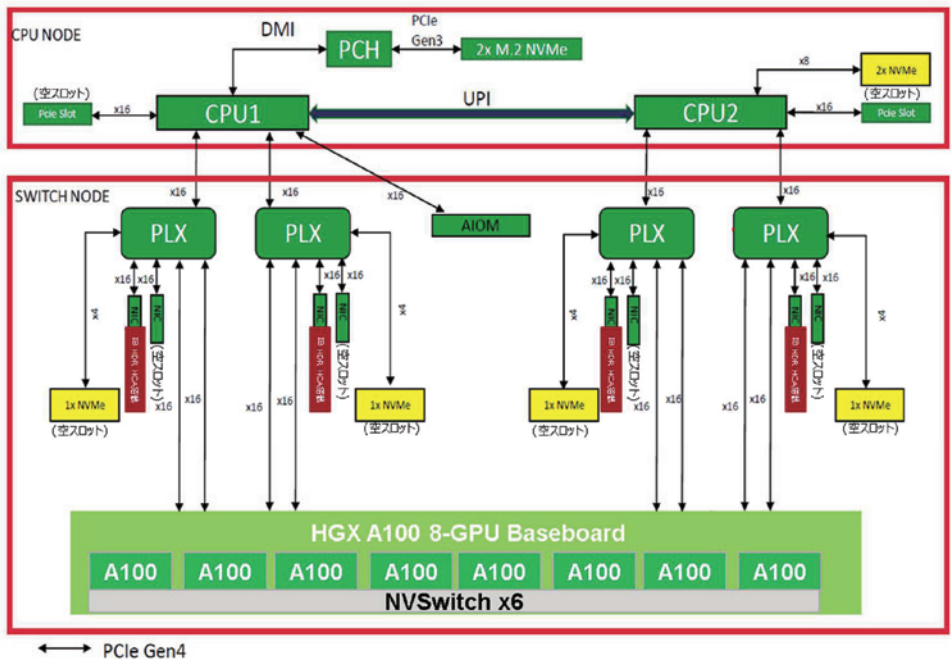


図 5 GX2570M6 のブロック図

2.3 ストレージシステム

2.3.1 共有ファイルシステムの OSS/OST

Wisteria/BDEC-01 の共有ファイルシステムは、「DDN SFA7990XE」1 台と「DDN SS9012 Enclosure」1 台で 1 セットを構成し、合計 16 セットでビルディングブロックを構成しています。

表 3 共有ファイルシステム DDN SFA7990XE

DDN SFA7990XE 1 台あたりの構成	
コントローラ	Active/Active Dual Controller
ストレージキャッシュ	16GiB (Battery-Backup) /Controller
ストレージネットワーク	2port×InfiniBand HDR100 / Controller
管理インタフェース	Mgmt x2、BMC 用 x2
搭載ドライブ	NL-SAS HDD 12TB (7.2krpm)
RAID レベル	RAID6(8D+2P) [ダブルパリティ]
有効利用容量	1.6128 PB
ストレージ転送速度	31.51GByte/秒
DDN SS9012 Enclosure 1 台あたりの構成	
シャーシ	90 Drive Slot / 4U
対応ドライブ	SSD, SAS, NL-SAS



2.3.2 高速ファイルシステムの OSS/OST

Wisteria/BDEC-01 の高速ファイルシステムは、All Flash ブロックストレージ「DDN SFA400NVXE」 16 台でビルディングブロックを構成しています。

表 4 高速ファイルシステム DDN SFA400NVXE

DDN SFA400NVXE 1 台あたりの構成	
コントローラ	Active/Active Dual Controller
ストレージキャッシュ	32GiB (Battery-Backup) /Controller
ストレージネットワーク	4port×InfiniBand HDR100 / Controller
管理インタフェース	Mgmt x2、BMC 用 x2
搭載ドライブ	NVMe SSD 3.84TB
RAID レベル	RAID6(8D+2P) (ダブルパリティ)
有効利用容量	67.5TB
ストレージ転送速度	63.0GByte/秒



3. ソフトウェアの特長

3.1 Technical Computing Suite

Wisteria/BDEC-01 のシステム運用管理やアプリケーション利用環境は、HPC ミドルウェア「FUJITSU Software Technical Computing Suite」です。Technical Computing Suite は、並列プログラム開発環境・並列処理ライブラリ、ファイルシステム環境、ジョブ運用管理機能など、高速な科学シミュレーションや AI/機械学習を効率的に実行し、システム運用を効率化するためのシステムソフトウェアです。

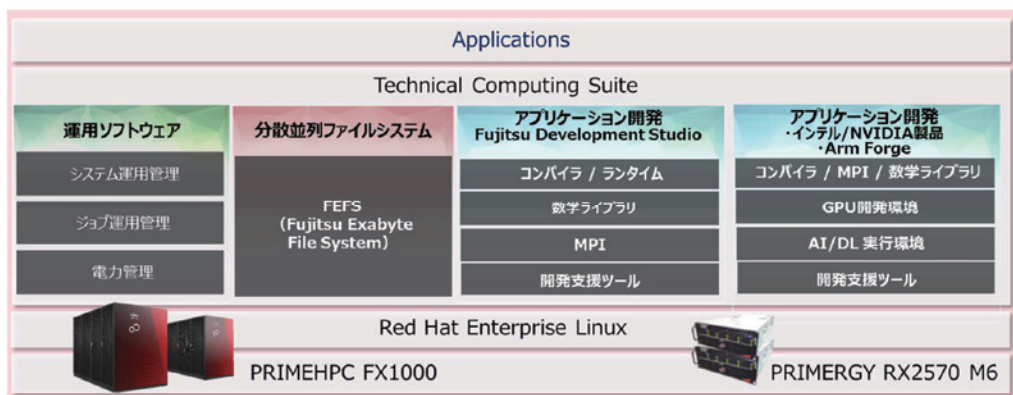


図 6 HPC ミドルウェアの構成

3.2 アプリケーション開発環境

3.2.1 Fujitsu Development Studio

FX1000 向けのアプリケーション開発環境である Fujitsu Development Studio(図 7 参照)は、性能を最大限に引き出せるように、コア、ノード内、ノード間の各階層の高速化に対応した Fortran/C/C++コンパイラ・ランタイム、数学ライブラリおよび開発支援ツールを提供します。

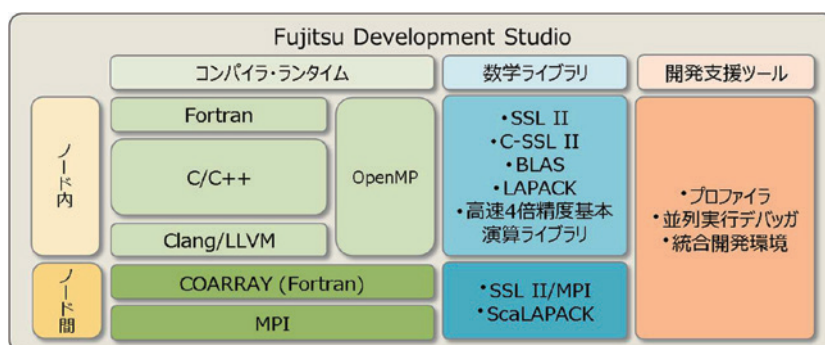


図 7 Fujitsu Development Studio の構成

表 5 サポート標準規格一覧

言語	サポート規格仕様
Fortran	ISO/IEC 1539-1:2018 (Fortran 2018 規格) の一部 ISO/IEC 1539-1:2010 (Fortran 2008 規格) ISO/IEC 1539-1:2004、JIS X 3001-1:2009 (Fortran 2003 規格) ISO/IEC 1539-1:1997、JIS X 3001-1:1998 (Fortran 95 規格) Fortran 90 規格および Fortran 77 規格
C	ISO/IEC 9899:2011 (C11 規格) ISO/IEC 9899:1999 (C99 規格) ISO/IEC 9899:1990 (C89 規格) ※GNU コンパイラの拡張仕様もサポート
C++	ISO/IEC 14882:2017 (C++17 規格) の一部 ISO/IEC 14882:2014 (C++14 規格) ISO/IEC 14882:2011 (C++11 規格) ISO/IEC 14882:2003 (C++03 規格) ※GNU コンパイラの拡張仕様もサポート
OpenMP	OpenMP API Version 5.0 の一部 OpenMP API Version 4.5
MPI	Message-Passing Interface Standard Version 3.1 および 4.0 (仮称) の一部

3.2.1.1 コア内高速化機能

Fortran/C/C++ コンパイラは、A64FX の SVE(Scalable Vector Extension)機能を活用するベクトル化機能を搭載します。SVE 活用により、IF 文や数学関数を含むような複雑なループをベクトル化でき、また回転数の少ないループを SVE のマスク付きの SIMD 命令を利用することでベクトル化し、高速に実行することができます。PRIMEHPC FX1000 のデータアクセスは、PRIMEHPC FX100 のデータアクセスに比べて 2.0～2.3 倍程度高速です。

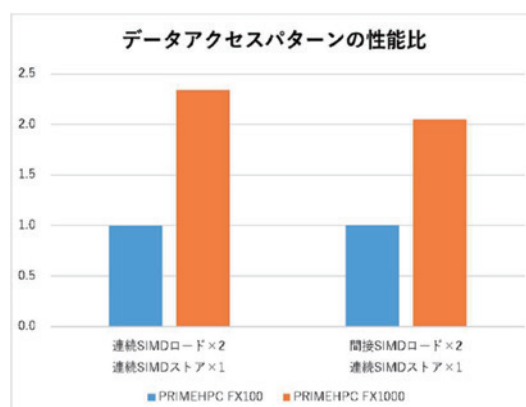


図 8 データアクセスパターンの性能比

数学関数の非分岐型インライン展開機能は、Fortran/C/C++コンパイラの三角関数、指数関数、さらに平方根と除算について、三角関数補助命令、指数関数補助命令、および逆数近似命令を活用して分岐を含まないインライン展開を実現し、ソフトウェアパイプライン化を促進します。基本的な演算や数学関数のループでは、PRIMEHPC FX1000 は、PRIMEHPC FX100 に比べて 2.3～4.2 倍の速度で処理できます。

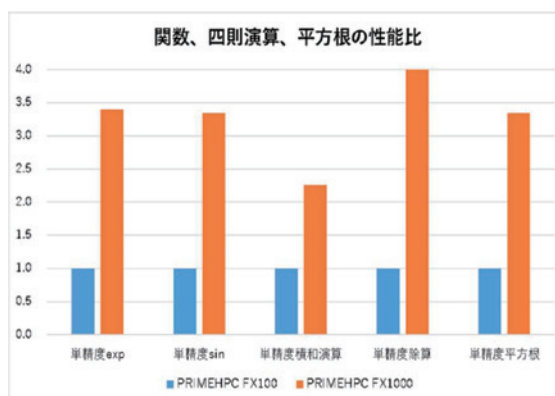


図 9 関数、四則演算、平方根の性能比

コア内の高速化機能を適用した高速数学ライブラリとして、線型代数分野で著名な BLAS、LAPACK、広い分野のアルゴリズムをサポートし幅広く利用されている富士通の数学ライブラリ SSL II、さらに 4 倍精度の値を double-double 形式で扱うことで高速化する高速 4 倍精度基本演算ライブラリが利用できます。A64FX では、BLAS の行列積ルーチンは、単精度は倍精度の 2 倍の性能、FP16 ではさらにその 2 倍の性能を実現しています。

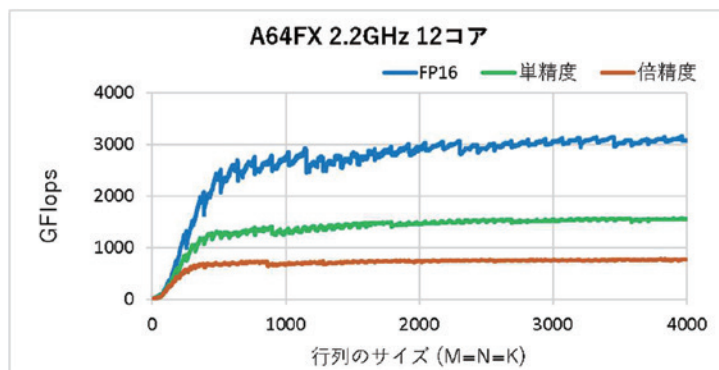


図 10 行列積の性能

3.2.1.2 ノード内並列による高速化

ノード内のメニーコアを活用するため、Fortran/C/C++コンパイラは、ループに対する自動並列化と OpenMP をサポートしています。A64FX は、スレッド並列のための高速なハードバリア機構を搭載し、高速なスレッド並列実行を実現します。A64FX は、CMG を 4 つ搭載し (図 3 参照)、それらをリングバスによって接続する NUMA アーキテクチャを採用しています。

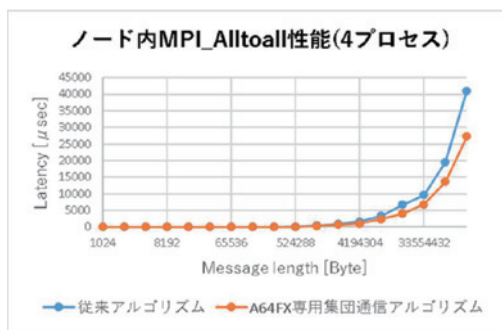


図 11 A64FX 専用 Alltoall アルゴリズムの性能

3.2.1.3 ノード間並列による高速化

PRIMEHPC FX1000 の Tofu インターコネクト D では、ネットワークインターフェース数が 6 で、6 方向同時通信が可能です。MPI はノード当たりの通信バンド幅が必要な Allgather や Bcast などの集団通信アルゴリズムを強化し、性能向上を実現しています。また MPI 並列化した高速数学ライブラリは、ScaLAPACK と SSL II/MPI が利用できます。

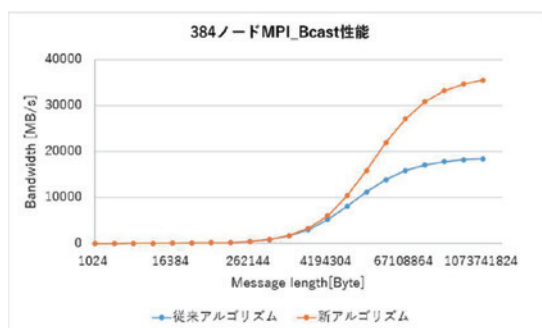


図 12 6 方向対応した集団通信アルゴリズム性能

3.2.2 Aquarius 向け開発ツール

3.2.2.1 Intel OneAPI

Intel One API は、スケーラブルなコード開発が可能な Fortran/C/C++をはじめ、AI 向け機能、MKL(数学ライブラリ)、OpenMP や MPI ライブラリの並列環境、VTune プロファイラ等をサポートしています。また、C++17 や OpenMP 5.0(一部)の最新標準規格にも対応しています。

3.2.2.2 NVIDIA HPC SDK

NVIDIA HPC ソフトウェア開発キット(SDK)は、コンパイラ、ライブラリ、各種ツールが含まれています。GPU 数学ライブラリは、Fortran/C/C++で記述された CUDA や OpenACC から呼び出すことができ、最適化されたライブラリが利用できます。その他 NCCL や GPUDirect 等のスケーラブルプログラミング、プロファイラ等が提供されます。

3.2.2.3 NVIDIA CUDA SDK

NVIDIA CUDA SDK は、GPGPU 向けの統合開発環境であり、コンパイラ、開発ツールおよびライブラリが含まれます。OpenCL 1.2 以降を利用可能であり、OpenCL 並列プログラミング環境に関するデバッグ、性能解析ツールが含まれます。

3.2.2.4 Arm Forge (Arm DDT / Arm MAP)

Arm Forge は、Fortran/C/C++および OpenMP/MPI のデバッガである Arm DDT、マルチスレッド/マルチプロセス向けの CUDA GPU に対応したプロファイラ Arm MAP が提供されます。

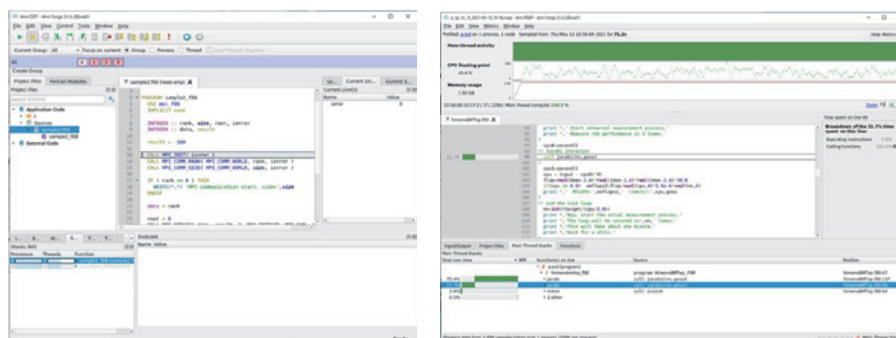


図 13 Arm DDT および Arm MAP の画面イメージ

3.3 ジョブ運用管理

3.3.1 ジョブ管理システムの特長

多数の利用者のジョブ投入、豊富なジョブバリエーションに対応し、以下に示すコンポーネントにより、大規模システムでの効率的なジョブスケジューリングを実現します。

機能名	説明
ジョブマネージャ	ジョブの受付、ACL、状態管理および実行を制御
ジョブスケジューラ	複数のジョブを効率よく実行。用途に応じたノード群の論理分割、フェアシェア機能、バックフィル等の優先度制御をサポート
ジョブ資源管理	ジョブが必要とする資源管理を行う機能。カスタム資源機能で GPU 資源数を管理しノード割り当てを適切に実施
並列実行環境	複数のノードを使う並列プログラムのプロセス制御を実施
ジョブ実行環境	ホスト Linux 環境でのジョブ実行に加え、Docker コンテナ上でのジョブ実行や Singularity コンテナをサポート。

