



TOHOKU  
UNIVERSITY

ISSN 2436-0066

東北大学  
サイバーサイエンスセンター

大規模科学計算システム広報

SENAC

Vol.54 No.3 2021-7



Cyberscience  
Center

Supercomputing System  
Tohoku University

[www.ss.cc.tohoku.ac.jp](http://www.ss.cc.tohoku.ac.jp)

## 大規模科学計算システム関連案内

<大規模科学計算システム関連業務は、サイバーサイエンスセンター本館内の情報部情報基盤課が担当しています。>

<https://www.ss.cc.tohoku.ac.jp/>

| 階  | 係・室名                    | 電話番号(内線)*<br>e-mail                                                           | 主なサービス内容                               | サービス時間                       |
|----|-------------------------|-------------------------------------------------------------------------------|----------------------------------------|------------------------------|
|    |                         |                                                                               |                                        | 平日                           |
| 一階 | 利用相談室                   | 022-795-6153 (6153)<br>sodan@cc.tohoku.ac.jp<br>相談員不在時<br>022-795-3406 (3406) | 計算機利用全般に関する相談<br><br>大判プリンタ、利用者端末等の利用  | 8:30～17:15<br><br>8:30～21:00 |
|    | 利用者談話室                  | (3444)                                                                        | 自販機                                    | 8:30～21:00                   |
|    | 展示室* (分散<br>コンピュータ博物館)* | *見学希望の方は共同利用支援係までご連絡ください。                                                     | 歴代の大型計算機等の展示                           | 9:00～17:00                   |
| 三階 | 総務係                     | 022-795-3407 (3407)<br>cc-som@grp.tohoku.ac.jp                                | 総務に関すること                               | 8:30～17:15                   |
|    | 会計係                     | 022-795-3405 (3405)<br>cc-kaikei@grp.tohoku.ac.jp                             | 会計に関すること、負担金の請求に関すること                  | 8:30～17:15                   |
|    | 共同利用支援係<br>(受付)         | 022-795-3406 (3406)<br>022-795-6251 (6251)<br>uketuke@cc.tohoku.ac.jp         | 利用手続き、利用相談、講習会、ライブラリ、見学、アプリケーションに関すること | 8:30～17:15                   |
|    | 共同研究支援係                 | 022-795-6252 (6252)<br>rs-sec@cc.tohoku.ac.jp                                 | 共同研究、計算機システムに関すること                     | 8:30～17:15                   |
|    | ネットワーク係                 | 022-795-6253 (6253)<br>i-network@grp.tohoku.ac.jp                             | ネットワークに関すること                           | 8:30～17:15                   |
| 四階 | 研究開発部                   | 022-795-6095 (6095)                                                           |                                        |                              |
| 五階 | 端末機室                    | (3445)                                                                        | PC 端末機 (X 端末)                          | 8:30～17:15                   |

\* ( ) 内は東北大学内のみの内線電話番号です。青葉山・川内地区以外からは頭に 92 を加えます。

### 本誌の名前「SENAC」の由来

昭和 33 年に東北地区の最初の電子計算機として、東北大学電気通信研究所において完成されたパラメロン式計算機の名前で SENAC-1 (SENdai Automatic Computer-1) からとって命名された。

[共同研究成果]

## 乱流大規模直接数値計算コードの SX-Aurora TSUBASA 上での性能評価

山本 義暢：山梨大学大学院総合研究部  
滝沢 寛之：東北大学サイバーサイエンスセンター  
加藤 季広：NEC・AI プラットフォーム事業部  
磯部 洋子：NEC・AI プラットフォーム事業部

乱流大規模直接数値計算コードの AOBA-A への移植及びその性能評価を行った。全対全通信(all-to-all)通信を回避するコードにおいては、実際の高レイノルズ数直接数値計算条件のベンチマークにおいて、単体ベクトルエンジンにおいて理論演算性能の 9%、AOBA-A 全システム(576 ベクトルエンジン)使用時に 57 Tflop/s の実行演算速度を得ることができた。前機種 SX-ACE 並びに Cray XC40 との比較においては、同一数のベクトルエンジン対ノードとの比較では約 4 倍程度の計算速度向上が得られている。これにより AOBA-A で実行可能な条件では全ケースに対し 1 タイムステップ 1 秒程度での時間積分が可能となっていることを確認した。

### 1. はじめに

非線形・非定常の他自由度力学系の典型である乱流現象を理解する手法として、乱流の直接数値計算(Direct Numerical Simulation, DNS)は、最も有力な手法である。しかし DNS においては流れ場のレイノルズ数( $Re = UL/\nu$ ,  $U$ :代表速度、 $L$ :代表長、 $\nu$ :流体の動粘性係数)の 9/4 乗に比例する格子分解能が必要となり、工学的に重要な高レイノルズ数を対象とすることが重要な課題となっている。そのため高レイノルズ数乱流 DNS においては、スーパーコンピュータを用いた大規模容量・高速計算が必須となる。周期境界条件が適用できる場合、フーリエ・スペクトル法が空間離散化手法として最も高精度であり、同一精度を得るための計算コストにおいても最も高効率な手法であるため、DNS における標準離散化手法として確立している。フーリエ・スペクトル法で必要となる高速フーリエ変換(Fast Fourier Transform, FFT)は、計算方向に領域分割が施されている場合、分割軸を変更して並列性を捻出する必要が生じる。この分割軸の変更は、全対全(all-to-all)通信となるため、ネットワークバンド幅(特にフルバイセクションバンド幅)への要求が高くなる。

上記のように乱流 DNS においては、高メモリバンド幅・高速ネットワークシステムが要求されベクトル並列計算機が最適システムとされてきた。第一筆者においても初代地球シミュレータ(SX-5 ベース) [1]以来、NEC SX シリーズ(SX-9 [2]、SX-ACE [3])を対象とした DNS コード開発 [4], [5]を実施している。

一方東北大学サイバーサイエンスセンターに 2020 年 10 月に導入された新ベクトル並列計算機 AOBA-A(NEC 製 SX-Aurora TSUBASA, 以降、SX-AT と表記) [6]は、高メモリバンド幅(ベクトルエンジンあたり 2.45Tflop/s の理論演算性能に対し、1.53TB/s のメモリアクセス速度)を維持しているものの、初代地球シミュレータに代表される単段クロスバーネットワーク [1]のような特別なネットワークシステムは有さず、x86/Linux であるベクトルホスト(VH)を通じた InfiniBand によるネットワーク構成(図 1 参照)となっており、その影響が懸念される。また新システムにおいては NEC Numeric Library Collection(NLC)による新数値計算ライブラリ [7]、ベクトルエンジン(VE)内並列における OpenMP と自動並列の併用など多くの変更が試みられている。本研究ではベクトル並列計算機上で開発された DNS コードを SX-AT に移植し、その性能評価を実施した。

### 2. 計算体系と計算手法の概要

#### 2.1 計算体系と支配方程式

計算対象は図 2 に示す、一定圧力勾配により駆動される十分に発達したチャンネル流であり、境界条件としては流れ方向( $x$ )とスパン方向( $y$ )に周期境界条件、壁面では no-slip 条件となる。流れ

場の支配方程式は非圧縮性流体の Navier-Stoke 方程式と連続式である。

## 2.2 計算手法 [4], [5]

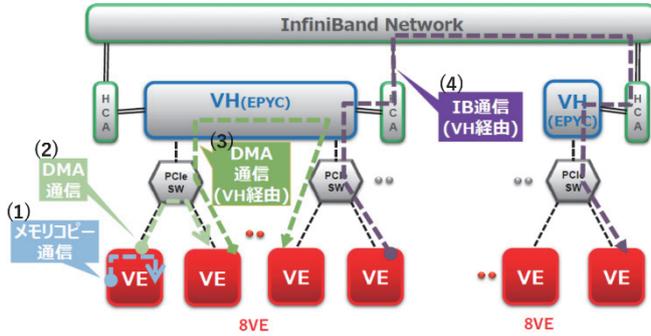


図1 AOBA-Aにおけるネットワークシステム

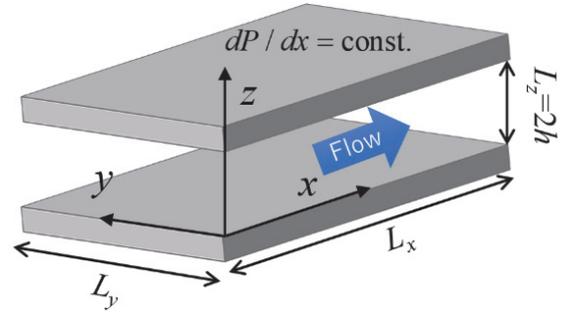


図2 計算対象(チャンネル流)と座標系

空間離散化手法としては、 $x, y$  方向にフーリエ・スペクトル法、壁垂直方向( $z$ )に2次精度中心差分法を適用し、Fractional Step 法により Navier-Stokes 式と連続式をカップリングさせる。これにより派生する圧力ポアソン方程式(1)は、以下となる。

$$-(k_x^2 + k_y^2)\Phi(l, m, k) + \left\{ \frac{\Phi(l, m, k+1) - \Phi(l, m, k)}{dzw(k)} - \frac{\Phi(l, m, k+1) - \Phi(l, m, k)}{dzw(k-1)} \right\} \frac{1}{dz(k)} = D(l, m, k) \quad (1)$$

ここに  $k_x (= 2\pi l/L_x, l = 0, \dots, N_x/2, N_x: x$  方向のフーリエモード数),  $k_y (= 2\pi m/L_y, m = -N_y/2, \dots, N_y/2-1, N_y: y$  方向のフーリエモード数) は  $x, y$  方向への波数,  $\Phi, D$  は  $x, y$  方向にフーリエ変換を施した圧力及び部分段階速度により評価した連続式にマイナスをかけタイムステップ幅で除した値,  $k (= 1, \dots, N_z)$  は  $z$  方向の格子点番号,  $dz$  及び  $dzw$  は壁垂直方向の格子間隔(不等間隔格子)を示す。式(1)は式(2)のように整理すると、各波数( $l, m$ )に対して独立に  $\Phi(k), \Phi(k+1), \Phi(k-1)$  に対する3重対角行列(Tri-Diagonal Matrix)となっている。

$$\underbrace{\left\{ \frac{1}{dz(k)} \left( \frac{-1}{dzw(k)} + \frac{-1}{dzw(k-1)} \right) - (k_x^2 + k_y^2) \right\}}_{A(l, m, k)} \Phi(l, m, k) = \underbrace{\frac{1}{dz(k)dzw(k)}}_{B(l, m, k)} \Phi(l, m, k+1) + \underbrace{\frac{1}{dz(k)dzw(k-1)}}_{C(l, m, k)} \Phi(l, m, k-1) + D(l, m, k) \quad (2)$$

