

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粋に議論して明らかにするものであり、決して最高性能のトップマシンだけを意識したものではない。

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。汎用メニーコアでは、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 程度 (倍精度) でスペースカラー 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 程度と、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に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な可能性があるのは 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はと考えられる。

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コアの場合である。汎用 (ホモジニアス) メニ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州原子核研究機構(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論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の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る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、標準理論を超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、医療や科学的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った、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によ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]

ミューラ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 柄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。係数行列はクオーカ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 | → QED効果を入れたハドロン質量精密計算 | | | | |
| 格子QCDを用いたQCD相構造の理解 長期目標(a-2) | ← 軽原子核束縛エネルギー直接計算。格子間隔0.08fm | → ハドロン2体散乱、前壠過程精密計算 | | | | |
| 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説) 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 長期目標(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 長期目標(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ビーカ領域、ウラン領域のモンテカルロ殻模型計算 | | | |
| 原素核密度汎関数計算 | ← 全核種の線型応答計算による計算核データの構築 | → 变形共存、核分裂の微視的記述 | | | | |
| 振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 長期目標(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 長期目標(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 長期目標(b-2) | ← 行列模型 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 | → 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 インフレーション仮説の検証、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 AdS/CFT 対応の検証 | → 揃らぎの古典化の検証 | → | → | → |
| 超対称模型の非摂動ダイナミクス 長期目標(b-3) | ← 2次元の超対称ウェーブスミノ模型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 | → | → | → | → |
| ウォーキングテクニカラーモデルの非摂動ダイナミクス 長期目標(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モデルの候補の探索 | | | | |

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・精密化を進めるに同時に、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、新奇な量子多体现象の発見と機構解明、新しい量子機能を持つ新物質の探索、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、相転移とともにう自発的対称性の破れ、集団運動励起やトポロジー励起、マクロ量子現象といった基礎科学を一新する普遍概念をもたらし、素粒子物理学から経済学まで広がるさまざまな学問分野に大きな影響を与えてきた。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・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、スピニ液体、量子臨界や脱閉じ込めといった新概念が次々に発見され、自然の新たな機構解明への挑戦が

続けられている。概念の革新は次世代、次々世代の最先端技術へ展開する研究をますます活性化させていくが、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、熱揺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、更にミクロからメゾ、マクロをつなぐマルチスケール計算が必須となる。超並列大規模計算機環境を用いて、大規模第一原理計算・自由エネルギー計算を実行するとともに、フェーズフィールド法等により、ミクロ-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ミクロスコピックな電磁場ダイナミクスが結合した状態を記述するナノ光学理論とその理論に基づく電子・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・AINシュタイン凝縮をはじめ、ボーズ系モット転移、多種原子系における対超流動、双極子相互作用系での超流動固体状態など、固体中での実証の難しかった量子多体现象が次々に検証されており、更に理論予測を超えて、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($O(N)$ 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 | | | |
| 強相関多体量子系 | 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 | | | $10^{13}\text{--}10^{14}$ 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。そういう意味において、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、スピニ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の低コスト分離・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、低コストで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の低コスト分離・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

| 年代 課題 | 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 ナノスケール規模の強相関電子系シミュレーション | | | 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 大規模高精度計算のための新規量子化学計算手法の開発・実装・高度化 | | | 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。更に大きなりボーズームやウイルス、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、バイアスポ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。

