
大規模計算による非平衡研究の可能性

渡辺宙志

東京大学物性研究所
物質設計評価施設
渡辺宙志



東大物性研マスコット
「物性犬」

自己紹介 (1/2)

お仕事

東京大学物性研究所物質設計評価施設設計部助教 (スパコン助教)
物性研スパコンの調達、運用がお仕事

研究

専門: (多分)統計力学
研究手段: スパコン、短距離分子動力学法、並列化
研究対象: 粒子系の相転移や非平衡現象を研究

僕と夏学

1999年: 第44回参加 (ここで次期準備局員に)
2000年: 第45回参加 (準備局、初のインカレ体制)
2001年: 第46回参加
2002年: 第47回参加
～ 時は流れ ～
2015年: 第60回参加



自己紹介 (2/2) 私とスパコン

2001年 (D1): 物性研 SGI 2800/384

2002年 (D2): 筑波大 CP-PACS

2003年 (D3): JAMSTEC 地球シミュレータ

2004年 名古屋大学情報科学研究科に赴任

2005年 物性研 SGI Altix 3700

2008年 東京大学情報基盤センターに赴任

2009年 九州大学 SR16000 (42ノード) 25.3 TF

2010年 核融合研究所 SR16000 (128ノード) 77 TF

2010年 物性研究所に赴任

2010年 物性研 SGI Altix 8400EX (1024ノード) 96 TF

2012年 情報基盤センター FX10 (4800ノード) 1 PF

2014年 理研「京」10PFLOPS



数値計算は真に科学を発展させ得るか



はじめに

某実験家「数値計算屋は実験の後追いしかしてくれない」

某理論家「数値計算で本当の科学の面白さがわかるとは思えない」

某数値計算屋「理論的には解けないので、仕方なく数値計算をせざるを得ない」

扱いがまるで「必要悪」……



➡ 数値計算で何を「研究」するのか？

➡ スパコンで何をするのか？



数値計算とは何か？

数値計算とは

いくつかの**支配方程式**を**数值的**に計算することで**非自明**な結果を導く手法

変数と観測量

変数 (variable)とは、我々が先験的(a priori)に認める物理量
観測量 (observable)は、変数から導かれる物理量

支配方程式と変数

支配方程式を記述する自由変数は先験的(a priori)な変数として扱う
非自明な結果(観測量)は、先験的変数の(汎)関数として定義する

採用する支配方程式により、変数と観測量は異なる

圧力(応力テンソル)はナビエ・ストークスでは変数、MDでは観測量
温度は、熱伝導方程式では変数、MDでは観測量



良い数値計算とは何か？

良い数値計算例 ※渡辺の独断と偏見による

ケレスの軌道計算 (1801年):

ガウスの三ヶ月に及ぶ計算により準惑星ケレスの位置が予測される

→ 最小二乗法の初めての本格的な適用例

Alder転移 (1957年):

MDやMCにより剛体球系に固体-流体転移が存在することを確認

→ 固体-流体転移に本質的なのは斥力相互作用(排除体積効果)

FPU格子のエルゴード性 (1953年):

非線形格子の振動が熱平衡状態に到達しない(エルゴードでない)

→ ソリトンの発見、可積分系へと発展

四色問題 (1976年):

二次元平面グラフは四彩色可能である

→ 計算機なしには(事実上)証明不可能な数学定理

シンプルなモデルから導かれる非自明な結果
本質的に多体問題であり、計算機の助けが必要

我々は数値計算を使って本質的な研究ができるだろうか？

さらに「スパコンを使って初めて見えてくる世界」はあるだろうか？



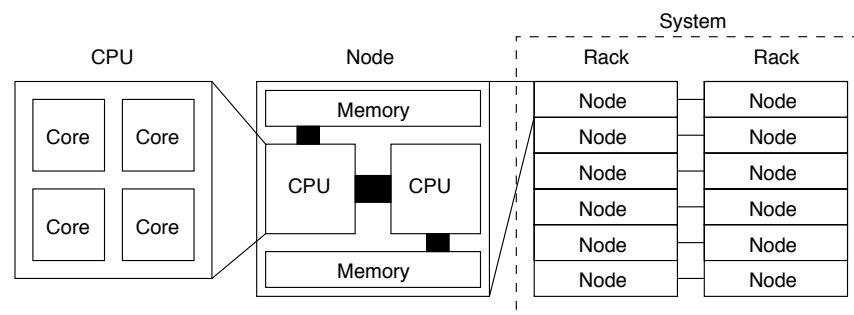
スパコンを使うということ



スパコンとはなにか？ (1/2)

構成要素

コアを複数束ねてCPU
 CPUとメモリを複数束ねてノード
 ノードを複数束ねてラック
 ラックを複数束ねて一つのスパコン



ノードの構成要素は通常のPCと変わらない

何がスーパーか？ ➡ ネットワークと信頼性

あと使いづらさもスーパー

ネットワーク

通常のPCのネットワークはEthernet (レイテンシ 20~50 μ 秒)
 多くのスパコンのネットワークはInfiniBand (レイテンシ < 1.0 μ 秒)
 最近のノードは約 1TFLOPS \rightarrow 1 μ 秒に100万回計算できる

レイテンシ1.0 μ 秒のシステムでは、100万回計算して一度同期するプログラムの性能が50%に劣化

➡ 低レイテンシであるほどプログラムが楽になる



スパコンとはなにか？ (2/2)

TOP500と信頼性

LINPACKというベンチマークプログラムで性能を測定

メインは連立一次方程式の解法

一番時間がかかるのがDGEMM (Double General Matrix Multiply) ← $O(N^3)$

Top500 は 年に2回測定があり、「京」は二期連続首位 (現在4位)

問題サイズは自由に設定できる。

→性能を出すのにはサイズが大きいほうが有利 (通信が相対的に無視できるから)

→ただし大きいと時間がかかる (故障が心配)

京が1位をとったときの計算時間は29時間28分。

88128CPU(705024コア)なので、2372コア年

このジョブがまっとうに走るためには、最低でも10倍の保証期間が欲しい

→ **2万年保証**

逆に、ノードが5年に一度壊れる程度の通常の保証しかないと...

