

計算科学ロードマップ

大規模並列計算によるイノベーションの目指す
社会貢献・科学的成果

平成26年3月

将来のHPCI システムのあり方の調査研究「アプリケーション分野」

本ロードマップは、文部科学省の科学技術試験研究委託事業「アプリケーション分野からみた将来の HPCI システムのあり方の調査研究」(平成 24~25 年度)において、独立行政法人理化学研究所計算科学研究機構が取りまとめたものである。

目 次

| | |
|---|-----|
| 1. 序論 | 1 |
| 1.1. はじめに | 1 |
| 1.2. 本文書の構成 | 2 |
| 2. 今後の HPC が貢献しうる社会的課題 | 3 |
| 2.1. 創薬・医療 | 3 |
| 2.2. 総合防災 | 10 |
| 2.2.1. 地震・津波防災 | 10 |
| 2.2.2. 気象災害 | 16 |
| 2.3. エネルギー・環境問題 | 24 |
| 2.4. 社会経済予測 | 31 |
| 3. 分野連携による新しい科学の創出 | 36 |
| 3.1. 基礎科学の連携と統一理解 | 36 |
| 3.1.1. 基礎物理における連携 | 36 |
| 3.1.2. 宇宙科学、地球科学の連携による惑星科学 | 46 |
| 3.1.3. 生命科学分野、物質科学分野、ものづくり分野の分野横断連携 | 53 |
| 3.2. ビッグデータの有効利用 | 67 |
| 3.2.1. 計算科学基盤技術の創出と高度化 | 67 |
| 3.2.2. ビッグデータの有効利用例①：衛星・観測データの有効利用 | 72 |
| 3.2.3. ビッグデータの有効利用例②：ゲノム解析・バイオインフォマティクス | 78 |
| 3.3. 大規模実験施設との連携 | 85 |
| 3.3.1. X線自由電子レーザー施設 SACLAC 等の大型研究施設との連携 | 85 |
| 4. 各計算科学分野の社会的・科学的課題 | 90 |
| 4.1. 生命科学 | 90 |
| 4.2. 物質科学 | 124 |
| 4.3. 地球科学 | 157 |
| 4.3.1. 気象・気候科学 | 157 |
| 4.3.2. 固体地球科学 | 174 |
| 4.4. ものづくり | 190 |
| 4.4.1. 热流体 | 190 |
| 4.4.2. 構造解析 | 201 |
| 4.4.3. 機械材料 | 207 |
| 4.4.4. プラズマ・核融合 | 218 |
| 4.4.5. 電磁界解析 | 226 |
| 4.4.6. 可視化・データ処理 | 231 |
| 4.5. 基礎物理 | 240 |
| 4.5.1. 宇宙研究 | 240 |
| 4.5.2. 素粒子 | 261 |

| | |
|--------------|-----|
| 4.5.3. 原子核物理 | 282 |
| 4.6. 社会科学 | 297 |
| 5. おわりに | 307 |
| 用語集 | 310 |
| 執筆者一覧 | 334 |

1. 序論

1.1. はじめに

現代の科学技術における知識の獲得、発見には、スーパーコンピュータは必須となっている。同時に、スーパーコンピュータは一般市民の毎日の生活を陰で支えてもいる。わが国は現在、東日本大震災からの復興、福島原発事故の収束や環境浄化、エネルギー問題、少子高齢化、財政逼迫など山積する難題に直面している。スーパーコンピュータによる大規模シミュレーションは、科学技術を牽引するとともに、我々が直面しているこれらの困難な課題解決にも重要な役割を果たしている。日本社会を力強く支え、明日の時代を切り開くためにスーパーコンピュータは不可欠の基盤技術である。

国の主導で導入されるスーパーコンピュータにより得られる研究成果や研究手法は、科学技術の最先端をさらに伸ばし、次の時代には、企業自身がスーパーコンピュータを導入することによる産業活性化に展開し得る。また、医療の現場や気象予報などの現業におけるスキルの大変な向上に繋がる可能性がある。スーパーコンピュータで培った技術が、最終的に産業や社会の現場で利用されること、すなわち計算科学の下方展開の重要性は今後ますます増加、シミュレーションや大規模データ処理の果たす役割はさらに拡大し、その結果は社会に大きな恩恵をもたらすであろう。

このように社会に貢献する基盤技術としてのスーパーコンピュータが重要性を増す中で、平成23年、HPCI計画の推進にあたり国として今後のHPC研究開発に必要な事項等を検討するため、文部科学省研究振興局長の諮問会議「HPCI計画推進委員会」のもとに「今後のHPC技術の研究開発のあり方を検討するWG」が設置された。そして、同WGからの提言により「アプリケーション作業部会」と「コンピューターアーキテクチャ・コンパイラ・システムソフトウェア作業部会」が設置され、両者の緊密な連携のもと「計算科学ロードマップ白書」がとりまとめられた¹。同白書は、平成24年3月に公開されている。更に、作業部会での議論の更なる精査をめざし、文部科学省委託研究「将来のHPCIのあり方の調査研究（アプリケーション分野）」が平成24年7月にスタートした。そこでは、計算科学が貢献し得る社会的課題・科学的ブレークスルーの課題抽出が行われ、その成果として新たな「計算科学ロードマップ」の取りまとめが行われた。同ロードマップをまとめにあたっては、計算科学分野はもとより、実験・観測・理論の研究者、並びに、各学術コミュニティの第一線で活躍する大学・研究機関、企業の現役研究者約100人が一同に会し、演算性能だけではなく、解決すべき社会的課題・期待される科学的ブレークスルーのために必要となる計算機システム全体のバランスを踏まえた適切な性能について深い議論が行われてきた。

本書は、「将来のHPCIのあり方の調査研究（アプリケーション分野）」での議論の成果として抽出された、計算科学からの貢献できる社会的課題の解決・科学的ブレークスルーのため

¹ <http://www.open-supercomputer.org/workshop/sdhpc/>

の課題等をとりまとめたものである。本書をまとめるにあたり、前述のように大学・研究機関、企業で活躍している約 100 人の現役の研究者が中心となり、該当調査研究期間中（平成 24 年 7 月から平成 26 年 3 月まで）に 12 回の討論（ワークショップ）が開催された。なお、「今後の HPCI 計画推進のあり方に関する検討ワーキンググループ」が平成 25 年 6 月 25 日に公開した「今後の HPCI 計画推進の在り方について（中間報告）²」では、スーパーコンピュータを先導するエクサスケールの計算機だけでなく、第二階層のスーパーコンピュータ群の必要性も言及されている。本書が示す大規模計算科学の可能性は、将来サイエンスとして何が必要かを純粋に議論して明らかにするものであり、決して最高性能のトップマシンだけを意識したものではない。

1.2. 本文書の構成

第 2 章では、5~10 年程度の将来において、「創薬・医療」「総合防災」「エネルギー・環境問題」「社会経済予測」の 4 つの分野における社会的課題に対して、今後の計算科学により実現を目指す具体的な貢献について記載した。

第 3 章では、従来は異なる研究分野と見なされていた諸分野が有機的に結合する事によって実現する新しい科学的課題を挙げた。この中では近未来的に重要性が増すと考えられている、ビッグデータのスーパーコンピュータ利用についても記載した。

第 2 章、第 3 章で想定する読者は、これまで大規模計算を活発に行って来た各計算科学分野の研究者、将来においてデータ解析に大型計算機を必要とする実験科学者だけでなく、製品開発を加速しコストを減らすために大型計算機を利用しようとする産業界の技術者などを含む幅広い層である。そのため、専門性を失わない範囲においてできるだけ平易な表現を用いることを心掛けた記述した。

第 4 章では、2 章と 3 章で記述した社会的および科学的課題の基礎となりうる各分野での研究課題を詳細にまとめた。具体的には、現在から今後 5~15 年程度の中長期にわたる各研究分野における計算科学から期待されるサイエンスブレークスルーおよび社会貢献をまとめた。

また、第 2 章から 4 章にかけて、次世代に解決すべき課題を遂行するために必要なアプリケーション群についても記述し、どの程度の計算機資源が必要かを検討し、各節末尾に要求表としてまとめた。要求表には計算手法や現状のプログラムおよび実機を用いたプロファイルから見積もった実効演算性能（浮動小数点演算性能もしくは整数演算性能）や必要メモリ容量等の値を掲載した。これは一般的には実際の計算機の理論性能とは異なること、また将来に対する推定であることから数倍程度の変動は無視した推定であることに注意されたい。更に、各分野において学会、ワークショップ、シンポジウムなどで行われた意見交換会での議論や提案、コメントについても記述した。なお、本ロードマップ記述された内容は、平成 25 年 3 月 10 日時点のものであり、今後更に精査していく予定である。最新の計算科学ロードマップについては、Web 版としてインターネット上で隨時公開³していく。

² http://www.mext.go.jp/b_menu/shingi/chousa/shinkou/028/gaiyou/1337595.htm

³ <http://hpci-aplfs.aics.riken.jp/>

2. 今後の HPC が貢献しうる社会的課題

2.1 創薬・医療

(1) 社会的貢献 一健康で長寿な社会を目指して一

日本はこれから急速に更なる高齢化社会を迎える、国民の健康の増進はきわめて重要な国家的課題となる。健康の増進に資する画期的創薬・医療技術の創出には、その基盤として人体等における生命現象の理解が不可欠であるが、生命現象はあまりに多くの要素が絡み合って複雑に関係している現象であり、まさに、今後の HPC での計算能力の飛躍的増大が有効に活用される分野であると言える。

生物の遺伝情報の単位である遺伝子、および遺伝情報全体を意味するゲノムは、生命の設計図であるとよく言われる。21世紀に入ってすぐにヒトの全遺伝配列が決定されたが、それから10年近く経過し、遺伝子配列計測技術は飛躍的に進歩した。以前であれば数年かかった全ゲノム解読が、一人のゲノムについて数週間程度で可能になってきており、個人が自分自身のゲノム配列を知り、それに基づく医療（テラーメイド医療）を受けることができる個人ゲノム時代が目前に迫っている。そのような超高速ゲノム解析を可能とする次世代 DNA シークエンサー（DNA を短く断片化し、並列に処理して高速に読み取る装置）では、膨大な観測データが日々算出されており、そこから意味のあるデータに処理するためには莫大な計算が必要となる。例えば、がんゲノムにおいては、膨大な遺伝情報の中から、がんの種類に応じたゲノム上の特徴を見出す必要がある。更には、個々の遺伝子配列のみならず、異なる因子が複合的に関わる疾患では、複数の遺伝子がどのように連携しつつ働いているかを解明する遺伝子ネットワーク解析も、HPC の重要な応用分野となっている。

ゲノム解析により疾患に関わるメカニズムが明らかになると、それを制御する薬をいかに開発するかという課題に直面する。通常、薬は、開発から市販まで、10年以上の時間がかかるが、近年、更に対象の複雑化ゆえ、開発期間が長期化する傾向にあり、新薬開発のためのコストが上昇している。実際、一つの新薬開発には数百億円規模の投資が必要と言われており、技術的革新を引き起こすブレークスルーが望まれている。そのような状況下で、HPC を利用した計算創薬が期待を集めている。次世代の HPC で想定される膨大な計算資源を利用できるようになると、これまで物理化学分野で蓄積してきた分子シミュレーションや量子化学計算などの予測信頼性の高い方法を創薬に応用することが可能になり、画期的な技術革新が期待される。更には、計算量が膨大になるためにこれまで考慮できなかった現実に近い環境、すなわち、細胞環境やウイルス全体を対象に含めた計算も、創薬に貢献するようになるであろう。

加えて、創薬のみならず、ナノテクノロジーと生命分野の境界領域に位置するナノバイオ分野において、生命分子と関連した新しいものづくりの技術革新への貢献が想定される（3.1.3 項を参照）。具体的には、タンパク質を用いた次世代デバイスやバイオセンサー、界面活性剤分子が会合したミセルや脂質膜を用いたドラッグデリバリシステム（患部に薬剤を届ける仕組み）や生体親和性の高いインプラント（人造の骨や歯）、細菌汚染の足場となるバイオフィル

ム（細菌などの微生物の増殖の足場）形成を阻害する洗浄表面などである。これらは分子間相互作用レベルでの制御がなされており、多くの生命分子と関連した次世代ものづくりへの展開が期待される。

医療応用の分野では、分子レベルのミクロなスケールから細胞・臓器・脳・全身スケールに至るまで、幅広い時空間スケールを統合的に扱うマルチスケールシミュレーションが重要な役割を果たす。例えば、心筋梗塞や脳梗塞などにおいては、血流中における血栓形成の理解が重要であり、HPC を用いた血栓形成のシミュレーション法の確立が医療応用上の重要課題として積極的に進められている。血栓症のみならず、糖尿病など、血液内のさまざまなイベントを通じて引き起こされる疾患は数多く、その予測に対する社会的要請は大きい。患者個別の情報を用いた血液中での薬効評価が可能になれば、患者個人の状態に合わせた医療を創出することにつながる。

また、医療機器開発における HPC の応用も重要である。患者の Quality of Life (QOL : 生活の質) を向上させる非侵襲治療法の開発は重要な課題であるが、その一つである超音波治療機器の開発においても、シミュレーションの果たす役割は大きい。低侵襲治療によって患者の QOL が向上すれば、患者の社会復帰が容易になり社会が活性化するだけなく、医療費の低減につながることが期待される。現在の創薬・医療において、計算機による開発支援は非常に重要な課題である。

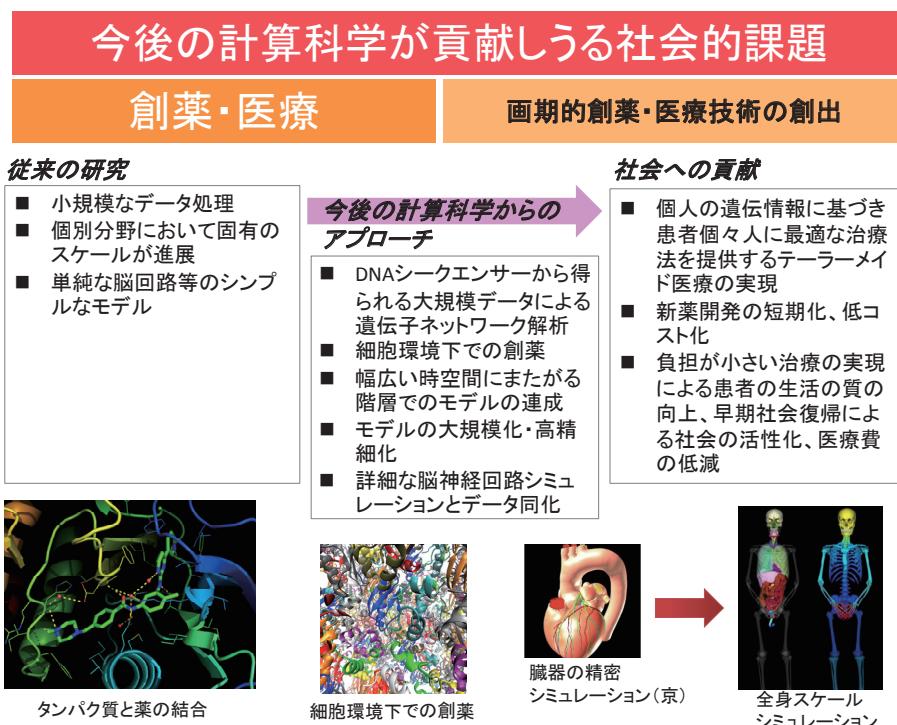


図 2.1-1 創薬・医療

(2) サイエンスの質的变化

画期的創薬・医療技術の創出には、その基盤として人体等における生命現象の理解が不可欠であり、生命分野のサイエンスを強力に推し進める必要がある。生命分野は、その複雑さ故に

経験的色彩の濃い分野であったが、HPC の進展により、経験的方法論から、モデル化、シミュレーションといった演繹的方法論への転換が図られようとしており、まさに時代の転換点にさしかかっていると言える。生命現象のモデル化においては、原子・分子レベルのミクロなスケールから、細胞・臓器・脳・全身スケールに至るまで、時空間スケールが非常に幅広く、しかも各スケールが密接に関係し合っているという特徴がある。そこで、HPC の発展とともに、幅広いスケールを統合的に扱おうとするマルチスケール・マルチフィジックスシミュレーション法（幅広い時空間にまたがる対象に対し、それぞれの階層での計算を連成させるシミュレーション法）の開発が進展し、新たな分野を切り開きつつある。マルチスケール・マルチフィジックスシミュレーションでは、従来、別な分野で独立に進められていたさまざまなシミュレーションを統合することが求められる。分子レベルでは、ナノ分野で展開されてきた第一原理計算等の高精度の方法が生命分野に續々と応用され、大きな成果が期待される。また、細胞、細胞内小器官、ウイルス全体といった生命体の高次のレベルにまで、原子・分子のモデルを拡張したシミュレーション計算が可能になってくると思われる。また、そのような原子・分子レベルから、細胞レベル、臓器・全身スケールに至るまで、階層間をなめらかにつないでいくマルチスケール・マルチフィジックスシミュレーション技術を発展させることで、生命体の全体像が見えてくるであろう。その中で、特に発展が期待されるのが、脳・神経系である。人間の脳が、いかにしてこれほどまでに高度な知的情報処理を実現しているのか、その機構を解明することは、生命分野での究極の課題の一つである。人間の脳には 10^{11} とも言われる莫大な数の神経細胞が存在し、それらが 10^{15} のシナプスで複雑に結合していると推定されている。京の時代には不可能である人間の脳のシミュレーションも、次世代のエクサスケールの計算規模では、比較的単純な積分発火モデルであれば可能になると予想される。更に、昆虫の脳においては、エクサスケール級計算機を用いると全神経細胞を用いたリアルタイムシミュレーションが可能であると予想され、生理実験と連携して、神経回路網の機能の細部まで解明が進むと期待される。

また、今後の生命分野の計算科学に大きな影響を与えるものとして、実験施設から産出されるビッグデータが挙げられる。上記の次世代シークエンサーで高速に読み取られたゲノム情報の解析は、そのようなビッグデータ解析の代表例であるが（3.2.3 項を参照）、その他にも、X 線自由電子レーザー（3.3.1 項を参照）による生体資料の散乱像など、実験設備の高度化によって、そこから出てくるデータの量も莫大になっている。それを効率的に利用し、そこから意味のある情報を見出す技術開発が急務である。

以上のように、今後の HPC のもたらす莫大な計算能力が、さまざまな面で生命分野の発展に大きく資するのは間違いない、ひいては画期的創薬・医療技術開発の重要な科学基盤となり得る。

(3) コミュニティからの意見

計算機科学の技術を利用して生物学の問題を解くバイオインフォマティクス分野からは、この分野のアプリケーションが、従来の典型的な HPC のアプリケーションとは異なる特徴があるという指摘があった。従来の典型的な HPC のアプリケーションでは、浮動小数点演算を重視しており、計算負荷の高い部分を高度に最適化して、繰り返しそのルーチンを使って計算するという方式をとるが、この分野のアプリケーションでは、膨大なデータを扱う都合上、スク

リプト言語の多用、アレイジョブ（同一のプログラムを異なる入力・設定で大量かつ同時に実行する並列計算の実行方法）、I/O、実数演算のみならず整数演算も重視するため、従来の HPC アプリケーションとは異なる評価基準を持つべきだと言う意見があった。また、現在のゲノム解析（3.2.3 項参照）を支えているヒトゲノム解析センターの現在および将来の計算能力が将来予想されるデータ規模に対して危機的な事が指摘された。

創薬分野からの意見では、他の大規模実験研究施設との連携についての指摘があった。創薬分野や分子レベルの計算では、タンパク質など生体分子の立体構造が重要な役割を果たしているため、それを決定する放射光施設などの大型実験研究施設の連携を十分に考慮しつつ、進展させていくべきだという意見がでた。更に、今後発展が期待される、X 線自由電子レーザー（波の位相が揃ったレーザーの性質を持つ超高輝度の X 線を発生することのできる光源）の研究施設である SACLA（国家基幹技術として兵庫県播磨に建設された X 線自由電子レーザー装置）（3.3.1 項を参照）とも十分によく連携していくべきという意見が出た。更には、今後のスーパーコンピュータで想定される、膨大な CPU コア数や計算を加速するアクセラレータを活用する計算方法やソフトウェアの開発についての意見も出た。

医療分野からは、医学系の分野では、HPC になじみがある人はまだ少数であり、今後とも HPC 分野と医学系分野の連携を深めていき、分野間のコミュニケーションを充実させるべきであるという意見が出された。

また、次世代研究者育成について、バイオインフォマティクス人材の不足、HPC 用プログラミング方法などの教育プログラムの充実や、生命分野で HPC の技術を持つ研究者の雇用先の拡充についての意見もあった。

（2012 年 10 月 19 日バイオスーパーコンピューティング研究会、2013 年 3 月 10 日文部科学省科学研究費補助金新学術領域研究「システム的統合に基づくがんの先端的診断、治療、予防法の開発」プロジェクトの公開講演会、2013 年 6 月 12 日～14 日 第 13 回日本蛋白質科学会年会、2013 年 6 月 27 日情報計算化学生物（CBI）学会研究講演会等にて）

（4） 計算機要求

上記のように、本分野は構成要素が非常に多いため、条件など詳細な個別の計算機需要は関連した箇所（3.1.3 項、3.2.3 項、3.3.1 項、4.1 節、4.2 節）を参照していただくとして、ここでは代表的なもののみを述べる。

まず、個人ゲノム解読を行う次世代シークエンサー解析については、2020 年頃に行われると思われる 200,000 人規模の解析を想定した。このようなビックデータ解析では、CPU 速度だけでなく、シークエンサーとストレージ間のネットワーク速度、メモリ容量、ストレージ容量・速度などデータに関連する性能の充実が望まれる。2020 年頃にはシークエンサーとストレージ間のネットワークの総和は 600～1200 GB/s、1 人のゲノム解析に要するメモリ容量は 1.6PB、演算性能は 5.4TIPS（tera-instruction per second）、ストレージ性能は 5.5TB/s、ストレージ容量は 100TB 程度必要となる。遺伝子ネットワーク解析については、2020 年には現在の 100 倍程度の量のデータが公開データベースにて入手可能になると予測され、そのデータ量を 4 万転写物 × 26,000 データセット・280 万アレイと想定して、ベイジアンネットワークおよび L1 正則化法の解析を行うとすると、恒常的に 25PFLOPS の計算需要が想定され、1 データセットの計

算に必要なネットワーク性能は 1.1PB/s、メモリ量は 0.08PB、ストレージ容量は 16TB 程度である。

創薬の分野でよく用いられる分子動力学（MD）シミュレーション（原子間相互作用に基づいて分子運動を計算する方法）では、短い時間間隔で繰り返し原子間相互作用を計算する必要があるため、演算性能重視でかつ高いネットワーク性能（特に低レイテンシ）が求められる。現在、標的タンパク質に対して 1000 種類の化合物の結合強度を調べると、10 PFLOPS の計算機を使えば 5 日くらいで計算が終了するが、1 EFLOPS の計算パワーがあれば、同じ時間内に、候補化合物をある程度網羅できる 10 万種類の化合物について標的タンパク質との結合強度が評価できる。ここでは、各々の化合物に対する結合強度は密に通信する並列ジョブで計算されるが、その並列ジョブは各化合物別のアレイジョブとして実行されるとした。また、複数のタンパク質を含む多成分系の超大規模計算へ拡張し、1 EFLOPS の実効演算能力があれば、細胞環境やウイルス全体や、細胞膜を模した脂質膜環境やドラッグデリバリシステムを全原子レベルで扱うことが可能な 1 億原子系の 1μ 秒の MD シミュレーションを 2 日程度で完了可能である（以上の MD シミュレーションの詳細な見積もりは、4.1 節、4.2 節を参照いただきたい）。これにより膜輸送や細胞認識といった生命科学的現象を追跡することが可能となる。より長い分から時間スケールでの反応ネットワーク動態を再現する 1 分子粒度計算では、1EFLOPS の能力で 1,000 から 10,000 細胞で構成される細胞集団、あるいは組織における応答不均一性の計算が行える。更に、結合能計算の予測信頼性を上げるために、薬品分子（リガンド）と標的タンパク質との相互作用解析を量子化学計算で行った場合でも、1 EFLOPS の計算資源では候補化合物を絞るための 100 サンプルの同時処理が可能であり、計算効率が大きく向上すると期待できる。ここでは、水和条件下で 500 残基程度のタンパク質に一つのリガンドを組み合わせるケースを考え、10 PFLOPS の計算資源で 1 サンプル当たり 1 時間程度とした。また、10 PFLOPS ~1 EFLOPS の計算資源ではバイオデバイスで用いられる光関係タンパク質など、200~500 残基程度のタンパク質（電子軌道数は 10 万超）の実験分光データを日常的に解析するツールとなると思われる。以上の量子化学計算（FMO）で求められる計算スペックの詳細は、4.2 節を参照いただきたい。

医療応用の血流シミュレーションでは、詳しくは 4.1 節を参照いただきたいが、長さ 100mm、径 100μ m の血管中を流れる血球の変形挙動を取り扱うために 0.1μ m の格子幅を用い、血栓生成の時間スケールである 10 秒の現象を計算するには、必要な主記憶容量は 1 PB 程度である。全演算量は 2.5×10^{23} FLOP 程度となり、実効性能が 40% とした場合、1EFLOPS の計算機を用いると、約 174 時間の計算時間と見積もられる。ノード当たりの性能が 100 TFLOPS だとすると、理想的なキャッシュであれば B/F は 0.064 となるので、必要なメモリバンド幅は 6.4 TB/s と見積もられる。大規模な計算でモデルを精緻化することと併せ、10PFLOPS 程度の計算を 100 ケース程度並列させ、多くのパラメータスタディを行うことで医療に貢献するという視点もある。また、超音波シミュレーションでは、400 mm の立方体領域中の超音波の伝播が京の全ノードを占有した場合、実効性能が 20% 程度なため、1 日程度で計算できる。しかし、軟らかい生体組織の温度変化で生じる微妙な剛性の変化をとらえるためには、より高い解像度と長時間の時間積分が必要になり、最低でも 1000 倍の自由度の計算となり、1 EFLOPS の計算資源で 10 日程の計算時間が必要である。また、マイクロカプセルとの干渉によって生じる超音波音場の解

析を1日で行うためには、計算コストが通常の超音波伝搬計算に比べて数十倍程度必要となるため、京の全ノードを占有した計算の100倍程度の計算処理速度が将来的に必要となると考えられる（詳しくは4.1節を参照いただきたい）。

脳神経系シミュレーションにおいては、2020年ごろに実現可能なモデルとして一つには、積分発火モデルを用いた人の全脳規模の神経回路シミュレーションが考えられる。そのシミュレーションでは、1秒のシミュレーションに0.7 EFLOP程度の計算量と56PBのメモリ容量が必要であり、B/F値はメモリに対しては1程度、ネットワークに対しては0.25程度が望ましく、700EFLOP程度の計算量が見込まれる。

また、昆虫脳に対しては詳細なマルチコンパートメントシミュレーションが全脳に対して可能になり、更にシミュレーションを用いたパラメータ推定や実験とのリアルタイム通信による回路推定や制御が行われると見込まれる。カイコガの全脳における神経回路のリアルタイムシミュレーションの計算では、10%の実効効率を見込んで700EFLOPSの計算性能と0.83のメモリB/Fが必要となる。全体の計算量としてはシミュレーションの開発と実行に20EFLOP、更にその100倍程度の計算量で神経回路のパラメータ推定を行えることが見込まれる。更に、リアルタイムシミュレーションにおいては、シミュレータと生理実験装置と100MB/s程度の通信が可能である必要がある。

| 課題 | 要求性能(PFLOPS) | 要求メモリ帯幅(PB/s) | メモリ量/PB | ストレージ量/PB | 計算時間/hour | ケース数 | 総演算量(EFLOP) | 概要と計算手法 | 問題規模 | 備考 |
|---|--------------|---------------|---------|-----------|-----------|---------|---|---|---|----|
| 個人ゲノム解析 | 0.0054 | 0.0001 | 1.6 | 0.1 | 0.7 | 200000 | 2700シーケンスマッチング | がんゲノム解析200,000人分のマッピングおよび変異同定 | 1人分の解析を1ケースとした。入力データを分割することで、細かい単位での実行、拠点をまたいだ実行も可能。整数演算中心のため「総演算量」はInstruction数とした。総浮動小数点演算量は45.864EFLOPとなる。 | |
| 遺伝子ネットワーク解析 | 25.0 | 89.0 | 0.08 | 0.016 | 0.34 | 26000 | 780000ペイジアンネットワークおよびL1正則化法 | 4万転写物×26,000データセット・280万アレイ | | |
| 創薬などMD・自由エネルギー計算 | 1000 | 400 | 0.0001 | 0 | 0.0012 | 1000000 | 4300000全原子分子動力学シミュレーション | ケース数:10万化合物x10標的蛋白質(10万原子程度) | B/F=0.4。数百から数千ケース同時に実行することを想定しているので、実行時に必要な全メモリ量、各ケースの実際の実計算時間は、表の値の数百～数千倍となる。メモリ量/ケースは100ノード実行時を想定。 | |
| 細胞環境・ウィルス | 490 | 49 | 0.2 | 1.2 | 48 | 10 | 850000全原子/粗視化分子動力学シミュレーション | ~1億粒子 | B/F=0.1 | |
| 細胞内信号伝達経路シミュレーション | 42 | 100 | 10 | 10 | 240 | 100 | 3600000一分子粒度細胞シミュレーション(格子法) | 1000から10,000細胞K構成される細胞集団 | 格子法・整数系の演算性能を要求。ケース数は最低10回、100回程度が望ましいため100回とした。 | |
| 高精度創薬 | 0.83 | 0.1 | 1 | 0.001 | 1 | 100 | 300薬品とタンパク質間相互作用の量子化学計算 | 水和条件下、500残基タンパク質+リガンド | ファイルI/Oは終了時に1TBを1秒で書き出すことを想定し、1TB/s必要とした | |
| バイオデバイス設計 | 1.1 | 0.2 | 1 | 0.001 | 1 | 100 | 400 ²⁰⁰⁻⁵⁰⁰ 残基程度のタンパク質の分光計算 | 電子軌道数10万超 | ファイルI/Oは終了時に1TBを1秒で書き出すことを想定し、1TB/s必要とした | |
| 血流シミュレーション | 400 | 64 | 1 | 1 | 170 | 10 | 2500000差分法・準陽解法(構造・流体・生化学連成シミュレーション) | 100mm長×100um径、0.1um格子、流速10 ⁻² m/s、解像度1us、10秒 | | |
| 超音波シミュレーション | 3800 | 4600 | 540 | 640 | 240 | 10 | 33000000差分法・陽解法(音波・熱シミュレーション) | 400mm ³ の計算領域を軟組織とマイクロカプセル干涉音場を捉えるため、2250兆点の格子と時間ステップ数として1459200ステップが必要である。また、1格子点あたり演算数1000程度となる。 | | |
| 脳神経系シミュレーション(ヒト全脳簡約モデル) | ※7 | ※7.6 | ※56 | ※3600 | 0.28 | 100 | 700単一コンパートメントIFモデルシナプス可塑性・通信 | 1000億ニューロンニューロンあたり1万シナプス 10 ⁵ step | ネットワークのボトルネックはレイテンシー | |
| 脳神経系シミュレーション・昆虫全脳詳細モデル 神経回路バラメータ推定・生理実験とシミュレーションの通信 | ※71 | ※60 | ※0.2 | ※20 | 28 | 20 | マルチコンパートメントH-H(局140000所クラシックニコルソン) シナプス通信 進化的アルゴリズム | 1000ニューロン 10 ⁶ 遺伝子 100世代 | 100MB/S程度の外部との通信も想定 | |

※印の値は未だ精査中である。より精度の高い数値はWeb版(→「1.2. 本文書の構成」)を参照のこと。

2.2 総合防災

2.2.1 地震・津波防災

(1) 社会的貢献 一科学的知見に基づく災害予測のシステム化を目指して一

南海トラフの巨大地震や首都直下地震等、大地震の備えを不斷に行うことはわが国に課せられた宿命である。合理的に備えるためには精度の高い被害想定が必要であるが、現状では国レベルでの被害想定には経験式が用いられているため、その精度には多くの疑問がある。より合理的科学的な地震災害の想定・予測が必要とされており、大規模数値計算を使った地震・津波とそれとともになる災害のシミュレーションはこのための切り札となり得る。

被害想定においては、2011年東日本大震災が突き付けた「想定外」の轍を踏まないためにも、人間の先入観を排除し、観測されるデータと物理モデルから予測される多様なシナリオに対して、その結果、どのような被害が生じ得るかを考慮することが不可欠である。地震のシナリオを考えるにあたっては、地震の発生過程を左右する震源域の上限・下限・水平方向の広がり・破壊開始点・仮定する摩擦則をそれぞれ4~5通り考慮するだけでも、その組み合わせは1,000を超える。こうしたシナリオは、観測事実との整合性等を考慮して数十程度に絞り込むことになる。そうしたとしても、揺れを評価する個々の建物直下の地盤情報や建物の劣化状況、津波遡上に影響する港湾や河川毎の詳細地形の曖昧さを考慮したり、広域に被害をもたらす巨大地震で同時に複数の都市を計算しようとすると、結局1,000ケース程度の地盤震動や津波遡上を計算することになる。そのような多数の地震シナリオを想定し、地下や海底の情報の不確実性も考慮した上で、将来起こり得る被害の多様性を見据えて防災・減災対策を進めなければならない。これは現在のたかだか数例の地震シナリオの想定に基づく防災・減災対策とは一線を画す。また、信頼度の高い被害想定のためには、合理的な法則に基づく構造物と都市のシミュレーションが不可欠である。具体的には、震源からの弹性波動伝播、地盤と構造物の震動、津波の伝播と遡上などのシミュレーションである。更に、揺れや遡上を受けて、どのような経路で避難するのがよいか、また避難誘導を効果的に行うには誘導する人がどこにどれだけ必要かといったことのための避難シミュレーションも必要となる。

また、地震発生から津波遡上に至る一連のシミュレーションは、地震発生前の減災対策に資する災害予測としてだけではなく、地震直後の初動対応のための災害予測としても重要である。地震直後は、特に広域災害で、かつ夜間などの場合、被害状況を推定することは困難を極める。そのような状況において、数時間以内に、発生した地震や津波のデータと、一連のシミュレーションを基に災害予測を行うことができれば、被害状況の推定にとって有益な情報が得られる期待される。

一方、東日本大震災での津波による被災過程から明らかになったように、巨大津波が港湾施設と市街地の隣接した地域を襲う際の被害の波及は、単なる海水の侵入による施設破壊に留まらない。例を挙げると、宮城県気仙沼市では津波の来襲にともなうタンクや船の漂流にともなう油の流出と引火により大規模延焼火災が発生し、被害は甚大なものとなった。このように、災害の外力が複合的・連鎖的に被害を拡大させる過程を「複合災害」と呼ぶが、その発生メカ

ニズムや被害の波及過程を予測できる技術はいまだ発展途上である。複合災害の被害想定には、地震波の伝播や津波の遡上といった連続体の計算だけでなく、長時間の震動による液状化、津波による構造物破壊、漂流物の移動やその衝突による構造物破壊、更には火災といった現象を扱う必要があり、さまざまな物理法則に支配される現象を予測する高精度なシミュレーションモデルを高度に連成させたマルチフィジックスシミュレーションを行う必要がある。

こうしたシミュレーションを行うことができれば、例えば防潮堤・防波堤等の海岸施設において、以下のようなことが期待される。まず、施設が破壊・倒壊するまでの時間を少しでも長くする、すなわち施設が完全に流失する「全壊」に至る可能性を少しでも減らすような、減災効果を目指した構造上の工夫への要件を明らかにすることができます。また、津波に対する構造物の安定性を評価する技術基盤を構築したり、沿岸部の津波被害（複合被害）拡大リスクを減少させるための評価技術を確立したりすることができます。

一方で、グローバリゼーションが進む経済活動の発展を考えると、将来の地震災害は、構造物や都市の被害という直接的な被害に加えて、この被害がもたらす都市や地域の経済活動の低下といった間接的な被害をより深刻なものとすることが指摘されている。したがって、直接被害の推定の信頼度を持続的に向上するシミュレーションの高度化とともに、地震発生直後の経済活動の低下と被害の復旧の進捗による経済活動の回復を解析できる、間接被害のシミュレーション手法の開発も重要な課題と言える。例えば、電力流通復旧過程において、どれだけの人数の作業員と指示員が、どこからどういう順番に復旧をしていくのがよいかといったことを分析するためには、複数のエージェントの相互作用による振る舞いを分析することができ、避難シミュレーションでも使われているマルチエージェントシミュレーションが応用できる（この場合は作業員がエージェント）。これを、都市や地域の経済の回復と関連させることができ、間接被害のシミュレーション手法開発の第一歩となるだろう。

以上のような地震発生シナリオから被害想定に至る一連のシミュレーションは、日本にとつて重要なものである。その一方で、極端に言えば自然の中の複雑な人間活動すべてを計算機で追跡する極めて複雑なものであるため、その時代の最先端のHPC上で、継続的に解析手法・モデルを高度化しつつ開発を行うことが必要である。それと同時に、5年、10年単位でのHPCの高速化に応じて、一時代前に最先端HPC上で開発したシミュレーションツールを、個別の地域を対象とする研究機関や大学での研究レベルや実務レベルに順次下方展開していくことも重要である。これにより、国レベルでの大規模災害に対する想定業務はもとより、各地方自治体や企業レベルでの想定業務が、継続的に高度化され、信頼性を高めていく流れができる。そのためには、継続的に最先端のHPC、それに続く研究レベルや実務レベルのHPCを開発・製造することが必要になる。これは、最新の計算科学に基づいた最良の被害評価手法を標準化したものとして社会で共有し、減災に結びつけることであり、この課題の社会的意義でもある。

今後の計算科学が貢献しうる社会的課題

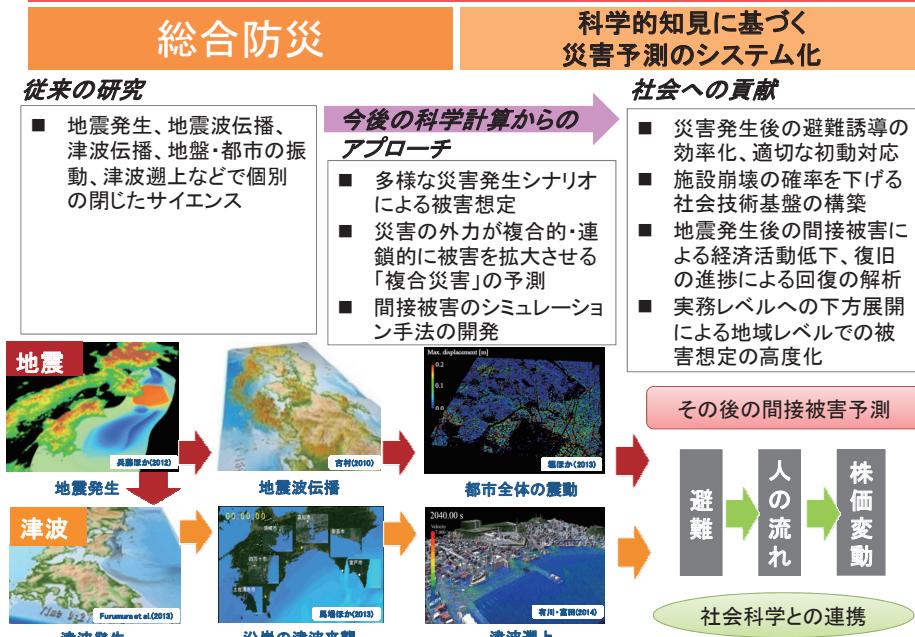


図 2.2.1-1 総合防災（地震・津波防災）

(2) サイエンスの質的变化

地震・津波分野では、従来は、地震発生・地震波伝播・津波伝播・地盤や都市の振動・津波遡上といった各現象を独立して扱い、それぞれが閉じたサイエンスとして発達してきた。例えば、地震発生であれば、地震発生に関わる仮説を提案し、それに基づいて断層運動の結果としての地殻変動や地震波形をシミュレーションで計算し、観測データとの比較によって仮説を検証することが行われてきた。しかし、東日本大震災をもたらした M9 クラスの地震は、その繰り返し間隔が数百年以上に及ぶため、地殻変動や地震波形の観測データは、最近発生した地震に対してもしか得られない（そこでは同様の地震は当面起こらない）。これに対して、地震発生から都市の振動や津波遡上までをつなぐシミュレーションが実現すれば、これまでとは質的に全く異なる状況となる。各現象には、それに応じた観測データがさまざまな時期にさまざまな精度で残されている。例えば、津波堆積物は 1000 年以上にも遡ってデータが存在する。そのため、ある一つの地震発生シナリオに基づいて津波遡上まで計算すれば、それが数百年前に津波堆積物をもたらした現象と整合するかどうかを、誤差を考慮したうえで科学的根拠に基づいて評価することができる。それを非常に多数のシナリオに対して行えば、それらのシナリオがさまざまな時空間スケール、そしてさまざまな精度で散在している貴重な観測データに対して、どの程度整合しているかを評価できることになる。同様なことを、津波堆積物だけではなく、地震発生から建物の振動や津波遡上に至る過程に対して適用していくことで、質の異なる多様なデータ（情報量の多さとしてビッグデータでもある）を統合的な知見として集約していくことができ、これまで個々に発展してきたサイエンスが、分野の垣根を越えて総体として発展していく道筋ができると期待される。

また、分野の垣根を越えるという意味では、津波に関わる課題において、これまでの各分野で独立に先鋭化された地震学、計算工学、流体力学、構造工学といった学術分野を専門とする研究者が連携して問題に取り組むようになりつつある。具体的には、(1) 沖合の津波観測情報のリアルタイム処理と波源の推定、(2) リアルタイム浸水予測を含む津波ハザード解析手法の高度化、(3) 津波氾濫にともなう土砂移動・地形変化の解析手法の高度化、(4) 固体・液体の連成解析手法の確立、(5) 避難行動解析を含む人的被害予測手法の高度化などが課題として挙げられる。なかでも、津波に強い町づくりに資する重要なテーマとして、「固体・液体の連成解析手法」の取り組みを更に発展させ、津波による複合災害の予測と減災対策への利用・普及を目的としたマルチフィジックスシミュレーションモデルを開発するといった目標を達成するため、以下に示すようなテーマに取り組むことで、今後より一層の連携が進むはずである。

- ① 巨大地震津波の近地・遠地の波動場の高精度予測（全球シミュレーション）
- ② 構造物の破壊・被害拡大過程のシミュレーション（水位・流速・波力・破壊・漂流物・火災等）
- ③ 流体・構造物・地盤の相互作用の解明
- ④ 「粘り強い構造」の性能と設計照査のための予測技術体系
- ⑤ 津波防災地域づくりへの貢献

更に、マルチエージェントシミュレーションを活用した間接被害のシミュレーション手法の開発は、計算科学と数理経済学を結ぶ新たな境界領域となることが期待され、これは、計算科学の社会科学的課題への貢献にもつながるものである。

(3) コミュニティからの意見

一般論として、災害対策の実務において、シミュレーション技術の発展が社会の問題の具体的解決にどのように役立つかといった意見がある。具体的には、予測結果はどの程度正確なのか、結果のばらつき・不確実性はどのように考えるのか、逆に、災害対応の現場において果たしてそこまで高度な予測結果が必要なのか、といったことである。例えば、シミュレーション結果を津波に強い町づくりに向けてどの局面で活用していくか、といった課題がある。これらは、研究成果の社会実装を考えるうえで取り組むべき重要な課題であり、これらの疑問への回答を得ることを念頭において、シミュレーション結果の検証やばらつき・不確実性へ考え方も含めて課題に取り組む必要がある。なお、ばらつきや不確実性は、現象の本質やデータが不可避的に不十分であることに起因する面が大きいので、HPCを活用した多数シナリオの導入によってそれらを定量化したうえで、実務に関わる人達と一緒に、実務への生かし方を検討することが不可欠である。そのなかで、災害対応の現場でどのように高度な予測結果が生かせるかを示して行く必要がある。

また、平成25年5月20日に行われた日本地球惑星科学連合合同大会の特別セッション「ハイパフォーマンスコンピューティングが拓く固体地球科学の未来」においては、工学分野からの意見として、災害予測や被害想定をシミュレーションベースで行う方向性について全面的に賛成する一方で、本当のニーズをいかに捉えて、それに応えるものにしていくかの重要性が指摘された。ニーズに応えるといつても、受け手から的一方的な要求に応えるのではなく、災害予測や被害想定の実力に見合った範囲で、かつ受け手が満足できるところのコンセンサスを得

ることが重要である。そのためには「ご意見伺い」ではなく、ユーザを取り込み、分野を超えた共同研究を行うことが必要になる。また、これからの方針として、オンデマンドで、個人や個々の団体のニーズに合わせた減災に資する情報を、Web やスマートフォン等も活用して個別に発信していくことが複数の講演者から提案された。更に、地球科学は、真理を探求する認識科学から、観測データとシミュレーションを両輪として問題解決のための予測能力を高める設計科学への質的転換が必要であるとの指摘もなされた。

このように、コミュニティ内外からの意見は、基本的に本書における計画の方針性を支持しつつ、よりよいものにするための意見であったと言える。

(4) 計算機要求

防災連携シミュレーション(地震直後の被害状況予測)について、地震発生から建物の振動、津波遡上に至るまでのシミュレーションで個々のアプリケーションに必要となるのは、1 ケース当たりで最大メモリ量～0.1PB、最大演算量～25.8EFLOP であり、地震発生、波動伝搬、地震動増幅(広領域および都市部)、建物震動、津波遡上を合わせた 1 ケース分の演算量の総計は約 75.7EFLOP となる。

| 課題 | 要求性能 (PFLOPS) | 要求メモリ bandwidth (PB/s) | メモリ量/ ケース (PB) | ストレージ量/ ケース (PB) | 計算時間/ ケース (hour) | ケース数 | 総演算量 (EFLOP) | 概要と計算手法 | 問題規模 | 備考 |
|---|------------------|---------------------------|----------------------|------------------------|------------------------|------|-----------------|--|---|---|
| 防災連携シミュレーション(地震直後の被害状況予測) 内訳は以下(1)～(6) | 7 | 15 | 0.1 | 9.00 | 3 | | 310000 | | | 地震発生は1領域1000シナリオを5領域行う。 各領域について1000シナリオ中、観測に基づき20%アリオを選び、波動伝播計算を行う。一方、地震動増幅や建物震動・津波遡上については、地盤構造や建物劣化、海底地形の不確実さを考慮するために数十ケース計算するとともに、複数の都道府県の都市(例えば南海トラフ地震の場合に、東海・近畿・四国・九州の4都市)を一度に計算する必要を考慮すると、結果的に各領域で1000ケース程度は計算が必要。アブリの最大BF値=8.0 |
| (1) 地震発生 | | | 0.00086 | 0.00086 | | 5000 | 48 | 境界積分法による地震サイクル計算 | 面素数10 ⁷ | アブリの最大BF値=4 |
| (2) 波動伝搬 | | | 0.1 | 0.5 | | 100 | 1400 | 差分法による弾性波動伝搬計算 | 1200x1000x200Km ³ (125mx125mx62.5m格子)、ステップ数24万回 | アブリの最大BF値=2.14、京での実測1.4、1ケースあたり演算量14EFLOP(東北大調べ)。東大前田先生による新バージョンを京でも主に利用。そちらは20EFLOP。 |
| (3) 地震動増幅 | | | 0.01 | 4 | | 5000 | 130000 | 有限要素法による地震波動計算 | 30億節点(300x250x10km ³) | アブリの最大BF値=8.00 |
| (4) 地震動増幅 | | | 0.01 | 4 | | 5000 | 130000 | 有限要素法による地震波動計算 | 30億節点(30x25x1km ³) | アブリの最大BF値=8.00 |
| (5) 建物震動 | | | 0.05 | 0.05 | | 5000 | 500 | | 構造物100万棟 | BF値=0.26(実測値)。メモリ転送量はBF値と演算量から逆算。BF値はキャッシュに載るので小さい演算量はプロファイルからの外挿と一致、メモリ転送量はプロファイルからの外挿 |
| (6) 津波遡上 | | | 0.002 | 0.5 | | 5000 | 50000 | Navier-Stokes方程式複数モデル (静水圧近似、非静水圧、VOF法)計算 | 3x3x0.08Km(1都市領域を1m格子幅)から 1400x100x10Km(5.4Km格子幅)の複合格子、7都市同時計算、72万ステップ | 演算量、メモリ転送量、メモリ量は実測値からの外挿。BF値=10(実測値) |
| 避難誘導シミュレーション | 3.3 | 0.28 | 0.3 | 0.006 | 1 | 5000 | 60000 | マルチエージェントモデルによる行動シミュレーション | 300,000 agents, 18,000 steps (1 hour simulation), 1,000 Monte-Carlo members | 演算量は命令数である。浮動小数演算は命令数のおよそ1/40。演算量、メモリアクセス量、メモリ使用量は京でのプロファイルから外挿 |

(注：地震発生から津波遡上は防災連携シミュレーションの内訳である)

さまざまな地震発生のシナリオを、地盤構造や建物の震動特性、海底地形などの不確実性を考慮して多数のケースについて計算する際には、計算時間の制約はそれほど厳しくない。しかし、迅速な対応が求められる地震発生直後の災害予測に対しては、時間的な制約が大きくなる。地震発生直後の被害状況を予測することを想定した場合、数時間以内には計算が終了することが必要となる。この場合、不確実性の考慮はしないとしても、複数都市の同時計算は必要となる。例えば南海トラフ巨大地震で、東海・近畿・四国・九州の4都市で地震動増幅・建物震動・津波遡上を計算する場合、総演算量は約 250EFLOP となり、これを3時間以内に終了させた場合の実効的な要求性能は 20PFLOPS 以上となる。この値は一見小さく見えるが、ここで用いるほとんどのアプリケーションがメモリバンド幅に律速であることや、演算量の多くを占めるアプリの京 (BF 値=0.5 程度) での実行効率が 10-20% であることを考慮すると、最低でも 100PFLOPS 程度のピーク性能が必要である。実際は、「京」よりもノード数が大きくなるなど計算効率は下がると考えられ、数 100 PFLOPS から 1EFLOPS のピーク性能を持つ計算機でないと要求が満たされないのであろう。ただし、地盤や建物の震動、津波遡上は、より多数の都市での計算が本当は必要であることに注意する必要がある。こうした個々の都市での計算のためには、フラグシップマシンではなく、リーディングマシン第2階層のような別のマシンで対応するのが現実的である。その場合も、迅速な対応のためには、少なくとも 100PFLOPS 程度のピーク性能が必要である。

なお、地震発生前にさまざまな不確実性を考慮した予測を行う場合でも、(1)で触れた通りケース数が一つの領域で 1,000 程度必要となり、日本列島を囲む海域を 5 領域（千島海溝、日本海溝、相模トラフ、南海トラフ、琉球海溝）に分けたとすると 5,000 ケースの計算が必要となる。この場合の総演算量は 31 万 EFLOP となり、約 5 ヶ月の占有で日本列島全域のプレート境界地震を対象とした地震発生から津波遡上までを含めたシナリオ計算がようやく実現できる。

一方、群集避難のためのマルチエージェントシミュレーションでは、避難制御への展開を目標としている。この場合、リアルタイム以上の速度で 30 万程度の群衆が避難する過程を解析できる高速なマルチエージェントシミュレーションが必須となる。また、統計的に意味のある結果を得るために、モンテカルロ法により 1 ケースあたり 1,000 回程度の試行が必要である。このようなシミュレーションに必要とされる計算は、エージェント一つ当たりの計算が現在と同程度の場合（1 ステップの演算回数は 1 エージェント 1 モンテカルロシミュレーション当たり 2 百万回程度）、1 時間の避難のシミュレーションに対して演算回数は 12 Exa 回程度必要となる。必要となるメモリ（1 エージェント当たり 1MB 程度、エージェントがラスターデータの地図データを持つとメモリはそれに応じて増加する）は 0.3PB 程度である。現状のマルチエージェントシミュレーションでは、プログラム内で多用している C++ のテンプレート等の京での整備が遅れているため計算効率が低い（理論性能の 0.2% 程度）。仮に理論性能が 1EIPS のマシンで同じ効率（0.2%）であるとすると、実効性能が 2PIPS なので、6000 秒（実時間の約 1.7 倍）で計算を終了することが可能である。ただし、周囲のエージェントのわずか数秒先（10～100 ステップ先）の動きを予測するアルゴリズムを加えるだけで、1 エージェント当たりの演算回数は最大 2 极度大きくなる。現在開発中の先読みアルゴリズムを次世代計算機でどの程度を想定するかという見通しはまだないが、より現実的なエージェントシミュレーションには、実効性能を上げるとともに、より高い演算性能の計算機が必要なことは確かである。

2.2.2 気象災害

(1) 社会的貢献 一科学的知見に基づく災害予測のシステム化を目指して一

日本は、その国土の約7割を山地・丘陵地が占め、台風や豪雨等に見舞われやすいという、地形・気象の両面で厳しい条件下にある。低地の狭い平野部に人口や重要な社会資産が集中しており、洪水や高潮が発生すれば大きな影響を受けることになる。また、山地・丘陵地による傾斜地もしくはその近傍にも多くの民家やさまざまな施設が存在し、土石流や地すべり・崖崩れといった現象は災害に直結する。

日本を含む東アジアにおける気象災害の最大の要因は、台風である。日本では、1983年以降は50名を超える死者・不明者を出す台風災害は生じていなかったが、近年(本稿では2004年以降の過去10年)になって大きな台風災害が頻発している。2004年10月の台風23号は、全国に強風と大雨をもたらし、98人の死者・行方不明者と7千億円を超える平成最悪の被害を出した。2011年9月の台風12号は、紀伊半島に1,800mmを超える記録的な豪雨をもたらし、90名を超える死者行方不明者と1千億円を超える被害を出している。2013年10月には、台風26号で伊豆大島で土石流による大きな災害が発生した。東南アジアでも、近年台風による大きな災害が頻発している。ミャンマーでは、2008年5月にサイクロンナルギスの高潮により、死者・行方不明者13万人という最大級の気象災害が発生した。2009年8月の台風8号は、台湾で大規模な深層崩壊を引き起こし、過去50年で最悪と呼ばれる800名近くの死者・不明者を出している。また2013年11月にフィリピン南部を襲った台風30号は、最強クラスの上陸台風として高潮などにより死者・不明者6千人を超えると推定される同国での過去最大規模の災害を発生させている。

台風によらない豪雨も、梅雨末期などにしばしば大きな被害を出している。特にここ数年は、平成21年7月中国・九州北部豪雨(死者・不明者30名)、平成23年7月新潟・福島豪雨、平成24年7月九州北部豪雨など、顕著な被害(損壊家屋等1,000棟程度以上、浸水家屋10,000棟程度以上など)として命名される集中豪雨が頻発している。また、2013年8月の山口・島根での豪雨や9月の秋田県、岩手県での豪雨など過去の降水記録を更新するような激しい雨も多く発生している。

台風や集中豪雨など大規模な気象災害の他に、短時間の顕著気象として、局地的大雨や竜巻がある。「ゲリラ豪雨」と呼ばれる局地的大雨は、2008年7月神戸市都賀川、2008年8月豊島区雑司が谷、2009年8月那覇市ガーブ川など、狭い範囲に1時間100mmクラスの雨をもたらし、急激な増水による人的被害を発生させている。2012年5月にはF3という国内最強クラスの竜巻が関東地方に発生し、つくば市などに大きな災害を引き起こした。また2013年9月の台風18号は、過去最多の10個の竜巻を伴っていた。竜巻は、ドップラーレーダーなどでも検出できない現象であるが、スーパーセルに付随するメソサイクロンに伴って発生することがある程度わかってきていている。

国土交通省(気象庁)の調査では、近年、1時間に50mmや1日に200mmを超えるような激しい雨の回数が増加しており、土砂災害の発生件数もこの10年で20~30年前の1.5倍に増加している。IPCCの第4次評価報告書によれば、今後、大雨の頻度は引き続き増加する可能

性がかなり高いと予測されている。日本においても、地球温暖化の進行により、100年後と現在とで比較すると、200mm以上の日降水量の年間日数は、ほとんどの地域で増加すると予測し、また、年最大日降水量は多くの地域で1.1～1.3倍に増加するとしている。日本では、伊勢湾台風以降大規模な高潮災害は発生していないが、昭和三大台風と呼ばれるような巨大台風が1960年以降襲来していないこともその原因の一つと考えられる。地球温暖化の進行に伴う海面水温の上昇と大気中の水蒸気量の増加が台風の強化に働く可能性が指摘されており、将来にわたって大きな高潮が発生しないという保証はない。

台風による豪雨や局地的大雨は、不安定な大気状態の中での総観場強制が弱い場で発生する場合が多く、その予測は大変難しい。また台風による雨の場合でも、域内のどこで災害に至る量の雨が降るかを正確に予測するのは多くの場合難しい。竜巻（メソサイクロン）はさらにスケールが小さく、現在の現業数値予報は、これらを直接の予報対象としていない。このため、これらの現象に関する警報や注意情報の発令は主として監視に基づいているのが現状である。気象庁は、2013年8月から重大な災害の危険性が著しく高まっている場合を対象に、「特別警報」の運用を開始した。数十年に一度の現象が予想される場合が対象となるが、大雨特別警報に関する指標（48時間あるいは3時間降水量と土壤雨量指数）の予測は、実況監視を主体としている。実際の豪雨災害は深夜や未明に発生する例も少なくないため、現在の情報は、安全な避難行動をとるタイミングを考える上では十分ではない場合がある。豪雨予測の精度を向上させるとともに、リードタイムを持って最悪のシナリオを提示できる技術基盤を確立していくことが重要である。

積雪、干ばつや冷害など、集中豪雨よりも大きな時間・空間スケールの現象は、短期間で人命を奪うものではないが、大きな経済的損失を伴う場合がある。現代の大都市の交通は、その頻度が少ない首都圏などでは、積雪に対して極めて脆弱になっているが、その正確な予測が現在でも難しい場合がある。干ばつは、アフリカなど世界的には最大の気象災害の一つとして恐れられており多くの人命を奪ってきた歴史があるが、季節予報は気象予測の中でも最も難しいものに数えられている。また、発展途上国の産業振興に伴い、PM2.5のような越境汚染の深刻化が懸念されており、環境予測の重要性も高まりつつある。

地球温暖化の進行とその影響の将来予測の精度を上げるために、モデル計算についての「気候感度の不確実性の幅の縮減」が極めて重要である。この不確実性の多くは、地球全域の雲の動向の変化予測の難しさに起因している。衛星観測との比較検証により現在の雲分布とその放射効果を正しく再現できるモデルを開発し、そしてそのモデルを用いて地球温暖化時の雲分布の変化を確認することがこの問題の解決の正攻法である。

気象防災のために必要な予測について、時間スケールの観点から分類すると以下の表2.2.2-1のようになる、なお、これら全てのスケールにおいて、その予測は予報誤差の定量的な評価に基づく確率的な表現となるべきであることを後述する。

表 2.2.2-1 気象防災に必要な予測

| 時間スケール | モデル | 主な内容 | 防災対策 |
|------------|--------------|-----------------------------------|---------------------|
| 数十年 | 気候モデル（全球、領域） | 地球温暖化など気候変動に伴う台風の動向や豪雨等顕著現象リスクの評価 | 治水社会資本の整備やエネルギー政策 |
| 数か月 | 全球大気海洋結合モデル | マッデンジュリアン振動やエルニーニョなど季節内振動や季節変動の予測 | 水資源や食糧の管理、農業での対応 |
| 数日予報～2週間程度 | 全球モデル | 台風の発生、進路・強度予測、急発達する低気圧の予測 | ダム管理や企業・自治体での短期防災計画 |
| 半日～1日 | 領域モデル | 局地的大雨を含む豪雨等の予測、都市の積雪予測 | 事前の避難などの対策、防災待機情報 |
| 1時間程度 | 領域モデル | 局地的大雨や竜巻をもたらす巨大積乱雲やメソ対流系の移動・消長 | 命を守るための行動 |



図 2.2.2-1 総合防災（気象災害）

(2) サイエンスの質的变化

数値モデルによる気象予測は、計算科学の最適な応用分野の一つとして古くから注目されてきた。Richardson (1922) の試みに始まった数値計算による気象予測は、1946年に米国ペンシルバニア大学でデジタル計算機 ENIAC が開発されると現実のものとなった。Charney ら (1950) は、水平格子間隔 736km の 2 次元順圧モデルで鉛直絶対渦度保存の式を解くことにより、数値モデルを用いた気象場の予測に初成功している。気象庁は、1959年に日本初の大型計算機 IBM704 を導入し、翌年から東アジア領域を対象とする水平格子間隔 381km の 2 次元順圧モデルの運用を開始している。2012年8月からは、水平格子間隔 2km の局地モデルの運用を開始しており、約半世紀で現業数値モデルの格子間隔は約 200 倍になっている。これは平均的には6-7 年で解像度が 2 倍になることに相当し、そのペースはこの期間中概ね変わっていない。ス

一パーコンピュータを用いた数値モデルによる予測は、天気予報に関しては、かつての参考資料から現在では不可欠の基幹技術になっている。

その一方で、大気現象は極めて自由度の大きな複雑系であり、計算科学としての第一原理のみに基づくアプローチは特殊な場合を除き、将来に渡って実現しないであろう。気象の予測においては、大気中の水の状態と放射による非断熱過程や乱流輸送が非常に重要で、これらを完全に直接計算することは不可能なので、何らかの粗視化（パラメタリゼーション）による近似が不可避である。これらの粗視化は、気象モデルによる予測の不確定の大きな原因となっているため、できる限り物理的性質が理解されている過程によって大気中の物理を記述することが重要になる。

歴史的には、気象予測モデルの水平格子間隔は積乱雲（水平 10km）を表現するために必要な格子間隔（概ね 2km 以下）よりもはるかに粗く、現業数値予報モデルでは長く静力学近似と積雲対流パラメタリゼーションが使われてきた。静力学近似は、鉛直方向の運動方程式を鉛直圧力傾度と重力の平衡に置き換えるもので、鉛直流や 3 次元の気圧を予報するプロセス、気象学的にはノイズとなる音波に対する複雑な扱いなどを省略できる利点がある。水平格子間隔 10km 以上の場合など、現象のアスペクト比が 1 よりも十分に小さい場合には良い精度で成り立つことが知られている。積雲対流パラメタリゼーションは、格子平均した積雲や積乱雲の効果（主に、水蒸気の凝結や蒸発に伴う潜熱の出入りや、熱や水蒸気（運動量）の鉛直輸送）のみをパラメタライズする手法である。これらの手法は、中緯度の総観スケールの気象擾乱を対象とする予報では現在でも十分に有効であるが、気象災害につながる顕著現象を引き起こす積乱雲を直接表現する場合には適用できない。

数値モデルの格子間隔が積乱雲を表現できるようになると、深い対流についての積雲対流パラメタリゼーションが不要になる。概ね水平格子間隔 2km 以下で雲物理過程を含むモデルを雲解像モデルと呼び、気象庁局地モデルがそれにあたる。水平解像度 4km 程度でも積雲対流パラメタリゼーションを用いないで計算を行うことは可能で、対流許容(convective permitting)モデルなどと呼ばれることがある。一方、水平格子間隔 2km ではスケールの小さな浅い対流は表現できないため、雲解像モデルとしての解像度は十分とは言えない。また深い対流についてもその解像度依存性の収束計算を調べた近年の研究では、水平格子間隔として上昇流のコアを表現するために 250m 程度が必要と言われることが多くなっている。雲の物理として一般に良く用いられている粗視化は、バルク法と呼ばれる手法で、水物質を雲や雨、雪などのカテゴリーに分け、粒径分布関数を仮定して混合比や数濃度といった限られたモーメントのみを予報するものである。また、境界層内の対流や乱流に関しては、乱流渦の等方性の程度に応じて幾つかの予報式を診断式に簡略化したクロージャ境界層モデルと呼ばれる粗視化が行われているが、水平格子間隔 1-2km は、境界層モデルによるパラメタリゼーションの適用が好ましくないとされる'grey zone' と呼ばれる解像度にさしかかっている。

数値モデルによる気象予測は初期値問題であり、気候予測以外のほとんど全ての気象予測において初期値の精度は決定的に重要である。数値予報の分野では、前の時間の予報結果を第一推定値として、それを観測で修正して初期値を作る作業が行われる。基礎となっているのは、条件付き確率に対するベイズの定理であり、第一推定値と観測値の誤差に応じた最尤推定の手法として、変分法が広く用いられている。観測値と第一推定値の双方からの誤差の重みに応じ

た距離の和で評価関数を定義し、評価関数が最小となる解を探索して解析値を求めるものである。4次元変分法と呼ばれる手法では、異なる時刻の観測を同化するために、データ同化にも数値モデルが用いられる。最適値の探索のためには数十回に及ぶ繰り返し積分が必要なため、4次元変分法の計算においては、同化モデルの解像度を予報モデルよりも低くする妥協が広く用いられている。日本を含む先進予報センターでは、初期値作成に関連する手続きに予報そのものと同程度もしくはそれ以上の人的・計算的資源を投入している。

我が国におけるHPC技術の先駆けとしての地球シミュレータの登場は、全球気候モデルの解像度を20kmに、領域気候モデルの解像度を5km程度にすることを可能にした。これらの改善はモデルにおける台風や地形の現実的な表現を可能とし、気候変動に伴う台風の強度や強雨の出現頻度についてのより信頼性の高い情報が得られるようになった。地球シミュレータによるこれらの全球20km、領域5kmの気候計算は、IPCC報告書に直接的に寄与するとともに、気象庁の現業数値予報システムの開発にも重要な技術情報を提供し、2006年の気象庁での20km全球予報モデルと5km領域非静力学モデルの運用開始とそれらによる現業予報システムの予測精度向上に間接的に寄与した。但し、地球シミュレータでのこれらの気候計算は、タイムスライス実験と呼ばれる海面水温を境界条件として与える実験とそのダウンスケールである。NICAMに代表される全球非静力学モデルの開発とそれを用いた研究においても、地球シミュレータは一定の役割を果たしている。

京コンピュータの登場に代表される最新のHPC技術は、戦略5分野に代表されるさまざまな分野への数値シミュレーションの適用を可能にしたが、計算科学の最適な応用分野としての気象気候の重要性は変わっていない。前述したように気象計算には様々な粗視化や妥協が余儀なくされているが、京の登場は、先端研究に質的な変化をもたらした。戦略分野3「防災・減災に資する地球変動予測」においては、対流許容モデルを全球規模に応用して、台風の発生や進路・強度についての予測可能性を調べる計算が行われるようになった。また2日間ではあるが、全球を対象とする本格的な雲解像計算が世界で初めて行われた。領域モデル計算においては、雲解像モデルを用いたアンサンブル予報やアンサンブル予報にリンクしたデータ同化研究が行われるようになった。前述したように気象予測では初期値が決定的に重要であるが、解析は第一推定値と観測値の誤差に基づく最尤推定であるため、初期値には不可避の誤差が存在する。アンサンブル予報は解析誤差などに応じた初期値の時間発展を多数の予測計算から求めるもので、確率的な予測を得ることが可能になる。またアンサンブルカルマンフィルタに基づくデータ同化と高解像度アンサンブル予報を、九州北部豪雨やつくば竜巻などの災害事例に適用する予測実験も行われ始めている。初期値への敏感性がそれほど大きくないとされる気候計算においても、モデルや境界条件の不確定性を考慮するアンサンブル計算が予測の信頼度の評価のために必要である。

物理過程の粗視化に起因する数値モデルの不確定を定量的に評価する研究が、戦略プログラムで行われている。バルク法による雲物理の粗視化では、あるカテゴリーの水物質について質量平均や数濃度平均した落下速度を仮定するが、「BIN法」では、粒径などの「BIN」を設定し、各BINに含まれる水物質の量を計算する。乱流は、その運動エネルギーが大きなスケールから小さなスケールに流れるだけの慣性小領域と呼ばれる領域では、その性質が比較的良好く理解されている。より大きなスケールの渦についてを直接解像するものとして、ラージエディシ

ミュレーション(LES)がある。これらを用いるモデルはこれまで限られた設定での理想実験しか行えなかつたが、戦略分野 3 では、個々の建物も解像する LES モデルによる現実設定での大規模シミュレーションが世界で初めて行われるようになってきている。

京コンピュータにおける気象気候分野への先駆的な試みは、その先進性のゆえに、気象防災の分野にその成果が本格的に反映されるにはまだかなりの時間有すると思われる。地球シミュレータで行われた全球 20km、領域 5km という解像度は、気候モデルとしては画期的な高解像度であったものの、基本的なモデル設計は 2000 年代前半に既に気象庁において現業化されていた解像度 60km の全球静力学モデルと解像度 10km の積雲対流をパラメタライズする領域非静力学モデルの延長であった。現在の気象庁の現業予報システムの解像度が、全球モデルで 20km、局地モデルで 2km、領域 4 次元変分法のインナーモデルが 15km、であることを考えると、6-7 年で 2 倍という現業数値モデルでの解像度の改善ペースが今後も続くと仮定しても、全球雲解像数値予報モデルやメソサイクロンを解像する領域数値予報モデル、雲を解像するデータ同化、などの現業的な運用の実現には今後まだ 15-20 年を要すると思われる。全球雲解像計算を気候変動予測に応用したり、BIN 法雲物理過程や LES を顕著気象の予測計算に応用するには、現在の京の能力はまだ不足している。これらは、その結果から十分な科学的知見を引き出すには例数が少なすぎるが、次世代スパコンでは実現可能であることを例証する重要なフラグシップ計算と言える。

次世代スパコンでは、京で行われているフラグシップ計算が、本格的に行えるようになることが期待される。空間解像度の向上とそれに伴うモデルや初期値の不確定性の減少は、気象防災という観点では、時間方向へのダイナミックレンジの拡張を可能にするであろう。熱帯での積雲活動を陽に表現することによる 2 週間先までの天気予報が視野に入ると考えられる。また現在は監視に頼っている 1 時間のレンジでのストームスケールの力学的短時間予測についての本格的な実証実験が可能となる。これらは、現在よりはるかに早い段階での台風の予測や局地的大雨や竜巻をもたらすメソサイクロンの直前予測につながる本格的な実証研究となる。ただし、ストームスケール気象災害の予測の実用化には（気象衛星ラピッドスキャンデータやフェーズドアレイレーダなど）高頻度高密度の観測ビッグデータをいかに同化するかという技術的な問題についての研究の進展やそのようなデータを観測するシステムをどう展開しデータを迅速に収集するシステムの構築が不可欠である。

アンサンブル予報によるあらゆるスケールでの予測誤差の定量評価は、数値モデルによる予測情報の防災的実用価値を大幅に高める。現在は主として実況監視に基づいている災害への警戒情報を、リードタイムに応じた確率的予測情報や最悪シナリオの提示で補えれば、コストとリスクの大きさに基づいた防災対策が可能となり、気象災害に伴う被害を大きく軽減できる可能性がある。BIN 法や LES の本格的な計算に基づくバルク法雲物理過程や境界層過程の高度化（grey zone 問題の解決）は、領域数値予報モデルや次世代以降の全球数値予報モデルの改善に重要である。これらの開発研究の一部については、地球シミュレータが全球雲解像モデルの開発に貢献したように、京コンピュータも貢献できる余地がある。

次世代スパコンでは、現在は行えない計算が、フラグシップ計算として可能になる期待がある。浅い対流を解像する 250m 以下の水平格子間隔での全球計算や全球の雲解像データ同化、粒子フィルタを用いたデータ同化研究、BIN 法と LES、ビル解像モデルを組み合わせた領域予

報実験などである。常に最新の解析をその誤差の確率密度とともに保持し、観測データが入る度にそれを随時アップデートしていく解析予測システムが構築されるかもしれない。これらの計算は、気象予測にさらなる質的变化をもたらすだろう。これらの現業化はその実現性を議論できる段階にはないが、Richardson の夢から百年を経て、次世代スパコンが現在の研究者の夢の一部を具現してくれるかもしれない。

(3) コミュニティからの意見

日本気象学会では、専門分科会「ポスト『京』」に向けた気象・気候シミュレーションの展望」を 2013 年 5 月 18 日に開催し、「京」の利用経験に基づいた次世代スパコンに向けた数値モデルリング・データ同化研究の将来構想やアーキテクチャに関する要望などについての議論を行なった。気象・気候科学に関する社会的・科学課題は、本報告の 4.3.1 項に詳しく論じられている。高い風水害リスクを持つ我が国としては、その時代の最高性能の計算機を利用するにより最先端の研究開発をオールジャパンで推進していくことが、将来の減災のために重要である。高精度の気象予測は、総合防災のみならず、再生可能エネルギーの供給や都市の電力需要、放射性物質などの拡散・沈着予測、食糧生産や運輸・交通、国家の安全保障にも関わる重要な課題であることを再度強調しておく。

(4) 計算機要求

次世代スパコンに関わる計算機要求については、適用アプリの具体例を基に、総メモリ量、演算性能、メモリ帯域、ネットワーク性能などの各項目について、本報告の 4.3.1 項の(3)に詳しく述べられている。

地球シミュレータでは行われなかったデータ同化研究の京への適用は、同時に現在の京のような計算機が抱える大きな弱点をも露呈することにつながった。観測データの品質管理や様々なジョブステップで構成されるデータ同化の一連の手続きをこなすには、京の設計思想はあまりにも貧弱で、計算本体よりデータの入出力により多くの実行経過時間を要することもしばしばである。次世代計算機においては、ビッグデータへの対応がますます重要にかつ本質的になるのは疑いようがない。上述の日本気象学会の「ポスト『京』」に向けた気象・気候シミュレーションの展望」専門部会では、計算速度のみならずデータ入出が成果を得るまでのスループットを決める重要な要因となってきていることが指摘されたほか、実験結果の可視化やデータマイニングといった後処理を効率的に進めるためにも、高い計算速度に見合った I/O 性能の必要性が強調された。

| 課題 | 要求性能 (PFLOPS) | 要求メモリ バンド幅 (PB/s) | メモリ 量/ ケース (PB) | ストレージ 量/ ケース (PB) | 計算時間/ ケース (hour) | ケース数 | 総演算量 (EFLOP) | 概要と計算手法 | 問題規模 | 備考 |
|----------------------|------------------|-------------------------|--------------------------|----------------------------|------------------------|------|-----------------|--------------------------------------|---|---|
| 高解像度気象予報(全球) | 130 | 360 | 3 | 58 | 340 | 1 | 150000 | モデル名NICAM, 有限体積法 | 格子点数: 1兆(水平解像度220m, 鉛直94層)、ステップ数: 520万(dt=1秒、2ヶ月) | 10万ノードを仮定(ノードあたり隣接通信1GB/s) |
| 高解像度気象予報(領域) | 33 | ※ 33 | 0.09 | 0.3 | 0.5 | 2700 | 160000 | モデル名ASUCA, 有限体積法 | 格子点数: 7500x7500x500、ステップ数: 13万(dt=1秒、36時間) | 演算量、メモリ量に関しては、SR1600でのプロファイルを元に外挿。メモリアクセス量は、B/F値が1と仮定して見積もった。 出力は、25変数は10分毎に出力する。 通信に関しては、22500ノードを仮定(ノードあたり隣接通信40GB/s) |
| 局所的・集中的大雨、熱帯気象の高精度予測 | 220 | 270 | 0.7 | 5 | 580 | 2 | 900000 | 大気モデル:NICAM(有限体積法)、アンサンブルデータ同化:LETKF | 水平解像度3.5km、鉛直100層、1000アンサンブルメンバー、3時間おきの同化サイクル、2ヶ月積分 | 10万ノードを仮定(大気モデルのノードあたり隣接通信1GB/s) 演算量、メモリ転送量、メモリ使用量は、京でのプロファイルを元に外挿 |

※印の値は未だ精査中である。より精度の高い数値はWeb版(→「1.2. 本文書の構成」)を参照のこと。

2.3 エネルギー・環境問題

(1) 社会的貢献 —エネルギー技術と環境との調和を目指して—

エネルギー資源小国である日本にとって、エネルギー問題は最重要課題の一つであり、今後も、あらゆる科学技術を駆使してエネルギー利用技術を高めていく必要がある。更に、わが国のみならず今後地球規模のエネルギー問題を解決するには、全世界が進むべき道として低炭素社会・省エネルギー社会を目指していかなければならない。この点においても我が国の科学技術・計算科学の果たすべき役割は大きい。このためには幅広い観点からさまざまな取り組みが必要であるが、ここでは計算科学の役割をエネルギーのライフサイクル（創成、変換・貯蔵・伝送、利用）の観点とライフサイクルの各段階での環境との調和の観点とから述べていく。

エネルギー創成の観点からは、再生可能エネルギー（自然エネルギー）のより効率的な利用が第一の課題であり、太陽光発電や風力発電、バイオマス利用などに大きな期待が寄せられている。太陽光発電技術の鍵となる太陽電池・人工光合成素子の開発では、光吸収過程、電流を担う電子やホールのダイナミクスの理解と予測が必要である。また、熱エネルギーを電気エネルギーに変換する熱電変換素子の開発では、その変換効率を決める、電気伝導度に対する熱伝導度の比率を極力下げることが要求される。これらに共通して必要なのは、デバイス全体を構成する複合材料のサブミクロンオーダーの構造とエネルギー変換効率との相関の理解、使用される材料性能の劣化機構の解明と予測であり、量子力学に基づく有機・無機材料の大規模な電子状態計算など計算科学の手法が必要不可欠である。また、メタンハイドレートやバイオマス利用技術の進歩のためには、熱力学過程や酵素反応過程の解明が不可欠である。ここでも、分子動力学法などの計算科学の手法が重要な研究手段となっている。

一方で、自然エネルギーを用いて安定的な電力供給を行うためには、事前に、立地条件の環境アセスメントを行い、更には、実際の運用時に有効な発電予測技術を確立しておかねばならない。メガソーラー設置地点や集合的風力発電所（ウインドファーム）のアセスメントでは、年平均の日射量や風速の調査が重要となるため、長期観測や局地気候シミュレーションが必要となる。また、効率的な太陽光・風力発電量予測を行うためには、精度のよいピンポイント気象予測が不可欠となる。太陽光発電・風力発電、アセスメント・予測、のいずれの組み合わせに対しても、現在の領域気候モデル・天気予報モデルよりも高精度・高分解能な気象モデルが必要となる。

長期的代替エネルギー源のもう一つの候補は核融合炉である。現在、日本、米国、欧州、ロシア、中国、韓国、インドが共同で取り組んでいる国際熱核融合実験炉（International Thermonuclear Experimental Reactor: ITER）計画は、核融合出力 50 万キロワットの長時間運転を実現し、核融合炉を科学的・技術的に実証することを目標としている。この目標を達成するうえで、燃料プラズマの閉じ込め性能を左右するプラズマ乱流現象の解明が重要な課題となっている。プラズマ乱流現象は装置サイズに依存するため、ITER のような大型装置を小規模な実機試験で評価することは難しく、計算科学が必要不可欠である。特に、ITER 規模のシミュレーションにはペタスケールを超える計算資源が必要とされるため、次世代の HPC 技術が重要な役割を果たす。

エネルギー変換・貯蔵・伝送の観点からも、より一層の技術開発が必要とされる。例えば炭化珪素（SiC）や窒化ガリウム（GaN）を使った低損失なパワーデバイスの実用化は大きく省エネルギーに寄与すると期待されており、精力的な研究開発が行われている。また、風力発電や太陽光発電などの再生可能エネルギーは気候・地形・時間に依存して生産量が大きく変動する特性がある。このため、化石燃料エネルギーや原子力エネルギーを代替する割合を増やすには、各種2次電池や燃料電池など電力を効率的に貯蔵し取り出す技術の開発が必要である。ここに挙げたパワーデバイス材料の特性解析、燃料電池や2次電池における電気化学過程の解明、あるいは触媒や電極として用いられる白金・リチウム・インジウムなどの希少元素の代替物の探索においては、第一原理に基づく電子状態計算が広く使われるようになってきており、大規模シミュレーションによる物質設計は、次世代の素材やデバイス開発の主流となりつつある。更には、近年発見された、鉄や銅を含む高温超伝導体や表面や端のみで電流が流れるトポロジカル絶縁体、強磁性や強誘電性を同時に備えるマルチフェロイクスなど、いわゆる「強相関量子多体系」は新しい現象と概念の宝庫であり、全く新しいエネルギー変換・伝送技術へつながっていく可能性を秘めている。ここでも、量子多体系に対するモンテカルロ法などのさまざまな計算科学の手法が開発され、それらを用いた大規模シミュレーションによる研究が発展している。

次にエネルギー利用（省エネルギー）の観点から考える。多岐にわたる工業製品によって現代社会は支えられているが、これらは多くエネルギーを利用している。エネルギーは「動かす力」であるが、現代において重要な形態は「情報＝ソフト」を動かすものと、「物体＝ハード」を動かすものの二つに分けられる。

「ソフト」の代表例は、半導体をはじめとする電子デバイスである。省エネルギーはここでも重要な課題であり、より高機能で高速な半導体デバイスの実現に際しては、低消費電力化、熱対策などが解決すべき大きな課題となっている。シリコンデバイスに関連する材料はシリコン、その酸化膜、添加する不純物元素や水素だけでなく、ゲルマニウム、各種高誘電率絶縁膜、化合物半導体、カーボンナノチューブなどに広がっている。またデバイス性能も、平衡状態に近い条件下だけでなく、過渡的現象を含む非平衡状態に近い条件下での物性が重要となってきている。これらの材料・現象を原子レベル、量子力学のレベルで理解・予測することが重要となっており、このための計算科学の重要性は増大している。ここでは、より大きな系の電子構造を求めるということだけでなく、異種材料界面や電子励起された状態の熱的特性、電気的特性、分光学的特性を長時間測定することも求められている。他に、電子デバイスにはない高機能性を備えた次世代量子デバイスの一つの候補として、ナノ分子構造体を利用した、光・電子機能性デバイスが提案されている。電気・光学・磁気特性それぞれ単独の機能性だけでなく、光と電子のダイナミクスが密接に絡み合って生まれる新しい機能性が計算科学により明らかにされることにより、広帯域・高効率光エネルギー変換デバイスや量子データ転送素子の開発などにつながる理学・工学の新たな研究領域を切り開くことが期待でき、その学術的意義は非常に高い。これらはいずれも次世代量子デバイスの設計原理に大きく関わる現象であり、計算科学を通じて「ものづくり」の観点から社会へ大きな還元ができると考える。

一方の「ハード」の代表例としては、輸送機械が挙げられる。自動車や航空機などの輸送機器が最終エネルギー消費に占める割合は大きいが、低損失なパワーデバイス、高効率で希少元

素を使わないモーター（磁石）、高比強度かつ軽量な材料などがエネルギー利用効率を大幅に向上させると期待されている。また、これらの実用化は、エネルギーの利用段階だけでなく、発電機の高効率化や風車の軽量化など、エネルギーの生成段階においても省エネルギーや二酸化炭素排出抑制に大きく寄与する。こうしたデバイスや材料の物性は、原子間結合のみならず、サブミクロンスケールの内部組織（界面・転位・不純物など）に大きく支配される。それらの系統的な理解・設計・制御には、第一原理に基づく電子状態計算や自由エネルギー計算、加えてマルチスケール計算など計算科学の手法の確立と、それらによる大規模なシミュレーションが重要な役割を果たす。

これまで工業製品の開発・改良は、理論、実験ベースの設計手法で行われてきた。しかしながらその努力も限界に近づいており、今後、飛躍的な性能向上の実現にはシミュレーションに基づく革新的設計技術やそれを駆使した新たなる発想が必要である。シミュレーションを設計に適用することで、これまで未解明であった複雑な物理現象を解明し、物理メカニズムを把握したうえでの製品設計や、試行錯誤に基づいて決定していた種々の設計パラメータを理論的に最適化できる最適設計技術を活用することが可能となる。また、シミュレーションを用いることで、革新的な製品のアイディアやコンセプトを効果的に検証することが可能となり、これまでにない革新的な工業製品を実現することも可能となる。そして、これらを実現するためには、工業分野ごとにそれぞれの課題やブレークスルーが存在し、例えば、輸送機械などと深く関わる熱流体分野では、乱流輸送現象の解明がブレークスルーとなる。この乱流輸送現象の予測と制御は、他にも気象・気候分野、土木・建築分野、地震・津波分野、核融合分野、宇宙分野、物質科学分野などきわめて幅広い分野でも重要な課題となっている。大規模な計算科学によって乱流の基礎科学を推進、解明することはさまざまな乱流のより確かな予測と制御に向けての学際的共通基盤をより強固なものとするうえでも大いに意義のあることである。

最後に、エネルギーライフサイクルと環境との関わりについて考える。化石燃料の燃焼による二酸化炭素排出に起因する地球温暖化問題は、エネルギーを利用することが環境に影響を及ぼす一例である。また、太陽光や地熱など自然エネルギーの利用も、自然界に起源を持つエネルギーの変換過程に人間が介入することを意味しており、少なくとも地域規模でのある程度の影響は避けられないだろう。したがって、新エネルギーの創出にあたり地域から地球規模までのさまざまな空間スケールでの環境影響を、気象・気候シミュレーションモデルを駆使して予測することは、自然環境と調和した社会の健全な発展にとって不可欠と言える。また、気象・気候シミュレーションの性能向上は、風力や波力、潮流といった自然エネルギーの利用を効率化することにもつながる。

更に地球規模の環境問題に関しては、国際問題となっている地球温暖化対策に関する意思決定の基盤情報を構築するため、生物・化学過程を含む大気海洋結合大循環モデルである地球システムモデルをベースに、データ同化技術を取り入れ地球環境の状態を診断し、将来予測も行う「地球環境監視予測システム」を開発することが急務である。これまでの数百年スケールの温暖化予測モデルは、将来の地球環境に対する基礎的理解の増進に貢献してきたが、これに観測データを同化することにより、精度が高くより実践的な「近未来予測」も可能になる。このような新しい科学的成果を社会への気候予測情報の提供という形で実現させる仕組みの構築は、気候変動への適応、緩和という人類喫緊の課題に対し、地球環境の観測ネットワークと大

規模な計算機資源およびそれらを活用する人的資源をすべて有するわが国が国際社会においてイニシアチブを示す絶好の機会である。基礎理論の発展のみならず、計算機能力の向上に呼応したモデルの高解像度化や、数値計算技術、データ同化技術の向上、更には革新的設計技術の導入により、エネルギーをつくり、変換し、使うという一連のサイクルが人類にもたらす便益を、社会と自然環境という大きな系の中で総合的に捉え、永続的な営みへつなげていくことが可能になろう。



図 2.3-1 エネルギー・環境

(2) サイエンスの質的变化

次世代の HPC を活用することで、これまでの要素解明中心の科学から、さまざまな要素が複雑に絡み合う集団・階層解明の科学へと本質的な変化が期待される。すなわち、これまでに確立された古典力学、量子力学、統計物理学に基づいた、ナノ材料の物性・化学のボトムアップ的な予測が可能となり、シミュレーションによる新しい半導体デバイス、触媒材料、各種電池、構造材料などの物質設計・開発へつながると期待される。

次に、核融合分野のシミュレーションについて説明する。ITERにおいて世界で初めて実現する核燃焼プラズマ実験を解析するには、燃料の重水素、三重水素、および、核融合反応で発生するヘリウムを含む多種イオン系のプラズマ乱流現象の解明が必要となる。更には、核融合反応による熱源・粒子源の変化と乱流輸送による燃料密度・温度の分布形成の自律的な振る舞いに至る幅広い時空間スケール(マルチスケール)の複合的な物理効果(マルチフィジックス)を模擬することが必要となる。これらはシステムサイズ、分解能、時間スケール、どれをとっても従来のシミュレーションに比べてきわめて高い計算コストを要求する。この壁を次世代の

HPC 技術で乗り越えて核燃焼プラズマ実験を模擬することができれば、その核融合エネルギー開発に対するインパクトはきわめて大きいと考えられる。

ものづくりにおける計算科学は、これまで補助的手段として開発途中での不具合や各種試験でのトラブルなどの原因究明など、課題解決のためのツールとして使われてきた。しかしながら HPC の発達とともに、適用分野・範囲、解析精度・速度などが大幅に向上した結果、従来の簡易理論や実験ベースの設計に代わって、計算科学による設計というパラダイムシフトを実現しつつある。また、これまで要素レベルへの適用だったものが、それらを組み合わせたシステムへの適用としてマルチスケール、マルチフィジックスシミュレーションへと変化し、これまで未解明だった複雑系システムの複合要因の解析などに有効活用されつつある。

また地球規模環境問題への対応のため、生物地球化学的な物質循環と気候変動との相互作用を取り入れた地球システムモデルの開発を進めることで、人類が自然界に排出したさまざまな物質の循環とその気候や生物多様性への影響を把握し、人類の将来に関する意思決定につなげることができる。例えば、改善された地球システムモデルを用いた予測システムをベースに、現状下における二酸化炭素収支の診断による排出削減政策の効果の確認や、二酸化炭素濃度や気温等の将来予測、そして予測結果に基づいて社会に警告を発したり、地球温暖化対策立案に際し助言を行ったりといった役割を果たし得るシステムも構築できよう。更に、人類が地球環境の形成に大規模な変化を引き起こすようになった現代を「人新世」(Anthropocene) という新たな地質年代として捉えるべき、という議論がある。地球システムモデルによる古環境の再現実験や、人類の影響を加味した現在気候の再現・将来予測実験などを通じた視点で、地球環境研究に取り組むことが可能となる。ここで提案しているシステムは、地球史における人新世の位置づけや人類の存在意義、といった根源的問題に対する考察の一助ともなるであろう。これまで、物質科学分野、ものづくり分野、気象・気候分野が独立して研究を行ってきた。しかし、対象は異なっても数理構造が同一ならシミュレーション技術は共有できる。この視点に立ち、個々の基礎理論の発展とモデルの高解像度化を進めると同時に、多くの分野に共通する流体的手法を共有し、他分野における数理モデルに学びながらシミュレーション技術・データ同化技術の向上を図ることが求められる。この実践を通してエネルギーをつくり、変換し、使うという一連のサイクルを一つの大きな科学として総合的に捉えることが可能となり、地球規模のエネルギー・環境問題に貢献することができる。

(3) コミュニティからの意見

上記課題についてのコミュニティからの意見の詳細は、第 4 章 (4.2, 4.3.1, 4.4.1, 4.4.4 など) を参照されたい。代表的な意見としては、J-PARC、SPring-8、SACLA といった大型実験施設との連携、元素戦略（磁石、触媒・電池、電子材料、構造材料分野）における計算科学からの貢献、コミュニティーソフトウェアの整備への期待などが挙げられる。

(4) 計算機要求

個別の計算機要求は詳細については第 4 章に記載してあるので、ここでは代表的な例に絞り記述する。

電子材料の電子状態計算においては、 $O(N)$ 法を用いることにより、1億原子規模の第一原理分子動力学計算が視野に入ってくる。この計算には実効 0.1EFLOPS 程度の浮動小数点数演算性能が要求される。また総メモリ容量が 5PB 程度必要である。あるいは、実空間基底 $O(N^3)$ 法では 10 万原子規模の計算が可能となる。この場合、演算は行列行列積が主となるが、実効 0.1EFLOPS の浮動小数点数演算性能に加えて、ノード当たり 100GB/s のネットワークバンド幅が要求される。一方、高温超伝導体に代表される強相関量子多体系のモデル計算では、今後、多軌道効果や格子歪効果を取り入れた数万格子点規模の変分モンテカルロ法によるシミュレーションを進めていく必要があるが、この計算には 2EFLOPS 程度の浮動小数点数演算性能、0.2PB 程度のメモリ容量、さらにメモリ B/F 値=1.4 程度が要求される。また、クラスターアルゴリズム量子モンテカルロ法のように整数演算、ランダムアクセスが主体のアルゴリズムも今後主流となっていくと考えられ、浮動小数点数演算性能だけでなく、整数演算性能も強く求められる。

ITER 規模の装置サイズにおいて单一イオン種の準定常乱流 ($\sim 10\text{ms}$) の数値実験を実施するのに「京」コンピュータ (10PFLOPS) で 1 日程度の計算が要求される。これに対して、10 ~ 100PFLOPS 規模のポストペタスケール計算では多種イオン系の核燃焼プラズマの数値実験が実現し、更に、1~10EFLOPS 規模のエクサスケール計算では核燃焼による炉心の自律的な振る舞いを模擬するのに必要な長時間スケール ($\sim 1\text{s}$) の数値実験も視野に入ってくる。このような数値実験が実現すれば、より高性能な炉心プラズマの設計をシミュレーションで探索することが可能になると期待される。

熱流体分野の数値シミュレーションにおいてはものづくりでの利用に耐え得る解析精度を実現するためには微細な渦の運動まで直接計算する準第一原理的手法である Large Eddy Simulation (LES) が必要となる。乱流中の主要な微細渦まで計算する際の計算規模（格子点数や計算時間）は、流れの代表速度、代表長さ、および動粘度により決定されるレイノルズ数とよばれる無次元パラメータの大小により大きく異なり、レイノルズ数のほぼ 3 乗に比例して大きくなる。例えば自動車回りの流れではレイノルズ数は 10^6 程度となる。この流れに LES を行うためには数百億点の格子が必要となるが、数百 PFLOPS の計算機を使えば 1 週間程度で解析が可能となる。実際の設計に用いるためには数百ケースのパラメトリックスタディが必要となるため、更に大きな計算機が必要となる。なお、本計算の予測ではシステム全体で 10EFLOPS、ノード演算性能が 100TFLOPS の計算機を想定し、ノードのスペックとしてネットワークバンド幅が 0.5~5TB/s、メモリ容量は 0.1~1TB、メモリバンド幅は 50TB/s、I/O 性能は 0.1~1TB/s を想定した。

風力発電量予測のための気象 LES では、ウインドファームよりも広い領域を数十 m の高い空間解像度で計算することが望ましい。例えば水平 100km 四方、地上高さ 3km 程度までの領域の局地気象について、水平 30m、鉛直 10m の分解能でスピニングアップ（助走計算）1 日を含む 3 日間のシミュレーションを行うとした場合、必要な格子点数はおよそ 33 億点、ステップ数は $dt=0.2\text{sec}$ としておよそ 123 万ステップとなる。実行に必要なメモリ総量は倍精度の予報変数、診断変数および中間変数の総数が 400 であるとして 10TB 程度と見積もられる。この実験を 1 例当たり 72 時間で計算し、通年での統計的な風況アセスメントを行うために 100 例行うとす

る。これを実現する計算機は実効計算性能でおよそ 30PFLOPS、メモリ転送性能で 90PByte/s が必要である。ネットワークバンド幅は、隣接通信が主であるためトータルで 0.5~5PB/s 程度を必要とする。出力データは後半 48 時間のうち 20 変数を単精度で 10 分ごとに出力すると 70TB 程度となり、ファイル I/O 性能はトータルで 0.5TB/s あればよい。なお、この見積もりは立地アセスメント一つに対してであり、複数の立地に対してアセスメントを迅速に進めるためには、より高速な計算が求められる。一方、太陽光発電量予測のための計算の場合、大気放射過程を 3 次元的に計算するスキームの導入が必要となる。3 次元放射スキームはより多くの計算を必要とし、各ノードで受け持つ格子を大きく飛び越えて光が伝達するため大域通信を行う必要がある。また、降水時にはメソ降水系全体を表現できる更に広い計算領域が必要となる。このため、風力発電量予測のための気象計算の少なくとも 10 倍以上の計算量とデータ出力が必要となる。

| 課題 | 要求性能 (PFLOPS) | 要求メモリバンド幅 (PB/s) | メモリ量/ ケース (PB) | ストレージ 量/ ケース (PB) | 計算時間/ ケース (hour) | ケース 数 | 総演算量 (EFLOP) | 概要と計算手法 | 問題規模 | 備考 |
|------------------------------|------------------|---------------------|----------------------|----------------------------|------------------------|----------|-----------------|--|--|---|
| 電子材料の電子状態計算・手法1 | 100 | 20 | 5 | 15 | 240 | 10 | 860000 | 第一原理分子動力学計算 | 原子数:1億、時間ステップ数10 ⁴ | |
| 電子材料の電子状態計算・手法2 | 100 | 10 | 1.2 | 12 | 96 | 10 | 350000 | 実空間基底O(N^3)第一原理分子動力学計算 | 原子数:10万、100ステップ | 20SCF × 100ステップ |
| 強相関電子系の理解 | 1900 | 2700 | 0.2 | | 8 | 100 | 5500000 | 変分モンテカルロ法 | 原子数1万 | メモリ使用量はMPIプロセス数に比例し最大使用量を記載した |
| プラズマ乱流計算・マルチスケール乱流 | 100 | 200 | 0.5 | 0.1 | 24 | 50 | 430000 | ボルツマン方程式の5次元計算(スペクトル法+差分法) | 10 ¹² 格子、10 ⁶ ステップ | |
| プラズマ乱流計算・大域的非定常乱流 | 100 | 200 | 0.5 | 1 | 170 | 10 | 610000 | ボルツマン方程式の5次元計算(差分法) | 10 ¹² 格子、10 ⁷ ステップ | |
| 熱流体シミュレーション(自動車、実際の設計、最適化問題) | 110 | 230 | 0.04 | 4 | 1 | 100 | 41000 | Re=10 ⁶ ~10 ⁷ のLES流体計算、パラメータスタディ、100ケースを4日 | 10 ¹⁰ 格子 | BF=2として計算 |
| 熱流体シミュレーション(自動車、ハイエンドベンチマーク) | 120 | 230 | 0.5 | 48 | 24 | 10 | 100000 | Re=10 ⁶ ~10 ⁷ のLES流体計算、ストロングスケール | 格子点数:10 ¹² | 構造格子でBF=2、1,000タイムスライスを30分で出力と想定 |
| 風力発電立地条件アセスメント | 29 | 89 | 0.01 | 0.07 | 72 | 100 | 760000 | 高解像度LES流体計算(差分法) | 3300x3300x300格子点(30x30x10m解像度)、123万ステップ(dt=0.21秒、72時間、スピニングアップ24時間含) | 1立地のアセスメントに約100ケース(200日)必要。これを立地ごとに行うことが必要。 |
| 近未来地球環境予測システム | 56.00 | 110.0 | 0.6 | 80 | 600 | 1 | 120000 | モデル名MIROC-ESM | 格子点数:2000x1000x200、ステップ数:5300万(dt=60秒、100年)、100アンサンブル同時実行 | 計算の大半を占める大気モデルのみで見積もり。100ケース全体が1ヶ月で計算完了することが必要。ネットワークは100ノードを仮定(ノードあたり大域通信1TB/s)演算量、メモリ転送量、メモリ使用量は、京でのプロファイルを元に外挿 |

2.4 社会経済予測

(1) 社会的貢献 —社会経済活動に柔軟に対応する予測システムの実現を目指して—

社会経済現象は人間自身の行動の結果であるにもかかわらず、予測が困難であることが多い。構成員の数が多く、また一人一人の持つ情報や行動が限られているためである。

例えば、交通渋滞や鉄道の混雑を和らげ、解消するにはどうすればよいだろうか。各人には、それぞれ通勤・通学の時間的都合、家から目的地への交通手段の都合があり、混雑することはわかっていても避けられないことも多い。これを解消するには、社会全体での対策が必要であり、これまでにも、鉄道・道路の新設から渋滞・混雑情報の伝達まで種々の対策が進められてきた。しかし、事前の入念な新設計画にもかかわらず、予想外の混雑を招いてしまったり、混雑・事故情報を提供した結果、迂回路の混雑を招くなどの副作用も発生し、更に緻密な対策が必要となっている。加えて、こうした交通に関わる課題の解決には、二酸化炭素等の温室効果ガス発生を低減させるというエネルギー消費の最適化の効果も期待されている。

同様の課題は、歩行者の集団の振る舞い、すなわち群衆運動にも見られる。ターミナル駅の乗り換えやイベントの誘導、避難誘導などでも交通の最適化が期待される。

もう1例として、経済活動が挙げられる。必要とする人に、物資・資源を無駄なく効率的に行き渡らせることが経済システムの目的である。しかしながら、自由に生産・取り引きを行わせれば、自然と実現するとされる古典的な「見えざる神の手」に委ねられる限界が明らかとなり、現代では経済システムも緻密に設計し制御することが不可欠となっている。各生産者・消費者の持つ情報は不完全で、そもそも何が必要であるのかもあいまいである。そこで全体を見通したうえで、「神の手」を設計・制御する必要がある。より高度な精度設計と制御の課題は、消費財・生産財の配分のみならず、金融証券取引とそのシステムでも顕在化しており、株式や為替取引ではミリ秒を争う応答が繰り広げられるなかでの管理・監督が模索されている。

上に挙げた交通と経済の例は、社会経済における独立した事象では決してなく、密接に連携している。そもそも交通現象の大部分が経済活動に起因しており、また経済活動の大部分が交通現象として具現化しているためである。このため、交通現象と経済活動とは本来一体のものとして予測・制御すべきものである。電力・上下水道・ガスのネットワークもその一部である。更に社会経済活動だけではなく、気象天候や地震・火山噴火といった地球物理的事象の予測との連携も期待される。

わが国は、有数の経済生産性を誇る。それ故、その社会経済システムはすでに高度な効率化・最適化が成し遂げられていると考えられる。とはいえ、さらなる生産性向上も議論され続けており、その余地も多いと考えられる。更に少子高齢化といった動的な社会構造の変革への最適化も不可欠な現状である。同様に、防災面でもすでに高度な対策が進められており、さらなる安全性の向上は経済生産性同様に緻密な最適化が必要とされる問題と考えられる。

社会経済の目的は、経済生産性・防災安全性に限られるものではない。結局のところ、一人一人の、更にはすべての人々の幸福を極大化するためのシステムである。しかし現代社会では、核家族化と価値観の多様化等による人間関係の希薄化により、地域社会を基礎として伝統的に機能してきた相互扶助による福祉制度の限界も否定できないであろう。計算機科学を活用した

社会経済予測が、個々人レベルに多様かつきめ細かく対応することができれば、こうした現状を改善することができると期待される。



図 2.4-1 社会経済予測

(2) サイエンスの質的変化

社会経済現象では、自然現象における物理法則に匹敵するような客観性・信頼性を持つ基本法則は確立していないのが現状である。このため社会経済予測に際しては、現実の現象を精査し、実際の現象の多様性に匹敵する客観的なシミュレーションモデルを模索し続ける必要がある。このため自然現象以上に、現象を不斷かつぶさに見据えつつ、予測モデルを調整し続ける必要がある。こうした緻密なデータ収集・解析を大規模に遂行し続けることが可能となったのは、コンピュータとネットワークが発展し、社会経済データが蓄積されたことによる。これは21世紀直前のことと、今日ではこうした解析はビッグデータのマイニングなどと称せられ、日常的な手法となっている。

そもそも、社会経済活動研究におけるデータマイニングの重要性が注目されるきっかけともなった例が、1995年に発表された株価変動の統計則の確認である。これは Rosario Mantegna 博士がミラノ証券取引所の株価データを分析（マイニング）し、株価の変動がレニ分布と呼ばれる分布に従うことを確認したという業績である。レニ分布はべき分布の裾、平均より離れた事象が正規分布よりも高い確率で予想される、いわゆるファットテールを持つ統計分布であるが、株価変動にファットテールがあること自体はこの研究以前にも知られていた。しかし金融理論では伝統的にガウス分布・伊藤過程による変動に固執した結果、金融クラッシュのリスクを過小評価する運用を続け、クラッシュ自体を想定外の事象と位置づけるに留まっていたのである。このレニ分布の変動がミラノ証券取引所に限らず普遍的な株価変動であることも確認され、ま

たさまざまな経済データのデータマイニングも展開され、経済物理学という研究分野として社会経済への応用が進められている。

一方、こうした経済変動がなぜ生じるのかを理解するために、経済活動の個々の主体をモデル化したエージェントを使った理論研究も進められている。社会経済現象の構成要素である個々人や企業・団体を出発点として、構成要素から社会経済全体まで、あらゆるレベルでの可塑性を持ったモデルが必要となるためである。その結果、データマイニングにより発見された諸現象に対して、現実の多様性に負けない表現力を持ったエージェントモデルが開発されつつある。こうした研究から、現実の現象から諸データを柔軟にモデルパラメータに同化し続けることにより社会経済予測を実現するシミュレーションモデルが実現しつつあり、スーパーコンピュータの応用への期待が高まっている。

エクサスケール以降のコンピュータでは、現在までのデータに基づいて一瞬先から遠い未来までの社会経済予測を行うことが期待される。その際、予測自体はあくまでも入力データとシミュレーションモデルによって千差万別となるが、いずれにせよエージェントベースモデルによる離散事象シミュレーションと離散パラメータの管理・実行技術による種々のモデルにより、社会の多様な課題に柔軟に対応できるコンピュータシステムの実現が期待されるのである。

以上は、計算機の高性能化と情報通信技術によりもたらされた社会経済科学の質的変化であるが、阪神淡路大震災から東日本大震災へと続いた地震災害は、社会経済科学の目的意識に質的変化をもたらした。

わが国は、関東大震災をはじめ数多くの犠牲の教訓を生かしつつ地震防災・減災を先導してきた。にもかかわらず、阪神淡路大震災から東日本大震災へと続き、現在も進行中と考えられる地震災害では甚大な被害を被ってしまった。津波もその一部である。地震の2次災害としての津波は、更に複数の原子炉の爆発・メルトダウンという3次災害を引き起こし、原発事故からは数えきれない4次、5次…災害・被害がもたらされ続けている。「忘れた頃にやってくる」という寺田寅彦博士の至言の初心に立ち戻り、常に想定外の事が生じ得ることを想定する必要があるが、経済社会予測シミュレーションにはこうした防災・減災を極限まで高度化する手助けとなることが期待されている。とはいっても、地震や火山噴火を十分な時間をおいて予測することが困難である現状では、最初の地震動・火山動や空振を捉えて数分以内に襲いかかる災害に備えることが必要である。人間感覚ではごくわずかな時間であっても、スーパーコンピュータを使えば相当な即時処理が期待できるからである。

(3) コミュニティからの意見

社会経済科学の質的変化にともなう、ビッグデータのマイニングによるデータ同化を使ったエージェントモデルシミュレーションをスーパーコンピュータの活用により実現しようとする研究の歴史はいまだ浅い。このため、研究者コミュニティもマスとしては確立しておらず、現時点では個々人のレベルであるが、それ故に先鋭的な研究であるといえ、「京」コンピュータおよび次世代スーパーコンピュータの応用により分野の創出というレベルの質的飛躍が期待されている。

こうしたなかで挑戦している研究者レベルのコミュニティからは、我々の社会経済活動の中で蓄積されるビッグデータを効果的に活用するうえでの個人情報保護の法体制およびさまざまな災害・事故などの際の有事法制の再検討の必要性が指摘されている。

(4) 計算機要求

上述のように、社会経済予測シミュレーションは大きく分けて、ビッグデータマイニングとエージェントモデルへのデータ同化、そしてシミュレーションモデルによる予測・最適化の3つの部分からなる。以下では、交通流と経済取り引きとを典型例として挙げる。詳細は第4章を参照されたい。

地球上には、2008年の時点で 8.4×10^8 台の自動車および 3.4×10^7 Km の道路（車線数は考慮しない長さ）があると推定されている。混んでいる道路はごく一部で、すべての車が常に混雑に関わっているわけではないので、計算機資源推定のために、 10^8 台の自動車が 10^7 Km の道路を走っているとする。実際の交通流を全体の 1/1000 の自動車からの GPS データから毎秒 10^2 バイトの位置情報他をプローブするとすれば、外部から計算機への転送性能は 10^2 B/秒 $\times 10^8$ 台 $\times 1/1000 = 10\text{MB}/\text{秒}$ となる。このプローブデータを同化するのに、10 秒間分のシミュレーションを 10^3 ケース使うとし、この同化を 0.1 秒で処理し、続く 1 秒間を予測することを考える。

自動車のシミュレーションには 1 台当たり 1 ステップ 10^3 演算、状態記述・シミュレーション作業領域に 10^2 バイトの比較的簡単なエージェントモデルを仮定し、1 ステップを 10^{-2} 秒とすると、1 ケース当たりの計算量は 10^3 演算 $\times 10^8$ 台 $\times 10$ 秒 / 0.01 秒 = 100 TFLOP である。必要なメモリ容量は、自動車に 10^8 台 $\times 100$ B = 10GB および地図データに 100GB、実効メモリアクセス量は $10\text{GB} \times 1000$ 回 = 10 TB、実効ネットワーク通信量は 1TB と見積もられる。

以上が 1 秒当たりの 1 ケース分の計算量なので、毎秒 10^3 ケースを 0.1 秒で処理するのに必要な性能は、演算速度 1EFLOPS、使用メモリ容量 1.1EB、実効メモリバンド幅 0.1EB/秒、実効ネットワーク通信バンド幅 10PB/秒と見積もられる。毎秒予測した交通流状態を記録していくとして、ディスクストレージ使用量は毎秒 10GB で、1 日分の記録がおよそ 1PB となる。

次に株式取引所の制度設計の例を挙げる。1 つの株式取引所全体のダイナミクスをトレーダーエージェントモデルによりシミュレートし、取り引きルールの最適化を考えるとする。これは、取引参加者にとって魅力的な競争力のある取引所を模索すると同時に、株価の変動に異常が表われることを防ぐ（市場の無用の混乱を避ける）などの目的から望まれているものである。

1 銘柄には 10 程度のトレーダーが参加し、注文は 1 ミリ秒単位で受け付けるものとする。トレーダーエージェントの意志決定は 10^4 演算、10KB で実現するとする。取引所のシミュレーションに係る演算量は無視できる。取引所には 10^3 銘柄上場されているるとし、各銘柄について取引時間 5 時間分の取引の 10^4 モンテカルロシミュレーションを 1 ケースとする。

1 ケース当たりの演算量は、5 時間 $\times 3600$ 秒/時間 $\times 1000$ 注文機会/秒 $\times 10^4$ 演算/注文機会 $\times 10$ トレーダー $\times 10^4$ サンプル $\times 10^3$ 銘柄 = 1.8×10^{19} 演算、使用メモリ容量は 10MB である。取り引きルールとして 10^4 とおりを試すとすると 1.8×10^{23} 演算、メモリ 100GB となる。通信量・出力する計算結果は、ごくわずかである。このシミュレーションを 1 日程度で終わらせるためには、2 EFLOPS 程度の性能が必要となる。

| 課題 | 要求性能 (PFLOPS) | 要求メモリ バンド幅 (PB/s) | メモリ量/ ケース (PB) | ストレー ジ量/ ケース (PB) | 計算時間/ ケース (hour) | ケース 数 | 総演算量 (EFLOP) | 概要と計算手法 | 問題規模 | 備考 |
|-----------------------|------------------|-------------------------|-------------------|----------------------------|------------------------|-----------------|-----------------|---|--|---|
| 自動車交通流のリアルタイムシミュレーション | 1000 | ※ 100 | ※ 0.00011 | 0.001 0.000000028 | 1000 0.000000028 | 1000 | 0.1 10^8台 | 地球上の全自動車交通規模 (10万台、道路総延長3400万 Km)、エージェントモデルによ るシミュレーション (実際に計算対象となる稼働 している車の台数は10^8台と 推定) | $10^8 \text{台} \times 10^3 \text{演算} \times$ $10^3 \text{step} \times 10^3 \text{ケース} (10$ 秒分のシミュレーション) これを0.1 secで計算する | 要求ストレージおよび総 演算量は1日分あたり、と する。一台あたり 10^{-3} FLOPと推定。 |
| 株式取引所ルール の最適化 | 2100 | 0.0001 0.00000001 | | | 0.0024 10000 | 10000 180000 | | 1取引所の1000銘柄について 1日分の取引をトレーダー ^{エージェントモデルでモントカルロシミュレーション} | 総演算量 5時間 × 3600秒/時間 × 1000 注文機会/秒 × 10^4 演算/注文機会 × 10トレーダー × 10^4 サンプル $\times 10^3$ 銘柄 = 1.8×10^{19} 演算 これを24hで 10^4 ケース計算する | 整数演算が中心 「要求性能」「総演算量」 はインストラクション数 |

※印の値は未だ精査中である。より精度の高い数値はWeb版(→「1.2. 本文書の構成」)を参照のこと。

3. 分野連携による新しい科学の創出

3.1 基礎科学の連携と統一理解

基礎科学における知の探究は、科学技術を発展させるために不可欠なものである。細分化し分野ごとに発展・深化してきた基礎科学の各分野を計算科学の手法により強く連携させ、新たな学術フロンティアを切り開いていくことが期待される。各分野での基礎科学の詳細は4章に譲り、ここでは宇宙・物質・生命に関連する基礎科学分野における三つの連携事例を代表例として示す。

3.1.1 基礎物理における連携

(1) 課題概要

基礎物理における課題は大きく二つに分かれる。一つは究極的な物理法則を見つけていくことであり、もう一つはその物理法則を用いて様々な現象を理解することである。近年では、どちらのタイプの課題に対しても、計算機によるシミュレーションが欠かせない。その役割は年々増しており、要求される計算機能力も高度になってきている。ここではスーパーコンピュータ「京」を大きく超える能力を持つ計算機と素粒子・原子核・宇宙天体物理学分野の連携によって解明されうる研究課題の例をタイプごとに挙げる。

前者のタイプに相当する代表的な課題の一つは、究極的な物理法則の追求、特に素粒子標準理論を超えた物理法則の探求である。素粒子標準理論は、重力以外の三つの力（電磁気力・強い力・弱い力）の性質を記述することに大きな成功を収めた。1980年代までに基礎が確立された標準理論は、今のところ実験や観測による値との矛盾は認められない。しかし、もともとこの理論の中では重力の量子化（量子重力）が考慮されていないこと、近年の宇宙天文物理学と観測技術の発展により明確になった未知の重力源「ダークマター」や「現在の宇宙の加速膨張」については説明ができないこと、など不完全な部分が残っている。

これらを克服した新しい理論を見つけ出すためのヒントは、高エネルギー加速器や高輝度加速器を駆使した超精密実験による測定値と、標準理論を高精度に計算した結果との間の微妙な“ズレ”に現れる可能性が高い。標準理論から高精度の予言ができなければ、精密実験の意義は半減してしまう。この課題における計算科学の役割は、精密実験が計画されている2020年代までに標準理論に基づいた理論計算を高精度に行い、新しい理論の発見を促すことである。

もう一つのタイプに当たる代表的な課題は、自然界の元素の起源、特に重元素の起源を探ることである。水素やヘリウムなどの比較的軽い元素は、宇宙創成後にどのように生成されたかについて理論的にも定量的にも明らかにされている（ビッグバン原子核合成）。また、ヘリウムよりも重い元素は、恒星内の熱核融合反応によって合成され得ることがわかっている。しか

し、鉄（原子番号 26）より原子番号が大きい重元素は、貴金属やレアアースとして身近に存在するものであるにもかかわらず、自然界における合成の定量的過程はいまだ解明されていない。

重元素が合成されるには莫大なエネルギーを発生する何らかの“現象”が起こらなければならない。この“現象”として現在最も有力視されているのが、超新星爆発などの爆発的天体现象である。これらは実験により再現することは不可能であるため、説の真偽を知るには計算機によるシミュレーションによるしかない。例えば爆発時にどのような比率で各元素が生成されるのかを高い精度でシミュレーションする。この比率が自然界における観測値と一致すれば、重元素合成の一つのシナリオの確からしさを証明することにつながる。

超新星爆発は、多くの物理過程が複雑に絡み合っている。素粒子・原子核・宇宙天文学の連携による問題の定式化（方程式を立てること）と、計算科学を用いた数値的な解析が必要である。関連する分野は、星の重力（一般相対論）、電磁流体力学、熱・輻射輸送、原子核反応、核力・核物質状態方程式、ニュートリノ輻射輸送など多岐にわたる。詳細は 4.5 節に譲るが、概要としては、まずクォークとグルーオンの運動を記述する量子色力学（QCD）に基づく数値シミュレーションにより核力を導き、その核力を用いて関係する原子核の性質を多体系計算により求め、それを用いた統合シミュレーションにより星の中心部分の高温高密度核物質の性質や超新星爆発での元素合成を計算し、最終的に天体観測データと定量的な比較を行うことが目標となる。

このような複雑な現象のシミュレーションは、現存する計算機の能力では近似的な結果しか得ることができず、爆発現象と重元素合成の本質に迫ることができていない。近似を極力取り除いた緻密なシミュレーションのためには、2020 年代に完成予定である、より高性能の計算機の稼働を待たなければならない。

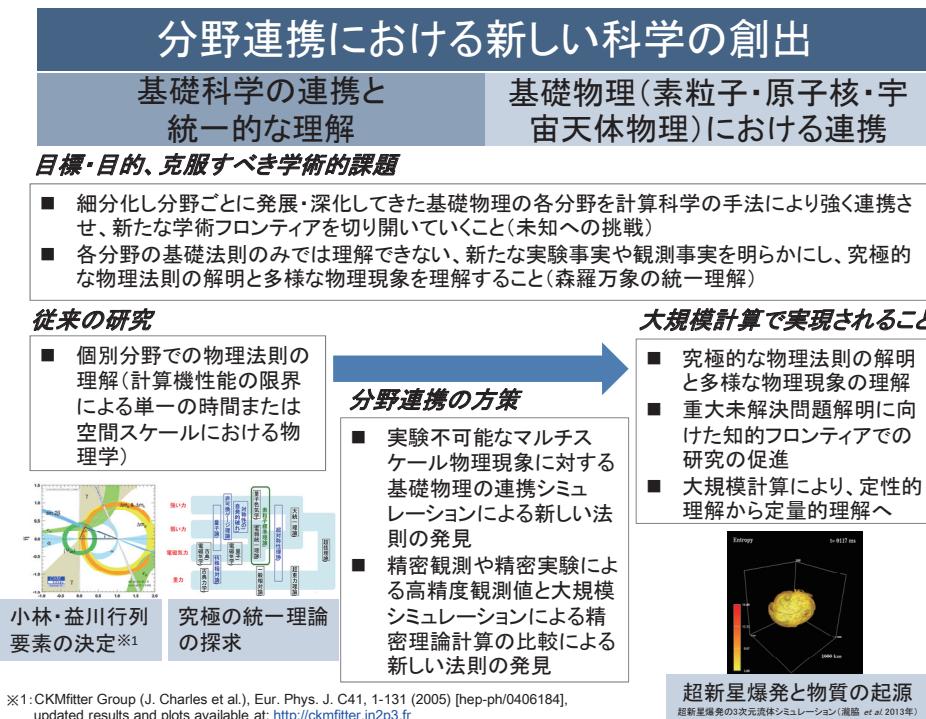


図 3.1.1-1 基礎物理における連携

(2) サイエンスの質的変化と長期的目標

素粒子・原子核・宇宙天文学分野は、宇宙と物質、そしてそれらを支配する法則を探求する学問分野である。この分野におけるこれまでの到達点と今後を概略したものを図 3.1.1-2 に示した。

歴史を振り返ると、20世紀中盤までは、基礎法則の発見と検証および新しい分野の開拓を繰り返してきたことがうかがえる。20世紀中盤から今世紀にかけては、素粒子・原子核・宇宙天文学それぞれの分野に属する基礎法則の確立と検証が行われてきた。今世紀に入り、実験や観測技術の向上によって新たな事実が明らかになり、基礎法則の理解と宇宙の理解に向けて新たな課題が出てきた。前述したダークマターの存在と現在の宇宙の加速膨張の発見は、現在われわれが理解している素粒子理論と一般相対性理論では説明できない。また、素粒子標準理論に内在するエネルギー階層性は、存在そのものは確実であるものの、階層性の起源やからくりは長年にわたり不明のままである。宇宙を支配する法則の理解のためには、素粒子・原子核・宇宙天文学それぞれの分野において個別に確立してきた基礎法則を連携させ、新たな課題に挑戦することが必要である。

これらの理解できていない「謎」の解明に向け、以下のようなフロンティアでの活動が進んでいる。

■ エネルギーフロンティア

高エネルギー加速器実験や高エネルギー天体现象から物質のミクロな構造を探り、物質の起源の理解や新しい物理法則の発見を目指す。

■ ルミノシティ（強度）フロンティア

非常にまれな事象や不安定な現象を捉えるため、高強度のビームによる加速器実験や大規模な観測実験を行って大量の観測データを取得する。高エネルギーとは相補的に、低エネルギーでかつ精密な実験により、物質の起源の理解や新しい物理法則の発見を目指す。

■ コズミックフロンティア

地上では実験できない、重力現象や高エネルギー現象を引き起こす天体现象の理解から、宇宙と物質の起源の理解を目指す。

これらのフロンティアで扱う現象には二つの特徴がある。一つには、現象が複数の物理現象の相互作用によっていることである。もう一つは、長さや時間のスケールが大きく異なる現象が複数連携していることである。このことから素粒子・原子核・宇宙天文学間の連携による実験・観測事実の総合理解が必要である。

これらのフロンティアにおいては、さまざまな実験と理論的アプローチがとられている。実験や観測においては、マルチスケール・マルチフィジックスの徵候を捉るために高精度な観測値を得ることが目標となっている。その成果を生かすには、計算科学的手法による理論計算においても実験精度に匹敵する精度を達成することが不可欠である。

(例)

■ SuperKEKB/BelleII 実験計画による B 中間子の物理を通じた標準模型の精密検証

- J-PARC でのミューオン異常磁気能率の精密測定を通じた標準模型の精密検証
- 理研の放射性同位元素 (RI) ビームファクトリーによるエキゾチック原子核の生成と原子核理論によるその性質の解明

複数のスケールと物理過程を連携したマルチスケール・マルチフィジックスに対する計算科学的手法は長年にわたり試みられてきたが、主に計算機性能の理由から、多くがさまざまな近似を含んだ形に留まっていた。「京」の登場により、ようやく現実的に計算できる範囲が広がってきたところである。

(例)

- クオークを要素としたヘリウム原子核の計算
- 超新星爆発の計算における流体力学計算と流体中の核反応計算を結合した計算

今後 10 年の基礎物理分野における計算科学（計算物理学）においては、従来の個々の課題の精密化と計算科学的手法の高度化に加え、素粒子・原子核・宇宙天文学が連携し、マルチスケール・マルチフィジックスに対する計算を発展させていくべきである。

図 3.1.1-3 に、基礎物理分野における数値計算とフロンティアの関連をロードマップとして示した。現在行われている数値計算は、2020 年以降、各フロンティアでの課題を解決するための基礎となるものである。4.5 節「基礎物理」では、各フロンティアに位置する計算機を用いたシミュレーションがサイエンスターゲットとともに具体的に説明されている。なお、学問としての本分野の動向については参考文献[1-4]に詳しい。

宇宙を理解するという壮大な目標に向けては、すぐには解決できない課題が数多く残っている。「京」や更に高性能な計算機の登場により、未知の部分が徐々に明らかになっていくと期待している。

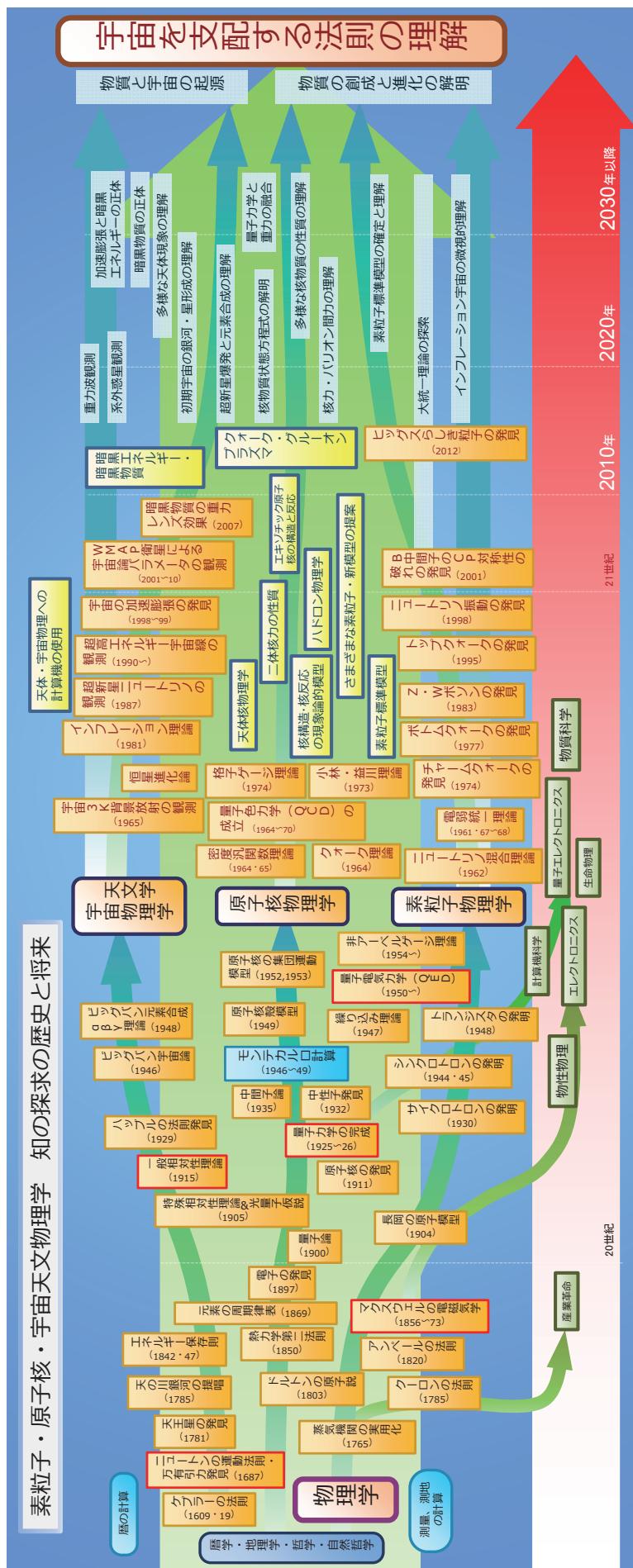


図 3.1.1-2 素粒子・原子核・宇宙天文学 知の探求の歴史と将来

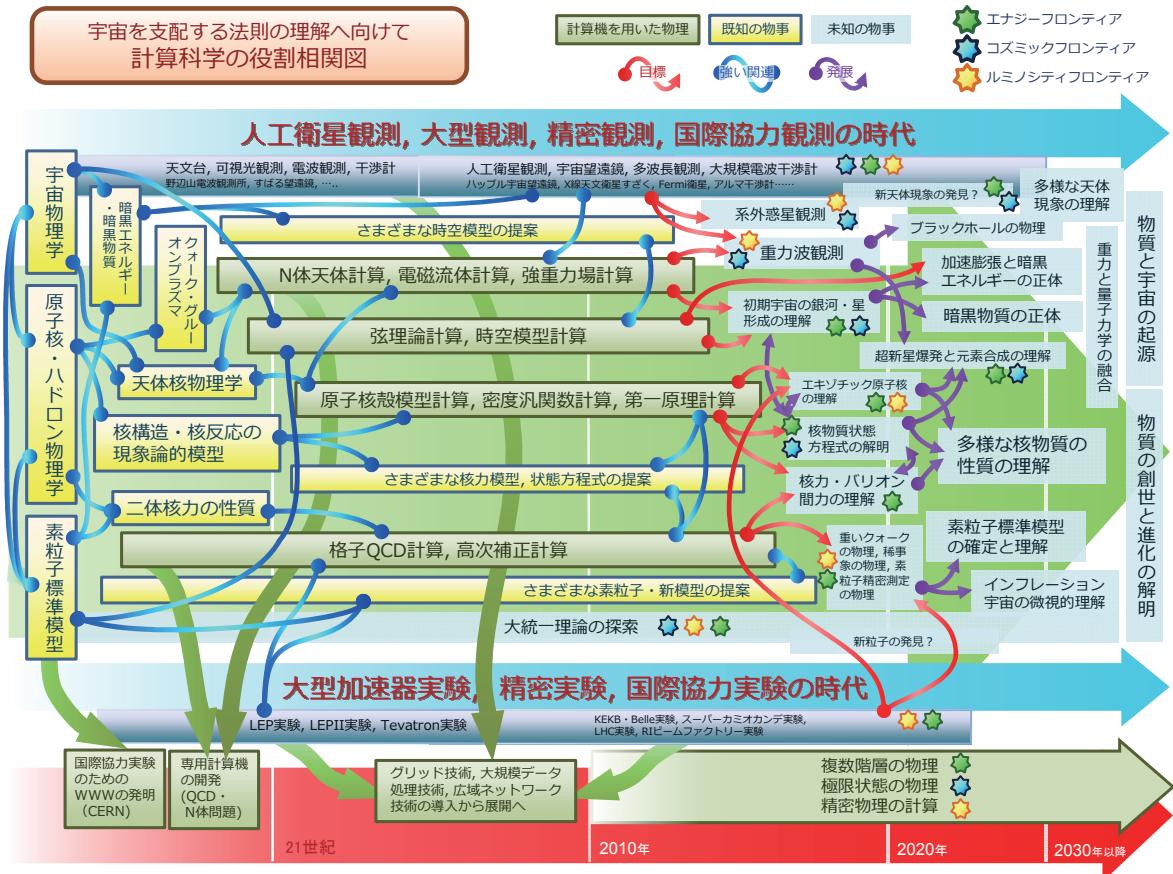


図 3.1.1-3 計算科学の役割相関図

(3) コミュニティからの意見

基礎物理分野の研究は、世界の研究者との協力と競争により進んでいる。計算物理学も例外ではない。一方、最先端の計算機の利用は国境を越えることは難しく、日本の研究者は国内の計算資源を利用する。これまでの国内の計算機資源の整備状況を振り返ると、計算機需要の傾向が十分に考慮されたものとは必ずしも言えなかった。

近年、国内の最先端計算機は1台の大きな計算機を単発で、かつ7~10年に一度のペースで整備する形がとられている。単発の整備により一時的に計算能力は飛躍するが、世界的には計算機性能は3~5年で約十倍のスピードで向上しているため、現行の国内の更新ペースでは研究競争力を常には維持することができない。

このような問題を排除し各分野での研究活動を推進していくためには、途切れることなく連続的に最先端レベルの計算機資源を供給する体制が必要である。基礎物理分野におけるアプリケーションの性質はさまざまである。それらを汎用計算機1台で賄うのではなく、複数台(2、3台)の計算機を計算アプリケーションの性質ごとに割り当て、それぞれが常に世界最先端に近い性能を保つよう整備するといった戦略的な工夫が必要である。その場合、1台の最高性能にこだわるのではなく、国全体での実行性能の合計が世界最高レベルになることを目指すのがよい。

(4) 必要な計算機資源

具体的な計算量を見積もるため、代表例として示した元素合成の例のうち、重力崩壊型超新星爆発による元素合成を理解するために必要な計算資源に関して述べる。

超新星爆発時の元素合成を理解するには以下の 3 つのスケールでの物理計算が必要である。

1) 素粒子標準理論から核力やニュートリノと原子核の間の相互作用を導くこと。

素粒子スケール (10^{-15}m 未満) の情報を基にし、原子核スケール (10^{-15}m) での核力の値や原子核の性質をアウトプットする（素粒子物理学と原子核物理学の連携）。

核力は、素粒子標準理論の強い力に関する部分を格子 QCD の方法を用いて計算することができる。

2) 核力から原子核構造や核反応率、高温高密度物質の状態方程式を導くこと。

原子核スケール (10^{-15}m) の計算を行う。

超新星爆発時には、多様な原子核が高温高密度プラズマ状態の中で中性子を吸収し、質量数が大きい中性子過剰なエキゾチック原子核に変換されていくと考えられている。これらのエキゾチック原子核は不安定であり、次第に安定な原子核に移り変わっていく。このような過程を経て鉄よりも原子番号の大きい元素が宇宙空間に広がっていくと考えられている。この一連の反応過程を理論的に取り扱うためには、高温高密度プラズマの状態方程式、原子核の存在限界、核反応率や反応ネットワークの詳細が必要である。

核力に基づく状態方程式の解明には、格子 QCD から導き出された核力を用了計算も視野に入る。また、原子核の核反応率は、反応に関与する原子核の性質を原子核物理の手法を用いて計算し、それらの性質を反応理論と組み合わせて計算することができる。

3) 超新星爆発と元素合成をシミュレートすること。

1)、2)で得られた原子核スケール (10^{-15}m) の情報を基にし、恒星中心部スケール (数千 km) の値をアウトプットする（原子核物理学と宇宙天文物理学の連携）。

超新星爆発で鍵となる物理過程として、中性子コアでの跳ね返りで発生した衝撃波の中の高密度物質がニュートリノにより加熱されることで、爆発を助け全体を吹き飛ばすという機構が考えられている。この機構の解明には、ニュートリノ輻射輸送と高温高密度プラズマの流体計算が必要になる。ニュートリノ輻射輸送と高温高密度プラズマの流体計算の計算には、2)に関連する高温高密度プラズマの組成の詳細と状態方程式、およびニュートリノとの反応率が必要である。元素合成では、2)で得られた原子核の核反応率と反応ネットワークを、超新星爆発する恒星内部に適用する。

2020 年頃に、超新星爆発による元素合成の理解のための足掛かりとなるシミュレーションや理論計算群に必要とされる計算資源は、以下のとおりである。

1) に関して、2008～2009 年にクォークの多体系としての陽子や中性子などの質量を計算できるようになっており、また先行して 2007 年頃から核力をクォークから理解する取り組みが

始まっている。格子 QCD の方法で陽子 1 個の質量を精度よく計算するための計算量はおよそ 100TFLOPS 年であった。これは 100TFLOPS 相当の計算機を 1 年間使用する量に相当する。核力の計算を行うには最低でも 2 個の核子（陽子や中性子など）を同時にシミュレーションする必要がある。このときの計算量は 16 倍以上（陽子 1 つが入る時空の大きさに比べ、2 核子が入る時空の大きさは一辺当たり 2 倍必要）となる。高温高密度環境における核力では、更に 3 つの核子が存在して初めて現れる 3 体力や、ストレンジクォークを含む核子についても考慮することが重要と考えられている。現在、「京」を使用した 2 体力と 3 体力の計算が始まっている。「京」では現実的に使用可能な計算量の範囲での精度で計算を行っており、必要な計算量は数百 TFLOPS 年以上であると見込んでいる。また 3 体力の計算では 3 核子の波動関数の詳細な形が必要であるが、すべての波動関数を解析するとおよそ 40EByte のストレージ容量が必要であり、まだ現実的ではない。「京」では 3 核子の波動関数の一部を解析することで 3 体力の概形と一部の詳細についての計算にとどめる予定である。この場合のストレージ容量は 10～100 TByte を予定している。しかしこのような精度では 3 体力核力の理解は定性的なものにとどまる。

2020 年頃には格子間隔を細かく（「京」に比べ 3/4 倍）することで、3 体力の定量的な計算ができるようになると予想している。格子 QCD 計算による 3 体力の計算量については、3 体力の計算に必要な精度と計算手法の詳細から以下のように見積もっている。

