

「特定高速電子計算機施設の共用の促進に関する
基本的な方針」に対する意見書

平成20年3月31日

名古屋大学情報連携基盤センター
スーパーコンピュータ利用者懇談会

1. まえがき

次世代スパコン(ペタコン)の利用促進に向けて、組織的に大規模計算を推進してきた研究分野(物性・材料、生命科学、ゲノム、ナノテクノロジー、ものづくり、流体、環境、防災、航空・宇宙、天体物理、原子力など)の研究者や研究グループでは、大学共同利用機関法人のスパコン利用者などを中心母体として、それぞれの研究分野のコミュニティーを代表するコンソーシアムを形成し、その組織でペタコン利用の提言・要望・計画書がまとめられています。それを補完する利用形態として、大学附置の全国共同利用情報基盤センターのスパコン利用者が、センターのスパコンの計算機資源を越える超大規模計算に直接チャレンジできる枠組みを導入して頂くためにここにペタコン利用の提言・要望・計画書を提出します。

地球シミュレータの共用に関しては、まず、気象・海洋などの地球科学の分野の計算が重視され、その残り(全体の数分の一)の資源をいろいろな分野の計算に供給されましたが、ペタコンにおいては、共用に関するそのような極端な分野の偏りは避けるべきだと考えます。また、地球シミュレータの共用においては、せつかくの計算機パワーが無駄にならないように、ベクトル化および並列化のような最適化が十分になされたプログラムのみ利用が許されました。ペタコンにおいても十分なチューニングがされたプログラムのみ共用を許すべきです。しかし、地球シミュレータよりもノード数が大幅に増えるペタコンにおいては、そのチューニングは個人の研究者にとっては、大変困難になることが予想されます。よって、名古屋大学情報連携基盤センターのような全国共同利用の大型スーパーコンピュータをもつ計算機センターが中心となって、まず、そこで、ペタコン利用のためのプログラムチューニングを支援すべきだと考えます。すなわち、各研究者が自分の研究室に持つクラスター計算機で開発したプログラムでは、ペタコンで十分なパワーを発揮することができませんから、まず、クラスター計算機とペタコンの中間に位置する、全国共同利用の大学計算機センターがプログラムチューニングの橋渡しをすべきだと考えます。

名古屋大学情報連携基盤センターのスパコンユーザーは、他の大学附置の全国共同利用情報基盤センターのユーザーと同じように、広範な分野(流体、分子、数値解析、たんぱく質、気象、地球流体、プラズマ、宇宙、環境など)の研究にスパコンを利用しています。利用する計算機資源の大きさで分類すると、中規模までの計算と大規模計算に分けられます。センターのスパコンの計算機資源の1%程度以下を利用する中規模までの計算は、研究室のクラスター計算機でも実際計算が行われています。しかし、それ以上の大規模計算はセンターのスパコンを使わざるを得ません。

名古屋大学の特徴として、応用分野と計算アルゴリズムを連携した計算理工学専攻が存在し、その専攻を中心として計算科学 COE に採択され、計算科学を他の大学に先駆けて推進しています。また、情報連携基盤センターは並列化計算講習会などを通してスパコンユーザーを多数育てると同時に長期間にわたって大規模計算を奨励する方策を採ってきました。こうして、センターのスパコンユーザーで大規模計算を頻繁に実行しているグループが現在では10以上あり、その中には地球シミュレータなどで実績を上げているグループもあります。さらに、若手のシミュレーション(大型計算)研究者の中には、センターのスパコンの計算機資源を大幅に超える計算を是非とも、それもできたら直ぐに実行したいと希望するチャレンジングな研究者が何名もいます。そのセンターの計算機資源を大幅に超える挑戦的な計算は、次世代スパコン(ペタコン)を利用して初めて実現するものです。

ペタコンを必要とする研究計画は、通常、組織化されたコンソーシアムの中から、特にコンソーシアムにとって最優先とされる多数の研究課題が出てくると思われます。一方、名古屋大学情報連携基盤センターなどの全国共同利用情報基盤センターのスパコンユーザーの中には、研究室単位の小規模なグループで大規模計算を限界まで実行し、さらにペタコンを利用すると画期的な結果が得られると予想できる超大規模計算に是非ともチャレンジしたいという研究者が多くいます。本意見書は、コンソーシアムの提言・要望・計画書を補完する形で、名古屋大学情報連携基盤センターのスーパーコンピュータ利用者懇談会がペタコン利用の枠組みを是非とも設定して欲しいと強く要望して提出するものです。

「名大のスパコンで大規模計算の実績があり、ペタコンで具体的な数値目標が達成できるような課題については、ペタコンにチャレンジできるよう枠組みを是非とも設定して欲しい」

2. 提言

次世代スパコン(ペタコン)の利用促進に関して、「名古屋大学情報連携基盤センターの様な大学附置の全国共同利用情報基盤センターのスパコンで大規模計算の実績があり、ペタコンで具体的な数値目標が達成できるような研究課題については、ペタコンにチャレンジできるよう枠組みを是非とも設定して欲しい」と要望した、その内容となぜ必要かについて具体的に述べます。

① 特定高速電子計算機施設の共用の促進に関する基本的な方向

次世代スパコン(ペタコン)を、大学共同利用機関法人のスパコン利用者と同様に大学附置の全国共同利用情報基盤センターのスパコン利用者が利用できるようにすることは、広範な分野の研究者にペタコンの利用機会を与える点で重要です。同時に、ペタコンが多く研究者にとってより身近なものとして捉えられ、高速並列計算技術、効率的なデータ利用、高度なネットワークと可視化技術の共用、高度なIT技術の利用促進に大きく貢献することが期待できます。

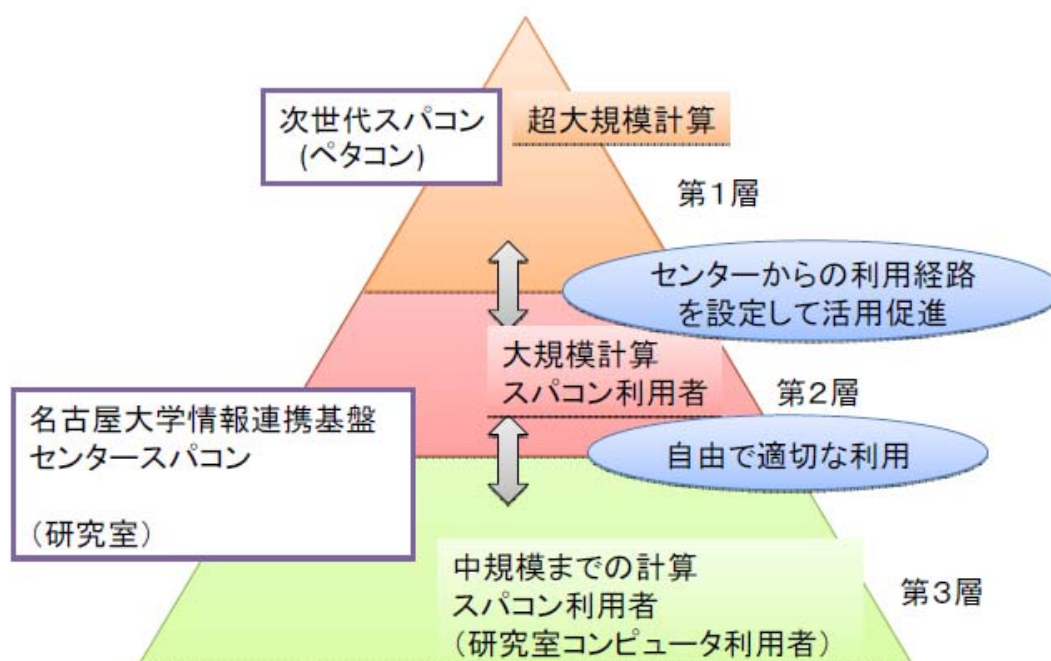


図1 名古屋大学情報連携基盤センターのスパコン利用者からみた計算機資源の階層的配置

名古屋大学情報連携基盤センターのスパコン利用者からみた計算機資源の階層的配置は、図1のように分類でき、センターのスパコン利用者は中規模までの計算(最大でも全部の計算資源の約1%以下で十分な計算)を行う第3層とそれ以上の大型計算を行う第2層の研究者グループに分けられます。第3層には研究室でクラスター計算機を独自に導入して計算を行っているグループが多く存在します。第3層で大規模計算を行う必要が生じた場合に、第2層に容易に移れるパスがあること、すなわち、第3層と第2層間の行き来が自由にできることは計算機資源の有効利用と信頼性のある計