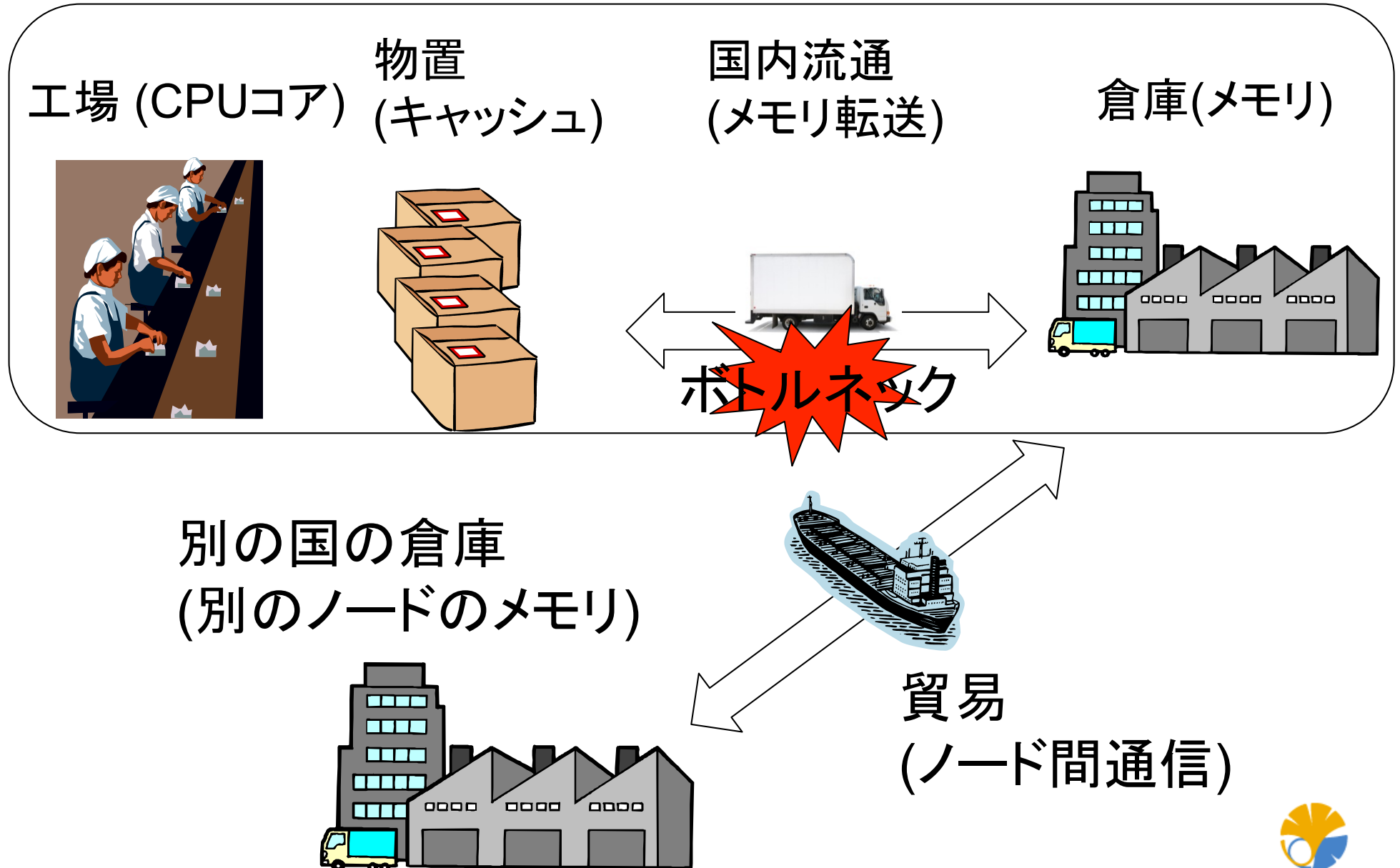
→ 平均30分に一つノードが壊れる

→ スパコンとして使い物にならない

スパコンで一番お金がかかる場所は「名目ピーク性能」ではない

スパコンプログラミング (1/2)

ノード (国内)



スパコンプログラミング (2/2)

CPUには様々な種類がある
種類ごとに得意不得意がある
種類ごとにコードを開発する必要がある

第五世代	SS	SH-2
	PS	R3000A (MIPS)
	N64	VR4300 (MIPS)

第六世代	DC	SH-4
	PS2	MIPS (Emotion Engine)
	GC	IBM PowerPC カスタム (Gekko)
	Xbox	Intel Celeron (Pentium III ベース)

第七世代	Wii	IBM PowerPC カスタム
	Xbox 360	IBM PowerPC カスタム
	PS3	IBM Cell 3.2

第八世代	Wii U	IBM Espresso Power
	PS4	AMD Jaguar
	Xbox One	AMD Jaguar



物性研 SGI Origin 2800 (MIPS)



KEK Blue Gene/Q (PowerPC)
via <http://scwww.kek.jp/>

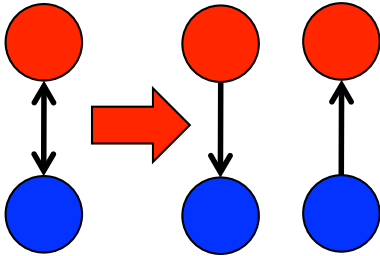


LANL Roadrunner (Cell)
via <http://ja.wikipedia.org/wiki/Roadrunner>



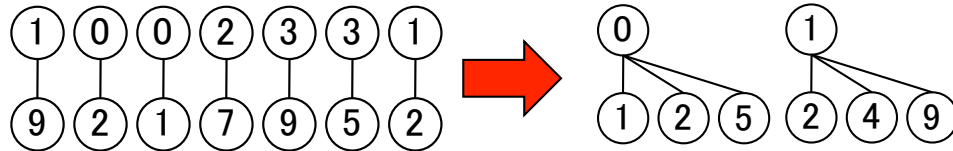
チューニング例

作用反作用無視



同じものを二回計算
メモリ転送量が半分に

相互作用粒子ソート



同じ粒子と相互作用する粒子をまとめる
メモリ転送量が半分に (レジスタ活用)

条件分岐削除

1. 粒子の距離を計算
2. ある程度以上遠ければ次のペアへ
3. 粒子間の力を計算
4. 速度を更新
5. 次のペアへ



1. 粒子の距離を計算
2. 粒子間の力を計算
3. **もし距離が遠ければ力をゼロに上書き**
4. 速度を更新
5. 次のペアへ

※実際にはソフトウェアパイプラインングというテクニックで、予め距離を計算し、判定に間に合わせる

除算削除

$$\begin{aligned}
 A1 &= 1/C1 \\
 A2 &= 1/C2
 \end{aligned}
 \rightarrow
 \begin{aligned}
 D &= 1/(C1 * C2) \\
 A1 &= D * C2 \\
 A2 &= D * C1
 \end{aligned}$$

除算二回を、除算1回乗算3回に変換
除算が遅いアーキテクチャで有効

その他細かいチューニング

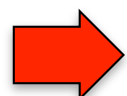
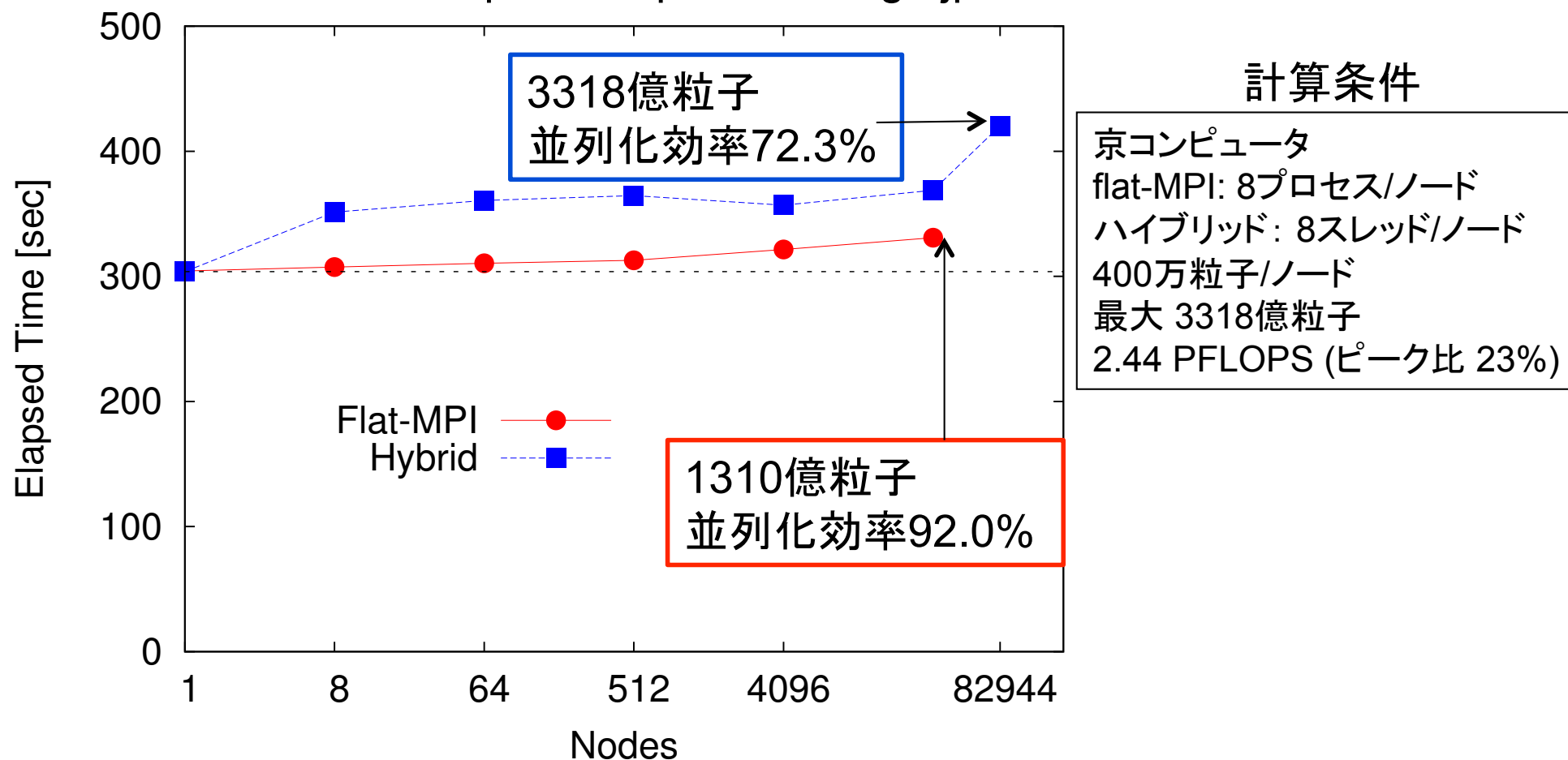
除算のSIMD化のため、低精度逆数近似命令(frcpd)と精度補正+ループアンロール+手でソフトウェアパイプラインング