式(2)の3重対角行列は以下に示す TDMA(Tri-diagonal Matrix Algorithm)により各波数( $l, m$ )に対して直接解くことができる。

(i)  $k=1, \dots, N_z$ ( $z$  方向の格子点数)の時の  $P, Q$  を式(3)及び(4)により求める(forward step)

•  $k = 1$

$$P(l, m, 1) = \frac{B(l, m, 1)}{A(l, m, 1)}, Q(l, m, 1) = \frac{D(l, m, 1)}{A(l, m, 1)}$$

•  $k = 2, \dots, N_z$

$$P(l, m, k) = \frac{B(l, m, k)}{A(l, m, k) - C(l, m, k)P(l, m, k-1)}$$

$$Q(l, m, k) = \frac{D(l, m, k) + C(l, m, k)Q(l, m, k-1)}{A(l, m, k) - C(l, m, k)P(l, m, k-1)} \quad (3)$$

(ii)  $k = N_z, \dots, 1$  に対し式(4)により順次 $\Phi$ が得られる(backward step)。

$$\begin{aligned} \square k &= N_z \\ \Phi(l, m, N_z) &= Q(l, m, N_z) \\ \square k &= N_z - 1, \dots, 1 \\ \Phi(l, m, k) &= P(l, m, k)\Phi(l, m, k+1) + Q(l, m, k) \end{aligned} \tag{4}$$

またフーリエ・スペクトル法における非線形項の計算は擬スペクトル法を適用し、これにより派生する aliasing error は 3/2 則により除去する。時間積分は圧力項に Euler 陰解法、その他の項に 2 次精度の Adams-Bashforth 法を用いる。

### 3. 並列化手法の概要

領域分割は図 3-(a)に示す壁垂直方向( $z$ )への 1 次元領域分割を適用する。これより  $x, y$  方向のフーリエ変換においては分割軸の変更は不要となる。一方圧力ポアソン方程式(2)の壁垂直方向( $z$ )の TDMA においては、式(3), (4)は分割軸( $z: k$ )に対して逐次計算となるため並列性が得られない。

(A) a2a コード

そこで一般には分割軸  $z$  を変更し並列性を確保する。変更する分割軸に際しては、一般にチャンネル流における計算では、 $x, y, z$  方向の格子点数が異なることから、単純に  $z \rightarrow x$ , あるいは  $z \rightarrow y$  と変更すると分割数の不均一が生じるため、 $x, y$  軸を 1 次元化( $xy$  軸)し、この  $xy$  軸に対して図 3-(b)のように領域分割を行う。これにより  $z(k)$  軸方向の TDMA においても完全かつ均一な並列性を確保できる。しかしこの分割軸の変更には全対全(all-to-all)通信となりそのコストは高い(以下本コードを a2a コードと呼ぶ)。

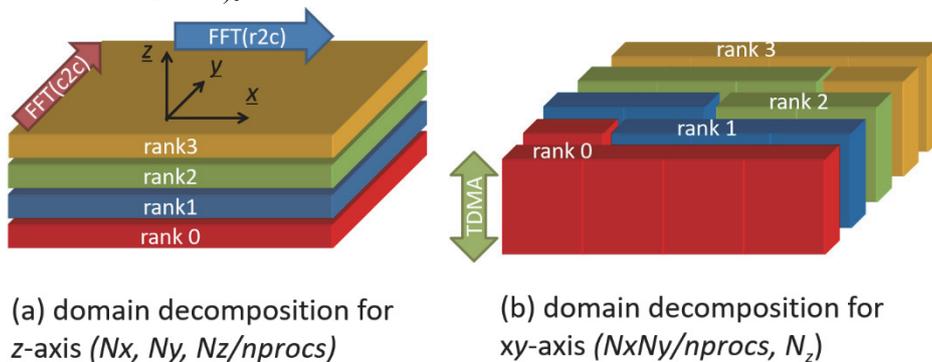


図 3 領域分割方法, MPI 並列数( $nprocs$ ) = 4 の場合

(B) shift コード

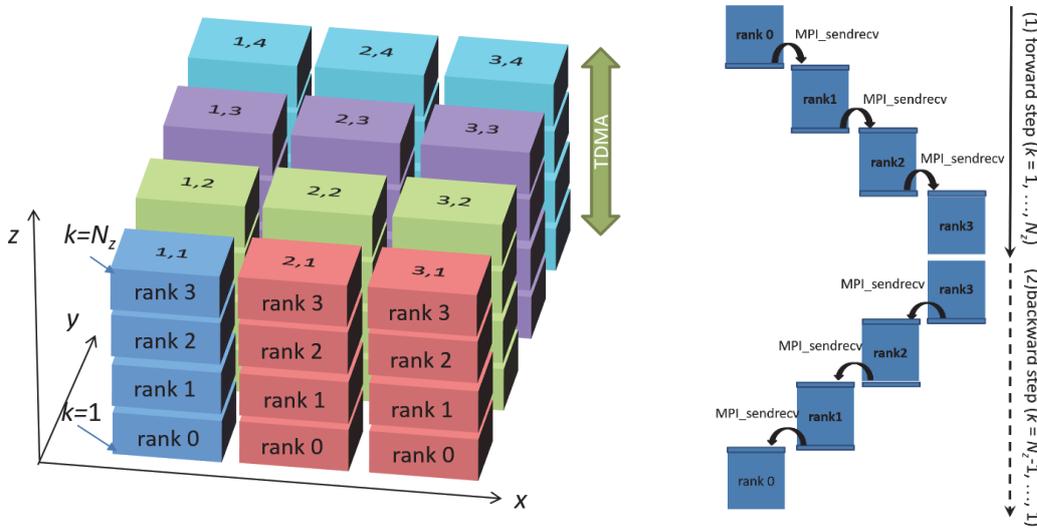
そこで all-to-all 通信を用いずに TDMA を図 4 のように計算する。図 4-(a)は  $x, y$  方向の格子数を 3 及び 4 とした例であり、図中直方体の数字: 1, 1 は  $x, y$  方向の格子点番号を示す。従って一つの直方体が  $z$  方向への 1 回の TDMA 計算を意味する。この 1 回の TDMA 計算を以下の手順で計算する(図 4-(b)参照)。

(1) まず壁垂直方向の第一格子点( $k=1$ )を持つ rank 0 において式(3)を計算し、rank 0 に領域分割の上限の  $P$  及び  $Q$  の値を同期通信:mpi\_sendrecv により rank 1 に送る。rank 1 が担当する  $k$  の値の範囲において式(3)を計算し、同様に上限の  $P$  及び  $Q$  の値を rank 2 に送る。これを rank  $nprocs - 1$  ( $nprocs$ :MPI 並列数, 図 4 の例では  $nprocs = 4$ )まで繰り返す (forward step)。

(2) 次に  $k = N_z$  を持つ rank  $nprocs - 1$  において式(4)を計算し、領域分割下限の  $\Phi$  の値を同期通

信:mpi\_sendrecv により rank  $nprocs - 2$  に送る。これを rank 0 まで繰り返すことにより、 $k$  方向のすべての格子点における圧力:  $\Phi$  が求まる(backward step)。

但しこれは逐次計算となっており並列性はゼロである。そこで式(3)及び(4)は各波数( $l, m$ )に対しては独立であることを利用して、図 5-(a)に示すように( $l, m$ )に対して各ランク(MPI プロセス)の計算をオーバーラップさせることにより並列性を作る(本コードを shift コードと呼ぶ。なお図 5-(a)においては上記の同期通信 : mpi\_sendrecv のコストを省略している)。図 5-(a)において同一時間において各ランクで重複計算となっている部分が並列性に相当する。一方 a2a コードにおいては図 5-(b)に示すように演算部分においては完全な並列性が得られるが、分割軸の転置コスト (all-to-all 通信) 次第では shift コードが優位となることが期待できる。なお図 4 においては理解を容易とするために  $x, y$  方向 1 格子の  $z$  方向への TDMA を計算単位としているが、実際の計算コードではベクトル化及びベクトル長を確保するために複数の TDMA 計算をある程度まとめた単位(通常は  $x$  方向の格子数分を 1 単位としている)を 1 回の計算としている。



(a) unit of TDMA for shift code, grid numbers:  $(N_x/2+1, N_y, N_z) = (3, 4, N_z)$

(b) sequential TDMA calculation

図 4 shift コードにおける TDMA の逐次計算

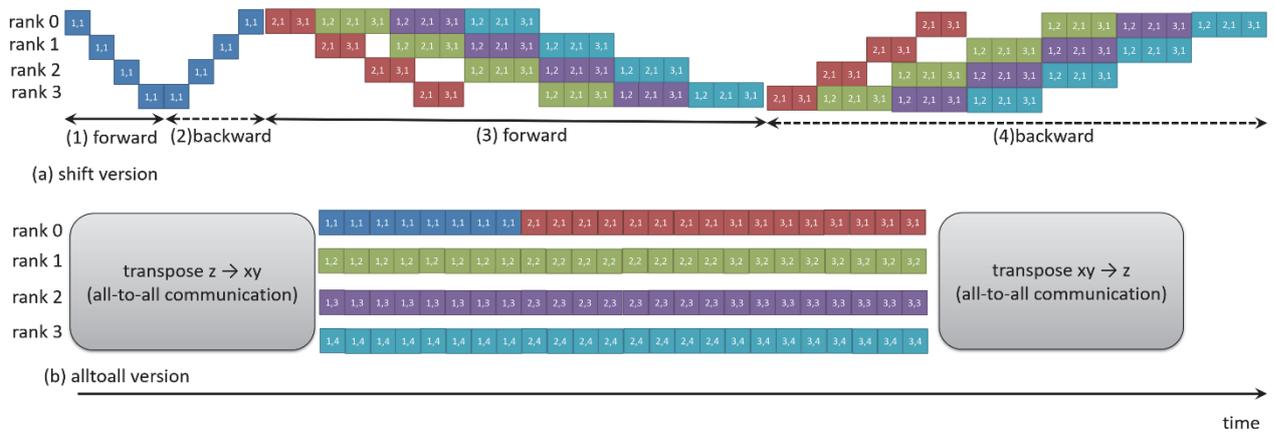


図 5 shift コード及び a2a コードにおける並列性, 格子数  $(N_x/2 + 1, N_y, N_z) = (3, 4, N_z)$ , MPI 並列数:  $nprocs = 4$  の場合、図 4-(a)と同様に 1,1 等は  $x, y$  方向の格子点番号を示す。

