

スーパーコンピューティング ニュース

Vol.26 No.2, 2024.3



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

スーパーコンピュータシステム 利用負担金表

Wisteria/BDEC-01 スーパーコンピュータシステム 利用負担金表(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	利用期間 12 ヶ月の金額・トークン量 (利用期間は1ヶ月単位で設定可)
公募制度による申込 Wisteria-O	申込 1 セット当り 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	
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 2 TB 利用者当り /home 50 GB	利用期間は当該年度末まで
トークン量追加	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。

※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

- 注意事項
- 「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 2 月、1 月から 3 月までは 3 月。
 - 前年度内に事前申込をした分については、利用開始月に関わらず、11 月の請求となる。
 - 利用負担金額が減額となる変更はできない。
 - ディスク量は、グループ全体の上限値である。

スーパーコンピュータシステム ジョブクラス制限値

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

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

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

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

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

※3 1ノード当りの利用者が利用可能なメモリー容量

※4 インタラクティブジョブの起動は次のとおり (トークン消費なし)

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

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

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

★ 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ノード当りもしくは1GPU 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"

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) ユーザ ID 登録数 制限なし		
	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]
ディスク容量追加	※ 東京大学情報基盤センターのスーパーコンピュータシステムのいずれかにユーザ ID(教育利用、講習会を除く)を有する場合、利用者ごとにディスク容量 5 TB を無償で付与し、グループごとに登録されているシステム(トークン移行先のシステムを除く)で付与されているディスク容量の 15%を無償で付与する。いずれも申込不要。		
	申込時点のディスク容量に応じて、1 TB 追加当たりの負担金額は下表参照 (無償で付与されたディスク容量は「申込時点のディスク容量」に含まない)		
	申込時点のディスク容量	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

2024 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 29 日 (金) ～ 4 月 3 日 (水)	3/29 9:00 ～ 4/3 17:00 までサービス休止	年度末処理
4 月 26 日 (金)	9:00 ～ 22:00 までサービス休止	月末処理
5 月 24 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 28 日 (木) 8:30 ～	3 月 29 日 (金) 9:00 まで
4 月 25 日 (木) 8:30 ～	4 月 26 日 (金) 9:00 まで
5 月 23 日 (木) 8:30 ～	5 月 24 日 (金) 9:00 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, GPU 専有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 29 日 (金) ～ 4 月 3 日 (水)	3/29 9:00 ～ 4/3 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 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

(2024.1.1 - 2024.2.29 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 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) … なし

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

最先端共同 HPC 基盤施設スーパーコンピュータシステム(OFP-II)導入のお知らせ (再掲)

スーパーコンピューティングチーム

Oakforest-PACS (OFP)システムの後継システムについて、「最先端共同 HPC 基盤施設スーパーコンピュータシステム (OFP-II)」として最先端共同 HPC 基盤施設(JCAHPC)において共同調達(筑波大学計算科学研究センター、東京大学情報基盤センター)を進めておりました。Web ページ「最先端共同 HPC 基盤施設が「OFP-II」の導入を決定」(https://www.cc.u-tokyo.ac.jp/supercomputer/ofp-II/service/introduction_OFP-II.php)でもお知らせしておりましたが、このたび納入システムが決まりましたので、お知らせいたします。

OFP-IIは、2つの計算ノード群(汎用 CPU ノード群、演算加速ノード群)、ログインノード群、共有ファイルシステム、管理サーバ群から構成されるシステムで、富士通株式会社 が構築を担当します。

OFP-IIの試験運用開始は、2025 年 1 月中を予定しております。サービス内容などの詳細は決まり次第、Web ページ、スーパーコンピューティングニュースなどでお知らせいたします。

1. システム構成

1.1 ハードウェア構成

OFP-IIのシステム構成は以下の通りです (図 1、表 1、表 2)。

図 1. システム構成図

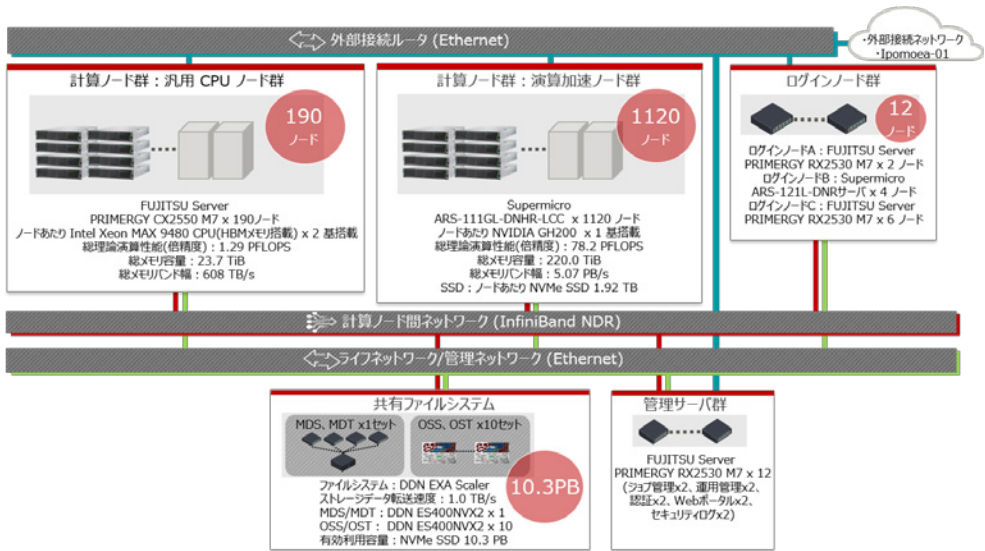


表 1. 全体構成

項目		汎用CPU ノード群	演算加速ノード群
総理論演算性能		1.29 PFLOPS	78.28 PFLOPS
総ノード数		190	1120
総メモリ容量		23.75 TiB	220.02 TiB
総メモリバンド幅		608 TB/s	5.07 PB/s
ネットワークポロジ		フルバイセクション Fat Free	フルバイセクション Fat Tree
共有ファイルシステム	ファイルシステム	Lustre (DDN EXAScaler)	
	サーバ(OSS)	DDN ES400NVX2	
	サーバ(OSS)数	10	
	ストレージ容量	10.32 PB	
	ストレージデータ転送速度	1.0 TB/s	

表 2. ノード構成

項目		汎用CPU ノード群	演算加速ノード群
マシン名		FUJITSU Server PRIMERGY CX2550 M7	Supermicro ARS-111GL-DNHR-LCC
CPU	プロセッサ名	Intel Xeon Max 9480	NVIDIA Grace CPU Arm Neoverse V2 CPU
	プロセッサ数(コア数)	2 (56 + 56)	1 (72)
	周波数	1.9 GHz	2.6 GHz
	理論演算性能	6.8096 TFLOPS	2.995 TFLOPS
	メモリ容量	128 GiB	111.7 GiB
	メモリ帯域幅	3.2 TB/s	512 GB/s
GPU	プロセッサ名	—	NVIDIA Hopper H100 GPU
	搭載数		1
	理論演算性能		66.9 TFLOPS
	メモリ容量		89.4 GiB
	メモリ帯域幅		4,022 GB/s
	CPU-GPU 間接続		NVLink Chip-2-Chip interconnect (片方向 450 GB/s)
SSD			NVMe SSD 1.92 TB (PCIe Gen4 x4)
冷却方式		水冷	水冷
インターコネクト		InfiniBand NDR200 (200Gbps)	InfiniBand NDR200 (200Gbps)

1.2 ソフトウェア構成

OFFP-IIのソフトウェア構成は、以下の通りです(表 3)。

表 3. ソフトウェア構成

		汎用 CPU ノード群	演算加速ノード群
OS		Rocky Linux 9 (ログインノードは Red Hat Enterprise Linux 9)	
ジョブスケジューラ		PBS Professional	
コンパイラ	GNU コンパイラ		
	Intel コンパイラ Fortran77/90/95/2003/2008 C、C++	NVIDIA HPC SDK Fortran77/90/95/2003/2008 C、C++ OpenMP、OpenACC NVIDIA CUDA Toolkit CUDA C CUDA C++	
メッセージ通信ライブラリ		Intel MPI	Open MPI
ライブラリ	—		cuBLAS、cuSPARSE、cuFFT、 MAGMA、cuDNN、NCCL
	BLAS、CBLAS、LAPACK、ScaLAPACK、SuperLU、SuperLU MT、SuperLU DIST、METIS、MT-METIS、ParMETIS、Scotch、PT-Scotch、PETSc、Trillinos、FFTW、GNU Scientific Library、NetCDF、Parallel netCDF、HDF5、Parallel HDF5、OpenCV、Xabclib、ppOpen-HPC、MassiveThreads、Standard Template Library (STL)、Boost C++		
アプリケーション		OpenFOAM、ABINIT-MP、PHASE、FrontFlow/blue、FrontISTR、REVOCAP-	

	Coupler, REVOCAP-Refiner, OpenMX, MODYLAS, GROMACS, BLAST, R packages, bioconductor, BioPerl, BioRuby, BWA, GATK, SAMtools, Quantum ESPRESSO, Xcrypt, ROOT, Geant4, LAMMPS, CP2K, NWChem, DeepVariant, Paraview, VisIt, POV-Ray, TensorFlow, PyTorch, JAX, Keras, Horovod, MXNet, Miniforge, Kokkos
フリーソフトウェア	autoconf, automake, bash, bzip2, cvs, emacs, findutils, gawk, gdb, make, grep, gnuplot, gzip, less, m4, python, perl, ruby, screen, sed, subversion, tar, tcsh, tcl, vim, zsh, git など
	Julia, CMake, Ninja, Java JDK
	Grid Community Toolkit, Gfarm, FUSE
コンテナ仮想化	Apptainer, Singularity Community Edition,

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

(1)～(3) のとおり、利用規程別表を改正します。本改正では、Oakbridge-CX の削除を行います。

(1) Oakbridge-CX の削除

2023 年 9 月 29 日に運用終了した Oakbridge-CX に関する利用負担金別表を削除いたします。

(2) 表記の修正

「利用者番号」の表記を「ユーザ ID」に修正します。スーパーコンピューティング部門各 Web ページ含め、利用者番号/ユーザ ID/ユーザ名/ログイン名など複数の表記が用いられていたため、わかりやすさ・英語表記などを考慮し、これらを「ユーザ ID」に統一します。

(3) トライアル利用負担金表の改正

(1)(2)についてトライアル利用負担金表に適用いたします。

● 利用負担金据え置きについて

2023 年度利用負担金においては、電気料金高騰に伴い、2022 年度比 1.5 倍に値上げさせていただき、さらに Wisteria/BDEC-01 Odyssey の計算ノードの 25 %を稼働停止とする対応を取らせていただきました。その後、電気料金は下降を示したため、2023 年 8 月には Odyssey を全系運用に戻しましたが、中東情勢の悪化などにより、2023 年 10 月には下げ止まり、現在は微増の状況となっております。この間、利用負担金の値下げについて検討を進めておりましたが、今後急激に電気代が高騰する可能性も考慮して、2024 年度の利用負担金について据え置き(2022 年度比 1.5 倍を維持)と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。引き続き 2025 年度の利用負担金の見直しに向けて検討を行ってまいります。

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ーシステム利用規程 (<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（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-0（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			
「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-0/A 基本セット（年額）【大学・公共機関等 90,000 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-0），24 時間×360 日相当，1 セット当たり） トークン消費係数 Wisteria-0: 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 （1 セット当たり） ユーザ ID 登録数 制限なし			
	公募制度による 申込（要審査） （但し Wisteria-A における「GPU 専有申込」，「ノー ド固定」も可能）	Wisteria-0 基本セット（年額）【大学・公共機関等 90,000 円，企業 108,000 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） ユーザ ID 登録数 制限なし			
	GPU 専有申込 （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 270,000 円，企業 324,000 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 （1 GPU，24 時間×360 日相当，1 セット当たり） トークン消費係数 3.00（1 GPU 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） ユーザ ID 登録数 制限なし			
		Wisteria-A 1GPU セット （年額）【大学・公共機関等 364,500 円，企業 437,400 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-0: 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） ユーザ ID 登録数 制限なし			
		GPU 数	トークン量	大学・公共機関等	企業
		1	25,920 トークン	364,500 円	437,400 円
		2	51,840 トークン	729,000 円	874,800 円
		4	103,680 トークン	1,458,000 円	1,749,600 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 2,916,000 円, 企業 3,499,200 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 ユーザ ID 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 7,500 円, 企業 9,000 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 2 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	一 般 申 込	Wisteria-O/A 最小セット 【大学・公共機関等 7,500 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 ユーザ ID 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 7,500 円】 720 トークン (1 ノード (Wisteria-O), 24 時間×30 日相当)

備考

- 「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
- 「企業」は第3条第7号に該当する者に適用する
- 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
- 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
- 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
- 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
- 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
- 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
- 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
- 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2（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	90,000	（8,640）
11ヶ月	82,500	（7,920）
10ヶ月	75,000	（7,200）
9ヶ月	67,500	（6,480）
8ヶ月	60,000	（5,760）
7ヶ月	52,500	（5,040）
6ヶ月	45,000	（4,320）
5ヶ月	37,500	（3,600）
4ヶ月	30,000	（2,880）
3ヶ月	22,500	（2,160）
2ヶ月	15,000	（1,440）
1ヶ月	7,500	（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	90,000	（8,640）	108,000	（8,640）	270,000	（25,920）	324,000	（25,920）
11ヶ月	82,500	（7,920）	99,000	（7,920）	247,500	（23,760）	297,000	（23,760）
10ヶ月	75,000	（7,200）	90,000	（7,200）	225,000	（21,600）	270,000	（21,600）
9ヶ月	67,500	（6,480）	81,000	（6,480）	202,500	（19,440）	243,000	（19,440）
8ヶ月	60,000	（5,760）	72,000	（5,760）	180,000	（17,280）	216,000	（17,280）
7ヶ月	52,500	（5,040）	63,000	（5,040）	157,500	（15,120）	189,000	（15,120）
6ヶ月	45,000	（4,320）	54,000	（4,320）	135,000	（12,960）	162,000	（12,960）
5ヶ月	37,500	（3,600）	45,000	（3,600）	112,500	（10,800）	135,000	（10,800）
4ヶ月	30,000	（2,880）	36,000	（2,880）	90,000	（8,640）	108,000	（8,640）
3ヶ月	22,500	（2,160）	27,000	（2,160）	67,500	（6,480）	81,000	（6,480）
2ヶ月	15,000	（1,440）	18,000	（1,440）	45,000	（4,320）	54,000	（4,320）
1ヶ月	7,500	（720）	9,000	（720）	22,500	（2,160）	27,000	（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	364,500	(25,920)	437,400	(25,920)
11 ヶ月	334,200	(23,760)	401,000	(23,760)
10 ヶ月	303,800	(21,600)	364,500	(21,600)
9 ヶ月	273,400	(19,440)	328,100	(19,440)
8 ヶ月	243,000	(17,280)	291,600	(17,280)
7 ヶ月	212,700	(15,120)	255,200	(15,120)
6 ヶ月	182,300	(12,960)	218,700	(12,960)
5 ヶ月	151,900	(10,800)	182,300	(10,800)
4 ヶ月	121,500	(8,640)	145,800	(8,640)
3 ヶ月	91,200	(6,480)	109,400	(6,480)
2 ヶ月	60,800	(4,320)	72,900	(4,320)
1 ヶ月	30,400	(2,160)	36,500	(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	2,916,000	(207,360)	3,499,200	(207,360)
11 ヶ月	2,673,000	(190,080)	3,207,600	(190,080)
10 ヶ月	2,430,000	(172,800)	2,916,000	(172,800)
9 ヶ月	2,187,000	(155,520)	2,624,400	(155,520)
8 ヶ月	1,944,000	(138,240)	2,332,800	(138,240)
7 ヶ月	1,701,000	(120,960)	2,041,200	(120,960)
6 ヶ月	1,458,000	(103,680)	1,749,600	(103,680)
5 ヶ月	1,215,000	(86,400)	1,458,000	(86,400)
4 ヶ月	972,000	(69,120)	1,166,400	(69,120)
3 ヶ月	729,000	(51,840)	874,800	(51,840)
2 ヶ月	486,000	(34,560)	583,200	(34,560)
1 ヶ月	243,000	(17,280)	291,600	(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	7,500	(720)	9,000	(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（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)	Wisteria-O/A 基本セット 【大学・公共機関等 27,000 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(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 (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 (1 セット当たり) ユーザ ID 登録数 制限なし
企業利用(トライアル)	Wisteria-O/A 基本セット 【企業 24,300 円/年】 (最大6セットまで) 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 (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 (1 セット当たり) ユーザ ID 登録数 制限なし
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)	【大学・公共機関等 2,300 円, 企業 2,700 円】 720 トークン (1 ノード(Wisteria-O), 24 時間×30 日相当)

表2 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	27,000	24,300	(8,640)
11ヶ月分	24,800	21,600	(7,920)
10ヶ月分	22,500	18,900	(7,200)
9ヶ月分	20,300	16,200	(6,480)
8ヶ月分	18,000	13,500	(5,760)
7ヶ月分	15,800	10,800	(5,040)
6ヶ月分	13,500	8,100	(4,320)
5ヶ月分	11,300	5,400	(3,600)
4ヶ月分	9,000	2,700	(2,880)
3ヶ月分	6,800	0	(2,160)
2ヶ月分	4,500	0	(1,440)
1ヶ月分	2,300	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。

別表 1 (第 13 条関係)

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

区 分		利 用 負 担 金 額		
大規模共通ストレージシステム(第 1 世代)	一般申込	【大学・公共機関等 7,200 円, 企業 8,640 円】 (1 TB 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) ユーザ ID 登録数 制限なし		
		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]
	ディスク容量追加	※ 東京大学情報基盤センターのスーパーコンピュータシステムのいずれかにユーザ ID (教育利用, 講習会を除く) を有する場合, 利用者ごとにディスク容量 5 TB を無償で付与し, グループごとに登録されているシステム (トークン移行先のシステムを除く) で付与されているディスク容量の 15% を無償で付与する。いずれも申込不要。		
		申込時点のディスク容量に応じて, 1 TB 追加当たりの負担金額は下表参照 (無償で付与されたディスク容量は「申込時点のディスク容量」に含まない)		
		申込時点のディスク容量	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

(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。

備考

- 「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
- 「企業」は第 3 条第 7 号に該当する者に適用する
- 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

別表2(第13条関係)

大規模共通ストレージシステム(第1世代)月数別利用負担金 (Ipomoea-01 システム)

一般申込 1ヶ月当たり利用負担金表

並列ファイルシステム ディスク容量	一般申込	
	大学・公共機関等	企業
1 TB	600 円/月	720 円/月
[10 TB まで 1 TB 追加当たり]	[350 円/月]	[420 円/月]
10 TB	3,750 円/月	4,500 円/月
[100 TB まで 1 TB 追加当たり]	[250 円/月]	[300 円/月]
100 TB	26,250 円/月	31,500 円/月
[1,000 TB まで 1 TB 追加当たり]	[200 円/月]	[240 円/月]
1,000 TB	206,250 円/月	247,500 円/月
[以降 1 TB 追加当たり]	[175 円/月]	[210 円/月]

追加オプション

ディスク容量追加 1ヶ月当たり利用負担金表

申込時点のディスク容量	並列ファイルシステム(1 TBにつき)	
	大学・公共機関等	企業
1 TB 未満	600 円/月	720 円/月
1 TB 以上 10 TB 未満	350 円/月	420 円/月
10 TB 以上 100 TB 未満	250 円/月	300 円/月
100 TB 以上 1,000 TB 未満	200 円/月	240 円/月
1,000 TB 以上	175 円/月	210 円/月

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

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

Wisteria/BDEC-01 スーパーコンピュータシステムでは、「大規模 HPC チャレンジ」を実施しています。「大規模 HPC チャレンジ」は、スーパーコンピュータシステムがもつ最大規模のノード数を、最大 24 時間・1 研究グループで計算資源の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。

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 24 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)

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～翌 9:00 までの最大 24 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 においては各月 Odyssey で 1 件、Aquarius で 1 件、最大 2 件まで受入可能、ただし 1 グループで Odyssey、Aquarius 両方利用することも可能

3. 実施日程

2024 年度の今後の「大規模 HPC チャレンジ」実施日程は表 1 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. 2024 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	2024 年 4 月 25 日(木) 9:00 ～ 4 月 26 日(金) 9:00	2024 年 3 月 18 日(月) 17:00 【締切】	3 月下旬	4 月上旬
	2024 年 5 月 23 日(木) 9:00 ～ 5 月 24 日(金) 9:00			
	2024 年 6 月 27 日(木) 9:00 ～ 6 月 28 日(金) 9:00			
	2024 年 7 月 25 日(木) 9:00 ～ 7 月 26 日(金) 9:00			
第 2 回	2024 年 8 月 15 日(木) 9:00 ～ 8 月 16 日(金) 9:00	2024 年 7 月 16 日(火) 17:00 【締切】	7 月下旬	8 月上旬
	2024 年 9 月 26 日(木) 9:00 ～ 9 月 27 日(金) 9:00			
	2024 年 10 月 24 日(木) 9:00 ～ 10 月 25 日(金) 9:00			
	2024 年 11 月 21 日(木) 9:00 ～ 11 月 22 日(金) 9:00			
第 3 回	2024 年 12 月 19 日(木) 9:00 ～ 12 月 20 日(金) 9:00	2024 年 11 月 18 日(月) 17:00 【締切】	11 月下旬	12 月上旬
	2025 年 1 月 23 日(木) 9:00 ～ 1 月 24 日(金) 9:00			
	2025 年 2 月 20 日(木) 9:00 ～ 2 月 21 日(金) 9:00			
	2025 年 3 月 27 日(木) 9:00 ～ 3 月 28 日(金) 9:00			

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

4. 研究対象

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

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

5. 利用資格

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

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。

6. 採択基準、審査方法

応募課題は、以下の基準により、東京大学情報基盤センタースーパーコンピューティング研究部門の教職員、及び、外部委員より構成される審査委員会により採択課題を選考し、できるだけ速やかに公表を行う予定です。

主な採択基準

- 計算・結果の詳細を論文等も含めて公表できること。
- 計算結果が科学的に有用、あるいは社会的なインパクトがあると考えられること。
- 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）以上の利用を目標としていること。
- 計画に実現性があり、短期間で効果を示すことが可能であること（一回の使用時間は最大 24 時間です）。
- 本システムの運用、ユーザーにとって有用な情報を提供すること。

※ 項目 A) ～ D)は、必須となります。項目 E)は必須ではありませんが、申込書に該当する記述がある場合、加点点評価される場合があります。

※ 最大利用可能ノード数：Odyssey：6,144 ノード、Aquarius：36 ノード

¹ 「大規模 HPC チャレンジ」

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

7. 利用申込

募集要項、スーパーコンピュータシステム利用規程等をよくお読みの上、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 ITC website with the following elements:

- Header:** ITC logo, "東京大学情報基盤センター スーパーコンピューティング部門", "Supercomputing Division, Information Technology Center, The University of Tokyo", "ENGLISH", "サイト内検索", and navigation links: "お問い合わせ", "アクセス", "リンク", "サイトマップ".
- Navigation Bar:** "ホーム", "システム", "利用案内", "サポート", "FAQ", "研究会・イベント", "広報・刊行物", "研究成果" (circled in green), "研究部門について", "研究活動設備紹介", "Wisteria/BDEC-01".
- 研究成果の取扱い (Research Results Handling):** A section titled "国外での成果発表について" with text about publishing research results. A blue arrow points down to the next section.
- 研究成果の登録について (Research Results Registration):** A section explaining the registration process. A green circle highlights the link "研究成果登録のページ".
- 研究成果登録 (Research Results Registration):** A form titled "研究成果の登録をお願いします。" with fields for "アカウント名" (Account Name), "メールアドレス" (Email Address), and "登録したい業績" (Research Results to be registered). A green circle highlights the "ログイン" (Login) button.

