



筑波大学
University of Tsukuba

平成22年3月5日

「HPCIフォーラム2010」

スパコンの発展と 計算科学のフロンティア

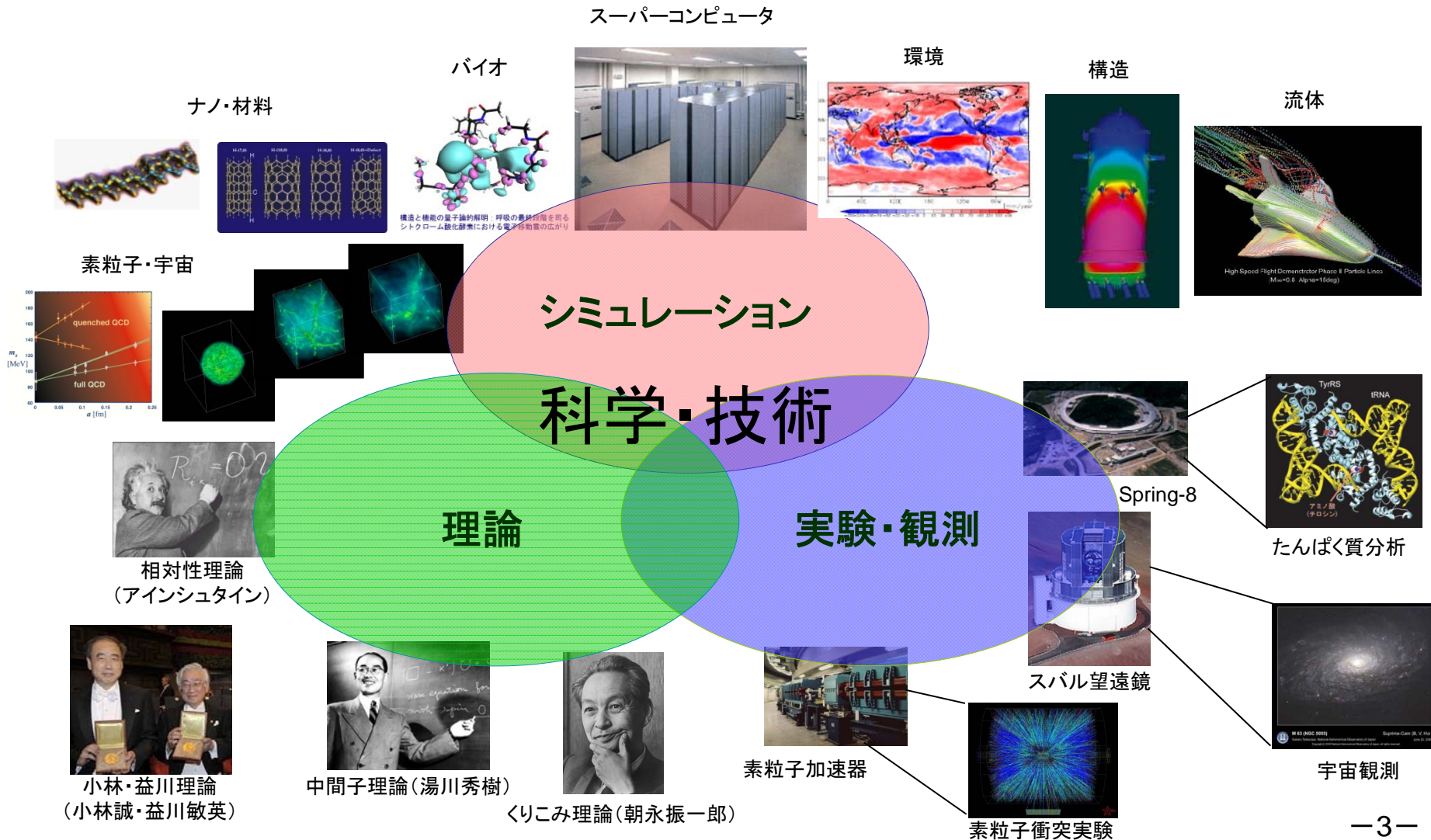
岩崎 洋一

目次

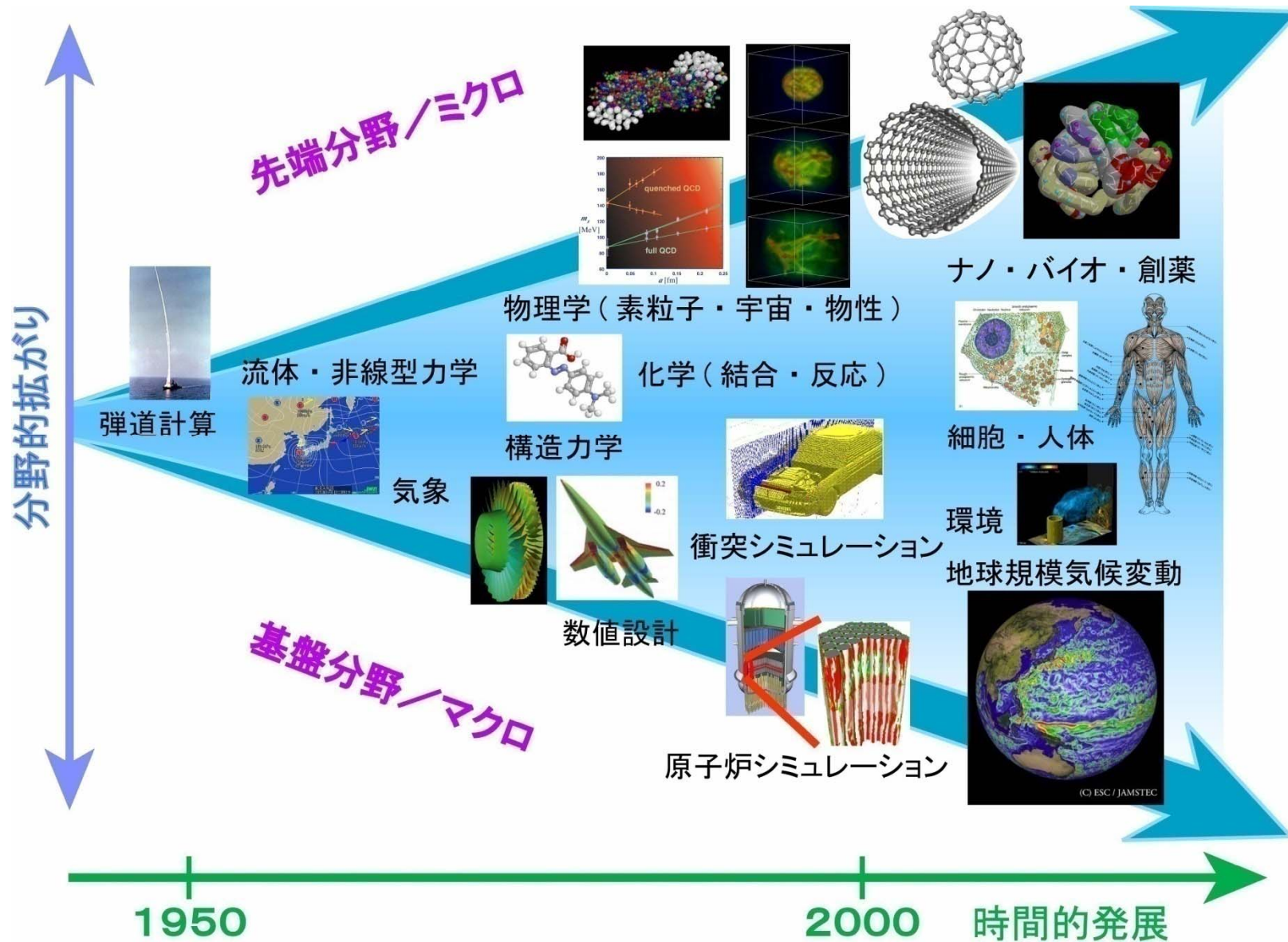
- 計算科学とスパコン
 - 計算科学の発展
 - スーパーコンピュータの歴史
- 計算科学のフロンティア
- フロンティアのさらなる開拓
- むすび

