

計算科学ロードマップ 2017

今後の HPCI を使った計算科学発展のための検討会

平成 29 年 6 月

改定履歴

v170616 2017年6月16日 初版

v170713 2017年7月13日 「付録B 執筆者一覧」の誤りを修正

目次

第 1 章	序論	1
1.1	はじめに	2
1.2	将来実現しうる計算機アーキテクチャ	3
第 2 章	各計算科学分野の課題	9
2.1	素粒子・原子核	10
2.2	ナノサイエンス・デバイス	21
2.3	エネルギー・資源	30
2.4	生命科学	36
2.5	創薬・医療	44
2.6	設計・製造	49
2.7	社会科学	59
2.8	脳科学・人工知能	69
2.9	地震・津波	79
2.10	気象・気候	87
2.11	宇宙・天文	95
2.12	計算機要求性能まとめ	106
第 3 章	アプリケーションの分類	109
3.1	アプリケーションカテゴリ分け	110
3.2	ミニアプリとの対応	113
第 4 章	各課題の詳細	121
4.1	素粒子・原子核	122
4.2	ナノサイエンス・デバイス	154
4.3	エネルギー・資源	168
4.4	生命科学	189
4.5	創薬・医療	201
4.6	設計・製造	219
4.7	社会科学	270

4.8	脳科学・人工知能	276
4.9	地震・津波	295
4.10	気象・気候	312
4.11	宇宙・天文	324
4.12	計算機要求性能まとめ	355
付録 A	用語集	359
付録 B	執筆者一覧	413

第1章

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幅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。[\(http://www.open-supercomputer.org/workshop/sdhpc/\)](http://www.open-supercomputer.org/workshop/sdhpc/)

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）」（略称：アプリFS）が平成24年7月にスタートした。アプリFS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。[\(<http://hpci-aplfs.aics.riken.jp/document.html>\)](http://hpci-aplfs.aics.riken.jp/document.html)

同ロードマップをまとめるにあたっては、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。

このようにアプリFSが築いてきた計算科学コミュニティを維持すべく、アプリFSの「計算科学ロードマップ」の各分野の執筆取り纏め役を中心に、平成26年に「今後のHPCIを使った計算科学発展のための検討会」（略称：「計算科学検討会」）が発足した。本検討会では、計算科学分野における横断的なコミュニティの育成・維持・発展、若手の発掘、情報交換・成果発表の場の創出、計算科学のための計算資源の確保を目指し活動を行ってきた。その中で、新規分野を含む「計算科学ロードマップ」の改定作業のための会合、分野横断的なオープンな学術的会合「計算科学フォーラム」の定期的な開催を行った。

本書は、計算科学検討会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、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粹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。

なお、計算科学検討会は平成 26 年度から 28 年度の間、理化学研究所の受託した文部科学省委託事業「HPCI の運営」の下で運営された。平成 29 年度からは HPCI コンソーシアムの下で「計算科学フォーラム」として活動を行い、より広いコミュニティの中で多くの研究機関との連携を持ちながらの分野横断的な活動を継続していく予定である。その中で今後も引き続き「計算科学ロードマップ」を定期的に更新し、フラッグシップ・第二階層・第三階層システムのアーキテクチャに関する提言に資する情報を提供できるものと考える。

1.2 将来実現しうる計算機アーキテクチャ

本節では、5-10 年後として想定するべき HPC システムについてまとめる。

まず 5 年後、次に 10 年後程度までを考える。

1.2.1 5 年後 (2021 年)

2021 年頃については、具体的なマシンを想定することが可能であろう。汎用メニコアでは、例えばポスト京、インテルでは汎用 Xeon の Cannonlake y、Xeon Phi では KNH ないしその後継、また、ポスト京以外にも ARM SVE アーキテクチャのものがでてくる可能性はある。

これらは、コア数は 32-64、コア内 SIMD 幅は最大 8 度 (倍精度) でスーパースカラー 2 ユニット、主記憶へのバンド幅は B/F(bytes per flops) で 0.25 から 0.3 度と、あまり大きく変わらないアーキテクチャになると想像される。ネットワークはポスト京では京、FX100 と同様な 6 次元トーラスアーキテクチャになるが、それ以外はファットツリーやドラゴンフライ等の階層的なネットワークになると想定される。1 ノードあたりの性能は、3-5Tflops 程度となるであろう。ノードあたりのネットワークバンド幅は、階層的なネットワークの場合で 20-50GB/s 程度になると予想される。

利用されるテクノロジーは、TSMC の用語でいう 7nm から、5nm 程度に相当するものになると予想される。TSMC では 16nm から、Intel では 22nm から採用されている FinFET 構造が引き続き使われる。露光は 5nm では EUV になると予想されているが、若干不透明である。

動作周波数に向上がるとは考えにくい。Xeon Phi では 1.1-1.3GHz 程度と非常に低い動作クロックがとられており、高い電力性能が必須になるため、この傾向は他のアーキテクチャでも同様になると考えられる。

ネットワークレイテンシ等は現在実現されているものから飛躍的な進化があるとは考えにくい。

表 1.1 Intel Xeon の進化

アーキテクチャ	Nehalem	SB	IB	HW	BW	SL
年	2009	2012	2014	2014	2016	2018?
デザインルール	45	32	22	22	14	14?
最大コア数	4	8	12	18	22	28?
コアあたり演算数	4	8	8	16	16	32?
演算器数	16	64	96	288	352	896
演算器率	32K	66K	46K	139K	68K	175K

表 1.2 富士通メニーコアの進化

アーキテクチャ	FX1	京/FX10	FX100	ポスト京
年	2008	2011	2015	?
デザインルール	65	45/40	20	?
コア数	4	8/16	16	?
コアあたり演算数	4	8	16	?
演算器数	16	64/128	512	?
演算器率	68K	130K/200K	200K	?

表 1.1 と表 1.2 に、過去 10 年程度の Intel 及び富士通のメニーコアプロセッサの進化をしめす。ここで、演算器数はチップあたりの演算器の数、演算器率は、チップあたり演算器の数にデザインルールの 2 乗をかけたものである。大雑把には、演算器率が大きいことは、チップ面積に占める演算器の割合が大きいことを意味する。但し、チップ面積で規格化はしていないので、チップ面積自体が大きい場合もある。

富士通アーキテクチャの演算器率は Intel アーキテクチャの 2 倍程度であること、Intel アーキテクチャではこの 10 年間で徐々に演算器率が高くなっているが、富士通アーキテクチャでは FX10 から変化がないことがわかる。インテルの場合、プロセスシュリンクとアーキテクチャ変化を互い違いに行うため、一時的に演算器率が下がるが、富士通ではアーキテクチャとプロセステクノロジーが同時に変わるためこのような後退はない。どちらも、演算器率で 200K 程度を維持するなら、10ないし 7nm での主力のアーキテクチャでは演算器数が 2000 から 4000 程度 (FMA 演算器の数であればこの半分) まで増加することになる。

次にみていく、アクセラレータベースのシステムやヘテロジニアスメニーコアに比べて、ピーク性能、電力性能、価格性能比でメリットがあるとは考えにくいが、一方、ソフトウェアの蓄積もあり、依然もつとも広く使われるアーキテクチャである可能性が高い。

GPGPU については、現在事実上 NVIDIA 1 社だけがプレイヤーになっていて、AMD や Intel は意味があるマーケットを形成できていないように思われる。従って、ここでは NVIDIA のみを考慮する。

表 1.3 NVIDIA GPGPU の進化 (まだできてない)

アーキテクチャ	Fermi	Kepler	Pascal	Volta
年	2009	2012	2016	2018?
デザインコール	40	28	16	10/12?
1コア数	512	2496	1792	?
コアあたり演算数	1	(2/3)	2	?
演算器数	512	1664	3584	?
演算器率	819K	1.3M	918K	?

現行の PASCAL アーキテクチャの延長にある Volta、あるいはその後継が主力になると思われる。B/F は、比率としては汎用メニーコアと同様な 0.2 前後だが、チップあたりの演算性能が高いことに対応してメモリバンド幅も高くなっている。

GPGPU を多様なアプリケーションで使う上での現状の最大の問題は、メモリが物理的に別であり GPGPU メモリと CPU メモリの間の転送速度に限界があるにもかかわらず、GPU 側のプログラミングモデルは十分に汎用的ではなく、全ての処理を GPU 側で行うのはほとんどのアプリケーションで現実的ではないことであろう。

NVIDIA のこの問題への対応は、NVLINK と呼ばれる PCI-Express よりも高速なインターフェースである。しかし、GPGPU 自体の演算能力の向上に追いつく程度の転送速度であり、本質的な問題の解決にはなっていないように思われる。

2016/17 年の現在、新しいアーキテクチャとして今後重要になる可能性があるのは 1 チップに統合されたヘテロジニアスメニーコアである。これは、Intel や AMD は GPU を 1 チップに統合したものとして以前から製品化しているものの、HPC マーケットに対して力をいれてきたとはいいがたかったこともあり、広く使われるようにはなっていない。一方、NVIDIA も自社 ARM コアを統合したプロセッサを当初は HPC 用にも展開する計画であったように見えるが、現在は車載等を主なターゲットにしている。

このため、2017 年 4 月の現時点において、大規模 HPC システムで 1 チップヘテロジニアスメニーコアのアプローチをとっているのは、中国の Sunway TaihuLight のみであるが、日本では PEZY 社の SC2 が開発中であり、早ければ 2017 年 6 月にもランキングに現れることが期待される。TaihuLight の SW26010 プロセッサは、MPE 1 コアと CPE 64 コアからなる「コアグループ」を 4 グループ集積した、260 コアプロセッサであり、MPE, CPE はともに、256 ビット幅の SIMD ユニットを 1 つもつ。MPE はデータキャッシュをもつが、CPE はローカルデータメモリを持ち、主記憶には基本的に DMA でアクセスする。この、メニーコア部分がキャッシュをもたないアーキテクチャによって、SW26010 は(テクノロジーが明らかではないが、28nm だと仮定して)PEZY-SC と同等の演算器率 1.6M を達成しており、これは汎用メニーコアの 10 倍、GPGPU に比べても高い。PEZY-SC2 は SC, SW26010 よりも低くなっているが、これは TSMC の 16FF テクノロジーの特殊性による。トランジスタ密度が 28HPM の 2 倍程度にしかなっていないからである。TSMC では 7nm にも同様な問題があり、名前とトランジスタスケーリングが一致していない。

表 1.4 ヘテロジニアスメニーコア

アーキテクチャ	PEZY-SC	SW26010	SC2	SC3
年	2014	2016	2017	2019?
デザインコール	28	28?	16	7?
コア数	1024	256	2048	8192?
コアあたり演算数	2	8	2	2
演算器数	2048	2048	4096	16384?
演算器率	1.6M	1.6M	1.0M	800K?

PEZY-SC では、アプリケーションを動作させるにたる汎用プロセッサは統合されておらず、Xeon をホストとしたアクセラレータ型のシステムだったが、SC2 では統合される。B/F は、SC2/SC3 では磁界結合メモリが計画されており、それが実現すれば 1 前後になると見られる。そうでなければ 0.05 程度以下と見られる。

ハイエンドシステムにおいては、電力性能が主要な制約になる。このため、演算器率で 5 倍程度の差がある限り、汎用メニーコアプロセッサを用いたシステムが Top 10 に入ることは例外的になると考えられる。

1.2.2 10 年後 (2026 年)

10 年後になにが起こるかを予測するのは難しいが、「シリコン半導体の延長で現在程度のレートでの性能向上を実現できるなら」現在の延長での発展が続き、エキゾチックな技術への転換は進まないのでと考えられる。

性能向上に対して、主要な障害になる可能性が高いのは電力性能である。これは、半導体製造技術自体に限界があるからである。しかし、とはいえ、EUV 等で 3nm 程度までは到達できるのではないか。

そうすると、現在の 16FF 程度のテクノロジーに比較して、トランジスタサイズによる電力消費の低下は 3/16、約 1/5 である。これだけでは大きな性能向上は期待できないが、なんらかの方法によって動作電圧を現在の 0.9-1.0V から 0.5V 程度まで低下させれば(動作周波数は低下するが)、周波数・トランジスタ当たりの消費電力は 1/20 程度まで下がる。

2017 年現在、Sunway TaihuLight が 100PF、6Gflops/W を実現しているので、従来のトレンドに従った性能向上を実現するためには電力性能でほぼ 100 倍、600GF/W、あるいは少なくともその半分、300GF/W の実現が必要と考えられる。

一方、半導体技術だけで、16FF からでまだ 20 倍、Sunway TaihuLight がおそらく使っていると思われる 28nm からは 40 倍近い電力性能向上が可能である。従って、アーキテクチャの改善で 2.5-5 倍の電力性能の向上が実現できれば、従来通りの指數関数的な性能向上が 2026 年頃までは実現できる。

このことは、おそらく破壊的なアーキテクチャの転換はおこらない、ということを意味する。つまり、2026 年においても、

- メニーコア
- ヘテロジニアスメニーコア

が共存する可能性が高い。但し、Top 10 クラスのマシンでは、汎用メニーコアはやはり消費電力の観点から困難になると予想される。

1.2.3 まとめ

Top 1 クラスのマシンで

- 5 年後 (2021): 現状 (2016/6) の 10 倍から 20 倍程度。つまり、ピーク性能が現在の 125PF から約 1EF ないし 2EF
- 10 年後 (2026): 5 年後のさらに 5-10 倍。つまり 5-10EF

というのが過去の経緯と技術状況からのありそうな数値と思われる。これはアクセラレータやヘテロジニアスメニーコアの場合である。汎用 (ホモジニアス) メニーコアでは電力制約からこの 1/3-1/5 程度の性能になる。指數関数的な成長は続くので、アーキテクチャやテクノロジーの破壊的な変化はおそらくおこらない。

第2章

各計算科学分野の課題

2.1 素粒子・原子核

2.1.1 分野の概要

我々が生きている自然界には、宇宙から極微の世界まで、多くの階層が存在する。素粒子分野では自然界の最小構成要素である素粒子の階層を探求し基礎法則の確立を目指している。原子核分野における原子核の階層の探求は、素粒子の世界から原子、元素の世界を説明することを可能にする。このようなミクロな階層の探求は宇宙の成り立ちの探求につながっている。また、素粒子・原子核分野での研究活動は歴史的に計算科学の発展を促してきた。現在においても以下で述べるように計算科学的手法を大いに活用する分野となっている。

素粒子分野

素粒子分野の目的はより深く素粒子の階層を探ることによってその世界を記述するより根源的かつ統一的な基本法則を探求するとともに、得られた基本法則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理解することにある。

素粒子の階層を含めた全ての自然界は強い力、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3つの力は「素粒子標準理論」(以下、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、標準理論に含まれる多くのパラメータの起源を説明できない問題や標準理論には量子的重力が含まれていない問題など、標準理論の枠を超えた問題が存在している。これらを解決する新しい自然階層の存在が期待されており^{*1}、その手がかりを探す活発な研究が理論・実験の両面から世界的に進められている。この新しい階層を探す方法には大きく分けて未知の領域を直接探索するアプローチと既知の物理現象の高精度検証によるアプローチがある。2012年にヒッグス粒子を発見した欧洲原子核研究機構(CERN)の大型ハドロン衝突型加速器(Large Hadron Collider: LHC)での粒子加速器実験が未知の領域を直接探索するアプローチの典型例であり、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している。高エネルギー加速器研究機構(KEK)におけるBelle II実験やKEKと日本原子力研究開発機構(JAEA)が共同で建設したJ-PARCにおけるミュー粒子実験は、既知の物理現象を高精度に測定することを目的としている。このような高精度実験と標準理論の精密計算との比較から新しい階層の手がかりを得ることが高精度検証によるアプローチである。これら両アプローチにおいて計算科学は次のように利用されている。実験におけるデータ解析では情報科学の手法や計算機科学の技術が利用されておりCERNのデータグリッド(Worldwide LHC Computing Grid: WLCG)はその一例である。理論においては新しい階層の理論の候補の探索や実験精度に比する高精度の計算に計算科学の手法が必要不可欠となっている。

一方で新しい階層ではなく現在の標準理論から現在の宇宙の有り様を理論的に再現し宇宙の進化の過程を探る研究も活発である。すでに、現在の宇宙の構造や観測事実の説明にはダークエネルギーやダークマターの存在が必要となっており、これらは標準理論のみでは説明できない現象である。また、現在の宇宙

^{*1} 新しい階層を説明する理論の代表例としては、素粒子と重力を含む全ての相互作用を超対称性を持つ弦として考える超弦理論などがある。

を構成する元素の様相はミクロの階層の理論である標準理論から説明できなければならない。これらの現象を説明するためにはミクロからマクロの階層間の相互作用を取り入れる必要があり、宇宙物理学・原子核物理学・素粒子物理学を連携させる分野間連携も活発となっている。天体现象や宇宙の構造の観測が進んでいる現在、宇宙や天体のような広大な対象物を原子・原子核・素粒子のようなミクロの基本法則から定量的に取り扱うための連成計算が進んできている。ここにも計算科学の手法が利用されている。

以上のような標準理論を超える理論の探索や、標準理論から現在の宇宙の有り様を説明する研究、及び後述の原子核分野の研究で重要な鍵を握るのが、標準理論の一部である、強い力を記述する量子色力学 (Quantum Chromodynamics : QCD) である。特に上記研究に必要な、標準理論に含まれるパラメータの精密決定、宇宙における元素合成や核力による多様な原子核の性質の第一原理的理説には、QCD の第一原理計算である格子 QCD による大規模数値計算が不可欠となっている。

原子核分野

強い力の物理の構成要素であるクォークやグルーオンは単独で取り出すことができないため、強い力の物理は必然的に多体問題の物理となる。原子核物理は QCD を指導原理として強い力が織りなす多体系の非常に多彩な様相を明らかにすることを目指した研究分野であり、その対象は有限多体系のハドロンや原子核だけでなく、初期宇宙に存在したと考えられるクォーク・グルーオン・プラズマや中性子星など広範にわたる。宇宙の構成要素のうち、ダークエネルギーとダークマターを除いたものの大半をバリオンが占めており、強い力の物理を知ることは宇宙を知ることであるとも言える。

地上の世界においては、強い力の物理は核子と総称される陽子・中性子多体系の物理と捉えられる。この核子多体系の物理においては、地上にある安定同位体を構成する原子核のみならず、安定同位体に比べ中性子あるいは陽子が極めて過剰な原子核や、中性子星の内部構造を含む核子多体系のあらゆる存在形態を統一的に理解することを目指している。陽子/中性子過剰核は理化学研究所の RI ビームファクトリー (Radioactive Isotope Beam Factory : RIBF) などの大型加速器によってその性質が調べられており、これらの魔法数 (原子核が相対的に安定となる核子数) が安定核とは異なることが明らかになるなど、多くの新たな知見が生まれている。こうした現象を可能な限り核力に基づいて理解することが原子核理説の重要な課題である。そのインプットとなる核力に関しては、核子 3 体力に対する知見が限られていることから、格子 QCD による核力の構築に大きな期待が寄せられている。核子多体系の物理の応用としては、天体における元素合成過程の理解や、最近ニホニウムで話題となっている新元素合成手法の探求などがある。

初期宇宙や星の中心部等の高温・高密度の極限状況下での物質の性質を知ることは宇宙の進化を解き明かす上で重要である。初期宇宙のような高温下では核子は存在せず、物質はクォーク・グルーオン・プラズマとして存在していると考えられている。宇宙の進化とともに温度が下がるとクォークが核子内に閉じこめられ、クォークが質量を持つようになる。中性子星の内部の高密度の状態では、物質は星の表面から中心に向かって核子の多体系である核物質と呼ばれる状態から、徐々に核子が溶けたクォーク物質へ変化しているとも予想されている。高温・低密度でのハドロンの性質に関しては米国の Relativistic Heavy Ion Collider (RHIC) 実験などによって多くの知見が得られてきているが、有限密度での性質については未解明なことが多い、J-PARC で計画されている重イオン衝突実験などで明らかにされることが期待される。QCD 物性やハドロンの存在形態の理解に向けて、QCD の有効模型を用いたこれら実験データの理

論解析が進められている。よりミクロな階層の第一原理計算である格子 QCD による解析も大規模計算の発展とともに進展してきており、今後、極限状況下におけるハドロンやクォーク・グルーオン多体系の性質を QCD に基づき定量的に理解できるようになると期待される。

コミュニティからの意見

素粒子・原子核分野における計算科学的手法の利用は必要不可欠であるが、計算科学的手法を用いた若手研究者的人材が不足している。このような人材の確保のためには計算科学的手法と基礎科学の両輪を併せ持つ分野横断的教育が必要であるが、国内におけるこのような教育拠点の数は少ない。裾野を広げる必要性が指摘されている。これらの意見は以下の会合にて伺った。

- 2016年9月21日（水）日本物理学会2016年秋季大会（宮崎大学）、インフォーマルミーティング「計算科学ロードマップ素粒子・原子核部更新意見交換会」
- 2017年2月17日（金）計算基礎科学連携拠点（JICFuS）・ポスト「京」重点課題9「宇宙の基本法則と進化の解明」主催、素粒子・原子核・宇宙「京からポスト京に向けて」シンポジウム
- 2017年3月18日（土）日本物理学会第72回年次大会（大阪大学豊中キャンパス）、インフォーマルミーティング「H28年度版計算科学ロードマップ素粒子・原子核部報告会」

ソフトウェアや計算機ハードウェアに対する技術的意見については各課題の計算機手法・アプリケーションの項に記載した。

2.1.2 長期目標と社会貢献

長期目標

最終的な目的は、宇宙の進化過程を解明するために必要な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 による統一的理解を進めること、標準理論に含まれているクォークの性質に関するパラメータの精密決定により新しい階層の手がかりを探ることである。素粒子・原子核分野における計算科学的手法が有効な長期目標は以下の通りである。

(a) 強い力が創り出す階層構造の非摂動的理解

(a-1) QCDに基づく有効バリオン間相互作用の決定と応用

自然科学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により発展してきた。強い力の理解においても、原子核の階層 ⇒ 核子（陽子・中性子）の階層 ⇒ 素粒子であるクォークの階層の理解というプロセスをたどってきた。強い力を記述する QCD の第一原理計算である格子 QCD 計算は、原子核階層での既知の物理法則を矛盾なく説明するとともに、それを超える未知の物理現象に対する理論的予言が可能なはずである。QCD に基づいた有効バリオン間相互作用を決定し、クォーク階層から原子核階層を説明することが目標となる。これらの計算で得られた知見は、素粒子の階層と原子核の階層にまたがる物理現象や多様な構造を持つ原子核階層の性質を理解する上で大きな役割を果たすとともに、クォーク・グルーオンの自由度から原子核を直接構成する第一原理的アプローチの基礎としても重要である。

(a-2) 有限温度・有限密度 QCD の解明

クォークの階層についての理解を深めることも宇宙の進化解明にとって重要である。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。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。このようなクォークやグルーオンの自由度が重要となる超高温・超高密度状態における物質の相構造を QCD に基づいて解明することが目標となる。クォーク・グルーオンプラズマは、近年の重イオン衝突実験（米国 の RHIC 実験、CERN の ALICE 実験）により研究は進められているが、温度と密度の関数として多様な相構造を持つことが予想される QCD は、その全貌を実験により解明することは不可能であり、格子 QCD 計算に大きな期待がかけられている。

(a-3) 第一原理計算による原子核構造・反応の記述

核子多体系の物理に関しては、核力から直接原子核を記述する第一原理計算がその重要な目標の一つとなっている。核力から原子核を直接計算する少数多体系計算では、手法および精度によるが、現在では核子数 5-10 程度の原子核の計算が可能であり、今後その限界を漸次拡大していく。さらにより質量数の大きな原子核の構造・反応を記述するためには、理論的・計算科学的観点からの様々な発展が必要となっており研究が進められている。こうした第一原理計算によって、格子 QCD の結果と核構造との間に整合性のある核子 3 体力（あるいは 4 体力以上の必要性）を得ることや、現在では有効模型を用いて議論されている原子核構造・反応の諸問題に対し原子核階層での第一原理的な立場から答えを出すことを目指す。

(a-4) 適用範囲の広い原子核有効模型の構築

核子多体系における数 MeV（メガ電子ボルト）程度の低エネルギー現象の説明には、核力の長距離相関の自由度を取り入れた有効模型がこれまで大きな成功を収めてきた。第一原理計算によって、全ての核種や現象を記述することは当面は到底不可能なことから、今後も有効模型は有力な手段であり続ける。有効模型の長期的目標は、模型が記述できる核種や現象を飛躍的に拡大することである。この中には未知核種や実験が困難な現象も含まれる。また、これまで計算能力の限界から、対象とする核種や現象に応じて出発点の異なった有効模型が使われてきたが、今後はこれらの有効模型の統一化を進めていく。さらに、有効模型の精度を上げるために、模型の有効相互作用を現象論的・経験的なものから核力に依拠した微視的なものへと置き換えていく。こうした統一的かつ定量的な原子核の記述は、天体核物理や原子力工学等への応用においても非常に重要な役割を果たす。

(b) 標準理論を超えた物理の探索

(b-1) 標準理論の高精度検証による新しい物理階層の探索

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の手段の 1 つに、既知の物理現象に対する高精度の実験結果と標準理論による理論的予言（理論値）とのズレを見出すアプローチがある。このアプローチで重要なのが、ズレを明確に捕らえるために、理論・実験の双方が目標精度を達成することである。このアプローチの実験は、KEK の Belle II 実験と CERN の LHCb 実験によるボトムクォークに関する物理現象の精密測定や、日本の J-PARC 及び米国のフェルミラボで計画されているミュー粒子異常磁気能率の超高精度測定、将来建設が計画されている国際リニアコライダー (International Linear Collider : ILC) 実験が挙げられる。ボトムクォーク実験に対しては格子 QCD を

用いたハドロン行列要素の精密計算、ミュー粒子異常磁気能率実験に対しては摂動論に基づく量子電磁力学 (QED) 高次補正計算、将来の ILC 計画のデータ解析にはファインマン図自動計算が不可欠であり、これらの全ての計算に対して実験精度の向上に合わせた精確な理論的値を与えることが目標となる。これらの高精度計算は大型計算機による計算が不可欠である。

(b-2) 超弦理論の量子ダイナミクスの解明

超弦理論は、宇宙に存在する全ての粒子と重力を含む4つの力を統一的に記述する究極理論の候補とされ、世界中で精力的な研究が展開されてきた。しかし、解析的計算だけでは理論の全体像を完全に把握することが難しく、様々な問題が未解明なまま取り残されている。宇宙創成の機構の解明、素粒子の運動を記述する標準理論の根源的な理解、時空が4次元である理由、さらに超弦理論から予測されるゲージ重力双対性を用いたブラックホールの情報喪失問題の解明や、QCD、超伝導、超流動のホログラフィックな記述の確立などである。このような多くの未解決問題を行列模型や超対称ゲージ理論の数値シミュレーションから解明することは、超弦理論の応用の広がりとともに、21世紀の物理学の中心的な課題の一つとなっている。

(b-3) 標準理論を超えた理論の探索

自然界には何故4つの力が存在するのか、ダークマターとは何か、素粒子の種類ごとに質量が大きく異なる理由は何か、このような多くの基本的な問題が依然謎につつまれている。これらの謎は、標準理論を越えた階層に現れる新理論により解明されると期待されており、欧州の LHC において、新理論の兆候を捕らえるための実験がすでに始まっている。超弦理論や大統一理論の基礎であり現在最も有力視されている超対称性理論や、ヒッグス粒子を複合粒子として理解するウォーキングテクニカラー理論など、新理論の候補となる理論が数多く提案されている。実験と相補的に、理論的な観点から新理論の候補を絞るために、これらの理論の力学的な性質を数値計算により明らかにすることが今後の課題となっている。この研究が進展すれば、将来世界的に推進される実験の方針決定に対して大きな貢献が期待できる。

社会貢献

素粒子・原子核物理学の最終目標は「自然界はどのようにできているのか」「宇宙はどのように始まりどのように進化するのか」という、誰もが一度は考えたことのある基本的な問いに答えようとするものであり、その目標へ向けた研究で得られた知見は多くの人の知的好奇心を満たすものである。基礎科学である素粒子・原子核物理学の研究活動を通じて得られた科学的知見そのものが新しい価値であり、その知見を積み重ねることが基礎科学の社会貢献である。このような研究活動を通じて開発された技術や手法・理論は私たちの日常生活に深く関わってきた歴史がある。発見から数十年から百年経った後に、思いがけないかたちで日常生活の質を劇的に向上させた科学的知見は決して少なくない。例えば、カーナビやスマートフォンに搭載されている GPS の理論的基礎となっている相対性理論^{*2}は、生まれてから百年を経て日常生活に欠かすことのできないものになっている。研究データの共有や研究コミュニティ形成のために CERN で開発された World Wide Web (WWW) もまた日常生活に不可欠となっている。

一方、原子核物理は、ハーン・シュトラスマン・マイトナー・フリッシュによる核分裂の発見以来、エ

*2 相対性理論を用いた補正を考慮しないと、GPS の位置情報の精度は格段に悪くなる（日本物理学会誌 2005 年 9 月号 741 頁「カーナビと相対論」中村卓史 <http://ci.nii.ac.jp/naid/110002079440>）

エネルギー利用とともに発展してきた側面がある。また、原子核の崩壊に伴う放射線は、医療や科学研究の道具として広く利用されている。最近ニホニウムで話題となつた、新元素合成も挙げられる。現在、狭義の原子力利用に関しては放射線廃棄物の処理法の確立、放射線利用については医療用同位体の安定供給体制の構築が喫緊の課題であり、これらの社会的要請に原子核物理の新知見が活かされる余地は多く残されている。

基礎科学は応用を目指していないが、得られる知見は基礎的であるがゆえに世代（個人の寿命）を超えた先で、思いがけない応用がなされる可能性を常に持つ。また社会の発展とともに新たな技術的・科学的知見が必要となる問題もでてくるであろう。そのような問題の解決にはそれまでの基礎的な技術的・科学的知見の蓄積が重要になってくる。このように私たちの知的好奇心を満たし、生活を豊かにする可能性を持つ科学的知見を、研究活動を通じて積み重ね、長い年月を経ても失われないよう、正しく後世へ伝えていくことが基礎科学の社会への貢献である。

2.1.3 課題とその解決に必要な計算手法・アプリケーション

前述した長期目標を達成するためには様々な課題を計算科学的手法によって解決することが必要不可欠となってくる。本節では特に 2026 年ごろに解決すべき、もしくは解決できる課題について、それらの課題の概要とそのために必要な計算手法とアプリケーションについて計算規模が大規模なものと計算手法が特徴的なものを 5 つ概説する。素粒子・原子核分野における、より詳細な課題の分類と課題内容、計算科学的解決方法については第 4.1 節にて説明する。

計算手法やアプリケーションは物理の基礎法則や考え方に基づいて記述されるため課題間で共通のものもある。課題概説には計算手法・アプリケーションの名称を列挙するにとどめ、名称に添字^(a)を付した。添字に対応する各計算手法・アプリケーションの説明は課題概説から分離し課題概説の後にまとめた。

課題概説

(i) 格子 QCD を用いたバリオン有効相互作用の決定 [長期目標 (a-1) の課題]

第一原理格子 QCD 計算を用いたバリオン間相互作用の決定により、原子核や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バリオン間 3 体力に対し、第一原理格子 QCD 計算によって得られた (S/D/P 波) バリオン間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。また散乱理論と様々なバリオン・ハドロ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。課題詳細は 4.1.1 節にある。

必要な計算手法・アプリケーション

格子 QCD ハイブリッドモンテカルロ法^(a)、ウィルソン型フェルミオン作用^(b)、大規模疎行列反復解法^(b)、格子 QCD バリオン 2 体波動関数計算^(c)

(ii) 格子 QCD を用いた QCD 相構造の理解 [長期目標 (a-2) の課題]

温度と密度を関数とするクォーク物質の相構造解析は、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、相図におけるクォーク・グルーオン・プラズマ相とハドロン相を隔てる相転移線が消える臨界終点の温度と密度の精密決定である。その後の主要課題としては、低温中高密度領域での QCD 相構造解析と状態方程式の精密決定、及び重イオン衝突実験で注目されている保存電荷のゆらぎのガウス分布からのずれを表す高次キュムラントやクォーク・グルーオン・プラズマの輸送係数の決定があげられる。課題詳細は 4.1.4 節にある。

必要な計算手法・アプリケーション

格子 QCD ハイブリッドモンテカルロ法^(a)、ウィルソン型フェルミオン作用^(b)、大規模疎行列反復解法^(b)

(iii) 多核子力を含む核力の深い理解 [長期目標 (a-3) の課題]

二核子間相互作用は核子散乱実験データによってかなりよくわかっているものの、核子が複合粒子であることに起因する多核子力（核子 3 体力など）の不定性は未だに大きい。核子多体系である原子核の構造・反応の精密な記述によって、その不定性を極力減らすことを目指す。そのためには、多核子力の影響が大きくなると考えられる、より核子数の大きな原子核へと核力に基づく第一原理計算のフロンティアを拡大することが必要である。少数多体系計算によって厳密解を担保するとともに、中重核に適用可能な方法論の開発も進めていく。同様のアプローチは、ハイパー核の構造・反応からハイペロンの相互作用を理解するのにも有用である。「少数多体系計算」、「QCD に立脚した原子核反応計算」の課題を含む。これらの課題詳細は 4.1.6 節、4.1.7 節にある。

必要な計算手法・アプリケーション

ガウス関数展開法^(e)、確率論的変分法^(e)、無芯殻模型計算^(e)、離散化連続チャネル結合法^(e)、グリーン関数モンテカルロ法、結合クラスター法

(iv) 普遍的有効核力の構築 [長期目標 (a-4) の課題]

有効模型では、模型であらわに取り扱われない自由度である核力の短距離成分を有効核力として繰り込む必要がある。有効核力は生の核力よりもさらに不定性が大きいものの、原子核の存在限界や未知核種の性質を決定づける極めて重要な要素である。微視的および現象論的観点から普遍的な有効核力の確立を目指す。特に核子 3 体力の最新の知見を取り入れた微視的理論を発展させるとともに、その物理的知見を現象論的有効核力に活かし、核構造のみならず核反応、状態方程式、核分裂のエネルギー面をも記述可能なり包括的な有効核力を構築する。そのためには、核構造、核反応、核分裂のいずれの現象においても、模型空間内の自由度を十分に取り込んだ高精度の多体系計算を広い質量領域で行うことが非常に重要である。「原子核反応と状態方程式」、「配位間相互作用計算（殻模型計算）」、「原子核密度汎関数計算」、「揺動散逸理論による重イオン反応・核分裂・新元素合成」の課題がある。これらの課題詳細は 4.1.8 節、4.1.9 節、4.1.10 節 4.1.11 節にある。

必要な計算手法・アプリケーション

密度汎関数法（乱雑位相近似や生成座標法なども含む）^(e)、殻模型計算^(e)、反対称化分子動力学計算

(e)、離散化連続チャネル結合法^(e)、ランジュバン方程式

(v) 新物理探索・解明のための精密格子 QCD シミュレーション [長期目標 (b-1) の課題]

主目的は、 B 中間子レプトニック崩壊の崩壊定数 (f_B, f_{B_s})、セミレプトニック崩壊 ($B \rightarrow \pi l\nu, B \rightarrow D^* l\nu, \Lambda_b \rightarrow p(\Lambda_c)l\nu$) の形状因子、 B 中間子混合行列要素を高精度で決定することである。同時に、標準理論に現れる行列要素だけでなく、新物理模型に現れる一般的な行列要素も包括的に計算する。これら計算は Belle II 実験の測定精度に見合うように、理論誤差を 1–5% 以下に抑えることが目標となる。理論誤差を抑えるためには、①約 5GeV (ギガ電子ボルト) のボトムクォーク質量を直接扱える高詳細格子を用いた計算、②カイラル外挿の不定性を排除した物理点の計算、③新物理解明に重要な軽いハドロンの行列要素計算を行う。これらの計算では、計算の不定性を可能な限り抑えるため、カイラル対称性を保つフェルミオン作用を用いる。課題詳細は 4.1.12 節にある。

必要な計算手法・アプリケーション

格子 QCD ハイブリッドモンテカルロ法^(a)、ドメインウォール型フェルミオン作用^(b)、大規模疎行列反復解法^(b)

(vi) QED の高次補正計算 [長期目標 (b-1) の課題]

ミュー粒子異常磁気能率は 0.00001% 程度の精度になると未知の重い粒子の影響が見え、新しい階層の手がかりが得られるのではないかと期待されている。この手がかりを探すためには、実験および理論の双方がこの精度を達成し、両者の差異を確定させることが必要である。現在よりも 1 桁向上すると予想される将来の実験精度の飛躍的向上に対応すべく、QED 摂動計算の 8 次と 10 次の展開係数の不定性を現在よりも 1/4 に削減することを目標とする。実験グループからの強い要望もあり、2~3 年程度でこの目標達成を目指す。その後、将来実験の精度で有意な寄与として現れると推測される、12 次の展開係数をターゲットにし、摂動展開の妥当性検討の後、主要項をピックアップして係数の目標精度を 10% 程度にし、数値計算を行う。課題詳細は 4.1.13 節にある。

必要な計算手法・アプリケーション

QED 高次摂動モンテカルロ積分計算^(d)、4 倍精度実数計算、高度に最適化された 4 倍精度ライブラリ

計算手法・アプリケーションの概説

上述の各課題で必要となる計算手法・アプリケーション群の概説を以下にまとめた。

(a) 格子 QCD ハイブリッドモンテカルロ法

格子 QCD は格子離散化されたユークリッド時空上で場の量子論に基づいて構築されており、物理量は膨大な自由度の重みつき積分で表現されている。この積分をそのままでは実行することはできないため、積分の重みを再現するようにアンサンブル（ゲージ配位）を生成し、統計平均から物理量の値を得る、モンテカルロ法が用いられている。現在の主流のゲージ配位生成法は、ハイブリッドモンテカルロ (Hybrid Monte Carlo: HMC) 法である。この HMC 法の中で計算コストの 8 割以上を占めるのが、次項目「(b) 格子 QCD フェルミオン作用・大規模疎行列反復解法」によるフェルミオン伝搬関数の計算である。

(b) 格子 QCD フェルミオン作用・大規模疎行列反復解法

フェルミオン伝搬関数の計算は、大規模疎行列連立方程式を解く問題に帰着できる。係数行列はクオータの運動方程式を格子離散化したものであり、4次元構造格子上のステンシル計算になる。本節の課題では次の2つのが使われる：① ウィルソン型作用、② ドメインウォール型作用。これらの作用を用いたフェルミオン伝搬関数の計算（大規模疎行列連立方程式を解くこと）には、クリロフ（Krylov）部分空間反復法が用いられる。

(c) 格子 QCD バリオン波動関数計算

バリオン間有効ポテンシャルは、多体バリオン波動関数の空間微分で定義される。多体バリオン波動関数の計算には、4次元時空の異なる各点での多体バリオン相関が必要であり、また相関関数の計算コストはバリオンの数に従いべき乗で増加するため、従来の格子 QCD 計算よりも遙かに多くの演算と通信が必要になる。この多体バリオン波動関数計算には高速フーリエ変換（FFT）が用いられている。

(d) QED 高次摂動モンテカルロ積分計算

異常磁気能率に対する QED の高次摂動計算は、木下東一郎（コーネル大学）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。摂動展開の係数は、ファインマン図と呼ばれる図形の和として表され、その図に現れるループが運動量空間における多次元積分に対応する。この積分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。数値計算の特徴は、①被積分関数プログラムが1億行程度の長さになる、②発散の処理手続きの大きな桁落ちのため4倍精度の実数計算が必要、③モンテカルロ積分では通信をほとんど必要としない処理が可能な点が挙げられる。

(e) 核子系の多体計算

核子多体問題に対しては (iii) および (iv) 項に挙げたような様々な手法およびアプリケーションが用いられているが（代表的なものについては第 4.1 節に記述する）、数値計算の観点からは、その多くに共通する枠組が採用されている。それは、求めるべき多体状態を物理的に重要となる基底波動関数で展開するという方法である。そこでは主に、①基底波動関数の生成、②多体ハミルトニアン行列要素の計算、③多体ハミルトニアン行列の対角化、という3つのステップで構成される。ここでは基底波動関数の数が多体ハミルトニアン行列の次元となる。核子数が増えるにつれ、多体ハミルトニアン行列要素の計算時間がかかるとともに、必要な行列要素の数（すなわち行列の次元数）も増える傾向にある。

2.1.4 ロードマップ

前述した各課題および第 4.1 節で述べられている課題のロードマップを図 2.1 に記載した。各課題の詳細は第 4.1 節に記載されている。

課題 \ 年代	2016 ~	2018 ~	2020 ~	2022 ~	2024 ~	2026 ~
格子 QCD を用いたバリオン有効相互作用の決定 長期目標(a-1)		S/D波バリオン間相互作用の原子核物理・天体物理への応用。重いクォーク質量を採用したP波を含むバリオン間相互作用と3バリオン間相互作用の決定。		P波を含むバリオン間力と3バリオン間相互作用の決定とその応用。		
ハドロン階層の理解へ向けた格子QCD計算の進化 長期目標(a-1)		連続極限でのハドロン質量精密計算 軽原子核束縛エネルギー直接計算。格子間隔0.08fm		QED効果を入れたハドロン質量精密計算 ハドロン2体散乱、崩壊過程精密計算		
格子QCDを用いたQCD相構造の理解 長期目標(a-2)		臨界点の精密決定。格子間隔0.08fm		状態方程式の精密決定。		
	保存電荷ゆらぎの高次キュムラントの解析	4次キュムラントの解析	6次・混合4次	8次・混合6次		
	エネルギー運動量テンソル相関関数と輸送係数の測定	相関関数精密測定(ケンチ近似)		粘性係数測定(ケンチ近似)		
	有限密度解析	Taylor展開法による解析		新しいアルゴリズムの開発と解析		
高エネルギー重イオン衝突実験(クォーク・グルーオンプラスマの解明) 長期目標(a-2)	RHIC・LHCの定量的な解析			低エネルギー領域の解析・ペイズ統計解析		
多核子力を含む核力の深い理解 长期目標(a-3)	少数多体系計算	質量数5.6の軽い中性子過剰原子核の共鳴研究		質量数7以上のエキゾチックな原子核への応用		
	QCDに立脚した原子核反応計算	大規模チャネル結合反応計算の実装		核構造モデルの結果を用いた原子核反応計算		
普遍的有効核力の構築 长期目標(a-4)	配位間相互作用計算(殻模型計算)	質量数130~150領域のモンテカルロ殻模型計算		第3ピーク領域、ウラン領域のモンテカルロ殻模型計算		
	原子核密度汎関数計算	全核種の線型応答計算による計算核データの構築		変形共存、核分裂の微視的記述		
	揺動散逸理論による重イオン反応・核分裂・新元素合成	微視的輸送係数と多次元化の導入		全融合分裂過程を動力学模型のみで計算するための改良		
新物理探索・解明のための精密格子 QCD シミュレーション 長期目標(b-1)		軽いハドロンの行列要素の精密計算。空間体積(6 fm) ³ 、格子間隔 0.04~0.08fm		重いハドロンの行列要素の精密計算空間体積 (4 fm) ³ 、格子間隔 0.02~0.04fm		
量子電磁気学(QED)の高次補正計算 长期目標(b-1)		8次と10次の展開係数の精密計算		12次の展開係数の計算		
ファインマン振幅自動計算 长期目標(b-1)		2ループ图形の自動計算システム構築 トップクォーク対生成電弱相互作用とQCD混在2ループ計算		トップクォーク対生成全電弱相互作用2ループ計算		
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 长期目標(b-2)	行列模型	フェルミオニックな自由度の完全な取り入れ、繰り込み群的改良 インフレーション反転の検証、e-foldingの決定		密度揺らぎの測定、時空を伝播する物質粒子の種類の同定 揺らぎの古典化的検証		
	超対称ゲージ理論	低次元系でのゲージ重力双対性的検証		AdS/CFT対応の検証		超弦理論から標準模型およびビッグバン宇宙の導出、超弦理論の確立と新しい物理への応用
超対称模型の非摂動ダイナミクス 长期目標(b-3)		2次元の超対称ウェス-ゼミノ模型のにおける超対称性の破れの機構の研究と計算手法の改良	4次元超対称ゲージ理論における超対称性の破れの機構の研究		標準模型を越える新物理模型の確立	
ウォーキングテクニカラー理論の非摂動ダイナミクス 长期目標(b-3)		カイラル極限近傍での8フレーバーQCDの性質の理解		実験で観測される可能性のあるハドロン質量の計算 8フレーバーQCD以外のウォーキングテクニカラー模型の候補の探索		

図 2.1 素粒子・原子核分野ロードマップ

2.1.5 必要な計算機資源

2026年頃における課題解決のために必要な計算機資源として、前小節に挙げたアプリケーションのうち以下のものについて2章末尾の表2.1で示す。必要な計算機資源の見積りの詳細は第4.1節に記載した。

- 課題(i) 格子 QCD を用いたバリオン有効相互作用の決定 [長期目標(a-1)の課題]
 - アプリケーション(a) 格子 QCD ハイブリッドモンテカルロ法
 - アプリケーション(b) 格子 QCD フェルミオン作用・大規模疎行列反復解法： ウィルソンフェルミオン作用による配位生成と測定
 - アプリケーション(c) 格子 QCD バリオン波動関数計算
- 課題(v) 新物理探索・解明のための精密格子 QCD シミュレーション [長期目標(b-1)の課題]
 - アプリケーション(a) 格子 QCD ハイブリッドモンテカルロ法

- アプリケーション (b) 格子 QCD フェルミオン作用・大規模疎行列反復解法 : ドメインウォールフェルミオン作用による配位生成と測定
- 課題 (vi) QED の高次補正計算 [長期目標 (b-1) の課題]
 - アプリケーション (d) QED 高次摂動モンテカルロ積分計算
- 課題 (iv) 普遍的有効核力の構築 [長期目標 (a-4) の課題]
 - アプリケーション (e) 核子系の多体計算: モンテカルロ殻模型計算

2.2 ナノサイエンス・デバイス

2.2.1 分野の概要

半導体材料や超伝導物質など、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、物性物理、統計物理を中心に、分子科学、材料科学などにもまたがり、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シミュレーション手法がある。

物質科学分野においては、現在「高性能半導体デバイス」、「光・電子融合デバイス」、「超伝導・新機能デバイス材料」、「高性能永久磁石・磁性材料」、「高信頼性構造材料」といった科学的・社会的に重要な課題群や、複合・マルチスケール問題を通じて極限の探求を目指す萌芽的課題などが、ポスト「京」コンピュータ時代に向けて重点的に進められており、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、かつそれぞ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。

(i) 半導体電子デバイス

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されてきた。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、AkaiKKR・ASCOT・CMD・FEMTECK・OpenMX・PHASE・QMAS・RS-CPMD・RSDFT・RSPACE・TOMBO・UVSOR・xTAPP 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 原子規模のゲルマニウム (Ge) ナノ構造の解明などが進んでいる。

(ii) 光・電子融合デバイス

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 GCEED 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が十分に計算可能な状態となっている。また、高強度長短パルスと物質の相互作用を扱うコード ARTED の開発も進んでいる。

(iii) 強相関多体量子系

粒子間の相互作用の強い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、新奇な量子多体現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、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くりこみ群 (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くりこみ群法 DDMRG など、大規模並列環境への最適化も進んでいる。また、近年ではテンソルネットワーク法と呼ばれる新しい手法も急速に発展してきている。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 や HΦ、mVMC 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・公開も徐々に進みつつある。

(iv) 永久磁石・磁性材料

世界最強磁石であるネオジム磁石の高性能化とそれに代わる新磁石化合物の探索を目指し実験・理論だけではなく、シミュレーションによる研究も精力的に進められている。磁石・磁性材料は典型的なマルチスケール物質であり、スケールに応じて様々な手法を組み合わせて研究が行われている。磁石化合物の主相あるいは副成分との界面の微細構造に関しては、OpenMX・QMAS・AkaiKKR などを用いた第一原理計算が進められている。磁化反転のダイナミクスに関しては、ランダウ・リフシツ・ギルバート (LLG) 方程式に基づく粗視化シミュレーションが行われている。また、第一原理電子状態計算で得られたパラメータをもとに、平均場近似やモンテカルロ法による、キューリ温度や磁化、保持力などの計算、機械学習などのインフォマティクスの手法を用いた新規磁性材料の探索なども進められている。

(v) 構造材料

実用材料の飛躍的性能化にむけて、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のメゾスケールでの粗視化シミュレーション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・OpenMX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。また、機械学習や進化的アルゴリズムを用いた大規模複雑構造の探索の試みも精力的に進められている。

(vi) コミュニティーからの意見

物質科学分野では、これまで、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)、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継続的に行ってきている。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を受け、計算物質科学のポータルMateriApps(<http://ma.cms-initiative.jp/>)の整備も進められている。

2.2.2 長期目標と社会貢献

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、相転移とともに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。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。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、スピントリニティ、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くが、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、次世代のデバイスの設計・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) 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징）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。

(ii) 光・電子融合デバイス

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。

(iii) 強相関多体量子系

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。

(iv) 永久磁石・磁性材料

日本国内電力の50%以上はモータに消費されており、高効率永久磁石モータ化(回転子の永久磁石化とインバータ駆動)による効率の向上にむけた高性能磁石の開発が期待されている。とりわけハイブリッド車の駆動用モータに用いられる強力磁石の使用量が近年急増しており、今後の電気自動車の普及とともにさらなる需要増が見込まれる。特に、耐熱性の向上と希少元素に頼らない高性能磁石の開発は急務である。一方、磁気抵抗効果(GMR)やトンネル磁気抵抗効果(TMR)を利用した不揮発性メモリーや磁気センサーにおいては、熱振らぎによる不安定性とメモリ書き換え時の熱発生が大きな課題となっている。高精度・大規模な第一原理シミュレーション技術を開発し、電子論に基づいて永久磁石・磁性材料の高性能化の指針を示すとともに、粗視化シミュレーションによる磁化ダイナミクスの解明、機械学習などのインフォマティクスの手法を用いた系統的な新規磁性材料探索を行い、産業競争力の強化につなげていく。

(v) 構造材料

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、メソ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。そのために、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、更にミクロからメソ、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-メゾ-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。

2.2.3 課題とその解決に必要な計算手法・アプリケーション

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、電子・電磁場ダイナミクス法、変分モンテカルロ法、厳密対角化、クラスターアルゴリズム量子モンテカルロ法、テンソルネットワーク法についてとりあげる。

(i) 半導体電子デバイス

次世代技術では、デバイス構造の微細化が強く要求されると同時に、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。さらに、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が用いられる。計算需要は(1)より原子数が多く複雑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100万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る。 $O(N)$ 法は、収束性や計算精度など理論的に未解明な部分も多く、適用可能な系はまだ限られているが、近い将来1000万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億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。

$O(N^3)$ 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・電子融合デバイス

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を考えられる。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、きわめて重要かつ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、時間依存密度汎関数法による電子ダイナミクスとマクスウェル方程式による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電子・電磁場ダイナミクス法が必須である。

(iii) 強相関多体量子系

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・アイン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て、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、厳密対角化や量子モンテカルロ法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。厳密対角化では必要とされる計算資源が系のサイズに対して、指数関数的に増加するが、エクサスケールでは50格子点以上の計算が可能となると期待される。一方、 $O(N)$ 法である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)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。

さらに、近年ではテンソルネットワーク法と呼ばれる手法が急速に発展してきている。テンソルネットワーク法は、多数のテンソルを部分的に縮約したものにより量子状態や古典統計力学系を表現する数値計算手法であり。従来の量子モンテカルロ法では負符号問題のため計算が困難であった系に対しても、大規模かつ高精度なシミュレーションが可能になると期待されている。実際、テンソルネットワーク法の特別な場合である密度行列くりこみ群法は1次元量子系への応用で大きな成功を収めた。現在、二次元以上の系やフェルミオン系への拡張がさかんに研究されており、物性物理だけでなく、分子科学、素粒子物理分野への応用も始まっている。

(iv) 永久磁石・磁性材料

磁石・磁性材料は典型的なマルチスケール物質であり、スケールに応じて様々な手法を組み合わせてシミュレーションを行う必要がある。磁石化合物の主相あるいは副成分との界面の微細構造に関しては、OpenMX・QMAS・AkaiKKRなどを用いた第一原理計算が必要である。ポスト「京」に向けたコードの

高度化を進めることで、界面の大規模第一原理電子状態計算を実行する。また、構造最適化、磁気異方性と交換結合の計算や不純物系・不規則系のシミュレーション、電界下の磁気異方性の解明などを進める。磁化反転のダイナミクスに関しては、ランダウ・リフシツ・ギルバート (LLG) 方程式に基づく粗視化シミュレーションが行われている。これらの手法により、解明状態の違いが磁気物性値に与える影響を議論できるようになり、永久磁石、さらに膜厚数 nm 程度の磁気デバイスもターゲットに入る。また、第一原理電子状態計算で得られたパラメータをもとに、平均場近似やモンテカルロ法による、キューリ温度や磁化、保持力などの計算、機械学習などのインフォマティクスの手法を用いた新規磁性材料の探索なども進める。

(v) 構造材料

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などを連成したマルチスケール計算により、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。

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。

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。1EFlops 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。

2.2.4 ロードマップ

年代 課題	2016 ~	2018 ~	2020 ~	2022 ~	2024 ~	2026 ~
半導体電子デバイス	100万原子系の第一原理計算($O(N^3)$ 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 50万原子系
光・電子融合デバイス	10数nmのナノ構造体の電子・電磁場ダイナミクス			数十nmの実在系ナノ構造体		
強相関多体系子系	数千格子点の変分モンテカルロ計算 50格子点の厳密対角化計算		1万格子点		数万格子点 60格子点の厳密対角化計算	
永久磁石・磁性材料	界面の大規模第一原理計算 永久磁石の粗視化シミュレーション			構造最適化、不純物系・不規則系 膜圧数nmの磁気デバイス		
構造材料	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の連成			10 ¹³ -10 ¹⁴ 規模のメッシュによる フェーズフィールドシミュレーション		

図 2.2 ナノサイエンス・デバイス分野のロードマップ

2.2.5 必要な計算機資源

- 第一原理計算 $O(N^3)$ 法 (実空間基底)
- 第一原理計算 $O(N^3)$ 法 (平面波基底)
- 第一原理計算 $O(N)$ 法
- 変分モンテカルロ法
- 厳密対角化法

参考文献

- [1] 押山淳, 天能精一郎, 杉野修, 大野かおる, 今田正俊, 高田康民. 計算と物質 (岩波講座計算科学第3巻). 岩波書店, 2012.
- [2] 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. 理学・工学分野における科学・夢ロードマップ. <http://www.scj.go.jp/ja/info/kohyo/kohyo-21-h132.html>, 2011.

2.3 エネルギー・資源

2.3.1 分野の概要

資源小国である我が国にとり、エネルギー問題の解決は差し迫った重要な課題である [1]。当該分野においては、ポスト「京」で取り組むべきプロジェクト「フラッグシップ 2020 重点課題 5：エネルギーの高効率な創出、変換・貯蔵、利用の新規基盤技術の開発」[2] が現在進行中である。このプロジェクトでは、「京」コンピュータを活用した数値シミュレーション研究が実施されており、将来的にはポスト「京」コンピュータを活用する計画になっている。そこでの知見を活かし、以下の持続可能なエネルギー新規基盤技術を確立することが目標とされている。

- (i) 新エネルギー源の創出・確保 — 太陽光エネルギー
太陽電池、人工光合成による新エネルギーの創出・確保
- (ii) エネルギーの変換・貯蔵 — 電気エネルギー
燃料電池、二次電池によるエネルギーの変換・貯蔵
- (iii) エネルギー・資源の有効利用 — 化学エネルギー
メタンや CO₂ の分離・回収、貯蔵、触媒反応によるエネルギー・資源の有効利用

(i)–(iii) の課題においては、複雑で複合的な分子からなる構造体によってもたらされる化学・物理過程が中心的な役割を担う。このような分子のミクロな挙動の理解は、新規材料の合理的な理論設計と機能制御の開発において最も重要なファクターとなっている。しかしながら、そのような分子レベルの情報は実験のみからでは得ることは難しく、開発指針を経験から定めることも困難である。そういった意味において、重点課題 5 で確立する分子論に基づいた計算科学技術は、産業や社会問題と密接に関係しており、実験研究と相補的に用いられることになる。

重点課題 5 で確立を目指す基盤技術により、以下のような産業利用が期待される。(1) 安価・軽量な高効率太陽電池材料の開発、(2) 人工光合成系の実現による代替エネルギーの創出、(3) 自動車産業の根幹を変革する可能性を持つ低コスト電気自動車、燃料電池車の世界に先駆けた開発、(4) メタンハイドレートからのメタン資源の確保、(5) 高性能触媒の開発によるエネルギーを大量消費する工業過程からの転換、(6) CO₂ による地球温暖化問題の解決と化石燃料の安定的利用の実現。

長期的な観点から、高効率かつ安価な太陽電池や二次電池は、発展途上国のエネルギー問題を改善する可能性を持ち、地球規模での資源・環境問題の解決によって国際貢献に繋がっていく。重点課題 5 で確立される技術は、単にエネルギー問題に限られることなく広く産業に応用され、我が国の産業の革新的発展に大きく貢献することが期待される。

2.3.2 長期目標と社会貢献

重点課題 5 では、分子のミクロな振る舞いが中心的役割を果たすエネルギー技術に対する計算科学基盤技術を確立することが目標として挙げられている。その上で、ポスト「京」運用開始 5 年後には、(i) 高効率・低コストの太陽電池や新規人工光合成系を設計・提案、(ii) 新しい燃料・二次電池に向けた材料探

索や動的過程等の解析を進め、新規システムを設計、(iii) メタンや CO₂ の効率的かつ革新的な分離・回収、貯蔵、変換法の確立を行うことが目標とされている。また、ポスト「京」運用開始 10 年後には、安価かつ高効率な太陽電池、人工光合成系の実現、高性能電池の開発による電気自動車や燃料電池車の普及、メタンハイドレートのエネルギー資源としての利用が目指されている。また、CO₂ による地球温暖化問題の解決の見通しをつけ、化石燃料の安定的利用がなされるような環境を実現する。このような新規基盤技術を社会に応用する上では、可能な限り実験研究者や産業界と連携することが不可欠である。以下、(i)–(iii) について個々に詳述する。

(i) 新エネルギー源の創出・確保 — 太陽光エネルギー

太陽光エネルギーの高効率変換による新エネルギー源の創出に向けて、新規太陽電池の開発と人工光合成系の物質設計が目指されている。

太陽電池

太陽光発電は光エネルギーから電気エネルギーに変換するため、従来の火力発電等と比べ環境負荷の小さい発電機構である。現在普及しているシリコン結晶型太陽電池は、変換効率が比較的高い反面、生産コストがかかる。そのため、低コストで高い耐久性を持ち高効率な太陽電池が重要である。その中でも有機薄膜型太陽電池が現在盛んに研究されている。光吸収に伴う界面での電荷分離の過程が、有機系太陽電池の光変換効率を上げる重要なファクターである。そこで、有機系太陽電池の物質設計とモルフォロジー・界面の制御に貢献できる理論計算手法の開発が行われている。また、理論手法の開発と並行し、スピン制御や熱電変換等のような新機構に基づく物質設計とモルフォロジー・界面の制御を目指し、太陽電池シミュレータの開発が行われている。産業界への貢献として、候補材料の絞り込みを行うことで、新規材料開発の指針を与えることが期待される。

人工光合成

天然光合成は、光エネルギーを利用して、CO₂ と水から酸素とブドウ糖を取り出す化学反応である。人工光合成は天然光合成を模して、光エネルギーで水を分解し、酸素と水素を生成する反応を行う。光合成の反応が起こる部位は、多核金属錯体（マンガンやカルシウムといった金属原子を複数含んだ複雑な構造体）である。特に、これらの金属原子の酸化数の変化は、水分子の分解反応において重要なファクターである。そこで、人工光合成系の素反応から物質設計までを取り扱える統合的な計算手法を確立し、水分解反応の本質を解明することが求められる。加えて、有望な人工光合成材料の探索が行われる。可視光を含む幅広い吸収領域の光エネルギーで酸素発生を促す高性能な触媒の開発が必須である。多核金属錯体・半導体による人工光合成の反応機構の解明と物質設計を可能とする統合的な人工光合成シミュレータの開発が行われている。

(ii) エネルギーの変換・貯蔵 — 電気エネルギー

蓄電・水素エネルギー社会の構築のためには、現在普及しているリチウムイオン二次電池や燃料電池、さらに将来の電池を高性能、長寿命、低コスト化するための技術が不可欠である。そのためには電池の各部材（電極、電解質、セパレータ等）を高性能化するとともに、実験や測定が困難な電極（固体）と電解質（液体）の界面等を制御する必要がある。それにもかかわらず、電池の充放電過程には未解明な微視的

現象が数多く存在し、電池開発には、これらを解明したうえで各部材をあらゆる物質の組み合わせから探索する必要がある。このため、計算科学に基づいて電極反応や電子・イオン移動の機構解明と物質探索の加速が強く求められており、電池の性能の予測や信頼性向上への貢献を可能にする計算手法を確立するべく研究開発が実施されている。数値シミュレーションを用いて、社会産業的課題として電池の設計開発の重要な問題が解決されることになる。この分野は国際的に激しい競争下にあり、電池開発に対する我が国の主導権の継続に寄与することが期待される。

(iii) エネルギー・資源の有効利用 — 化学エネルギー

エネルギー資源を輸入に頼る我が国では、エネルギーの有効な循環が国家的重要課題である。この課題の解決に向けて、化学エネルギーの新規な資源開発と貯蔵の効率化、及び新規触媒の開発が目指されている。前者では、日本近海に埋蔵されているメタンハイドレートからのメタンの生産と貯蔵、火力発電所などから大量に発生する CO₂ の分離・回収の効率化を図り、消費エネルギーコストを削減する新規分子の提案・最適な条件の予測が行われている。後者では、反応経路全面探索を用いて産業界に需要のある触媒反応機構を解明し、新規触媒設計の知見を得るシミュレーション研究が行われている。これにより、高収率高選択性の化学反応の探索、それに続く分離精製法のエネルギー低コスト化が期待できる。すでに、化学エネルギーを対象とする課題として、メタンハイドレートからメタンの抽出、CO₂ 分離・回収、触媒の反応経路探索に対するシミュレーションが実施されており、さらなる新規基盤技術の開発が望まれる。

2.3.3 課題とその解決に必要な計算手法・アプリケーション

重点課題5は実験研究者や企業研究者との連携に基づき、計算と実験が相互的な関係を持ち課題解決を目指すものである。上述した(i)–(iii)のエネルギー新規基盤技術の実現において、新規材料の合理的な理論設計と機能制御の開発は最も重要なファクターとなっている。

現状の計算科学研究では、理想的な要素に対するモデルの取り扱いにとどまっている。実在系の分子は、構成要素が複合して形成されており、直接的な分子過程の記述が不十分である。また、分子過程は、複雑に絡みあった電子や分子の振る舞いが中心的な役割を担っている場合が多いので、全て構成要素を考慮した全系に対する大規模な数値シミュレーションが必要不可欠である。このような非常に複雑な現象の解明は学術的にも意義が高く、ポスト「京」なくしては不可能である。そのため、ポスト「京」を用いた超大規模並列シミュレーションにより、全系の計算を実行して、実験的に観測されている分子過程を世界に先駆けて解明することが必要である。さらに、計算科学者の立場から分子過程の知見を実験研究者に提供し、互いに協力しながらエネルギー問題の解決に向けて一步を踏み出すことが可能となる。以上のように、ポスト「京」の利用による明確な投資効果が見込まれる。

(i) 新エネルギー源の創出・確保 — 太陽光エネルギー

太陽光エネルギー技術の課題では、低成本、ありふれた元素、高変換効率、長寿命の太陽電池及び光触媒（人工光合成）の開発である。計算科学に求められていることは、太陽電池に対しては変換効率を決定付ける様々な因子による太陽電池のエネルギー変換効率要因の特定である。更に従来の理論限界を超える太陽電池の新機構を提案する。また、人工光合成系に対しては、多核金属錯体や半導体光触媒での水素

発生機構の解明と設計の指針を与える。触媒自体の電子状態に加えて、それを制御する周辺環境との相関が最も重要となる。このため、上述したように太陽電池シミュレータならびに人工光合成シミュレータの開発を行うことが強く求められており、これらに基づいて、実験研究者、企業研究者と連携して新しい原理に基づく太陽電池、光触媒の開発に繋がることが期待できる。

太陽電池シミュレータでは、数千～1万原子規模の電子供与体・受容体の界面での電荷分離状態のシミュレーションを行うための計算手法が開発されている。太陽電池の変換効率を決める支配的な因子は、有機電子供与体・有機電子受容体の相互作用と光誘起による電子の振る舞いに強く依存する。太陽電池シミュレータを用いることで、この因子を飛躍的に増加させる有機物材料の設計指針が明らかになる。更に、ペロブスカイト太陽電池の光電荷移動機構やキャリア機構の解明に向けた研究も行われる。

光合成シミュレータでは、複雑なスピニ状態を伴う多核金属錯体のような強相関電子系の正確な取り扱いを可能にする計算手法の開発が行われている。大規模な量子力学系を取り扱う新規の理論と数値解法を発展させ、光合成の機構解明をポスト「京」で始めて可能とする。基礎となる天然光合成系については各素反応の酸化状態での水分解サイトの構造決定を行うことで、反応機構の解明が見込まれる。半導体光触媒については、大規模な量子化学計算によるバンドギャップと水の酸化還元準位とのエネルギー・バンド位置の最適化が行われる。更に、上述の光合成シミュレータを用い、新規光触媒設計と助触媒の最適化の応用研究が行われることになっている。

現状の「京」においては、1,000 原子程度の光を吸収した分子の量子化学計算が実現されているが、有機太陽電池の開発に実用的な界面のシミュレーションには 10,000 原子規模の取扱いが不可欠である。この計算を終えるには現状の「京」ですら非常に多くの時間を要するため、ポスト「京」による材料設計における短時間での予測が重要である。全系の複合現象の解明は、新エネルギー創成の出発点となるものであり、今後 20 年の研究の方向性を決定するなど、我が国の産業・経済への大きな波及効果が期待される。

(ii) エネルギーの変換・貯蔵 — 電気エネルギー

電気化学エネルギー技術の課題では、二次電池と燃料電池共に、低コスト化、高信頼性、高耐久性、ありふれた元素利用の電池開発が重要であり、特に高エネルギー密度、高出力密度、高速充放電を実現することが求められている。これらの課題解決のために計算科学に求められていることは、一つは各種電池共通課題として、電極反応、電極被膜生成、イオン輸送に関わる「電極 / 電極被膜・電解質膜 / 電解液」界面挙動の解明である。もう一つは、個別な電池部材の最適材料設計、材料探索である。

計算科学的課題としては、第一原理電子状態計算に基づく電極反応の計算と分子動力学法に基づく電解質・陰陽極分離部位の計算を統合させ、個々の部材の性能に加えて、二次電池の充放電曲線や燃料電池の電流電圧の相関を予測し、信頼性の向上に貢献できる手法を確立する。実際の開発研究においては高分子電解質膜と電解液からなる系が触媒層に圧着されている数億原子からなる現実系に対する計算が必要となる。この計算は現状の「京」では数年かかり実質的に研究不可能である。ポスト「京」においては、新規アルゴリズム開発も含めて、2 ミリ秒から 20 ミリ秒の分子動力学計算の実現を目指しており、その場合 1 週間以下で計算を終了できると見込まれる。このため、電極反応、電極被膜、電極界面の研究を迅速に進めることができる。

また電解質膜、セパレータ、電極被膜と電解液との界面を研究する全電池プロセスシミュレータの開発が不可欠となっており、電極界面の電気的性質などの計算結果のデータを統合して、電流電圧の相関を再

現できることが期待されている。

これら計算科学の課題を解決し、その上で「ImPACT」[3]、「元素戦略」[4]、「JST-ALCA」[5]など大規模国家プロジェクト等において実験研究者、企業研究者と連携し、自動車産業で日本が優位に立ち得る高性能燃料電池・二次電池の開発へと繋げるとともに、将来の電池開発を加速化し、大きな変革をもたらすことが可能になる。たとえば、低コスト高性能電気自動車や燃料電池車は、自動車メーカーが激烈な国際競争の下に開発を進めており、この分野で市場を制することは我が国に計り知れない利益をもたらす。更に、自動車産業、化学産業、電機産業等に極めて大きな波及効果をもたらすことが期待される。

(iii) エネルギー・資源の有効利用 — 化学エネルギー

化学エネルギー技術の課題は、メタンハイドレートからのメタンの効率的な採集技術の確立、「元素戦略」に立脚した安価で入手可能な元素に基づく高性能触媒の開発、CO₂の低成本分離・回収、貯蔵、資源化である。

計算科学的課題としては、エネルギー資源として大量に存在するメタンハイドレートの効率的採取法の開発を目指し、大規模長時間分子動力学シミュレーションを実施して、メソスケールでの解離の機構解明、解離の律速過程の探索を行い、効率的な融解法への指針を得ることが求められている。具体的には、ハイドレート分解の律速過程の解明と除去法の提案、メタン/CO₂の高効率変換の可能性の検証であり、CO₂還元を実現する高機能触媒の提案、低成本でCO₂回収を実現する吸収剤の設計、またイオン液体や金属-有機構造体など新規吸収媒体の提案である。これには、多相共存シミュレータ、触媒反応経路探索シミュレータ、凝縮相内化学反応シミュレータの開発を要し、これらを用いた大規模計算に基づいて上述の課題解決に向けた提案、設計・開発指針の提示を行い、メタンハイドレートの資源化、CO₂の低成本分離・回収、廃棄、資源化を分子技術、元素戦略の実験研究者とともに実現することが期待される。このような技術は単にエネルギー問題に限られることなく広く応用され、我が国の産業の革新的発展に大きく貢献することが期待されるが、同時に基礎科学分野においても大きなブレークスルーをもたらすものである。

まとめ

これらの課題解決により、孤立系や部分系における单一現象の科学から脱却し、現実系である界面、不均一性を有する電子、分子の複合現象を統合的に捉え得る新しい学術的視点を確立することができ、科学的にも大きな革新をもたらすことが期待される。重点課題5において開発された高精度量子化学計算、大規模第一原理計算、超大規模分子動力学計算などの方法論、アプリケーションは化学、物理、材料、生物分野等に適用できるものであり、エネルギー問題に限ることなく、広く他分野での展開も期待される。

2.3.4 ロードマップ

課題	年代	2016～	2018～	2020～	2022～	2024～	2026～
大規模分子系の励起状態計算		千原子分子規模の時間依存密度汎関数法			1万原子規模	数万原子規模	
大規模分子系の基底状態計算		数千原子分子系規模の密度汎関数法計算			1万原子規模	2万原子規模	
強相関電子状態に対する第一原理計算		有限系への応用研究		新エネルギー材料の実証研究	固体系への応用研究		
高精度電子相関計算		ナノサイズ系高精度計算	高精度計算による新規光機能性材料の構造・物性予測				
界面・表面の分子動力学計算		1千万原子系の古典分子動力学 10nmサイズの気相・固相界面	1億原子規模 数十nmサイズ		10億原子規模 100nmサイズの気液界面		

図 2.3 エネルギー・資源ロードマップ

2.3.5 必要な計算機資源

2026 年頃における課題解決のために必要な計算機資源を代表的な 5 つのアプリケーションについて、2 章末尾の表 2.1 に記載した。また、その他のアプリケーションも含め、計算機資源の見積りの詳細は第 4.3 節に記載しているので併せて参照されたい。

参考文献

- [1] 日本のエネルギーのいま：抱える課題. http://www.meti.go.jp/policy/energy_environment/energy_policy/energy2014/kadai/.
- [2] ポスト「京」重点課題 5. <http://ft-energy.ims.ac.jp/ft-energy/>.
- [3] ImPACT. <http://www.jst.go.jp/impact/>.
- [4] 元素戦略を基軸とする物質・材料の革新的機能の創出. <http://www.element.jst.go.jp/>.
- [5] ALCA. <http://www.jst.go.jp/alca/>.

2.4 生命科学

2.4.1 分野の概要

本章では、生命科学に関する計算科学分野のうち、主に生体分子シミュレーションと、ゲノム解析・遺伝子ネットワーク解析に焦点を当てる。量子化学計算を含む創薬関連分子シミュレーション、脳科学、および細胞臓器レベルのシミュレーションについては 2.5 および 2.8 を参照してほしい。

生体分子シミュレーション

生体分子シミュレーションは、主に分子動力学（Molecular Dynamics (MD)）法を用い生体分子の挙動を分子レベルでシミュレートする。対象はペプチドや蛋白質などの小分子から、ウイルスなどの超分子まで多岐にわたる。生体分子のダイナミクスの時間スケールはナノ秒からミリ秒まで幅広いため、注目する現象に合わせて解像度（粒度）を選択する必要がある。生体分子シミュレーションは計算機演算能力の向上とともに、実験では解明できない生体分子の反応機構を分子レベルで解明したり新薬の設計を支援したりするための重要な手法となっている。

世界的には、全原子モデル（2.4.3 を参照）を用いた MD シミュレーション（全原子 MD）が広く普及しており、生体分子の長時間（ミリ秒程度）のダイナミクスを再現するシミュレーションと、巨大分子複合体や複数の生体分子を含む大規模系（1 億原子程度）のシミュレーションの二つの潮流がある。長時間ダイナミクスについては、GPU や MD 専用計算機の発展が牽引している。日本においては MD 専用計算機「MDGRAPE」の開発が継続しており、MDGRAPE-3 が 2006 年に世界で初めて 1 PF/s の演算性能を達成した（現在後継機の開発が進められている）。また、米国では 2008 年に専用計算機 ANTON が開発され、全原子モデルを用いた蛋白質のダイナミクスをミリ秒規模で再現するなど、この分野に大きな飛躍をもたらした。これらの専用計算機は主に数十万原子程度の系に限定されるため、1 千万～1 億原子の大規模系 MD シミュレーションは京クラスのスーパーコンピュータを用いて実行されている。またこのような時空間の大規模化に加えて、より幅広い構造空間を効率よく探索（サンプリング）したり反応座標に沿った自由エネルギープロファイルを得るための様々なアルゴリズムの開発が進められている。このような計算は処理や通信が複雑になるため、ANTON 等の専用機では実装が難しく、高速な汎用機が必要となる。

ゲノム解析・遺伝子ネットワーク解析

ゲノム解析や遺伝子ネットワーク解析は、次世代 DNA シーケンサやマイクロアレイなどの実験的データ（ビッグデータ）が大量に得られるようになったことで大きく発展した生命情報科学（バイオインフォマティクス）分野である。ゲノム解析は、次世代 DNA シーケンサから得られる大量の断片的配列データを全長配列データに変換したり、遺伝的な多様性や変異を求めたり、さらに疾病に関係する遺伝的な多様性や変異を同定したりする。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。遺伝子発現データは、計測に用いるマイクロアレイや次世代シークエンサーの試薬のコストが下がり、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。さらに「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ている。このような大規模な網羅的解析によって得られる情報は、病態の予測や、個人の体質に合わせた薬剤の選択などへの活用が期待されている。

他分野との連携

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、その他にも、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。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）による生体資料の散乱データや、クライオ電子顕微鏡から得られる大量の画像などが重要な情報源となるであろう。これらのビッグデータからの三次元イメージングや時間軸も含めた4次元イメージングは、非常に計算負荷が高く、計算科学分野との連携が不可欠である。またこれらの画像処理によって得られる生体分子の三次元構造は解像度が不足している場合もあり、MDと連携した構造精密化も活発化していくと思われる。

2.4.2 長期目標と社会貢献

長期目標

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。下記では、主にMDシミュレーション、ゲノム解析、遺伝子ネットワーク解析における長期的展望と目標について記述する。

(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、溶液中で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。更に大きなリボゾームやウイルス、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や、自由エネルギー計算

を目的として、バイアスボテンシャルを利用する計算法など、今後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。

一方粗視化MDは、一つには全原子モデルからの高精度の導出法や全原子分子と粗視化分子のシムレスな接続が課題であり、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。もう一つの課題は、主に水分子とイオンで構成される媒質の粗視化である。水分子を介した流体力学的相互作用やイオンなどによる静電相互作用の遮蔽効果をいかに精度よく近似するかが今後の課題となる。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、ウイルス動態などの解明が重要な課題となる。

(ii) ゲノム解析・バイオインフォマティクス

次世代DNAシークエンサーによるゲノム解析については、より大規模な検体数の解析によるマッピング、遺伝的多様性や変異の同定が目標となるであろう。一方で、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。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、2012年時点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た。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2.4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200万サンプルが登録されており、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。しかし、現状では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200万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以降に想定されるサンプル数を仮定すると、2013年頃に行われていた計算（256サンプル、512ネットワークの解析）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。

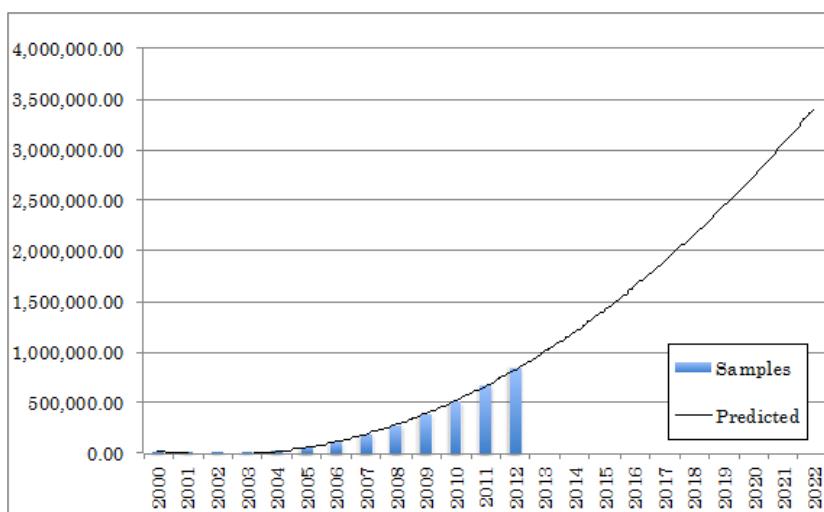


図 2.4 NCBI GEO に登録されているアレイ数と今後の予測

社会的貢献 —健康で長寿な社会を目指して—

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（プレシジョン医療）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、さらにはがん種横断的な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。

一方で、生体分子シミュレーションは、すでに新薬の設計やスクリーニングに広く用いられている。今後の HPC 分野においては、膨大な化合物対標的蛋白質の網羅的相互作用解析（2.5、4.5 で述べる）に加えて、複数の蛋白質や化合物を同時にシミュレートする方法も創薬分野への貢献が期待できる。例えば細胞質を模した大規模シミュレーションでは、薬剤が実際に働く場である細胞中の分子混雑環境や競合的相互作用の影響が考慮されている。このような多対多の大規模シミュレーションを通じて、好ましくない副作用や、未知の相互作用を予測するための基盤技術を整備する事も大きな社会貢献として目標にすべきことである。

2.4.3 課題とその解決に必要な計算手法・アプリケーション

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）と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）については、2.5を参照してほしい。各シミュレーション法で方法論に小さな差異はあるが、経験的な分子間相互作用パラメータ（一般的に力場と呼ばれる。）を用いて、原子間（または粗視化粒子間）に働く力を計算し、運動方程式を数値積分することで系の時間発展を得る点は共通している。

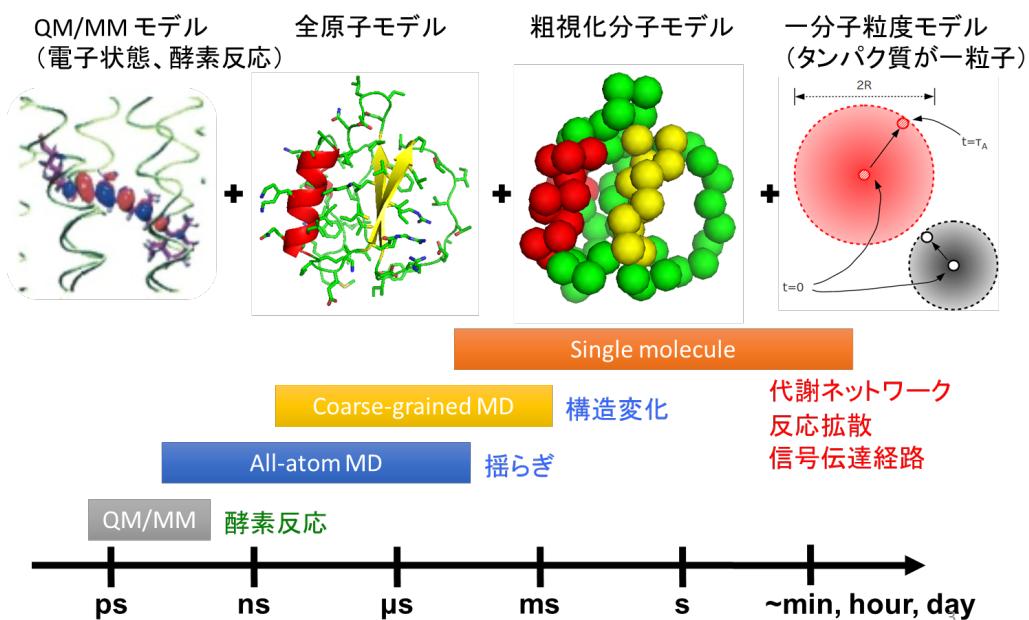


図 2.5 分子シミュレーションの異なるモデルと対象とする生命現象・時間スケール

(i) 全原子分子動力学法

全原子分子動力学法の代表的なアプリケーションは、既に世界的に普及しているものが多くある。代表的なものに、AMBER (米)・CHARMM (米)・DESMOND (米)・GROMACS (蘭)・LAMMPS (米)・NAMD (米)・TINKER (米)、国内では MARBLE・MODYLAS [1]・GENESIS [2] などがあり、非常に多岐にわたる。その中でも日本発の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。また GENESIS では長距離相互作用計算に用いる FFT の高並列化に成功しており、1 億原子からなる細胞質のシミュレーションに成功している。

(ii) 粗視化分子動力学法

粗視化分子動力学法では、全原子シミュレーションでは再現することが難しいような大規模な構造変化を計算することができる。代表的なものは Marrink らが開発する MARTINI 力場（およびそれを用いたシミュレーションプログラム群など）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。日本では CafeMol [3] が開発され、タンパク質や核酸の構造変化の研究に広く用いられている。粗視化モデルではアミノ酸 1 残基を 1~2 個程度の粒子で近似する場合が多く、全原子モデルに比べて粒子数が 10 分の 1 程度に減り、水分子もあらわに扱わないので粒子数が少數ですむ。結果として、計算量をかなり減らすことができるのであるが、これは並列性能を出しにくいということにも繋がっている。粗視化された粒子間に働く相互作用はさまざまなものがあり、相互作用毎に異なるチューニングが必要になってくる。

(iii) 一分子粒度モデル

細胞スケールのシミュレーションの多くは、細胞内の分子が均一に分布していおることを仮定し、細胞内で起きる化学反応を化学マスター方程式（分子が衝突し、反応を起こす確率が均一であるとする）などで記述している。一方で、分子 1 つ 1 つの運動を考慮した細胞スケールシミュレータの開発も進められている。日本においては Spatiocyte [4] が代表的なアプリケーションとして使用されている。Spatiocyt e は、蛋白質などの生体高分子を一つの粒子で記述（1 分子粒度モデル）し、格子状に離散化された空間の中でモンテカルロ法によって運動を計算する。分子同士の反応は、Collins-Kimball 法および Gillespie 法に基づいて計算される。Spatiocyt e はスパコン京などに向け、高並列化されたバージョン（pSpatiocyt e）が開発され、HPCI 戦略プログラムのもと、細胞内シグナル伝達やリン酸化反応に及ぼす細胞環境の影響などが調査されている。細胞環境（特に分子混雑）の影響は全原子 MD 計算によっても活発に調査されており、近い将来に原子粒度の生体分子シミュレーションと pSpatiocyt e などの細胞シミュレータが連携し、分子から細胞スケールまでの時空間階層を接続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が実現する可能性が高いことを示唆している。1 分子粒度モデル計算のアルゴリズムの詳細や、今後の課題、および要求性能などは、平成 26 年度版計算科学ロードマップを参照してほしい。

(iv) ゲノム解析

次世代シーケンサから得られる大量の断片的配列データ（リード）の解析には、リードの標準 DNA 配列（リファレンス）に対する位置同定（マッピング）、ソート、PCR 増幅による重複リードの除去等の工程による配列情報再構成工程と、得られたデータから対象とする遺伝的多様性や遺伝子配列の変化（点変異、挿入・欠失、コピー数変化、遺伝子融合、構造変異）に焦点を合わせた候補部位抽出と統計的判定（シーケンス読み取りエラー等の偽陽性除去）が必要である。このような解析を大規模計算機を用いて高並列化したアプリケーションの代表的なものとして NGSanalyzer [5] がある。次世代シーケンサーにより得られたリード配列をリファレンスとなるゲノム配列に対して“貼りつけ”（マッピング）るには、Burrows-Wheeler Transform (BWT) アルゴリズムが用いられる。

(v) 遺伝子ネットワーク解析

DNAチップや次世代シークエンサーなどで得られる遺伝子発現データやタンパク発現データ、miRNAを含むnoncoding RNA発現データなどを用いて遺伝子間の関係（転写因子—被制御遺伝子の相互作用など）を明らかにする事を遺伝子ネットワーク解析という。遺伝子ネットワーク解析では、薬剤や外的刺激を与えた後の遺伝子転写量の時系列データ（例：マイクロアレイデータを数時間おきに取る）などから遺伝子発現の因果関係（遺伝子間の相互作用）を明らかにし、遺伝子ネットワークを推定する。SiGN [6]は「次世代生命体統合シミュレーションの研究開発」プロジェクトで研究開発されたソフトウェアの1つで京コンピュータの演算能力を最大限活用できるよう開発された。SiGNはネットワーク推定のアルゴリズムによって3つのモデル（SiGN-SSM：状態空間モデルを用いる、SiGN-BN：ベイジアンネットワークを用いて予測する、SiGN-L1：静的データから依存関係をL1正則化を用いて予測する）が存在する。

2.4.4 ロードマップ

ここでは、主に生体分子シミュレーション、遺伝子ネットワーク解析、ゲノム解析について2026年までのロードマップを表にした。

課題	年代	2016～	2018～	2020～	2022～	2024～	2026～
生体分子シミュレーション		全原子モデルによる、ウイルスなどの生体超分子複合体や細胞混雑環境などの大規模系のダイナミクス		全原子や粗視化モデルによる、細胞膜や核、細胞小器官を含めた細胞スケールのダイナミクス			
遺伝子ネットワーク解析		256サンプル512ネットワークの解析と比較して 40倍規模の解析		100倍規模の解析			
ガンゲノム解析		第3世代シークエンサーによる解析		第四世代シークエンサー(200,000人規模)による解析			

図2.6 生命科学系シミュレーションのロードマップ

2.4.5 必要な計算機資源

本分野は構成要素が非常に多いため、ここでは大まかな要求計算機資源を表にまとめた。要求資源の根拠や詳細については4.4を参照してほしい。

1. 巨大分子系の分子動力学計算については、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日程度で完了することを目標にした。（詳細な見積もりは、4.4を参照）。

2. 個人ゲノム解読を行う次世代シーケンサー解析については、2020年以降に行われると思われる200,000人規模の解析を想定した。
3. 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、そのデータ量を想定して解析を行う場合を想定した。
4. XFELの散乱データからのイメージングについては、 $10^7 \times 10^5$ イメージから構造の分類、時間軸の推定などを行い4次元イメージング（立体構造の時間変化）を実現する事を想定とした。

課題	要求性能 (PFLOPS)	要求メモリ帯幅 (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 (h)	ケース数	総演算量 (EFLOP)	概要と計算手法	問題規模	備考
巨大分子系の全原子MDシミュレーション	490	49	0.2	1.2	48	10	850000	全原子モデルによる古典分子動力学計算 空間分割による並列化 all_to_all通信	1500個ほどの蛋白質や核酸を含む細胞質(総原子数:1億)の1μ秒のダイナミクス、蛋白質の配置や種類を変えて10ケース程試行した場合。	B/F = 0.1
大規模個人ゲノム解析	0.0054	0.0001	5	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推定	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・拡張をまたいた実行も可能。整数演算中心のため、総演算量はInstruction数でした。浮動小数点演算は45.864EFLOPとなる。
大規模遺伝子ネットワーク解析	2.5	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	
XFELからの散乱データ解析による4次元イメージング	2	0	0.000001	0.000001	2.8E-11	1E+12	200	構造分類、三次元構造構築、時間軸推定のための統計処理	107×105 イメージの相関計算で合計1012回の相関計算。1回の相関計算を1ケースとした。1イメージあたりのサイズは数百MB	通信・ファイルIOは引き続き精査必要、特にファイルI/Oがボトルネックになる可能性あり。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。

図 2.7 生命科学系シミュレーション要求性能

参考文献

- [1] MODYLAS. <http://www.modylas.org/>.
- [2] GENESIS. <http://www.aics.riken.jp/labs/cbrt/>.
- [3] CafeMol. <http://www.cafemol.org/>.
- [4] Spatiocyte. <http://spatiocyte.org/>.
- [5] NGSanalyzer. <http://www.cspr.riken.jp/islim/ngsanalyzer-j.html>.
- [6] SiGN. http://sign.hgc.jp/index_ja.html.

