

スーパーコンピューティング ニュース

Vol.26 No.5, 2024.9



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ノード当たり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 当たり3.00

※3 1ノード当たりもしくは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、lpomoea-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																											
	<table><tr><th>並列ファイルシステム ディスク容量</th><th>大学・公共機関等</th><th>企業</th></tr><tr><td>1 TB</td><td>7,200 円/年</td><td>8,640 円/年</td></tr><tr><td>[10 TB まで 1 TB 追加当たり]</td><td>[4,200 円/年]</td><td>[5,040 円/年]</td></tr><tr><td>10 TB</td><td>45,000 円/年</td><td>54,000 円/年</td></tr><tr><td>[100 TB まで 1 TB 追加当たり]</td><td>[3,000 円/年]</td><td>[3,600 円/年]</td></tr><tr><td>100 TB</td><td>315,000 円/年</td><td>378,000 円/年</td></tr><tr><td>[1,000 TB まで 1 TB 追加当たり]</td><td>[2,400 円/年]</td><td>[2,880 円/年]</td></tr><tr><td>1,000 TB</td><td>2,475,000 円/年</td><td>2,970,000 円/年</td></tr><tr><td>[以降 1 TB 追加当たり]</td><td>[2,100 円/年]</td><td>[2,520 円/年]</td></tr></table>	並列ファイルシステム ディスク容量	大学・公共機関等	企業	1 TB	7,200 円/年	8,640 円/年	[10 TB まで 1 TB 追加当たり]	[4,200 円/年]	[5,040 円/年]	10 TB	45,000 円/年	54,000 円/年	[100 TB まで 1 TB 追加当たり]	[3,000 円/年]	[3,600 円/年]	100 TB	315,000 円/年	378,000 円/年	[1,000 TB まで 1 TB 追加当たり]	[2,400 円/年]	[2,880 円/年]	1,000 TB	2,475,000 円/年	2,970,000 円/年	[以降 1 TB 追加当たり]	[2,100 円/年]	[2,520 円/年]
	並列ファイルシステム ディスク容量	大学・公共機関等	企業																									
	1 TB	7,200 円/年	8,640 円/年																									
	[10 TB まで 1 TB 追加当たり]	[4,200 円/年]	[5,040 円/年]																									
	10 TB	45,000 円/年	54,000 円/年																									
	[100 TB まで 1 TB 追加当たり]	[3,000 円/年]	[3,600 円/年]																									
	100 TB	315,000 円/年	378,000 円/年																									
	[1,000 TB まで 1 TB 追加当たり]	[2,400 円/年]	[2,880 円/年]																									
	1,000 TB	2,475,000 円/年	2,970,000 円/年																									
[以降 1 TB 追加当たり]	[2,100 円/年]	[2,520 円/年]																										
※ 東京大学情報基盤センターのスーパーコンピュータシステムのいずれかにユーザ 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。																												
ディスク容量追加	申込時点のディスク容量に応じて, 1 TB 追加当たりの負担金額は下表参照 (無償で付与されたディスク容量は「申込時点のディスク容量」に含まない)																											
	<table><tr><th>申込時点のディスク容量</th><th>大学・公共機関等</th><th>企業</th></tr><tr><td>1 TB 未満</td><td>7,200 円/年</td><td>8,640 円/年</td></tr><tr><td>1 TB 以上 10 TB 未満</td><td>4,200 円/年</td><td>5,040 円/年</td></tr><tr><td>10 TB 以上 100 TB 未満</td><td>3,000 円/年</td><td>3,600 円/年</td></tr><tr><td>100 TB 以上 1,000 TB 未満</td><td>2,400 円/年</td><td>2,880 円/年</td></tr><tr><td>1,000 TB 以上</td><td>2,100 円/年</td><td>2,520 円/年</td></tr></table>	申込時点のディスク容量	大学・公共機関等	企業	1 TB 未満	7,200 円/年	8,640 円/年	1 TB 以上 10 TB 未満	4,200 円/年	5,040 円/年	10 TB 以上 100 TB 未満	3,000 円/年	3,600 円/年	100 TB 以上 1,000 TB 未満	2,400 円/年	2,880 円/年	1,000 TB 以上	2,100 円/年	2,520 円/年									
	申込時点のディスク容量	大学・公共機関等	企業																									
	1 TB 未満	7,200 円/年	8,640 円/年																									
	1 TB 以上 10 TB 未満	4,200 円/年	5,040 円/年																									
	10 TB 以上 100 TB 未満	3,000 円/年	3,600 円/年																									
	100 TB 以上 1,000 TB 未満	2,400 円/年	2,880 円/年																									
1,000 TB 以上	2,100 円/年	2,520 円/年																										

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

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

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

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

センターから

サービス休止等のお知らせ

2024 年 9 月下旬からの計算機及びストレージシステムのサービス予定は以下のとおりです。

Wisteria/BDEC-01 スーパーコンピュータシステム

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

日 付	利用者サービス	センター内作業
9 月 27 日 (金)	9:00 ～ 22:00 までサービス休止	月末処理
10 月 25 日 (金)	9:00 ～ 22:00 までサービス休止	月末処理
11 月 22 日 (金)	9:00 ～ 22:00 までサービス休止	月末処理

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

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

大規模 HPC チャレンジ 実施期間
9 月 26 日 (木) 8:30 ～ 9 月 27 日 (金) 9:00 まで 10 月 24 日 (木) 8:30 ～ 10 月 25 日 (金) 9:00 まで 11 月 21 日 (木) 8:30 ～ 11 月 22 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
9 月 27 日 (金)～ 9 月 30 日 (月)	9/27(金)9:00 ～ 9/30(月)17:00 までサービス休止	月末処理、空調機メンテナンス、柏キャンパスにおける特別高圧受変電設備点検・二次変電設備点検

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

(2024.7.1 - 2024.8.31 変更)

1. ハードウェア

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

1.2 Ipomoea-01 大規模共通ストレージシステム … なし

2. ソフトウェア

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

➤ Odyssey

FEFS	T01941-01	(2024.7.26)
------	-----------	-------------

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

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

3. その他

3.1 Wisteria/BDEC-01 における set_quota コマンドの修正について (2024.7.26)

ログインノードにおいて、グループ管理者ユーザが set_quota コマンドを実行した際に sudo パスワードを要求される不具合を修正しました。

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。

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 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。

¹ 「大規模 HPC チャレンジ」

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

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

- A) 計算・結果の詳細を論文等も含めて公表できること。
- B) 計算結果が科学的に有用、あるいは社会的なインパクトがあると考えられること。
- C) システムごとに決められたノード数（Odyssey：4,096 ノード、Aquarius：36 ノード）以上の利用を目標としていること。
- D) 計画に実現性があり、短期間で効果を示すことが可能であること（一回の使用時間は最大 24 時間です）。
- E) 本システムの運用、ユーザーにとって有用な情報を提供すること。

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

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 and annotations:

- 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".
- ① 「研究成果」 → 「研究成果の取扱い」をクリック**: A green arrow points from the "研究成果" link to the "研究成果の取扱い" link in the navigation bar.
- 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**: A green arrow points from the "研究成果の登録について" link in the main content area to the "研究成果登録のページ" link in the sidebar.
- 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**: A green arrow points from the registration form fields to the "登録したい業績" dropdown menu.
- 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**: A green arrow points from the "ログイン" button to the registration form.

研究成果の取扱い

国外での成果発表について

スーパーコンピュータを用いた研究成果を国外に向けて発表される場合、技術の秘匿とすることを目的とする場合は、特許権利を侵害する可能性があります。特許権利を侵害しない場合は、特許申請が必要になることがありますので、学術誌等への論文の投稿や学会発表などにあたっては十分に留意下さい。不明な場合は以下までお問い合わせください。

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

【検索/東京大学】

▶ 新入・女性利用
▶ 本館蔵 HPC チェレンジ
▶ トライアルコース

研究成果の登録について

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いております。以下の Web ページより研究成果の登録をお願いいたします。研究成果登録は、東京大学における本センターの大規模計算資源の整備・拡充につながるものと、今後の計算資源の活用促進を目的として重要なるものです。特許の登録には何卒ご協力の程宜しくお願い申し上げます。

▶ **研究成果登録のページ**

研究成果 FAQ

研究成果登録

研究成果の登録をお願いします。

研究成果の登録は、本センターのスーパーコンピュータシステムを利用して得られた研究成果のうち、論文、口頭発表、著書、受賞情報についてご報告いただくものです。ご報告いただいた内容は、研究成果データベースへの登録、センター発行の広報誌及び Web ページへの掲載に使用させていただきますことをご承諾ください。研究成果は、東京大学におけるスーパーコンピュータシステムの整備・拡充につながるものとなりますので、利用の促進には何卒ご協力の程宜しくお願い申し上げます。

お使いのアカウント名と登録メールアドレスを入力し、登録しようとする業績を選択してください。

アカウント名
メールアドレス
登録したい業績
検索
登録

JavaScript を有効にしてください。
成果登録内容の削除などのお問い合わせ、登録メールアドレスが不明といった際のお問い合わせは
Email: kenkyu_shien.adm@gs.mail.u-tokyo.ac.jp までお問い合わせします。

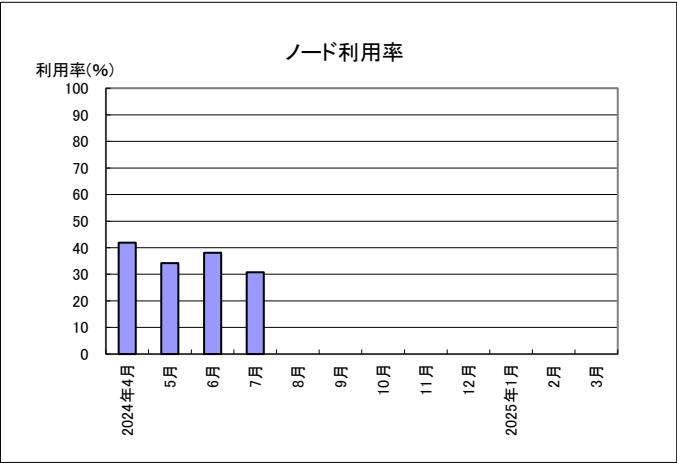
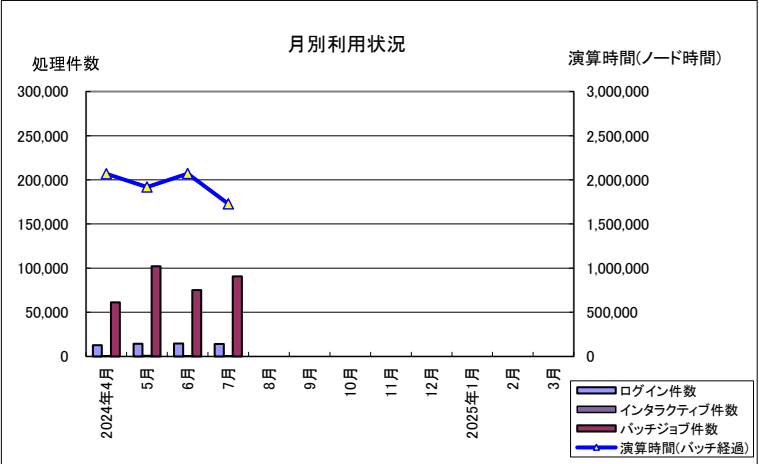
東京大学/情報基盤センター/スーパーコンピューティング部門
Supercomputing Division, Information Technology Center, The University of Tokyo

6・7月のジョブ統計

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

年月	登録者数	実利用者数	処理件数				接続時間 [時間]	ファイル使用量 [GiB]		ログイン (実CPU)	演算時間 [ノード時間] (経過時間)			平均ノード 利用数 (ノード)	ノード 利用率 (%)
			ログイン	プリポスト	インタラクティブ ジョブ	バッチジョブ		/home	/lustre		プリポスト	インタラクティブ ジョブ	バッチジョブ		
2024年4月	3,050	809	12,872	279	493	61,385	57.283	3,977	3,589,529	2,697.35	1,870	235	2,066,766	3,219.2	41.9
5月	2,581	836	14,356	455	1,037	102,288	67,883	4,064	3,413,075	4,138.19	1,051	487	1,918,358	2,624.7	34.2
6月	2,674	918	14,788	642	729	75,067	86,045	4,229	3,472,841	4,240.77	2,358	365	2,070,065	2,928.4	38.1
7月	2,815	847	14,041	587	772	90,717	81,792	4,504	3,682,226	4,853.91	3,256	369	1,728,179	2,364.6	30.8
2023年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
2月	2,527	722	13,736	511	483	180,843	65,272	4,495	4,152,727	5,756.16	3,380	238	2,645,542	3,873.4	50.4
3月	2,553	677	13,339	432	483	192,658	60,762	4,685	4,068,699	5,804.22	3,437	161	3,124,275	4,588.0	59.7
合計			177,822	5,916	9,015	2,072,371	923,485			63,392	30,125	4,659	29,556,662		

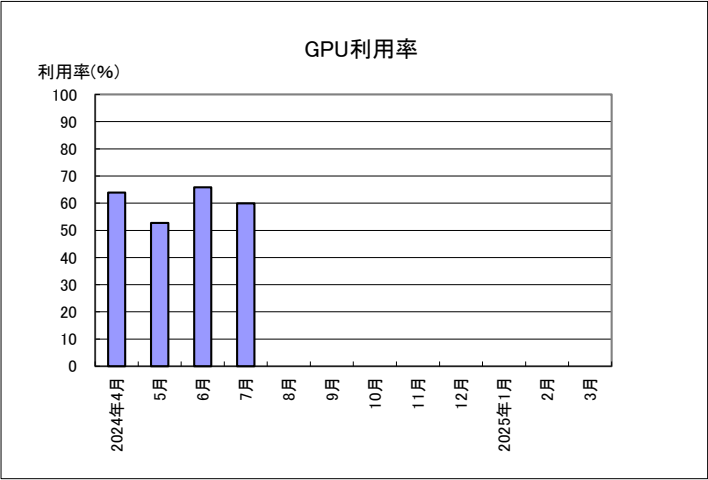
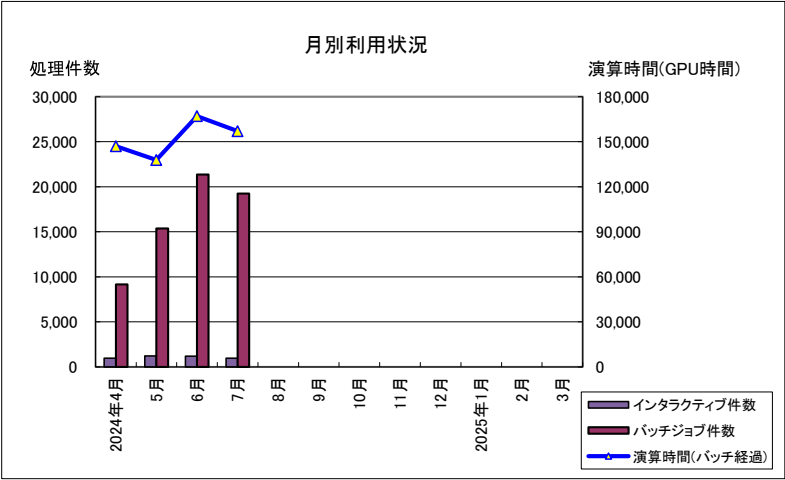
- ・試運転は、2021年5月14日より開始。正式サービスは、2021年8月2日より開始
- ・接続時間： ログイン時間の累計
- ・ログイン(実CPU)： コア時間単位
- ・2023年7月分は合計に含まない
- ・ノード利用数： インタラクティブおよびバッチジョブの経過時間を1ノードが100%動作したと仮定した場合の利用ノード数。
計算式＝1ヶ月のインタラクティブおよびバッチジョブ経過時間合計÷1ヶ月の稼動時間
- ・ノード利用率： サービスノードに対する利用率。 計算式＝ノード利用数÷サービスノード数×100



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		
2024年4月	981	9,153	508	147,090	229.9	63.9
5月	1,224	15,366	821	137,871	189.7	52.7
6月	1,205	21,363	521	167,041	237.0	65.8
7月	984	19,244	497	157,112	215.6	59.9
2023年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
2月	1,070	21,152	699	161,804	237.9	66.1
3月	1,248	29,077	464	167,323	246.4	68.4
合計	14,036	201,798	8,158	1,852,148		

