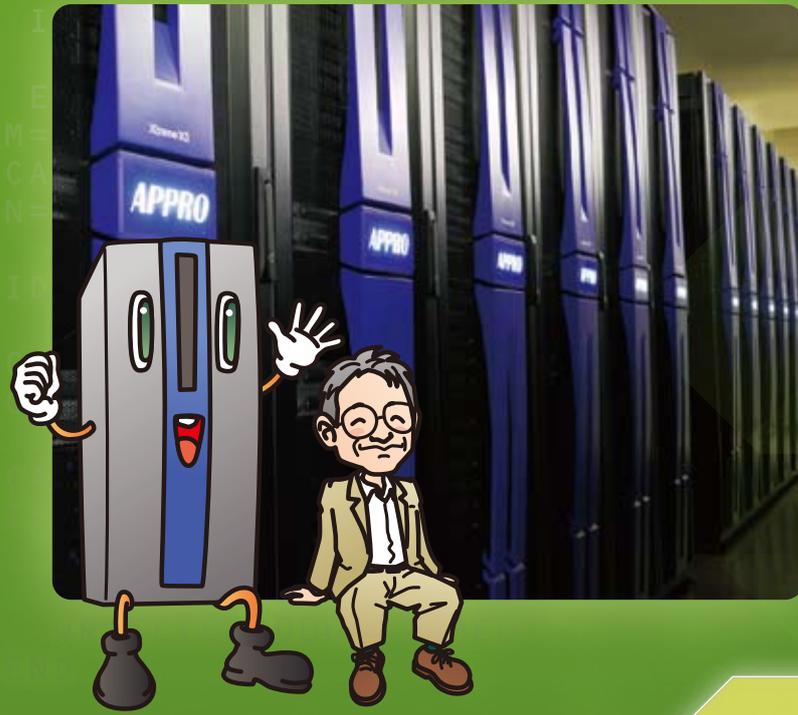




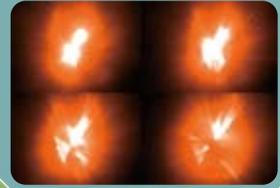
```
COMMON /COARY4/ IZ
COMMON /IPROC/ ME/NPROC/NPU
INTEGER*8 ICMP,L,N
```

```
CALL MPI_INIT(ierr)
CALL MPI_COMM_WORLD_CREATE(comm_world,me,ierr)
CALL MPI_COMM_SIZE(comm_world,npu,ierr)
```

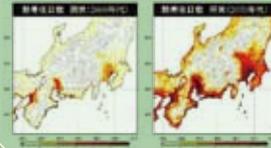
計算科学と スーパーコンピュータ



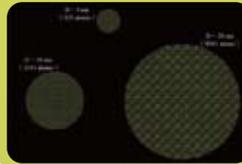
宇宙



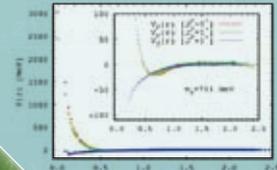
地球環境



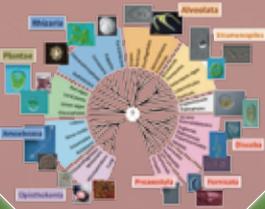
量子物性



素粒子



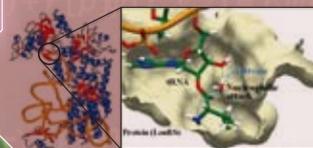
進化



原子核



生命



Mathematical equations related to quantum mechanics and wave functions:

$$\frac{\partial^2 \psi(x, y, z)}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \psi(x, y, z)}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 \psi(x, y, z)}{\partial z^2} + \psi(x, y, z) = \epsilon \psi(x, y, z)$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi(x, y, z) + V(x, y, z) \psi(x, y, z) = E \psi(x, y, z)$$