(a) shift コード、(b)a2a コード

## 4. AOBA-A (SX-Aurora TSUBASA) への移植作業

上記 DNS コードを SX-AT に移植するあたり以下の作業が必要となった。

- (1) FFT ライブラリの変更：本 DNS コードは、1 物理量に対し  $x, y$  方向への 2 次元実フーリエ変換/逆変換(2D-FFT)を科学技術計算ライブラリ：ASL (逐次版) [8]により  $z$  方向格子数回実施する。ノード内に自動並列を使用する場合 (ハイブリッド並列) は、 $z$  方向を分割し 2D-FFT 部分を並列実行していた。しかし SX-AT においては ASL の 2D-FFT (逐次版) はスレッドセーフではないため、ハイブリッド並列が不可となる。そこで NEC Numeric Library Collection の FFTW3 インターフェース [9]への変更及び  $z$  方向へ OpenMP を利用してのハイブリッド並列化を行った。
- (2) 自動並列不可部分の OpenMP 化：従来の SX シリーズでは OpenMP と自動並列の併用が不可であったが、SX-AT においてはこの併用が可能となった。そこで自動並列不可部分に対し OpenMP による並列化を実施した。
- (3) all-to-all 通信方法の変更：従来の SX シリーズにおいては、グローバルメモリ機能を活用した `mpi_put` 関数による高速ノード間通信 [10]が可能であり all-to-all 通信においてはこれを利用していた。一方 SX-AT ではグローバルメモリ機能が廃止されている。そこで `mpi_alltoallv` への変更を行った。
- (4) その他：この他の変更点としてはコンパイルオプションの変更、基準エンディアンが little endian となったことによる対応、ローカル変数がスタック領域に割り付けられることになったことにより、スタックサイズの指定 (本 DNS コードの場合、デフォルトではスタック領域が不足する) 等が必要となった。

## 5. AOBA-A (SX-Aurora TSUBASA) 上での性能評価

### 5.1 評価条件

ベンチマークにおいては、高レイノルズ数効果解析条件 [11], [12]を用いた。表 1 にその条件をまとめる。ここに  $Re_\tau (= u_\tau h/\nu, u_\tau$ :壁面摩擦速度,  $h$ :チャンネル半値幅,  $\nu$ :流体の動粘性係数)は摩擦レイノルズ数であり、 $N_x, N_y$  は  $x, y$  方向へのフーリエモード数、 $N_z$  は壁垂直方向への格子点数を示す。なお物理空間における非線形項計算時は  $x, y$  方向にそれぞれ  $3N_x/2, 3N_y/2$  格子を用いて計算を行う (3/2 則)。 $\Delta x^+, \Delta y^+, \Delta z^+$  は  $x, y, z$  方向への空間解像度を示し、上付き添え字+は壁面摩擦速度と動粘性係数により無次元化された値であることを示す。各ケースにおいて 100 タイムステップの時間積分を行い、初期設定及び乱流統計処理を含んだ結果である (但し瞬間乱流場の IO は除く)。

表 1 ベンチマーク条件 [11], [12]

| $Re_\tau$ | $L_x/h$ | $L_y/h$ | $N_x$ | $N_y$ | $N_z$ | $\Delta x^+$ | $\Delta y^+$ | $\Delta z^+$ |
|-----------|---------|---------|-------|-------|-------|--------------|--------------|--------------|
| 500       | 16.0    | 6.4     | 500   | 384   | 384   | 16.0         | 8.3          | 0.4-5.3      |
| 1000      | 16.0    | 6.4     | 1000  | 768   | 512   | 16.0         | 8.3          | 0.6-8.0      |
| 2000      | 16.0    | 6.4     | 2000  | 1536  | 1024  | 16.0         | 8.3          | 0.6-8.0      |
| 4000      | 16.0    | 6.4     | 4000  | 3072  | 2048  | 16.0         | 8.3          | 0.6-8.0      |
| 8000      | 16.0    | 6.4     | 6912  | 5760  | 4096  | 18.5         | 8.9          | 0.6-8.0      |

### 5.2 ベンチマーク結果

以下に示す実行時間(elapsed time)[s]、実行演算速度[Gflop/s]等は、SX-AT における性能情報解析ツール(FTRACE)により取得した値である。

### 5.2.1 単一ベクトルエンジン(VE)性能

図 6-(a)に単一 VE(総 core 数:8)における  $Re_{\tau}=500$  のケースの実行演算速度[Gflop/s]を示す。ここで #AP は VE 内スレッド並列数を示し、#MPI(=8/#AP)は MPI 並列数を示す。a2a コード及び shift コード両者とも #AP = 1(#MPI = 8, flat MPI)のケースが最も効率がよく、shift コードにおいては理論演算性能の 8.5%の演算速度が得られている。#MPI を減らし、#AP を増やすと演算速度はやや減少し shift コードの #AP = 4(#MPI = 2)の時は理論演算性能の 7.7%の実行効率となっている。a2a コードと shift コードの比較においては、flat MPI の場合はほぼ同じ演算速度が得られているものの、#AP が増加すると shift コードの方が高速である。#AP=1(#MPI=8)の shift コードにおいては 1 タイムステップあたりの実行時間は約 0.40 秒である。

### 5.2.2 単一ベクトルホスト(VH)性能

図 6-(b)に単一ベクトルホスト(VH)内における  $Re_{\tau} = 1000$  のケースの実行演算速度[Gflop/s]を示す。ここで #VE はベクトルエンジン数(最大 8)を示し、ベクトルエンジン内においては MPI 並列数 = 2, #AP = 4 と固定している。従って、総 MPI 並列数は、#VE × 2 となる。shift コードにおいては #VE = 2 の時に理論演算性能の 8.9%, #VE = 8 の時に 7.0%の実行効率が得られており、これは単一 VE 内効率と同等である。a2a コードと shift コードの比較においては、shift コードの優位性がより顕著となっている。#VE = 2, 8 の比較により算出した並列化効率は、shift コードが 78.8%, a2a コードが 64.2%となっている。#VE = 8 の shift コードにおいては 1 タイムステップあたりの実行時間は約 0.33 秒である。

### 5.2.3 マルチ VH 性能

図 6-(c)にマルチベクトルホストにおける  $Re_{\tau}=2000$  のケースの実行演算速度[Gflop/s]を示す。ここで #VH はベクトルホスト数を示し、1ベクトルホスト内の VE 数は 8 であり、1VE 内の MPI 並列数を 2, スレッド並列数を 4 と固定している。従って総 MPI 並列数は、#VH × 16 となる。なお a2a コードは、#VH = 2 ではメモリアーバとなり動作しなかった。shift コードにおいては #VH = 2 の場合の理論演算性能に対する実行効率は 7.0%であり、#VH = 8 の場合の実行効率は 4.3%となり、#VH = 2, 8 の比較により算出した並列化効率は 70.9%となり、単一 VH の場合と比べて、実行効率、並列化効率ともに減少している。#VH = 8 においては 1 タイムステップあたりの実行時間は約 0.59 秒である。shift コードと a2a コードの比較においては、shift コードの方が約 3 倍程度高速である。

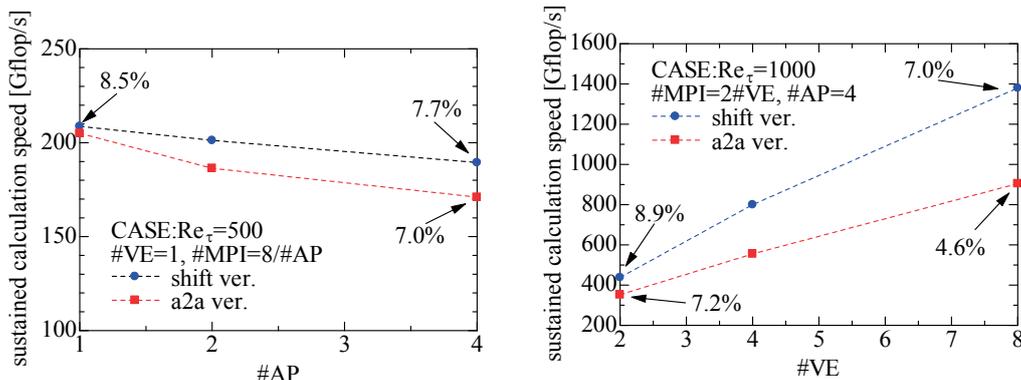
$Re_{\tau} = 4000$  のケースはメモリ量の制約により、AOBA-A における最大ジョブクラス(#VH = 32, #VE = 256, #core = 2048)のみで動作する。上記と同様にベクトルエンジン内においては MPI 並列数 = 2, #AP = 4 としている。表 2 に計測結果を示す。なお shift コードにおいては前機種 SX-ACE/256 ノードの結果も併記している(SX-ACE の場合 #VE はノード数に相当)。本条件においても a2a コードに対する shift コードの優位性が確認できる。SX-ACE との比較においては、実行効率において 3 分の 1 程度に低下しているものの、約 3.3 倍の実行演算速度(20.92Tflop/s)が得られている。この 20.92[Tflop/s]は全機種 SX-ACE の最大ジョブクラス 1024 ノードでの  $Re_{\tau}=8000$  のケースの実行演算速度に匹敵する。なお SX-AT ではメモリ量減少により  $Re_{\tau}=8000$  のケースは動作しない。

AOBA-A の全システム(#VH = 72, #VE = 576)を用いて実施した shift コード : 3200 × 5120 × 4608 格子条件においては、実行演算速度 : 57 Tflop/s, 実行効率:4%が得られている。

### 5.2.4 他システムでの性能

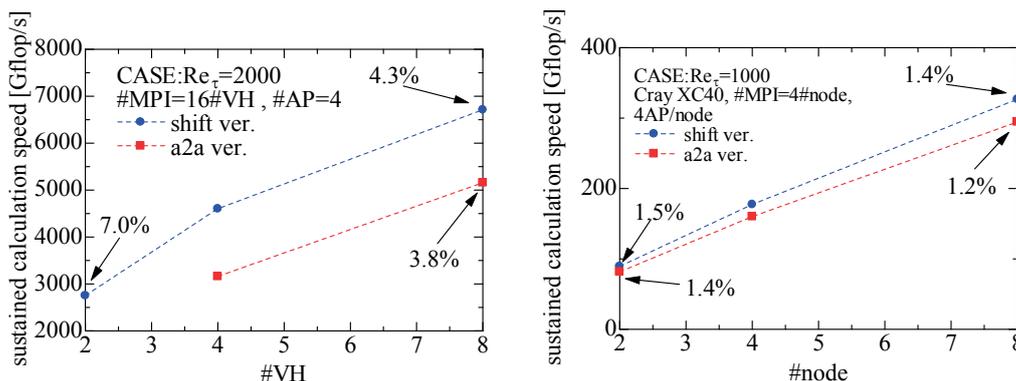
図 6-(d)に京都大学学術情報メディアセンターの Cray XC40 [13]の最大 8 ノード(ノードあたり理論演算性能:3.05Tflop/s, core 数:68, メモリ量 : 85GB)を用いた  $Re_{\tau} = 1000$  のケースの結果を示す。

shift コードにおいては 2 ノードにおいて、理論演算性能に対する実行効率 1.5%、8 ノードにおいて 1.4%であり、ノード数 2, 8 の比較により算出した並列化効率は 91.3%である。a2a コードにおいては shift コードと比較し、実行演算速度で 10%程度劣っているが、ノード数 2, 8 の比較により算出した並列化効率は 90.2%であり高い効率を維持している。shift コードノード数 8 の場合、1 タイムステップの実行時間は約 1.38 秒であり、Cray XC40/8 ノード(理論演算性能:24.4Tflop/s)に対し、約 80%の理論演算性能である AOBA-A #VE = 8(理論演算性能:19.6Tflop/s)の方が約 4.2 倍高速である。