3.3.2 Wisteria/BDEC-01 のジョブ管理

Wisteria/BDEC-01 システムでは、ジョブ管理システムによりバッチジョブおよびインタラクティブジョブの実行が制御されます。利用者はジョブ実行に必要なリソースグループ名、ノード数、経過時間などを指定し、ジョブ管理システムにジョブ実行を依頼します。依頼されたジョブはジョブ管理システムにより資源の空き状況や優先度などを元に自動で実行開始されます。Odyssey、Aquarius とともに、様々な要望に応えられるジョブ運用(表 6 参照)を実現しています。バッチジョブは、通常ジョブ、ステップジョブ(投入した複数のジョブを 1 つのまとまりとして扱い、その中で実行順序、依存関係をもつジョブ)、バルクジョブ(1 度のジョブ投入で、複数の通常ジョブを生成し実行するジョブ)の 3 種類が利用できます。

表 6 Wisteria/BDEC-01 のジョブ運用

項目	パラメタ値 / 運用機能	
ジョブスケジューリング	スケジューリングポリシー	FCFS
	バックフィル	有効
	フェアシェア	無効
ジョブ運用(一般)	プロジェクト単位で、トークンを設定し、ジョブ毎にトークン消費するジョブ運用を実現しています。 消費係数が Odyssey と Aquarius では異なります。	
専有利用	リソースグループ機能で、ノード固定による専有利用や、GPU の専有利用を実現しています。	
講習会利用	特定リソースグループのスケジューリング機能により、講習会の開催時刻に要求されたノード数の利用が可能となります。	
大規模ジョブ実行	Odyssey や Aquarius の全ノード規模を利用した HPC チャレンジ運用を実現するスケジューリング機能です。	
プリポスト運用	常時利用のほかに、利用支援ポータルから計算ノード予約が行え、指定した日時での利用が可能となります。	

3.4 並列ファイルシステム FEFS

FEFS(Fujitsu Exabyte File System)は、HPC 向けファイルシステムとして実績のあるオープンソース Lustre 2.10 をベースとした、クラスタ型の分散並列ファイルシステムです。Lustre が持つ高い並列性やスケラビリティなどの優れた性能・機能を継承しつつ、幅広いシステムに適用できるように富士通が拡張を行い、高性能と高い安定性、使いやすさを実現しています。

3.4.1 FEFS の主な仕様と機能

信頼性と性能を両立させた FEFS の機能を、表 7 に記載します。

表 7 FEFS の仕様と機能

分類	項目	仕様および機能
ファイルシステム仕様	最大ファイルシステムサイズ	8EiB
	最大ファイルサイズ	62.5PiB
	最大ファイル数	16Ti 個
	最大サブディレクトリ	10Mi 個
	最大ストライプ数	4K 個
	最大クライアント数	1Mi
高性能	トランザクション数	マルチ MDS(メタデータ負荷分散)
	I/O バンド幅	大規模 OSS 対応、LNet MultiRail、クライアントキャッシュ、サーバキャッシュ
信頼性	動的切替	MDS/OSS フェイルオーバー、ジョブ継続
	通信経路の可用性	InfiniBand のパス切替、ジョブ継続
運用性	容量制限	ユーザ・グループ Quota、Directory Quota
	アクセス権管理	POSIX 準拠の ACL
	I/O 高負荷監視・対応、性能確保	統計情報機能、ノード間 I/O 優先制御 ユーザ間フェアシェア機能

3.4.2 高いアクセス性能

FEFS は、使用する OSS 数に比例して総スループットをスケールアウトでき、ラウンドロビンやストライピングといったアクセスにより高性能を実現しています。またマルチ MDS により、システム性能のボトルネックになりがちなメタデータアクセスの負荷を分散します。

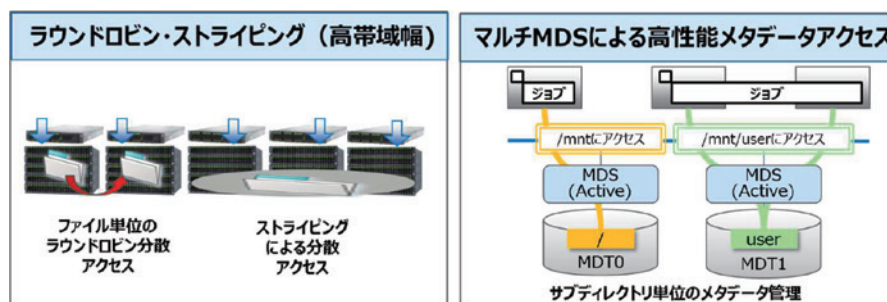


図 14 高性能処理を実現する FEFS の技術

3.4.3 共有ファイルシステムと高速ファイルシステムの MDS 構成

Wisteria/BDEC-01 の共有ファイルシステムは、マルチ MDS 機能(図 15 参照)により、ユーザ領域のメタデータアクセスを 5 つの MDT(MDT0~4)に分散し、メタデータアクセス性能のスループットを向上させています。また MDS の 4 台は、2 台ずつがペアの冗長構成となっており、問題発生時はフェイルオーバー機能により、処理継続が可能な構成となっています。

Wisteria/BDEC-01 の高速ファイルシステムも、マルチ MDS 機能(図 16 参照)により、一時領域と恒久領域のメタデータアクセスを 2 つの MDT(MDT0,MDT1)に分散しています。また、2 台の MDS により、冗長構成を実現しています。

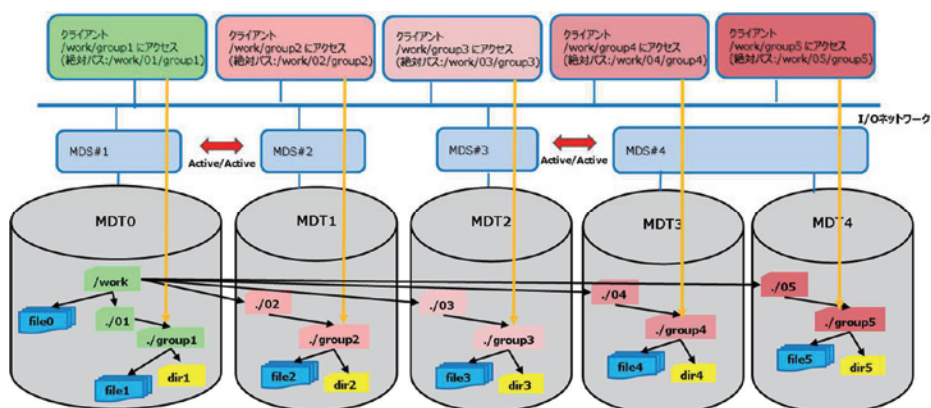


図 15 共有ファイルシステムのマルチ MDS 構成

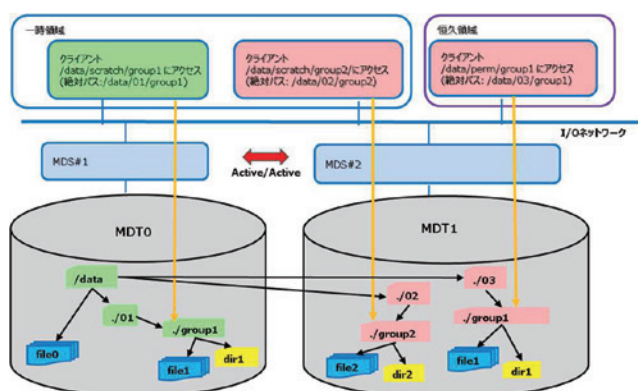


図 16 高速ファイルシステムの MDS 構成

3.4.4 FX1000 での並列アプリケーションへの外乱排除

高並列な MPI アプリケーションの性能を引き出すには、システムデーモンによる外乱を排除することが重要です。FEFS は、定期的に動作するファイルシステムデーモンの処理を削減し、実行時間への影響を抑えています。FX1000 は、48 個の計算用コアに加えて、OS 用のアシスタントコアを 2 または 4 個備えています。I/O 処理を行うシステムデーモンをアシスタントコアで動作させ、計算コアをアプリケーションに占有させることで、ジョブ実行に対する外乱を排除しています。

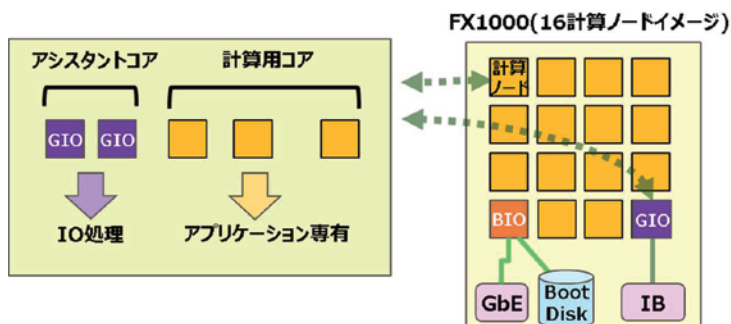


図 17 アシスタントコア活用による I/O 処理と計算処理の分離

4. 利用環境

4.1 利用イメージ

ログインノードでは、SSH によるログイン後、コマンドの対話的実行が可能であり、プログラムの作成・編集、コンパイル/リンク、プロファイラの利用、ジョブ投入・表示などを行います。高負荷な前・後処理は、プリポストノードが利用できます。また、ログインノードは、Pythonなどを Web ブラウザ上で記述し、計算ノードへのバッチジョブ投入を可能とする Jupyter Notebook 環境や、Web ブラウザからログインノードへのリモートアクセスを可能とする Apache Guacamole 環境を提供しています。利用支援ポータルは、SSH 公開鍵登録やマニュアル閲覧が行えます。

Wisteria/BDEC-01 システムでは、全ての計算ノードとログインノードで、共有/高速ファイルシステム(FEFS)を共有します。計算ノード向けのプログラムを実行する場合、バッチジョブもしくはインタラクティブジョブとしてジョブ管理システムに処理を依頼します。インタラクティブジョブは、プログラムのデバッグや会話的なアプリケーションの実行に使用します。

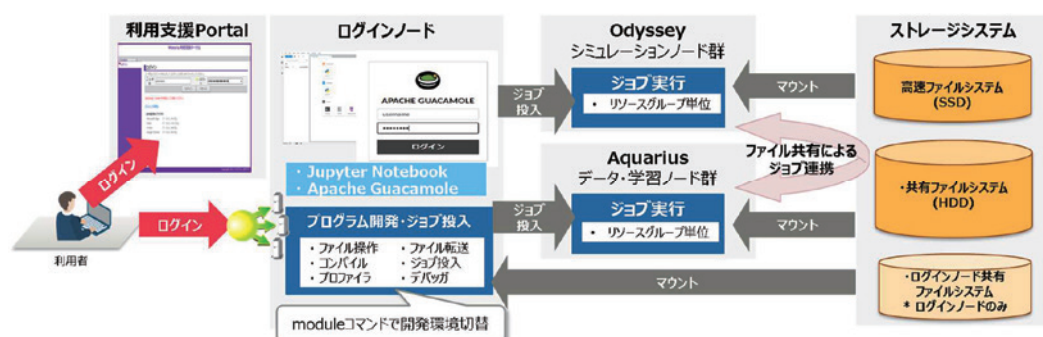


図 18 Wisteria/BDEC-01 の利用イメージ

5. 性能情報

5.1 TOP500

世界で最も高速なコンピュータシステムのランキング「TOP500」の 2021 年 6 月結果において、Odyssey および Aquarius は、以下の性能を達成しています。

	理論ピーク性能	LINPACK 性能	問題規模(Nmax)	ランキング
Odyssey	25,952.3 TFlop/s	22,121 TFlop/s	4,853,760	13 位
Aquarius	7,268.83 TFlop/s	4,425 TFlop/s	1,347,016	94 位

5.2 Green500

スーパーコンピュータの電力効率が高いランキング「Green500」の 2021 年 6 月結果において、Odyssey および Aquarius は、以下の性能を達成しています。

	LINPACK 性能	電力	電力性能	ランキング
Odyssey	22,121 TFlop/s	1,468 KW	15.069 GFlops/watts	21 位
Aquarius	4,425 TFlop/s	184 KW	24.058 GFlops/watts	10 位

5.3 HPCG

実際のアプリケーションでよく使われる、疎な係数行列から構成される連立一次方程式を解く計算手法である共役勾配法を用いたベンチマーク・プログラム「HPCG」の2021年6月結果において、Odyssey および Aquarius は、以下の性能を達成しています。

	HPCG 性能	ランキング
Odyssey	817.58 TFlop/s	9 位
Aquarius	84.71 TFlop/s	53 位

5.4 Graph500

多種多様な応用を持つグラフ解析の性能を競う「Graph500」の2021年6月ランキングで、Odyssey は以下の性能を達成しています。

	BFS 性能	ランキング
Odyssey	16,118 GTEPS	3 位

5.5 HPL-AI

AI の計算などで活用されている単精度や半精度演算器などの能力も加味した計算性能を評価する指標として、2019年11月に制定されたベンチマークで、Odyssey は以下の性能を達成しています³。

	HPL-AI 性能	ランキング
Odyssey	0.10 Eflop/s	7 位

6. 参考資料

- Wisteria/BDEC-01(Odyssey) TOP500 性能 <https://top500.org/system/179962/>
- Wisteria/BDEC-01(Aquarius) TOP500 性能 <https://top500.org/system/179963/>
- Green500 List JUNE 2021 <https://top500.org/lists/green500/list/2021/06/>
- HPCG LIST JUNE 2021 <https://top500.org/lists/hpcg/list/2021/06/>
- Graph500 <https://graph500.org/>
- HPL-AI June 2021 <https://icl.bitbucket.io/hpl-ai/results/>
- White Paper <https://www.fujitsu.com/downloads/JP/jsuper/primehpc-fx1000-hard-ja.pdf>
<https://www.fujitsu.com/downloads/JP/jsuper/primehpc-fx1000-soft-ja.pdf>
- 利用支援ポータル(アカウント必要) <https://wisteria-www.cc.u-tokyo.ac.jp>
- Wisteria/BDEC-01 システム仕様 <https://www.cc.u-tokyo.ac.jp/supercomputer/wisteria/system.php>

³ 似鳥啓吾博士(理化学研究所計算科学研究センター)により測定いただきました。詳細は、塙 敏博, 中島 研吾, 下川辺 隆史, 芝 隼人, 三木 洋平, 星野 哲也, 河合 直聡, 似鳥 啓吾, 今村 俊幸, 工藤 周平, 中尾昌広, 「計算・データ・学習」融合スーパーコンピュータシステム Wisteria/BDEC-01 の性能評価, 情報処理学会研究報告 2021-HPC-180, 2021年7月において発表予定です。

Wisteria/BDEC-01 を構成する NVIDIA GPU 及びネットワーク製品の概要

エヌビディア合同会社
平野幸彦¹
岩谷正樹²

1. はじめに

AI、HPC、データ分析のワークロードはますます複雑化と多様化が進み、さらなる GPU コンピューティング能力、マルチ GPU 接続の強化、強力なインターコネクト、これらをサポートする包括的なソフトウェアスタックの充実が求められています。NVIDIA は、NVIDIA Ampere GPU アーキテクチャをベースにした新たな NVIDIA A100 Tensor コア GPU と最新の CUDA ソフトウェア、NVIDIA Mellanox InfiniBand を組み合わせることで、増大し続けるコンピューティングへの期待と課題に応えます。

2. NVIDIA A100 Tensor コア GPU

(1) 概要

A100 GPU はコアアーキテクチャに多くの改良が加わり、前世代 GPU の V100 と比較しても AI、HPC、データ分析などのワークロード処理能力が大幅に高速化されています。新規スパース性機能が利用できる場合には、演算速度をさらに 2 倍にまで高めることができます。また、高帯域幅の HBM2 メモリと、大容量化かつ高速化された L2 キャッシュにより、演算を担う CUDA コアや Tensor コアに効率的にデータを転送することができます。計算精度としても、FP64、FP32、BFLOAT16、FP16、INT8、INT4 などの様々なデータタイプをサポートし、あらゆるワークロードに対応します。

新規の第 3 世代 NVLink と PCIe Gen 4 は、マルチ GPU システム構成を高速化し、ハイパースケールなデータセンターを支援します。さらに、新たな機能であるマルチインスタンス GPU (MIG) は 1 つの GPU を最大 7 つの GPU インスタンスに物理的に分割することを可能にし、次々変化するワークロードの要求に動的に適應できる柔軟性の高い統合プラットフォームを実現します。