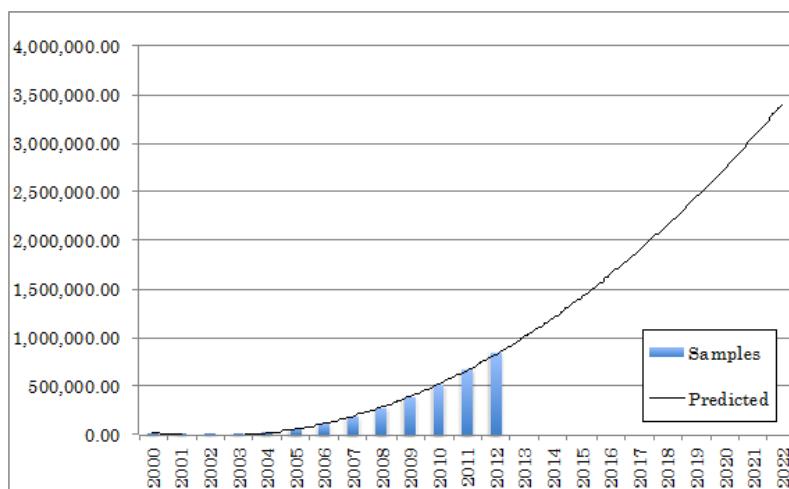


図 2.4 NCBI GEO に登録されているアレイ数と今後の予測

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。

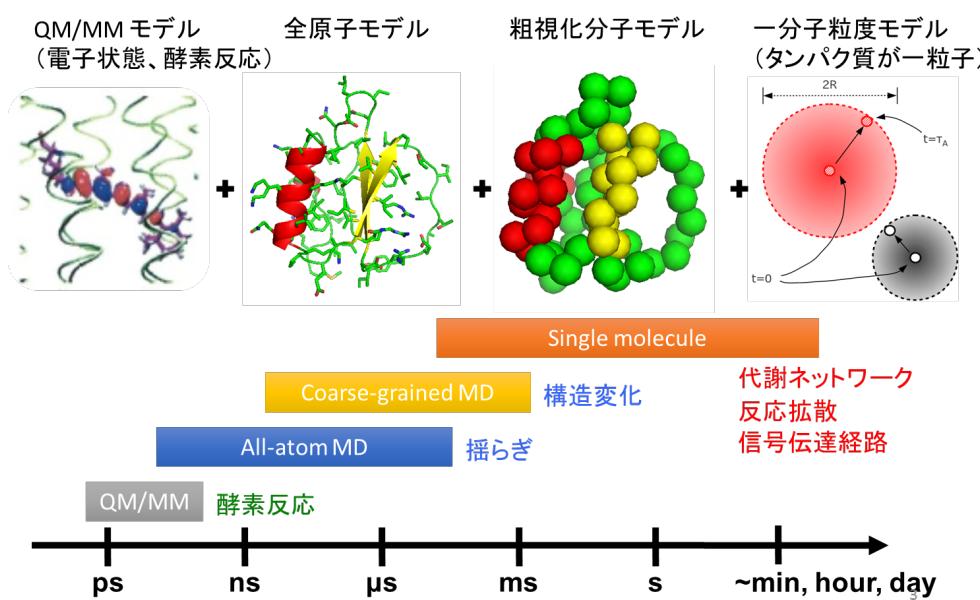


図 2.5 分子シミュレーションの異なるモデルと対象とする生命現象・時間スケール

(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。Spatiocyte 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。Spatiocyte はスパコン京などに向け、高並列化されたバージョン（pSpatiocyte）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 pSpatiocyte 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（シークエ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一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。

| 年代 課題 | 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 | 40倍規模の解析 | 256サンプル512ネットワークの解析と比較して | 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 |
| 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・拠点をまたいた実行も可能。総演算中心のため、総演算量はInstruction数とした。浮動小数点演算は45.864EFLOPとなる。 |
| 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IO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IO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.csrp.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。

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には間違いなく、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に、薬品分子 (リガンド) と標的タンパク質との相互作用解析を量子化学 (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視点もある。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 | <p>タンパク質、生体膜、DNAなどのダイナミクス</p> <p>MD計算を用いた医薬品候補の探索(数百から数千)</p> | | | <p>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</p> <p>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</p> | | |
| 細胞臓器医療 | <p>細胞内シグナル分子混雑等の細伝達反応経路のモデル構築</p> <p>膵ラ氏島や血小板による血栓形成</p> <p>血流解析シミュレーションの大規模化と並列化</p> <p>超音波治療シミュレーション</p> | | <p>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)</p> <p>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</p> | | <p>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)</p> <p>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</p> | |

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

タイミ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、並列度には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とともに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け

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心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 $17\mu\text{m}$ 程度である。このメッシュ部分の電磁波の伝搬時間は 10^{-15} 秒オーダとなるため、タイムステップが小さくなり解析時間増大の大きな原因となる。今後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。

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。

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

| 年代 課題 | 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。しかしながら現在の社会は、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ことは限らないし、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 자체、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わ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、グラフ上での運動・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。まずもっ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ならないことが多い。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つた。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に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數関数 $\exp(-\sqrt{t/\tau})$ 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數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

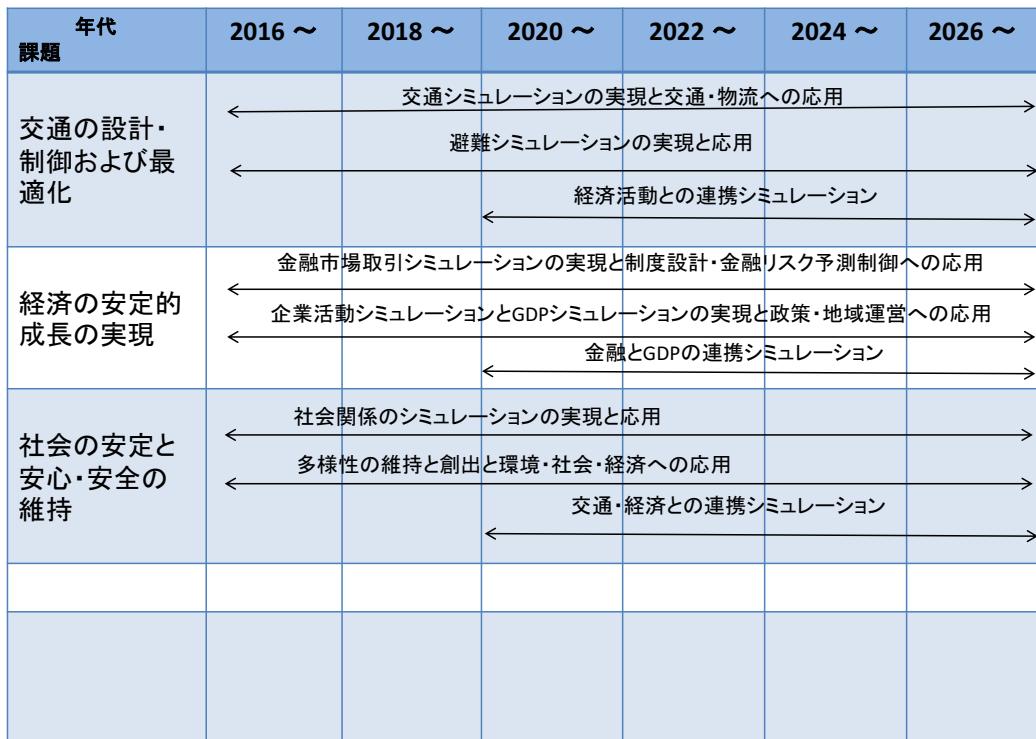


図 2.11 社会科学ロードマップ

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バ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。

