

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、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（～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・デア・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・デア・ワールス力や周期境界条件に対応するエワルド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。

2. 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^{*1}）

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^{*2}、Xiao^{*2}）

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^{*2}）

近年、高感度で1000×1000以上の画素を持つ大型の二次元元素が普及し、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からの天体画像および三次元ファンクショナルデジタイザのデータ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。

3. 可視化、体感化

(1) リアルタイム可視化（三浦^{*2}、戎崎）

シミュレーション結果についての人間の直感的な理解を助けるためシミュレーションデータのリアルタイム可視化および体感化できるシステムを構築する。

*1 奨励研究員、*2 基礎科学特別研究員

誌上発表 Publications

(原著論文) *印は査読制度がある論文誌

Okada Y., Tanimura S., and Takeuchi K.: "Cluster forma-

口頭発表 Oral Presentations

(国際会議等)

- Tion in steady supersonic laval nozzle flow", J. Aerosol Sci. **28**, S491–S492 (1997). *
- Tanimura S., Okada Y., and Takeuchi K.: "Fourier transform infrared spectroscopy of UF₆ clustering in a supersonic Laval nozzle: Cluster configurations in supercooled and near-equilibrium states", J. Chem. Phys. **107**, 7096–7105 (1997). *
- Okada Y., Tanimura S., Okamura H., Suda A., Tashiro H., and Takeuchi K.: "Vibrational spectroscopy and predissociation of UF₆ clusters in a supersonic Laval nozzle", J. Mol. Struct. **410/411**, 299–304 (1997). *
- Okada Y., Sunouchi K., Ryu H., Patra A., Ashimine K., and Takeuchi K.: "Measurement of condensation onset in steady supersonic Laval nozzle flow for the molecular laser isotope separation process", J. Nucl. Sci. Technol. **35**, 158–162 (1998). *
- Hirata D., Sumiyoshi K., Tanihata I., Sugahara Y., Tachibana T., and Toki H.: "A systematic study of even-even nuclei up to the drip lines within the relativistic mean field framework", Nucl. Phys. A **616**, 438c–445c (1997). *
- Xiao F., Yabe T., and Ebisuzaki T.: "Simulation of collapsing bubble affected by latent heating", Proc. 1997 Meet. Japan. Society of Fluid Mechanics Suppl. **16**, 359–360 (1997).
- (その他)
- Shimizu T. M., Ebisuzaki T., and Miura H.: "Simulation of Rayleigh-Taylor instability on 600³ grid points", 第10回数値流体力学シンポジウム講演論文集, pp. 208–209 (1996).
- Toki H., Sumiyoshi K., Hirata D., Sugahara Y., and Tanihata I.: "Relativistic many body theory for unstable nuclei and neutron stars", Proc. Int. Symp. on Origin of Matter and Evolution of Galaxies in the Universe, edited by T. Kajino, Y. Yoshii, and S. Kubono, World Scientific, Singapore, pp. 367–374 (1997).
- Shimizu T. M.: "Supernova explosion energy and anisotropic neutrino radiation", Proc. Workshop on Science with Radioactive Nuclear Beams '96, Tanashi, 1997-01, edited by S. Kubono, T. Nakamura, K. Otsuka, and I. Katayama, High Energy Accelerator Research Organization (KEK), Tanashi, pp. 348–352 (1997).
