

スーパーコンピューティング ニュース

Vol.25 No.2, 2023.3



スーパーコンピュータシステム 利用負担金表

Wisteria/BDEC-01 スーパーコンピュータシステム 利用負担金表(2023年4月1日)

区分	負担金額(税込)		ディスク容量	備考
	大学・公共機関等	企業		
一般申込 (基本セット) Wisteria-O/A	申込1セット当り 90,000円 (8,640トークン)		申込1セット当り /work 2TB 利用者当り /home 50GB	
公募制度による申込 Wisteria-O	申込1セット当り 90,000円 (8,640トークン)	申込1セット当り 108,000円 (8,640トークン)	申込1セット当り /work 2TB 利用者当り /home 50GB	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 270,000円 (25,920トークン)	申込1セット当り 324,000円 (25,920トークン)	申込1セット当り /work 6TB 利用者当り /home 50GB	
GPU専有申込 (公募制度の申込可) Wisteria-A	申込1GPUセット当り 364,500円 (25,920トークン)	申込1GPUセット当り 437,400円 (25,920トークン)	申込1GPUセット当り /work 6TB 利用者当り /home 50GB	利用期間 12か月の金額・トークン量 (利用期間は1ヶ月単位で設定可) 1, 2, 4GPUのみ申込可, 申込単位は下表参照
ノード固定 (公募制度の申込可) Wisteria-A	2,916,000円 (207,360トークン)	3,499,200円 (207,360トークン)	/work 48TB 利用者当り /home 50GB	利用期間 12か月の金額・トークン量 (利用期間は1ヶ月単位で設定可) 1セットのみ申込可
一般申込 (最小セット) Wisteria-O/A	7,500円 (720トークン)		/work 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	7,500円 (720トークン)	9,000円 (720トークン)		
ディスク容量追加	6,480円/(1TB*年)			1TB単位で申込可 (/workのみ)

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

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

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

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

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

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

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

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	364,500円	437,400円
2	51,840	729,000円	874,800円
4	103,680	1,458,000円	1,749,600円

Oakbridge-CX スーパーコンピュータシステム 利用負担金表(2023年4月1日)

区分	負担金額(税込)		ディスク容量	備考
	大学・公共機関等	企業		
一般申込	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)	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 225,000円 (8,640トークン)	申込1セット当り 270,000円 (8,640トークン)		
一般申込 (最小セット)	12,500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	12,500円 (720トークン)	15,000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 (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	○	○
shm ※4	1 ~ 8 (448)	24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 ※5	168	×	○
(interactive) ※6					
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 shared memory (/dev/shm)の利用上限値は、通常は各計算ノードに搭載される物理メモリー(192 GiB)の50%、shm キューを構成する計算ノードのみ90%

※5 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

※6 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																											
	<table border="1"> <thead> <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> </thead> <tbody> <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> </tbody> </table>	並列ファイルシステム ディスク容量	大学・公共機関等	企業	1 TB	7,200 円/年	8,640 円/年	[10 TB まで 1 TB 追加当たり]	[4,200 円/年]	[5,040 円/年]	10 TB	45,000 円/年	54,000 円/年	[100 TB まで 1 TB 追加当たり]	[3,000 円/年]	[3,600 円/年]	100 TB	315,000 円/年	378,000 円/年	[1,000 TB まで 1 TB 追加当たり]	[2,400 円/年]	[2,880 円/年]	1,000 TB	2,475,000 円/年	2,970,000 円/年	[以降 1 TB 追加当たり]	[2,100 円/年]	[2,520 円/年]
	並列ファイルシステム ディスク容量	大学・公共機関等	企業																									
	1 TB	7,200 円/年	8,640 円/年																									
	[10 TB まで 1 TB 追加当たり]	[4,200 円/年]	[5,040 円/年]																									
	10 TB	45,000 円/年	54,000 円/年																									
	[100 TB まで 1 TB 追加当たり]	[3,000 円/年]	[3,600 円/年]																									
	100 TB	315,000 円/年	378,000 円/年																									
	[1,000 TB まで 1 TB 追加当たり]	[2,400 円/年]	[2,880 円/年]																									
	1,000 TB	2,475,000 円/年	2,970,000 円/年																									
[以降 1 TB 追加当たり]	[2,100 円/年]	[2,520 円/年]																										
※ 東京大学情報基盤センターのスーパーコンピュータシステムのいずれかに利用者番号(教育利用、講習会を除く)を有する場合、利用者ごとにディスク容量 5 TB を無償で付与し、グループごとに登録されているシステム(トークン移行先のシステムを除く)で付与されているディスク容量の15%を無償で付与する。いずれも申込不要。																												
ディスク容量追加	申込時点のディスク容量に応じて、1 TB 追加当たりの負担金額は下表参照 (無償で付与されたディスク容量は「申込時点のディスク容量」に含まない)																											
	<table border="1"> <thead> <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> </thead> <tbody> <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> </tbody> </table>	申込時点のディスク容量	大学・公共機関等	企業	1 TB 未満	7,200 円/年	8,640 円/年	1 TB 以上 10 TB 未満	4,200 円/年	5,040 円/年	10 TB 以上 100 TB 未満	3,000 円/年	3,600 円/年	100 TB 以上 1,000 TB 未満	2,400 円/年	2,880 円/年	1,000 TB 以上	2,100 円/年	2,520 円/年									
	申込時点のディスク容量	大学・公共機関等	企業																									
	1 TB 未満	7,200 円/年	8,640 円/年																									
	1 TB 以上 10 TB 未満	4,200 円/年	5,040 円/年																									
	10 TB 以上 100 TB 未満	3,000 円/年	3,600 円/年																									
100 TB 以上 1,000 TB 未満	2,400 円/年	2,880 円/年																										
1,000 TB 以上	2,100 円/年	2,520 円/年																										

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

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

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

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

センターから

サービス休止等のお知らせ

2023 年 3 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
3月31日(金)～ 4月5日(水)	3/31 9:00～4/5 17:00 までサービス休止	年度末処理
4月21日(金)	9:00～22:00 までサービス休止	月末処理
5月26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
3月30日(木) 8:30～17:30 まで
4月20日(木) 8:30～17:30 まで
5月25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
3月31日(金)～ 4月5日(水)	3/31 9:00～4/5 17:00 までサービス休止	年度末処理
4月19日(水)	9:00～20:00 までサービス休止	月末処理
5月24日(水)	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
3月30日(木) 8:30～17:30 まで
4月18日(火) 8:30～17:30 まで
5月23日(火) 8:30～17:30 まで

- 上記期間中、Oakbridge-CX の debug, short, shm, 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5日(水)	3/31 9:00～4/5 17:00 までサービス休止	年度末処理

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

【注意事項】

- ・ サービス休止等の計画は原稿作成時の予定です。やむを得ずサービスを変更したり、休止したりする場合がありますので、最新の情報は login 時のメッセージ及びスーパーコンピューティング部門の Web ページの運用スケジュール (<https://www.cc.u-tokyo.ac.jp/supercomputer/schedule.php>) をご確認ください。
- ・ 平日の9:00～17:00以外、休日(土・日・祝日等)は、システム障害等でサービスが停止した場合、運転を継続できない場合があります。その場合は、その時間をもってサービスを中止しますのでご了承ください。
- * Wisteria/BDEC-01 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

(2023.1.1 - 2023.2.28 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

CP2K	v2023.1	(2023.1.27)
Parallel HDF5 (NVIDIA HPC SDK v22.7 で構築)	v1.12.2	(2023.1.27)
netCDF 並列版 (NVIDIA HPC SDK v22.7 で構築)	v4.9.0	(2023.1.27)
Parallel netCDF (NVIDIA HPC SDK v22.7 で構築)	v1.12.3	(2023.1.27)

➤ ログインノード

Parallel HDF5 (NVIDIA HPC SDK v22.7 で構築)	v1.12.2	(2023.1.27)
netCDF 並列版 (NVIDIA HPC SDK v22.7 で構築)	v4.9.0	(2023.1.27)
Parallel netCDF (NVIDIA HPC SDK v22.7 で構築)	v1.12.3	(2023.1.27)

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。

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

oneAPI	ver2022.3.1	(2023.2.9)
--------	-------------	------------

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 Oakbridge-CX サービス終了について (再掲)

Oakbridge-CX スーパーコンピュータシステムは 2023 年 9 月末をもってシステムを停止し、すべてのサービスを終了致します。詳細について決まり次第 Web ページ、メール、スーパーコンピューティングニュースにて順次ご連絡致します。

Oakbridge-CX サービス終了にあたっては以下の点にご注意ください。

- 2023 年度の Oakbridge-CX のご利用は、最長でも 6 ヶ月間のご利用となります。
- 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 をご検討ください。
- 一般利用にて Oakbridge-CX をご利用の方は「トークン移行」を行うことが可能です。Wisteria/BDEC-01 への移行をご検討の利用者様につきましては「トークン移行」も併せてご参考ください。「トークン移行」についての詳細は Web ページ (<https://www.cc.u>

tokyo.ac.jp/guide/application/transfer_token.php)をご参照ください。

- ファイルの移行先については、前述の Wisteria/BDEC-01 以外に「大規模共通ストレージシステム (Ipomoea-01)」もご利用頂けます。「Ipomoea-01」についての詳細は Web ページ(<https://www.cc.u-tokyo.ac.jp/supercomputer/ipomoea01/service/application.php>)をご参照ください。なお、ファイルの移行作業は利用者様ご自身で実施願います。

3.2 Intel コンパイラ脆弱性対応に伴うデフォルトバージョン変更について

各スーパーコンピュータシステムにインストールされている Intel コンパイラに脆弱性が存在することが判明したため 2 月 13 日 (月) にアップデートを行い、デフォルトコンパイラのバージョンを以下のとおり変更いたしました。デフォルトコンパイラのバージョンより前のバージョンでは、C/C++コンパイラ(icc、icpc、icx、icpx コマンド)が利用できません。Fortran コンパイラは利用可能です。

Oakbridge-CX:	ver2020.4.304	->	ver2022.3.1
Wisteria/BDEC-01:	ver2021.2.0	->	ver2023.0.0

デフォルトコンパイラのバージョン変更に伴い、以下の点にご注意ください。

- 変更前のバージョンで構築されていたアプリケーション・ライブラリは変更後のバージョンで再構築中のため、Intel コンパイラのバージョンを指定せずアプリケーション・ライブラリを使用している場合は、Environment Modules 設定に失敗いたします。変更前のバージョンを明示的に指定してアプリケーション・ライブラリをご使用ください。
- 変更後のバージョンによるアプリケーション・ライブラリの再構築には時間を要する見込みです。利用可能なアプリケーション・ライブラリは show_module コマンドでご確認ください。再構築完了後には変更前のバージョンで構築されたアプリケーション・ライブラリは利用不可となります。
- 変更後のバージョンで C/C++コンパイラ(icc/icpc)を使用した場合、以下のメッセージが出力されます。コンパイル・リンクには影響ございません。

icc: remark #10441: The Intel(R) C++ Compiler Classic (ICC) is deprecated and will be removed from product release in the second half of 2023.

The Intel(R) oneAPI DPC++/C++ Compiler (ICX) is the recommended compiler moving forward. Please transition to use this compiler.

Use '-diag-disable=10441' to disable this message.

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 (再掲)

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。

利用負担金の改正について

スーパーコンピューティング部門

2023年4月1日より、利用規程別表を改正します。本改正は、本誌関連記事「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(再掲)」にてご案内の、昨今の電気料金高騰に伴う利用負担金の値上げに相当するものとなります。主な改正点は以下のとおりです。

(1) スーパーコンピュータシステムにおける利用負担金の改正

Oakbridge-CX スーパーコンピュータシステムおよび Wisteria/BDEC-01 スーパーコンピュータシステムにおける 2023 年度利用負担金を、2022 年度比 1.5 倍といたします(利用規程別表 1、2、3、4)。ただし、ディスク追加料金及び Ipomoea-01 利用負担金は据え置きとします。

(2) トライアル利用負担金の改正

(1)について、トライアル利用負担金表に適用いたします(トライアル実施要領別表 1、2、3、4)。

最新情報は、本センターWeb ページに掲載の「利用申込書・記入要領」より、各システムおよびコースの利用負担金表をご覧ください。なお、利用規程につきましても、本センターWeb ページに掲載しておりますので併せてご覧ください。

- スーパーコンピュータシステム利用規程 (<https://www.cc.u-tokyo.ac.jp/guide/application/rules.php>)
- 利用申込書・記入要領 (<https://www.cc.u-tokyo.ac.jp/guide/application/guideline.php>)
- トライアル (<https://www.cc.u-tokyo.ac.jp/guide/trial/>)

別表1 (利用規程第13条関係)

大規模超並列スーパーコンピュータシステム利用負担金表 (Oakbridge-CX システム)

区 分		利 用 負 担 金 額	
大規模超並列スーパーコンピュータシステム	一般申込	基本セット (年額) 【大学・公共機関等 <u>150,000</u> 円, 企業 <u>180,000</u> 円】 (複数セット申込可, 利用期間は1ヶ月単位で設定可)	
		トークン量 8,640 トークン (1ノード, 24時間×360日相当, 1セット当たり)	
		トークン消費係数 1.00 ※ ※ 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	
		ディスク容量 並列ファイルシステム グループにつき 4TB (1セット当たり)	
	利用者番号登録数 制限なし		
	ノード固定 (要審査)	基本セット (年額) 【大学・公共機関等 <u>225,000</u> 円, 企業 <u>270,000</u> 円】 (1ノード1年分, 複数セット申込可, 利用期間は1ヶ月単位で設定可)	
		トークン量 8,640 トークン (1ノード, 24時間×360日相当, 1セット当たり)	
		トークン消費係数 1.00 ※ ※ 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	
		ディスク容量 並列ファイルシステム グループにつき 4TB (いずれも1セット当たり)	
		利用者番号登録数 制限なし	
	ディスク容量追加	並列ファイルシステム	1TBにつき 【6,480 円/年】
	トークン量追加	【大学・公共機関等 <u>12,500</u> 円, 企業 <u>15,000</u> 円】	720 トークン (1ノード, 24時間×30日相当)

(注)上記の利用負担金額は総額表示である。尚, 月数別利用負担金については別表2に定める。

最小セット利用負担金表 (Oakbridge-CX システム)

区 分		利 用 負 担 金 額	
大規模超並列システム	一般申込	最小セット 【大学・公共機関等 <u>12,500</u> 円】	
		トークン量 720 トークン (1ノード, 24時間×30日相当)	
		トークン消費係数 1.00 ※ ※ 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	
		ディスク容量 並列ファイルシステム グループにつき 4TB	
		利用期間 当該年度末まで	
		利用者番号登録数 制限なし	
	ディスク容量追加	並列ファイルシステム	1TBにつき 【6,480 円/年】
	トークン量追加	【大学・公共機関等 <u>12,500</u> 円】	720 トークン (1ノード, 24時間×30日相当)

備考

- 1 「大学・公共機関等」は第3条第1号, 第2号, 第3号, 第4号, 第6号および第8号に該当する者に適用する
- 2 「企業」は第3条第7号に該当する者に適用する
- 3 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
- 4 トークンはジョブ実行ごとにノード時間積(経過時間×ノード数)にトークン消費係数を乗じた値を消費するものとし, トークン残量が無くなった場合には, ジョブ実行は抑止される。但し, 計算リソースの状況によって非優先ジョブの実行を許可するものとする

- 5 計算資源を予約する申込においては、予約した期間およびノード数に相当するジョブ実行を行ったものとみなして、トークンを消費するものとする
- 6 トークンは利用期間内に限り有効とし、利用終了後にトークンの残量がある場合でも引継ぎおよび利用負担金の返還は行わない
- 7 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
- 8 トークンの一部を他のスーパーコンピュータシステムへ移行することができる。移行元と移行先でのトークン量の対応については別表5に定める
- 9 ノード固定は審査によって認められた利用期間およびノード数にて占有利用できるものとする。但し、トークン残量が無くなった時点で占有は解除される
- 10 ノード固定の申込に提供するリソースは、申込状況やシステムの稼働状況により変更する場合がある。変更となった場合の負担金額の適用については申し合わせによるものとする。
- 11 追加オプションは利用期間内に限り有効とする
- 12 追加オプションの負担金額は追加単価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
- 13 申込全体のトークン量が提供可能なトークン量の1.2倍を超えない場合に限り受け付けるものとする。但し、企業、若手・女性、大規模 HPC チャレンジ等の公募制度による利用、講義・講習会等の教育利用およびトライアルユース等の申込においてはこの限りでない

別表2 (利用規程第13条関係)

大規模超並列スーパーコンピュータシステム月数別利用負担金 (Oakbridge-CX システム)

一般申込 利用負担金表 (単位 円)

利用期間	一般申込 (1セットにつき)			
	大学・公共機関等	(トークン量)	企業	(トークン量)
12ヶ月	<u>150,000</u>	(8,640)	<u>180,000</u>	(8,640)
11ヶ月	<u>137,500</u>	(7,920)	<u>165,000</u>	(7,920)
10ヶ月	<u>125,000</u>	(7,200)	<u>150,000</u>	(7,200)
9ヶ月	<u>112,500</u>	(6,480)	<u>135,000</u>	(6,480)
8ヶ月	<u>100,000</u>	(5,760)	<u>120,000</u>	(5,760)
7ヶ月	<u>87,500</u>	(5,040)	<u>105,000</u>	(5,040)
6ヶ月	<u>75,000</u>	(4,320)	<u>90,000</u>	(4,320)
5ヶ月	<u>62,500</u>	(3,600)	<u>75,000</u>	(3,600)
4ヶ月	<u>50,000</u>	(2,880)	<u>60,000</u>	(2,880)
3ヶ月	<u>37,500</u>	(2,160)	<u>45,000</u>	(2,160)
2ヶ月	<u>25,000</u>	(1,440)	<u>30,000</u>	(1,440)
1ヶ月	<u>12,500</u>	(720)	<u>15,000</u>	(720)

括弧内は含まれるトークン量(単位はトークン)

ノード固定 利用負担金表(単位 円)

利用期間	ノード固定 (1セットにつき)			
	大学・公共機関等	(トークン量)	企業	(トークン量)
12ヶ月	<u>225,000</u>	(8,640)	<u>270,000</u>	(8,640)
11ヶ月	<u>206,300</u>	(7,920)	<u>247,500</u>	(7,920)
10ヶ月	<u>187,500</u>	(7,200)	<u>225,000</u>	(7,200)
9ヶ月	<u>168,800</u>	(6,480)	<u>202,500</u>	(6,480)
8ヶ月	<u>150,000</u>	(5,760)	<u>180,000</u>	(5,760)
7ヶ月	<u>131,300</u>	(5,040)	<u>157,500</u>	(5,040)
6ヶ月	<u>112,500</u>	(4,320)	<u>135,000</u>	(4,320)
5ヶ月	<u>93,800</u>	(3,600)	<u>112,500</u>	(3,600)
4ヶ月	<u>75,000</u>	(2,880)	<u>90,000</u>	(2,880)

3ヶ月	<u>56,300</u>	(2,160)	<u>67,500</u>	(2,160)
2ヶ月	<u>37,500</u>	(1,440)	<u>45,000</u>	(1,440)
1ヶ月	<u>18,800</u>	(720)	<u>22,500</u>	(720)

括弧内は含まれるトークン量(単位はトークン)

追加オプション

トークン量 追加利用負担金表(単位 円)

追加トークン量	大学・公共機関等	(トークン量)	企業	(トークン量)
1ノード月相当	<u>12,500</u>	(720)	<u>15,000</u>	(720)

括弧内は含まれるトークン量(単位はトークン)

ディスク利用負担金表(単位 円)

並列ファイルシステム (1TBにつき)	
1ヶ月	540

別表3 (利用規程第13条関係)

「計算・データ・学習」融合スーパーコンピュータシステム利用負担金表 (Wisteria/BDEC-01 システム)

Wisteria-O (Odyssey) : Wisteria/BDEC-01 のシミュレーションノード群

Wisteria-A (Aquarius) : Wisteria/BDEC-01 のデータ・学習ノード群

区分		利用負担金額
一 計 算 ・ デ ー タ ・ 学 習 ・ 融 合 ス ー パ ー コ ン ピ ュ ー タ シ ス テ ム	一般申込	Wisteria-O/A 基本セット (年額) 【大学・公共機関等 <u>90,000</u> 円】 (複数セット申込可, 利用期間は1ヶ月単位で設定可) トークン量 8,640 トークン (1ノード (Wisteria-O), 24時間×360日相当, 1セット当たり) トークン消費係数 Wisteria-O: 1.00 (1ノード当たり) ※ Wisteria-A: 3.00 (1GPU 当たり) ※ 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 ディスク容量 共有ファイルシステム グループにつき 2 TB (1セット当たり) 利用者番号登録数 制限なし
		Wisteria-O 基本セット (年額) 【大学・公共機関等 <u>90,000</u> 円, 企業 <u>108,000</u> 円】 (複数セット申込可, 利用期間は1ヶ月単位で設定可) トークン量 8,640 トークン (1ノード, 24時間×360日相当, 1セット当たり) トークン消費係数 1.00 (1ノード当たり) ※ ※ 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 ディスク容量 共有ファイルシステム グループにつき 2 TB (1セット当たり) 利用者番号登録数 制限なし
		Wisteria-A 基本セット (年額) 【大学・公共機関等 <u>270,000</u> 円, 企業 <u>324,000</u> 円】 (複数セット申込可, 利用期間は1ヶ月単位で設定可) トークン量 25,920 トークン (1GPU, 24時間×360日相当, 1セット当たり) トークン消費係数 3.00 (1GPU 当たり) ディスク容量 共有ファイルシステム グループにつき 6 TB (1セット当たり) 利用者番号登録数 制限なし

GPU専用申込 (Wisteria-Aのみ、公募制度による申込可能)	Wisteria-A 1GPU セット (年額) 【大学・公共機関等 <u>364,500</u> 円, 企業 <u>437,400</u> 円】 (最大 7GPU まで、申込単位は下表参照、利用期間は1ヶ月単位で設定可) トークン量 25,920 トークン (1 GPU, 24時間×360日相当, 1セット当たり) トークン消費係数 Wisteria-O: 1.00 (1ノード当たり) ※ Wisteria-A: 3.00 (1 GPU 当たり) ※ 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 ディスク容量 共有ファイルシステム グループにつき 6 TB (1セット当たり) 利用者番号登録数 制限なし																
	<table border="1"> <thead> <tr> <th>GPU 数</th> <th>トークン量</th> <th>大学・公共機関等</th> <th>企業</th> </tr> </thead> <tbody> <tr> <td>1</td> <td>25,920トークン</td> <td><u>364,500</u>円</td> <td><u>437,400</u>円</td> </tr> <tr> <td>2</td> <td>51,840トークン</td> <td><u>729,000</u>円</td> <td><u>874,800</u>円</td> </tr> <tr> <td>4</td> <td>103,680トークン</td> <td><u>1,458,000</u>円</td> <td><u>1,749,600</u>円</td> </tr> </tbody> </table>	GPU 数	トークン量	大学・公共機関等	企業	1	25,920トークン	<u>364,500</u> 円	<u>437,400</u> 円	2	51,840トークン	<u>729,000</u> 円	<u>874,800</u> 円	4	103,680トークン	<u>1,458,000</u> 円	<u>1,749,600</u> 円
	GPU 数	トークン量	大学・公共機関等	企業													
	1	25,920トークン	<u>364,500</u> 円	<u>437,400</u> 円													
2	51,840トークン	<u>729,000</u> 円	<u>874,800</u> 円														
4	103,680トークン	<u>1,458,000</u> 円	<u>1,749,600</u> 円														
ノード固定 (要審査) (Wisteria-Aのみ、公募制度による申込可能)	Wisteria-A 基本セット (年額) 【大学・公共機関等 <u>2,916,000</u> 円, 企業 <u>3,499,200</u> 円】 (1ノード 8GPU 1年分, 1セットのみ申込可, 利用期間は1ヶ月単位で設定可) トークン量 207,360 トークン (8 GPU, 24時間×360日相当) トークン消費係数 Wisteria-O: 1.00 (1ノード当たり) ※ Wisteria-A: 3.00 (1 GPU 当たり) ※ 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 ディスク容量 共有ファイルシステム グループにつき 48 TB 利用者番号登録数 制限なし																
ディスク容量追加	共有ファイルシステム 1 TB につき 【6,480 円/年】																
トークン量追加	【大学・公共機関等 <u>7,500</u> 円, 企業 <u>9,000</u> 円】 720 トークン (1ノード (Wisteria-O), 24時間×30日相当)																

