



筑波大学のアプリの 計画・期待

梅村 雅之

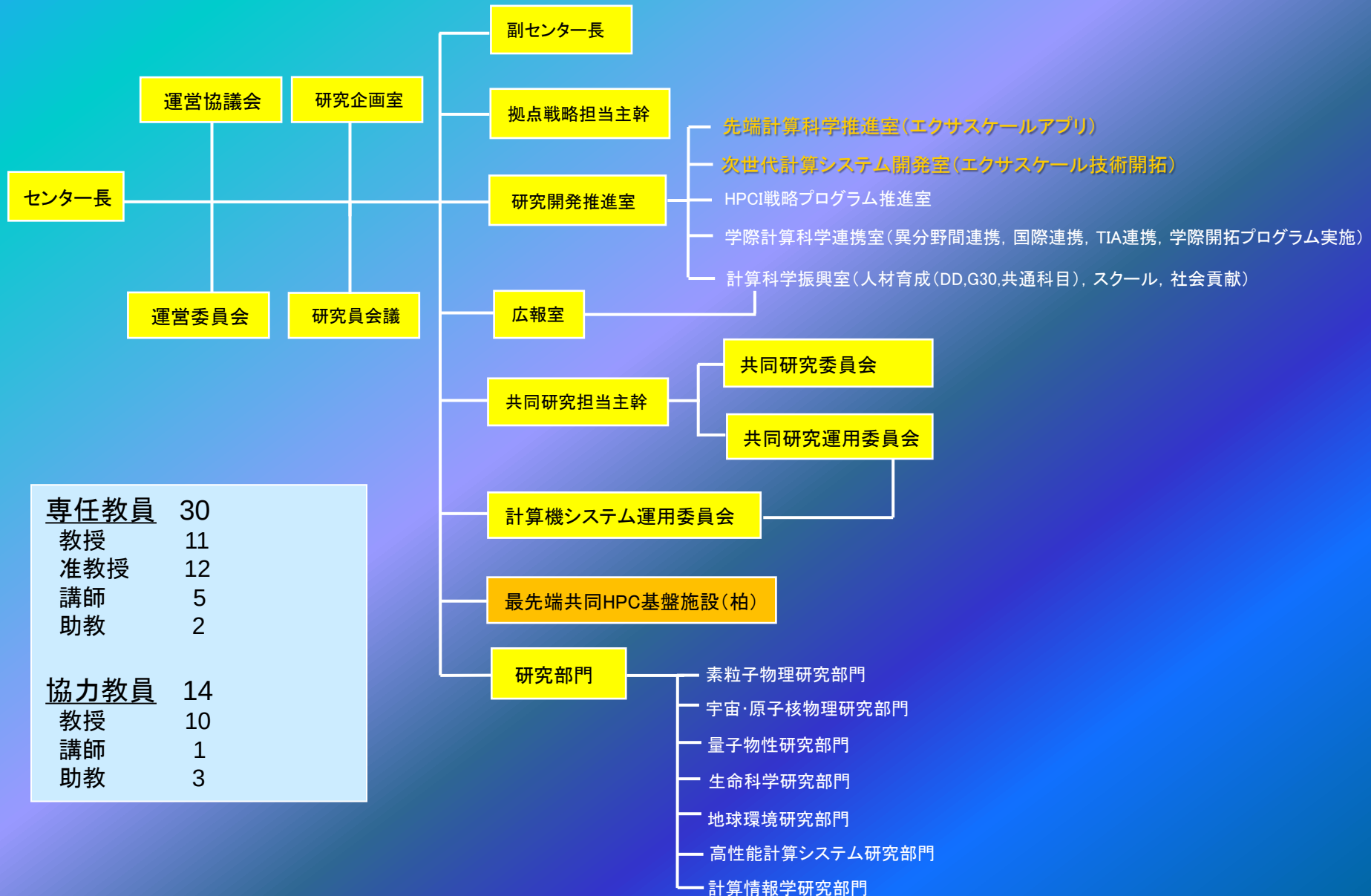
(筑波大学 計算科学研究センター)

最先端共同HPC基盤施設発足記念シンポジウム

2013年7月24日

筑波大学計算科学研究センター

文部科学省共同利用・共同研究拠点「先端学際計算科学共同研究拠点」



専任教員 30

教授	11
准教授	12
講師	5
助教	2

協力教員 14

教授	10
講師	1
助教	3



プロジェクト推進体制

Since 2011.8

先端計算科学
推進室

次世代計算機
システム
開発室

【学内】

梅村 雅之	センター・数理物質科学研究科	宇宙分野, 室長
矢花 一浩	センター・数理物質科学研究科	原子核分野
田中 博	センター・生命環境科学研究科	地球環境分野
北川 博之	センター・システム情報工学研究科	データ基盤
藏増 嘉伸	センター・数理物質科学研究科	素粒子分野
全 暁民	センター・数理物質科学研究科	物質分野
日下 博幸	センター・生命環境科学研究科	地球環境分野
天笠 俊之	センター・システム情報工学研究科	データ基盤
高橋 大介	センター・システム情報工学研究科	計算機システム分野
塙 敏博	センター・システム情報工学研究科	計算機システム分野
吉川 耕司	センター・数理物質科学研究科	宇宙分野
庄司 光男	センター・数理物質科学研究科	生命分野
寺崎 康児	センター	地球環境分野