(a) 単一 VE 性能: Re<sub>τ</sub> = 500

(b) 単一 VH 内性能: Re<sub>τ</sub> = 1000



(c) マルチ VH 性能: Re<sub>τ</sub> = 2000

(d) Cray XC40 での性能: Re<sub>τ</sub> = 1000

図 6 a2a コード、shift コードの性能評価: 実行演算速度[Gflop/s]

表 2 AOBA-A 最大ジョブクラスでの性能: ケース Re<sub>τ</sub> = 4000 (参考値: Re<sub>τ</sub> = 8000)

| Ver.  | Re <sub>τ</sub> | computer | #VE  | #MPI/VE | #AP/VE | #step | elapse[s] | Tflop/s | 実行効率  |
|-------|-----------------|----------|------|---------|--------|-------|-----------|---------|-------|
| a2a   | 4000            | SX-AT    | 256  | 2       | 4      | 100   | 313.5     | 11.06   | 1.76% |
| shift | 4000            | SX-AT    | 256  | 2       | 4      | 100   | 165.8     | 20.92   | 3.33% |
| shift | 4000            | SX-ACE   | 256  | 1       | 4      | 100   | 550.6     | 6.30    | 9.62% |
| shift | 8000            | SX-ACE   | 1024 | 1       | 4      | 100   | 1027.6    | 21.02   | 8.02% |

### 5.2.5 性能評価に対する考察

表 3 に a2a コードにより算出した TDMA の演算及び通信コストを示す。ここに type は MPI 通信のハード上での違いを表しており、図 1 に示すように使用する VE 数により、type 1 はメモリコピー、type 2 は Direct Memory Access (DMA), type 3 は VH を介した DMA、type 4 は VH を介した

InfiniBand による通信となることを示している。すべてのケースにおいて TDMA の演算量( $C_{TDMA}$ ) は DNS コード全体の演算量( $C_{total}$ )に対して 1%程度となっている。一方図 5-(b)に示した TDMA 演算部と all-to-all 通信部の計算時間比( $T_{a2a}/T_{TDMA}$ )は、通信がメモリコピーで行われる type 1 で 2.2 倍であり、演算時間よりも all-to-all 通信にかかる時間が大きいことがわかる。また DMA 通信の type 2 が 5.4 倍、VH を介した DMA 通信の type 3 が 20.6 倍、VH を介した InfiniBand 通信の type 4 が 30-100 倍となり通信タイプの違いにより all-to-all 通信に要する時間が圧倒的に大きくなることが確認できる。実際全計算時間( $T_{total}$ )に占める TDMA 演算及び all-to-all 通信にかかる時間( $T_{TDMA}+T_{a2a}$ )は type 4 で 40% 以上に及ぶ。all-to-all 通信において、総送受信量を要した時間で除して求めた実効バンド幅[GB/s]は通信 type に応じて大きく変化していることがわかる。ベクトルホスト数を増やすことにより実効バンド幅は向上しているもののその比率は一定ではなく、演算速度の向上に比して鈍化している。

以上より SX-AT においては all-to-all 通信と演算をオーバーラップして隠ぺいする [14]か、all-to-all 通信自体を回避する方策をとる必要があることがわかる。しかし TDMA については演算量自体が全体演算量の 1%程度しかなく、実行時間においても all-to-all 通信の比率が圧倒的に大きいことにより、演算とのオーバーラップによる隠ぺい効果は期待できない。従って shift コードのような all-to-all 通信を回避する対策が不可欠であると言える。

表 3 DNS コードにおける TDMA 及び all-to-all 通信のコスト(a2a コード)

| type* | $Re_{\tau}$ | #VE | $C_{total}$<br>[Gflop/step] | $C_{TDMA}$<br>[Gflop/step] | $C_{TDMA}$<br>/ $C_{total}$ [%] | $T_{a2a}$<br>/ $T_{TDMA}$ | $(T_{TDMA} + T_{a2a})$<br>/ $T_{total}$ [%] | 実効バンド<br>幅[GB/s] |
|-------|-------------|-----|-----------------------------|----------------------------|---------------------------------|---------------------------|---------------------------------------------|------------------|
| 1     | 500         | 1   | 82.36                       | 1.14                       | 1.39                            | 2.2                       | 4.2                                         | 190.3            |
| 2     | 1000        | 2   | 450.75                      | 6.09                       | 1.35                            | 5.4                       | 16.8                                        | 64.8             |
| 3     | 1000        | 8   | 450.76                      | 6.09                       | 1.35                            | 20.6                      | 36.4                                        | 67.9             |
| 4     | 2000        | 32  | 3975.62                     | 48.76                      | 1.23                            | 29.4                      | 40.7                                        | 189.9            |
| 4     | 4000        | 256 | 34688.06                    | 390.07                     | 1.12                            | 98.0                      | 46.9                                        | 515.5            |

\*1:memory copy, 2: DMA(Direct Memory Access), 3: DMA via VH, 4:Infiniband via VH (図 1 参照)

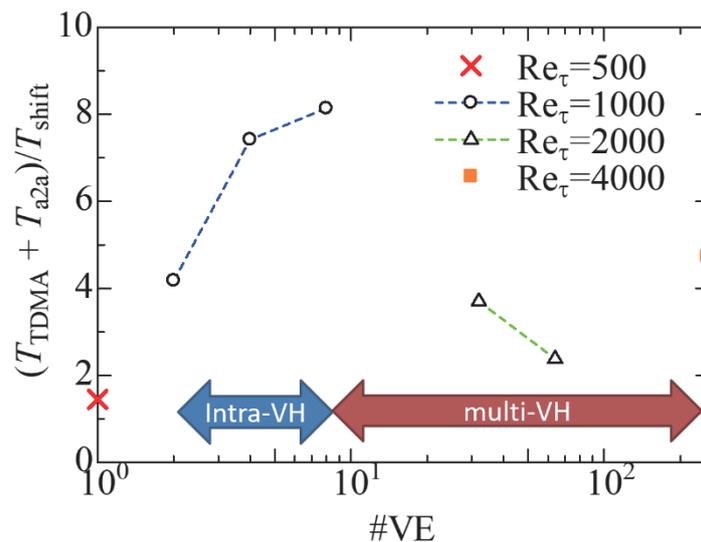


図 7 a2a コードと shift コードの TDMA 計算時間比

図 7 に各ケースにおける a2a コード及び shift コードの TDMA に要する時間の比を示す(a2a コード場合は、表 3 の  $T_{TDMA}+T_{a2a}$  の値)。shift コードは単一 VE 時以外においては a2a コードに対して 2 倍以上の優位性を持っているものの、その優位性は一律ではないことがわかる。これは shift

コードにおいては、 $z$  方向分割数が減少すると図 4-(a)に示した並列性が減少することに起因する。一方、all-to-all 通信はバイセクションバンド幅（実効バンド幅）に依存するが、表 3 に示すように VE 数の増加に伴い実効バンド幅自体は向上していることにより、VE 数の増加に伴う shift コードの a2a コードに対する優位性が複雑に変化するものと思われる。

## 6. まとめ

本研究では、2020 年 10 月に導入された新ベクトル並列計算機 AOBA-A(NEC・SX-Aurora TSUBASA)上への大規模乱流 DNS コードの移植を行い、その性能評価を実施した。その結果、(1) SX-Aurora TSUBASA は同一 VE 数と前機種(SX-ACE)及び他機種 Cray XC40 の同一ノード数比較において、約 4 倍程度的高速演算が可能であることを確認した。

(2) AOBA-A 全システム(576VE)を用いた場合は 57Tflop/s(理論演算性能の 4%)の実行演算速度が得られた。

(3) 以上により AOBA-A 上で実行可能な直接数値計算を 1 タイムステップ 1 秒程度での実行が可能となっている。

(4) 一方、近年の並列計算機は演算性能の向上に比して、ノード間(SX-AT では VE 間あるいは VH 間)通信速度の向上は鈍化しており、SX-AT においても all-to-all 通信を用いる手法は VE 内以外においては性能劣化をもたらし、これを回避する対策をとる必要がある。

今後は本評価結果を踏まえ、AOBA-A の 20 倍規模の拡張が予定されている次期システムをターゲットとした大容量・高速 DNS コードの開発を行う予定である。

## 謝辞

本研究は東北大学サイバーサイエンスセンターとの共同研究により実施した。AOBA-A 全システム(576VE)を利用した計算は、大規模並列ジョブチャレンジ制度を利用して行った。また本研究は栢森情報科学振興財団による研究助成を受けて遂行した。記して謝意を表する。

## 参考文献

- [1] “地球シミュレータ システムの概要(ES),” JAMSTEC, [オンライン]. Available: <http://www.jamstec.go.jp/es/jp/es1/system/hardware.html>. [アクセス日: 16 5 2021].
- [2] 大泉健治, 江川隆輔, 伊藤英一, 岡部公起, 小林広明, “スーパーコンピュータシステム SX-9 の紹介と性能評価,” *SENAC*, Vol.42, No.1, pp. 129-135, 2009.
- [3] 山下毅, 森谷友映, 佐々木大輔, 齋藤敦子, 小野敏, 大泉健治, “スーパーコンピュータシステム SX-ACE の紹介,” *SENAC*, Vol.48, No.1, pp. 39-46, 2015.
- [4] Y. Yamamoto and T. Kunugi, "Direct numerical simulation of a high-Froude-number turbulent open-channel flow," *Phys. Fluids*, vol. 23, no. 12, p. 125108, 2011.
- [5] Y. Yamamoto and T. Kunugi, "MHD effects on turbulent dissipation process in channel flows with an imposed wall-normal magnetic field," *Fusion Eng. Des.*, vol. 109, no. 111, pp. 1137-1142, 2016.
- [6] 山下毅, 森谷友映, 佐々木大輔, 齋藤敦子, 小野敏, 大泉健治, 滝沢寛之, “東北大学サイバーサイエンスセンター スーパーコンピュータ AOBA の紹介,” *SENAC*, Vol.No.54, No.1, pp. 50-55, 2021.
- [7] “NEC Numeric Library Collection 2.3.0 ユーザーズガイド,” NEC Corporation, [オンライン]. Available: [https://www.hpc.nec/documents/sdk/SDK\\_NLC/UsersGuide/main/ja/index.html](https://www.hpc.nec/documents/sdk/SDK_NLC/UsersGuide/main/ja/index.html). [アクセス日: 16 5 2021].

