

# 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、VPP500E128（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、薄田<sup>\*2</sup>、成見<sup>\*2</sup>、末永<sup>\*2</sup>、古沢<sup>\*1</sup>）

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解明したり、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、タンパク質や鉱物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、ケーロン力やファン・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バイオラインを持ったLSIおよびそれを搭載したボードを設計・試作した。全システムの汲み上げと調整を進める。また、タンパク質分子や、鉱物のシミュレーション用ソフトを開発する。

(2) 行列演算専用計算機の開発（戎崎、飯高<sup>\*1</sup>）

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. 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、VPP500E128（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）

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共同で行う。

(2) 三次元流体力学計算（清水<sup>\*2</sup>、Xiao<sup>\*2</sup>、ブリチコ<sup>\*2</sup>）

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<sup>\*2</sup>）

近年、高密度で1000×1000以上の画素を持つ大型の二次元要素が普及し、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ンナルデジタルデータ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。

### 3. 可視化、体感化

(1) リアルタイム可視化（戎崎、三浦<sup>\*2</sup>）

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 協力研究員、\*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

Xiao F. and Ebisuzaki T.: "An efficient numerical model for multi-phase fluid dynamics", Adv. Eng. Software **29**, 345-352 (1998). \*

Sumiyoshi K., Yamada S., Suzuki H., and Hillebrandt W.:

- "The fate of a neutron star just below the minimum mass: Does it explode?", *Astron. Astrophys.* **334**, 159–168 (1998). \*
- Hatano Y., Hatano N., Amano H., Ueno T., Sukhoruchkin A. K., and Kazakov S. V.: "Aerosol migration near Chernobyl: Long-term data and modeling", *Atmos. Environ.* **32**, 2587–2594 (1998). \*
- Xiao F., Yabe T., and Ebisuzaki T.: "An oscillation suppressing semi-Lagrangian solver for the advection equation", *Comput. Phys. Commun.* **116**, 121–135 (1999). \*
- Tanimura S., Yasuoka K., and Ebisuzaki T.: "Molecular dynamics simulations of the homogeneous nucleation of UF<sub>6</sub> and SF<sub>6</sub> molecules: Effects of the intramolecular vibrational relaxations on the nucleation rates", *J. Chem. Phys.* **109**, 4492–4497 (1998). \*
- Terada T., Ito Y., Shirouzu M., Tateno M., Hashimoto K., Kigawa T., Ebisuzaki T., Takio K., Shibata T., Yokoyama S., Smith B. O., Laue E. D., and Cooper J. A.: "Nuclear magnetic resonance and molecular dynamics studies on the interactions of the Ras-binding domain of Raf-1 with wild-type and mutant Ras proteins", *J. Mol. Biol.* **286**, 219–232 (1999). \*
- Shimizu H. M., Ebisuzaki T., Ikeda T., Kato H., Kawai K., Matsuoka M., Miyasaka H., Oku T., Otani C., Sato H., and Watanabe H.: "Superconducting tunnel junctions as general purpose detectors", *Jpn. J. Appl. Phys.* **37**, No. 37-2, pp. 61–65 (1998). \*
- Iitaka T., Nomura S., Hirayama H., Zhao X., Aoyagi Y., and Sugano T.: "Calculating the density of states and the linear response functions with time-dependent Schroedinger equations", *Microelectron. Eng.* **43/44**, 459–470 (1998). \*
- Narumi T., Susukita R., Ebisuzaki T., McNiven G., and Elmegreen B.: "Molecular dynamics machine: Special-purpose computer for molecular dynamics simulations", *Mol. Sim.* **21**, 401–415 (1999). \*
- Oyamatsu K., Tanihata I., Sugahara Y., Sumiyoshi K., and Toki H.: "Can the equation of state of asymmetric nuclear matter be studied using unstable nuclei?", *Nucl. Phys. A* **634**, 3–14 (1998). \*
- Shen H., Toki H., Oyamatsu K., and Sumiyoshi K.: "Relativistic equation of state of nuclear matter for supernova and neutron star", *Nucl. Phys. A* **637**, 435–450 (1998). \*
- Sumiyoshi K. and Ebisuzaki T.: "Performance of parallel solution of a block-tridiagonal linear system on Fujitsu VPP500", *Parallel Comput.* **24**, 287–304 (1998). \*
- 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", *Physica B* **241/243**, 172–174 (1998). \*
- Iitaka T. and Ebisuzaki T.: "Non-degenerate two photon absorption spectra of Si nanocrystallites", *Proc. NPMS'98: Microelectronic Engineering*, pp. 258–260 (1999). \*
- Nureki O., Vassylyev D. G., Tateno M., Shimada A., Nakama T., Fukai S., Konno M., Hendrickson T. L., Schimmel P., and Yokoyama S.: "Enzyme structure with two catalytic sites for double-sieve selection of substrate", *Science* **280**, 578–582 (1998). \*
- Hatano Y. and Hatano N.: "Dispersive transport of ions in column experiments: An explanation of long-tailed profiles", *Water Resour. Res.* **34**, 1027–1033 (1998). \*
- (総説)  
矢部孝, 肖鋒: "固体・液体・気体の統一解法とCIP法(1)", *数値流体力学* **7**, No. 2, pp. 70–81 (1999).
- (その他)  
Ebisuzaki T., Ohno Y., Sunouchi K., Susukita R., Otani C., Yoshida A., Kawai N., Shimizu H. M., Matsuoka M., Ueno M., Wada T., Yamauchi M., and Yoshizawa H.: "TOMBO: Transient observatory for microlensing and bursting objects", *All-sky X-ray Observations in the Next Decade: Proc. Int. Workshop for ASM and GRB Missions in the X-ray Band*, Wako, 1997-03, edited by M. Matsuoka and N. Kawai, RIKEN, pp. 362–362 (1997).
- 住吉光介, 戎崎俊一: "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", 物性研だより **37**, 37–38 (1997).
- Yamanishi N. and Matsumoto Y.: "Molecular dynamics simulation of a diatomic gas molecule scattering from a solid surface", *RIKEN Rev.*, No. 19, pp. 11–12 (1998).
- Xiao F.: "Implementation of a multiphase hydrodynamic code on VPP500 parallel computer", *RIKEN Rev.*, No. 19, pp. 95–110 (1998).
- Nomura S., Iitaka T., Zhao X., Sugano T., and Aoyagi Y.: "Optical absorption spectra of large silicon nanocrystals", *RIKEN Rev.*, No. 19, pp. 118–120 (1998).
- 肖鋒, 三浦均, 清水鉄也, 戸崎俊一: "液面に落下する物体の数値シミュレーション及び可視化", *日経サイエンス* **29**, No. 2, p. A17 (1998).

