

---

# 次世代 スーパーコンピューティング・ シンポジウム2008

---

～次代を担う世界水準の人材育成に向けて～

## 報告書

2008年9月16日（火）～9月17日（水）

MY PLAZA ホール&MY PLAZA 会議室

理化学研究所次世代スーパーコンピュータ開発実施本部

## 目次

1. 開催概要	1
2. 開催結果	1
2.1. 参加状況	1
2.2. 来賓	2
3. 挨拶	3
3.1. 開会	3
3.2. 来賓	4
4. 講演要旨	7
4.1. 政策講演	7
4.2. プロジェクト進捗状況報告	12
4.3. 基調講演	14
5. ポスターセッション・インデクシング	22
6. テーマ別セッション（分科会）	33
6.1. 分科会 A：「次世代の産業界をリードする人材育成を目指して」	33
6.2. 分科会 B：「計算機科学と計算科学の学際融合ーその意義と人材育成を考えるー」	50
6.3. 分科会 C：生命体統合シミュレーション	70
6.4. 分科会 D：ナノ統合シミュレーション	84
6.5. 分科会 E：素粒子・原子核・天文学宇宙	99
7. 全体セッション：全体討議	112
7.1. 全体討議	112
7.2. 提言	130
8. ポスターセッション表彰式	132
9. 閉会挨拶	135
10. 収支報告	136
付録（レセプション概要写真）	137

1. 開催概要

名称：次世代スーパーコンピューティング・シンポジウム2008～次代を担う世界水準の人材育成に向けて～  
 開催日：平成20年9月16日（火）、17日（水）  
 場所：MY PLAZA ホール及びMY PLAZA 会議室（東京都千代田区丸の内）  
 主催：理化学研究所  
 共催：文部科学省、分子科学研究所  
 後援：内閣府、経済産業省、日本学術会議、日本経済団体連合会、電子情報技術産業協会、情報処理学会、可視化情報学会、日本計算工学会、日本シミュレーション学会、日本応用数理学会、国立情報学研究所、物質・材料研究機構、防災科学技術研究所、宇宙航空研究開発機構、海洋研究開発機構、日本原子力研究開発機構、産業技術総合研究所、筑波大学計算科学研究センター、東京大学生産技術研究所、東京大学物性研究所  
 協力：計算物質科学連絡会議、計算基礎科学コンソーシアム、スーパーコンピューティング技術産業応用協議会  
 開催主旨：次世代スーパーコンピュータの利用に焦点を当て、スーパーコンピューティング技術の活用による様々な科学技術分野でのブレークスルーの可能性や産業界における実利用への展開について議論を行う。これらの討議の結果が、関係者がそれぞれの立場から今後の課題を明らかにし、行動していくための一助とする。

2. 開催結果

2.1. 参加状況

参加者：約 420 名

その他：ポスターセッション参加者 30 名、講演者等 39 名

【参加登録者分析表最終版：事前登録者数504名、最終出席者422名（うち当日参加者27名）】

	総数				レセプション				16日AM 政策講演/基調講演/ ポスターセッション・インデクシング等				16日14:30~18:00							
	事前登録		当日 参加	出席 総数	事前登録		当日 参加	出席 総数	事前登録		当日 参加	出席 総数	分科会A				分科会B			
	登録	出席			登録	出席			登録	出席			登録	出席	登録	出席	当日 参加	出席 総数	登録	出席
	登録	出席	参加	総数	登録	出席	参加	総数	登録	出席	参加	総数	登録	出席	参加	総数	登録	出席	参加	総数
大学等	91	78	9	87	30	30	1	31	73	56	7	63	12	8	0	8	69	63	7	70
研究機関	101	79	8	87	16	16	1	17	90	71	5	76	19	13	0	13	73	57	5	62
コンピュータメーカー	134	105	0	105	43	42	0	42	114	90	0	90	36	29	0	29	86	70	0	70
（うち外資系）	16	12	0	12	8	7	0	7	14	10	0	10	5	2	0	2	11	10	0	10
一般企業等	136	100	4	104	16	16	0	16	116	82	4	86	58	45	0	45	59	42	4	46
建設	11	7	0	7	0	0	0	0	6	4	0	4	7	5	0	5	2	1	0	1
政府	5	4	2	6	0	0	4	4	4	4	0	4	3	3	0	3	0	0	1	1
自治体	8	6	0	6	4	4	0	4	7	6	0	6	5	4	0	4	2	2	0	2
メディア	2	2	4	6	0	0	0	0	2	2	3	5	1	1	0	1	1	1	3	4
その他	16	14	0	14	7	7	0	7	15	13	0	13	4	4	0	4	9	7	0	7
講演者等							20	20												
total	504	395	27	422	116	115	26	141	427	328	19	347	145	112	0	112	301	243	20	263

	17日10:00~12:00												17日PM 全体討議/表彰式等			
	分科会C				分科会D				分科会E							
	事前登録		当日 参加	出席 総数	事前登録		当日 参加	出席 総数	事前登録		当日 参加	出席 総数	事前登録		当日 参加	出席 総数
	登録	出席			登録	出席			登録	出席			登録	出席		
大学等	33	29	2	31	22	18	1	19	20	18	1	19	77	66	2	68
研究機関	25	21	1	22	34	24	1	25	21	18	0	18	74	59	3	62
コンピュータメーカー	40	34	0	34	33	25	0	25	24	19	0	19	82	69	0	69
（うち外資系）	4	2	0	2	3	2	0	2	6	5	0	5	10	7	0	7
一般企業等	39	27	0	27	30	23	0	23	10	9	0	9	72	51	0	51
建設	1	0	0	0	0	0	0	0	3	2	0	2	5	3	0	3
政府	4	3	1	4	0	0	1	1	1	1	0	1	4	4	2	6
自治体	3	2	0	2	2	2	0	2	0	0	0	0	6	5	0	5
メディア	0	0	0	0	2	2	1	3	0	0	0	0	2	2	1	3
その他	3	2	0	2	4	4	0	4	6	5	0	5	13	11	0	11
講演者等																
total	148	118	4	122	127	98	4	102	157	72	1	73	335	270	8	278

## 2.2. 来賓

### 【文部科学省】

文部科学大臣政務官	浮島 とも子	(開会挨拶)
大臣官房審議官(研究振興局担当)	倉持 隆雄	(政策講演、レセプション挨拶)

### 【他省庁】

内閣府大臣官房審議官(科学技術政策担当)	大江田 憲治	(開会時来賓挨拶)
経済産業省大臣官房参事官	星野 岳穂	(開会時来賓挨拶)

### 【国会議員】

#### <開会時来賓>

衆議院議員、自由民主党政務調査会 科学技術創造立国推進調査会会長	船田 元	(来賓挨拶)
参議院議員、元科学技術政策担当大臣	松田 岩夫	(来賓挨拶)
衆議院議員	小野 晋也	

#### <レセプション来賓>

衆議院議員	尾身 幸次	(来賓挨拶)
衆議院議員	後藤 茂之	(来賓挨拶)

### 【その他】

スーパーコンピューティング技術産業応用 協議会 運営委員会副委員長	中村 道治	(レセプション来賓挨拶)
--------------------------------------	-------	--------------

### 3. 挨拶

#### 3.1. 開会

##### ○野依 良治（理化学研究所 理事長、次世代スーパーコンピュータ開発実施本部長）

文部科学省が推進する最先端高性能汎用スーパーコンピュータ開発利用プロジェクトは、開始から3年目を迎えています。理化学研究所はその中核機関として、次世代スーパーコンピュータの開発、次世代生命体統合シミュレーション、ソフトウェアの開発を担当し、現在、着実にその役割を果たしております。



次世代スーパーコンピュータの開発は、設計段階が大詰めを迎え、来年度から試作・評価作業に入ります。神戸市ポートアイランドに建設中の施設も、2010年5月に竣工する予定です。私どもは、名実ともに世界一と認められるスーパーコンピュータを開発するとともに、全国の研究者、技術者にすぐれた利用環境を提供し、次世代の人材育成も視野に入れた研究開発拠点の整備を進めてまいります。

文部科学省では、次世代スーパーコンピュータ完成後の利用や拠点整備について具体的な審議が進められ、既に利用の枠組みとして、従来の共用という概念に加え、戦略的利用という概念を導入されることを決めています。利用段階に入っても、設置者として理研が積極的に役割を果たすべきであるというご期待に沿いたいと思っております。

今年のシンポジウムのテーマは「次代を担う世界水準の人材育成に向けて」です。人材育成は大変に重要で、しかも、答えはただ1つと決まっておりません。また、効果があらわれるのもすぐというわけにはいきません。しかし、今後、我が国が科学技術あるいは産業において国際競争力を高めると同時に、地球規模の問題解決に積極的な役割を果たし、世界の中で確固たる地位を築くためには、スーパーコンピュータの利用技術がもたらす便益を、目に見える形で示していく必要があります。そのためには、活動を支えるすぐれた人材を確保し、積極的に活躍の場を与えていくことが重要です。

私は、長く大学で教育にかかわってまいりましたが、世界第一級の人材の確保、育成はそんなに簡単なことではありません。相当な覚悟が要ることです。私は、先月の北京オリンピックの惨敗ぶりを大変残念に思っております。これは今回の大会に限らず、かねてからの状況ですが、明らかに人材の確保、養成が不十分です。

次世代コンピュータプロジェクトは、科学技術におけるオリンピックの100メートル走のようなもので、国家基幹技術です。そこで世界制覇をしなければいけない。9秒67で走るジャマイカのウサイン・ボルトに勝つ人材を必要としております。日本は400メートルリレーで頑張っており、また敵失にも恵まれて銅メダルを獲得し、みんな大変喜んだわけですが、それでは不十分です。短距離で3冠をとったボルト級の走者が少なくとも4人必要です。さもないと、我が国の生命線たる科学技術、産業技術の水準は保てません。いつまでに、どの水準の人材を何百人ぐらい確保、養成するのか。是非スーパー・ボルト計画とでも名づけるアクションプランをつくって、不退転の決意で臨んでいただきたいと思っております。

私はボルトと一緒に走ったことはありませんが、科学界のボルトとは競争したことがあり、実感として彼らの力は圧倒的なものがあります。文部科学省、さらに産学のすべての関連セクターの方々には、是非危機感を持っていただきたいと思うのであります。

世界トップの人材の養成には、先天的な才能と育成の環境の双方が必要です。お金だけ、紙に書いただけのプランでは、とても実現しません。国内の人材のみならず、世界から有能な人材を集める必要があります。その実現のためには、まず、この分野で世界をリードする大学、大学院教育を充実させて、世界中から要請される人材を輩出できる世界最高水準の研究教育環境を実現していくことが不可欠です。さらには、産学官の連携、研究分野を超えた融合の推進にも取り組んでいく必要があります。

残念ながら、我が国は政治の混迷がございまして、経済環境の不安定性あるいは劣化がございまして、さらに、国民全体の精神の衰退が重なって、我が国の国際的存在感が極めて薄くなっています。このプロジェクトは、科学技術をもって我が国が輝きを取り戻す絶好の機会です。

今回のシンポジウムは、現在開発中の次世代スーパーコンピュータの利用にとどまらず、さらにその先をも視野に入れた重要な意味を持つものと考えております。お集まりの皆様方におかれましては積極的にご参加い

ただき、科学技術の、そして、我が国を含めた世界の将来、地球の将来にも思いをはせつつ、さまざまな可能性、実現性を議論していただければと思っております。皆様にとって、この後行われる議論が大きな意味のあるものとなることを祈念して、ご挨拶にかえさせていただきます。

#### ○浮島 とも子（文部科学大臣政務官）

スーパーコンピュータは、ライフサイエンスやナノテクノロジー、材料、ものづくり、工学といった分野から、環境、防災、物理学、天文学まで、広範な分野への活用が期待されており、我が国が科学技術創造立国を実現するために欠かすことのできない国家基幹技術です。

文部科学省は、平成18年度から、理化学研究所を中心とした産学連携体制により、世界最速・最高性能の次世代スーパーコンピュータの開発・利用プロジェクトを開始しました。現在、コンピュータ本体の詳細設計が進められ、施設面においては、本年3月より、神戸のポートアイランドで計算機棟の建設が始まるなど、順調に進んでおります。また、本年7月には、次世代スーパーコンピュータの利活用について国の審議会の報告書が取りまとめられるなど、具体的な利活用のあり方についての検討も進めております。

人材育成は本当に重要なことです。次世代スーパーコンピュータが今後の科学技術を担う学生、若手研究者の研究活動や交流の中核的な拠点となるとともに、次代を担う子供たちにとっても魅力ある研究成果を発信する場となることを強く期待しております。

このシンポジウムを通じて、本プロジェクトについて学界や産業界の皆様のご理解を一層深めていただくことを期待するとともに、本プロジェクトのますますの発展を祈念して、私のご挨拶とさせていただきます。



