

スーパーコンピューティング ニュース

Vol.24 No.5, 2022.9



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)

区分	負担金額(税込)		ディスク容量	備考
	大学・公共機関等	企業		
一般申込 (基本セット) Wisteria-O/A	申込1セット当り 60,000円 (8,640トークン)		申込1セット当り /work 2TB 利用者当り /home 50GB	
公募制度による申込 Wisteria-O	申込1セット当り 60,000円 (8,640トークン)	申込1セット当り 72,000円 (8,640トークン)	申込1セット当り /work 2TB 利用者当り /home 50GB	利用期間 12か月の金額・トークン量 (利用期間は1ヶ月単位で設定可)
公募制度による申込 Wisteria-A	申込1セット当り 180,000円 (25,920トークン)	申込1セット当り 216,000円 (25,920トークン)	申込1セット当り /work 6TB 利用者当り /home 50GB	
GPU専有申込 (公募制度の申込可) Wisteria-A	申込1GPUセット当り 270,000円 (25,920トークン)	申込1GPUセット当り 324,000円 (25,920トークン)	申込1GPUセット当り /work 6TB 利用者当り /home 50GB	利用期間 12か月の金額・トークン量 (利用期間は1ヶ月単位で設定可) 1, 2, 4GPUのみ申込可, 申込単位は下表参照
ノード固定 (公募制度の申込可) Wisteria-A	2,160,000円 (207,360トークン)	2,592,000円 (207,360トークン)	/work 48TB 利用者当り /home 50GB	利用期間 12か月の金額・トークン量 (利用期間は1ヶ月単位で設定可) 1セットのみ申込可
一般申込 (最小セット) Wisteria-O/A	5,000円 (720トークン)		/work 2TB 利用者当り /home 50GB	利用期間は当該年度末まで
トークン量追加	5,000円 (720トークン)	6,000円 (720トークン)		
ディスク容量追加	6,480円/(1TB*年)			1TB単位で申込可 (/workのみ)

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

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

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

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

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

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

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

トークンの他のシステムへの移行については、「トークン移行におけるトークン量の換算表」を参照。

※公募制度による申し込み、ノード固定の申し込みには審査を要する。

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

※GPU専有申込の申込単位

GPU数	トークン量	大学・公共機関等	企業
1	25,920	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(2022年4月1日)

区分	負担金額(税込)		ディスク容量	備考
	大学・公共機関等	企業		
一般申込	申込1セット当り 100,000円 (8,640トークン)	申込1セット当り 120,000円 (8,640トークン)	グループ1セット当り /work 4TB 利用者当り /home 50GB	利用期間 12か月の金額・トークン量 (利用期間は1ヶ月単位で設定可)
ノード固定	申込1セット当り 150,000円 (8,640トークン)	申込1セット当り 180,000円 (8,640トークン)		
一般申込 (最小セット)	8,400円 (720トークン)	/	/work 4TB 利用者当り /home 50GB	利用期間は当該年度末まで
トークン量追加	8,400円 (720トークン)	10,000円 (720トークン)	/	
ディスク容量追加	6,480円/(1TB*年)		/	1TB単位で申込可 (/workのみ)

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

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

※1ジョブで利用可能な最大ノード数は 256 ノード。

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

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

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

トークンの他のシステムへの移行については、「トークン移行におけるトークン量の換算表」を参照。

※ノード固定の申し込みには審査を要する。

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

トークン移行におけるトークン量の換算表

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

移行先に追加されるトークン量 = 移行トークン量 × 係数

注意事項 (Wisteria/BDEC-01, Oakbridge-CX スーパーコンピュータシステム 共通)

- ・「大学・公共機関等」は大学、高等専門学校及び大学共同利用機関、文部科学省所管の独立行政法人、学術研究及び学術振興を目的とする国又は地方公共団体が所管する機関、並びに文部科学省科学研究費補助金の交付を受けて学術研究を行う者に適用する。
- ・「企業」の申し込みには、企業利用申込書添付書類の提出および審査を要する。
- ・利用期間は、利用開始月から終了月の末日またはサービス休止前までとする。利用期間内に計算機利用を中止した場合であっても利用負担金額の変更は行わない。年度の途中で利用開始または終了する場合の負担金額は月数別利用負担金表(Web ページ)を参照すること。
- ・前掲の利用負担金表は基本セットの内容であり、最小セットについては Web ページを参照すること。
- ・利用負担金は、原則として利用開始月に応じ、以下の月に一括して請求する。
 - 利用開始月が 4 月から 9 月までは 12 月、10 月から 12 月までは 3 月、1 月から 3 月までは 3 月末。
 - 前年度内に事前申込をした分については、利用開始月に関わらず、11 月の請求となる。
- ・利用負担金額が減額となる変更はできない。
- ・ディスク量は、グループ全体の上限值である。

スーパーコンピュータシステム ジョブクラス制限値

Wisteria/BDEC-01 スーパーコンピュータシステム (Wisteria-O) ジョブクラス制限値 (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
debug-o	1 ~ 144 (6,912)	30 分	28	○	○
short-o	1 ~ 72 (3,456)	8 時間	28	○	○
(regular-o)					
small-o	1 ~ 144 (6,912)	48 時間	28	○	○
medium-o	145 ~ 576 (27,648)	"	"	○	○
large-o	577 ~ 1,152 (55,296)	"	"	○	○
x-large-o	1,153 ~ 2,304 (110,592)	24 時間	"	○	○
priority-o	1 ~ 288 (13,824)	48 時間	28	○	○
challenge-o	1 ~ 7,680 (368,640)	24 時間	28	★	★
(interactive-o) ※4					
interactive-o_n1	1 (48)	30 分	28	○	○
interactive-o_n12	2 ~ 12 (576)	10 分	"	○	○
prepost	1 (56)	6 時間	340	○	○
prepost1_n1 ~ prepost4_n1	1 (56)	1~6 時間	340	○	○
prepost1_n4	1 ~ 4 (224)	1~6 時間	340	○	○
prepost1_n8	1 ~ 8 (448)	1~6 時間	340	○	○

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

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

※2 トークンの消費係数は1ノード当り1.00。ただし priority-o は優先利用ノード群のためトークン消費係数は1.50

※3 1ノード当りの利用者が利用可能なメモリー容量

※4 インタラクティブジョブの起動は次のとおり (トークン消費なし)

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

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

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

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

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

※2 トークンの消費係数は1GPU 当り3.00

※3 1ノード当りの利用者が利用可能なメモリー容量

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

※5 インタラクティブジョブの起動は次のとおり (トークン消費なし)

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

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	一般 申込	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"

大規模共通ストレージシステム 利用負担金表

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

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

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

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

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

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

センターから

サービス休止等のお知らせ

2022 年 9 月下旬からの計算機及びストレージシステムのサービス予定は以下のとおりです。

Wisteria/BDEC-01 スーパーコンピュータシステム

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

日付	利用者サービス	センター内作業
9月16日(金)	9:00 ~ 22:00 までサービス休止	月末処理
10月28日(金)	9:00 ~ 22:00 までサービス休止	月末処理
11月25日(金)	9:00 ~ 22:00 までサービス休止	月末処理

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

- Wisteria/BDEC-01 スーパーコンピュータシステム 大規模 HPC チャレンジのお知らせ (*)

大規模 HPC チャレンジ 実施期間	
9月15日(木) 8:30 ~ 17:30 まで	
10月27日(木) 8:30 ~ 17:30 まで	
11月24日(木) 8:30 ~ 17:30 まで	

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

Oakbridge-CX スーパーコンピュータシステム

- 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
9月22日(木) ~ 9月26日(月)	9/22(木) 9:00 ~ 9/26(月) 17:00 までサービス休止	月末処理、空調機メンテナンス、柏キャンパスにおける特別高圧受変電設備点検・二次変電設備点検
10月26日(水)	9:00 ~ 20:00 までサービス休止	月末処理
11月22日(火)	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水曜日）はサービスを停止します。

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

大規模 HPC チャレンジ 実施期間	
9月21日(水) 8:30 ~ 17:30 まで	
10月25日(火) 8:30 ~ 17:30 まで	
11月21日(月) 8:30 ~ 17:30 まで	

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

大規模共通ストレージシステム (Ipomoea-01)

○ Ipomoea-01 サービス休止のお知らせ

日付	利用者サービス	センター内作業
9月22日(木)～ 9月26日(月)	9/22(木) 9:00～9/26(月) 17:00 までサービス休止	月末処理、空調機メンテナンス、柏キャンパスにおける特別高圧受変電設備点検・二次変電設備点検

- Ipomoea-01 は、原則 24 時間サービスを行っています。
ただし、月末処理等実施のためサービスを停止する場合があります。

【注意事項】

- サービス休止等の計画は原稿作成時の予定です。やむを得ずサービスを変更したり、休止したりする場合がありますので、最新の情報は login 時のメッセージ及びスーパーコンピューティング部門の Web ページの運用スケジュール (<https://www.cc.u-tokyo.ac.jp/supercomputer/schedule.php>) をご確認ください。
- 平日の9:00～17:00以外、休日(土・日・祝日等)は、システム障害等でサービスが停止した場合、運転を継続できない場合があります。その場合は、その時間をもってサービスを中止しますのでご了承ください。
- * Wisteria/BDEC-01 及びOakbridge-CX における大規模 HPC チャレンジについて、新型コロナウイルス感染症の状況次第で実施時間・実施条件の変更や、中止となる可能性があります。詳細はWeb ページ(<https://www.cc.u-tokyo.ac.jp/guide/hpc/>)をご覧ください。

システム変更等のお知らせ

(2022.7.1 - 2022.8.31 変更)

1. ハードウェア

- 1.1 Wisteria/BDEC-01 スーパーコンピュータシステム … なし
- 1.2 Oakbridge-CX スーパーコンピュータシステム … なし
- 1.3 Ipomoea-01 大規模共通ストレージシステム … なし

2. ソフトウェア

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

➤ Odyssey

GROMACS	ver2021.3 ver2022.1	(2022.7.29)
OpenFOAM(OpenCFD)	ver2106 ver2112	(2022.7.29)
LAMMPS	ver29Oct2020	(2022.8.19)
FFTW	v3.3.9	(2022.8.19)
PETSc	v3.15.0	(2022.8.19)

➤ Aquarius

Open MPI	4.1.4	(2022.7.29)
NVIDIA HPC SDK	v22.5	
CUDA	11.4	
UCX	v1.13.0	

➤ ログインノード

Open MPI	4.1.4	(2022.7.29)
NVIDIA HPC SDK	v22.5	
CUDA	11.4	
UCX	v1.13.0	

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お知らせ、またはドキュメント閲覧より利用手引書をご覧ください。

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

HyperWorks	2022	(2022.7.27)
------------	------	-------------

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

2.3 Red Hat Enterprise Linux 8 (Ipomoea-01) … なし

3. その他

3.1 Wisteria/BDEC-01 Odyssey インタラクティブキュー制限時間の緩和

利用者の皆様からのご要望を受け、8月2日に下記の変更を実施いたしました。

- ◆interactive-o キュー (制限時間)
 - 1 ノード利用 : 30 分 → 2 時間
 - 2～12 ノード利用 : 10 分 【変更なし】

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）

Wisteria/BDEC-01、Oakbridge-CX スーパーコンピュータシステムでは、「大規模 HPC チャレンジ」を実施しています。「大規模 HPC チャレンジ」は、スーパーコンピュータシステムがもつ最大規模のノード数を、最大 8 時間・1 研究グループで計算資源の専有利用ができる公募型プロジェクトです。採択条件等については、以下をご覧ください。皆様からの課題応募をお待ちしております。

※ 新型コロナウイルス感染症拡大防止の観点から当面の間特別スケジュール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ノードを最大 8 時間専有利用することができます。
(今後の状況次第で変更となる可能性があります)

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

2. 利用案内

- 1 ヶ月に 1 回、原則として月末処理前日の 9:00~17:00 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。
- 課題は公募制とし、現ユーザーに限定せず、広く課題を募集します。個人、及びグループによる応募が可能ですが、各月に 1 グループの採用 (*) を原則とします。
- **本制度により得られた成果については公開して頂きます。**成果公開には東京大学情報基盤センターのスーパーコンピュータシステムを利用し、「大規模 HPC チャレンジ」制度によって実施した旨を明記していただけます。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けます。
- センターの主催、共催するセミナー、ワークショップ等でご発表いただく場合があります。
- 利用料金は無料です。

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

3. 実施日程

2022 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。

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

表 1. 2022 年度 Wisteria/BDEC-01 大規模 HPC チャレンジ実施日程

	実施日時	募集締切	審査	採択通知
第 3 回	2022 年 12 月 22 日(木) 9:00 ~ 17:00	2022 年 10 月 31 日 (月) 17:00 【締切】	11 月上旬	11 月中旬
	2023 年 1 月 26 日(木) 9:00 ~ 17:00			
	2023 年 2 月 21 日(火) 9:00 ~ 17:00			
	2023 年 3 月 30 日(木) 9:00 ~ 17:00			

表 2. 2022 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
第 3 回	2022 年 12 月 20 日(火) 9:00 ~ 17:00	2022 年 10 月 31 日 (月) 17:00 【締切】	11 月上旬	11 月中旬
	2023 年 1 月 24 日(火) 9:00 ~ 17:00			
	2023 年 2 月 16 日(木) 9:00 ~ 17:00			
	2023 年 3 月 30 日(木) 9:00 ~ 17:00			

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

4. 研究対象

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

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

5. 利用資格

利用資格は、申込書を基に、東京大学情報基盤センタースーパーコンピューティング研究部門の教職員、及び、外部委員により構成される審査委員会において審査されます。現ユーザーである必要はありません。

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、及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、及び、外部委員より構成される審査委員会により採択課題を選考し、できるだけ速やかに公表を行う予定です。

主な採択基準

- 計算・結果の詳細を論文等も含めて公表できること。
- 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。

¹ 「大規模 HPC チャレンジ」

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

- 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、申込書及び研究グループメンバー情報に必要事項をご記入ください。ご記入頂いた申込書及び研究グループメンバー情報、論文は以下の提出先まで、電子メールに添付してお送りください。

申込書に必要な項目・提出書類は以下の通りです。

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

8. 問い合わせ先

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

【 提出先 】

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

【 問い合わせ先 】

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

復活したスパコン見学

大林由尚

東京大学情報基盤センター 広報担当

前田光教

情報システム部情報基盤課

1. 見学、はじめました

東京大学情報基盤センターでは、新型コロナウイルス感染症のため外部の方の入構が制限されたまま浅野キャンパスから柏 II キャンパスへの引っ越し、Reedbush システムや Oakforest-PACS のサービス終了、Wisteria/BDEC-01 のサービス開始などのイベントがありました。2022 年度に入って東京大学の活動制限が緩和されたのを受け、感染防止対策の徹底、発熱や咳などの症状のある方は入構しないでいただく、対応者が自宅療養などで不足する場合は中止、などの条件つきで 2022 年 8 月より見学受け入れを再開しました。見学再開にあたり、来訪者と案内者双方が安心して過ごせるよう、ワイヤレスガイドシステム（3 章を参照）や建物入り口での非接触型の検温機を導入し、活用しています。

2. 8 月には 3 件の見学を受け入れ

8 月 1 日、見学再開第 1 号で来訪したのは、JST さくらサイエンスプログラムで来日中のインドネシア、チョクローミノトパロポ大学の御一行でした。「スーパーコンピュータの利用法と大規模ネットワークの役割を学ぶ技術体験」のテーマのもと来日し、ほとんどが「島を出た



のが初めて」という学生 7 名と引率教員（Dr. Irwan Ramli）は、日本側の受入機関、理化学研究所の渡邊功雄 専任研究員ら仁科加速器科学研究センター中間子科学研究室の研究者と学生に伴われ、東京大学柏 II キャンパスの情報基盤センターを訪れました。見学に先立ち、スーパーコンピューティング研究部門長の中島研吾教授による講義があり、講義の後にはインドネシアの学生がスパコンを使うにはどのような手続きが必要か、など、実際のスパコン利用につながる質疑応答も繰り広げられました。続いての見学は、4、5 人の小グループごとにスーパーコンピューティング研究部門の教員が引率し、センターの最新のスパコン Wisteria/BDEC-01 やデータ利活用社会創成プラットフォーム mdxなどを案内、それぞれの計算機、ストレージやネットワーク、消費電力など、各所で丁寧な紹介を行いました。¹

お盆休みの明けた 8 月 16 日には千葉県の上野教育学園幕張中学・高校、19 日には神奈川県横浜緑ヶ丘高校の見学があり、どちらの学校の生徒さんたちも大変興味深く話を聞き、最先端のスパコンシステムに見入っていました。²³