- Okada Y., Tanimura S., and Takeuchi K.: "Study of cluster formation and dissociation in supersonic nozzle flow", RIKEN Rev., No. 17, pp. 23–24 (1998).
- Tanimura S., Okada Y., and Takeuchi K.: "Configurations of UF₆ clusters in supercooled and near-equilibrium states", RIKEN Rev., No. 17, pp. 25–26 (1998).
- 戎崎俊一: "計算機による新しい生物物理学", 第36回原子力総合シンポジウム, 東京, 1998-02, pp. 83–85 (1998).
- 三浦均, 橋孝博, 住吉光介, 望月優子, 戸崎俊一: "ハイゼンベルクの谷と重元素合成: 日経サイエンス第3回Computer Visualization Contest 佳作入選", 日経サイエンス **27**, No. 12, p. A14 (1997).
- Ohno Y., Sunouchi K., Ebisuzaki T., Susukita R., Ohtani C., Yoshida A., Kawai N., Shimizu H. M., Matsuoka M., Ueno M., Wada T., Yamauchi M., Takeyama N., and Yoshizawa H.: "TOMBO project: Transient observatory for micro-lensing and bursting objects", 23rd General Assembly of the International Astronomical Union, (Science Council of Japan, Astronomical Society of Japan), Kyoto, Aug. (1997).
- Shimizu H. M., Kato H., Oku T., Suda Y., Ogawa Y., Iwasa H., Kamiyama T., Kiyanagi Y., and Wakabayashi T.: "Cold neutron beam control using magnetic field gradient", ICNS'97, Toronto, Canada, Aug. (1997).
- Okada Y., Tanimura S., and Takeuchi K.: "Cluster formation in steady supersonic laval nozzle flow", 1997 European Aerosol Conf. (EAC '97), Hamburg, Germany, Sept. (1997).
- Yasuoka K. and Matsumoto M.: "Molecular dynamics simulation of homogeneous nucleation in vapor phase", CCP5 Ann. Meet. on Materials, Microstructures and Simulation, London, UK, Sept. (1997).
- Narumi T.: "Molecular dynamics machine: Highly parallelized special-purpose-computer for molecular dynamics simulations", Int. Symp. on Supercomputing: New Horizon of Computational Science, Tokyo, Sept. (1997).
- Yasuoka K. and Matsumoto M.: "Molecular mechanism of homogeneous nucleation in vapor phase: Lennard-jones fluid", Int. Symp. on Supercomputing: New Horizon of Computational Science, Tokyo, Sept. (1997).
- Xiao F. and Ebisuzaki T.: "An efficient numerical model for multi-phase fluid dynamics", NASA 4th Natl. Symp. on Large-Scale Analysis and Design on High-Performance Computers and Workstations, (NASA Langley Research Center), Williamsburg, USA, Oct. (1997).
- Sumiyoshi K., Yamada S., Suzuki H., and Hillebrandt W.: "Explosion of a neutron star just below the minimum mass: A possible site for r-process nucleosynthesis", Int. Symp. on Origin of Matter and Evolution of Galaxies '97, (CNS, Univ. Tokyo), Atami, Nov. (1997).
- Sumiyoshi K., Suzuki H., Yamada S., and Hillebrandt W.: "The fate of a neutron star just below the minimum mass: Does it explode?", Neutron Stars and Pulsars: Thirty Years after the Discovery, (Rikkyo Univ.), Tokyo, Nov. (1997).
- Sumiyoshi K., Carlson B., Tanihata I., Sugahara Y., Sugimoto S., Toki H., and Hirata D.: "Ground state properties of unstable nuclei in the relativistic mean field framework", 17th RCNP Int. Symp. on Innovative Computational Methods in Nuclear Many-Body Problems, (RCNP, Osaka Univ.), Osaka, Nov. (1997).
- Shirouzu M., Terada T., Kigawa T., Ito Y., Hashimoto K., Morinaka K., Koyama S., Hu C.-D., Hori-Tamura

