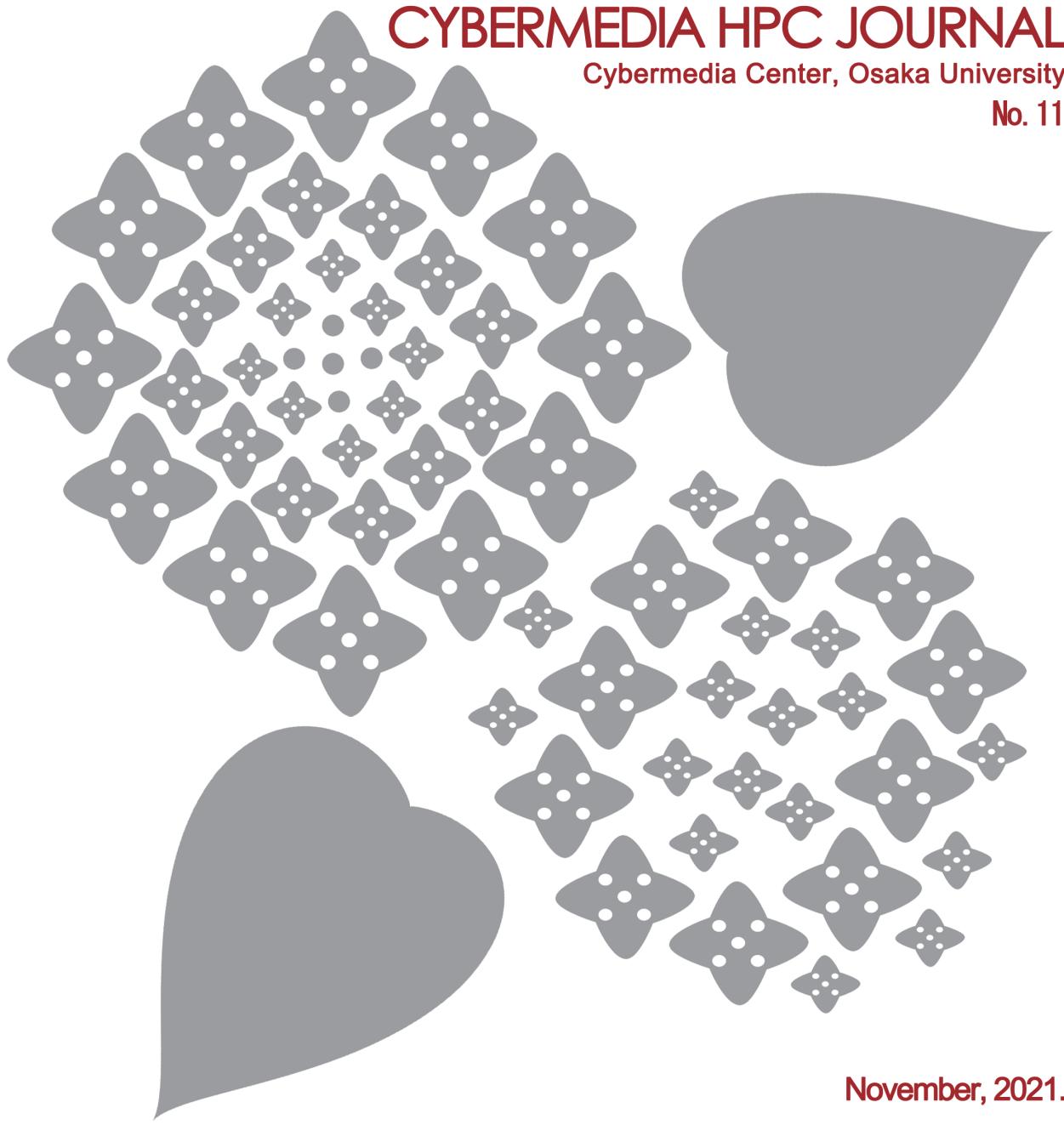


CYBERMEDIA HPC JOURNAL

Cybermedia Center, Osaka University

No. 11



November, 2021.

目 次

特 集：スーパーコンピュータシステム SQUID	1
・高性能計算・データ分析基盤システム (SQUID: Supercomputer for Quest To Unsolved Interdisciplinary Datascience) ～わが国の学術・産業の発展を支える研究基盤の実現に向けて～	3
伊達 進 大阪大学 サイバーメディアセンター	
大規模計算機システム利用者研究報告	33
・QCD の非可換ビアンキ恒等式の破れ(モノポール)に基づく 新しい閉じ込め機構のモンテ・カルロ法による研究	35
鈴木 恒雄 大阪大学 核物理研究センター	
・CeドープされたYAG結晶における光励起後の Franck Condon緩和の第一原理計算(2020年度)	37
宮本 良之 国立研究開発法人産業技術総合研究所	
・Gradient flowに基づく SFtX 法による物理点 QCD の熱力学特性の研究	39
金谷 和至 筑波大学 宇宙史研究センター	
・Z3 対称な量子色力学における格子シミュレーション	43
河野 宏明 佐賀大学 理工学部	
・ミウラ折り型ジグザグリブレットの実用のための研究	47
岡林 希依 大阪大学 大学院工学研究科	
・タンパク質-リガンド結合自由エネルギーにおける共溶媒濃度依存性の解明	53
肥喜里 志門 大阪大学 大学院基礎工学研究科	
・ハイブリッド汎関数を用いた水の第一原理分子動力学シミュレーション	55
大戸 達彦 大阪大学 大学院基礎工学研究科	
・格子QCDを用いたhidden-charm pentaquarkの解析	59
杉浦 拓也 理化学研究所 数理創造プログラム	
・微孔性高分子膜の気体吸収性の自由エネルギー解析	63
小嶋 秀和 大阪大学 大学院基礎工学研究科	
・先天的な顔の異常をスクリーニングする矯正診断支援AIシステムの開発	67
谷川 千尋 大阪大学 大学院歯学研究科	
・環状鎖メルトへの線状鎖の少量添加の粗視化MDシミュレーション	69
上原 恵理香 お茶の水女子大学 ソフトマター教育研究センター	

・大規模時系列テンソルによる多角的イベント予測	75
本田 崇人	大阪大学 産業科学研究所 産業科学AIセンター
センター報告	81
・2020年度大規模計算機システム利用による研究成果・論文一覧	83
・第26回スーパーコンピューティングコンテスト(SuperCon2020)報告および 第27回スーパーコンピューティングコンテスト(SuperCon2021)告知	95
・大規模計算機システム利用者講習会等の紹介	97
・2021年度大規模計算機システム利用講習会	99
・2020年度大規模計算機システム利用講習会アンケート集計結果	100
・2021年度「HPCI(High Performance Computing Infrastructure)利用」の活動状況	108
・2021年度「学際大規模情報基盤共同利用・共同研究拠点」の活動状況	109
・2020年度大規模計算機システム公募型利用制度（追加募集）の活動状況	110
・2021年度大規模計算機システム公募型利用制度の活動状況	111
・大規模計算機システム Q&A	112
利用規程等	115
・規程関係	117
大阪大学サイバーメディアセンター大規模計算機システム利用規程	117
大阪大学サイバーメディアセンター大規模計算機システム利用負担額一覧	119
大阪大学サイバーメディアセンター大規模計算機システム試用制度利用内規	121
大阪大学サイバーメディアセンター大規模計算機システム利用相談員内規	121
・附表	122
大規模計算機システム ホスト一覧	122
スーパーコンピュータSQUID、OCTOPUSのジョブクラス一覧	122
2020年度大規模計算機システム稼働状況	125
募 集	127
・大規模計算機システムを利用して行った研究・開発等の記事の募集について	129
・大規模計算機システム利用案内（サービス内容・サービス時間等）	130

— スーパーコンピュータシステム SQUID —

特 集

- ・高性能計算・データ分析基盤システム
(SQUID: Supercomputer for Quest To Unsolved Interdisciplinary Datascience)
～わが国の学術・産業の発展を支える研究基盤の実現に向けて～ 3

伊達 進 大阪大学 サイバーメディアセンター

高性能計算・データ分析基盤システム (SQUID: Supercomputer for Quest To Unsolved Interdisciplinary Datascience) ～わが国の学術・産業の発展を支える研究基盤の実現に向けて～

伊達 進
大阪大学 サイバーメディアセンター

1. はじめに

大阪大学サイバーメディアセンター（以下、CMC）は、2014年11月に導入されたベクトル型スーパー コンピュータ SX-ACE [1]の後継機として、2021年5月より高性能計算・データ分析基盤システムの運用を開始した。本センターでは、この高性能計算・データ分析基盤システムを通じて、我が国の学術・産業を支える研究者による未解決の学際的なデータサイエンス問題への探求を支援できるよう決意と願いを込めて、Supercomputer for Quest to Unsolved Interdisciplinary Datascience (SQUID)と命名した。

このSQUIDは総理論演算性能16.591ペタフロップス(Peta Flops)、つまり、浮動小数点演算を1秒間に1京6591兆回実行可能な演算性能を有する本センター初の10ペタフロップス超の性能を有するスーパー コンピュータである。この性能値は、一世代前のSX-ACEの総理論演算性能423テラフロップス(Tera Flops)と比較すると、約40倍向上した数字であり、同時に、本センターが国内屈指の演算性能を有するスーパー コンピュータの導入に成功したことを見示している。

HPCジャーナル読者の方々の多くはご存知かもしれないが、国立大学でのスーパー コンピュータシステムの導入は非常に長い時間と労力のかかる仕事となる。国立大学では、一定以上の金額や性能を超えるスーパー コンピュータを導入する場合、特定調達という枠組みで、導入したいスーパー コンピュータの仕様書の作成、導入すべきスーパー コンピュータが満たすべきベンチマークテストの設計を行う必要がある。その後、本センターで作成した仕様書やベンチマークを基に、スーパー コンピュータシステムを提案できる候補ベンダらが仕様書を満たす提案と見積もり金額を作成し、入札期日までに入札を行

うこととなる。その後、複数の候補ベンダらの提案が仕様書を充足しているかについて審査し、その充足度合いがあらかじめ仕様書やベンチマーク作成時に作成されていた得点表に基づき、技術点として点数化される。点数化された提案は所掌事務課に戻され、入札金額に基づいて得点化された価格点とあわせて評価され、最終的な落札者が決まる。厳密にいえば、所掌事務課が想定する落札金額と折り合いがつかない場合、再入札が行われるなどの流れがあるようだが、基本的な流れは上記の通りである。

このような調達の進め方は候補となるベンダ間の公平性と価格競争を促すことに目的の一因があることから説明できる。このような国が定めたルールに基づいてスーパー コンピュータシステムを導入しなければならないため、例えば、3ヶ月後に新製品として発売される、このプロセッサとあのアクセラレータを1000基導入して、などと、簡単にはできないのである。それゆえ、国立大学のスーパー コンピュータの調達では、導入するスーパー コンピュータシステムの導入時期をにらみながら、限られた予算で将来可能であろう性能値を推測しつつ、利用できるであろう製品・ソリューションを仕様書に落とし込んでいくこととなる。この仕様書の作成やベンチマークの設計が、導入されるスーパー コンピュータシステムを決定づけることとなり、調達を担当する教職員が最も労力と時間をかける部分となる。逆に言えば、ここに労力と時間をかけず手を抜いてしまえば、仕様書が非現実的な技術要求を含んでしまい、その結果不調となる場合もある。この場合、調達手続きを最初あるいは途中からやり直したり、新しいスーパー コンピュータの導入を待ち望んでいる利用者を失望させてしまう。一方、手を抜いて作成した仕様書でも、もちろん、その仕様をみたすスーパ

一コンピュータがどこかのベンダから導入されうる。しかし、この場合、調達金額に見合はずコストパフォーマンスが悪いスーパーコンピュータであったり、時代遅れのテクノロジーを採用したスーパーコンピュータであったり、利用者にとって使い勝手の悪いスーパーコンピュータが導入されるといった結果が起こる。こうした場合、直接的な被害を被るのはセンターの利用者であり、ひいてはわが国の国民の血税を無駄遣いしてしまうことになる。それゆえ、数十億円規模のスーパーコンピュータシステムの調達を担当する教職員は、調達失敗の不安感に苛まされながら、強い使命感と責任感で調達に向かい合わなければならぬのである。

今回の SQUID も例外ではなく、調達には著者が所属する応用情報システム研究部門教員、情報推進部情報基盤課技術系職員、情報推進部情報企画課職員、契約所掌課職員、本センターが設置した仕様策定委員会、技術審査職員委員会の教職員ら多くの関係者が一致団結して取り組んでいる。とりわけ、著者は、SQUID の構想立案、設計において中心的な役割を担ってきた。

手元のメモから過去を振り返ってみると、われわれは 2017 年後半頃より、将来導入すべきスーパーコンピュータ導入に向けた技術調査・検討を開始している。それ以降、入札候補ベンダだけでなく、スーパーコンピュータを構成するプロセッサ、アクセラレータ、ネットワーク、ソフトウェア等の構成技術を供給しうる候補ベンダとの打ち合わせ・情報交換を継続的に何度も行ってきた。同時に、導入するスーパーコンピュータがどうあるべきか？といったこともまた仕様策定員委員会を中心に議論・検討をつづけてきた。その結果、ほぼ 4 年の月日を経て、国内屈指の性能を有するスーパーコンピュータ SQUID を導入することに成功したのである。

以前の HPC ジャーナルで記載した OCTOPUS の特集記事 [2] にも記載したが、その時と同じくあえて同じ言い回しを使いたい。自画自賛のようであつともないが、SQUID はいま CMC が導入できる最高のスーパーコンピュータシステムである。限られた予算内で当初想定していた性能目標を達成するとと

もに、次世代のスーパーコンピュータにつなげることができる新しいチャレンジも盛り込むことができた。事実、後述するが本調達の一つのチャレンジとして導入したクラウドバースティング機能は本調達以降に行われている他大学計算基盤センターの調達にも盛り込まれ、このことは本センターのスーパーコンピュータの設計が他大学のスーパーコンピュータを先駆していることを示しているに他ならない。また、もう一つの新しいチャレンジでもあるデータ集約基盤 ONION については、すでに学内外の研究者の高い関心と興味が寄せられ始めている。

くどいようであるが、再度記載する。スーパーコンピュータの調達は、多大なる労力と時間をかけて行う。担当する教員は強い使命感と責任感で調達に尽力している。一方、こうした調達は、“ただの業務”にすぎないという教員もいるし、一生懸命やつても評価されないという教員もいる。事実、大学教員の公募などでこうした調達経験などが考慮・評価されることはほとんどない。著者自身も評価されている実感はほとんどなく、調達にまわす時間や労力を研究に回して論文を一つでも書いた方が自身の業績やキャリアパスに有益であろうと心底思う。しかし、著者の所属するサイバーメディアセンターはわが国の研究者が学術研究・教育に伴う計算及び情報処理を行う全国共同利用施設としてスーパーコンピュータを提供していくことを目的としており、著者はその目的遂行のための中心的なポストにある。そうした使命感から、自身の心底にある思いと戦いながら、大阪大学ひいてはわが国の学術・産業の発展を支える研究基盤を構想し、2017 年に OCTOPUS、2021 年に SQUID を実現してきた。再度記載するが、これらのスーパーコンピュータは、限られた予算の中で大阪大学ひいてはわが国の学術・産業の発展を加速させができる最高のスーパーコンピュータであり、そうあってほしいと願っている。

本稿では、CMC のスーパーコンピュータ事業の要であるスーパーコンピュータ調達の記録、また、当該調達の後任者への引き継ぎ・情報共有という視点も含めて、SQUID 導入の背景、SQUID 調達概要を記したのち、SQUID の構成・特徴について記したい。

徒然なるまま記すので、読みにくい部分があるかもしれないが、ご容赦いただければ幸いである。なお、SQUID の構成・特徴についてのみ関心がある方は、本稿の前半部を読み飛ばしていただければ幸いである。

2. SQUID 導入の背景・経緯

2.1 CMC のスーパーコンピューティングシステムを取り巻く背景

本センターでは、2017 年 12 月にペタフロップス級ハイブリッド型スーパーコンピュータ OCTOPUS (Osaka university Cybermedia cenTer Over-Petascale Universal Supercomputer) [3] の運用を開始した。OCTOPUS 導入当時、OCTOPUS の前身であるスカラ型スーパーコンピュータ HCC (汎用コンピュータクラスタ: Hanyou Computer Cluster) [4] は、スーパーコンピュータとしての基本的な要件を満たすことができない状況であり、スカラ型スーパーコンピュータを期待する利用者の皆様方を失望させる結果となっていた。その結果、本センターのスカラ型スーパーコンピュータの利用者はほとんどいない状況になってしまっていた。それゆえ、総計 300 ノードを超える OCTOPUS 導入に際しては、このスーパーコンピュータは利用者に使ってもらえるだろうか? という不安もあった。しかし、OCTOPUS 導入当初こそ比較的余裕があったものの、導入後初の年度末となる 2018 年 1-3 月頃には、汎用 CPU ノード群、GPU ノード群、Xeon Phi ノード群、大容量主記憶搭載ノード群のすべてのノード群で 80 % 以上の利用率を記録するような状態が継続する状況となっていた。その翌年度においては、年度始めの 4-5 月頃には利用率が一時的に低下する傾向がみられたが、それ以降は定常にどのノード群も利用率が高い状態が継続し、年間を通じて常にその状態を維持していた。当初、われわれはこのような高負荷状態を OCTOPUS 調達の成功の証であると喜んでいたが、ジョブの待ち時間が定常に長くなってしまい資源不足の状況に陥ってしまっていた。この傾向は年々激化傾向にあり、2019 年度、2020 年度においては、遅くとも 8 月には、年間で提供できる計算資源量が

売り切れてしまうという状況が発生してしまう深刻な資源不足の状態であった。つまり、利用者の計算需要に対して供給量が不足してしまい、利用者である研究者の研究活動に支障を与えててしまう状況となっていた。

一方、今回導入した SQUID の前身である SX-ACE は、2014 年度に導入したベクトル型スーパーコンピュータであった。この SX-ACE は、OCTOPUS 導入時、多少老朽化が進みつつある状況ではあったが、気象・気候、流体シミュレーション等の高い演算性能とメモリバンド幅のバランスを要求するプログラムをお使いの利用者に対しては好評なシステムとなっていた。加えて、SX-ACE は比較的資源量に余裕があり、ジョブ投入からの待ち時間も現実的な時間内に収まっていた。それゆえ、SX-ACE をお使いの利用者の満足度は非常に高いものであった。しかし、その一方、SX-ACE に対して否定的な意見をもつ利用者もいた。例えば、研究開発コミュニティで開発・公開されるオープンソースソフトウェアやライブラリを利用して研究開発を行う利用者は、それらのソフトウェアやライブラリを SX-ACE に移植することができないという状況が多々発生していた。また、たとえ移植できたとしても、インテル製プロセッサよりも実行時間が遅くなってしまうという状況も発生していた。これは SX-ACE が NEC 製の独自のオペレーティングシステムを採用していたこと、ダイナミックリンクをサポートしていないかったこと、NEC 製の独自ベクトルプロセッサであったことなどが起因している。こうしたことから、SX-ACE を利用できない利用者からは、次期スーパーコンピュータには、汎用的なプロセッサやアクセラレータを搭載した大規模なスーパーコンピュータを希望する声が高まる状況にあった。とりわけ、OCTOPUS が導入され高い利用率を継続するようになると、ますます OCTOPUS と同様な汎用型のスーパーコンピュータを SX-ACE の後継機として切望する利用者の声が高まる傾向にあった。

2.2 学術的な背景

SQUID 向けた検討・議論を開始した 2017 年後半期においては、数値解析・シミュレーションといったキーワードに代表される高性能計算(High Performance Computing)分野だけでなく、AI（人工知能：Artificial Intelligence）、ML（機械学習: Machine Learning）、DL（深層学習: Deep Learning）といったキーワードに代表される高性能データ分析(High Performance Data Analysis)分野の研究が急速に活発化する傾向にあった。その後、先進的な研究開発では、高性能計算と高性能データ分析を融合しようとする試みも報告されつつあった。例えば、高性能計算実行中に中間結果に対して AI あるいは DL といったデータ分析技術を適用することにより、それ以降の計算を取りやめるかどうかを判断するといった試み、あるいは、大規模なデータを取り扱う AI エンジンの開発に、複数の GPU ノードを併用する高性能計算技術を応用するといった試みはその一例としてあげることができる。

また、2.1 節で記載したが、利用者である研究者の計算ニーズはますます多様化傾向にあった。事実、次期スーパーコンピュータに対するアンケートを通じて、次期スーパーコンピュータが搭載すべきプロセッサやアクセラレータについて調査を行ったところ、ベクトル型プロセッサ、NVIDIA 製 GPU、インテル製プロセッサ、AMD 製プロセッサ、ポスト京プロセッサ、FPGA 等の回答がえられている。このような利用者の多様化する計算ニーズを次期スーパーコンピュータシステム SQUID でどのように収容するかが課題となっていた。

また、SQUID 調達では、急速に広域化・グローバル化する学術研究に対応することが課題となりつつあった。今日の学術研究では、同一の大学や研究機関というだけでなく、国内外の大学や研究機関で共同研究体制を形成して研究を推進することが日常的になりつつある。また、こうした研究は、大阪大学の OU ビジョン [5] に示されるように、産業と学術の共同・共創活動として行われることも期待され、さらに、こうした活動は新たな社会価値創造にむけて加速・発展していくことが求められる。こうした

ことから、SQUID 調達においては、そのような広域化・グローバル化する学術研究を支える計算基盤としてどのようなスーパーコンピュータであるべきかを考えることが課題となっていた。

また、一部の利用者からは、スーパーコンピュータシステムへのデータ移動の容易化を希望する声が寄せられていた。OCTOPUS 以前のスーパーコンピュータでは、予算的な制約もあり、スーパーコンピュータシステムへのデータ移動、あるいは、スーパーコンピュータシステムからのデータ移動は SCP や FTP といった CLI (コマンドラインインターフェース : Command Line Interface) による方法しか提供していなかった。それゆえ、上述した広域化・グローバル化する学術研究を鑑みつつ、SQUID 調達においても、利用者のデータ移動ニーズを充足できるデータ基盤をどのように提供するのかもまた重要な課題となっていた。

2.1 および 2.2 節に記した背景のもと、スーパーコンピュータシステム SX-ACE の契約更改をターゲットとして、新スーパーコンピュータ SQUID の導入に向けた検討・議論を 2017 年後半期より本格的に開始した。

3. 「高性能計算・データ分析基盤システム」に向けた調達

3.1 調達概要

本センターでは約 4 年近くの歳月を費やし、SQUID の導入に向けた検討・議論を経て準備を重ねてきた。その調達活動の経緯について、以下に記す。

SQUID の前進となる SX-ACE は 2019 年 11 月に契約満了（実際は、スーパーコンピュータが利用できない空白時間が長くなってしまうと困るという利用者の声を最大限に配慮して、規模を縮小しながらの契約延長をしており 2021 年 2 月末日までサービスを提供した。）となることから、次期スーパーコンピュータに向けた調達準備について 2017 年度後半期より調査・検討を開始した。次期スーパーコンピュータに向けては、2 節に記載した高性能データ分析に対する期待と関心を背景に、2016 年度に本センターが主催した Cyber HPC Symposium [6] で取りあ

げたテーマでもある、高性能計算と高性能データ分析の融合を目指すという視点から、調達名称を「高性能計算・データ分析基盤システム」と設定した。仕様策定委員会設置後も、SX-ACE の契約満了予定の 2019 年 11 月頃利用可能なプロセッサ、アクセラレータ、メモリ、相互結合網等のスーパーコンピュータ構成要素技術についての調査を継続し、本センターで構想するスーパーコンピュータについてまとめた導入説明書を作成した。この導入説明書を基に、ベンダ企業からの意見を招請することを目的とした導入説明会を 2018 年 5 月 8 日に開催した。

その後、提案ベンダから提出された資料を精査するとともに、日々更新し続けるスーパーコンピューティングシステム技術動向を勘案し、「高性能計算・データ分析基盤システム」のターゲットを 2019 年 11 月から 13 ヶ月延長して 2020 年 12 月に再設定することを決定した。その後、仕切り直しとなる 2 回目の導入説明会を 2019 年 6 月 4 日に本センター吹田本館 2 階大会議室で開催し、再度ベンダ企業からの意見を招請した。

一方、本センターのスーパーコンピュータの利用者および利用候補者がどのような次期スーパーコンピュータを希望するかを把握するため、2019 年 8 月 30 日～9 月 30 日の 1 ヶ月間、利用者および本学の教職員に対して次期スーパーコンピュータ希望アンケートを実施している。アンケートでは、2020 年 12 月頃に利用可能な最新プロセッサ、アーキテクチャ、ソフトウェアだけでなく、本センターに対するユーザ支援についても幅広く意見を集約した。

その後、各社より提出された意見および上記次期スーパーコンピュータ希望アンケート結果を参考にしながら、再度 2020 年 12 月頃に利用可能なプロセッサ、アクセラレータ、メモリ、相互結合網等のスーパーコンピュータ構成要素技術についての調査を通じて、本センターにおいて仕様書案の作成を進めていた。しかし、仕様書案作成を銳意進めている間の 2019 年 11 月に開催された、国際会議・展示会 SC で発表された最先端技術の動向を勘案し、次期スーパーコンピュータシステムの導入時期を 2020 年 12 月から 3 ヶ月延長し 2021 年 2 月と再設定した。ス

ーパーコンピュータを構成するプロセッサや最新 GPU の選択の幅をひろげ、本センターにとって最良の高性能計算・データ分析基盤システムの導入のために、本センター設置の仕様策定委員会で判断した。

導入時期を 2021 年 2 月に設定した仕様書案を作成し、2019 年 12 月 3 日に仕様書案説明会を開催し、各ベンダ企業からの意見招請を行った。本センターでは、この仕様書案説明会で配布した仕様書案に対して提出された各ベンダ企業からの意見、および、上述した 2019 年度に実施した次期スーパーコンピュータ希望アンケートの結果を基に、最終仕様書を作成すべく準備を進めた。その結果、2020 年 3 月 18 日の仕様策定員会において、次期スーパーコンピュータシステムの導入時期を 2021 年 5 月と再設定することとなった。最終仕様書確定にむけ、仕様書案の修正・加筆を繰り返しながら、完成度を高めるべく尽力した。

2020 年度初めに最終仕様書が完成すると、7 月 6 日に入札官報公告をおこない、その 1 週間後の 7 月 13 日に最終仕様書を説明する入札説明会を実施した。入札説明会は、新型コロナウイルス感染症拡大への懸念、および、社内事情により出張のできない企業の方々への配慮から、本センター吹田本館 2F 大会議室およびオンラインのハイブリッドな環境で行った。

本調達では、2020 年 8 月 26 日に入札期限が設定されていたが、当日までに 2 社の応札があった。その直後より技術審査委員会による審査が行われ、10 月 14 日に開札となった。なお、当初予定では、10 月 7 日に開札予定であり、1 週間開札を延長した。これは、入札参加企業より仕様書に対する技術的な疑義がよせられたため、本センター側で当該疑義が何ら問題がないことを実証する期間を設けたことによる。その後、11 月 24 日には、落札官報公示が行われ、日本電気株式会社に落札されたことが報告された。

3.2 SQUID 調達方針

1 節に記載した通り、スーパーコンピュータの調達は、導入時期頃に利用可能な技術・ソリューション、またそれらの技術動向に関する綿密な調査を行

いつつ、本センターで導入すべきスーパーコンピュータを調達予算内で構想し、仕様書に落としこまなければならぬ。スーパーコンピュータの調達ではこの仕様書の完成度が、導入されるスーパーコンピュータの成否を決定づけることになる。

今回の高性能計算・データ分析基盤システムの調達においては、われわれは下記 5 つのチャレンジを設定して調達を行った。

- (1) HPC・HPDA 融合
- (2) クラウド連動・連携機能
- (3) セキュアコンピューティング環境
- (4) データ集約環境
- (5) テイラー型計算

以下、これらについて説明する。

(1) HPC・HPDA 融合

2 節で記載したように、数値シミュレーション、数値解析といったキーワードに示される高性能計算分野に加え、AI、ML、DL 等のキーワードに示される高性能データ分析分野からの計算ニーズが急速に高まっている。そういった背景から、本センターでは、SX-ACE の後継機には、HPC 分野だけでなく HPDA 分野からの多様な計算ニーズを収容することが求められた。さらに、今日では、HPC for AI、AI for HPC といった言葉に示されるように、HPC と HPDA の両分野は密接に関連しつつある。さらに、多種多様な IoT (Internet of Things) センサを利活用したビッグデータ解析といったことも盛んに行われている。

一般的に、HPC 分野の研究者がスーパーコンピュータに求める要求と HPDA 分野の研究者がスーパーコンピュータに求める要求は大きく異なる。例えば、HPC 分野の研究者が要求するソフトウェアとしては MPI (Message Passing Interface)、OpenMP などを利用する一方、HPDA 分野の研究者が要求するソフトウェアとしては Jupyter notebook、TensorFlow、PyTorch などがあげられ、大きく異なる。また、利用するプログラミング言語も HPC 分野の研究者の多くは、C、Fortran などを利用するのに対し、HPDA 分野の研究者は Python、Java などを主に利用する。さらにいえば、HPDA 分野の研究者は HPC 分野の研究

者が当然のように利用できるスケジューラによるバッチ処理に対する強い抵抗感があり、インターラクティブ処理に対する強い要求がある。

このような考察や検討を経て、本調達では、HPC 分野および HPDA 分野の研究者がともにそれぞれの分野の計算を行うことができ、また HPC と HPDA を融合した新たな計算手法にチャレンジできる HPC・HPDA 融合計算基盤としてのスーパーコンピュータの実現を目指した。

(2) クラウド連動・連携機能

近年では、IaaS (Infrastructure As A Service) 型クラウドが手軽に利用可能となってきた。例えば、マイクロソフト社の提供する Azure [7]、オラクル社の提供する Oracle Cloud Infrastructure(OCI) [8]、Amazon 社の提供する AWS [9] などはその一例である。これらの IaaS 型クラウドの特徴は、利用者が自分自身の計算環境を即座に構築・利用できる点にある。例えば、利用者はブラウザ上から利用したい Linux あるいは Windows の仮想計算機イメージを選択し、希望する規模で展開し、利用者自身の計算環境を構築することができる。

本センターでは、この IaaS 型クラウドの特徴を利用して、既設 OCTOPUS の高負荷状態を回避し、利用者の待ち時間の縮小を提言することを目的としたクラウドバースティング機能の研究開発を続けてきた [10, 11, 12]。その結果、このクラウドバースティング機能を利用することで、OCTOPUS の高負荷時に、OCTOPUS に投入された計算要求 (ジョブ要求) を Azure および OCI にオフロードすることに成功している。

今回の調達では、本格的なスーパーコンピュータの運用に耐えうる、当該クラウドバースティング機能を中心としたクラウド連動・連携機能を次期スーパーコンピュータの一機能として実戦配備することを目指した。これにより、例えば、高負荷時のクラウドへのオフロードだけでなく、次期スーパーコンピュータ契約期間中に最新のプロセッサやアクセラレータが利用可能となった時、IaaS 型クラウドで提供されるそれら最先端技術を早期に実戦配備し、利

用者に提供することも可能となる。

(3) セキュアコンピューティング環境

2節で記載したように、近年では AI、ML、DL に代表される HPDA 分野の研究開発が活発化傾向にある。その結果、様々な学術研究分野において、AI、ML、DL の応用を試みる動きがある。こうした動きは、医学、歯学、薬学といった高い秘匿性を有する研究分野においても例外ではなく、当該分野が有する大容量データに対して高性能データ分析を適用することへの高い期待がある。しかし、高秘匿性・高機密性が求められるデータを扱う学術研究分野においては、多くの利用者が共有して利用するスーパーコンピュータを利用することはデータセキュリティ上の問題があり困難となっている現状がある。このことは、わが国の学術、産業の発展・加速を妨げる一要因となりえ、早急に解決すべき課題となっている。

上述の背景と考察から、本調達では、高秘匿性・機密性を扱う分野の研究者が、安心してデータ処理を行うことができるセキュアコンピューティング環境の試験導入を目指すこととした。

(4) データ集約環境

本センターのスーパーコンピュータ環境では、利用者のローカル環境とスーパーコンピュータ間のデータ移動のために SCP および FTP を提供している。利用者のローカル環境からスーパーコンピュータ環境のログインノードあるいはフロントエンドノードに上述のプロトコルを用いて接続し、データを双方に移動できる。SCP や FTP にはオープンソースとして利用できるクライアントソフトウェアも多くあり、これらのプロトコルに詳しくない利用者でも、クライアントソフトウェアの提供する GUI (Graphical User Interface) 経由で直感的にデータ操作が可能である。

しかし、2017 年度に OCTOPUS を導入以降、新たにスーパーコンピュータの利用を開始した利用者も増加していること、また、近年の AI や ML といった高性能データ分析を活用とする研究活動の活発化も

あり、より簡易的にデータをスーパーコンピュータに集約したいという要望もみられるようになった。また、今日では、新型コロナウイルス感染症拡大の影響はあるが、国内外の研究者と連携した共同研究の枠組みの中でスーパーコンピュータを利用してくるケースが多く見られるようになってきた。学術機関の研究者だけでなく、企業の研究者らとも共同研究もまた活発化傾向にある。このような国際共同研究や産学共同研究では、共同研究に参画する研究者の所属する研究機関、大学、さらには、民間クラウドベンダのクラウド環境間でプログラムや入力データおよび計算結果などのデータを移動・共有することが日常茶飯事となりつつある。

本調達では、このような背景から、スーパーコンピュータをグローバル化・広域化する学術研究で要求される研究環境を構成する一計算基盤に位置付け、本センターのスーパーコンピュータに対して簡易にデータを集約することのできる機能性を実現することを目指した。さらに、利用者、クラウド、スーパーコンピュータ間でこれら研究データを自由に共有・移動させることができる仕組みの実現を目指した。

(5) テイラーメイド型計算

本センターのスーパーコンピュータ上では多種多様なプログラムが稼働している。本センターのスーパーコンピュータ上で一から開発されたプログラムもあれば、利用者環境で開発されたプログラム、オープンソースとして利用可能なプログラムなど多種多様なプログラムがスーパーコンピュータ上で動作することが期待されている。事実、2017 年度に OCTOPUS を導入以降、本センターにはオープンソースとして利用可能な各種プログラムの導入にむけた相談が数多く寄せられている。本センターでは、それらに個別にベストエフォートによる対応を行ってきてはいる [13] が、少ない人数でのスーパーコンピュータの運用を行っているため、今後さらに相談件数が増えると対応できなくなることも予測される。

オープンソースとして公開されているプログラム

や、利用者環境で開発されるプログラムの場合、コンパイラ、ライブラリ、ソフトウェア、アプリケーションのバージョンの違いによってスーパーコンピュータへの導入が難しい場合がある。一般権限で動作するソフトウェアやアプリケーションの場合、利用者のホームディレクトリ環境で行うなどの方法で回避できる場はあるが、コンパイラなどのシステムソフトウェアやオペレーティングシステムなどの相違はインストールが困難あるいは不可能な場合もある。

一方、今日では、仮想計算機(Virtual Machine)技術や、コンテナ(Container)技術などが一般的に利用可能的となってきている。VMWare や KVM (Kernel Virtual Machine)などはすでにプロダクションレベルでのサーバ運用でも利用されているし、Docker はデファクトスタンダードなコンテナ技術として様々なクラウドサービスでも利用されている。HPC の分野でも、仮想計算機技術やコンテナ技術は近年でも利用されるケースが増えており、これらの技術を前提とした機能を具備するプロセッサも存在し、性能面でのオーバヘッドも小さくなっている。しかし、これらの技術は、一般的に管理者権限を必要とするものが多く、これらをスーパーコンピュータ上で利用可能にした際、システムセキュリティ上の問題がある。

しかし、本調達では、利用者の計算ニーズ・要求の多様化は今後ますます進展していくと考え、利用

者が利用者自らの計算環境をテイラーメイドできる環境が必要不可欠と考えた。それゆえ、本調達では、テイラーメイド型計算環境の利用者への提供は必須と位置付けている。

4. SQUID の概要

4.1 概要

3 節で記した調達の結果、本センターでは、総理論演算性能 16.591 PFlops の高性能計算・データ分析基盤システム SQUID の調達に成功した。SQUID (表 1) は、汎用 CPU ノード、GPU ノード、およびベクトルノード、20 PB のハードディスクと 1 PB の SSD から構成される大容量ストレージが 200 Gbps の相互結合網で接続されるハイブリッド型スーパーコンピュータである。後述するが、汎用 CPU ノードおよび GPU ノードに搭載されている。

CPU、GPU ノードに搭載されている GPU、ベクトルノードに搭載されているベクトルプロセッサはいずれも最新の製品が搭載されている。とりわけ、汎用 CPU ノードに搭載される CPU については、SQUID の 2021 年 5 月の稼働開始直前の 4 月 6 日（米国時間）に米国 Intel 社によって第 3 世代 Xeon Scalable Processor として発表[14]されたばかりの製品となっており、まさに最新製品である。

表 1: SQUID の構成概要

ノード構成	汎用 CPU ノード 1520 ノード(8.871 PFlops)	プロセッサ : Intel Xeon Platinum 83686 (Ice Lake / 2.4 GHz 38 コア) 2 基 主記憶容量 : 256 GB
	GPU ノード 42 ノード(6.797 PFlops)	プロセッサ : Intel Xeon Platinum 8368 (Ice Lake/ 2.4 GHz 38 コア) 2 基 GPU : NVIDIA HGX A100 8GPU ボード 主記憶容量 : 512 GB
	ベクトルノード 36 ノード(0.922 PFlops)	プロセッサ : AMD EPYC 7402P (ROME / 2.8 GHz 24 コア) 1 基 主記憶容量 : 128 GB ベクトルプロセッサ : NEX SX-Aurora TSUBASA Type20A 8 基
相互結合網	Mellanox InfiniBand HDR (200Gbps)	
ストレージ	DDN EXAScaler (Lustre/ HDD 20.0 PB, NVMe SSD 1.2 PB)	

また、GPUについても、本記事執筆時点においては、国内の学術計算基盤センターに大規模に導入された実績はいまだ少ない状況であり、最先端のテクノロジーとなっている。ベクトルプロセッサについてはNEC SX-Aurora TSUBASA Type20A[15]という最新モデルが導入されている。このように稼働時点で最新・最先端の技術を結集したスーパーコンピュータを導入できたことは、まさに仕様策定に長い時間と多大なる労力を費やした結果である。

さらに、今回導入する高性能計算・データ分析基盤システム SQUID には、3 節で記したように、これまでのスーパーコンピュータ調達にはなかった 5 つのチャレンジを盛り込んだ。これらは後述するが、SQUID ではすべてのチャレンジが実現されている。本記事執筆時点においては、新しいチャレンジを実現できる機能についてはまだ利用者に周知が行き届いていない部分もあるが、本センターでは今後の運用を通じて利用者の皆様方に積極的にご利用いただきたいと考えている。

さて、SQUID の性能について冒頭に少し触れたが、その性能値がどのような意味をもつのかを気にされる読者の方も多いと思うので、ここで再度性能面についてふれる。結論から言うと、この 16.591 PFlops という性能は、国内でも屈指のものである。もちろん国内の最大のスーパーコンピュータは理化学研究所計算科学研究センターが運用する富岳(理論演算性能: 537 PFlops) や、産業技術総合研究所の ABCI (理論演算性能: 54 PFLOPS)、東京大学と筑波大学が共同で運用する最先端共同 HPC 基盤施設の Oakforest-PACS (理論演算性能: 25 PFlops) とは比べ物にならないが、理論演算性能 15 PFLOPS 超のスーパーコンピュータを有する学術研究機関・大学は宇宙航空研究開発機構、名古屋大学、海洋研究開発機構等数えるほどしかないので現状である。このことからも本センターの SQUID のポテンシャルをご理解いただけるであろうか。

さらに、2021 年 6 月に開催された国際会議・展示会 ISC2021 (オンライン開催) で発表された、世界のスーパーコンピュータの性能をランキングする TOP500[16]においては、性能評価指標 LINPACK[17]

による性能評価結果をエントリーした結果、SQUID の汎用 CPU ノード群だけで世界 67 位という記録を残している[18]。また、同様に HPCG [19]という性能指標によるランキングでも 54 位[20]、また電力効率のよい高性能計算の実現を評価する Green500 においても世界 57 位を記録する結果となった[21]。SQUID の全部ではなく一部の汎用 CPU ノード群のみを用いて世界のスーパーコンピュータの性能を評価するランキングで上位の成績を収めていることからも SQUID が高い性能を有することが示されている。



図 1: SQUID の外観 1



図 2: SQUID の外観 2

SQUID の外観を図 1、図 2 に示す。図 1 はラックに描画されたスーパーコンピュータ SQUID の“顔”となるラックペイントである。このラックに描画されたラックペイントは、2021 年 5 月に稼働を開始する前に、「スーパーコンピュータシステム SQUID ラックデザインコンテスト」[22]と称して、本センターで実施したコンテストでの最優秀賞の作品である。このコンテストは読者の皆様方は記憶にあるかもし

れないが、スーパーコンピュータシステムを一般の方に親しみを持ってもらうこと、スーパーコンピュータシステムの研究成果の一般の方へのアウトリーチや本センターのプレゼンス向上という視点から、OCTOPUS を導入した際に初めて実施した企画であり、導入するスーパーコンピュータシステムの顔となるべきラックデザインを一般公募するコンテストを今回の SQUID においても実施した。本コンテストでは、大阪大学サイバーメディアセンターが主催し、SQUID の導入業者となる日本電気株式会社が共催、SQUID を構成するプロセッサ、アクセラレータ、ストレージ、クラウド資源を供給する、インテル株式会社、エヌビディア合同会社、クラウディアン株式会社、株式会社データダイレクト・ネットワークス・ジャパン、日本オラクル株式会社、日本マイクロソフト株式会社が協賛し、事務局を担当する株式会社サイバースケッチが協力する体制にて、2021年2月15日を締め切りとして実施した。図1に示したラックペイントデザインは全59作品のなかから選定されたデザインである。図2の左面には、本コンテストに本センターのロゴとともに、本コンテストに共催、協賛してくれた各企業のロゴをプリントしている。本記事を掲載時点では、新型コロナ感染症拡大が猛威をふるっている状況であるため難しいが、この状況が改善すれば見学会などを通じて読者の皆様にもご覧いただける機会を提供できればと切に思う。

以下の節では、スーパーコンピュータ SQUID を構成する要素について解説する。

4.2 計算ノード

4.2.1 汎用 CPU ノード

SQUID の CPU ノードは、Intel Xeon Platinum 8368 プロセッサを 2 基、256 GiB の主記憶容量を搭載した計算ノードである。この Intel Xeon Platinum 8368 プロセッサは、Intel 社の Ice Lake 世代のプロセッサであり、2.4 GHz 38 コアを有しており、単体での理論演算性能は 2.918 TFLOPS となる。それゆえ、CPU ノード単体での理論演算性能は 5.836 TFLOPS となる。さらに、この SQUID には 1,520 基の CPU ノード

が搭載されているため、CPU ノード群全体の理論演算性能は 8.871 PFLOPS となる。この 8.871 PFLOPS という数字は、SQUID の総理論演算性能 16.591 PFLOPS の約 53.4 % となる。上述したが、この CPU ノード群だけで TOP500 では世界で 67 位の性能を有するスーパーコンピュータになっている。

この Ice Lake 世代の Intel 製プロセッサの最大の特徴は、PCI Express 4.0 (Gen4)に対応したことにある。これに伴い、CPU サーバでは、メモリチャネルも 8 チャネルまでサポートされており、メモリ帯域幅も増強されている。SIMD(Single Instruction Multiple Data)命令に関しては、OCTOPUS に導入されている Sky Lake 世代のプロセッサと同様に、AVX-512 命令セット[23]がサポートされている。そのため、512 ビットに拡張された SIMD は OCTOPUS と同様に利用することが可能である。



図3: NEC LX103Bj-8



図4: 汎用 CPU ノードを収容する Blade Enclosure

この CPU ノードは、NEC LX103Bj-8 という型番のサーバ（図3）として供給される。表2に NEC LX103Bj-8 の構成を示す。図4は NEC LX103Bj-8 を搭載する 8U の Blade Enclosure である。LX103Bj-8 には、上述した第3世代 Intel Xeon Scalable Processor

である Intel Xeon Platinum 8368 (2.40Ghz, 24 コア)が 2 基搭載されている (図 3 中央部)。その 2 基のプロセッサを取り囲むように、16 GiB の DDR4-3200 DIMM が 16 本が搭載されている。この LX103Bj-8 を図 4 に示す Blade Enclosure の 1 シャーシに 19 台を収容させる。この Blade Enclosure を 4 シャーシ組み上げ、1 ラックに搭載している (図 5)。SQUID の汎用 CPU ノード群は上述の通り 1,520 ノードであるため、合計 20 本のラックが本センターの IT コア棟に設置されている。なお、汎用 CPU ノードに搭載されたプロセッサは、OCTOPUS と同様に、液冷方式で冷却を行い、安定的に高性能が供給できるよう設計・実装を行なっている。図 5 に見えるラック前面の黒いホースは、冷却水をサーバ上のプロセッサに供給し、また、プロセッサの熱を回収した冷却水をサーバから回収するためのものである。なお、プロセッサの熱を回収した冷却水は、サーバ上部 Asetek 製 CDU (Cooling Distribution Unit)を通じて、サーバラックの設置されている IT コア棟のサーバ室の階下にある冷凍機に送られ、冷却されたのちにサーバラック CDU に戻ってくる仕組みになっている。

表 2: NEC LX103Bj-8 構成

プロセッサ	Intel Xeon Platinum 8368 (Ice Lake) x 2
メモリ構成	256 GiB (16GiB DDR4-3200 DIMM x 16)
ストレージ	240 GB SSD
NW I/F	InfiniBand HDR x 1, 25 G / 10GbE x 2, BMC
OS	Cent OS 8.2



図 5: 汎用 CPU ノードラック

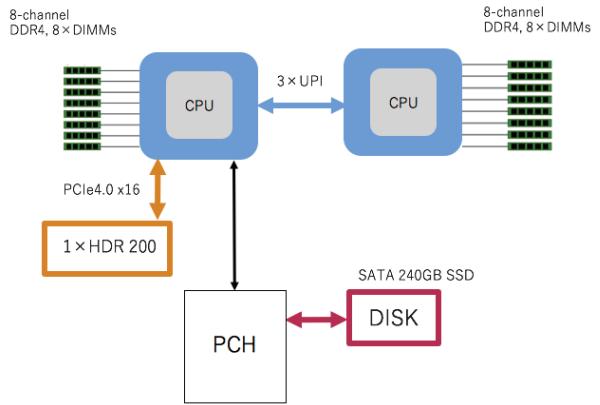


図 6: 汎用 CPU ノードブロック図

次に、内部構成について解説する。図 6 は LX103Bj-8 の内部構造を示したブロック図である。サーバ内では、2 基のプロセッサは UPI (Ultra Path Interconnect) 3 本によって接続されている (当該 CPU がサポートする最大の UPI 数である)。各リンクで 11.2 GT/s (Gigatransfer per second) × 3 での信号速度で転送が可能となっている。また、上述したが、SQUID の汎用サーバに搭載されている Ice Lake 世代のプロセッサは PCI Express 4.0 (Gen4)に対応しており、メモリチャネルも PCIe Express 3.0 (Gen3) 時代の 6 チャネルから 8 チャネルに拡大している。LX103Bj-8 では、2 個ある CPU ソケットのそれぞれから 8 チャネルメモリコントローラを経て 8 個の 16 GiB DDR4-3200 DIMM に接続されている構造である。それゆえ、1CPUあたりのメモリとの転送速度は、 $3200 \text{ MHz} \times 8 \text{ Byte} \times 8 \text{ ch} = 204.8 \text{ GB/s}$ となる。OCTOPUS の汎用 CPU ノードの 127.968 GB/s と比較すると、SQUID の 1 CPU あたりのメモリ転送速度は 1.6 倍向上していることになる。また、汎用 CPU サーバには、NVIDIA 製 Mellanox InfiniBand HDR (200Gbps)が搭載されているが、PCI Express 4.0 (Gen4) × 16 (256Gbps) で CPU と接続されているため、200 Gbps での高速通信がボトルネックなしに可能となっている。なお、図中にある SATA 240 GB の SSD はシステム領域として利用している。

4.2.2 GPU ノード

SQUID の GPU ノードは、Intel Xeon Platinum 8368 プロセッサを 2 基、512 GiB の主記憶、NVIDIA HGXA100 8 GPU ボード（開発コード: Delta）を搭載した計算ノードである。GPU ノードに搭載されているプロセッサは、CPU ノードに搭載されているプロセッサと同等であり、単体での理論演算性能は 2.918 TFLOPS となる。なお、この構成は、OCTOPUS で発生しているように汎用 CPU ノード群の混雑状況が激化し利用者の待ち時間が大きくなつた際に一次的に GPU ノードを汎用 CPU ノードとして開放するといったこと、また、利用者のプログラムの CPU ノードから GPU ノードへの移植を容易にするといったことを想定して設計されている。

GPU ノードの中核である NVIDIA HGX A100 8 GPU ボード（開発コード名：Delta）は、名前の示す通り、GPU アクセラレータが 8 基搭載されたボードである。1 個の A100 あたりは、8 GB の HBM2 (High Bandwidth Memory2) を 5 個、すなわち、HBM2 を 40 GB、108 個の有効化されたストリーミングマルチプロセッサ(SM)が搭載されている。その結果、HBM2 へのメモリバンド幅は 1.555 TB/s、理論演算性能は、倍精度で 19.5 TFlops となっている。

この数字を基に OCTOPUS に搭載されている NVIDIA Tesla P100 と SQUID で導入された A100 を単体で比較すると、メモリ帯域幅では 732 GB/s から 1.555 TB/s へ約 2.1 倍、メモリ容量では 16 GB から 40 GB へ 2.5 倍、理論演算性能（倍精度）では 5.3 TFlops から 19.5 TFlops へ約 3.7 倍の性能向上がみられることがわかる。さらに、ノード単位でみれば、OCTOPUS に搭載された Tesla P100 4 基の理論演算性能が 21.2 TFlops であるのに対し、SQUID に搭載された A100 8 基の理論演算性能は、OCTOPUS の GPU ノード 1 基あたりの GPU 演算性能の約 7.35 倍の 156 TFlops となっている。さらに、整理すれば、OCTOPUS の GPU ノード単体に搭載された CPU と GPU の総理論演算性能は 23.196 TFlops であるが、SQUID の GPU ノード単体の CPU と GPU の総理論演算性能は約 6.98 倍の 161.836 TFlops に性能向上していることになる。

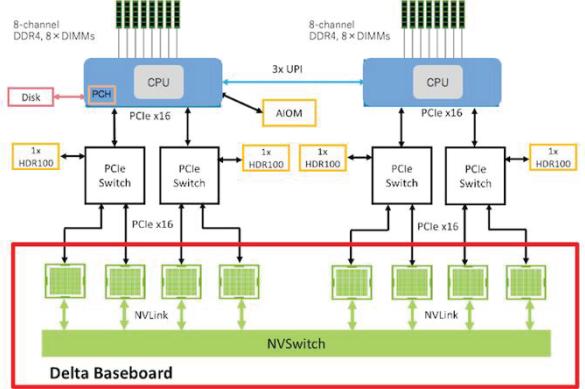


図 7: GPU ノード ブロック図

次に、GPU ノードの内部構成について解説する。図 7 に GPU ノードのブロック図を示す。CPU およびメモリの構成は、メモリサイズが違う点をのぞき、4.2 節で記載した汎用 CPU ノードと同一であるので、ここでの再度の説明は省略する。図中下部の黄緑色で囲まれた部分が GPU ノードの中核となる前述の Delta ボードである。この Delta ボードの最大の特徴は、8 基の A100 は NVIDIA 製の第 3 世代 NVLINK、および、これら NVLINK を収容し相互に接続する第 2 世代 NVSwitch から構成されている。NVLINK や NVLINK の仕様詳細については、NVIDIA 社のウェブサイト[24]やホワイトペーパーをご覧いただければと思うが、この第 3 世代の NVLINK では、仕様上、1 リンクあたり双方向で 50 GB/s のデータ転送が可能であり、第 2 世代の NVSwitch では最大 600 GB/s の通信が可能である。GPU ノードに搭載されている NVIDIA HGX A100 8 GPU ボード（開発コード名：Delta）の内部構成[25]を図 8 に示すが、各 A100 より 12 本の NVLINK が NVSwitch に接続されていることからも上記に示した性能値をお分りいただけると思う。

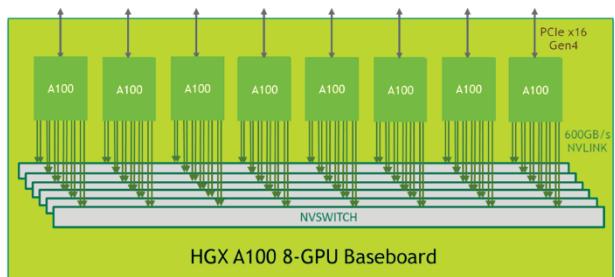


図 8: NVIDIA HGX A100 8GPU Baseboard [25]

また、GPU ノードでは、汎用 CPU ノードと異なる点として、相互結合網への接続が 200 Gbps から 400 Gbps となっている点があげられる。相互結合網への接続のために、GPU ノードからは 4 本の InfiniBand HDR 100 が用いられている。GPU との InfiniBand HDR 100 は、PCIe Gen4 x 16 で PCI スイッチ経由で実現されており、100 Gbps の帯域を確保している。GPU ノード内では、各 CPU ソケットあたり 2 本の HDR 100 が接続されており、相互接続網への接続は CPU ソケットに対して対照的な構成となっている。



図 9: NEC LX106Rj-4G

表 3: NEC LX106Rj-4G 構成

プロセッサ	Intel Xeon Platinum 8368 (IceLake) x 2
メモリ構成	512 GiB (32 GiB DDR4-3200 DIMM x 16)
ストレージ	240 GB SSD
NW I/F	InfiniBand HDR100 x 4, 25 G / 10 GbE x 2, BMC
GPU	NVIDIA A100 (SXM4) x 8 (Delta)
OS	CentOS 8.2

