

序論

はじめに

産業革命以降、現在に至るまで、科学技術の開発と急激な普及は産業を支え、災害や事故を未然に防ぎ、人々の生活に豊かな物質を供給してきた。また、健康を促進し、病気を克服して長寿を可能にしてきた。科学技術は間違いなく社会の要請に応えてきたといえる。しかしながら、エネルギー問題や環境問題をはじめ限られた地球の資源があらゆる人間活動の限定条件となりはじめ、人類はその生き方を変えることを覚悟せざるを得なくなっていると考えられる。

この100年、世界人口は15億から70億に急激に増加した。先進国の寿命は40歳から80歳へ上昇し、CO2濃度は産業革命前の1.4倍にまで上昇、産業活動による環境劣化と気候変動は待ったなしの状況である。我が国においては、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、財政逼迫などの難題に直面している。21世紀の科学は、こうした課題を直接的に解決することが期待されている。一方で、これらの課題解決に真理の探求のための基礎科学が後押しすることを忘れてはならない。抜本的な解決の第一歩は人類の共通知をさらに積み上げることである。

現代の科学技術の知識獲得、発見にスパコンは必須となっている。スパコンは同時に一般市民の毎日の生活を陰で支えている。また、スパコンは科学技術の最先端をさらに伸ばすことはもとより、産業の国際競争を活性化している。スパコンによるシミュレーションは科学技術を牽引するとともに、われわれ人類が直面している困難な課題解決にも重要な役割を演じる。人類はスパコンを駆使する大規模シミュレーションによって複雑な自然現象や社会現象・経済現象を認識する新しい科学的アプローチを獲得したといえる。シミュレーションや大規模データ処理の果たす役割は今後、ますます大きくなり、その結果は社会に大きな恩恵をもたらすであろう。

先に述べたように、東日本大震災以降、我が国の抱える問題は山積している。現在、明日の日本社会を力強く支え、明日の時代を切り開くためにスパコンは不可欠の基盤技

術である。2012 年秋「京」が本格稼働したが、山積する課題を解決するためには、今こそ次に向けて具体的なスタートを切らねばならない。

本調査研究の具体的な背景

2011 年度後半期、「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、「アプリケーション作業部会」、「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」が発足し、これらの協同のもと「計算科学ロードマップ白書」（リファレンス必要）として報告がなされている。計算科学と計算機科学がしっかりと手を携えて次世代の計算科学の方向性を議論する試みは、我が国では初めての試みであった。

これを受けて、次世代の計算機システム、特にフラグシップ機となる計算機をどのように構成していくかを念頭に、2012 年度には文科省委託研究「将来 HPCI のあり方調査研究」が始まった。3 つのシステム設計チームと 1 つのアプリケーション分野チームが立ち上がり、その構成を図 1 に記す。4 つのチームは互いに協調しながら、次世代の HPCI でどのようなことを期待し、それは実現可能なのかを調査するのが最大のミッションである。2013 年度の後半には、4 チーム総体としての結論を提示する。本文書は、アプリケーションチームで 2012 年度に議論した中間報告書である。

2011 年度の「今後の HPC 技術の研究開発のあり方を検討する WG」におけるアプリケーション・アーキテクチャ合同作業部会から現時点までの最大の合意事項は、従来からも方法を踏襲しつつも、スーパーコンピュータ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を抽出、十分に吟味し、これを実現するためのシステムを設計するという点である。この目的を遂行するために共有している計算機科学側とのコンセンサスを以下に挙げる。

- ① 2020 年頃、エクサスケール級の計算機が登場すると考えられるが、今後の計算機開発の指針として、ピーク性能を目標に掲げるのではなく、社会ニーズと期待される科学的ブレークスルーに基づいたシステム構成を十分に考慮に入れる。
- ② 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、中長期的視野にたって 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。
- ③ 今後、汎用マシンだけでは全てのアプリケーションに対応できるとは限らない。こ

のため、計算科学ロードマップを実現するための主要アプリケーションの計算方法・計算スキームを効率よくは資させるために、複数のアーキテクチャを想定する。

- ④ 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如何に効率よく解析していくかについても考察する

「アプリケーション分野」チームの主なミッションは、HPC に関わる全科学分野で社会的課題・科学的ブレークスルーの課題を抽出し精査することであり、以降のシステム設計を行う上での原点となりうるもので、その責務は重大である。

次世代に解決が求められる社会的課題・科学的課題

これまで、各学術分野では、各分野間での緩やかな連携をもって、多くの課題について、深く研究されてきた。今後もこれらの研究スタイルは維持されるであろうが、本調査研究で得られた一つの共有認識として、より密接に分野横断的な連携体制が必要となる課題が山積しているということである。このため、これまでの戦略5分野を中心とした研究体制の連携がより強く求められる。以下に大きく括りなおした課題を列挙する。

① 創薬・医療

- 日本はこれから急速に高齢化社会を迎えるが、国民の健康の増進は極めて重要な国家的課題である。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、生命科学と物質科学との連携が不可欠となる。

② 防災・減災

- 2011年3月11日に我が国を襲った東日本大震災以降、防災・減災は我が国喫緊の課題であることはいうまでもない。直接的な地震津波の予測は現段階では難しいと考えられるが、シナリオを通じて様々な被害想定をしておくことがまず必要である。また、その被害想定をもとに構造物耐震設計をより精度の高いものにしておくことが肝要である。さらに、実際に災害が起こった時にどのよ

