



計算科学研究センターの研究計画

- PACS-CSプロジェクトとFIRSTプロジェクト -

筑波大学計算科学研究センター
宇川 彰

- 筑波大学における並列計算機開発と計算科学
 - *CP-PACS* と 素粒子物理をはじめとする計算物理学
 - *HMCS*と輻射宇宙流体力学
- 計算物理学研究センターから計算科学研究センターへ
- PACS-CSプロジェクト
- FIRSTプロジェクト
- まとめ



筑波大学における並列計算機開発の歴史

世界最高速を達成したCP-PACS

第1号機PACS-9



1978

第2号機PAXS-32



1980

第5号機QCDPAX

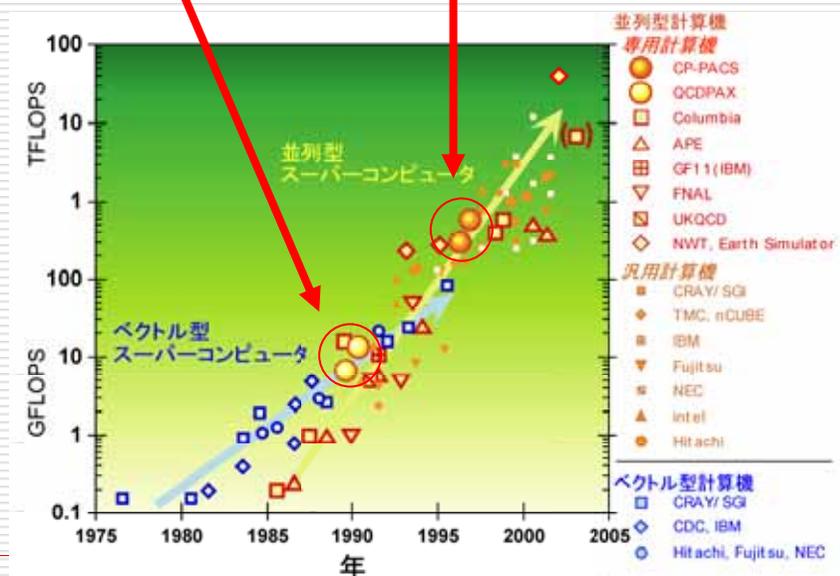


1989



1996

完成年	名称	計算速度
1978年	PACS-9	7Kflops
1980年	PAXS-32	0.5Mflops
1983年	PAX-128	4Mflops
1984年	PAX-32J	3Mflops
1989年	QCDPAX	14Gflops
1996年	CP-PACS	614Gflops





超並列計算機CP-PACS

Computational Physics by Parallel Array Computer System

□ 文部省新プログラム「専用計算機による場の物理の研究」(平成4～8年度)により開発

- ピーク演算性能 0.61TFLOPS
1996年(平成8年)11月スーパーコンピュータトップ500リスト第一位
- 予算総額 22億円(科研費創成的基礎研究費)
- 開発期間 4年6ヶ月(平成4年度～8年度)



□ 計算機工学における様々なアイデアの実現

- 擬似ベクトル処理機構(高速演算)
- ハイパクロスバ結合網とリモートDMA機構(高速通信)

□ 計算物理学において最先端の成果

- ケンチ近似ハドロン質量スペクトルの決定(素粒子物理)
- u, d, s クォーク質量の理論的決定(素粒子物理)
- 宇宙の最電離機構及び銀河形成機構の解明(宇宙物理)
- 超高压化の固体水素の相構造の解明(物性物理)

□ 産学連携

- 共同開発メーカー(日立製作所)により汎用計算機として製品化 (SR2201, SR8000)
- 国内(東大、KEK等)国外(ドイツ、イギリス等)の研究機関に導入