総計算量：数百 PFLOPS 年

ストレージ容量は、3 核子の波動関数のデータサイズが 4 次元時空の空間の格子点数の 2 乗に比例するので、2020 年代でもすべてのデータを解析することは現実的でない。3 体力核子の波動関数の解析のための計算は 4 次元時空の空間の格子点数に比例するため、「京」で解析するデータのおよそ 2 倍に増加する。2020 年代では「京」に比べ 100 倍高速にデータを解析できるので、解析可能な波動関数のデータサイズは「京」での 50 倍である 0.5～5 PByte と見積もっている。

2) に関して、原子核の構造はヘリウムなどの少数の陽子・中性子から構成されたものから、金やウランのように数百個の陽子・中性子からなるものまで幅広い種類がある。これらを統一的に理解することは原子核物理学の夢である。現在は核子の数（質量数）の領域ごとに別の計算手法を用いて原子核の性質を調べている。質量数の小さい領域では、第一原理的に原子核の性質を調べることができる。現在、原子核殻模型計算の手法と「京」を用いて、質量数が 16 程度までの原子核の精密な構造と反応率の計算を実行しており、およそ 200 TFLOPS 年の計算量が必要と見込まれている。質量数 16～40 程度までの計算を行うためには、原子核の取り得る状態の数が増えるため、外挿すると計算量はおよそ百倍弱になると見込まれており、2020 年頃には計算可能になると予想されている（ストレージ容量は小規模であるので省略する）。

総計算量：数十 PFLOPS 年

原子核殻模型による精密計算と実験で得られるデータを比較することで核力の情報を引き出すことができ、原子核殻模型による計算は格子 QCD と相補的な役割もある。このようにして得られた精密な核力の情報は金などの重い元素に対して用いられる原子核理論への入力と

なり、超新星爆発での元素合成に関連する重い元素や中性子過剰核の構造や反応の解明に寄与する。

3) に関して、現在、高温高密度プラズマの動きを計算する流体計算については3次元計算が行われるようになってきた。ニュートリノ輻射輸送については、近似的ではあるが3次元空間で流体計算とニュートリノ輻射（1次元近似）を連携させることが、「京」によりようやく可能となってきた。2020年頃には、ニュートリノ輻射流体の完全な6次元の取扱いが可能になると予想している。この計算に必要な計算資源は以下のようになると見積もられている。星の最内部のような高密度の空間ではニュートリノの散乱の時間スケールが超新星爆発の爆風のタイムスケールより十分速いため、ニュートリノの輻射輸送の計算は陰解法で行う必要がある。陰解法は行列反転をともなうが、その時の反転行列のサイズが演算量を決める。空間解像度 $512 \times 64 \times 128$ 、位相空間解像度 24^3 の場合には、

総計算量：数十 PFLOPS 年

であると見積もっている。出力されるデータは約13PByteが出力されるが、I/O頻度は低い。この計算により太陽の十倍以上の質量を持つ星の最期である超新星爆発が再現され、爆発の物理過程の全貌を明らかにすることができる。

| 課題 | 要求性能 (PFLOPS) | 要求メモリ リバンド 幅 (PB/s) | メモリ 量/ ケー ス (PB) | ストレージ 量/ケー ス (PB) | 計算時 間/ケー ス (hour) | ケー ス数 | 総演算量 (EFLOP) | 概要と計算手法 | 問題規模 | 備考 |
|------------------------------------|------------------|---------------------------|------------------------------|-------------------------|-------------------------|----------|-----------------|---|--|---|
| カイラル対称性とQCDに基づく有効バリオン間相互作用の決定とその応用 | 510 | 390 | 0.066 | 0.5 | 880 | 10 | 16000000 | 格子QCD (カイラル5次元型),ハイブリッドモンテカルロ法,CG法 | 問題規模 格子点： $128^3 \times 32$ 、格子間隔:0.1 [fm] 以下 | ノード数を 16^4 ノードを仮定し、ノードあたり性能を、オンチップメモリ容量 200MB, オンチップメモリバンド幅 6TB/s, ネットワークレイテンシ $1\mu\text{sec}$ 程度、ネットワークバンド幅 128GB/sを想定。 |
| 閉殻を仮定しない殻模型計算 | 100 | 10 | ※ 1 | ※ 0.0001 | 28 | 100 | 1000000 | モンテカルロ殻模型法に空間を調和振動子基底で展開し、7~8主殻までを考慮。 よる原子核の構造計算、軽い核 | メモリ量は $10000/\text{ノード} \times 100\text{GB}$ 10^9 ステップ。 | メモリ量は $10000/\text{ノード} \times 100\text{GB}$ 10^9 ステップ。 |
| 相対論的輻射流体計算による超新星爆発メカニズムの探究 | 18 | 70 | 1.6 | 1.3 | 1200 | 10 | 780000 | ニュートリノ輻射輸送計算(超新星爆発) | 空間 $512 \times 64 \times 128$ 位相空間 24^3 で1秒分の時間を計算 | 100Tflops/ノード $\times 10000/\text{ノード}$ 、 主記憶100GB/ノード、主記憶バンド幅 20TB/s/ノード、オンチップメモリ容量 2MB/コア、1000コア/ノード、通信速度60GB/s/ノード |

※印の値は未だ精査中である。より精度の高い数値はWeb版（→「1.2. 本文書の構成」）を参照のこと。

参考文献

- [1] 報告「理学・工学分野における科学・夢ロードマップ」日本学術会議第三部拡大役員会・理学・工学系学協会連絡協議会（2011）
<http://www.scj.go.jp/ja/info/kohyo/pdf/kohyo-21-h132-00.pdf>
- [2] 高エネルギー物理学将来計画検討小委員会答申」委員浅井祥仁他（2012）、高エネルギー物理学研究者会議 <http://www.jahep.org/>
- [3] 記録「天文学・宇宙物理学の展望と長期計画」日本学術会議物理学委員会 天文学・宇宙物理学分科会長期計画小委員会（2010）
<http://www.scj.go.jp/ja/member/iinkai/kiroku/3-0319.pdf>

- [4] 記録「基礎物理学の展望—素粒子原子核研究の立場から—」日本学術会議物理学委員会
素粒子・原子核物理分科会（2008）<http://www.scj.go.jp/ja/member/iinkai/kiroku/3-0909.pdf>

3.1.2 宇宙科学、地球科学の連携による惑星科学

(1) 課題概要

「此処は何処で、我々は何者なのか?」、古くからの人類共通の問い合わせであるこの問題に迫ることが、本学問領域が担う知の探求の究極の目標である。惑星科学は、宇宙科学と地球科学の間にあって、惑星をはじめとする宇宙空間のさまざまな天体の性質を明らかにし、星間物質から惑星が形成され生命を有する地球に至るまでの道を探り、そのような性質や進化の普遍性や特殊性を考察する。惑星科学の特色は、宇宙科学ならびに地球科学双方の知見や手法を活用、融合、発展させなければならないところにあり、両分野との連携は欠かせない。数値シミュレーション研究はその特色が最も際立って現れる研究領域にあたる。

近年の太陽系探査ならびに太陽系外惑星系観測の進展により、哲学的な色彩の濃い冒頭の問い合わせも科学が対象とする具体的な研究課題として認知されるようになってきた。また、地球への小天体の衝突や太陽活動の変動が私たちの地球環境に大きな影響を与えることが社会に広く実感されるようになり、太陽系内小天体群の運動や太陽活動度の変動とそれにともなう地球表層環境への影響をより正確かつ詳細に理解することが大きな社会的要請となってきている。現代の惑星科学はこうした課題にも取り組んではいるが、実際に社会が必要とする精度で答えを出すことはいまだ困難であり、残念ながら今後も当面この状況は続くものと思われる。そのような状況下において私たちが目指すべきものは、宇宙における一般惑星系に関する包括的・哲学的理解を進め、そうした理解のうえに太陽系内の個々の事象を位置づけ、不確定性に関する留意点をも含めて、そのようにして得られた現象の理解の仕方を社会に提供していくことであろう。

本課題では大規模数値シミュレーションにより惑星科学の研究を進展させることを目指す。具体的な研究課題群は、物理的な構造とそれに対応した理論的ならびに計算手法的違いにより大きく次の4つに分類することができるだろう。

(i) 惑星系の起源と進化

惑星系はどのように誕生、進化し、どのような構成に至るのかを探求する研究課題である。星間雲の収縮による原始惑星系円盤ガスの形成（原始惑星系円盤=中心星の周囲に存在する円盤状構造、ガスとダスト微粒子からなり、惑星系が形成される母体となる）、円盤ガス中のダストの凝集、ダストから微惑星・惑星等の惑星系天体の形成に至る過程、形成される惑星系天体個々のタイプ（質量・組成）、タイプの多様性（地球型惑星、木星型惑星等あるいはそれらにとどまらない新たなタイプの存在）、惑星系天体の自転公転パラメタなどの軌道要素、それらの分布と進化などを考察し、太陽系の起源と進化をその中に位置づける。

(ii) 個々の惑星等の個性

惑星系天体の集積による誕生から始まる天体内部および表層の構造分化とその進化を探求する研究課題である。地球型惑星、木星型惑星等、惑星あるいは衛星タイプごとに、個々の天体の形成進化、その構造とダイナミクス（対流運動や磁場を生み出すダイナモ作用、地球上の

地形変形や地震等を生じさせるプレートテクトニクスなどの発現) を考察し、太陽系惑星の個々をその中に位置づける。

(iii) 惑星の表層環境

惑星・衛星等の表層環境とそのダイナミクスを探求する研究課題である。惑星・衛星等の質量や組成、軌道要素、中心恒星の活動度に対する、惑星気象・気候の多様性を考察し、太陽系惑星個々の表層環境をその中に位置づける。

(iv) 生命の起源

惑星や衛星等で見られるであろうさまざまな表層環境における有機物化学を探求し生命の起源に迫る研究課題である。中心星の表面温度や活動度の違いがもたらす惑星表層への入射放射エネルギーの質の違い等も有機物の循環に大きな影響を与えるであろう。そのような考察の中に太陽～地球系での生命の発生を位置づける。

上述の主要研究対象は独立に存在するものではない。対象間の結合を考察し、連結した計算を可能にしていくことが今後（「京」コンピューター後の計算惑星科学）の課題となる。惑星系の誕生は中心星の誕生と、個々の惑星の形成は惑星系の形成と、惑星表層の形成進化は惑星全体の形成進化と、そして、生命の存在進化と惑星表層環境の進化とは整合的に考察されるべきものであり、さまざまなレベルでそのような連結を可能とするソフトウェアの開発と数値シミュレーションの実現が試みられていくものと予想される。

これらのシミュレーション課題は近年の太陽系探査ならびに天文観測の展開によって現実的な課題となってきたものが少なくない。また、シミュレーションによる予測は、新たな探査計画や観測計画の立案を促すものである。そのような太陽系探査あるいは天文観測と数値シミュレーションの連携例としては次のようなものが挙げられる。

- 星・惑星系形成領域に関する観測の蓄積に対し、これを説明する惑星系形成シミュレーションを実現し、それによるモデルの検証を行う。特に、太陽系外惑星が多数発見され、そのタイプに太陽系で知られてきた惑星タイプ（地球型惑星、木星型惑星等）とは異なるタイプの惑星が存在すること、また、その軌道パラメタが太陽系の惑星とは大きく異なっていたことなどが発見されたことから、これらを説明するシミュレーションの進展と惑星系の起源と進化のシナリオの再構築が期待される。
- 太陽系探査の展開、特に、はやぶさ2等の今後の探査に対応し得る、太陽系の起源・進化シミュレーションの実施とそれを用いた太陽系の現状の推定。小惑星の起源を推測し、サイズや軌道分布、太陽系内の物質分布を明らかにする。
- 惑星等の太陽系天体の構造探査や表層探査を説明し、あるいは、これらをモデルの検証に用い、更には、将来の探査計画の設計に用いることのできるシミュレーションモデルの開発とそれによる太陽系惑星・衛星の内部構造あるいは表層環境の推定。これらのシミュレーションモデルは地球内部の構造推定や気象・気候予測に用いられてきた知見を惑星一般に適応することで構成され、逆に、惑星を対象とすることで地球において蓄積してきた知見のテストがなされる。

これらのシミュレーションの実現が可能とする、社会的な必要に対する情報提供としては次のような例があるだろう。

- 惑星系天体の分布進化を理解し、太陽系内の小惑星の分布や軌道を明らかにすること、特に、直接観測の困難な小天体の存在確率を推測できるようになることは、地球への小惑星衝突の可能性を診断するうえでの基礎情報である。
- 太陽系外惑星の環境を推測し、太陽系の惑星表層環境の変遷を理解すること、それを記述するシミュレーション能力を持つことは、太陽活動の今後の変遷に対する地球気候の応答を予測するうえで大きな寄与となる。例えば、暗い太陽パラドックス問題（太陽系初期の太陽活動度は現在の70%程度であったが、比較的古い時代から地球には海洋が存在し、あるいは、火星の古気候は温暖であった可能性がある）の考察に耐えられる惑星表層シミュレーションモデルの開発と検証はこのような問題への貢献につながるだろう。

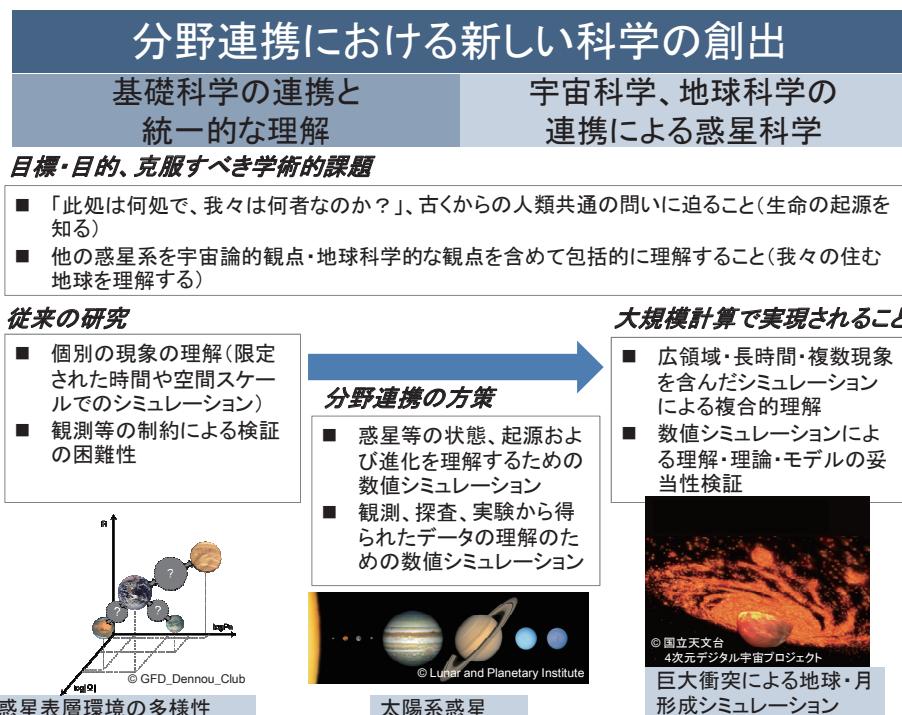


図 3.1.2-1 宇宙科学、地球科学の連携による惑星科学

(2) サイエンスの質的变化と長期的目標

新たな展開として期待される1点目は、計算に対する量的な制約の緩和による理解の進展である。本領域での課題には次のような特徴が存在する。

- 多種類で多量の物質や粒子を含み、重力、流体现象、放射、相変化・化学変化などが複雑に関係し合う、多種多様な物理的・化学的素過程からなる。
- 長い時間や広い空間領域など、長短・大小の幅広い範囲を含む。
- 実験あるいは観測による検証が困難である素過程や現象を対象とすることが多い。

これらの数値シミュレーションは次のような計算侧面において容易に大規模となる。

- 素過程計算：比較的単純な物理化学モデル、したがって、ソフトウェアとしても比較的単純であるが、大自由度で計算を実行する必要が生じる。
- システム計算・システム統合計算：惑星系、惑星、惑星表層環境は、本来、多種多様な素過程から構成される複雑な系であり、その時間発展を追跡するために必要とされる計算資源は必然的に大規模であるのみならず、ソフトウェア自体が複雑大規模になる。更に、惑星系の起源と進化、個々の惑星等の個性、惑星の表層環境、生命の起源といった対象相互の結合を考察するためには、複数のシステムソフトウェアを結合した統合システムモデルを設計・構築し、計算を実現していくことが必要となる。
- アンサンブル計算：素過程計算においても、システム計算においても、系の非線形性やパラメータ依存性を掌握するために、たくさんの数値実験を行う必要が生じる。

計算機で実施できる数値シミュレーションの規模には限界があり、また、有限の人員と利用できるソフトウェア環境で構築可能なソフトウェアの複雑度にも限界がある。これまでの数値シミュレーションでは、これらの困難を克服するため次のような方法がとられてきた。例えば、シミュレーションの対象とする現象を原始惑星系円盤・巨大衝突・惑星大気・固体惑星等の個別の事象に限定する、シミュレーションに含める物理的・化学的素過程を少数に限定する、含める物質の量や粒子の数を限定する、計算する時間や空間領域を限定するなどの方法である。こうした工夫を重ねて数値シミュレーションを実現することにより、各現象の理解は少しづつ進んできたが、前節に概説した課題の探求にはいまだ至っているとは言えない。

新たな展開として期待される2点目は、数値シミュレーションモデルの検証可能性が高まることがある。直接的な実験あるいは観測が困難な素過程や現象に対して数値シミュレーションは強力な考察手段となってきた。しかし同時に、計算の検証をどう行うかという問題に不可避的に悩まされてきた。こうした問題は大規模数値シミュレーション技術の発展により、軽減されることが期待される。例えば近年、天文学的観測（さまざまな波長を用いた望遠鏡による観測）の進展により、太陽系外の惑星が多数発見され、特に、太陽系とは大きく異なる姿をした惑星系も多数存在していることがわかつってきた。惑星系の一般論を展開するための背景が整えられたと言える。一方、地球科学においては、地震学や地球内部物理学、地球物質科学、気象海洋学・気候学など、地球の構造やそのダイナミクスと進化を解明する研究が大きく進んでおり、惑星科学は、これを惑星一般に適応するべく一般化する任を担っている。この作業は、地球科学で得られた知見を惑星という場を使って検証することである。そこでは、不可避的に地球科学諸分野との連携が必要とされる。地球科学での知見が導入されると同時に、その妥当性は、地球以外の世界に適応する際に生じるであろう不具合によって検証されることが期待される。

新たな展開として期待される3点目は、複雑な現象に対する知見の集積である。近年の地球科学においては、複雑な対象を扱うシステム計算型の数値シミュレーションモデルは、科学の推進やその活用において、より積極的・戦略的な役割を担うようになってきている。シミュレーションモデルは科学的成果の集大成であり、研究活動の次なる展開はこの集大成を基として企画される。現象に対する個々の知見はシミュレーションモデルに組み込まれ数値実験がなさ

れることによって、現象の理解の体系の中に位置づけられ、意義づけられる。シミュレーションの不具合は新たな理解を必要とする問題や、観測や実験がなさるべき問題を提起する。モデルが複雑大規模になればなるほど、容易には追従できなくなるために、その戦略的重要性は高くなる。地球科学の知見の一般化としての惑星科学は、地球科学で展開されたシミュレーションモデルのこのような今日的役割を認識し、惑星科学的見地からの知見集積と研究展開を行っていくためのシステム再構築を必要としている。また、惑星科学固有の対象においても、地球科学で進んできたような知見の集積物としてのシミュレーションモデルのシステム化を推進していく必要がある。こうしたシステム化されたソフトウェアの構築とそれによる数値計算とによって、私たちの理解を更に進めていくことが可能となるだろう。

(3) コミュニティからの意見

複雑な対象をシステムとして扱い大規模なプログラムを構成し、これを実行することは地球科学の、特に、気象・気候シミュレーションで先行してきたが、今後、それと類似の手法が、惑星科学の領域にも広がっていくことは必然である。また、惑星探査においてはいわゆる観測シミュレーションの導入が観測企画において当然のこととなり、観測データの処理にもシミュレーションモデルを用いたデータ同化（観測データとシミュレーションを融合する高度なデータ解析手法の一つ）が広範に用いられるようになると予想される。これらに耐えられる数値シミュレーション体制を構築することは急務である。

今後の大規模計算の展開においては、計算機のハードウェア的な大規模性のみならず、ソフトウェア的な大規模性という観点に注目する必要があり、これに対応する投資が行われるべきである。共通基盤的なソフトウェア開発とその提供維持に関しては、わが国は、メインフレーム時代のライブラリ開発を除けば、1990年代の Unix とインターネットの展開に逆行してあまり積極的な投資がなされてこなかったのではないかと危惧される。開発や利用を容易にするツールセットライブラリから、知見の集積装置としてのシステムモデルまで、研究活動や研究成果の提供・利用を支える基盤材としてのソフトウェアのライブラリ化と提供に、改めて投資がなされるべきであろう。計算科学の応用領域としての惑星科学の進展はそのようなソフトウェアの蓄積に大きく依存するものと予想される。

これらは日本惑星科学会を中心とする、惑星科学に関連する数値計算に携わる研究者コミュニティの意見である。これまで、日本惑星科学会や CPS (Center for Planetary Science : 神戸大学惑星科学研究センター) を中心として、当該分野の研究者を集めた研究集会を開催してきた。例えば、日本惑星科学会の 2013 年度秋季講演会（2013 年 11 月）に際しては、「計算惑星科学シンポジウム」を開催し、惑星科学における今後の計算科学の展開を議論した。今後も、コミュニティからの意見を更に集め、議論を深め、認識を共有するため、同種の研究集会を開催していく予定である。

(4) 必要な計算機資源

(i) 惑星系の形成シミュレーション

太陽系のように恒星を中心としてその周囲を回る複数の惑星からなるシステムの形成過程を明らかにする。従来は狭い円環領域における少数個の惑星の形成についての計算がなされている。しかし、本質的には、複数個の惑星と惑星前段階の微惑星が広い時空間領域にわたって相互作用しながら成長する様子を調べる必要がある。こうした計算には、次のような規模の計算が必要となるだろう。

従来：重力多体系計算、10万体粒子、10万年分の進化、100 ケース

展望：重力多体系計算、1億体粒子、1億年分の進化、100 ケース

10^{10} ステップ、1 ケース当たり 1.5×10^{22} 回演算

(ii) 地球・惑星の形成シミュレーション

地球をはじめ、太陽系内外の多様な惑星の形成過程を明らかにする。例えば、地球・月系の形成は巨大衝突によると考えられているが、巨大衝突現象と地球内部構造形成は表裏一体の現象であるにもかかわらず、従来は計算機能力の限界により別個の現象として調べられている。しかも、それらの計算での解像度は十分とは言えない。これら 2 つを同時にかつ高精度でシミュレーションすることが必要である。

従来：巨大衝突、SPH 計算 (Smoothed Particle Hydrodynamics: 流体粒子を用いた流体計算法)、1 万体粒子、1 月分の進化、100 ケース

展望：巨大衝突+内部構造形成、SPH 計算、10 億体粒子、数ヶ月分の進化、100 ケース

10^8 ステップ、1 ケース当たり 4.5×10^{22} 回演算

(iii) 惑星表層環境の形成と進化シミュレーション

地球の表層環境に対する理解を発展させ、多様なパラメータを持つ多様な惑星表層環境のシミュレーションを行う。

従来：流体計算+輻射計算、 $1,920 \times 960 \times 96$ 格子、1 ケース

展望：流体計算+輻射計算、 $3,840 \times 1920 \times 192$ 格子、100 ケース/惑星、10 惑星

3×10^7 ステップ、1 ケース当たり 2×10^{21} 回演算

これは基本的には地球科学で用いられてきたシミュレーションモデルの惑星科学的見地からの一般化として展開されるが、惑星の進化を統合的に扱えるような、システム結合型（気象・海洋・氷床は言うまでもなくマントルや中心核の形成など）のモデルを発展をさせることが期待される。

| 課題 | 要求性能 (PFLOPS) | 要求メモリ バンド幅 (PB/s) | メモリ量/ ケース (PB) | ストレージ量/ ケース (PB) | 計算時間/ ケース (hour) | ケース数 | 総演算量 (EFLOP) | 概要と計算手法 | 問題規模 | 備考 |
|----------------------|------------------|-------------------------|----------------------|------------------------|------------------------|------|----------------------------------|---|------|---|
| 惑星系形成のシミュレーション | 4 | 0.02 | 0.00001 | 0.05 | 1000 | 100 | 1500000N-体 シミュレーション | 粒子数: 1億体 積分時間: 1億年 (ステップ数: 10G) | | 論文で報告されているアルゴリズムとGRAPEにおける計測結果から算出。1ステップ1粒子あたり1万5千演算、グループ内粒子数128。メモリアクセスは6000 演算あたり32 バイト |
| 地球・惑星の形成シミュレーション | 520 | 29.0 | 0.001 | 1 | 24 | 100 | 4500000SPH 計算 | 粒子数: 10億体 積分時間: 数ヶ月 (ステップ数: 100M), 演算量 NlogN | | 演算量、メモリ転送量、メモリ使用量は、TSUBAMEでのプロファイルを元に外挿 |
| 惑星表層環境の形成と進化シミュレーション | 6 | 25 | 0.01 | 4 | 100 | 1000 | 2000000 流体計算 + 輻射計算 (スペクトル法+差分法) | 格子数: 3840x1920x192, 100 ケース × 10 惑星, 積分時間: 10年 (ステップ数: 30M), 1ステップ1格子あたりの演算量: 50K | | 演算量、メモリ使用量は、TSUBAMEでのプロファイルを元に外挿 |

3.1.3 生命科学分野、物質科学分野、ものづくり分野の分野横断連携

生命現象は、ナノメートルの非常に微細なスケールから我々日常生活のスケールに至るまで、非常に幅広いスケールにまたがって存在し、本質的にマルチスケールな対象である。タンパク質やDNAなどに代表される生体分子は、生命科学的側面から見ると「生命」を構成する基本単位に位置づけられるが、物質科学的側面から見ると対称性の少ない非常に複雑な「物質」であり、「生命」と「物質」の二面性を持つ存在である。したがって、生体分子の研究、特にその立体構造に基づく解析は、生命科学と物質科学という大きな2分野の境界に位置する課題であり、それぞれの分野で培ってきた方法を横断的に集約し駆使することで、大きなブレークスルーが期待される。細胞、臓器といった高次の生命現象へのつながりを意識した生命科学的アプローチと、電子や原子・分子、更には分子集団における物質的側面を重視した物質科学的アプローチは相補的であり、この二つを融合することによって、創薬や生体分子を活用したものづくりなど社会的に重要な課題において飛躍的な発展が可能になるであろう。ここでは、生命科学分野、物質科学分野、ものづくり分野の分野横断連携の例として、生体分子・複合体の立体構造に基づくシミュレーション解析を取り上げ、具体的な対象、すなわち、創薬、バイオナノ境界ものづくり、ウイルスや細胞動態などの巨大系のシミュレーションについて詳述する。

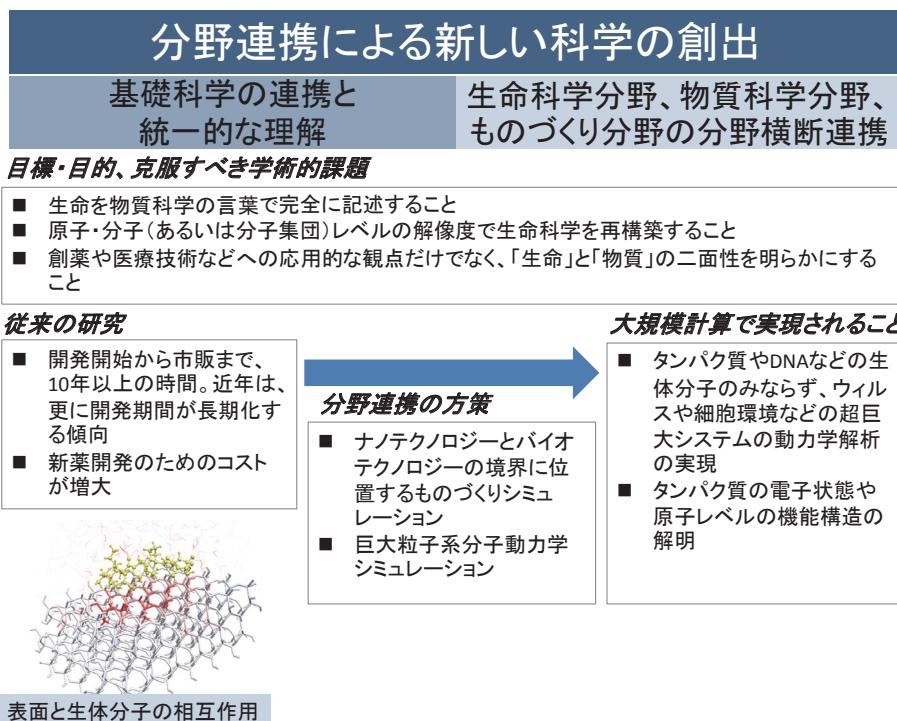


図 3.1.3-1 生命科学分野、物質科学分野、ものづくり分野の分野横断連携

3.1.3.1 計算創薬における連携例

(1) 課題概要

ほとんどの人は「健康で長生きしたい」と願っている。この願いを少しでも実現するために薬は非常に重要であるが、すべての病気に対応できているわけではない。更に、新型インフルエンザのように、人間とて脅威となる病気は日々増えていく。こうしたことを考えると、今後多くの薬を開発する必要がある。また、薬の開発手法そのものも効率化・加速化が期待される。

新薬の開発には、経済的な効果も重要である。通常、新薬は開発開始から市販まで10年以上の時間がかかるが、近年はさらに開発期間が長期化する傾向にあり、新薬開発のためのコストが増大している。実際、一つの新薬開発に数百億円規模の投資が必要と言われている。こうした観点からも、薬開発に技術的革新を引き起こすブレークスルーが望まれている。良い薬の市場は1兆円規模である。困難を乗り越え新しい薬を一つでも開発できれば、海外から日本国内にこうした規模の利益が流れ込み、大きな経済効果が見込まれる。こうした戦略のために、日本の新薬開発の国際競争力を高めていく技術革新を強く推進していく必要がある。

上述の技術革新の実現に向けたブレークスルー技術として期待されている新規手法の一つがコンピュータ支援によるドラッグデザイン(CADD:computer aided drug design)である。CADDの代表的手法は定量的構造活性相關であり、1960年代から始まった長い歴史を持つ。1990年以降、X線構造解析やNMR分光によるタンパク質の立体構造が多数解明されたことから、CADDは、立体構造に基づくドラッグデザイン(SBDD:structure based drug design)という新段階を迎えた。SBDDでは、タンパク質の結合部位に医薬品候補化合物を計算機上で結合させ、立体構造とエネルギーに基づいて化合物の結合の強さを評価して分子設計を進めてゆく。この手法の成功例として1997年に開発されたインフルエンザ治療薬であるタミフルがよく知られている。しかし、現在の標準的な手法では結合構造の予測計算やエネルギー計算の信頼性の不十分さから、CADDは限定的な役割に留まっている。しかし、「京」コンピュータが登場し、これまでにない規模の計算資源を利用できるようになったことで、計算精度が大きく改善されている。また、情報科学分野、物質科学分野、生命科学分野で発展した手法が創薬研究のさまざまな課題に活用できる状況が生まれている(ここではすべてを含めて計算創薬と呼ぶ)。このような状況から、今後、計算創薬の効率・信頼度が高まり、イノベーションが起きると思われる。

計算創薬の研究には、非常に多岐にわたる技術・知識・知見を集約し、組み上げる必要がある。設計する薬が標的とするのは一つのタンパク質の機能であるから、原子レベルでのタンパク質と医薬品の相互作用を解析する必要がある。このように物質科学と見なせる側面がある一方で、タンパク質の機能は細胞内の化学反応ネットワークの一部であり、薬の作用が細胞、臓器、個体へと現れることを考えると、生命科学として的一面もある。現に、物質科学系・生命科学系それぞれで標準的なCADDの手法を超えた計算創薬手法を開発しようとさまざまな基礎・応用研究が進んでいる。しかし、実践の計算創薬で世界をリードしていくためには、両分野の技術を結集していくことが必須である。

現状の計算創薬においては、典型的な新薬の開発プロセス（ここでは SBDD を想定）は、以下のようになっている。

- ① 標的探索：疾患に関連したタンパク質の中から標的とするタンパク質（ターゲットタンパク質）を決める。
- ② タンパク質の構造決定：以下の分子設計や阻害活性予測のために必須であるタンパク質の 3 次元構造を解く。
- ③ 分子設計・化合物ライブラリの作成：タンパク質の構造を参照した化合物のアイデアを創出する。もしくは、化合物探索のための化合物ライブラリを準備する。
- ④ 医薬品候補の選出：阻害活性を定量的に予測することで、医薬品候補を選出する。
- ⑤ 動物実験・臨床試験：細胞や動物による薬効と毒性試験を行い、次いで臨床試験を行う。

これらの研究ステージのうち、①ではバイオインフォマティクス技術による遺伝子レベルでの標的タンパク質の探索が行われている。②では、X 線結晶構造解析に多く依存している。しかし、100 残基程度の天然構造を分子動力学（MD : Molecular Dynamics）計算で再現することが可能になっていることから、実験の構造で精度の悪い部分を計算で補正して、分子設計や候補化合物の選択に利用できるようになっている。

③に関しては、1960 年頃に始まるドッキングと呼ばれる手法が中心的役割を担っている。実際、さまざまなタイプのドッキングソフトが開発されている。ドッキングとは、計算機で化合物ライブラリの化合物をしらみつぶしに標的タンパク質に結合させ、ドッキングスコアと呼ばれる経験的な親和性の指標で医薬品候補を選び出す技術である。また、創薬支援ソフトウェアでは、このドッキングの機能だけでなく、化合物の体内動態や毒性（いわゆる ADMET ; Absorption, Distribution, Metabolism, Excretion, Toxicity）を経験的に見積もる機能（Lipinski の法則など）も搭載され、分子設計を支援するための重要な情報を提供できるようになっている。このように、機能的には創薬支援ソフトウェアは広範囲をカバーしているにもかかわらず、現状では創薬研究において補助的、限定的な位置にとどまっている。この理由として、必要な物理量の予測精度が低いことが挙げられる。特に、結合自由エネルギーとドッキングスコアの相関が不十分であることは致命的な欠点であった。④は、このようなドッキングスコアに代わり、定量的に結合自由エネルギーを見積もることで阻害活性を予測しようとする試みである。現在、「京」の戦略分野の重点課題の一つとして創薬応用シミュレーションという課題が立ち上がっているが、これは MP-CAFE 法という MD 計算に基づく定量的結合自由エネルギー評価法を用いることで、計算機による新しい医薬品候補の選出法を確立することを目的としている。計算創薬が創薬プロセスの中心となるためのコアとなる部分で、世界屈指のスーパーコンピュータの莫大な計算資源を惜しみなく投入することで、イノベーションにつながりつつある。

⑤では実験的なアプローチがいまだ主流であり、新しい計算科学的なアプローチの開発が望まれているところである。これは、ドラッグデリバリの問題として議論されており、全原子レベルの MD シミュレーションだけでは不十分で、粗視化モデルや細胞・臓器・人体に関するマクロスケールのシミュレーションと連成するようなマルチスケール的アプローチが重要であると考えられている。

現在の計算創薬は、未熟で創薬プロセスで中心的役割を果たせていない。これは基盤となる学問分野の理論・計算法の未熟に起因する場合と、計算理論・手法はすでに存在するが、コンピュータの性能が不十分なために現実にあわせて計算が簡便化されていることに起因する場合と考えられる。計算資源を投入すれば、実践の創薬において中心的な役割を担える計算技術に関しては、「京」コンピュータをはじめとする国内スーパーコンピュータの計算資源をしっかりと投入して、ノウハウの蓄積と新薬開発の中心技術として確立していくことが喫緊の課題であり、この課題を乗り越えることでスーパーコンピュータによるイノベーションへと展開が期待される。また、創薬を加速・効率化できる理論・計算手法に関しても、新たに開発させたり、現存法を成熟させたりしていくことも重要である。常に新しい技術が生まれる環境があって、初めて、日本が常に世界をリードできる医薬品開発力を持つと言える。

(2) サイエンスの質的な変化と長期的目標

現在、「京」の戦略分野1の1課題として創薬応用シミュレーションが推進されている。これは、「京」コンピュータのようなペタフロップス級の計算機を用いて、計算科学が主体となる創薬プロセスを確立しようとするものである。

こうした計算科学を積極的に利用した創薬は、世界各国が自国の創薬開発力の優位性を獲得すべく注力している。特に、米国の D. E. Shaw らは、MD 計算専用のチップを搭載した計算機 Anton を開発し、通常の汎用計算機の 100 倍以上の速度でタンパク質の MD 計算をすることを可能にしている。彼らは、米国メガファーマと強力なコンソーシアムをつくり、計算機を用いた創薬応用へと乗り出している。マイクロソフト社の Bill Gates もこのコンソーシアムを支持し、巨額の資金援助を行っている。

上述のように、現在、MD 計算を基盤とする結合自由エネルギーの定量的予測方法を中心として、スーパーコンピュータの創薬応用が進んでいる。しかし、それ以外にも将来的に重要なと考えられる方法が生命科学分野・物質科学分野で発展してきている。その中でも特に重要なと考えられるのが、タンパク質の電子状態を露わに考慮する QM/MM 法やフラグメント分子軌道 (FMO) 法や Divided-and-Concur (D&C) 法である¹。現在の MD 計算で標準的に用いられている力場は、金属錯体やラジカルのような特殊な原子団のよいモデルを与えておらず、また、化学反応のような動的な化学結合の切り替えを記述できないという欠点が残っている。将来、複雑なタンパク質を標的にする際や新しい機能阻害機構を持つ医薬品開発を目指す際には、こうした特殊な原子団の扱いを避けられない。こうした問題を解決する最も重要な方法が電子状態計算の手法である。

今後 10 年で実験にかかる負担を計算機科学の力で軽くしていくことが可能になっていくだろう。しかし、実験手順を省略できる段階ではない。こうした観点から、広い分野の実験グループとの連携を構築し、実践的計算創薬のノウハウを蓄積し進化させていくことが重要である。

¹QM/MM 法は、重要な部位を量子化学計算、環境としての役割しかない部分は古典的なモデルを使い計算を効率化させる方法である。D&C 法や FMO 法は、領域分割をつなげてタンパク質全体を計算する方法である。領域分割の考え方は並列化に向いたアルゴリズムになる。

次に、今後 5 年間の進展の見通しについて述べる。①標的探索、②タンパク質の構造決定、⑤動物実験・臨床試験に関しては、4.1 節で改めて議論することとし、ここでは、③分子設計・化合物ライブラリの作成および④医薬品候補の選出に焦点を当てる。

現在、「京」コンピュータを利用した戦略分野が開始され、生命科学分野の中で、計算科学主体の医薬品開発を実践段階に移す創薬応用シミュレーションが行われている。現在は、従来法で粗く絞り込んだ数百個の化合物から MP-CAFE 法という定量的結合自由エネルギー評価法を用いて阻害活性のある化合物を探し出すことを行っている。今後 5 年間で、ペタフロップス級の計算資源を使った技術が確立されていくと考えられる。生命科学分野では、分子設計への重要な知見を与える方法として、統計力学の積分方程式法の一つである 3D-RISM 法を用いたフラグメント探索についても、研究が進んでおり将来的な応用が期待される。

また、物質科学分野では、以下の課題が進行している。

課題 1) シード化合物（薬設計の元となる化合物）の探索範囲の拡大

現状ではバーチャルスクリーニング（計算機を用いて有力な化合物候補を化合物ライブラリーから取り出す技術）は、化合物データベース中の数十万程度の化合物を探索するレベルで行われてきた。ペタフロップス級の計算機を用いれば、1000 万化合物を対象に活性化合物探索を実施することが可能になり、従来知られている化合物群とは全く異なった新規骨格を持つ医薬品候補化合物群が発見される可能性が高い。多くの化合物を同時に計算していくアレイジョブ化が可能であり、高効率化が見込める。

課題 2) タンパク質と化合物の複合体構造の予測

タンパク質と化合物間の相互作用を解析するために、タンパク質の 3 次元構造が正確に解けていることは非常に重要である。現在は、実験構造にほとんど依存しているが、実験構造の解像度不足を量子化学計算（QM/MM 法、FMO 法、D&C 法）レベルでの構造最適化を用いて、高い精度で補うことができるようになると考えられる。

課題 3) タンパク質と化合物間の分子間相互作用の解明

タンパク質の特異的な分子認識は多部位かつ同時の分子間相互作用に起因している。したがって、特異性を高める分子設計を行うためには相互作用部位間の協同効果の知見が有用である。ペタフロップス級の計算機を利用することで、タンパク質の複合体全系の量子化学計算（FMO 法、D&C 法）がルーチン的に可能になり、多部位同時の相互作用やタンパク質内部の環境が化合物との結合に及ぼす効果が解明され、医薬品分子設計の指針となるタンパク質の特異的な分子認識機構を理解できるようになる。こうした計算を種々の化合物に適用し、実際の化合物探索を行えるようにしていく。この課題においても多数の化合物について調べるという観点から、単純並列計算で多くの試行錯誤ができる環境が好ましい。

特に、課題 2) と 3) は電子状態計算に基づくもので、一般に、MD 計算で用いられる経験的力場の精度より適用範囲が広い。しかし、計算コストの問題から十分な統計集団に基づく議論はいまだに難しい。こうした点から、将来の計算機の発展にともない重要な手法であり、ま

た、今後 10 年の間においては、経験的力場に基づく MD 計算と相補的な役割を持つものと考えられる。

今後 10 年後の展望としては、比較的単純な水溶性タンパク質に関しては、MP-CAFE 法を基盤とした創薬プロセスがさらに実践されるフェーズに入ることが見込まれる。現在では、従来法で絞り込んだ数百の化合物を対象に MP-CAFE 法を適用しているが、10 年後は数千から数万の化合物を直接的に MP-CAFE 法で調べられるようになる。このように定量的探索の範囲を広げることで、これまで見落としていた化合物も確実に発見することができるようになる。

更に、計算機資源が増大することで G タンパク質共役受容体 (GPCR) のような膜タンパク質などさらに複雑なタンパク質を標的にした計算創薬が始まる。これの重要性は、現在の薬の 50% が GPCR ファミリーを標的としているためであることを考えると自明であろう。2012 年には GPCR の構造解明に対してノーベル化学賞が送られたことが示すように、GPCR に対する医薬品設計の可能性が注目され競争が始まっている。しかしながら、膜タンパク質の結晶化は依然として非常に難しい問題であり、せっかく解かれた結晶構造の中にも精度の悪い部分が存在する可能性がある点が挙げられる。こうした問題は、物質分野やインフォマティクス分野で発展している構造予測法、長時間 MD 計算や拡張アンサンブル法などにより、うまく構造補正を行えると予測される。こうした構造に基づき、定量的自由エネルギー計算を行うことで、複雑なタンパク質の阻害薬を開発することが可能になっていくと思われる。

こうした計算創薬の発展にともない、新しい分子設計の在り方も十分に議論していく必要がある。上述の発展にともない、これまで十分に解き明かせていない阻害活性を上げる物理的条件が見えてくるであろう。このような知見に基づき、化合物の修飾を行うことは論理的ドラッグデザインの目指すべきゴールであろう。現在、さまざまな重要化合物の物性 (pK_a や $\log P$ など) は化合物中に含まれる原子団の種類に基づき定性的・経験的に見積もられている。もし計算資源が潤沢に与えられるのであれば、これらの物性も高精度量子化学計算に基づき実験を行う前に定量的に予測してしまうことが望ましい。さまざまな計算技術を投入し、創薬プロセスはますます効率化されていくと考えられるが、こうした計算科学が創薬をリードできる時代には、化合物ライブラリの在り方も変わってくると思われる。これまででは、とにかく多くの化合物の種類をカバーすることが重要であったが、代表的な化合物から残り多数の化合物の情報を計算機で予測・派生させる方法を確立できれば、化合物ライブラリに含めるべき化合物の数は圧倒的に少なくなることが見込まれる。

さまざまな種類のタンパク質がターゲットになると、金属錯体やラジカルのような原子団を含むタンパク質が創薬対象として含まれてくることも想定される。これら特殊な原子団の力場パラメータが、十分に確立されていないという問題は重要である。例えば、核内受容体タンパク質には亜鉛錯体が多く見られるし、呼吸鎖を形成するタンパク質には鉄イオンを含むヘムや銅-硫黄錯体を持つ。当然、これらのタンパク質に異常が起こると疾病を引き起こす。このような特殊な構造を含むタンパク質を正確に扱うことは、創薬応用シミュレーションにとって重要である。こうした特殊な原子団の取り扱いは、物質科学で育まれてきた分子軌道法計算によって解決されていくだろう。

こうした力場パラメータは、時に、環境に大きく依存する。したがって標的タンパク質の環境下でパラメータを決めるのが望ましい。現在、標準的な分子軌道法計算では、巨大なタンパク質をそのまま扱うことはできないが、QM/MM 法や FMO 法が発展してきており、こうした手法を用いることで MD 計算のための高精度パラメータを決定することが考えられる。

従来の医薬品は、分子間力で標的タンパク質に結合することでタンパク質機能を阻害する。それゆえ、古典的経験力場を用いた MD シミュレーションが非常に強力な開発解析ツールであった。しかし、標的タンパク質と化合物の親和性を高めるために、化学結合で複合体形成をさせるという新しいアイデアが考えられている。こうした新しいタイプの医薬品開発を、QM/MM 法や FMO 法でタンパク質内化学反応を直接的に計算・解析することで強力に支援することが可能になる。

また、従来のドラッグデザインは安定構造のタンパク質を標的としているが、反応経路にそつて変形した構造をターゲットとした医薬品分子設計の可能性を提供する。これは、キナーゼなど大きなタンパク質ファミリーで、疾患に関する特定のキナーゼに対する特異性を高める分子設計に有用な可能性がある。

3.1.3.2 ナノバイオ境界ものづくりシミュレーションにおける連携

(1) 課題概要

ナノテクノロジーとバイオテクノロジーの境界は、このところ高い注目を集めて活発に研究開発が展開されている領域であり、バイオセンサーや安全性の高いインプラントの調製、バイオミネラリゼーション²に基づくナノ構造・粒子の形成などが含まれている。端緒となったのは、米国国立がん研究所（National Cancer Institute）の Brown によって 1992 年に報告された、酸化鉄表面への特異的結合能を持つペプチドの遺伝子工学による創成である。また、半導体表面ではマサチューセッツ工科大学（MIT）の Belcher がガリウムヒ素で先鞭を付け、酸化チタン表面やナノチューブ系では日本でもがん研究所の芝らが先導的な研究を行ってきてている。

ナノバイオの研究開発は、遺伝子工学では“総当たり探索”が比較的容易なこともあり、これまで試行錯誤的な要素が多かったように見える。しかし、今後はシミュレーションに基づく生体分子と固体表面の界面での相互作用の原子レベルあるいは電子状態レベルでの把握が重要になってくると思われる。ただし、計算への要求は必然的に高くなる。古典力学に基づく分子動力学（MD）計算では、金属などの異種原子を含む力場セットの新規準備は不可欠であるが、複雑な界面での電子移動や広域での分極の記述あるいは化学反応の扱いを考えると、タンパク質の長時間の動的挙動の把握などを別にすれば、適用可能な問題はむしろ限られるかもしれない。一方、量子論系の密度汎関数（DFT）法では周期境界条件を課した計算を行うが、周期的に隣接する生体分子間の相互作用が十分に小さくなるように単位格子の大きさを設定する必要があることもあり、タンパク質の規模によっては非常に負荷の重い計算になってしまう。規模の大きい対象に対しては、低スケーリング系（いわゆる O(N) の手法）の DFT プログラムの開発・利用がこれまで以上に必要とされる。分子軌道計算においても、FMO 法などの

²生物が鉱物を作る作用のこと

分割&統合系の方法に期待がかかるが、タンパク質では実応用も含めて成功を収めてきたこれらの手法も固体系への適用は緒についたばかりである。いずれにせよ、単一の計算手法ですべての問題をカバーすることは難しい。どの方法を使うにせよ、ペタ~エクサ級の計算資源があるってこそ実用的になると思われる。

固体界面の問題ではないが、生体分子の精密分光も今後の発展が望まれる分野である。例えば、GFPなどの蛍光タンパク質を使ってがんなどの病変部を特定することはすでに広く用いられているが、生体組織透過性の高い赤外域の蛍光を使う試みがなされている。また、2次高調波発生（SHG）などの非線形応答に基づく組織の可視化技術も開発されている。さらに最近では、振動分光の一種であるテラヘルツ波を用いた非侵襲型の測定をタンパク質の畳込みの解析、基質・タンパク質の相互作用解析に応用しようとする試みが報告されている。これらの分光スペクトルの解析にはタンパク質の量子計算が必要不可欠である。

ここでは、DFT系の手法、MO系の手法によるナノバイオ境界問題の扱い、ならびに生体分子のテラヘルツ分光について概説する。

(i) 密度汎関数（DFT）法によるタンパク質 一表面反応の計算

吸着効果（吸着の強さや吸着にともなうタンパクやペプチドの構造変化、吸着ペプチド間の相互作用の強さなど）は溶媒の種類やpHにも敏感である。吸着させる材料とペプチドの種類、溶媒環境などの変数の組み合わせは膨大であり、試行錯誤によって探索できるのは極一部の組み合わせでしかない。そのため、シミュレーションによる探索の加速が期待されている。シミュレーション手法は大きく分けて、①量子論的に行うもの、②経験的力場を使って行うもの（MM、MC、MDなど）、③粗視化手法により行うもの、の三つがある。②あるいは③のシミュレーションは、創薬の分野で盛んに使われている。①、②、③の順に計算負荷が重いが、③、②、①の順により長時間の動力学計算が可能である。①の方法には、量子化学的手法と、主として固体物理に適用してきたDFTに基づいた量子論的手法がある。DFTに基づくシミュレーションは材料研究において果たす役割がますます大きくなっている。現在もさまざまな改良を施されながら発達している。最近では電池材料中の電極・電解質界面における反応計算などに適用対象を広げている。計算負荷が重いため、長時間の動力学計算を行って結合自由エネルギーを求めたり、大きな分子量のタンパク質が材料表面上にどのように吸着するかを求めるることは難しい。一方、②あるいは③の方法は経験論的パラメータに依存しており、表面、タンパク、および溶媒の組み合わせごとに最適なパラメータセットを用意しないと信頼性のある結果が得られない。また、そういうパラメータの組をつくるのは表面の反応系では難しい。

(ii) 分子軌道法による表面 一ペプチド相互作用解析

分子軌道（MO）法のスキームでは、基底状態を扱う場合、基本のハートリーフォック（HF）計算によって軌道を決めた後、2次摂動論から結合クラスター展開に至る階級的な近似法によって電子相関を導入して計算の信頼性を向上させる。その前提是、十分な広さのバンドギャップがあることで、DFT法に比せば、クラスターモデルを使うにせよ固体側の取り扱い種には自ずと限界がある。他方、ペプチド・タンパク質やDNAなどの生体分子では静電相互作用や水素結合とともに分散力による弱い相互作用が重要である。分散力の寄与は2電子励起で記述さ

れるが、摂動論系の相関計算では直接かつ適切に取り込める。更に、励起状態についても相関を含めた配置間の相互作用的な取り扱いが可能で、界面での電荷移動励起についても処方箋はある。

これまでのところ、MO 計算によってナノバイオの境界領域の問題を扱った例はきわめて限局的で、摂動論の代わりに相関を実効的に取り込める DFT を用い、シリカやアパタイトを対象に小規模モデルでの計算が報告されている程度である。上記のバンドギャップの問題もあるが、きちんと実問題を扱おうとすると、生体分子そのものの大きさと人工的な周縁効果を無視できるほどのサイズのクラスター・モデルの大きさがともに課題となる。この二つの大きさ要求を水和条件を課しつつ満たすことは、通常のアプローチでは計算コスト的にはほぼ不可能である。そこで、並列処理と高相性の FMO に代表されるフラグメント分割＆統合系の手法の適用が強く求められる。FMO 計算では、フラグメント間の相互作用エネルギーが得られるため、単なる高速化の手段ではなく対象系の内部解析ツールとしての利用もでき、特に創薬分野で好んで使われてきていることは本書に既述のとおりである。FMO 法を固体系に適用する試みは始まっており、GAMESS では軌道緩和に制限を課した 2 体のやり方で、一方の ABINIT-MP(X) では制限無しでフラグメント展開を 4 体まで進めたやり方 (FMO4) による。FMO4 では、コストは相対的に AFO よりも大きくはなるが、エネルギーの精度が適切に担保され得るメリットがあり、超並列処理の条件下で本質的なアドバンテージが出てくると思われる。

ナノバイオ分野の人造ペプチドでは、特定のアミノ酸残基が固体表面の認識に重要であることが議論されるのが通例である。例えば、芝らの酸化チタン結合タンパク質 mini TBP-1 では正荷電を帯びたアルギニンと負荷電を持ったアスパラギン酸が表面の荷電ポイントと相補的に引き合うことが表面への固着能を与えると実験を基に論じられている。しかしこれだけでは、アミノ酸残基と表面の活性ポイントとの相互作用の描像は不明であり、荷電性でない他残基の役割や水和の効果も含めた詳細な理解があれば、ペプチドの最適化デザインには有益である。こうした目的には、相互作用解析に長けた FMO 計算はまさに好適である。固体側としては、有バンドギャップが条件であることからシリカ、炭酸カルシウム、アパタイトなどが考えられるが、タンパク質を用いた次世代デバイスやバイオセンサー、ドラッグデリバリや極微量抗体検知用のナノ粒子の模倣バイオミネラリゼーション、生体親和性の高いインプラント（人造の骨や歯）、逆に細菌汚染の足場となるバイオフィルム形成を阻害する清浄表面などの研究開発をカバーできると考えられる。

(iii) 生体分子分光

量子力学と分光学は現代の物質科学を支える二つの主要な柱であり、固体物理学においては、その相互連携の重要性は十分認識されている。本節では、ナノバイオ分野における量子力学と分光学の連携を確立することを視野に記述する。

生体分光は、生体分子の挙動を分子レベルで観測することを可能とすることから、今後の発展が望まれる分野である。これまでに、可視分光、非線形光学分光、核磁気共鳴スペクトル法等の分光技術が生体分子の計測に用いられ、タンパク質をはじめとする生体分子の分子構造ならびに電子状態の解析に適用されている。これらの分光スペクトルは、基本的に分子の電子状態に起因するので、そのスペクトルの解析は、分子の電子状態を解析することにより可能であ

る。しかし、生体分子、特に水中の生体分子の電子状態には、溶媒である水の電子状態が関与するため、そのスペクトルの解析には水中での生体分子の電子状態を知ることが必要である。水中における分子の電子状態解析には、これまで水を誘電体として近似する平均場近似が用いられてきた。この近似では、水を連続的な誘電体と近似し、水と生体分子の相互作用を分子と誘電体として近似された水の間の静電相互作用として記述する。しかし、実際の水と生体分子の相互作用は、必ずしも静電相互作用のみで記述できるものではなく、水素結合ならびに電荷移動相互作用等の量子力学的な相互作用が重要な働きをする。したがって、水溶液中での生体分子の分光スペクトル解析には、水と生体分子からなる系の量子状態を明らかにし、その量子状態より生体分子のスペクトルを解析する技術を開発することが必要である。

生体分光のもう一つの大きな課題に、テラヘルツ分光がある。テラヘルツ分光は遠赤外光を用いる赤外分光の一種である。生体分子は巨大分子の一種であり、その骨格振動に特異的な振動を有する。テラヘルツ分光は、この骨格振動にともなう電磁波吸収を計測することにより、生体分子の種類、構造、機能を明らかにする。例えば、タンパク質と基質の相互作用系の骨格振動をテラヘルツ分光法により解析することにより、相互作用の強さを分光学的に評価する試みがなされている。しかし、現状のテラヘルツ分光法には、実測されたスペクトルを解析することができないという問題がある。低分子に関しては、分子軌道計算により分子の振動準位を解析した例があるが、タンパク質をはじめとする生体分子の骨格振動を量子力学的に解析した例はない。またテラヘルツスペクトルは、一般に水の影響を強く受けるので、水中での生体分子のテラヘルツスペクトルの解析には、水分子の存在を露わに考慮した分子の骨格振動計算が必要である。密度汎関数法に基づく水中生体分子の電子状態計算ならびにそれに基づく骨格振動計算は、これまでの不可能であった生体分子のテラヘルツスペクトルの分子論的な解析を可能とするものであり、テラヘルツ分光学および生体分子の研究を行ううえで、重要な寄与をすることが期待できる。

(2) サイエンスの質的変化と長期的目標

(i) 密度汎関数（DFT）法によるタンパク質 一表面反応の計算—

今後、DFT 計算は次のように利用されていくと考えられる。

- (1) 生体分光や STM、ESR などの実験観測と照応させながら、材料表面におけるペプチドなどの吸着構造を同定する。
- (2) 材料の表面構造を求めるのに用いる（溶媒中）。
- (3) 材料表面に吸着するペプチドの安定構造を探索するのに用いる。
- (4) 吸着構造探索や自由エネルギー計算は前述の②、③の方法で行うが、そのための経験的力場パラメータの高精度化は DFT 計算を行って得た結果を用いて行う。
- (5) 自由エネルギー計算自体も比較的小さいペプチドであれば、DFT 計算を用いて行う。DFT 計算は電子間クーロン相互作用の高精度化（ハイブリッド汎関数など）やファンデルワールス相互作用のような分散力を取り入れた計算が必要になる。

今後は、高精度・高効率化のための手法の開発とともに高速・高並列計算機の利用が必須である。また、DFT 計算に適用できる加速分子動力学法（Accelerated MD 法。メタダイナミクス法もそのうちの一つ）の開発も構造最適化を加速するであろう。

(ii) 分子軌道法による表面一ペプチド相互作用解析—

現時点での計算資源では、大型のクラスター モデルを組み、それにタンパク質を合わせる FMO 計算は単一から少数の構造サンプルでの実行に限られそうである（mini TBP-1 と千原子程度のシリカクラスターとの相互作用解析の先導的な研究事例は有り）。しかし、エクサ級の超並列機であれば統計的な算定が可能な数の計算が容易に処理できるので、シミュレーションとしての信頼性が向上する。また、多種のタンパク質を同時並行的に流して得られる多様なデータを解析して新しい最適化指針を得ることも意図され得るが、実用性という点ではこうした“アレイジョブ”という形態も有効であろう。ルシフェラーゼ（550 残基）とシリカの相互作用をモデル化する場合、基板側が 1 万個以上の原子を含むクラスターを使う必要があり、1 サンプル構造としても上記 mini TBP-1 モデルの FMO4 計算の百倍程のコストを要し、複数構造を高速処理するにはエクサ級の計算機の利用が望まれる。計算法の改良やプログラムの整備は不可欠であるが、ナノバイオの境界問題は FMO 法にとっても開拓すべきフロンティアを提供してくれるものと期待している。

(iii) 生体分子分光

密度汎関数 (DFT) 法による数百から数千の水分子と生体分子からなる系の量子状態計算は、水中の生体分子の挙動を明らかとするとともに生体分光技術を発展させるうえで重要である。このような計算は必然的に数万原子規模の量子計算となり、現行のペタフロップス級を超えるエクサフロップス級のスーパーコンピュータを必要とする。エクサフロップス級スーパーコンピュータによる数万原子規模の量子計算は、それ自身が計算科学上重要なテーマであり、生体分子の分光スペクトル解析は計算科学に及ぼすインパクトが大きい。

3.1.3.3 ウィルスや細胞動態などの巨大系シミュレーションにおける連携例

(1) 課題概要

MD 計算は、液体や気体、固体、ガラスや超臨界流体といった物質の種々の状態のミクロな性質からマクロな物性に至るまで、分子間相互作用から力学・統計力学法則をもとに明らかにする「物質科学」に起源をもつ研究手法である。これまで MD 計算はタンパク質や DNA、脂質分子、あるいは膜タンパク質、生体膜やウィルスといった生体分子系に適用され、その物質的側面についての情報を与えてきた。しかしながら、これらの研究は生命科学との連携が薄く、より高次の細胞や臓器といったレベルのシミュレーションとの連携が十分になされてきたとは言い難い。今後「物質科学」分野の方法論や物理・化学的アプローチと「生命科学」分野の生命現象に直結したシミュレーションとの連成による分野横断的な研究テーマが待ち望まれる。

そもそも生体分子は、溶媒である水やイオンと共に存する環境の下で、弱い秩序構造を保つつつ柔軟に変形可能な巨大分子集合体であり、熱揺らぎ程度のエネルギーを利用しつつ機能を発現させている。したがって生体分子のみならず溶媒やイオンの自由度についても露わに取り扱う、正確なMD計算が不可欠である。そのためには高い精度の力場が必要であり、すでに開発されているAMBER（米）・CHARMM（米）・GROMOS（蘭）などとともに、タンパク質分子については更なる改良が加えられ精度が向上している。また巨大分子集団系の構造やその揺らぎをシミュレートするためには、溶媒も含めて莫大な数の原子を含む系を高速で計算する必要があるが、大規模系に適したMD計算のアプリケーションについても、AMBER（米）・CHARMM（米）・GROMACS（蘭）・NAMD（米）・LAMMPS（米）が広く知られている。また国内でも精力的に開発が進められており、Marble、Modylas、Genesisといったアプリケーションが「京」において高い性能を発揮している。さらに系の熱力学的安定性の評価のための自由エネルギー計算については、熱力学的積分法、自由エネルギー摂動法、さまざまな拡張アンサンブル法に加え、溶媒和エネルギーを高速に計算可能なエネルギー表示法も提案され、すでに生体分子系に対してもその有効性が示されている。

(2) サイエンスの質的变化と長期的目標

(i) 生体膜のシミュレーション

生体膜のMD計算は、1980年代以降に全原子モデルによる単一脂質組成の系を中心に二分子膜構造の一部を切り出した、平面膜のパッチ構造について広く行われてきた。現在では、生体系と同一の複雑な脂質組成のリアルなモデル生体膜の全原子MD計算とともに、リポソーム（球殻状に閉じた膜構造を有する小胞）のような巨大系を丸ごと対象とするために脂質分子に粗視化モデルを用いたシミュレーションへと展開が図られている。前者は生体内の器官ごとの生体膜物性の違いを明らかにすることが可能であり、後者は平面膜のみならずリポソーム全体の物性評価を行える。これらにより得られる知見を高次の細胞シミュレーションへと連成させることにより、細胞環境を模倣しその力学構造をより正確に再現することが可能になるものと期待される。

また、リポソームはミセルなどとともにドラッグデリバリシステムの搬送媒体として薬学的関心も高い。リポソームのカプセルとしての安定性や、搬送薬物や細胞膜との親和性の評価のためには、数千万原子～一億原子規模のリポソーム全体のMD計算が不可欠である。また得られる知見は薬物の体内動態シミュレーションの高精度化に寄与できるものと期待される。

(ii) ウィルスの全原子シミュレーション

ウィルスの立体構造に関する実験的情報の蓄積、高精度化と高性能計算機の発展が相まって、タンパク質分子の複合体であるウィルスの全原子シミュレーションが計算科学の俎上に載ろうとしている。これにより、ウィルスの水溶液中における温度や圧力、pH、塩濃度などの熱力学条件や化学環境に対する安定性に加え、構造ゆらぎや弾性といった物理的性質の評価が行えるようになる。また、ウィルスと細胞表面のレセプターとの相互作用について自由エネルギー解析を行うことにより、レセプターのウィルス認識という生命科学的現象について物理化学的に取り扱えるようになる。このような物質科学的アプローチによって得られた微視的情報に基

づいて、ウイルスの細胞感染過程の高精度なモデル構築が可能となり、細胞レベルのシミュレーションとの連携が図れるものと期待される。

更に、細胞表面にあるタンパク質や糖質からなるレセプターをウイルスがどのように認識し選択的に結合するのか、あるいはウイルス表面上のタンパク質がウイルスと細胞との接合部位をどのように認識して切断するのかといった分子レベルの情報がMD計算によりもたらされる。これらをもとにしたウイルス感染や増殖を阻害する抗ウイルス薬の開発、あるいは新規の作用機序の開拓を通して、創薬への貢献も期待できる。

加えて、表面にエンベロープと呼ばれる脂質膜構造を有する、さらに巨大なHIVやインフルエンザウイルスなどの病原性の高いウイルスへの展開が必要である。これらは原子数10億程度、数十マイクロ秒からサブミリ秒の統計が必要となるため、エクサスケールのコンピュータの登場が待たれる。

(iii) 細胞環境のシミュレーション

原子粒度での生体分子シミュレーションと、分子粒度での細胞スケールシミュレーションの間にはいまだに大きなギャップが存在する。細胞スケールのシミュレーションの多くは空間解像度を持たない反応拡散モデルによる記述を行っているが、近年pSpatiocyteのように空間解像度を持つ粒子モデルに基づく細胞スケールシミュレータも開発されてきた。このことは、近い将来に原子粒度の生体分子シミュレーションとpSpatiocyteなどの細胞シミュレータが連携し、分子・細胞スケールシミュレーションが実現する可能性が高いことを示唆している。実際、細胞質内の分子混雑環境（Molecular CrowdingやConfinement）でのタンパク質の水和、安定性、分子認識などに関するシミュレーションが行われるようになってきた。さらに計算機の能力が発展するならば、現在はゲノム解析や反応拡散モデルで記述されている細胞質内の反応ネットワークが、タンパク質の立体構造を用いたシミュレーションを通して理解されるようになると期待される。また、細胞内環境を記述するためには、タンパク質やRNA、DNAなどの生体高分子のみならず、混雑物や微小管などの細胞骨格をつかさどる巨大生体超分子の導入も必要である。ターゲットとする細胞の種類によってその複雑さは異なるため、初めはすべてのゲノムが記述されているバクテリアなどから理解が進み、分子細胞生物学でモデル細胞としてこれまでよく用いられてきた大腸菌などの記述が進むと期待される。更に人の細胞に関する記述が実現すれば、疾患などの解明に本質的な役割を果たすことができる。計算科学的な技術としては、原子粒度の分子モデルだけでなく粗視化分子モデルを組み合わせたマルチスケールな分子モデルの記述が必要であるとともに、タンパク質とタンパク質の反応をどのように記述するかが大きな問題となる。また、細胞全体を記述するためには従来の構造生物学の枠組みにとらわれない新しい実験的手法が必須であるが、XFELなどで実現する生体系の単粒子解析は細胞スケールのシミュレーションと組み合わせることで、細胞の物理化学的記述を飛躍的に進歩させる可能性を秘めている。

3.1.3.4 コミュニティからの意見

2013年6月12日～14日に開催された第13回日本蛋白質科学会年会にて、「エクサフロップス時代の計算蛋白質科学」と題したワークショップを開催し、意見交換を行った。そこでは、以下に示すような意見が出た。

- 従来の浮動小数点演算性能を重視するHPCだけでなく、I/O性能や整数演算性能も重視すべき（バイオインフォマティクス分野より）
- アプリケーションに関しては、GPUなどのアクセラレータの利用促進や、ソフトウェアの共有化、公開
- 創薬など産業界との関係についても、今後、ますます発展させるべき
- タンパク質については酵素反応が重要な点の一つであるので、量子化学計算など物質科学で発展してきた方法を更に取り入れて、研究を行っていったほうがよい
- 今後想定される、更なる計算の高速化に対応して、大量に出力されるデータの解析法の充実も望まれる
- 次世代研究者育成について、HPC用プログラミング方法などの教育プログラムの充実
- 生体分子分野でHPCの技術を持つ研究者の雇用先の拡充

2013年6月27日に、製薬企業関係者が多数集まる情報計算化学生物（CBI）学会の研究講演会にて、計算創薬の展望についての意見交換を行った。

- 放射光施設など大型実験施設との関係
- これから更なる並列数増加への対応
- ものづくり分野との連携

についての意見が出された。

3.1.3.5 必要な計算機資源

詳細は2.1節の創薬・医療、4.1節の生命科学、4.2節の物質科学を参照のこと。

| 課題 | 要求性能 (PFLOPS) | 要求メモリバンド幅 (PB/s) | メモリ量 (PB) | ストレージ量/ ケース (PB) | 計算時間/ ケース (hour) | ケース数 | 総演算量 (EFLOP) | 概要と計算手法 | 問題規模 | 備考 |
|------------------|------------------|---------------------|--------------|------------------------|------------------------|---------|-----------------|------------------------|---|---|
| 創薬などMD・自由エネルギー計算 | 1000 | 400 | 0.0001 | 0 | 0.0012 | 1000000 | 4300000 | 全原子分子動力学シミュレーション | ケース数:10万化合物×10標的の蛋白質(10万原子程度) | B/F=0.4, 数百から数千ケース同時に実行することを想定しているので、実行時に必要な全メモリ量、各ケースの実際の実計算時間は、表の値の数百～数千倍となる。メモリ量/ケースは100ノード実行時を想定。 |
| 高精度創薬 | 0.83 | 0.1 | 1 | 0.001 | 1 | 100 | 300 | 薬品とタンパク質間相互作用の量子化学計算 | フラグメント分子軌道法で～500残基程度までの計算を統計的ゆらぎを含めた複数サンプルで行う | 計算要求は「物質科学」のフラグメント分子軌道法のところを参照 |
| バイオデバイス設計 | 1.1 | 0.2 | 1 | 0.001 | 1 | 100 | 400 | 200–500残基程度のタンパク質の分光計算 | 電子軌道数10万超 | 計算要求は「物質科学」のフラグメント分子軌道法のところを参照 |
| 細胞環境・ウィルス | 490 | 49 | 0.2 | 1.2 | 48 | 10 | 850000 | 全原子/粗視化分子動力学シミュレーション | ～1億粒子 | B/F=0.1 |

3.2 ビッグデータの有効利用

3.2.1 計算科学基盤技術の創出と高度化

(1) 課題概要

HPC が貢献しうる社会的課題と対応するシミュレーション技術は多岐にわたる。実世界で起る現象は現象自体が複雑であり、その因果関係を正確に把握することは難しい。そのため、多くの場合は現実世界のありのままを模擬することはできず、シミュレーションでは対象とする実現象（問題）を理想化して計算することになる。したがって、現実世界で起こる現象とシミュレーションする現象との間には、少なからずギャップが存在する。現実世界の問題の特徴をうまく再現できるような方程式群の形式を選定し、関連するパラメータを決めるプロセスをモデリングと呼ぶ。モデリングは観測や実験結果に対する洞察から得られた知見を基にしているが、シミュレーションの正しさや精度に影響する非常に重要なプロセスである。なかでもデータ同化は、実験や観測データとシミュレーションとを融合し、最適な初期条件や境界条件、その他のパラメータを推定してシミュレーションの不確実性を低減するものであり、実現象を扱う社会的課題では特に重要となる。モデリングに対して、計算結果として得られた巨大な数値データ群から、現象の理解や問題解決の指針となるような有用な情報を得るプロセスをシミュレーション結果の現実世界への投影という意味で、ここではプロジェクトと呼ぶ。このモデリングとプロジェクトは、現実世界とシミュレーションの世界とをつなぐプロセスであり、これらに関わる技術開発と人材育成は、HPC 成果の社会還元に必要不可欠である。

従来、これらの技術はアプリケーションの分野ごとに個別の技術的進化を遂げてきたが、共通部分も多い。例えば、現実世界の影響をモデリングに適用する技術であるデータ同化は、気象をはじめ、石油掘削、制御、ものづくり、創薬や分子シミュレーションなどの分野でも研究・活用されている。また、結果の解釈の一助となる可視化技術もさまざまな研究領域で利用され、個別の現象に適した表現方法が研究されている。今後、例として挙げたデータ同化と可視化、またその他の基盤技術の共通部分を横断的に統合し、情報共有を進め、技術を進化させることの重要性はますます増加する。加えて、今後の大規模化、多様化、リアルタイム化などに特徴付けられるビッグデータの扱いも共通的な課題となる。本節では、データ同化、可視化、ビッグデータ処理、知識処理を代表的な共通基盤技術として述べる。

大規模シミュレーションにおけるデータ同化は、数値天気予報のための初期条件を作成する際、さまざまな観測データと数値天気予報モデルとを統合的に扱う手法として気象分野を中心に発展してきた。近年、データ同化の役割は数値天気予報に限らず、幅広いシミュレーションに応用されてきている。データ同化で用いられている数学や統計数理は、最適化問題、制御工学、状態空間モデルなどいろいろな分野と類似したものであり、データ同化に関する計算科学はさまざまな分野に共通する基盤的技術としての重要な役割を果たしている。特に、地球環境観測データは種類も多様で、量も豊富ないわゆるビッグデータである。時空間的に変化が大きく、予測可能性に限界がある気象・気候という難しいシステムを対象としたデータ同化システ

ムは、実験データと数値モデルの統融合によって高付加価値データセットを作成するための実例としてさまざまな分野への応用が可能である。

可視化とデータ処理は計算結果の解釈を助ける共通的な技術と分野ごとの知見を利用する固有部分が混在する。共通部分の大きな課題は、急ピッチで規模が拡大するビッグデータに対応したシステム化である。シミュレーションの規模が大きくなると、必然的に分散ファイルとなるため、アプリケーションレベルでのファイルを管理し、シミュレータとポスト処理でスキームを共有することが必要となる。汎用的な枠組みとしてファイル交換や管理を一元化するフォーマットやライブラリが提案されているが、多機能で複雑なライブラリは、今後新しく出現するアーキテクチャの上で最適化することが難しいという課題を抱えている。また、高速化する演算装置と低速な記憶装置との間の処理速度の乖離は大きくなる一方であり、アプリケーションの性能を考慮すると低速なファイル入出力を抑制するほうがよい。この点で、計算と同時に可視化・データ処理を行うデータストリーミング手法の検討が必要となっている。

ビッグデータへの対応は、大規模シミュレーションを実行するうえで、まさに共通的な課題である。この中には、新しい知識の原石が埋没しており、学術や防災をはじめ、設計、医療・創薬、サービス等の分野に有用な知識を発掘し提供することが重要である。ビッグデータの特徴は、大量、多様、リアルタイムという特徴を持つ。加えて、ノイズがあり、全体として異なるタイプのデータの集合であり、多様な構造を持つ場合もある。しかしながら、その多くのデータは構造化されておらず、計算量が指数関数的に増大し処理が困難となる問題点がある。観測や実験系、シミュレーションから生成される多様なデータに対して、安定的かつ効率の高い、汎用的なデータ処理の枠組みの研究とツール蓄積が必要となる。

プロジェクトプロセスの中でも、シミュレーション結果から得られる知見を非専門家に対してわかりやすく説明するアウトリーチは、今後ますます重要になってくる。例えば、天気予報はシミュレーションの結果を基に、一般層へわかりやすく説明する役割を気象予報士が担っているが、他の分野では研究者自身がアウトリーチの役割も兼ねていることが多い。アウトリーチの仕組みや、そのための人材の育成の点も含めて検討していく必要がある。シミュレーション結果の活用という観点からは、データの中に潜む有益な知見を引き出す技術の高度化が重要になる。これまででは、人の経験やある程度定式化されたプロセスにより情報が抽出され、知識へと昇華してきた。ビッグデータの時代には、規模とスピードの点から、機械学習やデータマイニングによる自動的な知識形成の仕組みが必要であり、ボトムアップ的なエキスパートシステムや人工知能技術が役立つ。知識処理については、これまでにもクラスタリングやパターンマイニング、グラフ分類、類似性検索、ベイジアンフィルタ、機械学習など、多くの技術が創出してきた。ビッグデータの中から知識という抽象的なレベルの知見を得るには、データマイニングの前処理、本分析、後処理の各プロセスをうまく設計する必要がある。現時点では、汎用的なプロセスではなく、パターン抽出の観点は人間が指示しないといけないため、データから価値を発見するプロセスの高度化に取り組む必要がある。

分野連携における新しい科学の創出

ビッグデータの有効利用

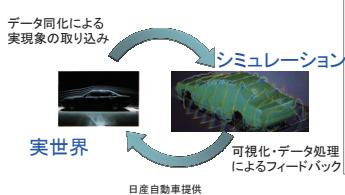
計算科学基盤技術の 創出と高度化

目標・目的、克服すべき学術的課題

- データ同化、可視化、ビッグデータ、知識処理といった計算科学基盤技術の横断的な統合による進化・高度化
- 実世界とシミュレーション世界との間のギャップ（シミュレーションモデル・境界条件・初期条件と実現象の違い）の克服
- 大量、多様、リアルタイム、そしてファイルI/O負荷の高いビッグデータへの対応、システム化

従来の研究

- 各アプリケーション領域で個別に進化
- 観測ありき、決定論的手法、結果からメタデータを作成・評価といった課題



大規模計算で実現されること

- 双方向的な現実世界とシミュレーションの融合による予測精度向上
- 確率論的手法の導入による、低確率でも重大な事象のリスク評価を可能に

分野連携の方策

- データ同化と可視化・データ処理をシミュレーションと融合
- 個別に進化してきたデータ同化技術の領域間での技術の統合化と洗練化
- 大量データの効率的な管理方法の開発やデータの再利用性を高める取組み

図 3.2.1-1 計算科学基盤技術の創出と高度化

(2) サイエンスの質的な変化と長期的目標

計算機と計算科学技術が発展した現在でも、シミュレーションの問題設定と初期条件・境界条件などには実現象との乖離があり、結果として得られるデータの解釈について専門的な知識や経験を必要とする。このため、シミュレーションの結果を直接そのまま社会へ反映することは難しく、実社会とシミュレーションの結びつきには改善されるべき点が多い。HPC技術の社会的意義の点からは、双方のフィードバックを実現し、相互の結びつきの深化が期待される。そのためには、以下に述べるサイエンスの質的变化を意識して、共通基盤技術を進展させることが重要である。同じ計算技術であっても個別の分野で独立に開発されてきた技術は多い。今後は、分野の垣根を越えて統合化できる基盤部分を強化し、熟成することにより、HPC利用技術全体としての底上げが促進される。

モデリングプロセスにおける共通基盤技術としてデータ同化が重要だが、そのサイエンスの質的な変化として着目すべき点として、以下の2点が挙げられる。

- ① 従来は観測をシミュレーションに生かすことが主体であったが、将来はシミュレーションに基づいて効果的な観測システムを設計し効率的にデータを収集するという逆向きの応用が行われるようになり、現実世界とシミュレーションとの融合が双方向的なものとなる。
- ② 従来は決定論的であったシミュレーション技術は、将来の計算機資源の増大により確率論的な表現が実現され、より詳細な不確実性の評価が可能となる。これにより、低い確率であるが重大な影響をもたらす事象の予測、つまり「想定外」を減らすこととなり、シミュレーション結果の信頼性および可用性が高まる。一方、データ同化技術

にとてはシミュレーションの確率表現が高度化することで、統計数理手法のブレーカスルーが期待される。

プロジェクトプロセスでは、シミュレーションで生成されるビッグデータが、計算プロセス自体を変えていく。従来は計算機資源の制限や計算手法の模索のため、固定的な計算プロセスを主体とするアプローチであった。今後、生成されるデータが次の処理プロセスを誘導し、一連の計算プロセスが実行されるデータドリブンへとパラダイムが変化していく。このプロセスの変化は、シミュレーションの結果を解釈し、有用な知識として社会還元する要求にも合致する。すなわち、知識処理技術を用いてシミュレーション結果を自動的に知識化するプロセスは、データドリブン的な処理に移行しつつある。このようにプロジェクトプロセスは、HPCの結果を社会に還元する技術と捉えることもできる。

更に、上述したモデリングとプロジェクトをシミュレーションと融合し、シミュレーション利用技術の高度化を加速することが、サイエンスの方法論の革新とそこから生み出される科学的な発見につながる。

このように、計算科学技術の進化により、得られるデータとそこから抽出される情報の質的な向上が見込まれるが、一方で、情報技術やデバイスの進化がHPC技術や使い方の変化をもたらすだろう。例えば将来的には、携帯端末のサービスの一環としてHPC利用が想定され、「いつでも、どこでも、だれでも」というユビキタスなキーワードが表すようなオンデマンド的な利用が、HPC技術の社会活用を大きく変えるであろう。より具体的な例を挙げると、緊急時に有害物質の分布予測が知りたければ、稼働中のジョブをすべてキャンセルし、最優先で物質拡散シミュレーションを実行する。それに先立ち、実際の初期条件と境界条件を収集し、データ同化を行ってシミュレーションを実行する、その全体の流れを適切にスケジューリングし、可能な候補を示して、計算指示者の実行判断を支援する。計算した結果から、特徴的で重要な点を自動抽出し、専門家向けの情報提示から、行政の意思決定者向け、更には一般市民といったエンドユーザー向けの情報提示までつなげる。このようなシナリオは、HPC技術、ネットワークインフラ、ユーザインターフェイス、スケジューリング、データマイニングなどさまざまな情報処理技術をベースとして積み上げて初めて成立する。

HPC技術が単に科学者のツールとして利用されるだけでなく、これまで利用促進が進んでいなかった領域への浸透し、得られた知見が広く一般社会へと還元されることが重要であり、また価値を高めていく手段でもある。HPCは科学者や技術者のツールであるという殻を破り、広く一般層への門戸を開く技術的な道筋をつける努力が必要である。

(3) コミュニティからの意見

大規模データ同化は、これまで気象・気候分野での技術的発展が顕著であった。しかし、設計における制御、石油掘削、分子シミュレーションなど他の分野においても適用が図られている。各アプリケーション分野のコミュニティに閉じていたデータ同化技術は、現在、コミュニティを越えて共通化する動きが起きている。技術の統合化とその過程で得られる機能や性能の向上、ロバスト性、可用性などが期待される。

計算機科学分野でもビッグデータ処理、マイニング、大規模データ処理系の技術的な融合が始まっている。また、可視化分野では、これまでの要素技術だけではなく、大規模データの扱いが必須であり、アプリケーションレベルのインターフェースが重要との認識が高まっている。将来的には、ファイルを介さない計算と同時の可視化処理や可視化と分析の融合技術の実現が知識創出を大きく促進する。

(4) 必要な計算機資源

データ同化に関しては、数値解法としていくつかの手法が提案されているが、いずれの手法においても、必要となる計算機性能は数値モデルの繰り返し計算を何回行うか、もしくは予報誤差情報を得るためにいくつのアンサンブル計算を行うかによって決まっており、おおよそシミュレーションを一つ実行する計算量の数十倍から数百倍の計算量であると見積もることができる。更に、データ同化特有の計算要求として、観測データとの比較を行い、最適化問題を解くために、シミュレーション結果を詳細に保存する必要があることが挙げられる。シミュレーションの結果がメモリ上に保存できる量の場合にはメモリ性能が、メモリ量が足りない場合にはディスクに保存する必要があるためにディスク I/O（入出力）の性能がボトルネックとなる。メモリ、ディスク I/O の量を高分解能の大気海洋結合モデルを用いたデータ同化システムにおいて見積もると、数百 PFLOP 程度の計算を 1 時間で行う場合（100TFLOPS 程度の実行性能）に、1TB 以上のメモリ量と数十～数百 TB のディスク I/O が行われる。すなわち、計算の実行性能を向上させるためにはメモリ性能、ディスク性能の向上が不可欠である。

可視化については、表示デバイスの要求から、これまでより大解像度（ 8096×8096 画素 =256MB/フレーム）の画像が生成される。このため、30fps 程度の場合、実効ネットワーク帯域として双方向 15.6GB/s 程度が必要になる。

また、運用技術に関しては、ポスト処理の段階ではインタラクティブ性が重要であるため、スケジューラのインタラクティブ予約や、ある計算プロセスに対して別プロセスからのメモリアクセスなどの機能実現が要求として挙げられる。

| 課題 | 要求性能(PFLOPS) | 要求メモリバンド幅(PB/s) | 要求メモリ量/PB | ストレージ量/ケース(PB) | 計算時間/ケース(hour) | ケース数 | 総演算量(EFLOP) | 概要と計算手法 | 問題規模 | 備考 |
|----------|--------------|-----------------|-----------|----------------|----------------|------|-------------|-----------------------------|------|----------------------------|
| 並列レンダリング | 200 | 61 | 0.8 | 10 | 0.5 | 1 | 360 | ボリュームレンダリング(レイキャスト、ファイルベース) | | 対象によって問題規模等は異なるため、典型的な例で概算 |
| 並列レンダリング | 200 | 61 | 2 | 1 | 0.5 | 1 | 360 | ボリュームレンダリング(In situ) | | 対象によって問題規模等は異なるため、典型的な例で概算 |
| データ圧縮 | 500 | 25 | 8 | 10 | 0.5 | 1 | 900 | POD圧縮(ファイルベース) | | 対象によって問題規模等は異なるため、典型的な例で概算 |

3.2.2 ビッグデータの有効利用例①：衛星・観測データの有効利用

(1) 課題概要

大気、海洋、陸域の物理・化学および生物環境に関する観測データは、環境変動の監視・検出や影響予測のための基礎データとして重要な役割を果たしており、日々の天気予報から地球規模の気候変動まで幅広い環境問題に適切に対処することに貢献するものである。これらの地球環境観測データは GEOSS (Global Earth Observation System of Systems) などの国際的な枠組みとも関係しながら、データのアーカイブや相互流通が進められている。

地球観測データの中でも、気象、海洋物理に関連した物理環境データは最も基礎的なデータの一つであり、現場における直接観測に加え、人工衛星からのリモートセンシングなどさまざまな種類の観測が行われ、その利用分野も広い範囲に及んでいる。ただし、それぞれの観測データは異なる場所、時間で得られており、また観測される物理量や精度等もさまざまであるため、単に既存の観測データをまとめただけではそのまま実際に利用することは難しい。そこで、データ同化と呼ばれる異なった観測データを統合する手法を用いて、より使いやすいデータセットに加工されている。

データ同化は気象予測のための高精度な初期値を求める方法として発展してきたが、数値モデルをプラットフォームとして異なる種類の観測データを統合することができるため、さまざまな観測データをまとめた統合データセットの作成にも有効に利用されている。データ同化システムは、観測データを数値モデルによってつくられる位相空間に射影することによって観測データを統合しており、時空間的に均質なデータセットを作成することができる。一方で、観測データには非常に広いスペクトルの情報が含まれているのに対し、数値モデルによって再現される現象はモデルの分解能や再現可能なプロセスの制約によって観測データよりも情報量が少なくなっているため、数値モデルに射影することにより情報が欠落してしまう。そこで、限られた観測データをより有効に活用し、より現実的なデータセットを作成するためには、大規模並列計算機を用いた数値モデルの高分解能化などの改良によって再現可能なプロセスを増やすことは必須である。

また、観測技術の進歩により、観測データの高分解能化や観測される変数の多様化も進んでいる。例えば、2009年に打ち上げられた人工衛星「いぶき」(GOSAT)による大気中の二酸化炭素濃度の観測や、海洋中を自動昇降しながら観測する ARGO フロートに近年クロロフィルセンサーが取り付けられる等、全球の炭素循環に関わる観測データも次々と得られるようになってきた。このような観測データと従来の物理データを統合するためには、データ同化システムも炭素循環プロセスを含むモデルを用いたものに改良する必要がある。更に、生物化学過程は強非線形であるため、データ同化手法についても、非線形かつ非ガウス型の、計算負荷が高いより高度なものに改良することが必要である。

加えて、計算機性能の向上によりシミュレーションが高分解能化し、精緻化すると、ゲリラ豪雨や竜巻といった小スケールの極端現象が再現できるようになる。これに合わせて、フェーズドアレイ気象レーダーや次期気象衛星「ひまわり」といった時空間分解能が桁違いに高い観測システムの展開も視野に入っている。これらにより、社会的インパクトの高い局所的な

顕著現象の予測に正面から取り組む材料がそろう。一方で、このようなシミュレーションと観測の双方の桁違いの大容量化に対応するには、これまでのデータ同化システムの延長ではリアルタイム処理を行うには困難であり、ビッグデータを扱うデータ同化技術のイノベーションが求められる。

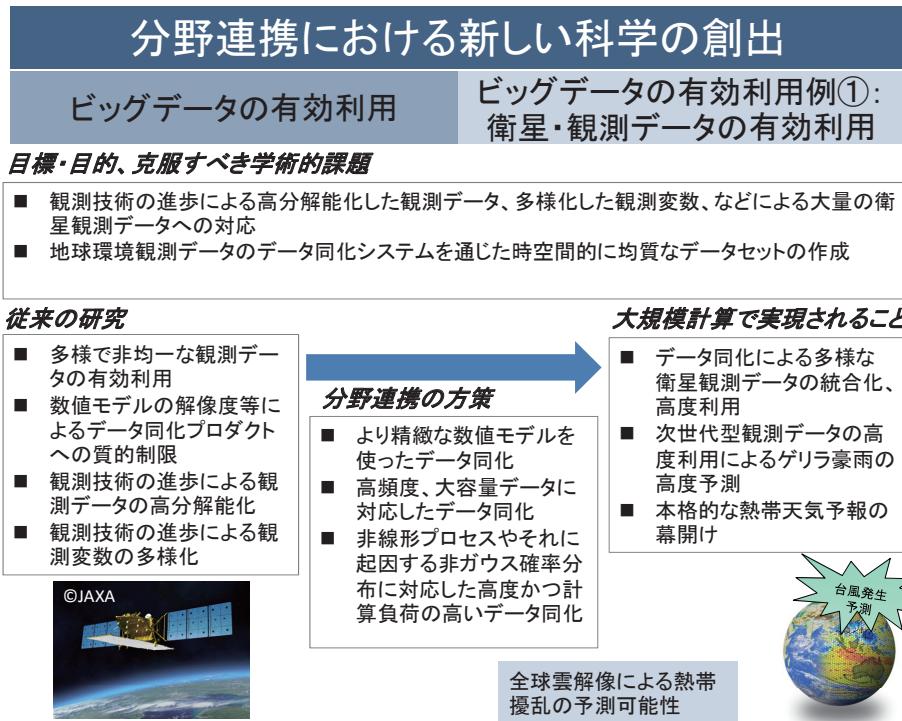


図 3.2.2-1 ビッグデータの有効利用例①：衛星・観測データの有効利用

(2) サイエンスの質的变化と長期的目標

データ同化システムでは、観測データと整合的な数値モデルの結果を求める最適化問題を解くことによって統合プロダクトを作成しており、その解法は大きく分けて二つのアルゴリズムがある。一つは数値モデルとその随伴方程式（adjoint）モデルを繰り返し計算することによって最適解を求める4次元変分法（adjoint法）と呼ばれる手法であり、もう一つは条件を少しづつ変えた数値モデルの計算を複数回実行（アンサンブル計算）し、その分散や共分散等の予報誤差情報を利用して最適解を求めるアンサンブルデータ同化と呼ばれる手法である。いずれの手法においても、必要となる計算機性能は、基本的に数値モデルの繰り返し計算を何回行うか、もしくは予報誤差情報を得るためにいくつのアンサンブル計算を行うか、によって見積もることができる。更に、データ同化システムの特徴として最適化問題を解く際に数値モデルのすべての結果が必要となることから、メモリおよびI/Oに関しての要求が追加される。

4次元変分法データ同化手法では、上述のとおり最適化問題を解くための adjoint モデルの計算において、前方積分モデルのすべての時間ステップでの結果が必要となるが、同化期間すべての結果をメモリ上に残すことは非常に困難であるため、チェックポイント法と呼ばれる方法を用いてこれを解決している（図 3.2.2-2 参照）。この方法は、（1）まず数値モデルの結果を定期的にディスクに保存しながら同化期間の前方積分を行う。（2）次に、メモリに保存でき

るだけの計算を改めて行い、その結果を用いて adjoint モデルの計算を行う。(3) これを繰り返すことにより、期間全体の adjoint 計算を行う。以上により繰り返し法の 1 往復計算が完了する。

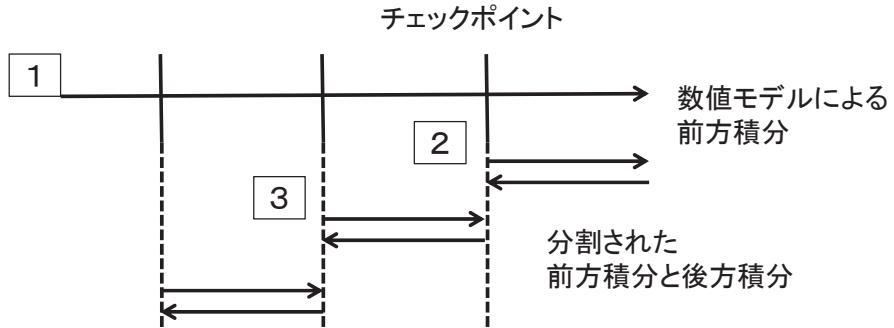


図 3.2.2-2 チェックポイント法の概略図

この手法では分割された計算ごとに計算をディスクに保存するための I/O が発生するため、高性能のディスクが必要となる。また、メモリサイズが大きくなれば、一度にメモリ上に保存できるステップ数が多くなり分割数が少なくてすむため、メモリ性能と I/O 性能の間にはトレードオフが存在する。

データ同化システムの計算には二つの運用形態が考えられる。一つは観測データが得られるたびに同化計算を行うもので、例えば 1 ヶ月に一度、3 ヶ月間分の同化計算を行うような形態を想定している。この場合には 3 ヶ月間の同化計算を 1 週間程度の実行時間で行うことができれば実用上問題はない。もう一つの形態は長期間の統合データセットを作成する場合である。例えば 1950 年からの約 60 年分の観測データを統合したデータセットを作成することを想定すると、システムを占有できる現実的な期間である半年で 60 年分の統合データセットを作成するためには、3 ヶ月の同化計算を 18 時間程度で行うこと必要となる。

(3) コミュニティからの意見

2013 年 3 月 25 日東京海洋大学で行われた日本海洋学会春季大会において「ポスト『京』に向けた計算科学としての海洋学の展望」と題したシンポジウムを開催し、海洋モデル研究者およびデータ同化研究者を含めた議論を行った。データ同化の視点からのコメントとして、主なものを挙げる。

- データ同化システムのためにはメモリ、CPU に加えてディスク性能が非常に重要となる。データ同化プロダクトを擬似的な観測データとして解析に使いたいという希望もあり、大量データを保存する必要があり、大量かつ高速なストレージへの要求は高い。
- ディスク I/O についてそれほどの性能向上がない場合には、モデルの中に解析ツールを埋め込んでオンラインで行う必要があるかもしれない。
- データ同化システムとしては今後大気との結合、生態系との結合等他の分野と連携したデータ同化システムの発展が期待されている。

- データ同化システムの開発の効率化や人材育成のために、いろいろなグループが協力してコミュニティモデルとして開発する方向で動き始めている。
- トップ性能の計算機だけでなくその次のレベルの計算機には多様な特徴を持つ計算機がいくつかあってほしい。また、そのなかで海洋分野に使いやすい計算機をコミュニティマシンとして利用できる形態があれば望ましい。

2013年5月18日に日本気象学会春季大会にて「ポスト『京』に向けた気象・気候シミュレーションの展望」と題した専門分科会が開催された。主な意見を以下に示す。

- 演算性能が向上し、モデルの解像度が上がることで、これまで有効利用できなかった高分解能な観測データが有効に活用できるようになる。
- 観測技術の向上により、次期気象衛星「ひまわり」やフェーズドアレイ気象レーダーなど、観測データの時空間分解能が桁違いに向かっていく見込みである。このため、次世代の計算機を考えるにあたっては、演算性能だけでなく、それに見合ったI/O性能の向上が、データ同化には重要となる。
- 次世代型大容量観測データを用いたリアルタイムの天気予報には、少なくとも1日1エクサバイト程度のスループットが必要だと見込まれる。

(4) 必要な計算機資源

(2) 述べた運用形態を踏まえ、4次元変分法についての要求条件をJAMSTEC（独立行政法人海洋研究開発機構）において開発された大気海洋結合データ同化システム（K7-CDA）の解析から見積もる。K7-CDAは数値モデルとして大気海洋結合大循環モデルを用いており、次世代のシステムとしては以下の問題規模を想定する。

- 格子数 大気：T213L150（水平約60km、鉛直150層） 海洋：3600×1800×150
- 積分時間と実行時間 60年分のデータセットを半年で作成
(3ヶ月積分×100回繰り返しを18時間程度)

これに対し、既存の計算で得られた演算量は以下のとおりである（3ヶ月積分×100回繰り返し）。

- 格子数 大気 T42L24（水平約280km、鉛直24層） 海洋：360×180×45
- 計算量 32PFLOP
- メモリ量：85GB
- I/O量：95GB
- 実行効率：4%（地球シミュレータ2 4node 3TFLOPS）

なお、この計算におけるチェックポイント法では、3ヶ月積分に対し adjoint 法は 720 回に分割して行っている。

これから次世代システムにおける計算リソースは次のように見積もられる。ただし、上述のとおり、メモリ量と I/O 量はトレードオフの関係にあるため正確に見積もるのは難しいが、既存の計算と同程度の分割数で行うと仮定した。（1ケース=3ヶ月積分×100回繰り返し）

- 計算量：48000EFLOP (200EFLOP/1ケース)

(1 ケースの計算を 18 時間で終わらせるためには実行効率 0.5%を仮定すると 0.6EFLOPS のシステムが必要)

- メモリ量 : 18TB
- I/O 量 : 22TB/1 ケース

以上が 4 次元変分法データ同化システムを用いた大気海洋統合データセットの作成に必要な計算機性能であるが、4 次元変分法ではなくアンサンブルデータ同化手法を用いた場合についても見積もる。数値天気予報システムの場合、次世代のシステムとしては以下の問題規模が想定される。

- 実験形態 : 大気モデルのシミュレーションを 4.5 時間分行ない、3 時間積分した時刻の前後 1.5 時間のアンサンブル出力値(30 分毎)を用いてデータ同化を実行する。これを 480 サイクル繰り返し 2 ヶ月間のシミュレーションを行う
 - ケース数 : 2
 - アンサンブルメンバー数 : 1000
 - 大気モデル設定
 - 格子数 : 43 億グリッド (NICAM G-level 11, 水平解像度 3.5km 相当, 鉛直 100 層)
 - アンサンブルデータ同化設定
 - 入力する観測データ数 : 80 万
 - 3 つの異なる空間スケールでの解析を行う

全ケースの実験に必要なリソースは京コンピュータにおける NICAM および LETKF の実行実績より、

- 総演算量 : 896000 EFLOP
- 総メモリ使用量 : 10 万ノードの実行で 0.7PB
- 総ストレージ使用量 : 5PB

と見積もられる。演算量は大気モデルが解像度 n 倍に対して n^3 倍に増える一方、アンサンブルデータ同化は解像度に対して n^2 倍、アンサンブル数に対して m^2 倍で増加する。この実験を 1 ケースあたり 24 日で行うとする場合、必要となる計算機性能は演算性能で 220PFLOPS、メモリバンド幅性能で 270PB/s である。このうち、アンサンブルデータ同化は行列演算が大きな部分を占めるので、大気モデルと比較してより高い演算性能を要求する傾向にある。ネットワーク通信については、大気モデルでは主に隣接通信を行い、アンサンブルデータ同化では数回の大域通信を行う。どちらも現在のネットワーク速度で十分と見積もられる。ファイル I/O では、大気モデルシミュレーションとアンサンブルデータ同化にかかる時間が 1:1 であるすると、大気モデルでは実時間で 20-30 秒ごとにノードあたり 1GB 程度のファイル出力をを行うと見積もられ、100MB/s 程度のファイル I/O 性能が必要である。これに対しアンサンブルデータ同化は書き出された大気モデルの結果を一気に読み込んで処理するため、ストレージ帯域全体で 80TB/s 程度の性能があると望ましい。また、アンサンブルデータ同化手法では、アンサンブルメンバー数の増加が性能向上に寄与することが知られている。これまででは計算機性能の制約によってメンバー数はたかだか 100 程度に限られてきたが、次世代システムとしては、モデルの

解像度を上げるのがよいのか、アンサンブルメンバー数を増やすのがよいのか、というトレードオフをますます考慮する必要が出てくるだろう。このための研究開発に、アンサンブル数を大幅に増やした実験などが必要となるため、以上の見積もりの数倍程度の性能が必要となるだろう。

なお、今回の見積もりは現行のデータ同化システムに対して単純に分解能を上げた場合のみを考えているが、より高度で計算負荷の高いデータ同化手法を用いることは想定していない。例えば、強非線形システムに対応するために非ガウス型の確率過程を考えることが可能な粒子フィルターと呼ばれる手法を用いた場合、従来のアンサンブルカルマンフィルターに比べ10倍以上のアンサンブル数が必要となる。数値モデルが高分解能化、複雑化した場合にはスケールに応じてシステムの非線形性も強くなり、粒子フィルターなどの高負荷な手法を用いる必要性が高まることが予想され、その場合には今回の想定以上の計算機性能が必要となるだろう。この他、観測データの高度利用、特に増え続ける衛星データを更に高度に利用していくことが、更なる計算性能を要求することへつながる。昨今の欧米の経済事情により各国の宇宙開発計画が見直され、これまでのように増大の一途をたどるかどうかは不確定要素も大きいが、近年、衛星による地球観測データは指數関数的に増大の一途をたどってきている。一方、現時点では、地球環境シミュレーションにおけるデータ同化での利用は限られており、得られているデータ量に比べて、実際に有効に利用されているデータ量はほんの一握りにすぎない。これまでも、衛星観測データの更なる高度利用に向けた研究開発は、欧米およびわが国の宇宙開発研究機関をはじめ現業天気予報機関や関連する研究機関等で精力的に進められてきており、ハイパスペクトラルサウンダといった1つの測器で2000チャンネルを超えるような大量のデータを扱えるようになってきた。今後もより高度な衛星観測センサーが開発され、これらを高度に利用する研究が続けられるとすると、データ同化システムで扱う観測データ量は膨大に増加していくことが想定される。これに対処するためのI/O、メモリ、および演算速度のすべての面において、計算機性能が要求されるようになり、特に、データ同化システムではメモリ量／速度、I/Oスピードに対する要求は非常に高くなることが予想される。

| 課題 | 要求性能(PFLOPS) | 要求メモリバンド幅(PB/s) | 要求メモリ量/ケース(PB) | ストレージ量/ケース(PB) | 計算時間/ケース(hour) | ケース数 | 総演算量(EFLOP) | 概要と計算手法 | 問題規模 | 備考 |
|---------------------|--------------|-----------------|----------------|----------------|----------------|------|-------------|--------------------------------------|--|---|
| 局所的・集中的大雨、熱帯気象の高度予測 | 220 | 270 | 0.7 | 5 | 580 | 2 | 900000 | 大気モデル:NICAM(有限体積法)、アンサンブルデータ同化:LETKF | 水平解像度3.5km、鉛直100層、1000アンサンブルメンバー、3時間おきの同化サイクル2ヶ月積分 | 10万ノードを仮定(大気モデルのノードあたり隣接通信1GB/s) 演算量、メモリ転送量、メモリ使用量は、京でのプロファイルを元に外挿 |
| 統合地球環境再解析 | 3.1 | 13 | 0.018 | 0.022 | 18 | 240 | 480004 | 次元変分法 | 格子点: 大気 640x320x150、海洋 3600x1800x150 Δt : 大気1min、海洋 30sec、結合 10min 100イタレーション 積分時間: 3month | B/F値: 大気4.66、海洋4.24 演算量、メモリ使用量は、ES2のプロファイルを元に精査。 メモリ転送量は、ソースから見積もったB/F値をもとに、 演算量から算出(キャッシュは考慮していない)。 |

3.2.3 ビッグデータの有効利用例②：

ゲノム解析・バイオインフォマティクス

(1) 課題概要

分子生物学では、細胞内の大量の遺伝子発現を同時計測可能なDNAマイクロアレイなどの登場により、実験で得られるデータの量が飛躍的に増加し、それら大量のデータ、いわゆるハイスループットデータから計算機を用いて生物学的な発見を行おうとする研究手法（＝バイオインフォマティクス）が行われるようになった。ヒトの染色体にあるすべてのDNA配列を解き明かしたヒトゲノム計画においても大量の計算機が投入され、「計算機を用いた分子生物学」が成果を挙げてきた。大規模なデータに基づく研究・解析はこの分野ではハイスループットデータが出始めた当初から重要な課題として考えられてきたことであるが、近年このような大規模データはビッグデータと呼ばれるようになりI/O性能への要求が高いなどこれまでになかった特徴を備えていることから、HPC分野においても計算機科学と連携が必要な重要な一分野として認識されるようになってきている。

ヒトゲノム計画ではたった一人のDNA解読に長い年月を要したが、近年になって次世代DNAシークエンサーと呼ばれる超高速かつ低コストでDNAを解読する装置が開発され、個人個人のゲノム解析あるいは組織毎など多種多様な細胞のゲノム解析を行うことが現実的になった。国民すべてが自分自身のゲノム配列を知り、ゲノムに基づく最適な医療を受けるいわゆる個人ゲノム医療の時代が目前に迫っている。次世代シークエンサーは、DNAを非常に短い断片にし、それを並列に読み込むことによりDNAを高速に読み取ることができる装置である。ゲノム解読は読み取ったDNA断片をつなぎ合わせる処理が必要なため、それに大量のストレージとI/O性能の高い計算機を必要とする。具体的には現在のDNAシークエンサーで1サンプル（細胞種）当たりおよそ1TBのストレージが必要である。病気とゲノムの関係性を明らかにするためにはある程度まとまった量の病態サンプルにおけるゲノムと正常組織でのゲノムとの比較が必要である。そのためには最低1000サンプル程度のゲノム解析が必要であり、それだけで1PBのストレージが必要となる。2020年には200,000人規模のサンプルの解析を行うと予想されており（後述）、また1サンプル当たりのデータ量も増えることが予想されているため、必要なストレージ量は膨大なものとなることが容易に予想される。また、病気の原因となる変異の同定などのためには、これらのストレージにあるデータに大量にアクセスすることが必要である。ゲノム解析に求められている計算機性能は、データ大量アクセスの必要性の点で、他のHPC分野で必要とされているものと大きく異なる。個人や病態サンプルのDNA配列データが蓄積されるとそれらのデータを用いた新しい解析が行われると考えられる。ゲノムと病気の関連を解析する、いわゆる全ゲノム関連解析（GWAS）も、より大規模化・複雑化し、それに必要な計算リソースもそれに応じて膨大になると予想される。

生命科学におけるデータ解析ではゲノム配列データだけではなく冒頭で触れた遺伝子発現データやDNA修飾のデータ（エピゲノム）、タンパク結合など多種多様で膨大なデータを組み合わせて解析が行われる。今後開発される観測技術によってより多くのデータが蓄積される

ことが予想され、観測技術の進展にしたがって多様な解析ソフトウェアが組み合わされて利用される。このようにこの分野では常に新しい計算・解析手法が提案されているため一つのソフトウェアの寿命（利用期間）が短いのも特徴である。

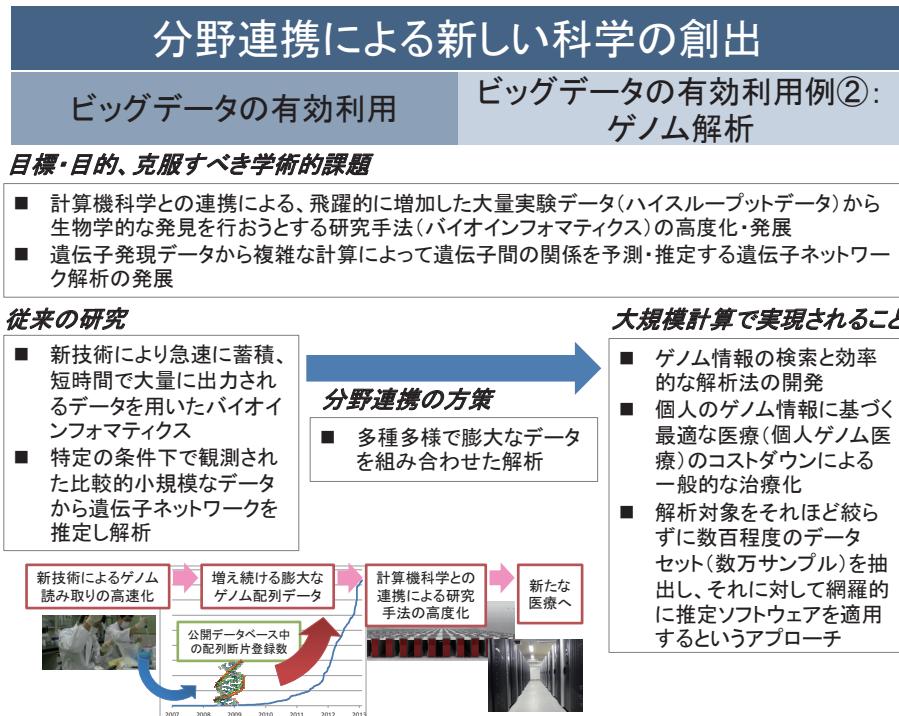


図 3.2.3-1 ビッグデータの有効利用例②：ゲノム解析

(2) サイエンスの質的变化と長期的目標

生命科学において長期的にどのような観測技術がどの程度のコストで可能になるかは非常に流動的であり不明確な部分が多い。しかしながら次世代 DNA シークエンサーについては技術的な発展のロードマップが示されていることもあり比較的予測しやすい。また次世代 DNA シークエンサーが扱うデータ量もその他の従来のハイスループットデータと比較して膨大である。実際、NCBI (National Center for Biotechnology Information) のデータリポジトリの 98% 以上がすでに次世代シークエンサーデータとなっている。したがって、ここでは次世代 DNA シークエンサーデータ解析をバイオインフォマティクス (生命科学データ解析分野) での代表的な課題として扱うこととする。次世代 DNA シークエンサーの普及により、それらのデータを生かした新たな解析需要も当然出てくると思われるが、ここではそれらを含めた値として概算値として議論をする。

現在、大規模なヒトゲノム解析プロジェクトとしてさまざまがんの細胞のゲノム配列を国際的に手分けして解読するプロジェクト、International Cancer Genome Consortium (ICGC) による国際がんゲノム計画が進んでおり、日本でも肝がん 500 人分の DNA 配列解読をこのプロジェクトの担当として行っている。このプロジェクトでは東京大学医科学研究所ヒトゲノム解析センターの持つ大型計算機を中心に利用し、2~3 年間でヒトがん細胞 500 症例 1000 サンプル

分のゲノム配列を解読する計画が進行中である。その他にも、日本は参加していないがさまざまな人種の 1000 人分のゲノムを国際協力の下、解き明かそうとする 1000 人ゲノム計画というものもある。更に、これらの計画の終了などを受けて、現在は 100 万人ゲノム計画が米国・中国を中心に呼びかけられている状況である。したがって、日本においても今後 2015 年頃には 10,000 サンプル（人）規模の、2020 年頃までに 200,000 サンプル（人）規模のゲノム解析が行われると予測される。また 2015 年頃には更に世代の進んだ第 3 世代シークエンサー、2020 年頃には第 4 世代シークエンサーが登場すると言われており、1 個人について得られる情報量も飛躍的に増加していくと予想されている。そのため、ゲノム解読だけでも非常に多くの計算リソースが必要になるのは自明であり、早急に研究体制を整備する必要があると言える。

以降では、次世代 DNA シークエンサーデータ解析と疾患関連遺伝子発見のための統計解析を具体例として述べる。

(i) 次世代 DNA シークエンサーデータ解析

次世代 DNA シークエンサーは、DNA 配列を 50 から数百塩基程度の長さに断片化し、それを同時に読み込むことによって超高速に DNA 配列を読み取る装置である。したがって、得られるデータは大量の断片化された DNA 配列であり、ヒトの場合およそ 1 億個程度、ファイルサイズにして~100TB（2020 年頃に開発が期待されている第 4 世代シークエンサーを仮定）になる。連續した DNA 配列を得るためにこれらを、次世代 DNA シークエンサー解析ソフトウェアを用いて染色体ごとに 1 本につなげる必要がある。現在、主に行われている方法は、配列が既知である参照元となる DNA 配列（いわゆるリファレンスゲノム）との部分に最も一致するか各断片 1 個 1 個について探索し一致させる計算である。その際、個人差や変異などにより完全に一致することはないため、ミスマッチを許す文字列探索法を用いている。読み込んだ断片の各塩基には信頼度の数値情報がついているが、DNA シークエンサーの世代が進むにつれ付加情報が豊富になり計算が複雑化すると予想されている。計算処理に膨大な計算リソースが必要となるため、現在は読み取る DNA 配列をタンパクをコードしているエクソン領域に限定するなど、読み込む対象を絞ることで対処している。次世代には個人個人が複数の組織のすべてのゲノムをシークエンスすることが当たり前になると予想され、それに必要な計算リソースもまた膨大となる。ゲノム解析では個人の DNA 配列を得るだけではその個人が既知の変異を持っているかなどの診断は可能であるが未知の変異を見つけることはできない。したがってある程度まとまった量のデータが必要になり、そこから統計的解析を行う必要がある。特にがんゲノム解析では、がんはゲノムの異常であることから、がんの特異的な変異の同定だけでなく DNA の特定部位のコピー数解析なども非常に重要である。

(ii) 疾患関連遺伝子発見のための統計解析

疾患関連遺伝子とは、病気のなりやすさに影響を与えていたる遺伝子である。疾患関連遺伝子がわかれば、その遺伝子をターゲットにした医薬品や治療法の開発へつなげることができる。疾患関連遺伝子発見のための統計的解析として最近広く使われている手法が、ゲノムワイド関連解析である。関連解析とは、患者群と、非患者群の間で、対立遺伝子の頻度の差を統計検定することにより、疾患関連遺伝子を探る手法である。関連解析の対象となる人数は、2013 年現

在では数千人～十万人ほどである。ゲノムワイド関連解析とは、関連解析を全ゲノムを対象に行う手法である。遺伝情報はすべての人が同じではなく、個人ごとに違っている部分がある。個人ごとの塩基配列の違いを遺伝子多型と呼び、1 塩基の違いを SNP という。ゲノム配列上、近隣にある SNP 同士は連鎖し、親から子へと一続きのまま遺伝する多いため、すべての SNP を見なくとも、代表的な SNP を選べば、ヒト集団の多様性がある程度は明らかになる。このために選ばれる代表的な SNP を tagSNP という。2013 年時点では、ヒトの全ゲノムの中から 100 万個ほどの tagSNP を選び、それを対象に関連解析が行われていることが多い。今後は、次世代シークエンサーなどの技術革新により、対象人数が増えて行くと予想される。また、tagSNP ではなく、ヒトの全ゲノム配列を用いた解析が行われていくようになると考えられる。現時点でも千人規模の全ゲノム配列を決定するプロジェクトが多国間共同研究として進行中である。今後はこのようなプロジェクトが日本国内、そして世界中で行われることが予想される。そのため、今後のゲノムワイド関連解析は、数万人以上・全ゲノム規模の解析へと進んでいくと予想される。そのための高速計算が必須である。

(3) コミュニティからの意見

2013 年 3 月 10 日に大阪にて文部科学省科学研究費補助金新学術領域研究「システム的統合に基づくがんの先端的診断、治療、予防法の開発」プロジェクトの公開講演があり、そこで実際に現場でがん研究を行っている研究者と、将来がんゲノム解析やがん遺伝子ネットワーク研究で必要となるスーパーコンピュータなどについてパネルディスカッションを行った。

そこで出た現場からの主な意見は以下のとおりである。

- 現在のゲノム解析を支えているヒトゲノム解析センターの現在および将来の計算能力が将来予想されるデータ規模に対して危機的なこと
- 計算機の能力だけでなく、それを使いこなす人材が不足すること、が挙げられる。またスーパーコンピュータを用いた研究が確実にがん研究を変えており今後の発展に大いに期待していること

(4) 必要な計算機資源

(i) 次世代 DNA シークエンサーデータ解析

次世代シークエンサー解析に必要な計算スペックを以下に示す。DNA シークエンサー技術の今後についてはかなり流動的であるため一部あいまいな表現を残している。例えば想定しているのは解析対象となる人数であり、一人当たり何種の細胞のサンプルが取得できるかはコストや技術的な制約により可変なため、ある程度幅を持たせる意味で明示していない。

2015 年頃に、第 3 世代シークエンサーにより 10,000 人規模の、2020 年頃に第 4 世代シークエンサーにより 200,000 人分規模の解析が必要であると想定しているため、その 2 つの時期における必要スペックを記す。なお、ここに挙げた計算スペックの見積は計算資源の総和として必要な物であり、10 抱点ほどに分割されていても問題ない。また、複数台のシークエンサーからのデータを独立に処理可能なことから、1 システムで実現が必要なスペックは導入されるシークエンサーの台数分で分割可能である。効率的に解析を行うためには、ゲノム解析に用いら

れる計算機は DNA シークエンサーに併設されている必要がある。また、必要演算性能については、ゲノム解析では整数演算が中心であるため、FLOPS ではなく、Operation 数で記述している。

【ネットワークバンド幅、レイテンシ】

2015 年 : 3~6GB/s (シークエンサー=ストレージ間の総和)

2020 年 : 600 GB/s~1.2 TB/s (シークエンサー=ストレージ間の総和)

(100 台のシークエンサーで分散させることを仮定すると~12 GB/s/台)

データ並列性があるため、計算機の計算ノード間の通信バンド幅およびレイテンシはあまり重要ではない。その代わりに、シークエンサー=ストレージ間のネットワーク帯域がボトルネックの一つとなり得る。第 3 世代および第 4 世代シークエンサー1 人分のデータはそれぞれ 1 ~10 TB および 10~100 TB であり、想定している 10,000 人および 200,000 人分のデータを 1 年間(31,536,000 秒)でシークエンサーから転送することを考えると最大で $1\sim10\text{TB} \times 10,000 = 10\sim100\text{PB}$ または $10\sim100\text{TB} \times 200,000 = 2\sim20\text{EB}$ の転送が必要とされ、必要な帯域は実効でそれぞれ 3GB/s および 600GB/s 必要である。実際に倍程度必要と考えると第 3 世代機時代には 3 ~6GB/s、第 4 世代機時代には 600 GB/s~1.2 TB/s の帯域が必要であると言える。これは総計であるので、10 抱点に分散されれば必要な帯域はこの 1/10 となる。また 100 台のシークエンサーに分散されれば、1 台当たりは 1/100 である 12GB/s ほどになる。実際にはもう一桁~二桁ほど多い台数のシークエンサーが導入される可能性もある。

【1 ケースあたりの総メモリ容量】2015 年 : 0.016PB~0.16PB、2020 年 : 0.16~1.6PB

現行既存アプリケーションのプロファイル結果より入力ゲノムサイズを x [MB]、分割数を n としたとき、消費メモリ量 y [GB] は $y = (0.015 x / n) + (1.4 * n)$ と表すことができる。想定している 2010 年頃は 1 ケース (サンプル) あたり 1~10TB、2020 年頃は 10~100TB であることからそれぞれ 0.016PB~0.16PB、および 0.16PB~1.6PB という見積もりになる。実際には入力ファイルを分割可能であるため分割実行が可能である。その場合、同時に必要なメモリ量は分割数で単純に割った値となる。

【ストレージ容量】2015 年 : 10~100PB、2020 年 : 2~20EB

単純に 1 人当たりの必要データ量に想定される人数を掛け合った値である。例えば、第 4 世代機による 1 サンプル 100TB の場合、200,000 人では 20 EB 必要となる。

【ストレージ速度】2015 年 : ~0.56 TB/s、2020 年 : ~5.56TB/s (分割処理可能)

現行システムにおける 1 ファイル 80MB の入力データに対するプロファイル結果は IO 量が 11.204GB である。これを 1 サンプル 100TB に外挿すると IO 量は 14,005,000GB となる。想定している 2020 年での 200,000 人 (サンプル) 規模の解析を 1 年間で行うと仮定すると 1 サンプルの実行時間は 2520 秒となる。以上より、必要な IO 性能は 5.56TB/s となる。2015 年頃のデータ量はこの 1/10 であるので単純に IO 性能も 1/10 である。またこれは入力データが分割可能

なことから同一システムで実現されなくても総計として必要なIO性能であって、システム（解析拠点）の数で分割可能である。

【CPU速度】2015年：～0.54TOPS、2020年：～5.4TOPS

現行システムにおける1ファイル80MBの入力データに対するプロファイル結果では総（実行命令数（整数演算量）は10,890GOP(GI)であった。ここから外挿すると1ケース（サンプル）あたり13,612,500GOPの演算量が必要であり、必要な整数演算性能は5.4TOPSである。

(ii) 疾患関連遺伝子発見のための統計解析

疾患関連遺伝子発見のための統計的解析ソフトウェアに必要な計算スペックを以下に示す。なお、シークエンサー技術の今後についてはかなり流動的であるため、それに応じ、疾患関連遺伝子発見のための統計的解析に使えるデータ量は、今後予想外に増大することもあり得る。そのため、一部あいまいな表現を残している。

2015年頃に第3世代シークエンサーにより10,000人規模の、2020年頃に第4世代シークエンサーにより200,000人分規模の解析が必要であると想定しているため、その2つの時期における必要スペックを記す。

【ノード当たりのメモリ容量】2015年：40GB、2020年：800GB

関連解析は、連鎖している領域をまとめて1ノードで解析したほうがよい。連鎖している領域の数は、ゲノム全体でおよそ10万である。しかしながら、連鎖している領域の大きさはさまざまである。そのため最大1千万塩基程度の長さのゲノム領域をセットで解析することが想定される。この領域に対して、部位一つ当たり1人2塩基を持つとすると、1万人を対象に関連解析する際も、年齢・性別・サンプルされた地域ごとに、患者群千人、非患者群千人ほどに分けて並列的に解析することが考えられる。すると、1千万×2塩基×2千人で、40GBほどあるのが望ましい。人数が20倍になると単純に20倍となる。

【ストレージ容量】2015年：100TB、2020年：2PB

ゲノム上の部位一つ当たり1人2塩基を持ち、一人一人のデータの区切りのために1バイトを使うとすると、一人当たりのデータ量が9GBとなり、これを人数で掛けると、2015年には10,000人でおよそ100TB、2020年には200,000人で2PB必要となる。

【ストレージ速度】2015年：25GB/s～250GB/s、2020年：500GB/s～5TB/s

ヒト一人のゲノムサイズは、父親由来と母親由来がそれぞれ3GB、計6GBであり、データにする際には一人一人の間に区切り文字が入るので一人当たりは9GBとなる。想定している10,000人および200,000人分のデータをストレージからメモリにロードする時間が、実際に計算機を占有できる時間を圧迫してはならないと考えると、許されるのは最大でも1時間ほどであろう。とすると、2015年には25GB/s、2020年には500GB/sが最低でも必要となる。仮に、ロード時間を6分で計算すると、2015年には250GB/s、2020年には5TB/sが必要となる。ただし、これには分散I/Oでの対応も可能である。

【CPU 速度】2015 年 : ~50 PFLOPS、2020 年 : ~1EFLOPS

現在、10PFLOPS の能力を持つ京速コンピュータ「京」の上で、tagSNP 数十万に対して、患者群 1500 人、非患者群 2000 人規模の解析を行っている。全計算能力の 10 分の 1 を利用しても、解析に数時間かかる。今後、tagSNP から全ゲノムに解析対象を広げることで一人当たりのデータ量が 100 倍になり、さらに 2015 年には人数も 3 倍ほどになることから、計算時間は 300 倍になる。現在の「京」の 5 倍のコンピュータで、使用割合を 10 倍に増やし、占有時間を 6 倍に増やすことで何とか対応できる。2020 年にはさらにこの 20 倍必要となる。

| 課題 | 要求性能(PFLOPS) | 要求メモリ帯幅(PB/s) | メモリ量/PB | ストレージ量/PB | 計算時間/hour | ケース数 | 総演算量(EFLOP) | 概要と計算手法 | 問題規模 | 備考 |
|------------------|--------------|---------------|---------|-----------|-----------|------|-----------------------|-------------------------------|---|----|
| 個人ゲノム解析 | 0.0054 | 0.0016 | 1.6 | 0.1 | 0.720000 | 2700 | シーケンスマッチング | がんゲノム解析200,000人分のマッピングおよび変異同定 | 1人分の解析を1ケースとした。入力データを分割することで、細かい単位での実行、拠点をまたいだ実行も可能。整数演算中心のため「総演算量」はInstruction数とした。総浮動小数点演算量は45.864EFLOPとなる。 | |
| 疾患遺伝子発見のための統計的解析 | 10 | 0 | 200 | 2 | 140 | 5 | 25000ゲノムワイド連鎖解析(GWAS) | ヒトゲノム3Gbp × 200,000人分、1ケース4万人 | メモリ量は800GB/node、ノード数25万を仮定 | |

3.3 大規模実験施設との連携

3.3.1 X線自由電子レーザー施設 SACL A 等の大型研究施設との連携

(1) 課題概要

X線自由電子レーザー (XFEL : X-ray Free Electron Laser) は、波の位相がきれいにそろったレーザーの性質を持つ超高輝度のX線を発生することのできる光源であり、電子銃、線形加速器、アンジュレータで構成される。XFEL施設 SACL A (SPring-8 Angstrom Compact free electron Laser) は、第3期科学技術基本計画における国家基幹技術として SPring-8 サイトに建設が進められ、2011年3月に完成した。全長 700m という施設規模は、欧米の類似施設と比べて3分の1以下であり、コスト面での利点に加えて小型化による信頼性の向上と安定運転が期待できる。2011年6月に初のX線レーザー発振を経て、2012年3月より内外に開かれた共用施設として利用運転を開始した[1]。

XFELでは、以下に記すようにこれまで構造を解くのが難しかった非結晶粒子や微細結晶の構造解析に威力を発揮すると期待されている。その際には、大量のデータ処理が発生するため、HPCとの連携の重要性が指摘されている。そこで、この節では、SACL Aの生命科学分野への利用研究として期待されている CXDI (Coherent X-ray Diffraction Imaging) [2]について、そのデータ解析における計算科学の重要性と今後の展望について紹介する。また、最近アメリカの XFEL施設 LCLS (Linac Coherent Light Source) で盛んに行われ始めた SFX (Serial Femto-second Crystallography) [3]について、HPCIにおける分子レベルシミュレーションとの連携について今後の展望を紹介する。

2012年に供用が開始された「京」と SACL Aは、その連携による新規ナノサイエンスの開拓を現在模索している段階である。その成果は、次世代の HPCI への引き継がれていくと期待される。

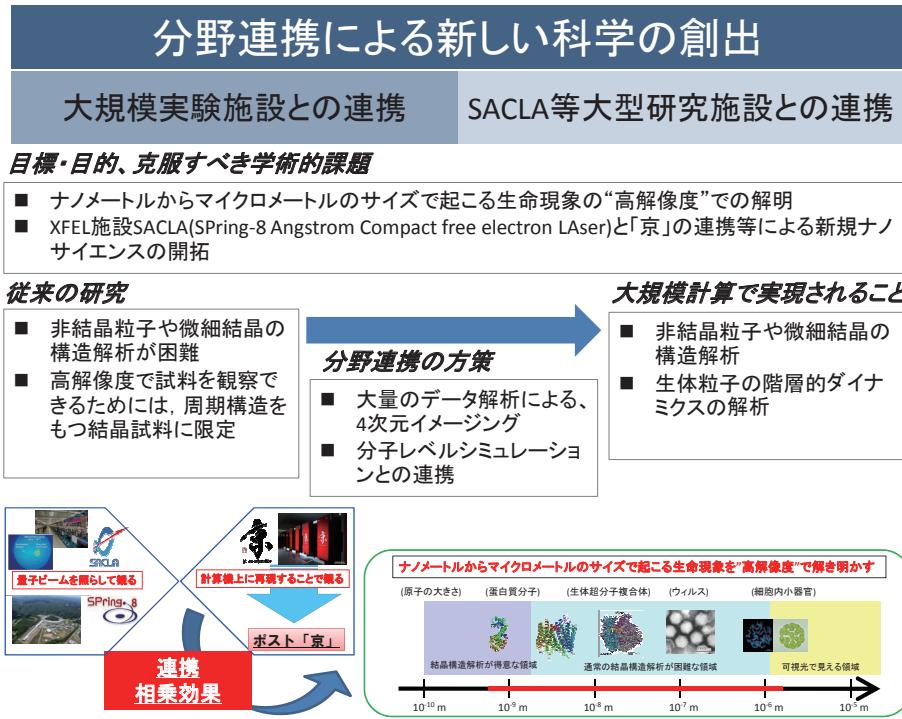


図 3.3.1-1 SACLA 等の大型研究施設との連携

(2) サイエンスの質的变化と長期的目標

(i) 大量データ解析による4次元イメージング

電子線に比べて透過力の高いX線を利用したCXDIは、非結晶粒子の構造研究で期待される手法である。放射光を含む従来のX線光源では、高解像度で試料を観察できるのは周期構造を持つ結晶試料に限定されていた。CXDIでは、試料に位相のそろったX線を照射し、スペックルと呼ばれる斑点模様状の2次元回折強度パターンを高い空間分解能で取得する。この回折強度パターンは、試料の電子密度（構造）のフーリエ変換である構造因子の2乗に電子散乱断面積等の因子を乗じたものである。構造因子は干渉波の様態を記述するが、波としての重要な情報である位相が検出時に欠落し、振幅情報のみが得られ、そのままでは元の構造を求めることはできない。この問題に対し CXDI では、高い空間分解能で取得した回折振幅データに位相回復法と呼ばれるアルゴリズム[4]を用いることで、試料の電子密度を決定することが可能である。

2012年度は、SACLA利用実験の立ち上げ時期であり、2次元イメージングが CXDI 実験の主流となっているのが現状であるが、今後は3次元構造解析へと発展していくと期待される。

XFELは、非常に高輝度であるため、一発の照射で試料を破壊してしまうという問題がある。XFELの照射で得られる回折パターンは、XFELのパルス幅である数十フェムト秒間隔で、試料をある方向から見た2次元のスナップショットである。このため、試料の3次元構造を得るために試料を破壊しながら多数の回折パターンを取得することになるが、試料の向きを実験的に決める事はできないため、計算科学的に試料の向きを解析しなければならない。最大で毎秒60回のX線パルスが生成されるSACLAでは、1日に最大で約500万枚の回折パターンが取得される。イメージングの解像度を上げるために、あらゆる向きの粒子からの回折パター

ンが必要である。このような大量実験データを効率よく解析し、試料の高解像度3次元イメージングを実現するためには、HPCIとの効率的な連携が不可欠となる。

ここまででは生体粒子の静的な構造を仮定した議論を進めてきたが、生体粒子は遺伝子に規定された固有の立体構造をとり、その周りを揺らぐことで機能を発揮する。1日で最大500万枚取得される大量実験データには、当然のことながらこの粒子の動きの情報が含まれる場合が多い。具体的には、生体粒子にはエネルギー的に準安定な多数の構造状態があり、構造間を熱揺らぎによって遷移しているが、そのさまざまな準安定構造からの回折パターンが含まれている。この大量データを生体粒子の“かたち”に基づき分類することができれば、3次元構造の動態を記述するべく時間軸を含めた4次元イメージングが実現できる可能性がある。そのためには、多変量解析など統計科学的計算手法を駆使する必要があるだろう。例えば、生体粒子のダイナミクスを多次元空間内の超平面である「manifold」に対応させて解析する手法が近年提案された[5]が、実際の実験データを用いた応用・実証研究が期待される。3次元イメージングと比べて次元が一つ増えることから、解像度を同じに設定した場合、3次元イメージングによる静的構造解析と比べて、データ解析に必要な回折パターンの数も飛躍的に増大する。良質の回折パターンを効率よく大量に取得するための実験システムの構築と併せて、次世代のHPCIとのスムーズな連携を見据えた解析システムの構築が必要となるだろう。

(ii) 分子レベルシミュレーションとの連携

SACLAのXFEL光は非常に高輝度であるが、その強度（現状： $\sim 10^{11}$ 光子/パルス）をもってしてもナノメートルサイズのタンパク質一分子からの回折パターンを取得するには不十分である。今後期待される加速器およびビームラインの高度化を考慮しても、SACLA利用によるCXDIのターゲットは、数十ナノメートルから1マイクロメートルのサイズの生体粒子となるだろう。到達可能な解像度はナノメートル程度と予想される。一方、化学反応によって媒介される生命現象を真に理解するためには、0.1ナノメートル程度の解像度が必要となる。SACLAによるCXDIの不足分に補うためには、電子顕微鏡解析、核磁気共鳴法、通常の結晶構造解析などさまざまな解析手法を相補的に利用することが重要となってくるだろう。

ここでは分子レベルシミュレーションとCXDIの連携について考えてみたい。粗視化MDでの今後約10年間のターゲットは、10ナノメートルから1マイクロメートル規模となり、SACLAのCXDIのそれとほぼ一致する。今後、SACLAのイメージング結果に基づく粗視化MDの解析手法が標準化できれば、ナノスケール解像度での染色体動態観察などの新規サイエンスの開拓が期待できる。また、粗視化MDを援用してCXDI実験データを解析することで生体粒子モデルを精密化し、更には結晶構造解析などの実験結果を援用しながら全原子MDにスムーズに接続することで、原子モデルの構造精密化を実現できる可能性もある。このような連携により、10ナノメートルから1マイクロメートルサイズの生体粒子の階層的ダイナミクスの解析が進み、この空間スケールで起こる生命現象の理解につながると期待される。

XFELによる生命科学研究には、CXDIとは別のアプローチとしてマイクロメートルスケールの微小タンパク質結晶を用いるSFXがある。生命現象を理解するうえで重要であり、また、創薬における重要な解析ターゲットである膜タンパク質などの試料では、その結晶化が困難であり、数マイクロメートル以下の微小結晶しか得られない場合がある。超高輝度のXFELを利用

用すると、このような結晶からの回折光を検出することが可能となる。また、数十フェムト秒程度のパルス幅を持つ XFEL の照射ごとに「新鮮な」状態の結晶を用いることにより、放射光で問題となっていたラジカル等に起因する X 線照射損傷がない状態の解析が可能となる。SFX で得られる膜タンパク質の結晶構造は、創薬 MD の重要なターゲットとなるだろう。また、SFX に可視光レーザーに状態を励起するポンププローブ実験を組み合わせると、光化学反応を担う生体超分子の数十フェムト秒からピコ秒の時間スケールの時分割構造解析が可能となる。このような SFX 実験結果に基づき HPCI 利用による QM/MM シミュレーションを実行することで、生命現象における光化学反応のメカニズム解明につながると期待される。

(3) コミュニティからの意見

SACLA の利用実験が順調に立ち上がりつつあり、取得実験データ量が加速的に増大してきている。今後は HPCI を利用して大量実験データを解析するためのコミュニティが形成されるものと期待される。その試みとして、XFEL 重点戦略研究課題についての委託事業「SACLA における低温 X 線回折イメージング実験の展開と標準化」第二回会合（2013 年 8 月 8~9 日）の中で議論された SACLA と HPCI の今後の連携に関する意見を以下にまとめた。