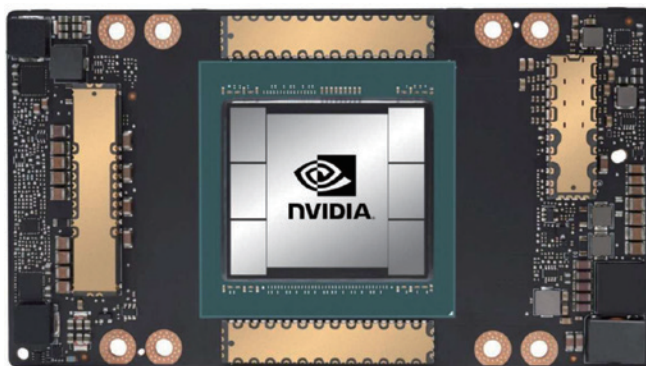
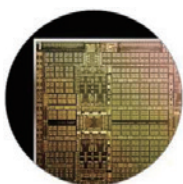


図 1 SXM4 モジュールに搭載された NVIDIA A100 Tensor コア GPU

¹ プリンシパル ソリューションアーキテクト

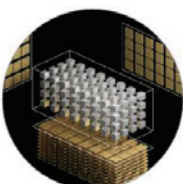
² HPC/AI ネットワークプロダクトマーケティング ディレクター

(2) NVIDIA Ampere アーキテクチャの画期的なイノベーション



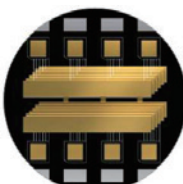
NVIDIA Ampere アーキテクチャ

マルチインスタンス GPU 機能(MIG) による A100 GPU の最大 7 つのインスタンスへの分割や、NVIDIA NVLink による複数 GPU の接続により、最小ジョブから大規模なマルチノードワークロードに至るまで、さまざまな規模の高速化ニーズに対応することができます。



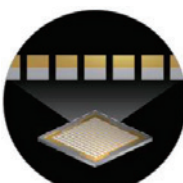
第 3 世代 Tensor コア

Tensor コアは、行列の融合積和演算 (FMA) を実行する専用の演算コアであり、AI のトレーニングと推論に画期的なパフォーマンスを提供します。A100 の Tensor コアは FP64 にも対応し、HPC でこれまでにない倍精度の演算能力を実現します。



次世代 NVLINK

A100 の NVIDIA NVLink は、前世代よりも 2 倍高いスループットをもたらします。NVIDIA NVSwitch と組み合わせれば、最大 16 基の A100 GPU を毎秒最大 600 ギガバイト(GB/秒)で相互接続可能となり、単一サーバーで実現可能なアプリケーションパフォーマンスを最大限まで引き出します。



マルチインスタンス GPU (MIG)

A100 GPU は最大 7 つのインスタンスにハードウェアレベルで分割することができます、それぞれに独立した高帯域幅メモリ、キャッシュ、およびコンピューティングコアを割り当てられます。MIG により様々なサイズのワークロードに柔軟に対応することができ、GPU の使用率を最適化できます。



HBM2

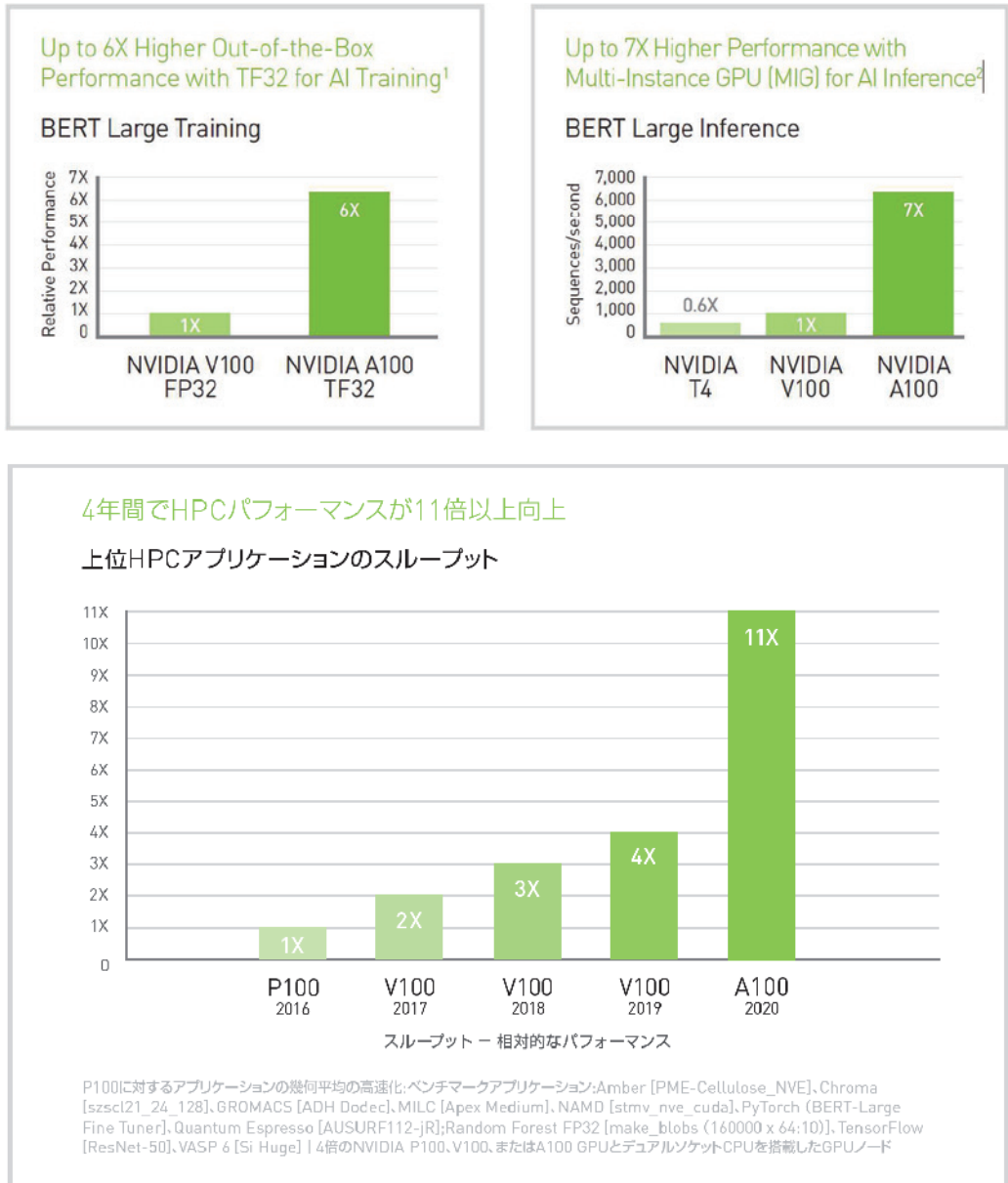
40 ギガバイト(GB) の高帯域幅メモリ (HBM2) の採用により、A100 は前世代の 1.7 倍となる毎秒 1.5TB のメモリ帯域幅を達成し、95%の高使用効率を実現します。



構造化スパース性

AI ネットワークには、数百万個から数十億個のパラメーターがありますが、全てのパラメーターが正確な予測に必要なわけではなく、一部をゼロに変換し、精度を損なうことなくモデルに「スパース」を設けることができます。A100 の Tensor コアは、スパースモデルについては最大 2 倍のパフォーマンスを提供でき、AI 推論やモデル学習の性能向上に役立ちます。

(3) 前世代 GPU と比較した NVIDIA A100 の性能向上例



参考情報

NVIDIA A100 Tensor コア GPU :

<https://www.nvidia.com/ja-jp/data-center/a100/>

NVIDIA A100 データシート:

https://www.nvidia.com/content/dam/en-zz/ja/Solutions/Data-Center/documents/tensor-core-gpu-nvidia-20201208_r2.pdf

NVIDIA AMPERE アーキテクチャ ホワイトペーパー :

<https://www.nvidia.com/content/dam/en-zz/ja/Solutions/Data-Center/documents/nvidia-ampere-architecture-whitepaper-jp.pdf>

2. NVIDIA Mellanox InfiniBand

(1) 概要

InfiniBand は、1999 年に最初に発表されたインターコネク特規格の業界標準で、コンピューティングおよびデータ集約型アプリケーションのデファクトスタンダードとなっており、AI、HPC およびハイパースケールのクラウド環境で幅広く採用され続けています。2020 年 10 月の TOP500 スーパーコンピュータリストにおいては、その上位 100 位に入るシステムの 60% で InfiniBand HDR が採用されており、国内の大学、研究所の HPC データセンターにおいても多数採用されています。

InfiniBand 技術は、次の 4 つの主要な基本機能に基づいています：

- InfiniBand は、OSI 階層のトランスポート層から物理層までを一括で提供し、ネットワーク内でネットワーク機能の実行及び管理ができる非常にスマートなエンドポイントネットワークです。ネットワーク機能は、CPU や GPU へ負荷をかけることなく実行されるため、CPU または GPU の実アプリケーションに対する処理時間を増やすことが可能となります。InfiniBand の ASIC は、CPU/GPU、OS、Kernel をバイパスしてホスト側のメモリに直接アクセスし通信する機能をサポートしているため、RDMA 通信、GPUDirect RDMA および GPUDirect Storage など、非常に効果的かつ効率的な方法で CPU、GPU、Storage 間で通信を行うことが可能です。
- InfiniBand は、最初からスケールすることを考慮された完全なソフトウェア デファインド ネットワーク (SDN) に基づいたスイッチングネットワークです。ネットワーク経路、ネットワークに接続されたデバイス (スイッチ、エンドノード) を集中管理し、オペレーティングシステムをスイッチ内で実行するため、全てのスイッチに専用の外部管理機構を必要としません (Ethernet スwitch の場合、ネットワーク全体管理をする場合には必要になります)。これにより、InfiniBand は Ethernet や他の独自のネットワークと比較して、コストパフォーマンスに優れたネットワークファブリックになります。また、In-Network Computing などの独自の技術革新を可能にし、ネットワーク経由で転送されるデータの処理が可能です。重要な例として、Scalable Hierarchical Aggregation and Reduction Protocol (SHARP)™ 技術があります。この技術により、シミュレーション解析、MPI による並列計算、及び深層学習アプリケーションフレームワークのパフォーマンスが大幅に向上することが実証されています。
- InfiniBand は、ネットワークを 1 つのサブネットマネージャが集中的に管理、制御、運用することが可能です。1 つのサブネットを設定することにより、多種多様なネットワークトポロジーに対応し、対象となるアプリケーションに応じてデータセンターネットワークをカスタマイズおよび最適化することが可能となります。InfiniBand は、Ethernet のようにネットワークのさまざまな部分に対して個別のスイッチ構成を作成する必要はなく、複数の複雑なネットワークアルゴリズムを処理する必要もありません。

InfiniBand は、Ethernet よりもより通信パフォーマンスを向上させるとともに、Ethernet よりも OPEX を削減することが可能です。

- InfiniBand は、InfiniBand Trade Association (IBTA) による国際標準化されたネットワーク規格であり、下位及び後方互換性を保証します。また、管理ソフトウェアはオープン API を使用したオープンソースを使用しています。

上記の 4 点から、InfiniBand は、非常にコスト効率が高く、管理が容易で最高の通信パフォーマンスを達成出来るネットワークであると言えます。

(2) NVIDIA Mellanox InfiniBand HDR

HDR 200Gb/秒 InfiniBand 製品ラインは、2019 年から生産されており、IBTA HDR InfiniBand 仕様をサポートし、世界中の多くの主要なスーパーコンピュータ、ディープラーニングプラットフォーム、クラウドデータセンターで使用されています。

ConnectX-6 InfiniBand HCA

ConnectX-6 InfiniBand HCA は、200Gb/秒の単方向リンク速度（または 400Gb/秒の相方向）で、最大 2 ポートの独立したポートを提供します。エンドツーエンドで低いアプリケーションレイテンシーを保ち、毎秒 2 億 1,500 万件のメッセージ処理が可能です。ConnectX-6 は PCIe Gen3、Gen4 をサポートしています。

NVIDIA Mellanox Quantum HDR 200 Gb/秒 InfiniBand スイッチ

NVIDIA Mellanox Quantum HDR InfiniBand スイッチは、レイヤ 2 とレイヤ 3 に対応しており、レイテンシーは 130ns (HDR モード) と非常に小さく、SHARP v2、Congestion Control、Adaptive Routing、SHIELD 機能をサポートします。1U サイズのスイッチで、200Gb/秒のスループット性能を持つポートを 40 ポート備えています。

(3) Aquarius のインターコネクト

WisteriaBDEC-01 のデータ・学習ノード群である Aquarius は、各ノードが転送速度 200Gb/秒の InfiniBand HDR の 4 リンクを用いたフルバイセクションバンド幅を持つ相互接続網にて結合されています。これにより、演算加速装置 1 基当たり 10 GB/秒以上の高速なインジェクションバンド幅を有し、高速な通信性能を得ることが可能となります。

(4) Odyssey と Aquarius の相互接続

WisteriaBDEC-01 は、A64FX アーキテクチャを採用した FX1000 にて構成される Odyssey と、x86 アーキテクチャを持つ汎用 CPU と GPU によって構成された Aquarius との間を InfiniBand EDR を用いた 2.0TB/秒のネットワークバンド幅で接続しており、NVIDIA は異機種で構成された両システム間の高速通信を提供し、「計算・データ・学習」融合を目指す本シ

システムの実現をサポートしています。

Odyssey と Aquarius を跨いで MPI による通信を用いたプログラムを実行することはできませんが、東京大学情報基盤センターにおいて開発中である両システム間ライブラリや制御機構を含んだソフトウェアである h3-Open-BDEC³ により、両システムのより深い融合が目指されています。特に、ヘテロジニアス環境下での異なるコンポーネント間のデータ受け渡しのためのライブラリである h3-Open-SYS/WaitIO には、異なる機種の計算機間での MPI 通信を実現するための機能が含まれており、WisteriaBDEC-01 では、InfiniBand が提供する高い性能を活用した本ライブラリを用いた通信が行われています。

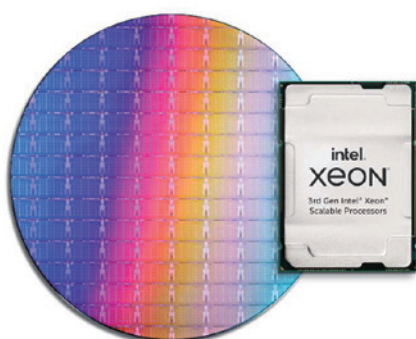
NVIDIA Mellanox InfiniBand は、本ライブラリをはじめとする様々なソフトウェアにより構成される h3-Open-BDEC が目指す「計算+データ+学習」の融合を目指したヘテロジニアスシステムの能力を最大限に引き出し、最小の計算量・消費電力での計算を実行するためのプラットフォームとして貢献しています。

³ <http://nkl.cc.u-tokyo.ac.jp/h3-Open-BDEC/>

第3世代 インテル® Xeon® スケーラブル・プロセッサの ご紹介

インテル株式会社

Wisteria/BDEC-01 のデータ・学習ノード群 (Aquarius) に搭載されている第3世代 インテル® Xeon® スケーラブル・プロセッサ (Ice Lake¹) は、データセンター向けプロセッサとしては



唯一 AI (Artificial Intelligence) の処理性能を加速するハードウェア機構を有しています。真にパフォーマンスの柔軟性を向上させる様々な機能を搭載・拡張・進化させています。また様々な用途、例えばクラウド、エンタープライズ、HPC (High Performance Computing)、及び Edge Computing 等にプラットフォームレベルで最適化されております。

プロセッサあたり最大 40 コアを搭載し、各コアにおいては、前世代製品よりサイクルあたりの命令実行数 (Instructions Per Cycle, IPC) は 20% 増加しています。コア数の増加と IPC 向上により、前世代製品

との比較で平均 1.46 倍の増加で優れたアプリケーション性能を提供することができます。なお、1.46 倍の増加は、4 種類のベンチマーク Geomean of Integer, Floating Point, Stream Triad, LINPACK の性能向上率の平均によって算出したものです。AI では、いくつかのソフトウェアの最適化と BERT (Bidirectional Encoder Representations from Transformers, Google によって開発された自然言語処理モデル) による自然言語処理に、AI 処理向けの新しい命令セットである「インテル® DL ブースト (DL Boost)」を活用した結果、前世代製品に比べ 1.74 倍高い推論パフォーマンスを提供します。Ice Lake¹ では、ソケット当たり最大 6TB のシステムメモリー、最大 8 チャンネルの DDR4-3200 メモリー、最大 64 レーンの PCIe Gen4 インターフェイスをサポートします。Ice Lake¹ は、オンプレミスと分散型マルチクラウドのどちらの環境でも稼動するモダンなワークロードに最適化されています。また、高度なセキュリティ機能、暗号化アクセラレーション、など、これまでのイノベーションに基づく柔軟性の高いアーキテクチャーを提供します。

