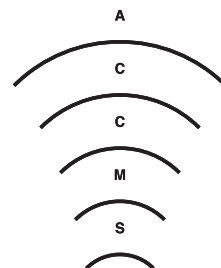


京都大学学術情報メディアセンター

Academic Center for Computing and Media Studies, Kyoto University

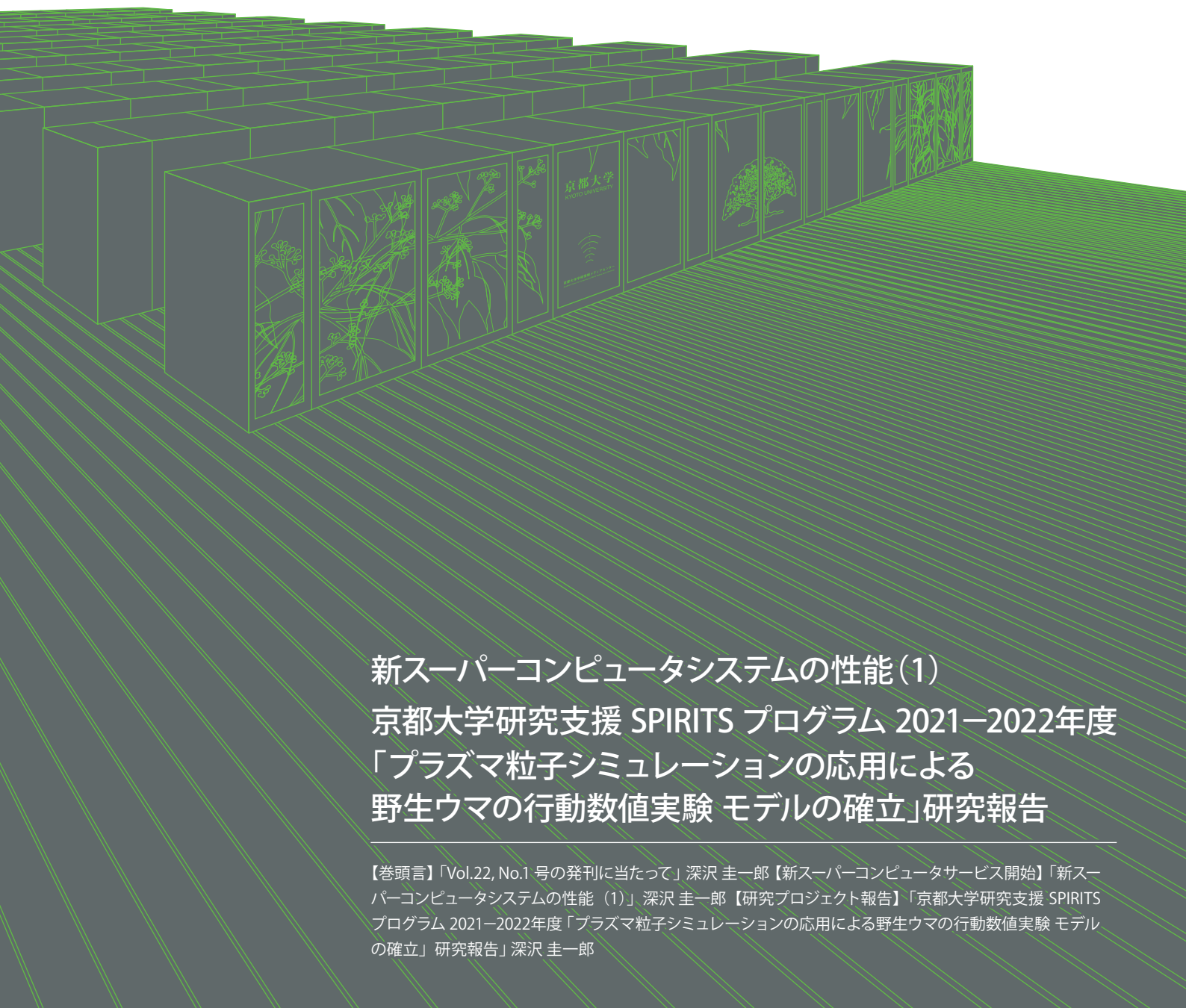


広報

全国共同利用版

Vol.22, No.1 2023

ISSN 1347-3581



新スーパーコンピュータシステムの性能(1)

京都大学研究支援 SPIRITS プログラム 2021-2022年度
「プラズマ粒子シミュレーションの応用による
野生ウマの行動数値実験 モデルの確立」研究報告

【巻頭言】「Vol.22, No.1 号の発刊に当たって」深沢 圭一郎【新スーパーコンピュータサービス開始】「新スーパーコンピュータシステムの性能 (1)」深沢 圭一郎【研究プロジェクト報告】「京都大学研究支援 SPIRITS プログラム 2021-2022年度「プラズマ粒子シミュレーションの応用による野生ウマの行動数値実験 モデルの確立」研究報告」深沢 圭一郎

巻頭言

Vol. 22, No.1 号の発刊に当たって

京都大学学術情報メディアセンター

深沢 圭一郎

昨年度の夏に旧スーパーコンピュータ（スパコン）システムを停止し、実質的なリプレイスが始まりましたが、CPU の出荷遅れなど予期しない様々な問題が起これ、新システム B の稼働開始が今年度からとなってしまいました。昨年 11 月にはクラウドシステムとストレージの稼働、その後に新システム B の代替としてシステム D が稼働しましたが、利用者の方には大変ご迷惑をおかけし、申し訳ありません。また、計画通りとはいえ、新システム A が今夏稼働というところで、現在もリプレイス中であり、計算資源不足が続いています。この号が出る頃には新システム A が稼働または稼働間近と思います。本号の特集記事でわずかに新システム A の CPU（Xeon CPU Max）の性能を Intel の協力により掲載しています。高メモリバンドなメモリを搭載した CPU のため、かなり実行性能が高いことが確認できており、待ったかいがあるシステムになると期待しています。

本号の特集記事の主テーマは新システム B の性能評価報告となっています。理論性能に関しては、これまでにご報告しているところですが、システム B の CPU である第 4 世代 Xeon は開発が遅れた結果、その実際の性能についてはほぼ報告がありませんでした。今回は、京都大学のスパコンのリプレイス時に利用している様々なベンチマークアプリケーションを実際にシステム B で動かして、旧システムとの実際の性能向上について報告しています。このアプリケーションは、スパコン向けによく利用されるものから、京都大学独自の粒子計算、流体計算が含まれており、利用者の方のアプリケーションに近い計算もあると思います。すでにシステム B は利用できますが、ご自分のアプリケーションの実行性能向上に関して参考にいただければと思います。記事内では、深沢のアプリケーションになりますが、システム D とクラウドシステム、システム G との性能比較もしています。こちらも参考にいただければと思います。

また、学術情報メディアセンターの研究プロジェクト報告として、「プラズマ粒子シミュレーションの応用による野生ウマの行動数値実験モデルの確立」を紹介しています。こちらは野生のウマの動きをシミュレーションする際に、宇宙プラズマ粒子シミュレーションを応用するという研究となっています。分野は全く違いますが、意外に応用がうまく行き、またスパコンを利用することでその計算が実現できています。

まだリプレイス中ということで、利用者の方にはご迷惑をおかけします。新システムでは使い方が一部変わっていますが、できるだけ使いやすく、またプログラムのチューニングもなく性能が出る計算機を目指して準備しています。システム A の性能に期待しつつフル稼働までもう少しお待ちください。今後ともセンターをよろしくお願いいたします。

新スーパーコンピュータシステムの性能（1）

深沢 圭一郎

京都大学学術情報メディアセンター

前号（Vol.21 No.1）では、新しく京都大学に導入されたスーパーコンピュータシステム（新スパコン）の構成を紹介しました。前システムの後継としてのシステム A（Camphor3）、システム B（Laurel3）、システム C（Cinnamon3）、新たに導入された GPU システムであるシステム G（Gardenia）とストレージシステムを紹介しました。新スパコンの概要は図 1 のようになります。前号では CPU の情報が公開されていませんでしたが、現在は公開されているた

め、図中に CPU の型式や性能について記載がされています。新スパコンのうちシステム A と高速ストレージを除いたシステムが第 1 段階として 2022 年 11 月から 2023 年 4 月にかけて導入が行われ、稼働を開始しています。今回は、主にシステム B の性能について、旧システムとの比較や簡易的な性能調査結果を紹介します。

新システム B は、最新の Xeon（コードネーム Sapphire Rapids）と DDR5 メモリから構成されま

Camphor 3 (System A)

Intel Xeon CPU Max 9480, 56cores 1.9GHz x 2 /node
#nodes = 1,120
#total cores = 112 cores x 1,120 → 125,440 cores
Peak performance = 6.80 TFLOPS x 1,120 → 7.63 PFLOPS
Memory capacity = 128 GiB x 1,120 → 140 TiB
Memory bandwidth = 3.2 TB/sec x 1,120 → 3.6 PB/sec

Storage

HDD capacity = 40 PB
HDD bandwidth = 280 GB/sec
SSD capacity = 4 PB
SSD bandwidth = 768 GB/sec

高速通信網 InfiniBand HDR/NDR

Laurel 3 (System B)

Intel Xeon Platinum 8480+, 56cores 2.0GHz x 2 /node
#nodes = 370
#total cores = 112 cores x 370 → 41,440 cores
Peak performance = 7.17 TFLOPS x 370 → 2.65 PFLOPS
Memory capacity = 512 GiB x 370 → 185 TiB
Memory bandwidth = 614 GB/sec x 370 → 227 TB/sec

Gardenia (System G)

AMD EPYC 7513, 32cores 2.6GHz x 2 /node
#nodes = 16
#total cores = 64 cores x 16 → 1,024 cores
Peak performance = 2.66 TFLOPS x 16 → 42.6 TFLOPS
Memory capacity = 512 GiB x 16 → 8.2 TiB
Memory bandwidth = 409 GB/sec x 16 → 6.5 TB/sec

Cinnamon 3 (System C)

Intel Xeon Platinum 8480+, 56cores 2.0GHz x 2 /node
#nodes = 16
#total cores = 112 cores x 16 → 1,792 cores
Peak performance = 7.17 TFLOPS x 16 → 114.6 TFLOPS
Memory capacity = 2 TiB x 16 → 32 TiB
Memory bandwidth = 563 GB/sec x 16 → 9 TB/sec

Accelerator

NVIDIA A100 80GB SXM x 4 /node
#GPUs = 4 GPU x 16 → 64 GPU
Peak performance = 19.5 TFLOPS x 64
(FP64) → 1.24 PFLOPS
Peak performance = 312 TFLOPS x 64
(FP16) → 20.0 PFLOPS
Memory capacity = 80 GiB x 64 → 5.1 TiB
Memory bandwidth = 2.04 TB/sec x 64 → 130 TB/sec

Cloud System (via SINET L2VPN)

Intel Xeon Gold 6354, 3.0GHz 18cores x 2 /node
#nodes = flexible
Peak performance /node = 3.45 TFLOPS
Memory capacity /node = 512 GiB

図 1 新スーパーコンピュータシステム概要

表 1 新システム B (Laurel3) と前システム B (Laurel2) のノード仕様

	コア数	周波数 [GHz]	最大同時 演算数	理論演算 性能 [GFlops]	メモリ バンド幅 [GB/s]	B/F	AVX2 理論 演算性能 [GFlops]	B/F
Laurel3	112	2.0	32	7168	614.4	0.086	3584.0	0.171
Laurel2	36	2.1	16	1209.6	153.6	0.127	1209.6	0.127
性能比	3.11	0.95	2.00	5.93	4.00	0.675	2.963	1.349

す。まず、前システム B と新システム B のノード仕様に関して表 1 に示します。表 1 では、Laurel3 の Laurel2 に対する性能比も示しています。コア数は大きく向上し 3 倍以上の 112 コアになり、AVX-512 が使えるため最大同時演算数も 2 倍になっています。これらにより周波数に大きな変化はありませんが、1 ノードの理論演算性能は 6 倍近くになっています。新システム B ではメモリが DDR5 になり、メモリチャンネル数も増加したことからメモリバンド幅が 4 倍になっています。表 1 では記載していませんが、新システム B ではメモリサイズは 512GB (前システム B の 2.67 倍) となっています。理論演算性能向上のほうがメモリバンド幅向上よりも大きいので、B/F (メモリバンド幅/理論演算性能) は新システム B の方が低くなっています。B/F は多くの