科学・技術の三本柱としての計算科学

- 科学・技術で、実験・観測、理論と並ぶ、重要な研究手段

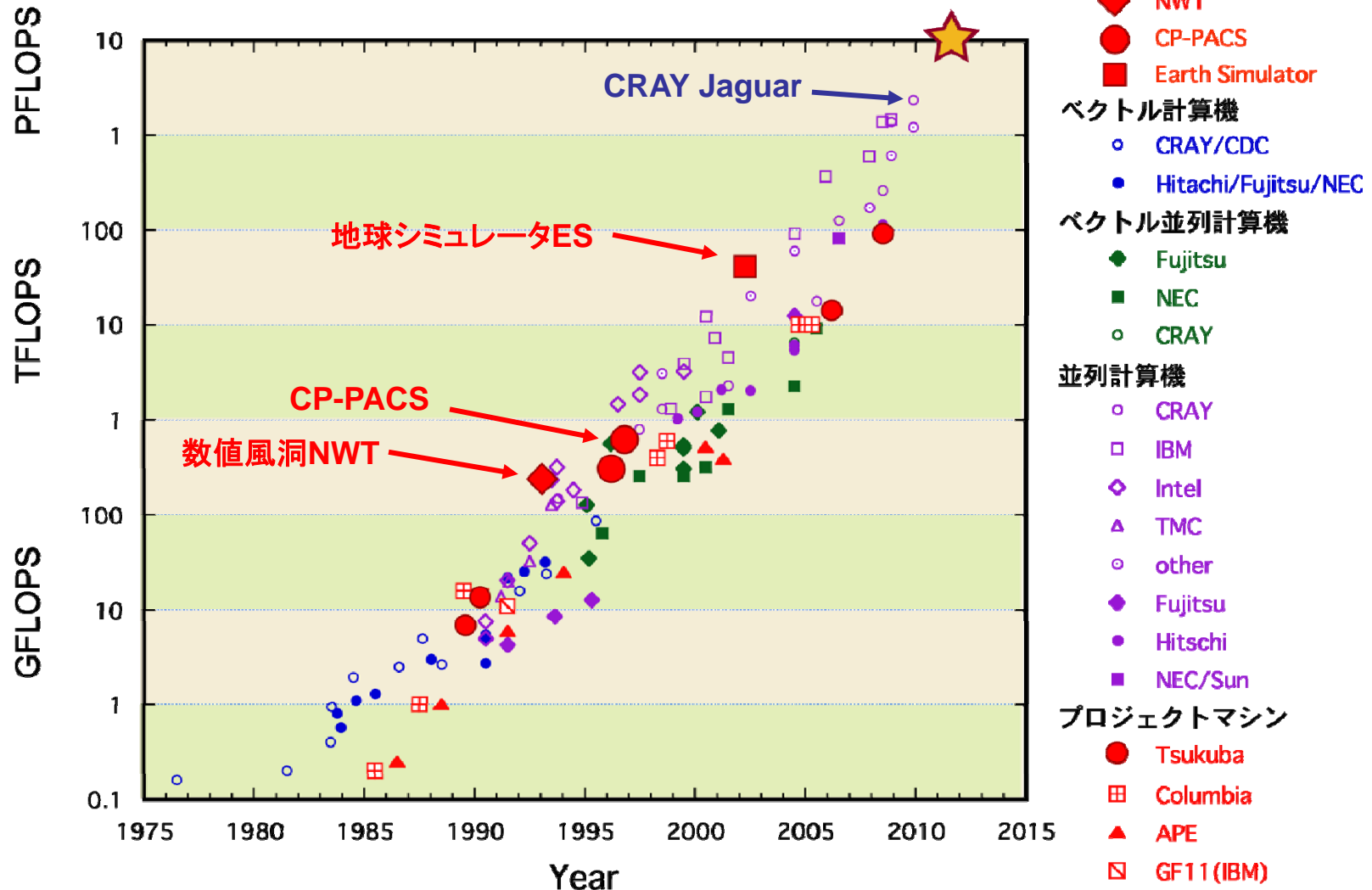


計算科学の発展



スーパーコンピュータの発展

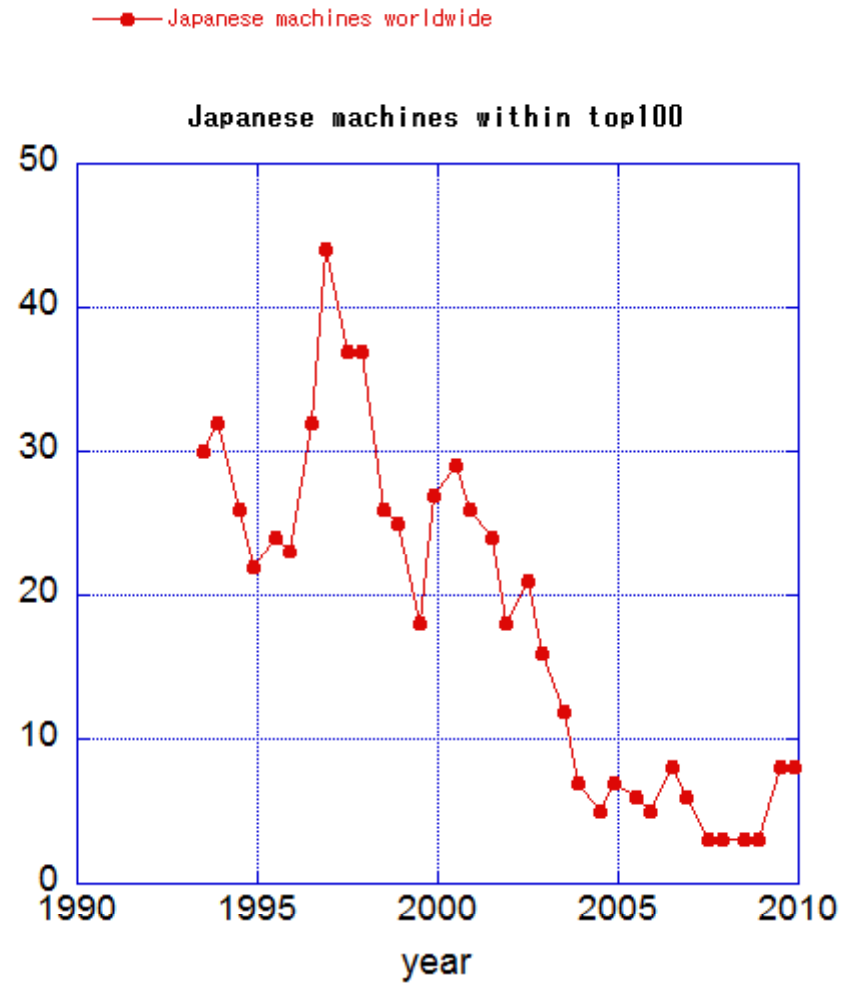
30年間(1980年~2010年)で1000万倍
の高速化



我が国のスパコン(過去)

- トップ500(1年に2度)の1位
 - 数値風洞 1993年11月
旧航空技術研究所、富士通
 - CP-PACS 1996年11月
筑波大学、日立製作所
 - 地球シミュレータ 2002年6月
JAMSTECなど三組織、NEC
- 1997年 トップ100のうち44台日本製

日本製スパコン 過去から現在への推移



スパコンの世界情勢(現在)

- トップ500(11/09)の日本製の最高順位 **31位** ES2
- 31位以内で米国以外に設置されたスパコン
(**赤** **白**国製)
4 **ドイツ** 5 **中国** 12 **ロシア** 13 **ドイツ**
14 **韓国** 18 **サウジアラビア** 19 **中国**
20 **英国** 21 **スイス** 22 **カナダ** 26 **インド**
28 **フランス**
- 米国の将来計画 2010-2011,
Blue Waters(約10PFlops), Sequoia(20PFlops)