うな避難経路をとればよいかなどの備えも必要である。これらは、固体地球科学、ものづくり、離散化事象科学との密接な連携が必要とされる。

③ クリーンエネルギー創出と環境問題解決

- 現在の生活レベルを維持するためには、現在、化石燃料による発電、原子力発電に頼らざるを得ない状況であるが、よりクリーンなエネルギーを目指すためには、自然エネルギーの積極利用、新しい太陽光発電デバイスの開発、核融合発電実用化への研究が急務である。そのためには現状の地球環境をより正確に把握し、将来的な予測へつなげることが必要である。これらは物質科学、ものづくり、気象・気候科学の連携が不可欠となる。

④ 社会科学

- 戦略5分野にはないが、新しく必要となる課題（TBD）

⑤ 知の探究

- 直接的に社会的な出口となる課題ではないが、これまでの歴史が実証してきたように、基礎科学の応用が我々の生活を豊かにしてきた。この観点から、知へのあくなき探究を止めてはならない。

① 素粒子・原子核・宇宙論における大規模実験施設などとの連携

- ・ 基礎物理学は、これまでも当該分野では大規模実験施設と連携しながら研究を行ってきたが、より一層の発展のためには、理論・実験・計算の一体化した研究システムが重要である。

② 宇宙科学、地球科学の連携による惑星科学

- ・ 他の惑星系を宇宙論を含めて包括的に理解することは、我々の住む地球を理解することにつながる。今後、多くの惑星探査が計画されているが、シミュレーション技術、データ同化技術がこれらの企画立案に深く寄与・貢献できることは間違いない。

⑥ 課題の効率的解決のための共通基盤

- 上記の課題を速やかに結果に結びつけるためには、基盤的な技術開発の進展が一つのカギを握っている。HPC の効率利用のため、6 番目の課題として、共通基盤的研究を挙げる。計算結果から出てくる大規模データ、ビッグデータの処理は、結果の社会還元性に大きく影響を与える。具体的には、大規模データ解析、可視化技術、データ同化技術、知識処理が挙げられる

本書の構成

本文書をまとめるにあたり、大学・研究機関、企業で活躍している現役の研究者が中心となり、これまで(2013/2 現在)に5回の討論(ワークショップ)が開催された。さらに、各研究分野で議論を持ち帰り、将来のアプリケーション課題やソフトウェア開発課題についての深い議論が行われた。

第2章では、10年程度の将来において、HPCにおいて解決すべき課題を6つに大別し、説明する。ここで想定する読者は、これまでHPCを活発に行って来た各計算科学分野の研究者、将来においてはデータ解析にHPCIを必要とする実験科学者だけでなく、製品開発を加速しコストを減らすためにHPCIを利用しようとする産業界などを含む広い層である。そのため、専門性を失わない限りでできるだけ平易な表現を用いることを心掛けた。

第3章では、現在から今後20年程度にわたる各研究分野における計算科学からのサイエンスブレークスルー及び社会貢献をまとめた。その際、「現在行われている課題」、「長期的目標」、「次世代に解決すべき課題」に分けて記述した。「現在行われている課題」は、「京」で行うことを目指して現在進行形で行っている課題である。必然的に「戦略5分野」で研究開発されている内容が中心になる。さらに、それらの研究と海外の研究動向とを比較検討した。「長期的目標」では今後20年くらいのスパンの話や方向性を記述し、期待される科学的ブレークスルーだけでなく産業界や社会から解決が期待される課題をまとめた。「次世代に解決すべき課題」では2016~2022年度程度を想定し、現在行われている研究を以下に発展させて長期的目標につなげるべきか検討した。いわば長期的課題へのマイルストーンであり、本文書における最も重要な記載の1つである。これらの記載は、第2章の強力な裏付けとなるものである。

また、3章では、これらに加えて、「次世代に解決すべき課題」を遂行するために必要なアプリケーション群や他分野との連携についても記述した。さらに各分野において学会、

ワークショップ、シンポジウムなどで行われた意見交換会での議論や提案、コメントについても記述した。

本報告書と 2011 年度版「計算科学ロードマップ白書」の違い

本調査研究では、2011 年度版の「計算科学ロードマップ白書」を以下の点を考慮し再構成を行っている。

- 2011 年版「計算科学ロードマップ白書」の内容の更なる精査、より信頼性の高い将来研究予測を行うこと
 - 各研究分野において、学会、シンポジウムでのセッション、WEB での公開などにより広く議論を周知し意見を求め、議論を深めている。
- 実験科学者や理論科学者などと対話し、将来 HPCI のあり方に関して意見交換を行うこと
 - 各分野内での議論みならず、他分野の研究者が終結する調査研究での全体会合などにおいても、実験・観測・理論科学者を招いて、計算科学への期待、連携の可能性などについて講演していただき、その意見を反映させる。
- 分野横断的課題を提案し、異なる分野を巻き込んだ議論を活性化すること
 - 重要な社会的課題の解決や更なる科学的知見の蓄積には、各個別分野での研究のみならず、分野を超えた協調は必須である。このような観点から、次節に挙げるように、今後の計算科学から貢献できうる 6 つの柱を掲げた。
- 各研究分野における将来 HPCI のあり方が他分野の研究者や産業界から見ても分かりやすすること
 - 専門分野外の読者が理解できるように平易な言葉で書いた。
- これまでの枠組みである戦略 5 分野でカバーしきれていない分野について追加、社会的貢献度が大きく必要である分野を充実させたこと。
 - たとえば工学分野での応用の拡大、離散現象や社会科学（特に経済）を網羅した。

- 社会的課題、科学的課題解決にとって重要である HPC 基盤的技術についても十分に考慮すること
 - 今後大きな問題となる大規模データ解析技術、観測・実験を取り入れるデータ同化技術、結果の解析に必要な可視化技術など共通基盤的 HPC 技術は、莫大なデータを解析してその結果を迅速に社会へ還元するためには、必要不可欠である。