¹ <https://www.itc.u-tokyo.ac.jp/blog/2022/08/05/post-3715/>

² https://twitter.com/UTokyo_ITC/status/1559472852214366208

³ https://twitter.com/UTokyo_ITC/status/1561910449138200577

3. ワイヤレスガイドシステムの導入

スーパーコンピュータ室は、スーパーコンピュータを冷却するために業務用空調設備があります。その空調によって冷やされた空気を各計算ノードなどに導入するためにファンを利用しています。ファンは小さな扇風機の役目を果たしていますが、ご存じのように扇風機は大きさや回転速度により大変大きな音を発します。スーパーコンピュータはそのファンがノード数以上ありますので、その音は人の声をかき消すほどになります。また、空調もモータで稼働していることから、そのモータが発する音も加わり、スーパーコンピュータ室は会話ができるような空間ではありません。本センターのスーパーコンピュータは水冷であり、ファンの数は減り以前に比べれば静かになっているとはいえ、通常の会話ができるほど静かではありません。そのため、スピーカを腰に付けるタイプのものを利用していましたが、案内者と離れたり、向きを変えると十分に聞こえないこともありました。そこで、無線により案内者の声が見学者に届くワイヤレスガイドシステムを導入しました。博物館などの案内で同様のシステムを利用したことがあるのではないのでしょうか。

導入したワイヤレスガイドシステムは、案内者が携帯する送信機4台と見学者が携帯する受信機24台、通信チャンネルが13個ある高性能タイプとしました。これにより、スーパーコンピュータ室で案内しやすい数名程度のグループに分けることができ、同時に複数グループを混線することなく案内することができます。送信機と受信機ともに音量とチャンネル切替つまみが小さく操作しにくいところもありますが、一度接続の確認をすれば、現地では音量を調整する程度で大きな支障はありません。ただし、見学者が質問する場合に案内者と他の見学者に声を届けることができないため、別途マイク型の送信機も準備しておき、質問の際にマイクを通すことにしましたが、案内者にも受信機を付けてもらう必要があり、案内者は送信機と受信機の2つを携帯する他にありませんでした。良い解決策があればまた紹介したいと思います。

新型コロナウイルス感染症の影響は続いており、利用後は除菌ティッシュなどで拭う手間があります。導入した受信機には、なくした場合の予備のためですが、取替用のイヤークッションが複数あり感染対策に役立ちました。



ワイヤレスガイドシステムを通して説明を聞く様子。騒音の大きなスパコン室内でも話者との距離を保ちつつ話を聞き取りやすいと好評でした。

研究成果の登録のお願い

情報戦略課研究支援チーム
情報基盤センタースーパーコンピューティング部門

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

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

東京大学情報基盤センター Supercomputing Division, Information Technology Center, The University of Tokyo

ENGLISH サイト内検索

お問い合わせ ● アクセス ● リンク ● サイトマップ

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

研究成果の取扱い

① 「研究成果」 → 「研究成果の取扱い」をクリック

② 「研究成果の取扱い」ページ下部の「研究成果の登録について」→「研究成果登録のページ」をクリック

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

研究成果の登録をお願いいたします。

研究成果の登録は、本センターのスーパーコンピュータシステムを利用して得られた研究成果のうち、論文、口頭発表、著書、受賞情報についてご報告いただくものです。ご報告いただいた内容は、研究成果データベースへの登録、センター発行の広報誌及び Web ページに掲載させていただきますことをご確認ください。研究成果は、東京大学におけるスーパーコンピュータシステムの整備・拡充につながるもので、今後の計算資源確保に重要なものです。判断の指標には何卒ご協力を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▲ 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 ● 受賞誌誌

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 までお問い合わせします。

東京大学情報基盤センター/スーパーコンピューティング部門
Supercomputing Division, Information Technology Center, The University of Tokyo

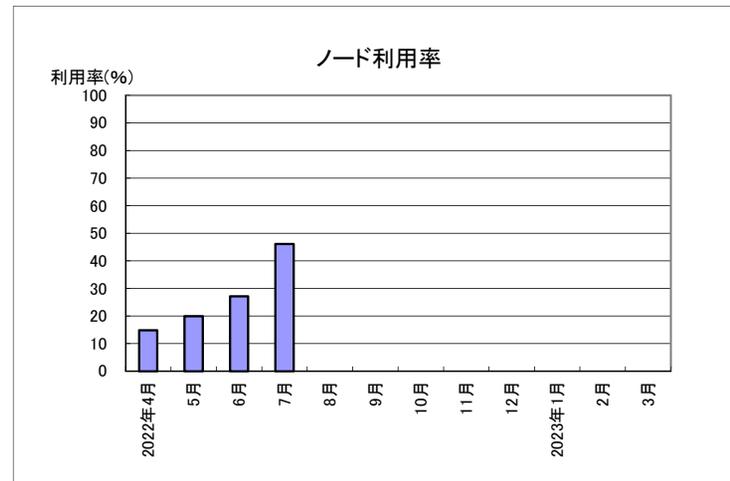
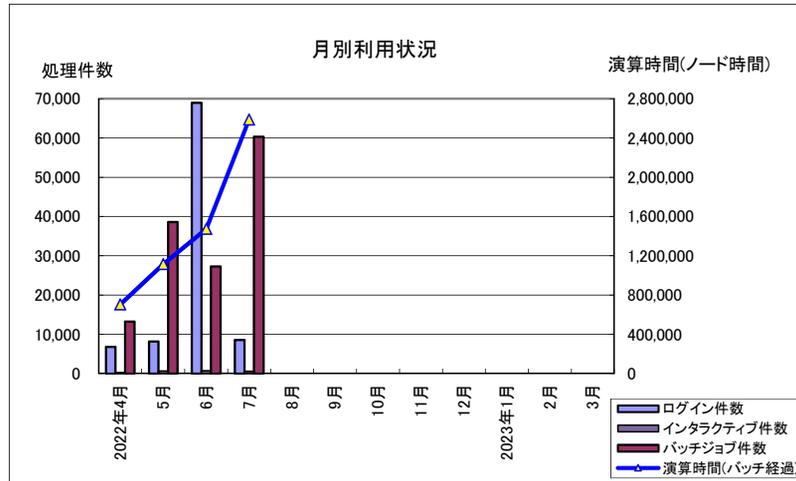
6・7月のジョブ統計

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

年月	登録者数	実利用者数	処理件数				接続時間 [時間]	ファイル使用量 [GiB]		ログイン (実CPU)	演算時間 [ノード時間] (経過時間)			平均ノード 利用数 (ノード)	ノード 利用率 (%)
			ログイン	プリポスト	インタラクティブ ジョブ	バッチジョブ		/home	/lustre		プリポスト	インタラクティブ ジョブ	バッチジョブ		
2022年4月	1,687	456	6,822	184	241	13,256	30,076	1,225	1,203,879	8,037.82	366	45	703,985	1,139.2	14.8
5月	1,794	506	8,152	228	647	38,581	55,029	1,312	1,387,835	2,068.13	578	73	1,114,477	1,524.7	19.9
6月	1,727	531	68,991	225	682	27,267	55,520	1,539	1,784,645	4,563.54	616	114	1,473,641	2,083.6	27.1
7月	1,749	489	8,578	222	586	60,294	64,200	1,693	2,447,243	7,460.21	431	124	2,587,977	3,540.3	46.1
2021年7月	1,103	229	4,638	66	64	10,730	24,723	438	211,696	1,670.10	74	10	996,901	1,492.2	19.4
8月	939	147	2,212	82	28	4,551	9,866	383	128,337	2,218.48	255	6	123,322	219.4	2.9
9月	1,058	196	3,835	76	150	20,431	19,769	434	246,063	1,944.79	281	40	204,279	289.0	3.8
10月	1,193	311	5,221	256	226	12,759	27,589	580	396,240	836.51	284	85	351,435	480.9	6.3
11月	1,279	256	5,337	76	311	7,340	26,676	774	515,631	3,092.91	86	91	147,549	208.8	2.7
12月	1,286	298	6,189	76	366	9,752	31,952	837	833,732	1,879.83	123	64	672,591	920.1	12.0
2022年1月	1,323	294	7,329	92	220	27,108	33,550	961	979,806	1,926.47	256	60	801,198	1,096.0	14.3
2月	1,293	269	6,015	168	275	13,449	29,553	1,105	1,021,929	2,675.51	496	124	813,968	1,235.3	16.1
3月	1,221	265	6,896	135	187	60,265	31,203	1,131	1,007,327	9,642.52	322	42	1,222,254	1,715.7	22.3
合計			135,577	1,820	3,919	295,053	414,983			46,346.72	4,094	868	10,216,676		

- ・試運転は、2021年5月14日より開始。正式サービスは、2021年8月2日より開始
- ・接続時間： ログイン時間の累計
- ・ログイン(実CPU)： コア時間単位
- ・2021年7月分は合計に含まない

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



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

年月	処理件数		演算時間 [GPU時間](経過時間)		平均GPU 利用数 (GPU)	GPU 利用率 (%)
	インタラクティブ ジョブ	バッチジョブ	インタラクティブ ジョブ	バッチジョブ		
2022年4月	422	4,911	277	59,779	97.2	27.0
5月	541	6,831	338	88,557	121.6	33.8
6月	955	5,330	837	82,946	118.5	32.9
7月	659	18,181	883	89,355	123.4	34.3
2021年7月	1,540	15,155	1,531	117,749	180.9	50.3
8月	466	3,004	470	37,677	67.9	18.9
9月	480	3,599	358	45,671	65.1	18.1
10月	272	3,139	91	63,871	87.5	24.3
11月	1,122	5,824	1,107	63,864	91.9	25.5
12月	1,077	7,209	957	107,582	148.5	41.2
2022年1月	615	8,846	623	100,024	137.7	38.2
2月	863	6,116	801	96,072	147.0	40.8
3月	479	7,204	417	108,978	150.1	41.7
合計	7,951	80,194	7,159	944,376		

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

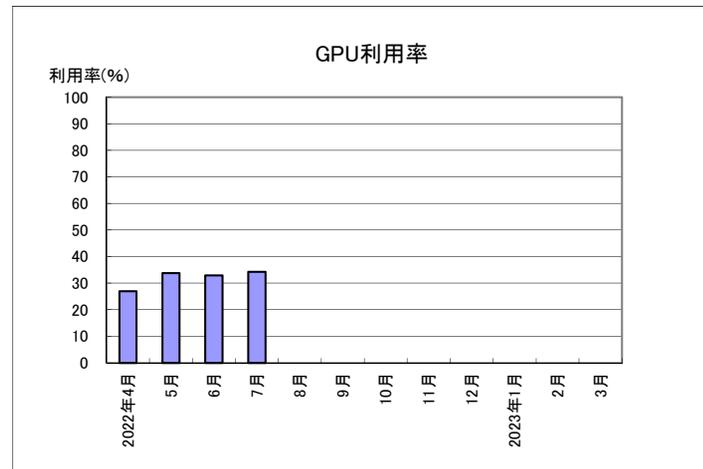
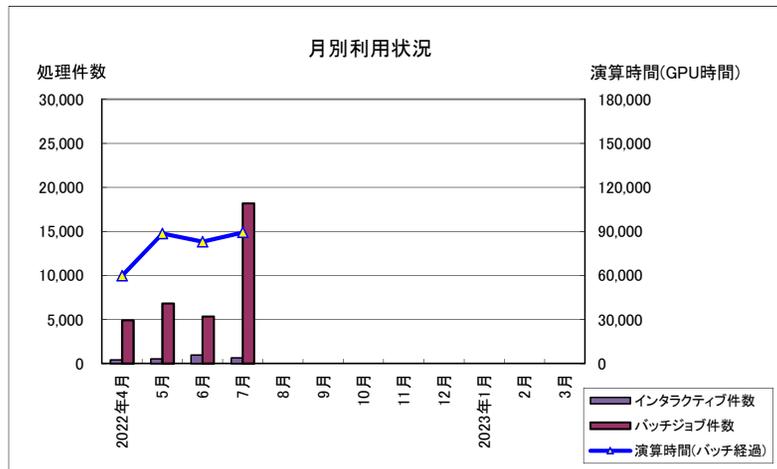
・登録者数、実利用者数、ログイン件数、接続時間、ファイル使用量、
ログイン(実CPU)はWisteira/BDEC-01(Odyssey)と共通。

・2021年7月分は合計に含まない

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

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

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

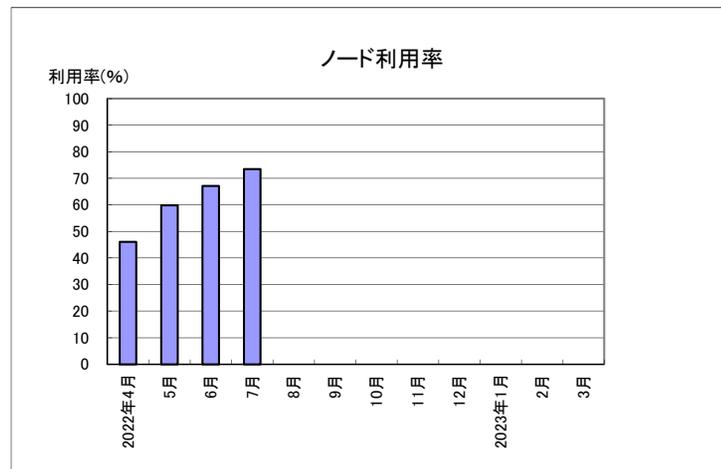
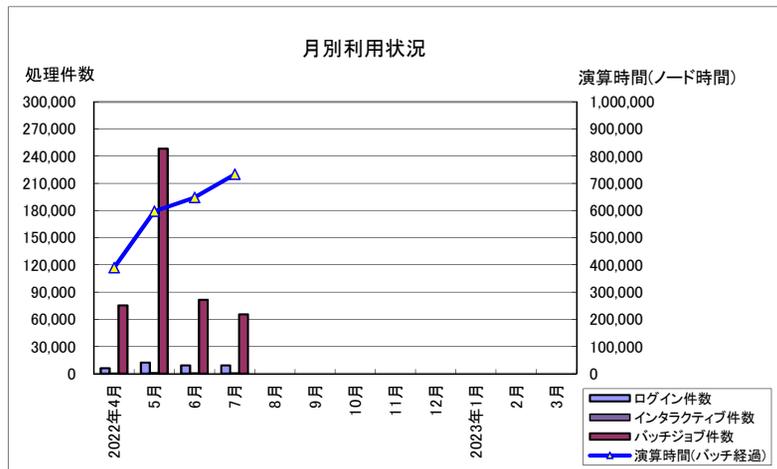


3. Oakbridge-CX スーパーコンピュータシステムジョブ処理状況 (Red Hat Enterprise Linux 7、CentOS 7)

年月	登録者数	実利用者数	処理件数				接続時間 [時間]	ファイル使用量 [GiB]		ログイン (実CPU)	演算時間 [ノード時間] (経過時間)			平均ノード 利用数 (ノード)	ノード 利用率 (%)
			ログイン	プリポスト	インタラクティブ ジョブ	バッチジョブ		/home	/work		プリポスト	インタラクティブ ジョブ	バッチジョブ		
2022年4月	1,095	312	6,123	10	310	75,245	24,901	1,461	1,384,480	3,981.48	0	112	389,831	630.5	46.1
5月	1,185	324	12,165	0	851	248,400	40,747	1,465	1,423,688	2,470.79	0	254	597,464	818.0	59.8
6月	1,213	398	9,040	18	691	81,532	45,535	1,539	1,471,204	7,255.12	8	359	648,084	917.3	67.1
7月	1,258	397	8,977	0	621	65,475	48,152	1,587	1,615,433	2,141.06	0	433	733,409	1,004.2	73.4
2021年7月	1,132	366	8,545	42	1,860	62,710	57,857	1,017	1,430,169	16,807.20	2	674	666,144	909.4	66.5
8月	1,141	278	5,494	59	1,814	31,559	22,299	1,060	1,499,355	4,136.73	5	592	524,972	945.0	69.1
9月	1,067	284	6,700	17	1,585	31,851	32,068	1,095	1,592,894	2,314.47	0	592	646,063	1,015.7	74.2
10月	1,120	305	8,969	29	3,898	72,268	48,565	1,183	1,697,798	3,616.60	3	1,253	772,159	1,057.7	77.3
11月	1,179	348	8,683	0	7,370	63,788	49,289	1,227	1,860,386	3,446.55	0	881	740,267	1,048.5	76.6
12月	1,187	362	9,052	2	763	73,500	43,544	1,377	1,883,279	2,295.56	0	258	742,688	1,016.8	74.3
2022年1月	1,200	375	10,915	0	497	84,721	50,652	1,522	1,941,483	7,899.93	0	262	726,123	994.1	72.7
2月	1,229	328	7,404	0	521	70,221	38,572	1,507	1,842,598	2,126.96	0	192	609,550	925.1	67.6
3月	1,245	317	6,767	0	403	48,195	39,693	1,579	1,674,826	3,006.83	0	228	589,505	830.9	60.7
合計			100,289	135	19,324	946,755	484,017			44,692.08	16	5,416	7,720,115		