Annotations and steps:

- ① 「研究成果」 → 「研究成果の取扱い」をクリック
- ② 「研究成果の取扱い」ページ下部の「研究成果の登録について」→「研究成果登録のページ」をクリック
- ③ 「アカウント名(利用者番号)」及び「メールアドレス」を入力し、登録したい業績を選択
- ④ 「ログイン」をクリックし、成果登録ページで研究成果の登録をお願いいたします

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		
2023年4月	2,490	609	10,918	199	1,015	126,222	52,135	2,287	3,249,272	2,972.28	374	590	1,362,467	3,059.4	39.8
5月	2,120	642	13,766	417	1,129	116,362	81,229	2,501	2,896,836	3,647.63	1,078	710	1,944,613	3,548.2	46.2
6月	2,214	697	14,341	482	1,018	99,350	67,039	2,712	3,115,214	7,363.70	1,016	519	2,342,234	4,367.8	56.9
7月	2,260	663	13,306	292	817	237,419	60,686	2,975	3,279,405	6,165.45	688	459	2,696,378	4,707.3	61.3
8月	2,305	562	10,539	264	968	171,053	37,527	3,231	3,469,397	7,280.53	804	505	2,185,461	3,851.7	50.2
9月	2,376	637	14,040	352	960	319,152	67,675	3,532	3,588,203	4,683.01	1,048	486	2,783,625	3,937.6	51.3
10月	2,453	766	17,688	647	1,077	259,646	109,709	3,832	3,793,773	6,342.43	3,314	608	2,904,633	4,032.3	52.5
11月	2,440	755	16,557	443	749	230,969	91,468	3,924	3,710,937	4,413.83	3,285	457	2,336,525	3,305.3	43.0
12月	2,470	765	17,814	589	645	209,255	102,758	4,145	3,684,525	4,170.89	2,497	414	2,467,254	3,375.4	44.0
2024年1月	2,460	771	18,052	715	619	179,338	95,311	4,378	4,009,854	9,010.93	3,825	334	3,325,979	4,550.0	59.2
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	3,817,548	5,222.5	68.0
2月	2,038	581	11,857	359	754	202,793	76,333	2,483	3,693,712	5,734.78	826	363	3,593,710	5,455.6	71.0
3月	1,984	542	12,085	344	575	356,988	66,373	2,668	3,696,232	4,037.06	1,113	358	3,875,012	5,316.0	69.2
合計			170,963	5,103	10,326	2,508,547	908,243			65,823	19,868	5,803	31,817,891		

- ・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

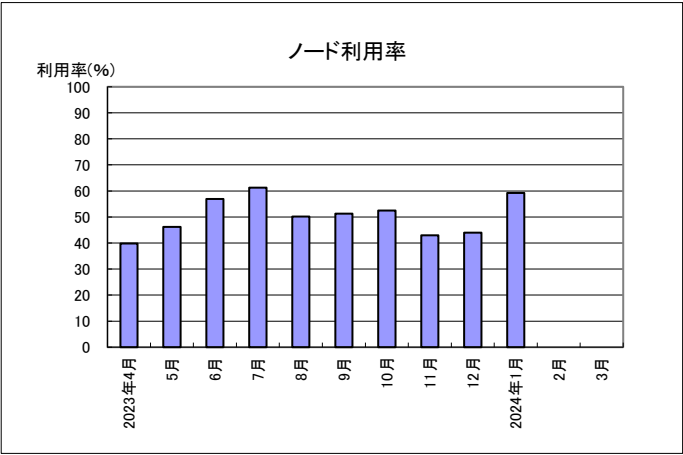
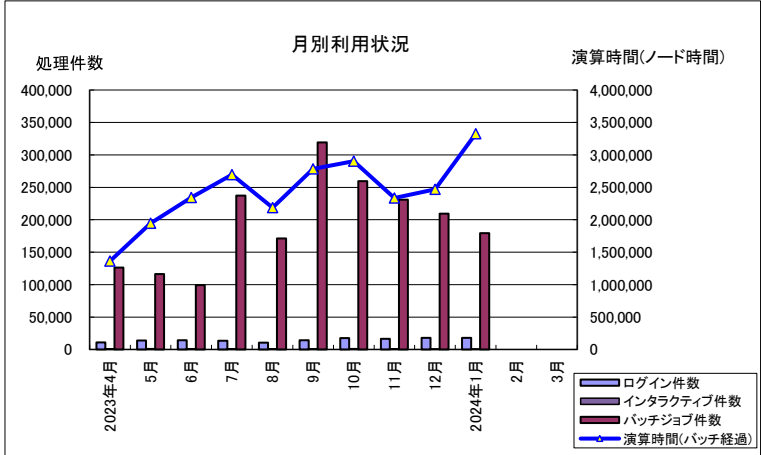
・接続時間： ログイン時間の累計

・ログイン(実CPU)： コア時間単位

・2023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)

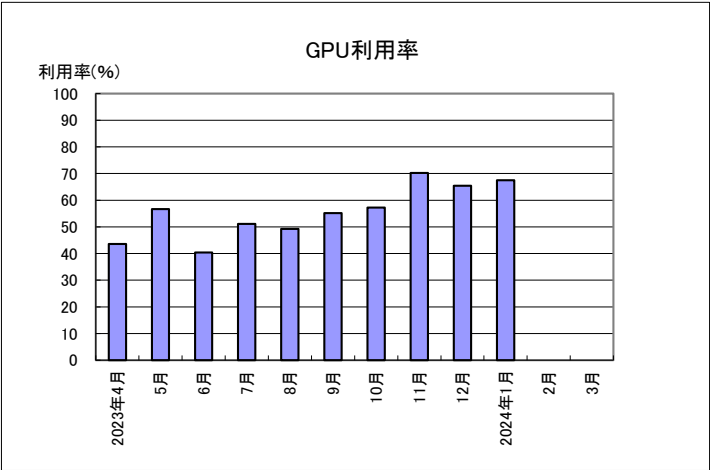
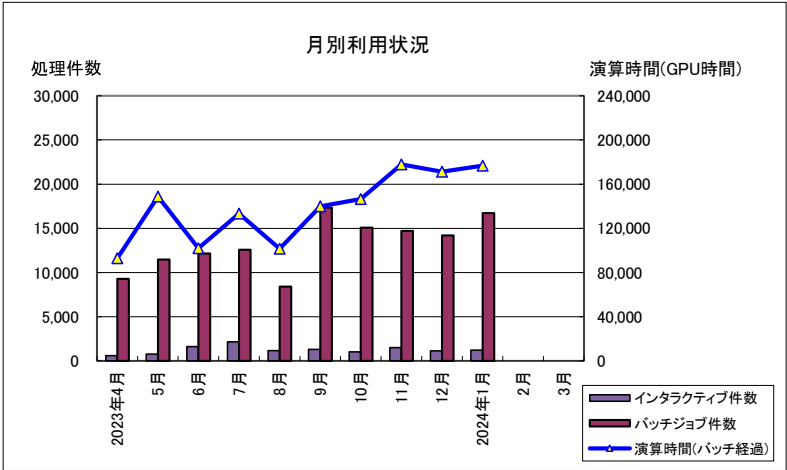
年月	処理件数		演算時間 [GPU時間](経過時間)		平均GPU 利用数 (GPU)	GPU 利用率 (%)
	インタラクティブ ジョブ	バッチジョブ	インタラクティブ ジョブ	バッチジョブ		
2023年4月	604	9,295	378	92,830	156.9	43.6
5月	757	11,461	453	148,834	204.2	56.7
6月	1,605	12,148	847	101,998	145.5	40.4
7月	2,165	12,566	1,181	133,352	184.0	51.1
8月	1,151	8,399	555	101,555	177.3	49.2
9月	1,304	17,342	614	139,913	198.8	55.2
10月	1,021	15,063	817	146,559	206.1	57.2
11月	1,500	14,720	862	177,838	252.7	70.2
12月	1,122	14,193	887	171,351	235.6	65.4
2024年1月	1,226	16,726	913	176,691	242.9	67.5
2023年1月	971	18,776	953	167,789	230.8	64.1
2月	713	11,134	428	120,574	183.6	51.0
3月	952	8,630	660	158,282	218.0	60.6
合計	14,120	151,677	8,595	1,669,777		

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

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

・2023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

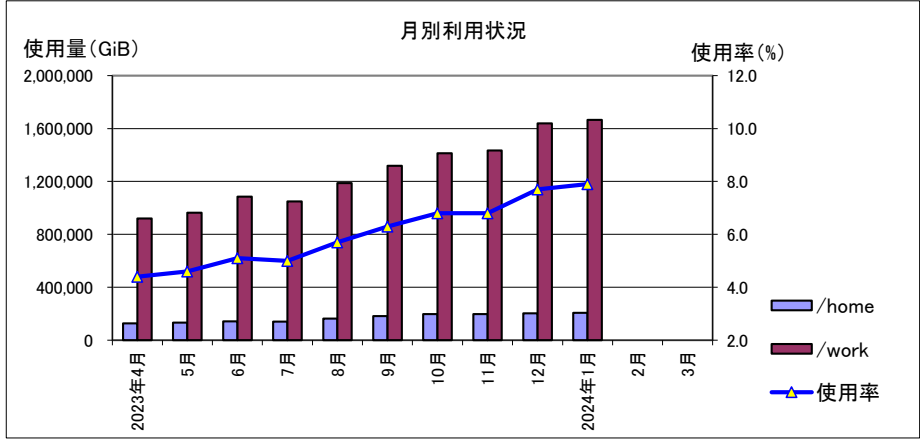
・GPU利用率： サービスGPUに対する利用率。 計算式＝GPU利用数÷サービスGPU数×100



3. 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		
2023年4月	2,074	52	176	1,339	17.7	126,821	920,839	4.4	23,657,187.6
5月	2,066	36	155	660	17.5	132,266	963,614	4.6	23,657,187.6
6月	2,063	31	106	621	6.7	142,578	1,084,425	5.1	23,657,187.6
7月	2,118	32	229	570	35.3	140,976	1,049,941	5.0	23,657,187.6
8月	2,147	41	158	626	20.9	162,691	1,187,456	5.7	23,657,187.6
9月	2,206	46	222	986	36.9	181,450	1,318,998	6.3	23,657,187.6
10月	2,134	46	200	1,119	28.1	197,114	1,414,140	6.8	23,657,187.6
11月	2,189	46	253	886	71.7	198,291	1,433,127	6.8	23,657,187.6
12月	2,209	33	142	338	35.9	203,268	1,638,146	7.7	23,657,187.6
2024年1月	2,240	32	124	370	24.2	207,529	1,664,714	7.9	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
2月	2,371	35	178	618	272.5	118,832	609,324	3.0	23,657,187.6
3月	2,352	29	212	591	57.1	122,422	807,757	3.9	23,657,187.6
合計			2,155	8,724	625				

- ・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
- ・2023年1月分は合計に含まない



第 45 回 ASE 研究会「(計算・データ・学習) 融合とその先にあるもの」国際ワークショップ (ハイブリッド開催)

中 島 研 吾

東京大学情報基盤センター

東京大学情報基盤センターASE 研究会 (Advanced Supercomputing Environment) は内外からの講演者をお招きして不定期に開催している。第 45 回 ASE 研究会 (2023 年 11 月 29 日)¹は、科研費基盤研究 (S) (計算+データ+学習) 融合によるエクサスケール時代の革新的シミュレーション手法 (19H05662, 研究代表: 中島研吾 (東京大学情報基盤センター)) (以下「本プロジェクト」)², 学際大規模情報基盤共同利用・共同研究拠点 (JHPCN)³と共催で、「(計算・データ・学習) 融合とその先にあるもの」国際ワークショップとして開催した。

昨今、スーパーコンピューティングは劇的な変化を遂げつつある。「計算 (シミュレーション)・データ・学習 (S+D+L)」の統合・融合は、日本政府が提唱するサイバー空間とフィジカル空間の融合を可能とする Society 5.0 の実現に向けて有効な手段である。本プロジェクトでは、エクサスケール時代のスーパーコンピュータによる科学発見を持続的に推進するため、「計算 (シミュレーション)・データ・学習 (S+D+L)」を組み合わせた革新的な計算科学手法をするとともに、Wisteria/BDEC-01 システム上で革新的ソフトウェア基盤「h3-Open-BDEC⁴」を開発し、①変動精度演算・精度保証・自動チューニングによる新計算原理に基づく高性能・高信頼性・省電力数値解法、②機械学習による階層型データ駆動アプローチ、③ヘテロジニアス環境におけるシステムソフトウェア、を中心に研究を実施し、その成果は国内外で高い評価を受けている。2023 年度は本プロジェクトの最終年度に当たっており、本ワークショップでは、これまでの研究成果の紹介とともに、将来展望についての議論も実施した。また、海外からは、Richard Vuduc 教授⁵ (Georgia Institute of Technology, USA), Xing Cai 教授⁶ (Simula Research Laboratory, Norway) をお招きし、現地での基調講演の他、議論にも加わっていただいた。

表 1 にプログラムを示す。会議は現地開催 (柏 II キャンパス)、オンラインのハイブリッドで開催され、申込数は合計 60 名、現地参加者は講演者も含め 12 名、オンライン参加者は 35 名で、そのうち 6 名は海外からの参加であった。ハイブリッド開催する午後の会議の場合、特に中東、ヨーロッパからは時間帯的にオンライン参加することが可能であり、昨今海外からのオンライン参加が増加している。

また、翌日 (2023 年 11 月 30 日) は、2 名の招待講演者、本プロジェクトメンバー、当センター教員によって、大規模シミュレーション、数値アルゴリズム、自動チューニングに関して議論を実施し、将来の更なる共同研究に向けた検討も併せて実施した。この日の議論を元に、2024 年度の JHPCN 共同研究課題を計画し、提案書を提出した。

¹ <https://www.cc.u-tokyo.ac.jp/events/ase/45/45.php>

² <https://kaken.nii.ac.jp/ja/grant/KAKENHI-PROJECT-19H05662>

³ <https://jhpcn-kyoten.itc.u-tokyo.ac.jp/ja/>

⁴ <https://h3-open-bdec.cc.u-tokyo.ac.jp/>

⁵ <https://vuduc.org/v2/>

⁶ <https://www.simula.no/people/xingcai/>

本研究会の様子は録画されており、東大情報基盤センターの YouTube チャンネル⁷から視聴することができる。

表 1 第 45 回 ASE 研究会プログラム

13:00 - 13:30	Kengo Nakajima (The University of Tokyo) Integration of Simulation/Data/Learning and Beyond
13:30 - 13:45	Takeshi Iwashita (Online) (Hokkaido University, Kyoto University) Research activities of Hokkaido University group for next-generation linear solvers - mixed precision computing, accelerators, subspace correction techniques-
13:45 - 14:00	Takahiro Katagiri (Nagoya University) Exploring AI for Auto-tuning through Sparse Matrix Image Information
14:00 - 14:15	Hikomichi Nagao (The University of Tokyo) Deep Learning to Extract Earthquakes and Low-Frequency Tremors in Continuous Seismic Waveforms
14:15 - 14:30	Takashi Shimokawabe (The University of Tokyo) Fast Prediction Methods for Fluid Simulation Results Using Deep Neural Networks
14:30 - 15:00	Richard Vuduc (Georgia Institute of Technology, USA) (Keynote Talk) Data-movement accelerators for scientific computing problems
15:00 - 15:20	(Discussion)
15:20 - 15:35	(Break)
15:35 - 15:50	Takeshi Ogita (Online) (Waseda University) Verified Solutions of Large Sparse Linear Systems Arising from 3D Poisson Equation
15:50 - 16:05	Masatoshi Kawai (Online) (Nagoya University) Effectiveness of low/adaptive precision with ICCG method
16:05 - 16:20	Hisashi Yashiro (Online) (National Institute for Environmental Studies) Algorithmic transformation from physical models to data-driven models using the coupling library: a case of a climate model
16:20 - 16:35	Shinji Sumimoto (The University of Tokyo) h3-Open-SYS/WaitIO: A System-wide Heterogeneous Communication Library to Couple Multiple MPI programs
16:35 - 16:50	Hayato Shiba (Online) (University of Hyogo) Deep learning of simulated glassy dynamics
16:50 - 17:20	Xing Cai (Simula Research Laboratory, Norway) (Keynote Talk) Towards high-performance unstructured-mesh computations
17:20 - 17:40	(Discussion)
17:40 - 17:45	(Closing)

⁷ <https://youtu.be/4tZ3YM4VTQc>

第 46 回 ASE 研究会（計算・データ・学習）融合における日仏国際協力と次世代計算基盤（ハイブリッド開催）

中 島 研 吾

東京大学情報基盤センター

東京大学情報基盤センターASE 研究会（Advanced Supercomputing Environment）は内外からの講演者をお招きして不定期に開催している。第 46 回 ASE 研究会（2024 年 1 月 16 日）¹は、フランスより Serge G. Petiton 教授²（University of Lille and CNRS, France）、Nahid Emad 教授³（University of Paris Saclay/Versailles, Maison de la Simulation, and LI-PaRAD, France）をお招きして、科研費基盤研究（S）（計算＋データ＋学習）融合によるエクサスケール時代の革新的シミュレーション手法（19H05662, 研究代表：中島研吾（東京大学情報基盤センター））⁴と共催で、「日仏国際協力と次世代計算基盤」として開催した。招待講演者による最先端 HPC 分野に関する講演、東大情報基盤センターの推進する、「計算（シミュレーション）・データ・学習（S+D+L）」融合における日仏国際協力の現状と展望の他、文部科学省「次世代計算基盤に係わる調査研究事業」⁵に関する講演も実施した。

日本（筑波大、東大、東工大、京大の各スパコンセンター）と Petiton 教授を中心としたフランス研究機関は、高性能計算（High Performance Computing, HPC）分野において、JST-ANR 日仏共同研究「FP3C（Framework and Programming for Post Petascale Computing）」⁶（2010 年度～2014 年度）等を通じて深い関係にあり、学際大規模情報基盤共同利用・共同研究拠点（JHPCN）⁷等で継続して共同研究を実施している。

表 1 にプログラムを示す。会議は現地開催（柏 II キャンパス）、オンラインのハイブリッドで開催され、申込数は合計 48 名、現地参加者は講演者も含め 13 名、オンライン参加者は 26 名で、そのうち 7 名は海外からの参加であった。現地では講演者の他、在日フランス大使館科学技術担当参事官も出席した。

本研究会の様子は録画されており、東大情報基盤センターの YouTube チャンネル⁸から視聴することができる。

¹ <https://www.cc.u-tokyo.ac.jp/events/ase/46/46.php>

² <https://www.cristal.univ-lille.fr/~petiton/>

³ <https://mdls.fr/glossary/nahid-emad/>

⁴ <https://kaken.nii.ac.jp/ja/grant/KAKENHI-PROJECT-19H05662>

⁵ https://www.mext.go.jp/b_menu/boshu/detail/mext_00229.html

⁶ <https://ieeexplore.ieee.org/document/6710357FP>

⁷ <https://jhpcn-kyoten.itc.u-tokyo.ac.jp/ja/>

⁸ <https://youtu.be/ZsG1Mhylilo>

表1 第46回 ASE 研究会プログラム

14:45 - 15:15	Kengo Nakajima (The University of Tokyo) Welcome, Integration of Simulation/Data/Learning and Beyond: Japan-France International Collaborations
15:15 - 15:45	Nahid Emad (University of Paris Saclay/Versailles, Maison de la Simulation, and LI-PaRAD, France) Unite and Learn: An iterative approach for AI
15:45 - 16:15	Serge G. Petiton (University of Lille and CNRS, France) Challenges for Iterative Methods on Extreme Scale Very Sparse Matrices
16:15 - 16:40	Masatoshi Kawai (Online) (Nagoya University) Performance Evaluation of Applications Applied Low/Adaptive Precision
16:40 - 16:55	(Break)
16:55 - 17:20	Takashi Shimokawabe (The University of Tokyo) Overview of System Research by the RIKEN team and Activities of its Application Group in Feasibility Studies on Next-Generation Supercomputing Infrastructures
17:20 - 17:45	Toshihiro Hanawa (The University of Tokyo) Feasibility Study for Operation Technology on Next-Generation's HPC Infrastructure
17:45 - 17:50	(Closing)

ガラスが示すせん断誘起臨界性と Gardner 相の類似性についての数値的研究

大山 倫 弘

東京大学総合文化研究科（研究当時）

（現 株式会社豊田中央研究所）

1. はじめに

ガラス転移は様々なソフトマター系で普遍的に観察される現象であり[1-3]，過去数十年にわたりその転移に関連した非自明な現象の数々が精力的な研究の対象とされてきた．ガラス転移・あるいはその結果得られるガラスについての理論的な理解の完成には未だ至っていないが，着実に理解の進展は得られている．たとえば，2010 年代後半頃からガラスの普遍的特徴の一つとして**限界安定性**と呼ばれる性質が注目され始めた[4]．これは無限小の歪の下でも塑性変形（ミクロな構成粒子の相互作用ネットワークの非線形な組み換え）を起こしうるというガラス系の特異な性質を指す．特に，無限次元において厳密な理論となる平均場レプリカ理論は**非 Debye 則**[5]や**Gardner 転移**[6-8]といった限界安定性に関連した様々な性質を予言する．

レプリカ理論の第一の予言，非 Debye 則は振動状態密度の低周波極限に現れる特異性である．結晶の振動状態密度については Debye 則[9]によって理論的な理解が与えられているが，ガラス系を対象にした理論はいまだ完成していない．レプリカ理論[5]によると，低周波極限においてガラス系は Debye 則で記述される通常のフォノンモードに加えて特殊なモードを持ち，それらのモードはフォノンとは異なる $D(\omega) \sim \omega^2$ という冪則に従うと予言されている．これを非 Debye 則と呼ぶ．有限次元においては，これらのモードは局在化しており塑性変形の素過程に対応している[10]．つまり低周波域での冪則は熱力学極限では無限小のエネルギー注入で励起される塑性変形モードが存在することを示唆する．多くの数値的研究により実際に低周波極限の振動状態密度の計測が行われ，多岐に渡る系で普遍的にこうした局在化した振動モードが非 Debye 則に従うことが確認された[11-16]．数値的に観測される冪則は $D(\omega) \sim \omega^4$ であり，指数の値は一般的な理論的予測が与える $D(\omega) \sim \omega^2$ [5, 17] とは乖離している（一部の理論では数値計算結果と整合的な冪則が得られる[18, 19]）が，冪則に従うという重要な定性的側面では一致しており，非 Debye 則の存在自体は確立された知見となっている．また，せん断外場に対する応答を通じた直接の塑性変形の測定も行われており，塑性変形を引き起こすのに必要な歪みの平均値 $\langle \delta \gamma \rangle$ がシステムサイズ N の冪的な減少関数として $\langle \delta \gamma \rangle \sim N^{-\chi}$ （指数 χ は $\chi \approx 2/3$ ）のように振る舞うことも知られている[20, 21]．

レプリカ理論による二点目の予言は熱力学的な『相転移』に関係している．ガラス系がパラメータ空間中で特定の境界を超えると，**完全なレプリカ対称性の破れ**という現象を経て，ほとんど同じ構造が異なる準安定状態を形成するようになる[8]（図 1）．転移の結果現れたこの特別な限界安定ガラス相は通常の安定ガラス相とは区別して **Gardner 相** と呼ばれる．Gardner 相では無限小の擾乱の下で，ほぼ同じ構造を持った準安定

状態間の遷移が観察される。自由エネルギー地形描像では、各メタベイスン内での無限の階層性を持ったサブベイスンの出現としてこの転移を理解することができる（一般に通常のガラスが持つ準安定状態に対応した谷底を**メタベイスン**、Gardner 相で現れる準安定状態に対応したものを**サブベイスン**と区別する：図 1）。Gardner 相を検出するには臨界的な性質、つまり適切に定義された相関長さや感受率の発散が重要な要素である。いくつかの研究で、有限次元の剛体球系でも実際にそうした性質の測定に成功し、Gardner 相の存在が確認された[22, 23]。しかし、Gardner 相に対応したパラメータ空間へのアクセスは一般には困難であり、これまでに Lennard-Jones 系などの代表的なガラス形成系で有限次元において Gardner 相の明確な検出に成功した例はない[24-26]。そのため、普遍性が確立された非 Debye 則とは対照的に、Gardner 相の普遍性についてはいまだ結論は与えられていない[27]（低次元では転移がクロスオーバーになるが Gardner 的な性質が普遍的に観察されうという学説も近年提案された[28, 29]）。

