

4. スパコンによる成果例

スーパーコンピュータ「京」の利用成果がゴードン・ベル賞を受賞 2011年

概要

理研、筑波大、東大、富士通のチームによる『京によるシリコン・ナノワイヤの第一原理計算』が、コンピュータシミュレーション分野で最高の賞であるゴードン・ベル賞の最高性能賞を受賞。日本人によるこの受賞は2004年以来7年ぶりの快挙。

(参考)ゴードン・ベル賞

米国計算機学会(ACM)が、毎年ハードウェアとアプリケーションの開発において最高の成果をあげた論文に付与する賞。毎年11月に開催される米国スーパーコンピュータ会議にて表彰式が行われる。このうち実行性能部門の最高性能賞は最も荣誉ある賞とされている。

研究内容

【背景】

- 22nm以下の微細構造をもつ次世代半導体において、漏れ電流による消費電力の解決が課題。このため、シリコン・ナノワイヤが次世代半導体の材料として期待されているが、その実現には、ナノワイヤ内の原子・電子の解析が不可欠。
- しかし、このような微細材料での実験はできず、また、シミュレーションでは計算機の能力不足から、2,000原子程度(ごく一部分)までしか計算できなかった。

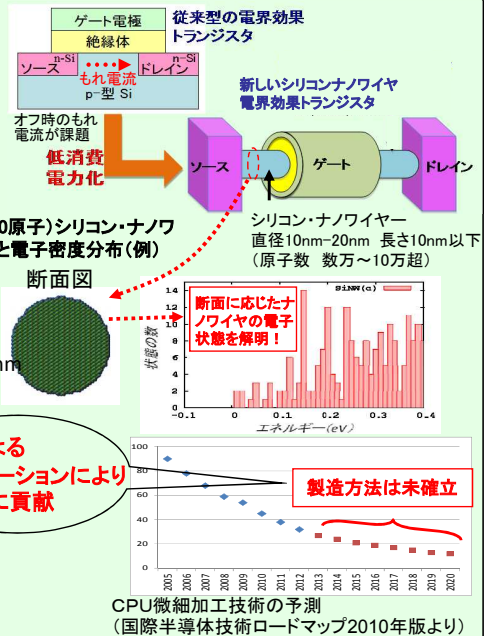
【京による成果】

- 現実の材料サイズに近い10万原子規模のナノワイヤの電子状態の計算し、世界で初めてナノレベルの高精度シミュレーションを可能にした(3ペタフロップスでの計算)。(→従来のシステムでは30年以上かかる計算が、「京」により1週間で実施可能に)
- また、約4万原子のナノワイヤの電子状態を断面の形状を変えて計算し、断面の形状による電子輸送特性の変化を初めて明らかにした。

【今後の展開】

- 22nm以下の微細構造を持つ次世代半導体の製造方法の確立
- 高速・高機能、省エネルギーなどの特長をもつ新しいデバイスの設計に貢献

シリコン・ナノワイヤを用いた次世代半導体のイメージ



スーパーコンピュータ「京」の利用成果がゴードン・ベル賞を受賞 2012年

概要

筑波大、理研、東工大の研究グループによる『約2兆個のダークマター粒子の宇宙初期における重力進化の計算』が、コンピュータシミュレーション分野での最高の賞であるゴードン・ベル賞を受賞。日本のグループによるゴードン・ベル賞受賞は2年連続で、今回は筑波大グループの単独受賞。

(参考)ゴードン・ベル賞

米国計算機学会(ACM)が、毎年ハードウェアとアプリケーションの開発において最高の成果をあげた論文に付与する賞。毎年11月に開催される米国スーパーコンピュータ会議(SC)にて表彰式が行われる。

研究内容

【背景】

- 宇宙の形成過程を明らかにするには、ダークマターの重力進化の解明が不可欠。(ダークマターとは:宇宙全体の物質エネルギーのうち約2割を占め重力相互作用だけが働く物質であり、素粒子としての正体は解明されていない)
- しかし、1兆個以上におよぶダークマター粒子のシミュレーションは計算機の能力が不足し、実施できなかった。(現在は筑波大グループの他、米国・アルゴンヌ研グループも実施中)

【「京」による成果】

- 世界最大規模である数兆個におよぶダークマター粒子の重力進化を、実用的な時間内にシミュレーションすることを可能とした(5.67ペタフロップスでの計算)。(→パソコン1台で数百年かかる計算が、「京」により3日で実現)
- 宇宙初期(約137億年前の宇宙誕生から約200万年後~約1億年後)のダークマターの密度分布を計算(右図参照)
- 筑波大グループのアプリケーションは、アルゴンヌ研グループの6倍程効率が良く、アプリケーション開発でも世界をリードしていることが示された。

【今後の展開】

- 星や銀河の形成など、宇宙の構造形成過程に関する科学的成果の創出が期待される。
- より微細なダークマター構造を解明でき、ダークマター粒子の探査、正体解明に貢献。