- ・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
- ・2021年7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



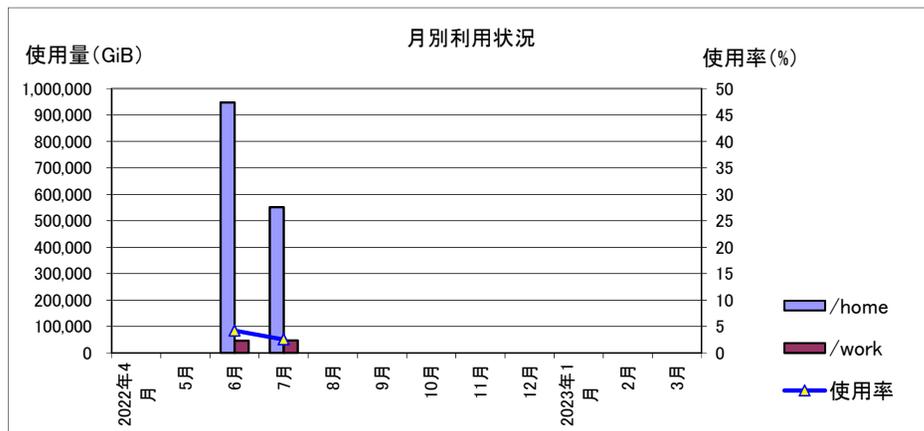
4. Ipomoea-01大規模共通ストレージシステム使用状況

年月	登録者数	実利用者数	ログイン数	接続時間 [時間]	ログイン (実CPU)	ファイル使用量 [GiB]		使用率 (%)	実効容量 (GiB)
						/home	/work		
2022年6月	2,063	80	345	4,119	179	947,118	46,122	4.2	23,657,187.6
2022年7月	2,153	45	152	4,257	19	550,750	47,509	2.5	23,657,187.6
合計			497	8,376	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

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



学際大規模情報基盤共同利用・共同研究拠点（JHPCN）

公募型共同研究 2022 年度採択課題一覧

飯野孝浩

東京大学情報基盤センター

1. 公募概要

2022 年度の国際・一般研究課題には 68 課題の応募があり、2022 年 2 月に行われた課題審査委員会での厳正な審査により、63 課題が採択された。当センターと共同研究を行う採択課題のうち、当センターの計算機資源（mdx の併用を含む）を利用する課題を表 1 に、mdx のみを利用する課題を表 2 に示す。

表 1. 2022 年度 JHPCN 採択課題（当センター共同研究分）

国際共同研究課題

研究課題名	研究課題代表者 (所属)
Hierarchical low-rank approximation methods on distributed memory and GPUs	横田理央 (東京工業大学)
High resolution simulation of cardiac electrophysiology on realistic whole-heart geometries	中島研吾 (東京大学)
Innovative Multigrid Methods II	藤井昭宏 (工学院大学)

一般共同研究課題

研究課題名	研究課題代表者 (所属)
電磁流体力学乱流の高精度・高並列 LES シミュレーションコード開発研究	三浦英昭 (核融合科学研究所)
偏った訓練データに基づく力学系の機械学習モデリング	齊木吉隆 (一橋大学)
大規模分散医用画像処理アプリケーションの実用化に向けた研究	大島聡史 (名古屋大学)
ノードを跨ぐ多数 GPU 環境下でのマルチフィジックス粒子法の高速化	浅井光輝 (九州大学)
時空間領域境界積分方程式法の高速解法の開発と巨大地震シミュレーションへの応用	安藤亮輔 (東京大学)
ハイブリッドクラウドを用いたゲノム情報に基づく構造多型パネルの構築とアノテーション	長崎正朗 (京都大学)

MPM と FEM による未解明な大規模土砂災害の数値シミュレーション	寺田賢二郎 (東北大学)
極端気象現象予測における不確実性の起源の解明	澤田洋平 (東京大学)
高性能かつ高信頼な数値計算手法とその応用	萩田武史 (東京女子大学)
三次元強震動シミュレーションとリアルタイムデータ同化の融合	中島研吾 (東京大学)
超高解像度の即時予測の実現に向けた都市街区内風況データベースの構築	小野寺直幸 (日本原子力研究開発機構)
Targeting exa-scale systems: performance portability and scalable data analyses	朝比祐一 (日本原子力研究開発機構)
大規模アプリケーションの高性能な実用的アクセラレータ対応手法	下川辺隆史 (東京大学)
GPU 並列計算による高分子材料系シミュレーションの高速化技法の検討	萩田克美 (防衛大学校)
人と衣服と気流の連成相互作用シミュレーション・フレームワークの構築	青木尊之 (東京工業大学)
次世代演算加速装置とそのファイル IO に関する研究	塙敏博 (東京大学)
グラフ構造で一般化された静的負荷分散フレームワークの高度化とメッシュフリー法への適用	森田直樹 (筑波大学)
HPC と高速通信技術の融合による大規模データの拠点間転送技術開発と実データを用いたシステム実証試験	村田健史 (情報通信研究機構)
合成人口プロジェクト: mdx による合成人口データベースの構築	村田忠彦 (関西大学)
時空間発展するシミュレーションを予測する代理モデルの開発	下川辺隆史 (東京大学)
ソフトマター流動の機械学習	John Molina (京都大学)
数値シミュレーションと機械学習との融合による水圏生態系予測	菊地淳 (理化学研究所)
統合機械学習分子動力学システムの構築	奥村雅彦 (日本原子力研究開発機構)
次世代学術情報基盤に向けた基盤ソフトウェアの実践的な研究・開発・評価	杉本章義 (北海道大学)

表 2. 2022 年度 JHPCN 採択課題（当センター共同研究分、mdx のみ利用）

一般共同研究課題

研究課題名	研究課題代表者 (所属)
財務ビッグデータの可視化と統計モデリング	地道正行 (関西学院大学)
医療・介護領域の人材マッチングに最適化された大規模グラフニューラルネットワーク	鈴木 豊太郎 (東京大学)
エージェントモデルと統計データを用いた全国規模の疑似人流データの開発	関本 義秀 (東京大学)
大規模な日本語モデル構築・共有のためのプラットフォームの形成	相澤彰子 (国立情報学研究所)
グラフニューラルネットワークとマルチタスク学習による汎用的物性予測モデルの構築	華井雅俊 (東京大学)
ビヨンド・“ゼロカーボン”を目指し地域と技術をつなぐ情報基盤の構築	兼松祐一郎 (東京大学)
多次元高精細地表情報 (MHESD) の地球科学・歴史考古学における高度利活用	早川裕弐 (北海道大学)

学際大規模情報基盤共同利用・共同研究拠点（JHPCN）

第 14 回シンポジウム開催報告

飯野 孝浩

東京大学情報基盤センター

1. 概要

7月7日・8日の2日間に渡って、学際大規模情報基盤共同利用・共同研究拠点（JHPCN）の第14回シンポジウムがハイブリッド形式で実施された。今年度より会場を東京コンファレンスセンター・品川へと移し、2セッションパラレルかつハイブリッド形式での実施となった。依然続く COVID-19 の感染蔓延の中、懇親会の実施は見送り、また発表者の発表形式（オンライン・現地）の選択も任意とした。招待講演には自然言語処理の若手の第一線研究者である Rui Zhang 氏（ペンシルベニア州立大学）をお招きし、「Contrastive Learning for Natural Language Processing」と題して講演をいただいた。ポスターインデキシングでは短時間の動画を連続投影し、オンラインのポスター発表は Slack を用いて非同期で実施した。2年ぶりの現地開催であり、対面での共同研究のネットワーキングや交流が行えたことは喜ばしいことであった。参加登録者は約 330 名であり、オンライン実施であった昨年度（350 名）とほぼ同数であった。2. に当日のプログラムを示す。詳細はシンポジウムのウェブサイト（<https://jhpcn-kyoten.itc.u-tokyo.ac.jp/ja/sympo/14th>）を参照されたい。

最後に、シンポジウムの形式変更と感染蔓延が重なり、毎年のように実施形態が変更される中、ご協力いただいた発表者・参加者の皆様、また運営に当たってくれた当センターの皆様に感謝申し上げます。

2. プログラム

7月7日（木）

10:00～10:10 主催者挨拶：総括拠点長 田浦 健次郎（東京大学 情報基盤センター長 教授）

10:10～10:20 来賓挨拶：藤澤 亘様（文部科学省 学術基盤整備室長）

10:20～16:40 オーラルセッション（ハイブリッド）

16:40～17:40 ポスターインデキシング（ハイブリッド）

17:40～18:40 ポスターセッション（現地会場）

7月8日（金）

9:30～10:30 招待講演（ハイブリッド）

11:00～17:00 オーラルセッション（ハイブリッド）

17:00～17:20 閉会挨拶：共同研究課題審査委員長 滝沢 寛之（東北大学 サイバーサイエンスセンター 教授）

※オンラインでのポスターセッションは会期を通じて実施

Wisteria/BDEC-01 (Odyssey) における OpenMP によるプログラミング入門 (その 3)

中島研吾^(a), 笠井良浩^(b), 坂口吉生^(b)

(a)東京大学情報基盤センター, (b)富士通株式会社

本稿では, 前々回, 前回 [4,5] に引き続き, Wisteria/BDEC-01 (Odyssey) 上でのプログラム最適化, 性能評価について紹介する。プログラム類は Wisteria/BDEC-01 の `/work/share/ompw/ompw.tar` から取得できるので, 興味ある方は試してみられると良い。また, プログラムのより詳細な説明については [2,3] を参照されたい。

1. 様々な問題規模における性能評価

前回 [5] では, 主として総メッシュ数=128³ の場合についての実行結果を紹介した。以下に問題規模を最大 256³ とした場合の実行結果を示す。

表 1 問題規模を変えた場合の各プログラミング言語・各実装における計算時間 (CG 法部分)

(a) 総メッシュ数=128³=2,097,152

	Fortran	C (clang)	C (trad)
src0 (初期設定)	1.671	1.564	2.354
src1 (First Touch)	1.480	1.122	1.720
src2 (+ELL)	0.747	0.809	1.127
src3 (+omp-parallel削減)	0.707	0.834	0.854

(b) 総メッシュ数=160³=4,096,000

	Fortran	C (clang)	C (trad)
src0 (初期設定)	3.610	3.484	4.067
src1 (First Touch)	2.993	2.228	3.425
src2 (+ELL)	1.534	1.690	2.340
src3 (+omp-parallel削減)	1.556	1.693	1.742

(c) 総メッシュ数=200³=8,000,000

	Fortran	C (clang)	C (trad)
src0 (初期設定)	7.666	8.321	9.397
src1 (First Touch)	6.952	5.102	8.008
src2 (+ELL)	3.421	3.910	5.381
src3 (+omp-parallel削減)	3.440	3.920	3.824

(d) 総メッシュ数=256³=16,777,216

	Fortran	C (clang)	C (trad)
src0 (初期設定)	34.308	24.772	25.547
src1 (First Touch)	32.202	22.172	23.814
src2 (+ELL)	8.916	10.761	14.566
src3 (+omp-parallel削減)	8.915	10.764	10.415

全体的な傾向としては, 総メッシュ数=128³ の場合と変わらないが, 以下の傾向が見られる。

- Fortran が最も効率が良い, 以下 C (clang), C (trad) と続く
- src2⇒src3 による速度向上は C (trad) で顕著である他, Fortran, C (clang) ではほとんど効果が無い
- src3 では C (clang) と C (trad) はほぼ同じ性能であり, 問題規模が大きくなると, C (trad) の方がむしろ高速となる
- Fortran は src0, src1 については, 総メッシュ数=256³ の場合は, C (clang), C (trad) よりもむしろ遅いが, src2, src3 では 4 倍近い性能向上が見られ, C (clang), C (trad) より高速となる

2. 詳細プロファイラの適用

詳細プロファイラ [2,6] を適用することにより、計算性能、消費電力等詳細なデータを得ることができる。詳細プロファイラの使用手順は以下の通りである：

- ① プログラムの性能測定部分の最初と最後に `fapp_start`, `fapp_stop` を挿入する (図 1)。C 言語の場合は「`#include "fj_tool/fapp.h"`」を挿入する。複数箇所の測定も可能である [6]。コンパイルは通常の実行時と同じである。図 1 に示す例では、CG 法のループの前後に `fapp_start`, `fapp_stop` を挿入している。
- ② “`-Hevent=pa1~pa17`”として、計算を 17 回実行する (図 2)。“`-d repo01~repo17`”で指定される各ディレクトルに分析結果が出力される。各ディレクトリが既存の場合は中身を空にしておく必要がある。
- ③ ②で生成した各ディレクトリ内ファイルに対して処理を実施する (図 3)。実行ディレクトリに“`pa1.csv`”～“`pa17.csv`”の 17 個のファイルが生成される。
- ④ ③で生成した“`pa1.csv`”～“`pa17.csv`”を PC にコピーし、同じディレクトリに詳細プロファイラ用の Excel マクロファイル [6] を置き、ダブルクリックする。
- ⑤ 以下、指示に従うことによって解析結果が Excel ファイルとして出力される (図 4, 表 2)。出力は各 CMG に対して行われる。

```
#include "fj_tool/fapp.h"

fapp_start ("CG", 1, 0);
Stime = omp_get_wtime();

for (L=0; L<(*ITR); L++) {
...
    if (ERR < EPS) {
        *IER = 0;
        goto N900;
    } else {
        RH01 = RHO;
    }
}

*IER = 1;
N900:
Etime = omp_get_wtime();
fapp_stop ("CG", 1, 0);

return 0;
}
```

```
call fapp_start ("CG", 1, 0)
Stime = omp_get_wtime()

do L= 1, ITR
...
    if (ERR .lt. EPS) then
        IER = 0
        goto 900
    else
        RH01 = RHO
    endif

enddo
IER = 1
900 continue
Etime= omp_get_wtime()
call fapp_stop ("CG", 1, 0)

return
end
```

図 1 詳細プロファイラ適用のための関数呼び出し [2,6]

fapp.sh

```
#!/bin/sh
#PJM -N "fapp"
#PJM -L rscgrp=lecture-o
#PJM -L node=1
#PJM -omp thread=48
#PJM -L elapse=00:15:00
#PJM -g gt00
#PJM -j
#PJM -e err
#PJM -o test.lst

module load fj
export OMP_NUM_THREADS=48
export XOS_MMM_L_PAGING_POLICY=demand:demand:demand

fapp -C -d ./repo01 -Hevent=pa1 ./sol2
fapp -C -d ./repo02 -Hevent=pa2 ./sol2
fapp -C -d ./repo03 -Hevent=pa3 ./sol2
fapp -C -d ./repo04 -Hevent=pa4 ./sol2
fapp -C -d ./repo05 -Hevent=pa5 ./sol2
fapp -C -d ./repo06 -Hevent=pa6 ./sol2
fapp -C -d ./repo07 -Hevent=pa7 ./sol2
fapp -C -d ./repo08 -Hevent=pa8 ./sol2
fapp -C -d ./repo09 -Hevent=pa9 ./sol2
fapp -C -d ./repo10 -Hevent=pa10 ./sol2
fapp -C -d ./repo11 -Hevent=pa11 ./sol2
fapp -C -d ./repo12 -Hevent=pa12 ./sol2
fapp -C -d ./repo13 -Hevent=pa13 ./sol2
fapp -C -d ./repo14 -Hevent=pa14 ./sol2
fapp -C -d ./repo15 -Hevent=pa15 ./sol2
fapp -C -d ./repo16 -Hevent=pa16 ./sol2
fapp -C -d ./repo17 -Hevent=pa17 ./sol2
```

data.sh

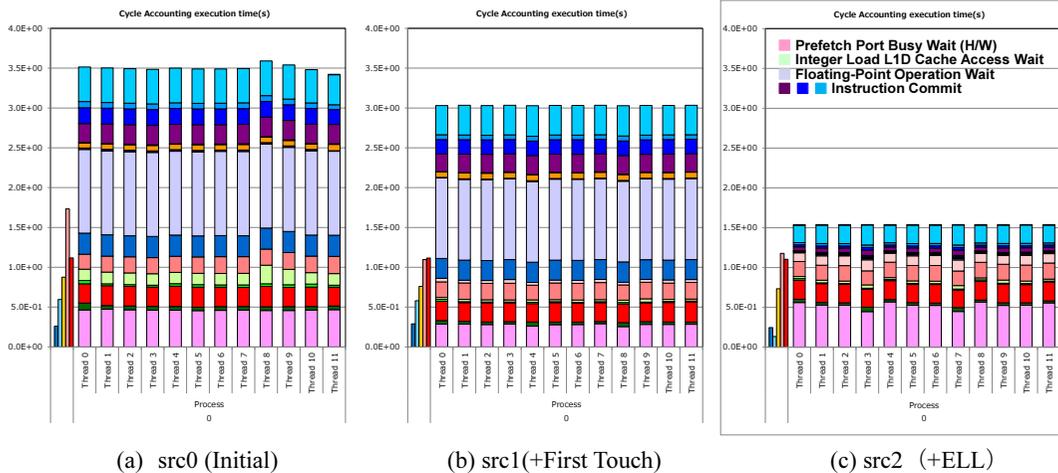
```
#!/bin/sh
#PJM -N "data"
#PJM -L rscgrp=lecture-o
#PJM -L node=1
#PJM --mpi proc=1
#PJM -L elapse=00:15:00
#PJM -g gt00
#PJM -j
#PJM -e err
#PJM -o data.lst

module load fj
module load fjmipi

fapp -A -d ./repo01 -Icpupa,mpi -tcsv -o pa1.csv
fapp -A -d ./repo02 -Icpupa,mpi -tcsv -o pa2.csv
fapp -A -d ./repo03 -Icpupa,mpi -tcsv -o pa3.csv
fapp -A -d ./repo04 -Icpupa,mpi -tcsv -o pa4.csv
fapp -A -d ./repo05 -Icpupa,mpi -tcsv -o pa5.csv
fapp -A -d ./repo06 -Icpupa,mpi -tcsv -o pa6.csv
fapp -A -d ./repo07 -Icpupa,mpi -tcsv -o pa7.csv
fapp -A -d ./repo08 -Icpupa,mpi -tcsv -o pa8.csv
fapp -A -d ./repo09 -Icpupa,mpi -tcsv -o pa9.csv
fapp -A -d ./repo10 -Icpupa,mpi -tcsv -o pa10.csv
fapp -A -d ./repo11 -Icpupa,mpi -tcsv -o pa11.csv
fapp -A -d ./repo12 -Icpupa,mpi -tcsv -o pa12.csv
fapp -A -d ./repo13 -Icpupa,mpi -tcsv -o pa13.csv
fapp -A -d ./repo14 -Icpupa,mpi -tcsv -o pa14.csv
fapp -A -d ./repo15 -Icpupa,mpi -tcsv -o pa15.csv
fapp -A -d ./repo16 -Icpupa,mpi -tcsv -o pa16.csv
fapp -A -d ./repo17 -Icpupa,mpi -tcsv -o pa17.csv
```