以下に、第3世代 インテル® Xeon® スケーラブル・プロセッサ (Ice Lake¹) の演算能力の特徴について紹介します：

- **浮動小数点演算アクセラレーション：**インテル® アドバンスト・ベクトル・エクステンション 512 (インテル® AVX-512)によって、モデリングとシミュレーション、データ分析と機械学習、データ圧縮、視覚化、デジタルコンテンツ作成などのアプリケーションにおける極めて要求の厳しい演算タスクのパフォーマンスとスループットを向上させます。
- **AI アクセラレーション：**インテル® ディープラーニング・ブースト (インテル® DL Boost) のアクセラレーション機能が組み込まれており、既存のワークロードと同一のハードウェアで複雑な AI ワークロードを実行するための柔軟性を提供します。AI アクセラレーションを

¹ 開発コード名

内蔵した唯一のデータセンター向け CPU として、ソフトウェアの最適化とすぐに導入可能なソリューションを包括的にサポートするため、エッジからネットワーク、クラウドまであらゆるアプリケーションへの AI 導入が可能です。最新のハードウェアとソフトウェアを最適化することで、前世代製品と比べて AI パフォーマンスを 74% 高速に実行します。int8 を利用した Vector Neural Network Instructions (VNNI) により、コンピューティング・リソースを最大限に活用し、キャッシュ使用率を向上させ、潜在的な帯域幅のボトルネックを減らすことで、推論ワークロードを強化します。

さらに、ソフトウェア開発者は第 3 世代インテル® Xeon® スケーラブル・プラットフォームで稼動するワークロードを高速化させるために、インテル® oneAPI が提供するアーキテクチャに依存しないオープンなプログラミング環境でアプリケーションを最適化でき、独自モデルの開発に伴う技術的な負荷やコスト面での負担からも解放されます。インテル® oneAPI ツールキットに含まれる高度なコンパイラ、ライブラリー、分析、デバッグのツールを使用して、プロセッサの性能、AI、暗号化機能を引き出すことが可能です。インテル® oneAPI は、インテル® Parallel Studio XE の後継製品でもあります。

第 3 世代 インテル® Xeon® スケーラブル・プロセッサの詳細は、下記を参照ください。

<https://www.intel.co.jp/content/www/jp/ja/high-performance-computing/hpc-3rd-gen-xeon-product-brief.html>

1. はじめに

Wisteria/BDEC-01 スーパーコンピュータシステムは、2021 年 5 月 14 日 10:00 ～ 7 月 29 日 9:00 まで試験運用を実施し、8 月 2 日 10:00 より正式サービスを開始します。基本的なサービス内容については試験運用期間中と変更はありませんが、ジョブクラス制限値（経過時間）の拡大、ノード固定サービスの開始などの変更を行います。本稿では、試験運用期間と正式サービス後の違いについて記載しています。また、最新の情報は、当センター Web ページ¹にて広報していますのでご確認ください。

2. 試験運用と正式サービスの違い

2021 年 8 月 2 日（月）10:00 より正式サービスを開始します。主な変更点は以下の通りです。

・トークンの再設定

利用申込書またはトークン移行申込書に記載されている内容でトークン量が再設定されます（例えば、利用期限を年度末としていた場合、申込セット数に応じて、8 ヶ月分のトークン量が設定されます）。

また、これまで利用した実績値も 0（ゼロ）に設定します。

・利用負担金

試験運用期間は無料でご利用いただきましたが、正式サービス開始以降のご利用には利用負担金が必要です。利用負担金額は、申込者の所属先により、「大学等・公共機関等」、「企業」の 2 区分となっています。

詳細は、当センター Web ページ² または、2021 年 5 月号記事「利用負担金の改正について」をご覧ください。

・ジョブクラス制限値

以下のとおりキューの制限（経過）時間が変更となります。

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

キュー名	ノード数(最大コア数)	制限(経過)時間		メモリー容量 (GiB)
		正式サービス	試験運用期間	
debug-o	1 ～ 144 (6,912)	30 分	30 分	28
short-o	1 ～ 72 (3,456)	<u>8 時間</u>	<u>4 時間</u>	28
(regular-o)				
small-o	1 ～ 144 (6,912)	<u>48 時間</u>	<u>12 時間</u>	28
medium-o	145 ～ 576 (27,648)	<u>48 時間</u>	<u>12 時間</u>	28
large-o	577 ～ 1,152 (55,296)	<u>48 時間</u>	<u>12 時間</u>	28
x-large-o	1,153 ～ 2,304 (110,592)	<u>24 時間</u>	<u>6 時間</u>	28
priority-o	1 ～ 288 (13,824)	<u>48 時間</u>	<u>12 時間</u>	28
(interactive-o)				
interactive-o_n1	1 (48)	30 分	30 分	28
interactive-o_n12	2 ～ 12 (576)	10 分	10 分	28
prepost	1 (56)	<u>6 時間</u>	<u>3 時間</u>	340
prepost1_n1 ～ prepost4_n1	1 (56)	<u>1～6 時間</u>	<u>1～3 時間</u>	340
prepost1_n4	1 ～ 4 (224)	<u>1～6 時間</u>	<u>1～3 時間</u>	340
prepost1_n8	1 ～ 8 (448)	<u>1～6 時間</u>	<u>1～3 時間</u>	340

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

² <https://www.cc.u-tokyo.ac.jp/guide/application/index.php#charge>

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

キュー名	ノード数・GPU 数 (最大 GPU 数)	制限(経過)時間		メモリー容量 (GiB)
		正式サービス	試験運用期間	
debug-a	1 ノード (8)	30 分	30 分	448
short-a	1 ～ 2 ノード (16)	<u>2 時間</u>	<u>1 時間</u>	448
(regular-a)				
small-a	1 ～ 2 ノード (16)	<u>48 時間</u>	<u>12 時間</u>	448
medium-a	3 ～ 4 ノード (32)	<u>48 時間</u>	<u>12 時間</u>	448
large-a	5 ～ 8 ノード (64)	<u>24 時間</u>	<u>6 時間</u>	448
share-debug	1, 2, 4 GPU	30 分	30 分	56
share-short	1, 2, 4 GPU	<u>2 時間</u>	<u>1 時間</u>	56
(share)				
share-1	1 GPU	<u>48 時間</u>	<u>12 時間</u>	56
share-2	2 GPU	<u>48 時間</u>	<u>12 時間</u>	56
share-4	4 GPU	<u>24 時間</u>	<u>6 時間</u>	56
interactive-a	1 ノード (8)	10 分	10 分	56
share-interactive	1 GPU	10 分	10 分	56

3. 問い合わせ先

最新の情報は、本センター Web ページ¹ にて広報しています。利用方法の詳細については Wisteria/BDEC-01 利用支援ポータル³ の「システム利用手引書」をご覧ください。メールによる問い合わせについては、事前に本センター Web ページ¹ にて情報がなければご確認の上、問い合わせの内容により、以下のどちらかのメールアドレスまでご連絡ください。

- ・利用申込に関する内容については、受付窓口 uketsuke@cc.u-tokyo.ac.jp までお願いいたします。
- ・利用相談、プログラム相談等に関する内容については、「問い合わせ」Web ページ⁴ から詳細を記載した上で、ご連絡をお願いいたします。

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

⁴ <https://www.cc.u-tokyo.ac.jp/supports/contact/#soudan>

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（臨時）

Oakbridge-CX、Oakforest-PACS 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 8 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。

※新型コロナウイルス感染症拡大防止に配慮し、当面の間特別スケジュール・条件のもと実施いたします。

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 8 時間占有利用することができます。
ただし活動制限指針レベルに応じて実施時間を延ばす可能性があります。

【Oakbridge-CX】

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】

Oakforest-PACS スーパーコンピュータシステムの flat モード（4,200 ノード）または cache モード（3,200 ノード）、あるいはその両方

- * 各月 flat モード 1 件、cache モード 1 件の最大 2 件まで受入可能、ただし 1 グループで flat モード、cache モード両方利用することも可能
- * 大規模 HPC チャレンジ実施前後の運用切り替えは実施しない

2. 利用案内

- ・ 1 ヶ月に 1 回、原則として月末処理前日 9:00～17:00 までの最大 8 時間、提供資源を専有利用することが可能です。（システム障害等が発生しない場合、flat モードは最大 4,346 ノード、cache モードは最大 3,346 ノードまで利用できる可能性がございます。）
- ・ 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。ただし Oakforest-PACS は最大 2 件まで受入可能です。
- ・ 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

2021年度の今後の「大規模 HPC チャレンジ」実施日程は表 1～2 のとおりです。

表 1. 2021 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
2021 年 12 月 16 日 (木) 9:00 ～ 17:00 2022 年 1 月 27 日 (木) 9:00 ～ 17:00 2022 年 2 月 24 日 (木) 9:00 ～ 17:00 2022 年 3 月 30 日 (水) 9:00 ～ 17:00	2021 年 10 月 25 日 (月) 17:00 【締切】	11 月上旬	11 月中旬

表 2. 2021 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
2021 年 12 月 14 日 (火) 9:00 ～ 17:00 2022 年 1 月 25 日 (火) 9:00 ～ 17:00 2022 年 2 月 21 日 (月) 9:00 ～ 17:00 2022 年 3 月 30 日 (水) 9:00 ～ 17:00	2021 年 10 月 25 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8時間です）。
- E) 本システムの運用、ユーザーにとって有用な情報を提供すること。

※ 項目 A) ～ D) は、必須となります。項目 E) は必須ではありませんが、申込書に該当する記述がある場合、加点点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、電子メールにてお送りください。なお、書類のご提出は PDF 形式にてお願いいたします。

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
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. 申込書提出先・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[あつとまーく]@cc.u-tokyo.ac.jp
（[あつとまーく]を@（半角）に変換後、ご送信ください）
東京大学 情報システム部 情報戦略課 研究支援チーム

【問い合わせ先】

E-mail : uketsuke[あつとまーく]@cc.u-tokyo.ac.jp
（[あつとまーく]を@（半角）に変換後、ご送信ください）
東京大学 情報システム部 情報戦略課 研究支援チーム

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

1. はじめに

Oakbridge-CX、Oakforest-PACS 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¹。(※)

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

※ 新型コロナウイルス感染症拡大防止に配慮し、通常から一部条件、実施時間等を変更し実施しています。

- ・ 実施時間は 8 時間（実施日当日 9:00～17:00）
- ・ Oakforest-PACS スーパーコンピュータシステムにおいては、flat モード（4,200 ノード）、cache モード（3,200 ノード）の各設定の上限までの利用とします（各月 flat モード 1 件、cache モード 1 件の最大 2 件まで受入可能、ただし 1 グループで flat モード、cache モード両方利用することも可能）

2. 採択課題

システム：Oakforest-PACS

募集期間：2021 年度 第 1 回募集 2021 年 4 月 7 日～2021 年 4 月 21 日

1 件の応募があり、以下の課題を採択しました。

採択課題一覧

課題名	温水冷却方式の効率に関する定量的評価に向けて
代表者名(所属)	庄司 文由（理化学研究所 計算科学研究センター 運用技術部門）
近年、温水冷却技術は、HPC システムの冷却にかかるエネルギー効率を改善するために、多くの HPC センターおよびデータセンターで採用されている。温水冷却においては、CPU 等の冷水温度を高く設定することで、外気による自然な冷却が促されるため、冷凍機等を駆動するための電力が節約できる。一方で、CPU 等のシリコンから構成される半導体は、高温で動作させればさせるほど、漏れ電流の増加により、消費電力が増加することが知られている。また、近年の CPU は、駆動温度や負荷が一定の水準を超えると、故障を回避するために自動的にクロック周波数や電圧を下げる機構を備えている。このため、温水冷却の効果を正しく評価するためには、冷却の電力を節約できるというポジティブな点に加え、上記のような消費電力の増加や、演算性能の低下のようなネガティブな点も等しく考慮に入れる必要がある。特にクロック周波数の低下による影響は、大規模なジョブでより深刻になると予想される。一般的に、CPU(プロセス)間で同期を取る際の性能は、最も遅い CPU(プロセス)に律速されるからである。以上を踏まえ、本研究では、単体および複数の CPU を使う様々なジョブを、異なる冷水温度で実行し、消費電力の増加および演算性能の低下を定量的に分析する。左記の分析に基づき、効率的な施設運用の実現に向けた、運用手順の確立を目指す。特に今回は、前回採択いただいた 2019 年 10 月の大規模 HPC チャレンジで十分なデータが得られなかった複数 CPU を使うジョブのケースについて重点的に調査したい。	

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

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。

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。

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

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

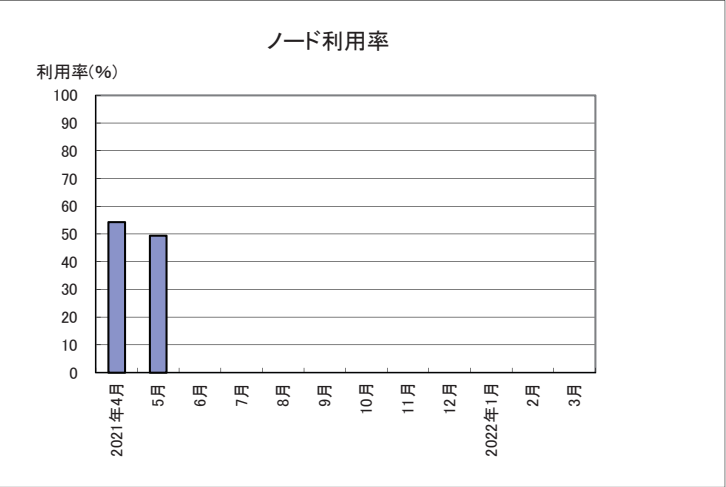
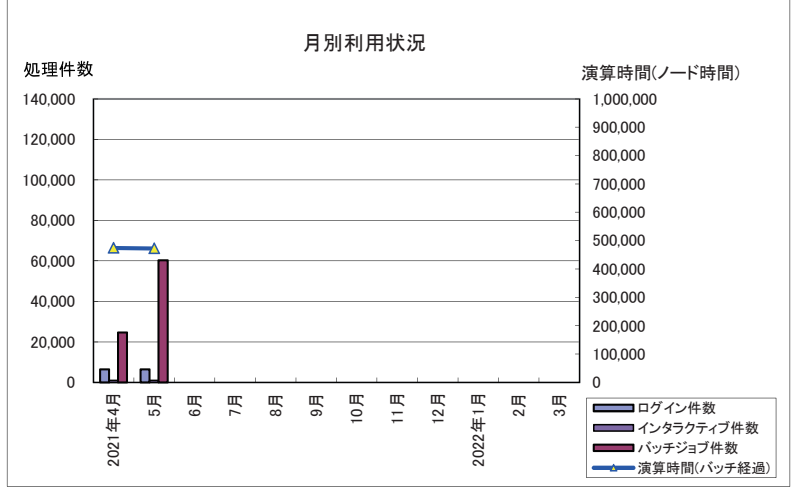
4・5月のジョブ統計

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]		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		
2021年4月	1,032	190	6,441	2	929	24,568	27,989	913	1,339,482	1,243.13	0	385	474,091	738.6	54.3
5月	1,058	188	6,429	0	984	60,244	40,008	874	1,292,853	8,997.03	0	995	472,465	671.4	49.4
2020年5月	1,127	215	7,937	71	1,324	39,551	30,946	514	1,121,097	1,190.20	725	709	496,108	709.9	52.2
6月	1,298	217	8,669	156	1,242	132,825	39,950	785	1,318,633	2,673.80	627	936	607,896	898.9	66.1
7月	1,378	347	18,263	118	1,760	80,506	53,532	1,040	1,319,119	5,753.21	519	1,179	668,610	957.8	70.4
8月	1,371	295	8,780	67	1,450	63,090	27,508	1,078	1,411,638	9,448.79	136	949	498,413	938.4	69.0
9月	1,535	299	11,804	48	1,152	80,846	39,017	1,130	1,539,134	3,073.18	119	740	630,436	1,030.7	75.8
10月	1,250	254	13,972	102	1,841	87,992	72,162	1,160	1,700,805	6,384.71	519	829	732,192	1,052.0	77.4
11月	1,241	268	13,169	13	2,707	47,307	62,082	1,172	1,878,875	15,583.41	17	980	716,567	1,086.7	79.9
12月	1,214	241	11,452	56	1,475	75,087	43,511	1,191	1,872,689	9,074.40	253	860	768,743	1,127.9	82.9
2021年1月	1,105	215	10,238	49	1,601	64,441	53,307	1,021	1,891,719	3,322.22	253	982	754,704	1,110.5	81.7
2月	1,110	161	7,326	117	2,215	40,336	28,469	1,049	1,963,710	2,864.16	398	893	591,306	941.2	69.2
3月	1,080	170	7,803	67	1,373	63,001	35,810	1,115	1,502,680	2,660.82	387	671	591,775	854.0	62.8
合計			124,346	795	18,729	820,243	523,345			71,078.86	3,228	10,399	7,507,198		