- [8] “ASL ネイティブインタフェース,” NEC Corporation , [オンライン]. Available: [https://www.hpc.nec/documents/sdk/SDK\\_NLC/UsersGuide/asl/f/ja/index.html](https://www.hpc.nec/documents/sdk/SDK_NLC/UsersGuide/asl/f/ja/index.html). [アクセス日: 16 5 2021].
- [9] “FFTW3 インタフェース (Fortran 用),” NEC Corporation, [オンライン]. Available: [https://www.hpc.nec/documents/sdk/SDK\\_NLC/UsersGuide/fftwint/f/ja/index.html](https://www.hpc.nec/documents/sdk/SDK_NLC/UsersGuide/fftwint/f/ja/index.html). [アクセス日: 16 5 2021].
- [10] 小林広明, 江川隆輔, 岡部公起, 伊藤英一, 大泉健治, “東北大学サイバーサイエンスセンターの取り組みと SX-9 の性能評価,” [オンライン]. Available: <https://jpn.nec.com/hpc/tech/journal-sx9/080413.html>. [アクセス日: 16 5 2021].
- [11] Y. Yamamoto and Y. Tsuji, "Numerical evidence of logarithmic regions in channel flow at  $Re\tau = 8000$ ," *Phys. Rev. Fluids*, vol. 3, no. 1, p. 012602, 2018.
- [12] Y. Kaneda and Y. Yamamoto, "Velocity gradient statistics in turbulent shear flow -an Extension of Kolmogorov's local equilibrium," *J. Fluid Mech.*, submitted.
- [13] “スーパーコンピュータシステム,” 京都大学学術情報メディアセンター, [オンライン]. Available: <http://www.iimc.kyoto-u.ac.jp/ja/services/comp/supercomputer/>. [アクセス日: 16 5 2021].
- [14] S. Maeyama, T. Watanabe, Y. Idomura, M. Nakata, M. Nunami and A. Ishizawa, "Computation-Communication Overlap Techniques for Parallel Spectral Calculations in Gyrokinetic Vlasov Simulations," *Plasma and Fusion Research*, vol. 8, p. 1403150, 2013.

[お知らせ]

## 令和3年度 サイバーサイエンスセンター講習会計画

東北大学サイバーサイエンスセンターでは、今後以下の講習会の開催を予定しています（zoomによるオンライン開催）。多くの皆様のご参加をお待ちしております。申し込み方法等、詳しくは以下をご覧ください。

<https://www.ss.cc.tohoku.ac.jp/lectures/>

| No. | 講習会名                            | 開催日時                    | 募集人数 | 内容                                                      |
|-----|---------------------------------|-------------------------|------|---------------------------------------------------------|
| 5   | Mathematica 入門                  | 8月31日(火)<br>13:30-16:30 | 15   | ・ Mathematica の基本的な使い方                                  |
| 6   | MATLAB 入門                       | 9月3日(金)<br>13:30-16:30  | 15   | ・ MATLAB の基本的な使い方                                       |
| 7   | Gaussian 入門                     | 9月7日(火)<br>13:30-16:30  | 15   | ・ Gaussian の基本的な使い方                                     |
| 8   | Fortran 入門                      | 9月10日(金)<br>13:30-16:30 | 15   | ・ Fortran の入門編                                          |
| 9   | はじめての Linux                     | 9月14日(火)<br>13:30-15:30 | 15   | ・ Linux システムの基本的な使い方<br>・ エディタの使い方                      |
| 10  | はじめてのスパコン                       | 9月16日(木)<br>13:30-15:30 | 15   | ・ スーパーコンピュータの紹介と<br>利用法入門                               |
| 11  | SX-Aurora TSUBASA の<br>性能分析・高速化 | 9月28日(火)<br>13:30-16:30 | 15   | ・ スーパーコンピュータでの性能<br>解析から最適化まで                           |
| 12  | 並列プログラミング<br>入門 I (OpenMP)      | 10月6日(水)<br>13:30-16:30 | 15   | ・ 並列プログラミングの概要<br>・ OpenMP による並列プログラミングの<br>基礎<br>・ 利用法 |
| 13  | 並列プログラミング<br>入門 II (MPI)        | 10月8日(金)<br>13:30-16:30 | 15   | ・ MPI による並列プログラミングの<br>基礎<br>・ 利用法                      |

[お知らせ]

## AOBA Users' NEWS 「AOBA の杜（あおばのもり）」の紹介

東北大学サイバーサイエンスセンターは、スーパーコンピュータ「AOBA」が、全国共同利用型のスパコンとして、皆さんに親しまれ、多くの人に利用していただけるよう、また学術研究から社会基盤まで多様な研究・開発を支えるシステムになるよう日々努めております

本年6月より、スーパーコンピュータ AOBA をご活用いただいている利用者の研究を紹介する AOBA Users' NEWS 「AOBA の杜（あおばのもり）」を始めました。ページ開設にあわせ、お二方の研究 (Vol. 1, Vol. 2) を動画と共に紹介中です。ぜひご覧ください。

<https://www.cc.tohoku.ac.jp/> >> 「AOBA の杜(あおばのもり)」 をご覧ください。



東北大学 サイバーサイエンスセンター  
Tohoku University Cybercience Center

> HOME  
> English  
> 情報セキュリティ

センター概要
分散コンピュータ博物館
アクセス
関連リンク

AOBA Users' News

# AOBAの杜（あおばのもり）

サイバーサイエンスセンターは、令和2年10月からスーパーコンピュータAOBAを導入し、共同利用・共同研究拠点の設備として学内外の多くの研究者に利用されています。「AOBAの杜(あおばのもり)」では、AOBAをより知っていただく目的で、生い茂る豊かな緑のようにAOBAを育て活用している利用者の研究を紹介します。

「杜」は、山などに自然に生えている樹木や草花だけではなく、そのまに暮らす人々が協力し合い、長い年月をかけて育ててきた豊かな緑のことです(仙台市HP「杜の都のいわれ」)。



### Vol.2 マルチフィジックスCFDによる高性能、高信頼なものづくりの実現



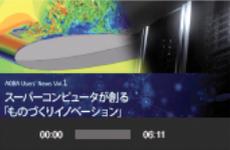
AOBA Users' News Vol.2  
マルチフィジックスCFDによる  
高性能、高信頼なものづくりの実現  
東北大学 工学部機械知能・航空工学科航空宇宙コース 兼担  
山本 裕 工学博士

ガスタービンや高気圧タービンを丸ごとスーパーコンピュータで計算することができる「数値タービン」や化学工学分野との学際的融合による「燃焼・流体シミュレータ」などのマルチフィジックスCFD技術を研究開発しています。これらシミュレーション技術は、高効率で高信頼な次世代の発電技術やエネルギー機器の開発、また化学工学分野で注目されている燃焼界水や燃焼界二酸化炭素を利用したナノ金属粒子やナノ高分子材料を創製する流体機器の開発に役立てられます。さらに、数値タービンをIoT技術に応用するため、数値タービンのデジタルツイン化も開始しました。



東北大学 大学院情報科学研究科 教授  
東北大学 工学部機械知能・航空工学科航空宇宙コース 兼担  
山本 裕 工学博士

### Vol.1 スーパーコンピュータが創る「ものづくりイノベーション」



AOBA Users' News Vol.1  
スーパーコンピュータが創る  
「ものづくりイノベーション」  
00:00 06:11

流体関連の数値シミュレーション(CFD)と設計最適化の2つを研究の柱としています。前者では先進的なシミュレーション手法とスーパーコンピュータ等も利用した実問題への応用、後者では現実の設計問題で直面する複数目的最適化問題を解決する次世代情報技術、さらにはそこから設計に有用な情報を抽出する設計探索(データマイニング)などが研究の中心です。



東北理科大学 工学部情報工学科 教授  
宇宙航空研究開発機構 名誉教授  
藤井孝蔵 工学博士

東北大学サイバーサイエンスセンター  
〒980-8578 仙台市青葉区荒巻字青葉6-3 TEL: 022-795-3407 FAX: 022-795-6098

## [利用相談室便り]

**令和3年度の利用相談について**

サイバーサイエンスセンターの利用相談についてご案内いたします。今年度は、新型コロナウイルス感染防止のため安全確保を最優先に考え、相談は主に利用相談フォームから受け付けます。面談をご希望の方は、事前に利用相談フォームでご連絡ください。相談内容、時間帯によっては、時間を要する場合がありますが、利用者の問題解決にむけて努めております。

センター利用に関してご質問、ご不明な点があればお気軽に利用相談をご利用ください。

- ・ **プログラムを高速化するにはどうしたらいいの？**
- ・ **プログラムを並列化してもっと速く計算したい！**
- ・ **スパコンでプログラムを動かしても速さがPCと変わらないんだけど、どうして？**
- ・ **研究室のコンピュータではメモリが足りない！**
- ・ **研究室の電気代高騰で困っている。**
- ・ **コンピュータの管理は面倒。研究に専念したい。**
- ・ **サービスしているアプリケーションを研究室から利用するにはどうすればいいの？**