- ・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7月分は合計に含まない
- ・GPU利用数： インタラクティブおよびバッチジョブの経過時間を1GPUが100%動作したと仮定した場合の利用GPU数。
計算式＝1ヶ月のインタラクティブおよびバッチジョブ経過時間合計÷1ヶ月の稼働時間
 - ・GPU利用率： サービスGPUに対する利用率。 計算式＝GPU利用数÷サービスGPU数×100



3. Ipomoea-01大規模共通ストレージシステム使用状況

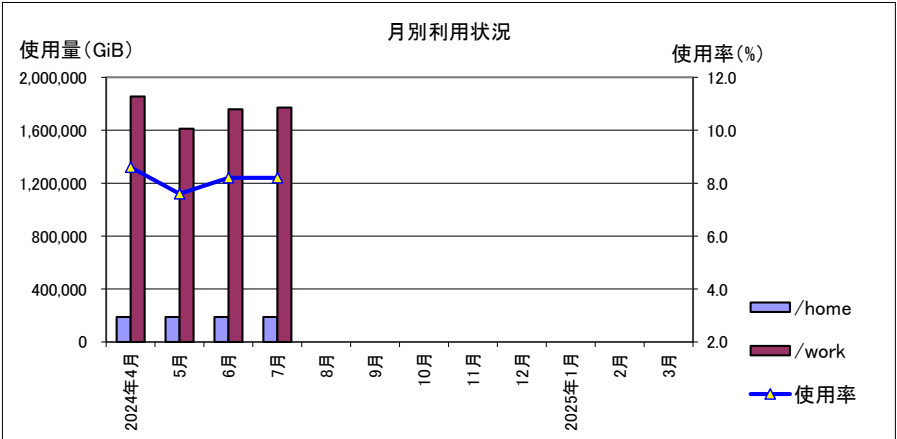
年月	登録者数	実利用者数	ログイン数	接続時間 [時間]	ログイン (実CPU)	ファイル使用量 [GiB]		使用率 (%)	実効容量 (GiB)
						/home	/work		
2024年4月	2,063	37	217	833	18.9	188,656	1,854,615	8.6	23,657,187.6
5月	2,052	37	159	802	24.4	189,159	1,612,688	7.6	23,657,187.6
6月	2,060	49	170	559	140.4	189,097	1,758,630	8.2	23,657,187.6
7月	2,148	45	207	1,688	241.5	189,063	1,770,802	8.2	23,657,187.6
2023年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
2月	2,252	30	137	405	25.6	209,334	1,690,637	8.0	23,657,187.6
3月	2,247	26	159	965	13.6	216,205	1,769,060	8.3	23,657,187.6
合計			2,148	9,577	682				

・接続時間：ログイン時間の累計

・ログイン(実CPU)：コア時間単位

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

・2023年7月分は合計に含まない



第 47 回 ASE 研究会

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 47 回 ASE 研究会 (2024 年 7 月 30 日)¹は, Keita Teranishi 博士² (Group Leader, Senior Scientist, Programming Systems, Oak Ridge National Laboratory (ORNL), USA) をお招きして, プログラミング環境, 性能評価等の話題を中心とした研究会を実施した。

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, 65 名の参加申込みがあり, 現地参加者は講演者も含め 16 名, オンラインで 27 名の参加者があった。

Teranishi 博士の講演は, プログラミング言語 Julia とその Accelerator 版である JACC を積極的に High-Performance Computing に活用していこうとする試みに関するものであり, 特に Fortran ユーザーには Julia/JACC は使いやすいはずなので, 是非試してみてほしいということであった。Teranishi 博士の講演スライドは下記から入手できるので, Fortran ユーザーは是非お読みいただきたい :

<https://www.cc.u-tokyo.ac.jp/events/ase/47/Teranishi.pdf>

また, 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³から視聴することができる。

表 1 第 47 回 ASE 研究会プログラム

16:00 - 16:05	Welcome
16:05 - 16:45	Keita Teranishi (Oak Ridge National Laboratory (ORNL), USA) JACC: Leveraging Performance Portability with the Just-in-Time Julia Language
16:45 - 17:10	Yohei Miki (The University of Tokyo) Performance evaluation of N-body codes on NVIDIA/AMD/Intel GPUs
17:10 - 17:35	Shinji Sumimoto (The University of Tokyo) Hierarchical, Hybrid, Heterogeneous Center-wide Computing using WaitIO
17:35 - 17:40	Closing

¹ <https://www.cc.u-tokyo.ac.jp/events/ase/47/47.php>

² <https://www.ornl.gov/staff-profile/keita-teranishi>

³ <https://www.youtube.com/watch?v=pLBRLkV7fX8>

グラフ表現学習のためのグラフゲート機構付き多層パーセプトロンの提案と有限要素法のサロゲートモデルとしての応用

中井 優, 奥田 洋司

東京大学

1. はじめに

グラフのノードやエッジに対する表現学習や分類・回帰を行うニューラルネットワークは Graph Neural Network (GNN) と呼ばれ, 近年盛んに研究開発が行われている。多くの GNN は GCN¹ などのグラフ畳み込み層を積み重ねることにより構成される。これらのグラフ畳み込み層は, 情報の伝播を近傍ノードに限定することで, グラフの構造を反映したノード間の相互作用を反映し, 特徴量を更新することができる。より広範なノードの作用を考慮して特徴量を抽出するには, より多くのグラフ畳み込み層を積み重ねることが必要である。他方で, GCN などのグラフ畳み込み層では, 総数を増やすことにより性能低下を生じてしまう過平滑化 (over-smoothing)² と呼ばれる問題が発生することが知られていた。この現象は, 各ノードの特徴ベクトルが定常ベクトルに収束してしまうことにより, ノードの見分けが付かなくなってしまうことが原因であるとされている³。この問題によって従来の GNN モデルは, 一定以上遠くのノードの情報を考慮することができず, それにより精度も頭打ちとなってしまう課題を抱えていた。

過平滑化を解決するための手段はこれまでいくつかの研究で提案されてきた。初期の試みとして Residual Connection⁴を導入する手法が提案されたが, この手法は過平滑化の始まるタイミングを遅らせることはできるものの, その発生を防止することはできないことが Huang らにより指摘されている⁵。同じく Huang らによる DropEdge では入力グラフのエッジをランダムに切り落とすことにより汎化性能の獲得を目指すアプローチが, JKNet⁶では各層の出力を集約して最終層に渡すことにより異なるスケールの特徴を抽出するアプローチが提案された。これら 2 つのアプローチは一定の効果を示すものの, 層数が深くなることにより性能低下に対する抑制効果が低下し

¹ Kipf, T., & Welling, M. (2017). Semi-Supervised Classification with Graph Convolutional Networks. In Proceedings of the 5th International Conference on Learning Representations.

² Li, Q., Han, Z., & Wu, X.M. (2018). Deeper Insights into Graph Convolutional Networks for Semi-Supervised Learning. In Proceedings of the 32nd AAAI Conference on Artificial Intelligence (pp. 3538-3545). AAAI Press.

³ Wang, G., Ying, R., Huang, J., & Leskovec, J. (2019). Improving Graph Attention Networks with Large Margin-based Constraints. CoRR, abs/1910.11945.

⁴ He, K., Zhang, X., Ren, S., & Sun, J. (2016). Deep Residual Learning for Image Recognition. 2016 IEEE Conference on Computer Vision and Pattern Recognition (CVPR), 770-778.

⁵ Huang, W., Rong, Y., Xu, T., Sun, F., & Huang, J. (2020). Tackling Over-Smoothing for General Graph Convolutional Networks. CoRR, abs/2008.09864.

⁶ Xu, K., Li, C., Tian, Y., Sonobe, T., Kawarabayashi, K., & Jegelka, S. (2018). Representation Learning on Graphs with Jumping Knowledge Networks. CoRR, abs/1806.03536.

てしまうことが指摘されている⁷。このように過平滑化を解決するための様々なアプローチが提案されてきたものの、いまだに本質的な問題解決には至っていない。

過平滑化によって十分に離れたノードの情報を考慮することができない課題は、特に大規模なグラフを対象とするタスクにおいて大きな障壁となる。その一例として、有限要素法（FEM）による応力計算のサロゲートモデルへの応用例が挙げられる。

FEM とは、構造解析などにおいて利用される数値解析手法の 1 つである。FEM の計算量は節点数や要素数の増加に伴い増加するため、サロゲートモデルを構築・利用することで計算の高速化を目指す研究が過去に行われてきた。Amir et al. (2021) はメッシュデータとその各節点に対して FEA 計算により求めた全体剛性マトリクスに基づく特徴量を入力として与え、複数層の GCN によって FEM 計算における平衡方程式を求解する手法を提案した⁸。この研究では、離れたノードの影響を加味するためには GCN の層数を増やす必要がある一方で、8 層を超えたあたりからいわゆる過平滑化を起こして性能低下を生じてしまうという問題があった。そこで、同研究では全ノードの特徴量から PCA によりグローバルな特徴を抽出することで、離れたノードの影響を考慮できるようにするアプローチを採用した。他方で、この方法はノードの位相的な情報を無視した情報の伝播を行ってしまう。

本研究は、この過平滑化の問題を根本的に解決するための新たな手段を提供することを目的とする。過平滑化を生じることなく多層化を達成することによって高い精度を達成し、大規模なグラフの効果的な特徴表現を可能にすることを目指した。さらに、この大規模なグラフの処理における優位性を活用して、FEM における応力計算を高い再現性で実現することを目指した。また本研究では、後述の考察において過平滑化の要因と考えられる GNN の構造的な問題を指摘し、本研究が提案する新しいモデル構造がその問題の解消に成功していることを定式的に裏付けた。

本研究における実験の結果、提案手法は GNN のノード分類のベンチマークにおいて最も高い精度を達成し、State-of-the-Art を記録した。また FEM のサロゲートモデルとしても高い有効断尾を確認した。さらに、本研究における実験の結果は、提案手法が過平滑化の問題を克服して、層数に対して単調に精度が向上することを定量的に裏付けた。

2. 関連研究

Transformer⁹をベースとする手法が、深層学習の多くの分野で高い性能を発揮している。CNN や RNN などの対象とするドメインに対してその特徴を抽出するのに有効な inductive bias¹⁰を与

⁷ Chen, M., Wei, Z., Huang, Z., Ding, B., & Li, Y. (2020). Simple and Deep Graph Convolutional Networks. CoRR, abs/2007.02133.

⁸ Amir, H., Koichi, S., Tsuguchika, T., & Hiroshi, O. (2021). Surrogate Model for Structural Analysis Simulation using Graph Convolutional Network (Unrefereed Workshop Manuscript). Fujitsu Ltd., Fujitsu Ltd., Fujitsu Ltd., The University of Tokyo.

⁹ Vaswani, A., Shazeer, N., Parmar, N., Uszkoreit, J., Jones, L., Gomez, A., Kaiser, L., & Polosukhin, I. (2017). Attention is All you Need. In NIPS (pp. 5998–6008).

¹⁰ Battaglia, P., Hamrick, J., Bapst, V., Sanchez-Gonzalez, A., Zambaldi, V., Malinowski, M., Tacchetti, A., Raposo, D., Santoro, A., Faulkner, R., Gülçehre, Ç., Song, H., Ballard, A., Gilmer, J., Dahl, G., Vaswani, A., Allen, K., Nash, C., Langston, V., Dyer, C., Heess, N., Wierstra, D., Kohli, P., Botvinick, M., Vinyals, O., Li, Y., & Pascanu, R. (2018). Relational inductive biases, deep learning, and graph networks. CoRR, abs/1806.01261.

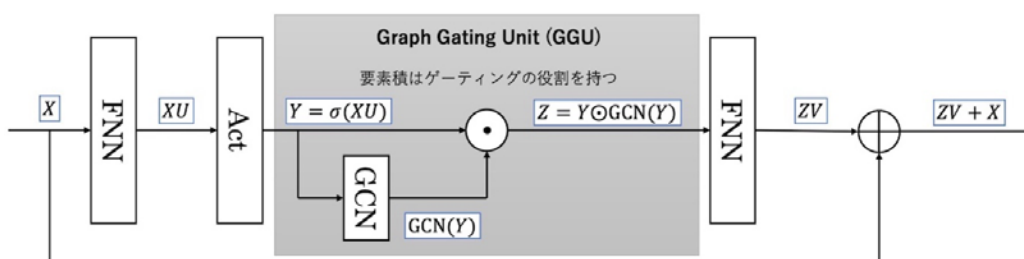
えるネットワークを直接利用するアプローチから、Transformer や gMLP¹¹ のように MLP をベースとして付加的にゲートの機構を利用するアプローチへのある種のパラダイムシフトとも捉えることができる。当初は Transformer に利用された Multi-Head Self Attention の持つ inductive bias がこの性能向上に寄与したと考えられ、実際 GNN の分野においても Graph Transformer Networks¹² などの Multi-Head Self Attention を利用した手法が提案された。他方で、この手法の性能向上は特定のタスクに限定された。gMLP を提案した Liu らは、この Transformer や gMLP の優位性は、Multi-Head Self Attention の与える inductive bias ではなく、MLP とそれに対するゲートの機構にあることを指摘した。

本研究においては、これらのゲートの役割を「対象ドメインに有効な inductive bias を与えること」と再定義し、MLP に対してグラフに有効な inductive bias を持つゲート機構を付加した新たなネットワーク構造を提案した。

3. 提案手法

本論文では、MLP をベースとして、Graph Gating Unit (GGU) と名付けた GCN によるゲート構造を付加した新しいネットワークである、Graph Gating Multi-Layer Perceptron (g2-MLP) を提案した。

提案手法のアーキテクチャは、GCN ではなく Feedforward Neural Network (FNN) の積み重ねである Multi-Layer Perceptron (MLP) をベースとする。各層は第 1 図に示すような、各ノードの特徴を独立に 2 層の FNN と勾配消失・爆発を抑制するための Residual Connection からなる基本構造と、ノード間の相互作用を考慮するための GGU から構成される。GGU では、1 層の GCN の入出力の要素積を計算することで、GCN によるゲーティング構造を実現している。GCN はグラフの構造を反映しながらノード間の相互作用を考慮した表現学習を行うことができるため、このゲート構造によりグラフに有効な特徴を抽出することを図っている。



第 1 図: 1 層の g2-MLP のネットワーク構造。

第 1 図で示した構造を複数層積み重ねた構造を、新たに g2-MLP と名付けて提案した。

4. 数値実験

¹¹ Li, Q., Han, Z., & Wu, X.M. (2018). Deeper Insights into Graph Convolutional Networks for Semi-Supervised Learning. In Proceedings of the 32nd AAAI Conference on Artificial Intelligence (pp. 3538-3545). AAAI Press.

¹² Yun, S., Jeong, M., Kim, R., Kang, J., & Kim, H. (2019). Graph Transformer Networks. In NeurIPS (pp. 11960-11970).