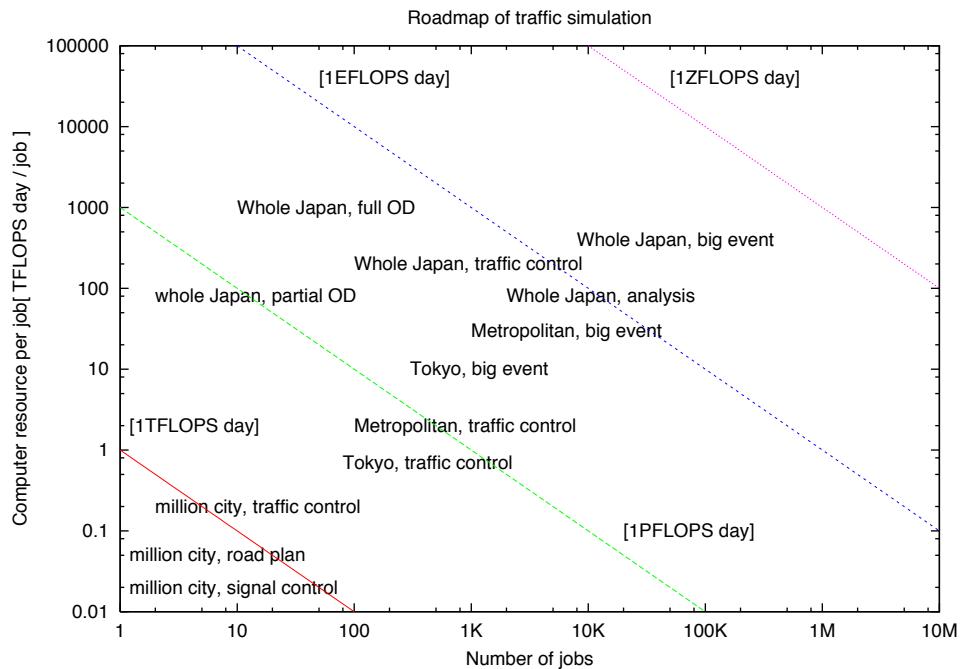


図 2.12 交通課題解決のために必要な推定計算量。

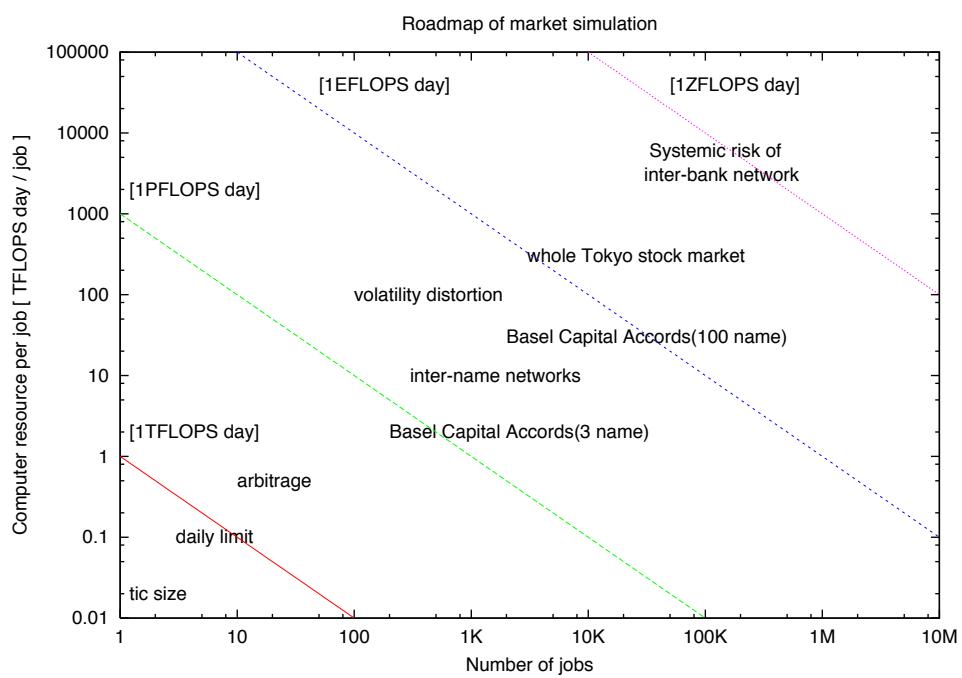


図 2.13 経済取引システム課題解決のために必要な推定計算量。

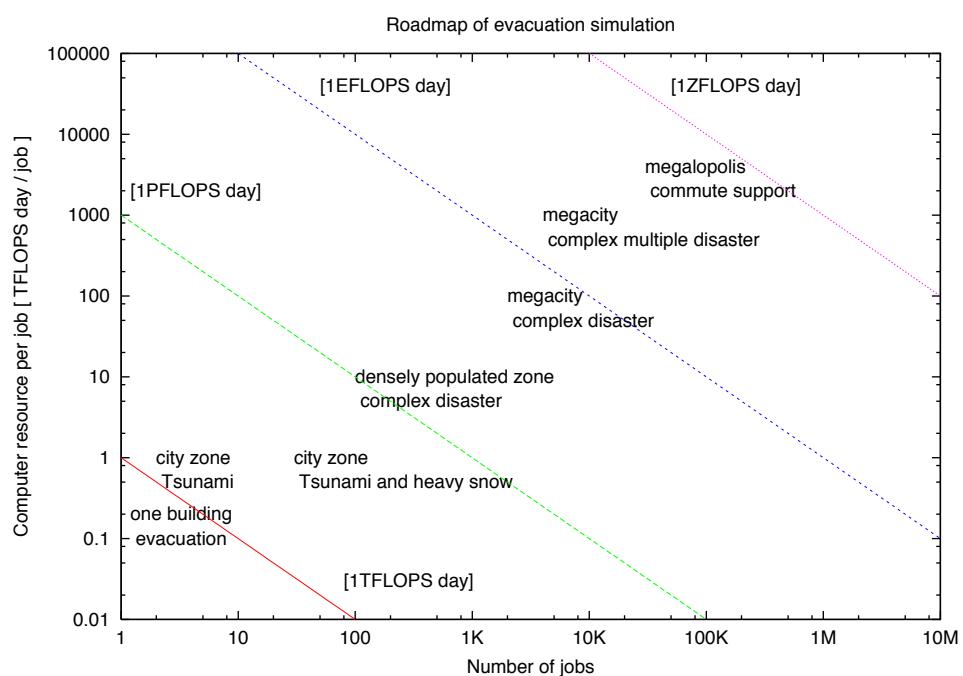


図 2.14 避難問題解決のために必要な推定計算量。

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、記号を持ちい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ことになった原因は主に 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合わせ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ら、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。

また同時に一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单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 | 大型靈長類・ ヒト全大脳皮質シミュレーション | 積分発火型モデルによる 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 | |
| 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 | | 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 | 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 |
| 昆虫全脳リア 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 | 1～数百ニューロン規模の 神経回路データ同化 | | 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 | 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 | 1000種類の物体の学習 | 