CP-PACSプロジェクトチーム

1996.3.9 1024PU設置時

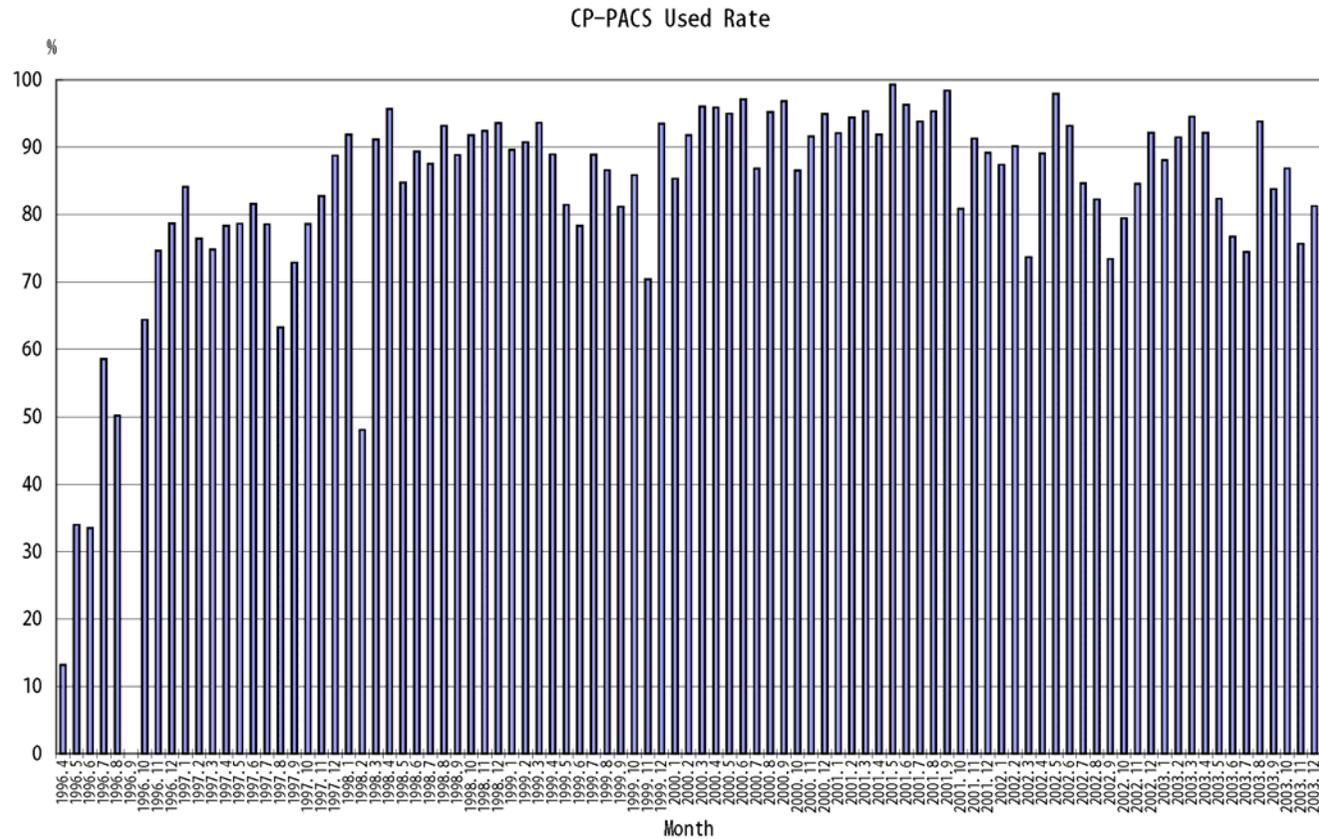


坂井 朴 中村 渡瀬 小柳 金谷 大川 山下
宇川 星野 岩崎 中澤 中田 吉江 青木



CP-PACS稼働統計(II)

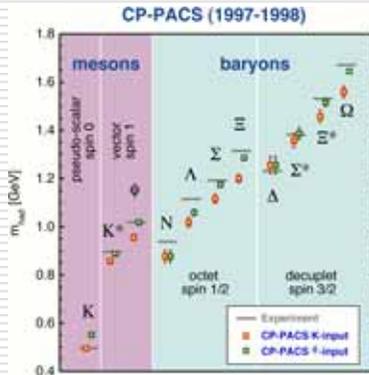
月別稼働率 = (ジョブ実行時間)/(各月物理時間)



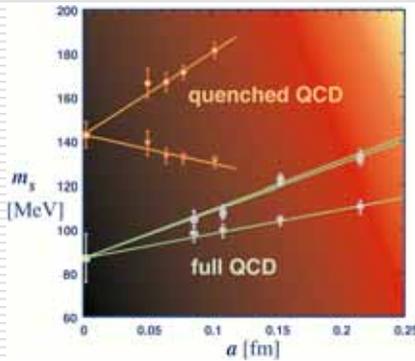


CP-PACSによる計算物理学の成果

素粒子物理学



CP-PACSによるクエンチ近似でのハドロン質量スペクトル



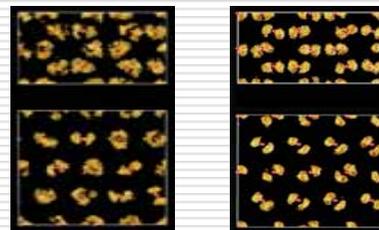
CP-PACSによるsクォーク質量の計算

並列計算機工学



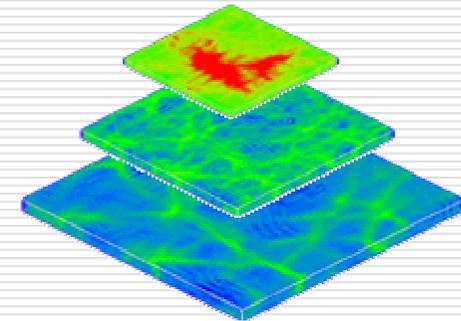
超並列計算機CP-PACS

物性物理学

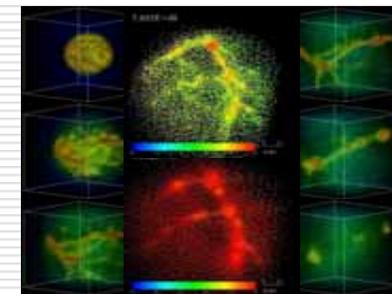


phase I phase II
CP-PACSによる高圧下の固体水素の相構造

宇宙物理学



CP-PACSによる宇宙再電離過程の3次元輻射輸送計算



HMCS (CP-PACS+GRAPE)による銀河形成の3次元輻射流体シミュレーション



HMCSと輻射宇宙流体力学

□ 学振未来開拓事業「計算科学」「次世代超並列計算機の開発」平成9～13年度

□ 基本的考え方

■ 短距離力

複雑且つ多様

$O(N)$ 計算

一般に複雑

長距離力

普遍的(重力, クーロン力)