並列分子動力学法コード「MDACP」

MDACP (Molecular Dynamics code for Avogadro Challenge Project)

<http://mdacp.sourceforge.jp/>



京コンピュータをフルに使い切るコードを書いた

注意: ベンチマークコードから「物の論文を書くためのコード」にするのは大変



分子動力学法による非平衡研究

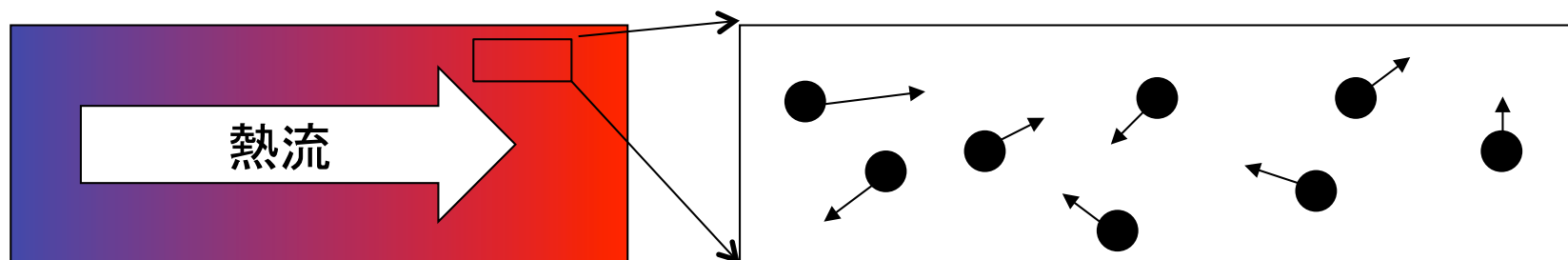
コードもできたし研究しよう！



MDによる非平衡研究 (1/2)

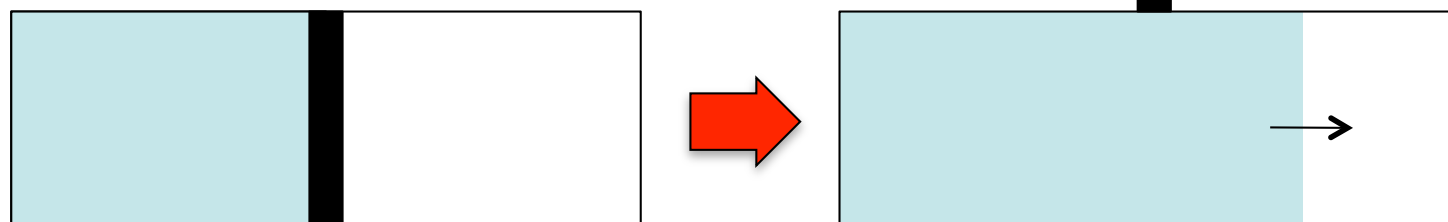
MDによる非平衡研究は、大きく分けて2つのタイプがある

非平衡定常型



系に外場をかけ、その定常応答を観測
熱伝導、電気伝導、ジェット流、etc.
主な興味は線形応答論を超える理論の構築

非平衡非定常型



平衡状態にある系に突然変化を加え、新しい平衡状態に至る過程を観察
磁場反転、断熱膨張(急減圧)、沸騰



MDによる非平衡研究 (2/2)

示強性変数制御をしたくない

温度や圧力などの示強性変数制御は、時間発展の意味を変える
観測値の異常が、人為的なものか系に内在するものか判断しづらい

現象と計算コスト

非平衡非定常系

$$L^3$$

タイムスケールのサイズ依存性が弱い
(核生成、音速、爆発)

平衡系、非平衡定常系

$$L^3 \times L^2 = L^5$$

緩和にかかる時間が系のサイズに依存
(遅い緩和を持つ現象はさらに厳しい)

空間を稼ぐ並列化に比べて時間を稼ぐ並列化は困難

渡辺がとった戦略

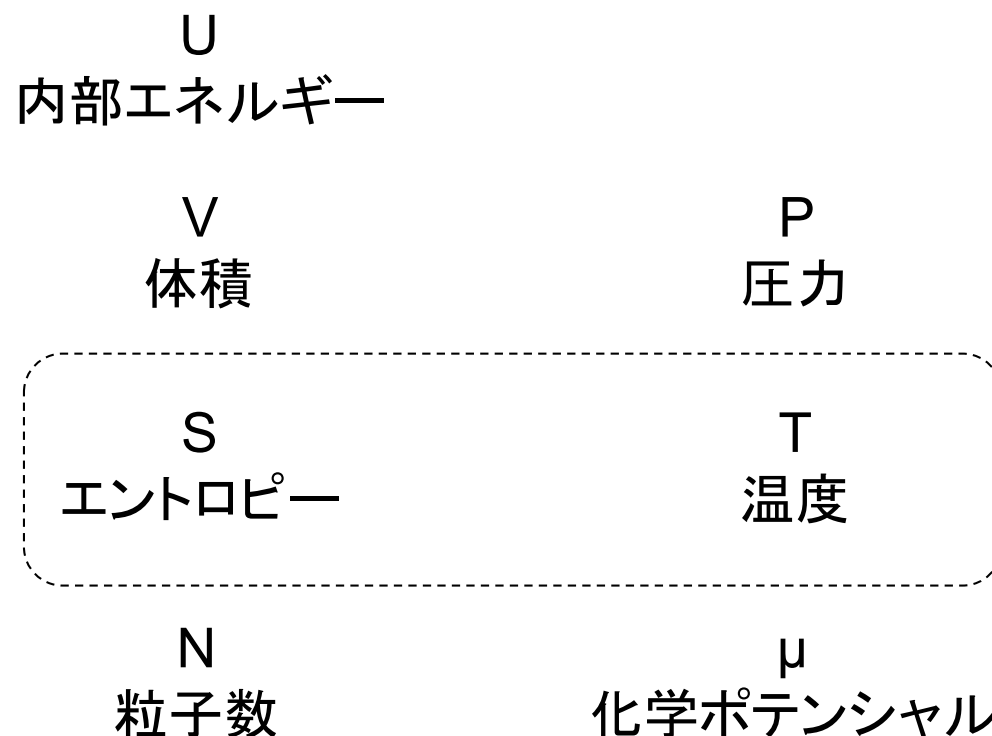
- ・支配方程式はなるべくシンプルに (ハミルトンの運動方程式をいじらない)
- ・非平衡非定常過程を研究する
- ・マルチスケールな問題を計算能力で力任せに解決



平衡系、非平衡系 (1/2)

示量変数

示強変数



示量変数をa prioriな変数とし、示強変数を定義する
(温度とエントロピーは?)