本研究では、PPI データセット¹³と新たに作成した FEM データセットを用いて、既存手法と g2-MLP の性能を比較した。PPI データセットはノード分類の代表的なデータセットであり、タンパク質から構成される 24 のヒト組織について、タンパク質の特徴量を入力として各タンパク質における 121 の遺伝子オントロジーを予測するタスクである。本研究において新規に作成したデータセットである FEM データセットは、複数の節点から構成される 229 の有限要素メッシュについて、各節点の座標情報を入力として、各節点における応力を予測するタスクである。

PPI データセットでは、比較対象とした全ての手法においてその分類精度が論文中で示されていたため、提案手法による実験の結果と、各論文で提示されている結果との間で精度の比較を行った。なお評価指標としては、先行研究に合わせて Micro-F1 値を採用した。FEM データセットでは、比較対象のモデルとして GCN と GAT¹⁴のそれぞれのモデルについて、学習・推論を行った。評価指標としては、回帰のタスクであることから平均二乗誤差を採用した。

5. 結果

第 1 表に示すように、提案手法である g2-MLP は 99.71%の最高精度を達成して、State-of-the-Art を更新することに成功した。既存手法の多くが 5 層から 9 層で高い精度を発揮しているのに対して、本手法は 20 層の構造で最も高い精度を達成した。

第 1 表: PPI データセットにおける精度の比較

Model	Micro-F1 Score
g2-MLP (20 層)	99.705(14)
GCNII (9 層)	99.56(2)
Cluster-GCN (5 層)	99.36
GaAN (5 層)	98.71(2)
GraphSAINT (5 層)	98.10(40)
JKNet (3 層)	97.60(7)
GAT (2 層)	97.30(2)
GraphSAGE (2 層)	61.2

さらに次の第 2 表で示すように、g2-MLP は FEM データセットでも最も高い精度を示した。

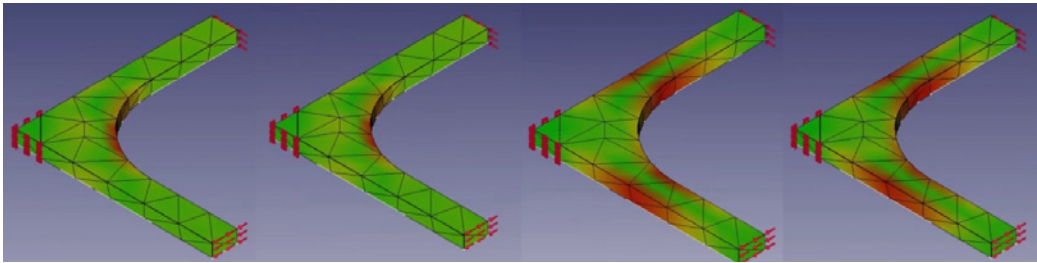
第 2 表: FEM データセットにおける精度の比較

Model	Displacement	Stress
g2-MLP	0.637(286)	0.879(370)
MLP	0.857(160)	1.481(6)
GAT	0.971(145)	1.598()
GCN	0.989(11)	1.602(5)

¹³ Hamilton, W., Ying, R., & Leskovec, J. (2017). Inductive Representation Learning on Large Graphs. CoRR, abs/1706.02216.

¹⁴ Veličković, P., Cucurull, G., Casanova, A., Romero, A., Liù, P., & Bengio, Y. (2017). Graph Attention Networks. In ICLR 2018.

テストデータの1つについて、各モデルによる応力の予測結果を第2図に図示した。

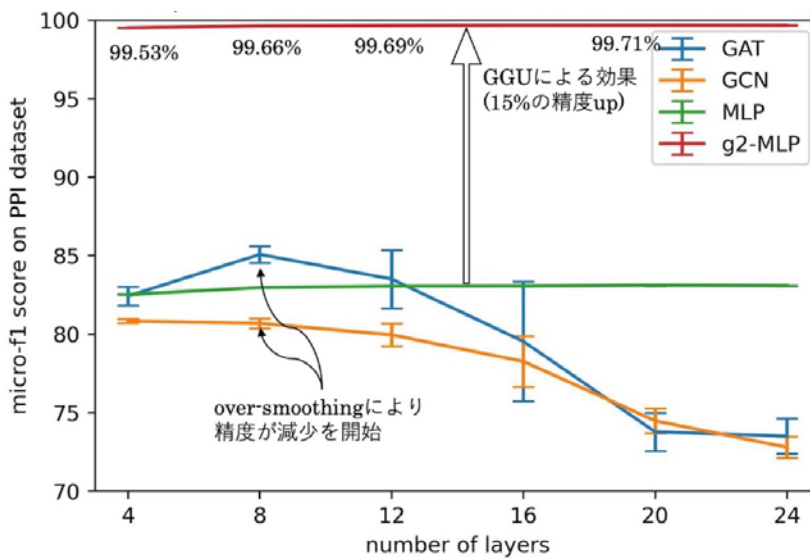


第2図: 左から GCN, GAT, FEM (正解データ), g2-MLP によるミーゼス応力の推論結果

g2-MLP の推論結果では、他のモデルと比較してもより高い再現性で FEM の計算結果を近似できていることが定性的に確認できる。例えば、GCN や GAT には予測することのできていないフィレット部分外側やその裏側における応力を予測できていることが確認された。

6. 考察

層数を変えた時の各モデルの分類精度の変化を第3図にプロットした。

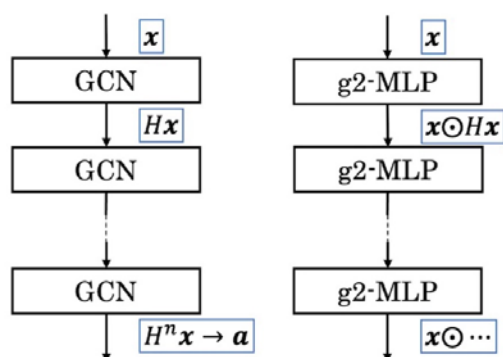


第3図: PPI データセットにおける層数と精度の関係

GAT や GCN では4から8層で精度が低下するのに対して、g2-MLP は20層に至るまで層数に対して単調に精度を向上することが確認できる。この結果から、g2-MLP は確かに過平滑化の問題を解消できていると結論付けられる。

このように g2-MLP が過平滑化の問題を解消することができたのは、GCN と g2-MLP の構造上の違いが理由であると考察した。1次元の入力ベクトル $\mathbf{x}$ を GCN と g2-MLP のそれぞれに入力した時の特徴ベクトルの更新の様子は、グラフの形状に依存するある行列を H として、第4図のように

表される。



第4図: GCN と g2-MLP における入力特徴ベクトルの更新の様子

左側の GCN の計算からは、 $H^n x$ という出力が得られるが、このベクトルは十分大きい n に対して行列 H の絶対値最大固有値に対応するある固有ベクトルに収束することが線形代数のべき乗法によって示される。すなわち、層数を増やすことにより入力はその特徴に依存しないベクトルに収束し、入力時の情報を失ってしまうことになる。他方で右の g2-MLP においては、行列 H はゲート内部にあるため H^n を生じず、出力においても入力特徴の情報を失うことなく変換を行うことができる。

このように g2-MLP は、定式的に過平滑化の原因と考えられる特徴更新の問題を原理的に解消し、確かに過平滑化を起こさずに層数に対して精度を向上できることを定量的に確認することができた。

7. 結論・課題

本研究では、過平滑化の問題を解消して高い精度を達成するため、また GNN における大規模なグラフの処理を可能にするための手法として、g2-MLP と名付けた手法を提案した。g2-MLP は PPI ベンチマークにおいて既存手法を上回る精度を達成し、State-of-the-Art を更新することに成功した。また g2-MLP は従来の GNN モデルの構造的問題を解消し、分野の課題であった過平滑化の問題を根本から解消して多層化を実現することに成功した。これらの結果は、今後 GNN モデルの利用・開発において本手法が新たなベースラインとなりうる可能性を示唆する。また FEM のサロゲートモデルとしても、高い有効性が確認できた。

今回はノード分類に焦点をおいて研究を行ったが、グラフそのものを分類するグラフ分類への応用には、研究の余地があると考えられる。いくつかのグラフ分類の実験における g2-MLP の推論結果では、ノード分類ほど高い効果を確認することはできなかった。このようなタスクにおいては、g2-MLP のより適切な利用方法を画策していく必要があると考えられる。

環境と結合したKitaev模型における磁場効果

福井 毅 勇

東京大学工学系研究科物理工学専攻

1. はじめに

本研究では、量子スピン液体状態を厳密な基底状態として持つ Kitaev 模型が外部環境と結合した際に生じる、新たな量子スピン液体状態に対する磁場の効果を明らかにする [1]。通常の磁性体では、熱力学第 3 法則に従い絶対零度でエントロピーをゼロにするために、低温で磁気秩序状態への相転移が起こる。ところが、**フラストレーション**の大きな量子スピン系では、**量子スピン液体**と呼ばれる非自明な非磁性状態をとることでエントロピーの解放を実現する場合がある。量子スピン液体とは、強いフラストレーションと量子力学的な揺らぎによって磁気秩序相への相転移が妨げられた、従来型の対称性の自発的破れが存在しない特殊な基底状態である。一部の量子スピン液体では、トポロジカル秩序と呼ばれる非従来型の秩序が存在し、それに付随する分数励起を用いることにより外乱に対して強固な**トポロジカル量子計算**を実現できるため、純粋科学だけでなく応用面からも注目を集めている。2006 年に提案された **Kitaev 模型** [2]は、2 次元ハニカム格子上で定義された量子スピン模型であり、ボンドに依存する異方的な相互作用 (Kitaev 型相互作用) による強いフラストレーションを持つにもかかわらず、基底状態が厳密に求まり、さらに、その基底状態が量子スピン液体状態となる。2 次元以上の模型で、基底状態が量子スピン液体状態であることを厳密に示すことができる模型は非常に稀である。2009 年に、この模型に現れる特徴的な Kitaev 型相互作用が一部のスピン軌道 Mott 絶縁体と呼ばれる物質群において実現することが指摘されてから [3]、理論と実験の双方からの精力的な研究により候補物質が多く発見され、その物性が解明されてきた。

このように、精力的に研究されてきた Kitaev 模型であるが、外部環境との結合の効果はあまり明らかにされていない。トポロジカル量子計算の応用を見据えると、実際の量子デバイスにおいては量子状態の読み出し・書き込みや基盤の効果等によって不可避免的に外部環境との結合が重要になるため、**環境との相互作用による散逸**の効果の解明は重要である。環境と相互作用する開放量子系の理論的な取り扱いは一一般には困難だが、計算手法の 1 つとして散逸の効果を取り入れた有効ハミルトニアンを用いる方法が知られており、そこでは有効ハミルトニアンが**非エルミート**となる。非エルミート系の物理は、最近ではトポロジーの観点からも注目を集めており、エルミート系では現れない相転移やトポロジカル相の実現が様々な系において精力的に調べられている。なかでも興味深い例の 1 つとして、量子スピン液体を基底状態を持つ Kitaev 模型における非エルミート効果が提案された。環境と結合した Kitaev 模型の非エルミート有効模型では、相互作用の結合定数が複素数に拡張される。通常の Kitaev 模型のギャップレス相では、量子スピン液体状態における分数励起である遍歴 Majorana 粒子の分散が Dirac 点を持つが、非エルミートの場合は Dirac 点が Fermi アークで繋がった 2 つの**例外点**に分裂し、例外スピン液体と呼ばれる非エルミート系固有の新たなスピン液体状態が現れる [4]。一方、エルミートな Kitaev 模型では、磁場の効果が摂動論を用いて議論されており、Majorana 励起が Dirac 的な分散を持つギャップレス相では、磁場により Dirac 点にギャップが開き、トポロジカルに非自明な状態になることが示

されている [1]。しかし、非エルミートな場合について、これらの磁場の効果は明らかにされていない。

そこで本研究では、非エルミート Kitaev 模型におけるこれらの磁場の効果を摂動論を用いて調べる [1]。非エルミート模型特有の複素エネルギー固有値に対する磁場の効果をギャップの大きさ、例外点のトポロジー、表皮効果の観点から総合的に明らかにするのが本研究の目的である。

2. 模型

本研究では、磁場中の Kitaev 模型に対する散逸の効果を非エルミート有効相互作用として取り入れる。模型の模式図を第 1 図に示す。磁場中の Kitaev 模型のハミルトニアンは、3 次摂動の範囲で

$$H_0 = - \sum_{\langle i,j \rangle_\mu} J_\mu \sigma_i^\mu \sigma_j^\mu - \tilde{h} \sum_{\langle\langle i,j,k \rangle\rangle_{\mu,\nu,\lambda}} \sigma_i^\mu \sigma_j^\nu \sigma_k^\lambda$$

である。 J_μ ($\mu = x, y, z$) は Kitaev 模型の磁気相互作用、 $\tilde{h}$ は 3 次摂動による有効磁場である。ここで、環境との結合の効果を Lindblad 方程式で取り扱うことを考えるが、量子ジャンプが起きない範囲内の有効ハミルトニアンとして、ゼロ磁場の先行研究 [4]を参考に、

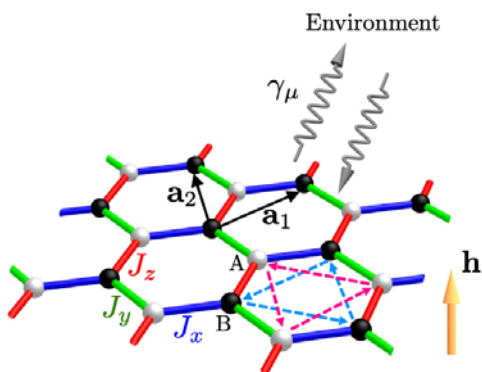
$$H_{\text{eff}} = H_0 - \frac{i}{2} \sum_{\langle i,j \rangle_\mu} \gamma_\mu \sigma_i^\mu \sigma_j^\mu \\ = - \sum_{\langle i,j \rangle_\mu} G_\mu \sigma_i^\mu \sigma_j^\mu - \tilde{h} \sum_{\langle\langle i,j,k \rangle\rangle_{\mu,\nu,\lambda}} \sigma_i^\mu \sigma_j^\nu \sigma_k^\lambda$$

という静的な非エルミート有効ハミルトニアンが導出できる。ここで、 $G_\mu = J_\mu + i\gamma_\mu = |G_\mu|e^{i\phi_\mu}$

は散逸の効果をとり入れた複素結合定数である。ここで、スピンを Majorana 粒子を用いて表現すると、基底状態がフラックスフリー状態であるという仮定を用いて、

$$H_{\text{eff}} = i \sum_{\langle i,j \rangle_\mu} G_\mu c_i c_j - i\tilde{h} \sum_{\{i,j\}} c_i c_j$$

という自由 Majorana 粒子のハミルトニアンに還元される。第 2 項の和は、第 1 図の破線矢印のようにとる。



第 1 図: 模型の模式図

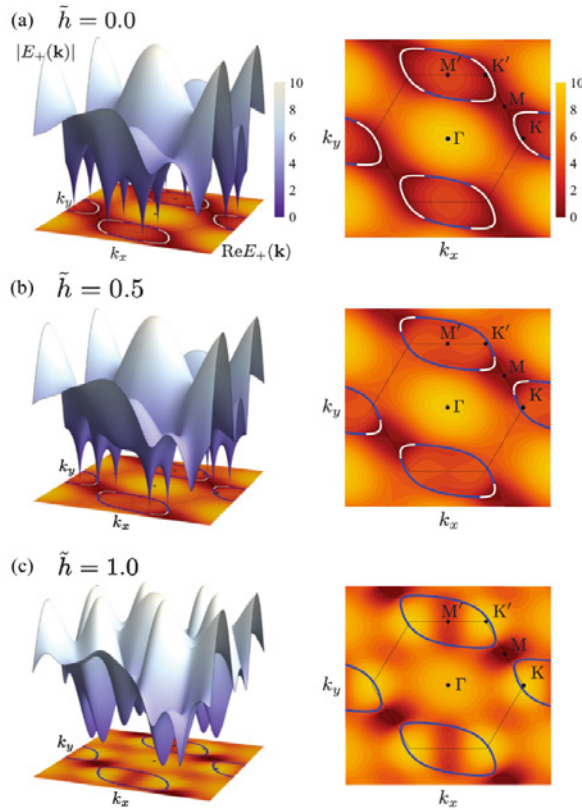
外部環境と結合した Kitaev 模型。Kitaev 模型は 2 次元ハニカム格子上に定義され、青、緑、赤色のボンド上で量子スピンの x, y, z 成分がそれぞれ相互作用している。 γ_μ ($\mu = x, y, z$) は外部環境との結合定数。水色とピンク色の破線矢印は 3 次摂動によって現れる Majorana 粒子間の次近接ホッピングの向きを表す。右のオレンジ色の矢印は、一様磁場 $\mathbf{h}$ の向きを表す。

3. 結果 1: 臨界有効磁場

まずは、Majorana 粒子の分散関係にギャップが開く磁場である臨界有効磁場 $\tilde{h}_c$ の数値的な見積もりを行った。磁場によってギャップが開く様子の典型例を第 2 図に示す。上記のハミルトニアンを Fourier 変換すると、副格子が 2 つあることに対応して、Majorana Bloch ハミルトニアンが 2 次の正方行列となる。その固有値は

$$E_{\pm}(\mathbf{k}) = \pm \sqrt{\varepsilon(\mathbf{k})\varepsilon(-\mathbf{k}) + \Delta(\mathbf{k})^2}$$