### 3.2. 来賓

#### ○船田 元（衆議院議員、自由民主党政務調査会科学技術創造立国推進調査会会長）



次世代スパコン・シンポジウム2008のご盛会をお祝い申し上げます。

自由民主党科学技術創造立国調査会は、研究開発分野で産学官のスムーズな連携を目指した研究開発強化法案を前の国会に提出し、ようやく成立させていただきました。昨年は、京都大学の山中教授が発明された iPS 細胞に触発されて、健康研究分野の発展のために何が必要かということを議論し、現在、提言の法案化の準備を進めております。

我が国のスパコン技術は、これまで大きな3つの流れがありました。

平成元年から行われた数値風洞シミュレーションを初めとして、最近では地球シミュレータの分野で、世界をリードする状況にありました。ところが、ここ数年、アメリカに比べて若干おくれをとっています。一度追い抜いたつもりでしたが、また追い抜かれた。しかし、追い抜かれたらもう一回追いつき追い越せというスローガンで、次世代スパコンを国家基幹技術の最も重要なものと位置づけまして、これからも推進する必要があると思っています。

平成19年6月からは、ハードウェア開発が始まりました。現在はソフトウェア開発に着手され、ナノ統合シミュレーション、生命体統合シミュレーションを2つの柱として、平成23年あるいは24年にはスタートできるということで、大変心強く思っております。

平成20年度のスパコン関係の予算は145億円でした。しかし、21年度の概算要求においては、要求基準目いっぱい、272億円という飛躍的な増加を見せたということです。満額獲得できるように、年末の予算編成に向けて力を尽くしていきたいと思っております。

最後に、皆様にお願いがございます。我々科学技術創造立国調査会は、最先端技術の進展に向けて後押しすることは当然ですが、同時に、国民向けに、我が国の科学技術がいかに私たちの生活に役立っているか、その研究成果をどのように実用化していくかという議論を続けております。研究開発協力法は、もちろんその一部を実現しようというもくろみでしたが、まだまだ不十分であると思っております。最近、有権者あるいは納税

者は、どのように自分たちのお金が使われているかということに対してとても敏感で、また、非常に批判的です。これだけの予算を投入して、どういう成果があらわれ、どういうことが私たちの生活に具体的に役立っているのか、目に見える研究成果のアピールをもっとやっていかなければいけないと痛感しています。是非皆様にも、この分野のご努力をさらにお願ひしたいと思います。

このシンポジウムが大きな成果を上げて、我が国のスーパーコンピュータの発展、ひいては科学技術の一層の進展に貢献されますことを心から期待して、お祝いの言葉にいたします。

#### ○松田 岩夫（参議院議員、元科学技術政策担当大臣）

私は、第3期科学技術基本計画をつくるときに大臣をさせていただきました。野依先生を初め、皆さんから何度もご講義をいただいて、国家基幹技術として5テーマを最終的に決めただけですが、次世代スパコンはその中で最も大きな期待を持って決められたものです。

シンポジウムの冒頭、野依理事長の熱き思いを伺い、皆さんも、よし、やってやろうという一方ならぬ思いを固めていただいたことと存じます。我々は次世代スパコンに大きな期待をかけております。体制整備、予算の獲得に力いっぱい頑張らせていただきます。

科学技術の分野は、世界各国が最大政策にしております。それは何も先進国に限りません。あらゆる国がそういう方向に向かっています。まさにこの次世代スパコンも同じで、競争の最も激しい分野です。是非皆さん、頑張ってください。心からのお願いであります。

今日のテーマは人材育成。立派なものをつかって、それを思い切り活用し、人類に貢献していく。とりわけ科学技術は人です。今日のシンポジウムを契機に、我が国の、いや全世界の科学技術人材、とりわけこの分野の人材で、大変な進歩を遂げたといっただけのような成果を心から期待しております。

日本が生きていく道は、世界の頭脳センターになることです。こんな難しい、また努力の要る生き方はないけれども、これしかありません。

次世代スパコンは、皆さんの挑戦で、ここに新しく世界の中核拠点ができます。どうぞ立派なものをつくり上げてください。そして、世界中から我ぞと思わん方々が我が中核拠点を目指して来ていただき、人類に幸せをもたらす偉大な研究成果が陸続と世界に発信されていく。それに向かって、皆さん、お互いに頑張りましょう。



#### ○大江田 憲治（内閣府大臣官房審議官 科学技術政策担当）



第3期科学技術基本計画は3年目を迎え、総合科学会議は、中間フォローアップ、第4期に向けた議論を始めております。総合科学会議は、世界最高水準の次世代コンピュータ研究を戦略重点科学技術と位置づけ、また、文科省の次世代スーパーコンピュータのプロジェクトを国家基幹技術として位置づけております。

世界に目を向けてみますと、スーパーコンピュータは、残念ながら、今、米国に一步先んじられ、日本とヨーロッパがそれを追いかけていくという状況になっております。インドにおいても、最近、相当強い仕事をしていると聞いております。このような過酷な状況下において、日本がその存在感を示して世界のトップを目指すためには、まさにこのプロジェクトをいかにしっかりと着実に進めていくか、この1点にあると思います。

総合科学会議は、世界水準の人材育成について、大きく3つのポイントを挙げております。第1に、産業界の多様な要望に沿ってスパコンを活用できる高度なIT人材育成を、長期的な展望に立つて行う。大学から民間に出て実際に活躍するという道筋ができないと、なかなか好循環になりません。第2に、スパコンを産業につなげるために、低消費電力プロセッサの市場についてもしっかりと考えていく必要があります。第3に、各大

学の情報基盤センターの連携をしっかりとっていただく。また、新たにスパコンの教育拠点をつくる必要があるのではないかという有識者のご意見をいただいております。

コンピュータの分野は、ハードウェアとソフトウェアが車の両輪です。ハードウェアの研究も非常に大変な仕事ですが、OS やコンパイラ、グランドアプリケーションがまだまだ必要ではないか。ナノテクやライフサイエンスは非常に大きな分野です。もっと広い、深い使い勝手を考えて、ハードウェアができたときに、こういうものを全部コンバインして、すぐにフロントランナーとして走り出せる状況をつくっていくことが必要です。

また、スパコンの開発はやはり府省の連携が必須です。文科省がリーダーとして進んでいきますが、内閣府として担当すべき内容がありましたら、積極的にその任務を果たしていきたいと思っております。甚だ簡単ではございますが、これをもってご挨拶とさせていただきます。

#### ○星野 岳穂（経済産業省大臣官房参事官）

スーパーコンピュータは、各国における技術開発の最優先課題として産官学が総力を挙げて取り組んでいる部分で、先進国に限らず、新興国も、国の第一ターゲットとして取り組む科学技術分野となっております。

我が国においても、少し古い話になりますが、当時の通商産業省で、超 LSI 半導体で大型コンピュータの国際競争力を確保しようというプロジェクトからスタートし、1981 年からは、大型工業技術研究開発制度のもとで、科学技術用高速計算システムプロジェクトを立ち上げ、それを皮切りに産官学が連携してスーパーコンピューティング技術が立ち上がってきました。まさに文部科学省、内閣府、総力を挙げて取り組んできたわけです。

その成果、基盤をもって、1990 年代には、日本がスーパーコンピュータで世界のトップを走る時代がありましたが、その後、アメリカに先を越されました。日本ももちろん必死の努力をしておりますが、いよいよペタの時代を迎えようとしている中で、欧州、アジアの参加も得て、開発競争がむしろ激化しています。

今や、スーパーコンピュータは単に最先端の IT 技術、コンピューティング技術の競争だけでなく、航空宇宙、原子力、バイオ、航空機、自動車などの科学技術、産業技術でも、スーパーコンピュータによるシミュレーション技術が競争力の基盤となり、これをどのような形で使いこなす、世界にその力を示していくかが大きな課題になっています。

世界中で産業界が最先端のスーパーコンピュータを使う台数は着実に伸びておりますが、非常に残念なことに、日本国内では、産業界は学界に比べると、使用実績がそれほど伸びていません。科学技術力、産業技術力を強化する意味でも、最先端のスーパーコンピューティング技術をこのプロジェクトによって確保し、それと並行して、何に、どのように使うのかを議論し、あるいは実際にそのアプリケーションが 1 つのプロジェクトとして進められていくことは、非常に心強い限りでございます。

経済産業省としまして、次世代コンピュータの開発、実現の一翼を担うべく、高性能、低消費電力、かつ、信頼性の高い半導体の開発を、現在、積極的に推進しております。

本日のシンポジウムが、成功に向けた大きな一歩となることを期待いたしまして、私のご挨拶とさせていただきます。





#### 4. 講演要旨

##### 4.1. 政策講演

###### 「スーパーコンピューティングの国家戦略」

倉持 隆雄（文部科学省大臣官房審議官（研究振興局担当） スーパーコンピュータ整備推進本部長）

今日は、次世代スーパーコンピュータプロジェクトの背景、プロジェクトの概要、さらなる利活用の促進という内容のお話をさせていただきたいと思います。

まず、プロジェクトの背景ですが、我が国の科学技術政策は、科学技術基本計画に沿って進められています。現行の第3期の科学技術基本計画は平成18年からの5年間をカバーするものですが、6つの目標を掲げておられます。次世代スパコンは、この6つの目標すべての達成に共通に必要なとなる科学技術の基盤であり、このような基盤を整備することは、科学技術創造立国としての要件にもなることを強調したいと思います。

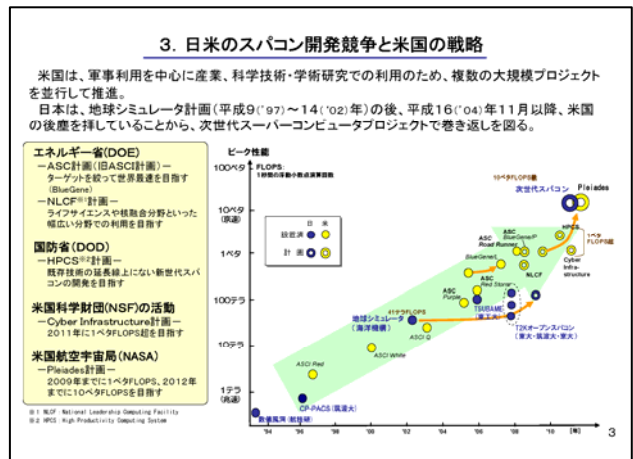
シミュレーションは、この10年間で目覚ましく発展し、今や実験、理論に次ぐ第3の科学的アプローチとして、自然現象を予測する科学の発展の切り札といわれています。ナノテクノロジーの分野では、原子構造や電子の動きを解析するシミュレーションが進んでいますが、今の計算能力では、デバイス全体の解析に非常に時間がかかります。したがって、要素に分けて解析して全体を推測するのですが、スパコンができれば、これをまとめて解析できるようになります。ライフサイエンスの分野でも同様で、新薬のデザインなどが画期的に変化することが期待されています。

より速く、より複雑な計算による高度なシミュレーションを可能とするスパコンの開発は、日米間で非常に熾烈な競争があります。自前の技術で世界最高性能を実現することは、我が国の技術の蓄積で国際競争力を培うことそのものです。

アメリカでは複数のプロジェクトが進められておりまして、ことし、エネルギー省 ASC 計画の Road Runner が、1ペタ FLOPS という計算速度を実現しました。10ペタクラスでは、我が国の次世代スパコン計画と NASA の Pleiades 計画が競っています。

第3期科学技術基本計画は、日本の科学技術の国際競争力を維持向上させるために集中投資して開発すべき技術を国家基幹技術と定義しておりまして、その5つのうち1つが、次世代スーパーコンピュータです。

次世代スーパーコンピュータプロジェクトは、(1)世界最先端・最高性能の10ペタ FLOPS 級のスパコンの開発・整備、(2)それを最大限に活用するソフトウェアの開発、(3)これを中核とする研究教育拠点の形成を目的に、平成22年度稼働、24年完成を目指して、理化学研究所を開発主体にスパコンを開発しようというものです。現在、システム開発については詳細設計が進んでおり、施設では建設工事が、また、ソフト