アプリケーションにとって、その実行効率に強く関係する値になります。一方で AVX-512 を最大限に利用できず前システム B で利用可能であった AVX2 相当の場合、新システム B の B/F は 1.3 倍以上となります。システム全体としては、新システム B は 370 ノードとなっており、前システム B の 850 ノードと比べ半分以下になっています。前述のようにノード単体の性能では大きな向上があるために、システム全体の理論演算性能で 2.5 倍以上、メモリサイズで 1.7 倍以上となっています。

次に、様々なアプリケーションが前システム B に比べて新システム B でどの程度性能向上しているか図 2 に示します。横軸にアプリケーション、縦軸が何倍性能向上しているかを示しています。各アプリケーションを簡単に説明します。

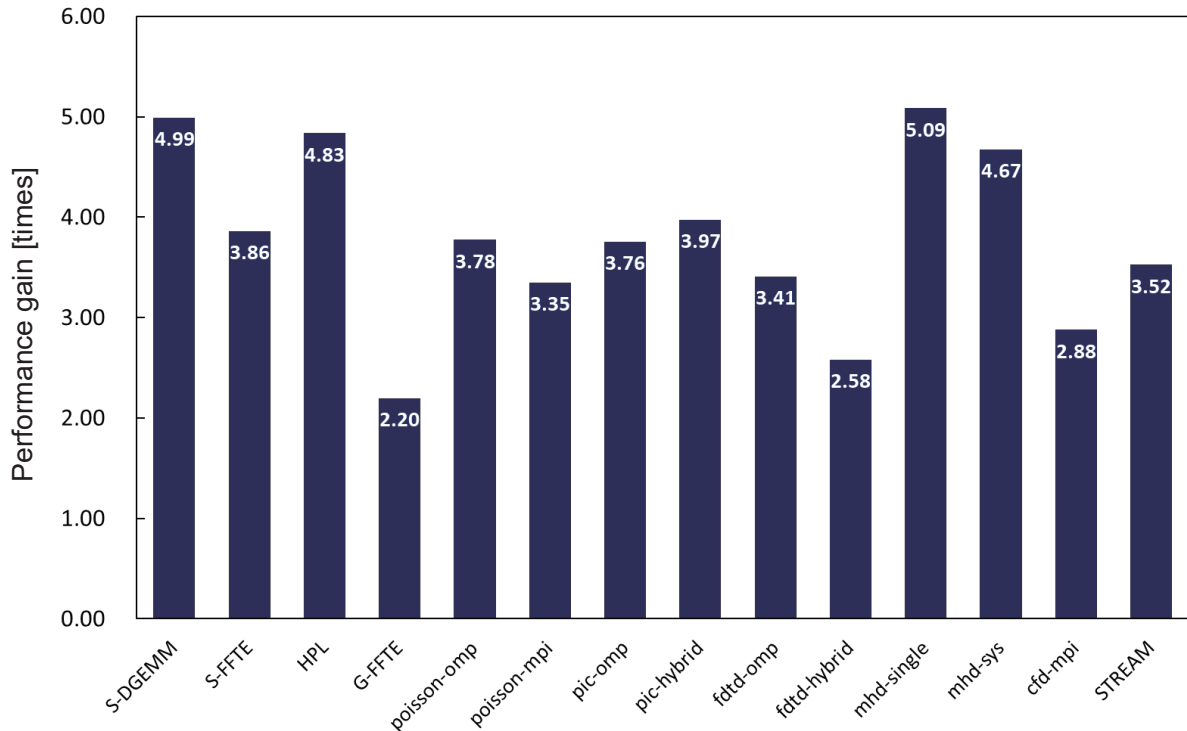


図 2 様々なアプリケーションの新システム B での性能

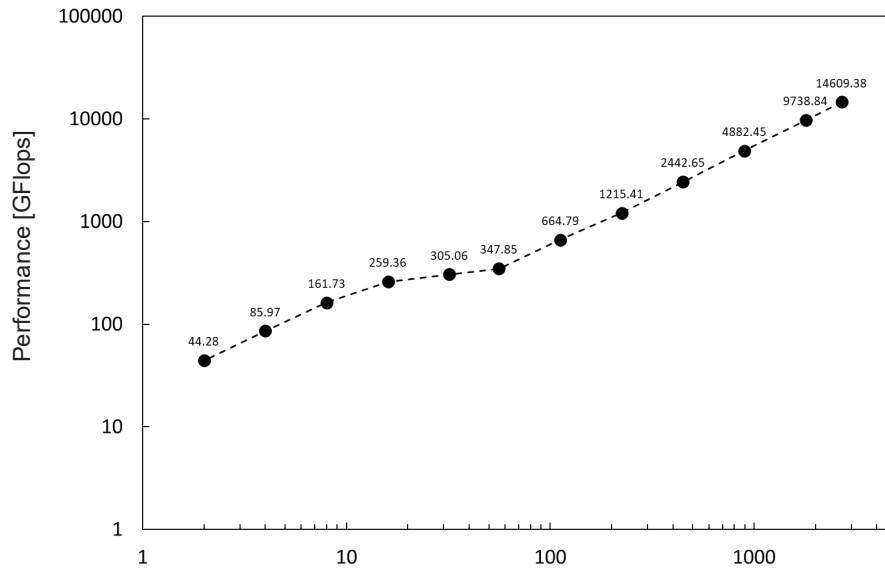


図3 利用コア数を変化させた場合の mhd-single の性能

- S-DEGEMM: 行列積演算プログラム (1 ノード)
- S-FFTE: 高速フーリエ変換プログラム (1 ノード)
- HPL: LINPACK ベンチマーク (32 ノード)
- G-FFTE: MPI 並列版高速フーリエ変換プログラム (32 ノード)
- poisson-omp: スレッド並列マルチグリッドポアソンソルバ (1 ノード)
- poisson-mpi: MPI 並列マルチグリッドポアソンソルバ (32 ノード)
- pic-omp: スレッド並列プラズマ粒子シミュレーションプログラム (1 ノード)
- pic-hybrid: ハイブリッド並列プラズマ粒子シミュレーションプログラム (32 ノード)
- fdtd-omp: スレッド並列 FDTD シミュレーションプログラム (1 ノード)
- fdtd-hybrid: ハイブリッド並列 FDTD シミュレーションプログラム
- mhd-single: 電磁流体 (MHD) シミュレーション (1 ノード)
- mhd-sys: MHD シミュレーション (32 ノード)
- cfd-mpi: 計算流体力学プログラム (23 ノード)
- STREAM: メモリ性能ベンチマーク (1 ノード)

行列演算、FFT、ポアソンソルバ、粒子シミュレーション、流体シミュレーションなど様々なアプリケーションをベンチマークとして利用しています。ご自分のアプリケーションと近いアプリケーション

の性能向上が新システム B 利用時の参考になると思います。

図2の性能向上を見ると最大で5倍程度、最低で2.2倍となっています。G-FFTEの性能向上が最も低いですが、ノード内実行のS-FFTEが3.86倍となっていることを考えると、ノード間通信がボトルネックで性能向上が制限されていると考えられます。理論性能では、5.93倍であり、B/Fが0.675倍を考慮すると、 $5.93 \times 0.675 = 4.00$ 倍の性能向上が想像されます。また、AVX-512を活用できない場合、理論演算性能は2.963倍になりますが、B/Fが1.349倍になるため、 $2.963 \times 1.349 = 4.00$ 倍の性能向上が期待されます。このため、前システムBと新システムBでは実行性能として4倍が見込まれます。図2では3.35~3.97倍となっているアプリケーションが7つあり、多くはその期待通りの性能向上となっています。一方で5倍近い性能向上を示すアプリケーションも4つあります。これらは、メモリよりもCPUをよく使う計算バンドのアプリケーションか、CPUのキャッシュが上手く働き見かけ上のメモリバンドが上昇している可能性があります。fdtd-hybridとcfd-mpiでは性能向上が3倍を切っています。fdtd-ompが3.41倍の性能向上からこれらもノード間通信がボトルネックになっている可能性が高いです。STREAMではメモリ性能を測定しますが、理論性能が4倍になっている一方で3.52倍の性能向上となり、メモリチャンネルが多くなった結果や、CPUのタイル構造など前システムBと比

表2 システム B、D、G とクラウドシステムの mhd-single のノード性能仕様

	MHD 実行性能 [GF]	MHD 実行効率 [%]
システム B (7.17TF+614GB/s)	665	9.3
システム D (3TF+256GB/s)	201	6.7
クラウドシステム (3.5TF+410GB/s)	350	10
システム G GPU (9.7TF+2039GB/s)	885	9.1

※D は Skylake 世代、クラウドシステムは Icelake 世代の Xeon

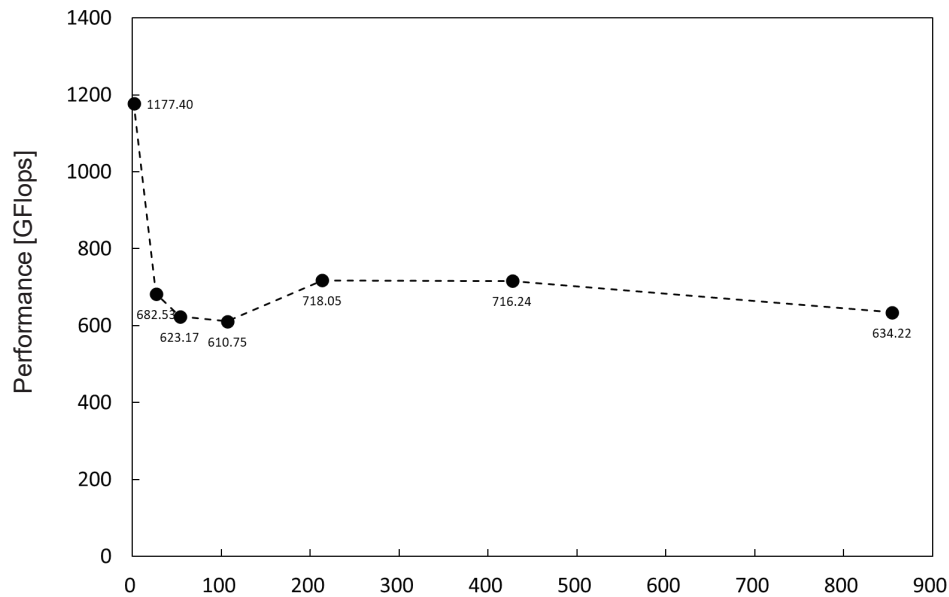


図4 計算サイズを変化させた場合の mhd-single の性能

べてメモリを扱う際に注意が必要と考えられます。

次に mhd-single (Flat MPI) を利用して、1 ノード (2~112 コア) ~24 ノード (2688 コア) と実行ノード数を変化させた場合の Weak スケーリング性能を図3に示します。横軸がコア数、縦軸が実行性能となります。両軸とも対数表示になっています。1CPU 内に 56 コアあるため、利用コアを 2, 4, 8, 16, 32, 56 と変化させると、小コア利用時にはコア当たりのメモリバンド幅大きく利用できるため、56 コア以上の利用時より実行効率が良くなっていることが分かります。これにより性能スケーリングが一部悪く見えるため、図3には傾きが3つに分かれるように見えています。1 ノードから 24 ノードまではスケラビリティも高く、良好な並列計算性能が得られています。

また、同じ mhd-single で計算サイズを変化させた場合の 1 ノード性能を図4に示します。横軸がプ

ロセス当たりの計算サイズ、縦軸が実行性能になります。計算サイズが最も小さいときに最も高い性能を示しています。このサイズは L2 キャッシュにデータが載るため、メモリではなくキャッシュのバンド幅が利いており、高い性能となっています。計算サイズが 100MB 程度までは実行性能が下がっています。その後、200~300MB では性能が上がっています。詳しい原因は分かっていますが、mhd-single の構造上 100MB 周辺では、キャッシュの活用がうまくいっていないと考えられます。このように計算サイズを小さくすることで性能が上がるとは限らないので、計算サイズをいくつか試して最適なサイズで計算を実行することが重要です。

