（オンライン） ISSN 2436—4940

スーパーコンピューティングニュース

Vol.25 No. 1， 2023.1

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

スーパーコンピュータシステム 利用負担金表

Wisteria/BDEC-01 スーパーコンピュータシステム 利用負担金表（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	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-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	
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 2 TB 利用者当り /home 50 GB	利用期間は当該年度末まで
トークン量追加	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 4 TB 利用者当り /home 50 GB	利用期間は当該年度末まで
トークン量追加	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値である。

スーパーコンピュータシステム ジョブクラス制限値

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

キュー名※1	ノード数※2（最大コア数）	制限時間（経過時間）	メモリー容量（GiB）※3	一般申込	公募制度による申込
debug-o	1 ～ 144 (6,912)	30 分	28	○	○
short-o	1 ～ 72 (3,456)	8 時間	28	○	○
(regular-o)					
small-o	1 ～ 144 (6,912)	48 時間	28	○	○
medium-o	145 ～ 576 (27,648)	〃	〃	○	○
large-o	577 ～ 1,152 (55,296)	〃	〃	○	○
x-large-o	1,153 ～ 2,304 (110,592)	24 時間	〃	○	○
priority-o	1 ～ 288 (13,824)	48 時間	28	○	○
challenge-o	1 ～ 7,680 (368,640)	24 時間	28	★	★
(interactive-o) ※4					
interactive-o_n1	1 (48)	2 時間	28	○	○
interactive-o_n12	2 ～ 12 (576)	10 分	〃	○	○
prepost	1 (56)	6 時間	340	○	○
prepost1_n1 ～ prepost4_n1	1 (56)	1～6 時間	340	○	○
prepost1_n4	1 ～ 4 (224)	1～6 時間	340	○	○
prepost1_n8	1 ～ 8 (448)	1～6 時間	340	○	○

★ 審査による課題選定の上，月1回の一定期間のみ利用可能（原則として月末処理日前日の朝～翌日朝）
※1 キューの指定（〝#PJM -L“rscgrp=キュー名”〞）は，regular-o, debug-o, short-o を小文字で指定する
regular-o キューはノード数の指定（〝#PJM -L“node=ノード数”〞）でノード数別のキューに投入される
※2 トークンの消費係数は 1 ノード当り 1.00。ただし priority-o は優先利用ノード群のためトークン消費係数は 1.50
※3 1ノード当りの利用者が利用可能なメモリー容量
※4 インタラクティブジョブの起動は次のとおり（トークン消費なし）

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

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

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

★ 審査による課題選定の上，月1回の一定期間のみ利用可能（原則として月末処理日前日の朝～翌日朝）
※1 キューの指定（〝#PJM -L“rscgrp=キュー名”〞）は，regular-a, debug-a, short-a を小文字で指定する
regular-a キューはノード数の指定（〝#PJM -L“node=ノード数”〞）でノード数別のキューに投入される
※2 トークンの消費係数は 1GPU 当り 3.00
※3 1ノード当りの利用者が利用可能なメモリー容量
※4 申込ノード数の合計以内ならば，キュー名・制限時間（原則 48 時間以内）は相談の上，任意に設定可能
※5 インタラクティブジョブの起動は次のとおり（トークン消費なし）

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

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）

<table>
<tr><th>区分</th><th>負担金額（税込）</th></tr>
<tr><td>一般申込</td><td>【大学・公共機関等 7,200 円，企業 8,640 円】（1TB の場合，年額）
（ディスク容量ごとの負担金額は下表参照，利用期間は 1 ヶ月単位で設定可）
利用者番号登録数 制限なし

<table>
<tr><th>並列ファイルシステム ディスク容量</th><th>大学・公共機関等</th><th>企業</th></tr>
<tr><td>1 TB</td><td>7,200 円/年</td><td>8,640 円/年</td></tr>
<tr><td>[10 TB まで 1 TB 追加当たり]</td><td>[4,200 円/年]</td><td>[5,040 円/年]</td></tr>
<tr><td>10 TB</td><td>45,000 円/年</td><td>54,000 円/年</td></tr>
<tr><td>[100 TB まで 1 TB 追加当たり]</td><td>[3,000 円/年]</td><td>[3,600 円/年]</td></tr>
<tr><td>100 TB</td><td>315,000 円/年</td><td>378,000 円/年</td></tr>
<tr><td>[1,000 TB まで 1 TB 追加当たり]</td><td>[2,400 円/年]</td><td>[2,880 円/年]</td></tr>
<tr><td>1,000 TB</td><td>2,475,000 円/年</td><td>2,970,000 円/年</td></tr>
<tr><td>[以降 1 TB 追加当たり]</td><td>[2,100 円/年]</td><td>[2,520 円/年]</td></tr>
</table>

※ 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。</td></tr>
<tr><td>ディスク容量追加</td><td>申込時点のディスク容量に応じて，1 TB 追加当たりの負担金額は下表参照
（無償で付与されたディスク容量は「申込時点のディスク容量」に含まない）

<table>
<tr><th>申込時点のディスク容量</th><th>大学・公共機関等</th><th>企業</th></tr>
<tr><td>1 TB 未満</td><td>7,200 円/年</td><td>8,640 円/年</td></tr>
<tr><td>1 TB 以上 10 TB 未満</td><td>4,200 円/年</td><td>5,040 円/年</td></tr>
<tr><td>10 TB 以上 100 TB 未満</td><td>3,000 円/年</td><td>3,600 円/年</td></tr>
<tr><td>100 TB 以上 1,000 TB 未満</td><td>2,400 円/年</td><td>2,880 円/年</td></tr>
<tr><td>1,000 TB 以上</td><td>2,100 円/年</td><td>2,520 円/年</td></tr>
</table></td></tr>
</table>

※利用期間については利用開始月から当該年度のサービス終了月までとし，年度を超えないものとする。利用期間の指定がある場合は利用終了月までとする。
※ディスク容量は利用期間内に限り有効とし，利用終了後に残存しているデータは削除するものとする。
※ディスク容量追加の負担金額は追加単位額に追加する資源量および利用期間を乗じたものとする。
※ファイル，ディレクトリの総数制限についてはディスク容量に比例した値を別途定めるものとする。

巻頭言（その 1）：忘れられない 2022 年

中 島 研 吾
東京大学情報基盤センター

新しい年，2023 年の初めにあたって，皆さまとご家族，ご友人，周囲の皆さまのご健康，そして世界の平和を心からお祈り申し上げます。2022 年は，様々な出来事があり，人類，そして日本に暮らす人々にとって忘れられない一年でした。一方で，対面での会合の機会も増え，3 年ぶりに行動制限のない年末年始となりました。まだまだ油断はできませんが，新しい生活様式への適応も始まっています。

東京大学情報基盤センター（当センター）でも様々な動きがありました。2021 年 5 月 14 日に運用を開始した「Wisteria/BDEC-01[1]」は，シミュレーションノード群（Odyssey）とデータ・学習ノード群（Aquarius）の 2 つの計算ノード群を有しています。当初は，Odyssey と Aquarius は別々に運用されておりましたが，両者を連携させて「計算・データ・学習」融合を実現するためのソフトウェア群が，革新的ソフトウェア基盤 h3-Open-BDEC[2]の一環として整備され，2022 年 6 月以降はユーザーの皆様に「計算・データ・学習」融合を体験いただけるようになり，講習会[3]も開催されました。また，データ活用社会創成プラットフォーム「mdx[4]」との試験的連携も開始されました。これらのアクティビティは国際的にも注目されており，現在，ドイツ，フランス，クロアチア等の研究機関との共同研究が始まろうとしています。「計算・データ・学習」融合 2 年，と位置付けた 2022 年は，お陰様にて非常に大きな成果を達成することができました。

筑波大学と共同で運営する JCAHPC（最先端共同 HPC 基盤施設）[5]による Oakforest-PACS（メニーコア型大規模スーパーコンピュータシステム，OFP）[6]は，2022 年 3 月末を以てその運用を終了しました。OFP は国内最大級のシステムであり，2016 年 12 月のフル運用開始時には国内最速でした。特に 2019 年 8 月末の「京」運用終了後は，「富岳」が本格的に稼働を開始するまでの約 2 年間，National Flagship System の代役を果たし，我が国における計算科学コミュニティに多大な貢献をしてくれました。2022 年 5 月 27 日には，第 11 回 JCAHPC セミナー[7]（OFP 運用終了記念シンポジウム）「ありがとう OFP：京から富岳への狭間で咲いた大輪の花」が，オンラインとのハイブリッドではありますが，久々に現地開催されました。JCAHPC では引き続き筑波大学と共同で OFP の後継機（OFP-II）の検討，調達を開始しており，2024 年 4 月の運用開始を予定しております。

また，長年の懸案であった，各スパコンシステムからアクセスできる「大規模共通ストレージシステム（Ipomoea）」の第 1 号機である「Ipomoea-01（25PB）[8]」も 2022 年 1 月末に運用を開始し，OFP からのファイル移行も 5 月中に無事終了し，2022 年 6 月から一般に利用できるよ

---

1 https://www.cc.u-tokyo.ac.jp/supercomputer/wisteria/service/
2 https://h3-open-bdec.cc.u-tokyo.ac.jp/
3 https://www.cc.u-tokyo.ac.jp/events/lectures/191/
4 https://mdx.jp/
5 https://www.jcahpc.jp/
6 https://www.cc.u-tokyo.ac.jp/supercomputer/ofp/service/
7 https://www.jcahpc.jp/event/seminar11.html
8 https://www.cc.u-tokyo.ac.jp/supercomputer/ipomoea01/service/

うになっています。

「お試しアカウント付き並列プログラミング講習会[9]」もオンラインでの実施が始まって約 3 年になります。全般的に好評で，年 20 回以上開催されています。後述する OFP-II との関係もあり，今後一年ほどは GPU プログラミング関連の講習会，ミニキャンプを集中的に頻繁に開催する予定です。

さて，2022 年は様々な要因のため，電力単価が高騰し，我々の日常の生活にも大きな影響がありました。2023 年 1 月現在で 2021 年と比較して 70%以上の高値で，このまま 3 月まで上昇が続いたとすると年度平均でも 50%以上の高値となっています。このような状況を考慮して，2023 年度は**「計算機利用負担金の一律 50%引き上げ，Wisteria/BDEC-01（Odyssey）の一部ノード停止」**という決断をせざるを得ませんでした。利用者の皆様には大変なご迷惑とご不便をおかけすることになりますが，何卒ご理解，ご了承のほどをお願いいたします。電力単価の状況が落ち着けば，2024 年度以降のできるだけ早い時期に，負担金を元にもどすことができればと考えております。

多事多難な日々が続きますが，本年（「計算・データ・学習」融合 3 年）もよろしくお願いいたします。

[9] https://www.cc.u-tokyo.ac.jp/events/lectures/

巻頭言（その 2）：第二軍の大輸送

中 島 研 吾
東京大学情報基盤センター

Oakforest-PACS の後継機（OFP-II）は，目標ピーク性能を 100-200 PFLOPS として検討を進めて来たが，現実的な消費電力・エネルギー（つまり電気料金）でこれを実現するには，「GPU 等の演算加速器を搭載した計算ノードを主とする」ことが必須であり，既に 2021 年秋頃にはこの方針に決していた。その後，利用者の皆様に向けては，加速器搭載システムへのアプリケーション移行に関するアンケートも実施した。当時，既に「脱炭素化」という世界的潮流があったが，2022 年になってからの電力単価高騰もあり，結果的には正しい選択であった。なお，OFP-II では汎用 CPU のみを搭載した計算ノードも一定数導入する予定である。

TOP500[10]のための HPL（High Performance Linpack）[11]性能測定時の消費電力あたり演算性能（GFLOPS/W）によるランキングが Green500[12]である。Wisteria/BDEC-01 のうち，Odyssey（Fujitsu/Arm A64FX）は 15 GFLOPS/W，Aquarius（Intel Icelake+NVIDIA A100）は 24 GFLOPS/W で，Aquarius の効率が約 60%良いことになる。2022 年 11 月現在の Green500 のトップのシステム（Henri）は NVIDIA の最新の GPU（H100）を搭載しており，消費電力当たり性能は 65 GFLOPS/W，Odyssey の 4 倍以上である。

GPU への移行に当たって問題となるのが，アプリケーションの移植である。OFP の利用者は約 3,000 人おり，全てのアプリケーションの移植を完了するには最低でも 18 ヶ月を要すると見込まれる。OFP-II の運用が 2024 年 4 月に開始するとして，そこから逆算すると 2022 年秋には移植のための活動を始めなければならず，そのためにはそれ以前に OFP-II で採用する GPU を決定しておく必要があった。そこで 2022 年年明け早々から GPU 選定のためのベンチマークと附属書類の整備を開始し，表 1 に示すような 7 種類のベンチマークを実施することになった。いずれも計算科学系アプリケーションである。OFP-II では，Wisteria/BDEC-01 で実施している「計算・データ・学習」融合という路線は継続するものの，ワークロードの中心は「計算」であり，GPU 選定にあたってもその点を最も重視した。

表 1　GPU 選定のためのベンチマーク概要

Name of the Code	Description	Lang.	Parallelization	GPU	Category
P3D	3-D Poisson's Equation by Finite Volume Method	C	OpenMP		A
GeoFEM/ICCG	Finite Element Method	Fortran	OpenMP, MPI		
H-Matrix	Hierarchical-Matrix calculation	Fortran	OpenMP, MPI		
QCD	Quantum-Chromo Dynamics simulation	Fortran	OpenMP, MPI	CUDA	B
N-Body	N-Body simulation using FDPS	C++	OpenMP, MPI	CUDA	
GROMACS	Molecular Dynamics simulation	C++	OpenMP, MPI	CUDA, HIP, SYCL	
SALMON	Ab-initio quantum-mechanical simulator for optics and nanoscience	Fortran	OpenMP, MPI	(OpenACC)	A