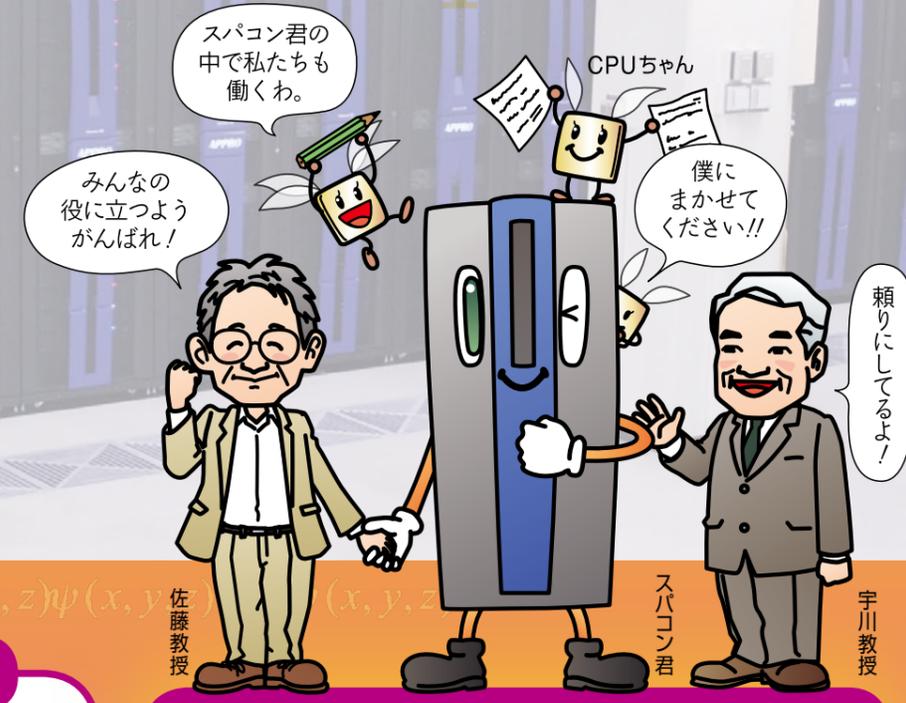
$$-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi(\mathbf{r}) + V(\mathbf{r}) \psi(\mathbf{r}) = E \psi(\mathbf{r})$$

$$\hat{H}[\rho] \psi = \epsilon \psi$$

計算科学とは？

素粒子物理研究部門 宇川 彰 教授

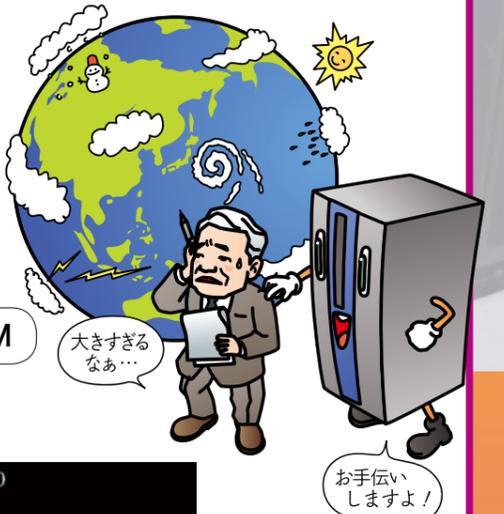
科学とは、自然のなかに潜む法則を見つけ出し、その法則をもとにさまざまな現象を理解し、予測する営みです。これまでの科学は、理論と実験・観測を柱として進歩してきました。しかし、科学が進歩するにつれ、現象の理解や予測のために膨大な計算が必要となる場合が増えてきました。一方、計算を高速で行えるスーパーコンピュータ(スパコン)が開発され、高性能化が進んでいます。そのため、理論と実験に加え、「計算」が科学の大きな柱に育ってきました。スパコンによる計算を中心として、科学の研究を行うのが「計算科学」です。素粒子から生物進化まで、科学のあらゆる分野が対象となりますが、計算をどのように利用するかによって、大きく3つのタイプに分けられます。



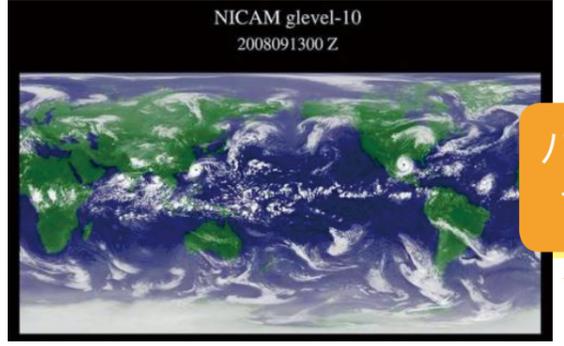
自然現象をモデル化し、予測する

気象の変化のように複雑な現象は、基本方程式にまで立ち返って理解することが困難です。そこで、現象を表す「モデル」を立て、そのモデルを用いて実際の観測データをもとに予測を行います。その予測が当たるかどうかで、モデルを検証し、改善していくのです。こうして精度の高いモデルが得られれば、気象予報などに用いることができます。