最後に、mhd-single を利用して、新システム B と新システム B が導入前にあったシステム D、クラウドシステム、さらにシステム G (GPU) の 1 ノード (GPU は 1 枚) 性能測定結果を表2に載せていま

す。システム D は SkyLake 世代の Xeon、クラウドシステムは IceLake 世代の Xeon です。システム D とは B/F も同程度ですが、システム B の実行効率が高く、良い性能向上が見えます。クラウドシステムは、システム B よりも B/F が高いこともあり、実行効率が高くなっています。ただし、ノード性能では 2 倍近くシステム B が高くなっています。システム G の GPU は NVIDIA A100 であり、理論演算性能、メモリバンド幅も高くなっています。実行性能もシステム B より高くなっています。システム G では OpenACC を利用して mhd-single を GPU で実行しています。CPU 実行に比べて手間はありますが、GPU に合うアプリケーション（ベクトル効率が低いアプリケーション）であれば、高い性能の恩恵を受けることができます。一方で GPU を利用する場合は GPU 間通信とノード間通信に注意し、最適化が必要になります。実際に複数 GPU や複数ノードを利用した場合のスケーラビリティは CPU に比べて低くなることが多いです。1 ノードや 1 GPU に収まる計算であれば、手軽に GPU の性能を活用できるため、上手い使い分けが必要です。

今回は、稼働が開始されたシステム B に関してその実行性能に関して紹介しました。近年の CPU は理論性能からはその実行性能が分からないことが多くあります。京都大学学術情報メディアセンターでは、利用者のアプリケーションが実際に早くなることを第一に、見かけ上の理論性能よりも実行性能の高さを重要視してスパコンを設計しています。今回のリプレースでは、半導体不足や CPU 開発遅れにより新スパコンの稼働が遅れ、また半導体価格高騰や円安により新スパコンのノード数が想定より減るなど利用者のみなさまにはご迷惑をおかけしています。今回の性能評価により高い性能が確認できていますので、これからよりみなさまにご活用いただけるようにセンターとしても準備を続けていきます。また、新システム A がまだ導入されておらず、2023 年 9～10 月にご利用いただける予定となっています。CPU としてはシステム B と同じですが、高メモリバンド幅の HBM2 を搭載しており、より高い実効性能が期待できます。試験機ではありますが、Intel 社の協力により mhd-single で 3 倍以上の性能を現在確認しています。次号ではシステム A の実行性能に関して紹介します。

京都大学研究支援 SPIRITS プログラム 2021-2022 年度

「プラズマ粒子シミュレーションの応用による野生ウマの行動数値実験
モデルの確立」研究報告深沢 圭一郎¹、井上 漱太²、前田 玉青³、鈴木 臣⁴、山本 真也⁵、平田 聡⁶

- | | |
|----------------------|--------------------|
| 1. 京都大学 学術情報メディアセンター | 2. 名古屋大学大学院 環境学研究科 |
| 3. 京都大学大学院 理学研究科 | 4. 愛知大学 地域政策学部 |
| 5. 京都大学 高等研究院 | 6. 京都大学 野生動物研究センター |

1 はじめに

SPIRITS とは、Supporting Program for Interaction-based Initiative Team Studies の略であり、文部科学省研究大学強化促進事業[1]において京都大学が実施している学際・国際・人際融合事業「知の越境」融合チーム研究プログラム[2]になります。このプログラムでは、国際化の推進、未踏領域・未科学への挑戦、イノベーションの創出を目指す融合チーム研究による新たな取り組みや企画を、資金面だけでなくプロジェクトの推進においても支援しています。本研究は2021-2022年度の2年間「プラズマ粒子シミュレーションの応用による野生ウマの行動数値実験モデルの確立」として、SPIRITS プログラムに支援を受け推進されました。

この SPIRITS プログラムの支援は、一般的な研究に対してだけでなく、その運営に対してもあります。運営に対する支援を上手く活用することで、シンポジウムの開催や研究内で開発したモデルや研究成果の広報活動などが行えました。シンポジウムは「 $\alpha \times \text{SC}2021\text{K}$ 行動学とスーパーコンピュータに関するシンポジウム」[3]や「 $\alpha \times \text{SC}$ 群れとスーパーコンピュータに関するシンポジウム」[4]として本全国共同利用版「広報」Vol.20 No.2 と Vol.21 No.1 で紹介しています。シンポジウム以外では、サイエンスカフェを福岡市[5]と名古屋市[6]で開催し、研究者以外への広報活動も行いました。図1はサイエンスカフェのポスターになります。サイエンスカフェ

では、SPIRITS プログラム参加者によるウマに関する研究紹介や科学館の学芸員によるネズミの行動に関する研究が紹介されました。サイエンスカフェということで、どちらも飲み物を片手に15人程度の少人数でのイベントであり、参加者との距離が近いいため、たくさんの質問があり、活発な議論が行われました。

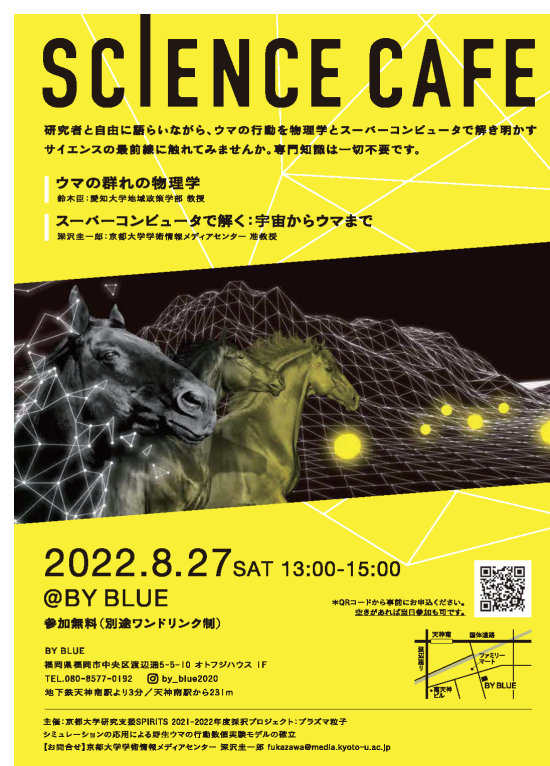


図1 サイエンスカフェ（福岡市開催版）

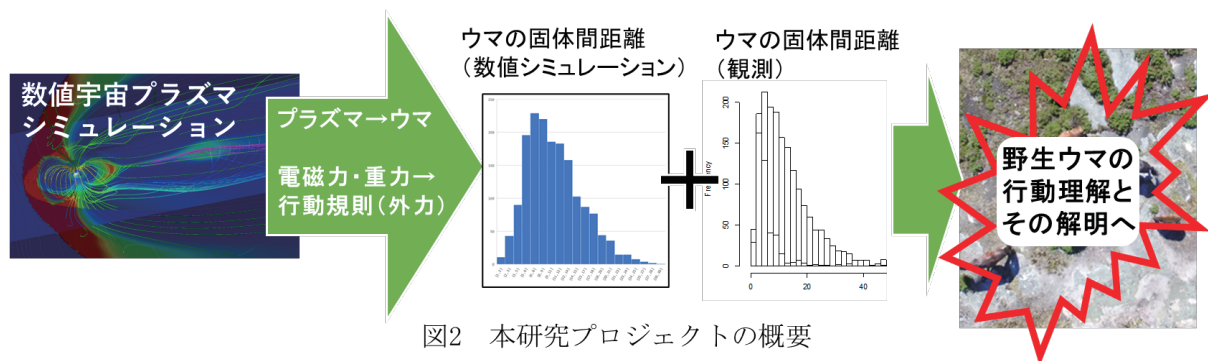


図2 本研究プロジェクトの概要

2 研究の背景と目的

この研究では、研究タイトルにもあるように野生のウマを対象としています。野生ウマは高度な社会性を持ち、固定されたメンバーで群れを作りますが、詳しい調査研究がほとんど行われておらず、その生態はよく分かっていません。これまでの野生ウマの群れの観察は、双眼鏡を使い、ビデオで記録することが一般的な方法でしたが、近年、ドローン技術の発展により動物を空から観察することができるようになってきました。上空からウマを見ることにより、これまで分からなかった個体同士の位置関係が正確に分かるようになり、ウマ個体間距離の分布も正確に測れるようになってきています。この分布を解析すると、個体同士が近づくと離れ、遠くに行くと近づく様子が示されており、何らかのウマの行動心理が働いていると考えられますが、なぜそのような分布となるのかは明らかになっていません。

一方、宇宙プラズマでは、電荷を帯びたプラズマ粒子が動くと、電磁場が電荷の影響を受け変動し、その変動した場によりプラズマ粒子が動くことを繰り返します。プラズマ粒子は膨大に存在するためプラズマ全体としてのダイナミクスの理解が難しいですが、この一連の動きを数値シミュレーションにより再現することで、宇宙プラズマダイナミクスの理解が進んでいます。私たちは、このプラズマ粒子の動きとウマの行動に類似点を見だし、宇宙プラズマシミュレーションを基に、ウマの行動を再現する数値シミュレーションモデルの開発ができるのではないかと考えました。

ここで、プラズマ粒子をウマとし、電磁場をウマの個体間距離に働く場と考えると、ウマそれぞれが持った場の重ね合わせで、ウマの行動が決まるということが想像され、個体間距離分布をうまく再現で

きるのではないかと考えられます。個体間距離に働く場合は、ウマの行動心理から考えられるウマの振る舞いを表現する関数とします。このように、本研究では宇宙プラズマの粒子シミュレーションを応用することで、野生ウマの行動規則を考慮した野生ウマの行動数値シミュレーションモデルを開発することを目的としました。図2のようにこのモデルを利用し、どの行動規則がどのようにウマの行動を決定づけているのか明らかにすることを目指しています。

3 野生ウマ行動数値シミュレーションモデル

前述しましたが、ウマの群れは、構成するウマの数に変動がなく安定しています。このようなウマの群れを解析すると、各ウマ間の距離のヒストグラムがガンマ分布に従っていることが分かりました。このことからウマに引力と斥力のようなものが働き、距離間を調整していると考えられています。

この引力と斥力のような働きを考えると、重力のように“場”の考え方を導入し、ウマ間距離が近いと上り坂になり、遠いと下り坂になるウマの距離間に働く力 (Horse distance force: HF) を定義することができます。例えば、中心にあるウマがいて、そのウマと別のウマとの間に HF が発生すると考えると、図3のような場が考えられます。図3は二次元空間であり、中心近くでは HF が大きくなり (傾きが正)、ウマが中心に近づけなくなり、中心から離れると HF が小さくなり (傾きが負)、ウマが中心に近づくように場が働くことが分かります。

ここで、中心にいるウマから別のウマまでの距離を r とすると、

$$r = \sqrt{x^2 + y^2} \quad (1)$$

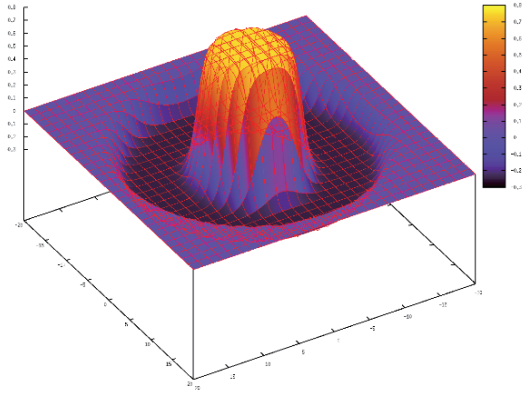


図3 ウマの距離間場 (HF) 分布

となり、HFは下記で表現できます。

$$HF(r) = -\left(\frac{1}{1 + \exp(-a(r - r_a))} - b\right) + c\left(\frac{1}{1 + \exp(-a(r - dr_a))}\right) \quad (2)$$

ただし、図3では $a = 2$ 、 $b = 0.75$ 、 $c = 0.25$ 、 $d = 2.5$ 、 $r_a = 6.5$ を利用しています。この式(2)はシグモイド関数の足し合わせで表現しています。