図 9 に GPU ノードの外観を示す。この GPU ノードは、NEC LX106Rj-4G という型番のサーバ（図 9）として供給される。表 3 に LX106Rj-4G の構成を示す。この GPU ノードは 4U サイズであり、図 7 に示すブロック図の構成で 2 基のインテル製 Ice Lake プロセッサ、および、NVIDIA HGX A100 8 GPU ボード（開発コード: Delta）が搭載される構成である。SQUID では、この LX106Rj-4G の 6 ノードが 1 ラックに搭載され、合計 7 ラックの GPU ノードが IT コア棟に設置されている（図 10: 奥から 2 番目から 7 ラック）。もちろん、この GPU ノードについても、搭載されているプロセッサ、および、GPU はすべて汎用 CPU ノードと同様に液冷方式により冷却し、高い性能を安定的に供給できるよう設計・実装している（図 11）。

クに搭載され、合計 7 ラックの GPU ノードが IT コア棟に設置されている（図 10: 奥から 2 番目から 7 ラック）。もちろん、この GPU ノードについても、搭載されているプロセッサ、および、GPU はすべて汎用 CPU ノードと同様に液冷方式により冷却し、高い性能を安定的に供給できるよう設計・実装している（図 11）。



図 10: GPU ノードラック



図 11: GPU ノードラック拡大図

4.2.3 ベクトルノード

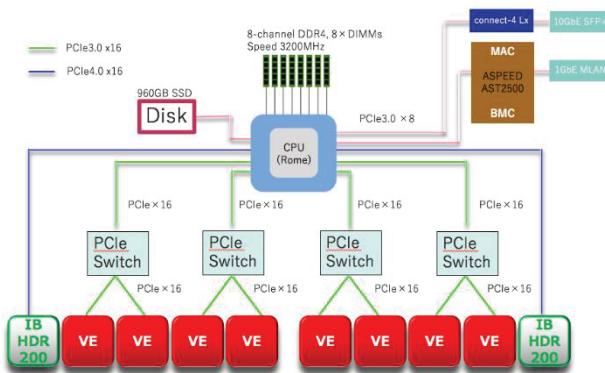
SQUID のベクトルノードは、AMD 製 EPYC 7402P (2.8 GHz, 28 コア) を 1 基、128 GB の主記憶、NEC 製 SX-Aurora TSUBASA Type20A を 8 基搭載した計算ノードである。この AMD 製 EPYC 7402P はコードネーム ROME として開発された、PCI Express 4.0 (Gen4) 対応の第 2 世代 EPYC であり、理論演算性能は 2.150 TFlops となる。



図 12: NEC SX-Aurora TSUBASA Type20A

ベクトルノードの中核であるベクトルプロセッサ NEC SX-Aurora TSUBASA Type20A（図 12）は、世界最速クラスのコア（倍精度での演算性能 307 GFlops）を 10 コア搭載しており、3.07 TFLops の理論演算性能を有する。また、このプロセッサには、8 GB の HBM2 を 6 個、すなわち 48 GB の HBM2 が搭載されており、1.53 TB/s のメモリ帯域幅が利用可能となっている。ベクトルノードはこのベクトルプロセッサを 8 基搭載しており、ベクトルノード全体の理論演算性能は 26.71 TFlops となる。

SQUID の前身となるスーパーコンピュータ SX-ACE では、256 GFlops の理論演算性能を有するベクトルプロセッサを搭載していた。図 12 に示す SX-Aurora TSUBASA Type20A は、前身の SX-ACE の約 12 倍の性能を有しており、さらに、SQUID と SX-ACE の単体ノードを比較すると、276 GFLOPS から 26.71 TFlops への約 96.78 倍の性能向上が得られていることになる。



次に、ベクトルノードの内部構成について解説する。図 13 にベクトルノード内のブロック図を示す。冒頭に記載したが、ベクトルノードに搭載されてい

る AMD EPYC 7402P は PCI Express4.0 (Gen4) 世代のプロセッサであり、8 チャネルのメモリコントローラ経由で 8 枚の 16 GiB DDR4-3200 DIMM が接続されている。このため、CPU とメモリ間の転送速度は、 $3200 \text{ MHz} \times 8 \text{ Byte} \times 8 \text{ ch} = 204.8 \text{ GB/s}$ となり、CPU ノードおよび GPU ノードと 1CPU あたりのメモリ転送速度は同等である。一方、CPU とベクトルプロセッサ(VE: Vector Engine)への接続は、PCIe Switch を経由する。具体的には、2 基のベクトルプロセッサが 1 個の PCIe Switch にそれぞれ PCI Gen3 × 16 (128 Gbps) で接続され、PCI Gen3 × 16 (128 Gbps) で CPU に接続される。

また、ベクトルノード単体は、GPU ノード同様に 400 Gbps で相互結合網に接続される構成である。この構成のため、IB HDR 200 の HCA (Host Channel Adapter) を 2 基搭載し、CPU と各 HCA は PCI Gen4 × 16 (256 Gbps) で接続されている。



図 14: NEC SX-Aurora TSUBASA B401-8

表 4: NEC SX-Aurora TSUBASA B401-8 の構成

プロセッサ	AMD EPYC 7402 (2.8Ghz/24c) x 1
メモリ構成	128 GiB (16GiB DDR4-3200 DIMM x 8)
ストレージ	960 GB SSD
NW I/F	InfiniBand HDR x 2
ベクトルプロセッサ	VE Type 20A x 8
OS	Cent OS 8.2

図 14 にベクトルノードの外観を示す。このベクトルノードは、NEC SX-Aurora TSUBASA B401-8 の

型番が付与されたサーバとして供給される。表 4 に NEC SX-Aurora TSUBASA B401-8 の構成を示す。このベクトルノードは 2U サイズであり、図 13 に示すブロック図の構成で 1 基の AMD 製 Rome プロセッサ、および、8 基の NEC SX-Aurora TSUBASA が搭載される構成である。図中赤く見える箇所が NEC SX-Aurora TSUBASA である。SQUID では、この SX-Aurora TSUBASA B401-8 の 18 ノードが 1 ラックに搭載され、合計 2 ラックのベクトルノードが IT コア棟に設置されている(図 15: 手前 2 ラック; 図 16)。このベクトルノードについても、搭載されているプロセッサおよびベクトルプロセッサはすべて汎用 CPU ノードや GPU ノードと同様に液冷方式により冷却し、高い性能を安定的に供給できるよう設計・実装されている。



図 15: ベクトルノードラック (表)



図 16: ベクトルノードラック (裏)

4.3 データ集約基盤 ONION

4.3.1 概要

3.2 節調達方針において、データ集約環境が一つのチャレンジであることについて記載した。これまでのスーパーコンピュータ調達のデータ基盤に対しては、いかに本センターのスーパーコンピュータ上で動作するプログラムが高速に処理されるか、という点を重視し、高性能計算のストレージへの入出力性能 (read, write)、ストレージ容量、および、耐障害性といったストレージそのものに対する性能評価指標に基づいてきた。本調達では、このストレージそのものに対する性能評価指標に加え、広域化・グローバル化する学術研究の中でデータを利活用できるかという視点を取り入れている。3.2 節で記したように、今日の学術研究においては、地理的に分散した研究者らがチームとなって国内、国外、产学の枠を超えて連携・協働することが日常的になりつつある。さらに、大阪大学では、OU ビジョン 2021[26]のもと、専門分野を超え、広く世界と協働する新たな知の創出を目指す「Open Research」、社会のニーズに基づく基盤研究の課題を発掘し、新たな社会的価値の創出につながる「Open Innovation」が示され、より一層国内、国外、产学の枠を超えて連携・協働することが求められている。

このような背景から、本センターでは、本学のスーパーコンピュータが具備すべきデータ基盤のあり方を検討し、本学のビジョンに示される Open Research および Open Innovation を加速・進展させることのできるデータ集約基盤を構想してきた。本調達では、そのデータ集約基盤を ONION (Osaka university Next-generation Infrastructure for Open research and Open innovatioN) と名付け、ONION の PoC (Proof of Concept) 実装として試験的に導入することとした。本調達で ONION を試験的な導入に留める理由としては、(1)本格的に大規模に ONION を整備することは、主目的である高性能計算・データ分析計算基盤で必要となる計算資源のサイズを大幅に縮減してしまい、ますます拡大傾向にある計算ニーズ・要求を満たすことができなくなる恐れがあること、(2)本センターで構想した ONION が有用では

なく、利用されない場合もありえることがあげられる。本センターでは、ONION を試験導入し、利用者に実際に利用していただきながら、改善、機能拡張・増強を経て成長させる方針を選択した。

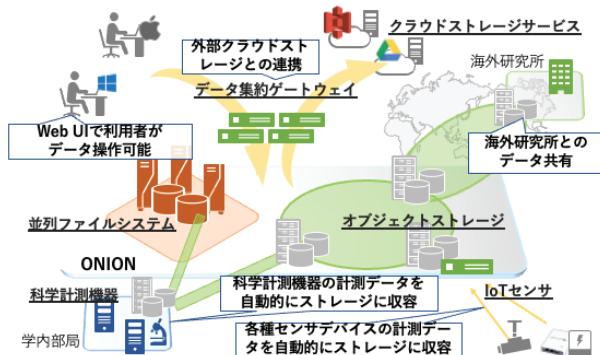


図 17: ONION の概要

図 17 に本センターで構想する ONION の概要を示す。広域化・グローバル化する学術研究、産学共創の支援には、国内外、産学の枠を超えて、計算に必要となるデータ、プログラム、計算結果など様々な研究データが広域研究環境上で共有されなければならない。また、本調達で導入する SQUID の計算資源もストレージ資源も広域研究環境での一拠点として構成されなければならない。そういった視点から、本調達では、ONION の PoC 実装を実現している。例えば、本センターでは、スーパーコンピュータでの計算結果を即座に外部のスーパーコンピュータを利用していない共同研究者に共有・公開したいという要望がある。また、学内に設置された科学計測機器で生成されるデータを速やかにスーパーコンピュータのストレージに移動し、データ解析をしたいという要望や、計算結果やプログラムを民間クラウドストレージに保存したいなどの要望がある。また、単にスーパーコンピュータのストレージをウェブインターフェースからアクセスしたいという要望もある。本調達で実現した ONION は、上述した要望をすべて実現するように設計・実装されている。

この ONION の実現に際して、SQUID は異なる 2 種のストレージを導入し、クラウドストレージでのデファクトスタンダードプロトコルである S3 (Amazon Simple Storage Service) プロトコルを中核と

して統合している（図 18）。今日では、S3 に対応した IoT センサも存在し、逆に、S3 に対応していれば民間クラウドストレージへのデータ保存も容易である。ONION では、この S3 を中核として、学内の各種科学計測機器やセンサからのデータ集約、スーパーコンピュータからクラウドへのデータ移動を容易にしている。その上で、オンラインストレージソフトウェア NextCloud を用いて、2 種の異なるストレージの違いを隠蔽することで、利用者にシングルディスクイメージ上での直感的なデータ操作を行うことを可能にしている。

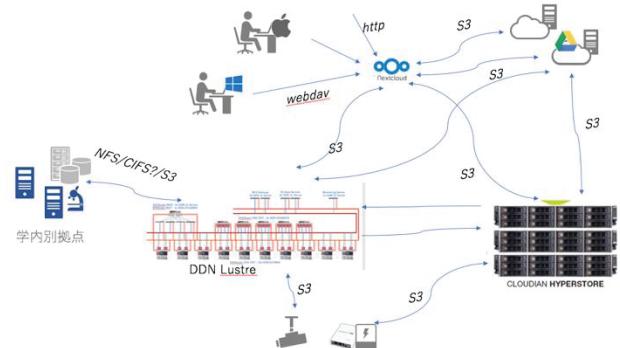


図 18: ONION でのプロトコル連携

以下では、ONION を構成する並列ファイルシステム DDN(DataDirect Networks) 製 EXAScaler(Lustre)、オブジェクトストレージ Cloudian 製 HyperStore、および NextCloud について概説する。

4.3.2 並列ファイルシステム EXAScaler

SQUID を構成する計算ノードは合計 1,598 ノードにも及ぶ。それゆえ、SQUID のストレージシステムには、SQUID 上で同時実行されるジョブの行うファイル操作の高速性が要求される。SQUID では、このようなファイル I/O の高速性を十分に満たすことのできる並列ファイルシステム DDN 製 EXAScaler (Lustre)[27]が採用されている。

図 19 に ONION を構成する並列ファイルシステム DDN EXAScaler の概要を示す。表 5 に ONION 構成並列ファイルシステム DDN EXAScaler の性能を示す。ONION 構成並列ファイルシステムは、約 80 億個の inode 数をサポートし、合計 21 PB を並列フ

イルシステム Lustre ベースのファイルシステムである DDN 製 EXAScaler を基軸として提供する。この DDN 製 EXAScaler は OCTOPUS でも使用されている。SQUID では、この 21 PB の大容量ストレージをわずか 3 ラックに高密度に収容している（図 20）。

この大容量ストレージは、ExaScaler ファイルサービス（Lustre ファイルサービス）実現のためのサーバ群(Object Storage Server (OSS)、Object Storage Target (OST)、Meta Data Server(MDS)、Meta Data Target (MDT)、ストレージ管理サーバ（モニタリングサーバ）、NFS サーバ、S3DS サーバから構成される。この構成は、それぞれのサーバ数は異なるが、構成要素としてはほとんど OCTOPUS と同様の構成となっている。詳細は OCTOPUS の特集記事[2]をご参照いただければ幸いである。

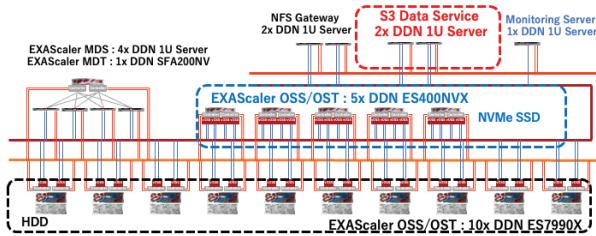


図 19: DDN EXAScaler の概要

表 5: ONION 構成並列ファイルシステムの性能

実効容量(HDD)	20.00 PB
実効容量(NVMe)	1.20 PB
最大合計 inode 数	約 80 億個
最大想定実効スループット(HDD)	160 GB/s 以上
最大想定実効スループット(NVMe SSD)	write:160 GB/s 以上 read:180 GB/s 以上

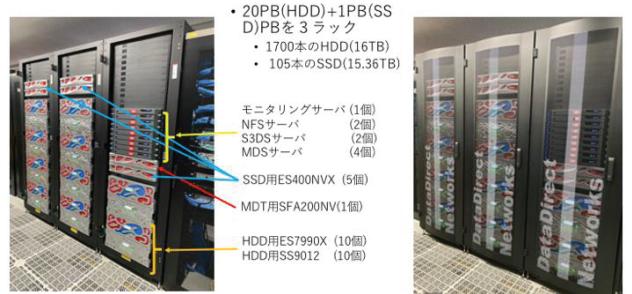


図 20: DDN EXAScaler 搭載ラック

しかし、OCTOPUS と SQUID では 2 点の相違がある。1 点目は、OCTOPUS ではハードディスクドライブ(HDD)のみの並列ファイルシステムの構成であったのに対し、SQUID では HDD および SSD のハイブリッド構成による並列ファイルシステムとなっている点である。2 点目は、4.3.1 で記載した S3 プロトコルを中心としたデータ集約基盤 ONION 実現のために、本調達では新しく S3DS サーバが導入されている点である。Lustre ファイルシステムを構成する OSS、OST などの各要素がどのような役割を担い、どのように動作するかについては OCTOPUS の特集記事の際に詳解したので、そちらを参照していただくとして、本特集記事では上述の 2 点の相違について説明する。

まず 1 点目の HDD および SSD のハイブリッド構成を採用した理由であるが、これはもちろんストレージへの read、write 性能の向上を目的としている。今日においては、SSD の価格も低下傾向にあり、SSD のみを用いた並列ファイルシステムを構成することも考えられる。しかし、本調達のスーパーコンピュータに見合う規模で並列ファイルシステムの導入を考える場合、未だ現実的ではなく、同一予算では導入できるストレージ容量は小さくせざるを得ない。本調達では、上記のストレージプロダクトの価格動向を考慮しつつも、大規模・大容量データを扱う利用者のストレージ I/O 性能に対する要望を満たせるよう、ハイブリッド構成とした。

さらに、SSD と HDD のハイブリッドでファイルシステムを構成する際、SQUID では、SSD、HDD それぞれに対してファイルシステムを構成し、それぞれの領域を異なるディレクトリにマッピングした。

これにより、HDD のデータを SSD に明示的に利用者に移動させるという手間を利用者にとらせるのではなく、利用者はディレクトリを使い分けるだけで SSD の高いストレージ I/O 性能を享受できるようにしている。読者の内で大規模・大容量データを扱っている方がおられれば、是非 SSD 領域の利用を検討いただければ幸いである。

次に、2 点目の相違点である S3DS サーバについて解説する。この S3DS (S3 データサービス) サーバは、Lustre ストレージ上で S3 API を提供する。これにより、外部の S3 対応クラウドストレージと Lustre ファイルシステム間でのデータのやり取りを可能にする。この S3DS サーバを用いることで、利用者は S3 に対応したクライアントから S3DS サーバ経由で並列ファイルシステム EXAScaler 上にデータをファイルとして格納できる。さらにいえば、この仕組みを利用することで、学内に設置された科学計測機器あるいはセンサ等からデータを自動的に集約する仕組みを構築可能となる。

4.3.3 オブジェクトストレージ HyperStore



図 21: Cloudian 製 HyperStore アプライアンス HSA-1610

ONION を構成するオブジェクトストレージとして、Cloudian 製 HyperStore アプライアンス HSA-1610 (図 21) が 7 ノード導入されている。この HSA-1610 にはデータ格納用に 10 TB の SAS HDD が 12 本の合計 120 TB、メタデータ格納用に 960 GB の SSD が 2 本の約 2 TB が搭載されている。SQUID では、この HSA-1610 7 ノードを一つのストレージシステムとして構築している (図 22)。



図 22: ラックに搭載された ONION 構成オブジェクトストレージ

この Cloudian 製 HyperStore は、前述した S3DS 同様に、S3 API をサポートしている。そのため、外部のクラウドや、S3 対応ストレージとの相互のデータ交換を容易に行うことができる。さらに、この HyperStore は、高信頼性、高拡張性、高可用性を特徴としている。この HyperStore では、最小 3 ノード以上からストレージシステムを構成でき、必要に応じてサーバ 1 ノード単位で拡張を行うことができる柔軟な拡張性を備えている。本調達では、上述したが、ONION は試験的な導入という側面もあるため、最低限を導入し、今後利用状況をみながら拡張を行うことを想定している。また、この HyperStore は、データが自動的に保護される機能を有しており、高信頼性を提供している。その方式として、レプリカ (複製) 方式 (図 23) と、イレージャー・コーディング(EC)方式 (図 24) が利用可能である[28]。前者は HyperStore にデータが格納される際に、自動的に書き込まれるデータのコピー (複製) をノード間に分散する方法であり、後者は格納されるデータに加えて、データを復元するための符号を付加して、それらを複数のサーバ間に分散する方法である。このようなデータ保護機能をもたせることで、オブジェクトストレージを構成する一部のサーバの障害時においてもデータを失うことのない仕組みになっている。本センターでは、後者のイレージャー・コーディング方式を採用している。なお、一部のノードが障害により利用できない場合においても、システム

は停止することがなく、可用性も高いものとなってい



図 23: HyperStore のデータ保護機能（レプリカ方式）

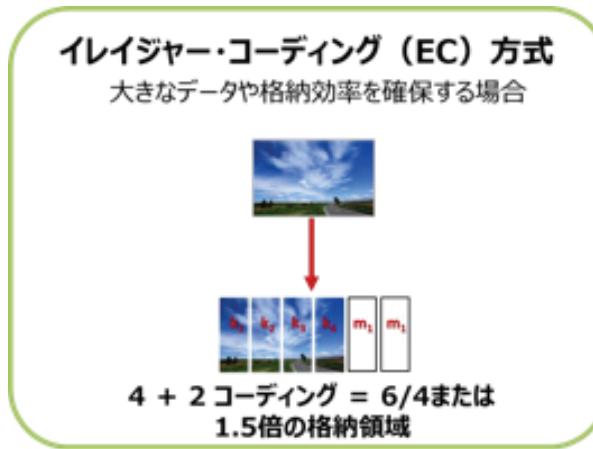


図 24: HyperStore のデータ保護機能（イレイジャー・コーディング方式）

ところで、読者のなかには、4.3.2 での S3DS サーバと、本節で記載した HyperStore をどのように使い分けるのか？という疑問をお持ちの方がおられるかもしれません。この質問は、著者が講演会、シンポジウム等で話をする際にはよくきかれる質問である。確かに、S3DS も HyperStore も S3 API を提供しており、S3API 経由で外部ストレージとデータのやりとりが可能である。しかし、データの格納は、前者はファイルとして行われ、後者はオブジェクトとして行われる。したがって、技術的な詳細については、オブジェクストレージとファイルの相違に帰着していくところが大きいため、ここでの説明は控えるが、

例えば、スーパーコンピュータで処理や解析するようなデータに関しては、スーパーコンピュータの計算処理で追記処理なども発生しファイルで格納・管理する S3DS が適している。一方で、データを保管、公開、共有したりする場合には、オブジェクトとして管理する HyperStore のほうが適している。このような観点で使い分けをご検討いただければ幸いである。

現段階では、この ONION 構成ストレージは IT コア棟に設置されている。そのため、IT コア棟のメンテナンス停電などの際には停止せざるを得ない。が、今後利用者が順調に増え、さらなる拡張が必要となった際に、例えば、豊中キャンパス、あるいは箕面キャンパスに一部のノードを拡張していくことで、無停止で運転することも可能になっていく。4.3.1 節に記載したが、試験的に導入したサービスであり、利用者の利用状況に応じて拡張を考えている。本学だけでなく我が国の学術研究の現場では、学術研究の再現性を担保し研究不正を防止する観点から研究データの適切な管理が求められている。本センターでは、そういった観点からもご利用いただけるよう機能拡張・増強も計画をしている。

4.3.4 NextCloud



図 25: NextCloud によるウェブインターフェース

NextCloud[29]はオンラインストレージソフトウェアである。読者の多くも研究室などでお使いかと思うが、本調達では、このオンラインストレージを利用者とのインターフェースとして採用している。

図 25 は著者が実際に NextCloud で自身のストレージにアクセスした際のスナップショットである。利用者はブラウザから自身の並列ファイルシステム内に置かれたデータを閲覧できる。また、外部ストレージ連携機能によって、外部のクラウドサービスや上述の HyperStore オブジェクトストレージを連携

させておくことによって、それらのストレージの違いを意識することなく、利用者はデータにアクセスすることが可能である。



図 26: スマートフォンを用いた NextCloud の利用例

また、NextCloud はブラウザ上で動作するため、お手元のスマートフォンからもアクセス可能である（図 26）。それゆえ、例えば、ジョブ終了後にスケジューラからジョブ完了通知をメール受信するように設定しておくことによって、ジョブ完了後に即座にブラウザを通じて ONION のインターフェースである NextCloud にアクセスすることで、その計算結果を確認することも可能となる。

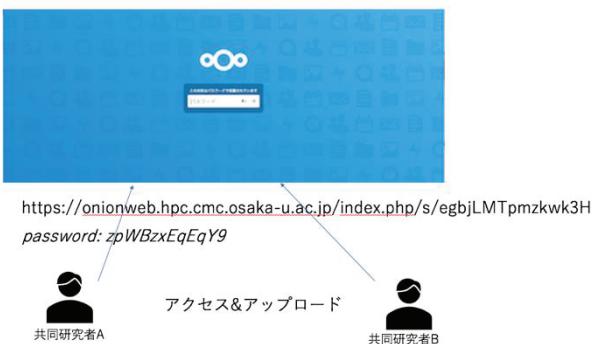


図 27: スーパーコンピュータを利用していない研究者へのデータ共有例

さらに、特定のファイルを、スーパーコンピュータのアカウントを利用してない外部の研究者に対してデータを共有することも可能である。図 25 の例では、公開・共有すべき特定のデータを選択し、外部の方にアクセスしてもらうデータの所在を示す URL を発行した上でパスワード設定を行なっているが、外部の研究者の方にこの URL とパスワードを発行することで、簡単に外部の研究者に公開・共有

させることができる（図 27）。もちろん、この設定もスマートフォンから可能であるので、外出先でも研究者に計算結果後即座に情報共有が可能となる。この仕組みを利用することで、得られた計算結果を即座に外部の研究者と共有可能となったり、逆に、外部の研究者に入力データを特定のディレクトリにアップロードしてもらうことも可能となる。

このように NextCloud は直感的でわかりやすいウェブインターフェースを提供するとともに、背後にあるストレージの地理的分散状況や違いを隠蔽し、利用者のデータ操作を容易にしている。この NextCloud も試験的に導入したものであるが、是非積極的にお使いいただければ幸いである。

4.4 クラウドバースティング機能

SQUID では、オンデマンドに民間のクラウドサービスが提供するクラウド資源をオンデマンドに利用可能とするクラウドバースティング機能を配備している。この機能は、OCTOPUS の定常的な高負荷状態に鑑み、本センター、NEC、マイクロソフト、オラクルとの連携・協働により、OCTOPUS 上でプロトタイプ実装されているが、本調達で正式に運用レベルでサポートできるよう配備した。

SQUID では、このクラウドバースティング機能を通じて、マイクロソフト社の提供する Azure、および、オラクル社の提供する OCI を利用可能としている。本センターでのクラウドバースティング機能の運用は、(1)SQUID の高負荷時のクラウドへの負荷オフロードによる待ち時間の縮減、(2)SQUID 運用期間中に発表された新製品の評価を目的とした早期実戦配備を目的としている。

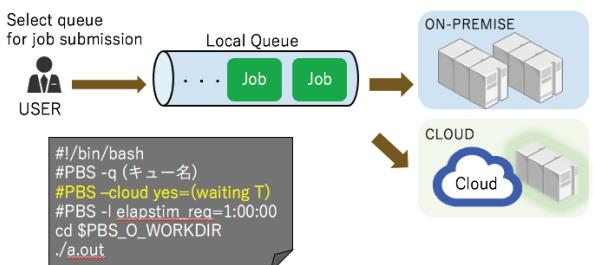


図 28: クラウドバースティング機能

図 28 に SQUID に導入されたクラウドバースティング機能の概念図を示す。通常では、大学の計算機センターのスーパーコンピュータにはスケジューラが配備されており、利用者のジョブ要求をキューに格納する。計算資源の利用状況を見ながら、ジョブ要求に対してオンプレミス、すなわち本センター配置のスーパーコンピュータの計算資源を割り当てていく。しかし、本センターでは SQUID が高負荷状態になった際には、クラウド環境上に本センターと同一のソフトウェアスタックをもつ計算ノードを動的に配備し、利用者にクラウド計算ノードを提供することを想定している。その際、本センターに配備されたクラウドバースティング機能では、利用者から投入されたジョブ要求の中からクラウド利用を承認されているジョブを順次クラウド資源に投下していく。これにより、システム全体の高負荷状態を緩和し、利用者のジョブ完了までの待ち時間を低減させる。また、SQUID 運用中に新たな製品が発表されクラウドで利用できるようになった際には、上記のようなクラウドバースティングキューだけでなく、クラウド専用キューを配備し、当該新製品を利用可能なクラウドノードとして利用者に早期展開する企画やイベントを想定している。

クラウド資源は、オンプレミス資源と比較して、同程度の性能をもつクラウド資源はどうしても価格が高い。それゆえ、クラウド資源の動的配備は、相当のコストが要求され、本センターの財布事情によるところもある。そのため、いつも利用できるというわけではないが、機会があれば利用を検討いただければ幸いである。

4.5 セキュアコンピューティング

サイバーメディアセンターは、全国の大学の研究者を対象として、その学術研究・教育に伴う計算及び情報処理を行う全国共同利用施設としてスーパーコンピュータを提供している。そのため、運用されるスーパーコンピュータは、多数の研究者によって共有利用される。このような共有型のスーパーコンピュータで、医学、薬学、バイオなど高い秘匿性や機密性が要求されるデータを扱う科学分野のシミュ

レーションや解析計算を行うのは非常に難しい現状がある。そのような高秘匿性・機密性が要求されるような分野の科学研究では、扱うデータに対する高いセキュリティ要求があるのが一般的である。一方、3.2 節に記載したが、今日の高性能データ分析分野への期待と関心の急速な高まりは、高いデータセキュリティが要求される科学研究分野におけるスーパーコンピュータの利用要求を高めている。

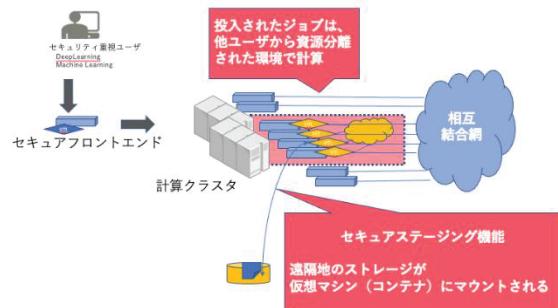


図 29: セキュアコンピューティング概念

本センターでは、このようなセキュアコンピューティングの実現にむけ、長らく研究開発を行ってきた。このセキュアコンピューティングは、そのような研究開発の経験と成果をもとに、SQUID に試験的に導入した機能である。図 29 に SQUID で導入されているセキュアコンピューティング環境の概念図を示す。セキュアコンピューティング機能は、SQUID に設けられたセキュアフロントエンド上から利用可能としている。なお、本特集記事執筆時点においては、このセキュアコンピューティング機能の利用は、本センターへの個別相談が必要となる。

以下、セキュアコンピューティング機能がどのように動作するかについて説明する。セキュアコンピューティング機能を利用する利用者グループには、セキュアフロントエンド上でコンテナ仮想化技術によって当該利用者グループだけがログインできる占有型フロントエンドノードが準備される。利用者はセキュアフロントエンドにログインし、スケジューラにジョブ要求を行う。この際、利用者のジョブ要求はコンテナジョブ（コンテナ仮想化技術により利用者個別の環境を計算ノードに配備し、その環境上でジョブを実行する）で行われることを前提とする。

このジョブが実際に計算ノード群に割り当てられると、当該ノード群上で実行されるコンテナは相互結合網から論理的に切り離され、それらコンテナ群だけを接続したネットワークが形成（セキュアパーティショニング機能：コンテナ間にオーバレイネットワークが形成）され、当該利用者のジョブのみが実行されるセキュアコンピューティング環境が動的に形成される。ジョブ実行が終了すると、当該利用者のためのセキュアコンピューティング環境は解消され、利用されたコンテナやデータもデータ流出防止の観点から計算ノードから削除される。

さらに、上記のセキュアコンピューティング機能に加えて、データを本センターに持ち出したくないという利用者向けにさらに高度なセキュリティ機能であるセキュアステージング機能を設けてある。この機能は、簡単にいうと、ジョブが割り当てられた計算ノードに対してのみ、そのジョブ実行中に遠隔地のストレージにアクセス可能とさせる。例えば、遠隔地のストレージに計算に利用するコンテナおよびデータを設置しておくことで、ジョブ実行時にジョブが実行される計算ノードにストレージがマウントされ、計算が行われる。計算結果はそのストレージに書き込まれ、計算が終わると計算ノードから切り離される。

このセキュアコンピューティング機能およびセキュアステージング機能は、SQUID でも最もチャレンジングな技術である。本センターでは大阪大学歯学部附属病院と S2DH (Social Smart Dental Hospital) [30] という共同研究を推進していることもあり、本特集記事執筆時点においては、歯学部附属病院の研究グループが、まず、最初の利用者になる予定であり、その準備を進めている。今後機会があれば、またこのセキュアコンピューティング機能およびセキュアステージング機能について報告したいと思う。

4.6 テイラーメイド型コンピューティング

3.2 節に記したが、今日の利用者の計算要求・ニーズは多様かつ複雑になっており、利用者によって計算方法も多様に異なる。それゆえに、利用するソフトウェアも多様に異なり、同一のソフトウェアであ

ったとしてもそのバージョンが異なるという場合が多々ある。こうした場合、共有型のスーパーコンピュータでは、ある利用者は使いやすく利用できるが、他の利用者にとっては別途ソフトウェアのインストールが必要だったり、あるいは、ソフトウェアの組み合わせ的な問題や不具合から利用できない場合がある。特に、AI、ML といった分野においては、そのソフトウェア開発状況が活発であり、ソフトウェアやツールのバージョンが頻繁にアップデートされる。それゆえに、利用者の多様な計算ニーズを収容したいという管理者側の視点からもまた困った問題である。

この問題を解決するために、SQUID では、コンテナ仮想化技術 Singularity[31]を採用し、利用者が各自の計算環境を“テイラーメイド”できるよう設計している。読者の皆様方のなかには、なぜ Docker じゃないのか？コンテナ仮想化のデファクトといえばコンテナだろう？と思われる方もおられるかもしれない。確かにコンテナ仮想化といえば今日では Docker であり、Docker Hub などで気軽に利用できるコンテナイメージが数多く公開されていることも本センターでは把握している。しかし、実際運用の視点からは、Docker を利用者の皆様方にお使いいただくのは難しい。

Docker の利用については、OCTOPUS において利用できるよう環境を整備し、運用レベルで利用可否について検証した[32]。Docker の利用については技術的には可能であることは確認できているが、Docker をどのように利用者の皆様にご利用いただくか（どのような環境を提供することで使いやすくなるのか？）ということだけでなく、セキュリティ上の問題をどのようにクリアするのか？という問題がある。具体的には、Docker の利用は管理権限を利用者に与えなければならない。このことは研究室レベルでの運用では問題とならないかもしれないが、センターレベルでの運用となると、利用者全員に対して管理権限を付与してしまうことは現実的ではない。一方で、Singularity は Docker のイメージを利用可能であることに加え、管理権限を利用者に付与することは必要ではない。そのため、HPC 分野では

Docker よりも Singularity を利用するケースが多々見られる。

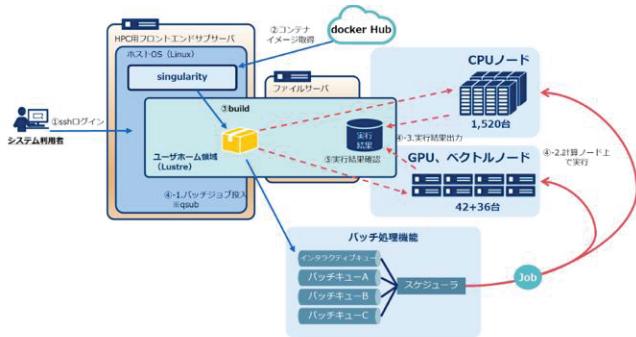


図 30: SQUID での Singularity 利用例

図 30 に SQUID での Singularity 利用例を示す。利用例は、SQUID の 3 種あるうちの 1 つの HPC 用フロントエンドノードからの利用例を示したものである。まず利用者は、ssh によってフロントエンドノードにログインする（図中①）。このログイン方法は、通常の Singularity を利用しない方法と同様である。その後、例えば、Docker HUB で公開されているコンテナイメージを取得し（②）、singularity でコンテナをビルドする（③）。その後、コンテナを利用しないジョブと同様に、qsub コマンドを利用して、Singularity コンテナジョブを投入し（④）、計算が終わると実行結果を確認できる（⑤）。Singularity の利用方法詳細については、本センターの大規模計算機システム事業 Web ページ[33]をご覧いただければ幸いである。

4.7 HPC・HPDA 融合

SQUID では、従来型の高性能計算向け利用者のための HPC 用フロントエンドノードに加え、高性能データ分析向け利用者のための HPDA 用フロントエンドノード、および、上述した高度なデータセキュリティを必要とするセキュアフロントエンドノードの異なる 3 種のフロントエンドを用意している。HPC 用フロントエンド、および、HPDA 用フロントエンドにそれぞれ 4 基、セキュアフロントエンドノードは 1 基を配備している。

HPC 用フロントエンドノードには、NEC LX112Rj-

2 という型番のサーバ（図 31）を導入している。HPC 用フロントエンドノードの構成は表 6 に示す通りである。その名前の通り、OCTOPUS 同様に HPC 向けの開発環境を準備しており、エディタを利用してプログラムを開発し、各種コンパイラを用いてコンパイル、スケジューラへのジョブ投入・ジョブ確認といった一連の処理が実行可能である（図 32）。SQUID では、OCTOPUS で導入されているスケジューラ NQS II よりも新しいバージョンである NEC 製スケジューラである NQS V が導入されているが、基本的な利用方法については OCTOPUS とほぼ同様である。もちろん NQS V の機能拡張にあわせて利用方法も変更となっている部分は存在する。この辺りについては、Web ページ [34] に記載してあるので参照されたい。



図 31: HPC 用フロントエンドノード NEC LX

112Rj-2

表 6: HPC 用フロントエンドノード NEC LX
112Rj-2 の構成

プロセッサ	Intel Xeon Platinum8368 (2.4Ghz, 38 コア) x 2
メモリ構成	256 GiB (16GiB DDR4- 3200 DIMM x 16)
ローカルストレージ	960GB SSD x 2
インターフェース	InfiniBand HDR x 1, 10GBase-SR x 2, 1000Base-T x 1, BMC
GPU	NVIDIA Quadro RTX6000 x 1
OS	Red Hat Enterprise Linux 8.2

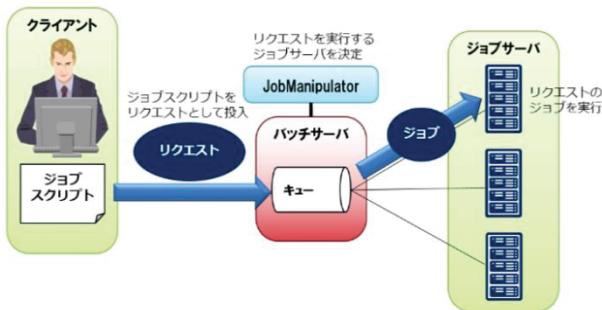


図 32: ジョブスケジューラを通じたジョブ投入

HPDA 用フロントエンドノードには、HPC 用フロントエンドノードと同様に、NEC LX 112Rj-2 という型番のサーバを導入している。表 7 に HPDA 用フロントエンドノードの性能を示す。表に示されるように、プロセッサ、ネットワークインターフェースは同様の構成であるが、メモリ構成は HPC 用フロントエンドと比べて 2 倍のメモリ容量となっている。またローカルストレージは SSD ではなく HDD となっている。さらに、HPC 用フロントエンドノードで搭載されていた GPU を HPDA 用フロントエンドノードでは搭載していない。これは、HPDA 用フロントエンドノードでは、NICE DCV Server による遠隔可視化を想定しないことによる。

SQUID では、この HPDA 用フロントエンドノードを通じて、利用者ごとに Jupyter notebook コンテナを起動し、利用できるよう設計している。この Jupyter notebook コンテナ上で Python を用いて試行錯誤的なデータ分析ができる環境を準備している（図 33）。これは AI、ML を扱う高性能データ分析分野の研究者は、従来の高性能計算分野の研究者のようにバッチ処理ではなく、試行錯誤的にインタラクティブ処理を希望していることに基づいている。この Jupyter コンテナを利用し、インタラクティブな処理をできるように設計している。ただし、現状では、計算ノードを用いた大規模なデータ分析を行う際には、高性能データ分析処理を行う場合にはスケジューラを通じたバッチ処理を行なっていただく必要がある。これは現時点では、限られた計算資源に対する計算要求を、HPC 利用者、HPDA 利用者で平等に扱いたいと考えたことによる。OCTOPUS では、待ち時間が数日以上に及ぶこともあり、その際には

現状利用者の皆様には、スケジューラのスケジュール方針に基づいて平等に待っていただかざるを得ない。それゆえ、HPDA 利用者がインタラクティブ処理を要求することを理由に、HPC 利用者よりも優先的にジョブを割り当てるることはむずかしい。この点については、今後の運用を通じた利用負担金や利用率の変化を見ながら、検討をしていきたいと考えている。

表 7: HPDA 用フロントエンドノード NEC LX 112Rj-2 の性能

プロセッサ	Intel Xeon Platinum8368 (2.4Ghz, 38 コア) x 2
メモリ構成	512 GiB (32 GiB DDR4-3200 DIMM x 16)
ローカルストレージ	1TB SAS HDD x 2
インターフェース	InfiniBand HDR x 1, 10GBase-SR x 2, 1000Base-T x 1, BMC
OS	Red Hat Enterprise Linux 8.2



図 33: HPDA フロントエンドの利用例

最後にセキュアフロントエンドノードについて記しておく。このセキュアフロントエンドノードには、HPC および HPDA 用フロントエンドノード同様、NEC LX 112Rj-2 という型番が付与されている。このサーバの外観は図 31 と同じである。表 8 に構成を示す。この構成は HPC フロントエンドノードとほぼ同様であるが、搭載されているストレージが HDD である。4.5 節で記したように、このセキュアフロントエンドノードから投入したジョブはセキュアな計算環境でジョブ実行が可能となる。

表 8: セキュアフロントエンドノード NEC LX 112Rj-2 の構成

プロセッサ	Intel Xeon Platinum8368 (2.4Ghz, 38 コア) x 2
メモリ構成	256 GiB (16 GiB DDR4-3200 DIMM x 16)
ローカルストレージ	1TB SAS HDD x 2
インターフェース	InfiniBand HDR x 1, 10GBase-SR x 2, 1000Base-T x 1, BMC
OS	Red Hat Enterprise Linux 8.2

5. 利用のために

本節では、これまでに説明した SQUID を実際に利用者の皆様がご利用いただくための参考情報を記す。ここまで読んでいただけた読者の皆様方には、ぜひ SQUID のご利用をご検討いただければ幸いである。なお、ここに記載する内容は、本センターの大規模計算機システム（スーパーコンピューティング）事業の Web ページにも記載しているので、詳細については当該 Web ページを参照いただければ幸いである。

5.1 利用負担金

利用負担金についての考え方とは、OCTOPUS の特集記事[2]にまとめた。が、しかし、利用負担金についてのご意見やご相談は、利用者の皆様から頻繁にいただく。大規模計算が必要不可欠となっている研究者の方にとって、利用負担金の件は最大の関心事であろうと思う。ここでは、この利用負担金についての考え方を利用者の皆様方にご理解いただけることは本センターにとっても極めて重要であるので、以前の OCTOPUS の特集記事の際に記載した内容をベースに再度記載する。ぜひ本センターでの利用負担金の考え方をご理解いただき、利用者の皆様方のご支援をいただければ幸いである。

多くの利用者の方の関心が高いのは、計算機利用に伴う負担金であろう。事実、現利用者の方からも負担金についての多くの質問・相談・要望が寄せら

れている。とりわけ、多く寄せられる要望としては、利用負担金がもう少し安くならないか？あるいは、無料にならないのか？というものである。

スーパーコンピュータ上で大規模なシミュレーションやデータ解析を行う研究者にとっては、どうしても利用負担金が大きくなってしまう。このことは容易に想像できる。スーパーコンピューティング事業を担当する者としても、研究者としても、上記の利用負担金に対する要望は痛いほどよくわかる。しかし、言い訳ではないが、サイバーメディアセンターの利用負担金は、計算機利用に相当する消費電力量に基づいており、できるかぎり低額な設定としている。

スーパーコンピュータの保守・運用には、スーパーコンピュータシステムをただ設置し「はい、どうぞ」と置いておくだけではダメで、ハードウェア保守、ソフトウェア整備、テクニカルサポート等の費用も発生する。サイバーメディアセンターのスーパーコンピュータの調達においては、スーパーコンピュータを構成するハードウェア機器だけでなく、ハードウェア保守、整備・サポートに関する人件費等の運用・保守にかかる費用の多くを含めて調達を行なっている。そのため、サイバーメディアセンターのスーパーコンピュータの利用負担金は、利用者の計算機利用に伴う消費電力量相当のみを負担いただく構造となっている。言い換えれば、スーパーコンピュータを運転するのに必要最低限となる費用だけを利用者に負担いただいている。この利用負担金をゼロにするためには、あらかじめ調達に消費電力を見込んで含めておく、あるいは、どこからかそのための予算をとってくるしかないのが現状である。

ここで、前者でいいのではないか？と思われる読者の方もおられるかもしれない。その場合、消費電力分相当の費用をスーパーコンピュータシステム調達より取り置いておかなければならなくなり、調達できるスーパーコンピュータの規模は小さくならざるを得ない。場合によっては、スーパーコンピュータではなく、ただのコンピュータになってしまい、利用者の計算要望やニーズを充足することはさらに難しくなってしまう。今日科学的研究に伴うデータ量

はますます大きくなり、計算要求・ニーズもまたますます大きくなりつつある。結果として、より大規模なシミュレーション、データ分析が可能なスーパーコンピュータの必要性・重要性が高まりつつある。このことを鑑みれば、計算機を利用した利用者自身に消費電力相当分を利用負担金として負担いただく受益者負担が最善ではないだろうか。

電気、水道等の生活ライフラインのように、科学研究のインフラであるスーパーコンピュータの運転にもどうしても費用が発生する。この費用については誰かが払わなければならない構造である。この構造をご理解いただき、SQUID をご利用いただければ幸いである。

5.2 SQUID 利用負担金

SQUID の利用負担金について説明する。表 9 に設計・策定した負担金制度の概要を示す。SQUID の利用負担金では、OCTOPUS 同様に、SQUID ポイントを導入している。SQUID もまた OCTOPUS と同様に、プロセッサ、アクセラレータの構成が異なる複数のノード群より構成されるハイブリッド型スーパーコンピュータである。そのため、それぞれのノード群ごとに消費電力が異なるため、原則に従えば異なる利用負担金単価となるのが適切であるが、利用者の皆様方にノード毎に契約いただく方式をとることはかなり不便である。そこで、SQUID では、SQUID ポイントを採用することで、利用者は事前にノード種別を確定しておく必要がなく、臨機応変に複数のノードを使い分けることができるよう利用負担金を設定した。

設計した利用負担金制度は、ノードを一利用者がある一定期間を予約して占有利用する占有、および、複数の利用者が時間分割で利用する共有の種別がある。占有利用は、現時点では、サイバーメディアセンターの計算拠点としての一角を担う革新的ハイパフォーマンス・コンピューティング・インフラストラクチャ(HPCI)[35]や、サイバーメディアセンターが参画する学際大規模情報基盤共同利用・共同研究拠点(JHPCN)[36]で採択された課題の利用を想定しており、多くの場合は共有利用となる。汎用 CPU ノ

ードについては、利用状況に応じて占有利用での提供を検討していく。

表 9: SQUID 利用負担金

(A) 占有	
基本負担額	占有ノード数
575,000 円/年	汎用 CPU ノード群 1 ノード
3,516,000 円/年	GPU ノード群 1 ノード
2,168,000 円/年	ベクトルノード群 1 ノード

(B) 共有		
コース	基本負担額	SQUID ポイント
	10 万円	1,000 ポイント
	50 万円	5,250 ポイント
	100 万円	11,000 ポイント
	300 万円	34,500 ポイント
	500 万円	60,000 ポイント

(C) ストレージ容量追加		
基本負担額	提供単位	
2,000 円/年	HDD 1TB	
5,000 円/年	SSD 1TB	

表 10 にノード種別の消費係数を示す。表は 1 ノード時間あたりの消費係数を示している。SQUID では、OCTOPUS が非常に好評で非常に長い待ち時間となっていること、および、利用者からの利用負担金を高くしてでも優先度をあげてほしいという声があることを考慮して、通常優先度、高優先度、シェアの利用種別を設けている。通常優先度の場合は、OCTOPUS と同様の資源提供方法で、計算資源を時間分割で利用者に利用いただく方法である。これを基準とし、シェアの利用種別では、自身のジョブが実行されている計算ノード上に他の利用者のジョブが割り当てられ実行される可能性がある。一方、高優先度の種別では、通常優先度、シェアと比較して、

高い優先度で計算資源の割り当てが行われる方法である。これに基づいて、高優先度、通常優先度、シェアの順に消費係数が多くなっている。

表 10: SQUID ノード種別消費係数

消費係数			
ノード群	高優先度	通常優先度	シェア
汎用 CPU ノード群	0.1873	0.1499	0.1124
GPU ノード群	1.1467	0.9174	0.6881
ベクトル ノード群	0.707	0.5656	0.4242

例えば、汎用 CPU ノードの場合、1 ノードを 1 時間通常優先度利用した場合、0.1499 SQUID ポイントが消費される。言いかえれば、1000 ポイント（10 万円税別）で、CPU ノードの 1 ノードを 6,671 時間利用できる。一方、高優先度利用では、CPU ノードの 1 ノードは 10 万円で 5,339 時間利用できることとなる。本利用負担金の設計は、近い将来の SQUID の混雑時に、利用者による利用負担金を高くしてでも優先度をあげてほしいという声に対応したものである。

なお、本センターでは季節係数[37]を導入している。季節係数は、平成 31 年度以降の運用時に前年度の利用状況に基づいて、季節ごとに消費係数を変更することで利用者の計算計画を制御しようすることを目的として導入した。この季節係数の仕組みは、消費係数から 1 未満の数字を乗算することにより、いわゆる利用負担金の割引を行う仕組みである。一般的に、年度末には、ジョブが多く投入され混雑する傾向にある一方、年度初めには比較的ジョブが走りやすい状況がある。これを緩和するために、例えば、年度初めころには消費係数を低くし、利用者の利用を年度初めに移動させることをねらう。OCTOPUS 同様に、SQUID の利用率等を加味しながら運用して行く予定としている。

5.3 公募利用制度

本センターでは、本センターの大規模計算機システムを活用する研究開発の育成・高度化支援の観点から、本センターが参画する「ネットワーク型」学際大規模情報基盤共同利用・共同研究拠点(JHPCN) [36]や革新的ハイパフォーマンス・コンピューティング・インフラ(HPCI) [35]の目的を踏まえつつ、今後の発展が見込まれる萌芽的な研究課題や本センターのスーパーコンピュータを最大限活用することで成果が見込まれる研究課題を公募する制度を 2016 年度より開始している。本制度には、それぞれ JHPCN および HPCI での課題として採択されることを目的とし、(1)若手・女性研究者支援萌芽枠、(2)大規模 HPC 支援枠を設定している。さらに、2019 年度からは、大規模な計算能力を必要とする人工知能分野の研究支援の観点から、(3)人工知能研究特設支援枠を設けている。本センターが設置する高性能計算機委員会において厳密な審査の上採択された研究課題については、本センターが研究課題推進のための利用負担金の全額を負担する。また、本センターの施設（会議室）もまた利用可能となる。ただし、その一方で、本センターが開催する公募型利用制度成果報告会での発表、成果報告、発表論文への謝辞記載等の義務も存在するので、その点はご留意いただきたい。

本制度は、例年、11 月半ば頃から 12 月半ば頃、3 月から翌年度の 4 月半ば頃までの期間の 2 期にわけて、翌年度の公募型利用制度への課題提案・応募を受け付けている。第 1 期の応募期間は、科学研究費の応募を終えた後に設定しており、研究者にとって応募しやすい（科研を提出した後に引き続き申請書を記載しないといけないが。）よう考慮している。また、2 期の応募期間は、HPCI および JHPCN への応募が不採択になった場合においても応募できる期間にしている。

本公募型利用制度の制度設計を行い、運営を行う筆者の立場からは、上記の公募利用制度整備趣旨をご理解頂ける方は、本センタースーパーコンピューティング事業ウェブページ内の公募型利用制度募集要項に従い、是非 SQUID を利用する課題の提案・応

募を積極的に検討いただければと思う。

5.4 HPCI & JHPCN

また、上述してきたように、サイバーメディアセンターは、学際大規模情報基盤共同利用・共同研究拠点(JHPCN) [36]や革新的ハイパフォーマンス・コンピューティング・インフラ(HPCI)[35]に参画している。HPCIでは、国立研究開発法人理化学研究所のスーパーコンピュータを中心とし、国内の大学や研究機関の計算機システムやストレージを高速ネットワークで結ぶことにより、全国のHPCリソースを全国の幅広いHPCユーザ層が効率よく利用できる科学技術計算環境を実現することを目的とする。また、JHPCNにおいては、北海道大学、東北大学、東京大学、東京工業大学、名古屋大学、京都大学、大阪大学、九州大学にそれぞれ附置するスーパーコンピュータを持つ8つの施設を構成拠点とし、超大規模計算機と超大容量のストレージおよび超大容量ネットワークなどの情報基盤を用いて、学際的な共同利用・共同研究を実施することにより、我が国の学術・研究基盤のさらなる高度化と恒常的な発展を目的としている。これらの枠組みを利用して、サイバーメディアセンターのスーパーコンピュータを利用することが可能である。

HPCIおよびJHPCNにおいても、前節5.3で記した公募型利用制度と同様に、課題申請書を記載の上、課題提案・応募を行う必要がある。応募された課題は、それぞれで設置された課題審査委員会で採否が決定される。採択された課題は、利用負担金を研究者が負担することなく利用することが可能となる。例年、JHPCNでは12月半ば頃より1月初旬、HPCIでは3月頃から5月初旬にかけて課題募集が行われている。本センターのスーパーコンピューティング事業からもウェブページやメーリングリストを通じて、これらの課題募集についてはアナウンスを行っている。HPCIおよびJHPCNに対して、SQUIDを含む本センターのスーパーコンピュータを利用する研究課題を是非提案・応募して頂ければ幸いである。

6. おわりに

本特集記事では、2021年5月に導入され、3ヶ月間の試験運用を経て、2021年8月から正式に運用を開始したSQUID（調達名称：高性能計算・データ分析基盤システム）について、その調達の背景、調達の方針、SQUIDの概要と特徴、および、本センターのスーパーコンピュータを利用するための方法についてまとめた。本特集記事を依頼された頃はSQUIDの導入がきまり、その具体的な設計を開始したか、始める直前のタイミングだったと思う。今回の調達では、本特集記事で記載したように、学術研究の広域化・グローバル化、高性能データ分析に代表される計算ニーズの多様化などを背景として、HPC・HPDA融合、クラウド連動・連携機能、セキュアコンピューティング環境、データ集約環境、ティラーメイド型計算の5つのチャレンジを盛り込んだ。それゆえ、導入後の具体的なシステム設計については、これまで本センターで経験したことのない労力と時間が必要であり、本特集記事を時間までに完成できるかどうか不安であった。しかし、今なんとか本特集記事の終わりに近づき安堵しつつある。ただ、それでもやはり、今回の特集記事については徒然なるままに文章を書かせていただくのが精一杯で、十分に推敲する時間を割く余裕がなかった。それゆえに、読みづらい部分、説明が不十分である点もあるかと思う。その点についてはご容赦いただければ幸いである。

最後に今一度記す。SQUIDは、本センターが現時点で提供できる最高のスーパーコンピュータであると自負している。当然、できるだけ多くの研究者にご利用いただき、研究活動にお役立ていただきたいと考えている。SQUIDに少しでも興味を持ってくださる方がおられたら、是非ご利用いただければ幸いである。SQUIDがわが国の学術・産業の発展を支える研究基盤へと成長・発展していくことを願っている。皆様方のご支援がサイバーメディアセンター スーパーコンピューティング事業の発展につながっていく。是非とも、率直なご意見、ご要望等のフィードバックを引き続きお寄せ頂けるようお願いしたい。

参考文献

- [1] SX-ACE, <http://www.hpccmc.osaka-u.ac.jp/sx-ace-sys/>.
- [2] 伊達 進, “ペタフロップス級ハイブリッド型スーパー コンピュータ OCTOPUS: Osaka university Cybermedia cenTer Over-Petascale Universal Supercomputer ~サイバー メディアセンターのスーパーコンピューティング事業の再生と躍進にむけて~”, HPC ジャーナル, Sep. 2018.
[DOI:10.18910/70826]
- [3] OCTOPUS, <http://www.hpccmc.osaka-u.ac.jp/octopus/>, 2021.
- [4] 汎用コンクラスタ (HCC), <http://www.hpccmc.osaka-u.ac.jp/hcc-sys/>.
- [5] OU ビジョン 2021 -社会変革に貢献する世界屈指のイノベーティブな大学へ-, <https://www.osaka-u.ac.jp/ja/oumode/OUvision2021/y66s8j>.
- [6] Cyber HPC Symposium 2017, http://www.hpccmc.osaka-u.ac.jp/lec_ws/cyberhpcsympo-3rd/.
- [7] Microsoft Azure, <https://azure.microsoft.com/>.
- [8] Oracle Cloud Infrastructure, <https://www.oracle.com/jp/cloud/>.
- [9] AWS, <https://aws.amazon.com/>.
- [10] 伊達進, 片岡洋介, 五十木秀一, 勝浦裕貴、寺前勇希、木越信一郎, “OCTOPUS のクラウドバースティング拡張”, 大学 ICT 推進協議会 2019 年度年次大会, 福岡, Dec.2019.
- [11] Susumu Date, Hiroaki Kataoka, Shuichi Gojuki, Yiki Katsuura, Yuki Teramae, and Shinichiro Kigoshi, “First Experience and Practice of Cloud Bursting Extension to OCTOPUS”, 10th International Conference on Cloud Computing and Services Science, CLOSER2020, pp.448-455, May 2020. [DOI: 10.5220/0009573904480455]
- [12] “増大するスペコン需要にこたえる新技術 パブリッククラウドを利用したクラウドバースティングを実装”, https://resou.osaka-u.ac.jp/ja/research/2019/20191115_2, Research at Osaka University, 2019.
- [13] Software and Library (OCTOPUS), <http://www.hpccmc.osaka-u.ac.jp/system/manual/octopus-use/software/>.
- [14] Welcome to How Wonderful Gets Done 2021, <https://www.intel.com/content/www/us/en/events/how-wonderful-gets-done.html>.
- [15] SX-Aurora TSUBASA ラインナップ, <https://jpn.nec.com/hpc/sxauroratsubasa/specification/index.html>.
- [16] TOP500, <https://www.top500.org/>.
- [17] The LINPACK BENCHMARK, <https://www.top500.org/project/linpack/>.
- [18] TOP500 LIST – JUNE 2021, <https://www.top500.org/lists/top500/list/2021/06/>.
- [19] HPCG Benchmark, <https://www.hpcg-benchmark.org/>.
- [20] HPCG – JUNE 2021, <https://www.top500.org/lists/hpcg/list/2021/06/>.
- [21] GREEN500 LIST – JUNE 2021, <https://www.top500.org/lists/green500/list/2021/06/>.
- [22] スーパーコンピュータシステム SQUID ラックデザイン コンテスト, <http://www.hpccmc.osaka-u.ac.jp/squid-rack-design/>.
- [23] インテル アドバンスト・ベクトル・エクステンション 512 (Intel AVX-512), <https://www.intel.co.jp/content/www/jp/ja/architecture-and-technology/avx-512-overview.html>.
- [24] NVLINK と NVSwitch, <https://www.nvidia.com/jp/data-center/nvlink/>.
- [25] NVIDIA Developer BLOG HGX A100 8-GPU connected with NVSwitch for fastest time-to-solution, <https://developer.nvidia.com/blog/introducing-hgx-a100-most-powerful-accelerated-server-platform-for-ai-hpc/>.
- [26] OU ビジョン 2021 -社会変革に貢献する世界屈指のイノベーティブな大学へ-, <https://www.osaka-u.ac.jp/ja/oumode/OUvision2021>.
- [27] DDN EXAScaler, https://ddn.co.jp/products/storage_software/exascaler.html.
- [28] “Cloudian HyperStore Technical Whitepaper”, Cloudian Inc., 2015. (CLO-WP-13002-EN-02)
- [29] NextCloud, <https://nextcloud.com/>.
- [30] Social Smart Dental Hospital (S2DH), <https://s2dh.org>.
- [31] Singularity, <https://sylabs.io/singularity/>.
- [32] 渡場康弘, 李 天鎬, 伊達 進, “OCTOPUS 上における既存サービスと共に存した Docker による資源提供環境の構

築, 大学 ICT 推進協議会 2019 年度年次大会, pp.239-241,
福岡, Dec.2019.

