

計算科学ロードマップ 概要

～大規模並列計算によるイノベーションの
目指す社会貢献・科学的成果～

平成 25 年 9 月

将来の HPCI システムのあり方に関する調査研究
「アプリケーション分野」

目次

はじめに.....	1
1. 計算科学をめぐる背景.....	2
1.1 HPCI を用いた計算科学のこれまでの経緯と今後の展望.....	2
1.2 「京」による重点分野での研究の成果.....	2
1.3 次世代の HPCI 計画.....	3
2. 今後の計算科学が貢献し得る社会的課題	4
2.1 創薬・医療.....	4
2.2 総合防災.....	6
2.3 エネルギー・環境問題.....	8
2.4 社会経済予測.....	10
3. 分野連携による新しい科学の創出	13
3.1 基礎科学の連携と統一理解.....	13
3.2 ビッグデータの有効利用.....	17
3.3 大規模実験施設との連携.....	21
おわりに ～計算科学の更なる発展に向けて～	23

参考資料 各計算科学分野での課題解決に必要な計算機性能

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更に伸ばし、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つながる可能性がある。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し、シミュレーションや大規模データ処理の果たす役割は更に拡大し、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なかで、2011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¹。同白書は、2012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目指し、文部科学省委託研究「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）」が2012年7月にスタートした。ここでは、計算科学が貢献し得る社会的課題・科学的ブレークスルーの課題抽出が行われ、その成果として新たな「計算科学ロードマップ」の取りまとめが行われている。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、ならびに、各学術コミュニティの第一線で活躍する大学・研究機関、企業の現役研究者約100人が一堂に会し、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いる。

本文書は、現在取りまとめられている「計算科学ロードマップ」の概要版として、今後の計算科学が目指すところについて、5～10年程度の将来において計算科学が貢献し得る社会的課題の具体例と、従来は異なる研究分野と見なされていた諸分野が有機的に結合することによって実現する新しい科学的課題について紹介する。なお、概要版で紹介する社会のおよび科学的課題の解決には、基礎となり得るさまざまな計算科学分野における研究課題への取り組みの深化が必須である。本概要版では、各分野における個々の研究課題には直接触れていないが、その詳細は「計算科学ロードマップ」の第4章に記載している。

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

1. 計算科学をめぐる背景

1.1 HPCI を用いた計算科学のこれまでの経緯と今後の展望

今日、スーパーコンピュータ等を用いた計算科学は、理論・実験と並ぶ科学技術の第 3 の手法として、最先端の科学技術や産業競争力の強化に不可欠な研究手法として欠くことのできないものとなっている。計算科学の発展により、我々は、自然現象や社会現象をモデル化し、シミュレート（計算）することにより、将来を予測することが可能となった。例えば、天気予報や地球温暖化予測等は、計算科学なしには実現できない。また、我々にとって、未踏の領域である基礎物理の解明にとっても、精緻な理論の検証や、理論を現実の複雑な系に適用する際にも計算科学が不可欠である。ヒッグス粒子の発見で著名な、欧州原子核研究機構が進めている大型ハドロン衝突型加速器 (Large Hadron Collider : LHC) は、巨大科学の成果と言えるものであるが、これも、計算科学の力なくしては機能しない。更に、遺伝情報や、経済・金融・交通動態の解析にも計算科学の力が必須となっている。

近年の飛躍的な計算機の性能向上にともない、計算科学の適用領域は深まり、また広がっている。1970 年代に最初のスーパーコンピュータが誕生した当初は、建築物の強度計算や、比較的単純な流体解析等、応用領域は限定されていたが、現在では多様な物質・材料の構造・物性および機能の解析や、遺伝子レベルおよび人体全体の解析が実施可能になりつつある。

このような状況下において、多様な分野の研究者・技術者に世界最高水準の計算環境を提供することで、さまざまな社会課題の解決や産業利用の加速につながる成果を創出することを目的に、理化学研究所の「京」と全国 9 大学の情報基盤センターが中核機関となり、革新的ハイパフォーマンス・コンピューティング・インフラ (HPCI) が構築されている。

1.2 「京」による重点分野での研究の成果

「京」は HPCI の中核となるスーパーコンピュータである。この「京」の能力を最大限に活用して世界最高水準の研究成果を創出するとともに、その分野において計算科学技術推進体制を構築する取り組みを支援するため、2009 年に 5 つの戦略分野が設定され、重点的な取り組みが開始されている。

「京」は 2012 年秋から本格的に稼働しており、従来は演算能力の不足によって実現できなかった詳細なモデルでの計算、あるいは現象全体を対象とした計算が実現しつつある。

- 戦略分野 1 予測する生命科学・医療および創薬基盤：細胞レベルでの生命現象の精密な理解等、生命の本質を理解するための基礎研究に加え、医薬品の開発の大幅な加速や、個別化医療等の実現といった社会課題の解決のための基礎的知見を得るための研究が進められている。
- 戦略分野 2 新物質・エネルギー創成：物質・材料の機能やナノ構造デバイスの電子機能を、基本理論に基づき解明・予測するための研究が進められている。高温超伝導材