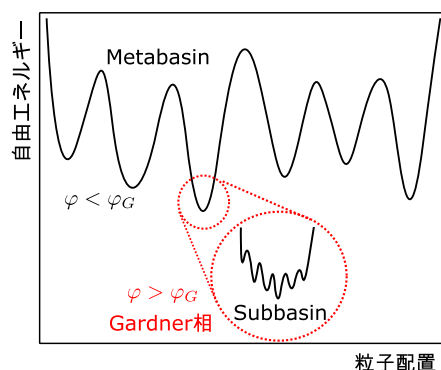


図 1. 自由エネルギー地形上での Gardner 転移の概念図。縦軸は自由エネルギー、横軸は粒子配置を表す。Gardner 転移前は自由エネルギー地形がメタベイスンのみで構成されるが、転移後は各メタベイスン内に無限の階層性を持ったサブベイスンが現れる。

本研究ではせん断外場下でガラス系が示す臨界的挙動と Gardner 相との定性的な類似性を調べた。上述の通り限界安定性には異なる側面が存在するが、無限次元の平均場理論の予言とは異なり、有限次元系ではこれら異なる側面の一部のみが観察される状況が多く存在する。本研究では、異なる側面がいずれも塑性変形で特徴づけられる点に注目し、塑性変形が示す特性の観点から限界安定性を再考する。本紙では主結果に関連した事項のみを簡単にまとめるが、限界安定性の様々な側面についてこの他にも多岐に渡る研究がなされてきている。それらと本研究の結果との関連については文献[30]で網羅的に議論している。

2 数値計算

2.1 モデルガラス系

本研究では文献[21, 31]と同じ、Lennard-Jones ガラス系を扱う。計算負荷軽減の観点からポテンシャルには有限のカットオフ長も導入した。詳細な説明やパラメータ設定は文献[21]に譲るが、カットオフ距離においてポテンシャルと力が滑らかにゼロになるように設定した。本研究で扱うゼロ温度系ではカットオフ距離で不連続性が存在するとアーティファクトが現れるためである[13]。また、結晶化を防ぐために異なる粒径を持った二成分の混合系を扱った。系の密度はガラス的な動力学が観察されるよう十分高密度の値を設定した。初期粒子配置は無限大温度に対応したランダム配置から、無限大の冷却速度に対応するポテンシャルエネルギー最小化により生成した。物理量はすべてマイクロなエネルギー単位（ポテンシャルの強さを決定するパラメータ）と平均粒径で無次元化した（本研究では以下に説明する通り準静的過程を扱うため時間の概念が存在せず、2つの単位のみですべて無次元化できる）。

2.2 準静的せん断外場

以下では熱ゆらぎの存在しない（ゼロ温度）状況で速度ゼロでせん断歪みを印加する、いわゆる athermal quasistatic (AQS) せん断プロトコル [32] 下での系の応答を調べる。速度ゼロの準静的プロセスは微小なせん断歪み $\Delta\gamma (\leq 5 \times 10^{-6})$ の印加と系の全ポテンシャルエネルギーの最小化の繰り返しにより実装される。エネルギー最小化過程には FIRE アルゴリズム [33] を採用した。Lees-Edwards の周期境界条件 [34] の下の二次元系を扱う。

せん断外場を印加されたガラス系は塑性変形、つまり構成粒子の非線形な配置換えを起こす。特に、AQS せん断下の塑性変形はポテンシャルエネルギー描像ではサブペイスン間（あるいは稀にはメタペイスン間）の状態遷移と捉えられる。本研究ではこうした描像に則り、AQS せん断下の塑性変形を介してポテンシャルエネルギー地形の幾何学的情報を調べる。せん断の印加とともに系の応力やポテンシャルエネルギーは単調に増加していくが、塑性変形発生時にはこれらの物理量が不連続に低下する（図 2）。そのため、塑性変形の発生はこうした応力降下等で検出することができる。本研究では図 2 のような巻き戻し法を用い、こうした塑性変形の測定を行った。この方法によって、異なるサブペイスン（つまり状態）に対応した安定配置を歪み γ_{Ci} に対応した完全に同一の境界条件の下で比較することができる。

2.3 状態間の平均相対二乗変位

本研究の目的はポテンシャルエネルギー地形が Gardner 相のような階層性を有するか否かを AQS せん断下の塑性変形を介して間接的に定量化・検証することにある。Gardner 相を特徴づけるための『秩序変数』としては、同一条件下で得られる異なる粒子配置（レプリカ）間のオーバーラップ（やその確率分布）が用いられる [35]。異なる粒子配置間のオーバーラップの定量化指標は複数提案されているが、本研究ではパラメータ

の導入なしに測定可能な平均相対二乗変位 $\Delta_{AB} \equiv \frac{1}{N} \sum_i^N (\mathbf{r}_i^A - \mathbf{r}_i^B)^2$ を採用する。ここで $\mathbf{r}_i^s$ は配置 $s \in A, B$ 中の粒子 i の位置を表し、A および B は図 2 に示したとおり塑性変形前後の状態を指す。レプリカ理論 [7, 24, 35] によると、Gardner 相では臨界的な挙動が観察される。つまり、秩序変数であるオーバーラップに関して適切に定義された感受率がシステムサイズの冪関数として発散されることが期待される。以下、2 つの状況でこうした性質の有無を確認する。

結果に移る前に本研究で採用した平均相対二乗変位 Δ_{AB} について 1 点注意を述べる。 Δ_{AB} はレプリカ液体論で用いられるレプリカ間の相対平均二乗変位（以下では $\Delta_{AB}^{\text{replica}}$ と呼ぶ）と似てはいるが完全に同一の量で

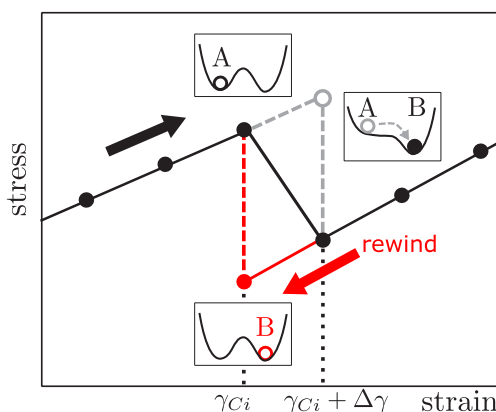


図 2. 応力歪み曲線上での巻き戻し法の概念図。黒線で示した過程は通常のせん断印加過程であり、赤色が巻き戻し過程を示す。灰色は塑性変形による遷移過程を示す（この図では i 番目の塑性変形を仮定している）。塑性変形は臨界歪み γ_{Ci} で発生する。塑性変形前後の状態は A, B によって表した。インセットは各状況に対応するポテンシャルエネルギー地形上のポンチ絵を示す。本図は英国王立化学会の許可を得て文献 [30] から一部変更した上で引用した。

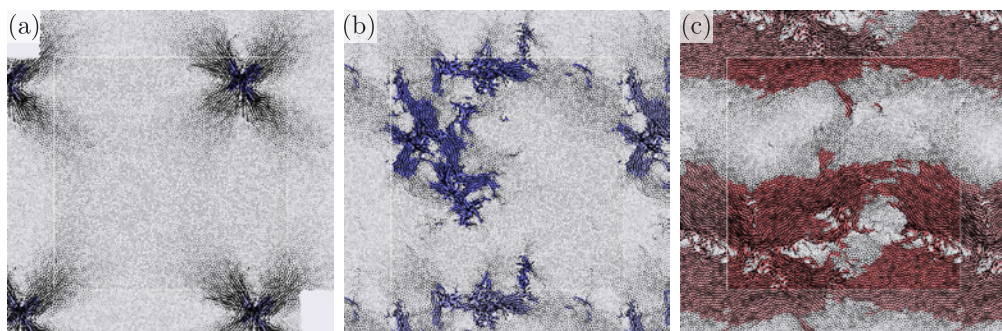


図 3. 塑性変形イベントにより誘起された変位場の可視化. (a) 静止状態アンサンブルのうち、単独の塑性変形素過程だけが励起されたイベントによる変位場. (b) 静止状態アンサンブルのうち $|\Delta_{AB}|$ が最大だったイベントによる変位場. (c) 定常状態アンサンブルのうち $|\Delta_{AB}|$ が最大だったイベントによる変位場. いずれもシステムサイズが $N=8192$ の系の結果. 矢印が各粒子の変位ベクトルを示しており、矢印の大きさは各イベントごとに視認性を確保できるように異なる値で規格化されている. 文献[21]の定義に従って、mobile particles のみを色付けしている. 白線で囲まれたオリジナルの数値計算ドメインの周囲に、周期境界条件によるコピーセルも可視化している. 本図は英国王立化学会の許可を得て文献[30]から引用した.

はない. 我々の定義 Δ_{AB} ではメタベイスン間の jump も含まれてしまう可能性があるが、レプリカ液体論では単一メタベイスン内の dynamics に議論を限定している (state-following 解析). そのため、これら 2 つの平均相対二乗変位の間には概ね $\Delta_{AB} \geq \Delta_{AB}^{\text{replica}}$ という関係が期待される. つまり、 $\Delta_{AB}^{\text{replica}}$ が Gardner 相に期待される臨界性に対応した system-spanning な性質を示すためには本研究で扱う Δ_{AB} が system-spanning であることが必要条件となる.

3. 結果 : 臨界的性質の発見

以下では 2 種類のアンサンブルを考え、両者の結果の違いから限界安定性についての考察を行う. 1 つ目のアンサンブルは複数のサンプルを用意し、それぞれにせん断外場を印加し始めて最初に観測される塑性変形のみを集めたアンサンブルである. こうした第一塑性変形は最も強く擾乱なしの静止状態の特性を反映しているため、以下ではこれを静止状態アンサンブルと呼ぶ. 異なるシステムサイズ $N = 512, 2048, 8192, 32768, 131072$ を扱い、各 N に対して 4000 の独立したサンプルを用意し、それぞれにおいて第一塑性変形による状態遷移過程の平均相対二乗変位 Δ_{AB} を測定した. こうした静止状態アンサンブルはいわゆるアバランチ臨界性は示さないことが知られている [20, 21].

2 つ目のアンサンブルでは定常せん断を印加した際に実現される定常状態での塑性変形を対象にする. γ を系に印加された歪みとして、LJ ガラス系においてマクロな降伏転移は $\gamma \approx 0.1$ 程度で起こる [36]. そこで、本研究では $\gamma > 0.25$ を定常状態とみなし、この条件下で発生する塑性変形を各システムサイズ ($N = 512, 2048, 8192, 32768$) で 5000 イベント測定した. 以下このアンサンブルを定常状態アンサンブルと呼ぶ. 静止状態アンサンブルと異なり、定常状態アンサンブルはシステムスパンしたアバランチも含むことが知られている [21]. つまり、定常状態アンサンブルはアバランチ臨界性を示す. 図 3(c) にシステムスパンしたアバランチの例として最大の平均相対二乗変位 Δ_{AB} が観測されたイベントにより誘起された変位場を可視化

した（参考として図3(a,b)に静止状態アンサンブルのうち単一の塑性変形素過程のみが励起されたイベントと最大の Δ_{AB} を示したイベント中の変位場を可視化した）。

Gardner 相に期待される臨界的挙動の定量化指標の一つとして、平均相対二乗変位のゆらぎの測定を行う。文献[24]に従い、以下の式で表される非平衡感受率

$$\chi_{AB} = N \frac{\langle \Delta_{AB}^2 \rangle - \langle \Delta_{AB} \rangle^2}{\langle \Delta_{AB}^i \rangle^2 - \langle \Delta_{AB}^i \rangle^2},$$

を用いた。ここで $\langle \Delta_{AB} \rangle$ は異なる塑性変形イベントについてアンサンブル平均した平均相対二乗変位であり、 $\langle \Delta_{AB}^i \rangle = \frac{1}{N} \sum_i \langle (\mathbf{r}_i^A - \mathbf{r}_i^B)^2 \rangle$ はその一粒子版を意味する。この感受率は集団と一粒子各レベルでの構造変化度合いの比に対応し、協調的に運動する領域の大きさの見積もりを与える。

静止状態・定常状態両アンサンブルの結果を図4に示した。この図では感受率 χ_{AB} をシステムサイズ N の関数としてプロットしている。静止状態アンサンブルでは N の増加とともに χ_{AB} が対数発散していることがわかる（対数的挙動はインセットの片対数プロット上での直線的振る舞いからわかる）。この発散は塑性歪み場が2次元系で有する長距離相関に起因し[37]、臨界的なシステムスパンした性質が存在しないことを示

す。実際、静止状態アンサンブル中で最大の Δ_{AB} を示すイベントで誘起される変位場をプロットしてみても、系全体に伝達してはいないことがわかる（図3(b)：ここではコンパクトなアバランチは形成されており、図3(a)で示した単独の塑性変形素過程が励起された場合の変位場とは定性的に異なる）。つまり、静止状態サンプルはGardner相とは定性的に異なる性質を持つ。文献[24-26]では有限次元の非剛体球系の静止状態においてGardner相の存在については否定的な報告がなされており、我々の結果はこれらと整合的と言える。

一方、定常状態アンサンブルの結果は非自明な冪的発散を示した（図4メインパネルの両対数プロット上の直線的振る舞いからわかる）。これはせん断誘起avalanche臨界性（降伏臨界性）[20, 21]に対応しており、定常状態において塑性変形素過程が連鎖的に発生しシステムスパンしたアバランチを形成することに起因する（図3(c)に示した最大 Δ_{AB} イベントの可視化結果参照）。こうした感受率の発散はまさにGardner相において期待される性質である[7, 22, 24]。

以上の結果は限界安定性についての重要な示唆を与える。1章で紹介したとおり、限界安定性には異なる側面が存在する：ひとつは無限小のひずみの下でも塑性変形を示すというものであり、もう一つは感受率の発散など、Gardner転移に関連した臨界的な性質である。文献[20, 21, 38]で報告されている通り、塑性変形を誘起するのに必要なひずみの平均値 $\langle \delta \gamma \rangle$ のシステムサイズ N 依存性は静止状態・定常状態両アンサンブルに

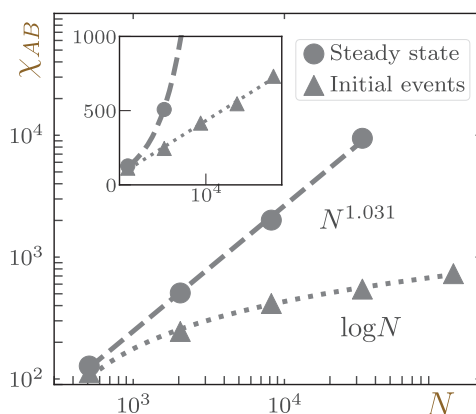


図4. 感受率 χ_{AB} をシステムサイズ N の関数として示した両対数プロット。●印は定常状態アンサンブル、▲印は静止状態アンサンブルの結果を示す。インセットは縦軸を線形軸にした片対数プロット。図中の線は観測結果に対する冪関数および対数関数によるフィッティング結果。本図は英国王立化学会の許可を得て文献[30]から引用した。

において、正の指数 χ を用いて $\langle\delta\gamma\rangle \sim N^{-\chi}$ という冪的な依存性を示すことがわかっている。換言すると、熱力学的極限では無限小の歪みの下で塑性変形が発生すると期待される。この意味では静止状態・定常状態双方が限界安定性を示すが、我々の結果はひずみに誘起され観察される塑性変形の空間構造は system-spanning な性質の有無の観点で定性的に異なることを示している。2.3 節で言及した $\Delta_{AB} \geq \Delta_{AB}^{\text{replica}}$ という関係を考慮すると、これは定常状態のみが Gardner 相の必要条件を満たすことを意味する。もし、この観測結果が真に有限次元の LJ ガラス系でのせん断誘起 Gardner 転移[39]を意味するならば、上述の2つの限界安定性、つまり $\langle\delta\gamma\rangle \sim N^{-\chi}$ というスケーリングの成立と Gardner 相に関連した臨界性は異なる機構で発現することになる。こうした描像は非 Debye 則と Gardner 相についての数々の先行研究とも整合的である：前者は普遍的に様々な系で観察されることが確立されている[11-16]一方、後者は限定的な状況でしか確認されていない[22-27]。そのため、有限次元系において限界安定性に言及する際は、より具体的に限界安定性のうちのこういった側面かを明確にする必要がある。過去の文献ではこうした区別を怠ったため、表面上の様々な矛盾[6, 7, 22-26, 28, 29, 40-48]が存在するように見えてしまっていた。

4. まとめ

本研究では準静的せん断下の二次元 Lennard-Jones ガラス系を対象に、塑性変形によって遷移する二状態間の平均相対二乗変位を解析した。特に、サンプルにせん断を印加しはじめて初めに観察される塑性変形のみを集めた静止状態アンサンブルと、定常状態で観察される塑性変形のみを集めた定常状態アンサンブルという、異なる2つのアンサンブルで、相対二乗変位が示すゆらぎから定義した感受率 χ_{AB} の比較を行った。静止状態では χ_{AB} のシステムサイズ依存性が対数発散を示すのに対し、定常状態では冪発散となった。前者は二次元系特有の歪み場の長距離相関に起因した自明な発散であるが、後者は臨界的な性質を反映している。せん断下で観察される塑性変形がサブベイスン間の（あるいは稀にメタベイスン間の）状態遷移に対応することを考えると、準静的せん断によって非平衡定常状態に駆動されたゼロ温度ガラスが持つポテンシャルエネルギー地形は Gardner 相と定性的に似た臨界性を示すと解釈できる。本研究での検討はエネルギー地形を直接観測しているわけではないため、必要十分条件の検証にはいたっておらず、Gardner 相とは異なる性質に起因した臨界性が現れている可能性も否定できない。しかし、本研究結果はなぜ有限次元の静止状態では Gardner 相の実現が極めて困難なのかについて解き明かすための新たな道筋を照らすものと期待している。例えば系がせん断下でどのように臨界性を獲得するかといった観点でのアプローチが重要な未解明問題である。

参考文献

- [1] L. Berthier, G. Biroli, J.-P. Bouchaud, L. Cipelletti, and W. van Saarloos, *Dynamical Heterogeneities in Glasses, Colloids, and Granular Media* (Oxford University Press, 2011).
- [2] L. Berthier and G. Biroli, Theoretical perspective on the glass transition and amorphous materials, *Rev. Mod. Phys.* **83**, 587 (2011).
- [3] H. Tanaka, H. Tong, R. Shi, and J. Russo, Revealing key structural features hidden in liquids and glasses, *Nat. Rev. Phys.* **1**, 333 (2019).

- [4] M. Müller and M. Wyart, Marginal Stability in Structural, Spin, and Electron Glasses, *Annu. Rev. Condens. Matter Phys.* **6**, 177 (2015).
- [5] S. Franz, G. Parisi, P. Urbani, and F. Zamponi, Universal spectrum of normal modes in low-temperature glasses, *Proc. Natl. Acad. Sci.* **112**, 14539 (2015).
- [6] P. Charbonneau, J. Kurchan, G. Parisi, P. Urbani, and F. Zamponi, Fractal free energy landscapes in structural glasses, *Nat. Commun.* **5**, 3725 (2014).
- [7] P. Charbonneau, Y. Jin, G. Parisi, C. Rainone, B. Seoane, and F. Zamponi, Numerical detection of the Gardner transition in a mean-field glass former, *Phys. Rev. E* **92**, 012316 (2015).
- [8] G. Biroli and P. Urbani, Breakdown of elasticity in amorphous solids, *Nat. Phys.* **12**, 1130 (2016).
- [9] C. Kittel, *Introduction to Solid State Physics*, 7th ed. (John Wiley; Sons, New York, 1996).
- [10] C. Maloney and A. Lemaitre, Universal Breakdown of Elasticity at the Onset of Material Failure, *Phys. Rev. Lett.* **93**, 195501 (2004).
- [11] E. Lerner, G. Düring, and E. Bouchbinder, Statistics and Properties of Low-Frequency Vibrational Modes in Structural Glasses, *Phys. Rev. Lett.* **117**, 035501 (2016).
- [12] H. Mizuno, H. Shiba, and A. Ikeda, Continuum limit of the vibrational properties of amorphous solids, *Proc. Natl. Acad. Sci.* **114**, E9767 (2017).
- [13] M. Shimada, H. Mizuno, and A. Ikeda, Anomalous vibrational properties in the continuum limit of glasses, *Phys. Rev. E* **97**, 022609 (2018).
- [14] G. Kapteijns, E. Bouchbinder, and E. Lerner, Universal Nonphononic Density of States in 2D, 3D, and 4D Glasses, *Phys. Rev. Lett.* **121**, 055501 (2018).
- [15] L. Wang, A. Ninarello, P. Guan, L. Berthier, G. Szamel, and E. Flenner, Low-frequency vibrational modes of stable glasses, *Nat. Commun.* **10**, 26 (2019).
- [16] D. Richard, K. González-López, G. Kapteijns, R. Pater, T. Vaknin, E. Bouchbinder, and E. Lerner, Universality of the Nonphononic Vibrational Spectrum across Different Classes of Computer Glasses, *Phys. Rev. Lett.* **125**, 085502 (2020).
- [17] M. Shimada, H. Mizuno, and A. Ikeda, Vibrational spectrum derived from local mechanical response in disordered solids, *Soft Matter* **16**, 7279 (2020).

- [18] E. Bouchbinder, E. Lerner, C. Rainone, P. Urbani, and F. Zamponi, Low-frequency vibrational spectrum of mean-field disordered systems, *Phys. Rev. B* **103**, 174202 (2021).
- [19] C. Rainone, P. Urbani, F. Zamponi, E. Lerner, and E. Bouchbinder, Mean-field model of interacting quasilocalized excitations in glasses, *SciPost Phys. Core* **4**, 008 (2021).
- [20] S. Karmakar, E. Lerner, and I. Procaccia, Statistical physics of the yielding transition in amorphous solids, *Phys. Rev. E* **82**, 055103 (2010).
- [21] N. Oyama, H. Mizuno, and A. Ikeda, Unified view of avalanche criticality in sheared glasses, *Phys. Rev. E* **104**, 015002 (2021).
- [22] L. Berthier, P. Charbonneau, Y. Jin, G. Parisi, B. Seoane, and F. Zamponi, Growing timescales and lengthscales characterizing vibrations of amorphous solids, *Proc. Natl. Acad. Sci. U. S. A.* **113**, 8397 (2016).
- [23] Y. Jin, P. Urbani, F. Zamponi, and H. Yoshino, A stability-reversibility map unifies elasticity, plasticity, yielding, and jamming in hard sphere glasses, *Sci. Adv.* **4**, eaat6387 (2018).
- [24] C. Scalliet, L. Berthier, and F. Zamponi, Absence of Marginal Stability in a Structural Glass, *Phys. Rev. Lett.* **119**, 205501 (2017).
- [25] C. L. Hicks, M. J. Wheatley, M. J. Godfrey, and M. A. Moore, Gardner Transition in Physical Dimensions, *Phys. Rev. Lett.* **120**, 225501 (2018).
- [26] B. Seoane, D. R. Reid, J. J. de Pablo, and F. Zamponi, Low-temperature anomalies of a vapor deposited glass, *Phys. Rev. Mater.* **2**, 015602 (2018).
- [27] L. Berthier, G. Biroli, P. Charbonneau, E. I. Corwin, S. Franz, and F. Zamponi, Gardner physics in amorphous solids and beyond, *J. Chem. Phys.* **151**, 010901 (2019).
- [28] Q. Liao and L. Berthier, Hierarchical Landscape of Hard Disk Glasses, *Phys. Rev. X* **9**, 011049 (2019).
- [29] Q. Liao, L. Berthier, H.-J. Zhou, and N. Xu, Dynamic Gardner cross-over in a simple glass, *Proc. Natl. Acad. Sci.* **120**, (2023).
- [30] N. Oyama, H. Mizuno, and A. Ikeda, Shear-induced criticality in glasses shares qualitative similarities with the Gardner phase, *Soft Matter* **19**, 6074 (2023).
- [31] N. Oyama, H. Mizuno, and A. Ikeda, Instantaneous Normal Modes Reveal Structural Signatures for the Herschel-Bulkley Rheology in Sheared Glasses, *Phys. Rev. Lett.* **127**, 108003 (2021).