10 https://www.top500.org/
11 https://www.top500.org/project/linpack/
12 https://www.top500.org/lists/green500/

右端の「Category」という列は，A : 汎用 CPU 向けベンチマーク，B : 既に GPU 化されたもの，という分類である。10 年ほど前までは，GPU プログラミングと言えば CUDA が必須で，これが大きな障壁となっていたが，その後，指示行ベースの OpenACC，OpenMP，また最近は標準言語（Standard Language）も整備され，プログラミングも容易になっている。絶対的な計算性能が高いことはもちろんであるが，「A Category」では，標準言語等による最低限の変更によるコードと OpenACC，CUDA によるフル最適化されたコードの性能比が 1 に近いことも評価基準の一つとした。

2022 年 2 月に各社によるベンチマーク開始，5 月に結果提出，ヒアリング・審査の後，6 月に NVIDIA の GPU（H100 またはその後継機種）を選定することに決定した。選定のポイントとなったのは：

① ベンチマークの演算性能
② 移植（ポーティング）のしやすさ
③ サポート体制
④ Fortran への対応

の 4 点である。科学技術計算においては，我が国では多くのプログラムが Fortran で記述されているため，④は特に重要であった。

GPU への移行に当たっては，各利用者がアプリケーションの移植を実施することを原則としている。そのため，ミニキャンプ，オンライン講習会を以前より頻繁に実施する他，「相談会」を毎月実施し，JCAHPC・NVIDIA 関係者が対応に当たっている。ミニキャンプや相談会は，共通の技術的課題を抱えている他の利用者とのネットワーク形成にも大きく貢献している。また，ミニキャンプでは，JCAHPC の OB・OG を含む他大学教員，関連会社社員の皆様にもメンターとして加わっていただいている。この場を借りて感謝の意を表する次第である。移行のためのポータルサイト[13]も整備されており，講習会の資料，ビデオ動画を初め，様々な情報が集約されている。是非一回覗いてみていただきたい。環境としては，現在は Wisteria/BDEC-01（Aquarius）を使用しているが，最新の H100 を搭載したシステムを利用できるよう調整を進めている。

OFP，Odyssey ユーザーのプログラムはほとんどが OpenMP＋MPI によって並列化されているため，利用者の皆様には，GPU 移行にあたっては OpenACC を利用することをお勧めしている。また標準言語は，特殊な GPU プログラミングの知識は不要であり，容易に GPU 化可能である。図 1 は心臓電気生理学（cardiac electrophysiology）の有限体積法シミュレーションを

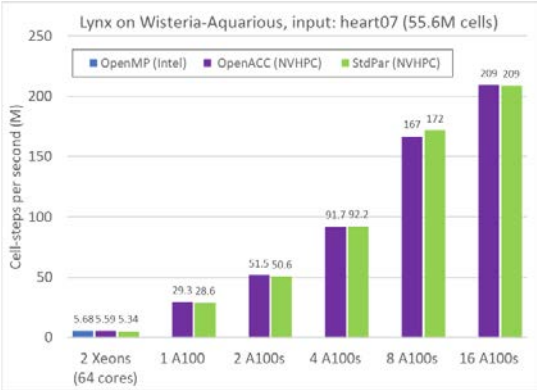


図 1　心臓電気生理学有限体積法シミュレーションの計算性能（時間当たり処理量），OpenACC と標準言語（StdPar）の比較，Wisteria/BDEC-01（Aquarius）使用［1］

[13] https://jcahpc.github.io/gpu_porting/

Wisteria/BDEC-01（Aquarius）で実施した結果［1］で，計算時間の大部分は疎行列を係数行列とする連立一次方程式の前処理付き共役勾配法による求解である。図は，時間当たりの処理量を示している。Aquarius は 1 ノード 8GPU（NVIDIA A100）を搭載しており，最大 2 ノードを使用している。1GPU の性能は，CPU1 ノード（Intel Icelake）の約 5 倍，また OpenACC と標準言語（StdPar）の計算性能はほとんど変わらないことがわかる。比較的単純な演算では，標準言語でも十分高い性能を得られる。

この他，OFP，Odyssey の大口ユーザーのグループ，広く使用されているコミュニティコードのグループを対象とした「特別サポート」を合計 16 グループに対して実施している。「特別サポート」は，JCAHPC・NVIDIA 関係者による個別のサーヴェイ，主要カーネルの最適化などのサポートである。ただ，コード量が多かったり，アルゴリズムやデータ構造の変更が必要になる場合もあり，また将来の継続的なメインテナンスも考慮して，ミニキャンプ，講習会，相談会にも積極的に参加していただいている。

また，需要の多い，OpenFOAM 等のアプリケーションについては，NVIDIA とも協力し，OpenFOAM HPC Technical Committee[14]で進められている GPU 化の成果を活用する予定である。

さて，「第二軍の大輸送」である。

司馬遼太郎「坂の上の雲」は，筆者の少年時代からの愛読書で，40 年余りの間に繰り返し読んでいる。主人公の一人である秋山真之（日露戦争時の連合艦隊作戦参謀）の功績の一つに，「日本海海戦」と並んで「第二軍の大輸送」というのがあるらしいが，小説中には明確な記述がない。半藤一利「日露戦争史」によると，奥保鞏大将を総司令官とする「第二軍」の約 4 万人の将兵を乗せた 56 隻の大船団は，ロシア軍の旅順要塞のある遼東半島の先端近く，金州・南山付近に上陸した。ロシア旅順艦隊による攻撃，ロシア陸軍の水際攻撃を想定して，海軍の護衛艦の手配などもしていたのだが，結局抵抗らしい抵抗はなく，全員無事に上陸できたらしい。詳細はよくわからないのだが，とにかくこの大規模な輸送計画の立案者が秋山真之だった，ということらしい。

GPU へのアプリケーション移植のための活動を始めるにあたって，ふと「第二軍の大輸送」のことが頭をよぎった。そこで，今回の一連の活動を個人的に「第二軍の大輸送」と呼ぶことにした。「万全の準備をして，3,000 人の利用者全員が，一人の例外もなく，OFP-II の GPU を使えるようにする」ことがそのミッションである。「作戦名」はともかく，本件に関わる全ての人々がその目標を共有している。2022 年 10 月以降，これまで全ての活動が驚くほどスムーズに進んでいるのは，その賜物であると思う。

これから一年あまり，長い旅になるが，どうか利用者の皆様は，安心してともに進んでいただきたい。よろしくお願いします。

参考文献

[1] A. Naruse, J.D. Trotter, J. Langguth, X. Cai, K. Nakajima, High resolution simulation of cardiac electrophysiology on realistic whole-heart geometries on Wisteria/BDEC-01 (Aquarius), 情報処理学会研究報告（2022-HPC-187-15），2022

[14] https://wiki.openfoam.com/High_Performance_Computing_(HPC)_Technical_Committee

センターから

サービス休止等のお知らせ

2023 年 1 月下旬からの計算機及びストレージシステムのサービス予定は以下のとおりです。

Wisteria/BDEC-01 スーパーコンピュータシステム

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

日　付	利用者サービス	センター内作業
1 月 27 日（金）	9:00 ～ 22:00 までサービス休止	月末処理
2 月 22 日（水）	9:00 ～ 22:00 までサービス休止	月末処理
3 月 31 日（金）～ 4 月　4 日（火）	3/31 9:00 ～ 4/4 17:00 までサービス休止	年度末処理

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

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

大規模 HPC チャレンジ 実施期間
1 月 26 日（木）8:30 ～ 17:30 まで 2 月 21 日（火）8:30 ～ 17:30 まで 3 月 30 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
1 月 25 日（水）	9:00 ～ 20:00 までサービス休止	月末処理
2 月 17 日（金）	9:00 ～ 20:00 までサービス休止	月末処理
3 月 31 日（金）～ 4 月　4 日（火）	3/31 9:00 ～ 4/4 17:00 までサービス休止	年度末処理

・ 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
1 月 24 日（火）8:30 ～ 17:30 まで 2 月 16 日（木）8:30 ～ 17:30 まで 3 月 30 日（木）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
3 月 31 日（金）～ 4 月　4 日（火）	3/31 9:00 ～ 4/4 17:00 までサービス休止	年度末処理

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

【注意事項】

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

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

システム変更等のお知らせ

(2022.10.1 － 2022.12.31 変更)

1. ハードウェア

1.1 Wisteria/BDEC-01 スーパーコンピュータシステム … なし

1.2 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)

➢ Aquarius

HDF5	v1.12.2	(2022.11.25)
GSL(GNU Scientific Library)	v2.6	(2022.12.23)
FFTW	v3.3.10	(2022.12.23)

➢ ログインノード

HDF5	v1.12.2	(2022.11.25)
gtags	v6.6.8	(2022.12.23)
GSL(GNU Scientific Library)	v2.6	(2022.12.23)
FFTW	v3.3.10	(2022.12.23)

➢ Guacamole サーバ

Apache Tomcat	v9.0.68	(2022.11.25)

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) … なし

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

3. その他

3.1 Oakbridge-CX における shm キュー新設について

Oakbridge-CX では、shared memory (/dev/shm) の利用上限値を計算ノードに搭載される物理メモリ (192 GiB) の 50% から 90% へ緩和した「shm」キューを 11 月 22 日より新設しました。
詳細は以下のとおりとなります。

キュー名 ：shm
ノード数 ：1 ～ 8
制限(経過)時間 ：24 時間
メモリ容量 (GiB) ：168
※ shared memory (/dev/shm) は物理メモリ (192GiB) の 90% まで利用可能

2023 年度の利用負担金値上げとシステムの縮退運転について

スーパーコンピューティング部門

昨今の電気料金高騰に伴い、各システムの電気料金が利用負担金収入を大幅に上回ることが見込まれることから収支を勘案し、2023 年度利用負担金について値上げを実施させていただくこととしました。利用者皆様にはご負担をおかけすることになりますが、ご理解、ご協力の程よろしくお願い致します。

電気料金は、今後も上がり続ける可能性が高く、2023 年 1 月時点では 2023 年度利用負担金について、一律 2 倍とする必要があります。しかし、各利用者において 2 倍の予算を用意していただくのは困難であるため、以下のとおり、利用負担金値上げに加え、システムの縮退運転を組み合わせた対応とさせていただきます。

- 2023 年度利用負担金は、一律 2022 年度比 1.5 倍とします。ただし、ディスク追加料金および Ipomoea-01 利用負担金は据え置きとします。

- 2023 年度は、消費エネルギーの多い Wisteria/BDEC-01 Odyssey の計算ノードの 25 %を稼働停止とします。
  (Wisteria/BDEC-01 Aquarius および Oakbridge-CX の計算ノードは縮退運転の対象外です)

2023 年度中に、もし電気料金の状況が好転した場合は、Odyssey の計算ノードの稼働を増やす予定です。また、可能であれば、2024 年度の利用負担金の再度見直しを検討しております。

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システム利用規程別表(利用負担金表)における具体的な改正点については、本センター Web ページおよびスーパーコンピューティングニュース 3 月号に掲載致します。

2023 年度の利用申込（新規・継続）について

情報戦略課研究支援チーム
情報基盤センタースーパーコンピューティング部門

2023年度のスーパーコンピュータシステム利用申込（新規・継続）は下記のとおり取り扱います[1]。利用申込の内容によって、利用申込期限が異なりますのでご注意ください。

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

また、**2023年4月からの利用に関する「利用登録のお知らせ」の送付については、2023年3月末を予定しております**ので、予めご了承ください。

１．新規利用申込

Wisteria/BDEC-01・Oakbridge-CX ［通常利用］

2023年1月下旬にスーパーコンピューティング部門Webページ（https://www.cc.u-tokyo.ac.jp/）にて2023年度版の利用申込サイトを公開します。スーパーコンピュータシステム利用規程等をよくお読みになり、利用申込を行ってください。

申込は随時受け付けますが、**2023年4月初めからのご利用を希望される場合は、利用申込期限までに手続きを行ってください。**

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

■利用申込期限：2023年2月10日（金）　（早めに手続きを行ってください）

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

２．継続利用申込

Wisteria/BDEC-01・Oakbridge-CX ［通常利用］

2023年1月下旬に代表者の方に2022年度の登録内容を記載した「継続手続きの案内」を送付します。2023年度も継続利用される場合は、案内に従い、利用申込期限までに手続きを行ってください。

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

また、提供セット数の決定にあたっては、2022年度利用実績、研究成果登録状況等を参考にさせていただく場合があります。

■利用申込期限：2023年2月10日（金）（早めに手続きを行ってください）

３．Oakbridge-CXサービス終了について

Oakbridge-CXは2023年9月末をもって全てのサービス終了を予定しております。利用申込（新規・継続）をご検討の際にはご留意いただきますようお願い申し上げます。

サービス終了後のスーパーコンピュータのご利用につきましては、Wisteria/BDEC-01の利用をご検討ください。

４．問い合わせ先

〒277-0882
千葉県柏市柏の葉6-2-3（東京大学情報基盤センター内）
東京大学情報システム部
情報戦略課研究支援チーム
E-mail：uketsuke@cc.u-tokyo.ac.jp

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

1. はじめに

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

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

※ 新型コロナウイルス感染症拡大防止に配慮し、通常から実施時間を変更して実施しています。
実施時間は 8 時間（実施日当日 9:00～17:00）

2. 採択課題

システム：Wisteria/BDEC-01
募集期間：2022 年度 第 3 回再募集　2022 年 11 月 7 日～11 月 28 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	大規模分散並列環境におけるコレスキーQR 型アルゴリズムによる縦長行列の列ピボット付き QR 分解の性能評価
代表者名（所属）	深谷 猛（北海道大学 情報基盤センター）
行列の列ピボット付き QR 分解（QRCP）は、行列の低ランク近似などの応用を持つ行列分解計算であり、特異値分解と比べて低コストで行列のランクに関する情報を取り扱うことができる。現在、我々は、縦長行列の QRCP に対して、コレスキーQR 型アルゴリズムの開発を行っている。縦長行列の通常の QR 分解に対するコレスキーQR 型アルゴリズムは、演算の大半が Level-3 BLAS で実行可能かつ通信回避型アルゴリズムであり、その有効性はよく知られている。我々は、これを縦長行列の QRCP へ応用することを目指してアルゴリズムの研究開発を進めている。本課題では、開発中のコレスキーQR 型 QRCP アルゴリズムの分散並列版プログラムについて、強スケーリングの観点でその性能を評価する。これにより、大規模分散並列環境におけるコレスキーQR 型 QRCP アルゴリズムの性能を詳細に調査するとともに、その有効性を示すことを目指す。	