図2 計算実行のためのシェルスクリプト例
(計算を17回実行する)

図3 データ処理用シェルスクリプト例



(a) src0 (Initial)

(b) src1 (+First Touch)

(c) src2 (+ELL)

図4 詳細プロファイラによる解析結果 (0番CMGの12コアの計算時間内訳)
(総メッシュ数=160³=4,096,000), Fortran

表2はFortranの場合の各実装におけるCG法計算部分の詳細プロファイラによる分析結果の抜粋である。0番CMGの出力結果を4倍して1ノード、48コアに換算している。SIMD化率、メモリスループットともに、最適化によって向上していることがわかる。ELLを適用することにより、メモリ性能はピーク性能の70%程度となっていることがわかる。それに反比例して命令数(Instruction)は減少している。消費電力(W)は「Node」はノードあたりの消費電力を示し、Core/L2/Memoryはそれぞれ、計算コア(L1キャッシュ含む)、L2キャッシュ、メモリの消費電力の内訳を示している。最適化により計算密度が上昇し、メモリもビジーとなるため、消費電力(W)の値は増加している。特にメモリ部分はsrc0⇒src2・src3で2.5倍程度増加している。計算時間が半分以下となっているため、総消費エネルギー(J)ではsrc0⇒src2・src3で64%程度となっている。

表 2 詳細プロファイラ出力結果抜粋 (総メッシュ数=160³=4,096,000), 1 ノード 48 コア換算

	計算時間 (sec.)	対ピーク性能比 (%)	SIMD 化率 (%)	Memory Throughput (%)	Instruction		Power (W)	
					Effective	Load/Store	Core L2 Memory	Node
solf0 (src0)	3.69	1.59	20.0	30.3	3.39×10^{11}	8.27×10^{10}	81.6 10.9 20.2	112.
solf1 (src1) (First Touch)	2.98	1.97	28.8	37.5	2.35×10^{11}	5.33×10^{10}	92.1 10.8 33.3	136.
solf2 (src2) (+ ELL)	1.58	3.73	49.7	70.0	1.19×10^{11}	4.17×10^{10}	104. 15.0 51.7	170.
solf3 (src3) (+ reduced "omp-parallel")	1.58	3.72	48.4	69.8	1.22×10^{11}	4.10×10^{10}	101. 14.9 51.0	167.

3. まとめ

3 回にわたって、Wisteria/BDEC-01 (Odyssey) を使用したプログラムの最適化、性能評価について紹介した。詳細プロファイラは、計算を 17 回実行しなければならないが、消費電力も含めた様々なデータを取得可能である。省電力化は今後のスーパーコンピュータの運用において重要な要素であり、読者の皆様も是非一回お手元のプログラムの消費電力を測定してみることをお勧めしたい。

参 考 文 献

- [1] Wisteria/BDEC-01 (「計算・データ・学習」融合スーパーコンピュータシステム) <https://www.cc.u-tokyo.ac.jp/supercomputer/wisteria>
- [2] 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), <http://nkl.cc.u-tokyo.ac.jp/seminars/multicore2021/>
- [3] P3D 関連資料
 - ソースコード等: <http://nkl.cc.u-tokyo.ac.jp/files/fvm.tar>
 - 解説資料 (Fortran): <http://nkl.cc.u-tokyo.ac.jp/seminars/multicore2021/omp-f-01.pdf>
 - 解説資料 (C): <http://nkl.cc.u-tokyo.ac.jp/seminars/multicore2021/omp-c-01.pdf>
- [4] 中島研吾, 坂口吉生, 笠井良浩, Wisteria/BDEC-01 (Odyssey) における OpenMP によるプログラミング入門 (その 1), スーパーコンピューティングニュース (東京大学情報基盤センター) 24-2, 2022: https://www.cc.u-tokyo.ac.jp/public/VOL24/No2/11_202203Wisteria-2.pdf
- [5] 中島研吾, 坂口吉生, 笠井良浩, Wisteria/BDEC-01 (Odyssey) における OpenMP によるプログラミング入門 (その 2), スーパーコンピューティングニュース (東京大学情報基盤センター) 24-3, 2022: https://www.cc.u-tokyo.ac.jp/public/VOL24/No3/14_202205-Wisteria-3.pdf
- [6] Wisteria/BDEC-01 利用支援ポータル: <https://wisteria-www.cc.u-tokyo.ac.jp/cgi-bin/hpcportal.ja/index.cgi>

Couette–Poiseuille 流れにおける大規模構造の解析

関本 敦

岡山大学学術研究院 環境生命科学学域

1. はじめに

壁に沿う乱流は壁面摩擦抵抗や熱伝達に大きく影響するため工学的に重要である。特に、飛行機翼やガスタービン翼のような曲がった面上の乱流は、航空機の安定航行や流体機械の不安定性に関わるため、曲面に沿って流れる乱流境界層流れの予測・制御は非常に重要である。これは、局所的な層流–乱流遷移が関わるため、乱流モデルが苦手とする流れである。剥離流れの正確な再現のためには Navier-Stokes 方程式をモデルを使わずに解く直接数値計算 (DNS) が有用であり、乱流統計量の評価だけでなく、時々刻々と変化する乱流構造の特徴を抽出して現象の理解につなげ、高精度の乱流モデルを構築することが課題となる。また、乱流境界層には境界層厚み δ の数十倍程度流れ方向に伸びた (very large-scale motions, superstructures など呼ばれる) 構造があることが報告されており、制御対象として注目されている [1, 2, 3].

乱流境界層は空間発展する乱流であるため、計算領域を非常に大きく取る必要があり、計算コストは膨大である。既往の研究では、流れに逆圧力勾配をかけて、曲がった平面上の乱流境界層を高精度にシミュレーションし、データベース [4] として公開されているが、計算領域の流入や流出面付近は人工的な境界条件の影響が入るため、解析対象とすることはできず、健全な乱流状態が得られる領域は境界層厚さ δ に対して数倍程度 [5] であるため、 $10\text{--}30\delta$ と言われる乱流の大規模構造を解析するには不十分である。そこで、本研究では、流れの大規模構造と壁面からの剥離現象の関連を調査するため、図 1 のような Couette–Poiseuille 流れを考える。図では、上壁面は一定速度 U_w で動くクエット流れに逆向きの平均圧力勾配 ($P' > 0$) がかかっており、圧力勾配 P' を大きくすると平均流 $U(y)$ と速度勾配 (シア, $\partial U/\partial y$) がともに、下壁面近傍で 0 に近づく。異なるレイノルズ数で、壁面せん断応力がほぼ 0 となる状態 (P' を調整しながら) 実現することで、流れが剥離する直前の壁面の状態を調べることができる。このような壁乱流の直接数値計算 (DNS) には、少ない格子点数でも高精度に計算できるスペクトル法を用いる。本課題では、Legendre-Chebyshev 変換を用いて、効率的に Helmholtz 方程式を解く事ができる in-house コードを用いる [6]。MPI と OpenMP のハイブリッドコードで Oakforest-PACS の Xeon phi のノードを多く利用してもスケールできることを確かめてある。本稿では、数値計算手法の詳細について述べた後、Couette–Poiseuille 乱流中の大規模構造について簡単に結果を示す。

2. 計算手法

スペクトル法による Couette–Poiseuille 流れの直接数値計算 (DNS) のアルゴリズムについて解説する。支配方程式は非圧縮の Navier–Stokes 方程式とエネルギー保存則で、スカラー場として温度 (T) を用いる。密度 ρ が温度に比例すると仮定してブシネスク近似を適用し、密度と温度の関係は $\rho = \rho_0[1 - \beta_T(T - T_0)]$ とする。ここで、 ρ_0 は基準密度、 T_0 は基準温度、 $\beta_T \equiv -\frac{1}{\rho_0} \frac{\partial \rho}{\partial T}$ は体膨張係数である。重力加速度ベクトルを $\mathbf{g} = (0, -g, 0)$ (g は重力加速度) として、流体塊に働く浮

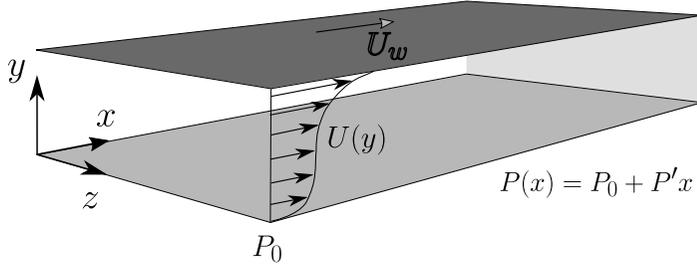


図1 Couette-Poiseuille 流れの外観. 上壁面が U_w で動き, 下壁面が動かない平行平板間 Couette 流れに, 流れ方向 (x) に逆方向の一定の圧力勾配 $P' (= \frac{\partial P}{\partial x} > 0)$ がかかっている.

力は $\mathbf{F}_B = (\rho - \rho_0)\mathbf{g}$ で, 支配方程式は以下で表わされる.

$$\nabla \cdot \mathbf{u} = 0 \quad (1)$$

$$\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + (\mathbf{u} \cdot \nabla)\mathbf{u} = -\nabla \left(\frac{p}{\rho_0} \right) + \nu \nabla^2 \mathbf{u} + g\beta_T(T - T_0)\mathbf{e}_y \quad (2)$$

$$\frac{\partial T}{\partial t} + (\mathbf{u} \cdot \nabla)T = \kappa \nabla^2 T \quad (3)$$

ここで, \mathbf{u} は速度ベクトル, p は圧力, ν は動粘性係数, κ は熱拡散係数である. 関本らの SS-HST の計算手法 [7] と同様に, 非圧縮の Navier-Stokes 方程式を y 方向の渦度 ω_y と $\nabla^2 v (= \phi)$ の支配方程式を式 (1)–(3) から導出すると,

$$\frac{\partial \omega_y}{\partial t} + S_y \frac{\partial \omega_y}{\partial x} = h_g + \nu \nabla^2 \omega_y \quad (4)$$

$$\frac{\partial (\nabla^2 v)}{\partial t} + S_y \frac{\partial (\nabla^2 v)}{\partial x} = h_v + \nu \nabla^2 (\nabla^2 v) + g\beta_T \nabla^2 T \quad (5)$$

ここで, 非線形項は $\mathbf{H} = \mathbf{u} \times \boldsymbol{\omega}$ とし,

$$h_g = \frac{\partial H_x}{\partial z} - \frac{\partial H_z}{\partial x} - S \frac{\partial v}{\partial z} \quad (6)$$

$$h_v = -\frac{\partial}{\partial y} \left(\frac{\partial H_x}{\partial x} + \frac{\partial H_z}{\partial z} \right) + \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) H_y \quad (7)$$

である. また, 平均流 $\langle \mathbf{u} \rangle_{xz}$ についての支配方程式は, 以下のようになる.

$$\frac{\partial \langle u \rangle_{xz}}{\partial t} = -\frac{\partial \langle uv \rangle_{xz}}{\partial y} + \nu \frac{\partial^2 \langle u \rangle_{xz}}{\partial y^2} - \frac{P'}{\rho_0} \quad (8)$$

$$\frac{\partial \langle w \rangle_{xz}}{\partial t} = -\frac{\partial \langle wv \rangle_{xz}}{\partial y} + \nu \frac{\partial^2 \langle w \rangle_{xz}}{\partial y^2} \quad (9)$$

ここで, $P' (> 0)$ は x 方向の平均逆圧力勾配で一定とする. これらを, 式 (3) と連立させ, 時間方向の離散化アルゴリズムには, 3 段の Runge-Kutta 法を採用する [7]. 粘性項および熱の拡散項については, Spalart ら [8] のように半陰的に取り扱う. x, z 方向には周期境界条件を課してフーリエ級数展開を適用し, 3/2 則でアライアス誤差を取り除く. y 方向には Chebyshev 多項式展開を適用し, 乱流渦を十分に解像するために壁面近傍に格子を細かく配置する (Chebyshev-Gauss-Lobatto 配置, $y_j/L_y = [1 - \cos(\pi j/(N_y - 1))]/2$), ($j = 0, 1, 2, 3, \dots, N_y - 1$). 例えば, 速度 u については,

$$u = \sum_{k=0}^{N_y} \sum_{l=-N_x}^{N_x} \sum_{m=-N_z}^{N_z} \hat{u}_{k,l,m} \exp[i(\alpha l x + \gamma m z)] T_k(y)$$

である．ここで， N_x, N_z は打ち切りフーリエ級数展開の打ち切り波数， T_m は Chebyshev 多項式であり，係数 $\hat{u}_{l,m,n}$ は複素数で $\alpha = 2\pi/L_x$ および $\gamma = 2\pi/L_z$ は x および z 方向の基本波数である．

数値計算においては，平均流量

$$u_b \equiv \frac{1}{L_y} \int_0^{L_y} U(y) dy \quad (10)$$

を一定に保つ．*1

境界層流れにおける代表長さや代表流速に用いられる排除厚さ δ_D を Couette-Poiseuille 流れにおいて定義すると，

$$\delta_D \equiv \int_0^{L_y} \left(1 - \frac{U}{U_w}\right) = L_y \left(1 - \frac{u_b}{U_w}\right) \quad (11)$$

であるから，平均流量を固定パラメータとすることは，排除厚さを設定することに相当する [6]．対応する排除速度を $U_D \equiv \frac{1}{\delta_D} \int_0^{\delta_D} U(y) dy$ と定義しておく．

平均流の支配方程式 (8) から，レイノルズ応力 $\langle uv \rangle$ と圧力勾配とのバランスを考えると，

$$\frac{\langle uv \rangle_{xz}}{\partial y} = \nu \frac{\partial^2 U}{\partial y^2} - P' \quad (12)$$

であり，これを $y = 0$ から L_y まで積分すると， $P' L_y = \nu \left(\frac{\partial U}{\partial y} \Big|_{y=L_y} - \frac{\partial U}{\partial y} \Big|_{y=0} \right) \equiv \tau_w - \tau_0$ という関係が得られる．境界層乱流で用いられる逆圧力勾配パラメータ β_p を，本研究では， $y = 0$ の壁面を基準として，その壁面せん断応力 τ_0 を用いて定義する．

$$\beta_p \equiv \frac{\delta_D}{\tau_0} P' = \frac{\delta_D}{L_y} \frac{\tau_w - \tau_0}{\tau_0} = \left(1 - \frac{u_b}{U_w}\right) \frac{\tau_w - \tau_0}{\tau_0} \quad (13)$$