料や高効率熱電変換素子、燃料電池用触媒等の探索のための重要技術として期待されている。

- **戦略分野 3 防災・減災に資する地球変動予測**：地球規模の環境変動シミュレーションをより精密に行うための研究、集中豪雨の直前予測につながる研究が行われている。また地震や津波などの被害予測につながる研究が進められている。
- **戦略分野 4 次世代ものづくり**：先端的な流体機器やナノカーボンデバイスの設計・開発プロセスの大幅な高速化とコストダウンのためのシミュレーション技術、原子炉プラント丸ごとの耐震シミュレーションといった、ものづくりの高度化につながる研究が進められている。
- **戦略分野 5 物質と宇宙の起源と構造**：素粒子加速器実験やブラックホール、超新星爆発といった極限的天体現象の観測を通して、宇宙の起源・物質の起源やそれらを支配する法則を理解するためのシミュレーションによる研究が進められている。

1.3 次世代の HPCI 計画

今後も、スーパーコンピュータの処理能力は飛躍的な進歩を遂げると期待されているが、計算機の進化にともない、計算科学が活躍する領域はますます拡大し、社会のさまざまな課題や産業競争力に直結する成果が創出されると期待される。

このような状況を鑑み、わが国としても引き続き長期的な視点から戦略的に研究開発を推進することが必要であるとの考えのもと、次世代 HPCI 計画についての検討が進められている。

次世代の HPCI 計画では、従来にも増して計算科学からの社会貢献が重視されており、その認識のもと、以下のような基本合意が形成されている。

- 単にピーク性能の達成を誇るのではなく、HPCI を駆使して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について十分に検討・吟味のうえ、これを実現するためのシステムを構築する。
- 現時点で「京」などの HPCI を利用しているユーザーだけでなく、中長期的視野にたつて HPCI を必要とする可能性のある研究課題をできるだけ抽出していく。
- アプリケーションのタイプによっては、汎用マシンで計算するよりも、専用に設計されたマシンを活用するほうがはるかに高速かつ効率的に計算できることが知られている。計算資源の有効利用のためには、汎用のアーキテクチャに加え、複数のアーキテクチャの導入を想定する。
- HPCI 技術を必要とするアプリケーションとして、大規模シミュレーションだけに限定せず、各分野で進行中の大型実験（観測）施設などで得られる大規模データをいかに効率よく解析していくかについても考察する。

2 今後の計算科学が貢献し得る社会的課題

2. 今後の計算科学が貢献し得る社会的課題

大規模数値計算が、現在の我々の社会生活を支える産業や経済活動に不可欠な貢献をしていることは紛れもない事実であり、今後のスーパーコンピュータの性能向上により得られる成果は、現在の社会が抱えるさまざまな課題の解決に貢献し得る。ここでは、「創薬・医療」「総合防災」「エネルギー・環境問題」「社会経済予測」の4つの分野における社会的課題に対して、今後の計算科学により実現を目指す具体的な貢献について記述する。

社会的課題	具体的貢献
創薬・医療	画期的創薬・医療技術の創出
総合防災	科学的知見に基づく災害予測のシステム化
エネルギー・環境問題	エネルギー技術と環境との調和
社会経済予測	社会経済活動に柔軟に対応する予測システム

2.1 創薬・医療

わが国はこれから急速な高齢化社会を迎え、国民の健康の増進はきわめて重要な国家的課題となる。健康の増進に資する画期的創薬・医療技術の創出には、その基盤として人体等における生命現象の理解が不可欠である。しかし、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、遺伝情報などの大規模データの解析、生命科学と物質科学との連携によるシミュレーション、分子から細胞・臓器・脳・全身スケールに至るマルチスケールシミュレーションとその医療応用などが不可欠となる。具体的には、ゲノム情報を超高速に読み取る次世代の DNA シークエンサーにより得られる膨大な個人ゲノム情報などを用いて、複数の遺伝子が連携する遺伝子ネットワーク等を解析することで、がんなどの複合因子が関わる疾患の原因を明らかにし、個人の遺伝情報に基づき患者個人に最適な治療法を提供するテーラーメイド医療の実現を図る。また、物質科学等で利用されてきた信頼性の高いシミュレーション手法を用いてタンパク質・薬剤結合予測を行うとともに、細胞・ウイルスまるごとの環境下でのシミュレーションを行うことで、新薬開発に必要なコストを大幅に低減、期間を大幅に短縮する。これらのシミュレーションは、生体分子を応用した新しい機能性を持つナノ分子材料の開発への展開も目指している。更に、分子から細胞・臓器・脳・全身に至るマルチスケールのシミュレーションは、例えば、心筋梗塞・脳梗塞などにおける血液中での血栓形成の理解など、複雑な疾患機構の解明に役立ち、患者への負担が小さい低侵襲治療やそれに必要な医療機器開発による患者の生活の質（Quality of Life : QOL）の向上、更には早期社会復帰による社会の活性化、医療費の削減等の効果へとつながる。