気象予測のためには、地球上の大気を細かいブロックに分け、その中の温度や風速などを一定時間ごとに計算します。このように、複雑な現象のモデル化には膨大な計算が必要となるため、スパコンを使います。



例：全球雲解像モデルNICAM



ハリケーンや台風の解明

理論に基づいて自然現象を理解し、予測する



人類がこれまでに見だしてきた物理法則は、理論の基本方程式の形で表されています。それらの基本方程式に基づいて計算すれば、さまざまな現象を理解し、予測できるはずですが、予測と実験・観測の結果が一致するかどうかから、理論の正しさも検証できるでしょう。しかし、宇宙の進化、素粒子の性質、半導体の特性、酵素の反応機構といった現象を計算するには、ばく大な数のプレーヤー(たとえば、原子や電子)が基本方程式に従って、時々刻々と動くのを追いかけていかなければなりません。そこで、スパコンを使って計算を行います。

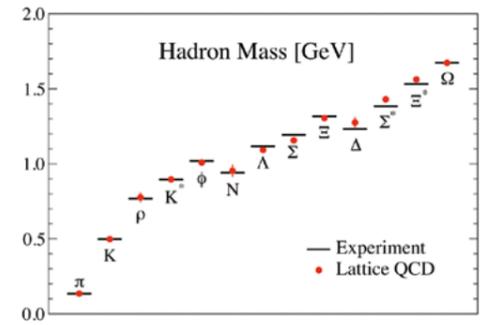
大規模計算 (スーパーコンピュータ)

例：場の量子論 (量子色力学の方程式)

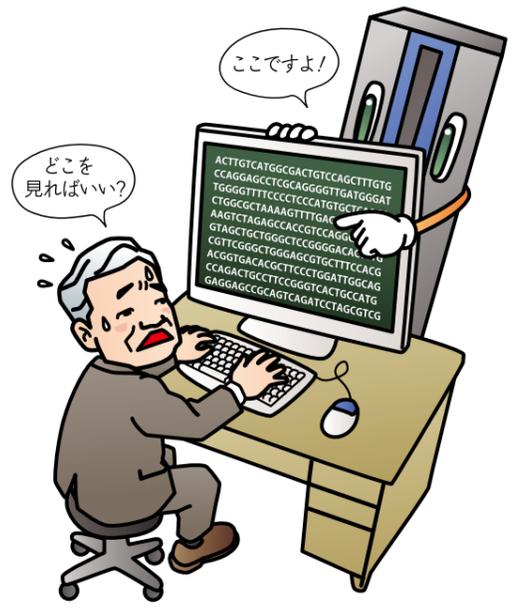
$$L_{QCD}(x) = \bar{\psi}(x) \left[\gamma_\mu \left(\frac{\partial}{\partial x_\mu} - iA_\mu(x) \right) + m_0 \right] \psi(x) - \frac{1}{2g^2} \text{Tr}(F_{\mu\nu}(x) F_{\nu\mu}(x))$$

$$Z_{QCD} = \int \prod_x dA_\mu(x) \prod_x d\psi(x) d\bar{\psi}(x) \exp(-\int d^4x L_{QCD}(x))$$

ハドロンの質量



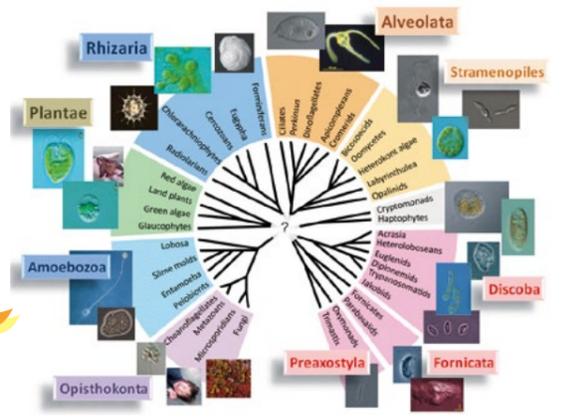
大規模なデータから規則性を見つけ出す



生物学の分野では、実験技術の進歩に伴い、大量のデータが蓄積されるようになりました。その代表は、生物の遺伝情報であるDNAの塩基配列です。塩基配列から生物の進化の道筋を知ることができますが、そのためには、多くの生物について何億個もの塩基の配列を比べる必要があります。こうした比較では、「場合の数」が非常に多くなるので、スパコンが威力を発揮します。