[33] コンテナ利用方法(SQUID), <http://www.hpc.cmc.osaka-u.ac.jp/system/manual/squid-use/singularity/>.

[34] フロントエンド利用方法, <http://www.hpc.cmc.osaka-u.ac.jp/system/manual/squid-use/frontend/>.

[35] 革新的ハイパフォーマンス・コンピューティング・
インフラストラクチャ (High Performance Computing
Infrastructure), <http://www.hpci-office.jp/>.

[36] 学際大規模情報基盤共同利用・共同研究拠点 (Joint
Usage/Research Center for Interdisciplinary Large-scale
Information Infrastructure), <https://jhpcn-kyoten.itc.u-tokyo.ac.jp/ja/>.

[37] 勝浦裕貴, 寺前勇希, 木越信一郎, 伊達進, “スーパー
コンピュータ OCTOPUS の混雑緩和に向けた取り組み”,
大学 ICT 推進協議会 2020 年度年次大会, Dec.2020

大規模計算機システム利用者 研究報告

※「研究報告」では、利用者様が大阪大学サイバーメディアセンターの大規模計算機システムを、どのように利用しているのか報告いただいている。ここでは、大規模計算機システム公募型利用制度採択者からの研究報告を掲載します。

- ・QCDの非可換ビアンキ恒等式の破れ(モノポール)に基づく
新しい閉じ込め機構のモンテ・カルロ法による研究 35
鈴木 恒雄 大阪大学 核物理研究センター

- ・CeドープされたYAG結晶における光励起後の
Franck Condon緩和の第一原理計算(2020年度) 37
宮本 良之 国立研究開発法人産業技術総合研究所

- ・Gradient flowに基づく SF_tX 法による物理点 QCD の熱力学特性の研究 39
金谷 和至 筑波大学 宇宙史研究センター

- ・Z3 対称な量子色力学における格子シミュレーション 43
河野 宏明 佐賀大学 理工学部

- ・ミウラ折り型ジグザグリプレットの実用のための研究 47
岡林 希依 大阪大学 大学院工学研究科

- ・タンパク質-リガンド結合自由エネルギーにおける共溶媒濃度依存性の解明 53
肥喜里 志門 大阪大学 大学院基礎工学研究科

- ・ハイブリッド汎関数を用いた水の第一原理分子動力学シミュレーション 55
大戸 達彦 大阪大学 大学院基礎工学研究科

- ・格子QCDを用いたhidden-charm pentaquarkの解析 59
杉浦 拓也 理化学研究所 数理創造プログラム

・微孔性高分子膜の気体吸収性の自由エネルギー解析	63
小嶋 秀和	大阪大学 大学院基礎工学研究科
・先天的な顔の異常をスクリーニングする矯正診断支援AIシステムの開発	67
谷川 千尋	大阪大学 大学院歯学研究科
・環状鎖メルトへの線状鎖の少量添加の粗視化MDシミュレーション	69
上原 恵理香	お茶の水女子大学 ソフトマター教育研究センター
・大規模時系列テンソルによる多角的イベント予測	75
本田 崇人	大阪大学 産業科学研究所 産業科学AIセンター

QCD の非可換ビアンキ恒等式の破れ（モノポール）に基づく 新しい閉じ込め機構のモンテ・カルロ法による研究

鈴木 恒雄¹、平口 敦基²、石黒 克也²

大阪大学 核物理研究センター¹、高知大学²

1. はじめに

半世紀間もの間の未解決問題である素粒子の強い相互作用の理論である量子色力学 QCD でのカラーの閉じ込め問題を、磁気的モノポールの真空凝縮による双対マイスナー効果の考え方で解明する。QCD では、ゲージ場が特異的でビアンキ恒等式の破れが起こり、その破れが、可換な保存則をみたす磁気的なモノポール流とみなせることを、最近著者の一人鈴木が発見した[1]。人為的なゲージ固定や QCD を拡張しなくとも、QCD での磁気的なモノポールが定義でき、連続極限を持っていること、連続極限でのモノポール有効作用をモデルである格子 SU2QCD でのモンテ・カルロ計算機実験で、ブロックスピニ変換という方法を用いて示した[2,3]。本研究計画では、
(1) SU2QCD での結果が、現実の SU3QCD でも成立しているかどうか？ (2) グルオンのみの PureSU3QCD で、グルーボールの質量や弦定数などの非摂動効果が、モノポールのみで理解できるかどうか？を確かめる。

2. 計算手法

計算手法は、QCD を有限体積 V 、有限格子間隔 a の 4 次元空間上に定式化し、モンテ・カルロ法を用いて QCD での真空配位を発生させ、それを用いて様々な物理量を計算する。最後に体積無限大、格子間隔ゼロとする極限を調べて、連続理論での結論を得る。

格子空間と連続極限での世界は、位相構造がまったく異なり、位相量であるモノポールを格子上で定義するためには、SU3 非可換理論から可換なゲージ場を定義し、モノポールを抜き出さなければならぬ。抜き出し方は、ユニークでなく、SU3 の場合は SU2 と違い非常に多様な方法があり、どの方法が連続極限を調べるのが良いかの事前準備に相当時間を

要した。抜き出した一つのカラーの可換ゲージ場やそのモノポールで計算される量は、全体として、ゲージ不变量ではない。しかし、非常に多量の真空配位を用いて平均操作を行うと、ゲージ不变部分が抜き出せる。もしも連続極限で重要な役割を果たすなら、ゲージ不变な部分が連続極限で、有限に存在しているはずである。非常に多量の真空配位を利用して平均操作をしないと、連続極限が得られないので、統計精度を上げるために、一つの真空配位に対して各々 3000 回ほどのランダムゲージ変換をした配位も平均操作に含める、さらに可換ゲージ場は、8 個あるがそれらが対等であることから、すべて平均操作に加えることで、S/N 比を改善した。

3. 完全な Abelian dominance と monopole dominance

Abelian Polyakov loop の相関、monopole Polyakov loop の相関から、弦定数を測定した。

まず Abelian 弦定数のみで、一切のそれ以上の近似をせずに、non-Abelian 弦定数を出せるという結果は、参考論文[4]の Multilevel method を活用して、示すことができた。

monopole dominance は、SU2 の場合は、比較的容易に示せたが、SU3 は比較にならないほど多くの真空配位が必要で、大変困難を極めた。ようやく 2020 年度夏に $24^3 \times 4$ という格子サイズで 6 万個の熱平衡真空配位に、それぞれ 3000 回のゲージ変換をした配位に、カラーの自由度の違うものもとりこんで、合計 16 億個の配位による平均操作をして、ようやく興味ある結果が得られた。結果を表 1 に示す。

SU3 $24^3 \times 4$ beta=5.6	16 億個の配位
Non-Abelian 弦定数	0.193(4)
Abelian 弦定数	0.184(15)
Monopole 弦定数	0.188(16)
Photon 弦定数	-0.0014(2)

表 1 からわかるように、誤差の範囲で閉じ込めを示す物理量である non Abelian の弦定数が、カラー 1 個での Abelian 弦定数で再現され、さらにそれが対応するカラーだけのモノポールの寄与で、きれいに再現されるということが示された。つまり 8 個の成分を持つグルオンに関するカラー平均電場が、8 個のカラー成分どれか 1 個の可換電場と同じ弦定数で再現され、それが対応するカラーのモノポールだけで再現されるということがわかった。この結果は、2018 年[2]に得られた簡単モデルとして SU2 の結果が、現実の SU3QCD でも、実現していることを示している。非可換ゲージ場の静的な Quark-AntiQuark の閉じ込めを示す線形のポテンシャルが、可換な双対マイスナー効果でソレノイド型のモノポール磁流で絞られて、生じていることを示している。しかもこの結果は、これまで真空配位を滑らかにするために導入された最大可換ゲージなどの人為的な仮定なしに、厳密に得られた結果であり、大変興味深い。参考までに、SU2 に比べていかに大変な計算であったかを示すために、SU2 の結果も載せる。熱平衡配位 5000 個、ゲージ変換 1000 回合計 500 万個の配位で、大きな格子のデータもきれいに決まった。

SU2 36^3x6beta=2.53	500 万個の配位
Non-Abelian 弦定数	0.072(3)
Abelian 弦定数	0.073(2)
Monopole 弦定数	0.073(3)
Photon 弦定数	-1.0x10^(-4)(2)

SU2 では、同じ温度系に対応する、いろいろな相互作用ベータでも同じ結果が得られたので、SU3 でも試みた。しかし、時間方向 6 の格子でベータ 5.75、および時間方向サイズ 8 でベータ 5.9 の計算は、困難を極めた。SX-ACE の運用終了後、別のセンターで利用した SX-Aurora での計算で、ようやく 40^3x6 beta=5.75 で非常にたくさんの配位数を採用して、意味のある結果はでたが、時間方向 8 の格子では、まだ出でていない。しかし、multilevel method による計算で、完全な Abelian dominance は、示せており、さらに photon-photon 相関から、photon による弦定数は、ゼロであること、Abelian の弦定数が、monopole と

monopole の積に分解されることから、Abelian の弦定数は、monopole から出ていることが、予想できる。

4. 双対マイスナー効果の測定

直接にカラー 1 個の Abelian 電場の振る舞い、その周りの対応するカラー磁流の分布を測定した。予想通り、可換電場も全体の電場と同じ浸透長をもって絞られていること。さらにソレノイド型の磁流分布が観測された。

5. おわりに

計算は、大阪大学サイバーメディアセンターの SX-ACE で大半得られた。成果の一部は、文献[5][6]に載せてある。センターの方や NEC の方に program 相談などにのっていただいた。大変感謝しております。また高エネルギー研究所の SX-Aurora、東北大学のサイバーサイエンスセンターの SX-Aurora も利用させてもらった。ここにその協力を感謝します。

参考文献

- [1] T.Suzuki, arXiv:1402.1294 (2014)
- [2] T.Suzuki, K.Ishiguro, V.Bornyakov, P.R. D97, 034501, 099905(erratum) (2018)
- [3] T.Suzuki, P.R. D97, 034509 (2018)
- [4] M.Luscher and P.Weisz, JHEP, 010(2001)
- [5] A.Hiraguchi, K.Ishiguro and T.Suzuki, P. R. D102 , 114504 (2020)
- [6] Asia-Pacific Symposium for Lattice Field Theory (APLAT 2020) August, 2020 (Online conference)
鈴木恒雄 「Color confinement due to violation of non-Abelian Bianchi identity」
石黒克也 「Abelian and monopole dominance without gauge fixing in pure SU(3) gauge theory」
平口敦基 「The dual Meissner effect due to the violation of non-Abelian Bianchi identity」

Ce ドープされた YAG 結晶における光励起後の Franck Condon 緩和の第一原理計算 (2020 年度)

宮本 良之

国立研究開発法人産業技術総合研究所 機能材料コンピュテーションナルデザイン研究センター

1. はじめに

LED 素子による高輝度白色光源に加え、暖色系光源のニーズも市場にあり、赤色発光材料開発が要求されています。2018 年以降、YAG 結晶中に Ce 不純物をドープした材料において、結晶性と Ce ドープ量の最適化により高効率の赤色発光が得られることが見いだされました。この材料における、光吸収後の発光の赤方偏移メカニズム解明のため、第一原理計算による研究を 2019 年度に開始しました。

2019 年度は YAG 結晶中の Ce 不純物の光吸収後の Franck-Condon 緩和過程が、Ce 近接酸素原子の移動であること、それにより Ce 4f 準位が上昇し 5d 準位にエネルギー的に近くなることで発光の赤方偏移を得ることを明らかにしました[1]。さらに、この機構は格子の温度が絶対零度から室温まで普遍であると予測されました。2020 年度は、YAG 結晶作成中に発生すると懸念される酸素欠陥の影響について、詳細に調べました。

2. 計算モデルの取扱い

2019 年度と同様に、YAG 結晶はイットリウム(Y)原子 24 個、アルミニウム(Al)40 個、酸素(O)96 個よりなる結晶構造を単位胞とする周期境界条件でモデル化し、24 個の Y 原子のうちのひとつを Ce 原子で置換した Ce ドープ構造を考えますが、2020 年度はさらに 96 個の O 原子のうち Ce に最近接するもの、2 番目に近接するもの、3 番目に近接するもののいずれかが欠損した構造を調べ、それぞれの内部エネルギー、光励起後の緩和過程を調べました。

シミュレーションは 2019 年度と同様に、時間依存密度汎関数理論[2]に基づく電子・格子ダイナミクスで、コード FPSEID[3]を用いました。

3. 大規模並列計算

実際には、時間依存 Schrödinger 方程式に類似した時間依存 Kohn-Sham 方程式

$$i \frac{\partial}{\partial t} \psi_n(\mathbf{r}, t) = H^{KS}(\mathbf{r}, t) \psi_n(\mathbf{r}, t)$$

を数値計算します。波動関数 $\psi_n(\mathbf{r}, t)$ の添え字 n ごとにこの方程式を Suzuki-Trotter 分解法で並列計算すると、波動関数同士の規格・直交関係が自動的に保存されるので、プロセッサー間の波動関数データの通信を必要としない高い並列度が達成されます。また、これと並行して電子の運動に伴い変化する原子核への力場をとりいれた分子動力学計算を行ない、電子励起による格子緩和の計算を行います。

4. 計算結果

4.1 酸素欠陥の位置と相対的な安定性

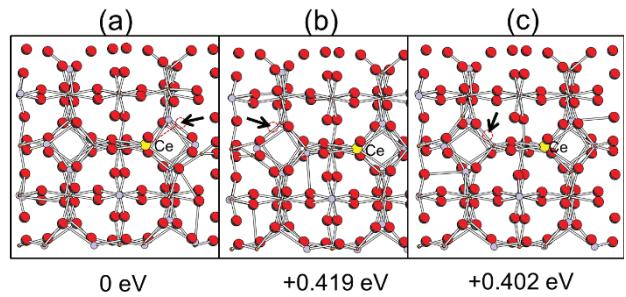


図 1: Ce ドープされた YAG 結晶中の酸素欠陥構造とその相対的な内部エネルギー

図 1 は Ce ドープされた YAG 結晶構造の単位胞あたりに 1 個の酸素欠陥が導入された構造と、その相対的な内部エネルギーを示しています。赤丸が O 原子、黄色が Ce 原子、小さな紫が Y 原子、小さなオレンジが Al 原子を示し、図中の矢印は O 原子の欠損した部分（酸素欠陥）の位置を示します。図 1(a) は酸素欠陥が Ce 原子の最近接位置、(b) は酸素欠陥が Ce 原子から 3 番目に遠い O 原子の位置、(c) は酸素欠陥が Ce 原子から 2 番目に遠い O 原子の位置に

ある構造を示し、原子構造は電子基底状態の下で最もエネルギーが下がるように最適化されています。図 1(a)の構造の内部エネルギーを 0 基準(0 eV)とすると(b)および(c)の構造の内部エネルギーはおよそ 0.4 eV 高くなります。

のことより、Ce ドープされた YAG 結晶において酸素欠陥が発生した場合には、高熱処理後に Ce 原子のそばに最も近くなるように酸素欠陥が発生する頻度が高くなることが示唆されます。

4.2 酸素欠陥のある構造における電子状態

前章で見せた酸素欠陥を有する場合の電子構造(エネルギー・バンド構造)を図 2 に示します。

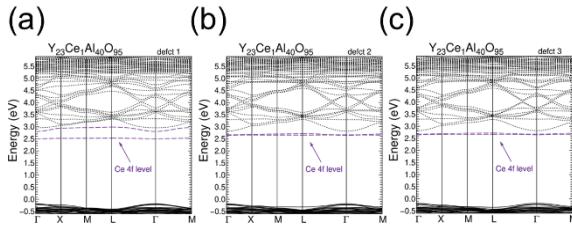


図 2 : Ce ドープされた YAG 結晶中に酸素欠陥のある場合のバンド構造

図 2 の(a)、(b)、(c)それぞれのエネルギー・バンド構造は図 1(a)、(b)、(c)それぞれに対応し、(b)と(c)の欠陥構造のバンド構造は、欠陥の無い時のバンド構造に類似しています。一方(a)のバンド構造は、酸素欠陥が Ce 原子に最近接した構造のせいで、Ce 原子周辺の対称性が著しく低下し、YAG 結晶のバンドギャップ中にある Ce 4f 準位が分裂を起こしていることが分かります。

4.3 酸素欠陥のある構造における電子励起とその緩和過程

図 3 に酸素欠陥のある場合の Ce 4f→5d 励起後の格子緩和(Franck-Condon 緩和)による電子エネルギー準位の時間変化を示します。

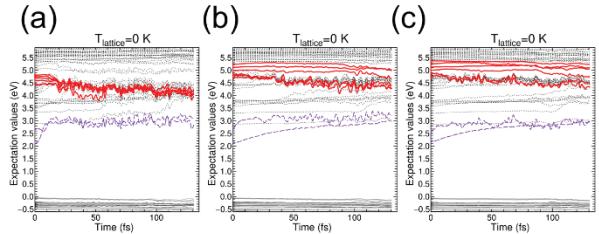


図 3 : 酸素欠陥のある Ce ドープされた YAG 結晶における Ce 4f→5d 励起後の電子準位緩和

図 3(a)、(b)、(c)は図 1 の(a)、(b)、(c)それぞれの構造に対応しています。電子励起状態は時刻 0 の時に Ce 4f 軌道(図中の紫の線)に正孔を開け、Ce 5d 軌道(図中の赤の線)に電子を占有させることで近似します。その近似された励起状態から出発した電子・格子ダイナミクスシミュレーションの結果は、酸素欠陥が Ce 原子に最近接しているときを除いて酸素欠陥の無い場合の 2019 年度の結果と似ています。一方酸素欠陥が Ce 原子に最近接している場合には 4f 準位と 5d 準位が非常に接近しますので、赤色発光を見るか、或いは無輻射緩和が起きかえって発光を生じない可能性があることが分かりました。

5. おわりに

2019 年度と 2020 年度の研究によって Ce ドープされた YAG 結晶中の光励起後の緩和過程が具体的にわかりつつあります。本研究で用いたシミュレーション技術は、発光材料の設計のみならず、製造過程で発生する欠陥の影響についても指針を与え、工業的応用に貢献することが期待されます。

参考文献

- (1) Y. Miyamoto, H. Nakamura, and T. Akai, *J. Luminescence*, **229**, 117647(2021).
- (2) E. Runge and E. K. U. Gross,, *Phys Rev. Lett.*, **52**, 997-1000, (1984).
- (3) O. Sugino and Y. Miyamoto, *Phys. Rev. B***59**, 2579-2586 (1999).

Gradient flowに基づく SF t X 法による物理点 QCD の熱力学特性の研究

金谷 和至¹

筑波大学 宇宙史研究センター

1. はじめに

ビッグバン宇宙論によると、138 億年前の宇宙創世直後は、宇宙全体が極めて高温・高密度であるために、クオークが陽子や中性子などのハドロンから解放された「クオーク・グルオン・プラズマ(QGP)状態」という、現在我々が知るものとは全く違う物質状態にあったと考えられている。ビッグバンからの膨張・冷却により、宇宙年齢 10^4 秒頃（温度約 1 兆度）に、高温相の QGP 状態から、クオークがハドロンに閉じ込められた「ハドロン状態」（低温相）へ相転移したと考えられる。この QCD 相転移の解明は、我々の知る元素がいかに創成されたかの初期状態の解明でもあり、超新星爆発やブラックホール周辺の物理過程などを経て、生命の発生にも繋がる様々な原子（元素）へと物質進化を理解する上で極めて重要である。

これは本質的に非摂動的な問題であり、信頼できる情報を得るためにには、クオークの基礎理論である量子色力学(QCD)の第一原理に直接基づく格子 QCD シミュレーションが不可欠である。これまでの格子 QCD 研究の多くは、計算量が比較的少ないスタガード型格子クオークを用いて行われているが、連続極限で現実の QCD を再現することが証明されていない等の本質的問題を孕んでいる。我々は、理論的基盤が確立した Wilson 型格子クオークを用いて、QCD 相転移の性質と、相転移近傍の温度でクオーク物質がどのような熱力学特性を示すかの大規模シミュレーション研究を推進している。

2. 研究方法

Wilson 型クオークは、連続極限の正しさが保証されている反面、有限の格子上ではカイラル対称性を

陽に壊しているため、カイラル対称性に関わる物理量に関して格子化誤差が大きく、それを取り除いて物理量を計算するために膨大な計算資源が要求されるという困難があった。

また、並進対称性に伴う保存カレントとして定義されるエネルギー運動量テンソルは系の力学特性を調べる上で基本的な観測量だが（例えば、対角成分はエネルギー密度や圧力などの情報を含み、2 点相關関数から様々な粘性率が導かれる）、格子上では連続的な並進対称性が離散的なものに壊されているため、従来の方法では、5 種類の演算子の非自明なくりこみと混合を非摂動論的に決定するという、複雑で困難な作業が要求されていた。

我々は、Gradient flow（勾配流）に基づいて鈴木博らにより開発された **SF t X 法 (small flow-time expansion method)** を応用して、これらの困難を緩和する[論文 1, 論文 2]。Gradient flow とは、仮想的なパラメータ t （フロー時間）を導入して、作用の勾配で与えられる発展方程式（フロー方程式）により場の量を変形させる理論的手法である。この発展方程式は一種の拡散方程式で、 $t = 0$ の元の場の量を $t > 0$ までフローさせた結果は、元の場の量を $\sqrt{8t}$ の物理的領域で平準化(smear)させたものと解釈することができる。さらに、フローさせた場で作る演算子に紫外発散も同一点特異性も存在しないことが、Lüscher らにより摂動の無限次まで証明された。

SF t X 法は、フローさせた場の有限性を活用して、連続極限のくりこまれた物理量を格子で評価する一般的な方法で、本プロジェクトのメンバーである鈴木博らにより開発された。図 1 にその基本アイデアを示す。連続理論で何らかの物理量を非摂動論的に評価しようとすると、通常は、その物理量を格子理

¹ プロジェクトメンバー：江尻信司（新潟大学）、北澤正清（大阪大学）、鈴木博（九州大学）、谷口裕介（筑波大学）、梅田貴士（広島大学）

論で定義し、格子上で評価された値を連続極限まで外挿 ($a \rightarrow 0$) するが、数値的なくりこみに加えて、格子上で重要な対称性が壊されている場合にはそれによる不要な演算子との混合を数値的に除去する必要があり、十分な精度を出すためにはしばしば重い計算となる。SFtX 法では、フローさせた演算子が有限であることを利用して、対応する演算子を格子上で計算することにより、くりこみ操作や混合の除去無しに直接評価する。ただし、フローさせた演算子は求める物理量そのものでは無いので、格子の結果を、連続極限 ($a \rightarrow 0$) とフロー時間ゼロ極限 ($t \rightarrow 0$) に 2 重外挿する。この 2 重外挿では、格子化誤差が大きい $t/a^2 \approx 0$ 領域のデータを取り除く必要があるが、それを行えば 2 つの外挿の順序によらず同じ結果が得られると期待される。後述するように、クエンチ QCD でそれを実際に確認した[論文 3]。

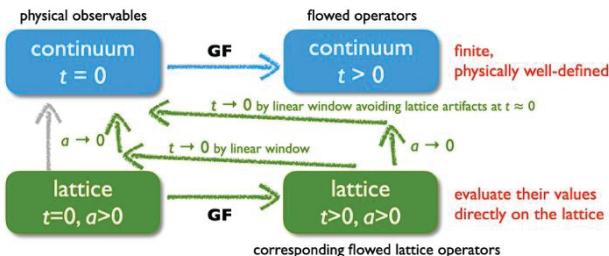


図 1 : SFtX 法 [論文 1, 論文 2]

この方法は、どんな物理量にも使うことができるるので、格子化で並進対称性が陽に壊されるためにこれまで扱いが難しかったエネルギー運動量テンソルの格子計算に応用された。我々は、SFtX 法がカイラル対称性の破れの困難にも有効であることに着目し、Wilson 型クォークを持つ QCD に SFtX 法を応用した一連の研究を推進している。

3. u, d クォークが重い $N_f=2+1$ QCD での試験研究

動的クォークを含む QCD への応用の第一段階として、s クォーク質量は現実に近いが u,d クォークは現実より重い $N_f=2+1$ QCD を、格子間隔 $a \simeq 0.07\text{fm}$ の格子で調べた[論文 2, 論文 4]。温度 $T = 1/(aN_t)$ は、温度軸方向の格子サイズ N_t で変化させる。

エネルギー運動量テンソルの対角成分から計算し

た状態方程式の結果を図 2 の左に示す。赤丸が SFtX 法の結果で、黒三角は従来の積分法の結果である。 $T < 300\text{MeV}$ ($N_t \geq 8$) で従来の結果を良く再現している。他方、 $T > 300\text{MeV}$ の不一致は、 $O((aT)^2 = 1/N_t^2)$ の格子化誤差が $N_t < 8$ で無視できないことを示唆する。右図には、ud クォークのカイラル感受率を示す。SFtX 法により直接計算した結果、相転移温度 190MeV 近傍で明確なピークを示す結果を得た。図 3 では、位相感受率の結果を示す。その温度依存性はアクションが宇宙暗黒物質の候補となるかの判定で重要だが、格子では評価の難しい量であった。SFtX 法により、2種類の評価式(gluonic と fermionic)で一致する、信頼性の高い結果を得た。これらは格子間隔 $a \simeq 0.07\text{fm}$ の 1 点で得られた結果で、連続極限外挿がまだ取られていないが、これらの結果は、この格子が連続極限に近いことを示唆する。

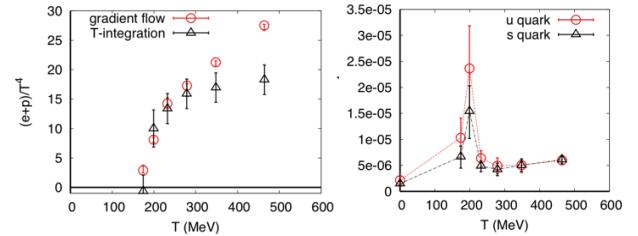


図 2 : u,d クォークが重い $N_f=2+1$ QCD の熱力学。
左:エントロピー密度、右:カイラル感受率 [論文 2]

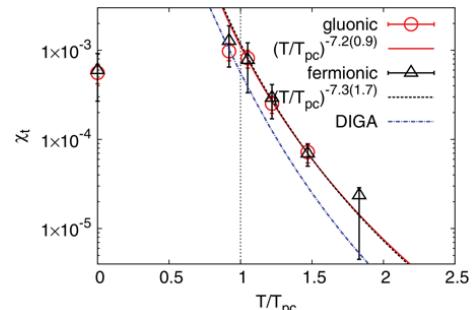


図 3 : u,d が重い $N_f=2+1$ QCD の位相感受率 [論文 4]

4. 2020 年度の研究成果

- この結果をうけ、2020 年度には以下を推進した。
- 現実のクォーク質量（物理点）での $N_f=2+1$ QCD シミュレーション[論文 5 の研究の継続]
 - SFtX 法のさらなる試験と改良[論文 3, 論文 6]
 - 連続極限外挿に向けてのシミュレーション
 - 他の物理量への応用[論文 3, 論文 7]

2020 年度の CMC 大規模計算機システム公募型利用制度による計算資源〔OCTOPUS 4,960 ノード時間配分、3,4777 ノード時間(84.9%)使用〕は、(i) のシミュレーション、および、論文 3、論文 6 の研究の一部で使用した。以下では、論文 6 と論文 3 の概要と、それに基づく(i)の進捗状況を報告する。

5. SF tX 法の改良 [論文 6]

第 2 節で説明したように、SF tX 法では、格子化誤差が大きい $t/a^2 \approx 0$ 領域を避けながら $a \rightarrow 0$ と $t \rightarrow 0$ の 2 重外挿を実行する必要があるが、その後の試験研究の結果、格子が粗い、もしくは演算子が複雑だと、外挿に必要な線形領域が不明確になる場合があることがわかった。論文 6 では、その改善にむけて、マッチング係数におけるくりこみスケールの効果を研究した。

マッチング係数は、フローさせた演算子と求めるくりこまれた物理量とを結びつける係数で、QCD を含む漸近自由な理論では t が大きくなればマッチング係数を摂動計算することができる。SF tX 法では、摂動であらかじめわかっている t 依存性をマッチング係数に取り込むことで、 $t \rightarrow 0$ 外挿が滑らかになるように改良する。実際、マッチング係数のおかげで、 $t \rightarrow 0$ 外挿を数値的に可能とする線形領域が実現する。マッチング係数の摂動計算におけるくりこみスケール μ は、フローさせた演算子の自然なスケールと同程度であれば何をとってもよく、 $t \rightarrow 0$ 極限の最終結果は μ に依存しないはずである。しかし、実際は摂動展開を有限次で切っているので、 μ により影響を受ける。

通常 μ としては、フローの smearing スケールである $\mu_d = 1/(8t)^{1/2}$ が採用されてきた。論文 6 では、Harlander らが最近の摂動の高次計算で提案した $\mu_0 = 1/(2\epsilon\gamma t)^{1/2}$ [論文 7] の効果を調べた (γ はオイラー数)。数値的には $\mu_0 \approx 1.5 \mu_d$ なので、 μ_0 は摂動領域をより大きな t まで拡大し、 t が大きな領域で $t \rightarrow 0$ 外挿のシグナルを改善してくれる可能性がある。

図 4 に、第 3 節で議論した、u,d クォークが現実より重い $N_f=2+1$ QCD におけるエントロピー密度（左図）と ud クォークのカイラル感受率（右図）の $t \rightarrow$

0 外挿を示す。緑が μ_d スケール、青が μ_0 スケールの結果である。 $t \rightarrow 0$ 極限はどちらもコンシスティントだが、 μ_0 スケールにより線形シグナルが改善されていることがわかる。

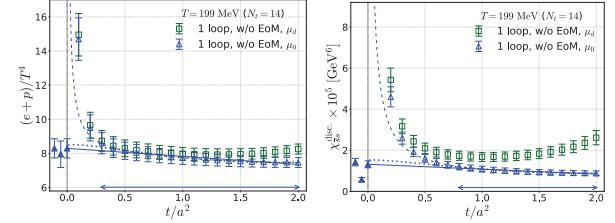


図 4：マッチング係数におけるくりこみスケールの効果。ud クォークが重い $N_f=2+1$ QCD の結果 [論文 6]

論文 6 では、マッチング係数における 2 ループ項 [論文 7] の効果や 2 ループ計算で使われた運動方程式の影響も研究しているが、SF tX 法の改良には大きくは寄与しないので、ここでは省略する。

6. クエンチ QCD の潜熱と SF tX 法における 2 重外挿の順序依存性の研究 [論文 3]

論文 3 では、SF tX 法を応用して、クエンチ QCD (SU(3) Yang-Mills 理論) の有限温度 1 次相転移点における潜熱と圧力ギャップ Δp を研究した。1 次相転移点では、共存する 2 相の動的平衡から $\Delta p = 0$ となるはずで、その数値的確認は結果の信頼性の良い指標とされてきた。また、クエンチ QCD では様々な格子間隔を系統的に計算できるので、第 2 節で議論した、 $a \rightarrow 0$ と $t \rightarrow 0$ の 2 重外挿における極限操作の順番の問題を試験した。

3 つの格子間隔、2 つの空間体積でシミュレーションを実行し、我々が開発した再重み付け法とヒストグラム法を組み合わせた手法を使って臨界点に調整した上で、SF tX 法を応用して臨界点における潜熱と Δp を測定した。

図 5 に、 μ_0 スケールを使った潜熱と Δp の結果を示す。 $t \rightarrow 0$ を先に実行する "method 1" と $a \rightarrow 0$ を先に実行する "method 2" の結果が比較されている ("method 2" では、さらに $t \rightarrow 0$ 外挿のフィット・レンジがいくつか比較されている)。filled symbols はアスペクト比 $N_s/N_t = 8$ 、open symbols は $N_s/N_t = 6$ に相当する空間体積での結果である。

図 5 から、(a) $a \rightarrow 0$ と $t \rightarrow 0$ の極限操作の順番を

変えてても結果が一致すること、および、(b) Δp がゼロとコンシスティントであることが確認される。これにより、連続極限における潜熱を精密で信頼性が高く測定することに成功したが、体積依存性が確認されるので、より大きな空間体積での追試が望まれる。

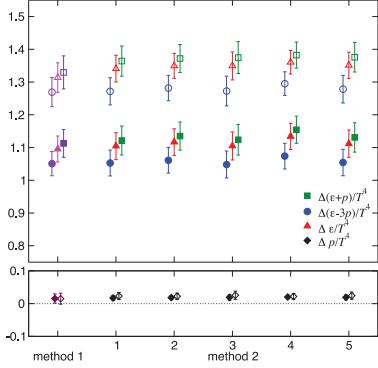


図 5 : クエンチ QCD の潜熱と圧力ギャップ [論文 3]

7. 現実のクォーク質量での $N_f=2+1$ QCD の研究

これらの研究を発展させ、クォーク質量を現実のクォーク質量（物理点）に調整した $N_f=2+1$ QCD の熱力学研究を推進している。ゼロ温度配位として PACS-CS Collaboration が生成したものを活用し、それと同じ格子間隔 $a \approx 0.09\text{fm}$ で有限温度シミュレーションを実行している。物理点の配位生成には大きな計算が要求されるので、様々な計算機資源を動員して系統的な大規模シミュレーションを遂行し、現在、この格子間隔での最後のステップとして、低温領域の統計数の補充を進めている。

この物理点シミュレーションでも、第 5 節で紹介した SF ℓ X 法の改良が重要な役割を果たしている。図 6 に、物理点におけるくりこみスケール依存性の試験結果を示す。 μ_d を使ったデータが $t/a^2 \leq 1.5$ までしか無いのは、そこで摂動展開が破綻し、running coupling constant が発散するからである。この物理点シミュレーションでは、上で議論した ud クォークが重い場合よりも格子が少し粗くなってしまっており、より小さな t/a^2 で破綻することになった。他方、 μ_0 スケールを採用すると、この格子でも $t/a^2 \approx 3$ まで摂動計算が有効である。左図のエントロピー密度から、 $t \rightarrow 0$ の外挿結果はくりこみスケールの取り方に依らないが、 μ_0 スケールでより安定した $t \rightarrow 0$ 外挿が可能となっていることがわかる。右図の ud クォークカイラル感受率より、 μ_d スケールでは $t \rightarrow 0$ 外挿をどのよ

うにとって良いか分からぬ物理量でも、 μ_0 スケールにより線形領域が拡がり、 $t \rightarrow 0$ 外挿が可能となることがわかる。

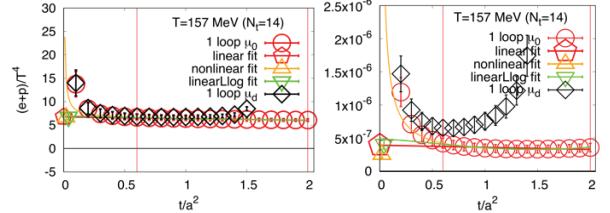


図 6 : 物理点 $N_f=2+1$ QCD におけるくりこみスケール依存性。左:エントロピー密度、右:カイラル感受率

この結果を得て、 μ_0 スケールを採用して物理点での熱力学量を評価している。これまでに得られた様々な物理量の挙動から、 $T \approx 122\text{-}146\text{ MeV}$ が相転移近傍の臨界領域にあることが示唆されるが、まだ統計が十分ではなく、明確な結論を得るためににはこの低温領域で更なる統計が必要である。我々の Wilson クォークによる相転移温度の結果は、スタガード型による選考結果より低い可能性があるが、相転移温度の精密な評価は実験的にも重要である。現在そのための低温領域の配位生成を集中的に進めている。

参考文献

- (1) H. Suzuki, Prog. Theor. Exp. Phys. 2013, 083B03 (2013), Erratum: [*ibid.* 2015, 079201 (2015)]; H. Makino and H. Suzuki, *ibid.* 2014, 063B02 (2014), Erratum: [*ibid.* 2015, 079202 (2015)]; T. Endo, et al., *ibid.* 2015, 053B03 (2015); K. Hieda and H. Suzuki, Mod. Phys. Lett. A 31, 1650214 (2016).
- (2) Y. Taniguchi, et al., Phys. Rev. D 96, 014509 (2017), Erratum: [*ibid.* 99, 059904 (2019)].
- (3) M. Shirogane et al., Prog. Theor. Exp. Phys. 2021, 013B08 (2021).
- (4) Y. Taniguchi, et al., Phys. Rev. D 95, 054502 (2017).
- (5) K. Kanaya, et al., EPJ Web Conf. 175, 07023 (2018); K. Kanaya, et al., PoS LATTICE 2019, 088 (2020).
- (6) Y. Taniguchi, et al., Phys. Rev. D 102, 014510 (2020).
- (7) A. Suzuki, et al., Phys. Rev. D 102, 034508 (2020).
- (8) Harlander, et al., Eur. Phys. J. C78, 944 (2018).

Z3 対称な量子色力学における格子シミュレーション

河野 宏明

佐賀大学 理工学部 物理学部門

1. はじめに

物質を構成する陽子や中性子とその仲間のバリオンはクォークと呼ばれるより基本的な粒子が 3 つ結合してできており、中間子はクォークとその反粒子である反クォークが結合してできている。バリオンと中間子を総称してハドロンと呼ぶ。通常の状態では、クォークと反クォークはハドロンの中に閉じ込められており、単体で取り出す事はできない。これをクォークの閉じ込めという。クォークや反クォークの間には、グルーオンと呼ばれるゲージ粒子によって媒介される強い相互作用が働き、クォークや反クォークをハドロンから単体で取り出そうとしても、すぐに引き戻される。強い相互作用の電荷は色電荷とよばれ、光の 3 原色に例えて、赤、緑、青と呼ばれる 3 つの種類がある。電磁気力を媒介する光子は電荷を持っていないが、グルーオンは色電荷を持っている。クォーク同様、グルーオンも閉じ込められる。

しかし、高温や高密度の状態では、ハドロンが溶けたり、つぶれたりして、クォークやグルーオンがハドロンから解放され、これらが多数密集した状態を形成するようになると考えられている。そのような状態はクォーク・グルオン・プラズマ(QGP)あるいはクォーク物質などと呼ばれている。強い相互作用を記述する基本理論は量子色力学(QCD)である。計算機上に作成した格子 4 次元空間において、QCDに基づいた統計力学的なシミュレーションを行うことで、高温においては QGP が出現することが示された。このような計算を格子 QCD という。また、高エネルギーの原子核衝突実験において、QGP が生成されていると考えられている。QGP の生成は、クォークの非閉じ込め状態の存在を示唆する。格子 QCD の計算によって、クォークの閉じ込め・非閉じ込めの転移は非連続的な相転移ではなく、クロスオーバー

であることがわかっている [1]。

一方、クォーク数と反クォーク数がアンバランスな高クォーク密度状態、すなわちクォーク化学ボテンシャルの大きな状態においては、符号問題とよばれる問題のため、格子 QCD のシミュレーションを行う事が困難である。クォークと反クォークのアンバランスのために、格子 QCD の計算の途中に現れる有効作用が複素数になってしまい、確率解釈に基づいたモンテカルロシミュレーションなどが実行できなくなるのである。符号問題については様々な解決方法が提案されているが、現在に至るも十分な解決はなされていない。

クォークの対生成・対消滅の効果を無視した極限においては、クォークの閉じ込め・非閉じ込めという状態は、QCD のゲージ対称性である SU(3)群の中心群である Z3 群によって分類できる事がわかっている。すなわち、Z3 対称性が保たれている状態が閉じ込めであり、それが自発的に破れている状態が非閉じ込めである。グルーオン場の時間成分から構成されるポリヤコフループは Z3 変換において不变でないため、これが Z3 対称性の秩序変数になる。ポリヤコフループが期待値を持たないと Z3 対称性が保たれてクォークが閉じ込められ、期待値を持つと Z3 対称性が自発的に破れてクォークは非閉じ込めの状態になる。実際、ポリヤコフループの期待値が零だと单一クォークの自由エネルギーが無限大になり、有限値だと单一クォークの自由エネルギーが有限になる事が示されている。

本来の QCD では、クォーク・反クォークの対生成の効果があるため、Z3 対称性が最初から破れてしまい、この対称性でクォークの閉じ込め状態と非閉じ込め状態を厳密に区別する事はできなくなり、両相の間の転移はクロスオーバーとなる [1]。ところが、3 フレーバー対称な QCD において、クォーク化学ボ

テンシャル μ に、フレーバー(u,d,s)依存性のある虚数化学ポテンシャルを

$$\mu_u = \mu + i2\pi/3T$$

$$\mu_d = \mu - i2\pi/3T$$

$$\mu_s = \mu$$

の形で付加する事で、Z3 対称性が回復する事が示された [2]。ただし、 T は温度である。ここでは、このような QCD を Z3-QCD と呼ぶ事にする。Z3-QCD には以下の 2 つの特徴が期待される。

(1) 虚数化学ポテンシャルは、時間方向の境界条件と同等なため、Z3-QCD は零温度極限では本来の QCD と一致する。

(2) Z3-QCD では、格子シミュレーションの途中に現れる有効作用が実となる配位が増えるため、符号問題が弱くなる [3]。

このため、Z3-QCD を利用する事で、零温度極限において、符号問題を回避して格子 QCD の計算が遂行できる可能性がある。そのような可能性を探るのが本研究の目的である。

2. 位相クエンチ近似とアイソスピン化学ポテンシャル

Z3-QCD の零化学ポテンシャルでの計算は行われており、現象論模型で平均場近似を用いて予測された結果と整合的な結果が得られている[4]。また、QCD の有効模型である Potts 模型を Z3 対称化した Z3-Potts 模型での有限化学ポテンシャルのもとでのシミュレーションも行われており、この場合は符号問題がない事が示されている [5]。さらに、QCD により近い有効模型である有効ポリヤコフループ（ライン）模型では、符号問題は存在するがかなり弱くなる事が示されている [6]。

有効ポリヤコフループ模型や QCD では、符号問題が存在するため再重み法などの計算方法を使用する必要がある。ここでは、一番シンプルな位相クエンチ近似を考えてみる。格子 QCD においては大正

準分布の分配関数 Z を以下のような経路積分表示に書き変えて計算するのが普通である。

$$Z = \int Dq D\bar{q} DU \exp(-S_g - \bar{q} M q)$$

ここで、 q はクォーク場、 U はグルーオン場であり、 S_g はグルーオン場のみを含む作用であり、 M はクォーク場に関するフェルミオンの行列である。クォーク場（およびその共役）の積分は実行できて、

$$Z = \int DU \det[M] \exp(-S_g)$$

となる。ところが、有限な化学ポテンシャルが存在すると、 $\det[M]$ が実数にならなくなるばかりかその実部が負になる場合がてくるので、大正準分配関数の被積分関数を確率密度関数として解釈できなくなり、モンテカルロ等の計算ができなくなる。これが符号問題である。そこで、行列式の部分を

$$\det[M] = |\det[M]| \exp(i\Phi)$$

と絶対値と位相 Φ を含む部分に分け、 $|\det[M]| \exp(-S_g)$ を近似的な確立密度関数として取り扱うのが位相クエンチ近似である。物理量 O の本来の期待値は、以下の再重み法で計算される。

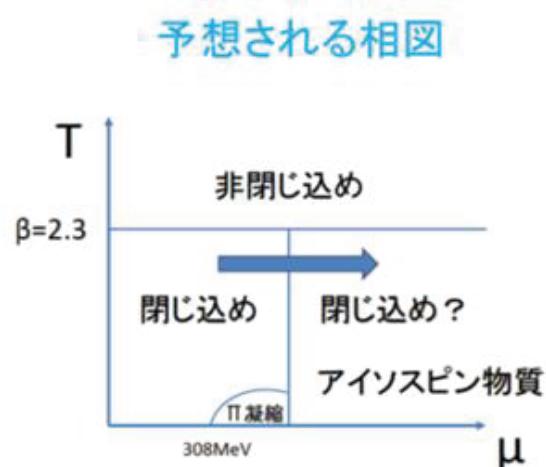
$$\langle O \rangle = \langle O \exp(i\Phi) \rangle' / \langle \exp(i\Phi) \rangle'$$

ただし、ダッシュ付きの期待値は近似的な確率密度関数を使って計算した期待値である。先の式の右辺の分母を位相因子と呼ぶが、この因子の絶対値が小さな値になると物理量の期待値の誤差が大きくなってしまう。位相因子の最大値は 1 である。位相因子が 1 に近いと符号問題が弱く、その絶対値が小さいと符号問題が強い。Z3 対称な有効ポリヤコフループ模型では、この位相因子が小さな領域がごく狭い領域に限られる事が示されている [6]。

格子 QCD では、有限化学ポテンシャルがない場合でも奇数フレーバーの場合は計算が複雑になる。そこで、2 フレーバーの計算が行われる事が多い [7]。2 フレーバーの場合は、位相クエンチ近似をすると、クォーク化学ポテンシャルはアイソスピン化学ポテンシャルと同じ形になってしまう事が知られており、低温においては人工的な“パイオノン凝縮”が発生して計算が難しくなる事が知られている。

ここでは、奇数フレーバー特有の計算の複雑化をさけるため、6 フレーバーの QCD を考え、それを Z3

対称化し、クォークの自由度に $1/3$ の因子をかける事で、零温度極限で 2 フレーバーの QCD に近づく模型を考える。そして、(再重み法を用いる以前の) 純粋な位相クエンチ近似でどのような相図が得られるかを調べる。零化学ポテンシャルでの格子 QCD 計算、有効模型での計算等から予想される相図は以下のようなものである。高温では非閉じ込めが実現している。低温では化学ポテンシャルが小さいと真空中に近い状態であり、大きくなるとアイソスピン物質が形成される。



低温で中間密度のところにパイオニン凝縮的な相が予想される。この相があると、計算が難しくなるだけでなく、本来のクォーク化学ポテンシャルの場合を再重み法で計算する際、位相クエンチ近似の確立密度関数が本来のそれと大きく異なることになり、位相因子が小さくなつて正しい答えが得られない。しかし、中間温度の領域にパイオニン凝縮がないがそれ以外は低温の部分とよく似た性質を持つ“窓”が存在する可能性がある。このような“窓”があれば、その部分の配位を使って、本来のクォーク化学ポテンシャルがある場合の低温領域の再重み法の計算が可能になる可能性がある。そこで、今回の計算では予測図の矢印の部分に重点を置いて解析を行った。

3. 格子 QCD 計算の設定と計算の実行

格子 QCD 計算のプログラムおよびセッティングは以下の通りである。(専門用語等については、参考文献[7]、[8]等を参照のこと。) 使用したプログラムは、中村純氏らのグループが開発した Lattice Tool Kit [9]

を、Z3-QCD に改造したものである。グルーオンの作用としては Iwasaki improved action [10]を、クォークの作用としては 2 フレーバーの Wilson fermion を使用している。ゲージ場の配位生成は、ハイブリッドモンテカルロ法を用いている。格子の大きさは、空間方向が 8 であり、時間方向が 4 である。計算に使用した大型計算機は、大阪大学サイバーメディアセンター(CMC)の SX-ACE である。

物理的な可変パラメータとしては、化学ポテンシャル以外では、温度に対応する β の異なるいくつかの値を使用したが、ここでは中間温度に対応する $\beta=1.5$ の結果を示す。これは温度にすると $T=0.76T_{pc}$ 程度である。ただし、 T_{pc} は通常の 2 フレーバー QCD での零密度での擬臨界温度($\sim 170\text{MeV}$)である。

ゲージ配位は最大で 40,000 程度生成し、最初の 2 千度を熱平衡達成までの過程として除いた。また、配位間の人口的な自己相関を避けるために 50 ごとに配位を採用して、物理量を計算した。計算した物理量は、プラケット変数、ポリヤコフループおよびアイソスピン密度である。

4. 数値計算の結果

図 1 に $\beta=1.5$ におけるポリヤコフループ P の絶対値の μ 依存性を示す。通常の 2 フレーバー QCD が緑色で、Z3-QCD が赤色で示されている。通常の QCD の場合は、連続的にポリヤコフループが増加しており、この範囲では非連続的な転移は認められない。Z3-QCD ではポリヤコフループはほとんど変化せず小さなままであり、状態が閉じ込め相にとどまっている事を示唆する。

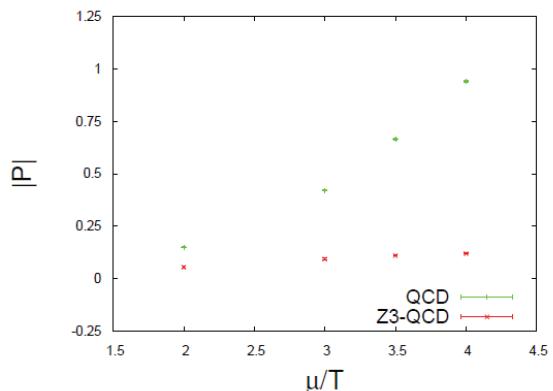


図 1: $\beta=1.5$ における $|P|$ の μ 依存性

図 2 は、 $\beta=1.5$ における（格子間隔の 3 乗で無次元化した）アイソスピニ密度 n の μ 依存性である。図 1 と同様に、通常の QCD の場合は、アイソスピニ密度は連続的な増加を見せているが、Z3-QCD では μ の大きなところで急激な増加が見られている。この急激な増加は“冷たい”アイソスピニ物質の形成を示唆している。図 1 と図 2 の結果から、中間温度における Z3-QCD では、真空とほぼ同じ状態から、 μ の大きいところで閉じ込め相のまま“冷たい”アイソスピニ物質が形成されている事が予測できる [11]。

