

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（～100Tflops）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、三次元流体力学計算、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（～100Tflops）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*¹)

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（100Tflops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する。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)

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。

2. 大規模並列化アルゴリズムの開発

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、三次元流体力学計算、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(戎崎、Stanczyk*²)

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VPP500に載せ、大規模に並列化する。この研究は、ゲノム科学研究所と協同で行う。

(2) 三次元流体力学計算(清水、Xiao*³)

三次元流体力学コードをVPP500に実装し、その性能が引き出せるようチューニングする。これを使って、レーリー・テーラー不安定の発達や、反応流のシミュレーションを行う。

(3) 画像処理(洲之内、大野*¹)

近年、高感度で1000×1000以上の画素を持つ大型の二次元素子が普及し、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。この研究は、宇宙放射線研究室と協同で行う。

(4) 放射輸送問題(住吉、清水*¹)

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。これを Tflops の計算能力と TByte 記憶容量とを持った次世代のスーパーコンピュータで実現する方法を検討する。

*¹ 基礎科学特別研究員, *² 訪問研究員, *³ 共同研究者

誌上発表 Publications

(原著論文) *印は査読制度がある論文誌

- Fukushige T., Taiji M., Makino J., Ebisuzaki T., and Sugimoto D.: "A Highly-Parallelized Special-Purpose Computer for Many-body Simulations with an Arbitrary Central Force: MD-GRAPE", *Astrophys. J.*, **468**, 51-61 (1996).*
- Taniguchi Y. and Wada K.: "The Nuclear Starburst Driven by a Supermassive Black Hole Binary", *Astrophys. J.*, **469**, 581-588 (1996).*
- Mori M., Yoshii Y., Tsujimoto T., and Nomoto K.: "The Evolution of Dwarf Galaxies with Star Formation in Outward Propagating Super Shell", *Astrophys. J.*, **478**, L1-L4 (1997).*
- Xiao F., Yabe T., Konma N., Uchiyama A., Akutu K., and Ito T.: "An Efficient Model for Driven Flow and Application to GCB", *Comput. Model. Simulation Eng.*, **1**, 235-249(1996).*
- Xiao F., Yabe T., and Ito T.: "Constructing Oscillation Preventing Scheme for Advection Equation by Rational Function", *Comput. Phys. Commun.*, **93**, 1-12 (1996).*
- Xiao F., Yabe T., Nizam G., and Ito T.: "Constructing Multi-dimensional Oscillation Preventing Scheme for Advection Equation by Rational Function", *Comput. Phys. Commun.*, **94**, 103-118 (1996).*
- Sato K., Shimizu T.M., and Yamada S.: "Gravitational Collapse of Rotating Stellar Cores and Supernovae", *Nucl. Phys. A*, **606**, 118-136 (1996).*
- Hirata D., Sumiyoshi K., Carlson B. V., Toki H., and Tanihata I.: "Triaxial Deformation of Unstable Nuclei in the Relativistic Mean-Field Theory", *Nucl. Phys. A*, **609**, 131-146 (1996).*
- Sugahara Y., Sumiyoshi K., Toki H., Ozawa A., and Tanihata I.: "Study of Light Nuclei in the Relativistic Mean Filed Theory and the Non-Relativistic Skyrme-Hartree-Fock Theory", *Prog. Theor. Phys.*, **6**, 1165-1178 (1996) *