HFの形は a 、 b 、 c 、 d 、 r_a によって変わります。 a は図3における中心の斥力が高い部分と、外側の引力が強い部分をなめらかに繋ぐための係数で、小さいほどなめらかに接続し、大きいとステップ状に接続することになります。1未満では直線的に接続します。現実的には0.5~5が取り得る範囲になります。

b は(2)右式第一項の値をシフトさせるパラメータです。 $b = 0$ の場合は第一項が負となり、 $b = 1$ の場合は正となります。HFが第二項との足し合わせのため、 $0 < b < 1$ の範囲をとります。 c は距離が遠いところに引力を作成するパラメータになります。引力を作る場合は $c > 1 - b$ となり、引力が無い場合は $c = 1 - b$ 、斥力の場合は $c < 1 - b$ となります。 d は引力をどこまで働かせるかのパラメータです。 $d = 1$ で引力は発生せず、 $d > 1$ で引力が発生します。 $r = d \times r_a$ で引力が無くなります。 r_a は斥力を働かせる始点です(b によりズレはあります)。どこまでウマが近づくか斥力が働かを決めているパラメータです。

それぞれ、想定される範囲は下記になります。

$$0.5 < a < 5.0, 0 < b < 1, c = 0.25, 1.5 < d < 4.0, 5 < r_a < 7.5$$

これらのパラメータを0.1ずつ変化させるとすると、 $45 \times 10 \times 25 \times 25 = 281250$ 通りの計算になります。パラメータ1セット当たりの計算が約1秒だとすると、281,250秒 = 約78時間となり、かなり時間のかかる計算になります。このパラメータを変化させる計算は独立に行って良いので(パラメータセット間に依存関係が無いので)、並列化することができ、また通信が必要無いため並列計算 scalability が高いと想定されるため、スーパーコンピュータを利用し、64並列計算を行うと約1.2時間で計算が終わります。

この $HF(r)$ を使い、ウマの運動方程式を解くことで、ウマの動きをシミュレーションし、ウマの位置分布を求めることができます。運動方程式 $F = ma$ (F は力、 m は質量、 a は加速度ベクトル)より、

$$\frac{dv}{dt} = \frac{F}{m} = \frac{HF}{m} \quad (3)$$

ここで、 v は速度ベクトル、 t は時間です。計算機で解くために、(3)を差分化すると、

$$\frac{v_r^{t+1} - v_r^t}{\Delta t} = \frac{HF(r, t)}{m} \quad (4)$$

$$v_r^{t+1} = \frac{\Delta t}{m} HF(r, t) + v_r^t \quad (5)$$

となり、速度の時間発展が式(5)のように求まります。

次に、ウマの位置を求めます。ウマの位置は速度の微分で求まるので、

$$\frac{dr}{dt} = v(r, t) \quad (6)$$

これを差分化して、

$$\frac{r^{t+1} - r^t}{\Delta t} = v_r^{t+1} \quad (7)$$

$$r^{t+1} = \Delta t v_r^{t+1} + r^t \quad (8)$$

となり、ウマの位置の時間発展がわかります。これによりウマがHFを受けて移動の様子がシミュレーションできます。

式(5)と(8)を使って実際にシミュレーションを行いました。ここでは $\Delta r = 1.0$ 、 $t = 0.01$ とし、ウマの初期位置、初期速度はランダムに与えました。また、初期値が異なるが同じパラメータセットの計算を61回のシミュレーションを行い、初期値依存性を減らしました。その結果から観測結果のヒストグラムと合うウマ間距離の分布をとったものが図4になります。ここでは、すべてのパラメータ計算をして4パラメータが観測と似た結果となりました。パラメータ a 、 b 、 c 、 d の取り方で分布に変化は出るため、

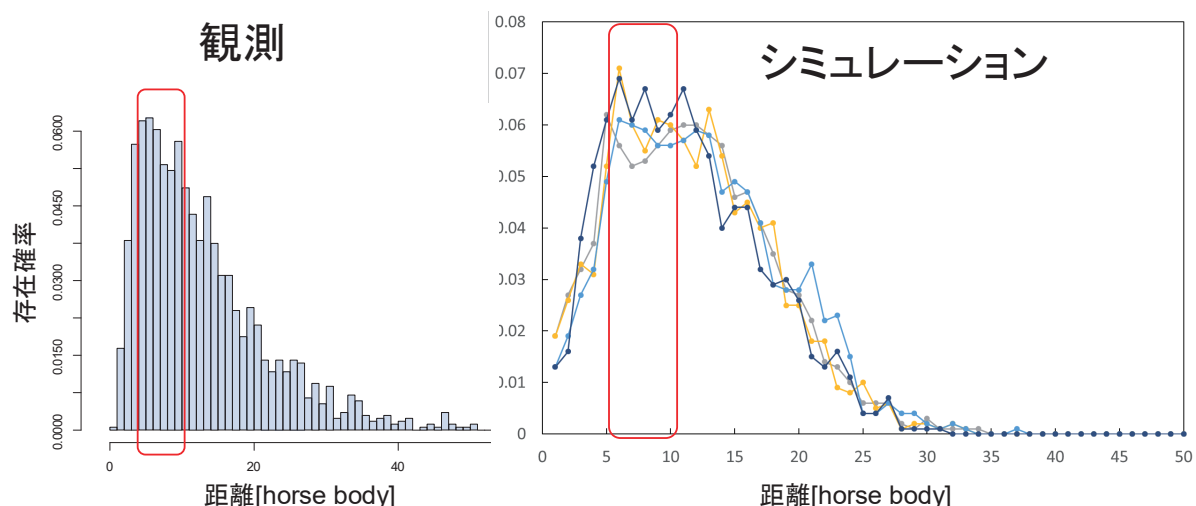


図4 観測結果とシミュレーション結果の比較

最適な結果にするためには更に調整が必要ですが、ガンマ分布に近い結果が得られています。

4 まとめと今後の展望

本記事では、SPIRITS プロジェクトによる宇宙プラズマ粒子シミュレーションの野生ウマ行動数値シミュレーションへの応用について報告しました。このプロジェクトでは、ウマの研究者、数値シミュレーション研究者、数値解析の研究者との共同研究によって、新しく野生ウマの数値実験が可能なシミュレーションモデルが開発できました。他分野の研究者が参加したことで、これまでに無い応用ができたと感じています。

また、プロジェクトのサポートのおかげで、研究者向け異分野交流シンポジウムや一般の方向け研究啓蒙活動など様々な活動を実施することができました。イベントの準備は手間がかかりますが、その価値はあることが今回の経験でよく分かりました。

野生ウマの行動数値シミュレーションの開発では、理学的な物理法則から力を考えるモデルではなく、意思を持った動物の動きを再現する力自体を考える必要がありました。ある意味勝手に作成した力のため、大量のパラメータサーベイが必要となります。このパラメータサーベイは、スパコンを利用しないと数日かかる計算のため、何度も数値実験を繰り返すことが難しく、一般的には採用されない研究手法だと思われます。しかし、今回はスパコンを利

用し、HF の形を考える計算やパラメータサーベイという計算を試行錯誤することができ、最終的には観測結果に近いシミュレーション結果を得ることができました。

この HF は、現在ではより観測結果を再現する形に最適化が進んでおり、またウマが整列して一列に歩くことを再現できる HF も作成しています。今後は、計算負荷は上がりますが、ウマの高さを考慮できる3次元化や HF が働く条件などをウマの行動理論や仮定に従い導入するなどより現実に近いモデルの高精度化が必要と考えています。

参考文献

- [1] 研究大学強化促進事業
https://www.mext.go.jp/a_menu/kagaku/sokushinhi/
- [2] 融合チーム研究プログラム SPIRITS
<https://www.kura.kyoto-u.ac.jp/results/list/re13/>
- [3] $\alpha \times \text{SC2021K}$ 行動学とスーパーコンピュータに関するシンポジウム
<https://sites.google.com/kyoto-u.ac.jp/sc2021k/>
- [4] $\alpha \times \text{SC}$ 群れとスーパーコンピュータに関するシンポジウム
<https://sites.google.com/kyoto-u.ac.jp/sc2022k/>
- [5] <https://sites.google.com/kyoto-u.ac.jp/science-cafe-fukuoka-2022/>
- [6] <https://sites.google.com/view/science-cafe-nagoya-2022/>

システム A 運転状況 (2022 年 4 月 ~ 2022 年 9 月)

1) 保守作業に伴うサービス休止およびシステムダウン障害発生状況

保守作業に伴うサービス休止

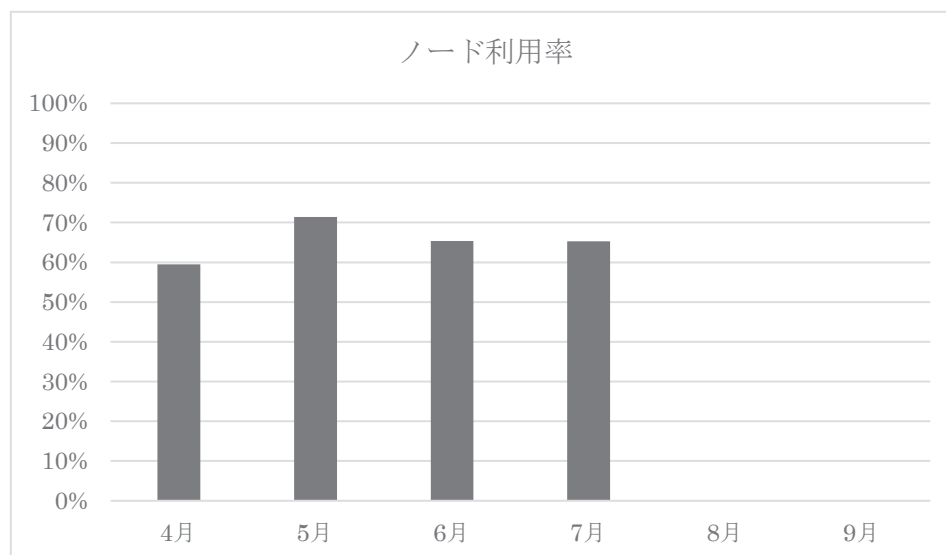
保守開始日時	サービス再開日時	保守時間[h]
2022/04/01 0:00	2022/04/04 13:00	85.00

システムダウン障害発生状況

障害発生日時	サービス再開日時	ダウン時間[h]
なし		

2) サービス状況

	サービス 時間[h]	ジョブ					
		処理 件数	経過 時間[h]	占有 時間[h]	CPU 時間[h]	平均稼動 ノード数	ノード 利用率
4 月	635.00	111,774	180,679	48,136,574	34,192,634	1770.2	59.5 %
5 月	744.00	193,057	255,769	62,467,476	45,197,236	1798.7	71.4 %
6 月	720.00	112,853	128,120	59,702,724	45,892,097	1721.3	65.4 %
7 月	665.00	27,790	161,519	57,207,644	40,262,323	1621.6	65.3 %
8 月	システム更新に伴う運転休止期間						
9 月	システム更新に伴う運転休止期間						
計	2,764	445,474	726,087	227,514,418	165,544,290	1,728.0	65.4 %



- 占有時間 = 合計(経過時間×占有コア数)
- 平均稼動ノード数 = 電源 ON 状態のノード数の月平均 (10 分間隔のサンプリングデータより算出)
- ノード利用率 = 稼動ノードに対するジョブが実行されているノードの割合

システム B 運転状況 (2022 年 4 月 ~ 2022 年 9 月)

1) 保守作業に伴うサービス休止およびシステムダウン障害発生状況

保守作業に伴うサービス休止

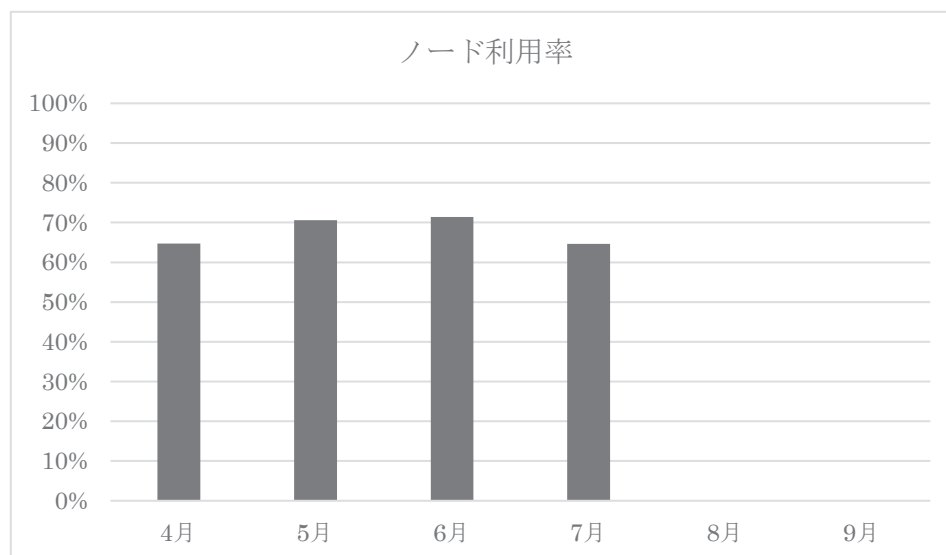
保守開始日時	サービス再開日時	保守時間[h]
2022/04/01 0:00	2022/04/04 13:00	85.00