### 1. 「次世代スーパーコンピュータ」プロジェクト

- 目的** 世界最先端・最高性能の次世代スーパーコンピュータの開発・整備及び利用技術の開発・普及
- 概要**  
理論、実験と並び、現代の科学技術の方法として確固たる地位を築きつつある計算科学技術をさらに発展させるための、長期的な国家戦略を持って取り組むべき重要技術（国家基幹技術）である「次世代スーパーコンピュータ」を平成22年度の稼働（平成24年の完成）を目指して開発する。  
今後とも我が国が科学技術・学術研究、産業、医・薬など広汎な分野で世界をリードし続けるべく、(1)世界最先端・最高性能の「次世代スーパーコンピュータ」(注)の開発・整備(注) 10ペタFLOPS級 (1ペタFLOPS:1秒間に1千兆回の計算)  
(2)次世代スーパーコンピュータを最大限に活用するためのソフトウェアの開発・普及  
(3)上記(1)を中核とする世界最高水準のスーパーコンピューティング研究教育拠点(COE)の形成を文部科学省のイニシアティブにより、開発主体(理化学研究所)を中心に産学官の密接な連携の下、一体的に推進する。さらに、施設の利用促進のため、戦略的な利用の先行的調査等を推進する。
- 体制**  
(1)開発主体である独立行政法人理化学研究所を中心とした産学連携体制を構築。  
(2)特定先端大型研究施設の利用促進に関する法律を整備し(平成18年7月施行)、産学官の研究者等に幅広く開かれた共用施設として位置付け。

ウェアのアプリ開発では、ナノ統合シミュレーションと生命体統合シミュレーションの開発が進んでおります。総経費は国費ベースで1154億円、来年度は272億円の要求をしています。

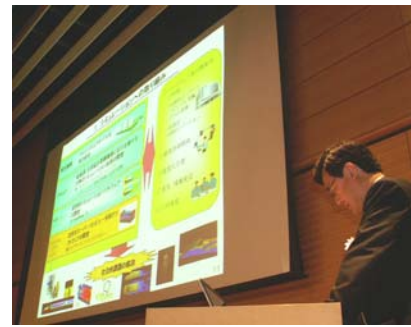
システムの構成は、スカラ部とベクトル部から構成される複合汎用システムとなっています。大きなデータを細分化して処理するスカラ型が得意とする分野、その大きなデータをまとめて処理するベクトル型が得意とする分野、両方のニーズを満たす汎用システムという非常に野心的な構成です。複数のプロジェクトが並行的に進む米国に負けない技術力を培うためにも、こうした高い目標を掲げる必要があります。

施設については、神戸のポートアイランドで本年3月から建設工事が始まったところで、平成22年5月の完工を目指しています。

次に、アプリケーションのソフト開発について、ペタスケールの計算能力を生かしたシミュレーションでインパクトのある成果を生み出す分野を、専門家に検討していただいた結果、ナノテクノロジーなど物質・材料の分野とライフサイエンスの分野が有望だということで、グランドチャレンジ計画を進めることになりました。

ナノ分野グランドチャレンジは分子科学研究所が中核機関となり、ナノエレクトロニクス分野では、電子デバイス全体をトータルで解析して新たなデバイスの創製を効果的、効率的に促進する、ナノバイオ分野では、ウイルス全体のシミュレーションを実現してウイルスの外殻たんぱくと抗ウイルス剤の相互作用を解析し、予防や創薬に大きく貢献する、エネルギー分野では、セルロースからエタノール生成の酵素反応を丸ごと解析して、実際の生産プロセスのイノベーションを可能にするなど、最高度のシミュレーションを実現しようと頑張っていたいております。

ライフサイエンス分野グランドチャレンジは理化学研究所を中核機関として、究極的には、分子、細胞、臓器といった階層を超えて生命現象の統合的な理解を目指し、当面は、分子スケールでは、たんぱく質の機能発現の全過程のシミュレーションを解析して創薬にも大きく貢献する、細胞レベルでは、細胞内物質移動のシミュレーションや複数細胞モデルを開発して、細胞の生理現象を積み上げた組織シミュレーションも可能にする、臓器全身スケールでは、血流のシミュレーションを可能として医療現場の革新的な診断、治療につなげる、データ解析融合分野では、ヒト全遺伝子等のネットワーク解析とか大規模遺伝子多型解析を可能として、遺伝情報の網羅的な解析に基づく治療や治療支援法の開発などにつなげていくといった計画で、開発を進めていただいております。



### 3. システムの基本的な構成

[システムの特徴]

**スカラ部とベクトル部から構成される複合汎用システム**

- 異なる2つの演算部の特性を活かし、あらゆるシミュレーションに対応可能な高い汎用性
- 計算能力に関する高い拡張性
- 大学や研究機関向けの高性能な計算機への展開性
- スカラ及びベクトルの両技術の確保による、我が国の技術力の強化と、国際競争力の向上

**スカラ型**

- 大きなデータを細分化して処理する
- (ナノデバイスの構造解析や、遺伝子の相関性検索等の計算が得意)
- 世界的主流となっている技術

従来のスカラ型計算機

- 比較的低速なCPUを多数接続

本システムのスカラ部

- CPUの高速化及び超高速ネットワーク技術による超大規模接続の実現

最新フロントエンド  
(ローカルシステムソフトウェア)

**スカラ部**

**ベクトル部**

共有ファイル

**ベクトル型**

- 大きなデータをまとめて処理する
- (大気や海洋の大規模や、航空機の空力等の計算が得意)
- 数が増えれば強みを持つ技術

従来のベクトル型計算機

- 比較的高速なCPUを接続

本システムのベクトル部

- CPUの省電力化及び先を用いた革新的ネットワーク技術による大規模接続の実現

### 4. 施設整備の進捗

- 計算機棟は、平成20年3月に建設を開始し、現在基礎工事を実施中。平成22年5月頃完工予定。
- 研究棟は、現在、設計を実施中。平成21年1月頃より建設を開始し、平成22年5月頃完工予定。




※理化学研究所提供資料

### 6. ナノテクノロジー分野の研究開発

— 豊かな未来社会に貢献するナノ分野グランドチャレンジ —

- 次世代ナノ情報機能・材料 高速、高機能、省エネルギー電子デバイスの開発へ
  - ★次世代スパコン★
  - 複合的ナノ電子デバイスシミュレーション  
ナノ電子デバイス全体(10万原子系)の計算が2ヶ月程度で可能。(実効性能:1ペタフロップス)
  - 電子デバイスの高速応答・高機能、省エネルギー、環境負荷の低減を可能に、新たなデバイス創製に寄与する。
- 次世代ナノ生体物質 感染症の克服に向けて
  - ★次世代スパコン★
  - ウイルス全原子シミュレーション  
ウイルスと抗ウイルス剤の結合による不活性化、抗体との特異な相互作用の解析を実現。1マイクロ秒の原子の動きをシミュレーションする。3ヶ月(実効性能:1ペタフロップス)
  - 未克服のウイルスに対する予防法と治療法の開発、将来的には創薬の効率化に寄与
- 次世代エネルギー セルロースからバイオマスエタノール生成へ
  - ★次世代スパコン★
  - 酵素反応のまるごと解析  
従来の数千〜数万倍の計算量。(従来型スパコンでは不可可能)1度のエネルギー計算が数秒で可能。全体でも1日〜数日で計算出来る!
  - 高効率の触媒・酵素の設計が可能に。

分子研提供資料を基に文部科学省が作成

ここからは、スパコンのさらなる利活用についてです。

実験と理論に次ぐ第3のアプローチ、シミュレーションについては、グランドチャレンジの他にも、科学技術振興機構の戦略的創造研究や革新的シミュレーションなど、いろいろ進められています。次世代スパコンの活用により期待される事例を少しご紹介いたします。

ものづくりの分野では、自動車衝突の解析は、現状では衝突現象を幾つかの要素に分解して時間をかけて計算しますが、今後は統合衝突モデルで解析が迅速に行えるようになる。まさに安全で高品質な自動車開発に向けて画期的な変化をもたらすと期待されています。

ジェットエンジンやガスタービンのシミュレーションにおいても、現状の要素ごとの解析から、エンジン全体の解析が短時間で可能になります。どこにどのような手を加えると、どんな効果がトータルとしてあらわれるのかといった答えを迅速に得ることができ、開発リスクやコストの大幅な低減につながる事が期待されています。

地球環境分野においては、大気大循環モデルの台風や集中豪雨の予測で、現在3.5キロのメッシュのスケールが400メートルになり、より精度の高い予測が可能となります。

続いて、シミュレーション技術の高度化、利活用の促進のための施策をご紹介します。

ものづくりを中心とした産業イノベーションの創出やシミュレーション研究の飛躍的な発展を図るため、今年度からさまざまなプログラムを立ち上げております。大学や研究機関のスーパーコンピュータを産業界の方々に利用していただくプログラムも進めております。施策の展開に当たっては、産業界のニーズを適切に反映することが大事です。スーパーコンピューティング技術産業応用協議会とよく連携をとりながら、充実した政策の展開に努めていきたいと考えております。

次世代スパコンはまさに全国共同利用施設として、SPRing-8と同様に、いわゆる大型研究施設共用促進法のもとでプロジェクトが進められております。すなわち、理研が設置主体となって、登録機関が利用者の選定あるいは支援を行います。

次世代スパコンの利活用について具体的なイメージを描くために、昨年末に科学技術・学術審議会に作業部会を設置していただき、7月に報告をまとめていただきました。

### 7. ライフサイエンス分野の研究開発

— 生命現象の統合的理解 ヘルスサイエンスへの貢献 —

- 分子スケール
  - ☆次世代スパコン☆
  - 量子化学計算、分子動力学計算、粗視化モデル計算手法を連携した、タンパク質の機能発現の全過程をシミュレーション
  - 他の分子・細胞機能と共同的に生起する現象の理解を可能に
- 細胞スケール
  - ☆次世代スパコン☆
  - イメージング研究との協働、実験研究の実証に基づく(肝細胞の)時空間シミュレーション、複数細胞(肝小葉)モデルの開発
  - 細胞間の物質輸送を考慮した複数細胞のシミュレーション、細胞の生理機能を積み上げた組織シミュレーションの確立
- 臓器全身スケール
  - ☆次世代スパコン☆
  - 連続体力学による臓器・循環器系を統一した全身血流モデルに、細胞レベルの血小板生理の機能を組み込んだ血流シミュレータの開発
  - 心臓の拍動、姿勢の変化による血管形状の変化、細胞レベルの生理を統合した血栓シミュレーションの実現
- データ解析融合
  - ☆次世代スパコン☆
  - ヒト全遺伝子規模のネットワーク解析、超大規模タンパク質相互作用推定、大規模遺伝子多型解析を実現する。
  - 遺伝情報の網羅的解析に基づく個人差を考慮した治療薬、最適投与プロセスなどの開発や新薬ターゲットの探索法の解決に貢献

理研提供資料を基に文部科学省が作成 10

### 2. 次世代スパコンの活用により期待される成果例(1)

ものづくり分野 自動車衝突の解析

現状

個別衝突モデル

前面衝突用 後面衝突用 側面衝突用

人手モデル作成で数ヶ月。計算時間が約10時間(1テラFLOPS)

今後

統合衝突モデル

コンピュータの自動モデル生成で約20分、計算時間が約1,000分(1ペタFLOPS)

期待される具体的成果

従来、人手で数ヶ月かかっていたモデル作成が、自動車衝突解析自動化で解析を含めて約1~2時間で終えることで、自動車開発での革命を起こす。それによって、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。

注)スーパーコンピューティング技術産業応用協議会の資料を基に文部科学省作成 12

### 3. 次世代スパコンの活用により期待される成果例(2)

ものづくり分野 ジェットエンジンやガスタービンのシミュレーション

次世代スーパーコンピュータの活用により、ジェットエンジンやガスタービン全体のシミュレーションによる空力、燃焼、燃焼、構造の解析が可能となる。これにより、開発期間、コスト等の大幅な削減が期待できる。

各要素ごとの解析

・約10ヶ所のエンジン全体  
各要素は従来の一割代替が可能

エンジン全体の解析

・約1ヶ所のエンジン全体  
エンジン燃焼の一部代替が可能となる

期待される成果

- ①開発期間を2/3に短縮  
従来と比べて2/3の期間で開発が可能となる(従来10年に対して7年弱)
- ②開発コストの半減  
1台当りの開発費が、従来は1500億円~2000億円として、750億円~1000億円へ削減
- ③開発リスクの極小化  
従来は3回程度の設計変更が必要、ほぼゼロにすることが可能

13

### 4. 次世代スパコンの活用により期待される成果例(3)

地球環境分野 全球雲解像大気大循環モデルの台風・集中豪雨の予測への活用

全球を対象とした気象シミュレーション

現在のモデル

正20面体格子モデル 3.5kmメッシュ全球雲解像モデルによる水蒸気凝集の雲画像

次世代スパコン

従来の3.5kmスケールが、400mスケールでシミュレーションが可能になる。

400mスケールが可能に

期待される具体的成果

- より精度の高い気候予測が可能になる。
- 気候変動に伴う台風や集中豪雨など極端現象の予測情報を提供できる。

14

まず、共用のあり方について、世界最先端・最高性能の計算機を最大限に活用するために有効な特定分野を決め、戦略的利用と、産業利用あるいは人材利用も含めた多様なニーズにこたえる一般的利用という2つの利用形態をご提言いただきました。