(注) 上記の利用負担金額は総額表示である。尚、月数別利用負担金については別表4に定める。

最小セット利用負担金表 (Wisteria/BDEC-01 システム)

区分	利用負担金額
「計算・データ・学習融合システム」 コンピュータシステム	Wisteria-O/A 最小セット 【大学・公共機関等 <u>7,500</u> 円】 トークン量 720 トークン (1ノード (Wisteria-O), 24時間×30日相当) トークン消費係数 Wisteria-O: 1.00 (1ノード当たり) ※ Wisteria-A: 3.00 (1 GPU 当たり) ※ 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 ディスク容量 共有ファイルシステム グループにつき 2 TB 利用期間 当該年度末まで 利用者番号登録数 制限なし
	ディスク容量追加 共有ファイルシステム 1 TB につき 【6,480 円/年】
	トークン量追加 【大学・公共機関等 <u>7,500</u> 円】 720 トークン (1ノード (Wisteria-O), 24時間×30日相当)

備考

- 1 「大学・公共機関等」は第3条第1号、第2号、第3号、第4号、第6号および第8号に該当する者に適用する
- 2 「企業」は第3条第7号に該当する者に適用する
- 3 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
- 4 Odyssey を使用した場合、トークンはジョブ実行ごとにノード時間積（経過時間×ノード数）にトークン消費係数を乗じた値を消費する
- 5 Aquarius を使用した場合、トークンはジョブ実行ごとに GPU 時間積（経過時間×GPU 数）にトークン消費係数を乗じた値を消費する
- 6 トークンの残量が無くなった場合には、ジョブ実行は抑止される。但し、計算リソースの状況によって非優先ジョブの実行を許可するものとする
- 7 計算資源を予約する申込においては、予約した期間およびノード数に相当するジョブ実行を行ったものとみなして、トークンを消費するものとする
- 8 トークンは利用期間内に限り有効とし、利用終了後にトークンの残量がある場合でも引継ぎおよび利用負担金の返還は行わない
- 9 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
- 10 トークンの一部を他のスーパーコンピュータシステムへ移行することができる。移行元と移行先でのトークン量の対応については別表5に定める
- 11 ノード固定は審査によって認められた利用期間およびノードにて占有利用できるものとする。但し、トークンの残量が無くなった時点で占有は解除される
- 12 ノード固定の申込に提供するリソースは、申込状況やシステムの稼働状況により変更する場合がある。変更となった場合の負担金額の適用については申し合わせによるものとする
- 13 追加オプションは利用期間内に限り有効とする
- 14 追加オプション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
- 15 申込全体のトークン量が提供可能なトークン量の1.2倍を超えない場合に限り受け付けるものとする。但し、企業、若手・女性、大規模 HPC チャレンジ等の公募制度による利用、講義・講習会等の教育利用およびトライアルユース等の申込においてはこの限りでない

別表4（利用規程第13条関係）

「計算・データ・学習」融合スーパーコンピュータシステム月数別利用負担金（Wisteria/BDEC-01 システム）

一般申込 利用負担金表（単位 円）

利用期間	Wisteria-O/A（1セットにつき）	
	大学・公共機関等	（トークン量）
12ヶ月	<u>90,000</u>	（8,640）
11ヶ月	<u>82,500</u>	（7,920）
10ヶ月	<u>75,000</u>	（7,200）
9ヶ月	<u>67,500</u>	（6,480）
8ヶ月	<u>60,000</u>	（5,760）
7ヶ月	<u>52,500</u>	（5,040）
6ヶ月	<u>45,000</u>	（4,320）
5ヶ月	<u>37,500</u>	（3,600）
4ヶ月	<u>30,000</u>	（2,880）
3ヶ月	<u>22,500</u>	（2,160）
2ヶ月	<u>15,000</u>	（1,440）
1ヶ月	<u>7,500</u>	（720）

括弧内は含まれるトークン量（単位はトークン）

公募制度による申込 利用負担金表 (単位 円)

利用期間	Wisteria-O (1セットにつき)				Wisteria-A (1セットにつき)			
	大学・公共機関等	(トークン量)	企業	(トークン量)	大学・公共機関等	(トークン量)	企業	(トークン量)
12ヶ月	<u>90,000</u>	(8,640)	<u>108,000</u>	(8,640)	<u>270,000</u>	(25,920)	<u>324,000</u>	(25,920)
11ヶ月	<u>82,500</u>	(7,920)	<u>99,000</u>	(7,920)	<u>247,500</u>	(23,760)	<u>297,000</u>	(23,760)
10ヶ月	<u>75,000</u>	(7,200)	<u>90,000</u>	(7,200)	<u>225,000</u>	(21,600)	<u>270,000</u>	(21,600)
9ヶ月	<u>67,500</u>	(6,480)	<u>81,000</u>	(6,480)	<u>202,500</u>	(19,440)	<u>243,000</u>	(19,440)
8ヶ月	<u>60,000</u>	(5,760)	<u>72,000</u>	(5,760)	<u>180,000</u>	(17,280)	<u>216,000</u>	(17,280)
7ヶ月	<u>52,500</u>	(5,040)	<u>63,000</u>	(5,040)	<u>157,500</u>	(15,120)	<u>189,000</u>	(15,120)
6ヶ月	<u>45,000</u>	(4,320)	<u>54,000</u>	(4,320)	<u>135,000</u>	(12,960)	<u>162,000</u>	(12,960)
5ヶ月	<u>37,500</u>	(3,600)	<u>45,000</u>	(3,600)	<u>112,500</u>	(10,800)	<u>135,000</u>	(10,800)
4ヶ月	<u>30,000</u>	(2,880)	<u>36,000</u>	(2,880)	<u>90,000</u>	(8,640)	<u>108,000</u>	(8,640)
3ヶ月	<u>22,500</u>	(2,160)	<u>27,000</u>	(2,160)	<u>67,500</u>	(6,480)	<u>81,000</u>	(6,480)
2ヶ月	<u>15,000</u>	(1,440)	<u>18,000</u>	(1,440)	<u>45,000</u>	(4,320)	<u>54,000</u>	(4,320)
1ヶ月	<u>7,500</u>	(720)	<u>9,000</u>	(720)	<u>22,500</u>	(2,160)	<u>27,000</u>	(2,160)

括弧内は含まれるトークン量(単位はトークン)

GPU 専有申込 利用負担金表(1GPU セット、単位 円)

利用期間	Wisteria-A (1セットにつき)			
	大学・公共機関等	(トークン量)	企業	(トークン量)
12ヶ月	<u>364,500</u>	(25,920)	<u>437,400</u>	(25,920)
11ヶ月	<u>334,200</u>	(23,760)	<u>401,000</u>	(23,760)
10ヶ月	<u>303,800</u>	(21,600)	<u>364,500</u>	(21,600)
9ヶ月	<u>273,400</u>	(19,440)	<u>328,100</u>	(19,440)
8ヶ月	<u>243,000</u>	(17,280)	<u>291,600</u>	(17,280)
7ヶ月	<u>212,700</u>	(15,120)	<u>255,200</u>	(15,120)
6ヶ月	<u>182,300</u>	(12,960)	<u>218,700</u>	(12,960)
5ヶ月	<u>151,900</u>	(10,800)	<u>182,300</u>	(10,800)
4ヶ月	<u>121,500</u>	(8,640)	<u>145,800</u>	(8,640)
3ヶ月	<u>91,200</u>	(6,480)	<u>109,400</u>	(6,480)
2ヶ月	<u>60,800</u>	(4,320)	<u>72,900</u>	(4,320)
1ヶ月	<u>30,400</u>	(2,160)	<u>36,500</u>	(2,160)

括弧内は含まれるトークン量(単位はトークン)

ノード固定 利用負担金表(単位 円)

利用期間	Wisteria-A (1セット)			
	大学・公共機関等	(トークン量)	企業	(トークン量)
12ヶ月	<u>2,916,000</u>	(207,360)	<u>3,499,200</u>	(207,360)
11ヶ月	<u>2,673,000</u>	(190,080)	<u>3,207,600</u>	(190,080)
10ヶ月	<u>2,430,000</u>	(172,800)	<u>2,916,000</u>	(172,800)
9ヶ月	<u>2,187,000</u>	(155,520)	<u>2,624,400</u>	(155,520)
8ヶ月	<u>1,944,000</u>	(138,240)	<u>2,332,800</u>	(138,240)
7ヶ月	<u>1,701,000</u>	(120,960)	<u>2,041,200</u>	(120,960)
6ヶ月	<u>1,458,000</u>	(103,680)	<u>1,749,600</u>	(103,680)
5ヶ月	<u>1,215,000</u>	(86,400)	<u>1,458,000</u>	(86,400)
4ヶ月	<u>972,000</u>	(69,120)	<u>1,166,400</u>	(69,120)
3ヶ月	<u>729,000</u>	(51,840)	<u>874,800</u>	(51,840)

2ヶ月	<u>486,000</u>	(34,560)	<u>583,200</u>	(34,560)
1ヶ月	<u>243,000</u>	(17,280)	<u>291,600</u>	(17,280)

括弧内は含まれるトークン量(単位はトークン)

追加オプション

トークン量 追加利用負担金表(単位 円)

追加トークン量	大学・公共機関等	(トークン量)	企業	(トークン量)
Wisteria-O 1ノード月相当	<u>7,500</u>	(720)	<u>9,000</u>	(720)

括弧内は含まれるトークン量(単位はトークン)

ディスク利用負担金表(単位 円)

並列ファイルシステム (1TBにつき)	
1ヶ月	540

別表 (トライアル実施要領関係)

表1 トライアル利用負担金表 (Oakbridge-CX システム)

通常利用(トライアル)	<p>基本セット 【大学・公共機関等 <u>45,000</u>円/年】 (最大1セットまで) トークン量 8,640 トークン (1ノード, 24時間×360日相当, 1セット当たり) トークン消費係数 1.00 ※ ※ 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 ディスク容量 並列ファイルシステム グループにつき 4TB (1セット当たり) 利用者番号登録数 制限なし</p>
企業利用(トライアル)	<p>基本セット 【企業 <u>40,500</u>円/年】 (最大4セットまで) トークン量 8,640 トークン (1ノード, 24時間×360日相当, 1セット当たり) トークン消費係数 1.00 ※ ※ 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 ディスク容量 並列ファイルシステム グループにつき 4TB (1セット当たり) 利用者番号登録数 制限なし</p>
トークン量追加 (新規申込時に付与されたトークン を含め1セットにつき最大12ヶ月 分まで)	<p>【大学・公共機関等 <u>3,800</u>円, 企業 <u>4,500</u>円】 720 トークン (1ノード, 24時間×30日相当)</p>

表2 トライアル付与トークン別利用負担金表 (Oakbridge-CX システム)

利用負担金表 (単位 円)

付与 トークン	1セットにつき		
	大学・公共機関等	企業	(トークン量)
12ヶ月分	45,000	40,500	(8,640)
11ヶ月分	41,300	36,000	(7,920)
10ヶ月分	37,500	31,500	(7,200)
9ヶ月分	33,800	27,000	(6,480)
8ヶ月分	30,000	22,500	(5,760)
7ヶ月分	26,300	18,000	(5,040)
6ヶ月分	22,500	13,500	(4,320)
5ヶ月分	18,800	9,000	(3,600)
4ヶ月分	15,000	4,500	(2,880)
3ヶ月分	11,300	0	(2,160)
2ヶ月分	7,500	0	(1,440)
1ヶ月分	3,800	0	(720)

括弧内は含まれるトークン量, 単位はトークン

大学・公共機関等は1セットまで申込可, 企業は4セットまで申込可

トークン量追加利用負担金表 (単位 円)

追加トークン量	大学・公共機関等	(トークン量)	企業	(トークン量)
1ヶ月分	3,800	(720)	4,500	(720)

括弧内は追加されるトークン量, 単位はトークン

新規申込時に付与されたトークンを含め1セットにつき最大12ヶ月分まで追加可

例: 申込時に5ヶ月分申し込んだ場合は7ヶ月分まで追加可

備考

- 1 「大学・公共機関等」は第3条第1号, 第2号, 第3号, 第4号, 第6号および第8号に該当する者に適用する。
- 2 「企業」は第3条第7号に該当する者に適用する。
- 3 利用期間については当該年度のサービス終了日までとする。
- 4 トークンはジョブ実行ごとにノード時間積 (経過時間×ノード数) にトークン消費係数を乗じた値を消費するものとする。
- 5 トークンは利用期間内に限り有効とし, 利用終了後にトークンの残量がある場合でも引継ぎおよび利用負担金の返還は行わない。
- 6 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。
- 7 トークンの他のシステムへの移行はできないものとする。
- 8 トークンの追加は新規申込時点で付与されたトークンも含め, 1セットにつき最大12ヶ月分までとする。

表3 トライアル利用負担金表 (Wisteria/BDEC-01)

Wisteria-O (Odyssey) : Wisteria/BDEC-01 のシミュレーションノード群
 Wisteria-A (Aquarius) : Wisteria/BDEC-01 のデータ・学習ノード群

通常利用(トライアル)	<p>Wisteria-O/A 基本セット 【大学・公共機関等 <u>27,000</u>円/年】 (最大1セットまで)</p> <p>トークン量 8,640 トークン (1ノード(Wisteria-O), 24時間×360日相当, 1セット当たり)</p> <p>トークン消費係数 Wisteria-O: 1.00 (1ノード当たり)※ Wisteria-A: 3.00 (1GPU 当たり)</p> <p>※ 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</p> <p>ディスク容量 共有ファイルシステム グループにつき 2TB (1セット当たり)</p> <p>利用者番号登録数 制限なし</p>
企業利用(トライアル)	<p>Wisteria-O/A 基本セット 【企業 <u>24,300</u>円/年】 (最大6セットまで)</p> <p>トークン量 8,640 トークン (1ノード(Wisteria-O), 24時間×360日相当, 1セット当たり)</p> <p>トークン消費係数 Wisteria-O: 1.00 (1ノード当たり)※ Wisteria-A: 3.00 (1GPU 当たり)</p> <p>※ 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</p> <p>ディスク容量 共有ファイルシステム グループにつき 2TB (1セット当たり)</p> <p>利用者番号登録数 制限なし</p>
トークン量追加 (新規申込時に付与されたトークン を含め1セットにつき最大12ヶ月 分まで)	<p>【大学・公共機関等 <u>2,300</u>円, 企業 <u>2,700</u>円】 720 トークン (1ノード(Wisteria-O), 24時間×30日相当)</p>

表4 トライアル付与トークン別利用負担金表 (Wisteria/BDEC-01)

利用負担金表 (単位 円)

付与 トークン	1セットにつき		
	大学・公共機関等	企業	(トークン量)
12ヶ月分	<u>27,000</u>	<u>24,300</u>	(8,640)
11ヶ月分	<u>24,800</u>	<u>21,600</u>	(7,920)
10ヶ月分	<u>22,500</u>	<u>18,900</u>	(7,200)
9ヶ月分	<u>20,300</u>	<u>16,200</u>	(6,480)
8ヶ月分	<u>18,000</u>	<u>13,500</u>	(5,760)
7ヶ月分	<u>15,800</u>	<u>10,800</u>	(5,040)
6ヶ月分	<u>13,500</u>	<u>8,100</u>	(4,320)
5ヶ月分	<u>11,300</u>	<u>5,400</u>	(3,600)
4ヶ月分	<u>9,000</u>	<u>2,700</u>	(2,880)
3ヶ月分	<u>6,800</u>	0	(2,160)
2ヶ月分	<u>4,500</u>	0	(1,440)
1ヶ月分	<u>2,300</u>	0	(720)

括弧内は含まれるトークン量, 単位はトークン

大学・公共機関等は1セットまで申込可, 企業は6セットまで申込可

トークン量追加利用負担金表 (単位 円)

追加トークン量	大学・公共機関等	(トークン量)	企業	(トークン量)
1ヶ月分	2,300	(720)	2,700	(720)

括弧内は追加されるトークン量, 単位はトークン

新規申込時に付与されたトークンを含め1セットにつき最大12ヶ月分まで追加可

例: 申込時に5ヶ月分申し込んだ場合は7ヶ月分まで追加可

備考

- 1 「大学・公共機関等」は第3条第1号, 第2号, 第3号, 第4号, 第6号および第8号に該当する者に適用する。
- 2 「企業」は第3条第7号に該当する者に適用する。
- 3 利用期間については当該年度のサービス終了日までとする。
- 4 Odyssey を使用した場合, トークンはジョブ実行ごとにノード時間積 (経過時間×ノード数) にトークン消費係数を乗じた値を消費する。
- 5 Aquarius を使用した場合, トークンはジョブ実行ごとに GPU 時間積 (経過時間×GPU数) にトークン消費係数を乗じた値を消費する。
- 6 トークンは利用期間内に限り有効とし, 利用終了後にトークンの残量がある場合でも引継ぎおよび利用負担金の返還は行わない。
- 7 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。
- 8 トークンの他のシステムへの移行はできないものとする。
- 9 トークンの追加は新規申込時点で付与されたトークンも含め, 1セットにつき最大12ヶ月分までとする。

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。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きます。また、「スーパーコンピューティングニュース」や広報誌等への成果報告記事の執筆などを行っていただきます。
- センターの主催、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 においては毎月 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

2023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. 2023 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 1 回	2023 年 4 月 20 日(木) 9:00 ~ 17:00	2023 年 2 月 27 日 (月) 17:00【締切】	3 月上旬	3 月中旬
	2023 年 5 月 25 日(木) 9:00 ~ 17:00			
	2023 年 6 月 22 日(木) 9:00 ~ 17:00			
	2023 年 7 月 27 日(木) 9:00 ~ 17:00			
第 2 回	2023 年 8 月 17 日(木) 9:00 ~ 17:00	2023 年 6 月 26 日 (月) 17:00【締切】	7 月上旬	7 月中旬
	2023 年 9 月 14 日(木) 9:00 ~ 17:00			
	2023 年 10 月 26 日(木) 9:00 ~ 17:00			
	2023 年 11 月 21 日(火) 9:00 ~ 17:00			
第 3 回	2023 年 12 月 21 日(木) 9:00 ~ 17:00	2023 年 10 月 30 日 (月) 17:00【締切】	11 月上旬	11 月中旬
	2024 年 1 月 25 日(木) 9:00 ~ 17:00			
	2024 年 2 月 21 日(水) 9:00 ~ 17:00			
	2024 年 3 月 28 日(木) 9:00 ~ 17:00			

表 2. 2023 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 1 回	2023 年 4 月 18 日(火) 9:00 ~ 17:00	2023 年 2 月 27 日 (月) 17:00【締切】	3 月上旬	3 月中旬
	2023 年 5 月 23 日(火) 9:00 ~ 17:00			
	2023 年 6 月 20 日(火) 9:00 ~ 17:00			
	2023 年 7 月 25 日(火) 9:00 ~ 17:00			
第 2 回	2023 年 8 月 24 日(木) 9:00 ~ 17:00	2023 年 6 月 26 日 (月) 17:00【締切】	7 月上旬	7 月中旬
	2023 年 9 月 28 日(木) 9:00 ~ 17:00			

※ 2023 年 9 月の Oakbridge-CX システムの終了に伴い、Oakbridge-CX における大規模 HPC チャレンジも 9 月をもって終了いたします。

- 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

¹ 「大規模 HPC チャレンジ」

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

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

- A) 計算・結果の詳細を論文等も含めて公表できること。
- B) 計算結果が科学的に有用、あるいは社会的なインパクトがあると考えられること。
- C) システムごとに決められたノード数 (Odyssey : 4,096 ノード、Aquarius : 36 ノード、Oakbridge-CX : 1,024 ノード) 以上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。

※ 最大利用可能ノード数 : Odyssey : 6,144 ノード、Aquarius : 36 ノード、Oakbridge-CX : 1,280 ノード

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、電子メールにてお送りください。書類のご提出は PDF 形式 (研究グループメンバーの情報はエクセル) にてお願いいたします。

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

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。

The screenshot shows the website's navigation menu with '研究成果' (Research Results) highlighted. Below, the '研究成果の取扱い' (Research Results Handling) page is shown, with a blue arrow pointing to the '研究成果登録のページ' (Research Results Registration Page) link. The registration page includes a form for account name and email, and a 'ログイン' (Login) button. Annotations 1-4 point to these specific elements.