- SACLA により細胞内の物質分布情報が得られれば、リアリスティックな細胞モデリングが可能となり、大規模分子シミュレーションによる細胞内環境の研究が加速される。連携のターゲットとして最適であり、将来ぜひとも実現させたい。
- 生命科学研究では創薬と結びつけた出口論が多くなされる傾向にある。しかし、これは構造解析の 2 次的産物でしかない。SACLA の利用実験の立ち上げフェーズである現状では、SACLA を用いた「生命の理解」にどのようにアプローチするかを確実に積み上げていくことが不可欠である。更に SACLA に限らず、SPring-8 における CXDI・結晶構造解析や電子顕微鏡など細胞内の生命活動をさまざまな空間階層で見渡すことのできる実験と HPCI 利用による大規模計算とを組み合わせた生命科学研究を推進していきたい。
- SACLA や SPring-8 などのさまざまな実験とマルチスケールシミュレーションの連携は、分子力場の改良など計算科学技術の向上にもつながる。「京」のような汎用スパコンでは、D.E. Shaw Research の anton のような MD 専用計算機にはかなわない面があるのは事実である。スパコンの計算性能に頼るだけでなく、計算手法を工夫することにより独創的な研究を進めていきたい。例えば、HPCI 利用による蛋白質と低分子の結合エネルギー計算技術の向上なしには in Silico 創薬の実現は難しいのではなかろうか？
- 日本の計算科学分野では高度なコーディングができる研究者・技術者が減少している。同様に、構造解析分野でも、回折・散乱の物理学を理解し、装置を組み立てたり解析ソフトウェア作ることのできる研究者・技術者が減少傾向にある。一方で、利用するだけの“ユーザ”は多い。今後の堅実な連携に向けては、ソフトウェア開発や技術開発を担う人材を中期的・長期的視野に立って育成することがきわめて重要である。

(4) 必要な計算機資源

SACLAによるCXDI実験を成功させるためには、解析に必要な回折パターンが十分に取得できていることを実験中に確認しながら実験を進める必要がある。例えば3次元イメージングでは、目的解像度を実現するのに十分な良質回折パターンが必要な向きを網羅するのに十分な枚数だけ取得できているか実験中に確認できなければ、その実験のスロットを無駄にしかねない。SACLAの利用実験の立ち上げ時期で、実験・解析手法が確立していない現状ではかなり粗い見積りになるが、 10^6 枚の回折パターンから3次元イメージングを目的とした取得セットの質を判断するために、1PFLOPSの実行性能を用いて約3時間を要する。4次元イメージングでは、更に数桁高い計算能力が必要となるであろう。また、4次元イメージングのための統計科学的計算では、回折パターン間の距離行列を扱う場合があり、その行列サイズは解析する枚数の2乗である。このような大規模行列を効率よく計算するためのシステム(ハード・ソフト)が望まれる。

| 課題 | 要求性能(PFLOPS) | 要求メモリバンド幅(PB/s) | メモリ量/ケース(PB) | ストレージ量/ケース(PB) | 計算時間/ケース(hour) | ケース数 | 総演算量(EFLOP) | 概要と計算手法 | 問題規模 | 備考 |
|-----------------------|--------------|-----------------|--------------|----------------|----------------|-------|-------------|----------------------------|---|---|
| 大量実験データ解析による4次元イメージング | 2 | 0 | 0.0000010 | 0.000001 | 2.8E-11 | 1E+12 | 200 | 構造分類、3次元構造構築、時間軸推定のための統計処理 | 10^7 イメージ× 10^5 イメージの相関計算で、合計10 \sim 12回の相関計算。1回の相関計算を1ケースとした。京ではローカリティを考慮したI/Oにより最適化している。 1イメージあたりのサイズは数百MB | 通信、ファイルI/Oは引き続き調査必要。特にファイルI/Oがボトルネックとなる可能性あり。 |
| 実験解析結果に基づく動的構造モデルリング | 490 | 49 | 0.2 | 1.2 | 48 | 10 | 850000 | 全原子/粗視化分子動力学シミュレーション | \sim 1億粒子 | B/F=0.1 |

参考文献

- [1] T. Ishikawa, et al., Nature Photon. 6, 540 (2012)
- [2] J. Miao, et al., Anu. Rev. Phys. Chem. 59, 387 (2008)
- [3] S. Boutet, et al., Science 337, 362 (2011)
- [4] J. R. Fienup, Appl. Opt. 21, 2758 (1982)
- [5] P. Schwander, et al., New J. Phys. 12, 035007 (2010)

4. 各計算科学分野の社会的・科学的課題

4.1 生命科学

(1) 現在行われている課題

生命科学分野でのシミュレーションの学術的意義が、今後ますます重要になっていくことは疑う余地がない。分子レベルにおいては、実験によって原子座標を解き明かすことの重要性は変わらないが、細胞内でタンパク質や酵素などの分子機械が働く姿を知ることが本来の目的であり、そのためにはどうしても計算科学により実験科学で得られない情報を補完する必要があるためである。

「京」を用いて行ってほしい研究を一般の方々にアンケートすると、「創薬や医療に役立つ計算」という意見は非常に多い。実際、ゲノム配列の次世代シークエンサーの発達によって、個人ゲノムの同定が日常的ななされるようになると、病気などの予防のために、人によるゲノムの違いが与える影響を分子レベルで解明する必要が出てくる。従来は、実験による特徴づけが中心であったが、今後は、タンパク質の立体構造に基づいたタンパク質の動きや揺らぎ解析が重要になってくるであろう。そのためには、精度のよい分子モデリングや結合過程のシミュレーションなどの分子動力学シミュレーションが社会的要請として重要になると思われる。また、医薬品開発では、熾烈な国家規模の競争が行われている。計算機を用いて医薬品開発を加速することは、国内医薬品産業の国際競争力を高めることにつながる。複数細胞ネットワークの解明、疾患の解明、詳細な血中薬物動態、血管形状と血液内の物質移動など、実際に医療現場に役立つものまで、数値シミュレーションに対する期待は大きい。血栓症や糖尿病など、血液内のさまざまなイベントを通じて引き起こされる疾患は数多く、その予測に対する社会的要請は大きい。疫学的に知識が構築されてきた研究分野において、数値シミュレーションがもたらす学術的な影響は大きく、例えば、患者個別の血管幾何形状を利用した直接シミュレーションと、疫学的データを照らし合わせることにより、これまでの事実を裏づけ、更には、新たな因果法則を与えることも可能となる。また、患者個別の情報を用いた血流中での薬効評価が可能となれば、有効な医療を創出することにつながる。超音波治療シミュレーションについて、低侵襲治療によって患者の Quality of Life (QOL : 生活の質) が向上すれば、患者の社会復帰が容易になり社会が活性化する効果も期待できる。

生命科学研究分野におけるシミュレーション方法の特殊性は、時間スケールおよび空間解像度の異なるさまざまな現象を解析する必要があることである。そのため、研究の必要性や研究者の興味・関心となる現象に対してさまざまなモデルや方法論が利用される。方法論的には、おおまかに、生体分子を対象とする生体分子シミュレーション、細胞や臓器を対象とする細胞・臓器シミュレーション、脳・神経を対象とする脳神経系シミュレーション、ゲノム情報などの大量に蓄積されたデータを対象とするゲノム解析・バイオインフォマティクスに分けられるので、その分類に沿って紹介する。

(i) 生体分子シミュレーション

生体分子シミュレーションには、全原子モデルを用いた分子動力学（全原子MD）、全原子MDを創薬に応用した創薬MD、酵素反応などを解析する量子化学／分子力学混合モデル（QM/MM）、粗視化モデルを用いた分子動力学（粗視化MD）がある。

全原子モデルを用いた分子動力学である全原子MDでは、小タンパク質の折れたたみ過程から、膜タンパク質、DNAタンパク質相互作用、リボゾームやウイルス全体などが研究対象としてよく用いられる[1]。原子数としては数十万から数百万原子、計算時間としては、数百ナノ秒から数十マイクロ秒程度の研究がよくなされている。海外では、最近アメリカのD.E. Shaw Researchが開発した分子動力学専用スパコンAnton[2]が特筆すべき性能を示している。現時点では10万原子程度までしか扱えないが、1ミリ秒を超える計算を実現し、80残基程度までのタンパク質の折れたたみや薬剤の自発的結合を再現できている。しかし、専用スパコンは計算速度に関しては秀でているが、計算法の柔軟性には欠けており、ある一定の計算しかできないのが問題である。一方汎用スパコンは、さまざまな計算法の工夫、例えば、上記のマルチスケール・マルチレゾリューション法の導入や、複数のレプリカを用いてレプリカ間を疎結合で結ぶ手法で分子の統計量（自由エネルギーなど）を計算する手法には向いている。

従来、創薬プロセスにおいては、発見的側面が大きく試行錯誤にかける時間的経済的コストが高いものであった。近年、病気の原因となるタンパク質の構造が原子レベルで解かれるようになり、分子間相互作用を見ながら分子を設計するSBDD（structure based drug design）という開発戦略が取られるようになってきた。（図4.1-1）しかしながら、数多くの化合物を調査する必要性から精密な計算モデルを採用できず、計算科学で創薬プロセスをリードしていくほどの精度は得られていない。典型的なドッキングプログラムでは、タンパク質の動きは固定、水分子の影響は無視されており、こうした近似が結合親和性の予測を困難にしていたと考えられる。これに対して、ペタスケールの京速計算が可能になった現在、タンパク質や水分子の自然な運動を考慮した全原子MDを活用して化合物探索が可能になりつつある。

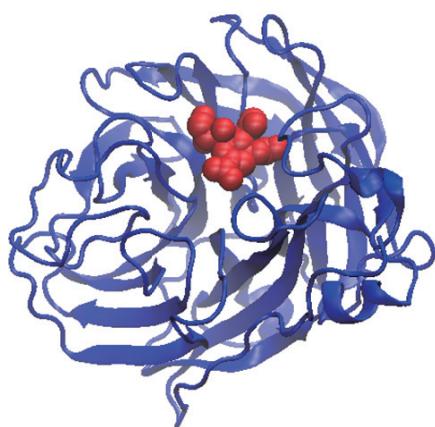


図4.1-1 医薬品（リレンザ、赤）とインフルエンザウィルスのタンパク質（青）が結合している様子

実際、創薬にターゲットを絞ったシミュレーションである創薬 MDにおいても全原子 MD を用いて数十種から数百種の化合物を調べることができるようになってきた。HPCI 戰略分野においても、定量的に化合物と標的タンパク質の結合強度を評価し、薬としての活性を予測するという試みが始まっている。D.E. Shaw Research も製薬会社と協力して医薬品開発を始めており、今後は計算機を用いた創薬支援は実践的なものに発展していくと期待されている。こうした流れを受けて、世界的にもスパコンによる合理的かつ効率的な医薬品開発を目指す風潮ができつつある。

分子レベルのシミュレーション研究における QM/MM 法は、酵素活性中心などの分子の電子状態を求める必要がある部分を量子化学 (QM) 計算で行い、その活性中心に与える触媒活性に重要なまわりのタンパク質環境を全原子 MD シミュレーションで用いている分子力学 (MM) に基づく分子力場で記述するハイブリッド法である。非常に効率的に反応性解析が行えるため、現在では、酵素反応解析においては標準的な手法である。この方法では、近年の実験によって重要性が認識されてきているタンパク質の遅い揺らぎの効果を取り入れることができる。

QM/MM 法では、依然 QM 計算が圧倒的に遅く（1万倍の差）、かつ QM 計算は MM 計算に比べて非常に複雑であり、効率の高い並列化が非常に困難なため、並列化度を上げると、より計算時間のミスマッチが大きくなる。この問題を解決する方針として二つの方向性の研究が進んでいる。一つ目は、近似的に DFTB (Density Functional Tight Binding) 法や EVB (Empirical Valence Bond) 法、Car-Parrinello 法などの QM 手法を用いて直接的な QM/MM-MD を行う方法

(QM/MM-MD 法) である。もう一つは、QM 構造の統計サンプリングを諦める代わりに高精度な QM 計算に基づく自由エネルギー面上での構造最適化を行う方法 (QM/MM 自由エネルギー構造最適化法) である。QM/MM-MD 法が、現時点では数十 psec から nsec までに限定されている一方で、QM/MM 自由エネルギー構造最適化法では、QM/MM 計算と MM 領域に対する MD サンプリングを分離し、MM 領域の分布で定義される自由エネルギー曲面上で QM 分子の最安定構造を決定する手法であるため、現時点でも酵素反応と相関するサブマイクロ秒のタンパク質の構造変化を見いだすことができる。

一方、巨大な生体超分子に対しては、全原子 MD の適用範囲が拡大したとはいえ、時空間スケールに限界があり、それを突破する試みとして、粗視化モデルを用いた分子動力学である粗視化 MD が盛んに行われている[3]。タンパク質折れたたみ研究で開発された郷ポテンシャル（天然構造の相互作用のみを導入する）が、分子モーターや膜タンパク質などの構造解析にも適用可能なことが示され、世界的にもユニークな研究が数多く発表されている。一方で、過去 5~10 年の間に、欧州を中心とした生体膜関連の粗視化モデル構築と、米国を中心とした粗視化モデル導出の方法論の開発が進み、広く応用されている。これらのモデルは、上記の郷ポテンシャルの流れとは異なり、生体膜や生体分子間の相互作用の記述に力点を置いている。欧州の中心は、Marrink らが開発する MARTINI 力場であり、最初の生体膜モデルから拡張されてタンパク質系も取り込んで発展している。方法論では米国の Voth らが精力的に理論展開をしており、それに基づいて巨大系の計算が行われている。核酸への適用は遅れていたが、ここ数年で徐々に整備され始めている。

(ii) 細胞・臓器シミュレーション

細胞シミュレーションについては、E-Cell [4]、SBML[5]、セルイラストレーター[6]、米国産のNeuron[7]など、連続体的なアプローチに基づいた細胞内の反応シミュレータの開発が国内外で活発に進められてきた。細胞レベルの中核的な生化学機能は代謝、信号伝達、そして遺伝子発現の三つである。下記では、連続体細胞シミュレーションによる代謝系の計算および1分子粒度シミュレーションによる信号伝達経路のシミュレーションを中心に述べる。これらHPCへの展開が比較的見通されている2方面に加え、今後の展望を考えるうえで取り上げるべき最近の顕著な動向として、スタンフォード大学が最近発表したマイコプラズマ菌の全ゲノムシミュレーションがある[8]。この全ゲノムシミュレーションでは、反応ネットワークモデルを採用しており、技術的にはわが国のE-Cellプロジェクトが1999年に発表したE-Cell 1全細胞モデル[9]から大幅な飛躍は見られないが、ゲノムアノテーション（ゲノム中の遺伝子の機能などの注釈）やマルチオミクスデータ（遺伝子発現量などの網羅的データ）の蓄積が進んだことでE-Cell 1全細胞モデルのように一部の遺伝子セットを選択するのではなく、特定のゲノムの全遺伝子を組み込んだモデルの構築に成功している点が特徴である。現状ではモデルにアドホックな部分が散見され、多数の経験的パラメータをどう決定していくかといった未解決の問題も多いが、今後継続的に改良を繰り返せば、多くの技術的な蓄積が進むと考えられる。統合的な細胞シミュレーションの実現は実用面でのインパクトが大きく、システム生物学の発祥の地の一つであるわが国としても長期的な取り組みを一層深く考えるべき時期に来ていると思われる。

連続体細胞シミュレーションでは、物質量をモル濃度で細胞内反応をMichaelis-Menten式や質量保存式などで記述し、細胞内の物質の濃度変化が計算される。これまでに、連続体細胞シミュレーションはシステム生物学の分野で細胞内の反応や物質相互作用のネットワークの検討に利用してきた。しかしながら、創薬や疾患を検討するうえで重要なのは、個体レベルでの挙動である。個体を理解するためには血液による物質移動や物質循環、相互作用を無視することができない。それを捉えるには、反応ネットワーク的な視点を超えて、細胞・臓器の持つ空間的な広がりや、血流との連成を考慮した解析が必要になる。米国のThe Virtual Cellプロジェクト[10]や、EUでのVirtual Physiome Project[11]では、細胞モデルの多次元化が進められ、特に心筋細胞、血管内皮細胞の刺激に対する反応について現在も検証が行われている。国内では、RICSプロジェクト[12]において、超大規模並列計算機の利用を見据え、細胞内構造の不均一性をボクセルデータで表現し、複数細胞内の数百の代謝物に対する数百の酵素反応を捉えようとする新たな取り組みがなされている。

一方、レーザー顕微鏡などを用いた高解像度でのライブイメージング技術が急速に発展したことにより、更に解像度を高めた1分子粒度での細胞シミュレーションへの取り組みが要請されている。1分子細胞シミュレータの代表的なものにChemCell（米サンディア国立研）[13]やMcell（米Salk Institute、コーネル大学、ピッツバーグスーパーコンピューティングセンター）[14]、Smoldyn（米国Fred Hutchinson Cancer Research CenterおよびThe Molecular Sciences Institute）[15]、GFRD（理研および蘭AMOLF）[16]、Spatiocyte（理研および慶應大学）[17]などがあるが、計算対象は大腸菌などの単純な原核細胞の信号伝達経路が多い。HPCへの展開はこれまで比較的ゆるやかであったが、1分子粒度の真核生物への展開には高並列化は不可避である。

HPCI戦略プロジェクトにより、Spatiocyteの京への実装が進められているほか、理研がGFRD

の並列版の開発を開始、また Smoldyn の GPU への実装が進んでおり今後数年での急速な進展が期待される情勢である。

臓器レベルのシミュレーション研究においては、血流解析の例を取り上げる。血流解析シミュレーション技術の開発には、高齢化社会において深刻な問題となっている循環器系疾患の治療法の開発、腫瘍治療などの高度化を進めるうえで重要な意味がある（例えば[18]参照）。先に挙げた細胞シミュレーションとの連成を進めることにより、創薬を支援することに直結する。そのために必要不可欠なのは、方法論の確立である。血流中における単一の赤血球あるいは血小板など生体膜の力学挙動に関するシミュレーションはここ十数年、数多く研究されてきた。特に米国では、応用数学分野との連携により、ストークス力学、境界埋込法による解析に適した膜表面要素やバネ要素を用いる膜のモデル化が進められてきた [19]。計算機性能の向上にともない、国内外で、複数の赤血球と血流を連成した3次元シミュレーションが報告されるようになってきた。このような適用可能範囲の急速な広がりにより、現在、血流シミュレーションに対する計算力学（とりわけ超大規模計算）の分野における研究者の注目が集まっている。赤血球を含む流体シミュレーションが2010年、2011年のGordon Bell賞を受賞したことは記憶に新しい[20]。国内では、「京」での超大規模並列計算を意識した（あるいは親和性のよい）血流解析手法が開発され、血管径0.2 mm程度の血流解析が進められている[21]。こうした動向を受け、国内では血流中における血栓形成シミュレータの開発が、医療応用上の重要課題として積極的に進められている[18]。血栓形成の初期過程である血管壁への血小板接着のモデル化は、実験と平行して十数年前から行われており、現在単一の血小板接着シミュレーションに関して方法論が確立されつつある状況にある。「京」の計算資源は、数百 μm 径の血管内に含まれる血球の「群」としての振る舞いを捉えるのに適している。「京」を利用する研究課題には、血小板血栓の生成と、それに起因する生化学反応の数値シミュレーションが挙げられる。また、戦略分野では、物性値の変化、凝固・溶解過程のモデル化が進められている。これらの至近の課題に続き、疾患の再現と薬効の評価、治療法の検討などが長期的な研究対象として発展していくものと考えられる。

医療へのシミュレーションの応用では、低侵襲治療の一つである超音波治療の実現に向けて、現在、機器開発の段階で厳しい競争が繰り広げられている。その数値的研究は現在進行中の「ものづくり」的課題や、市場の動向と密接な関係がある。近年、世界的な流れとして、患者の Quality of Life (QOL) 向上への要求とともに、低侵襲治療への関心が高まっている。なかでもエネルギー治療の一つである超音波治療が注目を集めている[22]。超音波治療の機器開発は、欧米と中国で盛んに進められており、日本はその後塵を拝している。欧米では、前立腺肥大や子宮筋腫などに対する超音波治療装置がすでに実用化され、認可もされている。更に最近では、MRI を併用した MR ガイドの超音波治療装置の開発が進められ、より深部の腫瘍に対する超音波治療の臨床試験も進められている[23]。それに対し日本では、超音波診断装置や MRI などの診断機器の技術開発のポテンシャルが高く、国内需要も高いため、積極的に新手法や新装置が研究開発してきた。しかしながら肝心の治療器については、景気後退、健保財政の悪化、医療機器審査の高いハードルなどの複雑な国内事情により、製品化が困難であり消極的であった。このような消極性が、1980年代以降、医療用具全体の貿易収支における赤字の膨大、更には、国民医療負担の増大をもたらした原因の一つとして指摘されており、わが国は、戦略的な治療

器開発の必要に迫られている。現在、低侵襲治療を実現する HIFU (High Intensity Focused Ultrasound) 装置の開発がオールジャパン体制で進んでいる[24]。特に装置の制御や生体へのリスク評価において、数値シミュレーションの果たす役割が大きく位置づけられている。海外ベンダーの状況に関して、精力的に開発が進められていることは伝わってくるものの、正確な計算機利用情報は、企業秘密の部分が多く不明である。だが、制御法に関しては 1990 年代に欧米で提案され、Finite-Difference Time-Domain 法との親和性の高い Time Shift 法[25]や Time Reversal 法[26]などが方法論として確立しており、これらの開発競争においては計算機性能が鍵を握る。わが国では、これまで、HIFU シミュレータの開発が進み、脳内腫瘍を対象とした実寸スケールの超大規模計算が実現可能となっており、世界的に高い競争力がある[27]。「京」の計算資源は、ある条件の計算を一つ行うことは能力的に余裕があるので、パラメータの探索を効率よく進めることができ、開発競争における戦略上、非常に魅力的である。そのため、「京」のハードウェア構成に合わせたソフトウェア開発が積極的に進められてきた。

(iii) 脳神経系シミュレーション

コンピュータにおける情報処理とはそもそも人間の脳で行われる情報処理を手本として作られているが、ここでは、その中で特に、神経細胞レベルからその大規模なネットワークを構築してその情報処理を再現するものを脳神経系シミュレーションと呼ぶ。神経回路の情報処理のモデリングとしては、80 年代頃からアーティフィシャルニューラルネットワークモデル、すなわち同種のニューロンの膜電位の一種の平均を「活動度」として扱い、関数を介して学習能力を持つシナプスに出力する McCulloch & Pitts 型モデル[28]が流行した[29]。この活動度というアナログ量がシナプスを通じて伝搬するアーティフィシャルニューラルネットワークモデルは情報処理の方法として一定の成功を見る。しかし、このようなモデルではシナプス後電位がスパイク列に変換されて運ばれる実際の脳の生理的データと詳細に対応させることが困難であり、脳という超大規模・並列なネットワーク構造で起こっている行動と関連した記憶・学習やさまざまな可塑性、感覚統合や、環境に適応する行動指令信号の生成を知るために、より精密な生物物理的詳細モデルが必要とされることがわかつてきた。このような要請に従い精密化、すなわち、神経形態をマルチコンパートメントなはしご状回路上で表現し、コンダクタンスの変化を決定論的にシミュレーションする Hodgkin-Huxley formalism[30]を用いたものが行われるようになり、細胞モデルをスクリプトベースで記述してシミュレーションさせる C/C++ベースのプラットホームシミュレータである NEURON や GENESIS、NEST 等が使われるようになった。2000 年代になって、ある程度神経回路のシミュレーションが現れ始めた。その多くのものは Hodgkin-Huxley formalism を採用しているが、計算量の問題で、多くのものはシングルコンパートメントモデルを採用しており、また、活動電位の記述を簡略化することでモデルを簡単にする Izhikevich モデルや、積分発火モデルのような簡約モデル[31]も使われていた。2005 年に、人の脳のシミュレーションを Hodgkin-Huxley formalism のマルチコンパートメントモデルを用いて行うことを最終的な目標にする BLUE BRAIN プロジェクトが始まったあたりから、大規模並列計算をともなう脳のシミュレーションプロジェクトが増え始めた。その例として、100 万個ニューロンに簡約化したヒト脳シミュレーション[32]や、ネコの脳と同数のニューロンで行った Synapse プロジェクト[33]などが挙げられる。しかしながら、これら

は大域的な信号の広がりはある程度シミュレーションできても、脳の function の再現とはほど遠いものであり、functional な全脳のシミュレーションは現状においては全く達成されていない。日本においては、2008 年の理研の次世代計算科学研究開発プログラムにおいて、脳神経系研究開発チームが発足し、日本初の大型の脳神経系シミュレーションの開発プロジェクトが始まった。ここでの昆虫の嗅覚＝運動系を対象としたマルチコンパートメントのシミュレーション（図 4.1-2）は、「京」上で 15% 程度の実効効率と細胞分割テクニックにより、神経回路シミュレーションのほぼリアルタイム実行が可能となっている。また、ほ乳類の視覚情報処理系を対象に、シングルコンパートメント積分発火モデルを用いた 10^9 ニューロンのシミュレーションも達成されている。（図 4.1-3）このように神経シミュレーションにおいて、そのモデリングは Hodgkin-Huxley formalism を最も精密なモデルとしつつも、さまざまな簡約モデルが試行されているのが現状である。大規模計算もその歴史は浅く、どちらかといえば HPC を用いた大規模計算よりも PC ベースのものが主流である。プログラミング言語（プラットホームシミュレータを用いるものを含め）は C/C++ ベースなものが多数であるが、MATLAB ベースや python ベースのものも多い。神経系はもともと高度に階層化・並列化した情報処理システムで、細胞の詳細な生物物理的な性質から新回路の機能までをカバーする大規模なシミュレーションが広く望まれており、HPC による脳神経系のシミュレーションがこれから大きく発展する素地はそろっている。最新の国際的動向としては EU の「未来および発展期にある技術（FET）プログラム」として、人間の脳の働きを解明するヒューマンブレインプロジェクトが 2013～2023 年の期間で動きだしている。

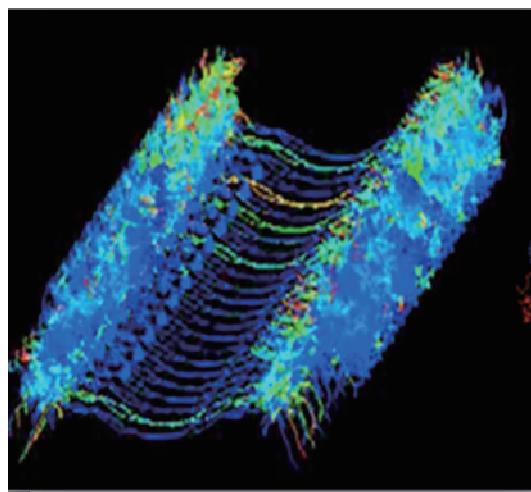


図 4.1-2 昆虫前運動中枢シミュレーション (NEURON)

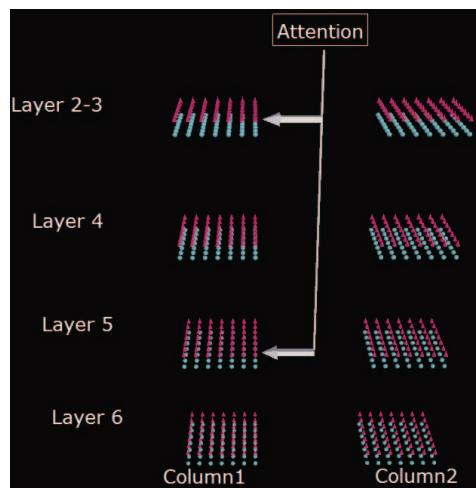


図 4.1-3 ほ乳類皮質シミュレーション (NEST)

(iv) ゲノム解析・バイオインフォマティクス

ゲノム解析・バイオインフォマティクス分野では、近年観測技術が大幅に進展し、DNA マイクロアレイによる遺伝子発現データや、次世代 DNA シークエンサーによる DNA 配列データに代表されるような、これまで得ることのできなかった短時間で大量に出力されるデータ、いわゆるハイスクロップデータが急速に蓄積されるようになってきている。米国 NCBI が運営するデータベースには 2012 年 12 月の時点での 84 万サンプルを超えるマイクロアレイによる遺伝子発現データが蓄積されており、これらの膨大なデータからの大規模な計算リソースを活用した生命科学、とりわけ医学や医療の発展が期待されている。特に、ヒトにはおよそ 3 万の遺伝子があるとされ、そこから産生されるタンパクは 10 万種とも言われている。バイオインフォマティクスやシステム生物学と呼ばれる分野では、このような膨大な因子間の関係を大規模な観測データから統計科学や情報科学に基づき推定・予測する研究が盛んに行われている。遺伝子発現パターンの比較解析や、発現データに基づくクラスタリング、共発現解析や仮説検定などの複雑な計算を必要とする遺伝子ネットワーク解析などがその代表的な例である。「京」を用いるグランドチャレンジアプリケーション研究開発プロジェクトや HPCI 戦略プログラムにおいても、遺伝子発現データからの遺伝子ネットワーク推定・解析ソフトウェアの研究開発が進められており、ペタフロップス級の大規模計算による観測データ解析が当たり前になりつつある。膨大な計算リソースを前提とした新しいアルゴリズムも登場しており、「京」時代ではこれまで難しかった全遺伝子を含む遺伝子ネットワークの推定も現実となった。

また一方で、DNA 配列に代表されるゲノム配列解析では、ショットガン法による DNA 配列決定法の登場により大規模な計算機の利用が一般的になった。最近になって登場した次世代 DNA シークエンサーではこれまで数年かかった全ゲノム解読を数週間のレベルにまで短縮することが可能になり、個人一人一人が自分自身のゲノム配列を知りそれに基づく医療を受けることができる個人ゲノム時代が目前に迫っている。次世代 DNA シークエンサーでは、1 回の計測で 1TB ほどのデータが発生し、そこから意味のあるデータに処理するために膨大な計算が必要となる。次世代 DNA シークエンサーは、世界各地に 1700 台以上導入されており、例えば

中国では、2010 年にすでに 100 台以上の次世代シーケンサーと 1 PFLOPS 程度の計算リソースを投入しゲノム解読に当たっている。日本においても、30 台程度のシーケンサーが全国で稼働しており、国際がんゲノムコンソーシアムのプロジェクトでは肝がん 500 サンプルの解読がヒトゲノム解析センターの計算リソース（225TFLOPS）を用いて進められている。HPCI 戦略プログラムにおいても次世代 DNA シークエンサーを用いたメタゲノムおよびがんゲノム解析の研究を行う予定となっている。今後、解析サンプル数は急激に伸びることが予想されるため、これらのデータ解析に必要な計算機の導入が、今後の研究の進展に必要不可欠である。また個人の配列データが蓄積されるようになれば、全ゲノム関連解析（GWAS）もより大規模化・複雑化し、またゲノム配列データと発現データを組み合わせた解析もより複雑度を増していくことが容易に予想され、必要な計算リソースもそれに応じて膨大になると予想される。このように取り扱うデータが膨大であるため、生命科学におけるデータ解析での計算における一番のボトルネックはディスク I/O 性能となる。また一般に、多種多様なソフトウェアが組み合わせて利用され、また観測技術の進展・変化が非常に速いため、常に新しい計算・解析手法が提案されており一つのソフトウェアの寿命（利用期間）が短いのも特徴である。統計科学やシステム生物学における数値計算から、生物ネットワーク解析に必要なグラフ探索、DNA 配列解析における離散的な計算、あるいはそれを複雑に組み合わせた計算など多種多様であり、前述の次世代 DNA シークエンサー解析ソフトウェアもそのうちの一つに過ぎない。観測データから計算・解析手法を開発し、実際に計算し、計算結果を生物学的な実験にフィードバックし、最終的に生物学的な発見を論文としてまとめ上げるまでの時間の短縮が当該分野で求められていることである。逆に、すでに確立した一つの方程式をいかに高速に計算するか、という点は当分野ではあまり求められてはいない。また並列計算という点からは、一般にバイオインフォマティクスやシステム生物学ではデータ並列性があるため、計算の独立性が高く並列性能を出しやすい。したがって、複雑な並列アルゴリズムの構築を経なくても、数万コアから数十万コアに達するような超並列計算機の恩恵を即座に受けやすいと言える。

(2) 長期的目標

すでに述べてきたように、生命現象の複雑さや多様さなどにより、これまでの生命科学の分野では異なる計算手法やモデルが用いられてきた。また、計算機の演算性能の限界により十分な時間およびサイズの計算が困難だった。今後、長期的研究ではその制約の多くが取り払われ、研究したい生命現象をまるごとシミュレーションできる日が来ると期待される。そして、理論・シミュレーションの専門家だけでなく、実験・医療関係者にもシミュレーションの有効性が明らかになっていくと思われる。そこで必要となる理論や手法の開発を行い、有効な実験とシミュレーションの共同研究を行っていく必要がある。更に、今後の生命系のシミュレーションでは、予測可能性という点が重視されると思われる。社会応用という観点からも、創薬や医療機器開発においてシミュレーションが盛んに利用されるようになると予想される。下記では、各スケール・方法における今後の発展について記述する。

(i) 生体分子シミュレーション

全原子MDでは、計算可能な時間スケールおよび空間スケールが更に増大していくが、研究対象はあくまで個々の研究の必要性によって多様性を持つと思われる。例えば、溶液中のタンパク質の折れたたみなどを解析するためには、10万原子程度の系で十分であるが、マイクロ秒から数ミリ秒に至る長時間の計算かレプリカを用いたアンサンブル計算が必要である。分子モーターや膜輸送体などの構造変化を通して機能を発現する過程を見るためには、やはり数マイクロ秒から数ミリ秒のシミュレーションが必要であるが、脂質膜も計算することを考慮すると、数十万から百万原子程度のサイズになる。更に大きなりボームやウイルス、ヌクレオソーム複合体などの生体超分子複合体、細胞環境を考慮したシミュレーションなどでは、数百万原子から1億原子に至る巨大な系のシミュレーションとなり、計算可能な時間はやはり、その時代の計算機の限界に依存する。全原子MDをオーソドックスな力場を用いて計算する場合には、すでに手法が確立しているため、その手法自身をハードウェアで組んだMD計算専用計算機が今後とも計算速度はリードしていくと思われる。しかしQM計算とのハイブリッドなど、今後とも開発される新たな計算法では、汎用計算機の利用が重要な役割を果たす。また、高並列な計算機で全原子MDを行う場合には、多数のレプリカを疎結合して系の統計的性質を解析するアンサンブル計算の重要性が増していくと思われる。

創薬MDにおいても、計算機パワーの向上は、より大規模な化合物探索（「京」を利用した場合、数百種から数千種）を可能にすると予想される。高精度な全原子モデルでの大規模な探索が可能になることで、予測の精度は格段に向上升し、計算による創薬の有効性はますます高まるだろう。また、膜タンパク質のような複雑な系に対しても計算機で薬を設計するという挑戦が始まると想定される。現在は、標的タンパク質と化合物の結合強度に焦点が当たっているが、副作用を抑えるという観点から、標的タンパク質以外のタンパク質と化合物との相互作用を調べることは重要である。計算機の進歩により、こうした医薬品候補の特異性に関わる予測もシミュレーションに基づき行われると予想される。

今後、SACLA（3.3.1項を参照）をはじめとする実験技術も大きく進展し、指數関数的に創薬応用シミュレーションの対象となるタンパク質構造が明らかになるであろう。こうした標的タンパク質の情報をすぐに計算に持ち込み、医薬品候補を探し出すというスピード感も重要な側面となる。そのためには、実験との連携を十分に高めていくことは当然ながら、数多くの標的タンパク質に同時並行で対応できる計算機環境が重要である。

QM/MM法は、酵素反応活性解析のみならず、新規酵素活性設計にも適用されていくと考えられる。特に、緑色蛍光タンパク質（GFP）やチャネルロドプシンのような、機能性タンパク質ツールの改変設計に大きな力を発揮していくと考えられる。また、生物学と化学のシームレスな記述を生かし、バイオミメティックな化学的触媒活性化合物の設計にも応用されていくと期待される。更に、創薬研究においては、これまで問題であった高精度な相互作用の記述とタンパク質構造変化の考慮の両立が可能であるため、QM/MM法が重要な役割を果たしていくと考えられる。方法論的には、QM/MM自由エネルギー構造最適化法による酵素反応活性における、マイクロ～ミリ秒のタンパク質構造変化の解析が今後主流になっていく。これまで、実験的にも直接的に追うことができていない酵素に特徴的な可塑的触媒場の新たな概念が明らかになる可能性がある。これは、上記の酵素活性設計や薬剤設計に、概念的にも、実際の設計ス

キームを構築するうえでも、決定的に重要となるであろう。一方、直接的な QM/MM-MD 計算では、計算時間のミスマッチが増えてしまい、並列化効率の高い MD の有効性を生かせない。その際、レプリカを用いた高い並列度の全原子 MD との組み合わせが発展し、タンパク質構造変化をともなう酵素反応経路解析などが精力的に行われると予想される。QM 計算自身は、その複雑なアルゴリズムにより、問題固定での並列化効率向上の問題解決はかなり困難であるだろう。計算精度とパラメータ化の困難さに目をつぶれば、DFTB 法が可能性として挙げられる。一方、MD 計算に必要な力の計算をエネルギー差分で行うような単純な疎結合アルゴリズムにより、比較的小規模な QM 分子系に対する非常に高精度な反応性解析を、超並列のメリットを生かして行う方向に発展していくことも想定される。並列数の増加に従い、問題を大規模化・高精度化するような QM 計算の場合には、QM 計算においてよくスケールする手法がいくつか開発されており、QM/MM 法の適用が進むと考えられる。サブナノ～ナノ秒程度のシミュレーションであっても重要な系は多くあり、特に、大規模分子全体にわたる電子波動関数の振る舞いが重要となる、電子移動系の解析には大きな力を発揮すると思われる。以上の分野は、物質科学的側面もあるので、物質科学分野、ものづくり分野との連携も重要である。生命分子に関わる分野間連携については、3.1.3 項ですでに詳細を述べた。

粗視化 MD は、一つには全原子モデルからの高精度の導出法が課題であり、それによりタンパク質・核酸・膜を統一的に扱える粗視化モデルの整備が進むであろう。方法論の進展に応じて、より高次の細胞生物学的な課題に適用されていくであろう。10nm から 1μm 規模で、ミリ秒から秒規模の現象が対象となる。具体的には、シグナル伝達系などのタンパク質の相互作用ネットワーク、転写や翻訳過程の構造機能計算、核内の遺伝子動態解析、膜・細胞骨格系、ウイルス動態などが重要な課題となる。

(ii) 細胞・臓器シミュレーション

一分子粒度細胞シミュレーションにおいては、まず原核細胞よりも大きな真核細胞 (10μm 以上) 内の複雑な信号伝達経路モデルについて巨大分子が密に存在し混雜している、より現実的な細胞環境のもとで、転写因子が応答する時間スケールである 1000 秒程度の計算を実現することが大きな課題となる。シミュレーション技術面では、分子の構造多型や重合脱重合など、分子レベルの状態変化の表現が可能な計算手法の開発が期待される。更に、1 細胞または少数の細胞のモデルから、多数の細胞から構成される集団および組織の計算が可能になると期待される。加えて、細胞の形、大きさの決定、また分化や発生過程のモデル構築のためには、化学反応と力学構造とのカップリングを取り込んだ計算が必要になり、この方面での研究開発が期待される。中長期的には遺伝子発現系や代謝系との連成により 10,000 秒以上の細胞周期を基準とする時間スケールでの予測性獲得が重要課題である。このためには、前述の E-Cell 1 全細胞モデルやスタンフォード大学のマイコプラズマモデルのようなゲノムスケールモデルとの連携、連成、また次に述べる連続体的アプローチによる代謝系モデルとの連携、連成が必要となる。

連続体細胞シミュレーションの適用可能な系が、計算機性能の向上にともない、均質な場から不均質な場へと広がってきた経緯を振り返ると、今後は、細胞の構造・形態のダイナミクスの捕捉を目指す方向へと発展するであろう。5 年以内には、一番小さい組織である臍ランゲル

ハンス氏島（5000～1万細胞）や血小板による血栓形成のシミュレーションが可能になると考えられる。より長期的視野から展望すると、細胞スケールの現象は、分子スケールから臓器スケールまでの異なるスケールの現象を渡す役割を果たすため、今後は、粒子系、流体・構造力学系の研究と連携、統合して研究が進むだろう。細胞の形態変化の仕組みは、実験観測による定性的な知見はあるものの、計測に限界があるため、それをもたらす力学的機構については定量的に不明な点が多い。この状況の打開には、粒子系の数値シミュレーションにより、ボトムアップ的なモデルの構築が期待される。また、細胞内反応を基とした組織・臓器・器官の生化学血流連成シミュレーションにより、疾患解明や創薬につなげる試みも進んでいくと思われる。

臓器レベルのシミュレーションにおける血流解析シミュレーションについて、これまで流体・構造・膜の力学的連成解析法の開発が大きな目的であったが、現在は方法論が確立しつつある。したがって今後の発展は、計算機性能の向上とともに計算対象の大規模化に向かうものと考えられる。数年～十数年先においては、数百 μm ～数 mm 径の血管内の血流解析が、計算機で捕捉可能になると考えられる。ただし、生命研究として意義のある結果を得るには、依然問題が山積みである。血栓生成は数秒～数分の時間スケールの現象であり、数値シミュレーションで有意な結果を得るには、生体膜の力学挙動を捉えるための離散時間幅 1 マイクロ秒に対し、 $O(10^6)$ ～ $O(10^8)$ 回もの時間積分を行う必要がある。そのため、数値的安定性の向上および数値誤差蓄積の低減が不可欠である。また、超大規模並列化に耐えうる並列化アルゴリズム、あるいは方法論そのものの見直しも必要となる。上記の問題を解決する方策として、粗視化法の構築も課題となる。そのためには、現象の本質と関わる血流の多重スケール性を踏まえたモデル化が重要となる。更に、血栓シミュレーションにおいては、上述のように、細胞の生化学反応をモデリングしシミュレーションに取り入れる必要があるが、個別要素の積み重ねから得られる知見が重要であり、モデル構築においても詳細な解析が必要不可欠である。

医療への応用における超音波治療シミュレーションの今後は、現在と同様、製品化に至るまでの治療器の開発状況や、市場の動向と密接な関係を持つはずである。長期的な予測は不確定要素が多く困難であるが、これまでの超音波治療を取り巻く状況を踏まえて、今後の発展について具体例を挙げていく。MR ガイドの超音波治療装置は低侵襲治療を実現することが実証されており、すでに、実際の治療に用いられつつある。しかし、装置導入に掛かる高コストが、普及の妨げとなっている。そこで、治療部位を特定する際に、MR ガイドの代わりに低コストの超音波ガイドを利用した、超音波診断治療器の開発が検討されている（例えば[34]）。超音波ガイドの実現には、軟らかい生体組織の温度変化で生じる微妙な剛性の変化をいかに精度よく捉えられるかが鍵となる。そしてその開発においては、剛性の温度依存性を捉える大規模数値シミュレーションによる支援が大きく期待されている。また近年では、薬物の体内動態を制御し、目標とする患部に必要な量の薬物を投与するドラッグデリバリーシステム（DDS : Drug Delivery System）において、超音波照射により治療効果を向上させる試みもなされている[22]。海外の超音波治療器メーカーは、薬剤メーカーと提携してその開発に注力し始めている。DDS で用いられる数ミクロンのマイクロカプセルが、血管中に 3 次元的に分布した生体中では、干渉によって超音波音場が大きく影響を受けることが知られている。マイクロカプセルの動的挙動には強い非線形性があるため、そのような場の予測は、数値シミュレーションによってのみ

可能となる[35]。よって、超音波診断治療装置を用いた DDS の実用化に向けた効率化や安全性の評価において、数値シミュレーションが果たすべき役割は大きい。

(iii) 脳神経系シミュレーション

神経科学における最大の目標は、脳で用いられている情報処理機構、究極的には人間の高度な知的情報処理を解明することである。それがまだ不可能であるのは、脳を構成する神経細胞の数が莫大で計算能力が不足していることと、脳内は非常に複雑であるため、実験による観測で神経細胞の活動を観測しきれないという原因がある。例えば、人間の脳には 10^{11} とも言われる莫大な数の神経細胞が存在し、それらが 10^{15} のシナプスで複雑に結合していると推定されている。後述するようにこれを詳細にシミュレーションすることは、エクサフロップスの規模においてもやや不十分である。また現在、生理実験において同時に神経活動を観測できる細胞数は電気生理のホールセルプランプにおいてはたかだか 10 個程度であり、イメージング技術を用いても 100 個程度のものにすぎない。しかし近年、顕微鏡技術を（多くの場合は計算機的解析や制御と融合させて）精密に用いてカルシウムイメージングによる神経細胞を同時に高解像度で観察する技術や[36-38]、そこから電気生理で得られる情報に近いものを解析により復元する技術[39]、また遺伝子技術をミックスさせて光により細胞を制御する技術[40]などが進歩しており、2020 年頃には、1000 個オーダーの神経細胞の活動状態の観察と制御が技術的には可能になっていると推測される。静的な形態解析では、脳のスライスの電子顕微鏡写真から行う再構成には多くの努力が傾けられており、エクサスケールにも達する 3 次元のイメージデータを統合することにより、小さなものであればほ乳類の脳のシナプス結合の全パターンは明らかにできる可能性がある[41]。そのような、“回路構成はわかるがどのように動作するかわからない”という状況では、シミュレーションを行い、動作メカニズムを調べることが、より強力なツールとしての役割を担うだろう。リアルタイム以上で神経回路のシミュレーションができれば、次世代のエクサスケール級計算機では昆虫脳の全神経細胞を用いたリアルタイムシミュレーションが可能となり、生理実験（主に光生理学のことになるだろう）と相補的に、その神経回路の機能の細部の解明は急速に進むと思われる。また、エクサスケール級計算機においては、単純モデルに限れば人間の全脳レベルのシミュレーションも可能な範囲に達する。その数学モデルが、脳のモデルとして妥当であるかどうかについては非常に議論があるところではあるが、人間の全脳のシミュレーションにおけるマイルストーンになると思われる。形態学や電気生理学的な性質を再現した詳細な全脳のモデルについては、2020 年代においてゼブラフィッシュやマウス等のモデル脊椎動物で行なうことが一つのチャレンジとなるだろう。プロセスレベルの微細化が終焉したのちも、何らかの技術革新によって HPC の FLOPS 向上に指數関数で性能向上するムーアの法則が適用されつづけるならば、2030 年前に、その速度が $2/3$ に落ちたとしても 2030 年代前半に十分詳細な人間の脳のシミュレーションがリアルタイム以上で可能な計算速度が得られる。そして 2040 年頃には、「人間の知的情報処理を解明する」というレスは一応のゴールを迎えると予想されるが、その前後には、個人の脳をシミュレーションして医療に用いたり、BMI（Brain Machine Interface）によって人間の脳とコンピュータの計算能力を組み合わせるなど、全脳のシミュレーションの社会への普及も実現されていくのではないだろうか。ただし、人間の脳の機能を再現した詳細なシミュレーションを人間より速く実行でき

るようになることは、人間以上の存在が生まれることを意味し、その実現が可能になる少し前には、倫理的議論が必要になるだろう。

(iv) ゲノム解析・バイオインフォマティクス

次世代 DNA シークエンサーについては 3.2.3 項を参照いただくとして、ここではバイオインフォマティクスにおけるもう一つの代表的な研究として、遺伝子発現データの解析について述べる。3.2.3 項で述べたとおり、バイオインフォマティクスにおいて今後は、長期的にどのような観測技術がどの程度のコストで利用可能になるかは非常に流動的であり不明確な部分が多い。したがってここでは非常におおざっぱな議論をする。遺伝子発現データの解析、なかでも遺伝子ネットワーク解析は、遺伝子発現データから複雑な計算によって遺伝子間の関係を予測・推定するもので、必要とする計算資源は他の発現データ解析手法と比べて圧倒的に多い。遺伝子発現データは、かつて計測に用いるマイクロアレイが非常に高価だったこともあり、数サンプルを用いて特定の疾患に特異的な遺伝子を発見するなどの研究が行われていた。しかし近年急激にコストが下がり、現在では数百サンプルを一度に取得・計測し解析することが当たり前になっている。研究で計測された遺伝子発現データは、公共データベース上に登録し公開することが一般的である。図 4.1-4 は、代表的な公共データベースである NCBI Gene Expression Omnibus に登録されている遺伝子発現データのサンプル数と今後の予想である。現在およそ 84 万サンプルが登録されており、2015 年頃には 150 万サンプル、2020 年頃には 280 万サンプルほどになると予想されている。遺伝子ネットワーク解析は、多くの計算資源を必要とすることから、まだごく一部の先駆的な研究でしか用いられていないが、今後大型計算機の利用が一般的になるに従い、一般的に行われるようになると思われる。また、遺伝子ネットワーク解析自体も、これまで研究者が興味のある疾患データや薬剤応答データなど特定の条件下で観測された比較的小規模なデータから遺伝子ネットワークを推定し解析をするということが行われていた。しかし「京」などの計算リソースの登場により、解析対象をそれほど絞らずに数百程度のデータセット（数万サンプル）を抽出し、それに対して網羅的に推定ソフトウェアを適用するというアプローチが現実的になった。具体的には、現状で 256 データセット・30,517 アレイ（サンプル）での網羅的計算を国内の研究グループで行っているが、これは公共データベースに登録されている全約 3 万データセット・84 万アレイのごく一部であり、すべてを計算対象とすることはできていない。2020 年に想定されるサンプル数を仮定すると現在の 100 倍の規模の計算が必要になる。また、サンプルの量が増えるだけでなく解析手法も多様化することが予想されるため、それらを見越した計算機資源の整備が研究推進に絶対不可欠であると言える。

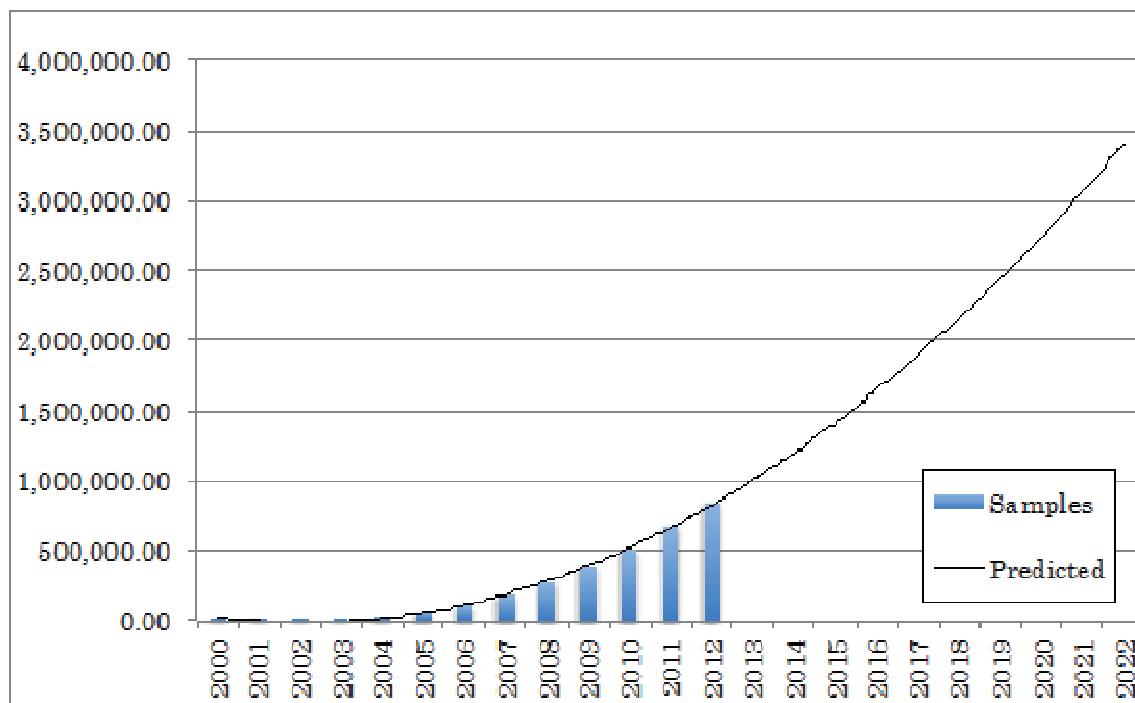


図 4.1-4 NCBI GEO に登録されているアレイ数と今後の予測

(3) 次世代に解決するべき課題

(i) 生体分子シミュレーション

全原子MDでは、構造生物学的に重要なタンパク質が次々と計算対象になるだろう。X線結晶解析などで構造が決定されたタンパク質の機能を解析するために、全原子MDを実行することがルーチンになっていくと思われる。研究対象に従って、数多くの課題に対応する計算が行われることになるが、数万から数百万原子を含む小規模～中規模系が、多くのユーザが選択する研究対象となると思われる。そのなかでもやや大きめの数十万から百万原子規模は、分子モーターや膜輸送体などの分子機械において生体膜環境などを露わに取り込んだモデルに対応する。一方、数百万原子系のような大規模系では、単一のタンパク質というよりはリボゾームに見られるようなタンパク質・核酸などを含む生体超分子複合体が主要な研究対象となるであろう。更に、細胞環境における生体膜だけでなく、細胞質やオルガネラなどの細胞内小器官も研究対象になるだろうが、そのような巨大系（数百万原子から1億原子系）のシミュレーションを行うためには、粗視化MDなどとの連成が必要となる。

創薬MDでは、可溶性タンパク質に関してより実践的な応用段階に入り、数千種から数万種の化合物から医薬品候補を選び出すため、化合物力場構築の自動化を行う必要がある。更に、類似タンパク質との結合強度を評価し、医薬品候補のタンパク質への結合が特異的なものか否かが判断される。また、膜タンパク質を標的とした医薬品設計も始められる。計算する原子数が10万を超えると、計算の高速化が必要となる。また、膜を構成する脂質についても高精度なモデルリングを行うことで、膜タンパク質を標的とする計算精度の向上を目指す。今後は実験技術が進歩し、解かれる標的タンパク質の3次元構造は指数関数的に増加していくと予想される。

これに応じて、計算分野でも、即時に数多くの標的タンパク質に対応する体制が求められると予想される。

QM/MM 法では、まずは分子モータータンパク質や膜輸送体・G タンパク質共役受容体などの分子機能解析がターゲットとなるであろう。これらは、タンパク質機能において化学反応とタンパク質構造変化が強く相関しており、生体分子機能のよいモデル系となる。また、実験的研究も進んでおり、計算科学的アプローチの有効性の検証に必須である緊密な共同研究も期待できる。また、酵素反応性解析で得られた知見に基づく酵素設計も行われる。酵素のアミノ酸配列の大幅な改変に基づく新規機能設計は、非常に挑戦的で、バイオインフォマティクスや全原子 MD 計算などと組み合わせた高度なスキームの洗練が必要となるであろう。一方、小規模改変による設計は、実験的な要求に応え得るもののが十分期待される時期に来ている。実験研究との連携を通して実績・経験を積みながら、高い仕様要求を満たす新規機能性タンパク質設計へのスキーム構築を目指すとともに、バイオミメティック触媒設計への応用を行う。

粗視化 MD では、その高速性を生かして、細胞スケールの生命現象に挑むべきである。遺伝子動態、シグナル伝達系、膜・細胞骨格系、ウイルス動態などが挑戦的課題である。例えば、真核細胞における遺伝子の本体であるクロマチンの構造解析や、さまざまな転写因子の作用機序、DNA 複製機構など、構造情報に基づいて研究すべき課題が多い。そのうえで、老化やがんなどの疾患とかかわるエピジェネティクスの理論計算は大きな挑戦である。シグナル伝達系は、分子構造に基づく MD と 1 分子粒度シミュレーションやシステム生物的な研究の接点になる可能性が高い。シグナル伝達を支えている足場タンパク質複合体などの構造基盤とその可塑性は、システム生物学に直接つながる粗視化 MD の課題となる。

(ii) 細胞・臓器シミュレーション

1 分子粒度細胞シミュレーションでは、1 細胞での 1 分子粒度での計算を実現、精密化することで、細胞の分化、癌化、増殖などの機序に信号伝達経路のダイナミクスからアプローチすることを目指す。計算を更に大規模化することにより、取り組む事が期待される問題として応答不均一性がある。ヒト細胞を用いた 1 分子観察実験および免疫染色実験では、同一の遺伝情報を持つ均一な細胞集団に対して上皮成長因子や神経成長因子などの同一の因子を同一の条件で与えても細胞の応答には一定の不均一性が観察されることが確認されており、これが発生などの高次の生命現象に持つ意味が議論されている。このばらつきが生じる要因には、分子の構造多型によるとする説、信号伝達ネットワークにおける内因的ノイズの影響によるとする説、転写制御ネットワークなどの遺伝子発現系におけるノイズ、エピジェネティクスによるとする説など複数あり決着していないが、実際にはこれらの要因が複合的に働いている可能性が強い。このうち、構造多型や信号伝達系の内因的ノイズに関しては、現在の 1 分子粒度計算の大規模化でアプローチできるが、遺伝子発現系やエピジェネティクスなどの要因に迫るには、10,000 秒以上の計算でも妥当性を失わない計算モデルが必要である。そのためには、長期的目標の項で述べたようにゲノムシミュレーションと代謝系シミュレーションとの連成が必要であるが、この方面では計算量の問題以前に大規模モデル構築における総合的、長期的な取り組みと技術の蓄積が必要とされ、長期目標の達成に至る筋道として微生物などの原核細胞などの比較的単

純なモデル生物を用いた先行的なプロトタイプアプリケーションの構築をポストペタ世代のうちに進めることが求められる。

細胞・血流シミュレーションについて、対象とする問題は多数考えられるが、例として、血栓性血小板減少性紫斑病[42]に関して説明する。これは、細動脈（血管径 100～200 μm）において過剰に血小板が積み重なることで、血流全体の血小板数が減少し、それに伴い出血（皮下出血による紫斑）が見られる疾患である。脳の細動脈で形成されると神経障害、腎の細動脈では腎障害を引き起こし、放置した際の致死率は 90%以上と知られている。この疾患の原因は、血漿中に存在する ADAMTS 13 と呼ばれるフォンビルブランド因子の切断酵素の欠損であり、通常、この ADAMTS 13 は血中の超高分子量フォンビルブランド因子多量体を適度な大きさに断片化することにより、過度な血小板凝集を抑制している。近年では、ADAMTS 13 の立体構造と血流のずり応力との関係が指摘されており、徐々にその原因因子が明らかになってきているが、創薬の観点ではまだ研究の初期段階である。今後、分子動力学法あるいは実験的アプローチにより、単一の分子に対する創薬開発が期待できるが、実際の人体においては、血流と細胞の代謝反応が連成して起こり、通常、そのような代謝反応は正のフィードバック機構が働くため、血流も踏まえたシミュレーションによる薬効評価が重要となると考えられる。このため、対象はある程度限定しつつ、解析アプローチを確立することが研究の対象となる。

超音波伝播シミュレーションについて、これまで生体内の縦波の伝播のみが扱われてきたが、エクサスケール級計算機では、縦波に比べて 2 衡程度遅い伝播速度を持つ横波の影響[43]を考慮した解析を行う。これにより、治療において報告されている皮膚の火傷や骨の痛み等の生体組織界面における横波による加熱の影響を加味することができ、超音波治療のリスク評価の高精度化や、温度上昇による剛性の変化を利用した超音波による治療部位特定手法の開発が可能になる。更に、ドラッグデリバリーにおけるマイクロカプセルと超音波が干渉した音場の解析や、超音波を援用した場合のドラッグの拡散に関するシミュレーションも可能になると考えられる。

(iii) 脳神経系シミュレーション

人間の脳の高度な知的活動は、どの部分がその複雑な神経メカニズムによるのか、あるいはその大規模性によるのかも判明しているとは言いがたい。したがって、現段階での HPC において詳細化を追い求めたものと規模の拡大を求めたものの双方の戦略を用いつつ、使用可能な計算資源を活用してシミュレーションを行っていくことになるだろう。計算技術的には、詳細シミュレーションでは膜電位伝搬とさまざまなイオンチャネルのダイナミクスの計算が多くの計算量を要する部位であり、そしてシナップス開口放出から後シナップスまでの一連の過程とその可塑性がネットワーク通信の大枠を規定する。そして、個々の神経の違いを階層的に記述する複雑な構造の上で、ローカルメモリ/キャッシュの効率的な利用が行えるかが一つの鍵になるだろう。また、大規模シミュレーションにおいては、メモリの効率的な利用によるメモリ使用量の削減が課題となるだろう。シナップス間通信などのネットワーク利用を効率的に行うために、通信の階層化や最適化アルゴリズムを介することになることが必要になる可能性も高い。このようななかで、 10^{11} のニューロンとその 10,000 倍のシナップスからなる人間の全脳規模の神経回路を用いた比較的単純なモデルを用いた神経回路シミュレーションと、入力から出力までの信

号処理を単一ニューロンレベルから詳細に調べることができる系として詳細なモデルを用いた昆虫脳の全脳規模の神経回路シミュレーションの二つが、マイルストーンとして重要であり、この二つを進めることで神経回路の機能に対する理解が深まると考えられる。すなわち、神経活動の大規模な同期や感覚情報処理・運動指令信号の形成での神経回路の情報処理における雑音の性質、形態や信号伝達・可塑性などの統計性や、同等なニューロンが集合する意味などがクローズアップされ、その内のいくつかははつきりと進展すると考えられる。また、HPC 計算能力をより小規模な神経回路や単一細胞の複雑性の評価・最適化に用いることもできる。このような系においては、進化的アルゴリズムのような並列シミュレーションや信号情報処理のマルコフ過程(代表的にはイオンチャネル)のダイナミクスの確率的なシミュレーション、更に、リアルタイム神経シミュレーションを神経インターフェースと結合することで神経活動のなんらかの制御や神経メカニズムの同定が行われることが期待される。細胞成長や筋肉などの運動系を含めたマルチフィジックスシミュレーションも一つの大きな課題となるだろうが、そのような時間・空間スケールの異なる現象の結合は、すでに脳神経シミュレーションそのものとは別の問題なのでここでは踏み込まない。

(iv) ゲノム解析・バイオインフォマティクス

遺伝子ネットワーク推定ソフトウェアは、マイクロアレイなどの遺伝子発現データから統計科学的・情報科学的な方法を用いて遺伝子間の制御の予測・推定を行うソフトウェアである。遺伝子ネットワーク推定の方法としてはさまざまなモデル・推定法が提案されているが、それぞれ一長一短があり、今後も解析対象・目的に合わせたさまざまな遺伝子ネットワーク推定法が現れると思われる。また前述のとおり、現在は「京」などの計算リソースの登場により、解析対象をそれほど絞らずに数百程度のデータセットを抽出し、それに対して網羅的に遺伝子ネットワーク推定ソフトウェアを適用するというアプローチが現実的になっている。現状で 256 データセット・30,517 アレイ (サンプル) での網羅的計算を行っているが、公共データベースに登録されているサンプル数は全約 3 万データセット・84 万サンプルと一部であり、これまでのデータの増加ペースを考えると 2015 年には 150 万サンプル、2020 年頃には 280 万サンプルほどになると予想される。つまり 2020 年には全体のサンプル数では現在の 3 倍ほど、全データを解析しようとすると 100 倍程度の計算資源が必要となる。また解析手法が多様化することが予想されるため実際に必要な計算資源は更に大きくなる。公共データベースにある発現データをまるごと計算対象にすることが可能になれば、膨大な遺伝子ネットワークが蓄積可能となり、そこから更に解析・知識発見を行う、というもう一段上の研究ステージに上がることができる（次世代 DNA シークエンサーについては 3.2.3 項を参照されたい）。

ゲノム解析・バイオインフォマティクスではこれまでの HPC での計算にない特徴的な部分がいくつかある。ゲノム解析・バイオインフォマティクス分野で特異的に必要となる定性的スペックを挙げておきたい。当該分野ではこれまで主に PC クラスターを用いて解析が行われてきたが、現世代機のフラッグシップである「京」では十分な対応がなされていないのが現状である。これらの大部分は PC クラスターでは当たり前に実現されていることであり、将来のフラッグシップシステムでも同等以上の利用環境になることが当該分野では必須事項である。

- 脳神経系シミュレーションにおいても共通な必要事項であるが、さまざまな既存アプリを利用するため、GCC を前提にしている一般的なオープンソースアプリがコンパイル・動作する必要がある。Java/R/Python/Ruby などの高級言語、あるいはミドルウェアが高速で動作することが生命科学のデータ解析では求められている。あるいは、こういったミドルウェアレベルでの並列プログラミングサポートが必要である。また、一歩進んでスクリプト言語やミドルウェアレベルでの並列化のサポートが望ましい。
- 複数のアプリを組み合わせて順番に利用することがあり、ジョブ管理システムの API がスクリプト言語や C/C++ などから利用できることが望ましい。現状、計算ジョブを監視・制御する別の計算ジョブを走らせる、ということで実現しているがプログラミング言語レベルで対応されれば解析に必要な計算手順の構築が容易になり研究全体がより効率的になる。
- 前項のとおりさまざまな既存アプリが使われるため、よく使われるものについては、あらかじめシステムにインストールされていることが望ましい。例えばヒトゲノム解析センター（HGC）に導入されているスペコンには、バイオ系アプリに限っても 41 種のアプリがプリインストールされユーザに使われている。
- 計算の背景に膨大なデータを利用しており、高速なデータとのアクセスが可能であることが望ましい。特にバイオインフォマティクスでは、システム内に公開データベースのミラーデータがあり高速にアクセスできることが必要である。具体的には、NCBI のアレイデータおよび配列データなどである。HGC のスペコンでは、実際に各種データベースのミラーリングを提供している。
- データ解析では、ジョブ実行時間が長期間に及ぶこともある。伝統的な HPC の世界では長くとも数日が最大のジョブ実行時間として運用されていると思われるが、HGC では数週間あるいは数ヶ月継続実行可能なキューが用意され、実際に使われている。
- ゲノム解析やバイオインフォマティクスでは、データ並列性が高いためアプリ自体は高並列化せずパラメータスイープ的な大量（具体的には数万から数十万）のアレイジョブによる並列実行が多い。
- ゲノム解析では DNA 配列という究極の個人情報を扱うためセキュリティにも配慮が必要である。

(4) 課題を解決するために必要なアプリケーション群（要求性能）

(i) 生体分子シミュレーション

分子動力学計算は、運動方程式を時間について数値積分することで、分子における粒子の動きのシミュレーションを行う計算手法である。計算する相互作用については、近距離の粒子間に働く相互作用と、遠距離の粒子間に働く相互作用があり、それぞれ計算コストのあり方がかなり異なる。近距離間相互作用は、空間的に系を分割し粒子を計算ノードに割り当てれば、隣接ノード間通信だけで計算に必要な情報はカバーできる。一方の遠距離間相互作用では、情報を大域的に共有する必要があるため、遠距離ノード間通信が発生する。現時点では、遠距離間相互作用計算では、FFT を利用する計算アルゴリズムが普及しているが、通信量を削減するため FFT を利用しないアルゴリズムの開発も求められる。

一方、実際の生物中では、分子は多数存在しアンサンブルとしてその機能を発揮しているので、一分子だけでなく、多数分子の統計量（自由エネルギー等）を計算すべきという考えがある。それに基づいた手法としては、対象系の複数のレプリカを計算機中に置き、それぞれのレプリカでシミュレーションを行いつつ、そのレプリカ間で情報交換を行いながら計算を進めていく方法がある。幅広いサンプリングを実現するレプリカ交換や、タンパク質の機能発現にともなう構造変化を扱うレプリカパス法が代表例だが、これらの方では、レプリカ間は疎結合ですむので、大規模並列計算に適しているという特徴がある。

全原子MDでは、演算性能が重視され、高いネットワーク性能（特に低レイテンシ）が必要となる。計算したい対象（タンパク質など）があらかじめ決まっていることが多いため、ある特定の対象に対して並列性能を上げる Strong Scaling が必要となる。分子レベルでの重要な生命現象の時間スケールは、マイクロ秒から秒ぐらいであるため、1日に 100 マイクロ秒のシミュレーションを行い、10 日で 1 ミリ秒の計算を行う場合について試算を行う。通常、時間刻みは 2 fs/step なので、1 ステップ当たり 1.7 マイクロ秒で計算を終える必要がある。演算量のおよその見積もりでは、~50k 演算/particle/step である。 10^6 原子では、50G 演算/step となる。ここから計算すると、30PFLOPS の実効性能があれば、上記の計算が可能となる。実効性能が 10% 出るコードであれば、300PFLOPS の計算機ということになる。1 ステップ当たり、通信は複数回存在するので、サブマイクロ秒以下のネットワークレイテンシが必要になってくる。ただし、この見積もりは対象のサイズに依存する数字である。対象が決まっていても、複数のレプリカを連携させながら計算するアンサンブルシミュレーションでは、計算機内で扱う原子数がレプリカの数だけ増えるため、問題サイズがかなり増大する。一方、レプリカ間の通信は疎であることが多いので、ネットワークへの要求は緩和される。上記の 1 ステップ当たり 1.7 マイクロ秒という速度は、使用する計算機の特性によっては、単独のシミュレーションで実現するのは厳しい目標値だが（例えば単に並列度が高いだけの計算機では実現困難）、複数のレプリカでの MD 計算を行い、それをマルコフモデルなどのアンサンブルモデルを用いて統合すれば、それぞれの単体シミュレーションでの要求速度は緩和されるため現実的となる。ストレージは、10 ピコ秒ごとに単精度の座標履歴をとったとして、 10^6 原子の 1 ミリ秒の計算では 1.2 PB 必要である。計算時間のうち 10 分で出力するとすると、ストレージ速度は 2 TB/s 必要である。長距離力の計算に PME 法(3D-FFT を利用)を用いた実測によると、メモリ速度は B/F=0.4 程度であり、各ノードに分割されたデータだけ持つようになれば必要メモリ量はそれほど多くない。そこで効果的にプログラミングをすればキャッシュで計算が完結しローカルメモリが有効となるため、適合する HPC の形態としては、アクセラレータやメモリオンチップ型の計算機を利活用できる可能性がある。ただし、高速化のために相互作用を行うペアリストを持てば、~1000 ペア/粒子程度が必要となり、各ノードに 1,000 原子を割り当てられれば (10^6 原子、100 レプリカ、10 万ノードを想定)、4 MB 程度が必要となる。さらに、プログラミングの自由度を考えると、各ノードに全原子のデータをある程度持っておいたほうがよく、実装にもよるが、各原子に対し力場パラメータなどを 80 バイト持つとすると、各ノードのメモリ量はペアリスト分も合わせ $10^6 \times 80 + 4\text{MB} = 84\text{MB}$ となる。10 万ノードを利用するとすれば、全体で 8.4 TB 必要になる。単体演算性能では、SIMD などのデータ並列機構も有効である。ネットワークに関しては、上記のように、低レイテンシのネットワークが必要であり、キャッシュ・ローカル

メモリからネットワークへ直接通信できることが望ましい。また、高速な同期、とくに reduction が必要である。現在、広く普及している長距離力の計算法は、3D-FFT を用いるものであるが、典型的な問題サイズに対しては FFT のグリッド数が~ $100 \times 100 \times 100$ 程度であり、超大規模な並列計算にて効率を出すのは困難かもしれない。この場合、FFT に依存しない相互作用計算法を導入する必要がある。一方、既に分子力場が確立したものであれば分子動力学計算専用のアクセラレータ（近距離および遠距離相互作用計算を含む）が利用できると高速計算が可能となる。

複数のタンパク質を含む多成分系の超大規模系に対しては、次世代機の全ノードを活用した計算が有効であると思われるため、ここでは、その計算量の見積もりを行う。例えば、理論性能 1 EFLOPS の計算機を実効性能 50% のコードで使用するとして、500 PFLOPS の実効演算能力があれば、細胞環境やウイルス全体、細胞膜を模した脂質膜環境やドラッグデリバリシステムについて、全原子レベルで表現した 1 億原子系に対する 1 マイクロ秒の分子動力学シミュレーションを 2 日程度で完了可能である。メモリ速度はソフトウェア MODYLAS の実測に基づき B/F=0.1 程度とし、ネットワーク速度は「京」程度の性能を想定した。必要メモリ量については、最低限、各ノードに分割された原子位置、速度、力、力場パラメータ等があれば、原理的には計算可能であり、MODYLAS の実測に基づく試算からも 0.2PB 程度あればよいという結果を得ている。ストレージについては、1 ps ごとに、単精度の 3 次元座標を出力するとすると、1 億原子系に対し、1 マイクロ秒では、 $4 \times 3 \times 10^8 \times 10^6 = 1.2 \text{ PB}$ 必要になる。これを計 10 分で出力するとすると、ストレージ速度は 2 TB/s 必要である。大規模な対象に対する MD については、第 4.2 節の長距離古典分子動力学シミュレーションの計算機見積もりも参照されたい。

創薬への応用において、標的タンパク質と化合物との結合強度（結合自由エネルギー）を定量的に求めることが、薬としての活性を予測するうえで重要である。結合自由エネルギーを精确に求める方法（例えば MP-CAFE 法）は、全原子分子動力学計算に基づいているため、全原子分子動力学計算の高速化と直接的に連動する。そのため、全原子分子動力学の計算手法の改善を行うことが重要な課題となる。また、大規模な化合物探索に向けて、化合物力場の作成の自動化・高精度化を行っていく必要がある。また、実験チームとの連携体制を整え、シミュレーションに基づく予測を検証し、経験を蓄積して行くことが重要である。

創薬 MD では、標的タンパク質に対して 1000 種類の化合物を MP-CAFE 法で結合強度を調べる場合、10PF マシンを使えば 5 日くらいで計算が終了する。1EF の計算パワーがあれば、同じ時間内に 10 万種類の化合物について標的タンパク質との結合強度が評価できる。ここでは、各々の化合物に対する結合強度は密に通信する並列化ジョブで計算されるが、その並列化ジョブは各化合物別のアレイジョブとして実行されるとした。MP-CAFE 法のような高精度計算で探索できる化合物が増加することは、医薬品開発を大きく加速できる可能性がある。また同時に、多数の標的タンパク質に対応できることは、産業応用にとっても大きな魅力である。

QM/MM 法は、QM 計算と MM 計算を用いたハイブリッド法である。MM 部分の計算については全原子 MD と同等の計算である。QM 計算は用いている近似法に基づきさまざまな手法がある。一般的に用いられているのが HF 法や DFT 法などの SCF に基づく手法である。DFT 法では、原子基底と平面波基底を用いたアプローチに大別される。誤解を恐れずに大雑把な表現をするのであれば、前者は HF 交換相互作用を用いたハイブリッド汎関数に基づく高精度な計算が可能であり、後者は高い計算効率を志向している。さらに、SCF 法で得られた波動関数を

出発点とし、電子相関の効果を考慮する Møller-Plesset (MP) 法や coupled cluster 法、また電子励起状態を計算する TDDFT や CASPT2 法などの post-SCF 法がある。このアプローチは、計算コストが高いが、非常に高精度な計算が可能である。SCF 法では、大きく分けて、行列要素の計算と、その対角化という二つの複雑な計算プロセスの繰り返しとなる。したがって、strong scaling するアルゴリズムの開発が非常に困難である。近年開発されている DFTB 法は、前者の行列要素の計算を経験的パラメータを用いて非常に簡略化することにより、高速化を図っている（精度とパラメータ決定の困難さがトレードオフとなる）。また、後者に関しては、Car-Parrinello 法により、対角化を避けて時間発展を計算する手法がよく用いられている（短いステップ長がトレードオフとなる）。これらを組み合わせることにより、並列化による大幅な計算速度の向上は見込めるが、DFTB 法の汎用性や精度に関しては更なる検討を要する段階である。一方、weak scaling を目指す計算（大規模系や高精度）に関しては、分子科学や物性物理などの分野で SCF 法および post-SCF 法の両者に対して、領域分割や実空間積分などに基づくさまざまな方法及びアルゴリズムの開発が行われている。したがって、それらを開発している分子・物性などの研究チームとの密接な共同研究が重要となるであろう。QM/MM 計算によるエネルギーおよび力の計算においては、ほぼ QM 計算が律速になり、QM-MM 相互作用も QM 計算のアルゴリズムに基づくことになる。したがって、QM/MM-MD 計算は、QM 計算の効率如何となる。一方、QM/MM 自由エネルギー構造最適化法では、QM/MM 計算と MD 計算が完全に分離される。QM/MM 計算では、従来の QM/MM 計算に加えて、MD 計算により得られた大量のトラジェクトリスナップショット構造における QM-MM 間の平均場 MM 相互作用の計算が SCF の繰り返し毎に必要となる。後者に関しては、スナップショット構造ごとに分割した計算が行えるので、超並列化に対して非常に高いスケーリングが期待され、長時間および大規模 MM 系に対する拡張は容易であると思われる（実効性能に関しては検討の余地あり）。前者に関しては、Strong Scaling が困難であるため、後者との同時実行を少数のプロセッサを用いて行うなどのアルゴリズム開発が必要であろう。QM/MM 計算は、QM および全原子 MD 計算のハイブリッド法のため、要求計算性能は、QM 計算（物質科学の 4.2 節参照）および全原子 MD に準じる。

粗視化 MD は、分子動力学計算の一種であり、運動方程式を時間について数値積分することで、分子中の粒子の動きをシミュレーションする計算手法である。その意味で全原子 MD と類似点は多いが、通常用いられる相互作用の差異などにより、アプリケーション開発においていくつか異なる状況がある。全原子 MD に比して、粗視化 MD のポテンシャル関数は多様であり一概に論じるのは難しいが、多くの場合、静電相互作用に起因する遠距離相互作用は、カットオフを用いるか Yukawa ポテンシャルなどダンピングがある形で記述されることが多い。そのために、全原子 MD の場合に比して、計算量に占める遠距離相互作用の割合は幾分少なくなる。これは、計算を速くするのに寄与しているが、並列計算における Strong Scaling を大規模まで実現するには困難がある。また、溶媒分子を陽に含まない粗視化モデルの場合には、粒子密度に大きな偏りがあり、全原子 MD とは異なる並列化アルゴリズムを工夫する必要がある。計算量は計算するシステムサイズに依存するので見極めは難しいが、通常、全体で 10^{10} 程度のステップ数が要求されるため、1 ステップ当たり 0.1 ミリ秒、遅くとも 1 ミリ秒程度が望まれる。

(ii) 細胞・臓器シミュレーション

一分子粒度細胞シミュレーションでは、格子法と粒子法の2種類の計算手法がよく用いられる。どちらも基礎方程式として Langevin 方程式の過減衰極限である Smoluchowski の反応拡散方程式を用いる。ペタ世代では、大規模並列化で格子法が先行しており、主なアプリケーションとなっている。格子法は格子気体法を拡張したアルゴリズム（例えば Spatiocyte 法）が用いられ、0.1 から 1PF の能力があれば、1 細胞でのレセプターへのリガンド結合から転写制御因子活性化までの一連の応答反応が計算できる。1EF であれば、1,000 から 10,000 細胞で構成される細胞集団、あるいは組織における応答不均一性の計算が行える。粒子法では、通常のブラウン動力学ではステップ幅がナノ秒を切り、生理学的な時スケールである 1,000 秒に到達するためには最低 10 の 12 乗のステップ数が必要であり、実用的ではない。このため、グリーン関数を用いたステップ幅の伸長（GFRD : Green's Function Reaction Dynamics 法）や経験的パラメータによる近似解法（Smoldyn 法）などの工夫が用いられる。近似を用いない正確な解法として現在最も性能がよい改良 GFRD 法（eGFRD 法）はイベント駆動型であるため高並列化が困難であり、1,000 分子程度の系までが適用限界であったが、階層的時ステップを用いて高並列化を試みる新世代の手法である pGFRD 法の開発が理研で進んでいる。これが順調に進めばポストペタ世代には百万分子程度の系の計算が可能になると見込まれ、粒子法が実用段階に入ると思われる。この分野のハードウェアへの要求の特徴として、まず第一に、格子法、粒子法の双方において反応ネットワークや境界条件などが複雑であり、イベント処理や例外処理が多いことがある。このため、SIMD も含めたベクトル系の命令の利用が十分に性能に反映されない場合が多く、整数系の性能が高いほうが有利である。特に、離散事象法においては Intel Haswell アーキテクチャ以降一般的になると考えられるハードウェアトランザクショナルメモリーの有効性およびその Simultaneous Multi-Threading との親和性が指摘されている。第二に、長時間のダイナミクスを対象とするため、必要なステップ数が多く、ネットワークのレイテンシが容易に律速となることがある。以下に、具体的な例を挙げての計算機要求の見積もりを示す。まず、格子法で 10,000 細胞のシミュレーションを 10 ケース程度行う場合を考える。細胞の体積が 10pL (10^{-12} L)、含まれるタンパク質すべての濃度が $10\mu\text{M}$ とすると、1 細胞当たりおよそ 10^9 個のタンパク質分子が存在する。格子法における典型的な時ステップサイズは $1\mu\text{秒}$ であり、 $3,600$ 秒のシミュレーションを行う場合、総ステップ数は 3.6×10^9 となる。1 粒子当たりの演算量はおよそ 10 FLOP であり、その時の総演算量は、 $3.6 \times 10^5\text{ EFLOP}$ となり、これを 10 ケース行う。10 日間でシミュレーションする場合、必要な演算性能は、 0.42 EFLOPS と見積もられる。同様に、粒子法で、一細胞の信号伝達経路のシミュレーションを行う場合を考える。粒子法での典型的な時ステップサイズは、1 ナノ秒であり、 3600 秒のシミュレーションを行う場合、総時ステップ数は、 3.6×10^{11} となる。1 粒子当たりの演算量はおよそ 1000 FLOP であり、総演算量は、 $3.6 \times 10^5\text{ EFLOP}$ となり、これを 100 ケース行う。格子法と同様に、10 日間でシミュレーションする場合、必要な演算性能は 0.42 EFLOPS と見積もられる。

これまでに連続体細胞、臓器レベルで取り上げてきた応用例では、いずれも有限差分法に基づき、カーティアン座標系で立方体格子を用いて基礎方程式を離散化する。このような方法は、並列計算において均等に領域分割することが容易であり、台数効果が高く、計算プロセッサ数の増加にともなう計算機性能の向上の恩恵を直接受けてきた。細胞・血流シミュレーションで

は、連続体に対する移流・拡散・反応式を扱い、時間積分によって生化学反応、流体・構造・膜の動力学挙動を再現する。圧力の更新には、擬似圧縮性の解法を用いることで、圧力ポアソン式の求解の際に不可欠な反復をともなう隣接通信を避ける。時間刻みを、クーラン条件を満たすように移流速度と格子解像度から決めると、粘性項と拡散項の一部には陰解法を適用する必要があるものの、計算コストのかかる反応項、移流項、構造・膜の運動学構成式には陽的な時間積分の適用が可能である。カーティアン格子ベースで、（ほぼ）陽解法を採用する細胞・血流シミュレーションでは、格子点当たりの演算量が多いため、今後、B/F が下がるとしても、それを捉える程度にキャッシュサイズが増えるならば、実行性能を出しやすい。一方、コードの書き方の選択肢が少なく、アルゴリズムの工夫で格段に性能向上することは期待できない。長さ 100mm、径 100~200um の血管を対象とし、流速を 10^2 m/s と考える。血球の変形挙動までを取り扱うため、0.1um 程度の格子幅を用いるとすると、格子点数は $10^6 \times 10^3 \times 10^3 = 10^{12}$ である。クーラン数を 0.1 とすると、時間解像度は 1us と見積られ、これは膜の動的挙動と捉えるための時間スケールと同程度である。血栓生成の時間スケールを考え、10 秒の現象を扱おうとすると、全計算ステップ数は 10^7 程度である。格子点上で定義される変数は速度ベクトル、圧力、VOF 関数、バルクひずみテンソル、膜ひずみテンソル、参照曲率、反応種であり、合わせて 10^2 個とするならば、必要な主記憶容量は、 8×10^2 (変数) $\times 10^{12}$ (自由度) $\sim 10^{15}$ Byte = 1PByte である。例えば、ノード当たりの性能、計算規模が、それぞれ、100TFLOPS、 10^8 格子 $\times 10^2$ 変数、実効性能が 40%だとすると、1 ステップ当たりの計算時間は 10^{-2} s 程度と見積られる。 10^2 個の変数を持つ 1 格子点、1 ステップ当たりの演算量は約 25,000 であり、 10^{12} の格子点に対する 10^7 ステップ数の計算の場合、全演算数は 2.5×10^{23} 程度となる。「京」の全ノードでの実効性能が 40% の性能を有しているため、1 EFLOPS の計算機を用いた場合、実効性能が 400 PFLOPS となり、約 174 時間の計算時間と見積もられる。理想的なキャッシュであれば B/F は $2 \times 8 \times 10^2$ (変数) / 25,000 = 0.064 と見積もられる。したがって、必要なメモリバンド幅は 100 (TF/s) $\times 0.064$ (B/F) = 6.4 TB/s と見積もられる。

超音波治療に用いられるコードの「京」での実効性能は 20% 程度である。したがって、超音波治療で用いられる周波数 1~2MHz の超音波の軟組織中での波長が、0.75~1.5mm であり、これを解像するのに 0.05mm 程度の格子幅を用いるとすると、京では、 $10,000^3$ 格子点 (5.12×10^{11} 自由度) の計算が可能であり、400mm の立方体領域中の超音波の伝播が 1 日程度で計算できる。しかし、軟らかい生体組織の温度変化で生じる微妙な剛性の変化を捉えるためには、音波である縦波に比べて 2 衍程度遅い伝播速度を持つ横波を再現する必要があり、より高い解像度と長時間の時間積分が必要になり、最低でも京での計算の 1,000 倍の自由度の計算が求められ、「京」の 100 倍 (1EFLOPS) の計算機を利用した場合、10 日程度で計算ができる見積もりとなる。また、マイクロカプセルとの干渉によって生じる超音波音場の解析を行うためには、時間スケールが小さいマイクロカプセルの時間積分を行うためには計算コストが通常の超音波伝播計算に比べて数十倍程度必要となるため、現状の 100 倍程度の計算処理速度が将来的に必要となると考えられる。

(iii) 脳神経系シミュレーション

脳神経系シミュレーションにおいては、理想としての詳細なモデルを用いた、ヒトの全脳規模の神経回路シミュレーション、2020年頃に実現可能な二つのモデルとしての単純なモデルを用いた、ヒトの全脳規模の神経回路シミュレーション、詳細なモデルを用いた昆虫（カイコガ）脳の全脳規模の神経回路シミュレーション、の三つのシナリオについてシミュレーションのプロファイルを検討する。詳細モデルにおいて神経細胞の膜電位変化のダイナミクスを十分に再現するには、Hodgkin-Huxley モデルの Na と K チャネルの他に、Nap、K(AHP)、Ca(high)、Ca(low)、H などのチャネルを追加することが必要であり、各コンパートメントは、Hodgkin-Huxley モデルの 5 倍程度の複雑度を持たせるとして、20 変数、600FLOP/ステップとする。これは Hodgkin-Huxley モデル 1 ステップの計算には、120FLOP かかるという Izhikevich の見積もり[44]に基づく。コンパートメント数を 5,000 とする。シナプスには、コンダクタンスベースのモデルを用いる。シナプス数は、Matrix exponential 法[45]を用いると、1 ステップに 5FLOP かかる。1 ステップは 0.1ms とする。シナプス可塑性は、時間スケールの異なるものがいくつかあり、短期可塑性を 2 種類、長期可塑性として STDP (Spike timing dependent plasticity)、短期と長期をつなぐ時間スケールの可塑性を 1 種類想定する。神経細胞の発火頻度は平均 10Hz として、発火 1 回に対する指數関数の積和演算 13FLOP (STDP は 26FLOP) を可塑性の演算量として見積もる。これに、人間の脳の規模のパラメータ、すなわち、 10^{11} の細胞数、1 個の神経細胞当たり 10000 個のシナプスという量を当てはめれば計算規模が見積もれる。1 神経細胞の 1 ステップあたりの計算に必要な、主記憶メモリバンド幅は、キャッシュメモリを使用しない場合、約 3.4 MB (神経細胞変数 : 800 KB、シナプスコンダクタンス : 160 KB、シナプス可塑性 : 320 KB の load/store と神経細胞定数 : 800KB の load) のメモリ転送と、約 3MFLOP (600×5000 FLOP + 5×10000 FLOPS + 650 FLOPS) の演算が必要と考えるならば、B/F 値は 1.1 と見積もれる。ネットワークバンド幅は、発火情報（神経細胞の ID と発火時刻）のデータ量で決まる。平均発火頻度を 10Hz とし、シナプス遅延である 1ms ごとにデータ転送を行うとするとき、発火情報 : $10^{11} \text{ neurons} \times 10 / 10000 \times 10 \text{ Hz} \times 16 \text{ Byte} = 16 \text{ GBbyte}$ が発生し、その間の計算量は、 $600 \text{ FLOP} \times 10 \text{ step} \times 5000 \text{ compartments} \times 10^{11} \text{ neurons} = 3 \times 10^{18} \text{ FLOP}$ となり、ネットワークバンド幅の BF 値は 5.3×10^{-9} となる。

単純なモデルを用いた、ヒトの全脳規模の神経回路シミュレーションでは、神経細胞数やシナプス数などの基本的な設定は、詳細なモデルを用いたヒトの全脳規模モデルと同様であるため、重複する説明は割愛する。単純モデルでは、神経細胞モデルに Leaky Integrate-and-Fire neuron モデルを用いることとし、1 ステップで 5 FLOP[38]かかる。シナプスには指數減衰型のモデルを用いて、1 ステップで、10FLOP、減衰の計算に更に 1FLOP かかる。シナプス可塑性は詳細なモデルと同様とする。

カイコガ全脳の神経回路のリアルタイムシミュレーションにおいては、計算の基本は詳細なモデルを用いたヒトの全脳規模の神経回路シミュレーションと同じであるが、神経数は 10^6 程度であり、1 個のシナプス当たりのシナプス数も数百個オーダーと規模は小さい。また、計算ステップを 0.05ms とする。三つのシナリオについてシミュレーションのプロファイルを概算した結果を表 4.1-1 に示す。

表 4.1-1 脳神経系シミュレーションの三つのケースの計算規模見積もり

| 項目 | 詳細なモデルを用いた人の全脳規模の神経回路シミュレーション | 単純なモデルを用いた人の全脳規模の神経回路シミュレーション | カイコガ全脳の神経回路のリアルタイムシミュレーション |
|-----------------------------|--|--|--|
| 細胞数 | 10^{11} | 10^{11} | 10^6 |
| コンパートメント数 | 5000 | 1 | 10000 |
| シナプス数/細胞 | 10000 | 10000 | 500 |
| リアルタイムシミュレーション必要 FLOP | | | |
| 細胞 | 3×10^{21} | 5×10^{15} | 7.2×10^{16} |
| シナプス | 5×10^{19} | 1.1×10^{16} | 5×10^{13} |
| 可塑性 | 6.5×10^{17} | 6.5×10^{17} | 6.5×10^{10} |
| データ量 (byte) | | | |
| 細胞 | 1.6×10^{17} | 2.4×10^{12} | 2×10^{12} |
| シナプス | 4.8×10^{16} | 2.4×10^{16} | 2.4×10^{10} |
| 可塑性 | 3.2×10^{16} | 3.2×10^{16} | 1.6×10^{10} |
| BAND 幅 (byte / step * CELL) | | | |
| 双方向 | 1.28×10^6 | 349 | 1.02×10^6 |
| コード | 8×10^5 | 32 | 9.6×10^5 |
| FLOP/STEP | 3×10^6 | 666 | 3.6×10^6 |
| B/F | 1.1 | 1.1 | 0.83 |
| キャッシング活用時 | | | |
| キャッシング必要量(byte)/チップ | 10^6 | | 10^6 |
| B/F (主記憶) | 0.11 | - | 0.041 |
| ネットワーク B/F (全系通信として評価) | 5.3×10^{-5} (5.3×10^{-9}) | 2.5×10^{-1} (2.5×10^{-5}) | 1.1×10^{-6} (2.2×10^{-9}) |

脳神経での詳細なモデルを用いた、ヒトの全脳規模の神経回路シミュレーションの見積もりから、ヒトの全脳規模の神経回路モデルの計算には、神経細胞の変数計算の割合が圧倒的に大きく、物理時間の1秒のシミュレーションを行うのに、 3×10^{21} FLOPが必要である。B/Fは1程度あることを考慮するとメモリバランス型が適しており、更に0.23EByteという大容量のメモリ容量が必要であると言える。ただし、B/F要求値については、必要最低限のメモリアクセスのためにシナプス遅延である1msの間はメインメモリにアクセスせずに1チップにおいて100～200MBのキャッシング利用による計算が可能なシナリオを考えると、1桁低くなる。

単純なモデルを用いたヒトの全脳規模の神経回路シミュレーションの計算には、リファレンスマネジメントモデルとメモリモデルの中間的性能が適していると考えられる。主記憶のメモリバンド幅の要求が高く、ネットワークバンド幅のB/F値も詳細なモデルに比べ高い。また、シナプス可塑性に関するメモリ転送量が大きく、キャッシングの効果はほとんど期待できない。1秒のシミュレーションに0.7EFLOPs程度の実行性能が必要であり、10%程度の実効効率ならば、メモリバランス型で、現実時間で1秒のシミュレーションが、数十秒程度で実行可能になると見積もられる。

カイコガ全脳の神経回路のリアルタイムシミュレーションの計算には、B/F重視型が適していると考えられる。ただし、カイコガの全脳モデル開発は、非常に複雑であり、開発を容易にするためGCC等一般的なコンパイラと互換性のある環境が望まれる。現在シミュレーションが実行できている「京」と同様のアーキテクチャと予測されるリファレンス、メモリバランス

型で、0.7EFLOPs の最大性能であれば、実効効率 10%程度で、リアルタイムシミュレーションを行える可能性がある。

昆虫神経回路シミュレーションを用いて精密なシミュレーションの状態推定・パラメータ推定を行うときの計算負荷はモデリング依存であり、また大規模神経回路になるとまだ見積もりが難しいところがある。1 細胞の 10,000 コンパートメントモデル程度の規模においては、物理時間 1 秒程度のシミュレーション (7.2×10^{10} FLOP) の 1,000 遺伝子×100 世代 = 10^5 倍ほど計算資源があれば可能である。1,000 細胞の神経回路を対象にするとすれば、 10^6 遺伝子×100 世代程度とすれば、 7.2×10^{21} FLOP 程度の計算実行がとりあえずの目安になり、この 10 倍程度の計算資源を用いれば実際の神経回路の動作についての有用な推定が行うことができると見込まれる。しかし、この状態推定のためにはおそらくまだ相当の試行が必要であり、2015~18 年程度までは、 10^2 程度の神経を用いた神経回路シミュレーションを用いた神経回路状態推定の方法を多くの人間がプロダクト計算実行が行える程度に定着させる必要があるだろう。この開発として、 10^{19} FLOP×100 回程度が見込まれる。

リアルタイムシミュレーションは、リアルタイムな実験とのデータ同化や生体コントロールの可能性を押し開く。したがってその段階においてはシミュレーションと観測装置とのリアルタイムに近いコミュニケーションが必要となる。2020 年頃に想定されるデータ量として、カルシウムイメージングにおいて、 $512 \times 512 \times 10 \times 16$ bit 程度のイメージデータが 100ms ごとに得られると仮定すると、これをシミュレーションを介した昆虫脳のリアルタイムのデータ同化や制御に用いるなら、シミュレータと外部環境と 100 MByte/s 程度の通信が可能である必要がある。カイコガ全脳の神経回路のリアルタイムシミュレーションにおいては、シミュレーション対象はたかだか 10~100 秒の物理時間であり、リアルタイムシミュレーションであるならば、同一の計算時間しか使用しないので、1 回の計算実行はきわめて短い。しかしながら、生物実験との同期をとるための特別なスケジューリングの運用が必要になる可能性は留意すべきである。それに見合った生物実験ができることが前提であるが、このような特別にスケジュールされたジョブを 10 回程度実行できれば、シミュレーションを用いた昆虫の神経回路の制御や同定の可能性を一通り評価することが可能であろう。

以上の個々の性能が見積もられた神経系シミュレーションに対して 2020 年頃に必要な総計算量は

①ヒトの脳シミュレーションにおいて

詳細モデルにおいては $10,000$ EFLOP×1

簡約モデルはにおいては 7 EFLOP×100

②昆虫脳シミュレーションに対しては

全脳シミュレーション単体に対しては 7 EFLOP×100

実験とのリアルタイム通信を含む神経回路の状態推定には 7200 EFLOP×20

程度であり、合計 1.5×10^{23} FLOP が見込まれる。

脳神経系シミュレーションにおいては、実験神経生理学との連携は必要不可欠である。形態学や同時多点計測が可能なイメージング技術などと連携することも望ましい。しかしながら、現実的にはそのすべてと強く連携することは不可能であり、その一部と連携しつつさまざま

情報を集積・再利用可能にするニューロインフォマティックスと連携することになると思われる。一つはニューロインフォマティックス分野のさまざまなデータベースとも連携し、自動的にオンラインでビッグデータを使用してシミュレーションを構築する動きが進むと予想される。また、現在はPCもしくは小規模なクラスターマシンでしか行われていない神経形態抽出や標準脳座標系へのマッピングのような3次元画像処理も重要性が年々増していくと思われ、これらの計算をHPCに乗せていく動きも強まるであろう。後者は技術的には医療画像処理の分野の画像処理と非常に近い分野であり、連携しつつ進むと思われる。

(iv) ゲノム解析・バイオインフォマティクス

次世代DNAシークエンサーについては3章で詳しく述べたのでここでは省略する。

遺伝子ネットワーク推定については、これまで「京」用ソフトウェア開発プロジェクトであるグランドチャレンジアプリケーションの研究開発プロジェクトにおいて「京」向けの並列遺伝子ネットワーク推定ソフトウェアを開発し「京」の計算リソースを活用して公開アレイデータ256セット・30517サンプルのデータに対しベイジアンネットワークを用いた2種類の推定アルゴリズム(SiGN-BN NNSR/HC+Bootstrap) [46,47]を用いた網羅的遺伝子ネットワーク推定計算を行っている。これには259CPUCore年を要し、FLOPS換算するとおよそ130EFLOPの演算量であった(理論性能ベース)。またそれとは別にL1正則化法を用いた個人ネットワークプロファイリングが可能なSiGN-L1の開発も進めている。これらを用いて2015年に現在の40倍の規模、2020年に100倍の規模の解析を想定すると、以下のような計算スペックが1ケースあたり必要となる。

【CPU速度】2015年:~1PFLOPS、2020年:~2.5PFLOPS

2020年には現在の100倍の規模である26000セットの計算を想定しており、1セット分の計算を分割可能な1ケースとする。26000ケースを1年間で処理すると仮定すると1ケースあたりの処理時間は1200秒である。プロファイル結果より2020年に想定しているパラメータの200,000分の1の規模の計算での総演算量は15TFLOPであった。単純にこれを200,000倍すると1ケースあたり3,000PFLOPである。これを1200秒で処理するので恒常的に必要な計算性能は2.5PFLOPSである。

【メモリ量】2015年:~0.03PB、2020年:~0.08PB

出力が1ケースあたり78GBであるので、多めに見積もってその100倍のメモリを計算時に使用すると仮定する。従って $78\text{GB} \times 100 = 78,000\text{GB} = 78\text{TB} = 0.08\text{PB}$ となる。

【ネットワーク性能】2015年:~0.4PB/s、2020年:~1.1PB/s

現行システムのプロファイル結果から求める。一番多い計算ノードでの通信量は897,000,000Bでこの計算は120秒であった。従っておよそ1GBを120秒で通信しているため1ノードあたり8MB/s程度である。実データではこの100倍程度を仮定する。またこれを140,000ノード程度での計算を仮定すると $800\text{MB/s} \times 140,000 = 112,000,000\text{MB/s} = 112\text{TB/s}$ で十分と思われる。そこからさらに将来10倍の複雑度になると仮定しても $112\text{TB/s} \times 10 = 1.1\text{PB/s}$ である。

【ストレージ容量】2015年：～6.24 TB、2020年：～ 15.6 TB

想定している2000分の1の計算規模で7.8 GBの出力がある。したがって1ケースあたりに必要なストレージ容量は単純にその2000倍の15.6 TBである。

| 課題 | 要求性能(PFLOPS) | 要求メモリバンド幅(PB/s) | メモリ量/PB | ストレージ量/ケース(PB) | 計算時間/ケース(hour) | ケース数 | 総演算量(EFLOP) | 概要と計算手法 | 問題規模 | 備考 |
|--|--------------|-----------------|---------|----------------|----------------|---------|---|--|--|--|
| 生体分子機能解析 | 29 | 12 | 0.0084 | 1.2 | 240 | 10 | 250000 分子動力学計算(全原子(代表)、対象:100万原子、100QM/MM、粗視化MDなど) | | | サブマイクロ秒以下のネットワークレイテンシが必要。メモリ量/ケースは10万ノード実行を想定。 |
| 細胞環境・ウィルス | 490 | 49 | 0.2 | 1.2 | 48 | 10 | 850000 全原子/粗視化分子動力学シミュレーション | ～1億粒子 | B/F=0.1 | |
| 創薬などMD・自由エネルギー計算 | 1000 | 400 | 0.0001 | 0 | 0.0012 | 1000000 | 4300000 全原子分子動力学シミュレーション | ケース数:10万化合物×10種の蛋白質(10万原子程度) | B/F=0.4、数百から数千ケース同時に実行することを想定しているので、実行時に必要な全メモリ量、各ケースの実際の実計算時間は、表の値の数百～数千倍となる。メモリ量/ケースは100ノード実行時を想定。 | |
| 細胞内信号伝達経路シミュレーション | 42 | 100 | 10 | 10 | 240 | 100 | 3600000 一分子粒度細胞シミュレーション(格子法) | 1000から10,000細胞で構成される細胞集団 | 格子法・整数系の演算性能を要求。ケース数は最低10回、100回程度が望ましいため100回とした。 | |
| 細胞内信号伝達経路シミュレーション | 420 | 0.010 | 0.001 | 0.001 | 240 | 100 | 36000000 一分子粒度細胞シミュレーション(粒子法) | グリーン関数反応動力学法・百万分子程度 | 共通・低ネットワークレイテンシを要求 | |
| 血流シミュレーション | 400 | 64 | 1 | 1 | 170 | 10 | 2500000 差分法、準陽解法(構造・流体・生化学連成シミュレーション) | 100mm長×100um径、0.1um格子、流速10~2m/s、解像度1us、10秒 | | |
| 超音波シミュレーション | | | | | | | | 400mm ³ の計算領域を軟組織とマイクロカプセル干渉音場を捉えるため、225兆点の格子と時間ステップ数として1459200ステップが必要である。また、1格子点あたり演算数1000程度となる。 | | |
| 脳神経系シミュレーション・ヒト全脳簡約モデル | 7 | 7.6 | 56 | 3600 | 0.28 | 100 | 700 単一コンパートメントIFモデル シナプス可塑性・通信 | 1000億ニューロン ニューロンあたり1万シナプス 10 ⁻⁵ step | ネットワークのボトルネックはレイテンシー | |
| 脳神経系シミュレーション・ヒト全脳詳細モデル | 71 | 78 | 250 | 25000 | 39 | 1 | 10000所クランクニコルソンシナプス通信 マルチコンパートメントH-H(局) | 1000億ニューロン ニューロンあたり1万シナプス 10 ⁻⁵ step | ストレージ量は最大想定 ネットワークはレイテンシーの影響も大きいと予測 | |
| 脳神経系シミュレーション・昆虫脳全脳詳細モデルリアルタイム | 71 | 60 | 0.002 | 0.2 | 0.028 | 100 | 720所クランクニコルソンシナプス通信 マルチコンパートメントH-H(局) | 100万ニューロン ニューロン(10000コンパートメント)あたり500シナプス | 通信パターンの設計に工夫の余地がある | |
| 脳神経系シミュレーション・昆虫全脳詳細モデル神経回路バラメータ推定 | 71 | 60 | 0.2 | 20 | 28 | 10 | 72000所クランクニコルソンシナプス通信 進化的アルゴリズム マルチコンパートメントH-H(局) | 1000ニューロン 10 ⁻⁶ 遺伝子 100世代 | 通信パターンの設計に工夫の余地がある | |
| 脳神経系シミュレーション・昆虫全脳詳細モデル生理実験とシミュレーションの通信 | 71 | 60 | 0.2 | 20 | 28 | 10 | 72000所クランクニコルソンシナプス通信 進化的アルゴリズム マルチコンパートメントH-H(局) | 1000ニューロン 10 ⁻⁶ 遺伝子 100世代 | 100MB/S程度の外部との通信も想定 | |
| 遺伝子ネットワーク解析 | 2900 | 1500 | 0 | 0 | 0 | 26000 | 94000000 ベイジアンネットワークおよびL ₁ 正則化法 | 4万転写物×26,000データセット・280万アレイ | | |

※本見積もりは未だ精査中である。より精度の高い数値はWeb版（→「1.2. 本文書の構成」）を参照のこと。

(5) 他分野との連携

タンパク質やDNAなどの生体分子およびそれらの複合体の立体構造に基づく解析は、「生命科学」分野と「物質科学」分野の境界に位置した横断的課題である。この点については、分野連携の章（3.1.3項参照）に詳述した。

脳神経系シミュレーションにおいては実験神経生理学との連携は必要不可欠である。形態学や同時多点計測が可能なイメージング技術などと連携することも望ましい。しかし、現実的にはそのすべてと強く連携することは不可能であり、その一部と連携しつつさまざまな情報を集積・再利用可能にするニューロインフォマティックス分野と協同して、ネット上のデータベースを構築し、自動的に、オンラインにビッグデータを使用してシミュレーションを構築する方向性が考えられる。また、現在は1PCもしくは小規模なクラスターマシンでしか行われていない神経形態抽出や標準脳座標系へのマッピングのような3次元画像処理も重要性が年々増していくと思われ、これらの計算をHPCに乗せていく動きも強まるであろう。後者は技術的には医療画像処理の分野の画像処理と非常に近い分野である。

(6) 公的な意見交換とそのサマリー

第4回アクセラレーション技術発表討論会（2012年9月6日～7日：福井大学）において、「人間の脳と同等のコンピュータがつくれないか？」をテーマに加沢・五十嵐がエクサフロップへの計算見積もりを紹介し、議論を行った。議論においては、どこまでの精密・巨大なシミュレーションが人間の脳の創造性を再現するために必要なのか、ということが一つの大きなテーマとなった。それは、規模の問題・粒度の問題ともに答えが出ない問題であり、当面は両面でやってみることが重要であるというところで落ち着いた。また、シミュレーションのメモリ使用量についての議論があり、現状ではそこがシミュレーションの性能向上の大きなファクターであるということで意見が一致した。

2012年9月23日の日本生物物理学会におけるシンポジウム「スーパーコンピューティング：分子ネットワークと細胞内ダイナミクス」や、2012年10月9日の計算物質科学イニシアティブ（CMSI）計算分子科学研究拠点第3回研究会においては、生命分野のサイエンスロードマップの紹介が行われた。

2012年10月19日のバイオスーパーコンピューティング研究会において、生命分野のサイエンスロードマップの紹介および意見交換が行われた。そこでは、放射光施設やX線自由電子レーザーなどの大型実験施設との連携を考慮して進めるようにとの意見が産業界から出された。また、医学分野との連携をより強く行うように医学界から意見が出された。

2013年6月12日～14日の第13回日本蛋白質科学会年会にて、「エクサフロップス時代の計算蛋白質科学」と題した生命科学・物質科学・ものづくりの各分野と連携したワークショップが開催され、意見交換が行われた。意見交換の詳細は、3.1.3項に記述している。

2013年6月21～22日 Neuro2013(第36回日本神経科学大会/第56回日本神経化学会大会/第23回日本神経回路学会大会合同大会)において本ロードマップの計算量見積もりの一部を紹介した。

2013年6月27日に、製薬企業関係者が多数集まる情報計算化学生物（CBI）学会の研究講演会にて、計算創薬の展望についての意見交換が行われた。放射光施設など大型実験施設との連携や、更なる並列数増加への対応、ものづくり分野との連携についての意見が出された。

2013年8月1日ニューロインフォマティックス国際統合機構日本ノード運営会議において次世代計算機に向けた計算量とロードマップの紹介を行った。将来のHPCIインフラに対しては高級言語の使用を含めた使いやすさの要望が多くあった。

2014年1月23日～24日のバイオスーパーコンピューティング研究会「ウィンタースクール2014」において、バイオスーパーコンピューティングにおけるポスト「京」の展望について意見交換が行われた。

(7) ロードマップ

| 年代 課題 | 2012～ | 2014～ | 2016～ | 2018～ | 2020～ | 2022～ |
|-------------|--|-------------|--|--|---------------------|-------|
| 分子創薬 | タンパク質、生体膜、DNAなどのダイナミクス MD計算を用いた医薬品候補の探索(数百から数千) | | 生体超分子複合体や細胞環境など巨大系のダイナミクス 膜タンパク質を含めた複雑なターゲットタンパク質への適用 | | | |
| 細胞臓器医療 | 細胞内シグナル分子混雑等の細伝達反応経路の細胞環境の導入モデル構築 脾ラ氏島や血小板による血栓形成 | | 細胞の分化、癌化、増殖等の機構の解明と細胞集団への拡大(1,000秒オーダーの予測性) | シグナル伝達に加え、代謝系、遺伝子発現系を導入へ(10,000秒オーダーの予測性へ) | | |
| | 血流解析シミュレーションの大規模化と並列化 超音波治療シミュレーション | | 生物の代謝反応のモデリングと、その血流解析シミュレーションへの導入 | 代謝反応と血流解析連成による循環器シミュレーションへの適用 | | |
| 脳神経 | 視覚野神経回路網モデルシミュレーション カイコガ詳細モデルでの嗅覚＝運動系リアルタイムシミュレーション | | 人間全脳単純モデルシミュレーション カイコガモデルでの全脳詳細モデルリアルタイムシミュレーション | | 人間の全脳の詳細モデルシミュレーション | |
| 遺伝子ネットワーク解析 | 現状256サンプル512ネットワークの解析 | 40倍の規模の解析 | | 100倍～の規模の解析 | | |
| ゲンゲノム解析 | 2,000人規模 | 第3世代シークエンサー | 第4世代シークエンサー | 200,000人規模による解析 | | |

図 4.1-5 生命科学ロードマップ

参考文献

- [1] T. Schlick, “Molecular Modeling and Simulation: An Interdisciplinary Guide”, Springer (2010)
- [2] R. Dror et al. “Biomolecular Simulation: A Computational Microscope for Molecular Biology”, Annu. Rev. Biophys. 41: 429-52 (2012)
- [3] G. Voth ed. “Coarse-Graining of Condensed Phase and Biomolecular Systems”, CRC Press (2009)
- [4] E-Cell: <http://www.e-cell.org/>
- [5] SBML: <http://sbml.org/>
- [6] セリイラストレーター: <http://www.cellillustrator.com/>
- [7] Neuron: <http://neuron.duke.edu/>
- [8] Karr et. al. “A Whole-Cell Computational Model Predicts Phenotype from Genotype”, Cell, 2012, <http://dx.doi.org/10.1016/j.cell.2012.05.044>

- [9] Tomita et. al., E-CELL: software environment for whole-cell simulation. *Bioinformatics* (1999) doi: 10.1093/bioinformatics/15.1.72
- [10] The Virtual Cell プロジェクト: <http://www.nrcam.uchc.edu/>
- [11] Virtual Physiome Project: <http://www.vph-noe.eu/>
- [12] RICS プロジェクト: http://cellsim.riken.jp/research_e.html
- [13] ChemCell: <http://chemcell.sandia.gov/>
- [14] Mcell: <http://www.mcell.cnl.salk.edu/>
- [15] Smoldyn: <http://www.smoldyn.org/>
- [16] GFRD: <http://gfrd.org/>
- [17] Spatiocyte: <http://spatiocyte.org/>
- [18] 高木周 (2012) 「生命と科学」(岩波書店) 第5章 「人体シミュレーション」
- [19] Pozrikidis, C. (Ed.) (2003) ‘Modeling and Simulation of Capsules and Biological Cells,’ (Chapman & Hall/CRC, Boca Raton); Bungartz, H.-J. and Schafer, M. (Eds.) (2006) ‘Fluid-Structure Interaction - Modelling, Simulation, Optimisation,’ Lecture Notes in Comput. Sci. Engrg., 53; Pozrikidis, C. (Ed.), (2011) ‘Computational Hydrodynamics of Capsules and Biological Cells,’ (CRC Press, Boca Raton).
- [20] Rahimian, A. et al. (2010) “Petascale direct numerical simulation of blood flow on 200K cores and heterogeneous architectures,” Proc. of 2010 ACM/IEEE Int. Conf. High Performance Computing, Networking, Storage and Analysis,, doi: 10.1109/SC.2010.42; Bernaschi, M. et al. (2011) “Petaflop biofluidics simulations on a two million-core system,” Proc. of 2011 ACM/IEEE Int. Conf. High Performance Computing, Networking, Storage and Analysis, doi: 10.1145/2063384.2063389; Grinberg, L. et al., “A new computational paradigm in multiscale simulations: Application to brain blood flow,” Proc. of 2011 ACM/IEEE Int. Conf. High Performance Computing, Networking, Storage and Analysis, doi: 10.1145/2063384.2063390.
- [21] Sugiyama, K. et al. (2011) “A full Eulerian finite difference approach for solving fluid-structure coupling problems,” *J. Comput. Phys.*, 230, 596-627; Ii, S. et al. (2012) “A full Eulerian fluid-membrane coupling method with a smoothed volume-of-fluid approach,” *Comm. Comput. Phys.*, 12, 544-576; Takagi, S. et al. (2012) “A review of full Eulerian methods for fluid structure interaction problems,” *J. Appl. Mech.*, 79, 010911; Sugiyama, K. et al. (2012) “Development of explicit Eulerian finite difference solver for large-scale fluid-structure interaction systems,” 2012 年ハイパフォーマンスコンピューティングと計算科学シンポジウム, IPSJ-HPCS2012056.
- [22] Duck, F.A. et al. (1998) ‘Ultrasound in Medicine,’ (Medical Science Series, Institute of Physics Publishing, Bristol and Philadelphia); Kennedy, J.E. et al. (2003) “High intensity focused ultrasound: surgery of the future?,” *Br. J. Radiol.*, 76, 590-599; Wu, F. et al. (2004) “Circulation tumor cells in patients with solid malignancy treated by high-intensity focused ultrasound,” *Ultrasound in Med. Biol.*, 30, 511-517; Kennedy, J.E. (2005) “Innovation: High-intensity focused ultrasound in the treatment of solid tumours,” *Nat. Rev. Cancer*, 5, 321-327; Hesley,

- G.K. et al. (2008) "A clinical review of focused ultrasound ablation with magnetic resonance guidance: an option for treating uterine fibroids," *Ultrasound Q.*, 24, 131-139.
- [23] http://www.healthcare.philips.com/main/products/mri/systems/sonalieve/
http://japan.gehealthcare.com/cwcjapan/static/rad/mri/MRgFUS_ExAblate2000/
- [24] 佐々木明 (2010) "バイオスーパーコンピューティングが拓くライフサイエンスの未来: 超音波治療の推進および治療機器開発に欠かせない生体の音響的シミュレーション研究," *BioSupercomputing Newsletter*, 3, 4-5
- [25] Sun, J. and Hynynen, K. (1998) "Focusing of therapeutic ultrasound through a human skull," *J. Acoust. Soc. Am.*, 104, 1705-1715.
- [26] Fink, M. (1992) "Time reversal of ultrasonic fields. Part I: Basic principles," *IEEE Trans. Ultrason. Ferroelectr. Freq. Control*, 39, 555-566; Fink, M. et al. (2003) "Time Reversal Acoustics in Biomedical and Engineering," *Annu. Rev. Biomed. Engrg.*, 5, 465-497.
- [27] Okita, K. et al. (2010) "Numerical simulation of the tissue ablation in high-intensity focused ultrasound therapy with array transducer," *Int. J. Numer. Meth. Fluids*, 64, 1395-1411; Okita, K. et al. (2011) "Development of high intensity focused ultrasound simulator for large-scale computing," *Int. J. Numer. Meth. Fluids*, 65, 43-66.
- [28] W. S. McCulloch and W. Pitts (1943), A logical calculus of the ideas immanent in nervous activity. *Bulletin of Mathematical Biophysics*, 5, 115–133.
- [29] 篠本滋 (2009) ニューラルネットワーク研究との遭遇日本神経回路学会会誌 Vol. 16, 3, 131-133.
- [30] L. Hodgkin and A. F. Huxley (1954), A quantitative description of membrane current and application to conduction and excitation in nerve, *J.Physiol.*, 117, 500–544.
- [31] A. V. M. Herz, T. Gollisch, C. K. Machens, Dieter Jaeger (2006), Modeling Single-Neuron Dynamics and Computations: A Balance of Detail and Abstraction, *Science*, 314, 80-85.
- [32] E. M. Izhikevich and G. M. Edelman (2008), Large-scale model of mammalian thalamocortical systems, *Proc. Nat. Acad. Sci.*, vol. 105, 3593 .
- [33] R. Ananthanarayanan, S. K. Esser, H. D. Simon, & D. S. Modha (2009), The cat is out of the bag: Cortical simulations with 109 neurons, 1013 synapses., In Sc '09: proceedings of the conference on high performance computing networking, storage and analysis (1–12). New York: ACM.
- [34] Sasaki et al. (2006) "Effect of echo-guided high-intensity focused ultrasound ablation on localized experimental tumors (theriogenology)," *J.Vater. Med. Sci.*, 68, 1069-1074; 中村弘文ら (2012) "超音波 CT を用いた超音波診断治療の基礎研究," 第 11 回日本超音波治療研究会, 15.
- [35] Liu, Y. et al. (2011) "Numerical study on the shape oscillation of an encapsulated microbubble in ultrasound field," *Phys. Fluids*, 23, 041904.; 杉山和靖ら (2012) "超音波音場における膜被包性マイクロバブルの表面安定性の数値解析," *超音波テクノ*, 24, 90-94.

- [36] A. J. Sadovsky, P. B. Kruskal, J. M. Kimmel, J. Ostmeyer, F. B. Neubauer, and J. N. MacLean (2011), Heuristically optimal path scanning for high-speed multiphoton circuit imaging, *J Neurophysiol.*, 106, 1591–1598.
- [37] J. Rosen and G. Brooker (2008), Non-scanning motionless fluorescence three-dimensional holographic microscopy, *nature photonics*, 2, 190-195.
- [38] B. A. Wilt, L. D. Burns, E. T. Wei Ho, K. K. Ghosh, E. A. Mukamel, and M. J. Schnitzer(2009), Advances in Light Microscopy for Neuroscience *Annu Rev Neurosci.*, 32, 435.
- [39] J. T. Vogelstein, A. M. Packer, T. A. Machado, T. Sippy, B. Babadi, R. Yuste, and L. Paninski (2010), Fast Nonnegative Deconvolution for Spike Train Inference From Population Calcium Imaging, *J. Neurophysiol.*, 104, 3691–3704.
- [40] S. Herlitze, & L. T. Landmesser (2007), New optical tools for controlling neuronal activity. *Curr. Opin. Neurobiol.* 17, 87–94.
- [41] D. Kleinfeld, A. Bharioke, P. Blinder, D.D. Bock, K.L. Briggman, D.B. Chklovskii, W. Denk, M. Helmstaedter, J.P. Kaufhold, W.C. Lee et al. (2011), Large-Scale Automated Histology in the Pursuit of Connectomes, *J. Neurosci.*, 31, 16125–16138.
- [42] Sadler, J.E. (2008) “Von Willebrand factor, ADAMTS13, and thrombotic thrombocytopenic purpura,” *Blood*, 112, 11-18.
- [43] Sugiyama, K. et al. (2012) “A priori modeling of the acoustic boundary layer effect on the heat source in ultrasound,” *J. Biomech. Engrg. Sci.*, 7, 84-101.
- [44] E. M. Izhikevich (2004), Which Model to Use for Cortical Spiking Neurons, *IEEE TRANSACTIONS ON NEURAL NETWORKS*, 15, 5.
- [45] S. Rotter and M. Diesmann (1999), Exact digital simulation of time-invariant linear systems with applications to neuronal modeling. *Biol Cybern.*, 81, 381-402.
- [46] S. Imoto, T. Goto, S. Miyano (2002) Estimation of genetic networks and functional structures between genes by using Bayesian network and nonparametric regression, *Pacific Symposium on Biocomputing*, 7, 175-186.
- [47] Y. Tamada, S. Imoto, H. Araki, M. Nagasaki, C. Print, S. Charnock-Jones, S. Miyano (2011) Estimating genome-wide gene networks using nonparametric Bayesian network models on massively parallel computers, *IEEE/ACM Transactions on Computational Biology and Bioinformatics*, 8 (3), 683-697.