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 | 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、津波遡上に影響する港湾や河川毎の詳細地形の曖昧さを考慮したり、広域に被害をもたらす巨大地震で同時に複数の都市を計算しようとすると、結局1,000ケース程度の地盤震動や津波遡上を計算することになる。そのような多数の地震シナリオを想定し、地下や海底の情報の不確実性も考慮した上で、将来起こり得る被害の多様性を見据えて防災対策（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、津波の伝播と遡上などのシミュレーションである。更に、揺れや遡上を受けて、どのような経路で避難するのがよいか、また避難誘導を効果的に行うには誘導する人がどこにどれだけ必要かといったことのための避難シミュレーションも必要となる。

また、地震発生から津波遡上に至る一連のシミュレーションは、地震発生前の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にともなう油の流出と引火により大規模延焼火災が発生し、被害は甚大なものとなった。このように、災害の外力が複合的・連鎖的に被害を拡大させる過程を「複合災害」と呼ぶが、その発生メカニズムや被害の波及過程を予測できる技術はいまだ発

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

こうしたシミュレーションを行うことができれば、例えば防潮堤・防波堤等の海岸施設において、以下のようなことが期待される。まず、施設が破壊・倒壊するまでの時間を少しでも長くする、すなわち施設が完全に流失する「全壊」に至る可能性を少しでも減らすような、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る。

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。

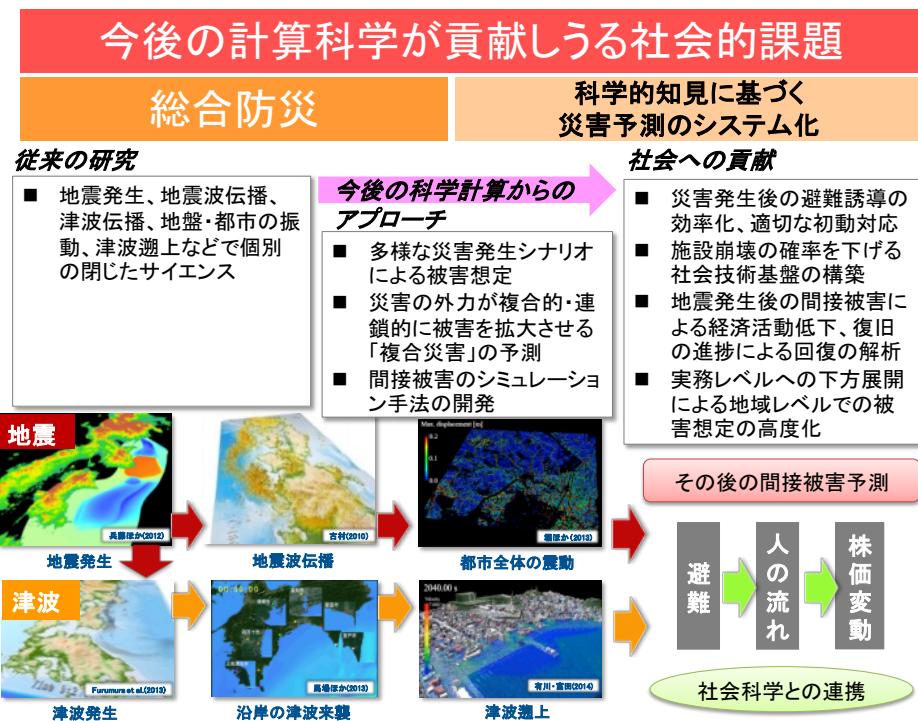


図 2.15 総合防災（地震・津波防災）

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、地震発生に関する仮説を提案し、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でもある）を統合的な知見として集約していくことができ、これまで個々に発展してきた