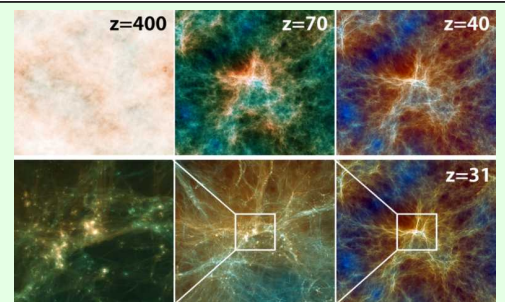


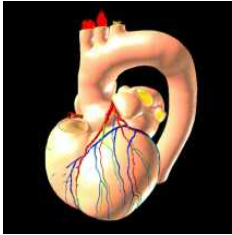
図:宇宙初期のダークマター密度分布

明るさはダークマターの空間密度を表し、明るいところは密度が高い。また、zは赤方偏移の量を表しており、数値が大きいくほど過去を見ている(天文学では時間や距離の尺度として用いられる)。

- 【上段左】宇宙誕生時はほぼ一様。z=400は宇宙誕生から約200万年後であり、1辺約5光年。
- 【上段中】時間の経過につれて重力により集まり、大きな構造が形成される。
- 【下段】下段右は、誕生から約1億年後の宇宙の姿(約136億年前、1辺約65光年)。中心部を拡大したものが下段中、更に拡大したものが下段左。(zは全て31)

スーパーコンピュータによって期待される成果の例（1）

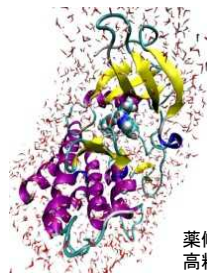
● 心疾患のマルチスケール・マルチフィジックスシミュレーション (研究代表者: 東京大学・久田俊明)



心臓シミュレーション

細胞・組織・臓器を部分ではなく、**心臓全体をありのままに再現し**、心臓病の治療法の検討や薬の効果の評価に貢献

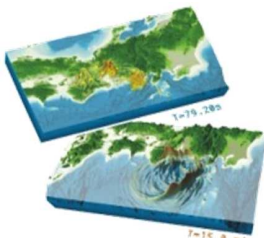
● 創薬応用シミュレーション (研究代表者: 東京大学・藤谷秀章)



薬候補のタンパク質への高精度結合シミュレーション

新薬の候補物質を絞り込む**期間を半減**(約2年から約1年)して画期的な新薬の開発に貢献

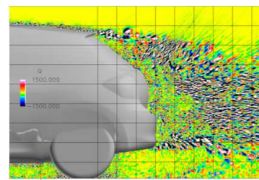
● 地震・津波の予測精度の高度化に関する研究 (研究代表者: 東京大学・古村孝志、東北大学・今村文彦)



シミュレーションによる地震・津波の被害予測

50m単位(ブロック単位)での予測から地盤沈下や液状化現象等の影響も加味した**10m単位(家単位)の詳細な予測**を可能とし、都市整備計画への活用による**災害に強い街作り**や**きめ細かな避難計画の策定**等に貢献

● 乱流の直接計算に基づく次世代流体設計システムの研究開発 (研究代表者: 東京大学・加藤千幸)

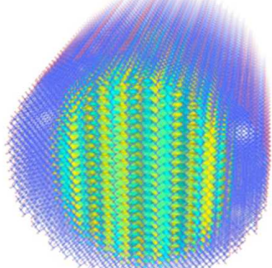


車両挙動を解明する全乱流渦のシミュレーション

乱流の直接計算を工業製品の熱流体設計に適用することにより、従来行われていた**風洞実験などを完全にシミュレーションで代替**し、設計の効率化に貢献

スーパーコンピュータによって期待される成果の例（2）

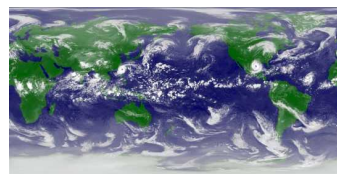
● シリコンナノワイヤーのシミュレーション (研究代表者: 東京大学・押山淳、岩田潤一)



シリコンナノワイヤー内の電流の通り道の解析

ナノレベルの精密シミュレーションにより、**低消費電力トランジスタなどの新しいデバイスや高効率な電池材料などの機能性材料の開発**等に貢献

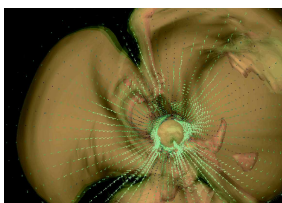
● 地球規模の気候・環境変動予測 (研究代表者: JAMSTEC・時岡達志、東京大学・木本昌秀、佐藤正樹)



全球雲解像モデルNICAMによるシミュレーション

世界初の雲まで解像できる高解像度の大気モデルを用いて、熱帯の巨大積雲群の東進を予測。**2週間以上先の天気予報の可能性を切り開く**

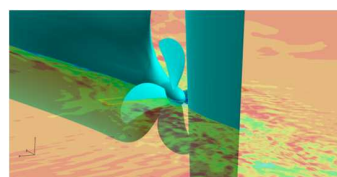
● 超新星爆発およびブラックホール誕生過程の解明 (研究代表者: 京都大学・柴田大)



超新星爆発の3次元シミュレーション

高精度な一般相対論的流体計算及びニュートリノ輻射輸送計算で、従来再現に成功していない**重力崩壊型超新星爆発及びブラックホール誕生過程を解析、評価**する。

● 船体まわりの流れのシミュレーション (研究代表者: 東京大学・加藤千幸)



プロペラ回転や波の影響も考慮した、300億格子規模の超大規模実用計算

(財団法人 日本造船技術センター 提供)

マイクロオーダーの渦まで再現することにより、予測精度を飛躍的に向上させ、**実験を完全にシミュレーションで代替**し、**開発コスト・開発期間を大幅に削減**することを目指す。