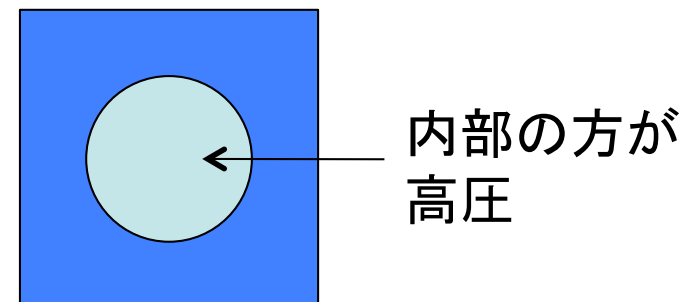


平衡系、非平衡系 (2/2)

平衡系の特徴

マクロな系が、少数の熱力学変数により記述される
→ 示強変数が系内で時間的、空間的に一様である

例: 気液共存状態



非平衡系の特徴

熱力学変数が**時間的**、**空間的**に非一様である

→ 時間、空間ともに局所的に物理量が定義されなければならない

時間的局所: スナップショットから物理量を定義

空間的局所: 空間の任意の点で物理量を定義

→ 平衡状態においては通常の設定と値が一致しなければならない



非平衡温度 (1/2)

温度の定義

以下を温度の定義とすることが多い

$$k_B T = \frac{2K}{3N}$$

K 運動エネルギー
N 粒子数

これは分配関数の部分積分から導かれる

$$\left\langle p \frac{\partial H}{\partial p} \right\rangle = k_B T \quad \text{運動温度 (Kinetic Temperature)}$$

上記をもとに、非平衡局所温度を定義できる

$$k_B T(\vec{r}) = \sum_i p_i \frac{\partial H}{\partial p_i} \delta(\vec{r} - \vec{q}_i)$$

座標に関しても同様な式が成り立つ

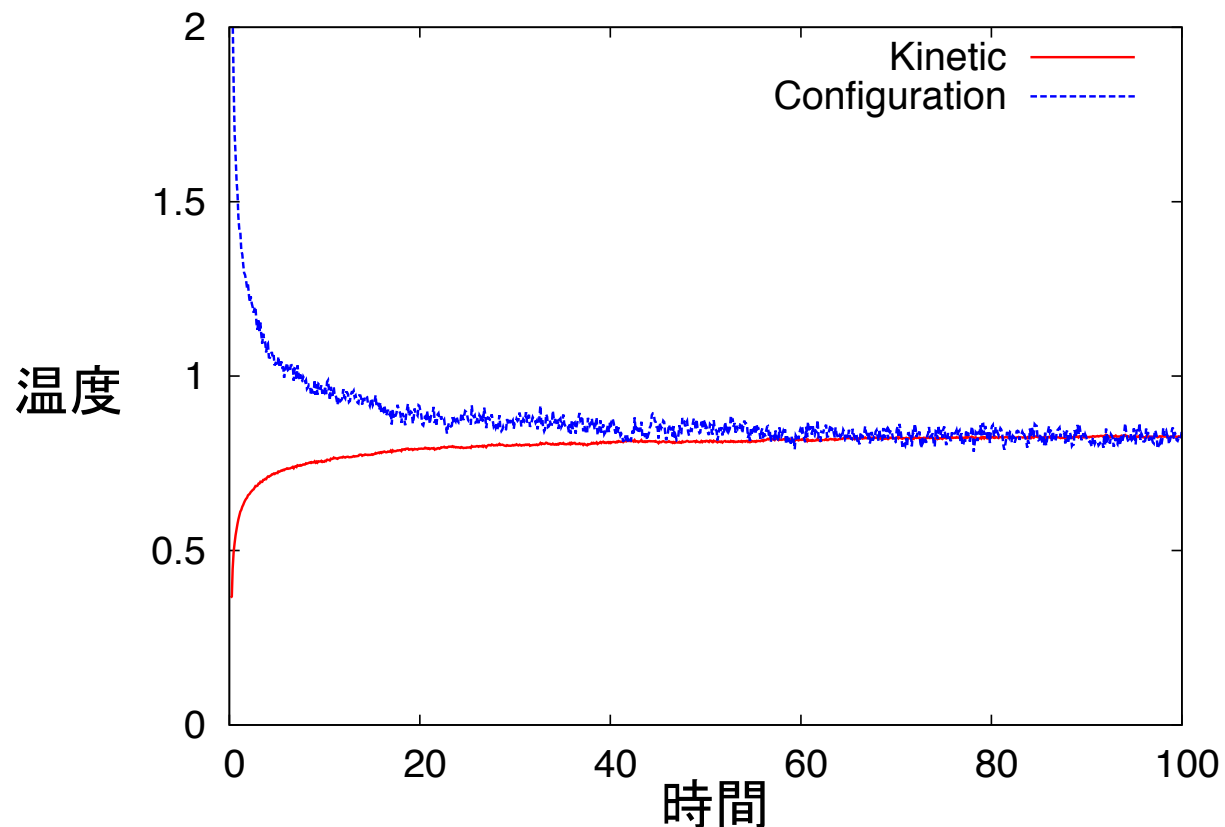
$$\left\langle q \frac{\partial H}{\partial q} \right\rangle = k_B T \quad \text{状態温度 (Configuration Temperature)}$$



非平衡温度 (2/2)

運動温度と状態温度の時間発展

粒子をFCCに組んでおき、NVEで時間積分したもの



非平衡状態においては、運動温度と状態温度は一致しない (平衡では一致)
より一般に、ハミルトニアンを構成する各自由度ごとに異なる温度を感じて良い
非平衡温度はどのように定義すべきか？

➡ 非平衡研究はそもそも物理量の定義が難しい



急減圧による多重気泡生成過程



工学応用上「泡」は厄介者

冷却システムで気泡発生→熱交換効率低下
スクリー周りで気泡発生→騒音や腐食

➡ 泡を理解/制御したい

お湯を沸かす
(加熱による発泡)



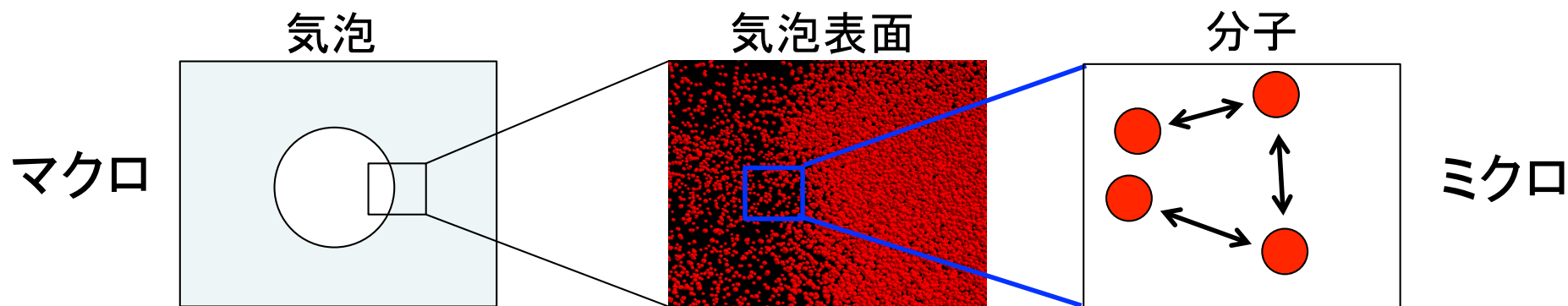
from Wikipedia

スクリーまわりの気泡
(減圧による発泡)



from Wikipedia

泡の発生の研究は難しい
(ナノメートル程度の相互作用がミリ～センチメートル程度の現象を支配)