算結果を得るために不可欠ですが、センターのスパコンは名大を含む全国の研究者に広く開かれているため、第3層と第2層のパスは既に存在します。

同様に、センターのスパコンで大規模計算を頻繁に実行している研究者が、その計算機資源を超える計算を是非やってみたい、そうすれば画期的な結果に結びつく可能性が高いというとき、次世代スパコン(ペタコン)で超大規模計算を実行できる道筋ができていれば、ペタコンの活用促進に大いに寄与するはずです。すなわち、第3層のスパコンを用いた中規模までの計算、第2層の大規模計算、それにペタコンを用いた第1層の超大規模計算間のスムーズな連携(自由で容易な往来)が保障されていれば、スパコン資源の有効活用と成果達成の可能性が大いに高まると期待されます。またこれは、コンソーシアムの優先課題推進を補完する形で、若手研究者に挑戦的かつ独創的な超大規模模計算を遂行する機会を与え、わが国の科学技術の振興や国際競争力の向上ならびに人材育成に大きく寄与するものです。

② 特定高速電子計算機施設の整備に関する事項

スパコンを利用して大型計算や大規模シミュレーションを実行する場合、計算速度、メモリ容量、ディスク容量が基本的計算機資源となります。それにプラスして、ネットワークと画像処理・可視化をどう実現するかが重要です。次世代スパコン(ペタコン)を利用する場合、多くの利用者が計算と前後処理を全てペタコンシステムだけで実行するのではなく、例えばリモートのスパコンシステムと連携してそれぞれのシステムの特徴を生かした利用形態となるはずで、その場合、ペタコンとリモートのスパコンシステムを結ぶ高速ネットワークとペタコンシステムでの大量計算データのハンドリングの容易さが重要な鍵になります。この意味で、ペタコンシステムに要求される機能は、計算速度と大容量メモリは当然のことながら、大容量ディスクと高速ネットワークのリモートからの使いやすさを考慮したペタコンシステムの整備が要望されます。

③ 特定高速電子計算機施設利用研究に関する事項

名古屋大学情報連携基盤センターのスパコンの利用状況をもう少し具体的に数値計算・シミュレーションの計算規模で分類すると図1に示したように次の3つに大きく分けられます。

- 第1層 超大規模計算:情報連携基盤センターのスパコンを越えての利用
(cpu 数 1000 程度を超えて)、ペタコン利用が必要
- 第2層 大規模計算:情報連携基盤センターのスパコンを大規模に利用

(cpu 数 1000 程度まで)

第3層 中規模までの計算:各グループ所有のクラスター計算機でも計算可能

(cpu 数 100 程度まで)

名古屋大学情報連携基盤センターのスパコンは現有のスカラ型並列機 **Fujitsu PRIMEPOWER HPC2500/1536 (12TF)** から 2009 年度初めには **(60TF)** 程度のスパコンに更新される予定ですが、その計算機資源を超えるような超大型数値計算・シミュレーションを実行するにはペタコン利用しか可能性はありません。もう少し具体的に言えば、名古屋大学のスパコンの最大スケールの計算で何ヶ月もかかる様な超大型計算とシミュレーションはペタコンの利用を積極的に考えるべきです。即ち、名古屋大学のスパコンで十分な知識と経験を積んでペタコンの利用に進めば、ペタコンの効率的で挑戦的な利用が促進されるはずです。

上記のような第1層の超大规模計算のカテゴリーに分類される「ペタコン利用の研究計画の具体例」を資料として後に添付しています。それらの研究課題には、

大規模計算1:一様非等方 **MHD** 乱流の減衰法則

大規模計算2:平行平板間乱流の超大规模直接数値計算

大規模計算3:タンパク質のシミュレーション

大規模計算4:ジオスペースにおける領域間結合

大規模計算5:無衝突衝撃波による粒子加速

大規模計算6:ブラソフシミュレーションで見る惑星磁気圏の 3 次元運動論的描像

大規模計算7:分子動力学法による液膜破壊現象の直接計算

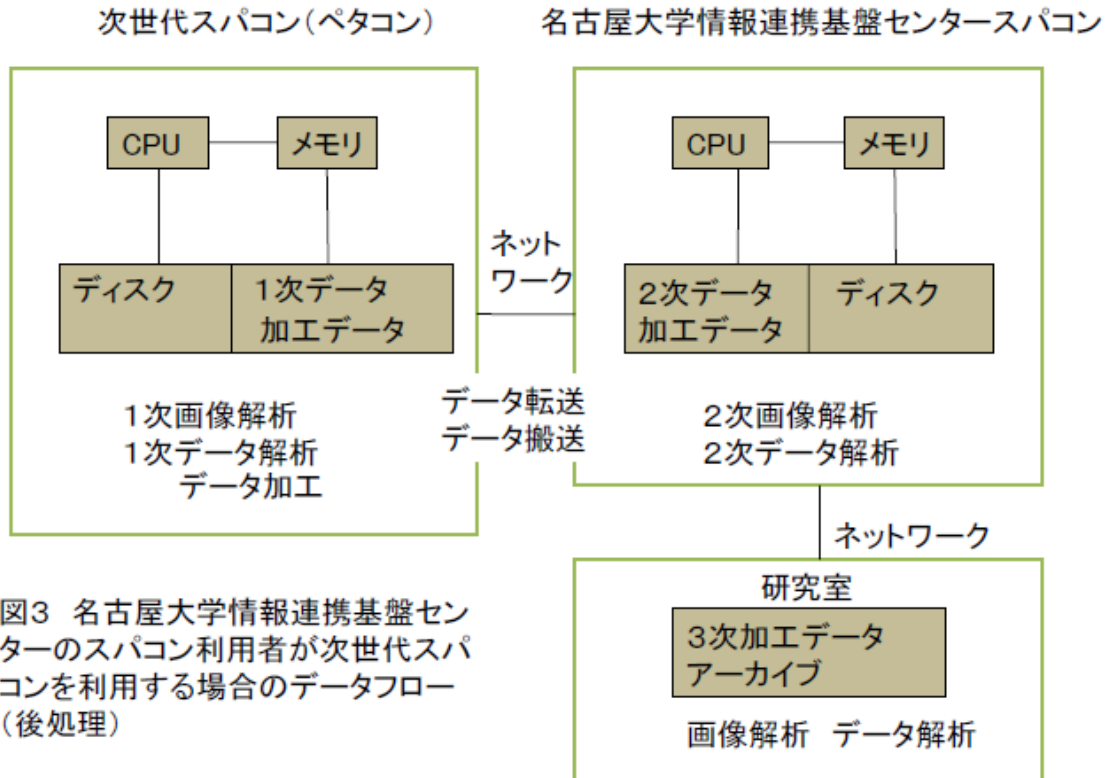
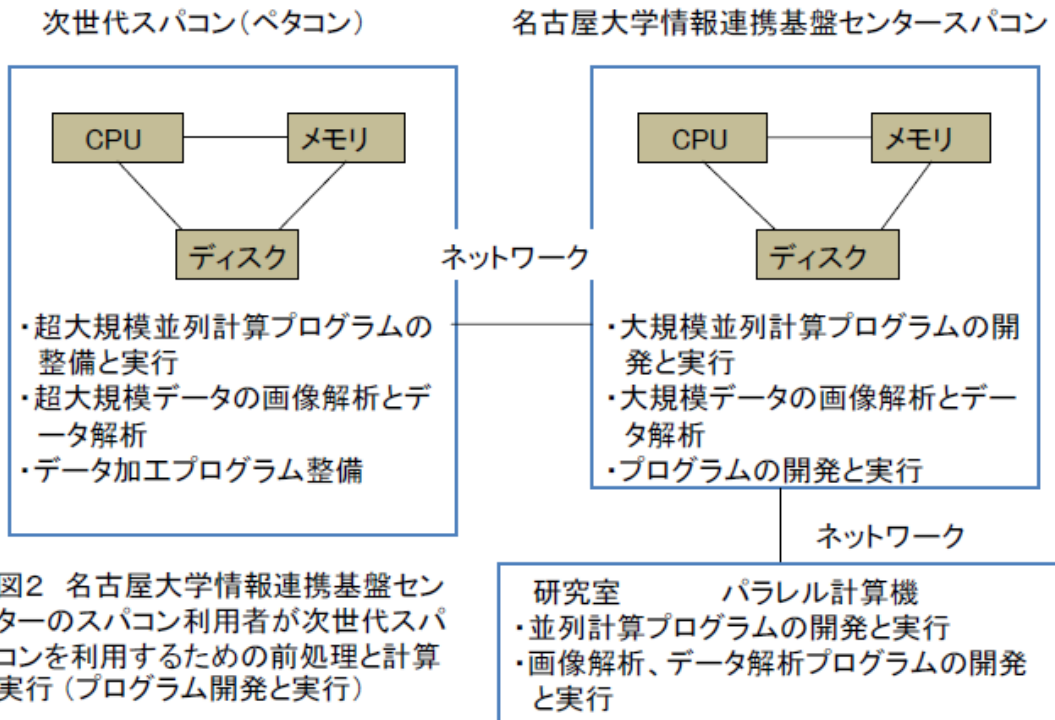
大規模計算8:大規模非線形固有値問題の解法とその応用