- [32] K. Maeda and S. Takeuchi, Computer simulation of deformation in two-dimensional amorphous structures, *Phys. Status Solidi* **49**, 685 (1978).
- [33] E. Bitzek, P. Koskinen, F. Gähler, M. Moseler, and P. Gumbsch, Structural Relaxation Made Simple, *Phys. Rev. Lett.* **97**, 170201 (2006).
- [34] M. P. Allen and D. J. Tildesley, *Computer simulation of liquids* (Oxford University Press, 1987).
- [35] G. Parisi, P. Urbani, and F. Zamponi, *Theory of Simple Glasses* (Cambridge University Press, 2020).
- [36] M. Ozawa, L. Berthier, G. Biroli, A. Rosso, and G. Tarjus, Random critical point separates brittle and ductile yielding transitions in amorphous materials, *Proc. Natl. Acad. Sci.* **115**, 6656 (2018).
- [37] G. Picard, A. Ajdari, F. Lequeux, and L. Bocquet, Elastic consequences of a single plastic event: A step towards the microscopic modeling of the flow of yield stress fluids, *Eur. Phys. J. E* **15**, 371 (2004).
- [38] S. Karmakar, E. Lerner, I. Procaccia, and J. Zylberg, Statistical physics of elastoplastic steady states in amorphous solids: Finite temperatures and strain rates, *Phys. Rev. E* **82**, 031301 (2010).
- [39] C. Rainone and P. Urbani, Following the evolution of glassy states under external perturbations: the full replica symmetry breaking solution, *J. Stat. Mech. Theory Exp.* **2016**, 053302 (2016).
- [40] M. C. Angelini and G. Biroli, Spin Glass in a Field: A New Zero-Temperature Fixed Point in Finite Dimensions, *Phys. Rev. Lett.* **114**, 095701 (2015).
- [41] A. Seguin and O. Dauchot, Experimental Evidence of the Gardner Phase in a Granular Glass, *Phys. Rev. Lett.* **117**, 228001 (2016).
- [42] Y. Jin and H. Yoshino, Exploring the complex free-energy landscape of the simplest glass by rheology, *Nature Communications* **8**, 14935 (2017).
- [43] C. Scalliet and L. Berthier, Rejuvenation and Memory Effects in a Structural Glass, *Phys. Rev. Lett.* **122**, 255502 (2019).
- [44] C. Scalliet, L. Berthier, and F. Zamponi, Marginally stable phases in mean-field structural glasses, *Phys. Rev. E* **99**, 012107 (2019).
- [45] A. P. Hammond and E. I. Corwin, Experimental observation of the marginal glass phase in a colloidal glass, *Proc. Natl. Acad. Sci.* **117**, 5714 (2020).

- [46] L. Kool, P. Charbonneau, and K. E. Daniels, Gardner-Like Crossover from Variable to Persistent Force Contacts in Granular Crystals, *Phys. Rev. E* **106**, 054901 (2022).
- [47] H. Xiao, A. J. Liu, and D. J. Durian, Probing the Gardner Transition in an Active Quasi-Thermal Pressure-Controlled Granular System, (2021).
- [48] V. Astuti, S. Franz, and G. Parisi, New Analysis of the Free Energy Cost of Interfaces in Spin Glasses, *Journal of Physics A: Mathematical and Theoretical* **52**, 294001 (2019).

An investigation of physics-informed neural network (PINN) method for estimation of reservoir permeability using poroelasticity principle

Yi Zhang^{1,2}

1. Geological Carbon Dioxide Storage Technology Research Association
2. Research Institute of Innovative Technology for the Earth

1. Introduction

Geological CO₂ storage (GCS) in subsurface aquifers has been proposed as a near-term solution for reducing CO₂ emission. In GCS projects, understanding reservoir permeability structure is important for the designing of CO₂ injection profile and the modeling and prediction of the flow behavior of injection CO₂. However, obtaining of the reservoir permeability profile is not easy. From conventional well testing methods based on pressure measurement, only the discrete permeability at selected depth intervals can be estimated.

The distributed fiber optic strain sensing (DFOSS) tool now can accurately measure rock deformation (e.g., $1\ \mu\epsilon$) induced by pore pressure change along a vertical wellbore with a remarkably high spatial resolution ($\sim\text{cm}$). Since the pressure change and the deformation are near-linearly related under small perturbations (e.g., the Biot's static poroelasticity principle), the strain change contains the information of the pressure change and reservoir permeability. Our previous study (Zhang et al. 2021) has demonstrated that the distributed strain data can be used for inversely estimating fine-scale reservoir permeability structure.

Albeit the success, in the study, there was a problem that the forward run using the finite element method is quite slow. This makes it hard to do inverse modeling and apply the method to more complex models. In this project, we aim to investigate the Physics-informed deep learning (or physics informed neural networks, PINNs) method for solving the inversion problem and estimate the reservoir permeability structure from distributed strain data. PINNs are neural networks that are trained to satisfy physical equations, such as the poroelasticity equation that relates pressure and deformation in porous media. By using PINNs, we may be able to avoid the expensive and slow forward runs of the finite element method, and instead use the neural network to simultaneously fit both the equations and strain data. The main steps of our method are:

Step 1: Construct the PINNs based model for poroelasticity equations using SCIANN libs (e.g. a TensorFlow wrapper for PINNs).

Step 2: Benchmark the PINNs poroelasticity model with the analytical solution of

Barry-Mercer fluid injection problem.

Step 3: Modify the PINNs model to cylindrical coordinates and perform the modeling for a water pumping problem with the synthetic distributed strain data. Minimize the loss function of the PINN, which consists of the mean squared error between the network output and the physical equation, the data mismatch term. Obtain the estimated permeability structure from the trained PINN.

2. Mathematical equations

The equations of Biot's quasi-static poroelasticity for the hydraulic and mechanical problem are as follows:

$$\frac{\partial}{\partial t} \left(\frac{1}{M} \frac{\partial p}{\partial t} \right) + \nabla \cdot \left(\frac{k}{\mu} \nabla p \right) = 0$$

$$\nabla \cdot \left(\frac{1}{M} \frac{\partial p}{\partial t} + \frac{b}{M} \nabla \cdot \mathbf{u} \right) = 0$$

where p is the fluid pressure, M is the Biot modulus, k is the permeability, μ is the fluid viscosity, b is the Biot coefficient, $\mathbf{u}$ is the displacement.

Following Haghighat et al. (2022) and Amini et al. (2023), in the non-dimensional forms (in cartesian coordinates), the above equations can be written as:

$$\frac{b^2}{\bar{K}_{dr}} D^* \frac{\partial \bar{p}}{\partial \bar{t}} + b \frac{b}{\bar{K}_{dr}} D^* \frac{\partial \bar{\sigma}_v}{\partial \bar{t}} - \frac{\bar{k}}{\bar{\mu}} \nabla^2 \bar{p} - f = 0$$

$$\bar{K}_{dr} \nabla \bar{\epsilon}_v + \frac{1}{2} \frac{1-2\nu}{1+\nu} \bar{K}_{dr} \nabla (\nabla \cdot \bar{\mathbf{u}}) + \frac{3}{2} \frac{1-2\nu}{1+\nu} \bar{K}_{dr} \nabla \cdot (\nabla \bar{\mathbf{u}}) - b \nabla \bar{p} = 0$$

where the overline denotes that the variable is dimensionless, $\bar{K}_{dr}$ is the drained bulk modulus, $\bar{\epsilon}_v$ is the dimensionless volumetric strain, f is the body force term. For the aquifer well testing setting in this study, we rewrite the hydraulic and mechanical equations to the forms in cylindrical (2DRZ) coordinates.

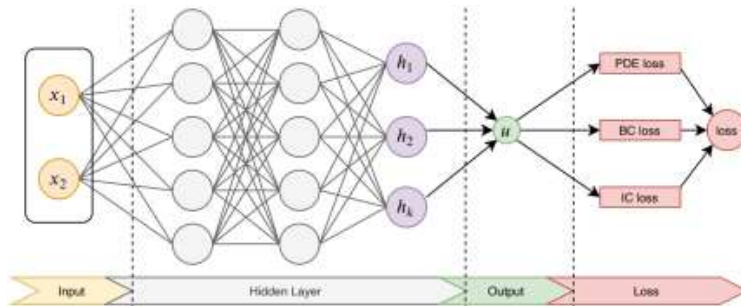


Figure 1. A schematic of a PINN for solving general PDEs (Peng et al. 2021).

The solution space of the PDEs are approximated using deep neural networks (Figure 1). Considering a PDE $\mathcal{P}u(\mathbf{x}, t) = f(\mathbf{x}, t)$ in the domain $\Omega \times T$, by PINNs, the variable $u(\mathbf{x}, t)$ is approximated by a set of deep neural networks as $u(\mathbf{x}, t) \approx \tilde{u}(\mathbf{x}, t) = \mathcal{N}_u(\mathbf{x}, t; \boldsymbol{\theta})$. We put the hydraulic and mechanical equations and initial/boundary conditions as the

constraint (or the loss function) terms of the deep neural networks. The loss function is:

$$\begin{aligned}\mathcal{L}(\mathbf{x}, t; \boldsymbol{\theta}) = & \lambda_1 |\mathcal{P}\tilde{u}(\mathbf{x}, t) - f(\mathbf{x}, t)|_{\Omega \times T} \\ & + \lambda_2 |\tilde{u}(\mathbf{x}, t) - g_D(\mathbf{x}, t)|_{\Gamma_D \times T} \\ & + \lambda_3 |\tilde{q}(\mathbf{x}, t) - g_N(\mathbf{x}, t)|_{\Gamma_N \times T} \\ & + \lambda_4 |\tilde{u}(\mathbf{x}, t_0) - h(\mathbf{x})|_{\Omega \times T_0}\end{aligned}$$

where λ_i is the weight of each term (the PDE, Dirichlet and Neumann boundary conditions, and initial condition). The training process is to find the “best-fit” approximated solution through minimizing the total loss function on the sampling points. Using the approach proposed by Haghighat et al. (2022), we sequentially train the hydraulic and mechanical networks to let the networks approximate the coupled hydro-mechanical system and improve the convergence. We have tested three problems: (1) the time-dependent, uniform, Barry-Mercer fluid injection problem; (2) a synthetic, time-independent, layered aquifer fluid pumping model; and (3) a synthetic, time-dependent, layered aquifer fluid pumping model.

3. Challenges and Results

(1) Barry-Mercer fluid injection problem

Referring to Amini et al. (2023), we set the fluid injection/production well at point $(x=0.25, y=0.25)$, and we use “observation” data at point $(x=0.75, y=0.75)$. We use a structured sampling grid and sequential strategy to train the problem. The results (Figure 2) reveal that the PINNs can well model the fluid injection/production resulted mechanical responses. Using the displacement or strain records, the permeability of the media can be inversely estimated with the training process.

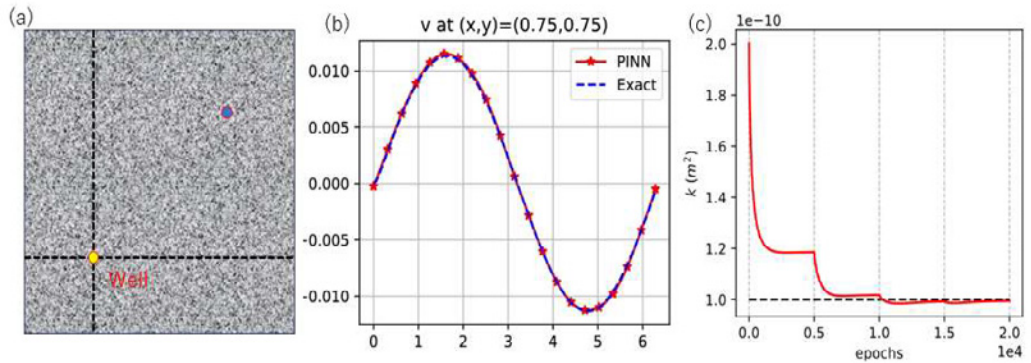


Figure 2. (a)The setting of the Barry-Mercer fluid injection problem with an injection well and observation point. (b)The PINNs modeled vertical displacement can be well matched at the observation point to the analytical solution. (c) The inversely estimated permeability as a function of training epochs.

(2) Synthetic aquifer testing model (steady state)

Next, we test the PINNs for a synthetic 2D cylindrical (2DRZ) aquifer water pumping model. The model is similar to those in common aquifer testing setting, but with an observation well installed with a distributed strain sensing tool, which can provide the entire profile of the vertical strain along the well, representing the aquifer strain. In the model, we divide the target formation (ROI) as 80 layers with different permeability values. To reduce the model training difficulty, we first only consider a steady-state case, in which no temporal change is considered. The results (Figure 3) suggest the PINNs model can well estimate the permeability profile for most parts of the target formation except those near upper and lower boundaries, where large errors exist.

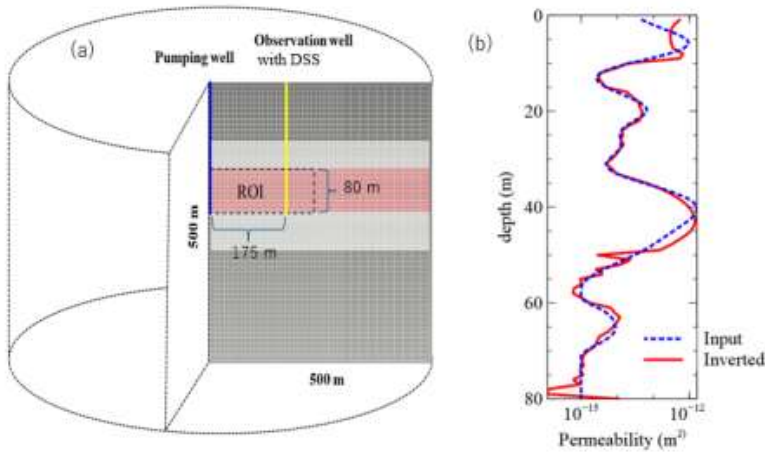


Figure 3. (a) The setting of the aquifer water pumping problem with a pumping well and an observation well (Zhang et al. 2021). (b) The inversely estimated permeability profile compared with the input permeability profile for synthetic model.

(3) Synthetic aquifer testing model (time-dependent)

The model setting is same as case (2) but consider the time-dependent changes. For this case, although we have applied the techniques such as the sequential training, nondimensionalization and adaptive weight strategy, we are not successful in the training process for time-dependent and heterogeneous field model. We find that the training process for time-dependent heterogeneous parameter field model of PINNs is a non-trivial optimization task. The loss of the training process is very unstable. The reason may be because we use less sampling points. However, increasing sampling points make the training very time consuming and become impractical for our purpose. I am still making effort to improve the training process by changing the network architecture or using transfer learning.

4. Conclusions

In this short report, we presented our preliminary results using PINNs method for modeling the hydromechanical coupled problem and parameter estimation. We find the PINNs method can accurately fit the simple uniform model. A useful characteristic of PINNs is that it likes a many-dimensional fitting problem—it not only fits the PDEs but also simultaneously fits the parameter with the measurement data. Therefore, an inverse modeling can implicitly and one-shot solved within the same training process of the PINNs. This way greatly benefits the inverse modeling compared with conventional gradient-based inverse modeling approaches, which needs many times of forward modeling and construction of Jacobian matrix, explicitly.

However, for completed heterogeneous model, this study finds that the training process is quite difficult for using the current network architecture. In addition, the training process is not transparent and readily controlled as in common gradient-based inversion methods. More investigations are needed to improve the network setting and training techniques.

Acknowledgements

This paper is based on results obtained from a project (JPNP18006) commissioned by the New Energy and Industrial Technology Development Organization (NEDO) and the Ministry of Economy, Trade and Industry (METI) of Japan. This research is partially supported by Initiative on Promotion of Supercomputing for Young or Women Researchers, Information Technology Center, The University of Tokyo.

Reference

- Amini, D., Haghighat, E., & Juanes, R. (2023). Inverse modeling of nonisothermal multiphase poromechanics using physics-informed neural networks. *Journal of Computational Physics*, 490, 112323.
- Haghighat, E., Amini, D., & Juanes, R. (2022). Physics-informed neural network simulation of multiphase poroelasticity using stress-split sequential training. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 397, 115141.

地震波形インバージョンによるマントル最下部の

S・P 波速度構造同時推定

—地球深部の熱・化学進化の理解に向けて—

佐藤嶺

東京大学大学院理学系研究科

1. はじめに

本研究の目的は中米下マントル最下部領域の詳細な S・P 速度不均質構造を推定することで熱及び化学不均質構造の解釈を行う事である。

固体岩石のマントルと液体鉄合金の外核が接する核-マントル境界 (CMB) は地球内部の最も主要な熱的・化学組成的境界の 1 つであり、その近傍の詳細な構造推定は地球の熱・化学進化の理解に重要である。CMB 直上約 400 km (D'' 領域) の化学進化の要因については議論が続いており、近年では (A) マントル対流における下部熱境界層である D'' 領域では、地温勾配とマントル組成のソリダスが交わり、部分熔融に伴う化学分化を起こすマグマが定常的に発生する可能性が高い¹。(B) 数億年かけて D'' 領域まで沈み込んだ海洋プレートのうち、放射性熱源を含む海洋地殻成分が海洋プレート本体から剥がれ濃集し、不均質構造を形成する²という二説が主に提唱されている。

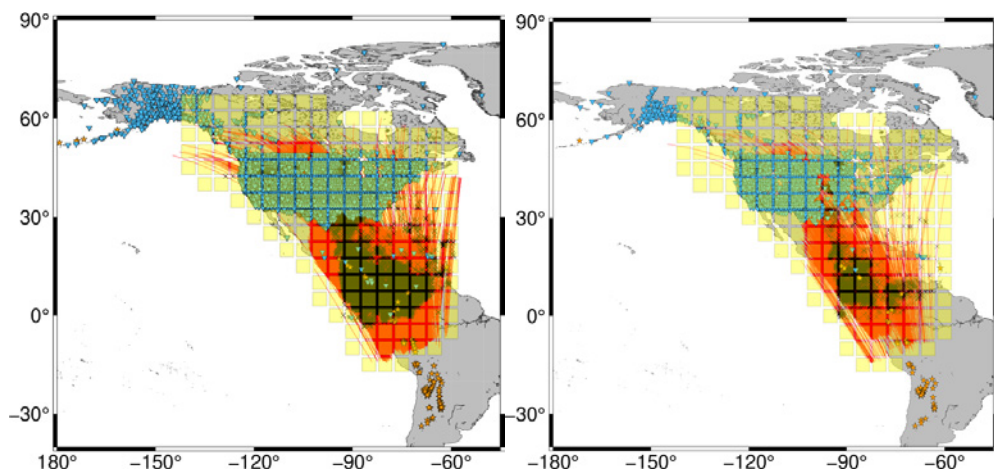
これら化学組成不均質の存在を地震波観測情報から制約するには、地震波 S 波速度 (V_s) 及び P 波速度 (V_p) の不均質構造を同質のデータから同程度の解像度で同時推定することで、地震波速度異常を温度効果と化学組成効果に分離する必要がある³。これまでの $V_s \cdot V_p$ 不均質構造同時推定の研究では、使用するデータセットの種類や質が異なる³、 V_s と V_p の解像度が異なる⁴、解像度が粗い⁵等の課題が存在した。そのため、同質の地震波形データを用いて、 $V_s \cdot V_p$ 不均質構造を同程度かつ D'' 領域内部を解像できるほどの高解像度 (鉛直 100 km 以下、水平 200 km 以下) で同時推定することが要求されていた。

申請者が属する研究グループでは上述の課題を解決しうる手法として、大量かつ地震波形そのものをデータとして用いることで局所的な三次元地震波速度構造を高解像度で推定する波形インバージョン法⁶が開発されている。しかし、これまでの研究では波形インバージョン法は S 波速度不均質構造推定への適用のみに留まっていた^{7, 8}。そこで本研究では、波形インバージョン法を $V_s \cdot V_p$ 構造同時推定ができるように拡張することで、 D'' 領域の $V_s \cdot V_p$ 不均質構造を鉛直 50 km、水平 200 km の高解像度で同時に推定し、その速度不均質構造を最新の鉱物物理学による下部マントル構成鉱物の熱弾性特性データベース⁹と対照することで温度・化学組成不均質構造に解釈することを目指す。

2. データ

本研究では中米下の最下部 400 km のマントル領域における三次元 $V_s \cdot V_p$ 構造を求めることを目的とし、地震波三成分の波形を用いて波形インバージョンを行った。用いた地震イベントは

2001-2019 年に発生したもの内、震央距離が 70° 以上 100° 以下、震源が 150 km 以深、マグニチュードが 5.6 以上 7.2 以下の 102 イベントである。これらのイベントを、USArray 観測網などのネットワークの観測点 2818 点で観測された地震波形をデータとして用いた。地震波形は transverse 成分については直達 S 波が到達する 20 秒前から ScS 波が到達した 60 秒後までを切り取った後に 0.005-0.1 Hz のバンドパスフィルタをかけた、vertical, radial 成分については直達 P 波が到達する 20 秒前から PcP 波が到達した 60 秒後までを切り取った後に 0.005-0.2 Hz のバンドパスフィルタをかけた。現段階では S 波のデータは約 14,000 波形、P 波のデータは約 4800 波形使用している。推定対象三次元モデルは $5^\circ \times 5^\circ \times 100$ km (CMB では約 $300 \times 300 \times 100$ km に対応する) の合計 1056 点の voxel に分割した。推定パラメータは各 voxel での等方的な弾性定数 (μ , λ) の初期モデルからの摂動とし、これら推定した後に $V_s \cdot V_p$ 構造に焼き直した。第一図にデータセットと推定対象領域をまとめてある。



第一図：使用したデータセットおよび推定対象領域

各図はそれぞれ S 波データ (左図) および P 波データ (右図) のデータセットを表している。橙色の星が震源、青色の三角が観測点、赤色線が震源-観測点を結ぶ波線のうち D'' 領域を通過する部分、黒色のバツが ScS 波または PcP 波の CMB 上における反射点、黄色の四角が推定対象領域を分割したのちの voxel の位置を示す。

3. 手法

第二章で述べた各パラメーターの摂動 (δm) の推定には波形インバージョン法⁶を用いた。初期モデルとして PREM¹⁰ を使用し、DSM 法¹¹ を用いて理論波形を、先行研究のアルゴリズム^{12, 13} を用いて偏微分係数波形 ($\mathbf{A}$) を計算した。震源付近と観測点付近の不均質構造の影響を取り除くためにオートピック手法¹⁴ を適用した後に、観測波形から理論波形を差し引くことで差分波形 (δd) を算出した。こうして求められた種々の値を用いて以下のような定式化が行える。

$$A\delta m = \delta d \quad (1)$$

(1) 式を逆解析することによって推定パラメーターを求められる。本研究では推定パラメーターとして μ と λ の二つを扱うため、波形インバージョンを二段階に分けることでパラメーターの推定を行った。具体的には、一段階目として S・P 波の両データを用いて μ のみの推定を行った後に、二段階目として推定された μ の摂動も加味した上で P 波データのみを用いて λ の推定

を行った。

4. 結果と考察

三章の手法に二章のデータを適用して得られた構造推定結果を第二図に示す。第二図には構造推定結果の他にも理論的な解像度テストの結果を、解像度が低い領域をグレースアウト、解像度が高い領域を白抜きで示してある。

まず、 $V_s \cdot V_p$ の解像度の差異に着目すると、本研究のデータセットでは V_s は広い領域で高い解像度を示しているのに対して、 V_p については P 波が密にサンプルする領域(第一図参照)のみ高い解像度を有している。これは P 波のデータセット数が S 波に比べて少ないことに起因すると考えられるため、現在は V_p の解像度向上を目指して P 波データを追加で収集している。