2.5 創薬・医療

2.5.1 分野の概要

—健康で長寿な社会を目指して—

日本はこれから急速に更なる高齢化社会を迎え、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。

画期的創薬・医療技術の創出には、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続々と応用され、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。

創薬分野コミュニティからの意見として、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 SACLAC（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）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。

医療分野コミュニティからは、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、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、2016年10月26日情報計算化学生物学会2016年大会パネルディス
カッション「生体分子シミュレーション実用化への道」等にて)

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。

2.5.2 長期目標と社会貢献

2.4で述べられ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ってくると、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、より複雑なターゲットへの創薬が望まれており、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。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（結合）したミセル（界面活性剤の集合
体）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（皮膚などに傷をつけない治療法）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。

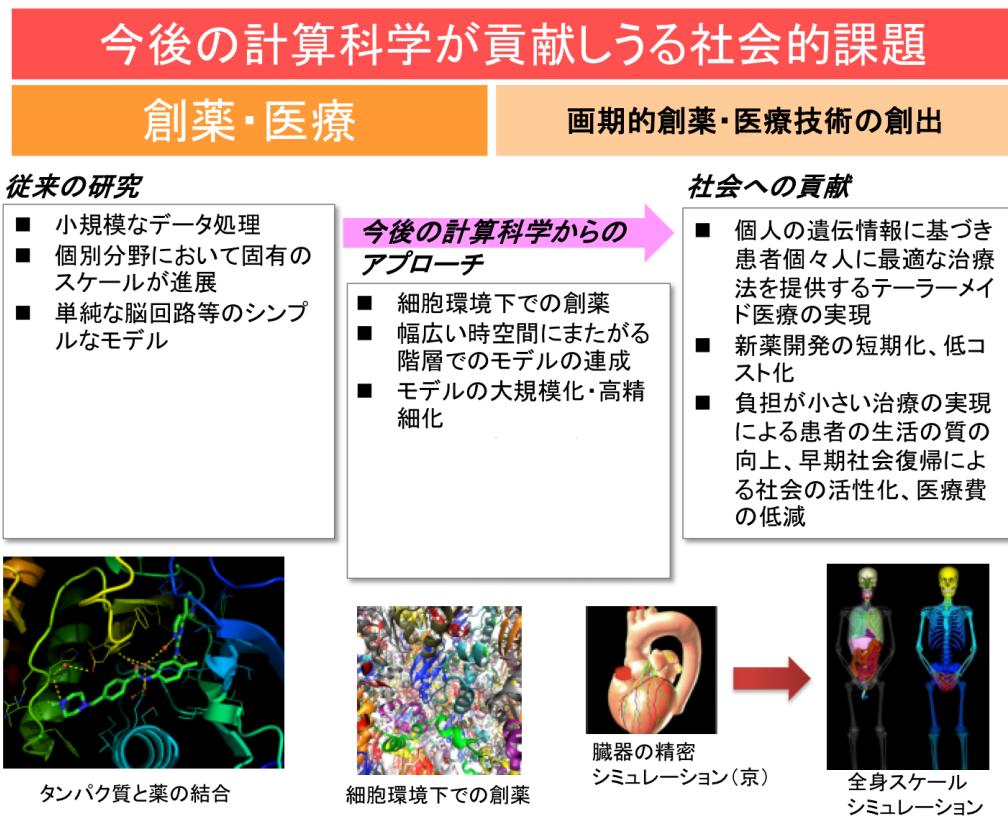


図 2.8 創薬・医療

2.5.3 課題とその解決に必要な計算手法・アプリケーション

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。

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たとした。(MP-CAFE 法)

SBDD (structure based drug design) での結合計算の予測信頼性を上げるため、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 (FMO) 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。FMO 法は、分割をつなげてタンパク質全体を計算する 法であり、分割の考え方は並列化に向い

たアルゴリズムである。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、バイオデバイスの開発促進に寄与できる。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、4.5 節を参照いただきたい。脂質膜や膜タンパク質の複合系の粗視化シミュレーションを FMO 計算に基づいて算定されたセグメント間の有効相互作用パラメータを用いて行うとした場合、パラメータの系統的な算定とリファインにも多サンプルの同時処理が有効である。上記のリガンド-タンパク質の場合と違って 1 つの構造あたりの計算量は少ない（数百分の 1）が、サンプル数はセグメント対あたりで数千となり、対の数は対象系の構成セグメントのタイプ数によって組み合わせ的に増加する。従って、トータルでの超並列資源の要求として（リガンド-タンパク質系と）同程度になると思われる。

医療応用の血流シミュレーションでは、連続体力学のステンシル計算と合わせて、必要に応じて反応方程式を用いられている。詳しくは 4.5 節を参照いただきたいが、血栓生成メカニズムを取り扱うには、長さ 100 mm、径 100 μm の血管中を流れる血球の変形挙動を取り扱い、0.1 μm 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、1 EFLOPS 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、現象の理解を促進する目的として、10 PFLOPS 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観点もある。また、波動方程式やエネルギー方程式を FTDT で取り扱う超音波シミュレーションでは、頭部が表現できる 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 4.5 節を参照いただきたい）。

2.5.4 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 膵ラ氏島や血小板による血栓形成 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	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) 細胞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	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) 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	Drug Delivery System (DDS)において超音波制御を用いる		

図 2.9 創薬・医療ロードマップ

2.5.5 必要な計算機資源

2026年頃における課題解決のために必要な計算機資源を、代表的アプリケーションについて、2章末尾の表2.1に記載した。また、計算機資源の見積りの詳細は第4.5節に記載している。

2.6 設計・製造

2.6.1 分野の概要

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数値シミュレーションに基づく革新的設計・製造技術やそれを駆使した新たなる発想が必要である。そのため熱流体分野を始め、ものづくりの基本となる構造・騒音・振動解析、自動車などで重要な衝突解析、大規模プラントや建物・橋梁や高速道路などの耐震解析、更に生産過程、例えば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の設計・製造シーンでの数値シミュレーション技術の導入、すなわち CAE (Computer Aided Engineering) の普及が進んでいる。数値シミュレーションを設計・製造に適用することで、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、数値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。

この様に、ものづくり分野で重要性が増している数値シミュレーション技術ではあるが、これを実現するアプリケーションプログラムは、産業界が利用する場合、航空分野など一部の分野を除いて主に商用アプリケーションが用いられている。これらの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 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、熱流体解析では STAR-CCM や Ansys Fluent、燃焼計算では CHEMKIN、構造解析では NASTRAN、ABAQUS や LS-Dyna など欧米発の商用ソフトウェアが標準ソフトウェアとして広く使われている。

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商用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おらず、これが逆に、産業界でのさらなる数値シミュレーション技術の導入を阻害している。また、ものづくりの設計・製造現場においては、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可視化など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

テイ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]。以下、各分野を概観する。

熱流体分野

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り、乱流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。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 LES (Large Eddy Simulation) 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。

構造分野

FEM (Finite Element Method) 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。

機械材料分野

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いる [2]。

核融合分野

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。核融合炉開発に関連する数値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する。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など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。ペタスケール計算機の登場や数値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。

電磁界分野

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してきた。計算機技術の進歩による大規模並列解析が実現し、並列度にほぼ比例して計算速度が向上する FDTD (Finite Difference Time Domain) 法を採用した電磁界解析システムの有効性が明確になってきた。そのため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 [3]。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。さらに、LSI 電流が高速にスイッチングすることにともな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。

可視化・データ分析

ものづくりにおいて数値シミュレーション結果を如何に設計・製造に役立てるかは非常に重要である。計算結果を可視化・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、設計・製造に利用可能な情報となって初めて数値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、ものづくり分野のスーパーコンピューティングを支える重要な基盤技術として位置づけられる。

2.6.2 長期目標と社会貢献

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数十 GFLOPS のオーダーであり、コア数は数百万程度に達している。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数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、2025 年頃には、数十万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、その有効性が実証されているものと推定される。

ものづくり分野において、特に大規模数値シミュレーションは物理現象の解明のみならず、多数の設計評価を行うことに価値がある。この分野で扱う物理現象は、マルチスケール、マルチフィジックスを考慮する必要があり、対象とする物理現象を解明するためには第一原理的な高精度解析が必要となり、おのず

と大規模解析が必要となる。一方、設計・製造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。そのためには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・製造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。

熱流体分野

計算機性能の長足の進歩や数値解析手法の進展により、微細な渦の運動まで準第一原理的に計算する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。今後の計算機の発達や計算手法の進歩により順次企業の研究開発の現場や設計・製造の現場で実用化されるものと期待されている。機械工学分野の多くの製品に関しては、現状、研究レベルでは準第一原理的な数値シミュレーションが実現されるているが、機械工学以外、例えば、航空宇宙や船舶などでは流れのレイノルズ数が総じて大きいため、さらに大規模な計算が必要となる。また、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も、更なる計算規模が必要となる。

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る。高圧燃焼では火炎の厚さは乱流スケールに比べても数倍から数十倍薄くなる場合がある。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り、当面はモデル（例えば、火炎を局所的に層流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なる。フレームレットモデル等の乱流燃焼モデルを用いることにより、実機実圧（25気圧程度まで）の燃焼器を丸ごと解析することが可能となり、燃焼器の設計や最適操舵条件選定の際の有用なツールとしての利用への期待が高まっている。今後は、数百気圧程度のより高い圧力を伴う超臨界燃焼流や、石炭の残存溶融灰までも模擬しうる固気液3相流への適用性拡張、および燃焼器壁面の境界条件をも予測可能とする構造連成シミュレーションの実現が望まれる。

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、今後は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。

構造分野

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し、その中で、スーパーコンピュータでの解析から部門サーバ、ワークステーションでの解析へといわゆる下方展開が実現してきた。また、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連成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、医療やバイオメカニクス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。

機械材料分野

ボトムアップアプローチでは、今後開発するトップランクのスペコンを用いれば固体すべてを原子レベルで取り扱うとき、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、5~10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。一方、トップダウンアプローチとしては、結晶粒レベルの欠陥が顕在化する解像度、すなわち、 $10\mu\text{m}$ の要素サイズで、実部品全体を有限要素分割することがマイルストーンとなる。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れば、新種材料の実用化に対する多大な貢献が期待できる。すなわち、これまでの強度評価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 $6\mu\text{m}$ 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。こ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、原子レベルのシミュレーションを連結することで、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。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、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。

核融合分野

核融合エネルギー開発においては、日米欧露中韓印、7極の国際協力の下に建設が進められている次世代核融合実験炉ITERが重要なマイルストーンとなっている。2025年に予定されている運転開始に向

て、今後10年程度の間は、既存実験データに対する実証研究によって基礎的な物理モデルの確度を高めつつ、ITERの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、長期的にはITERに対する実証研究によって核燃焼プラズマ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が提案されているが、そこで鍵を握る技術の一つが核燃焼プラズマ炉心の設計である。ITERの炉心熱出力が約400MWとなるのに対して、原型炉では軽水炉と同程度の炉心熱出力となる約3GWを想定しているため、炉心設計を行うには第一原理計算に基づく予測性能の高いシミュレーションが必須となる。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。

電磁界分野

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差分法の一種である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核に技術開発を推進すべきである。解析規模を拡大す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。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。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 μm 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} 秒オーダーとなるため、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なれないため、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。

可視化・データ分析

現状の可視化・データ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、今後の大規模データに対してはデータ量の巨大さから新たな手法が必要となる。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ウェアの機能を活かせる新しい可視化・データ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。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 可視化や可視化とデータ分析を統合した 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、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。今後必要となる可視化とデータ分析には、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。

2.6.3 課題とその解決に必要な計算手法・アプリケーション

単にアプリケーションプログラムだけあっても、製品設計・製造に活かすことはできない。超大規模な数値シミュレーションをものづくりの設計・製造に活かすためには、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、格子点数は数十兆点規模になると予想されるが、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。

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。複雑な物理現象、例えば流体であれば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、これらの物理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。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となる。

熱流体分野

一般的に熱流体分野のアプリケーションプログラムは高い B/F 値が要求される。プログラム側での工夫も必要となるが、できるだけ高 B/F 値を有するシステムが望ましい。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）によって解析規模が変化し、必要となるメモリ量が変化し、Capability Computingの方がより多くのメモリを必要とする。必要なメモリ量を削減するためには、同じ格子テンスでより高精度に解析が可能な高次精度解析手法の開発が必要となる。また、解析に必要となる計算格子の自動生成は長年の課題であるが、近年直交格子をベースにした取り組みが行われている。

構造分野

産業界の広い分野においてさまざまな解析が行われているが、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、微小な有限要素である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、圧力容器や少數の配管群など、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。

機械材料分野

ボトムアップアプローチとしては超並列による大規模分子動力学アルゴリズムの開発が必要となる。その際に並列化効率が著しく落ちないよう、加速分子動力学法を組み込むことなども必要である。原子間ポテンシャル作成技術の向上も課題であり、特に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指数的に増加するため、広大なパラメータ空間の中で最適値探索を行う作業を並列プロセッサに割り振るときの並列化技術、あるいは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などが必要である。

トップダウンアプローチとしては、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の開発が課題である。共役勾配法に代表される反復解法が多用されてはいるが、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は有効性が未知であり、新たな手法の開発が望まれる。材料強度評価に関わる数値シミュレーションでは、局所的に進行する非線形性の高い破壊現象を的確にハンドリングする必要がある。破壊の進行にともない、剛性が著しく低下し、連立方程式が悪条件となる状態も頻出するので、誤差に対するロバスト性も検討課題となる。

核融合分野

核燃焼プラズマ炉心設計という課題解決に向けて、核燃焼プラズマにおける物理モデルの拡張はもちろんのこと、strong scalingを飛躍的に向上して、処理速度を10～100倍加速するエクサスケール計算技術の開発が重要となる。これにより、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 の高精度計算を実験解析や炉設計等の Capacity computing に展開し、ITER計画や原型炉開発を加速することが可能になると期待される。また、計算速度の向上にともない、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、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。

可視化・データ分析分野

さまざまな要素技術が必要である。このため、一概には言えないが、基本的な特徴として、以下の項目が必要となる。

- 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必要。
- 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が必要。
- 並列レンダリング技術、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の必要がある。
- 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が必要。

2.6.4 ロードマップ

課題	年代	2016～	2018～	2020～	2022～	2024～	2026～
熱流体分野		100億～1,000億格子規模のLES解析(自動車、ターボ機械、燃焼器など)		1兆～10兆格子規模のLES解析(航空宇宙、高圧ターボ機械など)			
構造分野		まるごと解析		熱・流体効果の取込みによるまるごと詳細解析			
機械材料分野		~2 μm 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子間相互作用など)		~4 μm 規模の原子系の計算(高速衝撃下におけるミクロンサイズ結晶の変形など)			
		~20nm 規模の原子系の計算(バルクナノ多結晶セルの低ひずみ速度での粒界破壊)		~40nm 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大変形・塑性解析)			
		~200 μm 規模の解析(き裂モデルでの腐食割れ等)		~400 μm 規模の解析(少数の結晶粒間における粒界腐食割れ等)			
		500 μm レベルの解像度で欠陥をモデル化した強度評価		250 μm レベルの解像度で欠陥をモデル化した強度評価			
核融合分野		核燃焼のない超高温プラズマ実験(100m ³)の解析		ITERの解析(~800m ³ 、実験最適化などを含む)			
可視化 データ分析		Interactive可視化		In-situ可視化		エキスパートシステム/統合可視化	

図 2.10 設計・製造ロードマップ

2.6.5 必要な計算機資源

2026年頃における課題解決のために必要な計算機資源の見積りを行い、代表的アプリケーションについて、2章末尾の表2.1に記載した。また、計算機資源の見積りの詳細は第4.6節に記載している。

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, pp. 28–33, 2010.
- [2] Z. X. Guo, editor. *Multiscale materials modelling: Fundamentals and applications*. CRC press, 2007.
- [3] 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, 2011.

2.7 社会科学

2.7.1 分野の概要

社会科学・社会工学分野では古くからコンピュータが活用されてきた。19世紀末に現れたセンサデータの取得・分析のためのパンチカードシステムが今日のコンピュータのルーツの1つであることはよく知られており、その後もコンピュータは通信技術の発達と相俟って、今日に続く「ビッグデータ科学」に基づく社会科学を先導し続けている。他にも経済政策の立案・遂行、金融取引、交通管制、経営、会計などで古くから活用されており、選挙運動や戦争でもコンピュータシミュレーションは不可欠なものであった。そして現代にいたっては社会生活のすみずみまでコンピュータが使われている。さらに今後、コンピュータシミュレーションにより社会現象をより精緻に予測し制御することに対して人々の期待が大きい反面、不安と戸惑いも見過ごすことはできない。本節では、社会科学分野でのコンピュータシミュレーション、特にスーパーコンピュータの成長を想定したシミュレーションを中心に展望する。

社会現象を記述する社会科学的モデルは、自然現象とは異なり、記述する側とされる側との同一性が高い。そして、個々の構成要素である人や集団自身がおのれの行動を決定することができる。自然現象の構成要素、例えば原子・分子や流体の運動・ふるまいは一定の法則に従っており変化することはないことは対照的である。このため社会科学的モデルは、このような行動の元でどのような社会になるかという自然科学的モデルと同様のベクトルのみならず、望む社会にするために個々がどのように行動すべきかという逆のベクトルも有する。このことは、モデル構築の上で普遍的に信頼できる原理、いわゆる第一原理の欠如を意味するかもしれない。しかし現在の社会は、個々人の気まぐれでは基本的には大変動はしない。社会全体のふるまいを個々が予測し、個々の行動を修正した結果、個々の行動の変化も織り込まれた（くりこまれた）社会となっていると考えることもできる。そこで現実の現象を再現するもっとも簡潔なモデルをつくり、これに基づいてシミュレートしするという物理科学の手法を使うことが期待される。

こうした研究は社会物理学と呼ばれ、19世紀前半に始まる分野であるが、特に近年のコンピュータの成長に伴って発展が著しい。1980年代以降は人流・自動車交通流の、90年代以降は経済の、そして2000年代以降、社会関係の物理科学的研究が進んでいる。この3分野こそは現在、社会シミュレーション研究の柱である。こうした研究の結果、種々の社会現象の普遍性・個別性についての分類が深まり、合わせて社会を構成する個々の要素から普遍性・個別性を再現する統計物理学的エージェントモデルの開発が進められている。しかしながら、社会現象は典型的な複雑・複合系であり、ある局面で確立したモデルが異なる状況では有効性が限られることが多い。このため、実社会データのマイニング・現象の特徴付け・モデルの開発・シミュレーションの応用などの研究開発の諸段階を、目標ごとに同時進行することになる。逆に個々のふるまいによりどのような社会ができるかをシミュレーションにより予測することにより、社会経済制度や政策・倫理方針・宗教指針の設計・制御を行うことも期待される。そもそも、現在の社会がどのようなものであるかをわかりやすく提示する、すなわち「可視化」すること自体、データマイニングやシミュレーションの役割として認知されている。

1つの例として自動車交通のモデルについて挙げよう。1990年代半ば以降の研究により、1車線の1本道で発生する渋滞の原因が解明され、個々の自動車の運動に基づいたエージェントモデルにより再現・

予測に途をつけた。しかしながら、分岐路や道路ネットワークにおける交通ダイナミクスの解明には未だ至っておらず、目的ごとに模索する状況が続いている。さらに自動車交通の目的は、関係する当事者により異なることが普通である。個々の自動車は、目的地に速く、あるいは低燃費で、あるいは予定時刻どおりに到着したいと考える一方、道路のある地域社会・警察は事故や騒音・大気汚染を無くしたいと考えるであろう。また、道端のお店はそこを通る自動車の数を多くしたいと考えるであろう。これらの諸目的は同時に達成されるとは限らないし、おそらく互いに相入れない目的であることが多いであろう。すなわち自動車交通という社会的な問題は、単一の最適化問題として解決することはできないと推測される。どの立場での問題解決かに割り切るか、あるいは関係当事者すべてが同じ評価関数を共有するような交通ルール・交通経済を設計するところまで立ち戻る覚悟をする必要がある。同じ評価関数を共有することを目指している自由市場経済において、好ましからざる均衡点を回避する「見えざる神の手」の実現にもエージェントシミュレーションが活用されよう。

このような社会現象をシミュレートするモデルには、シミュレーションパラメータによって複雑多岐のふるまいがつきものである。またパラメータの数も多くなりがちで、現象を再現するパラメータの同定自体、困難であることは日常的である。数個程度の少数パラメータであれば経験や網羅的シミュレーションで同定することもできようが、数十個程度以上のパラメータ、それも解析的ではない離散的なパラメータとなると難しい。例えば、人口100万程度の都市の道路網には数万か所の交差点があるが、経路探索や交差点での信号制御や右折ルールの設定を網羅的に探索することは不可能である。そこで何らかの知能的探索が必要となり、当面はいわゆる人工知能的な手法の活用が課題となろう。個々のパラメータに対するふるまいをシミュレートするにもそれなりの計算能力が必要となるため、こうしたパラメータ探索研究でもスーパーコンピュータが潜在的には競争力の源となると期待される。

社会現象のシミュレーションでは、自然現象のシミュレーションと比べて特別な性能をコンピュータに要求するわけではない。あえて言えば、道路ほかの地図、人間関係や企業間の取引、お金の流れといった社会的な関係を表すグラフ構造の扱いが特徴である。例えば、自動車が走行する道路は交差点や終点をノードとし、ノード間を結ぶ道路をエッジとするグラフとして表現することができる。自動車交通シミュレーションはグラフ上に自動車のエージェントモデルを移動させることであり、走行経路はグラフ上の2点間の経路探索問題として表現される。また、道路の新設・廃止は道路を表すグラフの運動・変化として表現される。もう1例、マクロ経済・企業間取引のシミュレーションでは、企業間の取引関係を表すグラフの上でお金や原料・製品・サービスが移動し、また企業間競争・起業・倒産や災害・事故などに伴い取引関係を表すグラフも変化する。このように社会シミュレーションの多くは、グラフ上の運動・変化とグラフ自身の運動・変化として実行される。すなわちグラフシミュレーションなのである。

自然科学シミュレーションもグラフシミュレーションであることが多い。粒子・分子動力学法も含む離散要素法、有限要素法、格子模型などで扱う構成要素間の相互作用も一種のグラフシミュレーションである。こうした問題で扱うグラフは、ランダムグラフや完全グラフ、格子構造などの比較的単純なグラフである場合が多い。一方、社会シミュレーションでは、スマートワールド、スケールフリーといった複雑なグラフを扱うことが多いことが特徴である。このためデータベースやファイルシステム研究とも共通する問題を含んでいる。

とはいって一般には、個々の実行時間自体は、社会シミュレーションは自然科学シミュレーションと同程度かむしろ短い問題を扱うことが多い。動力学シミュレーションでは1兆粒子を必要とすることがある

が、人間は現状、100億人もいないし、自動車の数はもっと少ないのである。しかし先に記述したように、最適化関数の多義性や離散的なパラメータ依存性に由来するパラメータ探索の必要性から、個々の課題の解決に必要なシミュレーション数が相當に多くなることが特徴である。この特徴は、物質設計・創薬・ものづくりほかとも共通するものであり、連携も期待される。

2.7.2 長期目標と社会貢献

社会科学の長期的目標は、ミクロからマクロまで、刹那から長期間までさまざまな社会現象を解明することである。応用面から簡潔に言うならば安心・安全で幸福な社会の実現ということになるが、これは社会科学に限らず、あらゆる科学的研究・学術研究、さらにはあらゆる人間活動の重要かつ根源的な目標でもあるこうした高邁な目標が掲げる一方、なにをもって安心・安全・幸福とするかの基準も多様であり、社会の構成要素の間で互いに矛盾することも多い。地域・時代によっても変化する。このため諸研究分野では各分野での基礎・応用研究を、その時々の社会が想定している安心・安全・幸福な社会の実現とのバランスを取りながら進めている状況といえよう。

社会科学には、諸分野と同様に安心・安全・幸福を所与の前提とするという面がある一方、諸分野とは異なる面もある。それは社会自身を設計・制御の対象とするため、なにをもって安心・安全・幸福とするか、あるいはどのような安心・安全・幸福を実現するかを決めるという面である。特に社会シミュレーションでは、構成要素や構成要件が変わった時に社会全体と個々人の生活とがどのように変化するかを予測することが期待される。これはシミュレーションモデルに依存した一面的なものではあるが、長期的にはモデルの改良により高度な予測ができるようになると期待される。例えば、経済政策の選択によりGDPがどのように推移するか、道路整備により物流がどのように変化するか、新しい製品が市場をどのように変えるか、新しい技術が人々の生活をどのように変えるかといったように、諸分野での研究成果や行動決定がどのような社会的影響を及ぼすかを予測し可視化することが期待される。また社会規則や政治制度を変更すると、社会がどのように変化するかを明らかとすることが期待される。構成要素スケールから社会全体をシミュレートする技術は、ひとりひとりの立場・状況から社会全体の姿までをシームレスに解像するわけであるから、ひとりひとりに寄り添いながらの全体展望を実現する。これには社会がはらむ矛盾や利害対立が先鋭化するリスクがある一方、先鋭化した議論や戦いからその解決策・妥協策の実現までも社会シミュレーションを活用することになろう。社会事象のはらむリスクを社会シミュレーションにより精査したり、微調整では到達できない変革を実現する駆動力として、戦争・革命・クーデターに置き換わることさえも長期的には想像されよう。

この長期目標に向けた研究開発は、現在、以下の3つに大別されよう：

- (1) 社会システムを構成する1サブシステムのシミュレーション技術の開発と応用
- (2) 社会システムの複数のサブシステムのシミュレーション技術の開発と応用
- (3) シミュレーションモデルの評価およびパラメータ探索技術の開発と応用

社会全体は、種々のサブシステムが密接に連携して機能している。まずもつとも基本的なサブシステムのシミュレーション技術の開発・応用が(1)の段階である。たとえば自動車交通では自動車が道路と交通ルールとに則って移動するというシステムが基本であり、こうした移動をシミュレートする技術の開発・応用がこの段階に当たる。市場経済では取引ルールに則った自由な売買が基本であり、こうした取引のシ

ミュレーション技術である。

しかし移動・物流は自動車交通だけでは成立せず、他に歩行・鉄道・船舶・航空というサブシステムと連携する必要がある。また、通信・電力・ガス・水道他のサブシステムとも密接にかかわっている。これらのサブシステムのシミュレーション技術の開発・応用も進める必要がある。もう一つの例に挙げた経済も取引だけでは成立せず、生産活動と金融システムほかのサブシステムとの連携が不可欠である。さらに移動・物流と経済との連携も不可欠である。(2) の段階は、(1) で開発したサブシステムシミュレーションを連携してさらに大きな括りでのサブシステムシミュレーションを実現する技術の開発・応用である。複数のサブシステムを連携する際には時間的・空間的あるいは社会的なスケールが異なるサブシステムを連携させる方法を開発する必要があり、また必要となる計算資源も大きく増大するため、第2段階の研究課題とした。

サブシステムを連携し社会全体に向かう際にもう一つ問題となるのが、増えるモデルパラメータをどのように統御するかという課題である。数十パラメータですらそのすべてを計算機の能力で尽くすことは、一般には難しい。社会シミュレーションでは、(1) の段階のサブシステムですら莫大な数のパラメータを持ち、試すべきシナリオが想定される。モデルのふるまい自体、解析的でないどころか連続的ですらないことが多い。これが(3) の課題である。そのために社会現象・社会シミュレーションのためのデータマイニング・データ同化技術や人工知能技術の開発も必要となる。また単にモデルパラメータを探索して統御するだけでなく、社会の円滑な運営と非常事態への安心・安全な対応とを実現できるような社会の実現も期待される。

これら3段階は、必ずしもステップバイステップというわけではなく、まず(1) に着手し、次に(2)、(3) にもというように進行している。京コンピュータの段階で既に、最も基本的なサブシステムと考えられた自動車交通・鉄道交通・歩行者集団・市場取引・金融システム・企業間取引・人間関係などの研究がある程度進展している。そして現在、ポスト京コンピュータを見据えてこれらのサブシステムの連携およびモデル評価の研究が始まっていると同時に、社会を構成する他のサブシステムに対する(1) の段階の研究も進んでいる。たとえば、航空交通である。さらに社会のサブシステムではあるが、既にそれぞれの分野での研究が進んでいる電力システム・通信システムほかのシミュレーションや、社会に大きくかかわる気候・環境・地震・津波・噴火などのシミュレーションとの連携も段階(2) の課題となろう。

2.7.3 課題とその解決に必要な計算手法・アプリケーション

上では長期目標・社会貢献の実現に向けた社会シミュレーションの研究開発の3段階を掲げた。これに沿って現在進められている具体的な課題として、交通・経済・社会関係の3種類のサブシステムとその連携とを以下に挙げる。

1. 交通の設計・制御および最適化

これまでに研究が進んでいる自動車交通、歩行者集団のシミュレーションをベースとして、種々の交通モード・交通政策をも加味した交通シミュレーションを実現し、現実の交通・物流への応用が期待される。まずここでは交通・物流は平時の社会を念頭に置いているが、災害はテロリズム・ミサイル攻撃や軍事進攻といった非常時における避難や物流のシミュレーションの実現と応用も期待

される。前者では交通システムの最適設計や効率運営が、後者では交通インフラが部分的に破壊された際の最適輸送が主な課題となる。

こうした研究をさらに進め、交通と経済活動との連携シミュレーションが期待される。平時での効率化と非常時での緊急避難とが問題となる点では同様である。が、さらに費用対効果を経済活動の観点から、たとえばGDPインデックスによる定量化へと途を拓くと期待され、地域行政や政策判断への応用につながる可能性が期待される。

交通シミュレーションでは、個々の自動車や歩行者の動きを模したエージェントモデルを道路や街路・建物の内部などを模したシミュレーションスペース内に配置する。個々のエージェントモデルとしては、シミュレートする現象で本質的となる集団運動を再現する限り、できるだけ簡単なルールに従うものを使う。

例えば自動車であれば、先を走る自動車に衝突しないこと、交通ルールを守ること、および経路を決定することが必要最小限である。その際、運転手の操作や自動車が走る機械工学的・流体力学的シミュレーションは現段階では必要ではない。前を走る自動車との間隔と制限速度とから、数演算からせいぜい数十演算の簡単な関数で走行速度を決めて移動させるシミュレーションである。シミュレーションスペースである道路ネットワークは、交差点をノード、交差点を結ぶ道路セグメントをエッジとするグラフとして表現される。各エッジは車線構造を持ち、自動車は各車線上、時には車線変更をしながら走る。各ノードは、つながっている各エッジの各車線についてどこからどこに走行できるのかの構造を持つ。日本全土に道路は130万Km程度あり、600万程度の交差点と800万程度の道路セグメントを持つグラフとして表現できる。日本の登録自動車数は8000万台程度である。また全世界の道路は3,000万Km程度、交差点8,000万程度、道路セグメント1億程度で、10億台程度の自動車があると見積もられる。すべての自動車が同時に走行しているわけではないので、仮に10日本全体では実時間の十分の一程度、全世界でも実時間程度の経過時間で実行できる。これは極簡単な自動車エージェントモデルを使った場合の結果ではあるが、目安となる。

歩行者による群衆シミュレーションでは、歩道に列をなして歩くエージェントモデルから広い空間を自由に歩くモデルまで、目的に応じて計算量の異なるモデルが使われる。前者は上述の自動車シミュレーションに近く、計算量も少ない。各ステップで各エージェントの移動に数十演算程度である。後者ではより多くのエージェントとの相互作用を扱うため、前者に比べると演算量は数倍から数十倍程度多くなる。整然と避難する場合は前者に近く、スクランブル交差点やショッピングモール・公園・広場では後者に近いモデルを使う。

2. 経済の安定的成長の実現

自由市場経済では種々のものが自由に売買され、これを通して資源の最適配分と適正な生産活動が維持されるように取引ルールが決められている。とはいえたる一千分の一秒単位の為替取引から10年単位の資源開発・工場建設まで優に12桁の時間スケールや、1円単位の商品から1兆円単位のプロジェクトまでやはり12桁の金額スケールがどのように連携しているのかは経験則の域を出ない。現に株式取引に伴う株価の変動は1980年代までは素朴にガウス分布として扱われていたが、1990年代のビッグデータ解析からまったく異質なべき分布であることが明らかとなった。と同時に、ブラックマンデー、リーマンショックといった大暴落も絶えず、個々の株価が他の株価と相関をもつ

て変動することも明らかである。

こうした株価のダイナミクスをシミュレーションにより解明しようとする研究がすすめられた結果、株価の連鎖変動、ショックの運動といったふるまいが再現されている。また株式取引のルールが取引に与える影響についての研究も進められている。こうしたシミュレーションでは、株式を売買するエージェントモデル多数にモデル市場で取引をさせる。売買が成立するためには、同じ価格で売るエージェントと買うエージェントとがいないといけないため、数種類のエージェントを混在させる必要がある。基本的なエージェントは、株価の上下につられて売買するトレンドフォロワー、株価基準を持って高ければ売り安ければ買うファンダメンタリスト、売りが溜まれば買い、買いが溜まれば売るマーケットメイカーである。各エージェントの売買の意思決定自体は数十演算程度であるが、複数銘柄取引ではポートフォリオ管理をするエージェントを使うため最適ポートフォリオ計算のために演算量は桁違いに多くなる。目的により数百エージェントから数万エージェントあるいはさらに多くのエージェントをモデル市場で取引させることになる。例えば日本証券取引所では1500銘柄程度を扱うが、この規模を年単位相当でシミュレートするには京コンピュータ程度の性能が必要となる。

現在の株式取引のシステム自体にも連鎖安ショックを起こすダイナミクスがあることが明らかとなってきた。一方、連鎖安は株式を多く保有する金融機関が構築する世界規模の金融ネットワークのリスク管理とも関係していると考えられる。国際金融機関の自己資本比率を一定以上に規制するバーゼル規制のため、保有株の価格が下がった場合に株を売って規制を満たさなくなるリスクを回避するとする行動が起こると考えられる。また自己資本が尽きてしまい破綻する金融が現れると、金融ネットワークを介して破綻リスクが拡大する。こうした現象を念頭に、金融市場取引シミュレーションを実現し、安全な金融制度の設計および金融リスク予測制御への応用が進められている。

同様のシミュレーションは取引先が倒産することによる連鎖倒産リスクが企業間取引ネットワーク上に拡大する現象にも応用できる。災害などにより企業の倒産や減産が生じると、その企業にとどまらず取引企業にも影響が拡大する。この様子も企業間取引ネットワークを使ってシミュレートし、個々の経済イベントによりGDPがどれだけ増減するかを推定しようとする、金融とGDPの連携シミュレーションも進められている。

企業活動を担っている労働者と生産物を最終的に消費する消費者の動向は、内需経済が大きい日本ではGDPの動向に大きな影響を与えると考えられる。地域社会の高齢化や過疎化により労働者人口や消費者人口が減少した場合の影響が懸念される現在、経済成長への影響評価は重要である。これを実現する企業活動シミュレーションとGDPシミュレーションおよびそれらの政策・地域運営への応用も期待される。

3. 社会の安定と安心・安全の維持

個々人はどのような人間関係・社会集団を形成するかは社会構造の基礎といえる。家族・血縁からはじまり、周りの人々と関係を構築してゆく様子は社会心理学分野で長い研究があり、いわゆるスマートワールドネットワーク構造の発見という大きな成果も挙げられてきた。今世紀に入り、携帯電話の通話記録やフェイスブック・ツイッターなどのSNSのデータマイニングから、人間関係と

そのダイナミクスと関わる実証データが増大し、研究が一段と深化している。これまでの研究と実証データとを合わせて、人間関係のダイナミクスを記述するモデルの開発も進んでいる。例えば人間関係のモデルの嚆矢となったクンプラモデルは、人は単にだれかと友人となるだけでなく、相手の友人とも親しくなるという確率的なグラフダイナミクスモデルである。これを個々人の社会的な属性に拡張したものなど、種々のモデル開発が進められ、社会関係のシミュレーションの実現が期待されている。こうしたシミュレーションは、例えばマーケティングや情報伝達他、多様な応用が期待されている。

現代社会では人間集団の多様性の増進が活力の源泉であるとも考えられており、多様さの重要性は常々指摘されている。しかしここでいう重要な多様さとは何を意味するのか、例えば乱雑さとは違うのかも明確ではなかった。そもそも多様性の意義自体、生物の生態系進化の研究によるところが大きいため、この課題解決の糸口は生物進化や生態系のダイナミクスにあるものと考えられていた。これに対してはダーウィンの進化論以来、多くの議論と研究があり、特に遺伝子としてのDNAが発見されて以来、分子生物学・遺伝子工学分野での研究も相俟って精力的な研究が続けられていたが、簡潔な答えには至らなかった。この問題に対し、古生物学の研究のビッグデータ解析を契機として、今世紀に入って答えが出始めている。生物種をノードとし、生態系での種間の関係をエッジとするグラフのダイナミクスモデルとして、生態系進化の統計的特徴が引き延ばされた指数関数 $\exp(-\sqrt{t/\tau})$ であるとすることが提唱されている。このモデルを使ったシミュレーションは、多様性の維持と創出をシミュレートすることができ、環境保全への応用が期待される。さらにこの引き延ばされた指数関数はコンビニエンスストアの品揃えのビッグデータ解析からも発見されており、多様性の実態として社会・経済への応用も期待されている。

社会関係のシミュレーション技術は始まったばかりで、先の交通・経済と比べて技術展望に未知の部分が多く、具体的なロードマップは今後の研究に待たなくてはならない。とはいえ交通・経済と社会関係の連携シミュレーションは、社会シミュレーションを単なる社会のサブシステムのシミュレーションから、現実の社会の複雑さに匹敵するシミュレーションへと進化させる可能性をもつとも考えられる。

2.7.4 ロードマップ

年齢 課題	2016～	2018～	2020～	2022～	2024～	2026～
交通の設計・制御および最適化		← 交通シミュレーションの実現と交通・物流への応用 →				
		← 避難シミュレーションの実現と応用 →				
		← 経済活動との連携シミュレーション →				
経済の安定的成長の実現		← 金融市場取引シミュレーションの実現と制度設計・金融リスク予測制御への応用 →				
		← 企業活動シミュレーションとGDPシミュレーションの実現と政策・地域運営への応用 →				
		← 金融とGDPの連携シミュレーション →				
社会の安定と安心・安全の維持		← 社会関係のシミュレーションの実現と応用 →				
		← 多様性の維持と創出と環境・社会・経済への応用 →				
		← 交通・経済との連携シミュレーション →				

図 2.11 社会科学ロードマップ

2.7.5 必要な計算機資源

先述したように社会シミュレーションでは、問題解決のために多数のシミュレーションを実行しなくてはならないことが多い。このため必要な計算機資源を、キャパシティコンピューティングとケイパビリティコンピューティングとの2軸で図にまとめたものを、交通・経済・避難シミュレーションについて示す^{*3}。いずれも横軸に問題解決のために必要と予想されるジョブ数を、縦軸に1ジョブあたりの計算量をTFLOPS・日を単位として示した両対数図である。図中の右下がりの直線が、計算量が等しい問題を表す。図 2.12 が交通シミュレーション、図 2.13 が経済、図 2.14 が避難である。

^{*3} これらの図は Itsuki Noda, Nobuyasu Ito, Tomohisa Yamashita, Hideki Mizuta, Tomio Kamada, Yohsuke Murase, Sachiko Yoshihama and Hiromitsu Hattori, "Roadmap for Multiagent Social Simulation on HPC", Proceedings of 2015 IEEE/WIC/ACM International Conference on Web Intelligence and Intelligent Agent Technology (WI-IAT), Singapore, December 6-9, 2015, vol.3, pp.22-25, (DOI:10.1109/WI-IAT.2015.178) の図を基に作成した。

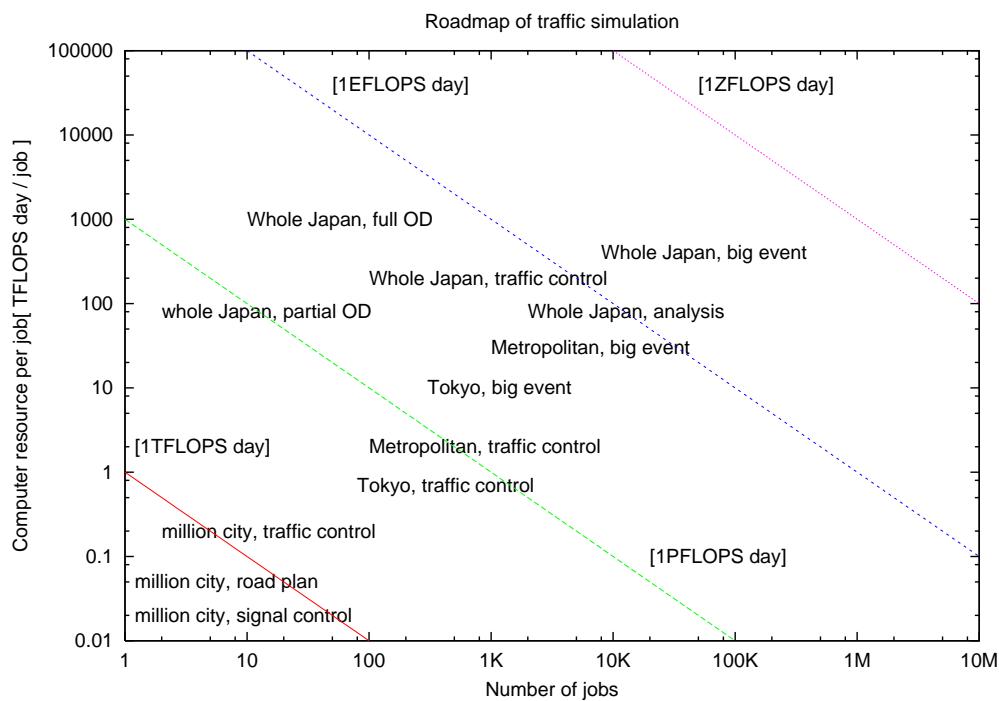


図 2.12 交通課題解決のために必要な推定計算量。

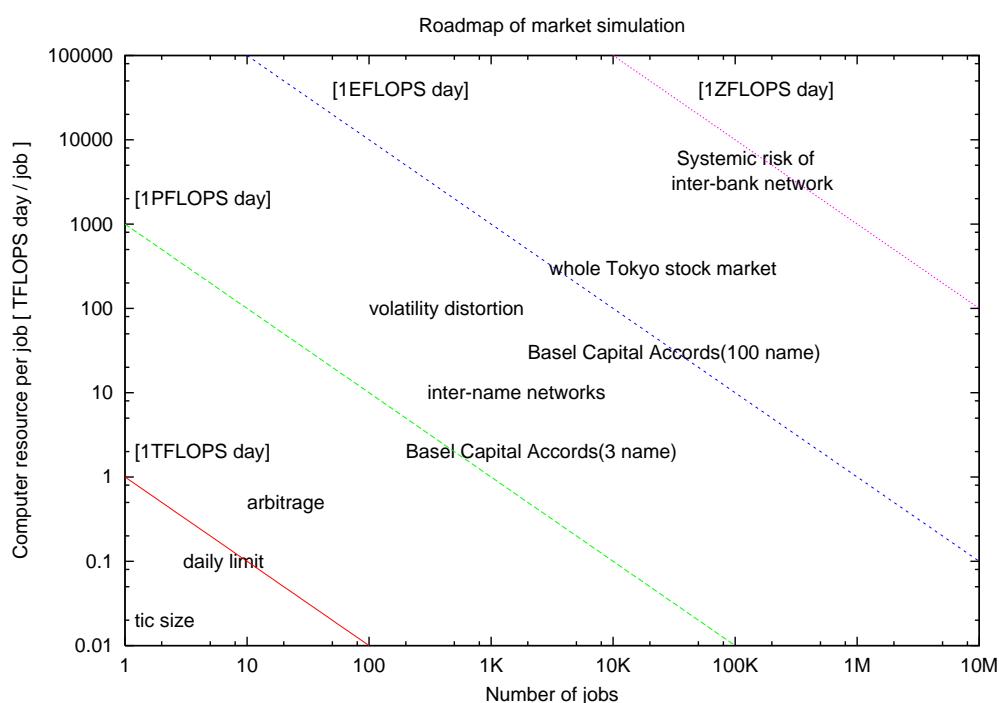


図 2.13 経済取引システム課題解決のために必要な推定計算量。

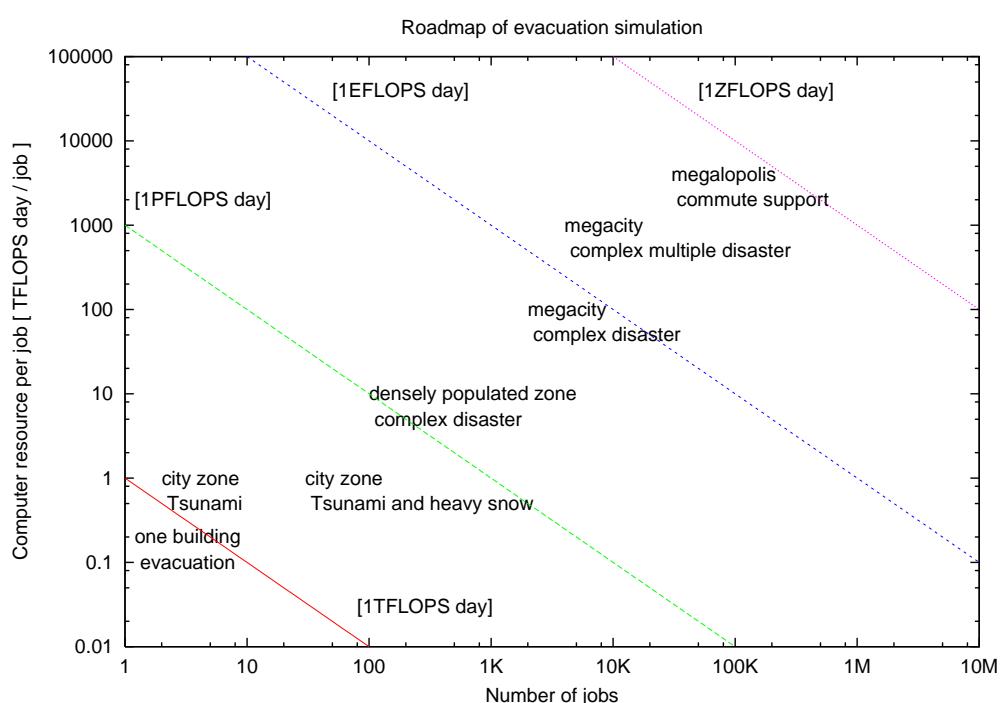


図 2.14 避難問題解決のために必要な推定計算量。

2.8 脳科学・人工知能

2.8.1 分野の概要

脳は呼吸・心拍のような生命維持から意識・思考といつたわゆる高次機能までを司る重要な器官であるが、そのためのシステムとしての脳の情報処理機構は未だに解明されていない。一方、脳の構成要素である神経細胞、ニューロンの挙動は非常に良く研究されており、単一ニューロンの挙動は具体的に数式として記述可能である。このような数式をニューロンの数だけ列挙し求解することで、原理的には脳活動を計算機上に再現し、その情報処理機構に迫ることが可能である。

脳科学、特に基礎神経科学においては、脳の微細な構造と機能に着目し、ボトムアップ的に脳機能の解明を目指しているが、一方でニューロンのネットワークを極端に抽象化・数理化したモデルで、トップダウン的に脳機能の解明に迫ることも可能である [1]。人工ニューラルネット、特に層を何十～何百層も重ねたいわゆる深層学習は、課題によっては既にヒトの能力を凌駕する性能を示しており、現在の人工知能ブームを牽引している。

過去 60 年間、脳科学と人工知能は近づいたり離れたりを繰り返しながら成長・成熟し、現在は両方とも巨大な学問分野となっている。脳科学は各国で巨大プロジェクトが推進されており [2]、人工知能は深層学習の大ブレークによって、アカデミア・インダストリーを問わず驚異的な勢いで分野が拡大している [3]。それぞれの分野で HPC の利活用はますます重要視されつつあるが、分野毎に必要とされる計算法・計算性能・計算機アーキテクチャは異なる。そこで本章では脳科学と人工知能とでそれぞれ個別に説明していく。

2.8.1.1 脳科学

脳は、認知、思考、感情など、情報処理をつかさどる器官で、脳の神経細胞同士が互いに結合し、主に活動電位と呼ばれる電気パルス状の信号で表象される信号を交換することで情報処理を行っている。動物の脳は様々な規模のものがあるが、人間の脳は、約 860 億神経細胞とそれらの間で形成される 100 兆以上の結合からなる最大級の脳で、この世で最も複雑な構造物と言われている。脳・神経科学は、その構成要素である神経細胞やシナプス結合の挙動、行動と神経活動の関係、脳機能マップ、脳結合マップなど、様々なことを明らかにしてきた。しかし、「全脳」の神経回路が互いに緊密に連携し実現される、思考や言語、複雑な運動といつたわゆる「高次脳機能」に関する脳の情報処理機構に関して、どのように実現しているかは、まだ明らかにされていないことが多く、現在も精力的研究が行われている。

脳研究は学際領域であり様々な手法によるアプローチが行われているが、脳神経回路を神経科学の知見に基づいて数理モデル化し、数値シミュレーションによってその挙動を解析することで明らかにしようとする、計算神経科学と呼ばれる一分野がある。ニューロンの挙動は微分方程式で記述され、シナプスについても同様であるため、ニューロン個数分・シナプス個数分の式を時間ステップ毎に解くことで、神経回路全体の挙動を数値的にシミュレートする。その始まりは、1952 年の Hodgkin と Huxley によるイカの巨大軸索の活動電位のシミュレーションで、はじめは手回し計算機で数値計算が実行された。それから

60年以上の間、計算神経科学は発展し続けており、最近では、神経回路シミュレータ NEURON による80万ニューロンのマルチコンパートメントモデルシミュレーション、STDP シナプス可塑性を用いたタスクの学習、ワーキングメモリを持ちいくつかのタスクを実行可能な神経回路モデル、詳細なラットの感覚皮質モデル、数十億の神経細胞からなる神経回路シミュレーションなど、様々な脳の大規模計算が盛んに行われている。このような大規模モデルの実行には、大きいものでは10ペタフロップス以上の性能を持つ大規模並列型の電子計算機によって実行されている。2016年現在、最大級の脳である人間の脳モデルはいまだ実現されておらず、それをを目指して競争するかのように、脳のシミュレーションの大規模化は現在急速に進んでいる。エクサスケール規模の計算機があれば、比較的単純なニューロンモデルを用いることでヒト全脳のシミュレーションが、また昆虫脳であれば個々のニューロンの具体的な形状まで考慮してリアルタイムシミュレーションが、それぞれ可能になると予想され、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。

脳の大規模モデル構築には、脳の神経細胞間の結合や、神経細胞の電気生理学的な特徴について、全脳規模の膨大なデータが必要である。2013年ごろから世界中次々に開始した、脳の大型プロジェクトは、全脳規模での結合の青写真の作成や神経活動の計測、脳データベースの拡充、大規模計算モデルの構築などについて取り組んでおり、大規模な脳のモデル研究をさらに後押しする動きとなっている。2013年開始のEUのHuman Brain Projectは、脳の情報処理と疾患の機構の解明・人工脳の開発、ヒト全脳シミュレーションを行い、2014年に開始した米国のBrain Initiativeは線虫や昆虫からヒトまでの多くのモデル動物をスケーラブルに扱う中で全脳の機能マップ構築にも取り組み、2014年から開始した日本のBrain/MINDSでは小型霊長類であるマーモセットの脳の構造と機能マップ解明を目指しており、2016年以降に中国はChina Brain Projectで脳、人工知能、ロボットに関する取り組みを行うことを予告している。

他分野と計算神経科学の関わりとして、ひとつに身体モデルと脳モデルの連成シミュレーションによる、運動情報処理や神経疾患に関する取り組みが挙げられる。また、人工知能分野は、脳の情報処理機構に基づく知能システムの開発を1950年代から行っており、深層学習の隆盛はその例の一つである。こうした密接な関係から、近年では、脳のシミュレーションと人工知能のプロジェクトが並立されることも珍しくない。

2.8.1.2 人工知能

本稿を執筆している2016年は、奇しくも言葉としての人工知能誕生60周年を迎える節目の年である。1956年のダートマス会議においてAI(Artificial Intelligence)という言葉が生まれ、そこから1980年ごろまでを第一次AIブーム、2000年ごろまでを第二次AIブームということがある。そして今は、第三次AIブームの真っ只中にいる。

第一次AIブームでは主に、記号を持った推論や探索の研究が精力的に遂行された。というのも、当初は実世界の事物はすべて何らかの記号で表現でき、その記号の操作こそが人工知能実現の要諦であると考えられていた為である。逆に、計算機が周囲の環境を認識する部分についてはさほど注意が向けられてはいなかった。迷路やパズルを解いて見せたり、数学の定理を証明して見せたりといったことが実現されたが、社会貢献につながるような段階までは至らなかった。

第二次 AI ブームではエキスパートシステムやオントロジーの研究が盛んであった。エキスパートシステムとは名前の通り専門家を計算機上に実装するシステムのこと、たとえば医者の知識を if then ルールの集合として計算機に実装することで、原理的には問診結果から自動で病理診断できるようになる。実際、知識の範囲をうまく絞り人力でルールを全て策定できる限定された条件においては、実用的なエキスパートシステムが作成できることがわかった。しかしながら、より広範で曖昧性の高い認知や判断、意思決定を行わせるには、こうした知識をルールとして書く作業そのものが非常に困難であった。オントロジーとはそのような知識をどのように体系化するかという研究領域であり、人手やデータドリブンな形での知識獲得についての取り組みが広がった。

現在の第三次 AI ブームにおいては、機械学習—とくに深層学習—が急速に発展・応用されている。たとえば、1000 種類の物体が写った 100 万枚の画像を学習し、未知の画像について人間よりも高い精度で写っている物体の名前を言い当てられるようになった。自己対局を重ねて強化学習し、囲碁の世界チャンピオンに勝てるようになった。機械学習自体もその歴史は人工知能と同等に古いのだが、現在のような注目を集めるに至った原因は主に 3 つあると考えられる。1 つめは、深層学習によって画像や囲碁の盤面から注目するべき画素情報、石の配置といった特徴を自動で抽出できるようになったことである。2 つめは、特に画像認識のような実データを伴う問題においての学習用データセットの進歩である。膨大な量のデータが web に消費者生成コンテンツとしてアップロードされるようになり、クラウドソーシングの普及によってそれらに正しい教師情報を与えられるようになったことで、より複雑で学習するべき変数の量が多い手法も検討できるようになった。3 つめは計算機の性能の向上で、特に GPGPU のように非常に高速な行列演算が可能な計算リソースが廉価で入手可能になったことで、大学の研究室レベルでも深層学習を時間的・金銭的に実行できるようになった。

もちろん現在でも、第一次や第二次の AI ブームで始まったような領域についても引き続き研究が進んでおり、今やその領域は非常に広範にわたる。また人工知能という分野の性質上、その研究の大半は計算機上で実装される。ほかの科学分野でも計算科学との融合によって新たな領域が生まれているが、人工知能という分野はとりわけ計算機に依存する領域の割合が高いと考えられる。

2.8.2 長期目標と社会貢献

2.8.2.1 脳科学

神経科学の最大の目標は、脳の情報処理機構の全容解明である。特に、人間の全脳による高次脳機能の理解は、医学、産業、教育、芸術、哲学など社会における幅広い分野への影響があり、究極の目標といえよう。一方で、昆虫の脳は人間の脳に比べ遙かにスケールが小さいながら、昆虫は知能的行動と呼ばれる性質の大部分の要素を備えており、知的情報処理の一般的な性質を理解するのに扱いやすいモデルである。このような複雑度の違う異なる種の脳について、扱いやすさの違いから調べられることが異なるため、神経科学ではそれらの実験やシミュレーションが並行して行われてきた。今後も、複雑度の違う異なる種の脳の研究が行われていくことは間違いない。そこで、ここでは人間の脳と、昆虫の脳のシミュレーションについて、考えていく。

これまでの脳研究では、神経細胞レベルの活動から神経回路の振る舞いを調べる場合、単一の脳領域が

主な対象であった。脳の全領域をシミュレーションする場合、脳領域間の相互作用を調べることができるようになる。特に人間の全脳シミュレーションでは、異なる脳領域の協調によって行われるヒトの思考を実現する高次脳機能について調べることができるようになる。また、てんかん、うつ病、パーキンソン病、統合失調症などの脳の病気は、脳の多数の領域が関与していると言われており、全脳シミュレーションによって、病気の状態や新しい治療法の推定などが期待される。さらに、病気に対する薬理学的効果をシミュレーションによって検討するためには、神経回路レベルだけではなく、個々の神経細胞あるいは細胞内の微細な構造と機能の詳細なシミュレーションが必要になる。例えば、神経細胞の樹状突起やシナプスの構造について1細胞あたり数千から数万コンパートメントで表現し、各コンパートメントについて、AMPAR, Ca²⁺, CaM, CaMKII, DARPP32, PKA, PP1, PP2Bなどに代表されるシグナル伝達系モデル（数十～150の分子種）を導入した場合、演算量は数10倍から100倍増大増え、全脳レベルでシミュレートするための必要な計算資源はエクサスケールを越えると考えられるが、いずれ視野に入ってくる課題である。一方、近年、目覚ましい性能向上を示す深層学習は、大脑皮質の階層的な神経回路による感覚情報処理の有用性を示しているといえるが、その深層学習の神経回路構造は、研究者らの探索による劇的な変化が起きている最中である。それに対して、実際の脳のなかで存在する神経回路のループ構造や機能、生物的・物理的な特徴を詳細な脳モデルで評価することで、より高性能な深層学習器を設計できる可能性がある。

このように、人間の社会生活をより良くするための直接的な貢献が、ヒト全脳のシミュレーション研究で期待できる。また、人間の「脳」を理解することは「ヒト」を理解することである。ヒトをヒトたらしめているのは脳のはたらきによるものであるから、脳を研究することで、ヒトとは何か、ヒトがヒトたる理由は何か、ヒトはどこから来てどこへ行くのか、といった根源的な問いに対して示唆を与えることが可能になるであろう。さらに、ヒトの全脳シミュレーションを実時間、またはそれ以上の速度で実行できるようなければ、人間の知性を持つシステムを様々な分野で応用できる可能性があり、人間の文明全体の発展を大いに加速するだろう。

一方、小規模ながら一つの脳をよりボトムアップで構築していく方向もある。その対象として有力なのが昆虫である。たとえば、多くの昆虫は甘いショ糖刺激と特定の匂いを同時に与えられると特定の匂いに従って摂食行動をとるようになる。これは、昆虫には感覚を記憶する能力、別の種類の感覚を結びつける能力、欲求を満たすために行動する能力があることを示している。喧嘩を行うコオロギや、人間の顔を認識するハチの例もある。すなわち、人間が行う未解明な知能もその複雑さを度外視すればおおむね昆虫も持っている。その上で昆虫の全脳シミュレーションは、その規模の小ささのため、モデル構築のために必要な生理実験データと、モデルを実行するために必要な計算資源が、高等な動物の場合に比べ遥かに少なくてすむ利点が有る。また、昆虫を機械とインターフェースで結合する試みや、遺伝子改変の容易さなどの特徴もある。そのため、実環境下における昆虫脳モデルを搭載したロボットを用いた脳機能の検証や、また、生理学実験で観測、操作された神経細胞の活動との比較を行い易いという利点が有る。そのため、昆虫全脳シミュレーションによる知的情報処理の一般的な性質の研究は、哺乳類などの高等な動物の脳を扱うより早期に実現可能になるとみられる。また、その後の哺乳類、霊長類、人間の脳全脳シミュレーションにとってのテストケースとしても、役割を果たすだろう。

2.8.2.2 人工知能

人工知能の当面の、そしていつ達成されるかは未だもって不明確な目標として、人間と同等に知的なふるまいをみせるコンピュータの実現が考えられる。未来学者のレイ・カーツワイルの予言によれば、人工知能が人間の知能を超える技術特異点が今世紀中にやってくるとみられている。一方で著者が知る限りにおいては、人工知能の諸分野の第一線の研究者で、そのような特異点がすぐに来ると考えている人物は少ない。

画像認識のようにデータセットが十分整備されていれば人間並みの精度で物体の名前がわかり、囲碁のようにゲームのすべての情報がプレイヤーにわかる場合であればトッププロ並みの腕前でプレイできるように学習できる。囲碁のように非常に難しいとされてきたゲームにおいてコンピュータが人間を越えたという点でセンセーショナルな成果ではあるが、基本的には画像による盤面の認識と強化学習の組み合わせただけである。視覚という感覚情報のみから物の名前を言い当てるだけでなく、人間並みに多様な感覚情報の情報から柔軟な環境認識を達成する、もしくは、報酬も不確定な環境下で、意思決定できるようなコンピュータが登場する…そのようなAIを実現するには、まだまだ多くの問題が残っている。

サイエンスの側面から考えられる社会貢献としては、知能とは何かという問いに構成論的なアプローチで答えることであろう。人間のように知的にふるまう計算機を目指すという分野の性質上、人間そのものにヒントを得た研究も多い。脳神経系に着想を得た機械学習手法としてのニューラルネットワークや深層学習、網膜や視覚野などを模した画像認識手法などがこれにあたる。一方で数学的に学習の最適化について突き詰めたり、ナイーブな着想を実直に試行したりというようなところからブレークスルーが起こる場合もあり、深層学習の発展もどちらかといえばこうしたアプローチによっている。より人間に近い知的なシステムが達成されれば、知能とは何かという理学的な問いにフィードバックできる可能性がある。

また同時に—人間並みの知能を実現するにはまだ多くの時間がかかるといつても—その研究の過程の中で、社会に対してエンジニアリング的な側面から大きな影響を与えると考えられる。抽象的に述べれば、まずは単一の感覚情報で何らかの認識を行うような分野で精緻化が進み、次に多様な感覚情報を総合的に判断して認識するようなステージへと進む。最終的にはそのような認識結果として得られるシンボル情報から、より複雑な意思決定を計算機が行うようになるだろう。

医療画像からの病変の発見や防犯・監視カメラの自動処理といった部分が最初に達成されるはずである。このように限られた感覚情報のデータから対象となる事物を認識する作業でも、現在は人的コストを割いて行われている。かつてのエキスパートシステムでは、何に注目してどういう反応であればどういう認識結果を返すというルールをすべて明示的に与える必要があった。深層学習を中心とする機械学習の進歩によって、入力データと求める認識結果の正解を与えればこうしたルールを内部的に獲得してくれるようになった。

視覚のみから事物を認識するといった単一モーダルデータ認識の次に、より広範で多くの感覚情報を用いた認識へと進化すると考えられる。そこでは、仮にある感覚情報のデータが欠損したり信頼性の低いデータとなったりしていても、ほかの感覚情報から情報を補えると期待される。表情だけでなく声や身振り手振りなども含めて正確に人間の感情を推定できれば、人間の感情を考慮したロボットやコンピュータとのインタラクションが可能になり、接客やオペレーションの補助が可能にある。周囲の環境をさまざま

なセンサ情報から頑健に把握できるようになれば、自動運転のように行動パターンの絞られたドメインにおいては意思決定システムが実現できる。

さらに将来的には、人間の知的活動そのものを支援するシステムが期待される。現在の状況を様々な感覚情報のデータから判断するだけではなく、その判断結果として帰着するシンボル情報を統合して次の行動を決定するような高度に知的な処理が自動化される。計算機の補助を受けながら指すアドバンスド・チェスのように、教育や経営判断といった知的作業にも計算機の補助が入るようになるとみられる。

2.8.3 課題とその解決に必要な計算手法・アプリケーション

2.8.3.1 脳神経回路シミュレーション

神経回路シミュレーションは、回路の構成要素である個々のニューロンについて、(1) シナプス入力(入力)、(2) 膜電位(状態)、(3) 発火判定とスパイク伝播(出力)を、各時刻毎に全てのニューロンについて計算していく。それぞれは微分方程式(常微分・偏微分)で記述され、常微分方程式の場合は陽解法(e.g., ルンゲクッタ法)、偏微分方程式の場合は差分化し陰解法(例えばクランクニコルソン法)で計算される。陰解法の場合は連立一次方程式を解く必要があり、その際はガウスの消去法が主に用いられている。ニューロンの挙動を記述する微分方程式は、細胞の形状を無視し仮想的な点で表すモデル(点モデル)と、形状を考慮し細胞内をどのように信号が伝わるかまで表すモデル(空間モデル)の2種類に大別される。時間ステップは全ニューロンで固定にするのが一般的であるが、ニューロン毎に動的に可変にすることもある。ニューロンのスパイク生成はミリ秒未満の非常に速い時間スケールで行われるが、それ以外ではニューロンは数ミリ秒程度の時間スケールで振る舞うため、このような可変タイムステップは性能向上に大きく寄与する。

神経回路シミュレーションは一般的に、個別のプログラムを書くと言うよりは、既に利用可能な汎用のシミュレータを用いて実施されることが多い。これは、大規模なモデルのプログラムを書くことが煩雑である一方、計算内容そのものは比較的単純かつ明らかであり、性能を重視しなければわざわざ一から書く必然性が薄いからである。様々なシミュレータが存在し、多くはマルチコア計算機で並列に動作する。「京」用にチューニングされたシミュレータも存在する。GPUやFPGA等のアクセラレータを利用可能なものも登場しつつある。また、ニューロモルフィックチップと呼ばれる、神経回路シミュレーションの専用チップの開発も進んでいる。一方、計算機の性能を引き出すために、専用のプログラムを書くこともないわけではない。例えばスペコン「菖蒲」上で動作するネコ小脳のシミュレーションは専用のプログラムで開発されている。

現在の課題は大きく、(1) 比較的単純なニューロンモデルで巨大なネットワークを構築する、(2) 非常に詳細なニューロンモデルでそこそこの規模のネットワークを構築する、のいずれかの方向性を持つ。前者は、例えばポスト「京」萌芽研究で進められているヒト全脳シミュレーションが該当する。積分発火型モデルと呼ばれるニューロンモデルを、ヒト全脳規模である1000億個結合したネットワークを構築する。脳は大脳皮質・大脳基底核・小脳を含むいくつかの脳部位からなり、また各部位も構造的・機能的に異なる領野に分割されている。これらを個別にモデル化し、系全体としてどのように連携・協調して動作するのかをシミュレーションによって検証する。後者は、同じくポスト「京」萌芽研究で進められてい

る、昆虫全脳リアルタイムシミュレーションや、ラットの体性感覚野の機能単位の再構成があげられる。昆虫全脳シミュレーションでは、ニューロンの空間形状を考慮した詳細なニューロンモデルを用いて100万ニューロン規模のネットワークを構築し、さらにリアルタイムでシミュレーションを実施する。昆虫脳の場合は個々のニューロンを同定することが可能であるため、各ニューロンの生理学的パラメータをデータ同化によって推定し、解剖学的構造だけでなく生理学的性質までをも忠実に再構成することができる。第3の方向性である、非常に詳細なニューロンモデルで巨大なネットワークを構築することは、現在の計算機の性能では難しい。

これらの課題を解決するために必要なアプリケーションとして、以下をあげる。

1. (主として) シングルコンパートメントモデルの汎用シミュレータ。大脳皮質・大脳基底核の構築に用いる。
2. (主として) マルチコンパートメントモデルの汎用シミュレータ。昆虫全脳モデルの構築に用いる。
3. マルチコンパートメントモデルの特定の脳部位のシミュレータ。具体的には小脳神経回路のシミュレーションプログラム。

2.8.3.2 人工知能

2.8.1節で述べたように、人工知能の研究開発においてはそのすべてが計算機上の実行を想定して行われる。従って、HPCI上でのアプリケーションをごくいくつかに絞る作業は困難を極める。検討の結果、以下の理由から今回は画像認識をモデルケースとし、深層学習アルゴリズムの学習及び実行についてその課題と計算を考察する。

- GPGPUの普及によって深層学習が普及したように、ほかの機械学習手法に比べて深層学習はより計算基盤への依存性がつよい。
- 一般論として、何らかの事物としてシンボル化された情報より、その元となったデータ—ここでいえば画像データ—の方がノイズと冗長性をもっており、その処理により大きな計算を必要とする。
- そのようなデータとしてテキストデータや音声データなども考えられるが、画像データのほうが一般的にチャネルやデータサイズが大きく、深層学習手法のネットワーク構造もより複雑になる傾向がある。
- 深層学習によってはじめて一般画像認識が人間並みの精度となり、画像認識を要素技術とするようなり高度な認識の研究やプロダクト開発が今後一層進むと考えられる。その際は学習だけではなく、学習結果をデータベース上の全画像に適用する計算も重要になる。

(i) 深層学習による画像認識器の学習

深層学習によって画像認識がより高精度化されるという実験結果が世界中に広がったのは、コンピュータビジョンの国際会議で共催されたコンペティション ILSVRC 2012 が契機であり、2012年のことであった。その当時は7層のレイヤーから構成されるニューラルネットワークであったが、2014年には40層超、さらに2015年には150層を超えるようなネットワークが提案され、以降も多くの層を持つ

ニューラルネットワークが検討されている。これらは CNN (Convolutional Neural Network) と呼ばれるネットワークに属するもので、およそ 200×200 程度のサイズの画像に対して 3×3 や 5×5 のような小さなフィルターによる相関値を計算する Convolution 層が続くものである。出力層のごく近くのわずかな層のみは、2 層の任意のユニット同士がそれぞれ異なるような重みでつながっている全結合層となっている。

ニューラルネットワークの各レイヤーについては基本的に、入力 $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^{d_x}$ に対して線形重み $W \in \mathbb{R}^{d_h \times d_x}$ をかけ、シグモイド関数など何らかの非線形な関数 σ で変換した結果 $\mathbf{h} = \sigma(W\mathbf{x})$ を次の層の入力としている。画像認識などでよく用いられる CNN でも系列データによく用いられる RNN (Recurrent Neural Network) やその亜種でも、基本的には同様に行列とベクトルの積による演算が繰り返されながら出力の層へと処理が移行していく。そして最終的には、認識したい事物のクラス数 d_c と同じ次元の層 \mathbf{y} へと繋がる。また、パラメータの学習時には誤差逆伝播法によって出力の誤差が入力側へと順次伝播しながらパラメータを更新するが、その際も基本的には行列とベクトルの積が支配的である。

現在もっとも代表的な学習用データセットでは 100 万枚の画像で 1000 種類の物体を学習している。以降では学習するべき事物の種類を代表的な英英辞典の語彙とほぼ同一として 35 万種類とし、同等の割合でデータを用意した総計 3.5 億枚の画像を対象とする。また、一つのネットワーク構造の学習についての並列計算は 1000 ノードで行うこととし、画像 1024 枚の学習に 200TFLOP の演算を伴う CNN を仮定する。深層学習においては半精度浮動小数点数の演算が重要であるが、この性能をノード当たり 100TFLOPS とおく。

まず演算性能について、このデータを 5 周して学習が収束するような CNN だと仮定して考える。1 つの CNN について総演算量は 350EFLOP となる。ネットワーク構造を 5 通り、それぞれの最適化手法を 5 通り試したいと仮定し、さらにこの構造と最適化手法が 2 種類のハイパーパラメータを持っていると考えれば、2500 通りのパターンの CNN を並列で学習させることになる。総演算量は 875,000EFLOP となり、計算を 1 週間で終えるためには 16,000 ノードで 1.6EFLOPS が要求性能となる。次に転送帯域については、100TFLOPS のノードで 24TB/s 程のメモリ帯域が必要となる。また、ノード当たり 35 万枚の画像計 700GB をノードごとのメモリ空間として担保するか、ストレージから学習に必要なデータを都度ロードするために 100GB/s の IO が必要となる。最後にストレージについてだが、主たるデータは 3.5 億枚の画像 70TB であり、これに比べれば学習結果の CNN については無視できるサイズである。

(ii) 深層学習による画像認識器の実行

画像認識器を深層学習によって獲得するだけではなく、この認識器を用いてさらなる研究や商用用途の計算を進めることができが今後より重要となる。消費者生成コンテンツとして web 上に大量の画像や動画が時々刻々アップロードされており、すべてを一人の人間がすべて視聴するのは全くもって不可能となっている。そこで代わりに計算機が各コンテンツの内容を理解し、ユーザごとにコンテンツを推薦できれば、今後より膨大になっていくデータをより効果的に利活用できる。また、現在も世界中の官民で監視カメラの設置台数を増やしているが、それらは基本的に人による監視がメインである。たとえば東急電鉄では保有する 1200 両の列車に 1 両当たり 2 台のカメラを設置する予定で、2400 の映像を時々刻々認識する必要があり、計算機が代替できれば効果は大きい。また世界中で急激に増大し続ける消費者生成コンテンツについても、その内容を認識させることで字幕や検索などに応用できる。

深層学習結果をもって認識する際にはフォーワード計算のみでよく、誤差を逆伝播する必要はない。19層のVGGNetで1024枚の画像からなるミニバッチを認識するのに19.6TFLOP、152層のResNetで11.3TFLOPほどなので、今後40TFLOPほどフォーワード計算に必要なCNNが主流になると仮定する。認識時にはデータ単位で容易に並列化が可能なので、100TFLOPSのノードごとに1秒で2.5個のミニバッチを認識すると解釈する。

消費者生成コンテンツの一例として、YouTubeが2027年まで現在と同じ速度で規模が増大し続けると仮定して、15000億秒分の動画を1日で認識させる計算を考える。必要な総演算量は60,000EFLOPである。1秒あたりでは0.69EFLOPが必要で、100TFLOPSのノード6900台に相当する。転送帯域を考えると、メモリについては24TB/sの帯域、ストレージのIOでは3.4TB/sの帯域が必要となる。最後にストレージは約290PBとなる。

2.8.4 ロードマップ

年代 課題	2016～	2018～	2020～	2022～	2024～	2026～
ヒト全大脳皮質 神経回路シミュ レーション	積分発火型モデルによる 大型靈長類・ヒト全大脳皮質シミュレーション				ヒト全大脳皮質リアルタイム シミュレーション	
				マルチコンパートメントモデルによる ヒト全大脳皮質シミュレーション		
ヒト全小脳皮質 神経回路シミュ レーション	積分発火型モデル1000億ニューロン リアルタイムシミュレーション			空間形状モデル1000億ニューロン リアルタイムシミュレーション		
				大脳小脳連携 リアルタイムシミュレーション		
昆虫全脳ア ルタイムシミュ レーション	昆虫匂い情報処理－運動司令系(10000 ニューロン規模)マルチコンパートメントモデル リアルタイムシミュレーション			昆虫全脳規模マルチコンパートメント確率的モデル (100万ニューロン規模)シミュレーション		
	1－数百ニューロン規模の 神経回路データ同化			数百－数万ニューロン規模の神 経回路のリアルタイムデータ同化		
深層学習によ る画像認識器 の学習	100TFLOPS級のCNNの開発			物体認識を要素技術とする より高度な画像認識		
	1000種類の物体の学習			10万種類の物体を学習		
深層学習によ る画像認識器 の実行	100TFLOPS級のCNNの開発			秒間100,000枚の画像の認識		

2.8.5 必要な計算機資源

2026年頃における課題解決のために必要な計算機資源の見積りを行い、代表的アプリケーションについて、2章末尾の表2.1に記載した。また、計算機資源の見積りの詳細は第4.8節に記載している。

参考文献

- [1] 竹内郁雄（編） . AI 人工知能の軌跡と未来. 別冊日経サイエンス. 日経サイエンス社, 2016.
- [2] Katja Brose. Global neuroscience. *Neuron*, Vol. 92, No. 3, pp. 557–558, 2016.
- [3] 人工知能学会（編） . 深層学習. 近代科学社, 2015.

2.9 地震・津波

2.9.1 社会的貢献 —科学的知見に基づく災害予測のシステム化を目指して—

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、様々な要因によって生じる被害想定のばらつきを定量的に扱える必要があるが、現状では国レベルでの被害想定は、距離に応じた揺れの減衰の式と、揺れと被害の関係の経験式の組み合わせという単純なものであり、ばらつきが大きいだけでなく、それを小さくするために何をすべきかを合理的に検討することが困難である。より科学的・合理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・津波とそれにともなう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。こうしたシナリオを、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、津波遇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遇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対策（以下では、災害を少しでも減らす「減災」の対策も含めた意味で用いる）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、震源からの弾性波動伝播、地盤と構造物の震動、津波の伝播と遇上などのシミュレーションである。更に、揺れや遇上を受けて、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、地震発生から津波遇上に至る一連のシミュレーションは、地震発生前の防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と期待される。

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とともに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、防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であろう。

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、日本にとっ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、一世代前に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仕組みを構築することができる。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、防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。

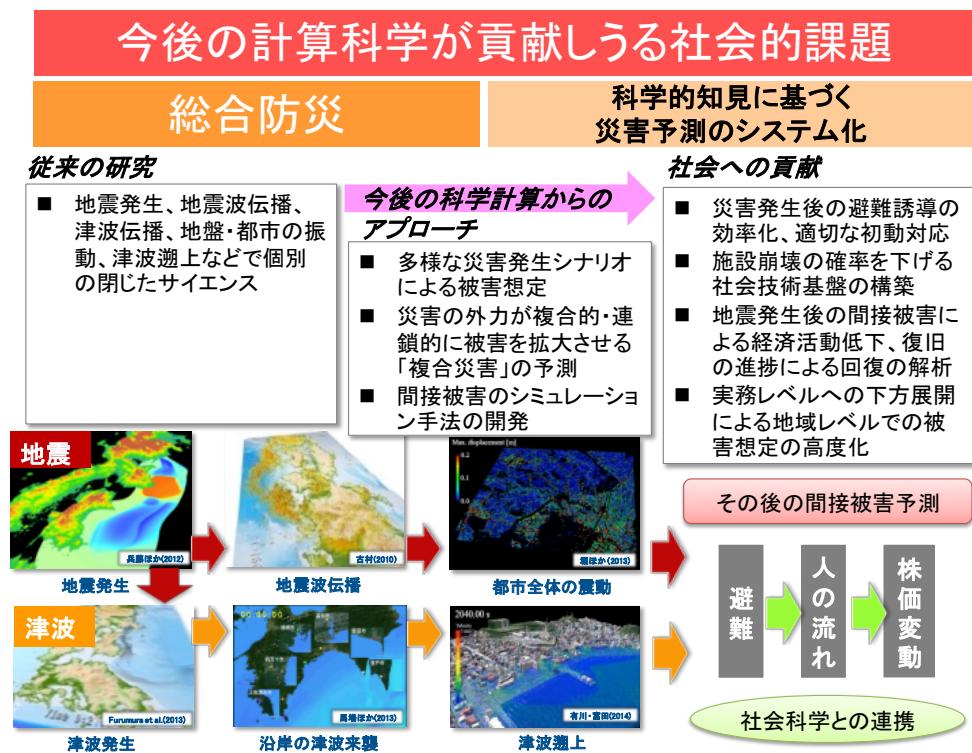


図 2.15 総合防災（地震・津波防災）

2.9.2 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マグニチュード（以下では M）9 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可能となる。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も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防災対策への利用・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。

2.9.3 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、結果のはらつき・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、受け手からの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、オーデマンドで、個人や個々の団体のニーズに合わせた防災に資する情報を、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。

2.9.4 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。

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、2～3 時間以内には計算が終了することが、迅速な応急処置や復旧作業のために必要となる。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るとし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 程度のピーク性能は必要である。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 100PFLOPS 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、国内に 1 台しかない最速 HPC ではなく、国内の各地域の複数台の HPC 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、2.9.1 節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12Exa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桁程度大きくなる。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。

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)										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、波動伝播計算を行なう。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、海底地形の不確実性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		0.00086	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 (125mx125mx62.5m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	130000	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	130000	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	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	3.3	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

図2.16 (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)

2.9.5 前回のロードマップ以降の進展

前回のロードマップの取りまとめ（2014年3月）以降、非構造格子有限要素法による非線形地震応答解析の超大規模問題の高速化において飛躍的な進展があった。計算機科学・計算科学の中心的な国際会議であるSCで、開発した大規模高効率有限要素コードについて発表し、2014年と2015年の2年連続でGordon Bell賞のファイナリストに選出された（Ichimura et al., 2014, 2015）。SC15では、山手線内全域を含む $10.25\text{km} \times 9.25\text{km} \times 0.24\text{km}$ の領域を1,336億自由度（332億要素）の構造・非構造ハイブリッドの有限要素メッシュでモデル化し、0.002秒×6600時間ステップで10Hzまで解の収束性を確認した計算で、京のフルノードでのピーク性能18.6%（=1.97PFLOPS）を達成した。また、その地盤震動を受けた328,056棟の建物1棟1棟の非線形応答計算を行うとともに、同じ領域内の200万体のマルチエージェントを対象にした避難シミュレーションも実現した。さらにSC16では、上記の有限要素法のソルバーの効率化をさらに高めた上で、2.05兆自由度（5,130億要素）のモデルでの静的な地殻変動・応力評価を京のフルノードで実現し、Best Poster Awardを受賞した（Fujita et al., 2016a）。このモデルは、M9の東北地方太平洋沖地震の震源域を含む $500\text{km} \times 500\text{km} \times 250\text{km}$ の領域で、断層面に沿って45mの超高解像度有限要素メッシュとなっており、従来困難であった3次元不均質媒質中の断層面上での応力評価を、M9クラスの大地震でも可能とした。これにより、半無限均質媒質に対して境界要素法を用いて行ってきた地震発生シナリオの計算を、3次元不均質媒質に対して有限要素法を用いて行える道が拓けるとともに、地震発生から波動伝播、地盤增幅、さらには地殻変動まで、共通のソルバーを持つ非構造格子有限要素法コードで計算できることになる。近年は陸域だけでなく海域の地殻変動データが入手できるようになり、海陸の高さの違いがデータ解析に影響するようになったり、海陸で地震波形データを使うことで、海陸境界における大きな構造不均質が震源位置や断層すべりの向きなどの解析に影響するようになってきていることから、3次元不均質媒質に対して、地震発生シナリオ計算から波動伝播や地殻変動まで、文字通りの統合シミュレーションが実現する見通しが得られたことの意義は大きい。さらに、津波シミュレーションについても、上記の有限要素法による地殻変動計算結果にもとづく初期波形を用いることで、詳細な地形や地下の構造不均質の影響を考慮した計算が可能となった。

一方、媒質の物性や地下構造の曖昧さを考慮する面でも大きな進展があった。上記の非構造格子有限要素法をGPUクラスタに移植・最適化することにより、8,220万自由度（1,992万要素）の問題に対して、京コンピュータ8ノードと比較して、8GPU（Tesla P100×8）でソルバーの計算効率が19.6倍高まった（Fujita et al., 2016b）。このように、GPUを用いた高速化が実現したこと、さらにはメッシュ生成や分割の自動化・高度化も進んだことで、1～10億自由度の問題を10～100万回計算するといったことが、GPUクラスタを用いて1週間～1ヶ月で行えるようになった。これは、東北地方太平洋沖地震の震源域を含む $1000\text{km} \times 800\text{km} \times 400\text{km}$ 程度の領域で、断層すべりによる地表の変位を計算する際の誤差要因となるプレート境界形状や媒質の物性について、それらの曖昧さを考慮した多数の3次元不均質媒質モデルを用意し、それぞれのモデルで断層すべり分布を求めて、すべり分布の誤差を定量的に評価するといったことが可能になることを意味しており、前回のロードマップに掲げた不確実性や多様性の考慮という課題の解決に向けて着実に進展したと言える。

以下では、上記の非構造格子有限要素法による非線形地震応答解析を用いて次の段階の超大規模問題と

して計算したい課題について紹介し、そのために要求される性能をリストアップする。

ここでの課題は首都圏の統括的地震応答シミュレーションである。地下に張り巡らされたライフラインの被害は、速度や加速度ではなく、地盤歪が原因であるが、都市全域の地盤歪の計測は不可能である。そこで以下のような計算によって、広域の面的な歪分布の把握と現象の定量的理解が進み、ライフラインの地震被害対策に資すると考えられる。計算方法は前述の非構造格子有限要素法による非線形地震応答解析である。以下に解くべき問題の規模や要求性能をリストアップした。

- 問題規模：10兆自由度・120秒間

200km × 200km × 数100m領域、2.5mメッシュ、時間分解能で2.5Hz程度

0.001秒 × 120,000タイムステップ

- ケース数：1

- 計算時間：50時間

- 演算量： 10^{23} FLOP = 100,000 EFLOP

- メモリ量：15PB

- メモリ転送量/ケース：40,000 exa-byte

- ストレージ量/ケース：1PB

- 要求ファイルI/O性能：1TB/s

- 想定するノード数：200000

- 通信にかけて良い時間：全計算時間の1/10

- 主要な通信：隣接通信

- 通信サイズ：1MB/message × 10 messageを同時通信 × (120000*400)回

12万はタイムステップ数で、400は各タイムステップの線形方程式ソルバーの反復回数の概算

- ネットワークバンド幅/ノード：20GB/sを10リンク

- レイテンシ：20 micro second per message

10 messageのレイテンシがオーバーラップできることを前提

そうでなければ2 micro second per message

- オンチップメモリ容量：不明

- 算出方法：京における小規模問題の計測結果より推定

2.10 気象・気候

2.10.1 分野の概要

1959年に気象庁が日本初のスーパーコンピュータを導入して以来、数値モデルの発展に伴って数値予報の精度は年々向上してきた。現在、数値モデルは欠かすことのできない基盤インフラとなっている。台風や集中豪雨、竜巻といった気象災害は、社会・経済そして人命に脅威を与える。近年の気象予測では、これら災害を引き起こす極端気象が一つの焦点となっている。全球規模、あるいは、領域規模のシミュレーションにより、極端事象を事前予測することで、災害を軽減する努力が続けられている。気象予測で用いられている数値モデルの開発には半世紀以上の長い歴史があるが、未だ気象モデルの不完全さ及び初期値に含まれる誤差により、完全な予測は困難である。これは、大気に内在するカオス性のため、数値予報の初期値に含まれる僅かな誤差が増大し、実際とは全く異なる予報結果となることがあるためである。より精度良く予測するためには、数値モデルの改良とともに、モデルでの初期状態を観測データから類推するデータ同化手法の高度化も必要不可欠である。この分野では、数値モデル、データ同化は、数値予報の双璧をなし、これらの相乗効果により発展してきた。後者は後で述べるように、使用できる観測データの質・量がともに飛躍的に増大したことに伴い、ますますその重要性が認識されているところである。

一方、1990年に初のIPCC(気候変動に関する政府間パネル)評価報告書が出版され、気候予測に対する重要性の認識が増すなか、全球気候モデルによる長期的な気候変動予測シミュレーションも行われてきた。当初は、大気海洋のみを扱ってきたが、長期的変動の観点からは大気中だけでなく陸域および海洋生態系との相互作用等も重要であり、現在では、大気化学、生態系、物質循環などのモデル化とその気候モデルへの実装が進み、「地球システム」のモデル化が進められている。これにより、想定する様々な将来シナリオに対応できるようになってきている。また、近年では地域スケールでの詳細な将来気候予測への需要も高まっている。領域気候モデルにより予測された結果は、地域気候の将来変化の把握だけでなく、気候変化にともなう農業や林業、畜産業などへの影響評価にも使われる。短時間豪雨の増加、夏季の猛暑日日数の増加、冬季の平均的な積雪の減少と豪雪の増加といった気候状態の極端化などが予測されており、これらの情報は気象災害に対するリスク評価、及び、気候変化に対する適応策の検討などに役立つ。

また、近年では大気環境の予測も重要性を増してきている。二酸化炭素などの長寿命温室効果気体だけでなくオゾンやエアロゾルといった短寿命温室効果気体など、様々な大気微量成分を考慮した気候変動予測実験なども実施されている。加えて、大気微量成分の大気中動態を評価する上では「地表との物質交換量」・「大気中輸送」・「大気中の未解明反応」などが主な不確定性要因と考えられるが、近年のリモート観測技術の発達により、これまで観測が困難であった地域などでも高頻度、高精度な観測が行われるようになってきており、データ同化技術の進展に伴い、地表からの放出量等の推定の精緻化が進められつつある。

このように気象気候分野では、短期の数値天気予報から長期の気候変動予測まで社会が直面する様々な課題解決へ向けた科学的アプローチをもとに、政策決定者に正確な情報を提供するという大きなミッションがある。この際に、気象・気候システムが強い非線形性を伴う複雑なシステムであるため完全な予測は困難であり、予測可能性と不確実性の幅に関しては、十分な配慮と考察が必要になってくる。高解像度化はモデルの不完全さを排除する一つの方策であるが、モデリング手法そのものの高度化も同時並行で行わ

れるべきである。例えば、解像度が粗いモデルでは格子内の積雲や乱流を表現するためにパラメータ化が必須である。しかしながら、現在気候にチューニングされたパラメータを将来気候や異なる気候状態の条件に適用することへの正当な根拠はない。そのため、モデル内の不確定なチューニング要素を減らしていく努力が必要である。近年、衛星シミュレータの登場により、衛星観測とモデルの比較において、定性的な評価だけでなく定量的な評価が可能となってきた。衛星シミュレータを用いた研究は、これまで直接観測することが難しかったパラメータの推定・検証方法の一つとして期待でき、今後さらに活発化していくべきである。モデルの空間解像度が高くなれば、大きなスケールへ影響を与える小さなスケールの現象を直接解像し、解くことが可能となる。一方で、気象・気候システムのカオス的性質のため、予測に内在する不確実性の軽減とばらつきの幅の評価を行うためには、モデル自身の高度化とともにアンサンブル予測は不可欠である。

ここまで、社会的要請の観点から天気予報、将来予測の重要性を述べてきたが、データ同化を含めた数値モデルは、同時に気象現象・気候変動のメカニズムそのものの解明という基礎科学のための道具としても欠くことのできないものである。現実における実験が難しい学問であるため、観測・理論・数値実験が三位一体となってこの分野の学術基盤を支えている。学術的な観点からも、このような物理メカニズムの解明に向けた取り組みは、将来気候予測の信頼性を向上させるためにも重要なプロセスである。

現在、我が国だけでなく、世界でも精力的にモデル開発が行われるとともに精度向上につながる高解像度化が進められている。最近の流れとしては、高解像度実験を効率よく行うことができる全球格子モデルの開発がある。全球格子モデルの開発・利用では、京コンピュータを用いて世界で初めて 1km を切る水平解像度で全球実験を行った日本の NICAM が世界の先頭を走っている。領域スケールでは 10m 格子での竜巻シミュレーションの試みや 100m オーダー解像度での集中豪雨シミュレーション等を複数ケース行なうことが可能となってきている。米国や欧州などでも同様のモデル開発が進んでおり、エクサスケール・コンピュータを見据え、次のサイエンス・ブレークスルーが期待される全球ラージエディーシミュレーション (LES) などに向けた世界的な競争がまさに激化しつつある。また、近年においては、大気と海洋間の相互作用の効果に関する研究が急速に進みつつある。衛星データなどから取得された海面温度は、台風通過後、もしくは通過前の値を参照していることが多いが、実際には、台風通過時に海水は鉛直方向にかき混ぜられるため、台風強度の予測の高度化には高解像度海洋モデルが必要であり、大気と海洋の相互作用に対する理解を深める必要がある。また、海洋の微細な渦構造や海洋前線が、海洋上の混合層を変化させ、擾乱の発達に影響を及ぼすという研究も注目されている。大気モデルだけ高解像度化するのではなく十分であり、海洋モデルも一緒に高解像度化していく必要がある。これら、海洋の空間詳細な構造や時間発展の表現は、天気予報の予測精度向上へも大きく貢献すると期待される。

2.10.2 長期目標と社会貢献

気象気候分野における社会貢献およびそれに向けた長期目標は多岐にわたるが、ここでは、喫緊の課題である、全球に関わる規模の防災、詳細な地域スケールの気候予測、大気環境アセスメント、それらすべてに関わり問題解決のカギとなるであろうデータ同化の 4 つに分けて記述する。

世界的な大規模な防災

日本を含む東・東南アジアにおいて、人的・経済的な損失をもたらす最大の気象災害は台風によりもたらされる。台風を含む風水害による死者は日本では戦後減少してきた。しかし、最近20年においてもほとんどの年で数十名以上の死者が出ており、2004年の台風23号、2011年の台風12号にいたっては100名近い死者が出ている。また、東南アジアの発展途上国では、2008年のサイクロンナルギス（ミャンマー：死者・行方不明者13万人）、2013年の台風30号（フィリピン：死者・行方不明者6千人）のように、台風等の気象災害によって未だに膨大な数の人命が失われている。台風だけでなく熱波や干ばつといった全球規模の異常気象もしばしば気象災害をもたらす。

このような気象災害を低減するためには、短期的な予報、および中・長期的な予測とともに継続的に改善していく必要がある。数日から1-2週間程度先までの短期的な気象予報は、モデルの改良とコンピュータの性能向上によって予報精度は概して向上している。しかし、台風の進路のように数日先の予報であっても大きく外れことがある。また、2週間を越えた1ヶ月程度先までの気象予報（延長予報）はその可能性が研究されている段階である。さらに、季節スケールの天候予測は農産業や水産業にとって重要であり、近未来～数十年以上先の気候予測は地球温暖化への適応策を検討するための基礎資料となる。

観測に基づく最近の研究によると、東アジアに上陸する台風の強度は強まる傾向があると指摘されている。IPCC第5次評価報告書では、地球温暖化によって地球全体の台風の数は減少するものの強い台風の割合は増加する可能性があると報告している。地球温暖化が台風をはじめとする気象現象を変調する可能性に備え、天気予報、季節予測、近未来予測、気候変動予測の精度・信頼性を向上させ、防災・減災のために必要な情報を提供していくことが気象気候分野に課せられた社会的使命であり、長期目標である。

地域スケールでの気象気候予測

地域スケールの気象気候予測に期待される社会的役割としては、大きく2つ挙げられる。1つめは、空間詳細な短時間及び数日先までの短期的な気象予測の提供である。2つめは、温暖化を含む気候変動に伴う地域気候変化予測と適応策に資する予測情報の提供である。地域の気象・気候予測は、相対的に粗い水平解像度で予測された全球気候モデルの結果を、領域気象モデルで細かい解像度まで落とし込むダウンスケーリングによって行われる。領域モデルを用いるメリットとしては、対象としている領域に対して少ない計算コストで高い空間解像度を確保できることにある。降水、強風、豪雪、落雷、高温といった顕著現象がいつ、どこで発生するのか、また、将来的にその発生頻度や発生地域はどのように変わるのであれば、といった生活に直接関係するきめ細かな情報を時空間方向に高い解像度で提供することが求められている。

数値モデルを高解像度化することのメリットとして、高い空間解像度の計算結果を得られることに加えて、小さなスケールの現象を格子で直接解像することが可能となるため、チューニングなどに由来する不確定性要素の大きいパラメータ化を排除できることがある。これにより、予測結果の信頼性の向上が期待される。

豪雨や強風などの顕著現象の正確な予測のためには、台風や温帯低気圧、夏季の対流不安定時などに発生する積乱雲の発生発達を精度よく表現する必要がある。積乱雲の上昇流コアを数値モデルで直接表現する際、水平格子間隔が概ね2km以下であれば、積雲対流パラメタリゼーションが不要となり、深い対流に伴う雲の形成・衝突・雲粒の発達・落下などの物理過程を格子スケールで直接計算することが可能となる。これを、雲解像モデルと呼ぶ。一方で、空間スケールの小さな積雲や層積雲などは、2kmの格子サイズでも表現できないため、雲解像モデルとしての解像度は十分とは言えない。これらの浅い対流を解像す

るには、数100m以下の解像度が必要である。層積雲や積雲は、積乱雲のように直接大雨を降らせるということはまれであるが、雲が存在することで短波放射（太陽放射）を反射したり、長波放射（地球放射）を吸収したりするため、地球の放射バランスの観点から重要である。モデルの高解像度化によるパラメタリゼーションの排除に加え、雲解像モデルで用いるスキームの違いによる雲やそれに伴うエネルギー取支への影響についてさらなる比較検討が必要である。

今後、地域スケールでの気候気象予測では、数100m程度の水平解像度の計算は主流となっていくと予想され、このスケールにおいては、乱流の扱いについても十分に検討していく必要がある。層積雲や積雲の形成は境界層構造と密接な関係があり、モデル内での乱流の表現の違いは、雲の形成、形状、発生発達にも影響する。また、積乱雲を含む雲の境界付近での相対的に乾燥した空気塊との混合にも乱流の働きは無視できない。一般的に境界層モデルは鉛直方向の混合のみを扱うが、高解像度になれば水平方向の混合も無視できないスケールとなってくる。これらの影響について、多方面から調査していく必要があろう。

これらの基礎的・技術的な知見は、領域モデル全球モデルに関わらず共通した問題であるが、問題解決には、領域モデルを用いることが計算機資源の面で有利である。さらに、領域モデルのもう一つの利点としては、境界条件に制約を設けることで様々な状態を想定した理想的実験による検証が可能なことがある。領域モデルで蓄積されたこれらの基礎的な知見は、領域気候シミュレーションだけでなく、将来の全球LES実現への道筋として避けては通れない。

大気環境予測

光化学オキシダントに代表される大気汚染物質は健康や植物等に直接的に影響を与えるため、長期および短期変動予測の精緻化は直接的な社会貢献につながる。世界保健機関(WHO)大気質ガイドライン2005ではオゾンの日毎8時間平均値の最高値が35ppmを超える場合、およびPM2.5の年平均値が $10\mu\text{g}/\text{m}^3$ を超える場合に健康リスクが増加するとしている。このため長期的には、国内および国際的な環境リスク評価およびリスク軽減に向けた政策決定の科学的基盤となるような信頼できる大気環境シミュレーションの実現が目標である。また高分解能シミュレーション等の知見が気象庁などの現業モデルの高度化につながれば、エアロゾルおよび大気汚染物質などの予測スコアを向上させることが可能となる。以下に挙げる2つの課題は予測スコア向上のための必須事項である。

1つ目は、エアロゾルの大気中動態の精緻化である。大気中を浮遊する微粒子であるエアロゾルは二酸化炭素などの温室効果気体に次いで地球温暖化への影響が大きいと考えられているものの、エアロゾル自身が太陽放射を反射もしくは吸収する直接効果に加えて雲粒子の数や粒径分布等に影響を与える間接効果なども考えられるため、その気候影響については他の気候変動因子に比べて不確定性が大きいと考えられている。またエアロゾルのうち粒径の比較的小さいもの($2.5\mu\text{m}$ 以下)はPM2.5と呼称されており、微小ゆえに呼吸器の深くまで侵入し、健康影響が生じる場合がある。

また、炭素物の不完全燃焼の際に発生する「すす」などの黒色炭素粒子は太陽放射を吸収するが、大気中での寿命は黒色炭素粒子表面の液滴による被覆の有無で大きく異なる。このことは特に発生源から遠く離れた極域などの黒色炭素濃度に大きく影響する可能性があるが、既存の化学輸送モデルは極域での黒色炭素の観測結果を再現できていない。このため観測の精緻化と並行して、モデル側ではエアロゾル混合状態の精緻化および発生源からの輸送経路上での除去過程の精緻化の必要性がある。具体的には、エアロゾルの各成分の粒径分布だけでなく混合状態も含めたモデル化、および降水に伴う湿性沈着を正しく評価