例：さまざまな生物のDNA塩基配列

生物進化の系統樹



宇川 彰 教授

昔の物理学者は、理論に基づく計算を筆算や手回し計算機でやっていた。現在は、スパコンをつくって動かすことを研究する研究者と、スパコンを使って研究する研究者が、協力して計算をする時代になっています。



佐藤 三久 教授

私たちのセンターには、スパコンの研究者と、計算科学のあらゆる分野の研究者がいます。そのため、スパコンを最大限に活用して研究を進めることができます。

研究者から一言！

スーパーコンピュータとは？

高性能計算システム研究部門 高橋大介 教授

スパコンとは、「普通のコンピュータよりはるかに高速なコンピュータ」のことです。あいまいな言い方ですが、コンピュータの性能は日進月歩なので、はっきりした数字で示すことができないのです。

スパコンも、パソコンも、計算の原理は同じで、CPU(中央処理装置)、メモリ(主記憶装置)、ストレージ(外部記憶装置)からできています。CPUは「脳」にあたり、実際に計算をする部分です、メモリは、筆算の時に数字をメモする「紙」にあたるもので、入力されたデータや計算途中の値、計算結果を記憶します。メモリの記憶は、コンピュータの電源を切ると失われてしまうので、計算結果はハードディスクなどのストレージに移して保存します。

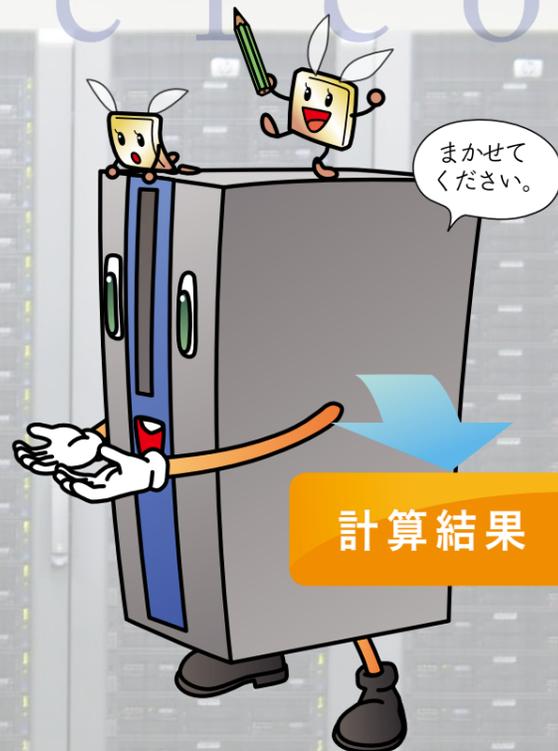
スパコンとパソコンの大きな違いは、スパコンにはCPUがたくさん入っていて、1つの計算を分担して行うことです。これを「並列処理」といいます。並列処理のおかげで、パソコンでは何年もかかるような計算を、スパコンでは1日で終わらせるといった「高速化」ができるのです。

よろしく
たのんだよ！

プログラムと
データ



高橋教授



計算結果

円周率の計算

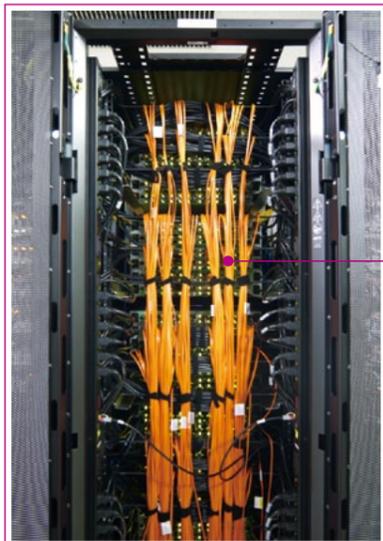
2009年4月にT2K-Tsukubaで、円周率を2兆5769億8037万桁まで計算しました。最近、パソコンや手作りコンピュータでもっと多い桁数の計算が達成されましたが、スパコンでの計算は、桁数の競争が目的ではありません。スパコンがトラブルなく働き、正しい計算結果を出してくれるかを確認するため、その目的は十分に果たせました。

また、円周率の計算には、「高速フーリエ変換」という科学計算に欠かせない重要な計算法が含まれています。円周率計算のプログラムを書く際に、それを高速で行えるアルゴリズムを開発したことも、大きな成果です。このアルゴリズムはほかのスパコンでも使われています。

