



第2回 「学際計算科学による新たな知の発見・統合・創出」 シンポジウム
—PACS-CSによる計算科学の発展と次世代コンピューティングへの展開—

HA-PACSにおける次世代計算科学

梅村 雅之
(計算科学研究センター)



HA-PACSプロジェクトの推進体制

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
 - ・ アルゴリズム
 - ・ GPU使用のノウハウ
 - ・ サイエンス

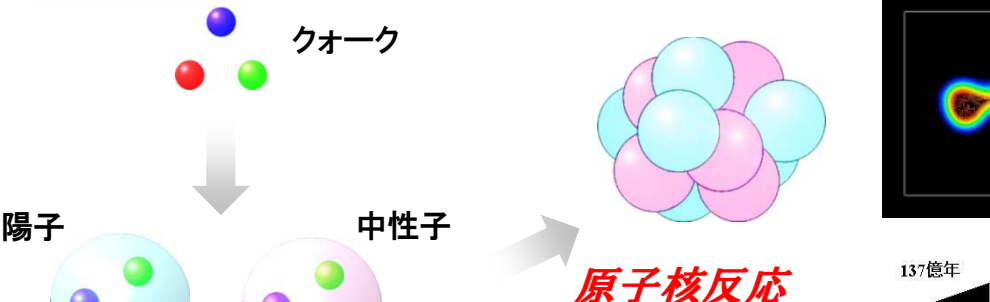


HA-PACSにおける次世代計算科学

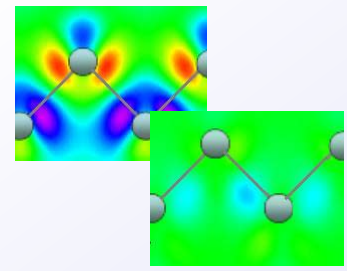
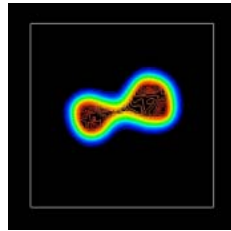
素粒子