$O(N^2)$ 計算

しかし定型・単純

■ ハイブリッドアプローチ:

□ 短距離力部分は汎用MPPで処理

□ 長距離力部分は専用ハードウェアで処理

□ 両システムをネットワークで連結



異機種融合型計算機

HMCS (Heterogeneous Multi-Computer System)

未来開拓プロジェクト申請書(平成9年8月)



CP-PACS/GRAPE-6によるHMCS

■ GRAPE-6:

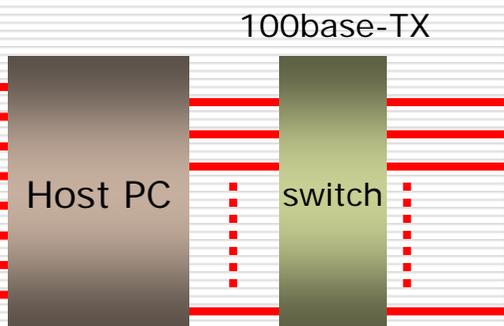
- 牧野淳一郎(東大)らが開発
Gordon Bell winner of
2001,2002
- 重力計算専用器
- 32Gflops/chip x 32chip/board
=1Tflops/board

$$-G \sum_{j=1}^N \frac{m_i m_j}{r_{ij}^2}, \quad i = 1, \dots, N$$

GRAPE-6
Special-purpose MPP
8Tflops



Parallel I/O system
PAVEMENT/PIO



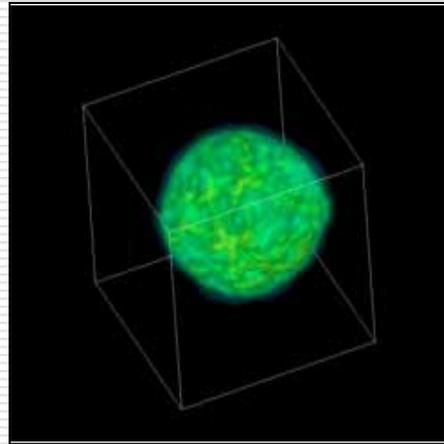
CP-PACS
General-purpose MPP
0.6Tflops



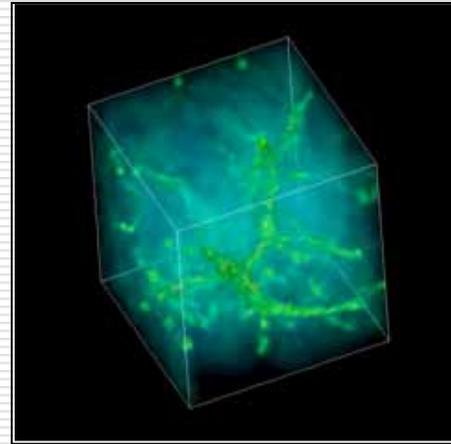


CP-PACS/GRAPE HMCSの応用例: 紫外輻射場中の銀河形成過程シミュレーション

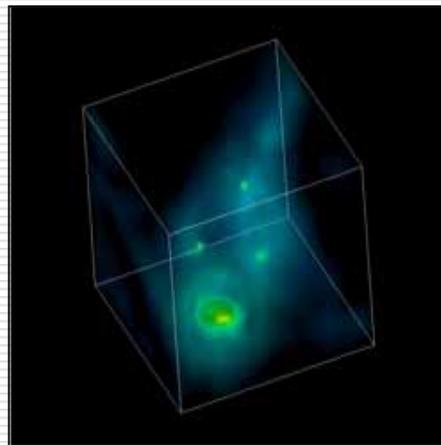
0.3 Gyr



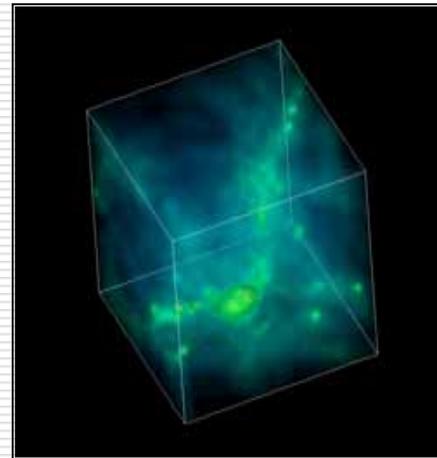
0.5 Gyr



1 Gyr



0.7 Gyr





計算科学研究センター発足に至る経緯

- 平成 4年 4月 全国共同利用**計算物理学研究センター**設置
(10年時限 定員10名 客員2名)
新プログラム「専用並列計算機による場の物理の研究」開始
- 平成 8年10月 超並列計算機CP-PACS完成
世界の高速コンピュータトップ500リスト第一位
- 平成 9年 4月 日本学術振興会未来開拓学術研究推進事業「計算科学」領域
「次世代超並列計算機の開発」プロジェクト開始(平成9年度～13年度)
- 平成14年 4月 同名センターを改組拡充の上設置(10年時限 定員11名 客員3名)
- 平成14年 6月 法人化後の体制について学内検討を開始
- 平成15年 7月 計算科学研究センターへの改組拡充を概算要求
- 平成15年12月 平成16年度政府予算案で計算科学研究センターの設置が認められた
- 平成16年 4月 **計算科学研究センター発足**