システム：Oakbridge-CX
募集期間：2022 年度 第 3 回再募集　2022 年 11 月 7 日～11 月 28 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	大規模分散並列環境におけるコレスキーQR 型アルゴリズムによる縦長行列の列ピボット付き QR 分解の性能評価
代表者名（所属）	深谷 猛（北海道大学 情報基盤センター）
行列の列ピボット付き QR 分解（QRCP）は、行列の低ランク近似などの応用を持つ行列分解計算であり、特異値分解と比べて低コストで行列のランクに関する情報を取り扱うことができる。現在、我々は、縦長行列の QRCP に対して、コレスキーQR 型アルゴリズムの開発を行っている。縦長行列の通常の QR 分解に対するコレスキーQR 型アルゴリズムは、演算の大半が Level-3 BLAS で実行可能かつ通信回避型アルゴリズムであり、その有効性はよく知られている。我々は、これを縦長行列の QRCP へ応用することを目指してアルゴリズムの研究開発を進めている。本課題では、開発中のコレスキーQR 型 QRCP アルゴリズムの分散並列版プログラムについて、強スケーリングの観点でその性能を評価する。これにより、大規模分散並列環境におけるコレスキーQR 型 QRCP アルゴリズムの性能を詳細に調査するとともに、その有効性を示すことを目指す。	

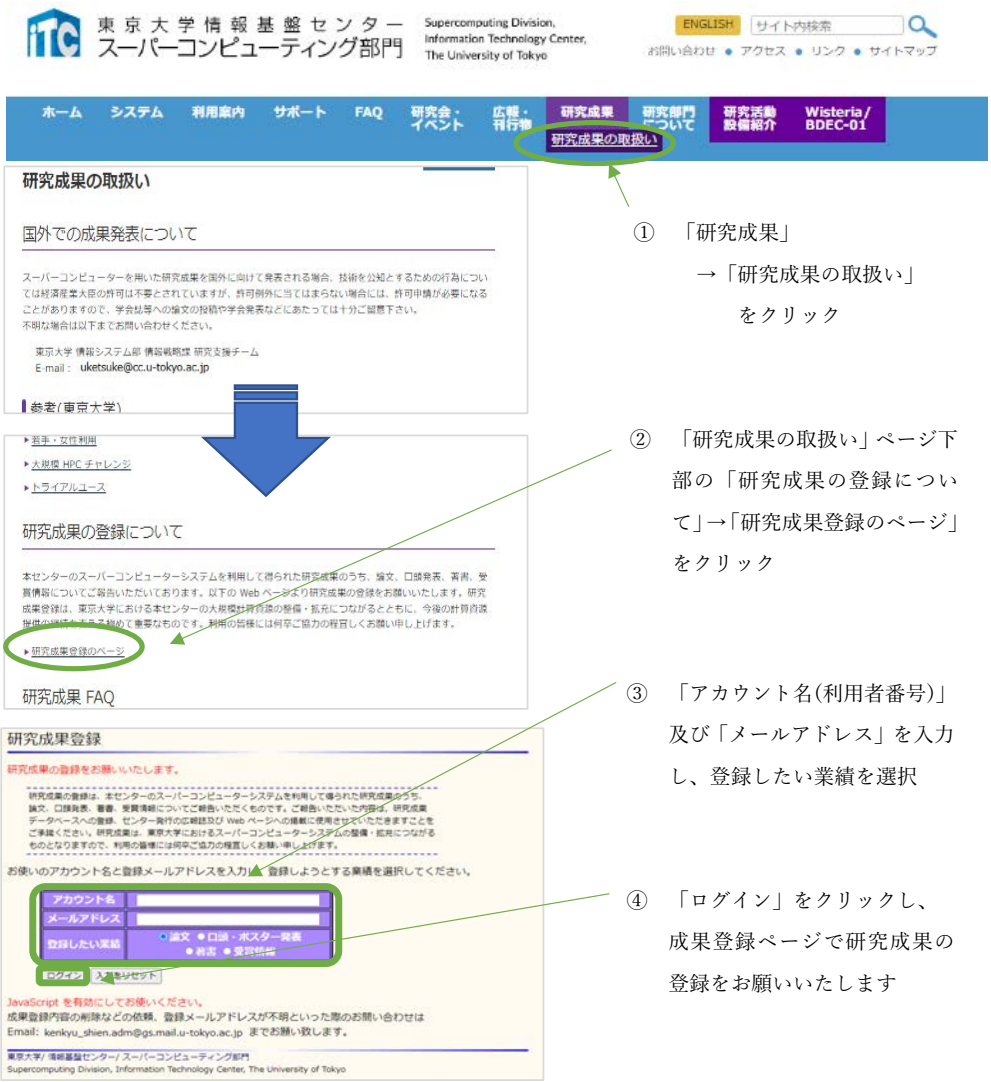
[1]「大規模 HPC チャレンジ」
https://www.cc.u-tokyo.ac.jp/guide/hpc/

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。



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

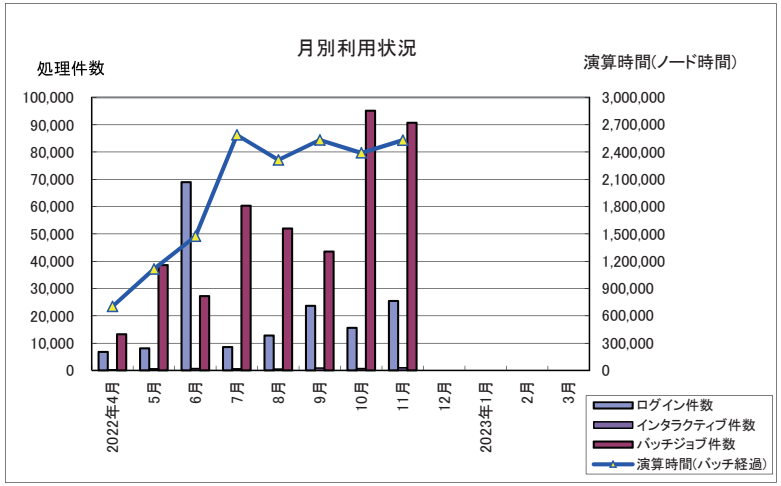
④ 「ログイン」をクリックし、成果登録ページで研究成果の登録をお願いいたします

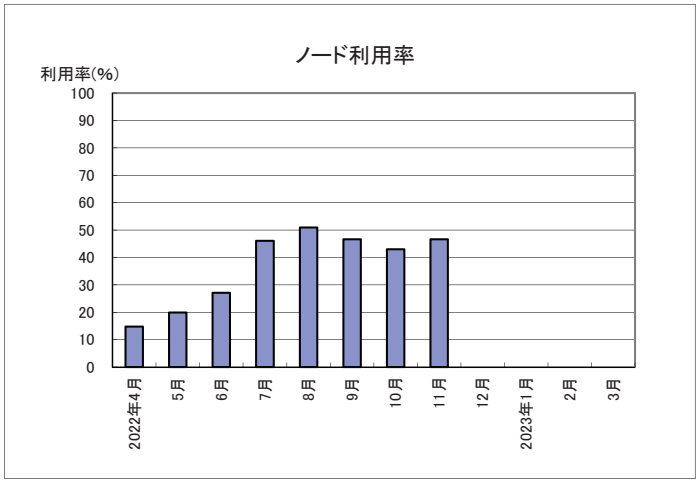
10・11月のジョブ統計

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

年月	登録者数	実利用者数	処理件数				接続時間［時間］	ファイル使用量［GiB］		ログイン（実CPU）	演算時間［ノード時間］（経過時間）			平均ノード利用数（ノード）	ノード利用率（%）
			ログイン	プリポスト	インタラクティブジョブ	バッチジョブ		/home	/lustre		プリポスト	インタラクティブジョブ	バッチジョブ		
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
8月	1,777	473	12,780	232	536	51,990	30,848	1,757	2,652,316	4,662.02	504	291	2,312,530	3,906.6	50.9
9月	1,869	451	23,670	276	920	43,593	46,290	1,905	3,123,150	8,952.28	689	757	2,531,647	3,581.7	46.6
10月	1,979	603	15,652	581	707	95,094	87,929	1,947	3,365,263	7,017.55	1,251	453	2,389,834	3,299.9	43.0
11月	1,941	585	25,443	455	975	90,678	80,522	2,154	3,515,919	13,344.25	1,038	603	2,530,095	3,579.2	46.6
2021年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			196,517	2,874	6,342	531,327	576,672			72,230	6,670	2,750	19,154,197		

・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11月分は合計に含まない
・ノード利用数： インタラクティブおよびバッチジョブの経過時間を1ノードが100%動作したと仮定した場合の利用ノード数。
計算式＝1ヶ月のインタラクティブおよびバッチジョブ経過時間合計÷1ヶ月の稼動時間
・ノード利用率： サービスノードに対する利用比率。 計算式＝ノード利用数÷サービスノード数×100



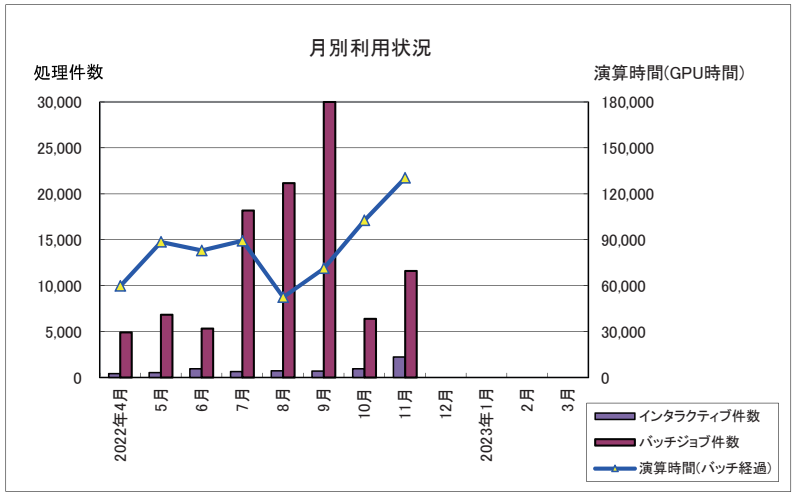


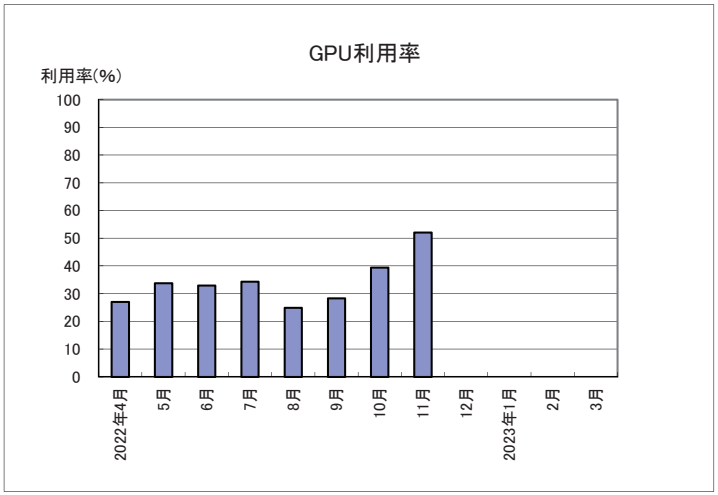
2. Wisteria/BDEC-01スーパーコンピュータシステム（Aquarius）ジョブ処理状況 （RedHat Enterprise Linux 8）

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
8月	740	21,165	651	52,512	89.8	24.9
9月	711	29,980	633	71,306	101.7	28.3
10月	965	6,389	865	102,722	141.7	39.4
11月	2,224	11,601	1,878	130,383	187.1	52.0
2021年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	10,251	133,763	9,160	1,090,216		

・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11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ヶ月の稼動時間
・GPU利用率： サービスGPUに対する利用比率。 計算式＝GPU利用数÷サービスGPU数×100



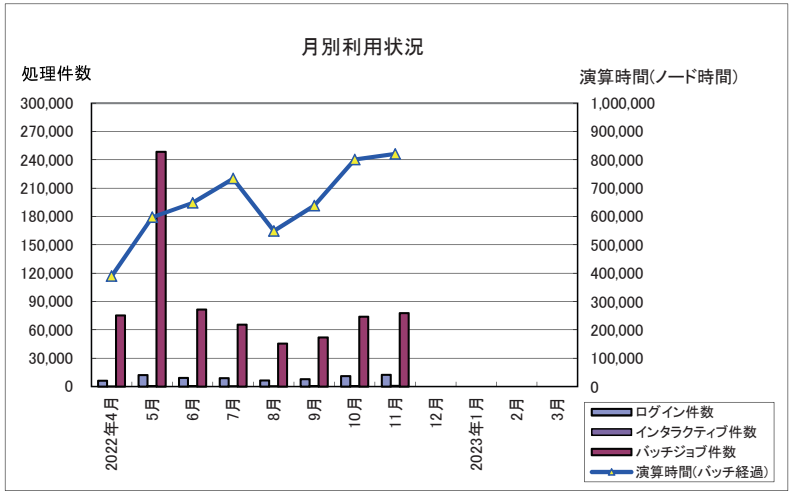


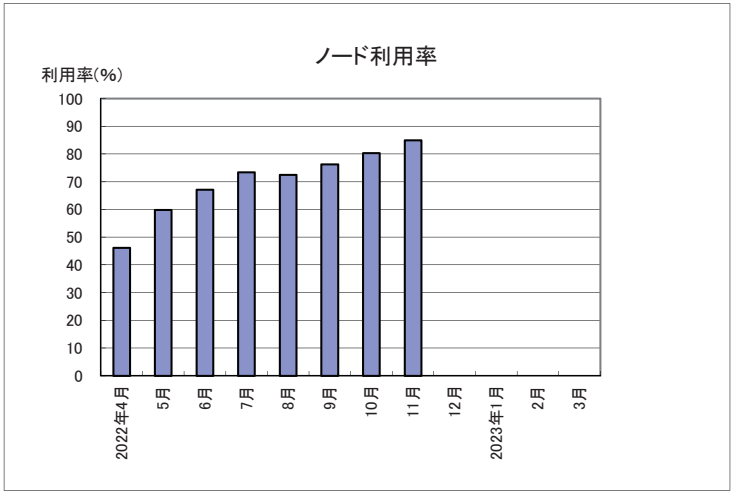
3. Oakbridge-CX スーパーコンピュータシステムジョブ処理状況（Red Hat Enterprise Linux 7、CentOS 7）