大規模計算9:生体分子の立体構造予測シミュレーション

大規模計算 10:強相関多体電子系シミュレーション

大規模計算 11:雲のバーチャルリアリティ

などがあります。そのほかにも、広範な分野(流体、分子、数値解析、たんぱく質、気象、地球流体、プラズマ、宇宙、環境など)の研究でスパコンを利用する研究者があり、近い将来ペタコンの利用にチャレンジしたいとの意見が名古屋大学情報連携基盤センターのスーパーコンピュータ利用者懇談会に寄せられています。名古屋大学情報連携基盤センターのスパコンを活用してぎりぎりまでの大型計算とシミュレーションを行い、その計算機資源を超える超大型計算とシミュレーションをペタコンに持っていく、という枠組みはペタコンの利用促進に大きく貢献すると期待されます。



次に、次世代スパコン(ペタコン)とリモートにある名古屋大学情報連携基盤センターのスパコンの連携と役割分担について述べます。図2にセンターのスパコン利用者がペタコンを利用するための前処理と計算実行(プログラム開発と実行)についての、図3にデータフロー(後処理)についての利用形態を示します。センターのスパコンの役割は、ペタコンに対して一回り小さい並列コンピュータを用いてのプログラム開発、大規模並列計算プログラムの開発とぎりぎりまでの大規模計算の実行、および大規模データの画像解析とデータ解析を実行することです。そうして、十分実績を積んだプログラムをペタコンに持っていきます。それでも大規模と超大規模の差は大きいわけですが、ペタコンでの超大規模計算を効率よく実行するための最善の方法といえます。ペタコンでの超大規模並列計算プログラムの整備と実行、画像解析とデータ解析を行うのと同時に、ネットワークでリモートのセンターのスパコンにデータ転送するためのデータ加工プログラムの整備が必要不可欠になります。

図3ではペタコンからセンターのスパコンへのデータフロー(後処理)を示しています。ペタコンのディスクは大量のデータを長時間保管するのは不経済であるから、ペタコンでの短期間の画像解析と1次データ解析を行った後は、ペタコンの1次データからサンプリングなどデータ加工して2次データを生成し、その2次データをネットワークでセンターのスパコンにデータ転送(搬送)して、十分時間をかけて徹底的に2次画像解析と2次データ解析を行って計算結果を解読する利用形態が最も一般的でかつ合理的な利用方法であると考えます。このように名古屋大学情報連携基盤センターのスパコンシステムと連携した利用を促進することにより、ペタコンの世界最大級の性能がより有効に発揮できます。

④ 特定高速電子計算機施設の運営に関する事項

図2, 3の名古屋大学情報連携基盤センターのスパコン利用者がペタコンを利用する場合のプログラム開発・整備、ペタコンでの効率的な超大規模計算の実行、計算結果のデータフローと後処理には、ペタコンとセンターのスパコンシステムを有機的に連携させて、かつ役割分担させることにより計算機資源を有効に使うことが本質的に重要です。特に、ペタコンシステムでの1次データ解析・画像解析と同時に、1次データ加工による2次データ生成が容易に行えることと高速ネットワーク(可能ならばグリッド技術など)を利用してその2次データをリモートのセンターのスパコンシステムに転送できることは計算データの徹底的な解読と成果を得るために必要不可欠です。

名古屋大学情報連携基盤センターの様な大学附置の全国共同利用情報基盤センターのスパコン利用者懇談会から推奨された超大規模計算・シミュレーションの研究課

題が、ペタコンで直ぐに実行するのに相応しいかどうかは専門分野のコンソーシアムでないと判断できないという意見もあるかも知れませんが、少なくともセンターのスパコンでは研究実績が出ている課題であって、ペタコンの利用でも十分に経験を活かせる課題であれば、コンソーシアムから出てくる課題を補完するルートとみなすことができます。多くの研究者にペタコンの利用機会を与える枠組みとして機能し、さらに、規模が小さくても独創的な研究グループがペタコン利用で先駆的な研究を成し遂げる可能性が期待できます。

⑤ その他特定高速電子計算機施設の共用の促進に際し配慮すべき事項

次世代スパコン(ペタコン)の利用促進に際して、名古屋大学情報連携基盤センターなどの大学附置の全国共同利用情報基盤センターの役割とそれらのセンターのスパコン利用者が果たす役割は非常に大きいと思われます。まず、第一には、大学共同利用機関法人と大学附置のスパコンセンターの利用者を合わせれば、アカデミックな分野での大規模計算のスパコン利用者は網羅でき、多くの大規模計算に従事している研究者とIT関連の研究者がペタコンをより身近な存在として受け止めることとなります。これは、多くの研究者がペタコンに興味を持続的に持ち続け、ペタコンの性能を十分に引き出して成果を上げるのに極めて有効に働くと期待されます。全国共同利用情報基盤センターのスパコン利用者には大学院生も含め多彩な人材が多数いて、大規模計算による優れた研究を推進する学生も少なからずいます。そのような学生が、ペタコン利用も夢ではないと思ってチャレンジングな大規模計算・シミュレーションに邁進するのは計算科学の躍進の大きな原動力となります。

