

計算科学の世界

京
K computer

京がつくる時代

K computer Newsletter
March 2013 No.5

Interview

スーパーコンピュータの中に

「宇宙」を
生みだす。

見えない粒子ダークマターの
重力進化を
「京」でシミュレーション

Research Teams

研究チーム紹介

可視化技術研究チーム
連続系場の理論研究チーム



独立行政法人理化学研究所
計算科学研究機構



スーパーコンピュータの中に 「宇宙」を 生みだす。 見えない粒子ダークマターの 重力進化を 「京」でシミュレーション

みなさんは「ダークマター」ということばを聞いたことがありますか。宇宙の構造形成のカギを握るといわれる謎の粒子です。世界中で多くの研究グループが、その正体を突き止めようと、理論研究や観測に取り組んでいます。その解明に大きく寄与しようというのが、「京」による大規模シミュレーション。スーパーコンピュータが描き出す宇宙進化のシミュレーションから、どのような新たな発見が生まれてくるのか、期待が高まっています。

筑波大学
計算科学研究センター
研究員

石山智明

Tomoaki Ishiyama

ダークマターとの付き合いは大学4年生から。その後、大学院、研究員と所属は変わるが一貫してダークマターシミュレーションに携わる。「京」との関わりは2011年4月から。



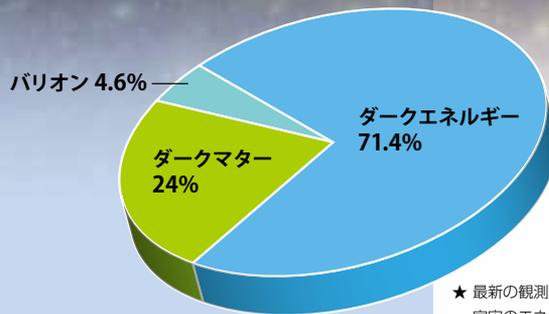
ダークマターとは何か？

『宇宙の物質のほとんどは実はダークマターである』と最新の宇宙構造形成理論では言われています。

石山さんは、その意味を次のように解説します。「最新の観測データの解析から、原子や分子、さらにそれらが集まって構成している恒星や銀河あるいは銀河団など、目に見えるすべての物質（ほとんどは陽子や中性子などの『バリオン』と呼ばれる物質）は宇宙のエネルギーのわずか4.6%に過ぎず、24%がダークマター、71.4%がダークエネルギーで構成されているこ

図1 宇宙のエネルギー成分

- バリオン 4.6%
 - ・原子など目に見えるもの
- ダークマター（暗黒物質） 24%
 - ・重力のみはたらく
 - ・宇宙の構造形成に寄与
 - ・コールド（速度分散が小さい）
- ダークエネルギー 71.4%
 - ・宇宙膨張に寄与



★最新の観測結果 (WMAP 9-YEAR) の解析に基づく
宇宙のエネルギー成分がNASAから発表されています。
<http://map.gsfc.nasa.gov/news/index.html>

とがわかりました」【図1】。

ダークマターは日本語では「暗黒物質」とも呼ばれ、目には見えませんが、重力のみが作用する未知の粒子です。

「そもそもダークマターは、理論的に導き出された『仮説』であり、今はその素粒子としての正体を明らかにしようと世界中の天文学者や宇宙物理学者が躍起になっているところです」。

ダークマターの存在を世界で初めて主張したのは、スイス人の天文学者、フリッツ・ツビッキーです。1933年、銀河団を観測していて、目に見える物質の質量だけでは銀河の動きが説明できず、見えない何らかの物質の質量がなければ、銀河がばらばらになってしまうということに気がついたのです。その後、大型望遠鏡やハッブル宇宙望遠鏡など観測技術の進歩もあり、ダークマターの存在を指し示す様々な証拠が見つかってきました。そこで「ダークマター発見競争」に火がついたのです。

ダークマターと宇宙の構造形成

私たちの宇宙には、星や銀河がまんべんなく存在しているのではない、ということが観測結果からわかっています。恒星が集まって銀河となり、銀河が数百から数千集まって銀河団となり、さらに銀河団が集まって超銀河団を形成する一方で、銀河がほとんどない超空洞と呼ばれる領域があります。これを『宇宙の大規模構造』と言います。このような構造がどのようにして生まれたのか、そこにダークマターが大きく関わっているのです。