するため、雲分解スケールもしくはそれに近い水平分解能での評価、および雲微物理との相互作用をさらに深く理解することが必要となる。

2つ目は、地表放出量分布等の精緻化も必要である。大気汚染物質の大気中濃度は、地表からの放出量および地表への吸収量に大きく依存している。フロンなどの人工的な温室効果気体については統計量等からかなり正確にその発生量を推定することが可能であるが、一方で反芻動物のげっぷ、発酵過程などからも発生するメタン、植物の呼吸、光合成等で放出、吸収される二酸化炭素、光合成の過程で放出されるイソプレンやテルペンなどの炭化水素などの天然起源放出量などは全球スケールで正確に把握することは非常に困難である。このため、「いぶき」などの衛星データによる広域観測と航空機や地表観測による精緻観測などを組み合わせた多種多様な観測網を用いた観測データとモデルデータのデータ同化による統融合が、地表放出量分布の精緻化に寄与すると期待される。これまで広く使われてきた逆解法などの同化手法では複数の化学種や観測網を利用するには技術的に煩雑であったが、局所アンサンブル変換カルマンフィルター (Local Ensemble Transform Kalman Filter, LETKF) 等の局所化された手法を利用することにより、比較的容易に可能となる。また地表放出量だけでなく大気中濃度の推定を併せて行うことにより、例えば積雲対流による鉛直輸送などのモデル内の各プロセスにおける不確定性についても評価することが可能になる。

データ同化

気象気候予測において、データ同化は数値モデルと双璧をなしてきた。今後、使用できるデータ量が莫大に増えるため、手法の更なる高度化により、本分野でのあらゆる課題の進展が期待できる。ここでは、データ同化自身の長期的課題について述べる。

人工衛星による観測や、船舶、飛行機などによる観測、そして気象官署などの定点観測など、観測データにはさまざまな種類があり、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初期値を作成するのは容易ではない。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4次元データ同化手法が複数開発されている。また、データ同化を用いてモデルのパラメータを最適化する方法や、モデルのバイアスなどの系統的誤差を推定し補正する方法も研究されており、今後予報精度の向上につながることが期待できる。

衛星観測の開始以降、観測データは年々増加し続けている。その一方で、衛星観測のように同一測器により得られた観測データは相互の誤差に相関があることがわかっている。系統的な誤差を含んだ観測データをそのまま同化すると、誤差を含んだ場を参照して矯正することになり、同化過程によってかえって初期値の精度が悪化する場合がある。このため、現在のデータ同化では誤差の相関が無視できるようにデータを間引いて使用している。つまり、有益な情報を含む観測データを数多く捨てていることになる。しかし、観測誤差相関を陽に考慮したデータ同化手法を用いることで精度が向上することが理論的には示されており、世界各国で実用化に向けた開発が進められている。また、大気・海洋・陸面・生態系・物質循環といった複数の要素を組み合わせた地球システムモデルにおいて、データ同化を応用して現実的な場を再現しながら、季節変動や年々変動の予測の精度を上げ、さらに長期的な予測を行い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」の構築も期待される。

近年増加している局所的・集中的な大雨や強風、落雷などの極端現象を精密に予報することも、今後

の気象予報における大きな課題である。こうした局所的な極端現象をもたらす積乱雲の時空間スケールは数百メートル以下、10分程度と非常に小さい。京を用いた最新の研究では、30秒毎に得られる水平解像度100mのフェーズドアレイレーダーの観測データを高解像度モデルに同化することで、実在の積乱雲の数十分後までの発達と降水を予測する試みが行われており、世界に先駆けて新たな成果が出始めたところである。さらに、竜巻のような現象の特徴的な時空間スケールは数十メートル・数秒スケールであり、このスケールでのデータ同化の取り組みはまだ始まっていない。今後の一層の計算機能力の向上によるモデルの高解像度化と、今後見込まれる新型気象レーダー等の観測網の充実によって、これまで不可能であったこれらの現象の予測に取り組むことが可能になっていくだろう。

2.10.3 課題とその解決に必要な計算手法・アプリケーション

気象モデルで扱う対象は、地球規模の大きなスケール（～10,000km）から雲・乱流といった小スケール（10m以下）の流れまでが相互作用する系である。このようにスケールの大きく異なる流れを第一原理に基づいて一度に解くことはほぼ不可能であり、スケール間相互作用を表現するため、乱流や対流といった格子以下のスケールの現象は経験則に基づくパラメタリゼーションで表現することが一般的である。信頼性の高い予報・予測を行うための正攻法は、経験則を出来るだけ排除し、マルチスケールの現象を一度に（シームレスに）解くことができる高解像度モデルを構築することである。そのためには、非静力学コアの採用に加え、パラメタリゼーション、特に対流・雲微物理過程の見直しを行うことが必要である。

雲の物理として一般に良く用いられている粗視化は、バルク法であるが、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。一方、「BIN法」では、粒径などで区切った「BIN」を設定し、各BINに含まれる水物質の量を計算する。現在、雲微物理プロセスをより直接的に表現するため、エアロゾルと結合したバルク雲微物理スキームやBIN法、粒子法といった第一原理により近い精緻なスキームの開発が精力的に行われている。

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パラメタリゼーションが行われている。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に理解されている。慣性小領域より大きなスケールの渦だけ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。一般的に、LESを適用するには、水平格子間隔は少なくとも100m程度以下である必要があり、それに対して、境界層モデルによるパラメタリゼーションの適用は水平格子間隔数km以上が想定されている。両者の間にはスケールのギャップ（“グレーゾーン”）があり、グレーゾーンでの乱流表現手法については研究が行われているところである。

以上の問題を見据えたシームレス全球大気モデルは国内に複数存在するが、代表例としてここではNICAM (Non-hydrostatic Icosahedral Atmospheric Model)を取り上げる。NICAMは正二十面体準構造格子を用いた全球気象モデルであり、力学過程では非静水圧のナビエストークス方程式を採用し、有限体積法を用いて解いている。物理過程として雲微物理（ダブルモーメントバルク法）、大気放射、乱流、陸面過程などを含むとともに、海洋モデルCOCOと結合することで大気海洋結合モデルとして実行することも可能である。全球モデルからのダウンスケールを行う領域モデルとして、ここではSCALE-RM (Scalable Computing for Advanced Library and Environment-Regional Model)を挙げておく。

大気環境問題の解決のためには、MIROC, NICAM 等で利用されている全球エアロゾルモデル SPRINTARS、もしくは領域化学輸送モデル NHM-Chem, WRF-Chem などのエアロゾルモジュールにおける混合状態（黒色炭素粒子と硫酸エアロゾルなどの異種のエアロゾル同士の混ざり具合）の導入などが必要となる。これにより、大気中におけるエアロゾルの状態変化を陽にモデルで見積もれるようになる。その際、モデル内で扱う大気中の化学物質の種類は現在の 4-5 倍程度に増加し、その結果、演算量も 4-5 倍に増加することが想定される。効率よく計算するためにはベクトルプロセッサもしくは SIMD の効果的な利用が必須である。

国内で広く使われているモデルとしては地球システムモデルである MIROC-ESM およびその大気化学、エアロゾルコンポーネントに特化した CHASER、同じく地球システムモデルの MRI-ESM およびそのエアロゾルモデルである MASINGAR、気象庁の非静力学メソ数値モデル NHM に化学過程を実装した NHM-Chem、全球雲解像モデル NICAM に化学過程を実装した NICAM-CHEM などがある。計算手法およびアプリケーションとしては MIROC、NICAM、CHASER、MRI-ESM などと LETKF とを組み合わせたデータ同化が想定される。計算機資源としては現状の環境同化では、300km 程度の水平解像度を用いたケースが中心だが、大気中の化学反応については空間スケールに対して非線形があるため、都市が解像できる 50-100 km 程度の水平解像度は必要と考えられる。また将来的な衛星データはおおよそ 1-10 km 程度の空間解像度を有すると考えられるため、長期的にはそれと同程度の空間解像度での領域モデルを用いた計算も想定する必要がある。本稿では、代表して、CHASER-LETKF を想定する。

現在気象分野で用いられているデータ同化手法には、大きく分けて変分法とアンサンブルカルマンフィルターがある。将来的な方向として、アンサンブルカルマンフィルターにより得られる「その日の流れ場」を考慮した背景誤差共分散を 4 次元変分法の中で利用することにより精度向上を図る、ハイブリッド手法があり、近年盛んに研究されている。また、これらのデータ同化手法が確率分布のガウス性を仮定しているのに対し、非ガウス性を考慮することが可能な粒子フィルター法を気象モデルに適用する研究も進んでおり、降水過程などの非ガウス性の強い現象に対して効果を発揮することが期待される。ここでは並列計算性能に優れ、多くの実績がある LETKF について評価を行う。

2.10.4 ロードマップ

課題	年代	2016～	2018～	2020～	2022～	2024～	2026～
全球規模での防災		全球LESに向けたモデル改良 雲システム解像モデルによる地球温暖化予測 高解像度シームレス予測システムの開発			全球LESモデルの開発 深い対流を解像するモデルによる 地球温暖化予測 高解像度シームレス予測システムの検証		
地域スケールでの気象気候予測		LES現実大気実験に向けた手法の改良 大気・海洋の乱流と粗過程との相互作用解明		雲・エアロゾル相互作用解明	LESモデルによる広領域現実大気実験 高解像度LES実験と検証(解像度10m以下)		
大気環境予測		大気汚染物質のデータ同化システムの開発		大気汚染物質データ同化予報システムの検証			
データ同化		全球アンサンブルデータ同化手法の開発 (全球3.5km解像度) 高頻度データ同化システム開発・実証実験 (領域100m解像度モデル) 観測ビッグデータ同化に向けたシステム開発		エアロゾルの大気中動態のモデル精緻化 地表放出量分布の精緻化	地球システムモデルによる強結合 データ同化システムの開発 高解像度データ同化手法の開発 (解像度数10m以下) 粒子フィルタ等の非ガウス性を考慮した データ同化手法の開発		

図 2.17 気象・気候ロードマップ

2.10.5 必要な計算機資源

2026年頃における課題解決のために必要な計算機資源の見積りを行い、代表的アプリケーションについて、2章末尾の表2.1に記載した。また、計算機資源の見積りの詳細は第4.10節に記載している。

2.11 宇宙・天文

2.11.1 分野の概要

宇宙・天文の分野では地球の外で起こる現象の全てを研究対象とする。したがってその空間スケールは隕石等、地球よりも小さいものから、銀河といったような地球より圧倒的に大きなもの、さらには我々と因果関係を持ちうる時間・空間領域全体として定義される我々の宇宙それ自体まで及ぶことになる。研究手法としては、望遠鏡で天体を観測し、そこで何が起こっているのかを物理的に理解するというのが、一般的である。ただし、現代では現象をより詳細に理解するため、天体现象の数値シミュレーションを行い、観測と比較することの重要性が高まっている。

宇宙の大きな空間スケールでは長距離に働く引力である重力が支配的になる。他の力のうち、強い力と弱い力は短距離にしか働くかず、最後に残った電磁気力は引力と斥力が両方働くため、天体のような大きな塊では片方の力が卓越しない。結果として天体の運動は重力に支配されることになる。このような理由から、宇宙の研究は重力の研究と馴染み深い。有名な例としては、ケプラーらが貯めてきた惑星の運動に関する観測的な知見をニュートンが万有引力の法則として整理したことが思い浮かぶ。ただし、ニュートンの理論も完璧ではなかった。太陽に最も近い惑星である水星の運動は、ニュートンの理論では記述できず、アインシュタインの一般相対性理論が必要になる。一般相対性理論は今のところは観測された全ての現象と無矛盾であるが、将来的に観測の手段や精度が改善されれば、いつかは水星の例のように現実とのギャップが現れるかもしれない。その意味で、一般相対性理論も検証すべき仮説である。また、たとえニュートンの理論が適応できる範囲内の現象でも複数の粒子や広がった密度分布が作る重力中の運動は解析的には解けないため、重力が作る構造・密度分布を予想するためには、一般に数値シミュレーションを行う必要があり、多くの未解決な問題がある。

宇宙・天文の分野でもう一つの重要なファクターは光である。上記のように天体の運動は重力が支配するかもしれないが、我々がその運動を認知するためには望遠鏡で光の観測をする必要がある。例えば光のスペクトラムを見れば放射源の温度が分かるように、光がどのように放射され、伝搬するのかを理解することができれば、天体の様子を深く知ることができるのである。ただし、光というのは一般にエネルギーが低ければ波動性を示し、エネルギーが高ければ粒子性を示すなど、多様な取り扱いを要求し、そこに宇宙・天文の研究の難しさがある。天体からの光の放射には一般には複雑な機構が介在し、定量的な評価を行うためには数値シミュレーションを行わなければならない。

本節では代表的な5課題を紹介するが、宇宙物理は本来は非常に幅広い分野であり、全てを網羅的に紹介するのは難しい。もう少し幅広い説明は4.11節に譲る。

2.11.2 長期目標と社会貢献

古来より天文学・宇宙物理学は二つの側面から社会に貢献してきた。一つは天動説対地動説のような我々の世界観の理解という哲学的側面であり、もう一つは農耕や航海術に使われてきた実学的な側面である。ここではより具体的に天文学・宇宙物理学が社会に貢献する理由を4つに大きくわけ、その内容や目標を紹介したい。4つとはそれぞれ(1)宇宙史の探求、(2)新たな物理法則の探求、(3)宇宙における

生命存在の意味の探求、(4) 宇宙環境学の推進である。それぞれ詳しく見ていく。

(1) 宇宙史の探求 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、現在の宇宙論は観測に支えられた精密科学となっている。なぜなら、遠くの宇宙をみることで過去の宇宙を直接見ることができるからである。例えば10万光年遠く（光年は距離の単位である）の天体から出た光は10万年かけて地球の望遠鏡に届き、10万年前のその天体の姿を知らせてくれる。

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。例えば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。

現代の宇宙像と宇宙史を図2.18に示す。現在の宇宙年齢は137億年である。宇宙誕生から38万年後にあたる時刻の情報である宇宙マイクロ波背景放射の精密な観測により、初期の宇宙は非常に熱い火の玉（ビッグバン）であったとわかつた。このときの宇宙の密度は比較的一様だが、その中でも密度が高いところが重力相互作用で収縮し、大規模な構造を作っていく。宇宙誕生から数億年経つと銀河が形成され、その中には $10^7\text{-}10^{14}$ 個の星が内包されている。このように宇宙は星や銀河など小さい構造の複雑な相互作用で大きな構造ができているが、現在のスーパーコンピューターでは銀河や星を一つ一つ解像しながら、大きな構造の進化を追うシミュレーションは不可能である。計算の規模を大きくし、小さなスケールの構造をなるべく解像しながら大きなスケールの構造の時間発展を追うのが長期的な課題となる。

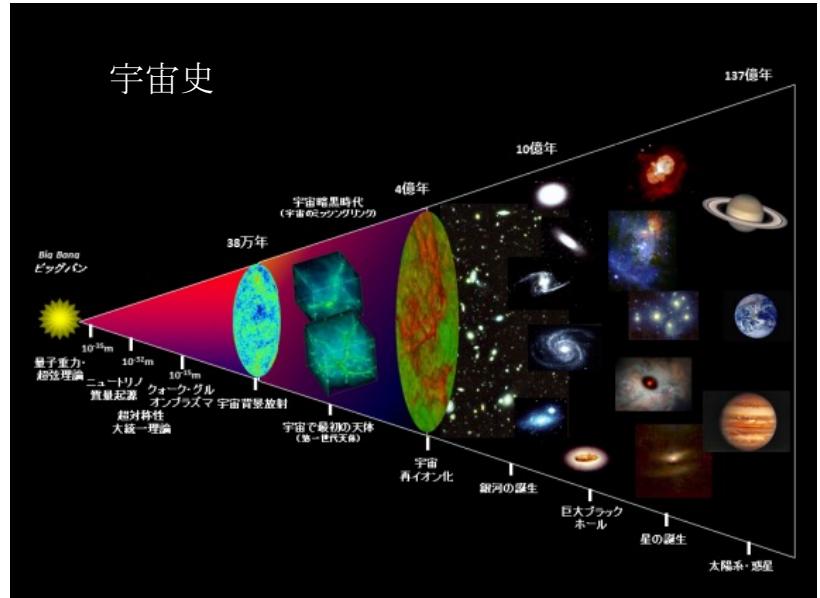


図 2.18 現在の宇宙観

(2) 新たな物理法則の探求 宇宙の環境は地球の環境とはかけ離れている。そのため、地上の実験では到達できないエネルギーや空間スケールを支配する未知の物理法則を探求する実験場として優れている。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。例えば、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、科学技術の精度が高まった今日、地球重力場においても、一般相対論の効果が顕わになっている。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。この時間の補正をしないと、位置情報は1日で11km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。

本領域での長期的な課題は、ブラックホール、ニュートリノ、超高エネルギー宇宙線、ダークマターおよびダークエネルギーに関してその正体や発生メカニズムを特定することである。最新の実験や観測に基づいた既知の物理法則を数値シミュレーションに全て反映させること、そしてそのシミュレーション結果を観測と比較することでこれらの謎に挑んでいく。ここではブラックホールと超高エネルギー宇宙線について取り上げる。

ブラックホールはアインシュタインの提唱した一般相対性理論の予測する強い重力を持つ天体である。ある質量の星を圧縮していくと、その質量により決定されるクリティカルな半径（シュヴァルツシルト半径）より小さくなるぐらい星を圧縮すると、光すらも逃げ出せない強重力な領域が表てくる。それがブラックホールである。提案当初は単なる理論的な存在と考えられていたが、大質量星の進化の理論の発達とともに、その存在可能性が現実味を帯び、現在では宇宙に多く存在する普遍的な天体であると考えられている。ブラックホールはその定義からして、本体が光を発することはないが、ブラックホールの周りに他の星が回っているとき、その星から流れてきたガスが円盤状にブラックホールを囲み、光を発する。その光は数多く観測されている。ブラックホールの存在の直接的な証明は、2015 年の重力波の直接検出によりなされた。重力波は質量の大きな天体が高速で運動する際に生じる時空のさざ波であり、やはり一般相対性論が予想するものである。観測された重力波は二つのブラックホールが互いに回りつつ合体したケースの理論予測と一致している。図 2.19 にその様子を示した。この歴史的なイベントを経て、今後は重力波を用いて天体现象を観測する重力天文学が可能になる。中性子星連星の合体および超新星爆発はそれらを発する重要な候補天体である。ブラックホールはその質量によって分類され、それぞれの名称は太陽の 3 倍から数十倍重い恒星質量ブラックホール、100 倍から 1000 倍重い中間質量ブラックホール、 $10^6\text{-}10^9$ 倍重い超大質量ブラックホールとなっている。

宇宙に漂う高エネルギー粒子、“宇宙線”の存在は、粒子と大気との衝突から生じるエアシャワーや地球磁気圏のその場観測により、確認されているが、その生成メカニズムには依然として多くの謎が残っている。なぜ、エネルギー等分配から外れて一部の粒子が選択的に超高エネルギーまで加速されるのだろうか。地上で観測される宇宙線のうち 10^{15} eV (eV はエネルギーの単位) までは我々の銀河系内の超新星爆発の後にできた超新星残骸という天体で作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^{15} eV を超える高エネルギーの領域になると、メカニズムだけでなく何処で加速されているのかについてもわかっていない。これらの高エネルギー粒子の起源は活動天体のダ



図 2.19 ブラックホール連星合体の様子 ©SXS COLLABORATION

イナミッ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。

(3) 宇宙における生命存在の意味の探求 「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、本領域が担う知の探求の究極の目標である。その問い合わせにきちんと答えるには、地球の成立を追うだけではなく、第二の地球（太陽系以外にある地球と環境が似た惑星）を探査・検証する必要がある。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、これらは誰もが一度は疑問に思うことであり、その研究に対する社会的な期待は大きい。この研究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ものである。本研究の長期的な課題は様々な惑星の形成・進化過程を解明し、我々の地球をそのシナリオの中に位置づけること、そして生命が生まれる環境の条件を精密化し、我々や我々以外の生命がどうして生まれて来たのか明らかにすることである。

現在標準だと考えられている、惑星の形成過程を図

2.20 に示した。上から下へ時間発展していく。惑星系が形成される母体となるのは原始惑星系円盤と言われるガスとダスト微粒子からなる円盤状構造である（上から一番目の状態）。これは中心星の周囲に形成される。そのダスト微粒子が衝突合体を繰り返し、微惑星（上から二番目の状態）、原始惑星（三番目の状態）、惑星（五番目の状態）とだんだん大きく育っていく。微惑星の状態ではガスとの相互作用を考える必要があり、微惑星が中心星に飲み込まれずに成長できるかは自明ではない。また原始惑星に育ったあととの衝突合体も典型的な状況でのシミュレーションしか行われられておらず、ケーススタディが不十分である。上記のような複雑な形成過程を経て出来た惑星は質量、組成、中心星からの距離等がそれぞれ異なり、様々な個性を持っている。惑星形成後の時間発展を追うためには地球型惑星、木星型惑星等の違いを考慮にいれながら、天体内部および表層の構造分化と

その時間発展を探求する必要がある。天体内部では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が発現する。中心部の岩石の回りに気体をまとった天体では表層の研究も重要であり、中心星の活動度に対する、惑星気象・気候の多様性が熱心に研究されている。最後に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が続く。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入射する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。上記のようなシナリオの上に太陽～地球系での生命の発生を位置づけたい。

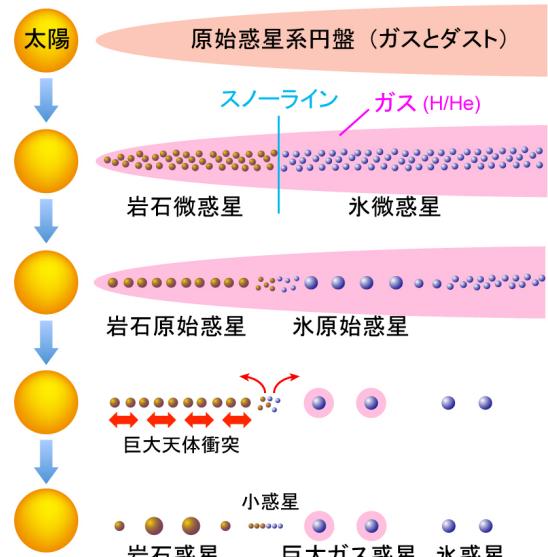


図 2.20 原始惑星系円盤から惑星形成までの時間進化

(4) 宇宙環境学の推進 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、強い太陽風が生じ、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て故障し、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、太陽系の環境科学の推進が必要である。

この分野の長期的な課題は太陽の内側、太陽の表面、そして地球の近傍の 3 つの領域にわたるプラズマの運動と磁気的な性質を明らかにすることである。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。太陽の様子は図 2.21 の左に表示した。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、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。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直接的な衝突ではなく、電磁場を介した運動量のやりとりで生じる衝撃波となる。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。この過程の様子は図 2.21 の右に表示した。

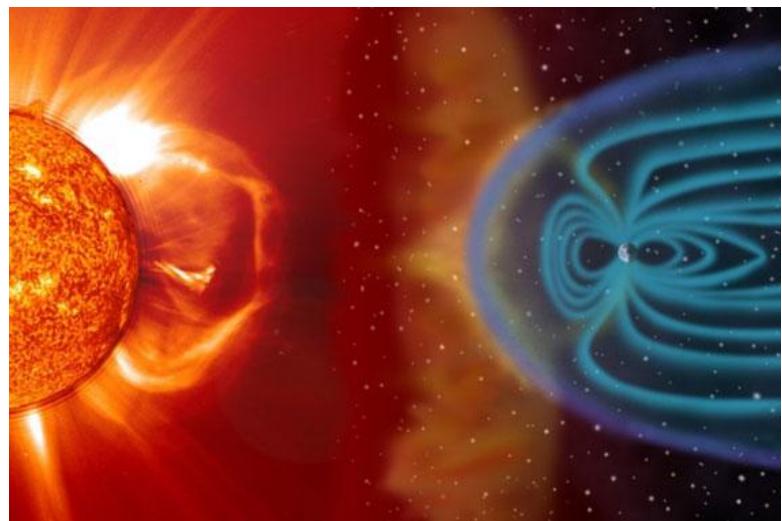


図 2.21 太陽（左）と地球磁気圏（右）。右の磁力線に囲まれた小さな球が地球を表している。©SOHO/LASCO/EIT NASA, ESA

2.11.3 課題とその解決に必要な計算手法・アプリケーション

前節で紹介した長期的な課題を解決するため、具体的にはどのような研究が行われているのかをそれぞれ短く紹介したい。宇宙史の探求からは (i) 宇宙の構造形成、新たな物理の探求からは (ii) 超新星の爆発機構と (iii) 宇宙線加速機構、惑星形成と宇宙生物学からは (iv) 原始惑星系円盤からの惑星形成、宇宙環境学の推進からは (v) 太陽ダイナモの話題をそれぞれとりあげる。繰り返しになるが、宇宙物理は本来は非常に幅広い分野であり、これ以外の研究も活発に行われている。もう少し幅広い説明は 4.11 節に譲る。

(i) 自己重力 N 体シミュレーションによる宇宙構造形成の解明

本研究の対象はダークマターの密度揺らぎからはじまる、星、銀河などの多様なスケールの構造形成である。図 2.22 にその典型的な様子を示す。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。ここで N 体シミュレーションとは粒子が N 個存在したときに、それぞれの粒子間距離から粒子間重力を計算し、すべての粒子間相互作用を計算することでその N 個の粒子の運動を解いて行く方法である。大粒子数・小タイムステップ数では「京」で兆程度の粒子数が扱えるが、宇宙初期の星形成スケールから、現在の銀河スケールを同時にシミュレーションするのに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 100 兆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。

過去 20 年以上にわたる研究により、宇宙論的な枠組みの中で宇宙初期にできた星（初代星）の形成過程が明らかになってきた。今まで生き残ることが可能なほどの、低質量の初代星の存在が示唆されている。生き残った初代星の観測を通して、宇宙初期の構造形成史を制限することができる。それには、初代星が銀河系内のどこにどれくらい生き残っているかを、理論的に理解しておく必要がある。

宇宙初期の星形成スケールから銀河系スケールを同時に理解するには、銀河系一つを 1 兆粒子程度で分解する必要がある。銀河系の形成史や環境にどのように影響するかを調べるために、数十以上の銀河系をシミュレーションするとすれば、全体として 100 兆以上の粒子数の計算が要求される。

(ii) 第一原理ニュートリノ輻射流体計算による超新星爆発メカニズムの探究

重力崩壊型超新星爆発は、太陽より質量がおよそ 10 倍～100 倍も大きい、重い星の最期におこる爆発的な華々しい天体现象である。様々な重い星がどのような超新星となり、どのような重元素を作り出し周辺に撒き散らすのか、中性子星あるいはブラックホールなどの極限天体を生み出すのかを定めることは、銀河・宇宙スケールにわたる物質階層の形成や進化を探るうえでも欠かせない。今までの計算資源では何らかの制約のもとで数値シミュレーションを行わざるをえないため、明確に答えを導くことが難しかった。しかし、将来の計算資源が十分なものになれば、第一原理的計算である「7 次元一般相対論的ニュートリノ輻射流体計算」が可能となる（空間 3 次元、運動量 3 次元、時間 1 次元で合わせて 7 次元）。一般に次元が一つ増えると必要な計算資源は 100 倍程度になる。これにより、半世紀以上にわたり謎とされてきた「爆発メカニズム」の最終的な答えを導き出して、星中心の鉄コア重力崩壊から爆発へいたる標準的なシナリオを確定できる。これをもとに様々な星の運命を系統的に定め、そうした計算からの予言と観測結果を照らし合わせて超新星現象の全容を明らかにすることが主たる目標である。

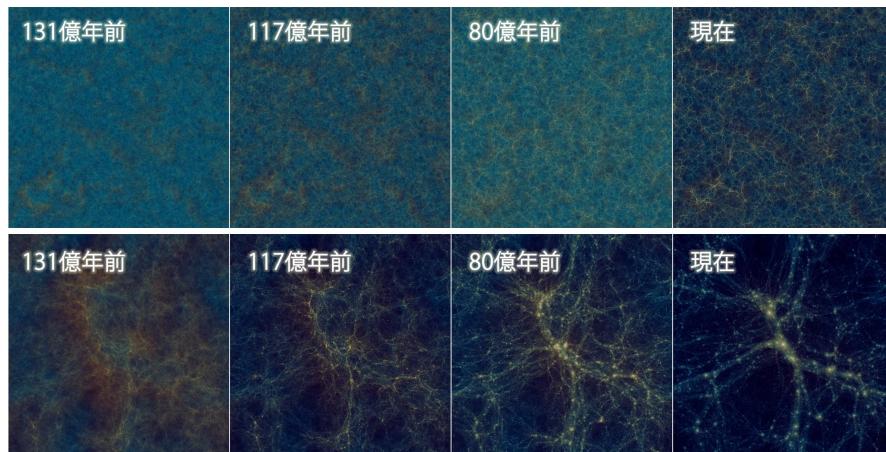


図 2.22 ダークマターの分布の進化: 明るさはダークマターの空間密度を表し、明るいところほど密度が高い。宇宙が生まれてすぐはほぼ一様（左）だが、時間が経つにつれて（順番に右へ）重力により集まり、大きな構造が形成される。上段と下段は空間スケールが異なる 2 種類のシミュレーションで、上段は一辺約 54 億光年、下段は一辺約 3.3 億光年である。

爆発メカニズムを確定させつつ、そのメカニズムの普遍性を探るために複数の初期条件の計算が必要であり、ニュートリノ輻射流体力学と一般相対論の効果を段階的に取り入れるとともに、効率のよい計算手法を開発する連携した研究を行う必要がある。この時、ニュートリノ輻射輸送の基礎方程式であるボルツマン方程式を解く計算手法が基軸となる。現在までに、京コンピュータにより、第一原理的なマルチアンダル法による空間 2 次元（軸対称）運動量空間 3 次元における超新星爆発シミュレーションが可能となった。この時点の計算資源の規模で、近似手法においては空間 2 次元・運動量 1 次元の数 100 例におよぶ探索計算が行なわれており、空間 3 次元・運動量 1 次元の計算も複数例にわたって計算可能となっている。図 2.23 の左パネルにその様子を示した。

このように第一原理計算が実現可能となった際には、その一部を近似した軽量化計算での系統的な研究が可能となっている。今後の研究においても、第一原理計算の実現と系統的な探索を並行して全体を網羅する研究を進める。「ポスト京コンピュータ」の実現が見込まれる 2020 年頃には 3 次元空間における第一原理計算が可能となるだろう。この時、軽量化計算では 3 次元空間における系統的計算が可能となり、元素合成やニュートリノ・重力波などの観測量の予測データを提供するようになるだろう。

2020 年初頭の段階では、重力場の取り扱いに制限を課して現象論的に一般相対論的な効果を取り入れることを重視するが、計算資源の増大とともに段階的に制限を取り除き最終的には一般相対論的な効果を完全に取り入れる。これにより代表的な星については究極の計算が行なわれて標準的な爆発メカニズムについての断定的な解明が期待される。また軽量化計算による系統的な計算によりメカニズムの多様性が明らかになり、観測量も一般相対論に基づいた信頼度の高いものとなるだろう。将来的にはブラックホール形成などの例も扱えるようになる。こうした計算が可能となれば磁場を含む計算が視野に入り、重力崩壊型超新星に関連した現象であるマグネター・ガンマ線バーストの解明にも深いメスが入れられるようになる。

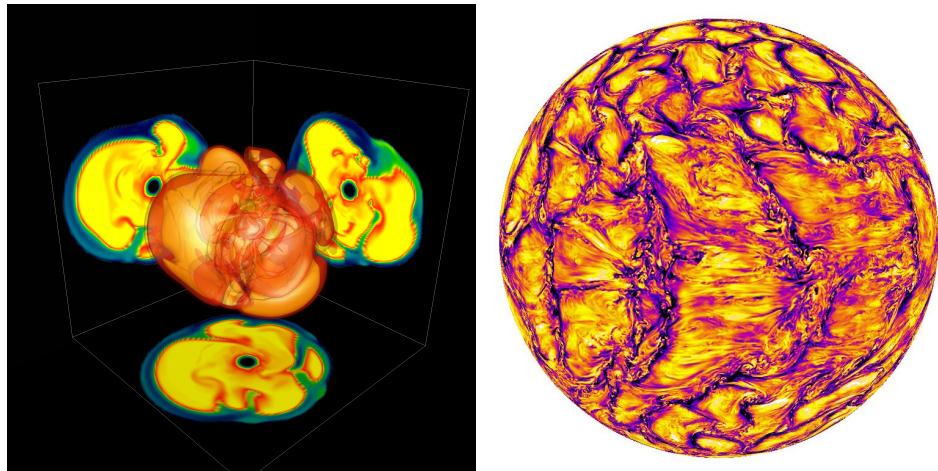


図 2.23 左：13 太陽質量の親星の超新星爆発の 3 次元計算。星の中心の 1000km を切り出してきてその爆発の強さの指標であるエントロピー表示している。右：太陽全球計算の結果。鉛直方向の速度を可視化。回転の影響を受けた乱流が複雑であるが、規則だったパターンを見せている。

(iii) 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

非熱的粒子加速には、粒子間の直接的な衝突はないと近似できる状況下、粒子と電磁場の相互作用を解くプラズマ粒子法と呼ばれる方法を用いた研究が進んできている。計算手法は、プラズマを超粒子としてラグランジュ的に解きつつ、マクスウェル方程式の時間発展をオイラー的に差分法で解く、particle-in-cell 法が広く採用されている。1970 年代から 80 年代にプラズマ粒子コードの基本アルゴリズムは完成しており、核融合プラズマを始めスペースプラズマ現象の理解などにも供され大きな成果を上げてきた。また 1990 年代ごろから積極的に天体现象にも用いられるようになってきている。最近では、超強磁場でのリコネクション問題を解くために、輻射減衰を組み込んだコードの開発も始まっており、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の天体现象や強光子場（レーザープラズマ）での相対論的プラズマ領域での研究も行われている。高エネルギー天体现象の解明には、相対論的プラズマの理解が必要となっており、新たな数値アルゴリズムやスキームの開発が行われようとしている。特に数値チエレンコフ問題への対処は急務である。

プラズマ粒子計算は、これまでスケールを限定した理想的な状況設定の問題にしか使われてこなかったが、スパコンの技術革新に伴い、より大きなスケールでの計算が可能になってきた。電子スケールを解像しつつ、陽子スケールを越えた流体现象を取り扱うことにより、熱浴から非熱的高エネルギー粒子が生成するさまを明らかにすることが可能となる。そのような大規模なシステムを扱うためには、約 1 京粒子の運動と電磁場の発展を自己無撞着に解き進める必要がある。

(iv) 惑星系形成の大域シミュレーション

惑星系形成の理論構築には、主に N 体シミュレーションが用いられている。本研究ではこれまでより大規模な計算を行い、「惑星のその場形成」という古典的形成論の刷新を目指す。この古典的形成論は数千から 1 万体の粒子数の N 体計算により検証された理論で、以下のようなシナリオである。ガスとダス

トの円盤内でダストが重力不安定をおこし、キロメートルサイズの微惑星を形成する。それらの微惑星は衝突合体をおこし、大きい物が暴走的に成長する暴走成長段階を経る。その天体は周りの微惑星を食べながら成長する寡占成長段階を迎え、火星サイズの原始惑星が形成される。最後に原始惑星どうしの巨大衝突がおこり、地球型惑星が誕生する。

このような古典的形成論には以下のようないくつかの問題点があり、より大規模で粒子数の大きな計算が、問題を解決することが期待されている。

これまでの計算では、初期条件の微惑星の質量が大きすぎるせいで、円盤の外側への動径方向の移動が追えていた。動径方向の移動を考慮できないと物質の円盤内の循環ということもとりあつかえない。今後の計算では微惑星の最小質量をこれまでの $1/10 - 1/100$ 倍にすることで N 体ダイナミクスを記述するまでの解像度を向上させる。

これまで粒子数に制限があったために動径方向の移動を考慮できるほど動径方向に広い微惑星円盤の初期条件から計算を始めることが出来なかつた。今後は、円盤内で水が氷になる雪線も含めた広い円盤を考慮し、計算を行う。円盤で雪線以遠内では固体面密度が増え、衝突確率が増加し、惑星の成長速度が雪線のすぐ内側より速くなる。つまり、大きな天体が円盤の内縁と雪線のすぐ外側で同時に形成されるということになる。それらの集積進化を同時に解くには、解像度をあげたまま粒子数を増やし広い円盤においてシミュレーションする必要がある。

本来、天体どうしが衝突をおこしたとき、衝突破壊がおこり、破片が生成される。天体どうしの衝突がおこったとき今まで完全に合体させていたが、衝突破壊による破片もシミュレーションにいれたところ、微惑星が成長しつつ、動径方向に移動することがテスト計算により明らかになった。この破片の効果も大規模シミュレーションに入れる必要がある。今後は天体衝突時の破片生成過程も導入し、天体の合体成長だけでなく、微小天体の生成も同時に追跡する。

微惑星の集積はガス円盤の中で進む。ガスがあることにより、天体にはガス抵抗とタイプ1惑星移動の効果が働く。両方の効果とも、天体を動径方向内側へひきずっていく効果があることが知られている。特に月質量以上になると、タイプ1惑星移動の効果は強く効いてきて、惑星が中心星に落ちて行くという問題がある。しかし、これらの効果は惑星からガスへのバックリアクションを考慮したものではなく、実際はガスと天体がどのように相互作用するのかは明らかにされていない。今後はガスもある質量の塊をひとまとめとみなした SPH 粒子 (Smoothed Particle Hydrodynamics) として扱い、天体とガスとの相互作用を明らかにする。微惑星や原始惑星がガス円盤の中でどのようにガス抵抗やタイプ1惑星移動をうけるかというのを、天体からガスへのバックリアクションも考慮して計算するためにガスも SPH 粒子として扱い、大規模シミュレーションを実行する。

上記の通り、今後の大規模シミュレーションの課題はいかに大粒子のシミュレーションを行うことができるかということになる。

(v) 輻射磁気流体計算による太陽恒星ダイナモの探求

本研究の最終目標は太陽の黒点数が 11 年周期で変動する謎を解明することである。11 年周期は、乱流と磁場、回転の相互作用の結果として発現すると考えられている。しかし、なぜ 11 年になるのか、また、それにともなう磁場の進化に出現する首尾一貫した法則が存在する理由は全く分かっていない。そうしたルールを司る未知の物理があるのではないかと考えられている。

これまでに、全球殻（半径に比べて 98% の部分）を領域とした計算で、10-20 年程度のランダムな磁場周期が再現できるようになっている。しかし、時間・空間スケールの小さな太陽表面付近は非常に高解像度が必要で計算領域に取り入れることはできていないために、計算の中に黒点は出現していない。また、太陽のように 11 年の規則的な周期も再現できていない。これが今後の研究の課題である。

近年の大きな発展として音速抑制法を用いることで、対流層の底から表面（99% の部分）までを扱い、対流層内部の磁場生成から黒点らしきものの形成までを一貫してあつかうことができるようになってきた。図 2.23 の右パネルは音速抑制法によって得られた計算のスナップショットである。今後は対流層内部で乱流の慣性領域を二桁程度解像することで、規則正しい周期を再現したい。

ポスト京の完成する 2022 年頃までは、ある程度領域を水平方向に制限して、対流層の底から恣意的においた磁束管が光球に浮上する様子を再現する（180 億格子点）。ポスト京完成後は、太陽全球を包括した計算で磁場生成から黒点の形成までをあつかう計算をおこなう。

2.11.4 ロードマップ

年代 課題	2016 ~	2018 ~	2020 ~	2022 ~	2024 ~	2026 ~
(i) 宇宙構造形成のN体シミュレーション		1兆粒子		10兆粒子		100兆粒子
(ii) 超新星爆発のニュートリノ輐射流体シミュレーション	3次元ニュートリノ 輐射流体計算		一般相対論による 第一原理計算		磁場を含む 第一原理計算へ	
(iii) 相対論的プラズマ粒子シミュレーション		1兆粒子		10-100兆粒子		1京粒子
(iv) 惑星系形成シミュレーション		1億粒子		10億粒子		100億粒子
(v) 太陽ダイナモの輐射磁気流体シミュレーション		200億格子点			2兆格子点	

図 2.24 宇宙・天文分野の代表的な課題のロードマップ

前節で紹介した (i) から (v) の課題のロードマップを図 2.24 にまとめる。(i)、(iii)、(iv) は粒子法であり、解像度を上げることを目標としている。数値シミュレーションでは解像度を上げるとこれまで見られなかった現象が起こることがよくある。これはある空間、時間スケールで特に発達する現象があるからである。流体不安定性がその代表であり、高解像度の計算をして初めて起こるものも多い。(ii)、(v) はメッシュ法を用いている。(v) は解像度の増強を目標としており、やはりそのことで生じる新たな現象がシミュレーションをより現実に近づけると予想している。(ii) は解像度ではなく計算手法を刷新しており、現実に近い計算をするために、様々な効果をシミュレーションに取り込んでいる。それらは一般により多くの計算資源を要求する。

2.11.5 必要な計算機資源

2026 年頃における課題解決のために必要な計算機資源の見積りを行い、代表的アプリケーションについて、2 章末尾の表 2.1 に記載した。また、計算機資源の見積りの詳細は第 4.11 節に記載している。

2.12 計算機要求性能まとめ

ここでは、2026年頃における課題解決のために必要な計算機資源見積りを、代表的アプリケーションに対する要求性能表としてまとめる。

「計算科学ロードマップ」アプリケーション要求性能表

※ 現在検査中。更新版はWebに掲載予定。<http://hpcl-apfs.ajcs.riken.jp/kentoukai/>

表 2.1 要求性能表 (1/2)

表 2.2 要求性能表 (2/2)

第3章

アプリケーションの分類

3.1 アプリケーションカテゴリ分け

2011年度の「計算科学ロードマップ」では、演算速度、必要なメモリ量、メモリバンド幅、ノード間通信バンド幅、ノード間通信レイテンシの観点からアプリケーションの要求を概観することを試みた。

その結果、特に重要なパラメータは、演算速度を一定とした時

- 演算速度に対するメモリバンド幅（いわゆる B/F 比）
- 総メモリ容量

であるということが示された。これは、ネットワーク速度、特にレイテンシを大きく下げる手段がないためにそのような性能を要求するアプリケーションが開発されていない、という面もあるが、ネットワークの要求は多くのアプリケーションにおいてそれほどクリティカルではないということである。

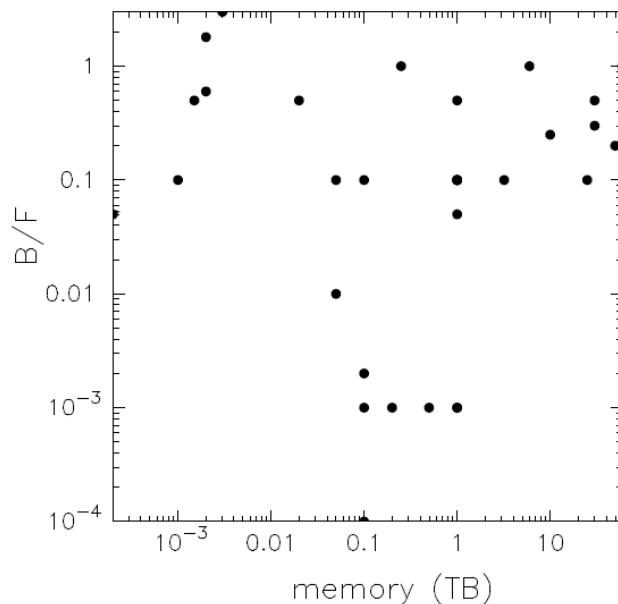


図 3.1 2011 年度「計算科学ロードマップ白書」でのアプリケーションの必要メモリ量とメモリバンド幅。メモリ量は演算性能 100Tflops 当り

図 3.1 に、2011 年度「計算科学ロードマップ白書」での、アプリケーション必要メモリ量とメモリバンド幅の分布をしめす。横軸は 100TF あたりとなっているので、1EF に対する値としては 4 術あげてみてほしい。

図 3.2 に今回集計したものをしめす。基本的な傾向は変わっておらず、多くのアプリケーションは B/F が 0.1 から 1 の間、必要メモリは 1TB から 100PB の間に分布する。いくつかのアプリケーションでは、必要な B/F が 0.1 よりも小さい。また、必要メモリ量が 100TB 以下のものも多い。

メモリの必要量については、今回アプリケーション開発者の書いた数値をそのままプロットしているが、精査すれば 1-2 術減るものもいくつかある。例えば古典 MD で 10 億原子、メモリ必要量 100TB と

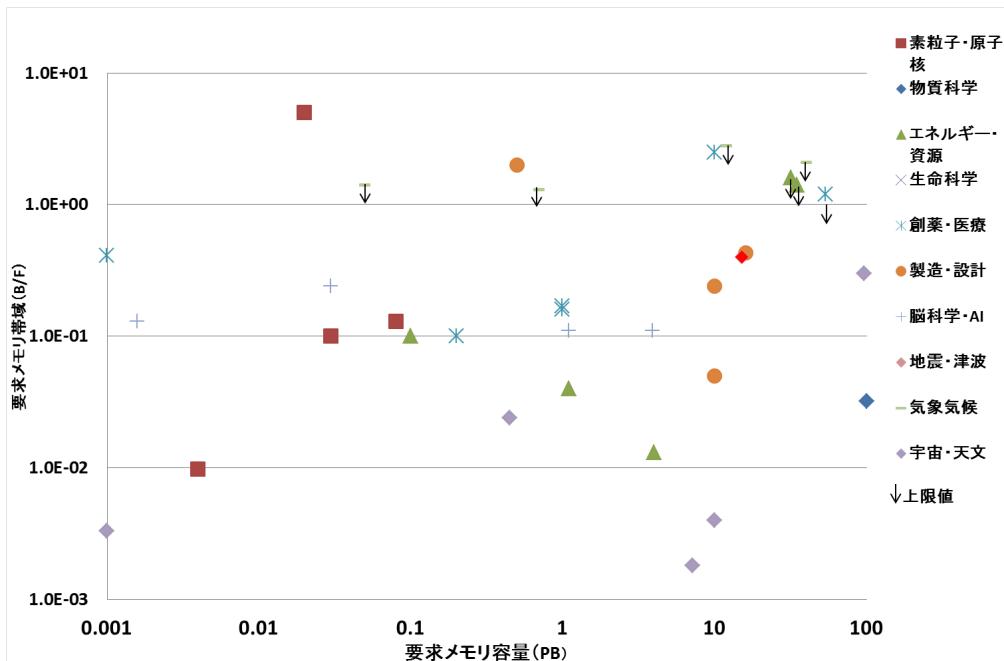


図 3.2 今回のロードマップにおけるアプリケーションの必要メモリ量とメモリバンド幅

なっているものがあるが、これは1原子あたり100KBに相当する。実際に必要なメモリは100B-1KB程度であろう。

その他、10兆自由度でメモリ150PBというものもあり、これも少し多いように思われる。

B/F要求値についても、1を超えているものがいくつかあるが、例えば規則格子陽的差分法で1を越えるもの等は実装法の改良によって1桁程度減少させることは可能と思われる。一方、構造解析や流体解析等での非構造格子を用いた非線型有限要素法では、原理的に4-6程度のB/Fが必要とされるが、実効効率として低い値を想定した結果B/Fに低い値が記載されている。言い換えると、非構造格子上での反復解法については、演算量を最小にするには極めて高いメモリバンド幅が必要である。が、一方、4章6節で議論されるように、EBE-MSF等の方法では必要なB/F比が全く変わってくる。

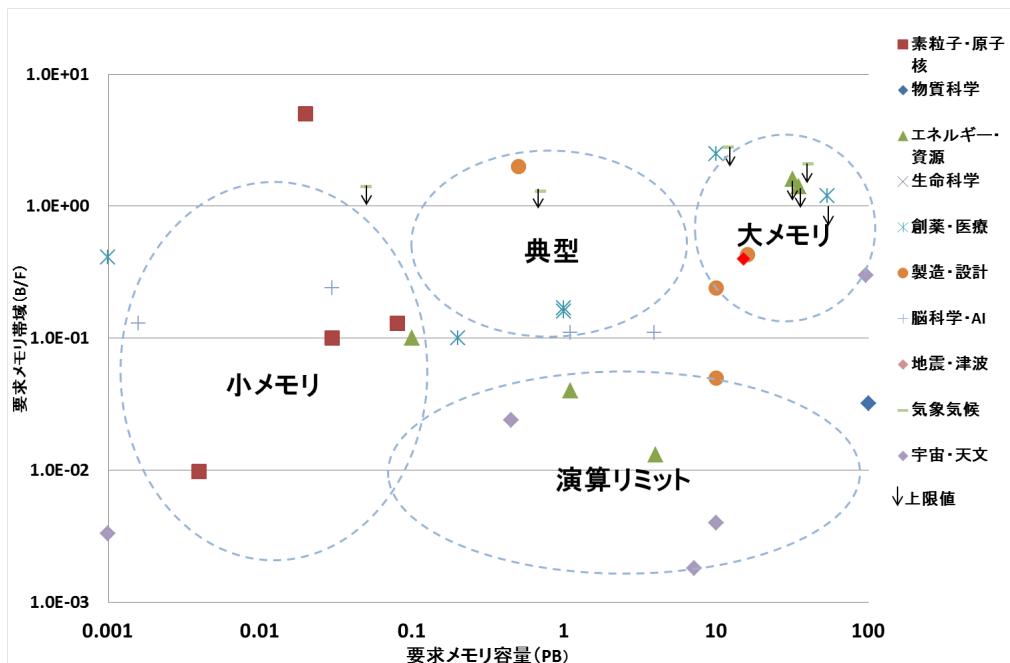
つまり、B/Fで1を超える領域に本当にニーズがあるかどうかは難しい問題であり、適切なソフトウェア環境の提供により多くのアプリケーションで必要なB/F値を大きく下げることは可能と思われる。

一方、格子点数や粒子数で1000兆前後の計算も課題に上がっており、これらでは100PB程度のメモリは必要となる。すなわち、1-10EFで計算量的には可能になる課題には、100PBを超えるメモリを必要とするものは一定の割合で存在するといえる。

ハードウェア側の観点からは、例えば10EFのシステムを3nmテクノロジー、10万チップで構成するなら、オンチップのキャッシュメモリが1-4GB程度になるので、0.1-0.4PBまではオンチップで実行可能になる。一方、DRAMコストの急激な低下は今後期待が難しいので、チップあたりメモリが現在の32-64GBから例えば128GBまで増えるかどうかかも疑わしい。つまり、メモリ容量は10PB前後にとどまる可能性がある。

以上の観点から、アプリケーションを、大雑把に

1. 必要な B/F 値が 0.1 を下回るもの（演算リミットタイプ）
2. 必要なメモリ容量が 0.4PB を下回るもの（小メモリタイプ）
3. 必要な B/F 値が 0.1 以上、メモリ容量が 0.4-10PB のもの（典型アプリケーション）
4. 必要なメモリ容量が 10PB を下回るもの（大メモリタイプ）



と分けることができ、これに収まらないものについてはより詳細な検討が必要、と考えられる。

メモリ要求が 100PB を超えるものについては、DRAM 以外の技術が必要と考えられる。本節担当の個人的な意見としては、3 次元 SRAM がもっとも可能性が高く、ノードあたり 1TB 以上で高速なメモリを実現できるのではないかと推測する。

3.2 ミニアプリとの対応

3.2.1 はじめに

計算機ハードウェア・ソフトウェアの性能や機能を評価するためにベンチマークソフトウェアが用いられているが、それらは典型的にはアプリケーションから限られた一部を切り出したプログラムであったり、人工的に作成されたプログラムである。カーネルベンチマークと呼ばれるこれらの評価用プログラムは、通常のアプリケーションと比較してそのサイズは大幅に小さいものであり、システムの評価に用いややすい利点がある。一方で、カーネルベンチマークは実際のアプリケーションのごく一部のみを反映したものであり、実際のアプリケーション全体を評価できているとは限らない。しかしながら、特に開発途中のシステムの評価に巨大な実アプリケーションを用いることは技術的に困難であり、カーネルベンチマークのような簡易なプログラムが必要である。

より実際のアプリケーションに即しつつ、プログラムサイズを比較的小さなものとし評価に利用し易くすることを目的としたベンチマークとして、ミニアプリベンチマークが提唱されている。ミニアプリは実アプリケーションから評価に必要な箇所を残し、それ以外の非本質的なコードを可能な限り削除することでプログラム全体の見通しを改善する。また、コンパイル方法や実行方法などの文書化、入力データの整備などがあわせて必要である。実アプリケーションには限定的なライセンスにより配布が制限されているものも多いが、そのような制約は限定された範囲内における利用で問題とならないかもしれないが、第三者によるベンチマークとしての利用の場合は利用に関する制約は大きな障害となりうる。そのためミニアプリが非公開アプリケーションから作成された場合であってもミニアプリについてはオープンソースとすることが一般的である。

上記のような背景のもとに作成されたミニアプリは特にアプリケーションと計算機システムのコデザインに有効なツールとして用いられている。特に代表的なものとしては米国のコデザインセンターを中心に開発された Manteko や Lulesh などがあげられる。国内では理化学研究所が中心となって整備した Fiber があげられる。以下ではそれらについて概要を紹介し、本ロードマップのアプリケーションとの比較を示す。

3.2.2 Fiber ミニアプリ

Fiber ミニアプリ集 (Fiber Miniapp Suite) [1] は、理化学研究所および東京工業大学にて実施した「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」」[2] (以下、アプリ FS と呼ぶ)において整備開発したミニアプリ群をまとめたものである。アプリ FS 参加協力者から提供されたアプリケーションプログラムをベースに、完成後の一般公開を前提に、オリジナルアプリケーション開発者の協力のもとでミニアプリの整備開発が行われた。2017 年 3 月現在、著作権や性能面などでの問題が解決できなかつたものを除いた、8 つのミニアプリを Web 上で公開している。

Fiber では、前節で示した一般的なミニアプリの共通点の他に、以下のような特徴を持ったミニアプリ集を目標とした。

- 簡単にインストール、簡単に実行
- 正しくインストールされ、正しく実行されていることが検証可能なテスト
- システムの性能評価に使える入力データセット
- 将来(2018~2020年頃)の想定計算対象規模とそこでの目標性能に関する記述を含めたドキュメントの整備

また、その開発経緯により、ミニアプリ化されたアプリケーションは全て国内で開発されたものであり、事実上国内固有のアーキテクチャである京コンピュータ上でのインストール・実行が保証されている。

以下では、Fiberとして公開中の各ミニアプリに対して、計算対象と計算手法、使用言語と並列化ライブラリ、どのようにミニアプリ化したか、ソースコードサイズ、付随する入力データ、などを中心に簡単に紹介する。

(i) CCS QCD

ミニアプリ CCS QCD [3, 4] は、高エネルギー物理学で用いられる格子量子色力学（格子 QCD）計算における、最も計算コストがかかるクォーク伝搬関数の計算部部分を抜き出したものである。CCS QCD では、Wilson 型の作用を用いたクォーク伝搬関数の 4 次元格子上での大規模疎行列連立 1 次方程式を、red/black ordering により前処理をした係数行列に対して、BiCGStab 法により解いている。プログラムは Fortran90 で記述され、並列化は、空間 3 次元に対する MPI 領域分割と OpenMP スレッド並列を行っている。コメント行を除いたソースコードサイズは約 1 千行である。パッケージには、強スケーリングおよび弱スケーリングでの性能計測に対応可能な 6 つの入力データセットが含まれている。

(ii) FFVC Mini

ミニアプリ FFVC Mini は、直交等間隔格子上の有限体積法による熱流体解析プログラム FFV-C [5] をベースとしている。プログラム全体の制御は C++ で記述されているが、ホットスポット部分は Fortran90 により書かれている。空間 3 次元に対する MPI 領域分割と OpenMP により並列されている。ミニアプリ化にともない、計算対象を非圧縮流体に対する 3 次元キャビティ流れに限定した。コメント行を除いたソースコードサイズは約 9000 行である。ミニアプリ内で、強スケーリングおよび弱スケーリングでの性能計測に対応可能なグリッドデータを自動生成する。

(iii) NICAM-DC Mini

ミニアプリ NICAM-DC Mini は、全地球規模での気象現象をシミュレーションする大気大循環モデルのアプリケーション NICAM [6] のサブセット NICAM-DC [7] をベースにしている。NICAM-DC は、NICAM から力学過程 (Dynamical Core) のみを抜き出したミニアプリとなっている。NICAM-DC では、地球大気の運動を静水圧近似を行わない Navier-Stokes 方程式で記述し、それを球殻上の三次元格子を用いて有限体積法により離散化して解いている。水平方向の格子は、正二十面体を構成する正三角形要素を再帰的に分割していくことにより得られる全球で一様な三角格子を採用している。NICAM-DC は、Fortran90 で記述され、MPI による領域分割並列化がなされている。コメント行を除いたソースコードサイズは 3 万 5 千行である。ミニアプリ NICAM-DC Mini には、強スケーリングおよび弱スケーリングでの性能計測に対応可能な 5 つの入力データセットが付随している。

(iv) mVMC Mini

ミニアプリ mVMC Mini は、強相関電子系シミュレーションプログラム mVMC [8, 9] をベースとしている。mVMC は、近藤格子などの多体量子系有効模型の基底状態の波動関数を多変数変分モンテカルロ法により求める。mVMC は、C 言語で記述され、MPI および OpenMP により並列化されている。コメント行を除いたソースコードサイズは約 9 千行である。ミニアプリ mVMC Mini には、強スケーリングおよび弱スケーリングでの性能計測に対応可能な 2 つの入力データセットが付随している。

(v) NGS Analyzer Mini

ミニアプリ NGS Analyzer Mini のベースとなった NGS Analyzer は、次世代シークエンサーの出力データを高速に解析し、ヒト個人間の遺伝的差異やがんゲノムの突然変異を高い精度で同定するプログラムである [10]。NGS Analyzer Mini は、NGS Analyzer を大規模 I/O 性能および整数演算性能を評価するためのミニアプリとして整備したものである。2 つのオープンソースソフトウェアを含む 4 つの C/C++ プログラムと、ワークフローを制御する MPI 並列化された C プログラムとシェルスクリプト群で構成され、オープンソースソフトウェアを除いた総コードサイズは約 3 千行である。入力データはサイズが大きいため、付属ドキュメントの記述に従い、別途ダウンロードする必要がある。

(vi) MODYLAS Mini

ミニアプリ MODYLAS Mini は、古典分子動力学シミュレーションプログラム MODYLAS [11, 12] をベースにしている。MODYLAS では、クーロン相互作用を、八分木構造を持つ空間セル上での多重極展開計算により計算する Fast Multipole Method (FMM) 法を採用している。MODYLAS は Fortran90 で記述され、MPI および OpenMP による並列化がなされている。ミニアプリ化にともない、計算対象を水分子系のミクロカノニカル計算に限定している。コメント行を除いたソースコードサイズは 8.7 千行である。パッケージには、強スケーリングおよび弱スケーリングでの性能計測に対応可能な 3 つの入力データセットが付随している。

(vii) NTChem Mini

ミニアプリ NTChem Mini は、第一原理計算にもとづく電子状態計算プログラム NTChem [13] のサブパッケージ NTChem/RI-MP2 [14] をベースにしている。NTChem/RI-MP2 では、電子相関を 2 次の Møller-Plesset 摂動 (MP2) 法に対する resolution-of-identity(RI) 近似を用いて計算しており、演算は密行列に対する行列行列積計算が中心となる。NTChem/RI-MP2 は、Fortran90 で記述され、MPI および OpenMP により並列化されている。コメント行を除いたソースコードサイズは約 6.5 千行である。ミニアプリ NTChem Mini には小規模分子系のサンプル入力データのみが付属するが、別途、強スケーリング性能計測に対応可能な入力データがダウンロード可能である。

(viii) FFB Mini

ミニアプリ FFB Mini は、有限要素法による熱流体解析プログラム FrontFlow/blue (FFB) [15, 16] をベースにしている。ミニアプリ化にあたり、計算対象を六面体要素に対する基本的な非定常流体解析計

算に限定した。FFB Mini は Fortran90 で記述され、MPI により 3 次元領域分割並列化に対応している。また、京コンピュータおよび富士通 FX10 上での、自動並列によるスレッド並列計算に対応している。コメント行を除いたソースコードサイズは約 8 千行である。ミニアプリ内で、強スケーリングおよび弱スケーリングでの性能計測に対応可能なグリッドデータを自動生成する。

3.2.3 その他のミニアプリ関連プロジェクト

海外においても FIBER と同様にミニアプリを整備して性能評価用の共通情報資源として活用しようとする動向がある。

3.2.3.1 米国のミニアプリ関連 - CORAL プロジェクト

米国においては米国エネルギー省の管轄下にある Argonne 国立研究所、Lawrence Livermore 国立研究所、Oak Ridge 国立研究所の 3 研究所の HPC 調達共通化にともない、性能評価用に用いられる CORAL ベンチマークが公開されている [17, 18]。CORAL ベンチマークの内 LSMS, CAM-SE, QMCPACK, NAMD を除き、アプリは基本的にミニアプリである。

表 3.1 CORAL benchmarks (tier1 および tier2 アプリのみ掲載)

アプリ名	CORAL によるジャンル分け
LSMS, QBOX, HACC, Nekbone	Scalable Science Benchmarks
CAM-SE, UMT2013, AMG2013, MCB, QMCPACK, NAMD, LULESH, SNAP, miniFE	Throughput Benchmarks
Graph500, Integer Sort, Hash, SPECint2006	Data-Centric Benchmarks
CLOMP, IOR, CORAL MPI, STREAM, STRIDE, LCALS	Skeleton Benchmarks

これらのミニアプリ全体で以下の計算負荷を網羅するように選択されている。

表 3.2 CORAL benchmarks Platform Stress Areas

システムの部位	注目する主な計算負荷
計算コア	浮動小数点演算、SIMD/ベクトル化、整数・分岐処理
メモリアクセス	メモリバンド幅、連続・等間隔アクセス、不連続アクセス、大規模メモリ領域
ノード間通信	非局所的 P2P 通信、短いメッセージ、長いメッセージ、集合通信、バイセクションバンド幅
スレッド処理	細粒度スレッド処理

3.2.3.2 米国のミニアプリ関連 - MANTEVO プロジェクト

また、米国においてはコデザインを推進するためのミニアプリの開発整備それ自体に主眼をおいたプロジェクトの試みもあり、ミニアプリを用いた性能モデリングと実際のプラットフォームにおける挙動とのマッピングが 2009 年あたりから提唱されている。MANTEVO プロジェクトはそのようなプロジェクトの一つである [19]。MANTEVO プロジェクトの特徴として、ミニアプリの開発整備は全てフルアプリの開発者が行っていることがあげられる。以下に Workshop on Representative Applications 2015 [20] において紹介された MANTEVO3.0 ミニアプリのリストを示す。

表 3.3 MANTEVO 3.0 miniApp

アプリ名	計算内容
Cleverleaf	Eulerian on structured grid with AMR
CloverLeaf	Compressible Euler eqns, explicit 2nd order accurate
CoMD	Molecular dynamics(SPaSM)
EpetraBenchmarkTest	Exercises Epetra sparse and dense kernels
HPCCG	Unstructured implicit finiteelement
miniFE	Implicit finite element solver
miniGhost	FDM/FVM explicit (haloexchangefocus)
miniMD	Molecular dynamics(Lennard-Jones)
miniXyce	SPICE-style circuit simulator
miniAMR	Adaptive mesh refinement of an Eulerian mesh
miniSMAC2D	FD 2D incompressible N/S on a structured grid.
PathFinder	Signature search
miniAero	3D unstr FV R-K4th order time, inviscid Roe Flux
TeaLeaf	Solid mechanics

3.2.3.3 ヨーロッパのミニアプリ関連 - European Exascale プロジェクト

ヨーロッパにおいては 2013 年から 2016 年にかけて European Exascale Projects (FP7) の活動の中で整備されたアプリケーションがプロトアプリと称されているが、これらはミニアプリと同じ位置づけである。Mini-FEM, BPMF, ExaMD, OASIS3-MCT の各プロトアプリが公開されている [21]。

表 3.4 EXA2CT proto apps

アプリ名	計算内容
Mini-FEM	reproducing the assembly step of 3D FEM unstructured meshes
BPMF	A big data and machine learning proto application
ExaMD	A scalable proto-app library for Molecular Dynamics using the Adaptive Midpoint method
OASIS3-MCT	Coupling code by CERFACS, developed for climate applications

3.2.4 2章アプリケーションとミニアプリの対応

公開されている Fiber ミニアプリとサンプルデータを用いて計算を行った場合の B/F 値、および必要メモリ量を、2章アプリケーション要求性能値に重ねた図を図 3.3 に示す。3.1 節のアプリケーションの分類に従うと、「小メモリタイプ」、「典型アプリケーション」、「大メモリタイプ」は、Fiber ミニアプリでかなりの部分をカバーできていることが分かる。一方で、「演算リミットタイプ」については、対応する Fiber ミニアプリがなく、今後整備を進めていく必要があると考えられる。

「計算科学ロードマップ」アプリケーション要求性能値より

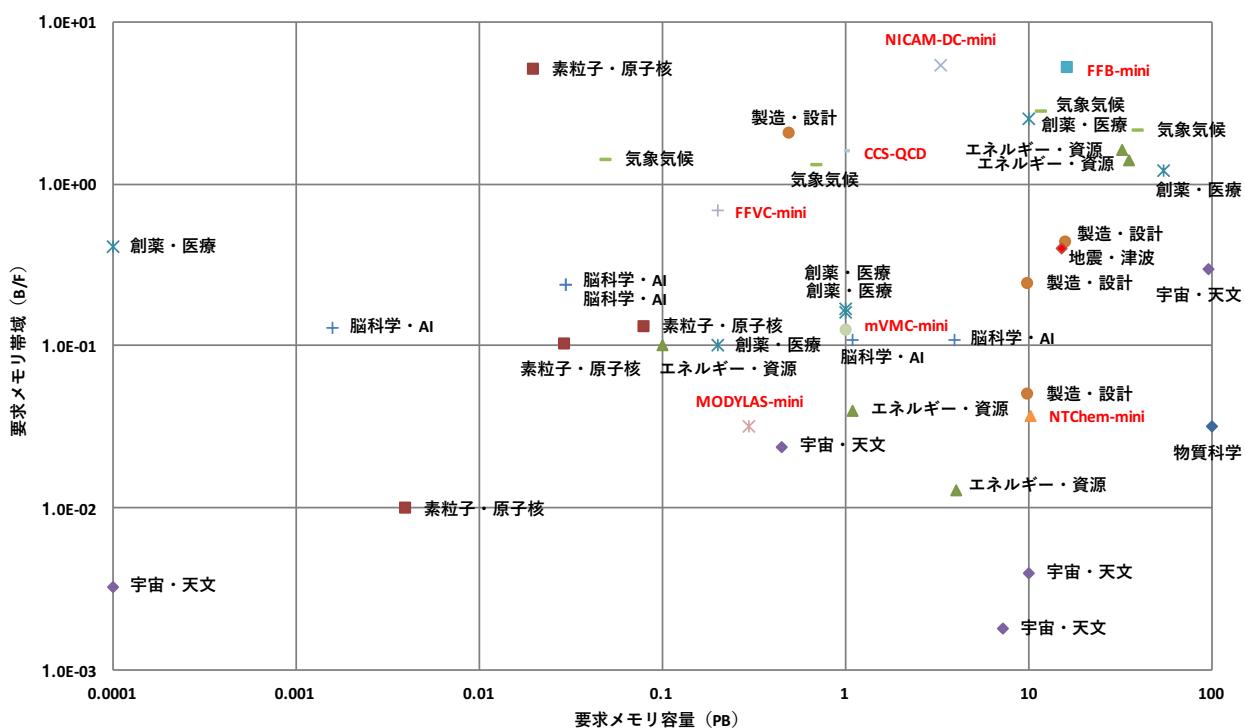


図 3.3 2章アプリケーションとミニアプリの対応

参考文献

- [1] Fiber MiniApp Suite. <http://fiber-miniapp.github.io/>.
- [2] 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」. <http://hpci-aplfs.aics.riken.jp/>.
- [3] T Boku, K-I Ishikawa, Y Kuramashi, K Minami, Y Nakamura, F Shoji, D Takahashi, M Terai, A Ukawa, and T Yoshie. Multi-block/multi-core SSOR preconditioner for the QCD quark solver for K computer. *arXiv preprint arXiv:1210.7398*, 2012.
- [4] 寺井優晃, 石川健一, 杉崎由典, 南一生, 庄司文由, 中村宣文, 藏増嘉伸, 横川三津夫. スーパーコンピュータ「京」における格子QCDの単体性能チューニング. 情報処理学会論文誌. コンピューティングシステム, Vol. 6, No. 3, pp. 43–57, 2013.
- [5] K. Ono, Y. Kawashima, and T. Kawanabe. Data Centric Framework for Large-scale High-performance Parallel Computation. *Procedia Comput. Sci.*, Vol. 29, No. 0, pp. 2336 – 2350, 2014.
- [6] M. Satoh, T. Matsuno, H. Tomita, H. Miura, T. Nasuno, and S. Iga. Nonhydrostatic icosahedral atmospheric model (NICAM) for global cloud resolving simulations. *J. Comput. Phys.*, Vol. 227, No. 7, pp. 3486–3514, 2008.
- [7] NICAM-DC. <http://scale.aics.riken.jp/nicamdc/>.
- [8] mVMC. <https://github.com/issp-center-dev/mVMC>.
- [9] D. Tahara and M. Imada. Variational Monte Carlo Method Combined with Quantum-Number Projection and Multi-Variable Optimization. *J. Phys. Soc. Jpn.*, Vol. 77, No. 11, p. 114701, 2008.
- [10] NGS Analyzer. http://www.csrp.riken.jp/application_d_e.html#D2.
- [11] MODYLAS. <http://www.modylas.org>.
- [12] Y. Andoh, N. Yoshii, K. Fujimoto, K. Mizutani, H. Kojima, A. Yamada, S. Okazaki, K. Kawaguchi, H. Nagao, K. Iwahashi, et al. MODYLAS: A Highly Parallelized General-Purpose Molecular Dynamics Simulation Program for Large-Scale Systems with Long-Range Forces Calculated by Fast Multipole Method (FMM) and Highly Scalable Fine-Grained New Parallel Processing Algorithms. *J. Chem. Theory Comput.*, Vol. 9, No. 7, pp. 3201–3209, 2013.
- [13] NTChem. http://labs.aics.riken.jp/nakajimat_top/ntchem_e.html.
- [14] M. Katouda and T. Nakajima. MPI/OpenMP Hybrid Parallel Algorithm of Resolution of Identity Second-Order Møller-Plesset Perturbation Calculation for Massively Parallel Multicore Supercomputers. *J. Chem. Theory Comput.*, Vol. 9, No. 12, pp. 5373–5380, 2013.
- [15] 南一生, 井上俊介, 堤重信, 前田拓人, 長谷川幸弘, 黒田明義, 寺井優晃, 横川三津夫. 「京」コンピュータにおける疎行列とベクトル積の性能チューニングと性能評価. 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論文集, 第2012巻, pp. 23–31, 2012.
- [16] 熊畠清, 井上俊介, 南一生. FrontFlow/blue の勾配計算カーネルのスーパーコンピュータ「京」上で

のチューニング. 情報処理学会論文誌. コンピューティングシステム, Vol. 6, No. 3, pp. 31–42, sep 2013.

- [17] CORAL benchmark codes. <https://asc.llnl.gov/CORAL-benchmarks/>.
- [18] Argonne-Livermore-OakRidge National Laboratories. CORAL Procurement Benchmarks. In *May 31 CORAL vendor meeting*, pp. 1–15, Sep 2013.
- [19] MANTEVO Project. <https://mantevo.org/>.
- [20] Workshop on Representative Applications 2015. <http://hepcce.org/files/2015/10/HerouxWRApKeynote.pdf>.
- [21] The EXA2CT European Project. <http://www.exa2ct.eu/content/proto-apps.html>.

第4章

各課題の詳細

4.1 素粒子・原子核

本節では素粒子・原子核分野における 2026 年頃に解決すべき科学的課題についてその課題の内容とアプリケーション・計算機資源について詳細を述べる。第 2.1 節で述べた素粒子・原子核分野における長期目標とこれらの課題は密接に関わっている。以下の各課題名には関係する長期目標を付与した。各課題間で共通の計算手法・アプリケーションを用いるものもあるが、計算規模やパラメータの違いから異なる計算機資源を要するものもある。

2026 年ごろに各課題が必要とする計算機資源のうち総計算量 (EFLOP^{*1}) を表 4.1 にまとめた。基礎的な密行列線形代数の計算ライブラリ、ステンシル系の疎行列ベクトル計算、高精度（多倍長）浮動小数点数演算が必要なアプリケーション群となっている。また、格子 QCD バリオン 2 体波動関数計算^(c) では FFT を使用している。各課題の総計算量は広く分布しているが、大きいものはエクサスケールの計算機を用いて半年から 1 年の計算量となっている。

また、直接的に長期目標や各課題に関連するものではないが、本分野での格子 QCD 計算で利用されている基盤的な資源であるデータグリッド利用の動向について第 4.1.18 節にて説明した。課題 (iv) 普遍的有効核力の構築 [長期目標 (a-4) の課題] にて説明したモンテカルロ殻模型計算の必要計算機資源の見積りの詳細を第 4.1.19 節に記した。

^{*1} FLOP は浮動小数点演算回数。EFLOP は 10^{18} FLOP。フロップス (FLOPS:1 秒間に実行できる浮動小数点演算回数) との関係は $[FLOP]=[FLOPS \times 秒]$ 。1 年間で 1EFLOPS の性能を持つ計算機が実行できる理論的計算量は $1[\text{EFLOPS}] \times 365[\text{日}] \times 24[\text{時間}] \times 60[\text{分}] \times 60[\text{秒}] = 31,536,000 [\text{EFLOP}]$ 。

表 4.1 素粒子・原子核分野における各課題の総計算量

長期目標	課題名	アプリケーション名（またはアルゴリズム名）	総計算量 (EFLOP)
(a-1)	格子 QCD を用いたバリオン有効相互作用の決定 (2.1.3(i) 節, 4.1.1 節)	格子 QCD ハイブリッドモンテカルロ法 ^(a) 、ウイルソン型フェルミオン作用 ^(b) 、大規模疎行列反復解法 ^(b) 、格子 QCD バリオン 2 体波動関数計算 ^(c)	1,050,000
(a-1)	ハドロン階層の理解へ向けた格子 QCD 計算の進化 (4.1.2 節)	格子 QCD ハイブリッドモンテカルロ法 ^(a) 、ウイルソン型フェルミオン作用 ^(b) 、大規模疎行列反復解法 ^(b)	200,000
(a-1)	ハドロン共鳴 (4.1.3 節)	複素密行列解法ガウス・ジョルダン法、 χ 二乗フィット、スプライン法	30 – 300
(a-2)	格子 QCD を用いた QCD 相構造の理解 (2.1.3(ii) 節, 4.1.4 節)	格子 QCD ハイブリッドモンテカルロ法 ^(a) 、大規模疎行列反復解法 ^(b)	10 次キュムラント解析計算: 7,900, エネルギー運動量テンソル相関関数計算: 260
(a-2)	高エネルギー重イオン衝突実験（クオーク・グルーオン・プラズマの解明）(4.1.5 節)	相対論的粘性流体方程式の数値解法リーマンソルバー、模型 (JAM, UrQMD など) によるイベントジェネレーター、ペイズ統計	36 – 360
(a-3)	少数多体系計算 (2.1.3(iii) 節, 4.1.6 節)	ガウス関数展開法 ^(e)	72 (6 体問題) – 151,200 (10 体問題)
(a-3)	QCD に立脚した原子核反応計算 (2.1.3(iii) 節, 4.1.7 節)	離散化連続チャネル結合法 ^(e)	170 – 1,700
(a-4)	原子核反応と状態方程式 (4.1.8 節)	反対称化分子動力学 (Antisymmetrized Molecular Dynamics, AMD) ^(e)	23,000 – 2,300,000
(a-4)	配位間相互作用計算 (殻模型計算) (2.1.3(iv) 節, 4.1.9 節)	ランチヨス法、モンテカルロ殻模型 ^(e)	厳密対角化法 (ランチヨス法) : 5,000 – 25,000, モンテカルロ殻模型 ^(e) : 250,000
(a-4)	原子核密度汎関数計算 (2.1.3(iv) 節, 4.1.10 節)	密度汎関数法 ^(e) 、Hartree-Fock-Bogoliubov(HFB) 方程式、行列対角化	780,000
(a-4)	揺動散逸理論による重イオン反応・核分裂・新元素合成 (2.1.3(iv) 節, 4.1.11 節)	力学模型、ランジュバン方程式	500 – 50,000
(b-1)	新物理探索・解明のための精密格子 QCD シミュレーション (2.1.3(v) 節, 4.1.12 節)	格子 QCD ハイブリッドモンテカルロ法 ^(a) 、ドメインイウォール型フェルミオン作用 ^(b) 、大規模疎行列反復解法 ^(b)	25,000,000
(b-1)	QED の高次補正計算 (2.1.3(vi) 節, 4.1.13 節)	QED 高次摂動モンテカルロ積分計算 ^(d) 、4 倍精度実数計算、高度に最適化された 4 倍精度ライブリ	2,000
(b-1)	ファインマン振幅自動計算 (4.1.14 節)	QED 高次摂動モンテカルロ積分計算 ^(d) 、4 倍精度実数計算、6 倍、8 倍精度実数計算、高度に最適化された 4 倍精度ライブリ	1,200
(b-2)	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 (4.1.15 節)	ハイブリッドモンテカルロ法 ^(a) 、密行列行列積、杉野格子作用、大規模疎行列反復解法 ^(b)	280,000
(b-3)	超対称ゲージ理論の非摂動ダイナミクス (4.1.16 節)	ハイブリッドモンテカルロ法 ^(a) 、杉野格子作用、大規模疎行列反復解法 ^(b)	100
(b-3)	ウォーキングテクニカラー理論の非摂動ダイナミクス (4.1.17 節)	格子 QCD ハイブリッドモンテカルロ法 ^(a) 、スタッガード型フェルミオン作用、大規模疎行列反復解法 ^(b)	310,000

以下では、長期目標 (a) 強い力が作り出す階層構造の非摂動的理解の各課題、長期目標 (b) 標準理論を超えた物理の探索の各課題の順にそれらの詳細を述べる。

4.1.1 格子 QCD を用いたバリオン有効相互作用の決定 [長期目標 (a-1) の課題]

課題概要と長期目標

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 ⇒ 核子（陽子・中性子）の階層 ⇒ 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。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。

クォークと原子核を跨いだ階層の物理を解明するため、まずはクォーク・グルーオンの自由度からバリオン 2 体間の有効相互作用を決定することが目標となる。特に、これまで主に研究されてきた S 波、D 波バリオン間相互作用に加え、P 波の相互作用も決定することで、原子核やハイパー核の 2 体有効相互作用の統一的記述を目指す。その他の課題としては、① 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バリオン 3 体力に対し、第一原理格子 QCD 計算によって得られたバリオン間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、② バリオン間相互作用を応用してバリオンの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、③ 散乱理論と様々なバリオン/ハドロ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、ことが挙げられる。

解決に必要な計算手法とアプリケーション

格子 QCD ハイブリッドモンテカルロ法^(a)、ウィルソン型フェルミオン作用^(b)、大規模疎行列反復解法^(b)、格子 QCD バリオン 2 体波動関数計算^(c)。

上付き (a), (b), (c) については 2.1.3 を参照。

計算量・計算資源

バリオン間相互作用の決定のためには、物理的クォーク質量を用いて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 $(10 \text{ fm})^3$ 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。

計算資源の見積りは、ウィルソン型フェルミオン作用を用いた格子サイズ $L^3 \times T = 128^3$ 、パイ中間子質量 135 MeV 、格子間隔 0.1 fm 、物理体積 $(12.8 \text{ fm})^4$ 、ゲージ配位数 1 万配位 (10^5 分子力学時間)、バ

リオン 2 体波動関数を 500 万回 (10 分子動力学時間当たり 500 回測定) 測定する計算に対して行った。この計算は大きく分けて、1) ゲージ配位生成と 2 体波動関数のためのクォーク伝搬関数の計算と、2) 2 体波動関数の計算に分けられる。以下に、それぞれについて詳細を述べる。これらの見積りの数値は 2.1.5 にまとめている。

これらの見積りの数値は現在の計算から予想される数値であるため、現時点では見積りが非常に難しいが、3 体バリオン波動関数の計算には 10 倍のメモリ量、P 波ポテンシャルには 100 倍のメモリ転送量が必要になる可能性がある。

1) クォーク伝搬関数計算

クォーク伝搬関数の計算は、 $12 \times L^3 \times T$ 次元の連立方程式解法に帰着され、その計算は Krylov 部分空間反復法 (BiCGStab) により行う。この計算のコア部分は行列ベクトル積であり、その計算量は行列の次元、つまり格子サイズ $L^3 \times T$ に応じて増加する。解が収束するまでの反復回数は、行列の最小固有値に対応するクォーク質量の逆幕で多くなり、物理的クォーク質量では典型的に 10,000 回程度が必要である。この計算を、ゲージ配位生成の 1 分子動力学時間あたり 240 回程度、また 2 体波動関数 1 測定あたり 12 回実行する。この計算を 1 万ゲージ配位生成と 2 体波動関数 5,000,000 測定実行するのに必要な総計算量は **550,000 EFLOP** である。

クォーク伝搬関数計算に必要な使用メモリ量は 4 次元体積 $L^3 \times T$ に応じて増加し、ゲージ配位生成と 2 体波動関数計算分を合わせて **4 TB** である。

実際の計算は行列とベクトルをノード数で分割するため、行列ベクトル積を実行する際に隣接ノード間のメモリ転送が発生する。その転送量はノード内の 4 次元格子サイズの境界の大きさに比例する。ノード数を 4096 とすると、ゲージ配位生成と 2 体波動関数計算分を合わせたメモリ転送量は **5,400 EB** になる。

生成するゲージ配位のファイル容量は 1 配位あたり 160 GB であり、1 万ゲージ配位の保存容量と計算に用いる中間ファイルの容量と合わせると、ストレージ量は **5 PB** が必要である。

2) バリオン 2 体波動関数計算

バリオン 2 体波動関数から有効ポテンシャルを計算するには、バリオン 2 個が異なる空間座標にある相関関数の計算を、時間方向に 20 点程度計算する必要があり、この計算には高速フーリエ変換 (FFT) が用いられている。また、クォーク場で書かれたバリオン演算子から相関関数を計算するには、全てのクォーク場の縮約を取る必要があるため、多くの計算量が必要になる。

現在使われている格子サイズ $L^3 \times T = 96^4$ で 1 測定を行うのに必要な計算量は 41 PFLOP であり、量計算は空間方向の格子サイズ、および測定数に比例して増加する。これを元に、格子サイズ $L^3 \times T = 128^4$ で 5,000,000 回測定を計算する総計算量は **500,000 ELOP** となる。

使用メモリは格子サイズ $L^3 \times T = 96^4$ 1 測定で 6.4 TB であり、これも空間方向の格子サイズと共に増加するので、格子サイズ $L^3 \times T = 128^4$ の場合には、使用メモリ量は **20 TB** になる。

FFT を使用するため全対全ノード通信が必要になり、格子サイズ $L^3 \times T = 96^4$ で 1 測定には、1 つのノードに対して 46 TB の通信が発生する。この通信量は空間方向格子サイズとノード数に比例して大きくなる。4096 ノード、格子サイズ $L^3 \times T = 128^4$ の場合には、メモリ転送量は **2,375,680 EB** になる。

バリオン2体波動関数を保存するファイル容量は1測定あたり23 GBであるので、5,000,000測定を行うとストレージ量は**115 PB**が必要である。

4.1.2 ハドロン階層の理解へ向けた格子QCD計算の進化 [長期目標(a-1)の課題]

課題概要と長期目標

素粒子標準理論の一部であるQCDにより強い力は記述されると考えられている。そうであれば、強い力で起こる全ての物理現象をQCDにより説明できるはずである。格子QCDの大きな目標の一つは、強い力で起こる物理現象を理解すること、つまり、既知の実験結果の再現である。この目標が達成されれば、未知の物理現象、例えば、新粒子探索などの予言を与える研究も行えるようになるはずである。

近年の計算機性能の飛躍的な向上と格子QCD計算アルゴリズムの進展により、格子QCD計算の不定性は格段に小さくなり、格子QCDは精密計算の時代へ入ろうとしている。特に基本的な物理量であるハドロン質量は誤差1%レベルの結果が得られており、既知の実験値の厳密な再現のためには、ハドロン質量に対して1%程度の効果しかないと考えられている電磁気力の効果、またはアップ・ダウンクォーク質量の違いを正しく評価する必要が出てきている。また、多くのハドロンは不安定粒子であり、その性質を正しく再現するためには崩壊先の終状態散乱を理解する必要がある。ハドロン質量計算と比べると、格子QCD分野でのハドロン崩壊・散乱過程の研究は進んでいないため、まだ精密計算の段階ではない。しかし、近年の研究の進展により、2体状態を終状態に持つ崩壊過程の計算方法が確立されてきた。この方法を用いて、ハドロン崩壊過程の精密計算を行うのも重要な課題である。その他にも、ハドロン階層の上の階層にある原子核の性質をクォーク・グルーオンから直接計算することも長期的な課題としてあげられる。

解決に必要な計算手法とアプリケーション

格子QCDハイブリッドモンテカルロ法^(a)、ウィルソン型フェルミオン作用^(b)、大規模疎行列反復解法^(b)。

上付き(a), (b)については2.1.3を参照。

電磁気力の効果を取り入れた計算を行うには、この他にQEDを組み込んだハイブリッドモンテカルロ法が必要になる。

計算量・計算資源

ここでは、電磁気力の効果を取り入れたQCD計算を行うための計算量を見積もる。QEDを取り入れた場合でも格子QCD計算のコア部分はクォーク伝搬関数の計算なので、計算量は格子QCD計算と同じと仮定して見積りを行う。一方、電磁気力の効果の効果により、有限体積効果がQCDのみの場合よりも非常に大きくなることが知られており、複数の体積を用いて無限体積極限への外挿が必要になる。さらに、現実的な素電荷の値で計算を行うと統計誤差を抑えることが難しいため、素電荷の値は現実よりも大きくした計算を行い、素電荷についての外挿が必要になる。これ以外にも、アップ・ダウンクォーク質量

についても、物理的なクォーク質量近傍でいくつかのパラメータの計算を行う必要がある。まとめると、複数の体積、素電荷、クォーク質量での計算が必要になる。

以下では、3つの格子サイズ $64^4, 96^4, 128^4$ で、各々 5 パラメータの計算を行うとして計算量を見積もった。京コンピュータを用いた QED を含まない格子 QCD 計算では、現実的クォーク質量付近、格子サイズ 96^4 で、2,000 分子動力学時間のゲージ配位生成を行うと計算量は 3,800 EFLOP である。計算量は、一辺の長さの 5 乗および、分子動力学時間に比例する。各体積、パラメータで 10,000 分子動力学時間ゲージ配位を生成すると、全ての体積、パラメータでゲージ配位生成を実行するための計算量は 100,000 EFLOP である。物理量測定には、ゲージ配位生成と同程度の計算が必要だと仮定すると、総計算量は **200,000 EFLOP** である。要求メモリ量は格子サイズに比例し、最大の格子サイズの場合、**4 TB** のメモリ量が必要になる。

4.1.3 ハドロン共鳴 [長期目標 (a-1) の課題]

課題概要と長期目標

バリオンの基底状態はクォーク模型により良く分類され、また格子 QCD 計算によって質量などの基本的な性質が説明されつつある。一方励起状態では、クォーク模型が多数の状態の存在を予言するのに対し、実験ではより少ない状態しか観測されていない。これは「消えた共鳴 (missing resonance)」問題として知られている。また最近では、クォーク模型や従来の有効理論では説明のつかないエキゾチックハドロンの発見も相次いでいる。これら励起状態に対して格子 QCD 計算は困難な状況にある。

このような中、最も基本的な問題として、実験データから共鳴状態の存在と性質を抽出し確立する必要がある。多くのバリオン励起状態は数十 MeV から数百 MeV の崩壊幅を持ち、単純な散乱断面積のエネルギー依存性からはそれらの多くが重なり合い、近傍にある複数の励起状態の分離は困難な状況である。そこでエネルギー依存性だけでなく、スピン、チャンネル、反応に関わる粒子数を選択的に指定し、部分波解析を実行する必要がある。それはクォークの種とそこに結合するハドロンチャンネルの絡んだ、高度に多重チャンネルの散乱問題に他ならない。実験データと比較すべき現実的な散乱方程式の構成には、種となるクォークの裸の状態の質量、それらと様々なハドロンチャンネルとの結合の強さ、ハドロン同士の相互作用などをインプットとし、上記の散乱観測量との比較からこれらの物理量を決定する必要がある。

当面の目標として、まず 2 GeV 領域までのバリオン共鳴状態を確立する。そのためには核子とパイ中間子だけでなく、ハイペロンと K 中間子まで含めた解析手法を確立する。また 2 パイ中間子チャンネルを取り込み現実的な理論とデータとの比較により得られる情報の精度を向上させる。実験データは J-PARC, KEK, LEPS2, JLab などから高精度で高統計のデータ取得が計画されている。これらにより、励起状態の質量、崩壊幅、結合定数などの基本的な物理量を提供し、QCD に基づいたハドロン理論研究に結びつける。また将来的には、J-PARC や KEKB で行われるマルチストレンジバリオンやチャームバリオンの探索へも応用できるようにアプローチを拡張する。

解決に必要な計算手法とアプリケーション

大きく分けて二つの計算が行われる。一つは多重チャンネルの散乱積分方程式を数値的に解くこと。もう一つはパラメータを決めるための最適化である。積分方程式は積分を離散化させることで（複素密）行列の形に帰着させる。これを解くために、ガウス・ジョルダン法に基づく逆行列の標準的な計算方法を用いる。パラメータの最適化には χ^2 乗フィットや、統計量の少ないデータには最尤法を直接利用する。また、3体のユニタリーカットに起因して散乱積分方程式に現れる（エネルギーに依存して動く）対数発散を処理する必要があるが、これにはスプライン法が用いられる。

計算量・計算資源

一つの散乱過程、例えば 2 GeV 領域における $\gamma N \rightarrow \pi N$ 散乱に対して、スピン、エネルギー、散乱角を一つに決めたときの散乱振幅を求めるのに、インプットである遷移ポテンシャルの計算と 300 – 1500 次元の多重チャンネル行列の逆行列計算が必要で、約 8GFLOPS の性能のコアで 1 – 20 秒程度を要する。実際のデータと比較すべく、全角度、全スピン、全エネルギーにおける散乱断面積の導出には 1 – 2 コア・時間程度要する ($\gamma N \rightarrow \pi\pi N$ のような 2 体 → 3 体反応ではさらに計算量が必要)。ここでコア・時間とは 1 コアで計算を 1 時間計算する計算量である。パラメータの最適化には、断面積の計算を 10^6 – 10^7 回程度繰り返すので、前出の例では 10^6 – 10^7 コア時間程度の資源を要する。総計算量は **30 – 300 EFLOP** となる。

4.1.4 格子 QCD を用いた QCD 相構造の理解 [長期目標 (a-2) の課題]

課題概要と長期目標

ビッグバン直後の初期宇宙や、中性子星中心部などでは、物質の温度や化学ポテンシャルが QCD スケールに達する超高温・高密度状態が実現する。このような極限的環境下では、QCD 真空の相転移であるカイラル相転移や非閉じ込め相転移をはじめとした、QCD に特有の種々の物性現象が発現する。これら高温・高密度環境下の QCD の研究は、前項で紹介した重イオン衝突実験により実験的に探索することも可能だが、実験結果を適切に分析し QCD の物性的諸性質への理解を深めるためには、格子 QCD による数値解析を併用することが必須となる。

格子 QCD による有限温度・密度系の数値解析は、バリオン数密度がゼロの場合には通常のモンテカルロ法で遂行可能である。特に、静的な熱力学量は解析法が確立しており、これまでにも活発に研究が行われてきた。例えば、物理クォーク質量・連続極限での状態方程式が高精度で測定されたのは、最近の重要な成果の一つである。また、重イオン衝突実験での観測量として最近注目される保存電荷の高次キュムラント (Taylor 展開法の展開次数と同じ量) など、より高い統計を必要とする熱力学量の測定も活発に行われているが、次数が上がるに従い統計誤差が増大するため、現状では高精度の測定は 4 次程度までに留まっている。より高次のキュムラントの高統計測定を実現することは、重イオン衝突実験などに大きな波及効果を及ぼす今後の重要課題である。

一方、バリオン数密度が有限の場合には符号問題（作用の複素位相問題）が起こるため、通常のモンテカルロ法による直接的な解析ができない。この問題は古くからの未解決問題だが、以前から議論されてきた Taylor 展開法や再重み付け法に加え、最近は複素 Langevin 法などの新しい手法に関する議論が活発に行われており、今後の発展が期待される。

静的な熱力学量の測定手法が確立しているのとは対照的に、熱力学系が持つ動的な性質、たとえば重イオン衝突実験で注目される輸送係数（粘性係数など）などは、格子上での測定が著しく困難な量である。これらの量の解析に必要となる相関関数は、誤差が大きく高精度測定が難しいほか、相関関数を動的観測量と結び付ける段階にも原理的な困難があるためである。相関関数の測定に関しては、最近 gradient flow 法などの新しい解析法が使われる等の進展が見られる。これらの発展と、計算機能力の増大により、動的観測量の測定も今後解決に向け前進することが期待される。

解決に必要な計算手法とアプリケーション

ゼロバリオン数密度の格子 QCD 数値解析は、広く使われている格子 QCD ハイブリッドモンテカルロ法^(a)により遂行できる。この手法の詳細は 2.1 節の格子 QCD の解説に譲るが、計算の主要な過程を占めるのは巨大なベクトル空間（次元は 10^7 以上）上のベクトルと疎行列の線形計算（大規模疎行列反復解法^(b)）である。また、作用の局所性により、格子 QCD 数値解析は並列化に適している。格子 QCD のコードは世界各地のグループにより開発されており、様々な環境へのチューニングが進んでいるほか、一部のコードはオープン化されている。

計算量・計算資源

上で述べた、高次キュムラントや、有限密度熱力学量、輸送係数などの解析を遂行するためには、現在投入されている計算資源を 2 桁以上上回る計算量が必要とされると見込まれる。たとえば高次キュムラントについては、以下のように計算時間が見込まれる。まず、現在行われている真空での仮想的クォーク対生成・対消滅の効果を取り入れた格子 QCD 計算（フル格子 QCD 計算）による熱力学量や 4 次キュムラントのシミュレーションが 5 TFLOPS で半年間程度の計算時間を要する。このことと、高次キュムラントは次数が 2 次上がる毎に計算コストが約 5 倍に増加することから見積もると、10 年後に挑むべき課題を 10 次のキュムラントの解析と設定し、これを現在と同じ計算時間である半年程度でする場合、500 TFLOPS の計算機が必要となる。計算量にすると 10 次のキュムラントの解析に必要な総計算量は約 **7,900 EFLOP** である。