I=13			
SQR	10	698	322122547200
SQR	11	1396	322122547200
SQR	12	2793	322122547200
SQR	13	5587	322122547200
SQR	14	11174	322122547200
SQR	15	22349	322122547200
SQR	16	44699	322122547200
SQR	17	89398	322122547200
SQR	18	178796	322122547200
SQR	19	357593	322122547200
SQR	20	715187	322122547200
SQR	21	1430376	322122547200
SQR	22	2860752	322122547200
SQR	23	5721504	322122547200
SQR	24	11443008	322122547200
SQR	25	19668000	322122547200
SQR	26	39321599	322122547200
SQR	27	78643198	322122547200
SQR	28	157286396	322122547200
SQR	29	176947200	322122547200
SQR	30	353894398	322122547200
SQR	31	707788796	322122547200
SQR	32	1415577592	322122547200
SQR	33	2831155185	322122547200
SQR	34	5662310371	322122547200
SQR	35	11324620743	322122547200
SQR	36	22649241487	322122547200
SQR	37	40265318400	322122547200
SQR	38	80530636799	322122547200
I=13 L=	1396	TIME=	31747.868092

中はどうなっている？

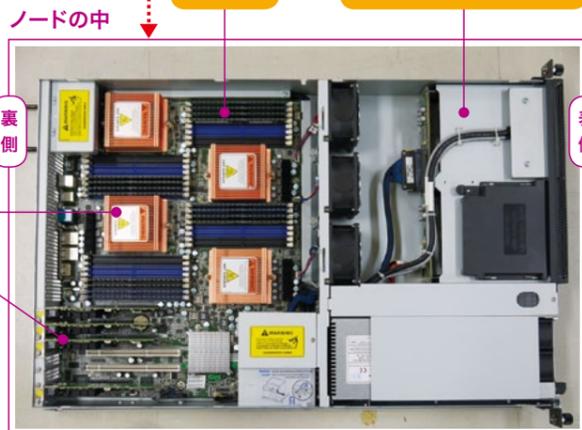
スパコンはたくさんの「計算ノード」からなっています(T2K-Tsukubaでは648台)。1つ1つのノードはパソコンに似ており、CPU(T2Kでは16個)、メモリ(同じく16個)、ハードディスクが入っています。ノードの間は高速のネットワークで相互につながれており、並列処理を行います。計算結果は、ノード内のハードディスクと、別のラックに収められたストレージに保存されます。



ラックの裏側
ノードどうしはネットワークでつながっている



ラックの表側
1つのラックの中にはノードがたくさん入っている



インフィニバンド

放熱板
(この下にCPUがある)

ネットワーク通信ボード

ノードの中

メモリ

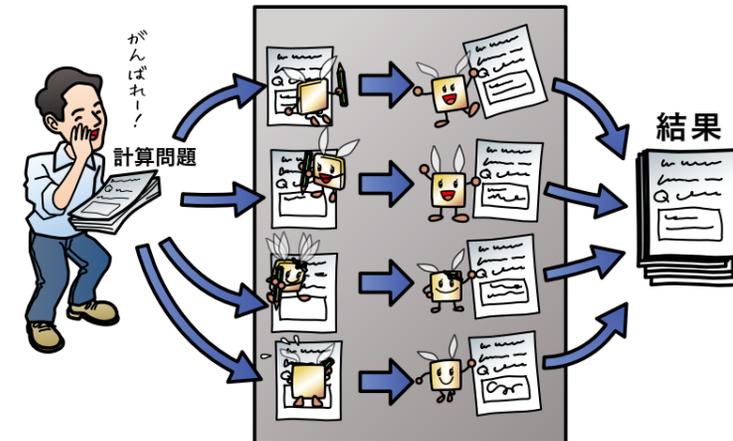
ハードディスクが入るところ

裏側

表側

なぜ速い？

1つの計算をたくさんのCPUに分けて行わせるからです(並列処理)。「紙」にあたるメモリもたくさんあって、大量の読み書きができるようになっています。しかし、CPUのなかに遊んでいるものがあると、全体の計算速度が遅くなってしまいます。そこで、ソフトウェアにより、たくさんのCPUに上手に仕事を割り振り、どれも休みなく働かせるようにしています。また、CPUに命令を伝えたり、1つ1つのCPUの計算結果を集めたりするのに時間がかかると、やはり計算は遅くなります。そのため、インターネットよりずっと速いネットワークでCPUの間をつないでいます。