システムダウン障害発生状況

障害発生日時	サービス再開日時	ダウン時間[h]
なし		

2) サービス状況

	サービス 時間[h]	ジョブ					
		処理 件数	経過 時間[h]	占有 時間[h]	CPU 時間[h]	平均稼動 ノード数	ノード 利用率
4 月	635.00	114,365	624,511	11,722,127	9,387,576	772.7	64.7 %
5 月	744.00	75,090	550,873	15,428,584	12,461,782	814.0	70.6 %
6 月	720.00	239,700	569,585	14,346,153	11,638,501	813.9	71.4 %
7 月	665.00	131,572	471,125	13,009,448	10,371,171	793.3	64.6 %
8 月	システム更新に伴う運転休止期間						
9 月	システム更新に伴う運転休止期間						
計	2,764	560,727	2,216,094	54,506,312	43,859,030	798.5	67.8 %



- 占有時間 = 合計(経過時間×占有コア数)
- 平均稼動ノード数 = 電源 ON 状態のノード数の月平均 (10 分間隔のサンプリングデータより算出)
- ノード利用率 = 稼動ノードに対するジョブが実行されているノードの割合

システム C 運転状況 (2022 年 4 月 ~ 2022 年 9 月)

1) 保守作業に伴うサービス休止およびシステムダウン障害発生状況

保守作業に伴うサービス休止

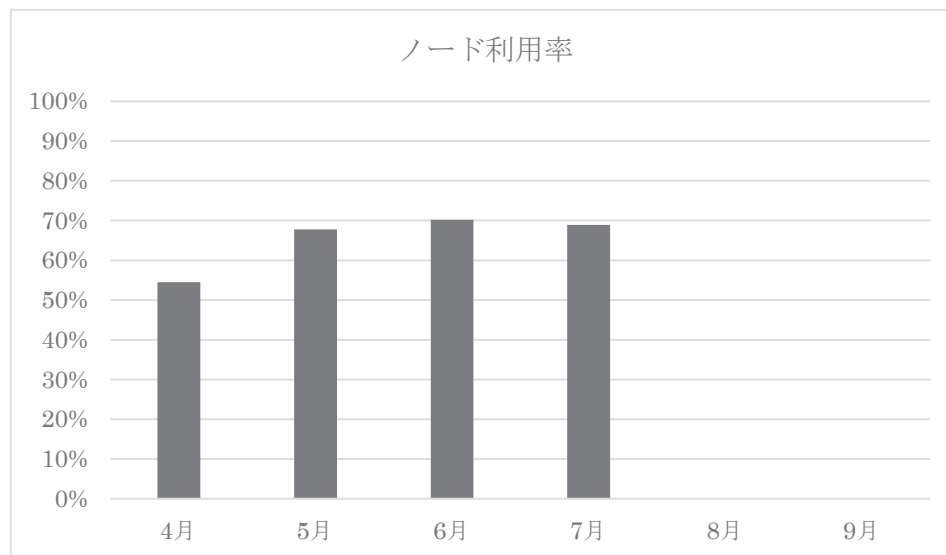
保守開始日時	サービス再開日時	保守時間[h]
2022/04/01 0:00	2022/04/04 13:00	85.00

システムダウン障害発生状況

障害発生日時	サービス再開日時	ダウン時間[h]
なし		

2) サービス状況

	サービス 時間[h]	ジョブ					
		処理 件数	経過 時間[h]	占有 時間[h]	CPU 時間[h]	平均稼動 ノード数	ノード 利用率
4 月	635.00	2,106	32,458	294,017	181,793	15.2	54.5 %
5 月	744.00	1,713	37,475	439,250	245,180	16.0	67.8 %
6 月	720.00	1,382	31,593	432,700	153,528	16.0	70.2 %
7 月	665.00	1,869	33,771	440,570	160,466	15.6	68.9 %
8 月	システム更新に伴う運転休止期間						
9 月	システム更新に伴う運転休止期間						
計	2,764	7,070	135,297	1,606,537	740,967	15.7	65.4 %



- 占有時間 = 合計(経過時間×占有コア数)
- 平均稼動ノード数 = 電源 ON 状態のノード数の月平均 (10 分間隔のサンプリングデータより算出)
- ノード利用率 = 稼動ノードに対するジョブが実行されているノードの割合

システムD 運転状況 (2022 年 10 月 ~ 2023 年 3 月)

1) 保守作業に伴うサービス休止およびシステムダウン障害発生状況

保守作業に伴うサービス休止

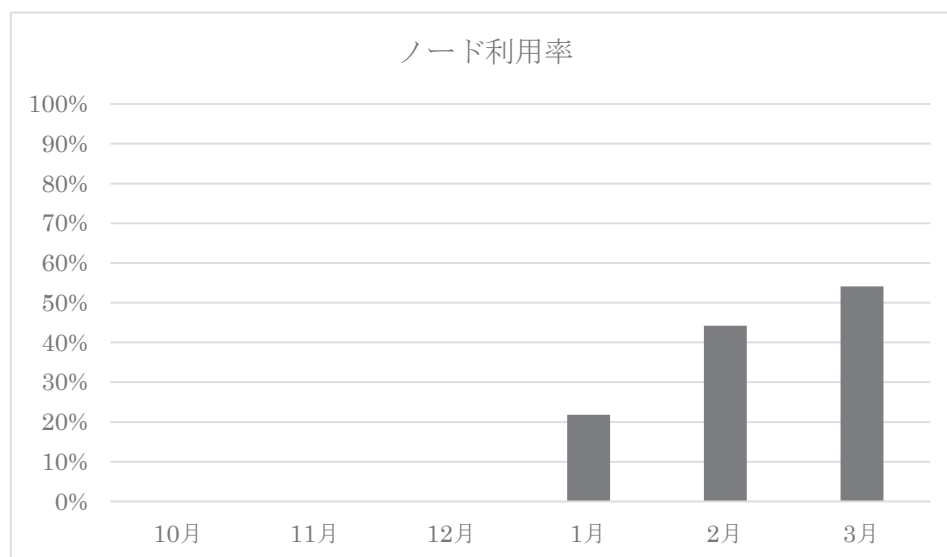
保守開始日時	サービス再開日時	保守時間[h]
2023/02/16 10:00	2023/02/17 12:00	26.0
2023/02/24 13:00	2023/02/28 10:00	93.0
2023/03/28 9:00	2023/03/31 23:59	87.0

システムダウン障害発生状況

障害発生日時	サービス再開日時	ダウン時間[h]
なし		

2) サービス状況

	サービス 時間[h]	ジョブ					
		処理 件数	経過 時間[h]	占有 時間[h]	CPU 時間[h]	平均稼動 ノード数	ノード 利用率
10 月	システム更新に伴う運転休止期間						
11 月	システム更新に伴う運転休止期間						
12 月	システム更新に伴う運転休止期間						
1 月	443.0	27,763	70,616	5,730,329	2,373,834	508.4	21.8 %
2 月	553.0	25,646	109,749	10,097,843	2,712,330	434.7	44.2 %
3 月	657.0	14,598	98,153	14,147,323	5,543,172	504.0	54.1 %
計	1653.0	68,007	278,518	29,975,495	10,629,336	480.2	40.0 %



- 占有時間 = 合計(経過時間×占有コア数)
- 平均稼動ノード数 = 電源 ON 状態のノード数の月平均 (10 分間隔のサンプリングデータより算出)
- ノード利用率 = 稼動ノードに対するジョブが実行されているノードの割合

システム E 運転状況 (2022 年 10 月 ~ 2023 年 3 月)

1) 保守作業に伴うサービス休止およびシステムダウン障害発生状況

保守作業に伴うサービス休止

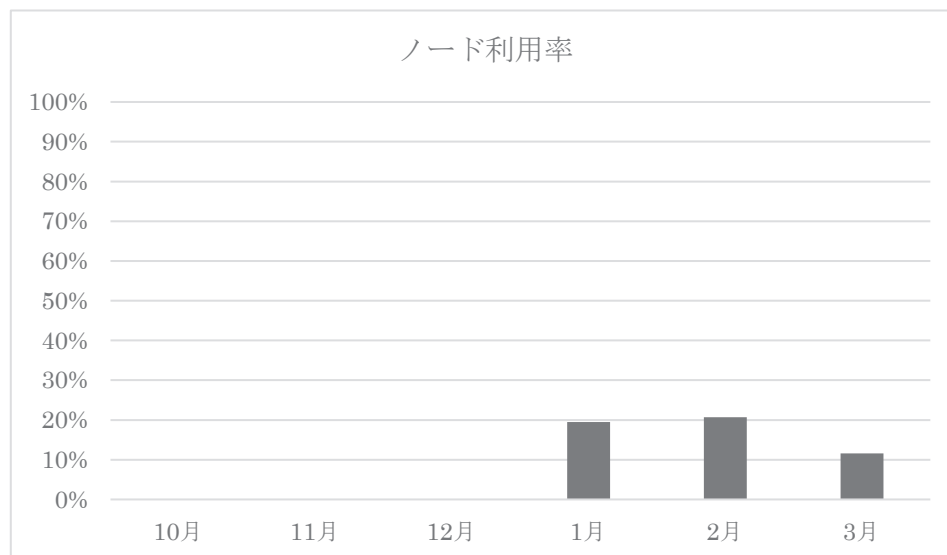
保守開始日時	サービス再開日時	保守時間[h]
2023/02/16 10:00	2023/02/17 12:00	26.0
2023/02/24 13:00	2023/02/28 10:00	93.0
2023/03/28 9:00	2023/03/31 23:59	87.0

システムダウン障害発生状況

障害発生日時	サービス再開日時	ダウン時間[h]
なし		

2) サービス状況

	サービス 時間[h]	ジョブ					
		処理 件数	経過 時間[h]	占有 時間[h]	CPU 時間[h]	平均稼動 ノード数	ノード 利用率
10 月	システム更新に伴う運転休止期間						
11 月	システム更新に伴う運転休止期間						
12 月	システム更新に伴う運転休止期間						
1 月	443.0	694	15,189	98,852	26,654	19.7	19.5 %
2 月	553.0	521	10,487	127,531	12,116	15.5	20.7 %
3 月	657.0	655	18,017	71,115	21,957	19.5	11.6 %
計	1653.0	1,870	43,693	297,498	60,727	18.2	17.3 %



- 占有時間 = 合計(経過時間×占有コア数)
- 平均稼動ノード数 = 電源 ON 状態のノード数の月平均 (10 分間隔のサンプリングデータより算出)
- ノード利用率 = 稼動ノードに対するジョブが実行されているノードの割合

システム G 運転状況 (2022 年 10 月 ~ 2023 年 3 月)