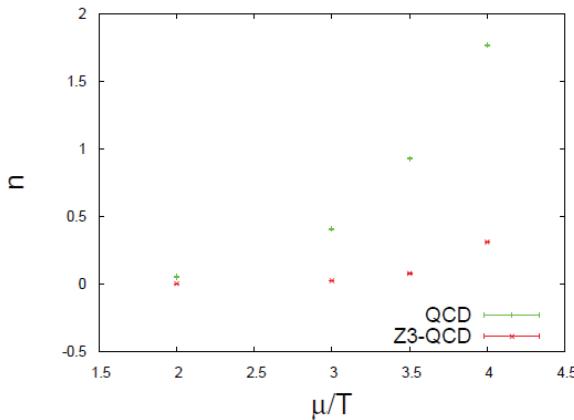


図 2 : $\beta=1.5$ における n の μ 依存性

5. まとめと今後の展望

この研究では、符号問題に対する解決策を模索するため、有限化学ポテンシャルのある場合の Z3 対称な格子 QCD シミュレーションを位相クエンチ近似のもとで行った。これはアイソスピニ密度のある状態の計算と等価な計算になっている。Z3-QCDにおいては、中間温度において、ほとんど真空と同じような状態から“冷たい”アイソスピニ物質が形成されているように思われる。この変化は低温かつクオーケン数化学ポテンシャルのもとで冷たい核物質やクオーケ物質が形成される現象とよく似ている。今後は、この領域の Z3-QCD による確立密度関数を低温の有限クオーケ密度における QCD の近似的な確率密度関数として使用し、再重み法により計算を実行する方法を模索していきたい。

謝辞

著者は有用な助言や議論に対して、中村純氏、三角樹弘氏、伊藤悦子氏、八尋正信氏、柏浩司氏、高橋純一氏、石井優大氏、宮原昌久氏、管野淳平氏、開田丈寛氏に感謝いたします。大阪大学サイバーメディアセンターと大阪大学核物理研究センターからは計算時間のサポートをいただきました。ここに謝意を表します。また、この研究は、科研費(基盤研究 C(No. 17K05446)および(No.20K03974)のサポートも受けております。ここに謝意を表します。

参考文献

- (1) Y. Aoki, G. Endrődi, Z. Fodor, S. D. Katz, and K. K. Szabó, Nature (London) 443, 675 (2006)
- (2) H. Kouno, Y. Sakai, T. Makiyama, K. Tokunaga, T. Sasaki and M. Yahiro, J. Phys. G: Nucl. Part. Phys. 39, 085010 (2012).
- (3) H. Kouno, K. Kashiwa, J. Takahashi, T. Misumi, and M. Yahiro, Phys. Rev. D93, 056009 (2016)
- (4) T. Iritani, E. Itou, T. Misumi, JHEP11, 159 (2015).
- (5) T. Hirakida, H. Kouno, J. Takahashi and M. Yahiro, Phys. Rev. D94, 014011 (2016).
- (6) T. Hirakida, J. Sugano, H. Kouno, J. Takahashi, and M. Yahiro, Phys. Rev. D 96, 074031 (2017)
- (7) 青木慎也, 格子上の場の理論, シュプリンガー現代理論物理学シリーズ第 3 卷, シュプリンガー・フェアラーク東京, 2005 年.
- (8) J. Takahashi, H. Kouno and M. Yahiro, Phys. Rev. D 91, 014501 (2015)
- (9) S. Choe, A. Nakamura, C. Nonaka and S. Muroya, Soryushiron Kenkyu (in Japanese), vol. 108 no.1, 1 (2003)
- (10) Y. Iwasaki, Nucl. Phys. B258, 141 (1985)
- (11) 河野宏明、開田丈寛、高橋純、八尋正信 “有限アイソスピニ密度がある場合の Z3 対称性な格子 QCD 計算”, 第 126 回日本物理学会九州支部例会、2020 年 12 月 5 日

ミウラ折り型ジグザグリプレットの実用のための研究

岡林 希依

大阪大学 大学院工学研究科 機械工学専攻

1. はじめに

航空機やパイプラインなどの流体摩擦抵抗低減デバイスとして、リプレット（図1）が知られている。リプレットは流れ方向に伸びる溝の列であり、鮫肌に着想を得て開発された。近年では、溝が流れ方向に直線状のものだけではなく、ジグザグ状や波状のリプレットが考案され、従来の直線リプレットよりも高い効果が得られると報告されている[1-6]。溝の間隔 s （図1）の最適値（最も抵抗低減効果が高い）は、周囲流体の速度と粘度によって決まる[7,8]。現状では平均的な流れの状態に合わせて間隔 s を設定するが、できれば瞬時の流れの状態に応じて間隔 s を合わせられれば効果的である。本研究では、図2のような「ミウラ折り」[9]をジグザグリプレットとして利用することを考える。ミウラ折りは対角線方向に引っ張るだけで簡単に伸縮できるため、間隔 s を瞬時の流れに合わせてすぐに変化させられる上に、ジグザグ形状による抵抗低減効果の向上も期待できる。申請者らの先行研究[6]において、静的なジグザグリプレットの抵抗低減性能を調査し、その有効性を示した。しかし、動的に形状が変化するジグザグリプレットの制御方法は実用に際し不可欠であるが、未だ把握できていない。外部流れの条件が変化し、それに合わせてミウラ折り型リプレットを動的に伸縮させると、速く溝間隔を追従させようとすると、リプレットが流れを乱し、抵抗増加につながる。また、速く動かすためのエネルギー投入も大きくなり、正味の抵抗低減効果では悪化する可能性がある。このように、ジグザグリプレットの制御は、「溝間隔変化率」「エネルギー投入量」「発生する乱れによる摩擦抵抗の増大」の3条件がトレードオフする複雑な問題となる。

また、実際に航空機などでリプレットを用いる場合に問題となるのは、局所的な流れの方向とリブ



図1：直線リプレット



図2：ミウラ折り型ジグザグリプレット

レットの溝のなす角と、航空機翼などで発生する逆圧力勾配である[10]。特に、逆圧力勾配下でのリプレットの抵抗低減効果は、実機への適用上非常に重要なにも関わらず、最も基本的な直線リプレットでもまだ明らかでない[10]。また、抵抗低減効果以外の付加的な効果として、ジグザグ形状によって直線リプレットよりも活発な運動量交換が行われ、逆圧力勾配下での境界層剥離を抑制する効果が期待される。

本研究では、ミウラ折り型ジグザグリプレットの実用のための技術および知見を獲得することを目的として、以下の二課題に取り組む。第一に、周囲の流れの状態が変化した際に、ミウラ折り型ジグザグリプレットの抵抗低減効果を最大にするための制御手法を求めるための基盤技術として、深層強化学習と数値流体力学 (Computational Fluid Dynamics; CFD) を融合した最適化手法を確立する。第二に、逆圧力勾配下でのリプレットの抵抗低減効果および境界層剥離の抑制効果について調査する。

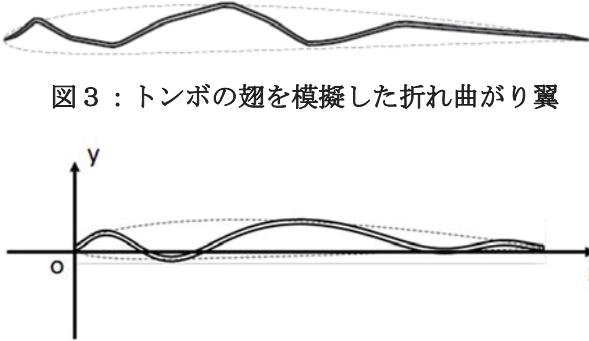


図 3 : トンボの翅を模擬した折れ曲がり翼

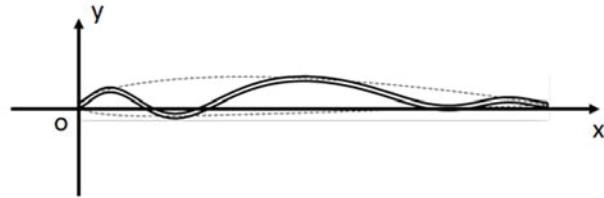


図 4 : 波状翼の例 ($z_1 = 5.0$, $z_2 = 2.5$, $z_3 = 0.75$)
と NACA2408 翼の断面 (点線)

2. 深層強化学習と CFD を融合した最適化手法

リブレット上の流れは壁乱流であり、またリブレットの溝を解像するために多くの格子点数が必要となり、計算規模が大きくなる。そこで、手法の確立を優先するため、導入的な問題設定として、リブレット上の流れではなく、波状翼（トンボの翅（折れ曲がり翼、図 3）をモデル化したもの）について、揚抗比最大を目的とした形状最適化問題を考える。この問題はレイノルズ数が低く、かつ二次元の CFD であるため、コストが軽く、手法について試行錯誤するのに適している。また、メタヒューリスティックな手法による解[11]が得られており、それと比較することで検証も可能である。以上の理由からこの問題設定を採用した。

2.1 波状翼モデル

波状翼モデルでは、形状最適化の設計変数を少なくするために、トンボの翅を模擬した折れ曲がり翼（図 3）における翼弦方向（ x 方向）尾根や谷の幅を正弦波の波数

$$n(x) = \frac{z_1 - 2}{2z_3 - 1} (x - z_3)^2 + z_1 - \frac{z_3^2(z_1 - z_2)}{2z_3 - 1} \quad (1)$$

によって表現する。 z_1 は前縁における波数、 z_2 は後縁における波数、 z_3 は二次関数の軸の位置を表し、本研究の問題設定はこれらの値の組み合わせ最適化に縮約される。本研究では、翼弦方向の位置 x における、 x に垂直な方向（ y ）における位置 y_w を、NACA2408 翼の包絡線 y_e を用いて、

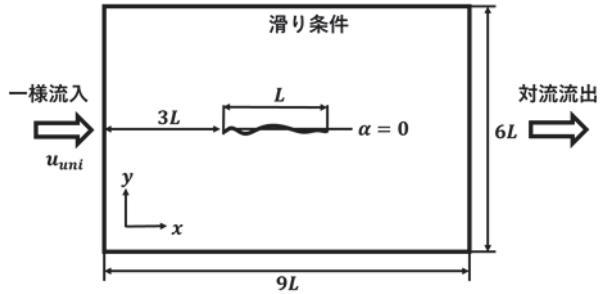


図 5 : 計算領域と境界条件

$$y_w = y_e \sin\{2\pi n(x)x\} \quad (2)$$

と表す。波状翼の例を図 4 に示す。

2.2 深層強化学習の理論

強化学習では、エージェントの行動 a により、報酬 r が得られる環境を設定する。エージェントは環境から状態 s を観測し、それをもとに行動指針である方策 π に従って行動 a を選択する。環境はエージェントが選択した行動 a によって、次の状態 s' に遷移し、それに応じた報酬 r をエージェントに与える、という一連の手順を 1 ケースと定義し、これを繰り返しながら、将来にわたって得られる報酬和を最大化する行動を学習する。環境は確率性を持ち、報酬和は期待値として得られ、これを行動価値（Q 値）と呼ぶ。強化学習の代表的手法である Q 学習[12]では、最適な Q 値を反復計算により求める。Deep Q network (DQN) [13]は、ニューラルネットワーク (NN) のパラメータ θ を用いて Q 値を近似するものであり、Q 学習の反復計算に当たる処理は θ の更新に替えられる。本研究では DQN を拡張した Twin Delayed Deep Deterministic Policy Gradient (TD3) [14]を用いる。

2.3 流体の数値計算法

本研究では、一様流中に置かれた迎角 0 度（固定）の二次元波状翼周りの流れを計算し、形状パラメータ z_1 、 z_2 、 z_3 の組み合わせに対する揚抗比を得る。図 5 に計算条件を示す。支配方程式は一般曲線座標で記述された二次元非圧縮連続の式および Navier-Stokes の式である。空間離散化には二次精度中心差

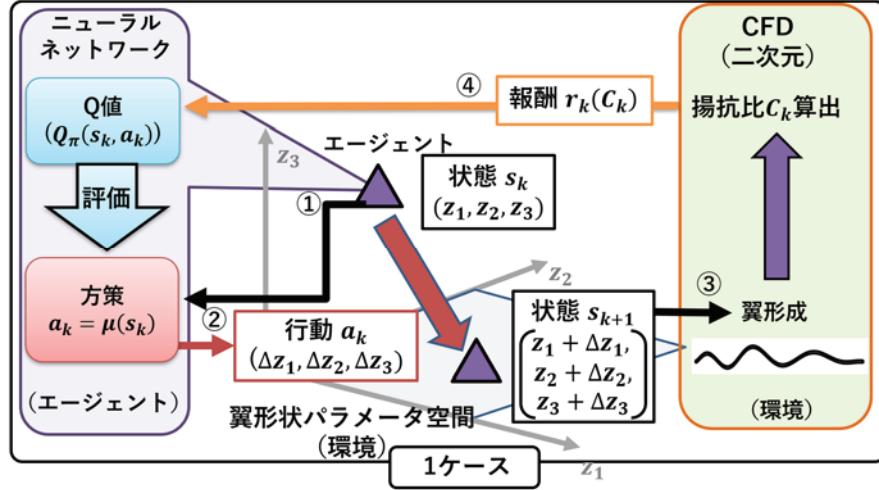


図 6 : CFD を環境に用いた深層強化学習の枠組み

分、Navier-Stokes 式の対流項と粘性項の時間発展にはそれぞれ二次精度 Adams-Bashforth 法と Crank-Nicolson 法を用いる。速度と圧力のカップリングには部分段階法を用いる。

2.4 CFD を環境に用いた深層強化学習の枠組み

図 6 に本研究で用いる深層強化学習と環境となる CFD の構成を示す。学習の流れとして、まずエージェントが方策に従って行動 a (形状パラメータの変化量 $\Delta z_1 \sim \Delta z_3$) を出力し、それを現在の状態 s (形状パラメータ $z_1 \sim z_3$) に加えることで次の状態 s' とする。変化後の形状パラメータを用いて環境に実装された CFD から揚抗比を得る。エージェントは揚抗比とともに報酬 r を受け取る。この一連の流れを 1 ケースとする。エージェントにはランダムに決定した初期形状が与えられ、20 ケースの試行を行い、これを 1 エポックと定義する。エポックを定め、エポックの最初に初期形状をリセットすることには、局所最適解に陥ることを防ぐ意味がある。また、エージェントに前もってある程度経験を蓄積して学習を安定させるために、エージェントをランダムに動かし、事前調査を行っている。

2.5 結果と考察

試行錯誤的に、報酬関数 r を

$$r = C - C_{90} \quad (3)$$

と決定した。ただし、 C_{90} は事前調査によって得ら

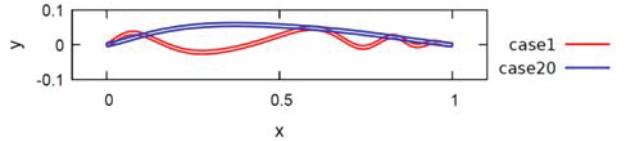


図 7 : 100 エポック目の初期形状と最終形状

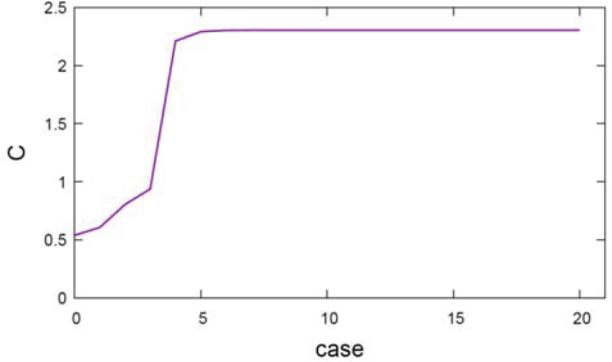


図 8 : 100 エポック目の揚抗比 C の推移

れた大まかな揚抗比分布の上位 10% の値である。この設定のもと、学習を行ったところ、100 エポック程度で揚抗比が収束した。100 エポック目の初期形状と最終形状の比較を図 7 に示す。100 エポック目の揚抗比の推移を図 8 に示す。図 7、8 より、収束した形状は曲板翼であり、また、揚抗比の収束値は 2.3 程度であることがわかる。これは先行研究[11]で用いられた勾配法とほぼ同様の結果であり、本手法の有効性が示された。

3. 逆圧力勾配下でのリブレットの抵抗低減

3.1 数値計算の概要

解析対象は下面が平滑面またはリブレット面であ

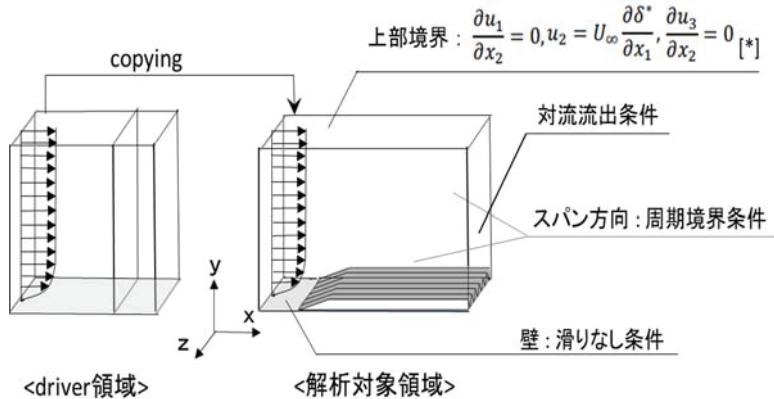


図 9 : 計算領域と境界条件

表 1 : 領域の大きさと格子点数

領域	$L_x \times L_y \times L_z$	$N_x \times N_y \times N_z$
driver	$125\theta_0 \times 100\theta_0 \times 38.4\theta_0$	$200 \times 128 \times 128$
解析対象 (平滑)	$125\theta_0 \times 100\theta_0 \times 38.4\theta_0$	$512 \times 128 \times 128$
解析対象 (riblet)	$125\theta_0 \times 100\theta_0 \times 38.4\theta_0$	$512 \times 128 \times 1152$

る領域における外部流れである。図 9 に概要を示す。将来的に逆圧力勾配を作り出すのに吹き出し・吸い込みを設定するため、上部に壁が存在しない空間発展シミュレーションを行う。計算領域は driver 領域（図 9 左）と解析対象領域（図 9 右）の二つの領域から構成される。driver 領域は解析対象領域の流入条件を与えるために設定する領域であり、主流方向 (x) 方向に準周期境界条件[15]を課すことで、ゼロ圧力勾配下で上部に壁がなく流体が排除される空間発展壁乱流をシミュレートする。本稿では前段階として、解析対象領域に吹き出し・吸い込みを設定せず、ゼロ圧力勾配下での計算を行う。表 1 に領域の大きさと格子数を示す。リブレットは頂角 90 度の三角形断面直線リブレットであり、リブレットの溝の間隔は流入部の摩擦速度を基準とした壁座標で 17 とする。これは最適な（最も抵抗低減効果が高い）溝間隔である。

支配方程式および数値計算法は第 2.3 節で示したものと同様である。レイノルズ数は解析対象領域の流入部での運動量厚さ θ_0 と一様流速度を基準として 300 と設定する。

3.2 ドライバー領域

図 10 にドライバー領域流入部での乱流統計量を示す。スペクトル法による先行研究[16]の結果に近い値を取っており、ドライバー領域の計算としては妥当であるといえる。他に、主流方向の運動量厚さおよび圧力係数分布を算出したが、妥当な値であることが確認されている（図示省略）。

3.3 解析対象領域

図 11 に平滑面の解析対象領域における摩擦係数 (C_f) 分布を経験式、先行研究の結果[16,17]とともに示す。横軸の Re_θ は主流方向の各位置での運動量厚さを基準としたレイノルズ数である。図 11 のように、一部の Re_θ の範囲ではあるが、どの位置でも摩擦係数は経験式と先行研究の結果に近い値を示している。したがって、壁面せん断応力の時間平均値は定量的に再現されている。また、平滑面およびリブレット面それぞれの壁面せん断応力を面積分・時間平均して摩擦力を算出した結果、3.1% の抵抗低減効果が得られ、これは溝間隔が壁座標で 17 の三角形断面直線リブレットの実験値[8]とほぼ同じである。しかしながら、時間平均流れ場は妥当であるものの、圧力の非物理的な振動が観察され、瞬時の流れ場の再現には課題が残っている。

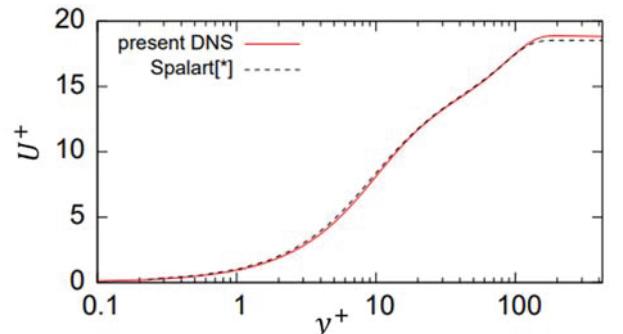
4. おわりに

ミウラ折りから着想を得たジグザグリブレットの制御則を得ることを最終目標として、深層強化学習

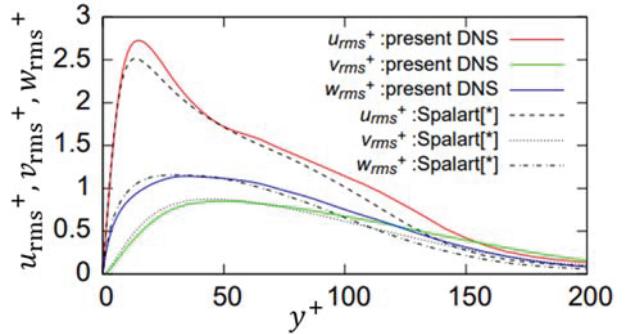
と CFD を融合した手法を構築し、その有効性を示した。また、航空機にリブレットを適用する際に考慮すべき逆圧力勾配が抵抗低減効果に及ぼす影響を調査することを目的として、直接数値シミュレーションを行い、時間平均的には妥当な流れ場を得た。

参考文献

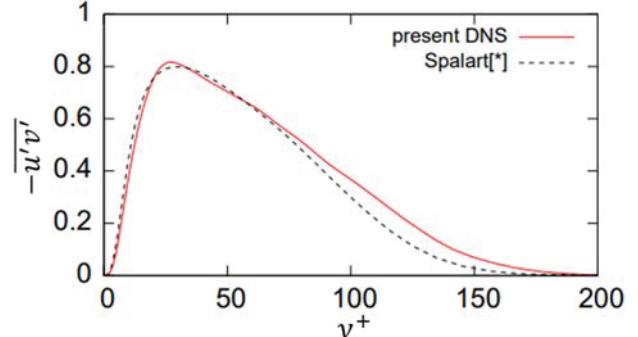
- (1) Y. Peet et al., Int. J. Hydrogen Energy, **34**, 8964–8973 (2009).
- (2) H. Miki et al., Trans. the Japan Society of Mechanical Engineers, Series B **77**, No. 782, 25–36, (2011) (in Japanese).
- (3) R. Grüneberger et al., Nature-Inspired Fluid Mech., **119**, 1605–1607, (2012).
- (4) M. Sasamori et al., Exp. Fluids, **55**, 1828-1–1828-14 (2014).
- (5) K. Okabayashi, J. Fluid Sci. Tech., **11**, No. 3, JFST0015, 1-16, (2016).
- (6) K. Okabayashi et al., AIP Advances, **8**, Issue 10, No. 105227, 1-20, (2018).
- (7) H. Choi et al., J. Fluid Mech., **255**, 503–539, (1993).
- (8) D. W. Bechert et al., J. Fluid Mech. **338**, 59–87, (1997).
- (9) K. Miura, Sugaku Seminar, **48**, No. 1-568, (2009).
- (10) P. R. Viswanath, Progress in Aerospace Sci., **38**, 571–600, (2002).
- (11) S. Kimura, Master Thesis, Osaka University (2018) (in Japanese).
- (12) C.J.C.H. Watkins, PhD thesis, Cambridge University, (1989).
- (13) V. Mnih, et al., Nature **518**, 529–533, (2015).
- (14) S. Fujimoto et al., arXiv:1802.09477, (2018).
- (15) T. S. Lund et al., J. Comp. Phys., **140**, 233–258, (1998).
- (16) P. R. Spalart, J. Fluid Mech., **187**, (1988).
- (17) H. Abe, J. Fluid Mech., **833**, (2017).



(a) 平均速度



(b) 速度の RMS 値



(c) レイノルズ応力

図 10 : 流入部での乱流統計量

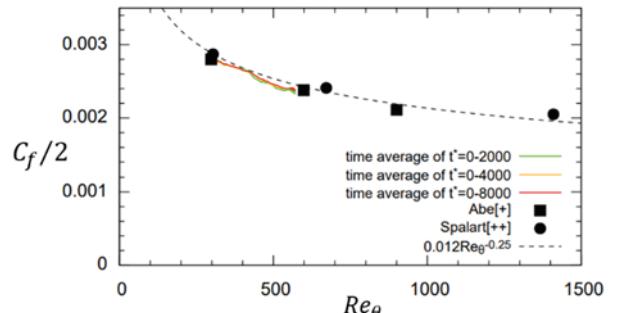


図 11 : 摩擦係数分布（解析対象領域、平滑面）

タンパク質-リガンド結合自由エネルギーにおける共溶媒濃度依存性の解明

肥喜里 志門

大阪大学 大学院基礎工学研究科

1. はじめに

生体分子の自己組織化過程（タンパク質の折り畳み、会合、凝集及びタンパク質による低分子認識等）を理論的に解析する方法が求められている。特にタンパク質-リガンド結合に伴う自由エネルギー変化（結合自由エネルギー(BFE)）は、結合親和性の指標を示す重要な熱力学量である。分子動力学シミュレーション(MD)により BFE を計算する際、生体分子の周りを囲む溶媒分子は、主要成分のみが考慮される事が多く、水溶性タンパク質とリガンドとの BFE 計算の例であれば、水分子のみが考慮される[1]。しかしながら、生体内（または試験管内）は多種多様な分子が入り乱れる空間であり、水以外の共溶媒分子の影響も受ける。実際、8M 尿素添加による Lysozyme と(GlcNac)₃ の結合親和性低下が実験で観測されており[2]、共溶媒分子をあらわに取り入れた計算が今後求められる。

そこで本研究では、8M 尿素添加による Lysozyme と(GlcNac)₃ の結合親和性低下を MD による自由エネルギー計算によって再現できるか検討した上で、その物理起源を求める目的とした。尿素添加前後で異なるのは溶媒環境であり、重要な鍵を握るのは溶媒和自由エネルギー(SFE)である。純水中における SFE 計算であれば、積分方程式理論と形態熱力学的アプローチを駆使した高速かつ正確な計算法がある[3]。しかしながら、この手法は水以外の溶媒分子を取り扱うのが難しいため、他の SFE 計算法を必要とした。よって現実的な時間で共溶媒分子存在下での正確な SFE 計算を可能とするエネルギー表示法(ER 法)を採用し、自由エネルギー成分の相関解析により、結合親和性低下の物理起源の特定を試みた。

2. 計算方法

Lysozyme-(GlcNac)₃ 複合体(PDB ID: 1HEW), Lysozyme 単量体(PDB ID: 193L)及び(GlcNac)₃ の構造サンプリング MD 計算を水分子 20000 個から成る純水中にて実行した。水モデルには SPC/E を使用し、Lysozyme 及び(GlcNac)₃

の力場には AMBER99SB 及び GLYCAM06 を使用した。GROMACS 2019.5 を用いて、温度 298.15 K の NVT 条件下で 25 ns の平衡化 MD を実行し、その後同条件で 100ns のプロダクション MD を行い 5 ns 毎の溶質構造をサンプリングした。

次に SFE 計算を実施した。サンプリング後の各溶質構造を固定し、純水中及び濃度 8M 尿素水溶液における SFE を ER 法により計算した。ER 法による SFE 計算では MD を利用するため、溶媒の初期配置依存性がある。よって SFE 計算を溶質 1 構造当たり 4 度行った。純水中及び 8M 尿素水溶液中で溶質構造が共通であることから、結合に伴う溶質の構造エネルギーと膨大なサンプリング MD を必要とする溶質構造エントロピー[4]の変化の差がゼロとなる。よって、両者の溶媒中での BFE の差、結合に伴う SFE 変化(ΔSFE)の差($\Delta \Delta SFE$)により評価した。

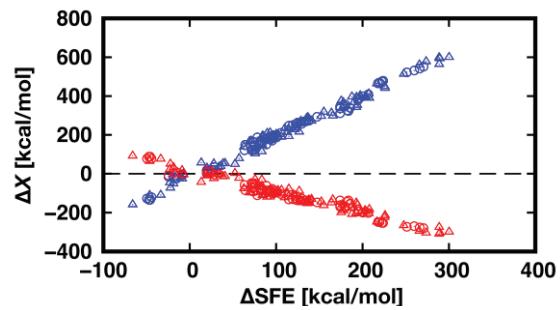


図 1 : ΔSFE とその成分(ΔX)の相関。青が ΔU_{uv} 、赤が ΔU_{vmo} 。丸が純水中環境下、三角が 8M 尿素水溶液環境下。

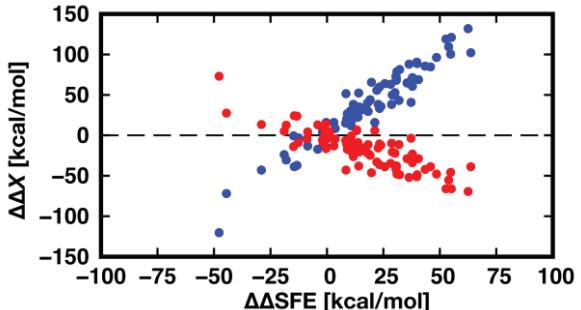


図 2 : $\Delta \Delta SFE$ とその成分($\Delta \Delta X$)の相関。青が $\Delta \Delta U_{uv}$ 、赤が $\Delta \Delta U_{vmo}$ 。丸が純水中環境下、三角が 8M 尿素水溶液環境下。

3. 計算結果

$\Delta\Delta SFE$ の計算値は $16.7 \pm 1.8 \text{ kcal/mol}$ であった。8M 尿素添加前後の BFE の差の実験値が 1.6 kcal/mol であること [2] から、 $\Delta\Delta SFE$ のみの計算でも尿素添加による Lysozyme-(GlcNac)₃ の結合親和性低下を定性的に再現できることがまず明らかとなった。

次に Lysozyme と(GlcNac)₃ の結合の駆動及び阻害力を特定するため、 ΔSFE を溶質-溶媒相互作用項(ΔU_{uv})と溶媒再配向項(ΔU_{vo})に分割した。図 1 に示すように、純水中及び 8M 尿素水溶液中において、 ΔU_{vo} が Lysozyme と(GlcNac)₃ の結合を駆動し、逆に ΔU_{uv} は結合を阻害する傾向にあることが明らかとなった。 $\Delta\Delta SFE$ を同様に分割すると(図 2)、8M 尿素水溶液中では純水中に比べ、結合に伴う溶媒再配向の利得が多い一方で、溶質-溶媒相互作用が結合を阻害する傾向にあることにより、結合親和性低下が起こることが明らかとなった。

4. 今後の展望

8M 尿素添加による Lysozyme と(GlcNac)₃ の結合親和性低下を MD と ER 法による自由エネルギー計算によって定性的に再現し、共溶媒濃度依存性の暫定的な結果を得ることが出来た。今後は 2M, 6M 及び 4M 尿素水溶液中での ΔSFE 計算を実施し、結合親和性低下の濃度依存性の物理起源の解明を目指していく。

参考文献

- [1]: T. Yamada, T. Hayashi, S. Hikiri, N. Kobayashi, H. Yanagawa, M. Ikeguchi, M. Katahira, T. Nagata and M. Kinoshita *J. Chem. Inf. Model.*, **59**, 8, 3533–3544, (2019).
- [2]: L. Stepanian, I. Son, and T. V. Chalikian *Biophys. Chem.*, **231**, 15–19, (2017).
- [3]: S Hikiri, T Hayashi, M Inoue, T Ekimoto, M Ikeguchi, M Kinoshita. *J. Chem. Phys.*, **150**, 175101, (2019).
- [4]: S. Hikiri, T. Yoshidome and M. Ikeguchi *J. Chem. Theory Comput.*, 12, 5990–6000, (2016).

ハイブリッド汎関数を用いた 水の第一原理分子動力学シミュレーション

大戸 達彦

大阪大学 大学院基礎工学研究科 物質創成専攻

1. はじめに

水分子は 2 個の水素原子と 1 個の酸素原子からなっており、非常に単純な構造を持つ。しかし、水分子が集まって液体の水になると、固相（氷）よりも密度が高く、表面張力が大きいなど、特異な性質を持つようになる。それらの特異な性質は複雑な水素結合ネットワークに由来する。水分子の局所構造と水素結合強度の関係を理解することは、水が関わる物質の性質を明らかにする上で重要である。

水分子の水素結合に関する情報は赤外分光やラマン分光といった振動分光スペクトルから得られる。水の赤外分光スペクトルは OH 伸縮振動、HOH 変角振動、束縛運動の 3 つの寄与からなる。OH 伸縮振動と HOH 変角振動は水素結合の強度を示す指標としてよく用いられる[1]。水素結合が強くなると、OH 伸縮振動の振動数は低下し[1]、HOH 変角振動の振動数は逆に上昇する[2]。つまり、水溶液中の OH 伸縮振動の振動数変化は溶質と水分子の相互作用がどのように水分子間の水素結合ネットワークに影響するかを反映する[2]。

しかし、振動分光スペクトルの解釈にはいくつかの問題が存在する。まず、水の振動分光スペクトルのピークは非常に幅が広く特徴に欠け、分子配向の情報と関係づけることが難しい。次に、水溶液になるなどして多数のピークが入り組んでくると、どの相互作用が振動分光スペクトルのどの変化に関係するのか対応づけるのが困難である。そうした中、全原子分子動力学(MD)法を用いたシミュレーションは、バルクの水分子と溶質に近い水分子を切り分けることができるため、直接的に振動分光スペクトルを解釈するために有用なツールである。全原子 MD シミュレーションでは、原子に働く力を何らかのモデル（力場）により記述した上でニュートン方程式

を解き、時間に対する各原子の位置（トラジェクトリ）を得ることで、種々の物理量を計算することができる。

溶質と水分子の相互作用が複雑な場合、振動分光スペクトルを計算するための正確な力場を開発することは難しい。それに対して、密度汎関数法(DFT)MD シミュレーションでは原子にはたらく力を DFT によって計算するため、力場を用いずとも溶質と水の相互作用をシミュレーションすることが可能となる。ただし、その分計算コストが増え、図 1 のように取り扱う分子の数と時間スケールに制約が生じることは知っておく必要がある[3]。例えば力場を用いた MD シミュレーションではナノ～マイクロ秒のシミュレーション時間が標準的だが、DFT-MD では 1 ns 程度が上限となる。

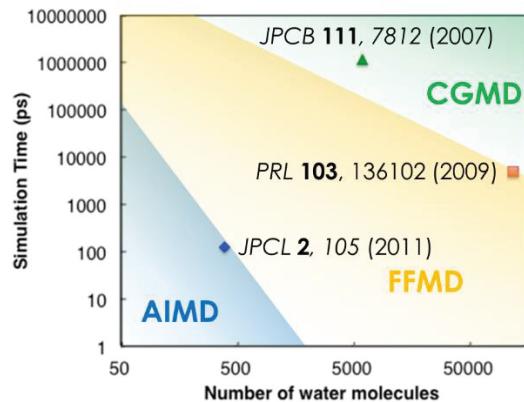


図 1: 第一原理 MD(AIMD)、古典 MD(FFMD)、粗視化 MD(CGMD)が取り扱える水分子の数とシミュレーション時間を、文献を基に色分けしたもの[3]。

密度汎関数法を用いるにあたり、交換相關汎関数とファンデルワールス力の記述方法を選択する必要がある。それらの選択によって、振動分光スペクトルの振動数は大きく影響される。

交換相関汎関数によって振動数が変化することはよく知られており、振動数を補正するためのデータベースが存在する[4]。しかし、それらのデータベース作成には小分子のセットが用いられ、また気相の計算／実験結果が採用されているため、液体の水に適用できるとは限らない。そこで、多様な交換相関汎関数、ファンデルワールス力の補正方法を用いたDFT-MDシミュレーションから補正係数を決めるこことは有用であると考えられる。

本研究では、多様の計算手法を用いて重水(D_2O)の振動状態密度(V DOS)を計算し、補正係数を算出した[5]。我々は以前、図2のようなスラブモデルを用いて振動和周波発生分光スペクトルを多様な手法で計算を行い、界面で水素結合する相手がないOH結合(free OH)の性質(free OHをもつ水分子の存在比率、free OHの角度と寿命)の再現性に基づいて計算手法の比較を行った[6]。

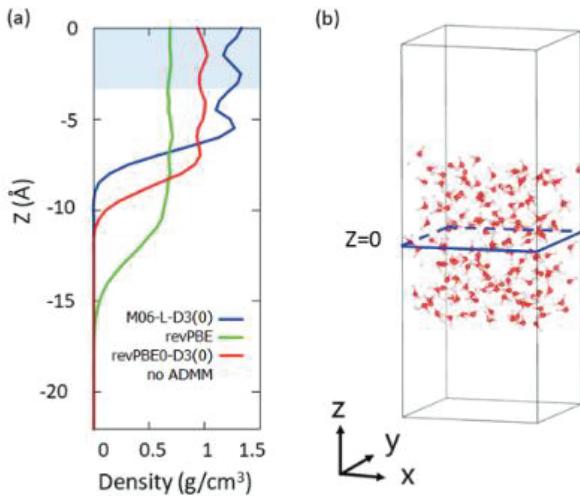


図2: 水160分子からなるスラブモデルの(a)密度と(b)スナップショット。系の重心を $z=0$ としている。スラブモデルの中心部分は、用いた計算手法によってバルクの密度が実現されている。revPBE0-D3(0)のような精度の良い手法では水の密度はほぼ 1 g/cm^3 となるが、計算手法によっては過小評価または過大評価する。(a)より、スラブの中心ほぼ 10 \AA 程度はバルクとみなせることがわかる。今回の計算でバルクとして採用した部分を水色で塗りつぶしている。バルクの密度から真空部分に向かって密度が減衰している領域が界面に相当する[5]。

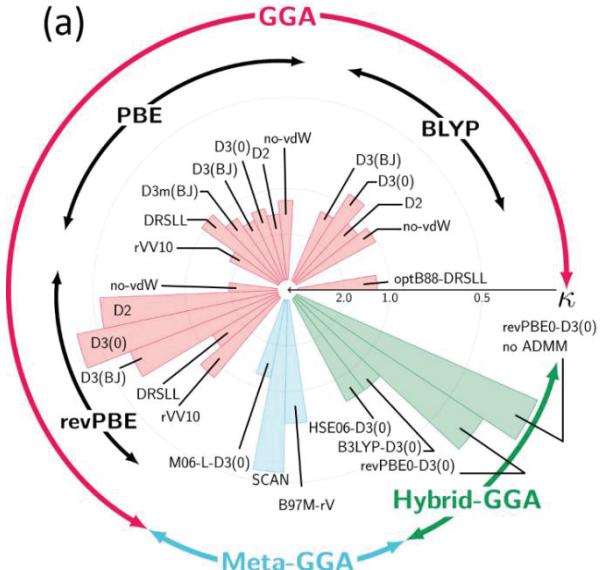


図3: 水の界面物性の記述力を表示したパイチャート。パインが大きいほど参照データとの誤差が小さいことを示している[6]。

図3に示したように、界面の水の記述についてはrevPBE0-D3(0)の性能がよく、ハイブリッドにせずrevPBE-D3(0)でもかなり記述がよいことがわかっている。revPBE0-D3(0)の次には、SCAN、B97M-rVといったメタGGA汎関数の性能がよい。これらの計算を行ったトラジェクトリのバルク部分を用いることで、V DOSを計算することにした。スラブモデルのバルク部分は、用いた計算手法にとって安定なバルクの密度が実現されている。

スラブモデルを用いてバルクの性質を計算する利点はもう一つあり、それは計算コストの問題である。通常、バルクの水の密度を古典分子力学法によって最適化する場合は、圧力を一定に保つNPTアンサンブルを採用することが多い。しかしDFT-MDの場合は、ユニットセルをグリッドに区切って電荷密度を計算するため、ユニットセルの大きさが毎ステップ変わるNPTアンサンブルではユニットセルに対するグリッド点の相対位置が毎ステップ変わることになる。この誤差の影響を小さくするために、体積一定のNVTアンサンブルの場合に比べて非常に密なグリッドを採用する必要が生じ、計算コストの面で不利となる。

2. 計算方法

密度汎関数に基づく CP2K プログラム[7]を用いて第一原理 MD を行った。BLYP, PBE, revPBE 一般化勾配近似(GGA)汎関数、M06-L, B97M-rV メタ GGA 汎関数、B3LYP, revPBE0, HSE06 ハイブリッド GGA 汎関数に、vdW 相互作用を組み合わせた計算手法の比較を行った。Grimme の vdW 補正のほか、非局所的な vdW 補正も採用した。新しいメタ GGA 汎関数の一つである SCAN については、Quantum Espresso という平面波を用いた第一原理計算プログラムで Car-Parrinello MD シミュレーションを行った。MD のトラジェクトリの長さは、通常の GGA で 500 ps 以上、ハイブリッド汎関数についても 160 ps 以上になる。ハイブリッド汎関数については、計算時間の短縮のため、Auxiliary Density Matrix Method (ADMM) を用いた。ADMM による影響を調べるために、revPBE0-D3(0)については ADMM の有無それぞれで MD 計算を行った。

3. 結果

ピーク位置を補正するため、次のような式を用いた。

$$\omega_{\text{str,ref}} = a\omega_{\text{str,DFT-MD}} + b \quad (1)$$

$$\omega_{\text{str,DFT-MD}} = \frac{\int_{\omega_1}^{\omega_2} \omega \text{VDOS}_{\text{DFT-MD}}(\omega) d\omega}{\int_{\omega_1}^{\omega_2} \text{VDOS}_{\text{DFT-MD}}(\omega) d\omega} \quad (2)$$

$$\omega_{\text{bend,ref}} = c\omega_{\text{bend,DFT-MD}} \quad (3)$$

$\omega_{\text{str,ref}}$ は POLI2VS という古典力場から得られた VDOS スペクトルの OH 伸縮振動数、 $\omega_{\text{str,DFT-MD}}$ は DFT-MD から得られた VDOS の OH 伸縮振動数である。振動数は式(2)に従って 1 次のモーメントを計算し、 ω_1 と ω_2 は VDOS の強度がピーク値の 10% となる振動数である。二つのパラメータ a, b を得るためには、VDOS だけでなくもう一つのデータセットが必要となるが、それは過去に計算した和周波発生分光スペクトルを採用した。変角振動についても同様に、 $\omega_{\text{bend,ref}}$ は POLI2VS というから得られた VDOS スペクトルの振動数、 $\omega_{\text{bend,DFT-MD}}$ は DFT-MD から得られた VDOS の振動数である。DFT-MD と参照データが一致するようにパラメータ a, b, c を決定した。

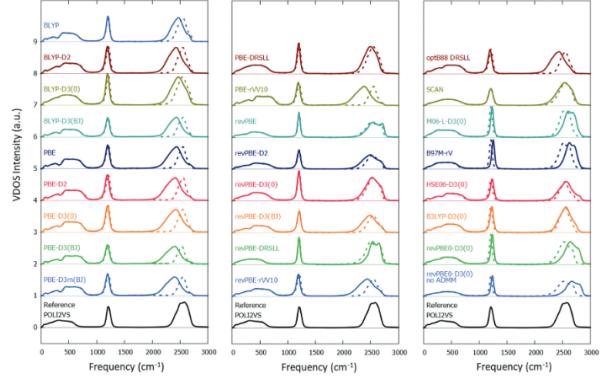


図 4: 様々な計算手法を用いて計算した水の VDOS。実線が無補正のデータ、破線が式(1),(3)に従って補正された VDOS である。

図 4 に、補正前後の VDOS スペクトルを示す。計算手法によらず、補正によってスペクトルの形が参照データと近くなっていることがわかる。これらの補正係数は、1/0.735[8]を乗じることによって、H₂O の振動スペクトルを予測するのに用いることができる。また、この補正係数は原子核の量子効果による赤方偏移を含んでいる。DFT-MD としてリングポリマー-MD、セントロイド MD など、原子核の量子効果を取り込んだ結果を用いる場合は、パラメータ a, c に 0.96 を乗じる必要がある。

4. 水の変換振動の緩和経路

振動数のスケーリングファクターの計算から一步進めて、revPBE0-D3(0)汎関数のトラジェクトリを用い、水分子の振動モード間のカップリングを考察した。revPBE0-D3(0)を採用した理由は、界面の free OH の性質の再現性に最も優れていただけではなく[6]、水の密度や OH 結合の回転速度といったバルクの性質のほか、OH 伸縮・HOH 変角振動の振動数についても再現性がよかつたためである[5]。水分子に光が当たると分子振動が励起され、そのエネルギーが次第に熱に変換されることで水は温まる。これまで水の OH 伸縮振動のエネルギー移動については多くの研究がなされていたが、変角振動についての理解が欠けていた。そこで、変角振動のエネルギーがどのモードに移動するかを考察するため、VDOS の分解を試みた。水分子の基準振動の方向に速度を分割し、

伸縮振動の成分、変角振動の成分、残り（束縛回転・並進とみなす）の3つに分けた。図5に示すように、高周波数にみられる伸縮振動のピークは伸縮振動の成分でほぼ説明できるものの、変角振動のピークは変角振動の成分と束縛回転の成分、そしてその相関が混ざっていることが明らかになった。さらに分子間の相関を取り入れても変角振動のピークにあまり影響がなかったことから、変角振動のエネルギーは隣の分子の変角振動に移動するよりも、同じ分子の束縛回転に移動しやすいことが示唆された[9]。

上記の結果は、水・重水の比率を変えて変角振動のポンプ・プローブ分光を行った実験結果からもサポートされた[9]。2つのH₂O分子が隣接している場合、変角振動の振動数はほぼ同一なので、エネルギーが移動する確率が高いが、H₂O分子とD₂O分子が隣接している場合は振動数が異なるため、エネルギー移動が起こりにくくなる。水と重水の比率を変えたときに振動の緩和時間が影響されれば分子間エネルギー移動の寄与が大きいということになる。測定の結果、変角振動の緩和時間は水と重水の比率にほとんど影響されなかつたため、分子間のエネルギー移動は無視できるくらい小さいことが明らかになった[9]。

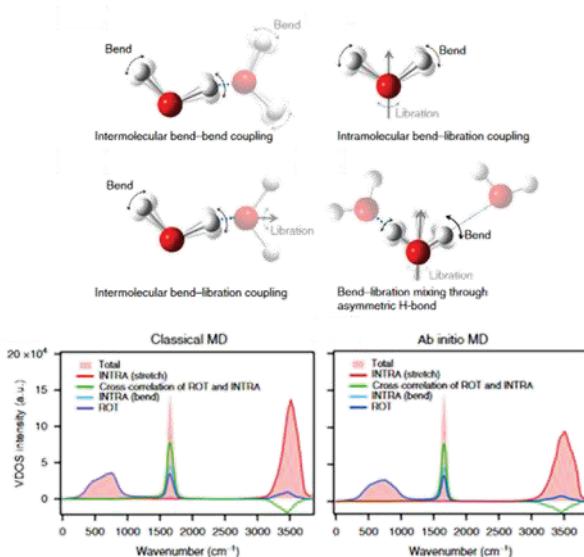


図5：水の変角振動のカップリングの様子と、分割されたVDOS。古典MDはPOLI2VS、第一原理MDはrevPBE0-D3(0)で行った。

5. おわりに

本稿では、DFT-MD法によるバルク水の振動状態密度(VDOS)計算とその活用について議論した。この手法を用いて、様々な密度汎関数とvdW相互作用の組み合わせについて比較を行い、液体水の振動数を算出するための補正係数を提案した。さらにVDOSの計算を活用し、水分子内部あるいは水分子間での振動エネルギー移動のメカニズムに対する考察を行った。今後も、これまで主に古典力場ベースで行われてきた水のシミュレーションについて、DFT-MDの観点から電子状態も絡めた予測・解釈が進展していくと考えられる。

参考文献

- (1) R. Rey et al., J. Phys. Chem. A **106**, 11993 (2002).
- (2) L. Piatkowski et al., J. Chem. Phys. **135**, 014502 (2015).
- (3) Y. Nagata et al., J. Phys. Chem. B, **120**, 3758 (2016).
- (4) J. P. Merrick, et al., J. Phys. Chem. A **111**, 11683 (2007), D. O. Kashinski, et al., J. Phys. Chem. A **121**, 2265 (2017), I. M. Alecu et al., J. Chem. Theory Comput. **6**, 2872 (2010).
- (5) K. Zhong et al., Phys. Chem. Chem. Phys. **22**, 12785 (2020).
- (6) T. Ohto et al., J. Phys. Chem. Lett. **10**, 4914 (2019).
- (7) CP2K, <http://www.cp2k.org>
- (8) X. Xu et al., J. Chem. Phys. **150**, 144701 (2019).
- (9) C.-C. Yu et al., Nat. Commun. **11**, 5977 (2020).