このような、スーパーコンピュータ利用に関する疑問や問題をお持ちの方、これから利用してみたいとお考えの方、一度相談してみたいはいかがでしょうか。

利用相談フォーム： <https://www.ss.cc.tohoku.ac.jp/> >> 利用者支援 >> 利用相談



サイバーサイエンスセンター本館（右）、  
2号館（左）

### 令和3年度利用相談日程と主な担当分野

| 曜日・時間                           |                    | テクニカルアシスタント              | 主な担当分野                                                                                                                              |
|---------------------------------|--------------------|--------------------------|-------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
| 月                               | 14時～16時            | 佐々木大輔<br>(情報基盤課共同研究支援係)  | <ul style="list-style-type: none"> <li>・スーパーコンピュータ</li> <li>・並列コンピュータ</li> <li>・Fortran</li> <li>・大判プリンタ</li> </ul>                 |
| 火                               | 14時～16時            | 齋藤 敦子<br>(情報基盤課共同研究支援係)  | <ul style="list-style-type: none"> <li>・スーパーコンピュータ</li> <li>・並列コンピュータ</li> <li>・大判プリンタ</li> </ul>                                   |
| 木                               | 14時～16時            | 森谷 友映<br>(情報基盤課共同研究支援係)  | <ul style="list-style-type: none"> <li>・スーパーコンピュータ</li> <li>・並列コンピュータ</li> <li>・Fortran</li> <li>・大判プリンタ</li> </ul>                 |
| 金                               | 14時～16時<br>(事前予約*) | 小松 一彦<br>(サイバーサイエンスセンター) | <ul style="list-style-type: none"> <li>・スーパーコンピュータ</li> <li>・並列コンピュータ</li> <li>・高速化 (ベクトル化、並列化)</li> <li>・Fortran ・C/C++</li> </ul> |
| 事前予約*                           |                    | 菅野 学<br>(理学研究科)          | <ul style="list-style-type: none"> <li>・ Gaussian</li> </ul>                                                                        |
| 事前予約*                           |                    | 山下 毅<br>(情報基盤課共同利用支援係)   | <ul style="list-style-type: none"> <li>・アプリケーション全般</li> <li>・高速化 (ベクトル化、並列化)</li> <li>・Fortran</li> <li>・負担金</li> </ul>             |
| 事前予約は、利用相談フォームからご連絡ください (前頁参照)。 |                    |                          |                                                                                                                                     |

## [JHPCN シンポジウム]

**JHPCN 学際大規模情報基盤共同利用・共同研究拠点  
第 13 回シンポジウム報告**

滝沢 寛之

東北大学サイバーサイエンスセンター スーパーコンピューティング研究部

今年度の学際大規模情報基盤共同利用・共同研究拠点(JHPCN)シンポジウムは、新型コロナウイルス(COVID-19)感染拡大防止のため、第12回に引き続き第13回もオンライン開催となりました。7月8日から9日にかけて開催された今年度のシンポジウムでは、実施方法にいくつか変更がなされました。まず、ミュンヘン工科大学のDaniel Rückert博士による基調講演が行われました。また、新しく運用開始したシステムを紹介するセッションを設け、東北大学のスーパーコンピュータAOBAを含む3システムが紹介されました。さらには、各口頭発表の時間を今までより5分長い20分(発表15分、質疑応答5分)とし、並列セッションとしました。

今回のシンポジウムでは、昨年度採択された52課題のオンライン講演がありました。また、今年度採択された課題49件のオンラインポスター発表に加えて、各構成拠点から推薦された萌芽課題11件のポスター発表、および3件の一般ポスター発表がありました。前回と同様に、Slackを用いた質疑応答の場も提供されました。

学際大規模情報基盤共同利用・共同研究は、東北大学、北海道大学、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する「学際大規模情報基盤共同利用・共同研究拠点」が、超大規模数値計算系応用分野、超大規模データ処理系応用分野、超大容量ネットワーク技術分野、およびこれらの技術分野を統合した大規模情報システム関連研究分野、更には分野間に亘る複合分野の研究者らと取り組む学際的な共同利用・共同研究です。

平成22年度から令和3年度の10年間において約450件を超える課題が学際大規模情報基盤共同利用・共同研究として採択されており、そのうち当センターとの共同研究課題は約75件となっております。今年度は、5件が当センターとの共同研究課題として採択されております。本年度採択された課題に関しましては、本報告末尾にポスターを再掲しております。また、今年度採択分も含め、これまでの採択課題に関する情報は以下のURLで公開されております。是非、高性能計算を用いた多岐にわたる共同研究活動をご覧頂ければと存じます。

(JHPCN URL: <https://jhpcn-kyoten.itc.u-tokyo.ac.jp/ja/sympo/13th>).

来年度の学際大規模情報基盤共同利用・共同研究拠点の研究公募は11月頃に公開予定です。ご興味のあるかたは奮ってご応募ください。また、応募に際しまして当センターの計算機科学を専門とする教員との共同研究の可能性を検討したい、手続き方法が分からない等、本応募に関して不明な点があります場合は、お気軽に当センターまでお問い合わせください。

【JHPCNに関する問い合わせ窓口】 [joint\\_research@cc.tohoku.ac.jp](mailto:joint_research@cc.tohoku.ac.jp)

【令和3年度学際大規模情報基盤共同利用・共同研究拠における当センターとの共同研究課題】

以下3件の課題は、次ページ以降のポスターをご覧ください。

- ・ jh210001-NAH 「日本全土の洪水氾濫被害の将来展望」  
研究代表者 風間聡 (東北大学)
  
- ・ jh210041-NAH 「熱中症リスク評価シミュレータの開発と応用」  
研究代表者 平田晃正 (名古屋工業大学)
  
- ・ jh210042-NAH 「GW space-time コードの大規模な有機-金属界面への適用に向けた高効率化」  
研究代表者 柳澤将 (琉球大学理学部)

以下2件の課題は URL でご参照ください。

- ・ jh210009-NAH 「HPC と高速通信技術の融合による大規模データの拠点間転送技術開発と実データを用いたシステム実証試験」  
<https://jhpcn-kyoten.itc.u-tokyo.ac.jp/abstract/jh210009-MDH>  
研究代表者 村田健史 (情報通信研究機構・京都大学)
  
- ・ jh210052-NAH 「プロペラ駆動小型無人機的设计検討技法の確立を目指した空力・推進・構造の実機丸ごと統合シミュレーション」  
<https://jhpcn-kyoten.itc.u-tokyo.ac.jp/abstract/jh210052-NAH>  
研究代表者 金崎雅博 (東京都立大)

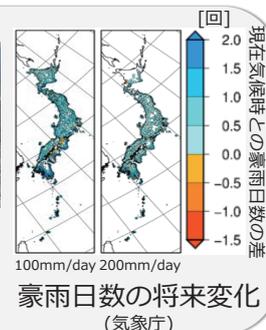
日本全土の洪水氾濫被害の将来展望

背景・目的

近年、日本各地で洪水被害が多発しており、  
気候変動の影響で豪雨の増加が見込まれる  
**社会の変化によるリスク上昇地域はどこか**  
⇒ 危険性の発信・効率的な治水投資  
複数のシナリオの検討が必須



西日本豪雨 (2018年)

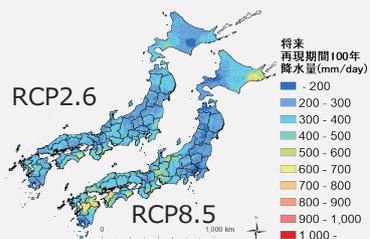


**研究目的：日本全国でのシナリオ（気候や社会環境など）に応じた膨大な組み合わせ洪水氾濫被害推定的高速化・不確実性**

洪水氾濫解析

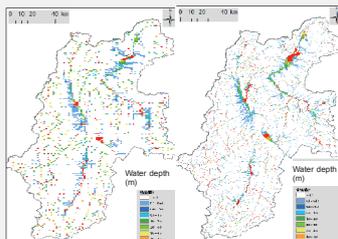
(Yamamotoら, Climatic Change, 165:60)

将来の降水量：全球気候モデル



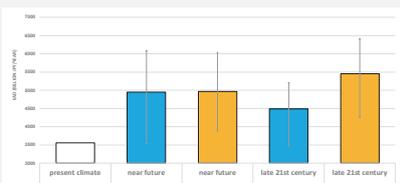
日本各域で再現期間100年洪水を生じさせる日降水量の気候シナリオRCPの違い (2050年時)

高解像度洪水氾濫解析



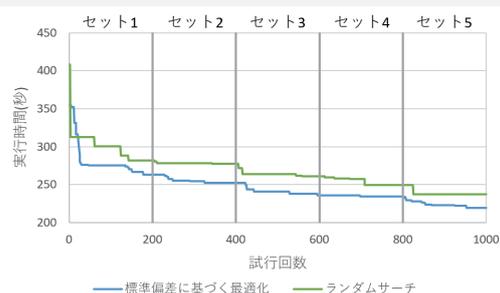
1km解像度 250m解像度  
100年確率降雨時の浸水深分布

将来目標期間の被害比較



日本各域での**現在**、**近未来** (2050年頃)、**遠未来** (2100年頃)の洪水被害額の違い

並列化の負荷分散



各プロセスの実行時間の標準偏差を目的関数とし、これを最小化したベイズ最適化とランダムサーチの比較 (石塚ら, 情報処理学会論文誌, 59)

多数の組み合わせ計算

複数計算の効率化・高速化

組み合わせは増える：他の要因

気候シナリオ  
RCP2.6  
RCP4.5  
RCP8.5

将来目標  
現在  
2050年頃  
2100年頃

人口予測  
高位  
中位  
低位

リスク計算：再現期間 5, 10, 30, 50, 100, 200年

162通り



並列化の負荷をベイズ最適化を利用し、高速化をはかる

### 熱中症リスク評価シミュレータの開発と応用

江川 隆輔、滝沢 寛之 (東北大学サイバーサイエンスセンター) 柏 達也、田口 健治(北見工業大学)  
堀江 祐圭(日本気象協会) 小寺 紗千子、西村 卓、上松 涼太、三浦 郁亮(名古屋工業大学)



#### 研究背景と目的

- 熱中症による死亡者数は増加傾向。死亡例も報告。
- 本研究グループでは日本の夏場などの環境において、熱中症の主な要因である体温上昇、発汗量の解析を実施。
- 解析結果から熱中症のリスク評価を行い、**熱中症予防の普及啓発活動**に寄与することが目的。

#### 解析手法

- 計算機上にて、様々な環境を模擬した仮想空間に人体モデルを配置し、図1に示したフローチャートに従って体温変化や発汗量を計算。
- 温度上昇解析は**生体熱輸送方程式**を用いる。組織間の**熱伝導**や体表面から外気への**熱伝達**に加え、体温上昇に伴う**発汗**、**血流量変化**による熱輸送などの**熱調整機能(システムバイオロジー)**、**太陽光**吸収による熱発生を考慮し、時間領域有限差分法で逐次計算。

#### これまでの主な成果

- 2015年からの採択課題により高速化・並列化による準リアルタイム熱中症リスク評価システムを確立。ロードインバランスの解消等により、従来の2倍の解像度を持つ1mmモデルにおいて、3時間の暑熱ばく露における体温変化や発汗量を**5.8分**で試算可能。
- 温熱調整モデルの高精度化により、年代や出生地の違いによる温度変化を推定可能とした(図2参照)
- 解析結果のデータベース化することで、気象と個人の年代、活動状況を考慮した熱中症リスク評価Webシステムを構築