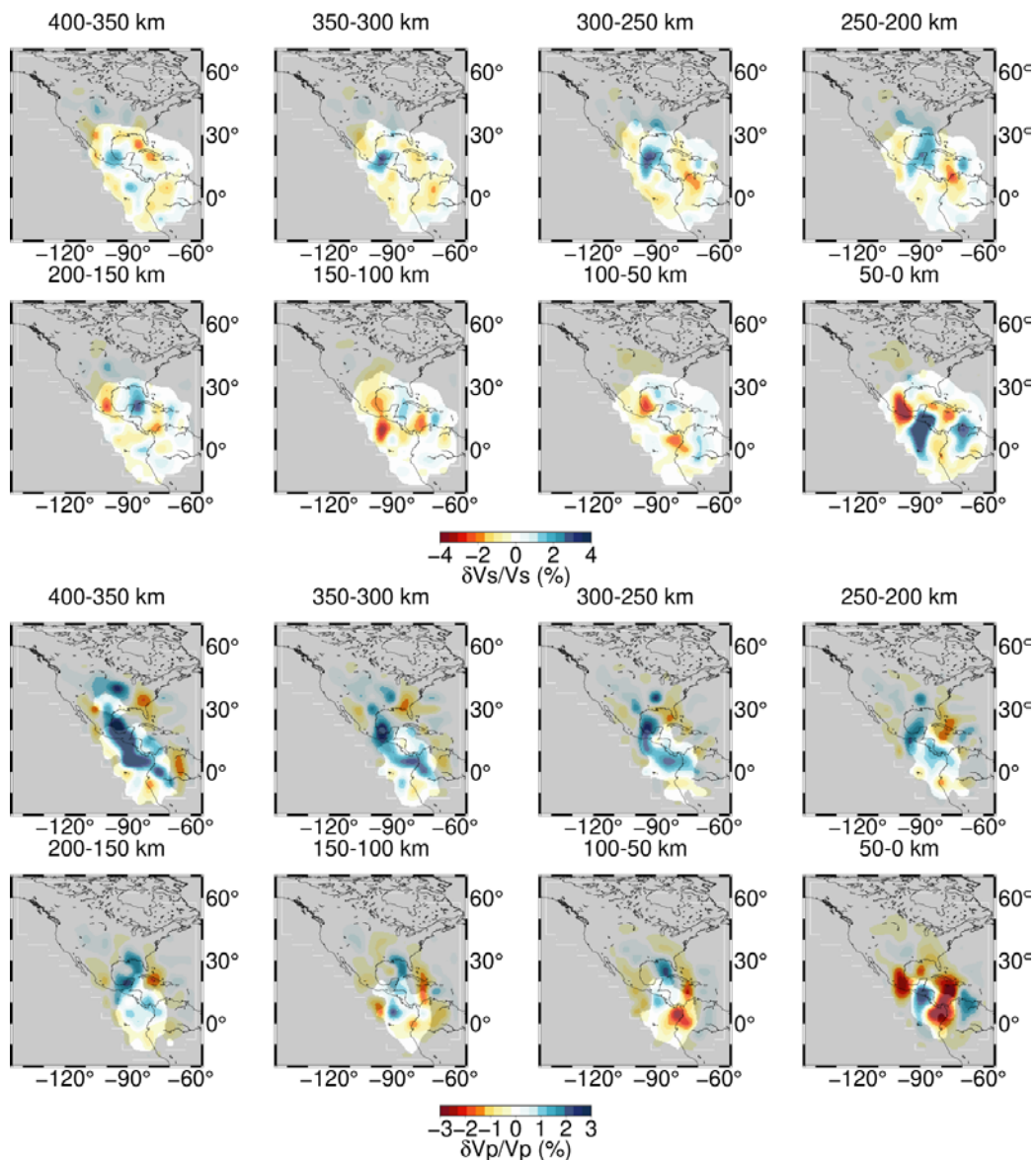
次に構造推定結果に着目をする。まず V_s については CMB 直上 0-50 km の領域では中米下とベネズエラ下に二つの高速度不均質構造が、その間およびメキシコ下に低速度不均質構造が存在している。このうち中米下の高速度不均質構造については北上しながら CMB 直上 400 km まで続いている。また、二つの高速度不均質の間に存在した低速度不均質構造についてもおおよそ同じ位置を保ったまま CMB 直上 400 km まで続いていることが読み取れる。これにより CMB 直上 200-400 km の領域については概して西側で高速度不均質、東側で低速度不均質構造を示している。

同様に V_p の構造推定結果の特徴を挙げて行く。CMB 直上 0-50 km の領域では V_s と同様に中米下に高速度不均質が、その東側に低速度不均質が存在している。高速度不均質については東側に広がりながら CMB 直上 400 km まで続いているのに対して、低速度不均質は CMB 直上 150 km まで続いた後にそれ以浅では消失している。よって CMB 直上 200-400 km の領域では概して巨大な高速度不均質構造が広がっていることが確認される。

以降では推定モデルを地質学的に解釈してゆく。まず、CMB 直上 400 km から CMB 直上 0 km まで続く V_s と V_p が両方とも高速度異常を示す西側領域については沈み込み Farallon スラブと考えられる。 $V_s \cdot V_p$ の両者が高速度であることから、摂動の原因はおおよそ低温異常のみで説明できる¹⁵ うえ、この高速度異常の位置は過去の走時トモグラフィ¹⁶ で解像された下部マントル領域の沈み込みスラブの位置および 150 Ma の Farallon プレート境界の位置¹⁷ と調和的である。従って、この領域は沈み込み Farallon スラブが由来の低温異常領域であると解釈される。次に、CMB 直上 200-400 km の領域における V_s は低速度、 V_p は高速度異常を示す東側領域の解釈を行う。 $V_s \cdot V_p$ 不均質が負相関となるには温度異常のみでの説明は不可能であり、化学組成異常の効果も考える必要がある。温度異常のみを考慮した場合、高温異常では $V_s \cdot V_p$ は共に高速度に、低温異常では $V_s \cdot V_p$ は共に低速度不均質を発生させる為、いずれの場合も $V_s \cdot V_p$ 不均質は正相関を示してしまう¹⁵。また、化学組成不均質を考える場合も鉄やアルミニウムなどの不純物の効果のみでは $V_s \cdot V_p$ 不均質の負相関は実現し得ない¹⁸。これを達成する可能性がある候補として鉱物物理学の研究から中央海嶺玄武岩(MORB)成分が提案されている。最下部マントル条件下ではブリッジマナイト-ポストペロプスカイト相転移の影響も加味すると MORB 成分はパイロライト成分と比較して V_s が低速度、 V_p が高速度となることが報告されている¹⁹。よって、CMB 直上 200-400 km の東側領域の解釈として MORB 物質が濃集している可能性があげられる。

5. まとめ

本研究では波形インバージョン法を拡張することで中米下 D'' 領域の $V_s \cdot V_p$ 構造推定を行っ



第二図：構造推定結果

波形インバージョンによる構造推定結果。(上図) S波速度構造(下図) P波速度構造。各図上部の数字はCMBから何 km 上部の層であるかを示している。各々の速度は初期モデルである PREM¹⁰ からの摂動を示している。各図の白抜き領域およびグレイアウト領域はそれぞれ理論的な解像度テストの結果解像度が高い又は低い領域を示している。

た。推定結果より沈み込んだ Farallon スラブが D'' 領域全域まで到達していることを明らかにした。また、D'' 領域浅部 (CMB 直上 200-400 km) の東側領域には化学的不均質構造が存在している事を示唆し、その候補として MORB 物質が濃集している可能性を提示した。今後の展望としては、依然として存在する Vs・Vp の解像度の差異を解消する為に、更なる P 波データの集計お

よび適切な重み付け方法の模索などを通して、最高解像度での $V_s \cdot V_p$ 構造推定を目指して行きたい。

謝 辞

本研究は東京大学情報基盤センターが提供する「若手・女性利用」制度からの援助を受けました。地震波形データは IRIS データセンターよりダウンロードしました。

参 考 文 献

- [1] Garnero, E. J., & McNamara, A. K. (2008). Structure and dynamics of Earth's lower mantle. *Science*, 320(5876), 626-628
- [2] Tackley, P. J. (2011). Living dead slabs in 3-D: The dynamics of compositionally stratified slabs entering a "slab graveyard" above the core-mantle boundary. *Physics of the Earth and Planetary Interiors*, 188(3-4), 150-162.
- [3] Masters, G., Laske, G., Bolton, H., & Dziewonski, A. (2000). The relative behavior of shear velocity, bulk sound speed, and compressional velocity in the mantle: implications for chemical and thermal structure. *Geophysical Monograph Series*, 117, 63-87
- [4] Houser, C., Masters, G., Shearer, P., & Laske, G. (2008). Shear and compressional velocity models of the mantle from cluster analysis of long-period waveforms. *Geophysical Journal International*, 174(1), 195-212.
- [5] Koelemeijer, P., Ritsema, J., Deuss, A., & van Heijst H.-J. (2016). SP12RTS: a degree-12 model of shear- and compressional-wave velocity for Earth's mantle. *Geophysical Journal International*, 204(2), 1024-1039.
- [6] Kawai, K., Konishi, K., Geller, R. J., & Fuji, N. (2014). Methods for inversion of body-wave waveforms for localized three-dimensional seismic structure and an application to D'' structure beneath central America. *Geophysical Journal International*, 197(1), 495-524.
- [7] Suzuki, Y., Kawai, K., Geller, R. J., Borgeaud, A. F. E., & Konishi, K. (2016). Waveform inversion for 3-D S-velocity structure of D'' beneath the Northern Pacific: possible evidence for a remnant slab and a passive plume. *Earth, Planets and Space*, 68, 198.
- [8] Borgeaud, A. F. E., Kawai, K., Konishi, K., & Geller, R. J. (2017). Imaging paleoslabs in the D'' layer beneath Central America and the Caribbean using seismic waveform inversion. *Science Advances*, 3(11).
- [9] Kawai, K., & Tsuchiya, T. (2015). Small shear modulus of cubic CaSiO_3 perovskite. *Geophysical Research Letters*, 42, 2718-2726.
- [10] Dziewonski, A. M., & Anderson, D. L. (1981). Preliminary reference Earth model. *Physics of the Earth and Planetary Interiors*, 25(4), 297-356.
- [11] Kawai, K., Takeuchi, N., & Geller, R. J. (2006). Complete synthetic seismograms up to 2 Hz for transversely isotropic spherically symmetric media. *Geophysical Journal*

International, 164(2), 411-424.

[12] Geller, R. J., & Hara, T. (1993). Two efficient algorithms for iterative linearized inversion of seismic waveform data. *Geophysical Journal International*, 115(3), 699-710.

[13] Borgeaud, A. F. E., Kawai, K., & Geller, R. J. (2019). Three - dimensional S velocity structure of the mantle transition zone beneath Central America and the Gulf of Mexico inferred using waveform inversion. *Journal of Geophysical Research: Solid Earth*, 124, 9664-9681.

[14] Fuji, N., Kawai, K., & Geller, R. J. (2010). A methodology for inversion of broadband seismic waveforms for elastic and anelastic structure and its application to the mantle transition zone beneath the northwestern pacific. *Physics of the Earth and Planetary Interiors*, 180(3-4), 118-137.

[15] Wentzcovitch, R. M., Tsuchiya, T., & Tsuchiya, J. (2006). MgSiO_3 postperovskite at D'' conditions. *Proceedings of the National Academy of Sciences*, 103(3), 543-546.

[16] Grand, S. P., van der Hilst, R., & Widiyantoro, S. (1997). Global seismic tomography: A snapshot of convection in the Earth. *GSA Today*, 7(4), 1-7

[17] Müller, R. D., Seton, M., Zahirovic, S., Williams, S. E., Matthews, K. J., Wright, N. M., Shephard, G. E., Maloney, K. T., Barnett-Moore, N., Hosseinpour, M., Bower, D. J., & Cannon, J. (2016). Ocean basin evolution and global-scale plate reorganization events since Pangaea breakup. *Annual Review of Earth and Planetary Sciences*, 44, 107-138.

[18] Tsuchiya, T., & Tsuchiya, J. (2006). Effect of impurity on the elasticity of perovskite and postperovskite: Velocity contrast across the postperovskite transition in $(\text{Mg,Fe,Al})(\text{Si,Al})\text{O}_3$. *Geophysical Research Letters*, 33(12), L12S04.

[19] Tsuchiya, T. (2011). Elasticity of subducted basaltic crust at the lower mantle pressures: Insights on the nature of deep mantle heterogeneity. *Physics of the Earth and Planetary Interiors*, 188, 142-149.

分子動力学計算を用いた DNA 分解酵素の失活メカニズムの解明

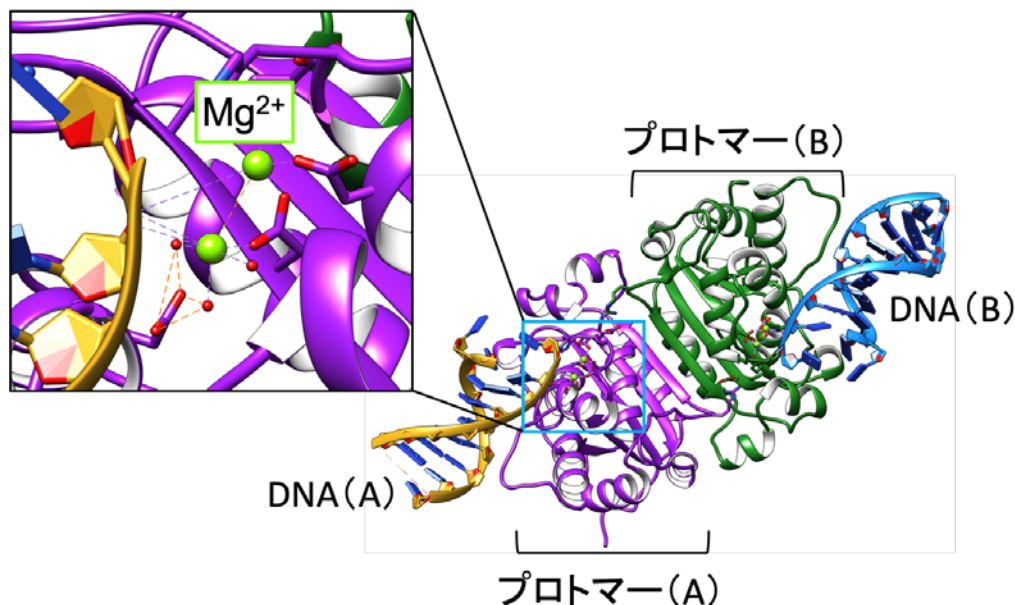
大 滝 大 樹

長崎大学 生命医科学域（医学系） 分子標的医学研究センター

1. はじめに

免疫は、細菌やウイルスなどの異物が体内に侵入するのを防いだり侵入した異物を認識して体外に排除する役割を持つ。その一方で、免疫の異常により臓器などに炎症や障害を生ずる疾患（免疫系疾患）が多数報告されている。人間の体に本来備わっている免疫（自然免疫）の異常による疾患は自己炎症性疾患と呼ばれ、例として家族性地中海熱、エカルディ・グティエール症候群（Aicardi-Goutières Syndrome: AGS）が挙げられる。一方、後天的に獲得する免疫（獲得免疫）に由来する疾患は自己免疫疾患と呼ばれ、例として全身性エリテマトーデス（Systemic Lupus Erythematosus: SLE）が挙げられる。原因・機序などにおいて不明な点も多く、厚生労働省の指定難病として挙げられているものも多く存在する。病態の解明および治療法の開発が喫緊の課題である。

大規模ゲノム解析などにより遺伝子変異と疾患の関係が明らかになってきており、免疫系疾患においても関連遺伝子が次々と同定されている。しかしながら、遺伝子がコードするタンパク質に着目すると、遺伝子変異がタンパク質の機能に及ぼす影響およびそのメカニズムについては不明な点が多い。例えば、免疫系疾患は上記のように区別されるが、自己炎症性疾患に分類される

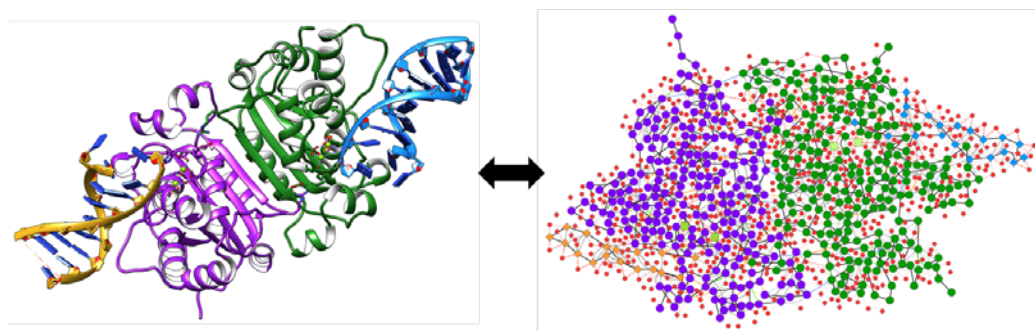


第1図：TREX1-DNA 複合体の構造（PDB: 5YWS）。

2つのTREX1タンパク質（プロトマー）が二量体を形成し、それぞれがDNAを分解する。活性中心（拡大図）には2つのマグネシウムイオンが存在する。

AGS と自己免疫疾患に分類される SLE は、どちらも関連遺伝子として *TREX1* が同定されており、臨床的特徴も類似している。*TREX1* 遺伝子がコードする TREX1 タンパク質は、3' →5' DNA 分解酵素（エキソヌクレアーゼ）であり、不要な二本鎖（あるいは一本鎖）DNA フラグメントを分解する（第1図）。AGS, SLE に加え、家族性凍瘡状狼瘡（Familial Chilblain Lupus: FCL）、大脳白質脳症を伴う網膜血管障害（Retinal Vasculopathy with Cerebral Leukoencephalopathy: RVCL）などの免疫系疾患患者にも *TREX1* 遺伝子の変異が報告されている[1]。変異型の種類は多岐にわたり、一部の変異型 TREX1 では DNA 分解反応が阻害され、異常な免疫反応が引き起こされることが分かっている。しかしながら、(1) 変異により DNA 分解機能が損なわれる分子メカニズム、(2) 変異がどこに・どのように影響し、なぜ機能に異常を及ぼすのか、(3) TREX1 という一つのタンパク質の変異が複数の疾患・多様な症状と関係するのはなぜか、という問題については不明な点が多い。

我々は、遺伝子変異が TREX1 タンパク質の構造に及ぼす影響と、その結果としての機能への影響を調べることを目的として、分子動力学（Molecular Dynamics: MD）シミュレーションなどの計算化学的手法を用いた解析を行ってきた。MD シミュレーションのトラジェクトリから解析した相互作用を相互作用グラフで可視化する方法を考案し（第2図）、SLE 患者から見出された D130N 変異型に本手法を適用した。その結果、活性中心におけるマグネシウムイオンの相対位置が変化し、DNA との相互作用が必要以上に強くなることにより DNA 分解機能が失われる可能性を示した[2]。本研究では、これまでに報告されているその他の変異について MD シミュレーションを行い、相互作用グラフを用いた解析を行った。



第2図：TREX1 二量体の分子構造（左）と相互作用グラフ（右）。

相互作用グラフでは、各点（ノード）がアミノ酸や核酸の残基、水分子、イオンなどに対応し、相互作用が存在するノードの間を線（エッジ）で繋ぐ。

2. 計算方法

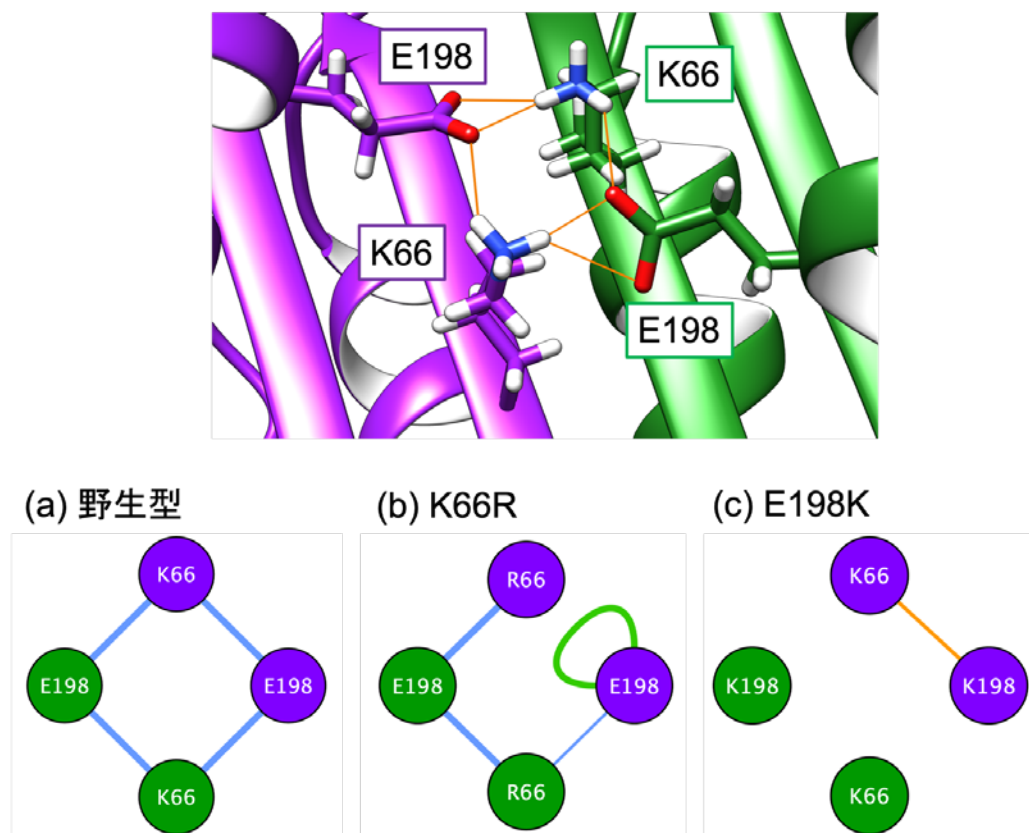
はじめに、Protein Data Bank (PDB)¹からマウスの野生型 TREX1 と DNA の複合体 (PDB ID: 5YWS) [3]を取得し、SCWRL4[4]を用いて TREX1 の変異型モデルを作成した。タンパク質の末端は、N 末端側、C 末端側をそれぞれアセチル化、N-メチルアミド化することでキャップした。作成したモデルの周囲に水、ナトリウムイオン、塩化物イオンを配置し、MD シミュレーションを行う系を作成した。

¹ <https://www.rcsb.org/>

MD シミュレーションには Gromacs[5]を使用した。各モデルについて最小化計算，平衡化計算を行った後， $1\mu s$ のプロダクション計算を行った。時間刻みは 2 fs とした。力場は，タンパク質に AMBER ff14SB[6]，DNA に OL15[7]，水分子には TIP3P[8]を用いた。TREX1 の活性中心にあるマグネシウムイオンには Allnér らのパラメータ[9]を用いた。系の温度は Velocity-rescaling 法[10]により 310.15 K ($37\text{ }^{\circ}\text{C}$)に制御し，圧力は Berendsen 法[11]を用いて 1 atm に制御した。van der Waals 相互作用のカットオフは $1.2\text{ \AA}$ とし，クーロン力による静電相互作用の計算には Particle Mesh Ewald 法[12]を用いた。MD シミュレーション中は 20 ps 毎にスナップショットを取得し，解析は $200\text{--}1000\text{ ns}$ のトラジェクトリを用いて行った。水素結合解析は AmberTools17[13]を用いて行った。本稿における分子の図は UCSF Chimera[14]を用いて作成した。

3. 結果

本稿では第 66 残基と第 198 残基の間の相互作用を取り上げる。野生型では第 66 残基はリシン(K)，第 198 残基はグルタミン酸(E)であり，これらはプロトマー内およびプロトマー間で Salt Bridge を形成している（第 3 図上および下(a)）。AGS の患者から K66R 変異および E198K 変異が