#### 口頭発表 Oral Presentations

(国際会議等)

- Xiao F. and Ebisuzaki T.: "Computing multi-phase fluid dynamics with high efficiency", 3rd Int. Conf. on Multiphase Flow (ICMF '98), Lyon, France, June (1998).
- Hatano Y.: "Resuspension and aerosol migration near Chernobyl", 4th Int. Conf. on Aeolian Research (ICAR-4), (School of Geography, Oxford Univ.), Oxford, UK, July (1998).
- Nomura S., Iitaka T., Zhao X., Sugano T., and Aoyagi Y.: "Quantum size effect in model nanocrystalline/amorphous silicon revealed by linear scaling calculations", 24th Int. Conf. on the Physics of Semiconductors, (IUPAP), Jerusalem, Israel, Aug. (1998).
- Okada Y., Tanimura S., and Takeuchi K.: "Formation and dissociation of UF<sub>6</sub> clusters in supersonic Laval nozzle flow", 6th Workshop on Separation Phenomena in Liq-

- uids and Gases, Nagoya, Oct. (1998).
- Yoshida A., Matsuoka M., Kawai N., Mihara T., Kotani T., Negoro H., Kubo H., Matsumoto H., Shirasaki Y., Rubin B. C., Sakurai I., Torii K., Yamauchi M., Tsunemi H., and Miyata E.: "GRB afterglow observations with the MAXI experiment on JEM/ISS", Gamma-Ray Bursts in the Afterglow Era, Roma, Italy, Nov. (1998).
- Itatka T.: "Order(N) calculation of linear- and nonlinear-response functions", Japan-Korea Joint Meet. on First-Principles Electronic Structure Calculations, (Joint Research Center for Atom Technology), Tsukuba, Nov. (1998).
- Itatka T.: "Non-degenerate two photon absorption spectra of nanocrystallites", 4th Int. Symp. on New Phenomena in Mesoscopic Structures (NPMS'98), (Japan Society for Promotion of Science), Kauai, USA, Dec. (1998).
- Yokoi K.: "Simulation for circular hydraulic jumps", Thematic Workshop: Nonlinear Science Festival, (Niels Bohr Institute, Univ. of Copenhagen), Copenhagen, Denmark, Dec. (1998).
- Kawai N., Matsuoka M., Yoshida A., Mihara T., Kotani T., Negoro H., Shirasaki Y., Sakurai I., Torii K., Tsunemi H., Miyata E., Yamauchi M., and Yoshida K.: "MAXI (Monitor of All-sky X-ray Image) for JEM on the Space Station", Small Missions for Energetic Astrophysics: Ultraviolet through Gamma-Ray, (Los Alamos National Lab.), Los Alamos, USA, Feb. (1999).
- Shimizu H. M., Ikeda T., Kato H., Kawai K., Miyasaka H., Oku T., Ootani W., Otani C., Sato H., Takizawa Y., and Watanabe H.: "Development of superconducting devices for radiation detection at RIKEN", CRL(Communications Research Laboratory) Int. Symp., Tokyo, Mar. (1999).
- (国内会議)