3. まとめ

名古屋大学情報連携基盤センターのスパコンユーザーで大規模計算・シミュレーションを目指している広範な分野の研究者がまとまって、次世代スパコン(ペタコン)の利用促進に向けての意見・要望・計画書を是非とも提出しようということになりました。そのために、名古屋大学の計算科学COEとより広範囲な研究者を含めた計算科学サロンを中心として会合を開き、次世代スパコン(ペタコン)の利用促進に向けて研究グループから意見・要望・計画を集め、それらをまとめてペタコン利用の提言・要望・計画書を作成して提案することになりました。ペタコンの利用促進の提言は、組織化されたコンソーシアムから多く提出されていますが、それを補完する形で、名古屋大学情報連携基盤センターのスーパーコンピュータ利用者懇談会としてペタコンの利用促進について提言するのは、大規模計算の訓練を十分に積み、かつ独創的な若手研究者・学

生の芽を育てる上で非常に意義があると考えています。

名古屋大学情報連携基盤センターのスパコンで大規模計算を限界まで実行していて、さらにペタコンを利用すると画期的な結果が得られると予想して、超大規模計算にチャレンジしたいという研究者のために、センターからのペタコンへの直接の利用経路を是非とも設けて欲しい、すなわち、「名大のスパコンで大規模計算の実績があり、ペタコンで具体的な数値目標が達成できるような課題については、ペタコンにチャレンジできるよう枠組みを是非とも設定して欲しい」と強く要望するものです。そして、その枠組みをセンターの推奨に基づいて円滑に活用できるように要望します。

名古屋大学情報連携基盤センター
スーパーコンピュータ利用者懇談会
(代表者: 荻野瀧樹、石井克哉)

世話人連絡先

〒464-8601 名古屋市千種区不老町

名古屋大学情報連携基盤センター内

荻野瀧樹 名古屋大学太陽地球環境研究所

ogino@stelab.nagoya-u.ac.jp TEL: 052-747-6348

石井克哉 名古屋大学情報連携基盤センター

ishii@cc.nagoya-u.ac.jp TEL: 052-789-4382

名古屋大学情報連携基盤センター
スーパーコンピュータ利用者懇談会名簿

| 名 前 | 役職 | 所属 |
|------------------------|-----------|------------------------|
| アオヤギ シノブ 青柳 忍 | 助教 | 名古屋大学 工学研究科・マテリアル理工学専攻 |
| アゼガミ ヒデユキ 畔上 秀幸 | 教授 | 名古屋大学 情報科学研究科・複雑系科学専攻 |
| アリタ タカヤ 有田 隆也 | 教授 | 名古屋大学 情報科学研究科・複雑系科学専攻 |
| イシオ ヒロム 石尾 広武 | PD | 名古屋大学 工学研究科 |
| イシハラ タカシ 石原 卓 | 准教授 | 名古屋大学 工学研究科・計算理工学専攻 |
| イトウ カズヒト 伊藤 一仁 | COE 特任准教授 | 名古屋大学 工学研究科・計算理工学専攻 |
| イトウ ヒロユキ 伊藤 博介 | 助教 | 名古屋大学 工学研究科・マテリアル理工学専攻 |
| イノウエ ジュンイチロウ 井上 順一郎 | 教授 | 名古屋大学 工学研究科・マテリアル理工学専攻 |
| ウエノ カズト 上之 和人 | PD | 名古屋大学 工学研究科 |
| ウチヤマ トモミ 内山 知実 | 准教授 | 名古屋大学 情報科学研究科・複雑系科学専攻 |
| 梅田 隆行 | 助教 | 名古屋大学 太陽地球環境研究所 |
| 海老原 祐輔 | 講師 | 名古屋大学 太陽地球環境研究所 |
| 大澤 幸治 | 教授 | 名古屋大学 理学研究科 |
| 大成 誠一郎 | 助教 | 名古屋大学 工学研究科 |
| 大東 忠保 | 特任助教 | 名古屋大学 地球水循環研究センター |
| 大峯 巖 | 教授 | 名古屋大学 理学研究科・物質理学専攻 |
| 岡崎 進 | 教授 | 分子科学研究所 |
| 岡本 直也 | D2 | 名古屋大学 工学研究科 |
| 岡本 祐幸 | 教授 | 名古屋大学 理学研究科 |
| 荻野 竜樹 | 教授 | 名古屋大学 太陽地球環境研究所 |
| カ ジュンソウ 柯 潤聡 | PD | 名古屋大学 工学研究科 |
| 加藤 雄人 | PD | 東北大学 理学研究科 |
| カネダ ユキオ 金田 行雄 | 教授 | 名古屋大学 工学研究科・計算理工学専攻 |
| キタ エイスケ 北 栄輔 | 助教 | 名古屋大学 情報科学研究科・複雑系科学専攻 |
| コガ ノブアキ 古賀 伸明 | 教授 | 名古屋大学 情報科学研究科・複雑系科学専攻 |
| コウ トシユキ 小藤 俊幸 | 准教授 | 名古屋大学 情報科学研究科・計算機数理学専攻 |
| サカタ マコト 坂田 誠 | 教授 | 名古屋大学 工学研究科・マテリアル理工学専攻 |
| ササイ マサキ 笹井 理生 | 教授 | 名古屋大学 工学研究科・計算理工学専攻 |
| ササキ タケン 佐々木 尚 | PD | 名古屋大学 工学研究科 |
| 篠原 育 | 准教授 | 宇宙航空研究開発機構 宇宙科学研究本部 |

| | | |
|-----------------------|-----------|-------------------------|
| 杉田 有治 | 研究員 | 理化学研究所 |
| スギモト ナリヒコ 杉本 憲彦 | PD | 名古屋大学 工学研究科 |
| スギヤマ トオル 杉山 徹 | 研究員 | 地球シミュレータセンター |
| スギヤマ ユウキ 杉山 雄規 | 教授 | 名古屋大学 情報科学研究科・複雑系科学専攻 |
| 鈴木 将 | PD | 名古屋大学 工学研究科 |
| スズキ レイジ 鈴木 麗璽 | 助教 | 名古屋大学 情報科学研究科・複雑系科学専攻 |
| セキ カナコ 関 華奈子 | 准教授 | 名古屋大学 太陽地球環境研究所 |
| 曽我部 知広 | 助教 | 名古屋大学 工学研究科・計算理工学専攻 |
| ソノヤマ マサシ 園山 正史 | 准教授 | 名古屋大学 工学研究科・マテリアル理工学専攻 |
| タチバナ カン タ 橋 完 太 | COE 特任准教授 | 名古屋大学 工学研究科・計算理工学専攻 |
| タナカ ユキオ 田仲 由喜夫 | 准教授 | 名古屋大学 工学研究科・マテリアル理工学専攻 |
| チケンジ ジョウジ 千見寺 浄 慈 | 助教 | 名古屋大学 工学研究科・計算理工学専攻 |
| チヨウ ショウリョウ 張 紹良 | 教授 | 名古屋大学 工学研究科・計算理工学専攻 |
| 坪木 和久 | 准教授 | 名古屋大学 地球水循環研究センター |
| テラダ トモキ 寺田 智樹 | 講師 | 名古屋大学 工学研究科・計算理工学専攻 |
| テラダ ナオキ 寺田 直樹 | PD | 情報通信研究機構 電磁波計測研究センター |
| 樋田 美栄子 | 助教 | 名古屋大学 理学研究科 |
| ナガオカ マサタカ 長岡 正隆 | 教授 | 名古屋大学 情報科学研究科・複雑系科学専攻 |
| 中村 琢磨 | PD | 宇宙航空研究開発機構 宇宙科学研究本部 |
| 中村 雅夫 | 准教授 | 大阪府立大学 工学研究科 |
| ナカムラ ヨシアキ 中村 佳朗 | 教授 | 名古屋大学 工学研究科・航空宇宙工学専攻 |
| ニシホリ エイジ 西堀 英治 | 准教授 | 名古屋大学 工学研究科・マテリアル理工学専攻 |
| ニシムラ シンイチロウ 西村 信一郎 | PD | 名古屋大学 工学研究科 |
| ネモト ジロウ 根本 二郎 | 教授 | 名古屋大学 経済学研究科・社会経済システム専攻 |
| フカザワ ケイイチロウ 深沢 圭一郎 | PD | 情報通信研究機構 電磁波計測研究センター |
| 藤本 桂三 | PD | 名古屋大学 太陽地球環境研究所 |
| フルハシ タケシ 古橋 武 | 教授 | 名古屋大学 工学研究科・計算理工学専攻 |
| 堀之内 武 | 助教 | 京都大学 生存圏研究所 |
| 町田 忍 | 教授 | 京都大学 理学研究科 |
| マツキヨ シュウイチ 松清 脩一 | 助教 | 九州大学 総合理工学研究院 |
| マツモト ヨウスケ 松本 洋介 | PD | 名古屋大学 太陽地球環境研究所 |
| ミタケ シンゲキ 美宅 成樹 | 教授 | 名古屋大学 工学研究科・マテリアル理工学専攻 |
| 光武 亜代理 | 助教 | 慶応義塾大学 理工学部 |