第 3 図：第 66 残基と第 198 残基の相互作用。

（上）野生型では K66 と E198 はプロトマー内／間で Salt Bridge（オレンジ）を形成している。（下）第 66 残基と第 198 残基部分の相互作用グラフ。青のエッジは側鎖-側鎖の相互作用，緑およびオレンジのエッジは主鎖-側鎖の相互作用を表す。エッジの太さは相互作用の強さに比例する。

見つかったことから[15, 16], これらの変異型のモデルを作成し, MD シミュレーションを行った。第 3 図下(b)(c)に, K66R 変異型と E198K 変異型のシミュレーションで得られた相互作用グラフを示す。K66R 変異型では, 野生型と比べて Salt Bridge が弱くなったり部分的に壊れたりしているのが分かる。また, E198K 変異では, 変異により Salt Bridge を作ることができず, 第 66 残基と第 198 残基の間の相互作用がほぼ完全に失われている。Salt Bridge は強い静電相互作用で形成されるため, 変異によりこの部分の相互作用が弱くなる (あるいは失われる) と TREX1 二量体の構造, ひいては機能に影響が及ぶ可能性が考えられる。この局所的な相互作用が系全体の構造や機能に及ぼす影響については, 現在解析を進めている段階である。

4. まとめと今後の展望

本研究では, 免疫系疾患に関与する TREX1 タンパク質について, 変異がタンパク質に及ぼす影響を調べるため, 変異型のモデルタンパク質を作成し MD シミュレーションを行った。アミノ酸残基間の相互作用を相互作用グラフで可視化することにより, 野生型および変異型の相互作用の違いを顕在化することができた。野生型ではプロトマー内およびプロトマー間で形成されていた K66-E198 の Salt Bridge が, K66R 変異と E198K 変異では弱くなる (あるいは形成されない) ことが分かった。これが系全体にどのような影響を及ぼすかは現在解析中である。相互作用グラフは系全体の相互作用を俯瞰的に捉えられる点が特徴であるため, 局所的な相互作用の違いが系全体にどのように影響するかを調べるのに本手法が非常に有用であると期待される。本稿では割愛したが, 免疫系疾患患者から報告された他の変異型についても MD シミュレーションを実行済みである。複数の変異型の計算結果を統合的に解釈することにより, 変異と TREX1 二量体の機能との関係性を明らかにしたいと考えている。

謝 辞

本研究は『2021 年度東京大学情報基盤センター「若手・女性利用課題」』および『2021 年度学際大規模情報基盤共同利用・共同研究拠点 (JHPCN) 萌芽型共同研究課題 (拠点課題 ID: EX21306)』の支援を受けて行われました。本研究における分子動力学シミュレーションは東京大学情報基盤センターの Oakbridge-CX で行われました。また, 本研究は科学研究費助成事業 (若手研究: 19K16058) の支援を受けています。この場を借りて感謝申し上げます。

参 考 文 献

- [1] G.I. Rice, M.P. Rodero, Y.J. Crow, Human disease phenotypes associated with mutations in TREX1, *J. Clin. Immunol.* 35 (2015) 235-243.
- [2] Y. Endo, T. Koga, **H. Otaki**, K. Furukawa, A. Kawakami, Systemic lupus erythematosus overlapping dermatomyositis owing to a heterozygous TREX1 Asp130Asn missense mutation, *Clin. Immunol.* 227 (2021) 108732.
- [3] K.-W. Huang, T.-C. Liu, R.-Y. Liang, L.-Y. Chu, H.-L. Cheng, J.-W. Chu, Y.-Y. Hsiao, Structural basis for overhang excision and terminal unwinding of DNA duplexes by TREX1, *PLoS Biol.* 16 (2018) e2005653.
- [4] G.G. Krivov, M.V. Shapovalov, R.L. Dunbrack, Improved prediction of protein side-chain conformations with SCWRL4, *Proteins: Struct. Funct. Bioinform.* 77

(2009) 778-795.

- [5] M.J. Abraham, T. Murtola, R. Schulz, S. Páll, J.C. Smith, B. Hess, E. Lindahl, GROMACS: High performance molecular simulations through multi-level parallelism from laptops to supercomputers, *SoftwareX* 1-2 (2015) 19-25.
- [6] J.A. Maier, C. Martinez, K. Kasavajhala, L. Wickstrom, K.E. Hauser, C. Simmerling, ff14SB: Improving the Accuracy of Protein Side Chain and Backbone Parameters from ff99SB, *J. Chem. Theory Comput.* 11 (2015) 3696-3713.
- [7] M. Zgarbová, J. Šponer, M. Otyepka, T.E. Cheatham, III, R. Galindo-Murillo, P. Jurečka, Refinement of the Sugar-Phosphate Backbone Torsion Beta for AMBER Force Fields Improves the Description of Z- and B-DNA, *J. Chem. Theory Comput.* 11 (2015) 5723-5736.
- [8] W.L. Jorgensen, J. Chandrasekhar, J.D. Madura, R.W. Impey, M.L. Klein, Comparison of simple potential functions for simulating liquid water, *J. Chem. Phys.* 79 (1983) 926-935.
- [9] O. Allnér, L. Nilsson, A. Villa, Magnesium ion-water coordination and exchange in biomolecular simulations, *J. Chem. Theory Comput.* 8 (2012) 1493-1502.
- [10] G. Bussi, D. Donadio, M. Parrinello, Canonical sampling through velocity rescaling, *J. Chem. Phys.* 126 (2007) 014101.
- [11] H.J.C. Berendsen, J.P.M. Postma, W.F. van Gunsteren, A. DiNola, J.R. Haak, Molecular dynamics with coupling to an external bath, *J. Chem. Phys.* 81 (1984) 3684-3690.
- [12] U. Essmann, L. Perera, M.L. Berkowitz, T. Darden, H. Lee, L.G. Pedersen, A smooth particle mesh Ewald method, *J. Chem. Phys.* 103 (1995) 8577-8593.
- [13] D.A. Case, D.S. Cerutti, T.E. Cheatham, III, T.A. Darden, R.E. Duke, et al., *AmberTools17*, University of California, San Francisco, 2017.
- [14] E.F. Pettersen, T.D. Goddard, C.C. Huang, G.S. Couch, D.M. Greenblatt, E.C. Meng, T.E. Ferrin, UCSF Chimera-A visualization system for exploratory research and analysis, *J. Comput. Chem.* 25 (2004) 1605-1612.
- [15] G.I. Rice, G.M.A. Forte, M. Szykiewicz, D.S. Chase, A. Aeby, et al., Assessment of interferon-related biomarkers in Aicardi-Goutières syndrome associated with mutations in TREX1, RNASEH2A, RNASEH2B, RNASEH2C, SAMHD1, and ADAR: a case-control study, *The Lancet Neurology* 12 (2013) 1159-1169.
- [16] G. Ramantani, J. Kohlhase, C. Hertzberg, A.M. Innes, K. Engel, et al., Expanding the phenotypic spectrum of lupus erythematosus in Aicardi-Goutières syndrome, *Arthritis Rheum.* 62 (2010) 1469-1477.

大規模分散並列環境におけるコレスキーQR 型アルゴリズムによる縦長行列の列ピボット付き QR 分解の性能評価（続）

深谷 猛

北海道大学 情報基盤センター

1. はじめに

行列分解は科学技術計算の基盤技術の一つであり、高性能な数値計算技術が求められている。著者らは、基本的な行列分解の一種である QR 分解について、これまでに様々な研究開発を行ってきた。前回の記事[1]では、縦長行列に対する列ピボット付き QR 分解（通称：QRCP：QR factorization with column pivoting）[2]に対して、著者らが現在開発している CholeskyQR 型アルゴリズムを、2023 年 1 月実施の大規模 HPC チャレンジで評価した結果の速報を報告した。その後、再度、2023 年 8 月に「Wisteria/BDEC-01 (Odyssey)」および「Oakbridge-CX」の両システムにおける大規模 HPC チャレンジの機会を頂き、初回の性能評価の後に改良を加えたアルゴリズムについて、より詳細な性能評価を実施することができた。そこで、本稿では、2 回目の大規模 HPC チャレンジにおける性能評価を通して得られた最新の結果のハイライトを紹介する。

2. 前回の記事の概要

本節では、前回の記事[1]の概要を述べる。詳細については、前回の記事を参照されたい。

2. 1. 問題設定および代表的なアルゴリズム

与えられた行列 $A \in \mathbb{R}^{m \times n}$ ($m \geq n$) に対して

$$AP = QR$$

の形で行列を分解する計算を QRCP と呼ぶ[2]。ここで、 $P \in \mathbb{R}^{n \times n}$ は置換行列、 $Q \in \mathbb{R}^{m \times n}$ は列直交行列、 $R \in \mathbb{R}^{n \times n}$ は上三角行列である。QRCP は Rank Revealing QR 分解の一種であり、行列の低ランク近似等の応用を持つ[3, 4, 5]。なお、本研究では行列 A が縦長 (tall-skinny) の場合、つまり、 $m \gg n$ の場合を想定する。

QRCP に対して、列ピボット付きハウスホルダーQR 分解 (HQR-CP: Householder QR with Column Pivoting) が代表的な数値計算アルゴリズムとして知られている[3, 6]。HQR-CP では、各ステップで貪欲法的にピボット列を選択 (P の構成と本質的に等価) しながら、ハウスホルダー変換による行列の上三角化を行う。これらの詳細は、例えば、文献[7]等を参照されたい。

2. 2. QRCP に対するコレスキーQR 型アルゴリズムの開発

縦長行列に対する通常 (列ピボットなし) の QR 分解において、コレスキーQR 型アルゴリズムが有効である[8, 9, 10, 11, 12]。この事実を踏まえて、コレスキーQR 型アルゴリズムを QRCP に拡張し、その有効性を示すことが我々の研究目的である。数学的には、通常のコレスキーQR アルゴリズムに対して、コレスキー分解を完全ピボット (Complete Pivoting) 付きコレスキー分解: $P^T W P \rightarrow R^T R$ [13] に置き換えることで、QRCP への拡張が可能となる。しかし、数値計算の

場合、丸め誤差の影響を受けるため、一般的に、正しい (HQR-CP と等しい) ピボットの選択に失敗する。

そこで、我々は、完全ピボット付きコレスキー分解の計算過程で現れる値をチェックして、ある条件を満たした場合に計算を打ち切り (それ以降の結果の信頼性が低いと判断)、それまでに得られた部分的なピボット選択の情報のみを採用するアプローチを考案した。そして、反復的に (部分的な) 完全ピボット付きコレスキー分解を繰り返す形のアルゴリズムを構築し、Ite-CholQR-CP (Iterative CholeskyQR with Column Pivoting) と名付けた。Ite-CholQR-CP の基本的な構造は、従来のコレスキーQR 型アルゴリズムと同じであり、計算の大部分が行列積 (GEMM) に代表される Level-3 BLAS で実行可能であり、分散並列計算における集団通信の回数が $O(1)$ である (CA: Communication-Avoiding)、といった高性能計算に適した特徴を維持している。なお、Ite-CholQR-CP の詳細については、本研究の成果をまとめた論文[14]が国際会議に採択されたので、そちらに委ねる形としたい。

2. 3. 性能評価結果の概要 : HQR-CP との比較

Wisteria/BDEC-01 (Odyssey) (以下、BDEC-0) と Oakbridge-CX (以下、OBCX) の両システム上で、MPI (と 1 次元データ分散) を用いて分散並列実装した Ite-CholQR-CP を、代表的な既存手法である HQR-CP (の簡略版) と比較した。BDEC-0 (4096 ノード) では、 n が比較的小さい ($n = 16, 32, 64$) の場合に、Ite-CholQR-CP は HQR-CP よりも高速 (最大で 4 倍弱) であった。一方、OBCX (1024 ノード) の場合に、テストした全ての n (最大で $n = 1024$) で HQR-CP よりも高速 (最大で 25 倍強) であった。これらの結果より、我々が開発した Ite-CholQR-CP は BDEC-0 や OBCX のような一般的な大規模分散並列環境 (所謂、スパコン) において、代表的既存手法である HQR-CP よりも有効な手法となり得る可能性が高いことが示された。なお、共有メモリ環境 (マルチコア CPU 環境) における性能評価結果も上記の国際会議論文[14]で提示しているので、興味がある場合は参照されたい。

3. 今回の性能評価の概要と主結果

本節では、今回の大規模 HPC チャレンジの実施内容の概要と主な結果を報告する。

3. 1. 実施内容の概要

前回の性能評価では、代表的な既存手法の一つである HQR-CP を比較対象とした。一方、計算対象の行列が縦長の場合、以下の計算手法も有力となる。まず、行列 A に対して、通常の QR 分解

$$A = Q_1 R_1$$

を行い、次に、得られた上三角行列 R_1 に対して、HQR-CP (あるいは他の手法) により

$$R_1 P = Q_2 R$$

と QRCP を行う。これにより

$$AP = Q_1 Q_2 R = QR, \quad Q = Q_1 Q_2$$

と行列 A の QRCP が得られる [15]。前半の A に対する通常の QR 分解の計算量は $O(mn^2)$ であり、一方、後半の R_1 に対する QRCP の計算量は $O(n^3)$ であるため、行列 A が縦長 ($m \gg n$) の場合には、前半の計算が支配的となる。したがって、(列ピボットなしの) コレスキーQR 型アルゴリズムなど、縦長行列に対する高性能な QR 分解の計算手法を活用することで、高速に QRCP を計算するこ

とが可能となる。今回、我々が開発した Ite-CholQR-CP の有効性を議論する上で、この計算手法との比較は不可欠であり、今回の性能評価では、これを主眼に置く。

また、Ite-CholQR-CP の実装方法に関して、いくつか改良できる可能性があることが分かった。具体的な実装の内容については、現在論文を執筆中であり、それに委ねる形としたい。方針としては、アルゴリズムに対する数学的な考察に基づいた、一部の演算（例：数学的にゼロになることが分かっている部分の演算）の省略や、ループの順番を入れ替えることによる、反復を途中で打ち切る場合に無駄になる可能性の高い演算の削減、という改良の導入を試みた。今回の実装方法の改変により、理論的な演算量の削減は期待できるが、一方で、各処理の演算効率（FLOPS）も変わるため、計算時間の意味での有効性は断言できない。そこで、今回の性能評価では、Ite-CholQR-CP の新旧の実装方法の比較も行う。

最後に、問題設定として、前回の大規模 HPC チャレンジの際の設定（ Q, R, P を全て求める）に加えて、事前に指定された一部の結果（例えば、必要なランクが指定されていて、それに対応する結果）のみを求める場合も考える。このような問題設定に対して、Ite-CholQR-CP は途中で計算を打ち切ることが可能であるが、一方で、上述した縦長行列に対する通常の QR 分解に基づく手法は、前半の QR 分解は完全に行うことが求められる（ランクの情報は後半で得られる）。そのため、Ite-CholQR-CP が有効となる可能の高い問題設定であり、検証する価値があると考えられる。

性能評価における設定や条件は前回と同様であり、前回の記事[1]を参照されたい。今回、新たに比較対象とした、通常の QR 分解に基づく手法に関しては、コレスキーQR 型アルゴリズムと TSQR アルゴリズムをそれぞれ用いた手法を実装した。前者については、シフト付きコレスキーQR (Shifted CholeskyQR) アルゴリズムを前処理に用いた手法であり、前処理の回数を動的に決定する形を採用した。これらのアルゴリズムの詳細については、文献[10, 11, 12]などを参照されたい。なお、上三角行列の QRCP は HQR-CP (LAPACK の関数) を用いた。

3. 2. 評価結果

図 1 に、BDEC-0 (4096 ノード) および OBCX (1024 ノード) における、各手法（の各実装）の HQR-CP に対する速度向上を示す。なお、「Ite-CholQR-CP」に関して、1 が以前の実装、2 が新しい実装である。また、「CholQR-QRCP」は通常のコレスキーQR 型アルゴリズムに基づいた手法、「TSQR-QRCP」は TSQR アルゴリズムに基づいた手法であり、それぞれ複数の実装を試した（BDEC-0 では一部の LAPACK 関数が利用できないため、評価した TSQR-QRCP の実装が OBCX よりも少ない）。なお、 m を固定（ $m = 16777216$ ）して、 $n = 16, \dots, 512$ と変えて性能を測定した。

図 1 のグラフから、縦長行列に対する通常の QR 分解を用いた手法も十分に有効であり、条件によっては Ite-CholQR-CP よりも高性能となっていることが確認できる。また、通常の QR 分解に対するコレスキーQR 型アルゴリズムや TSQR アルゴリズムの性能は文献[11, 12]などでも報告されており、 n が大きくなった場合に TSQR の性能が低下する点や BDEC-0 と OBCX で性能の挙動が異なる点など、これまでの報告と整合性が確認できる結果であることも分かる。

また、図 1 より、Ite-CholQR-CP について、今回の実装方法の変更（グラフ中の 2）が計算時間の意味でも概ね有効であったことも確認できる。特に、OBCX において n が大きい場合に効果が高くなっていることが観察できる。

図 1 の結果から、Ite-CholQR-CP と通常の QR 分解に基づく手法は、どちらも縦長行列の QRCP を計算する際に有望であることが確認できる。また、Ite-CholQR-CP および通常のコレスキーQR

型アルゴリズムに基づく手法は、どちらも反復型の計算手法であり、計算対象の行列の条件（や手法内部のパラメータの設定）に応じて反復回数が増加する。そのため、限られた実験結果のみから、両者の優劣を断言すべきではないことにも注意が必要である。以上の内容を踏まえると、我々が開発した Ite-CholQR-CP について、現時点では、縦長行列の QRCP の計算において、既存の有力な手法と同程度の性能を持った（有効な選択肢の一つになり得る）手法、と評価するのが妥当であると考えられる。

次に、部分的な QR 分解を計算する場合を考える。具体的には、 Q の一部（前半部分）と対応する R の部分行列のみを必要とする場合を想定する。このような設定において、Ite-CholQR-CP では反復の途中で計算をストップすることが可能であるが、最初に通常の QR 分解を行う手法では、QR 分解全体を計算する必要がある。そのため、Ite-CholQR-CP の有効性が期待できる問題設定である。図 2 に、BDEC-0（4096 ノード）および OBCX（1024 ノード）において、 Q の最初の $1/4$ の列ベクトル（ $n/4$ 本の列ベクトル）のみを計算する場合の、各手法（の各実装）の HQR-CP を基準にした速度向上を示す。

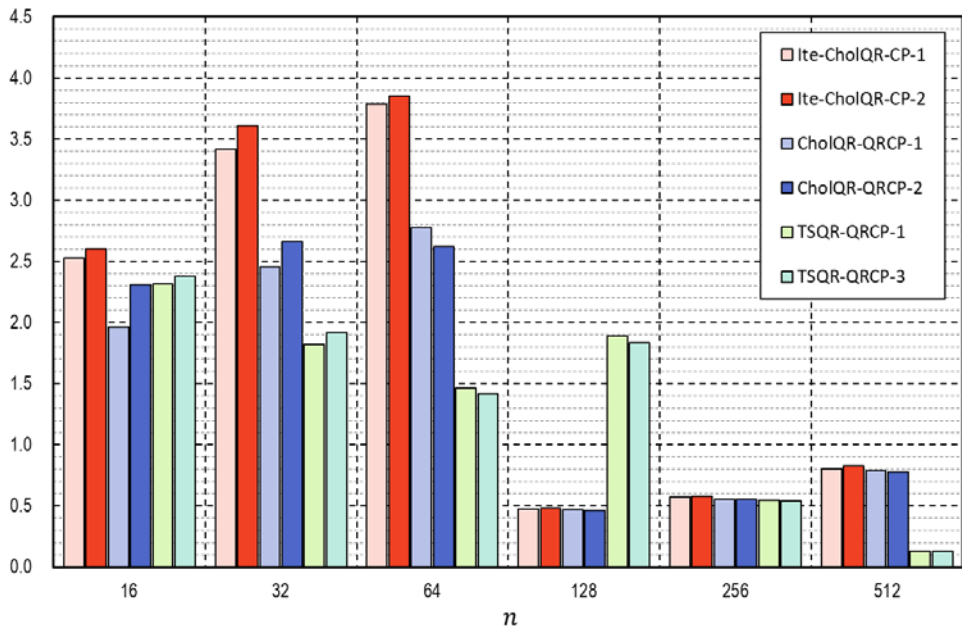
図 2 より、部分的な QRCP を計算する設定では、Ite-CholQR-CP が、通常の QR 分解を用いる手法よりも有効となるケースが多く、また、両者の差も図 1 の結果より大きいことが確認できる。特に、 n が大きくなるほど、両者の差が拡大する傾向にあることが読み取れる。ただし、HQR-CP も途中で計算をストップすることができるため、HQR-CP に対する速度向上は n に応じて大きくなるわけではなく、注意が必要である。

4. おわりに

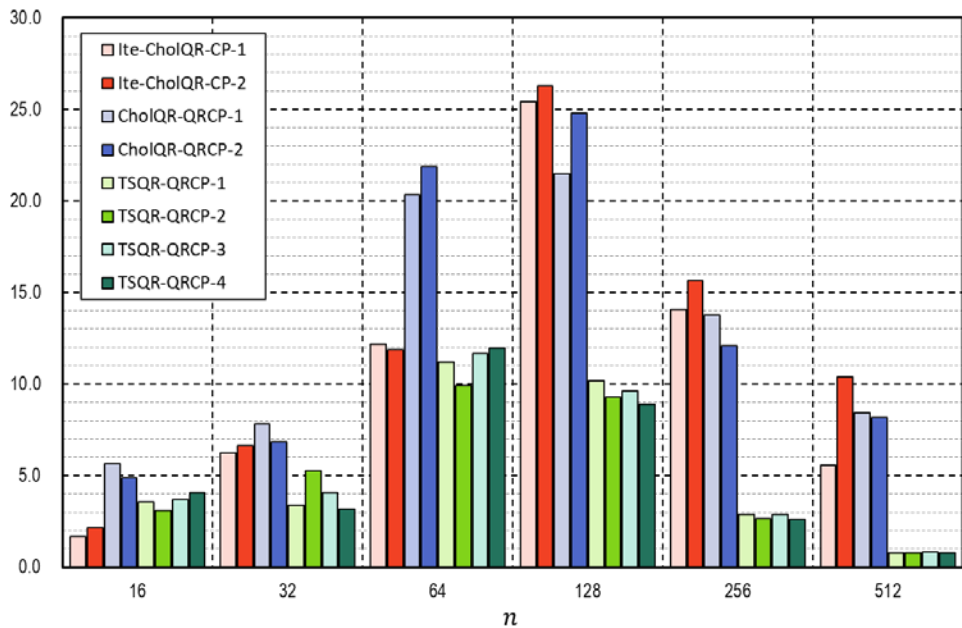
本稿では、前回の記事に引き続き、我々が開発しているコレスキーQR型の QRCP アルゴリズム（Ite-CholQR-CP）に関する性能評価の結果を中心に報告した。特に、縦長行列の QRCP を、通常の QR 分解を利用して計算する手法を比較対象とした性能評価の結果を示した。これまでに得られた性能評価の結果より、Ite-CholQR-CP は、通常の QR 分解を利用する手法と同程度の性能が期待され、状況に応じて両者の優劣は変化することが確認できた。乱択アルゴリズム[16]などのその他の最新のアルゴリズムを含めて、より詳細な性能評価を行うことが今後の課題である。また、部分的な QRCP を計算する設定では、Ite-CholQR-CP の有効性が十分に期待できることが分かった。各アプリケーションでのニーズに応じて、適切な計算手法を使い分けることが重要であり、そのための判断材料になる性能データの収集や分析を今後行うことが必要である。

謝 辞

大規模 HPC チャレンジの実施に関してお世話になりました、東京大学情報基盤センターの関係者の皆様に深く感謝いたします。本稿は、山本有作 教授（電気通信大学）および中務佑治 准教授（University of Oxford）との共同研究に基づいた内容であり、両氏に感謝いたします。本研究の一部は、JST さきがけ（課題番号：JPMJPR20M8）、JSPS 科研費（課題番号：JP21K11909、JP23H00462）、学際大規模情報基盤共同利用・共同研究拠点（JHPCN）、および、革新的ハイパフォーマンス・コンピューティング・インフラ（HPCI）（課題番号：jh230010）の支援を受けています。