最新の理論では、宇宙の構造形成を次のように説明しています。

ビックバン直後の宇宙にはほぼ一様にダークマターが存在しました。ただ、そこにごくわずかな物質のむら（密度揺らぎ）があったのです。密度揺らぎがあると、ダークマター粒子がそれぞれの重力によってたがいに引き合い、集まり始めます。その過程を繰り返して、しだいにダークマターがたくさん集まった“かたまり”（これをダークマターハローと言います）が生まれ、さらにこれらが合体を繰り返してより大きなものへと成長していきます。この大きなダークマターの“かたまり”の重力に、ガスが引き寄せられて初代星や銀河が生まれます。このようにダークマターをカギとして理論が構成されています【図2】。

スーパーコンピュータ「京」の出番

宇宙の構造形成にはダークマターの存在が不可欠であることが理論的には明らかになってきました。

しかしながら宇宙という広大な空間、137億年という時間スケール、しかも目に見えない粒子の振る舞いを実験で検証することは不可能です。

「そこでコンピュータによるシミュレーションが宇宙の構造形成過程を研究する最適手段となるのです。すでに多くの研究機関がこのシミュレーションに取り組み、ダークマターの構造形成がコンピュータ上に再現されてきましたが、スーパーコンピュータ「京」を活用すれば、これまでになかった大規模で高解像度のダークマターシミュレーションが可能になり、ダークマターの微細構造を見ることができるようになるのです。そうすれば宇宙の構造が形成さ

図2 宇宙の階層構造

ダークマターは、星や銀河などの天体形成に必要不可欠

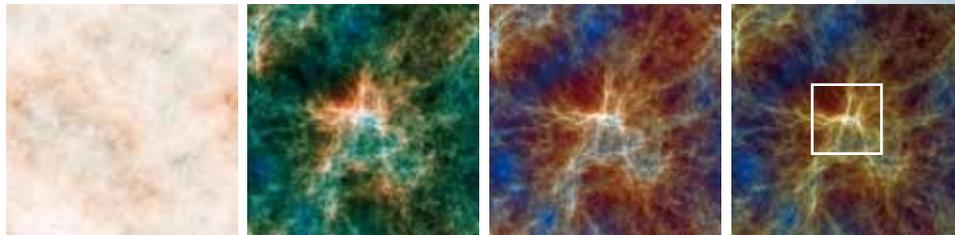


図3 宇宙初期のダークマターの空間分布シミュレーション

画像提供：石山智明研究員

明るいとところほどダークマターの空間密度が高いことを表しています。ダークマターは目に見えない物質ですが、このシミュレーションではダークマターの空間密度が高いところほど白く可視化しています。

①は宇宙誕生から約200万年後、②は宇宙誕生から約1億年後の宇宙の姿を表しています。ダークマターハロー（もっとも明るいところ）の中心は楕円状で高密度です。また周辺には無数のより小さいハローが存在しています。宇宙が生まれてすぐはほぼ一様ですが、時間が経つにつれて重力により集まり、大きな構造が形成されていく様子がわかります。



①200万年後

②1億年後

れる過程をより詳細に明らかにすることができます」。

こうして、最終的には2兆におよぶダークマター粒子が宇宙の誕生直後からどう進化していくのか、2兆もの粒子一つひとつが重力によってどのように引き合い、集まっていくのか、を明らかにしていくという世界最大規模のシミュレーションが始まったのです【図3】。

「京」によるシミュレーションは宇宙構造形成理論に寄与するだけでなく、実際のダークマター粒子の発見にも貢献します。より詳細にダークマターの分布をシミュレーションすることによって、ダークマターが高密度で存在する場所が推定されれば、銀河系のどのあたりを探査すれば、ダークマターを発見できる可能性が高いかがわかるのです。石山さんが今取り組んでいるのは、太陽系近傍におけるダークマター分布の微細構造の解明です。より詳細なシミュレーションにはより多くの粒子数が必要です。そこで「京」が力を発揮するのはいうまでもありません。

世界最速のアプリ開発で「ゴードン・ベル賞」受賞

石山さんたちの研究グループは、数兆個のダークマター粒子に



よる重力進化のシミュレーションを現実的な時間内で終わらせるために、「京」の性能をフルに引き出せるよう、シミュレーションアプリケーションを改良しました。その結果、2兆粒子のダークマターシミュレーションで、実効性能5.67ペタフロップス（毎秒5670兆回の演算性能）を達成。2012年11月16日（現地時間15日）、米国ソルトレイクシティで開催された「ハイ・パフォーマンス・コンピューティングに関する国際会議SC12」において、もっとも優秀な並列計算を達成した論文に贈られる「ゴードン・ベル賞」^{※4}を受賞しました。