我が国のHPCIに必要なこと

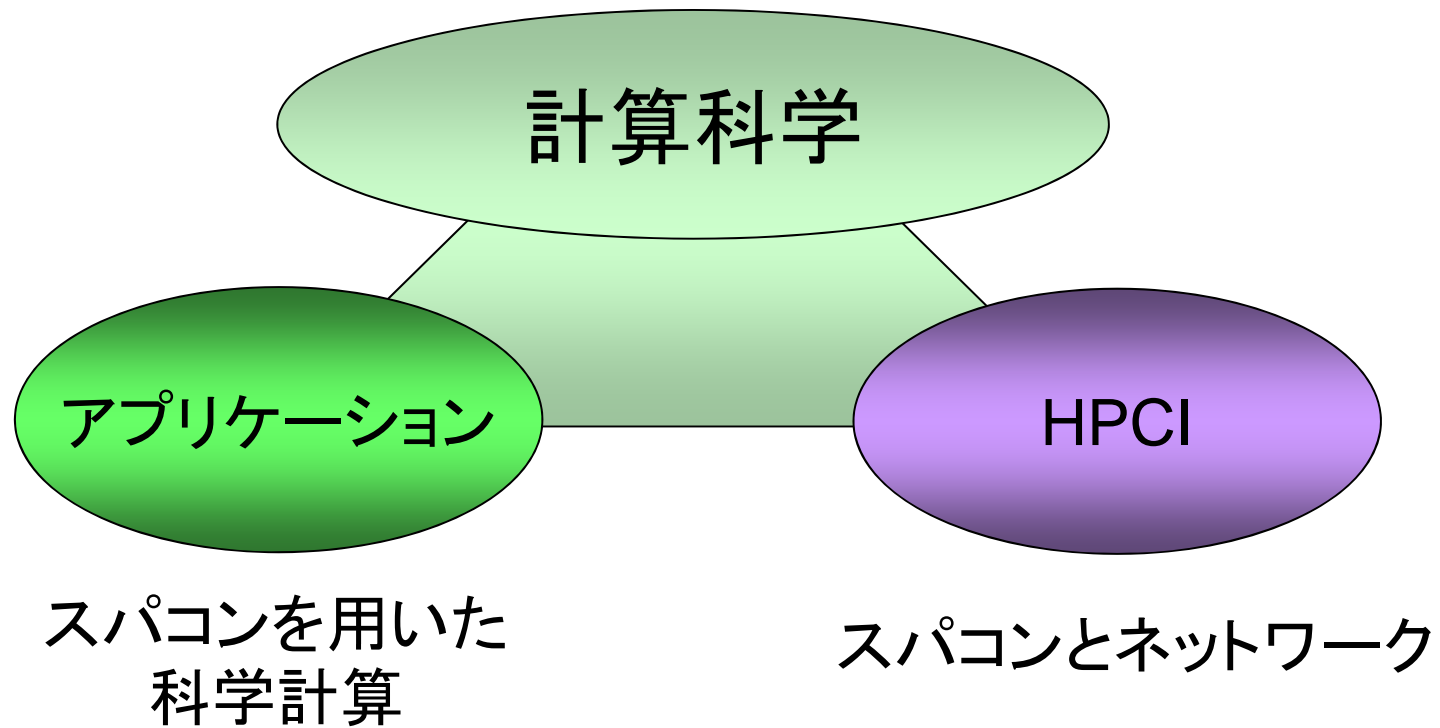
- 高性能スパコンの**重点的・重層的・効率的配備とネットワークの充実が急務**