【学外】

石川 健一	広島大学大学院理学研究科	素粒子分野
重田 育照	大阪大学大学院基礎工学研究科	生命分野

- 計算科学と計算機科学の連携
- 計算科学分野間の連携・協働
 - ・ 計算機システムのノウハウ
 - ・ アルゴリズム
 - ・ サイエンス



次世代計算科学

素粒子

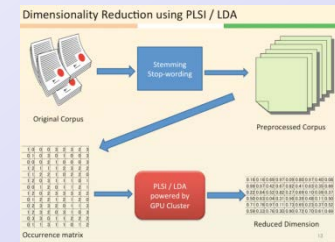
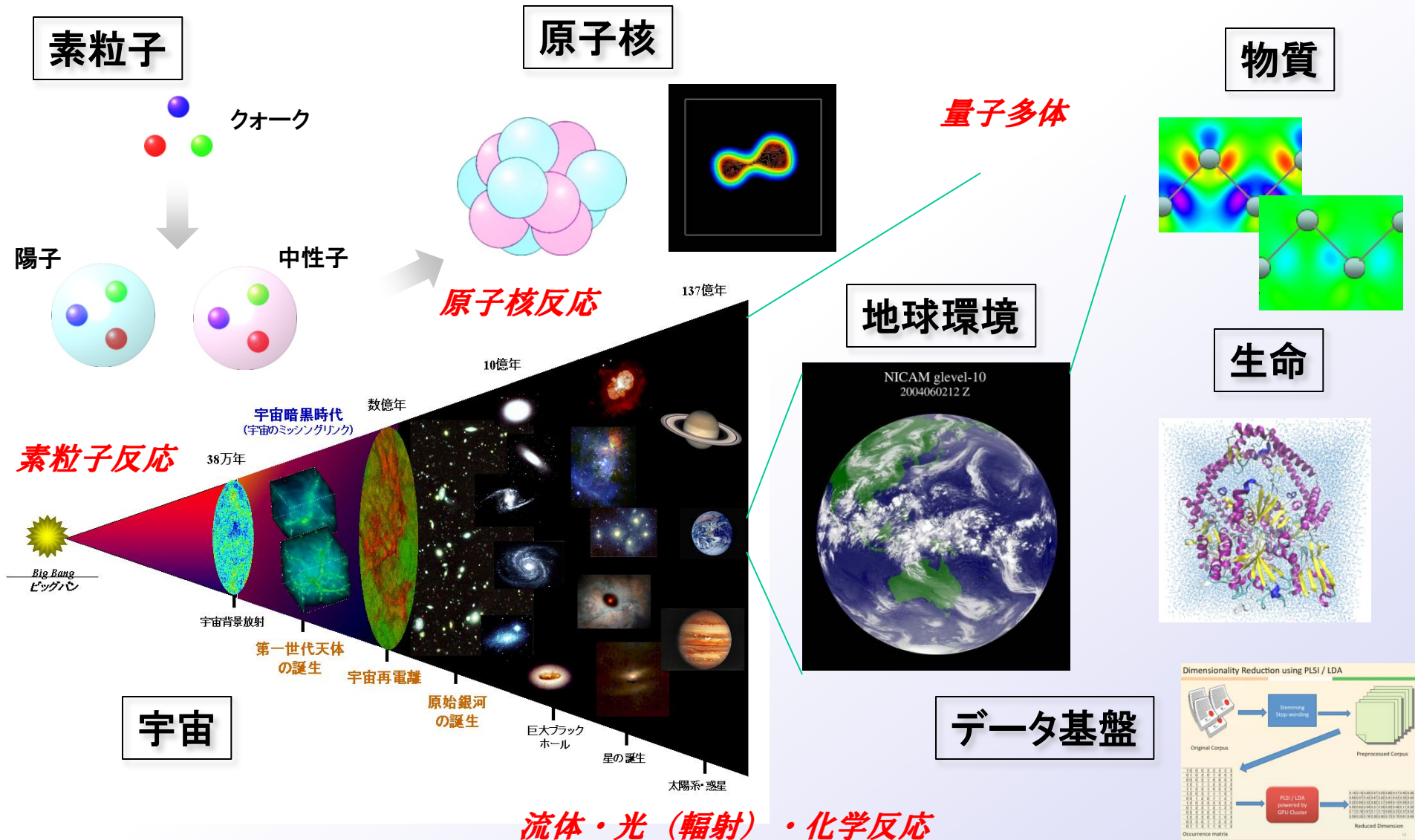
原子核