与えられる。ハミルトニアンが非エルミートであることに対応して、この固有値は複素数である。第2図では、この複素エネルギー固有値の絶対値を左図の3D図で示し、左図の底面と右図に複素固有値の実部を示している。白線と青線は、複素エネルギーの実部がゼロとなる Fermi アークと虚部がゼロとなる i-Fermi アークをそれぞれ表している。図から見て取れる通り、 $\tilde{h}_c = 0.0$



第2図: Majorana 粒子の分散関係の有効磁場依存性
系のパラメータは $G_x = 2.0, G_y = 1.0, G_z = 2.5e^{i\pi/3}$ 。左の 3D 図は複素エネルギー固有値の絶対値、左図の底面と右図は実部を示している。白線と青線は、フェルミアークと i-フェルミアークをそれぞれ表す。

と $\tilde{h}_c = 0.5$ の場合にはギャップレスになっており、 $\tilde{h}_c = 1.0$ ではギャップが開いている。非エルミートの場合には有限の有効磁場で Majorana 粒子の分散にギャップが開くことが分かる。実際に、ギャップが開く臨界有効磁場を数値的に見積もると $\tilde{h}_c \cong 0.78$ である。

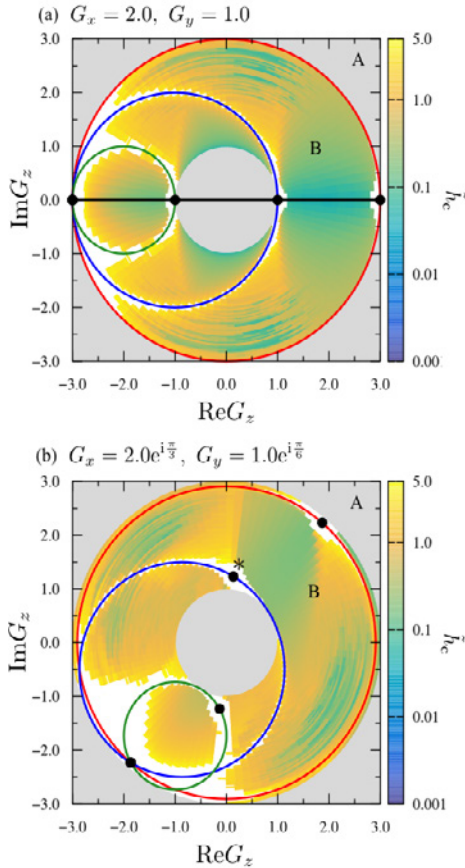
この臨界有効磁場 $\tilde{h}_c$ の値は系のパラメータに依存する。そこで、 $\tilde{h}_c$ の値を数値的に見積もったものを第3図に示す。図では、 G_x と G_y の値を固定し、複素 G_z 平面において $\tilde{h}_c$ をプロットした。計算においては各 G_z について並列化を行い、 500×500 $\mathbf{k}$ メッシュを用いた。ギャップの判定は、 $|E_{\pm}(\mathbf{k})|^4$ の最小値が 5.0×10^{-4} を超えるかどうかを基準にしている。これは、少々緩い判定基準であるが、第2図に見て取れるようにギャップが閉じている例外点において分散関係が波数のルートで立ち上がっている上に、磁場によって位置が変化するため、数値的にギャップを検出するのが非常に大変であるからである。図から、一般に非エルミートな場合には有限の有効磁場で系にギャップが開くことが分かる。これは、無限小の磁場で Majorana 粒子の

4. 結果 2: 磁場誘起トポロジカル転移

この系におけるギャップが閉じている点は、非エルミート系の文脈で例外点と呼ばれ、系の複

数の固有ベクトルが縮退する点であり、今の場合は、複素エネルギー固有値 $E_{\pm}(\mathbf{k}) = \pm\sqrt{\varepsilon(\mathbf{k})\varepsilon(-\mathbf{k}) + \Delta(\mathbf{k})^2}$ のゼロ点に対応する。よって、例外点は複素エネルギー固有値の位相の特異点となっているため、各例外点について、

$$W = \oint \frac{d\mathbf{k}}{2\pi i} \nabla_{\mathbf{k}} \ln \det[H(\mathbf{k}) - E(\mathbf{k}_{\text{EP}})]$$



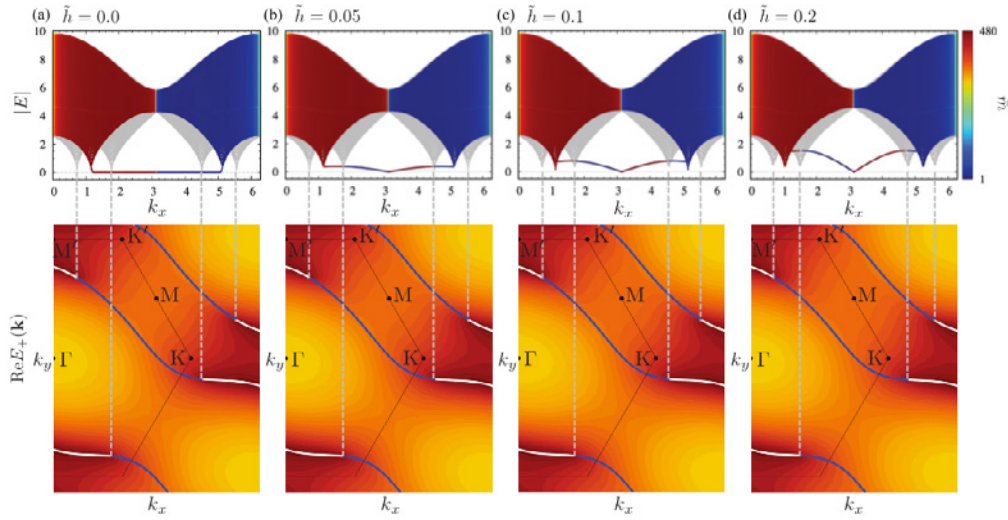
第3図: 複素 G_z 平面における臨界有効磁場 G_x と G_y が図中の値に固定している。灰色の領域はゼロ磁場ですでにギャップが開いている A 相、白い領域は 5.0 までギャップが開かなかった領域。青、緑、赤色の線はギャップが開かない領域の解析解を示している。黒色の点は $\varepsilon(\mathbf{k}) = \varepsilon(-\mathbf{k}) = 0$ が同じ波数で満たされるパラメータ。

いこと、そして、非エルミート表皮効果が起きる場合は、精度の担保のために倍精度を超えて 4 倍精度の計算を行う必要があることである。非エルミート表皮効果は非エルミート系特有の現象であり、系に開放境界条件を課した際にマクロな数の固有状態が系の端に局在する。これにより、

として例外点周りを反時計回りに 1 周する線積分によって巻き付き数を定義することができる。ここで、 $H(\mathbf{k})$ は Majorana Bloch ハミルトニアン、 $E(\mathbf{k}_{\text{EP}})$ は例外点 $\mathbf{k}_{\text{EP}}$ におけるエネルギー固有値である。この定義にそって例外点の巻き付き数を計算すると、第3図の B 相の青、緑、赤色の線上以外の領域において、磁場印加によってギャップが開くまでは例外点は巻き付き数 $W = \pm 1$ をとる。青、緑、赤色の線上において、黒点以外のパラメータにおいては磁場によってギャップが開くことがないため、磁場に依らず各例外点が巻き付き数 $W = \pm 1$ をもつ。さらに、黒点で示されたパラメータにおいては、 $W = \pm 1$ をもつ例外点に加え、 $\varepsilon(\mathbf{k}) = \varepsilon(-\mathbf{k}) = 0$ を満たす例外点は、ゼロ磁場で $W = \pm 2$ をもち、磁場を印加するとある磁場で $W = 0$ へと例外点の巻き付き数のトポロジカル転移が起きることを見出した。また、トポロジカル転移が起きる有効磁場の値の解析的表式を導出した。これは、磁場の印加によって例外点の巻き付き数が変化するトポロジカル転移の数少ない例となっている。

5. 結果 3: 非エルミート表皮効果

ここまでの結果は、系に周期境界条件を課して Fourier 変換を行った表示による計算であったが、ここでは端のある系を考え、数値対角化による計算を行う。具体的には、系の上下にジグザグ開放端を設け、横方向には周期性を課したまま Fourier 変換を行い、縦方向には開放境界条件を課して対角化計算を行う。この計算には、スーパーコンピュータによる計算が重要であることに言及しておく。理由は主に 2 つあり、下で述べる端状態の局在方向が入れ替わる波数点の位置は系のサイズを大きくとらないと収束しないこと、そして、非エルミート表皮効果が起きる場合は、精度の担保のために倍精度を超えて 4 倍精度の計算を行う必要があることである。非エルミート表皮効果は非エルミート系特有の現象であり、系に開放境界条件を課した際にマクロな数の固有状態が系の端に局在する。これにより、



第4図: 磁場の印加による開放系のスペクトルと波動関数の平均位置の変化

G_x と G_y を固定している。灰色の領域はゼロ磁場ですでにギャップが開いている A 相、白い領域は 5.0 までギャップが開かなかった領域。青、緑、赤色の線はギャップが開かない領域の解析解を示している。黒色の点は $\varepsilon(\mathbf{k}) = \varepsilon(-\mathbf{k}) = 0$ が同じ波数で満たされるパラメータ。

系の端から局在長を超える程度の系の内部において、固有ベクトルの精度が著しく悪くなってしまい、倍精度を超えた精度が必要になる。4 倍精度の対角化は、必要なメモリも計算時間も倍精度の時より大きく増大するため、スーパーコンピュータにおける実行が必要不可欠である。本研究では、4 倍精度の対角化計算コードとして公開されている QEISPACK [5]を用いた。

先行研究 [4]において、ゼロ磁場の場合に非エルミート表皮効果が起こる条件が調べられている。そこで、本研究においては、ゼロ磁場で表皮効果が起こる場合と起きない場合のそれぞれについて、磁場印加の効果を調べた。まず、ゼロ磁場で表皮効果が起きない場合では、磁場の印加とともに表皮効果が誘起されることを数値的に明らかにした。これは磁場の印加とともに、系のポイントギャップトポロジが変化し、開放境界条件のスペクトルが複素エネルギー平面において有限の面積を囲むように変形することで理解できる。次に、ゼロ磁場ですでに表皮効果が起こるパラメータにおける磁場によるスペクトルと波動関数の平均位置の変化を第4図に示す。ここでは、 $G_x = 2.0e^{i\pi/3}$, $G_y = 1.0e^{i\pi/6}$, $G_z = 2.5$ にパラメータを固定している。 x 方向に周期境界条件を課し、4 倍精度対角化計算により得られた複素スペクトルの絶対値の波数 k_x 依存性をプロットしている。 y 方向に開放境界条件を課した場合の結果について、波動関数の平均位置

$$\tilde{m} = \sum_{m=1}^M m |\psi(k_x, m)|^2$$

をカラープロットで示している。ここで、 m は y 方向のサイト位置を示す離散座標である。また、 y 方向にも周期境界条件を課した結果を灰色で示す。また、下のパネルには両方向に周期境界条件を課して計算した複素エネルギーの実部の等高線プロットを示している。灰色の点線は、上のパネルの周期境界条件の結果に現れる例外点と下のパネルの対応する例外点を繋いでいる。開放境界条件の結果のみに現れているゼロエネルギー付近のモードは端状態（正確に言うと、エルミート極限の端状態に接続する状態）を示している。まず、(a)のゼロ磁場の場合には、開放境界条

件の全ての固有値が $k_x = \pi$ を境に赤色と青色になっており、これは、ゼロ磁場ですでに非エルミート表皮効果が起きているために全てのモードが系の両端に局在していることを示している。有限の磁場の場合には、バルクのモードの局在は大きく変化しないが、端状態の局在方向がある波数で切り替わっていることが分かり、サイズ依存性を注意深く調べてみると、この波数は灰色の点線で示されている周期境界条件のスペクトルの例外点に対応していることが分かる。これは、エルミートな場合の3次元 Weyl 半金属の表面に現れる表面 Fermi アーク状態に類似している。エルミートな3次元 Weyl 半金属では、バルクのスペクトルに現れる Weyl 点の2次元波数空間への射影をつなぐように表面 Fermi アークが存在し、磁場中で電子の表面モードがこの Fermi アークの終端で反対側の表面モードに切り替わる。本研究の結果は、この非エルミートかつ2次元版となっており、2次元非エルミート系と3次元エルミート Weyl 系の対応の一例を与えている。

6. まとめ

本研究では、非エルミート Kitaev 模型に対する磁場の効果を摂動論の範囲で明らかにした。特に、エルミートな場合とは異なり、例外点(=今の場合はギャップレス点)が有限の磁場でギャップアウトされること、特に、磁場の強さによらずギャップが開かないパラメータ領域が存在することを明らかにした。また、このような領域の特定のパラメータにおいては、磁場によって例外点の巻き付き数が増加するトポロジカル転移が起きることを見出した。さらに、開放境界条件を課した計算においては、ゼロ磁場で非エルミート表皮効果が起きないパラメータにおいては磁場の印加により表皮効果が誘起されること、ゼロ磁場で表皮効果が起きる場合は、表面モードの局在方向がバルクのスペクトルの例外点に対応する波数で切り替わるという現象を明らかにした。特に最後の表皮効果の計算においては、マクロな数の波動関数が系の端に局在してしまうために、倍精度計算では十分な精度で計算が行えないため、4倍精度以上の精度が必要であり、メモリの観点からも計算時間の観点からもスーパーコンピュータにおける計算が重要な役割を果たした。本研究の結果は、散逸が強い場合のギャップレス量子スピン液体の新たな安定化機構を示唆しており、また、散逸によって系の表面状態を制御できる可能性も示している。本研究は、開放量子系における量子スピン液体の物理の新展開の扉を開くものであり、今後は、3次元量子スピン液体や Kitaev 量子スピン液体以外の量子スピン液体における散逸がもたらす興味深い現象の探索を続けたい。

参 考 文 献

- [1] K. Fukui, Y. Kato, and Y. Motome, Phys. Rev. B **110**, 024429 (2024).
- [2] A. Kitaev, Ann. Phys. **321**, 2 (2006).
- [3] G. Jackeli and G. Khaliullin, Phys. Rev. Lett. **102**, 017205 (2009).
- [4] K. Yang, S. C. Morampudi, and E. J. Bergholtz, Phys. Rev. Lett. **126**, 077201 (2021).
- [5] Y. Hanada, QEISPACK, <https://github.com/hanada-yasutaka/QEISPACK>

タンパク質ベースの材料における微視的な熱輸送特性

Tingting WANG

名古屋大学理学研究科

1. Introduction

The thermal transport properties of proteins are intricately linked to their structures and dynamic behavior. Advances in computational simulation techniques, such as the normal mode approach and molecular dynamics (MD)¹⁻⁴ based on the Irving-Kirkwood type formulation, have enabled us to explore the thermal transport properties of polymers, including proteins, at the atomic level. It's important to note that folded native proteins do not merely function as thermal conduits; they also operate as sophisticated molecular nanomachines within cells. While intrinsically disordered proteins behave differently, the molecular functions of globular proteins emerge primarily through the process of protein folding. Consequently, we are particularly interested in understanding the types of “communication” that occur through native contacts within folded proteins. We also anticipate that these processes may be related to specific patterns of intramolecular thermal transport, akin to vibrational energy transport, both of which are governed by the protein's structure and dynamics. However, the mechanisms by which vibrational energy and heat flow within protein molecules remain a topic of active debate.⁵⁻⁷ This is partly due to the inherent heterogeneity and anisotropy of proteins. Nonuniform energy flow occurs along the polypeptide chain and through non-bonded native contacts, resulting in varying transport efficiencies across different regions within the protein interior, where interactions such as van der Waals forces, electrostatic forces, and hydrogen bonding come into play. Therefore, it is essential to first grasp the fundamental properties of protein heat currents before delving deeper into the study of molecular functions in the context of thermal transport or vibrational energy transfer.