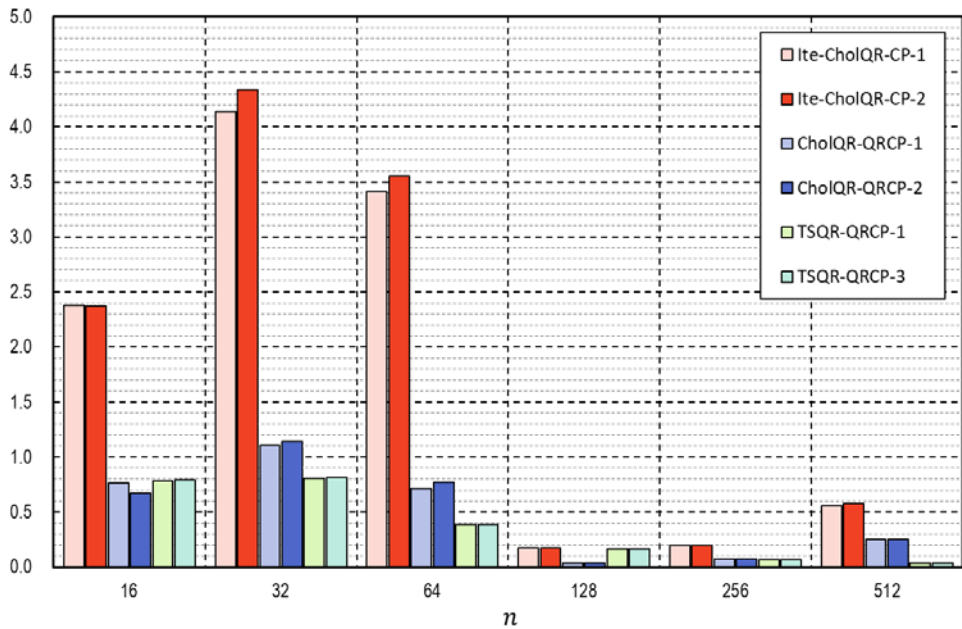


(a) BDEC-0 (4096 ノード)

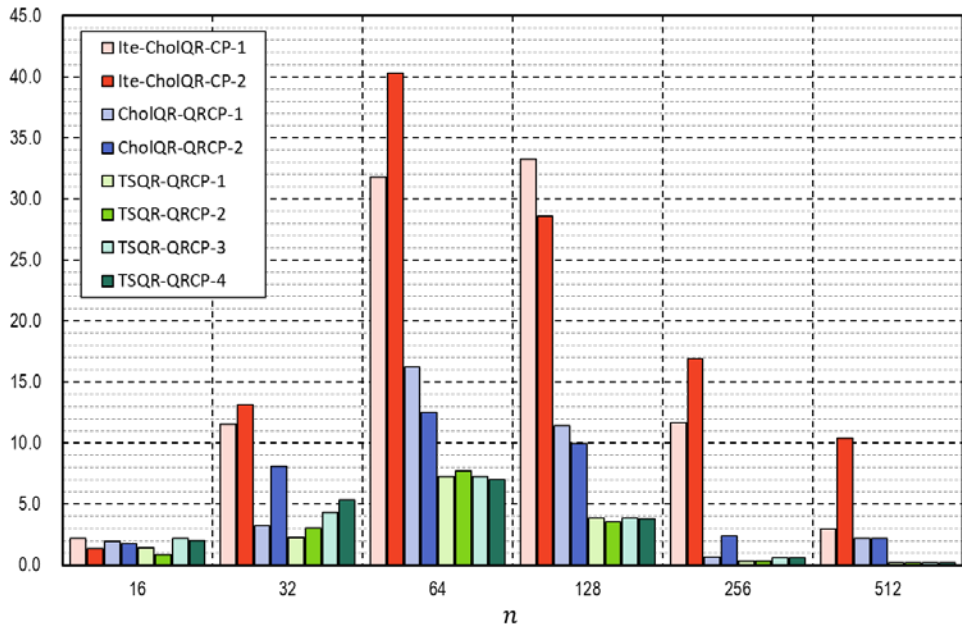


(b) OBCX (1024 ノード)

図 1 : HQR-CP に対する速度向上 ($m = 16777216$)。



(a) BDEC-0 (4096 ノード)



(b) OBCX (1024 ノード)

図 2 : 部分的な QRCP (Q の先頭から $1/4$ の列のみを計算する場合) における HQR-CP に対する速度向上 ($m = 16777216$)。

参 考 文 献

- [1] 深谷 猛, 大規模分散並列環境におけるコレスキーQR型アルゴリズムによる縦長行列の列ピボット付きQR分解の性能評価, 東京大学情報基盤センター スーパーコンピューティングニュース, Vol. 25, No. 4 (2023), pp. 20-28.
- [2] T. F. Chan, Rank revealing QR factorizations, *Linear Algebra Appl.*, Vol. 88-99 (1987), pp. 67-82.
- [3] G. Golub, Numerical methods for solving linear least squares problems, *Numer. Math.*, Vol. 7 (1965), pp. 206-216.
- [4] S. Chandrasekaran and I. C. F. Ipsen, On Rank-Revealing Factorizations, *SIAM J. Matrix Anal. Appl.*, Vol. 15 (1994), pp. 592-622.
- [5] S. Chandrasekaran and I. C. F. Ipsen, On Rank-Revealing Factorizations, *SIAM J. Matrix Anal. Appl.*, Vol. 15 (1994), pp. 592-622.
- [6] P. Businger and G. H. Golub, Linear least squares solutions by Householder transformations, *Numer. Math.*, Vol. 7 (1965), pp. 269-276.
- [7] M. Gu and S. C. Eisenstat, Efficient Algorithms for Computing a Strong Rank-Revealing QR Factorization, *SIAM J. Sci. Comput.*, Vol. 17 (1996), pp. 848-869.
- [8] T. Fukaya, Y. Nakatsukasa, Y. Yanagisawa, and Y. Yamamoto, CholeskyQR2: A Simple and Communication-Avoiding Algorithm for Computing a Tall-Skinny QR Factorization on a Large-Scale Parallel System, *Scala' 14*, pp. 31-38, 2014.
- [9] Y. Yamamoto, Y. Nakatsukasa, Y. Yanagisawa, and T. Fukaya, Roundoff Error Analysis of the CholeskyQR2 Algorithm, *ETNA*, Vol. 44 (2015), pp. 306-326.
- [10] T. Fukaya, R. Kannan, Y. Nakatsukasa, Y. Yamamoto, and Y. Yanagisawa, Shifted Cholesky QR for Computing the QR Factorization of Ill-Conditioned Matrices, *SIAM J. Sci. Comput.*, Vol. 42 (2020), pp. A477-A503.
- [11] 深谷 猛, 縦長行列のQR分解に対する各種アルゴリズムの比較: Oakforest-PACS 上での性能評価, 東京大学情報基盤センター スーパーコンピューティングニュース, Vol. 22, No. 6 (2020), pp. 28-39.
- [12] T. Fukaya, Distributed Parallel Tall-Skinny QR Factorization: Performance Evaluation of Various Algorithms on Various Systems, *PDCAT 2022 (LNCS Vol. 13798)*, pp. 275-287, 2022.
- [13] N. J. Higham, *Accuracy and Stability of Numerical Algorithms*, 2nd ed., SIAM, 2002.
- [14] T. Fukaya, Y. Nakatsukasa, and Y. Yamamoto, A Cholesky QR type algorithm for computing tall-skinny QR factorization with column pivoting, *IPDPS 2024*, 2024. (accepted).
- [15] R. Cunha, D. Becker, and J. Patterson, New Parallel (Rank-Revealing) QR Factorization Algorithms, *Euro-Par 2002*, pp. 677-686, 2002.
- [16] J. A. Duersch and M. Gu, Randomized Projection for Rank-Revealing Matrix Factorizations and Low-Rank Approximations, *SIAM Rev.*, Vol. 62 (2020), pp. 661-682.

低通信超並列チャンネル流 DNS コードの開発

山本義暢

山梨大学大学院総合研究部

1. はじめに

壁面に沿って流れる乱流場（壁乱流）は、流体物理学上はもちろん、工学的にも重要であり、乱流理論・モデリング・制御の検証に最も多く適用される流動場である。本研究ではこの壁乱流のカノニカル流であるチャンネル流(図 1 参照)を対象とし、世界最高レイノルズ数(Re)条件(表 1 参照)を実現する世界最速直接数値計算(Direct Numerical Simulation, DNS)コードを開発している。

乱流の DNS における空間離散化手法としては周期境界条件が適用できる場合、フーリエ・スペクトル法が最も高精度かつ効率的であり、標準手法として確立している。しかしフーリエ・スペクトル法の主要演算部となる高速フーリエ変換(Fast Fourier Transform, FFT)は並列性がなく、並列計算においては分割軸の転置により並列性を作る必要が生じる。この転置は一般に all-to-all 通信(a2a)となり近年の疎結合超並列計算機が最も苦手とする通信タイプとなる。そのためスペクトル法を用いた大規模乱流 DNS の実現には、通信量を最低とする並列化手法及びノード配置の検討が不可欠である。

本報告では、大規模 HPC チャレンジを利用して実施した wisteria BDEC-01(Odyssey) 6144 ノード上における通信量を最低とする最適ノード配置の検討とその性能評価結果を紹介する。

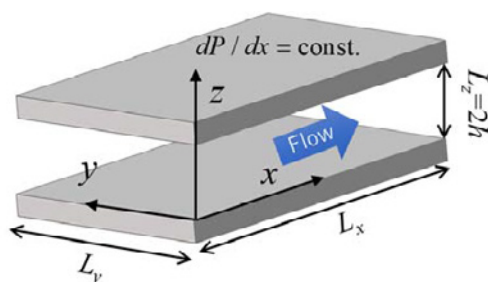


図 1 チャンネル流の体系と座標系

表 1 計算条件

Re_τ	L_x/h	L_y/h	$N_x/\Delta x^+$	$N_y/\Delta y^+$	$N_z/\Delta z^+$
16000	16	6.4	14400 17.8	13824 7.4	5760 0.6-12.0

$Re_\tau = u_\tau h/\nu$: friction Reynolds number. u_τ : friction velocity, h : channel half width, ν : kinematic viscosity, L_x : streamwise computational length, L_y : spanwise computational length, $N_x(\Delta x)$, $N_y(\Delta y)$, $N_z(\Delta z)$: grid number (resolution) for stream (x), spanwise (y), and wall-normal (z) directions, respectively.

2. 計算対象と領域分割及び並列化手法

計算対象は図 1 に示す 2 枚の平板間を一定の圧力勾配により流れる十分に発達したチャンネル流である。流れ場の支配方程式は非圧縮性流体の Navier-Stokes 式と連続式であり、主流(x)及びスパン方向(y)には速度及び圧力に周期境界条件、壁面($z=0, 2h$)では速度場に no-slip 条件、圧力場に対称条件が適用できる。空間離散化手法として、 x, y 方向フーリエ・スペクトル法、 z 方向に 2 次精度中心差分法を適用する。従って本 DNS コードの主要演算は、 x, y 方向への 2 次元 FFT と z 方向への 3 重対角行列解法(Tri-Diagonal Matrix Algorithm, TDMA)となる。

並列化においては世界最大 Re 数規模を対象とするために、数百万並列に対応すべく、 y (MPI におけるコミュニケータ: `mpi_xy_world`)及び z (同: `mpi_yz_world`)方向への 2 次元領域分割を行う。一般には図 2(a)に示すような 4 段階の転置が発生する [1], [2]。この場合、フーリエ正変換過

程における x 方向の FFT においては完全な並列性が得られるが、 y 方向の FFT において並列性を確保するために分割軸を x に変更する($y \rightarrow x$)。さらに z 方向の TDMA において並列性を確保するために分割軸を y に変更する($z \rightarrow y$)。フーリエ変換時はこの逆の過程にて実施し、正・逆過程において4段階転置が必要となる。この転置は各コミュニケーター内での a2a となり通信負荷は極めて高く、乱流 DNS における大規模化(高レイノルズ数への対応)において大きな障壁となっている。

そこで本 DNS コードにおいては TDMA において転置を伴わない並列化手法(隣接シフト通信による逐次計算と x, y 方向へのオーバーラップ化)を開発し [3], [4]、図 2(b)のように2段階の転置に抑え、通信負荷を低減させている。一方 y 方向の FFT においては、分割軸の転置($y \rightarrow x$)により並列性を確保する。従ってこの転置(a2a)は依然として残るが、`mpi_xy_world` を物理ノード上における直接(あるいは近接)接続ノードに割り当てることにより、a2a 負荷を低減させる。FX システムにおいては1 or 2 tofu 座標(1 tofu 座標=12 ノード)の近接結合の12 ノード程度を `mpi_xy_world` に割り当て、領域分割 = ノード形状 = $12 \times N$ (N は z 方向のノード数)とすると高効率が可能である。表 1 の計算条件においてはメモリ量で約 148TB を要するため、ノードあたりのメモリ量約 28GB の FX1000 では 5760 ノードが最低実行条件であり、この場合 $N=480$ となる。

また本 DNS コードでは、OpenMP 機能を用いた FFT 演算と a2a のオーバーラップ化を行っており、FFT 演算の約 90%以上を a2a 実行中に同時実行し、通信時間の隠ぺいを図っている。

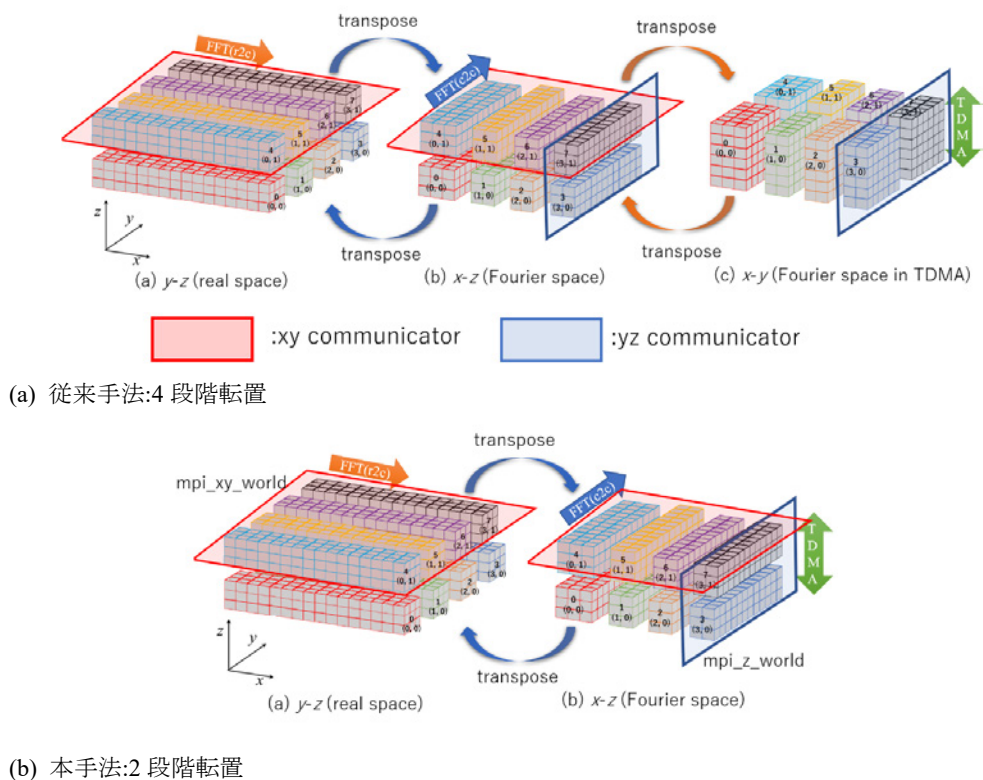


図 2 次元領域分割方法、 $4 \times 2 (=8)$ 並列)の場合

3. Tofu インタコネクト D とその問題点

Wisteria-O (Odyssey) のインタコネクトは Tofu インターコネクト D (6 次元メッシュ/トーラス) であり、 $(a, b, c) = (2, 3, 2)$ の 12 ノードを 1tofu 座標とし、この tofu 座標が 3 次元 $(X, Y, Z) = (10, 8, 8)$ メッシュにより構成されている。2D ノード形状指定時は $(X*a*b, Y*Z*c)$, 3D ノード形状時は $(X*a, Y*b, Z*c)$ のノードを使用することになる。今回の大規模 HPC チャレンジでは、 $(X, Y, Z) = (8, 8, 8)$ が利用可能なため、最大構成は、6144 ノード $= 48 \times 128$ (2D ノード形状指定時) $= 16 \times 24 \times 16$ (3D ノード形状指定時) となる。本 DNS コードでは上述の通り、領域分割として `mpi_xy_world` に 12 ノードを割り当てることにより a2a 負荷を低減させる。2D ノード形状指定時は、 $12 \times 128 (=1536)$ ノードが最大ノード数となり、全体の 1/4 のノードに抑えられてしまう。もちろん `mpi_xy_world` に 48 ノードを割り当てれば、6144 ノードが利用できるが、FFT 担当ノードが 48 ノードとなるため a2a コストが跳ね上がる。つまり 2D 領域分割 = 2D ノード形状 として高効率を維持するためには、FX システムにおいては全体の 1/4 程度のノードしか利用できない問題が生じる。

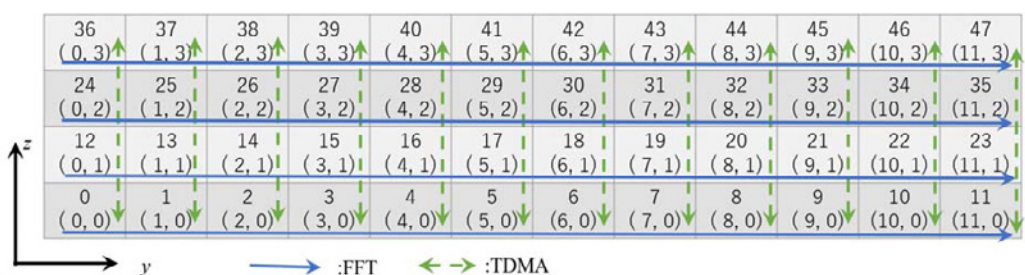
4. 3D ノード形状時における 2 次元領域分割の最適配置の検討

本 DNS コードにおいて FX システムの最大構成近くを利用しかつ、高効率を維持するには、ノード形状 3D 上において、2D 領域分割を通信量が最低となるように配置する工夫が必要となる。このためまず 3D ノード形状時における tofu 座標配置について分析を行った。

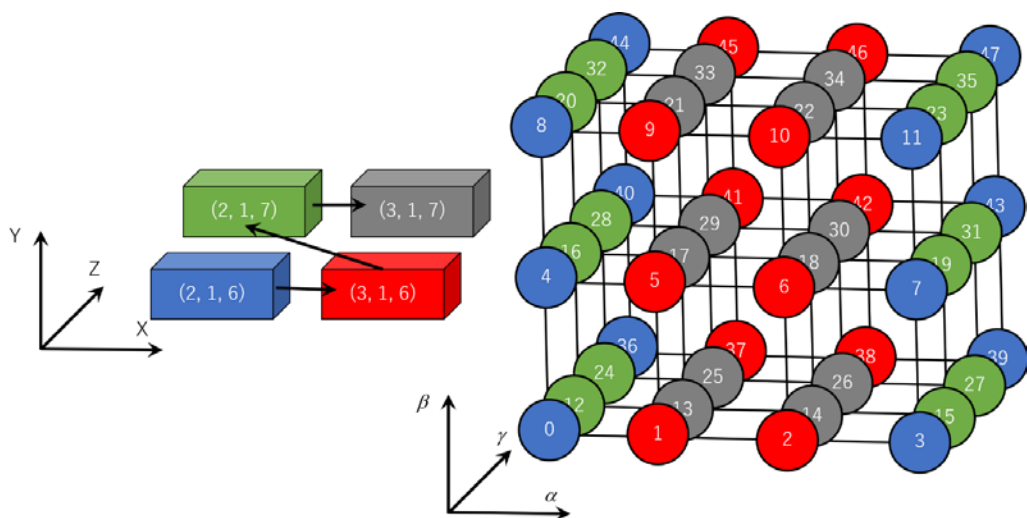
図 3 は 3D のノード配置: $\alpha \times \beta \times \gamma = 4 \times 3 \times 4$ (= 48 ノード:torus) を指定し、2 次元領域分割: 12×3 の場合におけるランク及びノード配置と tofu 座標 (1tofu 座標は 12 ノードから構成) の関係を示す。またここでは簡単のため 1MPI プロセス/1 ノードとして標記している。図 3(a) はチャンネル流の (y, z) 方向への 2 次元領域分割を示し、数字は `mpi_comm_world` のランク番号 (`mpi_xy_world` のランク番号、`mpi_z_world` のランク番号) を意味する。図 3(b) 左は 48 ノードの tofu 座標 (X, Y, Z) 配置を示す。48 ノードの場合、 (X, Z) 面内の直接結合された 4tofu 座標から構成される。一方図 3(b) 右は 3D のノード配置 (α, β, γ) を示し、数字は `mpi_comm_world` のランク番号、色はどの tofu 座標にあるか、を示している。このノード配置 (デフォルトの 3D ノード形状) の場合、FFT は 2 tofu 座標間で行われることがわかる。一方、TDMA は隣接シフト通信のため tofu 座標間で連続していれば、1 ホップ (中継なし) に通信を行うことができる。図 3(b) 左の場合は、 $(2, 1, 6) \rightarrow (3, 1, 6) \rightarrow (2, 1, 7) \rightarrow (3, 1, 7)$ の順にノードが割り当てられるが、 $(3, 1, 6) \rightarrow (2, 1, 7)$ 間は tofu 座標上で隣接していないため 2 ホップの通信が生じることがわかる。

そこで図 3(c) 左のように tofu 座標間で連続となるように $(2, 1, 6) \rightarrow (3, 1, 6) \rightarrow (3, 1, 7) \rightarrow (2, 1, 7)$ の順にノードを割り振ると隣接シフト通信のホップ数は 1 (直接通信) により実行できる。さらに図 3(c) 右のように 3D ノード上のランク配置を MAP により指定すれば、FFT に a2a は 1tofu 座標内の通信で行うことができる。

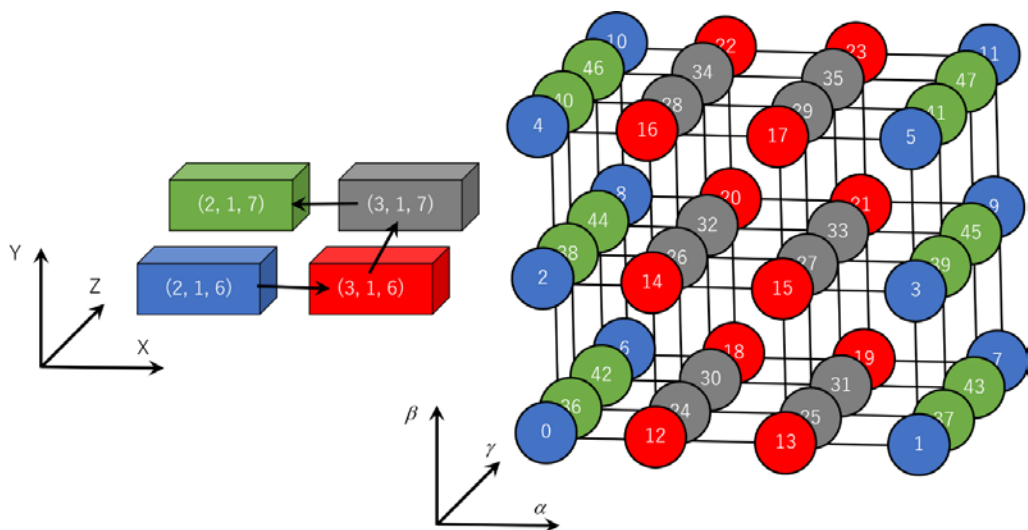
この MAP の作成手順としては、ダミープログラムにて 3D ノード形状を strict 指定により実施し、図 3(b) の tofu 座標と 3D ノード配置との情報を取得する (stats 情報を出力させるとこの情報が得られる)。この情報により図 3(c) のように FFT 担当の 12 ノード単位を 1tofu 座標に割り当て、かつ tofu 座標上で連続となるようにランクを割り振ることになる。数千から数万ノードを対象とする場合、手作業でこれを行うことは困難なため、一連の過程を自動化するコードを作成した。