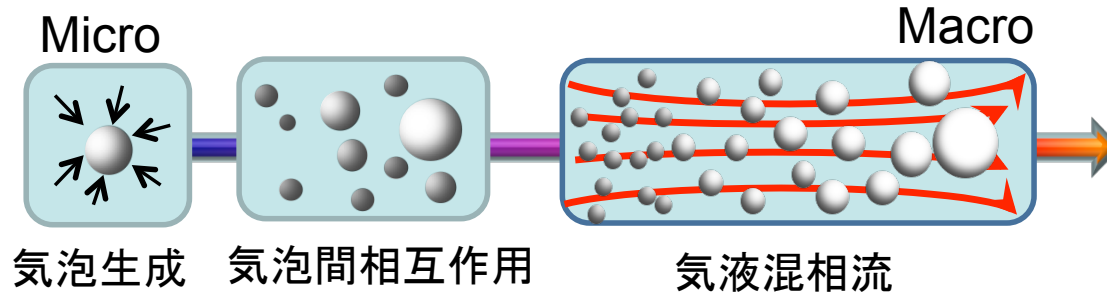


泡の発生・成長メカニズムを分子レベルから明らかにしたい

➡ 大規模計算で力任せに解明する

なぜ大規模計算？

階層性のある非平衡非定常現象を直接計算しようとしているから



応用？基礎理論？

Movie

主な興味は「慣性を伴う相転移現象」の理論的解析
「拡散」と「流れ」の間にある世界
非平衡系の統計力学的解析

なぜ分動力学法計算？

基礎理論 (解析力学 = 微分幾何学) が美しいから

a priori な原理 = 極小作用の原理

a priori な物理量 = p, q

a posteriori な物理量 = (p, q) の汎関数として定義

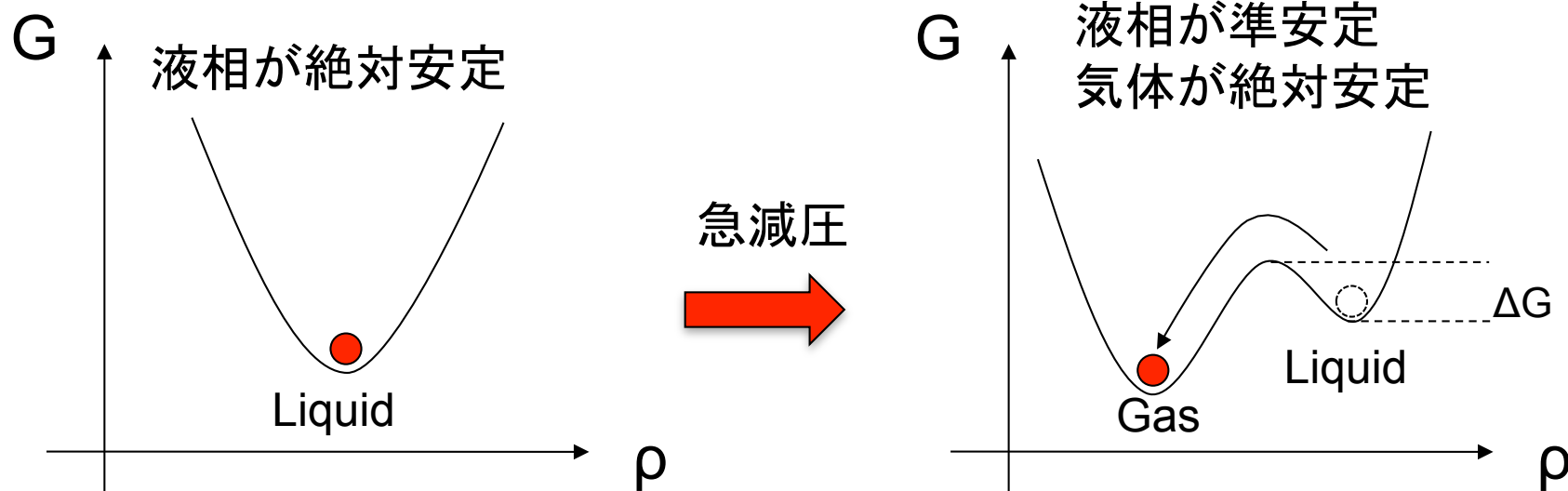
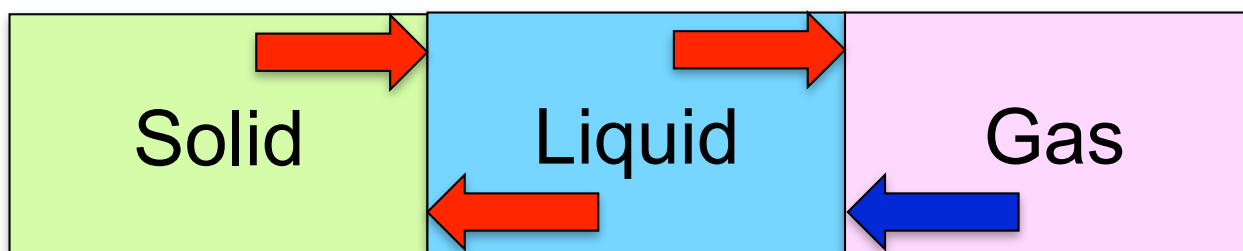
モデルはシンプル、数値計算結果は非自明 (良い数値計算の定義)



古典核生成論と気泡生成仕事 (1/2)

準安定状態と古典核生成論

一次転移を起こす系で、パラメータを急激に変化させると準安定状態になる



準安定状態から安定状態までの脱出時間を与えるのが古典核生成論
ただし、気相→液相以外の相転移では予言能力が低い

なぜ液滴生成はうまくいって気泡生成はうまくいかないんだろう？



古典核生成論と気泡生成仕事 (2/2)

気泡生成仕事

体積 V 、面積 A の気泡を作る仕事 W

界面による損

気泡が液体にする仕事

$$W = \boxed{\gamma A} - \boxed{V\rho\Delta\mu} - \boxed{V\Delta P}$$

化学ポテンシャル差による得

平衡気泡分布関数

平衡状態の液相における熱励起された気泡分布関数

$$f_0(v) \sim \exp(\beta W)$$

平衡状態の液相では常に $W > 0$

→ 大きな気泡ができる確率は指数関数的にレア

→ 指数関数的に大きな系、待ち時間が必要 (事実上不可能)



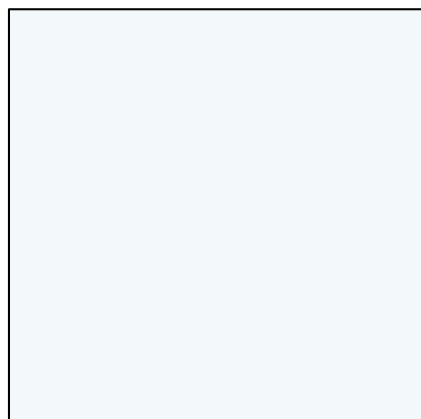
非平衡状態から気泡生成仕事を推定する



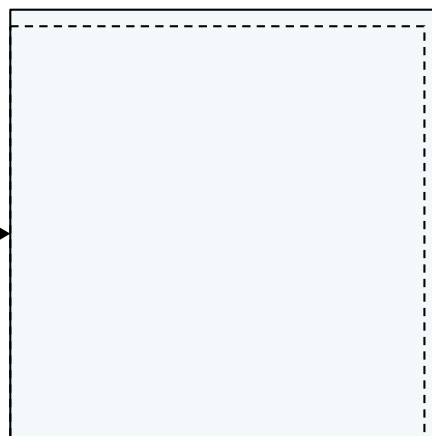
Ostwald成長 (1/2)

カットオフ付きLennard-Jones粒子をたくさん用意する(数億粒子ほど)