- N., Kariya K., Tateno M., Shibata T., Ernest L. D., Jonathan C. A., Kataoka T., Kikuchi A., and Yokoyama S.: "Interactions of the amino acid residue at position 31 of the c-Ha-Ras protein with Raf-1 and RalGDS", 1998 Keystone Symp. Conf., Lake Tahoe, USA, Mar. (1998).
- Shimizu T. M. and Ebisuzaki T.: "Simulation of rayleigh-taylor instability on 600³ grid points", Numerical Astrophysics 1998, (National Astronomical Observatory, Japan), Tokyo, Mar. (1998).
- (国内会議)
- 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).
- 清水鉄也: "超新星からの物質放出と r-プロセス", RIBF と天体物理学, 和光, 4 月 (1997).
- 泰岡顕治, 松本充弘: "気相均一核生成の分子動力学", 第 34 回日本伝熱シンポジウム, (日本伝熱学会), 仙台, 5 月 (1997).
- 住吉光介, 戻崎俊一: "並列化効率の予測と評価について: VPP500 における行列解法並列化の場合", 物性短期研究会「物性研究における計算物理: 並列計算の現状と今後の展望」, (東京大学物性研究所), 東京, 6 月 (1997).
- 肖鋒, 矢部孝, 戻崎俊一: "潜熱を考慮した気泡収縮のシミュレーション", 日本流体力学会年会 '97, 東京, 7 月 (1997).
- 住吉光介, 菅原雄一, Hirata D., 谷畠勇夫, 土岐博: "Light unstable nuclei in relativistic mean field theory", RI ピームの物理を考えるワークショップ「不安定核でのクラスター物理」, 和光, 8 月 (1997).
- 寺田透, 伊藤隆, 白水美香子, 館野賢, 木川隆則, 澪尾擴士, 柴田武彦, Cooper J. A., Laue E. D., 横山茂之: "NMR による Raf-1 の Ras 結合ドメインと Ras の相互作用の研究", 第 70 回日本生化学会大会, 金沢, 9 月 (1997).
- 宮崎利行, 昆野康隆, 有賀洋一, 前神佳奈, 藤本龍一, 満田和久, 工藤寛之, 中田太郎, 庄子習一, 清水裕彦, 三原建弘, 奥隆之, 佐藤広海: "高波長分解と位置検出を目指した X 線マイクロカロリメーターの開発", 日本物理学会 1997 年秋の分科会, 八王子, 9 月 (1997).
- 住吉光介, 山田章一, 鈴木英之, Hillebrandt W.: "最小質量中性子星の爆発と r-process", 日本物理学会 1997 年秋の分科会, 八王子, 9 月 (1997).
- 寺田透, 館野賢, 伊藤隆, 白水美香子, 木川隆則, 澪尾擴士, 柴田武彦, 横山茂之: "Raf-1/Ras 複合体の分子動力学計算", 第 35 回日本生物物理学年会, 京都, 10 月 (1997).
- 寺田透, 館野賢, 伊藤隆, 白水美香子, 木川隆則, 澪尾擴士, 柴田武彦, 横山茂之: "分子動力学計算による Raf-1 と Ras の相互作用機構の研究", 第 35 回日本生物物理学年会, 京都, 10 月 (1997).
- 清水裕彦, 加藤博, 奥浩之, 須田義之, 小川雪郎, 岩佐浩克, 平賀富士夫, 加美山隆, 鬼柳善明, 若林利男: "磁場勾配を用いた冷中性子ビーム制御", 日本物理学会 1997 年秋の分科会, 神戸, 10 月 (1997).
- 清水裕彦, 佐藤広海, 奥浩之, 加藤博, 大谷知行, 松岡勝, 河合誠之, 吉田篤正, 三原建弘, 赤穂博司, 仲川博, 青柳昌宏, 高田進, 木野幸浩, 稲葉克彦: "超伝導トンネル接合素子を用いた X 線検出器の開発", 日本物理学会 1997 年秋の分科会, 神戸, 10 月 (1997).
- 住吉光介: "Mean-field frameworks for astrophysics", 第 3 回「理研 RI ピームファクトリーの物理」ワークショップ「不安定核における平均場」, 和光, 11 月 (1997).
- 肖鋒, 清水鉄也, 戻崎俊一: "Calculation of suspended rigid body in 3D", 第 11 回数值流体力学シンポジウム, 東京, 12 月 (1997).
- 谷村志乃夫, 泰岡顕治, 戻崎俊一: "UF₆ クラスター生成過程の MD シミュレーション", 第 11 回分子シミュレーション討論会, 倉敷, 12 月 (1997).
- 成見哲, 薄田竜太郎, 戻崎俊一: "分子動力学専用計算機 MDM の開発", 第 11 回分子シミュレーション討論会, 倉敷, 12 月 (1997).
- 戎崎俊一: "計算機による新しい生物物理学", 第 36 回原子力総合シンポジウム, (日本原子力研究所), 東京, 2 月 (1998).
- 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, 戻崎俊一, 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 II", 日本天文学会 1998 年春季年会, 東京, 3 月 (1998).
- 肖鋒: "Parallel computation of multi-phase 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よる計算科学」, 和光, 3 月 (1998).
- 谷村志乃夫, 泰岡顕治, 戻崎俊一: "UF₆ 分子および SF₆ 分子の均一核生成の分子動力学シミュレーション: 分子内振動緩和が核生成速度におよぼす影響", 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よる計算科学」, 和光, 3 月 (1998).
- 泰岡顕治: "気相核生成の分子シミュレーション", 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よる計算科学」, 和光, 3 月 (1998).
- 住吉光介, 杉本聰, Hirata D., 土岐博, 谷畠勇夫: "不安定核構造の系統的研究: 原子核の形をさぐる", 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よる計算科学」, 和光, 3 月 (1998).
- 成見哲: "分子動力学シミュレーション専用計算機 MDM の開発", 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よる計算科学」, 和光, 3 月 (1998).
- 戎崎俊一: "理化学研究所における計算科学", 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よる計算科学」, 和光, 3 月 (1998).
-
- Research Subjects and Members of Computational Science Laboratory*
1. Developement of Heterogeneous Computing System
 2. Developement of Large-Scale Parallel Algorithm
 3. Real-time Visualization of the Results of Simulations