戦略的利用については、戦略的研究開発プログラムをつくり、国に設置される戦略委員会で特定の分野と目標を設定し、各戦略分野に責任を持つ戦略機関を選定して、5年程度の研究期間でスパコンの優先利用を認める。人材育成については、教育利用枠を設ける、あるいは、戦略機関が実施する研究計画の中にいろいろな大学等と連携した人材育成プログラムを組み込むといった方策を、ご提言いただいているところです。

戦略的研究開発プログラムのイメージをまとめると、繰り返しになりますが、国に置かれた戦略委員会が戦略分野や目標を決めて、公募によって戦略分野に責任を持つ戦略機関を選定する。戦略機関は重点開発事項を明確にして、実施計画を遂行する。その運用に当たっては、戦略機関、設置者の理研、登録機関が一体になった連携推進会議を設けて、有効活用を図っていくということです。

文部科学省は、このプロジェクトの真価はまさに次世代スパコンを利用した画期的な成果が得られるかどうかで問われるという認識のもとに、作業部会から示された利活用のあり方を具体化するために、努力していきたいと考えております。

理化学研究所や戦略機関は、産学連携、人材育成というプログラムを含む計画を推進し、理化学研究所は、次世代スパコンの開発整備後も、戦略機関を結びつける共通基盤の研究開発を進めて、いわゆるハブ的な役割を担っていただきたい。そして、連携推進会議のもとに、全国の計算機資源との連携を図りながら、このファシリティーの円滑な運営を図っていくことが期待されています。

また、スパコンの利用促進と計算科学の振興・普及を支援していただく全国規模でのフォーラムを設けたらよいという報告をいただいております、これから関係者の皆様とよく相談をさせていただきたいと考えております。

次世代スパコンプロジェクトはいよいよ佳境を迎えております。この十分な利活用を図るためには、プロジェクトの行程表を見ながら、いろいろな仕組みづくりとか当面注力すべきアプリケーションの絞り込みについて、具体的な方策をタイムリーに講じていかなければいけません。また、この分野の人材育成の重要性について、このシンポジウムの成果をしっかりと

## 9. 次世代スーパーコンピュータ施設の利活用の検討

### 共用のあり方

- 共用法に基づく、世界最先端・最高性能の計算機
- 特定分野の研究を戦略的・重点的に推進
  - ・ 戦略的利用
- 多様な利用者のニーズに応える利用
  - ・ 一般的利用(産業利用枠、人材利用枠)
- 設置者による高度化のための利用
- 登録機関によるきめ細かい研究支援

19

## 10. 次世代スーパーコンピュータ施設の利活用の検討(つづき)

### 研究機能の構築

- 戦略的研究開発プログラム
  - ・ 戦略委員会による分野及び目標の設定
  - ・ 国による戦略機関の決定(公募)
  - ・ 研究期間は5年間、スパコンの優先利用
- 効果的・効率的な連携体制
  - ・ 戦略機関、設置者などで構成する連携推進会議
  - ・ 幅広い関係者からなるフォーラム
- 産業利用や人材育成機能などを全体として有機的に形成
- ネットワーク型の機能形成

20

## 11. 次世代スーパーコンピュータ施設の利活用の検討(つづき)

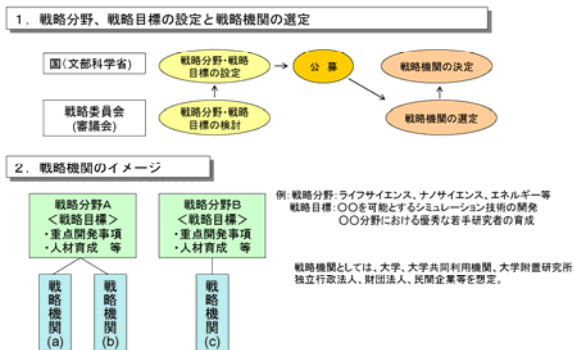
### 人材育成

- 研究者を目指す学生や企業等の研究者・技術者の育成
- 人材育成支援プログラム
  - ・ スパコンを直接利用する機会を提供(教育利用枠)
  - ・ 大学等と連携し、学生や研究者への研究指導、連携講座の設定(戦略機関)
- スパコン利用による研究活動を通じた人材育成
- 登録機関による技術講演会やセミナー
- インターンシップ制度

(平成20年7月 次世代スーパーコンピュータ作業部会報告書より抜粋)

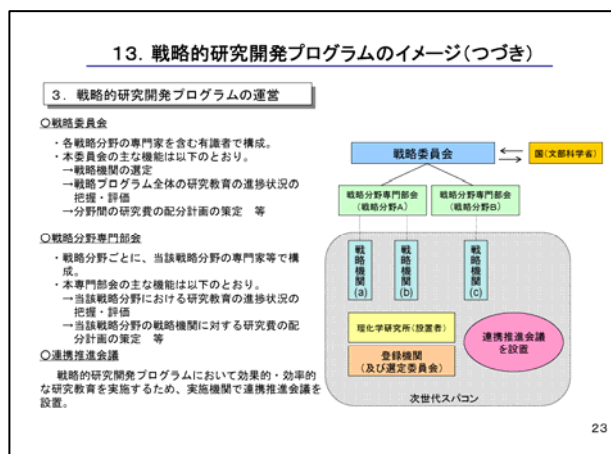
21

## 12. 戦略的研究開発プログラムのイメージ



22

受けとめて努力をしていきたいと考えておりますので、関係の皆様のご協力、ご支援を心からお願いいたします。



## 4.2. プロジェクト進捗状況報告

渡辺 貞（理化学研究所次世代スーパーコンピュータ開発実施本部 プロジェクトリーダー）



今日時点のプロジェクトの進捗状況について、特に施設の整備状況、システムの開発状況についてご報告します。

プロジェクト全体の開発日程としては、システムの演算部、制御フロントエンド部、共有ファイルは、すべて詳細設計という段階です。詳細設計は来年度初めには終了し、その後、来年度から試作・評価に移る予定です。最終的には、平成 22 年度にシステムとしては一部稼働。23 年度演算部完成。制御フロントエンドは残りの性能チューニング・高度化を行い、平成 24 年度中には完成という予定にしております。

施設については、現在、計算機棟を建設しており、基礎工事の段階です。研究棟については今年度中に設計を終え、今年度末から建設を進める予定です。最終的には、平成 22 年度 5 月末に竣工予定です。

施設の立地地点は、神戸のポートアイランド第 2 期です。ポートアイランド線の空港の次の「ポートアイランド南」という駅のすぐそばです。このあたりは神戸の医療センターで、理研の研究施設もありますが、いろいろな医療機関やライフサイエンス系の研究機関が集積しているところではあります。

整備の基本方針としては、世界最速・最大規模のスーパーコンピュータが設置されますので、それを十分に維持管理できる設備能力、電力、空調等の設備を確保する。このセンターを中心とした COE が形成される予定になっておりますので、それにふさわしい研究・教育設備の整備。コジェネを使った排熱利用の推進など環境に配慮した施設整備ということで、現在、研究棟の設計を進めているところです。

計算機棟は、延べ床面積約 1 万平米、建築面積は 4000 平米強、地上 3 階地下 1 階で、計算機は 1 階と 3 階に設置される予定です。見学者等もたくさん来るとお思いますので、全体が見渡せるような設備もつくり、広報等にも努めたいと考えています。

研究棟は、延べ床面積約 8500 平米、地上 6 階地下 1 階で、計算機棟を取り囲むような形でつくられる予定になっております。

続きまして、システム開発の状況です。

昨年の概念設計終了時に、スカラ部とベクトル部とで構成される複合汎用スーパーコンピュータシステムとしてシステムの構成、アーキテクチャを決定し、現在、これに基づいて、内部の詳細設計を進めているところです。

システムの特徴は、このプロジェクトではライフ、ナノに力を入れておりますが、その他分野を含めたいろんなアプリケーションで最適な計算環境を提供しようと、汎用目的で、スカラ部、ベクトル部の複合システムとしたわけです。特に高性能かつ環境に配慮して、性能当たりの消費電力を大幅に低減したシステム構成を考えております。

一昨年度から具体的にアーキテクチャの評価・設計を進め、概念設計の結果として、先ほどのようなシステム構成を決めたわけです。現在、詳細設計ということで、設計のピークです。具体的な成果は来年度の試作・評価に出てきます。

具体的に、昨年は概念設計の後、システム構成に従って、ハードウェアの内部のまとめ、CPU、ネットワーク等の基本的な機能、構成を決めました。ネットワークのバンド幅とか、最終的には、実装、インターフェース等も含めて、基本的な機能を決めました。

システムソフトウェアについても、具体的に OS の機能、その上に乗せるスケジューラの機能、あるいはファイル、コンパイラ等々の機能を決めています。

制御フロントエンド部は、総合システムとしてどういう機能が必要かという要件定義をして、基本設計を完了しております。

現在、20 年度は、「CPU/ネットワーク用チップの内部論理を設計中」と書いてありますが、具体的な演算機の内部の論理を組む、あるいはキャッシュの詳細な構成を設計する、命令の制御部の細かいロジックを作っていく

ということです。

特に CPU は、およそ 10 億弱のトランジスタがこの CPU のチップの中に入ります。10 億弱のトランジスタといいますと 1 つのシステムに相当します。これが完成した暁には、何万個と使われるわけです。それが 1 つでもバグがあると、何万チップを置きかえる必要があります。現在、論理シミュレーションとか、遅延の解析とか、いろんなツールを使って、内部にバグのない、設計品質を高める設計をしています。

ロジックとしていかに低消費電力を図るかということで、動作していないところはとめる、動き出したらすぐ動かすという低消費電力設計も非常に大きなキーポイントです。

「半導体プロセスを評価中」というのは、CPU あるいはネットワークの設計はできても、物がつくれないといけないわけです。現在、45 ナノの半導体プロセスを使うことで進めておりますが、並行して、テスト用のチップをつくって、その回路評価をしているところです。

あわせて、電源あるいは冷却機構も非常に超高密度の実装を行いますので、実際の保守性も含めた実装構造を設計中です。

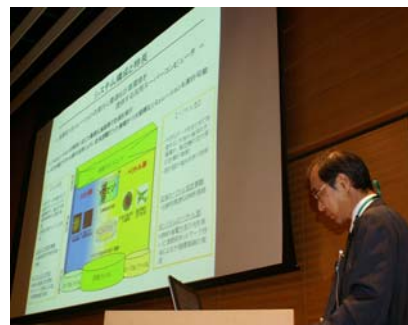
システムソフトについては、特にファイルシステムや運用ソフト、超大規模構成ですので資源を有効に使うスケジューラを設計中です。CPU の内部構造もこのための特別な構成が必要であり、それを十分引き出すコンパイラ、システムのユーザーから見てよく使われる基本的なライブラリもシステムの特徴を十分に発揮できるようなライブラリが必要で、こういったことも含めて、現在設計中です。

制御フロントエンドも、要件定義に基づいて、現在、仕様を決めているところです。

来年度初めには詳細設計を完了する予定で、その後、具体的なチップやプリント板を試作し、その上に乗せて評価をすることが始まります。来年の今ごろは、何らかの評価結果等をご報告できるのではないかと思います。

再来年度は、この評価で量産ゴーがかかると具体的な製造開始が始まり、22 年度末までには一部のシステムが搬入され、動き始める予定になっております。23 年度は、残りの部分を追加生産・評価して、最終的に複合システムとして完成します。現在、複合システムとしてのシステム統合について、その評価も含めて、計画中です。

以上、簡単ですが、現在の開発状況についてご報告させていただきました。



#### 4.3. 基調講演

##### 「次世代スーパーコンピュータと人材育成」

平尾 公彦（東京大学 副学長）

今日は、「次世代スーパーコンピュータと人材育成」というテーマで、日ごろ私が考えていることを発表させていただきたいと思っています。

今日、私がお話ししようと思っているのは、1つは、サイエンスがやはり重要だということです。21世紀は、予測の科学の時代に入りました。その中で、シミュレーションを中心とする計算科学が大きな役割を果たす。数値実験による新しい概念をつくるのがイノベーションにつながります。異分野融合、人材育成が重要です。当然のことですが、若い人のアイデアを生かすシステムをいかにつくるかということです。

20世紀、科学技術は飛躍的な発展を遂げました。量子論と相対論という基本的な法則が誕生したことがその背景にあります。新しい法則によって、自然科学の意識革命がなされました。また、それを実証した世紀でもあります。素粒子論、物質論、生命論、宇宙論、私たちの自然観は根底から覆されました。

2005年にアメリカの工学アカデミーが出した20世紀のイノベーション・トップ20によると、1番は電力・電化で、自動車、航空機、上下水道、電子技術等々と続いています。いずれもその源は基礎科学にあります。基礎科学で見出したことをロングレンジで公共的に発展させてきたのが、20世紀のイノベーションでした。