- **中期にわたるロードマップ(戦略)が必須**

米国:ASCなど複数

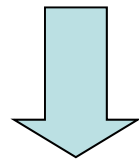
欧州:PRACE

計算科学を支える二つの要素



次世代スパコンによるフロンティアの開拓

- 過去のノーベル物理学賞のうち約3分の1は、新しい実験装置・観測装置の開発によるもの
- **次世代スパコンは新しい実験装置・観測装置に対応**



- 次世代スパコンで**グランドチャレンジ**に挑戦
- その分野での**フロンティア**を開拓
- **新学域**を創出

グランドチャレンジを実現するために

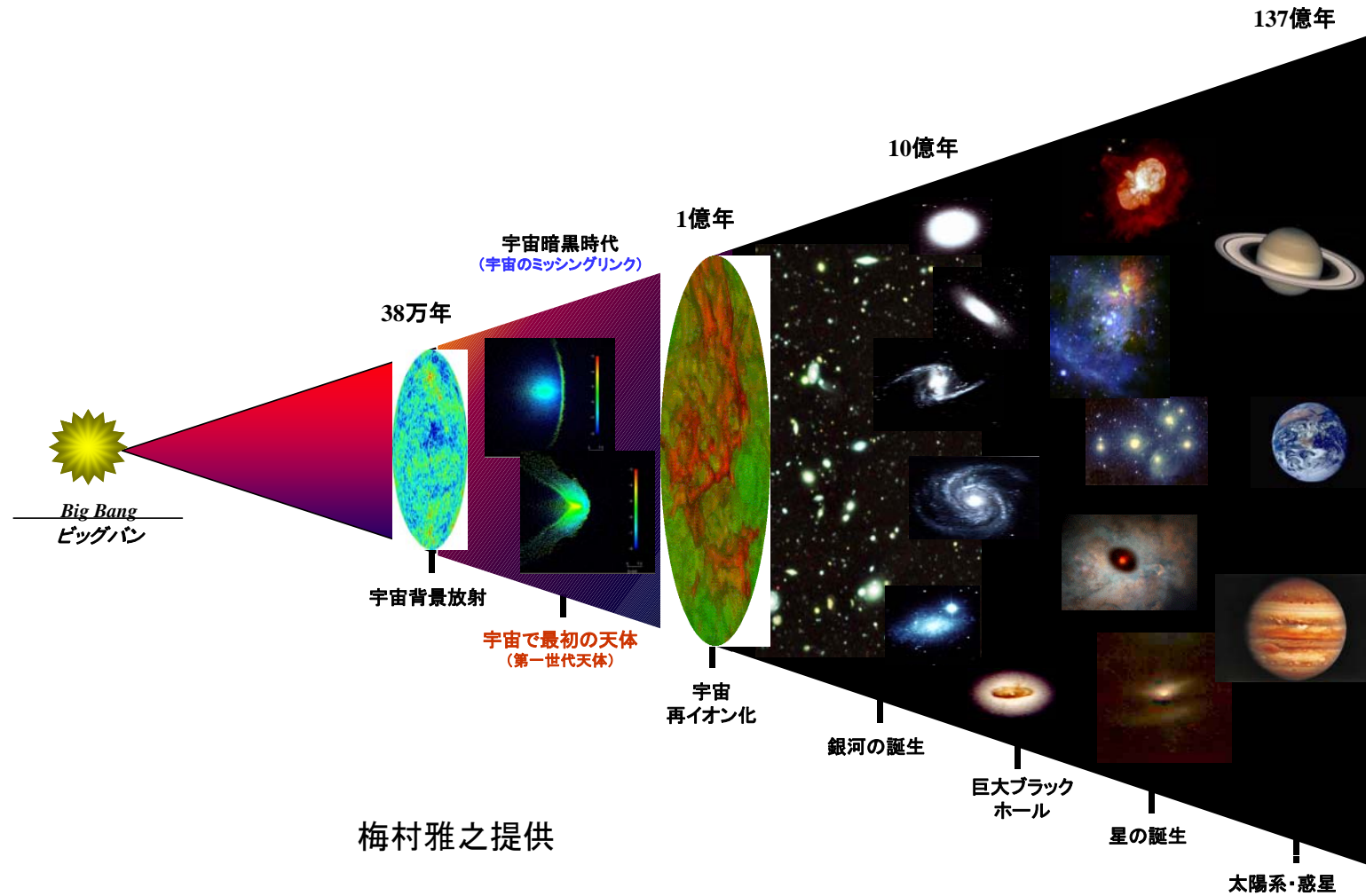
- 科学・技術上の**明確な大きな目標の設定**
- 問題の**モデル化**(理論化)
- 計算アルゴリズムの最適化・応用プログラム開発
計算機アーキテクチャによって、アルゴリズム、プログラミングは異なるべき
- スパコンを用いた大規模計算
- 計算結果(誤差)の吟味 \longleftrightarrow モデルの再構築
- 予測・予言

アプリケーション最前線

- 素粒子・宇宙
- ナノ・材料科学
- ライフ・サイエンス
- 地球環境
- 産業（自動車、製鉄、製薬、……）
- 社会システム（経済、金融、交通、……）??

宇宙の歴史

(ビッグバンから地球・生命誕生まで)



アプリケーション最前線：素粒子・宇宙

QCDによる素粒子の質量

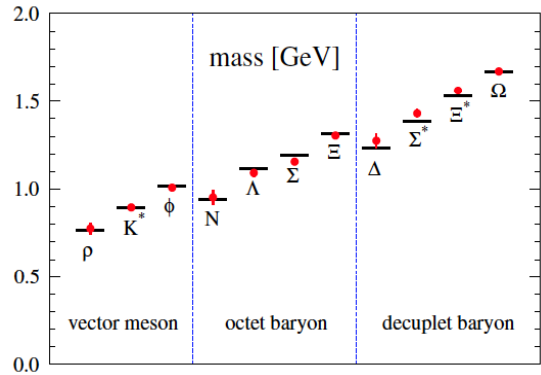
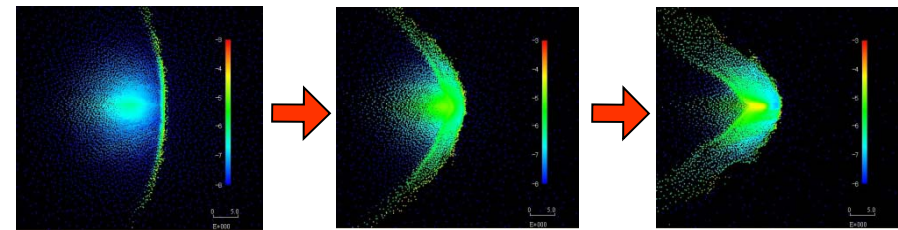


FIG. 24 (c) —: 実験値
 the physics: ●: m_π, m_K, m_Ω をインプットとする計算値
 bars denote PACS-CS提供

重力・物質・輻射の統合的アプローチ

紫外線輻射場中の第一世代星形成過程の3次元輻射流体力学シミュレーション(2006-2010, 宇宙シミュレータFIRST)