4.2 物質科学

(1) 現在行われている課題

半導体材料や高分子材料など、20世紀の科学技術研究の中で生まれた物質群は、100種類ほどの元素の無限とも言える組み合わせの中から見出され、特異な機能や新しい現象の発現を通して、現代社会の産業基盤を形成してきた。これらの物質や材料をミクロな視点に立って研究する物質科学は、物性科学、分子科学、材料科学という三つの学問分野にまたがり、基礎研究と応用研究をつなぐ役割をも担う、広大な学問分野である。

物質科学分野における大規模数値シミュレーションは、古くは Fermi-Pasta-Ulam の非線形励起・再帰現象、剛体球の Alder 転移などの概念革新への寄与に始まり、現代量子多体系では、分数量子ホール効果の数値検証、相転移と臨界現象の解明、高温超伝導の機構提案など、物質科学の基礎研究に欠かせぬものとなった。この分野では、電子状態を量子力学に基づいて第一原理的に計算する手法として、波動関数理論に基づいた量子化学計算や量子モンテカルロ計算、密度汎関数理論に基づいたバンド計算がある。また、大規模な原子・分子系の集団運動を古典力学・統計力学に基づいて計算する古典分子動力学法、古典モンテカルロ法などの分子シミュレーションがある。更に、物質を粗視化した連続体として扱う方法として、有限要素法やフェーズフィールド法がある。特に産業応用に直結する領域においては、単一の大規模ジョブだけでなく、アレイジョブ、すなわちパラメータサーチも重要となってきている。

物質科学分野においては、現在「次世代先端デバイス科学」、「分子機能と物質変換」、「エネルギー変換」、「マルチスケール材料科学」といった社会的にも重要な課題群に、それらの源流とも言うべき「新量子相・新物質の基礎科学」を加えた5つの課題が「京」コンピュータを用いて重点的に進められている。

(i) 次世代先端デバイス科学

半導体テクノロジーはポストスケーリング時代を迎え、ナノドット、ナノワイヤーなどの構造体が次世代デバイスに不可欠な要素となっている。それらナノ構造体の構造的安定性と電子機能についての高精度の予測を目指し、主に密度汎関数法に基づくシミュレーション技術が確立してきた。海外では、ABINIT(白)・CASTEP(英)・CONQUEST(英日)・CP2K(欧)・CPMD(独)・QUANTUM ESPRESSO(伊)・SIESTA(西)・VASP(奥)・WIEN2K(奥)、また国内では、ASCOT・CMD・FEMTECK・OPEN-MX・PHASE・QMAS・RSDFT・TAPP・TOMBO・UVSORなど、それぞれ特色のあるコードが開発されている。国内ソフトウェアでは、超並列計算の実績のあるものも多く、代表的なものとしては、「京」コンピュータで 3PFLOPS(44%の実効効率)を達成し 2011 ACM Gordon-Bell Prize を受賞したプログラム RSDFT、初代地球シミュレータ 512 ノード(4096CPU)で 50%の実効効率を出したプログラム PHASE(12,288 原子系を「京」12,288 ノードで 23%の実効効率)などがある。これらの高度に最適化・高速化されたソフトウェアにより、1,000～100,000 原子規模のナノワイヤーの電子状態や伝導特性の計算、1,000,000 原子規模の Ge ナノ構造の解明などが進んでいる。

一方、実在系ナノ構造体を対象とした光・電子デバイスの第一原理計算に基づく理論設計の試みは、現状では国内外ともにほぼ皆無と言ってよいが、わが国ではデバイス設計に不可避である光と物質の露わな相互作用を取り込んだナノ光学理論に基づく電子・電磁場ダイナミクス法プログラムが、「京」コンピュータ 24,576 ノードでの実機稼働に成功しており、十数ナノメートル程度のナノ構造体の電子・電磁場ダイナミクスであれば十分に計算可能な状態となっている。今後、2016 年までの間に更なる超並列化を行い、実在系ナノ分子構造体を対象とした光・電子デバイス設計に展開する。

(ii) 分子機能と物質変換

分子や分子集団系における構造形成と機能発現・機能制御の分子科学の確立を目指して、自己組織化により形成されるナノスケールの分子・分子集団の構造に基づき創成される機能の解明、環境との相互作用下での分子の電子状態に立脚した機能発現メカニズムの解明などが進んでいる。計算科学的手法としては、古典分子動力学法、自由エネルギー計算、FMO や分割統治法に基づく量子化学計算、およびそれらを組み合わせた、QM/MM 法、ONIOM 法、レプリカ交換法などが用いられている。

分子動力学計算においては、国内外でさまざまな競合ソフトウェアが開発されている。国外では AMBER (米)・CHARMM (米)・DESMOND (米)・GROMACS (蘭)・LAMMPS (米)・NAMD (米)・TINKER (米)、国内では MARBLE・MODYLAS・MPDYN・PEACH・PLATYPUS などがあり、非常に多岐にわたる。その中でも日本発の長距離古典分子動力学計算プログラム MODYLAS は、長距離相互作用計算に高速多重極展開法を導入し、更に隣接通信を最適化することにより「京」65536 ノードで実行効率 41.1%、並列化効率 80.9%を達成した。更にウイルスとレセプターからなる 1000 万原子系に至る巨大系に MODYLAS を適用し、生体のウイルス認識の分子論を展開している。

(iii) エネルギー変換

化学結合エネルギー、電気エネルギー、太陽光、熱エネルギーの間の相互変換における物質の機能の役割を明確化し、エネルギー変換の大幅な高効率化につなげるための計算手法の開発、コード開発、シミュレーションが進められている。燃料電池やリチウムイオン 2 次電池における電気化学過程、色素増感型の太陽電池の界面構造などの研究には、主として大規模な第一原理分子動力学計算が用いられている。また、水素・メタンハイドレートの熱力学過程の解明には古典分子動力学法などが、バイオマス利用における酵素反応の解明には有効媒質法(3D-RISM 法)などが有効である。わが国においては、いずれのシミュレーション手法についても大規模並列環境への最適化・高度化が進んでおり、理論的な蓄積と合わせて国際的にも優位な立場にある。

(iv) マルチスケール材料科学

実用材料の飛躍的高性能化に向けて、マルチスケールシミュレーションで材料組織を設計し、評価する試みが進んでいる。一例として、高精度の自由エネルギー計算による相図計算、各相の自由エネルギーや界面・粒界・欠陥の第一原理計算と、フェーズフィールド法・分子動力学

計算・モンテカルロ法などとの連結が挙げられる。これらの連成計算では、各スケールの計算規模はそれほど大きくないものの、それらを効率的に組み合わせて実行する必要がある。下部計算となる第一原理計算では、ABINIT・QMAS・TOMBO・OPEN-MXなど国内外で開発されたさまざまなソフトウェアが対象に応じて使い分けられる。第一原理計算の結果を用いた上部計算(分子動力学計算)を行うFERAMなどのソフトウェアも開発され、広く使われている。

(v) 新量子相・新物質の基礎科学

粒子間の相互作用の強い分子系や凝縮物質を取り扱う強相関多体量子科学・計算科学の汎用的手法の開発が進み、新奇な量子多体现象の発見と機構解明、新しい量子機能を持つ新物質の探索、化学反応や分子集団の非平衡ダイナミクスの理解を目指して研究が進められている。

強相関量子多体系のモデル計算については、厳密対角化や密度行列繰り込み群(DMRG)、変分モンテカルロ法や世界線量子モンテカルロ法などさまざまな手法により、鉄系超伝導体・銅系超伝導体の機構解明、強相関電子系のダイナミクスの解明、新しい量子臨界現象の解明などが進んでいる。国内においては、「京」24,576ノードでピーク性能比10%以上を達成した変分モンテカルロ法MACE/mVMC、ピーク性能比で70%を達成した動的密度行列繰り込み群法DDMRGなど、大規模並列環境への最適化も進んでいる。この分野は手法自体の発展が速く、コミュニティーコードと呼ばれるものは、まだ十分に育ってきているとは言えないが、ALPSなど量子格子模型に対するソフトウェアパッケージの開発も進みつつある。その中でも世界線量子モンテカルロ法ALPS/looperは、非局所グラフ操作など従来の計算機が不得手とする演算が主体であるにもかかわらず、「京」24,576ノードでMIPSピーク性能比10%以上の性能を達成している。

一方、量子化学計算については、ADF(蘭)・GAUSSIAN(米)・GAMESS(米日)・NWCHEM(米)・MOLCAS(典)・MOLPRO(独)・QCHEM(米)・TURBOMOLE(独)など欧米各国では一般ユーザにも使いやすい汎用コードの開発が進んでいる。日本においてもABINIT-MP(X)・GELLAN・OPEN-FMO・NTCHEM・PAICS・PROTEINDFなどが開発されている。しかしながら、超並列環境への対応は十分とは言い難い。しかしながら、国内で開発されている量子化学計算プログラムGELLANは、超並列機に対する最適化が進んでおり、「京」24576ノードで実行効率28%、並列化効率80%を達成した。更に、ほぼ基底関数極限での露わに相関した2次の摂動法でC₆₀フラーレン2量体の相互作用エネルギーの計算を行い、ナノスケール分子系の超高精度計算が実現可能になったことを示した。

このように、物質科学全般において、国内外で超並列環境に最適化された大規模ソフトウェアの開発が進められている。一方で、基礎理論自体が多層構造をなしており、それぞれのレベルにおける方法論が非常に多岐にわたり、かつそれが相補的に発展してきたことが、物質科学のもう一つの大きな特徴である。シミュレーションの大規模化・精密化を進めると同時に、全く新しい基礎理論・モデルの提唱、シミュレーション手法の開発・実装・高度化、最先端の計算機を使ったシミュレーションによる予言・検証と理論へのフィードバックというサイクルを効率よく進めていくことが、今後の計算物質科学分野の発展のために重要である。

(2) 長期的目標

物性科学は 10^{23} ほどの膨大な数の原子、分子多体系から成る自然を理解する営みを通じて、相転移にともなう自発的対称性の破れ、集団運動励起やトポロジー励起、マクロ量子現象といった基礎科学を一新する普遍概念をもたらし、素粒子物理学から経済学まで広がるさまざまな学問分野に大きな影響を与えてきた。

分子科学は、化学反応の理解とそれに基づく新しい分子・分子集合体の創製を通じて、物質科学研究に大きな展開をもたらしてきた。

材料科学は、一边の長さが原子 10 個分くらいに相当するナノメートルのスケールで物質材料を捉えることにより、金属組織や粒界、複合材料など、材料としての利用に係る諸問題の解決を目指してきた。

これらの成果は、20 世紀以降の産業・先端技術革新を生み出す基盤となった。トランジスタ、トンネルダイオード、半導体レーザー、集積回路、巨大磁気抵抗素子、CCD（電荷結合素子）、有機 EL などの革新デバイス、合成樹脂や導電性高分子などの新材料は、ノーベル賞の受賞対象ともなった物質科学の基礎研究が生んだ例である。同じく物質科学の精華である超伝導は、最先端の医療用 MRI の超伝導マグネットに使われ、更に超伝導リニアモーターやエネルギー損失のない電力線として実用化されようとしている。高効率の太陽電池や高効率熱電素子など、地球規模のエネルギー問題解決に向けた新しい概念に基づくデバイスも、物質科学の基礎研究に基づいて提案され始めている。燃料電池に用いられる白金触媒、色素増感太陽電池に用いられるルテニウム、透明電極に使われるインジウム、リチウムイオン電池材料のリチウムやコバルトなど供給量が希少、あるいは今後の需要増に応じて希少になると考えられる元素の代替材料を他国に先駆けて開発することが、わが国の産業競争力を高めるためにも必要である。

一方、原子の組み合わせからさまざまな官能基・分子ができ、その多様な組み合わせで、溶液・ミセル・脂質膜・タンパク質・高分子・クラスレートハイドレートなどが形成される。これらの系では、環境の熱エネルギー程度の弱い相互作用の制御によって、分子の認識、分配、分離、輸送といった多様な機能を制御・設計することができ、ドラッグデリバリーシステム(drug delivery system; DDS)、高分子分離膜（海水淡水化等）、食品・コスメティック、生体模倣材料、化学工学プラント設計、ガス分離、温暖化ガスの吸収、電池電解液、結晶成長といった広範な学術的・社会的ニーズに直結する。

界面系では、凸凹があり不純物も存在する現実系の取り扱いが可能になりつつある。分子素子やナノテクノロジー・トライボロジーの新展開の場であり、環境科学との関連も深い。

20 世紀の要素解明から 21 世紀には集団・階層解明と機能制御の時代に入ったと言われる現代科学の中核として、物質科学における基礎研究のフロンティアでは、量子ホール効果、トポロジー絶縁体、スピニ液体、量子臨界や脱閉じ込めといった新概念が次々に発見され、自然の新たな機構解明への挑戦が続けられている。概念の革新は次世代、次々世代の最先端技術へ展開する研究をますます活性化させているが、この基礎研究から応用研究、更には産業応用への多段階リレーは、高度な蓄積を持つわが国を含むきわめて限られた国でのみ追求し得る。

更に近年、高性能のスパコンを活用することで、近代までに確立された古典力学、量子力学、統計力学に基づいた、ナノ材料の物性・化学のボトムアップ的な予測に期待が寄せられている。

計算科学と実験・理論がタイアップし、次世代の半導体デバイス、触媒材料、各種電池、薬剤、触媒などの設計・開発に役立てることで、地球環境を守り、産業振興を助け、社会を豊かにすることにつなげることができる。

(i) 次世代先端デバイス科学

現有の半導体電子デバイスをベースとして更に高機能化したものは、次世代量子デバイスの有力候補の一つになると予想されるが、その一方で高機能化半導体電子デバイスの実現に際しては、微細化、高速化、大容量化、低消費電力化、熱対策等、解決すべき非常に大きな障壁があることも事実である。これらの問題に対して相補的な、あるいは理想的には根本的な解決策を与え、更には電子デバイスにはない高機能性を備えた次世代量子デバイスの一つの候補として、ナノ分子構造体を利用した光・電子機能性デバイスが考えられる。分子の持つ合成設計柔軟性と構成原子の多様性に起因する高機能発現能力を最大限に利用したナノ構造体において、光と電子のダイナミクスの二つの自由度が結合することによってこれまでとは本質的に異なる機能が発現すると期待できる。今後はこのようなナノ分子構造体を使った光・電子機能性デバイスの理論設計を積極的に進める。このため、「京」コンピュータで開発された電子・電磁場ダイナミクス法プログラムを更に超並列化することにより、デバイスの理論設計を加速させる。

本研究の中核であるナノ光学理論が完成すれば、従前の光学応答現象を大きく超えた理学・工学の新たな研究領域を切り開くことが期待でき、その学術的意義は非常に高い。また、これらはいずれも次世代量子デバイス設計原理に大きく関わる現象であり、計算科学を通じて「ものづくり」の観点から社会へ大きな還元ができると考える。

(ii) 分子機能と物質変換

物質変換技術は、基盤産業の基礎であるとともに、人類の生活を豊かにした科学技術という点で最も成功した技術であると言える。

分子と化学反応の微視的理解に基づいて、さまざまなクロスカップリング反応のような精密有機合成反応、バイナップなどの使用による高立体選択的合成反応、重合反応や脱硝、脱硫反応など、新しい考え方による物質変換反応が次々に開発されてきた。衣類、家や車の構造物、更には液晶や有機ELのような電子材料、航空機の構造材料など、化学反応による物質変換の成果は枚挙にいとまがない。今後のわが国の産業競争力を更に強化し、地球規模での資源問題を解決するためには、目的の物質を安価で汎用的な材料から効率よく作り上げることが不可欠である。複雑な構造を持つ新しい有機分子触媒、金属微粒子、金属(酸化物)表面、金属錯体などをまるごと精密に計算することにより、分子の相互作用と化学反応過程を解明し、新しい物質変換法を理論先導的に開発することを目指す。

(iii) エネルギー変換

エネルギー問題はわが国の最重要課題の一つであり、エネルギー資源小国であるわが国が世界の中でこれまで以上の繁栄を目指すためには、あらゆる科学技術を駆使してエネルギー創成・変換・利用技術を他国の追随を許さないレベルにまで高める必要がある。そのためには、

世界最高水準のわが国のエネルギー関連技術を科学にまで高め、試行錯誤というレベルとは異なる次元から物質開発を行うための道筋をつけることが必須である。

燃料電池や2次電池、太陽電池、あるいはバイオマス利用における電気化学過程、非平衡電気伝導などに対し、超並列大規模計算機を利用した第一原理に立脚したシミュレーション技術をかつてない高いレベルに押し上げる。これにより、物質とエネルギーの関連を理論とシミュレーションから突き詰めて考え、次世代の高効率エネルギー変換に寄与する物質・材料開発に資する知見を獲得し、その成果を社会全体へと還元する。

(iv) マルチスケール材料科学

熱エネルギーを効率的に機械・電気エネルギーに変換する耐熱材料や低燃費・省エネルギーに寄与する高比強度軽量材料等の飛躍的高性能化が、エネルギー問題の解決に向けて求められている。こうした材料の強度・信頼性は、ミクロの原子間結合のみならず、メゾスケールの内部組織（析出相・粒界・異相界面・転移・点欠陥・不純物偏析等の集合体）に支配され、それらを系統的に設計・制御することが肝要である。のために、第一原理による電子構造計算やエントロピーを考慮した自由エネルギー計算、更にミクロからメゾ、マクロをつなぐマルチスケール計算が必須となる。

超並列大規模計算機環境を用いて、大規模第一原理計算・自由エネルギー計算を実行するとともに、フェーズフィールド法等により、ミクローメゾーマクロをつなぐマルチスケール計算技術を確立し、内部組織の安定性、微細構造、強度、諸特性を解明する。（図4.2-1）

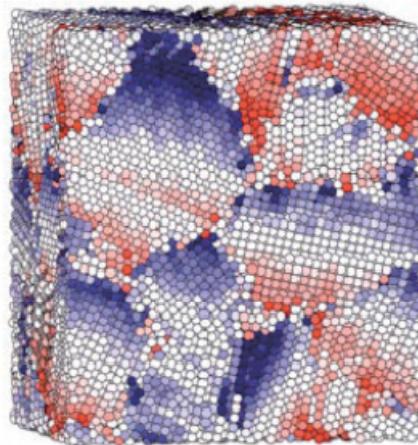


図4.2-1 鉄の内部組織(香山正憲(AIST))

(v) 新量子相・新物質の基礎科学

多体量子系の示す多様性や階層性の理解は、今世紀凝縮系科学の中心課題であり、人類の自然探索と理解の最前線でもある。とりわけ、強相関多体量子系は新しい現象と概念の宝庫であり、高温超伝導、巨大応答、トポロジーで分類される量子ホール相やトポロジカル絶縁体などの物理を生み出し、遷移金属酸化物、希土類化合物、有機導体などの強相関電子物質群やナノチューブなどのクラスター化合物、量子ドットなどの微細加工構造、冷却中性原子などの新しい系の探索と理解へと導いた。

更なる進展のためには、物質科学の中核と基礎科学を担い、物理と化学の枠を超えて粒子間の相互作用の強い分子系や凝縮物質を取り扱う強相関多体量子科学・計算科学の汎用手法を確立し、多体集団の励起状態や非平衡ダイナミクスに対する飛躍的な理解を図る必要がある。これにより、新しい量子相（新超伝導、新絶縁体、新量子液体）、すなわち、人類の知らない物質の新たな形態の発見を可能にするとともに、高温超伝導・高効率熱電素子・マルチフェロイクスなどの強相関新物質を次世代の応用や産業基盤開拓の基礎として展開していく。

また、高精度電子相関理論の開発、相対論効果の導入により、複雑な電子状態を分光学的精度で計算することが可能となり、更に、部分系の電子状態を重ね合わせる方法や液体論などの開発により周囲の環境を含めた巨大分子系の計算も行えるようになった。これらの手法の融合や、より高次の電子相関の取り込みによる金属原子を含む巨大分子系や励起状態などの計算、また電子状態計算と分子動力学計算の組み合わせによる自由エネルギー面での化学反応の理論的研究を通して、分子レベルの触媒設計や電池の開発、創薬などを進めていく。

(3) 次世代に解決すべき課題

(i) 半導体電子デバイス

次世代技術では、高速動作／高集積／低エネルギー消費の観点から、デバイス構造をナノメートルオーダーに微細化（ダウンサイジング）することが強く要求されると同時に、配線／High-k（高誘電率の絶縁膜）／新しい不揮発性メモリなどの要請からデバイスを構成する材料の種類も多岐にわたってきている。デバイス材料に関して言えば、シリコン、その酸化膜、ドーピングする不純物元素や水素だけでなく、ゲルマニウム、各種高誘電率絶縁膜、化合物半導体、カーボンナノチューブなどに対象が広がっている。またデバイス性能に関して言えば、平衡状態に近い条件下だけでなく過渡的現象を含む非平衡状態に近い条件下での予測が要求されている。

計算手法として、主として第一原理計算[4.2(4)(i)]が用いられる。計算需要は①より大きな系の電子構造を求める、ということの他に、②電子相関を高精度化して異種材料界面のバンドギャップなどを正しく評価する、③熱的特性、電気的特性、分光学的特性などを第一原理計算により予測する、④長時間の第一原理または古典的分子動力学法により動的性質を知る、⑤電子励起された状態を精度よく求める、などと多岐にわたる。

このような多岐にわたる要求を満たすことができるシミュレーションの重要性は増大している。これらの要求のうち特に①に答えるために、第一原理シミュレーションで、少なくとも数千原子から10万原子規模のモデルサイズを扱う必要がある。現在、計算負荷が計算対象の原子数Nに比例するO(N)法の開発が盛んであり、近い将来10万超の大規模計算の標準的なシミュレーション手法となる可能性がある。また、古典的分子動力学法により数千万原子規模のデバイス特性を予測する必要性も高まる。第一原理O(N)法、古典的分子動力学法は計算負荷が軽いため、④の動的性質を知るという要求にも応えることができる。また、第一原理計算と古典的分子動力学法（更には有限要素法）を連携して使うことで大規模計算を行う試みも数多く行われている。②の電子相関の高精度化に対する要求は特に強く、パラメータの第一原理に基づく自動設定や大規模並列化時の効率を上げることなどが課題である。③の電気特性の予測

には非平衡グリーン関数法を使って行う手法が有効であり、これも1万原子程度の規模の計算が必要となる。（図4.2-2）

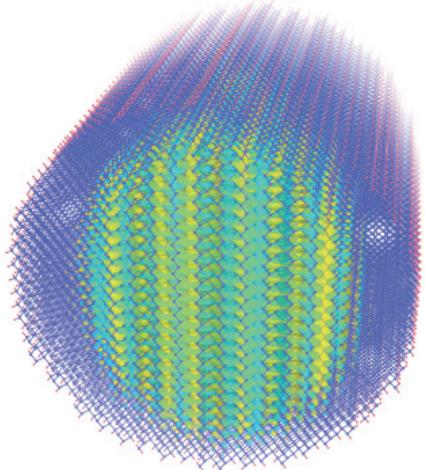


図4.2-2 カーボンナノワイヤーの電子状態計算(押山淳(東大))

$O(N^3)$ の第一原理計算に関しては、実空間密度汎関数法により10万原子の計算が可能であることが示され、実際に大規模手法が開発されている。また同じく平面波基底の手法でも、金属酸化物材料に対して10万原子規模の計算が視野に入っている。磁性材料や電子相関の強い材料などに関しては、大規模系を扱う場合の収束安定性が課題になると思われるが、この課題が解決するとこれまでの凝集系物理のかなりの問題を直接解明できる。

しかしながら、依然として更に一桁程度多い原子数の取り扱いが必要な問題も残されている。大規模な計算としては、自己無撞着な計算を一度行うもの、材料に関わるパラメータを変えた複数回の計算から実験的研究結果と比較し得る統計量を抽出するものなどがある。10万原子を超える計算課題としては、次のような例がある。(1)半導体金属界面における金属誘起ギャップ状態(MIGS)の存在の有無およびその電気特性への影響。(2)量子ドットによる新規デバイスの評価・特性予測。(3)相転移の核形成の問題。(4)合金における組成の微妙な違いによる塑性変形特性や、弾性特性の変化の予測。(5)固液界面の問題。

$O(N^3)$ の手法では、原子数の規模は数万原子程度までで統計量を抽出する需要や反応経路探索などの需要が多くなるであろう。

(ii) 光・電子材料

電気・光学・磁気特性を持った機能性材料は、エレクトロニクス、フォトニクス、スピントロニクス等のデバイスを構築する必須要素である。従来の機能性材料の主役は、シリコン等の半導体に代表される無機物質であるが、近年、その機能性の向上に不可欠な微細加工におけるさまざまな限界が明らかになってきた。一方、有機化合物や遷移元素を含む有機・無機複合分子を基本とする機能性材料は、その構造および電子的な柔軟さと多彩な分子集合様式に起因するはるかに高い機能性と化学的・物理的制御可能性を備えており、無機材料を凌駕する次世代分子デバイスの基本要素として注目されている。これらの物質の機能発現機構解明やその合理

的設計のためには、個々の分子からその集合相に至る構造・物性・反応の統一的な予測を可能にする高精度かつ大規模な最先端理論計算化学の方法の開発と実行が必須である。

近年、個々の分子やその集合相の相関量子状態において、「電子相関が新機能性発現の鍵となる」という新しい概念が化学と物理の学際領域において見いだされつつある。また、上述したように、電気・光学・磁気特性単独の機能性だけではなく、今後は電子と光が露わに結合したような状態に起因する電子・光新規機能性次世代ナノデバイスの開発が盛んに行われると考えられる。具体的な例としては、広帯域・高効率光エネルギー変換デバイス、量子データ転送素子、電子回路に替わり得るフォトニックナノ回路、波長変換素子、メタマテリアル等、きわめて重要な新規な機能性を備えた次世代デバイスが挙げられる。これらの高い光・電子機能性を持ったナノデバイスの理論設計を実現するためには、電子ダイナミクスとミクロスコピックな電磁場ダイナミクスが結合した状態を記述するナノ光学理論とその理論に基づく超並列電子・電磁場ダイナミクス法[4.2(4)(v)]の開発が必須である。

(iii) 生体分子機能・創薬

近年の急速な構造生物学研究の進展により、膨大な数のタンパク質立体構造の決定が進んだ一方、構造決定が本質的に難しく未解明のものも多数残されている。この中には、本質的に特定の立体構造を取りにくい、いわゆる天然変性タンパク質や、機能のうえでは複合体を形成して作用するものの、複合体を構造生物学的に安定状態として測定することが難しい過渡的複合体などが含まれる。このような柔軟性が高く、離合集散して機能する生体分子の原子分子レベルの機能解析が待たれる。またタンパク質-リガンド間相互作用については、タンパク質の3次元構造は実験によるところが大きいものの、より高い解像度の情報を得るためにQM計算(QM/MM法、フラグメント分子軌道(FMO)法[4.2(4)(iv)]、分割統治(DC)法)レベルでの構造最適化が求められている。また、拡張アンサンブルMD法[4.2(4)(viii)]などによって、タンパク質がリガンドと結合するプロセスを明らかにできるものと期待される。こうした中間状態の情報は、新しいタイプの阻害剤設計への重要な知見となる。更にはタンパク質分子に加えて脂質も結合した巨大複合体であるHIVやインフルエンザウイルスなど病原性の高いウイルスについて、細胞との結合・解離といった機能の分子レベルでの解明とともに、ウイルス性疾患の予防・治療薬開発への展開も期待される。このようなタンパク質複合体の構造形成においては、溶媒や塩の効果もきわめて重要であること、更にはタンパク質と脂質膜との相互作用について未解決であることから、全原子の分子シミュレーション[4.2(4)(vii)]による生体機能の分子レベルでの解明が求められている。(図4.2-3)

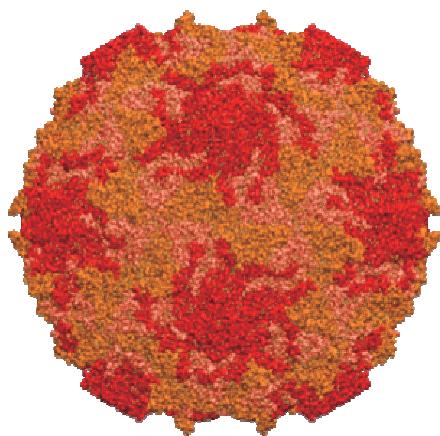


図 4.2-3 ウィルスの全原子計算(岡崎進(名大))

(iv) 分子構造・分子機能の非経験的予測

新たな理論と計算方法の開発および計算機の発達とともに、分子構造や分子機能を非経験的に計算から解析・予測できるようになり、計算化学者のみならず実験化学者も量子化学計算を行うようになっている。今後は、さまざまな分子の基底状態のみならず励起状態を分光学的精度で取り扱うため、相対論、露わに相關した電子状態理論、多参照理論などによる高精度計算[4.2(4)(ii)]がより一層重要になると考えられる。

また、FMO 法[4.2(4)(iv)]や DC 法、ONIOM 法、電子状態計算と古典力場計算を組み合わせた QM/MM 法、3D-RISM や MC-MOZ などの液体論、およびこれを組み合わせた 3D-RISM-SCF 法などは、巨大分子や溶液系など大規模系の計算を可能にした。これらにより、実在系の化学反応過程を理解し制御することで、新しい物質変換の開発ができ、創薬、触媒や電池の分子レベルの設計につながると期待される。

更に、上記の領域分割手法に加え、金属などの非局在系を扱うため線形スケーリング手法による全系計算を実現し、ナノスケールで初めて得られる弱い相互作用や立体障害を効果的に利用した機能や構造の提案を目指す。

(v) ソフト分子集団機能

界面活性剤や脂質・高分子などの多官能性の分子は、温度や塩・共溶媒濃度のような外部パラメータによって、ミセル・膜・液晶といった多様なソフト構造体に自己組織化し、分子の認識、分配、分離、輸送の機能を発揮する。イオン液体や超臨界流体は、溶媒条件選択による物理的・化学的性質のチューニング幅が大きく、特異的な反応選択性や溶解性・電気特性を発現する。更に、水のような「通常」の分子集団も、制限空間やクラストレート内では、分子間相互作用を原子レベルで反映して、構造や動的性質を大きく変える。一般的な高分子材料も、分子配向を高度に制御することにより、従来にない高機能・高強度化を示す。上記は、規則性とランダム性を兼ね備えた原子・分子集団としての働きであり、ドラッグデリバリーシステム(DDS)、分離膜(海水淡水化等)、食品・コスメティック、生体模倣材料、ガス分離、温暖化ガスの吸収、電池電解液(図 4.2-4)、結晶成長といった広範な学術的・社会的ニーズに直結する。

ソフト分子集団の機能の解析・設計には、原子・分子レベルの相互作用の理解と大域的な集団形状の記述の両方が必要である。数桁に及ぶ空間・時間スケールの解析には、量子化学計算[4.2(4)(iii)]・分子シミュレーション[4.2(4)(vii)]・粗視化シミュレーション・連続体モデルを融合したマルチスケール手法[4.2(4)(xiii)]の開発が必須である。特に、実地応用につなげるためには、熱エネルギー程度の分子間相互作用の効果を精度よく取り扱い、化学的個性を取り入れる必要がある。量子化学計算と分子シミュレーションの大規模化に加え、自由エネルギーを中心とする統計力学理論やレイイベント探索アルゴリズムの高度化が必要である。

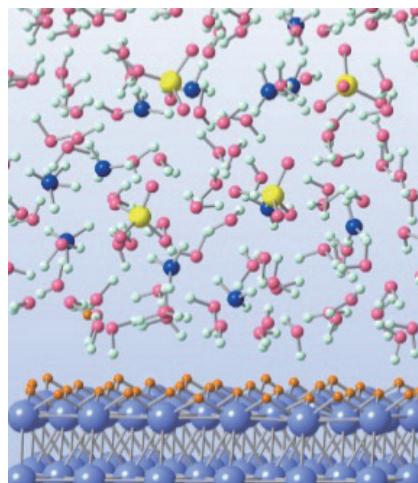


図 4.2-4 電極・電界液界面の第一原理計算(杉野修(東大))

(vi) 物質・エネルギー変換

必要な物質を汎用元素から効率よく合成する物質変換法の開発は、わが国の産業基盤の強化に止まらず、地球規模での持続可能な社会を構築するために不可欠である。このためには複雑な化学反応の微視的理解と予測・制御が必要であり、自由エネルギー面での理論・計算化学研究の遂行が不可欠である。研究対象としては、複雑な構造を持つ新しい有機分子触媒、金属微粒子、担持触媒、金属表面、金属酸化物表面、金属錯体などが挙げられ、周囲の溶媒などについては数千原子を含めた実際の物質変換系について、1000 原子程度の主要部分は量子化学計算[4.2(4)(iii)]、周囲は分子力場計算による QM/MM-MD 計算を実行するといったアプローチがある。

また、世界的なエネルギー需要の急増にともない、低コスト・低環境負荷の新規エネルギー変換デバイスの開発が急務になっている。太陽電池・人工光合成素子の開発では、光吸収過程、電子/正孔キャリアーのダイナミクスの理解と予測、燃料電池、リチウムイオン 2 次電池などの開発ではイオン伝導、電極と電解質界面での電気化学反応の理解が必要である。熱電変換素子の開発では、電気伝導度に対する熱伝導度の比率を極力下げる必要がある。これらすべてに共通する課題は、デバイス全体を構成する複合材料の有するサブミクロンオーダーの巨視的構造とエネルギー変換効率との相関の理解、使用される材料性能の劣化機構の解明と予測である。

これらの課題に対応するためには、有機・無機材料の大規模第一原理計算[4.2(4)(i)]が必要不可欠である。

(vii) 界面・表面

不均一触媒の反応場は典型的な気相・固相ナノ界面であり、半無限の周期性と乱雑さを併せ持つ固体表面と、反応に関わる分子群・微粒子の局所的電子相互作用を第一原理に基づきシミュレート[4.2(4)(i),(iii)]することが可能となってはじめて、理論計算が実験を先導する時代が到来する。気相表面反応における周期性+乱雑さ+局所性を再現するには少なくとも 100 ナノメートル四方の領域を露わに扱う必要がある。

気液界面は、大気環境科学との境界領域として、近年特に重要な課題として位置づけられている。工学分野における気液二相流の制御にとっても本質的であり、マイクロバブルなど特異な反応場としての応用も期待されている。

また、固液界面では、固体側の親水性／疎水性を原子レベルで微細制御することが可能になってきている。界面構造にナノレベルでの凹凸を付けたり、親水性・疎水性の分子を自在に並べるなど、ナノテクノロジーの新たな展開が計算・実験の協業で行われつつある。また、液体側についても、多成分水溶液系はもちろんのこと、摩擦低減などに使用する炭化水素系の分子など、さまざまな工学応用を目指した物質についての網羅的計算が必要である。

今後、多成分系を含めた実在の界面の解明のためには、界面構造の動的なゆらぎや電気二重層構造のイオン分布を分子シミュレーション[4.2(4)(vi),(vii)]で扱ったうえでマクロな理論につなげる必要がある。

従来の空間・時間スケールを超えたシミュレーションが新展開を示すと期待される。

(viii) 構造材料の構造と特性の高精度予測・設計

高精度自由エネルギー計算、第一原理計算、フェーズフィールド法[4.2(4)(xiv)]などを連成したマルチスケール計算[4.2(4)(xiii)]により、結晶相・化合物相・粒界・界面・欠陥の安定性・強度特性を第一原理から予測し、強度や耐久性、耐熱性を併せ持つ材料や軽量高強度の材料の開発を目指す。

これらのシミュレーションには、典型的にはアレイジョブ、すなわちパラメータを変えた互いに独立で比較的小～中規模のジョブを複数（数十～数万）実行することが必要となる。小規模ジョブは 1 ノードで実行され、ノード間通信を必要としない。中規模ジョブは数ノード～100 ノード、大きくても数百ノードで実行される。1 EFlops 級の計算機を用いることにより、数千～数万ジョブ規模の計算結果を一度で得ることができる。アレイジョブの結果からマクロな物理量を取り出し、次の計算へ素早くフィードバックするためにも、アレイジョブが一度に終了することは非常に重要である。

(ix) 熱交換デバイスの安全性向上・特性解析

火力、原子力発電所やボイラなど熱交換デバイスでは気相と液相が混在する、いわゆる気液混相流（気液二相流）が重要な役割を果たす。一般に気液混相流は相転移と流動運動がカップルした典型的なマルチフィジックス・マルチスケールな現象であり、マクロな流れとミクロな相転移のスケールの乖離、および相転移をともなうことによる相境界の生成・消滅・移動が数値計算の障害となってきた。

この問題に対しては、これまで現象をスケールに分け、それぞれの階層において現象論的な支配方程式を仮定することで全体の性質を調べる階層的アプローチが取られてきたが、この方法では各階層のモデル化に任意性が入る上、階層間の接続に経験的なパラメータが必要であった。

一方、気液混相流を構成するすべての粒子（分子）を陽に扱えば、ミクロな粒子間相互作用からマクロな現象を任意性なく再現、解析することが可能となる。エクサスケールではおよそ100兆粒子程度の自由度を持つ系の計算[4.2(4)(vi)]が可能と見込まれており、実験と直接対応可能なメソスケールに達する。この、気液混相流の全粒子計算により、より安全かつより高効率な熱交換デバイスの非経験的な設計・開発を目指す。

(x) 強相関電子系(超伝導体、磁性体)の機能解明、新物質デザイン

強相関量子多体系は新しい現象と概念の宝庫である。実際、高温超伝導、高効率熱電素子、マルチフェロイクスなど近年見出された新物質群の多くが、電子相関の大きな系に属し、その新機能発現機構の解明は、次世代の応用や産業基盤開拓の基礎として期待される。また、近年実験技術の進歩の目覚しい光格子中の冷却原子系においては、ボーズ・AINシュタイン凝縮をはじめ、ボーズ系モット転移、多種原子系における対超流動、双極子相互作用系での超流動固体状態など、固体中での実証の難しかった量子多体现象が次々に検証されており、更に理論予測を超え、概念の革新につながる系の設計も提案されつつある。

摂動論や平均場近似が破綻するような強相関系では、厳密対角化[4.2(4)(xii)]や量子モンテカルロ法[4.2(4)(x)]などの量子ゆらぎの効果を正しく取り込んだ第一原理的手法が不可欠である。エクサスケールでは、厳密対角化で50格子点以上、クラスターアルゴリズム量子モンテカルロ法では10億格子点以上のシミュレーションが可能となる。種々の量子スピン模型、低次元系理論模型のランダムネスの効果も含めた大規模シミュレーションを実行し、物性物理と統計力学の教科書を書き換えるような新概念の数値検証、提案を目指し、物理学の基礎理論の発展に寄与する。

また、第一原理ダウンフォールディング法により、数千バンド、単位胞当たり数百原子以上を含む系の有効模型を第一原理的に導出したうえで、量子モンテカルロ法（数万格子点）、変分モンテカルロ法（数千格子点）[4.2(4)(xi)]などのアルゴリズムを用いたシミュレーションにより、新機能を持った強相関物質材料の物性を高い精度で予測・解明し、材料開発や新デバイス開発を加速する。

(4) 課題を解決するために必要なアプリケーション群（要求性能）

計算物質科学で使われるアプリケーションは非常に多岐にわたる。以下、計算物質科学分野における、現在の主要なアプリケーション・アルゴリズムの中から、凝縮系に対する第一原理計算、高精度分子軌道法、大規模分子軌道法、フラグメント分子軌道法、電子・電磁場ダイナミクス法、短距離力古典分子動力学法、長距離力分子動力学法、化学反応動力学法、量子分子動力学法、クラスターアルゴリズム量子モンテカルロ法、変分モンテカルロ法、厳密対角化、階層的マルチスケールシミュレーションについてとりあげ、その概略・特性と、今後5~10年で必要となる計算機スペックをまとめた。

(i) 第一原理計算（凝縮系）

半導体材料、磁性材料、光学材料、金属材料などの固体材料を主な計算対象として発展してきた手法が密度汎関数理論(Density Functional Theory(DFT))に則った第一原理計算手法であり、第一原理分子動力学法やバンド計算法という名前で呼ばれることがある。Kohn-Sham 方程式(一電子シュレディンガ一方程式)と、電荷密度分布が自己無撞着場(Self-consistent Field=SCF)を満たすように、波動関数と電荷密度分布を繰り返し更新することで解くこの手法の計算需要は、より大きな系の電子構造を精度よく求めるということの他に、長時間の分子動力学計算や統計的処理を行うことにより反応経路や自由エネルギー差などを評価するという、二つの方向に広がりつつある。前者は大規模化を追求する方向性で weak scaling 的である。後者には strong scaling を追求するものと、時間やレプリカなど別の軸に関する並列化により計算機能力の向上を有効利用しようとするものがある。また、励起状態、光学特性、電気伝導特性などの物性予測を高精度に行いたいという需要も大きい。

・ $O(N^3)$ 法

扱う原子数 N に対して演算量が N^3 に比例する計算方法を $O(N^3)$ 法、 N に比例する計算方法を $O(N)$ 法（オーダー N 法）と呼ぶ。伝統的な $O(N^3)$ 法の場合、波動関数 Ψ を表現する M 個の基底関数による M 行 M 列のハミルトニアン行列を対角化して固有値を得るために M^3 に比例する計算量が必要になるが、Car と Parrinello の提案した方法とそこから発展した方法では、SCF の繰り返しの中で反復解法を使ってより少ない演算数で固有値問題を解くことができる。基底関数の選び方には、結晶の周期性を利用した平面波を用いるもの、実空間格子点上の値を用いるものなどがある。全電子ではなく価電子だけを陽に扱う擬ポテンシャル法が大規模計算に適している。価電子軌道の数を B とすると演算数は B^2M に比例する。典型的には、 B は原子数 N の数倍程度、 M は 100 倍程度の値であり、 $O(N^3)$ ではあるが M^3 の演算数に比較すればずっと少ない。ここでは擬ポテンシャル法第一原理計算の中で、平面波基底を用いるプログラムとして、PHASE と xTAPP を、実空間基底を用いるプログラムとして RSDFT を挙げて解析する。平面波基底は古典的基底であり FFT を頻繁に使うが、原子位置に対して計算精度が不变、行列要素を厳密に計算するのが容易である。一方、実空間基底は、力の計算精度を上げるのに工夫がいるが、非局所ポテンシャルと波動関数の積の計算負荷が軽いこと、FFT 演算を含まないことなどから大規模化に適しているとされる。また周期境界条件に縛られない $O(N)$ 法への展開が見込める。平面波基底を使う手法で大規模計算を行うためには FFT 演算にともなう通信を極力局所化する必要がある。基底関数が何であれ、一回の SCF ループ内の計算は、(i) グラム・シュミット法などにより規格直交化する部分、(ii) 波動関数を残差関数を使って更新する部分（残差最小化法 (RMM)）、共役勾配法 (CG)、Block-Davidson 法、最急下降法 (SD) など）、(iii) 部分対角化する（波動関数のユニタリー変換を行う）部分、(iv) 波動関数から電荷密度分布をつくる部分、などからなる。

平面波基底の場合には、負荷の重い部分は、各種の行列・行列積 $O(B^2M)$ と固有値問題 $O(B^3)$ 、FFT 演算 $O(BM\log M)$ などに分解することができる。扱う原子数が多くなるに従い FFT 演算部分の負荷は相対的に小さくなる。波動関数に関する 3 次元 FFT はバンド（軌道関数）と FFT

の1軸分あるいは2軸分を併せて分割することで、核心部のバタフライ演算はノード内（キャッシュ内）に閉じ込めて行い性能劣化を抑えることができる。ただし、分割軸を交換するため局所的な転置転送通信を行う必要がある。非局所ポテンシャルと波動関数の積は $O(B^2M)$ であるが、並列化効率の向上は容易である。これに対し(iii)の部分対角化で使う $O(B^3)$ の固有値問題はそれが難しい。大規模化するためにはこの部分の効率向上が必要であり、数値計算ライブラリの整備に期待する。また、波動関数の規格直交化に用いるグラムシュミット法はスレッド並列版の BLAS を用いて実装しているが、逐次実行部分が残っている。これが並列化効率の制限因子の一つとなっている。これに代わる手法の開発も必要である (TSQR 法 (AllReduce QR 法) や Car-Parrinello 法を改良した波動関数の規格直交化に用いるグラムシュミット法はスレッド並列版の BLAS を用いて実装しているが、逐次実行部分が残っている。これが並列化効率の制限因子の一つとなっている)。

実空間基底を用いる方法は、FFT 演算にともなう通信を局所化するなどの手間が要らない、非局所ポテンシャルと波動関数の積演算の負荷が軽いという違いはあるが、(i)規格直交化や (iii)部分対角化に関して抱える課題は、平面波基底を用いる方法と同じである。

$O(N^3)$ のアプリケーションは、うえで述べたように大規模化と、規模の拡大よりも動的性質を予測するといった方向性の両方を指向するが、ここでは RSDFT では 10~100 万原子規模の計算を目指し、平面波基底の手法は 1 万原子規模の系の動的性質を予測する方向を目指すものとして評価を行う。

・ $O(N)$ 法

より規模の大きい計算をするために複数のオーダーN 法が開発されている。Kohn-Sham 方程式の代わりに密度行列を用いる密度行列最適化手法、運動エネルギーを直接電子状態の汎関数で表す Orbital Free DFT 法、Wannier 軌道のような局在軌道を求める軌道最適化法 (Orbital Minimization 法) 、分割統治法 (フラグメント分子軌道法もその一手法) などがある。オーダーN 法に関しては、現状ではさまざまな手法が持つ問題点や計算精度が完全に明らかになっておらず適用範囲が限定的であるが、これらの問題が解決され、いったん標準的な手法になった後は計算時間が原子数に比例するという特性から、特に大規模系に対して標準的に使われる手法になるであろう。ここでは密度行列最適化によるオーダーN 法第一原理計算手法プログラム CONQUEST のエクサスケール計算機に対する要求値などを評価する。この方法の演算負荷の重い計算には、(i)行列要素計算、(ii)FFT、(iii)局在軌道の実空間座標での値、(iv)疎行列の行列積などがある。(i)は、密行列の行列積として BLAS3 を複数呼びだす方法を用いている。(ii)に関しては現在 Hartree 項の計算に FFT を使っている。これは数十万原子までの系では問題となるが、数百万原子系からは別手法の導入を予定している。(iii)は基底関数とその展開係数から電荷密度メッシュ (FFT メッシュ) 上の値を計算する部分である。(iv)が最も重い計算であり、通信、行列積演算いずれに関しても、複雑である。通信は隣接通信だけでなく、第 4、5 近接ノード程度までを含めた近接通信が多い。また疎行列積はパターンの異なる二つの行列の行列積、更に非ゼロの項の一部だけを計算する場合もあるというような特殊な疎行列の積で、非常に複雑である。またオーダーN 性を保つために行列要素の非ゼロ項だけを集めて一次元配列にストアする必要があり、実際の行列要素との対応づけのための複雑なアドレス計算が欠か

せない。更に並列計算では他プロセスから来る隣接原子情報から自分の隣接原子情報への対応表を、演算の前に毎回作成する必要があり、メモリ参照の量に比べて演算数がきわめて少ないという特徴がある。

【ターゲットとする研究対象】

計算対象は各種固体材料の他に、固相と液相の界面、固相と気相の界面を含む問題、生体材料などがある。 $O(N^3)$ 法は実空間基底を使うもの（RSDFT）が10万から100万原子規模の材料の電子状態計算を目指すが、100万原子規模の問題を対象とするには現在研究段階の新規アルゴリズムの実用化が必要である。 $O(N^3)$ 法で平面波基底を使うものは1,000から10万原子規模の計算を目指す。 $O(N)$ 法は一つの系の原子数は数十万から一億位を目指す。いずれの手法も、半導体や酸化物のナノ構造、固相・液相界面での安定構造や触媒反応などの反応シミュレーションの他に、バイオ系に対しても第一原理に基づく全原子分子動力学法、更に自由エネルギー計算を行う。同時に複数個（100～1000個程度）の第一原理計算を行い、拡張アンサンブル法や反応経路計算、自由エネルギー計算などを行うことが重要になる。この際、 $O(N)$ 法では一つの計算が数10万から100万原子、 $O(N^3)$ 法では1,000～1万個程度の原子を扱うことを想定している。

【要求スペック】

・ $O(N^3)$ 法実空間基底

RSDFTで10万原子規模を扱う場合、それがSi原子などである場合、20万程度の固有状態を求める問題となる。また、格子点は2000万個程度必要である。対象が金属原子でノルム保存型ポテンシャルを使う場合には、格子点は4億点程度必要になる。計算主要部分は、共役勾配法、グラムシュミット直交化、部分空間対角化から構成される。この計算を1日以内で可能な限り短時間で行いたい。格子点の数をM、固有値数をBとすると、必要なメモリ量は16BM Byteとなる。10万原子では、60TB～1200TBである。ノード当たり1TBのメモリがあると想定すれば、問題を乗せるだけで最低でも60～1200ノードが必要になる。部分空間対角化において $B \times B$ のサイズの行列の固有値問題を解く必要があり、ここで $O(B^3)$ の演算を行う。それ以外の箇所は行列行列積の形に還元してBLAS3を呼び出して計算効率を上げることができる。グラムシュミット規格直交化部分では、演算性能100TFLOPS/node、通信バンド100GB/s、ネットワークレイテンシ $1\mu s$ を仮定して、1エクサFLOPS(10,000ノード)のリソースを利用すれば、演算に30秒、通信に21秒要することになる。通信の大部分はreduction通信である。部分空間対角化では、 $B \times B$ の密行列要素計算にともなうreduction通信、固有ベクトルを求めたあとに各ノードにこれを配るためのbroadcast通信などがある。行列対角化に要する時間の他に、演算に40秒、通信に74秒が必要である。

・ $O(N^3)$ 法平面波基底

xTAPP、PHASEは、波動関数を更新するソルバーの種類、グラムシュミット規格直交化を行うかどうか、3次元FFTの分割方法、並列化軸の設定などの違いはあるが、スペック要求はほぼ同じになるので、まとめて記述する。10,000原子系の価電子バンド（固有値）の数Bを $5 \times$

10^4 、非局所ポテンシャルのプロジェクタの数 P も 5×10^4 、基底平面波関数の数 M を 2×10^6 であると想定する。また、FFT の格子点の数を $500 \times 500 \times 500$ とする。すると、波動関数用の必要メモリサイズは、平面波係数を倍精度複素数で持つとすると、 $5 \times 10^4 \times 2 \times 10^6 \times 16 =$ 約 1.5TB 、局所ポテンシャルと電荷密度用には約 2GB である。

ノード当たりの演算性能を 10TFlops とし、一つの構造（レプリカと呼ぶことにする）の計算を 1000 ノードで行う（1 レプリカの計算を 10PFlops で行う）ものとして考える。また、オンチップメモリは FFT の 2 次元分の計算ができるだけの大きさ（4MB 以上）があるとする。ネットワークは、リンク当たり 50GB/s 、トポロジーは $10 \times 10 \times 10$ nodes の 3D mesh を想定する（Bisection BW は効率 50% として、 2TB/s となる）。このシステムでレプリカ 1 個を担当し、これが $100 \sim 1,000$ 個並列で動くことで、全体で $1 \sim 10\text{EFLOPS}$ の計算機能を使う。また、レプリカ相互は SCF 1 回、あるいは MD 計算 1 回に 1 度程度通信するものとする。

また、バンドと平面波基底係数の両方を並列化軸にとるのが、規格直交化をグラムシュミット法で行う場合には有利であり、PHASE では、並列ノード数が $1,000$ の場合にはバンドに関する分割を 4、平面波基底係数に関する分割（G 分割）を 250 というように割り当てる。すると、FFT にともなう通信は、250 分割された（G 空間上では半径 G_{\max} の球内に分布している）平面波展開係数を同じく（一つの軸に関して）250 分割された（立方体状に分布する）FFT 格子点に展開するための転置転送と、FFT の分割軸を変更するための転置転送である。2 次元分の FFT 演算は一つのノード内に閉じて行うこととする。バンド分割だけしている場合には、FFT にともなう通信は必要なくなる。分割の仕方に関係なくいずれの場合にも、ノード内当たり、 500×500 の要素の 2 次元 FFT を $25,000$ 回、一次元 FFT を 1.25×10^7 回行うことになる。通信時間を無視して、メモリバンド幅を 1TB とすると、全バンドの FFT を完遂するのに 3 秒要する。しかし、バンド幅が 10 分の 1 になると（B/F 値=0.01）、30 秒程度要することになり、全体の計算時間を圧迫することになる。

行列行列積の大きなものは、非局所擬ポテンシャル(V_{NL})と波動関数(Ψ)の積の計算である。P 行 G 列の行列と G 行 B 列の行列をかけて P 行 B 列の行列をつくり、これに P 行 G 列の行列をかけ B 行 G 列の行列をつくる。前半の積の演算数は $2\text{PBG} = 10^{16}$ になり、 10PFlops 構成では、計算時間は 1 秒である。後半の積の演算は 2 回行うので計算時間は 2 秒である。P、B、G それが分割されているとすると、G 方向の reduction、B (P) 方向の broadcast あるいは allgather 通信が必要になる。バンド分割が 4 の場合、前半部分で 5GBytes のデータの reduction を行う。これは 50GByte/s の転送能力があれば、隣接ノードに送るのに 0.1 秒かかる。全体では G 分割数に応じた通信ステップ数に比例した時間がかかる。また、B (P) 方向の broadcast は各ノードが持つ $B/4 \times G/250 \times 16\text{Bytes} =$ 約 1.5GBytes のデータを送る。部分空間対角化にともなう行列要素の作成と、対角化した固有値・固有ベクトルを使って波動関数のユニタリー変換するのにも、同様の行列積計算を行う。

【計算時間】 PHASE を使って $12,288$ 原子を京速計算機の $12,288$ ノード ($\times 8$ コア) で計算したとき 1SCF (ただし修正最急下降法で部分空間対角化を含まない) 当たりの計算時間が約 190 秒であった (ただし効率は 25% 弱) ので、これから類推すると 10PFlops クラスターでは 1SCF に 30 秒程度かかることになる。他のソルバーを使う場合や部分空間対角化法を使う場合には、60 秒から 100 秒程度要すると予測される。10,000 原子に対して、xTAPP のプログラム解析か

ら予測した値、66秒から127秒とほぼ一致している。1MD計算に20SCF必要であるならば、1MD計算に1300秒から2500秒必要になる。

ここまでノード当たりの10TFlopsの計算能力があるとしてきたが、ノード当たり100TFlopsの能力がある場合には、1構造を100ノードで計算することになる。ノード数の変化により、bisection B/Wやreductionに必要な段数などが変わり、計算時間は最大15%程度減少する。

【メモリ】全波動関数係数のデータを保持するのに、ノード当たり約1.5GB必要であるが、他に作業用領域がバンド分割の数を掛けた量必要である。バンド分割数が10であれば、15GB必要になる。他にB×Bの部分空間行列、局所ポテンシャル、電荷密度分布などの記憶領域が必要である。ノード当たり10TFlopsの能力を想定すると、全部合わせて少なくともノード当たり50GB～200GB必要である。ノード当たり100TFlopsの能力を想定すると、ノード当たり150GB～300GBのメモリが必要である。

【オンチップメモリ】2次元FFTが載るのに十分な量としてチップ当たり10MBとする。

【ストレージおよびI/O バンド幅】10PFlops相当のノード当たり、最低1.5TB。1エクサ当たり15PB必要である。I/Oに一つの構造の計算時間の5%以下の時間を与えるとすれば、1000ノード当たり25GB/s程度の速度が必要である。

【メモリバンド幅】ここではB/F値を0.1程度として予測したが、これが0.01の程度になるとFFT演算に要する時間が10倍になり、実行効率を落としてしまう。また、規格直交化でグラムシュミットの直交化法を使う場合、並列化効率とノード内の効率が背反する傾向があり、特にノード当たりのバンド数が小さい場合（例えば10,000ノードを使う場合）には、この傾向が顕著になる。更に、電子相関を高精度化するなどの演算を行う場合には、より大きなメモリバンド幅が必要になる。

【並列ノード数とB/F値、扱う系の大きさの関係】ここでは並列ノード数を1,000程度にして考えたが、O(N³)計算では並列ノード数を増やせば必要B/F値は大きくなる関係がある。またこの関係が系の大きさとも相関を持っており、系が大きいほどB/F値は小さくてもよくなる。例えば、1,000原子程度の大きさの系を10,000ノードで計算することがバンド幅律速になっており計算効率が悪い場合にはノード数を減らして実行すればよい。この程度の規模の系の長時間MDを行う目的である場合にはノード数を増やしてstrong scalingの効率を向上する必要があるが、他に例えば統計性を重視する場合には時間に変わる別の並列化軸を設定して、1構造当たりのノード数を抑制することができ、計算機をより有効に使うことができる。Strong scalingの効率を向上するためのチューニング負荷は大きく、1万原子程度の系に対して京速計算機以上の並列ノード数を使って高い実効効率を達成することは困難が大きいと考えられる。

・O(N)法密度行列最適化法

CONQUESTで扱う行列には、補助密度行列L_{iα,jβ}や、局所軌道間の重なり行列要素S_{iα,jβ}があり、これらの項の積をつくって計算を進める。ここで、iやjは原子の、αやβは軌道の指標である。原子の指標iに関して並列化を行う。行列のサイズは、（全原子の軌道の数(iα)）×（平均の隣接原子数とその軌道の数(jβ)）となる。各行列は異なるカットオフ半径を持つ。行列積LSLなどは最も大きな行列の一つである。「京」の試験利用において、約4000ノードで50万原子系の計算を実現している。現在のサイズ(100万原子より小規模な系)では静電ポ

テンシャルの計算に使われる FFT の計算時間はほとんど問題にならない。将来も古典分子動力学で使われる手法の導入などによりこの部分の計算時間は無視できると仮定する。1 億原子系の第一原理計算を行う場合を考える。10TFLOPS の性能の計算機ノードを 10 万ノード使って計算するならば、1 ノード当たり 1000 原子を扱うことになる。局在基底、オーダー N 法の計算は精度によって必要なメモリ、計算時間が大きく変わるが、シリコン系で典型的なカットオフ半径、DZP 基底関数の場合、現在 1 ノード 128GFLOPS で 1 ノード当たり 100 原子程度で MD 計算の 1 ステップに 20 分程度かかる。

【計算時間】 1 ノードで扱う原子数が 10 倍、1 ノードの速度が 100 倍になるとすると、計算時間は 1/10 になり、2 分程度で MD 1 ステップの計算ができることになる。ただし、この実行性能は B/F 値が下がれば大きく減少する。

【通信】 1 ノードが扱う原子数が多くなると通信相手のノードがかなり近いものだけになる。ノード当たり 1000 原子を扱う場合には、ほとんど隣接ノードとの通信だけになる。CONQUEST では、各ノードが持つ行列要素（と隣接原子の情報、インデックス）は、適宜分割し必要なノードに送られる。一度の通信におけるパケットサイズはユーザによって制御されるが、この時のサイズはレイテンシが問題にならないためにはある程度大きな量であることが望ましい。一方、受け取った行列要素を用いて行われる演算は一度に行われるために、受け取った行列要素のサイズがキャッシュに載るサイズであると効率的な計算が行える。送受信はノンブロッキング通信で行われ、通信と演算の時間を重ねることによって時間を短縮することが可能である。

【メモリ】 1 億原子の場合の最小基底のシリコンの場合を考慮すると、必要行列サイズは、 1×10^8 (i の数) $\times 1000$ (j の数) $\times 4$ (軌道の数 α) $\times 4$ (軌道の数 β) $\times 8$ (bytes) $\cong 10^{13}$ (bytes) = 10 TB となる。密度行列のカットオフ半径の大きさなどが大きくなる可能性があること、軌道の数も原子当たり 13 くらいにはなる可能性があること、更に同程度の規模の行列が 5~10 個あることを考えると、この見積り値に 500 度乗する必要があり、結局、 $5 \times 10^{15} \cong 5$ PB 程度必要になる。使用するノードが 1000 個であれば、ノード当たり 5TB のメモリが必要である。この他作業領域などを考えると 5~10TB 必要である。

【オンチップメモリ】 計算速度がノード当たり 100 倍程度になるとして、それに比例して現状必要な量の 100 倍として 200~300MB 程度必要である。

【B/F 値】 現状の「京」のシステムにおいても計算効率を律速する要因の一つとなっているので、0.2 を要求値とする。

(ii) 高精度分子軌道法

分子軌道法は、基本となる Hartree-Fock 法を出発点とし、摂動法、結合クラスター法、配置間相互作用法などにより電子相関を取り込み、計算精度を系統的に引き上げられるという特徴がある。行列積、行列対角化、連立一次方程式計算、そして基底関数の軌道角運動量によって演算内容が異なる 1 電子・2 電子積分計算が主な演算で、計算対象分子を分割しない限り、どの方法でも全対全通信を行う必要がある。電子相関計算では、中間データ量が系の 3 乗もしくは 4 乗に比例して増加するため、各ノードに分散させてもノード当たりの必要メモリ量は多くなる。

エクサスケール計算機では、分光学的精度で分子構造や機能を予測することが期待される。この目標は、露わに相關した結合クラスター法を完全基底関数極限で解くという、超高精度電子状態計算で達成される見込みである。ここで、電子相關の計算で必要になる 4 中心 2 電子分子軌道積分を、3 中心 1 電子分子軌道積分と求積点での分子軌道の値の積から数値求積法により計算する。多電子積分計算についても同様に数値求積法で行う。求積法で 2 電子積分を計算する部分と、それに続く計算部分をまとめることで演算量を減らすとともに、計算負荷およびデータ分散を容易にする。主要な演算は行列一行列積である。各ノードに分散されている求積点ごとのデータを集めため、通信は allreduce、gatherv が大半である。以下、基底関数極限のフラーレン分子(2 万基底、100 万求積点)の計算、1 ノード性能 100TFLOPS、全体性能 1EFLOPS を想定して見積もりを行う。

【メモリ】2 万×100 万(160GB)の配列が 4 つ、更にその他の配列も考慮して 1 ノード当たり 1TB が必要になる。メモリバンド幅は、(2 万×100 万) × (2 万×2 万) の行列積演算では、一度だけメモリからデータが送られると仮定すると 40GB/s、余裕を見て 100GB/s が望まれる。一連の操作を波動関数が収束するまで数十回繰り返し行う。

【オンチップメモリ】求積法で計算する 3 中心 1 電子積分用として 1GB 程度は必要になる。

【通信】2 万×100 万の配列を gatherv で集めた後、上記の行列積演算を 4 回続けて行うので、計算時間の 1 割で受信を完了させるためにはノード当たり 50GB/s のバンド幅が必要になる。

【ストレージ】計算中のデータはすべてメモリに保存するため、出力するファイルは計算結果のみである。そのサイズは 100TB 程度であり、0.01TB/s のファイル I/O 性能が必要となる。

(iii) 大規模分子軌道法

Hartree-Fock 法、密度汎関数法によるナノスケール分子の計算を行う。大部分が 2 電子クーロン反発積分の計算であり、演算自体は複雑であるが比較的少量のデータを何度も利用するといった特徴がある。Gauss 関数の局所性を利用するため、IF 文によるカットオフを多用している。3 次元ナノスケール分子(1 万原子系、10 万基底)計算を想定すると、30TFLOPS マシン 1 万ノードの場合、計算時間は 1 回当たり 30 分である。安定構造を求めるためには、この計算を数十回繰り返す。

【メモリ】10 万×10 万(80GB)の配列を、Fock 行列、正準化変換、基底重なり、分子軌道、密度行列用に 5 つ用意するため、1 ノード当たり 400GB 必要になる。10 万×10 万の行列積を行うため、密度汎関数計算での数値積分で 1 原子当たり 1 万点グリッドを発生させる場合、ノード当たりの Fock 行列へのアクセスデータ量は、 $10 \text{ 万} \times 10 \text{ 万} \times 1 \text{ 万(点数/原子)} \times 1 \text{ 万(原子数)} / 1 \text{ 万(ノード)} \times 8 \text{ Byte} = 800 \text{ TB}$ となる。カットオフによるデータ量削減(約 10% に削減)を考慮し 1 分でこのアクセスを完了させるためには、ノード当たりのバンド幅は 1.8TB/s 必要になる。

【オンチップメモリ】2 電子積分計算のため、1 コア当たり 1MB 必要となる。これは、(gg|gg) 型積分では、 $15 \times 15 \times 15 \times 15$ のサイズの配列にデータを蓄え、同等程度の計算用配列も必要になるためである。

【通信】計算 1 回(30 分)あたり、80GB 配列を allreduce で集める操作を 30 回程度行う。通信時間を全体の 5% にするには、バンド幅 30GB/s が必要になる。

【ストレージ】 出力するファイルは計算結果のみで、そのサイズは 100GB 程度である。ファイル I/O 性能は 0.0001TB/s 程度で十分である。

(iv) フラグメント分子軌道法

フラグメント分子軌道(FMO)法は並列処理を駆使し、タンパク質の電子状態を量子論(QM)的に丸ごと計算することが可能な手法の一つである。FMO 計算は実際には、基本の Hartree-Fock から高次相関法まで多種の近似がある。一般に相関計算では、DGEMM 等の BLAS を使ったテンソル縮約が支配的で、軌道の添字を複数持つ多次元配列の操作となるために B/F が高いほうが性能的には有利である。ただし、タイリングやブロッキング等を適宜導入することで 0.1 程度までは性能の保持が可能である。メモリ要求値に関して述べれば、FMO2 のダイマーでクラスター展開の計算では、作業配列の総容量はアミノ酸残基の組み合わせと基底関数にもよるが、数十 GB には容易に達する。

現時点では、数百残基のタンパク質の PDB 構造をベースにした一点での FMO2 計算はルーチン的に行えるようになってきているが、より実在的なモデリング手法として信頼性を高めるには、水和条件を課したうえで揺らぎを考慮するために分子動力学的に生成された多数の構造サンプルを扱った統計的な算定が望ましい。また、3 体や 4 体の展開(FMO3、FMO4)を行うことが、精度向上の観点から望ましい。フラグメントのトリマーやテトラマーの相対計算コストは数的には単純組み合わせよりは少ないが、個々のサイズが大型化するために増加する。2 次摂動で数百残基のタンパクを扱う場合、FMO2 に比して FMO3 で 3~5 倍、FMO4 では 10 倍程度である。サンプル数の設定によるが、FMO4 で相関レベルを上げることまで考えれば、現行計算に比して要求される計算コストは数万~十万倍になるため、エクサ計算機で“統計的ジョブ”的な高速実行が可能となれば、その科学的な恩恵はきわめて大きくまた本質的なものとなる。

FMO 計算は、光応答タンパク質の電子遷移エネルギーの定量的な算定でも使われてきている。これは、応答部位(クロモフォア)を特定したうえで限定向励起状態計算を行うものだが、エクサ級の超並列計算資源があれば、タンパク質全体について求めることも可能であろう。物性値評価としても、2 次高調波などの非線形光学応答核磁気共鳴などの磁気応答などもカバーされる。光合成系(PSC)の電荷分離のモデリングについても、FMO 計算から得られるフラグメント MO を再構成する(FMO-LCMO)などの技法を用いて大域での電子移動度の算定が行えるようになると思われる。そこでは数千万次元の非疎行列の固有値問題を解く必要がある。

計算機の環境について付言すると、米国の NWChem すでに活用されている多ノード共有メモリ空間構築と行列積ツール(GA)等が提供されると大規模フラグメントの処理には福音となると思われる。また併せて、ノード間をまたぐスレッドベースの並列化もサポートされるとコードの発展には有利であろう。“統計ジョブ”に関連しては、計算結果をダンプする半導体メモリ(SSD)とともにフォルトトレランス機構が考慮されることが望まれる。

(v) 電子・電磁場ダイナミクス法

光機能性を持った量子ナノ構造体デバイスを理論的に設計するための、電子・電磁場ダイナミクスの数値計算シミュレーションソフトウェアである。対象とする系は、1辺十数 nm から数十 nm 程度の実在系ナノ構造体。原子数は 100 万原子から 200 万原子、時間ステップ数は 2.5 万～5 万ステップである。

【アルゴリズムの説明】

時間依存 Kohn-Sham 方程式(方程式の形は時間依存シュレディンガー方程式と同一)を実空間 3 次元グリッド上で差分法を用いて解く。x,y,z 方向の格子点数を各々 Nx,Ny,Nz とすると、実空間グリッドの総数は $N_x \times N_y \times N_z$ となる。主要な演算は、ハートリーポテンシャルを評価するためのポアソン方程式の計算、時間発展計算にともなうハミルトニアンの波動関数への作用の二つに大別できる。いずれにもラプラシアンの作用が含まれており、その演算は、 $((N_x \times N_y \times N_z) \times (N_x \times N_y \times N_z))$ の疎行列と $(N_x \times N_y \times N_z)$ のベクトルとの積と等価である。ただし、実際の計算では疎行列そのものを扱うのではなく、縮約してベクトルとベクトルの積に帰着する。マクスウェル方程式も実空間 3 次元グリッド上で差分法を用いて解くが、Kohn-Sham 方程式に比べればその計算負荷は格段に低いので相対的に無視できる。

【想定する計算】光機能性を持った量子ナノ構造体デバイスを設計するためには、最低 50000 ステップの時間発展が必要となる。C60 分子を立方体空間に 25 個×25 個×25 個～16000 個並べる系を想定してスペックを見積もる。この場合、原子数は 60×16000 分子～960000 個、軌道数は 120×16000 分子～1.9M 軌道となる。

【想定する計算機】時間発展 1 ステップ当たり 1 秒で計算を行うためには、630PFLOPS のシステムが必要になる。

【計算空間総メッシュ数】メッシュサイズを 0.25\AA とすれば 1 辺当たり $33\text{nm} \div 0.25\text{\AA} \sim 1300$ 点。したがって、総メッシュ数は $(1300)^3 \sim 2.2\text{G}$ となる。

【総演算量】1 ステップ当たり 2.2G (総メッシュ数)× 1.9M (総軌道数)×30 回(差分法演算回数)×5 回(テーラー展開 4 次+軌道エネルギー評価)～630P 回。

【総メモリ量】計算グリッド上に波動関数をストアしておくためのメモリがほとんどを占める。 2.2G (総メッシュ数)× 1.9M (総軌道数)× 16B (複素数)×3(作用前波動関数用配列、作用後波動関数用配列、テーラー展開での総和の波動関数用配列)～200PB。

【ネットワークバンド幅】1 ステップ当たり 2.2G (総メッシュ数)×8B(実数)～18GB の電子密度用データの Allreduce による通信が発生する。通信を全実行時間の 1 割と考えるとノード当たり 180GB/s 必要となる。

【メモリバンド幅】1 ステップ当たりの総メモリ量を 1 秒でアクセスするために 200PB/s 必要となる。

【オンチップメモリ】1 軌道当たりに必要とされるメモリ量は 2.2G (総メッシュ数)× 16B (複素数)×3(波動関数用配列数)～110GB。空間を 125 分割($5 \times 5 \times 5$ 分割)して、各ブロック内で差分法演算に使うデータをすべてオンチップ上に載せるためには 0.9GB 必要になる。

【ストレージ容量】波動関数を入力として読み込むために、 2.2G (総メッシュ数)× 1.9M (総軌道数)×8B(実数)～33PB が最低必要となる。

(vi) 短距離力古典分子動力学法

主にカットオフのある Lennard-Jones 型ポテンシャルなど、短距離相互作用の粒子モデルを古典分子動力学法により時間発展させ、気液二相流を全粒子計算によりシミュレーション、解析を行うというものを想定する。この場合、計算コストの大部分は二体力の計算であり、並列化は 3 次元空間分割、通信は隣接ブロックとの粒子座標交換となる。なおプロセス全体のフラグ同期を毎ステップともなう。想定する計算機の性能は、100TFLOPS の計算能力と 10TB のメモリを持つノードが全体として 1EFLOPS を構成しているとし、この計算機上で粒子数 10^{12} から 10^{14} 程度、粒子数×ステップで $10^{18} \sim 10^{20}$ 程度の計算を行うとして通信およびストレージへの要求性能の見積もりを行う。

【計算可能な総自由度の見積もり】 例えばカットオフ 3、密度 0.5 の系を想定すると、粒子当たり 50 回の力の計算が必要となる。粒子対当たりの浮動小数点演算回数はおよそ 50 回であり、力の計算を全体の 5 割、1 ステップを 1 秒以内で行うことを考えると、100TFLOPS 程度の計算能力があれば、20G 個程度の粒子の計算が可能となる。しかし、現在の実装では密度揺らぎのバッファも含めて粒子当たり 2KB のメモリを必要とするため、ノード当たり 10TB のメモリがあるとすれば 5G 個の粒子までしか扱うことができない。このように短距離古典分子動力学法においては、計算が比較的軽いため、扱うことができる粒子数は計算能力よりもメモリ容量によって規定される。以上のようにノード当たり 5G 個の粒子を扱い、1 万ノードあれば、50T 個、すなわち 50 兆粒子の計算が可能となる。

【メモリバンド幅】 理想的にキャッシュ、レジスタが使えた場合、一つの力の計算を行うのに粒子座標の 3 成分を読み込み、運動量の 3 成分を書き込む必要があるため、1 粒子対当たり 48Byte の読み書きが生じる。1 粒子対当たり 50 演算を行うため、演算器を使い切るために B/F 値は 1.0 程度必要となる。しかし、力の計算を理想的に行つた場合でも演算器を半分程度使うのが限度であると思われるため、ピーク性能比として 20%を目指すのであれば、B/F 値は 0.20 程度でよい。

【通信バンド幅】 100TFLOPS の計算能力を持つノードに 5G 個の粒子を載せた場合、粒子直径を 1 としておよそ $2000 \times 2000 \times 2000$ の領域に対応する。したがって、通信量は 1step 当たり $2000 \times 2000 \times 3(\text{カットオフ}) \times 6(\text{方向}) \times 24\text{Byte} = 1.73\text{GB}$ 程度となる。1step の計算に 0.25 秒程度かかると推定されるため、通信が 0.01 秒程度で完了することを要求すると、100GB/s から 200GB/s 程度必要となる。ただし、通信と計算を完全にオーバーラップさせることができれば、5GB/s から 10GB/s 程度でよい。また、アルゴリズム上、毎ステップすべてのプロセスで同期が必要となるが、1step が比較的長いため、通信および同期のレイテンシはほとんど問題にならないと思われる。

【ストレージ】 物理量は原則として計算中に TB オーダーまで粗視化したうえで出力することを想定している。そこで、ストレージはチェックポイントファイルがストレスなくはける程度でよい。50T 個の粒子情報をすべて出力すると 2.4PB 程度となる。一度のプロダクトランで数回出力するとして 10PB 程度。頻繁に保存しないため、数十秒かかってもよく、0.1PB/s 程度の I/O 速度があればよい。

(vii) 長距離力古典分子動力学法

脂質膜や高分子の大域構造やダイナミクス、特に、単純な球や平面を超えた現実的な曲率を持つ系の取り扱い、また、タンパク質複合体の解析には、1億～10億原子系を対象として、マイクロ秒～サブミリ秒の計算が必要となる。ナノ界面の取り扱いにも、原子レベルの凸凹を含めて、固体部分と液体部分の分子を露わに取扱うために、数千万原子系についてマイクロ秒～ミリ秒の計算が必要となる。

ここで必要な計算スペックを、modylas の「京」での MD 計算のパフォーマンスを基に試算した。マシンの性能を 5 EFLOPS と想定し、单ノード当たり 10 TFLOPS であったとすると、ノード数は 50 万となる。よって单ノード当たりの原子数は $1\sim10\text{ 億} \div 50\text{ 万}=200\sim2000$ となる。「京」ではノード当たり 160 原子程度が最適であったので、ノード当たりの負荷は約 1.2～12 倍となる。メモリについては、MODYLAS による実測に基づき 10 億原子系について試算した結果より、全ノード合計で 2PB 程度必要となる。また「京」と同程度の容量の L1,L2 キャッシュが装備され、SIMD 機能が備えてあればよい。更に单ノード当たりの性能は「京」に比べて $10\text{T}/128\text{G}=78$ 倍となっており、これが原子数増大による負荷 1.2～12 倍および 1 MD ステップ当たりの処理速度の向上（6～60 倍程度）に費やされると考えれば十分に実行可能である。

ノード当たりの通信量は、ノードに含まれる原子数に比例するとして、約 1.2～12 倍となる。「京」での数十マイクロ秒の 12 倍時間を要したとするとサブミリ秒程度である。目標は 1 MD ステップを 0.1～1 ミリ秒程度なので、通信速度は「京」よりやや速いものが必要となる。更に、「京」においてはレイテンシにサブミリ秒を要しているが、高速化のためにはこれを数分の一にする必要がある。

MD のトラジェクトリは、1 ps ごと程度に保存することが妥当である。この場合に必要な総ストレージ容量は、約 100～1000 PB となる。

(viii) 化学反応動力学法

反応経路上に複製された多数のレプリカ構造を等間隔に配置しつつ構造緩和させることで最小エネルギー経路を求める String 法や Nudged Elastic Band 法、反応経路のアンサンブルを発生する Transition Path Sampling 法や Onsager-Machlup 法、反応座標を拘束した分子動力学計算から反応自由エネルギー曲線を計算する Blue Moon Ensemble 法、バイアスプロテナシャルを用いて反応自由エネルギー表面を探索できる Metadynamics 法などがある。また、少数自由度系について網羅的に探索することのできる GRRM 法や AFIR 法もある。非断熱遷移をともなう反応には Surface Hopping 分子動力学法などが不可欠である。更に、分子振動状態を扱う vibrational SCF 法などがある。これらの手法の場合、レプリカを多数（数十～数万）用いた同時並列計算になるが、レプリカ間は座標・エネルギー・力などを交換や収集するだけで、通信量は少なくてすむ。

(ix) 量子分子動力学法

経路積分法により虚時間軸上に複製されたレプリカについて分子動力学計算を同時に並列で実行すると、零点振動・トンネル効果など量子現象を考慮した分子シミュレーションが可能になる。これを更に電子状態計算と組み合わせると、電子と原子核からなる量子多体系を丸ごと

と第一原理的に解ける。この方法によれば、水素をはじめとした軽元素の物性の定量的解析が可能となり、水・DNA・酵素など水素結合系の分野で貢献できる。また、この特徴を活かし、実験とのタイアップのもと、次世代エネルギーとして期待される水素貯蔵材料、燃料電池材料の研究開発に役立てることもできる。

経路積分分子動力学法では、数十～数百レプリカそれぞれについて、延べ数十万～数百万ステップ程度の統計量をとる必要がある。隣接するレプリカ同士には調和振動子的相互作用が作用するため、各ステップで、座標・エネルギー・力などの通信が発生する。

(x) クラスターアルゴリズム量子モンテカルロ法

量子スピン系、ボゾン系などの量子格子多体系において、量子ゆらぎの効果と温度ゆらぎの効果を厳密に取り入れた量子モンテカルロシミュレーションを行うというケースを想定する。具体的には、連続虚時間経路積分を用いて、量子格子模型を一つ次元の高い古典模型にマップ（世界線表示）して計算を行う。この手法の特徴は、世界線の更新にループクラスターアルゴリズムを用いる点にある。すなわち、世界線を局所的に更新するのではなく、ループと呼ばれる大域的な単位（かたまり）で更新する。ループの生成は、ループのサイズが系の内部自由度の相関とちょうど対応するように、かつ厳密につりあい条件を満たすように構成される。そのため、マルコフ連鎖の緩和は非常に速く、数百万～数億原子系においても自己相関時間は1～100程度である。これにより、計算機のメモリをフルに利用するような超大規模系においても、精度の高い平衡状態のシミュレーションが可能となる。

一方で、毎モンテカルロステップにおいて、全系の中でループを認識する必要があり、そのためのunion-findアルゴリズムが計算時間の大部分を占める。ここでは、リンクリストをたどる、リンクリスト同士を結合する、など非浮動小数点数演算が主であり、ベクトル化やSIMD化は非常に困難である。CPU単体性能としては、条件分岐やキャッシュミスのペナルティが小さいことが求められる。すなわち、レイテンシの短い演算器、レイテンシが短くインダイレクトアクセスの速いメモリが必要である。更に、ノード間ではバタフライ型の通信により、大域的なループ認識処理を行うので、輻輳を抑えるためにも高次元のネットワークが必要となる。

(xi) 変分モンテカルロ法

数百～数万原子からなる大規模な強相関電子模型・量子スピン模型の基底状態波動関数を計算するというものである。多数の変分パラメータを持つ変分波動関数について、エネルギーの期待値をモンテカルロ法で評価し、変分パラメータを最適化することで、基底状態の波動関数・エネルギー・さまざまな物理量の評価を行う。他の手法では扱うことの難しい2次元以上の強相関電子系やフラストレーションのある量子スピン系を精度よくシミュレートすることが可能である。例えば「京」では1000格子点規模のシミュレーションにより鉄系超伝導特性の物質依存性が明らかにされつつあるが、これを超える高温超伝導体の設計指針を確立するためには、より高い精度での理論予測の検証や実験系との定量的な直接比較による新機能発現機構の解明が必要である。そのためのシミュレーションには、多軌道効果や格子歪効果を取り入れた数万格子点規模の計算が必要であり、「京」の100倍程度の計算機環境が必要となる。

変分モンテカルロ法のボトルネックは、変分パラメータの最適化における逆行列の高速更新である。行列のサイズは電子の数（数千一数十万）である。5回=40Byteの読み書きに対して32の演算があるため、B/F値は1.25と見積もることができる。また、計算条件によっては、行列のパフィアン（行列式の一種）の高速更新における行列ベクトル積（B/F値=8）がホットスポットとなる場合もある。アプリケーション全体としてのB/F値は1.5程度と見積もられる。ノード数10000、1ノードの理論ピーク性能100TFLOPS、合計で1EFLOPSの計算機を想定すると、20%の実効性能を実現するためにはメモリB/F値=0.3が必要となる。ノード当たりのメモリ容量は1TByte、ネットワークバンド幅とディスク容量については「京」と同程度で十分である。

以上の性能を持つ計算機を1ヶ月程度専有することで、上記の目的を達成することができると考えられる。

(xii) 厳密対角化

量子スピンが相互作用する多体系のハミルトニアン行列をランチヨス法により対角化することを想定する。量子多体系のハミルトニアン行列は、疎行列であるが、非零要素が対角要素から遠く離れたところにも多く表れるのが特徴である。計算コストの大きな箇所は、行列を巨大ベクトルに作用させる部分で、計算は、この演算の繰り返しとなる。行列要素はon the flyで計算する。行列作用の回数は、バタフライ型の転送を要する行列と転送なしのケースがあり、総回数は10万～100万回。巨大ベクトルの次元に比例する時間とメモリ(分散メモリの合計でよい)が必要である。以下、ノード当たりメモリ量、バイセクションネットワークバンド幅としては比較的高い値を持つハードウェア、具体的には、1ノード性能として5TFLOPS(整数演算も同じ性能と仮定)・5TBメインメモリ・512MBオンチップメモリ、総ノード数 $2^{14}=16384$ 、全体性能として82PFLOPS・メモリ82PB、バイセクションハンド幅2PB/s(High-radix型のトポロジーを仮定)のハードウェアを想定し、性能の見積もりを行う。

【計算する物理系と計算規模】1次元のS=1/2スピン系を考える。スピン(格子点)数は54とする。このとき、行列・ベクトルの次元は ${}_{54}C_{27}=1,946,939,425,648,112$ 、1ノードのメモリ使用量最大値(40スピン分)= ${}_{40}C_{20}$ (要素) $\times 8$ (B/要素) $\times 5$ (本)=5,513,861,152,800B=5TB、総メモリ使用量= ${}_{54}C_{27}$ (要素) $\times 8$ (B/要素) $\times 5$ (本)=77,877,577,025,924,480B=69PBとなる。この超巨大規模の行列・ベクトル積演算を一回当たり100秒程度で行うことを想定する。

以下では、キャッシュ(オンチップメモリ)上にロードしたデータを最大限に利用するため、ベクトルを(最大) ${}_{26}C_{13}=9.9M$ 要素(79MB)単位でブロック化してメインメモリからオンチップメモリにロードするものとする。ブロック数は $2^{14}=16K$ となる。また、インデックスの逆引き用分割テーブル(少し大きい)と局所ハミルトニアンの行列要素のテーブル(非常に小さい)は計算の最初から最後まで常にオンチップメモリ上にあるとする。

【1ノード内での演算量・メモリ転送量】対角ブロック部分は計16K個のブロックからなる、各ブロックは9.9M要素の対角成分と、 $25\times 9.9M$ 要素の非対角成分からなる。対角成分の乗算にはインデックス計算は必要ないが、行列要素の計算には、1要素当たり、局所ハミルトニアン行列のインデックス計算に5整数演算(shift $\times 2+and\times 2+or\times 1$)、その和に1浮動小数点数演算が25セット必要である。ベクトルの要素との乗算には2浮動小数点数演算が必要となる。

また、非対角成分の乗算には、1要素当たり、ベクトルのインデックス計算(6整数演算)、局所ハミルトニアン行列のインデックス計算(5整数演算)、ベクトルの要素との乗算(2浮動小数点数演算)が必要となる。

一方、非対角ブロックは、合計で $14 \times 16K$ 個あるが、非対角ブロックの非零要素(9.9M 個)はすべて非対角成分である。1要素当たり、ベクトルのインデックス計算(6整数演算)、局所ハミルトニアン行列のインデックス計算(5整数演算)、ベクトルの要素との乗算(2浮動小数点数演算)が必要となる。

以上を合計すると、ノード内非並列部分合計として、1回ハミルトニアンを掛けるのに必要な演算数は、浮動小数点数演算 $=((1 \times 24+2) \times 9.9M + 2 \times 24 \times 9.9M + 2 \times 20 \times 9.9M) \times 16K = 181,000G = 17.6T$ 、整数演算数 $=(5 \times 24 \times 9.9M + (6+5) \times 24 \times 9.9M + (6+5) \times 20 \times 9.9M) \times 16K = 95,700G = 93.4T$ となる。一方、メインメモリアクセスは、左辺ベクトルの load/store が 79MB $\times 16K \times 2$ 、右辺が 79MB $\times (1+20) \times 16K$ 、合計 29,100G = 28.4TB 必要である。したがって、ピーク性能を出すために必要な B/F 値 $=28.4/17.6=1.61$ (もしくは B/(F+I) 値 $=0.256$)と見積もられる。

【並列部分】1回のハミルトニアン乗算に以下の転送演算が 16 回必要となる。転送パターンはバタフライ型である。ノード当たり転送量は $1TB \times 2$ の send/receive、すなわちバイセクション転送量は $1TB \times 16384 = 16PB$ となり、一回の転送に 8 秒かかる計算になる。演算に関しては、インデックス計算・行列要素計算はほぼ無視できる一方、浮動小数点数演算数は $2 \times 0.125T = 0.25T$ であるので、0.05 秒で完了、また、メインメモリへのアクセス量は $3 \times 1TB = 3TB$ であるので、0.6 秒で完了する。以上の見積もりから、律速となるのはノード間転送であることがわかる。すなわち演算とメインメモリアクセスはすべて転送の裏に隠せることになる。ノード間計算部分では「バイセクションバンド幅」が計算の律速となる。

【全体性能】全計算時間は $((17.6+93.4)/5+8 \times 16) \times 1000\text{iteration} = 150,200\text{sec} = 42\text{hour}$ と見積もられる。このうちノード間転送時間が全体の 85.2% を占める。仮にバイセクションバンド幅が 10 倍になると全計算時間は 9.7hour まで短縮される。逆に 1iteration を 100sec (すなわち全計算時間を 10^6sec) 以内で終わらせるためには、3.3PB/s のバイセクションバンド幅が必要となる。

【ストレージに対する要求】最終的な結果の出力はごくわずかであるが、チェックポイント用にベクトル 3 本(計 41PB)分の入出力が必要である。この読み書きを 30 分程度で終了する I/O 性能が要求される。

(xiii) 階層的マルチスケールシミュレーション

階層的マルチスケールシミュレーションとは、二つ以上の異なるプログラムを縦列に接続することにより、個々のプログラムでは得られない物性を引き出す手法である。具体的には、下部プログラムである第一原理電子状態計算（量子化学計算、バンド計算、FMO 計算、ONIOM 計算など）や古典力場計算（短距離力、長距離力）あるいはその組み合わせ（QM/MM 計算や RISM-SCF 計算など）を同時に複数並列で実行し、これに必要な入出力情報（原子核の位置、エネルギー、力、その他の物性情報）を通信で交換または収集する。次に、上部プログラムである分子シミュレーション法（分子動力学法、モンテカルロ法、拡張アンサンブル法など）や理論（統計力学、線型応答理論、化学反応論、経路積分理論）に基づいて追加的に処理を施す。以上が基本工程になっている。そして、目的とする物性データを最適化したり、統計的処理を

施したりするのに、この基本工程を大量に繰り返す必要がある。この際、下部プログラムが全計算の大半を占めるため、計算に必要なスペックは下部プログラムの種類に準じて決まる。通信は不可欠であるものの、通信量は限られていることから、超並列アーキテクチャをうまく活用できるという特徴があり、化学反応、量子分子動力学、相転移、相図、熱物性、分光学的・電気的物性、材料強度など、広範な応用が期待される。

このシミュレーションでは、上部ソフトウェアと下部ソフトウェアが独立している場合、現状ではシステム・コールとディスク I/O を介した情報交換を多用せざるを得ない。これを避けるためには、各ソフトウェアのインターフェースや MPI コミュニケータを著作権に注意しながら適宜書き換える必要が生じる。

・クラスター展開法：相図の第一原理計算

クラスター展開法での相図の第一原理計算では、100～10,000 原子のスーパーセルを対象とし、100～1,000 の異なるイオン配置について平面波基底の第一原理分子動力学法を同時に並列で実行し、それぞれの安定構造と全エネルギー値を収集する。次に、これをもとに決定されたイオン間の相互作用から、1,000 から 10,000 のモンテカルロ計算を行い、相図を求める。

エクサスケール計算機の活用により、2 元系合金にとどまらず 3 元系合金の相図を一度の計算で求める等の応用が期待される。例えば ATAT (<http://www.brown.edu/Departments/Engineering/Labs/avdw/atat/>) や CLUPAN (<http://clupan.sourceforge.net/>) が代表的なアプリケーションである。

・凍結フォノン法：熱物性の第一原理計算

凍結フォノン法は、第一原理計算から得られるフォノン分散関係から熱物性を計算する手法である。比熱評価のためには、約 100 原子のスーパーセル中の一つのイオンを微小に変位させた多数の構造で平面波基底の第一原理計算を同時に並列で実行し、それぞれで得られた各イオンに働く力を収集して得られるダイナミカル行列を対角化して、フォノン分散関係を求める。

熱伝導率評価のためには、高次の非調和相互作用項の計算が必要であり、そのためにはより大きなスーパーセル（100～10,000 原子）を用いてスーパーセル中のイオンを複数個変位させた第一原理計算を同時に実行する必要がある。例えば phonopy (<http://phonopy.sourceforge.net/>) が代表的なアプリケーションである。

・有効ハミルトニアンに基づいた分子動力学法：強誘電体物性

強誘電体を擬スピンが格子状に並んだモデルとして考える。その有効ハミルトニアンは第一原理計算から決定する。有効ハミルトニアンを温度、圧力、ひずみ、バルクか薄膜か、外部電場などさまざまな環境下で分子動力学法により時間発展させることで強誘電体の物性、すなわち相図やリラクサーの誘電率の周波数依存性などが決定できる。このためには、 $256 \times 256 \times 256$ ～ $512 \times 512 \times 512$ ほどの 3 次元 FFT（実数→複素数、複素数→実数）を多用する、1 ノードに載る比較的小規模の計算を数百～数万個実行する必要がある。例えば feram (<http://loto.sourceforge.net/feram/>) が代表的なアプリケーションである。

(xiv) フェーズフィールド法

フェーズフィールド法は、合金材料の組織形成をシミュレートする連続体モデルであり、実用合金の実プロセスにおいて問題となる組織形成過程の解析に応用されつつある手法である。合金凝固過程を対象とすると、流体の速度場、温度場、溶質拡散場および秩序変数の方程式を連立して解くことになる。フェーズフィールド法において、デンドライト組織形成を高精度にシミュレートするためには、 $10^{-8} \sim 10^{-7}$ m程度の空間分解能を要する。一方で、デンドライト集団の統計的挙動の議論において対象とする空間スケールは 10^{-3} m程度のスケールである。したがって、凝固組織形成の高精度シミュレーションには、およそ $10^{13} \sim 10^{14}$ 規模のメッシュ数が必要となる。並列化による大規模計算における主たる演算は陽解法によるステンシル型の計算であり、袖領域のデータ通信が並列化における通信時間の主となる。現在、TSUBAME2.0を用いたGPU並列により、 10^{12} メッシュ規模の計算で2PFlopsの実行性能が達成されている。

ミリメートルの空間スケールにおける数分間の実用合金の一方向凝固を、24時間程度の計算時間でシミュレートするために要する性能を見積もる。総メッシュ数は $10^{13} \sim 10^{14}$ 程度であり、1万ノード並列を仮定すると、1ノード当たりのメッシュ数は 10^9 程度となる。また、実時間スケールで数分間のシミュレーションのために必要な総時間ステップ数は 10^7 程度であり、一ステップあたり 10^{-2} s程度の計算時間である。これに基づくと、1ノードの理論ピーク性能は100TFLOPSが必要となり、全体で1EFLOPSを要する。そして、この計算に必要な一ノード当たりのメモリは約150GBとなる。また袖領域の通信容量は一ステップあたり300MBと見積もられ、通信には少なくとも30GB/sが必要となる。

(xv) まとめ：物質科学分野が必要とする計算機環境

計算物質科学におけるアルゴリズム・シミュレーションの特徴として、以下が挙げられる。

- 1回の時間発展の計算だけではなく、相関の強い系や平衡状態や定常状態に興味がある。
- 非平衡状態を議論する場合には、フェムト秒からピコ秒、ナノ秒といった非常に長時間のシミュレーションが要求される。
- シミュレーションする系の次元は3次元とは限らない。相関の強い量子多体系のシミュレーションでは、相互作用が非局所的であることが多い。
- 遠くの相関の効果を正確かつ効率的に取り込む、または、できる限り少ない反復回数で平衡状態にたどりつくためのアルゴリズム上の工夫として、非局所的な操作が導入される場合も多い。

このため、局所性が乏しくデータの再利用が困難、物理的に遠くのノードとの通信が必要となり高次元のネットワークトポロジーが必要など、一般的に高い性能を持つハードウェアが要求される。

【演算器・メモリ】

計算物質科学分野のアプリケーションが要求する性能は、演算重視、メモリバンド幅重視、クロック重視など、さまざまである。しかしながら、他の分野と比べ、一般的に大メモリ、高メモリバンド幅を必要とするアルゴリズムが多いと言える。一方で、浮動小数点数演算が少なく、SIMD が全く効かないアプリケーションも存在する。物質科学分野としては、「京」と同様のアーキテクチャー、あるいはメモリと演算とのバランスをより重視したアーキテクチャーを中心とした、複数のシステムが望ましい。

また、物質科学分野においては、非常に短いサイクルで新しい手法・アルゴリズムが次々と生まれているため、分野全体として必要とする演算の種類、B/F 値などをあらかじめ想定すること不可能である。したがって、ヘテロな構成の CPU の場合、ほとんどの場合その性能を使い切ることは困難であると考えられる。

演算精度については、安定性、精度の面から単精度では不十分な場合が多く、通常倍精度演算が必要である。一方、現状では 4 倍精度への要求はそれほど強いとは言えない。しかしながら、エクサスケールの計算機により長時間シミュレーションが可能になってくると、倍精度の限界が見えてくる恐れもある。

【ネットワーク】

物質科学分野のアプリケーションにおいては、3 次元の隣接通信だけではすます、4 次元あるいはより高次元の通信パターンが必要となる場合も多い。そのため「京」のような 3 次元メッシュ/トーラスではネットワークがボトルネックとなり演算性能が発揮できない場合も多い。

エクサスケール機のネットワークとしては、high-radix タイプのものが望ましい。あるいは、遠くは 3 次元トーラス、近くはより次元の高い密な結合といったハイブリッドタイプのネットワーク構成と、特に allreduce, allgather, altoall といった全対全通信を効率よく行うための機構や、FFT、疎行列の対角化、クラスターモンティカルロ法におけるバタフライ型通信・演算のための機構を組み合わせた全く新しいネットワークの開発が求められる。一方、strong scaling で長（実）時間の計算を行う場合のボトルネックはレイテンシである。近接通信、あるいはリダクション演算を現状と同程度あるいは現状より更に低いレイテンシで実行可能なネットワークが望まれる。

| 課題 | 要求性能 (PFLOPS) | 要求メモリ バンド幅 (PB/s) | メモリ量/ ケース (PB) | ストレージ 量/ ケース (PB) | 計算時間/ ケース (hour) | ケース数 | 総演算量 (EFLOP) | 概要と計算手法 | 問題規模 | 備考 |
|--------------------|------------------|-------------------------|----------------------|----------------------------|------------------------|-------|-----------------|--------------------------------------|--|--|
| 次世代先端デバイス | 100 | 100 | 1.2 | 10 | 96 | 10 | 350000 | 第一原理計算RSDF(T(擬ボテンシャル法、実空間基底)) | 原子数:10万 | |
| 次世代先端デバイス | 100 | 100 | 2 | 15 | 60 | 100 | 2200000 | 第一原理計算PHASE(擬ボテンシャル法、平面波基底、O(N^3)法) | 原子数:1万 100MDを同時実行 | |
| 次世代先端デバイス | 100 | 100 | 2 | 15 | 60 | 100 | 2200000 | 第一原理計算xTAPP(擬ボテンシャル法、平面波基底、O(N^3)法) | 原子数:1万 100MDを同時実行 | |
| 次世代先端デバイス | | | | | | | | | 原子数:1億 2fsの時間刻みで25000でナノ秒オーダーを想定 計算時間は要注意。時間ステップ数10^4。電子材料の電子状態計算・手法1と同じ計算だが、こちらは個々のケースを高速に計算する必要があり、ネットワーク性能をより要求する。ストレージ量の違いは出力頻度の違いによる。 | |
| 光・電子デバイス | 1000 | 1.0 | 10 | 0.1 | 1 | 100 | 360000 | 高精度分子軌道法 | 2万基底、100万求積点 | 100~1000くらいのアレイジョブを想定 |
| 分子機能 | 300 | 18 | 4 | 0 | 15 | 10 | 160000 | 大規模分子軌道法 | 原子数:1万 | |
| 分子機能 | | | | | | | | | 数百残基のタンパク質、数千万次元の密行列の固有値問題 | |
| 熱交換デバイスの安全性向上・特性解析 | 200 | 200 | 100 | 10 | 70 | 10 | 500000 | 短距離古典分子動力学 | 粒子数:50兆 | 同上 |
| 分子機能と物質変換 | 1000 | 100 | 2 | 1000 | 150 | 10 | 5400000 | 長距離古典分子動力学 | 原子数:10億 | |
| 光・電子材料 | | | | | | | | | 原子数:96万、時間は1ステップあたり1秒で計算量は0.63EFLOP。これを50000ステップでおよそ14時間 | |
| 強相関電子系の機能解明 | 3 | 390 | 10 | 10 | 10 | 100 | 11000 | クラスター・アルゴリズム・量子モンテカルロ法 | 原子数:1億 | 整数演算がメイン |
| 強相関電子系の機能解明 | 1000 | 300 | 0 | | 8 | 100 | 2900000 | 変分モンテカルロ法 | 原子数1万 | メモリ使用量はMPIプロセス数に比例し最大使用量を記載した |
| 物質・エネルギー変換 | 2000 | 100 | 8 | 1000 | 3 | 10 | 220000 | 量子分子動力学法 | 100レプリカ、100万ステップ | |
| 物質・エネルギー変換 | 1000 | 1.0 | 10 | 0.1 | 24 | 10 | 860000 | 化学反応動力学・量子分子動力学法(分子軌道計算またはQM/MM) | 10000レプリカ | |
| 物質・エネルギー変換 | 250 | 100 | 2 | 15 | 24 | 10 | 220000 | 化学反応動力学・量子分子動力学法(第一原理計算) | 数万レプリカ | |
| 分子構造・分子機能 | 1000 | 0.50 | 0.04 | | 24 | 1 | 86000 | 分子動力学法(foram)によるリアクター強誘電体の誘電率の周波数依存) | 512x512x512 | アレイジョブでノード間通信なし |
| 新物質探索 | 100 | 2.0 | 0.12 | | 24 | 1 | 8600 | クラスター展開法(第一原理計算) | 原子数:1万、100イオン配置の同時実行 | |
| 新材料 | 0 | 0.020 | 0.00012 | | 24 | 10000 | 86000 | 第一原理計算(凍結フロン法) | 原子数:1万 | PHASEの1/10の規模であることから、同時実行はこの表では想定していない |
| 強相関電子系の機能解明 | 82 | 130 | 82 | 41 | 42 | 10 | 120000 | 厳密対角化(ランチヨス法) | 54サイトのスピニ系(Sz=0) | |
| 新物質探索 | 1000 | 10 | 1.5 | 20 | 24 | 20 | 1700000 | フェーズフィールド法 | 10^14空間メッシュ、10^-7時間ステップ | |

※本見積もりは未だ精査中である。より精度の高い数値はWeb版(→「1.2. 本文書の構成」)を参照のこと。

(5) 他分野との連携

理論物質科学、すなわち理論物性物理、理論分子科学、理論材料科学は、古くから実験分野との強い連携の下に研究が進められてきたのは言うまでもない。今後は、J-PARC、SPring-8、SACLAといった大型実験施設との、より一層の連携が求められる。また、物性理論分野は、素粒子、原子核、宇宙といった他の基礎物理分野とも強い関連があり、伝統的に研究交流も盛んである。近年では、生体分子研究における生命科学分野との連携や、エネルギー・環境分野におけるものづくり分野との連携も進んでいる。

(6) 公的な意見交換とそのサマリー

物質科学分野では、討論会「エクサスケールコンピュータへの期待」（2012年7月13日、東大物性研）、日本物理学会計算物質科学インフォーマルミーティング（2012年9月18日、横国大）、TCCI 研究会（2012年10月9日、分子研）、計算物質科学シンポジウム（2012年10月22日、東大物性研）、CMSI 研究会（2012年12月3日、分子研）、日本化学会特別企画「超巨大計算時代の化学」（2013年3月25日、立命館大）、日本物理学会シンポジウム「エクサスケールに向けて歩み出す計算物理学」において、実験家、企業研究者も含めたコミュニティ全体に対しロードマップを紹介し、パネルディスカッションなどを通じて意見収集を行った。具体的には、J-PARC、SPring-8、SACLA といった大型実験施設との連携強化、元素戦略(磁石、触媒・電池、電子材料、構造材料分野)への計算物質科学からの貢献への期待などの意見を得ることができた。また、最先端 HPC だけでなく、非専門家が PC あるいはクラスターワークステーションでシミュレーションを実行できるよう計算物質科学コミュニティ全体でアプリケーション・ソフトウェアを整備することや、莫大なシミュレーション結果や実験結果を保存・公開する仕組みを整備することなどに対する強い要望があった。

(7) ロードマップ

| 年代 課題 | 2012 ~ | 2014 ~ | 2016 ~ | 2018 ~ | 2020 ~ | 2022 ~ |
|-----------|---|--------|------------------------------|---------------------|--------|--------|
| 半導体電子デバイス | 100万原子系の第一原理計算($O(N)$ 法) ← 1万原子系の第一原理計算($O(N^3)$ 法) | | 1000万原子系 → 10万原子系 | | 1億原子系 | |
| 光・電子材料 | 10数nmのナノ構造体の電子・電磁場ダイナミクス → | | | 数10nmの実在系ナノ構造体 → | | |
| 生体分子機能・創薬 | 1000万原子系の古典分子動力学計算 → | | 1億原子系 → | | 10億原子系 | |
| 分子構造・分子機能 | ナノスケール分子系の高精度計算 → | | 分光学的精度での分子構造の予測 → | | | |
| ソフト分子 | 量子化学計算と分子シミュレーションの大規模化 → | | マルチスケール手法の開発、統計力学理論の高度化 → | | | |

図 4.2-5 物質科学ロードマップ（1）

| 年代 課題 | 2012 ~ | 2014 ~ | 2016 ~ | 2018 ~ | 2020 ~ | 2022 ~ |
|------------|--------------------|----------|-----------------|--------|--------|--------|
| 物質・エネルギー変換 | 数百原子系のQM/MM-MD | | 1000原子系 | | 数千原子系 | |
| 界面・表面 | 10nmサイズの気相・固相界面 | 数十nmサイズ | 100nmサイズの気液界面 | | | |
| 構造材料 | 数百パラメータのマルチスケール計算 | 数千パラメータ | 数万パラメータ | | | |
| 熱交換デバイス | 100億原子系の分子動力学計算 | 1兆原子系 | 100兆原子系による気液混相流 | | | |
| 強相関電子系 | 100万格子点の量子モンテカルロ計算 | 1000万格子点 | 1億格子点の量子磁性体 | | | |
| | 1000格子点の変分モンテカルロ計算 | 数千格子点 | 1万格子点の強相関材料 | | | |

図 4.2-6 物質科学ロードマップ (2)

参考文献

- [1] 「計算と物質 (岩波講座計算科学第3巻)」押山淳, 天能精一郎, 杉野修, 大野かおる, 今田正俊, 高田康民著 (岩波書店, 2012).
- [2] 「巨大分子系の計算化学 超大型計算機時代の理論化学の新展開」日本化学会編 (2012).
- [3] 「理学・工学分野における科学・夢ロードマップ」物理学分野・化学分野・材料光学分野日本学術会議第三部拡大役員会・理学・工学系学協会連絡協議会 (2011) .

4.3. 地球科学

4.3.1 気象・気候科学

(1) 現在行われている課題

台風や集中豪雨といった大規模な気象災害は、社会・経済に大きな脅威を与える。こうした気象災害に対しては、その影響が広範に及ぶことから、迅速かつ効率的な対策を実施することが求められている。大規模気象災害は実験によって影響評価を検証することが不可能な事象であり、大規模シミュレーションによる防災・減災対策の検討が不可欠である。

台風の発生および構造については 100km 程度の解像度を持つ気候モデルでは再現が不十分である。このため、わが国の社会・経済に重大な影響を与える台風が地球温暖化によりどのように振舞いを変えるのか、その詳細はまだ十分にわかっていない。「京」コンピュータがもたらす膨大な計算資源を活用することにより、雲の塊までを再現できる数 km の解像度を持つ全球雲解像モデルを用いた数値実験で熱帯における降水等の季節内振動現象などを精度よく再現することが可能となり、この問題に対する知見を得ることが期待できる。この成果は、わが国のみならず台風の影響下にある世界の国々における温暖化時の影響評価の基礎資料としても活用できる。また、毎年わが国に多大な被害をもたらしている集中豪雨は、近年その頻度が増加傾向にある（図 4.3.1-1）。2~20km ほどの水平規模を持ち、1 時間に 50mm から 100mm 程度の雨をもたらす対流現象の発生や消長を一定時間前に予測するためには、積乱雲を解像できるモデルを用い、数 km~数十 km の空間スケールを対象としたデータ同化技術により初期値の精度を高めるとともに、初期値やモデルの誤差も考慮し、少しづつ条件を変えて多数実験を行うアンサンブル予測を用いる必要がある。「京」コンピュータの出現により、こうした高度な予測手法が現実のものとなる可能性が出てきた。こうした手法の開発を通じて高解像度の全球雲解像モデル、あるいは領域を限って解像度を高くした領域雲解像モデルに基づくアンサンブル解析予測システムを開発し、台風や集中豪雨といった顕著気象現象の予測実験を行う。この成果は、現業機関における将来の予報システムとして活用され、わが国におけるさまざまな気象災害の軽減に貢献する。

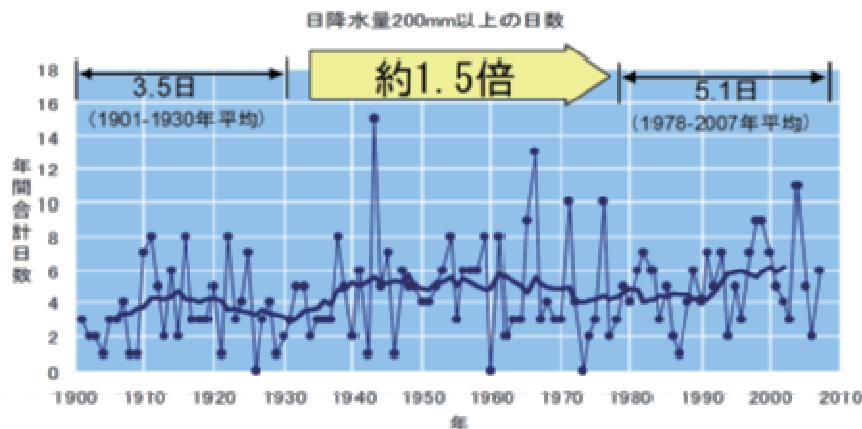


図 4.3.1-1 全国 51 地点の観測値から求めた日降水量 200 ミリ以上の年間日数。年々の変動（細線）と 11 年移動平均（太線）を示す。出典：気象庁「気候変動監視レポート 2007」
<http://www.mlit.go.jp/common/001024684.pdf>（2014 年 2 月 26 日閲覧）。

気象災害が多発する日本特有の条件と高い計算機開発能力とがあいまって、高解像度雲解像モデル開発の分野では日本は世界をリードしている。しかしながら、近年、各国の研究機関も同様のモデル開発に力を注いでおり、日本の優位性は揺らいできている。「京」コンピュータの活用により、この種のモデル開発を更に進めることで、世界的にも先導的な地位を維持することができよう。

更に、「京」コンピュータの登場により、それ以降を見据えて地球規模の防災予測研究をより効率的に行っていけるよう、コミュニティの英知を結集させた地球変動予測モデルのアプリケーションパッケージ（実際の問題に対する予測モデルの適用を容易にするソフトウェア群）の実現を図ることが重要となる。その際、モデル開発に関わる国内のグループ間に知見が分散することは避け、モデル開発環境を統一して知見の集積を図るべきである。「京」コンピュータは、大気中の雲や海洋の小規模渦、生物化学過程等の詳細な再現を可能とすることによって、日々の天気予報はもちろん、2 週間以上の長期予報、季節予測、10 年規模の気候変動予測、大気海洋環境予測、沿岸海況予測等、地球変動予測モデルの適用範囲を大幅に拡張させ、地球規模での気候・環境変動予測に革新的な変化をもたらすトリガーとなることが期待されている[1]。更には、予測には常に不確実性がともなうことを考慮に入れると、衛星観測データ等の地球環境観測データの同化によるモデルの初期値化、初期値およびモデルの構成要素を差し替えて行うアンサンブル解析の実現等の機能を含めた計算負荷調整機能が必要である。また、予測の時間スケールやターゲット現象に応じた各種コンポーネントの選択、解像度やモデルに組み込む素過程の表現の精密さ等の調整を容易にする仕組みも付加していく必要がある。更に、開発したソフトウェアを、今後効率的に継承、結合していくために、コミュニティの研究成果を全体システムに反映し、予測性能の向上につなげられるアプリケーションパッケージの実現に取り組む。

わが国における開発の着手より早くから、欧米においてもこうしたアプリケーションパッケージの開発は盛んに行われてきている。この種の開発は計算機アーキテクチャや既存のコンポーネントモデルの仕様を十分に考慮しながら行う必要があるため、国内に存在する大規模な計算

機の仕様を念頭に、わが国独自の開発を推進する必要がある。「京」コンピュータの登場が契機となり高度な予測システムの開発が進むことで、知見の集積と開発グループ間の協力を容易にするこうしたパッケージの開発が促進されることが期待できる。

(2) 長期的目標

(i) はじめに

気象・気候分野で大規模並列計算機を利用する研究は、気象予報、地球環境変化予測、スケール間相互作用の解明、の三つの研究領域に大別することができる。このうち一つ目の気象予測に関しては、アンサンブル数の増強による確率予報の精度向上や、予報モデルの高解像度化による局所的豪雨の予報などが含まれる。また、二つ目の地球環境変化予測に関しては、生態系までも含めた統合的な数値モデルによる予測や、温暖化とともに台風の変化の高解像度モデルによる予測などが大きな課題である[1,2]。更に、三つ目のスケール間相互作用の解明に関しては、気象予報モデルや気候変動予測モデルで用いられるパラメタリゼーション（格子間隔より小さい空間スケールで起こる現象の影響を取り込むため導入される経験則）の精度向上のため、小規模現象が大規模現象に与える影響を直接表現できるような超高解像度モデルを利用して、スケール間の相互作用を解明することが重要な研究領域である。以下では、これらの領域における課題について更に詳しく述べる。

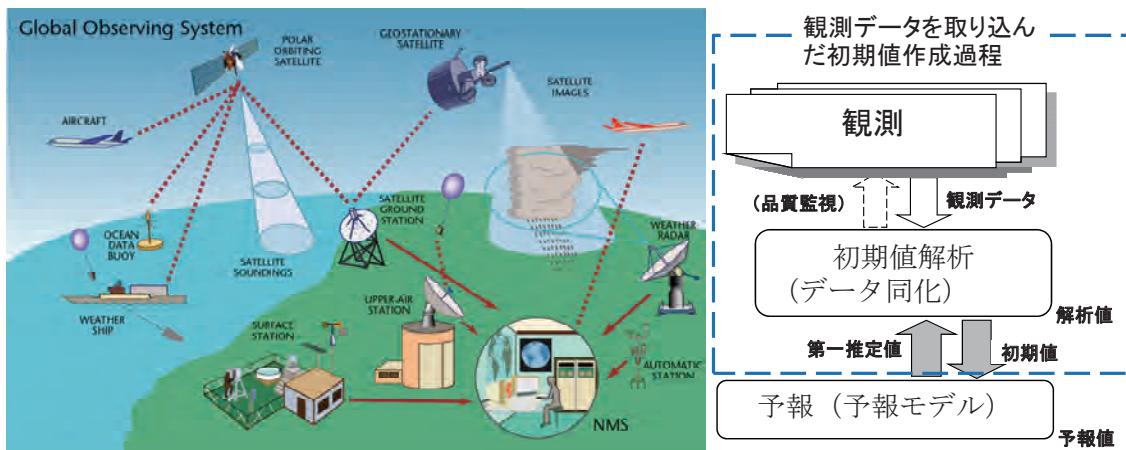
(ii) 気象予報

後述の 100 年程度の時間スケールを対象にした地球環境変化予測と、ここで述べる気象予報との大きな違いの一つとして、初期値の作成過程の重要性の違いを挙げることができる。気象予報においては、モデルを積分する期間が最大でも数ヶ月程度と気候変動予測に比べて短く、計算結果に初期値が大きく影響する。そのため、対象とする日付の気象場を、観測データに基づいて可能な限り現実的に表現したデータセットを作成することが、予測の成否の決定的要因となる。

衛星観測や船舶、飛行機などによる観測、そして定点観測など、観測データにはさまざまな種類があり（図 4.3.1-2 参照）、それらをバランスよく取り込みながら、数値計算上の発散も抑えられるような「性質のよい」データセットを作成するのは容易な作業ではない。これを可能にするために、観測データからの乖離を抑えるよう拘束条件をかけながら予報モデルを走らせ、その結果を初期値として利用できるような「データ同化」手法が複数開発されている[3,4]。それらの手法いずれについても、一定の期間に対してモデル計算を多数行うことが必要であり、気象予報では通常、初期値の作成に計算資源の半分以上が投入される。更に、予測計算においてもカオス的な誤差の発展は避けることができないため、軽微な修正を施した初期値を多数用意してアンサンブル実験を行うことが不可欠である。このアンサンブル数の増加は、予報の精度に直結する。計算機能力の向上により、初期値作成の効率やアンサンブル数が飛躍的に向上し、予報精度の向上につながることが期待できる。

また、近年増加している局所的・集中的な大雨（いわゆる「ゲリラ豪雨」）の予報を可能にすることも、今後の気象予報における大きな課題である[5]。こうした大雨をもたらす積乱雲の時空間スケールは非常に小さく、現在の気象予報モデルでは解像できていない。この点でも、

計算機能力の向上により高解像度化が可能になり、今後見込まれるレーダーなどの観測網の充実とあいまって、状況の大幅な改善が期待できる。



図の出典:世界気象機関
(<http://www.wmo.int/pages/prog/www/OSY/GOS.html>) および
気象予報士ハンドブック(日本気象予報士会, 2008年, オーム社)の図を改変

図 4.3.1-2 気象予報のためのデータ取得のイメージ図(左)と、データ同化手法の概念図(右)

(iii) 地球環境変化予測

二酸化炭素をはじめとする温室効果ガスの人間活動による排出にともない、全球的に気温が上昇する地球温暖化（以下、単に温暖化と呼ぶ）が懸念されている[6]。温暖化により、台風や集中豪雨、渇水などの極端事象の頻度や強度が変化し、新たな自然災害の脅威がもたらされる危険性が指摘されている。こうした極端事象が持つ空間スケールは往々にして小さいため、計算機資源が許す限りの高解像度モデルを用いた予測計算を行い、温暖化がもたらす脅威に備える必要がある。

更に温暖化は、森林や海洋プランクトンの成長、大気中の化学反応など、地球環境を形成するさまざまな過程にも影響を与える。こうした影響は、更に将来の温室効果ガスの濃度を左右することになる。例えば、温暖化が炭素循環過程に与える影響を考慮すると、昇温の予測を最大で 1.5 度程度上方修正する必要があることが最近の研究により示唆されている[7]。つまり、森林や海洋プランクトンの成長、大気中の化学反応と温暖化との間には、複雑な相互作用が存在する。そのため、温暖化を契機としてもたらされる地球環境の変化を包括的に予測するためには、海陸の生態系や大気中の化学物質の動態などの生物地球化学的過程を含んだ地球システムモデルの開発とそれによる予測とが不可欠である[4]。

地球システムモデルを用いて予測を行う際に注意すべきなのは、生物過程に関するパラメータが多く含まれ、それらの値を正確に決定することがほぼ不可能なことである。そのため、パラメータの値をさまざまに変えた実験を多数行って感度や不確実性の幅を調べることが重要となり、計算機資源も多く必要とされる。

また、データ同化の手法は、温暖化予測の領域でも重要性を増してきている。例えば、データ同化を施して作成した初期値から予測を開始し、数年～10年スケールで自然変動の影響も考慮した温暖化予測が可能になれば、政策を論じる際に考慮される時間スケールで予測を行うことになり、より政策にも反映しやすいであろう。また、地球システムモデル中の生物地球化学的過程にもデータ同化を応用して現実的な場を再現しながら、長期的な予測を行い（場合によっては）社会に地球環境の危機を警告する「地球環境監視予測システム」の構築も、将来的には可能となろう（図4.3.1-3参照）[8-10]。

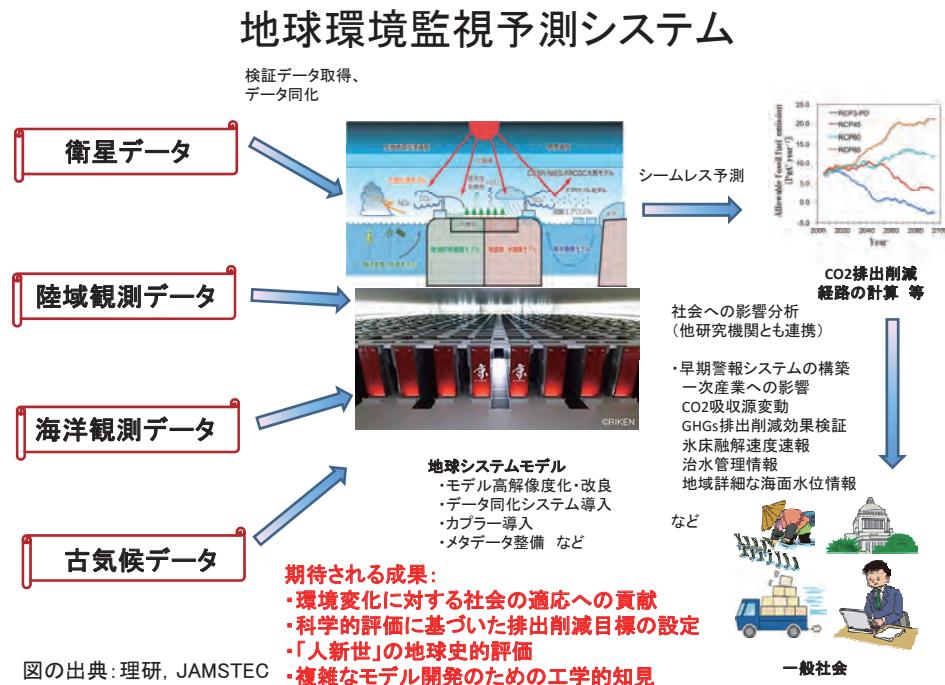


図4.3.1-3 地球システムモデルを用いた地球環境監視予測システムの概念図

(iv) スケール間相互作用の解明

大気や海洋中には、小さな規模の現象が大規模な場に有意な影響を与える現象がしばしば見られる。モデルの格子間隔よりも小さな空間スケールで起こるこうした小規模現象を取り扱うための手法が開発されてきている。例えば、熱帯域では、高い海面水温のせいで大気が下から暖められる格好になって活発に対流（大気の上下混合）が起こっており、これが地球全体で見たときの熱や水蒸気の輸送にも重要な役割を果たしている。こうした対流を一般に積雲対流と呼ぶが、これにともなって上昇する空気塊の水平方向の広がりは1～10kmのオーダである。したがって、例えば、温暖化予測で100年程度の積分期間を要する場合、雲の変化の把握が大変重要であるにも関わらず、その形成過程をすべて解像したモデルを使用するのは、今日得られる計算機資源では非現実的である。そこで、モデルで再現できる熱帯域の大まかな気温や水蒸気の分布から、対流がどの程度活発に起こっているか、を推測する経験則を導入する必要がある。こうした経験則をパラメタリゼーションと呼ぶ。

海洋モデルにもパラメタリゼーションは取り入れられている。海洋中には空間スケールにして 10~100km 程度の大きさの渦が存在しており、これらの渦は、海洋による熱の南北輸送に一定の役割を果たしている。このような渦も温暖化予測に用いられるモデルでは解像できない場合が多く、海水の密度分布などからパラメタリゼーションによってその役割を表現することになる。

こうしたパラメタリゼーションの検証や改良のため、対象とする現象（上の例では、積雲対流や海洋中の渦）を直接解像できるモデルを動かし、その結果を解析する手法は大変有効なものである。こうした手法は従来から用いられているが、解像度や積分期間が不足している場合が多く、計算機能力の向上にともなって得られる科学的知見の質も上がることが期待される。更に、50m 程度と言われる大気中の水平乱流の空間スケールを直接解像する Large Eddy Simulation により、大気汚染のシミュレーションに重要な大気中の水平混合のパラメタリゼーション精度の向上につながることが期待される。また、個体間の競争を直接表現したモデルによる森林動態の解明や、大気中のエアロゾルと大気化学過程の相互作用の解明など、生物・化学過程が関わる現象については過去の研究例も少なく、強力な計算機資源を生かし画期的な成果につながる可能性もある。

(3) 次世代に解決すべき課題

(i) 気象予報

気象予報の領域では、データ同化手法の開発が大きなテーマになる。高解像度化にともない、大気中の水分の相変化をデータ同化手法中でどのように取り扱うか、という問題に関しては工夫を要すると予想される。また、精度向上のため、近年注目されている新しいデータ同化手法の導入も検討していく。

(ii) 地球環境変化予測

地球環境監視予測システムの構築に向け、モデルの検証や高解像度化、データ同化の導入などに取り組む。生物過程が関わるモデル要素に関しては、検証に用いることのできるデータが他の分野に比べ乏しい。そのため、モデルの検証や、データ同化手法の開発などに関して気象予報の領域とは異なった問題を克服していく必要がある。

(iii) スケール間相互作用

大気モデル、海洋モデルなど、さまざまな高解像度モデルを利用して解析を行い、パラメタリゼーションの改良に結びつける。気象予報、地球環境変化予測の両領域で成果が活用されるよう、領域間のコミュニケーションは適切に保たねばならない。

当面、それぞれの領域におけるモデル開発は個別に行っていくことになるが、領域間で具体的課題の重複も存在する。こうした非効率性を解消するために、典型的なデータ通信をライブライアリ化するなどして異なるモデル間での構成要素交換を容易にするカプラー技術の開発が進んでいる[11]。こうした技術を利用しながら、各領域で用いられるモデルを統合したモデル

開発環境の構築にも取り組む。こうした努力により、広範な時空間スケールにわたって断絶のない、広い意味でのシームレスな予測システムの確立につながることが期待される。

(4) 課題を解決するために必要なアプリケーション群（要求性能）

はじめに、要求見積もりの基礎データとしてどのようなモデルが選択されるべきであり、かつ選択可能かを考察する。気象気候分野のサイエンスロードマップでは、気象予報、地球環境変化予測、そしてスケール間相互作用の解明の3つが主要な研究領域として挙げられている。これらの領域で用いられるモデルは、

- 気象予報領域
 - 高解像度アンサンブル予報モデル（5年後）
 - 超高解像度アンサンブル予報モデル（10年後）
- 地球環境変化予測領域
 - 中解像度シームレス予測モデル（5年後）
 - 高解像度シームレス地球システムモデル（10年後）
- スケール間相互作用領域
 - 地球環境変化予想と気象予報の2領域のモデルを用いる

のように想定されており、気象・気候分野では大別すると二つの系統のモデルが使われている。

気象予報領域に用いられるモデルは、数時間から数週間、長くとも数ヶ月の気象の変化を再現・予報するモデルであり、一般に気象モデルと呼ばれている。対象とする空間スケールは、全球から数百km（用途によっては数km）までさまざまである。後述する地球環境変化予測に比して時間スケールが短いため、モデルに組み込まれる物理現象の種類は、地球環境変化予測に用いられる地球システムモデルより少なくなる。反面、雲や降水など、気象現象を支配する主要な物理現象は、時空間的に密に、かつ物理的にもできる限り詳細に表現されねばならない。そのため、地球システムモデルではパラメタリゼーションを通じて表現されることが一般的な積雲対流を、気象モデルでは直接計算する例が増えてきており、雲の微物理過程もより詳細なスキームが用いられる傾向がある。気象モデルも地球システムモデルと同様、国内に複数のモデルが存在するが、ここでは、NICAMとasucaを評価対象とする。

地球環境変化予測領域に用いられるモデル群にも複数の種類が存在するが、代表的なものは、文字どおり地球環境の変化を予測することを主目的とした、一般に地球システムモデルと呼ばれるモデルである。地球システムモデルは、空間的には全球を、時間的には数十年から数百年、目的によっては大陸移動をともなうようなスケールの時間を対象とする。したがって、計算対象とする時間スケールに応じて、地球環境に影響を及ぼすと考えられる物理現象がモデル内で表現されていなければならない。近年問題となっている温室効果ガスの排出にともなう地球環境変化予測では、数十から数百年の時間スケールが主要なターゲットとなっており、地球システムモデルには、このスケールで温室効果ガスの消長や環境に影響を及ぼすと考えられる、大気や海洋、河川、陸氷、海氷や陸域生態系、海洋生態系などの物理現象が組み込まれている。多様な物理現象を長期にわたり計算しなければならないため、気象モデルに比して解像度は粗く、また、個々の物理現象は精度の許す範囲で簡略化されて表現されている。国内には複数の

地球システムモデルが存在するが、代表的なモデルとして MIROC-ESM と JMA/MRI-ESM が挙げられる。今回の要求見積もりでは、比較的パフォーマンス測定のデータがそろっている MIROC-ESM を評価の対象とする。

上に挙げたモデルはいわゆる気象・気候の数値シミュレーションモデルであるが、客観解析プログラムも当該分野における重要なアプリケーションである。客観解析とは不規則に分布した観測データから規則的な格子点での大気（や海洋）の状態を与える手法であり、初期値の精度が予報精度に直結するため、客観解析手法にも多くの改良が重ねられてきた。ここでは「4 次元変分法」という手法を用いた客観解析プログラム JNoVA を評価の対象とする。

(i) NICAM

NICAM は正 20 面体準構造格子を用いた全球気象モデルである。力学過程では非静水圧のナヴィエストークス方程式を有限体積法を用いて解いている。物理過程は雲微物理過程（ダブルモーメント・バルク法）、大気放射過程、スラブオーシャンなどを含む。

見積もりにあたって想定する問題規模は以下のとおりとする。

- 3 次元格子数：1 兆グリッド
(glevel15, 94layer : 水平解像度 220m、鉛直解像度 100m~1km)
- 積分期間と実行時間：2 ヶ月積分を 2 週間で実行
- 総ステップ数：520 万 step (dt : 1 秒)

水平格子間隔が 500m を切る計算においては、積雲対流の表現が格段によくなる（真の global-cloud-system resolving）。そこで北半球夏の熱帯計算について季節内振動の再現性評価（複数ケース）を行い、来るべき全球 LES への布石とすることがこの計算の位置づけである。

「京」コンピュータにおける glevel13, 94layer の計算結果から得られたデータは以下である。

- 3 次元格子数：700 億グリッド (glevel13, 94layer : 水平 880m、鉛直 100m~1km)
- 使用ノード数：20480 ノード
- 実行効率：8%
- 演算性能：200TFLOPS
- 総メモリ使用量：220TByte
- 積分期間と実行時間：1 日積分を延べ 106 時間（4.4 日）で実行
- 総ステップ数：43200step (dt : 2 秒)
- 1 ステップ当たりの総演算量：88GFLOP
- 1 ステップ当たりの所要時間：8.8 秒
- 1 格子あたりのメモリ使用量：3.5Kbyte (3 次元変数 440 個分に相当)
- 1 格子 1 ステップ当たりの演算量：29230FLOP
- 要求 B/F 比：およそ 3
- 出力データ量：44 変数 2.6TB を 900 ステップ（実時間 2 時間）おきに出力

これらの数値から、想定する問題規模で要求される値は以下のように見積もられる。

【総メモリ量】

- ・1 格子当たりのメモリ使用量×3 次元格子数 = およそ 3PByte

【演算性能】

- ・総演算量 : 1 格子 1 ステップ当たりの演算量×3 次元格子数×総ステップ数 = 152ZFLOP

これを実行時間 14 日で行う場合、

- ・総演算量 / 実行時間 = 125 PFLOPS

【メモリ帯域】

・アプリケーションの要求する B/F 比と要求される実効演算性能より、要求されるメモリ帯域はおよそ 360PByte/sec である。

・理論演算性能が 1EFLOPS のマシンを想定した場合、実効 B/F 比でおよそ 0.36 が必要とされる。それぞれ B/F 比が 0.01、0.1、1、4 であるマシンを想定した場合、必要とされる理論演算性能は 36EFLOPS、3.6EFLOPS、360PFLOPS、90PFLOPS である。

【ネットワーク性能】

・ほとんどの通信が隣接ノード間で行われるため、ノード当たり 1GB/s あればよい。出力データはシミュレーション 1 時間おきに延べ 40TB 程度出力すると見積もられ、ファイル I/O 性能は十分な I/O バッファが利用できるのであればトータルで 0.2TB/s で十分である。

(ii) asuca

asuca は領域気象モデルであり、力学過程では非静水圧のナヴィエストークス方程式を差分法によって解いている。

見積もりにあたって想定する問題規模は以下のとおりとする。

- 格子数 : $7500 \times 7500 \times 500$ (水平 400m、鉛直 40m)
→ 総格子数 28G
- 積分時間と実行時間 : 36 時間予報を 30 分、 $dt=1s$ (129600 ステップ)
→ 1 ステップ当たりの実行時間は $1800/129600=13.88ms$

計算領域の設定にあたっては、日本全体をおおむね覆う領域として東西 3000km、南北 3000km の領域を想定している。本資料を作成していた時点で、2013 年の気象庁のメソモデルは 36 時間予報を 30 分で終了することとしており、この予報時間および所要時間で計算を行うことを想定する。

既存の計算から得られた実測値(格子数 $1571 \times 1291 \times 57$)

- 演算量は 1 ステップ当たり 2TFLOP
- 377GByte のメモリを利用
- 所要時間の比率

通信時間を全体の 10%と仮定する。なお、入出力については入出力専用プロセスを設けることとして、オーバーラップさせることにより隠ぺいできると仮定する。

■ メモリバンド幅

力学過程（例えはセル境界でのフラックス評価）においては、四則演算を中心であることから比較的大きいメモリバンド幅を必要とするものの、物理過程においては複雑な関数を用いることもあり、力学過程よりもメモリバンド幅を必要としないものと考えられる。今後必要となるメモリバンド幅は、これから超高解像度の計算に対して、どのような力学過程・物理過程を開発していくかに依存しており、推定するのは難しいが、B/F 値が 1 であると仮定することにより見積もることとする。

■ ネットワーク性能

asuca は格子点法を用いており、全対全の計算を行うことはない。隣接プロセスとの通信回数として 1 ステップ当たり 75 変数に対していわゆる「のりしろ」領域（2 格子幅）を送信および受信する、とする。1 プロセスが担当する格子数を $50 \times 50 \times 500$ 層と仮定する（プロセス数としては $150 \times 150 = 22500$ プロセスを利用するとする）。のりしろ領域の 1 面当たりのバイト数は 50（1 方向の格子数） \times 500（鉛直層数） \times 2（のりしろの幅） \times 8（倍精度実数）=400Kbyte である。

■ データ出力

3 次元変数 25 個を予報時間 10 分おきに出力する（36 時間予報では 216 回）。データは圧縮して出力するものとし、1 変数当たり 2 バイトに圧縮できるとする。

これらの数値から

【総メモリ量】

$$377\text{Gbyte} \times (7500 \times 7500 \times 500) / (1571 \times 1291 \times 57) = 0.09\text{Pbyte}$$

【1 ステップ当たりの演算量】

$$2\text{TFLOP} \times (7500 \times 7500 \times 500) / (1571 \times 1291 \times 57) = 0.5\text{PFLOP}$$

【演算性能】

$$0.5\text{PFLOP} / 13.88\text{ms} = 30\text{PFLOPS}$$

【メモリバンド幅】

$$30\text{PFLOPS} \times 1 = 30\text{Pbyte/s}$$

【ネットワーク性能】

$$400\text{Kbyte} \times 75 \times 2 / (13.88\text{ms} \times 0.1) = 40\text{Gbyte/sec}$$

（隣接プロセスとの通信で必要な性能）

$$40\text{Gbyte/sec} \times 22500 = 0.9\text{Pbyte/sec} \quad (\text{全体で必要な性能})$$

【使用ストレージ量】

$$28\text{G} \times 25 \times 2 \times 216 = 0.3\text{Pbyte}$$

【ストレージ I/O 性能】

0.3Pbyte/1800（秒）=0.17Tbyte/sec

(iii) MIROC-ESM

MIROC-ESM は、地球環境の変化を予測することを主目的とした、一般に地球システムモデルと呼ばれるモデルである。地球システムモデルは地球環境の変化を再現・予測することを主目的としており、地球環境を形成している各種物理過程が、対象とする時間スケールや要求される精度に応じて組み込まれている。

見積もりにあたって想定する問題規模は以下のとおりとする。

- 格子数：大気モデル $2000 \times 1000 \times 200$ 、海洋モデル $3000 \times 1000 \times 50$
- 積分期間と実行時間：100 年積分を約 1 ヶ月で実行 (=1 年積分を 6 時間で実行)
- 総ステップ数：5256000000 (100 年、100 ケース並行実行、 $dt=60sec$)

地球システムモデルは複数のサブモデルから構成される。これらのサブモデルは流体の運動や光の放射伝達、大気化学反応など、異なる物理現象を表現しており、モデル全体にわたって全ての方程式系や解法を理解・把握することは多大な労力を要する。したがって、性能要求見積もりに際して、基礎方程式から出発し計算アルゴリズムから理論的に性能要求を導出する演繹的手法を採ることは困難であり、ここでは演算量やメモリ使用量などの測定値から帰納的に推測される値として要求を見積もることとした。なお測定は大気モデルのみで行った。

問題サイズ T85L40 (格子数 $256 \times 128 \times 40$) の計算を、京コンピュータで実行し得られたプロファイル情報は次のとおりである。

- 1 ステップ当たりの総演算量 : 74.7 GFLOP
- 1 格子当たりのメモリ使用量 : 16.0 Kbyte
- 1 格子 1 ステップ当たりの演算量 : 57000 FLOP
- 1 格子 1 ステップ当たりのメモリアクセス量 : 129 Kbyte

これらの数値から、想定する問題規模 (格子数 : $2000 \times 1000 \times 200$ 、並行実行数 : 100) で要求される値は以下のように見積もられる。

【総メモリ量】

- ・ 1 格子当たりのメモリ使用量 \times 3 次元格子数 \times 並行実行数 = 600 TByte

【演算性能】

- ・ 総演算量 : 1 格子 1 ステップ当たりの演算量 \times 3 次元格子数 \times 総ステップ数 = 120 ZFLOP
これを実行時間 600 時間で行う場合、

$$\cdot 120 \text{ ZFLOP} / (600 \times 3600 \text{ sec}) = 55 \text{ PFLOPS}$$

【メモリ帯域】

- ・ 総メモリアクセス量 : 1 格子 1 ステップ当たりのアクセス量 \times 3 次元格子数 \times 総ステップ数 = 240000 EB
- ・ 要求メモリバンド幅 : $240000 \text{ EB} / (600 \times 3600 \text{ sec}) = 110 \text{ PB/sec}$

上記の 1 ケース当たりの要求演算性能は比較的小さい。しかし 100 ケースのアンサンブル実験全体を 1 ヶ月で終了させたいという要請がある。完全にケース間の同期をとつて実行する必要はないが、同時に 100 ケースを実行するだけのキャパシティが不足しているシステムである場合、1 ケース当たりの実行速度がより高速に行われることが要求される。出力データはシミュレーション 100 年当たり 800TB 程度出力すると見積もられ、100 ケースで 80PB 必要である。ファイル I/O 性能は十分な I/O バッファが利用できるのであれば、トータルで 40GB/s (積分時間の 1%) あればよい。

(iv) JNoVA

JNoVA は「4 次元変分法」というデータ同化手法を用いた客観解析プログラムである。客観解析とは不規則に分布した観測データから規則的な格子点での大気（や海洋）の状態を与える手法であり、初期値の精度が予報精度に直結する。

見積もりにあたって想定する計算規模は以下の通りとする。

- 格子数 : $4000\text{km} \times 3000\text{km} \times \text{鉛直 } 150 \text{ 層} \times \text{水平格子 } 1\text{km}$ で計算する ($4000 \times 3000 \times 150$ 格子)。
- 同化ウィンドウ 3 時間のデータ同化を実行時間 30 分で計算。 $\Delta t = 4 \text{ 秒}$ (2700 ステップ)。

既存の計算から得られた実測値は以下のとおりである。

- 1 格子 1 ステップ当たりの演算量 : 12500FLOP
- 格子数 $241 \times 193 \times 40$ でのメモリ量 : 525Gbyte

これにより、必要なリソースは、以下のように見積もられる。

【総メモリ量】

4 次元変分法の計算では、ステップごとにモデル内で計算される予報値を保存しておかなければならぬ。そのため、モデル時間（積分時間）が同じでもステップ数が異なると、要求されるメモリ量は異なる。上の実測値は $DT=40$ 秒、270 ステップでの値である。一方、想定している計算規模では $DT=4$ 秒、2700 ステップとなるため、総メモリ量は、 $525\text{Gbyte} \times (4000 \times 3000 \times 150) / (241 \times 193 \times 40) \times (2700/270) = 5.08\text{Pbyte}$ となる。

【演算性能】

4 次元変分法では、最適な値を求めるために複数回の探査計算を行う。この探査回数を 50 回とすると、総演算量は、 $12500\text{FLOP} \times (4000 \times 3000 \times 150) \times 50 \times 2700\text{step} = 3.04\text{EFLOP}$ となる。これを 30 分で計算する。実行時間の 30% を通信が、70% を演算が占めるとすると、演算性能は $3.04\text{EFLOP} / (1800\text{s} \times 0.7) = 2.41\text{PFLOPS}$ となる。

【メモリ帯域】

JNoVA の計算ではステップ毎にメモリ量が変わるために、メモリ帯域の正確な算出は困難である。きわめて大まかな見積もりとして、他のデルと同様、1 ステップごとにロードストアが発生するとし、演算の 10 分の 1 でロードストア（ロードとストア）が行われると仮定する。4

次元変分法の探索計算内では、予報・随伴モデルにより予報値がステップごとに処理される。総メモリ量の大部分が予報値で占められていると仮定すると、予報値 1 タイムステップ当たりのメモリ量は $5.08\text{Pbyte}/2700 \text{step} = 1.88\text{Tbyte}$ となる。また、1 タイムステップ当たりのロードストアの時間は $1800\text{s} \times 0.1 / (2700\text{step} \times 50 \text{(繰り返し回数)} \times 2 \text{(予報・随伴モデル)}) = 0.67\text{ms}$ である。この時間でロードとストアが行われると仮定すると

$$1.88\text{Tbyte} / 0.67\text{ms} \times 2 = 5.64 \text{ Pbyte/s}$$

となる。

【ネットワーク性能】

JNoVA の時間発展演算子では、隣接プロセスとの通信回数として、1 ステップ当たり 68 変数についてのりしろ領域 (2 格子幅) を送信および受信する。1 プロセス当たりの格子数を $100 \times 100 \times 150$ 格子と仮定する (プロセス数としては $40 \times 30 = 1200$ プロセス)。のりしろ領域の 1 面当たりのバイト数は $100 \text{(1 方向の格子数)} \times 150 \text{(鉛直層数)} \times 2 \text{(のりしろの幅)} \times 8 \text{(倍精度実数)} = 240\text{Kbyte}$ である。

$$240\text{Kbyte} \times 68 \text{(変数)} \times 2 \times 2700\text{step} \times 2 \text{(予報・随伴モデル)} \times 50 \text{(探索回数)} \times 1200 \text{(プロセス)} = 10.58\text{Pbyte}$$

実行時間 30 分のうち 30% が通信と仮定して、

$$10.58\text{Pbyte}/(1800\text{s} \times 0.3) = 0.0196\text{Pbyte/s}$$

【ストレージ量】

解析結果 3 次元変数 21 個を出力するとして、

$$4000 \times 3000 \times 150 \times 21 \text{(変数)} \times 8\text{byte} = 302.4\text{Gbyte}$$

【ストレージ I/O 性能】

計算時間の 1% 程度を想定すると、

$$302.4\text{Gbyte} / (1800\text{s} \times 0.01) = 0.017\text{TB/s}$$

と見積もられる。

| 課題 | 要求性能 (PFLOPS) | 要求メモリ バンド幅 (PB/s) | メモリ 量/ ケース (PB) | ストレージ量/ ケース (PB) | 計算時間/ ケース (hour) | ケース数 | 総演算量 (EFLOP) | 概要と計算手法 | 問題規模 | 備考 |
|-------------------|------------------|-------------------------|--------------------------|------------------------|------------------------|------|-----------------|---------------------------|--|---|
| 高解像度気象予報(全球) | 130 | 360 | 3 | 58 | 340 | 1 | 150000 | モデル名 NICAM, 有限体積法 | 格子点数: 1兆(水平解像度220m,鉛直94層),ステップ数:520万(dt=1秒,2ヶ月) | 10万ノードを仮定(ノードあたり隣接通信1GB/s) |
| 高解像度気象予報(領域) | 33 | 33 | 0.09 | 0.3 | 0.5 | 2700 | 160000 | モデル名 ASUCA, 有限体積法 | 格子点数: 7500x7500x500,ステップ数:13万(dt=1秒,36時間) | 演算量、メモリ量に関しては、SR1600でのプロファイルを元に外挿。メモリアクセス量は、B/F値が1と仮定して見積もった。 出力は、25変数は10分毎に出力する。 通信に関しては、22500ノードを仮定(ノードあたり隣接通信40GB/s) |
| 地球環境変化予測 | 56 | 110 | 0.60 | 80 | 600 | 1 | 120000 | モデル名 MIROC-ESM | 格子点数: 2000x1000x200,ステップ数:5300万(dt=60秒,100年),100アンサンブル同時実行 | 計算の大半を占める大気モデルのみで見積もり。 100ケース全体が1ヶ月で計算完了することが必要。ネットワークは1000ノードを仮定(ノードあたり大域通信1TB/s) |
| データ同化を用いた気象予測精度向上 | 2 | 5.6 | 5 | 0.0003 | 0.5 | 1 | 4.2 | モデル名 JNoVA, 四次元変分法(同化モデル) | 格子点数: 4000x3000x150,ステップ数:2700 | 探査回数50、実行時間のうち70%が演算として見積もり |

*本見積もりは未だ精査中である。より精度の高い数値は Web 版 (→ 「1.2. 本文書の構成」) を参照のこと。

(5) 他分野との連携

惑星科学の分野では、惑星大気の振る舞いを理解するため、地球大気を念頭に開発されてきた大気大循環モデル（AGCM）を適用する研究が盛んに行われている。AGCMでは、グリッドスケール以下の地球大気現象を表現するためのパラメタリゼーションが多数用いられる。惑星大気へのAGCM適用により、こうしたパラメタリゼーションの適用範囲が明確になり、また惑星大気特有の現象再現のための改良の努力が地球の気象現象の再現性向上をもたらすことも期待される。また、ものづくり分野などで研究開発が進む流体モデルと連携することにより、精度の高い移流スキームや乱流の取り扱いの開発、高度な可視化技術の開発などにつながる可能性がある。

また、「(2)長期的目標」で触れたデータ同化技術は、気象・気候の研究を行うにあたって数値モデリング分野と観測分野を結ぶのに不可欠な手法であるが、生命科学分野や数値流体力学など他分野でも利用が盛んになってきている。それぞれの分野で進むデータ同化技術の開発について情報交換を行うことで、單一分野内での技術開発では望めないような思わぬ発展がもたらされるかもしれない。

更に、地球温暖化の予測など長期的な環境変化予測は、将来の社会・経済発展の方向性を議論するために開発してきたモデルと関連が深い。実際、IPCC（Intergovernmental Panel on Climate Change：気候変動に関する政府間パネル）の報告書作成へ向け使用される社会・経済シナリオ開発のために用いられるモデルでは、気候モデルによる温暖化予測実験結果が入力データとして直接、間接に用いられている。向上的著しい計算能力を活用して、社会・経済分野での詳細なモデルを、本節で述べた地球環境監視予測システムに組み入れることで、社会制度の未来設計に有用なツールを構築することは検討の価値があろう。

(6) 公的な意見交換とそのサマリー

2013年3月25日、日本海洋学会春季大会においてシンポジウム「ポスト『京』」に向けた計算科学としての海洋学の展望」を開催し、海洋学会員以外の参加者も含め約50名の参加を得た。気候モデリングの研究を進める主な国内機関（東大大気海洋研、気象研究所、北海道大学、海洋研究開発機構）からの講演者7名に、モデル研究の将来構想を個人として自由に発表してもらったのち、1時間ほどの総合討論を行った。総合討論では、ロードマップの大枠については支持が得られ、ロードマップの実現へ向けた具体的な手法や体制などを中心に議論が進んだ。討論で出された話題として、以下のようなものがあった。

- 計算機の高速化とともに、モデルの大規模化も進んでいる。海洋コミュニティの中で可能な限りモデルを統一していくための連携が始まっている。
- ポスト「京」の他に、分野ごとに最適化されたアーキテクチャを持つ大型計算機が存在し、ポスト「京」と連携していく体制が理想的。
- データ同化を行うにあたっては、メモリとCPUに加え早いI/Oが必要。また診断量をモデル内で計算してディスクに書き出しておく必要性が増しており、十分なディスクを確保することが重要。

- 波浪モデルや生態系モデルを海洋モデルに結合するケースが出てきている。波浪モデルは次元数が5次元と多いため、計算時間が20倍になることもある。また生態系モデルも、構造によってはトレーサの数が飛躍的に増大する。高性能の計算機の能力を活用するという意味では適切な課題。

また、日本気象学会においても、専門分科会「ポスト『京』に向けた気象・気候シミュレーションの展望」を2013年5月18日に開催し、学会員100名以上の参加を得た。気象・気候の数値モデリングを進める主な国内研究・行政機関（気象庁、理化学研究所、京大、東大、海洋研究開発機構など）に所属する講演者から、第1部では「京」を利用した計算結果について、第2部ではポスト「京」に向けた数値モデリング・データ同化研究の将来構想やアーキテクチャに関する要望などについて、計10の講演があった。特に、データ同化に取り組んでいる複数の講演者から、計算速度のみならずI/Oが成果を得るまでのスループットを決める重要な要因となってきていることが指摘されたほか、竜巻予測や気象LES実験といった先進的な取り組みも紹介されていた。講演終了後の総合討論では、データ同化のみならず、実験結果の可視化やデータマイニングといった後処理を効率的に進めるためにも、高い計算速度に見合ったI/Oの性能の必要性が改めて強調されていた。更に、大規模な資金を投じて開発される大型計算機の利用に際しては、社会に資するという意識が不可欠であるという指摘がある一方、高解像度モデルの活用により素過程の理解を深め、科学的知見を得ることで世界をリードすることも広い意味での社会貢献につながるという意見が出された。気象・気候分野での計算科学ロードマップは、この両面を含むものとして評価され、大枠での合意は得られた。

(7) ロードマップ

| 年代 課題 | 2012 ~ | 2014 ~ | 2016 ~ | 2018 ~ | 2020 ~ | 2022 ~ |
|------------------|--|--------|--------|--|--------|--------|
| 地球環境監視 予測システム | 中解像度シームレス予測システムの開発 地域スケールの詳細温暖化予測 ・確率的予測手法開発 ・一様格子力学コアの導入 ・領域モデル、GCM改良 | | | 高解像度シームレス予測システムの開発 地球環境再解析・再予測システム構築 ・ESM要素モデル開発・結合 ・古気候や惑星大気モデリングによるESM検証 ・生物化学過程データ同化 | | |
| スケール間 相互作用解明 | 大気・海洋の乱流と大規模場の相互作用解明 GCMパラメタリゼーション改良 ・LES・雲物理モデル結合 ・海洋渦解像モデル改良 | | | 化学－エアロゾル過程相互作用解明 個体動態と群集動態の関係解明 ・エアロゾル＋大気化学結合系モデル開発 ・個体ベース生態系モデル(陸域・海洋)開発 | | |
| 高解像度 気象予報 | 高解像度アンサンブル予測モデルの開発 1-2km雲解像モデルによる局地的強雨の直前 予測と確率的予測の実証実験 ・ストームスケール、雲解像スケールのデータ 同化手法の開発と統合 | | | 超高解像度アンサンブル予測モデルの開発 0.5-1kmモデルによる確率予報の実証と再生 可能エネルギー供給・大気汚染の精密予測 ・氷相を入れたデータ同化技術開発 ・高精度の風系・物質輸送再現モデル開発 | | |

図 4.3.1-4 気象・気候科学ロードマップ

参考文献

- [1] Ouchi, K. and H. Fudeyasu (2012) Cyclones: Formation, Triggers and Control, Nova Science Pub. Inc., ISBN 978-1619429765, 276pp.
- [2] J. L. Kinter III, B. Cash, D. Achuthavarier, J. Adams, E. Altshuler, P. Dirmeyer, B. Doty, B. Huang, L. Marx, J. Manganello, C. Stan, T. Wakefield, E. Jin, T. Palmer, M. Hamrud, T. Jung, M. Miller, P. Towers, N. Wedi, M. Satoh, H. Tomita, C. Kodama, T. Nasuno, K. Ouchi, Y. Yamada, H. Taniguchi, P. Andrews, T. Baer, M. Ezell, C. Halloy, D. John, B. Loftis, R. Mohr, and K. Wong (2013) Revolutionizing Climate Modeling - Project Athena: A Multi-Institutional, International Collaboration. Bull. Am. Meteorol. Soc., 94, 231-245.
- [3] 淡路敏之, 池田元美, 石川洋一, 蒲地政文 (2009) データ同化—観測・実験とモデルを融合するイノベーション, 京都大学学術出版会, 284pp.
- [4] 住明正, 露木義, 河宮未知生, 木本昌秀 (2012) 計算と地球環境 (岩波講座計算科学第5巻), 岩波書店, 256pp.
- [5] 斎藤和雄 (2012) 局地的大雨の予測に挑む—超高精度気象メソスケール予測の実証ー, 環境会議, 2012春号, 58-63.
- [6] 河宮未知生, 石井正好, 鬼頭昭雄, 木本昌秀 (2013) 「21世紀気候変動予測革新プログラム」における CMIP5 実験仕様に基づいた温暖化予測実験, 天気, 2013年4月号, 印刷中.