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
8月	1,257	321	6,430	10	618	45,434	26,764	1,581	1,726,576	1,838.84	27	425	549,014	992.0	72.5
9月	1,272	341	7,722	0	801	51,870	39,136	1,708	1,792,729	1,968.39	0	562	638,117	1,042.9	76.2
10月	1,296	385	11,115	0	755	74,026	54,840	1,765	1,947,947	11,911.11	0	424	800,362	1,098.9	80.3
11月	1,345	390	12,505	0	1,064	77,586	49,303	1,933	2,141,452	2,616.03	0	582	820,444	1,161.4	84.9
2021年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			108,215	40	7,895	996,205	501,839			49,512	35	4,091	7,844,591		

・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11月分は合計に含まない

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





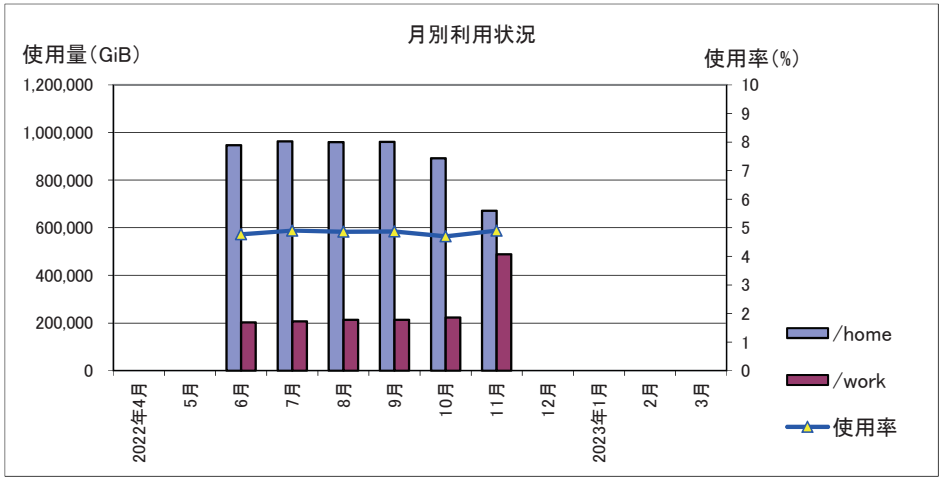
4. Ipomoea-01大規模共通ストレージシステム使用状況

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	2,056	80	345	4,118	179	947,117	203,168	4.8	23,657,187.6
7月	2,117	45	152	4,257	19	962,711	207,333	4.9	23,657,187.6
8月	2,166	30	120	338	10	959,300	213,839	4.9	23,657,187.6
9月	2,241	36	140	451	262	960,684	213,876	4.9	23,657,187.6
10月	2,332	46	155	946	95	891,698	223,457	4.7	23,657,187.6
11月	2,403	58	194	617	63	671,496	489,011	4.9	23,657,187.6
合計			1,106	10,727	628				

・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： 実効容量にに対する使用比率。計算式=ファイル使用量÷実効容量×100



SC22 参加報告

大林由尚，住元真司

東京大学情報基盤センター

1. SC22 について

東京大学情報基盤センターは 2022 年 11 月 13 日から 18 日までの間、米国テキサス州ダラスで開催された SC22(The International Conference for High Performance Computing, Networking, Storage, and Analysis)に参加し、研究展示を行った。本稿では、SC22 の開催概要と展示会場で行った研究展示の概要について報告する。

SC22 は Kay Bailey Hutchison Convention Center Dallas と Omni Hotel(Ball Room)で開催され、参加者は 11830 名、展示参加は 361 機関であった。

会場の Omni Hotel とその後方にあるコンベンションセンター

SC22 のプログラムは ACM A.M. Turing Award Lecture, Awards, Birds of a Feather, Early Career, HPC Accelerates Plenary, Invited Talks, Opening Session, Panels, Papers, Posters, Tutorial, Workshop と並行して多彩な構成となっているために全容を把握するのが困難である。昨年の SC21 より始まった録画を見ることにより並行して行われたプログラムを見ることができるようになったのは幸いなことである。
本稿では各種ランキングと Award について報告する。

各種ランキングについて

SC22 で発表される各種ランキングは ISC と同じで Top500, Green500, HPCG, Graph500 がある。

➢ Top500

Top500 は HPL(High Performance Linpack)の性能を競うベンチマークである。SC22 の Rank 1 は ISC22 と変わらず、US の Oak Ridge National Laboratory の Frontier システムで 1.1ExaFLOPS

であった。Rank 2 も変わらず理研-CCS の富岳で 442.0PFLOPS であった。東京大学柏 II キャンパスに設置されている産総研の ABCI は 22.21PFLOPS で Rank 22、同じく東京大学情報基盤センターの Wisteria/BDEC-01(Odyssey)は 22.12PFLOPS で Rank 23 であった。

➢ Green500

Green500 は HPL を実行した時の電力対性能 FLOPS/Watts を競うベンチマークであり TOP500 にランクインしているシステムの中で競われる。SC22 における Rank 1 は US の Flatiron Institute の Henri システムであり、NVIDIA H100 GPU を用いて 65.091GFLOPS/Watts であった。Rank 2 は ISC22 時の Rank 1 の US Oak Ridge National Laboratory の Frontier TDS システムであり、AMD Instinct MI250X を用いて 62.684 GFLOPS/Watts であった。日本の Preferred Networks の MN-3 は独自のアクセラレータを搭載して Rank 9 の 40.901 GFLOPS/Watts であった。東京大学情報基盤センターの Wisteria/BDEC-01(Aquarius)は Rank 28 の 24.058 GLOPS/Watts であった。

➢ HPCG

HPCG (High Performance Conjugate Gradient) は共役勾配法の処理速度を競うベンチマークであり HPL とは異なり疎行列を扱うベンチマークである。SC22 における Rank 1 は理研-CCS の富岳システムであり 16.0 PFLOPS の性能であった。Rank 2 は US の Oak Ridge National Laboratory の Frontier システムで 14.1 PFLOPS であった。東京大学情報基盤センターの Wisteria/BDEC-01(Odyssey)は Rank 12 の 0.82 PFLOPS であった。

➢ Graph500

Graph500 ベンチマークは大規模グラフ解析を競うベンチマークである。SC22 における Rank 1 は理研-CCS の富岳システムであり 103.0 TTEPS であった。Rank 2 は中国の Pengcheng Cloudbrain-II システムであり 25.2 TTEPS であった。東京大学情報基盤センターの Wisteria/BDEC-01(Odyssey)は Rank 4 の 16.1 TTEPS であった。

Award について

例年の SC ではいくつかの Award が発表される。今回は例年の Award の他に ACM A.M.Turing Award 受賞者であるテネシー大学の Jack Dongarra が SC22 Opening において ACM A.M.Turing Award 受賞記念講演を行った。https://sc22.supercomputing.org/tag/acm-a-m-turing-award/

10 分程度の紹介インタビューを含むビデオ紹介の後、講演が行われた。この受賞記念講演”A Not So Simple Matter of Software”は、Youtube で公開されている。彼の生きてきた歴史がそのままＨＰＣの歴史になっている。https://www.youtube.com/watch?v=cSOOTc2w5Dg

Opening が開かれた Omni Hotel の Ballroom

以下、主要な SC22 の Award は以下のとおりである。理研-CCS の松岡先生、佐藤先生が受賞された。

- ACM/IEEE-CS Ken Kennedy Award: Ian Foster, University of Chicago and Argonne National Laboratory
- ACM/IEEE-CS George Michael Memorial HPC Fellowship: Marcin Copik, ETH Zürich Masado Alexander Ishii, University of Utah Shelby Lockhart, University of Illinois, Urbana-Champaign (Honorable Mention)
- IEEE-CS Sidney Fernbach Memorial Award: Torsten Hoefler, ETH Zürich
- IEEE-CS Seymour Cray Computer Engineering Award: Satoshi Matsuoka, Riken Center for Computational Science (R-CCS)
- ACM Gordon Bell Prize: Pushing the Frontier in the Design of Laser-Based Electron Accelerators with Groundbreaking Mesh-Refined Particle-In-Cell Simulations on Exascale-Class Supercomputers Luca Fedeli, France Boillod-Cerneaux, Thomas Clark, Neil Zaïm, and Henri Vincenti, (CEA); Axel Huebl, Kevin Gott, Remi Lehe, Andrew Myers, Weiqun Zhang, and Jean-Luc Vay, (Lawrence Berkeley National Laboratory); Conrad Hillairet, (Arm); Stephan Jaure, (ATOS); Adrien Leblanc, (Laboratoire d'Optique Appliquée, ENSTA Paris); Christelle Piechurski, (GENCI); Mitsuhisa Sato, (RIKEN)
- ACM Gordon Bell Special Prize for High Performance Computing-Based COVID-19 Research GenSLMs: Genome-Scale Language Models Reveal SARS-CoV-2 Evolutionary Dynamics, Maxim Zvyagin, Alexander Brace, Kyle Hippe, Yuntian Deng, Bin Zhang, Cindy Orozco Bohorquez, Austin Clyde, Bharat Kale, Danilo Perez-Rivera, Heng Ma, Carla M. Mann, Michael Irvin, J. Gregory Pauloski, Logan Ward, Valerie Hayot, Murali Emani, Sam Foreman, Zhen Xie, Diangen Lin, Maulik Shukla, Weili Nie, Josh Romero, Christian Dallago, Arash Vahdat, Chaowei Xiao, Thomas Gibbs, Ian Foster,

James J. Davis, Michael E. Papka, Thomas Brettin, Rick Stevens, Anima Anandkumar, Venkatram Vishwanath, Arvind Ramanathan (University of Chicago, Argonne National Laboratory, NVIDIA, Cerebras Systems, Northern Illinois University, Arizona State University)

2. 東京大学情報基盤センターによる展示

東京大学情報基盤センターは「ITC/JCAHPC, The University of Tokyo」名義によるブース展示を行った。オンライン開催となったSC20、渡航の制約が大きかったSC21と異なり、今回のブース展示ではコロナ禍以前と同様の規模で、情報基盤センターの提供する計算資源や研究事例を紹介するポスターの展示やムービーの上映、パンフレット・グッズの配布などを行い、期間全体で延べ200名以上の来場者があった。また、14日の夕刻に開催したブースでのプレゼンテーションでは、以下の講演が行われた。

講演題目	講演者
Innovative Scientific Computing by Integration of (Simulation+Data+Learning)	Kengo Nakajima (Information Technology Center, The University of Tokyo)
Graph Neural Networks for Real-World Applications	Toyotaro Suzumura (Information Technology Center, The University of Tokyo)
Parallel Eigensolvers Based on Unconstrained Minimization	Osni Marques (Lawrence Berkeley National Laboratory (LBNL), USA)
Scalable finite-element earthquake simulation methods enhanced with data-driven methods and stochastic analysis	Kohei Fujita (Earthquake Research Institute, The University of Tokyo)

展示ポスター、ブース講演のライブ中継の録画などは、情報基盤センタースパコン部門のホームページにも掲載している。 https://www.cc.u-tokyo.ac.jp/en/public/sc22.php

ブースでの講演の様子

情報基盤センターの参加メンバーで集合写真

次回の SC23 は 2023 年 11 月 12 日から 17 日まで米国コロラド州デンバーのコロラドコンベンションセンターで開催される予定である。

実機単段遠心ブロワで生じるサージ点近傍非定常失速現象の大規模圧縮性 LES 解析

塚 本 和 寛

日立製作所 研究開発グループ

１．はじめに

遠心ブロワをはじめとした遠心式のターボ機械は，石油化学プラントや水処理施設，家電品などで気体の圧縮，送風工程において広く用いられている。古くからの課題ではあるが，顧客や製品使用環境下における運用ニーズに柔軟に応えるために，遠心ブロワの作動範囲拡大が求められている。

作動範囲拡大のためには，設計点の低流量側の運転限界点（サージ点）付近で生じる非定常現象の分析及び抑制が必要である。サージ点で生じるサージングは，ターボ機械の上流・下流の配管も含めた配管系全体の圧力変動現象であるが，その発生はターボ機械内で生じる非定常流動現象に起因するものと考えられている。本研究で対象とする遠心ブロワといった遠心式のターボ機械は，サージ点近傍の低流量側運転点において，羽根車の下流に設けられたベーンレスディフューザで旋回失速と呼ばれる非定常現象が生じることが古くから知られている[1]。旋回失速をはじめとした非定常現象の分析及び理解が作動範囲拡大のためには重要な点である。

遠心式のターボ機械で生じる非定常現象の分析について，これまでにも多くの報告がなされており，それらの報告によって失速現象が生じている流れ場の定性的な理解が進んでいる[2][3]。しかし，非定常現象を対象に顧客ニーズに応じて寸法や風量，圧力が変化する製品設計で活用可能となる一般的な設計基準を確立するためには，現象の定量的な分析と理解が必要と考えている。