サイエンスが、分野の垣根を越えて総体として発展していく道筋ができると期待される。

また、分野の垣根を越えるという意味では、津波に関わる課題において、これまでの各分野で独立に先鋭化された地震学、計算工学、流体力学、構造工学といった学術分野を専門とする研究者が連携して問題を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、結果のばらつき・不確実性はどのように考えるのか、逆に、災害対応の現場において果たしてそこまで高度な予測結果が必要なのか、といったことである。例えば、シミュレーション結果を津波に強い町づくりに向けてどの局面で活用していくか、といった課題がある。これらは、研究成果の社会実装を考えるうえで取り組むべき重要な課題であり、これらの疑問への回答を得ることを念頭において、シミュレーション結果の検証やばらつき・不確実性へ考え方も含めて課題に取り組む必要がある。なお、ばらつきや不確実性は、現象の本質やデータが不可避的に不十分であることに起因する面が大きいので、HPCを活用した多数シナリオの導入によってそれらを定量化したうえで、実務に関わる人達と一緒に、実務への生かし方を検討することが不可欠である。そのなかで、災害対応の現場でどのように高度な予測結果が生かせるかを示して行く必要がある。

また、平成25年5月20日に行われた日本地球惑星科学連合合同大会の特別セッション「ハイパフォーマンスコンピューティングが拓く固体地球科学の未来」においては、工学分野からの意見として、災害予測や被害想定をシミュレーションベースで行う方向性について全面的に賛成する一方で、本当のニーズをいかに捉えて、それに応えるものにしていくかの重要性が指摘された。ニーズに応えるといつても、受け手から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、オンラインで、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、津波遇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、地震動增幅（広領域および都市部）、建物震動、津波遇上を合わせた 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は必要となる。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 都市で地震動增幅・建物震動・津波遇上を計算する場合、総演算量は約 250EFLOP となり、これを 3 時間以内に終了させた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、津波遇上は、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。そ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遇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には、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、波動伝播計算を行う。一方、地震動増幅や建物震動・津波遡上についても、地盤構造や建物劣化、海底地形の不確実さを考慮するために数十ケース計算するとともに、複数の都道府県の都市（例えば南海トラフ地震の場合に、東海・近畿・四国・九州の4都市）を一度に計算する必要を考慮すると、結果的に各領域で1000ケース程度は計算が必要。アブリの最大BF値=8.0 |
| (1) 地震発生 | | | 0.00086 | 0.00086 | | 5000 | 48 | 境界積分法による地震サイクル計算 | 面素数10 ⁷ | アブリの最大BF値=4 |
| (2) 波動伝搬 | | | 0.1 | 0.5 | | 100 | 1400 | 差分法による弾性波動伝搬計算 (125m×125m×62.5m格子)、 ステップ数24万回 | 1200×1000×200Km ³ | アブリの最大BF値=2.14。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(300×250×10km ³)アブリの最大BF値=8.00 | |
| (4) 地震動増幅 | | | 0.01 | 4 | | 5000 | 130000 | 有限要素法による地震波動計算 | 30億節点(30×25×1km ³) | アブリの最大BF値=8.00 |
| (5) 建物震動 | | | 0.05 | 0.05 | | 5000 | 500 | | 構造物100万棟 | BF値=0.26（実測値）。メモリ転送量はBF値と演算量から逆算。BF値はキャッシュに載るので小さい演算量はプロファイルからの外挿と一致。メモリ転送量はプロファイルからの外挿 |
| (6) 津波遡上 | | | 0.002 | 0.5 | | 5000 | 50000 | Navier-Stokes方程式複数モデル 1m格子幅）から 1400×1100×10Km(5.4Km格子幅)の複合格子、7都市同時計算、72万ステップ | 3x3×0.08Km(1都市領域を 1m格子幅)から 1400×1100×10Km(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、地盤増幅、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験が進み、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は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、我が国だけではなく、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不十分であり、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らのか、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収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、その性質が比較的よく理解されている。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 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そらく 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

| 年代 課題 | 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 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 | | | 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 | | | 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、ainschtein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、光というも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こう。

(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。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。