- [7] Friedlingstein, P., P. Cox, R. Betts, L. Bopp, W. von Bloh, V. Brovkin, P. Cadule, S. Doney, M. Eby, I. Fung, G. Bala, J. John, C. Jones, F. Joos, T. Kato, M. Kawamiya, W. Knorr, K. Lindsay, H. D. Matthews, T. Raddatz, P. Rayner, C. Reick, E. Roeckner, K.-G. Schnitzler, R. Schnur, K. Strassmann, A. Weaver, C. Yoshikawa, and N. Zeng, et al. (2006) Climate-carbon cycle feedback analysis, results from the c4mip model intercomparison. *J. Climate*, 19, 3337–3353.
- [8] World Climate Conference-3 Geneva, 31 August – 4 September 2009, Conference Statement, http://www.wmo.int/wcc3/documents/WCC-3_Statement_07-09-09_mods.pdf (2013 年 4 月 5 日閲覧)
- [9] World Climate Research Programme (2005) The World Climate Research Programme Strategic Framework 2005-2015: Coordinated Observation and Prediction of the Earth System (COPES), WMO/TD-No.2191, 59pp.
- [10] Griggs, D. (2013) Sustainable development goals for people and planet, *Nature*, 495, 305-307.
- [11] Arakawa, T., H. Yoshimura, F. Saito and K. Ogochi (2011) Data exchange algorithm and software design of KAKUSHIN coupler Jcup, *Procedia Computer Science*, 4, 1516-1525.

4.3.2 固体地球科学

(1) 現在行われている課題

(i) プレートテクトニクスとマントル対流

固体地球科学においては、1960年代後半に提案されたプレートテクトニクスを中心としたパラダイムで研究が進んできた。プレートテクトニクス理論によれば、地球の表面は十数枚の岩盤（プレート）に分かれており、個々のプレートが地球の表面をほぼ剛体的に動いている。また、プレートとプレートの境界では、それぞれの動きの食い違いが生じ、結果的に地殻変動や地震、あるいは火山といった地殻活動が引き起こされるとされている。プレートテクトニクス理論も当初は陸上の古地磁気データや海洋底の地磁気異常の縞模様など主に地球物理学的な観測データを根拠とした仮説であったが、これにより地殻活動の空間分布の偏りをうまく説明することが可能になった。更に現在では VLBI (Very Long Baseline Interferometry) や GNSS (Global Navigation Satellite System) といった宇宙測地技術によって、地表の動きが高精度で実測され、グローバルスケール（地球規模）では剛体的なプレートの動きが実証されるに至っている。

ひとたびプレートテクトニクスを「公理」として認めてしまいさえすれば、グローバルスケールでの地震・津波現象はほぼ理解が可能な段階にあるといってよい。しかしながら、プレートテクトニクスがどのような仕組みで駆動・維持されているのかという肝心な点が、現在でも理解できているとは言い難い。むろん「プレートの運動はマントル対流の地表付近への現れである」という描像は（第0近似的とはいえ）十分妥当であり、それゆえマントル対流を通してプレートテクトニクスを理解しようという試みはプレートテクトニクス理論の黎明期から行われてきた。近年の計算機の進歩によって、全球規模でのマントル対流シミュレーションも盛んに行われるようになってきたが、マントル対流の枠内でプレートテクトニクスを再現することにはまだ成功していない。

現在のマントル対流の研究で対象とする科学的なテーマは、大きく分けて二つある。まず一つは地球惑星全体のスケールを対象として、マントルの流れによって駆動される地球内部の熱輸送や物質循環の過程を明らかにすることである。この例として、地球史約45億年にわたるマントル内部の熱化学進化を調べる研究、水や揮発性元素といった物質がマントル内部へ還流・循環する過程を調べる研究、あるいは近年発見された「スーパー地球」（太陽系外の惑星系に見つかった、地球より大きな地球型惑星）のマントルダイナミクスを調べる研究、などが挙げられる。もう一つは時空間スケールを限定したうえで、マントルの流れ場を高精細に求めることである。例えば、プレートの沈み込みに関連したものとして、沈み込み帯周辺での小規模な対流と火山の時空間分布との関係に注目する研究、地表面でのプレートの運動を既知としたときにマントル内に生じる流れとさまざまな観測量との関係に注目する研究、更にはマントル対流からプレートの運動が自発的に発生・維持される条件それ自身を検討する研究、などが挙げられる。（図4.3.2-1）

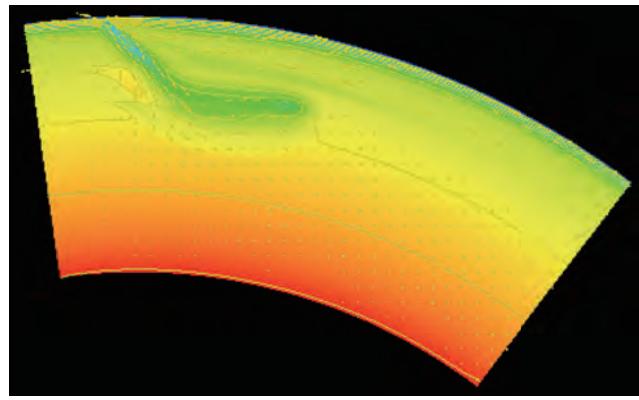


図 4.3.2-1 プレート沈み込みの地域的モデリング（図は亀山氏提供）

(ii) 地球コアダイナミクス

マントル対流を駆動するエネルギー源の1つとして、地球中心核（地球コア）からの熱の供給が期待される一方、核のダイナミクスについても十分な理解ができている訳ではない。地球コアのダイナミクスについての研究においては、3次元球殻内で電磁流体力学方程式を解く地球ダイナモシミュレーションが1995年に初めて登場して以来、自発的な磁場生成（ダイナモ）が可能であることの再現、双極子磁場の卓越の再現、地磁気極性逆転の再現、などの成果が得られてきた。その過程で高速回転系における球殻内対流、磁場との相互作用やダイナモ過程についての基礎的な物理の理解も進んできた。地球コア内部は直接覗いて調べることができないため、数値シミュレーションから得られる知見は非常に有益なものである（図4.3.2-2）。しかしながら、現在のスーパーコンピュータの能力の限界により、シミュレーションで使用されている物性値あるいは無次元パラメータの大部分は、実際の地球コアのものとは何桁もかけ離れたものになっている。パラメータが全く違うのになぜ双極子磁場が地球と似るのかといったことについても理由がわかつていない。現在の知見がどの程度まで地球コアダイナミクスとダイナモ過程の本質を捉えているかを確かめるためには、これらの物性値や無次元パラメータを現実の値に限りなく近づけたモデリングでその対流パターンや乱流構造、磁場生成メカニズムなどを調べることが必要である。物性値の中でも特に重要かつ再現が難しいのが粘性率である。地球外核はサイズ（厚さ約2200km）に対して粘性が非常に低く（水と同程度）、非常に小さなエクマン数($O(10^{-15})$)となっている。小さなエクマン数は（相対的に）小さな粘性を意味するため、流れのスケールが（外核半径サイズに比べると）ずっと小さくなり計算に必要な解像度は増大する。このエクマン数を実現する粘性率では流れのレイノルズ数（慣性力と粘性力の比）は $O(10^8)$ 程度と非常に巨大な値になると見積もられる。このことからわかるように外核内はきわめて激しい乱流状態になっている。現在のHPCで可能な解像度ではこのような巨大なレイノルズ数とそれによる強い乱流状態を実現することができない。現在のモデルではレイノルズ数はおむね $O(10^2) \sim O(10^3)$ 程度である。そのため現在のモデルでは実際の外核対流より極端に大きなサイズの渦までしか解像できていない。なお、分子粘性ではなく渦粘性を考慮したとしても $O(10^9)$ 程度の大きさだろうと考えられており、依然として数値シミュレーションはきわ

めて困難な状況である。大規模数値計算による低エクマン数の計算では日本が最もリードしているが、それでも最も低いものでも $O(10^{-7})$ である。

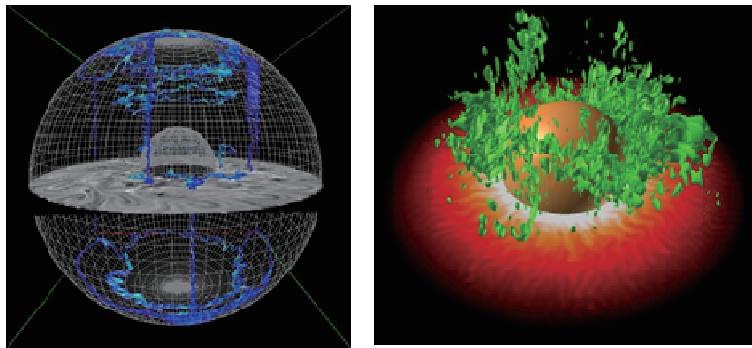


図 4.3.2-2 コア対流と地球ダイナモ過程の 3 次元球殻シミュレーション(宮腰・陰山提供)

(iii) プレート境界相互作用

プレートはグローバルスケールでは剛体的に振る舞うが、複数のプレートの境界付近では、プレート間の相互作用により変形や破壊が生じる。このうち短時間に生じる破壊が地震である。その中で特に、プレート同士の境界面に沿って発生する地震は、数百～千 km に渡って破壊が進展し、マグニチュード 9 (M9) クラスに達する場合もある。東日本大震災をもたらした東北地方太平洋沖地震もそのような地震であった。このような地震は、プレート境界での固着・すべりの時空間変化としてモデル化され、近年の地震発生の物理的進展と地球シミュレータによる大規模計算の実現により、M9 クラスを含む巨大地震の発生に至る応力蓄積過程や地震時の破壊伝播をシミュレーションすることが可能となっている。更に、プレート境界での固着・すべりの時空間変化は地表面の変形をもたらし、それが GNSS 等で観測されるため、そのデータを逆解析することで固着・すべりを推定することができる。このため、観測データに基づいた応力蓄積過程の推定もある程度可能となってきた。しかし、個別の地震やゆっくりしたすべりによる応力解放過程を予測するためには、強度の分布や低下の仕方、破壊開始位置の情報が必要であり、それを事前に推定するのは困難である。

更に、プレート内部の破壊現象もプレート境界での相互作用が原因である。ただし、地球内部がプレートの下も含めて弾性体として振る舞うのであれば、プレート境界近傍のみで破壊が生じるはずである。しかし、プレートの下は数年や数十年程度の時間スケールで粘弾性的に流动する性質を持つことがわかっている（アセノスフェアと呼ばれる）。そこで流动によって弹性的なリソスフェア（プレート）に応力集中が生じることで、プレート内部でも広域に応力が蓄積していくことになる。リソスフェアとアセノスフェアが成層構造の場合については、日本列島スケールでの数値シミュレーションが実現しており、プレート内の絶対応力場を推定できる。更にその結果を、地震のモーメントテンソルをデータとした絶対応力場のパターンの逆解析結果と比較することも可能となっている。しかし、プレート内部でさまざまな規模の地震が発生するメカニズムや局所的な応力蓄積・解放過程はまだ明らかになっていないのが現状である。このプレート内部におけるさまざまな規模の地震の起り方（いわゆる地震活動）は、大地震前にさまざまな時空間変化、例えば、発生頻度の低下（静穏化）や地球潮汐との相関を

示す。そのため、地震活動の時空間変化は、大地震の発生予測の手がかりを与える可能性を秘めている。しかし、地震活動は地震学の黎明期から研究が行われ、地震の規模別頻度分布や余震の発生頻度の時間変化のような統計則が知られているものの、これらの統計則を説明する物理的なメカニズムは未だ解明されていない。この課題は、現在まさに研究のフロンティアであり、室内実験や地震活動のデータ解析に加えて、最近では数値実験による研究も進められつつある。

(iv) 被害予測

より社会に密接した課題として、地震やそれにともなう津波によって生じる被害予測の課題がある。これは「京」の戦略分野3の地震・津波課題における中心であり、2章の総合防災で述べたように、地震発生から地震波や津波の伝播、都市の揺れや津波の遡上に至るまでを連携してシミュレーションすることによる災害予測と、避難シミュレーションの活用による減災対策に資するための手法開発が行われている。国内では東日本大震災を受けてこうした研究が注目されているが、戦略分野を含め、それ以前から進められてきた研究である。また、海外においても、スマトラ・アンダマンの地震津波をはじめ、多くの地震・津波災害が起きていることから、地震・津波の災害予測を対象としたシミュレーションが盛んに行われている。

地震発生のシミュレーションでは、沈み込みプレート境界地震を対象とした多数の地震発生シナリオ計算を行うとともに、多数のシナリオを観測データと照らし合わせて尤もらしさ（尤度）を評価し、尤度で重みづけしたシナリオのアンサンブルを用いてその後の推移を予測するシステムの構築に向けた研究が行われている。一方、海外ではカリフォルニアを対象とした複数モデルによるシナリオの検討や地震活動データを用いた予測実験などが行われている。

地震波や津波の伝播シミュレーションにおいては、従来別々に計算されていた地震波動の伝播と津波の発生・伝播を、1つの方程式系で同時に解くことにより地震発生中の海底での音波の発生も含めたシミュレーションが「京」で行われている。これはリアルタイムで海底ケーブルなどで観測される地震波ならびに水圧変動観測のデータとの比較を可能とするものである。一方、日本だけでなく海外（米国やヨーロッパ）でも、東日本大震災以降、考え得るあらゆる地震シナリオに対する地震動評価のために、大規模シミュレーションの必要性が議論されている。更に、高密度地震観測による地震波形の逆解析で、大地震の震源過程と地殻・マントルの不均質構造を推定する目的にも大規模シミュレーションを活用する動きがある。

また、地震災害のシミュレーションとして重点的に行われている課題は、1) 地盤の揺れと連動した構造物のシミュレーションと、2) 都市全体の地震被害と被害対応を計算する都市のシミュレーションの二つである。都市を襲う地震動を引き起こす地震そのもののシミュレーションとの連成や複合災害として対策が必要とされている津波との連成の検討も進められている。構造物のシミュレーションは、1億自由度を超える超詳細な構造モデルを自動構築し、揺れがもたらす構造物の局所的な損傷や全体的な破壊・倒壊という非線形過程を数値解析するもので、世界最先端の技術である。係数が時間・空間的に不連続に変化する4次元偏微分方程式を解く他、有限要素法による非構造格子の解析モデルを使い、並列計算の性能を上げることは決して容易ではない。性能の向上と時間・空間分解能の向上が当面の課題である。都市のシミュレーションは、多様な地理情報システムを利用して都市モデルを構築し、地震災害の三つの

過程、すなわち、地盤の揺れ・建物の揺れ・群衆避難を解析するものである。このような大規模数値計算を使う地震被害のシミュレーションもまた、世界最先端の技術である。

地盤と建物の揺れは物理過程のシミュレーションであるが、群衆避難のシミュレーションは粒子系のマルチエージェントシミュレーションである。より大規模な都市モデルでも実効性能が出る並列計算性能の向上が課題であり、同時に、津波も組み込んだ複合災害のシミュレーションも着手されつつある。そして、津波シミュレーションにおいては、沖合のリアルタイム観測データを活用した津波波源モデルのリアルタイム推定や津波ハザード予測の高度化として、リアルタイム浸水予測の津波予警報への活用、津波の高さだけでなく流速・波力の見積りやそれによる被害予測、津波による土砂移動・地形変化、更には津波による複合災害の予測のための基礎研究が行われつつある。

(2) 長期的目標

固体地球科学の分野では、グローバルな空間スケール・地質学的時間スケールで生じるマントルやコアの対流から都市規模での地震・津波による災害予測に至るまで、さまざまな時空間スケールの現象が対象となる。以下では対象となるスケールや現象ごとに、大規模計算に関わる研究についての長期的目標を述べる。

なお、これまで固体地球科学においては、HPC は数値シミュレーションを行うために使うことがほとんどであった。しかし、リアルタイムに連続的に広域多点で観測される地震波形や地表変位のようなデータはいわゆるビッグデータであり、波形そのものが含む膨大な情報を活用するための大規模データ解析、例えば逐次データ同化による推移予測などには、大規模データの読み書きに耐えられる I/O を備え、個々の計算でも大規模な計算を多数アンサンブルに対して行える高性能・高並列の HPCI が必須である。長期的にはそのような方向性も重要であるが、課題や期待される科学的なブレークスルーを検討すること自体が今後の課題であるため、以下ではシミュレーションを中心とした長期的目標についてのみ扱う。

(i) ダイナモシミュレーション

グローバルスケールでは、マントル対流とコアを模擬したダイナモの数値シミュレーションが中心となる。マントル対流研究が今後 20 年程度のスパンで目指すものの 1 つは、現在も取り組んでいる大目標を、自己無撞着かつ物理的に厳密な取り扱いにより解明することであろう（図 4.3.2-3）。例えば、プレート運動とマントル対流との関係についていえば、本来は「プレート運動はマントル対流の帰結」であるにもかかわらず、現在の研究の多くはプレート運動をマントル対流の境界条件として与えることでその影響をモデル化するという、いわば「逆方向」の議論に留まっている。これに「順方向」の議論も加えることにより、マントル対流とプレート運動の相互作用や沈み込み帯の局所的な流れ場の見積りを自己無撞着に取り扱うことを目指していく。同様の自己無撞着な取り扱いは、マントルより内側にある核の熱化学進化との相互作用、水や揮発性物質の還流・循環によって生じるマントル物質の物性変化が再び流れパターンを変化させる効果、更には地表面の環境変化（地形や気候の変化）からのフィードバック、およびスーパー地球などとの比較の際に求められる惑星サイズの効果、についても必要となるであろう。これに加えて、プレート運動再構築モデルを境界条件とした「逆方向」のマントル

ダイナミクスモデリングについても並行して進めていくことも想定される。ここでは、マントルダイナミクスと地質学的・地球物理学的・古地磁気学的な観測データとのリンクを現在よりも深化させていくことで、更に次の世代への準備としていくことが求められよう。

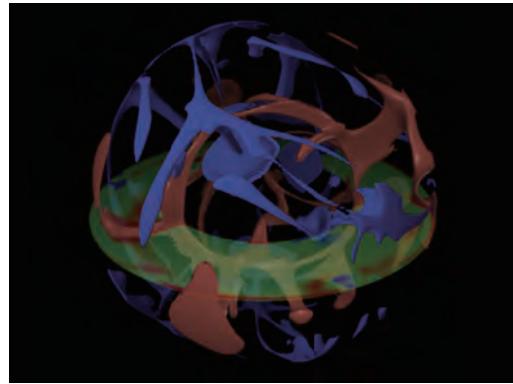


図 4.3.2-3 全地球惑星スケールでの自己無撞着なモデリング（図は亀山氏提供）

(ii) 地磁気変動シミュレーション

ダイナモシミュレーションが対象としている地球磁場は、高エネルギー宇宙線が地表に到達することを防ぎ、また太陽風による地球大気の散逸を抑えて、地表環境を生命が居住可能なものにする役割の一つを担ってきた。普段の生活では地磁気をあまり意識することはないが、このように人類を含む生物にとって重要な役割を果たしている。このバリア効果は地磁気の強さに依存する。太陽や宇宙からの影響の変動が地球に与える影響を予測するための宇宙天気予報において、地磁気強度は最重要物理量の一つであり、地磁気変動の未来予測は宇宙天気予報の研究においても重要なものである。過去の地磁気変動を再現できる信頼性の高いモデルが確立すれば、地磁気変動の将来予測を行うことが可能となり、社会的および科学的に意義の大きな成果となるであろう。数十万年、数万年から数十年、数年までさまざまな時間スケールの地磁気変動が存在するが、それらの変動の原因は明らかになっておらず、今後の重要な研究課題である。数万年～数十万年スケールの変動については、気候変動との相関が指摘されている。気候変動が地球の自転速度変動を通じて深部コアの対流と地磁気の変動を引き起こしている可能性がある。古地磁気学からもその可能性が示唆されており、重要な研究課題の一つである。またコア対流の駆動は、基本的にコアを包むマントルによる冷却によっている。そのためコア - マントル境界を通じたマントル対流活動との関係を調べることが不可欠である（図 4.3.2-4）。マントルの対流とその冷却過程は、コアばかりでなく表層活動の源でもあり、表層 - マントル - コアの活動は何らかの因果関係で結ばれていると考えられる。そのようなものの顕著な例の一つとして、白亜紀中期前後に見られる地磁気の振る舞いが挙げられる。地磁気は平均して 20 万年で極性反転が見られるが、この時期は約 4000 万年にわたって極性反転がないという特異な時期であった。更にこの期間は氷床がなく温暖な気候であり、またマントル対流活動は海嶺での海洋底の生成速度や巨大海台の存在から非常に活発であったと考えられている。これらの顕著な特徴は何らかの因果関係で結ばれていると考えられるが、それがどのようなものであるかは明らかになっていない。このような謎を解明するためには、マントル対流をはじめとする他分野の固体地球物理学研究者とも協力しながら研究を進めていくことが求められる。

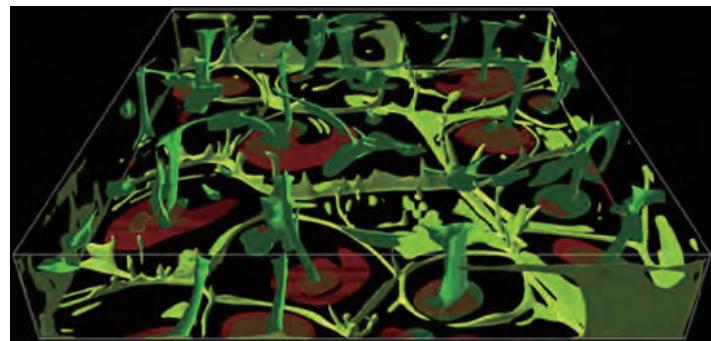


図 4.3.2-4 核・マントル境界の局所的モデリング（図は亀山氏提供）

(iii) プレート境界現象シミュレーション

日本列島スケールでは、プレート境界地震の発生を含む、プレート境界での応力蓄積・解放過程のシミュレーションと予測に向けた研究が中心となる。応力解放過程の予測は困難ではあるが、観測データから推定された固着・すべりの時空間変化に基づく応力蓄積状態の下で、地震時の強度変化の仕方や破壊開始位置をさまざまに仮定することで、起こり得るさまざまな地震のシナリオを定量的に予測することは可能になると期待される。ここで、応力蓄積状態を規定する固着・すべりの観測データは過去に遡るほど誤差が大きくなり、その曖昧さを多数の初期条件・モデルパラメタの組み合わせのアンサンブルで表現するなど、適切に定量化することが課題となる。したがって、「京」やその後の大規模計算においては、一つの大規模な計算を行うことよりも、個々の計算を観測データの分解能を表現できる範囲でできるだけコンパクト化し、多数（数百～数千）のアンサンブル計算を行うことで、定量的な予測を目指すことになる。こうして得られるさまざまな地震のシナリオを都市スケールの被害予測に順次取り入れる。更に、プレート境界の固着・すべりについては、その時空間変化をリアルタイムで陸上だけでなく海底を含めた地殻変動の観測データを基に推定しつつ、直後の推移を予測するための逐次データ同化システムを構築し、予測の試行を行うとともに、モデルの妥当性の評価や改善のための研究を進める。

(iv) プレート内破壊現象シミュレーション

プレート内の破壊現象については、日本列島スケールでのリソスフェアへの応力集中過程を、沈み込む弾性的なプレートの構造などを考慮した3次元的粘弹性不均質構造の下で数値シミュレーションを行い、その結果をモーメントテンソル逆解析による応力場推定結果と整合させていくことが一つの課題となる。そのため、日本列島スケールを対象とした数百億自由度以上の3次元有限要素法（FEM）モデルを構築し、粘弹性変形の大規模FEM計算をすることになる。大規模FEM計算については、メッッシュ作成段階での工夫や構造解析分野など他分野との協力により効率化を図る。更に、さまざまな規模の地震活動については、さまざまな規模の破壊を自発的に生じる離散要素と連続体を組み合わせた数理モデルによって、地震活動の統計則や潮汐との相関のメカニズムを研究することになる。桁違いの規模のバリエーションを計算するためには、3次元で億一兆オーダーの粒子・要素数の計算が必要となり、次世代や次々世代

の大規模計算機が必要となる。なお、離散要素法の計算を一般的に大規模に行うためには分散メモリにおける計算効率の向上が必須であるが、プレート内破壊現象のような相互作用する粒子の入れ替わりの少ない計算では、現状でも地球シミュレータのフルノードで並列化効率90%以上を達成しており、今後も並列性能を高める研究を進めていくことが期待される。また、地殻をモデル化するには、堆積物が岩石化して地殻を形成する過程を取り入れることが必須と考えられる。そのため、岩石化の室内アノログ実験と並行したモデル構築ならびに数値実験的な研究を進展させる必要がある。こうした地殻モデルを巨大地震の発生する境界条件下に置くことで、巨大地震発生前に必然的に生じる地震活動度や他の物理量の変化の有無、ひいては破壊前の切迫度や規模評価の可能性を物理的に明らかにすることを目指す。

(v) 被害予測シミュレーション

被害予測については、まずは地震発生ならびにそれによる強震動や津波伝播の予測を高解像度・高速で行えるようにして、海底観測データに基づいたリアルタイム強震動・津波予測ならびに事前のハザード評価に資する研究を進める。また、建物の揺れや損傷、都市全体の揺れの連続体モデルによるシミュレーション、複合災害である強震動による液状化、津波による構造物の破壊や漂流といった現象の粒子系シミュレーション、AI（人工知能）を取り入れた大規模避難シミュレーション等を実現する。こうした研究によって、非常に多数の地震発生シナリオに対する被害予測を行うことで、科学的根拠に基づいて予測の曖昧さを含めて評価できるシステムを構築し、政府の行っている長期評価の改善や中央防災会議や地方自治体による被害想定に用いられることを目指す。更に、将来的には、グローバルスケールのマントルダイナミクスや地殻モデルの研究成果に基づいて、各地域における超低頻度の最大規模の地震やメガ噴火の可能性、大規模地震の切迫度や規模評価など、可能なものから被害予測に取り入れていくことが長期的な目標となる。

(3) 次世代に解決すべき課題

(i) 地震発生から都市振動・津波遡上までのシームレスな連携のための高解像度計算

前述のように、科学的根拠に基づいて予測の曖昧さを考慮して地震津波の災害予測を行うためには、起こり得るさまざまな地震のシナリオについて、地震発生から地震波・津波伝播、都市振動、津波遡上の計算を連成して行う必要がある。地震発生のシナリオを考えるにあたっては、地震の発生過程を左右する震源域の上限・下限・水平方向の広がり・破壊開始点・仮定する摩擦則をそれぞれ4~5通り考慮するだけでも、その組み合わせは1,000を超える。ここで、扱う問題のスケールが地震発生から都市振動・津波遡上では大きく異なっていることに注意する必要がある。巨大地震は数百km×数百km以上の広がりを持った震源域で発生し、津波の波源域もこれに相当する。一方で、都市の振動では木造家屋や中低層建築物では周期1~2秒の揺れが問題となり、空間スケールとしては数百mオーダの構造不均質まで扱わなければならない。そのためには、地震波が励起される段階からそのオーダでの高解像度計算が求められることになる。地震波伝播の計算において、例えば南海トラフを対象とした1200km×1000km×200kmの領域で、周期1~2秒の計算を行うには水平方向に100mのメッシュでの計算が必要である。これは、「京」の全系を数時間使ってようやく1回の計算が可能な問題であり、1000

を超えるシナリオの計算は、「京」の数百倍の実効性能が出せる段階になって、初めて日常的に扱うことが可能なレベルになると言える。同様な高解像度計算は、地震発生のシミュレーションにおいても必要である。次世代の時点では、こうした計算が実際に実行可能であり、地震発生から被害予測までをシームレスに計算できることを示すことが課題となる。一方、こうした計算を意味のあるものにするためには、数百 m オーダーで地下の構造不均質や震源断層面上の不均質が明らかになっている必要があり、そのための地下構造モデルの構築や震源域内で普段から発生する小規模な地震の分布を明らかにすることも重要な課題である。なお「京」の戦略分野においても地震発生から被害予測までの計算を連携して行うことを課題としているが、それは粗い解像度でのシナリオ計算結果を入力として建物振動を計算するといった制約の中での計算となる。

(ii) 時空間スケールの異なる対流計算の高効率・高精度化（マントルの場合）

マントル対流計算において次世代で解決すべき最大の技術的課題は、時間的かつ空間的スケールが大きく異なる現象が共存している問題を、高効率かつ高精度で解く数値的手法の確立であろう。マントル対流問題では、この「スケールが大きく異なる現象が共存」していることが数値シミュレーションを著しく困難にする元凶である。例えば時間方向については、熱の輸送（熱伝導の時間スケールが数百億年）と運動量の輸送（ほぼ瞬間に起こる）の両方の取り扱いが求められる他、固相マントルとマントル物質の溶融によって生じる液相マグマの運動を同時に取り扱う場合には、両者の時間スケールの違いが時間・空間解像度の比である CFL 条件を厳しく制限してしまう。空間方向についても、マントル全体のスケール（数千 km～数万 km）とプレート運動の食い違いが局所的に起こるプレート境界のスケール（1km 以下）の両方を適切に解像しなければならない。このうち前者は、流れ場を（熱輸送に比べれば瞬間に定常状態に至るという意味で）楕円型偏微分方程式で記述・求解せねばならないことを要求する。これに加えて後者は、流れ場を記述する楕円型偏微分方程式の性質をきわめて悪くする。すなわち、マントル対流問題に内在する「時空間スケールの大きく乖離した現象を同時に取り扱う」うえでは、悪条件の楕円形偏微分方程式を高効率かつ高精度で解くことがきわめて重要であり、この克服はマントル対流の枠組でプレート運動を再現するという目標への大きな一歩になる。前述の技術的問題への取り組みとしては、Jacobian-free Newton-Krylov 法等の大規模 3 次元問題に適応可能な非線形ソルバーの開発とその実装、レオロジーの大きく異なる物質（マントル、マグマ、プレート境界等）の矛盾ない運動場を解として得るために複数の偏微分方程式を効率的にカップルさせて解く手法の開発、更には局所的には（km を下回る）超高解像度でグローバルスケールのシミュレーションを可能にするための技術として、AMR（Adaptive Mesh Refinement）や homogenization（あるいは upscaling）の実装などが挙げられる。こうした技術的な課題がある程度克服されたとすれば、階層的な空間解像度を持つモデリングが可能となり、その結果プレート運動とマントルダイナミクスの双方をグローバルスケールで取り扱うことが、次世代機で解決が期待できる科学的課題の一つと見込めるであろう。ただし、この場合にはマントルダイナミクス計算で一般的な流体解法の使用を想定しているので、このモデリングを実行する次世代機には 100PFLOPS 程度の理論性能はもとより、B/F 値の優れたハードウェアが期待されていることは言うまでもない。その一方で、巨視的現象に内在する微視的な現象の

取り扱いには、流体的な手法のみではなく粒子的な手法との併用が有効な手段の一つとされているものの、マントルダイナミクス分野で行われた例は現在までほとんどない。こうした新たな手法の開発も、更に次の世代を見越した取組みの一つとして有用であろう。

(iii) 時空間スケールの異なる対流計算の高効率・高精度化（コアの場合）

ダイナモシミュレーションにおいては、次世代のスパコンではエクマン数 $O(10^9)$ の直接計算が可能になる見込みはない。しかしながら、限られた計算機資源で地磁気変動の予測を行うため、天気予報等の計算で行われているように、計算で分解できない微小領域の渦や乱流を物理的に根拠のあるやり方で適切にパラメータ化してモデルへの導入を行う。そのようなモデルが過去の地磁気変動をよく再現することができれば、モデルの信頼性が高まり、地磁気変動の予測に利用することも可能になる。また、次世代のスパコンでは、マントルとコアのカップリングに着目したシミュレーションが現実的なものになる可能性がある。モデル開発を進め、コア—マントル境界（CMB）の熱流量とその変動や、相互作用の下でのマントルとコアの時間発展などについての理解を得る。これらを基にすれば、先述の白亜紀中期における温暖な気候・激しい火成活動・長期間の磁場極性反転のない時代（白亜紀スーパークロン）のような、表層・マントル・コアのカップリングが顕著な現象についてシミュレーションを行い各圈の相互作用について理解を進めることが可能となるであろう。

先に述べたように、現在計算可能なエクマン数は $O(10^{-7})$ である。実際の地球コアでは $O(10^{-15})$ 、渦粘性を考慮しても $O(10^9)$ 程度と考えられている。100PFLOPS 程度スケールにおいては、現在の値から 1 衍近づけることが現実的な目標となる。この場合、空間解像度は 3 次元各方向に現在の 4 倍（約 $2000 \times 2000 \times 6000 \times 2$ ）以上が必要ということがこれまでのテスト計算から見積もられている。この解像度で対流やダイナモの基礎過程がわかる磁場散逸時間（地球で約 2 万年）までを計算するには、地球シミュレータ 2 換算で 96 ノード（約 80TFLOPS）で 48×10^4 時間（約 60 年）必要となる見込みである。しかし、この 1000 倍（80PFLOPS）の性能があれば、480 時間（20 日）という現実的な時間での計算が可能となる。総演算量は、地球シミュレータ 2 で実効効率は大体二十数%程度なので、仮に 25% とすると $80\text{TFLOPS} \times (1/4) = 20\text{TFLOPS}$ 、これに 48×10^4 時間～ 1.7×10^9 [s] を掛けるとおおよそ（2 万年積分の場合） $3 \times 10^{22}\text{FLOPS}$ 程度と見積られる。なお、各方向に 4 倍というのは最低限の見積もりであり、必要な解像度はもっと大きくなる可能性がある。極性反転は平均して約 20 万年に 1 度生じ、このような地磁気変動を調べるためにには更にあと数十倍の計算能力が必要となる。これはエクサスケールでの目標となる。地球コアと実効的にほぼ同等と見做せる可能性のあるエクマン数 $O(10^9)$ の計算はさらに次の世代のスーパーコンピュータにおける課題となる。マントルとコアのカップリングシミュレーションについては、両者の対流の時間スケールはそれぞれ約 $O(10^8)$ 年、約 $O(10^3)$ 年と違いが大きい事が困難さを産んでいる。仮に 100PFLOPS で総計算ノード数が 10000 の場合、例えば 10 ノードをマントル、9990 ノードをコアに割振って計算を行えれば、時間スケール差が約 $O(10^3)$ ある系を調べることが可能になる。この場合コア側も 1 億年スケールの積分が欲しいため低エクマン数の計算は難しく（現実的に $O(10^{-4} \sim -5)$ 程度と見込まれる）、マントル側も 100TFLOPS と（実効性能を考慮するとおそらく）現行の地球シミュレータ 2 以下となるため高リソース数・大きな粘性コントラストや高解像度が必要なプレート境界を考慮したモデルの計算

は制限されるが、現在は着手するのが難しいカップリング現象に関する重要な知見が得られる可能性が高いため推進すべきモデリングである。エクサスケールにおいては、ノード数が先のものより 10 倍増加したとすると、マントル側に 10 ノード、コア側に 99990 ノードを割り振り時間スケール差が 10^4 程度の系が計算できる可能性がある。マントル側は 1 エクサの 1/10000 である 100TFLOPS で先のものと同程度であるものの、現実の時間スケール差 10^4 にかなり近づく。

(4) 課題を解決するために必要なアプリケーション群（要求性能）

(i) 総合防災連携アプリケーション

1000 オーダーのシナリオを普段計算できるとともに、地震発生直後に被害予測を行うために、少なくとも 1 シナリオを数時間程度以内に計算できることが必要である。つまり、ここでは地震発生や波動伝播などの個々の計算は、次世代で普段計算できる規模を想定している。必要な演算量やメモリ、ファイル容量についてはすでに 2.2(4)節に、表とともに詳述しているのでここでは省略し、ここではその他の性能要求について述べる。

地震動シミュレーションに用いられる運動方程式の差分法計算では、2.0～2.5B/F が必要であり、現状の「京」のメモリバンド幅（0.5B/F）では最大限性能チューニングを行っても実効性能は最大 20% 程度止まりである。未チューニングコードでは実効性能が数% 以下しか得られず、新しい物理モデルに基づく新規コード開発の効率が悪く、またチューニングに多大な時間を必要とする。

将来、メモリバンド幅が現行の 1/5（0.1B/F 程度）に低下した場合には、必然的に 5 倍量の並列化が必須となるが、すでに現状の数万 CPU において strong scaling の頭打ちが起きており、並列化効率の低下は避けられない。

また、並列分割数が増えると、領域ごとの計算量に対するデータ通信の負荷が相対的に大きくなる他、MPI 通信サイズが小さくなるために通信性能が下がるなど、分割数の増大には限度がある。特定の分割領域においては、境界条件等の処理のための余分な計算が必要になるため、分割数が増えて計算負荷が小さくなると計算負荷のアンバランスが顕在化し、並列性能の低下も起きる。「京」ではソフトウェアパイプライン機能を働かせるために、ループ長を長くする必要がある。しかし、領域分割数が増えるとループ長が短くなりパイプラインが機能しなくなる。これは、長いベクトル長を必要とするベクトル計算機にも共通する。

I/O については、数万～数十万 CPU に対して必要な入力データを渡し、各 CPU より出力される膨大な数の出力データを適切にマージするなど分散ファイル処理の Fortran 言語サポートが必要（現在では MPI-I/O で一部をサポート）である。

(ii) マントル対流アプリケーション

マントルダイナミクス分野からは、現時点で「性能評価」に供されているアプリケーションは存在しないため、以下では既存の HPC（地球シミュレータなど）で使用されているものの性能に基づいて述べる。また、マントル対流シミュレーションでは、一般的に流れ場の求解が計算時間の 9 割以上を占めることから、計算量の見積りは流れ場の反復求解ルーチンの本体部分に要するものに限定する。地球のマントル全体（深さ 2900km、外周 40000km）を、地表面で

10km の解像度となるように分割するとすれば、必要なメッシュ数は(深さ方向 2900/10) × (経度方向 40000/10) × (緯度方向 20000/10) = 2.32×10^9 となる。ただし、この解像度では不十分な領域が局所的に存在するが、AMR 等の技法を駆使することで、必要な解像度の向上に要するメッシュ数の爆発的増加が抑えられているものと仮定する。これに加えて、メッシュ 1 つ当たりに流れ場の 4 変数(速度 3 成分と圧力) が付随しているので、全自由度はおよそ 10^{10} と見積られよう。これらを倍精度実数として確保するには 8×10^{10} バイトの記憶域が必要となる。ただし、実際にはこれに加えて作業変数や他の物理量(温度・化学組成など)も含め、 10^{13} バイト程度の記憶域が必要と想定される。

以下、流れ場の反復求解に要する計算コストの見積りは、(初代) 地球シミュレータ向けに開発された、3 次元箱型領域内でのシミュレーションプログラム(Kameyama, 2005) の性能に基づいて行っている。なお、この手法には最大で $1024 \times 1024 \times 256$ のメッシュ分割での計算を行った実績があるが、楕円型偏微分方程式ソルバの性能に強く依存するマントル対流シミュレーションでは、この解像度が現在でも世界最高レベルである。流れ場の反復求解に当たっては、速度ベクトル各成分の残差の計算(歪速度テンソルの計算、応力テンソルの計算、および応力テンソルの微分)に 1 点当たり 34 演算、圧力の残差の計算(流束場の発散の計算)に 1 点当たり 12 演算、合計 $34 \times 3 + 12 = 114$ 演算が必要であり、解の更新に要する演算数も合わせて、1 反復当たり $114 + 2 \times 4 = 122$ 演算が必要になる。一方、多重格子法計算が理想的に動作した場合には、収束までに要する計算量は自由度に比例する。この計算量が最密格子で 1000 回分の反復計算に相当するとすれば、流れ場の計算に要する計算量は 1 時間ステップ当たり $2.32 \times 10^9 \times 122 \times 1000 = 3 \times 10^{14}$ となる。加えて、空間解像度 1km に対し、マントルの流れの速度がプレート運動とほぼ同等の 10cm/年とすると、時間刻みの大きさは 10^4 年である。これを用いて、地球史の 2 倍に相当する 100 億年の時間幅を計算するとすれば、 10^6 回の時間ステップが必要になる。これより、1 ケースに要する計算量はおよそ 3×10^{20} FLOPS であり、この計算を 1 EGFLOPS (10^{18} FLOPS) の速度で実行すると 300 秒の時間を要する。もちろんこれは理想的な場合の見積りであり、実際にはこれより格段に多くの時間を必要とする。とりわけマントル対流シミュレーションで重要な多重格子法計算では、粗い格子での反復計算に頻出するループ長の小さい計算のコストが不可欠であるため、計算の実行効率が一般の流体シミュレーションよりも、更に低下する傾向があることにも注意が必要であろう。なお、このことは、単体実行時の性能だけでなく、並列実行時の性能にも深刻な問題を及ぼしてしまう。例えば、計算に使用する解像度がどれほど細かくとも、それより格段に粗い格子系(例えば使用する PE 数よりも少ないメッシュ分割数)での計算が必ず発生してしまうが故に、「strong scaling」は容易に頭打ちとなってしまう。

マントル対流シミュレーションは主に連続体力学に基づく計算であり、変形を記述するテンソル成分を計算する際に多くの変数を参照する必要がある。そのため、キャッシュが効果的に利用できるごく例外的な場合を除けば、高い B/F 値でメモリアクセスのできることが望ましい。実際、前述した $1024 \times 1024 \times 256$ のメッシュ分割でのシミュレーションが可能となった背景には、(初代) 地球シミュレータの持つ高い B/F 値 (=4) の恩恵があった。また、並列化およびこれにともなう領域分割の副作用として MPI プロセス間での通信が発生するが、楕円型偏微分方程式の反復求解の手順で大量のシフト型通信が発生する。更に多重格子法では、粗い、

すなわち自由度や計算量の少ない格子レベルでの計算の際にデータ量の少ない通信が頻繁に発生してしまう。こうした少量ながら多数の通信をともなう計算の効率化にあたっては、レイテンシの十分低いノード間通信が望まれる。

(iii) ダイナモアプリケーション

外核(内核とマントルに挟まれた球殻部分)内における液体金属の対流および磁場を、電磁流体力学方程式を用いて解く。境界条件の記述や精度などで有利なため、ブシネスク近似を仮定して流れ場と磁場をポロイダル・トロイダル展開し、それらを球面調和関数展開するスペクトル法が広く用いられている。スペクトル法の場合、通信量の関係から、数万～数十万コア以上の大規模並列計算ではパフォーマンスが出しにくい可能性がある。一方、ブシネスク近似を仮定しない電磁流体力学方程式の下で、有限差分法およびインヤン格子(球座標問題を効率良く計算するために開発された手法)を用いて解く手法もある。開発者の陰山聰教授(現神戸大学)は2004年ゴードン・ベル賞を受賞し、大規模並列計算で実績を挙げている。以下はこの手法を基に記述する。

計算速度については、エクサスケールでエクマン数 $O(10^{-8})$ の計算が視野に入る。現実の地球コアを反映すると予想されている $O(10^{-9})$ の計算には、さらに次世代のスーパーコンピュータが必要である。エクマン数 $O(10^{-8})$ の場合、先述したとおり最低必要な解像度は $2000 \times 2000 \times 6000 \times 2$ 以上となる。基本変数は磁場ベクトル3成分、運動量ベクトル3成分、密度、圧力または温度の計8成分となり、その他電場や電流など多数の補助成分、作業配列が必要となる。そのため、全体のメモリ使用量の見積もりは53TB以上である。エクマン数 $O(10^{-8})$ で極性反転(平均的に20万年に1回)を見るため例えば50万年分を計算しようとした場合、(3)(iii)で述べたように80PFLOPSで2万年積分に480時間(20日間)だとすると、50万年積分はその25倍で約500日間となるが、エクサスケールであればその1/10の50日程度となる。

インヤン格子では、3次元球殻を緯度経度方向の2次元に分割している。見積もりのため使用ノード数を20000と仮定する。この場合、 $2000 \times 2000 \times 6000 \times 2$ のインヤン格子では、1ノード当たり約 $2000 \times 33 \times 33$ の格子点数となる。通信は基本場8変数を倍精度で、4方向に通信する。以上から、1タイムステップ当たりの通信量は約17MBとなる。1磁場散逸時間(2万年)まで計算するのに要するステップ数は、約 4×10^8 と見積もられる。この計算を480時間～ 1.7×10^6 sで終えるとすると、1ステップ当たりの許容時間は約 4×10^{-3} sとなる。以上から、ネットワーク速度の要求性能は約4GB/sとなる。

ここまで計算時間の見積もりは、現行の地球シミュレータと同程度のB/F(～2)があり、実効効率が現行の地球シミュレータより大きく下がらないと仮定して、現行の地球シミュレータの計算データを基に行っている。配列も先述のとおり現行計算よりかなり巨大化するため、大きなメモリバンド幅の需要が高い。次世代以降のスーパーコンピュータにおいても、2程度以上のB/Fがあることが望ましい。

I/Oとしては、1タイムスナップショット当たりのデータ出力は $2000 \times 2000 \times 6000 \times 2$ の解像度の場合約4TBとなる。解析のため磁場散逸時間(2万年)の1/20の時間間隔でデータを出力した場合、50万年のシミュレーションであれば総出力は2PB程度となる。ダイナモや磁気乱

流の素過程を調べる場合には、上述の時間間隔では粗すぎる可能性が高く、その場合は更に細かい時間間隔のデータが必要となる。

| 課題 | 要求性能 (PFLOPS) | 要求メモリ bandwidth (PB/s) | メモリ量 /ケース (PB) | ストレージ量/ ケース (PB) | 計算時間/ ケース (hour) | ケース数 | 総演算量 (EFLOP) | 概要と計算手法 | 問題規模 | 備考 |
|---|------------------|---------------------------|----------------------|------------------------|------------------------|-------|---|--|------|---|
| 防災連携シミュレーション(地震直後の被害状況予測) 内訳は以下(1)～(6) | | | 0.1 | 9 | 3 | | | | | 地震発生は1領域1000シナリオを5領域行う。各領域について1000シナリオ中、観測に基づき20シナリオを選び、波動伝播計算を行う。一方、地震動増幅や建物震動・津波遡上については、地盤構造や建物劣化、海底地形の不確実さを考慮するために数十ケース計算するとともに、複数の都道府県の都市(例えば南海トラフ地震の場合に、東海・近畿・四国・九州の4都市)を一度に計算する必要を考慮すると、結果的に各領域で1000ケース程度は計算が必要。 アプリの最大BF値=8.0 |
| (1) 地震発生 | | | 0.000860.00086 | | 5000 | 48 | 境界積分法による地震サイクル計算 | 面素数10 ⁷ | | アプリの最大BF値=4 |
| (2) 波動伝搬 | | | 0.1 | 0.5 | 100 | 1400 | 差分法による弾性波動伝搬計算 | 1200x1000x200Km ³ (125m×125m×62.5m格子) ステップ数24万回 | | アプリの最大BF値=2.14、京での実測1.4。1ケースあたり演算量14EFLOP(東北大調べ)。東大前田先生による新バージョンを京でも主に利用。そちらは20EFLOP。 |
| (3) 地震動増幅 | | | 0.01 | 4 | 5000 | 1300 | 有限要素法による地震波動計算 | 30億節点 (300x250x10km ³) | | アプリの最大BF値=8.00 |
| (4) 地震動増幅 | | | 0.01 | 4 | 5000 | 1300 | 有限要素法による地震波動計算 | 30億節点(30x25x1km ³) | | アプリの最大BF値=8.00 |
| (5) 建物震動 | | | 0.05 | 0.05 | 5000 | 500 | | 構造物100万棟 | | BF値=0.26(実測値)。メモリ転送量はBF値と演算量から逆算。BF値はキャッシュに載るので小さい。 演算量はプロファイルからの外挿と一致、メモリ転送量はプロファイルからの外挿 |
| (6) 津波遡上 | | | 0.002 | 0.5 | 5000 | | Navier-Stokes方程式複数500モデル(静水圧近似、非静水圧、VOF法)計算 | 3x3x0.08Km(1都市領域を1m格子幅)から 1400x1100x10Km(5.4Km格子幅)の複合格子、7都市同時計算、72万ステップ | | 演算量、メモリ転送量、メモリ量は実測値からの外挿。BF値=10(実測値) |
| 避難誘導シミュレーション | 3.30 | | 0.3 0.006 | 1 | 5000 | 60000 | マルチエージェントモデルによる行動シミュレーション | 30,000 agents, 18,000 steps (1 hour simulation), 1,000 Monte-Carlo members | | 演算量は命令数である。浮動小数演算は命令数のおよそ1/40。 演算量、メモリアクセス量、メモリ使用量は京でのプロファイルから外挿 |
| マントル対流 | 1000 | | 0.01 | 0.083 | 1 | 300 | 流れ場の反復求解、格子法差分計算 | 格子数: 290x4000x2000, 4変数 | | |
| ダイナモ | | | 0.053 | 4 | 1 | | 陰陽格子 | 格子点: 2000x2000x6000x2, 8変数 | | |

※本見積もりは未だ精査中である。より精度の高い数値はWeb版(→「1.2. 本文書の構成」)を参照のこと。

(5) 他分野との連携

総合防災は、すでにその内部が異なる分野間の連携で成り立っている。地震発生から波動・津波伝播は地震学など理学系の分野であり、都市の振動や津波遡上は工学系、避難は社会科学系である。そのような異なる分野を横断した連携を行うフロンティア的な研究が、「京」の戦略分野の研究であり、今後もその連携を深めて行く必要がある。また、振動計算に注目した場合、構造物のシミュレーションの最大の課題は、非構造格子を使う数値計算の並列計算性能の向上である。この課題は難問であり、解決には、地震工学・構造工学・計算力学の研究者だけでは不十分であり、数学の研究者との連携が必要である。また、都市のシミュレーションは、数理経済学のような社会科学との連携が期待できる。またマルチエージェントシミュレーションはモデル化が容易な粒子系のシミュレーションの一つであり、さまざまな連携が可能であろう。人工知能に関わる研究分野の連携も期待ができる。

マントル対流シミュレーションで登場する問題はきわめて特異である。このような理由もあって、現時点では異なる分野のシミュレーション技術との連携は多くない。ただし、悪条件の

大規模橿円形方程式の元凶たる「時空間スケールの大きな乖離」という難点は、他のいくつかの分野でも共通して登場するものであり、この問題を高効率かつ高精度で解く手法を連携して開発することはきわめて有意義なものとなるであろう。また、マントル対流シミュレーションの高度化においては、格子分割や空間離散化の方法の改善も有効な手段の一つであろう。世界的にみても、既存のマントル対流シミュレーションプログラムは多くが構造格子を用いた有限体積法（有限差分法も含む）に基づいており、いびつな形状を表現するのに必ずしも適していない。球殻形状に対してはインヤン格子という構造的な格子分割が提案され、これに基づくマントル対流シミュレーションプログラムも開発されてはいるが、橿円型問題との親和性が十分高いとは言えない。この対策の一つとして有限要素法で用いられているような、非構造的ながらも効率的な格子分割を採用することが考えられるだろう。その際には、メッシュ生成やオーダリングといった有限要素法に共通的な技術の開発も連携して行う必要があるであろう。これに加え、シミュレーション結果の可視化技法についてのニーズも大きくなるであろう。例えば、流れの3次元構造やその時間発展が容易に把握できるような可視化手法、あるいは乖離した時空間スケールで起こる複数の現象を効果的に表示する方法の開発についても連携が望まれよう。

コア対流はマントルによる冷却によって駆動されているため、その対流の様子はマントルがコアをどれだけ効率的に冷やすか、またコア・マントル境界の状態（例えば熱流束の不均質性など）に支配されている。したがって、コア対流研究とマントル対流研究との連携は今後の必須の課題である。コア対流およダイナモとマントル対流の相互作用を近似的にでも扱うことができるモデルを開発できれば、先に述べた白亜紀スーパークロンの謎や、コアの冷却に伴い地球史のいつごろ地球磁場が発生したか、またその時の磁場の様子は、といった問題について解明の手がかりが得られる可能性がある。これらは時間スケールがそれぞれ約1億年と約1000年という際立って異なる現象のカップリングであるため、今後20年以上を見据えた挑戦的課題となる。

(6) 公的な意見交換とそのサマリー

災害対策の実務的立場からの意見は2章の総合防災の項に述べた通りである。

地震発生予測や強震動・津波予測については、コミュニティの次期研究計画WG案（11/26コミュニティ内で検討会を開催）において、HPCを活用した予測システムが中核的役割を果たす方向で議論が進んでいる。ただし、シミュレーションに偏り過ぎることには警戒する声もある（予測には観測データが不可欠であることが必ずしも正しく伝わっていない面もある）。その後、次期研究計画策定のための委員会が立ち上がっており、今後パブリックコメントや分野内への意見聴取などが行われる予定である。

また、固体地球科学一般については、日本地球惑星科学連合大会での特別セッション「ハイパフォーマンスコンピューティングが拓く固体地球科学の未来」が採択され、平成25年5月20日に19件（口頭13件、ポスター6件）で開かれ、口頭の2件は議論用の枠となっており、社会的課題ならびに科学的課題について議論を行った。社会的課題については2章すでに触れたとおりであるが、科学的課題については、地球科学は、真理を探求する認識科学から、観

測データとシミュレーションを両輪として問題解決のための予測能力を高める設計科学への質的転換が必要であるとの指摘がなされた。

社会的課題・科学的課題いずれについても、コミュニティ内外からの意見は、基本的に白書における計画の方向性を支持しつつ、よりよいものにするための意見であったと言える。

(7) ロードマップ

| 年代 課題 | 2012 ~ | 2014 ~ | 2016 ~ | 2018 ~ | 2020 ~ | 2022 ~ |
|---------------------|---------------------------------|--------|------------------------------|-------------------------|------------------|------------|
| 被害予測 | 地震発生・波動伝播・都市震動・津波浸上・破壊・漂流等のモデル化 | | | | | 被害予測・避難最適化 |
| | | | 地震発生から都市災害までの連携計算・復旧過程 | | | |
| 地殻モデル | 様々な規模の破壊現象のモデル化 | | | | 地殻モデル構築と大破壊前状態解明 | |
| | | | 変形・破壊モデルと地震波散乱・減衰モデルの統合 | | | |
| プレート境界モニタリング & 推移予測 | プレート境界固定・すべりモニタ&予測システム構築 | | | | 推移予測の実用化と予測情報発信 | |
| | | | モニタ実用化・予測システム妥当性検証・改良 | | | |
| 全球マントル・コアダイナミクス | 熱輸送・物質循環過程・礎盤形成メカニズムの解明 | | | 大陸形成等の物質分化過程・コア実粘性計算の実現 | | |
| | | | プレート運動とマントル対流・マントルとコアのカップリング | | | |

図 4.3.2-5 固体地球科学ロードマップ

4.4 ものづくり

4.4.1 熱流体

(1) 現在行われている課題

熱流体解析に限らず、ものづくり分野で利用される商用アプリケーションソフトウェアの開発に関しては、わが国は欧米に対して大きく後れを取っている。現在、産業界で用いられている CAE (Computer Aided Engineering) 分野のアプリケーションソフトウェアは欧米製のものが大半であり、わが国で開発されたソフトウェアはほとんど用いられていない。例えば、英国インペリアル・カレッジ・ロンドンで開発された STAR-CCM や米国 Creare Inc.社で開発された Ansys Fluent が標準ソフトウェアとして広く使われている。また、燃焼計算の代表的ソフトウェアである CHEMKIN は米国サンディア国立研究所で開発されたものである。

しかしながら、ここに来て新たな転機を迎えようとしている。現在のスーパーコンピュータは数万個以上の CPU や演算コアを搭載しており、その性能を発揮させるためにはこれらを同時並列的に、かつ、効率的に動作させる必要があるが、現在、業界標準となっているアプリケーションソフトウェアの多くはこのような超並列計算には対応していないためである。また、ものづくりの設計現場においては、計算プログラムのみならず、設計者の扱う CAD (Computer Aided Design) データから計算格子を自動的に生成する前処理プログラムや、膨大な量の計算結果から、設計者が工学的に重要な情報を抽出し、その結果を設計にフィードバックすることを支援する後処理プログラムがあつて初めて、ものづくりの現場でスーパーコンピューティングの威力が発揮される。計算機ハードウェアの長足の進歩に伴い、アプリケーション・ソフトウェアやそれを利用した設計システムにもパラダイムシフトが起こりつつある[1][2]。

(2) 長期的目標

ソフトウェアや設計システムの研究開発や実証研究のフェーズは別として、ものづくり分野で HPC が実際の製品の研究開発や設計の現場で活用されるためには、企業の研究者や設計者が容易にアクセスでき、また、長時間にわたり一定のリソースを占有できる計算機環境があることが必須となる。現在のスーパーコンピュータのコア性能は 10 GFLOPS のオーダーであり、コア数は 100 万程度に達している。計算機の従来の価格性能比トレンドから推定すると、企業の研究者や設計者は世界最速のスーパーコンピュータの 1/10 程度の性能を持つ計算機を 3 年後に自由に使えるようになるものと予想される。したがって、2014 年頃には、10 万程度のコアを使用した超並列計算が先端的企業において有効性が実証されているものと推定される[3][4]。

ものづくりにおいて重要な熱流体シミュレーションでは、従来よりスーパーコンピュータが必要とされてきた。工学的に重要な流れは、ほとんどの場合「乱流」と呼ばれる状態の流れである。乱流では大小さまざまなスケールの渦が複雑な干渉をしており、その結果として、平均的な流れや流れの時間変動が決定される。例えば、時速 100 km で走行中の自動車まわりの流れを考えると、車の後ろには車と同程度のサイズの大きな渦が存在しているが、ルーフや側面に発達する乱流境界層中には数百 μm の微細な渦が存在している。このマルチスケール性

が熱流体シミュレーションの本質的な難しさの根源にある。従来、このような微細な渦を直接計算せず、モデルにより渦の効果を取り込むことにより熱流体の数値解析は行われていた。このため、普遍的で高精度なモデルを開発することは不可能であり、熱流体の数値解析を更に発展させるうえでの障害になっていた。しかしながら、計算機性能の長足の進歩や数値解析手法の進展により、このような微細な渦の運動まで準第一原理的に計算する Large Eddy Simulation (LES) と呼ばれる手法の実用化に大きな期待が集まっている。どの程度の計算規模の LES が何年頃に産業界で実用化されるかは、今後の計算機の発達や計算手法の進歩によるところも大きいが、おおむね、2014 年頃には 10 億点の計算格子を用いた LES (渦モデル使用時は 100 億点) が企業の研究開発の現場や設計現場で実用化されるものと期待されている。一方、詳細な説明は割愛するが、乱流中の主要な微細渦まで計算するために必要となる格子点数は、流れの代表速度、代表長さ、および動粘度により決定されるレイノルズ数 (Re) と呼ばれる無次元パラメータの大小により大きく異なり、レイノルズ数のほぼ 3 乗に比例して大きくなる。必要となる格子解像度と流れの一要素を解析するのに必要な格子点数を推定した結果をそれぞれ表 4.4.1-1 (Re はレイノルズ数、 C_f は摩擦係数、 Δx 、 Δy 、 Δz は格子幅、 L は代表長さ) と表 4.4.1-2 (n は格子点数を示す) に示す[6][7][8]。

この推定に基づき、実際の機械製品の解析に必要となる格子点数を見積もった結果を表 4.4.1-3 (N/n は格子点当たりの内部反復回数を示す) に示す。この表に示すように機械工学分野の多くの製品に関しては、今から 5 年後には熱流体の準第一原理的な数値解析が実現されるものと期待されている。機械工学以外のものづくり分野、例えば、航空宇宙工学分野などでは流れのレイノルズ数が総じて大きいため、必要な格子点数は表 4.4.1-3 に示した数の数百倍から数千倍程度になるものと推定されるが、今後これらの分野においても乱流の準第一原理的な計算が実用化されるものと予想される。

ものづくり分野で非常に重要な燃焼とともに流れや流体・構造連成問題などの複合分野においては、更なる計算規模が必要となる場合がある。特に燃焼流れの場合は、乱流の微細構造に加えて化学反応の微細プロセスとそれによる微細構造を解像する必要があり、例えバロケットエンジンなどの高压燃焼では火炎の厚さは乱流スケールに比べても数十万倍薄くなる。そのため化学反応のない流れに比べてはるかに多くの格子点数が必要となると推定でき、当面はモデル（例えば、薄い火炎を不連続として扱うフレームレットモデルなど）を用いた解析が主流と予想される。

表 4.4.1-1 LES 解析を実施する際に必要となる壁付近での格子解像度の予測

| R_e | C_f | $\frac{\Delta x}{L}$ | $\frac{\Delta y_{min}}{L}$ | $\frac{\Delta z}{L}$ |
|-----------------|----------------------|----------------------|----------------------------|----------------------|
| 2×10^4 | 1.1×10^{-2} | 2.7×10^{-2} | 1.3×10^{-3} | 6.7×10^{-3} |
| 2×10^5 | 6.2×10^{-3} | 3.6×10^{-3} | 1.8×10^{-4} | 9.0×10^{-4} |
| 2×10^6 | 3.9×10^{-3} | 4.5×10^{-4} | 2.3×10^{-5} | 1.1×10^{-4} |

表 4.4.1-2 工学的 LES 解析に必要となる計算格子点数の予測

| R_e | n_x | n_y | n_z | $n = n_x \times n_y \times n_z$ (total number of grids) |
|-----------------|-------------------|-------------------|-------------------|---|
| 2×10^4 | 3.7×10^1 | 2.5×10^1 | 1.5×10^2 | 1.4×10^5 |
| 2×10^5 | 2.8×10^2 | 1.0×10^2 | 1.1×10^3 | 3.0×10^7 |
| 2×10^6 | 2.2×10^3 | 4.0×10^2 | 9.0×10^3 | 7.9×10^9 |

表 4.4.1-3 2015 年における工学的 LES 解析の適用予測

| Products | Specifications | R_e | N/n | N |
|----------|--|-------------------|-----|----------------------|
| 車 | $L=1$ m, $U=28$ m/s (100 km/h) | 1.9×10^6 | 10 | 7.9×10^{10} |
| 模型船 | $L=5$ m (1/50 scale model), $U=1.0$ m/s | 4.6×10^6 | 1.2 | 8.9×10^{10} |
| 小型ポンプ | $D_2=300$ mm, 1500 rpm, $L=0.15$ m, $U=24$ m/s | 3.6×10^6 | 12 | 3.9×10^{11} |
| 風車 | $D_2=40$ m, $L=0.4$ m, $U=64$ m/s | 2.5×10^6 | 3 | 4.0×10^{10} |
| 軸流ファン | $D_2=600$ mm, 1800 rpm, $L=0.2$ m, $U=56$ m/s | 7.5×10^5 | 12 | 8.6×10^9 |
| 換気扇 | $D_2=500$ mm, 600 rpm, $L=0.2$ m, $U=16$ m/s | 2.0×10^5 | 3 | 1.0×10^8 |
| 小型冷却ファン | $D_2=80$ mm, 3400 rpm, $L=0.02$ m, $U=14$ m/s | 1.9×10^4 | 7 | 1.0×10^6 |

以上は計算機の性能向上のトレンドから、ものづくり分野における熱流体の数値解析がどの程度大規模化し、それにより、工学的に重要となる乱流の準第一原理的な数値解析が何年頃に実用化されるかに関して述べたものである。一方で、ものづくり分野においては単に解析ができるだけではなく、これらの解析が実際の設計で利用できることが重要となる。そのため、ものづくり分野における熱流体の数値解析の今後の発展形態の一つとして、数百から数万ケースにも及ぶ計算を同時並行的に実施し、数値解析に基づく本格的な設計探査が実用化されものと期待されている（一般に大量解析と呼ばれるスーパーコンピュータの利用形態の一つである）。これを実現するためには更に多くの計算リソースが必要となると同時に、実用的に問題となる多くの目的関数がある場合にも適用し得る設計探査方法の研究開発と、計算効率の抜本的な向上による strong scaling（問題規模を一定にして並列数を大きくして計算速度の向上を図る）時の計算時間を飛躍的に短縮するための研究開発などが必要となる。

従来から、工業製品の研究開発や設計に数値シミュレーションは幅広く用いられていた。しかし、従来の計算機で予測できる現象や予測精度には限界があり、複雑なミクロ現象の解明や製品試作の数値シミュレーションによる代替は実現されていなかった。しかし、長足の進歩を遂げているスーパーコンピュータを駆使すれば、製品試作の一部あるいは全部をシミュレーションにより代替したり、試行錯誤に基づいて決定していた種々の設計パラメータを理論的に最適化したりすることが可能となる。以下、具体例を用いて、ものづくり分野で期待されているブレーキスルーを説明したい。

自動車の空気抵抗を低減するために大規模な流体シミュレーションを活用した例を図 4.4.1-1 に示す[9]。車体回りの空気の流れには 1m 程度の大きな渦から 1mm 以下の非常に小さ

な渦まで存在しているが、従来の計算機では計算速度ならびに記憶容量の制約から、流れの中の小さな渦の運動までは計算することは不可能であった。しかし、近い将来、最先端のスーパーコンピュータを利用すれば、最大1兆点程度の計算格子を用いた大規模な流体シミュレーションも可能であり、車のまわりの微細な渦の相互作用を明らかにすることができますようになる。そのような知見に基づいて渦を制御すれば、従来手法による空気抵抗低減の限界を打破できることが期待されている。また、このようなシミュレーションにより風洞試験と同程度の精度で空気力の予測が可能となり、現在、試作車両を用いたり、クレイモデルを製作したりして行われている風洞試験の一部、あるいは全部を数値シミュレーションにより代替することも可能になる。これらのシミュレーションが民間企業で可能となれば産業競争力の大幅な向上に貢献できる。

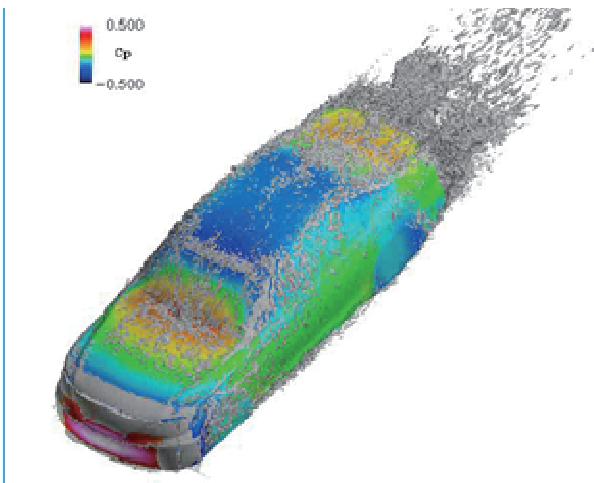


図 4.4.1-1 自動車回りの詳細な気流解析

種々の設計パラメータを決定するためにも熱流体シミュレーションが用いられてきたが、多数の設計パラメータを最適化するためには膨大なケース数に上がるシミュレーションを実行する必要があり、これに要する計算時間がボトルネックになり、シミュレーションを用いた最適設計は実用化されていなかった。しかしながら、現在のスーパーコンピュータは数万個以上のCPUから構成されているため、多数のケースを同時に計算することができ、スーパーコンピュータを駆使した最適設計の実現にも大きな期待が集まっている。図4.4.1-2に数値シミュレーションを利用した最適化により、計算機サーバ用の冷却ファンから発生する騒音を大幅に低減した例を示す。CPUなどの発熱量は年々増大しており、この熱を除去するためのファンの回転数も増大している。ファンから発生する騒音の大きさは理論的にはファンの回転数の5乗から6乗に比例して大きくなるため、回転数の増大とともに騒音も急激に増大する。したがって、冷却ファンの低騒音化は重要な技術課題であるが、経験的な手法による低騒音化は限界に達していた。ファンの翼形状は数十個のパラメータの組み合わせにより決定されるが、従来の計算機の能力ではこのような多数のパラメータの組み合わせのそれぞれに対して性能や騒音を予測し、最適なパラメータの組み合わせを探索することは不可能であった。しかし、現在のスーパーコンピュータを利用すれば数百ケースのパラメータスタディを数時間で実施するこ

とができるため、数値シミュレーションによる最適化が可能となる。このケースでは 6dB 以上の低騒音化が実現されている。

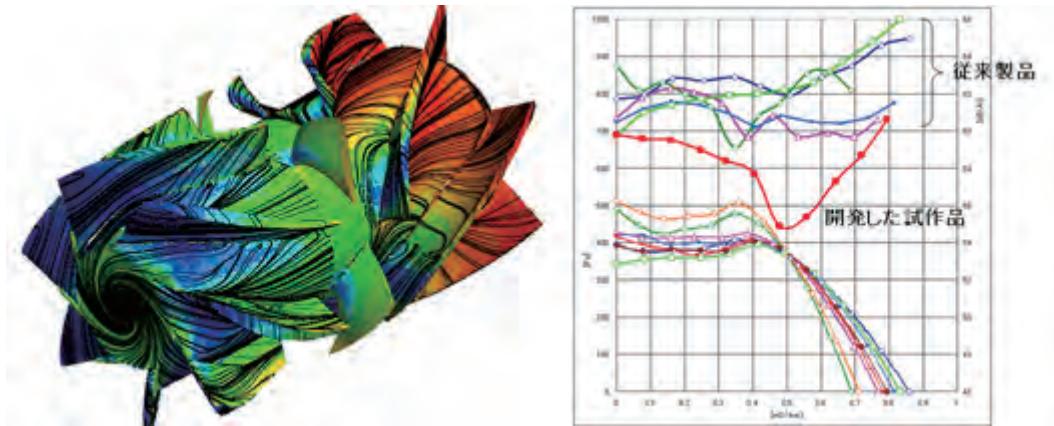


図 4.4.1-2 ファンの騒音低減例

一方、土木・建築系の熱流体シミュレーションとしては、土木分野における橋梁の耐風安定性の照査、建築分野における都市内の熱・拡散環境解析などがその代表例として挙げられる。橋梁の耐風安定性の照査では、耐風安定性が問題となる吊り橋や斜張橋などは長大橋であるため、従来の計算機の能力では、一部の橋梁断面区間をモデル化した解析しか実施できなかった。また、都市内の熱・拡散環境解析の場合、建物形状を正確にモデル化した解析では、都市の一部を取り出した数キロ四方の解析しか実施できなかった。しかし、最先端のスーパーコンピュータを利用すれば、橋梁の耐風安定性の照査においては全橋モデルを用いた耐風安定性の解析が、また都市内の熱・拡散環境解析では数十 km 四方の中規模都市（地方主要都市）を丸ごと解析することがそれぞれ可能となり、数値シミュレーションの適用性と信頼性が大幅に向上する。

(3) 次世代に解決すべき課題

(i) 解析プログラムの開発から解析システムの開発へのパラダイムシフト

単に計算プログラムだけがあっても、製品設計に生かすことはできない。超大規模な計算科学シミュレーションをものづくり設計に生かすためには、設計データを用いて迅速に計算を実行することを可能にする前処理プロセスや、計算結果を効率的に設計にフィードバックするための後処理プロセス、更に、設計の最適化を支援する機能などを有した、次世代の CAE システムを構築する必要がある。近い将来、熱流体解析における格子点数は最大 1 兆点程度になるものと予想されるが、このような大規模計算のための前後処理を従来の考え方の延長で実現することは不可能である。つまり、前後処理を含めた流れ解析システムとしてのパラダイムシフトが必要となり、これを実現するための研究開発が必要である。

(ii) 物理モデルの高度化、新規アルゴリズムの開発

今後の計算機の発達を考えると、さまざまな分野で大規模、高精度な解析が可能となることが期待されるが、計算機能力の向上に任せておけば物理モデルの高度化が不要となるわけではない。これまで述べてきたように、乱流自体に関してはほぼ予測の目処が立っており、モデルに対するこれ以上の高度化のニーズはない。しかしながら、キャビテーション流れや燃焼流れのように、乱流の渦スケールよりもはるかに小さな空間スケール、時間スケールを持ったマルチスケール現象に関しては、計算機性能が向上するだけでは分子スケールの運動を直接解析することは不可能であり、これらの現象のより定量的な予測のためには物理モデルの更なる高度化が必要である[10][11]。また、流体・構造・音響現象などのマルチフィジックス現象に関しては、それぞれの現象の解析手法は確立されているが、連成現象の高精度で効率的な数値解析手法の研究開発も必要である。更に、これから計算機アーキテクチャに合致したシミュレーションの方法論やそれを具現化する計算アルゴリズムの研究開発も欠かしてはならない。また、大規模な連立一次方程式に対する、前処理も含めた高収束性で低コストの計算アルゴリズムの研究開発や輻射計算などで必須となる密行列の超並列解析アルゴリズムなどの研究開発も必要である。

(4) ターゲットとする研究対象

多くの製品や構造物の熱流体解析にスーパーコンピューティングの活用が期待されるが、代表的な例を下記に列挙する。

- ターボ機械の熱流動、振動、音響解析
- 自動車の空力解析、流体振動解析、車室内の騒音解析、エンジンルームや車室内の熱解析
- 電子機器の熱流体解析、騒音解析
- 航空機の翼設計、機体設計、エンジンや機体の空力・騒音解析
- 宇宙機の熱流体設計、推進系解析、全機システム解析
- 原子力機器等、プラントの熱流動解析
- 都市や建築物内の空気の流れや汚染物質の拡散解析

(5) 課題を解決するために必要なアプリケーション群（要求性能）

熱流体解析では、差分法や有限要素法などにより解析領域を計算格子に分割し、各計算格子上で近似的に成立する、質量、運動量、ならびに、エネルギーの保存則を計算することにより、流れ場の解を時間発展させて行く。時間発展の方法は差分法による場合が多いが、計算時間刻み幅の制約を受け難い陰解法を用いることが多い、この場合は各時間ステップにおいて連立一次方程式を解く必要がある。各計算格子上の近似方程式では隣接する計算格子の情報を用い、参照する格子点数は数値解析手法により異なるが、最低で 6 点、最大で 100 点程度である。したがって、陰解法を用いて連立一次方程式を解く場合の係数行列はバンド幅が 6~100 程度の疎行列となる。1 時間ステップ計算を進めるのに必要な計算回数（浮動小数点演算）は 1 格子点当たり数百から数万程度である。また、浮動小数点演算 1 回実行するのに必要となる実効的

なデータのロード回数（キャッシュミスを最小限に抑えた場合）は1格子点当たり0.2～2ワード（コンピュータで使うデータ量の単位）程度である。

熱流体の数値解析では、表面張力の計算など複雑な計算をする場合を除いて、基本的には1演算当たり最低でも0.5ワードから1ワードのデータをメモリからロードあるいはメモリにストアする必要がある。例えば、この値が1ワードであった場合、メモリバンド幅比（B/F値）が0.5の計算機で実現可能な実効性能比は8バイトワードの場合で6.25%、4バイトワードの場合で12.5%となる。例えば、現在「京」用にチューニングを進めている非圧縮ナビエ・ストokes解析プログラムでは4バイトワード（データのロード・ストア量を削減するために、メモリとCPUとの間では4バイトワードと用いているが、演算は倍精度で実行している）を用いているが、B/F値0.5の「京」において、ピーク性能に対する実効性能は8.5%である。今後の大規模解析では8バイト（倍精度）ワードのロード・ストアが必須となるものと予想されるため、より高いB/F値が要求される。したがって、現在の「京」と同程度のB/F値でも不足であり、更に低い値、例えば0.1となってしまうと、計算の実効性能比は最大でも1%程度となってしまい、そのような計算機を使う意味がほとんどなくなってしまう。

計算機のノード性能に関してはweak scaling（問題規模の増大に合わせて並列数を増やす方式、理想的な状態では計算時間は一定である）していく場合は特に制約はないが、エクサスケールの計算機（具体的には10エクサフロップスのピーク性能を持つ計算機を想定している）において、筐体の大きさや筐体数、筐体内に搭載可能なCPU数（ノード数）は現状とさほど変わらないものと推定されるため、エクサスケールの計算機のノード性能はペタスケールの計算機の1,000倍になっている必要がある。ノードのメモリ容量に関しては離散化手法により異なるが、1格子点当たりに必要な変数の数は数十から最大1,000程度であり、通信性能とメモリ性能の比を0.1と仮定した場合、weak scalingで並列性能が確保できるためには、最低でもノード当たりのメモリ容量としては1TB程度は必要になる。つまり、演算性能に対するメモリ容量の比GB/GFLOPS値で0.01程度までは小さくしもよいということである。この値は現在のL2キャッシュの大きさ（GB/GFLOPS値で0.0005）の20倍程度になるが、メモリ容量比の1/10程度までは小さくしても問題がないということを意味しているが、詳細に関してはより具体的なケーススタディを実施する必要がある。更に、解析対象や解析目的（現象解明のための Capability Computing（一つの問題を大規模に計算）なのか設計のための Capacity Computing（小規模な問題を大量に計算）なのか）によってノード当たりの計算規模が変化する。その結果メモリ量やネットワークバンド幅は1桁程度は変動する。

以上から、計算機の单一ノードの演算性能を仮に100TFLOPSだと想定した場合について、必要となる計算機のスペックをまとめると以下のようになる（单一ノードの性能が異なる場合は、以下の数値は別の値になる）。

- 想定する单一ノード演算性能：100 TFLOPS
- ネットワークバンド幅（ノードあたり）：0.5～5TB/s
- メモリ容量（ノードあたり）：0.1～1 TB
- メモリバンド幅（ノードあたり）：50 TB/s
- ストレージ容量・ストレージ速度：単純に外挿するとエクサバイト、ペタバイト/秒のストレージが必要となるが、今後、後処理の高度化のための研究開発が必要であり、

これらの値を現実的な範囲に縮減する必要がある。そのため、現時点では必要となるストレージ容量、ストレージ速度は不明。

| 課題 | 要求性能 (PFLOPS) | 要求メモリ バンド幅 (PB/s) | メモリ量/ ケース (PB) | ストレー ジ量/ ケース (PB) | 計算時間/ ケース (hour) | ケース数 | 総演算量 (EFLOP) | 概要と計算手法 | 問題規模 | 備考 |
|------------------------------|------------------|-------------------------|----------------------|----------------------------|------------------------|------|---|---------|-----------------------------|--------------|
| ターボ機械の熱流動・振動、音響解析 | 120 | 51 | 16 | 500 | 120 | 20 | 1000000有限要素法 | | 10^{12} 格子 | B/F=0.5として計算 |
| 熱流体シミュレーション(自動車、実際の設計、最適化問題) | 280 | 560 | 0.04 | 4 | 1 | 100 | 100000 $Re=10^6 \sim 10^7$ のLES流体計算、パラメータスタディ、100ケースを4日 | | 10^{10} 格子 | BF=2として計算 |
| 電子機器の熱流体解析、騒音解析 | 14 | 19 | 0.01 | 1.6 | 2 | 100 | 10000有限要素法 | | 10^{10} 格子 | |
| 航空機の翼設計、機体設計、エンジンや機体の空力・騒音解析 | 23 | 23 | 0.1 | 8 | 24 | 1000 | 2000000差分法 | | 10^{11} 格子 | |
| 宇宙機の熱流体設計、推進系解析、全機システム解析 | 58 | 57 | 1 | 80 | 240 | 10 | 500000差分法 | | 10^{12} 格子 | |
| 都市や建築物内の空気の流れや汚染物質の拡散解析 | 930 | 490 | 50 | 160 | 96 | 10 | 3200000有限要素法 | | 10^{13} 格子、 10^{4} ステップ | |

※本見積もりは未だ精査中である。より精度の高い数値はWeb版（→「1.2. 本文書の構成」）を参照のこと。

(6) 他分野との連携

これまで熱・流体解析技術に関しては、物質科学分野、ものづくり分野、気象・気候分野などが独立して研究を行ってきた。しかし、対象は異なっても数理構造が同一ならシミュレーション技術は共有できる。この視点に立ち、個々の基礎理論の発展とモデルの高解像度化を進めると同時に、多くの分野に共通する流体的手法の共有や他分野における数理モデルに学びながらシミュレーション技術の向上が図られる。

(7) 公的な意見交換とそのサマリー

平成23年度にアプリケーション作業部会によって執筆された計算科学ロードマップ白書に関する、以下の会合で意見交換を実施した。

- 第26回数值流体力学シンポジウム 特別企画2「エクサスケールコンピューティングに向けて」 平成24年12月19日（水）国立オリンピック記念青少年総合センター

意見交換の結果、次世代のスーパーコンピュータにおいて熱流体分野のシミュレーション研究を展開することについて、特に異論は出なかった。1番を目指す意義についての議論があり、科学としての必要性とものづくりにおける意義について意見交換が行われた。

- 平成25年6月20日（木）計算工学講演会シンポジウム「エクサスケールに向けた計算工学の取り組み」（この意見交換は、熱流体、構造、材料、建築などものづくりの主要な分野を含んでいる）

ものづくり分野のコミュニティである計算工学会での議論では、シミュレーションの周辺技術まで含めたスループットが重要視されるという意見があった。つまり、ものづくり分野のシミュレーションで意味のある成果を創出するためには、モデル生成などの前処理、物理シミュレーション、ポスト処理のプロセスが必要となる。そこでは単にシミュレータの計算性能だけでなく、超大規模格子生成や計算結果の迅速かつ効果的な可視化への強い要求が特徴として挙げられる。このことは、ファイルシステムへの高い要求数値として表れている。一方で、現在のグローバルファイルシステムからローカルファイルシステムベースでグローバルビューを与えるような方式の検討も指摘された。

ものづくりの実務への応用を考えると、今後、単一の大規模な解析（Capability Computing）から小・中規模の多数の解析（Capacity Computing）へと適用方法がシフトしていく点が強調された。この変化は、シミュレーション結果に基づく大規模なデータベースを利用した設計高度化の実現につながるとともに、出現頻度は少ないが重大な事象の予測も現実的になり、より信頼性の高い製品開発の基盤技術となる。

今後、計算規模が大きくなると、結果の分析・可視化フェーズがものづくり解析プロセスのボトルネックとなることが容易に予想できる。また、結果の分析から新たな知見を発見することを支援するために、インタラクティブなポスト処理環境は非常に有効であるという意見が多数挙げられた。

以上のように、単にハイエンドの計算機が必要なだけではなく、高いファイルI/O性能やグラフィクス性能を備えたサブシステムを準備し、不足性能を補完することにより、全体として高スループットなシミュレーションを実行可能なシステムが要求されている。

一方、ソフトウェア開発においては、ソフトウェアの寿命とメンテナンスの点から、生産性が高く効率的な高性能アプリケーション開発方法への期待が高い。これを実現するためには、高性能機能ライブラリやアプリケーションレベルのミドルウェア（機能ライブラリと実アプリケーションの間に位置する機能部品群の集合体、およびコードのひな形機能を提供するソフトウェア）が必要となる。高性能ライブラリの開発は、アーキテクチャを熟知した専門家に任せ、アプリケーション開発者は提供されるライブラリや部品群を用いて高レベルのアルゴリズム記述を行うような、開発作業の分業化に向かうと思われる。

(8) ロードマップ

2020年頃にはエクサスケールのスーパーコンピュータが実現されるものと予想されているが、ものづくり分野における熱流体解析の大まかなロードマップを図4.4.1-3に示す。

| 年代 課題 | 2012 ~ | 2014 ~ | 2016 ~ | 2018 ~ | 2020 ~ | 2022 ~ |
|----------|---|---------------------------------|------------------------------------|-------------------------|--------------------------------------|--------|
| アルゴリズム開発 | | エクサに向けた産業利用の全体像の検討、 アルゴリズム開発 | | | | |
| 基盤S/W開発 | | | エクサに向けた基盤S/Wの研究開発 | | | |
| 実証・実用化研究 | Re数 10^6 に対するLESの実証研究 多目的設計探査手法の実証研究 | | | Re数 10^7 に対するLESの実証研究 | | |
| 実用化フェーズ | | | 100億～1,000億格子規模のLES解析(自動車、ターボ機械など) | | 1兆～10兆規模格子のLES解析 (航空宇宙、高圧ターボ機械など) | |
| | | RANS計算による設計探査 | | | LES計算による設計探査 | |

図 4.4.1-3 热流体解析ロードマップ

参考文献

- [1] 加藤千幸：ものづくりと次世代スーパーコンピュータ——期待と課題——，日本の科学者，Vol.45，No. 12，日本科学者会議発行，pp.28-33，2010年12月
- [2] 加藤千幸：ものづくりにおけるスーパーコンピューティング技術の推進検討小委員会」から提言，学術会議主催第2回計算科学シミュレーションシンポジウム，2011年4月20日，日本学術会議
- [3] 加藤千幸：HPCによるものづくりの革新，京コンピュータ・シンポジウム2012および第2回戦略プログラム5分野合同ワークショップ，2012.6.14-15，神戸大学
- [4] 加藤千幸：ものづくり分野におけるスパコン「京」の活用，都市政策第148号，pp.4-10，2012年7月
- [5] Chisachi Kato : Very Large-Scale Fluid-Flow and Aeroacoustical Simulations for Engineering Applications Performed on Supercomputer “K”, SC12, November 10-16, 2012, Salt Lake City, Utah, U.S.A.
- [6] 加藤千幸：乱流の直接シミュレーションによる熱流体設計の革新を目指して，文部科学省 HPCI 戦略プログラム 第3回分野4 次世代ものづくりシンポジウム 講演集，pp.21-pp.32，2012年12月
- [7] 加藤千幸：21世紀のものづくりにおけるCFDへの期待と課題，ながれ30（2011），pp.57-60，2011年5月
- [8] 加藤千幸：非定常流れのCFDとターボ機械の騒音予測，ターボ機械，第38卷第11号，pp.27-32，2010年11月
- [9] 忠津雅也，山村淳，田中博，安木剛，高山務，山出吉伸，鈴木康方，加藤千幸：2Box車の空気抵抗低減に関する研究，自動車技術会 2012年秋季大会，2012年10月，大阪国際会議場

- [10] Chisachi Kato: Industry-university collaborative project on numerical predictions of cavitating flows in hydraulic machinery, ASME-JSME-KSME Joint Fluids Engineering Conference 2011, July 24-29, 2011, Hamamatsu, Japan
- [11] 鈴木貴之, 加藤千幸: 均質媒体モデルを用いたキャビテーション解析の問題, 第 16 回 キャビテーションシンポジウム、2012.11.24、金沢大学

4.4.2 構造解析

(1) 現在行われている課題

現在、産業界において製品およびその生産や維持工程を設計し評価する際に、シミュレーション技術が不可欠なものとなりつつある。例えば自動車の騒音・振動解析や衝突解析、航空機や船舶の構造健全性評価、大規模プラントや建物・橋梁や高速道路などの耐震解析、更にものづくりにおける生産過程、特に塑性加工やプレス成型を再現するためのバーチャルマニュファクチャリングなど、多種多様なものづくり・設計シーンでのシミュレーション技術の導入、すなわち CAE の普及が進んでいる。有限要素法（FEM : Finite Element Method）[1]に基づく構造解析ソルバーは対象となる人工物・構造物の機能や応答性、安全性、健全性などを評価するためのツールであり、こういった CAE を実現するための最重要コンポーネントとして、今やものづくりにとって不可欠なものとなっている。

FEM ベースの構造解析ソルバーは、その数値計算スキームおよびこれを用いたビジネスモデルの特性により、狭い範囲の課題や特定の問題を解くための専用コードよりも、多数の機能を集積した汎用目的のコードが一般的である。こういった汎用コードは、機械・電気・化学・建築土木をはじめ、船舶海洋・航空宇宙・原子力、そして現在では医療・環境など驚くほどさまざまな分野で用いられている。また、主に大企業や研究所を中心に、これらの構造シミュレーションにおける解析の高速化やモデルの大規模化・詳細化を目的として、PC クラスタや中規模スパコンなどの HPC 環境が導入されつつある。

残念ながら現状では、この構造解析分野の多くで NASTRAN、ABAQUS や LS-Dyna など欧米発の商用ソフトウェアが用いられている。しかしながら、これらの多くでは数万コアオーダーの超並列技術の導入が遅れしており、これが逆に産業界でのさらなる HPC 技術の導入を阻害している。一方、最新 HPC 技術の存在を前提に、超並列技術の導入に関する新たな技術開発が国内でも現在進行中である。今後のペタおよびエクサスケールのスパコンの登場と普及により、国産ソフトウェアにも新たな普及の道が開ける可能性があるのみならず、シミュレーションを通じてわが国のもつくり技術の発展に寄与すると考えられる。

(2) 長期的目標

FEM による構造シミュレーションはものづくり・設計現場においてすでに数十年の長い歴史を有する。しかしながらその具体的な内容は、大型計算機における弾性応力解析、弾塑性解析、ベクトルスパコンを用いた衝突解析や振動解析、UNIX サーバやワークステーションでの設計者向け CAE、そして PC クラスタでの流体構造連成解析など、時代時代のニーズやその時点での台頭してきた新しい計算機アーキテクチャとともにさまざまに変遷してきた。

これまでの過程を見る限り、この分野では、例えば数年前にスパコンで行われていた解析が、現在は部門サーバ上で行われており、そしてその数年後にはワークステーション上で行われるといった形での、いわゆる下方展開が実現してきた。すなわち、新規のニーズとそれに応えるための新規コードの多くは、その当時における最先端の HPC 技術を用いてまずスパコン上で開発・利用してきたといえる。実際、10 年前に TOP500 クラスであったテラスケールの

PC クラスタが現在多くの大企業で導入・利用されており、この流れは今後も続くと思われる。例えば、エクサが登場する時点ではペタクラスマシンが普及しており、現時点において、ペタクラスマシンを用いることでようやく実現可能になるような課題が、数年後には多くのセクションで普通に取り扱われるようになるものと考えられる。したがって、エクサクラスマシンにおいて、現時点においてきわめて困難な課題を扱うことにより、近未来の産業界への普及が見えてくるはずである。

例えば、主な産業分野における部品数は、一般的な家電製品で数千、自動車や重機では数万、そして航空宇宙や大規模プラント業界ではこれが百万のオーダーである。従来は部品単位での構造解析が主流だったものが、近年の傾向として、それらをアセンブリした構造物全体のまるごと解析が可能となりつつある。これにより大規模解析のニーズは飛躍的に増大している。

また、近年産業界において流体構造解析のニーズが増大しつつあるが、構造解析ソルバーに対して近年急速に普及しつつある熱流体解析ソルバーを連成させることでこれが実現できる。この場合、高精度化のために流体側の解像度が細かくなるにつれ、対応する構造側も詳細化・大規模化していく傾向がある。

加えて、先に医療やバイオメカニクス分野において別途示されているように、この分野において骨や筋肉、臓器などの生体構造をシミュレーションするニーズが高まりつつある。これらの対象では非常に複雑な形状モデルと非線形性の強い材料物性を扱う必要があり、モデルのさらなる大規模化と計算時間の増大が不可避となっている。

こうした課題に対する現実的な時間でのシミュレーション実施のため、HPC 技術が必須である。

(3) 次世代に解決すべき課題

さきに述べたように大規模構造解析のニーズとしては、すでに産業界の広い分野においてさまざまなものが顕在化しつつあるが、ここで一例として挙げるのは、原子力プラントの耐震解析である。鉄筋コンクリート壁、配管、圧力容器、燃料集合体などすべてがソリッド要素で表現されている。解析規模としては、原子炉圧力容器単体でも数十億自由度を要し、配管や発電機器を含むプラント全体と付近の地盤を合わせて数百億自由度と見積もられる。また、解析は弾塑性の動解析であり、時間方向および非線形計算の繰り返しからなる数万から数十万ステップの計算が必要となる。

「京」コンピュータをもってしても、自由度や計算ステップに関して各々これらの 10 分の 1 程度のものを扱うのが限界となっているようであり、現時点では、圧力容器や少数の配管群など、特定箇所にフォーカスした解析を行うか、あるいはアドホックなモデル化や線形解析に頼らざるを得ない。今後の HPC 技術の進展により、プラント全体の計算が可能になるのみならず、地球物理・大気海洋分野で行われている地震シミュレーションや津波シミュレーションとの連携により、中越沖地震や東日本大震災における原子力プラントのより厳密かつ高精度なシミュレーションが可能となると思われる。

(4) 課題を解決するために必要なアプリケーション群

有限要素法を用いた構造解析の計算手法や解析の分類は、線形弾性解析、弾塑性解析、振動解析、熱応力解析、衝撃解析、塑性加工解析など多岐にわたる。ここではこれらを、HPC 技術との関連という見地から、連立一次方程式を解かないもの（陽解法系）と、連立一次方程式を解くもの（陰解法系）の二つに分類して議論する。これらはどちらも重要であり、個々の問題の特性や要求精度に合わせて使い分けられる。

前者の場合、各有限要素の単位で得られる情報だけを用いた行列ベクトル積が主要な演算パターンとなり、計算時間の大半は要素剛性行列評価や応力積分などの要素単位での計算処理に割かれる。

一方、後者の場合、まず各要素の要素剛性行列を用いて、全体剛性行列と呼ばれる比較的大サイズの疎行列を組み上げる。非定常問題における陰解法ソルバーの場合、これに関する連立一次方程式を時間ステップあるいは非線形ステップごとに解くことになる。なおこの手順は、静解析、固有値解析含め、解析ソルバー内に連立一次方程式の解法が組み込まれているもの全般についてあてはまる。

数千万から数億自由度クラスの大規模解析の場合には、もっぱら反復型解法の系統が用いられる。その際、大規模な連立一次方程式を解くための超並列アーキテクチャ向けアルゴリズムに関して、並列反復法ソルバーおよび領域分割法の二つが考えられる。

以下、エクサスケール級計算によって可能となる超大規模問題を想定したうえで、エクサスケール級の HPC アーキテクチャ上で高い性能を発揮できると思われる計算スキームについていくつか取り上げる。

(i) 連立一次方程式を解かない場合（陽解法系）

陽解法は、衝突解析や塑性加工解析のように、非定常でしかもきわめて短時間に生じる現象を表現する場合に用いられる。例えば、商用ソフトで言えば LS-Dyna や PAM-CRASH などがある。本手法に基づくソルバーの場合、もっぱら個々の有限要素レベルでの比較的小規模な行列やテンソルに関する演算を数百万ステップ以上繰り返すことになる。FEM では一般にこのような演算パターンを Element-by-element (EBE) 型オペレーションと呼ぶ。コアごとの性能に関して、EBE 演算では要素ごとの限られた情報だけを用いて比較的大量の演算を行うため、キャッシュやレジスタを有効に利用することが可能であり、コンパイラによっては非常に高い性能を発揮する。B/F(Byte/FLOP)値が低い計算機でも有効である。並列性に関しては、要素単位での計算が主なのでその並列化は容易である。ただし、衝撃解析や塑性加工解析では要素間の接触を扱うことが多く、接触判定を行うため検索処理の並列化に注意する必要がある。大規模アセンブリ構造物の取り扱いでは部品間の結合が重要であり、この処理方法に関し、活発な研究開発が行われている。

(ii) 連立一次方程式を解く場合（陰解法）：並列反復法ソルバー

並列反復法は、商用コードではあまり例がないが、国産フリーソフトの GeoFEM や FrontISTR などをはじめいくつかのコードで採用されている。並列反復法ソルバー[2]の場合、対称正定値であれば CG 法、非対称であれば Bi-CGSTAB あるいは GMRES 法などにより、全

体剛性行列に関する連立一次方程式を解く。構造解析では一部の非線形問題を除き、対称正定値行列を扱うことが多い。一方、構造物の大型化あるいは軽量化により、梁や板状の薄い形状を扱うことも多く、この場合係数行列の条件数は悪化する。したがって、強力な前処理が必要とされることが多い。並列反復法ソルバーでは、行列ベクトル積演算が繰り返される。有限要素法の場合、これは三種類の方法により実装することができる。まず、係数行列である全体剛性行列を要素剛性行列から組み上げ、その非ゼロ成分をメモリ上に保存する、非ゼロソルバー。次に、係数行列の全体化は行わず、要素剛性行列の形でメモリ上に保存する、EBE ソルバー。最後に、要素剛性行列すらメモリ上に保存せず、行列ベクトル積が必要とされる都度に評価する EBE-MSF (Matrix Storage-Free) ソルバー。以下、係数行列を対称とし、CG ソルバーにおいてこの 3 種類のソルバー実装の性能見積もりを行う。なお、行列ベクトル積部分の並列化は比較的容易であることから、通信パターンは隣接間が主なものとなる。

非ゼロソルバーの場合、全体剛性行列とベクトルとの積であることから、メモリアクセスは主に行列成分のみとなる。行列の 1 成分をメモリから読み出すごとに、対称性を考慮して 4 個の浮動小数点演算が必要となる。ただし、行列は疎でしかも非構造格子からのものであるため、メモリアクセスは不規則でベクトル化の効率は低く、しばしば節点単位でのレジスタブロックキングが不可欠となる。また CPU アーキテクチャおよびネットワーク通信の双方におけるハードウェア支援のギャザースキャッタ機構は性能向上に役立つ。

次に EBE ソルバーの場合、メモリ上に記憶された個々の要素剛性行列とベクトルとの積結果を組み上げていくことになる。要素剛性行列は密で対称であるため、非ゼロソルバーと同様、行列の 1 成分ごとに 4 個の浮動小数点演算が必要となる。EBE ソルバーは非ゼロソルバーより記憶量、演算量とも多いが、メモリアクセスパターンは比較的規則的で性能を出しやすい。

最後に、EBE-MSF ソルバーの場合、これは陽解法ソルバーの場合と同様、EBE 演算がメインとなる。B/F 値の低い計算機でも有効である。もし B/F 値が極端に低い場合、本ソルバーは主にメッシュデータのみをメモリから読み出すため省メモリであり、しかも他のソルバーよりメモリアクセス量が少なくなるために結果的に最速ソルバーとなる可能性がある。

(iii) 連立一次方程式を解く場合（陰解法）：領域分割法

領域分割法 (DDM : Domain Decomposition Method) [3-5] は、国産フリーソフト ADVENTURE や米国の Salinas などで採用されている。先に述べた線形代数レベルでの並列化を行った並列反復法ソルバーと異なり、領域分割法は偏微分方程式レベルでの並列化手法である。まず全体領域を複数の部分領域に分割する。各部分領域に適当な境界条件を与えて独立に解き、領域間境界条件が落ち着いてくるまで反復的にこれを繰り返す。したがって、この方法は反復解法の一種である。構造問題においては、並列反復法ソルバーの場合と同様、強力な前処理が不可欠となる。DDM の場合、FETI (Finite Element Tearing and Interconnecting) や BDD (Balancing Domain Decomposition) などのマルチグリッド型前処理が多用されている。DDM の主要な演算パターンは部分領域ごとの有限要素解析（ローカルソルバー）である。DDM の並列化はローカルソルバーを単位として、その並列化は容易であり、通信パターンは隣接間がメインとなる。ローカルソルバー実装にはいくつかの方法が考えられる。まず一つ目は、部分領域ごとの剛性行列について、これをまず直接法ソルバーを用いて行列分解し、スカイライン形式などでメモリ上

に保存しておく。その上で DDM 反復ごとに前進後退代入を行うというものである。二つ目は、部分領域ごとに反復法ソルバーを用いて部分領域問題を解くというものである。このとき、メモリ上にはほとんどデータを記憶しない。三つ目は、部分領域ごとに対応する密行列をあらかじめ作成しておき、これらとベクトルとの積を繰り返すというものである。これは並列反復法ソルバーにおける EBE ソルバーのように、ローカル Schur 補元行列と呼ばれる、部分領域ごとの剛性行列を、静的縮約により陽に導出してメモリ上に保存しておくものである。

最初の直接法ソルバーアプローチでは、行列分解されたデータに対する前進後退代入演算が主である。この場合、行列の 1 成分を読み出すごとに 2 個の浮動小数点演算が必要となる。二つ目の反復法ソルバーアプローチでは、メモリからメッシュ情報を読んでキャッシュ上で反復法ソルバーを起動する。大量の演算が L2 あるいはラストレベルキャッシュ上で行われることになる。並列反復法ソルバーで説明した非ゼロ、EBE、あるいは EBE-MSF ソルバーのいずれも利用可能である。なお、前処理の導入により反復回数を削減したい場合、前処理行列をあらかじめ作成してメモリ上にストアしておくことも考えられる。最後のローカル Schur 補元行列保存の場合、EBE ソルバーと同様、対称な密行列とベクトルの積であり、1 成分ごとに 4 浮動小数点演算を要する。なお、部分領域ごとに静的縮約によりローカル Schur 補元行列を作成する際に、行列行列積を中心とした大量の浮動小数点演算が行われる。

これらをまとめると、エクサスケール級計算機のアーキテクチャ分類について、「メモリバランス」あるいは「リファレンス」型が理想である。ただし、陽解法ソルバー、EBE-MSF 型反復法ソルバーや DDM の場合には、「演算重視」あるいは「メモリ容量削減」でもある程度対応は可能であると思われる。なお、それぞれについて最適な実装形態を用意する必要がある。

| 課題 | 要求性能 (PFLOPS) | 要求メモリ バンド幅 (PB/s) | メモリ量/ ケース (PB) | ストレージ 量/ ケース (PB) | 計算時間/ ケース (hour) | ケース 数 | 総演算量 (EFLOP) | 概要と計算手法 | 問題規模 | 備考 |
|---------|------------------|-------------------------|----------------------|----------------------------|------------------------|----------|-----------------|------------|---------|----|
| 衝突解析 | 210 | 5 | 1 | 100 | 24 | 10 | 180,000 | 有限要素法(陽解法) | 10~11節点 | |
| 弾塑性解析 | 21 | 5 | 1 | 1 | 24 | 10 | 18,000 | 有限要素法(陰解法) | 10~10節点 | |
| 丸ごと詳細解析 | 210 | 50 | 10 | 10 | 24 | 10 | 180,000 | 有限要素法(陰解法) | 10~11節点 | |

※本見積もりは未だ精査中である。より精度の高い数値は Web 版 (→ 「1.2. 本文書の構成」) を参照のこと。

(5) 他分野との連携

構造解析や有限要素法は、自動車や鉄道、航空機分野で求められている熱流体や電磁場ソルバーとの連成、バイオメカニクスにおけるソフトマテリアルの非線形解析、ナノ材料分野における均質化法などを介したマルチスケール解析、あるいは、地球物理・大気海洋分野における自然災害に対する構造物の健全性の評価など、大規模シミュレーション技術全般を通して不可欠なコンポーネントとなりつつある。

(6) 公的な意見交換とそのサマリー

主に機械学会や計算工学会、IACM 関連の計算力学コミュニティを中心に、エクサ時代における構造解析の位置づけに関してディスカッションと意見交換が行われている。

(7) ロードマップ

構造解析分野のロードマップを図 4.4.2-1 に示す。

| 年代 課題 | 2012 ~ | 2014 ~ | 2016 ~ | 2018 ~ | 2020 ~ | 2022 ~ |
|------------|--------|------------------------|--------|--------------------------------|--------|--------|
| 解析技術 研究 | → | 大規模構造物の まるごと解析技術の開発 | → | 熱・流体効果の取込みによる まるごと詳細解析技術の開発 | | |

図 4.4.2-1 構造解析ロードマップ

参考文献

- [1] Zienkiewicz O.C., Taylor R.L, The Finite Element Method, 5th ed., Oxford (2000).
- [2] Saad, Y., Iterative methods for sparse linear systems, PWS publishing company (1996).
- [3] Smith, B., Bjorstad, P.E., Gropp, W.D., Domain decomposition : Parallel multilevel methods for elliptic partial differential equations, Cambridge University Press (1996).
- [4] Toselli, A., Widlund, O.B., Domain decomposition methods : Algorithms and theory, Springer (2004).
- [5] Tarek. P.A. Mathew, Domain Decomposition Methods for the Numerical Solution of Partial Differential Equations, Springer (2008).

4.4.3 機械材料

(1) 現在行われている課題

機械材料分野において、材料機能設計に関する第一義的要件は、機械部品の寿命を保証する長期にわたる強度信頼性の確保である。強度低下の要因については、内在する欠陥の成長による応力場の変化という力学的側面と、使用環境下での劣化という化学反応的側面の両面より評価する必要がある。欠陥成長に関しては、連続体力学を基礎とした応力・ひずみ場の評価が機軸となり、部品レベルの m オーダーから結晶粒界レベルあるいは炭素繊維強化プラスチックの炭素繊維直径レベルの μm オーダーに向けて、トップダウン的アプローチによるシミュレーション手法の開発が進められている。使用環境下での劣化に関しては、量子力学を基礎として原子・分子レベルから結晶粒界レベルに向けてボトムアップ的アプローチによるシミュレーション手法の開発が進められている。

これらの両アプローチを統合することを目指し、メゾ領域の力学モデルにより原子スケールとマクロスケールを接続する試みが、マルチスケールシミュレーションとして行われてきた(図 4.4.3-1) [1,2]。しかしながら、現時点では原子モデルで扱える対象がたかだか数十～百 nm 以下に限定されているため、実用レベルには至っていない。原子系の計算で得られた力学特性パラメータを上位スケールの力学モデルに入力値として与え、それを更に上位スケールモデルに受け渡していくとの定性的解決策はあったが、実務的手法は未だないといえる。原子シミュレーション単体としても、その材料設計・開発への応用はいまだ限定的であり、現象を理解するための手段にとどまっている。

実務レベルに至らない主因は周期境界条件の呪縛にあり、それを解かない限り、すなわちボトムアップアプローチとトップダウンアプローチがオーバーラップする領域まで、双方のスケールを拡大しない限り、根本的解決は困難である。その領域を数 μm と定めて、根本的解決を目指した研究開発が進められている。以下では、i) ボトムアップアプローチと ii) トップダウンアプローチに分けて、状況と方策を解説する。

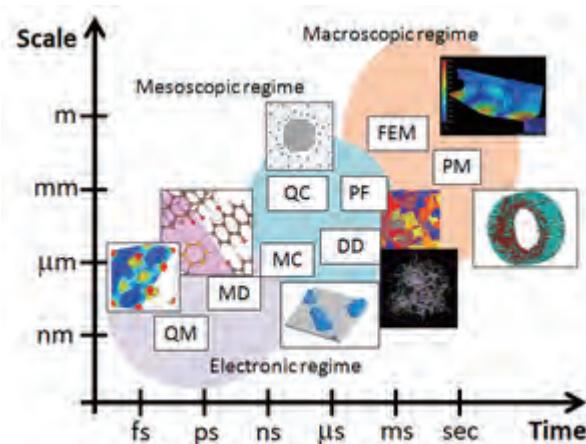


図 4.4.3-1 マルチスケールシミュレーションによる材料強度評価

(i) ボトムアップアプローチ

環境による劣化の一例を挙げると、固体酸化物形燃料電池（SOFC : Solid Oxide Fuel Cell）では高温での運転中にナノ構造が変化する（燃料極の金属原子拡散による三相界面減少、酸化還元反応起因の応力発生による亀裂発生、固体電解質の相変態など）ことにより性能が著しく劣化すると言われている。その対策のためには原子レベルの構造変化メカニズムを明らかにする必要がある。ひとたびメカニズムが明らかになれば、それを抑制するための適切な対策を検討することが容易になる。例えば、特定の欠陥構造（ボイド、積層欠陥等）や析出物が構造変化の主要因となっていることが明らかになれば、その混入を最小限にするための材料やプロセス選択が必要であることがわかる。適切な材料・構造選択を行う際、このような理論的アプローチに基づいた指針を立てることで、材料の膨大な組み合わせを手当たり次第に試すというような非効率的な手法から脱却し、設計・開発過程を大幅に効率化することが可能となる。これははすなわち、デバイスデザイン技術のスマート化であり、原子モデルに基づくデザイン技術の確立が急務となっている。このような要求に応えるためには、原子に関する運動方程式を数値積分することで原子レベルの変形を時系列で追跡する方法である、分子動力学（MD : Molecular Dynamics）シミュレーション技術の高度化を図り、大規模かつ長時間の原子シミュレーションを実現することが求められる[3,4,5]。

海外では、分子動力学ソフトウェアの組織的な開発が積極的に行われてきており、LAMMPS（Sandia National Laboratories, USA）、IMD（University of Stuttgart, Germany）などはデファクトスタンダードと言われるほど世界的に普及している。また、分子動力学計算では、原子間相互作用を記述するポテンシャル関数の構築と信頼性評価が常に重要な問題である。この問題を解決するため米国で KIM（Knowledgebase of Interatomic Models）という大型プロジェクトが進行しており、ポテンシャル関数データの標準規格づくり、体系的データベース作成、API（Application Programming Interface）整備の動きがある。マルチスケールシミュレーションについても積極的に取り組まれており、例えばヨーロッパでは国家間アライアンスによるマルチスケールシミュレーション技術発展の取り組みが見られる。

翻ってわが国では、分子動力学計算ソフトウェア開発やポテンシャル関数の整備の重要性が十分に認識されず、個々の研究者が別々に開発を進めてきているのが現状である。大型のプロジェクトの下で組織的かつ効率的に進められてきていないため、さまざまな研究シーズを有しているものの組織的な連携という意味では海外勢力の後塵を拝していると言わざるを得ない。

ここで、原子モデルシミュレーションによって解析可能な空間スケールの現状を整理しておく。微小な時間スケール幅の計算であれば、1兆原子の分子動力学計算の記録が1995年に Stuttgart のグループによりつくられているが、固体中の材料強度あるいは材料力学的に意味ある現象を見るためには十分な時間スケール（MD 計算におけるステップ数）を取らなければならない。材料物性・材料強度学的に意味のある計算としては、10年前に100億原子を超える分子動力学計算が米国 Los Alamos 研究所において行われている。ムーアの法則と、古典分子動力学法がほぼオーダー N （計算時間が原子数 N に比例すること）であるとの仮定に基づくと、現在の世界のトップランクに位置するスペックでは力学的に意味のある計算が行える原子数は1兆個に手が届くところまで来ている。これは固体では1～数ミクロンサイズのモデルについてシミュレーションが可能であることを意味する。

スパコンと普及型 PC の性能差は約 1 万倍で推移していると言われており、ものづくりに供することのできる一般的な計算サーバがその中間に位置するとすれば、現在、100 億原子・数百 nm スケールの対象物について原子シミュレーションが行える状況である。拡散問題など長時間スケールの分子動力学シミュレーションを行う際は、当然ながら空間スケールは小さくなる。

(ii) トップダウンアプローチ

基本となる方法論は連続体力学をベースとする有限要素法の枠組みにある。固体の有限要素シミュレーションは工学的シミュレーション手法を代表するものであり、経験に支えられた豊富な知見の蓄積があり、商用ソフトウェアの主流を支えている。その半面、これまでの資産の多くが黎明期のスーパーコンピュータ上で開発されたものであるため、超並列コンピューティングへの転換に多大な労力を要している。

また材料モデルの観点からは、これまで鋼を中心とする金属機械材料を評価の対象としており、線形弾性体から弾塑性構成則あるいはクリープ構成則などの非線形挙動評価へと展開してきた。

近年の環境問題に対する意識の高まりから、自動車や航空機などの輸送機器の燃費向上が強く求められ、より軽い素材の活用が試みられている。炭素繊維強化プラスチックは軽量材料の代表格であるが、その材料の非線形挙動の数理モデルについては開発の途上にあり、今後の研究進展に期待が高まっている。

炭素繊維強化プラスチックの最小構成単位は炭素繊維であり、直径 $6 \mu\text{m}$ の炭素繊維まで明確にモデル化できることが理想ではあるが、現状では炭素繊維を数万本オーダーで束ねた繊維束の単位でモデル化を行うにとどまっている。そのようなメソスケールモデルであっても、樹脂の材料特性と強度発現機構を顕在化させることは可能であり、試験片レベルのシミュレーションから材料選定と炭素繊維束のメソ構造決定に益する知見を得る試みがなされている。

(2) 長期的目標

(i) ボトムアップアプローチ

世界トップのスパコンは 2018 年に並列度 1 億で EFLOPS レベル、15 年後には 10EFLOPS 以上に到達すると予想される。固体すべてを原子として扱うとき、トップランクのスパコンでは数百ミクロンオーダーの直接原子シミュレーションが理論的には可能となることになる。ものづくりに適用可能な計算機レベルで考えると、15 年後に 1 兆原子、すなわち $10 \mu\text{m}$ スケールの計算が現実的になると予想される。実際には、直接原子シミュレーション単独ではなく、Quasicontinuum (QC) 法など、弾性変形領域に対して自由度を減らす方法を組み合わせることで空間スケールを増大させ、ミリメートルスケールの対象物の直接計算を目指す流れになると思われる[6,7]。

拡散など時間依存現象のシミュレーションのためには、少なくとも数十ナノ秒～マイクロ秒程度の実時間幅の計算をターゲットとせねばならない。その際には扱えるモデルサイズは 1 枝ほど小さくなる。またクリープなど更に長時間の変形を追跡せねばならない問題の場合には、サブ μm スケールのモデルサイズでも、通常の分子動力学計算では追いつかない。そこで、原

子移動等の“event”に対するエネルギー障壁を人為的に下げてやることで rare event の発生頻度を上げ、こうした長時間依存の現象を解析可能とする Metadynamics や Hyper MD などと呼ばれる加速分子動力学法のアルゴリズムなどを用いて、数桁大きな時間スケールを扱えるようになる必要がある。あるいは、粗視化分子動力学法、転位動力学法、フェーズフィールド法といったマルチスケールシミュレーション技術によって、原子スケールとマクロスケールを接続する必要がある。

(ii) トップダウンアプローチ

結晶粒レベルの欠陥が顕在化する解像度で、実部品全体を有限要素分割することがマイレストンとなる。すなわち、 $10\text{ }\mu\text{m}$ の要素サイズで 1 m の物体を離散化するため、 $(10^5)^3$ 要素のシミュレーションを現実的な時間内で行うことが要求される。固体の強度解析においては、極端な非線形挙動が発生する領域は限定的であることから、ほぼ線形挙動を呈する大部分の領域とその領域の計算ロードバランスを取れる計算手法が必要である。また局所的な剛性が極端に異なることに起因する基礎方程式の悪状態化に対処可能な、大規模並列ソルバーの開発も必須となる。

以上の研究開発が完成を見た暁には、結晶粒レベルを連結点として、原子レベルからマクロスケールまでを統一的にハンドリングできるシミュレーション技術が確立し、当該分野の長年の課題であった固体材料の変形・破壊現象の物理に基づくシミュレーションが可能となる[8]。

材料強度の問題は有史以来、人類が道具を開発した瞬間から嘗々と解決の努力を積み重ねてきた問題であるが、数理的方法論による合理性を付与する試みはごく近年になってから進展したものである。これまでの方法論は経験則の蓄積を基礎としているため、新種の材料を実用に供する際は、膨大な試験が必要となる。航空機への応用で脚光を浴びている炭素繊維強化プラスチックを例にとれば、材料開発から本格的実用まで約半世紀の歳月を費やしたが、現状においても材料強度発現機構について合理的な解明が行われたわけではなく、多くの研究開発課題が残されている。その解決策として期待されているのが、最小構成単位である直径 $6\text{ }\mu\text{m}$ の炭素繊維まで明確にモデル化できるシミュレーションである。

そのような連続体ベースのミクロスケールシミュレーションにより、樹脂の材料選定と炭素繊維構造決定の最適化問題を構成することが可能となり、これまで試行錯誤に頼らざるを得なかった材料開発の効率化が飛躍的に進展するものと期待される。

破壊のメカニズムは実験的手法のみで明らかにできるものではなく、実験で観察できない部分をシミュレーションが補完することで、合理的な説明が可能となる。原子レベルから部品レベルまでをカバーする合理的な材料強度シミュレーション手法が準備されれば、現象観察の積み重ねであったこれまでの材料強度評価手法の一大転換を促すことになる。

炭素繊維強化プラスチック材料の強度評価においても、炭素繊維と樹脂単体の強度特性と複合材としての強度特性の相関を合理的に評価できるようになる。合理性に裏づけられた強度評価手法により、試行錯誤による部分を排除し、材料開発から実用までのリードタイムを大幅に短縮することができる。このように、シミュレーションの活用による製品開発の加速を通じ、「ものづくり」分野に大きく貢献することができる。

(3) 次世代に解決すべき課題

(i) ボトムアップアプローチ

(ア) 超並列による大規模分子動力学アルゴリズム

超並列による大規模分子動力学アルゴリズムは、シミュレーションセルを領域分割により並列化するというものである。この場合、各セグメントの境界に近い原子の情報を隣り合うセグメントに毎ステップ受け渡す必要があるため、並列化効率が著しく落ちないように配慮したコーディングが重要である。更に、加速分子動力学法を組み込むことが考えられる。例えば HyperMD 法や Metadynamics 法が提案されており、これは結晶格子位置の深いポテンシャルの谷から原子を強制的に追い出すようなバイアスポテンシャルを付加し、他の pKa へのジャンプのようなレアイベントの発生を加速するものである。通常の分子動力学法との違いは基本的にはバイアスポテンシャルの付加部分であるので、超並列分子動力学アルゴリズムにそのまま加速機能を搭載することは難しくない。

(イ) 超並列によるポテンシャルの高効率構築（パラメータフィッティング）技術

中長期的に飛躍的な原子モデルシミュレーションの展開を可能とするため、短期的には原子間ポテンシャル作成技術の向上が求められる。環境非依存性の高いロバストなポテンシャルではパラメータの数が数十以上にも上り、合金や酸化物など多元系では原子種の組み合わせの数だけパラメータが倍増するため、広大なパラメータ空間の中で最適値探索を行わねばならない。この最適値探索のために、パラメータ空間を並列プロセッサに分割し、各プロセッサはそれぞれのセグメント内の最適値探索を行う遺伝的アルゴリズムの高度化が求められる。この方法は、パラメータ空間をセグメントに分割するのみであるため、超並列計算機にきわめて適した問題であり、高い並列効率が期待できる。また、パラメータ探索範囲を学習することにより、ポテンシャルの半自動構築を行うアルゴリズムの開発が必要である。これによって、企業の製品開発部門など専門レベルの研究者がいない場合でも、対象とする材料に適応したポテンシャル関数の開発が容易に行えるような環境を整備することができる。更に、電子構造に対する自由度を含めた電荷移動型ポテンシャルや磁性ポテンシャルなどの複雑な関数形にも対応できるアルゴリズムへの改良も必要となる[9]。

(ii) トップダウンアプローチ

シミュレーションの中核を占めるのが、数千万自由度以上の大規模な連立一次方程式を解くソルバーである。大規模並列計算に適した解法として、共役勾配法に代表される繰り返し修正に基づく、いわゆる反復解法が多用されている。この方法の有効性はコモディティの高い PC クラスターレベルまででは実証されているが、数万以上の並列コアが動作する「京」クラス、エクサクラスのシミュレーションにおいても同様にその有効性が保持されるか否かについては未知である。

材料強度評価に関わるシミュレーションでは、局所的に進行する強度の非線形性現象を的確にハンドリングする必要がある。すなわち、分割された領域ごとの非線形度が大きく異なる状態で計算を進行させる必要があり、CPU に対するロードバランス、通信の問題まで考慮した革新的アルゴリズムの開発が必要となる。

また破壊の進行にともない、剛性が著しく低下し、連立方程式の係数がほぼ零となる状態も頻出する。大規模並列解析で発生する誤差に対するロバスト性も要件の一つである。

動的破壊問題の超並列シミュレーションにおいては、これらの問題を解決することが特に重要となり、アルゴリズムの抜本的改良が必要である。

(4) ターゲットとする研究対象

(i) ボトムアップアプローチ

手法開発と工業的要求の双方の観点から、電子部品用の機能性材料に関する強度評価が適切なターゲットである。機能性材料の解析のためには、電気的特性や磁気特性など電子構造が支配する特性と、機械的ひずみや変形の連動作用によるマルチフィジックスが関与する問題に対処する必要がある。これまでこのような問題については第一原理解析や半経験的量子力学シミュレーションが必須であったが、電荷移動や電子 спинを記述することができる原子間ポテンシャルモデル（以下、マルチフィジックスポテンシャル）を用いれば、電子に対するハミルトニアンを解くことなく分子動力学計算を行うことができ、第一原理などと比べ格段に大きなサイズの問題が扱えるようになる。このようなポテンシャルは次々と提案されるようになってきているが、パラメータの数が膨大になるため限定的にしか活用されていない。上記の超並列ポテンシャル作成ソフトの整備によりこの問題は解決できるため、マルチフィジックスポテンシャルの構築ならびに電子特性－変形連動問題に対する大規模分子動力学計算技術の開発も進めるべきである。

(ii) トップダウンアプローチ

「京」を頂点とするハイパフォーマンスコンピューティングの現状を考慮し、またわが国のもつくり分野へ与える影響度も勘案すれば、連続体力学を基礎とする材料強度評価の対象とすべき材料は、炭素繊維強化プラスチックである。炭素繊維束の厚さは $500 \mu\text{m}$ 程度であるので、そのレベルまでの解像度で代表寸法 1m の部材をモデル化することが目標となる。

炭素繊維強化プラスチックによる軽量化の恩恵を最も受けるのが、自動車と航空機である。これら輸送機械の軽量化とトレードオフ関係にある安全性確保の観点から、最も過酷な試験は衝突安全性評価である。よって、動的衝撃荷重に対する炭素繊維強化プラスチック材料の破壊シミュレーションを、 $500 \mu\text{m}$ の解像度を有するモデルで実施可能とすることが究極の目標である。

短期的目標として、炭素繊維を 1 万本程度束ねた繊維束のレベルでのモデル化による、炭素繊維強化プラスチック製の高圧水素容器の破壊評価の高度化を挙げる。これは、燃料電池自動車の普及を目前に控え、水素供給インフラを支える基盤部品である超高压水素蓄圧器の開発に必須の事項である。この圧力容器は炭素繊維束をフィラメントワインディングによりライナーと呼ばれる内部容器に巻きつけて成形される（図 4.4.3-2）。強度発現機構を明らかにし、強度を確保したうえで軽量化コンパクト設計を合理的に進めるために、シミュレーションの果たす役割は大きい。

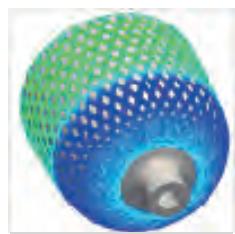


図 4.4.3-2 フィラメントワインディング高压水素容器の強度評価

(5) 課題を解決するために必要なアプリケーション群（要求性能）

(i) ボトムアップアプローチ

分子動力学法の並列化には空間ベースの領域分割法が用いられ、その計算量と系の大きさの関係は weak scaling となることが期待される。その領域分割においては、サブボリュームの縮小によるデータ量の削減がキャッシュ効率の向上に有効な一方で、原子間力のカットオフ領域以下にサブボリュームを縮小することはノード間通信の増加による並列化効率の悪化を招く。また、ある種の加速分子動力学法では、レプリカを用いたアンサンブル計算によって、いわば「時間軸方向の並列化」が行われる。

後述のロードマップにおいては、これらの並列化手法を想定して計算量の予測を行った。例えば、銅粒界（粒径 50nm）、10 マイクロ秒の加速分子動力学（1000 レプリカ）による引張シミュレーションを考える。ここでは、1 コアのピーク性能が「京」と同等の計算機を想定する。1 コアあたり 6000 原子を割り当て、1 フェムト秒の分子動力学ステップに 12.0×10^8 並列で 0.05 秒を要するとしたとき、この計算を 12 時間で終えるために必要な実効性能は 1000PFLOPS と見積もられる。

(ii) トップダウンアプローチ

非線形有限要素法においても分子動力学法と同様に、空間ベースの領域分割法が有効である。陰解法に基づく非線形有限要素法では、計算時間のほとんどは連立一次方程式の解法である反復解法に費やされる。その領域分割において、サブボリュームの縮小はキャッシュ効率の向上に繋がる一方で、反復解法の収束性悪化による計算量増大を招く。

後述するロードマップにおいては、「京」と同様の性能・特徴を持つ並列計算機上で weak scaling を実現すると理想化して計算量の予測を行った。例えば、 $50 \mu m$ の欠陥を含む代表長さ 20cm の試験片における非線形有限要素シミュレーションを例として考える。非線形ステップ、反復解法ステップを各々 4000 とし、1 コアが担当する要素数を約 3 万とする。このとき、1 反復解法ステップに 3.0×10^8 並列で 12 秒要すると仮定すると、この計算を 12 時間で終えるために必要な実効性能は 200PFLOPS と見積もられる。

| 課題 | 要求性能 (PFLOPS) | 要求メモリ リバンド 幅 (PB/s) | メモリ量 (PB) | ストレージ量/ ケース (PB) | 計算時間/ ケース (hour) | ケース数 | 総演算量 (EFLOP) | 概要と計算手法 | 問題規模 | 備考 |
|----------------------------|------------------|---------------------------|--------------|------------------------|------------------------|------|-----------------|----------|---|----------------------------------|
| 電子部品用機能性 材料に関する強度評 価 | 1,000 | 50 | 10 | 500 | 12 | 10 | 430,000 | 加速分子動力学法 | 粒径50nm、10マイクロ秒、 レプリカ数1000の銅粒界 引張シミュレーション | レプリカによる加速化率は 1000並列あたり666倍と仮定 |
| 炭素繊維強化プラス チック開発 | 200 | 50 | 30 | 500 | 12 | 10 | 86,000 | 非線形有限要素法 | 試験片20cm、欠陥サイズ 50 μm、4000ステップの 陰解法シミュレーション | 反復解法における反復回数 は4000として見積もり |

※本見積もりは未だ精査中である。より精度の高い数値はWeb版（→「1.2. 本文書の構成」）を参照のこと。

(6) 他分野との連携

(i) マルチスケール

すでに述べたようなボトムアップアプローチおよびトップダウンアプローチによって、原子レベルから mm～μm オーダーまでのスケールをカバーするマルチスケールシミュレーション技術やデバイスデザイン技術の構築が期待される。しかしながら、デバイスや微小構造材料が実機の中で使用される状況について信頼性評価などを行うためには、更に上位スケールの力学・強度問題と結びつけることが必要である。サブミクロンスケールのモデリングと有限要素法 (FEM) 等の連続体モデリングのカップリングは、境界領域でひずみや応力を連続的に接続することで実現され、その方法論はほぼ確立しているが、計算コストのほとんどはサブ μm 領域の計算に費やされ、連続体領域の計算負荷はそれに比較するときわめて小さくなる。すなわちロードバランスが悪くなるという問題があり、これを超並列計算機でどのように効率的に処理していくかが技術的なキーとなる。

(ii) 物性・界面

物性物理・界面工学の分野において、ひずみや変形による物性変化が注目されており、これらの特性をデバイスの機能向上に積極的に利用しようとする試みが進められている。例えば、半導体デバイスの設計においては、ひずみ負荷による電子の有効質量変化をデバイスの機能向上のために利用している[10]。また、グラフェンのような低次元構造体でオングストロームオーダーの波長のコルゲーション（しわ形状）が起こることが観察されており、こうした特異な変形による新奇な特性の発現・応用が期待されている[11]。ひずみや変形による新奇物性の発現を利用したナノデバイスの開発は、今後更に注目を集めると予想される。ナノ～ミクロンレベルの構造体のひずみ・応力分布や特異な変形特性を容易に予測できるマルチスケール変形シミュレーション技術と、物性物理・界面工学を融合することで、新規ナノデバイス開発の可能性が開けると期待される。

(7) 公的な意見交換とそのサマリー

日本機械学会および日本材料学会内の、機械材料関連の部門および研究分科会における議論や参加メンバーに対するアンケートを通じ、平成 25 年度上期を目標に取りまとめる予定である。

(8) ロードマップ

図 4.4.3-3 に示す計算機性能予測に基づき、ロードマップを作成した。図 4.4.3-4 に示す。原子系の規模は、製品開発に利用可能と考えられる計算機の性能から見積もった。なお、Quasicontinuum 法などのマルチスケール手法の援用が可能な場合は、空間スケールをセル一辺当たり 10 倍程度拡大できる。

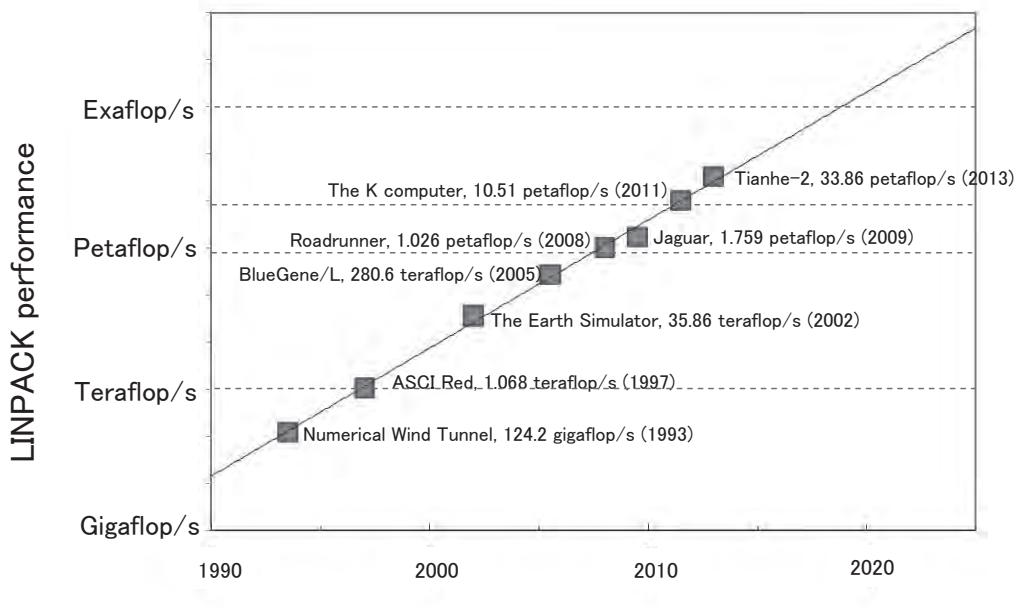


図 4.4.3-3 計算性能向上予測

| 年代 課題 | 2012 ~ | 2014 ~ | 2016 ~ | 2018 ~ | 2020 ~ | 2022 ~ |
|---------------------------|---|--------|--------|--|--------|--------|
| 短時間(数nsec)の分子動力学法・力場の計算 | ↔ | ↔ | ↔ | ↔ | ↔ | ↔ |
| | ～200 nm規模の原子系の計算。単結晶内の欠陥間相互作用、少數の結晶粒間の相互作用等 | | | ～2μm規模の原子系の計算。バルクナノメタルの多結晶セルでの粒間相互作用等 | | |
| 加速化手法による長時間(数μsec)の分子動力学法 | ↔ | ↔ | ↔ | ↔ | ↔ | ↔ |
| | ～20 nm規模の原子系の計算。単結晶内での拡散、転位。現実的なひずみ速度下における単結晶内の欠陥の運動等 | | | 20～200 nm 規模の原子系の計算。バルクナノメタル多結晶セルにおける低ひずみ速度での粒界破壊等 | | |
| 化学反応・分極を考慮した分子動力学法 | ↔ | ↔ | ↔ | ↔ | ↔ | ↔ |
| | ～20 nm規模の短時間・長時間シミュレーション | | | 20～200 nm 規模の短時間・長時間シミュレーション。亀裂モデルでの腐食割れ等 | | |
| 連続体力学に基づく強度評価 | ↔ | ↔ | ↔ | ↔ | ↔ | ↔ |
| | 1 mmオーダーの解像度で欠陥をモデル化した強度評価 | | | 50μmオーダーの解像度で欠陥をモデル化した強度評価 | | |