物質

量子多体

生命

データ基盤



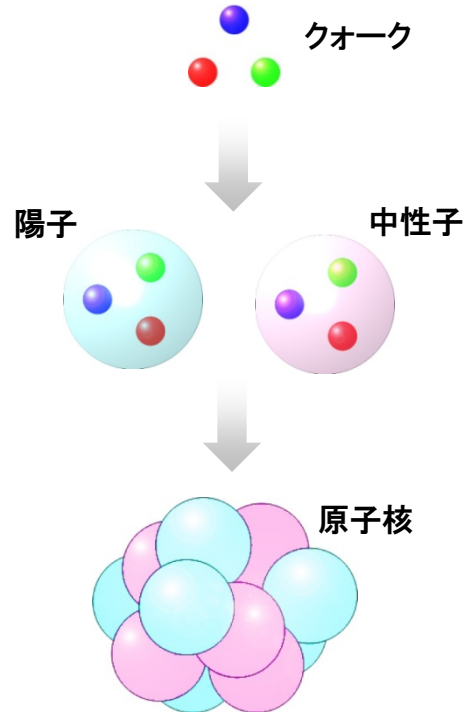


素粒子分野

マルチスケールの物理

格子QCDによる原子核の直接構成とその諸性質解明

大規模疎行列線形方程式求解

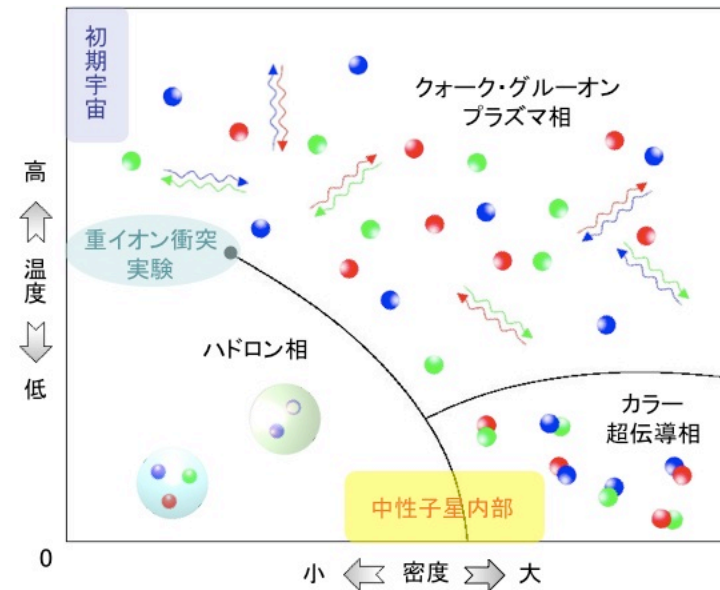


有限温度・有限密度の物理

幅広い有限温度・有限密度領域における相構造解析

密行列の行列・行列積計算

期待されているQCDの相図





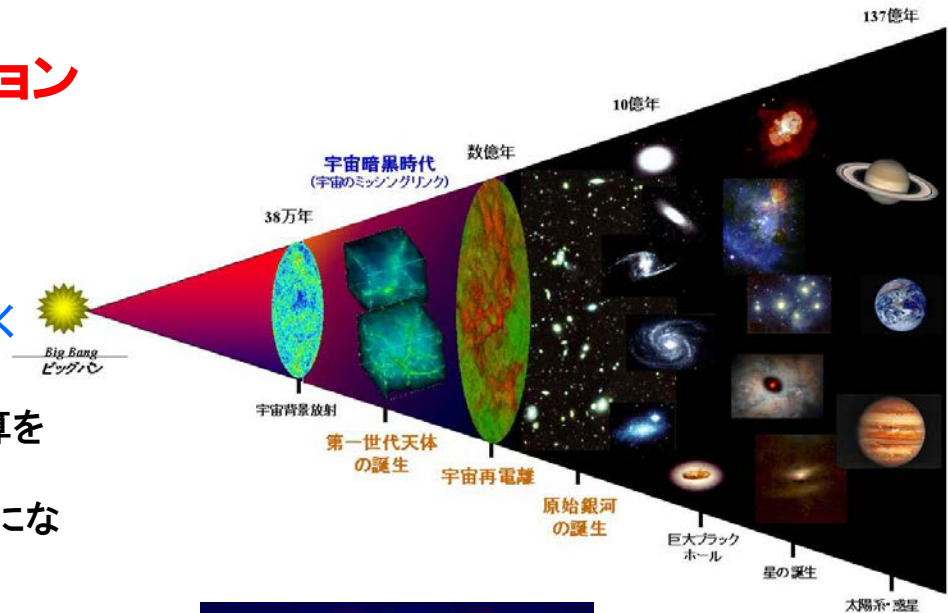
宇宙分野

(A) 6次元宇宙輻射流体シミュレーション

目的 初代天体形成過程の解明
宇宙再電離過程の解明

原子を3次元流体, 光(輻射)を6次元輻射輸送を解く

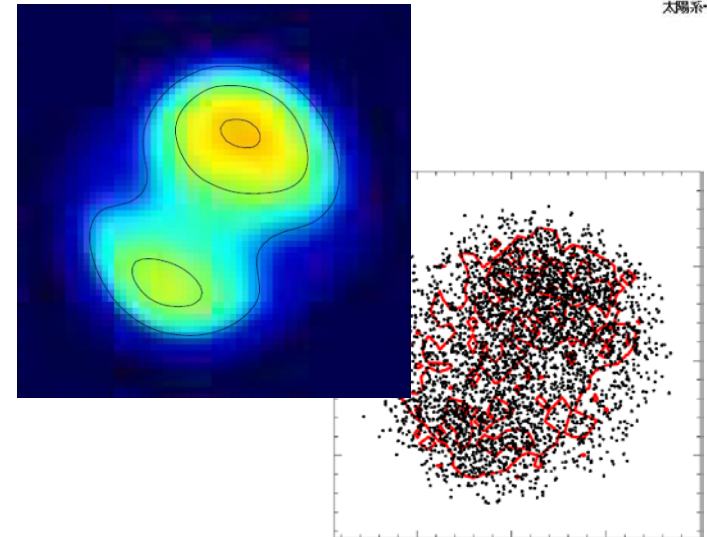
- Ray tracing による光の強度計算と化学反応計算を高速化。Strong scaling。
- 流体計算とカップルさせた輻射流体計算が可能になる。



