

計算科学研究室

Computational Science Laboratory

主任研究員 戎崎俊一
EBISUZAKI, Toshikazu

当研究室では、いくつかの計算機科学の重要な分野において、計算パワーを飛躍的に増大させることを目的としている。そのために超高速（～100 Tflops）専用計算機と、それを並列型スーパーコンピュータを超高速ネットワーク（～Gbps）で結合したヘテロジニアス計算機システムを構築する。当面、分子動力学シミュレーション、行列演算、格子力学シミュレーション用の超高速専用計算機の開発を進める。また、ベクトル・パラレル型スーパーコンピュータ、VPP500（富士通）を使って、ダイナミックプログラミング法、画像処理、放射輸送問題解法について、大規模並列化アルゴリズムを開発する。さらに、高速グラフィクスワークステーションを使ったシミュレーション結果を、リアルタイムで可視化・体感化する技術を開発する。

1. ヘテロジニアス計算機システムの構築

超高速（～100 Tflops）の専用計算機とスーパーコンピュータを高速（～Gbps）のネットワークで結合した、ヘテロジニアス計算機システムを構築する。超高速専用計算機は、分子動力学シミュレーション、行列演算、格子色力学シミュレーションについて、開発を当面進める。

(1) 分子動力学シミュレーション専用計算機の開発（戎崎、館野）

大規模な分子動力学シミュレーションは、タンパク質の三次元構造や機能を明らかにしたり、岩石などの超高压状態における結晶構造や物性を研究する基本的な手段になっている。本研究では、この分子動力学シミュレーション用の超高速計算機（100 Tflops程度）を開発し、タンパク質や岩石の超高压物性の研究の飛躍的な発展を図る。分子動力学シミュレーションでは、クーロン力やファン・デ・ワールス力などの非結合力の計算がその計算時間の大部分を占める。これらの中心力を計算して積算する専用パイプラインを持ったLSIを開発する。クーロン力に加えてファン・デ・ワールス力や周期境界条件に対応するEwald法に必要な力を計算できるように、力の形を表わす捕間テーブルをメモリチップに格納する。その内容は、ホスト計算機からその内容を書きかえられるようになる。このようなLSIを数千個並列に接続して、100 Tflopsのピーク速度を持つ専用計算機を開発する。

(2) 行列演算専用計算機の開発（戎崎、住吉、清水）

大規模行列演算を超高速に行う専用計算機システムを開発し、数値シミュレーションを大幅に加速することを目的とする。シミュレーション計算のネックとなっている行列演算の並列アルゴリズムを開発する。これをもとに、行列積、線形方程式解法などを高速に実行する専用LSIの試作・設計を行い、大規模シミュレーション計算を可能にする専用計算機システムを構築する。

(3) 格子色力学シミュレーション専用計算機の開発（戎崎）

基本的な素粒子であるクォークとグルーオンの相互作用

のシミュレーションを行う格子色力学専用計算機を開発する。このマシンによって、quench近似によらない完全な格子色力学シミュレーションが世界で初めて可能となり、その精度を飛躍的に向上させることができる。この研究は後藤特別研の太田滋生研究員と協力して行う。

2. 大規模並列化アルゴリズムの開発（Stanczyk, 大野, 清水）

ベクトルパラレル型スーパーコンピュータ、VPP500（富士通）を使って、ダイナミックプログラミング法、画像処理、多次元放射輸送問題について大規模並列化アルゴリズムを開発する。

(1) ダイナミックプログラミング法

ダイナミックプログラミング法は、遺伝子のホモロジー検索に一般に用いられている。年々膨大な量の遺伝子情報が報告されており、これら相互の類似度（ホモロジー）を高速に検索することは、遺伝子の発現機構や生物の進化の道筋を探る上で極めて重要になっている。これをVPP-500に載せ、大規模に並列化する。

(2) 画像処理

近年、高感度で 1000×1000 以上の画素を持つ大型の2次元元素子が普及し、それを使った測定装置がいろいろな分野で使われるようになった。このため、装置が出力されるデータ量は急激に増加しており、計算機への取り込みや画像処理の部分が、研究のボトルネックになっている場合も増加している。この問題は、大規模な並列化によって解決することが可能である。特に、CCDからの天体画像をケーススタディとして効率の良い並列化技法を開発する。

(3) 放射輸送問題

放射輸送問題は、超新星や星形成など、天体物理の分野において避けては通れない重要な問題となっている。しかし、放射輸送問題の方程式自身が強い非線形性を持っているので、安定にシミュレーションを進めることが難しい。さらに、二次元の問題でも光の位相空間を含めると五次元問題を解くことになるので、必要な計算量やメモリー量が

膨大になりすぎて現状では実行不可能である。この問題を解決するため、効率の良い大規模並列化アルゴリズムを開発する。

3. シミュレーション結果の可視化・体感化技術の開発（戎崎、三浦）

計算機が高速化するにつれて、シミュレーションが大規模化し、数字をプリントアウトしたものを眺めるだけではシミュレーションで何が起こっているのかを把握することが困難になっている。この困難を解消するため、シミュレーション結果をほぼリアルタイムで可視化・体感化する技術を開発する。

誌上発表 Publications

(原著論文) *印は査読制度がある論文誌

Fukushige T., Makino J., Nishimura O., and Ebisuzaki T.: "Smoothing of the Anisotropy of the Cosmic Background Radiation by Multiple Gravitational Scattering", *Publ. Astron. Soc. Jpn.*, **47**, 493-508 (1995). *