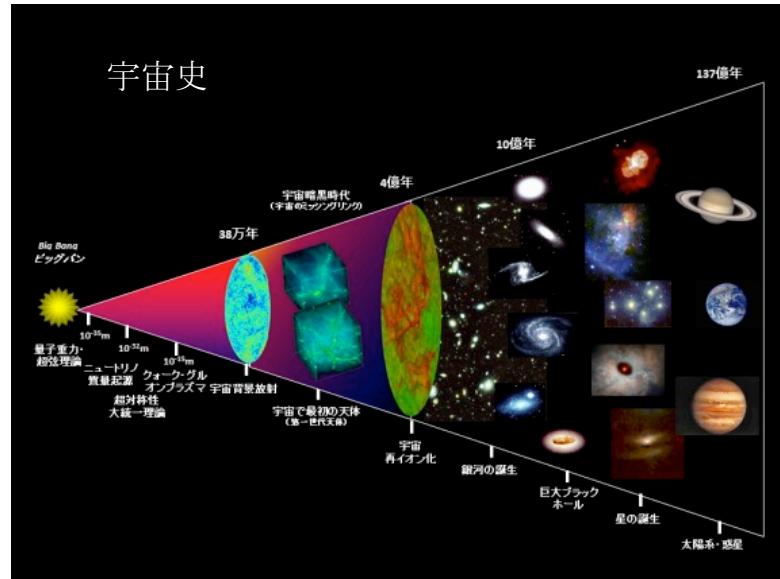


図2.18 現在の宇宙観

(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（シェ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的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。

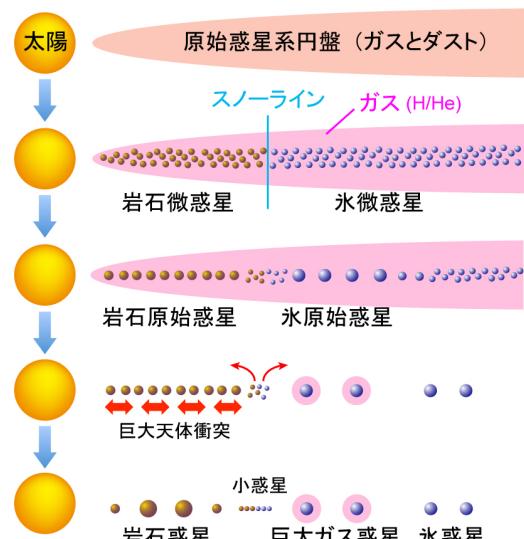


図 2.20 原始惑星系円盤から惑星形成までの時間進化

(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。

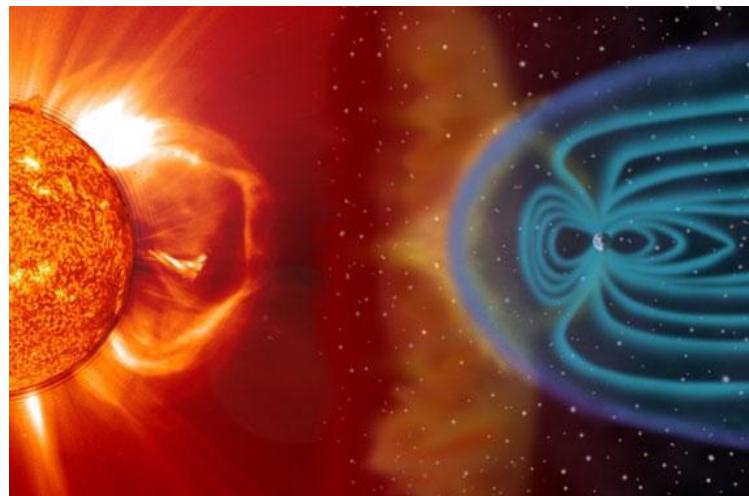


図 2.21 太陽（左）と地球磁気圏（右）。右の磁力線に囲まれた小さな球が地球を表している。©SOHO/LASCO/EIT NASA, ESA

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。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、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。

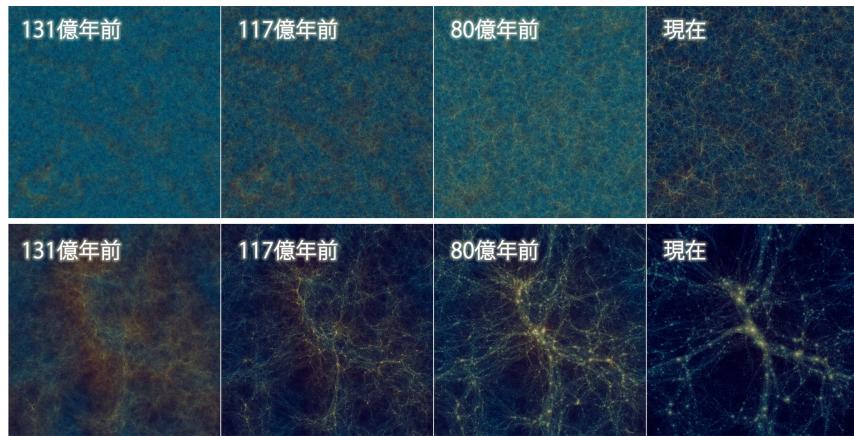


図 2.22 ダークマターの分布の進化: 明るさはダークマターの空間密度を表し、明るいところほど密度が高い。宇宙が生まれてすぐはほぼ一様（左）だが、時間が経つにつれて（順番に右へ）重力により集まり、大きな構造が形成される。上段と下段は空間スケールが異なる 2 種類のシミュレーションで、上段は一辺約 54 億光年、下段は一辺約 3.3 億光年である。

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ギル法による空間 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。