(a) 2次元領域分割: 12×3 の場合



(b) 3D ノード形状時の tofu 座標とランク番号の関係(デフォルト時): $4 \times 3 \times 4$



(c) 3D ノード形状時の tofu 座標とランク番号の関係(最適化時): $4 \times 3 \times 4$

図3 3D ノード形状において 2D 領域分割における通信量を最低とするノード配置(48 ノードの例)

5. 世界最高レイノルズ数条件でのベンチマーク

4.で示した 3D ノード形状上で 2 次元領域分割時の通信量を最低とするノード配置最適化手法を Wisteria-O (Odyssey) 6144 ノード(294,912 コア)に適用した。計算条件は表 1(世界最高レイノルズ数条件)とし 100step の時間積分により計測を行った。ただし実際の乱流計算では乱流場(初期条件)を読み取る必要があるが、本ベンチマークでは疑似乱流場を作成し、データ読み取りは行っていない。ノード配置条件としては、(1) 2D ノード形状指定=2D 領域分割、(2) 3D ノード形状上で 2D 領域分割をデフォルト配置(図 3(b)相当)、(3)3D ノード形状上で 2D 領域分割を最適化した場合(図 3(c)相当)、の 3 ケースを実行した。またノード内は全ケースとも 12MPI × 3AP(OpenMP & 自動並列)を適用した。

計測結果を表 2 に示す。RUN(1)のノード形状=領域分割の場合は、3.で示したように FFT 担当ノードが 48 ノードとなる。この時 FFT 担当の 48 ノードは 8 tofu 座標で配置されていた。これはトーラス指定に対応するためと思われる(従って本 DNS コードでは 2D ノード形状時のトーラス指定を外した方がいいかもしれない)。この 8 tofu 座標間の FFT 及び a2a により、1 ステップあたり約 10 秒を要する。RUN(2)の 3D ノード形状時は、FFT 担当 12 ノードが 8 あるいは 12 tofu 座標に配置されている。このため a2a コストが(1)よりも増加し、1 ステップあたり約 13.3 秒を要した。RUN(3)の 3D 形状時に最適ノード配置を用いた場合は、FFT 担当 12 ノードが 1 tofu 座標内に配置され、かつ tofu 座標間で連続となる。そのため 1 ステップあたり 4.63 秒と RUN(1)の 2.3 倍高速となった。

表 2 世界最高レイノルズ数条件での計測結果

RUN	ノード数	ノード形状	領域分割	s/step	TFLOPS	備考
(1)	6144	48×128	48×128	10.73	166	ノード形状=領域分割
(2)	6144	16×24×16	12×512	13.30	134	デフォルト
(3)	6144	16×24×16	12×512	4.63	385	最適 MAP 使用

6. 理化学研究所「富岳」への応用

本研究の 3D ノード配置における 2D 領域分割の最適ノード配置方法は、同様のインタコネクトをもつ理化学研究所「富岳」へも適用可能である。「富岳」の large クラスは、2D ノード形状は 144 × 816 (但し、利用ノード数 12288 以下)、12288 ノードを超える middle クラスは 144 × 576(但し、利用ノード数 55296 以下)となっている。従って、表 1 の条件においては、2D ノード形状 = 領域分割の設定($12 \times N$)においては、 $N = 720$ の 8640 ノード程度が上限となる。これを超えるノード数を利用するには、 $24 \times N (N=480, 576)$ のように FFT 担当ノードを拡張する必要があった。図 4 は富岳での実行結果であり、ノード形状=領域分割とし、□が $12 \times N (N=480, 720)$ 、▲が $24 \times N (N=480, 576)$ の結果である。 $12 \times N$ の場合はほぼ 100%の並列化効率が得られているが、これ以上ノード数を増やすことができず、FFT 担当ノード数を 24 とすると性能が劣化することがわかる。一方本研究で開発した 3D ノード形状で 2D 領域分割を最適配置する方法(■)においては、領域分割： $12 \times 960 (=11520 \text{ ノード})$ 、 $12 \times 1440 (=17280 \text{ ノード})$ において $12 \times N$ の場合(□)とほぼ同等の性能でノード数を増やすことが可能になっている。17280 ノードを用いた場合の演算速度は約 1050 TFLOPS であり、チャンネル流 DNS における最速値となっている(従来の最速値は Lee et al [2], による IBM Mira 全系を利用した 271 TFLOPS)。

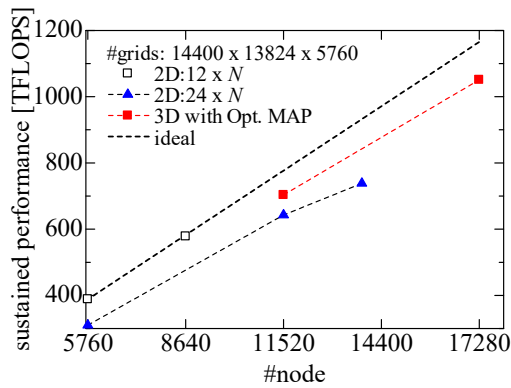


図4 本手法の「富岳」への応用：表1の実行条件での検証、■が本手法の結果

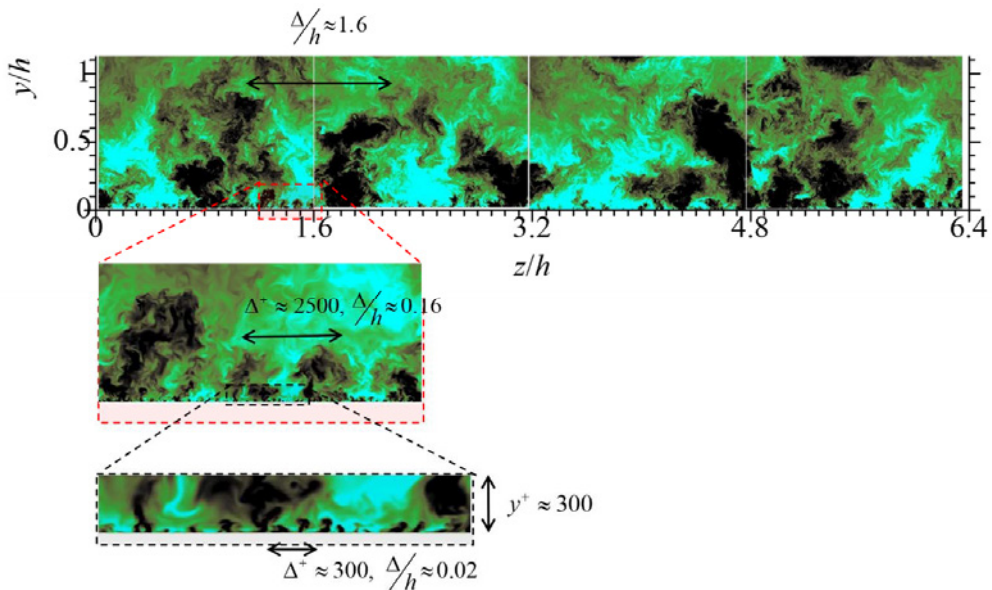


図5 高レイノルズ数壁面乱流場における階層構造：主流方向速度乱れ(u)のコンタープロット、 $-3(\text{black}) < u^+ < 3(\text{green})$ 、endview (チャンネルの下半分: $0 < y/h < 1$)、なお本可視化においては y 軸：壁垂直方向、 z 軸：スパン方向としている。

7. 世界最高レイノルズ数条件での PRODUCTION RUN

表2のRUN(1)及び(3)の条件で、PRODUCTION RUN (初期乱流場を読み取り、最後にリスタート用に最終状態の乱流場を出力)を実施した。本条件では、約33TBのデータ読み取りと書き込みをそれぞれ行う必要があり、実際のPRODUCTION RUNにおいては計算速度に加えてIO速度も極めて重要となる。本DNSコードでは、 (x, y) 平面内の代表ランクがIOを担当するため、RUN(1)では 128×4 (速度3成分+圧力)並列によりIOを実施する。同様にRUN(3)では 512×4 並列でのIOとなり並列数はRUN(3)が4倍多くなる。

実測したIO速度は、RUN(1)が読み取り・書き込みのそれぞれに約10分に対し、RUN(3)が約4分(約150GB/sのIO速度)と2.5倍程度高速であった。一方理化学研究所の「富岳」においては、並列数に依存せず10-20分とムラが大きく、かつ遅いIOであり、Wisteria-oにおけるファイルシ

システムの優位性が確認できた。この PRODUCTION RUN を 1 回あたり約 4 時間の実行時間で 5 回実施したがハード障害等の発生もなく安定した計算を行うことができた。

図 5 に PRODUCTION RUN による計算された瞬時乱流場の可視化を示す(なおここでは本分野の慣例に従い、壁垂直方向を y 軸、スパン方向を z 軸と置き換えている)。高レイノルズ数の壁面乱流場では階層的な縦渦構造が出現することが知られているが、本条件では、外層規模($\sim 1.6h$)、内層規模($\sim 0.16h$)、そして wall-unit(摩擦速度と動粘性により無次元化した単位)でスケールする特徴的な階層構造が存在することがわかる。なお本条件の速度 1 成分は約 8TB(単精度に落としても 4TB)の容量を要するため、全計算領域の可視化は実現できておらず今後の課題である。

8. まとめと今後の展望

スーパーコンピュータ「富岳」は京に比べ、ノードあたりの演算性能で 26 倍の向上を実現しているが、通信性能は 2 倍程度の向上にとどまっており、通信負荷の高い大規模並列コードの適用においては、その対策が不可欠となる。本 DNS コードでは all-to-all 通信を伴う転置を 2 段階に抑えた 2 次元領域分割方法、通信と演算とのオーバーラップによる通信時間の隠ぺい、かつノード形状と領域分割を一致させ、FFT 担当ノードを 12 ノード程度に抑え all-to-all 通信負荷を低減させる手法を開発することにより高効率演算を実現している。しかし FX システム特有の tofu インターコネクトにおいて全系規模を対象とする場合には、2 次元ノード形状時の FFT 担当ノードが大幅に増加し、性能劣化をもたらす問題が生じていた。

そこで本研究では、3D ノード形状において 2 次元領域分割時の通信量を最低とするノード配置最適化手法を開発し、Wisteria-O (Odyssey) の全系規模 6144 ノード(294,912 コア)に適用しその性能評価を実施した。その結果、従来の 2D ノード形状=2D 領域分割の場合に比べ、2.3 倍の高速化を達成し、384TFLOPS の演算速度(理論性能の約 1.8%に相当)を得た。本手法は Wisteria-O (Odyssey)のみならず、tofu インターコネクトによるすべての FX システムに適用可能である。つまり富岳全系規模への拡張も可能であり、本 DNS コードの適用性を大きく進展させるとともに、世界最大レイノルズ数壁面乱流場の DNS データベース構築の実現性を飛躍的に向上させるものである。

謝辞

本研究は Wisteria/BDEC-01 スーパーコンピュータシステムにおける「大規模 HPC チャレンジ」制度を利用して実施した。また科学研究費 JP26400410 及び公益財団法人柏森情報科学振興財団の助成を受けた。記して謝意を表する。

参考文献

- [1] J. Xu, "Benchmarks on tera-scalable models for DNS of turbulent channel flow," *Parallel Computing*, vol. 33, no. 12, pp. 780-794, 2007.
- [2] M. Lee, N. Malaya and R. D. Moser, "Petascale direct numerical simulation of turbulent channel flow on up to 786k cores," in *Proceedings of the International Conference on High Performance Computing, Networking, Storage and Analysis*, 2013.
- [3] Y. Yamamoto and Y. Tsuji, "Numerical evidence of logarithmic regions in channel flow at $Re\tau = 8000$,"

Phys. Rev. Fluids, vol. 3, no. 1, p. 012602, 2018.

- [4] Y. Kaneda and Y. Yamamoto, "Velocity gradient statistics in turbulent shear flow : an extension of Kolmogorov's local equilibrium," *J. Fluid Mech.*, vol. 929, p. A13, 2021.

教育利用報告：工学部電子情報工学科電気電子工学科

3 年生後期実験 「人工知能演習」

山下 倫 宏

東京大学工学部電気電子工学科

1. はじめに

工学部電子情報工学科・電気電子工学科(EEIC)の3年生後期実験「人工知能演習」での演習の際に、Wisteria/BDEC-01[Aquarius]を教育目的で利用させていただいた。人工知能演習では、前半に演習を通じて深層学習や音声処理の基本を学び、後半に自由課題としてチームで人工知能を用いたシステムを開発した。本稿では、スパコン利用に関して学んだ点と、開発したシステムについて説明する。

2. スパコン利用に関して学んだ点

スパコンの利用自体が初めてであったため、情報基盤センターの記事[1]を参考に miniconda と conda-forge の環境を構築した。Wisteria/BDEC-01 のマニュアルを参考にバッチジョブを作成し演習を行った。今後の研究活動でスパコンを利用するための良い準備段階となった。

3. 開発したシステム

私の所属するチームでは、講義スライドから講義動画を生成するシステムを開発した。私は音声+テキストを入力とし、人体の各関節点の座標を出力とする講義動作の生成部分を担当した。Motion Diffusion Model [2]を基本として、音声入力を追加し入力マルチモーダル化によって、より豊かな動作が生成されることを期待した。

結果は、テキストだけの入力の場合と、音声+テキストを入力とする場合では、生成される動作の豊かさには違いがみられなかった。この原因としては、学習に使用した音声をテキストの機械読み上げで作成したことにより、抑揚などの音声特徴を学習させることが出来なかったからであると考えている。

4. まとめ

スパコンの使い方を学ぶのに最適な機会となった。最後に、スパコンの教育利用に際してお世話になった東京大学情報基盤センターのみなさまに感謝を申し上げます。

参 考 文 献

- [1] 堀 敏博. “Python 環境 (2021 年版).” スーパーコンピューティングニュース, vol. 23, no. 6, Nov. 2021. https://www.cc.u-tokyo.ac.jp/public/VOL25/No1/16_202301-hasegawa.pdf.
- [2] Tevet, Guy, et al. "Human motion diffusion model." *arXiv preprint arXiv:2209.14916* (2022).

2023年度 お試しアカウント付き並列プログラミング講習会 開催状況

	開催日	内容	区分	人数	満足度※
第220回	2024年1月19日	「Wisteria実践」 ¹ Wisteria/BDEC-01(Odyssey,Aquarius) 埴 敏博	事前登録者	7	4.00
			参加者	大学・研究機関教職員	2
				企業の方	0
				学部学生	2
				大学院生	1
				その他	0
			合計		5
第221回	2024年1月31日	「OpenFOAM中級・3次元ダムブレイク解析」 ² Wisteria/BDEC-01 (Odyssey) 今野 雅	事前登録者	8	4.14
			参加者	大学・研究機関教職員	1
				企業の方	2
				学部学生	4
				大学院生	1
				その他	0
			合計		8
第222回	2024年2月5日	「OpenMPIによるA64FX並列プログラミング入門」 ³ Wisteria/BDEC-01(Odyssey) 下川辺 隆史	事前登録者	5	4.33
			参加者	大学・研究機関教職員	2
				企業の方	0
				学部学生	1
				大学院生	1
				その他	0
			合計		4
第223回	2024年2月7日 2月14日	「第10回 GPUミニキャンプ」 ⁴ Wisteria/BDEC-01 (Aquarius) 下川辺 隆史	事前登録者	9	3.80
			参加者	大学・研究機関教職員	5
				企業の方	0
				学部学生	0
				大学院生	3
				その他	1
			合計		9

※「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/220/>

² <https://www.cc.u-tokyo.ac.jp/events/lectures/221/>

³ <https://www.cc.u-tokyo.ac.jp/events/lectures/222/>

⁴ <https://www.cc.u-tokyo.ac.jp/events/lectures/223/>

第 222 回お試しアカウント付き並列プログラミング講習会

「OpenMP による A64FX 並列プログラミング入門」

下川辺 隆史

東京大学情報基盤センター

2024 年 2 月 5 日 (月) に、第 222 回お試しアカウント付き並列プログラミング講習会「OpenMP による A64FX 並列プログラミング入門」が開催されました。本講習会では、A64FX という 48 コア搭載された CPU において、性能を引き出す手法を学びます。前処理付き共役勾配法を題材として、OpenMP の指示文挿入によるスレッド並列や、SIMD 演算を活用するコードの説明と実習を行います。

本講習会は、東京大学情報基盤センター、PC クラスタコンソーシアム（実用アプリケーション部会）の共催で開催され、富士通株式会社の長坂侑亮氏、福本尚人氏、本田巧氏に講師を務めていただきました。本講習会は Zoom によるオンライン講習会として実施され、情報提供や質問対応など、コミュニケーションツールとして Slack を利用しました。実習には、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 を利用しました。本講習会のスケジュールは表 1 の通りです。受講者には実習で使用した Wisteria/BDEC-01 を受講後も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
2 月 5 日	13:00 - 13:30	スパコンの使い方など
	13:30 - 14:20	A64FX アーキテクチャと並列プログラミング (座学)
	14:20 - 14:30	(休憩)
	14:30 - 15:20	OpenMP を活用した並列プログラミング演習 (前編)
	15:20 - 15:30	(休憩)
	15:30 - 17:00	OpenMP を活用した並列プログラミング演習 (後編)

今回の講習会では、合計 5 名の事前申込があり、4 名が参加しました。参加者の内訳は、大学・研究機関教職員：2 名、大学院学生：1 名、学部学生：1 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。自由回答では、下記の回答をいただきました。

- 満足した点：A64FX を自由に利用できるアカウントがついてきたことと、サンプルプログラムをいただいて手を動かしながら、回答例の説明を聞いて理解する時間があつたことには満足しています。不満だった点：題名に「A64FX 並列プログラミング入門」と掲げられていたので A64FX 独自の話や富士通コンパイラ独自の話についてもっと話が聞けると思っていました。内容の多くが A64FX 以外のプロセッサでも変わらないであろう OpenMP の使い方であつたことと、コンパイラが GCC であつたことは期待外れでした。”
- お試しアカウントが 1 ヶ月もあるのはありがたいです。

自由回答を見ると、A64FX に特化した最適化やそのためのプロファイラの使い方などを中心に取り上げることが期待する声もあり、講習会の内容を再度検討し、次回以降の開催を考えたいと思っております。本講習会でもオンライン開催を望む声が多いことがわかりましたので、オンラインまたはハイブリッド開催を進めていこうと思います。

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	3			0			
	評点	1	2	3	4	5	平均
講習会時間	短い <-> 長い		1	2			2.7
講習会講義内容（プレゼン）	簡単 <-> 難			2	1		3.3
配布資料内容	簡単 <-> 難		1	2			2.7
サンプルプログラム内容	簡単 <-> 難		1	2			2.7
満足度	不満 <-> 満足			1		2	4.3

第 223 回お試しアカウント付き並列プログラミング講習会

「第 10 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

2024 年 2 月 7 日（水）、14 日（水）の 2 週にわたり、第 223 回お試しアカウント付き並列プログラミング講習会「第 10 回 GPU ミニキャンプ」が開催されました。本イベントは、東京大学浅野キャンパス情報基盤センターの現地会場とオンラインでのハイブリッドとして開催されました。現地会場およびオンラインにて各自の Slack と Zoom を立ち上げて参加しました。

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 2025 年 1 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 5 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
- Kazuaki Matsumura：NVIDIA Corporation, HPC Compiler Engineer
- 阿部光平：プロメテック・ソフトウェア株式会社 HPC エンジニア
- 今任嘉幸：プロメテック・ソフトウェア株式会社 ソリューションチームマネージャ
HPC インフラエンジニア
- 迎 祐樹：富士通株式会社 システムエンジニア
- 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
- 佐藤賢斗：理化学研究所 計算科学研究センター 高性能ビッグデータ研究チーム チームリーダー

- 三木洋平：東京大学 情報基盤センター 助教
- 山崎一哉：東京大学 情報基盤センター 助教

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、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、これまでと同様に、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 Slack を用いて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、図2と図3は講習会実施中の写真です。受講者には実習で使用した Wisteria/BDEC-01 を受講後も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
2月7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
2月8日-13日		各チームで実践
2月14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



図2 講習会実施の様子（1）



図3 講習会実施の様子（2）

今回の講習会では、合計 4 チーム 9 名の事前申込があり、申込者全員が参加しました。参加者の内訳は、大学・研究機関教職員：5 名、大学院学生：3 名、その他：1 名でした。参加チームは、それぞれ下記の課題について取り組みました。

- 密度汎関数理論に基づく第一原理電子状態計算ソフトウェア OpenMX の GPU 化とベンチマーク
- 非静力学数値海洋モデル kinaco の GPU 化
- FMO プログラム ABINIT-MP の GPU 対応
- 大規模並列有限要素法構造解析ソフトウェア FrontISTR の GPU 化

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。アンケートの自由回答を見ると、できる限り現地参加したいが、オンライン参加があると参加ハードルがさがる、普段の作業環境を利用できるという意見がありました。その両方を満足するということで、ハイブリッドを期待する声が多数あり、これはアンケート集計結果からも窺えます。運営側としてもハイブリッド開催のメリットはよくわかりましたが、一方でイベント準備やメンターを現地に集めることにそれなりにコストがかかるため、来年度はハイブリッド開催 2 回（浅野、柏それぞれ一回ずつ）、それ以外はオンラインのみという形態で開催していく予定です。

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	5			0			
GPU プログラミング経験	3			2			
	オンライン が良い	現地開催が 良い		ハイブリッド 開催がよい	どの開催形 式でもよい		
オンラインと現地開催	0	0		5	0		
	評点	1	2	3	4	5	平均
講習会時間	短い <-> 長い			5			3.0
講習会講義内容（プレゼン）	簡単 <-> 難			5			3.0
配布資料内容	簡単 <-> 難			5			3.0
サンプルプログラム内容	簡単 <-> 難			5			3.0
満足度	不満 <-> 満足			2	2	1	3.8

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://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/#SODAN

【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※1 wisteria0{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※1 i01login{1-2}.cc.u-tokyo.ac.jp

※1 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	2
最先端共同HPC基盤施設スーパーコンピュータシステム (0FP-II)	
導入のお知らせ (再掲)	3
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	15
研究成果の登録のお願い	18
12月・1月のジョブ統計	19

研究報告

第45回ASE研究会「(計算・データ・学習) 融合とその先にあるもの」 国際ワークショップ (ハイブリッド開催)	22
第46回ASE研究会 (計算・データ・学習) 融合における 日仏国際協力と次世代計算基盤 (ハイブリッド開催)	24

ユーザーから

ガラスが示すせん断誘起臨界性とGardner相の類似性についての 数値的研究	26
An investigation of physics-informed neural network (PINN) method for estimation of reservoir permeability using poroelasticity principle	36
地震波形インバージョンによるマントル最下部のS・P波速度構造同時推定 ー地球深部の熱・化学進化の理解に向けてー	41
分子動力学計算を用いたDNA分解酵素の失活メカニズムの解明	47
大規模分散並列環境におけるコレスキーQR型アルゴリズムによる 縦長行列の列ピボット付きQR分解の性能評価 (続)	52
低通信超並列チャンネル流DNSコードの開発	59

教育活動報告

教育利用報告：工学部電子情報工学科電気電子工学科 3年生後期実験「人工知能演習」	67
2023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	68
第222回お試しアカウント付き並列プログラミング講習会 「OpenMPによるA64FX並列プログラミング入門」	69
第223回お試しアカウント付き並列プログラミング講習会 「第10回GPUミニキャンプ」	71

原稿募集	75
------	----