格子 QCD を用いた hidden-charm pentaquark の解析

杉浦 拓也

理化学研究所 数理創造プログラム

1. 背景

素粒子であるクォークとグルーオンが強い力によって結び付いた粒子を、一般にハドロンと呼ぶ。その中でも、2000 年代初頭から相次いで実験的に報告されているエキゾチックハドロンと呼ばれるものの性質は特に注目を集めている。構成子クォーク模型は、クォーク・反クォーク対（メソン）またはクォーク 3 体系（バリオン）という描像に基づいて励起状態を含めた多くのハドロンの性質を再現してきた。これを超えた 4 クォーク以上からなるハドロン、エキゾチックハドロンの形成機構を明らかにすることは、強い力における大きな謎であるカラー閉じ込め機構の解明につながる重要な課題である。

特に、2015 年に初めて LHCb コラボレーションによって報告された[1] P_c と呼ばれるハドロンは、4 つのクォークと 1 つの反クォークからなるペンタクォークであると期待されている。2019 年には統計数を 9 倍に増やした再解析がなされ、 $P_c^+(4312)$ 、 $P_c^+(4440)$ 、 $P_c^+(4457)$ という 3 つの状態が報告された[2]。また、ストレンジクォークを含むパートナー状態も報告されている[3]。 P_c は終状態として J/ψ 中間子と陽子のペアに崩壊するハドロン共鳴状態であり、その解析にはチャームクォークを含むハドロン間相互作用を知る必要がある。 P_c の存在形態に関して既に多くの理論的研究が行われているが、チャームクォークを含んだハドロンの相互作用に関する実験データは非常に限られているため、定量的な議論ができず明確な結論は得られていないのが現状である。

2. 格子 QCD によるハドロン間相互作用

ハドロン間相互作用を生み出している強い力の基礎理論は量子色力学(QCD)である。原理的には、QCD を解析することで全てのハドロンの静的・動的な性質が理解できる。しかし、QCD は低エネルギー領域

で強い非摂動的性質を示すことが知られており、解析的に解くことは不可能である。QCD の基礎方程式を解くことのできる現時点での唯一の方法は、離散化した有限体積の箱の上で QCD のシミュレーションを行う格子 QCD という手法である。

近年、HAL QCD コラボレーションによって提唱された手法により、ハドロン間相互作用を格子 QCD により計算することが可能になった[4,5]。この手法は格子 QCD で計算したハドロン相關関数の空間相関から、シュレディンガー方程式を通してポテンシャルエネルギーを取り出す手法である。これはより古くから知られている Lüscher 法 [6]と理論的に等価であるが、時間依存法[7]と呼ばれる改良型を使うことでより系統誤差をより容易にコントロールすることが可能となる[8]。

HAL QCD 法を用いることで QCD の第一原理計算によりチャームクォークを含んだハドロン間の相互作用を計算し、それを使って P_c の解析を行うのが本研究の目的である。これにより、実験データによらず定量的な議論が可能になり、理論的アプローチによる実験結果のクロスチェック及び予言をすることができる。

3. チャンネル結合

P_c は 2 つの u クォーク、1 つの d クォーク、そして c クォーク・反 c クォークから成っている。スピノ・パリティ $J^P = 3/2^+$ を持つ S 波の 2 体ハドロン系を仮定すると、最も閾値の低いチャンネルは実験的に P_c が発見された J/ψ と陽子 p の系となる。しかしクォークの入れ替えにより他のハドロンにも結合できて、 $P_c^+(4457)$ より下に閾値があるものとしては(1) $J/\psi + p$ 、(2) $\Lambda_c + \bar{D}^*$ 、(3) $\Sigma_c^* + \bar{D}$ 、(4) $\Sigma_c + \bar{D}^*$ の 4 チャンネルとなる。終状態・始状態として各 4 つのチャンネルを考え、合計 16 通りのハドロン相關関数を

計算することで、チャンネル間の遷移を考慮した結合チャンネルポテンシャルが求められる。

しかし現状、結合チャンネル系の解析はまだ終わっていないので、ここではチャンネル間遷移を無視した有効ポテンシャルを調べる。

4. 有効ポテンシャル

格子 QCD 計算には、PACS-CS コラボレーションによって生成された、2+1 フレーバーゲージ配位を用いる[9,10]。格子体積は $32^3 \times 64$ 、格子間隔は 0.0907 fm であり、物理的な空間体積は $(2.90 \text{ fm})^3$ に相当する。パイ中間子質量は 700 MeV, 570 MeV, 410 MeV の 3 つを用いた。格子 QCD 計算においては線型ソルバによる伝播関数の計算が大きな計算量を占める。これには格子 QCD 共通コード Bridge++ [11] の最適化されたソルバを用いた。

パイ中間子質量 410 MeV での、4 つのチャンネルに対する有効ポテンシャルを図 1 に示す。どのチャンネルも近距離で引力的であるが、遠距離では力が働くなくなるのがわかる。 $J/\psi + p$ は他の 3 つのチャンネルに比べて引力が弱く、 $\Sigma_c^* + \bar{D}$ や $\Sigma_c + \bar{D}^*$ は引力がより強い。

このことをより定量的に見るために、観測量である散乱位相差を計算したのが図 2 である。 $\Sigma_c^* + \bar{D}$ と $\Sigma_c + \bar{D}^*$ の有効ポテンシャルからは束縛状態の存在が示唆される。それぞれの散乱長 a と有効距離 r は、(1) $J/\psi + p$: $a = 0.51 \pm 0.07 \text{ fm}$, $r = 2.18 \pm 0.17 \text{ fm}$ 、(2) $\Lambda_c + \bar{D}^*$: $a = 1.89 \pm 0.50 \text{ fm}$, $r = 1.21 \pm 0.12 \text{ fm}$ 、(3) $\Sigma_c^* + \bar{D}$: $a = -2.40 \pm 0.25 \text{ fm}$, $r = 0.56 \pm 0.31 \text{ fm}$ 、(4) $\Sigma_c + \bar{D}^*$: $a = -3.22 \pm 0.22 \text{ fm}$, $r = 0.96 \pm 0.01 \text{ fm}$ であった。この解析ではチャンネル間遷移を無視しているが、 $\Sigma_c^* + \bar{D}$ や $\Sigma_c + \bar{D}^*$ の準束縛状態としてのハドロン共鳴状態が存在することが示唆され、これが P_c である可能性はある。より正確な議論のため、今後チャンネル結合系の解析を進めていく。

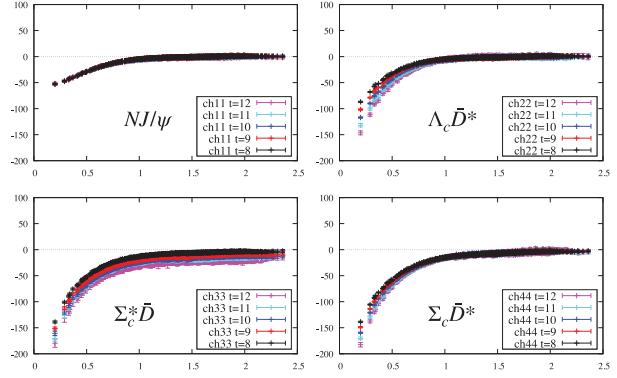


図 1：パイ中間子質量 410 MeV における有効ポテンシャル。横軸はハドロン間の相対距離[fm]、縦軸はポテンシャルエネルギー[MeV]。(左上) $J/\psi + p$ 、(右上) $\Lambda_c + \bar{D}^*$ 、(左下) $\Sigma_c^* + \bar{D}$ 、(右下) $\Sigma_c + \bar{D}^*$ について、異なる 5 つの時間において評価された有効ポテンシャルを示している。

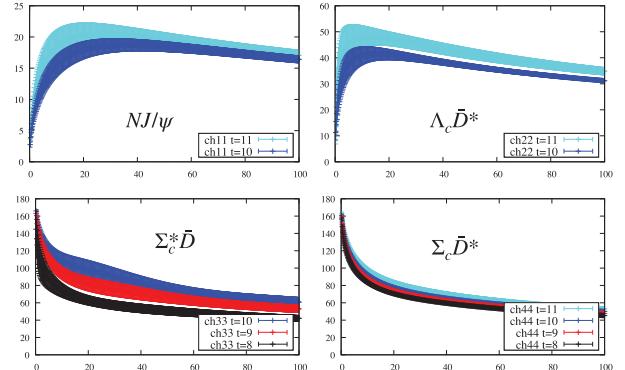


図 2：有効ポテンシャルから求めた散乱位相差。横軸は重心系のエネルギー[MeV]、縦軸は位相差[degree]。

5. 結論と今後の展望

本研究では、格子 QCD を用いた第一原理計算によってハドロン間相互作用を計算し、それを用いてペンタクォーク候補である P_c の解析を行った。簡易的な解析である有効ポテンシャルからは、準束縛状態としての P_c の存在が示唆された。今後、結合チャンネル系の解析を行いより正確な議論を行なっていく。

本研究で用いたクォーク質量は、最も軽いセットアップでもパイ中間子質量 410 MeV と、実験値の 140 MeV よりも大きい。さらに空間体積の $(2.90 \text{ fm})^3$ も最低限の大きさであり、より大きくして調べてみるべきである。現実的クォーク質量における大体積計算を、来年度以降富岳で進める計画をしており、さらなる発展が期待できる。

参考文献

- [1] R. Aaij *et al.*, Phys. Rev. lett. **115**, 072001 (2015).
- [2] R. Aaij *et al.*, Phys. Rev. lett.**122**, 222001 (2019).
- [3] R. Aaij *et al.*, (2020) arXiv:2012.10380 [hep-ex].
- [4] N. Ishii, S. Aoki and T. Hatsuda, Phys. Rev. Lett. **99**, 022001 (2007).
- [5] S. Aoki, T. Hatsuda, and N.Ishii, Prog. Theor. Phys. **123**, 89 (2010).
- [6] M. Lüscher, Nucl. Phys. B**354**, 531 (1991).
- [7] N. Ishii *et al.*, Phys. Lett. B**712**, 437 (2012).
- [8] T. Iritani *et al.*, J. High Energ. Phys. **2019**, 7 (2019).
- [9] S. Aoki *et al.*, Phys. Rev. D**79**, 034503 (2009).
- [10] S. Aoki *et al.*, Phys. Rev. D**81**, 074503 (2010).
- [11] S. Ueda *et al.*, J. Phys. Conf. Ser. **523**, 012046 (2014).

微孔性高分子膜の気体吸収性の自由エネルギー一解析

小嶋 秀和

大阪大学 大学院基礎工学研究科 化学工学領域

1. はじめに

高分子膜は、我々の生活に深く関わっている。その中でも微孔性高分子膜は、二酸化炭素回収、水素貯蔵、ドラッグデリバリーシステムなどの応用が期待されている[1]。微孔性高分子膜は内部に nm サイズの微孔を持つが、膜を構成する高分子である PIM (polymers of intrinsic microporosity) が、nm サイズのハードセグメントが柔軟に結合されているために、化学構造に起因して立体障害が発生するためである。膜には透過する速度と分離能のトレードオフがあると一般的に知られているが、従来のガラス状ポリマーのトレードオフのラインを超える性能を持つ PIM が発見してきた。

透過する分子の膜の透過係数（透過速度）は、溶解拡散モデル（図 1）により表現され、分子が膜内に入り込む量である分配係数と、分子の膜内での拡散係数の積で表現される。このモデルに基づき PIM の透過性について、膜内での透過分子の透過サイト [2] や拡散経路 [3] 等の分子レベルでの理解が分子シミュレーションを用いて深められてきた。その一方で、従来のガラス状ポリマーとの直接的な比較による PIM の特性である微孔性についてはほとんど理

解されていない。吸収性は透過性を支配する因子であると考えられているが、この点における研究はほとんどなされていない。

本研究は、PIM の吸収性についての微孔性に特徴的な理解を得ることを目的とする。溶解性の指標である分配係数は分子の膜内への吸収の自由エネルギー ΔG で表される。PIM の気体吸収の自由エネルギー的特性を、ガラス状ポリマーの結果と比較することで明らかとする。 ΔG は、分子動力学シミュレーション (MD) とエネルギー表示法 (ER) の組み合わせで求めた [4]。比較する高分子として、PIM の典型的モデルである PIM-1 と、多孔性を生じないが PIM-1 と同じく芳香族六員環を持つ PS を採用した（図 2）。透過分子としては、気体の透過分子として典型的な CO_2 、 O_2 、 CH_4 、 Ar を採用した。まず最初にシミュレーションと実験の対応を、 ΔG に加えて拡散係数 D および透過係数 P から確認し、その後に ΔG の成分解析をすることで明らかとなった高分子膜における共通点および PIM で特性について述べる。

2. 方法

膜の性質は表面ではなく内部で代表されるため、高分子が充填された構造に対して MD シミュレーションを行った。ER 法による ΔG 計算に必要なトラジェクトリのために、高分子種それぞれについて、重合体のみを含む参照系と、重合体と溶質（透過分子）一つを含む溶液系に対して MD 計算を実行した。 D は、後者の透過分子を含む溶液系について長時間シ

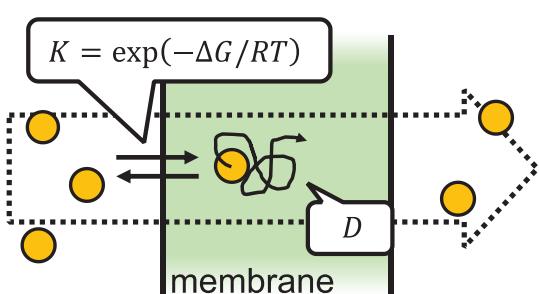


図 1 : 溶解拡散モデル。透過性の指標である透過係数 P は、透過分子の膜外-膜中の間の分配係数 K と膜中の拡散係数 D の積で表される。

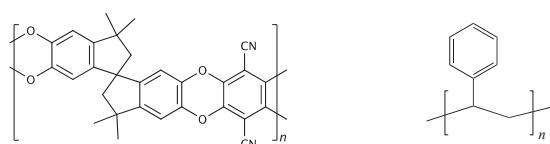


図 2 : 本研究の対象であるポリマー。

ミュレーションを行い、そこから得られた透過分子の平均二乗変位の直線領域に対して線形関数をフィッティングすることで得た。サンプリングは、 ΔG 計算では 300 K、1 bar、 D 計算は 300 K で行った。力場は、高分子には GAFF/RESP、CO₂ には EPM2、O₂ には TraPPE、CH₄、Ar には GAFF/RESP を用いた。ソフトウェアは、MD 計算には Gromacs 2016.6、 ΔG 計算には ERmod 0.3.5 を用いた。

成分解析は、ER 法のフレームワークにおいて行った。ER 法において、 ΔG は溶液系における溶質–溶媒間相互作用エネルギーの平均値(u)と、溶媒の再配置の寄与である $f(\epsilon)$ のエネルギー ϵ に対する積分で表される。積分区間を、溶液系で現れない値 ϵ^c をしきい値で区切ると、 ΔG は次式のような成分に分けられる。

$$\Delta G = \langle u \rangle + \int_{-\infty}^{+\infty} f(\epsilon) d\epsilon = \langle u \rangle + \Delta G^{\text{excl}} + \int_{-\infty}^{\epsilon^c} f(\epsilon) d\epsilon$$

ΔG^{excl} は、溶媒中に溶質分子が入る空間を生じるために必要なエネルギーである[5]。 $\langle u \rangle$ は、本研究で用いたモデルでは全て、クーロン相互作用 $\langle u \rangle^{\text{cl}}$ と、分散力と反発力の項である Lennard-Jones (LJ)相互作用 $\langle u \rangle^{\text{LJ}}$ の和で表される。これらの成分について PIM-1 と PS で比較を行った。

3. 結果

3.1 計算による評価の実験との対応

図 3 は、 ΔG 、 D 、 P の計算値と実験値の対応を示している。計算により評価された ΔG は PIM-1、PS 両方で Ar > CH₄ > CO₂ の順であったが、これは実験による測定結果と同じであった。計算値と実験値の相関係数は 0.93 と大きく、溶解性の傾向がシミュレーション上で再現できている。 D では、計算値と実験値の相関係数は、全ての透過分子を含めた場合は 0.87、CH₄ を除いた場合は 0.98 と、CH₄ を除いては計算値と実験値の対応は良い。実験値と同様にシミュレーションでも PIM-1 の D は全体的に PS の D よりも大きいが、微孔性による膜内の空隙(自由体積)の増大による拡散性の向上に起因する。CH₄ を除い

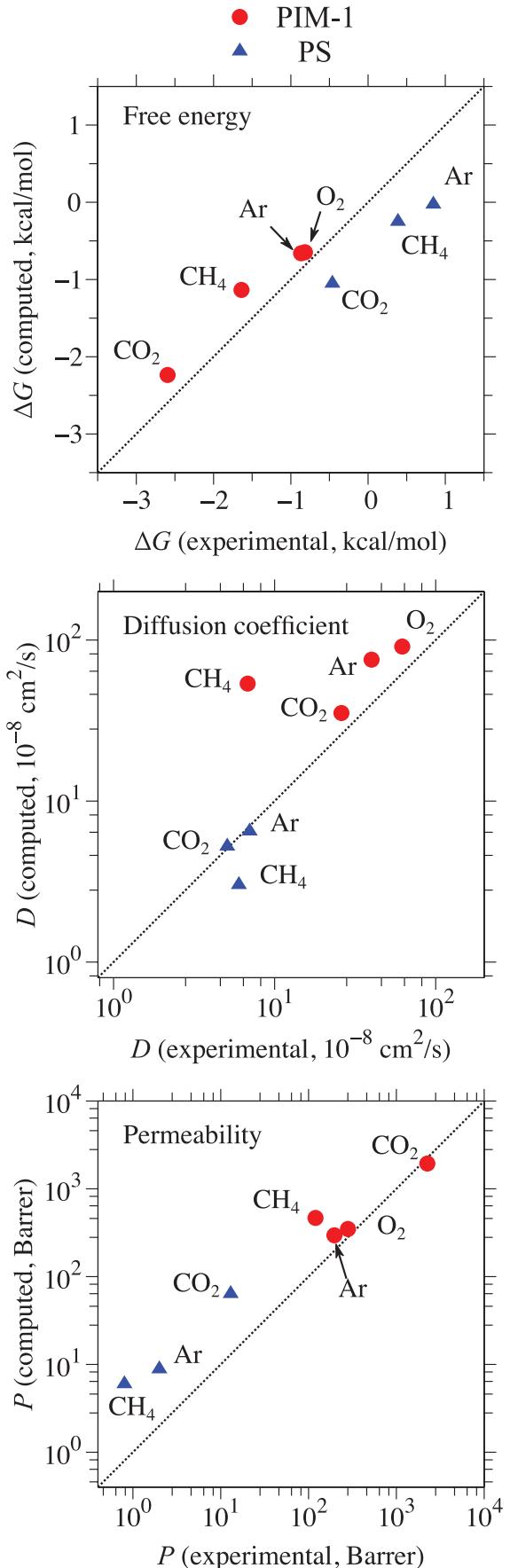


図 3 : ΔG (上段)、 D (中段)、および P (下段) の計算値と実験値の対応。実験値として PIM-1 は Ref. [6]、PS は Ref. [7]を参考にした。

て最も計算値と実験値に乖離がある PIM-1 中の Ar で、計算値と実験値はそれぞれ 91×10^{-8} 、 $62 \times 10^{-8} \text{ cm}^2/\text{s}$ である。拡散係数は評価が難しい値であるが 1.5 倍程度の誤差で精度良く、良く評価できている。一方で CH_4 は PIM-1、PS の両方とも計算値は実験値から大きく離れており、また実験で見られる拡散係数の大きさの溶質の順序から外れている。 ΔG を良く評価できても、 D までも良く評価できるとは限らないと言えるが、膜の機能として重要である P として評価すると、計算値と実験値の対応は良くなり、相関係数は 0.98 となる。これは、 P に対して ΔG の寄与が大きく、また透過性の制御に重要であることを意味する。例えば、PIM-1 の実験値を例にとると、 ΔG の変化幅 1.5 kcal/mol は分配係数 K に変換すると 12 であるのに対し、これと同じスケールで P へ寄与する D の最小値と最大値の比は 5.9 である。従って P への寄与は ΔG の方が 2 倍大きい。また PIM-1 での CO_2 に注目すると、 D は PIM-1 中では低い値であるが、 ΔG の寄与により P は他を離して最も大きい。よって、透過係数 P に対して拡散の因子である D よりも溶解の因子 ΔG の方が重要な因子なのである。

3.2 ΔG の成分解析

シミュレーションにより得られた ΔG が、実験値との対応が良く、また P を精度良く評価できることがわかった。それぞれの差異の要因を調べるために、 ΔG を成分へと分割する。

図 4 の上段は、 ΔG に対する $\langle u \rangle$ が示されている。PIM-1 および PS それぞれで透過分子種についての $\Delta G \cdot \langle u \rangle$ の相関はそれぞれ 1.0、0.99 と良い一方で、PIM-1 と PS の値の間には差がある。また Ar、 CH_4 では両膜の間で $\langle u \rangle$ に差がほとんどない一方で、 CO_2 では 0.75 kcal/mol の差がある。 $\langle u \rangle$ をさらにクーロン相互作用と LJ 相互作用に分割したところ、寄与はそれぞれ 0.30、0.35 kcal/mol であった。 CO_2 は他の透過分子と異なる四重極子モーメントを持つが、 $\langle u \rangle$ の差は全てこれに起因するものではない。相互作用を分割した結果は CO_2 以外を含めて図 5 に示されている。クーロン相互作用は LJ 相互作用よりもとても小さ

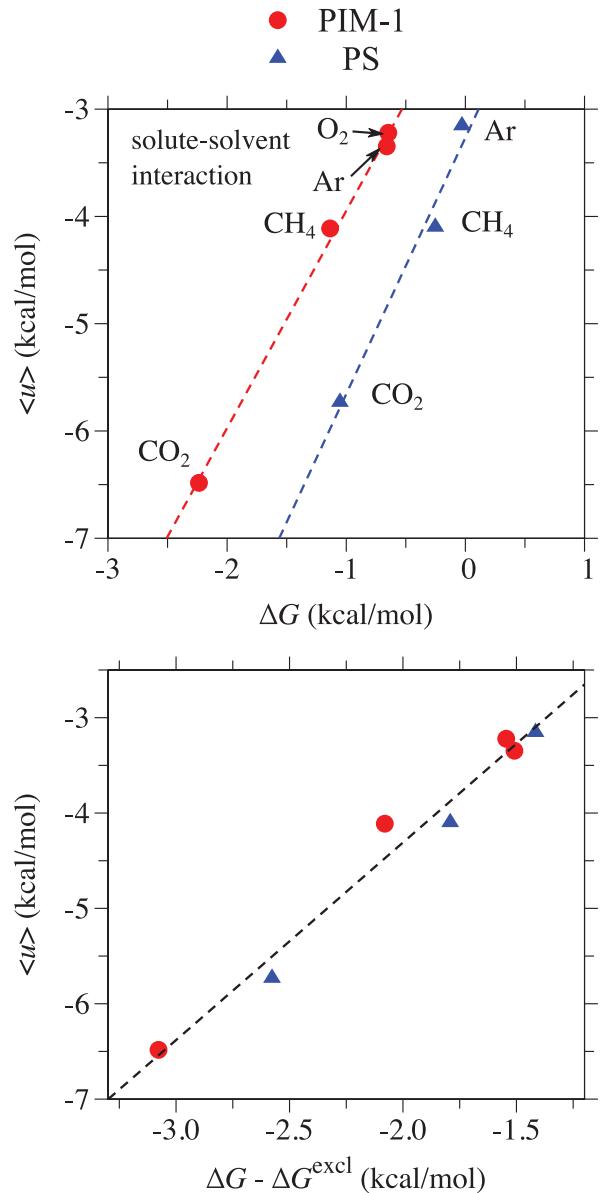


図 4 : ΔG に対する $\langle u \rangle$ (上段)、および $\Delta G - \Delta G^{0\text{excl}}$ に対する $\langle u \rangle$ (下段)。赤破線、青破線、黒破線はそれぞれ PIM-1、PS、全データに対するフィッティング直線である。

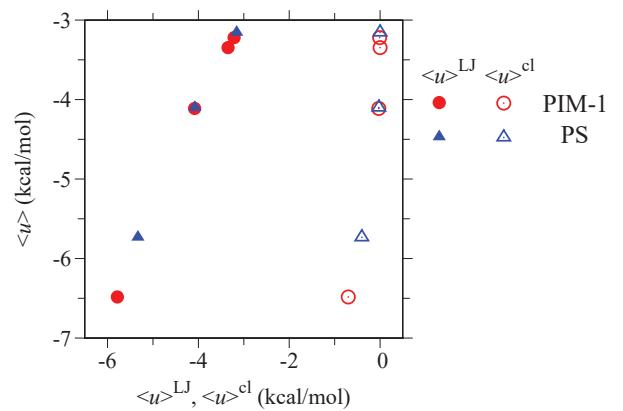


図 5 : $\langle u \rangle^0$ および $\langle u \rangle^{\text{cl}}$ に対する $\langle u \rangle$ 。

く0に近いため、 $\langle u \rangle$ はLJ相互作用が支配的であることがわかる。

排除体積による寄与を ΔG から除き、 $\langle u \rangle$ と比較した結果を図4の下段に示す。相関係数が0.99とともに大きく、PIM-1とPSの ΔG の差は排除体積による寄与によるものであったことがわかる。排除体積の寄与を除くと、微孔性の有無によらずポリマー膜の ΔG は $\langle u \rangle$ の一次の式で十分に表現できている。排除体積の寄与は、透過分子が膜中に入る時の高分子原子の排除によるものであり、この寄与の差は膜の原子の充填度の差によるものである。それぞれの膜での ΔG^{excl} の平均値は、PIM-1、PSそれぞれで0.88、1.5 kcal/molであり、PIM-1の方が小さい。これは正に膜内の微孔が存在による効果であり、微孔性は透過分子の侵入時の排除体積効果を低下させることで吸収性に対して寄与しているといえる。

4. おわりに

PIMであるPIM-1高分子膜とガラス状ポリマーであるPS高分子膜への気体の透過分子の吸収性の差は排除体積効果によるものであり、微孔性に起因していることが分かった。またこの差異を除くと、PIMとガラス状ポリマーのどちらの吸収性も、透過分子と膜との間の相互作用により一つのモデルで表現できることが示唆された。

今回は、微孔性がどのようにして気体の吸収に寄与しているかの解析を行った。その一方で、拡散性については、高分子膜として同じメカニズムはどれであり、微孔性により何が異なるのか、は明らかとなっていない。これは今後の課題したい。

参考文献

- [1] S. Das, P. Heasman, T. Ben, S. Qiu, *Chem. Rev.*, **117**, 1515 (2017).
- [2] L. Zhang, W. Fang, J. Jiang, *J. Phys. Chem. C*, **115**, 11233 (2011).
- [3] H. Frentrup, K. E. Hart, C. M. Colina, E. A. Müller, *Membranes*, **5**, 99 (2015).
- [4] T. Kawakami, I. Shigemoto, N. Matubayasi, *J. Chem. Phys.*, **137**, 234903 (2012).
- [5] Y. Karino and N. Matubayasi, *Phys. Chem. Chem. Phys.*, **15**, 4377 (2013)
- [6] P. M. Budd, K. J. Msayib, C. E. Tattershall, B. S. Ghanem, K. J. Reynolds, N. B. McKeown, D. Fritsch, *J. Membr. Sci.*, **251**, 263 (2005).
- [7] F. Mozaffari, H. Eslami, J. Moghadasi, *Polymer*, **51**, 300 (2010).

先天的な顔の異常をスクリーニングする矯正診断支援 AI システムの開発

谷川 千尋¹, 清水 優仁¹, Lee Chonho², 山城 隆¹

1 大阪大学 大学院歯学研究科 顎顔面口腔矯正学教室

2 大阪大学 サイバーメディアセンター

1. 緒言

レントゲン検査や詳細な検査を実施する前に、臨床において顔や歯の形を観察し、考えうる遺伝的問題を推測することは歯科治療計画を立案する上で非常に重要である。そのような推測を行うためには専門医の長年の経験が必要であることが知られている。専門医の長年の経験を反映した AI システムの構築が可能となれば、歯科医師にとって大きな作業負担の軽減につながり、また経験の浅い歯科医師にとって、問題の見落としを防止する上でも重要である。そこで本研究の目的は、顔画像から患者の顔面画像所見を自動で生成し、先天的な顔の異常が疑われた場合にその情報を出力する AI システムを構築することにある。

2. 方法

当院に蓄積された 1000 件の患者の顔画像を資料として用いた。900 症例をシステムの学習に用い、残りの 100 症例を評価用に用いるものとした。顔の評価における解は有限種類の表現の組合せであり、そのため顔の評価の際に注目する項目とその正解ラベルを事前に用意することで顔画像に対するマルチラベル分類問題として解くことができる。本研究では顔画像を入力データとし、対応する顔の評価結果をベクトル化したものを出力データとして学習を行うことにより AI システムを構築したものとした。

13 年の矯正歯科臨床経験を有する専門医 A に 17 インチラップトップ型パソコンコンピューター上に表示した側貌および正面画像を同時に閲覧させ、治療計画立案時に注目する項目（以下評価項目）をマウス型光学式ポインティングデバイスにより選択させ、続いて評価項目の評価を同様に選択させた。

専門医 A には、約 1~2 分で顔画像の評価を行うこ

と、および評価項目数に上限はなく、診療上必要と考える場合は全ての項目を選択するように指示した。学習に用いるアルゴリズムには畳み込みニューラルネットワークの一つである ResNet50[1]をベースとした Faster R-CNN[2]を選択した。学習率は最初の 10 回を 0.001 とし、10 回の学習ごとに 0.1 倍するものとした。過学習を避けるため、損失関数が収束し、精度の明らかな上昇が認められなくなった段階で学習を終えるものとした。

システムの構築に用いなかった 100 症例分の顔画像を用いてシステムの正答率、精度、感度、F 値の平均値を求めた。

3. 結果

構築したシステムについてサンプル全体の正答率、精度、感度、F 値を表 1 に示す。精度、感度についてはそれぞれ 0.36 および 0.39 であり、専門医が存在すると判断した所見のうち約 6 割は見落とされていたものの、高い正答率を示した。学習回数については 50 回の段階で喪失関数及び制度が収束したことから過学習を避けるため 50 回で学習を終了した（図 1,2）。また大きな異常を認めない症例の顔画像にシステムを使用した例を図 3(a)(b)に、先天的な顔の形態異常を有する症例について使用した例を図 3(c)(d)に示す。先天的な顔の形態異常を有する患者では、複数のラベルが検出されたのに対し、異常がない場合には、ラベルが検出されないなど、臨床医の評価に近い結果を得た。

表 1：顔画像からの顔画像所見の自動生成

	正答率	精度	感度	F 値
システム	0.95	0.36	0.39	0.37

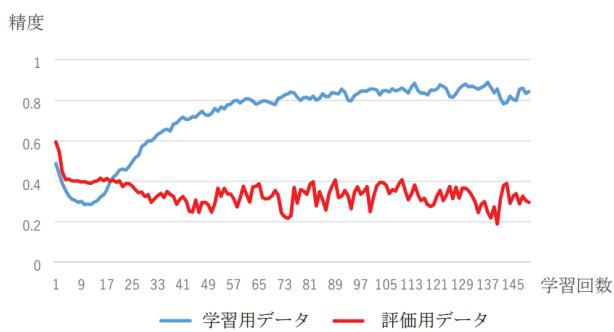


図 1 : 学習回数の増加に伴う患者の顔画像より顔画像所見を作成する AI システムの精度の評価

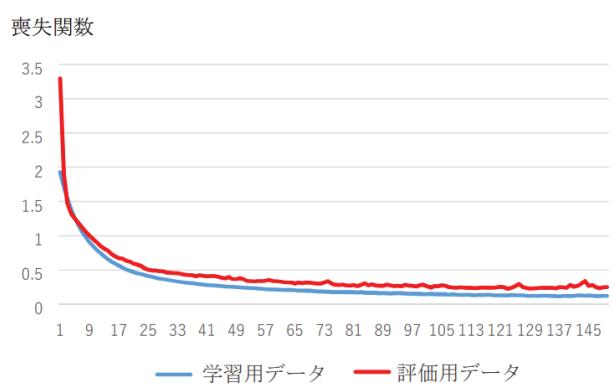


図 2 : 学習回数の増加に伴う患者の顔画像より顔画像所見を作成する AI システムの喪失関数の変化

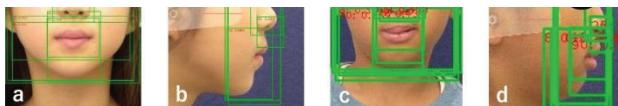


図 3: 顔形態について主な異常のない症例(a)(b)、ならびに先天的な顔の形態異常を有する症例(c)(d)に対して患者の顔画像より顔画像所見文を作成する AI システムを顔画像に用いた例 緑線は検出された異常の部位を、赤はラベルを示す

4. 結論

マルチラベル分類問題として、顔画像から患者の顔面画像所見を自動で生成し、先天的な顔の異常が疑われた場合にその情報を出力する AI システムを構築した。今後専門医の評価との比較を行う予定である。

参考文献

- (1) He K, Zhang X, Ren S, Sun J. Deep Residual Learning for Image Recognition. Proc IEEE Comput Soc Conf Comput Vis Pattern Recognit. 2016;770–8.
- (2) Ren S, He K, Girshick R, Sun J. Faster R-CNN: Towards Real-Time Object Detection with Region Proposal Networks. IEEE Trans Pattern Anal Mach Intell. 2017;39(6):1137–49.

環状鎖メルトへの線状鎖の少量添加の粗視化 MD シミュレーション

上原 恵理香

お茶の水女子大学 ソフトマター教育研究センター

1. 背景

高分子はモノマーと呼ばれる小分子を数十から数万重合させた長く柔軟な分子であり、溶液中では熱運動によってランダムに折れ曲がり、互いに絡み合う。数学的には自分自身と絡まりあった折れ線や曲線を結び目 (knot)、ほかの曲線と絡まりあったものを絡み目 (link、図 1) という。すでに 1983 年には環状 DNA に結び目が生じることが実験によって確認されており [1]、また長い高分子鎖には必ず結び目が生じることをランダムウォークを用いた数値計算によって示している [2]。

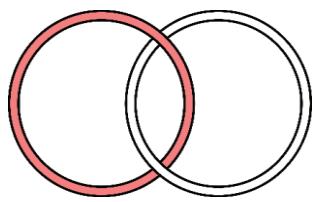


図 1：シンプルな絡み目の一つ Hopf link。

絡み合いは高分子鎖の移動を制限し、とりうる立体配置の状態数を減少させる [3]。これは環状鎖同士が図 1 のような絡み目を作っているとき、2 つの環状鎖の重心が慣性半径の 5 倍以上離れているような配置は確率的にほとんど実現しないということである [4]。その結果、絡まり合った高分子鎖を離そうとするときにはエントロピックな力が引力として生じ抵抗する。

絡み合いは粘性などレオロジカルな高分子の性質に影響を及ぼすが、その起こりやすさは溶媒との相互作用の強さ、高分子の重合度、そして線・環・投げ縄など高分子の構造にも左右される。環状高分子は絡み合いが起こらず、粘性が低くなることが理論的に予測されている [5]。実際にポリスチレンを使った実験では、環状鎖は同じ重合度の線状鎖よりも粘性が低くなるようである [6]。一方、十分に長い環状

高分子の系では、輪の中に輪が入り込む貫入が起こりうることもシミュレーションによって指摘されている [7]。投げ縄型の高分子鎖のシミュレーションで、線状部分と環状部分が絡み合っていることを示した研究も存在する [8]。また、構造の異なる高分子を混合すると、混合比によって絡み合いの起こる割合などが変化し、レオロジカルな特性が変化することが見込まれる。著者が参加する CREST 研究課題 [9]においても線状鎖濃厚系に環状鎖を少量添加した系の研究が実験と理論の双方で進められている。一方、環状鎖に少量の線状鎖を添加した系（環状鎖リッチな系）においてもレオロジカルな特性が変化することが見込まれるが、濃厚系の数値計算は大規模計算となることからもあって詳細は未だ調べられていない。

数学的には、線状高分子の絡み合いは環状高分子のように定義できない。トポロジーの考え方では有限回の連続変形によって互いに移り変わることのできる配置を同じとみなすので、線状鎖は常に絡み合い無し（自明）である。しかし、十分に長い間引き離すことができないのであれば相互に運動を制限しているはずである。線状鎖の絡み合いをトポロジーを使って分類したシミュレーションには、ガラス状態の線状鎖の解析に絡み数を用いたもの [10]、アレクサンダー多項式量を用いて絡まつた状態の線状鎖を伸長したもの [11] などがある。

2. 目的・意義

環状鎖と線状鎖の混合系のモノマーの三次元座標を MD 計算によって作成し、トポロジーを使って絡み合い状態の時間発展を観測する。絡み合いの起こる頻度や絡み合いの持続する時間、合わせて分子鎖の広がりなどの基本的な物性量の絡み合いとの関連を調べる。

3. シミュレーションの手順

3.1 LAMMPS による線-環混合系の配置の作成

環状鎖メルトに 0、5、10、20% の線状鎖を添加した場合の分子動力学的シミュレーションを行う。OCTOPUS にインストールされている LAMMPS を用い、320 個のモノマーからなる Kremer-Grest 鎖を 140 本を持つ系の疎視化分子動力学計算を行った。

$$U(R) = -0.5KR_0^2 \ln \left[1 - \left(\frac{R}{R_0} \right)^2 \right] + 4\epsilon \left\{ \left(\frac{\sigma}{R} \right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{R} \right)^6 \right\} + \epsilon$$

式 1 : Kremer-Grest 模型のモノマーが持つポテンシャル。各パラメータは $K=30$ 、 $R_0=1.5$ 、 $\epsilon=1$ 、 $\sigma=1$ とし、ボンド長の二乗平均はおよそ 0.93 になる。

初期配置は、結び目を持たない環状鎖 (trivial knot) 140 本を数密度が 0.85 となるように各辺の長さ約 37.5 の立方体状の周期境界条件の箱に配置したもの用いる。線状鎖が 5% 混入した系は、ランダムに選んだ 7 本の環状鎖のボンドをそれぞれ一か所で切断して線状鎖に変え、 10^9 MD steps の緩和計算を実施して作成する。同様にして 10%・20% の系も作成する。 10^8 MD steps 毎にスナップショットを記録して環状-線状鎖の比率による物性量の変化、および絡み合いの有無による変化を追った。また、 5×10^5 MD steps の短間隔でスナップショットを出力し、一度線-環の間に生じた絡み合いがどれほどの時間で解消されるか（絡み合いの持続時間）を計算した。

3.2 絡み合いの判定

絡み数は絡み目のトポロジカル不变量である。絡み数の定義は Gauss によって

$$Lk(L_1, L_2) = \frac{1}{4\pi} \int \frac{(\vec{r}_2(s) - \vec{r}_1(t))}{|\vec{r}_2(s) - \vec{r}_1(t)|^3} \cdot d\vec{r}_1 \times d\vec{r}_2$$

式 2 : 絡み数の積分を用いた定義

と積分を用いて定義されている (1833)。 $\vec{r}_1(s)$ 、 $\vec{r}_2(t)$ はそれぞれ二つの曲線の媒介変数表示で、MD シミュレーションではモノマー間のボンドの三次元座標に相当する。絡み数の正負は分子鎖の上をどちら向きに進むかによるので本研究のように一様な環状鎖では考慮しなくてもよいが、DNA やタンパク質、ジブロックコポリマーのように頭尾の区別がある分子ではこのとおりではない。絡み数は直感的には、一方の曲線の周りをもう一方の曲線が何周巻いている

かを表す整数値である。たとえば Hopf link (図 1) であれば ±1、ソロモンの結び目であれば ±2 になる。絡み数には定義の仕方がいくつかあり、積分のほかに射影図の交差の和を 2 で割ったもの、片方の閉曲線がつくるザイフェルト曲面をもう片方の閉曲線が何回貫いているかで定義するものなどがある。

以上の計算は環状高分子のモノマーの座標列に相当する閉じた折れ線の座標列に定義されたものであるが、線状鎖に相当する開いた折れ線にも天下りに絡み数を計算することが出来る。開いた曲線はトポロジカルには自明なため、計算されたものはトポロジカル不变量ではない。しかし、積分を用いて計算した絡み数と、交点の和を射影の方向で平均した絡み数は等しいであることを事前に確認している。以後、本研究では絡み数を積分を用いて計算した。

4. 結果

以下では、絡み数 Lk の絶対値が 0.8 を超えるペアを絡み合っていると見なす。

4.1 分子鎖の静的な統計物理量

慣性半径

分子鎖の形状(カッコ内は線状鎖の混合比)	慣性半径の二乗平均(カッコ内はサンプル数)
linear(5%)	$101.096 \pm 5.533(77)$
ring(5%)	$36.2131 \pm 0.285(1463)$
linear(10%)	$90.9139 \pm 3.915(154)$
ring(10%)	$36.7961 \pm 0.321(1386)$
linear(20%)	$95.6513 \pm 3.111(308)$
ring(20%)	$37.2443 \pm 0.3203(1232)$

線状鎖はサンプルが少ないため正確な値ではないが、慣性半径の二乗平均はおよそ 95 程度になった。理想鎖で線状鎖の慣性半径の二乗平均は環状鎖の 2 倍になり、また結び目の無い環状鎖は膨張するので線状鎖は相対的に 2 倍よりも小さくなるが、線-環混合系では線状鎖の慣性半径の二乗平均は環状鎖の 2.7 倍ほど大きい。慣性半径に対する線状鎖の混入率の影響はあまりないようであるが、詳細にみれば線状鎖に貫通された環状高分子は慣性半径がやや増加する。貫通した線状鎖には、環状鎖を広げるような効果がある。

	0 penetrated	1 penetrated	2 penetrated
ring(5%)	35.4343 ± 0.333(1069)	37.9074 ± 0.589(342)	40.765 ± 1.525(51)
ring(10%)	35.086 ± 0.435(754)	37.8576 ± 0.547(477)	41.5594 ± 1.025(136)
ring(20%)	35.0163 ± 0.590(363)	36.2371 ± 0.540(433)	38.887 ± 0.650(299)

表：線状鎖と絡み合った環状鎖の慣性半径の二乗平均

絡み合ったペアの重心間距離の二乗平均

	Linked	Linked & Unlinked
5%	133.48 ± 5.12848 (447)	353.222 ± 1.79129 (10241)
10%	120.96 ± 3.38354 (811)	353.142 ± 1.29736 (19404)
20%	126.452 ± 2.61646 (1485)	352.67 ± 0.970064 (34496)

表：線状鎖と環状鎖の重心間距離の二乗平均

絡み合ったペア間の重心間距離の二乗は、線状鎖の慣性半径二乗の 1.3 倍程度である。線状鎖の重心から遠い部分 (≈ 線状鎖の端に近い部分) に絡んでいる環状鎖があるためかもしれない。環状鎖が線状鎖のどの部分に絡んでいるかは 4.4 節で再確認する。

4.2 絡み数の概観

絡み数が一定の範囲にある線-環ペアの個数を数えて片対数スケールのヒストグラムにしたのが下の図 2 である。たとえば線状鎖を 5% 含む系では、 $0.875 < Lk < 1.125$ のペアは 194 ペア検出された。データの元となった配置は 10^8 MD steps ごとに出力したスナップショット 11 枚から取得したものである。

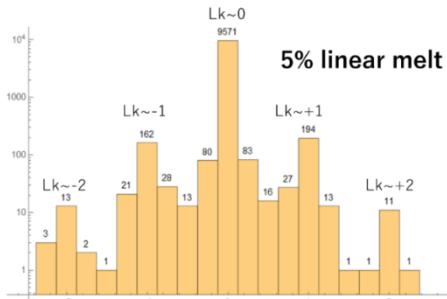


図 2a 線状鎖を 7 本含む系の絡み数の分布。93.5% のペアが絡み数～0、3.48% のペアが絡み数±1、0.234% のペアが絡み数±2。

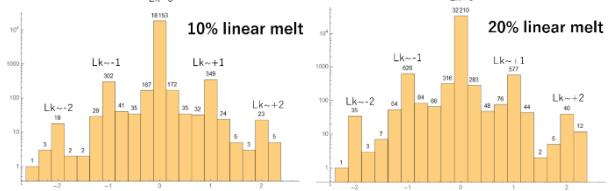


図 2b 線状鎖を 14 本含む系の絡み数の分布。
93.6% のペアが絡み数～0、3.35% のペアが絡み数±1、0.211% のペアが絡み数±2。

図 2c 線状鎖を 28 本含む系の絡み数の分布。
93.4% のペアが絡み数～0、3.49% のペアが絡み数±1、0.217% のペアが絡み数±2。

絡み数ゼロのペアの多さは、分子鎖の慣性半径にたいする系の大きさを反映するため、絡み合いの起りにくさを表しているわけではない点に注意。絡み数が～1 のペアは、絡み数が～2 のペアの 15 倍ほど存在する。この割合は、線状鎖の混入率に依存しないようである。一般にモノマー間の斥力相互作用が強ければ交点数の少ない結び目や絡み目が生じやすく、絡み数±1 の Hopf link は非自明な絡み目のうちでもっとも交点数が少ないので自然な結果である。

また、多くの場合、絡み数は整数に近い値をとることが分かった。環状鎖同士の計算では絡み数は常に整数値をとり、線状鎖同士の絡み数は非整数の値も計算される。線-環系ではその中間的な振る舞いをしていると考えられる。絡み合っているとみなす閾値は前述のとおり 0.8 としているが、この性質のため閾値を多少変化させても絡み合い判定の結果を大きく変えることはないことが保証される。

図 3 は、一本の線状鎖に何本の環状鎖が絡んでいるかをカウントしたヒストグラムである。線状鎖一本当たり 4～5 本の環状鎖が絡んでおり、中には 10 本の環状鎖と絡まる線状鎖も存在する。

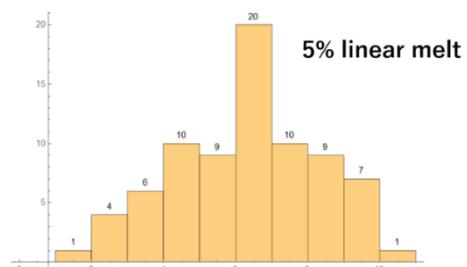


図 3a 線状鎖を 7 本含む系で 1 本の線状鎖に何本の環状鎖が絡み合っているかのヒストグラム 平均 5.63 本

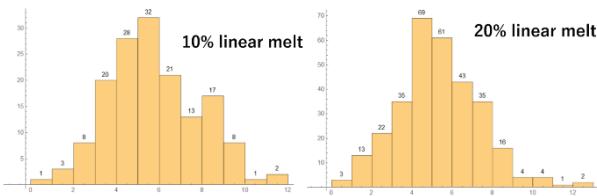


図 3b 線状鎖を 14 本含む系で 1 本の線状鎖に何本の環状鎖が絡み合って いるかのヒストグラム
平均 5.23 本

図 3c 線状鎖を 28 本含む系で 1 本の線状鎖に何本の環状鎖が絡み合って いるかのヒストグラム
平均 4.67 本

この様子からは一本の線状鎖は複数の環状鎖の中を縫うように、すなわち輪投げのピンのように貫いて束ねていることが想像される。このような絡み合いがどの程度の時間維持されるかを次の節で考察する。

4.3 線-環絡み合いのダイナミクス①：持続時間

環状鎖と線状鎖の絡まりが解消されるまでの時間は、指数 0.3～程度のパレート分布に従う（図 4）。これは、大半の絡まりが短時間で解消される一方、一部の絡まりは非常に長い間残ることを意味する。

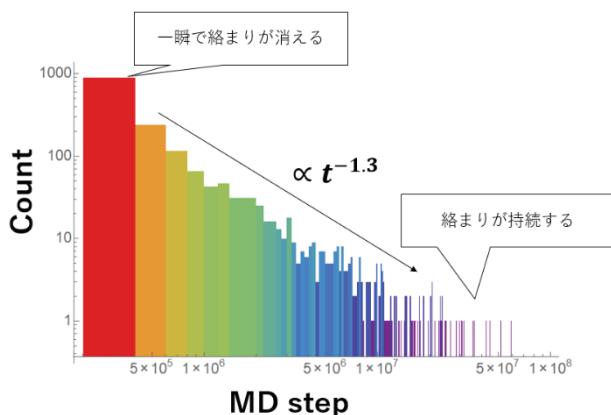


図 4：線状鎖を 5%混入した系の絡み合いの持続時間 のヒストグラム（両対数スケール）

	a	$\chi 2/DF$
5% linear	0.311±0.017	0.86
10% linear	0.324±0.018	2.07
20% linear	0.307±0.01	1.14

表：持続時間の分布にパレート分布 $x^{-(a-1)}$ をフィットしたもの。

指数 $a < 1$ のパレート分布にしたがう確率変数の期待値は無限大に発散するので、絡み合いが消される

までの持続時間の期待値は無限大である。

持続時間のこのようなるまいは一次元 RW の回帰時間に見られるものであり、環状鎖は線状鎖の上を RW 様に行ったり来たりスライドして動いていることを示唆する。これは前節で、線状鎖は環状鎖を多数貫く輪投げのピンのようになっているとしたことと一致する。

4.4 絡み合いのダイナミクス②：絡合の移動

線状鎖を分割し、環状鎖と絡み合っている部分を環状鎖の線状鎖上の一次元座標とみなす。すなわち、線状鎖の一方の端からモノマーに 1、2、……、320 と番号を振り、絡み合いを起こしている部分のモノマーの番号を、線状鎖上の一次元座標とする。下の図 5 は環状鎖の一次元座標を縦軸、MDsteps を横軸に取ったものである。

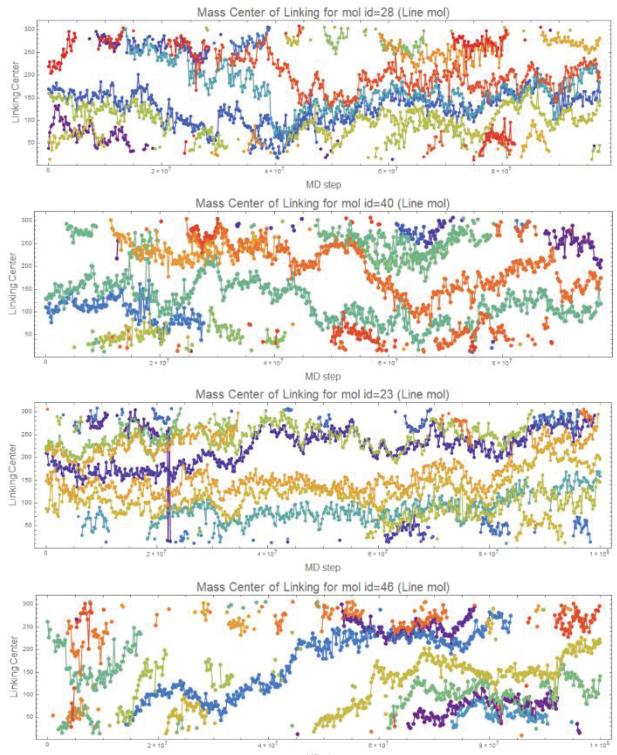


図 5：環状鎖の線状鎖上の一次元座標の時間変化。異なる色は、異なる環状鎖の一次元座標を表す。

環状鎖が線状鎖上をランダムにスライドして動いていること、一部の環状鎖の絡み合いは長時間保持されることが確認できる。また、このグラフからは、環状鎖が隣の環状鎖をすり抜けて向こうに移動することはほとんどないことが見て取れる。このため両端に絡んでいる環状鎖は短時間で抜け落ちることが

多いが、中央付近に絡んでいる環状鎖は長時間絡み合いを維持する。

理想一次元 RW では回帰時間の分布は $a=0.5$ に比例するが、線-環系の持続時間の指数がやや小さいのは、隣接する環状鎖に阻害されて動きにくくなっている影響かもしれない。

5. おわりに

線状鎖上の環状鎖は、RW 様にスライドして移動していることが分かった。またこのようなダイナミクスは、絡み合いの持続時間が無限大に発散するため、一部の絡み合いは非常に長いあいだ維持される。線-環は引き離すことができるるので数学的には絡み合いが存在しないといえるが、一方で非常に長いあいだ貫通が維持されるのであれば物性への影響は無視できない。

課題

- ・重合度 N への依存性
- ・Brunnian knot 型の絡み目の検出

参考文献

- (1) M. A. Krasnow、 A. Stasiak、 S. J. Spengler, F. Dean、 T. Koller and N. R. Cozzarelli, “Determination of the absolute handedness of knots and catenanes of DNA”, Nature 304, 559–560(1983)
- (2) D. Sumners & S. Whittington, “Knots in self-avoiding walks”, J. Phys.A: Math. Gen. 21, 1689 (1988)
- (3) W. W. Graessley and D. S. Pearson, “Stress-strain behavior in polymer networks containing nonlocalized junctions”, J. Chem. Phys., 66, 3363 (1977)
- (4) N. Hirayama、 K. Tsurusaki and T. Deguchi, “Linking probabilities of off-lattice self-avoiding polygons and the effects of excluded volume”, J. Phys. A: Math. Theor. 42 (2009)
- (5) T. Sakaue, “Statistics and geometrical picture of ring polymer melts and solutions”, Phys. Rev. E, 85 (2012)
- (6) Y. Doi、 K. Matsubara、 Y. Ohta、 T. Nakano、 D. Kawaguchi、 Y. Takahashi、 A. Takano and Y. Matsushita, “Melt Rheology of Ring Polystyrenes with Ultrahigh Purity”, Macromolecules, 48 (2015)
- (7) J. Smrek、 K. Kremer and A. Rosa, “Threading of Unconcatenated Ring Polymers at High Concentrations: Double-Folded vs Time Equilibrated Structures”, Macro Lett. 8 (2019)
- (8) A. Rosa、 J. Smrek、 M. S. Turner and D. Michieletto, “Threading-Induced Dynamical Transition in Tadpole-Shaped Polymers”, Macro Lett. 9 (2020)
- (9) 「高分子弾性のホモロジー的トポロジー理論の構築と環状混合デバイス」 お茶大 出口哲生代表
- (10) R. Ahmad、 S. Paul and S. Basu, “Characterization of entanglements in glassy polymeric ensembles using the Gaussian linking number”, Phys. Rev. E 101 (2020)
- (11) M. Caraglio、 C. Micheletti and E. Orlandini, “Physical Links: defining and detecting inter-chain entanglement”, Scientific reports 7: 1156 (2017)

大規模時系列テンソルによる多角的イベント予測

本田 崇人、松原 靖子、川畠 光希、櫻井 保志

大阪大学 産業科学研究所 産業科学 AI センター

1. はじめに

近年、製造業において製造工場のスマート化が推し進められている。大量のセンサを使用して生産ラインの稼働状況をつねに監視し、その様子を時系列データとして蓄積、分析することにより、機器の異常検知 [1], [2] や品質管理 [3] 等、あらゆる側面から生産性を向上する取り組みが行われている。これらの取り組みに共通する重要な課題は、収集した大規模データからの効果的な知見獲得と、それに基づく将来予測技術の開発である。

特に、製造工場から得られる時系列データは複数のドメイン（設備、センサ、時間等）を持つ複雑なデータであり、複数の作業工程（パターン）の時間遷移や複数ラインでの並列作業によって生まれる作業ラインごとに共通/相違なパターンなど多角的な特徴を持つことが多い。

加えて、スマート工場で想定されるタスクでは、故障や不具合、加工精度の低下等、各イベントの発生を事前に把握することで、対策の選択肢が広がる。つまり、大規模センサデータの将来予測技術は、より長期的な予測能力を有することが望ましい [4]。

本論文では、大規模時系列センサデータのためのイベント予測手法である SplitCast について述べる。SplitCast は、時系列データに含まれる典型的なパターン（本研究では、“レジーム”と呼ぶ）の数と変化点を多角的にとらえ、システムの稼働状況を正確に把握することで、将来発生するイベントを予測する。

2. 問題定義

本研究で扱う工場設備センサデータは、(facility, sensor, time)の三つ組で表現され、それぞれ、 w 個の設備、 d 種のセンサ、 n の期間（5 秒単位）からなる。このセンサデータは、3 階のテンソル $X \in \mathbb{R}^{w \times d \times n}$ として表現することができ X の要素 $x_{ij}(t)$ は時刻 t における i 番目の設備の j 番目のセンサで

の計測値を示す。本論文では、このセンサデータを多次元時系列テンソルと呼ぶ。本研究の最終目的は、与えられた時系列テンソル X から l_s ステップ先の設備アラートを予測することであり、取り組む問題を以下のように定義する。

問題 1: 時系列テンソル $X(t_s: t_e)$ が与えられたとき、 l_s ステップ先のアラートラベル $Y(t_e + l_s)$ を次式に基づいて予測する。

$$Y(t_e + l_s) \approx F(X(t_s: t_e)) \quad (1)$$

ここで、 $(t_s: t_e)$ は予測に使用するシーケンスのウィンドウを表し、 F を提案モデルとする。

3. 提案モデル

提案モデルは次の 3 つの能力を有する。各章において、それぞれの概要と必要な定義について述べる。

3.1 (P1) 潜在的な動的パターンの多角的な検出

多次元時系列テンソル X が与えられたとき、提案手法はまず、 X を m 個のセグメント集合 $S = \{s_1, \dots, s_m\}$ に分割してその特徴をとらえる。 S_i は i 番目のセグメントの開始点 t_s 、終了点 t_e 、設備番号で構成され（つまり、 $s_i = \{t_s, t_e, facilityID\}$ ）、各セグメントは重複がないものとする。そして、発見したセグメント集合を類似セグメントのグループに分類する。本論文ではこれらのグループをレジームと呼ぶ。

定義 1 (レジーム) r を最適なセグメントグループの個数とする。それぞれのセグメント s はセグメントグループの 1 つに割り当てられる。

さらに、各セグメントが所属するレジームを表現するため、新たにセグメントメンバシップを定義する。

定義 2 (セグメントメンバシップ) 多次元時系列テンソル X が与えられたとき、 $F = \{f_1, \dots, f_m\}$ を、 m 個の整数列とし、 f_i を i 番目のセグメントが所属する

レジームの番号とする ($1 \leq f_i \leq m$)。

これにより、多次元時系列テンソルを m 個のセグメントと r 個のレジームで $\{m, r, S, \Theta, F\}$ として表現することができる。次に提案手法は、得られたレジーム情報に基づき、多次元時系列テンソルを統計モデル化し重要な特徴を抽出する。