筑波大学計算科学研究センター

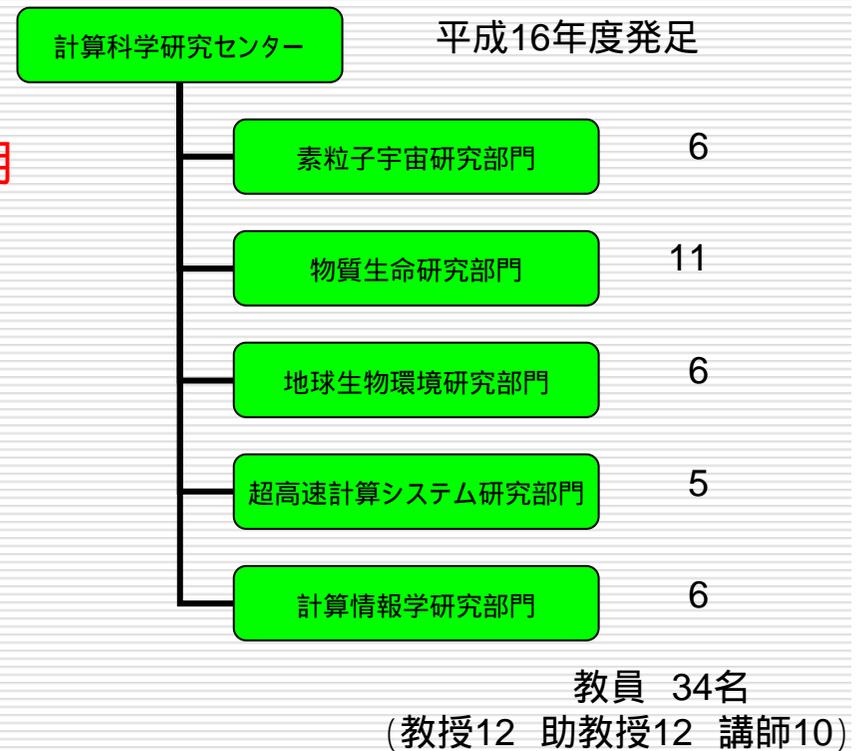
旧計算物理学研究センター



平成16年4月
改組・拡充



計算科学研究センター





計算科学研究センターの目的

物理学と計算機工学を一体化した研究組織としての計算物理学研究センターの特徴を、より幅広い科学諸分野に拡大し、計算科学分野で世界的にもユニークなCOEの形成を目指す

- 基礎科学・物質科学・生命科学・環境科学における重要課題の、大規模シミュレーション・大規模データ解析等を中心とする方法による研究
- 超高速計算機システムの開発・製作及び超高速ネットワークに関する計算機科学・情報科学の先進的研究
- 計算科学分野における、国際的研究拠点機能並びに全国共同利用研究センターとしての研究拠点機能の提供



計算科学研究センターの研究者構成

新メンバー
新規枠

□	素粒子宇宙研究部門		学内共同研究員	数理物質科学研究科
■	素粒子分野	宇川・吉江・石塚・蔵増・谷口	青木・金谷	物理学専攻
■	宇宙分野	梅村・中本		物理学専攻
□	物質生命研究部門			
■	物質分野	押山・岡田 矢花・中務 小泉・日野・新規(1名) 新規(2名)	白石・Boero	物質創成先端科学専攻 物理学専攻 物性・分子専攻
■	生命分野			
□	地球生物環境研究部門			生命環境科学研究科
■	地球分野	田中・新規(1名)	木村・鬼頭	地球環境科学専攻
■	生物分野	新規(1名)	橋本・漆原	構造生物科学専攻
□	超高速計算システム研究部門			システム情報工学研究科
■	アーキテクチャ分野	朴・高橋・新規(1名)	安永・和田	コンピュータサイエンス専攻
■	グリッド分野	佐藤・櫻井		コンピュータサイエンス専攻
□	計算情報学研究部門			
■	計算知能分野	北川・石川・新規(1名)		コンピュータサイエンス専攻
■	計算メディア分野	大田・亀田・新規(1名)	白川	知能機能専攻
□	共同研究部門	小柳(超高速計算システム)・牧野(宇宙)・舘野(生命)		