- ・接続時間： ログイン時間の累計
- ・ログイン(実CPU)： コア時間単位
- ・2020年5月分は合計に含まない

- ・ノード利用数： インタラクティブおよびバッチジョブの経過時間を1ノードが100%動作したと仮定した場合の利用ノード数。
計算式=1ヶ月のインタラクティブおよびバッチジョブ経過時間合計÷1ヶ月の稼働時間
- ・ノード利用率： サービスノードに対する利用率。 計算式=ノード利用数÷サービスノード数×100
- ・下線部分の値に誤りがございました。お詫びして訂正いたします。



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

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		
2021年4月	1,690	450	8,322	128	181	68,373	47,950	2,618	6,233,823	3,528.98	310	65	2,731,333	4,117.0	50.2
5月	1,732	347	8,252	192	288	63,829	63,997	2,216	4,729,782	2,036.24	411	78	2,977,248	4,089.8	49.8
2020年5月	1,802	446	9,554	247	254	59,496	64,493	2,025	5,455,455	2,698.20	502	152	3,571,465	4,885.8	59.5
6月	1,611	455	11,840	151	358	47,010	67,932	2,116	5,858,067	1,957.58	342	161	3,415,672	4,831.4	58.9
7月	1,622	410	12,928	343	327	52,585	64,608	2,164	5,996,751	2,262.33	492	163	4,121,263	5,909.8	72.0
8月	1,617	401	12,139	315	618	83,908	70,019	2,374	6,332,050	11,191.93	685	514	4,726,977	6,611.0	80.5
9月	1,732	420	9,811	293	795	52,222	56,925	2,441	6,299,074	3,237.18	667	1,390	4,125,115	6,447.3	78.5
10月	1,766	522	12,023	191	464	52,938	82,796	2,552	6,492,672	6,460.30	398	710	4,437,924	6,071.9	74.0
11月	1,822	461	13,149	251	256	65,413	74,790	2,535	6,618,475	3,297.48	516	125	4,468,068	6,400.5	78.0
12月	1,789	471	13,407	419	375	99,699	66,020	2,648	6,634,466	6,273.23	630	149	4,837,811	6,633.6	80.8
2021年1月	1,804	475	12,636	495	556	210,638	84,101	2,687	6,512,605	3,174.92	787	233	5,112,137	6,993.7	85.2
2月	1,786	431	11,384	314	282	79,481	78,257	2,787	6,581,603	5,791.25	546	197	4,733,131	7,166.3	87.3
3月	1,727	472	12,986	384	302	271,840	102,642	2,760	6,629,043	6,329.17	706	174	5,484,594	7,523.7	91.7
合計			138,877	3,476	4,802	1,147,936	860,037			55,540.59	6,490	3,959	51,171,273		

・接続時間：ログイン時間の累計

・ログイン(実CPU)：コア時間単位

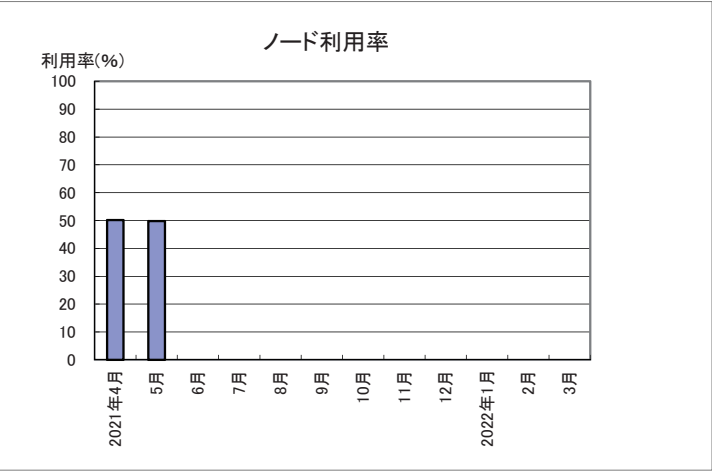
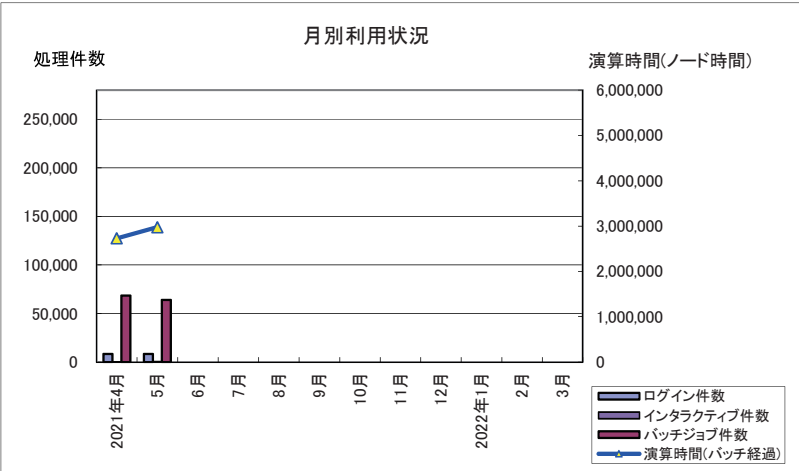
・2020年5月分は合計に含まない

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

計算式＝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率。 計算式＝利用ノード時間÷サービスノード時間×100

・下線部分の値に誤りがございました。お詫びして訂正いたします。



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

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		
2021年4月	986	127	2,183	19	253	6,489	3,140	146	192,825	12.31	2	284	24,386	41.1	34.3
5月	644	116	2,571	0	149	4,839	3,857	134	203,491	13.35	0	179	20,465	28.0	23.4
2020年5月	1,287	204	4,724	1	230	6,950	7,699	133	300,576	9.43	0	293	28,184	38.6	32.2
6月	1,032	235	5,136	2	110	7,720	7,073	145	306,587	5.06	0	29	39,952	56.2	47.2
7月	1,069	188	4,736	8	1,053	7,234	7,653	148	299,291	6.06	5	1,024	41,261	57.4	47.8
8月	999	171	4,032	0	897	5,165	6,535	157	298,649	7	0	1,213	34,188	72.2	60.2
9月	986	161	4,364	0	742	6,403	8,054	159	321,098	12.18	0	1,077	26,655	43.3	36.1
10月	1,127	214	5,277	0	869	6,962	7,133	168	327,145	18.74	0	973	47,424	72.9	60.8
11月	1,070	188	4,943	0	717	13,502	6,705	168	337,922	7.48	0	675	28,402	40.8	34.0
12月	1,094	236	5,252	0	1,545	16,439	8,449	180	349,615	6.64	0	1,979	47,463	67.1	55.9
2021年1月	1,112	195	4,585	0	1,010	12,940	7,523	181	356,486	7.35	0	1,173	44,632	62.2	51.8
2月	1,057	188	3,758	0	809	12,800	5,831	188	354,254	16.00	0	954	56,532	86.5	72.1
3月	1,056	176	4,140	0	776	7,345	5,273	189	316,348	13.20	0	920	73,742	102.4	85.4
合計			50,977	29	8,930	107,838	77,226			125.08	7	10,480	485,102		

・接続時間: ログイン時間の累計

・ログイン(実CPU): コア時間単位

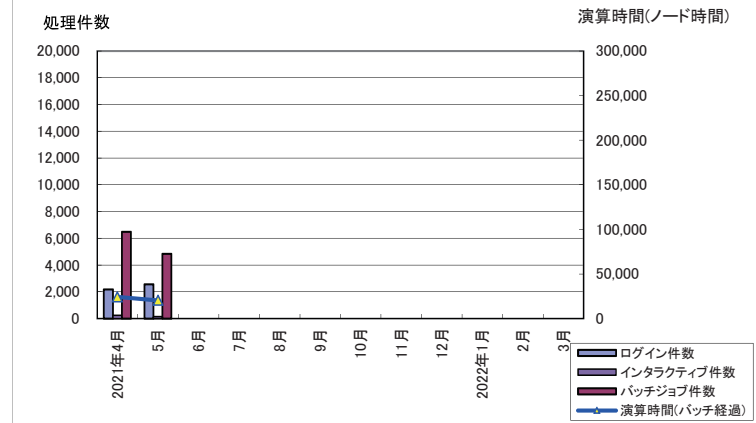
・2020年5月分は合計に含まない

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

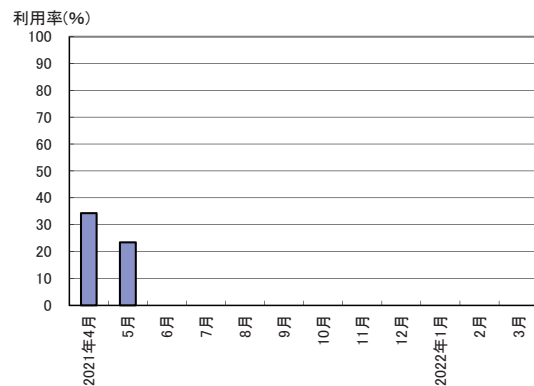
計算式=1ヶ月のインタラクティブおよびバッチジョブ経過時間合計÷1ヶ月の稼動時間

・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

月別利用状況



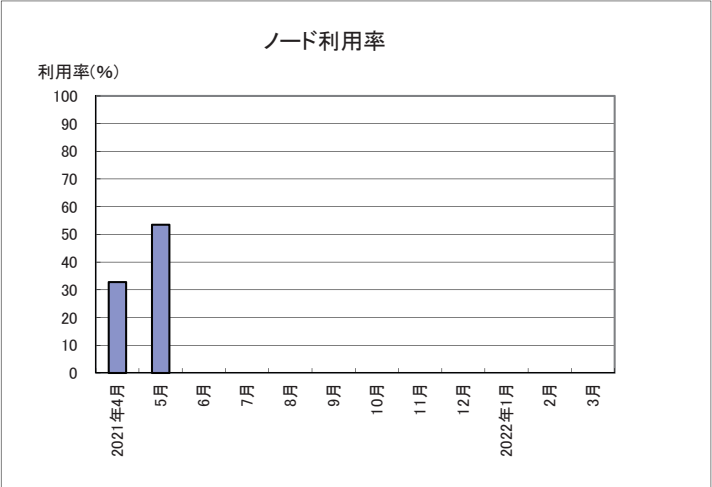
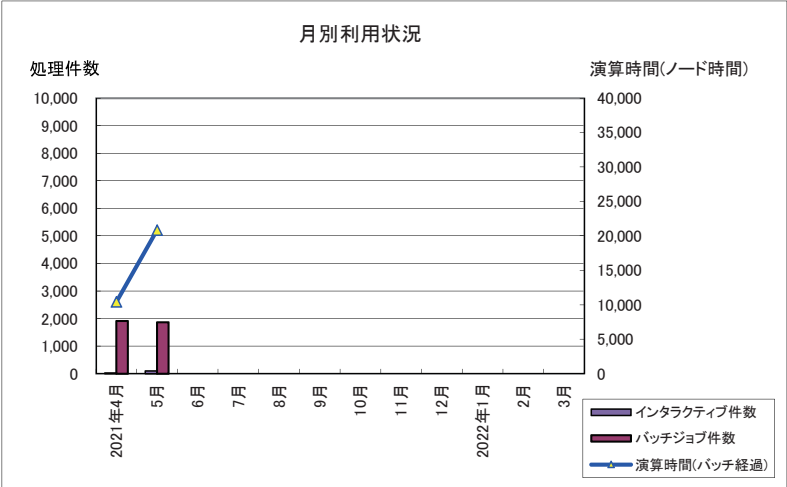
ノード利用率



4. Reedbushスーパーコンピュータシステム (Reedbush-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		
2021年4月	19	1,913	3	10,413	17.4	32.8
5月	95	1,867	45	20,833	28.3	53.5
2020年5月	80	2,115	74	13,149	17.9	33.2
6月	91	2,807	79	14,764	20.8	38.6
7月	21	2,883	27	15,123	20.6	38.1
8月	58	1,551	64	10,739	25.6	47.4
9月	57	1,757	49	20,902	32.7	60.6
10月	156	2,427	53	16,400	24.8	45.9
11月	56	1,695	25	24,476	34.4	63.7
12月	105	2,734	106	21,208	28.9	53.6
2021年1月	100	3,171	46	26,404	35.9	66.7
2月	56	2,657	212	28,072	41.1	74.7
3月	16	727	24	34,927	47.9	87.2
合計	830	26,189	733	244,261		

- ・登録者数、実利用者数、ログイン件数、接続時間、ファイル使用量、ログイン(実CPU)はReedbush-Uと共通。
 - ・2020年5月分は合計に含まない
- ・ノード利用数: インタラクティブおよびバッチジョブの経過時間を1ノードが100%動作したと仮定した場合の利用ノード数。
計算式=1ヶ月のインタラクティブおよびバッチジョブ経過時間合計÷1ヶ月の稼動時間
 - ・ノード利用率: サービスノードに対する利用比率。 計算式=ノード利用数÷サービスノード数×100



First cluster におけるブラックホール連星の形成

藤井 通子

東京大学大学院理学系研究科

1. ブラックホール連星合体と大質量星

2016 年にブラックホール連星合体による重力波が初めて検出されて以来、これまでに重力波観測によって数十個のブラックホール連星合体が観測的に確かめられてきた。[1]2019 年の長期観測の結果は、現在、徐々に公開されており、ブラックホール連星の質量や質量比の分布といったデータが蓄積されてきている。今後も、長期間の重力波観測が計画されており、数多くのブラックホール連星のデータから、近い将来、ブラックホール連星の分布について統計的な議論が可能となっていくであろう。

ブラックホール連星の分布（質量、質量比、離心率、頻度）は、ブラックホール連星の起源を明らかにするための重要な手がかりである。ブラックホールは太陽の数十倍以上の質量を持つ大質量星が進化した最後に残される天体であると考えられている。どの程度の初期質量を持つ恒星がブラックホールになるのかは、星の金属量（星の元素組成のうち、金属が占める割合で、ここでの金属はリチウムよりも重い元素全てを指す）や、連星による質量降着といった様々な要因に左右されると考えられているが、その過程についても、未だわかっていないことは多い。

最初に重力波によって検出されたブラックホール連星合体では、ブラックホールの質量が太陽の 30 倍程度と、これまで知られていた恒星質量ブラックホールの質量（太陽の 10 倍程度）よりはるかに重かった。その後、太陽の 50 倍程度の質量を持つブラックホールも検出された。それまでの標準的な恒星進化モデルでは、太陽の 30 倍以上の質量を持つブラックホールは形成しないと考えられていたため、重力波によるブラックホール連星の検出後、恒星進化モデルは大幅に変更されてきた。このように、重力波の観測は、それまで存在が知られていなかった太陽の数十倍の質量を持つブラックホールがこの宇宙に普遍的に存在していることを明らかにし、我々はその理由を説明できる理論モデルを考えなくてはならなくなった。

30 太陽質量を超える恒星質量ブラックホールの形成には、ブラックホールに進化する前の恒星の段階において大質量の星が生まれること、また、その後の恒星の進化において、その恒星があまり質量を失わないことが必要となる。そのためには、星の金属量が重要なファクターとなる。恒星が生まれる時の、個々の質量の分布（初期質量関数）は、星の材料となる星間ガスの金属量に依存していると考えられている。金属は、星の中での元素合成によって生成されていくため、宇宙初期に生まれた星ほど、恒星の金属量低い。現在、私たちが直接観測できる近傍の宇宙で典型的な金属量の場合の初期質量関数は、様々な観測から確かめられているが、まだ宇宙初期で、金属がほとんどない環境で形成する星の質量関数は、私たちが近傍で観測する質量関数とは大きく異なり、大質量星の割合が非常に高いと考えられている。大質量星がブラックホールに進化するため、大質量星の分布は、ブラックホール連星合体を考える上で、非常に重要な要素となる。また、金属量が大きいほど、星は、主系列星として輝いている間に、星風によってその質量を失う。つまり、金属量が大きい星ほど、初期の質量に対し、最後に残るブラックホール質量は小さい。このように、宇宙初期に生まれた星から進化したブラックホール連星があれば、それらは、観測

されている重いブラックホール連星合体の起源を説明できるかもしれない。

2. 連星進化と星団

ブラックホール連星の形成・進化過程は、主に次の二つが考えられている。1つ目は、初めから近接した連星として形成した二つの大質量星が、質量降着や common envelope と呼ばれる星の外層の共有を経て、より近接した軌道へと進化した後、ブラックホールへと進化してできる形成過程である。太陽近傍の星の観測から、大質量星は連星である割合が高く、大質量星どうしの連星である割合が高い。そのため、大質量星は連星として生まれることが多いと考えられている。そのため、連星として生まれる大質量星は、合体するブラックホール連星の起源の有力な候補である。

大質量星もう一つは、星団（図1）と呼ばれる、星が密集した領域で形成した連星が、周囲の星との重力的な相互作用により、周りの星に運動エネルギーを与えることで連星間距離を縮める力学的な進化である。連星間の距離が十分小さくなると、重力波によってさらに連星間距離が短くなり、最終的に合体する。合体するまでにかかる時間は、連星の軌道長半径の他、質量、離心率によって決まり、多くのブラックホール連星の合体時間は宇宙年齢より長いため未だ合体していないが、一部のブラックホール連星は宇宙年齢以内に合体し、その重力波が検出される。