構成は
同じ

パソコン



キーボード

ハードディスク

ディスプレイ
プリンタ

研究者から一言！



高橋大介 教授

スパコンは、車でいえばF1レーシングカーのようなものです。その性能を最大限に引き出すためにはどうしたらよいかを、いつも考えています。

都市の気候の研究

地球環境研究部門 日下博幸 准教授

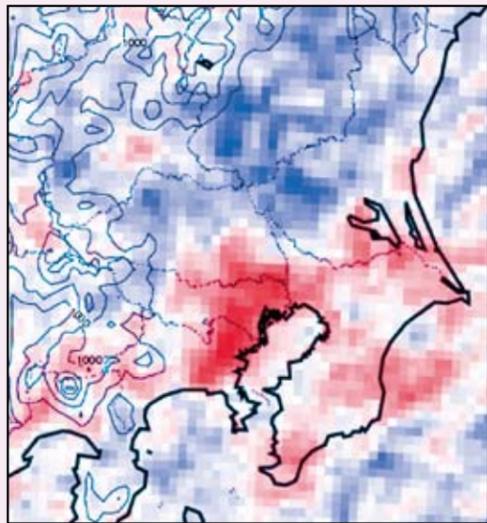


つくば市ヒートアイランド観測

つくば市の街路に気温観測装置を設置しているところ。ヒートアイランド現象のように狭い範囲の気候の実態を知るには、アメダスよりも細かく観測地点を設ける必要がある。観測データは、気象モデルを構築する際、それが正しいかどうかを確認するのにも使われる。



都市の存在によって増加した8月の総降水量(割合)



8月の降水量に対する都市の影響をシミュレーションした結果。都市があるときのほうが降水量の多い地点は赤、少ない地点は青で示されている。赤の地点が都市に集まっているのがわかる。

研究者から一言！



日下博幸 准教授

スパコンは飛行機のようなものです。研究のゴールは果てしない道の先であり、途中に海や川もあります。しかし、スパコンという飛行機を操縦すれば、あっという間にゴールに到達できるのです。

ヒートアイランドやゲリラ豪雨といった都市の気候、多治見や熊谷の猛暑を中心に研究しています。温暖化による気候変化の予測も行っています。

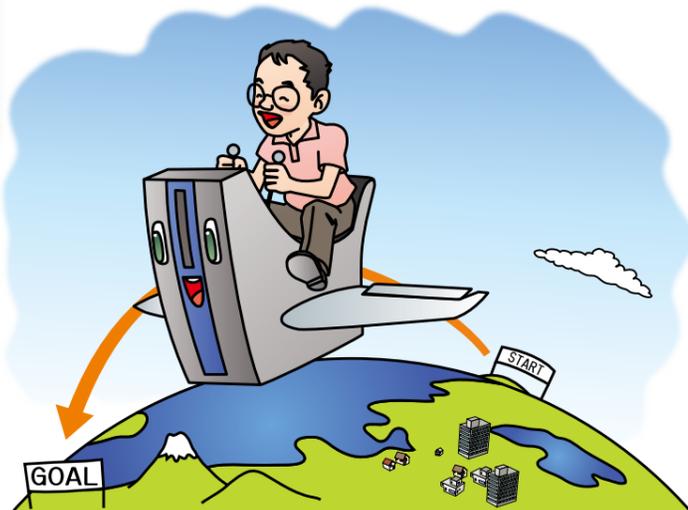
気候の研究では、まず、実態を知ることが大切です。そのために、気象庁のデータを用いるほか、自分たちで観測もします。次に、その実態が生まれる要因を、気象モデルに基づいて解明します。要因がわかれば、将来の変化を予測し、とるべき対策を示すことができます。

たとえば、最近、都市部でゲリラ豪雨が増えています。マスメディアなどでは都市化が原因だと報道されています。しかし、それがほんとうかどうか、まだわかっていません。私は、過去8年分の8月の気象データを用いて要因解明を行い、その可能性が高いことを明らかにしました。都市があるときとないときの降水量を比較したところ、都市があるときのほうが降水量の多い地点が都市部にきれいに重なったのです。つまり、都市があると都市の雨が增える可能性があることが確かめられたわけです。