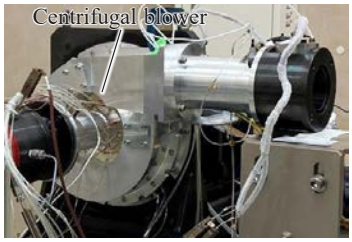
そこで本研究では，流れ場の最小渦スケールまで解像する LES（Large Eddy Simulation）に着目し，LES によって遠心ブロワ内で生じる非定常流れ場の定量的な分析手法確立を目的に，圧縮性流体解析手法を構築することとした。本報告では，LES を用いた遠心ブロワの解析手法確立に向けた最初のステップとして，2020 年度学際大規模情報基盤共同利用・共同研究拠点（JHPCN）萌芽型共同研究課題（課題名：実機単段遠心ブロワで生じるサージ点近傍非定常失速現象の大規模圧縮性 LES 解析，課題番号：EX20305）内において低解像度の解析格子を用いて解析を行った結果について説明する。

２．供試遠心ブロワ及び性能計測試験条件

供試ブロワの外観を第 1 図に示す。供試ブロワはオープン型の遠心羽根車，ベーンレスディフューザ，スクロールから構成される。羽根車の翼枚数はフルブレード 13 枚で，外径の周速マッハ数は 0.48 である。ディフューザ径比 D_4/D_2 は 2.1 で，羽根車出口との高さ比 b_3/b_2 は 1.0 の平行壁である。羽根車外径の周速度を代表速度，羽根車外径を代表長さにとった際の Re 数は 9.9×10^5 であった。

供試ブロワはオープンループ型の試験装置に設置され，ブロワ上流に設けられた調節弁の開閉によって吸込流量を変化させた。また，吸込部に設けられたノズルで流量を計測した。羽根車で

昇圧された流れはディフューザ，スクロールを経て大気開放した。ブロワは電動機により駆動し，インバータで回転数を制御した。また，ブロワと電動機の間にトルク計を設置し，軸動力を計測した。ブロワ性能を計測するために，吸込・吐出部において全圧，全温を計測した。また，ディフューザ性能を計測するために，羽根車出口（径比 1.1）及びディフューザ出口（径比 2.1）で壁面静圧を計測した。なお本ブロワは，サージ点近傍の低流量域においてセル数 2 のディフューザ旋回失速が発生することがわかっている。



第 1 図：供試遠心ブロワ外観

３．数値解析手法及び解析条件

本研究では，ターボ機械の非定常非圧縮 LES 解析において実績[4]を有する FrontFlow/blue(FFB)で圧縮性の解析を行うために，エネルギ方程式及び状態方程式を新たに追加して解析を行った。基礎方程式を以下に示す。

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i}(\rho u_i) = 0 \tag{1}$$

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho u_i) + \frac{\partial}{\partial x_j}(\rho u_i u_j) = \frac{\partial}{\partial x_j}\left\{-\delta_{ij} p + (\mu + \mu_{SGS})\left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i}\right)\right\} \tag{2}$$

$$\frac{\partial}{\partial t}\left(\rho \frac{1}{2} u_i^2 + \rho \frac{1}{\gamma - 1} RT\right) + \frac{\partial}{\partial x_j}\left(\rho u_j \frac{1}{2} u_i^2 + \rho u_j \frac{1}{\gamma - 1} RT\right)$$
$$= \frac{\partial}{\partial x_j}\left\{-\delta_{ij} u_i p + (\mu + \mu_{SGS}) u_i \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i}\right)\right\} + \frac{\partial}{\partial x_j}\left\{(\lambda + \lambda_{SGS})\frac{\partial T}{\partial x_j}\right\} \tag{3}$$

$$p = \rho RT \tag{4}$$

ここで流速成分を u とし，ρ, p, T はグリッドスケールの状態量（密度，圧力，温度）を表す．μ, λ はそれぞれ粘性係数および熱伝導率を表し，添字 SGS がついている変数はそれらのサブグリッドスケールの乱れによる貢献分を表す。流体は理想気体を仮定しており，R および γ はそれぞれガス定数および比熱比を表し，これらの値は一定であるものとした。

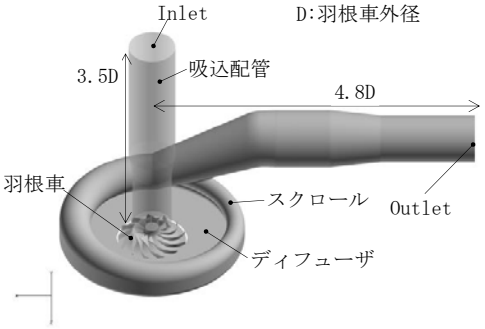
離散化手法は従来の FFB での解析同様に，時間，空間において 2 次精度の有限要素法により離散化を行った。圧力解法には Fractional Step 法を適用し，運動方程式は Crank-Nicolson 法に

より陰的に時間積分を行った。乱流モデルにはDynamic Smagorinskyモデルを用いた。

第2図に解析領域の外観を示す。解析領域は吸込配管，羽根車，ディフューザ - スクロールの3領域で構成した。計算領域の格子数を表1に示す。壁面近傍の格子解像度は，無次元コード方向 $r^+ = 80$，無次元壁垂直方向 $y^+ = 8$，無次元スパン方向 $z^+ = 40$ とした。この解像度は，本格子を各方向に対して分割数を4倍にすると，壁近傍の縦渦まで解像できる値である。本報告では上述の解像度での解析結果について説明するが，現在格子数を増やした解析を別途実施中である。

本解析では，入口境界条件として質量流量及び温度を付与し，出口境界で静圧を付与した。入口境界で付与する質量流量の値を振ることで，遠心ブロワの性能曲線を取得した。

計算機にはOakbridge-CXを用いた。領域分割にはMetisを用い，OpenMPIによる並列計算を行った。このとき羽根車1回転の計算に対して10ノード使用時で約4時間を要した。また，1流量点に対し羽根車50回転分の解析を行った。



第2図：解析領域

表1：解析格子数

	要素数
吸込配管	11,664,380
羽根車	13,584,714
ディフューザ＋スクロール	34,668,566
合計	59,917,660

4．数値解析結果

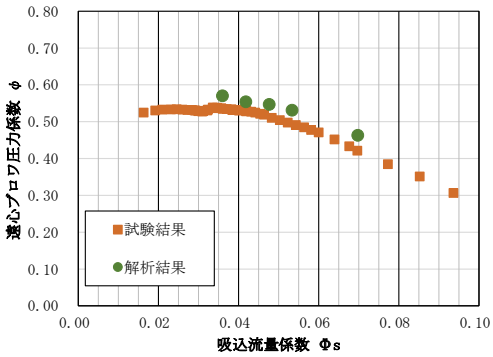
第3図に供試ブロワの性能予測結果を示す。図中横軸は吸込流量係数 ϕ_s，縦軸は圧力係数 ψ を示している。図より解析結果は遠心ブロワ性能を全体的に過大評価している傾向があり，$\phi_s = 0.07$ において10.0%の過大評価であった。この要因として，格子解像度の不足に伴う損失の過大評価が考えられ，壁近傍の縦渦を解像する解析を行うことで，誤差は低減するものと考えている。

第4図にベーンレスディフューザでの無次元静圧上昇についての結果を示す。図中横軸は無次元流量係数，縦軸は静圧上昇を羽根車動圧で無次元化した無次元静圧上昇を示している。図より供試ブロワは，$\phi_s = 0.044$ において性能曲線の勾配が右上がりに変化していることがわかる。

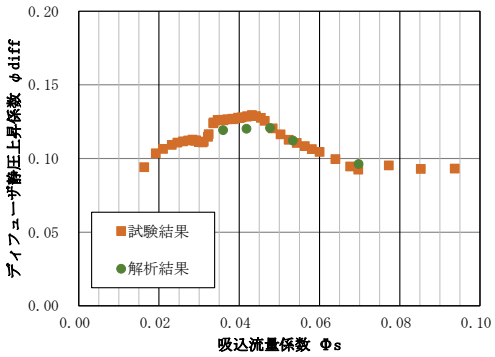
数値解析の結果は定性的にはこの傾向を捉えていることがわかる。このことから，解析はベーンレスディフューザ内で勾配が右上がりに変化する要因となる流れ場を定性的には捉えられているものと考えられる。

第 5 図及び第 6 図に解析で得られた ϕ_s = 0.036 でのベーンレスディフューザ中間断面における径方向流速分布（径方向外向きを正），静圧分布を示す。径方向流速分布は羽根車周速で無次元化した値を表示している。また静圧分布は，羽根車動圧で無次元化した値を表示している。図より，ディフューザ内には 2 か所の径方向流速が大きい領域が存在し，時間変化に応じて周方向に旋回していることがわかる。この流れ場は，先述した供試ブロワで確認されたセル数 2 の旋回失速であるものと考えられる。静圧分布の結果と比較すると，径方向流速の大きい領域で圧力が低くなっている領域（低圧域）が見られることがわかる。この傾向は，Ohuchida らの報告[5]による実験結果の傾向と一致することから，旋回失速の流れ場を解析で捉えることができているものと考えられる。

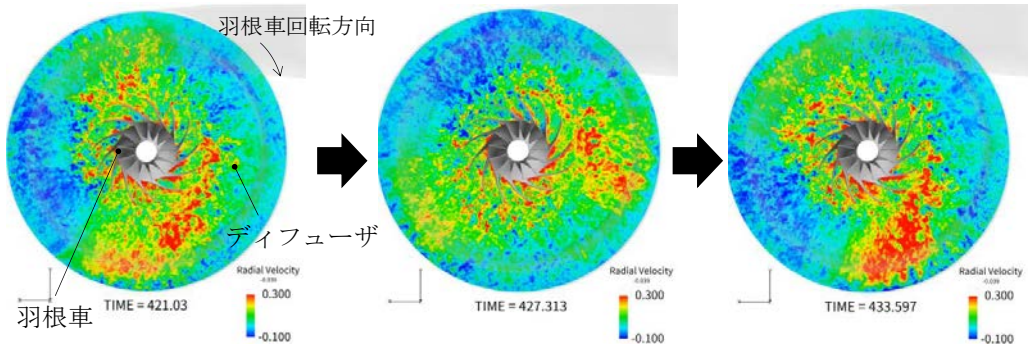
本解析は非定常現象の詳細分析に向けた最初のステップとして，低解像度の解析格子を用いて行った。今後より細かい解像度を有する格子を用いた解析を行うことで，解析精度の精度検証及び現象の定量的な分析を行う予定である。



第 3 図：遠心ブロワ圧力係数の比較

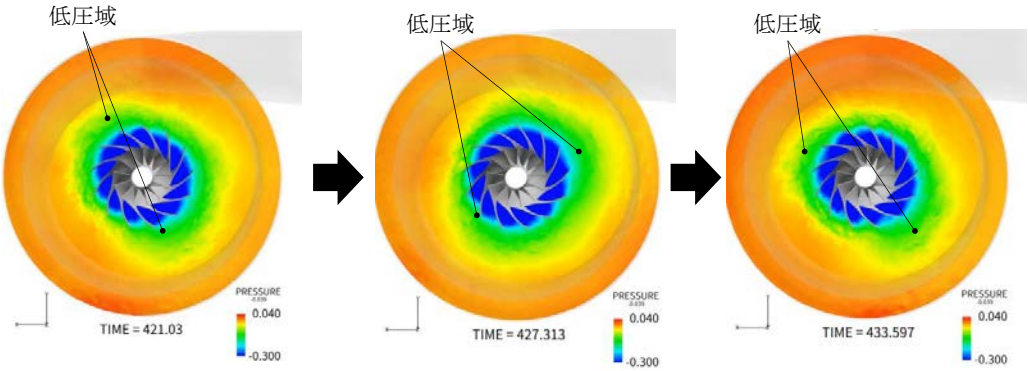


第 4 図：ディフューザ静圧上昇係数の比較



a) T* = 421.0　　b) T* = 427.3(2回転後)　　c) T* = 433.6(4回転後)

第 5 図：ディフューザ中間断面における径方向流速分布の時間変化（ϕs = 0.036）



a) T* = 421.0　　b) T* = 427.3(2回転後)　　c) T* = 433.6(4回転後)

第6図：ディフューザ中間断面における静圧分布の時間変化（ϕs = 0.036）

5．まとめ

流れ場の最小渦スケールまで解像する LES によって遠心ブロワ内で生じる非定常流れ場の定量的な分析手法確立を目的に，LES 圧縮性流体解析手法を構築した。低解像度の解析格子を用いた解析では，遠心ブロワ性能を過大評価するが，低流量域においてベーンレスディフューザ内で生じる非定常現象である旋回失速の様な流れ場の傾向を定性的に捉えられることがわかった。

今後は解析精度の向上及び現象の定量的な分析に向け，格子解像度をあげた解析を行う予定である。

参　考　文　献

[1] 妹尾 泰利，木下 凱文，遠心羽根なしディフューザに生じる失速と旋回失速，ターボ機械，1978，6 巻，4 号，p. 217-223

[2] Yamada, K., Furukawa, M., Arai, H., Kanzaki, D., Evolution of Reverse Flow in a Transonic Centrifugal Compressor at Near-Surge, Proc. ASME. GT2017, Volume 2C: Turbomachinery, V02CT44A014, June 26-30, 2017

[3] Fujisawa, N., Agari, Y., Yamao, Y., Ohta, Y., Rotating Mechanism of Diffuser Stall in a Centrifugal Compressor With Vaneless Diffuser, Proc. ASME. GT2021, Volume 2D: Turbomachinery, V02DT39A010, June 7-11, 2021

[4] Pacot, O., Kato, C., Guo, Y., Yamade, Y. and Avellan, F., Large eddy simulation of the rotating stall in a pump-turbine operated in pumping mode at a part-load condition, Journal of Fluids Engineering, Vol. 138, No.11 (2017), pp.111102-1-111102-11.