輸送係数測定に必要な相関関数に関しては、真空での仮想的クォーク対生成・対消滅の効果を無視した格子 QCD 計算（クエンチ近似格子 QCD 計算）ではエネルギー運動量テンソルの相関関数を計算するのに 1 TFLOPS で一ヶ月程度の計算時間を要する。このことと、同様の解析を物理質量のフル QCD で行うためには約 100 倍の計算時間を要することから見積もると、フル QCD でのエネルギー運動量テンソル相関関数の解析を 10 年後の課題に据えた場合、100 TFLOPS の計算機を用いて 1 ヶ月程度が必要となる。この時の総計算量は約 **260 EFLOP** となる。

輸送係数の測定には、この計算機に加え、原理的な問題の解決が必要となる。有限密度の解析については、解析手法およびアルゴリズム上の進展が解析の実現に向けた重要な要素となるため、現時点での定量的な見積をすることは難しい。

4.1.5 高エネルギー重イオン衝突実験（クォーク・グルーオンプラズマの解明）[長期目標(a-2)の課題]

課題概要と長期目標

クォーク・グルーオンプラズマ (QGP) の生成とその性質の定量的解明を目指し、高エネルギー重イオン衝突実験が世界各地で遂行されている。QGP 物理の困難さは、クォークやグルーオンを実験で直接観測できないことにあり、実験結果の理論的裏付けが重要である。このため、計算機上で高エネルギー重イオン衝突実験の時間経過、すなわち QGP 生成、ハドロン化、終状態相互作用までを詳細に記述し、理論的に QGP 物性を定量的に明らかにすることを目標にする。現象論的模型については様々な新しい提案と改善が行われている状況にあるが、現在のところ最も実験の定量的な理解に成功しているのは相対論的流体模型を中心とした模型である。そのためこの模型を元にし、かつ高精度、高統計の実験の解析に耐える数値コードを構築し使用する。さらに最近になってこのような現象論的模型に存在する幾つかのパラメータを実験と比較しながらベイズ統計の手法を用いて決定していくという新しい試みも出てきた。この場合かなりの計算が必要になることが予想される。

解決に必要な計算手法とアプリケーション

低エネルギーから高エネルギーに渡る原子核衝突実験を記述するため、現在の標準的な現象論的模型である相対論的粘性流体模型とハドロン、あるいはパートンで記述されるイベントジェネレーターを組み合わせた模型を用いる。相対論的粘性流体方程式の数値解法は QGP の物性を定量的に知るために、小さな人工粘性でも安定で衝撃波を扱うことのできる、リーマンソルバーに基づくコードを使用する。イベントジェネレーターは、公開されている模型 (JAM, UrQMD など) を用いる。最近になって提案されたベイズ統計の手法を用いた場合、少なく見積もって模型のパラメーター数 (~ 10) \times 観測量 (~ 10) \times 必要統計量 ($\sim 1000 - 10000$) $\sim 10^6$ 程度の計算量が必要になる。

計算量・計算資源

計算量は実行する計算の次元、ターゲットとする物理量の計算に求める精度、エネルギー領域などに依存する。例えば、3+1 次元の計算の場合、シングルコアで 1800 – 18000 秒程度、必要メモリは 2 – 10GB と見積もられる。計算時間のほとんどは流体部分に費やされている。計算量は統計量に比例することから、今後、ベイズ統計を採用することによって現状の $\sim 10^6$ 程度の計算量を要する場合、現状と同じ時間で計算を遂行するには $\sim 10^6$ コア程度 (20 PFLOPS 程度) の計算資源が必要であると見積もられる。同じ時間の 1800 – 18000 秒程度で計算するので、総計算量は **36 – 360 EFLOP** となる。

4.1.6 少数多体系計算 [長期目標 (a-3) の課題]

課題概要と長期目標

物理学における最近の重要な課題の一つは、量子力学によって記述される極小スケールの様々な3体以上の少数多体系のシュレーディンガー方程式を「厳密」に解くことである。このことにより、物理的な知見を深め、新しい発見や予言に至ることがしばしばある。そのためには、シュレーディンガー方程式を少数多体系問題に基づいて精密に解く、適用の広い計算法の開発が不可欠である。これまで世界的に見て、ファデーエフ法、無芯殻模型計算（no-core シェルモデル）、確率的変分法、グリーン関数モンテカルロ法、ガウス関数展開法など様々な少数多体系計算法が考案され、成功をおさめてきた。これらの計算法を使用した目標は、(1) 精密に何体計算を行うことが可能であるのか？この際、現実的バリオン間相互作用を使用し、実験値と比較・検討し、バリオン間2体相互作用、および、3体力の情報を引き出すこと、(2) これらの計算手法の応用分野は広いので、陽子・中性子で構成される原子核分野のみならず、ハイパー核（核子とハイペロンから成る新しい原子核）、不安定核、ハドロン多体系、宇宙核物理、エキゾチック原子分子、冷却原子のような分野に適用し、それぞれの分野の固有の重要課題を克服することである。

解決に必要な計算手法とアプリケーション

ここでは、主に変分法を使用した少数多体系計算法について述べる。これにはガウス関数展開法^(e)を用いる。少数多体系問題を精密に解くために、ヤコビ座標を用意する。例えば、3体問題の場合は、2つのヤコビ座標、4体問題の場合は、3つのヤコビ座標を導入する。このように1つずつ粒子が増えるたびに、座標が一つずつ増える。この座標ごとに基底関数を張る。変分法であるので、「良い」基底関数を選ぶ必要がある。経験的に、動径部分は、ガウス関数、角度部分は球面調和関数で表す基底関数を使用し、特に、ガウス関数のレンジは、等比級数に取ることがよいとされている。これらの基底関数を使用してハミルトニアンの行列要素を計算した後、一般化固有値問題を解くことによって、エネルギー固有値と波動関数を求める。

計算量・計算資源

現在のところ、ガウス関数展開法^(e)という変分法では、5体問題まで開発が完了している。5体問題の典型的なケースでは、約40,000次元の密行列の対角化問題を解くことに帰着され、理論計算性能350 GFLOPS程度のノード1つを用いて約2時間で計算が完了する。今後、6体、7体、…と粒子を1個増やすごとに必要な行列の次元数は6倍ほど増加すると見込まれる。1つの行列要素の計算時間は5体の場合からほとんど増加しないとした場合、全行列要素を得るために必要な計算時間は次元数の2乗に比例し、一般化固有値問題を完全に解くために必要な計算時間は次元数の3乗に比例する。今後は全ての固有値を計算しない対角化アルゴリズム（Krylov部分空間法を利用したものなど）を採用することによって対角化計算時間が相対的に小さくなるとすると、現在と同様の時間で計算を遂行するためには、6体問題、7体問題、8体問題、9体問題、10体問題ではそれぞれ10 TFLOPS程度、450 TFLOPS程度

度、16 PFLOPS 程度、600 PFLOPS 程度、21 EFLOPS 程度の計算能力が必要となる。総計算量は **72 – 151,200 EFLOP** の範囲である。ハミルトニアン行列を保存するのに必要なメモリは、5 体問題では 1.3 GB ほどであるが、6 体問題、7 体問題、8 体問題、9 体問題、10 体問題ではそれぞれ 50 GB、1.7 TB、60TB、2 PB、80 PB 程度まで増加する。

4.1.7 QCD に立脚した原子核反応計算 [長期目標 (a-3) の課題]

課題概要と長期目標

原子核は、強く相互作用する核子で形成された有限量子多体系であり、その構造の記述は一般に困難であるが、数値計算技術の向上と計算資源の拡大により、殻模型をはじめとする様々な手法を用いた定量的な核構造計算が可能になりつつある。他方、原子核反応は、そのような原子核同士の反応・衝突によって起きる動的なプロセスを研究対象とする分野である。その目的は、反応現象によってはじめて浮かび上がる、複数の原子核からなる開放系の性質を定量的に解明することである。今世紀以降、現象論から脱却し、核子間相互作用と原子核構造計算で得られた波動関数に基づいて原子核反応を記述するアプローチが目覚ましい進展を遂げている。特に近年注目されているのが、QCD の低エネルギー有効理論として知られるカイラル有効場理論 (χ EFT) で得られた 2 体力・3 体力に立脚した反応計算である。現在までに、核子と原子核の反応は、微視的な記述(予言)が確立していると言ってよい。しかし原子核-原子核反応に関しては、未だ道半ばである。その主な理由は、原子核-原子核反応では原子核の励起状態との複雑なチャネル結合が活性化するためである。この問題を解決するには、まず、様々な原子核の基底状態、励起状態(連続状態を含む)の波動関数のセットが必須である。これは、他の課題の成果として得られるものを活用する。その上で、これらの波動関数のセットを取り入れた大規模チャネル結合反応計算を遂行し、原子核-原子核反応に対する微視的理解を確立することが、本研究課題の目的である。

解決に必要な計算手法とアプリケーション

離散化連続チャネル結合法^(e)の計算を行う。反応計算は大きく 2 つの部分に分かれる。1 つはチャネル結合ポテンシャルの計算である。例えば反応に関与する 2 つの原子核それについて 10^2 個の状態を用意する場合、多重極度も考慮すると、概算で 10^8 個のポテンシャルが必要である。これを、原子核間距離の分点 ($\sim 10^2$) ごとに用意する。計算に必要な 5 重積分はモンテカルロ法によって遂行する。もう 1 つがチャネル結合反応計算である。これには予測子-修正子型ヌメロフ法を使用する。一般に閉じたチャネルが結合する場合には数値解が不安定化するので、独立解を適宜再直交化して解の安定化を図る。反応を解く際に生じる軌道角運動量の分岐を考慮すると、結合するチャネル数は 10^5 程度になると考えられる(現在の計算規模の 10^2 倍程度)。これを部分波 ($10^2 - 10^3$ 個程度) ごとに解く必要がある。

計算量・計算資源

RCNP の高性能計算システム (Intel Xeon 1 コア) 上で上記の計算を実行する場合、1 つの部分波あたり 8×10^7 秒程度の計算時間が必要となる。1 つの部分波あたりの計算量は 1.7×10^9 GFLOP である。

必要なメモリは 100 GB 程度である。計算は部分波ごとに独立しているため並列計算が可能である（効率 100%）。各部分波の計算については 10^5 個の独立解を並列的に処理することが可能であるが、再直交化が必要な場合にはその都度同期を取る必要があるため効率はある程度下がると考えられる。必要な部分波の数は $10^2 - 10^3$ 個であるので、総計算量は **170 – 1,700 EFLOP** である。

4.1.8 原子核反応と状態方程式 [長期目標 (a-4) の課題]

課題概要と長期目標

格子 QCD を用いた第一原理計算は、一般のバリオン数密度・温度については符号問題が深刻であり、決定的な解決法は見いだされていない。一方で、飽和核密度の数倍程度以下、温度が数十 MeV 以下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、核力に基づく一樣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。このアプローチは現実的核力に直接基づく計算ではないが、同様のアプローチによって重イオン衝突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とともに、実験データから状態方程式の情報を抽出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。現在の重イオン衝突の研究では対称エネルギー項のように少数のパラメータに注目するのが一般的であるが、今後は状態方程式を含む理論パラメータの膨大な多次元空間と多数の観測量との相関を総合的に検証することにより、状態方程式の抽出を推進することを目指す。

解決に必要な計算手法とアプリケーション

重イオン衝突シミュレーションについては、反対称化分子動力学（Antisymmetrized Molecular Dynamics, AMD）^(e) を用いるのが多くの場合に最も信頼性が高いと考えられる。また、理論模型の不定性を含めて検討するため、他の輸送模型との比較を行うのが望ましい。

計算量・計算資源

AMD による核反応計算は、現在の CPU（Intel Xeon など）を用いた場合、典型的な系で 1 イベントあたり 10 CPU 時間を要する。CPU 計算性能 64 GFLOPS で 10 時間計算することに該当するので、これは約 230 TFLOP の計算量に該当する。また、一般的な物理量を十分な統計精度で計算するには物理量に応じて $10^3 - 10^5$ イベントが必要である。理論パラメータと観測量との相関を総合的に研究するために理論パラメータの多次元空間中に 1,000 個の代表点を取るとすると、10 の反応系について計算する場合、 $10^8 - 10^{10}$ CPU 時間を要する。総計算量は **23,000 – 2,300,000 EFLOP** である。

4.1.9 配位間相互作用計算（殻模型計算）[長期目標(a-4)の課題]

課題概要と長期目標

原子核では、原子と同様に、個々の核子はそれぞれの軌道を占有するという独立粒子描像がよく成り立つことが知られている。しかし、残留相互作用（有効相互作用）の強さが隣り合う軌道間のエネルギー差と近いことから、現実の多体状態はその影響を取り入れた複雑なものとなる。配位間相互作用計算とは、与えられた少数個の軌道からなる空間（模型空間あるいはバレンス殻）の多体問題を厳密に解く手法であり、原子核物理では殻模型計算と呼ばれている。これは与えられた軌道群の多体問題を正確に解くものであるため、十分に多くの軌道を探すことによって第一原理核構造計算にも応用することができる。殻模型計算は与えられたハミルトニアンに非常に忠実な多体状態を与え、特に原子核の分光学的性質の解明に威力を発揮している。

現在のところ、ランチヨス法を用いた厳密対角化の手法により、 $10^{10} - 10^{11}$ 次元のハミルトニアン行列の数値対角化が現実的に行われている。それによって、 pf 殻（陽子あるいは中性子数が 20 から 40 まで）をバレンス殻と仮定した系のハミルトニアン行列の完全対角化が可能であり、質量数 70 程度までの中性子過剰核を含む多くの原子核の性質が調べられている。より重い原子核や軽い原子核でも大きな変形を持つ状態ではさらに大きな模型空間が必要であり、厳密対角化の限界を超える重要な課題は多く残されている。その限界を超えるため、少数の精選された多体基底によって原子核の波動関数を構成する、モンテカルロ殻模型が提唱されている。モンテカルロ殻模型計算によって、現在では核子数 100 程度までの原子核の構造研究が行われているが、将来的にはウラン領域までそのフロンティアを拡大することを目指す。

解決に必要な計算手法とアプリケーション

これらの計算は殻模型計算^(e)に該当する。大きく分けて二つの計算手法が採られている。一つはランチヨス法による厳密対角化計算であり、模型空間に含まれる全ての多体基底を構成し、それらで張られるハミルトニアン行列を数値的に対角化する手法である。もう一つはモンテカルロ殻模型であり、全ての多体基底を構成するのではなく、着目する多体状態に重要な精選された 100 本程度の多体基底（量子数射影を施した相関基底）によって良い精度で核構造を記述しようというものである。モンテカルロ殻模型では基底の精選において確率的過程および変分的過程が取り入れられ、より少数の基底によって厳密解に近い波動関数を表現することができる。厳密対角化計算とモンテカルロ殻模型計算は相補的な役割を担っているため、当面は両者が共存するとみられる。

計算量・計算資源

厳密対角化計算に関しては、 $\sim 10^9$ 次元のハミルトニアン行列に対して、1 CPU (12 コア)、1 ランチヨス反復あたり、200 – 1000 秒程度の計算が必要である（同じ次元数でも一粒子軌道数などに応じて必要な計算時間は変わる）。基底状態だけを求める場合、50 ランチヨス反復程度必要なため、数万秒程度の計算時間を要する。疎行列の場合、ランチヨス法では計算量がハミルトニアン行列の次元に概ね比例す

ることから、将来的に中重核の興味ある問題をカバーできる 10^{15} 次元程度の問題を目標にすると、現在と同程度の計算時間（10,000 – 50,000 秒程度）で計算を行うには 500 PFLOPS 程度の計算資源が必要となる。総計算量は **5,000 – 25,000 EFLOP** である。ランチョス法による厳密対角化計算ではメモリバンド幅が計算時間を決める重要なファクターであり、これは B/F 値が現状程度であることを前提とした見積もりである。

モンテカルロ殻模型計算については、第 2.1.5 節に計算量・計算資源の見積もりを記述している。また、第 4.1.19 節には見積りの詳細な根拠を記載している。100 ケースの計算に必要な総計算量は **250,000 EFLOP** である。

4.1.10 原子核密度汎関数計算 [長期目標 (a-4) の課題]

課題概要と長期目標

原子核の励起状態には、核子の独立粒子運動を反映した励起モードとならび、振動・回転といった多数の核子が運動に関与する集団励起モードが現れる。一核子状態（軌道）は、相互作用によって核子が自己無撞着に作り出す平衡平均場によって与えられる。また、多数の核子から成る集団運動は、平均場そのものが時間的に変化することによって与えられる。有効相互作用は短距離的であるので、平均場と核子密度は似たような空間分布を持つ。そこで、時間依存密度汎関数理論の考えに則って、核子系のエネルギー密度汎関数を出発点とし、一核子状態および集団運動を統一的に調べる微視的アプローチが、原子核密度汎関数法と呼ばれるものである。

エキゾチックな変形状態や、不安定核で見られる空間的に異常な核子密度分布をも表現できるよう、基本方程式 (Hartree-Fock-Bogoliubov (HFB) 方程式と呼ばれる) は実空間座標で解かれる。対角化すべきハミルトニアンは、3 次元座標を用いる場合、各方向のメッシュ点の数を N とすると、 $4N^3$ の次元をもつ。原子核の質量数を A とすると、核半径は $A^{1/3}$ でしか大きくならないため、軽い原子核であっても重い原子核であっても計算量はほとんど変わらない。従って、原子核密度汎関数法は、現在のところ、核図表上のすべての原子核を一つの枠組みで記述可能な唯一の方法である。それでも多数の核種を対象とした系統的計算には、計算機資源が限られているため、軸対称を課した 2 次元計算が主流である。短期的目標として、軸対称性を破る変形状態やクランキング法による不安定核の集団的回転状態も記述できるよう、3 次元コードの開発を目指す。また、集団的振動励起状態に関しては、現在は、線型応答計算が可能になってきたところである。長期的には、低励起領域に現れる非線型振動や、複数の平衡平均場を跨ぐような大振幅集団運動を記述できる理論・計算法を開発する。

解決に必要な計算手法とアプリケーション

密度汎関数法^(e) の計算である HFB 計算に関しては、厳密対角化が現在の主流である。厳密対角化法を用いて密度分布（平均場）の自己無撞着な解を得るのには 100 回程度の反復が必要である。しかし、密度の構築に、ハミルトニアンの全固有値・固有ベクトルが必要なわけではないため、将来の実空間 3 次元計算では、ある領域の固有値とその固有ベクトルのみを求めるアルゴリズムが採られる可能性もある。線型応答計算では、平均場に取り込めなかった残留相互作用の行列要素計算と、その行列の対角化が必要に

なる。更に大振幅集団運動の記述のためには、平衡平均場から離れた様々な配位での残留相互作用の行列要素計算並びに対角化が必要である。

計算量・計算資源

現在の系統的な線型応答計算では、軸対称性及び反転対称性を課した計算が主流である。ある量子数に対する遷移強度分布を得るのに、二準粒子励起の組み合わせ数 (M) が 10^4 程度のとき、256 コアを用いて 1,000 秒程度の時間が必要である。このときの計算量は 0.45 PFLOP である。計算、格納すべき行列要素の数は M^2 であるが、それらは各 CPU に分散しているため 1 コア当たりのメモリは数 MB 程度である。

核分裂現象は大振幅集団運動の典型例であり、その微視的記述は最もチャレンジングな課題の一つである。核変形 5 次元空間上の 10^5 個の核変形に対して拘束付き HFB(CHFB) 計算にてポテンシャルエネルギーを求め、その配位での集団運動の質量パラメータを局所準粒子乱雑位相似似 (LQRPA) にて計算する。行列要素の計算量は M^2 に比例する。対角化については、全固有値・固有ベクトルを必要とするならば M^3 に比例するが、今の場合エネルギーの低い数個の固有状態が分かれば良い。さらに、実空間表示ではなく調和振動子基底で CHFB 方程式を解くことで $M = 10^6$ 程度の問題とする場合、計算量が M^2 に比例するベストケースで総計算量は **780,000 EFLOP** となる。

4.1.11 搖動散逸理論による重イオン反応・核分裂・新元素合成 [長期目標 (a-4) の課題]

課題概要と長期目標

超重元素の合成を成功に導くためには、入射核・標的核同士の非常に強いクーロン反発力を克服し、さらに融合に向けた運動エネルギーの強い散逸も考慮しなければいけない。このような状況下では、ほぼすべての事象は複合核形成には至らず、弾性散乱、非弾性散乱、または準核分裂を起こす。超重元素合成の可能性を議論するためには、すべての反応の中で融合に至る「非常に稀な事象」を扱う必要がある。すなわち平均値から遙か離れた稀有な事象を扱う模型が必要となる。

従来、重イオン融合反応の理論的記述は、原子核の形状を表すパラメータによって形成されるポテンシャルを計算し、その空間内を移動する軌道追跡によって、原子核の形状の時間発展を記述する方法が取られてきた。この手法には摩擦を考慮したポテンシャル上を移動する軌道をニュートン方程式によって記述することであり、言わば平均軌道の追跡にあたる。ところが、超重元素領域では、上に述べた理由により、いくら高い入射エネルギーを投入しても、平均軌道は融合領域には到達することが出来ない。そこで、平均軌道からの揺らぎを考慮し、平均値から非常に離れた事象として、融合領域に到達できる事象を評価することが出来ないか検討してきた。原子核の運動の中で、速度の遅い「形状を表す集団運動」と、それ以外の速度の速い運動（例えば核子の運動）の二つの運動に分類することで、前者をブラウン粒子、後者を熱浴とみなすことが出来る。すなわち、平均値からの揺らぎを原子核の形状の熱的揺らぎに対応させることで、散逸揺動理論に基づくブラウン運動の理論を、原子核の反応理論に適用しようとする試みである。具体的には、多次元ランジュバン方程式を採用し、揺動を入れた軌道を追跡し、融合領域に

到達する確率を評価する手法を採用している。このような手法は統計模型に代表される静的模型に対し、「動力学模型」と呼ばれている。

超重元素領域の融合確率を計算する際、有為な結果を得るためにには、用意するアンサンブル数として 10^4 以上は少なくとも必要であると考えられる。さらにこのような軌道計算で蒸発残留核確率まで求めようとすると、 $10^{10} - 10^{15}$ 程度のアンサンブルは必要である（必要なアンサンブル数はエネルギーに依存する）。また動力学模型では、原子核のポテンシャル（液滴模型と殻補正エネルギー）、摩擦テンソルと慣性質量テンソル（これらを輸送係数と呼ぶ）、ランダム力の強さが計算のインプットデータとして必要である。現在は、原子核の形状を表すパラメータとして 3 変数を採用し（重心間距離、フラグメントの変形度、質量対称度）、輸送係数は巨視的模型を用いて計算している。現行の動力学模型を改良し高精度のシミュレーションを行うためには、原子核の形状を表す次元数を増やし、融合分裂過程における現実的な形状変化を記述可能にする必要がある。少なくともフラグメントの変形度を、左右独立に扱わなくてはいけない。長期的には、ネックパラメータも変数として取り扱い、さらに質量非対称度だけではなく、荷電非対称度も考慮する必要がある。また、入射核と標的核が接触するまでの段階では、各々の原子核の回転効果も考慮を入れるべきである。すなわち、8 次元以上のランジュバン方程式を解く必要があり、それに伴うポテンシャルや輸送係数テンソルが必要なため、膨大な計算量が必要となる。現在は融合過程に動力学計算を行い、形成された原子核（すなわち複合核）の崩壊過程では統計模型を用いて計算を行っている。前者の計算を 10^{-18} 秒まで行い、その後、統計模型にスイッチするという方法である。しかし、統計模型には不定なパラメータも多いため、理想的には蒸発残留核形成まで含めた全融合分裂過程を動力学模型で解くことが望まれる。計算時間の大幅な増加、さらに上に述べたようにアンサンブルも 10^{15} 個程度必要であると考えられる。また超重元素合成では、融合過程においても核構造の影響が大きいと考えられ、そのような効果を取り入れた計算を行うことで、実験計画を提案する必要がある。したがって、微視的輸送係数の導入が不可欠であるが、それには準位密度計算が必要であり、動力学模型の計算を実行するために必要な空間でこれらのデータを準備するには、多大の計算時間を必要とする。また微視的輸送係数は原子核の温度に依存するために、それぞれの温度でのデータが必要となる。しかし、動力学計算において軌道の温度は時々刻々と変わるために、まともに解けばさらに膨大な計算時間がかかることが予測される。しかしながら、超重元素の研究では、生成確率という非常に微小な現象を扱うため、上記に述べたような効果が、ほんのわずかでもダイナミクスに影響を与えた場合、それに伴って微小な確率も影響を受け、絶対値自体が大きく変動する可能性がある。そのため、計算時間にかかる困難を乗り越え、超重元素合成の微小な生成確率を、高精度で算出することが必要である。

解決に必要な計算手法とアプリケーション

全融合分裂過程を動力学模型を用いて計算するには、アンサンブルの増加、および計算時間の増大が回避できないため、計算手法を根本的に見直す必要がある。動力学模型の計算にはランジュバン方程式を用いている。ランジュバン方程式の数値計算は、並列化が非常に有効であり、使用する並列計算機に適したアルゴリズムを構築する必要がある。

計算量・計算資源

新元素合成における蒸発残留核断面積の計算において、現在、数 pb の計算が活発に行われている。将来は、合成される元素の原子番号の増加に伴い、さらに 3 枠小さい数 fb 程度のオーダーの断面積の計算が必要となってくる。このためには現在の計算機 (1 CPU(12 コア)、2.6 GHz) で 100 万秒程度 (11 日程度) の計算が必要である。これはひとつの入射エネルギーに対する計算であるが、励起関数を得るためにには、数ヶ月の計算が必要である。10 年後に挑むべき課題では、fb から ab (atto barn) の断面積の評価が必要になる可能性がある。すなわち原子番号 124 番以上の元素合成が想定される。この場合、現在より $10^3 - 10^6$ 倍程度の計算量が必要となる。従って、総計算量は **500 – 50,000 EFLOP** となるためにに 1 EFLOPS 程度の性能をもった計算機システムが利用可能になっていることが必要と考えられる。

4.1.12 新物理探索・解明のための精密格子 QCD シミュレーション [長期目標 (b-1) の課題]

課題概要と長期目標

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は、未知の高エネルギー領域を探索する実験と、既知の物理現象の精密検証実験の 2 種類のアプローチがある。KEK の Belle II 実験と CERN の LHCb 実験の目的は後者であり、既知の物理現象について高精度の実験結果と標準理論による精密な理論的予言（理論値）を比較することで、それらのズレを見出すこと、つまり標準理論では説明できない標準理論を超えた物理現象を捕らえることである。このズレを明確に捕らえるためには、高精度の実験結果と共に精確な理論的予言が要求されるが、どちらか一方が欠けても高精度検証は実行不可能になってしまうため、理論計算と実験結果の双方が要求精度を達成することが極めて重要である。

Belle II 実験と LHCb 実験で測定される物理量の理論計算には、ボトムクォークを含むハドロン行列要素が必要である。この量を最も精確に計算できるのは、ハドロン行列要素の第一原理計算が可能な格子 QCD 計算であると考えられている。しかし、現状では計算機性能の制約から、パイ中間子を構成する軽いクォークを再現しながら、1 fm 程度の QCD の特徴的スケールと、その 1/10 程度のボトムクォークのスケールを同時に取り扱うことが困難な状況にある。近年の急速な計算機性能の向上により、この困難が解決される兆しが見え始めた。そこで今後の長期的な目標は、ボトムクォークを直接取り扱った格子 QCD 計算から、将来の実験プロジェクトで得られる精度に見合う理論的予言を与えることである。具体的には、 B 中間子レプトニック崩壊定数 (f_B, f_{B_s})、セミレプトニック崩壊 ($B \rightarrow \pi l\nu, B \rightarrow D^* l\nu, \Lambda_b \rightarrow p(\Lambda_c) l\nu$) を記述する形状因子、 B 中間子混合行列要素 (B_B) を 1% 以下で予言する。また、ボトムクォーク稀崩壊過程 ($B \rightarrow K^* ll, \Lambda_b \rightarrow All$) の形状因子については 5% 以下を目標にする。これらの目標精度は Belle II 実験の計画に合わせたものになっている。

併せて、カイラル外挿の不定性を排除するため、現実的クォーク質量での計算から、新しい物理階層探索で重要となる軽いハドロンの行列要素計算 ($K \rightarrow \pi\pi$ 崩壊行列要素、中性子電気双極子能率、ミュー粒子異常磁気能率におけるハドロン真空偏極・光子-光子散乱)、及び ILC 実験計画で重要な QCD の基

本的パラメータの高精度決定も行う。ミュー粒子異常磁気能率に関する計算は、同じ目的の QED 高次補正計算と連携して推進していく。

解決に必要な計算手法とアプリケーション

格子 QCD ハイブリッドモンテカルロ法^(a)、ドメインウォール型フェルミオン作用^(b)、大規模疎行列反復解法^(b)。

上付き (a), (b) については 2.1.3 を参照。

計算量・計算資源

格子上でカイラル対称性を近似的に保つ 5 次元メビウスドメインウォール型フェルミオン作用を用いて、ボトムクォークの直接計算を行う。質量が非常に大きいボトムクォークを直接格子上で扱うためには、現在の典型的な格子間隔 ($a = 0.1$ fm) よりも小さな格子間隔が必要であるため、0.033 – 0.020 fm までの格子間隔が小さな高詳細格子を用いる。それ以外に、格子間隔 0.082 – 0.043 fm の格子を用いて、現実的クォーク質量での新しい物理階層探索のために有用なハドロン行列要素の計算も行う。これらの計算の有限体積効果を抑えるため、各格子間隔で $M_\pi L \geq 4$ という条件を満たし、最大で空間体積 (6 fm)³ での計算を行う。本課題で計画している計算の、具体的な格子間隔 a 、パイ中間子質量 M_π 、5 次元格子サイズのパラメータは表 4.2 にまとめる。

格子間隔 a [fm]	a^{-1} [GeV]	M_π [MeV]	格子サイズ	計算量 [EFLOP]
0.082	2.4	500,400,300,200,135	$72^3 \times 144 \times 12$	91,000
0.055	3.6	500,400,300,200,135	$80^3 \times 160 \times 8$	1,000,000
0.043	4.6	500,400,300,200,135	$96^3 \times 192 \times 8$	4,500,000
0.033	6.0	500,400,300,200	$120^3 \times 240 \times 8$	640,000
0.025	8.0	500,400,300,200	$160^3 \times 320 \times 8$	3,600,000
0.020	10.0	500,400,300,200	$200^3 \times 400 \times 8$	13,500,000

表 4.2 新物理探索・解明のための精密格子 QCD シミュレーションに用いるパラメータと計算量

高統計精度の計算結果を求めるため、ゲージ配位生成は、格子間隔 0.043 fm、 $M_\pi = 135$ MeV で 100,000 分子動力学時間行う。その他のパラメータでは、自己相関長 $\propto 1/(aM_\pi^2)$ を仮定して、分子動力学時間をスケールさせる。配位生成に必要な計算量は、格子間隔 0.043 fm、 $M_\pi = 300$ MeV で既に行つたシミュレーションの実測値と自己相関長の式に基づき、次のスケーリング式により評価した。実行性能は 15% を仮定している。

$$3300 \times \left(\frac{a^{-1}}{4.6 \text{ GeV}} \right)^6 \times \left(\frac{300 \text{ MeV}}{M_\pi} \right)^9 [\text{EFLOP}] \quad (4.1)$$

近年のシミュレーションの経験から、物理量計算にはゲージ配位生成の 2.5 倍の計算がかかると想定する。表 4.2 に、それぞれの格子間隔で全ての M_π のゲージ配位生成と物理量計算に必要な計算量をまとめた。よって、この課題全体に必要な総計算量は **25,000,000 EFLOP** である。

この課題の総計算量の約 6 割に相当する、格子間隔 0.020 fm、パイ中間子質量 200 MeV の計算について、要求性能の詳細な内訳とそれらの数値を第 2.1.5 節に挙げている。

上の式から、このパラメータでの総計算量は **13,500,000 EFLOP** である。ゲージ配位生成と物理量計算のコア部分は、クォーク伝搬関数の計算であり、ドメインウォールフェルミオン作用を用いたクォーク伝搬関数は、Krylov 部分空間反復法である共役勾配法 (CG) により計算される。

クォーク伝搬関数計算に必要なメモリ量は 5 次元格子サイズに比例し、一方、物理量測定に必要なメモリ量は 4 次元格子サイズに比例する。それらを合わせた、このパラメータでの使用メモリ量は **80 TB** である。

パイ中間子質量 200MeV でのクォーク伝搬関数を得るために反復回数を 10,000 回程度、ゲージ配位生成のクォーク伝搬関数の計算を 1 分子動力学時間あたり 400 回程度として、以下の見積りを行った。自己相関長の式から、このパラメータでは、100,000 分子動力学時間のゲージ配位生成が必要になる。つまり、ゲージ配位生成に必要な CG の反復回数は、 4×10^{11} 回である。物理量測定については、計算量と同じく、この 2.5 倍の反復回数が必要と見積もった。CG の計算に必要になる行列ベクトル積は、各ノードに分割された行列とベクトルを使って実行するため、隣接ノード間のメモリ転送が発生する。5 次元方向は各ノードでメモリを確保していると仮定すると、その転送量はノード内の 4 次元の各方向の境界の大きさに比例する。ノード数を 40,000 とすると、クォーク伝搬関数の計算に必要な CG 反復回数を上の値とすると、ゲージ配位生成と物理量測定に必要なメモリ転送量は **1,720,000 EB** になる。

生成されるゲージ配位は、4 次元格子サイズの大きさで決まり、1 ゲージ配位あたり 1.8 TB である。10 分子動力学時間ごとに保存すると、このパラメータでは 10,000 ゲージ配位を保存することになり、計算に用いる中間ファイルの容量と合わせるとストレージ量は **60 PB** が必要である。

4.1.13 量子電磁力学 (QED) の高次補正計算 [長期目標 (b-1) の課題]

課題概要と長期目標

量子電磁力学 (Quantum Electrodynamics : 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。理論的に異常磁気能率を計算するには、電磁気力の強さを表すパラメータ（微細構造定数） α の展開

$$\alpha A_2 + \alpha^2 A_4 + \alpha^3 A_6 + \alpha^8 A_8 + \alpha^{10} A_{10} + \alpha^{12} A_{12} + (\alpha \text{ の高次項}) \quad (4.2)$$

による摂動計算を行う。この各次数の展開係数 $A_n (n \geq 8)$ の計算に数値計算が必要になる。電子とミュー粒子の重要な違いは、異常磁気能率に対する 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を非常に高い精度で決めることが可能である。電磁気力は物理のあらゆる分野に関わっており、原子物理や物

性物理の物理現象から決定された微細構造定数を相互比較することで、QED だけでなく、広い物理理論の体系を検証することが、電子の場合の目的となる。現時点では電子異常磁気能率の最高精度の実験はハーバード大学グループによるもので、その相対誤差は $2.4 \times 10^{-8}\%$ という驚くべき精度であり、今後、電子の反粒子である陽電子も使って、精度を一桁以上改良する実験を計画している。

他方、ミュー粒子は電子より約 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、ミュー粒子異常磁気能率では 0.00001% 程度の精度になると未知の重い粒子の影響による新しい階層の手がかりが見えるのではないかと期待されている。この手がかりを探すためには、実験および理論の双方がこの精度以下を達成し、両者の差異を確定させなくてはならない。つまり、標準理論による正確で精密な予言が必須であり、当然、QED もその一翼を担う。現在、日本の J-PARC 及び米国のフェルミラボで別個に国際共同実験として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、2017 年に実験結果の第一報が予定されている。発見型実験の典型である LHC とは相補的に、精密測定を介して既存物理学のブレークスルーが期待できることが、ミュー粒子異常磁気能率実験への高い関心となっている。

QED 摂動計算の今後 5 年～7 年における目標の一つは、実験精度の飛躍的向上に対応すべく、8 次と 10 次の展開係数の高精度計算から、現在の QED 摂動計算の不定性を $1/4$ に削減することである。実験値と理論計算の精度が現在よりも 1 桁向上すれば、ミュー粒子だけでなく電子の異常磁気能率を用いても新しい未知の階層の手がかりを探ることが可能になると期待されているため、実験グループからの強い要望もあり、2～3 年程度でこの目標達成を目指す。その後は、更に高い次数の展開係数である 12 次の計算がターゲットになる。この展開係数は、電子の将来実験の精度程度では必要となるとは考えられないが、ミュー粒子の場合では有意な寄与として現れると推測されるため、摂動展開の妥当性を検討した後、主要項をピックアップして 10% 程度を目標精度にし、数値計算を行う。

解決に必要な計算手法とアプリケーション

QED 高次摂動モンテカルロ積分計算^(d)、4 倍精度実数計算、高度に最適化された 4 倍精度ライブラリ。上付き (d) については 2.1.3 を参照。

計算量・計算資源

素粒子の反応は、視覚的に理解しやすいように图形化された「ファインマン図」で表される。展開係数 $A_{2n} (n \geq 1)$ は n 重のループを含む複数のファインマン図で表され、各ループが運動量空間における多次元積分に対応する。例えば、10 次 A_{10} の場合は 5 ループを含む 1 万個以上という膨大な数のファインマン図を数値的に評価する必要がある。ファインマン図の数値計算における特徴として以下の点が挙げられる。

- 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。
- 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、擬似 4 倍精度の実数計算が必要である。

- 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。
- 被積分関数の評価点の数で並列化可能であり、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。

この計算に必要な要求性能の数値を第 2.1.5 節に挙げている。

10 次のファインマン図 1 個の値を、 4×10^9 個の評価点を用いて擬似 4 倍精度で 10 回の平均から評価する計算量は、倍精度換算で約 1 EFLOP である（擬似 4 倍精度計算 1 回は倍精度計算 1 回のおよそ 20 倍）。積分値の収束が遅い図形は 400 個程度あり、それらの平均評価回数を 10 とすると、10 次の展開係数の総計算量は **1,000 EFLOP** と見積もられる。一方、12 次のファインマン図 1 個の被積分関数の長さは 10 次の 10 倍程度であるが、目標精度は 10% 程度なので、倍精度計算で十分である。図形の数も一桁増えるが、主要寄与を与えるものだけを勘定すれば良く $\mathcal{O}(1000)$ 個で済むため、総計算量は 10 次と同じ程度と見積もられる。従って、10 次と 12 次の計算を完了するために必要な総計算量は **2,000 EFLOP** である。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。1,000 ノードを利用したとすると、使用メモリ量は **1 TB** である。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、コンパイラ（計算機性能）への要求として、①倍精度および 4 倍精度計算に対するコンパイラの高度な自動 SIMD 化、②巨大なプログラムに対する高速なコンパイル、③高度に最適化された 4 倍精度ライブラリの提供が挙げられる。

4.1.14 ファインマン振幅自動計算 [長期目標 (b-1) の課題]

課題概要と長期目標

大型加速器などによる素粒子反応実験のデータ解析では、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必要がある。また、シグナルと類似の現象（バックグラウンド）がどのくらいデータに混入するかの予測が必要であり、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不可能である。この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、それぞれの図形に含まれるループが表現する多次元積分を計算する方法が一般的である。展開の次数が上がるごとに、ファインマン図に含まれるループの数が増え、かつファインマン図の数が指数関数的に増えていくため、次数が高い展開係数ほど計算が急激に難しくなっていく。前出の QED の高次補正計算もこの一例であるが、この課題では QED に限定せず、標準理論全体およびそれを超える新しい理論を計算対象とする。多種多様な素粒子反応を、この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ぶ。このシステムは、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、現在では LHC 実験などのデータ解析に貢献している。

将来建設が検討されている国際リニアコライダー（International Linear Collider : ILC）のような、素粒子の衝突エネルギーが高いエネルギー・フロンティア型の実験では、重要なデータを得るために終状態が

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と予測されている。この 2 点に対応するため、理論計算においても複雑な終状態での高精度計算が要求されており、その要求を満たす自動計算システム構築が急務である。このシステムは、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・新現象の解明には不可欠である。すでにわが国でも、1 ループを含むファインマン振幅自動計算が完成し、ILC のエネルギー領域では QCD と電弱理論の 1 ループの寄与が各々 10% 程度あることを数値的に示している。しかし、計画では ILC の実験精度は 1% 以下になるので、更なる高精度計算のために 2 ループ図形についての自動計算システムが必要であり、このシステムを完成させることができが今後 5 – 10 年の課題となる。具体的には、2021 年ごろに電子陽電子衝突でトップクォーク対生成（終状態 2 体）の電弱相互作用及び QCD の混在した 2 ループ図形計算、2023 年ごろに全電弱相互作用における 2 ループ図形計算を可能にする。これにより、2020 年代後半以降の ILC 実験などの電子陽電子衝突実験の精密測定に寄与することができると考えている。

解決に必要な計算手法とアプリケーション

基本的に QED の高次補正計算と同じ枠組みの計算 (2.1.3 (d) を参照) であるが、大きな違いとしては、理論が QED に限定されない点、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。また、レプトン、クォーク、ゲージ粒子、ヒッグスボソンという、質量が 6 術も異なる粒子を扱うことや、様々な数値的相殺が発生することから、現在 4 倍精度計算が標準的であり、更なる高精度（6 倍、8 倍精度）を用いた計算も将来必要と考えられる。

ループ積分を実行する際の多次元積分方法として、二重指数関数型などの数値計算公式や、適応型積分公式を用いる。前者は SIMD 型で超並列計算可能であるが、適応型の場合には、並列度を高めるために並列化アルゴリズムが必要になる。

計算量・計算資源

ファインマン図の数は、ループの個数と共に指數関数的に増加していく。例えば、ILC のような電子・陽電子衝突実験における、トップクォーク対生成の電弱相互作用素粒子反応過程では、ループの無い図形の数は 4 個であるのに対して、ループ 1 個は 150 個、ループ 2 個は 31,193 個となる。

これらのファインマン図の計算を行うには、ループに対応する運動量積分を実行する必要があり、1 ループでは 3 次元積分、2 ループでは 6 次元積分が必要になる。またそれ以外に、素粒子反応の全確率を求めるためには、終状態の位相空間に対して積分が必要であり、積分の次元は終状態の粒子数に応じて増加していく。終状態が最も簡単な 2 体では 1 次元積分、3 体では 4 次元積分、4 体では 7 次元積分となる。

電子・陽電子衝突におけるトップクォーク対生成の場合に、電弱相互作用の 2 ループ図形で、運動量積分が最大の 6 次元の図形の数は 2,000 個である。1 次元あたりの評価点は 100 とし、2 体終状態の位相積分評価点は 10 とする。これらの図形 1 個の計算に、運動量積分と位相積分を 400 回程度実行する。それ以外の図形の計算は、この図形計算の 10 倍とすると、全体で 80×10^{18} 計算が必要である。この計算を擬似 4 倍精度で計算すると、倍精度計算の約 15 倍の計算が必要なので、この過程の 2 ループ計算の総計算

量は **1,200 EFLOP** と見積もることができる。一方で、自動生成プログラムによるファインマン図の処理、積分アルゴリズムの改良によって、格段に計算量を減らすことも可能かもしれない。現在の計算コードの実行効率は、擬似 4 倍精度計算を実行できる BlueGene や SR16000 で 20% から 30% である。

第 2.1.3(vi) 節および第 4.1.13 節にある QED 計算よりも複雑な計算が必要であるため、計算量は多くなるが、計算の枠組は同じであるため、計算機要求性能は共通する部分が多い。

- 高性能 4 倍精度浮動小数点計算が可能な計算機
4 倍精度の演算器を有する計算機、もしくは、倍精度演算器を利用して 4 倍精度計算を可能とする計算機
- 高度な SIMD 命令を生成できるコンパイラ及び#pragmaなどを用いたハードウェアに依存しないソフトウェアプログラミング環境
- 計算式が長大になるため、コンパイラ時間も重要
- 4 倍精度の高度なライブラリ
- 将来的には、多倍長計算が可能な計算機と高度なライブラリ

4.1.15 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 [長期目標 (b-2) の課題]

課題概要と長期目標

宇宙創成の機構の解明やブラックホールの微視的構造の理解には、AINシュタインの一般相対論にミクロの世界で重要な量子論の効果を取り入れる必要がある。超弦理論は、プランク長さ (10^{-35} m) 程度に広がった弦を宇宙の最小構成要素と考えることで重力をうまく量子化し、20世紀の2大理論である相対論と量子論を統一的に記述することに成功している。超弦理論のダイナミクスを行列模型や超対称ゲージ理論の数値計算から明らかにし、宇宙創成のシナリオや自然界の究極的法則の確立、ゲージ重力双対性の検証など、今後 100 年のうちに解決されるべき物理学の難問に挑戦する。

素粒子の標準理論とビッグバン宇宙論は、加速器実験や宇宙観測などにより精密に実証されており、これらを重力を含んだ微視的な理論から導くことは、21世紀の物理学の大きな目標の一つと言える。本課題では、重力を含んだ微視的な理論の最有力候補と考えられている超弦理論から、標準理論とビッグバン宇宙論を導ける可能性を明らかにする。そのために、超弦理論の非摂動的定式化として提唱されている行列模型の数値シミュレーションを実行し、宇宙の膨張の仕方や相関関数などを測定する。そこから、時空が4次元である理由を解明し、さらに、初期宇宙の密度揺らぎや時空を伝播する物質粒子の種類を同定することで、現実の宇宙がどのようにして生じるかのシナリオを確定する。

ゲージ重力双対性 (AdS/CFT 対応) は、超弦理論に基づいて立てられた、ゲージ理論と重力理論が同等であるという理論的な予想である。この予想は様々な問題の解明に応用してきた。量子効果によって蒸発していくブラックホール内部の“情報”がどこに行ってしまうのかというブラックホールの情報喪失問題の解決、手計算で解くことが難しい QCD、超伝導、超流動現象の解析的な理解、あるいは、超弦理論を非摂動的に定義する方法の確立など、多くの理論的な可能性が検討されている。本課題で、超対称

ゲージ理論を格子理論を用いて数値計算することで、AdS/CFT 対応やその低次元版の双対性予想を検証する。これにより、双対性の理論的応用の基礎づけや、超弦理論からゲージ重力双対性を仲介して、素粒子論、宇宙論、物性、量子情報といった複数の分野を横断する新しい物理学の開拓を行う。

本課題の更なる発展として、複数の超弦理論を統合する M 理論の実体や暗黒物質や暗黒エネルギーの正体を解明し、超弦理論の理論体系の完成を目指す。

解決に必要な計算手法とアプリケーション

行列模型と超対称ゲージ理論のどちらの理論でも、物理量は多自由度の積分によって与えられるため、格子 QCD の場合と同様、ハイブリッドモンテカルロ (HMC) 法^(a) を用いた計算が可能である。

行列模型の計算では 10^3 次元程度の密行列に関する行列行列積を頻繁に評価する必要がある。また、揺らぎの古典化を検証する際に古典運動方程式を解くときには 10^4 次元の行列サイズを想定している。フェルミオンの自由度を落とす、もしくは、実効的に取り入れるといった簡単化をした行列模型については、効率のよい計算コードが開発されており、実際の計算に使われている。現在、フェルミオン自由度を完全に取り入れた場合の計算コードの開発を進めている。またプロジェクトの後半では、大きな行列に対する代数方程式を、然るべき境界条件のもとで効率的に解くコードを開発する。

一方、超対称ゲージ理論の計算では杉野格子作用とよばれる格子超対称ゲージ作用を用いた計算を行う。この計算の主要部分は、格子 QCD と同様に、大規模疎行列反復解法^(b) によるフェルミオン伝搬関数計算であり、問題となるサイズは約 10^9 次元の疎行列である。この疎行列の対角の帶部分にはサイズが約 10 次元の密行列を多数含み、そのサイズの行列行列の積を複数回評価する必要がある。その小行列以外は疎の構造を持つ行列なので、並列化が有効である。現在までに 1、2 次元の超対称ゲージ理論用の計算コードの開発は終わっており、並列計算機での実行が可能な状況である。計算にフェルミオンの複素位相の効果を取り入れる際には、最近開発してきた複素作用問題の解決策である複素ランジェバン法やレフシェツシンブル上の HMC 法を用いた改良が必要になるため、今後開発される計算機資源に沿ったアルゴリズムの開発や改良、および高速化も同時に行っていく。

上付き (a), (b) については 2.1.3 を参照。

計算量・計算資源

ここでは、超対称ゲージ理論の計算での計算量の見積りを述べる。この見積りは京コンピュータを用いて行った、2 次元超対称ゲージ理論の計算を元に行った。京コンピュータでの計算は、2 次元格子サイズ 16×64 でゲージ群の次元は 6、フェルミオンのスピノル次元は 16 で行い、128 ノードを用いた場合、1 パラメータの計算に 2000 時間かかった。以下、実行性能は 5% として見積もる。

将来計画している計算は、4 次元格子サイズ 16^4 でゲージ群の次元は 10、スピノル次元は 16 を用いる。計算量はゲージ群とスピノル次元の 5 乗、格子サイズの $5/4$ 乗に比例すると仮定した。理論の性質を解明するためには、様々なパラメータでの計算が必要であり、全体で 20 パラメータの計算を行うとすると、

総計算量は **280,000 EFLOP** である。また、計算では各格子サイズで複素 10×10 行列を 300 個程度メモリに確保する必要があるため **31 GB** のメモリ量が必要になる。

4.1.16 超対称模型の非摂動ダイナミクス [長期目標 (b-3) の課題]

課題概要と長期目標

自然界の最も基本的な構成要素は素粒子であり、その物理的な振る舞いは標準理論によって説明されている。しかしながら、標準理論には理論的に不自然な点が数多く存在することが早くから指摘され、それを凌駕する新しい理論の確立が長らく望まれてきた。自然界に存在する力はなぜ 4 つあるのか、暗黒物質とは何か、素粒子に質量を与えるヒッグス粒子の量子論的な不安定性や素粒子ごとの質量に大きな違いが見られる理由など、多くの謎が標準理論では説明できていない。これらの謎に答えを与える新しい理論は 1 TeV (テラ電子ボルト) を超える高いエネルギー・スケールに存在することが期待されており、その発見は LHC をはじめとして今後継続される素粒子実験の中心的な課題となっている。

これまでに提案された標準理論を超える新しい理論の中で、最も有力とされているのが超対称性を有する理論である。この理論は、ヒッグス粒子の量子論的な安定性を保証できる点や、暗黒物質の正体が何であるかをうまく説明できる点で大きな成功を収めてきた。自然界の力を統合した大統一理論や万物の理論である超弦理論も超対称性に基づいて構築されていることも、この理論が有力視されている理由である。一方、高いエネルギー・スケールに存在する超対称性は、我々に身近なエネルギー・スケールでは壊れて見えなくなっているとされる。物理学では、この現象を超対称性の破れと呼ぶ。理論的な調査から、超対称性の破れは解析的には解けない複雑な物理効果によって生じていることがわかっている。それゆえ数値シミュレーションによって、超対称性の破れの機構や超対称理論のダイナミクスを解明することが、新しい階層の基本法則を理解する上で重要になっている。特に、破れに伴って現れる新粒子の質量や新しい物理現象の効果の大きさを数値的に予測することで、今後の実験をどのように進めるかの方向性決定に対する貢献が期待できる。

超対称模型を数値計算する簡単な方法は長い間良くわかつていなかったが、2000 年代初頭に格子ゲージ理論の枠組みで超対称性を自然に扱えることがわかり、状況が一変した。現在では、格子 QCD と同様の計算スキームを用いて超対称模型の数値的な研究が幅広く行われるようになっている。今後 5 – 10 年の期間は、超対称性の破れの機構の解明が重要な目標である。とりわけ、超対称 QCD におけるサイバーグ双対性、イントリゲータ・サイバーグ・シイ模型、アフレック・ダイン・サイバーグの超ポテンシャル、あるいは、D 項による力学的超対称性の破れなど、新理論の構築に使われる理論的なアイデア・予測の検証が重要となる。期間内に、最近進展してきたグラディエントフローを用いて超対称性の破れの有無を決める真空エネルギーを計算し、低次元のウェス-ズミノ模型から 4 次元の超対称ゲージ理論まで、超対称性の破れの機構を体系的に調査していく。

解決に必要な計算手法とアプリケーション

超対称ウェス-ズミノ模型や超対称ゲージ理論 (杉野格子作用) における超対称性の破れの機構を数値シミュレーションによって解明する。格子 QCD の場合と同様、物理量は多自由度の積分によって与えら

れるため、ハイブリッドモンテカルロ法^(a)を用いた計算が可能であり、計算の主要部分は大規模疎行列反復解法^(b)によるフェルミオン伝搬関数計算である。複数の模型に対する計算プログラムは既に完了している。

上付き (a), (b) については 2.1.3 を参照。

計算量・計算資源

超対称性は理論的な制約からフェルミオンの力学的な効果を取り入れることが必須で、その計算ではフェルミオン伝搬関数計算が計算時間の大部分を占める。超対称模型の問題規模は模型やパラメータに強く依存するが、最も計算時間の大きな場合でも格子サイズ 32^4 、ゲージ群の次元は 3、フェルミオンのスピノル次元は 4 での計算を計画している。超対称性の破れの有無の判定には温度を変えた複数点において真空エネルギーを測定する必要があるため、格子間隔や他のパラメータを変えた計算も考慮すると、全体では 100 個程度のパラメータでの計算を要する。

この計算の計算量を京コンピュータで行った 2 次元超対称ゲージ理論の計算を元に見積もる。京コンピュータでの計算は、2 次元格子サイズ 16×64 でゲージ群の次元は 6、フェルミオンのスピノル次元は 16 で行い、128 ノードを用いた場合、1 パラメータの計算に 2000 時間かかった。以下、実行性能は 5% とした。

計算量はゲージ群とスピノル次元の 5 乗、格子サイズの $5/4$ 乗に比例すると仮定し、将来計画の計算量を見積もると、総計算量は **100 EFLOP** である。また、計算では各格子サイズで複素 3×3 行列を 50 個程度メモリに確保する必要があるため **7.5 GB** のメモリ量が必要になる。

4.1.17 ウォーキングテクニカラー理論の非摂動ダイナミクス [長期目標 (b-3) の課題]

課題概要と長期目標

標準理論の理論的に不自然な点あるいは不満足な点は、標準理論を超えた新しい階層により解決されると期待されている。これまでに、数多くの新しい階層の物理理論が提案されており、その一つにウォーキングテクニカラー理論がある。

この理論の大きな特徴は、標準理論では素粒子として扱われるヒッグス粒子を、標準理論には存在しない新しい素粒子の複合粒子として記述することや、広いエネルギー領域で理論の結合定数がほとんど変化しない、近似的共形対称性を持つことである。しかし、この特殊な特徴を持つ具体的な理論は未だ発見されていない。その原因是、この理論は QCD と似た性質を持つため、解析的に取り扱うことが難しく、具体的な理論の候補を探すには、非摂動計算を用いて理論のダイナミクスを解かなくてはならないためである。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が、近年の計算機能力の飛躍的向上と計算手法の進展により、様々な理論を非摂動計算を用いて系統的に調査することが可能になった。

この課題の長期的な目標は、様々なゲージ群、フェルミオン数の理論を系統的に調べることにより、ウォーキングテクニカラー理論が要求する特徴を持つ理論を探すことである。これまでの研究により、QCD とフェルミオン数だけが異なる 8 フレーバー SU(3) ゲージ理論がこの候補になる可能性が出てき

た。今後数年の目標の一つは、この理論の特徴を詳細に調べることで、真にウォーキングテクニカラー理論の候補となるのかを検証することである。この検証には、①程度の大きな質量異常次元、②非常に軽いフレーバー1重項スカラー中間子の存在、③擬スカラー中間子崩壊定数がゼロではないことを、ゼロフェルミオン質量の極限で確認する必要がある。この特徴を持つことが確認できた後に、この理論に現れる様々な中間子質量を調べ、どのような質量を持つ粒子が将来実験で観測可能かの予言を与えることを目指した計算を進める。

一方で、8フレーバーSU(3)ゲージ理論が現実世界を記述する理論となるかは不確定であるので、この理論以外にもウォーキングテクニカラー理論の有力な候補があるかを調べる研究を進めることも重要である。

解決に必要な計算手法とアプリケーション

格子QCDハイブリッドモンテカルロ法^(a)、スタッガード型フェルミオン作用、大規模疎行列反復解法^(b)。

上付き(a), (b)については2.1.3を参照。

高改良スタッガード型フェルミオン作用は、ウィルソン型やドメインウォール型フェルミオン作用よりも計算量が少ない格子フェルミオン作用である。一方で、連続極限で理論が持つべきフレーバー対称性やカイラル対称性が格子上では一部破れている。そのため、それらの破れに関係する物理量計算には向きであるが、本課題では、これらの破れの影響が少ない物理量を計算する。

計算量・計算資源

上記①、②、③の検証を行うためには、フェルミオン質量がゼロ近傍の8フレーバー理論計算が必要である。特に擬スカラー中間子崩壊定数がゼロでないことを明確に検証するためには、これまでの計算よりもフェルミオン質量を1/4程度小さくする必要がある。このような質量で、有限体積効果を十分抑えるためには格子サイズ $132^3 \times 176$ での計算が要求される。これまでに九州大学情報基盤研究開発センターtatara 64ノードを用いて行った、格子サイズ $48^3 \times 64$ の計算を元に以下の見積りを行った。実行性能は5%を仮定している。

格子サイズ $132^3 \times 176$ で160,000分子動力学時間のゲージ配位生成を行う計算量を見積もると、必要な総計算量は**310,000 EFLOP**である。擬スカラー中間子崩壊定数やフレーバー1重項スカラー中間子計算は、この計算量に比べると非常に少ない計算量で実行できる。この計算に必要なメモリの大部分は、同時にゲージ配位を2個とフェルミオン伝搬関数を6個程度確保する容量なので、総メモリ量としては**820 GB**が要求される。

4.1.18 データグリッド

課題概要と長期目標

格子 QCD 計算では、格子上の経路積分をモンテカルロ法を用いて計算している。このモンテカルロ法ではアンサンブルとしてゲージ配位（グルーオン場）データを格子 QCD の作用積分に基づく統計分布に従うように生成する。物理量の量子論的期待値はアンサンブルの各ゲージ配位上で計算された物理量の統計平均として計算することが出来る。

現在主流のモンテカルロ法は真空中のクォークの仮想的対生成・対消滅の効果を取り入れることが出来る格子 QCD ハイブリッドモンテカルロ法^(a) である。この計算方法ではクォークの仮想的対生成・対消滅の効果の計算のためクォークの運動方程式を大規模疎行列反復解法^(b) を用いて大量に解く必要がある。ここには多くの計算資源を投入することになる。

このようにして生成されたゲージ配位のアンサンブルはデータとして長期保存され、さまざまな物理量の計算に使われる。またゲージ配位のアンサンブルを公開することで、ゲージ配位生成を行わない研究グループが物理量を計算することが出来るようになり、格子 QCD を用いた物理学研究の進展が促進される。研究に用いたデータは論文執筆・出版後 10 年間保存することが求められている^{*2}。

貴重な計算時間を費やして生成されたゲージ配位のアンサンブルをデータとして長期保存・公開し研究を推進する目的のために、2008 年から Japan Lattice Data Grid (JLDG,<http://www.jldg.org/jldg/>、文献 [4]) という広域データグリッドが日本国内で運用されている（図 4.1 JLDG システム概念図）。現在 JLDG に参画している拠点として、KEK、筑波大学、理研和光キャンパス、東京大学柏キャンパス、京都大学、大阪大学、広島大学があり、これらの拠点を統括するように分散ファイルシステムが Gfarm システム [5] によって構築され、各拠点の HPC システムと連携されている。また、JLDG システムは、2007 年から運用している国際格子 QCD データグリッド International Lattice Data Grid (ILDG, http://plone.jldg.org/wiki/index.php/Main_Page) とも連携しており、JLDG で公開されているデータを ILDG へ供給することも出来るようになっている。

この広域分散グリッドシステムではデータの複製が行われており、万一どこかの拠点がダウンしてもデータが維持されることを保証している。さらに、HPCI 共用ファイルシステムと JLDG システムを連携する仕組みを 2013 年 12 月から運用開始し、HPCI 戰略プログラムにて計算されたデータや HPCI システムを利用して計算したデータを JLDG システムに移動できるようにしており、HPCI プログラム終了後もデータ保持が出来るようにしている。日本の各地にいる研究者が近隣の JLDG 拠点にアクセスすることでデータ移動や共有の手間を省くことが出来る。また、格子 QCD のデータ以外にも超新星爆発研究グループの計算データの共有・保存にも使われている。

現在の JLDG の総データ容量は HPCI システムとの連携開始後急速に増加している状況（図 4.2）であり、2017 年 2 月時点で総容量約 9 PB のうち約 8 PB を使用している。現在は格子 QCD を用いた研究を行なっているグループによるデータ量が支配的である。2017 年現在、日本国内において京計算機の

*2 文部科学省による「研究活動における不正行為への対応等に関するガイドライン」を受けた、日本学術会議による「科学研究における健全性の向上について（回答）」に記載されている

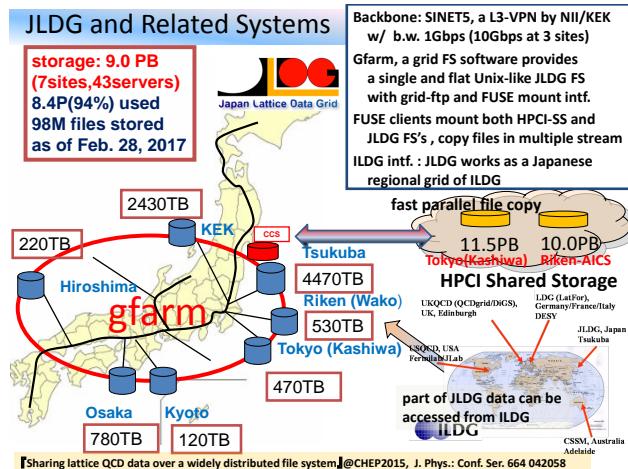


図 4.1 JLDG システムの概念図。

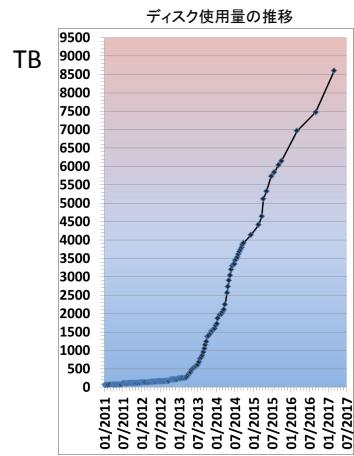


図 4.2 JLDG システムのディスク使用量の推移。

性能を超える HPC システムが稼働しており、引き続きこれらのシステムでも格子 QCD を用いた計算が行われることから、今後も出力されるデータ量が増えていくことが予想される。2026 年頃のエクサスケールの HPC システムから生成されるデータの保持に必要な容量を見極めて確保することが必要である。JLDG システム自身は直接科学を行うことを目的としていないが、上述のように格子 QCD 計算や物理学のための科学計算に必要不可欠なものである。

解決に必要な計算手法とアプリケーション

現在の JLDG の各拠点のファイルサーバは、国立情報学研究所が提供する SINET5 上の L3-VPN (レイヤ 3 バーチャルプライベートネットワーク) によって接続されている Hepnet-J/sc (高エネルギーネットワーク日本/スーパーコンピュータ, KEK:Hepnet-J の歴史:<http://www2.kek.jp/proffice/archives/3w/>) と呼ばれるネットワークにより相互に接続されている。

ファイルサーバ群は、産業技術総合研究所・筑波大学で開発された Gfarm システム [5] により東ねられており、ユーザーからはあたかも単一の (パーティションの区切りがない) ファイルシステム (JLDG ファイルシステム) に見えるようになっている。

計算量・計算資源

本節で述べられた課題のうち大きなストレージ容量を必要とするものに対応したストレージ量を用意することが必要となる。

4.1.19 アプリケーション：モンテカルロ殻模型計算の必要な計算資源の根拠 [長期目標 (a-4) 課題 (iv) 普遍的有効核力の構築]

第 4.1.9 節の配位間相互作用計算（殻模型計算）で用いられるアプリケーションのうち、第 2.1.5 節で紹介したモンテカルロ殻模型計算に必要な計算資源の根拠の詳細を述べる。

10 年後解くべき問題として、ウラン 238 領域のモンテカルロ殻模型計算とした。この領域は超重元素を除いた原子核で最も核子数の多い領域であり、それを解くことは、核図表上の原子核のほぼ全てを殻模型計算でカバーできるようになるという意義をもつ。

通常の殻模型計算では模型空間に含まれる全ての多体基底を生成し、これらの基底で張られたハミルトニアン行列を対角化することによって多体固有状態を求める。これは数値的に厳密な方法であるが、10 年後においても適用可能な核種は非常に限られているとみられる。モンテカルロ殻模型では、全ての多体基底は採らず、有限個の精製された試行波動関数

$$|\Psi^{IM\pi}\rangle = \sum_d^{N_b} f^{(d)} \sum_{K=-I}^I g_K^{(d)} \hat{P}^\pi \hat{P}_{MK}^I |\Phi(D^{(d)})\rangle \quad (4.3)$$

による表現で固有状態に十分近い波動関数を得る。これは、射影演算子 $\sum_{K=-I}^I g_K^{(d)} \hat{P}^\pi \hat{P}_{MK}^I$ で良い角運動量 ($J = I, J_z = M$)・パリティ (π) に射影された N_b 個のスレーター行列式基底 $|\Phi(D^{(d)})\rangle$ ($d = 1, \dots, N_b$) の重ね合わせ（係数は $f^{(d)}$ ）である。ここで $D^{(d)}$ は各々のスレーター行列式基底を決めるパラメータ（個々の $D^{(d)}$ は $N_s \times N_p$ の行列；ここで N_s はバレンス殻の大きさ、 N_p はバレンス殻に含まれる粒子数）であり、これら $D^{(d)}$ の最適化がモンテカルロ殻模型計算の本質的な計算要素となる。現実的な物理系では、十分良い波動関数を得るために必要なスレーター行列式基底の個数 N_b は、計算規模を特徴づけるパラメータ、すなわちバレンス殻の大きさ N_s やそこに含まれる粒子数 N_p に強く依存せず数百程度で良いとされており、そのため N_s や N_p の大きな重い原子核に対しても現実的な計算が可能となっている。

モンテカルロ殻模型計算では、総計算量は、[(a) 各スレーター行列式間のハミルトニアン行列要素 $\langle\Phi(D^{(d_1)})|H|\Phi(D^{(d_2)})\rangle$ の計算量] \times [(b) その計算回数] で決まる。(a) については、バレンス殻の大きさ N_s で特徴づけられる密行列積として表現されるため、その計算量は厳密に見積もることが可能である [Y. Utsuno *et al.*, Comput. Phys. Commun. **184**, 102 (2013)]。この密行列の次元は典型的には数百から数千程度であり、そのサイズの行列に対する BLAS3 の性能が実効性能を支配する。東工大 TSUBAME を用いたベンチマーク計算によると、 N_s によらず、実効性能は理論性能の約 50%、計算量に対するメモリ転送量の比はほぼ 1 Byte/FLOP であったので、以下の見積もりにはこれらの値を用いることとする。(b) は、[(b-1) 量子数射影に必要な分点数] \times [(b-2) 量子数射影されたハミルトニアン行列要素の計算回数] である。(b-1) の典型的な値は $2 \times 30^2 \times 20 = 3.6 \times 10^4$ であり、(b-2) は最適化プロセスの収束の様子に依存するため非常に正確に見積もることはできないが、これまでの経験から $N_b = 100$ のケースではおよそ 2×10^6 で、概ね N_b^2 に比例する。(b-1)、(b-2) ともに N_s で特徴づけられる計算規模にほとんど依存しない。

モンテカルロ殻模型計算では、(4.3) 式からわかるように、一度の計算において一つの原子核の一つの

スピン・パリティ状態しか得られないが、核構造においては、励起準位構造や周辺核の系統性を調べることが重要である。そのことを考慮し、ここではケース数を 100 (10 原子核 \times 10 スピン・パリティ量子数)とした。ケース毎の計算時間は、現実的な範囲内ということで 12 時間と設定した。

上記の前提のもとで、個々のケースにおける必要な計算資源を以下のように求めた。ウラン 238 の殻模型計算に必要なバレンス殻は、ニルソン図による見積もりから、陽子について $4 \leq N_{\text{osc}} \leq 7$ 、中性子について $5 \leq N_{\text{osc}} \leq 8$ となる (N_{osc} は調和振動子量子数)。この場合、陽子と中性子の N_s はそれぞれ 200 および 260 で、(a) の計算量は、 0.70 GFLOP となる。(b) については、ここでは $N_b = 500$ と仮定することによって、 $= (3.6 \times 10^4) \times (2 \times 10^6 \times (500/100)^2) = 1.8 \times 10^{12}$ 回とした。したがって、必要な総計算量は、 $0.70 \text{ GFLOP} \times 1.8 \times 10^{12} = 1260 \text{ EFLOP}$ となる。50% の実効効率を考慮に入れると、この場合の計算量は理論性能 2500 EFLOP 相当となることから、12 時間で計算を完了するための要求性能は理論性能で 58 PFLOPS となる。これは、10 TFLOPS の性能をもつノード約 6000 に相当する。メモリ転送量は、ベンチマークの Byte/FLOP 値から 1250 EB となる。

モンテカルロ殻模型の波動関数は少数のスレーター行列式基底で表現されるため、比較的サイズは小さい。ウラン 238 の場合でも各スレーター行列式基底を決める行列 D のサイズ $S(D)$ は $16 \times (200 \times 52 + 260 \times 76)/1024 = 470 \text{ kB}$ にすぎない (D が COMPLEX(16) の $N_s \times N_p$ 行列で表され、ウラン 238 の場合、陽子、中性子の N_s がそれぞれ 200、260 で、陽子、中性子の N_p がそれぞれ 52、76 のため)。最終的に得られた波動関数のみストレージで保存され、そのサイズは $S(D) \times N_b = 470 \text{ kB} \times 500 \text{ 基底} = 230 \text{ MB}$ となる。ファイルアクセスは非常に限られているため、特別な I/O 性能は必要ない。

主な通信パターンは MPI_Allreduce によるグラジエントベクトルの送受信である。グラジエントベクトルのサイズは計算する状態のスピン I に依存し、 $(2I + 1)^2 \times S(D)$ と表される。最大 $I = 8$ まで計算するとすると、 $17^2 \times 470 \text{ kB} = 140 \text{ MB}$ となる。経験的に、グラジエントベクトルの通信回数は基底あたり 20 回であることから、500 基底計算した場合、通信サイズの合計は、 $140 \text{ MB} \times 20 \text{ 回} \times 500 \text{ 基底} \times 6000 \text{ ノード} = 8400 \text{ TB}$ となる。通信にかけてよい時間を全体の 10% とした場合、ノードあたりのネットワークバンド幅は $(140 \text{ MB} \times 20 \text{ 回} \times 500 \text{ 基底})/(12 \times 60^2 \text{ 秒} \times 0.1) = 320 \text{ MB/s}$ が要求される。通信回数はそれほど多くないことから、レイテンシに対する要求は特にない。

メモリには、二体行列要素、ノルムカーネル、ハミルトニアンカーネル、 J^2 演算子のカーネルをストアする必要があり、ウラン 238 の場合は合わせて 5 GB と見積もられる。総メモリ量は、 $5 \text{ GB} \times 6000 \text{ ノード} = 30 \text{ TB}$ となる。

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 2014」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（2014）<http://www.scj.go.jp/ja/info/kohyo/kohyo-22-h201.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] 日本物理学会誌 2005 年 9 月号 741 頁「カーナビと相対論」中村卓史
<http://ci.nii.ac.jp/naid/110002079440>
- [4] T. Amagasa *et al.*, “Sharing lattice QCD data over a widely distributedle system”, 21st International Conference on Computing in High Energy and Nuclear Physics (CHEP2015) IOP Publishing, J. Phys.: Conf. Ser. 664 (2015) 042058 [doi:10.1088/1742-6596/664/4/042058].
- [5] Gfarm File System, Project page [<http://sourceforge.net/projects/gfarm/>]
- [6] Y. Utsuno et al., Comput. Phys. Commun. 184, 102 (2013).

4.2 ナノサイエンス・デバイス

4.2.1 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・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る。

(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ーファンダム）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の向上を有効利用しようとするものとがある。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ために工夫がいるが、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 $O(B^2 M)$ 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に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 $O(B^2 M)$ 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らないが、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

それに関しても、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 5×10^4 、非局所ポテンシャルのプロジェクトの数 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 100~1,000 個並列で動くことで、全体で 1~10EFLOPS 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 Gmax の球内に分布している）平面波展開係数と同じく（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（VNL）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 $2PBG=10^{16}$ 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 それぞ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（× 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 $B \times B$ 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、 $O(N^3)$ 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 $L_{i\alpha,j\beta}$ や、局所軌道間の重なり行列要素 $S_{i\alpha,j\beta}$ があり、これらの項の積をつぶって計算を進める。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 ($i\alpha$)) × (平均の隣接原子数とその軌道の数 ($j\beta$)) 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、 1×108 (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 度を乗する必要があり、結局、 $5 \times 10^{15} \cong 5\text{PB}$ 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) 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 N_x, N_y, N_z 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 とすれば 1 辺当たり $33\text{nm} \div 0.25 \sim 1300$ 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。

(iii) 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 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。

(iv) 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～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。

(v) 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) × 8(B/要素) × 5(本) = 5,513,861,152,800B = 5TB、総メモリ使用量 = ${}_{54}C_{27}$ (要素) × 8(B/要素) × 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 = $((1 \times 24+2) \times 9.9M + 2 \times 24 \times 9.9M + 2 \times 20 \times 9.9M) \times 16K = 181,00G = 17.6T$ 、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 106sec）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。

(vi) 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、 $256 \times 256 \times 256 \sim 512 \times 512 \times 512$ 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。

(vii) 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。

(viii) 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も多い。
- 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十分にある。

【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, alltoall 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。

「物質科学」要求性能表

	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
次世代先端デバイス	100	100	1.2	10	96	10	350000	第一原理計算 RSDFT(擬ポテンシャル法、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	2.2×10^6	第一原理計算 PHASE(擬ポテンシャル、平面波基底、 $O(N^3)$ 法)	原子数：1 万 100MD を同時実行

(次ページに続く)

「物質科学」要求性能表（続き）

	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
次世代先端デバイス	100	100	2	15	60	100	2.2×10^6	第一原理計算 xTAPP(擬ボテンシャル、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	20	5	10	240	10	860000	第一原理計算 CONQUEST(密度行列、最適化による $O(N)$ 法)	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 ¹	1000	10	10	0.1	1	100	360000	高精度分子軌道法	2万基底、100万求積点
分子機能	300	18	4	0.0001	15	10	160000	大規模分子軌道法	原子数:1万
分子機能（タンパク質の電子状態）	1.1	0.19	1	0.001	1	100	400	フラグメント分子軌道法	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	20	6.4	51	44	24	10	17000	短距離古典分子動力学	粒子数:4000億
分子機能と物質変換	1000	100	2	1000	150	10	5.4×10^6	長距離古典分子動力学	原子数:10億
光・電子材料	600	200	200	33	14	10	300000	ナノ構造体電子・電磁波ダイナミクス法	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 ²	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
強相関電子系の機能解明 ³	1000	300	0.2		8	100	2.9×10^6	変分モンテカルロ法	原子数1万
物質・エネルギー変換 ⁴	500	50	0.008	6.4	2.8	10	50000	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 ⁵	690	69	2	3.2	300	10	7.4×10^6	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）	QM1000 原子、10000 レプリカ、10000step, MM100,000 原子(roadmap)
物質・エネルギー変換 ⁶	410	41	0.02	0.05	20	10	300000	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

(次ページに続く)

「物質科学」要求性能表（続き）

	要求性能 (PFLOPS)	要求メモリバッンド幅 (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
分子構造・分子機能 ⁷	1000	0.5	0.04		24	1	86000	分子力学法 (feram による リラクサー強誘 電体の誘電率の 周波数依存)	512x512x512
新物質探索	4100	41	20		0.5	1	7400	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 ⁸	0.1	0.02	0.00012		24	10000	86000	第一原理計算 (凍結フォノン 法)	原子数：1万
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 (S z=0)
新物質探索 ⁹	690	1600	1.5	20	24	20	1.2×10^6	フェーズフィールド法	10^{13} 空間メッシュ、 10^7 時間ステップ

¹ 100～1000くらいのアレイジョブを想定² 整数演算がメイン³ 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⁴ 電子状態計算の要求性のは第一原理計算の xTAPP、古典 MD は MODYLAS、I/O の部分は東大渡辺による短距離古典 MD（東大渡辺さん）のデータをベースに概算⁵ 電子状態計算の要求性のは第一原理計算の xTAPP、古典 MD は MODYLAS、I/O の部分は東大渡辺による短距離古典 MD（東大渡辺さん）のデータをベースに概算⁶ 電子状態計算の要求性のは第一原理計算の xTAPP、古典 MD は MODYLAS、I/O の部分は東大渡辺による短距離古典 MD（東大渡辺さん）のデータをベースに概算⁷ アレイジョブでノード間通信なし⁸ 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⁹ 1 ノード 100 TFLOPS, 10000 ノード並列を仮定

参考文献

- [1] 押山淳, 天能精一郎, 杉野修, 大野かおる, 今田正俊, 高田康民. 計算と物質 (岩波講座計算科学第3巻). 岩波書店, 2012.
- [2] 日本化学会編. 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. 化学同人, 2012.
- [3] 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. 理学・工学分野における科学・夢ロードマップ. <http://www.scj.go.jp/ja/info/kohyo/kohyo-21-h132.html>, 2011.

4.3 エネルギー・資源

4.3.1 現在行われている課題

(i) 大規模分子シミュレーションによるエネルギー・材料課題

近年、エネルギー・環境問題が地球規模で深刻化している。石油や石炭等の化石燃料を現状のペースで消費していくと仮定した場合、数十年後には枯渇してしまいエネルギー不足に陥ると危惧されている。また、化石燃料の大量消費によって、二酸化炭素が大量排出され、地球温暖化や大気汚染等の環境問題も引き起こされている。これらの問題を解決するべく、化石燃料に頼らない代替エネルギーの開発が世界中の大学・研究機関・企業で盛んに行われている。太陽光発電はその代替エネルギーの有力候補であり、二酸化炭素を排出しないクリーンな発電を可能にする。太陽光発電にはいくつかの方法があるが、その中でも有機分子化合物から構成される有機薄膜太陽電池が注目を集めている。この太陽電池は大部分が有機分子から構成されており、基板にその有機分子を塗布するだけで製造できるため、低環境負荷、低コストで大面积の薄膜太陽電池を作ることができる。さらに有機ELデバイスのように軽く薄い、またフレキシブルな形状を持つという特徴があるので、様々な場所での自由な設置が可能となる。このような有機分子化合物を基礎とした新しい太陽光発電装置の開発は、その素材となる分子材料の設計が肝要である。優れた化学的特性を持つ分子を実験的に合成し、デバイスとして設計することは基本のプロセスであるが、高性能かつ高品質な有機薄膜太陽電池を実現するためには、候補となり得る分子の構造や特性を、分子スケールで詳細に調べることが必要不可欠となる。そのため実験的な測定のみならず、分子科学の基礎理論に基づく量子化学計算も重要なツールとなる。

量子化学計算とは実験データや経験的なパラメータを殆ど用いずに、量子力学の基本方程式に基づいて分子や原子の電子状態を求め、その電子状態から物性値や化学反応を予測する手法である。その量子化学計算の基礎理論において、最も発展し現在も主流となっている理論といえば、1997年にノーベル化学賞を受賞した Walter Kohn 達によって提唱された密度汎関数理論 (DFT) である。この DFT は、それまで主流であった Hartree-Fock (HF) 法に比べて同等の計算量で、HF 法では計算が困難であった比較的大きな分子に対しても、一定の信頼精度で安価に計算することを可能にしてきた。そのため、現在、最も有用性のある量子化学計算理論としてその地位を保っている。

様々な分子サイズの物性値の予測で多くの成功を収めてきた DFT ではあるが、励起状態の記述が良くないことは有名である。特に量子化学計算によって求められる発光吸収スペクトルは、分子の励起状態に関連した物性値であり、その正確な記述は、有機薄膜太陽電池における分子材料の設計において極めて重要である。DFT における励起状態の記述を改善する手法として、時間依存密度汎関数理論 (TDDFT) が提唱されている。TDDFT も分子の励起状態を正確かつ高速に記述出来る手法として、DFT 同様に現在幅広く利用されている。TDDFT の他に、励起状態の正確な記述に関しては、ポスト HF 法も有力な理論であり、実際に TDDFT よりも高精度な結果をもたらすことが多い。しかしながら、計算量は TDDFT よりもずっと大きく、数十～数百原子数の分子サイズにしか適応出来ていないのが現状である。そのため幅広いサイズの分子系の光学特性を、適度な精度で見積もる手法としては TDDFT が最有力の手法であると言える。

大規模分子系のための電子状態計算法の開発も望まれる技術の一つである。例えば、生体で起きる現象や反応を理解する手法を確立することは、創薬などに活かされるだけでなく、新たな反応系・材料の開拓にとっても重要である。また、試験管で起こる化学反応であっても、現実の系では、微量成分や pH などの条件で反応は大きく変化するため、これらの影響を取り込んだ計算が望まれるケースが多い。量子化学計算手法におけるアルゴリズムの高速化も盛んに行われており、近年の計算機の進歩と並列化技術の向上も相まって、DFT や TDDFT に基づく量子化学計算の適応できる分子系のサイズは飛躍的に拡大している。また、京コンピュータに代表される超並列環境を効率良く利用したハイパフォーマンスコンピューティングを実現することによって、不可能とされたウイルスや DNA、たんぱく質等の数万原子数以上に及ぶ大規模な分子系についても、量子化学計算が可能になると期待されている。しかしながら、 N 原子系の通常の電子状態計算に要する計算時間は、DFT では N^3 に、電子相関理論では N^5 よりも高い幕で増大する。そのため、たとえ計算機の性能が大幅に向上しても、その分だけ大きなサイズの系を扱うことはできない。この問題を解決する方法として、計算時間が N に比例するような手法、すなわちオーダー N 法の開発が進められてきた。我が国ではフラグメント MO 法、分割統治法、エロンゲーション法といったフラグメント分割型計算法の他、密度行列最小化法などの先進的なオーダー N 法の開発が進められている。

(ii) 高精度分子シミュレーションによるエネルギー・材料課題

化学の世界は、Schrödinger 方程式や Dirac 方程式をはじめとする量子力学の原理に支配されており、これを正確に解くことができれば、物質科学の現象を正確に予測することができる。しかしながら、Schrödinger 方程式や Dirac 方程式を多電子系である原子・分子に対して厳密に解くことは長い間不可能であると考えられていて、何らかの近似を導入することで従来は解かれてきた。例えば、前述した DFT 法や Møller-Plesset 法に代表される摂動法、配置間相互作用 (CI) 法、coupled cluster 法は、計算の精度と信頼性を高める電子相関法として確立された量子化学計算法となっている。

多電子系の波動方程式を厳密に解くことは不可能とされていたが、最近、原子・分子の Schrödinger 方程式を正確に解く理論として、自由完員関数法 (Free Complement (FC) Theory) が提案された。量子化学分野では、FC 理論を実用的な予言的量子化学にまで発展させるプロジェクトを遂行しており、方法論・計算アルゴリズムと共にその実用化プログラム「プリンシピア (Principia)」の開発が進められている。

電子間の強いクーロン相互作用と系の内部自由度より、特異な集団的量子効果を示す強相関電子系は、新しい物性の宝庫であり、基礎研究からその応用について国内外で精力的に研究が行われている。また強相関電子系は、高温超電導体など次世代のエネルギー・材料分野に対して非常に重要な分野の一つであると考えられる。強相関電子系の理論的研究は、バンド描像を超えた取り扱いが必要であり、厳密対角化法や量子モンテカルロ法、また密度行列繰り込み群法等による数値的研究が重要な役割を果たしている。しかしながら、強相関電子系の持つ電荷やスピン、格子等による巨大な内部自由度は、その数値的取り扱いにおいて巨大な計算資源を要求する。また、強相関電子系の応用の立場からもこのような物質の動的性質や温度、外場等の様々な効果を取り入れた計算が必要となるため巨大な計算資源が必要になることが考えられる。

(iii) 化学反応シミュレーションによるエネルギー・材料課題

化学反応は物質変換の核であり、化学反応を計算により予測するための理論・手法を確立することが新材料の開発そのもの、あるいは開発期間の短縮と開発費の削減のために不可欠となるであろう。計算化学では、2種類のアプローチを用いて化学反応の理解が進められてきた。すなわち、(1) 反応経路を求めるアプローチと、(2) 反応ダイナミクスを追うアプローチである。(1)は人間が反応経路を予想して反応のエネルギープロファイルを求めるという方法が従前から多数行われている。しかし、すべての反応経路を網羅的に追うことは N 原子分子に対して $3N - 6$ 自由度のポテンシャルエネルギー曲面を全て探索することとなり、これは現実的には不可能である。(2)は計算機性能の向上と理論の発展に伴って可能となつたものであり、高速で起こる反応の理解には非常に有力なツールとなつていている。しかし、化学反応のダイナミクスはフェムト秒刻みで追跡する必要があり、多くの化学反応の時間オーダーであるミリ秒以上の反応を理解する手段としてはまだ有効的ではない。

(iv) ダイナミクシミュレーションによるエネルギー・材料課題

天然資源の乏しい日本ではエネルギー関連の技術革新は将来にわたる継続的な課題である。また工業の基盤となる材料について、他国では真似できないようなミクロレベルからの設計指針を開発・保持することは将来にわたる国際競争力を維持する上で重要である。

エネルギー問題について、日本近海に眠る唯一とも言える国産天然資源であるメタンハイドレートの利用技術や、廃棄物系・未利用系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分子レベルからの解明が不可欠である。計算機能力の向上により、実験に並ぶ方法として計算科学的手法が重要な研究手段となっているが、現状では計算機上で基礎過程を再現することで精一杯である。今後5~10年の計算機の発展により、基礎過程の複合した現象、および周囲の環境との相互作用をフィードバックした形でのより現実的な計算機シミュレーションを行うことが可能になると期待される。例えば周囲へのメタンガスの拡散過程を含めたハイドレートの融解過程の分子シミュレーションにより掘削時およびプラントでのガス化プロセスに関するハイドレート気化過程を制御するための分子レベルの知見が得られ、より効率的なエネルギー利用が可能になると期待される。

さらに、燃料電池開発等では効率化のために電極界面での分子構造の解明が不可欠である。しかしながら電気化学で問題となる空間スケールは、原子、分子レベルのオングストロームオーダーからサブミクロンオーダーまで多岐にわたり、分子シミュレーションのみ、あるいは連続体理論のみで現象を説明することは大変難しい。これら両者の方針の溝を埋める手段として、大規模計算に期待が集まっている。

一方の材料については、分子の自己組織化により形成されるナノスケールの分子集合体（ミセル・脂質二重層膜・タンパク質複合体・高分子）は総じて「ソフトマテリアル」と呼ばれる。これらソフトマテリアルは、高分子分離膜・食品・化粧品・生体模倣材料・ドラッグデリバリーシステムのキャリア・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している。ソフトマテリアルの機能は分子集合体の微細構造やダイナミクスに応じて変わり、分子の種類や組み合わせを変えることで、機能を自在に制御・設計することができる。しかしながらそのスケールの微小性から実験からでは構造・ダイナミクスの詳細が不明なことが多く、また機能の発現には連続体モデルの適用が難しい界面が関係するため、ソフトマテリアルに対する原子分子レベルでの大規模シ

ミュレーションを行うことでその詳細を解明、さらにはその知見を活かし新機能ソフトマテリアルを分子レベルから設計する技術の確立が期待できる。特に、生活に浸透した高分子材料について計算機能力の進展により革新的な分子設計が可能になると期待されている。高分子特有の粘弾性挙動を扱うために、現状高分子のシミュレーションは粗視化モデルをベースとした物質に依らない普遍的な物理現象を扱ったものが主流である。しかしながら、実用上重要な高分子材料の電気的性質・化学的性質を計算機上で再現するには原子分子レベルでの知見を直接ないしボトムアップ的に計算モデルに取り込む必要がある。

ソフトマテリアルについての革新的な分子設計を行うためには、階層化シミュレーション方法論の開発が必要である。さらに、燃料電池開発等で重要となる電極界面での分子構造の解明においても、階層化シミュレーション法の開発は不可欠になる。原子分子の特性を反映した大規模かつ長時間のシミュレーションおよび数多くの試行が必要であり、計算機能力の向上が継続的に求められている。

(v) 液体シミュレーションによるエネルギー・材料課題

液体の統計力学理論の分野では日本、カナダ、米国、欧州に積極的に開発を行っている研究グループがあるが、我が国はこの中でも多くの活発な研究グループを抱え、世界をリードしているといえる。とくに生体分子への応用を志向した手法(3D-RISM, MC-MOZ, XMOZ)などの開発・発展・応用において顕著な業績をあげている。

(vi) 量子化学ソフトウェアの開発

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二次電池における電気化学過程、色素増感型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。

量子化学計算については、ADF(蘭)・GAUSSIAN(米)・GAMESS(米)・NWChem(米)・MOLCAS(典)・MOLPRO(独)・Q-Chem(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・GELLAN・NTChem・OPEN-FMO・PAICS・Protein-DF・SMASHなどが開発されている。例えば、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」24,576ノードで実行効率28%、並列化効率80%を達成している。更に、ほぼ基底関数極限での露わに相関した二次摂動法で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ることを示した。

4.3.2 長期的目標と次世代に解決すべき課題

(i) 大規模分子シミュレーションによる解決目標

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。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繋げることができる。

(1) 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ピ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性合成反応、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で開発することを目指す。

(2) 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。

燃料電池や二次電池、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、貴金属を用いない触媒反応などに対し、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および物質変換に寄与する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。

また、数万原子規模の量子化学計算が可能となれば、幅広いサイズの分子材料の物性値を予測できるようになるため、理論的な分子材料設計の多様性が増大する。従って、大規模量子化学計算を実現し、長寿命でエネルギー変換効率の高い有機薄膜太陽電池の素材となり得る分子を理論的に探索することは、昨今のエネルギー・環境問題の解決への道を切り開く可能性を与える。そのためには、効率の良い理論的予測が望まれるため、現在の京コンピュータの性能を上回るエクサスケールコンピュータにおける超並列計算

は必要不可欠なものである。

(ii) 高精度分子シミュレーションによる解決目標

高精度分子軌道法では、複雑な電子状態をもつ系に対して構造や物性値を分光学的精度で計算すること、およびより大きな分子に適用することが恒久的な課題となっている。特に、生体内の複核金属酵素のように複数の金属原子と巨大な有機配位子が複雑に相互作用をした系や、ナノサイズの半導体光触媒のように光励起状態で反応が進行する系の高精度な計算には、巨大な分子系で、いわゆる動的電子相関と静的電子相関の両方を正確にとりこむ必要があり、方法論とアルゴリズムさらに計算機資源の発展が必要となっている。マンガン、鉄、コバルト、ニッケル、銅元素などの第一遷移周期元素は、比較的安価に入手できるために触媒などの様々な応用分野での活用が期待されている一方で、これらの金属原子は電子相関が強く、構造や物性値を正確に算出するためには高精度な分子軌道法を適用する必要があることが知られている。また、有機分子からのみなる光電変換材料や光触媒は、分子設計の自由度がほとんど無限に近いために、高精度な分子軌道法の適用による物性値予測が大きく貢献できる対象であると言える。これらのことより、大規模計算機をもちいて電子相関を考慮した高精度な分子軌道法を適用することは、特に複雑な電子状態をもつ新規触媒や光が関与する機能性材料の設計に貢献するものである。

強相関電子系のエネルギー・材料分野への応用としては、銅酸化物超伝導体等の比較的高い超伝導転移温度を持つ高温超伝導体や、固体中の電子の持つ電荷の自由度のみではなくスピン自由度も利用したスピントロニクス素子、複数の強的性質が絡み合ったマルチフェロイック材料など枚挙に暇がなく、エネルギーのライフサイクルの各ステージにおいて様々な応用が期待される。このような強相関電子系の理論的研究においては、電子間の強い相関を精密に取り扱う必要があるため、平均場近似に基づいた解析的理論による取り扱いが困難であり、数値的手法による取り扱いが重要な役割を持つ分野である。したがって、数値的研究による強相関電子系の理解とその応用研究の推進は、エネルギー・材料分野への応用、および当該分野における日本の国際競争力確保の立場からも非常に重要であると考えられる。

物質科学の現象を正確に予測するためには、あらゆる物質の変換原理を統べている量子力学的原理の深い理解と、それを使いこなす理論と方法、同時にその具体的な計算を短時間で遂行できる計算機システムの存在、が揃わなければ不可能である。そのため、この基礎方程式である Schrödinger 方程式と Dirac 方程式を化学精度で解くことのできる理論と、それに基づくシミュレーション技術を中心を持つことが絶対に必要である。当該分野の目標は、これらの基盤技術を整え、物質科学の計算シミュレーション分野に高度な信頼性と予言性を提供し、実験と並ぶ有用な研究手段として発展させることである。化学精度を満足する正確な Schrödinger 方程式解や化学反応ポテンシャルが記述できれば、計算主導で有用な物質設計や物性解明を行うことができる。例えば、溶液反応は、溶媒との弱い相互作用により気相反応とは反応機構も全く異なり、あらゆる相互作用を正確に記述でき正確な反応ポテンシャルを与える当該理論でしか研究できない。長期目標と社会貢献に関しては、これらの特徴を生かし、薬剤設計や機能性分子設計、気相と溶液中での反応設計などにより、実験や産業を先導するような高信頼性シミュレーションを実現することが期待されている。

(iii) 励起状態シミュレーションによる解決目標

光励起により電子移動の起こることは光化学における大きな関心事であり、高精度分光技術、量子化学理論の発達により、小さい規模に限定すると、高精度な知見が得られるようになっている。これは、計算機能力の発達に依るところが大きい。化学機能発現にとり現実的なサイズにより近づくには常にコストと精度バランスのとれた手法の開発と大規模応用に耐えうる計算機の開発、双方の発展と努力が望まれる。