1) 保守作業に伴うサービス休止およびシステムダウン障害発生状況

保守作業に伴うサービス休止

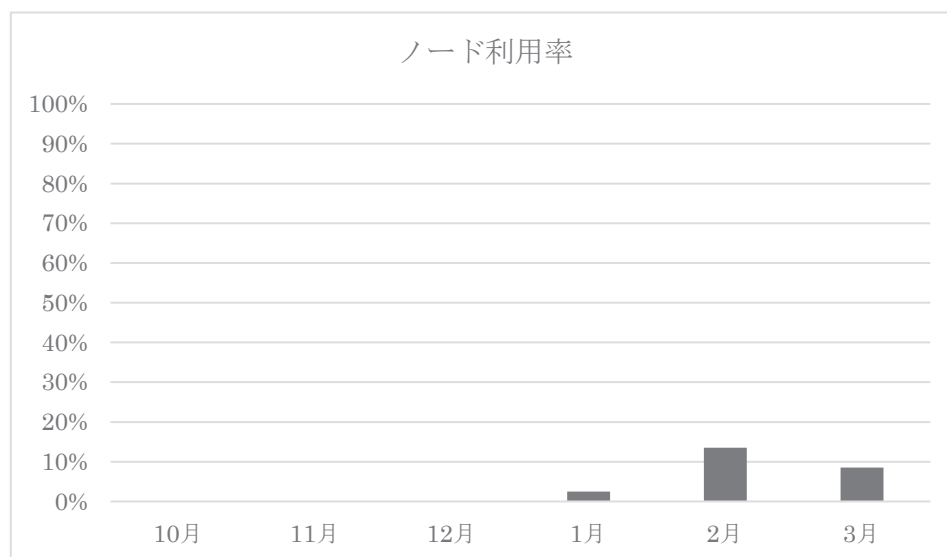
保守開始日時	サービス再開日時	保守時間[h]
2023/02/16 10:00	2023/02/17 12:00	26.0
2023/02/24 13:00	2023/02/28 10:00	93.0
2023/03/28 9:00	2023/03/31 23:59	87.0

システムダウン障害発生状況

障害発生日時	サービス再開日時	ダウン時間[h]
なし		

2) サービス状況

	サービス 時間[h]	ジョブ					
		処理 件数	経過 時間[h]	占有 時間[h]	CPU 時間[h]	平均稼動 ノード数	ノード 利用率
10 月	システム更新に伴う運転休止期間						
11 月	システム更新に伴う運転休止期間						
12 月	システム更新に伴う運転休止期間						
1 月	443.0	736	107	8,646	1,134	15.8	2.5 %
2 月	553.0	927	1,497	118,870	23,194	12.5	13.5 %
3 月	657.0	1,062	987	104,538	8,252	15.3	8.5 %
計	1653.0	2,725	2,591	232,054	32,580	14.2	8.2 %



- 占有時間 = 合計(経過時間×占有コア数)
- 平均稼動ノード数 = 電源 ON 状態のノード数の月平均 (10 分間隔のサンプリングデータより算出)
- ノード利用率 = 稼動ノードに対するジョブが実行されているノードの割合

センター利用による研究成果

—2021 年度計算機利用結果報告書から—

【1010 統計科学】

1. 春名純一, 兎子尾理貴, 中野直人 : リザバー計算機における普遍性と高次統計量 : 第 24 回情報論的学習理論ワークショップ講演要旨, 発表番号 19, 2021

【1501 生活科学一般】

2. N. Thushara, T. Darshani, S. R. Samarakoon, I. C. Perera, F. R. Fronczek, W. M. C. Sameera, T. Perera : Synthesis, characterization and biological evaluation of dipicolylamine sulfonamide derivatized platinum complexes as potential anticancer agents : RSC Adv., Vol.11, No., pp.17658 - 17668, 2021
3. T. Nguyen, Y. Oba, W. M. C. Sameera, A. Kouchi, N. Watanabe : Experimental and Computational Studies on the Physicochemical Behavior of Phosphine Induced by Reactions with H and D Atoms on Interstellar Ice Grains : Astrophys. J. 2021., Vol.198, No., pp.73 - , 2021
4. Taiki Fujita, Mina Yamane, W. M. C. Sameera, Harunobu Mitsunuma, and Motomu Kanai : Siloxy Esters as Traceless Activators of Carboxylic Acids: Boron- Catalyzed Chemoselective Asymmetric Aldol Reaction : Angew. Chem. Int. Ed., Vol.60, No., pp.24598 - 24604, 2021

【2202 自然災害科学】

5. Reika Nomura et al. : Multiscale Evaluation Method of the Drag Effect on Shallow Water Flow through Coastal Forests based on 3D Numerical Simulations : International Journal for Numerical Methods in Fluids, Vol.94, No.1, pp.32 - 58, 2021
6. Asano, K., T. Iwata, K. Yoshida, N. Inoue, K. Somei, K. Miyakoshi, and M. Ohori :

Microtremor array surveys and development of the velocity model in the Hakodate Plain, Hokkaido, Japan : Earth, Planets and Space, Vol.74, No.94, pp.1 - 25, 2022

【2301 基礎ゲノム科学】

7. Kohchi T, Yamato KT, Ishizaki K, Yamaoka S, Nishihama R : Development and Molecular Genetics of Marchantia polymorpha : Annu Rev Plant Biol., Vol.72, pp.677 - 702, 2021
8. Iwasaki M, Kajiwar T, Yasui Y, Yoshitake Y, Miyazaki M, Kawamura S, Suetsugu N, Nishihama R, Yamaoka S, Wanke D, Hashimoto K, Kuchitsu K, Montgomery SA, Singh S, Tanizawa Y, Yagura M, Mochizuki T, Sakamoto M, Nakamura Y, Liu C, Berger F, Yamato KT, Bowman JL, Kohchi T : Identification of the sex-determining factor in the liverwort Marchantia polymorpha reveals unique evolution of sex chromosomes in a haploid system : Curr. Biol., Vol.31, No.24, pp.5522 - 5532, 2021
9. Montgomery SA, Tanizawa Y, Galik B, Wang N, Ito T, Mochizuki T, Akimcheva S, Bowman JL, Cognat V, Maréchal-Drouard L, Ekker H, Hong SF, Kohchi T, Lin SS, Liu LD, Nakamura Y, Valeeva LR, Shakirov EV, Shippen DE, Wei WL, Yagura M, Yamaoka S, Yamato KT, Liu C, Berger F : Chromatin Organization in Early Land Plants Reveals an Ancestral Association between H3K27me3, Transposons, and Constitutive Heterochromatin : Curr. Biol., Vol.30, No.4, pp.573 - 588, 2020

【4103 数学一般 (含確率論・統計数学)】

10. Kengo NAKAI, Yoshitaka SAIKI : Machine-learning construction of a model for a macroscopic fluid variable using the delay-

- coordinate of a scalar observable : Discrete and Continuous Dynamical Systems Series S, Vol.14, No.3, pp.1079 - 1092, 2021
11. M. Kobayashi, K. Nakai, Y. Saiki, and N. Tsutsumi : Dynamical system analysis of a data-driven model constructed by reservoir computing : Physical Review E, Vol.104, No.044215, pp.1 - 7, 2021
 12. 関山 雄大 : データ並列プログラムによる Turyn 型列の分類 : 第 19 回情報学ワークショップ (WiNF2021) 抄録集, pp.9 - 9, 2021
 13. 関山 雄大 : データ並列プログラムによる Turyn 型列の分類 : 静岡大学大学院修士論文, 2022
 14. Araya and Tokihisa : The existence of partitioned balanced tournament designs : Journal of Combinatorial Designs, Vol.30, pp.621 - 625, 2022
- 【4303 物性 II】
15. 春名純一, 兎子尾理貴, 中野直人 : リザーバー計算機における普遍性と計算能力のサイズ依存性 : 日本物理学会 2021 秋季大会講演要旨, 領域 11, 講演番号 22pL4-6, 2021
- 【4306 生物物理・化学物理】
16. Akihiro Kimura, Hirotaka Kito-Nishioka, Yasuteru Shigeta, Shigeru Itoh : Comparison between the Light-Harvesting Mechanisms of Type - I Photosynthetic Reaction Centers of Heliobacteria and Photosystem I: Pigment Site Energy Distribution and Exciton State : The Journal of Physical Chemistry B, Vol.125, No.15, pp.3727 - 3738, 2021
 17. S Sakuraba, Q Xie, K Kasahara, J Iwakiri, H Kono : Extended ensemble simulations of a SARS-CoV-2 nsp1-5' -UTR complex : PLOS Computational Biology, Vol.18, No.1, pp. e1009804 -, 2022
- 【4401 固体地球惑星物理学】
18. Yamasaki, T., Sigmundsson, F., Iguchi, M. : Variable inflation rate of a magmatic deformation source beneath Aira caldera after the 1914 eruption of Sakurajima volcano: Inferences from a linear Maxwell viscoelastic model constrained by geodetic data : Journal of Volcanology and Geothermal Research, Vol.421, No.107446, 2022
 19. 菅原嵩史・大倉敬宏・成田翔平 : 阿蘇火山のマグマだまりに対する 2016 年熊本地震の断層変位による影響 : 日本火山学会講演予稿集 2021 年度 秋季大会, 2021
- 【4402 気象・海洋物理・陸水学】
20. 越後友利果・伊藤海彦・磯田豊 : 日本海深層における近慣性周期 Gyroscopic Wave の海底反射 : 海の研究, Vol.31, No.3,4, pp.71 - 98, 2022
- 【4601 物理化学】
21. Tatsuya Joutsuka and Koji Ando : Efficient Free-energy Calculation of Proton Transfer by Constrained Density Functional Theory and Geometrically Restrained Molecular Dynamics Simulation : Chemistry Letters, Vol.50, No.7, pp.1325 - 1328, 2021
 22. Yoshino Katsurayama, Yasuhiro Iwabata, Hajime Maeda, Masahito Segi, Hiromi Nakai, Taniyuki Furuyama : Direct Near - Infrared - Light - Activatable Phthalocyanine Catalysts : Chemistry - A European Journal, Vol.28, No.2, pp.e202103223 -, 2022
 23. Ayaki Sunaga, Trond Saue : Towards highly accurate calculations of parity violation in chiral molecules: relativistic coupled-cluster theory including QED-effects : Molecular Physics, Vol.119, pp.e1974592 -, 2021
 24. Kuroda, Naoya; Oho, Takumi; Senami, Masato; Sunaga, Ayaki : Enhancement of the parity-violating energy difference of H₂X₂ molecules by electronic excitation : Phys. Rev. A, Vol.105, pp.012820 -, 2022
 25. 砂賀彩光 : 相対論的量子化学計算に基づく UO₂(2+), UN₂ の化学結合解析 : 大洗・アルファ合同研究会, 2021
 26. 砂賀彩光, Maen Salman, Trond Saue : 重元素系の分子物性における量子電磁力学効果 : 高精度相対論的分子理論の開発と応用 : 第 15 回分子科学討論会, 2021
 27. Ayaki Sunaga : Parity-violating energy difference in chiral molecules enhanced by electronic excitation : Quantum Science Symposium, 17th International Conference of