3.2 (P2) 動的パターンに基づく特徴抽出

それぞれのレジームは統計モデル $\Theta = \{\theta_1, \dots, \theta_r, \Delta_{r \times r}\}$ として表現される。本研究では、多次元時系列テンソルの振舞いを表現するため、隠れマルコフモデル(HMM : Hidden Markov Model)を用いる。HMM は隠れ状態を持つマルコフ過程を仮定した確率モデルの 1 種であり、音声認識を含む様々な分野において、時系列処理手法として広く利用されている。HMM は初期確率 $\pi = \{\pi_i\}_{i=1}^k$ 遷移確率 $A = \{a_{ij}\}_{i,j=1}^k$ 、出力確率 $B = \{b_i(x)\}_{i=1}^k$ 三つ組で表現される(すなわち、 $\theta = \{\pi, A, B\}$)。ここで、 k は HMM の潜在状態数を示す。本論文では出力確率 B が多次元ガウス分布から生成されるものとする。HMM のモデルパラメータ $\theta = \{\pi, A, B\}$ と、入力データとしてあるユーザのシーケンス X が与えられたとき、 X の尤度 $P(X|\theta)$ は次のように計算される:

$$P(X|\theta) = \max_{1 \leq i \leq k} \{p_i(n)\}$$

$$p_i(t) \begin{cases} \pi \cdot b_i(x_1) & (t = 1) \\ \max_{1 \leq i \leq k} \{p_j(t-1) \cdot a_{ji}\} \cdot b_i(x_t) & (2 \leq t \leq n) \end{cases}$$

ここで、 $p_i(t)$ は時刻 t における潜在状態 i の最大確率を示し、 n は X のシーケンス長である。この尤度は動的計画法の 1 種であるビタビアルゴリズム [5] を用いて計算される。ここでさらに、新たな概念としてレジーム遷移行列 $\Delta_{r \times r}$ を導入する。

定義 3 (レジーム遷移行列) $\Delta_{r \times r}$ を r 個のレジーム群の遷移行列と呼ぶ。ここで、要素 $\delta_{ij} \in \Delta$ は i 番目のレジームから j 番目のレジームへの遷移確率を示す。すなわち、 $0 \leq \delta_{ij} \leq 1$ 、 $\sum_j \delta_{ij} = 1$ という条件を持つ。

上記のモデルを用いて、多次元時系列テンソル X を、以下に示す HMM の潜在状態系列 Z とモデル化した際の誤差 E で要約し、特徴量化することで、

高精度かつ長期的な予測を実現する。

定義 4 (潜在状態テンソル) 各設備ごとの HMM の潜在状態系列 $Z = \{Z_1, \dots, Z_w\}$ を潜在状態テンソルと呼ぶ。ここで、 $Z_i = \{z_{ij}(1), \dots, z_{ij}(n)\}_{j=1}^d$ であり、 $z_{ij}(t)$ は自身と同じ潜在状態に属するデータ集合 x の平均と分散の組 $\{\mu, \sigma\}$ で構成される。

定義 5 (誤差テンソル) 多次元時系列テンソル X を潜在状態テンソル Z でモデル化した際の誤差 $E = \{E_1, \dots, E_w\}$ を誤差テンソルと呼ぶ。

3.3 (P3) ls ステップ先の長期予測

上述の定義を用いて、式(1) は、

$$Y(t_e + l_s) \approx F(\{Z(t_e:t_e), E(t_s:t_e)\}) \quad (2)$$

と表現できる。ここで F は予測モデルを表す。すなわち、時系列テンソル X が与えられたとき、提案手法は X を潜在状態テンソル Z と誤差テンソル E で要約することで重要な特徴を抽出し、それらに提案モデル F を適用することで l_s ステップ先の長期的な予測を行う。

4. アルゴリズム

問題 1 を解決するためのアルゴリズムについて説明を行う。ここで問題となるのは、どのようにレジームやセグメントの数を決定するかである。提案手法は、最小記述長(MDL : Minimum Description Length)の概念に基づき、適切なモデルを生成するための基準となる符号化スキームを導入する。

$$\text{Cost}_T(X; M) = \text{Cost}_M(M) + \alpha \cdot \text{Cost}_C(X|M) \quad (3)$$

ここで、 $\text{Cost}_M(M)$ はモデル M を表現するためのモデルコストを示し、 $\text{Cost}_C(X|M)$ は M が与えられたときのテンソル X の符号化コストを示す。 α は符号化コストに対する重みであり、 α の値が大きいほどより実データに正確なモデルを生成する(すなわち、セグメントの数 m 、レジームの数 r が大きくなる)。

提案手法である SplitCast は、次のアルゴリズムで構成される。

- RegimeGeneration (P1) : テンソル X に含まれる時系列パターンの種類と変化点を検出する。各時系列パターンのダイナミクスをモデルパラメータ Θ として表現し、モデルパラメータ集合 $\{m, r, S, \Theta, F\}$ を

得る。

- FeatureExtraction (P2) : 時系列パターンの要約情報 $\{m, r, S, \theta, F\}$ を用いて、オリジナルテンソル X を潜在状態テンソル Z と誤差テンソル E で表現する。
- SplitCast (P3) : $\{Z, E\}$ のうち、あるウィンドウ $t_s: t_e$ の部分テンソル $\{Z(t_s: t_e), E(t_s: t_e)\}$ から故障の予兆となる特徴を抽出し、 l_s 先の故障ラベル $Y(t_s: t_e)$ を予測する。

4.1 RegimeGeneration (P1)

本研究では、与えられた時系列テンソルの根底にある構造を簡潔に要約した、多角的なパターン発見とグループ化を同時に行う。ここで、時系列テンソルの多角的解析のためのアルゴリズムである V-Split と H-Split を提案する。V-Split は時間方向の観点からレジームを推定し、H-Split は設備ごとの特性をレジームとして表現する。これら 2 つのアルゴリズムを任意方向に行うことで効率的かつ効果的に重要なパターンを多角的に発見しレジームとして要約する。具体的には、式(3)に基づき、以下の 2 つのアルゴリズムを繰り返す。

- V-Split : テンソル X から時間遷移するパターンとその変化点を検出し 2 つのグループ（すなわちレジーム）に分割する。それら 2 つのレジームに対し、モデルパラメータ $\{\theta_1, \theta_2, \Delta\}$ を推定する。
- H-Split : テンソル X に表れるある 1 つのレジームから設備ごとの特徴を抽出し、2 つのレジームに分割後、それらのレジームのモデルパラメータを推定する。

上記のアルゴリズムにより、 $r = 1, 2, \dots$ とレジーム数が変化していく。もしレジーム θ_0 を 2 つのレジーム $\{\theta_1, \theta_2\}$ に分割した際、コスト関数（式 (3)）の値が大きくなれば θ_0 は最適と見なし、これ以上分割しない。生成されたすべてのレジームについて同様にコスト計算を繰り返し、コストが下がらなくなるまで上記の分割アルゴリズムを繰り返す。最終的に、コストが収束したときのセグメント、レジーム、モデルパラメータ $\{m, r, S, \theta, F\}$ を出力し、RegimeGeneration を終了する。

4.2 FeatureExtraction (P2)

時系列テンソル X とモデルパラメータ集合 $\{m, r, S, \theta, F\}$ が与えられたとき、 X を時系列パターンに基づく潜在状態テンソル Z とモデル化した際の誤差テンソル E に分割する。今、 r 個のレジーム集合 $\theta = \{\theta_1, \dots, \theta_r\}$ が与えられたとすると、各時刻 t における、設備 i のデータ $x_i(t) = \{x_{ij}(t)\}_{j=1}^d$ は θ 内のレジームのいずれかの状態 $z_i(t)$ に変換される。ここで、 $z_i(t)$ は自身と同じ状態に属する全データポイントの平均と分散の組 $\{\mu, \sigma\}$ を示す。つまり、潜在状態テンソルの次元は $Z \in \mathbb{R}^{w \times 2d \times n}$ となる。続いて、 θ が与えられたときの、時刻 t における設備 i のセンサ j の計測値 $x_{ij}(t) \in X$ の符号化誤差を事後確率 $p(x_{ij}(t) | \theta)$ で表現する。すなわち、 X 全体の符号化誤差は $E \in \mathbb{R}^{w \times d \times n}$ である。最終的に、2 つの特徴を結合した系列 $X' = \mathbb{R}^{w \times 3d \times n}$ を出力する。以上の処理により、入力データの情報を失うことなく、学習モデル推定の際に時系列方向の潜在的な振舞いを考慮することができる。

4.3 SplitCast (P3)

確率モデルに基づく特徴抽出手法と深層学習手法を組み合わせ、実データから抽出された特徴的な時系列パターンを学習することで、より小さなネットワークで学習でき、過学習の問題を軽減しながら効率的かつ効果的なラベル予測を実現する。具体的には、テンソル $X' = \{Z, E\}$ の時間発展の様子をモデル化し、特徴ベクトル h_t を得るために、Long-short term memory (LSTM) [6] を適用する。また、本研究では、時刻 t における最新の部分シーケンスからの l_s 先故障予測を 2 クラス分類タスクとして扱い、出力を時刻 $t + l_s$ における故障発生確率とする。したがって、SplitCast の最終的な出力は、

$$y_{t+l_s} = \text{sigmoid}(W^y h_t + b^y)$$

となる。

5. 評価実験

5.1 提案手法の有効性

図 1 は、スマート工場データにおける SplitCast の出力結果を示している。図 1(a)はオリジナルのセン

サデータを示しており、5つの設備における3つのセンサ値（回転速度、稼働電圧、設備温度）で構成される。黒矩形で塗られた箇所は対応する設備が非常停止中であることを示す。図1(b)はSplitCastによるオリジナルデータからのパターン検出結果である。図中の縦線は時系列パターンが変化した時刻を示し、同一レジームに属するセグメントは同一色で塗られている。提案手法は、複数の設備から得られた時系列データを同時に解析することにより、多角的なパターン、すなわち、各設備内のパターンの時間遷移だけでなく、設備間で共通、あるいは相違なパターンを検出することが可能である。図1(c)に、オリジナルデータの中から、 $l_s = 200$ ステップ（約17分）後に非常停止した場合とそうでない場合の典型的な例を図示した。各図の左はセグメンテーション結果を示す。右の $\theta_1 \sim \theta_5$ はそれぞれ共通の時系列パターン（すなわちレジーム）を表し、それらの遷移の様子を可視化したものである。 p_{200} の値は、左図にある部分シーケンスとそのパターン検出結果が与えられたとき、提案手法が出力した200ステップ先での非常停止確率である。右図において、より多くの遷移が検出されたレジーム間には太い矢印が表示される。また、円の大きさはレジームの発生期間の大きさを示す。図1(c-ii)を見ると、設備が非常停止する前に回転速度が上昇(θ_5)しており、その傾向はレジーム θ_4 、 θ_5 の遷移が現れることによって表現されている。実際に、提案手法は非常停止を正確に予測し、 p_{200} が高い値を示している。つまり、データに含まれる潜在的なパターンを検出することで、非常停止に至る過程を多角的に分析できるだけでなく、それらの要約情報を用いることで長期的かつ高精度な予測が可能となる。

5.2 提案手法の予測精度

次に、与えられた時系列テンソルに対する提案手法の故障予測精度について検証する。比較手法には、一般的な2値予測モデルであるロジスティック回帰(LR: Logistic regression)[7]と再帰型ニューラルネットワークモデルであるRNN(Recurrent neural network)、

GRU(Gated recurrent unit)、LSTMと比較した。評価指標にはAccuracyを使用し、5分割交差検証を行った際の平均値を比較する。使用したデータセットは、三菱重工エンジン&ターボチャージャ株式会社で2017年10月から3ヶ月間実際に稼働し、ペアリング・ハウジング加工を行っていた55の工場設備に取り付けられた、回転速度(Speed)、稼働電圧(Load)、設備温度(Temp)の3つのセンサによって5秒間隔で取得されたものである。スライディングウインドウで学習用サンプルを生成しており、設備自体が稼働していないときのサンプルは省いている。正常稼働時のサンプル数が62、983、非常停止前のサンプル数が1069あり、学習に偏りが生じるため、非常停止時のサンプル数に正常稼働時のサンプル数を揃え、結果として 1069×2 サンプルを用い実験を行った。

図2は予測先のステップ数 $1s$ を変化させたときの精度の比較である。比較手法は、ランダムに予測した場合と同程度(Accuracy = 0.5)の予測精度を示す一方で、SplitCastはいずれの条件下でも優れた性能を示している。この結果から、非常停止の要因は温度の上昇や稼働電圧の低下といった単純なものではなく、非線形性を有する複雑な事象だと考えられる。提案手法は実データに含まれる時系列パターンを考慮して各時刻のダイナミクスをとらえることができるため、他の再帰型モデルと比べて効果的に非常停止の要因を抽出することに成功した。図3は、ネットワーク学習時に使用するミニバッチのウインドウ幅を変化させたときの予測精度の比較である。提案手法は、異なるウインドウ幅のデータに対しても安定して高い性能を示している。

6. おわりに

本研究では大規模 IoT センサデータのための予測アルゴリズムとして SplitCast を提案した。SplitCastは、与えられた時系列テンソルに含まれる特徴的なパターンやその変化点を多面的に抽出し、レジームとして要約することで、長期的な故障予測を実現する工場設備で得られた実データを用いて実

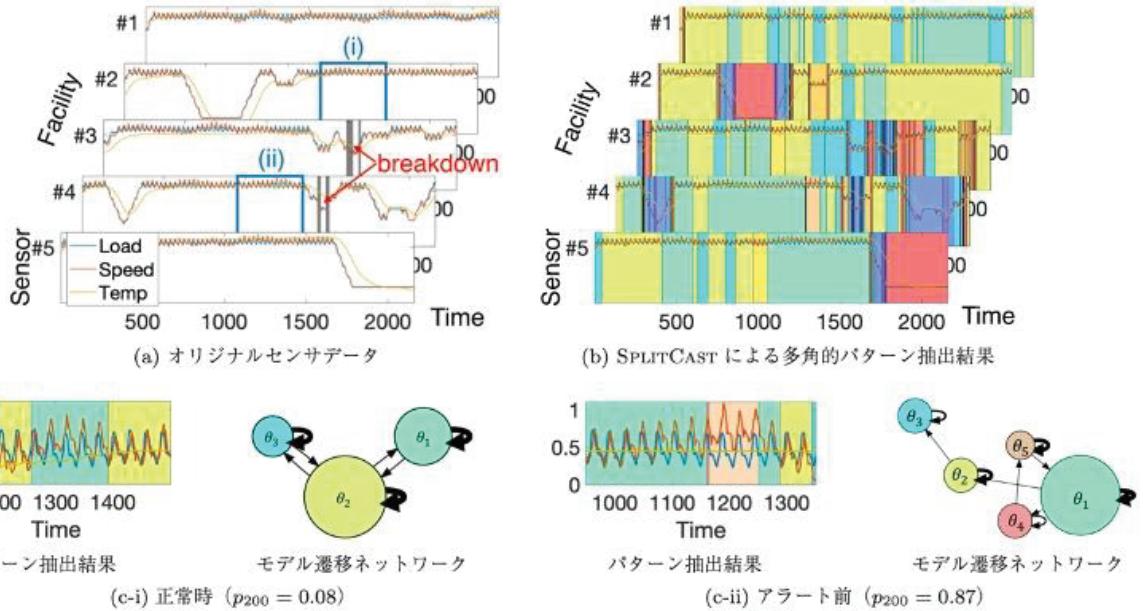


図1 工場設備センサデータに対するSplitCastの出力結果

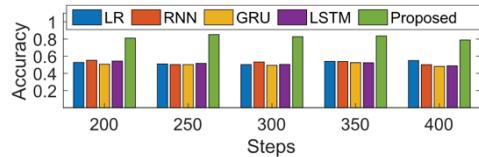


図2 予測先のステップ数ごとの予測精度

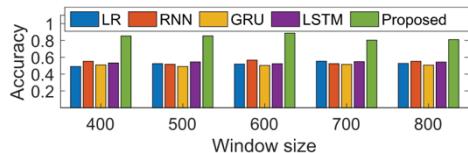


図3 入力ウインドウサイズごとの予測精度

験を行い、SplitCast が複雑な時系列パターンを適切にモデル化し、長期的な故障予測を高精度に行うことを見た。また、既存手法と比較して大幅な精度と性能の向上を達成していることを示した。提案手法から得られる、高精度の異常予測とその要因分析によって、工場稼働率の向上や設備保全などの実社会での応用が期待できる。

参考文献

- [1] Sakurai, Y., Papadimitriou, S. and Faloutsos, C.: Braid: Stream mining through group lag correlations, SIGMOD, pp.599–610 (2005).

[2] Zhou, Y., Zou, H., Arghandeh, R., Gu, W. and Spanos, C.J.: Non-parametric outliers detection in multiple time series A case study: Power grid data analysis, AAAI (2018).

[3] Li, Y., Wang, J., Ye, J. and Reddy, C.K.: A multitask learning formulation for survival analysis, KDD, pp.1715–1724 (2016).

[4] Matsubara, Y. and Sakurai, Y.: Regime shifts in streams: Real-time forecasting of co-evolving time sequences, KDD (2016).

[5] Forney, G.D.: The viterbi algorithm, Proc. IEEE, pp.268–278 (1973).

[6] Hochreiter, S. and Schmidhuber, J.: Long short-term memory, Neural Comput., Vol.9, No.8, pp.1735–1780 (Nov. 1997).

[7] Bishop, C.M.: Pattern Recognition and Machine Learning (Information Science and Statistics), Springer (2006).

センター報告

・ 2020 年度大規模計算機システム利用による研究成果・論文一覧	83
・ 第 26 回スーパーコンピューティングコンテスト(SuperCon2020)報告および 第 27 回スーパーコンピューティングコンテスト(SuperCon2021)告知	95
・ 大規模計算機システム利用者講習会等の紹介	97
・ 2021 年度大規模計算機システム利用講習会	99
・ 2020 年度大規模計算機システム利用講習会アンケート集計結果	100
・ 2021 年度「HPCI(High Performance Computing Infrastructure)利用」の活動状況	108
・ 2021 年度「学際大規模情報基盤共同利用・共同研究拠点」の活動状況	109
・ 2020 年度大規模計算機システム公募型利用制度（追加募集）の活動状況	110
・ 2021 年度大規模計算機システム公募型利用制度の活動状況	111
・ 大規模計算機システム Q&A	112

2020 年度大規模計算機システム利用による研究成果・論文一覧

この一覧は、本センター大規模計算機システムを利用して 2020 年 4 月から 2021 年 3 月までに得られた研究成果について、利用者から報告されたものを掲載しています。

1. 学術雑誌掲載論文

- [1] Chun-Chieh Yu, Kuo-Yang Chiang, Masanari Okuno, Takakazu Seki, Tatsuhiko Ohto, Xiaoqing Yu, Vitaly Korepanov, Hiro-o Hamaguchi, Mischa Bonn, Johannes Hunger, and Yuki Nagata, “Vibrational couplings and energy transfer pathways of water’s bending mode”, *Nat. Commun.*, 11, 5977, 2020.
- [2] Jingzhao Xia, Takahiro Hirai, Shoichiro Katayama, Haruki Nagae, Wanbin Zhang, and Kazushi Mashima , “Mechanistic Study on Bimetallic Dual Catalyst for Asymmetric C—C Fond Formation; Asymmetric Coupling of 1, 3-Dienes with C-nucleophiles to Construct Vicinal Stereocenters Mediated by Ni/Cu Dual Catalysis”.
- [3] Yasushi Nishida, Katsuhiro Honda, “Visualization of Potential Technical Solutions by SOM and Co-clustering and Its Extension to Multi-view Situation”, *Journal of Advanced Computational Intelligence and Intelligent Informatics (JACIII)*, Vol.24, No.1, pp.65-72, 2020.
- [4] Yasushi Nishida, Katsuhiro Honda, “SOM-Based Visualization of Potential Technical Solutions with Fuzzy Bag-of-Words Utilizing Multi-view Information”, Proc. of 8th International Symposium on Integrated Uncertainty in Knowledge Modelling and Decision Making, Phuket, Thailand, [online], pp.187-198, 2020.
- [5] Y. Ueki, H. Murashima, M. Shibahara, “Molecular dynamic study of evaporation in nanoslit: Influence of slit geometry and wettability”, *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 163, 2020.
- [6] Fujii, K. Fujiwara, Y. Ueki, M. Shibahara, “Molecular dynamics simulation on effects of nanostructure on interfacial thermal resistance during condensation”, *Journal of Thermal Science and Technology*, 15, 2020.
- [7] Sadataka Furui and Serge Dos Santos, “Application of Quaternion Neural Networks to Time Reversal Based Nonlinear Elastic Wave Spectroscopy ”, arXiv:2010.09487 (v5) [physics.gen-ph].
- [8] Yoshiyuki Miyamoto, “Selecting Carbon Nanotubes with Diameters of Less than 1 nm by Laser Pulses: An Ab Initio Exploration”, *Nano Letters*, 20, 4416-4421 (2020), March. 2021.
- [9] Yoshiyuki Miyamoto, “Polarization as a new parameter determining the laser-induced dynamics of carbon nanotubes studied by ab initio simulations”, *Carbon*, 172, 372-378 (2020), Oct. 2020.
- [10] Yoshiyuki Miyamoto, Hitomi Nakamura and Tomoko Akai, “Franck-Condon relaxation in photo-excited YAG:Ce studied using real-time time-dependent density functional theory”, *Journal of Luminescence*, Vol. 229, 117647 (2021), Jan. 2021.
- [11] Akio Ishii, “Energetics of heterogeneous Mg{10-12} deformation twinning migration using an atomistically informed phase-field model”, *Comput. Mater. Sci.*, 183, 109907, 2020.
- [12] Firdaus Mohamad, Takeo Kajishima, “Large-eddy simulation of unsteady pitching aerofoil using a one-equation subgrid scale (SGS) model based on dynamic procedure”, *Journal of Mechanical Engineering*, Vol.18, No.1, pp.157-173, Jan. 2021.
- [13] D. Nakamura, R. Tasaki, M. Kawamoto, H. Oshima, M. Higashihara, H. Ikenoue, T. Wakayama, A. Sunahara, and T. Higashiguchi, “Silicon twisted cone structure produced by optical vortex pulse with structure evaluation by radiation hydrodynamic simulation”, *Scientific reports*, 10, (2020) 20512.
- [14] E. Miura, Y. Mori, K. Ishii, S. Sakata, Y. Abe, Y. Arikawa, N. Nakajima, R. Takizawa, H. Moerita, K. Matuso, S. R. Miffayzi, A. Sunahara, T. Ozaki, A. Iwamoto, O. Komeda, R. Hanayama, S. Okishara, Y. Sentoku, S. Fujioka, H. Sakagami, T. Johzaki, Y. Kitagawa, “Verification of fast heating of core plasmas produced by counter-illumination of implosion lasers”, *High Energy Density Physics of Physics*, D 37 , 100890, 2020.

- [15] Kunichika Tsumoto, Takashi Ashihara, Narumi Naito, Takao Shimamoto, Akira Amano, Yasutaka Kurata, Yoshihisa Kurachi, “Specific decreasing of Na⁺ channel expression on the lateral membrane of cardiomyocytes causes fatal arrhythmias in Brugada syndrome”. *Scientific Reports*, 17;10(1):19964. doi: 10.1038/s41598-020-76681-3, 2020 Nov.
- [16] 山崎龍朗, 小田豊, 松本亮介, 香月正司, “脈動を伴う平行平板間乱流熱伝達のDNS”, 日本機械学会論文集, Vol. 86, No. 884, p. 19-00197, Apr. 2020.
- [17] T. Yamazaki, Y. Oda, R. Matsumoto and M. Katsuki, “Effect of thermal wall condition on the dissimilarity of momentum and heat transfer in pulsating channel flow”, *Journal of Thermal Science and Technology*, Vol. 15, No. 2, p. JTST0017, Aug. 2020.
- [18] Suzuki, S.; Yamaguchi, D.; Uchida, Y.; Naota, T, “Hysteretic Control of Near-infrared Transparency Using a Liquescent Radical Cation”, *Angew. Chem., Int. Ed.*, 60, 8284-8288., (DOI: 10.1002/anie.202016930), 2021.
- [19] Takashi Ohta, Daiki Eguchi and Akihiro Hayashi, “Calibration and evaluation of a spatial scaling method for the near-wall turbulent flow of viscoelastic fluids”, *Journal of Turbulence*, Vol.21, No.11, pp.607-631, Sep. 2020.
- [20] Takashi Ohta, Takafumi Ichiyanagi and Taisei Tanaka, “Direct numerical simulation of solidifying liquid turbulence using the phase-field model”, *Mechanical Engineering Letters*, Vol.6, pp.20-00327, Nov. 2020.
- [21] T. Fujimaki, M. Suzuki, and S. Kakio, “Analysis of leaky surface acoustic waves on quartz thin plates bonded to similar-material substrate”, *Jpn. J. Appl. Phys*, vol. 60, no. SD, pp. SDDC04-1-6, 2021.
- [22] 西田修三, 山西悟志, 中谷祐介, 入江政安, “高閉鎖性海域の水質底質特性と発電所取放水の影響解析”, 土木学会論文集B2 (海岸工学, 76(2), I_913-I_918, 2020.
- [23] 中谷祐介, 戸村祐希, 西田修三, “非構造格子モデルを用いた瀬戸内海 - 太平洋領域における外洋水の挙動解析”, 土木学会論文集B2 (海岸工学) , 76(2), I_997-I_1002, 2020.
- [24] T. Hiejima, “Helicity effects on inviscid instability in Batchelor vortices”, *Journal of Fluid Mechanics*, 897 [8], A37, 28 pages, 2020.
- [25] T. Hiejima, “How the circulation and axial velocity deficit in Batchelor vortices affect their disturbance growth?”, *Physics of Fluids*, 32 [7], 76107, 8 pages, 2020.
- [26] K. Iwano, T. Yamaguchi, and H. Okamoto*, “Ultrabosonic behavior in photoexcited one-dimensional Mott insulators in the region of weak inter-site Coulombic interaction”, *Physical Review B*, 102, 245114, 2020.
- [27] T. Yamaguchi, K. Iwano, T. Miyamoto*, N. Takamura*, N. Kida*, Y. Takahashi**, T. Hasegawa*, and H. Okamoto*, “Excitonic optical spectra and energy structures in a one-dimensional Mott insulator demonstrated by applying a many-body Wannier functions method to a charge model”, *Physical Review B*, 103, 45124, 2021.
- [28] Ryu Ezaki, Yasuhiro Mizutani, Naoki Ura, Tsutomu Uenohara, Yoshihiko Makiura, Yasuhiro Takaya, “Fabrication of three-dimensional high-aspect-ratio structures by oblique-incidence Talbot lithography”, *Optics Express*, Vol.28, No.24, 36924-36935, 2020.
- [29] Hajime Yoshino, *SciPost Phys. Core*, 2, 005, 2020.
- [30] T. Yamamura, “Numerical analysis on a conical shaped target for laser fusion rocket”, *High Energy Density Physics*, 37, 100894, 2020.
- [31] Huan Li, Shohei Sakata, Tomoyuki Johzaki, Xiaobin Tang, Kazuki Matsuo, Seungho Lee, King Fai Farley Law, Yasunobu Arikawa, Yugo Ochiai, Chang Liu, Jo Nishibata, Ryunosuke Takizawa, Hiroki Morita, Hiroshi Azechi, Yasuhiro Sentoku, Shinsuke Fujioka, “Enhanced relativistic electron beams intensity with self-generated resistive magnetic field”, *High Energy Density Physics*, Volume 36, 2020.
- [32] S. Lee, D. Kawahito, N. Iwata, Y. Sentoku, K.F.F. Law, S. Sakata, H. Morita, K. Matsuo, Y. Arikawa, K. Shigemori, T. Sano, H. Nagatomo, K. Mima, H. Azechi, R. Kodama, S. Fujioka, “Two-color laser-plasma interactions for efficient production of non-thermal hot electrons”, *High Energy Density Physics*, Volume 36, 2020.
- [33] K. F. F. Law, Y. Abe, A. Morace, Y. Arikawa, S. Sakata, S. Lee, K. Matsuo, H. Morita, Y. Ochiai, C. Liu, A. Yogo, K. Okamoto, D. Golovin, M. Ehret, T. Ozaki, M. Nakai, Y. Sentoku, J. J. Santos, E.

- d'Humières, Ph. Korneev, and S. Fujioka, "Relativistic magnetic reconnection in laser laboratory for testing an emission mechanism of hard-state black hole system", *Phys. Rev. E*, 102, 33202, 2020.
- [34] Hagita, K.; Murashima, "Hagita, K.; Murashima, T. Effect of Chain-Penetration on Ring Shape for Mixtures of Rings and Linear Polymers", *Polymer* 2021, 218, 123493.
- [35] Hagita, K.; Murashima, "T. Multi-Ring Configurations and Penetration of Linear Chains into Rings on Bonded Ring Systems and Polycatenanes in Linear Chain Matrices", *Polymer* 2021, 123705. (in press).
- [36] Y. Gao and S. Okada, "Edge Morphology effect on field emission properties of graphene thin films", *Carbon*, 157, 33-39, 2020.
- [37] K. Hisama, S. Chiashi, S. Maruyama, and S. Okada, "Energetics and electronic structures of single walled carbon nanotubes encapsulated in boron nitride nanotubes", *Applied Physics Express*, 13, 015004, 2020.
- [38] M. Maruyama and S. Okada, "Asymptotic behaviors of the energetics and electronic structures of graphene with pyridinic defects", *Chemical Physics Letters*, 739, 136966, 2020.
- [39] K. Yoneyama, M. Maruyama, Y. Gao, and S. Okada, "Mechanical properties of carbon nanotube under uniaxial tensile strain", *Japanese Journal of Applied Physics*, 59, SIID02, 2020.
- [40] Y. Gao and S. Okada, "Structural effects on carrier doping in carbon nanotube thin-film transistors", *Journal of Applied Physics*, 127, 134301, 2020.
- [41] Y. Gao, M. Maruyama, and S. Okada, "Influence of interlayer stacking arrangements on carrier accumulation in bilayer graphene field effect transistors", *Applied Physics Express*, 13, 65006, 2020.
- [42] M. Maruyama, K. Nagashio, and S. Okada, "Influence of interlayer stacking on gate-induced carrier accumulation in a bilayer MoS₂", *ACS Applied Electronic Materials*, 2, 1352–1357, 2020.
- [43] S. Okada, M. Maruyama, and Y. Gao, "Asymmetric Carrier Penetration into Hexagonal Boron Nitride in Graphene Field Effect Transistor", *Applied Physics Express*, 13, 75005, 2020.
- [44] H. Tomori, M. Maruyama, and S. Okada, "Electronic structure of graphene under uniaxial tensile strain", *Japanese Journal of Applied Physics*, 59, 75002, 2020.
- [45] M. Maruyama, Kosuke Nagashio, and S. Okada, "Carrier distribution control in van der Waals heterostructures of MoS₂ and WS₂ by field-induced band-edge engineering", *Physical Review Applied*, 14, 44028, 2020.
- [46] T. Kawata and T. Tsukahara, "Scale interactions in turbulent plane Couette flows in minimal domains", *Journal of Fluid Mechanics*, Vol. 911, A55, Feb. 2021.
- [47] H. Morimatsu and T. Tsukahara, "Laminar-turbulent intermittency in annular Couette-Poiseuille flow: Whether a puff splits or not", *Entropy*, Vol. 22, Issue 12, 1353, Nov. 2020.
- [48] K. Takeda, Y. Duguet, and T. Tsukahara, "Intermittency and critical scaling in annular Couette flow", *Entropy*, Vol. 22, Issue 9, 988, Sep. 2020.
- [49] S. Fujimura, K. Yamamoto, M. Motosuke, and T. Tsukahara, "Numerical study of thermocapillary-driven flow of a micro bubble on locally heated wall", *Heat Transfer Research*, Vol. 51, No. 12, 1087-1104, Aug. 2020.
- [50] T. Shimazaki, A. Yamamoto, "t Hooft surface in lattice gauge theory", *Phys. Rev. D*, 102, 34517, 2020.
- [51] K. Iwano, T. Yamaguchi, and H. Okamoto, "Ultrabosonic behavior in photoexcited one-dimensional Mott insulators in the region of weak intersite Coulombic interactio", *Physical Review B*, 102, 245114, 2020.
- [52] T. Yamaguchi, K. Iwano, T. Miyamoto, N. Takamura, N. Kida, Y. Takahashi, T. Hasegawa, and H. Okamoto, "Excitoic optical spectra and energy structures in a one-dimensional Mott insulator demonstrated by applying a many-body Wannier fucntions method to a charge model", *Physical Review B*, 103, 045124, 2021.
- [53] Etsuko Itou^{1, 2, 3} and Yuki Nagai^{4, 5}, "Sparse modeling approach to obtaining the shear viscosity from smeared correlation functions", *Journal of High Energy Physics*, 07, 007, 2020.
- [54] Takuya Furusawa^{1, 2}, Yuya Tanizaki³, and Etsuko Itou^{4, 5, 6}, "Finite-density massless two-color QCD at the isospin Roberge-Weiss point and the 't Hooft anomaly", *Physical Review Research*, 2,

- 033253, 2020.
- [55] Toshiaki Fujimori¹, Etsuko Itou^{1, 2, 3}, Tatsuhiro Misumi^{1, 4}, Muneto Nitta¹, and Norisuke Sakai¹, “Lattice CPN–1 model with $\mathbb{Z} N$ twisted boundary condition: bions, adiabatic continuity and pseudo-entropy”, *Journal of High Energy Physics*, 08, 011, 2020.
- [56] Kei Iida¹, Etsuko Itou^{1, 2, 3}, and Tong-Gyu Lee^{1, 4}, “Relative scale setting for two-color QCD with $N_f=2$ Wilson fermions”, *Progress of Theoretical and Experimental Physics*, 2021, 013B05, 2021.
- [57] Hiroaki Kouno, Takehiro Hirakida, “The persistent homology analyses in particle and nuclear physics”, *Reports of the Faculty of Science and Engineering, Saga University*, Vol. 49, No.1, pp.1~5, 2020.
- [58] Masayasu Hasegawa, “Monopole and instanton effects in QCD”, *J. High Energ. Phys.*, 2020, 113, 2020.
- [59] Nodoka Yamanaka, Hideaki Iida, Atsushi Nakamura, Masayuki Wakayama, “Dark matter scattering cross section and dynamics in dark Yang-Mills theory”, *Physics Letters B*, 813, 136056, 2021.
- [60] Nodoka Yamanaka, Hideaki Iida, Atsushi Nakamura, Masayuki Wakayama, “Glueball scattering cross section in lattice SU(2) Yang-Mills theory”, *Physical Review D*, 102, 054507, 2020.
- [61] Hiroki Ohata and Hideo Suganuma, “Gluonic-excitation energies and Abelian dominance in SU(3) QCD”, *Physical Review D*.
- [62] Hiroki Ohata and Hideo Suganuma, “Clear correlation between monopoles and the chiral condensate in SU(3) QCD”, *Physical Review D*.
- [63] Sibo Wang, Qiang Zhao, Peter Ring, and Jie Meng, “Nuclear matter in relativistic Brueckner-Hartree-Fock theory with Bonn potential in the full Dirac space”, arXiv:2103.12960, 2021.
- [64] J. Hu, S. Bao, Y. Zhang, K. Nakazato, K. Sumiyoshi and H. Shen, “Effects of symmetry energy on the radius and tidal deformability of neutron stars”, *Progress of Theoretical and Experimental Physics*, 043D01, 20 pages, 2020.
- [65] C. Nagele, H. Umeda, K. Takahashi, T. Yoshida and K. Sumiyoshi, “The final fate of supermassive $M \sim 5 \times 10^4 M_{\odot}$ Pop III stars: explosion or collapse?” *Monthly Notices of the Royal Astronomical Society*, 296, 1224-1231, 2020.
- [66] Harada, H. Nagakura, W. Iwakami, H. Okawa, S. Furusawa, K. Sumiyoshi, H. Matsufuru and S. Yamada, “The Boltzmann-radiation-hydrodynamics simulations of core-collapse supernovae with different equations of state: the role of the nuclear composition and the behavior of neutrinos”, *Astrophysical Journal*, 902, 150, 25 pages, 2020.
- [67] W. Iwakami, H. Okawa, H. Nagakura, A. Harada, S. Furusawa, K. Sumiyoshi, H. Matsufuru and S. Yamada, “Simulations of the early post-bounce phase of core-collapse supernovae in three-dimensional space with full boltzmann neutrino transport”, *Astrophysical Journal*, 903, 82, 24 pages, 2020.
- [68] Y. Suwa, A. Harada, K. Nakazato and K. Sumiyoshi, “Analytic solutions for neutrino-light curves of core-collapse supernovae”, *Progress of Theoretical and Experimental Physics*, 2021, 013E01, 12 pages, 2020.
- [69] K. Sumiyoshi, S. Fujibayashi, Y. Sekiguchi and M. Shibata, “Properties of neutrino transfer in a deformed remnant from neutron star merger”, *Astrophysical Journal*, 907, 92, 23 pages, 2021.
- [70] M. Mori, Y. Suwa, K. Nakazato, K. Sumiyoshi, M. Harada, Y. Koshio, R. A. Wendell and A. Harada, “Developing an end-to-end simulation framework of supernova neutrino detection”, *Progress of Theoretical and Experimental Physics*, 2021, 023E01, 21 pages, 2020.
- [71] R. Akaho, A. Harada, H. Nagakura, K. Sumiyoshi, W. Iwakami, H. Okawa, S. Furusawa, H. Matsufuru and S. Yamada, “Multi-dimensional Boltzmann neutrino transport code in full general relativity for core-collapse simulations”, *Astrophysical Journal*, 909, 210, 17 pages, 2021.
- [72] Hiraguchi, K.Ishiguro and T.Suzuki, “New Abelian-like monopoles and the dual Meissner effect”, *Phys.Rev. D*102, 114504-(1-9), 2020.
- [73] Begun, A. Nakamura, V.G. Bornyakov, V.A. Goy, R.N. Rogalyov, “Study of two color QCD on large lattices”, *Phys. Rev. D*.
- [74] M. Wakayama, S.-i. Nam and A. Hosaka, “Use of the canonical approach in effective models of QCD”, *PHYSICAL REVIEW D*, 102, 034035, 2020.

2. 国際会議会議録掲載論文

- [1] Haruka Taniguchi, Koichi Tsujimoto, Toshihiko Shakouchi, Toshitake Ando, Mamoru Takahashi, "DNS ANALYSIS OF MULTIPLE IMPINGING JETS UNDER OSCILLATION CONTROL", Proc. the 31th International Symposium on Transport Phenomena, 5p, Oct. 2020.
- [2] Kentaro Echigo, Koichi Tsujimoto, Toshihiko Shakouchi, Toshitake Ando, Mamoru Takahashi, "FLOW AND HEAT TRANSFER CHARACTERISTICS OF IMPINGING JETS EXCITED WITH BLOOMING CONTROL", Proc. the 31th International Symposium on Transport Phenomena, 5p, Oct. 2020.
- [3] K. Echigo, K. Tsujimoto, T. Shakouchi, T. Ando, M. Takahashi, "Direct numerical simulations of free jets emerging from a precessing nozzle", Proc. the 22nd Australasian Fluid Mechanics Conference, 4p.
- [4] Hiroki Kijima, Naitoh Ken, Tomotaka Kobayashi, Yuya Yamashita, "Spatial transition point from laminar flow to turbulence in a circular pipe with bellmouth inlet by solving a weakly-stochastic Navier-Stokes equation", AIAA Scitech 2021 Forum, Oct. 2020.
- [5] T. Fujimaki, M. Suzuki, and S. Kakio, "Analysis of leaky surface acoustic waves on quartz thin plates bonded to similar-material substrate", Proceedings of the 41st Symposium on Ultrasonics Electronics, 1Pa3-2, Nov. 2020.
- [6] Numerical simulation of intrusion behavior of oceanic water into the Seto Inland Sea, Japan, "Proc. the 30th Int. Ocean and Polar Eng. Conf", Vol.III, 2683-2688, 2020.
- [7] Y. Ogino, S. Nitta, S. Asai and T. Sano, "Development of weld quality monitoring technique by using a visual sensor and numerical simulation", Joint intermediate meeting of IIW Comm, I, IV, XII and SG212, Doc. XII-2467-2021 / 212-1691-2021 / IV-1477-2021 / I-1468-2021, March, 2021.
- [8] Tsutomu Uenohara, Yasuhiro Mizutani, Yasuhiro Takaya, "SUB-MICROMETER SCALE LASER MACHINING USING POSITION CONTROLLED PHOTONIC NANOJET", Leading Edge Manufacturing/Materials&Processing 2020, 8511, 2020.
- [9] Reza Aulia Rahman, Tsutomu Uenohara, Yasuhiro Mizutani, Yasuhiro Takaya, "IN-LIQUID LASER NANOMACHINING BY PHOTONIC NANOJET IN LASER TRAPPING SYSTEM", Leading Edge Manufacturing/Materials&Processing 2020, 8500, 2020.
- [10] T. Morita, "Experimental and numerical studies on the thrust generation for laser-fusion-powered spacecraft, AAPPS-DPP2020 as e-conference", 4th Asia Pacific Conference on Plasma Physics, 26-31, October, 2020.
- [11] R. Sakakibara, T. Nimura, T. Tsukahara, and T. Ishida, "Critical roughness heights of turbulent transition on a swept laminar-flow wing", In: Proc. of AIAA SciTech 2021 Forum, (Virtual Event), AIAA, 2021-1854, (11 pages), Jan. 2021.
- [12] R. Sakakibara, T. Nimura, T. Ishida, and T. Tsukahara, "DNS-NPSE analysis of turbulent transition on swept wing with roughness elements", In: Abstracts Proc. of the joint 14th World Congress in Comput. Mech. and ECCOMAS Congress (WCCM-ECCOMAS CONGRESS), Paris, France (virtual), 3673, Jan. 2021.
- [13] K. Takeda, Y. Duguet, and T. Tsukahara, "DNS study of annular Couette flow for low-high radius ratio in subcritical transition", In: Proc. of 17th Int. Conf. on Flow Dynamics (ICFD2020), Sendai, Japan (virtual), pp. 448-451, Oct. 2020.
- [14] H. Matsufuru and K. Sumiyoshi, "Acceleration of Boltzmann Equation for Core-Collapse Supernova Simulations on PEZY-SC Processors", Lecture Notes in Computer Science book series, Vol. 12251, 177-192, 2020.
- [15] M. Wakayama, Y. Murakami, A. Nakamura, M. Sekiguchi and H. Wada, "Spectroscopy of a mesons from lattice QCD with the truncated overlap fermions", World Scientific, Hadron2019, 104-108, 2020.

3. 国内研究会等発表論文

- [1] Haruki Nagae, Jingzhao Xia, Shoichiro Katayama, Toshihiro Hirai, Wanbin Zhang, and Kazushi Mashima, "Mechanism of Asymmetric Coupling of 1, 3-Dienes and C-Nucleophiles by Ni/Cu Cooperative Catalysts by DFT Calculations", 日本化学会第101春季年会, オンライン開催, 2021年3月22日.
- [2] Toshihiro Hirai, Jingzhao Xia, Shoichiro Katayama,

- Haruki Nagae, Wanbin Zhang, Kazushi Mashima, “Asymmetric Coupling of 1, 3-Dienes and C-Nucleophiles by Ni/Cu Cooperative Catalysts Bearing Planer Chiral Diphosphine Ligand”, 日本化学会第 101 春季年会, オンライン開催, 2021 年 3 月 22 日.
- [3] 原子シミュレーションに基づく結晶材料の塑性変形素過程の解析, “日本金属学会 2021 年春期講演大会・公募シンポジウム S6 「プラスチックの材料科学VIII」”, オンライン開催, 2021 年 3 月 16-19 日.
- [4] MAX相セラミックスおよび高分子ラメラ相におけるキンク形成過程の分子動力学解析, “日本物理学会第 76 回年次大会・共催シンポジウム「ミルフィーユ構造の材料科学」”, オンライン開催, 2021 年 3 月 12 日.
- [5] 第一原理に基づいたアルミニウム合金中のナノ析出物形成のマルチスケールモデリング, “日本材料学会マルチスケール材料力学部門第 69 期第 2 回部門委員会”, オンライン開催, 2020 年 12 月 23 日.
- [6] 高分子系およびセラミックス系ミルフィーユ構造のキンク形成における変形素過程の微視的解析, “日本金属学会 2020 年秋期講演大会・公募シンポジウム S1 「ミルフィーユ構造の材料科学III」”, オンライン開催, 2020 年 9 月 15-18 日.
- [7] 越後謙太郎, 辻本公一, 社河内敏彦, 安藤俊剛, 高橋護, “歳差運動するノズルから噴出する自由噴流の DNS”, 日本機械学会 2020 年度年次大会講演論文集, 5p, Sep. 2020.
- [8] 谷口晴香, 辻本公一, 社河内敏彦, 安藤俊剛, 高橋護, “振動制御した多重衝突噴流の流動・伝熱特性”, 日本機械学会 2020 年度年次大会講演論文集, 4p, Sep. 2020.
- [9] 谷口晴香, 辻本公一, 社河内敏彦, 安藤俊剛, 高橋護, “DMD を用いた振動制御した多重衝突噴流の解析”, 第 98 期日本機械学会流体工学部門講演会, 4p, Nov. 2020.
- [10] 越後謙太郎, 辻本公一, 社河内敏彦, 安藤俊剛, 高橋護, “歳差運動するノズルから噴出する自由噴流の構造解析”, 第 98 期日本機械学会流体工学部門講演会, 4p, Nov. 2020.
- [11] 越後謙太郎, 辻本公一, 社河内敏彦, 安藤俊剛, 高橋護, “DNS による傾斜回転制御した自由噴流の初期条件の検討”, 日本機械学会東海支部第 70 期総会・講演会講演論文集, 1p, Mar. 2021.
- [12] 谷口晴香, 辻本公一, 社河内敏彦, 安藤俊剛, 高橋護, “DNS による振動制御した多重衝突噴流の流動・伝熱特性”, 日本機械学会東海支部第 70 期総会・講演会講演論文集, 1p, Mar. 2021.
- [13] 磯部 佑磨, 植木 祥高, 芝原 正彦, “伝熱面における微細構造が蒸発に与える影響に関する分子動力学的研究”, 日本機械学会 関西支部第 96 期定期総会講演会, 2021 年 3 月.
- [14] 本川 祐輝, 藤原 邦夫, 植木 祥高, 芝原 正彦, “界面固体構造接点における熱輸送機構に関する分子動力学的研究”, 日本機械学会 関西学生会 2020 年度学生員卒業研究発表講演会, 2021 年 3 月 1 日.
- [15] 堤祐太, 植木祥高, 藤原邦夫, 松本亮介, 芝原正彦, “様々な濡れ性の固体表面における水滴の冷却および結晶化についての分子動力学的研究”, 日本機械学会熱工学カンファレンス, 2020 年 10 月 1 日.
- [16] 西健太郎, 藤原邦夫, 芝原正彦, “固体表面構造が固液界面の局所熱輸送機構に及ぼす影響に関するスペクトル解析”, 日本機械学会熱工学カンファレンス, 2020 年 10 月.
- [17] 植木祥高, 村島秀明, 芝原正彦, “ナノスリット内の液体の蒸発に関する分子動力学的研究：構造特性と濡れ性が与える影響”, 日本機械学会熱工学カンファレンス, 2020 年 10 月.
- [18] 内田翔太, 藤原邦夫, 芝原正彦, “SiO₂ 壁面構造が水の凝固現象に及ぼす影響に関する分子動力学解析”, 日本機械学会 2020 年度年次大会.
- [19] 藤原邦夫, 芝原正彦, “固液界面領域内の単原子スケール熱輸送場に関する古典分子動力学解析”, 第 57 回日本伝熱シンポジウム 2020 年 6 月, 2020 年 6 月.
- [20] 内田翔太, 藤原邦夫, 芝原正彦, “SiO₂ 壁面近傍の水の凝固状態に関する分子動力学的研究”, 第 57 回日本伝熱シンポジウム 2020 年 6 月, 2020 年 6 月.
- [21] 藤井彰人, 藤原邦夫, 植木祥高, 芝原正彦, “凝縮時のエネルギー輸送におけるナノ構造の影響に関する分子動力学的研究”, 第 57 回日本伝熱シンポジウム 2020 年 6 月, 2020 年 6 月.
- [22] 山本幸宏, 藤原邦夫, 植木祥高, 小原拓, 芝原正彦, “ナノ粒子懸濁液のエネルギー輸送機構に関する分子動力学的研究”, 第 57 回日本伝

- 熱シンポジウム 2020 年 6 月, 2020 年 6 月.
- [23] 植木祥高, 村島秀明, 芝原正彦, “ナノスリット内の液体の蒸発に関する分子動力学的研究”, 第 57 回日本伝熱シンポジウム 2020 年 6 月, 2020 年 6 月.
- [24] Sadataka Furui and Serge Dos Santos, “Application of Quaternion Neural Networks to Time Reversal based Nonlinear Elastic Wave Spectroscopy”, 日本物理学会, 2020 年年会概要集, 3/19 発表.
- [25] Sadataka Furui, “Anomaly detection in materials by a convolution of nonlinear phonetic wave and its time reversed wave using deep neural network techniques”, 日本物理学会, 2021 年年会概要集, 3/15 発表予定.
- [26] Sadataka Furui, “The Atiyah-Patodi-Singer Index Theorem and Lattice Simulations”, American Physical Society, April Meeting 2021, Abstracts, "4/20 発表予定.
- [27] 宮本良之, “超短パルスレーザーを利用した炭素材料およびその周辺材料の反応誘起：第一原理計算による提案”, レーザー学会第 41 回年次大会.
- [28] 宮本良之, “レーザー偏光に依存したカーボンナノチューブのフェムト秒ダイナミクス”, 日本物理学会第 76 回年次大会, March. 2021.
- [29] 折崎 真哉, 梶島 岳夫, “水中超音波により引き起こされる界面現象の数値シミュレーション”, 第 34 回数値流体力学シンポジウム, D03-4, Dec. 2020.
- [30] 藤井 健博, 大森 健史, 梶島 岳夫, “すべり境界条件に対する埋め込み境界射影法の開発”, 日本機械学会第 98 期流体工学部門講演会講演論文集, OS06-13, Nov. 2020.
- [31] 岡林 希依, 古川 歩夢, 大津 雄, 梶島 岳夫, “キャビテーション乱流の非定常解析における翼性能再現性向上のための検討”, 混相流シンポジウム 2020 講演論文集, No. 0136, Aug. 2020.
- [32] 古川 歩夢, 岡林 希依, 梶島 岳夫, “シートキャビティ周りの流線に基づくキャビテーションモデルの検討”, 第 34 回数値流体力学シンポジウム, B03-2, Dec. 2020.
- [33] 赤木 優太, 岡林 希依, 竹内 伸太郎, 梶島 岳夫, 安炳辰, 能見 基彦, 大渕 真志, “円筒で囲まれた回転－静止円盤間流れの全体安定性解析におけるパラメータ収束性”, 第 34 回数値流体力学シンポジウム, A06-4, Dec. 2020.
- [34] 三輪 敦俊, 大森 健史, 梶島 岳夫, “静電相互作用を考慮した気液二相流の数値解析”, 日本流体力学会第 34 回数値流体力学シンポジウム, Dec. 2020.
- [35] 五十嵐大智, 山下雄也, 曾我部康浩, 内藤健, 小長谷礼美, “多重衝突パルス噴流圧縮原理に関する数値解析研究：燃焼室内的 3 次元応力分布”, 第 64 回宇宙科学技術連合講演会, Oct. 2020.
- [36] 鈴木颯人, 木嶋洋貴, 内藤健, “多重衝突パルス噴流圧縮原理に関する数値解析：マルチグリッド化の検討”, 第 64 回宇宙科学技術連合講演会, Oct. 2020.
- [37] 砂原淳, “レーザーアブレーションの数値モデリング”, at 41th Annual Meeting of the Laser Society of Japan, 招待講演, January 18–January 20, 2021.
- [38] Kunichika Tsumoto, Takashi Ashihara, Narumi Naito, Takao Shimamoto, Akira Amano, Yasutaka Kurata, Yoshihisa Kurachi, “Development of fatal arrhythmias mediating subcellular Na channel expression changes: in silico study”, The 96th Annual Meeting of the Physiological Society Japan, Beppu Convention Center B-CON PLAZA (Beppu), Japan., Mar 2020.
- [39] Yasutaka Kurata, Kunichika Tsumoto, Ichiro Hisatome, Yu-ichi Kuda, Mamoru Tanida, “Controlling phase-2 early afterdepolarizations in human ventricular myocytes: A theoretical study using bifurcation analyses of two mathematical models”, The 96th Annual Meeting of the Physiological Society Japan, Beppu Convention Center B-CON PLAZA (Beppu), Japan., Mar 2021.
- [40] Takao Shimamoto, Kunichika Tsumoto, Yasutaka Kurata, Akira Amano, “Coordinately early afterdepolarizations evoked in ventricular tissue trigger reentrant arrhythmias: in silico study”, The 96th Annual Meeting of the Physiological Society Japan, Beppu Convention Center B-CON PLAZA (Beppu), Japan., Mar 2021.
- [41] 倉田康孝, 津元国親, 九田裕一, 谷田守, “ヒト心室筋細胞における早期後脱分極の発生機序と合理的制御法の非線形力学的解析”, 第 67 回中部日本生理学会大会, web開催, 大会予稿集, p.27, Oct 16–20, 2020.