Head

Dr. Toshikazu EBISUZAKI

Members

Dr. Kohsuke SUMIYOSHI [2]

Dr. Kei SUNOUCHI [2]

Dr. Masaru TATENO [1]

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 M. SHIMIZU (Cosmic Radiation Lab.) [2]

Dr. Ryutaro SUSUKITA (Cosmic Radiation Lab.) [2]

Dr. Azusa YAMAGUCHI (Computation Center) [2]

Dr. Atsumasa YOSHIDA (Cosmic Radiation Lab.) [2]

Visiting Members and Postdoctoral Fellows

Mr. Hidehiko AGATA (The Upper and Lower
Secondary Schools Attached to the Fac. Ed. Univ.

Tokyo) [3]

Dr. Syuichi HIRONO (Dept. Phys. Chem. for Drug
Design Sch. of Pharm. Sci., Kitasato Univ.) [1]

Prof. Yukio ISOZAKI (Dept. Earth and Planetary
Sciences, Tokyo Inst. Technol.) [1]

Dr. Sigenori MARUYAMA (Dept. of Earth and
Planetary Sciences, Tokyo Inst. Technol.) [1]

Dr. Hitoshi MIURA [3]

Prof. Umpei NAGASHIMA (Ochanomizu Univ.) [2]

Dr. Osamu NISHIMURA (Nagano Technical College,
Tohoku Univ.) [2]

Dr. Yousuke OHNO [2]

Dr. Tetsuya SHIMIZU [2]

Dr. Jacek P. STANCZYK [2]

Dr. Feng XIAO [2]

Dr. Makoto YAMAUCHI (Dept. Electr. Electron. Eng.,
Fac. Eng., Miyazaki Univ.) [2]

Mr. Takehiko WADA (Dept. Earth Sci. and Astr., Coll.
Arts Sci., Univ. Tokyo) [2]

Numbers in [] denote the research subjects listed above.