(B) 6次元ボルツマンシミュレーション

目的 ダークマターの力学
無衝突プラズマ計算

- 無衝突ボルツマン方程式の直接積分
- N体計算で起こる2体緩和を完全除去





原子核分野

実時間・実空間計算法によるフェルミオン多粒子系のシミュレーション

原子核の応答・反応ダイナミクスの研究

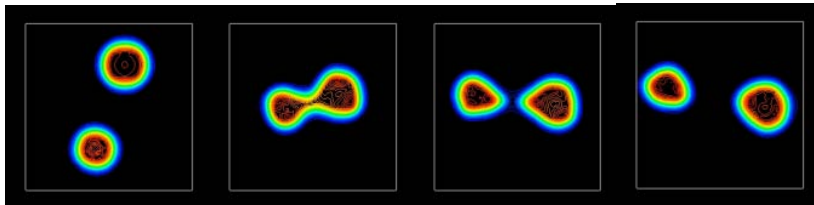
- ・元素合成の解明に関連する原子核の生成・応答・反応
 - r 過程核を生成する核子移行反応
 - 軽い核の融合反応
 - 原子核応答の系統的計算

原子核分野で発展した手法の関連分野への応用

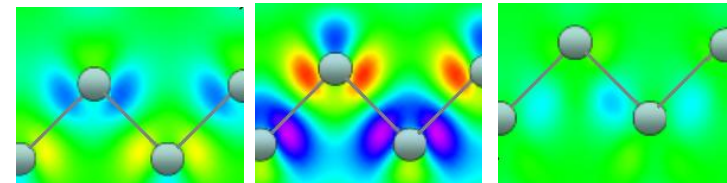
- ・光と物質の相互作用の第一原理計算
 - 高強度パルス光の物質伝播
 - アト秒科学への展開

方法論： 時間依存密度汎関数理論(TDDFT, TDHF, TDHFB)の
実時間・実空間(3次元差分)解法

ハミルトニアンの変動関数への作用がホットスポット。



中性子過剰核を生成する原子核衝突の
TDHFシミュレーション



パルスレーザーにより誘起される
固体結晶中のアト秒電子ダイナミクス



物質分野

- 目的: 物質の構造や動的な過程の**解明**と量子過程の**制御**
 計画: 量子多体に対して汎用の時間依存 Schrodinger 方程式を解く方法の開発
 特徴: 計算量が多い、並列化がしやすい
 (同じ計算手法で多種類の原子・分子・クラスターの様々な過程を研究できる、パラメータが多い)

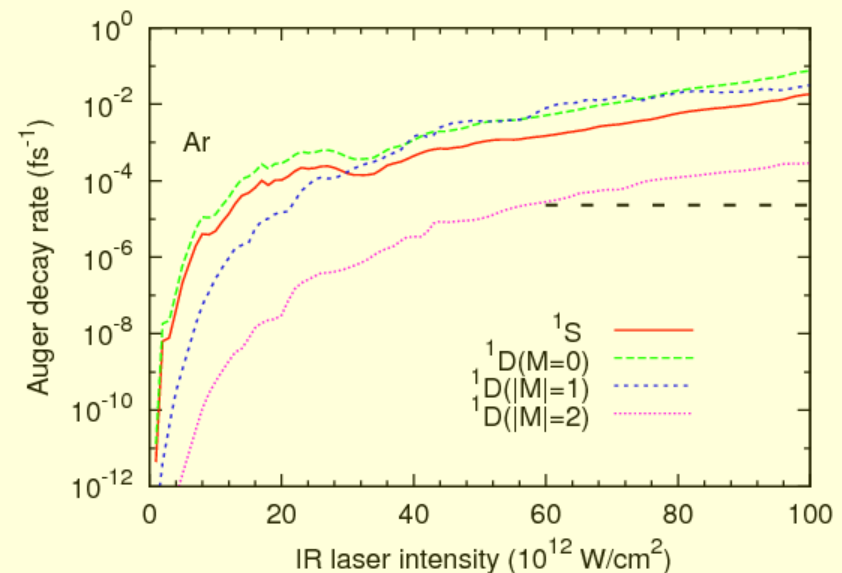
制御の例:

オージェ崩壊できない原子にレーザーを加えることによって、オージェ崩壊させる。レーザー強度と到着時刻によって、何時、どの程度崩壊させるかを制御できる。

期待される成果:

数値計算で、短時間に(フェト秒、及びアト秒の範囲)動的な過程に対して有効な制御方法を見つけることが期待される。

オージェ崩壊率とレーザー強度の関係



「実測計算速度: 270 Gflops /GPU」

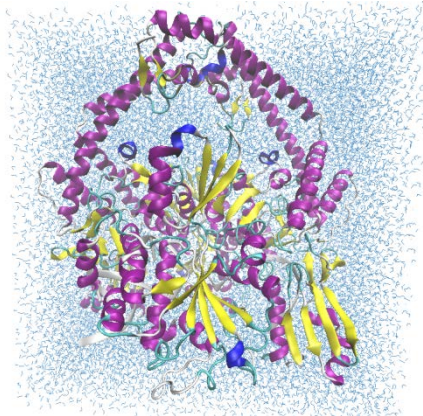
[Phys. Rev. Lett. 106 (2011) 053002.]