- [42] 津元国親, 島本貴生, 天野晃, 九田裕一, 谷田守, 倉田康孝, “ヒト心筋細胞の早期後脱分極応答に起因した不整脈トリガー : *in silico*研究. 第 67 回中部日本生理学会大会”, 第 67 回中部日本生理学会大会, web開催, 大会予稿集, p.55, Oct 16–20, 2020.
- [43] 山崎龍朗, 小田豊, 松本亮介, 香月正司, “ステップ状の流量変化に対するチャネル乱流熱伝達の過渡応答”, 日本機械学会熱工学コンファレンス 2020, Paper No. E123, Nov. 2020.
- [44] 山崎龍朗, 小田豊, 松本亮介, 香月正司, “ステップ状の流量変化に伴う平行平板間乱流熱伝達の過渡応答に関するDNS”, 第 57 回日本伝熱シンポジウム, Paper No. B222, Jun. 2020.
- [45] 吉田拓矢, 大谷智仁, 遠藤俊輔, 和田成生, “数値流体解析に基づく肺静脈切除が左房内の血流動態に与える影響の評価”, 日本機械学会 第 31 回バイオフロンティア講演会, 2020.
- [46] 阪井俊裕, 鈴木修一, 直田健, “機械的刺激によるテトラチアフルバレンラジカルカチオン塩の光学特性制御”, 日本化学会 第 101 春季年会, A08-4pm-10, 2021 年 3 月 19–22 日.
- [47] 平田椋大, 太田貴士, “水素燃焼混合層における渦構造がNOx生成に与える影響”, 日本流体力学会 年会 2020, Sep. 2020.
- [48] 田中大誠, 太田貴士, “フェーズフィールド法を用いた液体乱流の凝固組織成長と乱流変調のメカニズム解明”, 日本流体力学会 年会 2020, Sep. 2020.
- [49] 林晃弘, 太田貴士, “DNS による粘弾性流体およびニュートン流体乱流のための時間スケーリング法の導出”, 流体工学シンポジウム (第 66 回北陸流体工学研究会), Dec. 2020.
- [50] 北川雄太, 太田貴士, 大坂文哉, “乱流ケット流れにおいて渦キャビテーションが引き起こす乱流変調と壊食の予測”, 第 34 回数値流体力学シンポジウム, Dec. 2020.
- [51] 白畑風太郎, 太田貴士, “小径円柱周り軸方向流れで維持される乱流構造の観察”, 日本機械学会 北陸信越支部 第 58 講演会, Mar. 2021.
- [52] 河野拓真, 畑昌育, 長友英夫, “保存型スキームを用いたレーザーアブレーションに適した数値解析コードの開発”, 第 34 回数値流体力学シンポジウム, A11-4, (オンライン), 2020 年 12 月 23 日.
- [53] 松川敏徳, 長友英夫, “簡易フォッカー・プランク方程式モデルによる高速電子熱流束解法の開発”, 日本物理学会第 76 回年次大会, 15aB2-6, (オンライン), 2021 年 3 月 15 日.
- [54] 藤巻貴海, 鈴木雅視, 垣尾省司, “水晶を用いた同種材料接合構造におけるリーキーSAW の解析”, 2020 年電子情報通信学会ソサイエティ大会, A-4-3, Sep. 2020.
- [55] 藤巻貴海, 鈴木雅視, 垣尾省司, “同種・異種材料接合構造におけるリーキーSAW の伝搬・共振特性”, 電子情報通信学会・日本音響学会 2020 年度超音波研究会(US), US2020-33, Sep. 2020.
- [56] 藤巻貴海, 鈴木雅視, 垣尾省司, “同種・異種材料接合構造におけるリーキーSAW の伝搬・共振特性”, 第 49 回EMシンポジウム, EM49-1-11, Oct. 2020.
- [57] 藤巻貴海, 鈴木雅視, 垣尾省司, “同種材料接合構造におけるリーキーSAW の伝搬・共振特性”, 弹性波素子技術コンソーシアム第 1 回研究会, Nov. 2020.
- [58] 藤巻貴海, 鈴木雅視, 垣尾省司, “LiNbO₃ や水晶を用いた同種材料接合構造におけるリーキーSAW の伝搬・共振特性”, 圧電材料・デバイスシンポジウム 2021, F-2, Jan. 2021.
- [59] 石川和樹, 西田修三, 中谷祐介, “小川原湖の水環境管理に向けた塩水週上シミュレーション”, 令和 2 年度土木学会関西支部年次学術講演会概要集, II-4, 2020.
- [60] 戸村祐希, 中谷祐介, 西田修三, “非構造格子を用いた瀬戸内海-太平洋領域の流動シミュレーション”, 令和 2 年度土木学会関西支部年次学術講演会概要集.
- [61] 中司智仁, 荒木天秀, 天野泰嗣, 坪井伸幸, 小澤晃平, 武藤大貴, 寺島洋史, “超臨界圧下における極低温水素噴流に関する数値解析 : 噴射口数の影響”, 日本機械学会九州支部九州学生会第 52 回学生員卒業研究発表講演会, 2021, 3.
- [62] 吉富敬亮, 栗田暢皓, 坪井伸幸, 小澤晃平, 林光一, 川島秀人, “回転デトネーションエンジンの 2 次元数値解析-酸水素非予混合噴射口数の影響”, 2020 年度衝撃波シンポジウム, 104, 2A3-2, 2021, March.
- [63] 赤井優斗, 大島洋喜, 大森健史, 山口康隆, 梶島岳夫, “接触線近傍での流体界面の易動度”, 日本流体力学会年会, 2020.09.18.

- [64] 大島洋喜, 大森健史, 梶島岳夫, “Cahn-Hilliard 方程式を用いた二相流解析における OpenMPI/OpenACC Hybrid Computing”, 数値流体力学シンポジウム, 2020.12.21.
- [65] 三輪敦俊, 大森健史, 梶島岳夫, “静電相互作用を考慮した気液二相流の数値解析”, 数値流体力学シンポジウム, 2020.12.22.
- [66] 浦直樹, 水谷康弘, 江崎隆, 上野原努, 牧浦良彦, 高谷裕浩, “タルボット効果を用いた広範囲 3 次元リソグラフィ (第 6 報) -ディープラーニングを用いた露光光波の振幅位相制御-”, 2021 年度精密工学会春季大会学術講演会, D0234, 2021.
- [67] 江崎隆, 浦直樹, 上野原努, 水谷康弘, 高谷裕浩, 牧浦良彦, “タルボット効果を用いた広範囲 3 次元リソグラフィ (第 5 報)-斜め入射光を利用した多重露光によるナノピラー構造の作製-”, 2021 年度精密工学会春季大会学術講演会, D0114, 2021.
- [68] 並河峻佑, 上野原努, 水谷康弘, 高谷裕浩, “光後方散乱パターンの空間周波数解析に基づくガラス加工表面のマイクロクラック深さ計測の高精度化”, 2020 年度砥粒加工学会学術講演会, 2020.
- [69] 上野原努, ラーマンレザアウリア, 水谷康弘, 高谷裕浩, “フォトニックナノジェットを利用した液中レーザナノ加工に関する研究(第 3 報) 長焦点深度特性による加工特性”, 2020 年度精密工学会秋季大会, D0203, オンライン, 2020 年 9 月.
- [70] 棚葉 将規, 大場 春佳, 鈴木 祐介, and 水野信也, “Wi-Fi ログからマルコフ連鎖を利用した利用者行動取得”, 経営情報学会 全国研究発表大会要旨集 2020 年全国研究発表大会. 一般社団法人 経営情報学会., 2020.
- [71] 梶拓真, 大場春佳, and 水野信也, “密集度検出システムの構築と運用”, インターネットと運用技術シンポジウム論文集 2020., 2020.
- [72] 大塚高弘, 阿久津泰弘, “テンソルネットワークを用いた Monomer-dimer モデルの臨界現象の解析”, 第 76 回年次大会, 2021 年 3 月 12 日.
- [73] 森田太智, “レーザー核融合推進に向けたパルス駆動磁気ノズルにおけるエネルギー依存性の検証実験”, 第 64 回宇宙科学技術連合講演会.
- [74] 町田 貴大, “レーザー生成プラズマを用いた磁気スラストチャンバ実験との比較による数値解析コードの検証”, 第 64 回宇宙科学技術連合講演会.
- [75] 上原 弘之, 坪井 和也, 富田 栄二, “計算境界の影響のない水素/空気予混合火炎の固有不安定性の DNS の構築”, 日本機械学会 中国四国支部第 59 期総会・講演会講演論文集, 08b2, 2021 年 3 月.
- [76] 根村英克, “格子 QCD による一般化核力研究のための高速アルゴリズムの活用”, 日本物理学会 2020 年秋季大会, オンライン開催, 2020 年 9 月 14-17 日.
- [77] 根村英克, “格子 QCD による一般化核力研究と $\Lambda N, \Sigma N$ ポテンシャル”, 日本物理学会第 76 回年次大会, オンライン開催, 2021 年 3 月 12-15 日.
- [78] 萩田克美, 本田隆, 村島隆浩, 川勝年洋, “環状／線状混合系のブロックコポリマー相分離構造に対する複合的分子シミュレーション解析”, 日本物理学会 2020 年秋季大会, 2020 年 9 月 10 日.
- [79] 高分子系のシミュレーション画像に対する深層学習判別性能の検討, “高分子学会 高分子討論会”, 2020 年 9 月 18 日.
- [80] 森松 浩隆, 塚原 隆裕, “低円筒比環状流路の亜臨界遷移に生じる間欠構造に関する調査”, 第 34 回数値流体力学シンポジウム 講演論文集, オンライン開催, A05-1, 3 pages, Dec. 2020.
- [81] 竹田 一貴, 塚原 隆裕, “仮想周長拡張した環状クエット流の亜臨界遷移における乱流間欠性と DP 普遍性”, 第 34 回数値流体力学シンポジウム 講演論文集, オンライン開催, A04-4, 4 pages, Dec. 2020.
- [82] 柿原 誠太, “非線形放物型安定方程式と直接数値解析を用いた NLF(2)-0415 における表面粗さ誘起の遷移予測”, 第 58 回飛行機シンポジウム 講演集, オンライン開催, JSASS-2020-5126, (5 pages), Nov. 2020.
- [83] 中川 翔介, “主流乱れと円柱粗さの相互作用による後退平板境界層乱流遷移の直接数値解析”, 第 58 回飛行機シンポジウム 講演集, オンライン開催, JSASS-2020-5127, 7 pages, Nov. 2020.
- [84] 藤村 俊介, 山本 憲, 元祐 昌廣, 塚原 隆裕, “局所加熱条件下マイクロスケールバブルにおける温度差マランゴニ対流の 3 次元数値解

- 析”, 日本機械学会熱工学コンファレンス 2020 講演論文集, (オンライン開催), 札幌, 5 pages, Oct. 2020.
- [85] 川津 晃貴, 本間 貴大, 上野 一郎, 塚原 隆裕, “矩形自由液膜内温度差マランゴニ対流における多様な基本定常流”, 日本機械学会熱工学コンファレンス 2020 講演論文集, (オンライン開催), 札幌, 3 pages, Oct. 2020.
- [86] 松川 裕樹, 塚原 隆裕, “高円筒比 Taylor-Couette-Poiseuille 流における亜臨界遷移の局在乱流パターン”, 日本流体力学会年会 2020 講演論文集, (オンライン開催), 山口, 2 pages, Sep. 2020.
- [87] 仁村 友洋, 徐 之靈, 河田 卓也, 塚原 隆裕, “低Re回転平面クエット流れにおける粘弾性不安定性”.
- [88] 竹田 一貴, 塚原 隆裕, “環状クエット流の亜臨界遷移における局在乱流構造とDP 普遍性の円筒比依存性”.
- [89] 塚原 隆裕, 福田 雄大, “環状流の亜臨界遷移における螺旋型局在乱流と縦渦群の伝熱寄与”.
- [90] 川津 晃貴, 本間 貴大, 和田 亮平, 塚原 隆裕, 上野 一郎, “数値解析による自由液膜内温度差マランゴニ対流場におけるSingle-Layered Flowの液膜アスペクト比依存性”.
- [91] 正田悠人, 山口容平, 芳澤信哉, 陳何苗, 岡田健志, 杉山みなみ, 下田吉之, 林泰弘, “住宅・業務施設を統合化した地域エネルギー需給シミュレーション：東京 4 区市を対象とするケーススタディ”, 第 38 回エネルギー・資源学会研究発表会講演論文集, pp. 23 – 28, 2020.
- [92] 山口容平, 秋沢琴音, 北村拓也, 金範塙, 下田吉之, “ボトムアップモデルによる 2050 年における日本の業務部門エネルギー需要の推計”, 第 38 回エネルギー・資源学会研究発表会講演論文集, pp. 85 – 90, 2021.
- [93] 秋沢琴音, 山口容平, 金範塙, 鳴川公彬, 下田吉之, “日本全国の業務施設ストック経年変化を考慮したエネルギー需要推計”, 第 37 回エネルギー・システム・経済・環境コンファレンス講演論文集, pp. 85 – 90, 2021.
- 5. その他**
- [1] A. Musa, T. Soga, T. Abe, M. Sato, K. Komatsu, S. Koshimura, H. Kobayashi, “Evaluation of Tsunami Inundation Simulation using Vector-Scalar Hybrid MPI on SX-Aurora TSUBASA”, The poster presentation at The International Conference for High Performance Computing, Networking, Storage and Analysis (SC20), Nov-20.
- [2] 撫佐昭裕, “読売新聞”, 津波被害推計エリア 1.6 倍 北海道から鹿児島 地震後 20 分～30 分 東北大など, 2021 年 2 月 22 日 (朝刊).
- [3] 撫佐昭裕, “日刊工業新聞”, 3.11 メッセージ 東日本大震災 10 年 AI・スペコン 災害に挑む 想定外のないリスク管理へ, 2021 年 3 月 10 日.
- [4] 撫佐昭裕, “電波新聞”, 東日本大震災 10 年 電機 進化する津波の浸水予測 IT サービス 大手が存在感, 2021 年 3 月 24 日 (朝刊).
- [5] 長谷川航大, 三木望夢, 馬場吉弘, 長岡直人, “導電率テンソルを適用したFDTD法による CFRPパネルの電流分布解析”, 令和 2 年電気学会B大会, オンライン (2020-9).
- [6] K. Hasegawa, “FDTD Analysis of Lightning Current and Temperature Distributions in a CFRP Panel with Conductivity Tensor Technique”, International Symposium on EMC and Transients in Infrastructures and International Student Session (ISET-ISS2020), Online (2020-12) .
- [7] 船迫昌平, 宮澤弘法, 古澤卓, 山本悟, 梅沢修一, 米澤宏一, 大森修一, 鈴木武志, “エロージョンにより変形した静翼列を伴う蒸気タービン中圧段の非定常流动シミュレーション”, 第 34 回数値流体力学シンポジウム, Dec. 2020.
- [8] 河野宏明, 開田丈寛, 柏浩司, 高橋純一, 八尋正信, “QCDの有効模型とパーシステント・ホモロジー解析”, 日本物理学会 2020 年秋季大会 (オンライン開催), 2020 年 9 月 14 日.
- 4. 著書**
- [1] Sadataka Furui, “Understanding Quaternions from Modern Algebra and Theoretical Physics”, Chapter 2 of “Understanding Quaternions”, Ed. By Peng Du et al.”, Nova Science Publishers Inc, New York, New York (2020).
- [2] Sadataka Furui, “A Closer Look at Gluons”, Chapter 6 of “Horizon in World Physics”, vol 302, Ed. by Albert Reimer”, Nova Science Publishers Inc, New York (2021).

- [9] 吉野元, “深層ニューラルネットワークによる学習の統計力学：レプリカ理論とシミュレーション”, 日本物理学会, 秋季大会 オンライン開催, 2020 年 9 月 10 日.
- [10] 吉田惇輝, “多結晶Si太陽電池中の鉄不純物の電圧印加オペランド観察での時系列シミュレーション”, 株式会社NTTデータ数理システム, Jan-21.
- [11] 仁村友洋, 徐之靈, 河田卓也, 塚原隆裕, “低 Re 回転平面クエット流れにおける粘弾性不安定性”, 日本流体力学会年会 2020, 山口, 2020 年 9 月.
- [12] 塚原 隆裕, “粘弾性流体や乱流拡散を対象としたデータ同化と深層学習”, 第 7 回複雑熱流体工学シンポジア (7th COFTEC Symposia), 神戸, Oct. 2020.
- [13] 平岡慎一郎, “口腔粘膜疾患診断における AI ~口腔外科臨床医が行う AI 開発～”, 第 65 回 日本口腔外科学会総会・学術大会 口腔三学会合同シンポジウム, 2020 年 11 月 14 日.
- [14] 平岡慎一郎, “口腔粘膜疾患診断支援AIの開発について ~口内炎と口腔がんの診断AI～”, GPU Technology Conference 2020 , 2020 年 10 月 7 日.
- [15] 平岡慎一郎, 川村晃平, 鵜澤成一, 古郷幹彦, “口腔がん医療の未来へ向けたAIの活用・臨床診断 ~口腔粘膜疾患診断支援AIの研究開発～”, 第 38 回日本口腔腫瘍学会総会・学術大会・シンポジウム, 2020 年 1 月 23 日.
- [16] 平岡慎一郎, “大阪大学歯学研究科とNVIDIA がディープラーニングの共同研究を開始, 口腔がん早期発見AIの診断精度向上を目指す”, インターネットメディア (<https://www.nvidia.com/ja-jp/about-nvidia/press-releases/2020/nvidia-osaka-university-begin-deep-learning-research-improve-accuracy-ai-oral-cancer-detection/>).
- [17] 生口幹也, ”非球面ミラーの非接触ナノ形状測定及び走査型白色干渉顕微鏡との比較”, 精密工学会春季大会, 2021 年 3 月.
- [18] 生口幹也, “Measurement of aspheric mirror by non-contact three dimensional nano-profiler using normal vector tracing method”, euspen 21st International Conference & Ehibition, 2021 年 6 月.

第 26 回スーパーコンピューティングコンテスト(SuperCon2020) 報告および 第 27 回スーパーコンピューティングコンテスト(SuperCon2021) 告知

大阪大学サイバーメディアセンター准教授 吉野 元

1. SuperCon2020

昨年 2020 年 8 月 17 日から 21 日までの 5 日間に高校生・高専生を対象とする「スーパーコンピューティングコンテスト(SuperCon2020)」が予定されていました。これに向けて予選が行われ、東日本から 8 チーム、西日本から 11 チームが予選を通過しました。その結果は下記 HP に掲載されております。残念ながら新型コロナウィルス感染拡大のため、本戦は中止となりました。しかし後述しますように 9 月に理研のスーパーコンピュータ「富岳」を用いた臨時イベントがオンライン開催されました。

ここでは例年開催されていた本戦について説明いたします。このコンテストは、2 名又は 3 名を 1 チームとする高校生・高専生の参加者たちが、与えられた課題を解くプログラムを 3 日間に渡って作成し、最終日にスーパーコンピュータで実行して、解答の正確さや計算の速さを競うもので、そのレベルの高さから、別名「電腦甲子園」とも呼ばれています。過去の出場者が大学進学後に国際大学対抗プログラミングコンテストで活躍するなど、次世代の情報科学を担う若手育成にも貢献しており、2008 年度の文部科学大臣賞も受賞しています。

1995 年の第 1 回から 2005 年の第 11 回までは東京工業大学（東工大）学術国際情報センター(Global Scientific Information and Computing Center:GSIC)の単独主催でしたが、2006 年の第 12 回からは大阪大学（阪大）(Cybermedia Center:CMC)も共同主催しています。予選に参加したチームの中から、富士川以東 50Hz 地域からは 10 チームが、60Hz 地域からはやはり 10 チームが参加します。東工大と阪大の二つの会場で同時に開催した年は、wiki やポリコムなどで相互に交流し、開会式・表彰式などもポリコムを使って二元中継で行ってきました。このコンテストは 5 日間にも渡る合宿型で、実際にスーパーコンピュ

ータを高校生・高専生が使うことができるという、世界的にも大変ユニークなものです。原則として毎年交互に両大学のスーパーコンピュータを使います。2007、2011 年は阪大 CMC の SX-8R が、2009 年は SX-9 が、2015 年、2017 年は SX-ACE が使われました。2020 年の本戦では SQUID が用いられる予定でした。

2. 予選

2020 年の予選課題は 6 月 3 日に下記の SuperCon web に公表されました。この予選課題を解くプログラムを作成し、6 月 19 日正午までにプログラムを含む必要書類を添付してメールで申し込んでもらいました。予選問題は、スーパーコンピュータを使わなくとも学校や家庭にある普通のパソコンでも解けるような課題が出題されます。2020 年の予選課題は、東工大の作成チームによる「文字列書き換え問題」というものでした。これは与えられた 2 つの文字列の一方から他方に、指定された基本操作の繰り返しで変換するという問題です。この変換が可能かどうかを判定し、可能な場合にはできるだけ少ない「計算コスト」で行う手続きを示すことが課題となります。これを含め、過去の予選課題、本選課題は SuperCon web に全て掲載されています。また、参加者が 2 名以上集まらない人のために、希望者には「認定証」も発行しています。予選課題を正確に解くプログラムが書けたら、「SuperCon 1 級」が認定されます。問題のレベルに応じて 2 級と 3 級もあります。

3. 本選の中止、富岳チャレンジの開催

新型コロナウィルス感染拡大予防のため残念ながら本戦は急遽中止となりました。しかし、9 月 13 日から 22 日の期間に理化学研究所のスーパーコンピュータ「富岳」を用いた「富岳チャレンジ」という臨時

イベントがオンライン開催され、SuperCon2020 の予選を通過したチームが参加しました。詳しくは下記 HP をご覧ください。

4. SuperCon 2021 の告知

2021 年は 8 月 23 日（月）から 27 日（金）までの 5 日間での開催を予定しています。新型コロナウィルス感染拡大予防のため、オンライン開催となります。予選課題は 6 月 2 日に公表、課題提出〆切は 6 月 18 日正午です。理化学研究所も主催者に加わり、使用するスーパーコンピュータは、理化学研究所の富岳が使われる予定です。本年もチャレンジする高校生・高専生、引率の先生方など参加者の皆さんに喜んでいただけるよう様々な工夫を凝らそうと関係者一同考えています。本稿が皆様のお目に触れるときには既にスケジュールが進行しているかもしれませんが、もしも可能ならば皆様もお知り合いの高校生に SuperCon2021 というものがあり、大変に楽しい行事であることを呼びかけてください。また、来年以降、すなわち SuperCon2022 以降への参加、お申し込みをご検討頂ければ幸いです。

5. Web

<http://www.gsic.titech.ac.jp/supercon/> がコンテストページです。ぜひ一度御覧ください。また 2020 年度臨時開催されました富岳チャレンジについてはこちらをご覧ください。

<https://www.r-ccs.riken.jp/outreach/events/supercon-fuga>
ku/

大規模計算機システム利用者講習会等の紹介

大阪大学サイバーメディアセンター教授 降幡 大介

1. 概要

サイバーメディアセンターの教職員をはじめ、大阪大学の大規模計算機システムの運営、開発、支援に関わっている関係者は、システムをユーザにより有効に活用していただくために何が出来るかを日々考えています。たとえばその一端として、マニュアル・ドキュメント類を充実させること、ユーザからの質問をメールなどで受け付け適切に返答するための仕組みの構築と維持、それらを明文化するためのFAQの整備などの活動を行っています。

こうした活動の中でもわれわれが重要と考えているのが、ここで紹介する利用者講習会です。利用者講習会は計算機ユーザへ知識を伝える場だというだけでなく、その場での質問などを通じてユーザと直接やりとり出来る場でもあり、大変貴重な機会です。そのためしばしば、大規模計算機システムの運営・開発・管理・支援などを行っている関係者が立ち会います。

これら講習会の内容は、OSである Unix 環境、スーパーコンピュータのハードウェアについての概要説明といった入門的内容から、大規模計算を行う近年のユーザにとって重要な OpenMP, MPI などの並列計算通信プロトコルの概要からこれらを上手に使いこなすための各種プログラミング技法の詳細、AVS/Express や SALMON といった各方面的専門家用の特殊なソフトウェア等々、多岐にわたります。こうした内容はユーザの要望に沿って、計画されています。詳しくは次ページに掲載しております表に掲載しておりますが、大規模計算機の利用者だけではなく、学生、教員、研究者を幅広く対象とし、年に 13~14 回開催しております（2020 年度は 14 回開催いたしました）。また、より詳細な情報をサイバーメディアセンター大規模計算機システムの webにおいて掲載しておりますので、ぜひご参照ください。

2. 多忙な方も参加しやすく

近年、学生も研究者も大変に多忙です。これをうけて、サイバーメディアセンターの講習会は原則として年に 2 回、ほぼ同じ内容の講習会を時期をずらして開催するように工夫しています。実際には、6 月後半と 9 月頭～10 月頃に集中的に開催しています。これは、「学期始まりや学期末の時期は外して欲しい」「あまり遅い時期では、学生の研究開始に間に合わない」などのユーザの声を反映したもので、なるべく多くのユーザが参加できるように、また、講習会の受講が意義あるものになるようにと配慮した結果です。また、これまで現場での開催のみだった講習会にも 2019 年よりその一部についてオンライン配信を開始し、ユーザがより参加しやすいような形へと拡張しています。このようにオンライン配信を導入していたため、コロナ禍の中ながら 2020 年も無事にすべての利用者講習会をオンラインにて実施することができました。

また、AVS/Express や SALMON などの研究者用専門ソフトウェアの講習会では講師を確保しにくいという問題がありますが、われわれは筑波大学、高度情報科学技術研究機構と協力して講師を確保したり、当該ソフトウェアの関連会社に講師を依頼するなどして、こうした専門家向けソフトウェアの講習会を開催しています。こうした努力の甲斐あってか、これまでに各講習会ともに一定数のユーザの参加をいただいており、講習会をユーザの皆様に役立てていただいていると考えています。

3. 初学者にも優しく

未参加の方にとって、こうした講習会は敷居が高いと思われるかもしれません。しかし、先に述べたように初学者も講習会の対象で、1 年間のおおよそ 14 回程度の講習会のうちおおよそ 1/4 は初学者が対象の内容のものです。

具体的には、OS である Unix の簡単な操作方法の解説や、スーパーコンピュータのハードウェアの概要説明、細かい技法の説明の前に必要となる並列計算の概念の説明などからなります。スーパーコンピュータを使うユーザというと、こうした知識やプログラミング技法について通じた大変なプロフェッショナルばかりと想像されることもありますが、もちろんそれは違います。どなたも「最初は初心者」です。そして、細かい技術についてのマニュアルは豊富に見つかっても基礎的な概念や手法についてはなかなか良い資料・ドキュメント類が見つからないということは珍しくないです。

われわれサイバーメディアセンターでは、こうした点を補い、より広い分野・方面の方にユーザとしてシステムを使ってもらうべく、常に初学者に優しくありたいと考え、講習会をこのような構成で行っています。

4. プロフェッショナルな方も

もちろん、われわれは初学者ばかりでなくプロフェッショナルなユーザへの支援も怠っておりません。各種の専門的な内容について、多くの講習会を計画し、そして実施しています。

大阪大学の誇る大規模計算機である SX-ACE と OCTOPUS を利用しての講習会、近年の並列計算プログラミングに必須である OpenMP や MPI についての講習会はもちろんのこと、スーパーコンピュータや大規模並列計算機が活躍の場である言語 HPF (High Performance Fortran) についての専門家による講習会、そして、電子ダイナミクスに対する第一原理計算を行う SALMON、各種専門分野で用いられる可視化ソフトウェアである AVS/Express の講習会も行っています。また、一部の講習会は、大規模計算機システムの開発そのものを行っている会社から技術者を講師として招いて講習会に加えて特別相談会も実施しており、技術の非常に微細な部分に至るまで専門的な議論を行うことが出来る機会としてユーザーの皆様にご利用いただいております。

5. ぜひご参加され、そしてフィードバックを

講習会の情報については、われわれサイバーメディアセンターの web
http://www.hpc.cmc.osaka-u.ac.jp/lecture_event/lecture/ にて常に公開しております。情報は随時更新しておりますので、ぜひ頻繁にご覧になり、ご興味のある講習会に積極的にご参加ください。皆様のご参加を常に歓迎いたします。

また、大規模計算機のハードウェア、ソフトウェア、そしてユーザの使い方といったものは日々変化していくものです。上記に述べたように様々な工夫や努力を通じて開催している講習会ではありますが、こうした変化に合わせ、講習会のありかたも変化、進歩していく必要があります。そして、それにはユーザの方々からいただく意見がなにより重要です。そのフィードバックの先により良い講習会の実現があるのです。ユーザの皆様におかれましては、遠慮をせずに、いつでも構いませんので、講習会についての要望をぜひサイバーメディアセンターまでお聞かせください。

2021 年度 大規模計算機システム利用講習会

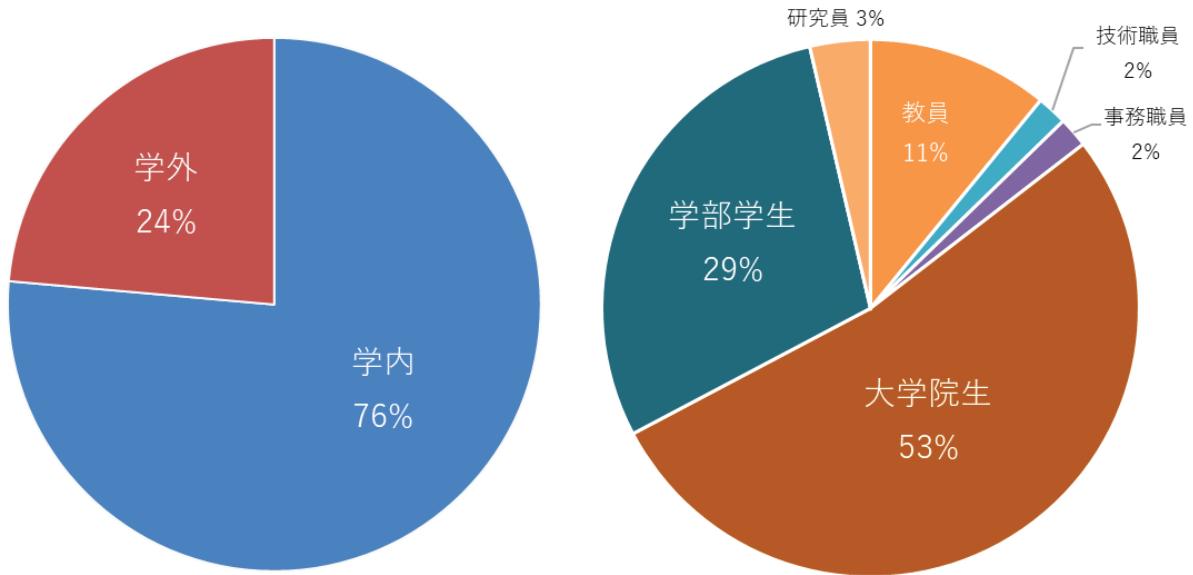
	講習会名	開催日時	講師	開催場所
1	スパコンに通じる並列プログラミングの基礎	6月 14 日	サイバーメディアセンター 宮武 勇登 准教授	オンライン開催
2	初めてのスパコン	6月 18 日	サイバーメディアセンター 木戸 善之 講師 情報基盤課 技術職員	オンライン開催
3	OpenMP 入門	7月 19 日	サイバーメディアセンター 吉野 元 准教授	オンライン開催
4	スーパーコンピュータ バッチシステム入門 / 応用	9月 16 日 12月 3 日	日本電気（株）	オンライン開催
5	GPU プログラミング入門 (OpenACC)	10月 6 日 12月 8 日	プロメテック・ ソフトウェア（株）	オンライン開催
6	ベクトルプロセッサ 高速化技法の基礎	10月 7 日 12月 9 日	日本電気（株）	オンライン開催
7	並列プログラミング入門 (OpenMP/MPI)	10月 15 日 12月 10 日	日本電気（株）	オンライン開催
8	コンテナ入門	10月 21 日	日本電気（株）	オンライン開催
9	ONION 活用講習会	11月 9 日	日本電気（株）	オンライン開催
10	GPU プログラミング実践	12月 20 日	プロメテック・ ソフトウェア（株）	オンライン開催
11	デバッグ・チューニングの基礎	開催時期未定	未定	オンライン開催予定

2020 年度 大規模計算機システム利用講習会 アンケート集計結果

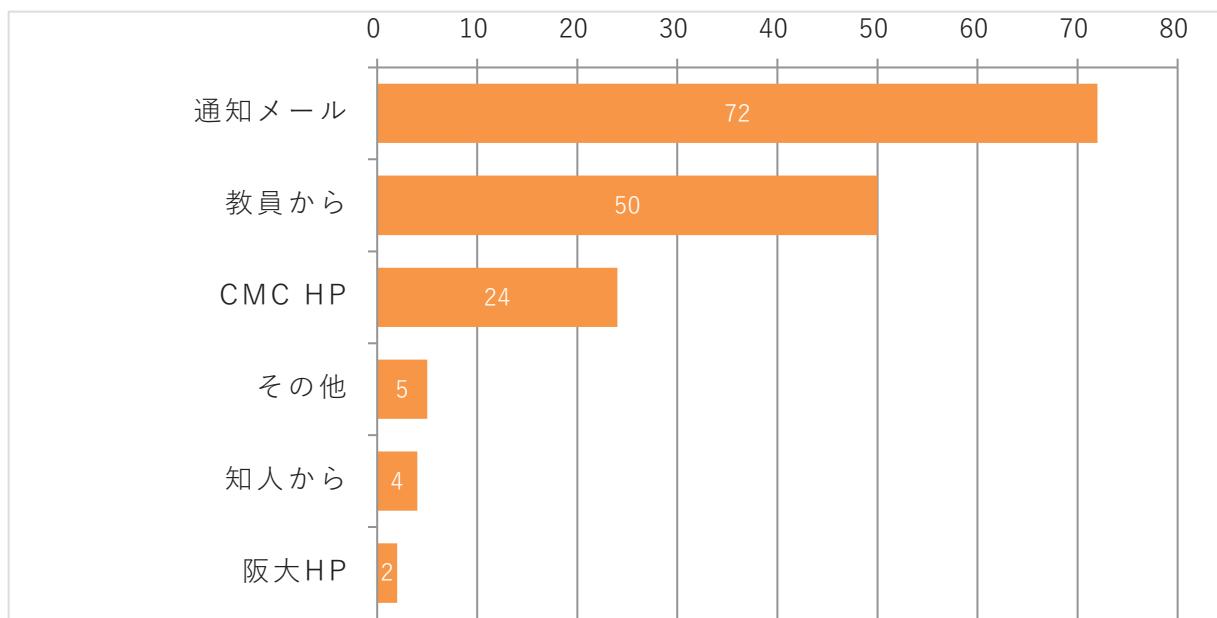
◆受講者数（すべてオンラインで開催）

講習会名	申込者数	受講者数
スパコンに通じる並列プログラミングの基礎(6/22)	110	87
スパコン概要とスパコン利用入門(6/26)	30	27
SX-ACE 高速化技法の基礎(6/29)	13	13
並列プログラミング入門(MPI)(6/30)	27	17
並列コンピュータ高速化技法の基礎(7/3)	20	15
スパコンに通じる並列プログラミングの基礎(9/2)	73	38
スパコン利用入門(9/10)	20	17
SX-ACE 高速化技法の基礎(9/16)	12	10
並列コンピュータ高速化技法の基礎(9/17)	12	7
並列プログラミング入門(MPI)(9/24)	9	9
OpenMP 入門(9/30)	12	10
AVS 可視化処理入門(10/28)	9	6
AVS 可視化処理応用/ 特別相談会(10/29)	2	3
合計	349	259