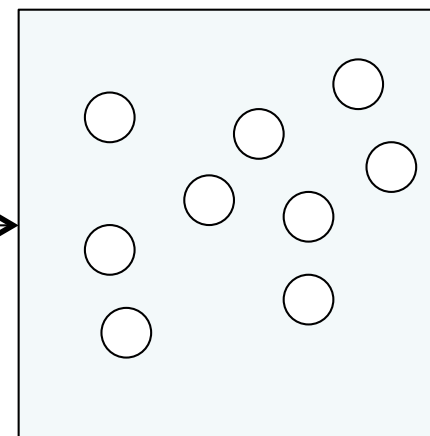
液相に平衡化



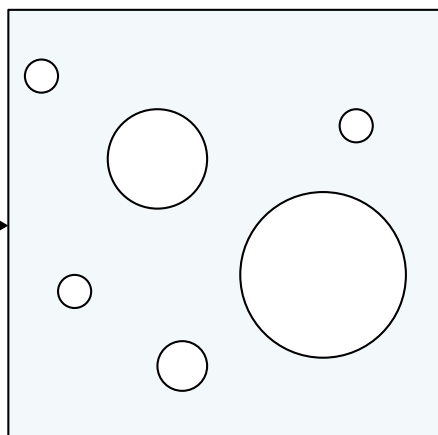
一様断熱膨張
(一辺 2.5%程度)



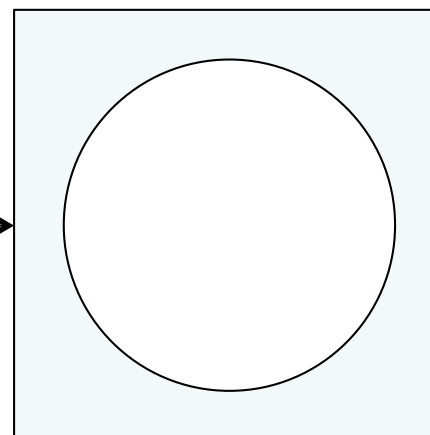
泡がたくさん出る



大きい泡がより大きく、
小さい泡がより小さくなる



やがて単一気泡へ収束



Movie

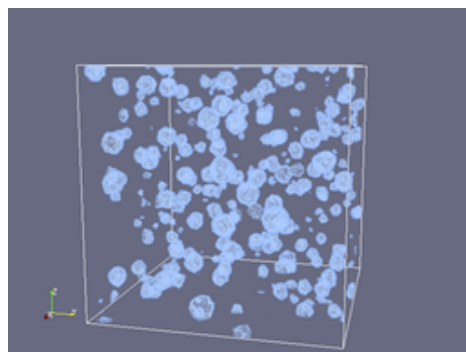
計算規模: 京4096ノード * 24時間 * 10サンプル = 100万ノード時間



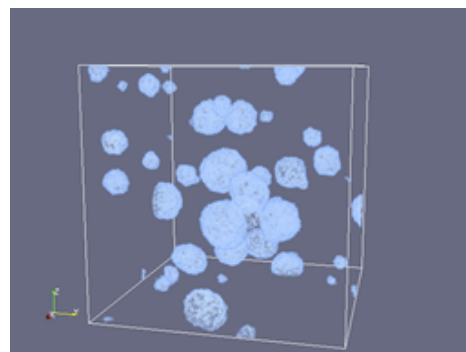
Ostwald成長 (2/2)

物性研の計算結果 (2300万粒子)

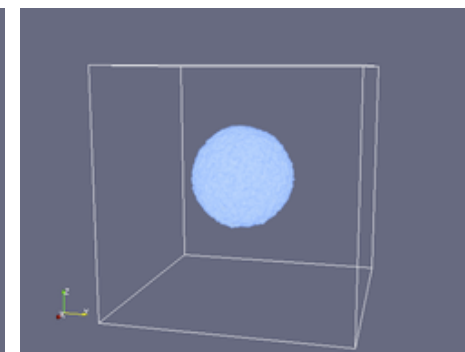
初期ステージ



中間ステージ



最終ステージ

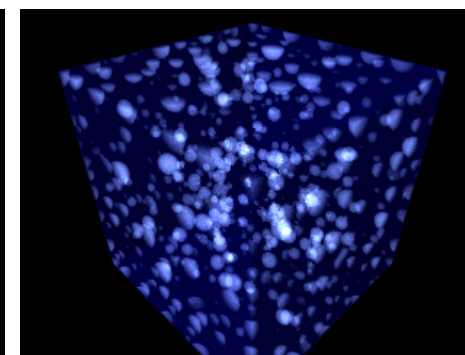
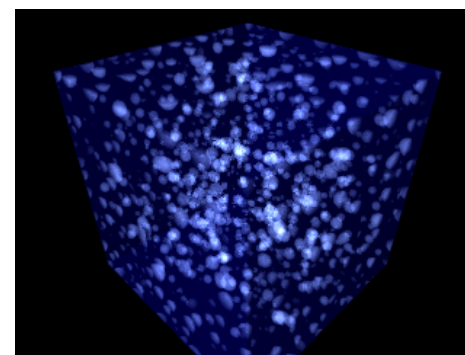
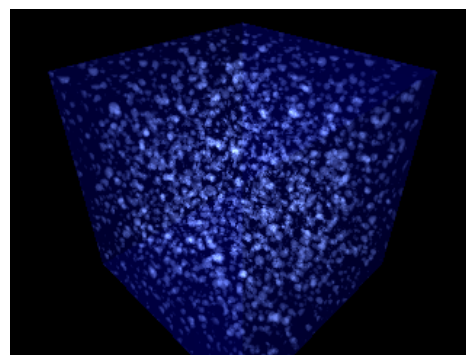
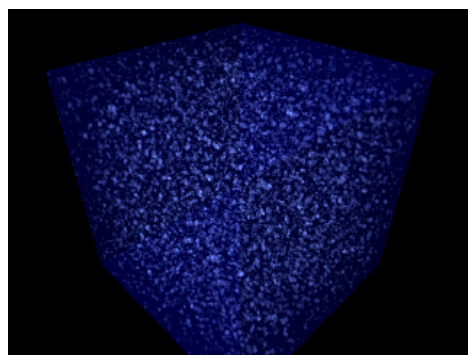


多重核生成

気泡間相互作用による「つぶしあい」

単一気泡へ収束

FX10の計算結果 (14億5千万粒子)



多重核生成から気泡間相互作用フェーズへ



気泡生成仕事の直接推定 (1/3)

非平衡気泡分布関数

$f(v, t)$ 時刻 t において体積 v を持つ気泡数

$$\frac{\partial f}{\partial t} = -\frac{\partial}{\partial v} (\dot{v} f) \quad \text{発展方程式}$$

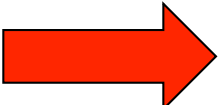
$\dot{v}(v, t)$ 時刻 t において、体積 v を持つ気泡の成長率
(気泡生成仕事に直接対応)