- Computational Methods in Sciences and Engineering (ICCMSE) 2021 (Video Conference (Streaming)), 2021
28. Ayaki Sunaga : Many-body calculation for the electron EDM searches: mechanism of enhancement for effective electric field and many-body theory including QED effects : Fundamental Physics Using Atoms (FPUA 2021), 2021
 29. Ayaki Sunaga : Effective QED potentials for relativistic correlated molecular calculations including QED effects : 24th DIRAC working Group Meeting, virtual via ZOOM, 2021
 30. Ayaki Sunaga, Maen Salman, Trond Saue : Relativistic molecular calculations of spectroscopic constants and chemical bondings including QED effects : 第 23 回理論化学討論会, 2021
 31. Tatsuya Joutsuka and Koji Ando : Efficient Free-Energy Calculation of Proton Transfer by Constrained Density Functional Theory and Geometrically Restrained Molecular Dynamics Simulation : Chemistry Letters, Vol.50, No.7, pp.1325-1328, 2021
- 【4602 有機化学】
32. Hisakazu Miyamoto and Hiroki Takahashi : Crystal structure and photoreactive behaviour of N,N-diisopropyl (p-phenylphenyl) glyoxylamide : Acta Crystallographica Section E, Vol.E77, pp.653 - 657, 2021
 33. Ken Yamazaki, Supriya Rej, Yusuke Ano, and Naoto Chatani : An Unusual Perpendicular Metallacycle Intermediate is the Origin of Branch Selectivity in the Rh(II)-Catalyzed C-H Alkylation of Aryl Sulfonamides with Vinylsilanes : Organometallics, Vol.40, No.23, pp.3935 - 3942, 2021
 34. Ken Yamazaki, Sanjit K. Mahato, Yusuke Ano, and Naoto Chatani : Double 1,2-Migration of Bromine and Silicon in Directed C - H Alkynylation Reactions with Silyl-Substituted Alkynyl Bromides through an Iridium Vinylidene Intermediate : Organometallics, Vol.41, No.1, pp.20 - 28, 2021
 35. Ken Yamazaki, Supriya Rej, Yusuke Ano, and Naoto Chatani : Origin of the Enhanced Reactivity in the ortho C - H Borylation of Benzaldehydes with BBr₃ : Organic Letters, Vol.24, No.1, pp.213 - 217, 2021
 36. Qiyuan He, Ken Yamazaki, Yusuke Ano, and Naoto Chatani : Palladium-Catalyzed Site-Selective [5 + 1] Annulation of Aromatic Amides with Alkenes: Acceleration of β - Hydride Elimination by Maleic Anhydride from Palladacycle : ACS Catalysis, Vol.12, pp.1595 - 1600, 2022
 37. Yoshino, J.; Sekikawa, T.; Hatta, N.; Hayashi, N.; Higuchi, H. : Photoinduced Solid-State Coloring Behavior of Boronium Complexes : Tetrahedron Lett., Vol.57, pp.5489 - 5492, 2016
 38. Yoshino, J.; Konishi, S.; Kanno, R.; Hayashi, N.; Higuchi, H. : An Azide - Substituted Triarylborane: A Key Compound for the Facile Synthesis of Fluorescent Triarylboranes Bearing Triazole Moieties as Connectable π - Conjugated System Linkages : Eur. J. Org. Chem., Vol.2019, pp.6117 - 6121, 2019
 39. Yoshino, J.; Hirono, Y.; Akahane, R.; Higuchi, H.; Hayashi, N. : Effects of π -Conjugation on the Solid-State Photoresponsive Coloring Behavior of Bipyridine-Boronium Complexes : Photochem. Photobiol. Sci., Vol.19, pp.1517 - 1521, 2020
 40. Yoshino, J.; Kawaguchi, S.; Takata, S.; Hayashi, N. : Triarylboranes Bearing a Benzimidazole or Quinoline Ring Attached to the Boron Atom: Synthesis, π -Conjugation, and Fluorescence : Results Chem., Vol.4, pp.100342 -, 2022
- 【4804 高分子・繊維材料】
41. 稲田壮偉・曾川洋光・三田文雄 : アルギン酸由来の高接着性材料の開発 : 第 70 回高分子学会年次大会, Vol.70, No.1, 2021
 42. 稲田壮偉・曾川洋光・三田文雄 : カテコール基を有するアルギン酸の合成と接着能 : 日本接着学会第 59 回年次大会, Vol.59, pp.105 - 106, 2021
 43. 稲田壮偉・曾川洋光・三田文雄 : 海洋バイオマスを活用した水溶性接着剤の開発 : 日本ゴム協会主催第 32 回エラストマー討論会要旨集,

Vol.32, pp.35 - 36, 2021

【4902 薄膜・表面界面物性】

44. Kyoichi Sawabe, Atsushi Satsum: Theoretical Study on Carbon Monoxide Adsorption on Unsupported and γ -Al₂O₃-Supported Silver Nanoparticles: Size, Shape, and Support Effects : ACS Omega, Vol.7, No.5, pp.4405 - 4412, 2022
45. 沢邊恭一、薩摩篤: γ -Al₂O₃(110)面に担持した Ag 双晶ナノ粒子の CO 吸着に関する理論研究: 第 15 回分子科学討論会予稿, 2021
46. 沢邊恭一、村田和優、薩摩篤: 第一原理分子動力学法を用いた Pd ナノ粒子と Al₂O₃ 表面相互作用の解明: 第 128 回触媒討論会予稿, 2021

【5001 機械材料・材料力学】

47. 篠原綾汰, 西川雅章, 伊藤明彦, 松田直樹, 北條正樹: 熱硬化性 CFRP の積層構成が熱特性および燃焼挙動に与える影響についての検討: 第 12 回日本複合材料会議 (JCCM-12) 講演論文集, 2021
48. 水田東吾, 西川雅章, 松田直樹, 北條正樹: AP-PLY 積層を用いた薄層テープ基材の半球型賦形に関する検討: 第 46 回複合材料シンポジウム講演論文集, 2021
49. Ryota Shinohara, Masaaki Nishikawa, Akihiko Ito, Naoki Matsuda, Masaki Hojo : Evaluation of heat conduction properties of thermoset CFRP with different laminate configurations during combustion : Proc. 17th Japan International SAMPE Symposium & Exhibition (JISSE-17), 2021

【5004 流体工学】

50. Jiangao Zhang, Yasunori Okano, Sadik Dost : Numerical simulation of Marangoni convection in a shallow rectangular cavity with a linear solutal boundary condition : Int. J. Heat Mass Transfer, Vol.178, No.121578, pp.1 - 13, 2021
51. Jiangao Zhang, Yasunori Okano, Sadik Dost : Effect of radiative heat transfer on thermal-solutal Marangoni convection in a shallow rectangular cavity with mutually perpendicular temperature and concentration gradients.: Int. J. Heat Mass Transfer, Vol.183,

No.1221024, pp.1 - 13, 2021

52. Jiangao Zhang, Yasunori Okano, Sadik Dost : Effect of ambient temperature on thermal-solutal Marangoni convection in a shallow rectangular cavity with mutually perpendicular temperature and concentration gradients. : The 8th Asian Symposium on Computational Heat Transfer and Fluid Flow (ASCHT2021), 2021

【5005 熱工学】

53. Tianyi Wei, Zhicheng Yuan, Ryoichi Kurose : 濡れ性を考慮した平面への液滴の衝突過程に関する数値解析: 第 35 回数値流体力学シンポジウム講演論文集, 2021

【5102 電子・電気材料工学】

54. Kosuke O. Hara : Discovering Low-Electron-Affinity Semiconductors for Junction Partners of Photovoltaic BaSi₂ by Database Screening and First Principles Calculations : The Journal of Physical Chemistry C, Vol.125, pp.24310 - 24317, 2021

【5202 構造工学・地震工学・維持管理工学】

55. Naotoshi Yasuda : Vibration characteristics of spalling defects in concrete lining : Tunnelling and Underground Space Technology, Vol.124, pp.104441 -, 2022

【5203 地盤工学】

56. 辻勲平, 浅井光輝, 笠間清伸: ISPH-DEM によるマウンド変形・ケーソン滑動を考慮した防波堤浸透崩壊シミュレーション: 土木学会論文集 A2 (応用力学), Vol.77, No.2, pp.I_105-I_116, 2022
57. 佐伯勇輔, 辻勲平, 浅井光輝: SPH 法による負圧領域を含むカルマン渦現象の再現: 令和 3 年度西部支部研究発表会, 2022
58. 辻勲平, 浅井光輝, 笠間清伸: SPH-DEM を用いた津波による防波堤崩壊解析および河川堤防の浸食解析への応用: 第 9 回河川堤防技術シンポジウム, 2022
59. 辻勲平, 竹崎奏詠, 浅井光輝, ハザリカ・ヘマンタ: 蛇籠補強を施した粘り強い防波堤設計のための ISPH-DEM 連成シミュレーション: 令和 3 年度土木学会第 76 回年次学術講演会, 2022
60. 竹崎奏詠, 辻勲平, ハザリカ・ヘマンタ, 浅井光

- 輝：粘り強い防波堤の構築に向けた捨石マウンドの洗掘低減効果の解析的検討：第56回地盤工学研究発表会, 2022
61. 辻勲平, 竹崎奏詠, 浅井光輝, ハザリカ・ヘマンタ：SPH-DEMマクロ型連成解析手法による防波堤の浸透・洗掘破壊シミュレーション：第26回計算工学講演会, 2022
 62. Kumpei Tsuji, Mitsuteru Asai, Hemanta Hazarika：ISPH-DEM Coupled Simulation for Designing Resilient Breakwater with Gabion Reinforcements：PARTICLES 2021, 2022
 63. Kumpei Tsuji, Mitsuteru Asai, Kiyonobu Kasama：SPH-DEM simulation for estimating seepage failure of breakwaters：ICADD15, 2022
 64. Mitsuteru Asai, Daniel S. Morikawa, Kumpei Tsuji：Fluid-Soil-Structure interaction simulation for natural disaster damage estimation using a particle method：ICADD15, 2022
 65. Kumpei Tsuji, Mitsuteru Asai, Kiyonobu Kasama：Simulation of Breakwater Failure induced by Tsunami Using an ISPH-DEM Coupled Method：COUPLED PROBLEMS 2021, 2022
- 【5204 水工水理学】
66. 大山 純佳, 仲吉 信人, 小野村 史穂, 金子 凌, 井戸 滉昇, 高根 雄也, 中野 満寿男：東京都区部のクールループ導入による夏季気温低下量の検証：土木学会論文集 B1 (水工学), Vol.77, No.2, pp.I_1339 - I_1344, 2021
- 【5401 金属物性】
67. T. Gake, Y. Kumagai, A. Takahashi, and F. Oba：Point defects in p-type transparent conductive CuMO_2 ($M = \text{Al, Ga, In}$) from first principles：Phys. Rev. Mater., Vol.5, pp.104602-1 - 104602-12, 2021
 68. T. Gake, Y. Kumagai, A. Takahashi, and F. Oba：First-principles study of point defects in CuMO_2 ($M = \text{Al, Ga, In}$)：The 12th International Conference on the Science and Technology for Advanced Ceramics, 2021
 69. T. Gake, Y. Kumagai, A. Takahashi, and F. Oba：Point defects in CuMO_2 ($M = \text{Al, Ga, In}$): A first-principles study：Materials Research Meeting 2021, 2021
- 【5402 無機材料・物性】
70. S. Kiyohara, D. M. Fonz, A. Shluger, Y. Kumagai, and F. Oba：Analysis of unique atomic and electronic structures of oxygen vacancies in amorphous SnO_2 by first-principles calculations and machine learning：Materials Research Meeting 2021, 2021
 71. F. Oba：Computational design and exploration of ternary zinc nitride semiconductors：2021 MRS Fall Meeting & Exhibit, 2021
- 【5406 金属生産工学】
72. Yoyo Hinuma, Ichigaku Takigawa, Masanori Kohyama, Shingo Tanaka：A simplified methodology for the modeling of interfaces of elementary metals：AIP Advances, Vol.11, No.11, pp.115020 - 115020, 2021
 73. Kazuhiro Hikima, Sou Taminato, Yoyo Hinuma, Keisuke Shimizu, Kota Suzuki, Masaaki Hirayama, Satoshi Yasuno, Kazuhisa Tamura, Ryoji Kanno：Influence of Chemical Composition and Domain Morphology of Li_2MnO_3 on Battery Properties：Batteries & Supercaps, Vol.4, No.3, pp.493 - 503, 2020
 74. Y. Hinuma, S. Mine, T. Toyao, T. Kamachi, K. Shimizu：Factors determining surface oxygen vacancy formation energy in ternary spinel structure oxides with zinc：Physical Chemistry Chemical Physics, Vol.23, No.41, pp.23768 - 23777, 2021
 75. Hinuma, S. Mine, T. Toyao, Z. Maeno, K. Shimizu：Surface activation by electron scavenger metal nanorod adsorption on TiH_2 , TiC , TiN , and Ti_2O_3 ：Physical Chemistry Chemical Physics, Vol.23, No.31, pp.16577 - 16593, 2021
 76. T. Yamamoto, S. V. Komarov：Enhancement of oscillation amplitude of cavitation bubble due to acoustic wake effect in multibubble environment：Ultrasonics Sonochemistry, Vol.78, pp.105734 -, 2021

【5601 航空宇宙工学】

77. Kazuma Emoto, Kazunori Takahashi, and Yoshinori Takao : Numerical investigation of internal plasma currents in a magnetic nozzle : Physics of Plasmas, Vol.29, No.9, pp.093506-1 - 093506-11, 2021
78. Kazuma Emoto, Kazunori Takahashi, and Yoshinori Takao : Axial momentum gains of ions and electrons in magnetic nozzle acceleration : Plasma Sources Science and Technology, Vol.30, No.11, pp.115016-1 - 115016-11, 2021
79. Kazuma Emoto, Kazunori Takahashi, and Yoshinori Takao : Vector Resolved Energy Fluxes and Collisional Energy Losses in Magnetic Nozzle Radiofrequency Plasma Thrusters : Frontiers in Physics, Vol.9, pp.779204-1 - 779204-13, 2021