20世紀の目覚ましい科学技術の開発・普及は、災害や事故を防ぎ、産業を支え、私たちの生活に豊かな物質を提供し、健康も促進し、長寿を可能にしてきたわけです。そういう意味では、20世紀、科学技術は間違いなく社会の要請にこたえてきたのです。

しかし、この間、科学技術の進化と細分化が進んで、個の相対的な埋没が進みました。何よりも前世紀の特徴の1つは、自然を克服して、それを利用することこそ人間の主体性の発露と自由の拡大に他ならないという人間中心の自然観があったのです。

今、私たちはどんな時代に住んでいるのか。この100年で、世界の人口は15億から66億ぐらいに増え、先進国の平均寿命は40歳だったものが80歳になっています。CO<sub>2</sub>の濃度も、280ppmから380ppm近くまで増えています。環境劣化と気候変動待ったなしで、地球温暖化へと向かっています。南北格差は拡大し、全世界人口の約2割の人たちは極貧で、毎年1600万人が餓死しています。この解決が21世紀の課題です。

21世紀における人類社会の目標は、肥大化してしまった人間圏を、地球と共生し得る持続的なシステムとして再構築すること、一方で、多様な価値観を持っている人たちと、健康で快適な生活をつくっていくことです。私たちの抱えている問題は複雑ですが、その中で個人の尊厳をいかに担保するかということが大きな課題となっています。

これまで、いろんな形で真理を追究する科学が進んできました。こういうことは今後も尽きることはないと思いますが、今世紀の科学は、社会とか平和のために使わないといけないと思っています。

今、技術の底流には大きな変化が生じています。私は工学を専門にしている者ですが、やはり大きな変化が生じていると感じています。人類社会の持続性に寄与し、人を支える技術へのパラダイムシフトが起こっているのです。



20世紀はどんな時代だったのか

20世紀の技術革新

1. 電力	11. 高速道路
2. 自動車	12. 宇宙船
3. 航空機	13. インターネット
4. 安全な水	14. 画像技術
5. 電子技術	15. 家庭用電化製品
6. ラジオ・テレビ	16. 医療技術
7. 農業機械化	17. 石油・石油化学
8. コンピュータ	18. レーザー・光ファイバー
9. 電話・通信	19. 原子力技術
10. 空調・冷凍	20. 高性能材料

アメリカ工学アカデミー-2005

いずれもその源は基礎科学にある



エンジニアリングは、もともとはミリタリーエンジニアリングでした。それが 20 世紀に入って、シビルエンジニアリングに変わりました。これから先は、もう一歩進んで、人と人、人と地球、人と自然をつなげる形、共生のためのエンジニアリングに変わらないといけないと思っています。

我が国は、今いろんな問題が起こり、悲観的な見方がありますが、私はむしろこういうときこそチャンスだと思います。日本の持っている文化と感性に根差した科学技術、省エネ技術は世界に通用するものです。今後、先進国で予想される人口減少、高齢化、環境問題、エネルギーという問題を我が国は率先して克服し、豊かな国家をつくる模範を示すべきです。そのためにも、優れた人材の確保は重要です。

私たちは、環境問題を初めとしたいろんな課題を抱えています。いずれも極めて複雑で、分野も多岐にわたり、複合的な課題です。そういう意味では、お互いの相関関係を重視した俯瞰的な学術の創成がどうしても必要です。

そこで期待されているのが計算科学です。計算科学、シミュレーションは、実験、理論と並ぶ第 3 の科学と呼ばれています。21 世紀に本当の意味の予測の科学が発展するとすれば、その基盤をつくるものです。

私は、計算科学は、理論や実験とは異なるコンピュータシミュレーションによる数値実験という新しい研究方法を実現して、新しい概念を提出するのではないかと思います。それによって科学にブレークスルーをもたらし、問題解決にいろんな意味の助けができるのではないかと思います。

計算科学で何ができるのでしょうか。

1 つは、再現することです。既にわかっている事象を再構築して理解する。次に、既にわかっているシナリオを最適化する。もう 1 つ、未来または未知の状況を予測するという大きな能力が、計算科学に期待されています。

いずれにせよ、コンピュータができてから、計算科学の分野は拡大してまいりました。ナノテクノロジー、ライフサイエンス、素粒子論、宇宙論からスタートし、シミュレーションはいろんなところに使われています。計算科学が対象とする領域はどんどん拡大していくと思います。

近代科学の発展は、今から 300 年ほど前に、自然現象を数学であらわすことから始まりました。デカルト、パスカル、フェルマー、ニュートン、ライプニッツが出て、微積分学が発達し、偏微分方程式ができて、自然現象を拡散とか、波動とか、非線形という数学によってあらわし、私たちはそれを通して自然や現象を理解するようになりました。その意味では、数学の果たした役割は大きいのです。

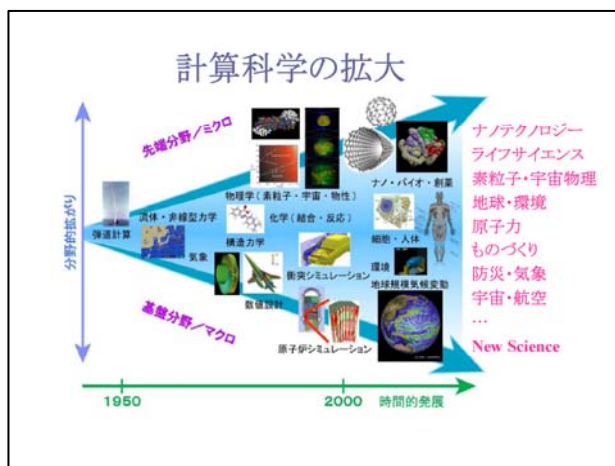
ところが、解析的な数学ですべて自然現象を解析できるかという、必ずしもそうではありません。例えば複雑な現象があります。複雑さを対象とする多様性科学がありますが、これは基本的には非線形工学をベースとした科学です。ランダムな振る舞いとかカオス的な振る舞いの中にも、数値計算をやってみると、ある法則があることがわかってきました。従来、解析不可能だと思われた領域にも、計算科学が手を差し伸べることができます。心理学、社会科学、経済学などは実験や論証のしにくい領域でしたが、数値実験によって分析できるようになりました。計算科学が新しい切り口を提供しています。そういう意味では、複雑さを科学する手段として、計算科学は大きな役割を担っていくのではないかと思います。

コンピュータは数学の脆弱性を補うものです。白色地図が何色で色分けができるかという 4 色問題というのがありますが、これを解決したのはやはり計算機です。コンピュータは、測定不能、実現不能な境界領域の場、時空を超えていろんなことができます。あるいは、未来を予測すること、複雑系を解析することができます。ですから、理論や実験からでなく、数値実験から新しい概念をつくるのが大きな役割を持っています。

例えばチェスというゲームでは、1996 年に IBM の Deep Blue がチェスの名人 Kasparov に勝ってから、最近では人間がコンピュータに勝つことは難しくなっています。

将棋は、取った相手の駒を自分の駒として使えるということがあって、チェスに比べるとはるかに複雑です。保木さんという物理学者が Bonanza という将棋のソフトを開発し、昨年、渡辺竜王と対戦をして、112 手で渡辺竜王勝ったのですが、渡辺竜王は、人間には発想できないような手を打つと感心しているのです。

いずれにしろ人類は、大型コンピュータを駆使する数値実験によって、複雑な自然現象とか社会現象を認識・



予測する新しい科学的なアプローチを手に入れました。だからこそ今、計算科学の振興が叫ばれ、この分野での人材育成が求められているのです。国家プロジェクトは本当に時宜を得たものであって、プロジェクトをぜひ成功させたいと思っています。

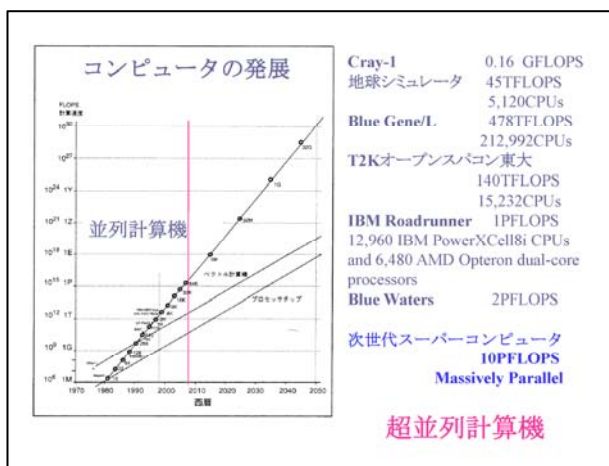
次世代スーパーコンピュータの開発の目的は、1つは当然のことながら、科学技術のブレークスルーを実現することにあるわけです。もう1つは、計算科学の革新とこの分野における人材育成です。

私は、グランドチャレンジは高い目標を掲げるべきだと思います。決して妥協しないことです。高い目標を掲げるためには、明確な科学技術上の目標を設定することが必要です。あるものではなくて、場合によっては、スクラッチからつくる、あるいは、原点に立ち戻って、理論、モデリングからもう一回やるのが重要です。決して妥協しないということの積み重ねでいろんな分野融合ができて、本来の目的が達成されるのではないかと思います。

私は、次世代スーパーコンピュータは、顕微鏡の世界ではつまらないと思うのです。今までぼけていたものが、もう少し見えるようになるとか、今まで小さなものは計算できたが、もうちょっと大きなところまで計算できるという世界でなく、これまでできなかったことができないうとダメだと。コンピュータが発達したおかげで可能になる科学をエンカレッジすべきです。これは複雑系の科学とか、それ以外の社会現象も大きな対象だと思います。

サイエンスの発展は決して連続ではありません。どこかでポンと飛び上がるわけです。ですから、そういう質的に新しい可能性を誘起するような研究システムなり人材育成のシステム、環境を整えておく必要があります。

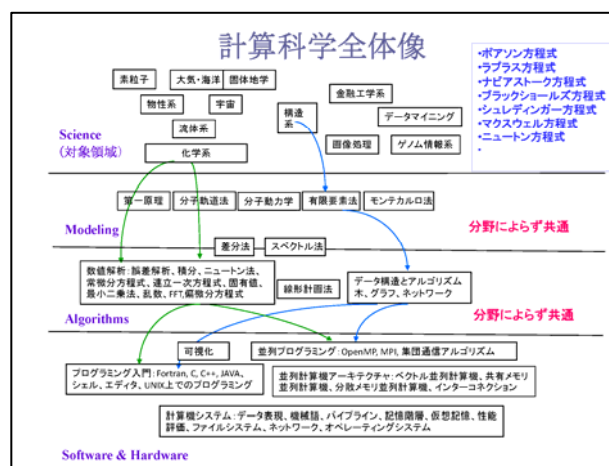
スパコンは、70年代のCrayから始まって、いろんなものが出てきました。この図は演算速度 FLOPS でコンピュータの発展を示したものです。CPUの数は、地球シミュレータで5000ぐらいだったのですが、今は万を超えています。次世代スーパーコンピュータもさらに並列度が増すことでしょう。超並列計算機をいかに使いこなすかということがブレークスルーにかかります。



もう1つ、計算科学は学術的な分野で、サイエンス、テクノロジー、エンジニアリングがその基盤にあることは事実ですが、それ以外に応用数学、数理科学、あるいは情報科学、計算機科学が重要です。それぞれのところが計算科学に影響を与える。重要なのは、ここに出てきたことをもう一回サイエンス、数理科学、情報科学に戻して、計算科学のおかげでそれぞれの分野がさらに発展、変革することです。

サイエンスコンピューティングは、「SMASH」よくいわれます。Science, Modeling, Algorithm, Software, Hardware。ですから、計算科学をきちっとやろうとすると、これだけ多くの分野を学ばないといけないということになります。当然のことながら、分野間の協力あるいは融合、連携が重要です。

これが計算科学の全体図です。一番上に、サイエンスの部分が書いてあります。いろんなサイエンスがある。それからモデリングの部分が出てくる。これは分野によらず、共通なところがたくさんあります。アルゴリズムも、分野によらず共通です。そして、ソフトウェア、ハードウェアがある。



基礎になっている方程式は、ポアソンとか、ラプラスとか、ナビエストークとか、ブラックショールズとか、いろいろありますが、偏微分方程式は形もよく似ています。

こういう俯瞰図で、自分の学問がどういう位置にあるかを見ることができます。

私の分野で少し考えてみましょう。私は、量子化学とって、量子論に基づいて物質の設計をしたりしていま

す。実は物質科学も、1Åから、ナノ、マイクロ、マクロまで、時間スケールも、フェント秒から、ピコ、ナノ、マイクロ秒、あるいは分というオーダーまで、いろんな現象があります。使われている論理も、電子の運動を見る量子化学、少し大きなところでは原子核の動きを記述する分子動力学、あるいはもっと大きなところになると連続体のモデルがあります。

