

The Computational Materials Science Unit Colloquium

理論計算科学ユニットコロキウム

Date & Time: August 7th (Thur.) 3:00pm – 5:00pm

Place: Seminar room, Theoretical Research Building, Namiki site

Speaker: Prof. Yusuke Tomita, Shibaura Institute of Technology

芝浦工業大学工学部 富田 裕介 准教授

Title & Abstract:

Is GPU Computing Effective Enough?

“More is Different” is a title of a paper written by P. W. Anderson [1], in which he considered reductionism is useless and a new paradigm is essentially needed for dealing with a many-body system. The title is now an oft-quoted phrase, and we also realize that “More is Different” in computational science. We understand that Graphics Processing Unit (GPU) computing also proves “More is Different”, but most of us do not realize that GPU computing brings about an essential change in computational science.

In this seminar, I will give a brief review of GPU computing. A key to feel affinity for GPU computing is the “Luxury Programming” [2], and I will introduce GPU-based Swendsen-Wang cluster algorithm [3] as an example of such a programming. A recent results obtained by using the cluster algorithm will also be discussed.

[1] P. W. Anderson, *Science* **177**, 393 (1972). [2] <http://www.pitecan.com/fugo.html> (in Japanese). [3] Y. Komura and Y. Okabe, *Comput. Phys. Commun.* **183**, 1155 (2012).

GPU計算は量質転化をもたらすか？

“More is Different”とはものごとを測る尺度が大きく変わるとき、本質的に新しい概念が生まれることを説いたP. W. Andersonによる論文のタイトルである[1]。この成句はさまざまな分野で引用され、数値計算の分野でもまた“More is Different”を過去に何度か経験してきた。「GPU計算」もまた、“More is Different”をもたらす新しい数値計算技術と目されているが、GPUを用いて自分の研究の役に立たせている研究者は少ないのではないだろうか。

本セミナーでは、GPUによる数値計算のなかみについて簡単に説明し、現状でGPU計算が身近な技術となっていない理由の考察を行う。またGPU計算がアルゴリズムの変更を促している例[3]について紹介し、今後のGPU計算の発展と普及には「富豪的」[2]に考えることがひとつの鍵であることを述べる。最後にGPU計算の適用例として、2次元連続スピン模型の解析結果を紹介する。

Contact: nonomura.yoshihiko@nims.go.jp – 理論計算科学ユニット (ext. 4963)