「最終候補の一つには、同様のアプリケーションを開発した米アルゴンヌ国立研究所のグループも残っていたのですが、実際の計算速度が米国グループと比べて5倍近い速度だったことから受賞となったようです」と、石山さんは受賞理由をこう推測しています。

この受賞によって、ダークマターの進化シミュレーションにも大きな弾みがつきそうです。

「夢はコンピュータの中に宇宙を創ること。見えないダークマターだけではなく、見えるバリオンを加えて、実際に銀河や銀河団などの天体が生まれるプロセスを再現してみたい」と、石山さんは、シミュレーションによる宇宙の構造形成過程の解明に情熱を燃やしています。

※1 観測的証拠：渦巻き銀河の回転速度の観測、速くの銀河がゆがんで見える重力レンズ効果や、二つの銀河団が衝突した際に観測される重力の分布（弾丸銀河団）が、ダークマターの存在を示す証拠として知られています。

※2 ビックバン：超高温、超高密度の最初期の宇宙が爆発的に膨張して宇宙が始まったとする理論。

※3 ダークマター粒子：シミュレーション上でのダークマター粒子は、一つひとつのダークマター素粒子ではなく、無数の素粒子が集まった素片として取り扱われます。扱える粒子数が大きいと、この素片を細かくすることができ、より微細な構造を見ることができるようになります。

※4 ゴードン・ベル賞：計算機設計者として著名な米国のゴードン・ベル氏により、並列計算機技術開発の推進のため1987年に創設されました。「京」による研究成果は、2011年に引き続き2年連続の受賞となります。

可視化技術 研究チーム

小野 謙二チームリーダー (中央) とチームのメンバー



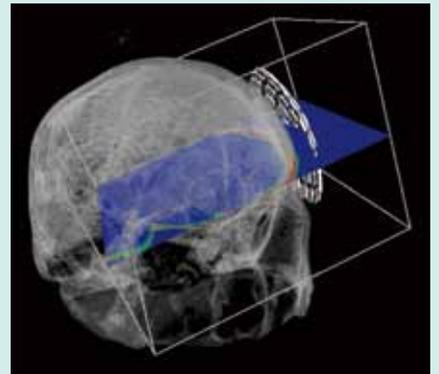
可視化技術研究チームは、文字通り“見る”ための技術を研究しています。“見る”という言葉は、“理解する”と置き換えてもいいでしょう。物理や化学、生命のコンピュータシミュレーションの結果は、数字の集まりとして表現されています。この数字の塊の中から現象を読み解く上で意味のある部分を見つけ、人間にとって分かりやすく表現することが重要であることは明らかですね。

可視化研究のユニークな点は、いろんな研究領域の融合分野であることです。見る材料

(イメージやグラフなど視覚的な情報)を作り出すには、周波数分析などのデータ処理やコンピュータグラフィクス技術が必要になります。一方、見る主体は人間の目ですから、人間側の認知特性や心理的な要因も研究対象となります。特に、京コンピュータは大規模なデータを生み出すので、巨大なデータを扱うための並列処理技術が欠かせません。また、作成されたイメージを効果的に見せるには、立体視や拡張現実(Augmented Reality)技術が大いに役に立つでしょう。

このように、様々な技術をツールとして組み合わせ、シミュレーションが生み出すデータの核心へと謎を解くように迫っていくことが可視化研究の醍醐味のひとつです。可視化は数学やプログラムを駆使してイメージを作る点で、アートにもつながる分野だと思っています。作り出したイメージを見て、ハッと思ってもらえる瞬間があると、とても嬉しいですね。可視化という技術の切り口をとおして、スパコンの成果に貢献することを目指しています。

(小野 謙二)



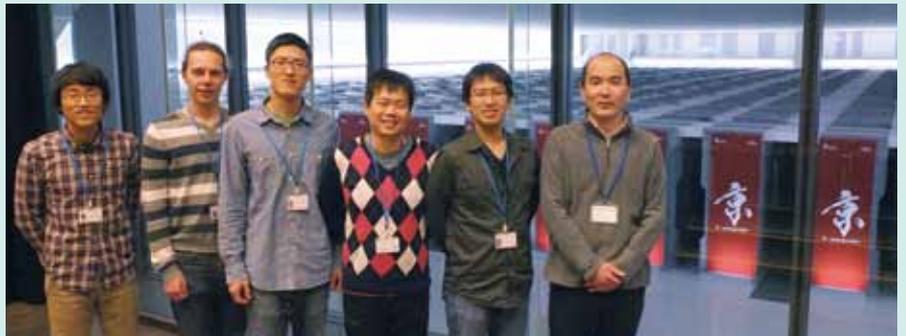
■ 強力集束超音波を利用した脳内腫瘍の治療シミュレーションの様子

Research Teams 研究チーム紹介

メンバーからのメッセージムービーを
ホームページ版『計算科学の世界』で公開中！
<http://www.aics.riken.jp/newsletter/>

連続系場の理論 研究チーム

藏増 嘉伸チームリーダー (右端) とチームのメンバー



この世の中をつくる最小の構成単位(=素粒子)は何なのか?また、それらに働く最も基本的な相互作用は何なのか?こうした素朴な問いは人類の有史以来のものであり、その答えを探す努力は現在においても続いています。