- 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

12・1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
12月	1,962	626	14,321	500	632	77,350	80,043	2,323	3,774,096	5,404.18	964	316	3,164,631	4,335.5	56.5
2023年1月	2,021	609	14,159	471	535	163,311	99,128	2,421	3,932,926	3,854.64	1,103	257	3,814,549	5,217.6	67.9
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			211,479	3,677	6,923	735,128	690,341			77,683	8,358	3,199	24,659,588		

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

・接続時間： ログイン時間の累計

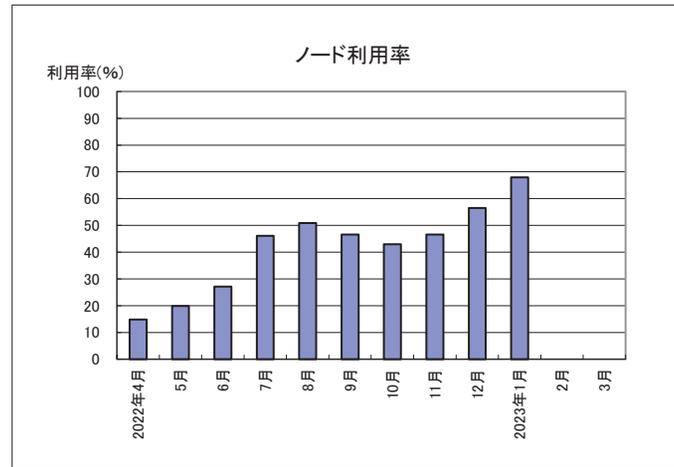
・ログイン(実CPU)： コア時間単位

・2022年1月分は合計に含まない

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

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

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



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

年月	処理件数		演算時間 [GPU時間] (経過時間)		平均GPU 利用数 (GPU)	GPU 利用率 (%)
	インタラクティブ ジョブ	バッチジョブ	インタラクティブ ジョブ	バッチジョブ		
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
12月	3,271	15,738	3,041	148,889	207.8	57.7
2023年1月	971	18,776	953	167,789	230.8	64.1
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	12,801	152,222	11,574	1,199,288		

・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

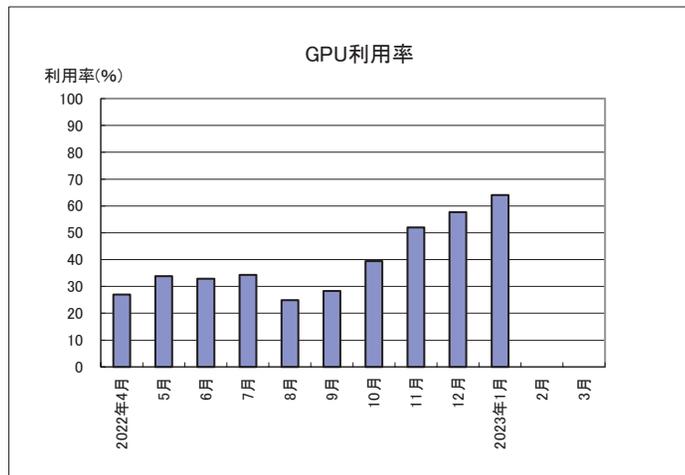
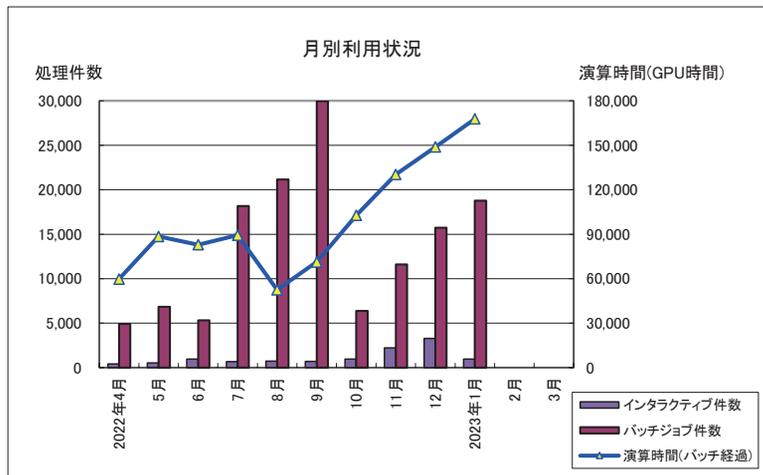
・登録者数、実利用者数、ログイン件数、接続時間、ファイル使用量、
ログイン(実GPU)はWisteria/BDEC-01(Odyssey)と共通。

・2022年1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

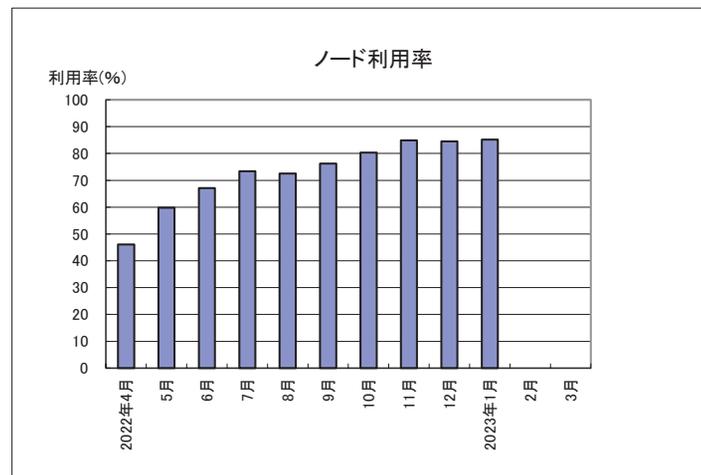
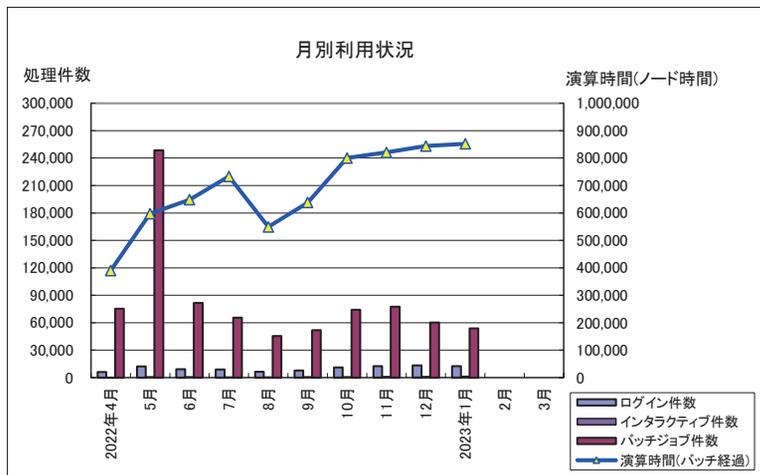


3. Oakbridge-CX スーパーコンピュータシステムジョブ処理状況 (Red Hat Enterprise Linux 7、CentOS 7)

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
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
12月	1,385	417	13,241	137	1,069	60,117	52,149	2,008	2,285,229	5,469.01	313	668	843,667	1,155.4	84.5
2023年1月	1,400	396	12,568	207	1,196	53,663	62,502	2,078	2,267,070	8,192.62	674	606	851,952	1,165.9	85.2
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			114,057	382	8,900	951,764	522,294			52,978	1,022	4,845	8,071,399		

- ・接続時間： ログイン時間の累計
- ・ログイン(実CPU)： コア時間単位
- ・2022年1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



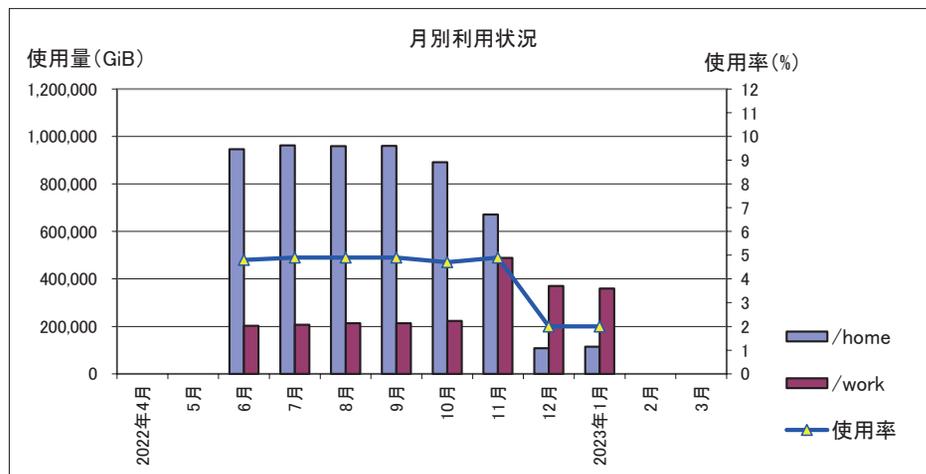
4. Ipomoea-01大規模共通ストレージシステム使用状況

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	4,119	179.4	947,117	203,168	4.8	23,657,187.6
7月	2,117	45	152	4,258	19.4	962,711	207,333	4.9	23,657,187.6
8月	2,166	30	120	338	10.5	959,300	213,839	4.9	23,657,187.6
9月	2,241	36	140	452	262.5	960,684	213,876	4.9	23,657,187.6
10月	2,332	46	155	947	95.5	891,698	223,457	4.7	23,657,187.6
11月	2,403	58	194	618	63.8	671,496	489,011	4.9	23,657,187.6
12月	2,295	25	68	246	0.3	108,139	370,835	2.0	23,657,187.6
2023年1月	2,353	31	101	385	5.1	114,720	359,196	2.0	23,657,187.6
合計			1,275	11,361	636.5				

・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



全ゲノム配列情報と画像クラスタリング技術の融合による

希少難治性疾患の層別・分類手法の開発

川口 修治

京都大学大学院医学研究科 京都大学・マギル大学ゲノム医学国際連携専攻

1. はじめに

希少難治性疾患（難病）は各疾患の患者数は少ないが、疾患の種類が多いため、全ての患者を合わせると日本における有病率は 8%とされている。難病は症例数が少ないために、疾患の十分な研究が進まず、明確な診断基準の確立や疾患の分類や定義が不明瞭なままの疾患も多い。一方、多くの難病において、遺伝的要因が発症と関連していることが知られており、発症の要因となる遺伝子（原因遺伝子）の同定が発症機序の解明に重要となっている。ゲノム解読装置の高性能化により、全ゲノム配列を高精度に解読できるようになり、多くの疾患で原因遺伝子が同定されてきた。しかしながら、ゲノムは個人毎に至る所で変異しており、一般的にゲノム解析には十分な数の症例を必要とする。そのため、症例数の少ない難病データに common disease 等で培われてきたゲノム解析手法を適用することが困難である。

このような問題に対し、ゲノム情報に加えて様々なデータを統合的に解析することで原因遺伝子と疾患との関連をより明確に捉えることが期待できる。中でも診断画像は、患者の症状を直接的に表しているため、大きな情報量を持つ。そこで本研究では、診断画像から特徴を抽出し、これをゲノム情報と関連づけることで、原因遺伝子と疾患との関連を明らかにすることを目的とする。特に、本研究では、深層学習を用いて原因遺伝子による診断画像の特徴を分類する手法の開発を目指した。開発は、指定難病の一つである網膜色素変性（指定難病 90）の超広角蛍光眼底写真（広角眼底写真）を用いて進めた。網膜色素変性は網膜に色素変性が起こることで、夜盲や視野狭窄、視力低下が見られる進行性の疾患である。メンデル遺伝病の一つであり、100 近くの原因遺伝子が知られているが[1]、これら既知の原因遺伝子情報を基に、患者のゲノム診断を行っても原因遺伝子が同定できる割合は 3 割を超える程度である[2]。これには、未知の原因遺伝子の存在が原因の一つと考えられるが、他にもゲノムは個人毎に様々な箇所ですべて変異するため、ゲノム情報のみではどれが真に網膜色素変性に関わる変異であるかを特定することが困難であることも挙げられる。

一方、原因遺伝子の種類が多いことから、同一の疾患であっても網膜色素変性の病態は、遺伝子や変異によって異なる特徴を持つ可能性が高い。とりわけ広角眼底写真は、網膜色素変性の病態を直接的に表すことから、その特徴の違いがより明確であると考えられる。そこで、網膜色素変性の患者の広角眼底写真を深層学習により学習し、全ゲノム情報から得られた原因遺伝子情報を基に、遺伝子間の違いを分類するクラスタリング手法の開発を行う。本研究で開発するクラスタリングを通じて、難病の詳細な層別・分類を可能とすることで、遺伝子診断率の向上や疾患発症機序の解明を図る。

2. 方法

本研究では、256名の網膜色素変性患者の縦2,728ピクセル、横3,082ピクセルの広角眼底写真計468枚に加えて、健常者の広角眼底写真104枚を解析に用いた。256名の患者の内、168名については全ゲノム解析によって原因遺伝子が特定されている。はじめに、網膜色素変性画像から256×256ピクセルの領域を無作為に1,400枚切り出し、これを専門医によって色素変性領域と正常領域に分類した。これを、教師画像として深層学習により学習を行い、色素変性領域と正常領域を分類する識別器を作成した(図1)。次に、網膜色素変性の全体画像に対して、256×256ピクセルの領域をスライドさせながら切り出して、作成した識別器を適用し、色素変性領域を取り出す。この際、画像の一部が撮影範囲外(黒領域)を含むものは除外する。また、健常者の画像から同様に256×256ピクセルの領域をスライドさせながら切り出し、これを正常領域とする。以上で得られた、色素変性領域と正常網膜領域の画像を教師画像として深層学習を再度行い、識別器を更新する(図1)。このプロセスを繰り返すことで、色素変性領域抽出識別器の精度向上を行う。深層学習には、TensorFlow(version 1.4.0)[3]とKeras(version 2.1.5)[4]を使用し、75%を訓練データとし、残りの25%を検証データとした。

作成した識別器を用いて、広角眼底写真314枚から色素変性領域を抽出する。色素変性領域を256×256より細かい解像度で抽出するため、識別器を64×64画素ごとにスライドして適用し、周辺領域の色素変性領域の判定値[0-1](高いほどより色素変性である可能性が高い)を用いて、128×128の分画で色素変性領域の可能性が高い箇所を抽出し、抽出画像から128×128サイズの識別器を作成する(図2)。次に、得られた128×128ピクセルサイズの画像を用いてクラスタリングを行う。クラスタリングには、Metric Learningによる深層学習を用いた[5]。抽出した画像には重複部分も多く、学習に偏りが出ることを避けるため、重複部においては識別時に得られる判定値[0-1]が最も高い画像を選別した。はじめに、各画像に対して全ゲノム解析によって得られた、原因遺伝子をクラスIDとして付与する。クラスIDを基にMetric Learningにより画像の特徴分類を行い、網膜色素変性の特徴が遺伝子間で異なるか調査した。ここで本研究では症例数の多い3遺伝子に限定し、遺伝子のペア毎にクラスタリングを実施し、結果の比較を行なった。

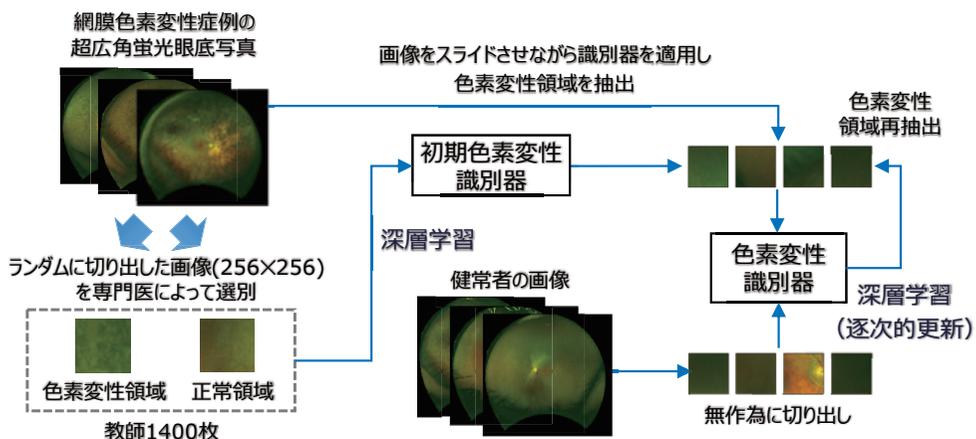


図1： 深層学習による色素変性領域識別器の作成。

専門医によって選別した、教師データを基に作成した色素変性領域識別器を用いて、超広角蛍光眼底写真から色素変性領域を抽出する。抽出した領域の画像と健常者の正常網膜画像から色素変性識別器を再作成する半教師付き学習を行う。

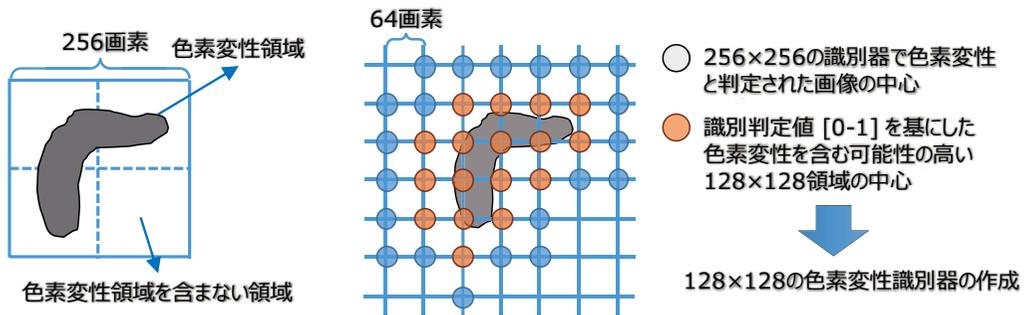


図 2: 色素変性識別器の高解像度化

256×256 の画像は、人手で判定する際には適切なサイズであるが、色素変性パターンの詳細な解析を行うにはサイズが大きい。そこで、256×256 画像の識別器を 64×64 の幅でスライドさせながら適用し、その結果の空間的な識別判定値から、色素変性領域を含んでいる可能性の高い 128×128 画像を選出し、識別器を再作成する。

3. 結果

図 3 に、本研究で構築したシステムの詳細を示す。本システムは、仮想コンテナ型システム上で動作するよう設計されており、上位アプリケーションは今後の拡張・統合を見据えて汎用的なプログラムで開発されている。初めに、網膜色素変性の超広角蛍光眼底写真から専門医によって人工的に教師画像を 1,400 枚選別し、初期色素変性識別器を深層学習により作成した。得られた識別器を用いて、網膜色素変性の広角眼底写真 468 枚から 256×256 サイズの色素変性領域を抽出し、健常者の広角眼底写真から切り出した正常領域の画像と併せて約 100 万枚の画像を用意し、これを用いて識別器を逐次的に更新した。ここで、健常者の画像 104 枚のうち 26 枚はテスト用として分離し、識別器の学習には用いなかった。最終的に得られた識別器を改めて広角眼底写真に適用し、64×64 で位置をスライドさせて色素変性の判定を行なったところ、256×256 サイズの色素変性画像が 2,403,625 枚得られた。次に、領域の解像度を上げるため、抽出位置における空間的な判定結果を基に、色素変性箇所が含まれている可能性の高い 128×128 サイズの色素変性領域を 4,071,511 枚抽出し、これらの画像から 128×128 領域用識別器を作成した。識別器の性能をテストするため、26 枚の健常者のテスト画像から 128×128 サイズの画像を 522,138 枚抽出し、色素変性領域の判定を行なった結果、偽陽性率は 0.49% (2,548/522,138) であった。色素変性領域の識別器の学習は Reedbush-H システムの GPGPU2 枚を用いて行い、実行時間は 60 時間を要した。

得られた 128×128 サイズの色素変性画像のうち、頻度の高い 3 遺伝子で診断された網膜色素変性の広角眼底写真に限定し、Metric Learning によるクラスタリングを行なった。重複部の画像を識別時に得られる判定値を用いて選別し、47,845 枚の画像をクラスタリングに用いた。ここで、病態の進行による影響を除くため、広角眼底写真内で選別された色素変性画像の枚数が 100 枚に満たない症例は除いた。また、画像のうち 50% を教師データ、25% を検証データ、残りの 25% をテストデータとした。図 4 は、ある二つの遺伝子のクラスタリングで得られた、色素変性パターンの特徴空間に対して、テストデータを写像した結果を示している。クラスタリングにより、色素変性画像は Gene A と Gene B の二つの大きなクラスタを形成する結果となった。各クラスタの重心に近い画像を調査したところ、Gene A 側では色素変性が線形的に広がっているのに対して、Gene B 側ではより円状に広がっているパターンが多い結果となった。更に、クラスタの重心

との cosine 類似度を用いて、6634 枚のテスト画像がどちらのクラスターに所属するか分類したところ、Gene A の画像の 95.2%が Gene A のクラスターに、Gene B の画像の 81.7%が Gene B のクラスター付近に集積していた。Gene B については、画像の 13.9%が Gene A のクラスター側に所属しており、一部の症例では Gene A に近い色素変性パターンを持つ可能性があった。

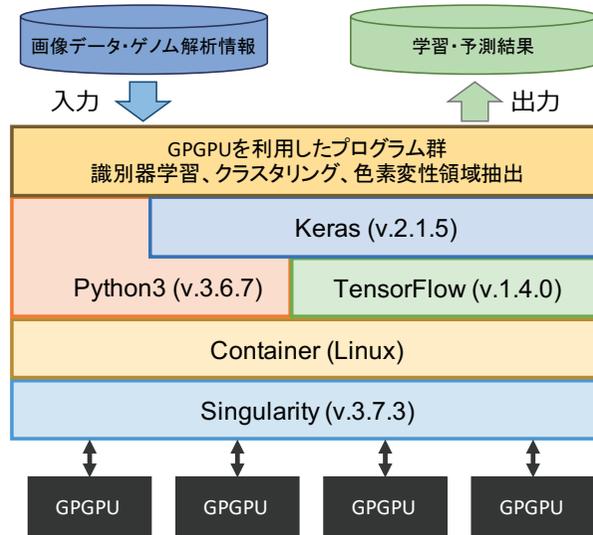
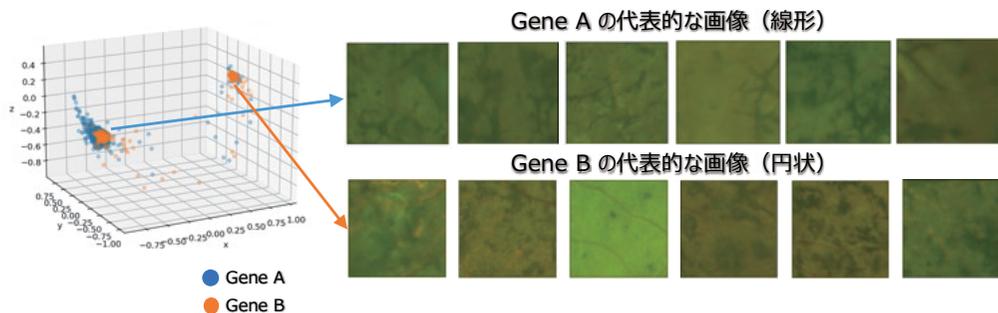


図 3:構築したシステムの構成

Reedbush-H 上で実行した本システムの構成図を示す。深層学習に必要なアプリケーションは仮想コンテナシステムに搭載され、Singularity 上で動作する。



cosine類似度によるテストデータの分類(縦 = 予測、横 = 実測)

	Gene A	Gene B	外れ値
Gene A	5036	92	164
Gene B	194	1096	52

図 4:二つの原因遺伝子間におけるクラスタリング結果

クラスタリングで分類された二つの原因遺伝子の色素変性領域のテストデータ画像(左上図)。左側に Gene A、右側に Gene B がそれぞれで大きなクラスターを形成している。各クラスターの重心に近い画像を調査した結果、Gene A のクラスターには色素変性が線形的な画像が多く含まれ、Gene B のクラスターには色素変性が円状となる画像が多い結果となった。(右上図)。クラスター重心との cosine 類似度を用いてテストデータを分類した結果、多くの画像は、同一の原因遺伝子クラスターに含まれたが、Gene B の一部の画像は Gene A のクラスターに含まれた(下表)。

4. 考察

深層学習技術の発展により、筋病理のような専門医でも見分けが困難な難病の診断画像に対しても、疾患の分類を高精度に行えるようになった[6]。そこで、開発されてきた技術と同じく難病の一つである網膜色素変性の超広角蛍光眼底写真に対しても応用した結果、十分に適用可能であると考えられる。網膜色素変性の原因遺伝子は非常に多く存在するため、その種類によって病態や進行が多岐に渡り、そのために適切な治療法が異なる可能性もある。そのため、原因遺伝子を基準とした、より詳細な疾患の分類が求められる。筋病理の先行研究のように、予め分類すべき疾患が定められているケースでは、各疾患にクラスを割り当てることで分類器を深層学習により作成することが可能であるが、網膜色素変性では、どの遺伝子群が近いクラスとして属しているのかは不明なため、クラス分類のような深層学習を直接適用できない。本研究では、この問題に対して Metric Learning による深層学習を通じて原因遺伝子間の色素変性パターンの違いを導き出すクラスタリング手法の開発を行なった。初めに、広角眼底写真から色素変性領域を抽出する分類器を作成したが、この時に色素変性領域の抽出と再学習を半教師的に繰り返すことで、専門医による教師データ作成労力を削減した。また色素変性領域抽出の高解像度化により、詳細に色素変性パターンを捉えることを可能とした。

開発したクラスタリング手法を広角眼底写真に適用した結果、二つの原因遺伝子間でパターンの異なる色素変性を検出することができた。今後、これらの遺伝子間の機能的な特徴の違いを調査することで、疾患再分類における有益な知見となることが期待できる。今回、クラスタリング手法の検証を目的とするため、症例数が多い原因遺伝子に限定した。しかしながら原因遺伝子の多くは、一つのクラスにおける教師データとして用いるには困難なほど症例数が少なく、加えて原因遺伝子が未だ不明な症例も多く存在する。本手法は、テストデータによる検証で用いたように、分類器を新規データに適用することで、各画像を特徴空間上に写像することができる。そこで、初期のクラスタリングでは症例数が多い原因遺伝子に限定し、そこで得られた分類器を基に、逐次的に原因遺伝子を追加するなどの工夫を用いて、クラスターの拡張を行う手法の開発を行っている。この際には、2クラス分類器をより多クラスの分類器へ拡張することも同時に進めている。これにより、網膜色素変性の様々な原因遺伝子群を、類似する色素変性パターン毎に分類していくことを目指す。

謝 辞

本研究は、2020年度東京大学情報基盤センター若手・女性利用者推薦制度の支援により実施いたしました。本研究の遂行に当たりましては、京都大学医学研究科附属ゲノム医学センターの松田文彦教授、稲富雄一氏、京都大学医学研究科眼科学教室の辻川明孝教授、沼 尚吾助教、大石明生助教（研究当時）、日本 IBM 株式会社の高野敦司氏（研究当時）、中野宏毅氏、壁谷佳典氏、関西医科大学附属生命医学研究所・ゲノム解析部門の日笠幸一郎教授の多大なるご協力を頂きました。ここに深く感謝いたします。

参 考 文 献

- [1] Daiger SP. *et al.*, Data services and software for identifying genes and mutations causing retinal degeneration, *Invest. Ophthalmol. Vis. Sci.*, 39:S295, 1998.
- [2] Oishi M. *et al.*, Comprehensive Molecular Diagnosis of a Large Cohort of Japanese Retinitis

- Pigmentosa and Usher Syndrome Patients by Next-Generation Sequencing, *Invest. Ophthalmol. Vis. Sci.*, 55(11), pp.7369-7375, 2014.
- [3] Abadi M. *et al.*, TensorFlow: A System for Large-Scale Machine Learning, In 12th USENIX symposium on operating systems design and implementation (OSDI 16), pp.265-283, 2016.
- [4] Chollet F., Keras, GitHub, <https://github.com/fchollet/keras>, 2015.
- [5] Kulis B. *et al.*, Metric learning: A survey, *Foundations and Trends® in Machine Learning*, 5(4), pp.287-364, 2013.
- [6] Kabeya Y. *et al.*, Deep convolutional neural network-based algorithm for muscle biopsy diagnosis, *Lab Invest.*, 102(3), pp.220-226, 2022.