To quantitatively evaluate the competition between different thermal transport pathways—specifically, covalent bonds and non-bonded contacts—and various types of interactions within proteins, we introduced the concept of inter-residue thermal conductivity. This concept is based on the autocorrelation function of the inter-residue heat current between pairs of residues in non-bonded native contact. Utilizing equilibrium molecular dynamics (EMD) simulations and the Green-Kubo formula, we examined the inherent thermal transport properties through residue contacts in HP36.

2. Methods

2.1 Inter-residue heat current analysis

The site-selective heat/energy current analysis is based on the atomistic expression

of the heat/energy current for molecular system. The inter-atomic heat current between atoms i and j , denoted as $\mathbf{h}_{ij}$, can be expressed as:

$$\mathbf{h}_{ij} = (\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j) \left\{ \frac{1}{2} \mathbf{F}_{ij} \cdot (\mathbf{v}_i + \mathbf{v}_j) \right\}, \quad \mathbf{h} = \sum_{i < j} \mathbf{h}_{ij} \quad (1)$$

, where $\mathbf{h}$ gives the macroscopic heat current of the entire molecule, $\mathbf{F}_{ij}$ is the force acting on atom i from atom j , $\mathbf{r}_i(\mathbf{r}_j)$ and $\mathbf{v}_i(\mathbf{v}_j)$ are position vector and velocity of atom $i(j)$, respectively. It should be noted that the derivation of mathematical expression of the pairwise interatomic forces for macromolecules is not straightforward because their potential energy functions contain multibody terms. To explore possible relationships between thermal energy transport and molecular mechanism of protein functions, it would be helpful to introduce coarse grained expression than Eq. (1). Thus, we define the heat current between a pair of residues α and β , $(1, \dots, \alpha(\beta), \dots, N_r)$, expressed as:

$$\mathbf{h}_{\alpha,\beta} = \sum_{i \in \alpha} \sum_{j \in \beta} \mathbf{h}_{ij}, \quad (2)$$

where N_r is the total number of residues. By using the following quantity:

$$\Lambda_{\alpha,\beta} = \int_0^\infty \langle \mathbf{h}_{\alpha,\beta}(t) \cdot \mathbf{h}_{\alpha,\beta}(0) \rangle dt, \quad (3)$$

the inter-residue thermal conductivity, $\lambda_{\alpha,\beta}$, can be defined as:

$$\lambda_{\alpha,\beta} = \frac{1}{3(V_\alpha + V_\beta)k_B T^2} \int_0^\infty \langle \mathbf{h}_{\alpha,\beta}(t) \cdot \mathbf{h}_{\alpha,\beta}(0) \rangle dt = \frac{\Lambda_{\alpha,\beta}}{3(V_\alpha + V_\beta)k_B T^2} \quad (4)$$

, where $V_\alpha(V_\beta)$ is the volume of residue $\alpha(\beta)$, k_B is the Boltzmann constant, T is the absolute temperature. The angle brackets represent ensemble average. We used the VLDP (Voronoi Laguerre Delaunay Protein) method to calculate the volume of each atom, and the volume of each residue was calculated as a summation of the volume of the constituent atoms.

2.2 Equilibrium MD simulations

2.2.1 Protein model

For the analysis of thermal energy transport properties, we build a protein system of villin headpiece (HP36) based on the nuclear magnetic resonance (NMR) structure (PDB code: 1VII). The protonation states of all ionizable residues were kept in their standard states at pH = 7. After the protein molecule was solvated by a truncated octahedral box of TIP3P water molecules with 2 sodium and 4 chloride ions, the total number of atoms for the simulation box became 7589. Amber ff19SB force field was used for protein molecule. For calculations of long-range electrostatic interactions, the particle mesh Ewald (PME) method was used under the periodic boundary condition. A 9 Å distance cutoff was used to calculate the non-bonded particle-particle interactions. All MD simulations were performed by using the AMBER 19 program.

2.2.2 MD Simulations

Energy minimization of the system was performed through three-stage optimization for the positions of (1) hydrogen, (2) sidechain, and (3) mainchain atoms. After the energy minimization, we generated five different Maxwell-Boltzmann atomic velocity

distributions at $T = 0.1$ K. Each of them was used as an initial condition for the subsequent MD simulation during which the temperature was gradually increased from $T = 0.1$ to 300 K for 50 ps at constant volume with positional restraints imposed on the mainchain atoms. The equations of motion were integrated with a time step of 2.0 fs with the SHAKE constraints applied for the bonds involving hydrogen atoms.

For each branch of the five simulation runs, a *NVT* simulation followed at $T = 300$ K for 50 ps with keeping the same positional restraints, then another *NVT* simulation was conducted for 200 ps at $T = 300$ K with no positional restraints. Finally, isothermal-isobaric (*NPT*) simulation was performed for 700 ps at $T = 300$ K, $P = 0.987$ atm with Nose-Hoover thermostat and barostat.

Starting from each end point of the previous simulation runs, we continued an *NPT* MD simulation for 56 ns consisting of 50-ns, 1-ns, and 5-ns runs with time steps of 2.0, 0.5, and 0.5 fs, respectively. After the first segment of 50-ns, the SHAKE constraints were switched off for the protein. From the last 5-ns trajectory, 10 snapshots of atomic coordinates and velocities were extracted every 0.5 ns. Thus, we obtained 50 ($= 5 \times 10$) initial conditions, from each of which we performed constant volume, constant energy (*NVE*) MD simulations for 1 ns with a time step of 0.5 fs, while atomic coordinates and velocities were saved every 1.0 fs with the time points of velocity snapshots adjusted to those of atomic coordinates.

2.3 Classification of nonbonded residue-residue interactions

2.3.1 Interacting residue pairs

In this study, we constructed three different sets, L , M , and S , of non-bonded residue pairs: Dataset L was defined as residue pairs, (α, β) , with the closest interatomic distance, $r_{\min}(\alpha, \beta)$, ≤ 6 Å in at least one frame in the fifty *NVE* MD trajectories, while Dataset M (S) as those with $\langle r_{\min}(\alpha, \beta) \rangle \leq 6(4)$ Å, where the angle brackets represent the average of all frames appeared in the all trajectories. Accordingly, the number of pairs became 268, 157, and 104 for Dataset L , M , and S , respectively. Dataset S mainly contains residue pairs in non-bonded contact, while datasets M and L include weakly interacting residue pairs in addition to those in direct contact.

2.3.2 Interaction types

The residue-residue interaction types are classified into four types based on the protein structure that appeared in MD simulation trajectories: H-bonding, π stacking, electrostatic interactions between charged or polar residue, and hydrophobic interactions. H-bonded pairs, (α, β) s, were identified by the *cpptraj* module of AmberTools 19, with a geometric criterion, *i.e.*, the distance between atoms $X \in \alpha$ and $Y \in \beta$ is less than 3.0 Å and the angle $X-H \cdots Y$ or $Y-H \cdots X$ falls within the range of $145^\circ - 180^\circ$, where each of X and Y are either oxygen or nitrogen atoms. The π stacking interactions were identified in the NMR structure of HP36 using the RING3.0 server⁵¹. A relaxed distance threshold was applied, where the centroid-to-centroid distance between two aromatic rings was required to be within 7.0 Å. Any residue pairs not

labeled as “H-bonding”, “ π stacking”, or “electrostatic” were classified as “hydrophobic interactions”.

3. Results

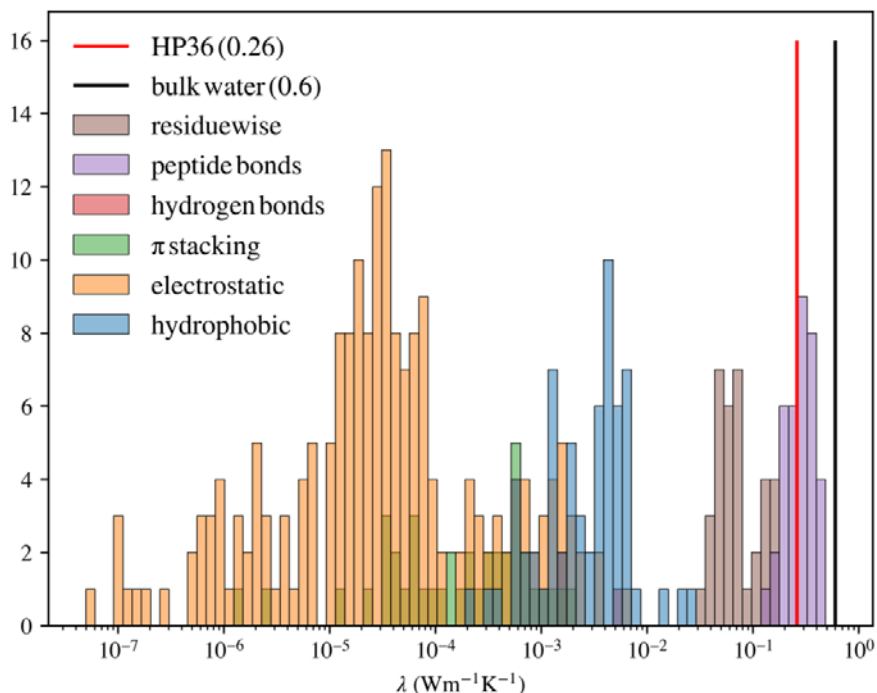


Figure 1: Histogram of occurrence frequency of local thermal conductivities, *i.e.*, $\lambda_{\alpha,\beta}$, for different types of residue pairs (α , β)s in dataset L. The residue-wise thermal conductivities, $\lambda_{\alpha,\alpha}(1, \dots, \alpha, \dots, N_r)$, and those between adjacent residue pairs $\lambda_{\alpha,\alpha+1}(1, \dots, \alpha, \dots, N_r - 1)$ were taken from the previous study for comparison.² Also, the value of the thermal conductivity of the entire HP36 molecule is indicated by the red dashed line, as well as that of bulk water by the black dashed line. It should be noted that we used V_α , instead of $(V_\alpha + V_\beta)$, in Equation 4 to evaluate $\lambda_{\alpha,\alpha}$.

Figure 1 shows the occurrence frequency of the calculated local thermal conductivities. The histogram reveals that the H-bonding pairs have the largest average value of among all types of the nonbonded interactions, with a peak at around $2.5 \times 10^{-2} \text{ W m}^{-1} \text{ K}^{-1}$, followed by those with electrostatic interactions with values ranging from 10^{-5} to $10^{-3} \text{ W m}^{-1} \text{ K}^{-1}$ with having a broader and less sharply peaked distributions than that of H-bonding pairs. In the hydrophobic core of HP36, there are three π stacking contacts: Phe7-Phe11 ($\lambda_{7,11} = 4.9 \times 10^{-3}$), Phe7-Phe18 ($\lambda_{7,11} = 1.5 \times 10^{-3}$), and Phe11-Phe18 ($\lambda_{11,18} = 1.5 \times 10^{-3}$), with $\lambda_{\alpha,\beta}$ values comparable with those of H-bonding contacts. Hydrophobic interactions constitute the majority of non-covalent residue pairs, showing a broad distribution spanning from 10^{-7} to $10^{-2} \text{ W m}^{-1} \text{ K}^{-1}$. Their $\lambda_{\alpha,\beta}$ values are relatively smaller, with a peak at around $5.9 \times 10^{-4} \text{ W m}^{-1} \text{ K}^{-1}$, than the other types of

interactions. In summary, the occurrence frequency of local thermal conductivities exhibits a strikingly broad distribution, where different types of non-bonded interactions have significantly different contributions to the thermal transport in the protein, with H-bonds playing a dominant role.

The molecular mechanism of thermal energy transport in proteins remains a subject of considerable debate.⁷⁻⁹ To address this issue, we conducted a site-selective heat current analysis (Figure 1), which highlights significant heterogeneity in the distribution of local thermal transport coefficients at the microscopic level. Specifically, the thermal conductivities for individual residues, denoted as $\lambda_{(\alpha, \alpha)}$, range from 0.08 to 0.3 W m⁻¹ K⁻¹, while those for peptide-bonded residue pairs, $\lambda_{(\alpha, \alpha+1)}$, range from 0.01 to 0.08 W m⁻¹ K⁻¹. Both of these ranges are higher than those observed for residue pairs connected solely by non-bonded interactions, suggesting that the polypeptide chain serves as the primary conduit for thermal energy transport. However, it is important to note three exceptions: $\lambda_{3,6}=2.4\times10^{-2}$, $\lambda_{4,15}=1.3\times10^{-2}$, and $\lambda_{5,8}=2.1\times10^{-2}$. The magnitudes of these values are comparable to the local thermal conductivities along the polypeptide chain. Interestingly, the residue pairs Ser3-Asp6 and Asp4-Arg15 were also identified as having relatively high local energy diffusivity in a theoretical study using non-equilibrium MD simulations and a master equation model.⁹ This suggests their potential roles as critical “shortcuts” in the thermal transport network of the HP36 protein.

4. Reference

- (1) Yu, X.; Leitner, D. M. Heat Flow in Proteins: Computation of Thermal Transport Coefficients. *J. Chem. Phys.* **2005**, *122* (5), 54902.
- (2) Wang, T.; Yamato, T.; Sugiura, W. Site-Selective Heat Current Analysis of α -Helical Protein with Linear-Homopolymer-like Model. *J. Chem. Phys.* **2023**, *158* (21), 214105.
- (3) Hayashi, Y.; Shiomi, J.; Morikawa, J.; Yoshida, R. RadonPy: Automated Physical Property Calculation Using All-Atom Classical Molecular Dynamics Simulations for Polymer Informatics. *Npj Comput. Mater.* **2022**, *8* (1), 1-15.
- (4) Ohara, T.; Yuan, T. C.; Torii, D.; Kikugawa, G.; Kosugi, N. Heat Conduction in Chain Polymer Liquids: Molecular Dynamics Study on the Contributions of Inter- and Intramolecular Energy Transfer. *J. Chem. Phys.* **2011**, *135* (3), 034507. <https://doi.org/10.1063/1.3613648>.
- (5) Kondoh, M.; Mizuno, M.; Mizutani, Y. Importance of Atomic Contacts in Vibrational Energy Flow in Proteins. *J. Phys. Chem. Lett.* **2016**, *7* (11), 1950-1954.
- (6) Reid, K. M.; Yamato, T.; Leitner, D. M. Scaling of Rates of Vibrational Energy Transfer in Proteins with Equilibrium Dynamics and Entropy. *J. Phys. Chem. B* **2018**, *122* (40), 9331-9339.
- (7) Deniz, E.; Valiño-Borau, L.; Löffler, J. G.; Eberl, K. B.; Gulzar, A.; Wolf, S.; Durkin, P. M.; Kaml, R.; Budisa, N.; Stock, G.; et al. Through Bonds or Contacts? Mapping

Protein Vibrational Energy Transfer Using Non-Canonical Amino Acids. *Nat. Commun.* **2021**, *12* (1), 3284.

(8) Mizutani, Y.; Mizuno, M. Time-Resolved Spectroscopic Mapping of Vibrational Energy Flow in Proteins: Understanding Thermal Diffusion at the Nanoscale. *J. Chem. Phys.* **2022**, *157* (24), 240901.

(9) Buchenberg, S.; Leitner, D. M.; Stock, G. Scaling Rules for Vibrational Energy Transport in Globular Proteins. *J. Phys. Chem. Lett.* **2016**, *7* (1), 25-30.

Acceleration of hydrogen/air turbulent non-premixed flame large eddy simulation using physics-informed neural network

Rahmat Waluyo

東京大学生産技術研究所

1. Introduction

The rise in global average temperatures in recent decades has been clearly linked to the increase in CO₂ and other greenhouse gas (GHG) emissions resulting from human activities [1]. This warming of the atmosphere poses significant risks to global climate patterns and could threaten the living conditions of people worldwide. In response to these challenges, many nations have committed to reducing GHG emissions to achieve carbon neutrality by 2050 [2].

In 2021, the energy sector was the largest contributor to GHG emissions, accounting for 75% of the total emission [3]. This figure includes the emissions from existing power generation systems that depend on high-temperature heat from combustion to remain economically feasible. Given the substantial role that combustion plays within the energy sector, improving emissions from these processes could lead to a significant reduction in overall GHG emissions.