原子核

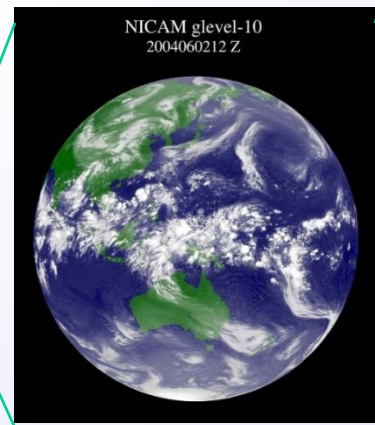
物質



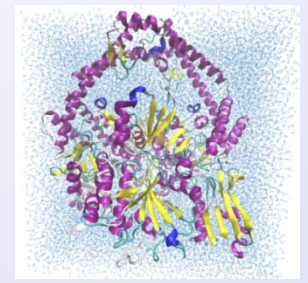
量子多体



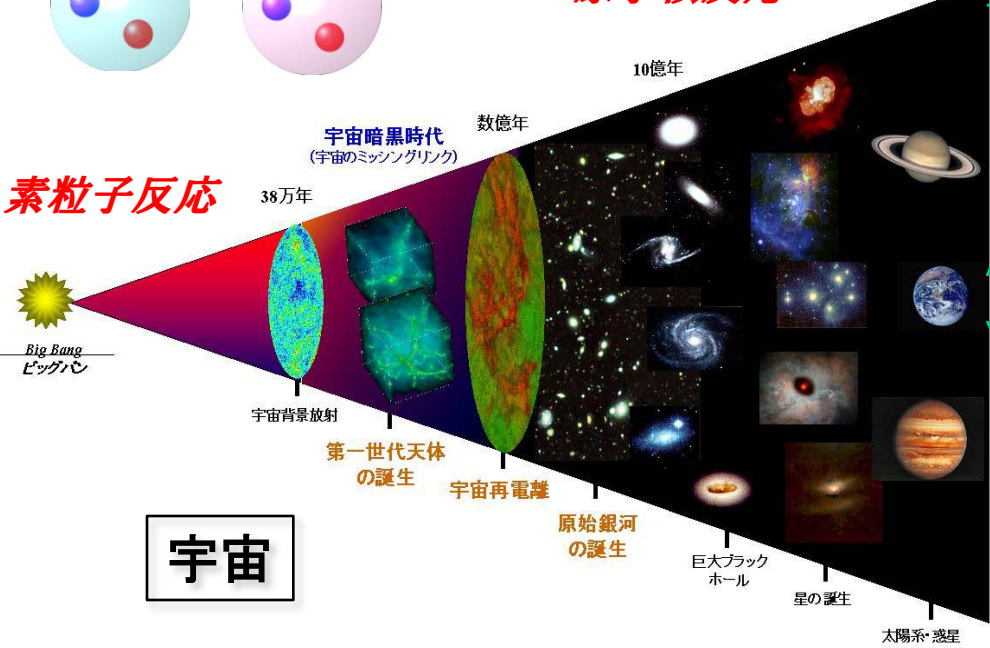
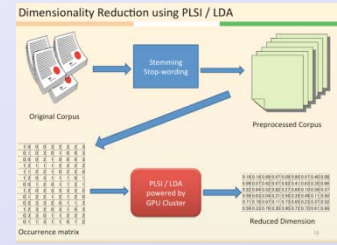
地球環境