計算科学研究センターの新規研究プロジェクト

- PACS-CSプロジェクト
 - 平成17年度～19年度
 - 物質・生命及び素粒子・宇宙を中心とし計算科学全般
 - 特別教育研究経費

- FIRSTプロジェクト
 - 平成16年度～19年度
 - 宇宙物理分野
 - 科研費特別推進 研究代表 梅村 雅之



PACS-CSプロジェクト

Parallel Array Computer System for Computational Sciences

- 正式名称:「計算科学による新たな知の発見・統合・創出」事業
- 平成17年度～19年度の3ヵ年計画
- 運営費交付金特別教育研究経費による拠点形成事業
- 事業内容
 - 大規模計算による物質・生命研究の開拓
 - ナノ・バイオ物質の機能発現原理の解明
 - 全生物進化系統樹の解明
 - 実績ある素粒子・宇宙研究の推進
 - 近似なしQCDによるクォークの解明
 - 輻射流体力学による宇宙天体形成の解明
 - これらを支える超並列クラスタ計算機PACS-CSの開発・製作



事業発足に至る経緯

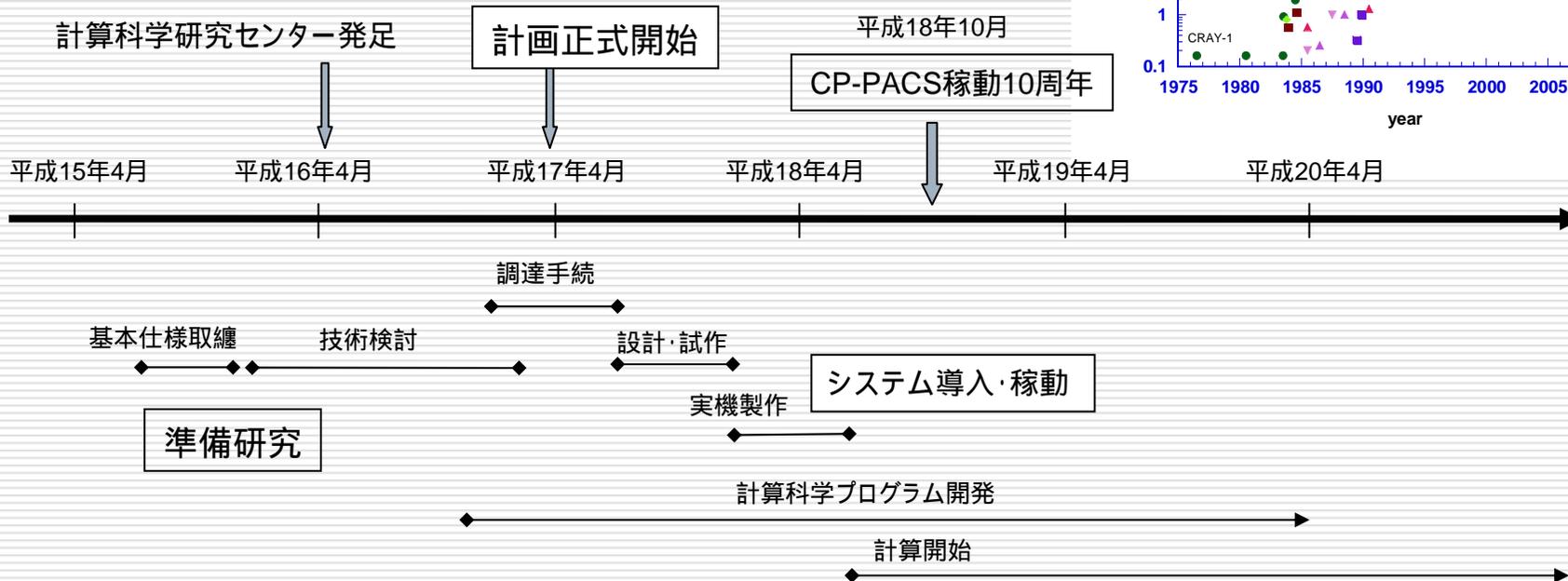
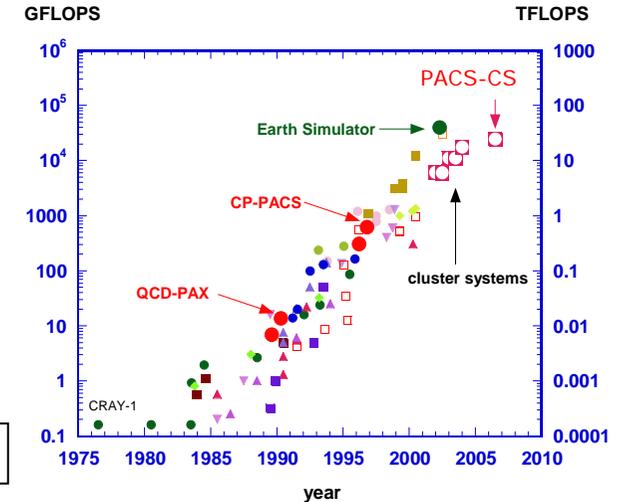
平成15年 6 - 8月	PACS-CS基本仕様検討・取り纏め
平成16年 1月	平成17年度概算要求に向けて文部科学省と初折衝
4月	計算科学研究センター発足
6月	平成17年度概算要求学内手続き
6 - 8月	文部科学省と概算要求折衝
8月	平成17年度文部科学省概算要求に盛り込まれる
9月	総合科学技術会議によるヒヤリング
10月	総合科学技術会議の評価公表(A相当)
12月	平成17年度政府予算案に盛り込まれる
平成17年 4月	事業発足予定