- 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", 日本物理学会第 52 回年会, 八王子, 9 月 (1997).
- 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, 奥隆之, 加藤博, 清水裕彦, 若林利男: "中性子レンズ管による冷中性子ビームの収束", 日本原子力学会 1997 年秋の大会, 沖縄, 10 月 (1997).
- 宮崎利行, 有賀洋一, 満田和久, 藤本龍一, 昆野康隆, 前神佳奈, 庄子習一, 工藤寛之, 清水裕彦, 三原建弘, 奥隆之, 佐藤広海: "マイクロマシニング技術を用いた X 線マイクロカロリメーターの開発", 日本天文学会 1998 年春季年会, 八王子, 3 月 (1998).
- 昆野康隆, 前神佳奈, 満田和久, 藤本龍一, 宮崎利行, 有賀洋一, 庄子習一, 工藤寛之, 清水裕彦, 三原建弘, 奥隆之, 佐藤広海: "超伝導トランジションエッジを用いた温度センサの開発", 日本天文学会 1998 年春季年会, 八王子, 3 月 (1998).
- 横井研介, 肖鋒: "Circular hydraulic jump 形成の動力学", CIPUS 第 4 回年会, 東京, 6 月 (1998).
- 横井研介, 肖鋒: "跳水のパターン形成の動力学", 京大基研研究会「統計物理の展望」, 京都, 7 月 (1998).
- 野村晋太郎, 飯高敏晃, 趙新為, 菅野卓雄, 青柳克信: "Linear scaling electronic state calculations of large silicon nanocrystallites", 第 17 回電子材料シンポジウム, 伊豆長岡, 7 月 (1998).
- 肖鋒, 戎崎俊一: "Computation of surface tension by using variational approach", 日本流体力学会年会 '98, 東京, 7 月 (1998).
- 黒川義元, 野村晋太郎, 飯高敏晃, 趙新為, 菅野卓雄, 青柳克信: "アモルファス中ナノ微結晶シリコンの量子サイズ効果", 第 9 回理論化学シンポジウム, 濑戸, 8 月 (1998).
- 谷村志乃夫, 泰岡顯治, 戎崎俊一: "UF<sub>6</sub> クラスター生成過程の MD シミュレーション: クラスターの幾何構造", 日本物理学会 1998 年秋の分科会, 沖縄, 9 月 (1998).
- 飯高敏晃, 戎崎俊一: "数値量子ダイナミクスのための, 高精度蛙飛び法の研究", 日本物理学会 1998 年秋の分科会, 沖縄, 9 月 (1998).
- 奥隆之, 加藤博, 清水裕彦, 大谷知行, 佐藤広海, 大友季哉, 猪野隆, 古坂道弘, 海老沢徹, 河合武: "中性子二次元検出器の開発", 日本物理学会 1998 年秋の分科会, 沖縄, 9 月 (1998).
- 佐藤広海, 池田時浩, 大谷知行, 奥隆之, 加藤博, 川井和彦, 清水裕彦, 松岡勝, 宮坂浩正, 渡辺博, 赤穂博司, 青柳昌宏, 仲川博, 高田進, 木野幸浩, 稲葉克彦, 石橋健二, 前畠京介, 田井野徹: "超伝導トンネル接合を用いた X 線検出器の開発 (I)", 日本物理学会 1998 年秋の分科会, 沖縄, 9 月 (1998).
- 大谷知行, 池田時浩, 加藤博, 川井和彦, 松岡勝, 宮坂浩正, 奥隆之, 佐藤広海, 清水裕彦, 渡辺博, 赤穂博司, 青柳昌宏, 仲川博, 高田進, 木野幸浩, 稲葉克彦, 石橋健二, 前畠京介, 田井野徹: "超伝導トンネル接合を用いた X 線検出器の開発 (II)", 日本物理学会 1998 年秋の分科会, 沖縄, 9 月 (1998).
- 池田時浩, 大谷知行, 加藤博, 川井和彦, 松岡勝, 宮坂浩正, 奥隆之, 佐藤広海, 清水裕彦, 渡辺博, 赤穂博司, 青柳昌宏, 仲川博, 高田進, 木野幸浩, 稲葉克彦, 石橋健二, 前畠京介, 田井野徹: "超伝導トンネル接合を用いた X 線検出器の開発 (III)", 日本物理学会 1998 年秋の分科会, 沖縄, 9 月 (1998).
- 横井研介, 肖鋒: "跳水のパターン形成の動力学", 日本物理学会 1998 年秋の分科会, 沖縄, 9 月 (1998).
- 飯高敏晃: "Optical properties of nanocrystallites calculated by computational quantum dynamics", 原子衝突理論セミナー, 東京, 10 月 (1998).
- 住吉光介, Shen H., 親松和浩, 土岐博: "Table of relativistic EOS and its astrophysical applications", 日本物理学会 1998 年秋の分科会, 秋田, 10 月 (1998).
- 住吉光介: "Relativistic mean field framework for unstable nuclei and dense matter", 6th Workshop for Physics of RI Beam Factory, 和光, 11 月 (1998).
- 肖鋒, 横井研介, 戎崎俊一: "A compact oscillation suppressing scheme and application to atmospheric flow", 第 12 回数値流体力学シンポジウム, 東京, 12 月 (1998).
- 谷村志乃夫, 泰岡顯治, 戎崎俊一: "UF<sub>6</sub> クラスター生成過程の MD シミュレーション: 過冷却状態におけるクラス