To address this issue, power generation industries are exploring the potential of replacing fossil fuels with carbon-neutral alternatives in gas cycle combustors. Among viable alternatives, hydrogen (H₂) has garnered increasing attention as a substitute fuel in current combustion systems. However, several key questions need to be answered, especially regarding the pollutant emissions and operational stability limits of H₂ in gas turbine applications. A deep understanding of how changes in fuel composition and combustor design affect the characteristics of combustion products and flame stability is essential. This knowledge is crucial for implementing significant changes in large-scale combustion systems, where comprehensive experimental measurements are often impractical.

The precision of experimental measurements is frequently constrained by the limitations of existing equipment. Unfortunately, the extreme conditions present in large-scale combustion systems hinder the use of advanced diagnostic tools, such as laser techniques, reducing the spatial and temporal resolution of measurements as the scale increases from laboratory burners to industrial combustors. On the other hand, numerical methods like direct numerical simulation (DNS) provide complete spatial and temporal resolution of combustion processes. However, the high accuracy of DNS is

accompanied by prohibitively high computational costs, limiting its application to a limited number of fuel compositions and flow conditions.

To overcome the limitations of high-fidelity results from both experimental and numerical methods, data-driven approaches can be employed to interpolate sparse data points from these sources. One such approach involves using physics-informed neural networks (PINNs) to combine experimental and simulation data. PINNs have been successfully applied to solve various physical problems [4], including multicomponent [5] and turbulent flows [6]. Recently, the PINN technique has been used to reconstruct DNS of turbulent reactive flows [7]. However, previous studies have mainly focused on simplified chemical reactions and idealized computational domains. This study aims to enhance the prediction of hydrogen/air combustion in burners by applying the PINN technique to validated large eddy simulation data [8].

2. Methods

2.1. Studied Burner

A turbulent flame with separate inlet for fuel and oxidizer is considered, i.e. turbulent non-premixed flame (TNF). The specific H_2/N_2 /air flame H3 from the model burner of German Aerospace Center (DLR) [9] is selected due to the strong turbulence-chemistry interaction. The combustion parameter of flame H3 is summarized in Table 1.

Table 1. Fuel composition, flow condition, and inlet parameter of flame H3.

Parameter	Value
Fuel composition	50:50 (H_2/N_2 , %vol)
Jet Reynolds number	10,000
Inlet velocity ($m.s^{-1}$)	34.8
Fuel inlet diameter (mm)	8

2.2. Large Eddy Simulation

Training data for the proposed PINN was generated in previous study utilizing validated large eddy simulation (LES) [8]. The LES was performed using supercomputing resources granted during this project. The final simulation case was run on supercomputer OBCX with 8 nodes (448 processors). The LES was conducted using open source CFD toolbox OpenFOAM 8.

The domain of interest has cylindrical shape and is bounded by 4 boundary planes with different conditions as illustrated and summarized in Fig. 1 and Table 2. `fixedValue` boundary condition (BC) indicates Dirichlet BC, while `zeroGradient` BC represents Neumann BC with zero gradient at direction normal to the boundary plane. No-slip BC is a special case of `fixedValue` BC where value of zero is assigned for velocity components at boundary plane. Further details on large eddy simulation can be

found in the corresponding research [8].

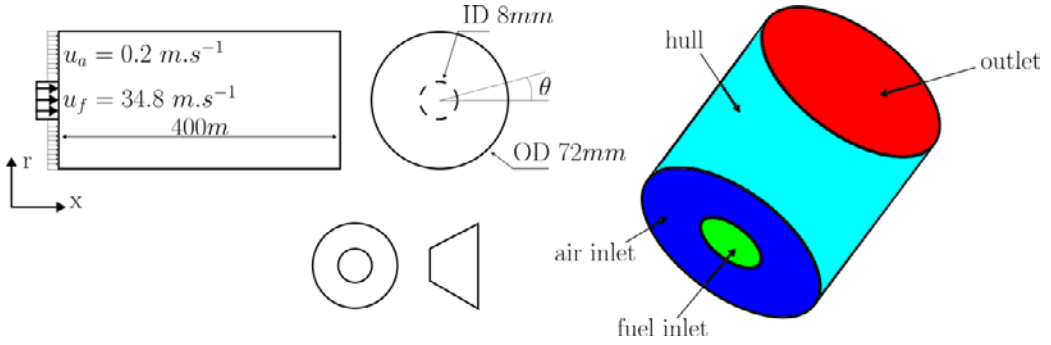


Figure 1. Schematic of simulation domain with boundary conditions. Figure is not to scale

Table 2. Boundary conditions for different quantities of interest at boundary plane.
fV: fixedValue, nS: no-slip, zG: zeroGradient

Boundary plane	$\mathbf{V}$	p	N_b
fuel inlet	fV	zG	500
air inlet	fV	zG	500
hull	nS	zG	500
outlet	zG	fV	500

2.3. PINN Architecture

2.3.1 Governing Equations and Loss Functions

The proposed PINN combines data-driven approach with physics-based knowledge. PINN works by minimizing the modified loss function which is supplemented by residual of governing equations. The obtained neural network not only satisfies training data but also complies with physical constraint.

There are 4 partial differential equations (PDEs) that govern turbulent reactive flow: (1) continuity, (2) momentum, (3) species, and (4) temperature equation [10].

$$\partial_t \rho + \nabla \cdot (\rho \mathbf{V}) = 0 \quad (1)$$

$$\rho \partial_t \mathbf{V} + \rho \mathbf{V} \cdot \nabla \mathbf{V} = -\nabla p + \nabla \cdot \tau_{ij} \quad (2)$$

$$\rho \partial_t Y_k + \rho \mathbf{V} \cdot \nabla Y_k = \rho D_k \nabla^2 Y_k + \dot{\omega}_k, \quad k = 1, \dots, N \quad (3)$$

$$\rho c_p \partial_t T + \rho c_p \mathbf{V} \cdot \nabla T = D_t p + \lambda \nabla^2 T - \nabla T \cdot \sum c_{p,k} h_k J_k - \sum h_k \dot{\omega}_k \quad (4)$$

where $\mathbf{V}$ and T represent velocity and temperature while Y_k , J_k , and h_k indicate mass fraction, diffusion flux, and specific enthalpy of species k . Thermodynamic parameter such as density ρ , viscosity μ , species diffusion coefficient D_k , heat capacity c_p , species heat capacity $c_{p,k}$, and thermal conductivity λ are approximated as function of temperature. Since computational domain for validated LES burner is largely cylindrical, cylindrical coordinate is adopted to evaluate spatial gradient.

PINN minimizes loss function that comprised of (1) residual, (2) boundary, and (3) colocation loss. The residual loss is obtained by enforcing PDE structure on PINN output. This is implemented by constructing residual expressions using automatic differentiation algorithm on predicted quantities of interest ($\phi = [V, p, Y_k, T]$). For example, residual loss from species equation is evaluated as follows.

$$L_r^Y = \frac{1}{N_r} \sum [\rho \partial_t Y_k + \rho V \cdot \nabla Y_k - \rho D_k \nabla^2 Y_k - \dot{\omega}_k]^2 \quad (5)$$

where N_r represents the number of internal points at which residual is calculated.

Similarly, boundary loss is evaluated by enforcing the condition of boundary plane to PINN prediction. For example, zeroGradient BC supplements loss function of PINN by following expression.

$$L_b^{\phi, zG} = \frac{1}{N_{b, zG}} \sum |\partial_n \phi_p - 0|^2 \quad (6)$$

where ϕ_p and $N_{b, zG}$ denote predicted quantity and number of boundary points, respectively. Operator ∂_n indicate spatial gradient at direction normal to the boundary plane.

Colocation loss originates from the data obtained from validated LES to PINN model. The evaluation of loss due to colocation points is straightforward.

$$L_c = \frac{1}{N_c} \sum |\phi_p - \phi_c|^2 \quad (7)$$

where ϕ_c represents colocation data.

Finally, all losses are combined as a weighted sum. The selection of weight is critical to determine the generalizability of trained PINN. In this study, colocation loss is assigned equal weight relative to residual and boundary loss.

2.3.2 Training of PINN

Three PINNs were initially developed to predict 4 quantities of interest (ϕ). However, due to the complexity of the phenomena, currently only PINN-1 is developed to predict velocity and pressure field inside cylinder computational domain.

Figure 2 summarizes the information flow during training of PINN. Since current implementation only considers velocity and pressure field, thermodynamic parameters such as density and viscosity are assumed at constant value.

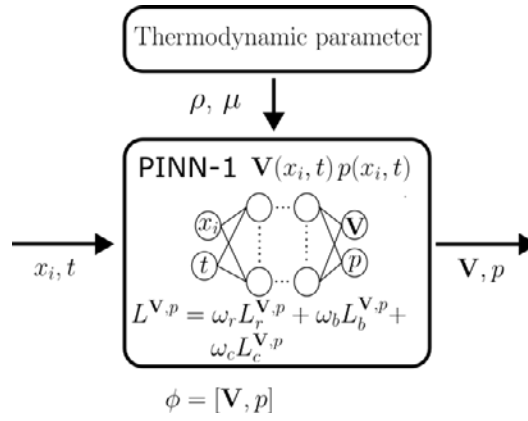


Figure 2. Information flow during training of PINN-1 for predicting flow and pressure field of H_2/air turbulent non-premixed flame.

PINN training is performed within 1000 epochs where training losses have achieved relative convergence. Sampling points for residual and boundary condition are taken randomly within internal and boundary points of simulation domain. On the other hand, colocation sampling points are taken randomly from internal points of validated LES whose distribution depends on spatial resolution of LES. Residual and colocation are sampled at 500 and 1000 points, respectively as shown in Table 2 for boundary points. Figure 3 illustrates the distribution of sampling points for training of PINN.

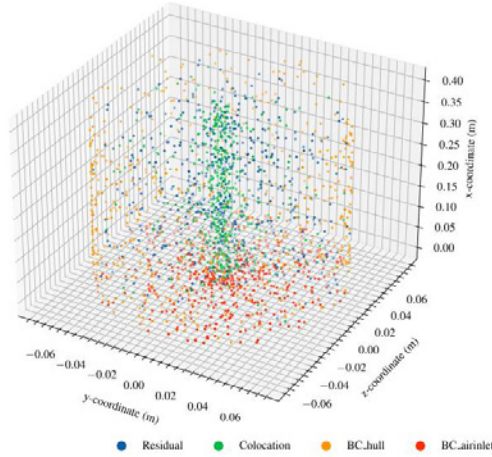


Figure 3. Sampling point distribution to evaluate losses due to residual, colocation, and two boundary conditions of hydrogen/air turbulent non-premixed flame.

The proposed PINN is developed using pytorch library. Adam optimizer is utilized to update weights and biases for the proposed PINN. The whole training process is performed on one GPU NVIDIA RTX4070.

3. Results and discussion

3.1. Training Convergence

PINN-1 has been constructed for prediction/reconstruction of velocity and pressure field. shows training convergence where further increase of epoch training will only lead to slight decrease of training losses. The proposed PINN converges faster at a lower number of sampled colocation points.

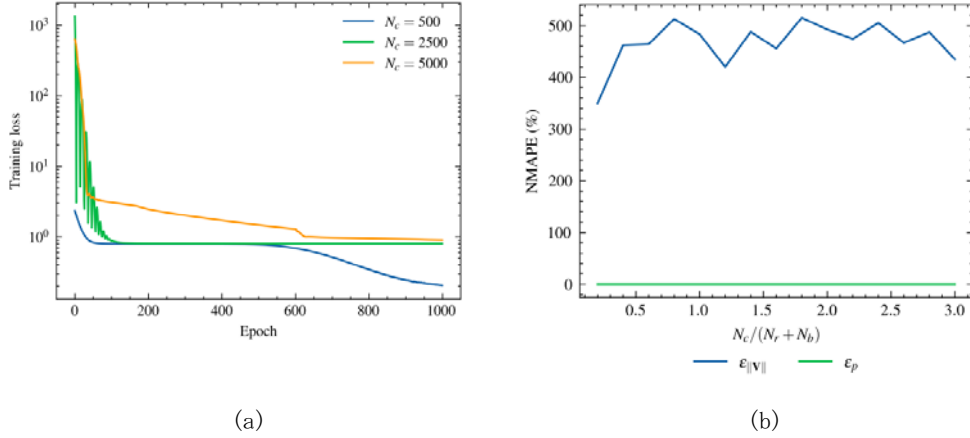


Figure 4. (a) Training loss of PINN-1 for velocity and pressure prediction (b) Validation of PINN prediction in terms of NMAPE for velocity magnitude and pressure.

3.2. PINN Prediction

The capability of PINN to predict the complete reference dataset is quantified by normalized mean absolute percentage error (NMAPE).

$$\epsilon_\phi = \frac{1}{N_d} \sum \frac{|\phi_{PINN} - \phi_d|}{\phi_d} \times 100\% \quad (8)$$

where subscript d represents attribution to reference dataset, which in this study is taken from the validated LES [9].

Figure 4 (b) illustrates the capability of PINN to reconstruct the full velocity and pressure field. PINN prediction in average deviates 3–5 times of the velocity magnitude in reference dataset. Meanwhile predicted pressure reproduces reference dataset quite good enough.

3.3. Simulation speed comparison

One of the main reasons to implement PINN for turbulent reactive flow is to speed up the simulation process. Classical numerical simulation requires a very short time step to fully capture turbulence. PINN bypasses this requirement by incorporating data from either experiment or simulation. Although complete and accurate reconstruction of LES result has not been achieved, it is worth to note Figure 5 represents the time

comparison between LES and training of PINN.

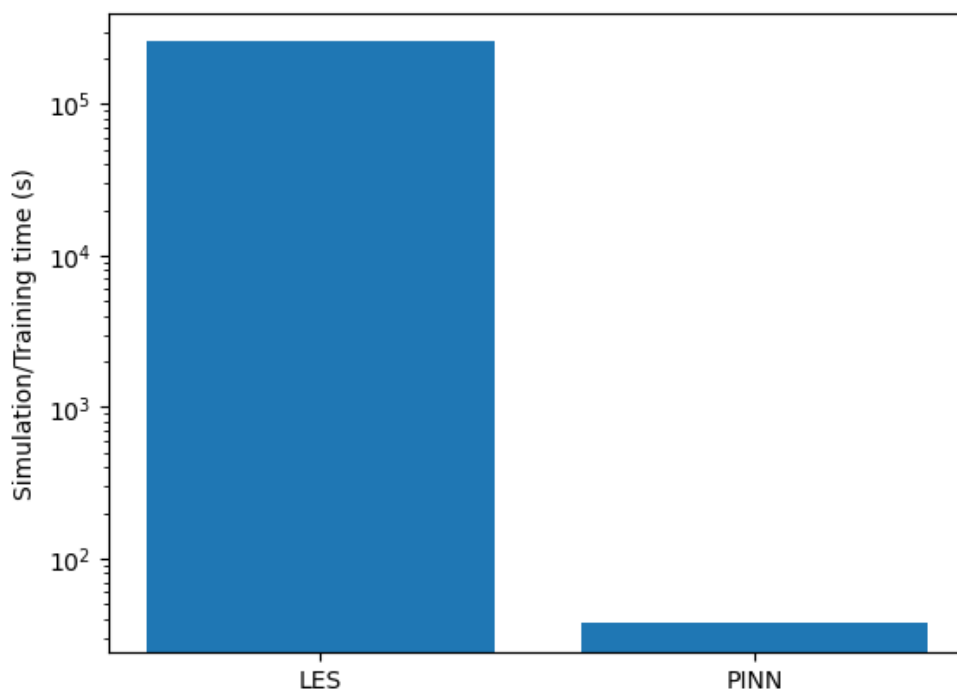


Figure 5. Simulation and training time comparison between original LES and field reconstruction using PINN.

4. Conclusions

Prediction of velocity and pressure field for hydrogen/air turbulent non-premixed flame has been attempted using PINN with training data generated from validated LES. Although complete and accurate reconstruction of turbulent reactive flow has not been achieved, this study provides details on implementation of PINN to predict some quantities of interest. Future research will be committed to improve accuracy of reconstructed thermochemical field using PINN.