これまでに知られている素粒子には6種類のクォークと6種類のレプトンが存在します。これらに加えて、2012年7月には欧州合同

素粒子原子核研究機構(CERN)においてヒッグス粒子(クォークやレプトンの質量に関係すると考えられている)とおぼしき新粒子が発見されています。また、自然界には「強い力」、「電磁気力」、「弱い力」、「重力」と呼ばれる4つの力が存在し、素粒子間の相互作用を担っています。重力や電磁気力はわれわれにとって馴染み深い力です。弱い力は β 崩壊という原子核の放射性崩壊などに関わっていますが、身近に感じることはありません。強い力は、太陽や夜空の星を輝かせている源であり、われわれの体を構成している様々な分子の中の原子核を構成している力でもあります。

素粒子とその相互作用の研究でミクロの

自然界の極限を究めようとすることは、ビッグバン宇宙論を通じて初期宇宙や元素合成論との研究にもつながり、また量子性が本質的な役割を果たす点で原子・分子レベルの物質研究にも通じています。コンピュータシミュレーションを用いてこれらの研究を遂行するためには、「京」を含む最先端の高性能計算機に対して高い実効性能を追求しなければなりません。そのためには、従来とは異なるアルゴリズムの開発や計算手法の開拓が必要です。こうした課題を克服し、自然界の根源的な疑問に対する答えを探ること、それが当研究チームの目標です。

(藏増 嘉伸)



■ 素粒子の一例。陽子と中性子はクォークからなる。



The History of
K computer

京のあゆみ

前号では「京」の搬入までを紹介しましたが、
実は、完成に向けてまだまだやる必要があります。
今号では、製造開始後に行われた試験利用と
「京」の運用について紹介します。

試験利用

2010年9月29日に最初の筐体が搬入されました。しかし、「京」を動かすためにはソフトウェアが必要です。ソフトウェアには、オペレーティングシステム(OS)、プログラミング言語コンパイラ、皆でシステムを共有して使えるようにするためのジョブスケジューラなどのシステムソフトウェアや、実際に科学的成果を生み出すためのアプリケーションなどがあります。これらは、「京」の製造前から開発が進められていましたが、実際に目標の成果を生み出すためには、「京」の本体上での開発、試験が不可欠です。ましてや世界で初めての規模である「京」は、搬入・

設置中の計算科学研究機構にしかありませんでした。

こうして、まだ工場で製造段階の2011年4月から2012年9月末の共用開始まで、「京」の一部を用いてソフトウェアの開発が行われてきました。当時は「京」の機能や使える規模など多くの制限もありましたが、完成度が高いアプリケーションから順次、大規模で計算できるテスト環境の提供を行った結果、共用開始にあわせて40本近いアプリケーションが大並列で実行できる準備が整いました。



完成した「京」と計算科学研究機構のメンバー

完成そして共用開始

試験利用と並行して製造と搬入も進められ、2012年6月にはついに全システムの完成を迎えました。そして、2012年9月28日15:00、「京」の共用が開始されました。奇しくもこの日は、「スーパーコンピュータの父」と称される故シーモア・クレイの誕生日です。

2012年11月には、米国ソルトレークで開催された国際会議SC 2012において、「京」を用いたダークマターシミュレーションがゴードン・ベル賞を受賞しました。LINPACKの実効性能で「京」を上回るスーパーコンピュータを使った米国の研究グループを抑えての受賞は、日本の研究グループの優れた計算法と京の性能が高く評価されたことによるものだと思います。



ゴードン・ベル賞の受賞

2013年1月現在、HPCI戦略プログラムを始めとする約140の課題が「京」を利用し、様々な研究を行っています。今後、「京」を用いたさらに多くの成果が出てくることでしょう。みなさんも、これからの「京」の活躍にご期待ください!

(運用技術部門
システム運転技術チーム 村井 均
ソフトウェア技術チーム 黒田 明義)