実際に都市をなくして実験をすることはできませんが、スパコンによるシミュレーションなら可能です。都市の特徴は、エアコンや車からの排熱が多いこと、ビルが多いこと、草木や土が少ないことなどです。モデルにこの特徴を取り入れれば都市がある状態、取り入れなければ都市がない状態を表すことができます。具体的には、地図を小さなマス目に区切り、高さ方向にも区切って、その中の気温、気圧、風などをこのモデルで計算しています。時々刻々と変化していくのを追いかけるので、計算量も、計算結果のデータも膨大なものになります。

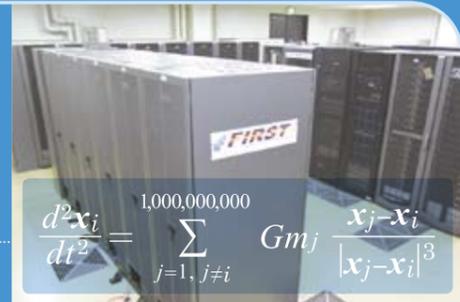
次は、予測と対策の段階に進もうと考えています。屋上緑化、打ち水、舗装材の変更など、対策はいろいろ考えられますが、そのうちのどれが一番効果的かを、シミュレーションで予測するのです。

※最終的には10年分を解析する予定



銀河の進化の研究

宇宙・原子核物理研究部門 森正夫 准教授



$$\frac{d^2x_i}{dt^2} = \sum_{j=1, j \neq i}^{1,000,000,000} Gm_j \frac{x_j - x_i}{|x_j - x_i|^3}$$

宇宙の歴史は137億年。「すばる望遠鏡」や「ハッブル宇宙望遠鏡」など大型の望遠鏡による観測が進み、100億年以上前に、今まで見たことのないようなさまざまな種類の天体が存在していたことがわかってきました。しかし、これらの天体と、今の私たちの近くにある銀河などの天体との関係はよくわかっていません。そこで私は、天体の進化を物理法則に基づいてスパコンの中で再現し、進化のしくみと道筋を明らかにする研究をしています。

たとえば、銀河の進化の道筋の1つとして、100億年以上前の天体である「ライマンアルファエミッター」が「楕円銀河」に進化することを明らかにしました。この計算では、ごく小さな銀河が衝突・合体を繰り返しながら大きな銀河へ進化していくようすを追いかけてきました。その際、暗黒物質とガスから最初の星ができる過程や、できた星が進化して超新星爆発を起こし、重い元素が宇宙にまき散らされて新たな星の材料となる過程を取り入れました。

その結果、スパコンの中につくった仮想宇宙で3億年ほど経ったところで、実際に観測されているライマンアルファエミッターと、

大きさ・空間分布・エネルギーなどがよく一致する天体が現れました。さらに計算を続けると、10億年目には、楕円銀河の特徴をもったものができてきました。つまり、ライマンアルファエミッターが楕円銀河に進化するという道筋が明らかになったのです。

最初は、1辺が40万光年の空間を約10億個の要素に分けて計算しましたが、その後、分け方をもっと細かくして計算の精度を向上させてきました。空間を細かく分けるほど計算量が増大するので、より効率的な計算方法を開発するとともに、より高性能なスパコンを使っています。

さらに、星やガスから出た放射は、ガスにエネルギーを与えたり、逆に奪い取ったりしながら伝わり、周囲のガスの状態を大きく変化させることがあります。この過程は星の向きに大きく影響するのですが、計算量が膨大になるので、まだ正確な取り扱いはできていません。そこで、正確さを損なわずになるべく計算量を減らせる方法を研究する一方、スパコン自体の研究者とともに、より高性能なスパコンの設計を検討しています。

研究者から一言！



森正夫 准教授

スパコンは、いろいろな目で宇宙を見ることができる「理論の望遠鏡」です。実際の望遠鏡で観測している研究者と私たちが、互いの結果をやりとりすることで、宇宙の進化がよりよくわかってきます。



スパコンの中で進化する銀河

シミュレーションの結果、3億年目のガスの分布を見ると、超新星爆発の爆風で水素原子ガスが泡状に急激に広がっている。この泡状の天体がライマンアルファエミッターにあたる天体。その下の酸素(重元素の1つ)の分布からは、超新星爆発でできた重元素が泡の中に閉じ込められているのがわかる。しかし、時間が経つにつれて重元素はどんどん広がっていく。10億年目の星の密度分布では、原始銀河のようなものができているのがわかる。