流れが剥離する直前では， $\beta_p \rightarrow \infty$ である．

安定に計算するための，時間ステップの刻み幅を移流項から見積もると，

$$\Delta t \leq \text{CFL} \min\left(\frac{\Delta x}{\pi|u|}, \frac{\Delta y}{\pi|v|}, \frac{\Delta z}{\pi|w|}\right), \quad (14)$$

なる制約を受ける．本研究では，CFL (Courant–Friedrichs–Lewy) 条件は $= 0.6$ とした．乱流の直接数値計算では，渦構造を解像するために壁面近傍に格子点数を多く配置するが，時間刻みに対する粘性項の影響が厳しくなるが，粘性項は時間に対して陰的に取り扱って，時間刻み幅の制約を緩和する．支配方程式のポアソン方程式を数値的に解く必要があり，式 (4) は 2 階の微分方程式，式 (5) については 4 階の微分方程式を満たすべき境界条件の下で数値的に解く必要がある．以下では，それらの計算手法の詳細について解説する．

3. Chebyshev-Legendre-Galerkin 法

Chebyshev 多項式展開を用いると微分係数行列の最大固有値が N^2 で大きくなるため，多くの格子点数を用いたときの精度が悪化する．そこで Legendre 多項式展開を用いたが，その微分係数行列は密行列であり，また高速変換も用いることが出来ない．そこで，Chebyshev 変換と Legendre 変換を組み合わせた解法 [6] を開発して用いた．

*1 一般に，平均流 $U(y) = \langle u \rangle_{xz}(y)$ は時間依存するが，帯域的な外力によって平均流速は常に一定に保たれる．

Chebyshev-Legendre 変換

まず, ある基底関数 ϕ_k が境界条件 $\phi_k(\pm 1) = 0$ (例えば, ω_y の境界条件) を常に満たしてほしいものとする. Legendre 多項式 L_k を用いれば, 以下のように表せる.*²

$$\phi_k = L_k + a_k L_{k+1} + b_k L_{k+2}, \quad (15)$$

$$a_k = 0, \quad b_k = -1. \quad (16)$$

また, Chebyshev 多項式 T_k を用いると,

$$\phi_k = T_k + a_k T_{k+1} + b_k T_{k+2}, \quad (17)$$

$$a_k = 0, \quad b_k = -1, \quad (18)$$

と表せる.*³

ここで, あるスカラー量 $p(y)$ が

$$p(y) = \sum_{j=0}^{N_y} f_j T_j(y) = \sum_{j=0}^{N_y} g_j L_j, \quad (19)$$

と書けるとき, $\mathbf{f} = \mathbf{A}\mathbf{g}$ (Legendre 係数 \rightarrow Chebyshev 係数), $\mathbf{g} = \mathbf{B}\mathbf{f}$ (Legendre 係数 \leftarrow Chebyshev 係数), および $\mathbf{AB} = \mathbf{BA} = \mathbf{I}$ という変換行列*⁴

$$a_{ij} = \frac{2}{c_i \pi} (T_i, L_j)_\omega, \quad b_{ij} = (i + \frac{1}{2})(L_i, T_j), \quad (20)$$

を作ることができる. ここで, $c_0 = 2, c_i = 1 (i \geq 1)$, $\omega = 1/\sqrt{1-y^2}$ で, 内積は $(a, b) = \int_{-1}^{+1} ab \, dy$, 重み付き積分を $(a, b)_\omega = \int_{-1}^{+1} \omega ab \, dy$ と定める. Chebyshev 多項式, および, Legendre 多項式の直交性と偶奇性から以下が分かる.

$$a_{ij} = b_{ij} = 0, \quad \text{for } i > j \text{ or } i + j, \text{ odd} \quad (21)$$

\mathbf{A} と \mathbf{B} の非ゼロ要素は以下の漸化式から求めることができる.

$$T_{i+1}(x) = 2xT_i(x) - T_{i-1}(x), \quad (i \geq 1), \quad (22)$$

$$L_{i+1}(x) = \frac{2i+1}{i+1}xL_i(x) - \frac{i}{i+1}L_{i-1}(x), \quad (i \geq 1). \quad (23)$$

具体的に係数 $\tilde{a}_{i,j} = (T_i, L_j)_\omega$ を $j \geq i \geq 1$ について求めると,

$$\tilde{a}_{i,j+1} = (T_i, L_{j+1})_\omega \quad (24)$$

$$= \frac{2j+1}{2j+2}(\tilde{a}_{i+1,j} + \tilde{a}_{i-1,j}) - \frac{j}{j+1}\tilde{a}_{i,j-1}. \quad (25)$$

同様に, 係数 $\tilde{b}_{i,j} = (L_i, T_j)$ を $j \geq i \geq 1$ について求めると,

$$\tilde{b}_{i,j+1} = \frac{2i+2}{2i+1}\tilde{b}_{i+1,j} + \frac{2i}{2i+1}\tilde{b}_{i-1,j} - \tilde{b}_{i,j-1}. \quad (26)$$

*² $L_k(\pm 1) = (\pm 1)^k, L'_k = \frac{1}{2}(\pm 1)^{k-1}k(k+1)$

*³ 本研究のように Couette-Poiseuille 流れの場合でも, 境界条件 $u(1) = 1$ を満足させる基底関数を同様に作成可能で, $\tilde{u} = \beta x^2 + \gamma x$ など変数変換を行えば良い. 例えば Couette 流れでは平均流 $\langle u \rangle_{xz}$ については, Chebyshev 多項式に対して, $\phi_k(\pm 1) = \pm 1, (a_k, b_k) = (-1, 1) (k = 2n); (0, 0) (k = 2n + 1)$ とすれば良い.

*⁴ \mathbf{B} の逆行列の計算には LAPACK ライブラリを用いる (dgetrf および dgetri).

Chebyshev 変換には高速フーリエ変換 (FFT) が応用できるため、単純に Legendre 変換を用いるよりも計算コストを抑えることができる [9]。また、壁乱流で従来からよく使われてきたのは、Chebyshev 多項式展開を用いた手法 [10] であるため、過去の資産を活かしたまま、高精度な数値解析を実施できる。

Galerkin 法の適用 1

一般的に、ある変数 $u(y)$ についての 2 階微分方程式 (Helmholtz 方程式)

$$-u'' + \alpha u = f, \quad \text{in } I = (-1, 1), \quad (27)$$

を境界条件 $u(\pm 1) = 0$ の下で解くことを考える。境界条件を満たす基底 $\{\phi_k\}_{k=0,1,\dots,N_y-2}$ を用いて、

$$\hat{f}_k = (I_N f, \phi_k)_\omega, \quad \tilde{\mathbf{f}} = (\hat{f}_0, \hat{f}_1, \dots, \hat{f}_{N_y-2})^T; \quad (28)$$

$$u_N(y) = \sum_{n=0}^{N_y-2} \hat{u}_n \phi_n(x), \quad \tilde{\mathbf{u}} = (\hat{u}_0, \hat{u}_1, \dots, \hat{u}_{N_y-2})^T; \quad (29)$$

$$s_{kj} = -([I_N \phi_j']', \phi_k)_\omega, \quad m_{kj} = ([I_N \phi_j], \phi_k)_\omega. \quad (30)$$

ここで、 I_N は物理格子点上への補間作用素、 $S = (s_{kj})$ と $M = (m_{kj})$ ($0 \leq k, j \leq N_y - 2$) はそれぞれ、Stiffness 行列と Mass 行列である。^{*5}したがって、式 (27) について、以下のような線形連立方程式が得られる。

$$(S + M)\tilde{\mathbf{u}} = \tilde{\mathbf{f}}. \quad (31)$$

この Stiffness 行列 S は対角成分

$$s_{kk} = -(4k + 6)b_k, \quad k = 0, 1, 2, \dots \quad (32)$$

のみを持ち、Mass 行列 M は 5 重対角対称行列で、非ゼロ成分は

$$m_{jk} = m_{kj} = \begin{cases} \frac{2}{2k+1} + a_k^2 \frac{2}{2k+3} + b_k^2 \frac{2}{2k+5}, & (j = k) \\ a_k \frac{2}{2k+3} + a_{k+1} b_k \frac{2}{2k+5}, & (j = k+1) \\ b_k \frac{2}{2k+5}, & (j = k+2) \end{cases} \quad (33)$$

である。

Galerkin 法の適用 2

次に、ある変数 $u(y)$ についての 4 階の微分方程式

$$u^{(4)} - \alpha u'' + \beta u = f, \quad \alpha, \beta > 0, \quad x \text{ in } I = [-1, 1], \quad (34)$$

$$u(\pm 1) = u'(\pm 1) = 0. \quad (35)$$

^{*5} S と M は一般に密行列であるが、Chebyshev 多項式については、 M は 5 重対角対称正定値行列、 S は上 3 重対角行列で、 $j < k$ または、 $j + k = \text{odd}$ の場合に成分がゼロである [9]; Legendre 多項式については、 M と S はどちらも対称な疎行列である。

を境界条件の下で解くことを考える．境界条件 $\phi_k(\pm 1) = 0$, $\phi'_k(\pm 1) = 0$ *6を満たす基底 ϕ_k は

$$\phi_k = d_k(L_k + a_k L_{k+2} + b_k L_{k+4}), \quad (36)$$

$$a_k = -\frac{2(2k+5)}{2k+7}, \quad b_k = \frac{2k+3}{2k+7}, \quad d_k = 1/\sqrt{2(2k+3)^2(2k+5)}, \quad k = 0, 1, \dots, N_y - 4. \quad (37)$$

である．*7 *8対応する弱形式は以下のように表わせる．

$$(u''_N, \phi''_k) + \alpha(u'_N, \phi'_k) + \beta(u_N, \phi_k) = (I_N f, \phi_k), \quad (38)$$

ここで, I_N は Legendre-Gauss-Lobatto 点への補間作用素である．係数は, Kronecker のデルタ δ_{ij} を用いて,

$$a_{kj} = (\phi''_j, \phi''_k) = \delta_{kj}, \quad (39)$$

で, $b_{kj} = (\phi_j, \phi_k)$, $c_{kj} = (\phi'_j, \phi'_k)$ の非ゼロ要素はそれぞれ, 以下で定められる．

$$b_{k,k} = d_k^2(e_k + h_k^2 e_{k+2} + g_k^2 e_{k+4}), \quad (40)$$

$$b_{k,k+2} = b_{k+2,k} = d_k d_{k+2}(h_k e_{k+2} + g_k h_{k+2} e_{k+4}), \quad (41)$$

$$b_{k,k+4} = b_{k+4,k} = d_k d_{k+4} g_k e_{k+4}, \quad (42)$$

$$c_{k,k} = -2(2k+3)d_k^2 h_k, \quad (43)$$

$$c_{k,k+2} = c_{k+2,k} = -2(2k+3)d_k d_{k+2}, \quad (44)$$

$$e_k = \frac{2}{2k+1}, \quad g_k = \frac{2k+3}{2k+7}, \quad h_k = -(1+g_k). \quad (k = 0, \dots, N_y - 4) \quad (45)$$

最終的に, $u_N = \sum_{k=0}^{N_y-4} \hat{u}_k \phi_k$, $\hat{f}_k = (I_N f, \phi_k)$, $\bar{\mathbf{u}} = (\hat{u}_0, \hat{u}_1, \dots, \hat{u}_{N_y-4})^T$, $\bar{\mathbf{f}} = (\hat{f}_0, \hat{f}_1, \dots, \hat{f}_{N_y-4})^T$, について, 以下の連立方程式が得られる．

$$(\alpha C + \beta B + I)\bar{\mathbf{u}} = \bar{\mathbf{f}}. \quad (46)$$

B, C はサイズが $(N_y - 3)^2$ の対称正定値行列であり, ϕ_k 偶数モードと奇数モードについて, 独立な方程式に分けることができ, B は 2つの 5重対角行列 (B_e, B_o) に, C は 2つの 3重対角行列 (C_e, C_o) に分離できる．つまり, 境界条件を満たす基底関数の係数 $\bar{\mathbf{f}}$ を $\sum_{k=0}^{N_y-4} \hat{f}_k \phi_k = \sum_{j=0}^{N_y} g_j L_j$ から求める際には, k が偶数と奇数で, 独立に以下の漸化式から求められる．

$$\hat{f}_k = d_k \left[\frac{g_k}{((k) + \frac{1}{2})} + a_k \frac{g_{k+2}}{((k+2) + \frac{1}{2})} + b_k \frac{g_{k+4}}{((k+4) + \frac{1}{2})} \right] \quad (47)$$

$$(k = 0, 2, 4, \dots, N_y - 4) \text{ or } (k = 1, 3, 5, \dots, N_y - 5) \quad (48)$$

また, 式 (46) を解くために, 以下の 2つの連立方程式を独立に解けば良い．

$$(\alpha C_e + \beta B_e + I)\bar{\mathbf{u}}_e = \bar{\mathbf{f}}_e, \quad (49)$$

$$(\alpha C_o + \beta B_o + I)\bar{\mathbf{u}}_o = \bar{\mathbf{f}}_o. \quad (50)$$

求めた係数 ($\bar{\mathbf{u}}_e, \bar{\mathbf{u}}_o$) は境界条件を満たすために用意した基底関数 ϕ_k の係数であるから, $\sum_{j=0}^{N_y} g_j L_j = \sum_{k=0}^{N_y-4} \hat{u}_k \phi_k$ より Legendre 係数を求め, $\mathbf{f} = \mathbf{A} \mathbf{g}$ (Legendre 係数 \rightarrow Chebyshev 係数) を適用することで, 最終的に変数 u の Chebyshev 係数が得られる．

*6 本研究では, y 方向の速度 v に相当する

*7 $\phi_k(1) = 1 + a_k + b_k = 0$, $\phi'(1) = \frac{1}{2}k(k+1) + \frac{a_k}{2}(k+2)(k+3) + \frac{b_k}{2}(k+4)(k+5) = 0$

*8 $k \sim O(10^3)$ では d_k に含まれる平方根の誤差が大きくなる恐れがあるので, $d_k^{-1} = (2k+3)\sqrt{2(2k+5)}$ を用いる．

4. 結果

3つの異なるレイノルズ数 ($Re_w = U_w L_y / \nu = 12000, 24000, 48000$) における Couette-Poiseuille 流れの DNS を実施し、どれも圧力勾配パラメータ β_P を $O \approx 10^{-6}$ に調節した上で、乱流統計量を取得した。

平均流速 $U(y)$ については排除厚さ δ_D とそれに基づく平均流速 U_D で概ねよくスケールできている (図 2)。

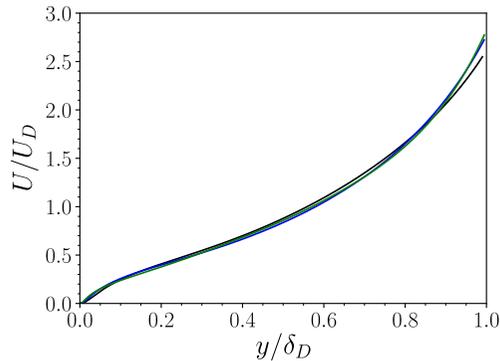


図 2 $y = 0$ 近傍の平均流速分布を排除厚さに基づくスケールで規格化した。(黒線) $Re_w = 12000$; (青線) $Re_w = 24000$; (緑線) $Re_w = 48000$ 。

図 3(a) は、ある瞬間場の速度変動の 3 次元可視化図で、変動が正 ($u' > 0$) の領域を赤系の等値面で表している。流れ方向に伸びた大規模ストリークが観測できる。図 4 では、2 点速度相関図で中央断面 ($y/h = 1$) から下壁面 ($y = 0$) 近傍では、図 3 の観測通り、幅 $\Delta z = \pi h$ 程度の大規模構造の影響をはっきりと確認できる。大規模構造の生成維持機構の解明と制御手法の開発が今後の課題である。

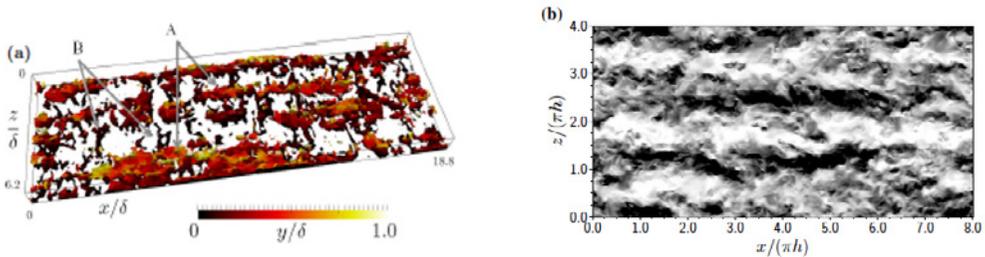


図 3 Couette-Poiseuille 流れの大規模構造 [6]. (a) 流れ方向速度の等値面。A で示すように流れ方向に伸びた構造が確認できる。B のようにせん断がほぼゼロとなる壁面の近傍でスパン方向に伸びた構造があり、局所的に流れが逆流している領域を示している。(b) 中心面 ($y/\delta = 0.5$) での流れ方向速度変動 ($-1.5 < u'/u_{rms} < 1.5$) の様子。ストリーク構造が確認できる。

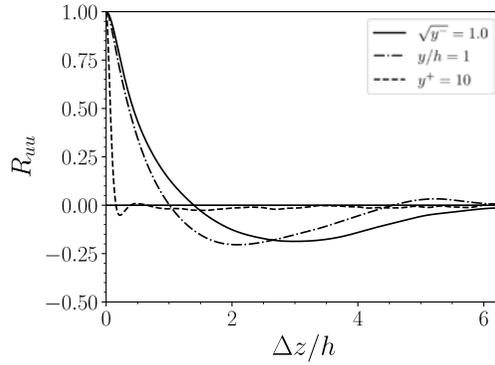


図4 速度 u のスパン方向 z 方向の2点速度相関係数. 剥離が生じている近傍での大規模構造がおおよそ $L_y/(\pi h) = 1$ の幅で確認でき図3(b)の観察結果とよく一致する.