第 XI 因子・トロンビンと血小板膜糖蛋白 GPIb α および VWF 複合体の結合エネルギー計算

中山正光

東海大学内科学系循環器内科学

1. はじめに

動脈硬化や糖尿病の治療に適用される抗血小板療法は、血中の血小板細胞の機能（活性化、凝集）を化学的に阻害する。血管内における血栓症の発症（血栓イベント）は抑制するが、既存薬は阻害効果が強すぎるため出血の副作用が大きな問題となっている。血流下の血栓形成の要因となる血小板接着は血小板膜糖蛋白 GPIb α と von Willebrand 因子（VWF）の相互作用によって惹起される（図 1）。

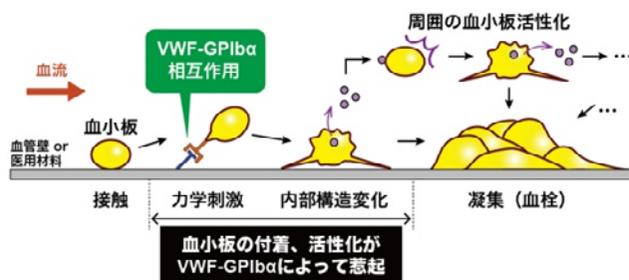


図 1 血流下における血小板相互作用

我々は、実証実験にて血小板接着に必須な血小板膜糖蛋白 GPIb α と von Willebrand 因子 (VWF) の相互作用に血液凝固因子の第 XI 因子 (FXI) とトロンビンが影響を与え、血栓形成に寄与するという知見を得た。これら 4 種のタンパク質の相互作用を分子動力学計算することで、出血イベントも血栓イベントも起こらない次世代の抗血小板薬の創薬標的モデルを作成する。血小板付着現象において中心的な役割をしている GPIb α および VWF の相互作用に対し、血液凝固因子に与える影響を分子動力学計算より明らかにした。過去の知見から凝固因子の対象として、第 XI 因子 (FXI) とトロンビンを選択したが、計算の都合上、本研究期間では FXI 因子について扱った。

2. 方法

GPIb α および VWF 複合体は先行研究のモデル (PDBID: 1SQ0) を使用¹し、FXI は結晶構造 (PDBID: 2F83) を用いた² (図 2)。実証実験から相互作用すると明らかになっているアミノ酸同士を約 5 Å に近づけた状態で初期構造を作成した。水分子を周囲 15 Å の領域に配置し、すべての原子の座標と速度ベクトルを 2×10^{-15} 秒毎に予測計算した。原子に作用する力として CHARMM (Chemistry at HARvard. Macromolecular) -36 力場を用いた。分子動力学計算のプログラムとして Nano

Scale Molecular Dynamics (NAMD) を用いて計算を実行した。

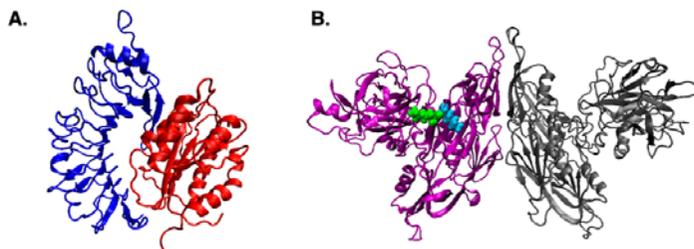


図2 計算に使用したモデル

(A. 青 GPIb α ・赤 VWF B. 紫 GPIb α 相互作用部位・灰 相互作用しない部位)

3. 結果

5×10^8 ステップの計算を行い、安定構造を予測した。Root mean square deviation (RMSD) を図3に示す。

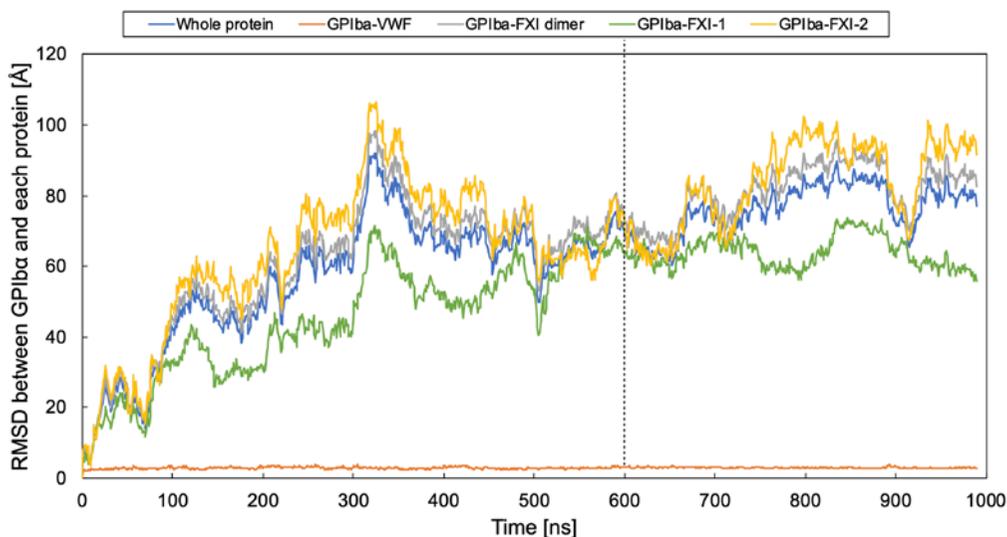


図3 対象モデルの平均二乗偏差の時間変化

計算時間中における GPIb α と VWF の平均二乗偏差 (RMSD) は GPIb α と FXI の RMSD よりも小さかった。FXI は計算開始から 300 ns 程度で GPIb (青) -VWF (赤) 複合体との安定構造を形成し始めた。GPIb α と相互作用した FXI-1 は 600 ns 以降、他の FXI 構造体に比べ安定していた。二量体の FXI (灰・紫) のうち、紫で示す部分の LYS253 (緑) が GPIb α の ASP73 (橙) と salt bridge (酸性アミノ酸と塩基性アミノ酸の間に形成) を形成し、相互作用していた (図4)。GPIb α と FXI の間にはこの1対以外の salt bridge は形成されなかった。タンパク質間に生じる非共有結合エネルギーについては GPIb α と VWF 間は GPIb α と FXI 間よりも負に大きく、安定していた。一方、GPIb α と VWF の間に形成される Salt bridge は6個あったが、FXI の相互作用によってその相互作用ペアが変化した。本研究から我々が構築したモデルにおいては、FXI は一対のアミノ酸によって GPIb α -VWF 複合体と相互作用し、その相互作用は GPIb α -VWF のものより弱いことが

明らかとなった。本研究では VWF は A1 ドメインを、GPIb α は N 末端ドメインのみを扱っており、実現象を完全に反映はできていない。

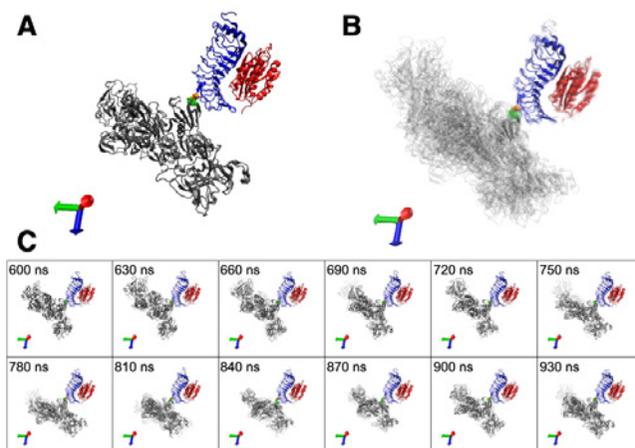


図 4 計算結果の時間経過の運動軌跡

(A. 960ns 計算後のタンパク質複合体の安定構造 B. 計算結果の重ね合わせ画像

C. 重ね合わせに使用した各軌跡の画像)

4. 結論

分子動力学計算を用いた安定構造予測から FXI は GPIb α と VWF の相互作用に影響を与えることが示唆された。分子動力学計算を用いた安定構造予測から FXI の GPIb α への結合により、GPIb α と VWF の結合構造の細部のみが変化した。

謝辞

本研究での計算は、東京大学情報基盤センター若手・女性利用者推薦制度（2020 年度）の援助を受け、Oakforest-PAC を利用した。

参考文献

1. S. Shiozaki, *et al.*, *J Atherosclero Thromb*, 2015
2. F.A. Baglia, *et al.*, *J Biol Chem*, 2004

微視的界面構造に基づくナノコンポジットの機械的特性の発現メカニズム

屋山 巴

工学院大学 先進工学部 応用物理学科

1. はじめに

人工衛星や宇宙往還機など、宇宙空間で運用する機器類を構成する構造部材は軽量性と高い強度を兼ね備えていることが求められる。近年、カーボンナノチューブ(CNT)やグラフェンなどのナノカーボンを強化材とした複合材料である、ナノコンポジットが注目されている。ナノカーボンは、炭素の共有結合のみからなる物質で、極めて高い強度を有する。しかし、母材樹脂への分散性の低さや、強化材/樹脂間の界面接着性の低さにより、実用への課題は多い。特に、界面接着性については、ナノカーボンと樹脂間の化学結合状態がカギとなると考えられ、微視的な界面構造とそこでの電子状態の理解が必須である。本研究では、強化材にCNT、母材にエポキシ樹脂のモデル分子を選択し、原子スケールの界面モデルを構築、界面近傍における電子状態について考察した。

2. 複合材料界面におけるCNT点欠陥の役割

本研究では、密度汎関数理論に基づく第一原理計算により電子状態を求めた。ジグザグ型(7,0)単層カーボンナノチューブ(SWCNT)を強化材、ビスフェノールAジグリシジルエーテル(DGEBA)分子を樹脂モデルとして、両者が接合した界面モデルを作成した。CNTについては、欠陥のないモデルと、点欠陥を有し、結合に寄与しうる価電子をあえて生じさせた欠陥モデルを用意した。これらに対し、DGEBA樹脂分子をCNTに対してさまざまな位置に配置して、電子の全エネルギーおよび状態密度を調べた。欠陥のないCNTと樹脂では、CNTの炭素原子直上に分子を近づけると、エネルギー的に不安定となり、CNTのハニカム構造の空隙である六角形の中心部分に分子が位置するときエネルギーが最も安定であった。これは、CNTが未結合手を持たず、原子間には反発的な相互作用のみがはたらくためである。一方、CNTに欠陥を導入した箇所隣接する原子付近に樹脂分子を接近させたとき、そのほかの位置に分子を配置するよりも安定となる場合があった。このときの電子状態密度を調べたところ、欠陥に起因する電子準位が、分子を接近させること

によって減少することがわかった。これは、CNTの未結合手と分子との間に結合/反結合準位を形成し、欠陥状態が伝導帯/価電子帯中に移動したためであると考えられる。実際に、電荷密度分布を可視化すると、欠陥近傍に配置したDGEBA分子とCNTの間には、わずかながらも軌道の共有が見られることがわかった。このことから、欠陥の存在によりCNTと樹

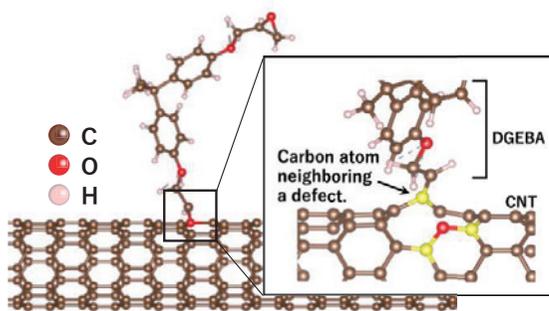


図1: CNT/DGEBA 界面結合モデル。

表 1: CNT/DGEBA 界面と基本的な炭化水素における炭素原子間の結合長と結合エネルギー.

	CNT/DGEBA interface (this work)	Ethane [1]	Ethylene [1]
Bond length [Å]	1.35	1.54	1.34
Binding energy [kJ/mol]	636.80	376	611

脂の間の軌道の共有が促進されており、化学結合が生じる可能性があると考えられる。この結果については、[Y. Serizawa et al., *Jpn. J. Appl. Phys.* (2022) 055002] に報告済みである。

本研究ではさらに、CNT の点欠陥に DGEBA を結合させた界面結合モデルを用い、点欠陥の有無とその終端状態が CNT の剛性へ与える影響を調べた。界面結合モデルを図 1 に示す。界面では、CNT の欠陥近傍の炭素原子と、DGEBA の端にある炭素原子とが結合している。CNT 長手方向のセルサイズを 1% ずつ変化させながらエネルギーを計算し、これを CNT がたくわえるひずみエネルギーとみなして引張試験を再現した。ここから、剛性を表す指標であるヤング率を求めた。まず参照値として CNT のみのヤング率を調べると、欠陥のない CNT では、ヤング率が 894.32 GPa であったのに対し、点欠陥を有する CNT は 845.49 GPa と約 5.5% 剛性が低下した。一方で、DGEBA が結合した界面モデルにおいては、ヤング率が 895.20 GPa と、欠陥のない CNT と同等程度の値となった。これは、CNT に点欠陥が生じることにより、CNT 本来の完全な sp_2 混成軌道ネットワークがやぶれて剛性が低下したものの、DGEBA との界面化学結合の形成により、再び電子が過不足なく結合に寄与したため、ヤング率が回復したと考えられる。このときの界面の炭素間結合のエネルギーおよび結合長を、炭素間に単結合を有するエタン、二重結合を有するエチレンといった基本的な炭化水素と比較したものを表 1 に示す。数値はエチレンのものと近く、界面の炭素間結合は二重結合的な状態にあり、比較的強い結合が生じていることが推察される。このことから、CNT 欠陥近傍において化学的活性が高い状態を活用することにより、CNT と母材樹脂間に強固な結合を生じる可能性が見出された。

3. まとめと今後の展望

微視的構造モデルを用いた理論検討により、界面接着性を高めるために化学的活性の高い欠陥構造を活用することの有意性が確認された。今後は、樹脂の分子量を大きくした大規模系にモデルを拡張し、樹脂の複雑な構造を反映したうえでより安定な微視的構造群を探る。そのために、今回用いた第一原理計算を軸としつつも、古典分子動力学手法や機械学習による分類手法などを効果的に融合し、高い機械的特性を有するナノコンポジットの作成指針を得る予定である。

謝辞

本研究は東京大学情報基盤センター若手・女性利用者推薦制度の助成を受けて実施された。

参考文献

[1] 荒木 孝二、高原 淳、明石 満、工藤 一秋「有機機能材料」東京化学同人。

随伴変数法とベイズ最適化による Top-Seeded Solution Growth 法を用いた SiC 結晶成長における断熱材分布最適化

竹原悠人, 岡野泰則

大阪大学大学院 基礎工学研究科

1. 諸言

炭化ケイ素(SiC)結晶は幅広いバンドギャップ、高い熱伝導率、低いオン抵抗値などの優れた特性を持つパワー半導体である[1]。SiC 結晶を作製する方法として気化させた SiC から結晶を作製する気相成長法、Si-C 溶液から結晶を作製する溶液成長法がある。Top-Seeded Solution Growth (TSSG)法は溶液成長法の一つで、気相成長法に比べて高品質な結晶を作製することが可能であるため、注目を集めている。TSSG 法では、炭素でできたるつぼ内で、固体のケイ素を加熱し融解させる。融解したケイ素に、るつぼから結晶作製に必要な炭素が供給されることで、Si-C 溶液が形成される。その後、炭素が溶液内の流れによって溶液表面上の低温部に取り付けられた SiC 種結晶に運ばれることで SiC 結晶が成長する (図 1 参照)。以上の過程から結晶が作製されるため、溶液内の流れなどの移動現象の理解と制御が、高品質な結晶作製に必要不可欠である。ところが、実験中は 1500 K 以上の高温環境となること、断熱のために装置を遮蔽すること、さらにケイ素が不透明な液体であることから、移動現象を直接観察することは困難である。以上のような理由から、これまで数値計算を用いた研究が行われてきた。我々は以前に数値解析により、結晶端部において生じる界面張力勾配に由来するマランゴニ対流が、結晶付近で支配的になることを明らかにした。さらにそのマランゴニ対流によって、結晶表面上の過飽和度が不均一になることがわかった[2]。これらを考慮し、マランゴニ対流を抑制しうる制御手法の提案にも取り組んだ。随伴変数法を用いた溶液とるつぼの境界における温度場の最適化では、マランゴニ対流を抑制し、結晶表面における過飽和度の改善に成功した[3]。これにより、溶液部の温度分布を制御することでマランゴニ対流の抑制が可能であることがわかった。

しかしながら、溶液部の温度分布のみを制御する方法は未だ確立されていない。そこで本研究では、これまで断熱のみを目的としてきたるつぼ周辺の単一の断熱材に着目し、複数の断熱材を組み合わせて利用することで、溶液内温度分布の制御を行った。

2. 解析手法

図 1(a)に示すように、これまで使用されていた熱伝導率 $k=0.3 \text{ W/(m}\cdot\text{K)}$ の単一の断熱材を 9 つの断熱材により構成することを考え、それらの熱伝導率の最適化を行った。断熱と排熱を行うために溶液部に近い領域 ($i=5-9$) では、熱伝導率を 0.3, 0.6, 3, 6 $\text{W/(m}\cdot\text{K)}$ のうちから選択し、外部の領域 ($i=1-4$) では、断熱を目的として 0.3, 0.6 $\text{W/(m}\cdot\text{K)}$ から選択した。

数値計算はこれまでの先行研究と同様に Integrate Process Model (IPM)[4]を使用した。IPM では、全体の計算を誘導加熱のための電磁場解析、炉内全体の温度場解析、溶液内移動現象解析の 3 段階に分けて行う。熱伝導率の変更による電磁場の影響はないものとして考え、熱伝導率を変更し、炉内全体の温度場解析と溶液内移動現象解析を行った。数値計算によって得られる結晶表面の過

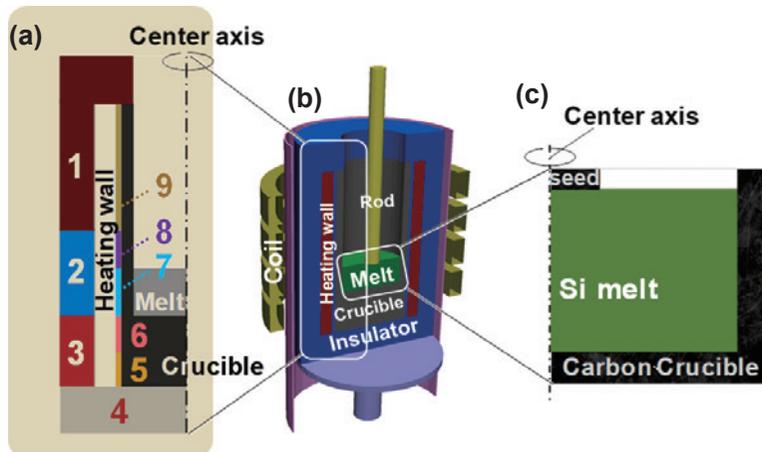
飽和度から結晶成長速度 v_g を以下の式を用いて算出した

$$v_g = -(DM/\rho)\mathbf{n} \cdot \nabla C|_{\text{seed}}$$

ただし、 D は拡散係数、 M は SiC 結晶のモル質量、 ρ は SiC の密度、 C は炭素濃度である。以上により求めた結晶成長速度分布から周方向に対する平均値 M と標準偏差 σ から以下のように目的関数 f を定義した。

$$\begin{aligned} f &= \frac{M - M_0}{M_0} + \frac{\sigma_0 - \sigma}{\sigma_0} \\ &= \frac{M}{M_0} - \frac{\sigma}{\sigma_0} \\ &= M^* - \sigma^* \end{aligned}$$

ただし、 M_0, σ_0 はそれぞれ、従来の断熱材配置における結晶成長速度の平均値と標準偏差である。目的関数は結晶成長速度の平均値と標準偏差の改善率の和として定義され、これを最大化することで均一で、かつ高い結晶成長速度を達成する断熱材の熱伝導率配置を求めた。最適化にはベイズ最適化を使用した。



第 1 図: 異なる熱伝導率を持つ 9 つの断熱材配置図(a)、TSSG 法に用いられる実験装置の模式図(b)、溶液部分の拡大図(c)

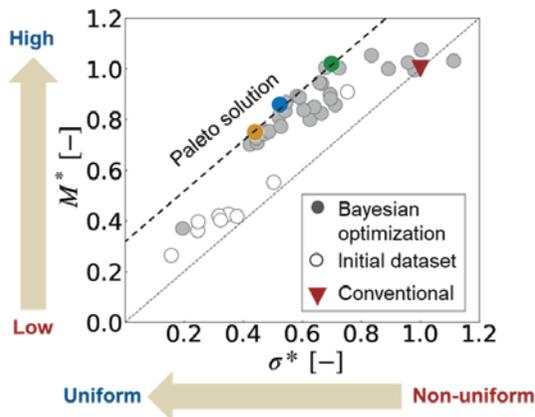
3. 結果と考察

図 2 に最適化の結果を示す。図上で左上の領域が均一で高い結晶成長速度であることを意味する。現在得られている最適状態 (青点) では、縦軸に示された結晶成長速度の大きさ (M^*) を保ちながら、横軸に示された均一度 (σ^*) の改善に成功していることがわかる。さらに、図 2 に色付きの丸点で示されたパレート解上の 3 点と逆三角で示された初期状態における結晶成長速度を図 3 に示す。パレート解上の各点において、結晶成長速度の均一度が改善されていることがわかる。

さらに各点における断熱材配置と温度分布を図 4 に、そして溶液表面上における温度分布、温度勾配を図 5 に示す。図 4 から、均一な結晶成長速度が得られた熱伝導率の組み合わせ(a, b, c)においては、断熱性能の高い (低い熱伝導率を持つ) 断熱材が溶液付近に配置され、断熱性能の低い (高い熱伝導率を持つ) 断熱材が溶液から離れたるつぼ上部に配置されていることがわかる。

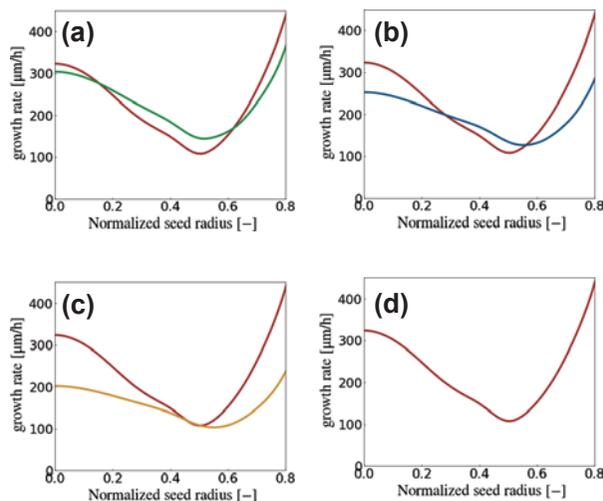
これにより、加熱壁 (Heating wall) から溶液部に伝わる熱量が減少し、るつぼ上部から排熱されるという熱の移動が生じていることがわかる。その結果、図 5 に示すように溶液表面上における温度差と温度勾配が減少し、温度勾配由来のマランゴニ対流が抑制され、結晶成長速度が改善されたと考えられる。

これらの結果から、側面からの溶液部に対する熱の輸送量を制御することで、マランゴニ対流を抑制するための温度分布が得られることがわかった。



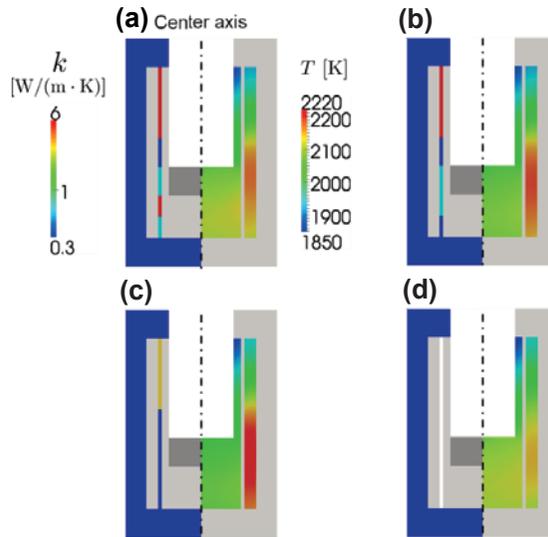
第 2 図: ベイズ最適化により提案されたパラメータにおける結晶成長速度の平均値と標準偏差

(a) において左にある点ほど低い標準偏差、つまり均一な成長速度であることを意味し、上にある点ほど高い平均値、つまり大きな成長速度であることを意味する。灰色、白色の丸点はそれぞれ、ベイズ最適化により提案されたパラメータと初期データセットにおける計算結果を示し、赤色の逆三角形は従来の単一の断熱材配置における計算結果を示す。ベイズ最適化のための初期データセットはランダムにパラメータを変更して生成した。



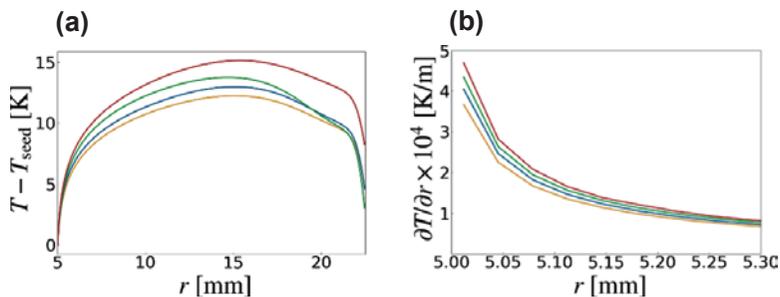
第 3 図: 図 2 において色付きの丸点で示された点における結晶成長速度。

(a) は緑点、(b)は青点、(c)は黄点、(d)は従来の断熱材を使用した際の結晶成長速度を示す。(a), (b), (c)における結晶成長速度の均一度は従来のものと比較してそれぞれ、+38%, +48%, +58%改善された。



第4図: 第2図の緑(a), 青(b), 黄(c)点と従来(d)の断熱材配置。

左側に断熱材の熱伝導率、右側に温度分布を示した。熱伝導率に対しては違いを強調するために、対数スケールのカラーバーを使用した。



第5図: 自由界面における温度分布(a)と自由界面上の結晶付近における温度勾配(b) 線の色は図2の点の色に相当する。

4. 結言

炭化ケイ素結晶成長のための TSSG 法において、ベイズ最適化により選択された熱伝導率の異なる複数の断熱材を用いることで、結晶成長速度の大きさを保ちながら、均一度の改善に成功した。改善に成功した断熱材の組み合わせにおける温度分布から、溶液側面からの熱の輸送量の制御が高品質な結晶作製に必要であることがわかった。

引用文献

- [1] Q. Xun *et al.*, *Renew. Sust. Energ. Rev.* **70** (2017), 1336-1342.
- [2] T. Yamamoto *et al.*, *J. Cryst. Growth*, **470** (2017) 75-88.
- [3] T. Horiuchi *et al.*, *J. Cryst. Growth*, **517** (2019) 59-63.
- [4] P. M. Gresho, J. J. Derby, *J. Cryst. Growth*, **85** (1987) 40-48.