PACS-CS開発計画

高性能化の著しいコモディティ(汎用品)の
プロセッサ技術、ネットワーク技術を基
盤として計算科学に適したクラスタ型コン
ピュータを開発・製作

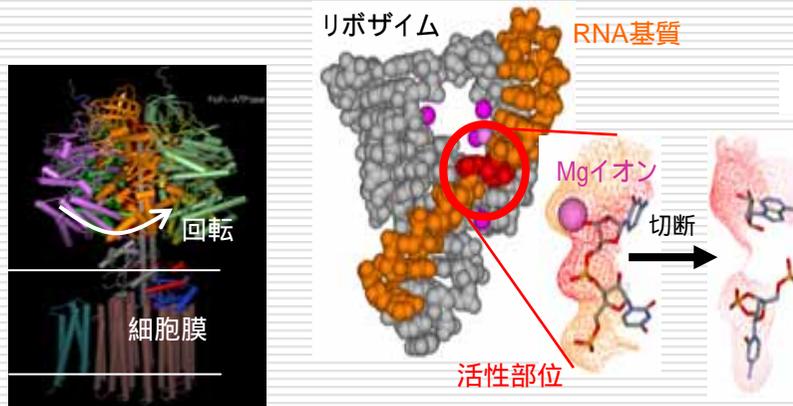
	PACS-CS	CP-PACS
ピーク性能	17.2TFLOPS以上	0.61TFLOPS
主記憶容量	6.0TByte以上	0.128TByte
ディスク容量	0.61PByte以上	1.05TByte
開発期間	2年(H17~18年度)	4.5年(H4年度~8年度)
完成時期	平成18年度末	平成8年9月





大規模計算による物質・生命研究の開拓

□ 生命機能の原子スケール量子論

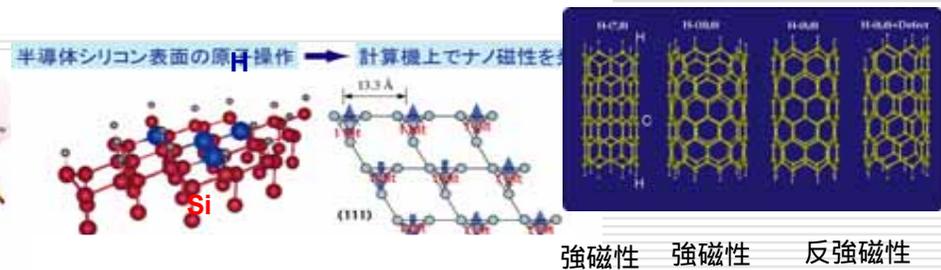


ATP合成酵素の作動原理(エネルギー産生を司る体内モータ)

リボザイムによるRNA切断(遺伝情報の発現にも必須の酵素反応)