図 4.4.3-4 機械材料ロードマップ

参考文献

- [1] S. Yip (ed), Handbook of materials modeling (2005), Springer Dordrecht, Berlin, Heidelberg, New York, ISBN-10 1-4020-3287-0
- [2] Z.X. Guo (ed), Multiscale materials modelling: Fundamentals and applications (2007), CRC press, ISBN 978-0-8493-9110-1
- [3] D.C. Rapaport, The art of molecular dynamics simulation (1995), Cambridge University Press, ISBN 0-521-59942-3
- [4] J.M. Haile, Molecular dynamics simulation: Elementary methods (1997), Wiley-Interscience, ISBN 0-471-18439-X
- [5] S. Ogata, Y. Umeno and M. Kohyama, “First-principles approaches to intrinsic strength and deformation of materials: perfect crystals, nano-structures, surfaces and interfaces”, Modelling Simul. Mater. Sci. Eng. 17 (2009) 013001 (33pp)
- [6] R.E. Miller and E.B. Tadmor, “The quasicontinuum method: Overview, applications and current directions”, J. Computer-Aided Mater. Design 9 (2002) 203-239.
- [7] J. Knap and M. Ortiz, “An analysis of the Quasicontinuum method”, J. Mech. Phys. Sol. 49 (2001) 1899-1923.
- [8] 渋谷陽二, 塑性の物理素過程から理解する塑性力学 (2011), 森北出版, ISBN 978-4-627-66761-7
- [9] M. Griebel, S. Knapek and G. Zumbusch, Numerical simulation in molecular dynamics (2010), Springer, ISBN 978-3-642-08776-9

- [10] 濱川佳弘, 半導体デバイス工学 (2000), オーム社, ISBN 4-274-13223-4
- [11] H. Shima, M. Sato and K. Iiboshi, “Diverse corrugation pattern in radially shrinking carbon nanotubes”, Phys. Rev. B 82 (2010) 085401 (7pp)

4.4.4 プラズマ・核融合

(1) 現在行われている課題

人類社会の持続的な発展を支える長期的に安定供給が可能なエネルギーの実現を目指して、核融合エネルギーの研究開発が世界規模で進められている。核融合エネルギーは

- i) 燃料が偏在せず豊富である
- ii) 高レベルの放射性廃棄物が生成されず環境負荷が低い
- iii) 核融合炉は暴走せず原理的に高い安全性を有する
- iv) 核拡散の制約を受けない

といった特徴があり、日本にとって国産エネルギーとなり得るばかりか途上国を含めた地球規模での基幹エネルギー需要を長期的に代替し得る革新的エネルギー源である。したがって、核融合エネルギーの実現に貢献することは、低炭素社会の実現につながるだけでなく、日本の新たなエネルギー戦略・産業の発展にもつながる。現在、世界中で精力的に開発が進められている磁場閉じ込め型の核融合炉（以降では磁場閉じ込め型の記述を省略する）では約1億度の燃料プラズマをトーラス状の磁場で効率的に閉じ込めて核融合反応を持続させる。燃料プラズマの重水素と三重水素の核融合反応によって3.5MeVのアルファ粒子と14MeVの中性子が発生し、高エネルギーのアルファ粒子は燃料プラズマを自己加熱して炉心プラズマの高温状態が維持する。一方、中性子はブランケットと呼ばれる機器に吸収されて、そのエネルギーは冷却材によって取り出されて発電が行われる。これまでに、JT-60U（日本）およびJET（欧州）という2つの実験装置で入力エネルギーと核融合出力（換算値）が等しくなる臨界条件を達成しているが、現在、核融合炉の科学的・工学的可能性の実証を目的として、次世代の実験装置である国際熱核融合実験炉ITERの建設が日米欧露中韓印、7極の国際協力の下にカダラッシュ（仏）で進められ、2020年に運転開始を予定している。これまでの高温プラズマ実験では水素、もしくは、重水素のみのプラズマを電磁波や粒子ビームで加熱して核融合炉心の高温プラズマ挙動を模擬してきたが、ITERでは重水素と三重水素からなる燃料プラズマを使用して核融合反応を発生させる核燃焼プラズマの長時間運転が計画されており、これまでの模擬実験とは質的に異なる炉心プラズマが実現する。このため、核燃焼プラズマの性能予測や実験条件最適化においてシミュレーションが大きな役割を果たすと期待されている。

核融合炉開発に関連するシミュレーション分野はプラズマ、熱流体、中性子、材料と多岐にわたっているが、この中で特にプラズマシミュレーションは最大規模の計算量を必要としている。これは、核融合プラズマの第一原理モデルが5次元位相空間（3次元空間×2次元速度、ここで、背景磁場中の粒子速度は3次元から2次元に簡約化される）における粒子分布の発展を記述するジャイロ運動論モデル[1]（異なる位置と速度を持つプラズマ粒子の集団を統計的分布関数によって5次元空間の連続体として表現するモデル）で与えられ、流体モデルに比べて $\sim 100^2$ 倍程度大きい自由度を必要とするためである。プラズマシミュレーションが対象とする問題として、プラズマ乱流に起因する熱輸送や燃料粒子輸送、あるいは、磁気流体现象に起因する高エネルギー粒子輸送が挙げられるが、これらのプラズマ現象は炉心性能に大きく影響するため、核融合炉の成立性を左右する重要課題となっている。

これまで世界中で 5 次元ジャイロ運動論シミュレーションが開発されてきたが、ペタスケール計算機の登場やシミュレーション技術の進歩によって、このようなシミュレーションの適用対象は核融合プラズマ物理の理論的研究のみならず、実験データ解析、乱流輸送モデル開発、さらには、炉心プラズマ設計など幅広い展開を見せるようになってきた[2]。

核融合プラズマの 5 次元ジャイロ運動論シミュレーションは 1990 年代に米国で基本的な手法が確立し、以降、計算機性能の進展と共に急速に発展してきた。核融合プラズマにおいては、炉心サイズが $\sim m$ 規模となるのに対して、乱流の最小スケールが背景磁場の影響下でサイクロトロン運動する荷電粒子の軌道半径（イオン $\sim 5\text{mm}$ 、電子 $\sim 0.1\text{mm}$ ）程度となるため直接数値計算 (DNS) が主に用いられる。プラズマの数値計算法としては歴史的に粒子法 (Particle-In-Cell) と格子法 (Eulerian, Semi-Lagrangian) が 1970 年代に開発されているが、1990 年代後半に初めて実現した第 1 世代のトーラスプラズマシミュレーション (GTC, ORB5 等) では比較的少ないメモリでも計算が可能な粒子法が主流であった。第 1 世代シミュレーションの最大の成果は帶状流と呼ばれる乱流が励起するメゾスケール流（平均流）が乱流輸送を抑制する効果を示したことであり[4]、この成果は ITER の設計の妥当性を巡る議論に大きな影響を与えた。次に、2000 年代前半に開発された第 2 世代のプラズマシミュレーション (GKV, GS2, GYRO, GENE 等) では、計算機性能、特に、メモリ容量の増大によって 5 次元位相空間を格子で分解する見通しが得られ、格子法のトーラスプラズマシミュレーションが開発された。格子法の計算は粒子法で問題となる粒子ノイズの影響がなく計算精度が安定しているために、シミュレーションの専門家以外にも広く普及し、系統的な実験解析等に第一原理シミュレーションが活用されるようになった。このような格子法のシミュレーションは 1 本の磁力線の近傍をモデル化した局所モデルによって開発されたが、その後の計算機性能の進展にともない、炉心全体を計算領域とする大域的モデル、あるいは、イオン軌道半径から電子軌道半径のスケールまで取り扱うマルチスケールモデルが開発されてきている。さらに、2000 年代後半にはペタスケール計算が視野に入ってきたことを受けて、より長時間スケールの数値実験を目的とする第 3 世代のプラズマシミュレーション (GT5D, GYSELA 等) が開発されるようになってきた。第 3 世代の大きな特徴は、第 1～第 2 世代の計算が時空間スケールの分離を仮定して背景プラズマ分布を固定し、乱流成分のみを計算する delta-f モデルを採用していたのに対し、第 3 世代では巨視的なプラズマ分布と微視的な乱流成分を同じ第一原理モデルで同時に発展させる full-f モデルが開発されたことである。full-f モデルでは、delta-f モデルの 100 倍の時間スケールの計算が必要になるが、delta-f モデルで発見された帶状流に加えて、自己無撞着に発展するプラズマ分布と乱流の相互作用という新たなフィードバックループを含む数値実験が実現し、炉心出力に影響するプラズマ分布を第一原理モデルで計算することが可能になった。

5 次元ジャイロ運動論シミュレーションはペタスケールのフラッグシップマシンを必要とするため、今日では各極当たり 2～3 本のコードに開発が集約され、米国では GS2 (メリーランド大学)、GYRO (ジェネラル・アトミック社)、GTC (プリンストン大学)、欧州では GENE (マックス・プランク-プラズマ物理研究所)、GYSELA (フランス原子力庁)、ORB5 (ローランヌ連邦工科大学) が主要コードとなりつつある。一方、国内では GT5D[3] (日本原子力研究開発機構)、GKV[4] (核融合科学研究所) という 2 本のコード開発が進行しており、前者は大域的 full-f モデルの長時間シミュレーション、後者は核融合科学研究所に設置されている大

型ヘリカル装置 LHD に代表される 3 次元形状トーラス磁場配位の複雑な磁場形状の取り扱いにおいて、欧米のコードにない独自性を発揮している (ITER や JT-60U で採用されている 2 次元軸対称トーラス磁場配位のトカマク装置がトーラス磁場コイルとプラズマ中の電流で閉じ込め磁場を形成するのに対して、3 次元形状トーラス磁場装置は螺旋状に巻かれたコイルのみによって閉じ込め磁場を形成する。3 次元形状トーラス磁場装置は現時点での炉心性能としては JT-60U や JET のようなトカマク装置に及ばないものの、定常運転を実現しやすいという長所がある)。

ペタスケール計算機の利用によって数年前まで困難であった実装置規模の 5 次元ジャイロ運動論シミュレーションが日常的に実行されるようになってきた。例えば、[5]では GKV を用いて LHD 実験のイオン熱輸送係数を定量的に再現する、あるいは、[6]では GT5D を用いて DIII-D 実験 (ジェネラル・アトミックス社) において報告されたイオン熱輸送係数のプラズマサイズスケーリングを再現するといった実証研究の成果が報告されており、今後 5 年程度で既存実験データに対する実証研究が飛躍的に進展するものと期待される。現時点では、各極における既存装置の実験データに対する実証研究が始まりつつある段階であり、サイエンスベースの議論が展開している状況であるが、今後、ITER という一つの国際協力目標に向かってコード間の国際競争、あるいは、標準化が進展する可能性がある。実際、G8 Nuclear Fusion Simulation@Exascale (G8NuFuSE) 計画[7]のような、多国間協力でエクサスケール計算に向けたソフトウェア開発に取り組むような枠組みも最近構築されている。

(2) 長期的目標

ITER は核融合エネルギー開発における重要なマイルストーンである。このため、今後 10 年程度の間では、前述の既存実験データに対する実証研究を推進することによってコードの基礎的な物理モデルの確度を高めつつ、ITER の本格的な核燃焼プラズマ実験に先駆けてその炉心性能を予測することが重要な課題となる。そして、今後 20 年程度のスパンでは ITER の運転開始後に初めて可能になる核燃焼プラズマ実験に対する実証研究によって ITER の知見を蓄積した炉心プラズマシミュレーションを開発することが最終的な目標となる。ITER の次の段階としては、各極とも商用炉 (原型炉) の開発を想定しており、国内では 21 世紀中葉までに核融合炉の実用化を目指すロードマップ[3]が提案されているが、そこで鍵を握る技術の一つが ITER における核燃焼プラズマ実験の知見を反映した炉心設計である。ここで、ITER の炉心熱出力が約 400MW となるのに対して、上記ロードマップでは現在の軽水炉と同程度の炉心熱出力約 3GW を想定している。したがって、このような炉心設計を行うには ITER の実験データを単純に外挿するのではなく、機構論的 (第一原理的) なアプローチに基づく予測性能の高いシミュレーションが必要不可欠になる。

上述の目標を達成するためには、まず、ITER の核燃焼プラズマ実験を模擬できるシミュレーションの開発が必要とされる。しかしながら、ITER のシミュレーションには、現時点で推測される範囲でも以下の点において従来の既存装置のシミュレーションにはない難しさがある。

- i) 既存装置に比べて半径で約 3 倍、体積で 10 倍以上となる巨大な炉心プラズマであること。

- ii) 既存装置が水素、あるいは、重水素の单一イオン系の模擬実験であるのに対し、ITER は燃料の重水素と三重水素、および、核融合反応で生成するヘリウムを含む多種イオン系となること。
- iii) ITER では 3.5MeV のヘリウム (α 粒子) による電子系の加熱が主要となるため、イオン軌道半径 ($\sim 5\text{mm}$) から電子軌道半径 ($\sim 0.1\text{mm}$) におよぶマルチスケールの電子系乱流による熱輸送が重要になること。
- iv) エネルギー閉じ込め時間 ($\sim 1\text{s}$) に及ぶ長時間スケールで変動するプラズマ乱流輸送、核燃焼による熱源・粒子源の変化および燃料密度・温度の分布形成の自律的な振る舞いが見られること。

これらの課題はシステムサイズ、分解能、時間スケール、どれをとっても従来のシミュレーションに比べてきわめて高い計算コストを要求する。この壁をペタスケール、あるいは、将来のエクサスケール計算で乗り越えることができれば、その核融合エネルギー開発に対するインパクトはきわめて大きいと考えられる。また、核燃焼プラズマ実験自体が ITER で初めて実現するきわめて科学的価値の高い研究対象であり、そこで展開するプラズマ現象をシミュレーションで理論的に解明することによって、プラズマ物理、あるいは、非線形科学としての大きな科学的ブレークスルーも期待できる。

(3) 次世代に解決すべき課題

(i) ITER の計算に向けたシステムサイズ、物理モデルの拡張

第3世代プラズマシミュレーションの例として GT5D による準定常乱流計算(重水素イオン、 $\sim 10\text{ms}$ 程度の時間スケール)の計算量を図 4.4.4-1 に示す。既存装置 (JT-60U) 規模の数値実験は現在のペタスケール計算で実現するのに対し、ITER 規模の準定常乱流計算を行うには 10PFLOPS 規模の計算が必要となる。さらに、10PFLOPS～100PFLOPS 規模のポストペタスケール計算では、ITER 規模の準定常乱流計算を多種イオン系(重水素、三重水素、ヘリウム)の核燃焼プラズマに対して行えるようになると期待される。

(ii) strong scaling の向上

1EF～10EF 規模のエクサスケール計算では、strong scaling を飛躍的に向上し、これまで数日～1週間という時間スケールで実行してきた Capability computing の問題を 10～100 倍加速して数時間に短縮し、パラメータスキャン等の Capacity computing を可能にすることが重要な課題となる。これによって、このようなシミュレーションを実験条件の最適化や炉心設計等に活用し、ITER 計画や商用炉開発を加速することが可能になると期待される。また、10～100 倍の計算速度が実現すれば、核燃焼による炉心出力の過渡的応答を模擬するのに必要なエネルギー閉じ込め時間 ($\sim 1\text{s}$) 程度の数値実験も視野に入ってくる。このような長時間スケールの数値実験が実現すれば、核融合炉の新たな運転手法や制御手法の開発、あるいは、より高性能な炉心プラズマの設計をシミュレーションで探索することが可能になると期待される。これまで、核融合分野の主要アプリケーションである GT5D および GKV を対象として、OpenMP で実装した通信スレッドによって 1 対 1 通信や集団通信を演算の背後で同時処理する通信隠蔽技術[9]を開発し、「京」フルシステム規模まで良好な strong scaling を達成している。これに加えてメ

ニーコア環境のカーネル最適化技術、あるいは、ノード間の動的負荷分散技術等の開発によって、エクサスケール計算に向けた更なる strong scaling の向上を目指す。

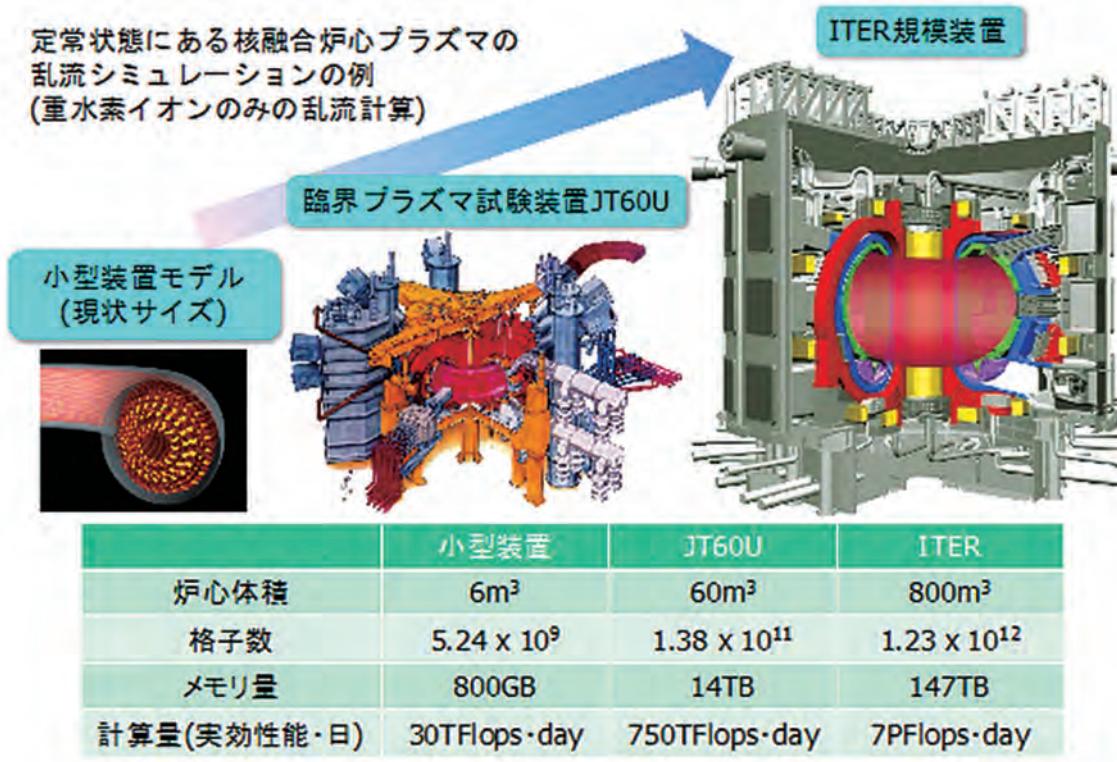


図 4.4.4-1 核融合プラズマ乱流シミュレーションの計算規模

(iii) マルチスケールの電子乱流計算

これまで述べたような装置サイズ、粒子種、時間スケールの拡張に加えて、ITER ではマルチスケールの電子系乱流のシミュレーションも重要な課題となっている。しかしながら、このようなマルチスケールシミュレーションはイオンスケールの乱流計算に比べて、 50^3 倍 ($\sim 10^5$ 倍) の問題規模となるため、大域的モデルで扱うことは依然として難しい。そこで、マルチスケールの電子系乱流の取り扱いでは GKV のような局所モデルの第 2 世代プラズマシミュレーションの分解能を拡張することが必要になる。GKV の計算コストの見積りでは、水素イオンと電子を含むマルチスケール乱流計算に 10PFLOPS 規模が必要となることから、ポストペタスケールではやはり多種イオンと電子を含む核燃焼プラズマのマルチスケール乱流計算が可能になると期待される。この見積りは 2 次元トーラス磁場配位のトカマク装置の場合であるが、3 次元トーラス磁場配位の LHD では計算コストが一桁以上大きくなるため、エクサスケール計算が必要になる。

(4) 課題を解決するために必要なアプリケーション群（要求性能）

GT5D[3]、GKV[4]ともに 5 次元位相空間（3 次元位置×2 次元速度）における移流・拡散方程式として与えられるジャイロ運動論方程式と乱流場の静電ポテンシャルを決めるポアソン

方程式をカップルさせてプラズマ乱流による燃料粒子の速度分布関数の非線形発展を追跡する。以下にこの二つのコードの基本要求性能を示す。

(i) GT5D の要求性能

GT5D (Gyrokinetic Toroidal 5D full-f Eulerian code) は大域的 full-f モデルの長時間シミュレーションを目的として開発され、トーラス全体を計算領域として移流・拡散方程式に差分 - 半陰解法を適用する。ここで、最もコストの大きい陰的ステップをクリロフ部分空間解法（共役残差法）の反復法ソルバーで取り扱う。ポアソン方程式はトーラス方向の 1 次元フーリエモード展開と断面上の 2 次元有限要素法を組み合わせて解く。ITER 規模の重水素イオンの計算には $\sim 10^{12}$ 自由度の計算格子を必要とし、多粒子種の場合には粒子種の数だけ計算格子が増加する。時間ステップ数は準定常乱流計算で $\sim 10^5$ ステップ、長時間スケールの数値実験で $\sim 10^7$ ステップが必要となる。メモリ量は数 100TB、1 ケースあたりの総演算量は準定常乱流計算で 10^{21} FLOP 程度（×数 100 ケース）、長時間数値実験で 10^{23} FLOP 程度（×10 ケース程度）となり、前者を 1 時間、後者を 1 週間で処理するために実効 100PFLOPS 程度が要求される。

(ii) GKV の要求性能

GKV (GyroKinetic Vlasov code) は LHD 装置の局所的 delta-f モデルのシミュレーションを目的として開発され、1 本の磁力線に沿った局所領域を計算領域として実空間に周期境界条件を適用する。これにより、スペクトル法によるマルチスケールの乱流スペクトルの高精度な取り扱いを可能にしている。また、速度空間には差分法、時間積分には陽解法を用いる。水素イオンと電子のマルチスケール乱流計算には $\sim 10^{11}$ 自由度の計算格子を必要とし、時間ステップ数は $\sim 10^5$ ステップとなる。GT5D と同様に多粒子種の場合には粒子種の数だけ計算格子が増加し、3 次元トーラス磁場配位の LHD の計算では更に高い解像度が要求されて計算格子と時間ステップ数が一桁増大する。このため、メモリ量は 100TB 程度、1 ケース当たりの総演算量は 10^{22} FLOP 程度（×数 10 ケース）となり、これを 1 日で処理するために実効 100PFLOPS 程度が要求される。

GT5D と GKV のどちらも 5 次元という問題の特徴を生かして 3 次元ないし 4 次元の階層的な領域分割を採用し、さらに、袖領域の 1 対 1 通信やデータ転置の集団通信を演算とオーバーラップする通信マスク手法を採用することによって並列化率の向上を図っている。要求するネットワークバンド幅については、通信マスク手法を適用する際の通信と演算のバランスで決まってくるため、演算ノードの構成によって変化する。プロセッサー・メモリ間のメモリバンド幅についても、京や BlueGene のような Thin node を想定する場合には B/F 比 ~ 0.5 程度が望ましいが、GPGPU のようにプロセッサ上の専用メモリを利用した処理を前提とする場合にはプロセッサ内のメモリバンド幅が問題となる。I/O 量は最大で使用メモリ量の十倍程度になる。

| 課題 | 要求性能 (PFLOPS) | 要求メモリ リバンド幅 (PB/s) | メモリ量 (PB) | ストレージ量/ ケース (PB) | 計算時間/ ケース (hour) | ケース 数 | 総演算量 (EFLOP) | 概要と計算手法 | 問題規模 | 備考 |
|--------------------|------------------|--------------------------|--------------|------------------------|------------------------|----------|-----------------|----------------------------|---------------------------|------------|
| プラズマ乱流計算・マルチスケール乱流 | 100 | 200 | 0.5 | 0.1 | 24 | 50 | 430,000 | ポルツマン方程式の5次元計算(スペクトル法+差分法) | 10^{12} 格子、 10^6 ステップ | B/F=2として計算 |
| プラズマ乱流計算・大域的非定常乱流 | 100 | 200 | 0.5 | 1 | 170 | 10 | 610,000 | ポルツマン方程式の5次元計算(差分法) | 10^{12} 格子、 10^7 ステップ | B/F=2として計算 |

※本見積もりは未だ精査中である。より精度の高い数値はWeb版(→「1.2. 本文書の構成」)を参照のこと。

(5) 他分野との連携

現在想定しているアプリケーション群は差分法およびスペクトル法に基づく5次元位相空間のCFDであり、ものづくり分野内外の大規模流体計算一般と課題を共有できると考えられる。また、陰解法ソルバーに現れるような大規模疎行列の反復法ソルバーに関しては流体計算のみならず、幅広い分野とライブラリや解法に関する知見を共有できるものと考える。

(6) 公的な意見交換とそのサマリー

平成23年度にアプリケーション作業部会によって執筆された計算科学ロードマップ白書に関して、以下の会合で意見交換を実施した。

■ 「核融合エネルギーフォーラム モデリング・シミュレーションサブクラスター 平成24年度第1回会合」 平成24年8月3日(金) 日本原子力研究開発機構 青森研究開発センター

意見交換の結果、次世代のスーパーコンピュータにおいてプラズマ・核融合分野のシミュレーション研究を展開することについて、特に、異論は出なかった。ただし、核融合分野のものづくり、すなわち、商用炉開発はITER計画の進捗と強くリンクしているので、今回の計算機開発スケジュールがITER計画に先行するようであれば、テーマの位置づけを“ものづくり”としてコミットするのは時期尚早であり、核融合プラズマのサイエンスとして取り組むべきだという意見があった。

(7) ロードマップ

核融合プラズマシミュレーションのロードマップとしては、図4.4.4-2に示すようにポストペタスケール規模までは装置規模、分解能、あるいは物理モデルの拡張にともなうweak scalingを想定し、それ以降は時間スケールの拡大にともなうstrong scalingを想定する。研究のロードマップとしては、

- i) 10PFLOPS～：既存装置における核燃焼のない超高温プラズマ実験に対する実証研究
- ii) 100PFLOPS～：ITERにおける核燃焼プラズマの性能予測研究

- iii) 1EFLOPS～：ITER の実験条件最適化や運転手法の高度化等を主要なターゲットとする研究開発

といった展開が想定される。既存実験に対する実証研究は JET、JT-60U に代表される 2 次元トーラス磁場配位のトカマク型装置、あるいは、3 次元トーラス磁場配位の LHD を対象とする。このような 3 次元形状磁場効果の研究は ITER における制御磁場や炉内機器の炉心プラズマへの影響を評価する上で有用である。

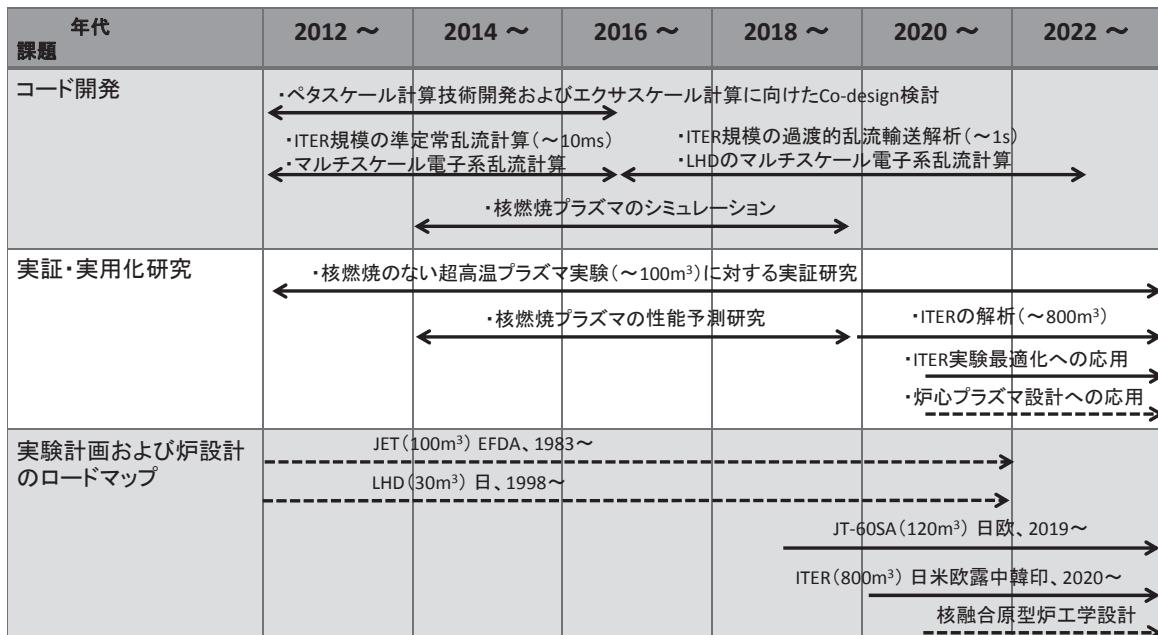


図 4.4.4-2 プラズマ・核融合ロードマップ

参考文献

- [1] A. J. Brizard and T. S. Hahm, Rev. Mod. Phys. 79, 421 (2007).
- [2] X. Garbet, Y. Idomura, L. Villard, and T. H. Watanabe, Nucl. Fusion 50, 043002 (2010);洲鎌、渡邊、日本物理学会誌 68, 296 (2013)
- [3] Y. Idomura, M. Ida, T. Kano, N. Aiba, and S. Tokuda, Comput. Phys. Commun. 179, 391 (2008).
- [4] T. H. Watanabe and H. Sugama, Nucl. Fusion 46, 24 (2006).
- [5] N. Nunami, T.-H. Watanabe, H. Sugama, and K. Tanaka, Phys. Plasmas 19, 042504 (2012).
- [6] S. Jolliet and Y. Idomura, Nucl. Fusion 52, 023026 (2012).
- [7] <http://www.nu-fuse.com/>
- [8] 核融合エネルギーフォーラム ITER・BA 技術推進委員会報告書「核融合エネルギー実用化に向けたロードマップと技術戦略」(2008 年 6 月、<http://www.naka.jaea.go.jp/fusion-energy-forum/>)
- [9] Y. Idomura, M. Nakata, S. Yamada, M. Machida, T. Imamura, T.-H. Watanabe, M. Nunami, H. Inoue, S. Tsutsumi, I. Miyoshi, and N. Shida, Int. J. HPC Appl. in press.

4.4.5 電磁界解析

(1) 現在行われている課題

高性能ハイエンドサーバなどのデジタル機器に使用されるプリント基板、マルチチップモジュール、システムインパッケージなどの動作周波数の高速化や LSI (Large Scale Integration) の低電圧駆動化にともない、信号伝送ノイズ、電源グランドバウンスノイズと同時スイッチングノイズなどのさまざまなノイズ源に起因する EMI (Electromagnetic Interference) 、ESD (Electrostatic Discharge) やアンテナ受信感度劣化への対策が困難になってきている。

電磁界解析は装置設計の上流段階で、以上のようなノイズ問題を可視化することにより、必要に応じて設計改善を実施して、ノイズ問題のない装置設計を実現することを目的に利用されてきた。電磁界解析の代表的な計算手法には、有限要素法、モーメント法、FDTD (Finite-Difference Time-Domain) 法があり、各種の派生的な手法を含めて数多くの電磁界解析システムが開発されている。有限要素法では HFSS (米国製) 、モーメント法では ACCUFIELD (日本製) 、FDTD 法では MW-STUDIO (ドイツ製) 、Poynting (日本製) などがよく知られており、電磁界解析の分野では、日本製システムは機能、性能ともにトップレベルにある。

以前の計算機能力が非力な時代においては、電磁界解析の適用可能領域は、機器内のプリント基板上の配線パターンやコネクタ、アンテナ単体の電気的特性を調査する程度の部分的なものであったため、設計段階で装置全体でのノイズ問題を的確に把握してノイズ問題のない装置設計を実現することは困難であった。その後の計算機技術の進歩により、PC クラスタ、GPGPU や「京」に代表されるスーパーコンピュータによる大規模で高速な解析環境がクラウド技術との組み合わせなどにより、広く一般に利用可能になってきている。この状況を受けて、大規模な並列解析環境において、その並列度を増加させた場合に並列度にほぼ比例して計算速度が向上する FDTD 法を採用した電磁界解析システムが、非常に効果的であることが明確になってきた。特に、Poynting では、PC サーバで数百台規模の計算能力をクラウド上で実現することにより、ノート PC 等の装置全体をモデル化した ESD 解析において、2.3 億メッシュ規模の解析を約 9 時間で実行したとの報告が富士通から行われている。このような解析を「京」などのノード間を高速ネットワークで接続された環境で実行することにより、ハイエンドサーバやスーパーコンピュータなどの大規模な機器においても機器全体の電磁界解析が可能になった[1-3]。

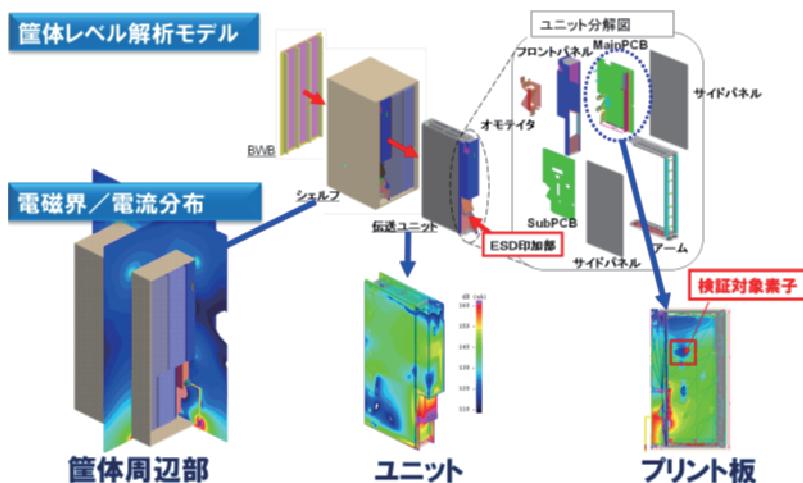


図 4.4.5-1 機器全体の電磁界場による ESD ノイズ伝搬の可視化

図 4.4.5-1 は大規模なデジタル処理装置における、人体からの ESD ノイズの伝搬を解析して可視化した事例である。このような解析により、従来は困難であった装置の設計段階での的確な ESD ノイズ対策が可能になった。

しかし、今後、高密度な 3 次元実装技術がコンシューマ製品からハイエンドサーバ、スーパーコンピュータまで幅広く適用されると、動作周波数の高速化とあいまって、解析精度の向上のためには大幅な解析規模の拡大が必要となる。最近の約 2 億メッシュ規模から約 5000 億メッシュ規模まで約 2000 倍の解析規模の拡大が必要と考えられる一方、解析時間を 1/10 の約 1 時間に短縮することが期待されている。なお、メッシュ規模が増加することから、解析モデルと電磁界マップデータもまた大幅に増加し、ユーザインターフェースや電磁界マップの応答と表示速度についても 1000 倍以上の高速化が必要になる。また、特にエクサコンピュータ以降のスーパーコンピュータでは実装密度、消費電流の増大や高速化が飛躍的に進展することが予想される。そのような装置を対象に、LSI 電流が高速にスイッチングすることにもう電源グランドバウンス、EMI 他の各種のノイズ問題を高精度に解析するには、LSI 内部動作を忠実に再現した解析が必要となる。

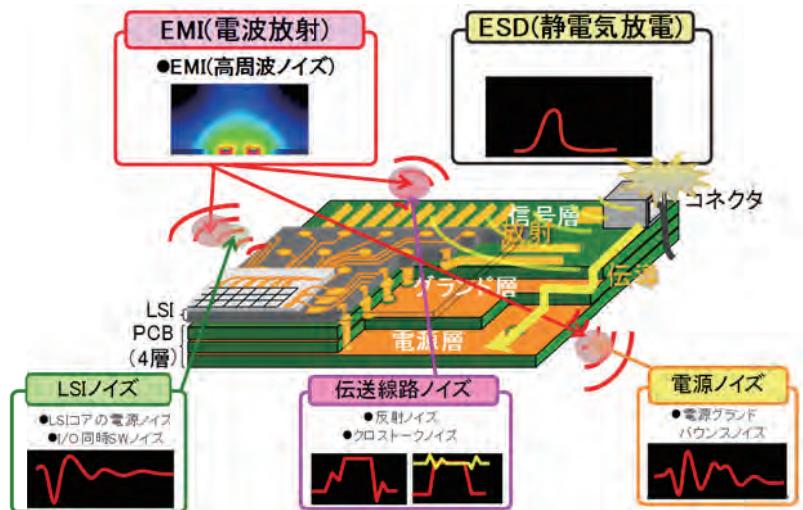


図 4.4.5-2 電磁界解析における LSI 内部モデルの必要性

図 4.4.5-2 に示すように LSI 動作状態が伝送線路ノイズ、電源ノイズ及び EMI ノイズの根本の原因となる。また外部からの ESD ノイズの LSI 動作への影響の度合いは LSI 内部回路の特性によって大きく変動する。このため、これらのノイズ問題に対する的確な対策を電磁界解析を利用して実施するにあたっては、LSI 内部動作の解析モデルへの組み込みが必要となる。

(2) 長期的目標

解析の大規模化と高精度化を今後更に推進するにあたって、最も有望な解析手法は FDTD 法またはこの派生的な手法と考えられる。したがって、今後も FDTD 法を中心とした計算手法を中心技術開発を推進すべきである。

前項で述べたように、解析規模を 2000 倍向上させる一方で解析時間を短縮するためには、計算機能力の向上に期待するところが大きい。しかし、エクサスケールコンピュータが実現さ

れたとしても、2000倍の大規模化に対応するのは困難と考えられるため、電磁界解析システム自体の高速化についても検討する必要がある。

FDTD法は陽解法による差分法であることから、クーランの判定条件に律速されてしまう欠点がある。クーランの判定条件とは、最小メッシュサイズの電磁波の伝搬時間よりも解析のタイムステップを短くしないと計算が不安定になるというものである。プリント基板の配線パターンの厚みは一般的なプリント基板の場合で最薄 $17\mu\text{m}$ 程度である。このメッシュ部分の電磁波の伝搬時間は 10^{-15}秒 オーダとなるため、タイムステップが小さくなり解析時間増大の大きな原因となる。今後、TSV(Through Silicon Via)、HMC(Hybrid Memory Cube)他の微細で高密度な実装技術においては更にメッシュサイズが縮小し、解析速度が低下することになる。したがって、クーランの判定条件に律速されない新手法の研究開発が必要となる。

連立方程式を解く陰解法による計算手法であれば、クーランの判定条件に律速されないため、メッシュが微細な場合でもタイムステップをある程度大きくしても安定に計算できることは以前から知られているが、陰解法による計算手法は並列度に対して解析速度の向上が大きくは期待できないため、メッシュ規模の大きな解析には適さないという問題がある。

(3) 次世代に解決するべき課題

高密度で高速な3次元実装技術を適用した装置のノイズ解析では、電磁界解析システムの高速化に加えて、次世代にはLSI動作の忠実な解析が必要となる。LSI動作の忠実なモデル化と解析を実現する計算手法として、LSI部分をSPICEモデルでモデル化して回路シミュレーションで解析し、同時にプリント基板や筐体部分を電磁界解析して、回路シミュレーションと電磁界解析を時間領域で連成させるという方法により、高精度な解析を実現できることが以前から知られている。この計算方法で、時間領域で連成させるためには回路シミュレーション部分とFDTD法部分のタイムステップを一致させる必要があるが、FDTD法のタイムステップが回路シミュレーションで精度的に必要な最大のタイムステップの $1/100\sim1/1000$ ときわめて小さくなってしまうため、回路シミュレーションの解析速度が全体の解析速度を律速してしまうという問題がある。

長期的な課題の解決に向けたマイルストーンは大きく以下の二つと考えられる。

1) 回路シミュレーションと電磁界解析の時間領域連成の高速化

現状よりも高速な回路シミュレーションと電磁界解析の時間領域連成技術の開発による高精度化の実現。

2) 動作周波数の高速化に対応した装置レベルの大規模解析の高速化

5000億メッシュの解析規模を約1時間で解析可能とする新しい電磁界解析手法の開発。解析手法の改善により高速化を実現。

(4) 課題を解決するために必要なアプリケーション群（要求性能）

最近、FDTD法の計算手法に部分的に陰解法を組み合わせることにより、クーランの判定条件による制約を緩和しようという試みが行われている。代表的なものに静岡大学で開発されたHIE-FDTD法[4]がある。この方法によれば、条件にもよるが従来のFDTD法に比べて $10\sim100$

倍程度の高速化が可能であることが示されている。今後はこのような手法を含めた、新しい解析手法の研究に注力していく必要がある。

また、回路シミュレータと電磁界解析の時間領域における連成解析において、回路シミュレータの解析速度が全体の解析速度を律速してしまう問題を解決し得る方法は現時点ではまだ見出されてないが、前述の陰解法と組み合せる等の新手法の開発によるブレークスルーが期待される。

新解析手法の登場を待たねば基本要求性能を明確に述べるのは困難であるが、新解析手法の開発による性能向上が 10 倍であると仮定し、かつ現状の FDTD 法における計算手法が新解析手法の中心を占めると仮定して要求性能を見積もることとする。この場合、新解析手法が CPU 性能に要求するメモリバンド幅比は 1 度で十分であり、メモリバンド幅が計算速度をほぼ決定すると考えてよい。長期目標の 5000 億メッシュ規模の解析を約 1 時間で実行するためには、並列計算時のメモリバンド幅 2PB/s、メモリー量 52TB 程度が必要となる。

| 課題 | 要求性能 (PFLOPS) | 要求メモリ バンド幅 (PB/s) | メモリ量/ ケース (PB) | ストレージ 量/ケース (PB) | 計算時間/ ケース (hour) | ケース数 | 総演算量 (EFLOP) | 概要と計算手法 | 問題規模 | 備考 |
|---------------|------------------|-------------------------|-------------------|------------------------|------------------------|------|-----------------|------------|--------------|----|
| サーバの装置全体レベル解析 | 2 | 2 | 0.05 | 0.1 | 1 | 20 | 140 | 陽解法と陰解法の混合 | 10^{12} 格子 | |

※本見積もりは未だ精査中である。より精度の高い数値は Web 版 (→「1.2. 本文書の構成」) を参照のこと。

(5) 他分野との連携

電磁界解析と熱流体および構造解析との連携は、高速かつ高密度な 3 次元実装構造を持つ機器開発では今後必須となると考えられる。これは、機器の発熱により、機器を構成するプリント基板や筐体が変形し、機器から放射される有害な電磁波の大きさが変化することや、逆に電源部のスイッチング動作により放射される電磁波が周辺の金属部分に誘導電流を発生させることによる発熱の影響等が無視できなくなるからである。よって、電磁界解析と熱流体および構造解析を同時進行的に実施して、このような現象を精度よく解くための仕組みが必要になる。メッシュレベルで電磁界解析と熱流体および構造解析を実施するために必要なすべての方程式や演算方法を連立あるいは同時進行的に解くことはきわめて困難であり、現状では現実解にはならないし、将来的にも解決は困難と考えられる。一方、各種の解析間で計算結果を相互にスムーズにやり取りさせることを繰り返すことにより、漸近的に解析を実施するアプローチ是有効であると考えられる。しかしながら、このような漸近的な手法による解析では、反復的な解析が必要になるため、総計算量は大幅に増大することが予想される。よって、エクサスケールコンピュータに要求される計算能力を見極めるにあたって、各種の解析を組み合わせた漸近的な手法について検討を行うことが必要と考えられる。

(6) 公的な意見交換とそのサマリー

前述の長期的な課題の解決に向けた二つのマイルストーンのうち、回路シミュレーションと電磁界解析の時間領域における連成解析の必要性については、2008年1月17日に開催された電子情報通信学会 電子部品材料研究会（CPM）のパネルディスカッションにおいて問題提起がなされており、現在ではその重要性について一般によく認識されている。

また、機器レベルの大規模解析については、2013年3月6日開催の電子情報技術産業協会 EDA 標準技術専門委員会が主催の LPB フォーラムにおいて、LSI、パッケージとプリント基板からなる機器レベルの大規模な解析を高精度に実施することの必要性が議論されている。

(7) ロードマップ

| 年代 課題 | 2012～ | 2014～ | 2016～ | 2018～ | 2020～ | 2022～ |
|------------|-------|---|-------|-------|-------|-------|
| 時間領域連成技術研究 | ← | 回路シミュレーションと電磁界解析の時間領域連成の高速化 *現状よりも高速な回路シミュレーションと電磁界解析の時間領域連成技術の開発による高精度化の実現 | → | | | |
| 大規模解析高速化研究 | ← | 動作周波数の高速化に対応した装置レベルの大規模解析の高速化 *5000億メッシュの解析規模を約1時間で解析可能とする新しい電磁界解析手法の開発。解析手法の改善により高速化を実現 | → | | | |

図 4.4.5-3 電磁界解析ロードマップ

参考文献

- [1] 佐藤敏郎：“当社における EMC 対策設計の取り組み”，月刊 EMC, No.292, pp.21-28(2012.8)
- [2] 佐相秀幸：“マルチ・フィジクス統合設計のための高効率電磁界シミュレーション解析技術”，電子情報通信学会論文誌 C, Vol.J94-C, No.8, p.210-222, 2011
- [3] 斎藤精一：“エンジニアリングクラウド開発環境”，FUJITSU, Vol.62, No.3, p.288-296(2011).
- [4] M. Unno and H. Asai, "High-Speed Electromagnetic Field Simulation by HIE-FDTD Method with GPGPU," in Proc. IEEE EDAPS 2010, Singapore, Dec. 2010.

4.4.6 可視化・データ処理

(1) 現在行われている課題

ペタスケールからエクサスケールの計算機環境が生み出すデータから、科学的な発見や物事の本質を引き出し、創造や改善につなげ、研究の成果を社会に還元することは非常に重要である。しかしながら、スペコン上でシミュレーションを実行するだけでは科学的な成果は得られない。生成されたデータを可視化・分析し、そこから意味のある情報を抽出し、人が理解できる形式に昇華させ、利用可能な情報となって、初めてシミュレーションの意義がある。この点で、可視化とデータ分析は、HPCを支える重要な基盤技術として位置づけられる。

可視化研究は、米国では90年代から政府の研究費が継続的に投資され、研究をリードする拠点が多数形成されてきた[1]。特に、大規模データに対する研究開発は、並列レンダリング処理、並列可視化法の研究など、米国が中心となっている。また、研究成果とともにオープンソースソフトウェアも数多く提供されている。米国エネルギー省が開発した可視化アプリとして、VisIt[2]、ParaView[3]の二つが存在するが、両方ともそれ以前に同じく政府系ファンドで開発された可視化ツールキット VTK[4]を用いて構築されている。可視化研究については、IEEE Visualization[5]、SuperComputing[6]、Siggraph[7]、EuroGraphics[8]などの学会で議論されている。

大規模なデータ可視化に関する具体的な研究項目としては、大規模並列可視化システムの構築技術、3次元データに対してレイトレーシングやボリュームレンダリングなどの画像（図4.4.6-1参照）を生成するレンダリング技術[9]、生成された画像を高精細ディスプレイや立体視などに投影する表示デバイス技術[10]、時間とともに変化する非定常データ可視化[11]、相互に関連する多くの変数に対する多変量データ可視化[12]、可視化と分析を統合する Visual Analytic 技術[13]、計算と同時に可視化やデータ処理をファイル出力なしで行う In situ 技術[14]、データベースと統合した QueryDriven 可視化技術[15]、可視化プロセス自体の再現やマイニングを対象とする Provenance 技術[16]など多岐にわたる研究が展開されている。

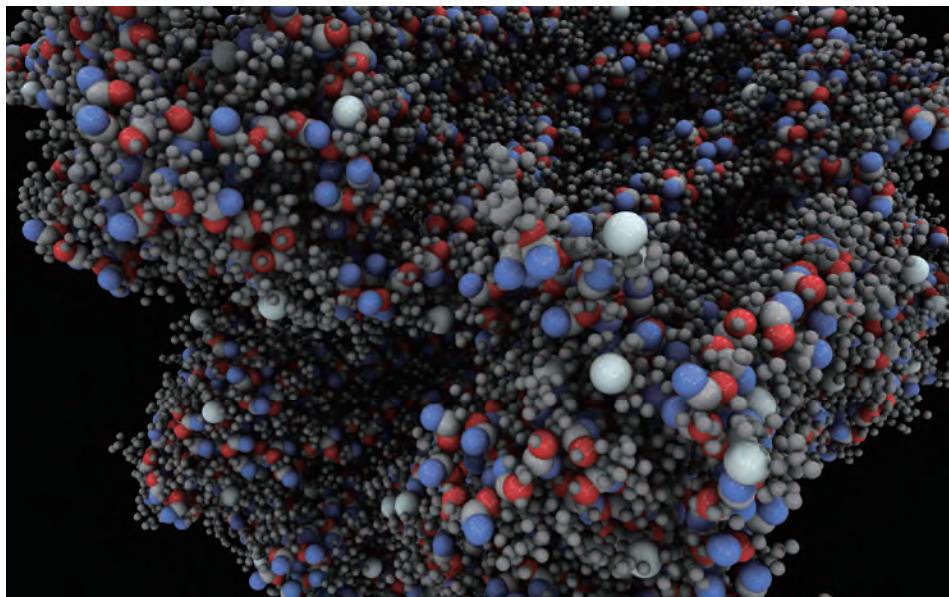


図 4.4.6-1 分子シミュレーションの並列レイトレーシング画像

データ：横浜市立大学大学院生命医科学研究科

池口満徳 博士/ 山根 努 研究員

可視化：理化学研究所計算科学研究機構 可視化技術研究チーム

一方、国内の可視化研究の状況として、可視化とデータ処理のコミュニティの規模が小さく連携は比較的疎であるが、各々主要な領域に特化した研究が行われている。例えば、大規模データの総括的な画像生成に適したポイントベースのボリュームレンダリング法の開発[17]、大規模データのデータレイアウトに適した階層的な表示方法の研究[18]、ボリュームデータの位相骨格に着目した表現[19]やテンソル場の解析[20]、大規模な時系列データの着目点のビジュアル化[21]、大規模な海洋シミュレーションの多変量データの効果的な可視化法[22]、ビジュアルデータマイニング[23]の研究が進められている。表示系の研究としては、タイルドディスプレイでの可視化[24]、没入型環境での立体視研究[25]、大規模粒子の可視化技術[26]の研究がある。また、可視化のシステム化研究および開発としては、RVSLIB[27]、日本原子力研究開発機構での非定常可視化システム[28]、海洋研究開発機構におけるCAVE VR[29]、理化学研究所で開発中のLSVシステム[30]、国立天文台のZindaiji3[26]などの可視化アプリケーションなどがある。

2011年からエクサスケールに向けた可視化研究のロードマップが検討されており、エクサスケールの可視化とデータ処理に向けて、ワークショップの開催、共通コンポーネントの特定、開発計画の策定、開発システムの適用データ規模を段階的に拡大する方針でシステム構築を進める計画が記載されている[31]。

(2) 長期的目標

大規模なシミュレーションに加え、時間とともに変化するデータ、相互に関連性を持つ多変数の分析、センサーから得られるリアルタイムデータなど、いわゆるビッグデータの中から有用な情報を抜き出し、科学的発見や設計に役立てることが可視化とデータ処理の目標である。

データの規模や複雑性が高まる中で、迅速な処理、優れたデータ処理アルゴリズムの開発などに加え、さまざまな分析・可視化プロセス中から適切な手法を選択適用するなど、高度な使い方により生産性を高める取り組みにより、ヒトの理解や発見を促進することが望まれる。

ペタスケールのデータに対しては、現状の可視化・分析技術を改善することにより対応可能なものもあり、中期的な視点としては有効である。しかしながら、エクサスケールのデータに対してはデータ量の巨大さから、別の手法が必要となる。また、複雑な階層構造を持つ新しいアーキテクチャのハード機能を生かせる新しい可視化・分析アルゴリズムなど、エクサスケールで有効な新しい可視化手法の研究も必要である。この過程においては、アプリ分野とのコデザインが有効である。

研究開発の継続性の点からは、まず、エクサスケールでも適用可能な可視化フレームワークの骨格を構築し、既存手法を機能として組み込み、ペタスケールでの可視化サービスを提供する。それから、エクサスケールでの新しい可視化手法の研究を行い、その成果を可視化フレームワークへ統合していくというアプローチが採用されると思われる。

個別の可視化技術については、計算により生成された大規模なデータの移動やファイル入出力が不要な *In situ* 可視化や可視化と分析を統合した visual analyticなどの技術が取り込まれていく。インタラクティブ性は重要であるが、エクサスケールにおいては、現状の技術の外挿では実現が難しいため、領域毎に特化したメタデータ化（データの特徴を表現する抽象的なデータ）によるデータ削減のアプローチなどと併用することになるだろう。また、データ量が膨大になり、人間が認識できる量を超えた場合には、プロセスマイニング（可視化方法やデータ処理方法自体の探索）による後処理の効率化や自動化も有効である。

可視化して抽出した情報をユーザにわかりやすく提示するという観点からは、ヒトが持つ複数のコミュニケーションインターフェースを有効に活用して情報を提示する技術も有効と考えられ、認知心理学などの観点も必要になる。このように、基本的な技術を積み上げてシステム化し、新しい技術を生み出していくアプローチが採用されるであろう。

可視化・データ分析分野が他の研究分野と大きく異なる点は、データ構造と手法を軸として、アプリケーション分野を横串で貫き展開できる点である。また、研究成果を基にソフトウェアを開発しサービスにつなげることが重要であり、研究拠点を設け、集中して推進していくべきである。

エクサスケールで役立つデータ可視化と分析には、多くの革新的な技術的なブレークスルーが必要で、かなりの開発とコストが予想される。したがって、継続的なファンディングが必要であり、開発資金面へ配慮しておくことが成功の鍵の一つとなる。また、研究開発を通して、コミュニティの活性化、人材育成、産業分野への展開などが期待される。

可視化・データ分析処理の要素技術を研究する分野には、応用数学、情報科学、アプリケーション、計算機科学などがある。可視化・データ分析の研究開発は、このような幅広い分野の教育や研究の機会につながる。また、研究開発された技術は、直接産業分野へ波及し、ソフトウェアの製品化にも貢献し得る。

(3) ターゲットとする研究対象

可視化とデータ分析の研究は、方法論の研究成果を具体的なソフトウェアとして整備し、ユーザに対して可視化サービスを提供し、実用的な成果を創出するシナリオを考慮すべきである。この点から、可視化システムの開発とエクサ向けの可視化・分析技術の研究という両輪がある。

可視化システム開発については、ペタからエクサにわたり利用可能な可視化フレームワークの設計・開発が挙げられる（図 4.4.6-2 参照）。ここでは、可視化に関するさまざまなユーザ要求に応えられる設計が必要であり、可視化システムを使うアプリケーションユーザとのコデザインが望ましい。大規模なデータに対応するため、分散並列環境に対応したクライアントサーバ方式のリモート並列可視化システムの構築が必要である。要素技術として、大規模並列ファイルの入出力、レンダリング、画像重畠（各ノードで生成した部分画像を集約し 1 枚の画像にする処理）などの研究開発が必要である。

データ分析の基本システムは、大規模なデータに対してさまざまな分析メソッドを独立に適用し、得られた結果の集約処理を更に並列処理する MapReduce 型の枠組みを利用し、大規模データを効率的に処理するベースシステムを構築する。また、シミュレーションの後処理として、データベースの活用も考慮する必要がある。

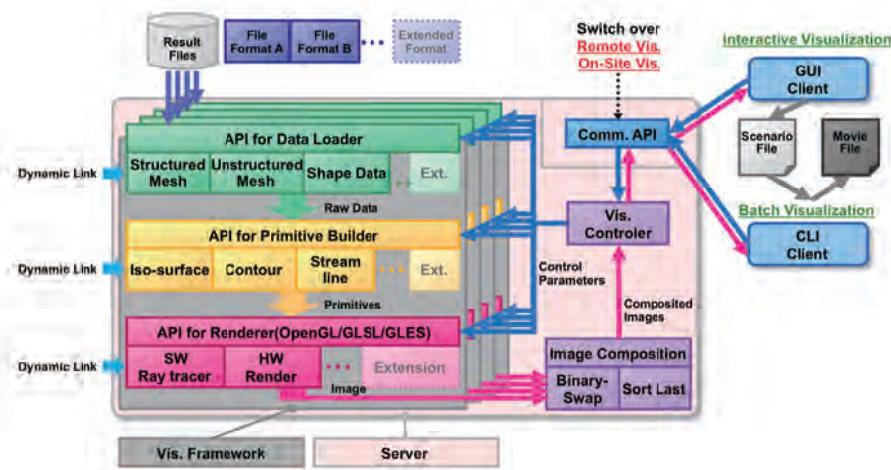


図 4.4.6-2 並列分散可視化システムの概念設計

可視化：理化学研究所計算科学研究機構 可視化技術研究チーム

<http://labs.aics.riken.jp/ono.html>

エクサスケール向けの可視化研究としては、可視化については In situ 可視化、特徴抽出などが研究対象となる。データ探査のためには、インタラクティブな可視化技術が重要で、データ

ストリーミング技術の応用が必須である。また、データ分析研究としては、開発したベースシステムを用いて、さまざまな分析を行う処理の研究がある。

データ表示技術としては、拡張現実や仮想現実の表示デバイス、超高解像度、没入型可視化環境、ホログラムなどが研究対象となる。

(4) 次世代に解決するべき課題

可視化・データ分析技術はさまざまな要素技術から構成される。このため、一概には言えないが、基本的な特徴として、下記の点が挙げられる。

(i) 大規模データの扱い

多数の大規模データファイルの管理、高速なファイルI/O技術。時系列のデータを扱う場合には、圧縮やリオーダリングなどの前処理も行う。

(ii) 並列データマネジメント・データ処理・スケジューリング技術

分散並列処理が必要なため、データ管理とスケジューリングアルゴリズムを用いる。

(iii) 並列レンダリング技術

大規模並列環境でのスケーラブルなレンダリングは、領域分割された担当空間のデータに対して画像を生成し、最終的に一つにまとめて表示する方法が基本的である。画像の生成過程では、レイトレーシングやボリュームレンダリングなどの個別の描画方法に最適な並列処理方法がある。

(iv) 並列データ重畠技術

分散環境でレンダリングした部分画像データを高速に重畠し、マスターノードに集約して、一枚の画像として生成する。binary-swap、binary-tree、direct sendなどの複数の重畠アルゴリズムを用いて、最適化する。

(v) エキスパートシステム構築フレームワーク

可視化とデータ分析のいわゆるポスト処理は、最終的にシミュレーションの結果から各領域の現象把握や設計に役立つ情報を抽出し、提示することが一つの目標である。これらの作業を効率化するため、特定領域の可視化・データ処理を行うための汎用エキスパートシステム構築フレームワークを整備する。

(5) 課題を解決するために必要なアプリケーション群（要求性能）

可視化は、大別して、計算と同時に行う In situ 可視化と計算で出力したファイルに対して行うファイルベース可視化がある。これらを単一の性能要求では記述できないため、それぞれの場合について必要性能を述べる。この場合、单一ノード性能は固定して考え、必要な帯域幅を見積もっている。

表 4.4.6-1 可視化要求性能

| | ファイルベース可視化 | In situ 可視化 |
|------------------------|--------------------|--------------------|
| 想定する演算性能 (ノード当たり) | 100TFLOPS | 100TFLOPS |
| ネットワークバンド幅 (ノード当たり) | 500GB/s | 2TB/s |
| メモリ容量 (ノード当たり) | 50GB | 100GB |
| メモリバンド幅 (ノード当たり) | 0.2TB/s | 20TB/s |
| ストレージ容量 | 各シミュレータが生成する最大容量×2 | 各シミュレータが生成する最大容量×2 |
| ストレージの帯域 | 0.1 PB/s | 0.01 PB/s |

インタラクティブな可視化にはグラフィクスハードウェアやアクセラレータがあると都合がよい。

In situ 可視化の場合は、組み込むアプリケーションと同程度の計算機性能が要求される。

(6) 他分野との連携

今後の大規模な計算機環境において重要な可視化技術となる In situ 可視化は、計算と同時にスケーラブルな可視化と分析を実施し、画像や統計情報などのメタデータを出力する技術である。In situ 可視化ツールの実装として、汎用的なライブラリとしてリンクする方法と解析領域に固有の分析コードを用いる方法がある。前者は、計算で利用するデータ構造との親和性が重要になる。一方、後者は、その処理機能のプログラム記述が必要になる。このように可視化技術は、分野横断的に切り出せる汎用的な技術と個々のアプリケーション分野に固有の手法とがある。分野毎の知識を使い効率的な手法を探る場合には、各分野と融合的に進める必要がある。

さらに、可視化は、アプリケーション分野だけに限らず、入力や表示デバイス技術などハードウェアとも密接に関連している。個別の計算手法には、行列演算や周波数分析などの数値ライブラリ、フレームワークなどの計算機科学分野との連携も必要となる。

(7) 公的な意見交換とそのサマリー

国内の可視化コミュニティは小規模で、適切な学会が存在しないため、個別のシミュレーション分野のアクティビティとなっている。このためグループミーティングや個別のディスカッションになっている。

公的な意見交換としては、2013 年の 6 月に開催される計算工学会において、可視化を含む大規模シミュレーションのシンポジウムが開催された。

準公的には、2012年10月に理化学研究所計算科学研究機構（AICS）可視化チームが3rd International Large-Scale Visualization Workshopを開催し、エクサスケールでの可視化環境についてのディスカッションを行った。参加者は、20名程度の有識者（神戸大、京都大、宇宙航空研究開発機構、AICSなど大規模データに取り組む機関が中心）で、ローレンスバークレイ国立研究所、Intelligent Light社、米国エネルギー省関連の海外機関からも参加があった。ここでは、大規模データ可視化の課題と今後の取り組みについて意見交換、研究協力を確認した。

(8) ロードマップ

可視化・データ処理分野のロードマップを図4.4.6-3に示す。

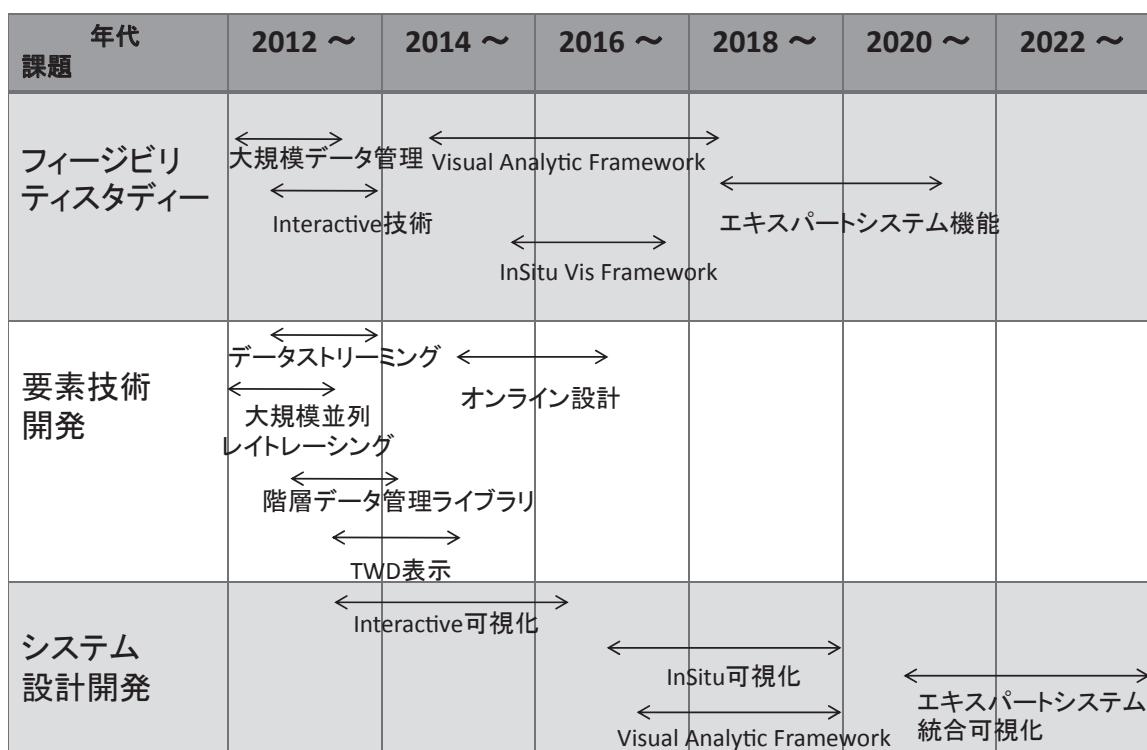


図4.4.6-3 可視化・データ処理分野のロードマップ

参考文献

- [1] McCormic, B., et al., Visualization in Scientific Computing, Computer Graphics, 21-6, 1987.
- [2] <https://wci.llnl.gov/codes/visit>
- [3] <http://www.paraview.org>
- [4] <http://www.vtk.org>
- [5] <http://visweek.org>
- [6] <http://www.supercomp.org>
- [7] <http://www.siggraph.org>
- [8] <http://www.eg.org>

- [9] Ma, K.-L., et al., Parallel volume rendering using binary-swap compositing, Computer Graphics and Applications, IEEE, vol.14, no.4, pp. 59-68, 1994.
- [10] Chao Li, et al., A survey of multi-projector tiled display wall construction, Multi-Agent Security and Survivability, 2004 IEEE First Symposium, pp. 452- 455, 2004.
- [11] Lum, E., et al., A hardware assisted scalable solution of interactive volume rendering of time-varying data, IEEE Transactions on Visualization and Computer Graphics 8, 3, pp. 286–301, 2006.
- [12] Sukharev, J., Correlation study of time-varying multivariate climate data sets, In Proc. IEEE Pacific Visualization, pp. 161–168, 2009.
- [13] Scholtz, J., Beyond Usability: Evaluation Aspects of Visual Analytic Environments, Visual Analytics Science And Technology, 2006 IEEE Symposium, pp.145-150, 2006.
- [14] Ma, K.-L., In Situ Visualization at Extreme Scale: Challenges and Opportunities, Computer Graphics and Applications, vol. 29, no. 6, pp. 14-19, 2009.
- [15] Stockinger, K., et al., Query-driven visualization of large data sets, In Proc. IEEE Visualization, pp. 167–174, 2005.
- [16] Silva, C. T., et al., Provenance for Visualizations: Reproducibility and Beyond, Computing in Science & Engineering, vol. 9, no. 5, pp. 82-89, 2007.
- [17] Sakamoto, N., et al., Visualization of Large-scale CFD Simulation Results Using Distributed Particle-Based Volume Rendering, International Journal of Emerging Multidisciplinary Fluid Sciences, Vol. 2, No. 2, pp. 73-86, 2010.
- [18] Itoh, T., et al., Hierarchical Data Visualization Using a Fast Rectangle-Packing Algorithm, IEEE Transactions on Visualization and Computer Graphics, Vol. 10, No. 3, pp. 302-313, 2004.
- [19] 竹島, 高橋, 藤代, 位相ボリューム骨格化アルゴリズムの改良, 情報処理学会論文誌, Vol. 47, No. 1, pp. 250-261, 2006.
- [20] Bi, C., Takahashi, S., and Fujishiro, I., Interpolation of 3D Diffusion Tensors by Locating Degenerate Lines, In Poster Proc. of IEEE Pacific Visualization 2011, pp. 9-10, March, 2011.
- [21] 宮村ほか, 時空間データの可視化, 可視化情報, Vol. 30, Suppl.1, pp. 269-272, 2010.
- [22] Matsuoka, D., et al., Visualization for High-Resolution Ocean General Circulation Model via Multi-Dimensional Transfer Function and Multivariate Analysis, International Conference for High Performance Computing, Networking, Storage and Analysis (SC12), November 10-16, 2012.
- [23] 白山, 知的可視化, 丸善, 2006.
- [24] 坂井ほか, 高精細タイルドディスプレイを用いた並列ボリュームレンダリングシステムの実装, 情報処理学会論文誌:コンピューティングシステム, Vol. 5, No. 3, pp. 124-136, 2012.
- [25] Kageyama, A., et al., Immersive Visualization in PI-CAVE, Proc. International Conference on Modeling and Simulation Technology (JSST 2011), pp. 286-290, 2011.
- [26] 武田, 大規模粒子シミュレーションデータの PC による可視化, 可視化情報, Vol. 32, No. 127, pp. 156-161, 2012.

- [27] 武井ほか, 大規模非定常数値シミュレーションのリアルタイム可視化 : 並列計算サーバによる可視化方式の実用化に向けて, 情報処理学会論文誌, ハイパフォーマンスコンピューティングシステム, Vol. 41(SIG_8(HPS_2)), pp. 107-118, 2000.
- [28] 村松ほか, 並列計算機上での流体解析のための実時間可視化システムの開発, 日本原子力研究所, JAERI-Data/Code 98-014, 1998.
- [29] Ohno, N. and Kageyama, A., Region-of-Interest Visualization by CAVE VR System with Automatic Control of Level-of-Detail, Computer Physics Communications, Vol. 181, Issue 4, pp. 720-725, 2010.
- [30] http://www.csrp.riken.jp/application_j.html
- [31] <http://hpci-aplfs.aics.riken.jp>

4.5 基礎物理

4.5.1 宇宙研究

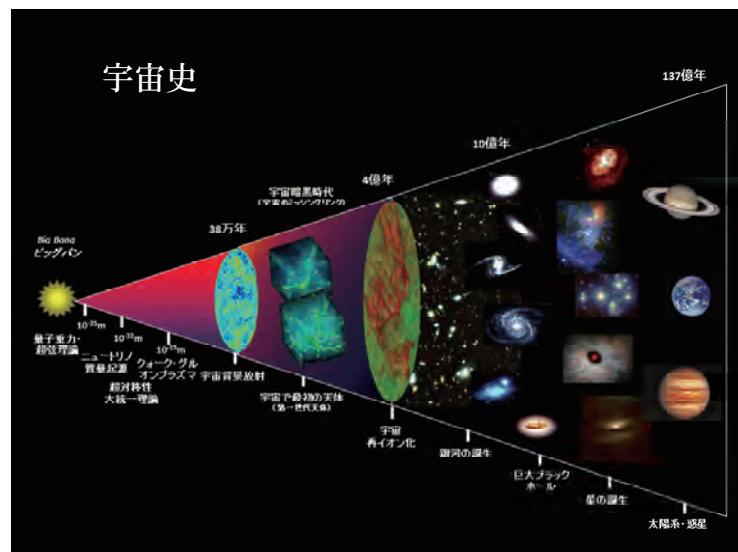
(1) 現在行われている課題

天文学・宇宙物理学は、宇宙の“過去・現在・未来”を探究することにより、(1) 宇宙観・自然観の醸成、(2) 新たな物理法則の発見、(3) 宇宙における生命存在の意味、(4) 人類の宇宙活動に大きな貢献をしてきた。宇宙研究は、20世紀までに築き上げられた礎の基、21世紀の新たなフロンティアの開拓に突き進んでいる。2009年に日本学術会議物理学委員会、天文学・宇宙物理学分科会によって「天文学・宇宙物理学の展望と長期計画」[1]が取りまとめられ、宇宙研究の進むべき方向とサイエンス・ビジョンが示された。この答申で、21世紀の宇宙研究における大型観測計画のマスタープランが示され、その中で数値シミュレーションは、大型観測計画と連動しますます重要な柱となることが強調されている。ここでは、宇宙研究分野の重要課題について、現在の取り組みとその社会的意義をまとめる。

(i) 宇宙史の探究

主な課題の背景と現状

20世紀は、相対性理論に基づく宇宙論の誕生に始まり、ダークエネルギーが支配する新たな宇宙像の確立を見た革新の世紀であった。この間、ビッグバン、ブラックホール、インフレーションといった新たな概念が誕生した。宇宙の成り立ちの探究においては、宇宙、素粒子、原子核の分野間連携が重要な役割を果たしてきた。原子核物理学と宇宙物理学の協働により、核反応による星の進化の概要が明



らかとなり、初期宇宙における軽元素合成のビッグバン理論が誕生した。更に、素粒子物理学と宇宙物理学から素粒子論的宇宙論という新たな融合分野が生まれ、初期宇宙のダークマター（暗黒物質）生成とダークマターが支配する宇宙の進化の基本的枠組みを確立した。これまで宇宙物理分野でノーベル物理学賞を受賞した、宇宙マイクロ波背景放射の発見、パルサー（回転中性子星）の発見、星の進化の理論、天体における原子核反応の研究、連星パルサーの発見、宇宙背景放射の異方性の発見、超新星からのニュートリノ検出、X線源としてのブラックホール天体の発見、ダークエネルギーによる宇宙の加速膨張の発見は、20世紀の宇宙物理学の発展史を表している。

1965 年にビッグバン宇宙の残光である宇宙背景放射が発見され、1990 年代に入り宇宙背景放射の精密観測によって、宇宙構造の種である密度ゆらぎが発見された。これは、現在の宇宙構造が重力相互作用によって作られたものであることを意味している。しかし、ダークマターとダークエネルギーが支配する宇宙における天体形成と構造形成は、多くが未解決のまとなっている。現在、我々が知る宇宙には、星・惑星や銀河、銀河集団といったさまざまな階層の構造が存在している。宇宙の密度ゆらぎから、宇宙構造がどのようにしてできたのかは、宇宙物理学の最重要課題の一つである。宇宙における最初の天体（第一世代天体）の誕生は、“宇宙暗黒時代”に起こったと考えられている。宇宙暗黒時代とは、宇宙の晴れ上がり期から、多くの星が誕生して星が放つ紫外線によって宇宙が再び電離する（宇宙再電離）までを指す。その後の銀河の誕生と進化は、再電離した宇宙の中で進行することになる。銀河が誕生すると、その中の重い星は超新星爆発を起こし、重元素をまき散らす。重元素を含んだガスからは、新たな星が誕生し、星形成の輪廻転生を繰り返す。また、銀河中心には巨大なブラックホールが誕生すると考えられており、ブラックホール誕生期に放つ強力な光は、銀河と宇宙全体の進化に甚大な影響をもたらす。しかし、巨大ブラックホールの起源はまだ解明されていない。また、近年、太陽系外に 900 個を超える惑星が発見されている。その中には、地球に近い環境を持ちうる惑星（ハビタブル・プラネット）も見つかっており、生命が誕生している期待ももたれている。このような宇宙の諸階層の天体の誕生と進化の研究は、さまざまな波長帯の観測と理論計算とが密接に結びついて大きな発展を遂げてきた。惑星の形成は、星の誕生とともに宇宙史の文脈の中で位置づけられるものであるが、宇宙における生命誕生を探究する宇宙生物学とも深く関係するため、(iii)で記述することにする。

星形成、銀河形成の研究において重要な計算は、流体力学計算である。天体形成過程の流体力学はいわゆる希薄なガスの流体であり、圧縮性流体として扱われる。そこでは、超音速流によって生じる衝撃波や低い粘性によって生じる乱流などが重要な働きをする。これらを、数値流体計算法によって扱う。数値流体計算法は、格子に基づく方法や、流体粒子による方法 (SPH 法 : Smoothed Particle Hydrodynamics 法) が用いられる。銀河形成の研究では、更にダークマターパーティクルや星の力学を、重力を及ぼす質点として扱うことになる。これらは N 体計算法によって扱われ、流体力学と同時に解かれる。また、星形成やブラックホール現象などでは磁場が重要な働きをする場合があり、磁場と流体を組み合わせた磁気流体力学で扱われている。更に、近年では輻射場の方程式を同時に解く輻射流体力学や輻射磁気流体力学計算が行われるようになってきている。宇宙において、エネルギー輸送過程として重要なのは輻射（放射）である。輻射は厳密には輻射輸送方程式によって扱う必要がある。輻射輸送方程式は、空間 3 次元、方向 2 次元、振動数 1 次元の計 6 次元の方程式である。よって、この取り扱いは、宇宙物理の計算の中でも高い計算コストのかかるものである。このため、輻射場のモーメントを 0 次で近似する拡散近似や 1 次で近似する M1 法などが用いられ、これと流体力学を結合した計算が行われている。

社会的意義

ビッグバンやブラックホールという概念は、数十年にわたる学術的論争を経て確立したものであるが、その言葉は、今や子供から大人まで誰もが知るものとなっている。これらは、科学

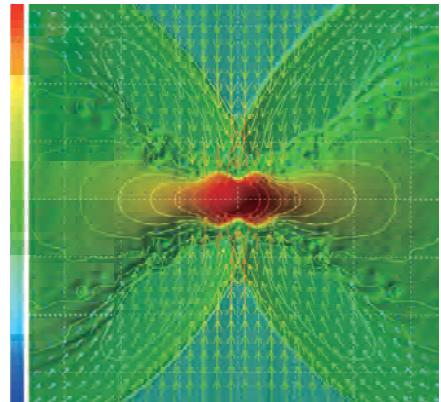
への興味をかき立てる原動力になっている。宇宙史は、宇宙がたどってきた歴史を研究するものであるが、考古学と決定的に異なるのは、宇宙研究では過去を直接見ることができるという点である。遠くから届いた光は過去の情報を教えてくれる。現在の宇宙年齢は137億年であるが、宇宙背景放射の観測により、宇宙誕生から38万年の宇宙の情報がわかり、遠方銀河と巨大ブラックホールの観測から数億年の宇宙の情報が得られる。よって、宇宙史の計算は、観測と直接比較することで実証することが可能である。こうして築き上げられた宇宙史は、人類の自然観の醸成に貢献し、貴重な知的財産となる。

(ii) 新たな物理の探究

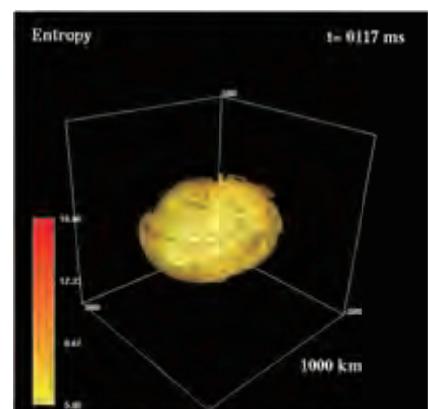
主な課題の背景と現状

ガンマ線バーストは、太陽が100億年かけて放出する輻射エネルギーの10倍以上のエネルギーをわずか数秒から数十秒でガンマ線として放出する現象である。ガンマ線バースト時のエネルギー密度は、宇宙誕生から 10^{-3} 秒後のビッグバン元素合成期に匹敵し、宇宙で最も激しい現象である。1967年の発見以来、ガンマ線バーストは宇宙物理学における最大の謎の一つとなってきた。ガンマ線バーストは、現在人類が認識している自然界の4つの力（重力相互作用、電磁相互作用、強い力、弱い力）すべて関わる天体现象である。よって、ガンマ線バーストは自然法則の重要な実験室となる。そして、その研究は新たな物理の探究につながる。ガンマ線バーストは、ブラックホールを生みだすことが予想されており、一般相対性理論を数値的に解く“数値相対論”が重要な研究手段となる。これに加えて、電子・陽電子対消滅や、ニュートリノ輸送、磁気回転不安定による対流や乱流現象などの物理過程を扱う必要がある。現在、これらの物理過程を入れた3次元数値相対論の計算が行われている。

超新星は、大質量星の進化の終末に起こる大爆発である。特に重力崩壊型超新星爆発は、ガンマ線バースト同様、4つの相互作用が関わる高エネルギー現象であり、いまだにそのメカニズムは解明されていない。超新星は、ニュートリノ天文学や、重力波天文学の重要な研究対象でもある。超新星の爆発メカニズムの解明において重要なのは、ニュートリノによるエネルギー輸送と、流体的な不安定性である。陽子が電子を吸収して中性子化する際に発生するニュートリノは、星の重力崩壊によって生じた衝撃波を失速することなく星の外層まで伝播させるエネルギー供給源と考えられている。このメカニズムは球対称計算ではうまく働くことがこれまでの研究で明らかとなり、多次元性を考えた相対論的流体計算が必要になっている。多次元効果とし



ガンマ線バーストの3次元数値
相対論シミュレーション
(関口, 柴田 et al. 2012年)



超新星爆発の3次元流体
シミュレーション
(滝脇 et al. 2013年)

て注目されているのは、定在降着衝撃波不安定（SASI : Standing Accretion Shock Instability）と対流であり、この不安定性とニュートリノによるエネルギー供給がカップルして爆発を起こす可能性が探求されている。

超高エネルギー宇宙線は、長年の謎となっている宇宙現象の一つである。 10^{15}eV までのエネルギーの宇宙線は我々の銀河系内の超新星爆発衝撃波でつくられていると考えられているが、その具体的な加速メカニズムは未だに解決していない。更に、 10^{20}eV を超える超高エネルギー宇宙線が見つかっており、メカニズムはおろか発生場所もわかつていない。超高エネルギー宇宙線のエネルギーは、素粒子の大統一理論のエネルギーに相当する。これらの高エネルギー粒子の起源は高エネルギー天体と密接に関連すると考えられている。この問題では、プラズマ粒子の運動を有限の広がりを持った超粒子としてラグランジュ的に扱い、電磁場をオイラー的に扱う電磁プラズマ粒子法（Particle-in-Cell 法）が用いられている。

更に、宇宙史の探究に避けて通れないダークマター、ダークエネルギーの問題は、依然として未解決の問題である。宇宙構造形成の標準理論で仮定している冷たいダークマターは、超対称性粒子などの素粒子であると考えられているが、実験的には未発見である。数値計算では、ダークマターを重力相互作用のみが働く超粒子として扱ったN体計算が行われる。最新の 10^{12} 粒子を用いた計算では、冷たいダークマターによって宇宙構造が作られたとすると、地球サイズのダークマターの塊が無数に存在することが予言されている。

社会的意義

物理学の基本法則の探究は、短期的な社会貢献が評価しづらい側面があるが、長期的に見れば、人間生活に大きな貢献をする可能性を持っている。この節のテーマは、一般相対性理論の検証に関わっている。一般相対性理論は、発表当時は宇宙の現象においてのみ重要な理論であり、我々の生活には無縁のものと考えられていた。しかしながら、科学技術精度が高まった今日、地球重力場においても、一般相対論重力の効果が顕わになっている。例えば GPS は、高度約 2 万 km を周回する 4 つの衛星によって機能しているが、GPS 衛星では一般相対論の効果によって地上よりも 1 日 45 マイクロ秒早く時間が進む。この一般相対論的な時間の補正をしないと、位置情報は 1 日で 11 km もの誤差を生じてしまう。宇宙の基礎研究が長期的に見て、人間生活に大きな貢献をすることは今後も期待できることである。

(iii) 惑星形成と宇宙生物学の探究

主な課題の背景と現状

太陽系の惑星の起源は、大きさ $0.1\sim1$ ミクロン程度の宇宙ダストであったと考えられている。宇宙ダストは、炭素、シリコン、酸素などの重元素が固化したものである。これらの重元素は、太陽系が形成される前に起った大質量星の超新星爆発によって放出されたものである。宇宙ダストは衝突・合体を繰り返して大きくなり小隕石をつくる。そこから大きさ 1km 程度の微惑星が生まれる。そして、微惑星の衝突・合体によって火星ほどの大きさの原始惑星が生まれ、現在の惑星の誕生に至ったと考えられている。太陽系の年齢は 46 億年であるが、ダスト集積のプロセスは、数億年で進むことが必要である。1m 程度の小隕石が形成されたとしても、太陽

からの輻射による効果（ポインティングング・ロバートソン効果）によって、数億年で太陽に落下してしまい微惑星をつくることができないからである。

わが国的小惑星探査機「はやぶさ」は、小惑星イトカワから微粒子サンプルを地球に持ち帰るという偉業を成し遂げた。その後、イトカワの微粒子サンプルの放射光X線回折分析により、鉱物組成が明らかにされた。そこからわかったことは、イトカワが誕生する前に直径20km程度の小惑星があり、大



ハビタブルプラネット（第2の地球）

Kepler/NASA

きな衝突現象によって粉々になり、その破片が再集積してイトカワとなったということである。イトカワは、500m大の微惑星である。ダストから隕石、隕石から微惑星への集積過程は、多粒子系の重力相互作用の問題であり、高精度のN体計算が行われている。

現在、ケプラー衛星（NASA）等により、太陽系外に900個を超える惑星系が発見されている。なかには、太陽系の惑星分布とは大きく異なる惑星系が見つかっている。その中で、地球型惑星を太陽系外に探す試みが進められており、地球質量の2倍ほどの惑星も見つかってきていている。研究のフロンティアは、更に生命を育むことのできる惑星（ハビタブルプラネット）の探査へと進んでいる。これは、宇宙生物学（アストロ・バイオロジー）の研究とともに発展している。

宇宙生物学の研究として、生命の宇宙起源説がある。生命体の基本分子にアミノ酸があるが、実験室でアミノ酸を作成すると、左巻き（L型）と右巻き（D型）が同量生成される。しかし、地球上の生命のアミノ酸を調べるとほとんどL型しか使われていない。これを、鏡像異性体過剰という。鏡像異性体過剰は、19世紀のパストール以来100年以上にわたって謎になっている。鏡像異性体の異なるものが体内に取り込まれたときの副作用は、サリドマイド児の悲劇に象徴されている。地球上の生命体はなぜL型アミノ酸しか使わないのか、宇宙生物学ではその起源が宇宙空間にあると考えている。1969年、オーストラリアのマーチソン村に隕石が落下し、その隕石からアミノ酸が検出された。そして、わずかではあるが鏡像異性体過剰が発見されたのである。2010年には、超高温の隕石からアミノ酸が発見され、隕石のアミノ酸は地球に大気圏通過の際に変成することなく落下することがわかった。発見された鏡像異性体過剰はわずかなものであるが、実験をすると鏡像異性体過剰は自己触媒反応により急速に増大することがわかつてき。よって、アミノ酸の鏡像異性体過剰が宇宙空間で起こり隕石を通じて地球に運ばれ、それが地上で急速に増幅した可能性がある。また、実験室で円偏光の光を当てると鏡像異性体過剰が引き起こされること（光不斉化反応）がわかつてき。近年になって、星形成領域で円偏光波が実際に発見された。よって、原始惑星系の近くで大質量星が誕生したとすれば、太陽系内でアミノ酸の鏡像異性体過剰が起こった可能性がある。現在のところ宇宙空間ではアミノ酸前駆体しか観測されていないが、将来アミノ酸そのものが観測される期待もある。現在、宇宙空間で円偏光波によるアミノ酸の鏡像異性体過剰の第一原理量子力学計算が行われており、

電子の励起状態を時間依存密度汎関数法（TDDFT）により計算し、光不斉化反応が調べられている。

宇宙生命計算科学としては、アミノ酸以外にも、系外惑星におけるバイオマーカー検出の問題がある。系外惑星におけるバイオマーカーの一つとして有力なのは光合成にともなうレッドエッジである。しかし、レッドエッジ（近赤外成分）がどのような物理過程に起因するかはまだ明らかにされていない。地上植物における光合成明反応のZ機構は、クロロフィルと光化学系II, I (PSII, I) によって機能する。地上植物のZ機構は、太陽スペクトルに最適化されていることを考えると、主星の光スペクトルが変われば、光合成機構も変わる可能性がある。これを調べるために、現在TDDFT計算によって得られたクロロフィルの電気双極子を用い、アンテナ機構の光吸収率波長依存性がクロロフィルの配位によってどのように変わるかについて量子計算が行われている。

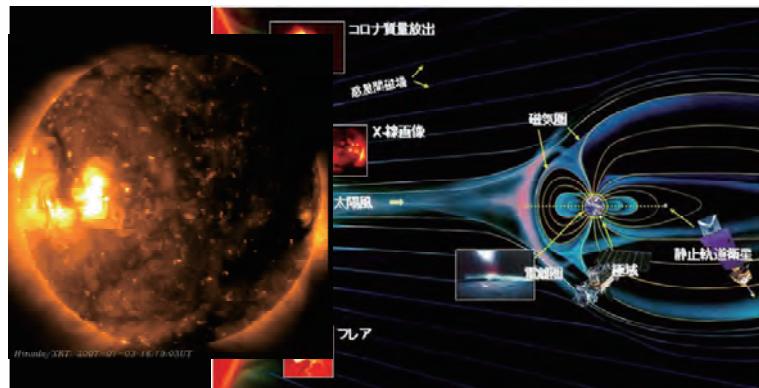
社会的意義

この宇宙に、地球以外に地球型の惑星は存在するのか、また地球以外の惑星に生命は存在するのか、これは多くの人が関心を寄せるテーマである。それは、宇宙における生命存在の意味を再認識することへつながるばかりでなく、生命誕生過程の本質に迫ることができる問題である。

(iv) 宇宙環境学の推進

主な課題の背景と現状

ここで言う宇宙環境とは太陽系環境である。現在、人類の活動範囲は、地上から宇宙空間へと拡大している。人工衛星は、通信、テレビ、GPS等で我々の生活に不可欠のものとなっている。宇宙環境は太陽活動によって大きな影響を受ける。太陽活動が活発になると、強い太陽風によって、衛星機能に影響を与える。太陽風はまた、宇宙ステーションでの活動にも影響を与える。



「ひので」X線画像（左）
名古屋大学JSTプロジェクト（右）

近年、太陽黒点数と地球の気候変動との関係が注目されている。太陽黒点数は11年周期で変動しているが、2008年から増加に転じるはずであった黒点数が2009年後半まで増加せず、太陽活動に変調が生じている。17世紀には太陽黒点が長期に出現しなかった期間があり、今期の太陽活動周期の乱れがその前兆である可能性などが検討されている。黒点は磁場の強い場所に対応し、そこではフレアという爆発現象が起こる。太陽フレアの結果、高エネルギー粒子が大量に放射される。これが太陽風である。黒点活動を知るためには、太陽における磁場の生成過程（太陽ダイナモ）を知る必要がある。太陽磁気活動を担う太陽ダイナモを理解することは

地球環境の将来予測をするうえでも重要な課題である。また、太陽フレアでは、磁場に蓄えられたエネルギーが磁場のつなぎ換え（リコネクション）によって、プラズマに受け渡されて、高速の粒子が生成されると考えられている。磁場のリコネクションは、まだ完全には解明されていない物理過程である。これは、磁気流体力学や電磁プラズマ粒子シミュレーションが必要であり、本格的な取り組みが始まったところである。また、太陽風が地球に接近すると、衝撃波が発生する。宇宙空間の密度は低いため、この場合の衝撃波は、地上で起こる衝撃波と異なり粒子同士の衝突がほとんど起こらないガスでの衝撃波となる。これを無衝突衝撃波という。無衝突衝撃波のシミュレーションには、電磁プラズマ粒子シミュレーションが必要となる。

社会的意義

太陽風は、現在我々の生活に欠かせない衛星の機能に大きな影響を与える。通信衛星の故障は、重要な通信機能の遮断になるだけでなく、制御不能に落ちいった衛星が地上に落下することで被害を及ぼすこともあり得る。また、太陽風によって生じた磁気嵐によって、変電所のコイルに大電流が流れ故障し、大停電が起きたこともある。したがって、太陽活動を予測できれば、これらを防災することができる。この目的で取り組みが進められているのが「宇宙天気予報」である。通信衛星、宇宙ステーション、惑星探査機等が、正確かつ安全に機能するためには、「宇宙天気予報」などを通じて、太陽活動現象とともに変化する太陽系の環境科学の推進が必要である。

(2) 長期的目標

(i) 宇宙史の探究

星形成、銀河形成の研究は、流体力学や磁気流体力学計算が基本となるが、エネルギー輸送を司る輻射（放射）の取り扱いが、次の課題である。上述のように、輻射は厳密には空間 3 次元、方向 2 次元、振動数 1 次元の計 6 次元の輻射輸送方程式を解く必要がある。21 世紀に入り、静的な物質場に対し 6 次元の輻射輸送方程式を直接解く取り組みが本格化した。しかしながら、これを流体力学や磁気流体力学と完全に結合した計算は端緒についたばかりである。6 次元輻射輸送と流体力学を完全結合した 3+3 輻射流体力学は、エクサスケールコンピューティングのグランドチャレンジになる。また、銀河形成の研究はダークマター計算と切り離すことができない。ダークマター粒子は重力以外の相互作用をほとんどしない粒子であり、かつ粒子同士の重力的な散乱も効かない。これは無衝突粒子系と言われる。ダークマターの振舞いを正確かつ詳細に調べるためにには、無衝突 Boltzmann 方程式で扱う必要があるが、Boltzmann 方程式は、位相空間密度の時間変化を計算するものであり、空間 3 次元、速度空間 3 次元の計 6 次元の方程式である。これは、6 次元輻射輸送計算と同規模の計算コストがかかる。現在、無衝突 Boltzmann 方程式の直接計算の取り組みが始まっている。これを大幅に発展させることが長期目標となる。また、無衝突 Boltzmann 方程式は、プラズマ系で使われる Vlasov 方程式と等価なものである。無衝突 Boltzmann 方程式の直接計算は、宇宙プラズマの研究において大きな発展をもたらすことが期待できる。

以上に関する具体的な研究テーマと必要な計算機能力は、(3) の(i)および表 4.5.1-1 にまとめられる。

(ii) 新たな物理の探究

ガンマ線バーストや超新星爆発の問題では、これまで数値相対論や相対論的流体力学の3次元化は行われているが、ニュートリノ輸送については空間の球対称性を課している。ニュートリノ輸送はブラックホール生成や爆発のメカニズムに関わる重要な物理過程である。エクサスケール・コンピューティングにおいては、3次元空間のニュートリノ輸送問題（6次元問題）を完全に解き、これによって3+3相対論的流体力学を実現することが鍵となる。

超高エネルギー宇宙線問題の進展については、現在行われている電磁プラズマ粒子（Particle-in-Cell）シミュレーションの計算分解能を2桁以上上げた計算が必要となるが、これはエクサスケールで実現することができる。また、非熱的分布を構成する高エネルギー粒子の生成を計算するためには、無衝突系プラズマのボルツマン方程式である6次元プラソフ方程式を解く必要がある。これは、(i)で述べた無衝突ボルツマン方程式と同様、エクサスケールでの重要な取り組みとなる。

更に、ダークマター問題については、太陽系の近傍でダークマター塊がどのように存在するかを計算するためには、 10^{14} 粒子の大規模なN体計算を必要とする。また、ダークエネルギーの問題は、宇宙の加速膨張の発見によって裏づけられた形となっているが、その物理的説明はまだできていない。ダークエネルギーが支配する宇宙を1000億年まで外挿すると、銀河も星もばらばらになる“ビッグ・リップ”が起こるとする理論もある。このとき、ブラックホールさえも蒸発してしまう。ダークエネルギー宇宙の未来予測においても、(i)で述べたような大規模N体計算は必須である。

以上に関する具体的な研究テーマと必要な計算機能力は、(3)の(ii)および表4.5.1-1にまとめる。

(iii) 惑星形成と宇宙生物学の探究

惑星形成問題において、宇宙ダストから微惑星が誕生する過程は、いまだにミッシングリンクとなっている。ダストは原始惑星系円盤の中で、赤道面に沈殿し、その後合体成長をすると考えられている。この際、ダスト粒子と乱流状態にあるガスとの相互作用を考えなくてはならない。乱流とダスト粒子の相互作用の問題は、いまだに解かれていない問題である。この問題は、現在行われている最高精度（約 10000^3 格子）の乱流計算とダスト粒子の計算を結合したハイブリッド計算を必要とする。これは、エクサスケールで取り組むべき重要課題となる。

アミノ酸の鏡像異性体過剰の宇宙起源の問題については、現在行われている電子の励起状態の時間依存密度汎関数法計算を更に発展させ、究極には陽子配置の変化までを量子力学計算することが目標となる。この場合は、量子多体の直接計算が必要となり、計算量はこれまでの1000倍を超える。

系外惑星における光合成の問題については、将来的にはエクサスケール・コンピューティングによってクロロフィルのダイナミクスを入れた光合成アンテナ機構の量子力学/分子動力学計算（QM/MM計算）が可能となる。また、光合成機構が惑星大気の化学構造にどのように依存するかも探究することができる。

以上に関する具体的な研究テーマと必要な計算機能力は、(3) の(iii) および表 4.5.1-1 にまとめる。

(iv) 宇宙環境学の推進

太陽における磁場の生成過程の解明には、高精度磁気流体力学計算を必要とする。必要な精度は 10000^3 格子になり、現在の計算の 1000 倍である。また、太陽フレアで起こる磁場のリコネクションは、まだ完全には解明されていない物理過程である。これは、磁気流体力学や電磁プラズマ粒子シミュレーションが必要であり、エクサスケールの重要な研究課題である。また、太陽風によって起こる無衝突衝撃波を正確に扱うためには、無衝突プラズマの方程式であるブラソフ方程式を解く必要がある。これは、無衝突ボルツマン方程式と同様、位相空間 6 次元の方程式であり、次世代の目標である。

以上に関する具体的な研究テーマと必要な計算機能力は、(3) の(iv) および表 4.5.1-1 にまとめる。

(3) 次世代に解決するべき課題

上記の長期目標の下、具体的に取り組むべき次世代の研究課題は以下のとおりである。

(i) 宇宙史の探究

自己重力 N 体／流体シミュレーションによる宇宙構造形成の解明

ダークマターの構造形成や惑星形成など、宇宙で多様なスケールの構造形成が研究対象となるため、こうした問題を N 体シミュレーションや主に粒子法による流体シミュレーションにより解明する。大粒子数・小タイムステップ数では「京」で兆を超える粒子数が扱える見込みだが、惑星形成等で必要になる長時間積分では並列度が小さく効率が落ちる。したがって、高い効率の計算が可能なアーキテクチャで 10^{12} 程度の粒子数での長時間計算ができればブレークスルーとなる。

輻射流体力学による銀河と巨大ブラックホール形成過程の解明

銀河内の星形成と巨大ブラックホール形成は密接に関わっているため、これらのダイナミクスを同時に解く計算を行うことで、銀河-ブラックホールの共進化を解明する。これには、自己重力計算、流体計算、6 次元輻射輸送計算を組み合わせた輻射流体計算が必要になる。

輻射流体計算は、近年その端緒に着いたばかりであり、海外でもまだ本格的な計算は行われていない。現在、輻射 5 次元の計算が最先端であるが、完全 6 次元輻射輸送を入れた輻射流体計算はエクサスケールでのグランドチャレンジになる。

6 次元位相空間上の Boltzmann 方程式による無衝突粒子系力学の探究

宇宙大規模構造におけるニュートリノのダイナミクスの正確な取り扱いや、宇宙プラズマにおける無衝突衝撃波による粒子加速機構を、シミュレーションにより解明する。6 次元位相空間でのシミュレーションは筑波大学・東京大学のグループで行われているのみであり、精度のよい計算スキームの開発もこれから重要な課題である。

ダークマター宇宙における宇宙暗黒時代の進化の解明

ダークマターによる重力相互作用と初代銀河形成・銀河間ガスの進化を同時に解くことで、初期宇宙の進化を理論的に解明する。また、全宇宙にわたる中性水素の分布の進化を明らかにし、初期宇宙の構造形成やインフレーションモデルを検証する。

個別の初代天体の形成については現在でも計算可能であるが、大域的な輻射輸送を取り入れ、銀河間物質の進化と同時に解くためにはエクサスケールの計算が必要となる。また、水素分布については、現在は小さな領域あるいは宇宙進化の限られた時期のみならば計算可能であるが、137億年にわたる宇宙全体の進化を整合的に解明するにはエクサスケールの計算が必要である。

自己重力輻射流体シミュレーションによる銀河スケール星間ガス進化の解明

星間ガスは星形成の現場であるとともに、大質量星から輻射や超新星爆発の形で解放されたエネルギーを銀河スケールへと伝え、銀河形成に影響を与える。星間ガスの多相構造を分解した銀河スケールのシミュレーションを行うことにより、銀河形成の物理的理理解が得られ、宇宙の物質循環を解明できる。

現状、星間ガスのシミュレーションは銀河の限られた一部分に注目したもの、もしくは本質的に重要な星間ガスの多相構造を分解できていないものしか行われていない。エクサスケールの計算では、銀河スケールで星間ガスの多相構造を分解した輻射流体シミュレーションが可能となり、銀河と星間ガスの相互作用を明らかにすることが可能である。

輻射磁気流体計算による天体降着流・噴出流の研究

物質が回転しながら天体に落下する際に形成される降着円盤の時間変動とジェット形成機構を、現象論的な粘性パラメータを導入しない3次元輻射磁気流体計算によって解明する。特に、輻射と磁気流体の相互作用が重要になる明るい降着天体の進化を明らかにする。

これまで、3次元輻射磁気流体計算は円盤の一部を取り出した計算しか行われておらず、輻射輸送には拡散近似が採用されている。円盤全体を計算領域に含め、高次モーメントを用いて輻射輸送を高精度化する。10年後には輻射の6次元計算を目指す。

(ii) 新たな物理の探究

数値相対論によるブラックホールの形成と強重力現象の解明

ブラックホールの形成や連星系をなす中性子星の合体に関する数値相対論シミュレーションを行い、強重力・極限状態下の宇宙現象を解明するとともに、放射される重力波の理論予測を行い LCGT による重力波観測計画に貢献する。このシミュレーションにおいては、重力・電磁気力・強い力・弱い力の基本相互作用すべてを考慮に入れた計算が必要になる。

基本相互作用の組み込みおよび一般相対的輻射輸送は近年その端緒についたばかりであり、日本のグループが世界をリードする状況にある。運動量空間を積分した輻射輸送から始め、最終的に7次元の輻射輸送を解くのが20年先に向けた課題である。

相対論的輻射流体計算による超新星爆発メカニズムの探究

重元素などの物質の起源である超新星爆発のメカニズムを解明し、大口径望遠鏡、カミオカンデ、重力波干渉計など次世代観測機器と比較可能なデータを提供する。ニュートリノの6次元輻射輸送計算を、核物質および重元素の3次元流体計算と同時に行う。

現状、ニュートリノの輻射輸送計算は空間3次元、位相空間1次元の合計4次元に簡易化されて行われている。これを近似なしに空間3次元、位相空間3次元で行い、非球対象的な物質の配位からのニュートリノ輻射と物質へのフィードバックを精査する。

相対論的粒子計算による超高エネルギー現象と粒子加速機構の探究

10^{15} eVを超える高エネルギー粒子については、その加速メカニズムだけでなく起源もわかつていない。これらは活動天体のダイナミクスの理解と密接に関連しており、非熱的粒子を生成する粒子加速の問題は、宇宙物理学・天文学・プラズマ物理学・宇宙線物理学などの学際的研究対象となっている。

相対論的プラズマの粒子加速問題に対して、輻射減衰を組み込んだプラズマ粒子シミュレーションコードの開発が始まっている。エクサスケールでは、輻射によるプラズマへの反作用が無視できない超高エネルギー天体现象や超強度光子場（レーザープラズマ）での相対論的プラズマ領域での研究が可能になってくる。

6次元プラソフシミュレーションによるプラズマ非熱的分布形成の解明

非熱的分布を構成する高エネルギー粒子の生成メカニズムを明らかにすることで、宇宙物理学の最大の謎の一つである宇宙線の起源に迫ることができる。熱的プラズマの粒子数に比べて非熱的粒子の数が圧倒的に少ないとから、分布関数の時間発展を直接解くプラソフシミュレーションの手法を確立することで、粒子法に代わる新たなアプローチによる解明が期待できる。

これまでの研究は、速度空間3次元の4次元静電シミュレーションが多くを占めている。速度空間3次元+実空間3次元の6次元電磁プラズマシミュレーションの粒子加速問題への適用は、エクサスケールでの計算によって初めて可能となる。

(iii) 惑星形成と宇宙生物学の探究

惑星系形成のシミュレーション

太陽系のように、恒星を中心としてその周囲を回る複数の惑星からなるシステムの形成過程を明らかにする。10AU以上の幅を持つ広い円環領域を対象とし、長い時間の進化を計算する。

国内外において、狭い円環領域における複数個の惑星形成の計算は実行されつつあり、微惑星集積による1個の惑星の形成だけでは見えなかった現象が本質的に重要な役割を担っていることが明らかとなってきた。今後は、ある領域における惑星形成の結果が他領域に及ぼす効果を考慮するため、10AU以上の幅を持つ広い円環領域を対象とし、長い時間の進化を計算することが必要である。

地球・惑星形成のシミュレーション

地球をはじめとした、太陽系内外の多様な惑星の形成過程を明らかにする。

原始惑星の巨大衝突による月形成や地球内部構造の形成など個々の過程は、これまでにもある程度のシミュレーションがなされている。しかし、各々の精度がまだ不十分であるうえ、それらを組み合わせた複合過程についてはほとんど計算がなされていない。エクサスケールでの計算により、各過程の高精度化と複合過程のシミュレーションが実施可能となる。

惑星表層環境の形成と進化シミュレーション

地球をはじめとする太陽系内外の惑星表層環境の形成と進化を明らかにする。

地球の表層環境（大気・海洋を含む気候）については、社会的要請もあり、大規模な数値シミュレーションを用いた研究が国内外において盛んに行われている。太陽系内外の惑星の多様な表層環境を理解するためには、多様なパラメータに対する多くのシミュレーションを行う必要がある。

量子計算による宇宙アミノ酸生成と光不斉化過程の探究

生命は L-アミノ酸で構成されているが、L 体過剰生成は原始太陽系での光（円偏光）との相互作用で生成された可能性が示唆されている。この環境を実験的に再現することはきわめて困難であるが、第一原理計算によるシミュレーションならば検証が可能となる。

偏光波によるアミノ酸の L 体過剰生成の研究は、現在実験室で行われているのみであり、宇宙空間を想定した研究はない。この研究は、エクサスケールでのみ本格的な計算が可能であり、生命の宇宙起源を探求するうえでのブレークスルーとなる。

(iv) 宇宙環境学の推進

輻射磁気流体計算による太陽恒星ダイナモの探究

天体プラズマ活動のエネルギー源である磁場の生成維持物理機構を太陽恒星を対象として明らかにする。球殻状領域内で 3 次元拡散入磁気流体方程式を解き、乱流と大規模構造とを同時に分解する。

現状では、磁気周期活動の片鱗が見え始め、乱流への遷移もぎりぎり達成できたかどうかというところである。今後は、より高解像度・大 Reynolds 数で乱流を十分発達させたシミュレーションを実施することで、大きなパラダイムシフトが起こる可能性がある。

プラズマ計算による太陽圏・宇宙空間無衝突衝撃波の研究

超新星衝撃波ではマッハ数が 100 を超え高効率で電子が加速されるが、太陽圏で見られる衝撃波ではマッハ 10 程度以下の場合が多く、電子がほとんど加速されていない。衝撃波における非熱的電子の生成をマッハ数によって整理することで、太陽圏から宇宙までの高エネルギー粒子の生成メカニズムを統一的に理解することができる。

プラズマ粒子コードによる衝撃波粒子加速の研究は、計算コストを軽減するために粒子数を減らしたり、規格化を換えたりした計算がほとんどであり、統一的な計算結果の比較ができるないのが現状である。エクサスケールの計算においては、超新星衝撃波でのパラメータ領域で計算することが初めて可能になる。

宇宙天気予報に基づく太陽系環境科学の推進

太陽活動と太陽地球システムダイナミクスのメカニズムを探るとともに、その変動を予測する技術を獲得することにより、生存空間としての太陽系の理解を深めると同時に衛星・通信・電力網など高度な社会基盤に対する宇宙天気擾乱の影響を最小化することができる。

数値シミュレーションに基づく宇宙天気予報の実験的試みが米国を中心に推進されている。今後、エクサスケールでの計算の実現によって、太陽面とコロナの精密観測を取り込んだデータ駆動シミュレーションが確立し、宇宙天気数値予報が実用段階に入ると考えられる。

(4) 課題を解決するために必要なアプリケーション群

上記 4 つのテーマについて、短期的に取り組むべきキーサイエンスとエクサスケールコンピューティングに向けた長期的戦略ならびに必要な計算機スペックをまとめる。

(i) 宇宙史の探究

宇宙史の探究において行われる次の個別テーマについて、その意義と計算内容、および現状とエクサスケールへの展望を表 4.5.1-1 にまとめる。

- 1.4.1 自己重力 N 体／流体シミュレーションによる宇宙構造形成の解明
- 1.4.2 辐射流体力学による銀河と巨大ブラックホール形成過程の解明
- 1.4.3 6 次元位相空間上の Boltzmann 方程式による無衝突粒子系力学の探究
- 1.4.4 ダークマター宇宙における宇宙暗黒時代の進化の解明
- 1.4.5 自己重力輻射流体シミュレーションによる銀河スケール星間ガス進化の解明
- 1.4.6 辐射磁気流体計算による天体降着流・噴出流の研究

(ii) 新たな物理の探究

新たな物理の探究において行われる次の個別テーマについて、その意義と計算内容、および現状とエクサスケールへの展望を表 4.5.1-1 にまとめる。

- 2.4.1 数値相対論によるブラックホールの形成と強重力現象の解明
- 2.4.2 相対論的輻射流体計算による超新星爆発メカニズムの探究
- 2.4.3 相対論的粒子計算による超高エネルギー現象と粒子加速機構の探究
- 2.4.4 6 次元プラソフシミュレーションによるプラズマ非熱的分布形成の解明

(iii) 惑星形成と宇宙生物学の探究

惑星形成と宇宙生物学の探究において行われる次の個別テーマについて、その意義と計算内容、および現状とエクサスケールへの展望を表 4.5.1-1 にまとめる。

- 3.4.1 惑星系形成のシミュレーション
- 3.4.2 地球・惑星形成のシミュレーション
- 3.4.3 惑星表層環境の形成と進化シミュレーション

3.4.4 量子計算による宇宙アミノ酸生成と光不斉化過程の探究

(iv) 宇宙環境学の推進

宇宙環境科学の推進において行われる次の個別テーマについて、その意義と計算内容、および現状とエクサスケールへの展望を表 4.5.1-1 にまとめる。

4.4.1 輻射磁気流体計算による太陽恒星ダイナモの探究

4.4.2 プラズマ計算による太陽圏・宇宙空間無衝突衝撃波の研究

4.4.3 宇宙天気予報に基づく太陽系環境科学の推進

表 4.5.1-1 エクサスケール・コンピューティングによるサイエンス（宇宙）

| アブリ | テーマ名 | 意義と計算内容 | 現状とエクサスケールへの展望 | ペタスケール (現状) | エクサスケール (展望) |
|-------|---|--|--|--|--|
| | | | | (1) 計算法 (2) 問題規模 (3) 計算量 (PFLOPS・hour) | (1) 計算法 (2) 問題規模 (3) 計算量 (EFLOPS・hour) |
| 1.4.1 | 自己重力N体／流体シミュレーションによる宇宙構造形成の解明 | ダークマターの構造形成から惑星形成にいたる宇宙における多様なスケールでの構造形成をN体+主に粒子法による流体コードで解明する。 | 大粒子数・小タイムステップ数では「京」で兆を超える粒子数が扱える見込みだが、惑星形成等で必要になる長時間積分では並列度が小さく効率が落ちる。高い効率が出るアーキテクチャで10~100億程度の粒子数での長時間計算ができるばいくつかの分野でブレークスルーになる。 | (1) 独立時間刻みとツリーのハイブリッド (2) $10^5 \sim 10^{12}$ 粒子 (3) 10^3 PFLOPS・hour | (1) 独立時間刻みとツリーのハイブリッド (2) 10^{14} 粒子、1run (3) 420 EFLOPS・hour |
| 1.4.2 | 輻射流体力学による銀河と巨大ブラックホール形成過程の解明 | 銀河内の星形成と巨大ブラックホール形成のダイナミクスを同時に解く計算を行うことで、銀河-ブラックホールの共進化を解明する。自己重力計算、流体計算、6次元輻射輸送計算を組み合わせた輻射流体力計算が必要になる。 | 輻射流体力計算は、近年その端緒に着いたばかりであり、海外でもまだ本格的な計算は行われていない。現在、輻射5次元の計算が最先端であるが、完全6次元輻射輸送を入れた輻射流体力計算はエクサスケールでのグランドチャレンジになる。 | (1) Tree Radiation SPH (2) 10^9 粒子 + 5×10^6 光源 (3) 10^4 PFLOPS・hour | (1) Tree Radiation SPH (2) 10^{11} 粒子 + 5×10^8 光源、1run (3) 2000 EFLOPS・hour |
| 1.4.3 | 6次元位相空間上の Boltzmann 方程式による無衝突粒子系力学の探究 | 宇宙大規模構造におけるニュートリノのダイナミクスを正確な取り扱い。宇宙プラズマにおける無衝突衝撃波における粒子加速の解明。 | 6次元位相空間でのシミュレーションは筑波大学・東京大学のグループで行われているのみ。精度のよい計算スキームの開発もこれからの重要な課題。 | (1) 有限体積法(方向分割) (2) 位置空間 128^3 個、運動量空間 64^3 個 (3) 20 PFLOPS・hour | (1) 有限体積法 (2) 位置空間 256^3 個、速度空間 256^3 個、10run (3) 100 EFLOPS・hour |
| 1.4.4 | ダークマターによる重力相互作用と初代銀河形成、銀河間ガスの進化を同時に解く。初期宇宙の進化を理論的に解明する。また、全宇宙にわたる中性水素の分布の進化を明らかにし、初期宇宙の構造形成やインフレーションモデルを解明する。 | ダークマターによる重力相互作用と初代銀河形成、銀河間ガスの進化を同時に解く。初期宇宙の進化を理論的に解明する。また、全宇宙にわたる中性水素の分布の進化を明らかにし、初期宇宙の構造形成やインフレーションモデルを解明する。 | 個別の初代天体の形成は計算できるが、大域的な輻射輸送を取り入れ、銀河間物質の進化と同時に解くためにエクサスケールが必要。また、水素分布については現在は小さな領域あるいは宇宙進化の限られた時期のみ計算可能。137億年にわたる進化を整合的に追うにはエクサスケールが必要。 | (1) Tree-PM (2) 100 億粒子 + 1000 光源 (3) 10000 PFLOPS・hour | (1) Particle-Mesh+FFT (2) 10^{13} 粒子 + 10^5 光源、10run (3) 140 EFLOPS・hour |
| 1.4.5 | 自己重力輻射流体シミュレーションによる銀河スケール星間ガス進化の解明 | 星間ガスは星形成の現場であるとともに、大質量星から輻射や超新星爆発の形で解放されたエネルギーを銀河スケールへと伝え、銀河形成に影響を与える。星間ガスの多相構造を分解する銀河スケールのシミュレーションを行うことにより銀河形成の物理的理識が得られ、宇宙の物質循環を解明できる。 | 現状、星間ガスのシミュレーションは銀河の限られた一部分に注目したもの、もしくは本質的に重要な星間ガスの多相構造を分解できないものしか行われていない。エクサスケールにより、銀河スケールで星間ガスの多相構造を分解した輻射流体シミュレーションが可能になり、銀河と星間ガスの相互作用を明らかにできる。 | (1) Tree-Based Radiation Transfer + mesh 流体 (2) 1024^3 メッシュ + 10^4 光源 (3) 10^2 PFLOPS・hour | (1) Tree-Based Radiation Transfer + mesh 流体 (AMR) (2) 8192^3 メッシュ + 10^8 光源、10run (3) 10^3 EFLOPS・hour |

| | | | | | |
|-------|----------------------------------|--|---|---|---|
| 1.4.6 | 輻射磁気流体計算による天体降着流・噴出流の研究 | 物質が回転しながら天体に落下する際に形成される降着円盤の時間変動とジェット形成機構を現象論的な粘性パラメータを導入しない3次元輻射磁気流体計算によって解明する。特に、輻射と磁気流体の相互作用が重要ななる明るい降着天体の進化を明らかにする。 | 3次元輻射磁気流体計算は円盤の一部を取りだした計算しか行われておらず、輻射輸送には拡散近似が採用されている。円盤全体を計算領域に含め、高次モーメントを用いて輻射輸送を高精度化する。10年後には輻射の6次元計算を目指す。 | (1) 相対論的磁気流体方程式の近似リーマン解法+1次モーメント法による輻射輸送 (2) 512^3 格子点、 10^8 時間ステップ (3) 100 PFLOPS・hour | (1) 相対論的磁気流体方程式の近似リーマン解法+輻射輸送の6次元計算 (2) 512^3 格子点、光線方向1000、振動数100、 10^8 時間ステップ、4run (3) 1100 EFLOPS・hour |
| 2.4.1 | 数値相対論によるブラックホールの形成と強重力現象の解明 | ブラックホールの形成、中性子星連星の合体の数値相対論シミュレーションを行い、強重力・極限状態の宇宙現象を解明するとともに、放射される重力波の理論予測を行い LCGT による重力波観測計画に貢献する。4つの基本相互作用すべてを考慮に入れた計算が必要になる。 | 4つの基本相互作用の組み込みおよび一般相対論的輻射輸送は近年その端緒についたばかりであり、日本のグループが世界をリードする状況にある。運動量空間を積分した輻射輸送から始め、最終的に7次元の輻射輸送を解くのが20年先に向けた課題である。 | (1) 4次精度 RK, HRSC (2) 空間($400 \times 400 \times 200$) 10^7 (steps) (3) 10^4 PFLOPS・hour | (1) 4次 RK, Rad-HRSC (2) 空間(1000^3), 10^7 (steps)、10run (3) 280 EFLOPS・hour |
| 2.4.2 | 相対論的輻射流体計算による超新星爆発メカニズムの探究 | 重元素などの物質の起源である超新星爆発のメカニズムを解明し、大口径望遠鏡、カミオカンデ、重力波干涉計など次世代観測機器と比較可能なデータを提供する。ニュートリノの6次元輻射輸送計算を核物質と重元素の3次元流体計算と同時にを行う。 | 現状、ニュートリノの輻射輸送計算は空間3次元、位相空間1次元の合計4次元に簡易化されて行われている。これを近似なしに空間3次元、位相空間3次元で行い、非球対称的な物質の配位からのニュートリノ輻射と物質へのフィードバックを精査する。 | (1) ニュートリノの輻射輸送計算 (2) 空間 $600 \times 128 \times 128$ 、位相空間 20 のグリッドでシミュレーション開始から 1s 計算する。 (3) 876 PFLOPS・hour | (1) ニュートリノの輻射輸送計算 (2) 空間 $512 \times 64 \times 128$ 、位相空間 24^3 のグリッドでシミュレーション開始から 1s 計算する、10run (3) 220 EFLOPS・hour |
| 2.4.3 | 相対論的粒子計算による超高エネルギー現象と粒子加速機構の探究 | 10^{15} eV を超える高エネルギー粒子については、その加速メカニズムだけでなく起源もわかつっていない。これらは活動天体のダイナミクスの理解と密接に関連しており、非熱的粒子を生成する粒子加速の問題は、宇宙物理学・天文学・プラズマ物理学・宇宙線物理学などの学際的研究となっている。 | 相対論的プラズマの粒子加速問題に対して、輻射減衰を組み込んだプラズマ粒子シミュレーションコードの開発が始まっています。エクサスケールでは、輻射によるプラズマへの反作用が無視できない超高エネルギー天体現象や超強度光子場(レーザー・プラズマ)での相対論的プラズマ領域での研究が可能になってくる。 | (1) Particle-in-Cell 法 (2) 1024^3 グリッド点、粒子数 10^{12} 個 (3) 200 PFLOPS・hour | (1) Particle-in-Cell 法 (2) 4096^3 グリッド点、粒子数 10^{15} 個、1run (3) 140 EFLOPS・hour |
| 2.4.4 | 6次元プラソフシミュレーションによるプラズマ非熱的分布形成の解明 | 非熱的分布を構成する高エネルギー粒子の生成メカニズムを明らかにすることで、宇宙物理学の最大の謎の一つである宇宙線の起源に迫ることができる。熱的プラズマの粒子数に比べて非熱的粒子の数が圧倒的に少ないことから、分布関数の時間発展を直接解くプラソフシミュレーションの手法を確立することで、粒子法に代わる新たなアプローチによる解明が期待できる。 | 速度空間3次元の4次元静電シミュレーションが多くを占める。速度空間3次元+実空間3次元の6次元電磁プラズマシミュレーションの粒子加速問題への適用は、エクサスケール計算で初めて可能となる。 | (1) セミ・ラグランジュアン法 (2) 実空間 1024^2 点、速度空間 256^3 点の5次元計算 (3) 1440 PFLOPS・hour | (1) セミ・ラグランジュアン法 (2) 実空間 1024^3 点、速度空間 256^3 点の6次元計算、1run (3) 420 EFLOPS・hour |
| 3.4.1 | 惑星系形成のシミュレーション | 太陽系のように、恒星を中心としてその周囲を回る複数の惑星からなるシステムの形成過程を明らかにする。10AU以上の幅を持つ広い円環領域を対象とし、長い時間の進化を計算する。 | 国内外において、狭い円環領域における複数個の惑星形成の計算は実行されつつある。こうした計算により、微惑星集積による1個の惑星の形成だけでは見えなかった現象が見えてきた。しかもそれが、本質的に重要な役割を担っていることが見えてきている。ある領域における惑星形成の結果が他領域に及ぼす効果を考慮するため、10AU以上の幅における広域を対象とした計算が必要である。 | (1) 重力多体系計算 (2) 10万体、10万年分、100 run (3) 100 PFLOPS・hour | (1) 重力多体系計算 (2) 10^8 体、 10^8 年分、100 run (3) 420 EFLOPS・hour |

| | | | | | |
|-------|-----------------------------|---|---|--|---|
| 3.4.2 | 地球・惑星形成のシミュレーション | 地球をはじめ、太陽系内外の多様な惑星の形成過程を明らかにする。 | 原始惑星の巨大衝突による月形成、地球内部構造の形成など個々の過程は、ある程度のシミュレーションがなされている。しかし、各々の精度がまだ不十分である上、それらを組み合わせた複合過程についてはほとんど計算がなされていない。エクサスケール計算により、各過程の高精度化と、複合過程のシミュレーションが実施可能となるだろう。 | (1) SPH (2) 1万体、1ヶ月分、100 run (3) 3.5 PFLOPS・hour | (1) SPH (2) 10億体、数ヶ月分（ステップ数100M）、100 run (3) 1250 EFLOPS・hour |
| 3.4.3 | 惑星表層環境の形成と進化シミュレーション | 地球をはじめとする太陽系内外の惑星表層環境の形成と進化を明らかにする。 | 地球の表層環境（大気・海洋を含む気候）については、社会的要請もあり、大規模な数値シミュレーションを用いた研究が国内外において盛んに行われている。太陽系内外の多様な惑星の多様な表層環境を理解するためには、多様なパラメータに対する多くのシミュレーションを行う必要がある。 | (1) 格子法 HD+輻射輸送 (2) $1920 \times 960 \times 96$ 、19年分、1run (3) 1400 PFLOPS・hour | (1) 格子法 HD + 輻射輸送 (2) $3,840 \times 1920 \times 192$ 、10年分（ステップ数100M）、100run x 10 天体分 (3) 560 EFLOPS・hour |
| 3.4.4 | 量子計算による宇宙アミノ酸生成と光不斉化過程の探究 | 生命はL-アミノ酸で構成されているが、このL体過剰生成は原始太陽系での光（円偏光）との相互作用で生成された可能性が示唆されている。この環境を実験的に再現することはきわめて困難であるが、第一原理計算によるシミュレーションならば検証が可能となる。 | 偏光波によるアミノ酸のL体過剰生成の研究は、現在実験室で行われているのみであり、宇宙空間を想定した研究はない。この研究は、エクサスケールでのみ本格的な計算が可能であり、生命の宇宙起源を探究する上のブレークスルーとなる。 | (1) 量子ダイナミックス計算サーフェスホッピング法 (2) 1アミノ酸×10 初期状態×3000 サーフェスホッピング (3) 3×10^4 PFLOPS・hour | (1) 量子ダイナミックス計算サーフェスホッピング法 (2) 20アミノ酸×10 初期状態×3000 サーフェスホッピング、1run (3) 600 EFLOPS・hour |
| 4.4.1 | 輻射磁気流体計算による太陽恒星ダイナモの探究 | 天体プラズマ活動のエネルギー源である磁場の生成維持物理機構を太陽恒星を対象として明らかにする。球殻状領域内で3次元拡散入磁気流体方程式を解き、乱流と大規模構造とを同時に分解する。 | 現状では、磁気周期活動の片鱗が見え始めた。また乱流への遷移もぎりぎり達成できたかどうかというところである。今後は、より高解像度・大 Reynolds 数で乱流を十分発達させたシミュレーションを実施することで、大きなパラダイムシフトが起こる可能性がある。 | (1) 非弾性近似(anelastic) (2) 250^3 (3) 10 PFLOPS・hour | (1) 音速抑制法+Yin Yang grid (2) $1024 \times 8192 \times 24576 \times 2$ 、 5×10^7 step、1run (3) 42 EFLOPS・hour |
| 4.4.2 | プラズマ計算による太陽・圏・宇宙空間無衝突衝撃波の研究 | 超新星衝撃波ではマッハ数が100を超える高効率で電子が加速されるが、太陽圏で見られる衝撃波では10程度以下の場合が多く電子がほとんど加速されていない。衝撃波における非熱的電子の生成をマッハ数によって整理することで、太陽圏から宇宙までの高エネルギー粒子の生成メカニズムを統一的に理解することができる。 | プラズマ粒子コードによる衝撃波粒子加速の研究は、計算コストを軽減するために粒子数を減らしたり、規格化を換えたりした計算がほとんどであり、統一的な計算結果の比較ができるていないのが現状である。エクサスケールの計算においては、超新星衝撃波でのパラメータ領域で計算することが初めて可能になる。 | (1) Paricle-in-Cell 法 (2) 24000×512^2 グリッド点（粒子数 10^{14} 個） (3) 10^4 PFLOPS・hour | (1) Particle-in-Cell 法 (2) 72000×3072^2 グリッド点（粒子数 10^{16} 個）、2run (3) 200 EFLOPS・hour |
| 4.4.3 | 宇宙天気予報に基づく太陽系環境科学の推進 | 太陽活動と太陽地球システムダイナミクスのメカニズムを探るとともに、その変動を予測する技術を獲得することにより、生存空間としての太陽系の理解を深めると同時に衛星・通信・電力網など高度な社会基盤に対する宇宙天気擾乱の影響を最小化することができる。 | 数値シミュレーションに基づく宇宙天気予報の実験的試みが米国を中心に推進されている。今後、エクサスケールの実現によって、太陽面とヨロナの精密観測を取り込んだデータ駆動シミュレーションが確立し、宇宙天気数値予報が実用段階に入ると考えられる。 | (1) 電磁流体力学有限要素・有限差分スキーム、ハイブリッドスキーム、PIC 等 (2) 512^3 格子 (3) 50 PFLOPS・hour | (1) 電磁流体力学有限要素・有限差分スキーム、ハイブリッドスキーム、PIC 等 (2) 3000^3 格子、100run (3) 170 EFLOPS・hour |

| 課題 | 要求性能 (PFLOPS) | 要求メモリ リバンド (PB/s) | メモリ量 /ケース (PB) | ストレージ量/ ケース (PB) | 計算時間/ ケース (hour) | ケース数 | 総演算量 (EFLOP) | 概要と計算手法 | 問題規模 | 備考 |
|--------------------------------------|------------------|-------------------------|----------------------|------------------------|------------------------|------|-----------------|---|---|---|
| 自己重力N体／流体シミュレーションによる宇宙構造形成の解明 | 420 | 1.4 | 5 | 100 | 1000 | 1 | 1,500,000 | 独立時間刻みヒツリーのハイブリッド | 10^{14} 粒子 | 100Tflops/ノード × 1000ノード、1000コア/ノード、通信速度30GB/s/ノード |
| 輻射流体力学による銀河と巨大ブラックホール形成過程の解明 | 1000 | 0.2 | 2 | 1 | 2000 | 1 | 7,200,000 | Tree radiation SPH | 10^{11} 粒子 + 5×10^8 光源 | 100Tflops/ノード × 1000ノード、1000コア/ノード、通信速度100GB/s/ノード |
| 6次元位相空間上の Boltzmann方程式による無衝突粒子系力学の探求 | 130 | 0.3 | 20 | 2 | 80 | 10 | 360,000 | 有限体積法 | 位置空間256 ³ 個 速度空間256 ³ 個 | 100Tflops/ノード × 1000ノード、1000コア/ノード、通信速度1000GB/s/ノード |
| ダークマター宇宙における宇宙暗黒時代の進化の解明 | 140 | 1.3 | 1.3 | 1 | 100 | 10 | 500,000 | Particle-Mesh + FFT | 10^{13} 粒子 + 10^{15} 光源 | 100Tflops/ノード × 1000ノード、1000コア/ノード、通信速度128GB/s/ノード |
| 自己重力輻射流体シミュレーションによる銀河スケール星間ガス進化の解明 | 100 | 0.3 | 2 | 10 | 1000 | 10 | 3,600,000 | Tree-Based Radiation Transfer + mesh流体(AMR) | 8192^3 メッシュ + 10^8 光源 | 100Tflops/ノード × 1000ノード、1000コア/ノード、通信速度128GB/s/ノード |
| 輻射磁気流体計算による天体降着流・噴出流の研究 | 560 | 4 | 0.08 | 200 | 500 | 4 | 4,000,000 | 相対論的磁気流体方程式の近似リーマン解法 + 輻射輸送の6次元計算 | 512 ³ 格子点、1000光線方向、100振動数、 10^{-8} 時間ステップ | 100Tflops/ノード × 1000ノード、1000コア/ノード、通信速度30GB/s/ノード |
| 数値相対論によるブラックホールの形成と強重力現象の解明 | 1000 | 100 | 0.04 | 50 | 28 | 10 | 1,000,000 | 4次元RK、Rad-HRSC | 1000^3 × $3,10^7$ step | 100Tflops/ノード × 1000ノード、1000コア/ノード、通信速度2.88GB/s/ノード |
| 相対論的輻射流体計算による超新星爆発メカニズムの探求 | 18 | 70 | 1.6 | 1.3 | 1200 | 10 | 780,000 | ニュートリノ輻射輸送計算(超新星爆発) | 空間512x64x128位相空間24 ³ で1秒分の時間を計算 | 100Tflops/ノード × 1000ノード、主記憶100GB/ノード、主記憶バッファ容量20TB/s/ノード、オンチップメモリ容量2MB/コア、1000コア/ノード、通信速度60GB/s/ノード |
| 相対論的粒子計算による超高エネルギー現象と粒子加速機構の探求 | 680 | 68 | 68 | 700 | 200 | 1 | 490,000 | Particle-in-Cell法 | 4096^3 グリッド、 10^{15} 粒子 | 100Tflops/ノード × 1000ノード、1000コア/ノード、通信速度1GB/s/ノード |
| 6次元プラソフシミュレーションによるプラズマ非熱的分布形成の解明 | 300 | 4 | 320 | 3200 | 1400 | 1 | 1,500,000 | セミ・ラグランジュアン法 | 実空間1024 ³ 点、速度空間265 ³ 点の6次元計算 | 100Tflops/ノード × 1000ノード、1000コア/ノード、通信速度1GB/s/ノード |
| 量子計算による宇宙アミノ酸生成と光不斉化過程の探求 | 100 | 0.1 | 1 | 10 | 6000 | 1 | 2,200,000 | 量子ダイナミックス計算サーフェスホッピング法 | $20\text{アミノ酸} \times 10$ 初期状態 × 3000サーフェスホッピング | 100Tflops/ノード × 1000ノード、1000コア/ノード、通信速度100GB/s/ノード |
| 輻射磁気流体計算による太陽恒星ダイナモの探求 | 100 | 88 | 7 | 13 | 410 | 1 | 150,000 | 音速抑制法+Yin-Yang grid | 格子点 $1024 \times 8192 \times 24576 \times 2$, 5×10^7 step | 100Tflops/ノード × 1000ノード、1000コア/ノード、通信速度1GB/s/ノード |
| プラズマ計算による太陽圈・宇宙空間無衝突衝撃波の研究 | 70 | 9 | 6 | 120 | 1400 | 2 | 710,000 | Particle-in-Cell法 | 72000×3072^2 グリッド点(粒子数 10^{16} 個) | 100Tflops/ノード × 1000ノード、1000コア/ノード、通信速度1GB/s/ノード |
| 宇宙天気予報に基づく太陽系環境科学の推進 | 17 | 2 | 2 | 1 | 100 | 100 | 600,000 | 電磁流体力学有限要素法・有限差分スキーム、ハイブリッドスキームPIC等 | 3000^3 格子 | 100Tflops/ノード × 1000ノード、1000コア/ノード、通信速度100GB/s/ノード |

※本見積もりは未だ精査中である。より精度の高い数値はWeb版（→「1.2. 本文書の構成」）を参照のこと。

(5) 他分野との連携

(i) 宇宙史の探究

天体の形成・進化の研究は、宇宙理論と宇宙観測の密接な連携の下に進んできたことは論を待たない。更に、宇宙論や元素合成においては、素粒子・原子核分野とも連携してきた。これらの連携は、今後も継続される。

星形成、銀河形成、巨大ブラックホール形成過程では、衝撃波や乱流が重要な役割を果たす。これらは、HPCI 戰略プログラム「戦略分野 4：次世代ものづくり（以下、分野 4）」で探究されている課題と密接に関係する。更に、宇宙物理学で用いられる圧縮性流体の格子法は、多くが航空工学などの分野で開発されてきたものである。よって、今後も分野 4 との連携は重要になると考えられる。

第一世代星の形成過程では、水素原子 3 つの衝突による水素分子の形成（3 体反応）が重要な素過程であるが、3 体反応は反応断面積を実験的に決定することはきわめて難しく、量子力学に基づく数値計算を必要とする。しかし、これまでの計算で正確な反応率は求まっていない。多体系の量子力学計算は、さまざまな工夫が必要となる。これは、HPCI 戰略プログラム「戦略分野 2：新物質・エネルギー創成（以下、分野 2）」の研究と密接に関係するものであり、分野 2 との連携は、宇宙量子力学という学問分野の開拓につながる。

(ii) 新たな物理の探究

ガンマ線バースト、超新星爆発は、陽子の中性子化とニュートリノ発生、電子・陽電子対消滅といった素粒子・原子核の素過程が重要な役割を果たす。中心核が中性子星化した際の状態方程式も、爆発がどのように起こるかを決める重要な要素である。素粒子・原子核分野では、数値計算によって、量子色力学から原子核の核力を導出する研究が進んでおり、原子核多体系への新たなアプローチによって、中性子星化の物理素過程の研究にも新たな進展が期待されている。このような点において、素粒子・原子核との連携は不可欠なものとなる。超高エネルギー宇宙線の起源に関わる粒子加速の問題は、プラズマ物理学の最先端の研究としても精力的に行われており、宇宙物理学・天文学・プラズマ物理学・宇宙線物理学などの学際的研究分野となっている。その意味で、分野 4 との連携は、研究の遂行において必須である。

(iii) 惑星形成と宇宙生物学の探究

惑星形成の研究は、地球惑星科学分野との連携が重要であり、現在観測分野でも密接な連携の下で進められている。

アミノ酸鏡像異性体過剰の問題は、量子多体計算として計算物質科学に密接に関係する。また、鏡像異性体過剰の增幅問題は生命科学の問題でもある。よって、この研究課題は、HPCI 戰略プログラム「戦略分野 1 予測する生命科学・医療および創薬基盤」や分野 2 との融合研究となる課題である。