私の分野は、シュレジンガー方程式を解きます。これは2階の微分方程式なのですが、一般には解析的な展開法を利用して、最終的には行列式の固有値問題という代数の問題に置きかえて、これを近似的に解いています。

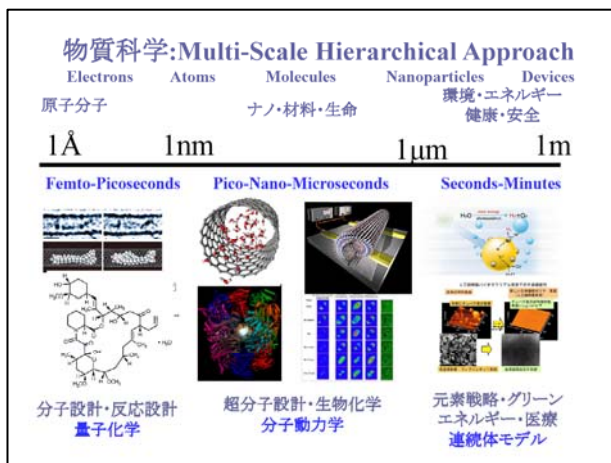
先ほどの俯瞰図でいきますと、私の対象領域は化学で、モデルは殆どすべてを使っている。アルゴリズムも殆どのものを使っている。他の分野で使われているものも、みんな使う。だから、全く違う分野の人という話をすると、ああ、同じような方程式を、同じようなモデルを使っているというのが、よく出てきます。

実は私たちの分野では、大きな系を計算できないというのが悩みでした。系の大きさを $N$ とすると、計算量が $N^3$ で増えていくのです。系の大きさが10倍になったら10倍の計算時間がかかるというリニアスケールングの方法を見つけないと大きな系が計算できないという悩みがありました。

ネックは、クーロン積分といわれる4中心積分です。電子密度を電子間距離 $r_{12}$ の逆数で挟んだものです。今までは解析的にこの積分を求めていました。 $\chi$ はガウス型関数です。この方式ですとクーロン積分の数は $N^4$ で増えていきます。あっという間にその数は莫大になり、大規模系を計算するには不向きです。


しかし、クーロンポテンシャルがわかれば、クーロン積分はそれに電子密度を掛けたら出てくるわけです。クーロンポテンシャルは、実はポアソン方程式を解くやり方とか、あるいは積分を離散問題に変えて数値的に解くやり方だってあるわけです。クーロンポテンシャルは、原子核の上では鋭くスパイク状に立っているのですが、それ以外のところではなめらかなのです。こういうことをうまく使ってやると、リニアスケールングでクーロン積分を計算することが可能となります。

私たちは電子密度をガウス型関数と有限要素で展開し、ポアソン方程式を解いて、クーロンポテンシャルを計算する方法を新しく開発しました。この方法による計算結果です。この結果は1万基底、原子数では1000個ぐらいの系のものですが、このようにクーロン積分をリニアスケールングで計算することができます。



### 原子分子の基礎方程式

$N$ 個の原子核と $n$ 個の電子から成る系のSchrödinger方程式



$$H\Psi = E\Psi$$

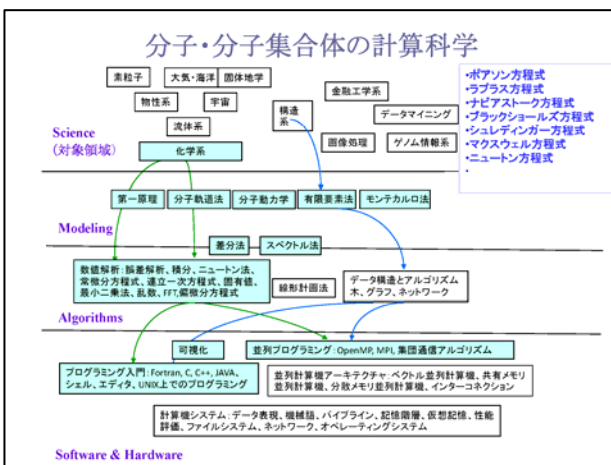
$$H = -\sum_{\alpha} \frac{\nabla_{\alpha}^2}{2M_{\alpha}} - \sum_{i=1}^n \frac{\nabla_i^2}{2} - \sum_{\alpha} \frac{Z_{\alpha}}{r_{\alpha i}} + \sum_{i,j} \frac{1}{r_{ij}} + \sum_{\alpha,\beta} \frac{Z_{\alpha}Z_{\beta}}{R_{\alpha\beta}}$$

$$\Psi = \Psi(r_1, r_2, \dots, r_n; R_1, R_2, \dots, R_N)$$

2階の微分方程式を解析的展開法を利用して、行列式の固有値問題という代数の問題に帰着させて近似的に解く。波動関数、エネルギーは電子の軌道関数の汎関数

$$\Psi \equiv \Psi(\{\varphi_i\}), \quad E \equiv E(\{\varphi_i\})$$

軌道関数も原子軌道で展開

$$\varphi_i = \sum_p \chi_p C_{pi}$$


### 分子計算の悩み

系の大きさ(N)依存性が極めて大きい

計算時間は $N^{3.0}$ で増加

計算時間

系の大きさ, N

$O(N^3)$

$O(N)$

**N依存性を下げる理論(Linear Scaling)が求められている!**

もっと大きな系でも問題なく計算できます。

計算時間を 1000 倍速くするという問題は、決してコンピュータだけの問題ではなく、コンピュータ以前に、サイエンスとか数学の問題です。したがってサイエンスをしっかりと教育する必要があります。これはやはり大学の仕事です。

もう 1 つは、若い人のフレッシュなアイデアが重要ということをお話します。私たちの分野にいる若い人が、コンピュータにすべてやらしたらどうだということを考え出したのです。式もコンピュータに導出させて、プログラムそのものもコンピュータに自動的にやらせようと考えました。

例えば Coupled Cluster 法というのがありますが、これを人間の手でプログラムしようとすると大変複雑になります。

平田聡さんという若い人が、波動関数は第 2 量子化で定義され、方程式はテンソル表現をとるのだし、結局は、行列の足し算、掛け算の組み合わせでできるのだから、波動関数の式の導出及びプログラムの作成も全部抽象化して計算機にやらせることができると言い出しました。事実、そのとおりです。

人間がつくったソフトウェアと計算機がつくったソフトウェアは、1 万 3000 行ぐらいだとまだ人間の方が効率はいいのけれども、8 万行になると、人間がつくったものと、計算機で自動的につくったものは殆ど変わりません。

私は、コンピュータの持っている算術演算以外の側面をもっと利用した方がいいと思います。そういうことに関して、若い人たちはすぐれた感覚を持っています。若い人たちのアイデアをいかに生かすかというシステムが重要です。

最近、私たちの大学では、計算科学、コンピュータの進歩とともに、この分野を担う若い人たちをどうやって育てるかということを議論しています。これまではそれぞれの分野で研究室に来てから学生を訓練するというやり方だったのですが、もう少し体系的にやる必要があります。たくさんの方がかかっていますので、大学全体で連携して人材育成を図ることが重要です。次世代スーパーコンピュータを駆使した大規模シミュレーションを実施し、新しいサイエンスを開拓する人材を育てたいと思っています。

これは、今私たちのところで始まっている計算科学の人材育成の委員会です。中心になっているのは、米澤センター長の情報基盤センターです。それ以外にも理学系、工学系、新領域、情報理工系の研究科や研究所の人たちが加わっています。学内にはシミュレーションを教育研究している分野がたくさんあります。計算科学は部局横断的ですが、今、この分野の人材育成を部局横断的でやろうという試みがスタートしています。インターディシプリナリーな領域でどうやって人を育てるかということは、大学教育にとっても大きな課題であり、チャレンジです。

一般論として、この分野でどういう人を育てるのか。

アプリケーションプログラムをちゃんと使える人、アプリケーションソフトを自分で開発できる人、これはアルゴリズムも並列のプログラムも両方使えないといけません。それから、もうちょっと進んで、ソフトウェア、ハードウェアの開発ツールをつくれる人。レベルはいろいろあるので、それに対応して教育をしないとダメです。

東京大学は、できることなら、グランドチャレンジをみずからつくり出せるような人、あるいはモデル、アルゴリズム、ソフトウェアをみずから開発できる人、単なるソフトが使えるというだけでなく、グランドチャレンジに果敢に挑戦できる人、そして、システムアーキテクチャを共同開発できる人たちをぜひ育てたいと思っています。

**なぜ自動化するのか？**  
**Coupled-Cluster Singles & Doubles で既にこれだけ複雑**

$$E = \langle \Phi_0 | \hat{H} | \Phi_0 \rangle + \langle \Phi_0 | \hat{H} | \Phi_1 \rangle + \langle \Phi_0 | \hat{H} | \Phi_2 \rangle + \langle \Phi_0 | \hat{H} | \Phi_3 \rangle + \langle \Phi_0 | \hat{H} | \Phi_4 \rangle + \langle \Phi_0 | \hat{H} | \Phi_5 \rangle + \langle \Phi_0 | \hat{H} | \Phi_6 \rangle + \langle \Phi_0 | \hat{H} | \Phi_7 \rangle + \langle \Phi_0 | \hat{H} | \Phi_8 \rangle + \langle \Phi_0 | \hat{H} | \Phi_9 \rangle + \langle \Phi_0 | \hat{H} | \Phi_{10} \rangle + \langle \Phi_0 | \hat{H} | \Phi_{11} \rangle + \langle \Phi_0 | \hat{H} | \Phi_{12} \rangle + \langle \Phi_0 | \hat{H} | \Phi_{13} \rangle + \langle \Phi_0 | \hat{H} | \Phi_{14} \rangle + \langle \Phi_0 | \hat{H} | \Phi_{15} \rangle + \langle \Phi_0 | \hat{H} | \Phi_{16} \rangle + \langle \Phi_0 | \hat{H} | \Phi_{17} \rangle + \langle \Phi_0 | \hat{H} | \Phi_{18} \rangle + \langle \Phi_0 | \hat{H} | \Phi_{19} \rangle + \langle \Phi_0 | \hat{H} | \Phi_{20} \rangle + \langle \Phi_0 | \hat{H} | \Phi_{21} \rangle + \langle \Phi_0 | \hat{H} | \Phi_{22} \rangle + \langle \Phi_0 | \hat{H} | \Phi_{23} \rangle + \langle \Phi_0 | \hat{H} | \Phi_{24} \rangle + \langle \Phi_0 | \hat{H} | \Phi_{25} \rangle + \langle \Phi_0 | \hat{H} | \Phi_{26} \rangle + \langle \Phi_0 | \hat{H} | \Phi_{27} \rangle + \langle \Phi_0 | \hat{H} | \Phi_{28} \rangle + \langle \Phi_0 | \hat{H} | \Phi_{29} \rangle + \langle \Phi_0 | \hat{H} | \Phi_{30} \rangle + \langle \Phi_0 | \hat{H} | \Phi_{31} \rangle + \langle \Phi_0 | \hat{H} | \Phi_{32} \rangle + \langle \Phi_0 | \hat{H} | \Phi_{33} \rangle + \langle \Phi_0 | \hat{H} | \Phi_{34} \rangle + \langle \Phi_0 | \hat{H} | \Phi_{35} \rangle + \langle \Phi_0 | \hat{H} | \Phi_{36} \rangle + \langle \Phi_0 | \hat{H} | \Phi_{37} \rangle + \langle \Phi_0 | \hat{H} | \Phi_{38} \rangle + \langle \Phi_0 | \hat{H} | \Phi_{39} \rangle + \langle \Phi_0 | \hat{H} | \Phi_{40} \rangle + \langle \Phi_0 | \hat{H} | \Phi_{41} \rangle + \langle \Phi_0 | \hat{H} | \Phi_{42} \rangle + \langle \Phi_0 | \hat{H} | \Phi_{43} \rangle + \langle \Phi_0 | \hat{H} | \Phi_{44} \rangle + \langle \Phi_0 | \hat{H} | \Phi_{45} \rangle + \langle \Phi_0 | \hat{H} | \Phi_{46} \rangle + \langle \Phi_0 | \hat{H} | \Phi_{47} \rangle + \langle \Phi_0 | \hat{H} | \Phi_{48} \rangle + \langle \Phi_0 | \hat{H} | \Phi_{49} \rangle + \langle \Phi_0 | \hat{H} | \Phi_{50} \rangle + \langle \Phi_0 | \hat{H} | \Phi_{51} \rangle + \langle \Phi_0 | \hat{H} | \Phi_{52} \rangle + \langle \Phi_0 | \hat{H} | \Phi_{53} \rangle + \langle \Phi_0 | \hat{H} | \Phi_{54} \rangle + \langle \Phi_0 | \hat{H} | \Phi_{55} \rangle + \langle \Phi_0 | \hat{H} | \Phi_{56} \rangle + \langle \Phi_0 | \hat{H} | \Phi_{57} \rangle + \langle \Phi_0 | \hat{H} | \Phi_{58} \rangle + \langle \Phi_0 | \hat{H} | \Phi_{59} \rangle + \langle \Phi_0 | \hat{H} | \Phi_{60} \rangle + \langle \Phi_0 | \hat{H} | \Phi_{61} \rangle + \langle \Phi_0 | \hat{H} | \Phi_{62} \rangle + \langle \Phi_0 | \hat{H} | \Phi_{63} \rangle + \langle \Phi_0 | \hat{H} | \Phi_{64} \rangle + \langle \Phi_0 | \hat{H} | \Phi_{65} \rangle + \langle \Phi_0 | \hat{H} | \Phi_{66} \rangle + \langle \Phi_0 | \hat{H} | \Phi_{67} \rangle + \langle \Phi_0 | \hat{H} | \Phi_{68} \rangle + \langle \Phi_0 | \hat{H} | \Phi_{69} \rangle + \langle \Phi_0 | \hat{H} | \Phi_{70} \rangle + \langle \Phi_0 | \hat{H} | \Phi_{71} \rangle + \langle \Phi_0 | \hat{H} | \Phi_{72} \rangle + \langle \Phi_0 | \hat{H} | \Phi_{73} \rangle + \langle \Phi_0 | \hat{H} | \Phi_{74} \rangle + \langle \Phi_0 | \hat{H} | \Phi_{75} \rangle + \langle \Phi_0 | \hat{H} | \Phi_{76} \rangle + \langle \Phi_0 | \hat{H} | \Phi_{77} \rangle + \langle \Phi_0 | \hat{H} | \Phi_{78} \rangle + \langle \Phi_0 | \hat{H} | \Phi_{79} \rangle + \langle \Phi_0 | \hat{H} | \Phi_{80} \rangle + \langle \Phi_0 | \hat{H} | \Phi_{81} \rangle + \langle \Phi_0 | \hat{H} | \Phi_{82} \rangle + \langle \Phi_0 | \hat{H} | \Phi_{83} \rangle + \langle \Phi_0 | \hat{H} | \Phi_{84} \rangle + \langle \Phi_0 | \hat{H} | \Phi_{85} \rangle + \langle \Phi_0 | \hat{H} | \Phi_{86} \rangle + \langle \Phi_0 | \hat{H} | \Phi_{87} \rangle + \langle \Phi_0 | \hat{H} | \Phi_{88} \rangle + \langle \Phi_0 | \hat{H} | \Phi_{89} \rangle + \langle \Phi_0 | \hat{H} | \Phi_{90} \rangle + \langle \Phi_0 | \hat{H} | \Phi_{91} \rangle + \langle \Phi_0 | \hat{H} | \Phi_{92} \rangle + \langle \Phi_0 | \hat{H} | \Phi_{93} \rangle + \langle \Phi_0 | \hat{H} | \Phi_{94} \rangle + \langle \Phi_0 | \hat{H} | \Phi_{95} \rangle + \langle \Phi_0 | \hat{H} | \Phi_{96} \rangle + \langle \Phi_0 | \hat{H} | \Phi_{97} \rangle + \langle \Phi_0 | \hat{H} | \Phi_{98} \rangle + \langle \Phi_0 | \hat{H} | \Phi_{99} \rangle + \langle \Phi_0 | \hat{H} | \Phi_{100} \rangle + \dots$$