#### 今年度の研究計画

- 高齢者における太陽光・暑熱の複合ばく露時の体温変化2種類の高齢者モデル(65歳モデル, 75歳モデル)を用いて夏場の長期間解析を行い、体温変化、発汗量変化を推定を行う。解析期間は2018-2020年の6-9月とし、実際の気温、湿度、日射量を考慮し、様々な条件における深部温度、発汗量の変化を取得を行っている。
- 熱中症搬送者数をはじめとする統計データと解析結果との連携  
高齢者の熱中症に着目し、実際に搬送された患者の搬送時体温と、上記長期間解析により得られた推定深部体温とを比較することで、高齢者の発症が多い、非労作性熱中症の発症メカニズムを検討している。

#### 解析結果・グラフ

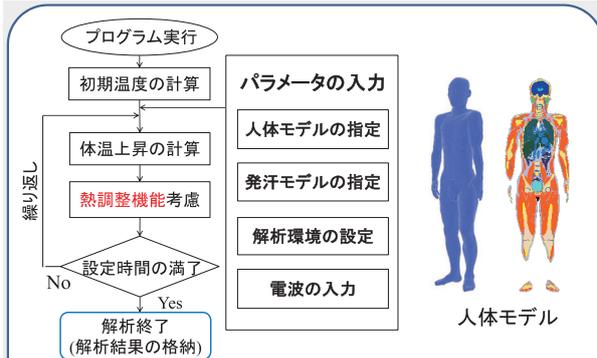


図1. 解析のフローチャート

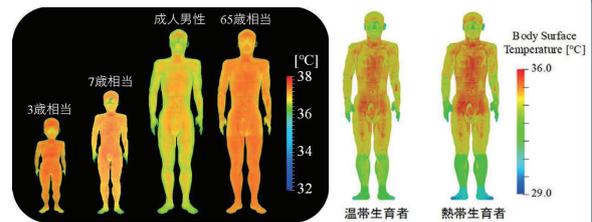


図2. 温熱調整モデルの改良による年代別・出生地別温度分布の再現結果

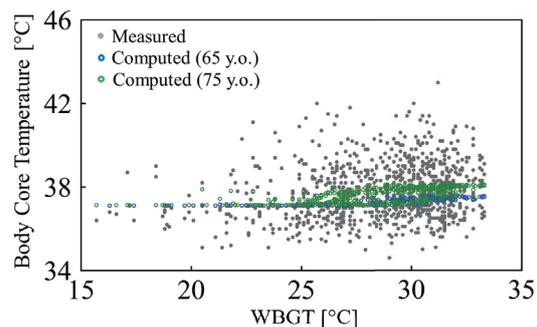


図3. 熱中症搬送者(屋内・高齢者)の搬送時体温と長期間解析による同日時での推定深部体温の比較

- 熱中症搬送者の搬送時の環境での推定体温と実際の測定体温の比較(図3参照)。推定体温にくらべ測定体温が高く、高齢の熱中症搬送者は、発汗量などの体温調整機能が十分でないことが予想される。

jh210042-NAH

13th Symposium JHPCN

柳澤 将 (琉球大学・代表)、滝沢 寛之 (東北大学・副代表)

研究課題名

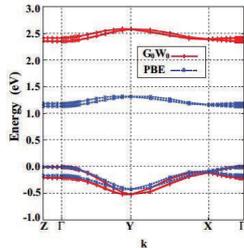
GW space-timeコードの大規模な有機-金属界面への適用に向けた高効率化

1. 研究背景・目的

有機エレクトロニクス材料物質の基礎電子物性の理解

- ・ バンドギャップ・バンド分散の精密予測

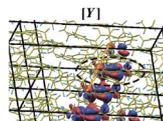
ルブレ単結晶のバンド計算  
(GW近似; GW space-time プログラム)



S. Y., Y. Morikawa, and A. Schindlmayr, Phys. Rev. B 88, 115438 (2013)

有効正孔質量( $m_h^*/m_e$ )

| method | [T-V]    | [V-X]   |
|--------|----------|---------|
| DFT    | 1.00     | 2.15    |
| GW     | 0.90     | 1.65    |
| Exp.   | 0.65±0.1 | 1.65    |
| Exp.   | 0.8±0.1  | 1.9±0.3 |

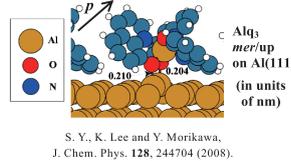


- ・ 有機層と電極金属の界面

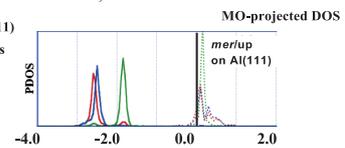
電荷 (正孔・電子) の電極からの注入障壁の形成要因  
- 界面での電荷移動、化学結合  
- 電子密度分布の再構成

H. Ishii et al., Adv. Mater. 11, 605 (1999).

金属フェルミ準位と有機層の最高占有・最低非占有(HOMO・LUMO) 準位の並び



S. Y., K. Lee and Y. Morikawa, J. Chem. Phys. 128, 244704 (2008).



- ・ 結晶構造・分子配置とバンド構造の関係

- S. Y. and I. Hamada, J. Appl. Phys. 121, 045501 (2017).  
- S. Y. and I. Hamada, A Chapter in Theoretical Chemistry for Advanced Nanomaterials - Functional Analysis by Computation and Experiment (Springer Nature 2020).

- ・ 有機薄膜表面での電荷注入準位の分子配向依存性

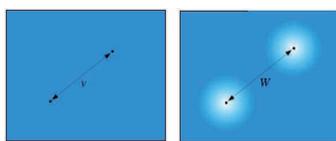
- K. Yamada, S. Y., T. Koganezawa, K. Mase, N. Sato, and H. Yoshida, Phys. Rev. B 97, 245206 (2018).  
- Y. Uemura, S. A. Abd-Rahman, S. Y., and H. Yoshida, Phys. Rev. B 102, 125302 (2020).

本研究の目的:

有機-金属界面での準位接続の予測の精密化のためにGW近似を適用できるよう、プログラムを大規模並列計算向けに効率化する。

2. 理論

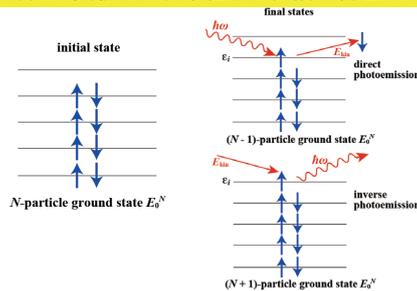
GW近似: 独立粒子模型・平均場近似に対し固体内のクーロン相互作用の遮蔽の効果を取り込む。



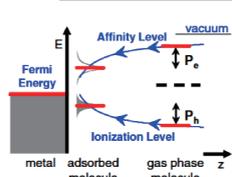
自己エネルギー  $\Sigma$   
 $\Sigma \approx GW$   
G: 1体グリーン関数

「裸の」クーロン相互作用V 遮蔽相互作用W

光電子分光の実験での、準粒子の伝播に物理的に対応



有機層と電極金属の界面での準位接続の再現



J. B. Neaton et al., Phys. Rev. Lett. 97, 216405 (2006).

- ・ 有機層のHOMO-LUMO バンドギャップ
- ・ 表面付近での鏡像ポテンシャルの効果  
 $\sim 1/4|z - z_0|$

3. 計算方法、プログラムの現状、予定

GW space-time 法

M. M. Rieger et al., Comput. Phys. Commun. 117, 211 (1999).  
L. Steinbeck et al., Comput. Phys. Commun. 125, 105 (2000).  
C. Freysoldt et al., Comput. Phys. Commun. 176, 1 (2007).

$$W(\mathbf{G}, \mathbf{G}'; i\omega) = \epsilon^{-1}(\mathbf{G}, \mathbf{G}'; i\omega) v(\mathbf{G}, \mathbf{G}')$$

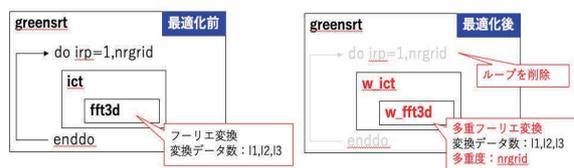
$$\Sigma(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; i\tau) = iG(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; i\tau) W(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; i\tau)$$

畳み込み積分でなく、積を計算

- ・ 高速フーリエ変換で、計算量が依存する変数を頻繁に切り替える:  $(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$  と  $(\mathbf{G}, \mathbf{G}')$ ;  $(i\tau)$  と  $(i\omega)$ ; 波数  $\mathbf{k}$  と実格子ベクトル  $\mathbf{R}$
- ・ 非局所な複素数の量を計算。必要メモリが大きい。

前年度の実装、応用の状況

- ・ 有機混合膜に適用し、表面の分子に配向した電荷注入準位の形成について知見を得た [Y. Uemura et al., Phys. Rev. B 102, 125302 (2020)]。
- ・ 表面などの計算のための効率的計算法の実装 (クーロンカットオフ [S. Ismail-Beigi, Phys. Rev. B 73, 233103 (2006)]) と、有機薄膜の初期計算を実行した。
- ・ ベクトル化率が低い高速フーリエ変換 ( $\mathbf{k} \leftrightarrow \mathbf{R}$ ) について、多重フーリエ変換を導入することで、コストの解消・計算時間の短縮に大きな成果が見られた。



今年度の予定

- ・ 他の箇所のベクトル化率の向上。MPI\_ALLtoALLv通信のコスト軽減。
- ・ より収束性を高めた計算の達成のために、SX-Aurora上でのメモリの有効利用や、通信のマッピングの向上をはかる。
- ・ コードの、有機分子薄膜表面・スラブモデルへの適用を進め、典型的な有機-金属界面での、鏡像ポテンシャルの効果を考慮した準位接続の再現を目指す。

[報 告] 計算科学・計算機科学人材育成のためのスーパーコンピュータ無償提供制度

## 全学教育・基礎ゼミ 分子の不思議 I コンピュータを使った分子の計算演習の実施報告

岸本 直樹

東北大学大学院理学研究科化学専攻

2021年4月26日から5月24日までの4週間、全学教育・基礎ゼミ「分子の不思議 I」の一部として、1年生14人を対象に量子化学計算演習を実施しました。この4回は、サイバーサイエンスセンターの実習室でコンピュータを使って分子の世界を研究する方法の最前線を経験することを目的としました。

4回は以下の構成で、各自がWindows PCでGaussian社のソフトウェアを使って演習に取り組みました。

1. GaussViewで分子モデルを作る (+ サイバーサイエンスセンター紹介)
2. Gaussian16Wを用いた分子構造の計算と振動スペクトル
3. Gaussian16Wを用いた化学反応の計算
4. Gaussian16Wを用いた溶液中の構造と励起状態の計算