電子状態の時間変化は電荷輸送特性に本質的に重要であり、一般に時間静的な計算に比べコストがかかる。また、より定量的な予測には、電子相関の考慮が不可欠であるが、これについてもやはり一般に多くの計算コストがかかる。関与する励起状態数が多くなり、また、構造が複雑になると、この事情は顕著になる。加えて、太陽光デバイス開発における電子エネルギー動力学の研究に必要とされる大規模な構造変化を伴う励起状態を記述するためには、単純なモデルでの計算は信頼性に欠ける。そこで、できる限り高精度電子状態理論に基づく微視的な機構の理解は非常に重要となり、実験との共同が部分的に必要になるが、これに応じて必要な計算規模も柔軟に設定する必要がある。同時に、定性的理解に向けた簡易模型開発の努力も必要である。

短時間過程については光電子分光技術の発達が近年著しい。様々な波長の短パルス光の複合利用やイオン-光電子相関観測等の技法を駆使して、エネルギー移動の解明研究が光デバイスに対して適用され、これまでに理論の側だけで予測されていたことの検証が可能になりつつある。これを受けて、計算科学側としても、より大規模で信頼性のある理論模型に基づく研究が必要となる。特に、始めと最後はわかっている実験研究に対し、その間の知見を得られる理論計算には大きなアドバンテージがある。若手後進の計算物質科学研究者に興味を引き出す効果もあると予想される。国内外を問わず物質科学分野の維持発展にとり大事であり、計算科学はこれに貢献できるはずである。そのための計算機科学分野の発展は極めて重要である。

計算科学側からの太陽光エネルギー活用に向けたデバイス開発においては、光吸収と励起電子エネルギー輸送が電子外場環境としての分子構造運動にどのように左右されるかを計算機で解明することが求められる。特に、環境変動や電子的フラストレーションに伴う電子揺らぎ、電荷キャリアのトラップ、有機分子から成る集合系における電荷分離可能性、円錐交差による電子失活の抑制、揺らぎを逆利用した輸送特性の向上等の相関は、大規模計算科学を利用した研究ではじめて得られるものと考えられる。

複雑な励起状態の関わる光デバイス、反応系においては、原理的には時間に依存する電子の波動関数を追跡する電子動力学計算を行うことで、より微視的な情報を得ることができる。そのためにはやはり大型計算の重要性は疑いようがない。一方で大型の分子集合系における電子動力学の粗視化研究、基礎定式化研究も必要である。現時点での計算機レベルでは不可能な対象にも事前に粗くとも様々にあたりをつけておくことは、先端研究がしばしば陥りがちな分野の先細りを防ぎ、研究の多様性を維持する上で重要である。このことを踏まえて、大規模で柔軟性のある計算機が開発されることを望む。

(iv) 化学反応シミュレーションによる解決目標

人類は現在、環境問題・エネルギー問題・食糧問題など、多くの問題に直面している。古くは、ハーバー・ボッシュがアンモニア合成触媒を開発して世界の人口問題を救ったように、目的反応を効率的に起こす触媒の開発は、これらの問題を解決するためにますます重要となっている。触媒開発による解決が望

まれている環境問題としては、まず自動車排ガス浄化触媒の開発があり、現在実験と計算の研究者が一体となって研究が進められている。また、温暖化ガスである二酸化炭素の分離・回収技術の開発が進んでおり、火力発電所などの大型排出施設への設置が実現しつつあるが、回収した二酸化炭素を貯蔵するだけでなく、炭素源として利用する触媒の開発が期待されている。PM2.5に代表される粒子状物質の回収も、触媒開発による解決が望まれている。食糧問題では、リン資源の枯渇が重要な問題として認識され始めている。我が国は、肥料に利用されるリン酸を100%外国からの輸入に依存しているが、リンの希少価値が高まると輸入にかかるコストの大幅な増加が予測される。そこで、現在あるリン資源を回収し、有効利用する触媒の開発が望まれている。このように、新規触媒開発に集まる期待は大きいものの、その反応過程は非常に複雑であるため、理論・計算主導による設計はこれまで困難であった。しかし、近年、反応経路を自動的に探索する方法の開発が進み、複雑な触媒反応経路を人間の直感を極力排除して探し当てることが可能となってきた。

また、現実系のシミュレーションを行う手法としては、対数スケールで効く条件まで考慮した希薄多成分溶液系の反応分子動力学計算法の開発が望まれるようになってきた。このような反応系に対しては、オーダーの異なる原子数のシミュレーションをオーダーの異なる時間スケールで追うことが必要となっている。

(v) ダイナミクスシミュレーションによる解決目標

燃料電池や二次電池、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。また、海中に眠るメタンハイドレートの定常的な掘削、プラントでのガス化プロセス、さらには逆にガスをクラスレート化合物として貯蔵する技術を、巨視的な熱力学、伝熱工学と原子分子の運動に則った微視的大規模シミュレーションを組み合わせることで確立する。さらに電気化学に関連して、新規溶媒として期待されるイオン液体といった新しい材料開発においても分子モデリングを含めた高いシミュレーション技術が求められており、計算科学的方法論を実験との相補的な手段としても確立する。

一方、界面活性剤、脂質、タンパク質、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・ナノカプセル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。これらの機能は、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設計することができ、ミセル・ウィルス外殻（カプシド）を利用したドラッグデリバリーシステム、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・社会的ニーズに柔軟に対応した新規ソフトマテリアル設計が可能になる。

また、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の大規模分子シミュレーションは、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、全原子の分子動力学シミュレーション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。

これらにより、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。

4.3.3 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) 大規模分子シミュレーションのためのアプリケーション群

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験と予測・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、1万から2万原子系の電子状態計算、さらに周囲の溶媒などについては数万原子を含めた実際の物質変換系について、1,000原子程度の主要部分は量子化学計算、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。これらの計算を実施するために、計算手法として Hartree-Fock 法および密度汎関数法を用い、アプリケーションとして SMASH が利用できる。

また、大規模量子化学計算を行うために使用するアプリケーションとして、分子科学計算ソフトウェアの NTChem の利用も可能である。これらの課題の解決のためには、現在の京コンピュータ以上の超並列環境において高効率に実行できるようなアルゴリズムの構築と、高度な並列プログラミングおよびチューニング、そしてメモリの分割が必要である。Hartree-Fock 法および密度汎関数法計算において最も計算時間を要するのは二電子積分の見積りであり、この部分を高速化することが最も重要となってくる。二電子積分を高速化するための手法の一つとして、Pseudospectral (PS) 法がある。PS 法は二電子積分の一部を、解析積分から実空間グリッドによる数値積分に置き換えることによって、ある程度の計算精度を保ちつつ高速化を図る手法である。形式的に二電子積分は、 $O(N^4)$ (N :基底関数の数) の計算量となっているが、PS 法を適用することによって、 $O(MN^2)$ (M :グリッド点の総数) まで計算量を下げることができる。また PS 法には、CPU コア数に対する並列化効率が非常に良い手法となっており、大規模な分子系であっても比較的高い並列性能を維持できる利点がある。従って、京のような大規模超並列環境に適した手法となっているため、PS 法による DFT 計算、即ち PS-DFT 計算が課題解決の計算手法になり得ると予想する。また計算する分子系のサイズが大きくなればなるほど、必要なメモリサイズは増大するため、各並列プロセスに対してのメモリ分割の処理も必要になる。

今後の大規模量子化学計算において必要となる計算機環境の1つとして、通信ミドルウェアの高性能化ならびに充実が挙げられる。現在、ほとんどの大規模量子化学計算プログラムでは、MPI 通信ライブラリが利用されている。これは、並列プログラミングのモデルが現在の大規模分散メモリ型計算機環境に良く適合していると考えれるためである。しかしながら、例えば 10 万基底を超える大規模分子を対象に SCF 計算をする際には、計算の中間データとして必須の Fock 行列のサイズが 30GB を超えると試算される。今後の超並列コンピュータシステムの1プロセスあたりの使用可能メモリ量はハードウェア消費電力バージェットの分配の問題から数 GB 程度と予想されているため、1ノードのオンメモリにて SCF に必要な全行列要素を保存し対角化する現在のアルゴリズムが利用出来なくなると予想される。さらに、データを多ノードのメモリ上に保存した場合にも、計算中に他ノードのデータアクセスが必要となる場合には、そ

のノードの CPU 处理を中断させないよう、RDMA の機構を利用する必要があり、現在多く利用されているメッセージパッシング型の通信ではなく、片側通信を利用することとなる。このため、RDMA をサポートする PGAS や Coarray 等の通信の仕組みが必要となり、さらにこの多ノード上に分割保存されたデータに対する対角化や連立方程式計算を効率よく行うミドルウェアが必要不可欠である。NWChem プログラムでは、多ノードにまたがる大規模なデータを保存可能な Global Arrays 通信ライブラリを利用しておらず、また、このライブラリには対角化等の計算も同梱されているため、利用上便利な仕様となっている。また、MPI+PGAS ライブラリも MVAPICH グループにより開発されている。

しかしながら、現状の MPI 実装のままではエクサ環境において省メモリかつ高性能な実装とすることは難しいことが知られており、Global Arrays は内部で MPI の初期化関数を利用していることもあり、今後省メモリ実装が必要不可欠となっている。これに対し、我が国で開発中の ACP 通信ライブラリは Infiniband や Tofu, Tofu2 で利用可能な RDMA 通信ライブラリである。MPI との併用も可能であり、エクサ環境においてもメモリ使用量が 1 プロセス当たり数百 MB 程度となるように実装されており、有望であると考えられる。しかしながら、こちらは対角化等の計算アルゴリズムが未開発であり、今後開発が望まれる。

また、FMO などの計算では対角化の遅延が積分計算の遅延と同等になるまで並列化されており、今後さらに大規模化するためには、この対角化遅延の隠蔽のため、モノマーの分子積分計算と対角化ルーチンを分離して、積分計算プロセスと対角化計算プロセスを独立に動作させる試みが必須となっている。この計算のためには、MPI の様な SPMD 型計算モデルでは記述が困難である。MPI-Spawn の仕組みを利用するのも考えられるが、ライブラリそのものではなく、複数のタスクを非同期的に利用可能なよりユーザから便利に利用可能なフレームワークとしての通信ミドルウェアライブラリが必要となっている。

(ii) 高精度分子シミュレーションのためのアプリケーション群

分子軌道法は、基本となる Hartree-Fock(HF) 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の post HF 法により電子相関を取り込むことで、計算精度を系統的に引き上げられるという特徴がある。動的電子相関を考慮した高精度分子軌道法とは、一般にこれらの单参照の post HF 法を指すことがほとんどである。上記の post HF 法は、複数の電子配置から出発することで静的電子相関を考慮した多参照分子軌道法へと拡張することができ、参照状態にすべての重要な電子配置をとりこむことができれば、分光学的精度を達成することができる。また、すべての電子配置を考慮した完全配置間相互作用法が適用できれば、与えた基底関数の範囲内では厳密な結果を得ることができるため、完全配置間相互作用量子モンテカルロ法などの確率論に基づいた近似手法やモデル空間量子モンテカルロ法のような確率論と決定論的な手法を組み合わせた計算手法も開発されてはいるが、大規模計算機で高効率に実行でき、かつ巨大系でも適用できるようにするために、方法論やアルゴリズムのうえでの更なる発展が必要である。

これらの計算理論の軸とは別に、分子軌道法では基底関数を適切に選択することも正確な計算のために必要な要素として挙げられる。Post HF 法は基底関数サイズに対する収束が遅いために、完全基底極限に近い結果を得るために最低でも一原子あたり 100 個程度の基底関数を用意しなければならない。露わに相関した電子状態理論は、基底関数サイズに対する遅い収束性の問題を解決でき、一原子あたり 30 個程度の基底関数で完全基底極限とほぼ同等の結果を得ることができる。

長期目標と社会貢献の項でふれたような生体内の金属酵素や半導体は、複雑な電子状態をもつ系するために、高精度な post HF 法に露わに相関した電子状態理論を組み合わせた計算が必要である。そのような post HF 法では、行列行列積、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。ここでは、電子相関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アルゴリズムについて検討を行う。この方法は、ノード間に求積点を分散させることでプロセス間の負荷分散が容易であるという利点と、求積点に関する総和が行列行列積になるために高い単体性能が得られるという利点がある。多電子積分計算についても同様に数値求積法で行う。最も重い演算は、倍精度実数の行列行列積であるため、DGEMM の性能がアプリケーションのピーク性能になると想定してもよい。ただし、3 中心 1 電子分子軌道積分に関しては、必要なメモリサイズが巨大なものになる。また、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 が大半であり、これらの通信性能も重要である。

大規模並列第一原理密度行列繰り込み群法のアプリケーションとして、理化学研究所計算科学研究機構において「paraDMRG」が開発されている。第一原理密度行列繰り込み群法は、物性物理分野において特に一次元強相関量子系の計算に用いられていた密度行列繰り込み群法を、量子化学分野における強相関電子系の取り扱いへと発展させた数値的手法である。強相関電子系の取り扱いでは、系の電子相関を精密に取り扱う必要があるため、個々の電子の自由度を顕わに取り扱う電子の量子多体問題を解く必要がある。そのため、強相関電子系の取り扱いにおける系の内部自由度は取り扱う軌道数に対して指数関数的に増大する。したがって、強相関電子系の取り扱いについて、従来行われてきた厳密対角化法では、計算規模の面から取り扱う軌道数に対して非常に強い制限がかかる。このような問題に対して、密度行列繰り込み群法による取り扱いでは厳密対角化法における軌道数の制限を超えた取り扱いが可能である。さらに厳密対角化法に匹敵する高い計算精度の結果を得ることが可能となる。このような密度行列繰り込み群法が従来の厳密対角化法の限界を超えた取り扱いが可能となる理由は、密度行列繰り込み群法が計算の目的とする特定の状態に焦点を絞った計算を行っているためである。これは密度行列繰り込み群法が計算の目的とする状態を最適に表現する基底を、計算規模や計算資源等により決定される任意の数 m の制限の中で与えるためである。

また、原子・分子の Schrödinger 方程式と Dirac 方程式を正確に解く一般理論である FC 理論に基づき、これを実用化するために様々な理論・計算手法が提案されている。FC 理論が生成する正確な波動関数に収束する完員関数群は、積分計算が困難な関数も含むため、積分フリーな局所 Schrödinger 方程式理論 (Local Schrödinger Equation (LSE) 理論) が提案された。LSE 法は、サンプリング手法の 1 つであるため、大規模な並列計算に適している。また、大きな分子系で最も計算負荷の大きい反対称化則（パウリ原理）の計算については、行列式ベースの Nk 理論や、化学の局所性に基づき遠く不要な電子交換を自然に排除する inter Exchange (iExg) 理論が提案された。これらの方法により、Schrödinger 方程式の一般的解法でありながら大規模系にも展開可能な理論体系が確立されつつあり、その実用化プログラム「プリンシピア」の開発が進められている。

(iii) 古典ダイナミクスシミュレーションのためのアプリケーション群

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、物質科学的研究に大きな展開をもたらしてきた。

ハイドレートから得られたメタンを始めとした各種ガス（水素、二酸化炭素など）の貯蔵および分離、蓄熱などに利用する技術の開発が継続的に行われている。そこで問題は過冷却状態において不均一核生成によりハイドレード結晶核を如何に効率よく発生させるかにある。ある種の水溶液気液界面ないし固液界面はハイドレート結晶核生成を促進させる効果があることが知られている。その分子論を大規模分子シミュレーションによって解明し、さらには結晶化を促進する界面の分子設計に応用することができれば、エネルギー貯蔵コストを劇的に減少させることができる。さらにハイドレート結晶粒界の効果、バルクへのガス放出といった因子を大規模シミュレーションによって取り込むことで、液化天然ガスに代わる新形態としてエネルギー輸送のブレークスルーに貢献する。

ソフトマテリアルを構成する界面活性剤や脂質・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、結晶成長、機能性高分子材料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・分子レベルにおける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・全原子分子動力学シミュレーション・粗視化分子動力学シミュレーション・散逸粒子動力学法・連続体モデルを融合したマルチスケール手法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。

特に界面系では、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。気液界面でのガス吸収、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。また界面系での電気化学の基礎的問題として、水界面は酸性であるか塩基性であるかの長い議論があるが、未だに統一的見解は得られていない。この原因是、おそらく「界面」と定義される領域の空間スケールが問題によって異なることが原因の一つと考えられる。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で扱ったうえでマクロな理論に繋げる必要がある。

(iv) 古典・量子混合ダイナミクスシミュレーションのためのアプリケーション群

この節では、光エネルギー吸収後の過程を解析する手法「非断熱分子動力学シミュレーション」について述べる。この手法の究極的な目標は、「分子が光を吸収すると何が起こるのか」との問い合わせに対して、反応時間や反応機構をリアルタイムの分子シミュレーションで明らかにすることである。分子が光を吸収すると、電子はエネルギー準位が高い位置へと移動し、電子励起状態が生成される。励起状態からの緩和過程として、蛍光や燐光のような発光だけでなく、光を放出しない無輻射遷移が考えられる。エネルギー差が小さな領域に複数の電子励起状態が存在するとき、後者は特に顕著であり、超高速な緩和過程に大きく寄与する。非断熱分子動力学シミュレーションでは、状態間の遷移を取り扱う必要があるが、非断熱カップリングから確率論的な手法で導入している。したがって、励起状態の緩和時間や緩和過程を評価するうえで非常に重要な方法である。

非断熱分子動力学シミュレーションを実現するためには、(1) 非断熱遷移の理論的な取り扱い、および(2) 励起状態を記述できる高精度かつ計算コストが小さな電子状態計算が課題となる。現在、surface hopping に代表される非断熱分子動力学シミュレーションのアルゴリズムの開発や改良はめざましく、(a) 古典力学では取り扱いが困難な (de)coherence や (b) スピン許容およびスピン禁制遷移の統一的な取り扱いといった点が挙げられる。しかしながら後者—大規模な分子系の電子励起状態の計算コスト—は依然として解決されていない。半経験的手法を除いて、時間依存密度汎関数法 (TDDFT) に限られているのが実情である。TDDFT 法は計算コストが小さく、並列化も容易であるため、非断熱分子動力学シミュレーションと組み合わせた手法が採用されつつある。解析的な非断熱カップリングの計算は、通常の分子動力学における力 (エネルギー微分) とほぼ同じコストであるが、すべての状態対に対して計算する必要がある。すなわち、計算コストはほぼ状態数の 2 乗に比例する。計算コストを劇的に削減するため、「波動関数」の重なりを利用したスカラー版の非断熱カップリングを導入されることが多い。

将来の目標としては、太陽電池の分子設計があげられる。有機薄膜タイプの太陽電池は、ドナーの有機ポリマー分子とアクセプターのフラーレン分子から構成される分子系である。ドナーあるいはアクセプター単体の計算も分子設計においては有益であり、さまざまな有機分子が候補として提案されている。その一方で、ドナー・アクセプター間の電子移動のように分子対として成立する物性の理解や、移動度といった動的過程の解析には、非断熱分子シミュレーションが欠かせない。先に述べた TDDFT 法による surface hopping を適用するうえで問題となるのは、やはり電子状態計算の高速化である。特に、TDDFT 法によるエネルギー計算が律速となることが予想される。求める電子状態の数に対応した行列固有値と固有ベクトルが必要となるが、ベクトルの次元は (占有電子数) × (基底関数) で与えられるため、複雑な分子集合体では容易に 10^{10} に達する。大規模な並列計算機においても、メモリ分割などデータ保持をうまく行うアルゴリズムだけでなく、ノード間のデータ通信などハード面での貢献も欠かせないであろう。

(v) 量子ダイナミクスシミュレーションのためのアプリケーション群

化学反応動力学は、電子状態変化と構造変化に特徴付けられる。電子励起状態とのエネルギー差が分子の運動エネルギーに比べ十分に大きく電子基底状態で進行する熱化学過程においては、電子状態が位相を除き原子核配置に対し瞬時に追随する描像が自然であり、多くの分子理論を支えている。この近似描像の妥当性と限界については数理的によく調べられており、軽い電子と重い原子核の質量比とハミルトニアン

演算子の構造に依る。原子核配置の動きは電子にとっての外場変動である。一般に、電子運動にとって緩やかに変動する外場、例えば低い周波数成分からなるレーザー場が印加された場合にも同様の断熱描像を考えることができる。

多様な化学変化を伴う電子エネルギー輸送、中間捕縛、電子揺らぎ、電荷分離、化学反応場等、太陽光デバイスを特徴付ける化学機能発現の契機となる電子励起を伴う光化学過程においては、関与する複数の電子状態間に準位近接が生じ、断熱仮定が破綻する。厳密には、あらゆる分子構造においてこの破れは生じており、強度の差こそあれ、常に電子状態間の遷移が起きている。有意な強度がある場合、対比する化学過程との時間スケール比に応じ、破れへの対処法を選択することになる。例えば、分子運動スケールに対し十分長く、少しずつ電子状態遷移がおきる過程を特徴付けるために、無輻射遷移速度を摂動論に基づく黄金則表式を用いて求める例を考えるとわかり易い。

「状態近接領域で顕著に非断熱性が大きくなる」ことに言及したのは、動力学過程において電子遷移が状態エネルギー近接箇所で極めて強くなり、非断熱遷移項に対して非摂動的な扱いが必要になったり、離れている為に摂動的でよかつたり、或は極めてエネルギー差があることと対応して無視できる、といった様相が時間に沿い変化することを強調したかったためである。原子核間の配置構造の変化に電子状態が瞬時に追随できず電子状態間を移りあったり、断熱電子状態の重ね合わせ（=電子波束）が出現したりする。これを総称し分子の非断熱動力学過程と呼ぶ。電子の内部自由度と電子の運動の結合に由来するスピニ軌道相互作用を介した異なるスピニ多重度間の系間交差を含む一般的な場合については、更に計算コストが大きくなり、計算科学としては大きなチャレンジとなる。大型の計算資源の割当が切に望まれる。

非断熱遷移後、或は相互作用領域を通過した後、関与する電子断熱状態のポテンシャル面の勾配は一般に異なる為に、多くの場合、長時間後には分子波束は複数の電子状態面に枝分かれ（非断熱分岐）していく。サーフェスホップ法や非断熱分岐法に対して、初期状態に対する適切なサンプリングや、干渉破壊補正、軌道相関補正、原子核の量子効果補正等の工夫を施すことにより、記述の定量的および定性的精度をあげることができる。改良近似手法は多数存在し、記述精度と目的に応じ選択或は開発するのが望ましい。統一的な記述としては、非断熱古典軌道に沿い時間大域的に評価した電子の非断熱性を有効作用に繰り込む、Pechukas 流の経路積分に基づく手法が理論形式的に整っている。実時間経路積分は虚時間発展と比べ収束が著しく難しく、適切な和の取り方に関する計算科学に基づく基礎研究と、大型数値計算を用いた電子動力学への応用展開研究は学理的にもデバイス応用研究の面でも重要な課題であり、大型計算資源の確保が望まれる。

多くの非断熱化学過程の研究においては、電子遷移に伴う状態占有率の変化、電子緩和の時間スケールに注目することが多い。実験計測で得たデータと比較することにより、理論で仮定したシナリオを査定する形で、光化学過程における電子失活の機構解明が行われてきた。近年、こうした電子失活時定数の研究を超え、光短パルス生成を含む分光観測技術の発達と実時間測定理論の進展に伴い、サブフェムト時間スケールでの電子状態変化の追跡が可能になりつつある。種々のエネルギー領域の光を用い、運動スケールを多角的に計測することで、化学変化やデバイスにおける、電子状態の動的変化の源に迫る重要な基礎研究である。計算科学にはこれらをサポートする能力があり、大型の計算資源の確保が求められる。

電子波束の時間変化は微視的な意味で化学反応動力学と対応づくこと、励起状態の重ね合わせからは多彩な電子状態が発現し得ることを考え合わせれば、光照射下での化学動力学における非断熱電子波束の時間発展をより基礎的な立場から記述、追跡そして解読する研究は、励起状態が多種多様に相關することで

化学機能に結びついている複雑な励起化学過程の理解と制御を目指す上でも、電子波束動力学を基礎とした新しい化学を一般展開するという意味でも今後益々発展させたい分野である。太陽光エネルギーのデバイスを通じた加工、特に、制御可能なエネルギー形態への転換に向けた基礎研究としての貢献が可能である。

原子核座標微分重なりとしての電子状態間非断熱結合と分子運動速度の積に比例する強度で、複数の状態からなる部分空間を電子波束は変遷していく。特に、電子の非断熱性は、励起状態が密集する高擬縮重励起状態が関与する系で極めて顕著である。異なる特性を持つ状態の重ね合わせや、干渉破壊後に出現する状態の統計的混合と、結合変化を促す反応場や内部励起エネルギー移動の関わりについて理解を得ることは、エネルギー変換デバイスをより微視的なレベルからマクロなレベルへと連結する上で欠かせない。その為には、動的な非断熱電子波束と構造動力学を研究することが必要であり、これに伴って大型の計算機資源が必要となる。擬縮重励起状態では、エネルギー的に近接する電子状態が、電子にとっての外場を通じ容易に相互作用する。ここで、外場は、原子核配置の時間変化や輻射場を指す。エネルギー変換デバイスではこれらが質的に高い電子エネルギーの効率的な輸送特性に強く影響を及ぼす。

金属を含む化合物は一般に柔軟で多様な電子反応場を提供するが、多くの場合生成コストがかかることが多い。有機分子や周期表低位置の元素による代替が望まれている。例えば、低い周期表位置の元素からなり、励起状態に擬縮重性が発現し易い単体原子クラスターの例として、ホウ素クラスターがある。ホウ素は価電子軌道空間を埋める電子の数が少ないとから、集合しクラスター化することで、価電子自由度を主成分とした擬縮重励起状態群を生み出し易い。同様に価電子空間に豊富な空軌道の存在する遷移金属原子と異なり、比較的小さい軌道角運動量で軌道広がりも小さく、基底、励起状態ともに、僅かな分子運動に対し化学結合と電荷局在様式がフラストレーションを起こす。こうした特性は太陽光を吸収した後の物質媒体中におけるエネルギー輸送の制御にとって、一つの可能性を提供すると想像できる。要点を抑えつつ、できる限り第一原理的なアプローチ、例えばDFT、TDDFT、EOM-CCSD、MSCASPT2、MRCI、post-DMRGなどの高精度電子状態計算理論を活用して上記に向けた研究を行えれば素晴らしい。その為には、従来よりも大型の系を取り扱うことも含め、転送速度の点で高度な機能をもつメモリ資源と巨大な計算機環境が必要となる。

(vi) 溶液シミュレーションのためのアプリケーション群

酵素反応・ドラッグデザインなどさまざまな分野において溶媒環境を含めた計算が必須のものとなっており、分子シミュレーションのみならず液体の統計力学理論によるアプローチが不可欠の技術となっている。とくに、生体分子の溶媒和を志向した手法（3D-RISM, MC-MOZ, XMOZ法）を基盤とした開発が有効と考えられる。これら手法の高速化・高精度化とともに量子化学計算手法や分子シミュレーションと行った手法との組み合わせによるマルチスケール手法の開発・高度化が不可欠である。

これらの研究対象における要求をもとに必要なアプリケーションソフトウェアの要求性能を以下に記載する。

(1) NTChem

数万～数十万原子規模の大規模分子系に対して、線形応答型時間依存密度汎関数理論(LR-TDDFT)に基づく第一原理計算を行う。30万基底の分子系で20個の励起状態の解を求める計算を、單一ノード演算

性能が 100TFLOPS のマシンで約 1 万 8 千ノードを使用して行う場合を想定する。

【演算量】 Davidson アルゴリズムを用いた反復計算によって、励起状態の解を求める。系の種類や大きさに依存するが、20 個の励起状態の解を求めるためには、10 回程度の反復計算が必要となり、結果として見積もられる演算量は 722EFLOPS となる。

【メモリ】 メモリに関しては、[基底数 * (基底数 - 1) / 2 * Davidson ベクトルの個数] の要素数を持つ配列を同時に 6 つ所有する瞬間があり、その時が最大メモリ使用になる。これを持ちこたえるためには 34.9PB のメモリが必要になり、1 ノード当たり 2TB 程度メモリ量が必要になると見込まれる。

【通信性能】 計算時間の 20% で通信コストを抑えるためにはノード当たり 9.31GB/s のバンド幅が必要になる。

【ストレージ】 計算途中のデータはメモリに主に保存するが、いくつかはストレージに中間ファイルとして保存する。特に大きな入出力データとして分子軌道係数、密度行列、エネルギー固有値が挙げられるが、これらを保存するためには少なくとも 0.98TB 程度のストレージ量が必要になると見込まれる。

(2) SMASH

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(2 万原子系、20 万基底) 計算を想定すると、10TFLOPS マシン 10 万ノードの場合、FX10 での結果から演算量は原子数の 3.26 乗に比例して増加するため、計算時間は 1 回当たり約 0.7 時間となる。分子の安定構造 1 つを求めるためには、この計算を数十回繰り返す。

【メモリ】 20 万 × 20 万の上三角の配列 (160GB) を、Fock 行列及び密度行列用に 2 つ用意するため、1 ノード当たり 320GB 必要になり、10 万ノードでは 32PB となる。FX10 での結果からメモリ転送量は原子数の 3.40 乗に比例して増加するため、1 回当たりの全メモリ転送量は 4291EByte となり、メモリバンド幅は 1702PB/s となる。

【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 (0.7 時間)あたり、Fock 行列 (160GB) を allreduce で集め、さらに対角化後の分散された分子軌道 (全体で 320GB) を送受信する操作を 30 回程度行う。通信時間を全体の 5% にするには、バンド幅 114GB/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 320GB 程度である。1 秒で書き出すためには、ファイル I/O 性能は 0.42TB/s 程度で十分である。

(3) Gellan

以下では、天然光合成の反応中心である光化学系 II の活性中心に周辺の主要なアミノ酸残基を含めたおよそ 1,000 原子 (およそ 6,000 電子、3 万基底、100 万求積点) 系の露わに相関した結合クラスター計算を、1 ノード性能 50TFLOPS、全体性能 4EFLOPS (8 万ノード) の計算機上で実行する状況を想定して見積もりを行う。

【演算量】 典型的な行列行列積の総演算量は、 $n_M = 30000 \times 3000 = 90M$, $n_N = 30K$, $n_K = 1M$ として $n_M n_N (2n_K + 2) \approx 5.4E$ なので、1ノードあたりおよそ 70TF である。結合クラスター計算は繰り返し計算であり、1サイクルあたりこの規模の演算を数十回行うことになる。

【要求メモリサイズ】 3中心1電子分子軌道積分のために全体として 3万 × 3000 × 100万 (720TB) の配列が1つ、求積点での分子軌道の値のために 3万 × 100万 (240GB) の配列が2つ、更にその他の配列も考慮すると全体で 800TB 程度が必要である。仮にこれらが 8万ノードに分散できたとすると、1ノード当たり 10GB が必要になる。

【要求通信性能】 3万 × 3000 × 100万の配列を gatherv で集めた後、上記の規模の行列積演算を数回続けて行うので、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。

【要求ストレージ量】 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り、せいぜい 1GB 程度しか必要ではない。

(4) MODYLAS (長距離力古典分子動力学法)

1エクサフロップス (EFLOPS) 級のポスト京が稼働する5年後には、長距離静電相互作用を含む分子動力学計算で扱える原子数が1~10億原子に達する。10年後には現状の技術（メニーコア、ヘテロジニアスメニーコア）の延長線上として 5~10EFLOPS 級の計算機が稼働すると予測され、100億原子規模の静電相互作用を含む全原子分子動力学計算が可能となる。これは空間スケールで約 500 nm に相当する。このサイズの計算系をマイクロ秒～サブミリ秒のオーダーで計算することが計算科学的課題となる。より小さな1~10億原子系でのMD計算については、10年後にはサブミリ秒～ミリ秒の長時間計算が計算科学的課題になる。例えば、脂質膜ベシクルや大域構造を持った高分子のダイナミクス、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、サブミクロン系を対象としたマイクロ秒～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、数百nm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」および FX100 での MD 計算のパフォーマンスを基に試算した。10年後のマシン性能を 10EFLOPS と想定し、ハードウェア・電力規模の観点からノード数を京と同程度の 10万ノードと仮定すると、单ノード性能は 100TFLOPS となる。この单ノード性能を省電力で実現するには、現実的には何かしらコ・プロセッサ機能が必要と予想される。計算対象に 100 億原子系を仮定すると、单ノード当たりの原子数は $100\text{億} \div 10\text{万} = 10^5$ 個となる。「京」ではノード当たり 160 原子程度を想定していたので、ノード当たりの原子数は約 600 倍となる。ノードあたり 1 プロセスとして、現行の MODYLAS から 10^5 個ノード条件ではメモリ消費量は 8GB/プロセスと試算され、プロセスあたり 16GB のメモリであれば実行に支障はない。必要に応じてさらに省メモリ化も可能である。メモリバンド幅律速のアリではないので現行 FX100 の 240GB/s で十分である。キャッシュについて、主要演算は京の L1 キャッシュ 32KB、L2 キャッシュ 6MB に載るようブロック化されており、これらと同程度のサイズあれば十分であるが、近年の開発において増加する傾向にある SIMD 幅に比例する形でのより大きなキャッシュが望ましい。

上の仮定の元で、单ノード当たりの性能は「京」に比べて $100T/128G = 780$ 倍となっており、これが

原子数増大による負荷 600 倍に費やされると考えれば現状と同等、ないし、より高速な演算が十分に実行可能である。ノード間の通信に要する時間は FX100 での測定では 10^5 個/ノード条件で現状 20 ミリ秒程度を要しており、目標は 100 億原子系で 1MD ステップあたり 5 ミリ秒程度なので、通信速度は実効で 10 倍、シミュレーション実時間としてミリ秒を目指す場合には 100 倍程度速いものが必要となる。特に「京」および FX100 においては実効の通信レイテンシにサブミリ秒を要しているが、strong scaling での高速化のためにはこれを数分の一、できれば~1/10 にする必要がある。MD のトラジェクトリは、100 億原子系で座標を単精度実数で保存するとして 1 フレーム 120GB 程度必要になる。精度の良い解析をする場合、1ps ごと程度に座標を保存することが妥当であるため、必要な総ストレージ容量は一実行あたり約 10PB~100PB となる。

分子動力学計算で長（実）時間の計算を行う場合には、strong scaling が最重要課題でありそのボトルネックは演算ではなくトーラスネットワーク上での 1 ホップごとの通信レイテンシである。近接通信、およびノード間でのリダクションを現状より更に高速で実行可能な低いレイテンシのネットワークインターフェースが切望される。

(5) paraDMRG

まず、 $N = 100$, $m = 10,000$ の系について第一原理密度行列繰り込み群法の有限系アルゴリズムを基底エネルギーの収束を得るために 10 sweep 実行した場合、100EFlops の倍精度実数演算が必要と考えられ、京全ノードを使った計算（10PFlops を想定）の場合 3 時間程度の計算が必要と考えられる。また、この時のメモリ使用量は 40TB 程度と考えられる。また、B/F 値は 0.1 程度である。同じく $N = 100$, $m = 10,000$ の条件で量子ダイナミクス、または有限温度での計算を実行した場合、5~10 倍程度の計算量の増加が見込まれる。ただし、メモリ使用量は 40TB、B/F 値も 0.1 と基底状態計算の場合と同等である。1EFlops の計算機で 4 時間程度の計算時間を想定した場合、計算量の増加が $O(N^3m^3)$ と考えられることから N 、または m について 5 倍程度の計算が可能となる。また、この時のメモリ使用量は 1PB 程度と考えられる。さらに、10EFlops クラスの計算機の場合には、同等の規模において量子ダイナミクス、または有限温度の計算が可能になると考えられる。

(6) Principia

今後の大規模な HPCI システムの利用に向け、「Principia」プログラムに新しい理論の開発と計算アルゴリズムの実装を加え、超並列・高速計算環境を最大限生かした開発とアプリケーションを行っていく。FC 理論の計算アルゴリズムを以下に示す。

[アルゴリズム]

ステップ 1: FC 理論に基づき、系のハミルトニアンに基づく完員関数の生成

- このステップは解析的な演算部位であり、計算量は僅かであらかじめ低並列計算機で作成することも可能。

ステップ 2-1: LSE 方程式の計算

- サンプリング点を各プロセスに分配し、各サンプリング点に対する完員関数の値と LSE 方程式を計算する。
- 最も計算時間のかかるステップだが、計算負荷が同じサンプリング点を各プロセスに均等

- に分配することができ、超並列計算にも向いている。この段階で、通信も発生しない。
- 計算律速な反対称化計算には、iExg-Nk 理論を使う。大きな分子系でオーダー N に近い計算が可能

ステップ 2-2: ハミルトニアン, 重なり行列の計算

- 各プロセスからデータを集約し行列式を計算

ステップ 3: 対角化（固有値問題）

- 一般的な並列化固有値問題ライブラリの利用することができる。

[ソフトウェアの効率性]

計算の最も律速な部分はステップ 2-1 だが、このステップは各プロセスに負荷を均等に分配でき、通信も発生しないため、理論上超並列計算に大変向いている。ステップ 2-2 では通信が必要であり（通信量は完員関数の次元: M に対し M^2 個の要素 (M は数千～数万を想定)）、MPI_Reduce により行列の和を取りながら実行する。ステップ 3 の対角化（固有値問題）は、中程度の並列化性能を期待するものの超並列計算には向いていないが、一般的な並列化固有値問題ライブラリの利用することができる。また、大きな分子系ほど完員関数同士の重なりが小さく 0 の要素が増えるため、疎行列のソルバーを使うことができる。

[将来の計算機アーキテクチャに向けた見通し]

FC 理論は、現時点で、ごく簡単な有機・無機化合物の化学精度を満足する精密計算から、フラー・レン (C_{60}) 程度の比較的大きな分子の試し計算も行えるようになってきた。超並列計算機のパワーを最も有効に利用するためには、理論・計算アルゴリズムが高い並列性を持っていると同時に、大きな系でオーダー N 理論であることが必要である。FC 理論と LSE 法, iExg-Nk 理論は、高精度計算が可能なだけでなく、高い並列性と大きな分子系でのオーダー N に近い計算を実現する理論体系を持っている。そのため、巨大な超並列環境になればそのパワーを、系の飛躍的な拡大へ直に反映することができる。現在、計算時間の多くは電子交換を無視することのできない領域の反対称化計算にあるが、それ以上に大きな分子系の計算は iExg 理論の利用で簡単になると予想される。現在、理論自身と計算アルゴリズム・プログラムは発展途上にあるため、将来の計算機アーキテクチャに向けた具体的な見通しを述べることは困難である。しかし、この理論体系を着実に実現する計算アルゴリズムが完成すれば、5～10 年後にピーク性能が 10～100 倍になると想定すれば、そのまま適用できる対象が（最も理想的な場合）10～100 倍拡大できる。そのため、実用的な分子設計・反応設計で要求される分子系や、極限的フロンティアの開発に要求される計算精度の拡大、等に向けた計算が実現できるであろう。

(7) DC-DFTB-K (DC-DFTB 法)

<現在>

35 万重原子 京 7,290 ノード（約 1PF）で 60 秒。長距離成分のカットオフと収束性能の改善が不可欠だが、それをクリアすれば weak scaling は問題なし。strong scaling は努力が必要。

<5 年後 1EF = 上の 1000 倍性能>

3 億重原子（約 100 倍サイズ）1EF 計算機を用いて 1 日で 10,000 ステップ (10 ps)。strong scaling で 10 倍性能があれば、1 ステップ 6 s = 1 日 14,400 ステップ。現在は 8 倍サイズで 85% 性能なので、weak scaling の悪化も想定して 70% かけると 1 日約 10,000 ステップ

<10 年後 5EF >

5億重原子（約200倍サイズ）5EF計算機を用いて1日で20,000ステップ（20 ps）

(8) 大規模電子相関計算法（DC-MP2法）

<現在>

600原子一点計算 0.1PF で約600秒（ただし用いている系が理想的すぎ）。SCF計算効率と収束性能の改善は不可欠。電子相関計算は weak scaling 性能問題なし。Strong scaling は精度向上（基底関数増加）で改善（扱える原子数は減るが）。エンジンを GAMESS から SMASH に変更することで効率上昇を図る。

<5年後 1EF>

100,000原子系 1EF 計算機を用いて60秒で一点計算。10,000原子系 0.1EF 計算機を用いて300秒でエネルギー勾配計算。1日で約300MDステップ

<10年後 5EF>

300,000原子系 5EF 計算機を用いて60秒で一点計算

(9) GRRM (AFIR法)

電子状態計算は NTChem や SMASH を使えば上手くスケールすると考える。電子状態計算を何回できるかは見積もれる。問題は計算回数の見積り。系や反応に大きく依存するので、厄介。

<5年後 1EF>

50原子系の分子触媒反応の網羅的反応経路探索

<10年後 5EF>

200原子系の分子触媒反応の温度指定（部分的）反応経路探索

(10) paraDMRG

第一原理密度行列繰り込み群法の計算コストは取り扱う軌道数 N と、計算精度に対応する密度行列繰り込み群法の打ち切り次数 m により与えられ、「paraDMRG」の場合に最も困難な条件を想定した場合の計算量は $O(N^3m^3)$ で、メモリ使用量は $O(N^2m^2)$ と与えられる。また、B/F値は N 、および m によらず 0.1 と考えられる。

10PFlops(京)： $N = 100, m = 10,000$ の基底状態（絶対零度）計算

100PFlops： $N = 100, m = 10,000$ の量子ダイナミクス、有限温度計算

1EFlops(ポスト京)： $N = 100, m = 50,000$ 、または $N = 500, m = 10,000$ の基底状態計算

10EFlops(ポストポスト京)： $N = 100, m = 50,000$ 、または $N = 500, m = 10,000$ の量子ダイナミクス、有限温度計算

(11) NRTChem (実時間非断熱電子動力学法)

Fock計算等の電子特性行列の計算が多数回必要となる。その為、大型のメモリを有しつつもCPUとのアクセスが律速とならない機体が望まれる。IOを多用する傾向にある電子状態計算において、計算の高度な効率化につながる筈である。システムに関しては、ジョブ投入時のファイル管理について、使用者側のプログラム開発にとってわかり易い仕様が望まれる。一般に陰的に行なわれるため、開発時に外部から持ち込んだプログラムとの可搬性が著しく失われる傾向にある。この点が改良されることが望まれる。近年では複数のプログラム言語、スクリプト言語を交えて計算コードが作成できる環境が整いつつある。これに対応できる環境が用意されることが望ましい。ごく標準的な計算機環境からの可搬性の向上は大型

計算機が広く用いられることにつながる。この点についても開発者側からの検討を期待したい。

(12) RISM

液体の統計力学理論の数値計算においては高速フーリエ変換が多用される。とくに生体分子への適用を想定すると三次元高速フーリエ変換が必要となるが、比較的小規模の配列 ($256^3 \sim 1024^3$) を用いるためメモリアクセスが高速で大規模な並列が可能な GPGPU の使用が適している。一方で、GPGPU の搭載メモリには制限が多いため、複雑な溶液環境の記述には大容量メモリを搭載した GPGPU の導入が望まれる。

4.4 生命科学

4.4.1 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。

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、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・遺伝子ネットワーク解析に分けられるので、その分類に沿って紹介する。細胞や臓器を対象とする細胞・臓器シミュレーションについては2.5、4.5節で、脳神経ネットワークのシミュレーションなどについては2.8、4.8節で説明する。

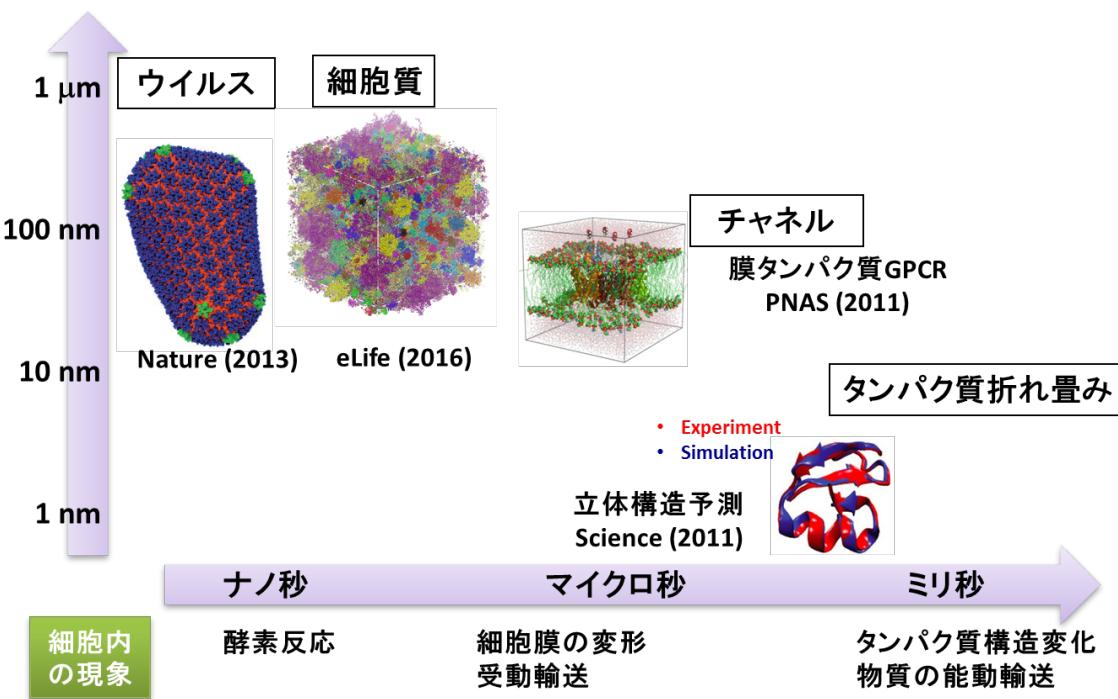
(i) 生体分子シミュレーション

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, 2, 3]。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[4]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（後継機ANTON2では数十万原子まで可能）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[2]。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。QM/MMについては4.5（創薬医療）で説明する。

一方、巨大な生体超分子や細胞スケールの分子集合体に対しても、全原子MDの適用範囲が拡大しつつある。例えば、バクテリア（マイコプラズマ・ジェニタリウム）の細胞質中のほぼ全ての生体高分子と代謝物を原子レベルでモデリングし[5]、現実的な濃度で集積した大規模細胞質モデル（総原子数約1億）が作成され、京コンピュータと超並列分子動力学シミュレータGENESIS[6]（理研計算科学研究所（AICS）が開発）による大規模MDから、細胞内分子ダイナミクスの微視的描像が得られている[7]。しかし、系が1000万から1億原子のサイズになる場合、全原子MD計算から得られる分子ダイナミクス

の時間スケールは $0.1\sim1\mu$ 秒程度であり、蛋白質間相互作用や代謝物と酵素の自発的結合を十分な回数観察するレベルには時間スケールが足りないのが現状である。



このように、大規模生体分子の全原子MD計算には、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[8]。タンパク質折れ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[9]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) ゲノム解析・遺伝子ネットワーク解析

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、いわゆるハイスループット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2017年3月の時点で200万サンプルを超える。

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2万数千の遺

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。2008 年頃に登場した次世代 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（最新のものでは数日以内）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（2012 年時点で）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 1PFLOPS 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 台以上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）を用いて進められた。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が行われた。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、あるいはそれぞ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。

4.4.2 次世代に解決すべき課題

(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。

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。

これらの課題に対してMDそのものの計算能力向上が大きく寄与する事は疑いないが、実験技術の進歩によって得られる質の高い観測データとの連携を深めることも重要である。2.4で述べたX線自由電子レーザーに加え、近年は特にクライオ電子顕微鏡(Cryo-EM)が構造生物学に大きなブレークスルーをもたらしている。Cryo-EMの電顕画像から推定される立体構造は解像度が不足している場合が多く、MDによる構造精密化(リファインメント)が必要となる。特に、拡張アンサンブルMD法と組み合わせた構造フィッティング計算の高効率・高精度化が重要な課題となるであろう。このような安定状態の構造予測に加え、膜蛋白質受容体などの生体分子の機能発現過程における各中間体構造もCryo-EMなどの実験測定によって繰々と解明されるであろう。生体分子がこれら中間体をどのように遷移しているかをMDによって解明することも、機能を構造だけではなくダイナミクスから理解するうえで重要な課題となる。このような問題に対しては、実験で得られた各中間体構造から出発した複数の独立したMDによるトラジェクトリを、MSM(マルコフ状態モデル)を用いて連結する計算手法の開発が近年活発化している。

(ii) ゲノム解析・遺伝子ネットワーク解析

次世代DNAシークエンサーデータ解析

現在よく使われている型の次世代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 5TB（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。連続した DNA 配列を得るためににはこれらの断片を、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）のど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、その個人が既知の多様性や変異を持っているかなどの診断は可能であるが、未知の原因までは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、がんに特異的な変異の同定だけでなく、DNA のコピー数解析なども非常に重要である。

遺伝子ネットワーク解析

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。2013 年頃に 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、これまでのデータの増加ペースを考えると 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。

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もある。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、「京」のようなフラグシップマシン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。当該分野の HPC における特徴や要望などを下記に列挙する。

- 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をコンパイルし動作させる必要がある。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パコンには、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 のスパコンでは、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。

4.4.3 課題を解決するために必要な計算機性能

(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 [10] 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 [11] 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

方法では、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2fs/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、計算機中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1.2PB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2TB/s必要である。長距離力の計算にPME法[10](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原子を割り当たられれば(10^6 原子、100レプリカ、10万ノードを想定)、4MB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つおいたほうがよく、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すれば、全体で8.4TB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）が利用できることで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1EFLOPS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、1ps 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 2TB/s 必要である。

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。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、流体力学相互作用を精度よく再現するためには、粒子間の拡散テンソルを計算する必要があるため粒子数に応じて計算量が爆発的に増加する。さらに、溶媒分子を連続体で近似する場合、粒子密度に大きな偏りがあるため、空間を一様に分割するのではなく、粒子密度に応じてサブドメインの大きさを変化させるなど、全原子 MD とは異なる並列化アルゴリズムを実装する必要がある。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。

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 (h)	ケース数	総演算量 (EFLOP)	概要と計算手法	問題規模	備考
巨大分子系の全原子MDシミュレーション	490	49	0.2	1.2	48	10	850000	全原子モデルによる古典分子動力学計算 空間分割による並列化 all_to_all 通信	1500個ほどの蛋白質や核酸を含む細胞質(総原子数:1億)の1μ秒のダイナミクス。蛋白質の配置や種類を変えて10ケース程試行した場合。	$B/F = 0.1$

図 4.3 細胞質の大規模全原子 MD に対する要求性能

(ii) 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。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（例えば、がんゲノム解析 200,000 人分のマッピングおよび変異同定）が必要であると想

定して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拠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】 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～12GB/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4世代シークエンサー1人分のデータは3～5TB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600GB/s～1.2TB/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拠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】 2020年：1.46～5.84PB

NGSAnalyzer（次世代シークエンス解析プログラム）のマッピングアルゴリズムにMEMを利用した場合を考える。250万～1000万リード程度を1プロセスに割り当てることが実用的なインプットサイズで、その場合は容量は8～16GBの範囲に収まる。1サンプルが100億リードと仮定した場合、100億/(250万～1000万) × 8GB=8TB～32TBがサンプル当たりの必要メモリ量となる。ここから、スループットの想定も合わせて、スペコン全体での必要メモリ総量を見積もる。20万検体/年であるならば、548検体/日の処理量になる。1検体の解析時間が24時間ならば548倍であるが、数ターンの解析が回ると考えるのが妥当である。3ターン（8時間×3セット）で想定すると182.6倍になるので、(8～32)TB × 182.6=1.46～5.84PBが、1ケースあたりの総メモリ容量となる。

【ストレージ容量】 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20EB必要となる。

【ストレージ速度】 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】 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。

課題	要求性能 (PFLOPS)	要求メモリ帯幅 (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 (h)	ケース数	総演算量 (EFLOP)	概要と計算手法	問題規模	備考
大規模個人ゲノム解析	0.0054	0.0001	5	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推定	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。浮動小数点演算は45.864EFLOPとなる。

図4.4 大規模個人ゲノム解析に対する要求性能

遺伝子ネットワーク推定

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)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259CPU Core年を要し、FLOP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】 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】 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】 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】 2020 年 : ~15.6 TB

想定している 2000 分の 1 の計算規模で 7.8GB 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 15.6TB 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/ ケース (PB)	ストレージ量/ ケース (PB)	計算時間/ ケース (h)	ケース数	総演算量 (EFLOP)	概要と計算手法	問題規模	備考
大規模遺伝子ネットワーク解析	2.5	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 × 26,0000 データセット・280万アレイ	

図 4.5 大規模遺伝子ネットワーク解析に対する要求性能

4.4.4 公的な意見交換とそのサマリー

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。

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、更なる並列数增加への対応、ものづくり分野との連携についての意見が出された。

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「ウインタースクール 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。

2016 年 11 月 8 日の理研シンポジウム「クライオ電子顕微鏡が拓く未来—構造生物学研究のパラダイムシフト—」において、MD をはじめとする計算科学との連携について意見交換が行われた。

参考文献

- [1] R. O. Dror, A. C. Pan, D. H. Arlow, D. W. Borhani, P. Maragakis, Y. Shan, H. Xu, and D. E. Shaw. Pathway and mechanism of drug binding to g-protein-coupled receptors. *Proceedings of*

- the National Academy of Sciences*, Vol. 108, No. 32, pp. 13118–13123, 2011.
- [2] K. Lindorff-Larsen, S. Piana, R. O. Dror, and D. E. Shaw. How fast-folding proteins fold. *Science*, Vol. 334, No. 6055, pp. 517–520, 2011.
- [3] G. Zhao, J. R. Perilla, E. L. Yufenyuy, X. Meng, B. Chen, J. Ning, J. Ahn, A. M. Gronenborn, K. Schulten, C. Aiken, et al. Mature HIV-1 capsid structure by cryo-electron microscopy and all-atom molecular dynamics. *Nature*, Vol. 497, No. 7451, pp. 643–646, 2013.
- [4] D. E. Shaw, M. M. Deneroff, R. O. Dror, J. S. Kuskin, R. H. Larson, J. K. Salmon, C. Young, B. Batson, K. J. Bowers, J. C. Chao, et al. Anton, a special-purpose machine for molecular dynamics simulation. *ACM SIGARCH Computer Architecture News*, Vol. 35, No. 2, pp. 1–12, 2007.
- [5] M. Feig, R. Harada, T. Mori, I. Yu, K. Takahashi, and Y. Sugita. Complete atomistic model of a bacterial cytoplasm for integrating physics, biochemistry, and systems biology. *Journal of Molecular Graphics and Modelling*, Vol. 58, pp. 1–9, 2015.
- [6] J. Jung, T. Mori, C. Kobayashi, Y. Matsunaga, T. Yoda, M. Feig, and Y. Sugita. GENESIS: a hybrid-parallel and multi-scale molecular dynamics simulator with enhanced sampling algorithms for biomolecular and cellular simulations. *Wiley Interdisciplinary Reviews: Computational Molecular Science*, Vol. 5, No. 4, pp. 310–323, 2015.
- [7] I. Yu, T. Mori, T. Ando, R. Harada, J. Jung, Y. Sugita, and M. Feig. Biomolecular interactions modulate macromolecular structure and dynamics in atomistic model of a bacterial cytoplasm. *eLife*, Vol. 5, p. e19274, 2016.
- [8] G. A. Voth. *Coarse-graining of condensed phase and biomolecular systems*. CRC press, 2008.
- [9] S. J. Marrink, A. H. De Vries, and A. E. Mark. Coarse grained model for semiquantitative lipid simulations. *The Journal of Physical Chemistry B*, Vol. 108, No. 2, pp. 750–760, 2004.
- [10] T. Darden, D. York, and L. Pedersen. Particle mesh Ewald: An N log (N) method for Ewald sums in large systems. *The Journal of chemical physics*, Vol. 98, No. 12, pp. 10089–10092, 1993.
- [11] Y. Sugita and Y. Okamoto. Replica-exchange molecular dynamics method for protein folding. *Chemical physics letters*, Vol. 314, No. 1, pp. 141–151, 1999.

4.5 創薬・医療

4.5.1 現在行われている課題

「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ななると思われる。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、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）、フラグメント分子軌道法（FMO）、粗視化モデルを用いた分子動力学（粗視化 MD）がある。

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 4.6）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。

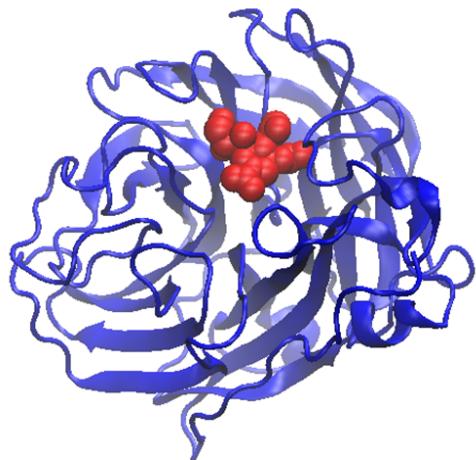


図4.6 医薬品（リレンザ、赤）とインフルエンザウィルスのタンパク質（青）が結合している様子

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戦略分野においても、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も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關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。

計算コストを上手くバランスさせた QM/MM 自由エネルギー評価は、複数の医薬品分子（化合物・リガンド）の標的タンパク質のファーマコフォアへの結合を定量的に評価するのには有効である。一方で、リガンド毎の官能基とアミノ酸算基との分極した電荷移動の局所的な相互作用を定量的に評価したいという要望も SBDD (Structure-Based Drug Design) には根強くあり、フラグメント間相互作用エネルギー (IFIE) や電荷分布の数値指標が直裁に得られる FMO 計算が長年使われている理由でもある。現在、産学官連携の FMO 創薬コンソーシアムにおいて、タンパク質とリガンド間の相互作用に対する IFIE データベースを開発中であり、今後数千構造規模の FMO 計算結果を格納する予定である。加えて今後は、複数のサンプル構造に対して FMO 計算を capacity computing 的に行い、得られる一連のデータを機械学習によって自動的に解析して「知識」を導出する試みが出てくると思われる。

(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 [1]、SBML [2]、セルイラストレーター [3]、米国産の Neuron [4] 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 [5]。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 [6] 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続けければ、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 [7] や、EU での Virtual Physiome プロジェクト [8] 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 [9]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）[10] 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）[11]、Smoldyn（米国 Fred Hutchinson Cancer Research Center および The Molecular Sciences Institute）[12]、GFRD（理研および蘭 AMOLF）[13]、Spatiocyte（理研および慶應大学）[14]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 [15] 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。血流中における单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 [16, 17, 18]。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 [19, 20, 21]。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 [22, 23, 24, 25]。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 [15]。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、現在单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 [26, 27, 28, 29, 30]。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 [31, 32]。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されてきた。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 [33]。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 [34] や Time Reversal 法 [35, 36] 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 [37, 38]。「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ると期待される。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。

4.5.2 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 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や、自由エネルギー計算を目的として、バイアスポテンシャルを利用する計算法など、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

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をはじめとする実験技術も大きく進展し、指数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える。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、決定的に重要な要素となるであろう。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。

FMO計算に関して言えば、既述のように全原子の電子状態ベースの詳細解析のメリットを活かす目的で、多サンプル構造の同時並行的処理を行うことで超並列計算資源を有効活用することが直截であろう。こうしたcapacity computingから得られるビッグデータとしてのIFIEや電荷情報を機械学習を利用して処理することで、人間では発見が出来ない新しい「知見」を得ることも可能かもしれない。特に、結合

するリガンドとファーマコフォア内の残基間の相互作用だけでなく、リガンド結合によって間接的に影響を受ける残基間の相互作用の変化に注目することも機械学習であれば容易である。さらに、機械学習の主流であるニューラルネットでは行列積型の演算が支配的であり、きわめて高速な処理が期待出来る。ワークフローの整備は今後の検討課題ではあるが、FMO 計算と機械学習を on-the-fly で組み合わせるタイプの大規模計算も創薬分野では有効であろう。

計算機パワーの向上に伴う化合物スクリーニング予測性能の高精度化としては、FMO 計算による相互作用スコアの高精度化も挙げられよう。FMO 法を用いて、現時点では数十～百化合物程度の full-QM による SBDD 計算が可能であるが、今後は数千～万構造に及ぶ FMO 計算が可能になると考えられ、数百万化合物から出発する化合物スクリーニングの最終段階を担うことも可能になるだろう（機械学習は適宜援用する）。

粗視化シミュレーション（散逸粒子動力学：DPD など）は高分子分野で使われるメソスケールの計算手法であるが、構成成分間の有効相互作用を表す χ パラメータが信頼性を左右することが知られている。通常、こうしたパラメータは溶解度などの実験データへのフィットや経験的な古典力場ベースで算定されるが、分極や電荷分離の大きな系、あるいは界面が複雑な系では上手くいかないことも分かってきている。最近、FMO 計算によって χ パラメータを非経験的に評価するプロトコルが確立されつつあり、これらを用いた粗視化シミュレーションによって脂質膜やベシクルの形成が可能となってきた。もちろん、脂質膜（膜タンパク質含む）には全原子の MD シミュレーションが王道であり、国内でも先導的な計算事例が多数報告されている。しかし、DDS (Drug Delivery System) 用のベシクル構造の最適化などパラメタスタディを重ねる場合には、FMO 計算と粗視化シミュレーションをマルチスケール的に繋ぐアプローチも有効であろう。

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。さらに、機械学習あるいは広義の人工知能といった情報科学分野のコミュニティとの共同作業も必要になってくる。

(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（ $10\mu\text{m}$ 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化など、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クロ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 [39, 40]）。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 [26, 27, 28, 29, 30]。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 [41, 42]。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。

4.5.3 次世代に解決すべき課題

(i) 生体分子シミュレーション

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、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。

FMO 法のターゲットとしては、複合タンパク質の全電子計算に加えて、水中の QM ダイナミクスなどのより計算コストを要求する高性能電子状態計算の進展を期待する一方で、ビッグデータからの機械学習を活用した FMO 力場の構築など、知識ベースで单一計算のオーダーを変えて下げ、より大規模なスケールあるいは時間発展を追求する流れも出てくると思われる。また、DDS 製剤のシミュレーションなど、FMO パラメータと粗視化 MD を有効に組み合わせた、メソ～マクロスケールの物性予測までを網羅するような取り組みもなされるだろう。数百ナノ～マイクロメートルスケールの粒子やアモルファス構造体の相分離など、より高性能な分子設計が期待される。

全原子 MD 及び粗視化 MD に関する課題については 4.2 章を参考。

(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 [43] について説明する。これは、細動脈（血管径 100~200μm）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。ポスト京のプロジェクトでは、連続体力学に基づくシミュレーションと実験観察・医用計測情報を組み合わせた物理法則に基づくデータ同化手法の開発が進められている。例えば、非侵襲的に取得した患者個別の血流情報を用いたデータ同化血流解析を行うことで、患者個別の血行動態・血行力学因子を時空間方向に高解像で評価し、疾病的機序解明・早期診断・手術支援などに繋げる試みがなされている。また、発話時の舌形状を用いたデータ同化変形解析を行うことで、舌筋線維の収縮力および神経活動を推定し発話調整機構の機序解明や治療診断に繋げる試みがなされている。これら一連の解析では、物理法則やシミュレーションモデルを介し、観察される情報以外の物理量を評価することができるため、エビデンスベースでの現象本質の解明や新たな医工学技術に繋がることが期待される。今後、大規模な時空間計測データを用いた同化解析に向けた大規模シミュレーションモデルの確立が必要とされる。

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 枠程度遅い伝播速度を持つ横波の影響 [44] 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。HIFU の研究について、最近は強度がより高く、ショートパルス

な超音波照射による組織破碎を対象にした研究が増えてきている。このキャビテーションを応用した強力集束超音波治療において、キャビテーションの音響的、熱的また力学的特性の効果的な利用が新たな技術開発の鍵になっている。そのため、集束超音波キャビテーションに対するマルチスケール・マルチフィジックス解析によって、生体へのキャビテーションの力学的作用に関する知見を得る必要がある。このためには、音響的な非線形だけでなく、気泡の非線形体積振動を考慮した解析が必要になるため、現状のHIFUシミュレーションよりも大規模な計算が必要になる。また、計算の課題としては、気泡の非線形体積振動の時間スケールが非常に小さく、振動状態によって並列計算時のロードインバランスを引き起こすため、これの対策が必要になる。

4.5.4 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、これらのことでは、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。

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確に求める方法（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たとした。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 計算および全原子 MD に準じる。

粗視化シミュレーションでよく使われる手法が散逸粒子力学 (DPD) であり、その有効パラメータはセグメント 2 成分系のフローリー・ハギンズ理論に基づく χ パラメータと対応付けられる。 χ パラメータの算定ではセグメント対の接触エネルギーが最も重要な数値であるが、FMO 計算の結果として得られる IFIE を使って定量的に評価することが最近では可能となっている。計算レベルとしては、アルキル基やベンゼン環などの相互作用では分散力が重要となるため 2 次摂動 (MP2) レベルは最低限必要であり、セグメントが荷電している場合には溶媒効果を連続誘電体モデルで考慮しなくてはいけない。接触エネルギーはセグメント対の多数の配置について計算され、最終的にはモンテカルロ法によって各温度毎に χ パラメータに変換される。セグメント対あたりのサンプル数は対象系にもよるが二千程度であり、構造

の違う同種の FMO 計算がこの数だけ実行される。また、多成分系となれば、組み合わせの数でセグメント対が増えるので、グロスでは相当数の計算量となる。幸い、こうした計算は同時並行処理 (capacity computin) が有効であり、超並列計算資源を効率良く使うことが可能である。一旦得られた、FMO ベースの χ パラメータを使い、セグメントの割合や繋がり方を変えながら対象の挙動を DPD でシミュレートし、目的とするプロパティを持つ条件をパラメータスタディすることも、同時並行処理に該当することは言うまでもない。

(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 109 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、 3.6×10^5 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、 3.6×10^5 EFLOP となり、これを 10 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とともに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とともに隣接通信を避ける。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) $\times 10^2$ (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 107 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。

4.5.5 公的な意見交換とそのサマリー

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уп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。

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、更なる並列数增加への対応、ものづくり分野との連携についての意見が出された。

2014年1月23日～24日のバイオスуп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уп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。

CBIの2016年大会(2016年10月25～27日)では、パネルディスカッション「生体分子シミュレーションの実用化への道」にて「スパコン創薬の実用化を目指して」というタイトルで奥野先生、北浦先生、池口先生、水口先生、本間先生、福澤らでスパコン創薬の現状とAI創薬を見据えた今後の方向性に関する議論があった。

4.5.6 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	細胞内シグナル伝達反応経路のモデル構築 薜氏島や血小板による血栓形成	分子混雑等の細胞環境の導入	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	細胞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	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		
ガンゲノム解析	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4.7 創薬・医療ロードマップ

参考文献

- [1] E-Cell. <http://www.e-cell.org/>.
- [2] SBML. <http://sbml.org/>.
- [3] Cell Illustrator. <http://www.cellillustrator.com/>.
- [4] Neuron. <http://neuron.duke.edu/>.
- [5] J. R. Karr, et al. A whole-cell computational model predicts phenotype from genotype. *Cell*, Vol. 150, No. 2, pp. 389–401, 2012.
- [6] M. Tomita, et al. E-CELL: software environment for whole-cell simulation. *Bioinformatics*, Vol. 15, No. 1, p. 72, 1999.
- [7] The Virtual Cell. <http://www.nrcam.uchc.edu/>.
- [8] Virtual Physiome Project. <http://www.vph-noe.eu/>.
- [9] RICS プロジェクト. http://cellsim.riken.jp/research_e.html.
- [10] ChemCell. <http://chemcell.sandia.gov/>.

- [11] Mcell. <http://www.mcell.cnl.salk.edu/>.
- [12] Smoldyn. <http://www.smoldyn.org/>.
- [13] GFRD. <http://gfrd.org/>.
- [14] Spatiocyte. <http://spatiocyte.org/>.
- [15] 高木周. 生命と科学, 第5章「人体シミュレーション」. 岩波書店, 2012.
- [16] C. Pozrikidis. *Modeling and simulation of capsules and biological cells*. CRC Press, 2003.
- [17] H.-J. Bungartz and M. Schäfer. *Fluid-structure interaction: modelling, simulation, optimisation*, Vol. 53 of *Lecture Notes in Comput. Sci. Engrg*. Springer Science & Business Media, 2006.
- [18] C. Pozrikidis, editor. *Computational hydrodynamics of capsules and biological cells*. CRC Press, 2010.
- [19] A. Rahimian, et al. Petascale direct numerical simulation of blood flow on 200k cores and heterogeneous architectures. In *Proc. of International Conference for High Performance Computing, Networking, Storage and Analysis*, pp. 1–11, 2010.
- [20] M. Bernaschi, et al. Petaflop biofluidics simulations on a two million-core system. In *Proc. of International Conference for High Performance Computing, Networking, Storage and Analysis*, pp. 4:1–4:12, 2011.
- [21] L. Grinberg, et al. A new computational paradigm in multiscale simulations: Application to brain blood flow. In *Proc. of International Conference for High Performance Computing, Networking, Storage and Analysis*, pp. 1–12, 2011.
- [22] K. Sugiyama, et al. A full eulerian finite difference approach for solving fluid–structure coupling problems. *Journal of Computational Physics*, Vol. 230, No. 3, pp. 596–627, 2011.
- [23] S. Ii, et al. A full eulerian fluid-membrane coupling method with a smoothed volume-of-fluid approach. *Communications in Computational Physics*, Vol. 12, No. 2, p. 544576, 2012.
- [24] S. Takagi, et al. A review of full eulerian methods for fluid structure interaction problems. *J. Appl. Mech.*, Vol. 79, No. 1, p. 010911, 2012.
- [25] Sugiyama K., et al. Development of explicit eulerian finite difference solver for large-scale fluid–structure interaction systems. 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論文集, 第2012卷, pp. 153–162, jan 2012.
- [26] F. A. Duck, et al. *Ultrasound in medicine*. CRC Press, 1998.
- [27] J. E. Kennedy, et al. High intensity focused ultrasound: surgery of the future? *Br. J. Radiol.*, 2014.
- [28] F. Wu, et al. Circulating tumor cells in patients with solid malignancy treated by high-intensity focused ultrasound. *Ultrasound in Med. Biol.*, Vol. 30, No. 4, pp. 511–517, 2004.
- [29] J. E. Kennedy. High-intensity focused ultrasound in the treatment of solid tumours. *Nat. Rev. Cancer*, Vol. 5, No. 4, pp. 321–327, 2005.
- [30] G. K. Hesley, et al. A clinical review of focused ultrasound ablation with magnetic resonance guidance: an option for treating uterine fibroids. *Ultrasound Q.*, Vol. 24, No. 2, pp. 131–139, 2008.

- [31] <http://www.healthcare.philips.com/main/products/mri/systems/sonalleve/>.
- [32] http://japan.gehealthcare.com/cwcjapan/static/rad/mri/MRgFUS_ExAblate2000/.
- [33] 佐々木明. 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*, Vol. 3, pp. 4–5, 2010.
- [34] J. Sun and K. Hynynen. Focusing of therapeutic ultrasound through a human skull: a numerical study. *J. Acoust. Soc. Am.*, Vol. 104, No. 3, pp. 1705–1715, 1998.
- [35] M. Fink. Time reversal of ultrasonic fields. i. basic principles. *IEEE Trans. Ultrason. Ferroelectr. Freq. Control*, Vol. 39, No. 5, pp. 555–566, 1992.
- [36] M. Fink, et al. Time-reversal acoustics in biomedical engineering. *Annu. Rev. Biomed. Engrg.*, Vol. 5, No. 1, pp. 465–497, 2003.
- [37] K. Okita, et al. Numerical simulation of the tissue ablation in high-intensity focused ultrasound therapy with array transducer. *Int. J. Numer. Meth. Fluids*, Vol. 64, No. 10-12, pp. 1395–1411, 2010.
- [38] K. Okita, et al. Development of high intensity focused ultrasound simulator for large-scale computing. *Int. J. Numer. Meth. Fluids*, Vol. 65, No. 1-3, pp. 43–66, 2011.
- [39] K. Sasaki, et al. Effect of echo-guided high-intensity focused ultrasound ablation on localized experimental tumors. *J. Vater. Med. Sci.*, Vol. 68, No. 10, pp. 1069–1074, 2006.
- [40] 中村弘文ほか. 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, 2012.
- [41] Y. Liu, et al. Numerical study on the shape oscillation of an encapsulated microbubble in ultrasound field. *Phys. Fluids*, Vol. 23, No. 4, p. 041904, 2011.
- [42] 杉山和靖ほか. 超音波音場における膜被包性マイロバブルの表面安定性の数値解析. 超音波テクノ, Vol. 24, pp. 90–94.
- [43] J. E. Sadler. Von Willebrand factor, ADAMTS13, and thrombotic thrombocytopenic purpura. *Blood*, Vol. 112, No. 1, pp. 11–18, 2008.
- [44] K. Sugiyama, et al. A priori modeling of the acoustic boundary layer effect on the heat source in ultrasound. *J. Biomech. Engrg. Sci.*, Vol. 7, No. 1, pp. 84–101, 2012.
- [45] S. Tanaka, et al. Electron-correlated fragment-molecular-orbital calculations for biomolecular and nano systems. *Phys. Chem. Chem. Phys.*, Vol. 16, No. 22, pp. 10310–10344, 2014.
- [46] D. G. Fedorov, et al. Exploring chemistry with the fragment molecular orbital method. *Phys. Chem. Chem. Phys.*, Vol. 14, No. 21, pp. 7562–7577, 2012.

4.6 設計・製造

4.6.1 熱流体

4.6.1.1 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]。

4.6.1.2 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 (R_e) 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 (R_e 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 4.5 (n は格子点数を示す) に示す [5, 6, 7]。

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 4.6 (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 4.6 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をともなう流れや流体・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、例えば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 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 4.5 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 4.6 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	$L = 1\text{m}$, $U = 28\text{m/s}$ (100km/h)	1.9×10^6	10	7.9×10^{10}
模型船	$L = 5$ (1/50 scale model), $U = 1.0\text{m/s}$	4.6×10^6	1.2	8.9×10^{10}
小型ポンプ	$D_2 = 300\text{mm}$, 1500rpm, $L = 0.15\text{m}$, $U = 24\text{m/s}$	3.6×10^6	12	3.9×10^{11}
風車	$D_2 = 40\text{m}$, $L = 0.4\text{m}$, $U = 64\text{m/s}$	2.5×10^6	3	4.0×10^{10}
軸流ファン	$D_2 = 600\text{mm}$, 1800rpm, $L = 0.2\text{m}$, $U = 56\text{m/s}$	7.5×10^5	12	8.6×10^9
換気扇	$D_2 = 500\text{mm}$, 600rpm, $L = 0.2\text{m}$, $U = 16\text{m/s}$	2.0×10^5	3	1.0×10^8
小型冷却ファン	$D_2 = 80\text{mm}$, 3400rpm, $L = 0.02\text{m}$, $U = 14\text{m/s}$	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つい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ク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 4.8 に示す [8]。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できるようになる。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。

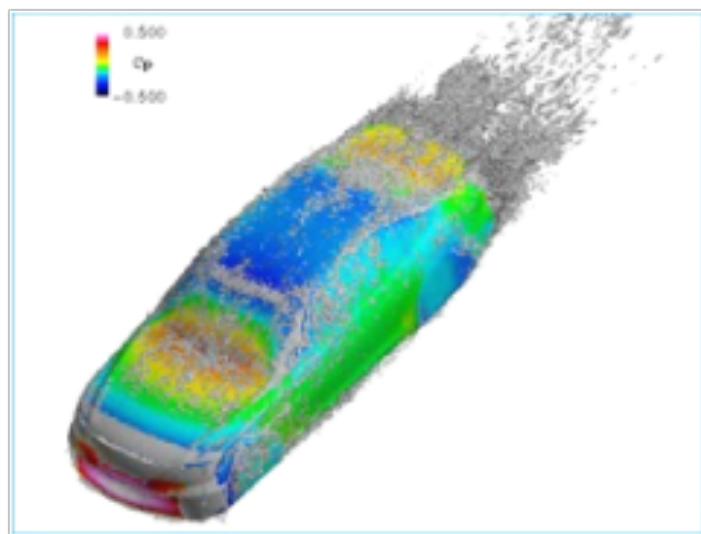


図 4.8 自動車回りの詳細な気流解析

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4.9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。

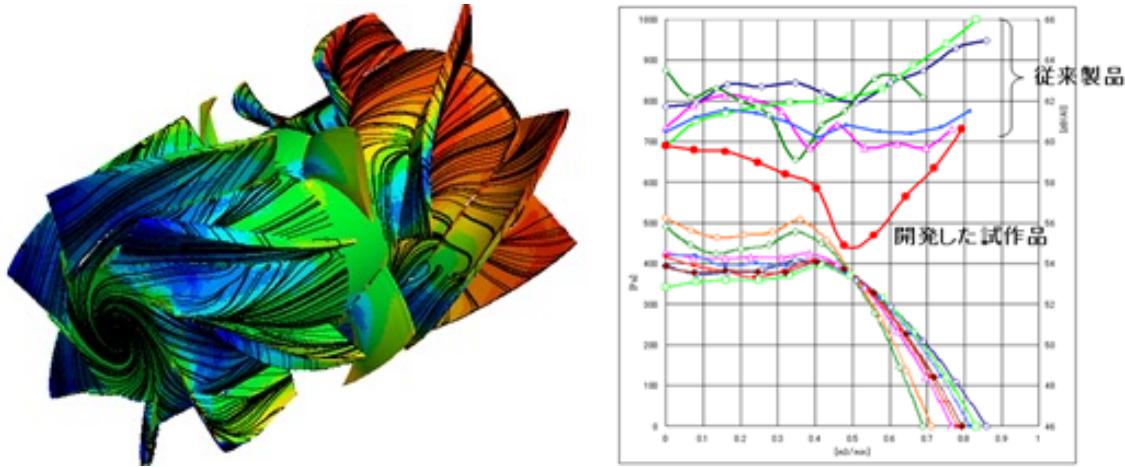


図 4.9 ファンの騒音低減例

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。

4.6.1.3 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物理モデルの更なる高度化が必要である [9, 10]。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。

4.6.1.4 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

4.6.1.5 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く、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・ストークス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。

4.6.1.6 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。

この観点に立ち、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。

4.6.1.7 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して、以下の会合で意見交換を実施した。

- 第26回数値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性能やグラフィッ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。

4.6.1.8 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4.10に示す。

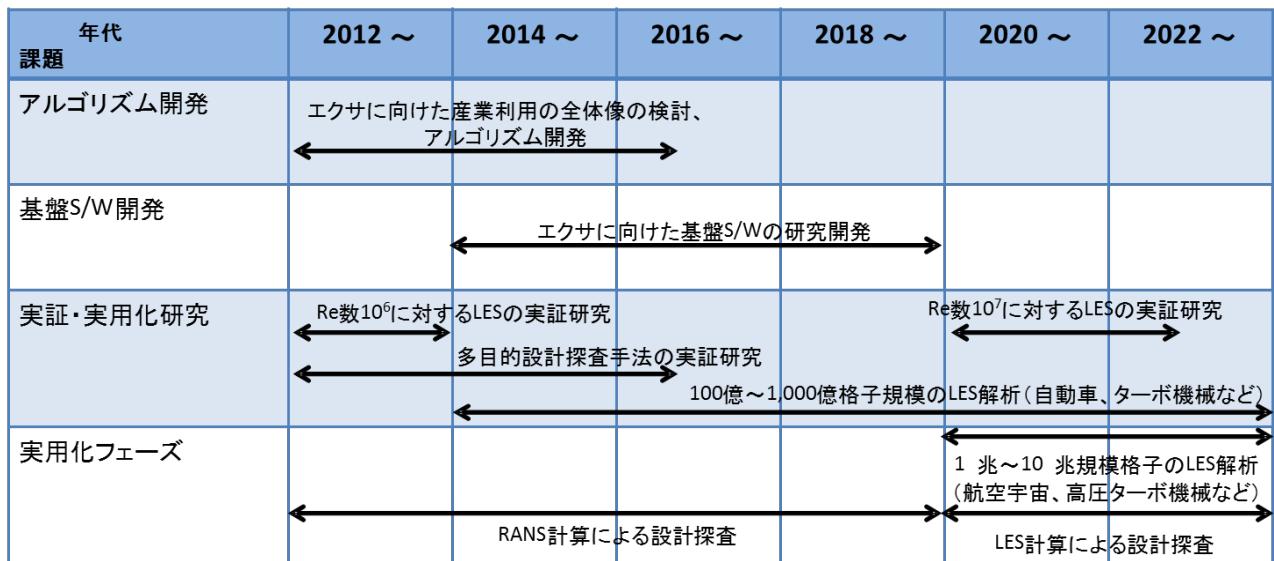


図4.10 熱流体解析ロードマップ

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, pp. 28–33, 2010.
- [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. 第2回計算科学シミュレーションシンポジウム, 2011.
- [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.
- [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, Vol. 148, pp. 4–10, 2012.
- [5] 加藤千幸. 亂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. 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, 2012.
- [6] 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, Vol. 30, pp. 57–60, 2011.
- [7] 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, Vol. 38, No. 11, pp. 27–32, 2010.
- [8] 忠津雅也ほか. 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.

- [9] Chisachi Kato. Industry-university collaborative project on numerical predictions of cavitating flows in hydraulic machinery. In *ASME-JSME-KSME Joint Fluids Engineering Conference 2011*, 2011.
- [10] 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] Chisachi Kato. Very Large-Scale Fluid-Flow and Aeroacoustical Simulations for Engineering Applications Performed on Supercomputer K. In *SC12*, 2012.

4.6.2 構造解析

4.6.2.1 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のづくり技術の発展に寄与すると考えられる。

4.6.2.2 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・利用されてきたといえる。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。

4.6.2.3 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。

4.6.2.4 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、線形弹性解析、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 などが有名である。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、商用コードではありません例がないが、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, 4, 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、それについて最適な実装形態を用意する必要がある。

4.6.2.5 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携、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。

4.6.2.6 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。

4.6.2.7 ロードマップ

構造解析分野のロードマップを図 4.11 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 4.11 構造解析ロードマップ

参考文献

- [1] O. C. Zienkiewicz and R. L. Taylor. *The Finite Element Method, 5th ed.* Oxford, 2000.
- [2] Y. Saad. *Iterative methods for sparse linear systems.* PWS publishing company, 1996.
- [3] B. Smith, P. E. Bjorstad, and W. D. Gropp. *Domain decomposition : Parallel multilevel methods for elliptic partial differential equations.* Cambridge University Press, 1996.
- [4] A. Toselli and O. B. Widlund. *Domain decomposition methods : Algorithms and theory.* Springer, 2004.
- [5] T. Mathew. *Domain Decomposition Methods for the Numerical Solution of Partial Differential Equations.* Springer, 2008.

4.6.3 機械材料

4.6.3.1 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 4.12）[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局的であり、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、ボトムアップアプローチと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。

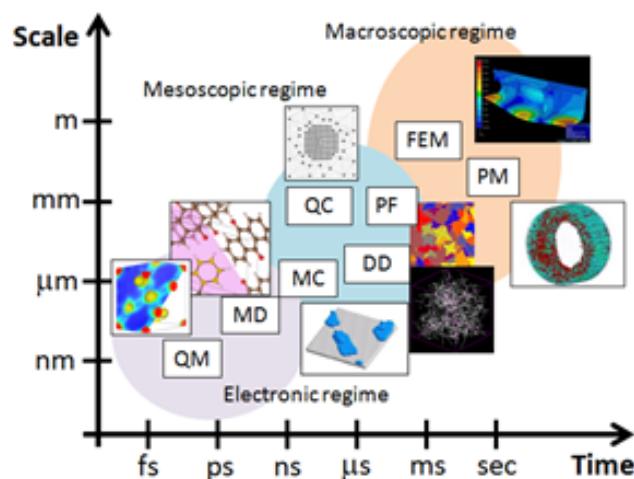


図 4.12 マルチスケールシミュレーションによる材料強度評価

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。

翻って我が国では、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ーパコン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。

スーパコンと普及型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。

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は理想ではあるが、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。そのようなメゾ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ゾ構造決定に益する知見を得る試みがなされている。

4.6.3.2 長期的目標

ボトムアップアプローチ

世界トップのスペコンは 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、トップランクのスペ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 桁ほど小さくなる。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する必要がある。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。

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ルストーンとなる。すなわち、 $10\mu\text{m}$ の要素サイズで 1m 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 $6\mu\text{m}$ 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。

4.6.3.3 次世代に解決すべき課題

ボトムアップアプローチ

(i) 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。

(ii) 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]。

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。

4.6.3.4 ターゲットとする研究対象

ボトムアップアプローチ

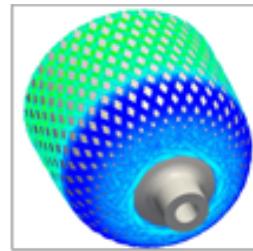
手法開発と工業的要件の双方の観点から、電子部品用の機能性材料に関する強度評価が適切なターゲットである。機能性材料の解析のためには、電気的特性や磁気特性など電子構造が支配する特性と、機械的ひずみや変形の連動作用によるマルチフィジックスが関与する問題に対処する必要がある。これまでこのような問題については第一原理解析や半経験的量子力学シミュレーションが必須であったが、電荷移動や電子スピンを記述することができる原子間ポテンシャルモデル（以下、マルチフィジックスポテンシャル）を用いれば、電子に対するハミルトニアンを解くことなく分子動力学計算を行うことができ、第一原理などと比べ格段に大きなサイズの問題が扱えるようになる。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。

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 500μm 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、500μm 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 4.13）。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。



First principal stress[MPa]
5.4 60.4

図 4.13 フィラメントワインディング高压水素容器の強度評価

4.6.3.5 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）

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。

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、 $50\mu\text{m}$ 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 時間で終るために必要な実効性能は 200PFLOPS と見積もられる。

4.6.3.6 他分野との連携

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。

物性・界面

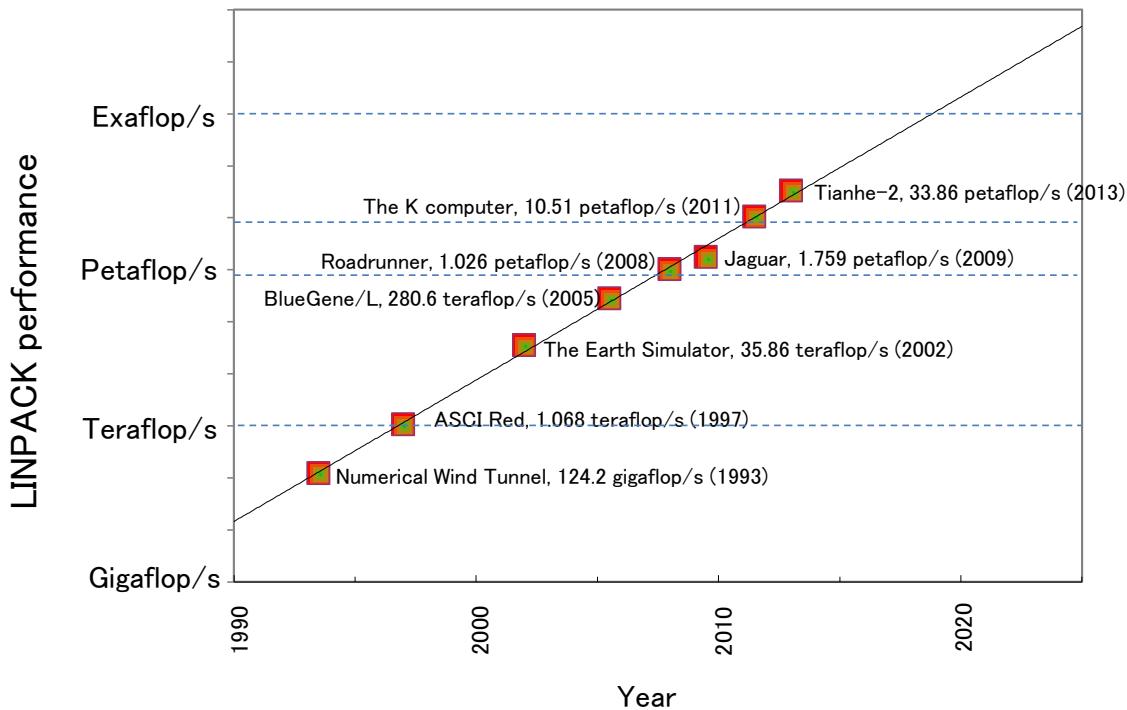
物性物理・界面工学の分野において、ひずみや変形による物性変化が注目されており、これらの特性をデバイスの機能向上に積極的に利用しようとする試みが進められている。例えば、半導体デバイスの設計においては、ひずみ負荷による電子の有効質量変化をデバイスの機能向上のために利用している [10]。また、グラフェンのような低次元構造体でオングストロームオーダーの波長のコルゲーション（しわ形状）が起こることが観察されており、こうした特異な変形による新奇な特性の発現・応用が期待されている [11]。ひずみや変形による新奇物性の発現を利用したナノデバイスの開発は、今後更に注目を集めると予想される。ナノ～ミクロンレベ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。

4.6.3.7 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。

4.6.3.8 ロードマップ

図 4.14 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 4.15 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。



データ出典：“Top500 Supercomputer sites” <http://www.top500.org/>

図 4.14 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、少数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μ sec)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4.15 機械材料ロードマップ

参考文献

- [1] Sidney Yip, editor. *Handbook of materials modeling*. Springer, 2005.
- [2] Z. X. Guo, editor. *Multiscale materials modelling: Fundamentals and applications*. CRC press, 2007.
- [3] D.C. Rapaport. *The art of molecular dynamics simulation*. 1995.
- [4] J.M. Haile. *Molecular dynamics simulation: Elementary methods*. Wiley-Interscience, 1997.
- [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.*, Vol. 17, No. 1, p. 013001, 2009.
- [6] R. E. Miller and E.B. Tadmor. The quasicontinuum method: Overview, applications and current directions. *J. Comput. Aided Mater. Des.*, Vol. 9, No. 3, pp. 203–239.
- [7] J. Knap and M. Ortiz. An analysis of the quasicontinuum method. *J. Mech. Phys. Solids*, Vol. 49, No. 9, pp. 1899–1923, 2001.
- [8] 渋谷陽二. 塑性の物理素過程から理解する塑性力学. 森北出版, 2011.
- [9] M. Griebel, S. Knapek, and G. Zumbusch. *Numerical simulation in molecular dynamics*. Springer, 2010.

- [10] 濱川佳弘. 半導体デバイス工学. オーム社, 2000.
- [11] H. Shima, M. Sato, K. Iiboshi, S. Ghosh, and M. Arroyo. Diverse corrugation pattern in radially shrinking carbon nanotubes. *Phys. Rev. B*, Vol. 82, p. 085401, 2010.