図1：実際の星団（M80）。

球状星団と呼ばれる 10^6 個以上の星からなる星団。年齢は 100 億年程度で、大質量星はすでにブラックホールに進化していると考えられている。NASA, The Hubble Heritage Team, STScI, AURA

現在、近傍の銀河で見られる星団の星の質量関数は、太陽近傍で観測されている星の質量関数とはほぼ同じだと考えられている。その質量関数は大質量側では「べき乗」分布であり、そのべきは-2.3 程度である。そのため、大質量の星ほど数が少なく、これらの星団で形成されるブラックホール連星の数は限られている。さらに、30 太陽質量を超えるようなブラックホールは 1 つの恒星からは生まれない。しかし、先に述べたように、宇宙初期の低金属量の星では、現在より大質量星の多い質量関数であると考えられており、また、恒星の進化過程における質量損失も少ないため、現在形成している星よりも多くの割合がブラックホールになると考えられる。その場合、ブラックホール連星の合体効率も現在の星団で見積もられるよりも高いと予想される。

そこで、本研究では、金属量の非常に少ない宇宙最初期に生まれた星「first star」によってできた星団「first cluster」で形成されるブラックホール連星の形成効率や質量分布、質量比の分布を星団進化シミュレーションによって明らかにすることを目的とする。

3. モデル・シミュレーションコード

本研究で用いる星団の星の空間分布のモデルには、Plummer モデルを用いた。Plummer モデルは球対称・力学平衡の分布で、星団シミュレーションの初期条件として標準的に用いられている。星団のシミュレーションでは、初期に力学平衡であった分布でも、星同士が重力相互作用によって初期の軌道からずれていくことで、星団中心の密度が上昇していくコアコラプスが起こる。コアコラプスにかかる時間は質量関数、特に重い星の質量に依存する。重い星ほど、より軽い星に自身の運動エネルギーを与えることで星団中心に沈む時間が短く、コアコラプスを加速させる。

星団の質量関数は、通常の質量関数との比較を行うため、 -2.35 乗のべき分布とし、星の最大・最小質量はそれぞれ太陽の 100 倍、0.1 倍とした。星の数は 4 万個とした。星団の初期の粒子分布の生成には、AMUSE を用いた (<https://amusecode.github.io/>) [2]。AMUSE は天文学のシミュレーションに必要なコードを Python から呼び出し、既存の複数のコードを自由に組み合わせることができるアプリケーションである。AMUSE を使い、Plummer モデルの粒子分布を生成した。また、今回のシミュレーションでは、星の軌道を積分しつつ、星の進化（＝質量や半径の変化）も同時に計算するのではなく、大質量星が進化し終わり、ブラックホールになった時点まで、星の質量を進化させ、その時点での星の質量分布（図 2）を初期条件とした用いた。星の進化（質量の変化）を入れて星団シミュレーションを行った場合、計算初期に大質量星からの質量損失が起こり、星団がいったん膨張するが、それが終わると、星団はその時点での力学平衡状態に落ち着き、その後の力学進化が進む。後者の方が期間としては圧倒的に長く、ブラックホール連星の力学的進化もこの期間に起こるため、本研究では、大質量星がブラックホールに進化した状態を初期条件として採用する。

星の金属量 (Z) は 2×10^{-6} とした。これは、太陽の金属量 ($Z=0.01$ 程度) や球状星団の典型的な金属量 ($Z=10^{-4}$ 程度) と比べて非常に低い。このような低金属量の星の進化のモデルとして Kinugawa et al. (2014) [3] のモデルを用いた。古くから用いられてきた星の進化モデル (Hurley et al. 2000) [4] に従って得られたブラックホールの質量関数と、本研究で用いる Kinugawa et al. (2014) の超低金属量モデルで得られたブラックホールの質量関数 (First cluster モデル) は図 2 の通りである。

また、本研究では、比較のため、金属量が球状星団程度 ($Z=10^{-4}$) の場合のブラックホール質

量分布の場合の計算も行った（球状星団モデル）。このモデルは、様々な星団進化シミュレーションモデルの比較を行うプロジェクト MIDAS(<https://github.com/astro-midas>)のために用意された共通の初期条件である。

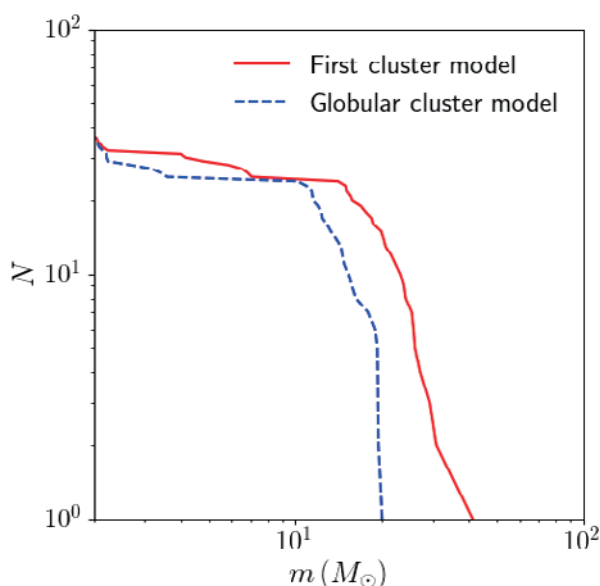


図 2：星団内のブラックホールの質量関数。

赤実線：First cluster モデル、青破線：球状星団モデル。

本研究課題では、GPU を用いて重力計算を高速化した重力多体問題用コード「NBODY6++GPU」[5]を用いた。NBODY6++GPU は、星団のような高密度かつ連星を含む恒星系のシミュレーション向けの重力多体問題（N 体問題）用コード「NBODY6」の GPU 拡張版であり、オープンソースであるため、世界中で利用されている。

球状星団の年齢は 100 億年程度であるのに対し、連星の軌道周期は短いもので数日である。このように時間スケールが数桁以上異なる系を同じ手法で時間積分するのは困難であるため、NBODY6 では、連星のみを取り出し、時間を含めて座標変換し、別の方法で積分する「regularization」と呼ばれるアルゴリズムが用いられている。このような連星の計算手法なしでは、ブラックホール連星を含めた星団の進化シミュレーションを行うことはできない。

計算には、Reedbush-L を用いた。

4. 結果

図 3 は、星団中で力学的に形成したブラックホール連星の重力波放出による合体時間である。この合体時間が宇宙年齢より短い場合、重力波観測による検出の可能性がある。今回の first cluster モデルでは、宇宙年齢以内に合体可能なブラックホール連星は 2 つであった。一方、球状星団モデルの場合では 4 つであり、first cluster モデルより多いが、サンプル数が非常に少ないため、今後、初期の分布の生成時に異なるランダムシードを用いた計算を複数回行い、統計

的に十分なサンプルを得て比較する必要がある。全体的な分布を見ると、first cluster は 10^4 yr (1 Gyr = 10^9 年) にピークがある一方、球状星団モデルでは 10^5 Gyr にピークがあり、First cluster の方が合体にかかる時間は短めである。しかし、ブラックホール連星の個数は first cluster モデルの方が少なかった。

図4は、ブラックホール連星の質量比の分布である。First cluster モデルは、球状星団モデルと比べてより質量に差のある連星が多い。これは、first cluster モデルでは、より大質量のブラックホールが形成するため、ブラックホール間の質量差がつきやすいためであると考えられる。

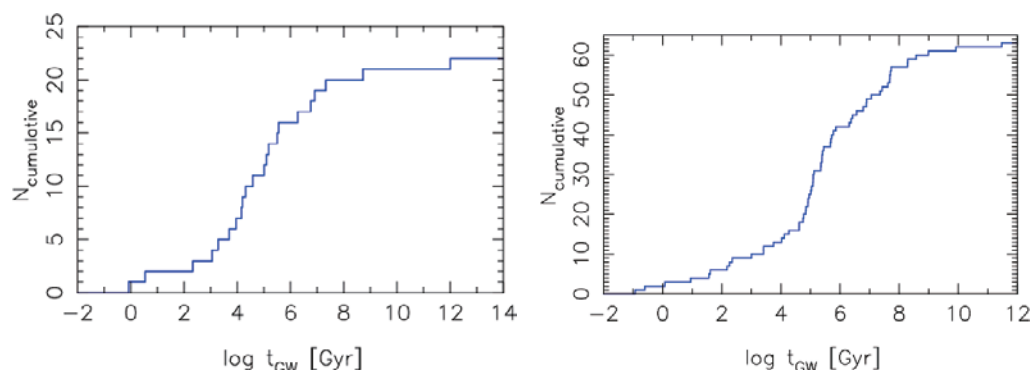


図3：星団中で力学的に形成したブラックホール連星の重力波放出による合体時間の累積個数分布。左：First cluster モデル。右：球状星団モデル。およそ $\log t_{\text{GW}} < 1$ ($t_{\text{GW}} < 10$ Gyr) のブラックホール連星が宇宙年齢以内に合体する。

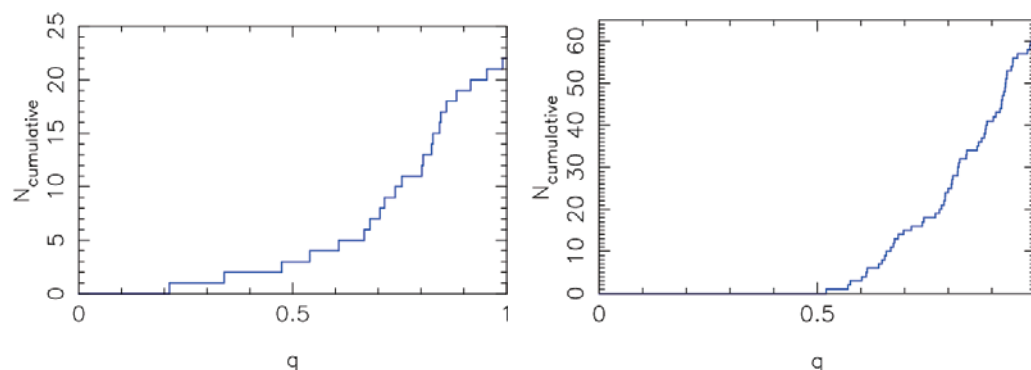


図4：ブラックホール連星の質量比 ($q=M_2/M_1$, $M_1>M_2$)。

左：First cluster モデル、右：球状星団モデル。

5. まとめと今後の展望

今回の研究で、first cluster から得られたブラックホール連星は予想に反して少なかった。これは、質量関数に起因している可能性がある。Wang, Fujii, and Tanikawa (2021) [6]では、質量関数のべきを変えた星団進化シミュレーションを行い、合体するブラックホール連星の数を

調べている。その結果、べきが浅い(=重い星の数が多い)ほど合体するブラックホール連星が多くなるわけではないことがわかった。それは、重いブラックホールが力学進化によって星団の中心に集まった結果、星団中心を力学的に温める(速度分散を大きくし、密度を下げる)ことによって、連星の軌道進化が進まなくなるためである。本研究でも同様の現象が起きている可能性があるが、サンプル数が少ないため、今後、ランの数を増やしてブラックホール連星のサンプル数を増やしてから議論する必要がある。

謝 辞

初期条件の作成に関して、衣川智也氏のご協力をいただきました。また、初期条件生成スクリプトは、Steven Rieder 氏作成の MIDAS プロジェクトの初期条件生成スクリプトを用いました(https://github.com/rieder/default_ics)。

参 考 文 献

- [1] Abbott R., et al., Physical Review X, 11, 2, 2021
- [2] Portegies Z. S., et al., Computer Physics Communications, 184, 3, 2013
- [3] Kinugawa T., et al., MNRAS, 442, 4, 2014
- [4] Hurley J. R., Pols O. R., Tout C. A., MNRAS, 315, 3, 2000
- [5] Wang L., et al., MNRAS, 450, 4, 2015
- [6] Wang L., Fujii M. S., Tanikawa A., MNRAS, 504, 4, 2021

共溶媒分子動力学における薬剤設計向け共溶媒セットの構築

柳澤 溪甫

東京大学農学生命科学研究科（現：東京工業大学情報理工学院情報工学系）

1. はじめに

共溶媒分子動力学 (cosolvent molecular dynamics; CMD) 法はタンパク質の立体構造を用いた薬剤開発 (structure-based drug design; SBDD) において近年利用されつつある手法である。通常、分子動力学 (molecular dynamics; MD) 法では溶媒として水分子を多量に配置した空間の中でシミュレーションを行うが、CMD 法では水に加えて共溶媒 (cosolvent) と呼ばれるごく小さな有機化合物を溶媒として混ぜることで、薬剤標的となるタンパク質の立体構造変化を誘発させたり[1]、あるいは共溶媒分子のタンパク質表面における存在確率を算出し、この結果をタンパク質表面における薬剤結合部位の推定[2]、薬剤の結合親和性の推定[3]などに応用している。このようなことから、CMD 法は mixed-solvent MD (MSMD) 法とも呼ばれる。CMD 法は通常短時間 (20-100 ns) のシミュレーションを多数 (10-20 回)、独立に行うことで、共溶媒の初期位置依存性を低減させ、結果の再現性や安定性を高める。これは長時間 (10 μ s 以上) のシミュレーションを通して事象を解明する場合より並列計算効率が良く、スパコンに適した計算である。

共溶媒の種類は、タンパク質と化合物の結合の要素である水素結合や電荷、芳香性、親水性、疎水性などを考慮して人力で決められてきた。例えば、負電荷をもつ共溶媒として酢酸イオンが、芳香環を持つ共溶媒としてベンゼンやピリミジンが、親水的な共溶媒としてアルコール (イソプロパノール、エタノール、メタノール) がよく用いられる。しかし、これらの選択は極めて恣意的であり、手法間で共通性に乏しいというのが現状である。

そこで本研究では、薬剤設計における CMD 法の共溶媒の選択に一貫性を持たせるため、既知薬剤の部分構造を抽出し、この部分構造を共溶媒とした CMD シミュレーションを実施することで、各共溶媒のシミュレーション中の挙動の類似性を評価し、薬剤設計に特化した共溶媒セットを構築した。なお、本研究は共溶媒セットを構築する手法 **EXPLORER** (**EXT**ended **PRO**bes set construction by **RE**presentative **RE**trieval) として Journal of Chemical Information and Modeling 誌に採択、公開済みであり[4]、本稿では概要を記す。詳細は公開済みの論文を参照されたい。

2. 共溶媒セットの構築

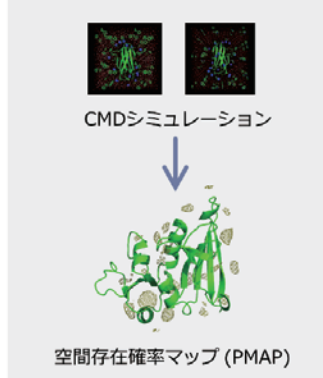
本研究では、I. 共溶媒候補群の作成、II. 網羅的な CMD シミュレーションの実施、III. シミュレーション結果の類似度を用いた代表構造の選出、の3つの手順を通して、創薬に適した共溶媒セットの構築を実施する (図1)。

I. 共溶媒候補群の作成：薬剤に頻出する部分構造を列挙し、共溶媒候補群を作成した。ここでは、ZINC データベース[5]に公開されている FDA (米国食品医薬品局) に承認された 1,615 件の薬剤分子構造を、著者が開発した Spresso[6]の分割手法を用いて部分構造に分割し、5 つ以上の薬剤分子に出現する部分構造を列挙した。このうち、共溶媒として適した性質を持つものをルールベースで抜き出し、最終的に 138 件からなる共溶媒候補群を作成した。

I. 共溶媒候補群の作成



II. 候補共溶媒の網羅的CMD



III. CMD結果を用いた代表構造選出



図 1 EXPRORER のワークフロー

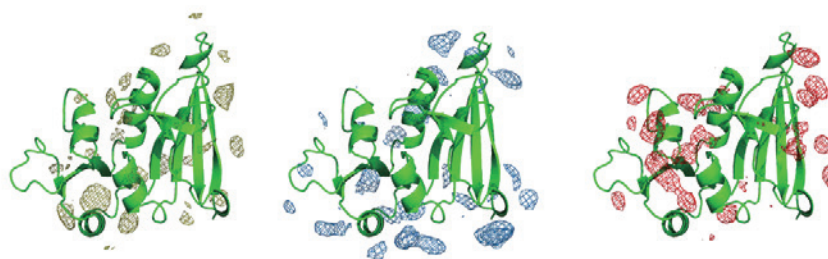


図 2 空間存在確率マップ (PMAP) の例

II. 網羅的なCMDシミュレーションの実施：選出した138件からなる共溶媒候補群について、実際に4種のタンパク質を対象としたCMDシミュレーションを実施した。各シミュレーションは20 nsの計算を20回実施したため、1つの共溶媒-タンパク質ペアについて400 nsのCMDシミュレーション、全体としては延べ約220 μ sのシミュレーションを実施し¹、それぞれの共溶媒のタンパク質表面における存在確率を計算、空間存在確率マップ (spatial probability distribution map; PMAP) を生成した (図2)。