GaussViewは量子化学計算ソフトウェアGaussian専用の可視化ソフトウェアで、Windows上で分子のモデルを作成しGaussian16Wを実行させることができます。大学に入学して2ヶ月も経たない学生に量子論から講義することは難しいと判断して、二酸化炭素の振動と温暖化問題、分子の異性化反応、水中のアミノ酸の構造変化など、高校化学の知識程度で理解できる内容を探しました。また、毎回の演習内容はGoogle Classroomを通じてPDFファイルを事前に配布し、授業時間内は教員とTAの2名で技術的問題に対応しました。

4回の演習を終了した後で受講生に感想を提出してもらいましたが、高校では暗記科目だった化学の内容や分子の構造を改めて理解することができたという感想が多く、概ね好評でした。扱った内容は、授業時間内に終わる程度の近似を使った計算に過ぎませんが、コンピュータを使った分子レベルの解析や説明が今後ますます重要性を増していくであろうことを1年生に感じてもらうことができたと自負しております。なお、筆者はサイバーサイエンスセンターの利用者講習会(Gaussian入門)を担当しており、様々な若手研究者に量子化学計算を教えておりますが、現在では化学のみならず物質科学の広範な研究分野で量子化学計算が必要とされていることを感じております。

本ゼミの開催に当たっては、サイバーサイエンスセンターの「計算科学・計算機科学人材育成のためのスーパーコンピュータ無償提供制度」を活用させていただきました。新型コロナウイルス感染拡大防止対策も含めて、関係各位に大変お世話になりました。厚く御礼申し上げます。

## — SENAC 執筆要項 —

### 1. お寄せいただきたい投稿内容

サイバーサイエンスセンターでは、研究者・技術者・学生等の方々からの原稿を募集しております。以下の内容で募集しておりますので、皆さまのご投稿をお待ちしております。なお、一般投稿いただいた方には、謝礼として負担金の一部を免除いたします。

- ・一般利用者の方々が関心をもたれる事項に関する論説
- ・センターの計算機を利用して行った研究論文の概要
- ・プログラミングの実例と解説
- ・センターに対する意見、要望
- ・利用者相互の情報交換

### 2. 執筆にあたってご注意いただく事項

- (1)原稿は横書きです。
- (2)術語以外は、「常用漢字」を用い、かなは「現代かなづかい」を用いるものとします。
- (3)学術あるいは技術に関する原稿の場合、200字～400字程度のアブストラクトをつけてください。
- (4)参考文献は通し番号を付し末尾に一括記載し、本文中の該当箇所に引用番号を記入ください。
  - ・雑誌：著者, タイトル, 雑誌名, 巻, 号, ページ, 発行年
  - ・書籍：著者, 書名, ページ, 発行所, 発行年

### 3. 原稿の提出方法

原稿のファイル形式はWordを標準としますが、PDFでの提出も可能です。サイズ\*は以下を参照してください。ファイルは電子メールで提出してください。

—用紙サイズ・文字サイズ等の目安—

- ・サイズ：A4
- ・余白：上=30mm 下=25mm 左右=25mm 綴じ代=0
- ・標準の文字数（45文字 47行）
- ・表題=ゴシック体 14pt 中央 ・副題=明朝体 12pt 中央
- ・氏名=明朝体 10.5pt 中央
- ・所属=明朝体 10.5pt 中央
- ・本文=明朝体 10.5pt
- ・章・見出し番号=ゴシック体 11pt～12pt

\*余白サイズ、文字数、文字サイズは目安とお考えください。

### 4. その他

- (1)一般投稿を頂いた方には謝礼として、負担金の一部を免除いたします。免除額は概ね1ページ1万円を目安とします。詳細は共同利用支援係までお問い合わせください。
- (2)投稿予定の原稿が15ページを超す場合は共同利用支援係まで前もってご連絡ください。
- (3)初回の校正は、執筆者が行って、誤植の防止をはかるものとします。
- (4)原稿の提出先は次のとおりです。

東北大学サイバーサイエンスセンター内 情報部情報基盤課共同利用支援係

e-mail uketuke@cc.tohoku.ac.jp

TEL 022-795-3406

## スタッフ便り

最近ではコロナ禍ということもあり、週末に家族で観光地に遠出することもなく、5歳になる子供をどの公園に連れて行くかで頭を悩ませることが多いです。子供のお気に入りには、線路が見える公園です。その公園からは仙台駅が近いため、電車が通過する頻度が高く、さらに電車の線路の上に新幹線の線路も通っているため、電車と新幹線を両方見ることができます。公園の中に、「いもむし」の形をした乗り物の遊具があるので、我が家では「いもむし公園」と呼んでいます。「いもむし公園」のほかにも、公園にある遊具の特徴で呼んでいる公園がいくつかあります。「ムーミン公園」「ハンドルぐるぐる滑り台公園」「短い長い滑り台公園」などです。小さいお子さんのいらっしゃるご家庭では、もしかしたら、どの公園のことをいっているかわかる方もいるかもしれません。なぜ、男の子はあんなに電車や新幹線に夢中になれるのでしょうか。電車が通過するたびに、飽きることなく楽しそうにしている子供の姿をみると、自分自身には今現在、夢中になれる何かはあるのだろうかと考えさせられます。ここ数年、子育ての大変さを痛感し、自分の時間がほとんどない状況でしたが、子供が成長するに連れて自分の時間も少しずつとれるようになってきたので何か夢中になれるものを見つけたいと思っています。(Y.S)

この度、初めての青葉山勤務となりましたが、開放されている窓から時折聞こえる驚くほど綺麗な鳥の鳴き声に感動したり、本館の自動ドア付近で大き目のヘビに遭遇して驚いたり…。自然豊かな青葉山を感じる一方で、新キャンパスの整然と並ぶ現代的な建物を眺めながら、Buddy's Table というオシャレな音楽の流れるレストランでランチを楽しむなんていうこともできる素敵な環境を満喫しています。

話は変わりますが、ここへ来る前、片平の本部で社会連携業務に携わっていました。その一つの事業として、大学の歴史的建造物を国の登録有形文化財に登録するという仕事がありました。2017年に5件、この7月に8件が新たに答申されました。(正式に登録され、計13件の登録有形文化財となれば国立大学では最多です。)歴史的財産を大学だけの資産にせず、市民共有の文化的資産として後世に引き継いでいくことを目的としています。片平キャンパスでは青葉山とはまた一味違う景色を味わうことができます。コロナ禍の今、人混みに出かけるのは憚られますが、学都仙台の象徴として歩んできた歴史あるキャンパスを散策するなんていう過ごし方はいかがでしょうか。(Y.K)

東北大学登録有形文化財 GUIDE SITE

<https://www.bureau.tohoku.ac.jp/somu/bunkazai/kenzobutsu/index.html>

東北大学キャンパスガイド

<http://campus.bureau.tohoku.ac.jp/index.php>



SENAC 編集部会

滝沢寛之 水木敬明 後藤英昭 伊藤昭彦  
早坂和勝 大泉健治 小野 敏 斉藤くみ子

令和3年7月発行  
編集・発行 東北大学  
サイバーサイエンスセンター  
仙台市青葉区荒巻字青葉6-3  
郵便番号 980-8578  
PDF作成 株式会社 東誠社

## スーパーコンピュータ AOBA システム一覧

| 計算機システム       | 機 種               |
|---------------|-------------------|
| サブシステム AOBA-A | SX-Aurora TSUBASA |
| サブシステム AOBA-B | LX 406Rz-2        |

## サーバとホスト名

|          |                       |
|----------|-----------------------|
| ログインサーバ  | login.cc.tohoku.ac.jp |
| データ転送サーバ | file.cc.tohoku.ac.jp  |

## サービス時間

| 利用システム名等      | 利用時間帯         |
|---------------|---------------|
| サブシステム AOBA-A | 連 続 運 転       |
| サブシステム AOBA-B | 連 続 運 転       |
| サ ー バ         | 連 続 運 転       |
| 館内利用          | 平日 8:30~21:00 |

## サブシステム AOBA-A の利用形態と制限値

| 利用形態  | キュー名 | VE 数※                   | 実行形態                     | 最大経過時間<br>既定値/最大値 | メモリサイズ    |
|-------|------|-------------------------|--------------------------|-------------------|-----------|
| 無料    | sxf  | 1                       | 1VE                      | 1 時間/1 時間         | 48GB×VE 数 |
| 共有    | sx   | 1                       | 1VE                      | 72 時間/720 時間      |           |
|       |      | 2~256                   | 8VE 単位で確保<br>(VH を共用しない) |                   |           |
| sxmix | 2~8  | 1VE 単位で確保<br>(VH を共用する) |                          |                   |           |
| 占有    | 個別設定 |                         |                          |                   |           |

※ 2VE以上を利用した並列実行にはMPIの利用が必用

## サブシステム AOBA-B の利用形態と制限値

| 利用形態 | キュー名 | ノード数※ | 最大経過時間<br>既定値/最大値 | メモリサイズ     |
|------|------|-------|-------------------|------------|
| 共有   | lx   | 1~16  | 72 時間/720 時間      | 256GB×ノード数 |
| 占有   | 個別設定 |       |                   |            |

※ 2ノード以上を利用した並列実行にはMPIの利用が必用

# 目次

東北大学サイバーサイエンスセンター

大規模科学計算システム広報 Vol.54 No.3 2021-7

## [共同研究成果]

|                                                    |         |
|----------------------------------------------------|---------|
| 乱流大規模直接数値計算コードの SX-Aurora TSUBASA 上での性能評価<br>..... | 山本 義暢 1 |
|                                                    | 滝沢 寛之   |
|                                                    | 加藤 季広   |
|                                                    | 磯部 洋子   |

## [お知らせ]

|                                               |    |
|-----------------------------------------------|----|
| 令和3年度サイバーサイエンスセンター講習会のご案内 .....               | 11 |
| AOBA Users' NEWS「AOBA の杜（あおばのもり）」を始めました ..... | 12 |

## [利用相談室便り]

|                      |    |
|----------------------|----|
| 令和3年度の利用相談について ..... | 13 |
|----------------------|----|

## [JHPCN シンポジウム]

|                                                 |          |
|-------------------------------------------------|----------|
| JHPCN 学際大規模情報基盤共同利用・共同研究拠点第13回シンポジウム報告<br>..... | 滝沢 寛之 15 |
|-------------------------------------------------|----------|

## [報告]

|                                                                                              |          |
|----------------------------------------------------------------------------------------------|----------|
| <計算科学・計算機科学人材育成のためのスーパーコンピュータ無償提供利用制度><br>全学教育・基礎ゼミ 分子の不思議 I<br>コンピュータを使った分子の計算演習の実施報告 ..... | 岸本 直樹 20 |
| 執筆要項 .....                                                                                   | 21       |
| スタッフ便り .....                                                                                 | 22       |