References

- [1] Intergovernmental Panel on Climate Change, Climate Change 2014: Synthesis Report, (2014), 3.
- [2] International Energy Agency, World Energy Outlook 2021, (2021), 25.
- [3] Climate Watch, Historical GHG Emission, (2024),
<https://www.climatewatchdata.org/ghg-emissions>.
- [4] M. Raissi, P. Perdikaris, G. E. Karniadakis, J. Comp. Phys., 378, (2019), 686–707.
- [5] R. Laubscher, Phys. Fluids., 33, (2021), 087101.
- [6] S. Cai, Z. Mao, Z. Wang, M. Yin, G. E. Karniadakis, Act. Mech. Sin., 37, (2021),

1727-1738.

- [7] S. Liu, W. Haiou, J. H. Chen, K. Luo, J. Fan, Comb. Flame, 260, (2024), 113275.
- [8] R. Waluyo, M. Aziz, Therm. Sci. Eng. Prog., 49, (2024), 102467.
- [9] T. Cheng, G. Fruechtei, A. Neuber, F. Lipp, E. P. Hassel, J. Janicka, Eng. Res., 61 (1995), 165-171.
- [10] T. Poinso, D. Veynante, Theoretical and Numerical Combustion., (2022), 13-22.

Going Beyond Local: Global Graph-Enhanced Personalized News Recommendations

Boming Yang

Graduate School of Information Science and Technology,
The University of Tokyo

1. Introduction

News Recommendation (NR) is the process of recommending news articles to users to satisfy their need for information by optimizing the accuracy of predicting relevance between news articles and users. Compared with making recommendations in other domains, news recommendation is more challenging because of the highly dynamic environment caused by the natural characteristics of news articles, such as timeliness, novelty, etc. Therefore, unsurprisingly, content-based recommendation methods have proven their effectiveness. Typically, these are achieved via harnessing various natural language processing (NLP) and machine learning (ML) technologies to extract user interest representations by analyzing news articles that they have read in the past, to build representations of candidate news articles by studying their content, and then match users with candidate news articles.

Recently, deep learning-based technologies have been developed rapidly and brought new opportunities for enhancing content-based solutions due to their strong ability to deal with textual data, such as news content, news title, etc., and capture sequential dependencies in user reading history. Whilst these solutions have achieved great success in news recommendation tasks, such as alleviating the serious item user behaviors sparse problem by extracting meaning representation from news content, these methods mainly focus on the reading history of each user individually (i.e., using a single user's historical news click sequence to construct this user's representation), which lack a global border view of news articles and clicking among multiple users, and might be insufficient for uncovering more implicit hidden user behaviors. For example, as illustrated in Fig. 1, assume that we want to recommend news articles for user U1. User U1's reading list contains only an orange news article, but at the moment, there are no news articles in the candidate set similar to the orange one. If recommendation models merely consider U1's reading history, it is difficult to make recommendations for U1 in this situation. But if we can harness multiple user histories together, for example, extracting a Global News Graph from user U3 and U2's clicks, we may find that there are certain relationships between orange news articles with blue news articles and green news articles. Therefore, the model may consider recommending dotted blue and green candidates that are similar to the blue one and the green one respectively.

The challenge is how to properly generate this global news graph based on clicking from multiple users and integrate it with news recommendation systems.

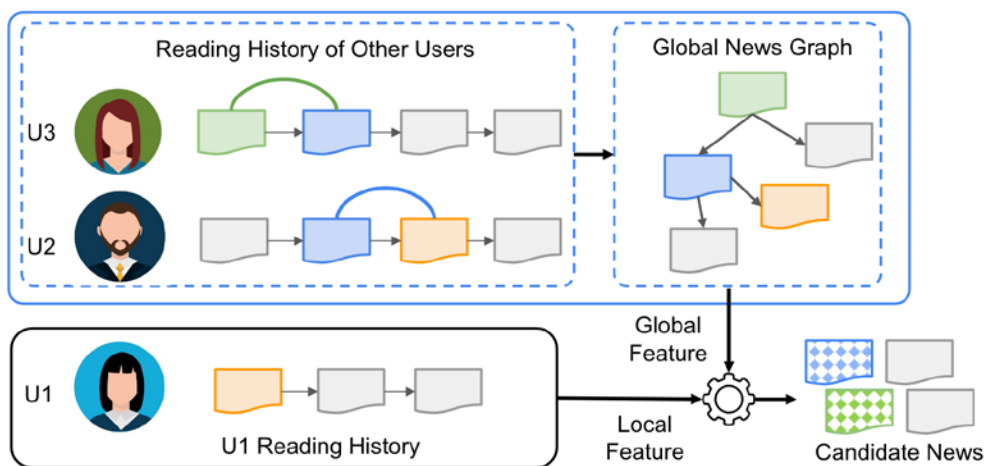


Figure 1: An example of how global feature may help predict the candidate news.

To address the mentioned issue, we propose a novel model, **GLORY** (Global-Local news Recommendation sYstem). Because historical news interaction data can provide more extensive and implicit relational information than semantic relevance, we propose a global-aware historical news encoder, specifically, using a global news graph to provide information on global perspectives for historical news. At the same time, to address the user behaviors sparse problem of candidate news, we propose a global-aware candidate news encoder, which uses a global entity graph to provide more effective associations for candidate news. Next, we use the multi-head self-attention mechanism to extract user interests from historical news. The final matching score came from the user news vector and the candidate news vector. We conducted extensive experiments on the MIND news dataset and Adressa, and the results showed that our model outperformed existing methods.

2. Method

Our proposed approach, GLORY, focuses on enhancing historical news representation by utilizing a global news graph, and improving candidate news representation through a global entity graph, as depicted in Fig. 2. First, we learn the representation of news text and news entities from a local perspective. Subsequently, we adopt the global-aware historical news encoder and the global-aware entity news encoder. Lastly, we employ a concise user encoder and a news recommendation component.

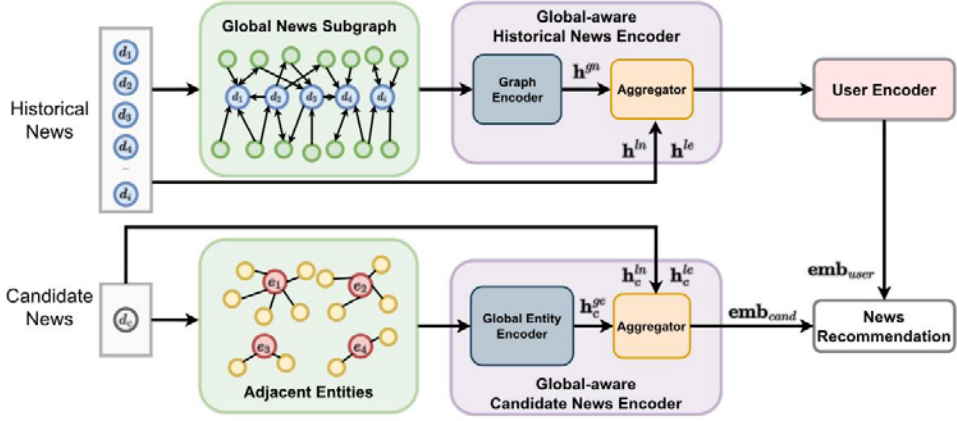


Figure 2: An overview of the proposed GLORY model.

The click history sequence of a user u can be denoted as $H_u = [d_1, d_2, \dots, d_H]$, where H is the number of historical news articles. Each news article d_i has a title, which contains a text sequence $T_i = [w_1, w_2, \dots, w_T]$ consisting of T word tokens, and an entity sequence, which is denoted by $E_i = [e_1, e_2, \dots, e_E]$ consisting of E entities. The objective is to predict the level of interest $s_{u,c}$ for a given candidate news article d_c and user u , which reflects the likelihood of a clicking action occurring between them. The recommendation task involves ranking multiple candidate news articles based on probability scores.

First, we need to learn local news representation h^{ln} and local entity representation h^{le} from news text and news entities. For each user behavior, we only consider the latest L_{his} clicked news from the click history sequence H_u of user u and candidate news. In this work, we use only the news title as the news text, and for each news title, we truncate the first L words as input.

To go beyond the local, we introduce a novel global-aware historical news encoder to merge global and local information. The Global News Graph is used to summarize users' reading histories. On the left part of Fig. 3, we show a directed Global News Graph, denoted as $G_n = V_n + E_n$, where V_n and E_n represent the sets of news articles and edges, respectively. To construct this graph, we collect the edges from each user's reading history in the training dataset. Specifically, a directed edge (v_i, v_j) is added to the graph to indicate that news item v_j was read immediately after v_i by the same user. The edge weight is determined by the frequency of this occurrence from all reading history.

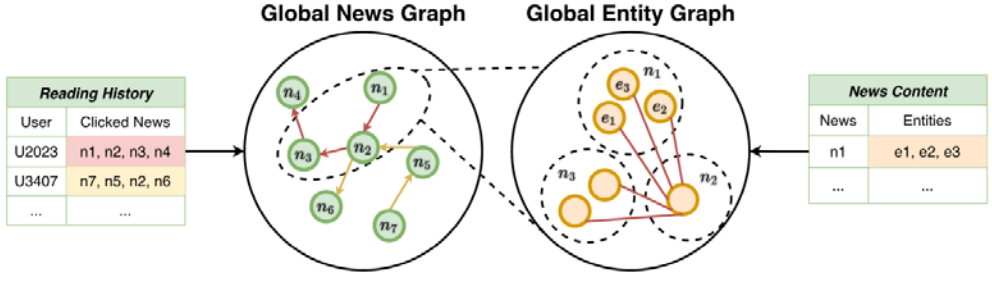


Figure 3: A simple Case of Global News Graph and Global Entity Graph.

For each user history, we extract the subgraph $G_{sub}^u = (V_{sub}^u, E_{sub}^u)$ from the global news graph to capture a global perspective on a specific user's interests. For each news in H_u of user u , we select news neighbors of multiple hops from the global news graph. For each hop, we select the top M_n neighbors based on the edge weight.

Following [12], after we obtain news embedding n_k of each news in a given user reading history H_u , we employ a multi-head attention layer and an attention pooling layer to finally learn the user representation emb_{user} .

As a vast number of news articles are generated daily, candidate news often lacks user interaction history. Therefore, we can not only enhance historical news using the global news graph but also improve candidate news using a similar global entity graph. Consequently, we propose a novel global-aware candidate news encoder

In accordance with the prior work [3], we employ the negative sampling technique during our training process.

3. Experiments and Results

We mainly select three groups of baselines to compare:

Feature-based Methods (1) LibFM [1], a widely used recommendation method that uses factorization machines to predict user preferences for news articles based on their features; (2) DeepFM [2], a neural network-based recommendation method that combines factorization machines with deep learning to improve recommendation accuracy for news articles.

Neural Recommendation Methods: (1) DKN [3], using a knowledge-aware CNN to learn news representation from both news text and knowledge entities; (2) NPA [4], using personalized attention network to learn news and user representation; (3) NAML [5], using the multi-view attention network learn representation based on different news article features; (4) LSTUR [6], jointly modeling users' long-term and short-term interests by a GRU network; (5) NRMS [7], using the multi-head self-attention network to learn user and news representation; (6) FIM [8], utilizing hierarchical representations of news articles through stacked dilated convolutions to perform fine-grained interest; (7) HieRec [9]: using a three-level hierarchical structure to

represent each user’s diverse and multi-grained interest. (8) MINER w/o PLM [10]: using a poly attention scheme with disagreement regularization to model multiple user interests. We select the version without the pre-trained language model (PLM) to compare fairly.

Graph-based Methods: (1) GERL [11], using a bipartite graph and combines transformer architecture with a graph attention network to enhance news and user representations; (2) GNewsRec [12], utilizing a heterogeneous graph to model user-news-topic interactions, and employs graph neural networks to learn high-order user and news representations; (3) User-as-Graph [13], using a personalized heterogeneous graph built from user behaviors and a novel heterogeneous graph pooling method; (4) DIGAT [14], using news- and user-graph channels and a dual-graph interaction process to match news-user representations effectively. Similarly, we choose the version without PLM.

Tab. 1 shows the performance comparison between GLORY and the baselines on two settings of the MIND dataset. The tabulated values are expressed as percentages without the symbol %. The overall best and baseline best results are boldfaced and underlined respectively.

Method	MIND-small				MIND-large			
	AUC	MRR	nDCG5	nDCG10	AUC	MRR	nDCG@5	nDCG@10
LibFM	59.74	26.33	27.95	34.29	61.85	29.45	31.45	37.13
DeepFM	59.89	26.21	27.74	34.06	61.87	29.3	31.35	37.05
DKN	62.90	28.37	30.99	37.41	64.07	30.42	32.92	38.66
NPA	64.65	30.01	33.14	39.47	65.92	32.07	34.72	40.37
NAML	66.12	31.53	34.88	41.09	66.46	32.75	35.66	41.40
LSTUR	65.87	30.78	35.15	40.15	67.08	32.36	35.15	40.93
NRMS	65.63	30.96	34.13	40.52	67.66	33.25	36.28	41.98
FIM	65.34	30.64	33.61	40.16	67.87	33.46	36.53	42.21
HieRec	67.95	32.87	<u>36.36</u>	42.53	69.03	33.89	37.08	43.01
MINER w/o PLM*	<u>68.07</u>	<u>32.93</u>	-	<u>42.62</u>	-	-	-	-
GERL	65.27	30.10	32.93	39.48	68.10	33.41	36.34	42.03
GNewsRec	65.54	30.27	33.29	39.80	68.15	33.45	36.43	42.10
User-as-Graph‡	-	-	-	-	<u>69.23</u>	34.14	<u>37.21</u>	<u>43.04</u>
DIGAT w/o PLM†	67.82	32.65	36.25	42.49	-	-	-	-
GLORY(ours)	68.15	32.97	36.47	42.78	69.54	34.03	37.92	44.19

Table 1: Evaluation performance of all baselines on MIND.

We have several reservations from Tab. 1: 1) The outcomes of neural news recommendation methods surpass those of featurebased methods across all cases, thereby highlighting the efficacy of neural networks in modeling news and users based on implicit semantic representation rather than manually created features. 2) While some baseline methods apply news topics and categories as auxiliary information to improve news encoding (i.e., HieRec), or design complex architecture to encode users (i.e., MINER w/o PLM constructs 32 interest vectors using a polyhedral interest system for users), they focus on a local perspective of the historical news of a given user. Our GLORY model

integrates global features and outperforms these baselines. Although DIGAT w/o PLM employs a semantically enhanced graph to enable the model to learn beyond historical news, it is still based on semantic relevance and does not learn latent behavioral information from other users' interactions. In contrast, GLORY, even with simply attention-based user interest encoding, can achieve the best performance, and the global graph information provides significant assistance in learning news encoding. 3) Both GERL and GNewsRec employ graph-based methods to model user-news interactions. However, the bipartite interactionbased approach faces difficulties in the test dataset, particularly when candidate news items are novel and lack interaction history. In contrast, our approach enhances historical news by incorporating information from the global news graph, thereby augmenting user interests. We also leverage a global entity graph to strengthen the relevance of candidate news beyond just semantics.