[5] Ohuchida, S., PIV for Turbomachinery Applications, Proceedings of 14th International Symposium on Transport Phenomena and Dynamics of Rotating Machinery (2012) p. 1 126

DCB ライブラリを使用した効果的な負荷分散の検討

河合 直聡

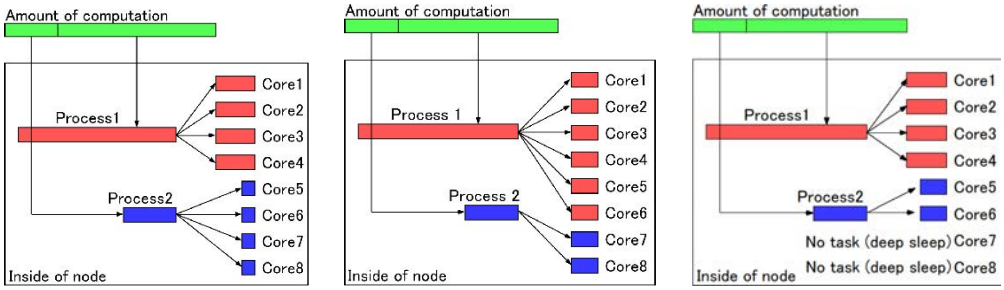
東京大学情報基盤センター

１．はじめに

現在のスーパーコンピュータはマルチコアのノードを複数台高速なネットワークで接続した構成をとっている。このようなシステムを使用してアプリケーションを高速化する場合、ノード内とノード間の並列化を個別の実装で対応し(OpenMP＋MPI)、ノード内およびノード間の負荷を均衡にする必要がある。多くのアプリケーションではこの多層な並列化構造に対応した場合に、全てのレイヤーで負荷を完全に均一にするのは困難である。例えば、主計算開始前の演算量の見積が困難な場合($\mathcal{H}$行列[1])や、計算過程で空間的な演算量が変化する場合などが挙げられる。加えて、メニーコア CPU が広くスーパーコンピュータで利用されるようになり、ノード内の負荷分散がさらに困難となっている。このような演算量の不均衡は、スーパーコンピュータ使用時に期待通りの性能が得られないばかりか、待機コアの増加による無駄な電力消費にもつながる。

２．DCB ライブラリ

本研究では、プロセス毎の演算量に併せて割り付けるコア数を変更し、コア単位での演算量を均一化する Dynamic Core Binding(DCB)ライブラリ[1]を提案している。図 1(a)に示すように、一般的な OpenMP＋MPI の並列化で、プロセス毎の演算量が不均一な場合は、プロセス毎に割り付けられるコア数が均等なため、コアレベルでの演算量も不均一となるが、DCB ライブラリを使用した場合はプロセス毎に割り付けるコア数を変更し、コアレベルでの演算量を均一化する。DCB ライブラリでは全てのコアを使用し、プロセス毎の演算量に併せて割り付ける“計算時間削減モード”(図 1(b))と、演算量の多いプロセスに併せて演算量の少ないプロセスに割り付けるコア数を削減する“消費電力削減モード”(図 1(c))を用意している。計算時間削減モードでは、演算量の多いプロセスに多くのコアが割り付けられるため、アプリケーション全体の計算時間短縮に繋がる。消費電力削減モードでは、ノード内の使用するコア数が減るため、割り付けられなかったコアはディープスリープ[2]状態に移行し、アプリケーション全体の計算時間をそのままに、消費電力削減が期待できる。



(a)一般的な環境　(b)DCB(計算時間削減モード)　(c)DCB(消費電力削減モード)

図 1：DCB を使用した場合のプロセスに対するコア割り付けの一例

[1] Bebendorf Mario. “Hierarchical matrices”. Springer Berlin Heidelberg, 2008.
[2] https://www.intel.co.jp/content/www/jp/ja/support/articles/000006619/processors/intel-core-processors.html

３．評価結果

図２にDCBの有無による効果を示す。図２はWisteria BDEC/01 Odysseyを最大24,336プロセス(ノード辺り４プロセス、6,084ノード)使用した結果を示している。評価ではLattice $\mathcal{H}$行列[2]とベクトルの積にDCBライブラリを適用し、その行列ベクトル積を50回実施した。図１に示すように、DCB(計算時間短縮モード)の利用によって256プロセス(64ノード)使用時で36.2%、24,336プロセス使用時で8.5%の計算時間短縮を達成した。Oakbridge-CX(OBCX)に関しても同様の傾向を示しており、16プロセス(ノード辺り４プロセス、４ノード)使用時で40.6%、5,184プロセス(1,296ノード)使用時で4.5%の計算時間短縮を達成した。大規模並列環境でDCBの効果が小さくなるのは、ノード間の負荷の不均衡によるものであり、この点に関しては今後の研究で解消予定である。消費電力削減モードでは、Odyssey 上では消費電力削減の効果が確認できず(消費電力が増加する結果となった)、OBCXでは5,184プロセスで46.7%の消費電力削減を達成した。Odysseyで消費電力削減の効果が得られなかったのは、デフォルトでretentionモード(CPUのディープスリープを有効にする機能)が無効になっているためであり、後の評価で49.1%(4,096プロセス、1,024ノード)の消費電力削減を達成している。

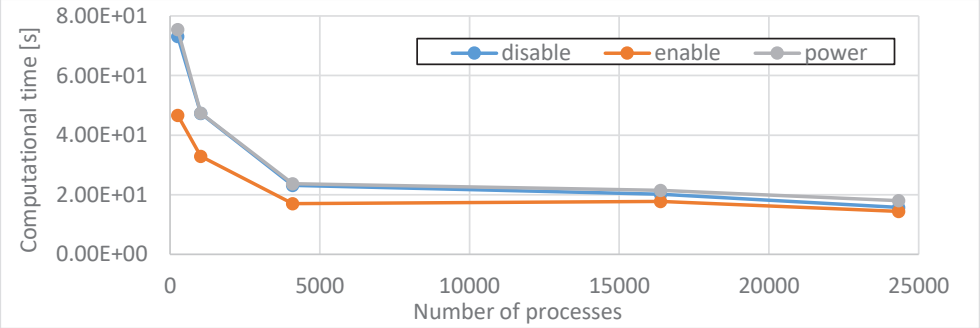


図２: DCBの評価結果(Wisteria-BDEC/01 Odyssey)

３．まとめ

本研究では、OpenMP+MPI で並列化された均一な負荷分散が困難なアプリケーションの動的負荷分散を実現するDynamic Core Binding(DCB)ライブラリの開発、評価を行っている。DCBライブラリはプロセス毎の演算量に併せてプロセスに割り当てるコア数を不均衡にし、コアレベルでの演算量均一化を可能とする。大規模 HPC チャレンジにて大規模並列環境で評価した結果、Wisteria-BDEC/01 Odysseyの6,084ノード使用時で8.5%の、Oakbridge-CX(OBCX)の1,296ノード使用時で4.5%の計算時間短縮を達成し、Odysseyの1,024ノードで49.1%の、OBCXの1,296ノードで46.7%の消費電力削減を達成した。

謝辞

今回、OBCXおよびWisteria-BDEC/01 Odyssey両システムの大規模HPCチャレンジを利用させていただいた。複数の大規模並列環境を利用させていただいたことで、様々な知見を得ることができ、より有効なライブラリ開発につなげることができた。ここに、本チャレンジ実施で様々な対応を頂いた皆様に感謝の意を表す。

参　考　文　献

[1] 河合,伊田,中島 ”不均一なコア割付による動的負荷分散手法の検討” 応用数理学会,2020年

[2] A. Ida, ″Lattice H-Matrices on Distributed-Memory Systems,″ 2018 IEEE International Parallel and Distributed Processing Symposium (IPDPS), 2018, pp. 389-398

教育利用報告：工学院大学３年次講義「並列･分散システム」

藤　井　昭　宏

工学院大学情報学部

教育利用制度により，Oakbridge-CX システムを工学院大学の情報学部 3 年生の講義で利用させていただいた。今年度で本制度を利用させていただけて，9 年目となった。2022 年度の講義と Oakbridge-CX システムを利用した効果について報告する。

昨年度はコロナ禍の影響により遠隔の講義となったが,今年度は対面で講義演習を行なえた。昨年度同様に OpenMP や MPI のプログラムの作成，デバッグは Google Colaboratory 上にて C 言語で行わせるようにした。この環境では実行結果がブラウザ上で確認でき，こちらが作成したコードも参照可能となるため，スムーズに学習させることができた。そのためスパコンの利用は，デバッグが終わったあとに，ジョブを投入して計測をするようにさせた。

授業内容は 例年通り 1.CPU と並列性，2.並列システム，3.分散メモリと共有メモリでのプログラム，4. Oakbridge-CX での演習とした。1，2 が主に並列システムの知識に関するもので，3，4 が並列システム上でのプログラムに関する講義と演習としている。最終課題は昨年度と同様に，オイラー法による重力についての多体問題の逐次コードを渡し，それの OpenMP，MPI を用いた並列化とした。

成績については，期末のプログラミングを伴うレポート課題と，対面で設定した期末試験により評価した。今年度の履修人数は 42 人であり，実際に単位を取得したのは 41 人だった。また講義の日程と簡単な内容のリストは表１のようになっている。本講義は並列計算の導入として位置づけており，はじめに基礎知識を講義し，最後の４回の講義時間(表１の 4-1～4-4)のみ Oakbridge-CX を利用してプログラム演習を行った。上に述べたようなレポート課題もだしており，授業時間外にも各自に自習させ，今年度の前期末である，7 月末まで授業用アカウントを利用させて頂いた。

工学院大学では，卒業研究を含め，研究用に Oakbridge-CX を含む東京大学のスーパーコンピュータを利用できるようにトークンを購入している。今年度も過去のこの授業を受け，スパコンを使い卒論を進めている学生や学会発表を行う学生もいる。学部 3 年生のうちから本制度の支援を受け，スパコンの利用に関して認証手続きからジョブ投入の方法，さらに並列システムの基礎知識と合わせて簡単な並列プログラムの実装まで経験させておけたことは，この後で学生が卒業研究を進める上でも有用なものになったと考えている。

表１：講義日程，内容

日付	時間	内容
4 月 8 日	15:50-17:20	1-1　CPU の仕組み，OS の機能 プロセス，キャッシュ，仮想メモリ空間
4 月 15 日	15:50-17:20	1-2 並列性の分類 {命令，スレッド，プロセス}レベル並列性 2-1 並列システム 共有メモリや分散メモリでの相互結合網
4 月 22 日	15:50-17:20	キャッシュの一貫性，計算と通信のコスト， αβモデル 2-2 共有・分散メモリ型の並列処理 SPMD，共有･分散メモリ，性能計測， アムダールの法則
5 月 6 日	15:50-17:20	3-1 分散メモリ型の並列処理 MPI 基礎
5 月 13 日	15:50-17:20	集団通信関数 プログラム例：数値積分，内積コード
5 月 20 日	15:50-17:20	3-2 Google Colaboratory を利用した MPI のプログラム演習
5 月 27 日	15:50-17:20	3-3 マルチスレッドと排他制御 mutex_lock，デッドロックとその検知
6 月 10 日	15:50-17:20	3-4 OpenMP の書き方と例題 False sharing 実行例等
6 月 17 日	15:50-17:20	4-1 並列プログラムの実践 1 計算環境，認証，実行手順， 数値積分による円周率の計算の OMP 化
6 月 24 日	15:50-17:20	4-2 並列プログラムの実践 2 数値積分による円周率の計算の MPI 化
7 月 1 日	15:50-17:20	4-3 並列プログラムの実践 3 逐次の多体問題のプログラムの OMP 化にむけて (依存関係のない for 文の説明)
7 月 8 日	15:50-17:20	4-4 並列プログラムの実践 4 逐次の多体問題のプログラムの MPI 化にむけて (データを全プロセスでコピーして持ち，自分の担当データのみ更新し，allgather で共有するモデル)
7 月 15 日	15:50-17:20	総復習
7 月 22 日	15:50-17:20	授業内 期末テスト

Wisteria 利用講義「並列数値計算」

須田礼仁

東京大学情報理工学系研究科

１．はじめに

「並列数値計算」は情報理工学系研究科の大学院講義である。隔年で実施しており，2020 年に続く開講となる。英語名は“Parallel Numerical Computations”としている。講義はスライド・説明とも英語で実施しているため，留学生が多く参加している。今年度は情報理工学系研究科，工学系研究科のほか，理学系研究科，数理科学研究科，総合文化研究科，新領域創成科学研究科，学際情報学府の学生を含め約 50 名が履修登録した。

2020 年からは新型コロナウイルス感染症 COVID-19 の影響を受けてきたが，2022 年も多少影響が残存した。増減を繰り返しながら感染は継続したので，この講義もほぼオンラインで実施することとした。

２．講義の概要

計算機の性能向上は並列性によって実現されている。今後まだコア数は伸びてゆくと思われるので，並列計算は誰にとっても重要な技術となってきている。膨大な計算量を必要とする近年の機械学習の隆盛もあって，GPU をアクセラレータとする計算機が広く使われるようになっている。さらに，FPGA の性能も向上し，解く問題によっては最新の CPU や GPU を凌駕する高い性能を達成しているところである。