電子・原子の量子ダイナミクスから生命の機能を理解する、生命科学の量子論の構築

□ 量子機能を持つナノ物質の量子デザイン



水系恢復したシリコン表面は磁石
(半導体と磁性の融合)
DRAMの10万倍の超高密度
記憶素子の可能性

ジグザグエッジのカーボン
ナノチューブの磁性発現

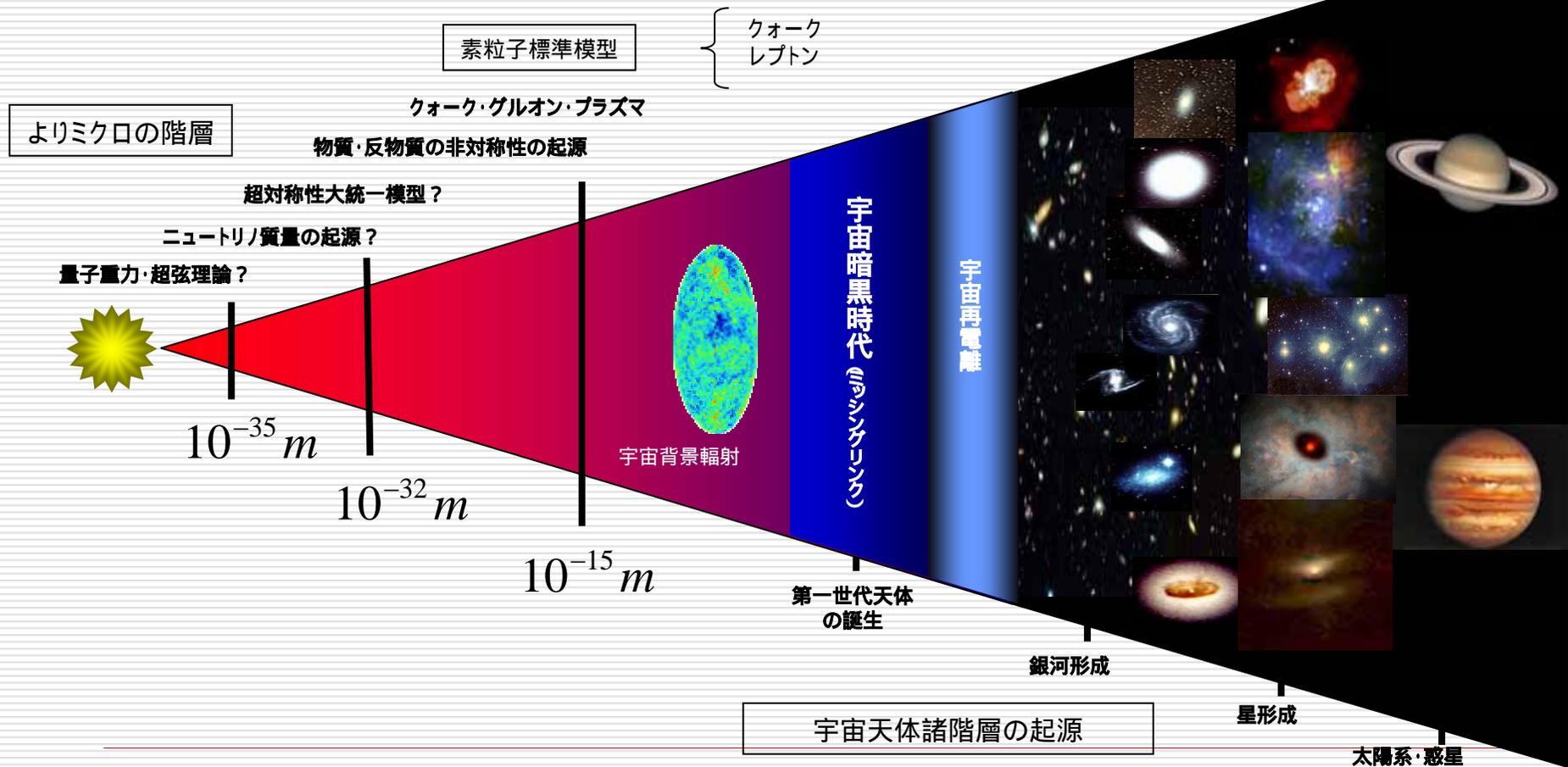
量子効果により常識を覆す新機能を発現するナノ物質をデザインする方法の開拓

- 電子・原子の量子ダイナミクスを追う第一原理量子計算法の開拓
- 現実のナノ・バイオ物質(1万~10万個の原子群)に対する量子論的シミュレーションの実現(現状1千個程度)



素粒子・宇宙の先進的研究

- 素粒子標準模型とそれを超えるミクロ階層の素粒子像
- 宇宙暗黒時代と天体の諸階層の起源





FIRSTプロジェクト

Elucidation on the Origin of FIRST Generation Objects by HMCS-E

□ 科研費特別推進研究

「融合型並列計算機による宇宙第一世代天体の起源の
解明」(平成16年度～19年度)

研究リーダー: 梅村 雅之

研究分担者: 須佐 元、森 雅之、朴 泰祐、佐藤 三久 他

- 目的: 宇宙に生まれた最初の天体(第一世代天体)の起源の解明
- 方法: 輻射流体力学 (= 光伝播 + 流体力学)
- 手段: HMCS-E (汎用クラスタのボードにGRAPE-6を実装)を開発

□ 緒元

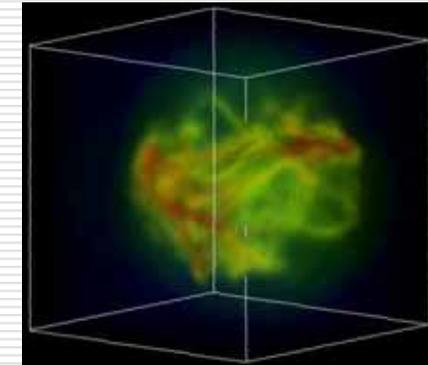
- 256ノード (512CPU + 256Blade-GRAPE)