$v_c(t)$ 臨界核サイズ

$\dot{v} > 0$ ($v > v_c$) 臨界核より大きな気泡は成長

$\dot{v} < 0$ ($v < v_c$) 臨界核より小さな気泡は収縮

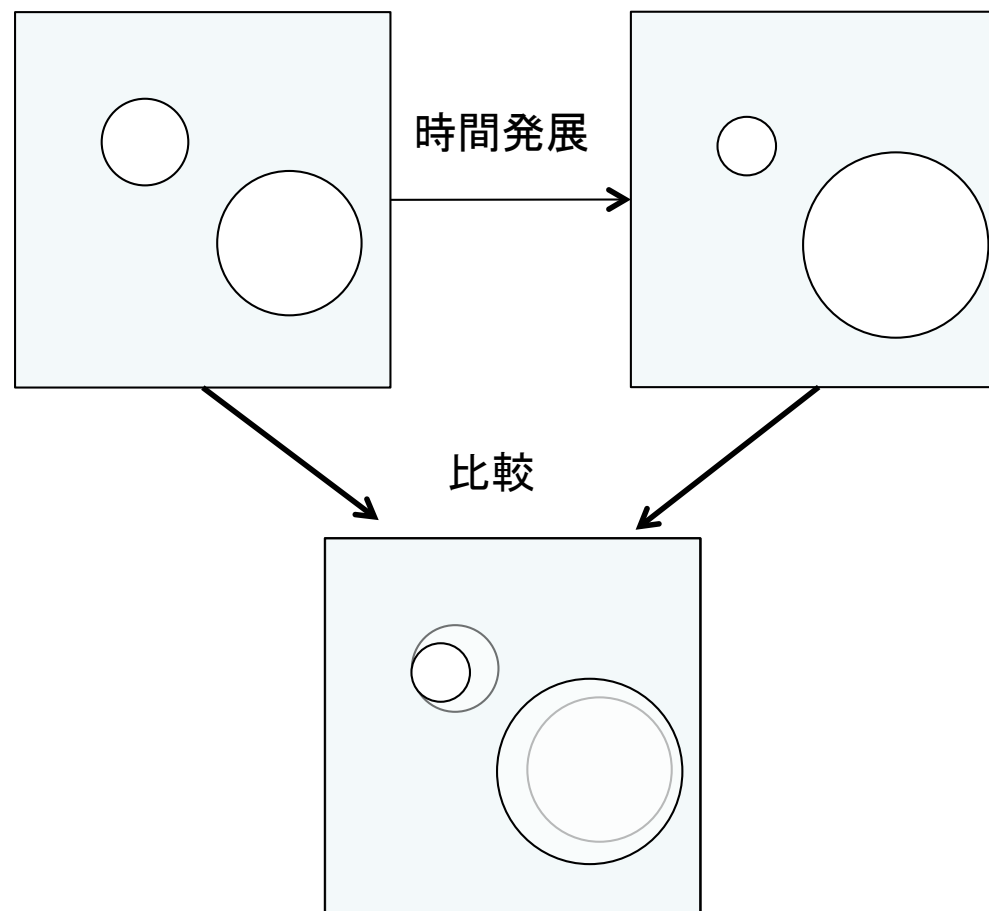
気泡生成仕事はOstwald成長を支配する

 気泡生成仕事を直接推定する



気泡生成仕事の直接推定 (2/3)

スナップショットから同一気泡を推定、体積変化を直接追う

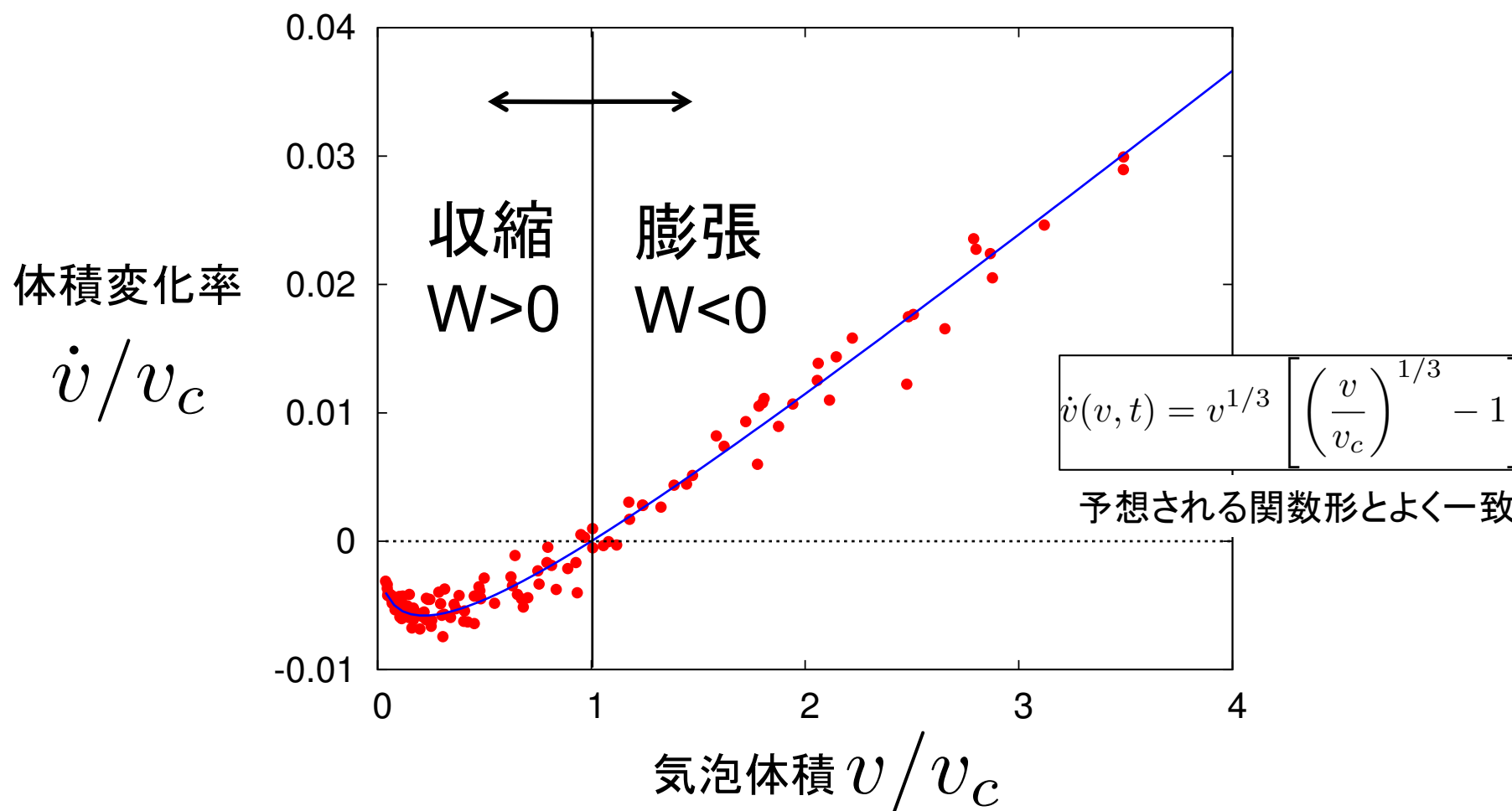


二次の中心差分でKinetic Termを近似

$$\dot{v}(v, t) \sim \frac{v_i(t + \Delta t) - v_i(t - \Delta t)}{2\Delta t}$$



気泡生成仕事の直接推定 (3/3)



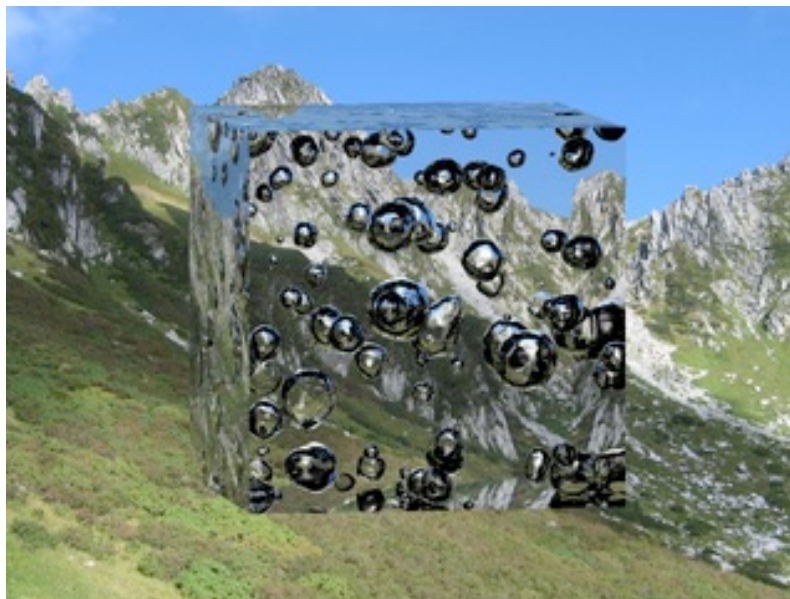
多重気泡生成過程における気泡生成仕事の直接推定



研究成果のアウトリーチ (1/4)