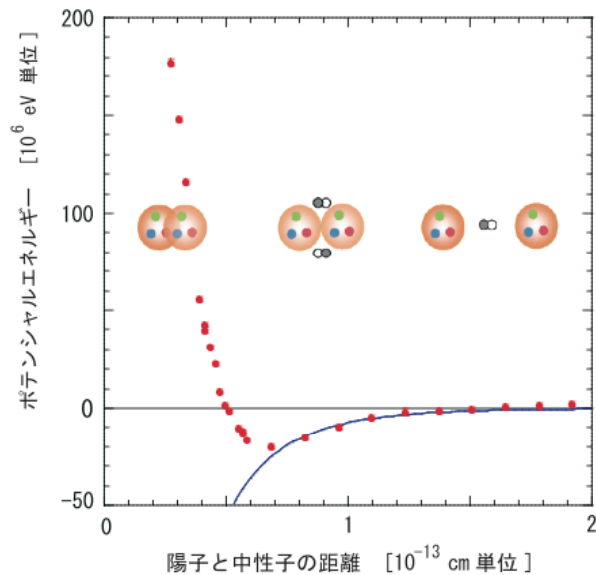


星の進化 50万年

100万年

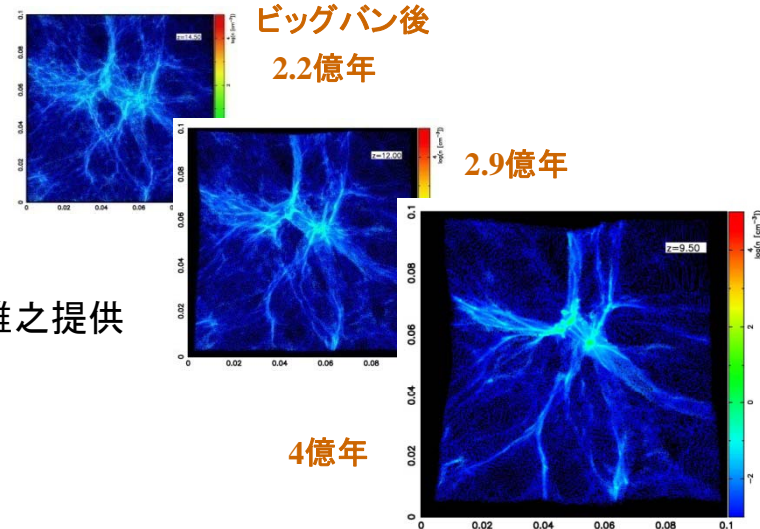
150万年

QCDによる核力(湯川理論の基礎付け)



青木慎也提供

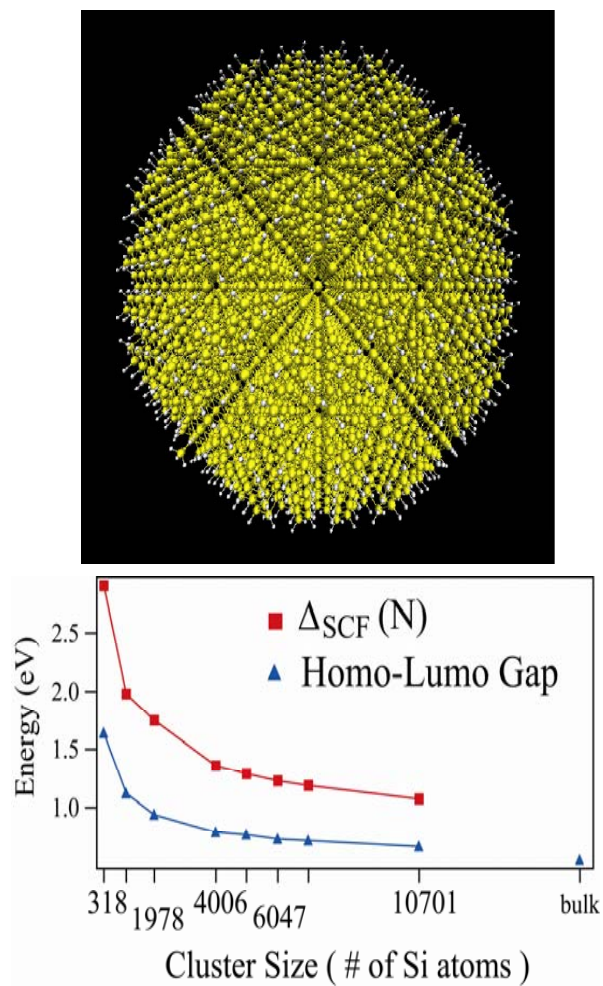
宇宙最初の構造発生の大規模重力流体シミュレーション(2007-2010, 宇宙シミュレータFIRST)