(iv) 宇宙環境学の推進

太陽活動と太陽風の研究は、プラズマ物理と深い関係にある。したがって、分野 4 のプラズマ分野との連携は、重要性が高い。

また、通信衛星や宇宙ステーションを太陽活動に従って制御することは、地上災害からの防災を宇宙スケールにまで拡大した“宇宙防災”である。よって、宇宙防災の推進は、HPCI 戰略プログラム「戦略分野 3：防災・減災に資する地球変動予測」と連携して進めることも重要なとなる。

(6) 公的な意見交換会とそのサマリー

2012年9月20日、日本天文学会秋季年会（大分大学）における理論天文学宇宙物理学懇談会総会において、宇宙分野の計算科学ロードマップ白書作成経緯および平成23年度版白書初稿について報告し意見の募集を行った。いただいたコメントは白書に反映させた。

2012年12月20日、理論天文学宇宙物理学懇談会メーリングリストに白書初稿を投稿し意見を求めた。また、12月23日理論天文学宇宙物理学懇談会シンポジウム（つくば国際会議場）における総会で、白書の内容を説明し、意見交換した。いただいた意見は白書に反映させた。

2013年3月27日、日本物理学会年次大会（広島大学）における素粒子論領域・理論核物理領域・（物性）領域11,9,8,7,3,4,5,6,12合同シンポジウムにて宇宙分野の平成24年度版計算科学ロードマップについて説明し意見交換を行った。

ロードマップ

宇宙史の探求

| 年代 課題 | 2012 ~ | 2014 ~ | 2016 ~ | 2018 ~ | 2020 ~ | 2022 ~ |
|-------------------------------------|--------------------------------------|--------|--------|---|--------|--------|
| 自己重力N体／流体シミュレーションによる宇宙構造形成の解明 | 大粒子数・小時間刻み数・短時間積分で兆を超える粒子数での計算 | | | 惑星形成に必要な長時間積分を高い効率で行いブレークスルーを目指す | | |
| 輻射流体力学による銀河と巨大ブラックホール形成過程の解明 | 5次元に近似した輻射流体力学計算 | | | 完全な6次元輻射流体力学計算 | | |
| 6次元位相空間上のBoltzmann方程式による無衝突粒子系力学の探究 | 有限体積法による6次元位相空間での萌芽的計算 | | | 有限体積法による6次元位相空間での高精度計算 | | |
| ダークマター宇宙における宇宙暗黒時代の進化の解明 | 初期天体形成計算、大域的輻射輸送計算、小領域水素分布計算の個別発展的計算 | | | 初期天体形成と輻射輸送および水素分布計算を整合的に連成した宇宙進化シミュレーション | | |
| 自己重力輻射流体力シミュレーションによる銀河スケール星間ガス進化の解明 | 銀河の小領域や疎分解能での星間ガスシミュレーション | | | 銀河スケールの多層構造を反映した銀河と星間ガスシミュレーション | | |
| 輻射磁気流体力計算による天体降着流・噴出流の研究 | 降着円盤の一部での3次元拡散入輻射流体力近似計算の高度化 | | | 降着円盤全体を含む6次元輻射輸送+磁気流体力計算 | | |

図4.5.1-1 宇宙史の探求ロードマップ

新たな物理の探求

| 年代 課題 | 2012 ~ | 2014 ~ | 2016 ~ | 2018 ~ | 2020 ~ | 2022 ~ |
|----------------------------------|--|--------|--------|--|--------|--------|
| 数値相対論によるブラックホールの形成と強重力現象の解明 | 4つの基本相互作用を組み込んだ相対論的輻射輸送計算の開発と発展 | | | 4つの基本相互作用を組み込んだ相対論的輻射輸送計算(7次元輻射輸送計算が目標) | | |
| 相対論的輻射流体計算による超新星爆発メカニズムの探究 | ニュートリノ輻射輸送を近似的に取り入れた計算 | | | 非球対称物質中の完全6次元ニュートリノ輻射輸送を取り込んだ計算 | | |
| 相対論的粒子計算による超高エネルギー現象と粒子加速機構の探究 | 相対論的プラズマの粒子加速計算のための輻射減衰を取り込んだ計算の開発と検証 | | | 超高エネルギー天体現象や超高強度光子場での相対論的プラズマ領域での研究 | | |
| 6次元プラソフシミュレーションによるプラズマ非熱的分布形成の解明 | 空間1~2次元・速度空間3次元近似のプラソフ法による電磁プラズマシミュレーション手法の確立と発展 | | | 空間3次元速度空間3次元の6次元 プラソフ法による電磁プラズマシミュレーション | | |

図 4.5.1-2 新たな物理の探求ロードマップ

惑星形成と宇宙生物学の探求

| 年代 課題 | 2012 ~ | 2014 ~ | 2016 ~ | 2018 ~ | 2020 ~ | 2022 ~ |
|---------------------------|--------------------------------------|--------|--------|-------------------------------------|--------|--------|
| 惑星系形成のシミュレーション | 狭い円環領域における複数個の惑星形成計算 | | | 10天文単位にわたる広域を対象とした長時間の惑星形成計算 | | |
| 地球・惑星形成のシミュレーション | 原始惑星の巨大衝突による月形成や地球内部構造の形成過程の解明計算の進展 | | | 各物理過程の高精度化と過程の複合連成による惑星形成の高精度計算 | | |
| 惑星表層環境の形成と進化シミュレーション | 地球表層環境シミュレーションの地球外惑星表層環境シミュレーションへの展開 | | | 多様な環境パラメータに対する高サンプル惑星表層環境シミュレーション | | |
| 量子計算による宇宙アミノ酸生成と光不斉化過程の探究 | 円偏光波によるアミノ酸の電子励起状態の量子力学計算 | | | 円偏光波によるアミノ酸、アミノ酸前駆体の陽子・電子量子ダイナミクス計算 | | |

図 4.5.1-3 惑星形成と宇宙生物学の探求ロードマップ

宇宙環境学の推進

| 年代 課題 | 2012 ~ | 2014 ~ | 2016 ~ | 2018 ~ | 2020 ~ | 2022 ~ |
|----------------------------|--|--------|--------|--|--------|--------|
| 輻射磁気流体計算による太陽恒星ダイナモの探究 | 疎解像度低レイノルズ数での磁気流体計算による太陽磁気周期活動の理解 | | | 高解像度大レイノルズ数での磁気流体計算による太陽磁気周期活動の解明 | | |
| プラズマ計算による太陽圏・宇宙空間無衝突衝撃波の研究 | 太陽圏における衝撃波に対するプラズマ粒子計算による衝撃波粒子加速の計算 | | | 超新星による衝撃波に対するプラズマ粒子計算による衝撃波粒子加速の計算と衝撃波粒子加速機構の統一的理解 | | |
| 宇宙天気予報に基づく太陽系環境科学の推進 | 太陽活動と太陽地球システムダイナミクスのメカニズム探索計算と、予測技術の開発 | | | 太陽面と太陽コロナ精密観測とのデータ駆動シミュレーションによる宇宙天気予報 | | |

図 4.5.1-4 宇宙環境学の推進ロードマップ

参考文献

- [1] 「天文学・宇宙物理学の展望と長期計画」日本学術会議物理委員会天文学・宇宙物理学分科会（2010）[<http://www.scj.go.jp/ja/member/iinkai/kiroku/3-0319.pdf>]

4.5.2 素粒子

(1) 現在行われている課題

素粒子物理学が目指すもの

我々が生きている自然界には幅広い階層性が存在する。これまで人類はその英知を駆使して階層ごとの自然現象を記述する物理法則を探求してきた。現在我々がいまだ完全には理解できていない階層として、自然界の最小構成要素である素粒子の階層と、広大なスケールを扱う宇宙の階層がある。これら両極端の階層は人類の発展と理解が進むとともに新たな階層が現れてくるという自然科学のフロンティアでもある。素粒子物理学の目的は、より深い階層を探ることによって素粒子の世界を記述するより根源的かつ統一的な基本理論を探求するとともに、得られた基本理論を用いて宇宙の始まりから現在に至るまでの進化の過程を解明・理解することにある。このような研究活動を通じて得られた科学的知見は直ちに現在の我々の日常生活の質の向上につながるものではないかもしないが、発見された物理法則や世界認識の視点、科学的成果等は普遍性を持って人類共通の知的財産となり、文化遺産として遠い将来まで引き継がれて行くものである[1]。

自然界は強い力、電磁気力、弱い力、重力の4つの力によって支配されており、重力を除く他の相互作用は「標準理論」と呼ばれる体系によって記述できることが知られている。しかしながら、重力の量子効果や標準理論に含まれるパラメータの起源等は標準理論の枠内では解決できない問題であるため、これらを説明する新しい自然階層の存在が期待され世界的に活発な理論的・実験的研究が進められてきている（図4.5.2-1参照）。素粒子加速器実験には大きく分けて二つの相補的アプローチがある。一つはエネルギー フロンティア型の実験であり、加速粒子の衝突エネルギーを上げることによって新しい粒子・物理現象の発見を目指す[2]。現在欧州原子核研究機構（CERN）において稼働中の LHC（Large Hadron Collider）が典型例である。エネルギー フロンティア型の場合、通常の標準理論を超える新しい理論を想定して実験が計画・推進される。もう一つのアプローチはルミノシティ フロンティア型の実験である。粒子の衝突イベント数增加による統計精度の向上によって標準理論からのズレを検出し、新しい物理の手がかりを得ようというものである。代表的なものとして高エネルギー 加速器研究機構（KEK）におけるスーパーKEKB 計画や KEK と日本原子力研究開発機構（JAEA）が共同で建設した J-PARC におけるミューオン実験が挙げられる。これらのアプローチでは、高精度の実験結果に対応して、標準理論を定量的に高い精度でコントロールする必要がある。このような加速器実験の現状も踏まえつつ、本稿では以下の5つの計算素粒子物理の課題について、その短・長期的目標とそれを達成するために必要な計算スペックを検討する。

- i) 格子量子色力学（格子 QCD）
- ii) テクニカラー理論の非摂動ダイナミクス
- iii) 量子電磁気学（QED）の高次補正計算（多倍精度演算）
- iv) ファインマン振幅の自動計算（4倍精度演算）
- v) 超弦理論シミュレーションで探る時空の量子ダイナミクス

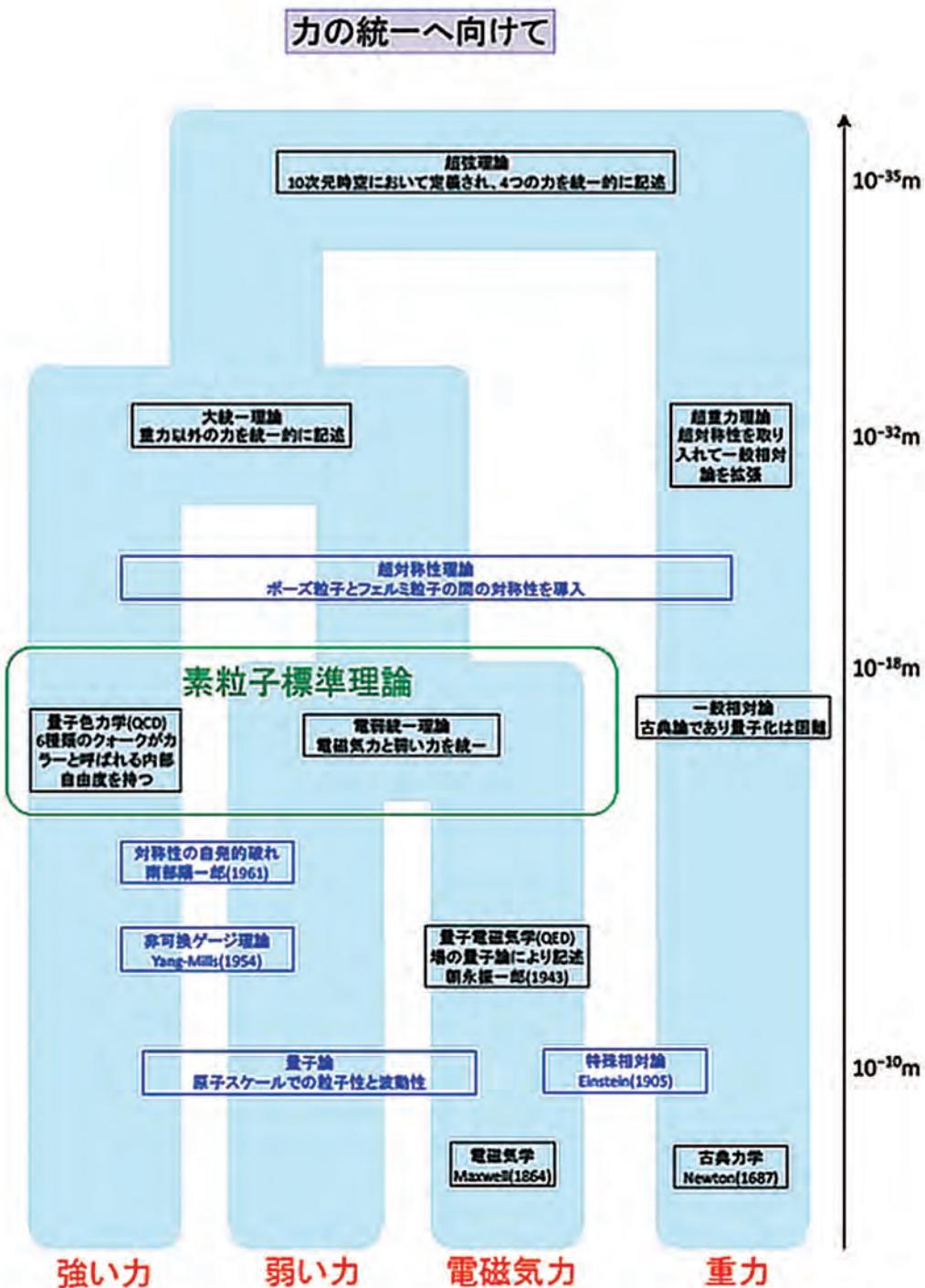


図 4.5.2-1 自然界に存在する力の構造

「京」での研究課題

HPCI 戦略分野 5 の素粒子物理分野の課題として「格子 QCD による物理点でのバリオン間相互作用の決定」が設定されている。格子 QCD は、1974 年 Wilson によって提唱され、1981 年頃から高性能計算機の登場とともに実際の数値計算が始まった。それ以来、格子 QCD は常に世界最高レベルのスーパーコンピュータを用いた大規模計算によって計算素粒子物理学を牽引してきた。ここでは格子 QCD 研究の歴史を概観し、「京」での研究課題にどのようにつながっているのかを簡単に説明する。

標準理論において強い相互作用は QCD により記述され、原子核や陽子・中性子の性質をその構成要素であるクォークとグルーオン（相互作用を媒介する粒子）の力学から説明する。しかしながら、強い力は陽子・中性子の大きさ程度の距離 (10^{-15}m) 以上では相互作用が大きいために摂動論（一種の近似）による解析的取り扱いが難しく、何らかの非摂動的な（つまり、近似によらない）計算手法が必要になる¹。格子 QCD はその要請に応えるものであり、空間 3 次元と時間 1 次元を離散化することによって QCD を格子上で定義し、モンテカルロ法による数値計算を用いて非摂動的な理論的予言を可能とする。

格子 QCD の数値計算が始まった当初は、クォークの真空偏極効果を無視することによって計算コストを抑えた、いわゆるクエンチ近似を用いた小規模計算に限定されていた。その後計算機性能は着実に向上し、1990 年代中頃には 600GFLOPS 程度のピーク性能を持つ計算機を用いることによってクエンチ近似計算でのハドロン質量は 10% の精度で実験値を再現したが、同時に、数% の精度で実験値と一致させるにはクエンチ近似では不十分でありクォークの真空偏極の寄与が必要であることも明らかとなった。これにより、研究の焦点はクォークの真空偏極効果を取り入れた近似のない計算へと移行し、現在数百 TFLOPS から 1PFLOPS 相当のピーク性能を持つ計算機を用いたハドロン質量再現の試みは誤差を数% 以下に抑えた非常に高精度なものとなっている。また、標準模型においてクォークの力学を記述する部分（クォークセクター）のパラメータを決定するために必要な各種ハドロン行列要素の計算に関しても、近似を排すことによって高精度化が推し進められている。

2000 年代に入り、10TFLOPS を超えるピーク性能を持つ計算機が利用できるようになると格子 QCD 研究に二つの新たな流れが加わった。一つは、格子カイラル対称性を保持した計算である。カイラル対称性は QCD の持つ特徴的な性質の一つである。しかしながら、格子カイラル対称性を保持した計算はそれを保持しない計算に比べて計算コストが 10 倍以上必要なため、扱える物理的体積が小さくなってしまったり、格子間隔が粗くなってしまう。そのため格子カイラル対称性を保持した計算はその対称性が本質的な役割を果たす物理量の計算に主眼をおいて推し進められている。もう一つの流れは、QCD のダイナミクスを表すハドロン間相互作用の研究である。具体的には、不安定粒子の崩壊、ハドロン同士の散乱・束縛状態、核力を含むバリオン間力、クォークを自由度とした原子核の直接構成などの課題が挙げられる。これまででは主に孤立したハドロンの静的な性質が調べられてきたが、ハドロン間相互作用の計算では複数のハドロンを扱うため、より大きな物理体積を必要とする。これまででは計算コストを抑え

¹よく知られている電磁気力では相互作用が十分小さいため、摂動論的に精度の高い計算が可能となる。

るために現実世界よりも重いクォーク質量を用いた計算が中心であったが、現在では積年の目標であった現実的なクォーク質量での計算（物理点計算）が可能となってきた。

このような状況の下、「京」での研究課題「格子 QCD による物理点でのバリオン間相互作用の決定」が目指すものは、微細化とマルチスケール化を鍵とする格子 QCD 計算の新しい展開である。微細化とは、電磁相互作用やアップ・ダウンクォークの質量差を取り入れたシミュレーションの実現を意味する。物理点計算が可能となったことにより、格子 QCD 計算は誤差 10% レベルの段階から誤差 1% レベルの精密計算の時代を迎えつつある。それにともなって、たかだか 1% 程度と考えられている電磁相互作用やアップ・ダウンクォークの質量差の効果を正しく評価する必要性が認識され始めている。他方、マルチスケール化とは格子 QCD を用いてバリオン 2 体間の有効相互作用を調べたり、更には核子の束縛状態である原子核の直接構成を行うことを意味する。前者が従来の原子核研究の延長・発展であるのに対して、後者はクォーク・グルーオンを自由度とした第一原理的アプローチである。

(2) 長期的目標

(i) 格子量子色力学（格子 QCD）

格子 QCD 研究の目的は、(1)標準理論の精密化によって、より小さなスケールの階層を支配する新しい物理法則への足掛かりを探すこと、(2)宇宙の進化過程を解明するために必要な多体系物理の定量的解明・理解を進めることである。より具体的な研究項目として

- 素粒子標準模型におけるクォークセクターのパラメータの精密決定
- クォークから原子核にわたる複数階層をつなぐダイナミクスの QCD による統一的理解
- 有限温度・有限密度の物理の解明

が挙げられる。これらの研究目標を達成するために、今後格子 QCD が取り組むべき課題は大きく分けて、(a)格子カイラル対称性を保持した計算の進化、(b)複数の階層を取り入れることのできる大きな物理的体積や小さな格子間隔での計算の進化、(c)有限温度・有限密度計算の進化に分類される。以下それぞれの課題について科学的意義を述べる。

(a) 格子カイラル対称性を保持した計算の進化

標準理論はすべてカイラル対称性を持つフェルミオンから構築されており、QCD も例外ではない。特に標準理論におけるクォークセクターのパラメータの精密決定に関しては、格子カイラル対称性を保持した計算は理論的に大きな利点を持っている。しかしながら、格子カイラル対称性を保持した計算はそうでないものに比べて計算コストが 10 倍以上必要なため、大規模な計算はいまだ困難である。今後、格子カイラル対称性を保持した計算を効率的に実行するためのアルゴリズム的進展が望まれる。

格子カイラル対称性を保持した計算の重要性は QCD のみにとどまらない。QCD とともに標準理論を構成する電弱統一理論はカイラルなゲージ対称性に基づいており、そのダイナミクスにおいて本質的な役割を果たす。しかしながら、この対称性は QCD の持つカイラル対称性よりも複雑な構造を持っており、現在のところ実際の数値計算は非常に困難である。また、標準理論よりも一段深い階層の物理を記述する理論の候補である超対称性理論においてもカイラ

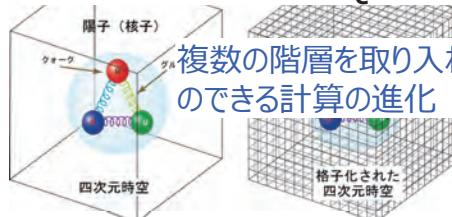
ル対称性は重要である。格子上における超対称性の定式化が困難であるために数値的研究は進んではいないが、もし現在稼働中の加速器 LHCにおいて超対称性粒子が発見されれば、超対称性を持つゲージ理論の非摂動的な側面の研究が必要になってくる。

(b) 複数の階層を取り入れることのできる大きな物理的体積や小さな格子間隔での計算の進化

自然科学の発展は実験による新たな階層の発見と、既存の物理法則を統合的に説明する新しい物理法則の構築を積み重ねてきた。強い相互作用においても歴史的には原子核の階層 \Rightarrow 核子（陽子・中性子）の階層 \Rightarrow 素粒子であるクォークの階層という深化のプロセスをたどってきた。現在、強い相互作用を記述する理論は QCD であると信じられているが、そうであれば格子 QCD 計算は原子核階層での従来の物理法則を矛盾なく説明するとともに、それを超える理論的予言が可能なはずである。そのためには、クォークの階層と原子核階層を同時に取り扱わなければならず、大きな物理的体積での計算が必要となる（図 4.5.2-2 右参照）。宇宙における鉄より重い元素の合成過程は素粒子の階層と原子核の階層にまたがる物理現象であり、格子 QCD を用いた第一原理計算が果たす役割は大きい。

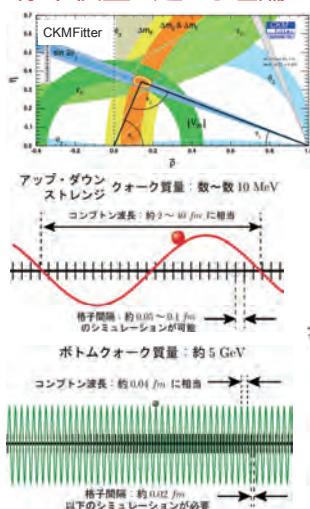
標準理論が記述する階層よりも更に一段深い階層の新しい物理を探るために、エネルギー フロンティア型とルミノシティフロンティア型の 2 種類の実験的アプローチがあることは先に述べたとおりである。KEK によって推進されているスーパー KEKB 計画は後者のタイプの実験であり、その目的は B ファクトリー実験の更なる精緻化によって、標準理論による理論的予言（理論値）と実験値とのズレを見出すことである。この実験はボトムクォークを含むハドロン行列要素の精確な理論的評価を要求するが、そのためには 1 fm オーダーの QCD の特徴的スケールとその 1/10 程度の長さであるボトムクォークの波長を同時に取り扱う必要がある。いまのところ計算機性能の制約から格子間隔はボトムクォークの波長よりも粗いものとなっておりボトムクォークの直接的な取り扱いは困難な状況にあるが、重いクォークの有効理論などを使うことでその困難を解決し、ボトムクォークを含むハドロン行列要素の精密計算を目指して行く（図 4.5.2-2 左参照）。

格子量子色力学 (QCD)



複数の階層を取り入れること
のできる計算の進化

重いクォークの物理から 標準模型を超える理論へ



- ボトムクォークの精密物理と格子 QCD による高精度計算の比較から素粒子標準模型のスレを見いだす可能性

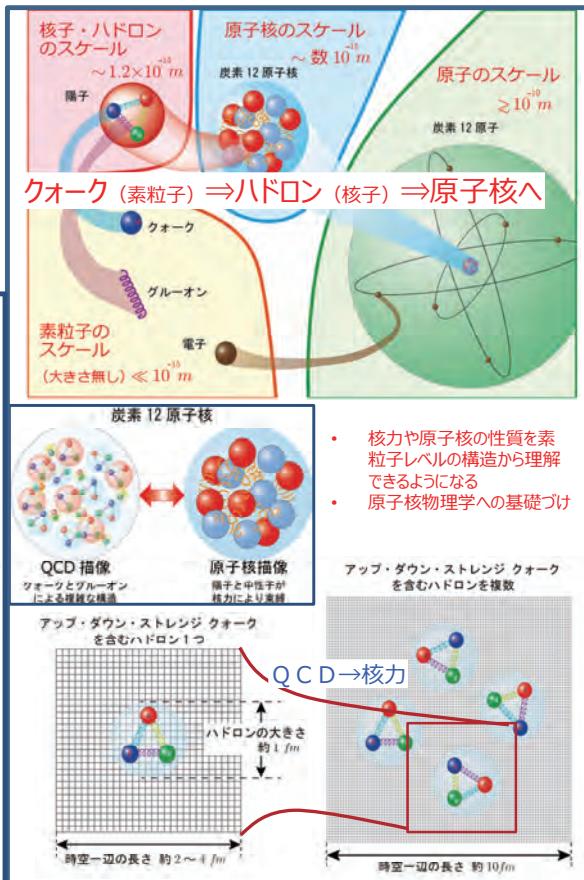
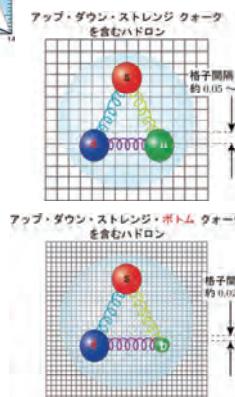


図 4.5.2-2 長期的目標 複数の階層を取り入れることのできる計算の進化 (CKM Fitter 図[3])

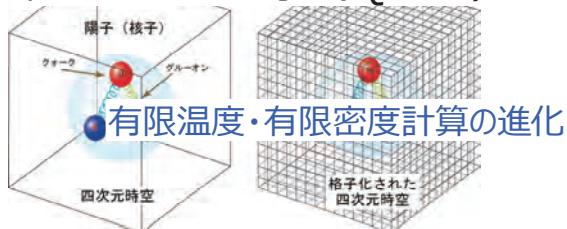
(c) 有限温度・有限密度計算の進化

現在の宇宙の姿はビッグバンによる宇宙開闢後のミクロなスケールにおける物理現象の帰結であると考えられている。例えば QCD は宇宙初期のような高温ではクォーク・グルーオン・プラズマ相を、現在のような“冷えた”状態ではハドロン相を予言する。また、低温高密度における QCD の相構造解析は、超新星の爆発メカニズムの解明や、中性子星などの高密度天体の内部状態を知るうえで必須である。QCD は温度と密度の関数として多様な相構造を持つことが期待されているが、その全貌を実験的に解明することは不可能であり、格子 QCD による第一原理計算への期待は大きい（図 4.5.2-3 参照）。

しかしながら、有限密度計算におけるモンテカルロ法の符号問題のために、歴史的にはゼロ密度における有限温度相転移の研究が重点的に進められてきた。現在相転移温度や状態方程式（熱力学量間の関係式）の計算は精密測定と呼べる段階に入っている。今後は流体力学的性質を表す輸送係数などの物理量を計算し、相構造のより詳細な解析と理解を目指す。

他方、有限密度計算において現在広く用いられている方法の一つは、クォークの化学ポテンシャル μ について $\mu=0$ のまわりで級数展開を行い物理量を評価する試みである。残念ながらこの方法は収束半径による制約から低密度領域でしか有効ではない。真に興味深い相構造は高密度側で予想されているため、その領域を開拓できる計算手法が確立されれば新たな物理学の地平が開けるはずである。

格子量子色力学 (QCD)



極限状態でのミクロの階層構造と物質の物理

- 宇宙誕生直後や中性子星、超新星爆発などの高エネルギー・高密度状況下での物質の性質を知ることができる。
- 有限温度・有限密度における相構造解析
- クオーケ→ハドロン→原子核つながる階層構造の諸性質解明

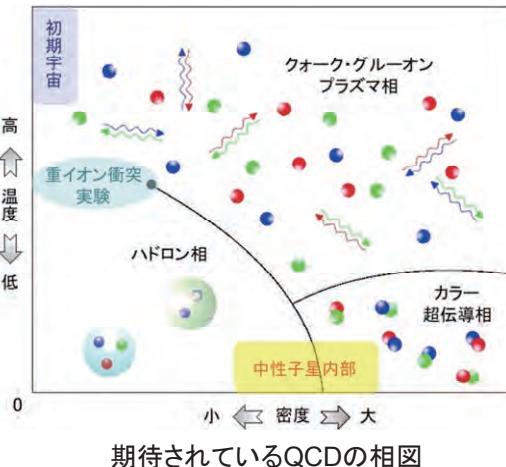


図 4.5.2-3 長期的目標 有限温度・有限密度計算の進化

(ii) テクニカラー理論の非摂動ダイナミクス

標準模型において、すべての素粒子の質量の起源はヒッグス場の凝縮によって説明される。2012年7月、CERNのLHCにおいてヒッグス粒子“らしきもの”が発見されたとの報道がなされたことは記憶に新しい。今後より詳細な解析を経て最終的な論文が発表される予定である。では、素粒子物理学は標準理論の実験的検証によって終焉を迎えるのであろうか？実は、標準理論には理論的に不自然な点あるいは不満足な点が存在することが早くから指摘されており、そのためこれが究極の理論だとは考えられていない。例えば、ヒッグス場のような基本的な場の凝縮のエネルギー・スケールは量子論的に不安定であることが挙げられる。ただし、これまでの実験結果により標準理論が $1\text{TeV}=1000\text{GeV}$ より下のエネルギー・スケールの物理現象を非常によく記述していることが確認されているため、 1TeV を超えるような高いエネルギー・スケールに新しい物理理論が存在し、標準理論の枠内では説明できない素粒子物理学上の疑問に対する答えを与えてくれることが期待されている。

これまで、標準理論を超える新しい物理理論として数多くのものが提案されている。テクニカラー理論もその一つであり、ヒッグス場の凝縮を“複合粒子”的な凝縮に置き換えることによってエネルギー・スケールの不安定性の問題解決を目指していることが大きな特徴である（図4.5.2-4）。この理論はQCDに似た理論的構造を持っているため解析的な取り扱いが難しく、非摂動ダイナミクスを数値的に解く必要がある。ただし、QCDとは異なる困難として、理論を構成するゲージ群の種類・表現とフレーバー数（QCDはSU(3)群の基本表現で6フレーバー）が確定しておらず、両者の組み合わせを系統的に試すことによって有力候補を絞り込む必要がある。そのため、提案から30年以上経った現在に至るまで定量的な予言はほとんどなされてこなかった。しかしながら、近年の計算機能力の飛躍的向上と新規計算手法・アルゴリズムの開発により、テクニカラー理論の非摂動ダイナミクスをゲージ群の種類・表現とフレーバー数を変えながら系統的に調べることが可能になり、今後の発展が期待されている。

(iii) 量子電磁気学（QED）の高次補正計算（多倍精度演算）

量子電磁気学（QED : Quantum Electrodynamics）は、量子論と特殊相対論を統合した「場の理論」で記述される。1940年代、朝永振一郎、J. Schwinger、R. Feynman らによる繰り込み手法に基づく定式化によって完成した（1965年ノーベル物理学賞共同受賞）。QEDにおける場の理論の成功がその後の標準理論の礎となっており、素粒子物理学の発展における歴史的役割はきわめて大きい。

QEDは現在実験的に最も高い精度で検証されている理論であり、素粒子物理学的に重要な研究対象として電子とミュー粒子の異常磁気能率がある。磁気能率は通常 g で表され、QEDによる補正がなければその値は厳密に 2 と予想されている。そのため g の 2 からのズレを表す $g-2$ という量は異常磁気能率と呼ばれている。便宜的に $g=2 \times (1+a)$ と表すと、現時点では電子の異常磁気能率に関する最も高精度の実験結果は 2008 年ハーバード大グループによるもので、 $a=0.00115965218073(28)$ で与えられている。その相対誤差は 0.24ppb であり、 10^{-9} レベルという驚くべき精度である（図 4.5.2-4 参照）。他方、理論的に a を計算する場合には、電磁相互作用の強さを表すパラメータ α （微細構造定数）による摂動展開を行う：

$$a \text{ (理論)} = \alpha A_2 + \alpha^2 A_4 + \alpha^3 A_6 + \alpha^4 A_8 + \alpha^5 A_{10} + (\alpha \text{ の高次項}) + (\text{QED 以外の寄与})$$

ここで、展開係数 $A_{2n}(n \geq 4)$ の評価のために数値計算が必要となる。電子の場合とミュー粒子の場合の重要な違いは QED 以外の寄与の大きさであり、そこから両者の研究目的が異なってくる。電子の場合は QED 以外の寄与が小さいため、実験値と理論式を等しいとして微細構造定数 α を現時点で 0.25ppb の精度で決めることが可能である。電磁相互作用は物理のあらゆる分野に関わっており、微細構造定数 α は原子物理や物性物理における異なる物理現象からも決定することができる。特に、近年の原子物理実験の発展によって、電子異常磁気能率に比肩する精度の α の値が得られるようになってきた。これらの α を相互比較することで、QED の検証、それを含む標準理論の検証、更に広く物理理論の体系をも検証することを目的とする。他方、ミュー粒子の場合はその質量が電子の約 200 倍重いため、より高いエネルギーの現象に敏感である。そのため、ミュー粒子の異常磁気能率では $0.1\text{ppm}(10^{-6})$ 程度の精度で未知の重い粒子の影響が見えるのではないかと期待されている。そのためには、実験および理論の双方がこの ppm 以下の精度を達成し、両者の差異を確定させることが必要である。現在 J-PARC でミュー粒子異常磁気能率実験の準備が精力的に進められており、理論側は QED の寄与を精確に決定することが求められている。

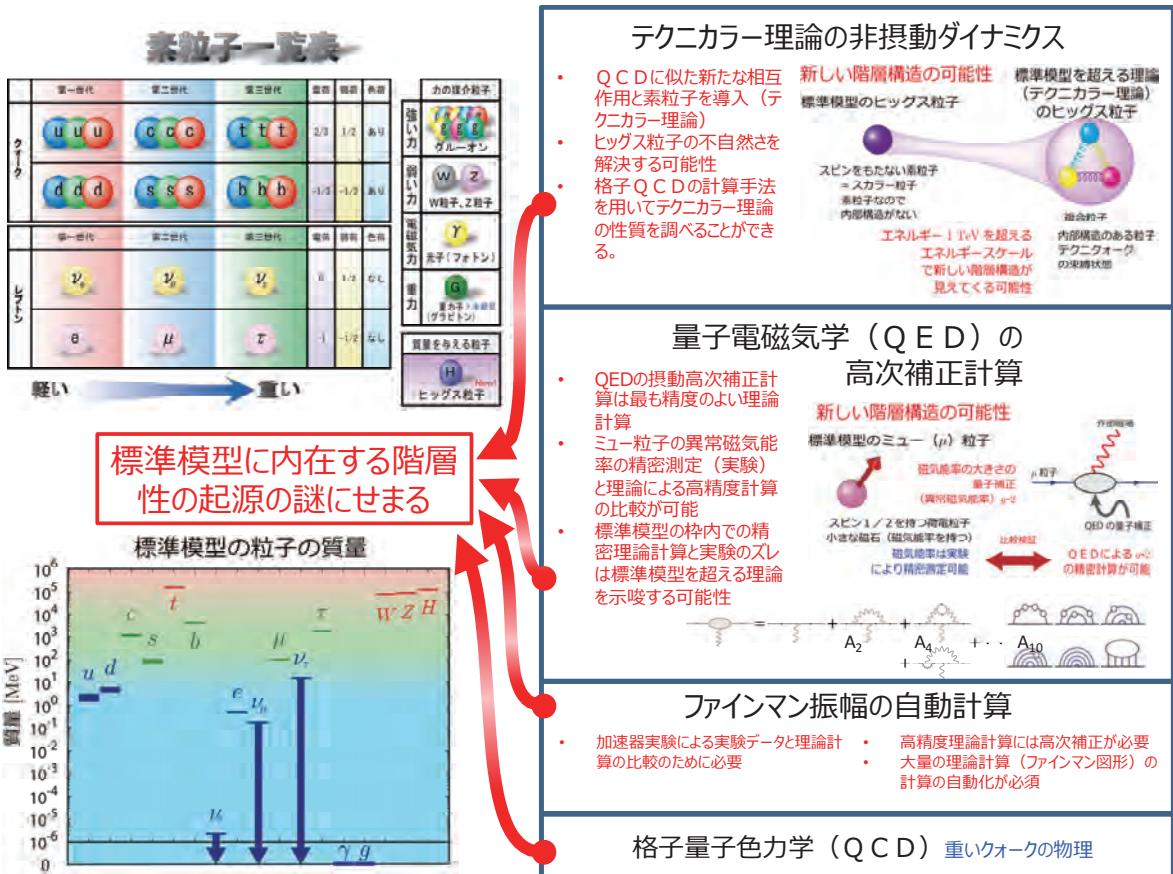


図 4.5.2-4 長期的目標 テクニカラー理論の非摂動ダイナミクス、量子電磁気学 (QED) の高次補正計算、ファインマン振幅の自動計算

(iv) ファインマン振幅の自動計算 (4 倍精度演算)

大型加速器などによる素粒子反応実験に対しては、理論から素粒子の反応確率や運動量分布などを計算し、実験データと比較することが必要である。またシグナルと類似の現象（バックグラウンド）がどのくらい混入するかも予測が必要であり、これらの計算なしには、実験から有意な結論を導くことは困難である。反応確率や分布の計算は相対論的量子場理論を摂動論的に計算する手法が定式化されている。摂動展開を数値的に評価する場合は展開係数をファインマン図で表し、それぞれの図形の表現する多次元積分を計算する方法が一般的である。前出の QED の高次補正計算もこの一例であるが、ここでは QED に限定せず、標準理論全体およびそれを超えるような新しい理論も対象とする。多種多様な素粒子反応の散乱断面積をこのような手法で数値計算するシステムをファインマン振幅自動計算と呼び、わが国をはじめ、ロシア、フランス、米国などで開発されてきており、90 年代には CERN の LEP-II 実験、現在は LHC 実験などのデータ解析に貢献している（図 4.5.2-4 参照）。

(v) 超弦理論シミュレーションで探る時空の量子ダイナミクス

一般相対論では約 100 年前に Einstein によって構築され、重力は時空（時間と空間）の曲がり方で表される。例えば、物質が運動すれば時空の曲がり方が変化する。仮に何も物質が存在しなくとも、時空の曲がり方は波として伝播することが可能である（重力波）。しかしながら、

重力の量子効果が重要な役割を果たす宇宙初期やブラックホールの研究においては、一般相対論の有効性は限定的である。なぜなら、一般相対論は量子論的効果が考慮されていない古典力学的な理論であり、量子論との統合がきわめて困難だからである。現在、重力の量子論として最も有望な候補は超弦理論だと考えられている。超弦理論においては、宇宙の最小基本要素はプランク長 (10^{-35} m) 程度の有限の大きさを持った弦だと考える。一般相対論の単純な量子化における困難は最小基本要素を大きさを持たない点として扱うことに起因しているが、超弦理論では最小基本要素を広がりを持った弦だと考えることによりその困難を回避している。また、超弦理論のもう一つの魅力的な特徴として、弦の振動の仕方によりさまざまな粒子（標準理論に現れるすべての粒子を含む）を表現することができる点である。これは、超弦理論が重力、強い力、弱い力、電磁気力という4つの力の統一的に記述する理論である可能性を示唆している。では、本当に現実世界を記述している究極の理論なのだろうか？今後、超弦理論の構造をより深く理解し、現実世界を記述する理論としての可能性を検証することが長期的目標と言える。

超弦理論の大きな問題は、理論の礎である最小基本要素が実験によって直接検証することが不可能なほど小さいことである。ちなみに、LHC 実験において調べられているスケールは 10^{-19} m 程度である。そのため、理論が正しいことを実証するためには現実世界との整合性を示す証拠の断片を積み重ねていく必要があり、解析的な手法および超弦理論の非摂動的定式化である行列模型を用いた数値シミュレーションによって活発な研究が行われている。

(3) 次世代に解決すべき課題

(i) 格子量子色力学（格子 QCD）

(a) カイラル対称性と QCD に基づく有効バリオン間相互作用の決定とその応用

格子 QCD 計算を用いた有効バリオン間相互作用の決定により原子核・ハイパー核の統一的記述を目指す。実験データ量の不足から不定性が大きいハイペロン間力や3核子間力に対し、格子 QCD 計算によって得られたバリオン間の有効ポテンシャルの情報を提供することで、天体物理においても重要な役割を果たす不安定核やハイパー核の理解を発展させる。同時に有効バリオン間相互作用を応用して状態方程式を決定し、中性子星の構造や超新星爆発の理解を推し進める。また散乱理論と有効バリオン間相互作用を組み合わせることで多様なエキゾチックハドロンの構造解明を進める。現在これらの計算はウィルソン型作用を用いて行われているが、次世代では格子カイラル対称性を持つ5次元有効型作用を使用する。

有効バリオン間相互作用の決定のためには複数のバリオンを取り入れた格子 QCD 計算を行う必要があるため、格子の物理的空間体積は(10 fm)³以上が望まれる。また、本計算では重いクォークを含まないため格子間隔が 0.1 fm 以下であれば有限格子間隔効果をコントロールできると考えられる。

(b) 重いクォークの物理

現在計画中のスーパーB ファクトリーでは、ボトムクォークを含むハドロンの崩壊の中からまれに起こる崩壊を精密に測定することにより、標準理論が予言する CP 対称性の破れからのズレを検知することで新しい物理の発見を目指している。そのためには、実験精度に匹敵する

精度でボトムクォークを含むハドロンの崩壊の理論計算が必要となる。しかしながら、ボトムクォークは非常に重くその波長が格子間隔よりも小さくなるために、これまでの計算機性能では直接取り扱うことは困難であった。

原理的には、計算機性能の向上とともに格子間隔を小さくすることによって有限格子間隔効果による誤差をコントロールすることが可能である。エクサスケールマシンでの目標としては、格子の物理的空間体積が $(4 \text{ fm})^3$ 、格子間隔が 0.02 fm 程度の計算が一つの目安になると考えられる。この格子間隔であってもボトムクォークを直接取り扱うことは難しいが、有効理論と組み合わせることにより 1% 以下の精度の理論計算は可能であると考えられる。

(c) 極限状態でのミクロの階層構造と物質の物理

ビッグバン以降の宇宙の進化において、現在宇宙に存在する多種多様な元素・物質が素粒子から構成されていった過程を解き明かす。そのためには、フェムトスケールにおける二つのテーマを探求することが必要である。一つはクォーク \Rightarrow ハドロン \Rightarrow 原子核へとつながる階層構造の諸性質解明である。現在原子核を構成する基本自由度はクォークとグルーオンであり、その力学を記述する理論は QCD であると広く信じられている。最初の目標は格子 QCD を用いた第一原理計算によって原子核の安定構造の基本指標である魔法数を導出することである。その後、宇宙における元素合成にとって本質的な役割を果たす中性子過剰核の諸性質解明を目指す。もう一つのテーマは、温度・密度を関数とするクォーク物質の相構造解析である。これらを実験によって包括的に研究することは困難であるため、格子 QCD を用いた第一原理計算への期待は大きい。当面の課題は臨界終点の精密決定であるが、その後低温中高密度領域での相構造解析と状態方程式の決定が主要課題となる。

原子核の半径は $1.3 \times A^{1/3} \text{ fm}$ (A は質量数) 程度であることが実験的に知られているため、格子 QCD を用いた原子核の直接構成のためには格子の物理的空間体積は $(10 \text{ fm})^3$ 以上が必要だろう。また、格子間隔は 0.1 fm 以下であれば有限格子間隔効果をコントロールできると考えられるが、なるべく小さい方が望ましい。

(ii) テクニカラー理論の非摂動ダイナミクス

テクニカラー理論の非摂動ダイナミクスを探る際の鍵となる物理量として以下の 3 つが挙げられる。

- (a) 質量異常次元の計算：有限サイズの格子を利用したステップスケーリング型の計算手法を用いて大きな質量異常次元（およそ 1 が望ましい）を持つゲージ群とフレーバー数の組み合わせを調べる。
- (b) 複合粒子のスペクトラム：テクニ中間子質量とその崩壊定数、カイラル凝縮など。テクニカラー理論で期待される特徴的なスペクトラムを探索。
- (c) 多フレーバー QCD における有限温度相転移：強い一次相転移を示すフレーバー数とその質量領域を探る。

今後数年間は、小中規模の格子サイズを用いてゲージ群とフレーバー数の組み合わせを変えながら上記 3 つの物理量を調べ、ゲージ群とフレーバー数の有望な組み合わせを絞り込んで行

くことが中心課題となる。有力候補が見つかった後は大規模格子サイズを用いた精密計算へと移行し、LHC での発見可能性が議論されているテクニ中間子質量の予言を行う。

(iii) 量子電磁気学 (QED) の高次補正計算 (多倍精度演算)

電子の異常磁気能率に対して、ハーバード大のグループが更に 1 桁の精度向上を確定させる実験を計画している。これに対応して、摂動の 8 次の係数 A_8 と 10 次の係数 A_{10} の理論計算精度を更に高めることが強く求められている。実験値と理論計算の精度が現在よりも 1 桁向上すれば、電子の異常磁気能率を用いて未知の重い粒子の効果を探ることが可能になると期待されている。今後 5 年～7 年における目標は、実験精度の飛躍的向上に対応すべく、 A_8 および A_{10} の数値的評価におけるモンテカルロ積分の統計誤差を現在の半分以下に削減することである。そのため、モンテカルロ積分の計算プログラムを高度に最適化したうえで従来の精度を超える高統計計算の遂行を目指す。 A_8 と A_{10} の両者の計算においては 4 倍精度が要求されるため、4 倍精度ライブラリの開発を行うなどにより計算の高速化を図る必要がある。実験グループからの要望により、できれば 2～3 年程度で終わらせたいが、残念ながら計算資源獲得の目処は立っていない。

(iv) ファインマン振幅の自動計算 (4 倍精度演算)

将来建設が検討されている国際リニアコライダー (ILC : International Linear Collider) のようなエネルギー・フロンティア型の実験では、素粒子の衝突エネルギーが高くなり、重要なデータを得るために終状態のチャネルが多粒子系となる場合が多い。また反応を検知する測定器の感度が向上することにより、より精密で高精度な実験データが得られる。この 2 点から、対応した理論的計算においても複雑な終状態で、高次補正を入れたファインマン振幅の計算が必要となる。すでにわが国でも、1 ループ図形を含むファインマン振幅自動計算が完成し、国際リニアコライダーのエネルギー領域では弱い相互作用の 1 ループ補正の寄与が 10% 程度あることを数値的に示している。2 ループ補正についても数値化した計算が必要であるが、現在のところ、世界的に 2 ループ図形の計算まで自動化するシステムはなく、そのようなシステムの開発が急務となっている。またファインマン振幅自動計算システムでは標準理論だけではなく超対称性を取り入れた新たな理論による計算も実行可能であり、未知のエネルギー領域での新粒子・新現象の解明には、このような自動計算システムが不可欠である。

(v) 超弦理論シミュレーションで探る時空の量子ダイナミクス

超弦理論が本当に現実の世界を記述しているのかという問い合わせるうえで、大きな課題の一つが時空の次元である。我々が生きている世界は空間 3 次元と時間 1 次元を合わせた 4 次元時空であるが、実は超弦理論は 10 次元時空で定義されており現実世界を自然に説明できない。この問題に対しては、初期宇宙においては 10 次元時空が実現していたが、その後量子論的な非摂動ダイナミクスにより現在の 4 次元時空が誕生したのではないかと考えられている。この説を行列模型に基づく数値シミュレーションによって検証し、その後日常的には観測できない残り 6 次元の方向の広がりや構造の詳細を明らかにする。

(4) 課題を解決するために必要なアプリケーション群

(i) 格子量子色力学（格子 QCD）

格子 QCD 計算の大まかな流れについて説明する。格子 QCD は場の量子論に基づいて構築されており、Feynman による経路積分量子化を格子離散化されたユークリッド時空上で直接計算するものである。力学的自由度はグルーオンに対応するリンク場とクォークに対応するフェルミオン場を含み、これらの場からなる物理量は、QCD のラグランジアンを指數に持つ重みつき積分で表現される。積分の自由度は非常に巨大であるため、これらの積分の評価はモンテカルロ法で行われる。より具体的には、何らかの方法で重みを再現するようにリンク変数のアンサンブルを生成し、物理量をこのアンサンブルの上で評価し、統計平均をとることで物理量の期待値が得られる。現在、アンサンブル生成に用いられている主流の方法は、クォークの真空偏極の効果を取り入れることができる Hybrid Monte Carlo (HMC) 法である。

以上の一連の計算の流れで最も計算コストのかかる部分はクォーク伝搬関数の計算であり、全体の 8 割以上を占めている。HMC 中では分子動力学の力の計算に現れ、物理量の計算ではハドロン伝搬関数構築のため必要となる。さまざまな物理の問題においてこのクォーク伝搬関数の計算が十分速やかに行われる必要がある。

クォーク伝搬関数の計算は、大規模連立方程式を解く問題に帰着する。係数行列はクォークの運動方程式を 4 次元格子離散化したものになる。格子離散化には任意性があるが、離散化の方法により大まかに以下の 3 種類のクォーク作用が使われている。

- ① スタッガード型
- ② ウィルソン型
- ③ オーバーラップ型、ドメインウォール型（以下ではまとめて 5 次元有効型と呼ぶ）

①はここでは説明しない。ターゲットとする研究対象では②ウィルソン型と③5 次元有効型を用いる。②ウィルソン型は Wilson による格子 QCD の提唱時から長年使用されてきている。この作用はカイラル対称性を持たないが、係数行列は 4 次元格子上の 1 階差分の形になり、計算効率がよく、大規模化に向いていると言える。一方③5 次元有効型は格子カイラル対称性を持ち理論的に望ましい作用である。しかし、対称性を保持するために②ウィルソン型に比べ計算コストはおよそ 10 倍になり、計算は比較的困難である。大規模連立方程式は Krylov 部分空間反復法を用いて計算する。

エクサスケールでの研究対象では以下の作用の組み合わせと計算規模と計算スペックが必要である。

(a) カイラル対称性と QCD に基づく有効バリオン間相互作用の決定とその応用

5 次元有効型作用を用い $128^4 \times 32$ 格子 ($8^4 \times 32/\text{node}$)、格子間隔約 0.1fm 以下、物理体積約 $(12\text{fm})^4$ 以上が必要となる。

- 演算性能 : 10TFLOPS/node
- オンチップメモリ容量 : 200MB/node
- オンチップメモリバンド幅 : 6TB/s (更に上位にキャッシュがあれば 2TB/s)

- オフチップメモリ容量 : 1GB 以上
- オフチップメモリバンド幅 : 128GB/s
- ネットワークバンド幅 : 128GB/s (リンク 8 本 4 次元トーラス)
- ネットワークレイテンシ : 1μs (8 リンク同時) 反復法内でベクトルの内積計算のためのリダクション計算を高速化する必要性有り
- ストレージ容量 : 0.5~5PB
- 必要総演算量 : 実効 10^6 ~ 10^7 EFLOP
- ジョブ 1 当たりの演算量 : 実効 100EFLOP 以上

(b) 重い夸克の物理

ウィルソン型作用を用い 192^4 格子 ($16^4/\text{node}$)、格子間隔約 0.02fm、物理体積約 $(4\text{fm})^4$ 以上が必要となる。

- 演算性能 : 10TFLOPS/node
- オンチップメモリ容量 : 200MB/node
- オンチップメモリバンド幅 : 18TB/s (更に上位にキャッシュがあれば 6.3TB/s)
- オフチップメモリ容量 : 1GB 以上
- オフチップメモリバンド幅 : 128GB/s
- ネットワークバンド幅 : 128GB/s (リンク 8 本 4 次元トーラス)
- ネットワークレイテンシ : 1μs (8 リンク同時) 反復法内でベクトルの内積計算のためのリダクション計算を高速化する必要性有り
- ストレージ容量 : 10PB
- 必要総演算量 : 実効 10^6 ~ 10^7 EFLOP
- ジョブ 1 当たりの演算量 : 実効 50EFLOP 以上

(c) 極限状態でのミクロの階層構造と物質の物理

ウィルソン型作用を用い 256^4 格子 ($16^4/\text{node}$)、格子間隔約 0.05fm、物理体積約 $(12\text{fm})^4$ 以上が必要となる。

- 演算性能 : 10TFLOPS/node
- オンチップメモリ容量 : 200MB/node
- オンチップメモリバンド幅 : 18TB/s (更に上位にキャッシュがあれば 6.3TB/s)
- オフチップメモリ容量 : 1GB 以上
- オフチップメモリバンド幅 : 128GB/s
- ネットワークバンド幅 : 128GB/s (リンク 8 本 4 次元トーラス)
- ネットワークレイテンシ : 1μs (8 リンク同時) 反復法内でベクトルの内積計算のためのリダクション計算を高速化する必要性有り
- ストレージ容量 : 2PB
- 必要総演算量 : 実効 10^6 ~ 10^7 EFLOP
- ジョブ 1 当たりの演算量 : 50EFLOP 以上

(ii) テクニカラー理論の非摂動ダイナミクス

基本的に格子 QCD シミュレーションと同じ枠組みの計算であるが、ゲージ群とその表現の選び方とフレーバー数の自由度が付加される。特に、計算コストおよび必要メモリはフレーバー数に比例して増大する。現在典型的なフレーバー数は 10 程度である。

以下では典型例として、SU(3)ゲージ群の基本表現で 10 フレーバーの場合を 5 次元有効型作用を用いて $96^4 \times 32$ 格子 ($6^4 \times 32/\text{node}$) でシミュレーションすることを考えた場合の計算スペックを示す。

- 演算性能 : 5TFLOPS/node
- オンチップメモリ容量 : 200MB/node
- オンチップメモリバンド幅 : 18TB/s (更に上位にキャッシュがあれば 6TB/s)
- オフチップメモリ容量 : 7GB 以上
- オフチップメモリバンド幅 : 128GB/s
- ネットワークバンド幅 : 128GB/s (リンク 8 本 4 次元トーラス)
- ネットワークレイテンシ : $1\mu\text{s}$ (8 リンク同時) 反復法内でベクトルの内積計算のためのリダクション計算を高速化する必要性有り
- ストレージ容量 : 500TB (配位のみ)
- 必要総演算量 : 実効 $10^6 \sim 10^7$ EFLOP
- ジョブ 1 当たりの演算量 : 実効 200EFLOP 以上

(iii) 量子電磁気学 (QED) の高次補正計算 (多倍精度演算)

電子の場合もミュー粒子の場合も、摂動展開の係数 $A_{2n}(n \geq 1)$ は運動量空間における多次元積分の和の形で表され、これを解析的に多次元パラメータ空間に変換した後、モンテカルロ法を用いて数値的に評価する。異常磁気能率に対する QED の高次摂動計算は、木下東一郎 (ヨネル大)を中心とした日本人研究グループ独自の数値的アプローチによってのみ計算されてきた。現在ターゲットとなっているものは摂動の 8 次の係数 A_8 と 10 次の係数 A_{10} である。素粒子の反応は、視覚的に理解しやすいように図形化された「ファインマン図」で表され、各々の多次元積分はこのファインマン図に対応している。重要な特徴として、 $A_{2n}(n \geq 1)$ は n 重のループを含むファインマン図で表される。例えば、10 次の場合 1 万個以上という膨大な数の 5 ループを含むファインマン図を数値的に評価する必要がある。数値計算における特徴として以下の点が挙げられる。

- (a) 被積分関数が長大であること。10 次ではすべてのファインマン図の寄与を合わせると 1 億行程度の長さになる。
- (b) 紫外 (運動量が大きい) および赤外 (運動量が小さい) 領域での発散の処理手続きにおいて大きな桁落ちが発生するため、4 倍精度の実数計算が必要である。
- (c) モンテカルロ積分において、多次元運動量空間 (8~13 次元) の各点における被積分関数の評価は独立であるため、通信をほとんど必要としない embarrassingly parallel 的な処理が可能である。

また、必要総演算量は $10^3 \sim 10^4$ EFLOP である。被積分関数の評価点の数で並列化可能であり、評価点の数はイタレーション当たり 10 億から 100 億点を用いる。これを SIMD とコア並列の両方に適宜振り分ければよく、どのような階層性を持つ並列計算機の構成にも対応できる。必要メモリ容量は並列化の実装の詳細によるが、コア当たり 1GB 程度を目安として見込んでおけばよい。また、計算に必要なストレージ容量は総計 1TB で十分である。その他の要望として以下が挙げられる。

- 倍精度および 4 倍精度演算に対するコンパイラの高度な自動 SIMD 化
- プログラムが巨大であるため、コンパイル速度も重要
- 高度に最適化された 4 倍精度ライブラリの提供
- プログラム言語のポータビリティ

(iv) ファインマン振幅の自動計算（4 倍精度演算）

基本的に QED の高次補正計算と同じ枠組みの計算であるが、大きな違いとしては、一つは対象が QED に限定されない点、もう一つは反応の終状態が多岐にわたる点が挙げられる。これにより QED の高次補正計算よりも格段に複雑な計算となっている。

この点を理解するために、電子・陽電子衝突で電弱統一理論に基づく事例を考える。終状態が WW の 2 体、WW γ の 3 体、WW $\gamma\gamma$ の 4 体では、摂動展開の最低次の項（ループ図形を含まない）におけるファインマン図の数は 3 個、18 個、138 個となる（W、 γ は各々ウィークボゾン、光子と呼ばれる素粒子を表す）。摂動展開の最初の補正となる 1 ループ図形では、WW の 2 体でもファインマン図は 129 個となり、4 体ともなれば数千個となる。なお、これに対応する QED 補正計算における A_2 では、1 個のファインマン図のみ必要である。

実験精度が高まれば、摂動展開の更に高次のファインマン振幅の計算が必要とされるが、ファインマン図の数は展開次数の増加と共に指数関数的に増大する。また、反応の全確率を計算するためには終状態の位相空間での積分が必要となるが、終状態 2 体では 2 次元積分、3 体では 5 次元積分、4 体では 8 次元積分となる。ループ図形に対しては、終状態の位相空間積分に加えて反応の中間状態に対する積分が必要となる。終状態が 2 体の最も簡単な場合でも、1 ループ図形では 3 次元積分、2 ループ図形では 6 次元積分が必要である。

以上のように、QED と比較して計算量は格段に増加するものの、計算の枠組みは同じであるため、計算機に対する要望も共通している。

- 倍精度および 4 倍精度演算に対するコンパイラの高度な自動 SIMD 化
- プログラムが巨大であるため、コンパイル速度も重要
- 高度に最適化された 4 倍精度ライブラリの提供

また、各々の多次元積分は単体ノードジョブによる embarrassingly parallel 的処理が可能である点も同じであり、必要総演算量は以下と予想される。

- 摂動展開の最低次の項（ループ図形を含まない）： 10^4 TFLOP 以内
- 1 ループ図形： $10^4 \sim 10^5$ PFLOP
- 2 ループ図形： $10^5 \sim 10^6$ EFLOP

(v) 超弦理論シミュレーションで探る時空の量子ダイナミクス

行列模型は超対称性を持ち、ボゾン的自由度とフェルミオン的自由度を同数含んでいる。フェルミオン的自由度を積分した後に、ボゾン的自由度に対してモンテカルロシミュレーションを行う。ただし、フェルミオン的自由度の積分によって位相因子が現れ、いわゆる符号問題が起こるため、数値シミュレーションは必ずしも容易ではない。

今後しばらくは、アルゴリズムの高度化などを含む数値シミュレーション手法の研究・実証が中心課題になると予想され、エクサスケールの計算機資源は必要としない。

| 課題 | 要求性能(PFLOPS) | 要求メモリバンド幅(PB/s) | メモリ量/PB | ストレージ量/PB | 計算時間/hour | ケース数 | 総演算量(EFLOP) | 概要と計算手法 | 問題規模 | 備考 |
|------------------------------------|--------------|-----------------|---------|-----------|-----------|------|-------------|--|--------------------------------------|---|
| カイラル対称性とQCDに基づく有効パリオン間相互作用の決定とその応用 | 510 | 390 | 0.066 | 0.5 | 880 | 10 | 16000000 | 格子QCD (カイラル5次元型)、ハイブリッドモンテカルロ法、CG法 | 問題規模 格子点: 128^4x32、格子間隔: 0.1 [fm] 以下 | ノード数を16^4 ノードを仮定し、ノードあたり性能を、オンチップメモリ容量 200MB、オンチップメモリバンド幅 6TB/s、ネットワークレイテンシ 1 μ sec程度、ネットワークバンド幅128GB/sを想定。 |
| 重いクォークの物理 | 510 | 370 | 0.021 | 1 | 880 | 10 | 16000000 | 格子QCD (ウィルソン型)、ハイブリッドモンテカルロ法、CG法 BiCGStab 法 | 192^4 | ノード数を12^4 ノードを仮定し、ノードあたり性能を、オンチップメモリ容量 200MB、オンチップメモリバンド幅 18TB/s、ネットワークレイテンシ 1 μ sec程度、ネットワークバンド幅128GB/sを想定。 |
| 極限状態でのミクロの階層構造と物質の物理 | 510 | 1200 | 0.066 | 0.2 | 880 | 10 | 16000000 | 格子QCD (ウィルソン型)、ハイブリッドモンテカルロ法、CG法、 BiCGStab 法 | 256^4 | ノード数を16^4 ノードを仮定し、ノードあたり性能を、オンチップメモリ容量 200MB、オンチップメモリバンド幅 18TB/s、ネットワークレイテンシ 1 μ sec程度、ネットワークバンド幅128GB/sを想定。 |
| テクニカラー理論の非摂動ダイナミクス | 510 | 1200 | 0.46 | 0.05 | 880 | 10 | 16000000 | 格子QCD (カイラル5次元型)、ハイブリッドモンテカルロ法、CG法 | 96^4x32 | ノード数を16^4 ノードを仮定し、ノードあたり性能を、オンチップメモリ容量 200MB、オンチップメモリバンド幅 18TB/s、ネットワークレイテンシ 1 μ sec程度、ネットワークバンド幅128GB/sを想定。 |
| 量子電磁気学(QED)の高次補正計算(多倍精度演算) | | | | | | 1 | 1000 | モンテカルロ法による多次元(8~13次元)積分 | | 1万個以上の単体ノードジョブのアレイジョブ、SIMDとコア並列が必要、プログラムが巨大なためコンパイル速度が重要、高度に最適化された4倍精度ライブラリが必要。ケース数は独立なノードジョブの個数である1万程ともいえる。2から3年かけて計算を終えるようにしたい。 |
| ファインマン振幅の自動計算(4倍精度演算) | | | | | | 1 | 1000 | モンテカルロ法による多2ループ図形 次元積分 | | 同上、QEDの高次補正計算と同程度の計算性能が必要 |

※本見積もりは未だ精査中である。より精度の高い数値はWeb版(→「1.2. 本文書の構成」)を参照のこと。

(5) 他分野との連携

共同研究等、研究内容に関わる他分野との連携の可能性については現在検討中であるが、計算アルゴリズムやスーパーコンピュータ開発においては他分野との交流はこれまでにも行われている。

まず、格子 QCD 計算の鍵となるアルゴリズムとして、モンテカルロ法、分子動力学法、乱数生成、大規模連立線形方程式の反復解法、誤差解析などが挙げられる。これらのうち、格子 QCD 研究において開発され、他分野へと展開されていった基礎的アルゴリズムとして、Lüscher の乱数生成アルゴリズム、Sexton-Weingarten の多重時間刻み分子動力学法積分スキーム、Duane-Kennedy-Pendleton-Duncan のハイブリッドモンテカルロ法などがある。逆に、他分野から導入されたアルゴリズムとして、大規模連立線形方程式反復解法における ILU 前処理や流体計算で用いられてきた領域分割 Schwarz 前処理、分子動力学法における Omelyan-Mryglod-Folk 積分スキームなどがあり、現在においてもアルゴリズムの開発・交流が活発に行われている。他方、スーパーコンピュータ開発への寄与として、これまで格子 QCD 計算を主目的とした開発された計算機の一覧を表 4.5.2-1 にまとめた。これらほとんどは当時の世界最高レベルのピーク性能を持つ計算機であり、そのうちのいくつかは発展的に商用化されたり、他分野の計算にも供されて来た。

表 4.5.2-1 格子 QCD 計算を主目的とした開発された計算機の一覧

| 計算機名 | 登場/開発時期 | ピーク性能 |
|------------------|-----------|----------------|
| Columbia(USA) | 1985–1989 | 0.25–16 GFLOPS |
| GF11(USA) | 1983–1992 | 11 GFLOPS |
| QCDPAX(Tsukuba) | 1989 | 14 GFLOPS |
| APE(Italy) | 1986–1988 | 0.25–1 GFLOPS |
| ACPMAPS(USA) | 1991–1993 | 5–50 GFLOPS |
| APE100(Italy) | 1994 | 100 GFLOPS |
| CP-PACS(Tsukuba) | 1996 | 614 GFLOPS |
| QCDSP(USA) | 1995–1998 | 600 GFLOPS |
| APEMille(Italy) | 2000 | 1 TFLOPS |
| APENEXT(Italy) | 2006 | 12 TFLOPS |
| QCDOC(USA) | 2005 | 10 TFLOPS |
| PACS-CS(Tsukuba) | 2006 | 14 TFLOPS |
| QPACE(EU) | 2009 | 200 TFLOPS |

(6) 公的な意見交換会とそのサマリー

2011 年 1 月 12 日、素粒子論・原子核理論合同の研究者コミュニティ「素粒子論グループ」メーリングリスト(sg-l)にて計算科学ロードマップ白書作成経緯および平成 23 年度版白書初稿について報告し意見の募集を行った。いただいたコメントを白書に一部反映させた。

2012 年 9 月 13 日、日本物理学会にて、素粒子論グループの活動報告を行うインフォーマル・ミーティング「素粒子論懇談会」において、平成 23 年度版計算科学ロードマップ白書作成の経緯と報告、平成 24 年度版白書作成とアプリケーションの募集についての協力を要請した。後日、メーリングリストを通して再度案内を周知することとした。

2012年9月21日、素粒子論グループのメーリングリスト(sg-l)に上記案内を送付し協力を呼びかけた。

2012年12月19日、HPCI分野5、および計算素粒子関係の研究者に平成24年度白書の初稿についての意見の募集を行った。必要な修正を反映した。

2012年12月26日、素粒子論グループメーリングリスト(sg-l)にて国内の素粒子論研究者に平成24年度白書の初稿（前記修正済）についての意見の募集を行った。必要な修正を反映した。

2013年3月27日、日本物理学会年次大会（広島大学）における素粒子論領域・理論核物理領域・（物性）領域11,9,8,7,3,4,5,6,12合同シンポジウムにて宇宙分野の平成24年度版計算科学ロードマップについて説明し意見交換を行った。

(7) ロードマップ

素粒子分野のロードマップを図4.5.2-5に示す。

| 年代 課題 | 2012 ~ | 2014 ~ | 2016 ~ | 2018 ~ | 2020 ~ | 2022 ~ |
|-----------------------------------|---|---|--------|--------|--------|--------|
| カイラル対称性とQCDに基づく有効バリオン相互作用の決定とその応用 | ・ウィルソン型作用を用いた物理点計算による有効バリオン間相互作用の決定 ・空間体積(10fm) ³ 、格子間隔0.1fm | ・5次元有効作用を用いた物理点計算による有効バリオン間相互作用の決定 ・空間体積(12fm) ³ 、格子間隔0.1fm以下 | | | | |
| 重いクォークの物理 | ・ボトムクォークを含むハドロン行列要素を5%以下の精度で計算 ・空間体積(2.6fm) ³ 、格子間隔0.10~0.05fm | ・ボトムクォークを含むハドロン行列要素を1%以下の精度で計算 ・空間体積(4fm) ³ 、格子間隔0.02fm | | | | |
| 極限状態でのミクロの階層構造と物質の物理 | ・QCDによる軽原子核直接構成の物理点計算 ・有限温度・有限密度QCDにおける臨界終点の決定 | ・軽原子核直接構成による魔法数導出と中性子過剰核の諸性質解明 ・低温中高密度領域におけるQCDの相構造解析と状態方程式の決定 | | | | |
| テクニカラー理論の非摂動ダイナミクス | ・様々なフレーバー数のQCDのβ関数、質量異常次元、スペクトロスコピーを中規模サイズの格子(例 24 ³ ×48)で系統的に調べ、最も有力なフレーバー数の候補を絞る | ・最も有力なフレーバー数を持つQCDの大規模計算(例 96 ⁴)を行い、定量的予言とLHCの結果を比較することによりテクニカラーモデルの検証を行う | | | | |
| 量子電磁気学(QED)の高次補正計算 | ・電子及びミュー粒子の異常磁気能率におけるQED高次補正計算 ・微細構造定数におけるQED補正の決定(0.03ppb) | ・電子及びミュー粒子の異常磁気能率におけるQED高次補正計算 ・微細構造定数におけるQED補正の決定(6ppt) | | | | |
| ファインマン振幅の自動計算 | ・1ループ図形の自動計算 | ・2ループ図形や多体終状態図形の自動計算 | | | | |
| 超弦理論シミュレーションで探る時空の量子ダイナミクス | ・超弦理論とその離散化手法を用いて重力の量子効果を研究 | ・超弦理論とその離散化手法を用いた時空構造の解明 | | | | |

図 4.5.2-5 素粒子ロードマップ

参考文献

- [1] 報告「理学・工学分野における科学・夢ロードマップ」日本学術会議第三部拡大役員会・理学・工学系学協会連絡協議会 (2011)
<http://www.scj.go.jp/ja/info/kohyo/kohyo-21-h132.html>
- [2] 「高エネルギー物理学将来計画検討小委員会答申」委員浅井祥仁他 (2012)、高エネルギー物理学研究者会議 <http://www.jahep.org/>
- [3] CKMfitter Group (J. Charles et al.), Eur. Phys. J. C41, 1-131 (2005) [hep-ph/0406184], updated results and plots available at: <http://ckmfitter.in2p3.fr>

4.5.3 原子核物理

(1) 現在行われている課題

原子核は強い相互作用によってフェムトメートル(10^{-15} m)のスケールに自己束縛した有限量子多体系である。ラザフォードによるその発見から 100 年を経て、計算科学としての原子核物理は新しい時代を迎しようとしている。まず、構成要素である陽子と中性子(総称して核子)の間に働く核力の精密な性質が解明されつつあることが挙げられる。核力の性質は、日本初のノーベル賞受賞者である湯川秀樹とその後の研究から、その遠距離での性質は解明されているが、近距離および中間距離領域の性質はきわめて複雑であり、未解決部分が多く残されている。また 3 体力の必要性は古くから認識されながら、その解明には程遠い状態が続いていた。しかし近年、安定線から離れたエキゾチック核の観測と量子多体計算との比較、3 核子系におけるスピンに依存する物理量の測定などによって、テンソル力や 3 体力についての新たな情報が引き出されてきている。また、格子量子色力学(格子 QCD)による核力の直接的計算(4.5.2 節参照)に光が差したこと、原子核物理にとって新たな発展の契機となるであろう。

次に、核子多体系の量子力学的状態に関する計算手法における急速な進歩が挙げられる。よく知られる Faddeev 方程式などの少数系手法[1]では、4 体、5 体系を超えた原子核を計算することは難しいと考えられるが、近年のグリーン関数モンテカルロ法の発展により、10 核子程度までの原子核の構造を核力から直接計算することができるようになった[2]。また、もともと核物理で開発された結合クラスター法が近年見直され、更に、閉殻を仮定しない殻模型(No-core shell model)、カイラル有効場理論による格子計算等の新しい計算手法の開発などにより、p 殼(陽子・中性子それぞれ 8 粒子以下)を超えた原子核の直接計算も視野に入りつつある。このような軽い原子核の核力を用いた直接計算は、これまで米国の研究者が世界を牽引していたが、HPCI 戦略分野の重点課題として最近国内においても目覚ましい発展を遂げており[3]、海外を凌駕する成果が目前に迫っている状況である。また、ラムダ粒子をはじめとするハイペロンを含む軽い原子核の精密計算も、国内で大きく発展した分野である。ハイペロンが絡む相互作用は、核力(核子間相互作用)に比べて情報が非常に限られていて不定性が大きい。上記の核力の解明と合わせて、不定性を排除した核力を用いた多体理論計算が実現すれば、原子核の性質を高精度で予言・解明できるようになる。

これら粒子数の小さい軽い原子核の第一原理計算の発展と同時に、粒子数が 100 を超えるような重い原子核を対象にできる信頼性の高い計算手法の開発も求められている。これまで実験で観測された原子核はおよそ 3000 個であり、その 9 割以上が短寿命で崩壊する不安定なアイソトープ、更に未発見の原子核がまだ数千個存在すると考えられており(図 4.5.3-1)、これらの人工生成と未知の核現象の発見に向けたさまざまな技術開発・新施設建設が世界中で進められている。上記の第一原理的手法による計算では、とてもない革新的な計算技法・計算機の発展がない限り、10~20 年のスケールでこれらの重い原子核を対象にすることは不可能と思われる。このため別のアプローチを必要とするが、その一つとして密度汎関数理論が挙げられる[4]。この理論は、厳密かつ普遍的な汎関数の存在定理を基礎とし、1 体密度の汎関数で物理量が与えられる多体系の理論である。鍵となるものは高精度の普遍的エネルギー密度汎関数の構

築であるが、最近の発展により、原子核の束縛エネルギーを平均誤差 0.1 %以下で再現する密度汎関数が開発されつつあり、また反応や励起状態の計算などにも応用できるエネルギー汎関数の開発も進められている[5]。同時に汎用計算コードの開発・公開が進んでおり、大規模並列計算によって原子核の質量の系統的計算も現在では可能になっている。また、多体系の量子状態を記述するヒルベルト空間を、少数のバレンス粒子を記述する小さな空間に制限して計算する殻模型計算についても、より重い原子核の記述に向けた進歩が著しい。特に国内では、通常ランチョス法を用いる行列対角化の代わりにモンテカルロ技法を用いた方法が開発され、通常の直接的な行列対角化では到達できない巨大なバレンス空間を扱うことに成功している[6]。また、原子核の特徴の一つとして、基底状態からわずかに励起させることで、原子核をさまざまな単位に分割することができるため、その閾値近傍にクラスター（分子的）状態が出現し、核反応においても重要な役割を果たす。このような多中心的状態を微視的に記述する理論[7]、連続状態を離散化することで複雑な核反応を記述する理論等[8]が国内で発展している。これらの有効模型的アプローチは、状態方程式データテーブル構築、原子核の電子捕獲・光分解・ニュートリノ反応率などの系統的計算を通じて、数値一般相対論シミュレーションによるブラックホール形成・爆発天体シミュレーション計算等に貢献している。

原子核物理学では、核子多体系を扱うだけではなく、核子・中間子などのハドロン構造やハドロン反応をクォーク・グルーオンのダイナミクスから取り扱う計算が活発に行われている。そこでは、格子 QCD による大規模計算が中心となっており、原子核構造論の基礎となる核力やハイペロン力の第一原理計算のみならず、軽い原子核を直接格子 QCD で構成する試み[9]もある。このように、格子 QCD 計算を通じて素粒子物理と原子核物理の垣根がなくなりつつあるのが現状であるが、その詳細は 4.5.2 項の素粒子分野の中にまとめられているので、ここでは割愛する。ハドロン物理は、QCD による理論的な基礎づけに加えて、実験研究との連携が必須であり、そのためには散乱データからさまざまなハドロン状態の性質を引き出す必要がある。そこでは多くのハドロン状態は散乱状態に強く結合した共鳴状態として現れ、散乱振幅の詳細な解析が必要になる。これらはハイペロンや重いクォークを含んだハドロンの研究に加え、グルーボールやハイブリッド粒子の探索にも共通している。これまで異なる理論模型を用いて、ドイツ、アメリカ、日本のグループで独立に研究が行われ、お互いに比較してきた。その研究には現有スペコンを含め多くの計算資源が使われてきたが、特定のスーパーコンピュータを戦略的に利用するような研究はなされてこなかった。

一方、高エネルギー重イオン衝突実験により急速に研究が進展しているクォーク・グルーオン・プラズマ (QGP) については、その物性に関する理論的予言と膨大な実験データを結びつけるための数値シミュレーションが重要な課題である[10]。特に、衝突初期のカラーグラス凝縮から始まり、クォーク・グルーオン・プラズマへの熱化とその時空発展、そしてクォーク・グルーオンがハドロンに転換して観測に至るまでの非平衡ダイナミクスの統合シミュレーションの構築は急務の課題である。また、非平衡過程にともなう量子揺らぎ、熱揺らぎ、およびその緩和過程を取り入れた理論・計算手法の開発も必要となっている。

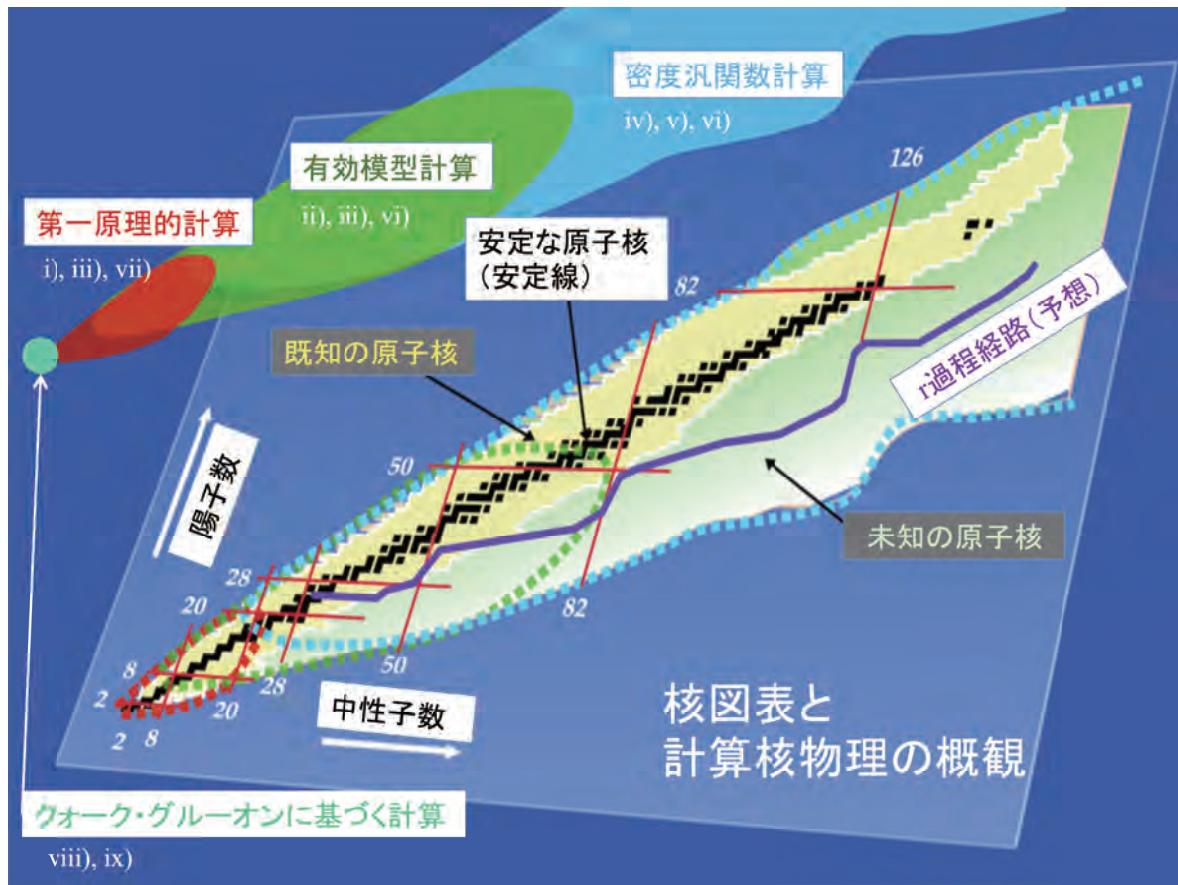


図 4.5.3-1 計算核物理学の分類と核図表¹

「G.F.Bertsch, D.J.Dean, W.Nazarewicz, SciDAC Review (UNEDF collaboration) より引用」

(2) 長期的目標

自然界に存在する原子核は、単体の陽子・中性子から核子数（質量数）240程度までの比較的少数の粒子で構成された系であるが、その微視的な記述には多くの困難がともなう。原子核が強い量子性を示す有限フェルミ多体系であるということに加えて、核力の特異性・複雑性がこの問題をより困難にしている。このため、核力から多体系の波動関数を直接計算する方法では、核子数10程度の原子核が現在のスーパーコンピュータの能力の限界である。限られたこの計算可能な領域を拡大することでその微視的構造を解明し、更に核反応断面積の第一原理計算につなげていく。究極的には、陽子・中性子数を指定されれば、その原子核が核力に基づいた計算によって計算機上に構成され、そのさまざまな性質が解明されることが計算核物理学の目標であると言えよう。このためには、計算機性能の向上のみならず、量子多体系の理論・計算手法・計算アルゴリズムなど、多方面からの発展が求められる。更に、多数の原子核に対して核力に基づいた第一原理計算が可能になることにより、散乱実験等で解明が困難な核力の性質を（帰納的に）明らかにすることも可能であろう。例えば、3粒子が直接相互作用する3体

¹核図表上の2,8,20,⋯といった数字は原子核が安定化する魔法数に対応する。i), ii), iii), ⋯は「(3)次世代に解決するべき課題」の中の課題の番号に対応する。

力には、3核子散乱データが存在しないため不定性が大きいが、第一原理核構造計算および少數核子系の反応計算と対応する実験データによって、その性質を定量的に明らかにしていくことができる期待される。

核力に基づく軽い原子核の構造計算が進むと、空間的に局在化した束縛状態の波動関数の情報が得られるようになるが、これを更に一步進め、低エネルギー核反応理論の開発とその精密第一原理計算が期待される。原子核同士の反応を計算で完全に決定するには、励起・融合・分解・移行反応といったさまざまな終状態が現れることを考慮し、量子散乱ダイナミクスを正確に扱わなければならない。これは、束縛状態の構造計算とは比較にならない程の莫大な計算量を必要とする研究であり、例えば重陽子同士の反応($d+d$)といった簡単な計算ですら、核力に基づいて厳密には解かれていない。一方で、星の中での元素合成反応では、実験での直接測定が非常に困難な低エネルギー核反応の反応率が求められているが、ごく微小な断面積を正確に計算する必要があり、この第一原理計算は困難な挑戦的課題である。

上記の核力に直接基づくアプローチは当然長期的課題として位置づけられるべき重要課題であるが、質量数の大きな開殻配位の相関が強い原子核においてこれを実現することは10年スケールでは難しい。したがって、第一原理アプローチに並行して、現実の原子核におけるさまざまな物理量の計算を目的とした有効模型的アプローチも不可欠である。モンテカルロ殻模型、クラスター模型、あるいはそのハイブリッド的模型などの手法を用いるためには、その手法に最も有効な模型空間の切り出しが必要であり、その切り出した空間と矛盾しない有効相互作用の構築は重要な課題である。現在、実用的な有効相互作用には現象論的補正が必要とされているが、上記の第一原理計算の発展は、高精度かつ微視的な有効相互作用の構築にも大きく貢献すると期待される。これは、精密科学として発展するうえで避けて通れない課題だと言える（図4.5.3-2参照）。

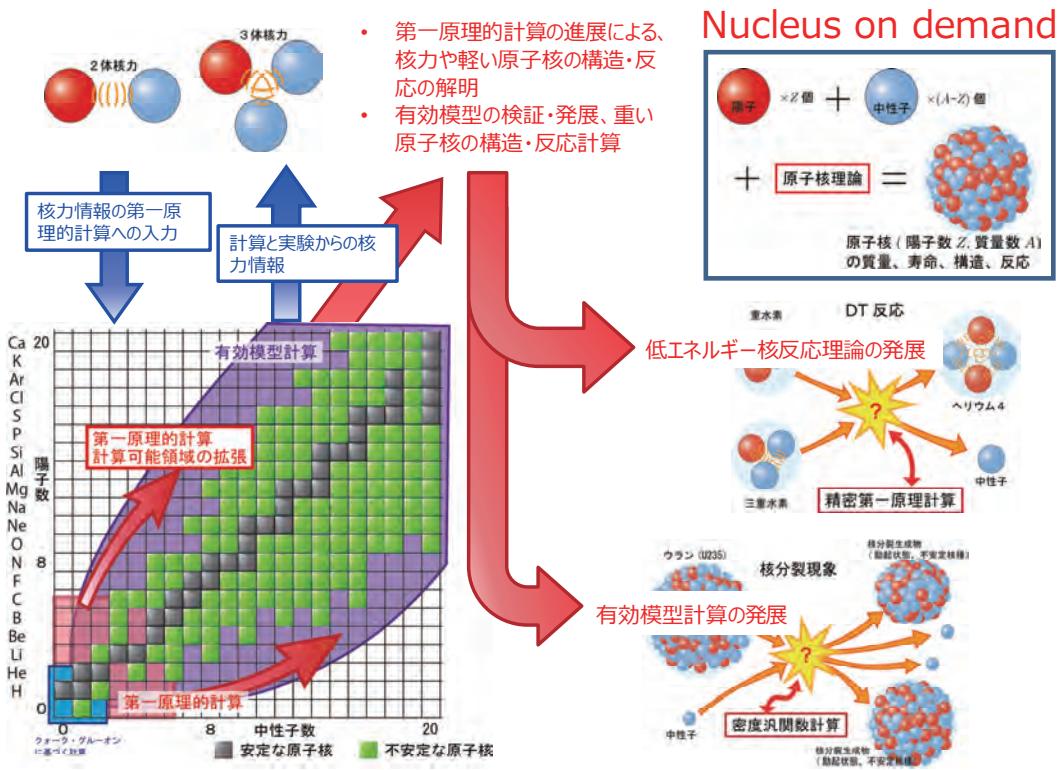


図 4.5.3-2 長期的目標のイメージ図(その 1)

強い相関を持つ複雑な原子核においては、有効模型アプローチにおいても莫大な計算量が必要とされ、あらゆる原子核を対象とし得るアプローチを確立することは容易ではない。現在は、対象とする現象や核種などによって異なる有効模型が用いられており、複雑な構造に基づいた核反応の直接計算などには、まだ手が付けられていない。しかしながら、この方向に向けた努力は絶え間なく続いており、理論や計算技法の発展が今後も進んで行くと考えられ、将来的には統一的な記述を目指すべきである。このような統一的な模型・計算手法の確立は、基礎科学としての核物理学だけでなく、天体核物理、原子力工学等、応用の面においても非常に重要である。特に、低エネルギー核反応の理論的解明は、元素起源、星や宇宙の進化の解明、計算核データの構築などに寄与し、そのインパクトは大きい（図 4.5.3-3 参照）。廃棄物処理を含む核変換テクノロジーに必要なマイナー・アクチナイト核を含む核反応データ、核融合炉プランケットでの中性子捕獲反応など、工学的応用に耐え得る高精度の理論核データが求められている。

原子核物理が鍵となる宇宙の疑問

- ・鉄より重い重元素の起源は？
- ・星の燃焼・爆発のメカニズムは？
- ・中性子星内部で核子(バリオン)はどうなっている？

第一原理的計算・有効模型計算・密度汎関数計算などの理論や計算手法の発展が必要

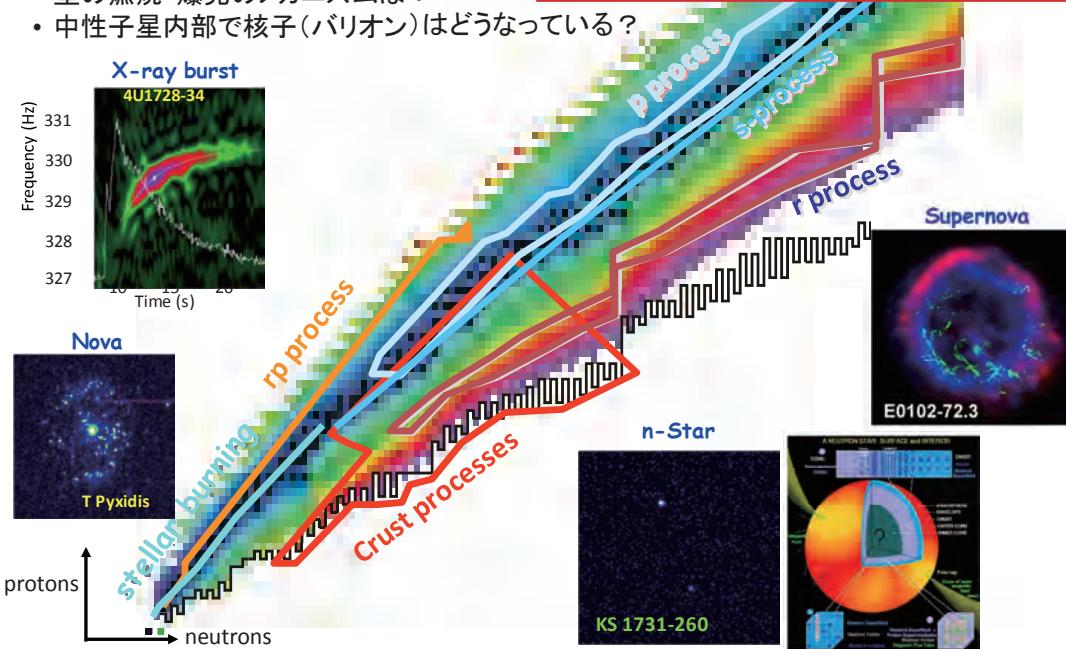


図 4.5.3-3 長期的目標のイメージ図(その 2)

(H.Schatz, W.Nazarewicz 氏の好意による)

ハドロン物理の興味の一つは、より高いエネルギー領域に向かっている。多くの共鳴状態が現れると同時に、QCD の動力学が非摂動から摂動領域に移っていくところである。そこでは多粒子生成をともなう散乱振幅の解析が必要となる。更にそれら多粒子の一部が共鳴をつくるなどして、多くのチャンネルが寄与してくれる。このような散乱振幅は複雑な解析的な構造をもち、その解明には多変数積分方程式の解が持つ複素解析関数としての性質を明らかにする必要がある。実験研究が進み、より包括的なデータが蓄積されるにつれてこのような研究は必須のものとなる。そこでは明らかに現在のスケールを超えた計算を実現していく必要がある。物理としては、K 中間子生成をともなう反応からはハイペロン相互作用を引き出すなどの重要な課題が存在している。将来的には、ストレンジネスにとどまらず、チャームなどのより多彩なフレーバーの生成領域に発展させ、ハドロン生成機構とそこから引き出せるハドロン状態の理解へと発展していくことが期待される。

高エネルギー重イオン衝突の物理で生成される高温物質は、他の量子多体系には見られないほど強く相關したクォークとグルーオンからなる強結合プラズマであることが示唆されている。このプラズマの性質の解明には、圧力・エネルギー密度・エントロピー密度などの熱力学量だけでなく、その時間的空間的揺らぎにともなう動的性質の理解が必須となっている。熱力学量について大きな成功を収めつつある格子 QCD 計算も、クォーク・グルーオン・プラズマの動的性質の定量的計算を行うには、さまざまな困難が存在し、新しい手法の開発が待ち望まれている。また、強結合プラズマの動的性質がどのように実験データに影響するかを知るため

には、衝突初期から生成されたさまざまな粒子が観測にかかるまで、統合的かつイベントごとのシミュレーションを行う必要があり、それを可能にする理論的手法の開発と大規模計算の実行が重要な課題となっている。これらの計算が可能になれば、宇宙初期に存在した強結合クオーカ・グルーオン・プラズマの詳細な性質が理論計算と実験データから明らかになる（図 4.5.3-4 参照）。

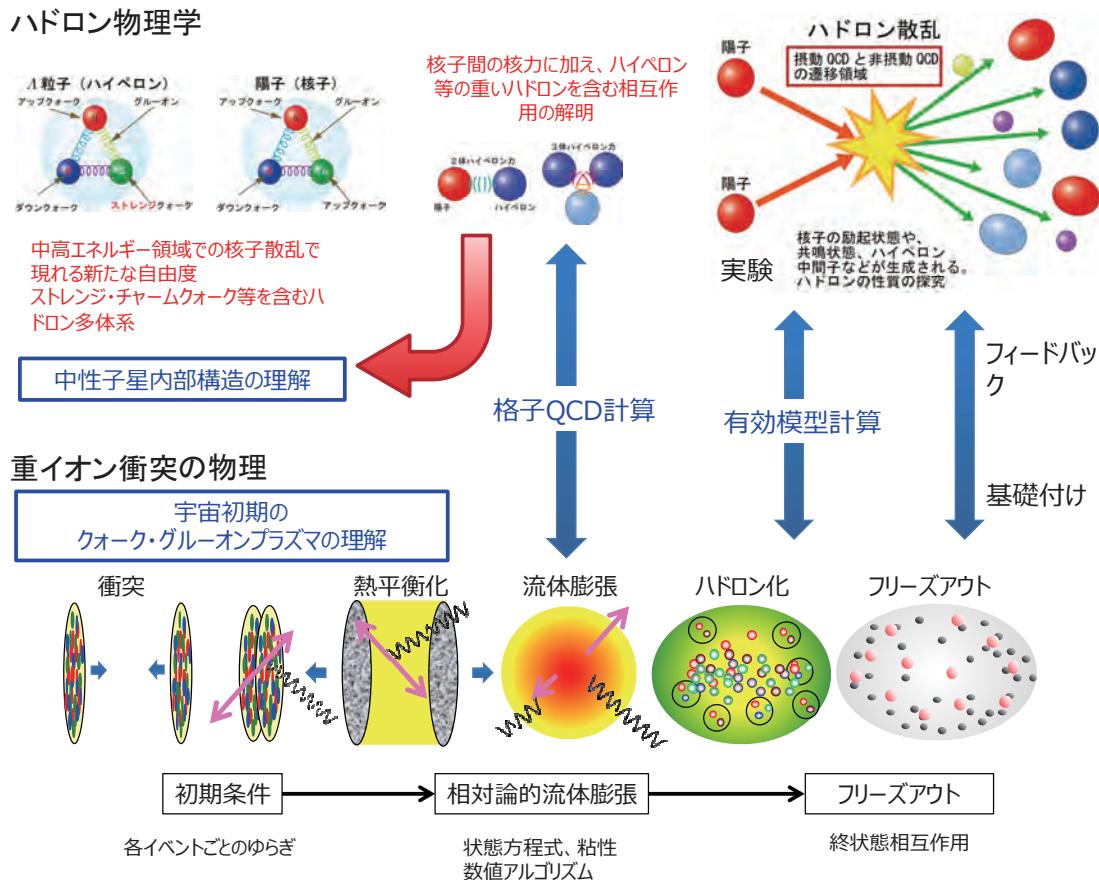


図 4.5.3-4 長期的目標のイメージ図(その 3)

(3) 次世代に解決すべき課題

上記の長期的課題を達成する過程において、今後 5~7 年程度において計算核物理学の発展の方向性について、その代表例を挙げることにする。同一の理論手法・計算手法がさまざまな物理の解析に利用できることが多くあるため、実験による新発見等によって、10 年スケールで目標が変更されることもあるであろう。

(i) 原子核構造の第一原理的解明

核力に基づく第一原理的アプローチでは、p 裂を超えて sd 裂（陽子・中性子 20 以下）の原子核を対象にした研究が大きな目標になっていくと考えられる。これにより軽い原子核の基底状態および低エネルギー領域の励起状態について、微視的な構造の解明が進み、核力が果たしている役割も明らかになっていくであろう。少数系の直接的解法やグリーン関数モンテカルロ法では、空間次元の著しい増大によって、この領域に到達することは非常に困難であると予想

されるが、結合クラスター法では、陽子・中性子数が魔法数に対応する閉殻配位の原子核の計算を得意としており、すでに一部の sd 殼核に対して計算が試みられている。これに対して国内では、閉殻を仮定しない殼模型とモンテカルロ・サンプリング技法を組み合わせた新たなアプローチを現在日米共同で開発中である[3]。次に述べる通常の殼模型計算は、バレンス粒子間の有効相互作用を出発点にする配置間相互作用（CI）計算のことを指すが、閉殻を仮定しない殼模型は、現実的核力を出発点に全核子の多体系波動関数を計算する。sd 殼のさまざまな原子核を核力に基づいて計算機上に構成できる時代が現実のものになると期待される。調和振動子基底による多粒子系波動関数を用いた配置間相互作用計算によって、「京」スーパーコンピュータで p 殼核（陽子・中性子 8 以下）へ、更にエクサに向けて sd 殼核（陽子・中性子 20 以下）へと進めていく。更に大きな質量領域では、微視的な有効相互作用の構築を目指すとともに、エキゾチックな核構造に関する有効相互作用を用いた CI 計算を行う。

(ii) 原子核殼模型計算の適用領域の拡張

閉殻を仮定した従来の原子核殼模型計算では、有効相互作用の精密化と模型空間の拡大による重い原子核への適用が課題となる。これまでには、模型空間を 1 主殻（major shell）とすることが主流であったが、これを 2 主殻以上に拡張することで、その汎用性は飛躍的に向上すると期待される。また、拡張した模型空間における有効相互作用の構築も課題となるが、最近の研究から、3 体力の効果等を考慮して精密化することの必要性が示唆されている。爆発的に増大する計算コストを抑える計算手法と適切な有効相互作用の開発によって、pf 殼（陽子・中性子数 40 以下）を超えて、質量数 100 の領域に迫ることが期待される。これにより、謎とされる重元素合成過程の解明、特に r 過程の第 3 ピークに至る核種の精密な殼模型計算が可能になり、ベータ崩壊寿命を含めたさまざまな物理量が明らかにできる。

(iii) 原子核構造・反応の統一的解明

原子核理論で発展してきた生成座標法（GCM）は、もともと核分裂現象の記述を目的として提案された理論であり、核構造のみならず核反応の記述にも応用できる。この特性を生かして、複雑な相関を取り入れた核構造を記述するとともに、その構造がどのように反応に反映されるのかを解明することが期待される。核構造計算に通常用いられる調和振動子基底表示とは相補的なガウス基底[11]や実空間・平面波基底を用いることで、核反応ダイナミクスの解明が可能になる。この理論手法は、原子核の基底状態とその近傍の状態の記述を得意とした有効模型と、分解反応やその閾値近傍の状態の記述を得意とする模型との融合を目指したアプローチだと言える。このようなアプローチの重要性は、1 つの原子核の中に異質な性質の状態が混在することからも理解できる。例えば、炭素や酸素の励起 0+ 状態を、特定のクラスターの存在を仮定せずに核子自由度だけから記述することは、現在でも難しい課題として残っている。将来的には、有効模型から脱却し、現実的な核力に基づいた方法、“ab-initio GCM” といった理論への発展を目指す。

(iv) 原子核応答関数の系統的記述と計算核データ構築

密度汎関数理論の強みの一つは、同じエネルギー汎関数を用いて、特定の質量領域ではなく、ほぼすべての原子核を対象にできることである。この性質を生かして、核図表全体にわたった系統的な計算が行われており、微視的質量公式などはその代表例である。最近では、時間依存密度汎関数理論（TDDFT）を用いた核応答計算のためのプログラム開発が世界中で進められている。すでに線形応答レベルでは、変形核や超流動核を扱えるコードが開発済みであり、光吸収断面積等の系統的計算が進行中である[12]。これによって、実験データの取得が困難な莫大な数の計算核データが蓄積され、将来のさまざまな応用に資することになる。今後、基底状態の性質に関する制限を取り除いた計算、連続状態を厳密に扱う線形応答計算、1体密度の線形効果を超えた高次効果を取り扱った計算などが遂行すべき課題である。

(v) 核分裂現象の微視的記述

多粒子が関与する大振幅集団的運動が重要な役割を果たすような低エネルギーの核反応の代表として核分裂反応が挙げられる。その微視的な記述は非常に困難であり、ポテンシャルエネルギーの計算以外は、これまで巨視的（マクロ）な模型による記述がほとんどである。核分裂には、中性子や光によって引き起こされる誘起核分裂と、有限の寿命で自ら壊れる自発核分裂とがあるが、双方ともに現在密度汎関数理論によって微視的にそのダイナミクスを記述しようとする試みが活発化しており[5]、5~7年程度で大きな進歩が期待される分野である。上記の巨視的模型による記述において、分裂経路、ポテンシャルエネルギー、集団質量パラメータ、散逸(摩擦)係数など、微視的な計算によるインプットが必要とされており、これらに対して密度汎関数理論に基づいた計算を行う[4]。また、TDDFTを用いた実時間計算の発展も近年目覚ましい。低エネルギーの大振幅集団運動に非常に重要な対相関を取り入れたTDDFTにより、誘起核分裂現象の直接的シミュレーションに向けた開発が現在進行中である。

(vi) 核物質の相構造・状態方程式の解明

クオーク・グルーオン・プラズマ等が議論される高温かつバリオンの密度がゼロである系に対しては、格子QCDを用いた第一原理計算が進展しているが、低温・有限密度における計算は符号問題が深刻で困難である。さまざまなアイデアが提案されているが、決定的な解決法は見いだされていない。一方で、低温・低密度では核子自由度からその熱力学的性質を計算することが有効であるため、核力に基づく一様核物質の多体計算も進展している。この場合、3体力などの核力の不定性が大きな問題であり、軽い核の第一原理計算が進められることで、この問題の解決にも光が差すと期待される。また、低温の低密度核物質では、原子核がクラスターとして存在すると考えられるため、分子動力学的アプローチを用いた計算が国内で発展している[7]。このアプローチは現実的核力に基づく計算ではないが、同じアプローチによって重イオノ反応シミュレーションが可能であり、実験データとの比較からその妥当性を検証することが可能である。中性子星の構造や超新星爆発など、天体现象においても核物質の相構造・状態方程式の解明は求められており、原子核物理においても重要な課題として位置づけられている。

(vii) ハイペロンを含む軽い核の構造・反応の解明

ラムダ粒子をはじめとするハイペロンを含む原子核（ハイパー核）の研究は、核子自由度の世界をストレンジネスを含む世界に拡大する。ここでは、核子・ハイペロン多体系としての多体問題を、 p 殻ハイパー核にまで適用できる計算手法の確立が課題となる。基本となる相互作用に関する情報が核力に比較すると圧倒的に不足しているため、格子 QCD 計算による相互作用に関する情報がこれを補うことが期待される。ハイパー核ではラムダ粒子とシグマ粒子との結合が重要であり、模型空間によっては 3 体力効果として記述されるこれらの結合効果の定量的な理解を進める必要がある。これらの解明は、中性子星の内部構造の理解にも大きな影響を与える可能性がある。

(viii) 相対論的重イオン衝突とクォーク・グルーオン・プラズマ物性の解明

重イオン衝突実験における精密測定は、宇宙初期のクォーク・グルーオン・プラズマに対する詳細な理解を得る絶好の機会を与えている。膨大な実験データからクォーク・グルーオン・プラズマの物性を引き出すためには、衝突の非平衡ダイナミックスに対する数値シミュレーションが不可欠である。特に、衝突初期から最終段階までのさまざまな段階での量子揺らぎと熱揺らぎの効果を取り入れた統合シミュレーションが重要課題である。衝突初期条件のイベントごとの揺らぎの効果、前平衡過程を記述するカラーグラス凝縮を取り入れ、相対論的粘性流体力学とハドロン凍結後のボルツマン方程式を統合した重イオン衝突シミュレーションを実行する。

(ix) 多粒子生成反応で探るハドロン共鳴と相互作用の新たな展開

現状では、パイ中間子を 2 個取り込むようなチャンネルの解析が現実のものになったところである。当面はパイ中間子を 2 個含むチャンネルを取り込み、閾値から 1 GeV 程度の領域での散乱振幅の解析を完成させる。次の段階はストレンジネス生成に向かう。ハイペロンと核子の相互作用を引き出すためにも重要な研究であるが、理論的な基盤が十分整備されていない。そこでその基盤の構築から検討し、実験データとの定量的な比較を目指す。その結果として、 K 中間子を最大で 3 個まで生成するプロセスの解析を目指し、オメガ粒子まで含めた uds ハドロンの生成反応を記述することを目指す。

(4) 課題を解決するために必要なアプリケーション群

(i) 原子核・無芯殻模型計算

計算の概要

核力のみをインプットとした核子多体系としての原子核の構造を、量子多体計算により解明する。粒子数は 30 程度、模型空間の一粒子軌道は調和振動子の主殻 (N_{shell}) にして 6 主殻から 8 主殻を目標にする。従来型の直接対角化の方法では、指數関数的な配位の増加があるため、ここでの計算方法はモンテカルロ殻模型 (MCSM) 法を採用する。波動関数を角運動量射影し変形の効果を考慮したスレーター行列式の線形結合で記述し、その変分パラメータを変分原理に基づいて決定する。

基本要求性能

核力の多体基底ベクトル間の行列要素の計算が最も時間がかかり、全体の約 50%を占める。波動関数のストアのために必要なデータ容量は、数十から 100 GB 程度であり、比較的小さい。演算量は、7 主殻での計算で 1 つの準位に対して、およそ $30 \text{ TFLOPS} \times \text{year}$ で、1 つの原子核に対して数個の準位を計算し、更に数十種の原子核に対して計算を実行すると、全体で $10 \text{ PFLOPS} \times \text{year}$ 程度の演算量となる。6、7 主殻の計算を中心に、特に重要な場合にはおよそこの 10 倍の演算量となる 8 主殻の計算を考えると、全体で数 $10 \text{ PFLOPS} \times \text{year}$ となる。

中重核領域における計算では、設定を変更し有効相互作用を用いた殻模型計算となる。この場合、前述の閉殻を仮定しない計算の 5~6 主殻に相当するので、 $1 \text{ TFLOPS} \times \text{year}$ 程度の計算を合計して数百準位分する。有効相互作用の構築のため、更に同程度の計算機資源が必要とされるため、全体で数 $\text{PFLOPS} \times \text{year}$ となる。必要とされる計算機性能は以下のとおりである。

- 1 ノードの演算性能 : 100TFLOPS
- 1 ノード当たりのネットワークバンド幅 : 10~数 10GB/s
- ネットワークレイテンシ : $1\mu\text{s}$ 程度
- 1 ノード当たりのメモリ容量 : 10 GB~100 GB
- 1 ノード当たりのメモリバンド幅 : 1 TB/s
- 1 ノード当たりのオンチップメモリ容量 : 100 MB~1 GB
- I/O 量は大きくない

(ii) 核構造・核反応 GCM 計算

計算の概要

有効相互作用、あるいは現実的核力から低運動量空間に繰り込まれた相互作用等を用いて、多スレーテー行列式の重ね合わせによって原子核を記述することを目標とする。ランダムに生成した配位の取捨選択による最適化を行い、CI 計算によって波動関数を決定する。スレーテー行列式を記述する基底として実空間表示または平面波基底を採用し、生成座標法 (GCM) を用いて、核構造とともに、クラスター崩壊等の核反応の記述を同時に目指す。

基本要求性能

^{16}O の実空間格子計算を想定。現在行っている接触型（相互作用レンジがゼロ）の有効相互作用を用いた計算で演算量はおよそ 10^{17} FLOP 程度。これを有限レンジの現実的核力にすることでおよそ 100 倍、更に生成配位の最適化を入れることで 40 倍程度と見積もると、 $10 \text{ TFLOPS} \times \text{year}$ 程度の演算量になる。必要とするメモリ量、データ量は大きくない。将来的には、核反応への応用を考える。そのためには、ここで想定したものよりはるかに大きな空間を必要とするため、 $100 \text{ TFLOPS} \times \text{year}$ 以上の演算量になると考えられる。

(iii) TDDFT 実時間実空間シミュレーション

計算の概要

時間依存密度汎関数理論を用いた実時間シミュレーション計算である。現状では線形応答関数計算、核融合反応計算等に用いられているが、誘起核分裂を対象にしたシミュレーション計

算に応用することを想定する。重い原子核において重要な核子超流動性を扱う密度汎関数を用いて、実空間格子表示によって準粒子軌道を表現し、実時間発展を計算する。

基本要求性能

想定する計算のサイズは、空間格子点、準粒子数、時間ステップ数がすべて 10^5 程度であり、理想的な並列化効率が得られれば演算量はこれらと比例関係にある。現状の計算量から単純にスケールすると、約 $10 \text{ TFLOPS} \times \text{year}$ に相当すると推定され、これを異なるエネルギー点・核種で行う必要があるため、実際にはこの数十倍程度が必要とされる。更に将来的には、これに確率的分岐の効果を導入した計算を目指したい。これには、 $1 \sim 10 \text{ PFLOPS} \times \text{year}$ の演算量になると考えられる。データ容量は、準粒子波動関数の時間発展をすべてストアすると 10 PB 程度が必要であるが、選択的に保存することで 100 分の 1 かそれ以下に減らすことが可能であり、 100 TB 程度と予想する。

必要とされる計算機性能は以下のとおりである。

- 1 ノードの演算性能 : 100 TFLOPS
- 1 ノード当たりのネットワークバンド幅 : 10 GB/s
- 1 ノード当たりのメモリ容量 : 100 GB 程度
- 1 ノード当たりのメモリバンド幅 : 1 TB/s
- I/O 量は最大で 10 PB のストレージ容量が必要とされるが、 100 TB 程度でも対応可能

(iv) 多次元模型パラメータ計算

計算の概要

核分裂の記述において現在主流なアプローチは巨視的模型アプローチであり、ポテンシャルや集団質量がそのインプットである。拘束付平均場（CHFB）と局所準粒子乱雑位相似似（LQRPA）の計算によってこれらを微視的に決定する。5 次元の変形空間上に対応する拘束条件をつけた平均場状態を計算し、そのうえで LQRPA 方程式を解くことでパラメータが決定される。

基本要求性能

CHFB 計算を核変形 5 次元空間中の 10^3 点で実行し、そのうえで LQRPA 計算を実行する。準粒子を表現するヒルベルト空間の次元は実空間表示とすれば約 10^5 次元であり、不定性があるものの CHFB+LQRPA を 1 点で収束させるのに $1 \text{ PFLOPS} \times \text{hour}$ 程度が必要である。したがって、全体でおよそ $100 \text{ TFLOPS} \times \text{year}$ の演算量となる。空間点の数を増やしてこれを更に精密化した計算は、エクサの先の課題になると考えられる。データ容量は大きくない。

| 課題 | 要求性能 (PFLOPS) | 要求メモリ リバンド 幅 (PB/s) | メモリ量 ケース (PB) | ストレージ 量/ケース (PB) | 計算時間/ ケース (hour) | ケース 数 | 総演算量 (EFLOP) | 概要と計算手法 | 問題規模 | 備考 |
|---------------------------------|------------------|---------------------------|---------------------|------------------------|------------------------|----------|-----------------|--|--|---|
| 原子核構造の第一原理的解明 | 100 | 10 | 1 | 0.0001 | 28 | 100 | 1,000,000 | モンテカルロ殻模型法による原子核の構造計算、軽い核 | 空間を調和振動子基底で展開し、7~8主殻までを考慮。 | メモリ量は10000ノード X 100GBで計算 |
| 原子核殻模型計算の適用領域の拡張 | 2.2 | 0.001 | 0.32 | 0.0001 | 10 | 800 | 63,000 | モンテカルロ殻模型法による原子核の構造計算、中重核領域 | 模型空間は、パレンス殻2主殻や、一部それを超えるものを想定。 | メモリ量は10000ノード X 32GBで計算 |
| 原子核構造・反応の統一的解明 | 53 | | 0.03 | | 100 | 50 | 950,000 | 生成座標法を用いた第一原理的CI計算 | 空間格子点1万点、配位数100程度 | |
| 原子核応答関数の系統的記述と計算核データ構築 | 32 | | 0.03 | 0.1 | 0.1 | 10,000 | 120,000 | 実空間表示準粒子による線形応答行列対角化 | 10000核種に対して特定の一による計算核データ構築が現実的体場に対する応答関数を系 | 1核種あたり10分以内での計算が可能になれば、系統的な計算による。現在、反復解法などが改良されており、将来的には行列対角化に頼らない方法になる可能性あり。 |
| 核分裂現象の微視的記述 | 35 | 0.3 | 0.04 | 10 | 24 | 100 | 300,000 | 実空間・実時間発展計算 | 空間格子点数、準粒子数、時間ステップ数、それぞれ10万 | 時間発展1ケースあたり、 3×10^{21} FLOP |
| 核物質の相構造・状態方程式の解明 | 23 | | | | 24 | 100 | 200,000 | 分子動力学法による熱平衡の計算 | | |
| ハイペロンを含む軽い核の構造・反応の解明 | 21 | 10 | 0.4 | 0.00001 | 4 | 200 | 60,000 | 量子少数多体系の厳密計算 | 7体系への応用 | |
| 相対論的重イオン衝突とクォーク・グルーオン・プラズマ物性の解明 | | | | | | | | 高エネルギー重イオン衝突実験の流体シミュレーション計算 | 実験においても初期状態の揺らぎが注目されるなど、理論の枠組み自体の発展も激しい。現在確立している物理状況を取り入れた模型における計算を目指している。 | (課題解決に向けた現在の取り組み) 衝撃波を扱った相対論的粘性流体方程式解法のアルゴリズム開発。数値解の安定性、初期条件等の吟味。(手法確立に必要な知識) 粘性が有限の場合の低温での数値不安定性の回避が必要。 |
| 多粒子生成反応で探るハドロン共鳴と相互作用の新たな展開 | 1 | 0 | 0.0002 | 0.000005 | 720 | 10 | 29000 | 大量の散乱現象のデータと理論計算とを比較することで、励起バリオൺに関する知見を得るための計算。微視的な多チャンネル動的反応模型を用いた数値計算。 | chi-2乗値を計算するために1000次元の複素行列の逆行列を6000回計算する。そのchi-2乗値の計算を 2.5×10^7 回繰り返す | (課題解決に向けた現在の取り組み) 誤差評価を含めたchi-2乗最適化への収束の問題解決。(手法確立に必要な知識) 多次元パラメータ空間上での極小値サーチの効率的手法。chi-2乗計算の高速化。(実計算への見込み) 現在のチームで4~5年程度と予想。 |

※本見積もりは未だ精査中である。より精度の高い数値はWeb版(→「1.2. 本文書の構成」)を参照のこと。

(5) 他分野との連携

原子核分野においては、HPCI 戦略プログラム「戦略分野2 新物質・エネルギー創成（以下、分野2）」における物性分野、量子化学分野と、量子多体系の解法という軸を通して多くの共通点があり、密接な交流がおこなわれている。例えば、結合クラスター法は、原子核理論においてかつて開発された理論であるが、その後、量子化学の分野で大きく花開いた手法であり、最近になって再び原子核構造・反応の第一原理的記述の手法として見直され発展している[13]。また、強相関系の物理における経路積分繰り込み群法と、原子核構造計算におけるモンテカルロ殻模型法は、当初独立に発展してきたものの、後に類似性が判明し、比較検討がおこなわれた。この作業をとおして、原子核分野で発展してきた量子数射影法の凝縮系分野への応用[14]、凝縮系分野で導入されたエネルギー分散外挿法や変分モンテカルロ法の原子核分野への応用[3,15]など、分野間をまたがった計算手法が発展してきた。密度汎関数理論も分野2と接点の強い共通な理論手法であり、密度汎関数にどのように長距離相関を取り込むかといった共通の課題も見えている。今後、量子多体系計算手法の発展、共通化を見えた連携強化を図っていく予定である。

(6) 公的な意見交換会とそのサマリー

2011年1月24～25日、理化学研究所において、研究会「大規模計算による原子核研究の展開」を開催し、その中でユーザー支援の説明と、原子核物理分野における萌芽的課題の提案、エクサフロップ級計算機におけるアプリケーションの募集について説明した。その後、約10名程度から萌芽的課題に関する提案を受けることができた。本書にも、その内容が一部生かされている。

2012年9月13日、日本物理学会におけるインフォーマル・ミーティング「核理論懇談会総会」において、計算科学ロードマップ白書作成に至る経緯、アプリケーションの募集等を説明した。その場では特に意見はなかったが、後日、メーリングリストを通して再度案内を周知させることにした。

2012年9月21日、素粒子論・原子核理論合同のコミュニティである素粒子論グループのメーリングリスト(sg-l)、原子核理論・実験合同のコミュニティである原子核物理懇談会のメーリングリスト(ml-np)に上記の案内を送付し、核物理分野については、同時にアプリの募集をアナウンスした。その後、核物理実験の大規模データを扱った解析に関して、HPCIとの協力が得られないか相談があり、その内容を簡単にまとめてもらうこととした。

2013年3月27日、日本物理学会年次大会（広島大学）における素粒子論領域・理論核物理領域・（物性）領域11,9,8,7,3,4,5,6,12合同シンポジウムにて宇宙分野の平成24年度版計算科学ロードマップについて説明し意見交換を行った。

(7) ロードマップ

代表的な課題のロードマップを以下に示す。ここで、i)、iii)等の番号は、「(3) 次世代に解決すべき課題」の中の番号に対応している。

| 年代 課題 | 2012 ~ | 2014 ~ | 2016 ~ | 2018 ~ | 2020 ~ | 2022 ~ |
|---------------------------------------|----------------------------------|--------|---|-------------------|------------|--------|
| i) 原子核構造の第一原理的解明 | p 裂殻(陽子・中性子数8以下)の多粒子系波動関数のCI計算 | | p 裂殻を超えて sd 裂殻(陽子・中性子数20以下)へ | | | |
| iii) 原子核構造・反応の統一的解明 | 4、5体系の第一原理核反応計算 | | | 6体系以上へ | | |
| v) 核分裂現象の微視的記述 | 核分裂を記述する集団運動パラメータの微視的計算 | | p 裂殻のGCMを用いた核構造・核反応ダイナミクスの統一的計算 | | | |
| vi) 核物質の相構造・状態方程式の解明 | 重イオン反応シミュレーション計算と実験データによる3体力等の検証 | | 核変形空間を多次元化し、非対称分裂を含めた現実的な記述へ | | | |
| viii) 相対論的重イオン衝突とクォーク・グルーオン・プラズマ物性の解明 | 衝突後の時間発展のそれぞれにおける数値シミュレーションの精密化 | | 衝突初期から最終段階までの量子・熱揺らぎを取り入れた統合シミュレーション計算 | | | |
| ix) 多粒子生成反応で探るハドロン共鳴と相互作用の新たな展開 | $\bar{\nu}$ 中間子を複数含む散乱振幅 | | ストレンジネス領域に拡張された、 k 中間子とハイペロンの生成を取り入れた解析 | \leftrightarrow | チャーム領域への拡張 | |

図 4.5.3-5 原子核物理ロードマップ

参考文献

- [1] H. Kamada et al., Phys. Rev. C 64, 044001 (2001); E. Hiyama, Prog. Theor. Exp. Phys. 2012, 01A204 (2012).
- [2] S. C. Pieper and R. B. Wiringa, Ann. Rev. Nucl. Part. Sci. 51, 53 (2001); J. Carlson et al., Prog. Theor. Exp. Phys. 2012, 01A209 (2012).
- [3] N. Shimizu et al., Prog. Theor. Exp. Phys. 2012, 01A205 (2012).
- [4] T. Nakatsukasa, Prog. Theor. Exp. Phys. 2012, 01A207 (2012).
- [5] SciDAC-2 UNEDF project; <http://www.unedf.org/>
- [6] N. Shimizu et al., Phys. Rev. C 82, 061305(R) (2010).
- [7] Y. Kanada-En'yo et al., Prog. Theor. Exp. Phys. 2012, 01A202 (2012).
- [8] M. Yahiro et al., Prog. Theor. Exp. Phys. 2012, 01A206 (2012).
- [9] T. Yamazaki et al., Phys. Rev. D 81, 11504(R) (2010).
- [10] T. Hirano and Y. Nara, Prog. Theor. Exp. Phys. 2012, 01A203 (2012).
- [11] K. Arai et al., Phys. Rev. Lett. 107, 132502 (2011).
- [12] T. Inakura et al., Phys. Rev. C 80, 044301 (2009); Phys. Rev. C 84, 021302 (2011).
- [13] G. Hagen et al., Phys. Rev. Lett. 109, 032502 (2012).
- [14] T. Mizusaki M. Imada: Phys. Rev. B 69, 125110 (2004).
- [15] T. Mizusaki and N. Shimizu, Phys. Rev. C 85 021301(R) (2012).