4.6.4 プラズマ・核融合

4.6.4.1 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～100²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, 3]。

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otron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（ローザンヌ連邦工科大学）が主要コードとなりつつある。一方、国内ではGT5D [5]（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、[6] 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、[7] では GT5D を用いて DIIID 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きており、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 [8] 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。

4.6.4.2 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 [9] 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（～1s）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。

4.6.4.3 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、～10ms 程度の時間スケール）の計算量を図 4.16 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。これによつて、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（～1s）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 [10] 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。

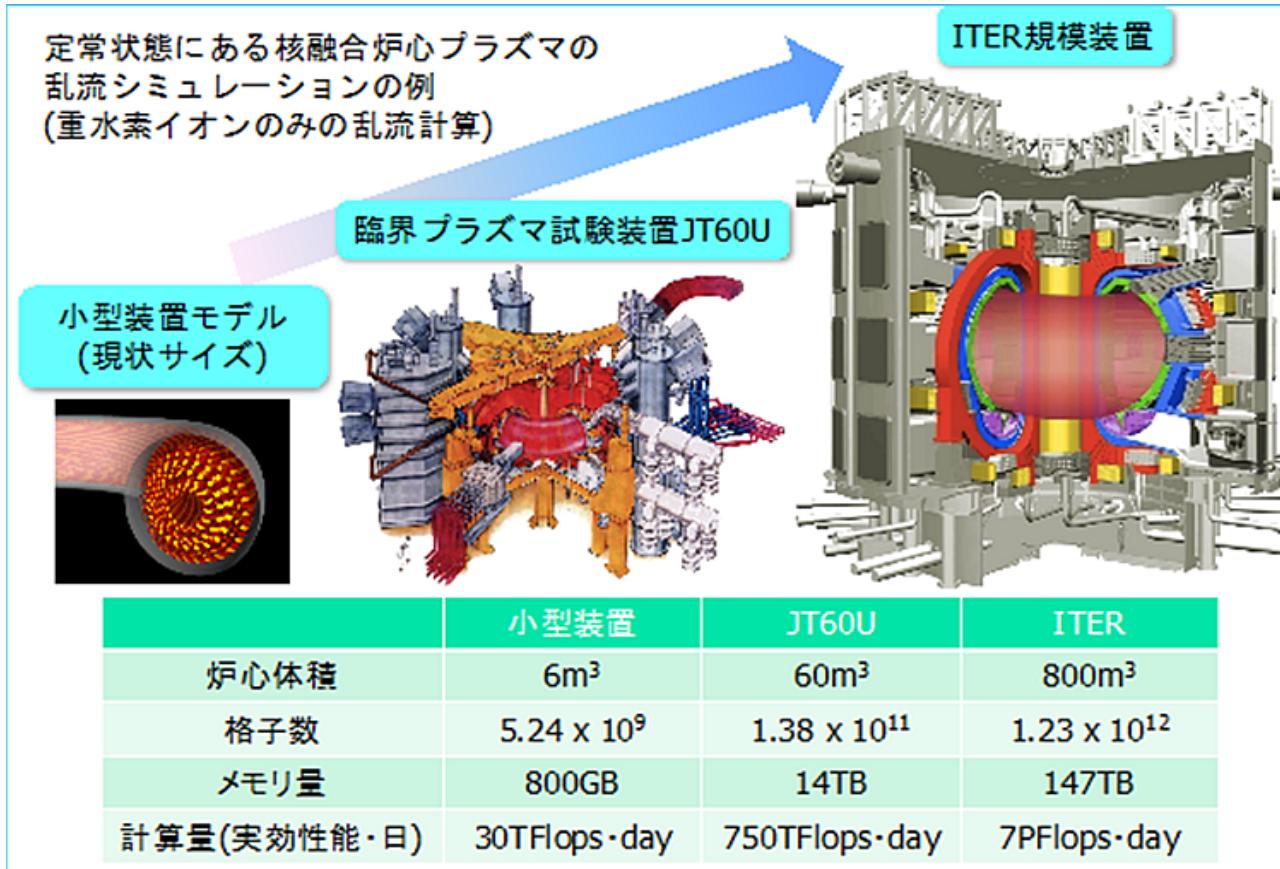


図 4.16 核融合プラズマ乱流シミュレーションの計算規模

(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。

4.6.4.4 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 [5]、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オフ部分空間解法（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 (\times 数 100 ケース)、長時間数値実験で 10^{23} FLOP 程度 (\times 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 (\times 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。

4.6.4.5 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。

4.6.4.6 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開拓することについて、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。

4.6.4.7 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4.17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。

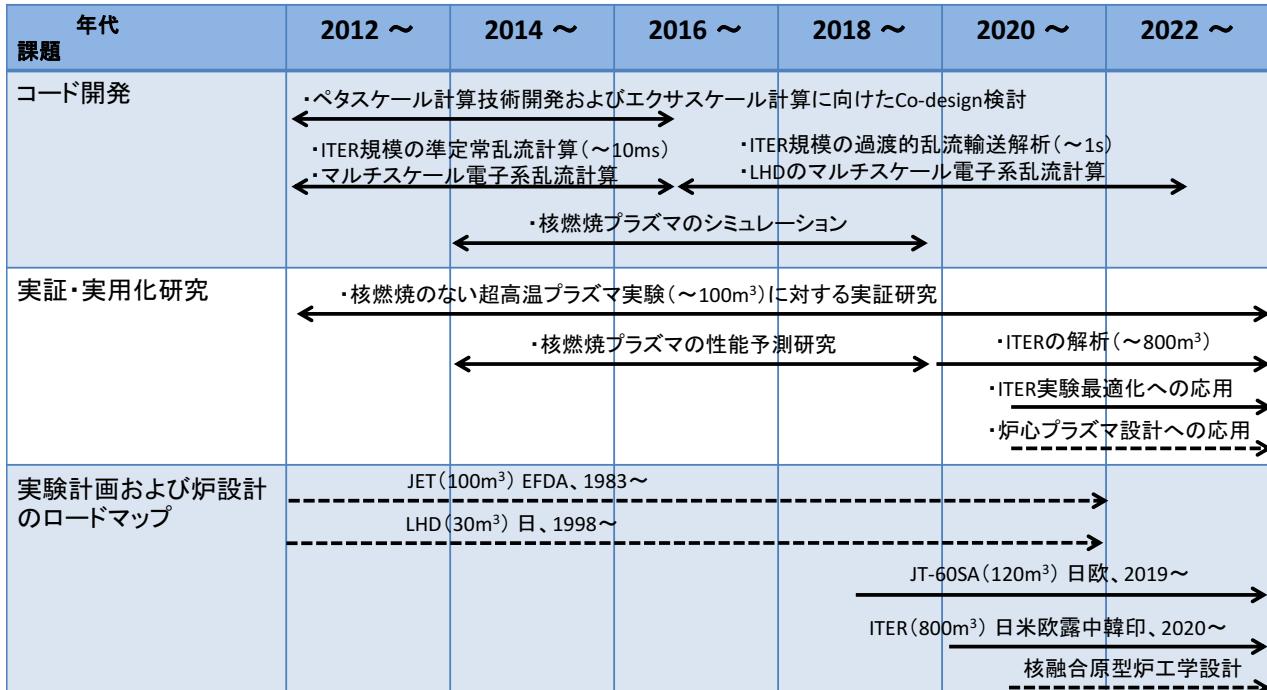


図 4.17 プラズマ・核融合ロードマップ

参考文献

- [1] A. J. Brizard and T. S. Hahm. Foundations of nonlinear gyrokinetic theory. *Rev. Mod. Phys.*, Vol. 79, pp. 421–468, Apr 2007.
- [2] X. Garbet, Y. Idomura, L. Villard, and T.H. Watanabe. Gyrokinetic simulations of turbulent transport. *Nucl. Fusion*, Vol. 50, No. 4, p. 043002, 2010.
- [3] 洲鎌英雄, 渡邊智彦. ジャイロ運動論による磁化プラズマ乱流の研究 : 核融合から宇宙まで. 日本物理学会誌, Vol. 68, No. 5, pp. 296–304, 2013.
- [4] T.-H. Watanabe and H. Sugama. Velocityspace structures of distribution function in toroidal ion temperature gradient turbulence. *Nucl. Fusion*, Vol. 46, No. 1, p. 24, 2006.
- [5] Y. Idomura, M. Ida, T. Kano, N. Aiba, and S. Tokuda. Conservative global gyrokinetic toroidal full-f five-dimensional Vlasov simulation. *Comput. Phys. Commun.*, Vol. 179, No. 6, pp. 391–403, 2008.
- [6] M. Nunami, T.-H. Watanabe, H. Sugama, and K. Tanaka. Gyrokinetic turbulent transport simulation of a high ion temperature plasma in large helical device experiment. *Phys. Plasmas*, Vol. 19, No. 4, p. 042504, 2012.
- [7] S. Jolliet and Y. Idomura. Plasma size scaling of avalanche-like heat transport in tokamaks. *Nucl. Fusion*, Vol. 52, No. 2, p. 023026, 2012.
- [8] Nu-Fuse project. <http://www.nu-fuse.com/>.
- [9] 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」. <http://www.naka.jaea.go.jp/fusion-energy-forum/>, 2008.

- [10] Y. Idomura, et al. Communication-overlap techniques for improved strong scaling of gyrokinetic eulerian code beyond 100k cores on the K-computer. *Int. J. HPC Appl.*, Vol. 28, No. 1, pp. 73–86, 2014.

4.6.5 電磁界解析

4.6.5.1 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, 2, 3]。

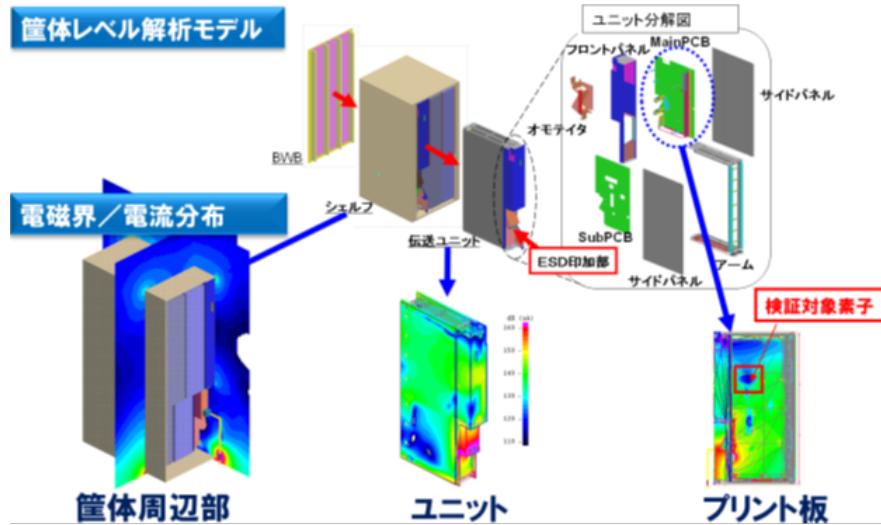


図 4.18 機器全体の電磁界場による ESD ノイズ伝搬の可視化

図 4.18 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ともな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。

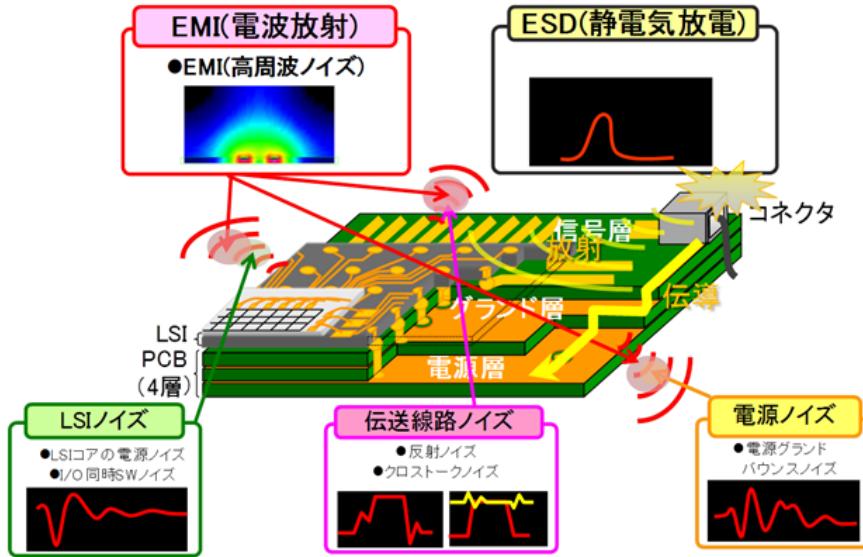


図 4.19 電磁界解析における LSI 内部モデルの necessity

図 4.19 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。

4.6.5.2 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} 秒オーダーとなるため、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。

4.6.5.3 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1/100～1/1000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。

4.6.5.4 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10～100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程度で十分であり、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。

4.6.5.5 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は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。

4.6.5.6 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。

4.6.5.7 ロードマップ

課題	年代	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4.20 電磁界解析ロードマップ

参考文献

- [1] 佐藤敏郎ほか. 当社における EMC 対策設計の取り組み. 月刊 EMC, 8月号, No. 292, pp. 21–28, 2012.
- [2] 佐相秀幸ほか. マルチ・フィジッ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(半導体材料・デバイス). 電子情報通信学会論文誌 C, Vol. 94, No. 8, pp. 210–222, 2011.
- [3] 斎藤精一, 伊藤明, 松本弘. エンジニアリングクラウド開発環境. *Fujitsu*, Vol. 62, No. 3, pp. 288–296, 2011.
- [4] M. Unno and H. Asai. High-speed electromagnetic field simulation by HIE-FDTD method with GPGPU. In *2010 IEEE Electrical Design of Advanced Package Systems Symposium*, pp. 1–4, Dec 2010.

4.6.6 可視化・データ処理

4.6.6.1 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、スパ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 4.21 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。

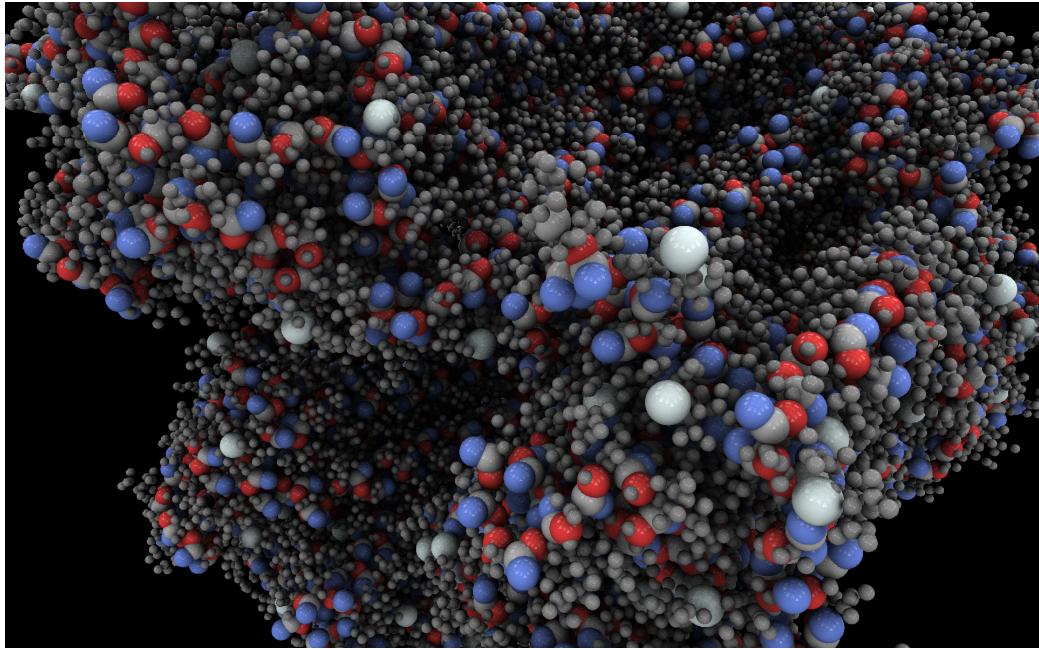


図 4.21 分子シミュレーションの並列レイトレーシング画像

データ：横浜市立大学大学院生命医科学研究所

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]。

4.6.6.2 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、中期的な観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。

4.6.6.3 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4.22参照）。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。

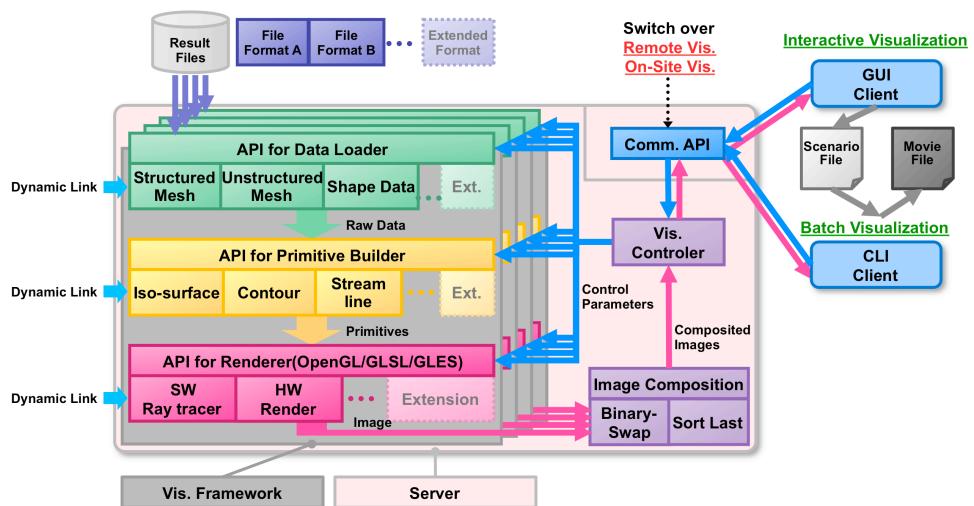


図4.22 並列分散可視化システムの概念設計

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。

4.6.6.4 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。

4.6.6.5 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 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、必要なバンド幅を見積もっている。

表 4.7 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。

4.6.6.6 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。

4.6.6.7 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など大規模データを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。

4.6.6.8 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4.23に示す。

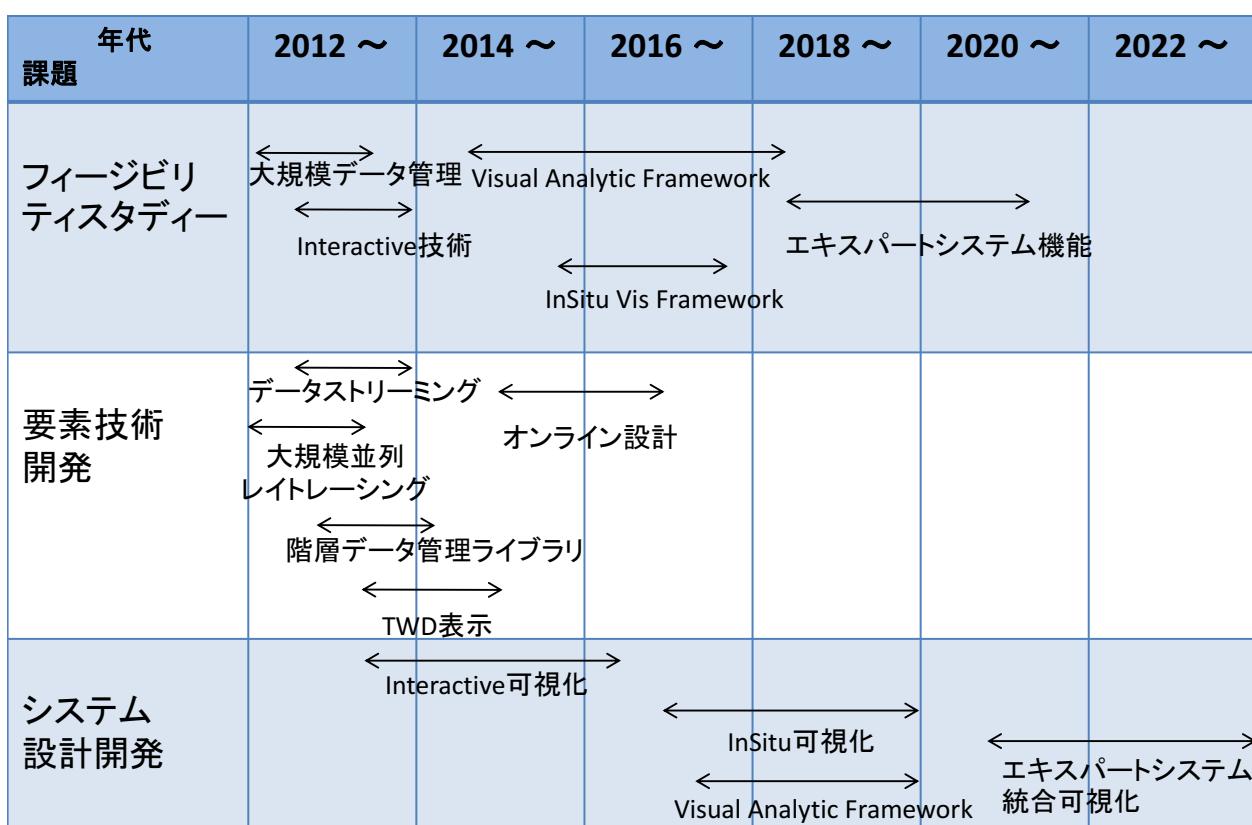


図4.23 可視化・データ処理分野のロードマップ

参考文献

- [1] B. H. McCormick, T. A. DeFanti, and M. D. Brown. Visualization in scientific computing. *SIGGRAPH Comput. Graph.*, Vol. 21, No. 6, 1987.
- [2] VisIt. <https://wci.llnl.gov/codes/visit>.
- [3] ParaView. <http://www.paraview.org>.
- [4] VTK. <http://www.vtk.org>.
- [5] IEEE VIS. <http://ieeevis.org>.

- [6] Supercomputing Conference. <http://www.supercomp.org>.
- [7] ACM SIGGRAPH. <http://www.siggraph.org>.
- [8] Eurographics. <https://www.eg.org>.
- [9] K.-L. Ma, J. S. Painter, C. D. Hansen, and M. F. Krogh. Parallel volume rendering using binary-swap compositing. *IEEE Comput. Graph. Appl.*, Vol. 14, No. 4, pp. 59–68, 1994.
- [10] C. Li, H. Lin, and J. Shi. A survey of multi-projector tiled display wall construction. In *Image and Graphics (ICIG'04), Third International Conference on*, pp. 452–455, 2004.
- [11] E. B. Lum, K.-L. Ma, and J. Clyne. A hardware-assisted scalable solution for interactive volume rendering of time-varying data. *IEEE Trans. Vis. Comput. Graph.*, Vol. 8, No. 3, pp. 286–301, July 2002.
- [12] J. Sukharev, C. Wang, K.-L. Ma, and A. T. Wittenberg. Correlation study of time-varying multivariate climate data sets. In *2009 IEEE Pacific Visualization Symposium*, pp. 161–168, 2009.
- [13] J. Scholtz. Beyond usability: Evaluation aspects of visual analytic environments. In *2006 IEEE Symposium On Visual Analytics Science And Technology*, pp. 145–150, 2006.
- [14] K.-L. Ma. In situ visualization at extreme scale: Challenges and opportunities. *IEEE Comput. Graph. Appl.*, Vol. 29, No. 6, pp. 14–19, November 2009.
- [15] K. Stockinger, J. Shalf, K. Wu, and E. W. Bethel. Query-driven visualization of large data sets. In *VIS 05. IEEE Visualization, 2005.*, pp. 167–174, 2005.
- [16] C. T. Silva, J. Freire, and S. P. Callahan. Provenance for visualizations: Reproducibility and beyond. *Comput. Sci. Eng.*, Vol. 9, No. 5, pp. 82–89, 2007.
- [17] N. Sakamoto, et al. Visualization of large-scale cfd simulation results using distributed particle-based volume rendering. *Int. J. Emerging Multidiscip. Fluid Sci.*, Vol. 2, No. 2, pp. 73–86, 2010.
- [18] T. Itoh, et al. Hierarchical data visualization using a fast rectangle-packing algorithm. *IEEE Trans. Vis. Comput. Graph.*, Vol. 10, No. 3, pp. 302–313, 2004.
- [19] 竹島由里子, 高橋成雄, 藤代一成. 位相的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, jan 2006.
- [20] C. Bi, S. Takahashi, and I. Fujishiro. Interpolation of 3D Diffusion Tensors by Locating Degenerate Lines. In *Poster Proc. of IEEE Pacific Visualization 2011*, pp. 9–10, 2011.
- [21] 宮村浩子ほか. 時空間データの可視化. 可視化情報学会誌, Vol. 30, pp. 269–272, 2010.
- [22] D. Matsuoka, et al. Visualization for High-Resolution Ocean General Circulation Model via Multi-dimensional Transfer Function and Multivariate Analysis. In *2012 SC Companion: High Performance Computing, Networking Storage and Analysis*, pp. 1466–1466, Nov 2012.
- [23] 白山晋. 知的可視化. 丸善, 2006.
- [24] 坂井陽平ほか. 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] A. Kageyama, et al. Immersive Visualization in PI-CAVE. In *Proc. International Conference*

on Modeling and Simulation Technology (*Jsst 2011*), pp. 286–290, 2011.

- [26] 武田隆顧. 大規模粒子シミュレーションデータのPCによる可視化：可視化ツールZindaiji3の開発について. 可視化情報学会誌, Vol. 32, No. 127, pp. 28–33, 2012.
- [27] 武井利文ほか. 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, No. 2, pp. 107–118, 2000.
- [28] 村松一弘ほか. 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. JAERI-Data/Code 98-014, 日本原子力研究所, 1998.
- [29] N. Ohno and A. Kageyama. Region-of-interest visualization by CAVE VR system with automatic control of level-of-detail. *Comput. Phys. Commun.*, Vol. 181, No. 4, pp. 720–725, 2010.
- [30] LSV. http://www.csrp.riken.jp/application_h_j.html#H2.
- [31] 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」. <http://hpci-aplfs.aics.riken.jp>.

4.7 社会科学

社会科学課題では、実社会のデータ収集・解析とモデル構築・シミュレーションとが同時進行しており、多様なモデル・解析手法が試みられている。例として自動車交通シミュレーションを挙げよう。自動車交通シミュレーションへの多様なアプローチを思いつくまま挙げると、運転行為の人間工学的シミュレーションや機械工学的・物理学的な運動のシミュレーション、他の自動車や歩行者・障害物に対応する運転のシミュレーション、天候による道路状況のシミュレーション、騒音・排気による環境シミュレーションといった具合に、目的に応じて多様である。使われているシミュレーション技術も様々であるが、社会科学課題に特徴的と考えられるのは、離散要素・エージェントモデルと離散構造・離散事象の扱いであろう。

偏微分方程式で記述される自然現象のモデルも、離散要素の集団のふるまいの近似モデルであることが多い。ナビエ・ストークス方程式は流体運動でよく使われる。流体自体は離散要素である分子の集団であるが、アボガドロ数に象徴されるように分子数が非常に多い、いわゆるマクロ現象では良い非常に近似モデルなのである。これに対し社会現象では、社会を構成する基本要素の数はそれほど多くはないことが多い。人の数は当面、100億人を越えないぐらいである。また個々の要素のふるまいも多様であり、他の要素や社会全体のふるまいの下で多岐にわたる選択を繰り返すことも多い。さらに過去の状態や未来の推測も現在の行動決定に関わることも多い。このため単純な離散要素モデルにとどまらず、エージェントモデルによるシミュレーションが使われる。

個々の離散要素の行動決定が複雑多岐であるのみならず、離散要素間・社会全体との関係も複雑である。経済活動は企業や消費者ほかの間の取引活動の総体である。どの企業がどの企業とどれだけの取引をしているか、どの消費者がどの商品を消費しているかは自明ではない離散構造をもち、複雑なグラフ・ネットワークとして記述される。交通・電力・通信といった社会のインフラストラクチャーも複雑なネットワーク構造を持つ。こうした離散構造自体も、社会の在り方とともに変化してゆく。

このようなエージェント・離散構造のダイナミクス自体、時々刻々の選択の繰り返しである。たとえば個々の自動車が、今朝はこの経路、明日はこの経路と道路状況や天候などに応じて選択することにより、渋滞の様相や事故のリスクが変化する。ある道路が渋滞しているという交通情報から、その道路を避けた結果、別の道路が渋滞するといった具合にである。このような複雑なフィードバック・フィードフォワードが内在するため、現象自体が安定ではないことが多い。社会事象自体も複雑多岐にわたる離散事象間の遷移を繰り返してゆくわけである。

社会現象は個々人から社会全体まで、地域の街路から国土開発まで、ミリ秒単位の為替取引から数十年に一度の経済恐慌までと時空間スケールも多様である（図4.24参照）。異なる時空間スケールの事象も、相互に連携して社会のダイナミクスを構成している。個々のスケールでの個々の特徴的な事象を再現するシミュレーションモデルのふるまいを完全に把握したとしても、異なるモデルとの複合により現れるふるまいには驚かされることもある複雑系である。にもかかわらず、総体的な統計的な記述だけでなく、構成要素個々のふるまい・関係も重要なのである。

社会シミュレーションに内在するこうした複雑さをスーパーコンピュータの力を活用して統御しようとする試みのいくつかを、以下に例示しよう。

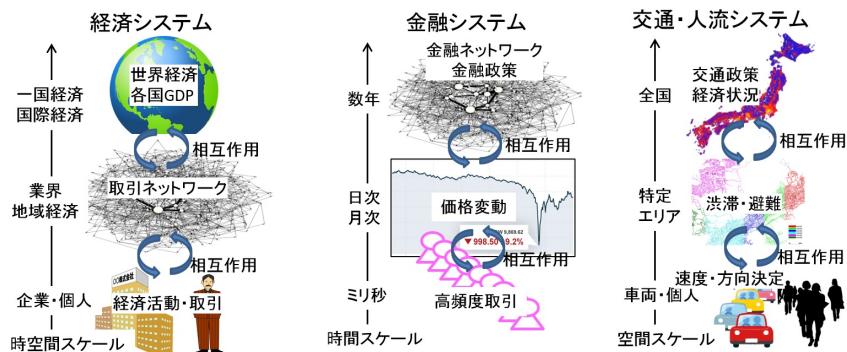


図 4.24 社会現象の時間的空間的スケールの多様性

4.7.1 証券取引と信用リスク

証券取引所で実行されている株式などの証券取引は、投資家エージェントモデルとを使ってシミュレートされる。投資家エージェントの行動モデルは多様であるが、「順ばり・逆ばり」、「ファンダメンタリスト」、「マーケットメイカー」が基本である。「順ばり・逆ばり」エージェントは、値上がりしている株を買う・売るという行動を基本とし、特定の値動き・出来高パターンを検出して売買を決めるいわゆるチャーティストモデルへと拡張される。「ファンダメンタリスト」エージェントは、個々の会社の価値から個々の株の根源的価値を確信し、その価格よりも高ければ売り、安ければ買う。「マーケットメイカー」は売買注文が売り・買いのどちらかに偏って成立しないときに、反対売買注文をいれて取引を実現する。

証券取引では時折、多くの銘柄が急騰・急落するバブル・ショックが現れるが、こうした大変動も統計的にはまれではない。このため、株価変動がガウス分布に従う仮定したリスク管理はしばしば破たんする。こうした現象のシミュレーションモデルの1つが、個々のエージェントのポートフォリオ最適化である。どの株に売買注文をどれくらい出すかを決めるためには、個々のエージェントがもつお金と株式のポートフォリオを最適化するように決める結果、各銘柄の値動きに相関が現れ、時としてバブル・ショック様のふるまいが現れる。

こうしたショックにより投資家が破産するリスクは、銀行において顕著となる。銀行の破産は銀行間の取引ネットワークを通じて広がり、世界経済の停滞から社会不安・世界的戦争を招いた事例も歴史にはうかがわれる。こうした事態を防ぐために、銀行が過大なリスクを抱えないように種々の規制があるが、規制を守る行動自体が株価間の相関を生み出してショックを誘発する可能性も指摘されている。

そこでスーパーコンピュータを使ったシミュレーションにより証券取引のリスクとその金融システムへの影響を評価し、より合理的で安全と信じられる制度設計の試みが、現在進められている（図 4.25 参照）。

4.7.2 企業活動と GDP

企業活動は経済生産力の源であり、GDP はその総体である。個々の企業活動がどのように営まれ、他の企業とどのようにかかわっているかを解明することは経済のみならず、政治・行政を進めるうえでも重要な課題である。グローバル化した現在では、国際的にも重要である。

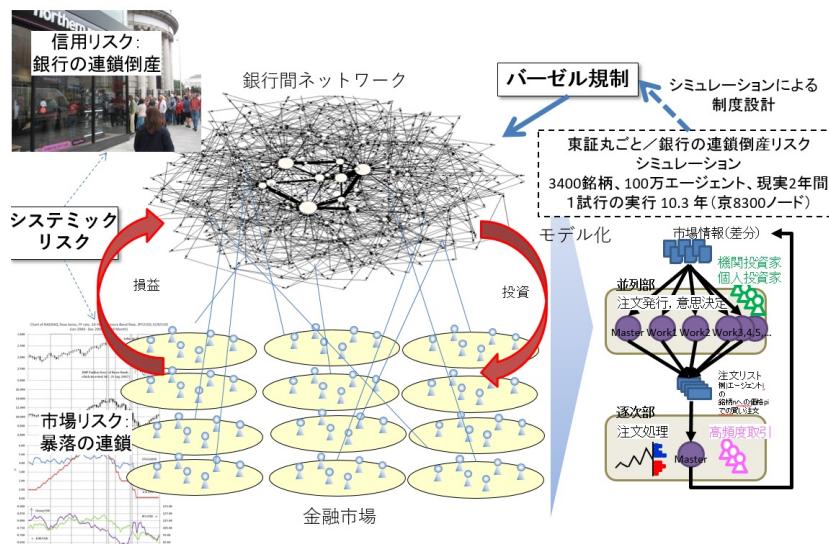


図 4.25 証券取引と信用リスクのシミュレーション研究

企業活動のデータを解析した結果得られた、企業間取引の取引高情報をも含めたグラフを使った GDP シミュレーションがこれまでに進められてきた。中小も含めた 200 万社程度をノードとするグラフを使って、例えば、図 4.26 に示すような災害予測がなされた。これは平成 28 年 4 月に発生した熊本地震が及ぼす経済的な被害を予測した例である。被害を受けた地域の事業が止まったり低減したとしてその影響が企業間取引のグラフ上、どのように及ぶか解析して得られたものである。

現在、こうした経済活動シミュレーションをさらにすすめて経済変動のダイナミクスを解明し、また景気リスクを解明するため、個々の企業活動シミュレーションモデルの高度化が研究されている。その中には、個々の企業の地域社会との関係、たとえば人口構成から雇用できる労働者や期待される消費者を推定し、成長過程をモデル化するといった関係がある。企業活動の時系列データの解析手法の高度化も試みられている。また全世界レベルの企業活動も考慮したシミュレーションモデルの開発も進められている。

こうした研究では、相当数の経済シナリオ・災害シナリオに対するシミュレーションを、数百万ノード規模の企業間取引グラフモデルを使って系統的に実施する必要がある。大規模並列の京・ポスト京スーパー・コンピュータによりその可能性が広がると期待される。

4.7.3 交通・人流

効率的で安全な交通・物流は経済活動のみならず現代社会に不可欠である。上に挙げた企業活動も、交通と密接に関わっている。船による水運がかつては物流の柱であり、大都市では河川・運河を使った物流ネットワークが整備されていたが、今日では数万トン単位の数千キロメートル以上の長距離輸送で活躍している。現在では鉄道・自動車のウエイトが大きくなっており、特に高付加価値の物資では航空が活用されており、多様化している。物流に加えて人の移動も激しくなっており、1 日に 10 万人単位の旅客を運ぶことができる新幹線システムや高速道路を使った旅客用自動車、6000Km を一晩で結ぶ航空機など旅客輸送システムの多様化も日進月歩である。

こうした交通システムに加えて、都市圏では歩行移動の重要性も増している。駅やバス停までの移動、

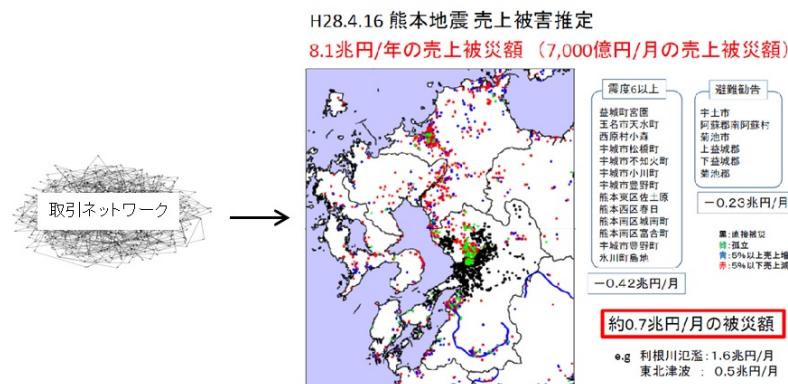


図 4.26 地震による被害地域から企業間取引ネットワークに基づく経済被害予測（東工大・高安美佐子博士による）



図 4.27 自動車交通・歩行者のシミュレーション

ターミナル駅での乗り換え、イベント他枚挙にいとまがない。多数の歩行者が遅滞なく安全に移動できるようにすることは、バリアフリー化や非常時の避難誘導と合わせて重要な課題である。

自動車交通や歩行者は、鉄道に比べて経路やスケジュールに自由度が大きく、気候・天候・経済情勢によりおおきな変動がある。広域地震や津波・火山噴火といった非常時の避難では、多くが一方向に集中するため、効率化安全化は容易ではない。一方、移動シナリオのひとつひとつをシミュレートすること自体は比較的容易で、個々のエージェントのモデルが行う判断も比較的簡単である。このため大規模並列のスーパーコンピュータは、想定シナリオをできる限り網羅し、想定外を低減させる目的に特に有用となる。現在、図 4.27 に示すように、街角・交差点での交通から大規模避難まで、多岐にわたる交通シミュレーションへのスーパーコンピュータの活用が進められている。

4.7.4 モデル評価と実行管理

これまでにも述べたように社会シミュレーションでは、シミュレーションモデルがどのようなふるまいをするのかを評価することと、数多くのシナリオやパラメータでシミュレーションを実行することが特に重要で、スーパーコンピュータが特に有用と考えられる。

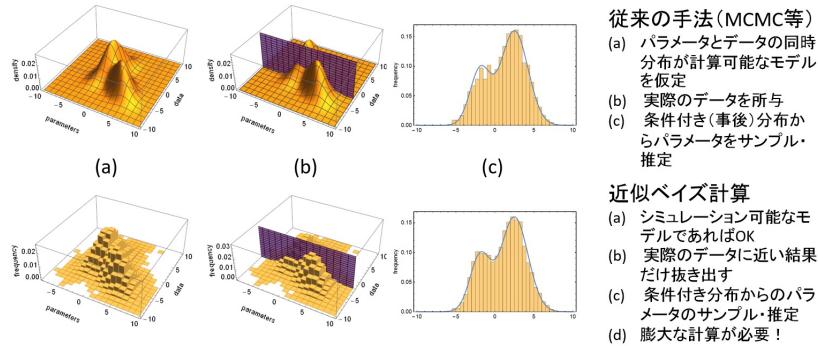


図 4.28 近似ベイズ計算によるモデル推定

モデル評価では、できるだけ多くのパラメータを網羅的に探索し、探索した範囲でのモデルのふるまいを使って行うことになる。知っている情報から、見ていないところも含めて推定・評価せざるを得ないという意味で、ベイズ統計を活用することになる（図 4.28）。この意味で、いわゆる人工知能技術の活用が期待される。

現在のそして次世代のスーパーコンピュータでは数十万から数千万並列でのパラメータ・シナリオ探索まで可能となる。これらはただ独立に実行するだけに限らず、それまでの実行結果をみて次のパラメータ・シナリオを決めるという意味で、相互に連携した1つのシミュレーションでもある。しかしこの数になると1つ1つについて、ジョブ投入、実行待ち、結果の参照と繰り返すことは現実的ではない。そこで、シミュレーションを行うプログラムと実行結果を評価して次のパラメータ・シナリオを決めるプログラムとを与えて、計算機資源の許す限り、探索を進める汎用アプリケーションの開発が進められている。これまでに、ネットワークを介したホストコンピュータを使って数百万パラメータ程度までを実行・管理するアプリケーション・OACISと、実行・管理・パラメータ決定までをまとめて大並列計算機に投入することにより、数億からさらに多くのパラメータを探索するアプリケーション・CARAVAN（図 4.29）が開発され、社会シミュレーションで活用されている。

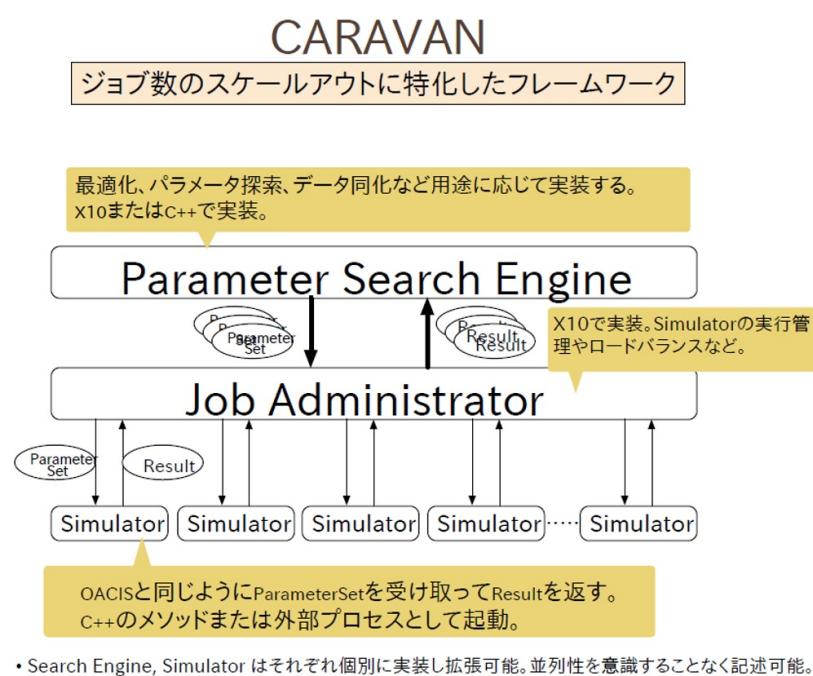


図 4.29 多数のシナリオ・パラメータを系統的に実行し管理するアプリケーション CARAVAN

4.8 脳科学・人工知能

本章では、2.8.3に記載した内容について、その詳細および呈示した数値の根拠について記載する。

4.8.1 脳科学

本章では、

- 脳神経回路シミュレーションの概要
- 脳部位・ニューロンモデルの違いによる計算量・計算手法の違い
- アクセラレータや専用ハードウェアの利用
- 脳神経回路シミュレーションにおける代表的なアプリケーション
- 計算量の見積もり

を説明する。

4.8.1.1 脳神経回路シミュレーションの概要

神経回路シミュレーションはプログラム4.1で行われる[1]。

ソースコード4.1 神経回路シミュレーションの擬似コード

```

1 for t : 時間にに関するループ {
2   for i : ニューロンに関するループ {
3     ニューロンiへのシナップス入力の計算();
4   }
5   for i : ニューロンに関するループ {
6     ニューロンiの膜電位の計算();
7     ニューロンiが発火したかどうかの判定();
8     スパイクの伝播();
9   }
10 }
```

ニューロン毎に、(1) シナップス入力の計算、(2) 膜電位の計算、(3) 発火判定、(4) スパイク伝播、を順番に行う。

(1) シナップス入力の計算

ニューロンは別のニューロンからシナップスという構造を介して信号を受け取る。入力を送るニューロン(シナップス前細胞)の軸索終末が、入力を受け取るニューロン(シナップス後細胞)の樹状突起に結合^{*3}し、シナップス前細胞からは化学物質が分泌され、シナップス後細胞の受容体がそれを受け取る。

^{*3} 実際には、物理的に結合しているのではなく隙間がある(シナップス間隙)。

前者の計算は具体的には式 (4.4) に従う。時刻 t におけるニューロン i へのシナプス入力は、

$$I_{\text{syn}i}(t) = g_{\text{syn}i}(t) (v_i(t) - E_{\text{syn}}) \quad (4.4)$$

と書ける。ここで $I_{\text{syn}i}(t)$ はシナプス入力によって流れる電流、 $g_{\text{syn}i}(t)$ はシナプスコンダクタンス、 $v_i(t)$ は膜電位、 E_{syn} は反転電位と呼ばれる定数である。興奮性シナプスの場合 E_{syn} は通常 0 mV、抑制性シナプスの場合は $-75 \sim -80$ mV の値が用いられる。シナプスコンダクタンスは以下のように計算される。

$$g_{\text{syn}i}(t) = \bar{g}_{\text{syn}} \sum_j w_{ij} \sum_{f_j} \kappa(t - t^{(f_j)}) \Theta(t - t^{(f_j)}) \quad (4.5)$$

ここで \bar{g}_{syn} はピークコンダクタンス、ここで j はニューロン i に対するプレ側のニューロンの添字、 w_{ij} はシナプス結合の強度、 f_j はニューロン j のスパイク、 $t^{(f_j)}$ はそのスパイクがニューロン i に到達した時刻、 $\kappa(t)$ はスパイクを電位に変換するためのカーネル、 $\Theta(t)$ はヘビサイド関数である。 $\kappa(t)$ は最も簡単な場合は時定数 τ を持つ指数関数:

$$\kappa(t) = \exp(t/\tau) \quad (4.6)$$

が用いられる。より一般的には、2つの指数関数を用いて立ち上がりと減衰を記述する

$$\kappa(t) = \exp(t/\tau_{\text{decay}}) - \exp(t/\tau_{\text{rise}}), \quad (\tau_{\text{rise}} < \tau_{\text{decay}}) \quad (4.7)$$

や、 $\tau_{\text{rise}} = \tau_{\text{decay}} = \tau$ とした

$$\kappa(t) = (t/\tau) \exp(t/\tau) \quad (4.8)$$

が用いられる。

(2) 膜電位の計算

外部からの入力を得て、各ニューロンの状態を表す膜電位をニューロン毎に独立に計算する。モデル化の抽象度に応じて様々な記述が可能であるが、代表的なものを以下に記載する。

(a) Hodgkin-Huxley モデル

Hodgkin-Huxley モデルはヤリイカの巨大軸索のデータにもとづいて作成された最初のニューロンモデルであり、イオン電流の流れを具体的に記述したモデルである。式 (4.9) の 4 式からなる常微分方程式に従う。

$$\begin{aligned} C \frac{dV}{dt} &= -\bar{g}_{\text{leak}} (V(t) - E_{\text{leak}}) - \bar{g}_{\text{Na}} m^3 h (V(t) - E_{\text{Na}}) - \bar{g}_{\text{K}} n^4 (V(t) - E_{\text{K}}) + I(t) \\ \frac{dm}{dt} &= \alpha_m (V(t)) (1 - m(t)) - \beta_m (V(t)) m(t) \\ \frac{dh}{dt} &= \alpha_h (V(t)) (1 - h(t)) - \beta_h (V(t)) h(t) \\ \frac{dn}{dt} &= \alpha_n (V(t)) (1 - n(t)) - \beta_n (V(t)) n(t) \end{aligned} \quad (4.9)$$

ここで、 C は膜のキャパシタンス、 \bar{g}_{xxx} はイオン電流のコンダクタンス、 E_{xxx} は反転電位、 $I(t)$ はシナプス入力を含む外部入力の電流、 m, n, h はイオンの流入・流出を制御するゲート変数である。

ヤリイカの巨大軸索でのパラメータは $C = 1\mu F/cm^2$, $g_{\text{leak}} = 0.3mS/cm^2$, $E_{\text{leak}} = 10.6mV$, $g_{\text{Na}} = 120mS/cm^2$, $E_{\text{Na}} = 115mV$, $g_{\text{K}} = 36mS/cm^2$, $E_{\text{K}} = -12mV$ である [1]。 $\alpha_{xxx}(t)$, $\beta_{xxx}(t)$ はそれぞれゲートの開閉を表す式であり、同様にヤリイカの巨大軸索の場合は

$$\begin{aligned}\alpha_m(v) &= \frac{2.5 - 0.1v}{\exp(2.5 - 0.1v) - 1} \\ \beta_m(v) &= 4 \exp(-v/18) \\ \alpha_h(v) &= 0.07 \exp(-v/20) \\ \beta_h(v) &= \frac{1}{\exp(3 - 0.1v) + 1} \\ \alpha_n(v) &= \frac{0.1 - 0.01v}{\exp(1 - 0.1v) - 1} \\ \beta_n(v) &= 0.125 \exp(-v/80)\end{aligned}\tag{4.10}$$

である [1]。

Hodgkin-Huxley モデルはスパイクを生成するためのイオン電流である Na, K 電流を記述しており、スパイクの波形を忠実に再現することが可能である。スパイクの生成は 1 ミリ秒程度の非常に短時間で行われるため、時間刻みを数十マイクロ秒程度に小さくする必要がある。

一方、スパイク生成以外の部分については膜電位の変化は比較的遅いため、1 ミリ秒程度の時間刻みでもうまく動作する場合が多い。このため、時間刻みを動的に調整する手法が用いられる。あるいは、次に記載する積分発火型モデルを利用する。

(b) 積分発火型モデル

Hodgkin-Huxley モデルはスパイク生成を再現するため、時間刻みを小さく取る必要がある。一方、スパイク生成以外の部分については膜電位の変化は比較的遅いため、1 ミリ秒程度の時間刻みでもうまく動作する場合が多い。このため、スパイクが生成される詳細な機構と言うよりは、例えば大規模ネットワークにおいてスパイクがどのように交換されネットワークとして機能するのかといった問題を取り扱う場合は、スパイク生成の部分を簡略化した積分発火型モデルが用いられることが多い。

最も簡単な積分発火型モデルは以下の式で記述される。

$$\begin{aligned}C \frac{dv}{dt} &= -g_{\text{leak}}(v(t) - E_{\text{leak}}) + I(t) \\ v(t) > \theta &\Rightarrow \text{スパイク発射}, v(t) = v_{\text{reset}}\end{aligned}\tag{4.11}$$

ここで、Hodgkin-Huxley 方程式と同様に、 C は膜のキャパシタンス、 g_{leak} はリークコンダクタンス、 $v(t)$ は時刻 t での膜電位、 E_{leak} はリークの反転電位、 $I(t)$ は外部入力であり、新たに閾値と呼ばれる定数 θ 、リセット電位と呼ばれる定数 v_{reset} を導入する。膜電位が閾値を超えると、その時刻でニューロンはスパイクを発射したと見なし、かつ膜電位をリセット電位に強制的にセットする。これにより、スパイク発射とその後の過分極を模擬する。

両辺を g_{leak} で割り $\tau = C/g_{\text{leak}}$ と置くと、元の式を

$$\tau \frac{dv}{dt} = -v(t) + E_{\text{leak}} + I(t)/g_{\text{leak}}\tag{4.12}$$

と書くことができる。これは時定数が τ である通常の一次遅れ系に対応する。

最も簡単な積分発火型モデルは、一定の外部入力に対しては一定の間隔でスパイクを発射し続けるだけのダイナミクスしか持たないが、実際のニューロンは様々な種類のイオンチャネルや Ca^{2+} 依存型のチャネルを持ち、非常に複雑な発火パターンを示すことが知られている。Hodgkin-Huxley モデルでもそのようなチャネルを導入することで再現可能である。積分発火型モデルでは、閾値を時間依存にする、微分方程式ではなく積分方程式に書き直し適当な非線形カーネルを導入する (Spike Response Model, SRM) 等のアドホックな手法により再現可能である。一方、Hodgkin-Huxley モデルよりは簡単であるが、単一ニューロンの多様なダイナミクスを自然に再現できるモデルとして、次の Izhikevich モデル [2] が存在する。

(c) Izhikevich モデル

Izhikevich モデル [2] は膜電位の他にもう一つ内部パラメータを持つ、以下の式で記述される。

$$\begin{aligned} C \frac{dv}{dt} &= k(v(t) - v_r)(v(t) - v_t) - u(t) + I(t) \\ \frac{du}{dt} &= a(b(v(t) - v_r) - u(t)) \\ v(t) \leq v_{\text{peak}} &\Rightarrow v(t) = c, \quad u(t) = u(t) + d \end{aligned} \quad (4.13)$$

ここで、 $u(t)$ が内部パラメータであり、時刻 t での値を表す。 k, a, b, c, d は定数、 $v_r, v_t, v_{\text{peak}}$ も定数である。 v_r, v_t が膜電位の上限・下限を設定し、 v_{peak} が閾値を設定する。 k, a, b, c, d を変更すると様々なダイナミクスを再現することができる (図 4.30)。

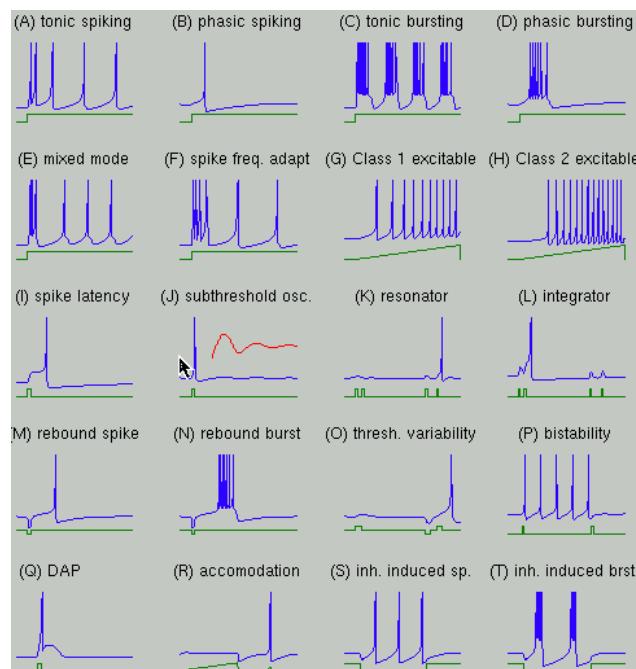


図 4.30 Izhikevich モデルのダイナミクスの例。画像は Simulation Platform (http://sim.neuroinf.jp/modules/xoonips/detail.php?item_id=67) から入手した。

(d) マルチコンパートメントモデル

上述の Hodgkin-Huxley モデル、積分発火型モデル、Izhikevich モデルは全て、ニューロンの形状を無視し、仮想的な点と考える。一方、実際のニューロンは複雑に広がる樹状突起や長距離を伸展する軸索など、特徴的な空間形状を有している。このような空間形状を考慮したモデルをマルチコンパートメントモデルと呼ぶ [3]。

マルチコンパートメントモデルは、(1) ニューロンの形状を十分短く電気的に等価なケーブルに分割し (コンパートメント)、(2) 隣接するコンパートメントを抵抗で接続したモデルである (図 4.31)。必要に応じて各コンパートメントにイオンチャネルやシナプスを配置する。例えば樹状突起には興奮性シナプスを、細胞体には抑制性シナプスを、軸索にはスパイク生成に必要な Na, K チャネルを割り当てる。

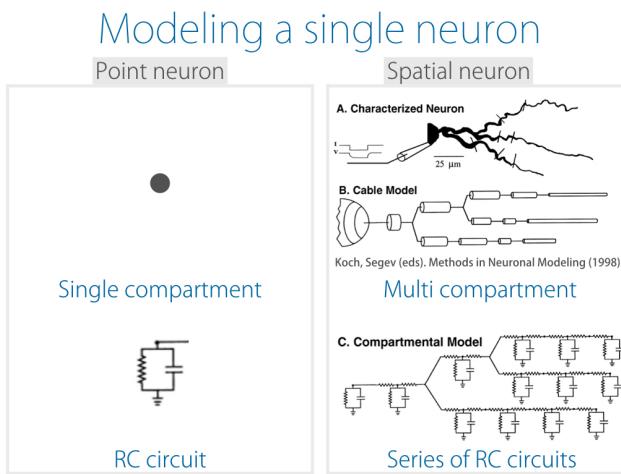


図 4.31 点モデル (左) とマルチコンパートメントモデル (右) の差異。

定式化は以下のように行う。電気的に均一な一次元のケーブルを考えると、ケーブル上の点 x での電位は以下の拡散方程式 (ケーブル方程式) で記述される。

$$C \frac{\partial v}{\partial t} = -g_{\text{leak}} (v(t, x) - E_{\text{leak}}) + \frac{a}{2R} \frac{\partial^2 v}{\partial x^2} + I(t, x) \quad (4.14)$$

ここで C は膜のキャパシタンス、 g_{leak} はリークコンダクタンス、 $v(t, x)$ は時刻 t 、位置 x における膜電位、 E_{leak} 、 a はケーブルの直径、 R は長軸方向の抵抗、 $I(t, x)$ はその場所への外部電流である。時間について後退差分、空間について 2 次の中心差分を取ると、

$$-\sigma v(t+\Delta t, x-\Delta x) + (1+2\sigma+\gamma)v(t+\Delta t, x) - \sigma v(t+\Delta t, x+\Delta x) - g_{\text{leak}}E_{\text{leak}} = -v(t, x) + I(t, x) \quad (4.15)$$

となる。ここで $\sigma = a\Delta t / 2RC(\Delta x)^2$ 、 $\gamma = g_{\text{leak}}\Delta t / C$ である。これを陰解法で求解していく。分岐がある場合も同様の定式化を行えば良い。

(3) ニューロンの発火の判定

膜電位の値がある閾値に達したことをもって、そのニューロンは発火したと考える。

(4) スパイク伝播

ニューロンが発射したスパイクは、通常 1 ミリから数十ミリ秒の遅延を持って他のニューロンに伝播

する。通常膜電位の計算に用いる時間刻みはそれより短いため、ニューロンが発火したことを持って直ちにスパイクを伝播しなくてもよく、その遅延に応じた時間スケールでまとめてスパイクを伝播すればよい。このように複数の時間スケールを考慮することで、通信と膜電位の計算をオーバーラップし、計算時間を削減することが可能となる。

マルチコンパートメントモデルは、細胞内でどのように電流が流れるのかをシミュレートするときに主に用いられる。例えば、樹上突起上の異なる場所についているシナプスの電流がどのように統合され細胞体へと流れるのかといった詳細なシミュレーションを行う際に必要となる。

点モデルは細胞内の詳細なダイナミクスというよりは、細胞同士がシナプスを介して結合し、ネットワークとしてどのように振る舞うのかをシミュレートする際に主に用いられる。常微分方程式の数値計算は通常のルンゲクッタ法等を用いて行われる。高度な数値解法が用いられる場合は稀である。

マルチコンパートメントモデルでネットワークを構成することも当然可能であるが、計算量が膨大になる。特に、偏微分方程式を解くことになるため、この場合は数値不安定性を回避するために陰解法、例えば陰的オイラー法やクランクニコルソン法が用いられる。その際に連立方程式を解く必要があり、NEURON [4] や GENESIS [5] はガウスの消去法を用いている。ニューロンの計算では係数行列は必ず正定値対称かつ疎行列になるため、新興のシミュレータでは共役勾配法を用いるものもある。

4.8.1.2 アクセラレータや専用ハードウェアの利用

グラフィクスプロセッシングユニット (GPU) は計算を加速するためのデバイスであり、神経回路シミュレーションにおいても利用されている。この分野のスタンダードな神経回路シミュレータである NEURON[4] は実験的に GPU をサポートしており、新興の神経回路シミュレータはいずれも GPU サポートをうたっている [6]。個々のニューロンを GPU の個々のスレッドに割り当て、スレッド毎にニューロンの計算を行う並列化を行っている。

汎用のシミュレータだけでなく、単一の脳部位のシミュレーションをおこなうためのプログラムも GPU で加速されている。例えば大脳基底核 [7] や小脳 [8, 9] のモデルは GPU で加速され、解剖学・生理学に比較的忠実なシミュレーションがリアルタイム^{*4}で実行可能である。後者は複数枚の GPU を利用し、100 万ニューロンからなる非常に大規模なシミュレーションを実現している。

Field-Programmable Gate Array (FPGA) も同様に用いられている。一般的なスパイキングネットワークのシミュレーション [10] や、小脳の神経回路モデルの実装 [11] がある。

PEZY Computing 社が開発している PEZY-SC プロセッサも利用されている。理化学研究所 情報基盤センターの「菖蒲」(図 4.32) は 320 ノード 1280 PEZY-SC チップからなる液浸冷却のスパコンであるが、全ノードの 5 分の 4、1008 チップを利用して、10 億ニューロンからなる小脳神経回路のリアルタイムシミュレーションが既にできている [12, 13]。これはネコ一匹分の全小脳に相当する規模である。

^{*4} ここでは 1 秒間分の神経活動のシミュレーションが現実世界の 1 秒内で完了することと定義する。



図 4.32 理研情報基盤センターの「菖蒲」。画像は http://www.riken.jp/pr/topics/2016/20160620_2/ より取得。

神経回路シミュレーションを行うための専用チップ(ニューロモルフィックチップ)の開発も進められている。

SpiNNaker [14] はマンチェスター大が開発しているニューロチップである(図 4.33)。1 個の SpiNNaker チップは 18 個の ARM968 コア、128MB の SDRAM、プロセッサ間でデータを交換するためのルータで構成されており、各コアには 64KB のデータメモリが搭載されている。このチップを 48 個並べて 1 枚の SpiNNaker ボードを構成し、さらに SpiNNaker ボードを多数並べて SpiNNaker システムを構成する。ボードのネットワークインターフェースは 100Mb/s の Ethernet である。1 SpiNNaker コアで約千個のスパイキングニューロン、約百万個のシナプスからなる神経回路をシミュレートできる。SpiNNaker ボードを 1200 枚からなる 19 インチラック 10 台で構成したシステムでは約 10 億ニューロンのシミュレーションができ、その際の消費電力は約 75KW である。プログラムは PyNN [15] で実装する。ニューロンモデルは Izhkevich モデルまたは積分発火型モデルが利用できる。空間形状を持つニューロンモデルは利用できない。

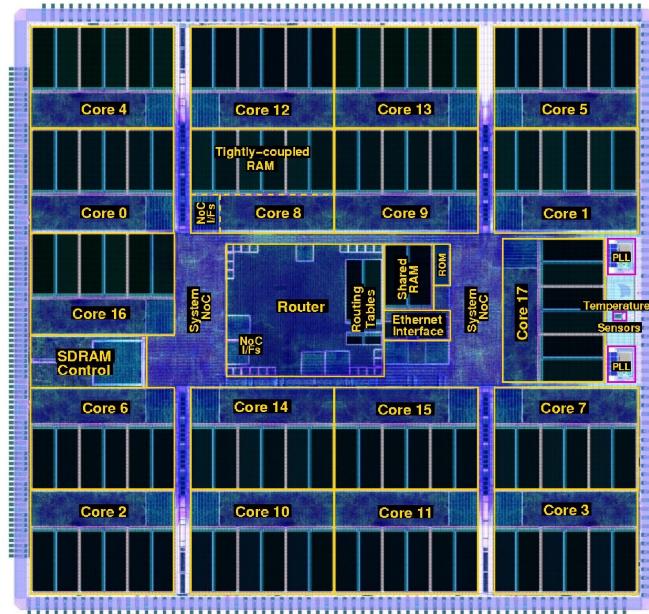


図 4.33 SpiNNaker チップ。画像は <http://apt.cs.manchester.ac.uk/projects/SpiNNaker/SpiNNchip/> より取得。

TrueNorth [16] は IBM が開発しているニューロチップである。1 チップは 4096 個のコアからなり、各コアには約 10KB のローカルメモリを備えている。1 コアで 256 個のスパイキングニューロンと 65536 個のシナプスをシミュレートし、コア間でスパイクをルーティングする。ニューロンモデルは積分発火型モデルを単純化したものであり、シナプスの計算も単純化されている。時間ステップは 1 ミリ秒であり 1KHz で動作する。TrueNorth の本質的な制約として、シナプス結合を動的に変更できない点ある。つまり学習ができない。学習は別のシステムで行う必要がある。

4.8.1.3 脳神経回路シミュレーションにおける代表的なアプリケーション

代表的なアプリケーションとして、(1) シングルコンパートメントモデルのためのシミュレータ NEST、(2) マルチコンパートメントモデルのためのシミュレータ NEURON、(3) 小脳神経回路に特化したシミュレータ Realtime Cerebellum、をそれぞれ紹介する。

1. NEST [17]

ドイツのユーリッヒ研究所のマーカス・ディーズマン氏とアビゲイル・モリソン氏らの主導するグループによって、1993 年から開発が行われている神経回路シミュレータ。デスクトップコンピューターからスーパーコンピュータまで利用できる神経回路シミュレーターで、ソースコードが公開されていて、誰でも自由に利用することができる。数十種類の神経細胞モデルやシナプスモデルが利用できるようになっており、ユーザーによるモデルの拡張にも対応している。自動並列化に対応しており、MPI プロセス並列と、OpenMP、pthread などのスレッド並列を利用可能で、それらを組み合わせたハイブリッド並列にも対応している。神経細胞やシナプスのデータ構造のメモ

リ消費効率化がなされており、京コンピュータ上で NEST を用いて、17 億神経細胞と、10 兆個のシナプス結合からなる、大規模実行な皮質神経回路モデルの 1 秒分のシミュレーションを、約 40 分で実現した実績を持っている。

2. NEURON [4]

NEURON はデューク大学 Michael Hines, John W. Moore, and Ted Carnevale らによって 1980 年代に開発が始まり、現在も拡張されつづけている神経細胞シミュレータである。その核は形態をもつ神経細胞内の電気伝導を cable 方程式で計算することであり、MODL と呼ばれる形式でチャネルの動態を記述できるようになることで汎用的な神経シミュレータになった。ソースコードは公開されていて、膨大な量のイオンチャネルモデル、神経回路モデル、神経細胞モデルが ModelDB などで公開されている。2005 年より Blue BRAIN Project が始まって以来いくつかの並列化実装が試みられて次第に大規模並列が可能になってきており、日本で開発された京向けのチューニング済みの実装、NEURON K+ [18] では 20 万コアを用いた 80 万ニューロンの神経回路に対して 187TFLOPS の性能が達成されている。

3. Realtime Cerebellum [8]

アクセラレータを利用する代表的なアプリとして、上述の人工小脳を挙げる。CPU 版、マルチ GPU 版、FPGA 版、PEZY-SC 版と様々なバージョンが存在しており、アクセラレータの種類によらず加速に成功している。特に最新の PEZY-SC 版では理研情報基盤センターの「菖蒲」を利用し、252 ノード、1008 PEZY-SC チップを用いて 10 億ニューロンからなる人工小脳のリアルタイムシミュレーションに成功している。その際の実行効率は 2.6%、約 70 TFlops となっている。

4.8.1.4 計算量の見積もり

脳神経系シミュレーションにおいては、まず長期的な目標として、詳細な神経細胞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についての必要な性能の見積もりを行う。次に、2020 年以降に実現可能な二つのモデルとしての単純な神経細胞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、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について性能の見積もりを行う。ヒトの脳の場合、大脳皮質と小脳が 99% の神経細胞数を占め、全脳シミュレーションに必要な計算リソースについても、大脳皮質と小脳がそのほとんどを占める。大脳皮質と小脳皮質では、神経回路構造、神経細胞の性質、結合数などで大きな違いがあり、シミュレーションにおける要求性能が異なる。そこで、全脳規模のシミュレーションのより正確なプロファイルを取るため、大脳皮質と小脳の評価をそれぞれ行い、それらをもとに全脳規模のシミュレーションの見積もりを行う。

単純な神経細胞モデルとシナプスモデル

単純モデルとして神経細胞モデルに Leaky Integrate-and-Fire (LIF) neuron モデルを用いた場合を考える。LIF は、1 ステップで 5 FLOP [19] かかる。シナプスには指数減衰型のモデルを用いて、1 ステップで減衰の計算に更に 1FLOP かかる。シナプス可塑性は詳細なモデルと同様とする。

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、神経細胞とシナプスモデルに関

する演算とデータ量が異なる。生物学的 1 秒分の計算に必要な演算量は、大脳皮質は 0.5PFLOP、小脳は 2PFLOP、全脳の演算量は 2.5PFLOP となる。BF 値は～1.、ネットワークバンド幅の BF 値は $8\text{TB}/2.5\text{PFLOP} = 3 \times 10^{-3}$ となる。

詳細モデルな神経細胞モデルとシナプスモデル

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 [19] に基づく。

コンダクタンスベースのシナプスモデルの計算は、Matrix exponential 法 [4] を用いると、1 ステップに 5FLOP かかる。シナプス可塑性は、時間スケールの異なるものがいくつもあり、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。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。

ヒト全大脳皮質モデル

大脳皮質は様々な異なる処理を行う領域に分かれているが、各領域は同様の構造をしていて、層間の結合パターンについては、他の領域間と類似した規則性を持っている。また、大脳皮質が形成する結合は、約半数が同皮質領域内で形成され、残りの半数は外部の脳領域との間で形成されると言われている。これらの性質は、大脳皮質領域全体の神経回路モデルを並列化する場合、ロードバランス、通信量の削減、メモリ消費量の削減を実現するうえで重要である。例えば、大脳皮質の同領域内の神経細胞は、並列計算機の近傍の計算ノードに配置することで、発火情報の通信の回数やレイテンシを削減することができる。また、大脳皮質全体の構造である、2 次元シート状の構造のトポロジーを保つようにして、並列計算機上にマップすることで自然に実現できる。

ヒト大脳皮質は 160 億個の神経細胞を持ち、1 個の神経細胞あたり 1000～10000 個のシナプスを持つ。以下では、5000 コンパートメントのマルチコンパートメントモデルを用い、1 神経細胞あたり 10000 個のシナプスを持つとして要求性能の見積もりを行う。1 神経細胞とその細胞へのシナプスの 1 ステップあたりの計算量は、約 3MFLOP ($600 \times 5000\text{FLOP} + 5 \times 5000 \times 4\text{FLOP} + 650\text{ FLOP}$) である。計算ステップを 0.1ms、神経細胞の発火頻度は平均 10Hz とするとき、ヒト大脳皮質全体では 50PFLOP となる。データ型として倍精度を用いたとき、必要なデータの主記憶メモリからの読み込みと書き出しの量は、合計で約 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 の読み出し/書き出しと、神経細胞定数 : 800KB の読み出し) になる。Byte/FLOP (BF) 値は、1.1 となる。ただし、キャッシュメモリを利用して、最小シナプス伝搬遅延時間 1ms の間、主記憶メモリへのアクセスなしで計算を行う場合、BF 値はステップ数だけ減少し、0.11 になる。

計算ノード間のネットワークのデータ通信は、発火情報 (神経細胞の ID と発火時刻) の転送になる。平均発火頻度を 10Hz とし、最小シナプス伝搬遅延時間 1ms ごとにデータ転送を行うとする。脳内の結合パターンは、同一領域内で密、領域間では疎であるという性質がある。そこで、1 領域からデータを転送する領域の数は 10 程度として、転送量を見積もる。1 回の通信で発生する通信データ量は 2.56TB (1.6×10^{10} 細胞 $\times 10\text{Hz} \times 10/10000 \times 16\text{Byte} \times 100$ 計算ノード) となる。ネットワークバンド幅の BF 値は、

$2.56\text{TB}/500\text{PFLOP}$ (10ステップ) = 5×10^{-6} となる。

神経細胞、シナプスの変数や定数を格納するのに必要な主記憶メモリ量は、39PB になる。

仮に、2030年までに登場が見込まれる 10EFLOPS 級の計算機での実行を想定し、1秒間の神経活動のシミュレーションを 0.1 時間で完了でき、かつ 1000 ケース実行したとすると、総演算量は 530ZFLOP となる。

ヒト全小脳モデル

ヒト小脳の顆粒細胞は 700 億個で脳の神経細胞の大部分を占め、小脳シミュレーションの計算でほとんどの計算リソースが顆粒細胞で消費される。1 個の顆粒細胞は 10 個程度のシナプスを持つ。計算ステップを 0.1ms としたとき、1 頂粒細胞とその細胞へのシナプスの 1 ステップあたりの計算量は、約 0.3MFLOP ($600 \times 500\text{FLOP} + 5 \times 500 \times 4\text{FLOP} + 650\text{ FLOP}$) である。ヒト小脳全体では 21PFLOP となる。データ型として倍精度を用いたとき、必要なデータの主記憶メモリからの読み込みと書き出しの量は、合計で約 0.3 MB (神経細胞変数 : 80 KB、シナプスコンダクタンス : 16 KB、シナプス可塑性 : 32 KB の読み出し/書き出しと、神経細胞定数 : 80KB の読み出し) になる。BF 値は 1.1 となる。ただし、大脳皮質同様に、キャッシュメモリを利用して、最小シナプス伝搬遅延時間 1ms の間、主記憶メモリへのアクセスなしで計算を行う場合、BF 値はステップ数分減少し、0.11 になる。

計算ノード間のネットワークのデータ通信は、大脳皮質同様、小脳領域内で密で、小脳と他領間では疎になる。そこで、小脳からデータを転送する領域の数は 10 度として、転送量を見積もる。また、顆粒細胞の発火頻度を 50Hz として見積もる。1 回の通信で発生する通信データ量は 5.6TB (7×10^{10} 細胞 \times 50Hz \times $10/10000 \times 16\text{Byte} \times 100$ 計算ノード) となる。ネットワークバンド幅の BF 値は $5.6\text{TB}/210\text{PFLOP} = 2.5 \times 10^{-5}$ となる。

神経細胞、シナプスの変数や定数を格納するのに必要な主記憶メモリ量は、11PB になる。

仮に、2030年までに登場が見込まれる 10EFLOPS 級の計算機での実行を想定し、1秒間の神経活動のシミュレーションを 0.1 時間で完了でき、かつ 1000 ケース実行したとすると、総演算量は 200ZFLOP となる。

詳細なヒト全脳モデル

上述のヒト大脳皮質とヒト小脳の性能を合算して、ヒト全脳モデルの要求性能とする。計算ステップあたりの演算量は、70PFLOP、生物学的 1 秒分のシミュレーションの場合、700EFLOP となる。BF 値は 1.1、ネットワークバンド幅は 1×10^{-5} となる。神経細胞、シナプスの変数や定数を格納するのに必要な主記憶メモリ量は、50PB になる。

仮に、2030年までに登場が見込まれる 10EFLOPS 級の計算機での実行を想定し、1秒間の神経活動のシミュレーションを 0.1 時間で完了でき、かつ 1000 ケース実行したとすると、総演算量は 730ZFLOP となる。

カイコガ全脳モデルリアルタイムシミュレーション

自然環境の中での脳の行動決定の振る舞いをみるには入力から出力までの一連の情報処理を取り扱う必要があり、これがリカレントなネットワークである以上最終的には全脳のシミュレーションが必要となる。この意味では昆虫脳のマルチコンパートメントはその神経数とシナプス数で現在京とポスト京のレベルの計算規模としてフィットしており、よい対象といえる。時空間的な情報を取り扱うにはマルチコンパートメント Hodgkin-Huxley モデルが必要であり、1000 ニューロン 1000 コンパートメントであれば

リアルタイムが京コンピュータ上で達成されている。ポスト京においてはすべての昆虫の全脳規模である100万ニューロンのリアルタイム化が期待される。また、昆虫脳においては同定ニューロンといわれる1つまたは少数のニューロンが重要に役割をもち、それが多数の匿名ニューロンと結びつくような構造になっている。このような神経回路の性質を再構築するには推定器が重要になる。非線形で複雑な微分方程式の時間発展を推定するのは進化的アルゴリズムを基盤としたものが有力である[20]。また、typicalな出力だけではなくて、様々な環境に対して確率的に行われることもある情報処理をシミュレーションにのせるなら統計的な振る舞いをもシミュレーションで行うことが必要である。すなわち stochastic multi-compartment Hodgkin-Huxley型シミュレーションである。これは例えばコンパートメントごとに動的な荷重をかけた乱数項を付加することによってなされる[21]。このような確率的要素を含む詳細シミュレーションを積み上げることによって匿名性と identified neuron が併存する神経回路の統計的な振る舞いを調べることができるようになる。最終的には、このような取り扱いにより神経回路のリアルタイムデータ同化すら可能となる[22, 23]。このようにポスト京時代の昆虫に代表される中規模の神経回路のシミュレーションを眺めば、昆虫全脳レベルのシミュレーションの高速化のみならずシミュレーションを使用した推定器や、分子過程の確率的な性質を考慮した神経回路の統計的な振る舞いが重要となる。

昆虫脳をモデルにしたマルチコンパートメントモデルの大規模神経ネットワークシミュレーションができるだけ早く効率的に行いたいという立場に立つとき、そのポイントはネットワーク性能よりコアの単体性能に存在する。現状では5000コンパートメントを仮定すると50GFLOPS程度の計算速度がリアルタイムシミュレーションには必要で、実行効率は10%を大きく超えることは困難である。細胞を分割して計算することは可能だが、現状では計算遅延が問題になって、並列度は極めて低い。1チップでの性能が1TFLOPS程度になれば、おおまかに1細胞は1チップで計算可能で、リアルタイムが可能となる(ネットワークBFを考えてホストCPUをもつアクセラレータタイプではないことを前提としている)。2020年にかけての高性能CPUの普及に並行して、そのようなマルチコンパートメントタイプの高速神経回路シミュレーションが次第に行われていくと考えられる。また、さらに10倍の単体性能があると1チップでstochastic multi-compartment simulationが行うことが可能となる。並列性能に関しては单一ニューロパイルである数百ニューロンのネットワークでは本質的には(ただし通信を含めたロードバランシングの問題は存在する)京のレベルのネットワークを考える限りは問題は生じないが、1万-100万ニューロンの規模ではメモリを含めて様々な問題が生じる。したがって、サイエンス的には<1000ニューロンの神経回路のシミュレーションが先に行われ、100万ニューロンについてはごく限られた場合にだけ行われることになるだろう。後述の推定器の問題もある。昆虫の触角葉(一次感覚中枢)、LAL(全運動中枢)などはこのレベルの神経回路で詳細にシミュレーションすることが可能である。これらをシミュレーションと実験・データベースと連携して行うことによって、生物脳の物理的性質を関連づけた形で感覚受容や運動パターン生成の理解が進むことが期待できる。また、次世代では10万-100万ニューロンのシミュレーションが日常的に行われることが期待できる。ここでは行動と関連づけた脳全体のループが詳細モデルで再現できるので、基本的な知能のメカニズムの仕組みが物理的詳細モデルのレベルで理解できる世界が訪れるだろう。

推定器について

進化的アルゴリズムによる1細胞の性質推定にはだいたい100世代100遺伝子もあれば足りる。京世代においては細胞分割は5-10ノード間程度くらいが適当で、そのなかで上記のジョブが走ることは様々

な細胞の性質を実験データと調和させて行うために可能となってきた。このような進化的アルゴリズムを用いた推定は HPC を用いて今後よく行われるようになっていくと考えられる。

また、同様なアルゴリズムを用いた回路推定は初期的見積もりでは N の細胞結合強度に対して $N \log N$ 程度の遺伝子数が必要である。500 細胞の神経回路で位置細胞の相手が 5 更に位置を 1 次元で表象して 10000 パラメータとしたときに 40000 遺伝子が必要な計算になる。並列度は 1/100000 のオーダーなのでこれはなんとかなる範囲であるが計算量が爆発する。統計的な手法などを用いて全体のパラメータ分布に制限をかけて自由パラメータは 100 パラメータ程度には押さえ込む必要がある。このためには様々な試行をする必要がある、FRINSTON のフリーエナジー原理や、標準脳マッピングの統計的解釈などにもとづき、統計的手法による研究の進展が期待される。

2020 年をすぎる時期を展望するならこのようなパラメータ推定を昆虫脳の全脳レベルで実験と平行しておこなう技術が考えられる。シングルコンパートメントの 1 細胞レベルではこれはすでに実現しているが [22, 23]、このような技術が神経回路上で適用できることによって、詳細シミュレーションにとって必要なパラメータがより詳細に明らかになり、さらに深い脳の理解とシミュレーションにつながるという正のフィードバックが期待できる。このようなことが可能なのは物理的詳細モデルを考えながら全脳のリアルタイムが可能であると考えれる昆虫脳に向いている。

4.8.2 人工知能

2.8.1 節で述べたように、人工知能の研究開発においてはそのすべてが計算機上での実行を想定して行われる。従って、HPCI 上でのアプリケーションをごくいくつかに絞る作業は困難を極める。検討の結果、以下の理由から今回は画像認識をモデルケースとし、深層学習アルゴリズムの学習及び実行についてその課題と計算を考察する。

- GPGPU の普及によって深層学習が普及したように、ほかの機械学習手法に比べて深層学習はより計算基盤への依存性がつよい。
- 一般論として、何らかの事物としてシンボル化された情報より、その元となったデータ—ここでいえば画像データ—の方がノイズと冗長性をもっており、その処理により大きな計算を必要とする。
- そのようなデータとしてテキストデータや音声データなども考えられるが、画像データのほうが一般的にチャネルやデータサイズが大きく、深層学習手法のネットワーク構造もより複雑になる傾向がある。
- 深層学習によってはじめて一般画像認識が人間並みの精度となり、画像認識を要素技術とするようなり高度な認識の研究やプロダクト開発が今後一層進むと考えられる。その際は学習だけではなく、学習結果をデータベース上の全画像に適用する計算も重要になる。

4.8.2.1 深層学習による画像認識器の学習

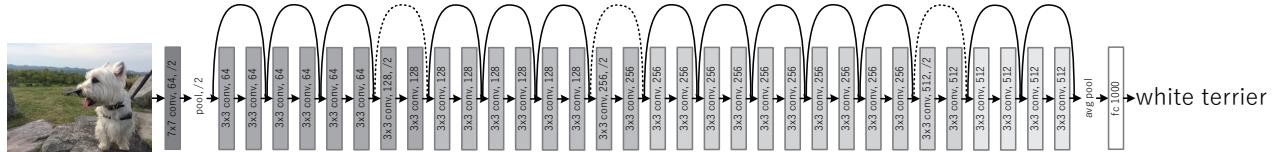


図 4.34 34 層 ResNet[24] のネットワーク構造。

深層学習によって画像認識がより高精度化されるという実験結果が世界中に広がったのは、コンピュータビジョンの国際会議で共催されたとあるコンペティションが契機であり、2012年のことであった。その当時は 7 層のレイヤーから構成されるニューラルネットワーク [25] であったが、2014 年には 40 層超 [26]、さらに 2015 年には 150 層を超えるようなネットワーク [24] が提案され、以降もより多くの層を持つニューラルネットワークが検討されている。これらは CNN (Convolutional Neural Network) と呼ばれるネットワーク [27] に属するもので、およそ 200×200 程度のサイズの画像に対して 3×3 や 5×5 のような小さなフィルターによる相関値を計算する Convolution 層が続くものである。出力層のごく近くのわずかな層のみは、2 層の任意のユニット同士がそれぞれ異なるような重みでつながっている全結合層となっている（図 4.34）。

ニューラルネットワークの各レイヤーについては基本的に、入力 $x \in \mathbb{R}^{d_x}$ に対して線形重み $W \in \mathbb{R}^{d_h \times d_x}$ をかけ、シグモイド関数など何らかの非線形な関数 σ で変換した結果 $h = \sigma(Wx)$ を次の層の入力としている。画像認識などでよく用いられる CNN でも系列データによく用いられる RNN (Recurrent Neural Network) やその亜種 [28] でも、基本的には同様に行列とベクトルの積による演算が繰り返されながら出力の層へと処理が移行していく。そして最終的には、認識したい事物のクラス数 d_c と同じ次元の層 y へと繋がる。また、パラメータの学習時には誤差逆伝播法によって出力の誤差が入力側へと順次伝播しながらパラメータを更新するが、その際も基本的には行列とベクトルの積が支配的である。

現在もっとも代表的な学習用データセットでは 100 万枚の画像で 1000 種類の物体を学習している。また学習対象は物体の種類にとどまらず、屋内外のシーンや形容表現、地名や人名などの固有名詞なども学習対象となっている。以降では学習するべき事物の種類を代表的な英英辞典の語彙とほぼ同一として 35 万種類とし、同等の割合でデータを用意した総計 3.5 億枚の画像を対象として検討を進める。

先ほど述べたように、画像認識における CNN の構造はより深いものへと発展している。一方、実はその演算量はさほど増えていない。そもそもより深いネットワークが提案される理由は、全結合層において隠れ層のユニット数 d_h を増やすよりも、Convolution 層の数を多くしたほうが、同じパラメータの数でより複雑な認識器を表現できるためである。つまり、少なくとも CNN の研究においては、パラメータ数を増やすずにその複雑性を増やす方法が探求されていると言える。実際、2012 年に出た 7 層の AlexNet[25] が 1024 枚の画像^{*5}を学習する際に 7.0TFLOP の計算を必要とするのに対し、40 層を超える GoogLeNet[26] においては 9.7TFLOP 程度でしかない。19 層の VGGNet[29] ではこれが 120TFLOP

^{*5} しばしばこうしたデータの部分集合をミニバッチと呼ぶ。

に増えてはいるが、ResNet[24]では34層で22TFLOPS、152層で69TFLOP程度と、再び計算量が抑えられている。そこで、このロードマップでは画像1024枚の学習に200TFLOPの演算を伴うCNNを仮定する。

深層学習を並列計算する際にはメモリ帯域がボトルネックとなり、さほど容易ではない。しかしながら最近では、ChainerやTensorFlowなどで100ノードを超える並列計算環境でもノード台数に線形な速度を達成しているという報告がある。そこで、一つのネットワーク構造の学習についての並列計算を1000ノードで行うことを検討する。またノードあたりの性能について考える。東京工業大学のTSUBAME3.0などでも念頭に置かれているように、深層学習においては半精度浮動小数点数での演算が重要である。これは深層学習において演算の精度が大して重要ではない一方、精度を落とせば一度により多くの演算が可能になるという期待によるものである。現在のGPGPUでも、例えばNVIDIA社のTesla P100は半精度で21.2TFLOPSの演算性能を持っている。そこで、人工知能分野としてはノード当たり100TFLOPSを仮定する。画像1024枚の学習に200TFLOPの演算を伴うCNNを仮定すると、1000ノードの並列化で1000のミニバッチを2秒ごとに学習できる計算になる。

まず演算性能について考える。このデータを5周して学習が収束するようなCNNだとすれば、のべ175万のミニバッチそれぞれで200TFLOPの演算を処理することになる。したがって、1つのネットワークにおいて演算量は350EFLOPとなる。これを1単位として、ネットワークの構造や最適化手法・種々のハイパーパラメータをチューニングするために、CNNの学習を何通りも試行することになる。ネットワーク構造を5通り、それぞれの最適化手法を5通り試したいと仮定し、さらにこの構造と最適化手法が2種類のハイパーパラメータを持つているとする。このハイパーパラメータが独立に10段階で設定されると考えると、合計で2500通りのCNNを学習することになるので、総演算量は875,000EFLOPである。これを1週間以内に終えるためには、16,000ノードで1.6EFLOPSが要求性能となる（つまり、16種のネットワークを同時に独立して学習させている）。

次に転送帯域について考える。現在のCNNでは、並列学習時にやり取りするのはパラメータの集合であり、これがAlexNetで249MB、19層のVGGNetで575MBほどである。このパラメータサイズが将来的に1GBとなったと仮定すると、1000ノードの並列化では1秒間に1TBのパラメータが往復するため、パラメータサーバまわりで2TB/sのネットワーク帯域が必要になる。またメモリ帯域に関しては、現在NvidiaのGPGPUにおけるBLAS実装cuBLASを用いてキャッシュを効率的に利用した行列ベクトル積を実行すると、ピーク性能1.4TFLOPSかつメモリ帯域288GB/sのTesla K40で1.2TFLOPSの性能を得ている。ピーク性能には到達していないというところがメモリ帯域律速であるためと仮定すると、100TFLOPSのノードにおいては24TB/s程のメモリ帯域が必要となる。256ピクセル四方のRGBからなる画像は、画素の値を256段階としたときに200kBほどになる。3.5億枚の画像を1000ノードで学習するのであれば、ノード当たり35万枚の画像計700GBをノードごとのメモリ空間として担保する必要がある。ほかの方法としてストレージから学習に必要なデータを都度ロードする場合は、ノードごとに1秒あたり0.5バッチ分の画像100MBをストレージから読みこむ必要があり、1000ノードごとに並列にストレージサーバが存在している想定で考えると、ストレージの周辺で100GB/sのIOが必要となる。

最後にストレージについてだが、主たるデータは3.5億枚の画像70TBであり、これに比べれば学習されたCNNのパラメータは無視できるサイズである。

4.8.2.2 深層学習による画像認識器の実行

画像認識器を深層学習によって獲得するだけではなく、この認識器を用いてさらなる研究や商用用途の計算を進めることが今後より重要となる。消費者生成コンテンツとして web 上に大量の画像や動画が時々刻々アップロードされており、すべてを一人の人間がすべて視聴するのは全くもって不可能となっている。そこで代わりに計算機が各コンテンツの内容を理解し、ユーザごとにコンテンツを推薦できれば、今後より膨大になっていくデータをより効果的に利活用できる。また、現在も世界中の官民で監視カメラの設置台数を増やしているが、それらは基本的に人による監視がメインである。たとえば東急電鉄では保有する 1200 両の列車に 1 両当たり 2 台のカメラを設置する予定で、2400 の映像を時々刻々認識する必要があり、計算機が代替できれば効果は大きい。

深層学習結果をもって認識する際にはフォーワード計算のみでよく、誤差を逆伝播する必要はない。19 層の VGGNet で 1024 枚の画像からなるミニバッチを認識するのに 19.6TFLOP、152 層の ResNet で 11.3TFLOP ほどなので、今後 40TFLOP ほどフォーワード計算に必要な CNN が主流になると仮定する。認識時にはデータ単位で容易に並列化が可能なので、100TFLOPS のノードごとに 1 秒で 2.5 個のミニバッチを認識すると解釈する。

まずデータ量について考えるたとえば、Instagram にアップロードされている画像は 400 億枚を超えており。近年では YouTube に 1 分間にアップロードされる動画の合計は 400 時間を超えている。動画 1 秒分ごとに 1 回内容を認識する場合、合計で 144 万回の認識を 1 分で計算しないと、認識されていないデータが増大し続けてしまう量である。2005 年 2 月の開設当時から線形でアップロード量が増加してきたと仮定すると、合計で約 4500 億秒の動画がアップロードされていることになり、2027 年には約 15,000 億秒に達する。最近 Google では 1 日に YouTube の動画 10 億本の音声を自動字幕化したと発表しているが、動画の長さが平均で 4 分とすれば、2400 億秒の動画を 1 日で処理していることに相当し、15000 億秒の動画の処理には約 6 日分の計算が必要となる。

処理すべきデータの量が分かったので、演算性能について考える。ここでは 15000 億秒分の動画の内容 1 秒ごとに 1 回認識する計算を 1 日で終える想定で演算性能を考える。15 億のミニバッチを処理するので、総計算量は 60,000EFLOP となる。1 秒あたりでは 0.69EFLOP が必要で、100TFLOPS のノード 6900 台に相当する。

次に転送帯域について考える。ノードごとに独立してストレージから画像を読み込み認識を行うので、ノード間のネットワークに関しては特に要求性能をもたない。メモリについては (ii) 節と同様の帯域が必要である。ストレージの IO で主に流れるのは画像データであり、1 秒あたり 17,000,000 枚ほどの画像をノード群に送るためには 3.4TB/s の帯域が必要となる。

最後にストレージについてだが、1 秒間に 17,000,000 枚相当の画像データを受信し、これを 1 枚 200kB として 1 日分蓄積させると約 290PB となる。

参考文献

- [1] Wulfram Gerstner and Werner Kistler. *Spiking Neuron Models: Single Neurons, Populations, Plasticity*. 2nd edition, 2002.
- [2] Eugene M Izhikevich. *Dynamical systems in neuroscience: the geometry of excitability and bursting*. MIT Press, 2007.
- [3] Christof Koch and Idan Segev, editors. *Methods in Neuronal Modleing: From Ions to Networks*. MIT Press, 2nd edition, 1998.
- [4] Nicholas T. Carnevale and Michael L. Hines. *The NEURON Book*. Cambridge University Press, New York, NY, USA, 1st edition, 2009.
- [5] James M. Bower and David Beeman. *The book of GENESIS - exploring realistic neural models with the GEneral NEural models SImulation system*. Springer, 1995.
- [6] JM Nageswaran, N Dutt, JL Krichmar, A Nicolau, and AV Veidenbaum. A configurable simulation environment for the efficient simulation of large-scale spiking neural networks on graphics processors. Vol. 22, No. 5-6, pp. 791–800, 2009.
- [7] J Igarashi, O Shouno, T Fukai, and H Tsujino. Real-time simulation of a spiking neural network model of the basal ganglia circuitry using general purpose computing on graphics processing units. *Neural Netw*, Vol. 24, No. 9, pp. 950–960, 2011.
- [8] Tadashi Yamazaki and Jun Igarashi. Realtime cerebellum: A large-scale spiking network model of the cerebellum that runs in realtime using a graphics processing unit. *Neural Netw*, Vol. 47, No. 11, pp. 103–111, 2013.
- [9] Masato Gosui and Tadashi Yamazaki. Real-world-time simulation of memory consolidation in a large-scale cerebellar model. *Front Neuroanat*, Vol. 10, p. 21, 2016.
- [10] Runchun Wang, Gregory Cohen, Klaus Stiefel, Tara Hamilton, Jonathan Tapson, and Andr van Schaik. An fpga implementation of a polychronous spiking neural network with delay adaptation. *Frontiers in Neuroscience*, Vol. 7, p. 14, 2013.
- [11] Junwen Luo, Graeme Coapes, Terrence Mak, Tadashi Yamazaki, Chung Tin, and Patrick Degehaar. Real-time simulation of passage-of-time encoding in cerebellum using a scalable fpga-based system. *IEEE Transactions on Biomedical Circuits and Systems*, Vol. 10, No. 3, pp. 742–753, 2016.
- [12] 日経テクノロジー online. スパコン上に猫の小脳を再現、リアルタイムで動作, 6月13日 2016. <http://techon.nikkeibp.co.jp/atcl/news/16/061302534/>.
- [13] マイナビニュース. ネコの小脳を shoubu スパコンで実現, 6月 20 日 2016. <http://news.mynavi.jp/series/numericalbrain/001/>.
- [14] Steve B Furber, Francesco Galluppi, Steve Temple, and Luis A Plana. The spinnaker project. *Proc IEEE*, Vol. 102, pp. 652–665, 2014.
- [15] Andrew P Davison, et al. Pynn: A common interface for neuronal network simulators. *Frontiers*

- in *Neuroinformatics*, Vol. 2, p. 11, 2008.
- [16] Paul A. Merolla, John V. Arthur, Rodrigo Alvarez-Icaza, Andrew S. Cassidy, Jun Sawada, Philipp Akopyan, Bryan L. Jackson, Nabil Imam, Chen Guo, Yutaka Nakamura, Bernard Brezzo, Ivan Vo, Steven K. Esser, Rathinakumar Appuswamy, Brian Taba, Arnon Amir, Myron D. Flickner, William P. Risk, Rajit Manohar, and Dharmendra S. Modha. A million spiking-neuron integrated circuit with a scalable communication network and interface. *Science*, Vol. 345, pp. 668–673, 2014.
- [17] Marc-Oliver Gewaltig and Markus Diesmann. Nest (neural simulation tool). *Scholarpedia*, Vol. 2, No. 4, p. 1430, 2007.
- [18] 宮本大輔, 加沢知毅, 神崎亮平. 昆虫嗅覚系全脳シミュレーションに向けて: スーパコンピュータによる大規模脳シミュレーションの現在とその展望. 人工知能: 人工知能学会誌, Vol. 30, No. 5, pp. 630–638, 2015.
- [19] EM Izhikevich. Solving the distal reward problem through linkage of stdp and dopamine signaling. *Cerebral cortex*, Vol. 17, No. 10, pp. 2443–2452, 2007.
- [20] 加沢知毅, 宮本大輔, 後藤晃彦, 朴希原, 福田哲也, 神崎亮平. 昆虫全脳シミュレーションへむけて. 日本神経回路学会誌, Vol. 22, No. 3, pp. 89–102, 2015.
- [21] P Orio and D Soudry. Simple, fast and accurate implementation of the diffusion approximation algorithm for stochastic ion channels with multiple states. *PLoS one*, Vol. 7, p. e36670, 2012.
- [22] Dimitrios V Vavoulis, Volkmar Straub, John A D Aston, and Jianfeng Feng. A self-organizing state-space-model approach for parameter estimation in hodgkin-huxley-type models of single neuron. *PLoS Comput Biol*, Vol. 8, No. 3, p. e1002401, 2012.
- [23] 李夏榮, 加沢知毅, ハウプトスティファン周一, 神崎亮平. 確率的手法によるカイコガ触角葉神経細胞の生物物理的膜特性の推定. Technical Report 382, 電子情報通信学会技術研究報告ニューロコンピューティング (NC), 2014.
- [24] Kaiming He, Xiangyu Zhang, Shaoqing Ren, and Jian Sun. Deep residual learning for image recognition. In *Computer Vision and Pattern Recognition*, pp. 770–778, 2016.
- [25] Alex Krizhevsky, Ilya Sutskever, and Geoffrey E Hinton. Imagenet classification with deep convolutional neural networks. In *Advances in Neural Information Processing Systems*, pp. 1097–1105, 2012.
- [26] Christian Szegedy, Wei Liu, Yangqing Jia, Pierre Sermanet, Scott Reed, Dragomir Anguelov, Dumitru Erhan, Vincent Vanhoucke, and Andrew Rabinovich. Going deeper with convolutions. In *Computer Vision and Pattern Recognition*, pp. 1–9, 2015.
- [27] Kunihiko Fukushima and Sei Miyake. Neocognitron: A new algorithm for pattern recognition tolerant of deformations and shifts in position. *Pattern Recognition*, Vol. 15, No. 6, pp. 455–469, 1982.
- [28] Sepp Hochreiter and Jürgen Schmidhuber. Long short-term memory. *Neural computation*, Vol. 9, No. 8, pp. 1735–1780, 1997.
- [29] Karen Simonyan and Andrew Zisserman. Very deep convolutional networks for large-scale image

recognition. In *International Conference on Learning Representations*, 2015.