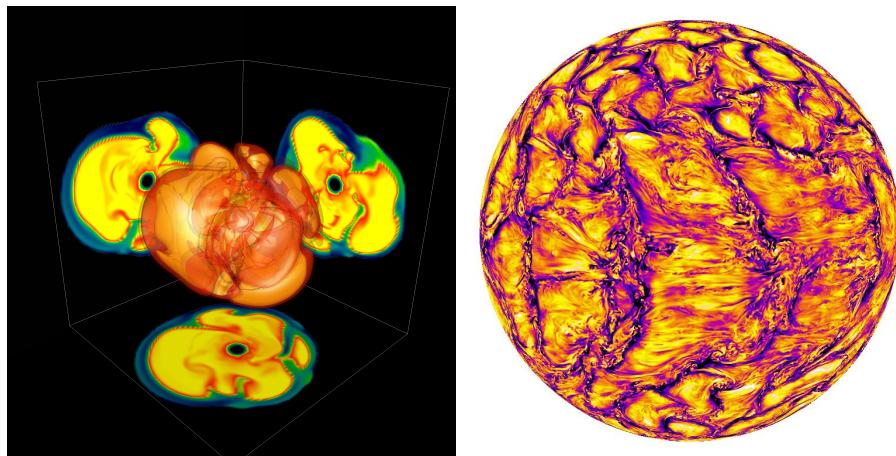


図 2.23 左：13 太陽質量の親星の超新星爆発の 3 次元計算。星の中心の 1000km を切り出してきてその爆発の強さの指標であるエントロピー表示している。右：太陽全球計算の結果。鉛直方向の速度を可視化。回転の影響を受けた乱流が複雑であるが、規則だったパターンを見せてている。

(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る、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なかった。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できなかった。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I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I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。

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 | 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輻射流体シミュレーション | 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 | | |
| (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) 太陽ダイナモの輻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

※ 現在精査中。更新版はWebに掲載予定。<http://hpcl-aplfs.aics.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。

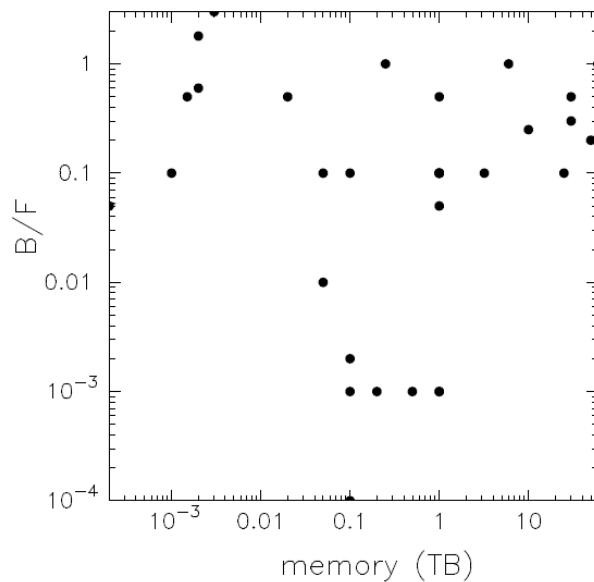


図 3.1 2011 年度「計算科学ロードマップ白書」でのアプリケーションの必要メモリ量とメモリバンド幅。メモリ量は演算性能 100Tflops 当り

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

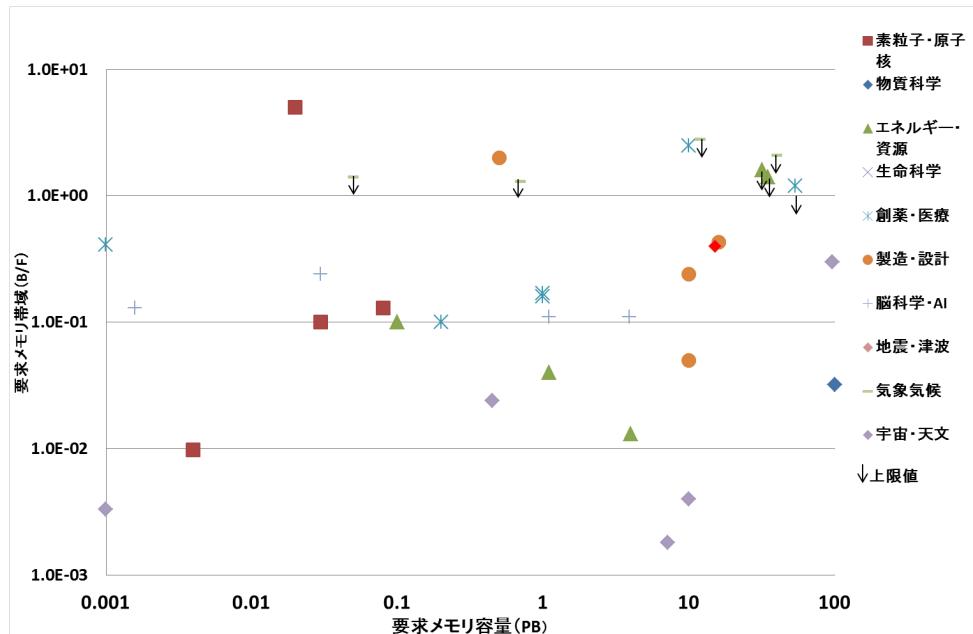


図 3.2 今回のロードマップにおけるアプリケーションの必要メモリ量とメモリバンド幅

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を超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。