汎関数繰り込み群による量子スピン液体候補物質の物性解明

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の精力的な研究により候補物質が多く発見され、その物性が解明されてきた。それに加え、元々の Kitaev 模型は $S=1/2$ の量子スピン模型であったが、近年になって $S=1$ や $S=3/2$ といった、 $S>1/2$ の Kitaev 模型の候補物質の提案が理論と実験の双方からなされ始めた [3]。しかしながら、一般の S について厳密解は未だ見つかっておらず、数値計算についても、一般に S の増大と共に系の Hilbert 空間の次元も増大することが系統的に S を変化させた研究を困難にしている。さらに、多くの候補物質においては、Kitaev 型相互作用に加え、Heisenberg 型相互作用等の非 Kitaev 型相互作用が不可避免的に存在し、Kitaev 量子スピン液体状態の実現可能性やその安定性を議論する上では、それらの相互作用をも取り入れたフラストレートした量子スピン系の計算手法が必要となる。

そこで、本研究ではこれらの困難を克服し、かつ、大きなシステムサイズでの基底状態の計算が可能である計算手法として PFFRG 法 [4]に着目し、 $S>1/2$ の高スピン候補物質のミニマルな模型の 1 つであるスピン S の Kitaev-Heisenberg 模型の基底状態相図を解明する [5]。

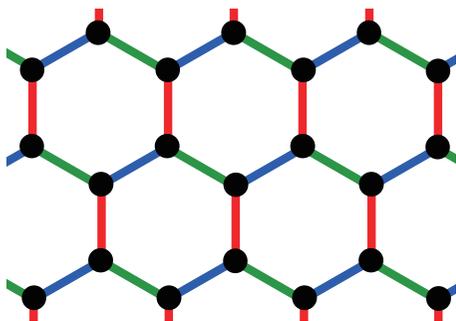
2. 模型と手法

上述の通り、本研究ではスピン S の Kitaev-Heisenberg 模型、

$$\mathcal{H} = \frac{1}{(2S)^2} \sum_{\mu=x,y,z} \sum_{\langle i,j \rangle_{\mu}} [2 \sin(2\pi\xi) S_i^{\mu} S_j^{\mu} + \cos(2\pi\xi) \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j]$$

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、 ξ は Heisenberg 相互作用

用と Kitaev 相互作用の強さの比を決めるパラメータであり、和 $\sum_{\langle i,j \rangle_{\mu}} S_{\mu}$ は、 $\mu = x, y, z$ ボンド上の最隣接スピン間の和を表している。この模型が定義されているハニカム格子を図 1 に示す。



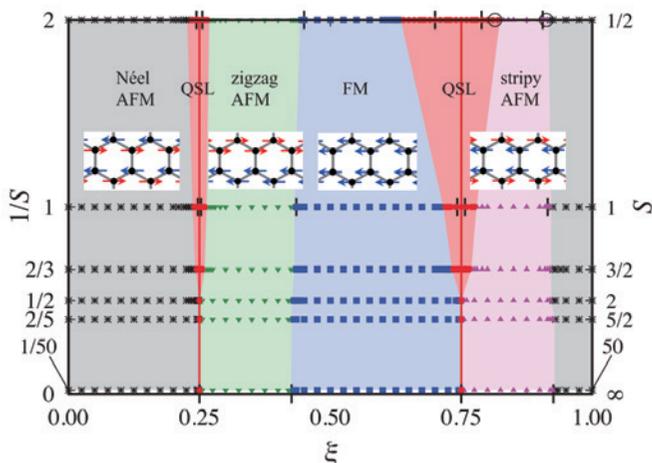
第 1 図: ハニカム格子上に定義された模型の模式図。青色、緑色、赤色のボンドはそれぞれ、 x, y, z ボンドを表す。

また、ここでは異なる S をもつ模型間でエネルギースケールを揃えるために全体を $(2S)^2$ で割っている。本研究では、この S を系統的に変化させながら模型の基底状態を解明する。

上述の通り、Kitaev 型相互作用と非 Kitaev 型相互作用の双方を取り扱え、かつ、 S を系統的に変化させるような計算が大きなシステムサイズで実行できる手法は非常に限られている。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 [4] を用いてこれを可能にする。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、フラストレーションのある場合も含む多彩なスピン間相互作用を持つ模型を取り扱うことができる。さらには、一般のスピン S を持つ系への拡張法も提案されている [6]。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

前節で述べたように、Kitaev 型相互作用と Heisenberg 型相互作用の比と符号を決めるパラメータ ξ とスピンの長さ S を系統的に変化させながら、スピン S の Kitaev-Heisenberg 模型の基底状態



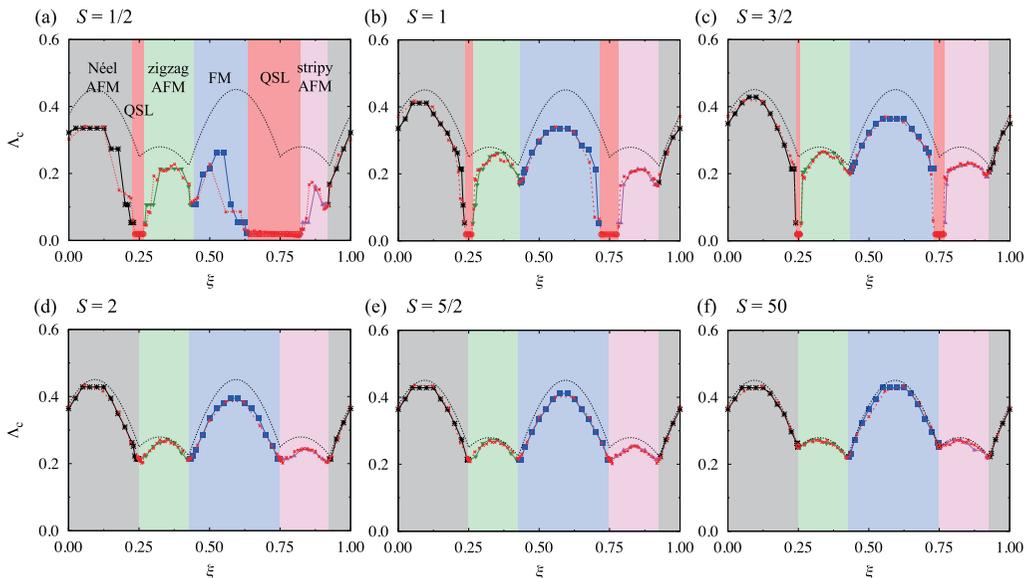
第 2 図: PFFRG 法を用いて得られたスピン S の Kitaev-Heisenberg 模型の基底状態相図。

を PFFRG 法により計算して得られた基底状態相図と各磁気秩序相でのスピン配位の模式図を第 2 図に示す。磁気秩序相への相転移は、常磁性状態で計算したスピン感受率の繰り込み群のカットオフエネルギースケールである Λ 依存性から判断している。 Λ を小さくしながら各 Λ でのスピン感受率を計算し、感受率が最大となる波数 \mathbf{k}_{\max} におけるスピン感受率 (z 成分) $\chi^{zz}(\mathbf{k})$ がある臨界エネルギースケール Λ_c で発散した場合は、その波数 \mathbf{k}_{\max} に対応する秩序ベクトルの

磁気秩序が実現したと判断している。実際の数値計算においては、有限サイズ効果や周波数について離散的なメッシュを用いているために、感受率の発散は感受率が Λ_c 以下の Λ において数値的な不安定化となって現れるため、この不安定化によって秩序化の判定を行なっている。逆に、量子スピン液体状態では $\Lambda=0$ までスピン感受率は発散しないため、計算で用いた Λ の最小値である Λ_{\min} までスピン感受率が不安定な振る舞いを示さない場合は量子スピン液体状態と判定した。ここで、スピン感受率の x 成分と y 成分は模型の 3 回対称性によって z 成分から得られるため、ここでは z 成分のみを考える。

まずは、 $S = 1/2$ 、 1 と $S = \infty$ (古典スピン) の場合に先行研究 [7-9] で示されているように、Néel 反強磁性 (AFM)、zigzag 反強磁性、強磁性 (FM)、stripy 反強磁性の 4 つの磁気秩序相が見られ、これらの秩序の種類とそれらの間の相境界は S にあまり依らないこと、また、これは先行研究で得られた相境界とほぼ一致することが確かめられた。 $S = 1/2$ 、 1 、 ∞ の場合の先行研究における相境界は相図において短い黒線で示している。これら 4 種類の磁気秩序相に加え、赤色で示した量子スピン液体 (QSL) 相が 2 つの Kitaev 点である $\xi = 0.25$ 、 0.75 の周りに見い出された。先行研究と比較して、本研究の結果では量子スピン液体相が過大評価されているが、これはシステムサイズや計算手法の違いだと考えられる。また、図中で \circ で示された PFRG 法を用いた $S = 1/2$ の場合の先行研究 ($0.75 \leq \xi \leq 2.00$) の相境界と本研究による相境界はよく一致している。 S を大きくしていくと量子スピン液体相が狭くなっていき、本研究の手法・近似の範囲内では S が 2 よりも大きい場合は有限の量子スピン液体相は見られなかった。

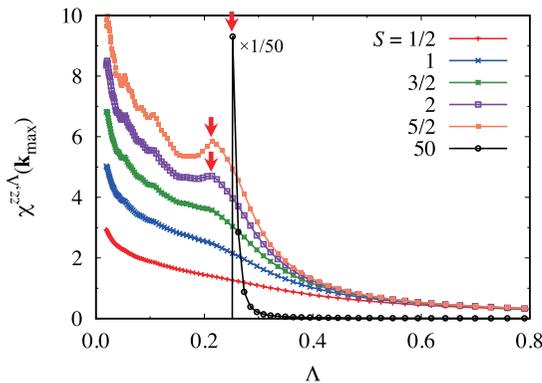
第 3 図に各 S における Λ_c の値を示す。秩序相においては Λ_c の値を、量子スピン液体相においては Λ_{\min} をプロットしている。先行研究では、 S の値によらず Kitaev 点 (本研究では $\xi = 0.25$ 、 0.75) では基底状態はスピン液体であることが解析的に示されている [10]。しかしながら、本研究では、 $S = 1/2$ から $3/2$ までは Kitaev 点では Λ_{\min} までスピン感受率の不安定化が見られないが、 S が 2 以上の場合、有限の Λ でスピン感受率に不安定化が見られた (これを Λ^* とする)。下で議論する通り、これは計算における近似によるアーティファクトであると考えられる。各秩序



第 3 図: PFRG 法を用いて得られた、各 S での Λ_c の ξ 依存性。

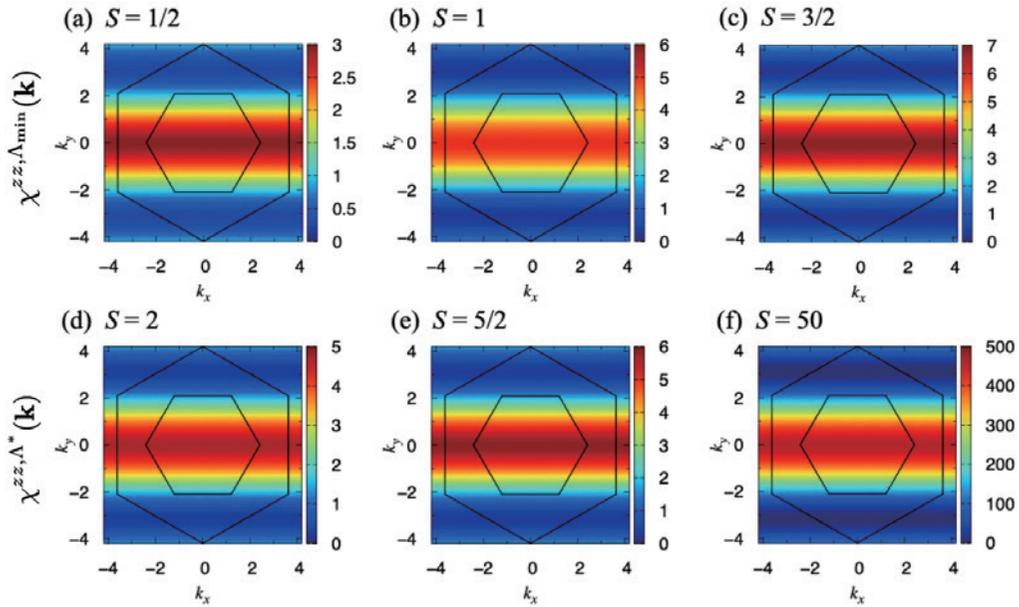
相においては Λ_c はドーム状の構造をとっているが、 $S = 1/2$ では離散的な値をとっているように見え、 S が大きくなるとともに滑らかな Λ 依存性を示している。これは、 S が小さい場合は量子性が強く、周波数依存性が強く効いてくるため、周波数において有限のメッシュを切っていることが原因だと考えられる。実際、 S が小さいときは Λ_c の値が周波数のメッシュ数の影響を受けやすいことが確認されている。また、第 3 図において、古典スピン系のための手法である Luttinger-Tisza 法 [11, 12] によって得られた系の古典エネルギーの絶対値を黒破線で示している。 S が小さい場合は Λ_c は Luttinger-Tisza 法の結果と異なるが、 S を大きくするにつれて Λ_c が Luttinger-Tisza 法に近づくことが見てとれる。本研究で用いたスピン S の場合へ拡張された PFRG 法は $S \rightarrow \infty$ で Luttinger-Tisza 法に一致することが解析的に示されているため [6]、この振る舞いは本研究においてスピン S への PFRG 法の拡張がうまくいっていることを示している。さらに、図において 4 副格子変換を施した Λ_c を赤破線で示している。4 副格子変換においては、 $\xi \rightarrow \xi' = \arctan[-\tan(2\pi\xi) - 1]/2\pi$ と変換され [7]、 ξ における Λ_c は、 $\Lambda_c(\xi) \rightarrow \Lambda_c'(\xi') = \Lambda_c(\xi)/\sqrt{[\sin(2\pi\xi) + \cos(2\pi\xi)]^2 + \cos(2\pi\xi)^2}$ と ξ' における Λ_c' として変換される。分母はエネルギースケールを揃えるための因子である。第 3 図を見ると、 $S = 1/2$ においては Λ_c が離散的であることによる多少のずれはあるものの、全ての S において $\Lambda_c(\xi)$ と $\Lambda_c'(\xi')$ がよく一致している。これは、我々の結果が模型の持っている 4 副格子対称性を反映していることを示しており、結果の妥当性を示すもう 1 つの根拠になっている。

次に、Kitaev 点における結果を詳しく議論する。まず、第 4 図に強磁性 Kitaev 点 ($\xi = 0.75$) におけるスピン感受率 $\chi^{zz}(\mathbf{k})$ の Λ 依存性を示す。 $S = 1/2$ から $3/2$ までは感受率は Λ_{\min} まで不安定化を示さないが、 $S \geq 2$ では赤い矢印で示した Λ^* で感受率が秩序化のような不安定性を示している。この振る舞いが秩序化を意味しているのかどうかを明らかにするために、スピン感受率の波数 \mathbf{k} 依存性を調べる。第 5 図にスピン感受率の波数依存性を示す。 $S = 1/2$ から $3/2$ については Λ_{\min} における感受率、 $S \geq 2$ については Λ^* における感受率をプロットしている。図より、全ての S において、感受率は $\cos(k_y) + \text{const.}$ に比例していることがわかる。これは、スピン感受率が最近接サイト間のみで有限であり、全ての S において、基底状態は



第 4 図：強磁性 Kitaev 点 ($\xi = 0.75$) でのスピン感受率の Λ 依存性。

スピン相関が最近接のみである Kitaev 型の量子スピン液体であることを示している。これは、先行研究における解析系計算の結果 [10] と一致している。つまり、感受率の Λ 依存性において Λ^* でみられた不安定化のような振る舞いは、系の秩序化に伴う不安定化ではなく、PFRG 法で用いている 1 ループ近似によるアーティファクトであると結論づけられる。近年拡張されたマルチループ近似の PFRG 法 [13, 14] をスピン S に拡張して計算することができれば、このアーティファクトは取り除かれると期待できる。反強磁性 Kitaev 点 ($\xi = 0.25$) においても、基底状態の持つ対称性 (粒子-正孔対称性) より、同様の結果が得られる。



第5図：強磁性 Kitaev 点 ($\xi=0.75$) でのスピン感受率の波数依存性。

4. まとめ

本研究では、スーパーコンピュータを用いた並列計算により、スピン S の場合に拡張された PFFRG 法を用いてスピン S の Kitaev-Heisenberg 模型において、スピン S と Kitaev 相互作用と Heisenberg 相互作用の比を決めるパラメータである ξ を系統的に変化させながらスピン感受率を計算することによって基底状態相図を解明した。スピン S を大きくしていくと、量子スピン液体相は S の増加とともに急速に縮小し、 $S \geq 2$ の場合には有限のスピン液体相の領域は見出されなかった。対照的に、 S を増加させても秩序相同士の境界はあまり変化しなかった。また、任意の S について、Kitaev 点ではスピン相関が最近接サイト間のみである量子スピン液体状態となり、これは、先行研究における解析の結果と一致している。

我々の結果は、Kitaev 模型の基底状態で実現する量子スピン液体状態が Heisenberg 相互作用に対して安定であるためには量子揺らぎが重要であること、そして、 $S \geq 2$ の場合に量子スピン液体の実現のためには Kitaev 点に著しく近い相互作用となるように精密に相互作用がチューニングされていなければならない、このような候補物質の発見・設計は困難であることを示している。また、 $S = 3/2$ の Kitaev 量子スピン液体候補物質である CrI_3 について角度依存強磁性共鳴実験の結果から ξ の値として約 0.762 と見積もられており、このパラメータは本研究の結果では量子スピン液体相に含まれる。しかしながら、実験結果は強磁性 (FM) 秩序を示しており、これは、Kitaev-Heisenberg 模型に含まれていない Γ 項などのスピン非対角相互作用の重要性を間接的に示していると言える。

系のサイズを変えずにスピンの長さ S を系統的に変化させる計算は他の手法においては難しく、本研究の結果はスピン S の場合へ拡張された PFFRG 法によって初めて得られたものである。この結果は、 $S > 1/2$ の高スピン Kitaev 量子スピン液体候補物質の探索において重要な示唆を与える。本研究は、アメリカ物理学会の発行する国際誌である *Physical Review B* に掲載された [5]。

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] J. Reuther and P. Wölfle, *Phys. Rev. B* **81**, 144410 (2010).
- [5] K. Fukui, Y. Kato, J. Nasu, and Y. Motome, *Phys. Rev. B* **106**, 174416 (2022).
- [6] M. L. Baez and J. Reuther, *Phys. Rev. B* **96**, 045144 (2017).
- [7] J. Chaloupka, G. Jackeli, and G. Khaliullin, *Phys. Rev. Lett.* **110**, 097204 (2013).
- [8] X.-Y. Dong and D. N. Sheng, *Phys. Rev. B* **102**, 121102(R) (2020).
- [9] C. Price and N. B. Perkins, *Phys. Rev. B* **88**, 024410 (2013).
- [10] G. Baskaran, D. Sen, and R. Shanker, *Phys. Rev. B* **78**, 115116 (2008).
- [11] J. M. Luttinger and L. Tisza, *Phys. Rev.* **70**, 954 (1946).
- [12] J. M. Luttinger, *Phys. Rev.* **81**, 1015 (1915).
- [13] J. Thoenniss, M. K. Ritter, F. B. Kugler, J. von Delft, and M. Punk, *arXiv:2011.01268* (2020).
- [14] D. Kiese, T. Müller, Y. Iqbal, R. Thomale, and S. Trebst, *Phys. Rev. Res.* **4**, 023185 (2022).