Reference

- [1] Steffen Rendle. 2012. Factorization machines with libfm. *ACM Transactions on Intelligent Systems and Technology (TIST)* 3, 3 (2012), 1-22.
- [2] Huifeng Guo, Ruiming Tang, Yunming Ye, Zhenguo Li, and Xiuqiang He. 2017. DeepFM: a factorization-machine based neural network for CTR prediction. *arXiv preprint arXiv:1703.04247* (2017).
- [3] Hongwei Wang, Fuzheng Zhang, Xing Xie, and Minyi Guo. 2018. DKN: Deep Knowledge-Aware Network for News Recommendation. In *Proceedings of the 2018 World Wide Web Conference (WWW '18)*. International World Wide Web Conferences Steering Committee, Republic and Canton of Geneva, CHE, 18351844.
- [4] Chuhan Wu, Fangzhao Wu, Mingxiao An, Jianqiang Huang, Yongfeng Huang, and Xing Xie. 2019. NPA: Neural News Recommendation with Personalized Attention. In *Proceedings of the 25th ACM SIGKDD International Conference on Knowledge Discovery & Data Mining (KDD '19)*. Association for Computing Machinery, New York, NY, USA, 2576-2584.
- [5] Chuhan Wu, Fangzhao Wu, Mingxiao An, Jianqiang Huang, Yongfeng Huang, and Xing Xie. 2019. Neural News Recommendation with Attentive Multi-View Learning. *arXiv:arXiv:1907.05576*
- [6] Mingxiao An, Fangzhao Wu, Chuhan Wu, Kun Zhang, Zheng Liu, and Xing Xie. 2019. Neural news recommendation with long-and short-term user representations. In *Proceedings of the 57th Annual Meeting of the Association for Computational Linguistics*. 336-345.
- [7] Chuhan Wu, Fangzhao Wu, Suyu Ge, Tao Qi, Yongfeng Huang, and Xing Xie. 2019. Neural News Recommendation with Multi-Head Self-Attention. In *Proceedings of the 2019 Conference on Empirical Methods in Natural Language Processing and the 9th International*

Joint Conference on Natural Language Processing (EMNLP/IJCNLP). Association for Computational Linguistics, Hong Kong, China, 63896394.

[8] Heyuan Wang, Fangzhao Wu, Zheng Liu, and Xing Xie. 2020. Fine-grained interest matching for neural news recommendation. In Proceedings of the 58th annual meeting of the association for computational linguistics. 836-845.

[9] Tao Qi, Fangzhao Wu, Chuhan Wu, Peiru Yang, Yang Yu, Xing Xie, and Yongfeng Huang. 2021. HieRec: Hierarchical User Interest Modeling for Personalized News Recommendation. In Proceedings of the 59th Annual Meeting of the Association for Computational Linguistics and the 11th International Joint Conference on Natural Language Processing (Volume 1: Long Papers). Association for Computational Linguistics, Online, 5446-5456.

[10] Jian Li, Jieming Zhu, Qiwei Bi, Guohao Cai, Lifeng Shang, Zhenhua Dong, Xin Jiang, and Qun Liu. 2022. MINER: Multi-Interest Matching Network for News Recommendation. In Findings of the Association for Computational Linguistics: ACL 2022. Association for Computational Linguistics, Dublin, Ireland, 343-352.

[11] Suyu Ge, Chuhan Wu, Fangzhao Wu, Tao Qi, and Yongfeng Huang. 2020. Graph Enhanced Representation Learning for News Recommendation. In Proceedings of The Web Conference 2020 (WWW '20). Association for Computing Machinery, New York, NY, USA, 2863-2869.

[12] Linmei Hu, Chen Li, Chuan Shi, Cheng Yang, and Chao Shao. 2020. Graph Neural News Recommendation with Long-Term and Short-Term Interest Modeling. Information Processing & Management 57, 2 (March 2020), 102142.

[13] Chuhan Wu, Fangzhao Wu, Yongfeng Huang, and Xing Xie. 2021. User-as-Graph: User Modeling with Heterogeneous Graph Pooling for News Recommendation.. In IJCAI. 1624-1630.

[14] Zhiming Mao, Jian Li, Hongru Wang, Xingshan Zeng, and Kam-Fai Wong. 2022. DIGAT: Modeling News Recommendation with Dual-Graph Interaction. arXiv:arXiv:2210.05196

教育利用報告「実践的シミュレーションソフトウェア開発演習」

小川 秀 人

東京大学大学院工学系研究科機械工学専攻非常勤講師

1. はじめに

「実践的シミュレーション開発演習」は 2009 年に開始し本年度で 16 年目となる。本科目はスーパーコンピュータを用いた計算流体力学(CFD: Computational Fluid Dynamics)と分子動力学(MD: Molecular Dynamics)のシミュレーションソフトウェアを開発する実践的なスキルを身に着けることを目標としている。そのため、シミュレーション技術等を専門とする生産技術研究所の教員と、ソフトウェア開発技術を専門とする民間企業の非常勤講師が連携して講義および演習を担当している。筆者は開始当初から本科目を担当してきた居駒幹夫青山大学教授の講義を引き継いで本年度より本科目を担当した。本稿では本科目の概要と本年度の実施報告およびソフトウェア工学観点での考察を述べる。

2. 本科目の内容と構成

スーパーコンピュータを用いたシミュレーションソフトウェア開発の実践には、CFD や MD に代表されるシミュレーション技術やスーパーコンピュータの知識に加えて、ソフトウェア開発の知見も必要である。本科目はガイダンスを含め全 14 回の演習科目であり、ハイパフォーマンスコンピューティングに関する講義とコーディングの基礎演習, MD および CFD に関する講義, MD または CFD どちらかのシミュレータをグループで開発する応用演習からなる。

ソフトウェア開発の観点では、信頼性や保守性を考慮したソフトウェア設計や実装・テストの手法、プロジェクトマネジメント手法などを解説し、基礎演習と応用演習でそれらを実践することが求められる。表 1 に本科目で習得するソフトウェア開発の手法と利用する開発環境を示す。

応用演習では、講師が配布するサンプルソースコードを基に受講生が作成した UML 図面のレビューや、グループで開発するシミュレータの設計図面のレビュー、グループで作成したソースコードのレビュー、グループ単位での最終成果報告と、複数回の報告・レビューを実施する。これにより、各種手法を習得できるよう構成している。より詳細な内容や経緯は、書籍[1], 論文[2] および過去のスーパーコンピューティングニュース[3]等を参照されたい。

表 1 本科目で習得する主なソフトウェア開発手法の例

分類	手法等	環境/ツール等
ソフトウェア設計	オブジェクト指向設計 UML(クラス図, シーケンス図)	draw.io
ソフトウェア実装	オブジェクト指向実装	C++, Visual Studio Code
	並列プログラミング	MPI, OpenMI
構成管理	分散リポジトリ	Git, GitHub
プロジェクトマネジメント	チケット管理	Trello
チームコミュニケーション	ー	Slack, Google Classroom

3. 2024 年度の実施報告

本年度の受講者数は 5 名で修了者は 2 名であった。応用演習では修了生 2 名は同一グループで MD シミュレーションを作成した。図 1 に修了者によるシミュレーション結果の例を示す。さらに、彼らは NVT アンサンブルの実装などの独自の工夫も加えており、シミュレーションソフトウェア開発という目標に対して一定の成果が得られたと考える。一方で、2 名での分担開発となり、プロジェクト管理等のチーム開発に有用な手法や環境について、必要性や利点の実感が難しかったと思われる。

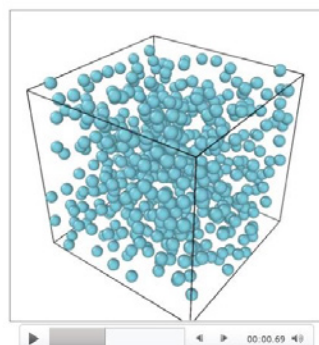


図 1 応用演習の結果表示例

4. ソフトウェア工学的視点での考察

表 2 に IEEE CS によるソフトウェア工学の知識体系である SWEBOK V4 の知識領域に対し、本科目で扱った領域に○をつけた。各領域を深堀はしていないが、領域の約半数に言及している。本科目で幅広い領域に触れることで、受講生が今後、大規模で高性能なシミュレーションソフトウェアを開発する際の有用な知識を得る基礎となることが期待される。

しかし、シミュレーションに特化した一層の改善の余地もある。例えば、シミュレータは正しい期待結果を予め知ることができないため、古典的なテスト手法では扱いが難しい。今年度はその問題に対処する先進的なテスト設計手法に言及したが、それを演習に反映するに至らなかった。同様の事項は他の領域にもあると考えられ、より実践的な演習に向けて検討していきたい。

5. おわりに

筆者はソフトウェア工学の専門家として本科目に参画した。より実践的な演習科目となるよう今後も改善を続けたい。

参 考 文 献

- [1] 佐藤文俊, 加藤千幸編, “ソフトウェア開発入門：シミュレーションソフト設計理論からプロジェクト管理まで”, 東大出版, 2014 年, ISBN-4130624547
- [2] 居駒幹夫, 高橋英男, 他, “非情報系の学生を対象としたソフトウェア開発演習の設計と改善”, 情報処理学会研究報告, 2016 年 8 月, Vol.2016-IS-137, No2.
- [3] 居駒幹夫, “教育利用報告「実践的シミュレーションソフトウェア開発演習」”, スーパーコンピューティングニュース, 2023 年 9 月, Vol.25, No.5, https://www.cc.u-tokyo.ac.jp/public/VOL25/No5/11_202309-ikoma.pdf
- [4] IEEE Computer Society, “SWEBOK Evolution” 2024 年 2 月, <https://www.computer.org/volunteering/boards-and-committees/professional-educational-activities/software-engineering-committee/swebok-evolution>

表 2 SWEBOK と本科目の対応

SWEBOK の領域	本科目
要求	-
アーキテクチャ*	-
設計	○
構築	○
テスト	○
運用*	-
保守	-
構成管理	○
マネジメント	○
プロセス	-
モデルと手法	○
品質	○
セキュリティ*	-
専門職	-
経済	-
計算基礎	○
数学基礎	-
工学基礎	-

*: SWEBOK V4 で新設予定の領域

2024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226回	2024年6月11日	「GPUプログラミング入門」 ¹ Wisteria/BDEC-01(Aquarius) 山崎 一哉	事前登録者	26	4.40
			参加者	大学・研究機関教職員	5
				企業の方	7
				学部学生	3
				大学院生	6
				その他	0
			合計	21	
第227回	2024年6月17日 24日	「第11回 GPUミニキャンプ」 ² Wisteria/BDEC-01(Aquarius) 下川辺 隆史	事前登録者	11	4.67
			参加者	大学・研究機関教職員	4
				企業の方	0
				学部学生	4
				大学院生	3
				その他	0
			合計	11	
第228回	2024年7月22日	「OpenACCとMPIによるマルチGPUプログラミング入門」 ³ Wisteria/BDEC-01(Aquarius) 星野 哲也	事前登録者	15	3.90
			参加者	大学・研究機関教職員	4
				企業の方	4
				学部学生	3
				大学院生	2
				その他	0
			合計	13	

※「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/226/>

² <https://www.cc.u-tokyo.ac.jp/events/lectures/227/>

³ <https://www.cc.u-tokyo.ac.jp/events/lectures/228/>

第 226 回お試しアカウント付き並列プログラミング講習会

「GPU プログラミング入門」

山崎一哉

東京大学情報基盤センター

本稿は、2024 年 6 月 11 日にオンライン会議システム Zoom を用いて開催された『第 226 回お試しアカウント付き並列プログラミング講習会：GPU プログラミング入門¹』の開催報告である。

本講習会では、GPU を用いるために必須である、GPU の特性やプログラミング手法に関する講義および実習を行った。対象 GPU としては主に NVIDIA 社の GPU を、GPU 向けの並列化プログラミング環境としては主に OpenACC を用いた。講義では、GPU を活用するうえで必要となる並列計算の基礎から始め、GPU の構造や、GPU 向けのプログラムを作成する方法、GPU プログラミングを行う上で役に立つツールの使用方法、CPU-GPU 間のデータ転送の最適化を適用するまでの手順を紹介した。実習では拡散方程式のカーネルなど、HPC において利用される基本的な計算問題を題材として、OpenACC による指示文を挿入してプログラムを GPU 化する作業を、順を追って解説した。

本講習会は 2021 年 5 月 14 日より運用を開始した Wisteria/BDEC-01 の Aquarius ノードを用いて実習を行なった。Aquarius ノードには 8 基の A100 GPU が搭載されているが、講習会受講者が利用できるのは 4 基までである。受講者には 1 ヶ月有効なアカウントが与えられ、1 ノード 30 分までのジョブが実行可能である。合計 26 名の事前登録者があり、21 名（学生：9 名、研究機関：5 名、企業：7 名）が受講した。

本センターは筑波大学計算科学研究センターと共同で、次期スーパーコンピュータシステム Miyabi²を 2025 年 1 月に運用開始する予定である。Miyabi には、1120 基の NVIDIA GH200 Grace Hopper Superchip が含まれている。GH200 は CPU と GPU とを密に結合した製品であり、CPU-GPU 間のデータ転送が高速である。そのため、従来は非常に重要であったデータ転送の最適化という工程を省いても、プログラムが GPU 上で高い性能を発揮できると見込まれている。そこで、Miyabi の運用開始後には、本講習会の内容に加えて GH200 の特性にも焦点を当てた講習会を開催し、より容易にプログラムを GPU 化する手法を紹介する予定である。

¹ <https://www.cc.u-tokyo.ac.jp/events/lectures/226/>

² <https://www.jcahpc.jp/supercomputer/miyabi.html>

第 227 回お試しアカウント付き並列プログラミング講習会

「第 11 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 6 月 17 日 (月)、24 日 (月) の 2 週にわたり、第 227 回お試しアカウント付き並列プログラミング講習会「第 11 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 Miyabi (OFP-II) を 2025 年 1 月に運用開始予定です。本講習会は、GPU を搭載した Miyabi への移植に向けた GPU ミニキャンプ第 6 弾で、今後同じような GPU ミニキャンプを Miyabi 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、JCAHPC、東京工業大学学術国際情報センター、名古屋大学情報基盤センター、九州大学情報基盤研究開発センター・データ駆動イノベーション推進本部データ分析支援部門、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
- ・ 五十木 秀一：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
- ・ 今任嘉幸：プロメテック・ソフトウェア株式会社 テクニカルマネージャ
- ・ 阿部光平：プロメテック・ソフトウェア株式会社 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
- ・ 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
6月17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
6月18日-23日		各チームで実践
6月24日	10:00 - 10:30	事務連絡・情報交換
	10:30 - 16:00	実施（適宜自由に休憩）
	16:00 - 16:50	実施内容の紹介
	16:50 - 17:00	事務連絡・終了



図1 講習会の集合写真

今回の講習会では、合計6チーム11名が参加しました。参加者の内訳は、大学・研究機関教

職員：4名、大学院学生：3名、学部学生：4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。

- 圧縮性境界層乱流 LES コードの高速化、マルチ GPU 化
- 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 化とボトルネック検証
- マルチ GPU を用いた機械学習
- OpenFOAM のキャビティ問題用ソルバ icoFoam を Aquarius で実行
- MHD シミュレーションコードの CUDA を用いた高速化
- FMO プログラム ABINIT-MP の GPU 対応

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、ハイブリッド開催を期待する声が多数ありました。運営コストを考え、オンライン開催の回を一部設けながら、ハイブリッド開催を中心とする予定です。また、技術情報をまとめた記事を提供することや講習会日に合わせてセミナーを開催することなどを望む意見もあり、これらを何かしらの形で提供できないか検討していきたいと考えています。

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	5			1			
GPU プログラミング経験	5			1			
	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		6		0	
	評点	1	2	3	4	5	平均
講習会時間	短い <-> 長い			6			3.0
講習会講義内容（プレゼン）	簡単 <-> 難	1		5			2.7
配布資料内容	簡単 <-> 難			6			3.0
サンプルプログラム内容	簡単 <-> 難			6			3.0
満足度	不満 <-> 満足			1		5	4.7

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
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	3
研究成果の登録のお願い	6
6月・7月のジョブ統計	7

研究報告

第47回 ASE研究会	10
-------------	----

ユーザーから

グラフ表現学習のためのグラフゲート機構付き多層パーセプトロンの 提案と有限要素法のサロゲートモデルとしての応用	11
環境と結合したキタエフ模型における磁場効果	17
タンパク質ベースの材料における微視的な熱輸送特性	23
Acceleration of hydrogen/air turbulent non-premixed flame large eddy simulation using physics-informed neural network	29
Going Beyond Local: Global Graph-Enhanced Personalized News Recommendations	37

教育活動報告

教育利用報告「実践的シミュレーションソフトウェア開発演習」	44
2024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	46
第226回お試しアカウント付き並列プログラミング講習会 「GPUプログラミング入門」	47
第227回お試しアカウント付き並列プログラミング講習会 「第11回 GPUミニキャンプ」	48

原稿募集	51
------	----