

巻頭言

大規模計算資源を利用する今後の計算科学の展望と期待

慶応義塾大学名誉教授 棚橋 隆彦



自然科学や社会科学の真理を追究し認識するのに昔は理論的研究方法と実験的研究方法が中心であった。しかし現在では電子計算機の発達により計算科学的研究方法が第三の柱として育ってきた。そして産業界への応用を中心とした物づくりの現場では、実験を計算機実験で置き換え、これにより経費の節約と納期の短縮を加速しようとしている。ここで要求されるのはシミュレーションの高速化と予測精度である。そして、シミュレーションのソフト開発技術において汎用化、高速化、高精度化は必須である。

私が学生のとき電子計算機はなく数表、計算尺、手回し計算機であった。卒業するころ真空管を用いた電動計算機が現れた。大学院生のころやっと電子計算機が使用できる環境が整備されてきた。お陰様で管路網内の流体過渡現象を電子計算機でシミュレーションし学位論文をまとめることができた。このとき電子計算機のすばらしさを実感した。その後IBM、UNIVAC、CRAY等の汎用電子計算機が現れた。夢は流体现象の基礎方程式であるナビエ・ストークス方程式を三次元で直接解くことであった。しかし計算資源の不足から不可能であった。その後日立、富士通、NECのスーパーコンピュータが国立研究所や日本の各大学に納入され急速に計算資源が高度化した。

大規模計算資源としての初登場は航空宇宙技術研究所の数値風洞である。ナビエ・ストークス方程式の乱流のDNS(大規模直接数値計算)シミュレーションで渦構造が解明され話題になった。次に登場したのが横浜の海洋研にあるテラフロップスマシン、すなわち地球シミュレータである。大気の流れや海洋の流動は気候変動に伴う地球温暖化に関連した環境問題として、また台風の進路予測や地殻の運動に伴う地震の予測、および河川の氾濫は自然災害として人類が直面している解決すべき大規模問題である。これらの問題に対して定量的な高精度予測が必要である。地球シミュレータはこれらの解析に非常に役立っている。しかし残念ながらこれらのマシンは非常に限られた人々にしか使用できないことである。また産業界への応用もつい最近になって始まった状態である。

そこで、理研が中心になって開発し神戸に設置が決定している近未来の大規模計算資源であるペタフロップスマシンに次のことを期待したい。大規模計算資源を利用して産官学の未解決問題をスピーディに解く必要がある。大規模連成解析技術はすべてマルチフィジックスの問題である。巨視的物理の立場では流体、固体、熱、電磁の連成問題である。たとえば、原子炉容器や超高層ビルや海洋構造物の耐震設計、電磁場によるプロセス制御等である。一方微視的物理の立場から例をあげると癌に関連した創薬、タンパク質の合成、新素材の開発等である。これらは時空間の

階層構造による高度計算利用技術が必用である。さらに血液循環系と病気の関係も解決しなければならない問題である。物理学はニュートン力学から始まりマックスウェルの電磁理論、アインシュタインの相対論、シュレーディンガーの量子力学へと発展しこれらは存在物理学と知られている。そして現在は複雑系を支配する非線形ダイナミックスの発展物理学が国際的にも注目を集めている。生命システムはこの代表的な一つで熱平衡から遠く離れた開放系で起こるバイオインフォマティクスに基づいた自己組織化と相転移である。脳における神経系を伝達する高度な情報交換システムおよびその階層構造制御システム技術は次期開発の計算機であるヘテロジニアスなペタフロップスマシンにも影響するのではないかと思う。

最後に、日本の未来発展を担う産業（IT、バイオテクノロジー、ナノテクノロジー）の一分野である大規模複雑系の計算科学には役割分担した共同研究、目的を明確にした人材育成、継続的な研究投資が必要である。よって、未来推進事業としてさらなる大規模計算資源の充実が望まれる。しかし計算機分野も2極化が進んでいる。私学では高価でリプレースの早いスパコンの維持はできなくなった。ゆえに、大学や産業界から容易に利用可能な高速大容量ネットワーク技術による利用環境整備と総合的にバランスのとれたハードとソフトの両面からのスパイラルな発展、大規模計算結果のリアルタイムでの可視化技術、およびこのマシンが生命に学び故障が起きたとき自己修復可能なマシンになることを期待したい。