III. シミュレーション結果の類似度を用いた代表構造の選出：II. で作成した PMAP について、共溶媒間の類似度を算出し、類似度に基づいて代表構造の選出を行った。この際、類似度の閾値を変化させ、共溶媒10件からなるセット (小セット)、共溶媒18件からなるセット (大セット) をそれぞれ構築した。なお、閾値を自由に変化させることで任意の共溶媒数からなるセットを構築可能である。

3. 構築された共溶媒セット

前章に説明した方法によって構築された小セットおよび大セットを図3A、図3Bに示す。先行研究の共溶媒は図3Cに示すように重原子 (水素以外の原子) が6つ以下からなる構造が多い。一方、我々が作成した共溶媒セットには重原子が8つ以上の構造も多数含まれている。分子認識においては単一の相互作用だけではなく、複数の相互作用が同時に行われることが重要であるとされていることから、このような共溶媒を選択することには意義がある。

¹ 東京大学情報基盤センター 若手・女性利用者推薦に基づく計算資源貸与 (Reedbush-H) を受けて一部の計算が実行された。

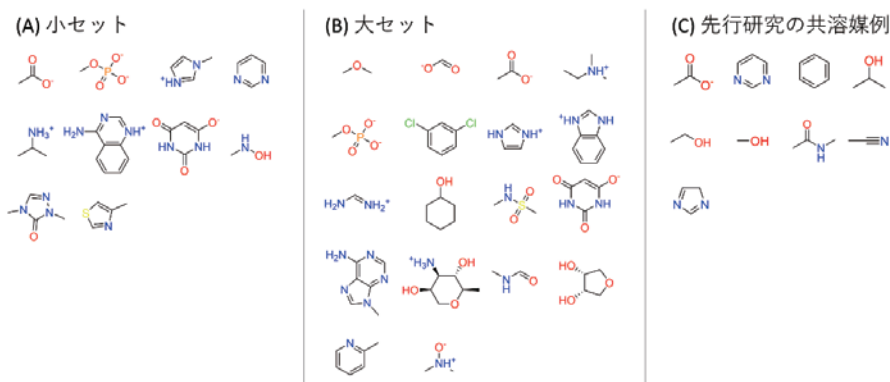


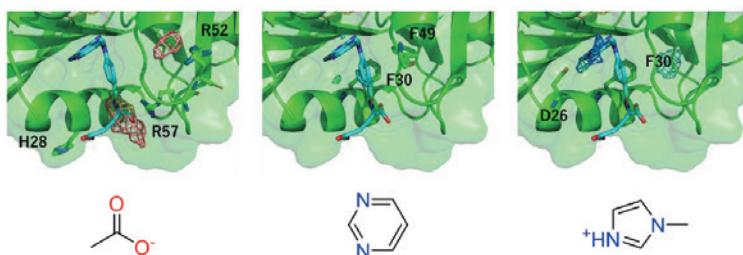
図3 構築された共溶媒セットと先行研究の共溶媒例

また、従来の方法では全く利用されてこなかった2つの共溶媒が選択されていることにも注目したい。すなわち、**双性イオン**（正の形式電荷と負の形式電荷を同時に持つような構造）と**単糖状の構造**である。双性イオンは中性状態と比べて PMAP が大幅に異なることが筆者らの実験により判明しており、新たに用いることで電荷の偏りに適したタンパク質表面を見つけることが期待される。単糖状の構造は従来、環の自由度や多数のヒドロキシ（-OH）基によって初期構造依存性が顕在化しやすいと考えられていた。しかし後述するタンパク質の薬剤結合部位解析の結果から、この構造を用いることで薬剤結合部位をより詳細に発見することができており、このような構造を共溶媒として用いることが重要であることが判明した。

4. 共溶媒セットを用いたタンパク質の薬剤結合部位解析

最後に、本研究で構築した共溶媒セットを用いて、タンパク質の化合物結合部位の解析を実施した。まず、ジヒドロ葉酸還元酵素（dihydrofolate reductase; DHFR）と、その阻害剤である methotrexate の結合部位についてみると、構築した共溶媒セットのうち、小セットで結合すべき部分構造を含めて判別できることが分かった（図4A）。一方、DNA ジャイレース B（DNA gyrase B; GyrB）については、阻害剤の単糖状の構造が結合するタンパク質表面に単糖状共溶媒が存在しやすい（図4B）という結果が得られた。このことから、**本研究で提案した共溶媒セットは、単に結合部位を推定するだけではなく、その部位にどのような構造が結合するかまで適切に推定している。**

(A) DHFR



(B) GyrB

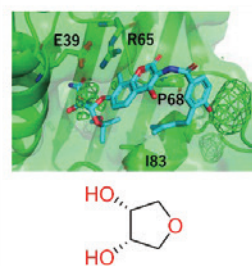


図4 タンパク質の薬剤結合部位解析

(A) ジヒドロ葉酸還元酵素（DHFR）の結合部位周辺における、小セットに含まれる3種類の共溶媒の PMAP

(B) DNA ジャイレース（GyrB）の結合部位周辺における、大セットに含まれる単糖状の共溶媒の PMAP

5. まとめ

本研究では、薬剤分子構造の部分構造を共溶媒候補として、網羅的な CMD シミュレーションによってシミュレーション結果の類似度を定義、薬剤設計に特化した共溶媒セットを構築した。さらに、その共溶媒セットが薬剤結合部位解析に活用できることを確認した。

薬剤分子に頻出する、毒性を示しにくい部分構造に本研究では着目して解析を行ったが、一方で毒性を持つ部分構造について同様の共溶媒シミュレーションを実施、PMAP を作成し、本研究で用いた部分構造の PMAP との類似度を評価することで、毒性を持つ部分構造の置換を提案することができる可能性がある。このような利用法を含めて、本研究で提案した共溶媒セットを利用した応用例を提案していくことが今後の展望である。

なお、本研究で用いられたコードは <https://github.com/keisuke-yanagisawa/explorer> に GPL v3 ライセンスの下で公開されている。

謝 辞

本研究は東京大学情報基盤センター 若手・女性利用者推薦 (『大規模な共溶媒分子動力学シミュレーションによる至適共溶媒セットの構築』)、日本学術振興会 科学研究費 (19J00878, 20K19917)、および日本医療研究開発機構 (AMED) 『創薬等ライフサイエンス研究支援基盤事業』 (20am0101107) の支援を受けて実施された。また、東京大学農学生命科学研究科の清水謙多郎教授、寺田透准教授、森脇由隆助教には、本研究を進める上で極めて多くの助言をいただいた。この場を借りて厚く御礼申し上げる。

参 考 文 献

- [1] Kimura, S. R., et al. *J. Chem. Inf. Model.* **2017**, 57, 1388-1401.
- [2] Ghanakota, P., et al. *J. Chem. Inf. Model.* **2018**, 58, 784-793.
- [3] Ustach, V. D., et al. *J. Chem. Inf. Model.* **2019**, 59, 3018-3035.
- [4] Yanagisawa, K., Moriwaki, Y., Terada, T., Shimizu, K. *J. Chem. Inf. Model.* (Epub ahead of print, doi: 10.1021/acs.jcim.1c00134)
- [5] Sterling, T.; Irwin, J. J. *J. Chem. Inf. Model.* **2015**, 55, 2324-2337.
- [6] Yanagisawa, K., et al. *Bioinformatics* **2017**, 33, 3836-3843.

第 152 回お試しアカウント付き並列プログラミング講習会

「スーパーコンピューター超入門」

芝 隼 人

東京大学情報基盤センター

2021 年 4 月 26 月に、第 152 回お試しアカウント付き並列プログラミング講習会「スーパーコンピューター超入門」（共催：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・HPC オープンソースソフトウェア普及部会））を開催した。本稿はその実施報告である。

「超入門」と題した講習会は、2020 年 9 月 18 日に初回を実施し好評を博したことから、今年度も開催する運びとなったが、担当講師の人数は 2 名から今回私 1 名で実施することに変更された。内容については前回同様 Linux の簡単な操作・ログインの仕方といった基本的な事柄から始めてスーパーコンピューターを用いるための基本を学ぶ講義及び実習を行うものとしたが、受講申込は順調に進んで締切である 4 月 19 日に定員に到達した。

今回の講習会の時間割は次の通りとした。

13:00 - 14:00 ガイダンス・初めてのログイン（講義・実習）

14:15 - 16:00 サンプルプログラムによる並列計算超入門（講義・実習）

16:15 - 17:00 より進んだ利用に向けて（講義）

前回（第 138 回）は休憩を挟んで講義と実習の時間を分けて実施したが、両者の間で内容的に相重なる部分も多く、これらを織り交ぜることとした。また、第 3 部について前回は利用制度の紹介などを行ったが、大学院生等の参加が多いことなどを考慮し内容の見直しを行った。具体的には、並列計算に必要なトークンの見積もり方や、統合開発ツールをログインノード上に接続する使用方法の紹介、また GPU コンピューティングや、当センターにおいて 2021 年 5 月に新規導入されるシステム（Wisteria/BDEC-01）の紹介を行った。

実習に用いるサンプルプログラムでは FORTRAN, C/C++, Python のいずれかから選択してもらうこととしたが、今回は申込受付時にいずれの言語を使用するかアンケートを行った。その結果は次の通りである。

- ・FORTRAN 10 名
- ・C/C++ 4 名
- ・Python 15 名

顕著だったのは Python ユーザーの多さであるが、これは諸分野へ広がっているデータ科学手法による研究開発にスーパーコンピューターを使いたい、という利用者の増加を反映したものと思われる。C/C++を用いるスーパーコンピューターユーザーは多いと思われるものの、どちらかというと「通」な人が用いる言語で、今回のような講習会には参加をそもそも考えなかった方が多いものと想像する。出席者の構成は、学部学生 2 名・大学院学生 14 名・教員 7 名・研究員 1 名・

技術職員 2 名・官公庁 1 名・企業 1 名・その他 1 名となっていた。特に、言語学や社会科学を専門とする方、医療・生命科学データを取り扱われる方などの参加者が大きい割合を占めていたのは、当センターの講習会の中で見ても特徴的である。とりわけ、前者（言語学・社会科学）分野の数名からは講習会後も大変熱心な質問が寄せられて、大きな手応えがあった。

演習中の質疑応答は他の多くの当センターにおけるオンライン講習会におけるのと同様に Slack を用いるのが良いと考え準備したが、実際の質問は Zoom のチャットテキストで送られてくることが多かった。また参加者の半分近くが Slack のワークスペースにサインインせずに当日参加されていたように思う。アフターケアについてもメールで行えば良く、コードの受け渡しもそれほど複雑なものにならない「超入門」では、Slack を使用せずとも充分やっていけるという印象であった。

次の表 1 には、受講者からのアンケートの結果を集計したものを示す。参加者の約 8 割にあたる 22 名からご回答をいただくことができた。

表 1 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	1		20	1	
(b) 講習会講義内容	簡単⇔難		6	13	3	
(c) 配布資料内容	簡単⇔難	1	5	14	2	
(d) サンプルプログラム内容	簡単⇔難	3	5	12	2	
(e) 参加した満足度	不満⇔満足			6	6	10

アンケートの自由記述欄には次のような意見が寄せられた。

- ・ 丁寧な資料のおかげで、受講前にはほぼ全てを自分で実行することができた。過去の講習会の資料も掲載いただいていたおかげで様子がわかり、本講習会を受講する決め手となった。TA の方が 3 名近くも常駐し、手厚いサポート体制に驚いた。
- ・ 今回の講義ではジョブスクリプトは配布されたが、自分で書く方法・書き方を教えたらより良いと思う。
- ・ 今後もオンラインでの講習会を続けてほしい。
- ・ 何もわかっていなかったので大変助かりました。初心者用のコース本が少ないのが現状かと思います。

1 名の方は、講義資料中の FORTRAN サンプルプログラムの誤植を指摘してくださり、ここに感謝する。また、Zoom でのオンライン開催については「遠方から交通費なしで参加ができて良い」「具体的な質問がたくさんできる」「個別対応をお願いしやすい」「気楽に受けられる」などの意見が寄せられた一方、（おそらく当センター側の）通信障害により聞き取れない部分が発生したとの指摘もあった。

今回も満席となったこと、アンケート結果もそれなりに好評であったことに鑑み、秋頃にもう一度、同様の内容の講習会を実施する予定である。

当日の講習会も Zoom によるオンライン形式で行われ講義・実習合わせて約 4 時間に及んだが、

ビデオ収録を行ってほぼそのままの形で動画サイト YouTube に掲載、公開した。通常の講義を担当しておらず、また情報系分野の出身でない私自身にとって大きなチャレンジであるとともに、普段の自分の話し方がどういうものかを自覚させられる機会であった。ゆっくりと話すように努めていたつもりであったが、勢い余って言葉を取捨できなくなることもあれば、自分が思っている以上に「えー」「そのー」などの言葉が入っており、語尾がはっきりしないことも多数である。個人的な技量の不足に関わることをわざわざここに述べるのは適切でないかもしれないが、普段からの注意や心掛けを保ちながら講義への場慣れをしてくると、改善してくる部分もあると思っている。次回講習会も引き続きオンライン開催となる予定であるため、コンテンツとしてより完成に近い状態の動画教材が提供できるよう再挑戦の機会があるかもしれない。

講義資料および実習資料を当センターの第 152 回講習会ホームページ（<https://www.cc.u-tokyo.ac.jp/events/lectures/152/>）において公開している。また同じ場所から、上述の講義・実習の YouTube 動画へのリンクを貼っている。

最後に本講習会の実施にあたって、事前のサンプルプログラムの動作チェックを大学院生の鈴木翔太氏に行っていただいたおかげで、1 点不具合が発見された。前回(第 138 回)のときにあったような当日の実習におけるサンプルプログラムの動作トラブルが起きることなく実施することができた。情報基盤課スーパーコンピューティングチームの中張遼太郎、山田新の両氏には今回も当日の講習会のアシストにおいて大変お世話になった。また、大学院生の大森拓郎氏は動画の編集および公開の作業をしてくださった。この場を借りて皆様にお礼を申し上げる。

第 153 回お試しアカウント付き並列プログラミング講習会

「MPI 基礎：並列プログラミング入門」実施報告

三木 洋平

東京大学情報基盤センター

2021 年 4 月 28 日（水）、第 153 回お試しアカウント付き並列プログラミング講習会「MPI 基礎：並列プログラミング入門」が開催されました。例年は東京大学情報基盤センターにおいて開催されていた本講習会ですが、今回も新型コロナウイルス感染症対策のために Zoom および Slack を用いたオンライン講習会として実施されました。

本講習会は、東京大学内および学外における当センターのスーパーコンピュータの利用を考えているユーザに加え、社会貢献の一環として、高性能計算や並列処理の技術習得を目的にした企業に所属する研究者、技術者の方が参加可能になっております。

受講者の内訳は、学部学生：4 名、大学院学生：9 名、大学・研究機関教職員：4 名、企業：6 名で、合計 23 名でした。

1 ヶ月間有効となるお試しアカウントが与えられ、Oakforest-PACS スーパーコンピュータシステムの利用方法、MPI (Message Passing Interface) を用いたプログラミングに関する基礎演習が、1 日終日の日程で行われました。

当日のプログラムを、以下に載せます。

- 4 月 28 日（水）
 - 10：00 - 11：20 テストプログラムの実行など（演習）
 - 11：30 - 12：30 並列プログラミングの基本（座学）
 - 13：40 - 14：40 MPI プログラム実習 I（演習）
 - 14：50 - 15：50 MPI プログラミング実習 II（演習）
 - 16：00 - 17：00 MPI プログラミング実習 III（演習）

対面での講習会として開催してきた本講習会では例年スパコンへのログイン支援を当日行ってきましたが、新型コロナウイルス感染症対策のためにオンライン開催ということもあり、事前に配布した資料を参考に事前にログインしてもらうこととしました。これは去年度の講習会と同様の対応です。また、座学パートについては Zoom 講習会を録画したものを、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の YouTube チャンネル (<https://www.youtube.com/channel/UC2CHaGp1A0-vqRlV7wmU0-w/videos>) にアップロードした (<https://youtu.be/DEFQEYWPQvo>) のでいつでも視聴できるようになっています。

23 名中 19 名の参加者について、講習会に関するアンケートをご提出いただきました。主要な項目の集計結果を以下に掲載します。

プログラミング経験については1年の方が7名と最多でしたが、最長で15年と回答された方もおり幅広く分布していました（図1）。一方で並列プログラミング経験については、並列プログラミング入門ということもあり、まったくない方が17名と大半を占めていました。普段使用しているプログラミング言語については、Python が最多で Fortran および C/C++が続きました（図2）。