別表1 スーパーコンピュータシステム

区分			利用負担額	提供サービス					
コース	タイプ	セット		システム	バッチ	システム資源	経過時間 (時間)	ストレージ (TB)	無料 利用者数
エントリ	-	基本	12,600 円/年	B	共有	最大0.5ノード相当((112コア、512GBメモリ)×0.5)	1	0.2	-
パーソナル	タイプA	基本	100,000 円/年	A	共有	最大2ノード相当((112コア、128GB高速メモリ)×2)	168	8.0	-
	タイプB	基本	100,000 円/年	B	共有	最大2ノード相当((112コア、512GBメモリ)×2)	168	8.0	-
	タイプC	基本	100,000 円/年	C	共有	最大1ノード相当((112コア、2048GBメモリ)×1)	168	8.0	-
	タイプG	基本	100,000 円/年	G	共有	最大1GPU相当((16コア、128GBメモリ+1GPU)×1)	168	8.0	-
グループ	タイプA0	最小/追加	110,000 円/年	A	準々優先	1ノード((112コア、128GB高速メモリ)×1)	168	6.4	2
	タイプA1	最小/追加	275,000 円/年		優先	1ノード((112コア、128GB高速メモリ)×1)	336	16.0	4
	タイプA2	最小/追加	330,000 円/年		準優先	2ノード((112コア、128GB高速メモリ)×2)	336	19.2	6
	タイプA3	最小/追加	412,500 円/年		占有	1ノード((112コア、128GB高速メモリ)×1)	336	16.0	4
	タイプB0	最小/追加	120,000 円/年	B	準々優先	1ノード((112コア、512GBメモリ)×1)	168	6.4	2
	タイプB1	最小/追加	300,000 円/年		優先	1ノード((112コア、512GBメモリ)×1)	336	16.0	4
	タイプB2	最小/追加	360,000 円/年		準優先	2ノード((112コア、512GBメモリ)×2)	336	19.2	6
	タイプB3	最小/追加	450,000 円/年		占有	1ノード((112コア、512GBメモリ)×1)	336	16.0	4
	タイプC0	最小/追加	132,000 円/年	C	準々優先	1ノード((112コア、2048GBメモリ)×1)	168	6.4	2
	タイプC1	最小/追加	330,000 円/年		優先	1ノード((112コア、2048GBメモリ)×1)	336	16.0	4
	タイプG0	最小/追加	86,000 円/年	G	準々優先	1GPU((16コア、128GBメモリ+1GPU)×1)	168	6.4	2
	タイプG1	最小/追加	430,000 円/年		優先	2GPU((16コア、128GBメモリ+1GPU)×2)	336	32.0	8
大規模ジョブ	タイプA	最小	110,000 円/週(7日)	A	占有	8ノード((112コア、128GB高速メモリ)×8)	168	-	-
		追加単位	27,500 円/週(7日)			2ノード((112コア、128GB高速メモリ)×2)		-	-
	タイプB	最小	120,000 円/週(7日)	B	占有	8ノード((112コア、512GBメモリ)×8)	168	-	-
		追加単位	30,000 円/週(7日)			2ノード((112コア、512GBメモリ)×2)		-	-
専用クラスタ	タイプB	最小	900,000 円/年	B	-	2ノード((112コア、512GBメモリ)×2)	-	32.0	8
		追加単位	450,000 円/年			1ノード((112コア、512GBメモリ)×1)		16.0	4
ストレージ	大容量ストレージ		10,000 円/年	大容量ストレージ容量10TBの追加につき					
	高速ストレージ		10,000 円/年	高速ストレージ容量2TBの追加につき					
	ネットワークストレージ		5,000 円/年	ネットワークストレージ容量1TBの追加につき					
ライセンスサービス			20,000 円/年	可視化ソフトおよびブリポストアウェアの1ライセンスにつき					

備考

- 利用負担額は、年度単位（大規模ジョブコースは週単位）で算定している。また、総額表示である。
パーソナルコース、グループコース又は専用クラスタコースを年度途中から利用を開始する場合及び年度途中で利用を終了する場合の利用負担額は、上記表中の利用負担額を12で除した後、利用月数を乗じて算出するものとし、100円未満に端数が出た場合は、10円単位を四捨五入するものとする。
なお、月途中から利用を開始する場合及び月途中で利用を終了する場合は、それぞれ1月の利用とする。
- 大型計算機システムの全ての利用者は、上記表のサービスの他、次のサービスを受けることができる。
 - 大判プリンタサービス
 - その他、大型計算機システムが提供するサービス、機器の利用
- 上記表の大規模ジョブコース、ストレージコース、ライセンスサービスの申請には、スーパーコンピュータシステムの利用者であることが必要である。
- 上記表のバッチの種類は、次のとおりとする。
 「共有」：当該カテゴリのユーザ間で一定の計算資源を共有するベストエフォートのスケジューリングを行う。
 「準々優先」：定常稼働状況において記載値の計算資源が確保されるようにベストエフォートのスケジューリングを行う。
 「準優先」：定常稼働状況において記載値（以上）の計算資源が確保されるように準優先スケジューリングを行う。
 また、稼働状況によらず記載値の1/4の計算資源が確保されることを保証する。
 「優先」：定常稼働状況において記載値（以上）の計算資源が確保されるように優先スケジューリングを行う。
 また、稼働状況によらず記載値の1/2の計算資源が確保されることを保証する。
 「占有」：稼働状況によらず記載値の計算資源が確保されることを保証する。
- システム障害、電力不足又は電気代の高騰に伴う節電、天災等の要因により、定常稼働が困難な状況においては、上記表に規定するバッチにかかわらず、ベストエフォートのスケジューリングを行う。
- ストレージ容量はバックアップ領域（最大で総容量の1/2）を含む。
- グループコース及び専用クラスタコースの利用者番号は、利用者あたり年額5,000円を負担することで追加できる。
- 機関・部局定額制度
他機関又は学内における部局（『国立大学法人京都大学の組織に関する規程』第3章第2節から第11節で定める組織をいう。）の組織が、その組織単位でグループコースサービスを利用申請する場合の利用負担額は、別表1に規定する1.5倍の額とする。
なお、利用負担額が年額150万円未満の場合は100人、年額150万円を超える場合は、150万円毎に100人までの利用者を認める。
ストレージは、1.5倍の容量とする。
- スパコン連携サービス
学術情報メディアセンターのスーパーコンピュータシステムと密な連携により、学内における部局の組織が計算サーバ等を設置する場合下記の負担額を支払うものとする。

区分	冷却方式	利用負担額	利用負担額算定単位
スパコン連携サービス	水冷	23,200 円/月	水冷冷却方式の計算サーバ等の定格電力 1kWにつき
	空冷	27,500 円/月	空冷冷却方式の計算サーバ等の定格電力 1kWにつき

別表2 アカデミッククラウドシステム

区 分	利用負担額	単 位
仮想サーバ ホスティングサービス	38,400円／年	1仮想サーバにつき

備考

1. 利用負担額は、総額表示である。
2. 上記表の仮想サーバホスティングサービスを利用するには、スーパーコンピュータシステムの利用者であること。
3. 1仮想サーバに割当ててるシステム資源は、CPU：2コア、メモリ：4GB、ストレージ：100GBである。
4. 仮想サーバホスティングサービスにおいて、下記の負担額を支払うことによりCPU、メモリ、ストレージを増量することができる。

区 分	利用負担額	単 位
CPU増量	3,600円／年	2コアにつき(最大8コアまで)
メモリ増量	3,600円／年	4GBにつき(最大64GBまで)
ストレージ増量	7,200円／年	100GBにつき(最大1,000GBまで)

5. 利用負担額は、当該年度(4月から翌年3月まで)の利用に対して年額として算定するが、年度途中から利用を開始する場合及び申請時において年度途中で利用を終了することが明らかな場合には月数に応じて減額する。

別表3 スーパーコンピュータシステム（民間機関利用）

システム	システム資源	経過時間 (時間)	ストレージ (TB)	無料 利用者数	利用負担額
A	2ノード((112コア、128GB高速メモリ)×2)	336	19.2	6	1,320,000 円/年
	3ノード((112コア、128GB高速メモリ)×3)	336	28.8	9	1,980,000 円/年
	4ノード((112コア、128GB高速メモリ)×4)	336	38.4	12	2,640,000 円/年
B	2ノード((112コア、512GBメモリ)×2)	336	19.2	6	1,440,000 円/年
	3ノード((112コア、512GBメモリ)×3)	336	28.8	9	2,160,000 円/年
	4ノード((112コア、512GBメモリ)×4)	336	38.4	12	2,880,000 円/年

備考

- 利用負担額は、年度単位で算定している。また、総額表示である。
年度途中から利用を開始する場合及び年度途中で利用を終了する場合の利用負担額は、上記表中の利用負担額を12で除した後、利用月数を乗じて算出するものとし、100円未満に端数が出た場合は、10円単位を四捨五入するものとする。
なお、月途中から利用を開始する場合及び月途中で利用を終了する場合は、それぞれ1月の利用とする。
- ストレージ容量はバックアップ領域（最大で総容量の1/2）を含む。

— サービス利用のための資料一覧 —

1. スーパーコンピュータシステム・ホスト一覧

- システム A (Camphor3) : camphor.kudpc.kyoto-u.ac.jp
- システム B (Laurel3) : laurel.kudpc.kyoto-u.ac.jp
- システム C (Cinnamon3) : cinnamon.kudpc.kyoto-u.ac.jp
- システム G (Gardenia) : gardenia.kudpc.kyoto-u.ac.jp
- アプリケーションサーバ : app.kudpc.kyoto-u.ac.jp
- ファイル転送サーバ : hpcfs.kudpc.kyoto-u.ac.jp

※ ホストへの接続は SSH(Secure SHell) 鍵認証のみ、パスワード認証は不可

2. 問い合わせ先 & リンク集

- 情報環境機構のホームページ
<http://www.iimc.kyoto-u.ac.jp/>
- 学術情報メディアセンターのホームページ
<http://www.media.kyoto-u.ac.jp/>
- 利用申請などに関する問い合わせ先
【情報環境支援センター】
E-mail : zenkoku-kyo@media.kyoto-u.ac.jp / Tel : 075-753-7424
URL: <http://www.iimc.kyoto-u.ac.jp/ja/services/comp/>
- システムの利用など技術的な問い合わせ先
【スーパーコンピューティング掛】
E-mail : consult@kudpc.kyoto-u.ac.jp
URL: <http://www.iimc.kyoto-u.ac.jp/ja/services/comp/contact.html>

This image shows a full page of blank, lined paper. It features approximately 28 horizontal grey lines spaced evenly apart, typical of notebook paper. The lines extend across the entire width of the page, leaving small margins at the top and bottom. There are no vertical lines, text, or other markings present.

京都大学学術情報メディアセンター全国共同利用版広報 Vol. 22, No. 1

2023年 6月 16日 発行

編集者 京都大学学術情報メディアセンター
全国共同利用版広報編集部会
発行者 〒606-8501 京都市左京区吉田本町
京都大学学術情報メディアセンター
Academic Center for Computing and Media Studies
Kyoto University
<http://www.media.kyoto-u.ac.jp/>
印刷所 〒616-8102 京都市右京区太秦森ヶ東町 21-10
株式会社エヌジーピー

広報編集部会

深沢 圭一郎 (部会長)
鳥生 大祐 (副部会長)
當山 達也
熊谷 真由美

表紙デザイン：中山 豊
(中山商店)

目次

【巻頭言】

- ・ Vol.22, No.1 号の発刊に当たって 深沢 圭一郎 1

【新スーパーコンピュータサービス開始】

- ・ 新スーパーコンピュータシステムの性能(1) 深沢 圭一郎 2

【研究プロジェクト報告】

- ・ 京都大学研究支援 SPIRITS プログラム 2021－2022 年度「プラズマ粒子シミュレーションの
応用による野生ウマの行動数値実験 モデルの確立」研究報告 深沢 圭一郎 7

【サービスの記録・報告】

- ・ スーパーコンピュータシステムの稼働状況(2022 年 4 月～ 2022 年 9 月) 11
- ・ スーパーコンピュータシステムの稼働状況(2022 年 10 月～ 2023 年 3 月) 14
- ・ センター利用による研究成果(2021 年度) 17

【資料】

- ・ 大型計算機システム利用負担金 別表 23
- ・ サービス利用のための資料一覧 26