- Mori M., Yoshii Y., Tsujimoto T., and Nomoto K.: "GRAPE-SPH Simulations of the Chemodynamical Evolution of Dwarf Galaxies", Proc IAU Symp. on Dynamical Evolution of Star Clusters, edited by P. Hut and J. Makino, Vol. 174, pp. 395-396(1996).
- Nakasato N., Mori M., Tsujimoto T., Nomoto K., and Mathews. G.: "GRAPE-SPH Simulations of the Globular Cluster Formation", Proc IAU Symp. on Dynamical Evolution of Star Clusters, edited by P. Hut and J. Makino, Vol. 174, pp. 397-398 (1996).
- Mori M., Yoshii Y., Tsujimoto T., and Nomoto K.: "Numerical Simulations of the Formation and Chemo-dynamical Evolution of Dwarf Elliptical Galaxies", Proc. ASP Conf. Ser. 112, The History of the Milky Way and it's Satellite System, edited by A. Burkert, D. Hartmann, and S. Majewski, pp. 87-88 (1997). (単行本)
- 戎崎俊一: "宇宙創世記(翻訳): A Short History of the Universe", Silk, J.著, 東京化学同人, pp. 1-245 (1996). (その他)
- Sumiyoshi K. and Ebisuzaki T.: "Parallelization of the Direct Solution of Large Block-Tridiagonal Matrix System for Problems of Radiative Transfer", High Performance in RIKEN 1995, **1**, 161-163 (1996).
- Sumiyoshi K., Hirata D., Tanihata I., Sugahara Y., and Toki H.: "A Systematic Study of Even-Even Nuclei Up to the Drip Lines in Terms of the Relativistic Mean Field Theory", High Performance in RIKEN 1995, **1**, 165-168 (1996).
- Nishimura O., Sumiyoshi K., and Ebisuzaki T. : "The Radiative Transfer in Neutron Star Atmospheres with Super Strong Magnetic Field", High Performance in RIKEN 1995, **1**, 169-171 (1996).
- Tateno M.: "Molecular Modeling of Protein, RNA and Their Complex", High Performance in RIKEN 1995, **1**, 199-202 (1996).
- Sumiyoshi K., Hirata D., Tanihata I., Sugahara Y., and Toki H.: "A Systematic Study of the Ground State Properties of Even-Even Nuclei Up to the Drip-lines within the Relativistic Mean Field Framework ", High Performance in RIKEN 1995, **1**, 249-251 (1996).
- Sumiyoshi K., Hirata D., Tanihata I., and Sugahara Y., : "A Systematic Study of Even-even Nuclei in the Nuclear Chart by the Relativistic Mean Field Theory", Proc. 1st Internet Symp. on Nuclear Data, Apr. 8 - Jun. 15, 1996", JAERI-Conf, 97-004, pp. 187-192 (1996).
- Ebisuzaki T.: "Dreams of Hecto-Tera Flops and Tera Byte", RIKEN Rev., No.14, pp. 1-2 (1996).
- Tateno M.: "Doching Simulation of Protein and RNA Molecules by Computer Modeling and Molecular Dynamics Calculation", RIKEN Rev., No. 14, pp. 5-6 (1996).
- Jacek P. Stanczyk: "Matching Biological Sequences on VPP500", RIKEN Rev., No.14, pp. 9-10 (1996).
- Sumiyoshi K.: "Systematic Study of Unstable Nuclei in the Relativistic Mean Field Framework on the RIKEN Supercomputer VPP500", RIKEN Rev., No.14, pp. 25-26 (1996).
- Shimizu T.M.: "An Extension to Roe's Scheme for Gas Dynamics: General Equations of State and Spherical