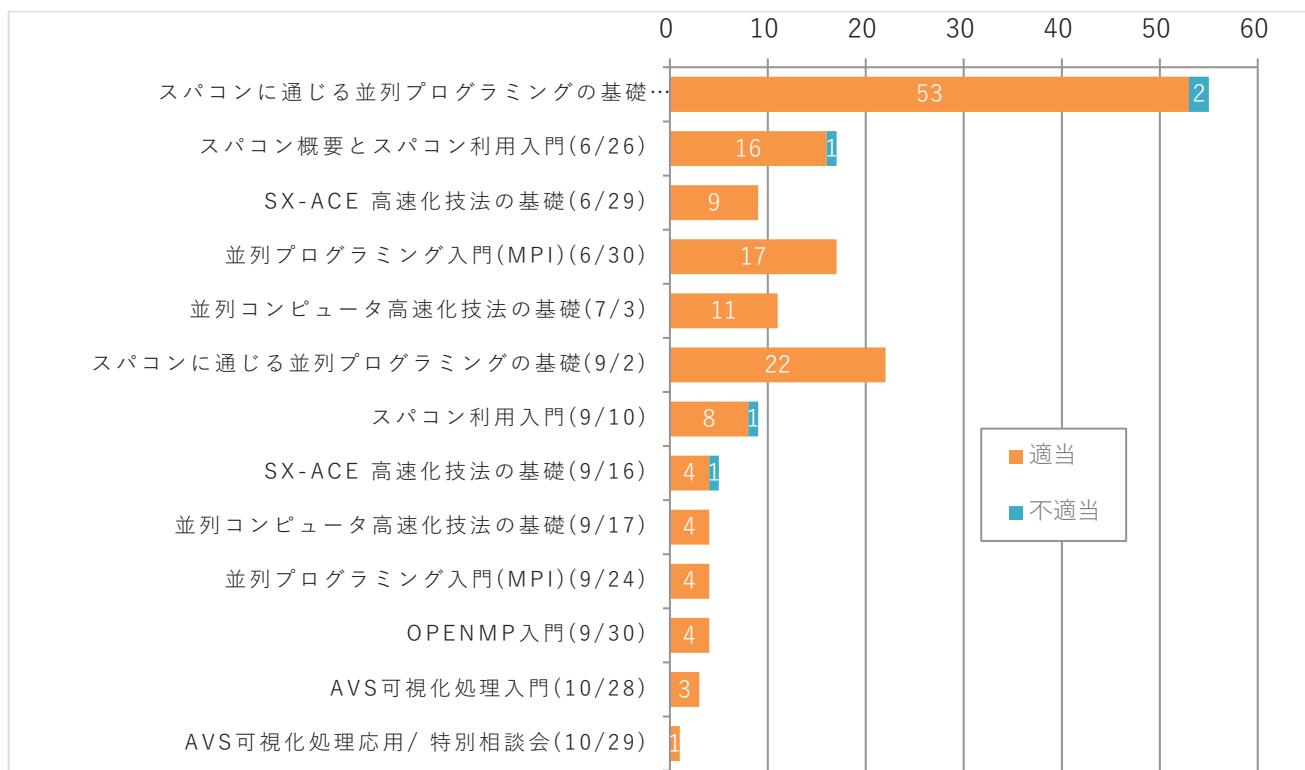
◆受講者の内訳



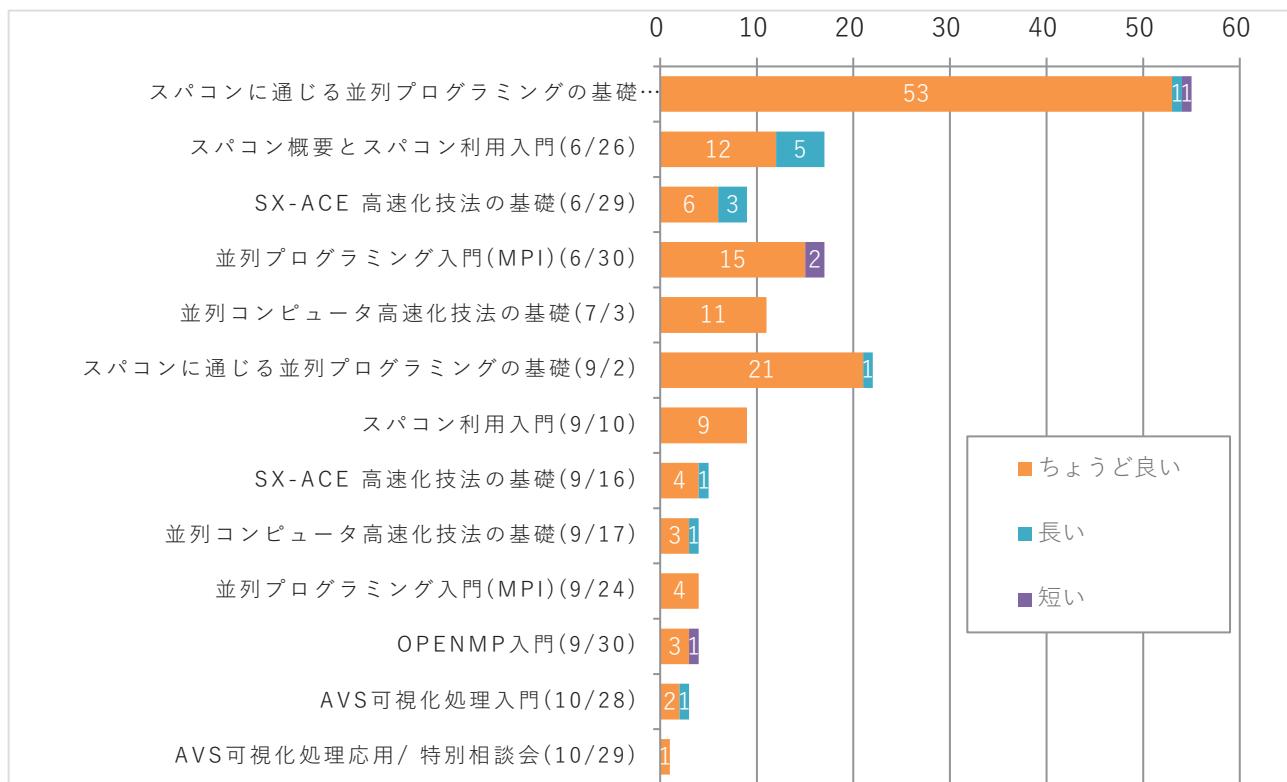
◆講習会についてどのようにお知りになりましたか。（複数回答可）



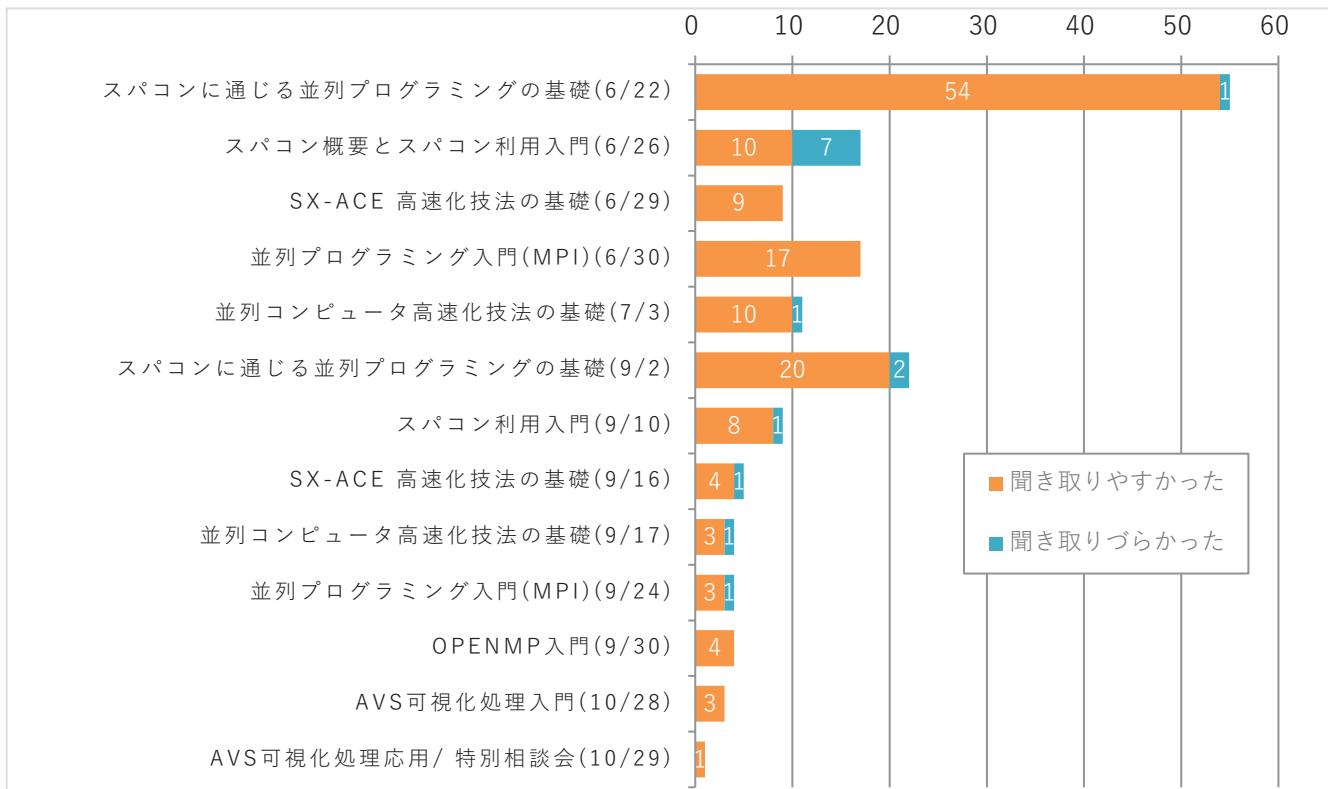
◆開催日は適当でしたか。



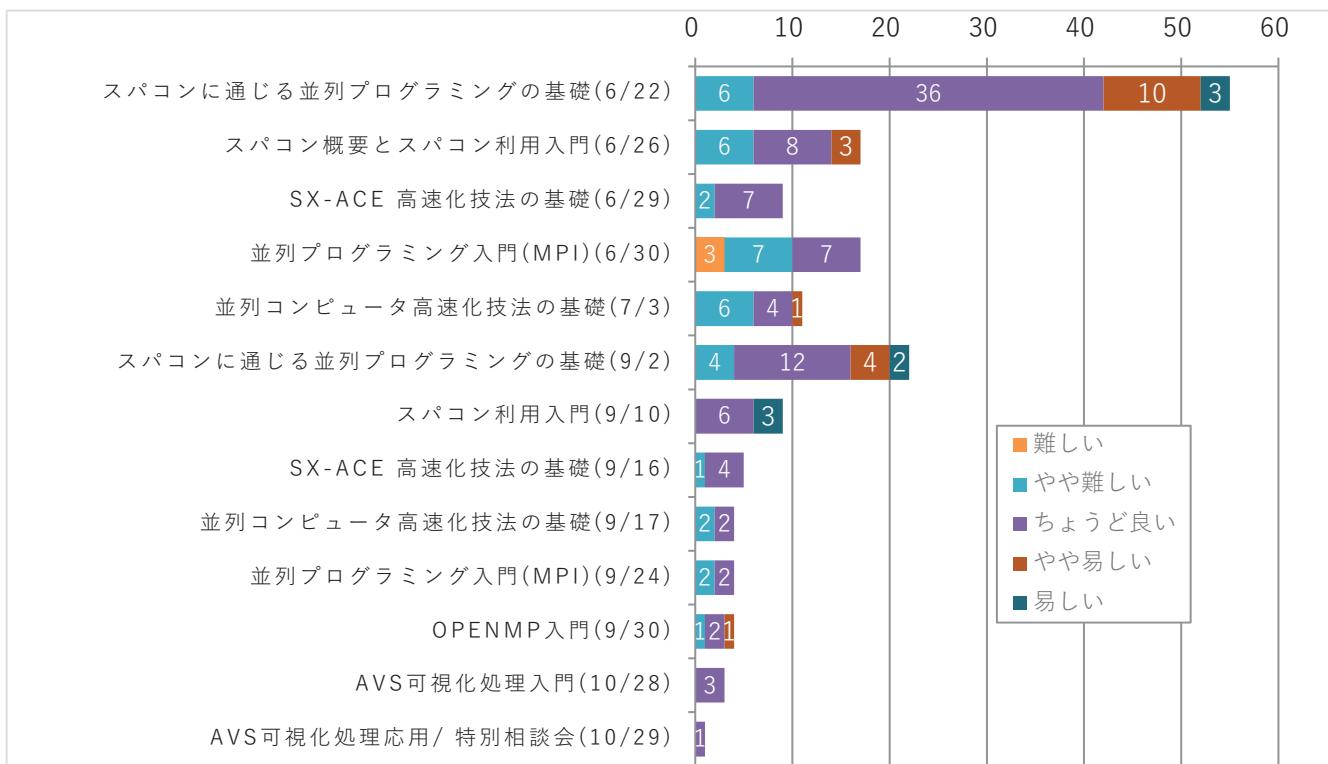
◆講習会の時間は適当でしたか。



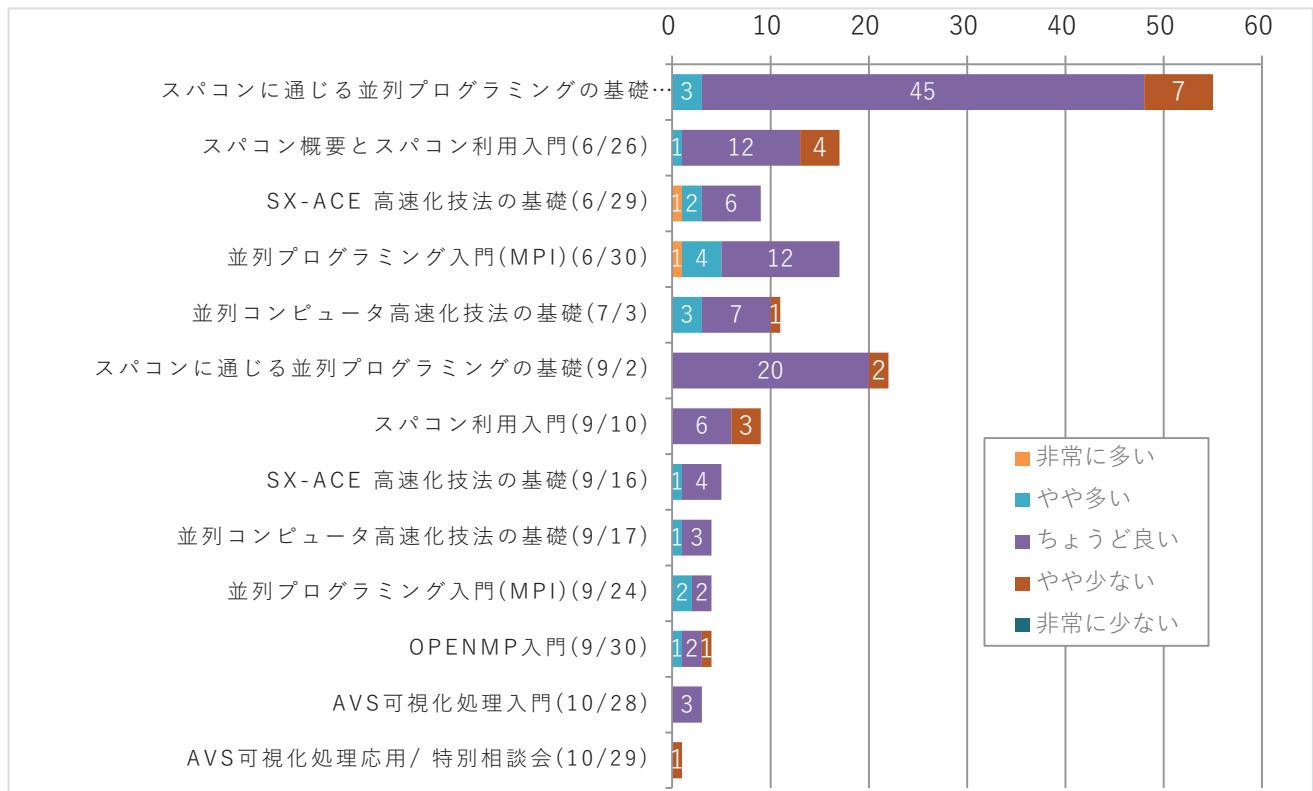
◆今回の講習会の音声はいいかがでしたか。



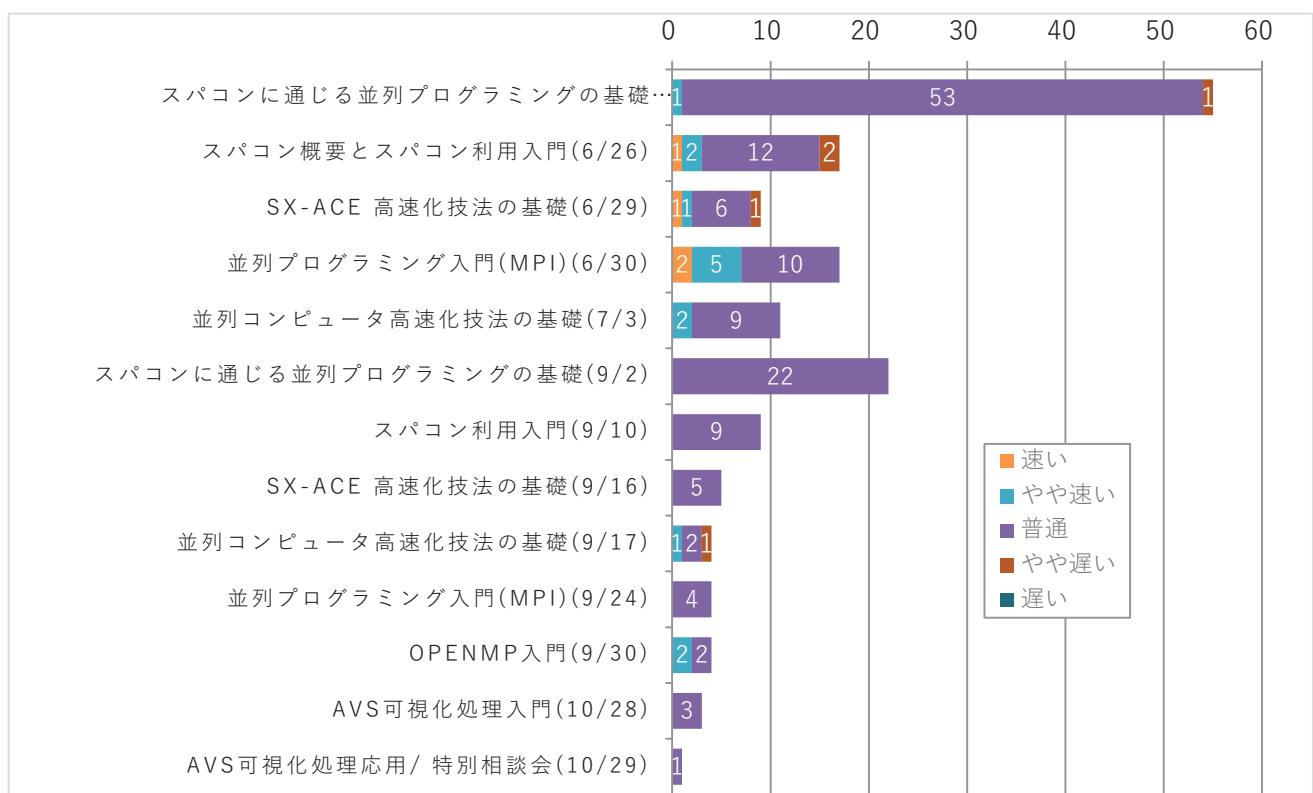
◆講習会の内容はどうでしたか。



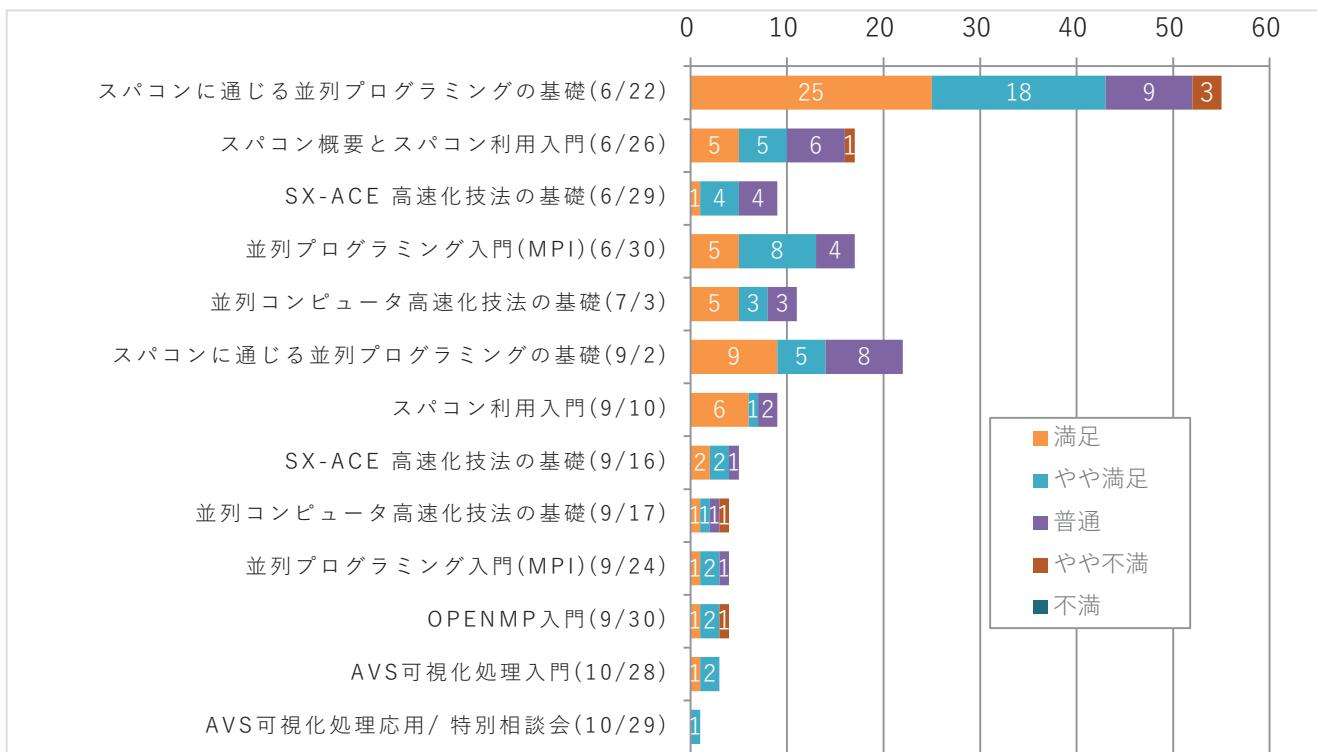
◆講習会で取り扱った内容量はどうでしたか。



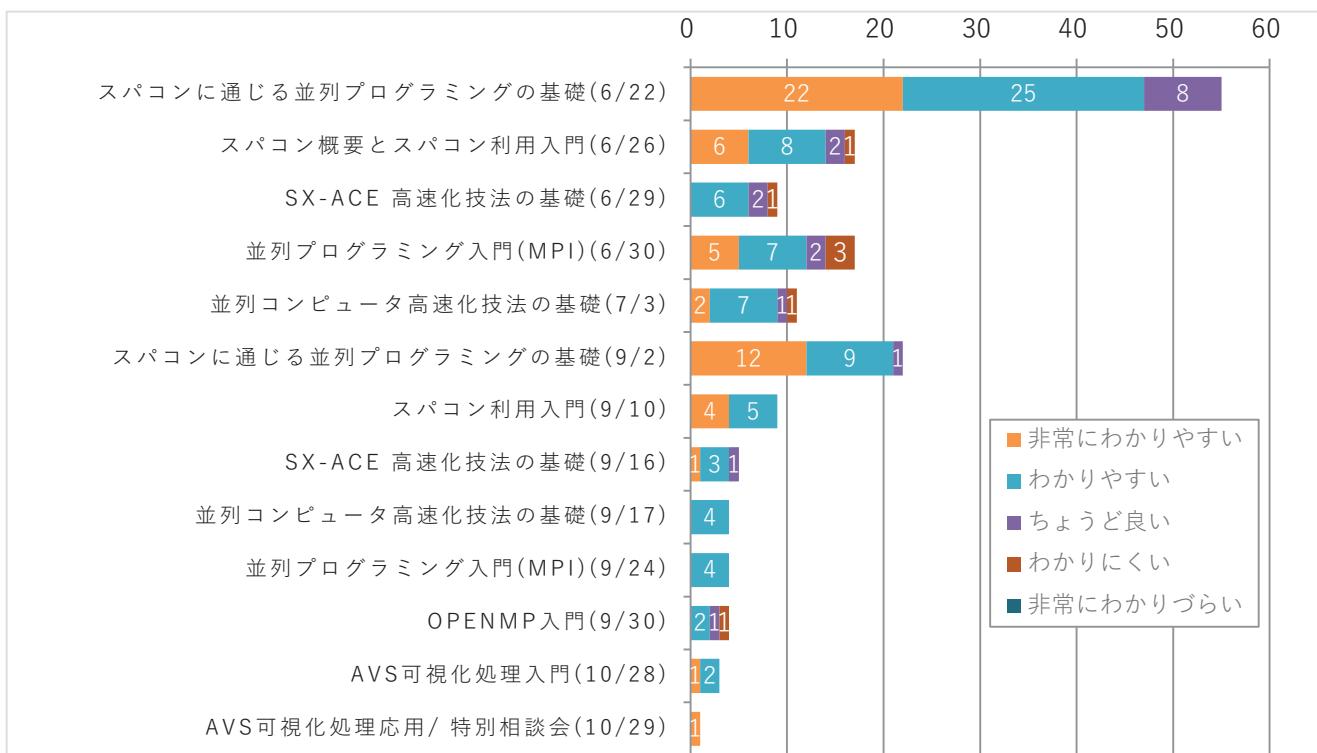
◆講師の進め方はどうでしたか。



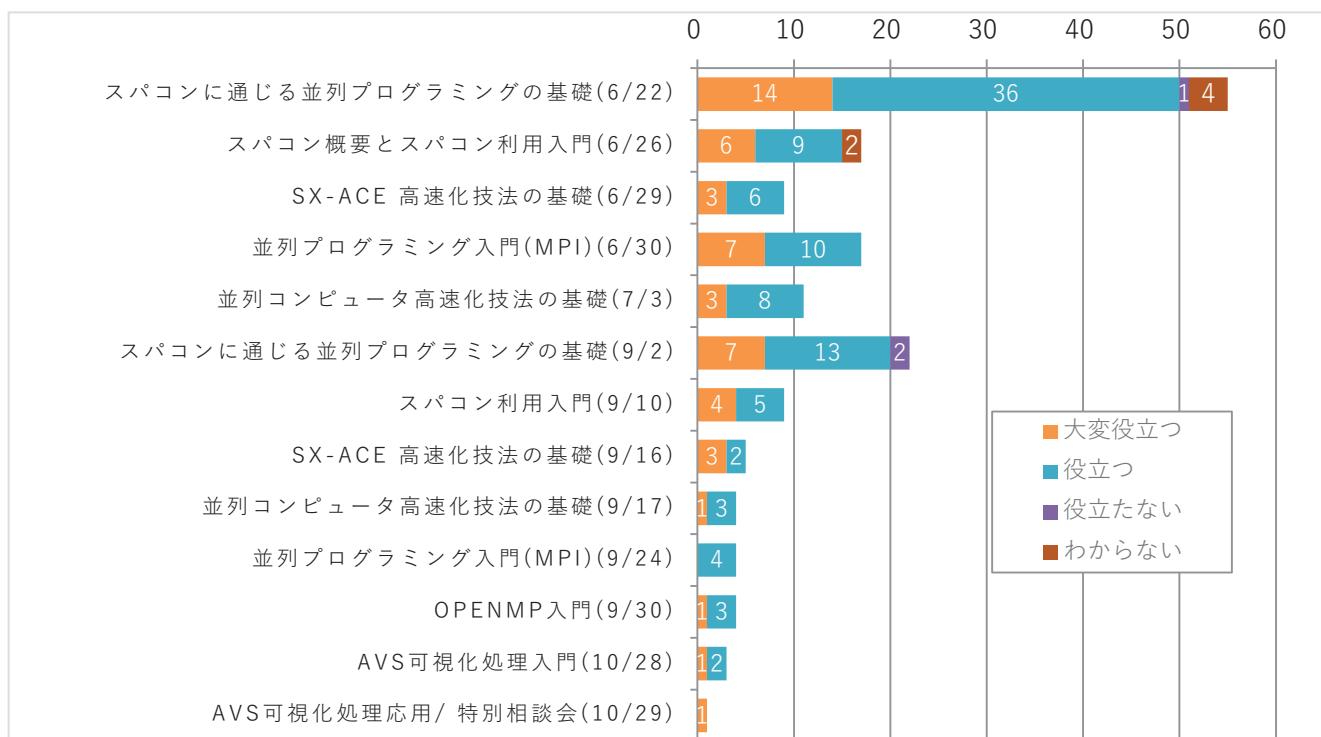
◆満足度は？



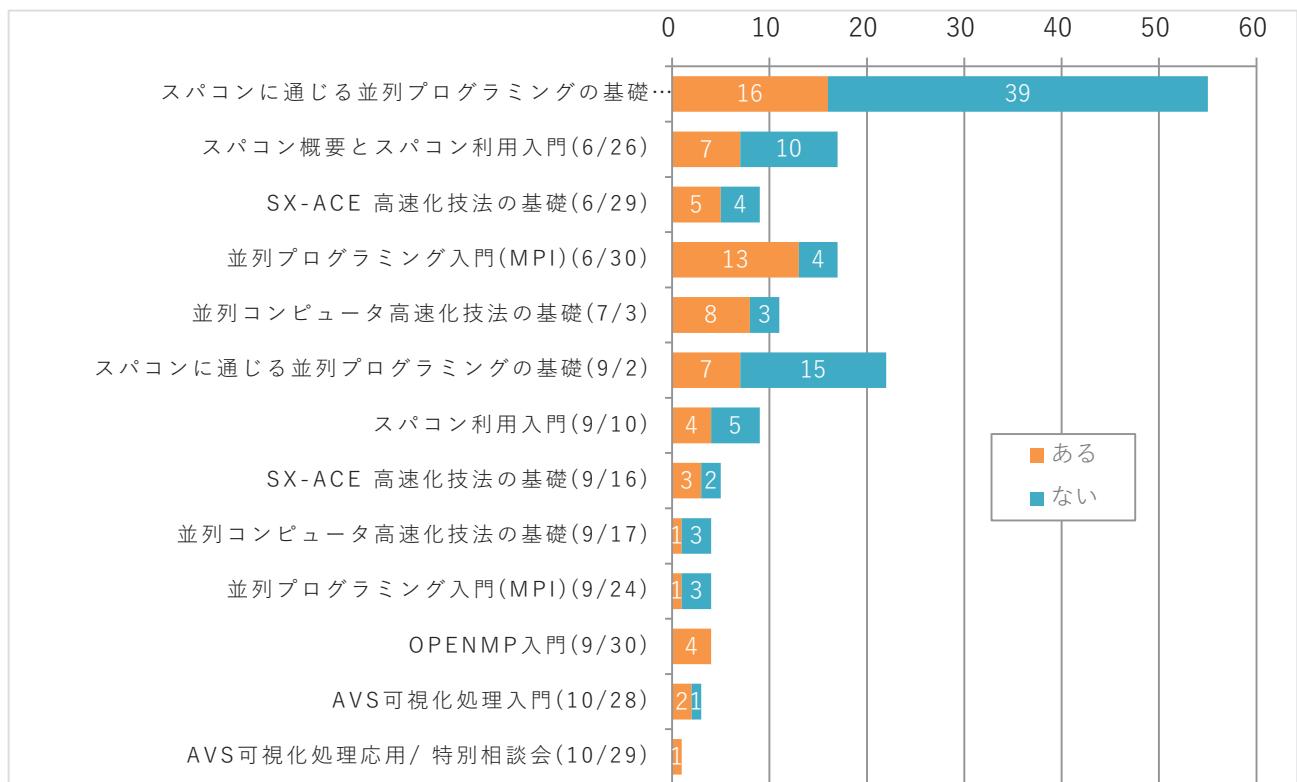
◆講習会の資料はどうでしたか。



◆皆さんの今後の研究・業務・勉学に役立つと思いますか。



◆他の情報基盤センター等も含め、これまでにスーパーコンピュータを利用したことがありますか。

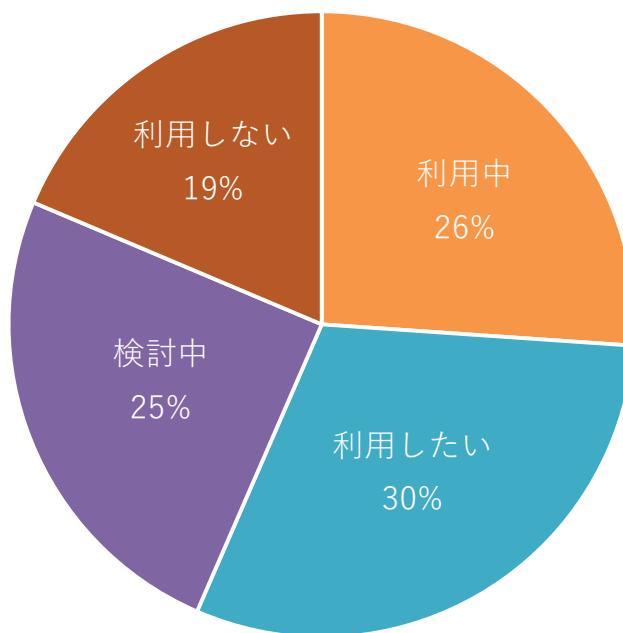


◆ 「ある」と回答された方の利用方法

■ プログラムの実行 ■ アプリケーション利用



◆ サイバーメディアセンターの大規模計算機システムの利用を希望されますか。



2021 年度「HPCI (High Performance Computing Infrastructure) 利用」の活動状況

HPCI(High Performance Computing Infrastructure)システムは、個別の計算資源提供機関ごとに分断されがちな全国の幅広いハイパフォーマンスコンピューティング（HPC）ユーザ層が全国の HPC リソースを効率よく利用できる体制と仕組みを整備し提供することを目的として構築され、2012 年 10 月より運用開始しました。北海道大学、東北大学、筑波大学、東京大学、東京工業大学、名古屋大学、京都大学、大阪大学、九州大学の各情報基盤センター、及び理化学研究所、海洋研究開発機構、統計数理研究所が資源提供機関となり、計算機資源や、共有ストレージ、ネットワーク、認証基盤、可視化装置等といったシステムを、中立・公正で科学的・技術的・社会的根拠に基づき配分・提供しています。

本センターの計算機資源を利用する 2021 年度 HPCI 採択課題一覧

利用枠	利用資源	研究課題名
一般課題	SQUID	Dirac 流モノポールによる QCD のカラー閉じ込め機構の モンテ・カルロ研究
一般課題	SQUID	Gradient flow による物理点 QCD の熱力学
一般課題	OCTOPUS	活動銀河核フィードバックと宇宙の化学汚染
一般課題	OCTOPUS	シクロデキストリン系高分子包接化合物による水圈機能材料の 分子シミュレーション
一般課題	SQUID	水中 Tetra-PEG ゲルの負のエネルギー弾性の分子論的解明
一般課題	SQUID	格子 QCD を用いた光・光散乱ダイアグラムの間接的計算
若手課題	SQUID	インスリン解離における共溶媒添加効果の自由エネルギー解析
産業課題	OCTOPUS	全原子型分子動力学計算によるゴム系粘着剤と粘着付与剤の バルク及び界面における親和性評価
「富岳」 産業課題	SQUID	ランダムコポリマーを用いた環状高分子の相溶構造の検証

2021 年度「学際大規模情報基盤共同利用・共同研究拠点」の活動状況

「学際大規模情報基盤共同利用・共同研究拠点」は、北海道大学、東北大学、東京大学、東京工業大学、名古屋大学、京都大学、大阪大学、九州大学にそれぞれ附置するスーパーコンピュータを持つ 8 つの共同利用の施設を構成拠点とし、東京大学情報基盤センターがその中核拠点として機能する「ネットワーク型」共同利用・共同研究拠点として、文部科学省の認可を受け、平成 22 年 4 月より本格的に活動を開始しました。

本ネットワーク型拠点の目的は、超大規模計算機と大容量のストレージおよびネットワークなどの情報基盤を用いて、地球環境、エネルギー、物質材料、ゲノム情報、Web データ、学術情報、センサーネットワークからの時系列データ、映像データ、プログラム解析、その他情報処理一般の分野における、これまでに解決や解明が極めて困難とされてきたいわゆるグランドチャレンジ的な問題について、学際的な共同利用・共同研究を実施することにより、我が国の学術・研究基盤の更なる高度化と恒常的な発展に資することにあります。本ネットワーク型拠点には上記の分野における多数の先導的研究者が在籍しており、これらの研究者との共同研究によって、研究テーマの一層の発展が期待できます。

2021 年度の課題募集には合計 49 課題が採択されました。このうち以下の 6 課題が本センターと共同研究することとなっています。

課題代表者	研究課題名
横田理央 (東京工業大学)	Hierarchical low-rank approximation methods on distributed memory and GPUs
飯田圭 (高知大学)	高密度領域まで適用可能なモンテカルロ法の開発と 有限密度 2 カラー QCD の相図の決定
関口宗男 (国士館大学)	格子 QCD によるスカラー中間子の質量生成機構の研究
萩田克美 (防衛大学校)	GPU の高速並列計算で実現する交差禁止制御可能な 高分子シミュレータの開発
村田忠彦 (関西大学)	合成人口プロジェクト：従業地・通学地属性の確率的割当てと 深層学習による空中写真からの住宅判別
谷川千尋 (大阪大学)	矯正歯科診断・治療計画立案を行う人工知能システムの開発

2020 年度 大規模計算機システム公募型利用制度 (追加募集) の活動状況

大阪大学サイバーメディアセンターでは、大規模計算機システムを活用する研究開発の育成・高度化支援の観点から、本センターが参画する「ネットワーク型」学際大規模情報基盤共同利用・共同研究拠点 (JHPCN) や革新的ハイパフォーマンス・コンピューティング・インフラ (HPCI) の目的を踏まえつつ、今後の発展が見込まれる萌芽的な研究課題や本センターの大規模計算機システムを最大限活用することで成果が見込まれる研究課題を公募しています。2020 年度は通常の募集に加えて追加募集を行い、以下の 3 課題を採択しました。

若手・女性研究者支援萌芽枠 採択課題

代表者名	研究課題名
谷川 千尋 様 (大阪大学 歯学部附属病院)	自動矯正歯科診断 A I システムの開発
上原 恵理香 様 (お茶の水女子大学 ソフトマター教育研究センター)	環状鎖メルトへの線状鎖の少量添加の粗視化 MD シミュレーション

人工知能研究特設支援枠 採択課題

代表者名	研究課題名
本田 崇人 様 (大阪大学 産業科学研究所)	IoT ビッグデータからのイベント予測による 異常検知ソフトウェアの開発

2021 年度 大規模計算機システム公募型利用制度の活動状況

2021 年度も引き続き研究課題の公募を行い、以下の 4 課題を採択しました。

若手・女性研究者支援萌芽枠 採択課題

代表者名	研究課題名
岩崎 昌子 様 (大阪市立大学 理学研究科)	素粒子物理学実験への機械学習の適用研究

大規模 HPC 支援枠 採択課題

代表者名	研究課題名
伊藤 悅子 様 (京都大学 基礎物理学研究所)	勾配流法とスペースモデリング法による QCD 粘性の決定
鈴木 恒雄 様 (大阪大学 核物理研究センター)	Dirac 流モノポール凝縮による QCD の カラー閉じ込め機構のモンテ・カルロ法研究

人工知能研究特設支援枠 採択課題

代表者名	研究課題名
小山 恭平 様 (大阪大学 生命機能研究科)	ニューラルネットワークによる蛋白質機能予測の 解釈性に関する研究

大規模計算機システム Q&A

当センターに寄せられた質問を掲載しております。

同じ内容を以下の Web ページでも閲覧いただけます。

<http://www.hpc.cmc.osaka-u.ac.jp/faq/>

Q. 年度途中で計算資源やストレージ容量の追加は可能でしょうか？

A. はい。可能です。資源追加の申請につきましては、以下の利用者管理 WEB システムから申請頂いております。

利用者管理システム（要認証）

<https://manage.hpc.cmc.osaka-u.ac.jp/saibed/>

申請手順につきましては、以下のページにまとめておりますので、ご参照ください。

一般利用（学術利用）資源追加申請

http://www.hpc.cmc.osaka-u.ac.jp/service/basic_resourceadd/

Q. 年度途中で利用負担金の支払い費目や支払い時期を変更できますか？

A. WEB システムからは変更できませんので、下記までご連絡ください。

大阪大学 情報推進部 情報基盤課 研究系システム班

Mail: system@cmc.osaka-u.ac.jp

TEL: 06-6879-8808

Q. ディスク容量を追加した場合、利用期限はいつまでですか？

A. 年度途中に申し込まれた場合でも、利用期限は年度末までとなります。翌年度にディスク容量を追加しない場合は、データの整理を 3 月中にお願いいたします。やむを得ない事情がある場合や、間に合わない場合は、ご連絡くださいませ。原則として、事前連絡無しにこちらでデータを削除することはできません。

Q. ユーザ間でファイルを転送することは可能でしょうか？

A. scp コマンドを使用することで可能です。

例えば、カレントディレクトリ下の abc ディレクトリの中のファイル sample.c を、b61234 のホームディレクトリに転送する場合は以下のようなコマンドとなります。

```
scp ./abc/sample.c b61234@localhost:
```

Q. 一度に大量のジョブを投入し、ジョブごとに入力ファイル/実行ファイルを変更したい

A. ファイル名に連続した数値が含まれている場合、パラメトリックジョブという投入方法で、一度に大量のジョブを投入できます。

パラメトリックジョブでは、ジョブスクリプト内の"\$PBS_SUBREQNO"環境変数に、-t で指定した数値(下記の例では 1 から 5 までの数値)が格納されます。qsub すると同時に 5 本のジョブが投入され、a.out に対してそれぞれ異なる入力ファイル(下記の例では input1 から input5) が設定されます。

ジョブスクリプト例(jobscript.sh)

```
#PBS -q OCTOPUS
#PBS -l elapstim_req=0:30:00,cpunum_job=24
cd $PBS_O_WORKDIR
./a.out input$PBS_SUBREQNO
```

投入方法

```
qsub -t 1-5 jobscript.sh
```

qstat の表示例:パラメトリックジョブの場合、1 回の qsub につき 1 件分の表示となります

RequestID	ReqName	UserName	Queue	Pri	STT	S	Memory	CPU	Elapse	R	H	M	Jobs
123456[1].oct	nqs	username	OC1C	0	QUE	-	-	-	-	Y	Y	Y	1

sstat の表示例:-t で指定した数値分だけ表示されます

RequestID	ReqName	UserName	Queue	Pri	STT	PlannedStartTime
123456[1].oct	nqs	username	OC1C	0.5002/	0.5002	QUE -
123456[2].oct	nqs	username	OC1C	0.5002/	0.5002	QUE -
123456[3].oct	nqs	username	OC1C	0.5002/	0.5002	QUE -
123456[4].oct	nqs	username	OC1C	0.5002/	0.5002	QUE -
123456[5].oct	nqs	username	OC1C	0.5002/	0.5002	QUE -

利用規程等

- ・規程関係

大阪大学サイバーメディアセンター大規模計算機システム利用規程 117

大阪大学サイバーメディアセンター大規模計算機システム利用負担額一覧 119

大阪大学サイバーメディアセンター大規模計算機システム試用制度利用内規 121

大阪大学サイバーメディアセンター大規模計算機システム利用相談員内規 121

- ・附 表

大規模計算機システム ホスト一覧 122

スーパーコンピュータSQUID、OCTOPUSのジョブクラスター一覧 122

2020年度大規模計算機システム稼働状況 125

・規程関係

大阪大学サイバーメディアセンター大規模計算機システム利用規程

第1条 この規程は、大阪大学サイバーメディアセンター(以下「センター」という。)が管理・運用する全国共同利用のスーパーコンピュータシステム及びワークステーションシステム(以下「大規模計算機システム」という。)の利用に関し必要な事項を定めるものとする。

第2条 大規模計算機システムは、学術研究及び教育等のために利用することができるものとする。

第3条 大規模計算機システムを利用することのできる者は、次の各号のいずれかに該当する者とする。

- (1) 大学、短期大学、高等専門学校又は大学共同利用機関の教員(非常勤講師を含む。)及びこれに準ずる者
- (2) 大学院の学生及びこれに準ずる者
- (3) 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轄する機関に所属し、専ら研究に従事する者
- (4) 学術研究及び学術振興を目的とする機関(前号に該当する機関を除く。)で、センターの長(以下「センター長」という。)が認めた機関に所属し、専ら研究に従事する者
- (5) 科学研究費補助金の交付を受けて学術研究を行う者
- (6) 第1号、第3号又は第4号の者が所属する機関との共同研究に参画している民間企業等に所属し、専から研究に従事する者
- (7) 日本国内に法人格を有する民間企業等に所属する者(前号に該当する者を除く。)で、別に定める審査に基づきセンター長が認めた者
- (8) 前各号のほか、特にセンター長が適当と認めた者

第4条 大規模計算機システムを利用しようとする者は、所定の申請を行い、センター長の承認を受けなければならない。ただし、前条第6条の者は、この限りでない。

2 前項の申請は、大規模計算機システム利用の成果が公開できるものでなければならない。

第5条 センター長は、前条第1項による申請を受理し、適当と認めたときは、これを承認し、利用者番号を与えるものとする。

2 前項の利用者番号の有効期間は、1年以内とする。ただし、当該会計年度を超えることはできない。

第6条 大規模計算機システムの利用につき承認された者(以下「利用者」という。)は、申請書の記載内容に変更を生じた場合は、速やかに所定の手続きを行わなければならない。

第7条 利用者は、第5条第1項に規定する利用者番号を当該申請に係る目的以外に使用し、又は他人に使用させてはならない。

第8条 利用者は、当該申請に係る利用を終了又は中止したときは、速やかにその旨をセンター長に届け出るとともに、そ

の利用の結果又は経過を所定の報告書によりセンター長に報告しなければならない。

- 2 前項の規定にかかわらず、センター長が必要と認めた場合は、報告書の提出を求めることができる。
- 3 提出された報告書は、原則として公開とし、センターの広報等の用に供することができるものとする。ただし、利用者があらかじめ申し出たときは、3年を超えない範囲で公開の延期を認めることがある。

第9条 利用者は、研究の成果を論文等により公表するときは、当該論文等に大規模計算機システムを利用した旨を明記しなければならない。

第10条 利用者は、当該利用に係る経費の一部を負担しなければならない。

第11条 前条の利用経費の負担額は、国立大学法人大阪大学諸料金規則に定めるところによる。

第12条 前条の規定にかかわらず、次の各号に掲げる場合についてでは、利用経費の負担を要しない。

- (1) センターの責に帰すべき誤計算があったとき。
- (2) センターが必要とする研究開発等のため、センター長が特に承認したとき。

第13条 利用経費の負担は、次の各号に掲げる方法によるものとする。

- (1) 学内経費(科学研究費補助金を除く。)の場合にあっては、当該予算の振替による。
- (2) 前号以外の場合にあっては、本学が発する請求書の指定する銀行口座への振込による。

第14条 センターは、利用者が大規模計算機システムを利用したことにより被った損害その他の大規模計算機システムに関連して被った損害について、一切の責任及び負担を負わない。

第15条 センターは、大規模計算機システムの障害その他やむを得ない事情があるときは、利用者への予告なしに大規模計算機システムを停止することができる。

第16条 センター長は、この規程又はこの規程に基づく定めに違反した者その他大規模計算機システムの運営に重大な支障を生じさせた者があるときは、利用の承認を取り消し、又は一定期間大規模計算機システムの利用を停止させることができる。

第17条 この規程に定めるもののほか、大規模計算機システムの利用に関し必要な事項は、センター長が定める。

附 則

- 1 この規程は、平成12年4月1日から施行する。
- 2 大阪大学大型計算機センターの利用に関する暫定措置を定める規程(昭和43年9月18日制定)は、廃止する。
- 3 この規程施行前に大阪大学大型計算機センターの利用に関する暫定措置を定める規程に基づき、平成12年度の利用承

認を受けた利用者にあっては、この規程に基づき利用の登録
があつたものとみなす。

附 則

この改正は、平成13年1月6日から施行する。

附 則

この改正は、平成13年4月1日から施行する。

附 則

この改正は、平成14年4月1日から施行する。

附 則

この改正は、平成14年6月19日から施行し、
平成14年4月1日から適用する。

附 則

この改正は、平成15年4月1日から施行する。

附 則

この改正は、平成16年4月1日から施行する。

附 則

この改正は、平成18年2月15日から施行する。

附 則

この改正は、平成19年9月28日から施行する。

附 則

この改正は、平成20年4月16日から施行する。

附 則

この改正は、平成23年4月1日から施行する。

附 則

この改正は、平成24年5月10日から施行する。

大阪大学サイバーメディアセンター大規模計算機システム利用負担額一覧

国立大学法人大阪大学諸料金規則 別表第17

大阪大学サイバーメディアセンター大規模計算機システム利用規程第11条の規定に基づく負担額

(1) OCTOPUSの負担額

(A) 占有

基本負担額	占有ノード数
191,000円／年	汎用CPUノード群 1ノード
793,000円／年	GPUノード群 1ノード
154,000円／年	XeonPhiノード群 1ノード

(B) 共有

コース	基本負担額	OCTOPUSポイント
	10万円	1,000 ポイント
50万円		5,250 ポイント
100万円		11,000 ポイント
300万円		34,500 ポイント
500万円		60,000 ポイント

(C) ディスク容量追加

基本負担額	提供単位
2,000円／年	1TB

備考

- 1 負担額は上記負担額で算出した合計額に、消費税(10%)を加えて得た額とする。
ただし、産業利用 成果非公開型の負担額は、上記負担額で算出した合計額に5を乗じ、消費税(10%)を加えて得た額とする。
- 2 登録時の利用期限または年度を越えて利用はできない。
- 3 ディスク容量は1申請単位で3TBを割り当てる。ただし、他のディスク容量と合算できない。
- 4 (A)は占有ノード数を追加する場合のみ変更申請を受け付ける。
- 5 (A)の2ノード以上の基本負担額は、1ノードを基準に比例するものとする。
- 6 (A)は資源提供状況により10ノード以上3か月単位の申請を受け付ける場合がある。
その場合の月額の負担額は、1ノード年の基本負担額の1/10とする。
- 7 (B)は年度の途中でコースの変更はできない。新たにコースを追加する場合は申請を受け付ける。
- 8 計算ノードの利用に使用するOCTOPUSポイントは、使用したノード時間に対して以下の消費係数および季節係数を乗じたものとする。季節係数は前年の利用状況等を鑑み、0を超える1以下の値を設定する。

ノード群	消費係数	季節係数
汎用CPUノード群	0.0520	大規模計算機システム WEBページに記載
GPUノード群	0.2173	
XeonPhiノード群	0.0418	
大容量主記憶搭載ノード群	0.3703	

9 (C)は年度の途中は追加申請のみ受け付ける。

10 (C)は1つの申請グループにつき、500TBの追加を上限とする。

(2) SQUIDの負担額

(A) 占有

基本負担額	占有ノード数
575,000円／年	汎用CPUノード群 1ノード
3,516,000円／年	GPUノード群 1ノード
2,168,000円／年	ベクトルノード群 1ノード

(B) 共有

コース	基本負担額	SQUIDポイント
	10万円	1,000 ポイント
50万円		5,250 ポイント
100万円		11,000 ポイント
300万円		34,500 ポイント
500万円		60,000 ポイント

(C)ストレージ容量追加

基本負担額	提供単位
2,000円／年	HDD 1TB
5,000円／年	SSD 1TB

備考

- 1 負担額は上記負担額で算出した合計額に、消費税(10%)を加えて得た額とする。
ただし、産業利用 成果非公開型の負担額は、上記負担額で算出した合計額に5を乗じ、消費税(10%)を加えて得た額とする。
- 2 登録時の利用期限または年度を越えて利用はできない。
- 3 ストレージ容量は1申請単位でHDD 5TBを割り当てる。ただし、他のストレージ容量と合算できない。
- 4 (A)は占有ノード数を追加する場合のみ変更申請を受け付ける。
- 5 (A)の2ノード以上の基本負担額は、1ノードを基準に比例するものとする。
- 6 (A)は資源提供状況により3か月単位の申請を受け付ける場合がある。
その場合の月額の負担額は、1ノード年の基本負担額の1/10とする。
- 7 (B)は年度の途中でコースの変更はできない。新たにコースを追加する場合は申請を受け付ける。
- 8 計算ノードの利用に使用するSQUIDポイントは、使用したノード時間に対して以下の消費係数および季節係数を乗じたものとする。季節係数は前年の利用状況等を鑑み、0を超える1以下の値を設定する。

ノード群	消費係数			季節係数
	高優先度	通常優先度	シェア	
汎用CPUノード群	0.1873	0.1499	0.1124	大規模計算機システム WEBページに記載
GPUノード群	1.1467	0.9174	0.6881	
ベクトルノード群	0.7070	0.5656	0.4242	

9 (C)は年度の途中は追加申請のみ受け付ける。

10 (C)は1つの申請グループにつき、HDD 500TB、SSD 10TBの追加を上限とする。

(3)ONION(オブジェクトストレージ)の負担額

基本負担額	提供単位
12,000 円／年	1TB

備考

年度の途中は追加申請のみ受け付ける。

大阪大学サイバーメディアセンター大規模計算機システム試用制度利用内規

第1条 この内規は、大阪大学サイバーメディアセンター（以下「センター」という。）が管理運用する全国共同利用のスーパーコンピュータシステム及びワークステーション（以下「大規模計算機システム」という。）の試用制度を利用するための必要な事項を定める。

第2条 試用制度は、初めてセンターの大規模計算機システムを利用する者（以下「利用者」という。）に一定の期間利用させることによって、利用者の研究活動における大規模計算機システムの有用性を確認できるようにすることを目的とする。

第3条 試用制度を利用することができる者は、大阪大学サイバーメディアセンター大規模計算機システム利用規程第3条に該当する者とする。

第4条 利用者は所定の申請手続きを行い、センター長の承認を得なければならない。

第5条 センター長は、前条の申請について適当と認めた場合は、利用者番号を与えて承認するものとする。

第6条 利用者の有効期間は初めて利用する計算機資源毎に3ヶ月間とする。ただし、当該会計年度を超えることはできないものとする。

2 計算機資源当たり500ノード時間を利用できるものとする。ただし、全国共同利用大規模並列計算システムOCTOPUSについては26 OCTOPUSポイントを利用できるものとする。

3 利用有効期間を超えた場合は、利用を停止するものとする。

第7条 利用者は、第5条に規定する利用者番号を当該申請に係る目的以外に使用し、又は他人に使用させてはならない。

第8条 センター長は、この内規に違反した場合、もしくは氏名等を偽り利用した場合、その他大規模計算機システムの運営に重大な支障を生ぜしめた場合には、当該利用の承認を取り消すことがある。

附 則

この内規は、平成12年11月30日から施行し、平成12年4月1日から適用する。

附 則

この改正は、平成13年1月6日から施行する。

附 則

この改正は、平成14年4月1日から施行する。

附 則

この改正は、平成16年4月1日から施行する。

附 則

この改正は、平成18年4月1日から施行する。

附 則

この改正は、平成19年1月5日から施行する。

附 則

この改正は、平成19年9月28日から施行する。

附 則

この改正は、平成24年4月1日から施行する。

附 則

この改正は、平成28年4月1日から施行する。

附 則

この改正は、平成30年11月1日から施行し、平成30年4月1日から適用する。

大阪大学サイバーメディアセンター大規模計算機システム利用相談員内規

第1条 大阪大学サイバーメディアセンター（以下「センター」という。）は、センターが管理・運用する全国共同利用のスーパーコンピュータシステム及びワークステーション（以下「大規模計算機システム」という。）の共同利用の効果を高め学術研究の発展に資するため、大規模計算機システム利用相談及び指導活動を行う。

2 前項の目的のため、センターに利用相談員を置く。

第2条 相談員は、共同利用有資格者の中から高性能計算機システム委員会が候補者を推せんし、センター長が委嘱する。

第3条 相談員の任期は、当該委嘱する日の属する年度の末日までとする。ただし、再任を妨げない。

第4条 相談員は、電子メール等を利用してオンラインで、第1条第1項のセンター利用相談活動を行うものとする。

第5条 相談員には、センター利用相談及び指導の必要上、計算機利用のために特定の番号を与えることができる。

2 前項に係る利用経費の負担額は免除する。

第6条 センターは、相談員に対し相談及び指導上必要な資料もしくは情報を提供するものとする。

第7条 相談員には、第5条第1項の目的以外においても、一定量の大規模計算機システム使用にかかるジョブ優先処理等の特典を与えることができる。

第8条 この内規に定めるもののほか、必要な事項については、高性能計算機システム委員会で検討後、教授会の議を経てセンター長が別に定めるものとする。

附 則

この内規は、平成12年11月30日から施行し、平成12年4月1日から適用する。

附 則

この改正は、平成19年9月28日から施行する。

附 則

この改正は、平成22年9月16日から施行し、平成22年7月22日から適用する。

附 則

この改正は、平成25年4月1日から施行する。

・附表

大規模計算機システム ホスト一覧

サーバ名	ホスト名
ログインサーバ (SQUID)	squidhpc.hpc.cmc.osaka-u.ac.jp
ログインサーバ (OCTOPUS)	octopus.hpc.cmc.osaka-u.ac.jp

※スーパーコンピュータなどの演算システムへは、ログインサーバ経由での接続となります。
(ホスト一覧表には明記していません)

スーパーコンピュータ SQUID のジョブクラスター一覧

汎用 CPU ノード群

利用方法	ジョブクラス	利用可能 経過時間	利用可能 最大 Core 数	利用可能メモリ	同時利用 可能ノード数	備考
共有利用	SQUID	24 時間	38,912 Core (76Core×512 ノード)	124 TB (248GB×512 ノード)	512 ノード	
	SQUID-R	24 時間	38,912 Core (76Core×512 ノード)	124 TB (248GB×512 ノード)	512 ノード	※1
	SQUID-H	24 時間	38,912 Core (76Core×512 ノード)	124 TB (248GB×512 ノード)	512 ノード	※2
	SQUID-S	24 時間	38 Core (76Core×0.5 ノード)	124 GB (248GB×0.5 ノード)	0.5 ノード	※3
	DBG	10 分	152 Core (76Core×2 ノード)	496 GB (248GB×2 ノード)	2 ノード	
	INTC	10 分	152 Core (76Core×2 ノード)	496 GB (248GB×2 ノード)	2 ノード	
占有利用	mySQUID	無制限	76Core×占有ノード数	248GB×占有ノード数	占有ノード数	

※1. クラスタを跨ぐ（相互接続網の帯域が狭い経路の）割当を許容するキュー。実行待ち時間が短縮される場合がある。

※2. 高優先度のため実行待ち時間が短縮されるが、ポイントの消費が大きくなる。

※3. 他のジョブとの 1 ノード内での資源共有を許容するキュー。ポイント消費が小さくなるが、他のジョブの影響を受ける可能性がある。

GPU ノード群

利用方法	ジョブ クラス	利用可能 経過時間	利用可能 最大 Core 数	利用可能メモリ	同時利用 可能ノード数	備考
共有利用	SQUID	24 時間	2,432 Core (76Core×32 ノード)	15.75 TB (504GB×32 ノード)	512 ノード	
	SQUID-H	24 時間	2,432 Core (76Core×32 ノード)	15.75 TB (504GB×32 ノード)	512 ノード	※1
	SQUID-S	24 時間	38 Core (76Core×0.5 ノード)	252 GB (504GB×0.5 ノード)	0.5 ノード	※2
	DBG	10 分	152 Core (76Core×2 ノード)	1,008 GB (504GB×2 ノード)	2 ノード	
	INTC	10 分	152 Core (76Core×2 ノード)	1,008 GB (504GB×2 ノード)	2 ノード	
占有利用	mySQUID	無制限	76Core×占有ノード数	504GB×占有ノード数	占有ノード数	

※1. 高優先度のため実行待ち時間が短縮されるが、ポイントの消費が大きくなる。

※2. 他のジョブとの 1 ノード内での資源共有を許容するキュー。ポイント消費が小さくなるが、他のジョブの影響を受ける可能性がある。

ベクトルノード群

利用方法	ジョブ クラス	利用可能 経過時間	利用可能 最大 Core 数	利用可能メモリ	同時利用 可能 VE 数	備考
共有利用	SQUID	24 時間	2,560 Core (10Core×256VE)	12 TB (48GB×256VE)	256VE	
	SQUID-H	24 時間	2,560 Core (10Core×256VE)	12 TB (48GB×256VE)	256VE	※1
	SQUID-S	24 時間	40 Core (10Core×4VE)	192 GB (48GB×4VE)	0.5 ノード	※2
	DBG	10 分	40 Core (10Core×4VE)	192 GB (48GB×4VE)	0.5 ノード	
	INTC	10 分	40 Core (10Core×4VE)	192 GB (48GB×4VE)	0.5 ノード	
占有利用	mySQUID	無制限	10Core×占有 VE 数	48GB×占有 VE 数	占有 VE 数	

※1. 高優先度のため実行待ち時間が短縮されるが、ポイントの消費が大きくなる。

※2. 他のジョブとの 1 ノード内での資源共有を許容するキュー。ポイント消費が小さくなるが、他のジョブの影響を受ける可能性がある。

OCTOPUS のジョブクラス一覧

汎用 CPU ノード群

利用方法	ジョブクラス	利用可能 経過時間	利用可能 最大 Core 数	利用可能 最大メモリ	同時利用 可能ノード数
共有利用	OCTOPUS	120 時間	3,072 Core (24Core×128 ノード)	24,576 GB (192GB×128 ノード)	128 ノード
	DBG	10 分	24 Core	192 GB	1 ノード
占有利用	myOCTOPUS	無制限	24Core×占有ノード数	192GB×占有ノード数	占有ノード数

GPU ノード群

利用方法	ジョブクラス	利用可能 経過時間	利用可能 最大 Core 数	利用可能メモリ	同時利用 可能ノード数
共有利用	OCTOPUS	120 時間	768 Core (24Core×32 ノード)	6,144 GB (192GB×32 ノード)	32 ノード
	DBG	10 分	24 Core	192 GB	1 ノード
占有利用	myOCTOPUS	無制限	24Core×占有ノード数	192GB×占有ノード数	占有ノード数

Xeon Phi ノード群

利用方法	ジョブクラス	利用可能 経過時間	利用可能 最大 Core 数	利用可能メモリ	同時利用 可能ノード数
共有利用	OCTPHI	120 時間	2,048 Core (64Core×32 ノード)	6,144 GB (192GB×32 ノード)	32 ノード
占有利用	myOCTPHI	無制限	24Core×占有ノード数	192GB×占有ノード数	占有ノード数

大容量主記憶搭載ノード群

利用方法	ジョブクラス	利用可能 経過時間	利用可能 最大 Core 数	利用可能メモリ	同時利用 可能ノード数
共有利用	OCTMEM	120 時間	256 Core (128Core×2 ノード)	12TB (6TB×2 ノード)	2 ノード

2020 年度大規模計算機システム稼働状況

稼働状況

事 項	月	(単位:時間)													
		4	5	6	7	8	9	10	11	12	1	2	3	合計	月平均
稼 動 時 間	稼算サービス時間 (A1)	710:00	744:00	720:00	744:00	744:00	709:30	744:00	720:00	744:00	744:00	672:00	744:00	8739:30	728:17
	初期化・後処理時間 (A2)	0:00	0:00	0:00	0:00	0:00	0:00	0:00	0:00	0:00	0:00	0:00	0:00	0:00	0:00
	業 務 時 間 (A3)	0:00	0:00	0:00	0:00	0:00	0:00	0:00	0:00	0:00	0:00	0:00	0:00	0:00	0:00
	(A) 小 計	710:00	744:00	720:00	744:00	744:00	709:30	744:00	720:00	744:00	744:00	672:00	744:00	8739:30	728:17
保 守 時 間 (B)	10:00	0:00	0:00	0:00	0:00	10:30	0:00	0:00	0:00	0:00	0:00	0:00	0:00	20:30	1:42
故 障 時 間 (C)	0:00	0:00	0:00	0:00	0:00	0:00	0:00	0:00	0:00	0:00	0:00	0:00	0:00	0:00	0:00
その他の時間 (D)	0:00	0:00	0:00	0:00	0:00	0:00	0:00	0:00	0:00	0:00	0:00	0:00	0:00	0:00	0:00
運転時間 (A+B+C+D)	720:00	744:00	720:00	744:00	744:00	720:00	744:00	720:00	744:00	744:00	672:00	744:00	8760:00	730:00	
稼動率 (A/(A+B+C+D)%)	98.61	100.00	100.00	100.00	100.00	98.54	100.00	100.00	100.00	100.00	100.00	100.00	100.00	—	99.76
運 転 日 数 (E)	30	31	30	31	31	30	31	30	31	31	28	31	365	30	
一日平均稼動時間 (A/E)	23:40	24:00	24:00	24:00	24:00	23:39	24:00	24:00	24:00	24:00	24:00	24:00	—	23:56	

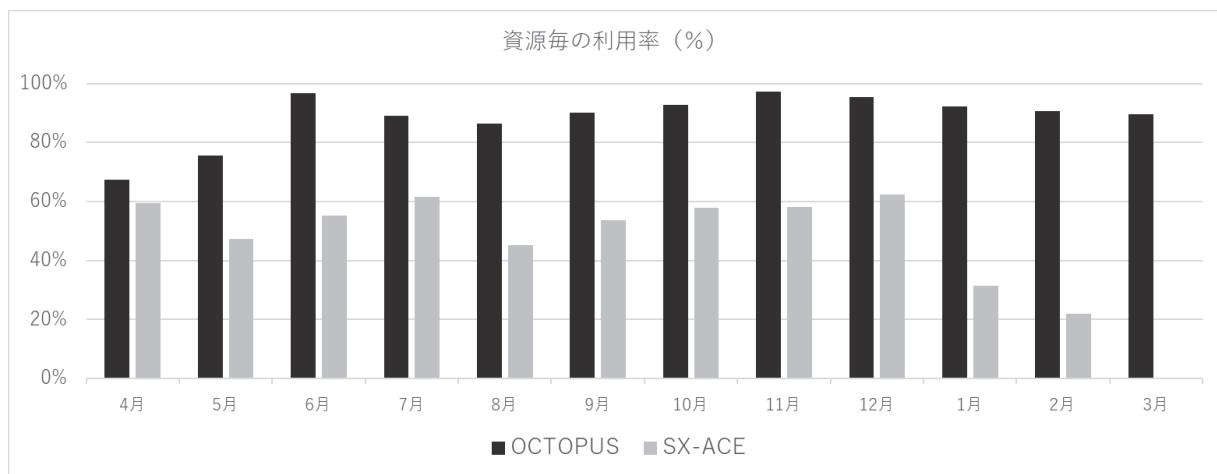
処理状況

処理月	スーパーコンピュータSX-ACE			OCTOPUS			
	共有利用		占有利用 CPU時間(時)	利用率(%)	共有利用		
	ジョブ件数	CPU時間(時)			ジョブ件数	CPU時間(時)	
4月	8,672	202,813	7,100	59.5%	17,376	152,221	67.3%
5月	2,832	160,703	7,410	47.2%	19,616	179,489	75.6%
6月	5,774	201,587	7,200	55.4%	15,934	221,375	96.6%
7月	5,975	227,264	7,440	61.6%	26,048	211,740	89.2%
8月	6,278	164,966	7,440	45.3%	25,162	204,692	86.3%
9月	4,667	150,898	5,903	53.6%	14,972	197,677	90.2%
10月	6,176	166,389	7,440	58.0%	21,052	220,211	92.8%
11月	3,733	166,963	7,200	58.2%	17,448	223,307	97.3%
12月	3,777	179,012	7,440	62.4%	15,974	226,333	95.4%
1月	3,488	90,654	7,440	31.6%	17,299	218,754	92.2%
2月	4,298	63,113	6,720	22.0%	17,260	193,786	90.6%
3月	-	-	-	-	9,916	212,033	89.6%
合計	55,670	1,774,362	78,733	-	218,057	2,461,618	-

(注) 利用率は、次の計算式により算出している。

$$\text{スーパーコンピュータ SX-ACE の利用率} = (\text{SX-ACE の CPU 時間} / \text{稼働中ノードの合計サービス時間}) * 100$$

$$\text{OCTOPUS の利用率} = (\text{OCTOPUS のノード時間積} / \text{稼働中ノードの合計サービス時間}) * 100$$



募 集

- ・大規模計算機システムを利用して行った研究・開発等の記事の募集について 129
- ・大規模計算機システム利用案内（サービス内容・サービス時間等） 130

大規模計算機システムを利用して行った研究・開発等の記事の募集について

（センターでは、大規模計算機システムを利用して研究したことを主体とする内容の広報誌「サイバーメディア HPC ジャーナル」を発行しています。この広報誌に掲載する次の内容の記事を募集しますので、皆さんのご投稿をお待ちしています。）

1. 隨筆
2. 大規模計算機システムを利用して行った研究・開発の紹介
3. プログラムの実例と解説
4. その他、広報誌に掲載するにふさわしいもの

*投稿いただいた方には、掲載した広報誌 5 部を進呈いたします。

【原稿の執筆および提出方法】

1. 原稿の執筆は、以下の書式設定で作成をお願いします。
 - ・ページ設定 (Microsoft Word2010 の設定です。)
 - ・用紙サイズ A4 縦
 - ・1 ページの文字数と行数：行数 40、行送り 18.2 pt、1 頁 2 段書き
 - ・フォント 本文 MS 明朝 10 pt
題名 MS ゴシック 14 pt、半角英数 Times New Roman
執筆者氏名 MS 明朝 10 pt、なお、姓と名の間及び機関と研究科と専攻名の間は半角スペースを入れる。
 - ・余白 上 20mm、下 20mm、左右 20mm、印刷形式：標準
 - ・その他 セクションの開始位置：次のページから開始
用紙の端からの距離：ヘッダ 15mm、フッタ 17.5mm
垂直方向の配置：上寄せ
 - ・文字等の設定
 - ・年は西暦で記述する。
 - ・数字、英字は半角（書式：Times New Roman）、数字英字を括弧で閉じる場合は、括弧も同様に半角
 - ・文字、漢字は全角、文字漢字を括弧で閉じる場合は、括弧も同様に全角
 - ・日本語文中の句読点は半角の“、”“.”を使用せず、全て全角の“、”“。”とする。
2. Microsoft Word 以外の日本語ワープロソフト及び、その他の文書作成ソフトで作成された原稿を投稿される場合は、PDF ファイルに変換してください。
3. 原稿は、電子メールにて以下のアドレスにお送りください。
zyosui-kikaku-soumu@office.osaka-u.ac.jp
なお、送信の際、件名を「HPC ジャーナル原稿」と入力くださるよう、お願いします。
4. 電子メールの容量が 35MB を超える場合は、CD-R 等の電子媒体に記録のうえ、以下の送付先にお送りください。
【原稿の送付先】
〒567-0047
大阪府茨木市美穂ヶ丘 5-1 大阪大学情報推進部情報企画課総務係

【注意事項】

1. お送りいただいた原稿を掲載する際、原稿の修正をお願いすることがありますのでご了承ください。
2. 提出いただいた原稿は、サイバーメディアセンターのホームページにて公開いたしますので、ご了承ください。

大規模計算機システム利用案内（サービス内容・サービス時間等）

・サービス内容

主なサービス内容	係・連絡先等	開館時間	
		月～金	土・日・祝休日
センター見学の申込、広報	情報推進部情報企画課 総務係（本館1F） 電話 06-6879-8804 zyosui-kikaku-soumu@office.osaka-u.ac.jp		
利用負担金に係る会計事務（請求及び収納）	情報推進部情報企画課 会計係（本館1F） 電話 06-6879-8980,8981 zyosui-kikaku-kaikei@office.osaka-u.ac.jp	8:30～12:00	閉 館
利用案内、受付 利用案内、利用申請、利用負担金、 利用講習会受付、 計算機マニュアルの閲覧	情報推進部情報基盤課 研究系システム班（本館1F） 電話 06-6879-8808,8812 system@cmc.osaka-u.ac.jp	13:00～17:15	
利用方法の問い合わせ スーパーコンピュータ、PCクラスタ等の 利用方法	情報推進部情報基盤課 研究系システム班（本館1F） 電話 06-6879-8812,8813 system@cmc.osaka-u.ac.jp		

・サービス時間

スーパーコンピュータ、PCクラスタ等	オンラインサービス 24時間365日（注）
--------------------	-----------------------

（注）障害の発生等により、予告なしにサービスを中止することがあります。
計画停電・定期保守によりサービスを停止する場合は、ホームページでお知らせします。

・大規模計算機システムURL

大規模計算機システムホームページ	http://www.hpc.cmc.osaka-u.ac.jp/
大規模計算機システムポータル (スーパーコンピュータ等についての情報を提供 しています。マニュアルの閲覧、パスワード の変更等が行えます。)	https://portal.hpc.cmc.osaka-u.ac.jp/portal/

・利用相談

プログラム、センターの利用に関する 質問・相談	利用相談を電子メールで受けます。 E-mail: system@cmc.osaka-u.ac.jp に質問・相談をお寄せください。 ※お問い合わせの際には、利用者番号をお申し出ください。
----------------------------	--

(お願い)

サイバーメディア HPC ジャーナルは、本センター利用者（利用登録者）の皆様に配布しています。お近くの研究者・大学院生の方にも、本冊子をご回覧くださるようお願い申し上げます。

大阪大学サイバーメディアHPCジャーナル No. 11
2021年11月発行

編集： 大阪大学サイバーメディアセンター

発行： 大阪府茨木市美穂ヶ丘 5-1 (〒567-0047)
大阪大学サイバーメディアセンター
Cybermedia Center, Osaka University
Tel: 06-6879-8805
URL: <https://www.hpc.cmc.osaka-u.ac.jp/>

印刷： 阪東印刷紙器工業所

表紙デザイン：阿部 浩和（大阪大学）

大阪大学サイバーメディアHPCジャーナル
High Performance Computer Journal

大規模計算機システムホームページ <http://www.hpc.cmc.osaka-u.ac.jp/j/>