| | | |
|--------------------|-----|--------------------------|
| ミヨシ タカヒロ 三好 隆博 | 助教 | 広島大学 理学研究科 |
| ミヨシ ヨシズミ 三好 由純 | 助教 | 名古屋大学 太陽地球環境研究所 |
| モリシタ コウジ 森下 浩二 | D1 | 名古屋大学 |
| ヤスダ コウジ 安田 耕二 | 助教 | 名古屋大学 情報科学研究科・複雑系科学専攻 |
| ヤマザキ リョウ 山崎 了 | 助教 | 広島大学 理学研究科 |
| ヤマト タカヒサ 倭 剛久 | 准教授 | 名古屋大学 理学研究科・物質理学専攻 |
| ヤマモト ユウサク 山本 有作 | 准教授 | 名古屋大学 工学研究科・計算理工学専攻 |
| ユウ イツセキ 優 乙石 | PD | 名古屋大学 情報科学研究科・計算科学フロンティア |
| ヨコサワ ハジメ 横澤 肇 | 教授 | 名古屋大学 情報科学研究科・複雑系科学専攻 |
| 吉岡 真由美 | PD | 名古屋大学 地球水循環研究センター |
| ヨシカワ トモヒロ 吉川 大弘 | 准教授 | 名古屋大学 工学研究科・計算理工学専攻 |
| ヨシマツ カツリ 芳松 克則 | 助教 | 名古屋大学 工学研究科・計算理工学専攻 |
| 依田 隆夫 | 講師 | 長浜バイオ大学 |
| ワタナベ タカシ 渡邊 崇 | 教授 | 名古屋大学 情報科学研究科・複雑系科学専攻 |
| ワタナベ ヒロシ 渡辺 宙志 | 助教 | 名古屋大学 情報科学研究科・複雑系科学専攻 |
| P. A. Davidson | | Cambridge University |

| | | |
|-------------------|-----|-----------------------------------|
| イシイ カツヤ 石井 克哉 | 教授 | 名古屋大学 情報連携基盤センター 大規模計算支援環境研究部門 |
| カヅタ ショウジ 梶田 将司 | 准教授 | 名古屋大学 情報連携基盤センター 情報基盤システムデザイン研究部門 |
| ツダ トモコ 津田 知子 | 助教 | 名古屋大学 情報連携基盤センター 学術情報開発研究部門 |
| ナガイ トオル 永井 亨 | 助教 | 名古屋大学 情報連携基盤センター 大規模計算支援環境研究部門 |
| 平野 靖 | 准教授 | 名古屋大学 情報連携基盤センター |
| ミヤオ マサル 宮尾 克 | 教授 | 名古屋大学 情報連携基盤センター |

(資料) ペタコン利用の研究計画の具体例

名古屋大学情報連携基盤センタースーパーコンピュータ利用者懇談会

名古屋大学情報連携基盤センターのスーパーコンピュータの利用者にペタコンを利用できるとしたらどのような研究計画があるか、ペタコン利用の研究計画について(案)とペタコン利用の希望について(案)のアンケートを取りました。その具体例を資料として以下に示します。

大規模計算1

1. 研究課題: 一様非等方 MHD 乱流の減衰法則
2. 研究組織(代表者・分担者):
金田行雄(名古屋大学)、P.A. Davidson(Cambridge 大学)、
岡本直也(名古屋大学)
3. 研究の概要:
一様非等方 MHD 乱流の減衰法則は、いくつかの理論予測があるものの未解決な問題である。本研究の目的は、NHD 乱流の大規模直接数値計算(DNS)を用いて、MHD 乱流の減衰法則を解明することである。
4. 計算の内容:
フーリエ・スペクトル法による周期境界 MHD 乱流の直接数値計算
(HPC では XPfortran, ES では MPI)
5. 現在までの到達度(具体的な大規模計算・シミュレーションの実施状況):
HPC: 格子点数 $N:N=512^3$ 、計算時間: 64CPU で 1.8 日
地球シミュレータ(ES): 格子点数 $N:N=512^3$ 、計算時間: 64 ノードで 0.03 日
ES: 格子点数 $N:N=1024^3$ 、計算時間: 256 ノードで 0.18 日
6. ペタコンで狙うものとその計算規模
一様非等方 MHD 乱流の減衰法則の探求には、格子点数 1024^3 , 2048^3 規模の大規模直接数値計算を必要とする。また、大規模 DNS において、パラメータ 3 つ(非等方性、乱れの強さ、初期のエネルギースペクトルのピーク)の依存性を調べる必要がある。これらの計算を効率よく実行するためには、ペタコンレベルの計算機能力を必要とする。また、MHD 乱流に限らず、他の非等方乱流に対する減衰法則を明らかにすることにより、非等方性乱流一般の減衰法則(大きいスケールの渦の普遍統計法則)についての統一的な理解が可能になると考えられ、非等方性乱流の組織的な大規模 DNS により、乱流現象解明へのブレークスルーが期待できる。

大規模計算2

1. 研究課題: 平行平板間乱流の超大規模直接数値計算
2. 研究組織(代表者・分担者):
金田行雄、石原 卓、森下浩二(名古屋大学)
3. 研究の概要:
近年のスパコンの発達により、壁のある乱流の最も基本的問題のひとつである平行平板間乱流の大規模直接数値計算 **DNS** が行われるようになってきた。しかしながら、計算機資源等の制約により、実験で観察されている「慣性小領域」が平行平板間 **DNS** では未だに実現されておらず、工学的に重要な高レイノルズ数の壁乱流の解析が出来ていない。本研究では、大規模数値計算の手法を駆使して、平行平板間 **DNS** による慣性小領域の実現を目指す。
4. 計算の内容:
フーリエ・チェビシェフタウ法もしくはフーリエ・コンパクト差分法による **DNS** (**HPC**、**ES** ともに **MPI**)
5. 現在までの到達度(具体的な大規模計算・シミュレーションの実施状況)
vpp5000: 格子点数 $N:N=1024 \times 512 \times 1024$ 、計算時間: **32cpu** で **18日**
hpc: 格子点数: $N=128 \times 128 \times 128$ 、計算時間: **32cpu** で **0.816(sec/step)**
hpc: 格子点数: $N=256 \times 256 \times 256$ 、計算時間: **32cpu** で **14.7(sec/step)**
6. ペタコンで狙うものとその計算規模
格子点数 $N=1024 \times 512 \times 1024$ で実施した平行平板間乱流の **DNS** では、得られた最大レイノルズ数が格子点数 256^3 の一様等方性乱流で実現できるものと同程度であった。この事実から格子点数 **4096** の **3乗クラス**の平行平板間 **DNS** で慣性小領域が見えはじめるのではないかと予想される。格子点数 **4096** の **3乗クラス**の平行平板間乱流 **DNS** は現在の **ES** を占有しても困難であり、ペタコンではじめて実現できるものである。