生命



データ基盤



宇宙

流体・光 (輻射) ・化学反応

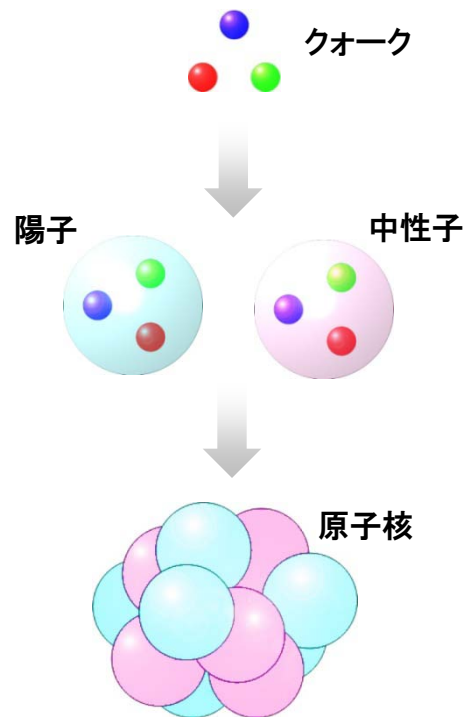


素粒子分野

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

GPU加速: 大規模疎行列線形方程式求解

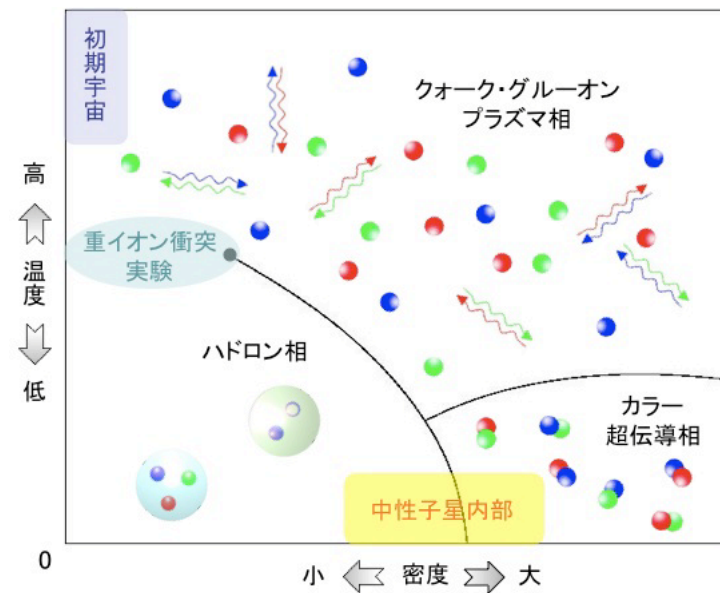


有限温度・有限密度の物理

幅広い有限温度・有限密度領域における相構造解析

GPU加速: 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

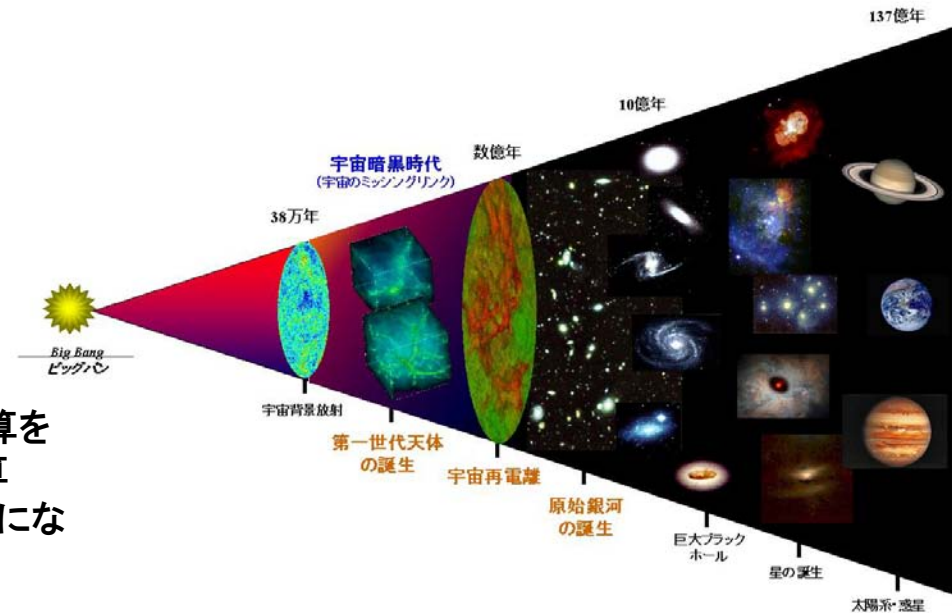
(A) 6次元計算宇宙物理の実現

目的 初代天体形成過程の解明
宇宙再電離過程の解明

6次元輻射流体シミュレーション

原子を3次元流体, 光(輻射)を6次元輻射輸送を解く

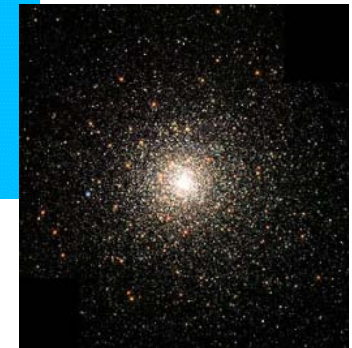
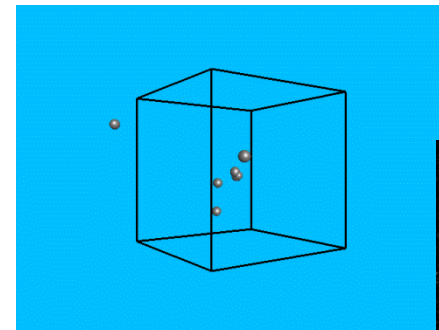
- Ray tracing による光の強度計算と化学反応計算をGPUで高速化。Strong scaling 且つGPU向きの計算
- 流体計算とカップルさせた輻射流体計算が可能になる。



(B) 衝突系重力多体シミュレーション

目的 巨大ブラックホールの合体・成長過程の解明
100億年におよぶ球状星団の進化過程の解明

- Tree法などによるアルゴリズム的な高速化では精度が足りず、直接計算が必要
- 重力加速度と加速度微分(jerk)の計算をGPUで加速し、高い精度の軌道計算を実現