このような背景のもと，本講義では並列計算の一般論と各論とを分離し，一般論として述べられる点はできるだけ一般的な論述をするように構成した。これにより一般論が統一的な視点で理解できるようにしたつもりである。ただし，一般論部分は話が抽象的になりがちで実感がわきにくくなっているかもしれない。今回は後述の確認テストを新たに導入したことで，一定の効果があったと感じたところであるが，今後とも継続的な改善を要するところである。一方，各論においては，特に大規模並列を念頭において MPI，OpenMP，CUDA の 3 種類のプログラミングモデルを取り上げている。AVX など CPU の SIMD 機構については十分な説明をする時間がなかった。分散メモリの MPI を最初に詳しめに説明して，その後 OpenMP と CUDA をやや軽めに説明している。レポート課題は MPI のみである。近年注目を浴びているタスク型の並列性，PGAS などのメモリモデル，FPGA といった新しいプロセッサについては説明できていない。同じ情報理工学系研究科において，共有メモリ並列処理でタスク型のモデルもきちんと取り上げている講義があり，多くの学生はそちらも受講してくれているようである。しかし，情報理工学系研究科の中で FPGA による高性能計算を教えている講義はないかもしれない。FPGA は数値計算で必要とする倍精度浮動小数点数は得意としていない点がネックであるが，注目されているアーキテクチャであるので，実際に触って演習することもできる講義があればよいのだが。

３．講義の内容

令和 4 年度には 12 回の講義を実施した。ほとんどは zoom によるオンライン講義で，配信の

録画を復習用に学内限定で提供した。この講義での録画の活用状況は確認していないが，一般的には復習ができることが便利らしい[1]。

以下に各回の内容の概要を示す。

第１回：イントロダクション

この講義で取り上げる並列計算とは何かを，類似性のある並行計算，分散計算と対比する形で定義した。特に，この講義では再現性があり予測可能な計算を取り上げ，動的な並列性は最小限とする。続いて，ハードウェア並列性の基礎概念として，複数演算器とパイプライン，SIMD と MIMD，分散メモリと共有メモリ，UMA と NUMA，およびそれらのハイブリッド，均一性・不均一性などを導入した。また，この講義では所要時間を主なメトリックとすること（スループットではない），そこから高速化率，並列化効率，理想高速化率，スーパーリニアなどの概念を導入した。また，強スケーリングと弱スケーリング，アムダール則とグスタフソン則といった相対性能の基本法則を導入した。加えて，絶対性能として flops およびピーク性能を説明した。また，所要時間測定時の注意点についても説明した。

第２回：並列性と依存性

並列性とは依存性のないこと，よって並列性の解析は依存性の解析に他ならないことからスタートした。続いて，データ依存と制御依存，RAW/WAR/WAW 依存などの依存性の類型を示した。配列，リスト，木などのデータ構造へのアクセスの並列性，ステンシル計算と超平面法・ループスキュー，木によるリダクション，カスケードによるスキャン，３項漸化式の並列性，パイプラインなどの依存性と並列性を事例として挙げた。一方で計算順序が変えられる場合にはリオーダリングにより並列性が変わること，その表現としてカラーリングが便利であることも示した。また配列への間接アクセスがある場合を取り上げ，その並列性の抽出方法には多数ありうることを示した。

第３回：局所性

並列計算は高性能を目指すものであるが，性能という観点では局所性は避けて通れない重要事項である。まずは分散メモリでも共有メモリでも局所性が低いと高い性能が期待できないことを説明した。局所性には計算強度と粒度の２つの側面がある。まず計算強度や B/F 値について説明し，行列積を例として，プログラムの書き方次第で計算強度が変わることを示した。また行列ベクトル積のような計算強度の弱い計算もあることも注意した。リダクション，FFT，ステンシル計算の計算強度について概観し，領域分割と Owner-computes-rule が局所性の観点から利点があることを説明した。次に粒度について説明し，パイプライン計算を例に並列性と粒度のトレードオフがあることを示した。最後に単純な通信性能モデルを導入し，計算強度と粒度が性能にどのように影響を与えるかを解析できることを示した。

第４回：スケジューリング理論

この講義では離散最適化問題に分類される古典的なスケジューリング理論についても紹介を

[1] タイパ（time performance?）なる言葉が 2022 年の流行語らしい。HPC はコンピュータ上でのタイパを追究することが，学問として確立したものと言えよう。

している。HPC 分野とはやや用語が異なるため，まずその点を注意した。そのうえで，タスクとスケジューリングの基本概念，不均一プロセッサの類別，メイクスパン，ガント図，グラハム記法などを導入した。P||Cmax に対する LPT の最悪性能比， P|prec|Cmax に対するリストスケジューリングの最悪性能比，P|intree, pj=1|Cmax に最適解を与えるレベルスケジューリング，P∞|prec|Cmax に最適解を与えるクラスタリングスケジューリングを説明した。また，クリティカルパス，タスク挿入，タスク重複などの概念を紹介した。不均一プロセッサやオンラインスケジューリングについては既知の性能オーダーを示すにとどめた。そのかわり，Divisible Load Theory およびループスケジューリングについて紹介した。

ここまでが一般論であり，このあと各論に入る。

第５回：MPI 入門

メッセージパッシング，local view，SPMD を説明したのち，MPI の基礎の一対一通信を説明した。Eager と Rendezvous プロトコル，ブロッキング・非ブロッキングの違い，メッセージの到着順序などについて注意をしたうえで，リダクションとステンシル計算を題材に実際の簡単な MPI 並列プログラムを説明した。

第６回：集団通信

MPI の集団通信について，基本的な集団通信と，それを実現するためのいくつかのアルゴリズムを説明した。プロセッサ数とデータサイズにより，異なるアルゴリズムが最適になりうることを確認した。また Broadcast と Reduction などの双対性，Scatter と AllGather で Broadcast が実現できるなどの集団通信の組み合わせについて解説した。

第７回：分散データ構造

まず，分散メモリ並列計算におけるデータ構造のあり方の一般論を導入した。続いて，最も単純な１次元ベクトルについて，ブロック，サイクリック，ブロックサイクリック，可変長ブロック，要素ごと指定の５種類の分散方法を示した。続いて２次元の場合には列１次元分散，行１次元分散，２次元分散の選択があることを説明し，LU 分解を例題として利害得失を考察した。またステンシル計算における袖領域を説明し，遅延隠蔽，piggy-backing を説明した。さらに，疎行列ベクトル積の事例，および動的負荷分散（この文脈では動的データ分散）の概念を紹介した。

第８回：OpenMP 入門

OpenMP の入門として，global view であること，また自動並列化ではなく正しさはプログラマの責任であることを注意した。基礎的な構文を説明したのち，OpenMP で陥りがちな誤りとして，共有・私有変数の区別，レース条件，弱い一貫性とメモリ同期の必要性を説明した。あわせて，reduction 節や atomic 節も紹介した。

第９回：OpenMP 高性能プログラミング

OpenMP の性能低下要因とその回避・軽減策を紹介した。排他制御のための構文である atomic，critical および lock 関数の違い，ループスケジューリングの選択肢，アフィニティに関する注意などを行った。また，キャッシュ周りの性能向上手法として，パディング，タイリング，ル

ープ交換，ループ結合，Arrays of Structures/Structures of Arrays などの手法を紹介した。また MPI + OpenMP ハイブリッド並列化の必要性について説明した。

第 10 回：CUDA 入門

アクセラレータという概念，GPU のハードウェア特性を導入した。続いて，CUDA の基本的な書き方の説明をした。ホストとデバイス，ブロックやスレッド，メモリ階層や同期など，しっかり理解しなければならないことが多いため，なかなか大変である。

第 11 回：GPU における高性能化

GPU において高い性能を達成するために重要な概念を説明した。GPU のハードウェアと CUDA の並列性階層の対応を説明し，SM ごとに走るブロックの数を決定する式を示した。またスレッドを実行する機構を説明し，並列性により遅延隠蔽が可能となることを説明した。分岐命令の削減，coalesced メモリアクセスの性能，CPU-GPU 間データ転送時間について注意を促した。

CUDA の更新は早く，講義のたびに新しい GPU と CUDA の仕様を確認している。今回はやや古くなってしまったが，ほぼ Pascal アーキテクチャに準拠して説明をした。

第 12 回：Wisteria ハンズオン

この回のみ対面とした。事前に配布しておいた Wisteria の使い方の資料についての不明点への回答や，アカウント登録・ログインや操作のトラブルへの対応について，必要な学生に指導を行った。

４．課題

講義の最初の３回で，UNIX コマンドと C/Fortran プログラミングのごく初歩的な問題を 3 分で解いてもらった。「カレントディレクトリを表示するコマンドは何か」「.o で終わるファイルを全部消すコマンドを示せ」とか，「vi か emacs で，現在カーソルがある１行を消すコマンドは何か」とか，「整数変数 n と m を宣言せよ」，「Hello, World! を表示するプログラムを書け」というレベルである。4 年前は平均点が半分程度であったが，前回と今回は 7 割ぐらいまでできていた。オンライン環境であったので，その場で調べた学生もいるかもしれない。今回は，ITC-LMS 上で 3 分の制限時間で回答をしてもらったが，自動採点には向かないので，得点は ITC-LMS のアンケート機能による自己申告としている（成績には反映されない）。

また，ほぼ毎回の授業の後，その授業での内容の肝のところを確認する主旨で，「Check your understanding」と称する簡単な復習問題を解いてもらった。こちらも ITC-LMS のテスト機能を用いており，全問選択式にして自動採点で確認できるように設定した。内容はごく簡単なものであるが，話を聞くだけになりがちのオンライン授業に，多少のアクティブな要素を入れられるので，一定の効果があったと感じている。特に，2 年前，前半の一般論の内容を後半に入ると忘れてしまっている場合が散見されたのだが，今回はそのような例はほとんどなかった。

さらに，全部で 3 回のレポート課題を課した。最初の２つの課題は各自が使える計算機により行い，これらの課題を提出した学生には Wisteria のアカウントを配布して，第 3 の課題を行わせた。

第 1 回：CPU モデルと計時方法の確認

各自のプロセッサのモデルを確認し，ピーク性能を計算させた。また，計時方法を適当に選ばせ，その計測精度を測定により求めさせた。

第 2 回：Flops への挑戦

「どんな計算でもよいので，できるだけ高い flops 値を出すプログラムを書け」という課題を出した。また，これに加えて，十分長いベクトルのコピー，内積，和の性能を測定させ，それらからメモリスループットを測らせた。

例年は，問題の主旨（高い性能はどのような場合に出るか）がわからない学生もちらほら見受けたが，今年はそのような学生はほとんどいなかった。これも「Check your understanding」の効果かもしれないと思っている。

第 3 回：MPI プログラミング

密行列計算，偏微分方程式の数値解法，もしくは個人的に興味のある計算のいずれかを選んで，MPI でプログラミングをして Wisteria で実行し，弱スケーリングと強スケーリングでの性能を報告させた。前回に引き続き，Cholesky 分解と熱伝導方程式については逐次プログラムをダウンロードできるようにして，それを修正して課題として提出してよいこととした。

以前は，並列性ばかりに注意が行って，局所性や通信コストを忘れる学生もいたが，今回はそのような学生はほとんどなかった。

なお，今回は GPU の話ができた（2 年前はコロナの影響でできなかった）ので GPU を使ってもらってもよかったのだが，Wisteria が CPU 並列部分と GPU 並列部分にすぱっと分かれているところで，少し残念な思いがした。

５．おわりに

全体として講義はスムーズに進み，Wisteria のアカウント発行も問題なくできた。例年はアカウント発行の申請が遅れてしまう学生が数名出るのだが，今年度は 1 名だけで，事前に準備していただいた予備アカウントで足りた。オンライン授業に学生が慣れてきたということなのかもしれない。スーパーコンピュータを用いた講義という貴重な機会を提供していただき，いつものようにもろもろご迷惑をおかけしましたが適時にご対応いただきました，情報基盤センターの皆様方に感謝を申し上げます。

大学院工学系研究科電気系工学専攻修士実験

MPI による並列プログラミング入門

下川辺隆史・塙敏博

東京大学情報基盤センター

本稿は 2022 年 S1 タームに実施された大学院工学系研究科電気系工学専攻修士実験「MPI による並列プログラミング入門 」について紹介する。修士実験は同専攻の修士課程（1 年）の学生が 2 人または 3 人が 1 組となって，1 ターム（約 2 ヶ月）のうちに，各教員が提供する課題に基づき実習を行うもので，原則として受講者の専門とは異なる分野の課題を選択することとなっている。

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

本年度は 2 組，5 名の受講者があり，新型コロナウイルス感染症拡大防止のため，Zoom を用いてオンラインで実施した。下記内容について座学及び演習を行なった：

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

学生実験でのスパコンの活用：分子回転状態の計算

長 谷 川 宗 良

東京大学大学院総合文化研究科/先進科学研究機構

１．はじめに

近年，適切に制御された高強度の光を気相分子へ照射することによって，分子の回転状態を極めて高い状態へ励起させることができるようになってきた[1]。Superrotor と呼ばれるこのような回転高励起状態は，新奇な物性が発現すると期待され，例えば，Cl_2 分子の回転の遠心力による化学結合の切断[2]，O_2 分子の巨視的な磁化の誘起[3]，キラル分子（酸化プロピレン）の選択的な回転運動の制御[4]などが実験的に示され，また PH_3 分子の回転運動に由来するキラリティの誘起が理論的に提案されている[5]。また，このような回転高励起状態では，振動と回転の相互作用が顕著になり回転エネルギー準位は摂動展開ではうまく表現できないと考えられ，回転エネルギー準位構造の解明も求められている。回転エネルギー準位を計算によって求めるには，回転ハミルトニアンを適切な基底関数を用いて行列として表現し，対角化することによってその固有値として回転エネルギーを得ることができる。もしくは，数値的に微分方程式（シュレディンガー方程式）を解くことによって回転エネルギーを得ることができる。

教養学部統合自然科学科では４年生の夏学期に，学生が各研究室において最先端の研究を行うという科目（物質科学実験 III）がある。先に述べた分子回転に対する問題意識のもと，私の研究室へ配属された学生に二原子分子の回転エネルギー準位を数値的に計算する課題を行ってもらった。その際にスパコンを利用させていただいたため，本稿はその報告としてまとめたものである。

２．計算方法

計算においては振動と回転の両自由度を考慮した以下のハミルトニアンを用いた。

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{d^2}{dr^2} + V(r) + \frac{\hat{J}^2}{2\mu r^2} \qquad (1)$$