4.6 社会科学

人々の社会活動がどのように営まれているか、よりよい社会とはなにか、それはどうすれば実現できるのか、これらは人間の歴史を通してもっとも基本的・根源的な課題であり続いている。しかしながら、社会の複雑化が加速する一方で、今日に至るまでこうした課題の解決は現象論的・対症療法的な段階にとどまっていた。その原因是、そもそも人間の社会的振る舞いについての根源的な理解が確立されていないためと考えられる。

自然科学では、物質世界をまず原子・分子に還元し、それぞれの個性や履歴によらない普遍的な諸性質を確立する。更に必要に応じて、素粒子・時空へと要素還元を推し進めると同時に、こうした構成要素の集団としての諸現象を理解することに成功している。今日の京級計算機では、こうした理解に基づいて物質の複雑な振る舞いを精密にシミュレートし、複雑なシステムの理解・設計に大きく貢献している。しかし、社会科学分野では個々の人間についての基礎的な原理に関する理解が欠如している。

計算機の性能向上にともなって高度化し続けている科学技術においても、その成果を人々に還元するためには社会的に解決すべき多くの課題がある。社会の運営における計算機の利用が浸透し始めてすでに半世紀、個々人にまで情報通信インフラと計算機が浸透しはじめて四半世紀が経過するが、われわれの社会はいまだに情報ネットワークにおける課題を抱えたままである。課題を克服するためには、新たな技術が社会に与える影響に対する効率的で信頼できるアセスメントが必要となるが、これには社会を大きく変える技術であればあるほど困難がともなう。

科学技術にとどまらず、事故・災害・疫病といった非日常的な事象に社会的に対応するうえで、社会科学への期待は大きい。しかし、現実の問題として相次ぐ地震や異常気象、原発事故への防災対応は後手に回っており、社会がどのように機能しているのかをより一層理解することは、喫緊に取り組むべき課題である。

これに対して、近年の研究の結果、社会活動にも一定の普遍性があることが解明され、社会現象を科学的に扱うための原理・基礎理論として注目されている。これは、情報通信技術の進展により、定量性をもって蓄積された社会活動の諸記録を計算機で分析することによる成果である。あたかも社会現象を自然科学的な実験の対象としたかのように扱うことができるようになったことによる、社会科学の進歩と言える。1990年代以降、顕著な成果を挙げてきたこうした手法は、今日ではすでに確立しており「ビッグデータ解析」などと呼ばれて広く使われている。

更に、社会活動の示す普遍性を人などの社会現象の構成要素に基づいて理解する研究も始まっている。いわゆるエージェントモデルによる社会シミュレーションである[1]。

社会科学への計算機の応用は、大きく分けて交通・経済・人間関係の3分野に分類することができる。今日の計算科学は、これらを物理現象への応用と統合することにより社会全体を取り扱うことを目指している。

(1) 現在行われている課題

(i) 交通

交通とは人や物の物理的な移動であり、特に道路網・歩行者群を対象とした研究が進められている。定期運行が主である鉄道・航空・船舶は、もともとエージェントモデルにより記述されており、精密な研究が個々の工学分野で進められている。一方、自動車や歩行者は、個々が自由に、しかし一定の規則に則って移動することにより、自動車交通流・歩行者流が自律的に形成されており、その機構の解明および応用が注目されている。

道路にどれだけの自動車が走行できるかは、道路網を設計する際の基本であり、かつて自動車交通流は、流体方程式を応用して設計されていた。こうした扱いは、各道路は交通容量と呼ばれる台数の自動車まではスムーズに走行できるが、交通容量以上の自動車が走行しようとすると渋滞が発生するという描像に基づく。しかしこの描像では、交通容量を超えないところで発生する渋滞や、交通容量以上でも場合によってはスムーズに走行するといった現実の交通流を再現しない。こうした欠陥は、1990年代以降に個々の自動車が前の自動車に衝突しないように走行する運動規則を持つ、というエージェントモデルによって克服された[2]。

現在では、GPSを使った自動車誘導装置（カーナビゲーションシステム）のデータに基づいて、1都市の交通を分析するデータマイニングおよび交通流の基礎モデルの精緻化や、交通センサスデータに基づいたシミュレーションによる交通予測・道路網設計・信号制御が行われている。数万台規模の自動車を扱う地方都市から、数百万台規模の自動車を扱う首都圏や近畿圏といった範囲までを対象とした分析・シミュレーションである。

歩行者の場合は、運動の自由度が自動車よりも大きいため、そのシミュレーションには自動車よりも少し手間がかかる。群衆を撮影した動画を解析する他、携帯電話などの端末からのGPSデータにより、個々人の動きを記録し分析することができるようになっている。これまでに、駅や商業施設など人の出入りの多い施設の設計や、人出の予測や避難計画の設計などが行われている。また、事故・災害などにより歩行移動せざるを得ない場合の群衆の振る舞いを可視化し、有効な誘導方法をシミュレーションにより立案する試みが都市規模で行われている（図4.6-1参照）。

ガスや石油のパイプラインや電力・ガス・上下水道網なども、資源を物理的に移動させる手段という意味で交通の一種と考えられる。これらは、これまでにそれぞれの専門分野で研究が進められてきた歴史が長い。しかし人口の増加や経済成長にともない、資源開発にともなう環境負荷から、末端の受給者の消費行動まで含めた研究が必要となっており、社会全体を扱う必要性が高まっている。

特に近年では、電力の交通網である電力網のシミュレーションが行われている。この背景には、マイクロタービンや太陽電池等の普及による発電施設の多様化や福島原発事故などで露見した既存電力供給体制の課題、インバータ制御の普及による需要特性の強非線形化への対応、発送電自由化などのため電力網再検討の機運の高まりなどが挙げられる。電力網シミュレーションでは、非線形振動子系を数値計算することが必要になるが、結合ネットワークの構造が複雑であり、かつ需要側・供給側ともに離散事象性が強いことも解析を複雑なものとしている。これまでに、基幹部分や都市レベルでの解析が試みられている。

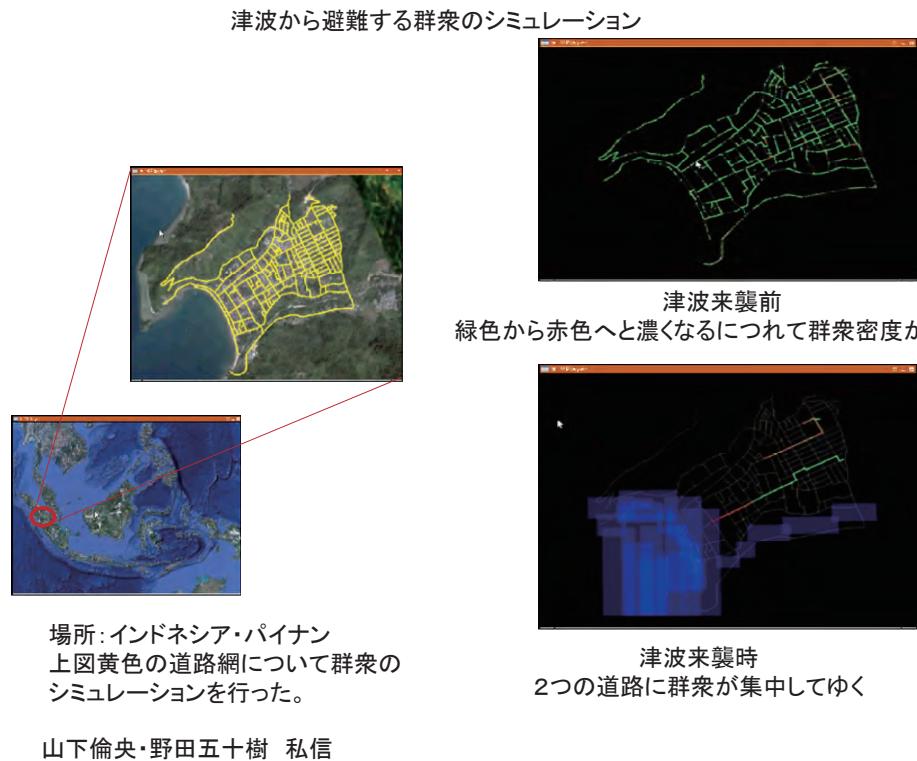


図 4.6-1 津波から避難する群衆のシミュレーション

(ii) 経済

社会活動の広域化にともない、資源を適切に配分することの重要性が高まってきた。低開発国・発展途上国の多くの国民が中開発国・先進国へと進もうとしている今日において、資源は天然資源に限らず、人的・資本的・生産財的・制度的資源といった社会的資源も注目されている。

資源の適正な配分を実現することは、経済制度の大きな目的である。これに対し、配分資源の質・量を整え、安定で持続可能な取り引き制度を用意したうえで、時々刻々の最適化は自由な取り引きにゆだねるという方法が有効であることが、これまでの歴史からの教訓であった。しかし資源と取り引き内容の多様化は著しく、また信頼性の高い制度設計自体も数学・計算科学の高度な課題となっている。例えば、金融オプションの値付けに、モンテカルロシミュレーションが使われていることはよく知られている。

経済分野では計算機の応用が進んでおり、オンライン取り引きは普遍化し、詳細なデータの蓄積が進んでいる。こうした「ビッグデータ」の解析から、1990年代には株価や為替の変動の実像が明らかとなり、伊藤解析に基づく金融工学理論の根本的な誤りも明らかとなった[3]。これを転換点とし、その後、今世紀の経済は計算機とともに急展開している。その最たるもののが為替取り引きである。

東京・ニューヨーク・ロンドンに設置された取り引きサーバを核として展開されている為替取り引きは 1000 分の 1 秒（ミリ秒）を争う情報戦であり、取り引き参加者は、取り引きサー

バから物理的距離の近いすぐ隣に自分の発注用のサーバを設置しているほどである。取り引き戦略・戦術の立案自体、計算機に依存している。

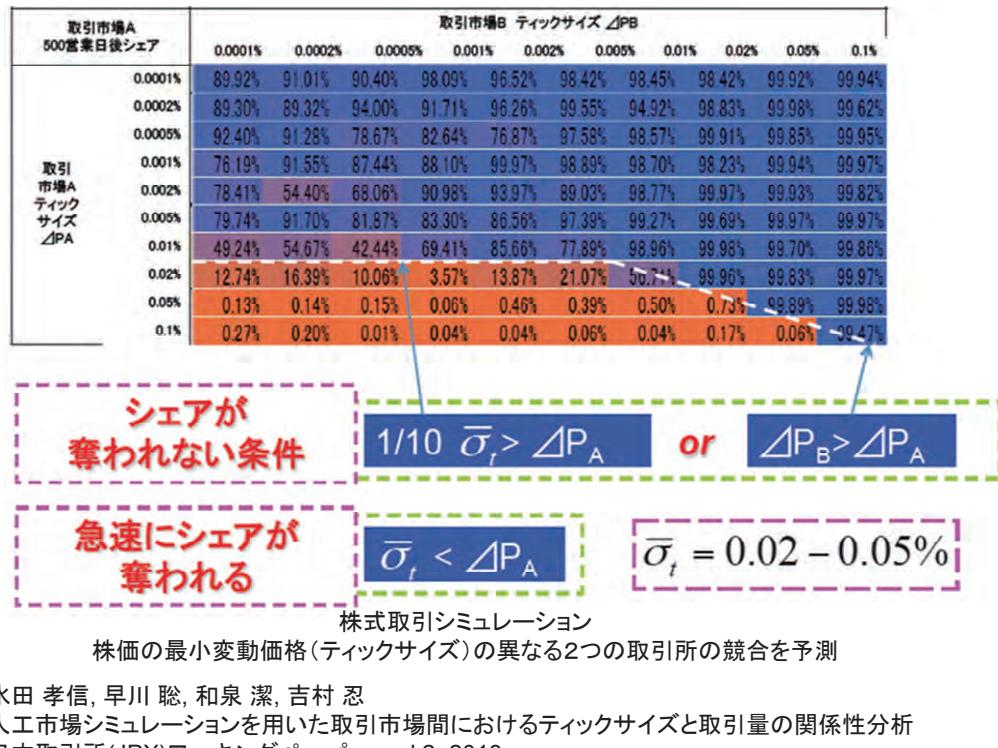
一方、取り引き制度自体は未だ完全なものとは言えず、瑣末な理由で暴騰・暴落し、経済システムの根幹を揺るがす事態を招いた事例は多い。これに対し、市場取り引き全体のシミュレーション解析による制度設計や経済活動の実時間監視システムが研究されている。

経済取り引きへの計算科学の応用は証券市場に限らず、魚市場などの現物市場でも進められている。

取り引きエージェントによる市場シミュレーションでは、個々の銘柄のレベルでの解析が進められている。例えば、株価の刻み幅（ティックサイズ）の最適化研究などが進められ、株式取り引き制度の改善に寄与している。また、為替取り引きのデータから現在の値動きの動向とゆらぎを分離し、大きな変動を予測する試みも成果を挙げている（図4.6-2参照）。

銀行間取り引き・企業間取り引きのネットワークの解析から、倒産のシステムリスクを評価する研究も行われている。取り引き関係のネットワークから、ある会社が倒産した際に連鎖倒産する可能性がある企業を推定する試みであり、連鎖倒産する会社が少数に限られるのか、あるいは無視できない規模に広がるのかに注目する一種のパーコレーション（浸透）問題である。

社会科学で扱うネットワーク構造は、連続系に対する離散近似による数値解析や物性シミュレーションで現れる、簡単で一様な構造ではないことが一般的である。よく現れるのは、ランダム・スマールワールド・スケールフリーといったネットワーク構造である。このため計算機で扱う際に、いわゆるステンシル処理とはならず、記憶装置上のデータ配置や並列処理での負荷分散が重要となる。



水田 孝信, 早川 聰, 和泉 潔, 吉村 忍
 人工市場シミュレーションを用いた取引市場間におけるティックサイズと取引量の関係性分析
 日本取引所(JPX)ワーキングペーパー, vol 2, 2013.
<http://www.tse.or.jp/about/seisaku/wp/>

図 4.6-2 株式取引シミュレーション

(iii) 人間関係

社会は、言うまでもなく人間関係を基礎としている。人間関係がどのように形成され、どのように発展するかをエージェントモデルおよび人間関係の「ビッグデータ」から解明する研究も進んでいる。

どのようなエージェントが人間の社会集団を形成するのかについては長い研究があるが、最近、数理的進化論的手法により集団の離散集合を記述するモデルも提唱されている[4]。

2000 年代後半以降、数百万台規模の携帯電話の数週間にわたる通話記録を解析した研究から、人間関係の構造が明らかとなってきた（図 4.6-3 参照）。また、ブログ（インターネット上の公開日誌）やツイッター（短いブログ）といった文字情報から、社会的事象の状況を分析する研究も進められており、自然言語処理へのプレークスルーとなっている。これらは、文章から作った個々の単語のネットワーク、また文章や発言の引用関係のネットワークを解析する作業である。

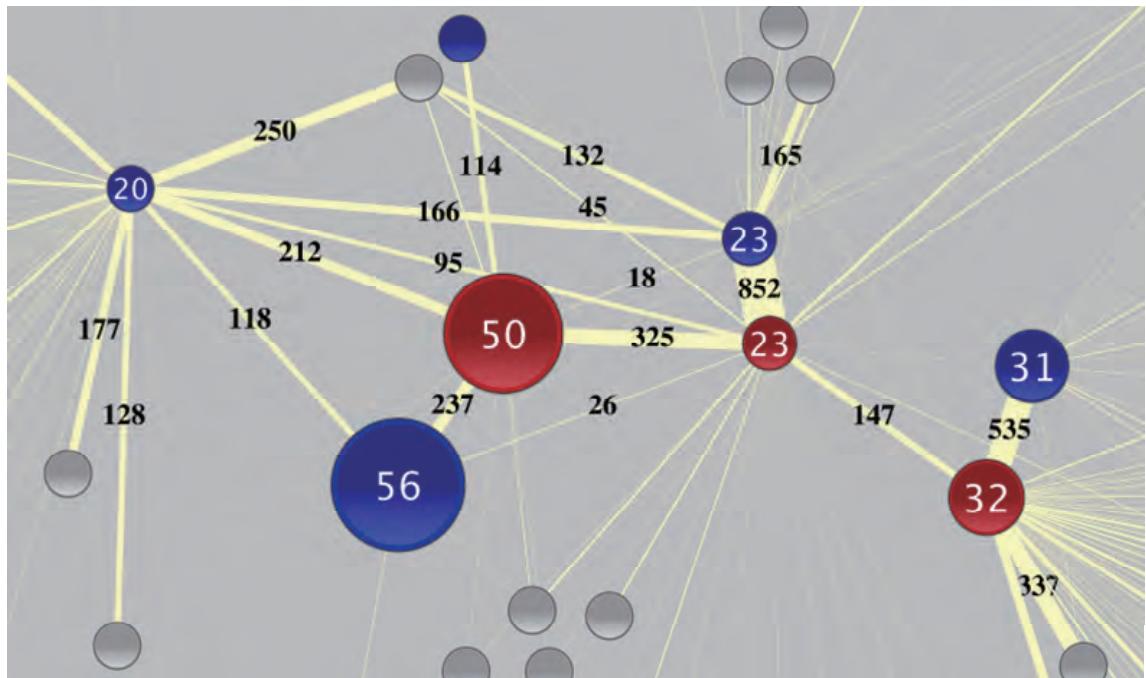


図 4.6-3 携帯電話の通話記録の解析結果¹ [5]

(2) 長期的課題

計算機による社会科学は、今のところ社会を構成する各要素の範囲内に限られている。長期的には、交通・経済・人間関係を物理地球と統合することが見込まれる。そして、防災・減災といったリアルタイム処理から、制度設計といった莫大な社会実験シミュレーションまで、幅広く展開する社会基盤となると考えられる。こうした応用を実現するためには、計算機の性能向上のみならず、社会的なデータの収集・活用が不可欠であるにもかからず、現在、社会データの収集には制約が大きい。戸籍・住民票等の個人情報に関わるデータや、徴税・警察公安をはじめとする行政が収集したデータの活用には厳格な制約が課せられているからである。その一方で、ネットショップをはじめとするネットサービスプロバイダは、ユーザーとの契約に基づいて種々の情報を集め、分析・活用を進めている。社会シミュレーションとその利用技術の黎明期である現在にあってのこうした動きは、データの抱え込みを通して、将来の利用技術まで囲い込むもうとする動きでもある。実際、企業が集めたデータを研究者が研究のために購入することが常態化している。

こうした動きは、自由で生産的な研究を阻害するものであり、公共の福祉の追求とは相いれないものである。公共の目的に積極的に活用することを目標とした場合には、社会的なデータを効率的かつ容易に収集できる体制を整えることが緊喫の課題である。

また、社会科学に現れるネットワーク（グラフ・離散構造）の解析には、組み合わせ論的な計算量がつきまとい、うまく回避する必要がある。人間関係のエージェントモデルでも、自分

¹人間関係のネットワーク記述する離散グラフ。青丸は男性、赤丸は女性を表わし、丸の中の数字は年齢である。丸をつなぐ辺の数字は関係の親密さを表わすインデックスである。

の行動を決める際には組み合わせ論的な、あるいはそれ以上の計算量が必要となることも指摘されている。相手が自分をどう理解しているかを評価する際に、すべてのエージェントにわたる相互参照が繰り返されるためである。

組み合わせ論的な計算量が必要となる処理、特に NP 完全問題では、完全な探索により真の解を求ることは期待できない。求めることができる解は、常によりよい解である。より高性能の計算機からよりよい解が得られるため、計算機の不断の高性能化が求められるのである。

(3) 次世代に解決すべき課題

社会シミュレーションの特徴は、基礎法則が多様であり、またモデルパラメータも多いことである。更に、典型的な複雑（複合）系であり、交通・経済・人間関係といった種々のシステムシミュレーションを統合する必要がある。このため、個々のシミュレーション自体の規模は大きくなるとも、全体として必要となる処理能力は大きくなる。

また、防災・減災のリアルタイム処理では、莫大な試行を瞬時に処理し、次の瞬間への最適解を提示することも期待される。

更に、現実の社会からリアルタイムで情報を収集し続ける必要があるため、ネットワーク性能・データベース処理も大規模となる。

現在、社会科学が直面している計算科学上の課題は、こうした大規模かつ離散事象的パラメータ探索を効果的に実行することである。「京」コンピュータをはじめとする現在のスーパーコンピュータは、数万台から数十万台規模の計算ノードからなる超大並列型計算機であるが、その全体を統合し効果的に活用する技術は発展途上である。莫大な数の計算ノードのそれぞれで、ノードのオペレーティングシステム（OS）が基本ソフトウェアとして動いており、更に個々の OS をまたいで情報をやり取りする通信システムソフトウェアと複合してベンチマーク性能の向上が続けられている。本来は計算機全体を見据えたプロセスの管理・実行が必要であるが、こうした超大並列型計算機の OS は存在しないに等しい。次世代のスーパーコンピュータでは、この課題の解決が望まれる。

(4) 課題を解決するために必要なアプリケーション群

(1)に記述した、交通・経済・人間関係を、地球全体でシミュレートするには、アプリケーションおよび(3)に記述した大規模な実行管理システムが必要となる。

交通シミュレーションでは 10^9 台の自動車、 10^{10} 人の群衆の動きを、エージェントモデルとして扱う。経済シミュレーションでは 1000 分の 1 秒単位の為替・証券取り引きから、10 年単位のインフラ整備を扱う。これら個々のシミュレーション自体は京速級のスペコンでも実現できるものも多い。しかし社会シミュレーションの常として、不断のデータ同化が必要である。更にシミュレーションモデルも単一のものでは一面的となるため、多数のモデルによるシミュレーションの比較検討が不可欠となる。これらを束ねる実行管理システムと合わせて、エクサフロップスの演算能力、毎秒ペタバイトの外部入出力のスーパーコンピュータが期待される。

人間関係シミュレーションにおいては、 10^{10} 人程度の集団が、集団の規模に応じて異なる規則に従う課題を扱うことを想定しているが、現時点においては大規模な人間関係のネットワー

クを記述するモデルそのものが研究段階にある。大規模な人間関係をシミュレーションするための解法および数値モデルはまだ存在せず、現時点では本課題を解決するために必要な計算性能は見積もることは出来ない。しかしながら、本分野の研究は近年の「ビッグデータ」などの背景のもと今後数年のうちに急速に進展すると期待され、数年後には大規模な人間関係のシミュレーションを行うアプリケーションが開発されると考えられる。その実行には、高い性能のスーパーコンピュータが必要となることが想定される。

| 課題 | 要求性能 (PFLOPS) | 要求メモリ バンド幅 (PB/s) | メモリ量/ ケース (PB) | ストレージ量/ ケース (PB) | 計算時間/ ケース (hour) | ケース数 | 総演算量 (EFLOP) | 概要と計算手法 | 問題規模 | 備考 |
|-----------------------|------------------|-------------------------|-------------------|---------------------|---------------------|-------|-----------------|--|---|---|
| 自動車交通流のリアルタイムシミュレーション | 1000 | 100 | 0.00011 | 0.001 | 0.000000028 | 1000 | 0.1 | 地球上の全自動車交通規模(10億台、道路総延長400万Km)、エージェントモデルによるシミュレーション(実際に計算対象となる稼働している車の台数は10^8台と推定) | $10^8 \text{台} \times 10^3 \text{演算} \times 10^3 \text{step} \times 10^3 \text{ケース} (10 \text{秒分のシミュレーション})$ これを0.1 secで計算する | 要求ストレージおよびそう演算量は1日分あたりとする。 |
| 株式取引所ルールの最適化 | 2100 | 0.0001 | 0.00000001 | | 0.0024 | 10000 | 180000 | 1取引所の1000銘柄について、1000 注文機会/秒 $\times 10^4$ 1日分の取引をトレーダーごとに演算/注文機会 $\times 10$ レジエンスモデルでモンテカルロ ダー $\times 10^4$ サンプル $\times 10^3$ 銘柄 = 1.8×10^{19} 演算。これを24hで 10^4 ケース計算する | 総演算量 5時間 $\times 3600$ 秒/時間 \times 整数演算が中心 「要求性能」「総演算量」は インストラクション数 | |
| 人間関係シミュレーション | | | | | | | | 10^{10} 人程度の集団が、集団の規模に応じて異なる規則に従うエージェントシミュレーション | | 現時点において、問題を記述するモデルおよび数値計算モデルが確立していないため、要求計算リソースを見積もることが出来ない |

※本見積もりは未だ精査中である。より精度の高い数値はWeb版(→「1.2. 本文書の構成」)を参照のこと。

(5) 他分野との連携

(3)に挙げた社会科学の次世代の課題では、以下の他分野との連携が必要と考えられる。

(i) 地球物理・宇宙科学

天気シミュレーションや太陽活動データと社会シミュレーションとの連携により、交通・経済活動の最適化が期待される。例えば天気の変化にともなう自動車交通や鉄道運行の効率化や、電力需給予測、農業・漁業生産の調整などが挙げられる。

(ii) 防災減災

地震・津波・火山噴火といった激甚災害の予測、あるいは予測は無理でも初動現象の観測に基づく災害予測と対策とが期待される。何秒後にどのような地震波・津波が到達するかを、到達する前に予測し、人的社会的被害を極小化する対策を実行することが期待される。

(iii) ものづくり

現在の社会経済でどのような新商品や新技術が期待されているのかを予測する技術の確立が予測される。これにより無駄な生産・消費を抑制するとともに、消費者にとって価値の高い商品の供給・普及を促進することが期待される。

(6) 公的な意見交換とそのサマリー

日本における社会科学へのスーパーコンピュータの応用は黎明期であり、その中核となる研究者組織も立ち上げの準備の段階である。今後、公的な場を早急に整備する必要があるという点で、多くの研究者の意見は一致している。

また現行の法体系の解釈・運用を、公共の目的のための社会シミュレーションに必要なデータの効率的活用の観点から再検討する必要がある。

(7) ロードマップ

| 年代 課題 | 2012～ | 2014～ | 2016～ | 2018～ | 2020～ | 2022～ |
|--------------------|----------------------------|-----------------------|-------------------|---------------------|-------|-------|
| 交通シミュレーション | 地域規模のシミュレーション | 走行状況のリアルタイムデータ同化の実証研究 | 国から世界規模のシミュレーション | 交通渋滞緩和への応用研究 | | |
| 経済シミュレーション | 取引所規模のシミュレーション | 取引制度設計・監督への応用研究 | 世界規模のシミュレーション | 取引データのリアルタイム同化の実証研究 | | |
| 人間関係シミュレーション | 村規模(数千人)のシミュレーション | 人間関係のリアルタイムデータ同化の実証研究 | 1国から世界規模のシミュレーション | 人間集団の生成・管理への応用 | | |
| 複合シミュレーション実行管理システム | 100万並列・100万パラメータ規模のシステムの実現 | | | 社会最適化への応用研究 | | |
| | | | | 1億スケールのシステムの実現 | | |

図 4.6-4 社会科学ロードマップ

参考文献

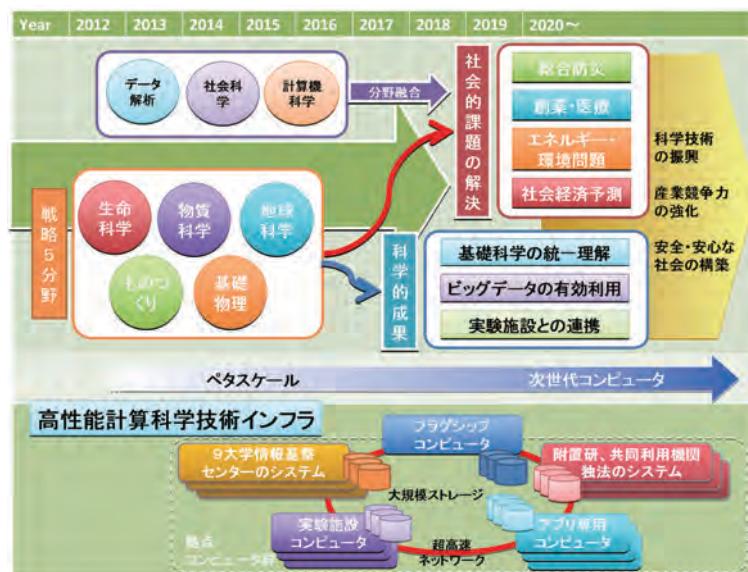
- [1] 横断型基幹科学技術研究団体連合: "分野横断型科学技術アカデミック・ロードマップ報告書"、経済産業省平成 20 年度技術戦略マップローリング委託事業、2009H. Kamada et al., Phys. Rev. C 64, 044001 (2001); E. Hiyama, Prog. Theor. Exp. Phys. 2012, 01A204 (2012).
- [2] M. Schreckenberg, A. Schadschneider, K. Nagel and N. Ito, "Discrete stochastic models for traffic flow", Physical Review E51 (1995) p.2939.
- [3] Rosario N. Mantegna and H. Eugene Stanley, "Introduction to Econophysics: Correlations and Complexity in Finance,"(Cambridge University Press, 2000)

- [4] J.-P. Onnela, J. Saramaki, J. Hyvonen, G. Szabo, D. Lazer, K. Kaski, J. Kertesz, and A.-L. Barabasi,"Structure and tie strengths in mobile communication networks",Proceedings of National Academy of Science (PNAS) 104, 7332-7336, 2007
- [5] Vasyl Palchykov, Kimmo Kaski, Janos Kertesz, Albert-Laszlo Baraba, Robin I.M.Dunbar, "Sex differences in intimate relationships", Scientific Reports vol.2 (2012) p.370

5. おわりに

計算科学の劇的な進歩にともない、従来は演算能力の不足によって実現できなかった詳細なモデルでの計算、現象全体を対象とした計算が実現しつつある。平成24年秋に「京」が本格稼働し、HPCIでは現在、5つの分野での戦略プログラムにより、ペタスケールの演算性能を利用したさまざまな研究開発が行われている。そしてこれらの研究開発からは、創薬・医療、エネルギー、ものづくり、防災等の多岐にわたる分野において、我々が営む社会経済活動の向上に有益な成果が生まれつつある。しかしながら、複雑化、グローバル化が進む現在の社会が抱える課題に対しては、次世代のスーパーコンピュータがもたらす更なる高性能な計算環境に期待されるところも多い。

大規模数値計算が、現在の我々の社会生活を支える産業や経済活動に不可欠な貢献をしていることは紛れもない事実であり、今後のスーパーコンピュータの性能向上により得られる成果は、社会が抱える様々な課題の解決に貢献し得る。本書の第2章では、将来において計算科学が貢献し得る社会的課題の具体例を示した。第3章では従来は異なる研究分野と見なされていた諸分野が、計算科学を通じて有機的に結合する事により、新しい科学が創出されることへの期待を示した。そして、第2章および第3章で示したこれらの社会的課題の解決や新たな科学の創出には、基礎となり得るさまざまな計算科学分野における研究課題への取り組みが不可欠であり、第4章において各分野における現状の課題、今の中長期的目標、そして解決すべき課題等についての詳細を記述した。今後、計算科学を更に発展させ、社会に山積する課題を解決し、生活の質の向上、安心・安全の確保、そして、産業の更なる発展や振興の礎となる技術基盤として確立するためには、社会における課題解決のために必要な技術革新を目指す研究開発と、それを後押しする基礎科学が相互に密接に連携して推進されることが極めて重要である。

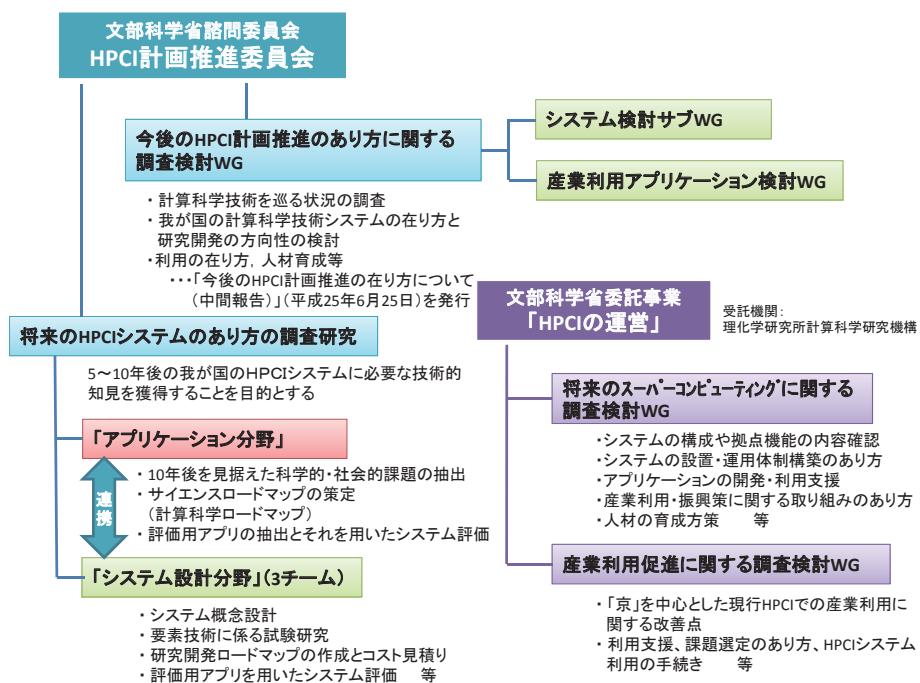


また、スーパーコンピュータの利用は、単体として高性能な計算環境を与えるのみならず、大規模実験施設と連携することによる成果が幅広い分野で期待されている。本書では、生命科学関連の大規模データ処理が必要となる構造解析やイメージングに大きな成果が期待されるSACLAと計算科学との連携について紹介しているが、他にも高分子材料など、幅広い分野でも大規模実験施設との連携が更なる科学技術の発展につながることが期待される。

一方で、本書が示す社会における課題解決に計算科学が貢献する成果を得るために単に高性能で大規模な計算機を構築することだけでは不十分であり、高性能の計算機を使いこなす優秀な人材の育成やモデル開発、運用のための十分な人的資源の確保や適切な組織体制の準備などのソフト面での対応を十分に行うこと必要である。人材育成を含めたこのような大規模数値計算に係わる全体的な施策については、本調査研究を推進するうえでの上部組織である

「今後のHPCI計画推進のあり方に関する検討ワーキンググループ」で議論され、平成25年6月25日に公開された「今後のHPCI計画推進の在り方について（中間報告）¹」で報告されている。また、平成25年7月に行なった、本ロードマップのパブリックコメント募集では、計算科学の更なる発展のためには、開発されたソフトウェアを（無償で）提供し大学、中小企業で利用できるようにすることの重要性や、開発したソフトウェアがPCからスーパーコンピュータまでを含めたマルチプラットフォームで利用できるようにすること、継続的なサポートを行うこと、ホームページや書籍等で広く情報を提供することなど、利用者の裾野を広げるための努力も必要であるとのコメントがあった。また、大規模計算科学は、その扱いによっては社会経済活動に大きな打撃を与えるリスクをはらんでおり、新たな技術の開発に対しては、その倫理的問題について十分に考察することの必要性を問う声もあった。

上述のように、将来の計算科学の発展に向けては、ハード、ソフトを含めた多面的な検討が必要であり、今後の HPCI の利用、運用については、本書の作成を行っている「将来の HPCI のあり方の調査研究（アプリケーション分野）」の活動以外にも様々な調査検討を行う体制が構築され、人材育成やアプリ開発、産業利用の促進などを含めた検討が行われている。下図に、今後の HPCI の利用・運用に関する検討体制の全体像を示す。



¹http://www.mext.go.jp/b_menu/shingi/chousa/shinkou/028/gaiyou/1337595.htm

本書は、計算科学分野はもとより、実験・観測・理論の研究者、ならびに、各学術コミュニティの第一線で活躍する大学・研究機関、企業の現役研究者約100人が一堂に会し議論が行われるという画期的な取り組みの成果として取りまとめられている。今後も、計算科学の更なる発展のため、このような取り組みを定期的に継続的に実施していくとともに、成果を創出する計算科学とハードウェアを設計するシステム設計分野をはじめ、様々な観点で検討を行う他の体制との連携をより一層強化していく。

用語集

| 用語 | 解説 |
|---------------------------------|--|
| A | |
| ABINIT-MP(X) | 望月・中野らが開発している国産 FMO 計算用のプログラムシステム。4 体のフラグメント展開までが可能。 |
| AFO | FMO 計算を 2 体展開の範囲内で固体系に適用するための技法の 1 つ。 |
| Allreduce QR 法 | QR 分解の手法の一種。高並列環境で高い並列性能を実現するために近年提案された新しい手法。 |
| allreduce, allgather, altoall | 計算ノード間での集団通信の様式。接頭辞の all はすべてのノードに渡って結果を共有する事を示す。allreduce は総和などリダクション型の演算を計算ノードにまたがって行うこと。allgather はすべてのノードから部分データを集めて全体データを作ること。altoall は全体全通信によって、データの転置を行うこと。 |
| AU | 天文単位(Astronomical Unit)の略称。天文単位とは長さの単位であり、地球と太陽間の距離に由来する。今日では 149,597,870,700 メートルと定義される。 |
| B | |
| Bi-CGSTAB 法 | 疎行列の連立一次方程式の解法の一つ。反復解法の一つである双共益勾配法 (BiCG 法) の残差を減少させ、安定化した手法。比較的高速・安定とされる手法で、偏微分方程式を解く多くの物理問題（熱流体・構造・電磁場など）の核となるソルバとして広く使用されている。 |
| Bisection BW | バイセクションネットワークバンド幅のこと |
| BLAS | Basic Linear Algebra Subprograms (BLAS)。ベクトルと行列に関する基礎的な線形代数演算のサブプログラム集のこと。線形代数演算ライブラリ API のデファクトスタンダードでもあり、高度に最適化された実装がインテルなどの各ハードウェアベンダーなどから提供されている。 |
| B 中間子 | ボトムクォークを含む中間子の総称。 |
| C | |
| CP 対称性 | C は荷電共役変換（粒子 \leftrightarrow 反粒子）、P はパリティ変換（鏡映変換）を表す。これらの変換の組み合わせによって理論が不変であるとき、その理論は CP 対称性を持つという。 |
| D | |
| DGEMM | 倍精度汎用行列乗算のための BLAS のサブルーチンのひとつ。LINPACK ベンチマーク内で多用されているため、DGEMM 実装の性能はベンチマーク結果に大きな影響を与える。 |
| DZP 基底関数 | double zeta polarization 基底関数。1s, 2p などの原子基底の各成分を、二つの短縮ガウス型関数を用いて表現した基底を DZ(double zeta) 基底と言い、それに分極関数を加えたもの。 |
| E | |
| EDA 標準技術 | 電子情報技術産業協会 EDA 標準技術専門委員会配下の EDA 標準化小委員会において推進している国際標準化機構の活動に対応した EDA (Electronic Design Automation) の標準化活動のこと。 |
| ESR | 電子スピニ共鳴の略。開殻系の電子状態に関する情報が得られる。 |
| F | |
| Fermi-Pasta-Ulam の非線形励起 | 非線形なバネで互いにつながれた多数の粒子の運動において孤立した波が生じる現象。ソリトンと呼ばれる |
| Finite-difference Time-domain 法 | 電磁場解析等で用いられる計算手法の一つ。空間を差分近似し陽的な時間進行法を用いる。 |

| 用語 | 解説 |
|-------------------------------------|---|
| FMO | フラグメント分子軌道法(FMO 法; Fragment Molecular Orbital Method)は、北浦和夫教授（現神戸大学）によって開発された量子化学理論。分子全体を小さなフラグメントに分割して計算をするため、通常の量子化学計算では不可能なタンパク質のような大規模分子系の量子化学計算が実行可能。また、分割した小規模のフラグメントごとに並列計算を実行することが可能なため、非常に効率よく並列計算を実行可能。 |
| Fock 行列 | 多数の電子の振る舞いを平均化されたポテンシャル中を動く、一電子のシュレディンガー方程式を行列表現した行列のこと。 |
| G | |
| GAMESS | 米ゴードン研が DOE などの資金で開発を続けている汎用の分子軌道計算プログラム。10 年ほど前から FMO 計算機能が導入されている。 |
| gatherv | MPI のデータ転送関数 (MPI_GATHERV)。全てのプロセスから一つの宛先プロセスにメッセージを転送する。 |
| Gauss 関数の局所性 | 中心からの距離が大きくなるにつれて急速に値が減衰する Gauss 関数の性質。2 電子クーロン反発積分などの計算で、これを利用したカットオフ、演算削減は大きな効果がある。 |
| GCC | GNU Compiler Collection. 自由に使える C/C++言語などのプログラム言語のコンパイラ。 |
| (gg gg)型積分 | 2 電子クーロン反発積分は 4 つの基底関数中心を持つが、その 4 つの基底関数ともに全角運動量 5 の g 軌道関数を含む 2 電子クーロン反発積分のこと。 |
| GMRES 法 | 疎行列の連立一次方程式の解法の一つ。反復解法の一種で、比較的ロバストなクリロフ部分空間法の一つとして知られている解法。同時に使用する前処理法や計算条件によって、並列計算性能が高く、高速に収束解が得られるため、偏微分方程式を解く物理問題の一部で使用されている。 |
| G タンパク質共役受容体 | 細胞外の神経伝達物質やホルモンを受容してそのシグナルを細胞内に伝える受容体。その際 G タンパク質と呼ばれる三量体タンパクを介してシグナル伝達が行われる。多くの薬剤のターゲットになっている。 |
| H | |
| HF 交換相互作用 | 密度汎関数法において、交換相互作用を表現する汎関数に Hartree-Fock(HF)法の交換相互作用を使ったもの |
| High-radix 型 | ある計算ノードからもう一つの計算ノードへの通信が、他の計算ノード同士の間の通信と同時に実行しやすいネットワーク。すなわち他のノードに妨害されずに通信できるノードあたりのノード数が多いネットワーク。 |
| Hodgkin-Huxley formalism | イカ巨大軸索を対象に神経細胞における活動電位の発生メカニズムをゲート（後に実体としてこれに相当するイオンチャネルがあることが明らかにされた）の協同性を用いて電気回路として記述したモデルが Hodgkin-Huxley モデルである。この形式を Hodgkin-Huxley formalism と呼び、多くの種類のイオンチャネルやマルチコンパートメントモデルに対しても用いられる。 |
| HPCI 戦略分野 | スーパーコンピュータ「京」を中心とした HPCI (High Performance Computing Infrastructure) を最大限に活用することによって、戦略的に取り組むべき 5 つの研究分野 |
| I | |
| IACM | International Association for Computational Mechanics。国際計算力学連合。計算力学に関するいくつかの国際学術講演会を運営する。 |
| L | |
| L1,L2 キャッシュ | CPU にはメモリとのデータ転送を節約するためのデータの一時的な保管場所があり、それをキャッシュという。キャッシュは演算装置とメモリとの間に多階層に配置されており、演算装置に近い順に L1, L2 と言う。 |
| L1 正則化法 | 影響を与える因子の数を抑えることができる機械学習法 |
| Langevin 方程式 | ブラウン運動を記述する確率微分方程式 |
| Leaky Integrate-and-Fire neuron モデル | 積分発火モデルの中でリーク電流をつけたモデル |
| Lennard-Jones 型ポテンシャル | 原子間の相互作用を記述する最も簡単なポテンシャルで、斥力の項と引力の項の 2 つによって記述される。 |

| 用語 | 解説 |
|------------------------|--|
| LHC | 大型ハドロン衝突型加速器 (Large Hadron Collider)。欧州原子核研究機構 (CERN) で稼働中の加速器の名称。ヒッグス粒子の発見と超対称性粒子などの新しい物理の探索を目指している。 |
| logP | 化合物の脂溶性を表す量 |
| LPB | LSI Package Board の略。 |
| M | |
| MIPS ピーク性能 | MIPS (ミップス) 値、あるいは MIPS ピーク性能は、100 万命令毎秒 (million instructions per second) の略で、コンピュータの性能指標の 1 つ。 |
| MPI | 並列計算のためのプロセス間通信ライブラリの業界標準 |
| N | |
| NMR 分光 | 原子核の磁気を測定する手法。分子構造に関するデータが得られる。 |
| NP 完全問題 | クラス NP に属する問題でかつ、クラス NP すべての問題から多項式時間帰着可能な問題。このクラスに属する問題は多項式時間で解を見つけるアルゴリズムが存在しないと予想されている。(P≠NP 予想) |
| O | |
| on the fly | 「実行中に」を意味し、プログラム中で繰り返し必要となるデータを、その度ごとに計算して用いるアルゴリズムを指す。これと対極にあるのは「あらかじめ計算して保存しておいたデータを、必要になる度に記憶装置から参照して用いる」やり方である。 |
| ONIOM 法 | ONIOM 法は諸熊啓治教授 (現京都大学) により考案された QM/MM 計算の代表的な方法。生体高分子などの巨大分子をいくつかのレイヤーに分け、レイヤーごとに量子化学計算や分子力学計算を行うことで、巨大分子の電子状態や分子構造の評価や反応機構の解析を行うことが可能。 |
| P | |
| PDB 構造 | Protein Data Bank(PDB)に登録されている NMR 解析や X 線構造解析などの実験的手法によって得られた蛋白質の構造。 |
| pKa | 化合物の酸性度を表す量 |
| Q | |
| QueryDriven | データに対するクエリー (質問) を行いながら、対話的にデータを調べていく手法。 |
| R | |
| RI (放射性同位元素) ビームファクトリー | 安定な原子核に含まれる中性子の数よりも、中性子の数がかけ離れた原子核をエキゾチック原子核という。このようなエキゾチック原子核は不安定なため天然には存在しない。しかし超新星爆発などの高エネルギー現象による重元素合成では、エキゾチック原子核が中性子過剰核として重元素合成の反応経路にあらわれ重要な役割を果たす。このようなエキゾチック原子核の性質を解明することは原子核理論のチャレンジであるが、実験的にも生成が難しい。このようなエキゾチック原子核の性質を調べることのできる実験設備が理研の所有する RI ビームファクトリーである。エキゾチック原子核の生成率は低いため大強度のビームが必要である。理研 RI ビームファクトリーは 2006 年から稼働しており、世界最強のビーム強度を誇り、これまでさまざまな新しいエキゾチック原子核を発見している。米国および独国においてもそれぞれ 2018 年と 2016 年の稼働を目指してより大強度の RI ビームファクトリーの計画がある。 |
| r 過程 | 宇宙における重元素生成過程は主に、星の内部で安定線上を時間をかけて進む中性子捕獲反応(s 過程)と、わずか数秒間の爆発的な過程で安定線から離れた原子核を作る r 過程に分けられる。図 4.5.3.1 も参照。 |
| S | |
| SPICE モデル | SPICE (Simulation Program with Integrated Circuit Emphasis)はカリフォルニア大学バークレー校で開発された回路シミュレータであり、SPICE モデルとはこの回路シミュレータで使用される、受動素子 (抵抗、インダクタ、コンデンサ等) と能動素子 (トランジスタ等) の等価回路モデルのこと。 |
| STM | 走査型トンネル顕微鏡。短針と固体側とのトンネル電流の観測により、表面構造や電子状態を知ることが可能。原理は異なるが、原子間力顕微鏡 (AFM) なども表面解析に用いられる。 |

| 用語 | 解説 |
|------------------------------------|---|
| Structure-based drug design (SBDD) | タンパク質などの立体構造をもとにして薬剤のデザインをする方法 |
| SU(3)群 | ゲージ群の一つ。QCD は SU(3) ゲージ群のゲージ理論である。 |
| SuperKEKB/BelleII 実験計画 | B 中間子の寿命や B 中間子がどのような粒子にどのような割合で崩壊するかを精密に測定する実験。高エネルギー加速器研究機構で行われている。2021 年頃に高精度データが取得できるよう計画されている。B 中間子に含まれるボトムクォークは、トップクォークに次ぐ質量を持つ重いクォークであり、ボトムクォークの性質を詳細に調べることで、素粒子標準理論に内在する階層性の起源や素粒子標準理論にない新しい物理を明らかにできる。 |
| T | |
| tagSNP | ゲノムの特定の領域においてその領域中の他の SNP (一塩基多型) の代表となりうる SNP |
| Thin node | 少数の演算器、メモリによって構成される計算ノード。 |
| U | |
| uds ハドロン | 6 種類のクォークのうち、軽い u,d,s の 3 種類のクォークから構成されるハドロン。 |
| union-find アルゴリズム | グラフ構造の中から、連結クラスター (互いに辺でつながっている頂点の集合)を見つけ出す際に用いられるアルゴリズム。 |
| V | |
| VOF 関数 | Volume Of Fluid の略。空間を計算要素に分割した際、その計算要素に占める流体の体積比率を用いる手法を VOF 法と呼ぶ。このとき使用する全計算要素の VOF 値の事を VOF 関数と呼ぶ。 |
| X | |
| XFEL | X 線自由電子レーザー(XFEL)は、波の位相がきれいにそろったレーザーの性質を持つ超高輝度の X 線を発生させることのできる光源 |
| あ | |
| アーティフィシャルニューラルネットワークモデル | 複数の同種神経の平均としての活動量関数とシナプス伝達関数を定義してネットワークを形成させるモデル。広義の McCulloch-Pitts Model |
| 足場タンパク質複合体 | 細胞内情報伝達系において、複数の情報伝達タンパク質と結合して複合体を形成する足場となるタンパク質の複合体 |
| アパタイト | リン酸カルシウム (磷灰石) のことだが、生体では水酸基が入ったヒドロキシアパタイトとして歯や骨の主要構成要素となっている。 |
| アルダー転移 | 剛体球の密度を上げると、ある密度を境に液体から固体 (結晶) に相転移すること。 |
| アンサンブルシミュレーション | 沢山のシミュレーションを行い、その統計的性質を研究する計算手法 |
| アンジュレータ | 加速された電子の直線軌道上に沿って、多数の N, S の磁極からなる磁石列を上下に配置して、その間を通り抜ける電子を周期的に小さく蛇行させて、明るく特定の波長を持った光を作り出す装置。 |
| い | |
| 位相空間 | 燃料プラズマ粒子の 3 次元位置と 3 次元速度を座標とする 6 次元空間。粒子間の衝突効果が十分に大きければ、局所的な熱力学的平衡を仮定して 3 次元流体モデルでプラズマを記述できるが、衝突効果が小さい高温プラズマに対しては 6 次元位相空間の粒子分布を記述する運動論モデルが必要になる。ただし、磁場閉じ込め核融合プラズマのような強磁場中の運動論モデルは 5 次元位相空間に簡約化できる。 |
| 位相空間密度 | 位相空間における密度。位相空間とは位置と速度(または運動量)を座標とした空間のことである。例えば、我々の世界ではそれぞれ 3 次元で合せて 6 次元の空間。 |
| 位相骨格 | データを変化点の接続情報 (スケルトン・骨格) により表し、大規模なデータを非常に小さなデータサイズで特徴付けることができる。 |
| 1 磁場散逸時間 | 磁場を作っている電流が電気抵抗により熱に変わること(ジュール散逸)によって、磁場が指数関数的に減少する典型的の時間。 |
| 一般相対性理論 | アインシュタインによって提案された重力の理論。物質のエネルギーが時空の幾何学を決定する理論。時空の幾何学を重力とみなす。星の重力を決定するだけでなく、宇宙全体の幾何学をも決定でき、宇宙物理学における基礎となる理論。量子力学が重要となるミクロの世界での重力の振る舞いについては記述できない。 |
| 遺伝子プロモータ | 特定の遺伝子の発現を促すタンパクなどの細胞内物質 |

| 用語 | 解説 |
|-------------|--|
| イベント駆動型 | 現象や手順を有限の数の瞬間的に起きる事象（イベント）の連続として扱うやり方 |
| 陰解法 | 時間積分の一つ。時間微分の離散化において後退差分（現在と過去の値を使って離散化する）を用いて離散化を行う手法。元の偏微分方程式は未知変数の連立一次方程式にと離散化され、この連立一次方程式を解くことになる。 |
| インフレーション | 宇宙誕生直後における宇宙の指数関数的膨張のこと。 |
| う | |
| ウィーク・スケール | 並列単位当たりの問題サイズを一定にして、並列数を増やしていく場合（つまり、問題サイズが並列数に比例して大きくなる）での、計算時間の変化 |
| え | |
| エキゾチックハドロン | 中間子(メソン)はクォークと反クォークから構成され、重粒子(バリオン)は3個のクォークから構成されると考える単純なクォークモデルからは予測できない異種のハドロン。 |
| 液体論 | 液体は気体に比べて原子、または分子間の相互作用が強く、また固体とは違いこれらの粒子が動き回るためその取扱いは容易ではない。液体そのものから溶媒としての性質等についても議論がされており、数値シミュレーションによる研究も盛んである。 |
| エネルギー階層性 | 素粒子標準理論のパラメータには以下のような階層性がある。 (1) 弱い力の媒介粒子の質量が重い。（陽子の約80倍と約90倍） クォークやレプトンの質量はバラバラであるが、 (2) トップクォークは特に重い。（陽子の約170倍） (3) ニュートリノの質量が直接測定不可能なぐらい軽い。 質量はエネルギーと等価であるので、エネルギー階層性という。このような階層性の起源を明らかにすることは現在の素粒子物理学の課題である。 |
| エネルギー分散外挿法 | 通常、変分計算によって得られたエネルギー期待値は、真のエネルギー期待値の上限しか与えることができない。変分空間を徐々に広げて、エネルギー期待値をエネルギー分散期待値の関数として外挿することによって、精度よく真のエネルギー期待値を見積もある方法。 |
| エピジェネティクス | DNA塩基配列の変化を伴わないが、細胞分裂後も継承される遺伝子発現あるいは細胞表現型を研究する学問領域。 |
| 円偏光 | 光を始めとした電磁波は、進行方向と垂直に電場と磁場が振動する横波である。円偏光では、進行方向と直交する平面上で電場もしくは磁場の向きが円運動を描く。進行方向を手前に取って時計回り、反時計回りのものが存在する。 |
| お | |
| オーダリング | 主に、メモリ空間でのデータの連続性を改善するために、数値データの格納順序を入れ替え、計算機による処理性能の向上を図ることを指す。 |
| か | |
| カーティアン座標系 | 直交座標系の事。空間の位置を示すのに互いに直交する座標系を用いる。 |
| カーネル最適化技術 | プログラムにおいて主要なコストを占める逐次演算処理をカーネルと呼ぶ。プロセッサのアーキテクチャに依存して逐次演算処理の最適化方法は異なるため、特に、メニーコアプロセッサを効率的に利用するには新たな最適化技術の開発が必要となる。 |
| カーパリメロ法 | 電子状態計算により原子にかかる力を直接見積もりながら、分子動力学計算を行う手法の1つ。電子状態に時間発展方程式を導入し、計算の高速化を実現している。 |
| 階層的時ステップ | 要素により計算時ステップ幅に幅がある場合に例えれば2の整数乗などのあらかじめ決めめた規則に沿って時ステップ幅を決定する事で同期を容易にするやり方 |
| カイラル凝縮 | クォーク・反クォーク対が凝縮し、真空期待値を持つこと。 |
| カイラルなゲージ対称性 | フェルミオンの右巻き成分と左巻き成分が異なるゲージ対称性を持つ場合の対称性のこと |

| 用語 | 解説 |
|-----------------|--|
| カイラル有効場理論 | 低エネルギー領域における物理現象を記述するために必要な自由度だけを取り入れた近似的な理論。 |
| カイラル対称性 | 質量ゼロのフェルミオンが持つ対称性の一つ。光速で運動するフェルミオンはそのスピンが運動量に対して平行な場合（右巻き）と反平行な場合（左巻き）の2つの独立な自由度に分かれる。理論が、右巻き粒子だけで（または左巻き粒子だけで）、粒子の入れ替え操作に対し不变である場合にカイラル対称性があるという。標準理論は質量ゼロのフェルミオンによって構成されている。 |
| 核子 | 原子核を構成する陽子と中性子の総称。大きさはおよそ 10^{-15} m。核子は3個のクォークが強い力で結合した粒子である。 |
| 核図表、安定線、エキゾチック核 | 原子核は陽子と中性子から構成されている。陽子数・中性子数をそれぞれ縦軸・横軸にとってこれを平面的に図示したものが核図表(nuclear chart)。この核図表上で、自然界に存在する安定な原子核は1次元の線のようになるため、安定線と呼ぶ。この安定線から離れた原子核は有限の寿命で崩壊するが、陽子数と中性子数が大きくなる原子核も存在し、ここではこれらをエキゾチック核と呼んでいる。 |
| 核変換テクノロジー | 原子炉の廃棄物処理の一つとして、長い寿命をもつ放射性同位元素や特に毒性の強く危険なものを、核反応を利用して短い寿命のものに変換させ消滅させるために必要な技術、方法、基礎知識等。 |
| 核力 | 核子やバリオンの間に働く力。陽子と中性子を結び付けて原子核を作り。湯川秀樹博士は核力をパイ中間子の交換による作用であると提唱し、実際にパイ中間子が発見された。核力は基礎的な力でなく強い力による副次的な力であり、複雑な様相を呈する。たとえば、3つの核子の間に働く核力（3体力）は2つの核子間に働く核力（2体力）の単純な重ね合わせではないことが挙げられる。核力の性質の理解には、強い力の深い理解が必要である。 |
| 過減衰極限 | Langevin 方程式において慣性力を無視できるとした場合の特殊ケース |
| 火成活動 | マグマの発生や移動に伴って生じる諸現象の総称。 |
| 可塑的触媒場 | タンパク質の構造変化などにより変化可能な触媒を行う環境 |
| カットオフ半径 | 短距離の成分のみを取り扱う場合に、どの程度の長さまで扱うかという距離。この距離より離れた成分は0と考える。 |
| カラーグラス凝縮 | 高エネルギーのハドロンで、量子色力学で「色」をもつグルーオンが大量に生成されて高密度に凝縮した状態。 |
| 軽い原子核、重い原子核 | 陽子数と中性子数の和を質量数と呼び、原子核の質量はほぼ質量数に比例する。「軽い」「重い」とは、この質量数の大きさを指している。明確な線引きはできないが、質量数が10程度以下のものは軽い原子核、100に近くなると重い原子核と呼ばれる。 |
| カルシウムイメージング | カルシウム感受性蛍光色素を標的細胞に導入して、蛍光観察を行う方法。一般にカルシウムの配位結合によるセンサー分子のコンフォメーション変化は大きく蛍光変化も大きい。そのせいか蛍光プローブを使った神経活動観察法としてはカルシウムイメージングは主流でありつづけている。脳組織内の多点同時観察を見据えると蛍光プローブの導入法が重要で特定神経組織へのローカルインジェクションや特定の遺伝子プロモータを標的としたカルシウムセンサタンパク質の遺伝子導入が2000年代になって多く行われている。 |
| き | |
| 季節内振動現象 | 中緯度帯にみられる高低気圧等の総観規模現象に比べて長く、季節変化より短い時間スケール(おおよそ10日～90日周期)の現象を総称して季節内振動現象と呼ぶ。有名な季節内振動現象として、地球規模の活発な積雲活動域が熱帯を東進していく Madden-Julian 振動や、アジアにおけるモンスーン活動が知られており、中長期予報を行う際の重要な現象と考えられている。 |
| 基底重なり | 電子雲を表現するために用いられる局在基底もしくは平面波基底間の空間的なオーバラップ（重なり）のこと。異なった平面波基底間の重なりは全空間で積分をするとゼロとなるが、局在基底間では重なり積分はゼロでない場合がある。 |

| 用語 | 解説 |
|--------------|---|
| 基底関数極限 | 無限に多くの基底関数を用い、基底関数展開による誤差がなくなる極限。デジタルカメラの画素数が上がり、アナログ写真との差がなくなった極限のような概念。 |
| 逆引き用分割テーブル | 配列の添字から対応する電子・スピニの状態を求めるためのテーブル。部分系に分割したテーブルを組み合わせて用いることで、そのサイズを大幅に小さくすることが可能となる。 |
| ギャザー・スキヤッタ機構 | 配列に対する間接インデックス参照を効率的に行うためのハードウェア組み込み機構。 |
| キャビテーション | 液体の流れの中で局所的に圧力が変化することにより短時間に泡の発生と消滅が起きる物理現象であり空洞現象とも言われる。キャビテーションの発生は、発生する気泡により、ポンプなどの流体機器における振動・騒音の発生や性能低下の原因となる。また同時に発生する圧力波がこれらの機器表面のエロージョン(壊食)を起こして、効率を下げたり破壊することがある。 |
| 球面調和関数展開 | 球面調和関数は完全性をもち、球面上の任意の連続関数を一意に展開できる。このため、球面上のスカラー場の表現に用いられる。 |
| 境界埋込法 | 流体の運動と構造体の変形を同時(連成問題)にシミュレーションするときに用いる手法。流体をオイラー座標系で表現し、構造物をラグランジュ座標系で表現する。 |
| 虚時間軸 | ある温度における統計力学的な平衡状態をあらわす式が、見た目上、通常の量子力学的な時間発展の式の「時間」のところに純虚数の値を入れた形になっており、「虚時間」と呼ばれます。単に見た目の問題というだけではなく、実時間 \leftrightarrow 虚時間の対応を考えることにより理論的にも見通しが良くなることが多い。 |
| 強震動 | 明確な定義を持つ言葉ではないが、一般に、建築・土木構造物の被害に直接関与するような地表面での強い地震動のことをいう。 |
| 共発現解析 | ある遺伝子の発現と相関の高い遺伝子を同定し特定の生物学的現象に互いに関係のある遺伝子群の機能などを解析する方法 |
| 共役勾配法 | 連立一次方程式を解くため、または制限付きの2次形式の極値を求めるための反復的アルゴリズムの一つ。 |
| 共溶媒濃度 | 溶液中の溶質および主なる溶媒のほかに含まれる第二の溶媒成分の濃度 |
| 行列模型 | 弦理論の非摂動的定式化の一つ。 |
| 局在基底 | 量子力学的には電子は点ではなく雲のように広がっている。この広がりを表し電子の雲の状態を記述するために用いられる関数のこと。電子は周囲の環境により、電子雲の広がりかたの度合いはことなるが、特にその広がりが強くない場合に用いられる関数のことを局在基底と呼ぶ。分子・原子では、電子の広がりは限定的であるために、原子・分子中の電子雲の状態を記述するために局在基底はしばしば用いられる。 |
| 局在軌道 | 特定の原子あるいは結合領域に、空間的に局在した分子軌道のこと。分子の量子化学計算で得られる分子軌道は、通常、分子全体に広がった(非局在化)形状をしているが、これらの非局在分子軌道に特定のユニタリー変換を施すことによって、局在軌道に変換することが出来る。空間的に離れた局在軌道どうしの積は無視できるほど小さくなることを利用して、計算コストの軽減をはかることができるほか、計算結果の物理化学的な解釈を手助けする目的にも用いられる。 |
| 局所準粒子乱雑位相近似 | 量子多体系において、非平衡状態の標準モード(近似的に独立な運動)を決定する方法。 |
| 巨大応答 | 外部からの磁場や電場や光照射などの刺激によって物質中の集団秩序を変化させ、抵抗値などを劇的に変化させること。 |
| 均質化法 | マルチスケール解析手法の一つ。材料の詳細ミクロ構造をマクロ解析に反映させるために、ミクロとマクロの連成解析を行う。 |
| 金属原子拡散 | 燃料極における多孔質構造を変化させる金属原子の移動。三相界面長さの減少を通じて反応性を低下させる。 |
| 金属誘起ギャップ状態 | 半導体と金属の界面において金属の電子状態が半導体にしみ出すことで半導体ギャップ中に生成される新たな電子状態・準位。 |
| く | |

| 用語 | 解説 |
|-----------------|---|
| クオーク | アップ、ダウン、チャーム、ストレンジ、トップ、ボトム、と名付けられた質量の異なる6種類のフェルミオンの族名。電磁気力、弱い力、強い力を受ける。アップクオークとダウンクオークは強い力により束縛しあい、陽子や中性子、中間子などの粒子を形成する。クオークの名前の違いは質量によって決まっており、質量の軽い順にクオークを並べると、アップ、ダウン、ストレンジ、チャーム、ボトム、トップとなる。 |
| クオーク・グルーオン・プラズマ | 通常、クオークはハドロンの中に閉じ込められているが、高エネルギー状態では自由に動き回れるようになる。クオークとグルーオンが電離したプラズマ状態。 |
| クオーク・グルーオンプラズマ相 | クオークはハドロンの中に閉じ込められておらず、自由に動き回れる状態。 |
| クオーク作用 | クオークに対する作用。作用から運動方程式などが得られる。 |
| クラスター モデル | 非周期条件の下で、固体側を有限の原子数のクラスターとして表現するモデル化。適宜水素終端化処理した上で、分子の吸着などを計算する。 |
| クラスレート | 結晶構造中に異分子が共有結合をすることなく内包されたもの。包摂化合物。メタン分子が氷状結晶中に内包されたメタンハイドレートなどが知られる。 |
| クラスレートハイドレート | 複数の水分子で作るかご型の構造中に気体分子が取り込まれた結晶。気体分子と水の混合物を加圧することにより生成する水和物 |
| グラフェン | 六角形二次元平面に周期的に配置された格子構造を持つ炭素結晶。 |
| グラムシュミット直交化 | 直交化とは、いくつかの「線形独立だが互いに非直交なベクトル（または関数）の組」を、「互いに直交するベクトル（または関数）の組」に変換する操作を指す。直交化を施することで、数学的表現が簡素になって取扱い易くなる。グラムシュミット直交化は、いくつか存在する直交化法の中でも概念的に最もシンプルなもの。 |
| クリープ構成則 | 主として金属材料が高温状態にさらされた際に呈する非線形挙動を応力とひずみの関係として記述したもの。各種金属に固有の温度を超えると、荷重が一定でもひずみが時々刻々変化する、いわゆるクリープ変形が顕著になる。その挙動を応力-ひずみ関係として記述したもの。 |
| クリロフ部分空間解法 | 連立一次方程式の解を求める際に使用される行列解法の一つ。行列積を直接計算する代わりにベクトルを利用した解法の総称で、ロシアの數学者にちなんで名づけられた。現在最も主流の行列解法であり、具体例として Bi-CGSTAB 法、GMRES 法などがある。 |
| グルーオン | 強い力を媒介する粒子。 |
| グルーボール、ハイブリッド粒子 | グルーオンが複数個結合した複合粒子がグルーボール。これにクオークもからむとハイブリッド粒子と呼ばれる。 |
| グローバルビュー | 通常並列計算機は複数の計算機から構成される複合システムであり、個々の計算機間は別個のビュー、すなわち実行の状態（メモリ）をもつ。グローバルビューは特別なソフトウェアもしくはハードウェアにより並列計算機全体で单一のビューを共有する方式であり、これによって並列計算機のプログラミングが大幅に簡略化される。 |
| グローバルファイルシステム | 並列計算機のすべての計算ノードから参照可能な共有ファイルシステム。一般に利用者の恒久的なファイル置き場として使われ、ローカルファイルシステムと比較して大容量かつ安定性を重視した構成となっている一方、読み書きの速度は限定的である。 |
| け | |
| 形態学 | 細胞の形状と組織の広がりなどを調べる方法 |
| ゲージ群 | 力学系の作用が余分な自由度をもち、その自由度に対して変数変換しても作用が不変な場合がある。このような変換をゲージ変換といい、これは一般に群をなす。これをゲージ群という。ゲージ変換のもとで不変な理論をゲージ理論と呼ぶ。この場合余分な自由度は観測にかかりない。 |
| ゲート | Hodgkin-Huxley モデルの中で電流の開閉を司るスイッチの役割を果たす仮想概念 |

| 用語 | 解説 |
|------------------|---|
| 結合クラスター展開 | 無限次の摂動論に相当する電子相関理論。複雑なテンソル積和処理を伴う繰り返し計算が必要で、2次に比して精度は高まるが計算コストは高い。 |
| 原子核殻模型計算 | 原子核の構造を計算する手法の一つ。陽子と中性子の多体系である原子核を、適切な1粒子状態を基礎にして核力に忠実に、多体相関を含みつつ量子力学的に計算する。量子化学における配置換相互作用計算と類似した手法である。計算は大次元行列の固有値問題に帰着する。その解法としては行列の対角化に基づく従来型の方法と、重要な多体状態の基底を探す方法の2種類がある。 |
| 原子軌道基底 | 分子軌道を表現するための関数群。原子軌道を表す関数の線形結合で分子軌道を表現。 |
| 元素の起源 | 現在の宇宙の元素の組成は、ほぼ水素とヘリウムで構成されおり、そのほかの元素の量は無視できるほどである。宇宙誕生後の物質進化の過程を追うことで、さまざまな元素の組成比を理解することが元素の起源を探ることである。 |
| こ | |
| 格子 QCD (格子量子色力学) | QCDはクォークとグルーオンの強い力の力学であるが、解析的に解くことはできていない。数値的にQCDを取り扱うことができるよう、4次元時空を格子に差分化した理論が格子QCDである。100TFlopsクラスの計算機が登場した2008~2009年に、クォークの複合粒子である陽子や中性子などの性質(質量やスピンなど)を計算で再現できるようになった。 |
| 格子気体法 | 流体問題を空間と流体の両方を離散化して解く計算手法 |
| 構造緩和 | 最初に仮定した物質の構造(=原子の配置)を原子に働く力が小さくなる方向に原子を動かすことでもっとも安定な構造に近づけること |
| 構造多型 | タンパク質などの巨大分子が複数の安定な構造を持つ性質 |
| 構造ゆらぎ | タンパク質分子が機能を発現させるためにその構造を変化させること |
| 拘束付平均場 | ある量が決まった値になるように条件を付けながら計算をする平均場理論。 |
| 高立体選択的合成反応 | 複数の立体異性体(配位子の付き方が立体的に異なる分子)の生成を考えられる化学反応において、触媒の利用などにより特定の立体異性体を選択的に多く作り出す反応のこと。 |
| 呼吸鎖 | 細胞の呼吸(ATPの生成)に関わるタンパク質群 |
| 骨格振動 | 2重結合や芳香環などの分子構造に起因する特徴的な振動。赤外やラマンで分光測定することにより、対象分子系の分子構造を推定できる。 |
| 混雑物 | 分子混雑環境において溶存するタンパク質、DNA、RNA、糖はじめとする様々な分子 |
| コンダクタンス | 電気伝導度。すなわち抵抗の逆数 |
| さ | |
| 再帰現象 | 相互作用する多数の粒子の運動において以前と同じ状態が準周期的に現れる現象 |
| 細胞環境 | 細胞内分子にとっての環境。分子が溶液中にあるときの環境と異なり、多くの分子で混み合っている。 |
| 材料強度発現機構 | 材料の破壊を発生・進行させるメカニズム。その破壊挙動は、主に材料内の力学場と材料固有の強度との相関により決定される。 |
| サブボリューム | 並列計算において、1プロセッサが担当する部分領域。なお、シミュレーションセルを空間分割して個々の並列プロセッサに割り当てる手法を領域分割法と呼ぶ。 |
| 差分法 | 微分方程式を数値的に解く際に用いられる離散化手法のひとつ。ある関数が2つの変数値に対してとる値の差を差分といい、この差分を変数値の差で割って得られる商を差分商と言い、この差分商を用いてもとの微分の近似値として偏微分方程式の離散化を実現する。 |
| 残基 | タンパク質、核酸、多糖類などの重合体を構成している単量体 |
| 参照曲率 | 計算要素内で形状を表現する時に用いるパラメータの一つ。形状の曲率の事。 |
| 三相界面 | 燃料極と固体電解質、空気極の三相が接する境界面。その長さが燃料電池の反応性を左右する。 |

| 用語 | 解説 |
|--------------|--|
| 散乱・束縛状態 | 2粒子以上の系において、各々の粒子の運動が有限の範囲に限定されるものを束縛状態、無限遠方まで許されるものを散乱状態という。 |
| し | |
| 磁気回転不安定 | 差動回転(天体の各部分で異なる角速度を持つ回転)する磁気流体に起る不安定性。通常の天体では内側の物質ほど角速度が大きい。内側の物質は角速度が大きいため、外側の物質に先行する。しかし、磁場を通して内側の物質と外側の物質はお互いを引っ張りあう。すると内側の物質は一旦減速し、外側の物質は一旦加速する。内側の物質は減速すると、天体の重力に引っ張られてさらに内側に落下する。内側ほど角速度は大きいため、内側の物質は結局減速前よりも大きい角速度を持つことになる。外側の物質はこれとは逆に加速前よりも小さい角速度を持つことになる。すなわちこの不安定は、内側と外側の物質の角速度差がどんどん大きくなる不安定である。 |
| 自己相関時間 | 系を時間発展させてサンプリングする際、ある時刻でのサンプルと、それとは独立と考えられる次のサンプルを採取するまでに要する時間。 |
| 自己無撞着 | セルフコンシスティント(self-consistent)。 |
| システムインパッケージ | 英語で system in a package のことで、1つの Package の中に複数の半導体チップを集積することにより、システムレベルの高度な機能を実現して、実装密度の向上とコストダウンを実現する技術。 |
| システム生物学 | 生命現象をシステムとして理解することを目指す学問分野 |
| 次世代シークエンサー | DNA を 100 塩基程度と非常に短く断片化し、それを並列に処理することにより高速に読み取ることのできる装置。読み込んだ DNA は断片であるため部位の特定のため計算機を用いた参照配列との照合に多量の計算が必要である。 |
| 質量異常次元 | エネルギーースケールの変化に対する質量の振る舞いを記述し、相互作用による効果を表す。 |
| シナプス遅延 | シナプス前末端でカルシウム濃度が閾値を超えてからシナプス後膜でシナプス後電位が発生するまでの遅延 |
| 自発的対称性の破れ | 系が本来持つ対称性の一部が自ずと破れて、より対称性の低い状態に系全体として落ち込むこと。この概念は相転移と密接に関連しており、たとえば水(液体)から氷(固体)への変化は水分子の併進対称性が失われることとして理解される。 |
| シフト型通信 | 各プロセスが隣接する他プロセスに対して、一斉に一定方向のデータ送信をする通信形態をいう。 |
| シミュレーションセル | シミュレーションの中で考慮する空間領域 |
| 重イオン | 陽子、ヘリウムなどの軽い原子核を除く、重い原子核のことを指す。電子をはぎ取った原子なのでイオンと呼ぶ。 |
| 重合脱重合化 | 同種の分子が結合してより大きな構造を取ったり結合を解くこと |
| 重陽子 | 陽子と中性子の束縛状態。二重水素の原子核。 |
| 重力の量子化（量子重力） | 素粒子標準理論の中の相互作用を記述する部分は、量子力学の原理に則り量子化され、ミクロな世界での物理を矛盾なく記述できている。一方で、重力理論であるアインシュタインの一般相対性理論を量子力学の原理に則り量子化しようとすると、うまくいかない。一般相対性理論や何らかの重力の理論を量子力学と矛盾なく量子化すること。宇宙そのものの誕生時を理解するためにには、量子力学が必要なミクロな世界での重力を理解する必要があるため、重力の量子化は理論物理学の長年の夢であるがまだ実現していない。超弦理論がその候補とされている。 |
| 主殻 | 調和振動子ポテンシャルによる一粒子軌道によって空間を展開した際に、縮退した一粒子軌道の集合を指す。 |
| 準粒子 | 相互作用している多体系を、近似的に自由に運動するある種の「粒子」の集まりとして記述することができるとき、この「粒子」を準粒子とよぶ。 |
| 状態空間モデル | 時系列観測データのモデル化の方法の一つでデータを状態モデルと観測モデルに分離し記述する |
| 状態方程式 | 物質の温度、圧力、エネルギー、密度、体積などの間に成り立つ関係式。 |

| 用語 | 解説 |
|---------------|--|
| ショットガン法 | ゲノム DNA を断片化し読み取りそれを計算機を用いてつなぎ合わせることにより染色体の連続した DNA を読み取る方法 |
| 真空偏極 | 真空における粒子・反粒子の対生成・対消滅過程。 |
| 神経成長因子 | 特定の細胞の神経細胞への分化を促進する因子となる分子 |
| 震源過程 | 地震は、発生源で断層が破壊されることによって生じる。この断層の破壊過程を、震源過程という。 |
| 信号情報処理のマルコフ過程 | 一個一個のイオンチャネルの挙動やレセプタとリガンドの結合はリガンド濃度や電圧などに対して確率的に挙動する |
| す | |
| 水平乱流 | 流れが乱れた状態(流体の粘性力に対して流れの慣性力が大きい状態)を乱流と呼ぶ。二次元(水平)乱流とは、大気のように成層が強い場で、鉛直方向の運動が制限され、水平方向の運動が卓越する状態を指す。水平乱流場においては、物質は水平方向に拡散される。 |
| 数値求積法 | 非解析的、近似的に積分値を求める手法。ガウス求積などの積分区間を区切る手法や、乱数を用いるモンテカルロ積分などがある。方法によって求積点数と誤差の関係が異なる。 |
| スーパーB ファクトリー | 電子と陽電子を高頻度で衝突させることによってボトムクォークを含むハドロンを大量に生成し、その崩壊を詳細に調べることを目的とした加速器。従来の B ファクトリーの数十倍のルミノシティを目指す。 |
| スーパーセル | 結晶中にとる事のできる周期セルのうち、基本セルよりも大きい物。基本セルよりも大きな空間スケールの構造揺らぎの表現に用いる。 |
| スカイライン形式 | 疎行列に対するメモリ格納形式の一つで、バンド形式をより精緻化し、境界の輪郭線を行単位で正確になぞるようにしたもの。 |
| スケール間相互作用 | 気象や気候現象に存在する複数の様々な時空間スケール(例えば、全球スケールや温帯高低気圧のスケールなど)の現象が相互に影響を及ぼしあっていること。 |
| スタッガード型 | 格子上で定義されたクォーク作用の一つ。 |
| ステップスケーリング | エネルギー規模を s 倍(典型的には $s=2$)ずつ不連続に変化させながら、結合定数などのエネルギー依存性を調べる数値計算手法。 |
| ストークス力学 | 流れの状態を示すレイノルズ数が小さな場合に、流れを近似方程式で示す事が出来、これをストークス方程式と呼ぶ。近似方程式では非線形項である対流項を無視している。 |
| ストレンジクオーター | 標準模型に含まれる素粒子には 6 つの質量の異なるクォークがある。粒子質量の軽い順からアップ、ダウン、ストレンジ、チャーム、ボトム、トップと名前が付けられている。標準模型では質量以外の性質は同じである。ストレンジクオーターは 3 番目に軽いクォークである。 |
| ストレンジネス | ストレンジクオーターが関与する量子数。正確には、ストレンジクオーターの数とその反粒子の数の差。 |
| ストロング・スケール | 並列化の指標。計算量と cpu 数が両方増えて行く時の計算効率。 |
| スパイク列 | 複数の活動電位が連続して出る様 |
| スピニ液体 | 量子力学的な揺らぎや幾何学的フラストレーションの効果により、磁気モーメント間の集団的な秩序化が絶対零度まで妨げられた状態。 |
| スピントロニクス | エレクトロニクスが物質中の電子が持つ電荷自由度だけを利用していたのに対し、スピントロニクスも工学的に応用する技術。 |
| スペクトル法 | 物理現象を表す偏微分方程式の時間積分法の一つで、物理変数の時間変化を直接計算するのではなく、周波数空間に置き換えて計算する手法。一般に高精度な解が得られるため基礎的な物理計算によく用いられるが、複雑な問題には対応が難しいとされている。 |
| せ | |
| 正準化変換 | Hartree-Fock 方程式を解く際に非直交基底関数の組を変換して規格直交系を作る手法のひとつ。 |
| 静的縮約 | 連立一次方程式において、自由度の一部を削除することで、係数行列のサイズを縮小する方法。スタティック・コンデンセーション。 |
| 世界線表示 | 量子力学に従う系は空間次元に加えてもう一つ虚時間と呼ばれる軸を導入することで、計算機が扱いやすい複素数での計算が可能となる。その際、系の状態が虚時間方向でどのように発展するかをグラフ的に表現することを世界線表示と呼ぶ。 |

| 用語 | 解説 |
|----------------------------|--|
| 積分発火モデル | 細胞外に抵抗と容量で接続された点として考え、シナプス後電流が複数の別の入力細胞からはいったとき、その時空間的統合としての細胞電位が閾値を超えたときに活動電位が起り、結果過分極側に一定量電位がシフトすると考えるモデル。英語は Integrated-and-Fire model |
| 零点振動 | 量子力学的に絶対零度でも不可避の量子の振動 |
| 0+状態 | 原子核の基底状態や励起状態は、角運動量 J とパリティ π で識別することができる。0+状態とは、 $J=0$ でパリティが $\pi=+$ の状態。 |
| 線型応答理論 | 熱平衡状態にある系に、磁場や電場などの外場が加わった時、その外場による系の状態の変化（応答）を扱う理論。 |
| そ | |
| 相対論的流体 | 相対性理論の枠組で扱う必要がある流体。速度が光速近くに達する流体や、中性子星のよう強重力場中の流体などがこれに対応する。 |
| 相変態 | ここでは、固体電解質における結晶構造の変化。 |
| 阻害活性 | 化合物が標的タンパク質の機能を阻害する性質 |
| 素過程 | 複雑な自然現象は、様々な物理(電磁気学、熱力学、流体力学等)が絡み合って生じている。しかし、少くない現象においては、関わる物理をいくつかの構成要素に分割し、その要素間の相互作用として記述することが可能である。そのような構成要素のうち、特に基本的な物理で比較的単純に数学的に表現することができるものを素過程という。たとえば、流体力学で支配される移流(力学)過程、放射伝達方程式で支配される放射過程などがそのような素過程である。 |
| 粗視化分子動力学法 | 複数原子からなる集団を一粒子とみなしその群としての運動をシミュレートする手法。計算量の減少を通じて大規模で長時間の分子シミュレーションを可能とする。 |
| 粗視化モデル | 原子のグループをまとめて、一つの相互作用点として表し、相互作用数を大幅に減らしたモデル。たとえば、タンパク質のアミノ酸を一つの相互作用点を近似する粗視化モデルなどがある。 |
| 塑性加工解析 | 金属部品の成型プロセスにおける材料加工処理のシミュレーション。この際に大変形弾塑性解析を行う必要がある。 |
| 袖領域 | 差分法等のステンシル計算では隣接する要素、格子上のデータを参照する。このため、計算領域を分割して並列処理を行う際に、隣接ノードの境界データを保持する。この境界データを袖領域という。 |
| ソフトウェアパイプラインング機能 | コンパイラの最適化機能の一つ。ループ内で繰り返される一連の CPU の処理命令を 1 サイクルに 1 つずつ実行するのではなく、複数の処理命令を並列実行することで処理速度を向上させる。 |
| ソリッド要素 | 構造解析において、連続体をそのまま表現するための有限要素。形状としては、四面体あるいは六面体などの形を有する。これとは別に、梁やシェルなどを表現するための構造要素がある。 |
| 素粒子標準理論（または素粒子標準模型） | 自然界の物質を構成する素粒子の運動と、素粒子間の相互作用を記述する法則をまとめた理論。素粒子としては、クォークと呼ばれる 6 種類のスピン $1/2$ のフェルミオンと、レプトンと呼ばれる 6 種類のスピン $1/2$ のフェルミオンが含まれる。相互作用は電磁気力、弱い力、強い力の 3 つの相互作用を媒介する 4 種類のスピン 1 を持つボソンが含まれている。電磁気力と弱い力を分化させ、素粒子に質量を与えるヒッグス粒子と呼ばれるスピン 0 のボソンを含む。量子力学と矛盾しないようになされている。実験との比較でしか決まらない 18 (+ α) 個の独立パラメータが含まれる。重力はここには含まれない。 |
| 素粒子標準理論に内在するエネルギー・スケールの階層性 | 素粒子標準理論のパラメータには以下のような階層性がある。 (1) 弱い力の媒介粒子の質量が重い。（陽子の約 80 倍と約 90 倍） クォークやレプトンの質量はバラバラであるが、 (2) トップクォークは特に重い。（陽子の約 170 倍） (3) ニュートリノの質量が直接測定不可能なぐらい軽い。 質量はエネルギーと等価であるので、エネルギー・スケールの階層性という。このような階層性の起源を明らかにすることは現在の素粒子物理学の課題である。 |
| た | |

| 用語 | 解説 |
|------------------|---|
| ダークマター | 暗黒物質とも呼ばれる電磁気力と強い力が作用しない仮説上の物質。電磁相互作用しないので、地上実験や天文観測では直接検出できない。ダークマターはエネルギーを持ち重力に影響を及ぼすことから、ダークマターによる重力レンズ効果や、銀河の回転運動の検証などで間接的にその存在が推定されている。シミュレーションにより、宇宙の大規模構造の生成にも重要な役割をしていることが分かっている。近年の WMAP (Wilkinson Microwave Anisotropy Probe) 衛星による観測から、ダークマターは宇宙全体のエネルギーの内、約 20%を占めていると考えられている。素粒子標準理論にはダークマターに該当する粒子はない。 |
| 第 0 近似的 | 実際の現象を細部まで捉えられてはいないが本質は捉えられている様子をいう。 |
| 大域構造 | 原子同士が直接触れ合うような短い距離でみられる構造ではなく、多数の原子の集団同士の関係が作り出す長い距離で特徴づけられる物質の構造のこと。 |
| 第一原理計算 | 電子シユレディング方程式を（半）経験的パラメータによる積分の近似を用いないで数値的に解く計算手法。化学では、非経験的計算とも呼ばれる。 |
| 第一原理ダウンフォールディング法 | 第一原理計算を用いて対象とする物質の個性を残しつつ注目するエネルギー・スケールに応じた有効模型を構築すること。得られた模型をより精緻な計算手法で解析することで非経験的かつ高精度な物性値の計算が可能となる。 |
| 大規模連立線形方程式 | ここでは変数の数が数千万から数十億程度の連立線形方程式を想定している。 |
| 対称正定値 | 行列が対称かつ、その固有値がすべて正值であること。この性質を有する行列はより効率的に扱うことができる。 |
| 大振幅集団運動 | 多数の核子が一斉にある秩序を持って運動することを集団運動とよぶが、特にその運動の振幅が大きく、物理学で良く使われる調和近似などが適用できない集団運動を大振幅集団運動とよぶ。 |
| 対超流動 | 2つのボーズ粒子のペアからなるボーズ粒子の示す超流動現象。 |
| 大統一理論 | 自然界の4つの基本的な力である電磁力・弱い力・強い力・重力のうち、電磁力と弱い力の統合(電弱統一理論)に加えて強い力をも統合する理論。 |
| ダイナミカル行列 | 結晶内の原子の相互作用を記述した行列。 |
| タイリング | 計算機上で、大規模なデータを配列の添え字ごとに細かく区切り、小さな部分配列 (=タイル) の集合として扱うこと。行列のような2次元のデータ配列をタイリングすると、四角形のタイルを敷き詰めたようなイメージになることから。 |
| タイルドディスプレイ | 高解像度の表示領域を確保するため、複数のモニタを並べて配置したデバイス。通常、クラスタシステムなどで動作する。 |
| 多参照理論 | 電子の波動関数を表すために、複数の電子配置の重ね合わせを用いる理論。分子の解離状態などでは、単一の Slater 行列式では良い波動関数が表現できず、多参照理論が必要となる。 |
| 多次元効果 | 対称性(球対称や軸対称など)を仮定し次元を落としたシミュレーションでは現れない現象。例としては対流などがある。 |
| 多重格子法 | ポアッソン方程式を格子で離散化して反復法で解く場合には、基本的に格子サイズ程度の短い波長の誤差が効率良く減衰する一方で、長波長の誤差はなかなか減衰せず、これが反復回数増大の原因となる。多重格子法は、格子サイズの異なる複数の格子を用意し、各波長の誤差を一様に減衰させることで反復回数の増大をおさえる数値解法である。 |
| 脱閉じ込め臨界現象 | 相転移でありながら、ランダウが提唱し相転移の標準的な起源として知られる「自発的対称性の破れ」の範疇に入らず、実在すれば教科書を書き換える発見になるとして注目されている、新しいタイプの臨界現象。 |

| 用語 | 解説 |
|------------------|--|
| 弾塑性構成則 | 主として金属材料の挙動を、応力とひずみの関係から記述する際の関係式を指す。金属材料は変形初期の段階では応力とひずみに線形関係がある、いわゆる線形弾性体であり、ある限界を超えると非線形な塑性挙動を呈するようになる。その限界値と、非線形挙動を応力一ひずみ関係として記述したものである。 |
| タンパク質の折れたたみ ち | タンパク質がある一定の立体構造をとる過程 |
| チェックポイントファイル | 計算の途中の状態を保存するファイル。万一計算が計算機の故障で中断した場合、このファイルから計算を継続実行できる。 |
| 地磁気異常の縞模様 | 海洋底の地磁気を調べて標準より強く帶磁している所を黒く塗ると海嶺と平行な縞模様が海嶺から両側に全く対称的に現れる。この縞模様は、海洋底が海嶺から湧き出して冷却する時に記憶する地球磁場が、その当時の地球磁場を反映して反転を繰り返しているためと説明される。 |
| チャネルロードシン | 緑藻植物のクラミドモナスなどがもつ色素たんぱく質で、光が当たるとイオンを透過する。 |
| 中間子 | パイ中間子やオメガ中間子などがある。1つのクォークと1つの反クォークが強い力で結合してきた粒子の総称。中間子にはいろいろな種類があるが、それらは2個のクォークの組合せによる違いや内部の状態の違いで理解されている。 |
| 中間子、パイ中間子、K中間子 | ハドロンのうち、クォーク2個(クォーク・反クォーク対)からなるものが中間子(meson)。核力を媒介する粒子として湯川によって予言されたものがパイ中間子。sクォークを含む中間子の1つがK中間子。 |
| 中性子過剰核 | 陽子数に比べて過剰に多い中性子を含む原子核。不安定であり、安定な原子核になるまで中性子から陽子へのβ崩壊を繰り返す。 |
| 超新星爆発 | 大質量恒星の進化(一生)の最後に起こる爆発的現象。太陽質量の10倍より重い質量の恒星は、熱核融合反応により恒星の中心部に鉄の芯が形成される。鉄は熱核融合を起さないため重力による収縮が起り、鉄コアの温度が上昇していく。ある温度で鉄原子核はヘリウムや核子に分解する吸熱反応を起こし、恒星外層部の物質が中心に向かって急速に落下(重力崩壊)し中性子の芯が形成される。外層部からさらに物質が中性子の芯へ落下してきて中性子の芯に跳ね返され衝撃波が生じる。この衝撃波が恒星外層部を吹き飛ばし、超新星爆発を引き起こすと考えられていた。しかし、これまでの計算機シミュレーションでは、この機構によって爆発をうまく再現できていない。爆発機構の解明は重要な課題である。 |
| 超対称性 | ボゾンは整数 спинを持つ粒子であり、フェルミオンは半整数スピニを持つ粒子である。それらを入れ替えるような操作を超対称性変換と呼び、その変換に対して理論が不变であるとき、その理論は超対称性を持つという。 |
| 超対称性粒子 | 超対称性理論では、標準理論に登場するすべての素粒子に対してペアとなる超対称性粒子を置く。標準理論のボーズ粒子に対してはフェルミ粒子、逆に標準理論のフェルミ粒子に対してはボーズ粒子が追加される。 |
| 超流動核 | 核子(陽子・中性子)がクーパー対を作ることでボーズ凝縮し、低温の液体ヘリウムのように超流動性を示す原子核。低温の金属における超伝導と類似した現象。 |
| 超流動固体状態 | 固体秩序と超流動秩序が共存した状態 |
| 調和振動子 | kx^{**2} のポテンシャルの中で運動する振り子、または量子。 |
| つ | |
| 通信マスク手法 | 非同期通信や通信用スレッドの実装によって演算処理の背後で通信処理を同時に実行する手法。 |

| 用語 | 解説 |
|----------------|--|
| 強い力 | 素粒子標準理論では、すべてのクォーク間に平等に働く力。電磁気力に比べ100倍強い。クォークの間でグルーオンと呼ばれるボソンが交換されることで力が作用しあうと考える。強い力では、3種類のクォークを強固に一つにまとめる場合と、1種類のクォークと1種類の反クォークを強固に一つにまとめる場合がある。陽子や中性子は3種類のクォークからなる複合粒子であり、パイ中間子はクォークと反クォークからなる複合粒子である。 |
| て | |
| 低次元構造体 | 一次元もしくは二次元の周期的な結晶格子構造を持つ原子構造体。一次元の例としてはナノワイヤー、二次元の例としてはグラフェン等のナノシートが挙げられる。 |
| 低侵襲治療 | 手術などに伴う痛み、発熱、出血などをできるだけ少なくする医療 |
| 低レイテンシ | 通信の際に、データ転送などを要求してから、実際に送られてくるまでの遅延時間のことをレイテンシ（遅延）と呼ぶが、その遅延時間が短いこと |
| データ転置 | 多次元データの並列処理において並列化軸を切替える際に発生するデータ転送処理。 |
| テクニカラー理論 | 標準理論を超えたモデルの一つで、ヒッグス粒子を複合粒子として考える。このモデルが妥当であるためにはQCDに似た性質を持ちつつも相互作用の強さの性質がQCDと違った特徴を持つ必要がある。 |
| テクニ中間子 | テクニカラー理論において予言される複合粒子の一種。 |
| 鉄よりも重い重元素の起源 | 恒星内部での熱核融合反応では、水素から始まる核融合反応は発熱反応であり、水素よりも安定な重い元素を合成する方向に進む。十分重い恒星では重力収縮と熱核融合反応の連鎖により、鉄原子核でできた恒星芯が形成される。しかし、鉄原子核まで合成が進むと鉄は最も安定な原子核であるので、発熱反応が終わり恒星芯での熱核融合反応は終了する。鉄よりも重い元素は恒星内部での熱核融合反応による元素合成では生成されず、中性子捕獲反応で生成されたと考えられる。超新星爆発は金やプラチナなどの、鉄よりも重い重元素の起源の一つと考えられている。 |
| 転位動力学法 | 結晶中の線状欠陥である転位の運動をシミュレートする手法。塑性を支配する、結晶すべり挙動の解析に用いられる。転位に働く力をモデル化することで、古典分子動力学法に比して大規模かつ長時間のシミュレーションが可能となる。 |
| 展開係数 | ある関数を基底関数の線形結合で表した際の、それぞれの基底関数のもつ重み。 |
| 電荷移動型ポテンシャル | 分子動力学法で用いる、電荷の局所的な移動を考慮した原子間ポテンシャル。原子における電荷の偏りを取り入れることで、電気陰性度の異なる異種原子間の結合を高精度に表現できる。 |
| 電気生理 | 細胞の電位を測定することによって生理的な性質を知ろうとする体系 |
| 点欠陥 | 結晶中の不純物または空孔。 |
| 電源グラウンドバウンスノイズ | L S I 内部の回路動作に伴う電流の時間変化に起因して発生するL S I 内の電源及びグラウンド配線部分の電圧ノイズ。 |
| 電子捕獲 | 原子核が電子を捕獲することで、陽子を中性子に変換させる反応。ニュートリノが放出される。 |
| 電磁気力 | 電気力や磁気力による相互作用の総称。素粒子標準理論では、電荷を持つ粒子の間で光子（フォトン）が交換されることで力が作用しあうと考える。 |
| 転写因子 | DNAに特異的に結合し、DNAの遺伝情報のRNAへの転写を促進、あるいは逆に抑制するタンパク質 |
| テンソル縮約 | 二つのテンソル量を掛け合わせて、新しいテンソル量を得る操作。行列どうしの掛け算も、テンソル縮約の一つである。 |
| テンソル力、3体力 | 核子(陽子・中性子)間に働く相互作用(核力)は、核子間の相対距離だけに依存する中心力とそれ以外の非中心力に分類できる。非中心力の代表がテンソル力(tensor force)。2核子のスピンの向きと配置の向きに依存する。これら2核子間の相互作用に加えて、原子核の定量的な記述には、3核子に働く3体力が不可欠であることが知られている。 |

| 用語 | 解説 |
|-------------------|---|
| 天体降着流・噴出流 | 天体に向って落下する物質の流れと、天体から放出される物質の流れ。一般に中心天体に向かって円盤状に降着し、回転軸方向にビーム状に放出される。 |
| 転置転送 と | 行列の転置操作に用いられるデータ転送パターン。 |
| 同時スイッチングノイズ | L S I の複数の外部出力信号がハイレベルからローレベルまたはその逆方向にほぼ同一のタイミングで変化する時にL S I 内部の出力回路用の電源及びグラウンド配線に発生する電圧ノイズ。 |
| トーラス状 | ドーナツ型の幾何形状。磁場閉じ込め核融合炉ではプラズマを磁力線で覆い、かつ、端や磁場のゼロ点をもたないトーラス状の磁場を用いて高温の燃料プラズマを保持する。 |
| トカマク装置 | 磁場閉じ込め核融合炉において最も有望な方式の一つ。トーラス状の磁場を発生するのに、トーラスに沿って並べたコイルとプラズマ中の電流を用いる。プラズマ中の電流を電磁誘導で駆動する場合にはパルス運転となるが、中性粒子ビーム等が誘起する電流を用いる定常運転も提案されている。トーラス断面形状が一様となる特徴（軸対称性）があり、核融合反応で発生する高エネルギー α 粒子の閉じ込めに優れる。 |
| トポロジー励起 | 複数の縮退した量子多体系の基底状態が局所的な情報だけからは互いに区別がつかず、巻きつき数などのトポロジカルな量によってのみ区別できる場合を、トポロジカルな状態という。また、このトポロジカルな量を変えるような非局所的な励起をトポロジー励起と呼ぶ。 |
| トラジェクトリスナップショット構造 | 分子動力学シミュレーションでの履歴（トラジェクトリ）中の1構造のこと |
| ドラッグデリバリーシステム | 必要な薬物を必要な時間に必要な部位へと作用させるために、薬物の体内分布を制御し、患部に薬剤を届ける仕組み（Drug Delivery System: DDS） |
| トレーサ | 一般的に大気や海洋の流れの影響を受けて、モデル内を移動する微量気体成分、溶存成分や個体のことを（パッシブ）トレーサーと呼ぶ。海洋生態系モデルにおいては栄養塩、植物・動物プランクトンや魚類がトレーサにあたる。 |
| トンネル効果 に | 量子がそのエネルギーより高いポテンシャルの山を越える、もしくはトンネルを抜けるようにくぐること。 |
| 二次高調波 | 入射電磁波と相互作用する物質中において、非線形光学効果により発生する入射電磁波の2倍の周波数を持つ電磁波のこと。 |
| 2次摂動論 | HF計算では考慮されない電子相関（平均場からのずれ）を摂動論に従って取り込むPost-HF法の中で、2電子励起だけを考慮する基本的なアプローチ。強相関系には適用できない。 |
| 2電子クーロン反発積分 | 電子の振る舞いを調べるにはシュレディンガー方程式を解く必要があるが、その中で2個以上の電子を扱うためには電子間の反発を表すクーロン項を取り扱う必要がある。数値的計算では、2つの電子間の反発を積分表現を用いて表す。このときに必要となる積分を2電子クーロン反発積分と呼ぶ。量子化学計算では、2電子クーロン反発積分は数値計算の律速となるために、その取り扱いが重要となっている。 |
| ニュートリノ | 素粒子でレプトン族の一種。電子ニュートリノ、ミューニュートリノ、タウニュートリノの3種類が確認されている。電磁気力を受けない中性粒子で、弱い力と重力が作用する。このため検出は難しい。太陽中心付近での熱核融合反応で電子ニュートリノが発生し、地球には1平方センチ当たり毎秒660億個やってきているが、ほぼ地球をすり抜ける。近年、質量がゼロではないことが分かったが、ほぼゼロであり詳しい質量は不明である。超新星爆発では中心部に中性子の芯が形成される際に大量にニュートリノが発生し外部に放出される。1987年に大マゼラン星雲で超新星爆発(SN1987A)が起こり、超新星爆発由来のニュートリノが初めて地球上で観測された。日本の「カミオカンデ」ニュートリノ観測施設では詳細な観測が行われ、超新星爆発機構の理解に貢献した。 |

| 用語 | 解説 |
|-----------------------------------|---|
| ニューロインフォマティクス | 神経データベースや情報理論のような情報学的な手法を神経科学で手用させる学問領域 |
| ぬ | |
| ヌクレオソーム | 真核生物の核における DNA とタンパク質の複合体であるクロマチンの構成単位 |
| ね | |
| 熱搖らぎ | 原子・分子程度の微小な粒子の熱運動に由来する運動エネルギー程度のエネルギー |
| の | |
| ノルム保存型擬ポテンシャル | 結晶内の電子の波動関数を平面波で展開するために真のクーロン型ポテンシャルの代わりに用いられるのが擬ポテンシャル。そのうちカットオフ半径内の電価（ノルム）を変えないのがノルム保存型擬ポテンシャル。 |
| ノンブロッキング通信 | 並列計算における通信方法の一つ。データの送受信を行う際に、送受信の完了を待たず、他の処理を開始する通信方法。 |
| は | |
| ハートリー項 | 2つ以上の電子が存在するときに、電子と電子との間にはクーロン的な反発する力が働くが、それに関係するポテンシャル（位置エネルギー）もしくはエネルギーのことを指す。 |
| ハートリーフォック (HF) 計算 | 電子間の反発を平均場近似の下で記述し、系の分子軌道を変分的に求める手法。 |
| ハートリーポテンシャル | 電子密度の空間分布で決まる静電ポテンシャル |
| バイアスポテンシャル | 自然状態では滅多に起こらないが重要な化学反応を人工的に高い頻度でシミュレーション上発生させるために加える原子間ポテンシャルのこと。Metadynamics 法はバイアスポテンシャルを生成する。 |
| バイオインフォマティクス | 生物学的な問題をハイスクープデータなどとアルゴリズムを組み合わせて計算機を用いて解決する研究手法 |
| バイオミネラリゼーション | 生物が結晶や無機鉱物を産生すること。骨や歯、貝殻などが身近な例。 |
| バイオミメティック | 生物が持つ優れた機能を人工の物質で実現しようとする化学 |
| バイセクションネットワークバンド幅 | 通信網の性能の指標の一つ。通信網の中の計算ノードを2等分し、その分割された部分同士の間で単位時間あたりに通信できるデータ量の事。 |
| バイナップ | 立体選択的合成反応において広く利用されている配位子。バイナップ-ブルテニウム触媒を用いた不斉水素化反応を開発した野依良治は2001年のノーベル化学賞を受賞した。 |
| ハイパー核 | ストレンジクォークを含むバリオンをハイペロンと呼ぶ。ハイパー核とはハイペロンを含む原子核の総称。 |
| ハイブリッド汎関数 | 実験値をより良く再現するために、従来の汎関数に HF 交換相互作用の要素を取り込んだ汎関数 |
| ハイペロン | ストレンジ(s)クォークを含むバリオンはハイペロンと総称され、ラムダ粒子、シグマ粒子、オメガ粒子などがある。 |
| バタフライ演算 | 高速フーリエ変換などにあらわれる演算および通信パターン。 |
| 発火 | スパイク様の活動電位が発生する様 |
| ハドロン | 強い力で結びついたクォークの複合粒子の総称。ハドロンはクォーク3個からなるバリオンとクォーク・反クォーク対からなるメソンに分類される。陽子や中性子はバリオンの一種である。 |
| ハドロン、バリオン、ハイペロン、ラムダ粒子、シグマ粒子、オメガ粒子 | 強い力で結びついたクォークの複合粒子の総称がハドロン。ハドロンの中で、クォーク3個からなるものがバリオン。陽子・中性子もバリオンの一種で2種類のクォーク(u,d)から構成されている。ストレンジ(s)クォークを含むバリオンはハイペロンと総称され、ラムダ粒子、シグマ粒子、オメガ粒子などがある。 |
| ハドロン共鳴 | 強い相互作用により様々なハドロンが形成されるが、その多くは短時間で崩壊するため、共鳴状態と呼ばれる。 |
| ハドロン行列要素 | 相互作用を記述する演算子をハドロン状態で挟んだ行列要素。 |
| ハドロン相 | クォークはハドロン中に閉じ込められており、単独では取り出すことができない状態。 |
| ハミルトニアン | 系の（量子）力学を表現するもの。直接には系の時間発展を記述する。 |

| 用語 | 解説 |
|---------------|--|
| ハミルトニアン行列 | ハミルトニアン（系のエネルギーを表す量子力学的演算子）を行列表現したもの。 |
| パラメータスキャン | 入力パラメータを変更して多数のシミュレーションを実行し、設計パラメータ等に対する性能や機能の依存性を検証すること。 |
| バリオン | クォーク3つから成る粒子の総称。陽子や中性子はバリオンである。一方クォーク1つと反クォーク1つから成る粒子はメソン（中間子）という。バリオンやメソンは強い相互作用をする粒子であり、バリオンとメソンを総称してハドロンという。 |
| parity | 空間の反転に対して系が対称性をもつときの量子数。 |
| バルクナノメタル | 一般的の金属よりも小さな結晶粒からなる金属材料。強度、延性、靭性等の機械的性質の向上が見込まれる。 |
| バルクひずみ | 複数の材料が混ざった状態での計算要素内のトータルのひずみ量 |
| バレンス粒子、バレンス空間 | 原子核の中の核子のうち、その構造の決定に特に重要な影響を与えるものをバレンス核子(粒子)と呼ぶ。近似的に、これらのバレンス粒子だけを取り扱った計算ができ、量子力学の計算ではバレンス粒子の運動を記述するヒルベルト空間を扱うため、これをバレンス空間と呼ぶ。 |
| バンドギャップ | 電子が占有出来ない禁止帯のこと。最高占有軌道準位と最低非占有軌道準位とのエネルギー差に対応する。 |
| ひ | |
| 光格子 | 対向するレーザー光を用いてその中を運動する粒子に対して周期的なポテンシャルを作り出す。その結果、粒子は結晶格子点に閉じ込められた粒子のように振舞い、そのような系のことを光格子と呼ぶ。 |
| 光生理学 | 化学的あるいは遺伝子光学的な光センサ-分子や光による刺激素子の発展を背景に蛍光顕微鏡のような光学的な方法で生体の活動をしる学問体系 |
| 非線形光学応答核磁気共鳴 | 核スピン間の非線形相互作用に伴い生じる高調波を利用する核磁気共鳴法 |
| 非線形振動子系 | 複数の非線形振動子が結合されたシステム。非線形振動子とは、運動が初期値に比例しない振動子（ばねのように振動する要素）のこと。カオスや同期など、様々な興味深い現象を示すことが知られている。 |
| 光分解 | 原子核が光（ガンマ線）を吸収して分解する反応。 |
| 非局所擬ポテンシャル | 内殻電子などの及ぼす影響をポテンシャルに置き換えたもののうち、位置以外の要素(角運動量など)に依存するもの。 |
| 歪速度テンソル | 速度場の空間的な変化を表す速度勾配テンソルから、回転を表す反対称成分を除いた対称成分で、変形の速度を表す。 |
| 非静水圧 | 大気や海洋の支配方程式を考える際、水平方向に十分大きな現象（気象では数十キロ以上）に着目する場合は、重力と鉛直方向の気圧傾度力が釣り合っていると近似(静水圧近似または静水圧近似と呼ぶ)することができる。全球を対象とした多くの大気・海洋モデルでは、静水圧近似した方程式が用いられている。一方、より細かな現象に着目する場合などは、静水圧近似が成り立たず、鉛直方向の運動方程式を陽に考慮する必要がある。このような方程式を、非静水圧の方程式と呼ぶ。 |
| 非摂動ダイナミクス | 摂動的手法では解析が難しく、その本質を理解するためには非摂動的手法を必要とする力学現象。 |
| ヒッグス場 | 素粒子が質量を持つ仕組みを説明する理論であるヒッグス機構において導入されるスカラー場。 |
| ヒッグス粒子 | 標準理論において電弱相互作用から弱い相互作用と電磁相互作用を分化させ、クォークやレプトンなどに質量を与える重要な役割を担っている。 |
| ビッグバン | 現在広く受け入れられている学説によれば、宇宙は約137億年前に大きな爆発（ビッグバン）のように膨張して現在に至ったとされる。 |

| 用語 | 解説 |
|---------------|---|
| ビッグバン原子核合成 | ビッグバン宇宙誕生直後に起こった原子核の合成を指す。宇宙誕生直後、宇宙全体は超高温高密度であった。宇宙誕生後ごく初期には物質はクオークの状態であったが、宇宙が膨張し冷えるとともにクオーク同士が結合し陽子や中性子を構成するようになる（宇宙開闢後約 10^{-6} 秒）。その後、温度が下がると、いくつかの陽子と中性子は結びつき、一部がヘリウム原子核などを形成する元素合成が始まる（宇宙開闢後約 3 分から約 20 分の間）。さらに温度が冷えると元素合成は終了し、軽原子核は安定な原子核に崩壊し元素比率が固定される。この過程では無視できる量のリチウム 7 までの元素と水素 1 とヘリウム 4 が生成される。宇宙開闢後約 3 分から 20 分の間で生成された原子核を理論的に計算することができ、現在の宇宙の元素質量の割合が（水素 1 が約 75%、ヘリウム 4 が約 25%）であることを説明する。一方でビッグバン原子核合成ではわれわれになじみ深い炭素、鉄、金、銀などのリチウムより重い元素は全く生成できない。 |
| 非熱的分布 | 粒子の速度分布が熱的でない分布。熱的である分布とは、粒子同士が（衝突などの）相互作用を繰り返すことで達成される正規分布（マクスウェル分布）のことである。非熱的分布は相互作用がない（または少ない）状況で存在しうる。非熱的分布の下では、熱的分布では存在しない高速な粒子が存在することがある。 |
| 微物理過程 | 大気中で雲を構成する水滴・水晶（雲粒）が、発生してから、雨・雪などの降水現象として地表面に落下する、もしくは蒸発により消滅するまでの一連の成長・消滅過程をさす。雲粒同士が大気中で衝突して併合する過程、雲粒が凍結・融解する過程などがある。 |
| 標準脳座標系 | 個体差を補償するように作られた脳内の標準座標系 |
| ヒルベルト空間、模型空間 | 量子力学では、系の状態は抽象的なヒルベルト空間の中のベクトルに対応している。この空間は無限次元であるが、実際の数値計算ではこれを有限の大きさの次元、しかもなるべく小さい次元の空間にする必要がある。このようにして計算に適した形に抜き出された空間を模型空間と呼ぶ。 |
| ふ | |
| ファインマン振幅 | 量子力学に基づいて素粒子反応の確率を計算する場合、絶対値の 2 乗が反応確率となる不变散乱振幅というものを計算する。通常普遍散乱振幅を解析的に厳密に計算することは困難であるため、摂動理論を用いて近似的に計算していく。摂動論では次数ごとにファインマン図形に基づく計算を行なう。この様な摂動計算による不变散乱振幅をファインマン振幅という。これにより素粒子反応の散乱断面積（反応確率）を求めることができる。 |
| フィラメントワインディング | 主に炭素繊維強化複合材料製の高圧容器を作製する際に用いられる製法。炭素繊維を数万本束ねた炭素繊維束を、ライナーと呼ばれる内容器に巻き付けて成型する方法。炭素繊維強化複合材料製高圧容器は、燃料電池自動車用高圧水素容器として使用され、高信頼性と軽量化の両立が求められている。 |
| フーリエモード展開 | 時間微分を含む偏微分方程式を、正弦波の重ね合わせであるフーリエ級数に変換すること。複雑な波動を単純な波の重ね合わせとして表現することができる。 |
| フェムトスケール | ハドロンや原子核の大きさ程度のミクロな世界。fm（フェムトメートル）は 10^{-15}m 。 |
| フェムト秒 | 1,000 兆分の 1 秒が 1 フェムト秒。1 フェムト秒は、光の速さ（秒速約 30 万キロメートル）でも 0.3 ミクロンしか進むことができないほどの極短時間。 |
| フェルミオン | フェルミ粒子。スピン角運動量が半整数倍である。フェルミオンには、クオーク、電子、ニュートリノ、陽子、中性子などがある。 |
| フォノン分散関係 | 結晶の格子振動を量子化したのがフォノン。そのエネルギーと波数との関係が分散関係。 |
| フォルトトレランス機構 | 1 ノードが故障したとしても補完により計算が止まらない仕組み |
| フォンビルブランド因子 | 血中にある凝固因子のひとつ |
| ブシネスク近似 | 流体を非圧縮性とし、圧力の変化に伴う密度変化は無視するが、温度変化に伴う密度変化は考慮する近似手法。 |

| 用語 | 解説 |
|-----------------|--|
| 不純物偏析 | 結晶中の不純物が表面や欠陥など何らかの構造の周辺に集まること。 |
| 不定性 | この文脈では、実験データの不足により、相互作用（力）の方程式（またはその元となるポテンシャル）を、実験データから良く決めることができないこと。 |
| 部分空間対角化 | 占有電子軌道など注目している一本電子軌道を基底とした空間でハミルトニアンを表現しそれを対角化すること |
| フラグメント | フラグメント分子軌道法計算を行うために分子全体を部分系に分割した際の構成単位のこと。 |
| フラグメント探索 | 化合物設計プロセスにおいて化合物の部品（フラグメント）を探し出すこと |
| プラットホームシミュレータ | その中で独自のスクリプト言語を持つことにより多数の異なった現象が扱われるようになったシミュレータ |
| フレーバー | クォークとレプトンの種類を表す。たとえば、クォークにはアップ、ダウンなどの種類があり、レプトンには電子、ミュー粒子などがある。 |
| ブロッキング | 配列のデータ処理をする際にデータ転送速度が高速なキャッシュやメモリに保持可能なデータサイズを考慮して配列を区分することで、処理性能の向上を図る性能チューニング手法。 |
| 分割統治法 | 分割統治法は大規模な問題を効率的に解くアルゴリズムの一つで、そのままでは解決することが難しい大きな問題をいくつかの小さな問題に分割して個別に解決していくことで最終的に大きな問題を解決する方式。量子化学計算のための分割統治法は Waitao Yang 教授（現デューク大学）より考案された。 |
| 分子混雑環境 | 細胞内のように、タンパク質をはじめとする様々な分子が高密度で存在する込み合った環境。分子は溶媒中における孤立した環境下とは異なる性質を示す。 |
| 分子動力学シミュレーション | 原子間力に基づき、運動方程式を数値的に解き、分子の運動をシミュレーションする計算方法 |
| 分子モーター | 生体内で ATP などのエネルギーを機械的な動きに変換する分子 |
| 分子モデリング | 分子の立体構造を、計算機中で構築すること |
| 分数量子ホール効果 | 半導体のヘテロ接合面等において実現される 2 次元電子系に強い磁場をかけると、低温でホール抵抗の値が量子化される現象が起こる。この値は e を電子の素電荷、 h をプランク定数とすると $(p/q) \cdot (e^2/h)$ と表される。ここで、 p と q は整数であり、 q が 3 以上の奇数で p/q が整数とならない場合を分数量子ホール効果と呼ぶ。これは物質中において分数電荷を持つ新たな素励起が生じるために起こる現象であり、発見者の Tsui, Stormer, Laughlin は 1998 年にノーベル物理学賞を受賞した。 |
| へ | |
| 閉殻・開殻配位 | 希ガスの原子が特別に安定化するように、陽子・中性子数がある決まった数(魔法数)になると原子核も安定化する。このような原子核の核子は閉殻配位に対応すると称される。逆に陽子・中性子の数が魔法数からずれたものを開殻配位と呼ぶ。 |
| ベイジアンネットワーク | 統計的因果モデルの一つで因因子間の因果関係を点と有向枝からなるネットワークで表現したもの。バイオインフォマティクスでは遺伝子発現制御ネットワークの推定・モデル化で用いられる |
| ベイジアンフィルタ | ベイズ統計に基づくデータの学習・分類法 |
| 平面波基底 | 分子軌道を表現するための関数群。平面波を表す関数の線形結合で分子軌道を表現。 |
| ヘテロな構成の CPU | 機能の異なるコアを組み合わせた CPU |
| へム | 鉄イオンを含む化合物。しばしば、タンパク質に含まれ機能の発現に重要な寄与をする。 |
| 変形核 | 形状が球形からずれて変形した原子核。 |
| ほ | |
| ポイントベースレンダリング | 点群を基本とした画像生成手法。並列処理に向いた方法で、画像の品質を点の数により調整できる。 |
| ボーズ・AIN シュタイン凝縮 | 多数のボーズ粒子が一つの量子状態を占めることで現れる物質の状態。 |
| ボーズ系モット転移 | ボーズ粒子が互いの間に働く斥力相互作用によって絶縁体化すること。 |

| 用語 | 解説 |
|----------------------|---|
| ホールセルプランプ | 細胞にパッチ電極を接続して全体を電位固定できる状態にして測定する方法 |
| ボクセルデータ | 形に沿った線や面で形状を表現するのではなく、空間を直方体で分割しその直方体内部の分布情報で形状を表現する方法。二次元の映像を示すピクセル(Pixel)に対して三次元(Volume)を表すボクセル(Voxel) |
| ポストスケーリング時代 | 大規模集積回路は、スケーリング(比例縮小)にもとづきトランジスタの微細化により高性能化と高集積化を同時に実現してきたが、今後は発熱や消費電力により困難となると予想されている。スケーリングの限界以降(ポストスケーリング)では、全く新しい指導原理が必要とされる。 |
| ボソン | ボース粒子。スピン角運動量が整数倍である。ボソンには、素粒子間の相互作用を媒介する粒子である、光子やグルーオンなどがある。 |
| ボゾン系 | 構成粒子がボーズ粒子である量子系 |
| ボリュームレンダリング | ボリュームデータに対する画像生成手法の一つ。データの内部構造や全体の様子を透過的なイメージで表現することができる。 |
| ポロイダル・トロイダル展開 | 任意のソレノイダル場は、トロイダルポテンシャルとポロイダルポテンシャルの二つのスカラー場で表現された二つの項の和として一意に分解できる。 |
| ま | |
| マイクロカプセル | 極小のカプセル内に薬剤等を内包した物 |
| マイコプラズマ | 真正細菌の一種でゲノムサイズが小さく、細胞サイズも小さい |
| マイナー・アクチナイト核 | ウラン・トリウムに代表される重元素をアクチナイトと呼ぶが、自然界に存在する安定な(寿命が非常に長い)ものの他に、原子炉などでは寿命の短いアイソトープが作られており、これらをマイナー・アクチナイトと呼ぶ。 |
| 膜輸送体 | 生体膜を貫通し、膜を通して物質の輸送をするタンパク質の総称 |
| 魔法数 | 原子核は陽子と中性子から構成されているが、ある特定の数の陽子または中性子を含むとき原子核は特に安定となる。この数のことを魔法数と呼ぶ。古くからよく知られている魔法数として2(ヘリウム: ^4He)、8(酸素: ^{16}O)、20(カルシウム: ^{40}Ca)などがある。 |
| マルコフ連鎖 | 離散的な時系列を生成するための確率過程の一種で、ある時刻での状態は直前の時刻での状態のみに依存して決まり、それ以前の履歴と無関係である性質(マルコフ性)を持つ。 |
| マルチグリッド型前処理 | 連立一次方程式の解法を使用する際、行列の収束性を向上するために導入される前処理法の一種。疎・密の計算格子に対して順に解を求め、反復計算において早く収束解が得られるようにした手法。構造型の格子を直接用いる方法、代数的に疎格子を表現する方法など、種々存在する。 |
| マルチコンパートメント | 神経線維を多数のシリンダ-様のコンパートメントの連なりと考えるモデル |
| マルチスケール・マルチレゾリューション法 | 幅広い時空間にまたがる対象に対し、それぞれの階層・解像度での計算を連成させるシミュレーション法 |
| マルチフェロイクス | 強磁性と強誘電性など二つ以上の秩序状態が物質中に共存し、互いに関係を持つ状態。これにより磁場(電場)をかけることで誘電性(磁性)を制御することなどが可能となる。 |
| み | |
| ミセル | 疎水基と親水基を併せ持つ界面活性剤分子が、溶媒中において球状や棒状に自発的に会合した分子集合体 |
| 密度行列くりこみ群 | 強相関系の数値的計算手法のひとつ。特に1次元、または2次元的な電子構造を持つ低次元強相関系の研究に用いられる。 |
| 密度汎関数(DFT)法 | 系の電子エネルギーが電子密度の汎関数で与えられるコーンシャム方程式に基づき固体系や凝集系の電子状態を計算する手法。汎関数のパリエーションは多数あるが、物理分野ではBLYPがよく用いられる。 |

| 用語 | 解説 |
|---------------|--|
| ミューオン異常磁気能率 | ミューオンはレプトン族のうち 2 番目に重い粒子。質量以外の性質は電子と同じ。質量は電子の約 200 倍である。ミューオンはスピン 1/2 で自転しているため小さな磁石となっている。磁石の強さを磁気能率（磁気モーメント）という。磁気能率は量子力学に基づく計算と量子力学を使わない計算で違いが生じるため、その差を異常磁気能率と呼ぶ。ミューオンの磁気能率は高精度（相対誤差約 0.5×10^{-6} ）で計測されている。素粒子標準理論を用いた理論計算が可能である。2012 年現在、理論計算と実験値は相対的に約 21×10^{-6} ずれている。ずれの原因是、理論計算に含まれる精度不足である可能性と新しい物理の兆候である可能性がある。 |
| ミュー粒子 め | レプトンの一種。電子と同じ性質を持つが質量が異なる。 |
| メソ降水系 | 水平スケールが 100km 程度(メソスケール)の積乱雲の集合体である。単純な集合体ではなく、上昇・下降流域といった構造を持つ「系」であるため、单一の積乱雲に比べて寿命が長い（6 時間以上）。大気の状態や地域特性によって形態を変え、停滞すると同じ場所に多量の降水をもたらす。 |
| メタゲノム | 特定の環境中の微生物群など單一種毎のゲノム解析が難しい場合に、その生物群内全体のゲノムの集合をひとつのゲノムとしてとらえる考え方 |
| メタマテリアル | 自然界では見られない性質を示す人工的に作られた物質一般を指す言葉であるが、特に負の屈折率を持つ物質を指すことが多い。光の波長よりも小さな物質で特殊な高次構造を作ることによって実現できる。その極めて特殊な光学的性質を利用した応用科学的研究も盛んに行われている。 |
| メッシュ/トーラス | 計算ノード間の通信ネットワークの形態の一つ。多次元の格子状のもの。格子の端を周期的に結合した物はトーラスと言う。 |
| メモリバランス型 も | エクサスケールシステム構成例の一つ。演算性能 100PFLOPS/ メモリ帯域 100PB/s メモリ量 100PB がめどの構成 |
| モデル脊椎動物 ゆ | 線虫（神経数 300）・ショウジョウバエ・カイコ等の昆虫（神経数 10 万）は遺伝子が同定され、ある程度生理実験も可能な無脊椎系のモデル生物であるが、同様な意味で、脊椎動物においては・ゼブラフィッシュ（神経数 100 万）・マウス（神経数 1 億）などが世代が短く遺伝子が同定されており、かつ生理実験も可能な比較的単純なシステムを持つモデル脊椎生物といえる。 |
| ユークリッド時空 | ユークリッド幾何学が成り立つ 4 次元時空。時間方向と空間方向の区別はない。 |
| 有限温度 | 非ゼロの温度を持つ物理系。 |
| 有限格子間隔効果 | 格子間隔が有限であることから生じる系統誤差 |
| 有限フェルミ多体系 | 核子（陽子と中性子）はフェルミ粒子であり、地球上に存在する原子核は最大でも数百個の核子から成っている。無限に近い粒子数の多体系と区別するため、有限多体系とよび、数値的に多くの特有の困難がある。 |
| 有限密度 | 非ゼロの密度を持つ物理系。 |
| 有効媒質法 | 溶液分子の周りの溶媒の分布確率を表す分布関数を求める理論。様々な種類の分布関数理論があるが、特に 3D-RISM 法はタンパク質やナノチューブといった大きな分子の溶媒和を扱うことができる。 |
| 有効模型的アプローチ | 特異性が強い核力を直接扱わずに、数値的に扱いやすい核力（有効相互作用）に変換する方法。上記の「カイラル有効場理論」と似た概念で、特定のエネルギー領域、制限されたヒルベルト空間における原子核多体系問題で用いられる。 |
| 溶媒和エネルギー よ | 孤立状態の溶質分子が溶媒中へと移行することに伴って変化する自由エネルギー量 |

| 用語 | 解説 |
|-----------------|---|
| 弱い力 | 不安定原子核が β 崩壊する際に働く力。素粒子標準理論では、すべてのフェルミオンの間でWボソンやZボソンという粒子を交換されることで力が作用しあうと考える。 |
| 4 中心 2 電子分子軌道積分 | 2電子クーロン反発積分のうち4つの分子軌道中心を持つ2電子クーロン反発積分のこと。 |
| ら | |
| ラジカル | 電子が対になつてないことで不安定になっている化学物質 |
| ランチョス法 | エルミート行列を三重対角化する手法。数値計算において再帰計算による効率的な演算が可能であることから、固有方程式の解法等でよく用いられる。 |
| 乱流境界層 | 乱流で構成された境界層（粘性を有する流体中において粘性の影響を強く受ける領域で、一般には物体表面に見られる） 乱流境界層では流体の渦運動により運動量やエネルギーの交換が強く行われる。このため、壁面近傍の流体へ運動量が供給されるので層流境界層よりも剥離しにくいが、壁面付近で急激に減少する速度分布を持つため摩擦抗力が大きい。 |
| 乱流スケール | 乱流における渦の大きさ |
| り | |
| リオーダリング | 計算順序の並べ替えのこと。計算処理を速くしたり、並列処理ができるように依存関係をなくすために行われる。 |
| リガンド結合 | 受容体に特異的に結合する物質（リガンド）が結合すること |
| リボゾーム | 細胞内の構造体で、遺伝情報からタンパク質へと変換する機構である翻訳が行われる場である。 |
| 量子色力学 | クオークとグルーオンの力学（強い力の力学）を量子力学的に記述する理論。素粒子標準理論の一部をなす。（QCD: Quantum Chromodynamics） |
| 量子数射影法 | 量子多体計算において、変分計算によって得られた波動関数はハミルトンがともと持っている対称性を自発的に破っていることが多い。この波動関数に射影演算子を作用させることによって、本来保つべき対称性を回復させる方法。 |
| リラクサー | 特殊な強誘電体。誘電率の周波数依存性に特徴がある。 |
| 臨界終点 | 相図において一次相転移が終結し、熱力学変数が連続的に変化するようになる（クロスオーバー）へと移行する点 |
| 隣接通信 | 並列計算で領域分割法を用いる時に、隣り合う分割された領域間でデータの授受を行う通信の事。 |
| る | |
| ループ | ファインマン図形において現れるループ構造。量子補正が高次になるにつれループの数が増える。 |
| ルシフェラーゼ | 螢の蛍光タンパク質 |
| ルミノシティ | ビーム衝突型加速器実験において、ルミノシティ=単位時間あたりに起こる反応の回数/断面積で定義される。 |
| れ | |
| レイイベント探索アルゴリズム | 通常のシミュレーションでは滅多に発生しないが、科学的に重要な事象を探索するためのアルゴリズム。例えば分子動力学シミュレーションでは高い活性化障壁をもった化学反応はなかなか発生しない。 |
| レイトレーシング | 光線追跡法。コンピュータグラフィックスの画像生成手法の一つで、光が反射屈折する物理現象を模倣し、画像を作成する。 |
| レオロジー | 物質の流動と変形を取り扱う学問。 |
| レジスタブロッキング | CPU内のレジスタ上になるべくデータを集められるようにするためのコーディングテクニック。これにより命令実行効率が向上する。 |
| レプリカ法 | 同じ原子から構成されるシステムを複数用意し、それぞれシミュレーションの条件を変えながら、シミュレーションを行う方法。条件パラメータをある一定の法則に従って交換しながら実行するレプリカ交換法などがある。 |
| ろ | |
| ローカルインジェクション | 外部からガラス細管などで分子を脳の中の特定の領域に注入することさらに電圧を同時に付加することで特定領域の細胞内に分子を注入するローカルエレクトロポレーションなども存在する。 |

| 用語 | 解説 |
|--------------|---|
| ローカルファイルシステム | 並列計算機の各計算ノードから独立して参照されるファイルシステム。各計算ノードで個別に使われるファイルを一時的に保存する場所として使われ、他の計算ノードからは参照できないためグローバルファイルシステムと比較して利便性に欠ける。一方でグローバルファイルシステムと比較して特に大規模なシステムにおいて高性能を達成しやすい構成である。 |

執筆者一覧

(五十音順)

| 担当分野 | 氏名 | 所属 | 役職 |
|---------------|--------|--------------------------------|------------|
| 序論 | | | |
| 執筆者 | 富田 浩文 | 理化学研究所 計算科学研究機構 複合系気候科学研究チーム | チームリーダー |
| | 杉田 有治 | 理化学研究所 計算科学研究機構 粒子系生物物理研究チーム | チームリーダー |
| 生命科学分野 | | | |
| 執筆者 | 伊井 仁志 | 大阪大学 大学院基礎工学研究科 | 助教 |
| | 五十嵐 潤 | 理化学研究所 次世代計算科学研究開発プログラム | 特別研究員 |
| | 池口 満徳 | 横浜市立大学 大学院生命医科学研究科 | 准教授 |
| | 太田 元規 | 名古屋大学 大学院情報科学研究科 | 教授 |
| | 沖田 浩平 | 日本大学 生産工学部 | 准教授 |
| | 加沢 知毅 | 東京大学 先端科学技術研究センター | 特任研究員 |
| | 北浦 和夫 | 神戸大学 システム情報学研究科計算科学専攻 | 特命教授 |
| | 城地 保昌 | 高輝度光科学研究センター XFEL 利用研究推進室 | チームリーダー |
| | 杉田 有治 | 理化学研究所 計算科学研究機構 粒子系生物物理研究チーム | チームリーダー |
| | 杉山 和靖 | 理化学研究所 情報基盤センター | ユニットリーダー |
| | 須永 泰弘 | 理化学研究所 情報基盤センター | センター研究員 |
| | 高田 彰二 | 京都大学 大学院理学研究科 | 教授 |
| | 高橋 恒一 | 理化学研究所 生命システム研究センター | チームリーダー |
| | 玉田 嘉紀 | 東京大学 大学院情報理工学系研究科 | 助教 |
| | 中迫 雅由 | 慶應義塾大学理工学部物理学科 | 教授 |
| | 野田 茂穂 | 理化学研究所 情報基盤センター | ユニットリーダー |
| | 濱田 智之 | 日立製作所 中央研究所 | 主管研究員 |
| | 林 重彦 | 京都大学 大学院理学研究科 化学専攻 | 教授 |
| | 三澤 計治 | 理化学研究所 情報基盤センター | センター研究員 |
| | 望月 祐志 | 立教大学 理学部化学科 | 教授 |
| 執筆協力者 | 山崎 隆浩 | 物質・材料研究機構 理論計算科学ユニット | 特別研究員 |
| | 山下 雄史 | 東京大学 先端科学技術研究センター | 特任准教授 |
| | 吉井 範行 | 名古屋大学 工学研究科附属計算科学連携教育研究センター | 特任准教授 |
| | 李 秀栄 | 理化学研究所 基幹研究所 | 協力研究員 |
| | 秋山 泰 | 東京工業大学 大学院情報理工学研究科 | 教授 |
| | 大野 洋介 | 理化学研究所 計算科学研究機構 | 上級研究員 |
| 物質科学分野 | 泰地 真弘人 | 理化学研究所 計算科学研究機構 | チームリーダー |
| | 長崎 正朗 | 東京大学 東北メディカル・メガバンク グノム解析部門 | 教授 |
| | 長谷川亜樹 | 理化学研究所計算科学研究機構 | リサーチアソシエイト |
| | 藤本明洋 | 理化学研究所統合生命医科学研究センター | 上級研究員 |
| | 藤堂 真治 | 東京大学 物性研究所 計算物質科学研究センター | 特任教授 |
| | 西松 肇 | 東北大大学 金属材料研究所 計算材料学研究部門 | 助教 |
| 執筆者 | 信定 克幸 | 自然科学研究機構 分子科学研究所 理論・計算分子科学研究領域 | 准教授 |
| | 吉本 芳英 | 鳥取大学 大学院工学研究科 機械宇宙工学専攻 | 准教授 |

| 担当分野 | 氏名 | 所属 | 役職 |
|-------|---------------------------------|---|----------|
| 執筆協力者 | 石村 和也 | 自然科学研究機構 分子科学研究所 計算分子科学研究拠点 | 特任研究員 |
| | 今田 正俊 | 東京大学 大学院工学系研究科 物理工学専攻 | 教授 |
| | 岩田 潤一 | 東京大学 大学院工学系研究科 物理工学専攻 | 特任講師 |
| | 江原 正博 | 自然科学研究機構 分子科学研究所 計算科学研究センター | 教授 |
| | 北浦 和夫 | 神戸大学 大学院システム情報学研究科計算科学専攻 | 特命教授 |
| | 北尾 彰朗 | 東京大学 分子細胞生物学研究所 計算分子機能研究分野 | 准教授 |
| | 甲賀 研一郎 | 岡山大学 理学部化学科理論物理化学 | 教授 |
| | 榎 茂好 | 京都大学 福井謙一記念研究センター 福井謙一記念研究部第二 | リサーチリーダー |
| | 佐藤 啓文 | 京都大学 大学院工学研究科分子工学専攻 分子理論化学講座 | 教授 |
| | 志賀 基之 | 日本原子力研究開発機構シミュレーション技術開発室 | 研究副主幹 |
| | 重田 育照 | 大阪大学 大学院基礎工学研究科物質創成専攻 | 准教授 |
| | 茂本 勇 | 東レ株式会社 先端材料研究所 ポリマー基礎研究ユニット | 主任研究員 |
| | 世古 敦人 | 京都大学 大学院工学研究科 材料工学専攻 | 助教 |
| | 武次 徹也 | 北海道大学 大学院理学研究院化学部門 | 教授 |
| | 田中 秀樹 | 岡山大学 理学部化学科 | 教授 |
| | 常行 真司 | 東京大学 大学院理学系研究科 物理学専攻 | 教授 |
| | 東後 篤史 | 京都大学 学際融合教育研究推進センター 構造材料元素戦略研究ユニット | 特定准教授 |
| | 長岡 正隆 | 名古屋大学 大学院情報科学研究科物質情報論講座 | 教授 |
| | 中嶋 隆人 | 理化学研究所 計算科学研究機構 量子系分子科学研究チーム | チームリーダー |
| | 中野 博生 | 兵庫県立大学 大学院物質理学研究科 物質科学専攻 | 助教 |
| | 中野 雅由 | 大阪大学 大学院基礎工学研究科 物質創成専攻化学工学領域 | 教授 |
| | 林 重彦 | 京都大学 大学院理学研究科 化学専攻 | 教授 |
| | 松林 伸幸 | 京都大学 化学研究所 分子環境解析化学研究領域 | 准教授 |
| | 宮崎 剛 | 物質・材料研究機構 先端的共通技術部門 理論計算科学ユニット | 主幹研究員 |
| | 宮本 良之 | 産業技術総合研究所 ナノシステム研究部門 電気科学界面シミュレーショングループ | 研究グループ長 |
| | 望月 祐志 | 立教大学 理学部 化学科 | 教授 |
| | 森田 悟史 | 東京大学 大学院工学系研究科 物理工学専攻 | 特任研究員 |
| | 泰岡 顕治 | 慶應義塾大学 理工学部 機械工学科開放環境科学専攻 | 教授 |
| | 山崎 隆浩 | 物質・材料研究機構 先端的共通技術部門 理論計算科学ユニット | 特別研究員 |
| | 山下 晃一 | 東京大学 大学院工学系研究科化学システム工学専攻 | 教授 |
| 山下 雄史 | 東京大学 先端科学技術研究センター システム生物医学ラボラトリ | 准教授 | |
| 吉井 範行 | 名古屋大学 大学院工学研究科 計算科学連携教育センター | 特任准教授 | |
| 渡辺 宙志 | 東京大学 物性研究所 物質設計評価施設 | 助教授 | |

| 担当分野 | 氏名 | 所属 | 役職 |
|------------------------------|---------|---|----------|
| 地球科学分野（気象・気候科学） | | | |
| 執筆者 | 河宮 未知生 | 海洋研究開発機構 地球環境変動領域 | チームリーダー |
| | 富田 浩文 | 理化学研究所 計算科学研究機構 複合系気候科学研究チーム | チームリーダー |
| | 日下 博幸 | 筑波大学 計算科学研究センター | 准教授 |
| | 荒川 隆 | 高度情報科学技術研究機構 | 主任研究員 |
| | 斎藤 和雄 | 気象庁気象研究所 予報研究部 | 部長 |
| 執筆協力者 | 原 政之 | 海洋研究開発機構 地球環境変動領域 | 技術研究主事 |
| | 八代 尚 | 理化学研究所 計算科学研究機構 複合系気候科学研究チーム | 研究員 |
| | 木本 昌秀 | 東京大学大気海洋研究所 | 教授 |
| | 井上 孝洋 | 高度情報科学技術研究機構 | 主任研究員 |
| | 大越智 幸司 | 海洋研究開発機構 地球環境変動領域 | 特任技術主任 |
| | 本田 有機 | 気象庁国際室 | 外事官 |
| | 荒波 恒平 | 気象庁数値予報課 | 技術専門官 |
| | 藤田 匡 | 気象庁数値予報課 | 調査官 |
| 地球科学分野（固体地球科学） | | | |
| 執筆者 | 堀 高峰 | 海洋研究開発機構 地震津波・防災研究プロジェクト | サブリーダー |
| | 堀 宗朗 | 東京大学 地震研究所 巨大地震津波災害予測研究センター | 教授 |
| | 越村 俊一 | 東北大学 災害科学国際研究所 災害リスク部門 | 准教授 |
| | 亀山 真典 | 愛媛大学 地球深部ダイナミクス研究センター | 准教授 |
| | 宮腰 剛広 | 海洋研究開発機構 地球内部ダイナミクス領域 | 研究員 |
| 執筆協力者 | 深畠 幸俊 | 京都大学 防災研究所 地震予知研究センター | 准教授 |
| | 浜野 洋三 | 海洋研究開発機構 地球内部ダイナミクス領域 | チームリーダー |
| | 古市 幹人 | 海洋研究開発機構 地球内部ダイナミクス領域 | 主任研究員 |
| | 古村 孝志 | 東京大学大学院 情報学環 | 教授 |
| | 前田 拓人 | 東京大学 地震研究所 観測開発基盤センター | 助教 |
| | 撫佐 昭裕 | 日本電気株式会社 文教・科学ソリューション事業部 | 事業部長代理 |
| 地球科学分野（衛星・観測データの有効利用） | | | |
| 執筆者 | 石川 洋一 | 海洋研究開発機構 地球情報研究センター | グループリーダー |
| | 三好 建正 | 理化学研究所 計算科学研究機構 データ同化研究チーム | チームリーダー |
| 執筆協力者 | 佐々木 祐二 | 海洋研究開発機構 地球情報研究センター | 特任技術副主任 |
| 地球惑星科学分野 | | | |
| 執筆者 | 林 祥介 | 神戸大学 大学院理学研究科 地球惑星科学専攻／惑星科学研究センター (CPS) | 教授 |
| | 中本 泰史 | 東京工業大学 大学院理工学研究科 地球惑星科学専攻 | 准教授 |
| 執筆協力者 | 玄田 英典 | 東京工業大学 地球生命研究所 | 研究員 |
| | 小久保 英一郎 | 国立天文台 理論研究部 | 教授 |
| | 高橋芳幸 | 神戸大学 大学院理学研究科 地球惑星科学専攻 | 准教授 |
| ものづくり分野 | | | |
| 執筆者 | 加藤 千幸 | 東京大学生産技術研究所 革新的シミュレーション研究センター | 教授、センター長 |
| | 樋山 和男 | 中央大学理工学部 | 教授 |
| | 高木 亮治 | 宇宙航空研究開発機構 宇宙科学研究所 | 准教授 |
| | 河合 浩志 | 諏訪東京理科大 システム工学部 | 准教授 |

| 担当分野 | 氏名 | 所属 | 役職 |
|---------------|--------|--------------------------------|---------|
| 基礎物理 | 吉川 暢宏 | 東京大学生産技術研究所 革新的シミュレーション研究センター | 教授 |
| | 梅野 宜崇 | 東京大学生産技術研究所 革新的シミュレーション研究センター | 准教授 |
| | 椎原 良典 | 東京大学生産技術研究所 革新的シミュレーション研究センター | 助教 |
| | 井戸村 泰宏 | 日本原子力研究開発機構 システム計算科学センター | 研究主幹 |
| | 佐藤 敏郎 | 富士通アドバンストテクノロジ(株) 複合回路技術統括部 | 部長 |
| | 小野 謙二 | 理化学研究所 計算科学研究機構 可視化技術研究チーム | チームリーダー |
| 執筆協力者 | 坪倉 誠 | 理化学研究所 計算科学研究機構 複雑現象統一的解法研究チーム | チームリーダー |
| | 渡邊 智彦 | 核融合科学研究所 ヘリカル研究部 | 教授 |
| | 前山 伸也 | 日本原子力研究開発機構 核融合研究開発部門 | 博士研究員 |
| 基礎物理における連携 | | | |
| 執筆者 /執筆協力者 | 青木 慎也 | 京都大学 基礎物理学研究所 | 教授 |
| | 阿部 番 | 東京大学 理学系研究科 | 助教 |
| | 入江 敦子 | 高エネルギー加速器研究機構 素粒子原子核研究所 | 広報支援員 |
| | 大塚 孝治 | 東京大学 理学系研究科 | 教授 |
| | 住吉 光介 | 沼津工業高等専門学校 教養科 | 教授 |
| | 滝脇 知也 | 国立天文台 天文シミュレーションプロジェクト | 特任助教 |
| | 土井 琢身 | 理化学研究所 仁科加速器研究センター | 研究員 |
| | 吉戸 智明 | 筑波大学 計算科学研究センター | 主任研究員 |
| 宇宙物理研究分野 | | | |
| 執筆者 /執筆協力者 | 梅村 雅之 | 筑波大学計算科学研究センター | センター長 |
| | 石山 智明 | 筑波大学 計算科学研究センター | 研究員 |
| | 岡本 崇 | 筑波大学 数理物質系 | 准教授 |
| | 草野 完也 | 名古屋大学 太陽地球環境研究所 | 教授 |
| | 柴田 大 | 京都大学 基礎物理学研究所 | 教授 |
| | 庄司 光男 | 筑波大学 数理物質系 | 助教 |
| | 関口 雄一郎 | 京都大学 基礎物理学研究所 | 特定研究員 |
| | 滝脇 知也 | 国立天文台 天文シミュレーションプロジェクト | 特任助教 |
| | 富阪 幸治 | 国立天文台 理論研究部 | 教授 |
| | 中本 泰史 | 東京工業大学 理工学研究科 | 准教授 |
| | 星野 真弘 | 東京大学 理学系研究科 | 教授 |
| | 長谷川 賢二 | 筑波大学 計算科学研究センター | 研究員 |
| | 牧野 淳一郎 | 東京工業大学 理工学研究科 | 教授 |
| | 松元 亮治 | 千葉大学 理学研究科 | 教授 |
| | 松本 洋介 | 千葉大学 理学研究科 | 特任助教 |
| | 三上 隼人 | 千葉大学 | |
| | 横山 央明 | 東京大学 理学系研究科 | 准教授 |
| | 吉川 耕司 | 筑波大学 数理物質系 | 講師 |
| | 吉田 直紀 | 東京大学 理学系研究科 | 教授 |
| 素粒子物理研究分野 | | | |
| 執筆者 /執筆協力者 | 青木 慎也 | 京都大学・基礎物理学研究所 | 教授 |
| | 石井 理修 | 筑波大学・数理物質系 | 准教授 |
| | 石川 健一 | 広島大学・大学院理学研究科 | 准教授 |
| | 石塚 成人 | 筑波大学・数理物質系 | 准教授 |

| 担当分野 | 氏名 | 所属 | 役職 |
|-----------|--------|-----------------------------------|---------|
| | 金谷 和至 | 筑波大学・数理物質系 | 准教授 |
| | 金児 隆志 | 高エネルギー加速器研究機構・素粒子原子核研究所 | 助教 |
| | 藏増 嘉伸 | 筑波大学・数理物質系 | 教授 |
| | 滑川 裕介 | 筑波大学・計算科学研究センター | 研究員 |
| | 中村 宜文 | 理化学研究所・計算科学研究機構 | 研究員 |
| | 仁尾 真紀子 | 理化学研究所・仁科加速器研究センター | 研究員 |
| | 西村 淳 | 高エネルギー加速器研究機構・素粒子原子核研究所 | 准教授 |
| | 橋本 省二 | 高エネルギー加速器研究機構・素粒子原子核研究所 | 教授 |
| | 早川 雅司 | 名古屋大学・大学院理学研究科 | 准教授 |
| | 松古 栄夫 | 高エネルギー加速器研究機構・計算科学センター | 助教 |
| | 山崎 剛 | 名古屋大学・基礎理論研究センター | 助教 |
| | 山田 憲和 | 高エネルギー加速器研究機構・素粒子原子核研究所 | 助教 |
| | 吉江 友照 | 筑波大学・数理物質系 | 准教授 |
| 原子核物理研究分野 | | | |
| 執筆者 | 中務 孝 | 理化学研究所 仁科加速器研究センター | 准主任研究員 |
| | 清水 則孝 | 東京大学 原子核科学研究センター | 特任准教授 |
| 執筆協力者 | 青山 茂義 | 新潟大学 情報基盤センター | 准教授 |
| | 小野 章 | 東北大学 理学研究科 | 助教 |
| | 野中 千穂 | 名古屋大学 理学研究科 | 准教授 |
| | 初田 哲男 | 理化学研究所 仁科加速器研究センター | 主任研究員 |
| | 肥山 詠美子 | 理化学研究所 仁科加速器研究センター | 准主任研究員 |
| | 保坂 淳 | 大阪大学 核物理研究センター | 教授 |
| | 松尾 正之 | 新潟大学 自然科学系 | 教授 |
| | 矢花 一浩 | 筑波大学 数理物質系 | 教授 |
| 社会科学分野 | | | |
| 執筆者 | 伊藤 伸泰 | 理化学研究所 計算科学研究機構 離散事象シミュレーション研究チーム | チームリーダー |
| 執筆協力者 | 和泉 潔 | 東京大学 工学系研究科 システム創成学専攻 | 准教授 |
| | 野田 五木樹 | 産業技術総合研究所 サービス工学研究センター | 研究チーム長 |

目次と執筆者リストとの対応

| | | |
|-------|-----------------------------------|-----------------------|
| 1 | 序論 | |
| 2 | 今後の HPC が貢献しうる社会的課題 | |
| 2.1 | 創薬・医療 | 生命科学分野 |
| 2.2 | 総合防災 | |
| 2.2.1 | 地震・津波防災 | 地球科学分野（固体地球科学） |
| 2.2.2 | 気象灾害 | 地球科学分野（気象・気候科学） |
| 2.3 | エネルギー・環境問題 | 物質科学分野、地球科学分野、ものづくり分野 |
| 2.4 | 社会経済予測 | 社会科学分野 |
| 3 | 分野連携による新しい科学の創出 | |
| 3.1 | 基礎科学の連携と統一理解 | |
| 3.1.1 | 基礎物理における連携 | 基礎物理における連携 |
| 3.1.2 | 宇宙科学、地球科学の連携による惑星科学 | 地球惑星科学分野 |
| 3.1.3 | 生命科学分野、物質科学分野、ものづくり分野の連携 | 生命科学分野、物質科学分野、ものづくり分野 |
| 3.2 | ビッグデータの有効利用 | |
| 3.2.1 | 計算科学基盤技術の創出と高度化 | ものづくり分野 |
| 3.2.2 | ビッグデータの有効利用例①：衛星・観測データの有効利用 | 地球科学分野（衛星・観測データの有効利用） |
| 3.2.3 | ビッグデータの有効利用例②：ゲノム解析・バイオインフォマティクス | 生命科学分野 |
| 3.3 | 大規模実験施設との連携 | |
| 3.3.1 | X 線自由電子レーザー施設 SACL A 等の大型研究施設との連携 | 生命科学分野 |
| 4 | 各計算科学分野の社会的・科学的課題 | |
| 4.1 | 生命科学 | 生命科学分野 |
| 4.2 | 物質科学 | 物質科学分野 |
| 4.3 | 地球科学 | |
| 4.3.1 | 気象・気候科学 | 地球科学分野（気象・気候科学） |
| 4.3.2 | 固体地球科学 | 地球科学分野（固体地球科学） |
| 4.4 | ものづくり | |
| 4.4.1 | 熱流体 | ものづくり分野 |
| 4.4.2 | 構造解析 | ものづくり分野 |
| 4.4.3 | 機械材料 | ものづくり分野 |
| 4.4.4 | プラズマ・核融合 | ものづくり分野 |
| 4.4.5 | 電磁界解析 | ものづくり分野 |
| 4.4.6 | 可視化・データ処理 | ものづくり分野 |
| 4.5 | 基礎物理 | |
| 4.5.1 | 宇宙研究 | 宇宙物理研究分野 |
| 4.5.2 | 素粒子 | 素粒子物理研究分野 |
| 4.5.3 | 原子核物理 | 原子核物理研究分野 |
| 4.6 | 社会科学 | 社会科学分野 |

計算科学ロードマップ

～大規模並列計算によるイノベーションの目指す社会貢献・科学的成果～

将来の HPCI システムのあり方の調査研究「アプリケーション分野」

独立行政法人理化学研究所 編 平成 26 年 3 月発行