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

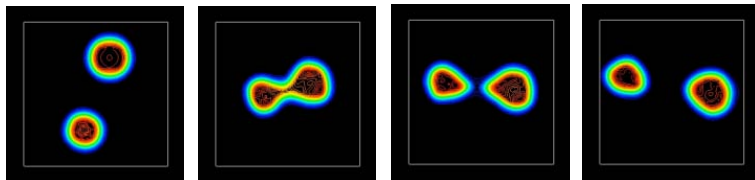
- ・元素合成の解明に関連する原子核の生成・応答・反応
 - r 過程核を生成する核子移行反応
 - 軽い核の融合反応
 - 原子核応答の系統的計算

原子核分野で発展した手法の関連分野への応用

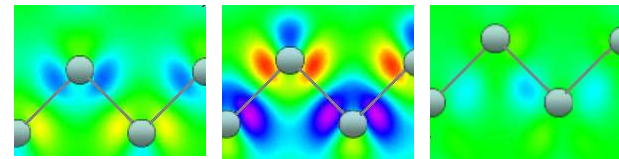
- ・光と物質の相互作用の第一原理計算
 - 高強度パルス光の物質伝播
 - アト秒科学への展開

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

GPU計算の利点： ハミルトニアンの変位関数への作用がホットスポットであり、GPUによる高効率な計算が期待できる。



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、**GPUが有効**
 (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:

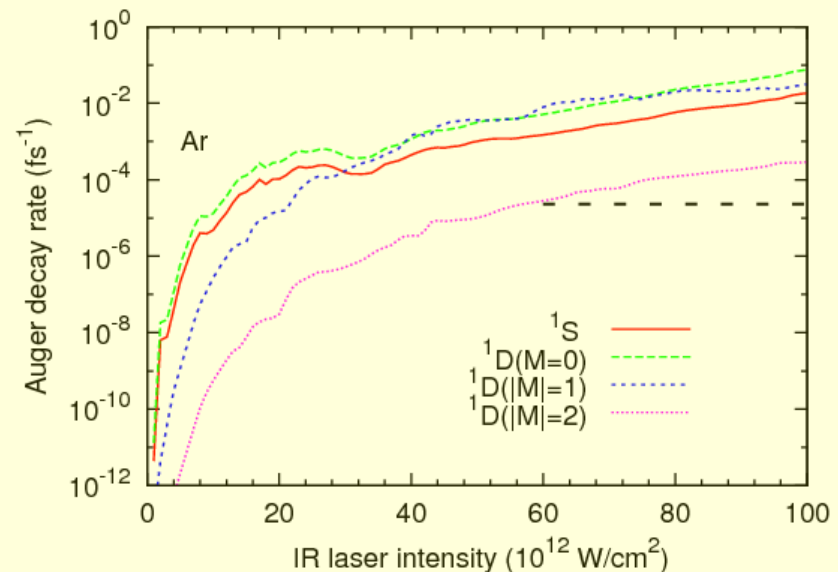
オージェ崩壊できない原子にレーザーを加えることによって、オージェ崩壊させる。レーザー強度と到着時刻によって、何時、どの程度崩壊させるかを制御できる。

(図に示した崩壊率の計算がGPU(Tesla C2050)で半日ぐらいかかるが、分子・クラスターの場合は計算量が百倍以上になってしまう。)

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」

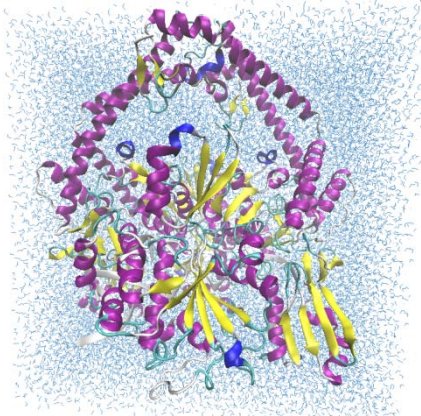
[Phys. Rev. Lett. 106 (2011) 053002.]