■ 演算性能

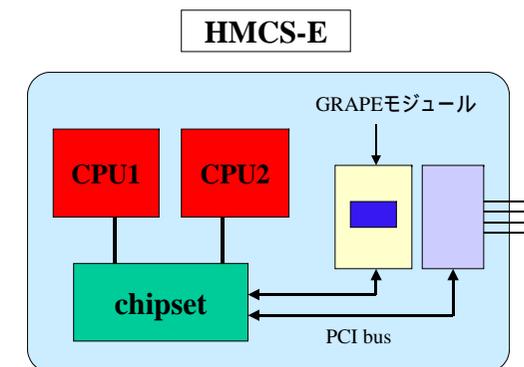
汎用PCクラスタ 3.5 Tflops

Blade-GRAPE 33.3 Tflops

- 当初PACS-CSの一部として計画、科研費採択により独立計画として推進

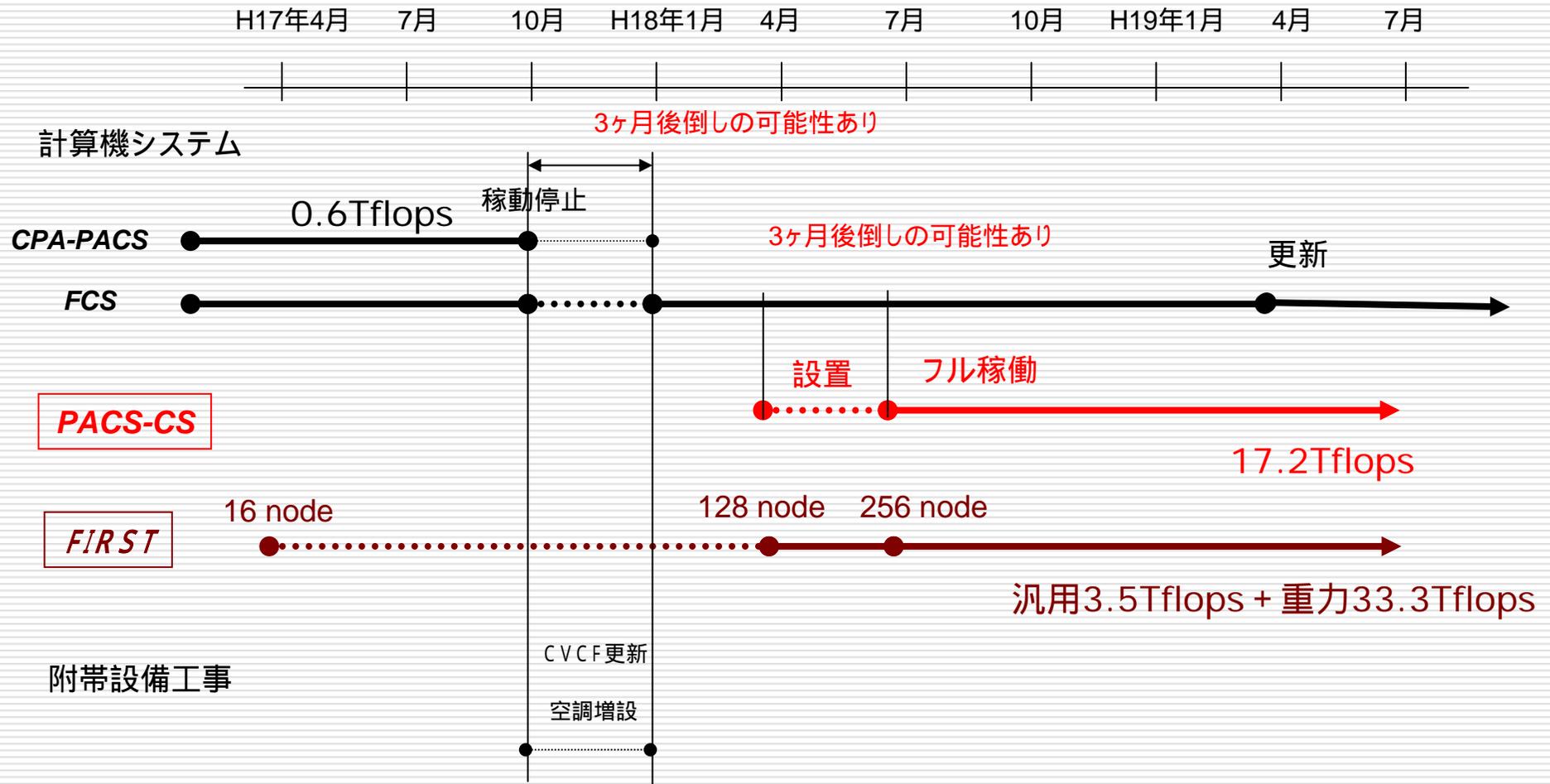


第一世代天体の輻射流体
シミュレーション





センター主要計算機設備更新日程





本シンポジウムにおける関連講演

□ PACS-CSプロジェクト

- 超並列クラスタPACS-CSの開発・製作
朴 泰祐(計算科学研究センター・システム情報工学研究科コンピュータサイエンス専攻)
- PACS-CSにおける素粒子物理
青木 慎也(数理物質科学研究科物理学専攻)
- PACS-CSにおける物質・生命科学
押山 淳(計算科学研究センター・数理物質科学研究科物質創成先端科学専攻)
白石 賢二(数理物質科学研究科物質創成先端科学専攻)
- PACS-CSにおける原子・分子・光科学
矢花 一浩(計算科学研究センター・数理物質科学研究科物理学専攻)
- 生物分子系統進化プロジェクト
橋本 哲男(生命環境科学研究科構造生物科学専攻)
- THORPEXと気象データベース構築プロジェクト
田中 博(計算科学研究センター・生命環境科学研究科地球環境科学専攻)
- 計算メディアのあらたな展開に向けて
大田 友一(計算科学研究センター・システム情報工学研究科知能機能システム専攻)

□ FIRSTプロジェクト

- FIRSTプロジェクトの概要
梅村 雅之(計算科学研究センター・数理物質科学研究科物理学専攻)
- FIRSTによる宇宙輻射流体力学
須佐 元(立教大学理学部)



まとめ

- 計算科学と計算機科学の一体的追及
 - 素粒子・宇宙分野では既に大きな実績と成果
 - 物質・生命分野等では未だ充分に開拓されていない領域(大きな発展の可能性)

- 計算科学研究センター
 - 研究の基本的手段としての計算機開発も視野に入れた、計算科学・計算機科学融合型研究組織
 - PACS-CS及びFIRSTの開発を梃子に、素粒子・宇宙から物質・生命を含むより幅広い分野における計算科学の一層の飛躍を目指す