梅村雅之提供

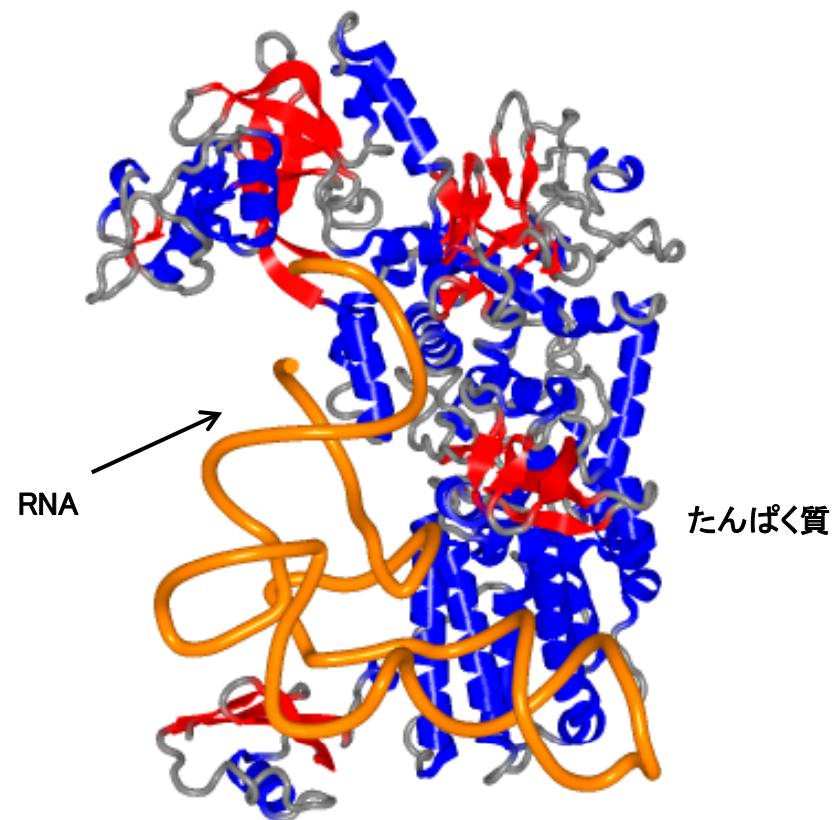
アプリケーション最前線: ナノ・バイオ

ナノドット: エネルギーギャップの評価
東大・筑波大



押山淳氏提供

タンパク質・RNAの「ハイブリッド」酵素反応



舘野賢氏提供

地球環境科学

全球雲解像モデルNICAMによる 気象シミュレーション

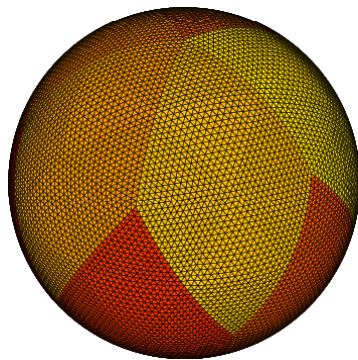
東京大学 佐藤正樹氏提供



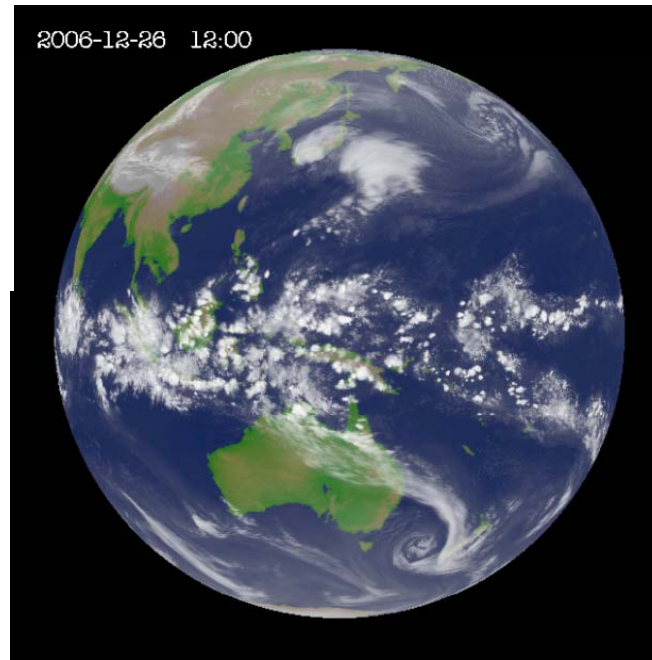
Thunderstorms seen from the Space Shuttle