謝辞

本研究は、若手・女性利用者推薦課題「Couette-Poiseuille 流れにおける大規模構造の解析」(2020年度)の援助を受けた。また、科研費基盤研究C「逆圧力勾配下における乱流境界層の統計量スケーリング則と新たなLES基盤の創出」(21K03876)の援助を受けて継続中である。

参考文献

- [1] A. J. Smits, I. Marusic, *Phys. Today* **66**, 25 (2013).
- [2] R. J. Adrian, *Phys. Fluids* **19**, 041301 (2007).
- [3] N. Hutchins, I. Marusic, *J. Fluid Mech.* **579**, 1 (2007).
- [4] J. Soria, *et al.*, Statistics and TKE Budgets of $\beta = 0, 1, 39$. Turbulent Boundary Layer DNS (2019).
- [5] V. Kitsios, *et al.*, *J. Fluid Mech.* **829**, 392 (2017).
- [6] A. Sekimoto, C. Atkinson, J. Soria, *J. Phys.: Conf. Series* **1001**, 012020 (2018).
- [7] A. Sekimoto, S. Dong, J. Jiménez, *Phys. Fluids* **28**, 035101 (2016).
- [8] P. R. Spalart, R. D. Moser, M. M. Rogers, *J. Comput. Phys.* **96**, 297 (1991).
- [9] J. Shen, *INTERNATIONAL CONFERENCE ON SPECTRAL AND HIGH ORDER METHODS* (1996), pp. 233–239.
- [10] J. Kim, P. Moin, R. D. Moser., *J. Fluid Mech.* **177**, 133 (1987).

繰り込み群による冷却極性分子系での

量子スピン液体実現可能性の探索

福井 毅 勇

東京大学大学院工学系研究科物理工学専攻

1. はじめに

本研究では、磁性体における量子スピン液体状態の実現可能性の検証を行う。磁性体では、熱力学第3法則に従い絶対零度でエントロピーをゼロにするために、通常は低温で磁気秩序状態への相転移が起こる。ところが、フラストレーションの大きな量子スピン系では、量子スピン液体と呼ばれる非自明な非磁性状態をとることでエントロピーの解放を実現する場合がある。量子スピン液体とは、強いフラストレーションと量子力学的な揺らぎによって磁気秩序相への相転移が妨げられた、あらゆる対称性の自発的破れが存在しない特殊な基底状態である。一部の量子スピン液体では、トポロジカル秩序と呼ばれる非従来型の秩序が存在し、それに付随する分数励起を用いることにより外乱に対して強固なトポロジカル量子計算を実現できるため、純粋科学だけでなく応用面からも注目を集めている。

2006年に提案された Kitaev 模型 [1]は、2次元ハニカム格子上で定義された量子スピン模型であり、ボンドに依存する異方的な相互作用 (Kitaev 型相互作用) による強いフラストレーションを持つにもかかわらず、基底状態が厳密に求まり、さらに、その基底状態が量子スピン液体状態となる。2次元以上の模型で、基底状態が量子スピン液体状態であることが厳密に示される模型は非常に稀である。2009年に、この模型に現れる特徴的なスピン間相互作用が一部のスピン軌道 Mott 絶縁体と呼ばれる物質群において実現することが指摘されてから [2]、理論と実験の双方から精力的な候補物質の探索が行われてきた。しかしながら、多くの候補物質においては、Kitaev 型相互作用に加え、Heisenberg 型相互作用等の相互作用が不可避免的に存在し、それらにより基底状態は量子スピン液体状態にならず磁気秩序状態になってしまう。

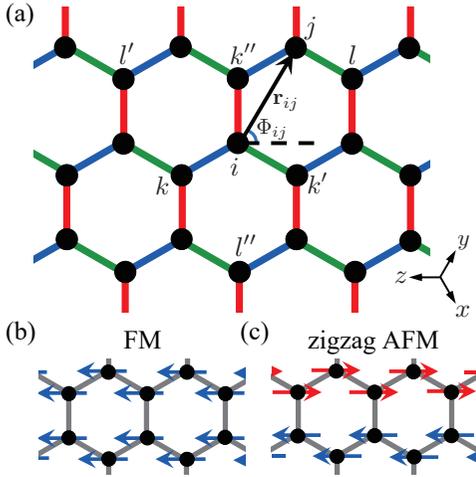
そこで、本研究では冷却極性分子系における Kitaev 量子スピン液体の実現を議論する。光格子中に閉じ込めた LiCs や KRb のような2原子極性分子の、量子スピン模型のシミュレーターとしての可能性は以前から注目されてきていた。2013年には、マイクロ波の照射により、実験的な実装が容易な Kitaev 量子スピン液体の実現可能性が提案された [3,4]。その提案の中では、ボンドに依存する異方的な Kitaev 型相互作用は、分子間の角度に依存した長距離相互作用により実装される。この長距離相互作用により、本当に Kitaev 量子スピン液体状態が実現するのかは、原論文では“open question”とされていたが、今日まで検証されてこなかった。本研究では、この提案をもとに、汎関数繰り込み群法を用いて、Kitaev 量子スピン液体の実現を検証するものである [5]。

2. 模型と手法

上述の提案を元に、本研究では以下のハミルトニアン

$$H = \sum_{i < j} \frac{-1}{r_{ij}^3} \left\{ J_x \left[1 - 2 \cos \left(2\Phi_{ij} - \frac{4\pi}{3} \right) \right] S_j^x S_j^x + J_y \left[1 - 2 \cos \left(2\Phi_{ij} - \frac{2\pi}{3} \right) \right] S_j^y S_j^y \right. \\ \left. + J_z [1 - 2 \cos(2\Phi_{ij})] S_j^z S_j^z \right\}$$

の基底状態を考える。 S_j^μ ($\mu = x, y, z$)は、 $S = 1/2$ の量子スピンの μ 成分、 J_μ は各スピン成分の相互作用的強さを決めるパラメータであり、 r_{ij} はサイト i と j の間のEuclid距離を表す。角度 Φ_{ij} はサイト i と j の相対位置により決まり、その定義は第1図(a)に示されている。



第1図: (a) 模型の模式図と(b) 強磁性秩序と(c) zigzag 反強磁性秩序のスピンの配位の模式図。

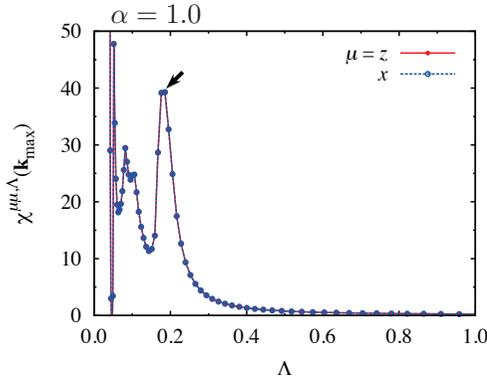
この模型は、最近接サイトのスピン間の相互作用はKitaev模型と同様となっている。しかしながら、次近接スピン間の相互作用は、 XXZ 型のような相互作用となる。このように、この模型はサイト間の相対角度 Φ_{ij} に依存して、各項が混ざり合う複雑な相互作用が働く模型となっている。また、スピン間相互作用はサイト間の距離の3乗分の1で強度が小さくなっていく長距離相互作用であり、このような相互作用のもとでもKitaev量子スピン液体が実現するかは一般には非自明な問題である。

上述のような長距離相互作用を持つ量子スピン模型を取り扱うことができる手法は限られており、これが検証を難しくしている要因でもあると考えられる。本研究では、擬Fermi粒子汎関数繰り込み群 (pseudofermion functional renormalization group、以下、PFFRG) 法と呼ばれる手法を用いる [6]。こ

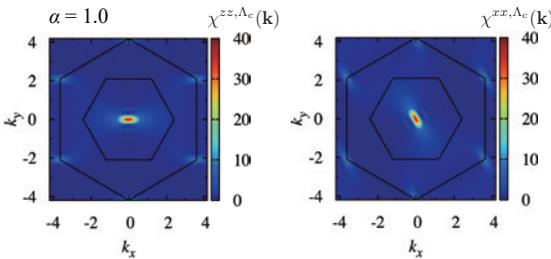
の手法は、2010年に提案された量子スピン模型のための数値計算手法であり、量子スピンをFermi粒子で書き換えることで、相互作用しているFermi粒子系の汎関数繰り込み群法を適用するものである。この手法は、磁場の効果や3体以上の相互作用の効果を取り扱うのが困難であるという制限を持つ一方、系のサイズを大きく取れ、かつ、長距離相互作用の場合も計算コストが最近接相互作用だけの場合と計算コストが変わらないという特長を持つ。これは、本研究の問題の検証に適しており、上述のハミルトニアンで記述される系のスピン感受率をPFFRG法により数値的に計算し、基底状態を明らかにした。計算は、自作のPFFRG法のプログラムを利用し、MPIとopenMPによりハイブリッド並列にて実行した。

3. 研究結果

まずは、強磁性的な模型の場合の結果を述べる。この場合は、ハミルトニアンの J_μ を $J_x = J_y = \alpha$ 、 $J_z = 3 - \alpha$ と取ることで、異方性パラメータ α ($0 \leq \alpha \leq 1.5$)を変えながら感受率の計算を行い、基底状態を調べた。結果としては、全ての α の場合で基底状態は強磁性秩序 (第1図(b))になることが分かった。等方的 ($\alpha = 1$) な場合のスピン感受率の Λ 依存性を第2図に示す。 Λ は繰り込み群計算におけるエネルギーカットオフスケールである。多くのPFFRG法の先行研究に倣い、本研究でも絶対零度極限を取って計算しているため、この Λ が温度のような役割を持つ。実際に、 Λ が系のエネルギースケールより十分大きい領域では、 Λ と温度は比例することを示すこ

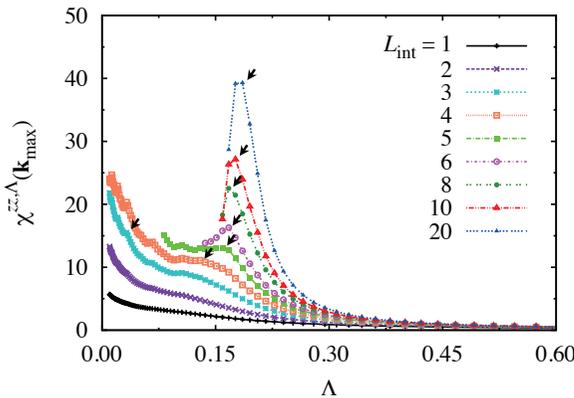


第2図：模型が等方的かつ強磁性的な場合のスピンの感受率の Λ 依存性。



第3図：模型が等方的かつ強磁性的な場合のスピンの感受率の波数依存性。

Kitaev 模型では基底状態はスピン液体であった。今の模型では、最も大きい寄与を持つ最近接スピン間の相互作用は Kitaev 模型と同様であるにもかかわらず、基底状態は秩序状態であった。従って、スピン液体状態への長距離相互作用の効果を明らかにするために、等方的かつ強磁性的な模型の場合に相互作用の到達範囲 L_{int} を導入し、それを、最近接まで ($L_{\text{int}} = 1$)、次近接まで ($L_{\text{int}} = 2$)、第3近接まで ($L_{\text{int}} = 3$)、 \dots と変化させながら感受率を計算して基底状態を明らかにした。



第4図：さまざまな L_{int} の場合のスピンの感受率の Λ 依存性。

とができる。ここで、 \mathbf{k}_{max} は感受率が最大となる波数を表している。第2図では黒矢印で示した $\Lambda = \Lambda_c$ で感受率が発散しており、そのときの \mathbf{k}_{max} の位置は強磁性秩序を示している。 Λ_c での感受率の波数空間におけるプロットを第3図に示す。強磁性状態への揺らぎを示す $\mathbf{k} = \mathbf{0}$ の強いピークが発達している事が分かる。次に、反強磁性的な模型の場合を考える。この場合は、ハミルトニアン J_μ を $J_x = J_y = -\alpha$ 、 $J_z = -(3-\alpha)$ と取る。この場合も、強磁性的な場合と同様に全ての α において感受率は有限の $\Lambda = \Lambda_c$ で発散し、磁気秩序状態への不安定化を示す。反強磁性的な場合では、感受率の波数空間でのピーク

構造は zigzag 反強磁性に対応しており、 α の値によらず基底状態が zigzag 反強磁性状態であることが明らかとなった。さらに、 Λ_c の α 依存性や、その Curie-Weiss 温度の α 依存性との比較から、強磁性的な場合と反強磁性的な場合の双方で、平均場理論で記述される従来型の秩序であること、また、等方的な場合にフラストレーションが最も強く、量子スピン液体の実現に近いことが分かった。

$L_{\text{int}} = 1$ の時は模型は Kitaev 模型と一致し、 $L_{\text{int}} = \infty$ の場合が元の模型に対応する。 L_{int} を変化させながら計算した感受率の Λ 依存性を第4図に示す。 $L_{\text{int}} = 1, 2$ の場合では感受率は異常を示さないが、 $L_{\text{int}} = 3$ 以上では第4図に示した黒矢印の Λ_c において感受率が発散し、磁気秩序状態への不安定化を示している。よって、 $L_{\text{int}} = 3$ 以上では基底状態は磁気秩序状態となることが明らかとなった。よって、Kitaev 量子スピン液体は模型の長距離相互作用に対して脆く、第3近接までスピ

ン間の相互作用を取り込むとすぐに不安定化してしまうことが結論づけられる。

4. まとめ

本研究では、PFFRG法の計算をスーパーコンピュータを用いて並列実行することで、2013年に提案された冷却極性分子系におけるKitaev量子スピン液体の実現法の提案の数値的検証を行った。結果としては、模型が強磁性的な場合と反強磁性的な場合の双方で、異方性パラメータによらず基底状態が磁気秩序状態であることが分かった。また、相互作用の到達範囲を導入し、それらを変化させながら感受率を計算することによって、相互作用が最近接のみの場合、次近接までの場合では基底状態は量子スピン液体状態であるが、第3近接スピン間までの相互作用を取り入れると量子スピン液体状態は不安定となり、基底状態が磁気秩序状態となった。これより、Kitaev量子スピン液体は模型の長距離相互作用に対して脆弱であることが明らかになった。

本研究の結果により、先行研究で提案されたKitaev量子スピン液体の実現法は不十分であり、もう一工夫が必要であることが明らかになった。より実現に近づくための改善策として、すぐに思いつくのは相互作用のより短距離的な設計だろう。サイト間の距離の3乗分の1で減衰する性質は、もともとの極性分子間の相互作用が双極子相互作用であることに由来する。例えば、2次摂動等により距離の6乗分の1で減衰するように設計できればよりKitaev量子スピン液体の実現に近づくと考えられる。また、Kitaev量子スピン液体は、長距離のKitaev型相互作用よりも長距離のHeisenberg型相互作用に対しての方が安定であるようなので、相互作用の長距離部分をよりHeisenberg型相互作用に近くなるような実装も有効かもしれない。

参 考 文 献

- [1] A. Kitaev, *Ann. Phys.* **321**, 2 (2006).
- [2] G. Jackeli and G. Khaliullin, *Phys. Rev. Lett.* **102**, 017205 (2009).
- [3] S. R. Manmana, E. M. Stoudenmire, K. R. A. Hazzard, A. M. Rey, and A. V. Gorshkov, *Phys. Rev. B* **87**, 081106(R) (2013).
- [4] A. V. Gorshkov, K. R. Hazzard, and A. M. Rey, *Mol. Phys.* **111**, 1908 (2013).
- [5] K. Fukui, Y. Kato, J. Nasu, and Y. Motome, *Phys. Rev. B* **106**, 014419 (2022).
- [6] J. Reuther and P. Wölfle, *Phys. Rev. B* **81**, 144410 (2010).