4.9 地震・津波

4.9.1 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）に分かれしており、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4.35）

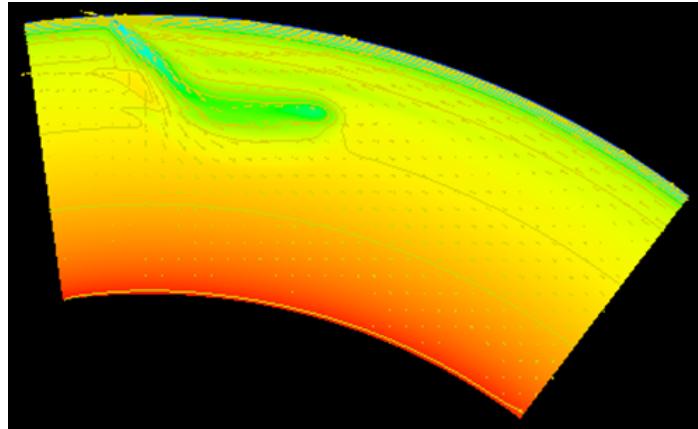


図 4.35 プレート沈み込みの地域的モデリング（図は亀山氏提供）

(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4.36）。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。

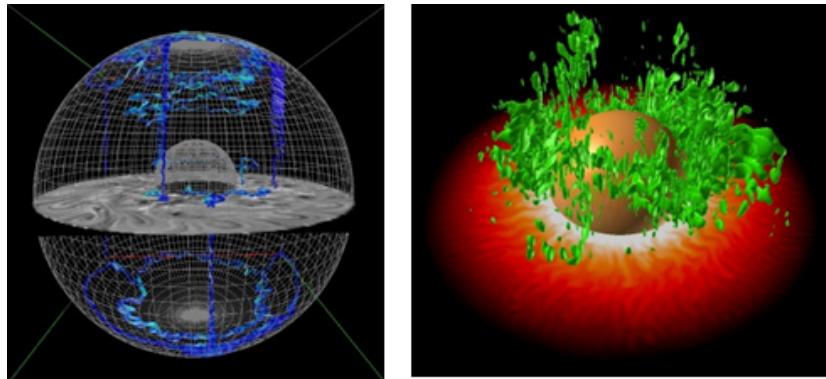


図 4.36 コア対流と地球ダイナモ過程の 3 次元球殻シミュレーション (宮腰・陰山提供)

(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や京コンピュ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と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動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)。そこで流動によって弾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。

2016年度から本格研究のスタートしたポスト京重点課題3「地震・津波による複合災害の統合的予測システムの構築」では、地震・津波の災害過程・被害過程・対応過程に対応して、理学・工学・社会科学の数値解析を連成した大規模シミュレーションを行うシステムを「統合的予測システム」と考え、ポスト「京」の計算能力の活用を必須の条件として開発を進めている。シミュレーションの具体的な対象は、理学では地震発生・地震波伝播・津波伝播、工学では建築建物と社会基盤施設の地震応答、社会科学では避難・交通・経済である。2章で触れたように、地震発生から波動伝播、地盤增幅、さらには地殻変動まで、理・工にまたがる計算を、共通のソルバーを持つ非構造格子有限要素法コードで実施できるようになるなど、統合システムに向けて順調に開発が進んでいる。

4.9.2 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 자체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4.37)。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。

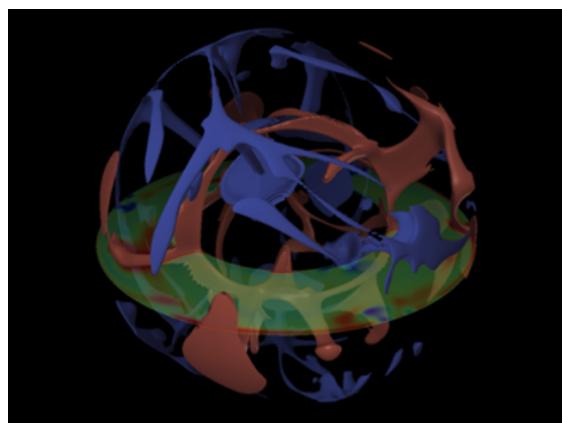


図 4.37 全地球惑星スケールでの自己無撞着なモデリング（図は亀山氏提供）

(ii) 地磁気変動シミュレーション

ダイナミ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上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 4.38）。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。

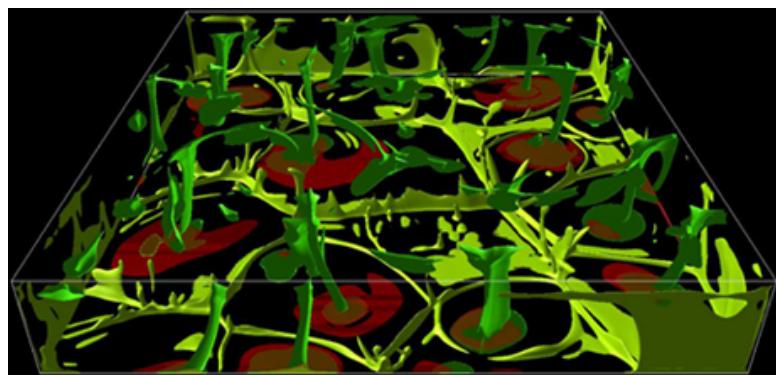


図 4.38 核・マントル境界の局所的モデリング（図は亀山氏提供）

(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。

ポスト京重点課題 3 での検討により、上記のような多数のモデルでのアンサンブル計算には、京で開発し、精度保証されたコードを移植・最適化した GPU クラスタ上の計算が適していることが示された。その際、メッシュ生成や分割は、大規模共有メモリ計算機上で自動で行えるようにした。現状では、1～10 億自由度の問題を 10～100 万回実施するのに数週間であるが、今後のハードウェアの進展により、京やポスト京でしか行えない規模の計算も、順次、こうしたクラスタ上で実現していくようになると期待される。

(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次元的粘弾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、粘弾性変形の大規模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（2章で述べた通り、2016年の時点で2兆自由度での計算がすでに実現している）。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次元で億～兆オーダーの粒子・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。実際、2016年の時点で、24億粒子の計算が京で実現している。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。

4.9.3 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オーダー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ー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ます、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步になる。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 術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 $O(10^{-4}) \sim O(10^{-5})$ 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 以下となるため高レイリー数・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。

なお、2017 年現在、様々な系外惑星の発見が相次いでおり、それらに地球外生命が存在するかどうかの関心も高まっている。惑星磁場は中心星のフレアや恒星風の直撃を防ぎ、また大気や海洋の宇宙空間への散逸も防ぐ可能性があると考えられているため、ある惑星が磁場を持つか、また持つ場合はどのような強さになるかを理論的に推定できれば、惑星の表層環境の推定の一助になると期待される。しかしながらどのような惑星がどのような強さの磁場を持つのかについて、太陽系内の天体についてさえも、人類の理解は圧倒的に不足している。例えば地球と金星はほぼ同程度の大きさであるが、地球は強い磁場を持ち、金星には磁場は存在しない。一方で地球より小さな火星には磁場は存在しないが、さらに小さい水星には存在する（ただし地球よりもずっと弱い）。なぜ、このような違いがあるのかは解明されていない。推測の手掛かりとして各惑星間の違いに着目してみると、まず地球にはプレート運動が存在するが金星には存在しない。また水星は、マントルが非常に薄い（惑星半径の 30% 以下）という、他の惑星に無い際立った特徴を持つと推定されている。磁場の強さや有無がこれらに起因しているかどうかを調べるには、コア対流とマントル対流を同時に解いてその相互作用を調べる、上述のようなシミュレーションが必要である。次世代以降のスペコンで、このような計算が可能になれば、他の惑星の環境の理解の助けになるばかりでなく、それらとの比較によって地球自身への理解もより深まるものと期待される。

4.9.4 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 2.9 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、 $2.0 \sim 2.5B/F$ 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。

なお、2017 年現在での要求性能については、2 章に追記した通りである。

(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 $(\text{深さ方向 } 2900/10) \times (\text{経度方向 } 40000/10) \times (\text{緯度方向 } 20000/10) = 2.32 \times 10^9$ 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} FLOP であり、この計算を 1EFLOPS (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。またこのような特質を持つが故に、マントル対流問題は近年のハードウェアの「進歩」による恩恵を受けづらく、既存のアプリケーションをそのまま活用して、地球科学的な成果を追究する方向性が選択されてきた。その一方で、「ポスト『京』」萌芽的課題「太陽系外惑星（第二の地球）の誕生と太陽系内惑星環境変動の解明（生命を育む惑星の起源・進化と惑星環境変動の解明）」の中では、近年のハードウェアに合わせて既存のアプリケーションのチューニングを進める作業に加え、マントル対流問題を（楕円型偏微分方程式を解くことなく）完全に陽的に解く手法を開発するという新たな試みも進められている。

(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）を見るため例えれば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
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	$1200 \times 1000 \times 200 \text{Km}^3$ ($125\text{m} \times 125\text{m} \times 62.5\text{m}$ 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($300 \times 250 \times 10 \text{km}^3$)	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($30 \times 25 \times 1 \text{km}^3$)	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	$3 \times 3 \times 0.08 \text{Km}$ (1都市領域を 1m 格子幅)から $1400 \times 1100 \times 10 \text{Km}$ (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	$300,000 \text{ agents}, 18,000$ steps (1 hour simulation), $1,000 \text{ Monte-Carlo}$ 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: $290 \times 4000 \times 2000$, 4変数	
ダイナモ			0.053	4		1		陰陽格子	格子点: $2000 \times 2000 \times 6000 \times 2$, 8変数	

本見積もりは未だ査読中である。より精度の高い数値はWeb版(→「1.1 はじめに」)を参照のこと。

4.9.5 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、悪条件の大規模梢円形方程式の

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はいない。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、楕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。コア対流および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年という際立つ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。

4.9.6 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。

その後も同セッションは毎年開かれ、2017年の際には、フォワード計算だけではなく、HPCをデータ解析にも活用する観点で講演・議論が行われた。セッションでは、フォワード計算や逆解析を行っている研究者らが現状の手法の抱える問題を提起するとともに、計算機科学・計算科学の発達についても紹介され、これらを固体地球科学分野の様々なフォワード計算や逆解析にフルに活用して解決していく方向性について議論した。従来の構造を単純化したモデルの限界が示されるとともに、高密度化する観測データをフルに活用した高詳細なモデルでの地震波伝播や地殻変動・津波伝播の計算、多数回計算を行うことによる物性や構造の誤差の影響の検討、誤差にガウス分布以外の一般的な分布を許した断層すべりの逆解析などが行われつつある現状が紹介され、その活用の必要性・重要性が確認された。

4.9.7 ロードマップ



図 4.39 地震・津波ロードマップ

4.10 気象・気候

4.10.1 社会的貢献に向けた気候気象学の位置付け

日本を含む東・東南アジアにおいて、人的・経済的な損失をもたらす最大の気象災害は台風である。台風を含む風水害による死者は日本では戦後減少してきた^{*6}。しかし、依然として最近20年においてもほとんどの年で数十名以上の死者があり、2004年の台風23号、2011年の台風12号では台風がもたらした暴風と大雨によって100名近い死者が出ている。2015年の台風18号に伴う関東・東北豪雨では鬼怒川を決壊させたことが記憶に新しく、2016年は北海道へ上陸した台風の数が史上最多を記録するとともに、北海道や岩手県といった大雨の経験が少ない地域に浸水等の大きな被害をもたらした。さらに日本では台風以外にも、梅雨末期の大雨はしばしば大きな被害をもたらす。2013年8月の山口・島根での豪雨は過去の降水記録を更新するような激しい雨に見舞われた。また、2014年8月には広島市で大雨による土砂災害が発生し、死者34名、行方不明者31名という大きな被害があった。また、海外に目を向けてみると、2008年のサイクロンナルギス（ミャンマー：死者・行方不明者13万人）、2013年の台風30号（フィリピン：死者・行方不明者6千人）のように、東南アジアの発展途上国では台風等の気象災害によって未だに膨大な数の人命が失われている。大雨だけでなく熱波^{*7}や干ばつといった全球規模の異常気象もしばしば気象災害をもたらしている。

台風や集中豪雨などの大規模な現象の他に、短時間の激しい気象現象として局地的大雨や竜巻がある。「ゲリラ豪雨」などと呼ばれる局地的大雨は、狭い範囲に1時間100mmクラスの雨をもたらし、河川の急激な増水や氾濫により浸水被害や人的被害を引き起こす。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、つくば市などで大きな災害を引き起こした。竜巻は空間規模が小さく、現状では、レーダーなどによる直接検出は難しい。

人命に直接関わる気象現象以外にも、積雪や猛暑、大気汚染などは、健康被害や経済的損失を招く可能性があり、できるだけ正確な予測が要求される。太平洋側の大都市域は積雪に対して脆弱であり、交通障害などが生じるが、雨雪判別の的中率向上のためには南岸低気圧の経路と発達過程を精度よく予測する必要があり、これは現在でも困難な課題となっている。また、発展途上国の産業振興に伴い、PM2.5（微小粒子状物質）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っている。例えば欧洲環境機関の2016年報告書では欧洲全域における大気汚染に起因する早期死亡者を毎年46万7千人程度と推定しており、そのうちの大部分はPM2.5によるものと考えられている。また世界保健機構が世界67か国の795都市について、2008年から2013年の間の統計解析を行ったところ、一部の地域では改善が見られるものの、全球的に見て都市域の大気環境は近年ますます悪化傾向にあり、特に中東から東南アジア域では大気汚染物質濃度が世界保健機構の環境基準の5-10倍に達していた。加えて、大気汚染に起因する早期死亡などによる経済的損失は、世界銀行による推定では南アジアではGDPの0.83%、東アジアでは0.25%に達するとみられている。日本においても、PM2.5、光化学オキシダント等についての環境基準達成率は、全体的には改善傾向にあるものの、低い達成率にとどまっている。

*6 http://www.bousai.go.jp/kaigirep/hakusho/h28/honbun/3b_6s_09_00.html

*7 World Disaster Report 2004, International Federation of Red Cross and Red Crescent Societies, p38.

近年、気象予報はリスクマネジメントの観点での利用にとどまらず、天候デリバティブや自然エネルギー分野に代表されるように、経済分野でも気象情報が積極的に利用されるようになってきた。例えば、各地域の日射予測は、太陽光発電の普及に伴って新たな需要として重要性が増してきている。これは、気象予報の精度の向上が背景にある。

以上のように、気象予報への需要は様々であるが、気象災害や経済損失を低減するためには、短期的な予報（日～数週間先までの予報）、および中・長期的な予測を継続的に改善していくだけでなく、短時間予報の精度を向上していく必要がある。短時間で発生発達する局地的大雨は、不安定な大気状態の中での総観規模場の強制が弱い場合が多く、その予測は大変難しい。また台風による雨も、台風勢力圏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ことは多くの場合難しい。竜巻（メソサイクロン）はさらに空間規模が小さいため、現在の現業数値予報でこれらを直接予報することは困難である。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。また、竜巻注意情報も2016年12月15日から新たな運用形態が始まり、使用する観測データの高性能化等により精度向上と相まって発表区域が細分化された。しかしながら、これも直接予報ではなく、実況監視が主体である。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時間的猶予の観点から、十分とはいえない。引き続き、狭領域・短時間スケールで起こる人命に関わる激しい気象現象の予測精度を向上させるとともに、時間的猶予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。これには、数値モデル自体の高精度化高解像度化とともに、データ同化の高度化が不可欠である。

降水、強風、落雷といった顕著現象の正確な予測のためには、時空間的には数100m～数km、数分～数時間スケールの気象情報が必要であり、数値モデルの計算のメッシュとしては数10m～数100m、時間刻みとしては1秒以下という高い時空間解像度が求められる。竜巻のようなマイクロスケールの顕著現象の実用的な予測のためには、時空間的にさらなる高解像度が必要となる可能性がある。また、高い空間解像度は、数値モデルだけでなく、データ同化のための観測データにも求められる。これまでにも、気象レーダや地上観測、人工衛星観測などの膨大なデータが用いられてきたが、近年はフェーズドアレイ気象レーダや気象衛星ひまわり8号などの登場により、従来と比べて一桁以上大きな観測ビッグデータが利用可能になってきた。高解像度高頻度の観測データの有効活用のためにも数値モデルの高解像度化と、膨大な観測データを効率的にシミュレーションに取り込むデータ同化システムの開発が求められている。上記の目的を達成するためには、大規模並列計算に適した領域気象モデルとデータ同化手法が必要となる。

数日から1-2週間程度先までの天気予報（短期的な気象予報）は、モデルの改良とコンピュータの性能向上により、その予報精度は概して向上している^{*8}。しかし、台風の進路のように数日先の予報であっても大きく外れることがある。また、2週間を越えた1ヶ月程度先までの気象予報（延長予報）は研究段階である。さらに、季節スケールの天候予測は農産業や水産業にとって重要であるが、初期条件（モデルに与えられる大気の初期値）が重要な気象予報と境界条件（陸面・海面条件や大気組成等の外部条件など）

^{*8} <http://www.jma.go.jp/jma/kishou/books/hakusho/2016/HN2016.pdf> (121ページ)

が重要な気候予測の間のスケールを持つため、予測可能性の有無を含めてさらなる理解が必要とされている。

国際的な研究の枠組みとして、Subseasonal-to-Seasonal (S2S) Prediction Project が進められている。十年～数十年以上先の気候予測は地球温暖化への適応策を検討するための基礎資料となる。観測に基づく最近の研究によると、東アジアに上陸する台風の強度は強まる傾向があると指摘されている^{*9}。IPCC の第5次評価報告書では、地球温暖化によって地球全体の台風の数は減少するものの強い台風の割合は増加する可能性があると報告している。加えて、地球温暖化によって日本では、200mm/day 以上の日降水量という大雨の年間日数はほとんどの地域で増加すると予測されている。日本では数千人以上の死者・行方不明者を伴う壊滅的な台風被害は昭和三大台風以来起こっていない。しかし、経験のない地球温暖化が台風をはじめとする気象現象を変調する可能性に備え、天気予報、季節予測、近未来予測、気候変動予測の精度・信頼性を向上させ、防災・減災のために必要な情報を提供していくことが気象・気候分野に課せられた目標である。

気象予測において、データ同化を用いて多くの観測情報を取り込んで精度の良い初期値を作成することは必要不可欠である。地球観測技術は年々高度化しており、数多くの人工衛星や地上観測装置が開発されている。そのデータ量は1世代前のものと比べると桁違いの数十～百倍となり、まさにビッグデータである。こうした人工衛星や、レーダー等の地上観測網の整備には多額の資金が必要であり、その価値を余すことなく利用することは我々に課せられた重要な責務である。近年では測器の投入前にその有効性をシミュレーションして評価する「観測システムシミュレーション実験 (Observing Systems Simulation Experiment: OSSE)」の重要性が高まっている。OSSEにより、どのような測器をどう配置・運用すれば効果的か、どのようなデータ同化システムを用いればどの程度予測の精度向上につながるかを事前に定量的に評価することが出来る。社会基盤としての気象予測システムの維持発展のためにはこのような研究も欠かすことができない。

4.10.2 分野の概要 —数値気象学の発展—

気象予測で用いられている数値モデルの開発には半世紀以上の長い歴史がある。気象庁は1959年に日本初のスーパーコンピュータ IBM704 を導入^{*10}し、翌年から東アジア域を対象とする水平解像度381km の2次元順圧モデルの運用を開始した^{*11}。その後のスーパーコンピュータの発展によって、全球モデルで用いられる水平解像度は約6年で2倍の割合で高解像度化し、現在、気象庁の現業で用いられている全球モデルの水平解像度は20kmとなっている。加えて数値モデルの改良が継続的に行われており、数値予報の精度は年々向上している^{*12}。数値予報の導入当初の天気予報は予報官の経験によるところが大きかったが、現在では数値モデルは天気予報に欠かすことのできない基盤インフラとなっている。より長期的な予測という観点からは、1990年に初のIPCC評価報告書が出版されて以降、気候予測の重要性が認識されたことで、気候モデルの継続的な開発・予測と適応策の検討が行われてきた。2020年頃に発表

^{*9} Mei & Xie (2016) Nature Geosci.

^{*10} <http://www.jma.go.jp/jma/kishou/know/whitep/1-3-2.html>

^{*11} 平成24年度数値予報研究テキスト「数値予報の基礎知識と最新の数値予報システム」, 図1.9.3, 平成24年11月, 気象庁予報部.

^{*12} <http://www.jma.go.jp/jma/kishou/know/whitep/1-3-9.html>

予定の IPCC 第 6 次報告書で取り上げられる予定の重要項目の一つは高解像度モデル比較プロジェクト (HighResMIP^{*13}) であり、50-25km 程度の水平解像度を用いた複数のモデルによる高解像度実験によって、台風等の極端現象に対する予測の信頼性が向上すると期待されている^{*14}。

気象予報・気候予測という直接的な応用に加えて、数値モデルは気象現象・気候変動のメカニズムの解明といった基礎科学のための基盤的ツールとして広く利用されている。気象気候分野は現実における実験が難しい学問であり、観測・理論・数値実験が三位一体となって発展してきた歴史がある。一例を挙げると、大陸西岸の海洋上で多く見られる下層雲は、太陽光を反射することで地球を冷却する効果があり、その増減は将来気候予測における全球平均気温の上昇量に不確定性をもたらす最大の要因であると言われている^{*15}。下層雲の振る舞いの物理的な理解はまだ十分とはいえず、10m スケール以下の境界層過程が重要であることから数値実験にもまだ困難が伴う。下層雲域における集中観測を行うとともに、数ミリスケールの領域渦解像実験 (DNS)、数十メートルスケールの領域大渦解像実験 (LES) などを通じて下層雲形成の理解が深まっている。このようなメカニズム解明に向けた取り組みは、将来気候予測の信頼性を向上させるために重要なプロセスである。気候予測の不確実性の幅を減らすだけでなく、不確実性の幅の理解も予測結果の活用のためには必要である。初期値や計算方法などが異なる複数のモデルによる気候アンサンブル実験による予測の幅の見積もりが行なわれている。

数値モデルは気象気候分野における基盤インフラとして、各国で精力的に開発が行われるとともに精度向上のための高解像度化が進められている。現業予報成績で先頭を走るヨーロッパ中期予報センター (ECMWF) では、水平解像度 9km のスペクトルモデル IFS を用いて 10 日予報を行っている^{*16}。日本では地球シミュレータに代表されるように地球科学向けのスーパーコンピュータ環境が充実していたこともあり、研究レベルでも世界最高水準の高解像度計算が行なわれている。気候予測においては日本の気象研究所が MRI-AGCM を用いて水平解像度 20km という高解像度で気候実験を実施^{*17}し、台風の将来予測などを発表することで世界に存在感を示している。また、水平解像度 60km で過去及び将来気候実験を約 100 メンバで実施した「地球温暖化対策に資するアンサンブル気候予測データベース (d4PDF)」^{*18}は世界的にもユニークなデータセットとして公開され、さらにこのデータを数 km 解像度までダウンスケールする取り組みも行われており、温暖化適応策の検討に利用されている。最近の流れとしては、現在よく用いられている全球スペクトルモデルにはスケーラビリティに難点があることから、全球格子モデルの開発が世界的に進められている。全球格子モデルの開発・利用では、京コンピュータを用いて世界で初めて 1km を切る水平解像度で超高解像度全球実験^{*19}を行った日本の NICAM が世界の先頭を走っている。一方、アメリカでは GFDL の FV3、ドイツでは MPI-M/DWD の ICON といった全球格子モデルが開発され、エクサスケール・コンピュータを見据え、次のサイエンス・ブレークスルーが期待される全球 LES

*13 <http://www.wcrp-climate.org/index.php/modelling-wgcm-mip-catalogue/429-wgcm-hiresmip>

*14 Haarsma et al. (2016), High Resolution Model Intercomparison Project (HighResMIP), Geosci. Model Dev. Discuss., in review.

*15 Vial et al. (2013), On the interpretation of inter-model spread in CMIP5 climate sensitivity estimates. Climate Dyn., 41, 3339-3362.

*16 <http://www.ecmwf.int/en/forecasts/documentation-and-support>

*17 Mizuta et al. (2006), 20-km-mesh global climate simulations using JMA-GSM model -- mean climate states J. Meteor. Soc. Japan, 84, 165-185.

*18 <http://www.mrioc-gcm.jp/~pub/d4PDF/>

*19 Miyamoto et al. (2013) Geophys. Res. Lett.

(水平解像度～100m) や全球雲解像気候実験 (水平解像度～2km) などに向けた世界的な競争が激化している。

数値シミュレーションが気象気候分野の基礎科学を発展させるという側面にも注意を払う必要がある。一例として、数多ある積乱雲の一握りが台風になり、場合によっては急発達するのはなぜか、という疑問に答えるためには、台風が解像できる高解像度モデルを用いて感度実験を行うことが必要である。また、モデルスキームの開発やパラメータチューニングを通じて、気候がどのような過程に支配されているのかの理解につながることも重要な側面である。

数値天気予報の歴史は、全球モデルと計算機の発展の歴史でもあるが、それに加えて領域モデルも重要な役割を果たしてきた。領域モデルには大きく2つの役割がある。1つ目は、対象としている領域に対して、少ない計算コストで高い空間解像度を確保することにある。地球全体の大気の計算には全球モデルが不可欠であるが、地域の天気・気候を表現するにはモデルの空間解像度が不十分であり、それを補完するための道具として領域モデルは発展してきた。最近では計算機の発展により比較的高い解像度（およそ20km）での全球天気予報が可能となつたが、それでもなお、豪雨などをもたらす線状降水帯などのメソスケール擾乱を解像するには不十分であり、より高い空間解像度をもつ領域モデル（水平格子間隔2km程度）が用いられている。2つ目の役割としては、解析モデルとして用いることによる素過程の理解である。例えば、現在、パラメタリゼーションで表現しているプロセスをより第一原理に近い手法で解くためには、大きな計算コストがかかるが、領域モデルを用いて計算領域を制限することで実現が可能となる。理想的な環境下や、様々な条件下での素過程の理解とより大きな空間スケールへのフィードバックに関する知見を蓄積し、問題点の洗い出しと解決を進めることで、将来、第一原理に近い手法による、より広領域の高解像度計算へとつながっていく。今後、特に、領域モデルに期待される役割としては、2つ目の用途が大きくなしていくものと予測される。

計算科学およびスーパーコンピュータ環境の進展に伴う計算機リソースの増加は、気象モデルの高解像度化のみならず気象・気候モデルにおける各種相互作用の評価にも重要な役割を果たしている。大気環境分野においては1970年代から1980年代にかけて、例えば成層圏オゾンの全球循環やオゾンホールなどについて東西方向に平均した、緯度—高度の二次元モデルを用いた研究が広く行われてきた。日本では1992年3月に国立環境研究所に導入されたベクトル計算機 SX-3 Model 14 上で全球気候モデル MIROC を元に、まず成層圏オゾンを対象とした全球3次元化学輸送モデルが開発され、以後エアロゾル、対流圏化学などにその研究対象を広げてきた。日本で開発されてきた化学輸送モデルは気象モデル、特にその放射過程との相互作用について比較的早期から考慮しており、地球シミュレータ稼働後は大気化学以外にも陸面の植生や海洋化学なども含めた「地球システムモデル」の一部として、化学物質による大気放射への直接効果、雲生成能の変調を通じた間接効果などによる気候影響や、炭素・窒素循環を通じた生物への影響等を評価できるようになりつつある。都市域の大気質を適切に表現するには東京などのメガシティであれば80km以下の解像度が、また雲との相互作用を適切に考慮するのであればさらに高い解像度が望ましいが、現在の計算機環境ではそのような解像度での長期計算や多メンバでのアンサンブル計算は難しい。一方で、都市由来の前駆物質が光乖離を通して引き起こす大気化学的な応答については非常に強い非線形性があるため、領域化学輸送モデル等も併用しつつ、素過程の理解と化学-気候相互作用の評価を進めていくことになると想定される。

数値予報においてデータ同化は数値予報モデルと並んで根本的な役割を果たす。大気に内在するカオス

性のため、数値予報の初期値に含まれる僅かな誤差が増大し、実際とは全く異なる予報結果となる場合がある。データ同化は数値予報モデルによる第一推定値を観測データを利用して修正することで最適な初期値（解析値）を推定する方法である。これまで様々なデータ同化手法が多くの研究者によって開発されてきた。現在では、4次元変分法（4D-VAR）及びアンサンブルカルマンフィルタ（EnKF）が主流となっている。4D-VAR、EnKFともに流れに依存した誤差成分を考慮する高度なデータ同化手法で、理想的な条件のもとでは同等の精度が得られている。

近年では、両手法のメリットを生かすためにハイブリッドデータ同化手法の開発が盛んに進められている。現状では、観測技術の向上により、高頻度高解像度の観測データが得られるようになっているが、数値予報モデルの解像度や観測データに含まれる誤差相関などの影響で、多くの観測データを有効に利用できず、捨てざるを得ない。今後、データ同化の更なる研究開発により、観測誤差相関を直接考慮する方法などを開発して、より多くの観測データを効率よく利用して予報精度が向上することが期待される。

4.10.3 課題と必要な計算手法

気候・気象の数値モデルで扱う対象は、地球規模の大スケール（～10,000km）から雲・乱流といった小スケール（10m以下）の流れまでが相互作用する系である。そのため、気象気候モデルではスケールの大きく異なるたくさんのコンポーネントの集合体であり、それら全てを第一原理に基づいて一度に解くことは不可能である。スケール間相互作用を表現するため、乱流や対流といった格子以下のスケールの現象は経験則に基づくパラメタリゼーションで表現することが一般的である。

しかし、パラメタリゼーションには様々な弊害がある。数百から数十キロスケールの水平解像度を持つ現在の気候モデルにとって、雲は格子サイズ以下の現象である。雲は地球のエネルギーバランス、すなわち気候形成にとって重要であることから、多くの気象・気候モデルでは積雲対流パラメタリゼーションを利用している。これは数百kmスケール格子を念頭に1970年代に考案されたもので、全球モデルでも使われ始めている10kmを切る水平解像度の計算にこれを用いる妥当性は曖昧である。実際、地球温暖化の大きさの指標であるCO₂倍増時の全球平均気温の上昇量（気候感度）にも大きな不確定性があり、その最大の要因は雲、特に下層雲の振る舞いの不確定性によるものであると指摘されており、積雲対流パラメタリゼーションの定式化の違いに対して鋭敏であることも分かっている^{*20}。高解像度モデルでは雲微物理プロセスをより直接的に表現する手法を採用するのが望ましく、エアロゾルと結合したバルク雲微物理スキームやビン法、粒子法といった第一原理により近い精緻なスキームの開発が進められている。

境界層内の対流や乱流も、おおよそ100m～1kmの間を「グレーゾーン」と呼び、扱いに考慮が必要なスケールである。「グレーゾーン」と呼ばれる所以は、これまで気象モデルで用いられてきた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パラメタリゼーションでの仮定と、慣性小領域と呼ばれる領域より大きなスケールの渦を直接解像するLESでの仮定が成り立つ範囲のちょうど狭間に位置するためである。今後、このスケールでの気象気候計算が主となってくるため、この「グレーゾーン」問題の扱いは特に注意を要する。また、多くの場合、工学分野で先に発展してきたLESシミュレーションでは、乾燥大気を仮定して理論構築がされてきたが、気象に適応する場合には湿潤過程への対応が不可欠

*20 Stephens (2005), Cloud feedbacks in the climate system: A critical review J. Climate, 18, 237-273.

である。将来のLES気象シミュレーションに向けて、湿潤過程が入った時の理論の再構築が必要である。

パラメタリゼーションのもう一つの問題として、用いるパラメータの決定に任意性がある点がある。気象予報や気候予測の精度向上といった目的を達成するため、パラメタリゼーションで用いられている未知のパラメータは目的に応じて異なることが多い。このような未知のパラメータは、モデル開発者が目的に応じて手動でチューニングを行うということも珍しくない。しかし、本来物理法則は対象とする現象やタイムスケールに依らず同一であるべきで、短期予報から長期予測までを同一のパラメータでシームレスに扱う全球モデルの構築が望まれている。データ同化を活用することにより、このような物理過程のパラメータ等を統計的客観的に自動最適化することが可能となるかもしれない。それと同時に、高解像度化や物理過程の精緻化を行い、第一原理に少しでも近づく方針を取り続けることもシームレスモデルの構築に向けて重要である。特にフラグシップマシンを用いるような最先端の研究ではモデル性能向上の正攻法として、極端な高解像度化と物理過程の精緻化を追求すべきと考えられる。雲・降水については、TRMMやCloudSat、CALIPSO、GPMといった雲・降水プロセスを観測可能な衛星のデータが利用可能になっており、これまで観測からその値を特定することの難しかった未知のパラメータに対する理解が進みつつある。

なお、多くの全球モデルでは、鉛直方向の圧力傾度力と重力の平衡（静水圧平衡）を仮定している。これは温帯低気圧のような数千kmスケールの中緯度擾乱を予報する上では有効であるが、顕著現象を引き起こす積雲対流などではその仮定が成り立たないため、力学コアの非静力学化が必須である。高解像度化には、他にも多くのメリットがあるが、一例としては、現在の気候モデルにおける台風の強度不足バイアスがある程度解消されることが期待される。

計算効率の観点からは、高解像度化による通信や演算量、ストレージアクセスに起因するスケーラビリティ低下の抑制が大きな課題である。多くの全球モデルでは球面調和関数を使ったスペクトル法を採用しているが、タイムステップ毎に全対全通信を行う必要があるとともに、球面展開の演算量が水平解像度に対して非線形に増大する。通信の局所化が可能で球面展開の必要がない格子法や、演算量の非線形性を抑制できる二重フーリエ法などが次世代モデルの力学コアとして検討・導入されている。水平解像度の上昇による入出力ファイルの肥大化もスケーラビリティ低下を招く。これまでのようにメニーコアで計算した結果を一つのファイルにまとめた後に可視化する方法には限界があり、前処理から後処理までを一貫して並列化する必要があるだろう。演算量に対してメモリアクセス量（要求B/F比）が高いことも気象気候モデルの特徴である。物理過程など計算精度が必ずしも求められていないスキームの変数については、単精度化・半精度化を進めることで要求B/F比を減少させる必要がある。雲微物理のような物理スキームの精緻化に伴うノードインバランスの拡大にも注意を払う必要がある。モデルの超高解像度化ではウイークスケーリングが、長期積分ではストロングスケーリングが重要になってくるが、特にストロングスケーリングの確保は難しく、今後の大きな課題になるであろう。

アンサンブルカルマンフィルタにおける主要な演算は、固有値分解や逆行列などの行列演算である。これまでアンサンブル数はせいぜい数十から百程度であったが、今後は少ないアンサンブル数によるサンプリングノイズを減らすために数百以上のアンサンブル数を確保することが求められるようになるだろう。しかし、行列の演算量は行列の大きさに対してその2乗や3乗で増加するため、演算量は劇的に増加する。数値予報モデルでは計算効率を上げるために、単精度実数の利用が進められている。データ同化においても単精度実数の利用を検討する必要があるが、行列演算の精度に影響を与える可能性がある。このよ

うな問題を含め、計算効率を向上させるために単精度実数の利用やアルゴリズムの改良を含めた開発が必要となるだろう。またアンサンブルカルマンフィルタでは、アンサンブル数だけのファイル入出力を伴うため、ストレージの量だけではなく巨大になるファイル数に対応したファイルアクセス速度の向上も非常に重要である。気象学やデータ同化のアプリケーション開発者のみでこれらの問題を解決することは難しく、現在ポスト京の開発においても行われている、アプリケーション開発者と計算機開発者による協調設計「コデザイン」が非常に重要である。

4.10.4 アプリケーションの詳細

(i) 全球気候 (NICAM)

本節で述べてきた問題を見据えたシームレス全球大気モデルは国内に複数存在するが、代表例としてここでは NICAM を取り上げる。積雲対流の表現が格段に良くなる LES (大渦解像シミュレーション) では水平 100m 程度の解像度が必要とされており、以下ではこの解像度での季節スケールの実験を想定する。

モデル名

- NICAM (Non-hydrostatic Icosahedral Atmospheric Model)
- モデル記述論文 : Satoh et al. (2014, 2008); Tomita and Satoh (2004)

計算手法

- 力学コア : 正二十面体準構造格子、有限体積法、非静水圧のナビエストークス方程式
- 物理過程 : 雲微物理 (ダブルモーメントバルク法)、大気放射、乱流、陸面過程など
- 海洋モデル COCO と結合して、大気海洋結合モデルとして実行することも可能

問題規模

- 格子点数 : 4兆 (水平解像度 110m、鉛直 94 層)
- ステップ数 : 1,040 万 ($dt=0.5$ 秒、2ヶ月積分)

要求性能精査の根拠等 (過程) などの説明

- 前回ロードマップの問題規模と結果
 - 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ヶ月積分)
 - 総メモリ量 : 3PByte
 - 総演算量 : 152ZFLOP
 - 実行時間 : 14 日間
 - 実効演算性能 : 125PFLOPS
 - 要求メモリバンド幅 : 360PByte/s
 - 要求 B/F 比 : 2.8

- 今回：前回ロードマップから推定
 - 総メモリ量：格子点数に比例 → $3\text{PB} \times (4\text{兆}/1\text{兆}) = 12\text{PByte}$
 - 総演算量：格子点数・ステップ数に比例 → $152\text{ZFLOP} \times (4\text{兆}/1\text{兆}) \times (1,040\text{万}/520\text{万}) = 1,216\text{ZFLOP} \sim 1,200,000\text{EFLOP}$
 - 実行時間：2倍程度を許容 → 14日 × 2 ~ 680時間
 - 要求B/F比：不变を仮定 → 2.8
 - 要求メモリ転送量：総演算量 × 要求B/F比 → $1,200,000\text{EFLOP} \times 2.8 = 3,360,000\text{EByte}$
 - 上の仮定ではストロングスケールしない部分について考慮していないが、チューニング・混合精度化によって解決すると期待する。

(ii) 領域気候 (SCALE-RM)

モデル名

- SCALE (Scalable Computing for Advanced Library and Environment) - RM (Regional Model)
- 文献：Nishizawa et al. (2015); Sato et al. (2015)

計算手法

有限体積法、構造格子、非静力学完全圧縮流体方程式

問題規模

- 格子点数： $10000 \times 10000 \times 300$ (300億) (水平解像度 100m を想定)
- ステップ数：100万 ($dt=0.4$ 秒、5日間積分を仮定)
- ケース数：100ケース
- 積分時間：12時間

要求性能精査の根拠等（過程）などの説明

これら計算に必要なリソースは、京でのプロファイルを元に見積もった。

- 総演算量：200000EFLOP (2000EFLOP/ケース)

以下ケースあたりの見積もり。

- 演算量：2000EFLOP
- 要求性能：46PFLOPS
- 想定ノード数： $46 \times 1000 / (10 \times 0.1) \sim 40000$ ノード
 - 単一ノード演算性能 10TFLOPS, 実行効率 10% を仮定
- メモリ使用量：0.05PB/ケース
- メモリ転送量：2700EB/ケース
- 要求メモリバンド幅；62.5PB/s

- 計算時間のほとんどの時間の間、メモリ転送をしていると仮定。
- ネットワークバンド幅 : 0.1GB/s
 - 1ノードあたり、 $50 \times 50 \times 300$ の格子サイズを想定。
 - 積分時間 12 時間のうち、10% を通信に使うと仮定。
- ストレージ容量 : 0.03PB/ケース
 - 出力は大気 2 次元 24 変数、土壤 3 次元変数 3 変数を 1 時間毎に、大気 3 次元 13 変数を 6 時間毎に出力を想定。
- 要求ファイル I/O 性能 : 0.0007TB/s
 - ファイル I/O に計算時間のほとんどの時間を使うことを仮定。

本アプリケーションは、B/F 値が大きく、メモリバンド幅がボトルネックになると想定される。通信は袖領域のデータ交換のための隣接通信が主であり、想定問題規模においては、全体の実行時間に対する通信時間の割合は大きくなないと想定される。ファイル I/O は、一定時間間隔での一定サイズの出力の繰り返しが主である。非同期 I/O により計算とオーバーラップさせることで I/O 時間は隠蔽できると想定される。

(iii) 大気環境 (CHASER-LETKF)

モデル名

- CHASER (Chemical AGCM for study of atmospheric environment and radiative forcing)-LETKF (local ensemble transform Kalman filter)
- 文献: CHASER : Sudo et al. (2002), CHASER-LETKF : Miyazaki et al. (2012,2015)

計算手法 (CHASER のみ)

- 力学コア : スペクトル法
- 移流スキーム : フラックスセミラグランジュ法
- 物理過程 : 雲微物理、大気放射、乱流、陸面過程など
- 化学過程 : 光乖離、気相反応、エアロゾル、雷 NOx 生成、湿性・乾性沈着、生物起源放出など

問題規模

- 格子点数 : 1200 万 (水平解像度 80km, 鉛直 60 層)
- ステップ数 : 530 万 ($dt=1$ 分, 10 年積分)
- アンサンブル数 : 100 メンバ

要求性能精査の根拠等 (過程) などの説明

- メモリ量 : 40 PB
- 総演算量 : 14,000 EFLOPS
- 要求メモリバンド幅 : 111 PB/s

(iv) データ同化 (NICAM-LETKF)

モデル名

NICAM-LETKF は、局所変換アンサンブルカルマンフィルタ (LETKF) を全球非静力学大気モデル (NICAM) に適用したものである。LETKF は格子毎に計算が完全に独立しているため並列性に非常に優れている。

問題規模

- 実行形態：1 時間毎に新たな観測データを取り込んで初期値をアップデートする（1 時間サイクル）。このため、大気モデルのシミュレーションを 1.5 時間分行い、1.5 時間積分した時刻の前後 30 分間の 10 分毎のアンサンブル出力値を用いてデータ同化を実行する。これを 1440 サイクル繰り返し 2 ヶ月間のシミュレーションを行う
- 格子数：全球 3.5km、鉛直 94 層（約 43 億格子）
- アンサンブルメンバー数：1000
- ケース数：2

要求性能精査の根拠等（過程）などの説明

これら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 及び LETKF の実行実績より

- 総演算量：896000EFLOP
- 総メモリ使用量：10 万ノードを使った実行で 1.4PB
- 総ストレージ容量：15PB

と見積もられる。大気モデルの演算量は解像度 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では、解像度に対して n^2 倍、アンサンブルメンバー数 m に対して m^2 倍から m^3 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 であるとすると、大気モデルでは実時間で 20-30 秒ごとにノードあたり 3GB 程度のファイル出力をすると見積もられ、300MB/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。

大気モデル及びデータ同化における通信量は、実測値からの推定で総経過時間に対する割合は高くないことがわかっている。上記の問題サイズにおける、1 サイクルでのデータ同化での通信量は約 3PB と見積もられる。データ同化 1 サイクルを約 1 時間で終わらせ、通信にかけても良い時間を全体の 2% と仮定すると、要求されるネットワークバンド幅はノード当たり高々 0.5GB/s となる。

ポスト京のコデザインでの取り組みにより、アルゴリズムの改良やチューニングによって演算性能が向上する可能性が示唆された。また現在気象モデルでは倍精度実数を用いるのが一般的であるが、演算性能を向上させるために单精度化への取り組みが始まっている。これにより演算性能が上がる事が実証され、さらに物理性能もおおよそ保証されることが示されている。

(v) データ同化 (SCALE-LETKF)

アプリケーション名

SCALE-LETKF は大規模並列計算に向けて設計された領域気象モデル SCALE-RM と、並列実行性能に優れたデータ同化手法である局所アンサンブル変換カルマンフィルタ LETKF を組み合わせたシステムである。ここでは SCALE-LETKF を念頭に、将来の領域気象予測に必要となる計算量の見積もりを行う。

問題規模

竜巻スケールの現象を解像できる数値天気予報の実現可能性について考える。解析領域として X バンドフェーズドアレイ気象レーダの探知範囲 120km 四方を設定する。50m 解像度、100 アンサンブルの領域気象モデルの時間積分を 30 秒先まで行い、30 秒毎にデータ同化を行う。観測データとして、300 方位角、600 レンジビン、110 仰角のフェーズドアレイ気象レーダの観測データを同化する。得られた解析アンサンブルを初期値として、100 メンバーの 30 分先までのアンサンブル予測計算を行う。

要求性能精査の根拠等（過程）などの説明

必要資源の見込みは以下の通りである

- 100 アンサンブルの 30 秒予報：約 4×10^{16} FLOP
- データ同化：約 5×10^{16} FLOP
- 30 分予報：約 2×10^{18} FLOP
- 合計：約 2×10^{18} FLOP

以上を 30 秒以内に処理する必要があるため、約 10^{17} FLOPS = 100PFLOPS

実行効率として現在と同じレベルの 10% を仮定すると、計算機の理論性能としては 1EFLOPS が求められる。主記憶は合計 300TB、ファイル IO は 1 サイクルあたり 12TB 必要となる。

4.11 宇宙・天文

古来より天文学・宇宙物理学は天動説対地動説のような我々の世界観の理解という哲学的側面と農耕や航海術に使われてきた実学的な側面を持ってきた。現代的な意味では、天文学・宇宙物理学を研究する理由はその二つの側面を発展させた4つに大きくわけられる：それぞれ(1)宇宙史の探求、(2)新たな物理法則の探求、(3)宇宙における生命存在の意味の探求、(4)宇宙環境学の推進である。それぞれを詳しく見ていく。

(1) 宇宙史の探求 古来から人類は我々の世界はどのようなものか想像してきた。有名な古来インドの世界像では、我々の大地が3匹の象に持ち上げられていて、さらにその象達が亀の上に乗っている。こうした奇抜な想像とは対照的に、現在の宇宙論は観測に支えられた精密科学となっている。なぜなら遠くの宇宙をみると過去の宇宙をみるとことに対応し、宇宙史の研究では過去の宇宙を直接見ることができるからである。例えば10万光年先（光年は距離の単位である）の天体から出た光は10万年かけて地球の望遠鏡に届き、10万年前のその天体の姿を知らせてくれる。図4.40にそうして分かった現代の宇宙像、宇宙史（様々な規模の天体・構造がいつ、どのようにできたか？）を示す。現在の宇宙年齢は137億年である。宇宙誕生から38万年後にある時刻の情報である宇宙マイクロ波背景放射の精密な観測により、初期の宇宙は非常に熱い火の玉であったと分かった。このときの宇宙の密度は比較的一様だが、その中でも密度が高いところが重力相互作用で収縮し、大規模な構造を作っていく（4.11.1や4.11.4節を参照）。ただし、こうした大規模構造を形成する物質としてはダークマターという直接観測はされていない（正体も分かっていない）ものがその大部分を占めており、こうした構造形成の完全な理解に至っているとは考えられていない。宇宙誕生から数億年経つと $10^7\text{-}10^{14}$ 個の星の集まりである銀河が形成される（4.11.5節を参照）。こうした銀河の中心には超大質量ブラックホールがあると考えられている（4.11.3節を参照）。ブラックホールについては(2)新たな物理法則の探求でより系統的に扱う。この銀河の速度を測定してみると、遠くの銀河ほど速く遠ざかっていることが分かった。2011年のノーベル賞はこの結果をType Ia超新星爆発の観測を用いてより確かに証明したものに対して与えられている。ここで遠くの天体ほど速く遠ざかるのは偶然ではない。宇

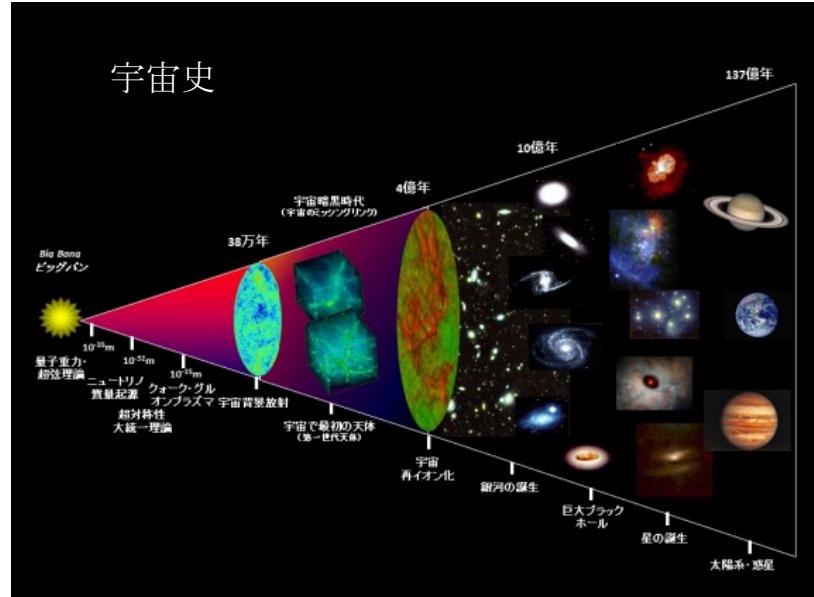


図4.40 現在の宇宙観

宇宙空間が膨張していることからくる帰結である。宇宙膨張を起こすにはダークエネルギーという非常に不可思議な物質（あるいは空間の性質）が必要になる。ダークエネルギーの素性は現代の物理学では全く分かっておらず、この現象の解明は急務である（4.11.2節を参照）。図4.40の右の方は比較的小さなスケールの星や惑星が書かれている。惑星については（3）宇宙における生命存在の意味のパラグラフで詳しく触れる。

これまで記述してきたような宇宙史の他に、物質史：（我々の体を構成する重元素の起源は何か？）も重要である。宇宙初期におけるビッグバン元素合成では主にヘリウム程度の比較的軽い元素しか合成できない。原子番号でいう炭素以上、鉄以下の重元素は星の内部の核融合でつくられ、超新星爆発で銀河中にまき散らされる（4.11.8節を参照）。まき散らされた物質から、また新たに星が誕生し、次の超新星爆発を起こすことを宇宙の物質循環と呼ぶ（4.11.5節を参照）。星の周りにできる惑星も、そして我々の体を構成する重元素も元は、この超新星爆発でまき散らされた物質で出来ていることになる。重力崩壊型の超新星爆発は中心部に中性子星を残すが、2つ中性子星が互いに回りながら、合体する現象が起こることがある（4.11.7節を参照）。この現象は近年、金や銀やプラチナなどの貴金属の生成現場なのではないかと注目を集めている。

（2）新たな物理法則の探求 ニュートンが万有引力の法則を発見したように、人類は現象を観測し、その背景に隠れた法則を理解しようと試みてきた。宇宙の環境は地球上の実験では実現できない環境であるため、そこで起きる現象も地球でおこるそれとはかけ離れており、未解明な現象にあふれている。それを解明しようとする宇宙物理学は人類の知の最前線であると言えるだろう。ここでは多くの謎の中から特に、ブラックホール、超高エネルギー宇宙線の謎に焦点を絞る。ダークマターおよびダークエネルギーに関する紹介するべき大きな謎ではあるが、（1）宇宙史の探求のパートにおいて既に言及してあるため、ここでは割愛する。

ブラックホールはアインシュタインの一般相対性理論が予測する、強い重力を持つ天体である。ある質量の星を圧縮していくと、その質量により決定されるクリティカルな半径（シュヴァルツシルト半径）よりその半径が小さくなると、光すらも逃げ出せない強重力な領域が現れてくる。それがブラックホールである。一般相対論の提案当初は実際にはない理論的な存在と考えられていたが、大質量星の進化の理論の発達とともに、その存在可能性が現実味を帯び、現在では宇宙に多く存在する普遍的な天体であると考えられている。ブラックホールはその定義からして、本体が光を発することはないが、ブラックホールの周りに他の星が回っているとき、その星から流れてきたガスが降着円盤となり、光を発する（4.11.6節を参照）。例え



図4.41 ブラックホール連星合体の様子 ©SXS COLLABORATION

ばはくちょう座 X-1 と呼ばれる天体はその光度の変動から小さい星でなければならず、隣で回っている星の公転周期等から質量を求める 11-15 太陽質量の重い星であることが分かる。これらの事実を考え合わせると、この天体の中心部にはブラックホールがいると推測される。ブラックホールの存在の直接的な証明は、2015 年の重力波の直接検出によりなされた。重力波は質量の大きな天体が高速で運動する際に生じる時空のさざ波であり、やはり一般相対性論が予想するものである。観測された重力波は二つのブラックホールが互いに回りつつ合体したケースの理論予測と一致している。図 4.41 にその様子を示した。この歴史的なイベントを経て、今後は重力波を用いて天体现象を観測する重力波天文学が可能になる。中性子星連星の合体および超新星爆発は重力波を発する重要な候補天体である (4.11.7 および 4.11.8 節を参照)。ブラックホールはその質量によって分類され、それぞれの名称は太陽の 3 倍から数十倍重い恒星質量ブラックホール (4.11.6 節)、100 倍から 1000 倍重い中間質量ブラックホール、 10^6 - 10^9 倍重い超大質量ブラックホール (4.11.3 節) となっている。

宇宙に漂う高エネルギー粒子、“宇宙線”の存在は、地球磁気圏のその場観測、太陽・恒星フレア、超新星残骸衝撃波やブラックホール天体周辺などからの高エネルギー放射などから示唆されているが、その生成メカニズムには依然として多くの謎が残っている。なぜ、エネルギー等分配から外れて一部の粒子が選択的に超高エネルギーまで加速されるのだろうか。地上で観測される宇宙線のうち 10^{15} eV (eV はエネルギーの単位) までは我々の銀河系内の超新星爆発の後にできた超新星残骸という天体で作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^{15} eV を超える高エネルギーの領域になると、メカニズムだけでなく何処で加速されているもわかっていない。これらの高エネルギー粒子の起源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領域となっている。高エネルギー粒子の加速メカニズムについては Particle In Cell(PIC) 法 (4.11.9 節) とブラソフ法 (4.11.10 節) という二つの手法により、研究されている。

(3) 宇宙における生命存在の意味 「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、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。惑星科学の立ち位置は、宇宙科学と地球科学の間にあって、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。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。

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 3 つ

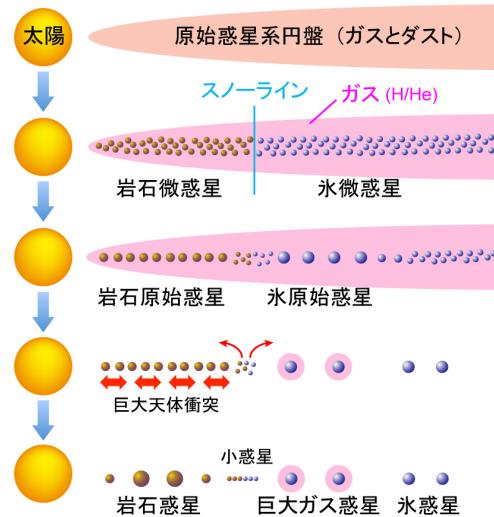


図 4.42 原始惑星系円盤から惑星形成までの時間進化

に分類することができるだろう。

(3-1) 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^{*21}、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。図4.42における上から4つまでの過程が研究対象である。4.11.11節ではシステム全体の進化を、4.11.12節では個々の衝突・合体の様子を議論する。

(3-2) 個々の惑星の進化とその表層環境 誕生した個々の惑星について、その内部および表層の構造分化とその時間発展を探求する。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。

次にその進化を下地にして、惑星・衛星等の表層環境とそのダイナミクスを探求する。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。図4.42における一番下の過程が研究対象である。4.11.13節で議論する。

(3-3) 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。4.11.14節で議論する。

(4) 宇宙環境学の推進 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。

近年、太陽黒点数と地球の気候



図4.43 太陽と地球磁気圏 ©SOHO/LASCO/EIT NASA, ESA

*21 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

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。太陽の様子は図4.43の左に表示した。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、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。この過程の様子図4.43の右に表示してある。太陽のダイナモと活動周期については4.11.15節で、リコネクションの機構解明については4.11.16節で、地球磁気圏のシミュレーションと宇宙天気予報については4.11.17節で、それぞれ議論する。

ロードマップ 以降、上で短く紹介したそれぞれの課題の各論を議論するが、それらの目次の意味も含めて各課題のロードマップを図に示す。

表4.8 (1) 宇宙史の探求に関するシミュレーションのロードマップのまとめ

セクションと課題	2016-	2018-	2020-	2022-	2024-	2026-
4.11.1 自己重力N体シミュレーションによる宇宙構造形成の解明	1兆粒子		10兆粒子		100兆粒子	
4.11.2 宇宙論統計解析のためのN体シミュレーションライブラリ構築	100リアライゼーション		パラメータ探索		統計解析	
4.11.3 輻射流体力学による超大質量ブラックホールの形成・成長過程の解明	光速制限法の適用 可能性調査・多重 入れ子格子法実装			局所計算	長時間・大規模計算	
	素過程の reduced モデルの構築・実装					
4.11.4 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	座標空間 128^3 ・速度空間 64^3		座標空間 256^3 ・速度空間 256^3 or 座標空間 512^3 ・速度空間 128^3			
4.11.5 自己重力流体シミュレーションによる銀河形成過程の解明	限定的な領域において多相星間ガス、大質量星、星団形成を直接分解		天の川銀河程度の質量を持つ銀河の形成と進化		銀河群、銀河団のような高密度環境における銀河形成	

表 4.9 (2) 新たな物理法則の探求に関するロードマップのまとめ

セクションと課題	2016-	2018-	2020-	2022-	2024-	2026-
4.11.6 コンパクト天体の活動性とその進化	積分されたエネルギーの輻射輸送計算		エネルギー依存の輻射輸送計算		ボルツマン方程式による輻射輸送計算	
4.11.7 数値相対論によるブラックホールの形成と強重力場現象の解明	開発及び最適化		本格計算及び輻射流体の第一原理計算に向けたアップデーター			
4.11.8 第一原理ニュートリノ輻射流体計算による超新星爆発メカニズムの探究	3次元ニュートリノ輻射流体計算	一般相対論による第一原理計算	磁場を含む第一原理計算へ			
	爆発メカニズムの普遍的な理解		多様な爆発・極限環境の探索へ			
4.11.9 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	1兆粒子	10–100兆粒子		1京粒子		
4.11.10 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2次元、速度 空間3次元の5次元電磁プラソフ計算の発展	空間3次元、速度 空間3次元の6次元電磁プラソフ計算の確立 ($256^3 \times 100^3$)	6次元電磁プラソフ計算の実施 ($512^3 \times 100^3$)		6次元電磁プラソフ計算の発展 ($1024^3 \times 100^3$)	

表4.10 (3) 宇宙における生命存在の意味の探求に関するロードマップのまとめ

セクションと課題	2016-	2018-	2020-	2022-	2024-	2026-
4.11.11 惑星系形成の大域シミュレーション	1億粒子		10億粒子		100億粒子	
4.11.12 地球・惑星形成のシミュレーション	100万粒子		1億粒子		10億粒子	
4.11.13 地球型惑星の個性と進化	2次元シミュレーション					
		3次元安定性解析				
		3次元矩形及び球殻でのシミュレーション				
4.11.13 惑星表層環境の多様性とその進化	静力学全球シミュレーション(火星から金星へ)					
		火星設定での全球計非静力学計算				
			金星設定での全球計非静力学計算			
4.11.13 ガス惑星の多様性とその進化	ブシネスク球殻対流計算(地球シミュレータから金へ)					
		圧縮性を許容するモデルの検討				
			超高解像度長時間積分の実行			
4.11.14 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						

表4.11 (4) 宇宙環境学の推進に関するロードマップのまとめ

セクションと課題	2016-	2018-	2020-	2022-	2024-	2026-
4.11.15 輻射磁気流体計算による太陽恒星ダイナモの探求	200億格子点				2兆格子点	
4.11.16 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	1兆粒子、電子スケール	10兆粒子、イオンスケール			1京粒子、流体スケール	
4.11.17 宇宙天気予報に基づく太陽系環境科学の推進						

4.11.1 自己重力 N 体シミュレーションによる宇宙構造形成の解明

本研究の対象はダークマターの密度揺らぎからはじまる、初代星、銀河などの宇宙で多様なスケールの構造形成である。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」で兆程度の粒子数が扱える見込みだが、宇宙初期の星形成スケールから、現在の銀河スケールを同時にシミュレーションするのに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 100 兆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。

過去 20 年以上にわたる研究により、宇宙論的な枠組みの中での初代星の形成過程が明らかになってきた。現在まで生き残ることが可能なほどの、低質量の初代星の存在が示唆されている。生き残った初代星の観測を通して、宇宙初期の構造形成史を制限することができる。それには、初代星が銀河系内のどこにどれくらい生き残っているかを、理論的に理解しておく必要がある。

宇宙初期の星形成スケールから銀河系スケールを同時に分解するには、銀河系一つを 1 兆粒子程度で分解する必要がある。銀河系の形成史や環境にどのように影響するかを調べるために、数十以上の銀河系をシミュレーションする必要がある。したがって 100 兆粒子以上の計算が必要である。

本計算は計算量 $O(N \log N)$ の N 体計算である。粒子間の相互作用演算が計算の主要な部分であり、「京」を使用した見積もりでは時間にしては 50 ~ 60% を占める。要求性能表に出した数字は、「京」上でチューニングし、フルシステム上で 50% 以上の実行効率で動作するコード、GreeM の詳細プロファイラによる性能解析に基づいている。

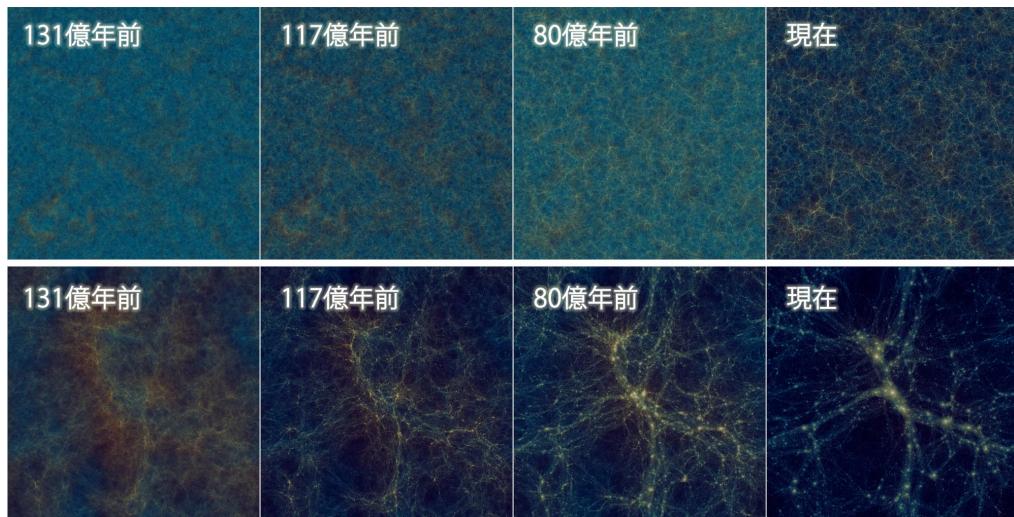


図 4.44 ダークマターの分布の進化: 明るさはダークマターの空間密度を表し、明るいところほど密度が高い。宇宙が生まれてすぐはほぼ一様（左）だが、時間が経つにつれて（順番に右へ）重力により集まり、大きな構造が形成される。上段と下段は空間スケールが異なる 2 種類のシミュレーションで、上段は一边約 54 億光年、下段は一边約 3.3 億光年である。詳しくは 4.11.1 節を参照

4.11.2 宇宙論統計解析のための N 体シミュレーションライブラリ構築

ダークマターの素粒子的性質（散乱断面積や粒子質量など）やダークエネルギーの時間変化の有無を明らかにするために、高精度の統計解析を行う。具体的には将来の大規模銀河サーベイ観測のデータを用いて精密な統計解析を行うことで、宇宙の物質密度やダークエネルギーの状態方程式を決定することができる。そのための基礎統計量、例えば物質分布のパワースペクトルの共分散行列を計算するためには膨大な数の N 体シミュレーションが必要である。数億光年にもおよぶ大領域を設定し、その中で銀河の内部構造まで解像する構造形成シミュレーションを多数の宇宙モデルに対して行い、各種統計量の理論テンプレートを構築する。

2020 年代には、地上大型望遠鏡や宇宙望遠鏡をもつて全天の大きな割合を観測する大規模な銀河サーベイが世界中で計画されている。これらのサーベイからは、銀河の大域的分布や重力レンズを通したダークマターの

3 次元的分布が明らかになる。それらの観測データを統計解析することにより、主要な宇宙論パラメータを決定することがサーベイ計画の主要な目的に掲げられている。 N 体シミュレーションは、与えられた宇宙モデルに対して、物質や銀河の大域的分布を記述する統計量を精密に求めるために必須なツールである。典型的な銀河一つを 100 万粒子程度で分解しつつ、1 辺が 10 億光年にもおよぶ大領域を設定したシミュレーションを多数行う。いくつかの典型的な宇宙モデルに対して N 体シミュレーションを数十個行い、物質分布パワースペクトルの共分散行列を求める。また宇宙論パラメータを変更したシミュレーションを 100 個以上行い、多次元パラメータ空間で統計量のパラメータ依存性を明らかにする。

要求資源表の見積もりは 4.11.1 節の計算モデルを参考に行っている。

4.11.3 輻射流体力学による超大質量ブラックホールの形成・成長過程の解明

ほぼすべての銀河中心には質量が $10^6\text{-}10^{10} M_{\odot}$ (M_{\odot} は太陽質量。太陽の何倍質量があるのかを表す単位。) に及ぶ超大質量ブラックホールが潜んでいる。遠方クエーサーの観測から、約 $10^9 M_{\odot}$ の超大質量ブラックホールが宇宙誕生後わずか一億年の間に形成されたことがわかつており、現代天文学における大きな謎の 1 つとなっている。宇宙初期から現在に至るまでのあらゆる時代に、様々な質量の巨大ブラックホールが存在しており、これらの形成過程を理解することは、宇宙史を理解する上で基本的知見を与えるだろう。

超大質量ブラックホールの形成・成長過程の解明のためには、種となるブラックホール（シードブラックホール）の形成過程とシードブラックホールの成長（質量獲得）過程を明らかにする必要がある。前者

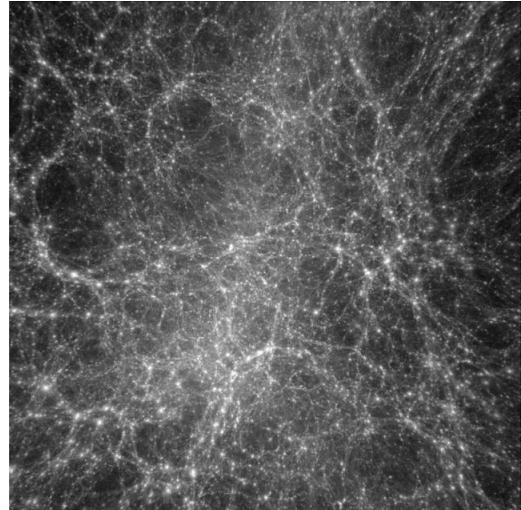


図 4.45 宇宙の大規模構造形成の重力多体シミュレーション

に関しては、 $\sim 10^5 M_{\odot}$ の超大質量星 (supermassive stars) を経由するシナリオが有力な候補の 1 つと考えられており、今後、質量が 10^4 - $10^7 M_{\odot}$ の超大質量ブラックホールへのガス降着過程を理解することが求められる。ガス降着過程それ自身はシュバルツシルト半径から銀河スケールに及ぶ過程であり、降着流全体の直接計算は現実的ではない。まずは質量 10^4 - $10^7 M_{\odot}$ のブラックホールのまわりの降着円盤の性質の理解と、降着円盤からの輻射フィードバックによりガス降着が阻害される領域 (降着円盤外縁部～半径 1 パーセク程度の領域、1 パーセクは約 3.2 光年) へのガス降着過程を理解することを長期目標とすべきである。銀河中心領域は銀河の他の領域と比べ進化が早く、重元素汚染も早く進む。したがって、重元素やダスト (固体微粒子) を含む詳細な化学反応や光吸収過程を考慮した、降着円盤および降着円盤外側領域の長時間輻射流体計算が必要となる。ガス降着過程に加え、正味のガス降着率や周囲へのフィードバックと関係があるアウトフローの性質を理解することも重要である。

超大質量ブラックホールの降着円盤の研究は活動銀河核分野において理論研究を中心として進められてきた。2000 年初頭から円盤表面からのアウトフローの輻射流体計算が行われはじめたが、降着円盤表面を境界条件として扱うに留まっており、降着円盤が異なるモードのときのアウトフローの様子は明らかではない。超大質量ブラックホールの降着円盤では円盤温度が低いため、重元素のオパシティー (不透明度、どのくらい光が抜けにくくなるか) が重要になる。従来の研究では、force-multiplier を用いる方法で輻射圧を評価してきたが、近年の詳細なモンテカルロ輻射輸送計算との比較からその精度が低いことが指摘されており、より厳密な方法の開発が必要である。降着円盤外縁部ではダスト形成が起こり、オパシティーが大きく変化するが、これを考慮した計算は存在しない。超大質量ブラックホール降着円盤およびそこへのガス降着過程を総合的に理解するためには、円盤そのものを数値的に分解することで様々な降着円盤モードに対応しつつ、さらに重元素/ダストの素過程を厳密に考慮した輻射流体計算が必要である。

本研究では、超大質量ブラックホールの降着円盤外側 (数 10^3 - 10^4 シュバルツシルト半径) へのガス降着過程および降着円盤外側で形成されるアウトフローの性質を、重元素やダストを含む詳細な化学反応および光吸収過程を考慮した 2 次元軸対称輻射流体計算^{*22}によって解明することを目標とする。特に、超大質量ブラックホールの形成・成長史を理解する上で最も重要な、質量が 10^4 - $10^7 M_{\odot}$ 、Eddington 比 (質量と光のエネルギーの比) が 0.1-1 の天体におけるガス降着・アウトフローに関して、重元素やダストが果たす役割を解明する。この目的のため、従来の研究では非常に簡素な取り扱いをされてきた重元素やダストをより詳細に扱い、輻射に関しても近似に頼らず intensity に関する輻射輸送方程式を直接解く。多重入れ子格子を採用し、円盤自体を分解しながら数 10^3 シュバルツシルト半径から 1 パーセクスケールの領域のガスダイナミクスの様子を調べる。最初の 1-2 年で (次節で述べる) 光速制限法の適用可能性の調査及び多重入れ子格子の実装作業を行う。次の 1-2 年で素過程の reduced モデルの構築・実装を行う。その後は、局所計算による調査から開始し、順次計算規模を大きくして長時間・大局計算の実施を目指す。

本研究で用いる計算コードでは、流体・輻射ともに有限体積法により計算する。計算量の削減とスケーラビリティのため、輻射は降着円盤内縁からの直接光をそれ以外の輻射から分離して取り扱い、光速抑制法を適用する。これによって、支配方程式すべてを陽解法で解く。計算量の大部分は間接光輸送計算と化学反応等の素過程計算にかかる見込みであるが、後者は reduced モデルが得られていない現時点で推定するのは難しいので、推定から除外する。計算領域は球座標を基本格子とした多重入れ子格子で覆い、円盤

^{*22} ほんとうは 3 次元空間であるものの、軸対称の近似を置くことで解く空間の次元を 2 次元におとす手法。

自体を空間分解しつつ、降着円盤外側からパーセクスケールまでを同時に計算する。要求性能の推定を行う上で置いた仮定をはじめに整理する。今回の推定ではブラックホール質量が $10^7 M_\odot$ 、Eddington 比が 0.1 の降着円盤を仮定する。計算法に関しては、光速抑制法が個数密度 $1\text{--}10^{15} \text{ cm}^{-3}$ の星間ガスでも問題なく機能するとし、光速を $1/10$ 程度まで抑制することが可能とする（これは検証の必要がある）。

以下に要求性能表に出した数字の算出根拠を示す。まず、必要な空間格子数を見積もる。この系のダスト昇華半径は約 $0.04 \text{ pc} \approx 8000 \text{ AU}$ である。標準降着円盤モデルによれば、半径 10000 AU で円盤の厚みは約 10 AU である。円盤内部を空間分解しつつ、輻射フィードバックが効果的に働く半径 1 pc 程度までの領域をカバーするためには、 512×1024 の格子を 14 段程度重ねる必要がある。これは一様格子換算で格子数が $2(2048^2)$ の問題規模である。以下、この空間格子数を仮定する。

次に必要なステップ数を推定する。時間刻みは（抑制された）光速と最小格子幅で決定される。後者は $\Delta z = 2h/512 \approx 0.04 \text{ AU}$ である。必要な計算時間をアウトフローが外側半径まで到達する時間の 3 倍（この間に半径 5000 AU の位置で円盤は 10 回転する）とすると、CFL 数 0.333 のとき、必要なステップ数は 17 億ステップとなる。1 ヶ月で計算を完了させるためには、1 ステップあたりの実行時間は 1.6 ミリ秒である必要がある。

次に浮動小数点演算数を見積もる。計算時間の大部分は間接光輸送計算に要するので、この部分だけを対象に演算数を推定する。セル境界での intensity を空間 2 次精度の van Leer 内挿で求める場合を考える。非対称性を除去する内挿法を使った場合、 (ϕ, θ, ν) を指定したときの 1 つのセルの intensity の更新に要する演算数は 236、ロード数は 49、ストア数は 1 と計算できる（十分なキャッシュサイズを仮定している）。計算を完了させるのに必要な演算数は、これを $2N_r N_\Theta N_\phi N_\theta N_\nu$ 倍し、ステップ数を掛け、約 $1.8 \times 10^6 [\text{Eflop}]$ と推定される。

メモリ転送量も同様にして推定でき、 $3.35 \times 10^6 [\text{EB}]$ と推定される（ここで $N_\phi = N_\theta = N_\nu = 64$ を仮定している）。メモリ量に関しては、intensity がほとんど占め、約 $35 [\text{TB}]$ と推定される。必要なストレージ量に関しては、1 つのランで 200 スナップショット程度を取得すると仮定し $7 [\text{PB}]$ 。要求ファイル I/O 性能は、200 ファイルを 1 日掛けて出力する場合で $0.08 [\text{TB}/\text{s}]$ となる。

次に、想定ノード数と通信性能を推定する。上記計算を実現するために必要なノード数は 1 ノード $10 [\text{Tflops}]$ 、実行効率 50% を仮定し、約 28 万ノードと推定される。このノード数を仮定し、振動数方向に領域を 64 分割した場合、1 ノードの袖領域のサイズは 200 流体セル程度になる。したがって、1 ステップのノード間隣接通信の通信量の全体は、時間精度 2 次を考慮して、 $13 [\text{MB}/\text{ノード}]$ と推定される。一方、光加熱率と輻射圧の縮約計算は、基本的には空間格子数分の浮動小数点数の allreduce であるので、通信サイズは $0.27 [\text{GB}]$ と計算される。ネットワークバンド幅は、通信に要する時間を 1.6 ミリ秒の 1% 程度であることを要請すると、隣接通信に関しては約 $1 [\text{TB}/\text{s}/\text{ノード}]$ の速度が必要である。これはノード間の片側通信に必要な速度である。一方、allreduce に関しては、システム全体で約 $20 [\text{TB}/\text{s}]$ の速度がでればよい。

4.11.4 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

従来の宇宙大規模構造形成の数値シミュレーションでは、物質分布を座標空間・速度空間からなる 6 次元の位相空間上で超粒子近似によって統計的にサンプリングする N 体シミュレーションが行われてきた。

多数の粒子間の相互作用を効率よく計算するための数値アルゴリズムや並列化手法が精力的に研究され、現在では 10^9 個を超える粒子数での計算が可能になっているが、物質分布を確率的にサンプリングするため計算結果に数値的ノイズが内在するのが最大の欠点である。その結果、自己重力系における無衝突減衰や 2 流体不安定性を精度良く取り扱うことができない。その理由は、これらの物理過程では位相空間上の物質分布のテイル部分に存在する少量の物質が重要な役割を果たしているが、 N 体シミュレーションではこれらの物質の寄与が数値的ノイズに埋もれてしまうためである。特に、宇宙空間に多量に存在すると考えられるニュートリノの宇宙大規模構造形成での無衝突減衰は、 N 体シミュレーションでは精度よく計算することが困難な物理課題である。

我々は、 N 体シミュレーションの欠点を克服するために、6 次元位相空間での物質の分布関数の時間発展を記述する無衝突 Boltzmann 方程式 (Vlasov 方程式) を直接数値シミュレーションする Vlasov シミュレーションを採用する。自己重力系での Vlasov 方程式は物質の位相空間での分布関数を $f(\mathbf{x}, \mathbf{v}, t)$ とすると

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \frac{\partial f}{\partial \mathbf{x}} - \nabla \phi \cdot \frac{\partial f}{\partial \mathbf{v}} = 0$$

とかける。ここで ϕ は重力ポテンシャルで、Poisson 方程式

$$\nabla^2 \phi = 4\pi G \rho = 4\pi G \int f(\mathbf{x}, \mathbf{v}, t) d^3 v$$

を満たす。宇宙大規模構造形成におけるニュートリノの力学的影響を調べるシミュレーションでは、ダークマターやバリオンの運動は従来の N 体シミュレーション、ニュートリノの運動を Vlasov シミュレーションで解くハイブリッドシミュレーションを行う。

2016 年現在では、国立天文台の XC-30 や筑波大学計算科学研究中心の HA-PACS システムを用いて座標空間のメッシュ数 128^3 ・速度空間のメッシュ数 64^3 の数値シミュレーションが可能であるが、既存の N 体シミュレーションと比較して空間分解能がかなり低い。2020 年以降に運用を開始するポスト京コンピュータでは座標空間のメッシュ数 256^3 ・速度空間のメッシュ数 256^3 または、座標空間のメッシュ数 512^3 ・速度空間のメッシュ数 128^3 の数値シミュレーションを行うことを目標としている。

4.11.5 自己重力流体シミュレーションによる銀河形成過程の解明

我々の宇宙では物質質量の大半をダークマターが占めている。このダークマターの持つ性質により、我々の宇宙では、小さな天体が先に形成されそれらが合体成長を繰り返して大きな天体を形成する階層的構造形成宇宙になっている。この中で銀河は次のようにして形成される。まず最初にダークマターが重力によって集まり重力的に拘束されたダークマターハローを形成し、続いてダークマターハローに捉えられた通常の物質—バリオン—が放射冷却によってエネルギーを失って中心に集まる。こうして集まったバリオンが、重力流体力学相互作用、輻射、磁場、宇宙線、星形成、化学進化、超新星爆発、超大質量ブラックホール周りの高エネルギー現象など様々な物理の影響を受けつつ進化し、さらに合体を繰り返し最終的に銀河を形作る。この一連の過程は極めて複雑であり、コンピュータシミュレーションによる研究が精力的に行われている。

1990 年代から始まった三次元銀河形成シミュレーションでは、バリオンが冷えすぎて過剰に高密度化してしまう過冷却問題が指摘されてきた。こうして形成された高密度バリオン塊は力学的摩擦によって角

運動量を失い銀河中心に落ちていく。その結果、銀河中心に角運動量を失ったバリオンが過剰に集中してしまう。そのため、コンピュータシミュレーションでは、長らく観測に対応する立派な円盤を持つ銀河を再現できなかつた。銀河形成シミュレーションでは、質量空間分解能が圧倒的に不足しているため、星形成やそれに伴う恒星風や超新星爆発のフィードバックモデルは全て分解能以下のサブグリッドモデルとして導入されており、そこに問題の原因があると考えられてきた。

近年、恒星風、超新星爆発、そして活動銀河核からのフィードバックのモデル化手法の進展により、過冷却問題が解決しつつある。その結果、観測と直接比較可能な銀河をコンピュータシミュレーション中に再現することが可能になり、そして、銀河の観測的・統計的性質なども割合良く再現できるようになってきた。しかし、依然としてサブグリッドモデルはサブグリッドモデルのままであり、結果へのモデルパラメータ依存性を排除しきれない。エクサスケールの演算能力を用いて、恒星スケール—特に主要なフィードバック源である大質量星—を直接分解する超高分解能銀河形成シミュレーションを達成できれば、それは強力なブレイクスルーとなる。これにより銀河を超えるスケールからの大局的な物質降着から、星形成領域の分解、分子雲形成、星間塵形成、星・星団形成、そして恒星風、超新星爆発と続く複雑な物質循環過程の全容を読み解くことが出来るようになり、銀河形成過程の究極的理解に至ることができるだろう。

大質量星を直接分解するために $10 M_{\odot}$ 程度よりも高い質量分解能が必要である。この質量分解能で天の川銀河程度の質量（ダークマター質量 $\sim 10^{12} M_{\odot}$ 、バリオン質量 $\sim 10^{11} M_{\odot}$ ）を持つ銀河を分解しようとすると、バリオン、ダークマターともに 10^{10} 粒子程度必要になる。また、注目する銀河の周りの重力場を表現するために必要な境界粒子として同程度を採用する。この分解能と粒子数は、これまでに行われてきた銀河形成シミュレーションを 2–3 柄上回る超大規模なものになる。

このようなシミュレーションは観測データと直接付きあわせて議論することができるような結果をもたらす。そのためエクサスケールの銀河形成シミュレーションは我々の銀河形成の物理への理解を大幅に推し進めてくれるだろう。さらに、こうして得られた銀河進化モデルは、銀河スケールよりはるかに小さいスケールと直接的に接続することが可能である。したがって、例えば化学進化による金属量の分布や進化、星間塵の形成と分布、そして環境（たとえば紫外線）などの情報などから惑星形成論や地球生命誕生についても新たな知見をもたらすだろう。

演算量の見積り 銀河形成シミュレーションは、大きく分けて (a) 遠距離力の重力相互作用、(b) 近距離力の流体相互作用、(c) サブグリッドモデルから構成される。ここでは演算量を見積もる上で特に重要なと考えられる (a) と (b) に注目して計算量を見積もる。

計算方法として、銀河形成シミュレーションの標準的手法である N -体 Smoothed Particle Hydrodynamics 法を採用する。重力計算にはツリー法を用いるとする。

- **粒子数の見積り:** 天の川銀河程度の全質量が $10^{12} M_{\odot}$ の銀河を考える。ガス粒子質量 $\sim 10 M_{\odot}$ ダークマター粒子質量 $\sim 100 M_{\odot}$ とすると粒子数はそれぞれ $\sim 10^{11}$ 個となる。今注目している銀河が形成される領域のさらに外側の物質分布を表す境界粒子にもおよそ 10^{11} 個用いるとする。以下簡単のため、総粒子数を 10^{11} として見積もる。
- **相互作用の評価:** 重力計算は 1 相互作用あたり 40 演算とする。ツリー法を用いて作った相互作用リ

ストの典型値として 10^4 、全粒子数を 10^{11} 個とする。そうすると、1 ステップあたりの演算量は

$$40 \times 10^4 \times 10^{11} = 4 \times 10^{16} \text{ 演算} = 40 \text{ Peta 演算} \quad (4.16)$$

になる。

一方流体計算は、1 相互作用あたり ~ 1000 演算、相互作用粒子を 100 個程度、全粒子数を 10^{11} 個とすると、

$$1000 \times 100 \times 10^{11} = 10^{16} \text{ 演算} = 10 \text{ Peta 演算} \quad (4.17)$$

となる。

- **Byte-per-flops** 値の評価重力計算の B/F 値を簡単のため相互作用計算部分だけで評価する。重力計算に必要な情報は座標と質量の 4 要素、また、相互作用リストを N_g 個の粒子で共有することを考えると

$$4 \times 8 \times 10^4 \times 10^{11} / N_g = 3.2 \times 10^{16} / N_g \text{ Byte} \quad (4.18)$$

になる。 $N_g \sim 10^3$ を採用し、式 (4.16) を用いると、結局 B/F $\sim 10^{-3}$ 程度になる。

流体計算では相互作用評価に必要な要素数を各粒子 30 程度とし、近接相互作用を 100 個程度とする。 $N_{g,h}$ 個の粒子で相互作用リストを共有すると

$$30 \times 8 \times 100 \times 10^{11} / N_{g,h} = 2.4 \times 10^{15} / N_{g,h} \text{ Byte} \quad (4.19)$$

のデータが必要になる。典型値として $N_{g,h} \sim 100$ を採用し、式 (4.17) を用いると、B/F $\sim 10^{-3}$ 程度となる。

上記見積りでは、相互作用リスト構築にかかるコストについては評価されていないことに注意されたい。

- 演算量/計算時間の見積り：最も短い時間刻みとして 1 pc スケールで、 10^7 K のガスを考える。音速は ~ 100 km/s になる。1 ステップは、

$$\frac{3 \times 10^{18} [\text{cm}]}{\sim 100 [\text{km/s}]} = 10^{11} [\text{sec}] = 3000 \text{ year} \quad (4.20)$$

CFL 条件から求まる時間刻み幅はおよそ 1000 年になる。ただし重力による時間スケールは CFL 条件から求まる値より 1 衡程度大きくなる。

最悪のケースとして、この CFL 条件から求まる時間刻み幅で全システムを進めるると考えると宇宙年齢 (138 億年) 計算を進めるにはおよそ 10^7 ステップが必要となる。以上から、一つの銀河の場合 1 ケースあたりの総演算量はおよそ、 5×10^5 Exa (500 Zeta) 演算になる。演算効率として重力相互作用・流体相互作用共に 10% を想定、1 Exa flops のシステムを想定すると、1 ケースあたり二ヶ月弱となる。この見積りでは、通信、IO などは一切考慮していない。

実際の計算では独立時間刻み法を用いる。これは異なる時間スケールを持つ異なる階層を同時にシミュレーションで扱うために開発された手法で天文学では広く用いられている。重力の時間刻み幅は、CFL 条件から求まる値より 1 衡程度大きいことが期待されるため、流体ステップと重力ステップを分離することで数倍程度高速化が可能になる。したがって銀河スケールのシミュレーションで 1 週間程度と考えられる。ただし超並列では同期によるコストが大きくなりがちであるため、より低レイテンシーなシステムやこれまで以上に洗練されたコード実装が必要になるだろう。

メモリ使用量の見積り 1粒子あたり 10-100 変数を持つ。全部 100 変数もつとして倍精度で銀河スケールのシミュレーションの場合に必要になるメモリ量を見積もると 10^{14} byte = 0.1 Petabyte 程度である。これに、ツリー構造を保持するために必要なメモリ通信バッファなどを考慮しても 1 Peta byte までは必要としない。

ノード間メモリ転送量の見積り ツリー法による並列重力計算の場合、あるノードに送られてくる他のノードの粒子数のリーディングタイムは表面積相当である (See Eq. 7 Makino 1991)。Makino (1991) の式 7 の第二項を採用すると、典型的な通信量はプロセッサ数を N_p として、 $\sim 10 \times (N/N_p)^{2/3}$ 程度になる。1粒子あたり座標質量の 4 変数を転送すると考える。そうすると、およそ $8 \times 4 \times 10 \times (N/N_p)^{2/3} \times N_p = 3.2 \times 10^2 \times N^{2/3} N_p^{1/3}$ byte の通信を必要とする。 $N = 10^{11}$ かつ $N_p = 10^6$ とすると、 $\sim 10^{12} \sim 1$ TB 程度の通信が必要になる。

流体相互作用は近接相互作用であるため、各計算ノードが担当する領域の縁に当たる部分の粒子情報だけで十分である。簡単に見積もると計算量は体積に比例し、通信量は表面密度に比例するため、ノード数が少ないほど通信量は減るセンスになる。 N 個の粒子をノード数 N_p で分けるとすると、各ノードは N/N_p 粒子を保持する。系全体の体積を L^3 とすると、一つのノードが持つ一片の幅は $l = \sqrt[3]{L^3/N_p}$ になる。一つのノードが担当する領域が立方体だと仮定するとその表面積は $6 \times l^2$ になる。この表面積に近接相互作用のスケール (SPH 法でいうところのカーネルサイズ、ここでは平均粒子間隔を採用) と粒子密度をかけることで、通信される粒子数が求まる。

$$6 \times l^2 \times h \times N/L^3 \sim 10(L^3/N_p)^{2/3} \times (L^3/N)^{1/3} \times N/L^3 \quad (4.21)$$

$$\sim 10(N/N_p)^{2/3} \quad (4.22)$$

たとえば $N = 10^{11}$ 、 $N_p = 10^6$ とすると、およそ 10^4 粒子情報が交換される。1 流体粒子あたり数十変数を通信するとし、倍精度を仮定すると $\sim 8 \times 100 \times 10^4 \times 10^6 = 10^{13}$ byte = 10 TB 程度の通信が発生する。

重力計算に 10^6 ステップ、流体計算に 10^7 ステップ使ったとして、銀河スケールのシミュレーションの場合、重力における通信は 10^{18} byte = 1 Exabyte、流体計算における通信が 10^{20} byte = 100 Exabyte になる。計算時間の 10% まで (ここではおよそ一日の 10^6 秒とした) 通信に使って良い場合、要求通信速度は 100 TB/sec である。

ストレージ量の見積り ポストプロセスで物理過程を調べるためににはシミュレーションデータを十分に短い間隔で出力する必要がある。ここでは、星団や分子雲のタイムスケールより短い 10^5 year という時間間隔で出力することを考える。宇宙年齢に渡って出力する場合、 10^5 スナップショットになる。一粒子あたり 100 個の倍精度変数を書きだすと仮定すると、銀河スケールのシミュレーションで $8 \times 100 \times 10^{11} \times 10^5 \sim 10^{19}$ byte = 10 Exabyte になる。

IO 性能の見積り 1 ステップの計算におよそ 1 秒かかり、100 ステップごとに書きだすとすると、100 秒ごとに IO が生じる。一ステップで書き出すデータ量はおよそ 100 TB になる。IO に使える時間を計算時間の 1% とすると、100TB/s が要求性能になる。

4.11.6 コンパクト天体の活動性とその進化

ブラックホールや中性子星という概念は今や誰もが知る言葉であり、特に2015年のブラックホール合体による重力波の検出は、その言葉をより一層認知させる事になった。特にブラックホールはその特異性から想像力がかき立てられ、科学への興味を引き立てる原動力となる。

1960年代にクエーサーが発見されたことを皮切りに、現在では超大質量ブラックホールが普遍的に銀河の中に存在することが明らかになっている。この超大質量ブラックホールの中には太陽の1億倍もの質量を持つものもあり、一部は宇宙の誕生からわずか10億年足らずで形成されていることがわかつてきた。しかしこの超大質量ブラックホールがどのように形成されたのかは未だに解明されていない宇宙物理学最大の謎の一つである。現在の標準的な理解ではブラックホールは超新星爆発によって形成され、その質量は太陽質量の10-100倍程度である。このブラックホールはブラックホール同士の合体や周囲のガスを吸い込むことで超大質量ブラックホールへと成長したと考えられる。銀河の内部では超大質量ブラックホールの成長とともに多数の星が形成される。重い星が超新星爆発を起こして重元素を撒き散らす。撒き散らされた重元素を含んだガスが新たな星の材料となる。こうして星形成の輪廻転生が行われる。また超大質量ブラックホールへと降着するガスは非常に明るく輝き星間ガスを照らすため、星形成や宇宙進化に甚大な影響をもたらす。さらに超大質量ブラックホール周辺からはジェットと呼ばれる光速に近い速度を持つ噴出流が形成され、光と同様に星形成や銀河形成に影響を与える。このように星や銀河の進化とブラックホールの活動性は密接につながっており、ブラックホールを理解することは我々が生きる宇宙を知ることに繋がる。

また一方で比較的小さい恒星質量ブラックホールや中性子星においてもガス降着によって輝く天体が多数見つかっており、その幾つかは今まさに急速な質量の増加を起こしている。これらコンパクト天体のガス降着現象（降着円盤）を理解することはその活動性を理解するだけでなく、恒星質量ブラックホールが超大質量ブラックホールへと進化する謎を解き明かす重要な鍵となる。

本研究のターゲットはブラックホールや中性子星とそれに付随する降着円盤である。手法としては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の取り扱いには課題が残っている。輻射の伝搬はボルツマン方程式と呼ばれる、空間3次元と方向2次元、振動数1次元の6次元空間で記述される。この輻射場と流体を同時に解くことで初めて降着円盤の全貌を明らかにできる。しかしながら6次元空間で輻射場を解くことはその計算量から難しく、従来の計算では近似を用いて輻射場を輻射モーメント量（空間3次元）で記述していた。この手法は降着円盤の光度を説明するという点ではある程度の成功を収めてきたが、どの程度のエネルギーを持つ光がどの程度の強さで放出されているか、というスペクトル情報を含まないため、観測との直接比較が難しい。また近似法では正しい輻射場を得られない場合もあり、降着円盤の全貌を正しく理解することはできない。輻射のボルツマン方程式と流体を同時に解くこと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となる。

一方で降着円盤はブラックホールの質量やガス降着量によって様々な様相を呈するため、様々なブラックホール質量、降着量について多数のモデル計算を行うことが必要である。しかしながら、ボルツマン方程式を解く手法は膨大な計算コストがかかるため、現実的に困難である。そこでボルツマン方程式を解く手法と並行して、輻射場を空間3次元、振動数1次元の4次元空間で輻射場を記述した振動数依存型の

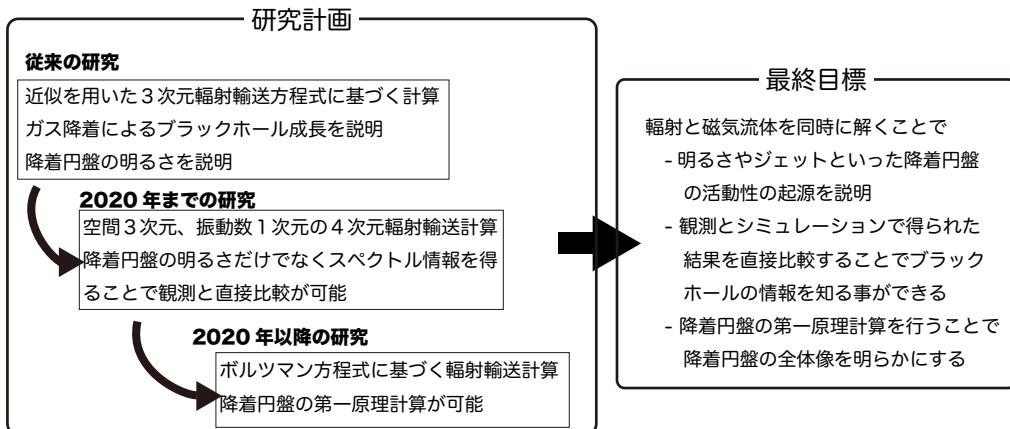


図 4.46 今後 10 年のコンパクト天体の活動性の研究のロードマップ。詳しくは 4.11.6 節を参照。

モーメント法に基づく輻射輸送方程式を解く手法も用いる。この手法は計算量を抑えることができるため、様々なモデル計算を行うことが可能となる。この計算では近似法であるものの、ボルツマン方程式を解く厳密な解と比較することで近似の妥当性を調べ、降着円盤の活動性を担う本質的な物理過程を理解することが可能となる。振動数依存型の計算であるので、輻射スペクトルとその時間変動を円盤のダイナミクスと矛盾無く解ける点が、従来の手法と異なる大きなメリットである。