- Coordinates", RIKEN Rev., No.14, pp.27-28 (1996).
- Mori M., Nakasato N., and Kumagai S.: "Numerical Experiments of the Formation of Dwarf Galaxies Using Smoothed Particle Hydrodynamics Method", RIKEN Rev., No. 14, pp. 31-32 (1996).
- Nishimura O., Sumiyoshi K., and Ebisuzaki T. : "The Radiative Transfer in Soft Gamma Repeaters with a Super-Strong Magnetic Field", RIKEN Rev., No.14, pp. 37-38 (1996).
- Miura H., Wada T., Narumi T., Ohno Y., and Ueno M.: "COGITO-CCD Clock Pattern Generator for Interactive Operation", すばる望遠鏡技術報告, SUBARU Project Office, No.52, pp. 1-26 (1996).
- 縣秀彦, 三浦均, 伊藤昌市, 小山浩, 鶴岡信彦, 戎崎俊一: "HSTからのライブインターネットを用いた新しい天文教育の可能性", 天文月報, 89, 548-553 (1996).
- Mori M.: "The Formation and Evolution of Dwarf Galaxies: Hydrodynamics and Color Gradient", Nagoya Univ., pp. 1-84 (1997).

口頭発表 Oral Presentations

(国際会議)

- Otani C., Yoshida A., Kawai N., Shimizu H., Matsuoka M., Susukita R., Ebisuzaki T., Ohno Y., Sunouchi K., Ueno M., Wada T., Yamauchi M., and Takeyama N.: "TOMBO Project -Transient Observatory for Microlensing and Bursting Objects-", 2nd India-Japan Seminar on Astronomy & Astrophysics, Tokyo, Mar.(1996).
- Shimizu T.M.: "Effect of Anisotropic Neutrino Radiation on Supernova Explosion Energy", CTIO/ESO/LCO Workshop "SN1987A: Ten Years After", La Serena, Chile, Feb.(1997).
- Ohno Y.: "TOMBO Project", JST Forums for Multi-disciplinary Res. on New Concepts and Techniques: Experiments vs. Computing, (主催 全日本地域研究交流協会), Hayama, Mar. (1997).
- Ebisuzaki T.: "TOMBO: Transient Observatory for Microlensing and Bursting Objects", Workshop for ASM and GRB Mission in X-Ray Band on All-Sky X-Ray Observations in the Next Decade, Wako, Mar. (1997).

(国内学会等)

- 清水鉄也: "Hydrodynamical Calculation of Super-nova Explosions", Workshop on Supercomputing Science at RIKEN, 和光, 6月 (1996).
- 大野洋介, 洲之内啓, 薄田竜太郎, 大谷知行, 松岡勝, 河合誠之, 吉田篤正, 清水裕彦, 戸崎俊一, 上野宗孝, 和田武彦, 山内誠: "「とんぼ」計画—プロトタイプ性能評価ー", 日本天文学会1996年秋季年会, 水沢, 10月 (1996).
- 清水鉄也: "超新星爆発エネルギーに対する非等方ニュートリノ放出の効果", 日本天文学会1996年秋季年会, 水沢, 10月 (1996).
- 森正夫, 吉井譲, 辻本拓司, 野本憲一: "矮小銀河の形成と進化Ⅱ", 日本天文学会1996年秋季年会, 水沢, 10月 (1996).

- 和田桂一, 坂本和, 峰崎岳夫: "NGC4321中心部の構造解明:M/L分布, パタンスピード, ガス分布", 日本天文学会1996年秋季年会, 水沢, 10月 (1996).
- 長瀧重博, 清水鉄也, 佐藤勝彦: "非対称な超新星爆発と物質混合", 日本物理学会1996年秋の分科会, 佐賀, 10月 (1996).
- 戎崎俊一: "理化学研究所における計算科学研究", 理研シンポジウム「スーパーコンピュータと専用計算機における計算科学」, 和光, 11月 (1996).
- Jacek P. Stanczyk :"Dynamic Programming Method for Homology Search of Genome on VPP500/28 Vectorization and Parallelization", 理研シンポジウム「スーパーコンピュータと専用計算機における計算科学」, 和光, 11月 (1996).
- 館野賢: "分子動力学計算専用コンピュータ:MD GRAPE-2システム", 理研シンポジウム「スーパーコンピュータと専用計算機における計算科学」, 和光, 11月 (1996).
- 清水鉄也: "VPP700/28によるレーリー・ティラー不安定シミュレーション", 理研シンポジウム「スーパーコンピュータと専用計算機における計算科学」, 和光, 11月 (1996).
- 三浦均: "大規模シミュレーションの可視化技術", 理研シンポジウム「スーパーコンピュータと専用計算機における計算科学」, 和光, 11月 (1996).
- 長嶋雲兵: "量子化学専用計算機の開発に向けて", 理研シンポジウム「スーパーコンピュータと専用計算機における計算科学」, 和光, 11月 (1996).
- 肖鋒: "A Class of Semi-Lagrangian Methods: CIP Type Schemes and Simulations of Multi-Material Flow", 理研シンポジウム「スーパーコンピュータと専用計算機における計算科学」, 和光, 11月 (1996).
- 肖鋒, 矢部孝: "弾塑性体を含むサスペンション流に対する計算手法", 日本機械学会「第9回計算力学講演会」, 福岡, 11月 (1996).
- 清水鉄也, 戸崎俊一, 三浦均: "格子点600³個でのRayleigh-Taylor不安定性の数値計算", 日本数値流体力学会「第10回数値流体力学シンポジウム」, 東京, 12月 (1996).
- 肖鋒, 矢部孝, 伊藤智義, 田島雅和: "重力流に浮かぶ固体の動きのシミュレーション", 日本数値流体力学会「第10回数値流体力学シンポジウム」, 東京, 12月 (1996).
- 和田桂一, 坂本和, 峰崎岳夫: "Numerical Modeling for the Central Region of M100", 理論天文学懇談会シンポジウム「大型観測装置時代の理論天文学」, 千葉, 12月 (1996).
- 長瀧重博, 清水鉄也, 佐藤勝彦: "非対称な超新星爆発と物質混合", 文部省科研費重点領域研究「短寿命核ビームの科学'96」研究会, 田無, 1月 (1997).
- 清水鉄也: "超新星爆発エネルギーと非等方ニュートリノ放出", 短寿命核ビームの科学'96, 和光, 1月 (1997).
- 森正夫, 吉井譲, 辻本拓司, 野本憲一: "超新星爆発と矮小銀河の形成", ラインX線, γ 線による天体物理,