極低温推進薬の軌道上貯蔵・輸送に向けた減圧沸騰現象の解明 と予測手法の開発

谷 和 磨

東京大学大学院工学系研究科

1. はじめに

宇宙分野においても極低温流体の大規模輸送・貯蔵技術の利用が期待されている。近年、米国を中心に月・火星有人探査に向けた動きが活発になってきており、そうした宇宙空間での長期間ミッションの実現に際し、軌道上燃料再補給船 (Space depot) [1] や液体水素を燃料とする核熱推進ロケット (Nuclear Thermal Propulsion Rocket) [2] などの利用も検討されており、極低温燃料を軌道上や低重力環境において長期間管理する技術が重要な役割を占めるようになると予想されている [3, 4, 5]。

また、近年の環境問題やエネルギー問題の解決に向けた活発な動きに伴い、これまで主に液体ロケット等の燃料として利用されてきた極低温流体の大規模利用の場面が増えつつある。水素社会を実現するために、日本政府は水素基本戦略を 2017 年に策定し、2030 年頃に商用サプライチェーンを構築し、2017 年現在の年間 0.02 万トンから 30 万トンへ水素流通を増やすことを掲げている [6]。この目標を達成するために構築される商用サプライチェーンの一つが The Hydrogen Energy Supply Chain である [7, 8]。この計画では、2030 年に液化水素をオーストラリアで褐炭から生産し、160000 m³ タンクを保有する液化水素運搬船で日本へ輸送することを目指している。

こうした将来的な軌道上燃料再補給船や国際水素サプライチェーンなど、大規模かつ長期間極低温流体を貯蔵し、輸送するプロジェクトの共通する課題の一つとして、減圧沸騰に関する問題がある。具体的には、Fig. 1 に示すように、外部からの入熱で発生したボイルオフガスによりタンク圧力は高くなり、タンクの限界圧力を超える危険性がある。これを防ぐために、放圧 (ベント) と呼ばれるタンク内の気体を外に逃すことでタンク内を減圧する。その際、減圧に伴う飽和温度の低下により、液体が過熱状態になり沸騰する現象である「減圧沸騰」が発生する。この現象により、タンク内の圧力制御が難しくなる上、突沸が発生しタンクの限界圧力を超えてしまう可能性や、発生した気泡により液面が押し上げられ液流出に繋がる危険性がある。宇宙においては、地上での課題に加えて、界面張力が重力を卓越するため気液の分離が難しい課題も付随する。

従来の減圧沸騰を対象にした研究は、高々 0.1m³ 程度の小寸法のタンクでの水・液体窒素を対象にした実験が中心である [9-20]。タンクの安全な運用の面で問題となりうる非定常な圧力回復

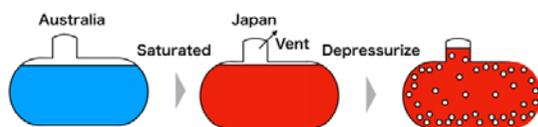


Fig. 1 Schematic of liquid state inside liquid hydrogen tanker during shipping.

現象(圧力が減少後上昇する)やそれに伴う液面上昇も確認されたが、その発生機構についての研究は少なく、大型タンクでの同様の実験事実が得られるのか十分に明らかにされていない。また、極低温流体を用いた研究も少なく、物性の影響に関しても不明な点が多い。よって、これらの問題を解決するためには、極低温流体の大型タンクにおける減圧沸騰現象に対する数値流体解析を実施する必要がある[21, 22]。しかし、相変化現象を取り扱う難しさから大型タンク内部の詳細な熱流体挙動の分析は少なく、その現象予測手法の開発が求められている上、減圧が数秒で完了する小タンクと異なり大型タンクをフルスケールで数値流体解析を行うのは計算コストの面で難しい。よって、大型タンク内部の熱流動現象を低コストで予測可能な手法の開発が急務である。

以上より、本研究の目的は、極低温推進薬の大規模・貯蔵輸送技術に向けて、大型タンク内の減圧時の圧力・液面挙動の予測技術を確立することを目的とする。

2. 数値流体解法

本研究では、圧力回復現象の解明を目的に数値流体解析(CFD)を実施した。解析には、Himenoら[23]やUmamuraら[24, 25]によって構築された自由表面流数値解析手法(CIP-LSM: CIP-based level set & MARS)を用いた。

均質二相流の支配方程式は、質量・運動量・内部エネルギーの式

$$\begin{aligned}
 \frac{D\rho}{Dt} &= -\rho\nabla\cdot\vec{u} \\
 \rho\frac{D\vec{u}}{Dt} &= -\nabla p + \nabla(\mathbf{T}_v + \mathbf{T}_\sigma) + \rho\vec{g} \\
 \rho\frac{De}{Dt} &= -p\nabla\cdot\vec{u} + \dot{\theta} \\
 \mathbf{T}_v &= -\frac{2\mu}{3}(\nabla\cdot\vec{u})\mathbf{I} + \mu(\mathbf{D} + \mathbf{D}^T), \\
 \mathbf{D} &= \nabla\vec{u}, \\
 \mathbf{T}_\sigma &= \sigma\delta_s(\mathbf{I} - \vec{n}_s\vec{n}_s^T), \\
 \dot{\theta} &= (\mathbf{T}_v + \mathbf{T}_\sigma)\nabla\cdot\vec{u} - \nabla\cdot\vec{q}.
 \end{aligned} \tag{1}$$

を解く流体解法の部分と、気液を識別する関数 H_s の移流方程式

$$\begin{aligned}
 \frac{DH_s}{Dt} &= \frac{\partial H_s}{\partial t} + (\vec{u}\cdot\nabla)H_s = 0 \\
 H_s &= 0.5 \quad \text{Liquid} \\
 H_s &= 0 \quad \text{Interface} \\
 H_s &= -0.5 \quad \text{Gas}
 \end{aligned} \tag{2}$$

を解く界面追跡法の部分で構成される。

CIP-LSM では、流体解法として CIP-CUP 法[26]の一種であり、温度を独立変数とする TCUP(Thermo CIP-CUP)法[23]を、界面追跡法として PLIC-VOF 法の一種である MARS 法[27]を採用している。また、CLSVOF(Coupled Level Set Volume-of-Fluid)法[28]と同様に、界面再構築には密度関数法の一種である Level-Set 法[29]を用いて、数値拡散を防ぎ界面を高精度で追従する仕様となっている。まず相変化を考慮した TCUP 法について説明する。局所熱平衡を仮定して相変化項を加えると、式(1)は基本量 $Q = (\mathbf{u}, T, p)^T$ を状態量とする次式に変換することができる。

$$\begin{aligned}
\rho \frac{D\vec{u}}{Dt} &= -\nabla p + \nabla(\mathbf{T}_v + \mathbf{T}_\sigma) + \rho \vec{g} + (\vec{u}_{gas} - \vec{u}_{liq}) \dot{m} \delta_s \\
\rho C_p \frac{DT}{Dt} &= -T \frac{\rho_T}{\rho} \frac{Dp}{Dt} + \dot{\theta} \\
\frac{1}{\rho C_s^2} \frac{Dp}{Dt} &= -\nabla \cdot \vec{u} - \frac{\rho_T}{\rho} \frac{\dot{\theta}}{\rho C_p} - \left(\frac{1}{\rho_{gas}} - \frac{1}{\rho_{liq}} \right) \dot{m} \delta_s \\
\dot{\theta} &= (\mathbf{T}_v + \mathbf{T}_\sigma) \nabla \cdot \vec{u} - \nabla \cdot \vec{q} - \{h_{gas} - h_{liq}\} \dot{m} \delta_s.
\end{aligned} \tag{4}$$

このうち、相変化を考慮することで生成された項

$$\begin{aligned}
&(\vec{u}_{gas} - \vec{u}_{liq}) \dot{m} \delta_s \\
&-\{h_{gas} - h_{liq}\} \dot{m} \delta_s \\
&-\left(\frac{1}{\rho_{gas}} - \frac{1}{\rho_{liq}} \right) \dot{m} \delta_s
\end{aligned} \tag{5}$$

は順に、運動量損失と生成、潜熱、気液密度差による体積湧き出しを示す。

TCUP 法では、支配方程式(4)の左辺の流体微分項を推定する移流項と右辺の非移流項に大別される。移流項では、矢部ら[26]が提案した双曲型偏微分方程式を解く高次精度差分法である CIP 法(Constrained Interpolation Profile Scheme)により、各状態量の値を更新する。非移流項では粘性項と伝熱項を陰的に評価し、速度と温度をそれぞれ修正する拡散段階と、それに続いて圧力項を陰的に評価して圧力を修正する音響段階に分けて解く。音響段階でポアソン方程式を解く際には、前処理として SA-AMG 法[30]を用い、非定常反復法の安定化双共役勾配法(Bi-CGSTAB 法)で解いている。また、大規模問題に対応するために、MPI を用いた領域分割法による解法の並列化も行っている。また、界面追跡法の部分に関しても、相変化による界面からの体積湧き出しを考慮すると次式を導くことができる。

$$\begin{aligned}
\frac{\partial H_s}{\partial t} + (\vec{u}_s \cdot \nabla) H_s - \frac{\dot{m}}{\rho_{gas}} \vec{n}_s \cdot \nabla H_s &= 0 \\
\frac{\partial H_s}{\partial t} + (\vec{u}_s \cdot \nabla) H_s - \frac{\dot{m}}{\rho_{liq}} \vec{n}_s \cdot \nabla H_s &= 0
\end{aligned} \tag{6}$$

相変化がない場合は $\dot{m} = 0$ で、かつ各相の速度と界面の速度が一致する ($\vec{u}_s = \vec{u}_{GAS} = \vec{u}_{LIQ}$) ので、一般的な識別関数の移流方程式となる。この式の解法には、二値関数の有限体積的な移流に優れた MARS 法を採用している。

相変化現象は、その複雑な機構から支配方程式で現れる \dot{m} を正確に計算するためには格子解像度を高くして計算する必要がある。しかし、相変化計算をする際には格子解像度を高くすると計算コストが増大するため、格子解像度が低くても相変化量を見積もれるモデルを導入する必要がある。そのため、**Fig.2** のような 3 段階の相変化モデルを採用する。まず CFD で捉えられる相変化と、CFD では捕えられないほど小さい相変化現象に分けて考え、前者は CFD により直接計算し、後者はサブグリッドスケールの相変化モデルで計算する。サブグリッドスケールの相変化モデルは 2 段階のモデルとなっており、壁面での気泡生成などを壁面沸騰モデルで、液相中での相変化を温度回復法ベースのモデルで計算する。これにより計算コストを抑えつつ、壁面セルでの気泡生成・成長から液相中での気泡成長をサブグリッドスケールモデルでも扱うことができる。

第一段階の壁面沸騰モデルでは、核沸騰と膜沸騰の両方を扱うことができるが、本研究では高い熱流束が必要な膜沸騰は無視する。核沸騰フェーズでは気泡生成の活性化条件 ΔT_K が既存気泡核における活性化条件

$$\Delta T = \frac{2\sigma \left(\frac{1}{\rho_{GAS}} - \frac{1}{\rho_{LIQ}} \right) T_{sat}}{L_{vap}} \frac{1}{r_c} \tag{7}$$

により計算され、液体の過熱度がこれより高い場合に気泡が生成される。

そして、壁からの入熱により成長する気泡(**Fig.3**)の成長速度は下式により計算する。

$$\dot{m}(\varphi) = \frac{\kappa_{LIQ}(T_{wall}-T_{sat})}{L_{vap} \times r(\cos \theta - \cos \varphi)}, \quad (8)$$

$$\dot{V} = \frac{1}{\rho_{GAS}} \oint_{Bubble} \dot{m}(\varphi) dS(\varphi) = \frac{2\pi\kappa_{LIQ}(T_{wall}-T_{sat})r}{\rho_{GAS}L_{vap}} \log \frac{\varepsilon + \cos \theta}{\varepsilon}. \quad (9)$$

気泡がある程度成長すると、第2段階の温度回復法ベースの沸騰モデルに移行し、

$$\dot{m} = \frac{\rho_{cell} V_{cell} C_p \min((T_{LIQ}-T_{sat}), \Delta T_{sup})}{L_{vap} \times dt}, \quad (10)$$

を適用し沸騰量を計算する。温度回復法を、格子内でのボイド率が 0.1%から 50%の場合の格子かつ液温が飽和温度より高いものに適用することで、壁面沸騰モデルから CFD の相変化計算に移行できるようにした。

こうして気泡が生成・成長して、一格子あたりに占める気体体積の割合が 50%を超えると、CFD の相変化の計算に移行する。**Fig.4** のように CFD での相変化量の計算では、式(11)を用いて格子点上での温度と界面での飽和温度の温度勾配から沸騰量を計算する。 ϕ は Level Set 法の概念に従った気液界面からの距離関数である。

$$\dot{m} = \frac{(\bar{q}_{LIQ} - \bar{q}_{GAS}) \cdot \bar{n}}{L_{vap}}, \quad (11)$$

$$\bar{q} = -\kappa \nabla T \sim -\frac{\kappa(T - T_{sat})}{\phi} \nabla \phi, \quad (12)$$

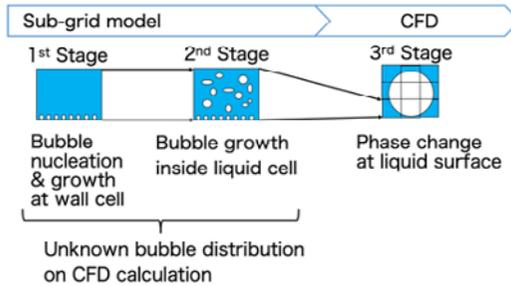


Fig. 2 Phase change model.

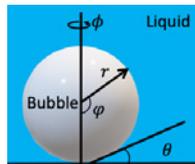


Fig. 3 Definition of a coordinate axis.

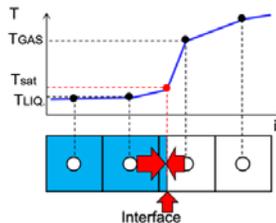


Fig. 4 Temperature distribution around liquid-vapor interface.

3. 解析条件

計算対象は、Fig. 5 に示すように、JAXA 能代ロケット実験場の 30m³ 液化水素タンク (直径 2.3m・高さ 7.622 m) [21, 22] の断面形状を模した 2 次元計算格子と軸対称 1/4 領域の 3 次元計算格子とした。2 次元格子は、全部で 33 の領域から成り立っており、総格子点数は 551,520 点である。3 次元格子は、129 領域で、総格子点数は 1,968,131 点である。

設定した初期条件は、液位は 6.248m で、系内の温度は実験値から線形補間して与え、初期圧力は 321.8kPaG で液体に対しては静水圧も課している。境界条件について、2 次元格子に関してのみ、下から 3 個目のドメインから 12 個目の中心に等温の粘着壁を設定し、仮想的に温度計プローブが存在するとした。同様に、タンク側壁にも等温の粘着壁条件を課している。3 次元格子に関しては、タンク壁に等温の粘着壁条件、半径方向壁面は滑り壁を与えている。流出境界条件は、2 次元と 3 次元格子に関して共に Fig. 6 のように実験で得られた質量流量をタンク上部の管の先端に与えている [22]。計算は、全て東京大学情報基盤センターが所有するスーパーコンピュータ Oakbridge-CX を用いて、二次元計算は 256 並列で 3 次元計算は 1024 並列で実施した。

4. 解析結果・考察

実験[21,22]及びCFD で得られた圧力履歴とそれに対応させた CFD 可視化結果を Fig.7 に示す。圧力履歴の結果より、定性的には数値計算により圧力回復の傾向をとらえることに成功を収めた。

2 次元計算の可視化結果と圧力履歴を比較しつつ考察していくと、圧力が落ちていく 0 から 6 秒付近までは沸騰が起こっているものの、流出流量による減圧が支配的であるため、圧力は減少していく。液位に関しては 6 秒で最大値をとるとともに、圧力も極小値をとる。そして、6 秒後

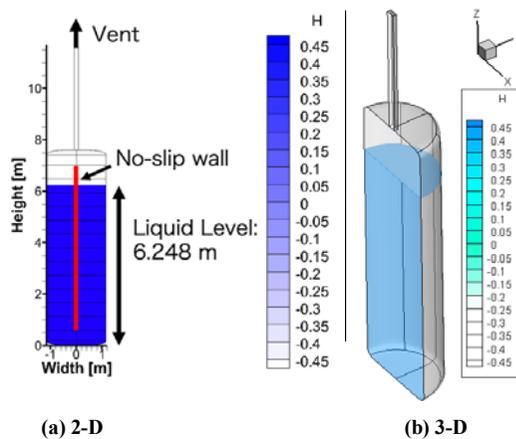


Fig. 5 Computational domain and initial condition (H: liquid occupation ratio. H=0.5: Liquid, H=-0.5: Gas)

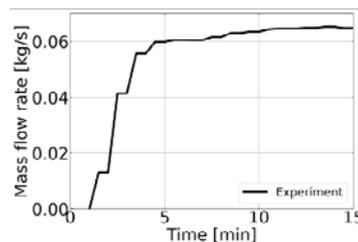


Fig. 6 Time variation of vent gas mass flow rate

以降から圧力が上昇に転じ、CFD においても圧力回復現象が確認できる。Fig.7(a)の可視化画像の下段の右端に示すように、7秒後以降では気泡により液体がよく混ざり圧力がゆっくり減少していくことがわかる。つまり、圧力回復現象は、気液界面面積が増加するまでに時間がかかるため、ベント量が沸騰量に上回ってしまうことが原因で発生する。そして、液相上部が気泡で攪拌され気液界面面積が十分に大きくなれば、系全体が平衡状態に到ることが考察される。3次元計算においても、Fig.7 (b)に示すように同様の圧力回復の傾向が見られ、2次元計算で考察されたことが3次元計算でも成立することを示す。

ただし、3次元 CFD 計算において実験より圧力回復の幅が大きいことが見て取れる。これは、今回の CFD 計算ではサブグリッドスケールの第2段階目の相変化モデルでは凝縮の影響を考慮していないため、沸騰により系の圧力が高くなっても気相部での凝縮が進まず、沸騰の影響を緩和できていないためと考察される。よって、今後の研究では第2段階目に温度回復法ベースの凝縮モデルを追加して計算を実施する必要があると言える。また、3次元 CFD 計算の可視化結果より、液面上昇が起こっていないことがわかる。そのため、今回の減圧速度の範囲では、液面が上昇して外部に液化水素が流出することなどは起こりにくいことが示唆される。

5. 結論

本研究では、大規模液化水素タンク内の高液位条件下での減圧沸騰現象を明らかにする CFD 解析を実施した。圧力回復現象の2次元および3次元 CFD 計算から、減圧開始時には壁からの

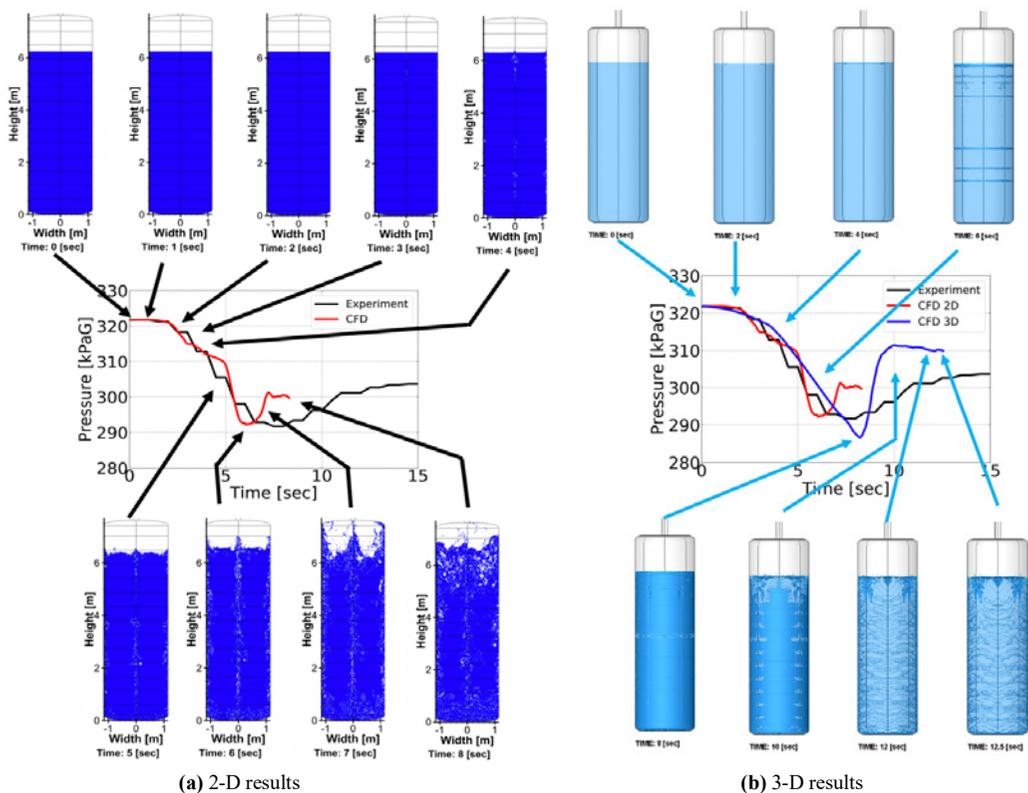


Fig.7 CFD and experimental result of time variation of pressure and visualized results.

沸騰がないため、圧力低下が支配的であることがわかった。その後、沸騰による気液界面積の増加に伴い圧力が上昇し、最終的に平衡状態に達することが示された。また、今回の減圧速度の範囲では、圧力回復時に液界面の急激な上昇が発生せず、液の外部流出の危険性や気相部が押し潰されて圧力が急上昇することは起こり得ないことがわかった。

また、サブグリッドスケールの沸騰モデルを二段階に分け、一段目に壁面沸騰モデル、二段目に温度回復法に基づく沸騰モデルを導入することで、減圧沸騰試験での圧力回復現象を3次元CFD解析により再現した。ただし、定量的な観点では実験値との解離があるため、凝縮モデル等に関する考察を行う必要があると言える。

参 考 文 献

1. Goff, J., Zegler, F., Bienhoff, D., Marchetta, J., Kutter, B., & Chandler, F.. Realistic near-term propellant depots: implementation of a critical spacefaring capability. In AIAA Space 2009 Conference & Exposition (p. 6756) (2009).
2. Tanner, C.L., Young, J.J., Thompson, R.W., & Wilhite, A.W. IAC-06-D 1 . 1 . 01 On-Orbit Propellant Resupply Options for Mars Exploration Architectures (2006).
3. Muratov, C. B., Osipov, V. V., & Smelyanskiy, V. N. Issues of long-term cryogenic propellant storage in microgravity (No. ARC-E-DAA-TN4295). (2011).
4. Chato, D. J. Cryogenic fluid transfer for exploration. *Cryogenics*, 48(5-6), 206-209. (2008).
5. Meyer, M. L., Chato, D. J., Plachta, D. W., Zimmerli, G. A., Barsi, S. J., Van Dresar, N. T., & Moder, J. P. Mastering cryogenic propellants. *Journal of Aerospace Engineering*, 26(2), 343-351 (2013).
6. Hydrogen and Fuel Cells Strategy Office, Advanced Energy Systems and Structure Division, Energy Conservation and Renewable Energy Department, Agency for Natural Resources and Energy Japan. Basic Hydrogen Strategy. 1-37 (2017).
7. Kamiya, S., Nishimura, M. & Harada, E. Study on introduction of CO2 free energy to Japan with liquid hydrogen. in *25th International Cryogenic Engineering Conference and the International Cryogenic Materials Conference in 2014, ICEC 25-ICMC 2014* vol. 67 11-19 (Elsevier B.V., 2015).
8. Takaoka, Y., Saeed, A., Nishifuji, K. & Kanbe, K. Design and Operation of the First LH2 Carrier. in *Gastech 2019 Exhibition & Conference* 1-10 (2019).
9. Miyatake, O., Murakami, K., Kawata, Y. & Fujii, T. Fundamental Experiments of Flash Evaporation. *Bull. Soc. Sea Water Sci. Japan* **26**, 189-198 (1972).
10. Miyatake, O., Fujii, T., Tanaka, T. & Nakaoka, T. Flash evaporation phenomena of pool water. *Kagaku Kogaku Ronbunshu* **1**, 393-398 (1975).
11. Saury, D., Harmand, S. & Siroux, M. Experimental study of flash evaporation of a water film. *Int. J. Heat Mass Transf.* **45**, 3447-3457 (2002).
12. Saury, D., Harmand, S. & Siroux, M. Flash evaporation from a water pool: Influence of the liquid height and of the depressurization rate. *Int. J. Therm. Sci.* **44**, 953-965 (2005).