ディンプルの敷設および脈動冷却流によるガスタービン翼後縁部 カットバック面上フィルム冷却の高性能化

徳 武 太 郎

東京農工大学大学院工学府機械システム工学専攻

1. はじめに

航空用・産業用ガスタービンの熱効率向上のためには、より少量の空気量でタービン翼等の構造部材を所定温度まで冷却することが重要である。ガスタービン翼後縁部は形状が薄いうえに、翼表裏面からの入熱が存在するため、冷却が最も困難な部位の一つである。本課題では翼後縁部のカットバック面フィルム冷却技術（冷却空気をカットバック面上に吹き出し、熱遮蔽と対流冷却を同時に行う手法）を対象に、冷却効率の高性能化を目的とする。

図1にカットバック面上フィルム冷却の模式図を示す。カットバック面上フィルム冷却の性能は、熱遮蔽性能としてフィルム冷却効率 η ($= (T_{main} - T_{aw}) / (T_{main} - T_{cool})$)、熱伝達性能として熱伝達率 $h (= q / (T_q - T_{aw}))$ を無次元化したヌセルト数 $Nu (= hDe / k)$ によって表される。ここで T は温度 [K]、 q は熱流束 [W/m²]、 De は等価直径 [m]、 k は熱伝導率 [W/mK]、添え字の main は主流、cool は冷却流、aw は断熱壁、 q は加熱壁である。平滑面上カットバック面のフィルム冷却では、主流と冷却流の質量流速比が Martini ら[1]による実験では 0.8 付近のときに、Schneider ら[2]による計算では 0.95 近傍のときに、主流と冷却流の隔壁端部から大規模渦が周期的に発生することで主流と冷却流の混合が促進され、フィルム冷却効率が低下することが報告されている（図2に数値解析により可視化した大規模渦を示す）。筆者のグループでは大規模渦の発生周波数に対して離調周波数の脈動をフィルム冷却流へ付与することでのフィルム冷却効率向上[3][4][5]、およびカットバック面上にディンプル（凹み形状）を敷設し乱流促進させることによるカットバック面上ヌセルト数の向上[6][7][8]について研究を実施している。本課題では脈動冷却流の付与およびディンプルの敷設によるフィルム冷却効率、ヌセルト数向上効果の考察のため複数条件/形状のカットバック面上非定常温度場、流れ場を LES (Large Eddy Simulation) によって解析した。以下にその概要を記載する。

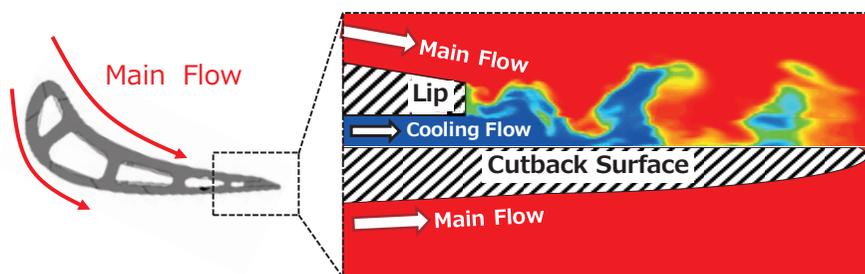


図1 ガスタービン翼後縁部カットバック面上フィルム冷却流の模式図

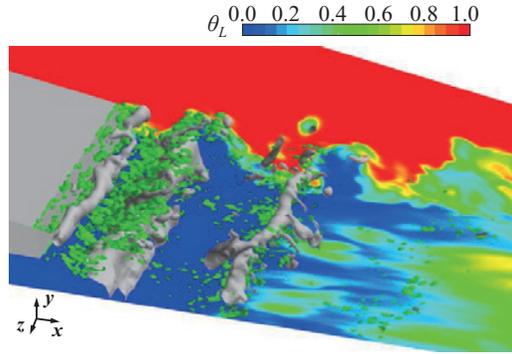


図2 カットバック面上大規模放出渦の可視化 (灰色：圧力変動の等値面、緑色：変形速度テンソルの第二不変量 Q 値の等値面、カラーコンター：無次元温度をそれぞれ表す)

2. 数値解析方法

数値解析は Oakforest-PACS システムにて、OpenFOAM-2.4.x の有限体積法ソルバによって実行した。非圧縮の連続の式(式(1))、Navier-Stokes 方程式(式(2))を PIMPLE 法で解いた。ここでパップスカラーのエネルギー方程式(式(3))を同時に解くようソースコードを編集した。LES の Sub-Grid-Scale(SGS)モデルには Lagrangian Dynamic Smagorinsky モデルを使用した。

$$\frac{\partial \tilde{u}_i}{\partial x} = 0 \quad (1)$$

$$\frac{\partial \tilde{u}_i}{\partial t} + \frac{\partial \tilde{u}_i \tilde{u}_j}{\partial x_j} = -\frac{\partial}{\partial x_i} \left(\frac{\tilde{p}}{\rho} \right) + \frac{\partial}{\partial x_j} \left\{ (v + v_{SGS}) \left(\frac{\partial \tilde{u}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \tilde{u}_j}{\partial x_i} \right) \right\} \quad (2)$$

$$\frac{\partial \tilde{T}}{\partial t} = -\frac{\partial}{\partial x_j} (\tilde{T} \tilde{u}_j) + \frac{\partial}{\partial x_j} \left\{ \left(\frac{v}{Pr} + \frac{v_{SGS}}{Pr_{SGS}} \right) \frac{\partial \tilde{T}}{\partial x_j} \right\} \quad (3)$$

ここで、上付きの $\tilde{\cdot}$ は空間フィルタ平均を表し、 u [m/s]は速度、 p [Pa]は圧力、 ρ [kg/m³]は密度、 ν [m²/s]は動粘性係数、 ν_{SGS} は SGS 渦粘度で

$$\nu_{SGS} = C\Delta^2 \sqrt{2 \tilde{S}_{ij} \tilde{S}_{ij}} \quad (4)$$

$$\tilde{S}_{ij} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial \tilde{u}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \tilde{u}_j}{\partial x_i} \right) \quad (5)$$

となる。また、 T [K]は温度、 Pr (=0.70) はプラントル数、 Pr_{SGS} (=0.90) は乱流プラントル数で、 C は Lagrangian Dynamic Smagorinsky モデルで導かれる係数 C_s の二乗、 Δ はフィルタサイズであり格子体積の三乗根とした。なお、フィルム冷却効率とヌセルト数を同一の流れ場に対して評価するため、2つの異なる温度配列 T_{aw} (カットバック面が断熱条件) と T_q (カットバック面が加熱条件) を用いたエネルギー方程式を同時に解いた。

解析形状は図3に示すカットバック面上フィルム冷却を模した扁平通路であり、寸法は冷却通路高さ H 、主流通路高さ $4H$ 、カットバック面長さ $11.3H$ である。冷却流の噴出角度は主流に対して 10° である。解析条件は主流レイノルズ数 $Re_{main}(=U_{main}8H/\nu)=25000$ 、主流と冷却流の質量流束比であるブロー比 $M(=(\rho U)_{main}/(\rho U)_{cool})=1.0$ とした。ここで U は時間平均流速の絶対値[m/s]を表す。幅方向の境界条件には周期境界を適用した。壁面はすべて滑りなし境界とした。主流、冷却流の入口境界には速度場においてリサイクル境界 (mappedFixedValue 関数) を適用し、流れを発達させた。

脈動冷却流を適用した解析は、冷却流の入口境界にリサイクル境界を適用したうえで、その領域平均速度を時間方向に脈動させた。脈動冷却流の式は以下で表される。

$$U_{cool,pulse} = U_{cool}A\sin(2\pi f(t + t_0)) \quad (7)$$

$U_{cool,pulse}$ [m/s]は脈動補正後の冷却流バルク流速、 A [m/s]は脈動流速片振幅、 f は周波数[Hz]、 t_0 [s]は位相調整のための時刻を表す。

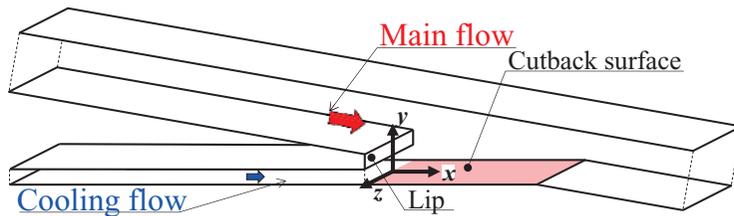


図3 解析形状 (カットバック面上フィルム冷却)

平滑カットバック面の解析格子は構造6面体格子で、ディンプル付きカットバック面の解析格子は非構造6面体格子で作成した。平滑カットバック面における代表格子解像度は $\Delta x^+=13.0$ 、 $\Delta y^+=0.8\sim 8.0$ 、 $\Delta z^+=11.5$ であり、時間刻みは $\Delta t^+=0.057$ である。統計時間は冷却流流速で流体がカットバック面上を 43sweep する時間 ($t^+=8,500$ 、 $t^*=450$) とした。格子解像度の収束状況は別途の解析で求めており、本格子解像度において物理量への影響が小さいことを確認した。

本解析ではディンプル粗面の複雑形状上の非定常乱流解析に多数の速度ベクトル配列、温度配列、乱れ度算出用のテンソル配列を取り扱ったことから、膨大な実行メモリとディスク容量を要した。また位相平均値を取得する解析を実施したため、統計定常を取得するまでに通常より多くの解析時間を要した。上記の2点において Oakforest-PACS システムの使用および若手・女性利用者推薦制度による計算機資源が大変有益なものとなった。

3. 結果

図4にカットバック面上フィルム冷却流の瞬时无次元温度 $\theta'_L(=(T_{main}-T'_{aw})/(T_{main}-T_{cool}))$ 、および時間平均無次元温度 $\theta_L(=(T_{main}-T_{aw,mean})/(T_{main}-T_{cool}))$ の分布を示す (時間平均無次元温度はフィルム冷却効率 η と同定義である)。(a)は平滑カットバック面上定常冷却流での解析結果を、(b)はディンプル付きカットバック面上定常冷却流での解析結果を、(c)は平滑カットバック面上脈動

冷却流での解析結果をそれぞれ示す。(c)の条件では、大規模渦の発生周波数に対して離調する周波数での脈動を冷却流に付与している。(a)の瞬时无次元温度場から大規模渦による主流と冷却流の温度混合が確認できる。(b)のディンプル付きカットバック面上流れ場ではディンプルによる冷却流の乱流促進効果が大規模渦に干渉し、渦構造が(a)と比べて縮小している様子が分かる。これによりカットバック面上時間平均無次元温度（フィルム冷却効率）は(a)に対して向上した。さらに、(b)においてはディンプルによるカットバック面上の流れの剥離/再付着が生じ、ヌセルト数が大幅に向上した（図省略）。

(c)の脈動冷却流条件では(a)に比べて渦構造の周期性が弱く、比較的小規模の温度混合が生じていることが分かる。(c)においても(b)と同様、上記の理由でフィルム冷却効率は(a)に対して向上した。

以上のように、ディンプルの敷設および脈動冷却流の付与はカットバック面上フィルム冷却性能を向上できる。

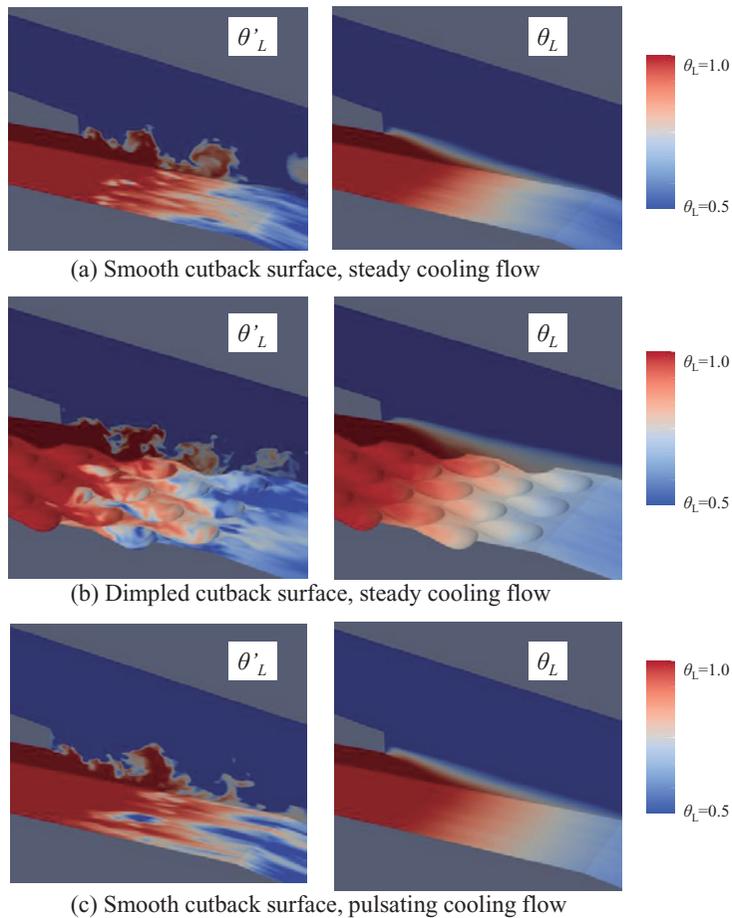


図4 カットバック面上無次元温度分布の比較

(左； θ'_L は瞬時温度、右； θ_L は時間平均温度)

- ((a)：平滑カットバック面の定常冷却流、(b)：ディンプル付きカットバック面の定常冷却流、
(c)：平滑カットバック面の脈動冷却流)

謝 辞

本研究の解析は東京大学情報基盤センター若手・女性利用者推薦制度および科研費 20K04321 の援助を受け、Oakforest-PACKS システムを利用しました。ここに記載し感謝申し上げます。

参 考 文 献

- [1] Martini, P.: Filmkühlung hoch-beanspruchter Turbinen-schaufel-hinter-kanten: Wärmeübergang und Strömung im Nahfeld praxis-bezogener Ausblase-spalte. Dissertation, University of Karlsruhe, Karlsruhe, Germany (2008).
- [2] Schneider, H., von Terzi, D., Bauer, H-J., “Turbulent Heat Transfer and Large Coherent Structures in Trailing-edge Cutback Film Cooling”, Flow Turbulence Combust, Vol. 88(2012), pp.101-120.
- [3] Murata, A., Nishida, S., Saito, H., Iwamoto, K., Okita, Y., and Nakamata, C., 2012, “Effects of Surface Geometry on Film Cooling Performance at Airfoil Trailing Edge”, J. of Turbomachinery, 134(5), 051033.
- [4] Murata, A., Yano, K., Hanai, M., Saito, H., and Iwamoto, K., 2017, “Arrangement Effects of Inclined Teardrop-Shaped Dimples on Film Cooling Performance of Dimpled Cutback Surface at Airfoil Trailing Edge”, Int. J. of Heat and Mass Transfer, 107, pp. 761-770.
- [5] Murata, A., Mori, E., and Iwamoto, K., 2014, “Effects of Surface Geometry And Blowing Ratio on Film Cooling Performance At Airfoil Trailing Edge Investigated By Using Large Eddy Simulation”, Proc. of the 15th Int. Heat Transfer Conference, Kyoto, IHTC15-8914.
- [6] Yamamoto, S., Murata, A., Hayakawa, S., and Iwamoto, K., “Three-Component PTV Measurements of Pulsating Film-Cooling Flow over Smooth Cutback Surface at Trailing Edge of Gas Turbine Airfoil”, Proc. Asian Congress on Gas Turbines 2018, Iwate, 86.
- [7] Yamamoto, S., Murata, A., Taniguchi, H., Hayakawa, H., and Iwamoto, K., 2019, “Effects of Cooling Flow Pulsation on Film Cooling Performance Over Smooth Cutback Surface at Airfoil Trailing Edge Measured by Transient Technique with Compensation of Three-Dimensional Heat Conduction”, Proc. of Int. Gas Turbine Congress 2019, Tokyo, 97.
- [8] Tokutake, T., Murata, A., Nakajima, D., Yamamoto, H., and Iwamoto, K., 2019, “Large Eddy Simulation of Film Cooling Performance of Smooth Cutback Surface at Airfoil Trailing Edge Improved by Pulsating Cooling Flow”, Proc. of Int. Gas Turbine Congress 2019, Tokyo, 47.
- [9] Yamamoto, S., Murata, A., Oho, K., Hayakawa, C., Hayakawa S., and Iwamoto, K., 2021, “Pulsating Film-Cooling Flow Over Smooth Cutback Surface at Airfoil Trailing Edge Measured by 2D3C-PTV”, J. of Heat Transfer, 143(9), 092101.