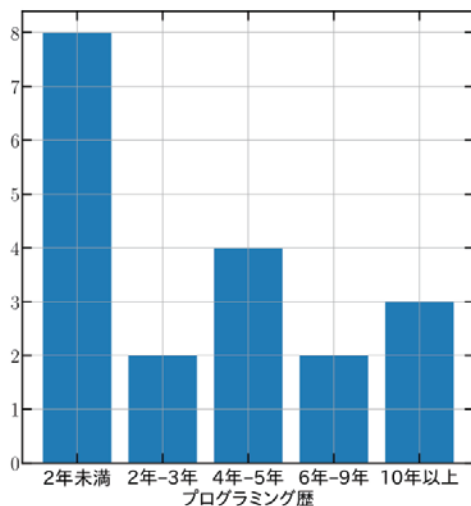


図1：参加者のプログラミング経験

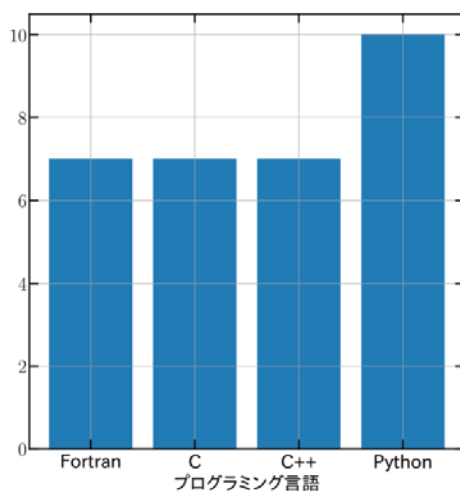


図2：普段使用しているプログラミング言語

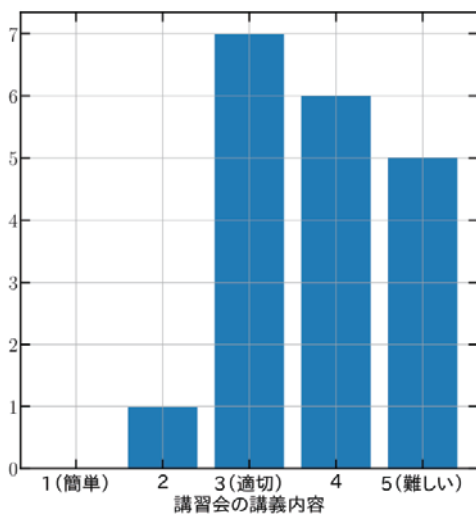


図3：講習会の講義内容（プレゼン）

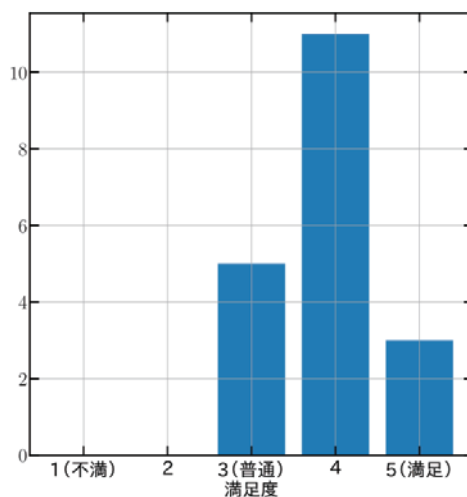


図4：講習会に参加した満足度

講習会の難易度設定については、適切と回答された参加者が最多ではありますが、例年の現地開催での講習会よりも難しく感じる方が増えているようです（図3）。また、講習会に参加した満足度は図4に示した通りであり、おおむね満足度が高かったようです（平均値は

3.9)。

今回は Zoom を用いての完全オンライン開催であったので、オンライン開催に関する回答をいただきました。オンライン開催で良かったことについての回答は

- 現地向かう時間が大幅に削減できた (3 名)
- 家から参加できる (2 名)
- 自分のペースで演習ができるため気軽に参加できました
- 自席で受講可能なこと
- 遠隔地から参加できること (2 名)
- 音声聞きやすかった
- 質問しやすかった
- 外出せずに講習会を受けられたこと
- スケジュールのコンフリクトをあまり気にせずに気軽に参加申込できたこと
- 地方在住のため時間と経路の節減で助かっています

で、悪かったことについての回答は

- たまに、どの部分を示しているか分かりにくいところがあった
- 自席からなのでマイクの使用が難しいこと
- 聞きやすさなどが通信環境に左右されること

というものでした。会場まで移動する必要がなくなったため遠隔地からの参加が容易になったというメリットを回答される方が多かったです。

また、自由記述欄においては以下の感想をいただきました。

- 並列計算の専門家でなくてもわかるような入門的な内容だったのでよかった
- 関数の使い方をもう少し分割して、教えていただきましたかったです。特に、演習の時に突然 MPI 関数が出てきて使い方が全く分からず、何もできませんでした。ですが、MPI に触れることができ、とても良い機会でした。ありがとうございました。
- 大変分かりやすくご講義いただきありがとうございました。4_sum_reduce の演習課題までは理解でき、これからの業務に参考になりました。最後の演習課題 (5_diffusion) だけついていけませんでした、実装例の解説を見ながら復習してみたいと思います。
- 4、5 が難しくついていけませんでした。後でじっくり復習してみます。
- 5 番の演習課題が初心者には難しかったですが、非常に良い経験ができました。ありがとうございます
- 最後の演習問題は難しく感じましたが、途中の演習問題のレベルはちょうどいい難易度だったと思います

演習課題については、前回までのアンケート結果を受けて調整しており、段々と難度を

上げていくようにしています。特に最終問題が難しいという感想が多かったため、今後も調整を続けていく予定です。

同様の講習会があれば、「また受けたい」という回答が10名、「どちらともいえない」が8名で、その他の講習会にも期待されていることが伺えます。

以上

第 154 回お試しアカウント付き並列プログラミング講習会 OpenMP によるマルチコア・メニコア並列プログラミング入門 (Wisteria/BDEC-01 (Odyssey, A64FX 搭載)) (オンライン)

中島 研 吾

東京大学情報基盤センター

本稿では、2021 年 5 月 31 日 (月) にオンライン開催した第 154 回お試しアカウント付き並列プログラミング講習会「OpenMP によるマルチコア・メニコア並列プログラミング入門 (Wisteria/BDEC-01 (Odyssey, A64FX 搭載))」¹⁾ (共催：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・HPC オープンソースソフトウェア普及部会)) について紹介する。

東京大学情報基盤センター (以下、本センター) 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 月からは全ての講習会を Zoom 使用による「オンライン」講習会として実施している。「OpenMP によるマルチコア・メニコア並列プログラミング入門」は、オンラインとなってから、第 131 回 (2020 年 4 月 27 日)、第 143 回 (2020 年 11 月 2 日)、第 151 回 (2021 年 4 月 21 日) と 3 回、Oakbridge-CX (OBCX)²⁾ を使用して実施してきた。2019 年度までは 2 日にわけて実施していたものを、2020 年度からは 1 日にまとめて実施している。

近年マイクロプロセッサのマルチコア化が進み、様々なプログラミングモデルが提案されている。中でも OpenMP は指示行 (ディレクティブ) を挿入するだけで手軽に「並列化」ができるため、広く使用されており、様々な解説書も出版されている。メモリへの書き込みと参照が同時に起こるような「データ依存性 (data dependency)」が生じる場合に並列化を実施するには、適切なデータの並べ替えを施す必要があるが、このような対策は OpenMP 向けの解説書でも詳しく取り上げられることは余り無い。第 151 回以前の講習会では、「有限体積法から導かれる疎行列を対象とした ICCG 法」を題材として、科学技術計算のためのマルチコアプログラミングにおいて重要なデータ配置、reordering などのアルゴリズムについての講義、スパコンを使用した実習を実施した。内容は筆者が本学大学院工学系研究科・情報理工学系研究科の講義として実施している「計算科学アライアンス特別講義 I」、「科学技術計算 I」、「スレッド並列コンピューティング」の内容に準拠している³⁾。本来であれば 105 分×10 回程度の講義の内容を 1 日 (正味 7.5 時間 (450 分) 程度) に圧縮しての内容となっているため、アンケートでも「1 日に詰め込む内容としては項目が多すぎる」が散見され、第 151 回のアンケートでは満足度が 3.73 (満点 5.00) と比較的低い値となった。

今回は、5 月 14 日に運用を開始した Wisteria/BDEC-01 (Odyssey)⁴⁾ を使った最初の講習会として企画して、第 151 回の内容を Odyssey を使って実施する予定であったが、急遽予定を変更し、データ依存性に関連した内容を完全に削除したカリキュラムを策定した。大体 105 分の講

¹⁾ <https://www.cc.u-tokyo.ac.jp/events/lectures/154/>

²⁾ <https://www.cc.u-tokyo.ac.jp/supercomputer/obcx/service/>

³⁾ <http://nkl.cc.u-tokyo.ac.jp/20s/>

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

義にして 4 回程度の内容であり，1 日，450 分程度で実施するには手頃な量であった。また，Wisteria/BDEC-01 (Odyssey) に搭載されている A64FX についても詳細な解説を実施した。内容もやや簡単になったため，アンケート結果（受講者 6 名，回収 6 名）は全般的に「普通，適切 (3)」が非常に多くなり，満足度も平均 4.67 と高めになった。

表 1 本講習会の概要

09 : 00-11 : 00	有限体積法
11 : 00-12 : 30	OpenMP 入門
13 : 30-16 : 00	オーダリング
16 : 00-17 : 30	OpenMP 並列化
17 : 30-18 : 00	質疑

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			6		
(b) 講習会講義内容 (プレゼン)	簡単⇔難			6		
(c) 配布資料内容	簡単⇔難		1	5		
(d) サンプルプログラム内容	簡単⇔難			6		
(e) 満足度 (平均 3.73)	不満⇔満足				2	4

講義内容の詳細については，ウェブページから資料及び録画ビデオをダウンロードできるのでそちらを参照いただきたい (<https://www.cc.u-tokyo.ac.jp/events/lectures/154/>)。また，従来実施していたデータ依存性を含むケースについては，3 日にわけてプログラムを再編成し，8 月以降に実施する予定である。

第 10 回 JCAHPC セミナー (Wisteria/BDEC-01 運用開始記念) 「JCAHPC 次の一手 : Oakforest-PACS の先にあるもの」(オンライン)

中 島 研 吾

東京大学情報基盤センター

2021 年 5 月 25 日 (火) にオンラインで開催された第 10 回 JCAHPC セミナー¹の概要を報告する。

最先端共同 HPC 基盤施設 (JCAHPC: Joint Center for Advanced High Performance Computing)²は筑波大学計算科学研究センターと東京大学情報基盤センターとが共同で設立した組織であり、国内最高クラスの性能を有する Oakforest-PACS システム (OFP)³を設計、導入、運用している。両センターは本施設を連携・協力して運営することにより、最先端の計算科学を推進し、我が国の学術及び科学技術の振興に寄与してきた。

現在、人類と地球は新型コロナウイルス感染症 (COVID-19) という未曾有の危機に直面している。筑波大学・東京大学の両センターと JCAHPC は、HPCI⁴ (革新的ハイパフォーマンス・コンピューティング・インフラ) システム構成機関として「新型コロナウイルス感染症対応 HPCI 臨時公募課題⁵」に計算資源を提供し、新型コロナウイルス感染症に関する研究推進に貢献している。

OFP の運用も最終年度に突入し、2022 年 3 月末にはサービスを終了する予定である。第 10 回となる JCAHPC セミナーでは、『「計算・データ・学習」融合スーパーコンピュータシステム (Wisteria/BDEC-01⁶)』(東京大学情報基盤センター) の運用開始 (2021 年 5 月 14 日) を記念して、「JCAHPC 次の一手 : Oakforest-PACS の先にあるもの」と題して、今後の JCAHPC のアクティビティの展望について紹介した。

Wisteria/BDEC-01 は、東京大学情報基盤センターが Society 5.0 実現へ向けて導入したシステムであり、本セミナーでは、システム紹介、地球科学分野を中心とした大規模ユーザによる招待講演とともに、類似したシステムをすでに運用している機関 (理化学研究所、名古屋大学) からも招待講演を実施した。また筑波大学で導入を進めている次期システム「Cygnus-BD」、更に OFP の後継機であり JCAHPC としての 2 号機である「次期 Oakforest-PACS」計画についても紹介を実施した。

今回は完全オンラインで開催され、合計 150 名の登録者があり、これまでで最大人数であった。講演の録画は、発表資料 (PDF) とともに本セミナーのホームページ (下記) でご覧いただける。もし、当日参加出来なかった方は是非ご覧ください！

<https://www.cc.u-tokyo.ac.jp/events/jcahpc/10.php>

¹ <https://www.cc.u-tokyo.ac.jp/events/jcahpc/10.php>

² <http://jcahpc.jp/>

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

⁴ <https://www.hpci-office.jp/>

⁵ https://www.hpci-office.jp/pages/adoptionlist2020_25

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

表 1：第 10 回 JCAHPC セミナー プログラム

時間帯	講演者・講演題目	座長
13:15 - 13:20	開会挨拶	
13:20 - 13:45	中島研吾（東京大学情報基盤センター/JCAHPC） Wisteria/BDEC-01 がもたらす新しい科学の夜明け	高橋大介 （JCAHPC/筑波大学）
13:45 - 14:10	塙敏博（東京大学情報基盤センター/JCAHPC） 次期 Oakforest-PACS 計画とその周辺	
14:10 - 14:35	朴泰祐/建部修見（筑波大学計算科学研究センター/JCAHPC） 筑波大学 CCS における次期スーパーコンピュータ Cygnus-BD	
14:45 - 15:10	羽角博康（東京大学大気海洋研究所）エクサスケール時代の 大気海洋シミュレーション	
15:10 - 15:35	市村強（東京大学地震研究所計算地球科学研究センター/工 学系研究科社会基盤学専攻）スーパーコンピューティングに よる大規模地震シミュレーション	下川辺隆史 （JCAHPC/東京大学）
15:35 - 16:00	中島耕太（富士通株式会社 ICT システム研究所） 計算・データ・A I を融合するコンピューティング技術	
16:15 - 16:40	澤田洋平（東京大学大学院工学系研究科 附属総合研究機構） 極端水文気象現象に対する予測の不確実性定量化	
16:40 - 17:05	庄司文由（理化学研究所計算科学研究センター運用技術部 門）富岳の利用サービスと運用について	
17:05 - 17:30	片桐孝洋（名古屋大学）スーパーコンピュータ「不老」導入 と Wisteria/BDEC-01 への期待	
17:30 - 17:50	総合討論・閉会	

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、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利用案内】

お知らせ	Web ページ
サービス案内、運転状況など	https://www.cc.u-tokyo.ac.jp/
公開鍵登録、マニュアル閲覧など	https://wisteria-www.cc.u-tokyo.ac.jp/ (Wisteria/BDEC-01) https://obcx-www.cc.u-tokyo.ac.jp/ (Oakbridge-CX) https://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	スーパーコンピュータ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/#SOLDAN
システムに関する要望・提案	voice@cc.u-tokyo.ac.jp

【IP ネットワーク経由時のホスト名】

シ ス テ ム	ホ ス ト 名
Wisteria/BDEC-01 スーパーコンピュータシステム (Wisteria-0/A)	wisteria.cc.u-tokyo.ac.jp 以下のホストの何れかに接続します※ wisteria0{1-6}.cc.u-tokyo.ac.jp
Oakbridge-CX スーパーコンピュータシステム	obcx.cc.u-tokyo.ac.jp 以下のホストの何れかに接続します※ obcx0{1-6}.cc.u-tokyo.ac.jp
Oakforest-PACS スーパーコンピュータシステム	ofp.jcahpc.jp 以下のホストの何れかに接続します※ ofp0{1-6}.jcahpc.jp
Reedbush スーパーコンピュータシステム (Reedbush-H/L)	reedbush.cc.u-tokyo.ac.jp 以下のホストの何れかに接続します※ reedbush-{u{1-4}, h1}.cc.u-tokyo.ac.jp

※どのホストに接続しても同じです。

【編集】

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

【発行】

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

目 次

センターから

サービス休止等のお知らせ	1
システム変更等のお知らせ	3
「計算・データ・学習」融合スーパーコンピュータシステム	
「Wisteria/BDEC-01」の特長	6
Wisteria/BDEC-01を構成する NVIDIA GPU 及びネットワーク製品の概要	20
第3世代 インテル® Xeon® スケーラブル・プロセッサのご紹介	26
Wisteria/BDEC-01 スーパーコンピュータシステム	
正式運用に関するお知らせ	28
「大規模HPCチャレンジ」課題募集のお知らせ	30
「大規模HPCチャレンジ」採択課題のお知らせ	34
研究成果登録のお願い	35
4月・5月のジョブ統計	36

ユーザーから

First clusterにおけるブラックホール連星の形成	40
共溶媒分子動力学における薬剤設計向け共溶媒セットの構築	46

教育活動報告

第152回お試しアカウント付き並列プログラミング講習会	
「スーパーコンピュータ超入門」(オンライン) 実施報告	50
第153回お試しアカウント付き並列プログラミング講習会	
「MPI基礎：並列プログラミング入門」(オンライン) 実施報告	53
第154回お試しアカウント付き並列プログラミング講習会	
「OpenMPによるマルチコア・メニョコア並列プログラミング入門」	
(オンライン) 実施報告	57
第10回 JCAHPCセミナー(オンライン) 実施報告	59

原稿募集	61
------	----