生命分野

生命計算科学フロンティアの新展開

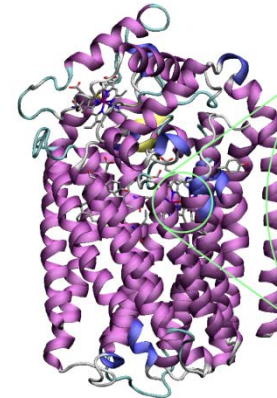
①



DNA切断タンパク質の
反応機構
(大規模MD計算)

創薬計算

②



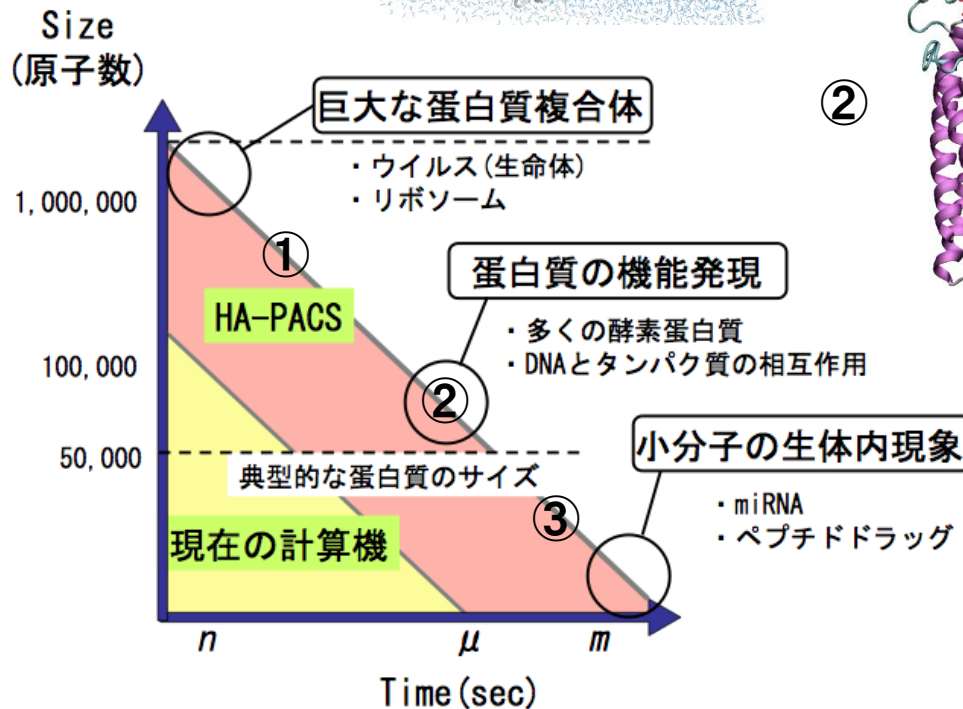
QM領域
~100原子

酵素反応機構の解明

(RSDFT-CPMD, PW-CPMD, QM/MM-MD)

③

プリオン蛋白質の
立体構造予測
(長時間MD計算)





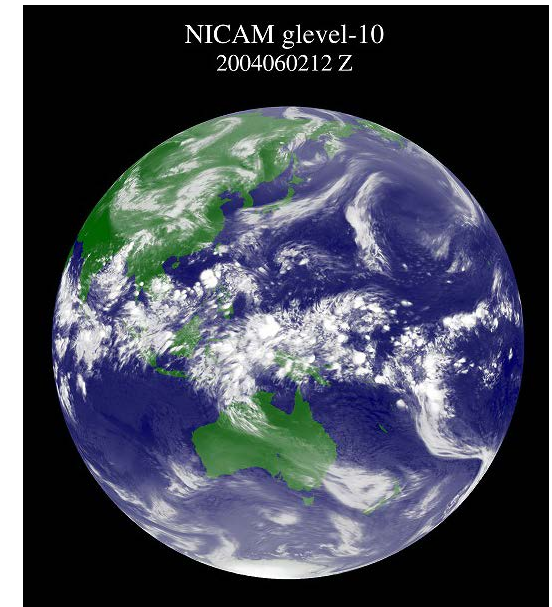
地球環境分野

目的

- ✓気候変動計算: 次世代型大気大循環モデル NICAM
- ✓都市型気象計算(ゲリラ豪雨, ヒートアイランド):
Large Eddy Simulation(LES)

期待される成果

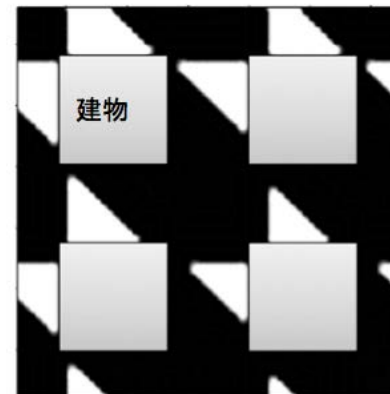
- LESモデルで、空間分解能10mでの計算が可能となる。
- NICAMは、計算時間の大幅な短縮が期待される。
- 高解像度での大気大循環のエネルギー循環の計算が可能に。



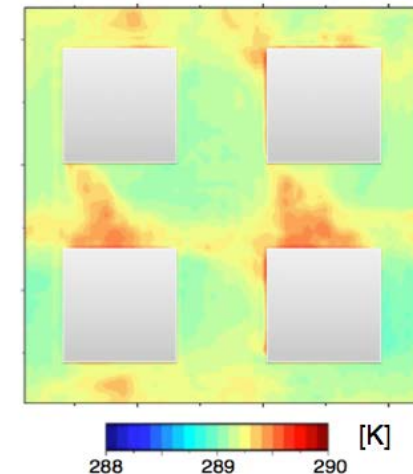
計算の特徴

一般的に格子点方の気象モデルはステンシル計算になるため、メモリアクセスが比較的単純になるので、高いメモリバンド幅を持つシステムを使用することで、高速化が期待される。