ターの幾何構造”, 第 12 回分子シミュレーション討論会, つくば, 12 月 (1998).

肖鋒, 矢部孝: “粘弹性体を含む流れの計算”, 第 48 回理論応用力学講演会, (日本機械学会), 東京, 1 月 (1999).

---

### *Research Subjects and Members of Computational Science Laboratory*

1. Development of Heterogeneous Computing System
2. Development of Large-Scale Parallel Algorithm
3. Real-Time Visualization of the Results of Simulations

#### *Head*

Dr. Toshikazu EBISUZAKI

#### *Members*

Dr. Kei SUNOUCHI  
Dr. Toshiaki IITAKA

#### *in collaboration with*

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

Dr. Masaru MATSUOKA (Cosmic Radiation Lab.)  
Dr. Chiko OTANI (Cosmic Radiation Lab.)  
Dr. Hirohiko SHIMIZU (Cosmic Radiation Lab.)  
Dr. Ryutaro SUSUKITA (Cosmic Radiation Lab.)  
Dr. Atsumasa YOSHIDA (Cosmic Radiation Lab.)

#### *Visiting Members and Postdoctoral Fellows*

Mr. Hidehiko AGATA (The Upper and Lower Secondary Schools Attached to the Fac. Ed. Univ. Tokyo)  
Dr. Syuichi HIRONO (Dept. Phys. Chem. Drug Design, Sch. Pharm. Sci., Kitasato Univ.)  
Dr. Sigenori MARUYAMA (Dept. Earth and Planetary Sciences, Tokyo Inst. Technol.)  
Dr. Syuichi HIRONO (Dept. Phys. Chem. Drug Design, Sch. Pharm. Sci., Kitasato Univ.)  
Dr. Hitoshi MIURA  
Dr. Osamu NISHIMURA (Nagano Technical Coll., Tohoku Univ.)  
Dr. Yousuke OHNO  
Dr. Tetsuya SHIMIZU  
Dr. Feng XIAO  
Dr. Makoto YAMAUCHI (Dept. Electr. Electron. Eng., Fac. Eng., Miyazaki Univ.)