この振動数依存型モーメント法を用いることで 2020 年までに降着円盤の降着円盤の光度、活動性を明らかにする。さらにエクサスケールのスーパーコンピュータを用いてボルツマン方程式に基づく輻射輸送方程式を解き、降着円盤の第一原理計算を行う。

4.11.7 数値相対論によるブラックホールの形成と強重力場現象の解明

ブラックホールが形成する様な強重力場では、一般相対性理論、強い相互作用、弱い相互作用、電磁相互作用すべてが本質的となる。また、一般に激しい時間変動を伴うため地球上で観測可能な重力波を放出すると考えられている。重力波の観測のためにはテンプレートと呼ばれる重力波の理論波形が必要である。高精度重力波の波形の導出には空間解像度を高くしたシミュレーションが必要不可欠となる。この様な背景の下、すべての基本相互作用を首尾一貫して実装し、十分な空間解像度を持った数値相対論シミュレーションを行うことが今後の課題である。

重力に関しては一般相対性理論、強い相互作用に関しては核物質状態方程式、弱い相互作用についてはニュートリノ輻射輸送、電磁相互作用については理想磁気流体力学を実装する。特に現在までにはニュートリノ輻射輸送と磁気流体力学は個別に実装されてきた。本研究ではこの二つの効果の統一化を図る。ニュートリノ輻射場については、運動量空間を積分したモーメント法の実装から始め、最終的には 7 次元輻射輸送を解くことを長期的目標とする。

2017-2018 年度を目標にテスト計算を行うコードの開発を行う。2018-2020 年度を目標に最適化を行う。2020 年度以降、本格計算を開始する予定である。

4.11.8 第一原理ニュートリノ輻射流体計算による超新星爆発メカニズムの探究

重力崩壊型超新星爆発は、太陽より質量がおよそ 10 倍～100 倍も大きい、重い星の最期における爆発的な華々しい天体现象である。様々な重い星がどのような超新星となり、どのような重元素を作り出し周辺に撒き散らすのか、中性子星あるいはブラックホールなどの極限天体を生み出すのかを定めることは、銀河・宇宙スケールにわたる物質階層の形成や進化を探るうえでも欠かせない。現在までの計算資源では何らかの制約のもとで数値シミュレーションを行わざるをえないため、超新星爆発のシナリオが多く提案されて検証されているなか、明確に答えを導くことが難しかった。しかし、将来の計算資源が十分なものになれば、第一原理的計算である「7 次元一般相対論的ニュートリノ輻射流体計算」が可能となる。これにより、半世紀以上にわたり謎とされてきた「爆発メカニズム」の最終的な答えを導き出して、星中心の鉄コア重力崩壊から爆発へいたる標準的なシナリオを確定する。これをもとに様々な星の運命を系統的に定めることを行い、広く観測データ予測と観測を照らし合わせて超新星現象の全容を明らかにすることが主たる目標である。

研究の状況(背景)と解決するべき課題 超新星爆発の解明には、素過程を担う原子核・ニュートリノ物理を組み込んで、ダイナミクスを扱う一般相対論における流体力学と輻射輸送を解く数値シミュレーションを行う必要がある。なかでも、高温高密度におけるニュートリノ核物理のもとでニュートリノの反応と移流を扱う多次元ニュートリノ輻射方程式を解くことは長年の課題となっている。これまでの研究では、これら物理の要素を段階的に取りいれることが行われ、各時代における大規模計算資源を最大限使い切る計算により、爆発メカニズムの新たな様相の発見がその節目ごとになされてきた。21 世紀初頭になって球対称における第一原理計算が初めて可能となり球対称では超新星爆発が起きないことが明白となった。これは、重力崩壊のうち中心部が跳ね返ることにより打ち上げられた衝撃波が常に停滞してしまうためである。その後、近似手法によるニュートリノ輻射輸送による 2 次元(軸対称)計算が可能となり、流体力学的不安定性とニュートリノ加熱(ニュートリノ吸収によるエネルギー増加)の組み合せが働いて、停滞した衝撃波が復活して爆発す

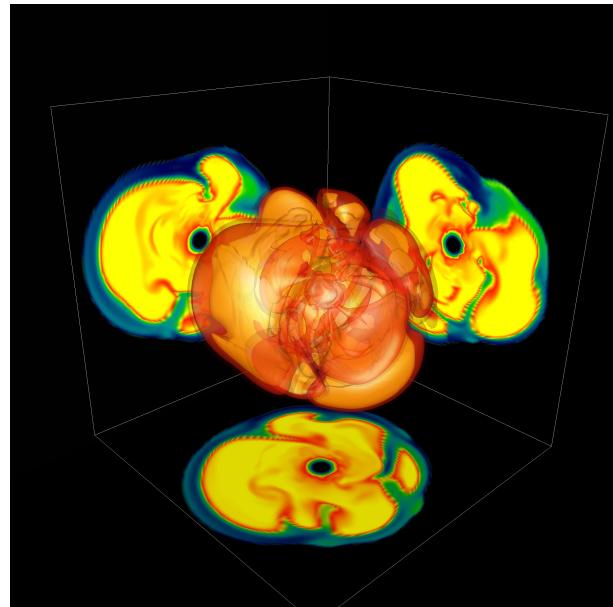


図 4.47 13 太陽質量の親星の超新星爆発の 3 次元計算。中心の 1000km を切り出し、爆発の強さの指標としてエントロピーを色で表示(黒 < 青 < 赤 < 黄の順で爆発が強い)。衝撃波の復活は得られているが、ニュートリノ輻射輸送を近似的に取り扱っている他、一般相対論的效果を取り入れられていないなど、手法に改善の余地が残る。

るシナリオが有力となった。さらに、京コンピュータの登場でようやく3次元計算が行われるようになり、軸対称の制限により得られる爆発とは異なる3次元爆発メカニズムがついに明らかになった。

現在に至っても残る課題は、3次元計算においてニュートリノ輻射輸送および一般相対論を近似的に扱っており、真の第一原理計算には至っていないことである。鉄コア上層部から物質が降着するなかで停滞した衝撃波が復活に転ずるか否かは閾値付近にあり精密計算が欠かせない。また、現時点でも3次元計算の計算コストは巨大であり多数の事例を探索できないため、未発見の多次元ダイナミクスの効果が爆発にとって重要である可能性も否定できない。従って、まず解決すべき課題は、一般相対論のもとでニュートリノ輻射流体を扱う第一原理計算を実現することであり、これにより3次元爆発メカニズムについての明確な結論を得ることである。そのうえで、この結論が普遍的であることを示すためには、第一原理計算を系統的に行なうことが不可欠であり、様々な重い星の条件についてダイナミクスを明らかにして、超新星の爆発エネルギー、中性子星／ブラックホール形成、元素合成、ニュートリノ・重力波の放出などの観測量と照らし合わせて超新星の全体像を理解することが包括的な課題となる。さらに、一般相対論のもとでのブラックホールを含むダイナミクスの記述や磁場を取り入れた第一原理計算により、ガンマ線バーストやマグネターの解明に取り組むことが発展した課題となる。

研究の内容や手法 爆発メカニズムの確定を行いつつ観測をにらんだ普遍性を探るために、ニュートリノ輻射流体力学と一般相対論の第一原理的な手法を段階的に取り入れるとともに、効率のよい計算手法を開発する連携した研究を行う必要がある。この時、ニュートリノ輻射輸送の基礎方程式であるボルツマン方程式を解く計算手法が基軸となる。ボルツマン方程式と流体力学を同時に解く手法（マルチアングル法）はもっとも第一原理的な手法ではあるが、計算量が過大になり計算例が少なくなることが懸念となる。この点を補うため、並行してモーメント法による計算手法による研究を行い、系統的な超新星メカニズムの探索を行うことを可能にする。モーメント法ではニュートリノ角度分布の高次のモーメントを打ち切るため、経験的な関係式を用いるが、これをボルツマン方程式により検証・較正することにより、第一原理的な手法と同等な手法にすることができる。

日本のグループでは、独自に開発した6次元ボルツマン方程式を解く計算コードを組み込んだマルチアングル法による重量級計算と近似手法から発展したモーメント法の軽量化計算の両者による連携した研究が進んでいる。これらを発展させて、3次元超新星シミュレーションの第一原理計算による解明と系統的な探索を並行して実現する。この際、計算資源の増大に応じて一般相対論的な拡張を施し、究極の第一原理計算による爆発メカニズムの最終的な答えを導き出す。

超新星爆発の問題に決着をつけるためには、様々な重い星を初期条件とした系統的な数値シミュレーションが必要である。代表的な星の場合について重量級計算を行って爆発メカニズムを確定するとともに、質量・回転・金属量・磁場の強さが異なる星について軽量化計算による多数例の計算を行なう。また、ニュートリノ・原子核物理の不定性による影響を確定することも重要である。これらにより、どのような星が爆発して中性子星を残すのか、それとも爆発に失敗してブラックホールになってしまうのか、などの分類を行い、高密度天体誕生、放出物質の元素量、超新星ニュートリノ・重力波のシグナル予測を行い、観測データとの連携から超新星の全容を明らかにする。

ロードマップ 現在までに、京コンピュータにより、マルチアングル法による2次元（軸対称）空間における第一原理的な超新星爆発シミュレーションが可能となった。結果は図4.48に示す。この時点の計算

資源の規模で、近似手法においては2次元超新星の数100例におよぶ探索計算が行なわれており、3次元超新星も複数例にわたって計算可能となっている。このように第一原理計算が実現可能となった際には、その一部を近似した軽量化計算では系統的な研究が可能となっている。今後の研究においても、段階的な第一原理計算の実現と系統的な探索を並行して全体を網羅する研究を進める。

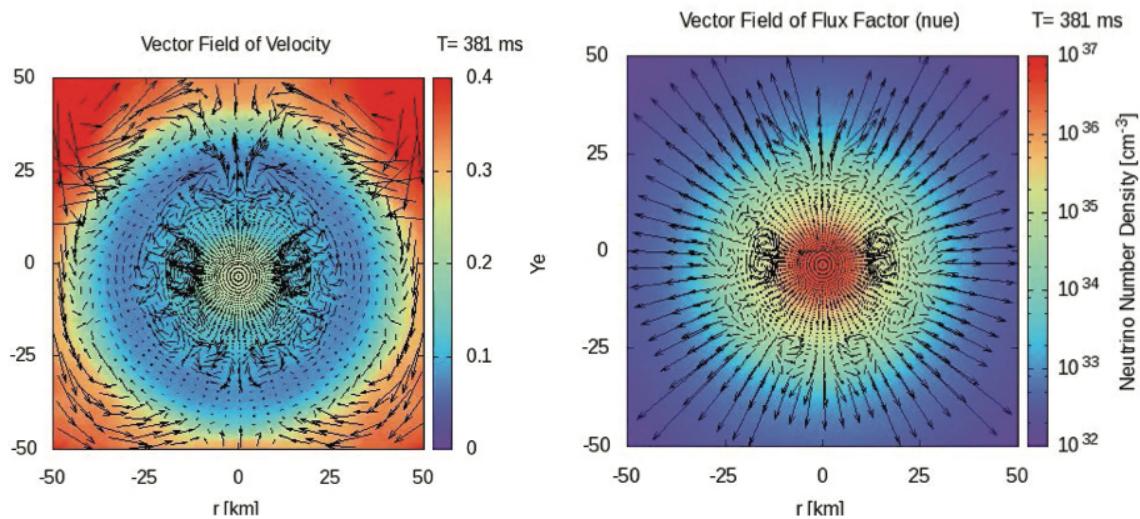


図 4.48 ニュートリノ輻射輸送の第一原理計算から得た、物質とニュートリノの分布のスナップショット。左：物質の Y_e のカラーマップと速度ベクトルの重ね合わせ。右：電子ニュートリノの数密度のカラーマップと flux factor ベクトルの重ね合わせ。原始中性子星の内部ではニュートリノが物質と強く相互作用するため、ニュートリノは物質の対流にひきずられながら外側へ拡散する。十分に密度が低くなった外側では、ニュートリノと物質との相互作用が弱くなつて半径方向に真っ直ぐ飛んでいくようになる。

「ポスト京コンピュータ」の実現が見込まれる 2020 年頃には 3 次元空間における第一原理計算が可能となるだろう。この時、軽量化計算では 3 次元空間における系統的計算が可能となり、元素合成やニュートリノ・重力波などの観測量の予測データを提供するようになるだろう。2020 年初頭の段階では、重力場の取り扱いに制限を課して一般相対論的な効果を取り入れることを重視するが、計算資源の増大とともに段階的に制限を取り除き 2020 年半ばには一般相対論による第一原理計算が予測される。これにより代表的な星については究極の計算が行なわれて標準的な爆発メカニズムについての断定的な解明が期待される。また軽量化計算による系統的な計算によりメカニズムの多様性が明らかになり、観測量も一般相対論に基づいた信頼度の高いものとなるだろう。将来的にはブラックホール形成などの例も扱えるようになる。こうした計算が可能となれば磁場を含む第一原理計算が視野に入り、マグネター・ガンマ線バーストの解明に深いメスが入れられるようになる。

計算科学的特徴 もっとも計算資源が必要となるニュートリノ輻射輸送の部分は、原理的には 6 次元ボルツマン方程式を解く問題であり、空間 3 次元、ニュートリノ運動量 3 次元空間におけるニュートリノ分布の時間発展を扱うグランドチャレンジ問題である。この時、分布変動に関わるニュートリノ反応は、エネルギー依存性が強く反応率の違いによる時間スケールが大きく異なること、高温高密度の極限環境のもと

での反応率を求めることが難しいことが問題を更に難しくしている。強いエネルギー依存性により、エネルギーの異なるニュートリノ分布の相互について密結合として扱い、時間発展を陰的に解くことが要求される。

これらを解くための方程式を線形化したのちの計算問題は、ニュートリノ反応に起因するブロック密行列を対角上に持ち、ニュートリノ空間移流による非ゼロ要素が線状に現れるパターンを持つ大規模粗行列の解法に帰着する。空間3次元のメッシュ数を N_r, N_θ, N_ϕ 、ニュートリノ運動量空間3次元のエネルギー・角度メッシュ数を $M_\epsilon, M_{\nu_\theta}, M_{\nu_\phi}$ とすると、密ブロック行列はサイズ $M_\nu \times M_\nu$ ($M_\nu = M_\epsilon M_{\nu_\theta} M_{\nu_\phi}$) であり、これらが空間グリッド数 $N_{space} = N_r N_\theta N_\phi$ の数並ぶパターンにより、全体の行列サイズは $N_{total} \times N_{total}$ ($N_{total} = N_{space} M_\nu$) となる。少なく見積もって空間グリッド数を 100^3 、ニュートリノ空間グリッド数を 10^3 としてもベクトルは 10^9 次元あり、粗行列は $10^9 \times 10^9$ となる。また、ニュートリノ種類を N_f とすると、 N_f 本のベクトルを扱い、方程式を N_f 回解くことになる。電子型ニュートリノ、電子型反ニュートリノ、ミュー・タウ型を区別して扱うために最低でも $N_f = 3$ は必要である。扱う行列・ベクトルのサイズが巨大であるため、行列を反復法によりいかに効率よく解くかが課題である。長大なベクトルは空間的に隣接グリッドの結合があり、エネルギー・角度については密結合を持っている。これらを分散してメモリ保持しつつ、行列要素の計算、行列解法、ベクトルのアップデートを行うことを超大規模並列において実現しなければならない。

超新星計算では爆発の可否を見出すために長大な時間ステップ数をかけて長時間発展を行う必要がある。したがって、時間1ステップにかかる時間がどの程度かが系統的な計算が可能になるかどうか分かれ目となる。ニュートリノ分布に非線形な部分があり、ニュートリノ輻射輸送と流体力学を連立しなければいけないため、1時間ステップ進めるためには上記の行列解法を数回以上解くことが必要となることにも留意しなければならない。流体力学、ニュートリノ移流、反応を分けることにより効率よく解くことができるかどうかも検討課題である。

さらに究極の第一原理計算に向けて、一般相対論的な取り扱い、磁気流体力学における乱流の取り扱い、などによる計算の複雑化や高度化が予想される。また、天体観測に対応するためには、空間領域を広くとったうえで、元素合成過程や光子の輻射輸送を扱う計算も必要となる。このように超新星現象の解明には様々な計算過程を統合したシミュレーションが必要とされる。以下では、もっとも計算負荷が大きい部分であるニュートリノ輻射輸送についてボルツマン方程式による扱いの場合について将来的な計算規模を評価する。

要求性能表の算出根拠 ここでは京コンピュータで現在行われている計算例をもとに計算規模をスケールすることで、およそ10年後のトップクラスのスーパーコンピュータを想定して必要となる計算機性能を評価する。

まず京における空間2次元（軸対称）での計算量は、解像度が空間 384×128 、ニュートリノ空間 $10 \times 6 \times 20$ ニュートリノ種類3の場合、バウンス後400 msまでの時間発展に必要な資源は1モデルについて3Mノード時間である。実行性能はピーク性能の10%程度であり、全浮動小数点演算量は 1.4×10^{20} flop、1ステップあたりでは 4×10^{13} flopである。1ステップあたりの演算量の内訳は、行列解法の計算と反応率の計算でおよそ半々である。前者については密ブロック行列の反復法による解法を想定して演算量は $M_{ang}^2 M_\epsilon N_s N_f n_{op} n_{iter}$ と見積もられる。ここでブロックサイズは反応による角度変化を扱う場

合に $M_{ang} = M_{\nu_0}M_{\nu_\phi}$ である。(もしもエネルギーが変わる非弾性衝突などを全て陰解法に組み入れる場合は M_ν に置き換える必要があり、さらに演算量が増大する。) 後者の反応率の計算においては、エネルギー・角度が変わる反応について $M_\nu^2 N_{space} m_{op}$ と評価できる。 n_{op}, n_{iter} は行列解法で発生する演算回数と反復回数、 m_{op} は反応率計算での演算回数のパラメータである。現在の 1 ステップでの演算量からパラメータを決定してスケールアップに用いる。

10 年後には、空間 3 次元の第一原理計算によりバウンス後 1 秒の時間発展にわたる多くのモデル計算を系統的に行って、多様な爆発メカニズムを確定していくこと、を想定する。解像度は空間 $512 \times 192 \times 384$ 、ニュートリノ空間 $24 \times 24 \times 24$ 、ニュートリノ種類 3 とする。ステップ数は時間刻みが小さくなることを想定して 10^7 ステップとする。この時、1 ステップの演算量は 4×10^{18} flop (4 Eflop) であり、総演算量は 1 モデルあたり 4×10^7 Eflop となる。1 モデルを 3 週間程度で計算して、初期条件となる親星の金属量・質量・回転について変えた 20 モデルを行うことを想定した値を総演算量とした。メモリ量は、密ブロック行列要素を格納する領域をもとに反応率を格納する部分を加えて評価した。ストレージ量は、6 次元ニュートリノ分布 3 種を保持する量が 1 スナップショットで 13TB であり、 10^4 スナップショット分で 130PB である。データ書き出し速度は 10^3 ステップに 1 スナップショットの出力で、演算時間の 1% 程度とした。通信については、ノード数を 10^5 にした時に 3 次元空間での境界面のグリッドにおいて隣接のニュートリノ分布をやりとりするデータ量を見積もり、通信時間は演算時間に対して 1% 程度を要求した。

4.11.9 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

超強度の磁場を有する中性子星磁気圏や活動銀河核からの相対論的ジェットなどでは、しばしば熱的エネルギーをはるかに凌駕する非熱的粒子（宇宙線）が作られていることが知られているが、エネルギー等分配から外れて一部の粒子が選択的に超高エネルギーまで加速されるメカニズムは未解決である。 10^{15} eV までは我々の銀河系内の超新星爆発衝撃波で作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おらず、また更に 10^{15} eV を超える高エネルギーの領域になると、メカニズムだけでなく何処で加速されているかもわかつていない。これらの高エネルギー粒子の起源は活動天体のダイナミッ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。

非熱的粒子加速には、平均自由行程が特徴的系のスケールに比べて十分大きな無衝突系での物理の解明が必要となる。そのため計算機シミュレーションとしては、プラズマ粒子コードと呼ばれる方法を用いた研究が進んできている。1970 年代から 80 年代にプラズマ粒子コードの基本アルゴリズムは完成しており、核融合プラズマを始めスペースプラズマ現象の理解などにも供され大きな成果を上げてきた。また 1990 年代ごろから積極的に天体现象にも用いられるようになってきている。最近では、超強度磁場でのリコネクション問題を解くために、輻射減衰を組み込んだコードの開発も始まっており、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も行われている。高エネルギー天体现象の解明には、相対論的プラズマの理解が必要となっており、新たな数値アルゴリズムやスキームの開発が行われようとしている。

プラズマ粒子計算は、これまで限定期的な問題にしか使われてこなかったが、スパコンの技術革新に伴

い、粒子効果の効くプラズマ運動論スケールから電磁流体スケールに及ぶ階層構造の解明や、相対論的効果の効く高エネルギー領域での輻射と動力学の相互作用の理解が進展すると考えられる。通常の空間マルチスケールだけでなく、エネルギー領域を広げた相対論的プラズマの理解には、新たなコード開発も必要となる。特に相対論的プラズマ領域を目指す研究では数値チェレンコフの問題や輻射過程のコードへの組み込みなどアルゴリズムの開発も必要である。またマルチスケールの物理を目指すためには、粒子系における自由境界条件の開発も必要であり、例えば重力回転系における降着円盤（磁気回転不安定）の問題では、粒子コードでも安定に解ける Shearing Box Boundary のスキームの開発が必要である。

計算手法は、プラズマを超粒子としてラグランジュ的に解きつつ、マクスウェル方程式の時間発展をオイラー的に差分法で解く、particle-in-cell 法を採用する。計算規模は、例えば磁気回転不安定 (MRI) の 3 次元 PIC シミュレーションの場合、 4096^3 グリッド、セル当たりの粒子数を 10,000 個の高プラズマ β 計算となり、全粒子数は 10^{15} 個となる。非線形飽和段階まで追う必要があるため、時間ステップ数が數 10 万になると見込まれ、それを 1 プロダクトランあたり数 100 時間で終わらせたいと考える。その結果、演算性能として 150PFLOPS、総メモリを 100PB 必要であると概算した。

4.11.10 6 次元ブ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

地球磁気圏のその場観測、太陽・恒星フレア、超新星残骸衝撃波やブラックホール天体周辺などからの高エネルギー放射から示唆されるように、宇宙には熱的分布から著しく外れた非熱的な高エネルギー粒子があまねく存在しているが、その生成メカニズムには依然として多くの謎が残っている。特に、超高エネルギー宇宙線の起源は宇宙物理学の最大の謎の一つである。この長年の問題への新たなアプローチとして、プラズマ位相空間分布関数の時間発展を直接解く電磁ブラソフシミュレーションを実施する。本手法を用いることで、熱的プラズマに比べて数が圧倒的に少ない非熱的プラズマをより正確に記述することが出来るようになり、従来の粒子法では達成困難な問題に迫ることが出来る。

ブラソフシミュレーションは位相空間分布を流体的手法で解く手法である。従来の粒子法固有の統計ノイズが発生しないため解像度が良い、全ての物理量がオイラー的のため並列効率が良いなど、超並列計算機に適合した技術である。本研究は電磁プラズマを対象としたブラソフシミュレーションだが、無衝突自己重力系においてもブラソフシミュレーションの有用性が認識され、研究が進められている。両分野の共同研究により、計算科学・宇宙物理学の両面での相乗効果やブレークスルーが期待される。

研究の状況(背景)と解決するべき課題 ブラソフシミュレーションの数値計算上の課題の一つは、速度空間分布関数をいかに精度よく解くか、という点である。特に、磁化プラズマの運動を速度空間上で記述することは多くの数値計算上の困難が伴うため、現在でも位相空間が 4 次元以下の静電ブラソフシミュレーションが多くを占める。しかしながら、より一般的なプラズマ諸現象を対象とするには、電磁プラズマの扱いが必須である。計算機資源の発展もあり、近年になって実空間 2 次元・速度空間 3 次元の 5 次元電磁ブラソフシミュレーションが、国内、フランス、米国において成果報告されるようになってきた。しかしながら、依然、非熱的分布生成を議論する高精細な計算には至っていないのが現状である。また、実空間 3 次元・速度空間 3 次元の 6 次元電磁ブラソフシミュレーションは、計算機資源の観点から、2016 年時点で未達成である。

研究の内容や手法 以上のように、ブラソフシミュレーション研究は従来の粒子法に比べて発展途上な部分が多いが、一方で流体的計算手法のため、超並列計算機により適合した計算手法である。そこで、次世代・次次世代の超並列計算時代に向けて、6次元ブラソフシミュレーション手法を確立する。解決すべき課題として、速度空間分布の更新を高精度かつ安定に行うアルゴリズムの開発、大きな時間ステップ幅でも安定に解ける時間積分法の開発、6次元並列計算に対する最適な領域分割手法や多重ループに対する効率的なチューニングの開拓、が挙げられる。これまでのブラソフシミュレーションでは、非熱的粒子生成という観点からはほとんど議論されていない。今後10~20年で、無衝突衝撃波、磁気リコネクション、降着円盤に代表される宇宙に普遍的な物理素過程をターゲットとして、それに伴う非熱的分布の形成メカニズムに迫る。

ロードマップ 現在達成可能な5次元電磁ブラソフシミュレーションを大規模化、高精度化することで、ブラソフシミュレーションによる非熱的粒子生成の議論を進める。これと並行して、6次元電磁ブラソフシミュレーションの技術を確立し、10年後には数百万エクサフロップ級の計算の達成を目指す。

要求性能表に出した数字の算出根拠 プラズマ非熱的粒子生成に迫るためにには、速度空間を広くかつ高精細に取る必要がある。また、非熱的粒子生成は粒子スケールで発生する一方で、現実の系へ適用するためには大局的進化も同時に追跡する必要があるため、実空間についても広く取る必要がある。そのため、実空間グリッド数が 1024^3 （イオン慣性長の100倍超）、速度空間グリッド数が 100^3 （熱速度の10倍超）程度必要になると見込んでいる。

4.11.11 惑星系形成の大域シミュレーション

研究の状況(背景)と解決するべき課題 系外惑星の発見にともなって、地球のような生命の存在できる惑星が他にも存在するのだろうかという問いは、もはやサイエンスフィクションに属するものではなく、宇宙科学における中心的課題となったと言っても良いだろう。このことは、系外惑星に関する観測が、より多くを発見(detection)する時代から道程されたものを特定付け(characterization)する時代へと移行しつつあることによっても今後加速されるであろう。太陽系における惑星探査がアストロバイオロジーの色を強めつつあることとも共鳴する。

その「第2の地球」を考える上での枠組みが惑星系形成論である。それは、太陽系の成り立ちを説明することを意識して立ち上げられた。そこでは(1)原始惑星系円盤においてはガスとダストが共存する中、(2)ダストが濃集して重力不安定を起こすことで微惑星が形成し、(3)無数の微惑星どうしの重力相互作用から原始惑星が生み出され、(4)さらに原始惑星どうしの相互作用から最終的な太陽系の形が出来上がった、という大枠のシナリオが提唱された。そして、(3)の過程を理解することにおいて「大規模シミュレーション」の果たした役割は極めて大きなものであった。

ところが、系外惑星の発見が相次いで「太陽系とは異なる形の惑星系の成り立ちを説明する」という研究が熱を帯びた時代においては、「大規模シミュレーション」が大きな活躍をすることはなかった。そこでは(4)の過程に関して様々なアイディアが試され、そのなかから、例えば「惑星移動」という概念が確立した時代であったということができよう。一方で(1)～(3)の過程に関連して存在し続ける難問が解決されたわけでは決してない。(4)の過程を研究する際の初期条件は、当然(3)までの過程を経て得られるものであるのだが、このことを「まずは横においておく」ということがなされて、問題の部分的解決を狙う研究が展開してきたと言うこともできるだろう。

系外惑星の観測的研究は detection から characterizationへのモード転移を迎えようとしている。であれば、惑星系形成論も、惑星系の多様性の起源の探究、そこにおける生命の存在しうる惑星形成の可能性の検討に関して、そのステージアップを狙うべきではないだろうか。そして、そこにおいて「大規模 N 体シミュレーション」の果たすべき役割はないのだろうか。

実は、この「大規模 N 体シミュレーション」が活躍しなかった間にも計算機能力の向上があり、このシミュレーションが惑星系形成論のレベルアップに貢献するポテンシャルは大きくなっている。ここでは、系外惑星の研究からも触発された要素を考慮しつつ、新たな要素を「大規模シミュレーション」の新しい地平線を切り拓く。

ここで、大規模シミュレーションのうち、N 体計算とは粒子が N 個存在したときに、それぞれの粒子間距離から粒子間重力を計算し、すべての粒子間相互作用を計算することでその N 個の粒子の運動を解いて行く方法である。 N^2 のオーターの計算となるため、粒子数が多くなるととても重い計算となり、当初確立された古典的形成論である、惑星のその場形成は数千から 1 万体の粒子数の計算により検証された。

古典的惑星形成理論とは、以下のようなシナリオである。ガスとダストの円盤内でダストが重力不安定をおこし、キロメートルサイズの微惑星を形成し、それらの微惑星が衝突合体をおこして、大きい物が暴走的に成長する暴走成長段階を経て、その暴走成長天体は周りの微惑星を食べながら成長する寡占成長段階を経て、火星サイズの原始惑星が形成され、最後に原始惑星どうしの巨大衝突がおこり、地球型惑星が

誕生する。

これに対し、問題点としては以下のようにあげられる。

- これまでの計算の初期条件の微惑星の質量が大きすぎるため、 N 体計算の解像度が粗すぎる。解像度をあげると、新しい物理現象がでてくることがわかった。具体的には惑星の円盤の外側への動径方向の移動というものがあげられる。動径方向の移動を考慮できないと物質の円盤内の循環ということもとりあつかえない。
- 粒子数に制限があったために動径方向の移動を考慮できるほど動径方向に広い微惑星円盤の初期条件から計算を始めることができなかった。今後、円盤内で水が氷になる雪線も含めた広い円盤を考慮し、計算する必要がある。円盤で雪線以遠内では固体面密度が増え、衝突確率が増加し、惑星の成長速度が雪線のすぐ内側より速くなる。つまり、大きな天体が円盤の内縁と雪線のすぐ外側で同時に形成されるということになる。それらの集積進化を同時に解くには、解像度をあげたまま粒子数を増やし広い円盤においてシミュレーションする必要がある。
- 本来、天体どうしが衝突をおこしたとき、衝突破壊がおこり、破片が生成される。天体どうしの衝突がおこったとき今まで完全に合体させていたところを、衝突破壊による破片もシミュレーションにいれたところ、微惑星が成長しつつ、動径方向に移動することがテスト計算により明らかになった。この破片の効果も大規模シミュレーションに入れる必要があるが、今までの大規模 N 体シミュレーションには取り入れられていなかった。
- 微惑星の集積はガス円盤の中で進む。ガスがあることにより、天体にはガス抵抗とタイプ1惑星移動の効果が働く。両方の効果とも、天体を動径方向内側へひきずっていく効果があることが知られている。特に月質量以上になると、タイプ1惑星移動の効果は強く効いてきて、惑星が中心星に落ちて行くという問題がある。しかし、これらの効果は惑星からガスへのバックリアクションを考慮したものではなく、実際はガスと天体がどのように相互作用するのかは明らかにされていない。

上記の通り、今後の大規模シミュレーションの課題はいかに大粒子のシミュレーションを行うことができるかということになる。

研究の内容や手法

- N 体計算の解像度の増加

微惑星の最小質量をこれまでの $1/10 - 1/100$ 倍にすることで N 体ダイナミクスを記述するまでの解像度を向上させる。

- 動径方向の計算範囲の増加

動径方向の計算範囲を大きく広げ、惑星移動がおきつつ、質量集積がおきる過程を追跡する。範囲は地球型惑星領域から海王星領域までを考えており、数十 AU にわたる。計算量域内に雪線といった動径方向の不連続を導入し、その惑星系形成に及ぼす効果を検証する。

- 衝突破壊の効果の導入

天体衝突時の破片生成過程も導入し、天体の合体成長だけでなく、微小天体の生成も同時に追跡する。

- ガスも SPH 粒子として扱い、天体とガスとの相互作用を明らかにする

微惑星や原始惑星がガス円盤の中でどのようにガス抵抗やタイプI惑星移動をうけるかというのを、天体からガスへのバックリアクションも考慮して計算するためにガスもSPH粒子として扱い、大規模シミュレーションを実行する。

4.11.12 地球・惑星形成のシミュレーション

研究の状況(背景)と解決するべき課題 星形成の副産物として星の周りに形成された原始惑星系円盤から惑星が誕生する。観測により、出発物質はミクロンサイズのダストであることがわかっている。これらダストが合体集積することによって、最終的に惑星サイズの天体が形成される。この惑星形成の過程では、様々なサイズの天体の衝突が無数に起こる。衝突過程は単純ではなく、衝突条件によっては、天体が破壊されたり、岩石が溶融したり、組成すら変化させる複雑な過程である。惑星科学におけるこれらの天体衝突過程に関しては、これまでにもある程度のシミュレーションがなされてきたが、計算精度がまだ不十分であること、惑星形成過程で起こりうる様々な衝突条件におけるパラメータスタディーが不十分であることから、個々の惑星の特徴がいかにして生じたのかに答えるだけの十分な確度がない。

研究の内容や手法 惑星形成過程で必然的に起こる、様々な衝突条件における天体衝突現象を、高解像度のシミュレーションを実行することによって、惑星の形成過程そのものだけでなく、衝突による個々の天体の特徴がいかにして生じたのかまでを明らかにする。惑星科学において、天体衝突の計算で広く使われてきたSPH法(Smoothed Particle Hydrodynamics)を用いて衝突の数値計算を行う。その際、惑星科学において重要な実際の物質(岩石・氷・鉄など)の状態方程式を用いる。SPH法は、流体を多数の粒子に分割し、粒子間の相互作用を計算機で解く手法であり、粒子数が計算の解像度となる。これまでの衝突計算では、多くて100万粒子の計算がなされてきた。3次元の計算においては、一辺が100粒子程度の解像度であり、多くの問題では、十分な解像度が得られていない。そこで、本計画では、最終的に10億粒子の計算を様々な衝突条件において実行する計画である。

研究のロードマップ 2020年までには、1億粒子の衝突計算のパラメータスタディーができるようにし、2020年以降では、粒子数を10億粒子までに拡張する。

4.11.13 個々の惑星の進化とその表層環境の形成

現在のポスト京萌芽研究の構造に合わせて、

- 地球型惑星の個性と進化
- 惑星表層環境の多様性とその進化
- ガス惑星の多様性とその進化

の三つにわけて記述する。

地球型惑星の個性と進化 惑星進化の「様相」を系統的に理解する上で鍵となるのは、(a) その惑星のサイズとマントル対流が起こるための臨界サイズとの大小関係、(b) 火成活動とマントル対流の相互作用、(c) マントル遷移層における岩石の高圧相転移（地球と金星）、(d) プレート・テクトニクス（地球）の四つの要因であることをこれまでの研究から結論した。しかし、この知見は主にマントル対流を二次元の矩形の箱に於ける熱・組成対流としてモデル化して得たものであり、三次元球殻マントルでも同様にこれらの要因が支配的役割を演じるかどうかは自明ではない。さらにこれらの研究を通して、現在の惑星形成論から推定される惑星進化の初期状態と、45億年を通じた惑星進化の様相から推定される初期状態とは整合的でないという問題が生じつつある。

上述の惑星内部進化の四つの主要因が3次元球殻マントルでも同様に働くかどうかを確認するため、現在この目的のために開発中の「疑似圧縮法」を用いた数値コードを用いたシミュレーションを行う。さらに、特にその形成過程から現在まで進化の全ての過程が観測から制約される月と挑戦的な探査が計画されている火星を題材として、(b) の火成活動とマントル対流の相互作用が惑星内部進化どのように支配したか、これらの惑星の形成過程がその後の進化にどのような影響を及ぼしたかを探求する。

惑星表層環境の多様性とその進化 現状の惑星大気シミュレーションでは、火星気象の特徴的現象である全球ダストストームの表現も、また、金星気象の特徴的現象であるスーパーローテーション（四日循環）もうまく表現できない。まして、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指摘されている）の考察には耐えられない。この状況に対するに、(a) 大気表現の高分解能化を進めて対流、波動、乱流など微細な運動構造ができるだけ陽に表現すること、(b) 放射過程、物質化学過程、雲降水過程など流体運動以外の様々な物理過程の導入と氷床や海洋など大気以外の系を導入による気候システムモデル化をすすめること、(c) 計算の正当性を担保する方法論を確立すること、が求められている。

今後10年では、上述三つの課題のうち特に(a)の高分解能化に焦点をしぼって、火星大気ならびに金星大気の現在姿を明らかにすることをめざす。火星については、大気大循環モデルにおいて日変化にともなう対流を十分に解像する数値計算を実現し、それによる数値シミュレーションによって、地表面からのダストの巻上げとその全球拡散の描像を得る。金星については、大気大循環モデルにおいて放射による熱輸送と雲物質輸送を陽に計算し、できるだけ細い重力波^{*23}を表現する高分解能計算によりこれを実行、スーパーローテーションの自律的な表現を得る。特に金星に関しては金星探査機「あかつき」の観測が蓄積しつつあり、現在行われつつある研究蓄積の上にタイムリーな計算となることが期待できる。

ガス惑星の多様性とその進化 現状の巨大惑星シミュレーションは、まだその試みが着手されたに過ぎないといつてよい状況にあり、木星や土星に特徴的な現象である大気表層の縞帶構造や、木星・土星の赤道順行流（超回転、西風）と天王星・海王星の赤道逆行流（東風）の起源などは未だよく理解されていない。これらの惑星では、大気表層に見られる典型的な渦のサイズに比して惑星半径が大きいため、水平渦を解像しつつ大気の全球循環を計算するためには莫大な計算資源が必要となること、また、惑星内部の流体層の厚さが惑星半径に比して小さくなく、大気表層の計算に惑星内部のほぼ全体の計算を結合させねばなら

*23 重力作用によって生じる界面での波のことであり、gravity waveの訳。一般相対性理論の予測する時空の波は英語では gravitational waveであり区別されるが、日本語の訳語は同じく重力波となってしまい、紛らわしい。

ないことがその困難の主たる原因となっている。

今後の10年は、この課題に対して大規模高解像度長時間計算を実現することにより、大気表層から内部にいたるまでの巨大惑星流体層全球計算を実現し、内部構造と無矛盾的な縞帶構造の表現や赤道での平均東西風の表現を得、その生成維持機構を理解することをめざす。流体力学に特化した単純な系での圧縮系(音波を許容する)全球計算の可能性を検討し、順次、放射による熱輸送、熱力学の精緻化、雲物理過程の導入を進めて、鉛直対流(雲対流)の存在を許容する巨大惑星流体層のシミュレーションを実現する。

4.11.14 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

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き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。よつて、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。

4.11.15 輻射磁気流体計算による太陽恒星ダイナモの探求

本研究の最終目標は太陽黒点数11年周期の謎を解明することである。この問題には新たな物理の探求という面と、宇宙環境学の推進という面がある。11年周期は、乱流と磁場、回転の相互作用の結果として発現すると考えられている。しかし、なぜ11年になるのか、また、それにともなう蝶形図やヘールの法則といった首尾一貫した法則が出現する理由はまったくわかっていない。特に首尾一貫したルールを司る未知の物理があるのであろう。また、太陽活動は地球を含んだ太陽系環境に直接影響する。そのため、11年周期の解明は宇宙環境学の推進にも貢献する。

研究の状況（背景）と解決するべき課題 これまでに、全球殻を領域とした計算で、10-20年程度のランダムな磁場周期が再現できるようになっている。しかし、時間・空間スケールの小さな太陽表面付近は計算領域に取り入れることはできていないために、計算の中に黒点は出現していない。また、太陽のように11年の規則的な周期も再現できていない。

研究の内容や手法 音速抑制法を用いることで、太陽対流層の底から表面までを一貫して扱い、対流層内部の磁場生成から黒点形成までを一貫してあつかう。また、対流層内部で乱流の慣性領域を二桁程度解像することで、規則正しい周期を再現する。

研究のロードマップ ポスト京の完成する2022年頃までは、ある程度領域を水平方向に制限して、対流層の底から恣意的においた磁束管が光球に浮上する様子を再現する（180億格子点）。ポスト京完成後は、太陽全球を包括した計算で磁場生成から黒点の形成までをあつかう計算をおこなう。

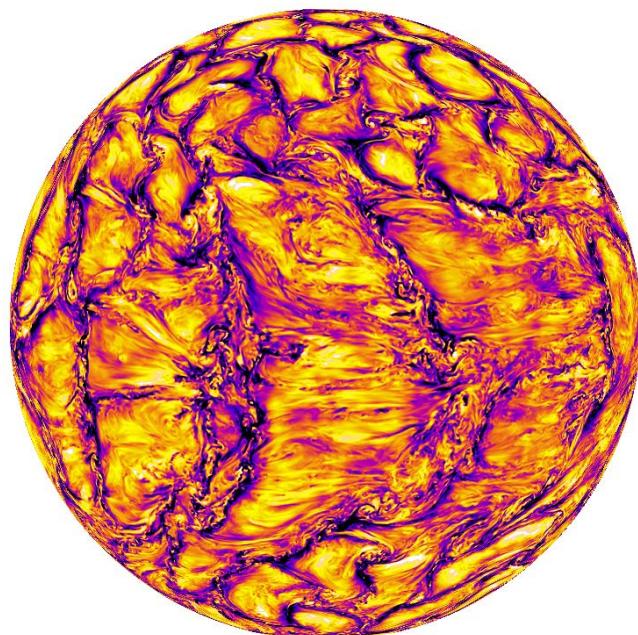


図4.49 太陽全球計算の結果（鉛直速度）。回転の影響を受けた乱流が複雑であるが、規則だったパターンを見せていている。

4.11.16 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

太陽フレアなどの激しい太陽活動に伴い生成される高エネルギー粒子は人工衛星に障害を引き起こしたり、宇宙飛行士や航空機の乗員に被爆を引き起こす可能性が指摘されている。このように地球に降り注ぐ高エネルギー粒子変動の予測を行うには、粒子の加速源として最有力視されている無衝突衝撃波の理解が必須である。無衝突衝撃波は高度に非線形な物理過程に支配されているため、数値シミュレーションによ

る研究が必須である。そのために第一原理に基づくプラズマ粒子計算による衝撃波粒子加速機構の理解を目指す。この研究は益々発展するであろう人類の宇宙開発において重要な意味を持つことはもちろん、得られた知見は太陽圏外の天体衝撃波における宇宙線の加速機構の理解にも繋がることになり、その意義は大きい。

これまでの研究の状況と解決すべき課題 プラズマ粒子シミュレーションは第一原理計算として無衝突衝撃波の研究に一般的に用いられているものの、莫大な計算量を要するため多次元計算の空間スケールは質量の軽い電子スケールにとどまっている。イオン加速は流体スケールの準平行衝撃波において最も効率良く起こると考えられているが、その議論に必要な空間スケールのシミュレーションには至っていないのが現状である。また、粒子シミュレーションでは速度分布関数を有限個の粒子で記述するため大きなノイズが生じ、これによって数値的な衝突が生じることが知られている。イオン加速の調査に必要な長時間計算で物理的な結果を議論するにはそれだけ数値的衝突の効果を抑えた精度の良い計算が不可欠であり。そのためには現状の10倍から100倍程度の粒子数を用いる必要がある。

研究の内容や手法 空間2次元のプラズマ粒子シミュレーションコードを用いる。問題規模は $18,432,000 \times 36,864$ で総粒子数は 10^{15} (セルあたり平均1000個以上)とする。この時の領域サイズはイオン慣性長 λ_i で規格化して $L_x = 1.8 \times 10^5 \lambda_i, L_y = 3.6 \times 10^2 \lambda_i$ となり、太陽圏内の衝撃波として標準的なマッハ数10程度の準平行衝撃波でのイオン加速を議論するのに十分な大きさである(格子幅はデバイ長とし、イオン・電子の質量比を $m_i/m_e = 100$ 、Alfven速度を $v_A/c = 0.01$ とする)。積分時間はイオンジャイロ周期で規格化して $\Omega_{ci}T = 10^3$ とすると、時間更新は $\sim 10^7$ 回を要する。

4.11.17 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。

4.12 計算機要求性能まとめ

ここでは、2026年頃における課題解決のために必要な計算機資源見積りを、代表的アプリケーションに対する要求性能表としてまとめる。

「計算科学ロードマップ」アプリケーション要求性能表

※ 現在精査中。更新版はWebに掲載予定。<http://hpci-aplts.aics.riken.jp/kentoukai/>

表 4.12 要求性能表 (1/3)

「計算科学ロードマップ」アプリケーション要求性能表

※ 現在精査中。更新版はWebに掲載予定。<http://hpci-appls.aics.riken.jp/kentoukai/>

表 4.13 要求性能表 (2/3)

表 4.14 要求性能表 (3/3)

付録 A

用語集

用語	解説
0	
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。
1	
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時間。
2	
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。
3	
3 体力, 三核子力	「核力」の項目を参照。
4	
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。
A	
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。
Alder 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。
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。

(次ページに続く)

用語	解説
allreduce, allgather, alltoall	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つ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。alltoall 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	
Belle II 実験	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。
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	ボトムクォークを一つ含む中間子の総称。
B 中間子混合行列要素	B 中間子のうち中性の B 中間子は B^0 と \bar{B}^0 の 2 種類が存在する。これらの中性 B 中間子はお互いに粒子反粒子の関係にある。これらの粒子は弱い相互作用の影響で互いに変化することができる。この変化頻度のうち、強い相互作用に関する部分を因子化したものを B 中間子混合行列要素 B_B とよぶ。実験値での変化割合は強い相互作用と弱い相互作用を含む値であるが、理論計算による B_B を用いることで実験値から弱い相互作用による影響を引き出すことができる。
C	

(次ページに続く)

用語	解説
Convolutional Neural Network	入力データの1部との相関を計算するようなフィルターを多数用意し、データ上でフィルターを走査した結果を次の層へ入力するような畳み込み層をもつニューラルネットワーク。
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变であるとき、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	電子スピノン共鳴の略。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。
Field Programmable Gated Array	プログラム可能な論理ゲート回路。略称は FPGA。
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。
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こと。
G	

用語	解説
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。
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。
GPU	グラフィクスプロセッシングユニットを参照。
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タンパク質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、その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一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 戰略分野	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。

(次ページに続く)

用語	解説
Izhikevich モデル	力学系の研究者であり理論神経科学者の Eugine Izhikevich が考案したニューロンの点モデル。膜電位の他に内部パラメータを持ち、パラメータを変更することで実際のニューロンが示す様々な発火パターンを再現することができる。
J	
J-PARC	J-PARC (Japan Proton Accelerator Research Complex) は大強度陽子加速器を中心とする実験施設で茨城県東海村にある施設。世界最高クラスの強度の陽子ビームを使って生成される、中性子、ミューオン、K 中間子、などの 2 次ビームを用いたさまざまな実験が行われている。
K	
Krylov (クリロフ) 部分空間反復法	線形連立方程式を数値的に解く計算方法 (アルゴリズム)。特に大規模な疎行列を係数とする連立方程式を効率よく解くことができる。共役勾配法 (Conjugate Gradient algorithm, CG) が良く知られている。
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) であるが、一つのクォークがストレンジクォークであり、もう一つのクォークがアップまたはダウンドクォークのものを K 中間子と呼ぶ。これらのクォークの組み合わせと粒子反粒子の違いにより、 K^+, K^-, K^0, \bar{K}^0 の 4 種類の K 中間子が存在する。
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。
LHC (Large hadron Collider)LHCb	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。

用語	解説
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一つ。
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	
QCD の第一原理計算	QCD の第一原理計算方法として格子 QCD による計算がある。近似を使わずに計算する。
QED 摂動計算	QED の計算では電荷を帯びた粒子同士の相互作用の強さ（電荷 e）が比較的小さい。物理量を電荷をゼロとした場合の解析的計算から e のべき級数として表すことができ、べき級数を打ち切った場合の近似誤差を制御できる。このばあい各次数の前の係数を解析的に計算することができる。このようなべき級数による計算を摂動計算という。
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	

(次ページに続く)

用語	解説
Recurrent Neural Network	内部に閉路をもつニューラルネットワーク。この閉路上で前回までの入力に対応するメモリを保持しており、現在の入力への出力計算に対してこのメモリの情報も用いる。自然言語や音声、画像（画素列）といった系列データによく用いられる。
RHIC, RHIC 実験	RHIC (Relativistiv Heavy Ion Collider, 相対論的重イオン衝突型加速器) は、米国ブルックヘブン国立研究所 (BNL) にある衝突型加速器。この加速器を用いて重イオン同士をぶつけた高温・高エネルギーの状態を作り出す実験を行っている。重イオンとしては金原子核や銅原子核などを用いている。大きな原子核同士を高エネルギーで衝突加熱することでクォーク・グルーオンプラズマ相の性質を調べることができる。
RI (放射性同位元素) ビームファクトリー (RIBF)	原子核は 6000 種以上存在すると考えられている（「核図表」の項目参照）が、天然に存在する安定同位体（「安定同位体」の項目参照）は 300 種程度しかない。RIBF は天然に存在しない不安定核種を人工的に合成するための加速器であり、理化学研究所にある。陽子・中性子過剰核（「陽子・中性子過剰核」の項目参照）を合成する能力において、現在、世界でトップを走る。RIBF によって、陽子・中性子過剰核の知られざる性質や、元素合成に関する新たな知見が得られている。
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。
Spike-timing dependent plasticity	あるシナプスにおいて、シナプスを形成する 2 つの細胞の発火のタイミングに応じてその結合の強さを決定するシナプス可塑性。略語は STDP。
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。
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

(次ページに続く)

用語	解説
SU(3) 群, SU(3) ゲージ理論	SU(3) 群とは数学の群の性質を持つもので 3×3 の特殊ユニタリー行列が構成する群である。この群の構造をゲージ対称性として持つ場の理論を SU(3) ゲージ理論とよぶ。QCD は SU(3) ゲージ理論の一つである。
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	
アクセラレータ	計算の一部を肩代わりする外部演算装置。GPU や FPGA はアクセラレータである。
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 (焼灰石) 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

(次ページに続く)

用語	解説
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。
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
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。
一般相対性理論	aigne 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
イベント駆動型	現象や手順を有限の数の瞬間に起きた事象（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

用語	解説
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。
エネルギーバンド	結晶といった固体物質の中に分布する電子について、量子力学的なエネルギー準位をあらわしたもの。
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る方法。
エネルギー密度	1kgあたりどのくらいエネルギーを蓄えられるのか、電池の性能をあらわした数値。
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。
エージェント	外界からの情報を知覚し、自らの基準やルールに基づいて行動を選択できるような意思決定主体のこと。社会シミュレーションでは、社会現象の構成要素の個人や企業などのエージェントを模倣したエージェントモデルを使うことが多い。
お	

用語	解説
オントロジー	事物の概念間を is-a や has-a といった関係で記述して知識を体系立てたデータ。近年では、クイズの人間チャンピオンを破った IBM 社のワトソンなどがオントロジーを用いた質問回答システムとして話題となった。
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	
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ば 2 の整数乗などのあらかじめ決められ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
カイラル外挿	質量を持つフェルミオンで計算した物理量を質量がゼロとなる極限へ外装すること。質量がゼロのフェルミオンはカイラル対称性を持つためこのような言い方をする。
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変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。
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
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有効核力理論。多体力を自然な形で含むことができることがその大きな特徴の一つである。
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。
核子多体系	複数の核子（陽子・中性子）が互いに相互作用しあっている物理系のこと。原子核もその一つ。
核図表	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、強い力にて束縛しうる原子核の種類を平面的に図示したものを核図表 (nuclear chart) と呼ぶ。未発見の原子核を含め、6000 種以上の原子核が存在すると考えられている。
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。

(次ページに続く)

用語	解説
殻模型計算 (原子核殻模型計算)	原子核の構造を計算する手法の一つで、量子化学における配置間相互作用計算と類似した手法。バレンス殻（「バレンス殻」の項目を参照）内の量子多体問題を正確に解く方法であり、その計算は大次元行列の固有値問題に帰着する。
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体力あるいは3核子力）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」をもつグルーラ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。重い原子核の中でも特に、質量数が100-150程度の原子核を中重核、200程度以上のものを重原子核と呼ぶことが多い。
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立体構造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ー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。
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。

(次ページに続く)

用語	解説
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。
カーパリネロ法	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。
き	
機械学習	定式化された問題を基に、データの背後に存在する規則や知識を見つけるデータ処理技術。教師データの有無によって教師あり学習や教師なし学習、または半教師あり学習などが存在する。また、教師データを与える代わりに報酬を定義する強化学習も存在する。
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。
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。
基底波動関数	多体波動関数を記述するために用意された波動関数のセットを基底波動関数と呼ぶ。これをどう選ぶかが多体問題を解く上で重要となる。
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。
キャリア	電荷を運ぶ自由な粒子。例えば、電子やイオンがあげられる。半導体においては、伝導電子と正孔(ホール)のことを指す。

用語	解説
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。
境界層	大気層のうち、地表面に最も近い大気の層。正式には大気境界層という。地表面の影響を熱や摩擦応力などを介して強く受ける。境界層の厚さは日変化や季節変化、場所による変化があるが、熱対流が卓越しているときは、高度 1000m～2000m に達する。大気境界層内では、乱流による熱、運動量、物質の輸送が卓越している。
強化学習	教師あり学習のように出力として望ましい値を陽に与えることはできないが、出力に対して何らかの報酬が計算できる場合に用いられる機械学習の枠組み。近年話題となった AlphaGo は強化学習と探索を用いたシステムである。
教師あり学習	入力データに対して、クラスラベルや推定値など出力として望ましい値（教師情報）が与えられる機械学習の枠組み。識別や回帰などは通常教師あり学習として解かれる。一部のデータにのみこうした教師情報が付与されているような場合には、半教師あり学習と呼ばれる。
教師なし学習	入力データに対して、クラスラベルや推定値など出力として望ましい値が存在しない機械学習の枠組み。クラスタリングなどは通常教師なし学習として解かれる。一部のデータにのみこうした教師情報が付与されているような場合には、半教師あり学習と呼ばれる。
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。
強相関電子系	物質の中でも電子-電子間に働く有効な静電相互作用が強いものの総称。電子がもつ電荷自由度とスピン自由度が複雑に絡み合い、特異な物性を示すことがある。
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

(次ページに続く)

用語	解説
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似	量子多体系において、非平衡状態の規準モード（近似的に独立な運動）を決定する方法。
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。
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。
近似ベイズ計算	尤度を直接計算せずに、近似事後分布からサンプリングする方法。事前分布からパラメーターをサンプルしモデルのシミュレーションを行い、実際のデータとシミュレーション結果が十分に一致する場合のみパラメーターのサンプルを採択する。この計算を繰り返すことで、採択されたサンプルの集合は、近似事後分布からのサンプルであると見做すことができる。
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。
ぎ	

用語	解説
逆引き用分割テーブル	配列の添字から対応する電子・スピン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・キャッタ機構	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。
凝集物質(凝集系)	多数の原子や電子が集まり互いに強い影響をおよぼしあっている状態、あるいはそのような状態にある物質。固体や液体は典型的な凝集物質である
行列模型	弦理論の非摂動的定式化の一つ。
く	
クォーク	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。名前の違いはフレーバーと呼ばれる。電磁気力、弱い力、強い力を受ける。アップクォークとダウンクォ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。クォークの名前の違いは質量によって決まっており、質量の軽い順にクォークを並べると、アップ、ダウン、ストレンジ、チャーム、ボトム、トップとなる。全てのクォークはそれぞれがカラーと呼ばれる内部自由度をもつ。クォークの間に働く強い相互作用は、この内部自由度の性質に基づいて記述されているQCDによって理解される。
クォーク作用	クォークに対する作用。作用から運動方程式などが得られる。
クォーク・グルーオンプロセス	クォ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。
クォーク・グルーオン・プラズマ	通常、クォ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。クォークとグルーオンが電離したプラズマ状態。
クラウドソーシング	webを通じて不特定多数の人に仕事を依頼するサービスやプロセス。とくに作業量が多いタスクを細分化して多くの人に廉価で遂行してもらう場合がおく、機械学習においては大量のデータに教師情報を付与する際などによく使われる。たとえば、画像認識において深層学習が流行するきっかけとなったImageNetデータセットは、Amazon Mechanical Turkというクラウドソーシングサービスを用いて作成されている。
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。

(次ページに続く)

用語	解説
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、ロシアの数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。
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。その挙動を応力ーひずみ関係として記述したもの。
クーロン力	時間変化を無視できる場合に電荷をもった粒子の間に働く電気力の事。
ぐ	
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
グラフィクスプロセッsingユニット	画像処理・画面表示用のハードウェア。多数の小さな計算コアを有しており、これを並列計算に用いる手法がある。
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。
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。これにクォ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。

(次ページに続く)

用語	解説
け	
形態学	細胞の形状と組織の広がりなどを調べる方法
結合強度	分子同士が結合している時の強度
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。
げ	
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。
元素合成	宇宙はビックバンにより始まったと考えられている。現在の宇宙に存在する元素は、ビックバン直後には存在しなく、ビックバン後、宇宙が広がり温度が下がるにつれてまず、水素とヘリウムが生成されたと考えられている。一方それ以外の元素は星の形成などによる核融合反応や超新星爆発などに伴う中性子捕獲によって合成されたと考えられている。このように元素が宇宙進化とともにどのように合成してきたかを考え、明らかにすることは現代の物理学の課題の一つである。
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。
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变な場合がある。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变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らない。
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
こ	

(次ページに続く)

用語	解説
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 спин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
高次キュムラント	この文脈では重イオン衝突実験で生成される荷電粒子の位相空間における分布のガウス分布からのズレを表す量。
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。
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
光分解	原子核が光 (ガンマ線) を吸収して分解する反応。
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) の生成が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、糖を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
ご	
誤差逆伝播法	ニューラルネットの学習法。ニューラルネットの出力と教師信号との誤差を、ネットワークの上から下に伝播させ学習する手法。
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。

(次ページに続く)

用語	解説
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することで偏微分方程式の離散化を実現する。
酸化還元電位	物質の電子の放出しやすさ、あるいは受け取りやすさを表す数値。
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。
散乱理論	量子力学において、非束縛状態を取り扱う理論を一般に散乱理論という。原子核物理では、核反応理論の基礎となるとともに、核子間相互作用や共鳴状態（極めて短時間で崩壊する準束縛状態）の解析にも用いられる。
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。
ざ	
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。
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
し	
システムリスク	個別の金融機関の支払不能等や、特定の市場または決済システム等の機能不全が、他の金融機関、他の市場、または金融システム全体に波及するリスクのこと。（日本銀行サイト https://www.boj.or.jp/announcements/education/oshiete/kess/i06.htm/ より）
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
質量異常次元	エネルギー規模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	ニューロン同士が結合する部分。
シナプス可塑性	シナプスの結合の強さは、シナプスを形成する2つの細胞の活動に応じて動的に変化する。その機構。

用語	解説
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
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
社会ネットワーク	社会経済現象をその構成要素の間の関係性に注目して構成したグラフのこと。格子などの規則的な構造や密結合の完全グラフとは大きく異なった構造をもつことが多い。
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。
出力密度	1 kgあたりどのくらいの出力を出せるのか、電池の性能を表した数値。
触媒反応	化学反応の際に、それ自身は変化せず、他の物質の反応速度に影響する働きをする物質(触媒)により引き起こされる反応。触媒反応には、触媒が反応によって変化する物質に混ざり合わない不均一触媒反応と、変化する物質に混ざる均一触媒反応がある。いずれの反応の場合も化学反応の平衡を変えることなく、正逆の反応速度をそれぞれ同じだけ変える。
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
シリコン結晶型太陽電池	普及が最も進んでいる太陽電池であり、シリコン結晶を材料とする。結晶シリコンのうち単結晶系は、効率は高いがコストも高い。最も使用されているのは、多結晶系(小さな結晶がモザイク状に集まつたもの)。効率は低くなるが、生産コストをおさえることができる。
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
深層学習	多層ニューラルネットワークを用いた機械学習。隠れ層を持たないペーセptronや、1層の隠れ層をもつニューラルネットワークとの違いを表すためにこの言葉を用いることも多い。Convolutional Neural NetworkやRecurrent Neural Networkの他、確率関数で層同士の関係を記述するボルツマンマシンなどがある。
じ	

(次ページに続く)

用語	解説
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)。
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。
実験分光データ	分光法で得られたスペクトルデータ。実験で得た分光データの既知試料との比較などで未知試料の同定を行う。
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。
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。
重イオン衝突実験	RHICやLHCにおいて重元素の原子核同士を互いに衝突させて、高エネルギー・高温度の状態を作る実験。原子核としては、金原子核や銅、鉛原子核などが用いられている。
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
充放電曲線	縦軸に電池電圧、横軸に充電状態0%(完全放電状態)から100%(完全充電状態)をとて、同じ電流での充電と放電の状態推移をグラフ化したもの。充電や放電のエネルギーおよび両者の差であるエネルギー損失を見積もることが可能。
重陽子	陽子と中性子の束縛状態。二重水素の原子核。

(次ページに続く)

用語	解説
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。
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。
助触媒	触媒の効果を高める添加剤。触媒には化学反応を促進あるいは抑制する効果があるが、助触媒は単独で存在してもそのような効果を持たない。
人工光合成	光合成を人為的に行う技術。自然界での光合成は、水・二酸化炭素と、太陽光などの光エネルギーから化学エネルギーとして炭水化物などを合成するものであるが、広義の人工光合成には太陽電池を含むことがある。現在、光合成のような多段階電子移動については部分的に成功しているが、天然光合成のように電荷分離状態をいかに効率よく生成し、一方で逆電子移動による失活を防ぐかという問題が残されている。
人工市場	コンピュータ上に、人工的に作り出された架空の市場。計算機上に仮想的なディーラーの役割をするコンピュータプログラムを作り、これらのエージェントが自由に取引を行う仮想市場において実験を行う。(和泉潔「人工市場 市場分析の複雑系アプローチ」森北出版、2003 より)
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。

用語	解説
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、全球スケールや温帶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。
ストレンジクオーク	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。ストレンジクオークは3番目に軽いクォークである。
ストレンジネス	ストレンジクオークが関与する量子数。正確には、ストレンジクオーク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。
スパイク	デルタ関数状の時間的に短い電気パルス。ニューロンが十分強く活動(脱分極)すると軸索から発射される。神経回路における情報のキャリアであると考えられる。
スパイク列	複数の活動電位が連続して出る様
スピニ	素粒子または素粒子で構成される量子力学的系の有する基本的な量の一つでその静止系での系のもつ角運動量。原子スペクトルおよび元素の周期律を説明するため、1924年にW.パウリが初めて導入した。
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、スピニ自由度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。
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。

(次ページに続く)

用語	解説
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。
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。
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
セグメント	高分子を構成する基本単位のこと。
摂動的 QED(量子電気力学)	QED を摂動論を用いて解析すること。
摂動マッチング	有効理論に基づく計算では、まず、有効理論のパラメータを固定しなくてはいけない。理論的には、基礎理論に基づく計算と有効理論に基づく計算が有効理論が妥当な条件のもとで一致するように有効理論のパラメータを固定する。このような過程をマッチングという。量子場の理論ではこのようなマッチングを摂動理論を用いて行うため、摂動マッチングと呼ぶ。
セパレータ(電池セパレーター)	電池の中で正極と負極を隔離し、かつ電解液を保持して正極と負極との間のイオン伝導性を確保する重要な材料。
セミレプトニック崩壊の形状因子	ハドロンが崩壊する場合にハドロンとレプトンに壊れる場合をセミレプトニック崩壊という。崩壊時の娘粒子の軌跡やエネルギー依存性を因子化したものを形状因子という。
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	

(次ページに続く)

用語	解説
相対性理論	アインシュタインによって提案された時空の幾何学。特殊相対性論と一般相対性理論の両方かどちらかを指す。特殊相対性論は異なる慣性系の間の関係を時間空間の幾何学で説明する。一般相対性理論は重力の理論であり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。
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。
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。
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
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。
素反応	大部分の化学反応は途中に反応中間体を生じる多段階の反応である。このような反応は複合反応と呼ばれ、いくつかの単純反応の組み合わせとして記述できる。この複合反応の各段階を構成する単純反応を素反応という。

(次ページに続く)

用語	解説
ソフトウェアパイプライン機能	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（標準理論）	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作られている。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	
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。
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。

(次ページに続く)

用語	解説
対称性の破れの機構	基礎理論には対称性があるが、現実の系ではそれが破れているように見えることがしばしばある。たとえば、磁石は高温では磁石となっていないが低温に冷やすと一つの方向に磁場をもつ。巨大で一様な磁石があつた時、低温では磁場の方向が特殊な方向であり、高温では磁場がないので特別な方向は何もない。これは高温での3次元の回転対称性が低温では磁場の方向の周りの回転対称性である2次元の回転対称性に対称性が減ったことになる。このように対称性が減る場合を対称性が破れたといふことがある。磁石の場合の対称性の破れは、ミクロな世界における原子の磁化が原子間でどのように相互作用しているかで記述されるものである。このようにミクロな世界での物理機構から、マクロな対称性の破れを議論することが、対称性の破れの機構を調べることとなる。
太陽電池	光起電力効果を利用し、光エネルギーを電力に変換する電力機器。光電池（Photovoltaic cell）とも呼ばれる。一般的な一次電池や二次電池のように電力を蓄える蓄電池ではなく、光起電力効果によって光を即時に電力に変換して出力する発電機である。タイプとしては、シリコン太陽電池の他、様々な化合物半導体などを素材にしたもののが実用化されている。最近では、低い変換効率ではあるものの柔軟で生産コストの低い有機薄膜型、高変換効率を見込めるペロブスカイト型や、量子ドット型の太陽電池の開発も進んでいる。
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	ポアソン方程式を格子で離散化して反復法で解くような場合には、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。
多体問題	複数の粒子や複数の物体の間の力学を解く問題。

(次ページに続く)

用語	解説
探索	迷路を解く経路や最適な組み合わせなどを求める際に用いられるアルゴリズムの総称。経路の探索で古典的なものとして、ダイクストラ法やA*などが知られている。統計的機械翻訳における出力単語列の探索などではマルチスタックビーム探索、囲碁などのゲームにおける手順の探索においてはモンテカルロ木探索がしばしば用いられる。
タンパク質の折れたたみ	タンパク質がある一定の立体構造をとる過程
だ	
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。
第一原理計算	電子シュレディンガー方程式を(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。
第一原理電子状態計算	電子シュレディンガー方程式を(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。
大規模疎行列連立方程式(反復解法)	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。このような方程式を数値的に解く方法としてKrylov部分空間反復法が用いられる。
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。
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。
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。
ダイナミクス	一般に力学過程や力学の仕組みのこと。

(次ページに続く)

用語	解説
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。
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。
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、非線形挙動を応力ーひずみ関係として記述したものである。
ダークエネルギー	宇宙の大規模構造(銀河や物質の分布の様子)や運動(宇宙は現在膨張している)の記述は一般相対性理論にもとづいたビックバン理論で説明されている。今現在の宇宙は膨張しているがその膨張速度が少しづつ早くなっていることが我々の近傍の銀河の運動の詳細からわかっている。この加速膨張はあたかも反発する重力によって引き起こされているように見える。このような反発する重力を説明するために導入されたのがダークエネルギーの考え方である。AINSHUTAIN方程式に宇宙項として導入されたものもダークエネルギーの一つの候補である。
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。
ち	
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。

(次ページに続く)

用語	解説
地球温暖化	気候変動の一種で、温室効果ガスによって地球表面の大気や海洋の平均温度が長期的に上昇する現象。ここで温室効果とは、大気圏を有する惑星の表面から発せられる放射（電磁波により伝達されるエネルギー）が大気圏外に届く前にその一部が大気中の物質に吸収されることで、そのエネルギーが大気圏より内側に滞留し、結果として大気圏内部の気温が上昇する現象。温室効果ガスとは、大気圏にあり、地表から放射された赤外線の一部を吸収することにより温室効果をもたらす気体の総称であり、対流圏オゾン、二酸化炭素、メタンなどが該当する。
蓄電・水素エネルギー社会	二酸化炭素を排出しないエネルギー源である水素を活用する社会システム。水素や生成した電気エネルギーを蓄電することで、必要に応じてエネルギーを適宜柔軟に使用できる形態が理想的とされる。
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帯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。
チャネル結合	核反応において、終状態（あるいは始状態）における放出粒子と残留粒子（あるいは入射粒子と標的粒子）の組の一つ一つをチャネルと呼ぶ。チャネル結合とは、各チャネルを基底にとった連立一次方程式のシュレーディンガー方程式として核反応の基礎方程式を表す方法で、チャネル間の遷移を非摂動的に取り扱うことができる。
チャネルロドプシン	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。
中重核	「軽い原子核、重い原子核」の項目を参照。
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。
超音波治療機器	超音波の集束などにより、熱エネルギーに変換し幹部に直接治療を行う機器

(次ページに続く)

用語	解説
超弦理論	素粒子は点であるとして考えているが標準理論には多数の素粒子とパラメータが含まれており複雑である。一方素粒子を点と考えず紐（＝弦）と考えて紐の振動の様子の違いで複数の素粒子を一つの弦で統一的に記述することができないかという考え方から弦理論というものが作られている。とくに超対称性を持つ弦理論を超弦理論とよぶ。標準模型に現れる粒子群に加え重力を含む超弦理論も構成できるため万物の理論の候補と考えられているが、非摂動的計算手法や理論の安定性など不明なところも多い。
超弦理論のゲージ重力 双対性予想	超対称性を持つゲージ理論と重力理論が等価関係にあるとする予想。この予想を使って、ゲージ理論の計算から重力理論の性質を調べる、またはその逆を調べる研究が行なわれている。
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。鉄は熱核融合を起こさないため重力による収縮が起こり、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っ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る。計算機シミュレーションによる超新星爆発の再現は爆発機構の解明につながる重要な課題である。
超重元素の合成	原子番号92のウランを超える元素は天然に存在しないが、原子炉や加速器によって人工的に合成することは可能である。こうした超重元素と呼ばれる極めて原子番号の大きな新元素を作り出すと、元素の命名権が与えられるため、世界的に競争が激化している。
超対称性	ボゾンは整数スピンを持つ粒子であり、フェルミオンは半整数スピンを持つ粒子である。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	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。
超対称ヤンミルズ理論	ヤンミルズ理論はゲージ理論のこと。超対称ヤンミルズ理論はそれを超対称化したものである。

(次ページに続く)

用語	解説
超大規模並列	並列計算機の中で特に規模が大きいもの（莫大な数のCPUをもつもの）をいう。多数のノードを用いて並列実行が可能なため、計算速度の向上が見込まれる。
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	
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。
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。
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
テクニカラー理論（ウォーキングテクニカラ）	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。

(次ページに続く)

用語	解説
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重み。
点欠陥	結晶中の不純物または空孔。
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。
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	行列の転置操作に用いられるデータ転送パターン。
で	
電解質	溶媒中に溶解した際に、陽イオンと陰イオンに電離する物質。溶媒とは、他の物質を溶かす物質の呼称。
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。
電荷分離	光照射によって半導体中に生じた電子と正孔が空間的に分離すること。

用語	解説
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
電極	真空または誘電体中に電場をつくる為、或は電気伝導体中に電流を流す為に設けられた導体。
電源グラウンドバウンスノイズ	LSI 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 LSI 内の電源及びグラウンド配線部分の電圧ノイズ。
電子供与体・受容体	他の分子に電子を渡しやすい性質をもった分子（供与体）、あるいは他の分子から電子を受け取りやすい性質をもった分子（受容体）。
電子相関	ある電子が他の電子の位置のゆらぎにより受ける効果
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。
電子ボルト	エネルギーの単位。約 1.6×10^{-19} J. これは真空中において 1 ボルトの電圧差で生じる一様電場の中で電子を加速した場合に電子の得るエネルギーに相当する。
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。
データセット	何らかの機械学習手法を適用・評価するためのデータベース。入力データや教師情報などが含まれており、通常はこれを訓練データ、検証データ、テストデータに分けて用いる。訓練データは学習させたいパラメータを獲得する為に用いられるもので、人手で決めなければならないハイパラメータを手動で調整する際には別途検証データを用いる。検証データで有望そうなハイパラメータを決定し、それに基づいて訓練データでパラメータを学習し、テストデータに学習結果を適用してその精度を評価する。テストデータはパラメータおよびハイパラメータを学習・調整する際には用いてはならない。
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。
と	
統一的量子論	この文脈では、標準理論と重力を含むような量子理論のこと。
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。

(次ページに続く)

用語	解説
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
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	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。
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。
ど	
同位体、安定同位体	元素を特定すると原子番号が一意にきまり、その原子核の陽子の数は原子番号と一致する。一方中性子の数は決まった数とはならず、複数の可能性がある。陽子の数は同じだが中性子の数の異なる原子核をもつ原子を互いに同位体の関係にあるという。特に、他の原子核へと崩壊しない、安定な原子核を持つ同位体を安定同位体という。不安定な同位体では、原子核がアルファ線やベータ線を放出したり核分裂することによって他の原子核へと崩壊する。
同時スイッチングノイズ	LSI 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 LSI 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。
ドラッグデリバリーシステム (Drug Delivery System: DDS)	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
に	
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）を摂動論に従つて取り込む 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。

用語	解説
二次電池	蓄電池(充電式電池)のこと。
ニホニウム	原子番号113の元素の名前。日本で初めて命名権を獲得した元素であり、理化学研究所にて合成された。元素記号はNh。
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。
ニューロインフォマティックス	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とする学問領域
ニューロン	神経細胞。脳の構成要素。
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	
熱電変換	2種類の異なる金属または半導体を接合して両端に温度差を生じさせると起電力が生じることを利用し、熱を電力に変換すること。
熱揺らぎ	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
燃料電池	電気化学反応によって燃料の化学エネルギーから電力を取り出す電池。燃料には、水素、炭化水素、アルコールなどが用いられる。
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	

(次ページに続く)

用語	解説
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。
ハイペロン間力	ハドロンの間に働く強い力のうちハイペロンの間に働く強い力をハイペロン間力と呼ぶ。
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（中間子）に分類される。陽子や中性子はバリオンの一種である。陽子と中性子は通常の原子核を構成することから総称して核子とも呼ばれる。
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。
ハミルトニアン行列	物理系のエネルギーはハミルトニアンと呼ばれる。物理系の運動はハミルトニアンから記述される運動方程式に従う。量子力学ではハミルトニアンは演算子または行列として表され、その行列の性質（固有値・固有ベクトル）から系の性質を知ることができる。
半導体	電気伝導性の良い金属などの導体（良導体）と電気抵抗率の大きい絶縁体の中間的な抵抗率をもつ物質。
反応経路	ある化学反応において出発物質がどのような過程を経て最終生成物に変化していくかを指す。反応機構とも呼ばれる。
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
ば	

(次ページに続く)

用語	解説
バイアスпотен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потен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
バイオセンサー	生体の認識システムを利用した化学的センサーのこと
バイオフィルム	細菌などの微生物の増殖の足場。カテーテル等の医療機器に形成されたバイオフィルム内の細菌は抵抗性が高くなり問題となる。
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-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。
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。
バリオン	ハドロンの中で、クォーク 3 個からなるものがバリオンと呼ばれる。陽子・中性子もバリオンの一種で 2 種類のクォーク (u,d) を 3 つ組み合わせて構成されている。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。
バルクナノメタル	一般の金属よりも小さな結晶粒からなる金属材料。強度、延性、韌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
バレンス殻	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) と呼び、バレンス核子が運動する空間をバレンス空間、あるいはバレンス殻と呼ぶ。有限のバレンス核子、バレンス殻を設定することによって多体シュレーディンガー方程式を正確に解くことが現実的に可能となる。
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。

用語	解説
ぱ	
パラメータ化, パラメタリゼーション	連続流体の性質を持つ大気を数値モデル化する際、有限個の格子や波数で表現する必要がある。このとき、モデル格子で表現できない格子サイズよりも小さなスケールの現象が格子スケールの現象に及ぼす影響が無視できないことがある。そのとき、格子の物理量を用いて、格子サイズよりも小さな現象が格子スケールに及ぼす影響を表現することをパラメタ化といい、その手法のことをパラメタリゼーションという。
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。
parity	空間の反転に対して系が対称性をもつときの量子数。
ひ	
光関係タンパク質	光を刺激として受けるタンパク質。
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。
光触媒	光を当てることで触媒作用を発現する物質の総称。
光生理学	化学の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てる学問体系
光電荷移動	光を吸収することで誘起される、ある分子が持っている電荷を別の分子と授受する化学反応。
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。
非侵襲治療法	生体に力学的影響を及ぼさない治療法
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。

(次ページに続く)

用語	解説
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。
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、ヒッグスボソン	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。
非熱的分布	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。
被膜	電極を覆い包んでいる膜。電池の性能を左右するため、安定的な制御が求められる。
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
標的タンパク質	薬が作用する標的となるタンパク質。
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。
び	
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。

(次ページに続く)

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ォークの状態であったが、宇宙が膨張し冷えるとともにクォ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。
微物理過程	大気中で雲を構成する水滴・氷晶（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。
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。
ファインマン図	相互作用を表す項が小さい場合に、その項をゼロにした計算から逐次近似で相互作用の効果を取り込んでいくことができる。このような計算手法を摂動計算というが、量子場の理論において摂動計算に必要な計算式を構成するためにグラフを用いて計算式を構成することができる。この際に用いるグラフをファインマン図という。量子場の理論においてグラフを用いた摂動計算の手法を R.P.Feynman が考案したためこのように呼ばれる。

(次ページに続く)

用語	解説
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、クォーク、電子、ニュートリノ、陽子、中性子などがある。
フェルミオン作用	フェルミオンの運動方程式を与える作用積分の事。作用積分はラグランジアン密度の時間空間積分である。格子場の理論では時空はとびとびの格子で近似される。この際フェルミオンの作用は格子上で近似されたラグランジアン密度の格子上での総和になる。格子化の方法には任意性があるため格子上のフェルミオン作用にはいくつかの種類がある。本文中ではウィルソン型とドメインウォール型が言及されている。
フェルミオン伝搬関数	フェルミオンが時空間を量子的に伝搬する確率振幅を表している関数。絶対値がフェルミオンの伝搬確率となる。
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
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、相互作用の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。
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
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、ダウントなどの種類があり、レプトンには電子、ミュー粒子などがある。

用語	解説
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。
ぶ	
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。
部分空間対角化	占有電子軌道など注目している一体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
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。
分子シミュレーション	分子動力学などに則り、分子の動きを計算すること。物理・化学的性質を求めるために行われる。
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
分子動力学法	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。
分子モデリング	分子の立体構造を、計算機中で構築すること
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 が整数となる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。
ぶ	

用語	解説
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
ヘ	
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。
平均場、平衡平均場	原子における電子と同様、原子核における核子は各々がポテンシャル場に支配されて独立に運動していると近似することができる。そのポテンシャルの源は、核子の相互作用自身が生み出す平均的な場であり、それを平均場と呼ぶ。特に時間に依存しない平均場を平衡平均場と呼ぶ。
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
ヘム	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。
ベ	
ベイジアンネットワーク	統計的因果モデルの一つで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
ペ	
ペロブスカイト太陽電池	ペロブスカイト結晶を用いた太陽電池。従来のシリコン太陽電池と比較して、光エネルギーから電気エネルギーへの変換効率が高いことが知られており、将来が有望であるとされている。
ほ	
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
ぼ	
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)
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。

用語	解説
ボゾン系	構成粒子がボーズ粒子である量子系
ボトムクォーク, b クォーク、B クォーク	標準模型には 6 フレーバーのクォークが含まれている。そのうち第 3 世代のダウンタイプのクォークがボトムクォーク（または b クォーク、ビューティクォーク）となぞけられている。6 フレーバーのクォークのうち b クォークは 2 番目に質量が重く、約 4.5 GeV の質量を持つ。b クォークは素粒子であるにも関わらず、複合粒子である陽子の質量の約 4.5 倍の質量を持っておりかなり重い粒子である。
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。
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。
ボーズ粒子	量子統計力学的な性質から分類した、粒子の種類のひとつ。多くの粒子が同じ量子状態を占めることができるという性質を持つ。典型的なボーズ粒子として光子やヘリウム 4 などがある
ボーズ・アインシュタイン凝縮	多数のボース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。
ぼ	
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。
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。
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。
膜電位	ニューロンの内部状態を表すパラメータ。ニューロンは電気的素子であり、膜の性質により細胞内外で電位差を生じる。その差のこと。
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

用語	解説
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エネルギー的に安定となる。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: ${}^4\text{He}$)、8 (酸素: ${}^{16}\text{O}$)、20 (カルシウム: ${}^{40}\text{Ca}$) 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ドー様のコンパートメントの連なりと考えるモデル
マルチスケールシミュレーション	異なる時空間スケールのシミュレーションを組み合わせて取り扱うシミュレーション。
マルチスケール物質	原子スケールからはじまり、何桁も異なる長さスケールの効果が顕著な物質。あるいはそのような効果を取り入れなければ理論的に説明のできないような物質
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
マルチフィジックスシミュレーション	異なる物理現象を組み合わせて取り扱うシミュレーション
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。汎関数のバ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。

(次ページに続く)

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。ずれの原因は、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（ミューオン）	ミュー粒子（またはミューオン）はレプトンの一種でミュー粒子は標準模型では第二世代に属する。質量以外は電子と同じ物理的性質を持つ。質量は電子の約 200 倍である約 106MeV をもつ。
ミュー粒子異常磁気能率	ミュー粒子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。ミュー粒子はスpin 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。ミュー粒子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。ずれの原因は、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。
ミュー粒子実験	ミュー粒子の性質を詳細に調べることで標準理論からのズレを見つけることができると期待されている。J-PARC においてもミュー粒子を用いた実験が行われている。ミュー粒子異常磁気能率を精密に測定する実験である。
め	
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。
メソスケール	ナノスケール（1 ナノメートル = 10^{-9} メートル）と現実世界との中間スケールをさす。ナノスケールよりも数桁大きいサイズの物質を扱う。

(次ページに続く)

用語	解説
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。
メタン	最も単純な構造の炭化水素で、1個の炭素原子に4個の水素原子が結合した分子である。分子式は CH ₄ 。和名は沼氣（しょうき）。
メタンハイドレード	低温かつ高圧の条件下でメタン分子が水分子に囲まれた、網状の結晶構造をもつ包接水和物の固体。およその比重は 0.9 g/cm ³ であり、堆積物に固着して海底に大量に埋蔵されている。
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	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
も	
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。
モデル脊椎動物	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。
モルフォロジー	分子集合体の空間分布構造。有機薄膜型の太陽電池においては、高分子膜質を指す。
モンテカルロ法	数値計算において乱数を利用した計算手法を一般にモンテカルロ法と呼ぶ。計算アルゴリズムのその一部に乱数を利用して効率的に計算ができるようになっている場合「モンテカルロ法」という語が用いられる。本文でもさまざまな計算アルゴリズムに対して乱数を利用し高性能化したアルゴリズムが用いられている。
ゆ	

用語	解説
有機薄膜太陽電池	導電性高分子やフラー・レン等の電子授与性、授受性を持つ有機分子の組み合わせで構成される有機薄膜半導体を用いた太陽電池。
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、数値的にも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	一般には、与えられた基礎方程式に対し、着目しているエネルギー領域において有効となるよう自由度を落とした模型のこと。原子核物理では、特異性が強い核力を直接扱わずに、低運動量成分のみの扱いやすい相互作用を用いて MeV 領域の低エネルギー現象を記述する模型一般を指す。上記の「カイラル有効場理論」も同じ概念に基づく。
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。
輸送係数	一般に、外場の強さに対する系の応答の強さを与える比例係数のこと。クォーク・グルーオン・プラズマ（QGP）の物理においては、粘性係数などを指し、QGP の物性を特徴づける量として重要なものである。また、ランジュバン方程式に基づく重イオン反応の計算では、摩擦や慣性を表すインプットとして与えられる量である。
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。
よ	
陽子・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。
溶媒和エネルギー	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
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。

(次ページに続く)

用語	解説
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く、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
リチウムイオン二次電池	正極と負極の間をリチウムイオンが移動することで充電や放電を行う二次電池。（二次電池：充電式電池のこと）
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（QCD: Quantum Chromodynamics）	クォ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。
量子化学計算	原子と電子の振る舞いから、物性や反応性を計算する。計算手法として、第一原理計算法が使用される。
量子数射影	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ニアンがも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。
量子多体系（量子多体现象）	凝集系のうち特に量子力学的効果が顕著な物質を指す。特に極低温において、古典力学では説明できない様々な現象を示す
量子電気力学、量子電磁力学（QED: Quantum Electrodynamics）	荷電粒子と光子の力学（電磁気学）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。
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。

(次ページに続く)

用語	解説
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。
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。
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。
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
レイトレーシング	光線追跡法。コンピュータグラフィ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。
レプトニック崩壊の崩壊定数	ハドロンの崩壊のうちレプトンへ崩壊する場合をレプトニック崩壊という。ハドロンの崩壊の頻度やハドロンの寿命のうち強い相互作用に基づく寄与を因子化したものを崩壊定数と呼ぶ。
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。条件パラメータが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。

(次ページに続く)

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。

付録 B

執筆者一覧

全体エディタ		
藤堂 真治	東京大学 大学院理学系研究科 物理学専攻	准教授
河宮 未知生	海洋研究開発機構 統合的気候変動予測研究分野	分野長
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
序章		
執筆者		
藤堂 真治	東京大学 大学院理学系研究科 物理学専攻	准教授
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
牧野 淳一郎	神戸大学 理学研究科 惑星学専攻 新領域惑星学講座	教授
素粒子・原子核		
執筆者		
石川 健一	広島大学理学研究科	准教授
宇都野 穂	日本原子力研究開発機構 先端基礎研究センター	研究主幹
山崎 剛	筑波大学数理物質系	准教授
素粒子部：執筆者・執筆協力者		
青木 保道	高エネルギー加速器研究機構 素粒子原子核研究所	特任准教授
石井 理修	大阪大学 核物理研究センター	准教授
石川 正	高エネルギー加速器研究機構 共通基盤研究施設計算科学センター	准教授
伊藤 祐太	高エネルギー加速器研究機構 素粒子原子核研究所	研究員
江尻 信司	新潟大学 理学部	准教授
加堂 大輔	慶應義塾大学 自然科学研究教育センター	特任助教
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	研究機関講師
金森 逸作	広島大学理学研究科	研究員

(次ページに続く)

土屋 麻人	静岡大学 理学部	教授
土井 琢身	理化学研究所 仁科加速器研究センター	専任研究員
滑川 裕介	筑波大学数理物質系	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	仁科センター研究員
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
サポート係	理化学研究所 情報基盤センター	
丸 信人	大阪市立大学大学院 理学研究科	准教授
原子核部：執筆者・執筆協力者		
阿部 喬	東京大学大学院理学系研究科	助教
有友 嘉浩	近畿大学理工学部・総合理工学研究科	准教授
小野 章	東北大学大学院理学研究科	助教
緒方 一介	大阪大学核物理研究センター	准教授
鎌野 寛之	高エネルギー加速器研究機構 素粒子原子核研究所	博士研究員
北沢 正清	大阪大学大学院理学研究科	助教
野中 千穂	名古屋大学素粒子宇宙起源研究機構	准教授
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
吉田 賢市	新潟大学大学院自然科学研究科	助教
ナノサイエンス・デバイス		
執筆者		
藤堂 貞治	東京大学 大学院理学系研究科 物理学専攻	准教授
執筆協力者		
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
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
三澤 貴宏	東京大学 物性研究所 計算物質科学研究センター	特任研究員(PI)
森田 悟史	東京大学 物性研究所 物質設計評価施設	助教
山地 洋平	東京大学 大学院工学系研究科 物理工学専攻	特任准教授
吉本 芳英	東京大学 大学院情報理工学研究科 コンピュータ科学専攻	准教授
エネルギー・資源		
執筆者		
安藤 嘉倫	名古屋大学 工学研究科 計算化学連携教育研究センター	特任講師
石村 和也	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	特任研究員
大西 裕也	神戸大学大学院 システム情報学研究科	助教

小林 正人	北海道大学 大学院理学研究院 化学部門	助教
澤田 啓介	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	特別研究員
曾田 繁利	理化学研究所 計算科学研究機構 量子系物質科学研究チーム	研究員
中嶋 浩之	量子化学研究協会・研究所	部門長
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
本田 宏明	九州大学 システム情報科学研究院	特任准教授
嶺澤 範行	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	研究員
吉田 紀生	九州大学大学院 理学研究院	准教授
米原 丈博	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	研究員
生命科学		
執筆者		
伊井 仁志	大阪大学 大学院基礎工学研究科	助教
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
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
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
福澤 薫	星薬科大学 薬品物理化学教室	准教授
望月 祐志	立教大学 理学部化学科	教授
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
優 乙石	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	研究員
執筆協力者		
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
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
創薬・医療		
執筆者		
伊井 仁志	大阪大学 大学院基礎工学研究科	助教
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
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
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
福澤 薫	星薬科大学 薬品物理化学教室	准教授
望月 祐志	立教大学 理学部化学科	教授
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
執筆協力者		
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
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

(次ページに続く)

製造・設計		
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
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	室長
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	名古屋大学 大学院理学研究科 素粒子宇宙物理学専攻	教授
前山 伸也	名古屋大学 大学院理学研究科 素粒子宇宙物理学専攻	助教
社会科学		
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
脳科学・人工知能		
執筆者		
五十嵐 潤	理化学研究所 情報基盤センター	上級センター研究員
牛久 祥孝	東京大学 大学院 情報理工学系研究科 知能機械情報学専攻	講師
宮本 大輔	東京大学 大学院 工学系研究科 先端学際工学専攻	博士課程
山崎 匡	電気通信大学 大学院 情報理工学研究科 情報・ネットワーク工学専攻	助教
執筆協力者		
中田 秀基	産業技術総合研究所 人工知能研究センター 脳型人工知能研究チーム	チーム長
地震・津波		
執筆者		

(次ページに続く)

堀 高峰	海洋研究開発機構 地震津波海域観測研究開発センター 地震津波予測研究グループ	グループリーダー
藤田 航平	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	助教
亀山 真典	愛媛大学 地球深部ダイナミクス研究センター	教授
宮腰 剛広	海洋研究開発機構 地球深部ダイナミクス研究分野	主任研究員
執筆協力者		
市村 強	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	准教授
気象・気候		
執筆者		
足立 幸穂	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
大塚 成徳	理化学研究所 計算科学研究機構 データ同化研究チーム	研究員
小玉 知央	海洋研究開発機構 ビッグデータ活用予測 PT 極端現象全球予測研究ユニット	ユニットリーダー
滝川 雅之	海洋研究開発機構 北極環境変動総合研究センター 北極化学物質循環研究ユニット	ユニットリーダー
寺崎 康児	理化学研究所 計算科学研究機構 データ同化研究チーム	研究員
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
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		
西澤 誠也	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
三浦 裕亮	東京大学 大学院理学系研究科 地球惑星科学専攻	准教授
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
宇宙・天文		
執筆者		
滝脇 知也	国立天文台 理論研究部	助教
執筆協力者		
天野 孝伸	東京大学 理学系研究科 地球惑星科学専攻	准教授
石山 智明	千葉大学 総合情報センター	准教授
梅村 雅之	筑波大学 計算科学研究センター	センター長
大木 平	カブリ数物連携宇宙研究機構	特任研究員
小河 正基	東京大学 教養学部 広域科学科 宇宙地球部会	准教授
亀山 真典	愛媛大学 理学部 地球科学科	教授
木内 建太	京都大学 基礎物理学研究所	特定准教授
草野 完也	名古屋大学 宇宙地球環境研究所	教授

(次ページに続く)

玄田 英典	東京工業大学 地球生命研究所	特任准教授
小南 淳子	東京工業大学 地球生命研究所	研究員
庄司 光男	筑波大学 数理物質系	助教
住吉 光介	沼津工業高等専門学校 教養科	教授
高橋 博之	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
竹広 真一	京都大学 数理解析研究所	准教授
田中 賢	筑波大学 計算科学研究センター	研究員
長倉 洋樹	カルフォルニア工科大学	学振研究員
行方 大輔	理化学研究所 計算科学研究機構	研究員
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
堀田 英之	千葉大学大学院 融合理工学府物理学コース	特任助教
牧野 淳一郎	神戸大学 理学研究科 惑星学専攻 新領域惑星学講座	教授
松本 洋介	千葉大学 理学研究科	特任准教授
簗島 敬	海洋研究開発機構	研究員
三宅 洋平	神戸大学大学院 システム情報学研究科	准教授
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 計算科学研究センター	講師
吉田 直紀	東京大学 理学系研究科	教授
アプリケーションの分類		
執筆者		
牧野 淳一郎	神戸大学 理学研究科 惑星学専攻 新領域惑星学講座	教授
丸山 直也	理化学研究所 計算科学研究機構 プログラム構成モデル研究チーム	チームリーダー
三上 和徳	理化学研究所 計算科学研究機構 アプリケーション開発チーム	開発研究員
鈴木 惣一朗	理化学研究所 計算科学研究機構 アプリケーション開発チーム	開発研究員
編集		
編集協力者		
秦 万美子	理化学研究所 計算科学研究機構 アプリケーション開発チーム	テクニカルスタッフ I
鈴木 惣一朗	理化学研究所 計算科学研究機構 アプリケーション開発チーム	開発研究員
児嶋 祥子	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	アシスタント

計算科学ロードマップ 2017

平成 29 年 6 月

国立研究開発法人理化学研究所

文部科学省委託業務「HPCI の運用」

今後の HPCI を使った計算科学発展のための検討会 編

※ 最新版は下記に掲載予定

<http://hpci-aplfs.aics.riken.jp/kentoukai/>