(a) 影の位置



(b) 地上1.5m気温分布

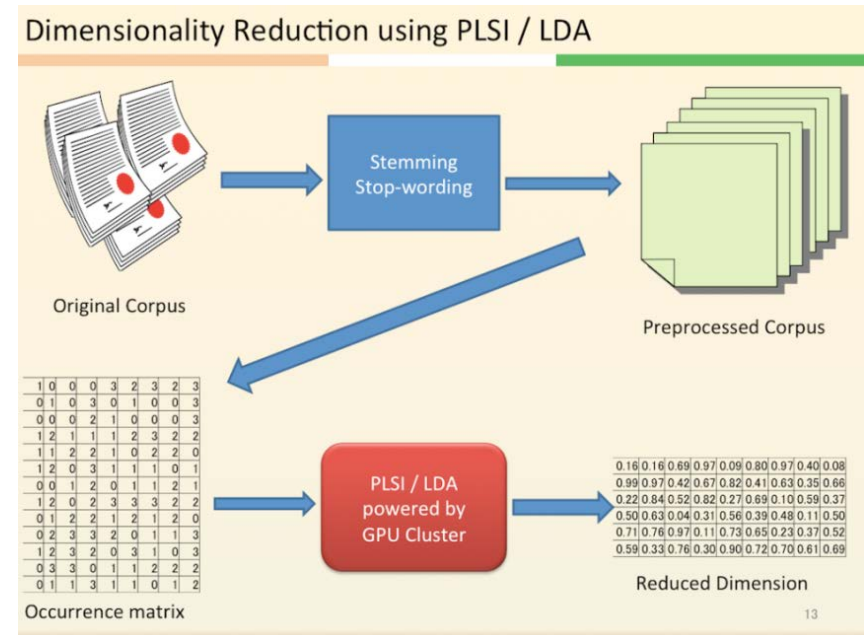




データ基盤分野

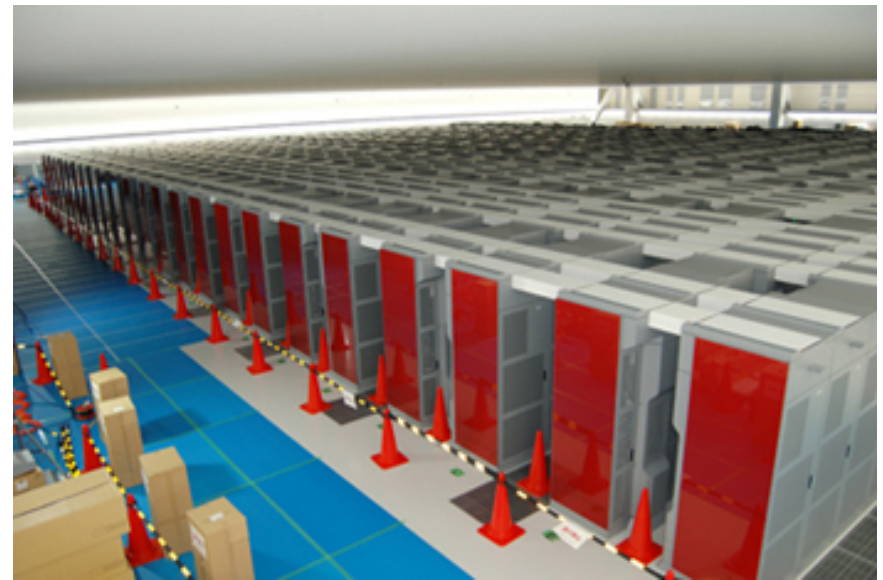
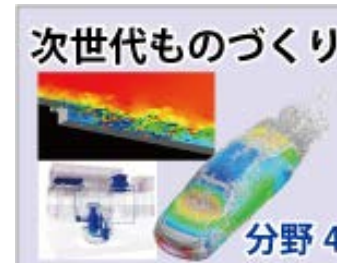
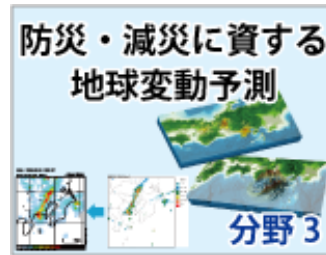
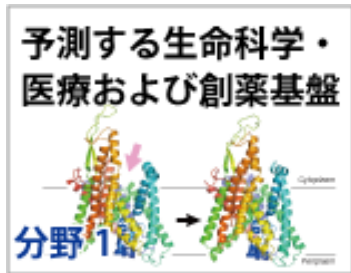
大規模データベースからの知識発見

- 目的と計画
 - 大規模データベースからの知識発見（マイニング）を高速化.
 - 対象とするマイニングアルゴリズム
 - 文書クラスタリング
 - PLSI (Probabilistic Latent Semantic Indexing)
 - LDA (Latent Dirichlet Allocation)
 - (確率的) 相関ルールマイニング
- 目標
 - 数値計算, シミュレーション以外の応用を目指す.
 - 大規模データ分析プラットフォームとしての利用を加速.