2022年度 お試しアカウント付き並列プログラミング講習会 開催状況

	開催日	内容	区分	人数	
第181回	2022年6月6日	「Wisteria実践」 ¹ Wisteria/BDEC-01 (Odyssey, Aquarius) 埴 敏博	事前登録者	17	
			参加者	大学・研究機関教職員	2
				企業の方	3
				学部学生	2
				大学院生	4
				その他	0
合計	11				
第182回	2022年6月28日 30日 7月 5日 15日	「並列有限要素法で学ぶ並列プログラミング徹底入門」 ² (MPIの基礎から三次元並列有限要素法まで) <4日間コース> Wisteria/BDEC-01 (Odyssey) 中島 研吾	事前登録者	19	
			参加者	大学・研究機関教職員	4
				企業の方	5
				学部学生	3
				大学院生	2
				その他	0
合計	14				
第183回	2022年7月12日 19日	「第5回 GPUミニキャンプ」 ³ Wisteria/BDEC-01(Aquarius) 下川辺 隆史	事前登録者	19	
			参加者	大学・研究機関教職員	10
				企業の方	1
				学部学生	1
				大学院生	5
				その他	0
合計	17				

¹ <https://www.cc.u-tokyo.ac.jp/events/lectures/181/>

² <https://www.cc.u-tokyo.ac.jp/events/lectures/182/>

³ <https://www.cc.u-tokyo.ac.jp/events/lectures/183/>

第 182 回お試しアカウント付き並列プログラミング講習会 「並列有限要素法で学ぶ並列プログラミング徹底入門」(MPI の基礎から三次元並列有限要素法まで, 4 日間/3 週間コース) (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, 2022 年 6 月 28 日 (火), 30 日 (木), 7 月 5 日 (火), 15 日 (金) にオンライン開催した第 182 回お試しアカウント付き並列プログラミング講習会「並列有限要素法で学ぶ並列プログラミング徹底入門」(MPI の基礎から三次元並列有限要素法まで, 4 日間/4 週間コース)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))¹ について紹介する。

有限要素法 (Finite Element Method, FEM) は偏微分方程式の数値解法として, 様々な科学技術計算に使用されている。基礎的な研究開発の他, NASTRAN に代表される有限要素法による商用コードも既に半世紀近く産業利用も含む様々な分野で設計・安全評価などに使用されている。有限要素法は要素単位のローカルな演算から構成されているところから, 並列化が比較的容易であることが知られている。本講習会では:

- 有限要素法のプログラミング
- MPI による並列プログラミングの基礎
- 前処理付き反復法による連立一次方程式解法のアルゴリズム

など, 大規模シミュレーションに必須の数値アルゴリズムから, 並列プログラミングまで幅広い知識と経験を, 講義及びスパコン (Wisteria/BDEC-01 (Odyssey)²) を使用した実習によって身につけることができる。本講習会は, 2021 年 3 月 2 日 (火), 9 日 (火), 22 日 (月), 26 日 (金) にオンライン開催した第 150 回お試しアカウント付き並列プログラミング講習会「並列有限要素法で学ぶ並列プログラミング徹底入門」³ の内容に基づき, 使用するスパコンを Oakbridge-CX (OBCX)⁴ から Odyssey としたものである。また, 第 150 回では実施しなかった「OpenMP+MPI ハイブリッド並列プログラミングモデル」についても講義, 演習を追加している。

当センターでは, 並列有限要素法に関する様々な講習会を開催して来た。2020 年 4 月以降は, オンラインで:

- 「一日速習: 有限要素法プログラミング徹底入門」⁵
- 「有限要素法で学ぶ並列プログラミングの基礎」⁶

¹ <https://www.cc.u-tokyo.ac.jp/events/lectures/182>

² <https://www.cc.u-tokyo.ac.jp/supercomputer/wisteria>

³ <https://www.cc.u-tokyo.ac.jp/events/lectures/150>

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

⁵ <https://www.cc.u-tokyo.ac.jp/events/lectures/145>

- 「一日速習：三次元並列有限要素法とハイブリッド並列プログラミング」⁷

をそれぞれ1日で実施している。全般的に好評であるものの、1日に詰め込むためにハンズオンの時間が制限されたり、細かい説明を省略するなどの事情もあり、特に遠方の受講者からは「東京へ出張する必要もなくなったので、もっと時間をかけてやって欲しい」という要望を頂いている。そのような要望に答えるべく、第182回講習会では：

- 一次元・三次元有限要素法のプログラミング
- MPIによるプログラミング
- 並列有限要素法（一次元・三次元）

を全て学べる、4日間、フルスペックのZoomによるオンライン講習会を企画した。

表1 スケジュール

6月28日（火）	
09:00-12:00	はじめに，1D有限要素法入門
13:00-15:30	3D有限要素法（1/2）
15:45-18:00	3D有限要素法（2/2），並列有限要素法への道
6月30日（木）	
09:00-12:00	Odysseyへのログイン，MPI入門（1/2）
13:00-15:30	演習，MPI課題 I
15:45-18:00	MPI入門（2/2）
7月5日（火）	
09:00-12:00	演習，MPI課題 II
13:00-15:30	並列有限要素法（1/2）
15:45-18:00	並列有限要素法（2/2）
7月15日（金）	
09:00-12:00	演習，並列可視化
13:00-15:30	OpenMP/MPIハイブリッド（1/2）
15:45-18:00	OpenMP/MPIハイブリッド（2/2）

4日の講習会を3週間にわたって分散して実施し、興味がある部分だけ参加できるようにした。また、ビデオ録画を翌日には公開し、都合の悪い日があれば、適宜録画を観てもらうことも可能とした。内容は、筆者が大学院生の向け講義として実施している、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

⁶ <https://www.cc.u-tokyo.ac.jp/events/lectures/146/>

⁷ <https://www.cc.u-tokyo.ac.jp/events/lectures/144/>

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」⁸の内容として実施しているものと同じである。講義における合計時間は 105 分×14 コマ (=1,470 分) に対して、本講習会は合計 1,875 分と演習を含めても十分に時間の余裕がある。また、ソウル国立大学⁹、国立臺灣大學¹⁰等で 4 日間の集中講義として実施してきた実績もある。表 1 にスケジュールを示す。休憩を適宜とり、ほぼこの通りの時間で実施した。

事前登録者は 19 名、出席者は 14 名 (学生 : 5 名、大学・研究機関教職員 4 名、企業・その他 : 5 名) となった。全日程出席者は 4 名であった。講習会終了後にアンケートを実施した (回収本数 : 9)。表 2 は質問項目と回答 (5 段階評価) の人数分布である。**全体的な満足度の平均値は 5 点満点で 3.56 であった。**アンケートの自由記述欄には、以下のような記述があった :

- 現地に行かなくて良い分、気軽にまた感染も気にせずに受講できる
- 有限要素法について、基礎的な理論からプログラム実装、連立一次方程式の反復解法も含めてコンパクトにまとまっていて有用であった
- 教材が詳細でわかりやすい
- 質問がしにくい (2 件)
- 9 時から参加するのが難しかった。時間があまるが多かったので 10 時 30 分スタートでも良いのではないか? (注 : 時間が余ったのではなく「演習時間」なのであるが)
- 動画を用意していただいたので、復習しやすかった。

アンケート回答者 9 名のうち、5 名は Fortran, C/C++ は普段使用せず、Python, Matlab 等を使用しているということであった。

表 2 アンケート集計結果

	評点	1	2	3	4	5
(a) 講習会時間	短い⇔長い			6	3	
(b) 講習会講義内容 (プレゼン)	簡単⇔難		2	4	3	
(c) 配布資料内容	簡単⇔難		2	5	2	
(d) サンプルプログラム内容	簡単⇔難		1	5	3	
(e) 満足度 (平均 4.25)	不満⇔満足		1	3	4	1

⁸ <http://nkl.cc.u-tokyo.ac.jp/21w/>

⁹ <http://nkl.cc.u-tokyo.ac.jp/SNU2019Jan/>

¹⁰ <http://nkl.cc.u-tokyo.ac.jp/NTU2022online/>

科学技術計算 I / 計算科学アライアンス特別講義 I / スレッド並列コンピューティング 「科学技術計算のためのマルチコアプログラミング入門」 (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、2022 年度 S1・S2 学期に実施した、科学技術計算 I (大学院情報理工学系研究科数理情報学専攻) / 計算科学アライアンス特別講義 I (同 コンピュータ科学専攻) / スレッド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) 「科学技術計算のためのマルチコアプログラミング入門」¹ について紹介する。

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。本講義では、「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。本年度からは、Wisteria/BDEC-01 (Odyssey)² を使用している。

講義内容の詳細については、ウェブページから資料をダウンロードできるのでそちらを参照いただきたい。本講義では、受講者の多様なバックグラウンドを考慮して、ほぼ全講義内容について Fortran, C 両方による教材を準備している。

2020 年度、2021 年度に引き続いて「新型コロナウイルス感染症」のため、全ての講義を Zoom によるオンラインで実施した。本講義は 4 月 7 日に開講したが、4 月からの入学者の通信環境準備を考慮して、4 月 8 日と 15 日は同じ講義を実施した (図 1)。

登録者は 56 名 (科学技術計算 I : 13 名, 計算科学アライアンス特別講義 I : 17 名, スレッド並列コンピューティング : 26 名) で、昨年と同数であった。例年は登録者 35 名程度、出席者は 20 名を切る程度なのであるが、オンライン下では、08:30 開始の 1 限にもかかわらず、7 月の最後の講義まで常時 35~40 名程度の出席者があった。毎回の講義は録画して、クラウド上の動画のありかを ITC-LMS 経由で受講者に連絡していた。これを使って復習している学生も少なからず居るらしく、連絡を忘れると催促が来たりした。このようにビデオ動画等を使ってオンデマンドで受講できるというのはオンライン講義の一つの利点と言える。国際会議でもオンデマンド (発表聴講) とリアルタイム (質疑・議論) とを組み合わせる方式は、定着している。更に Slack のようなツールを組み合わせることによって、効果的なコミュニケーションを効率良く実現できる。

2018~2020 年度はやや難しいプログラミング (sequential reordering の実装と評価) をレポー

¹ <http://nkl.cc.u-tokyo.ac.jp/22s/>

² <https://www.cc.u-tokyo.ac.jp/supercomputer/wisteria>

ト課題としたが、2021年度は少し簡単にして、First Touchによる実装の課題としたところ、単位取得者は13名から21名に増加した。2022年度はELL格納形式を実装する、やや難しい課題としたが、単位取得者は19名でそれほど変化はなかった。

2013年度以降、資料は英語版のみ用意していたが、講義そのものは日本語で実施していた。2017年度から英語で実施することとしたため、留学生の受講は増加しており、2020年度、2021年度は登録者の半数をやや上回っていたが、2022年度は56名中26名であった。

A1・A2学期も基本的にはオンライン講義継続となった。様々な模索も継続すると考えられるが、より受講者の負担を減らすような方法が何よりも重要である。7月13日の講義は、一部対面を導入したハイブリッドで実施したが、現地参加者は8名であった。学生側もオンライン講義に慣れてきて、早朝（08：30）の登校はやや困難となっているのかも知れない。また、従来使用してきた、情報基盤センター（浅野）の演習室はハイブリッド講義に対応した設備がないため、ハイブリッド講義の実施は難しい。

Date	ID	Title
Apr-06 (W)	CS-01a	Introduction-a
Apr-13 (W)	CS-01b	Introduction-b (Introduction-a and -b are same)
Apr-20 (W)	CS-02	FVM (1/2)
Apr-27 (W)	CS-03	FVM (2/2)
May-04 (W)	(no class)	(National Holiday)
May-11 (W)	CS-04	OpenMP (1/3), Login to Odyssey
May-18 (W)	CS-05	OpenMP (2/3)
May-25 (W)	CS-06	OpenMP (3/3)
Jun-01 (W)	CS-07	FVM/ICCG(1/2)
Jun-08 (W)	CS-08	FVM/ICCG(2/2)
Jun-15 (W)	CS-09	Reordering (1/3)
Jun-22 (W)	CS-10	Reordering (2/3)
Jun-29 (W)	CS-11	Reordering (3/3)
Jul-06 (W)	CS-12	Parallel Code by OpenMP (1/3)
Jul-13 (W)	CS-13	Parallel Code by OpenMP (2/3)
Jul-20 (W)	CS-14	Parallel Code by OpenMP (3/3), Q/A

図1 講義スケジュール

原稿募集

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

執筆要項

- 1 内容は、本センターのスーパーコンピュータシステムの利用者にとって有意義な情報の提供となる原稿とします。
- 2 掲載可否については当編集委員会で決定させていただきます。
- 3 掲載可とした投稿原稿に対して、加除訂正を行うことがあります。
- 4 原稿枚数には特に指定はありませんが、シリーズに分割することもあります。
- 5 プログラムの実例が大量になる場合（概ね1頁を超える）は、本文には一部のみを記述し、投稿者の Web ページ等に全体を掲載し、その URL を引用するようにしてください。
- 6 原稿は横書きにしてください。
- 7 原稿は、A4 サイズで、ページの余白は上下 20mm、左右 26mm、ヘッダー15mm、フッター10mm に設定してください。詳しくは原稿様式をご参照ください。PDF 形式（フォント埋め込み）の完全原稿を電子メールにて uketsuke@cc.u-tokyo.ac.jp までご提出願います。
- 8 採用された原稿は、本センターの Web ページに掲載いたします。
<https://www.cc.u-tokyo.ac.jp/public/news.php>

【スーパーコンピュータシステム・ストレージシステム利用案内】

お知らせ	Web ページ
サービス案内、運転状況など	https://www.cc.u-tokyo.ac.jp/
公開鍵登録、マニュアル閲覧など	https://wisteria-www.cc.u-tokyo.ac.jp/ (Wisteria/BDEC-01) https://obcx-www.cc.u-tokyo.ac.jp/ (Oakbridge-CX) https://ipomoea-www.cc.u-tokyo.ac.jp/ (Ipomoea-01)

お問い合わせ内容	お問い合わせ先
利用申込関係	スーパーコンピュータシステム・ストレージシステム 利用申込書提出先 uketsuke@cc.u-tokyo.ac.jp 東京大学情報システム部 情報戦略課研究支援チーム
プログラム相談・システム利用に関する質問	https://www.cc.u-tokyo.ac.jp/supports/contact/#SOUDAN
システムに関する要望・提案	voice@cc.u-tokyo.ac.jp

【IP ネットワーク経由時のホスト名】

システム	ホスト名
Wisteria/BDEC-01 スーパーコンピュータシステム (Odyssey/Aquarius)	wisteria.cc.u-tokyo.ac.jp 以下のホストの何れかに接続します※ wisteria0{1-6}.cc.u-tokyo.ac.jp
Oakbridge-CX スーパーコンピュータシステム	obcx.cc.u-tokyo.ac.jp 以下のホストの何れかに接続します※ obcx0{1-6}.cc.u-tokyo.ac.jp
Ipomoea-01 システム (大規模共通ストレージシステム(第1世代))	ipomoea01.cc.u-tokyo.ac.jp 以下のホストの何れかに接続します※ i01login{1-2}.cc.u-tokyo.ac.jp

※どのホストに接続しても同じです。

【編集】

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

【発行】

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

目 次

センターから

サービス休止等のお知らせ	1
システム変更等のお知らせ	3
スーパーコンピュータシステム「大規模HPCチャレンジ」 課題募集のお知らせ（臨時）	5
復活したスパコン見学	8
研究成果登録のお願い	10
6月・7月のジョブ統計	11

研究報告

学際大規模情報基盤共同利用・共同研究拠点（JHPCN） 公募型共同研究2022年度採択課題一覧	15
学際大規模情報基盤共同利用・共同研究拠点（JHPCN） 第14回シンポジウム開催報告	18
Wisteria/BDEC-01 (Odyssey) におけるOpenMPによる プログラミング入門（その3）	19

ユーザーから

Couette-Poiseuille流れにおける大規模構造の解析	23
繰り込み群による冷却極性分子系での量子スピン液体実現可能性の探索	31
ディンプルの敷設および脈動冷却流によるガスタービン翼後縁部 カットバック面上フィルム冷却の高性能化	35

教育活動報告

第181～183回お試しアカウント付き並列プログラミング講習会 開催状況	40
第182回お試しアカウント付き並列プログラミング講習会 「並列有限要素法で学ぶ並列プログラミング徹底入門 （MPIの基礎から三次元並列有限要素法まで、4日間/3週間コース）」	41
科学技術計算 I / 計算科学アライアンス特別講義 I / スレッド並列コンピューティング 「科学技術計算のためのマルチコアプログラミング入門」	44

原稿募集	46
------	----