13. Cheng, H. P. & Lin, C. T. The morphological visualization of the water in vacuum cooling and freezing process. *J. Food Eng.* **78**, 569-576 (2007).
14. Zhang, D., Chong, D., Yan, J. & Zhang, Y. Study on steam-carrying effect in static flash evaporation. *Int. J. Heat Mass Transf.* **55**, 4487-4497 (2012).
15. Wang, C., Xu, R., Chen, X., Jiang, P. & Liu, B. Study on water flash evaporation under reduced pressure. *Int. J. Heat Mass Transf.* **131**, 31-40 (2019).
16. Hewitt, H. C. & Parker, J. D. Bubble Growth and Collapse in Liquid Nitrogen. *J. Heat Transfer* **90**, 22-26 (1968).
17. Shingo, Y., Yutaka, H. & Ikuo, T. An Experimental Study on Flashing Phenomenon of Liquid Nitrogen. *Trans. Japan Soc. Mech. Eng. Ser. B* **58**, 1498-1503 (1992).
18. Toshiaki, W., Yutaka, H. & Ikuo, T. Flashing Phenomena of Liquid Nitrogen in a Pressure Vessel. *Trans. Japan Soc. Mech. Eng. Ser. B* **61**, 1849-1854 (1995).
19. Toshiaki, W., Yutaka, H. & Ikuo, T. Flashing Phenomena of Depressurized Liquid Nitrogen in a Pressure Vessel. *Trans. Japan Soc. Mech. Eng. Ser. B* **63**, 2148-2153 (1997).
20. Takeda, M., Usui, T. & Maekawa, K. Study on boiling behavior of pressurized liquid nitrogen under rapid depressurization. *IOP Conf. Ser. Mater. Sci. Eng.* **502**, (2019).
21. Tani, K. *et al.* Prediction of Pressure Reduction Rate in 30m³ Liquid Hydrogen Tank Based on Experimental And Numerical Analysis. in *International Conference on Hydrogen Safety 2019* 1-12 (2019).
22. Tani, K. *et al.* Pressure Undershoot During Pressure Reduction Experiment with Large-Scale Liquid Hydrogen Tank. *23rd World Hydrog. Energy Conf.* (2020).
23. HIMENO, T. *et al.* Numerical Analysis of Free-Surface Flows under Various Conditions in Acceleration: Improvement of CIP-LSM: CIP-Based Level Set & MARS(The Forefront of Multi-Physics CFD/EFD). *Trans. Japan Soc. Mech. Eng. Ser. B* **76**, 778-788 (2010).
24. Umemura, Y. *et al.* Liquid nitrogen chill-down process prediction by direct interface tracking approach. *53rd AIAA/SAE/ASEE Jt. Propuls. Conf. 2017* 1-12 (2017).
25. Umemura, Y., Himeno, T. & Watanabe, T. Numerical analysis of boiling flow in surface-tension-dominated environment. *49th AIAA/ASME/SAE/ASEE Jt. Propuls. Conf.* **1 PartF**, 1-14 (2013).
26. Yabe, T. & Takei, E. A New Higher-Order Godunov Method for General Hyperbolic Equations. *J. Phys. Soc. Japan* **57**, 2598-2601 (1988).
27. Kunugi, T. MARS for Multiphase Calculation. *Comput. Fluid Dyn. J.* **9**, 563-571 (2001).
28. Sussman, M. & Puckett, E. G. A Coupled Level Set and Volume-of-Fluid Method for Computing 3D and Axisymmetric Incompressible Two-Phase Flows. *J. Comput. Phys.* **162**, 301-337 (2000).
29. Osher, S. & Sethian, J. A. Fronts propagating with curvature-dependent speed: Algorithms based on Hamilton-Jacobi formulations. *J. Comput. Phys.* **79**, 12-49 (1988).
30. Vaněk, P., Mandel, J. & Brezina, M. Algebraic multigrid by smoothed aggregation for second and fourth order elliptic problems. *Computing* **56**, 179-196 (1996).

都市部 5.7km 四方の 1m 格子を用いたリアルタイム風況シミュレーション

朝比祐一、長谷川雄太、小野寺直幸、井戸村泰宏
日本原子力研究開発機構 システム計算科学センター

1. はじめに

都市区画における化学、生物、放射性汚染物質の拡散予測は安全性の観点から社会的な関心が高い。その拡散予測には高い精度かつ高速な都市風況予測が必要となる。本研究では、GPUを複数台利用することで高解像度のリアルタイム都市風況予測が可能な「CityLBM」の開発をおこなっている。本報告では、Wisteria/BDEC-01 データ・学習ノード群(Aquarius)における大規模並列実行によって初めて可能となった高解像度リアルタイム都市風況予測シミュレーションの性能測定について説明する。

2. コード概要

本研究で用いる都市風況シミュレーション CityLBM¹の概要について説明する。CityLBMは、非圧縮性流体の弱圧縮性近似解法の一つである格子ボルツマン法(LBM: Lattice Boltzmann Method)を用いる。LBMは、GPUなどの超並列アーキテクチャに適しており、効率的な演算を行うことが出来る。CityLBMは、特にNVIDIA社のGPUを対象として最適化されてきたが、近年のGPUスパコンの多様化に鑑み、AMD社のGPUへの移植もなされている。異なるベンダーのGPU上での性能比較については、学会での報告²を参考にされたい。

2.1. 物理モデル

CityLBMの支配方程式である格子ボルツマン方程式は、以下で表される。

$$f_i(\mathbf{x} + \mathbf{e}_i \Delta t, t + \Delta t) = f_i(\mathbf{x}, t) + \Omega_i(\mathbf{x}, t).$$

ここで、 i は速度方向を表し、 f_i は速度分布関数、 Ω_i は衝突項を示す。本研究で用いたD3Q27モデルでは移流速度 $\mathbf{e}_i \in \{-c, 0, c\}^3$ で与える。ただし、 c は隣接格子へ移動する速度で、 $c = \Delta x / \Delta t$ となる。流体の物理量である密度 ρ および流速ベクトル \mathbf{u} は、速度分布関数のモーメントをとって以下の式で計算する。

$$\rho = \sum_i f_i,$$
$$\rho \mathbf{u} = \sum_i f_i \mathbf{e}_i.$$

CityLBMでは、格子ボルツマン方程式と温度場の移流拡散方程式を連立して時間発展を行う。汚染物質についてはパッシブスカラーを仮定し、移流方程式の計算を行う。これらに加えて、CityLBMでは計算境界においてメソスケール気象シミュレーションデータとのデータ同化(Data

Assimilation) を Nudging 法によって行う。CityLBM では、計算コストやメモリ使用量を削減するために AMR (適合細分化格子) 法に基づく細分化を行う。本研究では、細分化レベルの最大値は 2 とし、Lv0 を最低解像度、Lv2 を最高解像度とする。

2.2. 並列化

CityLBM では、AMR 法に基づく細分化を行うが、都市風況シミュレーションにおける細分化格子は、高度方向に関してのみ行われており、水平方向に関しては一様である。したがって、領域分割は水平方向に等分する二次元領域分割が適している。分割後の各領域をどのように GPU に割り当てるかが性能向上の上での鍵となる。

Aquarius を始めとする近年の GPU スーパーコンピュータは、ノード内に複数の GPU を搭載するため、GPU 間の通信はノード内通信とノード間通信の階層的構造を有する。Aquarius は 1 ノードあたり 8GPU (NVIDIA TESLA A100) を搭載しており、ノード内 GPU 間通信には高速な NVlink が利用可能であり、ノード間通信では低速な Infiniband を利用する必要がある。従って、ノード間の通信量が小さくなるような分割が好ましい。

本研究では、通信の最適化として 2 次元領域分割のブロッキングを導入した³。これは、ノード間で通信が必要なグリッド数 (表面積) が最小となるように 2 次元領域分割の MPI プロセスを再配置するものである。図 1 は、8 ノード 64 GPU の 2 次元領域分割に対してプロセスマッピングを適用した場合を示す。(a) のブロッキングなしの場合では、ノード内領域のアスペクト比は 8:1 であり、ノード間通信量が增大する。(b) のブロッキングありの場合では、ノード内領域のアスペクト比が 4:2 に改善している。格子ボルツマン法のステンシル計算においては、3 次元で 26 方向の隣接点を参照する。ノードを跨いだ参照が必要となるプロセス数はブロッキングなしの場合に 18 プロセス、ブロッキングありの場合に 9 から 15 プロセスとなる。ブロッキングによってノード間通信の負荷が軽減されるため通信時間の短縮が期待できる。

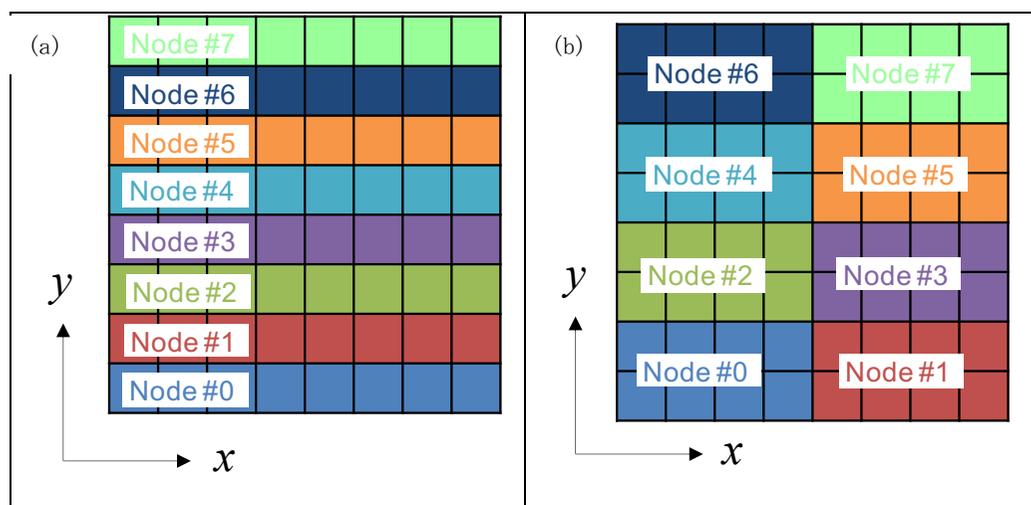


図 1: 8 ノード 64 GPU を用いた場合の 2 次元領域分割の模式図。各セルは各 GPU の担当領域を示し、色はノード番号と対応している。(a) ブロッキングなし。(b) ブロッキングあり。

3. 計算性能と計算結果

3.1. Aquarius と Summit におけるスケーリング

CityLBM は、GPU スパコンにおける大規模計算のために最適化されてきた。初期の CityLBM は、等間隔格子を用いており、TSUBAME2.0 において 10080x10240x512 格子に対し 4032 GPU (NVIDIA TESLA M2050) を用いて、新宿や皇居を含む東京都心部の 10km 四方のエリアを対象に 1m 格子での計算が実現されている⁴。その後 AMR 法が導入され、Summit において Oklahoma City の 5km 四方のエリアを最大解像度 1m で計算を行い、4096 GPU (NVIDIA TESLA V100) までの良好なスケーリングを実現した (図 2)。計算アルゴリズムや最適化手法の発展については、文献⁵を、物理モデルの発展や検証については、文献^{1, 6}を参照されたい。

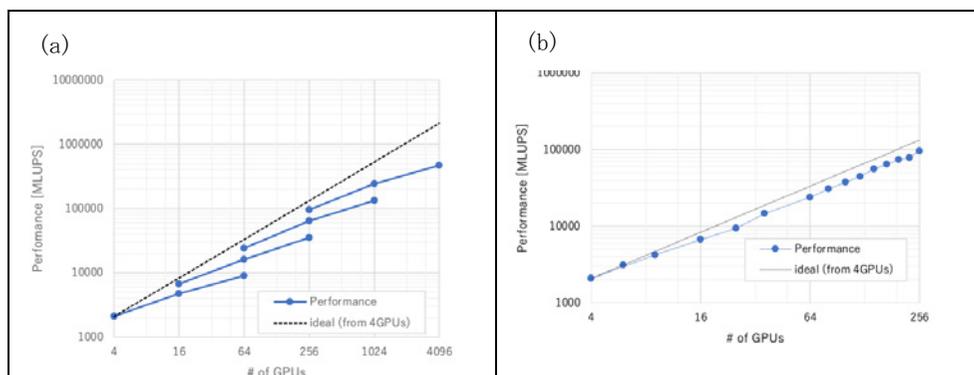


図 2: Summit における 4096 GPU までのスケーリング測定結果。(a)強スケーリング。(b)弱スケーリング。

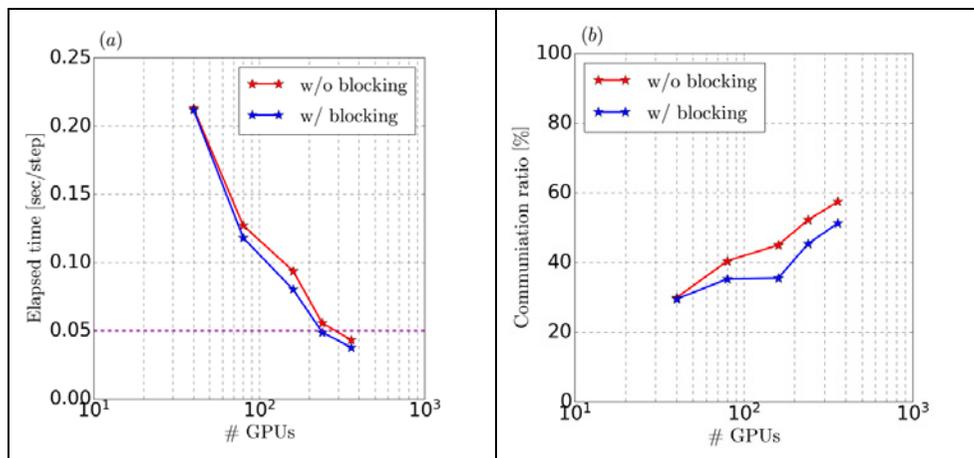


図 3: Aquarius における 360 GPU までの強スケーリング測定結果。(a) 1 ステップあたりの実行時間。ピンクの点線はタイムステップサイズと対応し、これを下回るケースではリアルタイム計算が実現されている。(b) 1 ステップの実行時間における MPI 通信の割合。

Aquariusにおいては、Oklahoma Cityの5.7 km四方のエリアを対象に最大解像度1mで計算を行った。細分化格子の設定は、高度(z)に基づく細分化とし、 $z < 32$ [m], $32 < z < 128$ [m], $z > 128$ [m]のそれぞれの領域に解像度1 m, 2 m, 4 mの格子を割り当てた。総計算格子点数は25億点である。地表面及び市街地の建物の境界条件としては、no-slip境界条件を仮定し、LBMのBounce-back境界条件を適用した。水平方向および上空の境界には、任意の気象条件を導入できるNudging法を適用し、WRF (Weather Research and Forecasting)モデルによる事前計算で得られた水平解像度500 m、鉛直解像度50m、時間間隔1分のメソスケール気象シミュレーションデータと同化させた。

図3は、40 GPUから360 GPUまでの強スケーリングの結果を示す。5.6倍の高速化という良好なスケーリングが実現されている。また、ブロッキングを行った場合(青線)では、ブロッキングを行わない場合(赤線)と比べ実行時間が短縮されていることが確認できる。縦軸は1タイムステップあたりの実行時間であり、これがタイムステップサイズ(ピンクの点線)よりも低くなっているものがリアルタイム計算となる。ブロッキングありの場合で、240 GPU、360 GPUでリアルタイム計算が実現されている。図3(b)は、1ステップの実行時間におけるMPI通信の割合を示す。360 GPUにおいては、ブロッキングありの場合でもMPI通信の割合は51%となっているが、ブロッキングなしの場合(57%)と比べて改善が見られる。

TSUBAME2.0においては、4032 GPU(NVIDIA TESLA M2050)を用いて1m解像度の計算を実行するのにリアルタイムの約30倍の処理時間がかかっていたが、Aquariusにおいては240 GPU(NVIDIA TESLA A100)においてリアルタイムの計算を実現している。これはハードウェア自体の進化に加えて、AMRの導入や通信最適化などアルゴリズムの改良によって初めて可能となったものである。

3.2. 高解像計算の結果

本研究で行った1m解像度の計算と4m解像度の計算結果の違いについて示す。

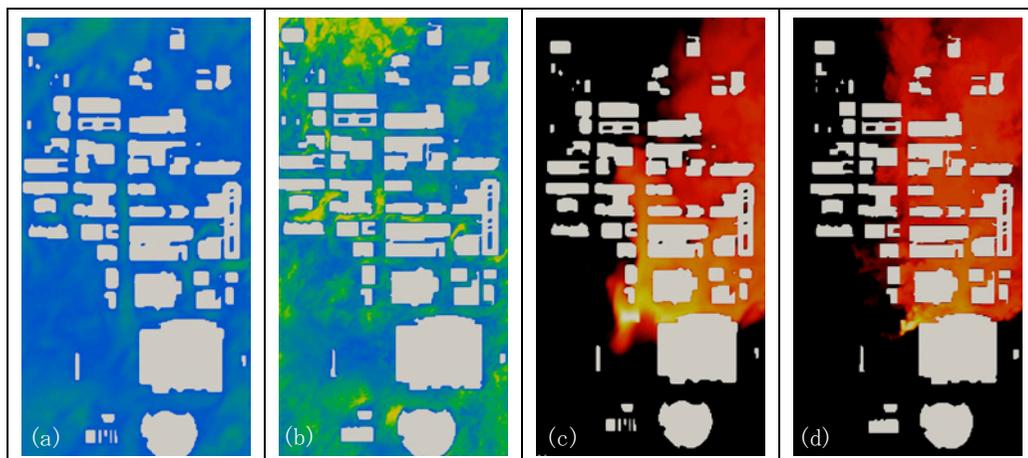


図4：地表面高さ5m地点における鳥瞰図。(a)4m解像度の風況場、(b)1m解像度の風況場。
(c)4m解像度の汚染物質濃度、(d)1m解像度の汚染物質濃度。

図4は1m解像度と4m解像度における、風況場および汚染物質拡散の鳥瞰図である。図から明らかなように、特にビル密集地帯における風の流れが大きく異なっていることがわかる。同様に

汚染物質の分布も異なる。文献¹では 2m 解像度のアンサンブル計算を実行し、そのアンサンブル平均を行うことで予測精度を向上しているが、1m 解像度の計算によってさらなる予測精度の向上が期待される。しかしながら、現在の計算機では 1m 解像度のアンサンブル計算はリアルタイムで実行することは出来ない。1m 解像度のアンサンブル計算をリアルタイムで行うためには、Frontier のような世界最大規模の計算機が必要と考えられることから、現在、Frontier に採用されている AMD GPU での最適化も同時並行して進められている。また、データ同化の精度を高めるためのパーティクルフィルタ法やアンサンブルカルマンフィルタ法の導入⁷も進められており、今後さらなる予測精度の向上が期待される。

4. まとめ

本研究では、都市風況予測シミュレーションコード CityLBM の Wisteria/BDEC-01 データ・学習ノード群 (Aquarius) における大規模並列性能測定を行った。強スケーリング性能測定においては、40 GPU から 360 GPU (Aquarius 全系) までの強スケーリングで、5.6 倍の高速化という良好なスケーリングを実現した。Aquarius を始めとする 1 ノードに多数の GPU を搭載するノード構成に対応するため、2次元のプロセスマッピングを行い、ノードを跨ぐ通信量を最小化した。この実装により、360 GPU 並列計算では 1.15 倍の高速化が達成された。これまでのリアルタイム計算は、P100 や V100 GPU において、4km 四方の 4m 解像度または 2m 解像度が限界であったが、今回の大規模計算により、Oklahoma City の 5.7km 四方のエリアに対し、1m 解像度の都市風況シミュレーションをリアルタイムで実現出来た。今後は、Frontier をはじめとする異なる GPU スパコンへの移植や、より大規模かつ高精細なシミュレーションの実現およびデータ同化手法の高度化等による予測性能向上などが期待される。

謝辞

本計算は、Wisteria/BDEC-01 (Aquarius) の大規模 HPC チャレンジを利用して頂いたもので、東京大学基盤情報センターの方々には深く感謝の意を表す。また、学際大規模情報基盤共同利用・共同研究拠点 (課題番号 jh210003, jh210049) の支援を受けた。記して謝意を表す。

参考文献

- [1] N. Onodera, Y. Idomura, Y. Hasegawa et al., “Real-time tracer dispersion simulation in Oklahoma City using locally mesh-refined lattice Boltzmann method”, *Boundary-Layer Meteorology*, 179, 2021, pp. 187-208, doi: 10.1007/s10546-020-00594-x.
- [2] 朝比 祐一、小野寺 直幸、長谷川 雄太、下川辺 隆史、芝隼人、井戸村 泰宏、“適合細分化格子ボルツマン法に基づく都市風況解析コードの Nvidia および AMD の GPU における性能移植性評価”、第 27 回計算工学講演会 (2022/6/1-3、秋田&オンライン)
- [3] 長谷川 雄太、小野寺 直幸、朝比 祐一、井戸村 泰宏、“格子ボルツマン法に基づく都市風況解析の Tesla A100 GPU における性能測定”、第 35 回数値流体力学シンポジウム (12/14-16、オンライン)
- [4] 小野寺直幸, 青木尊之, 下川辺隆史, 小林宏充. ”格子ボルツマン法による 1m 格子を用いた都市部 10km 四方の大規模 LES 気流シミュレーション”. *ハイパフォーマンスコンピューティングと計算科学シンポジウム論文集*, 第 2013 巻, pp. 123-131, 2013.