”京”スーパーコンピュータ

「HPCI戦略プログラム」



672筐体(CPU数68,544個)構成で8.162ペタフロップス(毎秒8,162兆回の浮動小数点演算数)を達成

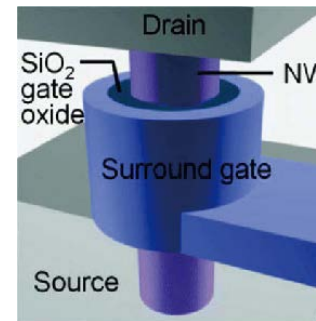
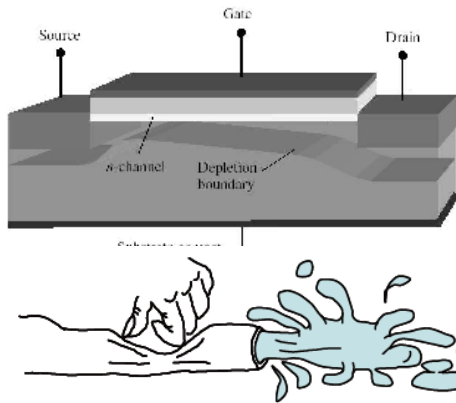
10万原子第一原理計算による シリコンナノワイヤー電子状態の予言

2011年 ゴードンベル賞

シリコンナノワイヤー
次世代半導体のキーテクノロジー

More Moore → More than Moore

planar
transistor



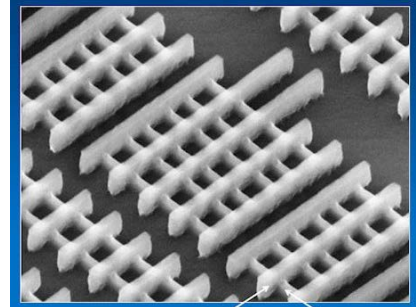
Surrounding gate
transistor



Gate Controllability
→ Suppress short-channel effects
Suppress leaks at off state
→ save energy

シリコンナノワイヤチャンネルの原子数
→ 10,000 - 100,000 原子！

22 nm 3-D Tri-Gate Transistor



Actually tri-gate by Intel
in 2011

ダークマター宇宙構造形成

京コンピュータシミュレーション



石山智明(筑波大), 牧野淳一郎(東工大), 似鳥啓吾(理研AICS)