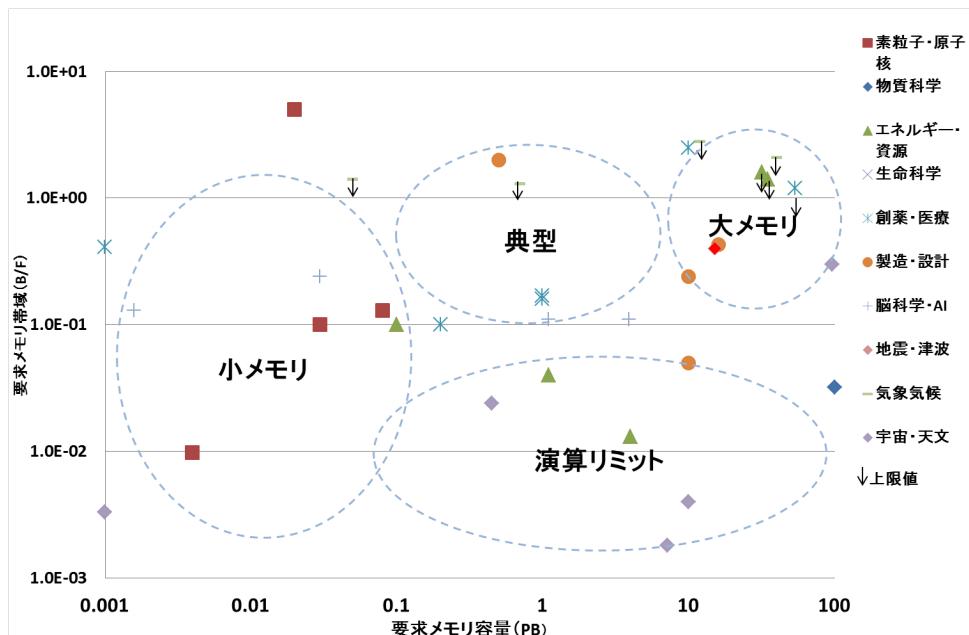
つまり、B/Fで1を超える領域に本当にニーズがあるかどうかは難しい問題であり、適切なソフトウェア環境の提供により多くのアプリケーションで必要なB/F値を大きく下げるこことは可能と思われる。

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とも疑わしい。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ー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ーデザインセンターを中心に開発された Mantevo 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、完成後的一般公開を前提に、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指とした。

- 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, QMC-PACK, 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

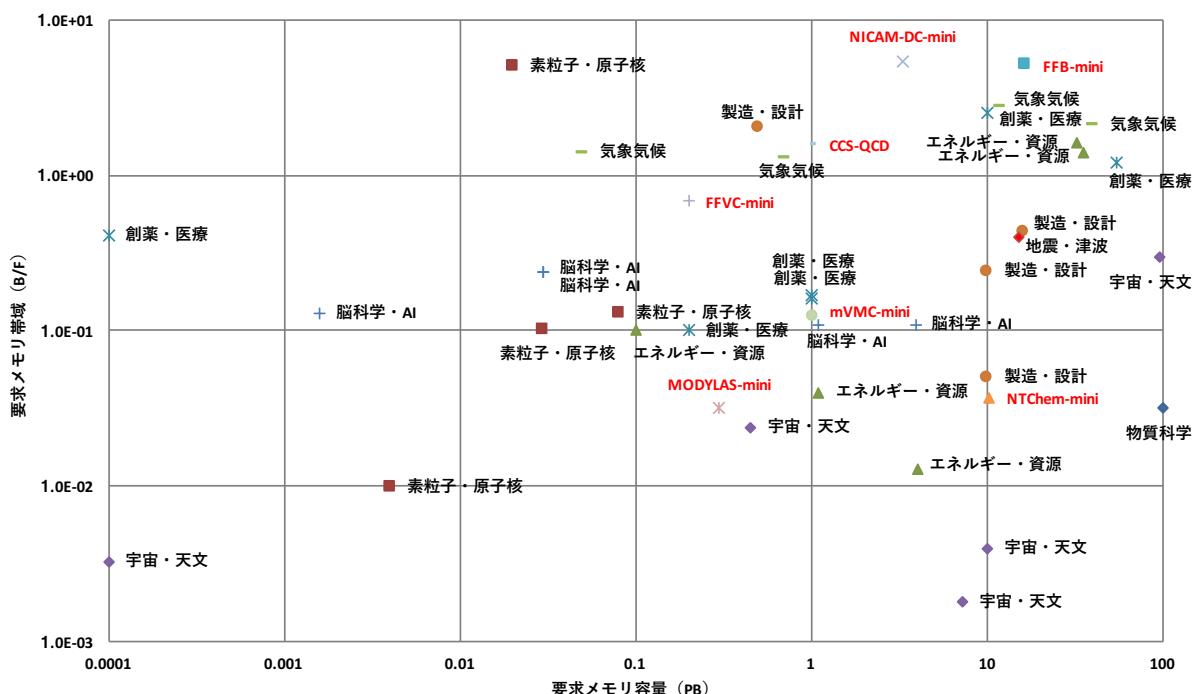


図 3.3 2 章アプリケーションとミニアプリの対応

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, 中村宜文, 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 Moller-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卷, 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://manteho.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>.