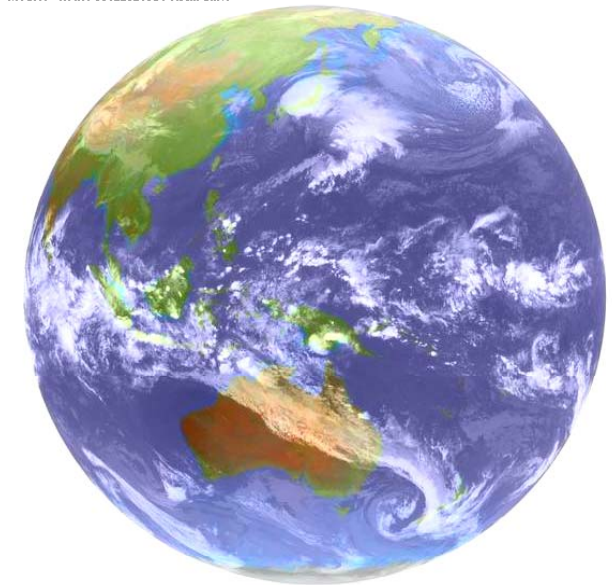
積乱雲: 大気循環の駆動源



正20面体分割格子
NICAMの格子配置の例

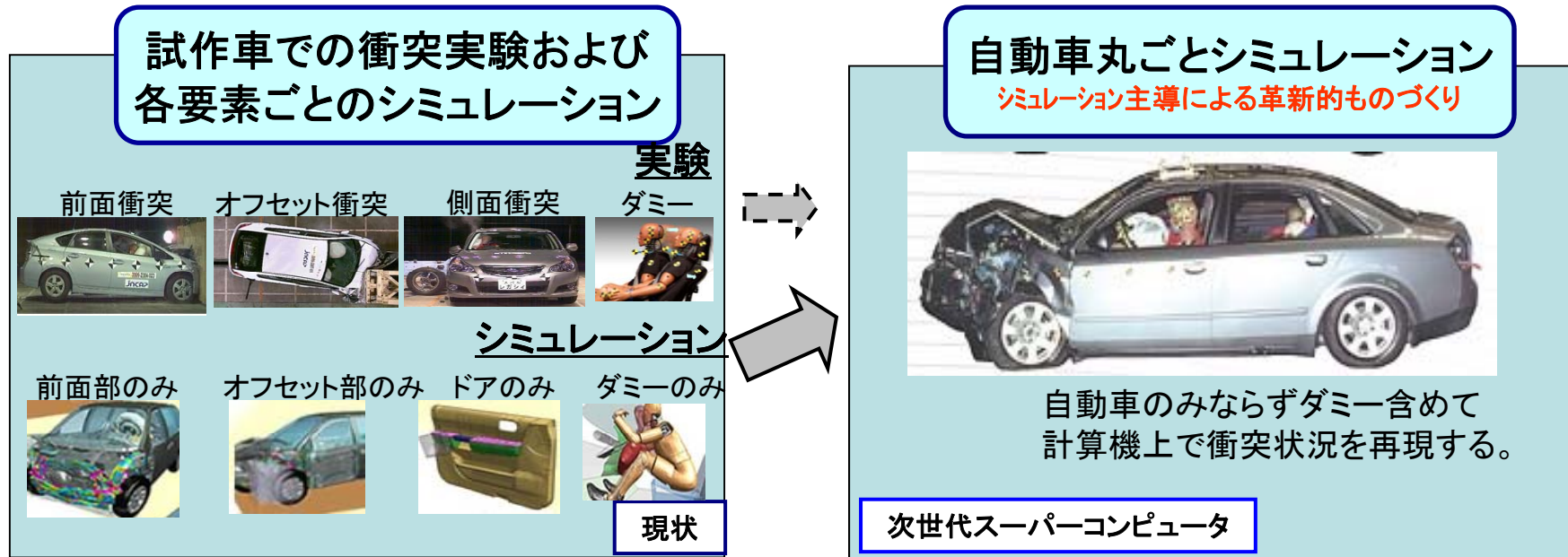


MTSAT-1R IR1 06122621 JST Kochi Univ.



左: 全球を約3.5kmメッシュで分割した数値シミュレーション。
右: 静止衛星画像 (2006年12月26日。初期値は25日)

自動車開発における衝突シミュレーション



期待される経済効果

○次世代スパコンの高精度シミュレーションにより、自動車の衝突実験回数（現在全国で3000回程度／年）を3分の1程度削減することが可能。（（財）日本自動車研究所）

⇒開発コストを大幅に削減

⇒安全で高品質な自動車を高い確率で生み出すことができる。

また、製造における環境への負荷を大きく低減できる。

※画像については、「(社)自動車事故対策機構、(株)日本総研、(株)日本ESI社」のHPより借用

計算科学の重要性: 今後ますます増大

- 基礎科学のフロンティアを開拓するシミュレーション
- 原子・分子のミクロの法則(量子力学)に基づく物質と生命のシミュレーション
- マクロな自然と人間社会の関わり方のシミュレーション
- ものづくりの道具となるシミュレーション

素粒子・宇宙物理

素粒子・初期宇宙の解明

提供: 国立天文台

銀河・惑星形成シミュレーション

ナノテクノロジー

物質設計

触媒

提供: (独)物質・材料研究機構

ライフサイエンス

計算創薬・テーラーメイド医療

遺伝子・タンパク質から細胞・人体まで解析

地球・環境

エルニーニョ予測

提供: (独)海洋研究開発機構

気候変動

原子力

原子炉設計

ものづくり

デジタルエンジニアリング

防災・気象

津波予測

台風

提供: 東北大学