**学際計算科学・工学人材育成委員会**  
平尾公彦  
東京大学情報基盤センター  
米澤明憲センター長  
石川 裕教授、中島研吾教授、片桐孝洋准教授  
常行真司教授(理学系)、奥田洋司教授(工学系)  
中谷明弘准教授(新領域)、須田礼仁准教授(情報理工)  
加藤千幸教授(生研)  
**部局横断的な学際領域の教育をどう実現するのか？**

す。その目標に向かって学際計算科学・工学人材育成プログラムをつくっております。

教育の基本は 2 つ、一つのことを深く掘り下げることと広い視野を持つことです。計算科学では、それぞれの人たちが専門のサイエンスとかエンジニアリングを持っています。専門とするところでは、よりファンダメンタルなことを、より深く、きちっと学ばなければなりません。深い理解には汎用性があります。専門の分野とともに、応用数学とか、計算機科学を体系的に理解させることが重要で、より深い理解と、膨らみを持った幅広い視野を持たせる教育をやりたいと思っています。

今、いろんな分野の組織の人たちが集まって、どうという教育システムをつくるべきかということについて議論して、実際に実行に移しつつあります。1 つは全学体制がどうしても必要だということです。単なる教育だけでなく、その後のケアをちゃんとできるように、環境整備をしておくことが必要です。計算科学と計算機科学、あるいは数理学との融合によって、お互いにいい効果を生み出すことが重要ではないかと思っています。

これは理学研究科地球惑星科学専攻の計算科学教育の例です。この学科、専攻は計算機に関する教育では先進的なところ。1 年生の一般教育では、実習も含めて、情報科学のリテラシー教育がなされています。

3 年生で、もう一度、計算機リテラシーに関するもの、言語教育 FORTRAN とか、基本的な数値解析の教育をします。1 週間に 3 日開講される授業で殆ど計算機漬けです。

さらに 4 年生で、実際に使う偏微分方程式の数値解法をきっちり教えます。

先駆的なことは、大学院で並列計算のプログラミングをちゃんと教育していることです。MPI を使って、差分法とか有限要素法などのアプリの並列化を理解するだけでなく、学生たちにパラレルプログラミングを組ませています。

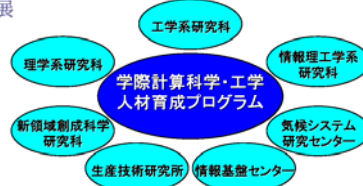
多くの大学では、一般教育と FORTRAN などの言語を含めた学部教育で計算科学の教育は終わりです。あとは研究室に入って個別に人を育てているのが現状です。体系的計算科学教育をきちんとやるのが重要です。何とか全学的に計算科学教育を広げたいと思っています

これまでの経験から、幾つかの教訓があります。並列計算はそんなに難しくないとか、計算機に使われてはならないとか、よい並列プログラムとはよいシリアルプログラムから生まれるとか、当たり前のことですが、こういう経験を学んで、整理して、それをもとに計算科学教育をデザインしています。

並列プログラミングへの道のりは、①計算機のリテラシー、プログラミング言語、その上を学ぶ人は、②科学技術計算用の理論とか演習、さらに進むと③実際のアプリケーションの実用的プログラミング。さらに進むと④並列プログラムをやる。②と③の間には実は大きな壁があって、多くのところでは②までしかやっています。これをもう少し広げて、特別な学生だけでなく、多くの学生たちに③、④を教育すると、格段に

### 学際計算科学・工学人材育成プログラム

- 情報科学は学際的であり、全学体制による環境整備が重要
  - 教育+その後の研究支援
  - 単に数年の教育だけでなく、HPC技術を駆使した研究を生産支援するための環境整備(=開発基盤, 協力体制)が必要
- 計算科学と計算機科学、数理学との融合、スパイラル効果による発展

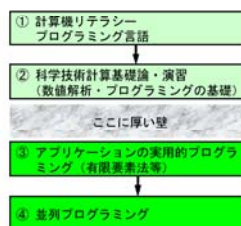


49

### これまでの東京大学の計算科学教育 理学研究科地球惑星科学専攻の例

- 一般教育(1,2年)における情報科学教育
- 地球惑星物理学演習(3年)  
計算機リテラシー、FORTRAN、基本的な数値解析  
計算機漬け
- 地球物理数値解析(4年)  
偏微分方程式の数値解法
- 並列計算プログラミング、先端計算演習(大学院)  
MPIを使って差分法、有限要素法などのアプリの並列化技術、先駆的

### 並列プログラミングへの道のり



Science  
Modeling  
Algorithm  
Software  
Hardware

①~④の各レベル(縦系)において「SMASH」(横系)  
③が最も重要、かつ教育困難  
現状はアルゴリズム中心

情報科学が進歩するのではないのでしょうか。

もちろんそれぞれのレベルで、サイエンス、モデリング、アルゴリズム、ソフトウェア、ハードウェアがあるわけで、縦糸と横糸の関係になっています。ですから、そのこと考慮しつつそれぞれのレベルで教育をすることが重要です。

e-Learning も有効です。学生たちが自習できるものをちゃんと備えておく必要があります。

メジャーとサブとか、ダブルメジャーという考え方がありますが、部局横断的な計算科学を勉強した学生には大学として正式の認定書を出すことも重要です。

私たちは今、こういう形でどういうものをつくるべきか、学外の方々とどういう形で連携が組めるかということを探っています。例えばこれは連続体力学のカリキュラム案ですが、既に開講されているものがあります。これに何が不足で、何をやらないといけないかということをそれぞれ話し合っ、不足分を全学的に開講することを考えております。

他の大学を初めとする教育機関と連携し、人材養成のネットワークをつくり、できることなら遠隔講義とか演習とかを活用し、あるいは e-Learning 教材などお互いに交換し、単位・資格認定の相互乗り入れを可能にしたいと思ひます。演習用コンピュータも場合によっては相互乗り入れし、教育人材の交流も図りたいと考えています。ぜひ日本全体で計算科学の人材育成ネットワークをつくりたいと思ひています。

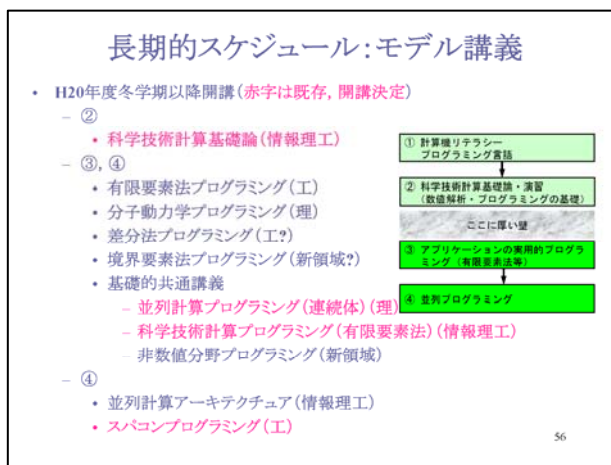
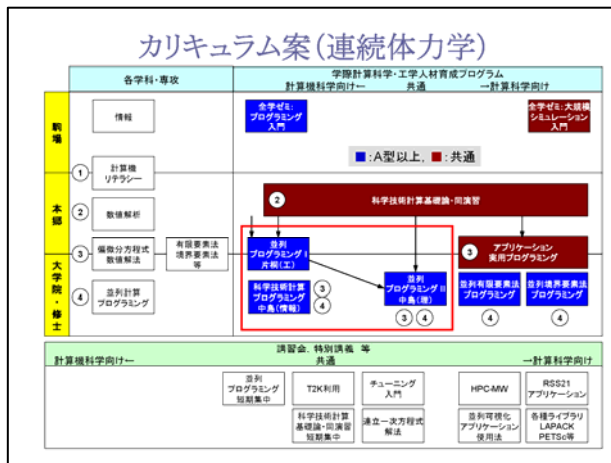
次世代スパコン施設が神戸にできるわけですから、ここに人材育成を担う機能をぜひ備えて欲しいですね。神戸拠点日本全体でつくる人材育成ネットワークの中核になって欲しいと思ひています。

もう1つ、すぐれた先端的ユーザー、分野を掘り起こすことは重要ですし、これまでコンピュータを見向きもしなかった人たちへの教育が重要です。次世代スパコンができたなら、その成果をぜひわかりやすい形で小中学生にも発信できるような仕組みも必要でしょうし、日本だけでなく、国際的な共同研究の推進も重要だと思ひます。

### 質疑応答

(フロア1) サイエンスはこうするという大きい絵を描いていただいで、大変元気づけられました。情報教育を担当している私としては、もう1つ、文部科学省から企業に役立つ人材を育てろという大きい課題が与えられていまして、それが今の先導的ITスペシャリストの育成につながっているわけです。この2つは実は別個の話ではなくて、例えば先導的の場合には、経済、経営、法学の分野の人が計算機を高度に使えるかという課題で、これは科学の分野です。これを含めて、さらに大きい絵が欲しいという希望を持っているのですが、企業が必要とする人材育成と科学、工学が必要とする人材育成をどうつなげるかというお考えはいかがでしょう。

(平尾) 実は産業界の方々ともしそういう話はしょっちゅうやらせていただいでいるんですが、大学の枠を超えて、いかに人材育成をするのかというのは重要なことです。どういうところから手がけていったらいいのか、今のところ、まだなかなか難しく、まず学生たちを中心とするプログラムをつくって、その中にいろんな形で取り込めるような形で、輪を広げていきたいと思ひております。