「京」4096ノード、10億粒子規模の計算を行い、気泡生成のダイナミクスを解明。
以下の論文として出版

H. Watanabe, et al. J. Chem. Phys. **141** 234703 (2014)



論文誌「J. Chem. Phys.」の出版元であるAIPよりプレスリリース

「シャンパンの泡が世界のエネルギー危機を救う？」

How the Physics of Champagne and Soda Bubbles May Help Address the World's Future Energy Needs



研究成果のアウトリーチ (2/4)

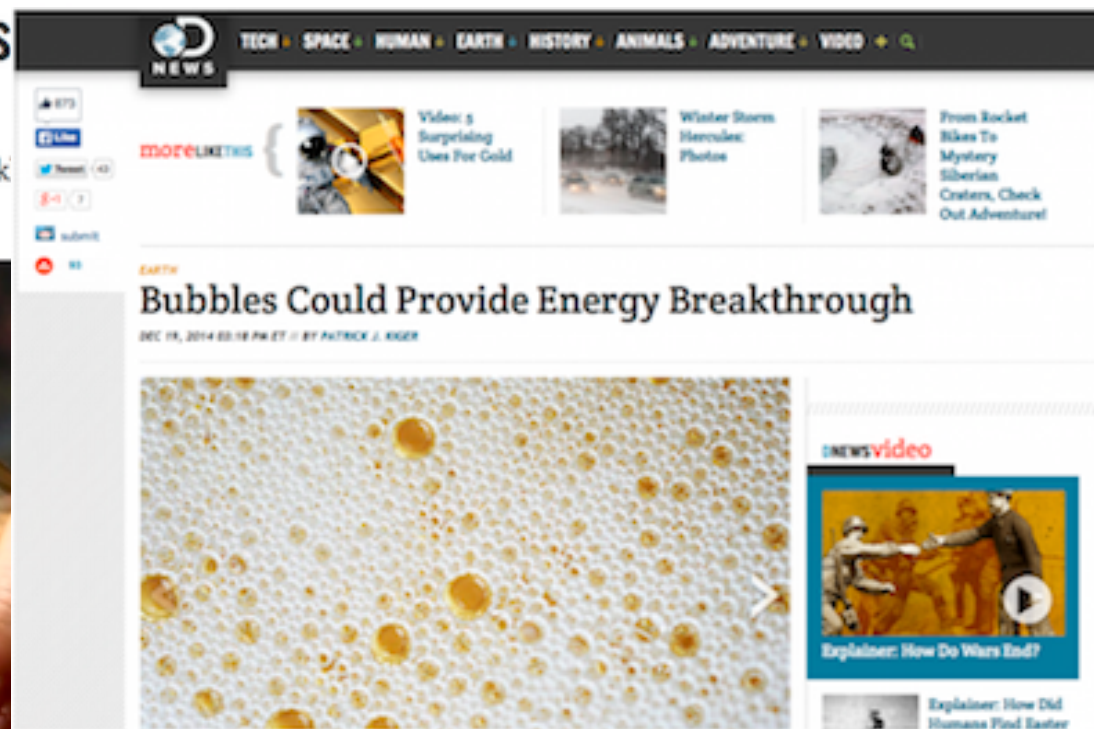
スミソニアン博物館のニュースサイト (メールによる取材)



ディスカバリーチャンネルの
ニュースサイト

The Physics of Champagne Bubbles Could Help Power the Future

Studying the principles that govern bubble formation in spark wine could improve power plant boilers



シャンパンの泡がエネルギーの未来を拓く

泡がエネルギー問題を解決する？



研究成果のアウトリーチ (3/4)

シャンパン、スパークリングワインの通販サイト



Champagne ▾ Prosecco Cava Cremant English Sparkling Other Sparkling Wines ▾



F

Could Champagne bubbles help address the world's energy needs?

We knew it all along. Champagne is always the answer!

Researchers in Tokyo may have discovered how Champagne bubbles could address the world's future energy needs.


Using Japan's most powerful computer, they have explored the physics of Champagne bubbles to help find better alternatives for efficient energy.

いつだってシャンパンが答えだってことはわかってたことさ！



研究成果のアウトリーチ (4/4)

ROOSTER | ART + CULTURE | MUSIC | SEX | VICES | WOMEN | POLITICS | EVENTS | HAPPY HOUR




CHAMPAGNE POWER PLANTS IS JUST ONE OF THE FOUR WAYS BOOZE IS HELPING THE WORLD

CULTURE | FEBRUARY 22, 2015

We knew alcohol was good for something other than enhancing your ability to fall on your face from a complete standstill. Here are four very inebriated ways how.

CHAMPAGNE:
Improves power plant technology
 Researchers are studying the way that champagne bubbles work in an effort to improve power plant efficiency worldwide. To do this, one study published in the Journal of Chemical Physics probed a phenomenon called Ostwald Ripening. That, news, is a thing where many smaller bubbles quickly morph into fewer large ones after a sudden decrease in pressure that occurs from, say, cracking open a champagne bottle with a sword. More importantly, to study this effect, they popped about 4,000 champagne bottles using a RIKEN supercomputer to track the ultra-fast changes that occur. They did this because while Ostwald ripening occurs in champagne



#OVERHEARD

「・・・研究者達は、この研究のために理研のスパコンを使って4000本ものシャンパンボトルを空けたそうだ。次にやるときは俺たちも呼んでくれよ、な？」



研究のアウトリーチってなんだろう？



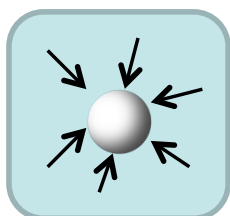
現象とスケール

物理現象

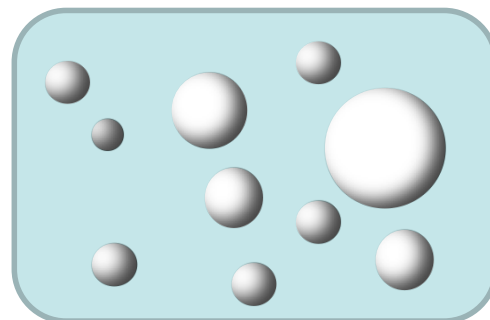
We are here

Micro

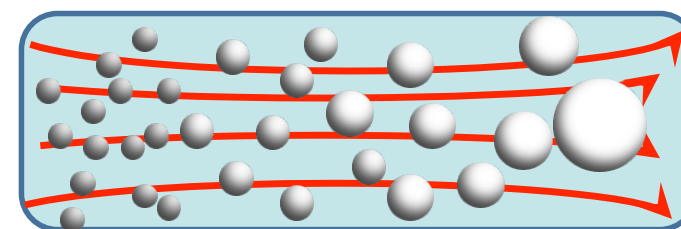
Macro



気泡生成



多重気泡生成



気泡流
(相転移と流動のカップリング)

必要粒子数

-10^6

$10^7 - 10^8$

$10^9 - 10^{12}$

Linear Scale

10 nm

100 nm

1 μ m



まとめ？

数値計算とはなんだろう？

「世界を記述するルールが全て既知とせよ、その上で何が起きるか調べる」という方法論。

研究者は世界の構成ルールを全て知っている(全知)だが、自由に制御できる(全能)わけではない

非平衡研究とはなんだろう？

非平衡は「なんでもあり」の世界
いかに条件を限定するかが勝負

スパコンは科学に本質的な貢献をするだろうか？

わかりません

しかし「計算資源」が数値計算屋の想像力の上限を決めてしまうのは事実
大事ななのは「変な目的意識をもたないこと」