大規模計算3

1. 研究課題: タンパク質のシミュレーション
2. 研究組織(代表者・分担者):
優乙石(情報科学研究科・計算科学フロンティア)
3. シミュレーションの目的:
タンパク質周囲の水分子の分布や、運動を調べる。
4. 計算の概要・内容・系の概要
系の大きさ: 77 \AA^3
粒子数: タンパク質1個 + 水分子(**Tip3P**)14000個 合計約 **45000** 原子

静電相互作用の計算法: Particle Mesh Ewald 法を使用

アンサンブル: 粒子数、体積、温度一定の NVT

境界条件: 周期境界条

上記の系を、連携基盤センター AMBER9 (8 並列計算) で 24 時間実行するとおよそ

1 ナノ秒のシミュレーションが可能

5. ペタコンなどに期待する事

タンパク質内部の水分子の交換は、数ナノ秒に一回おきるような遅いタイムスケールなので、より長時間のシミュレーションが必要となる。

大規模計算4

1. 研究課題: ジオスペースにおける領域間結合

2. 研究組織(代表者・分担者):

荻野竜樹、梅田隆行、松本洋介、海老原祐輔(名古屋大学 STE 研)、
三好隆博(広島大学)、深沢圭一郎(NICT)、寺田直樹(NICT・JST-CREST)、他

3. 研究の概要:

太陽から地球に至る空間で生起するプラズマの非線形現象では、マクロな構造と境界層で生起するプラズマ不安定の成長による再構造形成がエネルギーと物質の輸送に重要な役割を果たしていると考えられている。即ち、広大で背景の物理量が比較的なだらかに変化する特徴的な領域と物理量が急激にしかも大きな範囲で変化する境界層が織り成す領域間結合を自己無撞着に解くことが重要である。そのマクロとメソスケール結合はプラズマ非線形物理の最重要課題の一つであり、大振幅プラズマ揺動がどのように発展するか、プラズマ乱流に発展するかを太陽地球系の現実的なパラメータに基づいて解明する。

4. 計算の概要:

MHD、拡張 MHD 及び流体モデルにより、太陽から地球までの特徴的な領域におけるグローバル構造とその境界層で生起するメソスケール現象を自己無撞着に解くことにより、新しい段階に入った領域間結合を計算する。さらに、その結合する領域を拡張する。

パラメータの大きく異なる領域の大域的構造と境界層の物理を同時に解くために、非一様格子、マルチグリッド、陰陽(インヤン)格子などを組み合わせた計算モデルを使用する。並列計算には、MPI を用いる。

5. 現在までの到達度

富士通 PRIMEPOWER HPC2500/1536 を用いた 3 次元 MHD コードのテスト計算で次のように 512, 1024, 1536cpu を用いて 0.92, 1.58, 2.3 TFlops の計算速度を得ている。

現在実行している通常の MHD コードの大型計算は格子点数が 512 の 3 乗程度で

cpu 数は 64-256 である。

6. ペタコンで狙うものとその計算規模

MHD、拡張 MHD 及び流体モデルのシミュレーションは計算の繰り返し回数が 10,000 回以上と多いため、現在の計算機資源ではメモリより計算速度が大きな制限になっている。太陽地球系の実際のパラメータで、グローバルな構造における境界層の物理を解明してその反作用をグローバル構造に自己無撞着に戻すシミュレーションを行おうとすると、概算で 4000 の 3 乗の格子点を使って、現在の HPC2500 で 10,000 時間のオーダーの計算量になる。もちろん、格子や計算方法の改良は折込済みである。メモリ使用量は約 2-4TB であるが計算速度が必要なために並列度をできるだけ大きくしたい。

領域間結合として太陽風—磁気圏（—内部磁気圏）—電離圏を 3次元で自己無撞着に解くモデルは世界の幾つかのグループで試みが始まったが、まだ十分な 3次元モデルのシミュレーションは実施されていない。それは、外部磁気圏、内部磁気圏、電離圏のパラメータが広範囲に変化して、解くべき空間と時間のスケールの範囲が大きいためである。それに加えて内部磁気圏は環電流を含めるために多流体の扱いが、電離圏は Hall MHD か中性流体を含める必要がある。このプラズマと中性流体の結合を解く並列計算モデルの実行も電離圏の高度分解能が必要なために大規模計算となる。

大規模計算5

1. 研究課題: 無衝突衝撃波による粒子加速

2. 研究組織(代表者・分担者):

梅田隆行(名古屋大学 STE 研)、山崎了(広島大学)、
杉山徹(地球シミュレータセンター)、松清修一(九州大学)、他

3. 研究の概要:

宇宙に普遍的に存在する無衝突衝撃波は、高エネルギー宇宙線の発生源ではないかと考えられているが、高エネルギー粒子を生成する加速機構は数十年 来の未解決問題である。本研究では、プラズマの運動を第一原理で解くことにより無衝突衝撃波の運動論的物理を解明し、粒子加速機構の謎に迫る。計算科学・プラズマ物理学のアプローチにより天文学・地球物理学的な課題に挑む、学際的な研究である。

4. 計算の概要:

相対論的電磁粒子コードにより、無衝突プラズマの運動と電磁界の相互作用を直接計算する。

シミュレーション領域を衝撃波静止系でとることにより、従来の計算に比べて格段に長時間の計算を行うことが可能である。

現在は Open MP と自動並列の併用により、ノード内共有メモリ内で並列化

5. 現在までの到達度

2次元 4000×1000、全粒子数は約 20 億個。メモリ使用量は約 20GB。

名大 HPC2500 の 64CPU において、10,000 ステップで約 100 時間の計算を、100,000 ステップまで実行。

6. ペタコンで狙うものとその計算規模

コードの 3次元化により、4000×1000×1000 程度の格子点数での計算を計画。計算の精度を上げるために全粒子数を 4 兆個程度に増加。メモリ使用量は約 40TB であるため、既存または次期スパコンレベルではほぼ計算不可能。

無衝突衝撃波の大規模 3次元計算は世界的にも例がなく、衝撃波内における 3次元的な粒子の運動を世界で始めて明らかにすることができる。10 万以上の超並列計算において高い実効性能を得るための超並列化技術がコード開発課題として挙げられる。

大規模計算6

1. 研究課題:ブラソフシミュレーションで見る惑星磁気圏の 3次元運動論的描像

2. 研究組織(代表者・分担者):

梅田隆行、松本洋介(名古屋大学 STE 研)、三好隆博(広島大学)、
深沢圭一郎(NICT)、寺田直樹(NICT・JST-CREST)、他

3. 研究の概要:

これまで、惑星磁気圏の研究は単一流体 MHD シミュレーションが主流となって行われてきた。しかし磁気圏には、衝撃波・磁気リコネクションなど、MHD 近似が成り立たない物理過程が存在するため、粒子の運動論効果を取り入れる必要がある。本研究では、無衝突ボルツマン(ブラソフ)方程式とマックスウェル方程式を直接解き進める第一原理計算により、惑星磁気圏の運動論的描像を明らかにする。水星では磁場によるイオンの旋回半径と磁気圏のサイズが同程度とされており、水星磁気圏では粒子の運動論効果が重要となることが予想されている。本研究課題はペタコン稼働の時期に打ち上がる水星探査衛星「Bepi Colombo」ミッションとの連携を考える上でも重要である。

4. 計算の概要:

位置・速度位相空間におけるプラズマ粒子の分布関数と電磁界の時間発展を無衝突ボルツマン方程式とマックスウェル方程式により直接解き進める。従来の電磁粒子シミュレーション法と比べ、数値ノイズが格段に小さく、また分散メモリ型並列計算機に向いている。現在は Open MP と自動並列の併用により、ノード内共有メモリ内で並列化しているが、MPI による領域分割へは、短時間で移行可能である。

5. 現在までの到達度(具体的な大規模計算・シミュレーションの実施状況):

実空間 2 次元 256×128、速度空間 3 次元 30×30×30 でテスト中。メモリ使用量は約 20GB。

名大 HPC2500 の 64CPU において、5,000 ステップで約 140 時間の計算を、25,000 ステップまで実行。

6. ペタコンで狙うものとその計算規模

コードの 3 次元化により、512×512×512 程度の格子点数での計算を計画。メモリ使用量は約 80TB であるため、既存または次期スパコンレベルでは計算不可能。3 次元磁気圏ブラソフシミュレーションは世界で未だ行われていない。また、3 次元電磁粒子シミュレーションは、理想化された物理パラメータを用いる必要があるが、ブラソフシミュレーションでは現実の物理パラメータを用いた計算が可能であり、これまでの MHD シミュレーションと直接比較が行える。これまでの MHD シミュレーションでは流体的な描像しか得られなかったが、プラズマ粒子の分布関数を直接計算することにより、世界で初めて惑星磁気圏の運動論的描像を明らかにすることができる。

大規模計算 7

1. 研究課題: 分子動力学法による液膜破壊現象の直接計算

2. 研究組織(代表者・分担者):

渡辺宙志 (名古屋大学情報科学)、鈴木将 (名古屋大学計算科学フロンティア)

3. 研究の概要:

液膜破壊現象は、液滴が液膜に衝突して形成されるミルククラウン現象から、自動車のエンジン内における噴霧燃焼など、身近な例から応用まで多岐にわたる重要な現象である。これらの現象は相転移や化学反応を伴う非平衡非定常状態であり、界面張力や重力の影響も複雑にからむため理論的な解析は非常に難しく、これまで数値計算及び実験が主な研究手段となってきた。数値計算では、これまでナビエ・ストークス方程式の差分化を中心とした計算により研究が行われてきたが、境界の移動、生成消滅を伴うことから空間を格子に切って扱うことに対して様々な問題が指摘されている。そこで、構成粒子の運動を分子動力学法により全て追うことでこれらの現象の解明をはかる。一般に分子動力学法による計算は格子法に比べて計算量が大きいですが、昨今の計算能力の向上により数百億から 1 兆粒子に近い粒子を扱うことが可能となりつつある。また、粒子を用いれば相転移及び移動境界を自然に扱えるという利点もある。これら全ての粒子の情報を解析することで、液膜破壊現象の理論研究を推進し、自動車の燃費向上やインクジェットプリンタの設計など、応用面へのフィードバックを目指す。

4. 計算の概要:

Lennard-Jones 粒子に代表されるような斥力コアと引力相互作用を持った粒子の運動方程式を計算する。粒子計算におけるボトルネックは隣接粒子探索と力の計

算の二点だが、隣接粒子探索を高速化するためにグリッド登録法、及び有効時間の概念を用いた隣接粒子リストの再利用を行う。なお、粒子計算は格子計算に比べて使用メモリあたりの計算量が大きく、大規模計算を行うのにメモリバンド幅をあまり要求しないという特徴を持っている。これはメモリ転送がボトルネックになりにくいことを意味しており、計算機の理論性能に近い実効性能を得られると期待できる。

5. 現在までの到達度(具体的な大規模計算・シミュレーションの実施状況):
三次元中密度(数密度 0.5 程度)の系を1ノードあたり 100 万粒子程度の系を一秒間に一度数値積分することができる性能を持ったコードの開発を行った。これは現実の系に換算しておよそ 0.1μ 立方メートルの系に対応する。並列化は MPI を用いた主に実空間の領域分割を用いるが、現在隣接粒子の再利用に用いているアルゴリズムが粒子数の増大に対して(特に 1 千万粒子を超えたあたりから)性能を落としやすい性質を持っているため、大規模粒子計算に向けた新しいアルゴリズムを開発中である。
6. ペタコンで狙うものとその計算規模
現在の準備的計算により、液膜破壊現象を十分な解像度で計算するには最低で 1 億粒子以上の粒子数が必要となることがわかっている。1ノードあたり 100 万粒子を扱うとして、1 万ノードを使用して並列化効率を 50%と仮定すれば 50 億粒子となり、十分な粒子数を得ることができる。この系はおよそ 5μ 立方メートル大きさに対応し、液滴噴霧の直接計算が可能となる。

大規模計算8

1. 研究課題:大規模非線形固有値問題の解法とその応用
2. 研究グループ:
山本有作、曾我部知広、張紹良(名古屋大学)、他
3. 研究の概要:
パラメータ \mathbf{z} に依存する行列 $\mathbf{A}(\mathbf{z})$ に対し、 $\mathbf{A}(\mathbf{z})\mathbf{x} = \mathbf{0}$ を満たす $\mathbf{0}$ でないベクトル \mathbf{x} が存在するような \mathbf{z} の値を求める問題を非線形固有値問題と呼ぶ。非線形固有値問題は、電子状態計算、非線形弾性力学、理論流体力学など様々な分野で重要な役割を果たす。従来、非線形固有値問題の解法としては多変数 Newton 法、非線形 Jacobi-Davidson 法などが使われてきたが、指定された領域にあるすべての解を安定に求めることは困難である。そこで我々は、非線形固有値問題を線形固有値問題に帰着させることにより、指定された領域にあるすべての解を安定に求めるアルゴリズムを開発した。このプログラムをペタコン上で大規模並列化し、理論流体力学におけるスケーリング指数の計算など、物理の問題に適用する。
4. 計算の概要:
我々のアルゴリズムにおける計算は、行列の(線形)固有値を求めるための Arnoldi

法、その中で使われる連立一次方程式を解くためのクリロフ部分空間反復法、その前処理からなる。並列度を高めるため、前処理はマルチグリッド前処理など、高い並列性を持つ手法を採用する。並列計算には、MPI(ノード間)と OpenMP(ノード内)の両方を用いる。

5. 現在までの到達度

富士通 PRIMEPOWER HPC2500 16CPU を用いて、最大 50 万元の行列に対し、非線形固有値問題を解くことに成功した。この結果を名古屋大学の水野吉規 COE 研究員、金田行雄教授とともに、理論流体力学のスケール指数問題に適用し、2次元乱流におけるスケール指数の計算に成功した。計算格子は最大 30^4 、行列は 50 万元、非零要素率 10%の行列で、計算時間は 100 時間程度、使用メモリは 400GB である。並列化は OpenMP により行っている。

6. ペタコンで狙うものとその計算規模

我々のプログラムをペタコン上で大規模並列化することにより、10 億元程度の非線形固有値問題を解けるようにしたい。その際、ネックとなるのはクリロフ部分空間法の前処理部分であり、マルチグリッド前処理やブロック不完全 LU 分解前処理、領域分割型前処理など、並列度を向上できる前処理方式を複数検討中である。10 億元の非線形固有値問題が解ければ、たとえば 3 次元乱流のスケール指数計算(計算格子 30^6)が可能となり、より現実に近い乱流の統計的性質の解明に大きな前進が期待できる。

大規模計算9

1. 研究課題: 生体分子の立体構造予測シミュレーション

2. 研究組織(代表者・分担者):

岡本祐幸(名古屋大学)、杉田有治(理化学研究所)、光武亜代理(慶應義塾大学)、依田隆夫(長浜バイオ大学) 他

3. 研究の概要:

蛋白質の立体構造とその生化学的機能との間には密接な関係が存在する。よって、ゲノムプロジェクトが終わった現在の最重要課題は、ゲノムプロジェクトで決定された、蛋白質のアミノ酸配列の情報から、その立体構造を予測することである。しかし、生体高分子系などの多自由度の複雑系では、系にエネルギー極小状態が無数に存在するため、従来のカノニカルアンサンブル上の一定温度のシミュレーションでは、エネルギー極小状態に留まってしまうという困難があった。アミノ酸配列の情報のみを使う第一原理からのタンパク質の折り畳みが不可能と広く認識されているのは、このためである。我々は、拡張アンサンブル法と総称される強力な手法を分子シミュレーションの分野に適用することを提唱した。本研究では、我々が独自に開発した拡張アンサンブル法の一つである、マルチカノニカルレプリカ交換法(MUCAREM)な

どを、水分子をあらわに含む小タンパク質の系に適用する。そして、完全に伸びた構造から自然の立体構造に折り畳むことを目指す。

4. 計算の内容:

全原子模型の大規模分子動力学シミュレーション

5. 現在までの到達度(具体的な大規模計算・シミュレーションの実施状況):

アミノ酸数 **56** 個の小蛋白質系(水分子を含めて合計約 **5** 万原子の系)を、地球シミュレータ112ノード(896CPU)のレプリカ交換分子動力学シミュレーションを実行している。

6. ペタコンで狙うものとその計算規模

現在の小蛋白質系(5万原子系)においてさえ、地球シミュレータの数万ノード時間の計算量でも全然計算パワーが足りない状態であるが、ペタコンでは、ぜひ、数十万原子系の普通の蛋白質の折り畳みシミュレーションに挑戦したい。数万並列の計算を実行する。

大規模計算 10

1. 研究課題:強相関多体電子系シミュレーション

2. 研究組織(代表者・分担者):

大成誠一郎(名古屋大学)

3. 研究の概要:

超伝導や磁性等の物理現象は多数電子の相互作用により引き起こされる。マイクロから超伝導や磁性を解明するには、多数電子がクーロン斥力により複雑に相互作用している系(強相関多体電子系)を取り扱う必要がある。厳密に強相関電子系を解くことは非常に困難であり、現在では小数系で厳密対角化等の方法を用いて解かれているのみである。近年注目されている強磁性体から半導体へのスピン注入等、デバイスを作る際に必要になる、強相関接合系の計算は並進対称性が破れているため計算が困難であり、新しい計算手法の考案が必要であると考えている。今日まで、強相関多体電子系を取り扱うため、様々な近似方法が開発されてきているが現実の系の情報を詳細に取り込むにつれて計算は複雑になり、現在の計算リソースでは計算の遂行は非常に困難であり、ペタコンの使用により初めて解明される物理現象は非常に多く、重要な結果を導くと期待している。

4. 計算の内容:

強相関多体電子系における超伝導・磁性の計算

強相関多体電子接合系における電子状態計算

5. 現在までの到達度(具体的な大規模計算・シミュレーションの実施状況):

東京大学のスパコン(1ノード **16CPU**)を用いて、**2次元**の長距離クーロン相互作用による超伝導発現メカニズムの解明や、強相関接合系における超伝導ギャップ関

数の対称性の変化等を計算した。また、先日発見された新しい超伝導体である **LaOFeAs** の超伝導発現メカニズムを 2 次元 5 軌道モデルで解明した。更に、3 次元 2 軌道系における超伝導転移温度の上昇メカニズムについても、単純なハバードモデルの範囲ではあるが、計算を行った。

6. ペタコンで狙うものとその計算規模

現在の計算リソースでは、単純な 3 次元系や長距離クーロン相互作用を含んだ 2 次元系を計算するのが限界である。しかし、現実物質の相転移を有限温度で厳密に取り扱う際には 3 次元系で計算する必要があり、3 次元多軌道モデルや長距離クーロン相互作用を含んだ計算や強相関多体電子接合系の計算をペタコンで遂行したいと考えている。

極低温領域を計算する際には更に計算リソースが必要になるが、ノード間並列化の効率を増やし高速化を行うことにより、ペタコン等の次世代計算機であれば計算を遂行可能であると考えている。

大規模計算 11

1. 研究課題:雲のバーチャルリアリティ

2. 研究組織・グループ(代表者・分担者)

代表者:坪木和久 (名古屋大学・地球水循環研究センター)

分担者:大東忠保 (名古屋大学・地球水循環研究センター)

分担者:吉岡真由美 (名古屋大学・地球水循環研究センター)

3. 研究の概要・内容

雲は地球大気のもっとも特徴的な要素で、降水をもたらすものとして、また、大気の運動を駆動するものとして、さらに放射収支を通して気候に大きく影響するものとして重要である。しかしながら雲の内部構造を直接観測することは容易ではない。特に激しい降水や強風をもたらす積乱雲群の内部を観測することは困難である。そこで雲の研究では雲解像モデルを用いたシミュレーションが不可欠である。雲を構成する粒子は数マイクロメートルであり、一方で台風など組織化した雲システムは数 1000km におよぶ。このため雲のシミュレーションは非常に大規模なものとなる。我々はこれまで雲を詳細に表現する数値モデル(雲解像モデル)を開発してきた。これを高度化し雲一つひとつを解像するような超高解像度のシミュレーションを行い、現実の雲を計算機のなかで再現すること、すなわち「雲のバーチャルリアリティ(仮想現実)」を実行することが本研究の目的である。これにより観測では得られない雲の物理量を計算し、雲の物理プロセス、構造、メカニズムおよび雲の地球大気における役割を調べる。

4. 計算の概要・内容

我々は地球シミュレータなどの大規模並列計算機で効率よく計算できる雲解像モデ

ル CReSS (Cloud Resolving Storm Simulator) を開発している。これまでこのモデルを用いて、集中豪雨や豪雪、台風、竜巻などの激しい気象擾乱のシミュレーションを 1km 以下の高解像度で行ってきた。1km 解像度をシンボリックに用いて「1km メッシュの気象学」と呼んでいる。雲・降水システムを構成する積乱雲一つひとつを解像することで、台風や豪雨システムを非常にリアルに再現してきた。雲の物理過程を詳細に表現することにより、非常に激しい豪雨なども量的に精度よく予測することができる。さらに、積乱雲が作り出す竜巻などの激しい現象のシミュレーションも行ってきた。このようにここで行う雲解像モデルを用いた計算は、雲一つひとつを解像しつつかつ、1000km 以上におよぶ、雲・降水システム全体をシミュレーションするような計算を行う。

5. ペタコンで何をしたいか

上記のようにこれまで地球シミュレータを用いて、台風などの大規模なシステムを 1km 程度の高解像度でシミュレーションを行うことが可能になってきた。この解像度は台風を構成する積乱雲をkarouじて解像できるものである。次期計算機ではさらに高解像度で台風や豪雨システムを構成する雲そのものを詳細に解像する計算を行いたい。あたかも台風を構成する雲を観測しているかのような仮想現実、すなわち「雲のバーチャルリアリティ」を実現できる計算を行いたい。

6. ペタコン利用に関する要望・希望

上記のような雲解像モデルの計算では、出力データがテラバイトオーダーの非常に大規模なものになる。地球シミュレータでは非常に大規模なストレージが用意されているが、それでもまだ不十分であった。次期計算機において高速な計算速度は重要であるが、このような計算の場合、むしろデータを出力するストレージとそれを可視化するツールがより重要なものとなる。そこで次期計算機では大規模なシミュレーションの出力を十分扱えるような大規模ストレージの充実を希望する。計算の発展とともに出力が増加するが、それに対応できるような拡張性の高いストレージシステムが望まれる。また、そのような大規模データを解析し、効果的に可視化するツールがあることが必要である。