生命分野

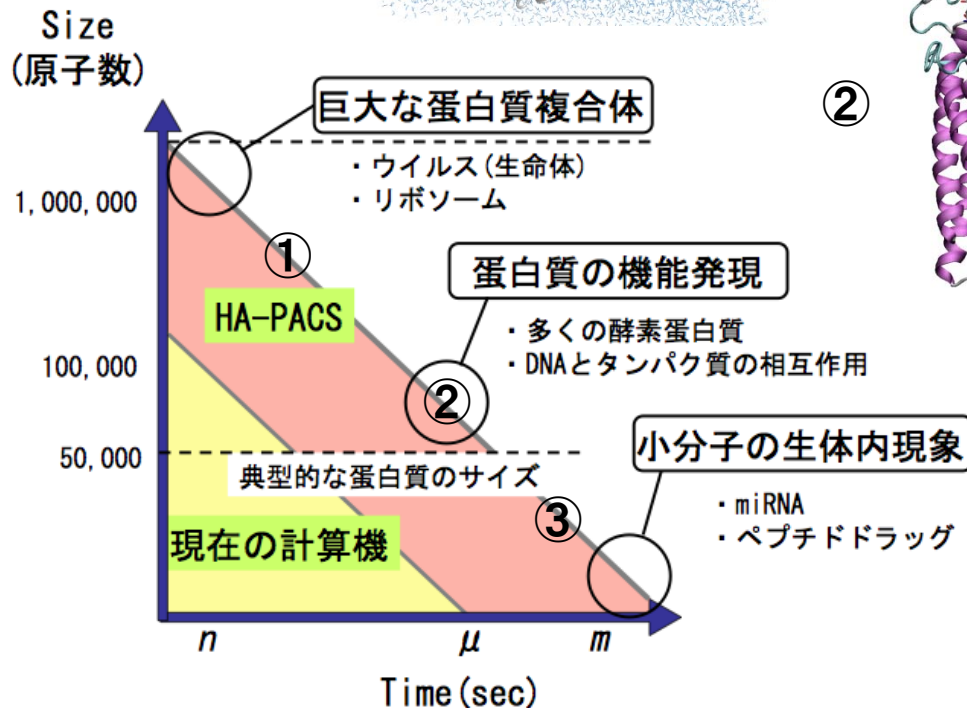
生命計算科学フロンティアの新展開

①

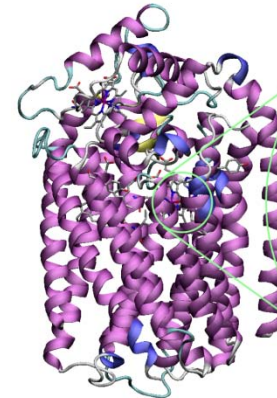


DNA切断タンパク質の
反応機構
(大規模MD計算)

GPUによる
高速化



②



QM領域
~100原子

酵素反応機構の解明
(RSDF-T-GPMD, PW-GPMD, 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

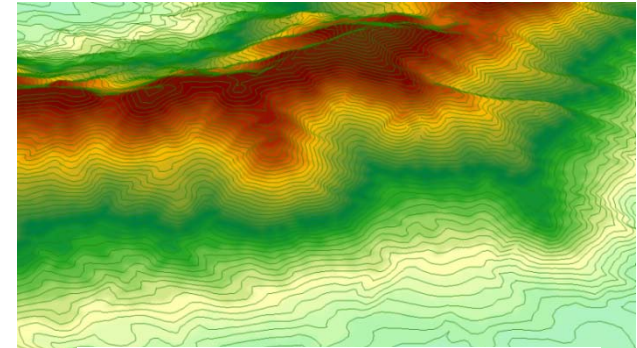
- ✓次世代型大気大循環モデルNICAMのGPU化
- ✓Large Eddy Simulation(LES)のGPU化
- ✓3次元ノーマルモード展開のGPU化