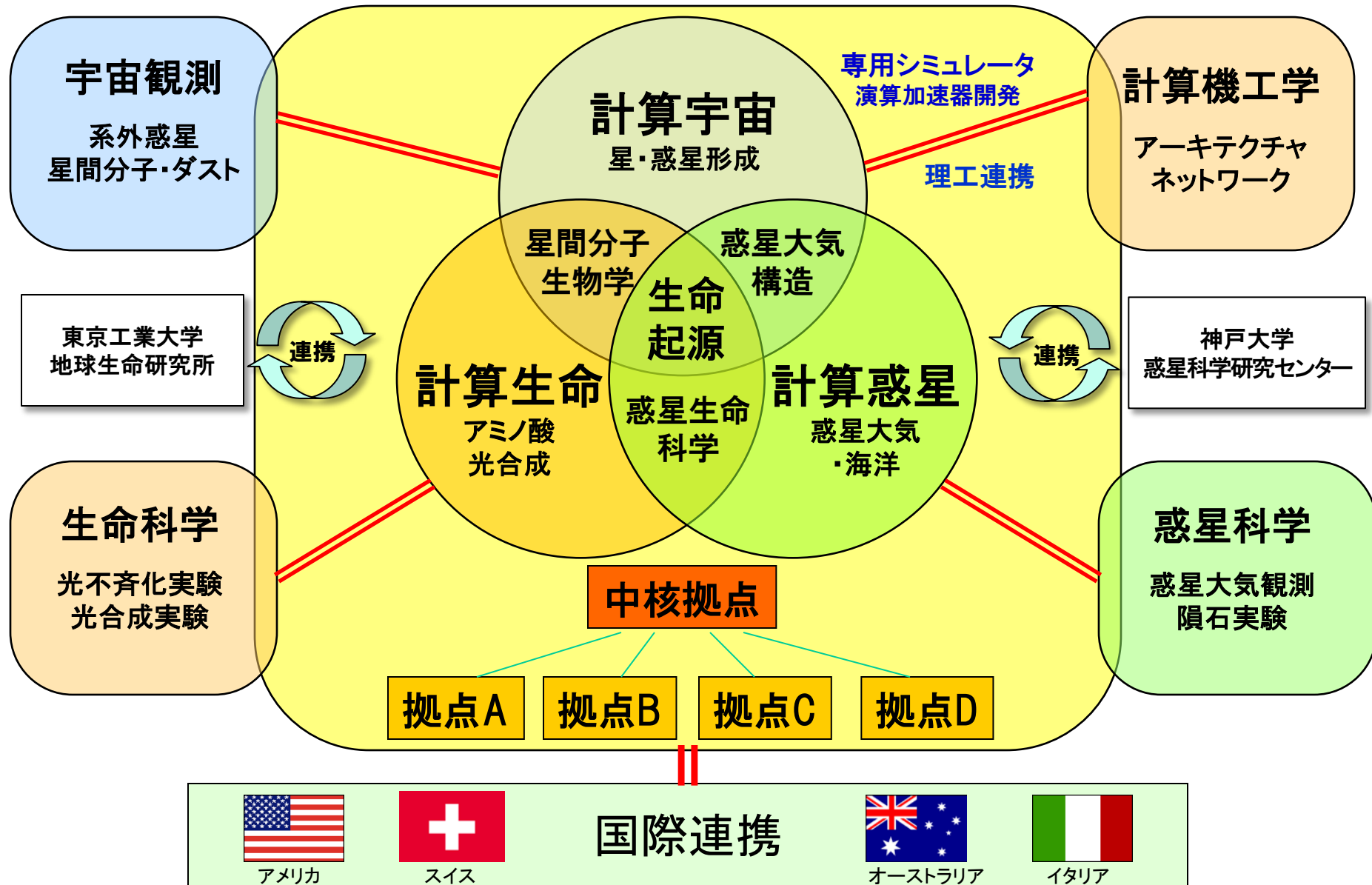
自己重力N体計算
ダークマター粒子数: 2048^3

2012年ゴードンベル賞

可視化 武田(国立天文台)

宇宙生命計算科学連携拠点

— 宇宙, 生命, 惑星計算科学連携による宇宙における生命起源の探究 —



宇宙生命計算科学

宇宙分野, 生命分野, 惑星分野の連携

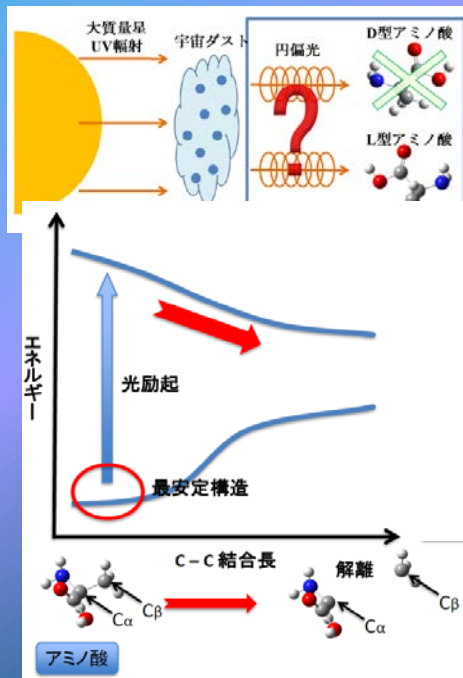
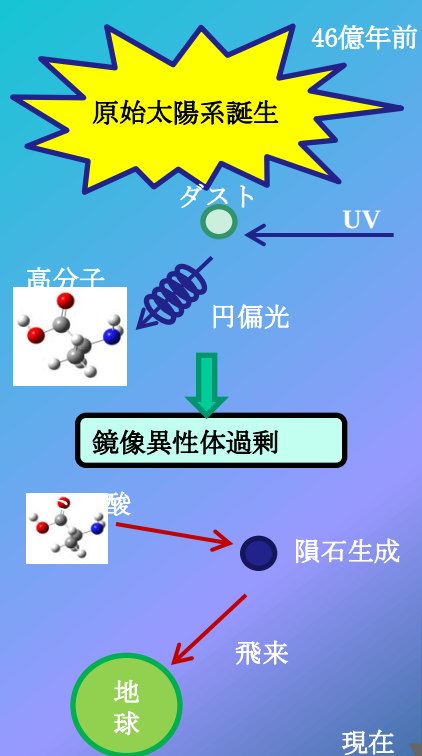
宇宙物理

生命物理

惑星物理



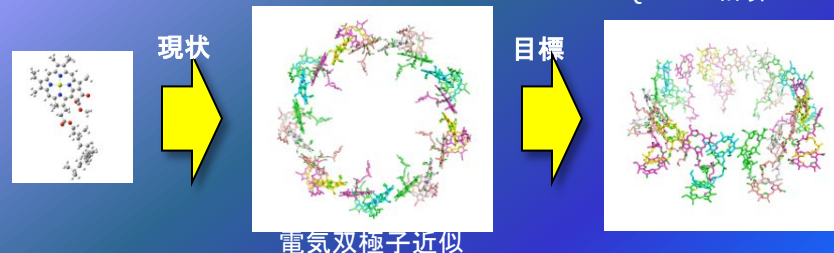
生物L型アミノ酸の宇宙起源説
星間アミノ酸の円偏光波による不斉化



系外惑星における生命発生過程の探究
系外惑星における光合成とバイオマーカー

クロロフィルTDDFT計算

クロロフィル・ダイナミクス
QM/MM計算



Current Potential Habitable Exoplanets

Compared with Earth and Mars and Ranked in Order of Similarity to Earth

#1	#2	#3	#4	#5	#6	#7
0.92	0.85	0.81	0.79	0.77	0.72	0.72
Gliese 581 g*	Gliese 667C c	Kepler-22 b	HD 40307 g*	HD 85512 b	Gliese 163 c	Gliese 581 d
Sep 2010	Nov 2011	Dec 2011	Nov 2012	Sep 2011	Sep 2012	Apr 2007

*planet candidates

CREDIT: PHL @ UPR Arcicibo (phl.upr.edu) Nov 19, 2012

系外ハビタブルプラネット候補



まとめ

先端計算科学推進室 & 学際共同利用を中心に

素粒子分野

宇宙分野

原子核分野

物質分野

生命分野

地球環境分野

において、ブレークスルーの達成のために、分野間連携および学外連携の下、主要アプリのHot Spot解析と高速化を進めている。

そして、

データ基盤

計算機システム分野

との連携を推進する。