ロケットエンジン設計

航空機開発

提供: (独)宇宙航空研究開発機構

ライフサイエンスは最前線

- 素粒子・宇宙・気候変動などと比較し、
大規模グランドチャレンジの設定が難しい
- しかし、フロンティアは非常に幅広い
- 一つアプローチは部分から全体
遺伝子→アミノ酸配列→蛋白質の構造・機能→細胞→器官→人体
- もう一つは、生命体全体をシステムととらえる
自律分散協調系、動的平衡系、非対称散逸系
- 両面から攻めることが「生命」を理解する上で重要
- 分野連携が重要：バイオ研究者、物理研究者、化学研究者、
数学者、計算機工学者

社会システム(経済、金融、交通・・・)

■ モデル化が難しい

人間の心理をどう扱うか？

■ LTCMの破綻 ロシア金融危機(1998)

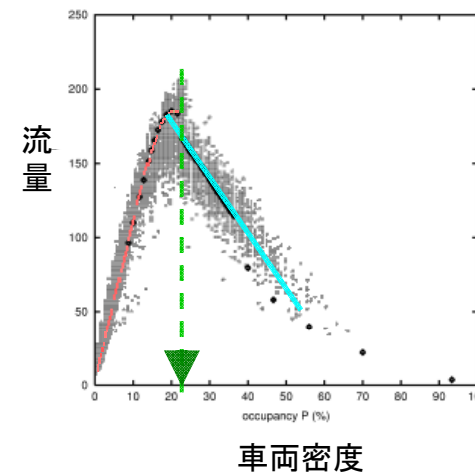
マイクロ・ショールズ、ロバート・マートン(1997、ノーベル経済学賞)
ブラック・ショールズ方程式(伊藤清方程式)

■ 高速道路での車の渋滞

モデル化可能: Optimal Velocity Model

相転移現象(水 \leftrightarrow 氷 と類似)(1995)

臨界密度 25台/km 車間距離 40m



杉山雄規氏提供

■ グローバル金融システム

予測の必要性高い、将来の重要課題

アプリ側が研究しやすいHPCIが重要

- スパコンの適切な配備と情報ネットワーク
アプリ側からの要求が重要
- 組織体制
透明性のある効率的な運用体制
- 人材育成機能
拠点と大学との有機的なネットワーク組織

むすび

- スパコンの発展とともに
計算科学・技術のフロンティアは急速に拡大
さらに大きな飛躍が期待できる
- 高性能スパコンの重点的・重層的・効率的配備と
ネットワークの充実が急務
- 異分野研究者間の共同作業・研究が重要
- 人材育成に力を注ぐべき
- HPCIのロードマップ(戦略)が必須