ここで，μは二原子分子の換算質量，r は核間距離，$V(r)$は分子振動のポテンシャルエネルギー，$\hat{J}^2$は回転角運動量の二乗の演算子を表す。ハミルトニアンの第一項は，それぞれ分子振動の運動エネルギーを表し，第三項は分子回転によるエネルギーであり，回転運動に伴う遠心力ポテンシャルとみなすことができる。第三項の分母にある核間距離 r が，分子の平衡核間距離 r_e に等しいとすると，いわゆる剛体回転近似となり回転エネルギーは，$B_e J(J+1)$という規則的なエネルギー準位構造を示す。ここで，B_e は分子構造により決まる回転定数，$J = 0, 1, 2, \ldots$は回転量子数である。しかし現実の分子は剛体でなく，また第三項は回転の励起に伴い寄与が増加するため剛体回転近似は破綻する。

今回の計算では，個々の J に対する式(1)のハミルトニアンを用いたシュレディンガー方程式

$$\hat{H}\psi = E\psi \qquad (2)$$

を，（位置座標の固有関数を基底関数に選んで）空間的にグリッドを切り，微分演算子は各グリッドにおける波動関数の差分で近似し数値的に解いた。ここで，ψは振動・回転の波動関数，E は

求めるべき振動・回転エネルギーである。回転量子数 J を変化させ，対応するハミルトニアン$\hat{H}$に対して振動エネルギーを求めることによって，振動・回転エネルギーを得た。

３．スパコンの活用と計算結果

今回の講義（実験）では，時間のある時に（コード作成から始めて）計算を進めてもらい，毎週木曜日に報告会を実施していた。４月に始まり６月中には，市販の PC で計算を進められるまでになった。市販の PC を用いて計算を行なったところ，$J = 100$ を超えたあたりから計算時間が数時間以上かかることが分かり夏学期の講義期間中の計算終了が見込めなくなった。このため，情報基盤センターのスーパーコンピューターWisteria-O システムを利用することとした。その結果，数日間かかった計算時間が数分程度で済み回転状態のエネルギーの計算を夏学期中に終わらせる見通しがたった。

具体的な計算では N_2 分子をモデルにしたモースポテンシャルを用い，$J = 100$ までの振動・回転エネルギー準位の計算を行なった。モースポテンシャルは，$V(r) = D\left\{1 - e^{-\alpha(r-r_e)}\right\}^2$によって与えられる関数であり，任意の J に対して振動・回転のエネルギーを v, J によって表すことができる[6]。このため，数値計算の結果の妥当性を評価できる。ここで，D は結合解離エネルギー，αは分子振動の振動数に関係する定数，v は振動量子数である。そこで，スパコンを用いた数値計算から得られた回転エネルギーを，各振動状態 v に対する厳密解，$E_J = BJ(J+1) - DJ^2(J+1)^2$を用いて当てはめたところ数値計算と解析的な式の間に良い一致が得られた。スパコンを用いて二原子分子の振動・回転エネルギーを高速に計算し，計算結果の妥当性を確認したところで夏学期の講義期間が終了となった。

４．まとめと展望

今回のスパコンの利用に当たっては，市販の PC では計算時間の関係から実施困難であった回転高励起状態におけるエネルギー準位の計算を行うということで，夏学期途中に申請し使用させていただいた。そして，すぐに計算結果を得ることができ分子のエネルギー準位を知るという教育目的を達成できた。今回は一ヶ月程度しか使用しなかったが，解析的な式が得られない三原子分子の回転高励起状態のエネルギー準位の計算を行うなど，最先端の研究を教育現場で実施することが可能になると思われる。学生がもっとスパコンを利用して活用してくれると良いと思う。

最後に今回の講義に参加し計算を実施してくれた大橋祐哉さんとスパコンを利用させていただいた情報基盤センターのみなさまに感謝申し上げます。

参　考　文　献

[1] J. Karczmarek, J. Wright, P. Corkum, and M. Ivanov, *Phys. Rev. Lett.*, **82**, 3420 (1999).

[2] D.M. Villeneuve, S.A. Aseyev, P. Dietrich, M. Spanner, M.Yu. Ivanov, and P.B. Corkum, *Phys. Rev. Lett.*, **85**, 542 (2000).

[3] A.A. Milner, A. Korobenko, and V. Milner, *Phys. Rev. Lett.*, **118**, 243201 (2017).

[4] A.A. Milner, J.A.M. Fordyce, I. MacPhail-Bartley, W. Wasserman, V. Milner, I. Tutunnikov, and I.Sh. Averbukh, *Phys. Rev. Lett.*, **122**, 223201 (2019).

[5] A. Owens, A. Yachmenev, S.N. Yurchenko, J. Küpper, *Phys. Rev. Lett.*, **121**, 193201 (2018).

[6] C.H. Townes and A.L. Schawlow, *Microwave Spectroscopy* (Dover, New York, 1975).

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	満足度※
第190回	2022年10月12日	「MPI上級編」[1] Wisteria/BDEC-01 (Odyssey,Aquarius) 塙 敏博	事前登録者		8	3.83
			参加者	大学・研究機関教職員	2	
				企業の方	3	
				学部学生	1	
				大学院生	0	
				その他	0	
				合計	6	
第191回	2022年10月14日	「異種システム間連成アプリケーション開発を学ぶ:WaitIO/MP講習会」[2] Wisteria/BDEC-01 (Odyssey,Aquarius) 住元 真司	事前登録者		6	3.50
			参加者	大学・研究機関教職員	2	
				企業の方	1	
				学部学生	0	
				大学院生	1	
				その他	0	
				合計	4	
第192回	2022年10月18日 25日 31日	「OpenMPによるマルチコア・メニィコア並列プログラミング入門(初級編(10月18日)・上級編(10月25日・31日))」[3] Wisteria/BDEC-01(Odyssey) 中島 研吾	事前登録者		4	4.05
			参加者	大学・研究機関教職員	1	
				企業の方	2	
				学部学生	0	
				大学院生	0	
				その他	0	
				合計	3	
第193回	2022年10月20日	「科学技術計算の効率化入門」[4] Oakbridge-CX 河合 直聡	事前登録者		5	4.00
			参加者	大学・研究機関教職員	2	
				企業の方	1	
				学部学生	0	
				大学院生	1	
				その他	0	
				合計	4	
第194回	2022年11月1日	「一日速習：有限要素法プログラミング徹底入門」[5] 中島 研吾	事前登録者		6	4.00
			参加者	大学・研究機関教職員	1	
				企業の方	0	
				学部学生	2	
				大学院生	0	
				その他	0	
				合計	3	
第195回	2022年11月2日	「OpenACCとMPIによるマルチGPUプログラミング入門」[6] Wisteria/BDEC-01(Aquarius) 星野 哲也	事前登録者		10	4.00
			参加者	大学・研究機関教職員	3	
				企業の方	3	
				学部学生	0	
				大学院生	0	
				その他	1	
				合計	7	

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

[1] https://www.cc.u-tokyo.ac.jp/events/lectures/190/

[2] https://www.cc.u-tokyo.ac.jp/events/lectures/191/

[3] https://www.cc.u-tokyo.ac.jp/events/lectures/192/

[4] https://www.cc.u-tokyo.ac.jp/events/lectures/193/

[5] https://www.cc.u-tokyo.ac.jp/events/lectures/194/

[6] https://www.cc.u-tokyo.ac.jp/events/lectures/195/

第 191 回お試しアカウント付き並列プログラミング演習「異種システム間連成アプリケーション開発を学ぶ:WaitIO/MP 講習会」開催報告

住元真司，荒川 隆
東京大学情報基盤センター

1. 講習会概要

本稿は、 2022 年 10 月 14 日（金）13：00 － 17：30 にオンライン会議システム Zoom を用いて開催された第 191 回お試しアカウント付き並列プログラミング演習「異種システム間連成アプリケーション開発を学ぶ:WaitIO/MP 講習会」開催報告である。

本講習会では， 今後のアプリケーション開発で重要になる異種システム間の連成アプリケーション開発について、Wisteria/BDEC-01 システムに新しく導入されたソフトウェアである h3-OpenSYS/WaitIO(WaitIO)と h3-Open-UTIL/MP(MP)を利用した異種システム間連成アプリケーション開発について学ぶことを目的に開催された。 連成計算の基本から WaitIO と MP を用いることにより Odyssey と Aquarius を用いてどのように異種システム間連成アプリケーションを開発することができるのかを中心に、WaitIO についてはファイルを用いた弱連成アプリケーション記述を MPI ライクな通信 API を用いて書き換える方法、MP については複数のアプリケーションの弱連成、特に Fortran/C で書かれた物理モデルと Python アプリケーションの連成を通じて、シミュレーションモデル同士の連成にとどまらない Wisteria/BDEC-01 の特性を生かしたプログラム連携について講習を行った。講習会の詳細については以下を参照されたい。
https://www.cc.u-tokyo.ac.jp/events/lectures/191/

講習会のプログラムは以下であり、初回の開催ということもあり比較的時間に余裕を持たせたものとしたが、連成アプリケーション実行に時間が予想以上にかかったため今後の改善が必要である。

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

参加者は 4 名であり、アンケートでは内容的に高度であるとの意見を頂いた。連成アプリケーション自体が広く知られていないため、連成アプリケーション自体の認知を広めていく必要があ

ると考えている。講習についても身近な例を含めた簡単な事例を組み込むなどの工夫が必要であると考えている。

2. h3-Open-SYS/WaitIO

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

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

3. h3-Open-UTIL/MP

h3-Open-UTIL/MP の講習に際しては、理論編として連成計算の概要と h3-Open-UTIL/MP の連成方法、具体的な利用手順について説明し、次いで実践編として事前に準備したサンプルプログラムを受講者にコンパイル・実行していただいた。サンプルプログラムは同機種内連成、異機種間連成、異機種間の Python アプリケーション連成の３種類を用意し、マイナートラブルはあったものの時間内に３通りの連成計算が実行できた。今回はサンプルを実行するというレベルの講習だったが、今後は API をモデルに組み込む等、受講者の必要性に即したより具体的で高度な内容の講習についても検討してゆきたい。

異機種間連成はシミュレーションノード群とデータ・学習ノード群で構成される Wisteria-BDEC01 のハードウェア構成に基づいたきわめて先進的な機能であり、今のところその機能が広く認知されているとは言いがたい。一方、機械学習の応用拡大やデータドリブンサイエンスの進展に伴い異機種間連成の潜在的なニーズは増加してゆくであろう。今後も講習会等を通じて h3-Open-UTIL/MP の周知・普及に務めたい。

参考文献

[1] Arakawa T., Yashiro H., Nakajima K., Development of a coupler h3-Open-UTIL/MP, ACM Proceedings of the International Conference on High Performance Computing in Asia-Pacific Region (HPC Asia 2022), 2022

[2] Sumimoto S. et al., A System-Wide Communication to Couple Multiple MPI Programs for Heterogeneous Computing, Proceedings of the 23rd International Conference on Parallel and Distributed Computing, Applications and Technologies (PDCAT ‘22), 2022 (Best Paper Award)

第 192 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・メニィ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，2022 年 10 月 18・25・31 日にオンライン開催した第 192 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・メニィ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。

近年マイクロプロセッサのマルチコア・メニィコア化が進み，様々なプログラミングモデルが提案されている。OpenMP は指示行（ディレクティヴ）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ない。

本講習会では，「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習を実施し，理解を深めるため，Wisteria/BDEC-01（Odyssey）スーパーコンピューターシステムを利用した実習を実施する。

今回は 3 日間に渡って講習会を実施した。1 日目（10 月 18 日）は「データ依存性の無い」プログラムを対象とした「初級編」で，2 日目・3 日目（10 月 25・31 日）が「上級編」となる。

「初級編」は第 179・184 回[2]に実施したものと全く同じであるため，受講済みの方は 2 日目からの参加も可能である。また，まず OpenMP プログラミングの基礎を学びたいという場合には「初級編」のみの受講も可とした。「初級編」に参加されない場合は Wisteria/BDEC-01 へのログインは自力で行っていただいた。

申込者は 4 名であったが，うち 1 名は欠席，他の 3 名は「初級編」相当を受講済みであったため，結果的には初級編は実施されなかった。回収されたアンケートは 2 通であったが，全般的に好評であった。

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/192/）。

[1] https://www.cc.u-tokyo.ac.jp/events/lectures/192/
[2] https://www.cc.u-tokyo.ac.jp/events/lectures/184/

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）

東京大学情報基盤センター ・ スーパーコンピューティングニュース
Vol.25 No.1(2023.1)

目　　次

巻頭言
巻頭言（その1）：忘れられない2022年 …… 1
巻頭言（その2）：第二軍の大輸送 …… 3

センターから
サービス休止等のお知らせ …… 6
システム変更等のお知らせ …… 8
2023年度の利用負担金値上げとシステムの縮退運転について …… 9
2023年度の利用申込（新規・継続）について …… 10
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 …… 12
研究成果の登録のお願い …… 13
10月・11月のジョブ統計 …… 14

研究報告
SC22参加報告 …… 18

ユーザーから
実機単段遠心ブロワで生じるサージ点近傍非定常失速現象の
大規模圧縮性LES解析 …… 23
DCBライブラリを使用した効果的な負荷分散の検討 …… 28

教育活動報告
教育利用報告：工学院大学3年次講義「並列・分散システム」 …… 30
Wisteria利用講義「並列数値計算」 …… 32
大学院工学系研究科電気系工学専攻修士実験
MPIによる並列プログラミング入門 …… 37
学生実験でのスパコンの活用：分子回転状態の計算 …… 38
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 …… 40
第191回お試しアカウント付き並列プログラミング演習
「異種システム間連成アプリケーション開発を学ぶ:WaitIO/MP講習会」
開催報告 …… 41
第192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・メニィ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） …… 43

原稿募集 …… 44