相模原, 1月(1997).

森 正夫, 吉井 讓, 辻本拓司, 野本憲一: “矮小銀河の形成と力学, 化学進化”, Numerical Astrophysics 96, 千葉, 1月(1997).

大野洋介, 洲之内啓, 薄田竜太郎, 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, 和田武彦, 山内 誠: “「とんぼ」計画-TDIと大フォーマットCCD”, 日本天文学会1997年春季年会, 東京, 3月(1997).

傳田紀代美, 山口あづさ, 竹重和明: “VPP300/500におけるBLASのベクトル化について”, 第4回「ハイパフォーマンス・コンピューティングとアーキテクチャの評価」に関する北海道ワークショッピング(HOKKE-97), 札幌, 3月(1997).

Research Subjects and Members of Computational Science Laboratory

1. Laser Spectroscopy of Exotic Atoms, Molecules
2. Analysis and Characterization of Liquid and Solid Materials

Head

Dr. Toshikazu EBISUZAKI

Members

Dr. Kohsuke SUMIYOSHI [1,2]
Dr. Kei SUNOUCHI [2]

in collaboration with

Dr. Yoshihide HAYASHIZAKI (Genome Science Lab.)
[2]
Dr. Nobuyuki KAWAI (Cosmic Radiation Lab.) [2]

- Dr. Masaru MATSUOKA (Cosmic Radiation Lab.) [2]
Dr. Chiko OTANI (Cosmic Radiation Lab.) [2]
Dr. Hirohiko SHIMIZU (Cosmic Radiation Lab.) [2]
Dr. Ryutaro SUSUKITA (Cosmic Radiation Lab.) [2]
Dr. Azusa YAMAGUCHI (Computation Center) [2]
Dr. Atsunasa YOSHIDA (Cosmic Radiation Lab.) [2]

Visiting Members and Postdoctoral Fellows

- Dr. Kiyomi DENDA [2]
Dr. Hitoshi MIURA [2]
Prof. Umpei NAGASHIMA (Cyclotron and RI Cen., Ochanomizu Univ.) [2]
Dr. Osamu NISHIMURA (Cyclotron and RI Cen., Tohoku Univ.) [2]
Dr. Yousuke OHNO [2]
Dr. Tetsuya SHIMIZU [2]
Dr. Jacek P. STANCZYK [2]
Dr. Masaru TATENO [1]
Dr. Munetake Ueno (Dept. Earth Sci. and Astr., Grad. Sch. Arts Sci., Univ. Tokyo) [2]
Dr. Keiichi WADA (Cen. Inf. Processing Ed., Hokkaido Univ.) [2]
Dr. Feng XIAO (Dept. Electron. Eng., Fac. Eng., Gunma Univ.) [2]
Dr. Makoto Yamauchi (Dept. Electr. Electron. Eng., Fac. Eng., Miyazaki Univ.) [2]

Trainees

- Mr. Masao MORI (Fac. Sci. Eng., Nagoya Univ.) [2]
Mr. Shigehiro NAGATAKI (Fac. Sci. Eng., Univ. Tokyo) [2]
Mr. Takehiko WADA (Dept. Earth Sci. and Astr., Coll. Arts Sci., Univ. Tokyo) [2]

Numbers in [] denote the research subjects listed above.