

サイエンスロードマップ再構築

理化学研究所計算科学研究機構

杉田 有治

本日の進め方

- 「計算科学ロードマップ白書」のおさらい
 - 生命科学(杉田:池口代理)
 - 物質科学(藤堂)
 - 地球科学(富田:河宮代理、堀)
 - ものづくり(高木)
 - 宇宙・原子核・素粒子(石川、牧野)
- 本年度の作業についての打ち合わせ
 - 役割分担
 - 進め方の議論

計算科学ロードマップ白書

- 「HPCI計画推進委員会」のもとで、「今後のHPC技術の研究開発のあり方を検討するWG」が設置。
- 「アプリケーション」、「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」の3つの作業部会が発足。
- 「アプリケーション」作業部会で4回に渡って議論された、今後5～20年程度の各分野における計算科学面からのブレークスルーおよび社会貢献などをまとめたもの。
- 上記のサイエンスブレークスルーを実現するために必要な計算機的能力についても記述。

白書に対するコメント

- 分野連携の議論がやや薄い
- 議論している分野に漏れがある
- 産業界の意見を取りこむ必要がある
- 学会からのオーソライズがなされていない
- 理論家(数理科学者)や実験家からのフィードバックが必要

本年度のサイエンスロードマップ班の ミッション

- 昨年度の「白書」をベースに、コメントなどを参考とし、広く学会などにオーソライズされた形の「白書(第二版)」を作成する
- 同時にシステム評価に必要なアプリの情報を提供する
 - アプリ評価班の依頼に応じて、フルアプリのドキュメント、ソースコードの提供を行う
 - アプリ評価班を中心に議論

分野横断的課題

- 白書で議論されていた3課題
 - 地震における構造物の耐震性解析(「防災減災」、「ものづくり」)
 - タンパク質やDNAなどの生体分子・複合体の立体構造に基づく解析(「生命科学」、「物質科学」)
 - 惑星系の形成、惑星の多様性、構造の理解(「宇宙科学」、「地球科学」)
- 議論のポイント
 - 他に分野横断的課題はないか？
 - 大規模データ解析(「生命科学」、「地球科学」)？
 - アンサンブル計算(???)
 - Capacity Computing(「物質科学」、「ものづくり」)
 - さらに議論を深めるためにどうするか？

戦略5分野以外、産業界

- 議論のポイント

- 材料科学？

- 「物質科学」と「ものづくり」にお願いできないか？

学会からのオーソライズ

- 議論のポイント

- 学会等で、次世代の計算機を用いたシミュレーションの必要性を議論できるか？コメント等を参考にサイエンスロードマップを再構築
- 本年度中にある程度進めたいが、時間的に可能か？
- 次ページに戦略分野の各課題と対応する学会をまとめた

分野1: 予測する生命科学・医療および創薬基盤

1. 細胞内分子ダイナミクス:
2. 創薬応用: 日本生物物理学会、蛋白質科学会
3. 予測医療: 機会学会 バイオスーパーコンピューティング研究会
4. 生命データ解析: 分子生物学会、他にないか?

分野2: 新物質・エネルギー創成

1. 新量子相・新物質 理論化学研究会、分子科学会
2. 先端デバイス科学 日本物理学会
3. 分子機能と物質変換 分子シミュレーション研究会
4. エネルギー変換 他にないか?

分野3: 防災・減災に資する地球変動予測

1. 気象・気候・環境予測 日本地球惑星科学連合、日本海洋学会、日本気象学会、日本流体力学会
2. 地震・津波の予測

分野4: 次世代ものづくり

1. プロダクトイノベーション 日本機械学会、応用物理学会、情報処理学会
2. プロセスイノベーション 電気学会、電気情報通信学会、土木学会
3. 安全・安心社会の構築 日本建築学会、日本原子力学会、日本流体力学会、可視化情報学会、計算工学会、自動車技術会、日本化学会

分野5: 物質と宇宙の起源と構造

1. 格子QCD
2. 大規模量子多体計算 日本物理学会、日本天文学会、応用物理学会、
3. 超新星爆発・ブラックホール誕生 電気情報通信学会、情報処理学会
4. ダークマター

理論家、実験家の声

- サイエンスロードマップ班会議に、理論家や実験家を数名招聘し、計算科学への期待やコメントを議論していただく
- サイエンスロードマップ班に参加されている実験家、理論家
 - 野地(東大:生物科学)
 - 市川(九大:気象気候)、日野(東北大:地震津波)
 - 高見(天文台:宇宙)
- **議論のポイント**
 - 人数は十分か?
 - ナノ?ものづくり?

次回のサイエンスロードマップ班会議 (9月20日(木)を想定)

- 各分野の議論の進捗
 - ロードマップの精査
 - 学会におけるオーソライズをどうするか？(計画)
- 分野横断課題の議論の報告
 - 「防災減災」&「ものづくり」
 - 「生命科学」&「物質科学」
 - 「宇宙科学」&「地球科学」
- 理論家、実験家の講演(少なくとも1名)
- システム評価に必要なアプリの議論
 - 具体的なアプリ課題(MD、MOなど)と代表的アプリを上げることができるか？