期待される成果

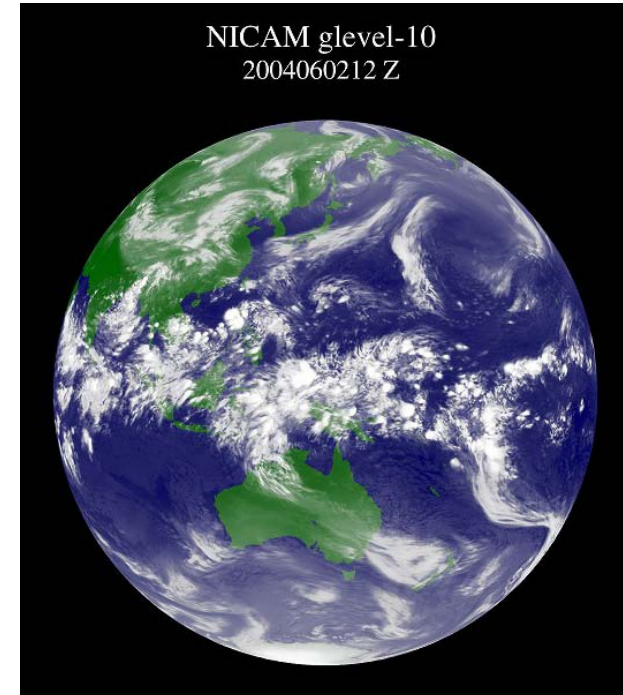
- LESモデルのGPU化**によって、空間分解能10mでの計算が可能となる。
- NICAMは**物理過程の計算にGPUを用いることで**、計算時間の大幅な短縮が期待される。
- 高解像度での大気大循環のエネルギー循環の計算が可能に。

GPU使用の有効性

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GPUを使用することで、数倍から数十倍の高速化が期待される。



空間分解能50mの地形

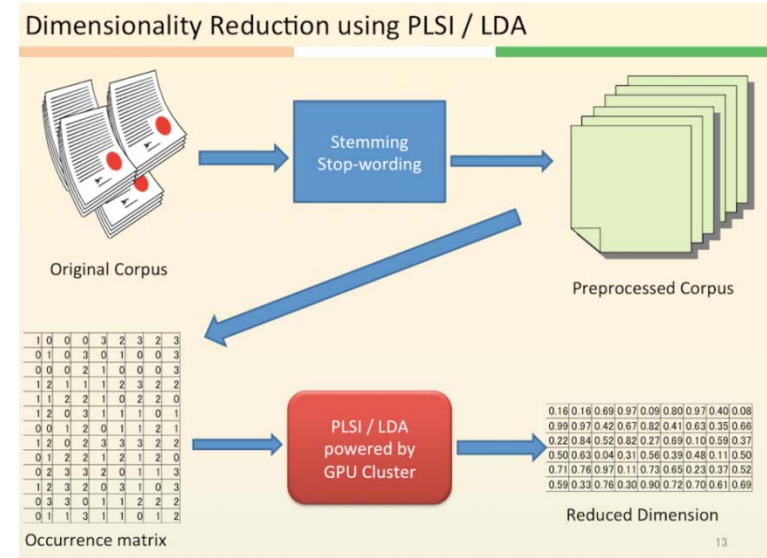




データ基盤分野

GPGPUによる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GPUを用いて高速化.
 - 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
 - 単体GPUの手法は一部確立済み.
 - GPUクラス手向けにマルチGPU化を行う.
- GPU使用の有効性
 - データやマイニングアルゴリズムによって適, 不適があり.
 - CPUとGPUを適切に組み合わせることによって高い実行性能が期待される.
- 計算規模
 - 検討中.
 - 少なくとも, 単体GPUで実行が困難な規模のデータを想定.
- 期待される成果とブレイクスルー
 - 数値計算, シミュレーション以外のGPUクラスタの応用を目指す.
 - 計算機科学分野では, データマイニングのマルチGPU化の事例は少ない.
 - GPUクラスタの, 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.





まとめ

先端計算科学推進室を中心に

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、HA-PACSを用いた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GPU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。