- [5] Onodera N, Idomura Y, Ali Y, Shimokawabe T (2018) Communication reduced multi-time-step algorithm for real-time wind simulation on GPU-based supercomputers. In: 2018 IEEE/ACM 9th workshop on latest advances in scalable algorithms for large-scale systems (Scala), pp 9-16. <https://doi.org/10.1109/Scala.2018.00005>
- [6] Onodera N, Idomura Y (2018) Acceleration of plume dispersion simulation using locally meshrefined lattice Boltzmann method. In: International conference on nuclear engineering, volume 8: computational fluid dynamics (CFD); nuclear education and public acceptance. <https://doi.org/10.1115/ICONE26-82145>
- [7] 小野寺 直幸、井戸村 泰宏、長谷川 雄太、下川辺 隆史、青木 尊之、“適合細分化格子ボルツマン法による大気境界層生成のためのパラメータ最適化”、第 27 回計算工学講演会 (6/1-3、オンライン)

東京大学大学院工学系研究科「材料量子モデリング入門」

渡 邊 聡

東京大学大学院工学系研究科マテリアル工学専攻

1. はじめに

2022年度 A1A2 タームに開講した「材料量子モデリング入門」（「日韓遠隔講義Ⅷ」）は、ソウル国立大学（以下、「ソウル大」と記す）材料系専攻の HAN Seungwu 教授と私が共同で担当して 2018 年度 S1S2 タームにはじめて開講され、2020 年度が 2 回目、今回は 3 回目の開講となる。情報基盤センターのスーパーコンピュータを利用した実習を含めて実施したので、本誌において実施報告をさせていただきます。なお、2018 年度¹、2020 年度²の講義についても本誌に報告記事が掲載されているので、興味のある方は参照されたい。

2. 講義概要

東京大学大学院工学系研究科はソウル大工科大学との間で 2007 年度から遠隔講義を実施しているが、「材料量子モデリング入門」では、両校の教員が半分ずつ分担することで教員の負荷を軽くするとともに、海外大学教員による講義という従来の遠隔講義の魅力は残しつつ、半分は目の前で受講することで受講生のモチベーションを高めることをねらっている。2020 年度はコロナ禍のために Zoom を利用した完全オンライン形式で行ったが、今回は Zoom を利用しつつ講師が講義している側では受講生は原則として講義室で受講する形で実施した。実習は、東大受講生は情報基盤センターのスーパーコンピュータを利用したのに対し、ソウル大受講生は各自の所属研究室等の計算機を利用する形で行われた。いずれの場合も、受講生はノートパソコンを持参し、講義室からこれらのコンピュータにアクセスして実施した。

2018 年度・2020 年度と同様に、東大側ではマテリアル工学専攻「材料量子モデリング入門」と工学系研究科共通「日韓遠隔講義Ⅷ」の 2 つの科目名が付与され、2 単位の科目として開講した。ソウル大側では 3 単位の科目として開講し、本講義の前に古典分子動力学法という計算法に関する講義と実習を行った点も過去 2 回と同様である。両校の学事歴等の違いを考慮し、10 月～12 月の間に計 8 回、火曜日 15 時～18 時（途中で休憩 15 分）という変則的な日程で実施した。

本講義では、量子力学に基づく計算によって材料の構造や性質を予測する手法を理解することを目指している。内容は、密度汎関数法という手法の概要とその応用事例の講義、および理解を深めるためのシミュレーション実習から構成されている。講義日程と各回の内容を表 1 に示す。理論の枠組みと研究事例の紹介（渡邊が担当）と実習とその基礎的講義（HAN 教授が担当）をどのような順序で行うかという点については試行錯誤を重ねており、今回は 2～3 回程度で交代する形とした。それぞれを前半・後半にまとめた過去 2 回より受講生の理解を深める上でよかったように思う。なお、分担する 4 回の内の 1 回は相手校に出張して講義をすることは講師にとっても受講生にとっても好ましいと考え、2018 年と同様、そのように実施した（2020 年度はコロナ禍のために海外出張できなかった）。Han 教授の東大における講義の様子を図 1 に示す。

¹ 渡邊聡、スーパーコンピューティングニュース Vol. 20, No. 6, pp. 55-58 (2018)。

² 渡邊聡、スーパーコンピューティングニュース Vol. 23, No. 1, pp. 44-47 (2021)。

表 1：講義日程および内容。

*は相手校において講義をしたことを示す。

回数	日程	担当教員	講義内容
1	10/11	渡邊	講義（序論、量子力学の復習、分子軌道法の概要）
2	10/18	渡邊*	講義（密度汎関数法の概要）
3	10/25	HAN	講義と実習（基礎的な概念の解説、ソフトウェアの使い方）
4	11/8	HAN	講義と実習（エネルギーバンド構造）
5	11/15	HAN	講義と実習（結晶中の欠陥の電子状態）
6	11/22	渡邊	講義（様々な系のモデリング法、原子ダイナミクスの計算法）
7	11/29	渡邊	講義（前回までの補足、量子モデリングの将来展望）
8	12/6	HAN*	講義と実習（スピンおよび磁性）

なお、HAN 教授担当講義の一部は過去の講義の録画を配信する形で行った。それ以外の部分はソウル大のティーチングアシスタント (TA) による実習課題の説明も含め Zoom で録画し、講義後に Google Drive にアップロードして両校の受講者が後日視聴できるようにした。また、講義は実習の説明を含めてすべて英語で行い、講義資料もすべて英語で作成したが、実習に関する質問は日本語でも受け付けた。渡邊担当分では問題に対する解答を記述させるレポートを毎回、HAN 教授担当分については計算機シミュレーションした結果をまとめるレポートを計 2 回出題した。

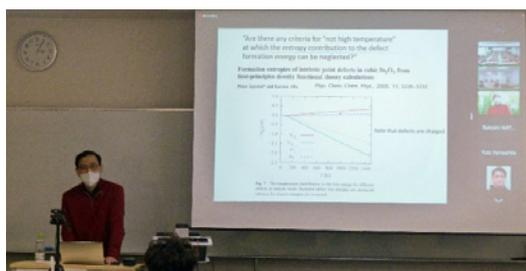


図 1：HAN 教授の東大での講義風景。
写真ではわかりにくいですが、スクリーン右上にソウル大と東大の講義室の様子を撮影した画像が見える。

3. 実習実施内容について

既述のように東大の受講生は情報基盤センターのスーパーコンピュータを利用して実習を行ったが、2018 年度は Reedbush-U、2020 年度は Reedbush-H、今回は Wisteria-0 と、毎回違うシステムを利用することになった。密度汎関数法計算の実習には、2018 年度・2020 年度と同様に世界的に広く使われている VASP (Vienna Ab initio simulation package) を使用した。VASP のライセンスは有償であるが、担当教員がライセンスを所有していて受講生がプログラムをコピーできない形で教育目的に使用する場合には、開発元に概要を通知した上で無料で利用できる。この科目用の Wisteria-0 アカウントを東大側担当教員と受講生だけでなく講義補助者（助教および TA）の分も発行してもらい、助教のアカウントのディレクトリに VASP のバイナリーファイルを置き、履修者にはこのファイルの実行権限のみ与える形（すなわち自分のディレクトリへのコピーはできない形）で実習を行った。

さて、上記の形での VASP の利用は 2018 年度・2020 年度と同じなのだが、実は Wisteria-0 上で「履修者には VASP 実行ファイルの実行権限のみ与え、このファイルをコピーすることはできないようにする」という設定が当初うまくできず、苦労した。情報基盤センターに何度か質問した結果、富士通コンパイラでアプリケーションを構築した場合にはデフォルトでラージページ機

能が有効となり、ラージページ機能を使用する場合は実行モジュールに対する read 権が必要となっていることが所望の設定ができない原因と判明した。そして、回避策としてジョブスクリプト内での環境変数の設定によりラージページ機能を無効化する方法を教えてください、所望の設定をすることができた。

実習において前処理・後処理、ジョブ投入等を行うため、2020 年度と同様に学生各自のノート PC に以下のプログラムをインストールしてもらったようにした。

- (1) 原子配置等の可視化プログラム VESTA³
- (2) SSH クライアントプログラム PuTTY⁴ (Windows ユーザーのみ)
- (3) ファイル転送プログラム WinSCP⁵ (Windows ユーザーのみ)

ソウル大側受講生とは利用している計算機システムが異なるため、ソウル大 TA が作成した前処理・後処理用の Python コードが Wisteria-0 上でうまく動作しない可能性があることは前 2 回に経験していたので、今回も事前に動作チェックをし、必要な場合には修正を施したコードを受講生に配布した。

4. 講義を終えて

履修登録者数は 2018 年度 10 名、2020 年度 22 名、今回 15 名だった。また単位取得者数は、2018 年度 6 名、2020 年度 8 名、今回 8 名だった。これまでと同様に工学系研究科マテリアル工学専攻所属の受講者が多かったが、同電気系専攻、機械工学専攻、物理工学専攻、情報理工学系研究科システム情報学専攻所属の受講者もいた。また、2020 年度は聴講のみして単位を取得しなかった者が相当数いたが、今回は最初の 1~2 回のみ出席した学生が若干名いた他は出席した学生全員が単位を取得した。この違いは、2020 年度は実習におけるトラブルもメールや Google フォーム等によりオンラインで対応したのに対し、今回は実習時間中に TA や助教に質問してトラブルを解決できたことによるものと思う。なお、ソウル大側の受講者数は東大側の約 2 倍であり、これは過去 2 回と同様であった。

最終回到 Google フォームで受講者に対して行ったアンケートの結果を表 2 に示す。回答者総数は 14 名で、受講者の約半数だった。また回答者の東大生/ソウル大生比率は受講者の比率と同様、ほぼ 1 対 2 だった。本講義のような海外大学との合同講義については、意義が大きいという声が多かった。海外大学の教員の講義を受けられるという点以外に、相手校の受講生の質問に刺激を受けた、2 人の教員の講義により同じ内容を異なる視点から見る事ができたところがあった、といった声があった。講義の時間帯や回数等が変則的である点については、あまり問題でな

表 2: 受講者へのアンケートの結果。

評点の意味は、例えば「合同講義の意義」の場合、意義が小さければ 1 点、大きければ 4 点としている。

	評点の意味	1 点	2 点	3 点	4 点	平均
合同講義の意義	小さい⇔大きい	1 名	1 名	5 名	7 名	3.29 点
変則的開講	障害⇔問題無し	0	4	5	5	3.07
休暇中に集中開催	良くない⇔良い	2	5	3	4	2.79

³ <https://jp-minerals.org/vesta/jp/>

⁴ <https://www.chiark.greenend.org.uk/~sgtatham/putty/index.html>

⁵ <https://winscp.net/eng/docs/lang:jp>

いと感じている受講生が多かった。大学院生なので変則的な形にも対応しやすいという声もあった。ただし、履修登録したのに実際には受講しなかった学生や、本講義を履修登録しなかった学生にとっては変則的な開講時間がネックだった可能性は否定できない。なお、学期中に今回のような形で開講するのと夏季・春季の休暇期間に集中的に開講する形のどちらが良いかという点については、意見が割れた。

アンケートの自由記述欄に書かれた意見を読んで、反省すべき点が2つあったことに気づいた。1点目は音声に関することである。各回の講義開始時と休憩時間後には相手側に音声がクリアに届いているかソウル大側 TA に確認したのだが、音声聞きづらい時があったとの意見が複数あった。もっと早くに気づいていれば原因究明や対策ができたかもしれない。2点目は、実習に関することである。ソウル大側 TA が自分で実習内容を実行しながら説明してくれたのだが、作業に大変習熟しているために進み方が速かったこと、東大側とは用いている計算機が異なるために作業の細部に違いがあることの2点で東大側受講者から不満の声があった。後者の点については両校の受講者が同じ計算機を使うのが最善の解決法であり、次回また本講義を開講するチャンスがあった際には、ソウル大生にも東大の情報基盤センターのスパコンを利用してもらうことを HAN 教授に強く勧めたいと思う。

以上に加え、相手校の学生と交流する内容がなくて残念だったとの意見もあった。本講義では、多くの受講生にとって内容が高度なものであるため、各自に実習で理解を深めてもらうところまでしか考えていなかったが、この指摘はもっともであり、両校の学生が共同作業するような課題を盛り込むと、一層意義の大きな内容になったかと思う。次に開講する機会があれば、この点もぜひ検討したい。

謝辞

本講義の実施に際しては、HAN Seungwu 教授に多大な協力をいただいた他、東京大学情報基盤センターの職員の皆様、工学系研究科附属国際工学教育推進機構杉浦仁美特任専門員、同研究科マテリアル工学専攻清水康司助教、および TA の大野雅央さん（東大）、DOU Ying さん（東大）、JUNG Jisu さん（ソウル大）、AN Hyungmin さん（ソウル大）に大変お世話になった。記して感謝の意を表す。

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

開催回	開催日	内容	区分		人数	満足度※
			事前登録者	参加者		
第196回	2022年12月7日	「MPI+OpenMPで並列化されたFortranプログラムのGPUへの移行手法」 ¹ Wisteria/BDEC-01 (Aquarius) 星野 哲也	事前登録者		29	3.59
			参加者	大学・研究機関教職員	9	
				企業の方	4	
				学部学生	3	
				大学院生	4	
				その他	0	
合計	20					
第197回	2022年12月12日 19日	「第6回 GPUミニキャンプ」 ² Wisteria/BDEC-01 (Aquarius) 下川辺 隆史	事前登録者		23	4.00
			参加者	大学・研究機関教職員	18	
				企業の方	0	
				学部学生	0	
				大学院生	5	
				その他	0	
合計	23					
第198回	2023年1月17日	「OpenFOAM中級・3次元ダムブレイク解析」 ³ Wisteria/BDEC-01(Odyssey) 今野 雅	事前登録者		11	4.71
			参加者	大学・研究機関教職員	0	
				企業の方	3	
				学部学生	1	
				大学院生	3	
				その他	0	
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/196/>

² <https://www.cc.u-tokyo.ac.jp/events/lectures/197/>

³ <https://www.cc.u-tokyo.ac.jp/events/lectures/198/>

第 196 回お試しアカウント付き並列プログラミング講習会

「MPI と OpenMP で並列化された Fortran プログラムの GPU への移行手法」

星野哲也

東京大学情報基盤センター

本稿は、2022 年 12 月 7 日にオンライン会議システム Zoom を用いて開催された「MPI と OpenMP で並列化された Fortran プログラムの GPU への移行手法」について報告します。近年では省エネルギーの観点から、大型計算機センターにおける GPU スパコンの導入は一般的となってきました。2024 年に導入予定の Oakforest-PACS II には、現行の Wisteria/BDEC-01 と比べてより多くの GPU が搭載される予定となっており、既存のアプリケーションの GPU への移行が課題となっております。このような背景から本講習会は、既存のスパコンユーザに多い MPI+OpenMP によって CPU 向けに並列化された Fortran プログラムの GPU 環境への移植手法を学ぶことを目的としています。

本講習会は主に既存のスパコンユーザを対象とした講習会ではありますが、これからスパコンの利用を考えているユーザに加え、社会貢献の一環として、高性能計算や並列処理の技術習得を目的とした企業に所属する研究者や技術者の方も参加することができます。本講習会では、Fortran で書かれたプログラムに対する GPU 向けの並列プログラミング手法である OpenACC, OpenMP 5.x, Fortran の言語標準の並列化 (do concurrent の利用), CUDA Fortran についてそれぞれの特徴を学び、また NVIDIA 社の GPU を搭載した Wisteria/BDEC-01 を活用し、OpenMP で CPU 向けに並列化された Fortran の有限要素法のプログラムを題材とした、GPU への移植の演習を行いました。本講習会のスケジュール は表 1 の通りです。今回の講習会では、合計 29 名の事前申込者があり、そのうち 20 名が受講しました。受講者の内訳は、学部学生 : 3 名、大学院学生 : 4 名、大学研究機関職員 : 9 名、企業の方 : 4 名でした。講習会終了後にアンケートを実施した質問項目と回答の人数分布 は表 2 の通りです。

表 1 スケジュール

時間	内容
13:00~13:50	OpenACC, OpenMP 5.x, do concurrent, CUDA Fortran の特徴 (座学 1)
14:00~14:50	OpenMP for CPU から OpenACC, OpenMP 5.x, do concurrent, CUDA Fortran への移植手法 (座学 2)
15:00~15:50	OpenMP for CPU から OpenACC, OpenMP 5.x, do concurrent, CUDA Fortran への移植演習 1
16:00~17:00	OpenMP for CPU から OpenACC, OpenMP 5.x, do concurrent, CUDA Fortran への移植演習 2

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		1	17	2	
(b) 講習会講義内容 (プレゼン)	簡単⇔難		2	14	4	
(c) 配布資料内容	簡単⇔難		4	14	2	
(d) サンプルプログラム内容	簡単⇔難		1	16	3	
(e) 満足度	不満⇔満足		2	8	6	4

第 197 回お試しアカウント付き並列プログラミング講習会

「第 6 回 GPU ミニキャンプ」

下川辺 隆史

東京大学情報基盤センター

2022 年 12 月 12 日（月）、19 日（月）の 2 週にわたり、Zoom と Slack を用いてオンラインにて、第 197 回お試しアカウント付き並列プログラミング講習会「第 6 回 GPU ミニキャンプ」が開催されました。

本講習会では、既存の CPU シミュレーションコードを GPU 化する方や、既存の単体 GPU コードを複数 GPU コードにする方などを対象に、東京大学情報基盤センターに設置されたスーパーコンピュータ Wisteria/BDEC-01 を活用した実践を行いました。ミニキャンプは参加者がコードやデータセットを持ち込み、各自のペースで GPU 化や GPU 利用効率向上などを実践する形で進めます。情報基盤センター教員に加えて、GPU のスペシャリストがメンターとして参加し、受講者はコードの GPU 化や利用率向上の作業を進めるにあたり随時相談することができます。

東京大学情報基盤センターと筑波大学計算科学研究センターが共同で運営する最先端共同 HPC 基盤施設（JCAHPC）では、Oakforest-PACS システム（OFP）の後継機種 OFP-II を 2024 年 4 月に運用開始予定です。スパコンへの性能要求とともに省電力、脱炭素化という昨今の状況を考慮すると、GPU 等の演算加速装置の導入は不可避と考え、OFP-II は GPU 搭載ノードを中心としたシステムとする予定です。本講習会は、GPU を搭載した OFP-II への移植に向けた GPU ミニキャンプ第一弾で、今後同じような GPU ミニキャンプを OFP-II 運用開始まで数ヶ月に一度の頻度で開催予定です。

本講習会は、東京大学情報基盤センター、エヌビディア合同会社、PC クラスタコンソーシアム（実用アプリケーション部会）の共催、プロメテック・ソフトウェア株式会社の後援で開催され、下記の皆様にメンターとしてご協力いただきました（敬称略）。

- 丹 愛彦：エヌビディア合同会社 HPC ソリューションアーキテクト
- 佐々木邦暢：エヌビディア合同会社 シニアソリューションアーキテクト
- 廣川祐太：株式会社 Preferred Networks エンジニア
- 星屋隆之：プロメテック・ソフトウェア株式会社 SVP 兼 技術グループ長
- 南 将平：プロメテック・ソフトウェア株式会社 HPC システムエンジニア
- 大友広幸：東京工業大学 横田理央研究室 博士課程 3 年
- 額田 彰：筑波大学 計算科学研究センター 教授
- 小林諒平：筑波大学 計算科学研究センター 助教
- 大島聡史：九州大学 情報基盤研究開発センター 准教授

本講習会のスケジュールは表 1 の通りです。本講習会では、オンラインで、まず座学を行い、その後はメンターと相談をしながら各チームで作業を進めていきました。本ミニキャンプでは、各チームでの実践時間を多く取るため、講習会 1 日目と 2 日目を 1 週間空けて開催しました。講習会開催日に挟まれた中日は原則各チームで実践し、ベストエフォートでメンターによる対

応を行いました。図1は講習会最後に撮影した集合写真です。受講者には実習で使用した Wisteria/BDEC-01 を受講後1ヵ月間利用できるお試しアカウントが与えられます。

表1 スケジュール

日付	時間	内容
12月12日	10:00 - 10:30	Wisteria/BDEC-01 使い方講座
	10:30 - 11:00	自己紹介と目標設定など
	11:00 - 16:50	実践（適宜自由に休憩）
	16:50 - 17:00	事務連絡・終了
12月13日-18日		各チームで実践
12月19日	10:00 - 10:30	事務連絡・情報交換
	10:30 - 16:00	実施（適宜自由に休憩）
	16:00 - 16:50	実施内容の紹介
	16:50 - 17:00	事務連絡・終了



図1 講習会の集合写真

今回の講習会では、合計9チーム23名の事前申込があり、申込者全員が受講しました。受講者の内訳は、大学・研究機関教職員：18名、大学院学生：5名でした。講習会終了後に実施したアンケートの質問項目と回答の人数分布は表2の通りです。

アンケート集計結果やアンケートの自由回答を見ると、OpenACCに関するドキュメント、OpenACCを体系的にまとめた資料、基礎的なものから応用的なものまで取り扱ったOpenACCのサンプルコード、などの要望がありました。OFP-IIへの移植に向けたGPUミニキャンプという観点からも、OpenACC関連の資料の整備に力を入れていきたいと思います。

表2 アンケート集計結果の人数分布と平均

	あり		なし				
並列プログラミング経験	11		3				
GPUプログラミング経験	5		9				
	オンラインが良い	現地開催が良い			どちらでも良い		
オンラインと現地開催	7		2			5	
	評点	1	2	3	4	5	平均
講習会時間	短い <-> 長い			14			3.0
講習会講義内容 (プレゼン)	簡単 <-> 難		2	9	2	1	3.1
配布資料内容	簡単 <-> 難		3	9	1	1	3.0
サンプルプログラム内容	簡単 <-> 難	1	2	10		1	2.9
満足度	不満 <-> 満足		1	2	7	4	4.0

第 198 回お試しアカウント付き並列プログラミング講習会 「OpenFOAM 中級・3次元ダムブレイク解析」実施報告

今野 雅

東京大学情報基盤センター客員研究員

2023年1月17日(火)、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)、オープンCAE学会との共催で、第198回お試しアカウント付き並列プログラミング講習会「OpenFOAM中級・3次元ダムブレイク解析」がオンラインで開催された。本講習会は、センターに設置されたスーパーコンピュータ(以降、スパコン)の利用促進とスパコンを用いた数値流体解析の普及を目的として実施されたものである。なお、本講習会はセンターのお試しアカウント付き並列プログラミング講習会として行われた24回目のOpenFOAMの講習会である。受講者は、大学院学生3名、学部学生1名、企業の方3名であり、事前申込者11名、受講者合計は7名であった。センターが運営するスパコンWisteria/BDEC-01を用い、Wisteria/BDEC-01の概要、利用方法、OpenFOAMの演習が1日終日の日程で行われた。当日のプログラムを表1に掲載する。なお、講習会終了後約1ヶ月有効なお試しアカウント(Wisteria-0, 最大ノード数12, 最大実行時間15分)が受講者に与えられた。

表1 講習会プログラム

【2023年1月17日(火)】	
10:00 - 12:00	講習会の準備・概要説明
10:00	イントロダクション
10:15	スーパーコンピュータへのログイン・環境設定
10:43	講習会の準備
11:13	moduleによるOpenFOAMの環境設定・質疑
13:00 - 18:00	3次元ダムブレイク解析演習
13:00	解析対象(Kleefsmanらによる段波・構造物衝突流れ実験)
13:13	OpenFOAMの二相流解析ソルバの概要
13:25	解析ケースの作成
13:34	解析手順
13:40	ベース格子生成・領域分割
14:35	休憩
14:45	ParaViewによるOpenFOAMデータ可視化
14:54	ベース格子の可視化
15:15	格子生成
16:04	最終格子の可視化
16:12	休憩
16:28	初期値設定
16:36	解析条件の設定
17:11	流体解析
17:17	圧力時系列の実測値との比較
17:22	解析結果の可視化
17:26	液面の可視化動画の作成
17:33	解析演習・質疑

講習会終了後のアンケート集計結果(回答数 7)を表 2 に示すが、参加した満足度の平均は 5 点満点中、4.71 と高かった。また、参加者から表 3～5 に示すご意見を頂いたので、今後の講習会の参考になりたい。

表 2 アンケート集計結果

評 点	講習会の時間		講習会の講義内容 (プレゼン)		配布資料の内容		サンプルプログラム 内容		参加した満足度	
1	短い	0	簡単	0	簡単	0	簡単	0	不満	0
2		1		1		1		1		0
3	適切	5	適切	5	適切	4	適切	5	普通	0
4		1		1		2		1		2
5	長い	0	難	0	難	0	難	0	満足	5
	平均	3.00	平均	3.00	平均	3.14	平均	3.00	平均	4.71

表 3 Zoom によるオンライン講習会で良かったこと(原文ママ)

- 移動時間が無く、海外からも参加できるので、大変助かります。
- 資料に書いてない知識なども口頭で説明いただける点
- 移動する必要があるため受けやすい。
- 質疑応答が素早い
- 気軽に参加できてよかったです。
- 画面が見やすかったです。

表 4 Zoom によるオンライン講習会で悪かったこと(原文ママ)

- 勝手に発言される方がいるので、ルールの厳格化をお願いしたいです。
- 既に知っている内容の説明を飛ばすことができなかった点
- 質問の挙手率が低い

表 5 本講習会に対するご意見(原文ママ)

- 大変勉強になり、OpenFOAM に関する理解が深まりました。ありがとうございました。
- とても面白かったです。

最後に、本講習会の資料や演習用ケースファイル、動画については講習会の WEB ページ (<https://www.cc.u-tokyo.ac.jp/events/lectures/198/>) から閲覧できるので参照頂きたい。

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
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（再掲）	5
利用負担金の改正について	6
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）	17
研究成果の登録のお願い	21
12月・1月のジョブ統計	22

ユーザーから

全ゲノム配列情報と画像クラスタリング技術の融合による 希少難治性疾患の層別・分類手法の開発	26
第XI因子・トロンビンと血小板膜糖蛋白GPIb α およびVWF複合体の結合エネルギー計算	32
微視的界面構造に基づくナノコンポジットの機械的特性の発現メカニズム	35
随伴変数法とバイズ最適化によるTop-Seeded Solution Growth法を用いた SiC結晶成長における断熱材分布最適化	37
汎関数線り込み群による量子スピン液体候補物質の物性解明	42
極低温推進薬の軌道上貯蔵・輸送に向けた減圧沸騰現象の解明と 予測手法の開発	48
都市部 5.7km 四方の 1m 格子を用いたリアルタイム風況シミュレーション	56

教育活動報告

東京大学大学院工学系研究科「材料量子モデリング入門」	62
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	66
第196回お試しアカウント付き並列プログラミング講習会 「MPIとOpenMPで並列化されたFortranプログラムのGPUへの移行手法」	67
第197回お試しアカウント付き並列プログラミング講習会 「第6回 GPUミニキャンプ」	69
第198回お試しアカウント付き並列プログラミング講習会 「OpenFOAM中級・3次元ダムブレイク解析」実施報告	72

原稿募集	74
------	----