Sumiyoshi K., Kuwabara H., and Toki H.: "Relativistic Mean Field Theory with Non-linear s and w Terms for Neutron Stars and Supernovae", *Nucl. Phys.*, **A581**, 725-746 (1995). *

Toki H., Hirata D., Sugahara Y., Sumiyoshi K., and Tanihata I.: "Relativistic Many Body Approach for Unstable Nuclei and Supernova", *ibid.*, (Proc. Int. Symp. on Physics of Unstable Nuclei, Niigata), **A588**, 357c-363c (1995). *

Sumiyoshi K., Oyamatsu K., and Toki H.: "Neutron Star Profiles in Relativistic Brueckner Hartree Fock Theory", *ibid.*, **A595**, 327-345 (1995). *

Sumiyoshi K., Suzuki H., and Toki H.: "Influence of the Symmetry Energy on the Birth of Neutron Stars and Supernova Neutrinos", *Astron. Astrophys.*, **303**, 475-482 (1995). *

(その他)

Sumiyoshi K., Hirata D., Suzuki H., Sugahara Y., Toki H., and Tanihata I.: "Impact of Unstable Nuclei on Neutron Stars and Supernovae", *RIKEN Rev.*, No. 10, pp. 17-18 (1995).

住吉光介, 戎崎俊一: "VPP500 におけるブロック三重対角行列の直接解法の並列化", 情報処理学会研究報告, **96**, 79-82 (1996).

Suzuki H. and Sumiyoshi K.: "Neutrino Emission from Protoneutron Stars", Proc. of Oji Int. Seminar on Elementary Processes in Dense Plasmas, Tomakomai, S. Ichimaru and S. Ogata (Eds.), pp. 85-92 (1995).

口頭発表 Oral Presentations

(国際会議)

Fukushige T., Makino J., and Ebisuzaki T.: "Effect of Multiple Gravitational Lensing on the Anisotropy of the Cosmic Background Radiation", IAU Symp. on Astrophysical Applications of Gravitational Lensing,

Melbourne, Australia, July (1995).

(国内学会等)

住吉光介: "Unstable Nuclei and Relativistic EOS for Neutron Stars and Supernovae", 不安定核の構造と反応研究会, 大阪, 7月 (1995).

住吉光介, Hirata D., 菅原雄一, 土岐 博, 谷畠勇夫: "相対論的平均場理論による変形核の系統的研究", 日本物理学会 1995秋の分科会, 愛知, 9月 (1995).

福重俊幸, 泰地真弘人, 牧野淳一郎, 杉本大一郎, 戎崎俊一: "MD-GRAPE: 任意中心力を計算できる多体問題専用計算機", 日本天文学会 1995 年度秋季大会, 新潟, 10 月 (1995).

和田武彦, 大野洋介, 上野宗孝, 朴 垣基, 戎崎俊一: "マゼラン銀河の近赤外線サーベイ観測", 同上.

杉本大一郎, 牧野淳一郎, 泰地真弘人, 福重俊幸, 戎崎俊一: "超高速多体問題専用計算機による星団・銀河・銀河団の進化の研究", 同上.

Sumiyoshi K.: "Neutron Stars and Unstable Nuclei in Relativistic Many Body Framework", 短寿命核ビームの科学 95 研究会, (主催 日本天文学会), 東京, 1月 (1996).

住吉光介, 戎崎俊一: "VPP500 によるブロック三重対角行列の直接解法", 数値シミュレーションによる天文学, (主催 国立天文台), 東京, 1月 (1996).

住吉光介, 戎崎俊一: "ブロック三重対角行列解法の並列化と輻射輸送", 宇宙における構造形成と輻射輸送, (主催 京大基研), 京都, 3月 (1996).

住吉光介, 戎崎俊一: "VPP500におけるブロック三重対角行列の直接解法の並列化", 計算機アーキテクチャ研究会, 札幌, 3月 (1996).

大谷知行, 松岡 勝, 河合誠之, 吉田篤正, 清水裕彦, 戎崎俊一, 上野宗孝, 大野洋介, 和田武彦, 山内 誠: "「とんぼ」計画—概要とプロトタイプ開発—", 日本天文学会 1996 春季年会, 神戸, 3月 (1996).

牧野淳一郎, 戎崎俊一: "R17a 楕円銀河コアの構造について", 同上.

和田武彦, 上野宗孝, 大野洋介, 戎崎俊一: "R25a 近赤外線による銀画面変光星サーベイ計画", 同上.

大野洋介, 蜂巣 泉, 戎崎俊一, 杉本大一郎: "T17a 銀河間ガス中を運動する銀河に作用する抵抗力", 同上.

Research Subjects of Computational Science Laboratory

1. Development of Heterogeneous Computer System
2. Development of Large Scale Parallel Algorithm
3. Visualization of Results of Simulations

Head

Dr. Toshikazu EBISUZAKI

Member

Dr. Kohsuke SUMIYOSHI [1]

Dr. Jacek P. STANCZYK ^h [2]

Dr. Masaru TATENO^b [1]

Researchers

Dr. Hitoshi MIURA ^b [3]

Dr. Yousuke OHNO ^b [2]

Dr. Tetsuya SHIMIZU ^b [1,2]

Numbers in [] denote the research subjects listed above.

^b Postdoctoral Researcher, ^h Visiting Scientist