(フロア1) 私からのコメントですが、実はこの問題は根が深いのは、両方とも文部科学省から来ている課題ですが、原局が違います。ですから、逆にそちらの方の政策面でも、もうちょっと調和をとっていただきたいということは感じるところです。

## 5. ポスターセッション・インデクシング

(高田) 本ポスターセッションは、次代を担う世界水準の人材育成を目指して、学生や若手の研究者、技術者の研究活動をエンカレッジするために、昨年度より始めております。

ことしは 40 件強の応募をいただき、書類の事前審査によって 31 件を選考しました。きょう、これからインデクシングをし、午後のポスターセッションで審査を行います。1 件辞退された方がおりますので、30 件の審査をお願いします。

ポスターの審査をしていただきます先生方をご紹介します。

審査委員長の工学院大学 教授情報学部長・教授、小柳義夫先生です。

審査委員の東京工業大学 大学院理工学研究科 教授、斎藤 晋先生です。

筑波大学 計算科学研究センター長・教授、佐藤三久先生です。

理化学研究所 基幹研究所 先端計算科学研究領域 システム計算生物学研究グループディレクター、泰地真弘人先生です。

お茶の水女子大学 大学院人間文化創成科学研究科 教授、鷹野景子先生です。

東京大学 大学院情報理工学系研究科 准教授、中村 宏先生です。

東北大学 流体科学研究所 教授、藤代一成先生です。

宇宙航空研究開発機構 研究開発本部数値解析グループ長、松尾裕一先生です。

慶応義塾大学 医学部薬理学教室 教授、安井正人先生です。

東京大学 大学院工学系研究科 教授、吉村 忍先生です。

以上の 10 名の先生方で審査をいただき、最優秀賞 1 件、優秀賞 2 件を選定していただきます。この受賞者 3 名のうち、参加可能な方は、11 月に米国オースティンで行われる SC08 にレポーターとして派遣する予定になっております。

また、会場の一般の方々の投票によりまして、特別賞を用意しておりますので、ぜひとも皆様方には投票をよろしくお願ひしたいと思います。

では、早速インデクシングを始めたいと思います。



### P-01 「第一原理荷電表面計算法による TiO<sub>2</sub> 表面の光誘起親水性メカニズム解析」

梶田 晴司 (豊田中央研究所)



TiO<sub>2</sub> の光誘起親水性メカニズムは、光生成 Hole による正荷電により表面で水が反応し、OH 基が増加して親水性表面になると考えられています。私は第一原理計算によりこれを検証、解析しました。まず、新規の荷電表面計算法を考案しました。この方法は、荷電表面を高精度にシミュレートし、容易に第一原理のプログラムに適用可能です。アルミ表面でこの方法を適用したところ、金属特有の遮蔽特性を見事に再現しました。次に、TiO<sub>2</sub> の正荷電表面における水分子の吸着反応を考察したところ、既存モデルにある OH 基増加モデルを実現しないことがわかりました。一方、表面上の水が正荷電によって H<sub>3</sub>O<sup>+</sup> に変化する新しい反応を見つけました。次世代スーパーコンピュータなどによる水分子の時間発展計算などで、そのメカニズムの解析をより詳しく行い、高効率の光誘起親水性材料や濡れ性変化による摩擦材料、電池などの新規材料を、原理原則に基づいて開発していきたいと考えております。



## P-02 「粒子シミュレーションに見る宇宙空間で発生する大規模渦」

中村 琢磨 (宇宙航空研究開発機構・宇宙科学研究本部)



本研究では、宇宙空間に発生する流体的な大規模渦を、粒子シミュレーションを用いて再現することに成功しました。宇宙空間では、粘性の極めて低いプラズマで満たされているので、乱流的であり、渦が普遍的に存在すると考えられています。宇宙プラズマは、流体的なマクロスケールと粒子的なマイクロスケールが不連続に影響し合うという特異な性質がありますので、渦の理解には、粒子スケールも解像する必要があります。そこで我々は、PIC法を用いた2次元の粒子シミュレーションを行いました。その結果、渦の成長に伴って磁気リコネクションというプラズマ特有の爆発現象が粒子スケールで発動することで、渦が大きく巻き上がるという結果が得られました。さらに、磁気リコネクションの特徴であるプラズマの混合や加速が、渦の内部で大規模に見られるということがわかりました。

## P-03 「分子動力学計算による気泡生成過程の研究」

鈴木 将 (名古屋大学 工学研究科)



我々は、現在、沸騰現象に伴う気泡の成長過程を分子動力学的に再現することを試みています。この現象は相転移に伴う気泡生成から始まって、成長過程の気泡と周りの流体ダイナミクスとのカップリングまで含んだマルチフィジックスの興味深い物理現象と考えられます。流体計算を用いて解く手法は現象論的な仮定が不可欠ですが、分子動力学的に解けば、粒子間相互作用のみでダイレクトに計算できるという利点があります。一方で、計算量が膨大になるという問題がありますが、現在成功している並列化計算から外挿すると、次世代スーパーコンピュータを用いれば1兆粒子規模の計算が可能になると考えています。

## P-04 「高性能計算機を用いた大規模流体解析手法の研究」

高橋 俊 (東北大学 大学院航空宇宙工学専攻 中橋・佐々木/松島研究室)



研究目的は急速に発展を遂げているスーパーコンピュータを十分に生かすことのできる流体解析手法を構築することです。Building-Cube法は多数の立方体を用いて計算する空間を分割する手法で、この手法を用いると、このような複雑なモデルに対しても、3億点という大規模なメッシュをわずか3分程度で作成することができます。NECのスーパーコンピュータSX-9を用いて、Formula-1周りの大規模流体解析を行い、本解析手法の性能を検討したところ99.8%のベクトル化率で256CPUを用いたMPI並列計算にて130倍の速度向上率を確認することができました。今後は、より高効率、高精度な計算手法の研究を進めていきたいと考えています。

#### P-05 「時間依存平均場理論に基づく原子核大振幅集団ダイナミクスの研究」

日野原伸生（京都大学 基礎物理学研究所）



私は原子核構造の研究をしています、特に原子核における大振幅集団ダイナミクスに興味を持っています。これは原子核の形が大きく変わる現象で、例えば核分裂現象もそうですし、変形共存現象といわれる複数の変形状態が安定に存在する核においては、トンネル効果が起こることによって、古典的に形が定まらない、形を定義することができないような原子核があります。こういうものも大振幅集団ダイナミクスを示します。そもそも原子核は陽子と中性子から成る量子多体系ですので、多体問題を解くことによってその記述は可能なはずですが、多体の基底数は非常に膨大な次元を持っていて、これを解くのは非常に困難です。我々は、この膨大な多体の基底の中から本質的に重要な自由度を抜き出す理論を完成しました。これを変形共存現象に適用した結果をポスターでお見せしたいと思います。

#### P-06 「適合格子細分化法を用いた超並列マルチスケール・プラズマ粒子コードの開発」

沼波政倫（京都大学 生存圏研究所）



我々が注目しているプラズマ物理現象は、電子運動スケールから全系スケールにわたるマルチな広いレンジスケールが舞台になっている現象です。このような物理現象に対して、従来、プラズマ粒子法を用いて計算してきましたのですが、従来法は計算空間に均一な計算格子を細かく切らなければいけないという理由等で、非常に膨大な計算機資源が必要でした。我々は、近年数値流体計算でよく用いられる適合格子細分化法とプラズマ粒子法を融合させることで、マルチスケールにわたる現象に対するプラズマ粒子シミュレーションを可能にしようと試みております。このコードによって大幅な計算機資源を節約することができました。ポスターでは、さらに負荷バランスを考慮した超並列環境に向けた取り組みとか、このコードによるさまざまな分野への応用について議論をさせていただきます。

#### P-07 「feram コードによる強誘電体薄膜キャパシタのヒステリシス・ループの超高速分子動力学シミュレーション」

岩本昌也（東北大学 金属材料研究所 計算材料学研究部門）



I am showing you two characteristic properties of ferroelectrics, spontaneous polarization and piezoelectric effect. Due to the spontaneous polarization, you will observe domain wall and hysteresis loops. Purpose of this study is to reveal hysteresis loops, polarization switching and dynamics of domain wall motion. However, long-range dipole-dipole interaction makes it difficult. To solve this problem, we introduced new periodic boundary conditions effective and the calculation of deposits, advanced molecular-dynamics method, parallel computing. In this poster session, I am showing you a snapshot of dipole and hysteresis loops. From such simulations, we can predict thickness, temperature, and metal electrode or property of ferroelectrics.

#### P-08 「地球放射線帯電子の生成過程についてのプラズマ粒子シミュレーション」

加藤 雄人（東北大学 大学院理学研究科惑星プラズマ・大気研究センター）



放射線帯は、光の速度の 99%に至るまで加速された高エネルギー電子によって構成されている領域で、人工衛星の異常を引き起こす要因となるなど、宇宙空間での人類活動の妨げとなることが知られています。私たちは、特にこの放射線帯がどのように作り出されているのかに着目して研究を進め、近年プラズマ粒子シミュレーションを大規模並列環境で実行することにより、放射線帯の中心部を模擬することが初めて可能となりました。シミュレーション結果では、放射線帯の電子の加速過程を担うカギとなるプラズマ波動が自然に発生する様相と、その発生したプラズマ波動によって、電子が高効率に相対論的エネルギーにまで加速される様相を、世界で初めて再現することに成功しています。この加速過程は、地球に限らず、さまざまな天体で見られる加速過程を説明し得る可能性が指摘されており、今後は、科学衛星計画などによって得られる直接観測の結果とシミュレーション結果とを突き合わせた実証的研究を進めてまいりたいと考えています。

#### P-09 「中性子過剰不安定核に対する量子多体計算」

吉田 賢市（理化学研究所 仁科加速器研究センター）



理研の新加速器 RIBF が稼働すると、原子核の世界は、安定核から中性子過剰な不安定核の世界へと大きく広がっていきます。広い質量数領域にある原子核の量子構造を、微視的かつ統一的な枠組みで記述するために、現在、理論化に励んでいます。今回は、Skyrme エネルギー密度汎関数法を用いた中性子過剰核に対する量子構造の記述に関して発表します。変分原理を通じて得られる Skyrme HFB 方程式を有限差分法を用いて離散化し、2次元の lattice 上で波動関数を記述します。さらに、中性子過剰核におけるユニークな励起モードを記述するために、ここで得られた波動関数を用いて RPA 方程式を構築し、これを対角化して、励起モードの性質を議論します。この RPA 方程式はノンエルミートですので一般化固有値問題として解き、励起モードの微視的構造及びそのメカニズムを議論していきます。今後、計算機能力が発展したらどのような計算ができるかということについても、あわせて議論したいと思います。

#### P-10 「タンパク質膜透過 Sec トランスロコンの分子動力学シミュレーション」

森 貴治（理化学研究所）



たんぱく質が細胞内でどのように運搬されるのかは、生命現象を理解する上で非常に重要です。真核生物の場合、DNA 情報をもとにまずメッセンジャーRNA が合成され、そこにリボソームが結合することにより、たんぱく質が合成されます。特に細胞の外に分泌されるたんぱく質は、この後、小胞体の膜に存在するたんぱく質膜透過装置、Sec トランスロコンに結合し、そこでたんぱく質が小胞体の内部に押し込まれて、最終的にゴルジ体を経て、細胞の外に分泌されていきます。近年、東大の濡木教授らによって、世界で 2 例目となるトランスロコンの結晶構造が X 線実験により決定されました。我々のグループでは、世界に先駆けてこのトランスロコンのシミュレーションを行い、チャネルパートナーとの結合により実現されたプレオープン構造から、単体で安定なクローズド構造への構造変化の観測に成功しました。ポスター発表では、このトランスロコンの構造変化のメカニズムについて詳細に議論いたします。

### P-11 「アルツハイマー病に関わる膜蛋白質 APP の膜貫通部位の二量体化構造」

宮下尚之（理化学研究所 次世代計算科学研究開発プログラム 分子スケールチーム）



この研究は、コンピュータを使いアルツハイマー病のメカニズムを解明しようという試みの 1 つです。アルツハイマー病の進行過程では、老人斑の形成と細胞死という 2 つの過程が起こります。今回はこの過程の初期過程に注目しました。A $\beta$  ペプチドは、神経細胞の膜にあるアミロイド前駆体たんぱく質（APP）から生成されます。この APP は膜中で二量体化しています。最近の実験では、アミノ酸をたった 2 つだけ変えた変異型では、A $\beta$  ペプチドを生成しないということがわかってきました。この理由を探るために、野生型と変異型の二量体構造の予測をしました。計算は、並列化効率とサンプリング効率により、レプリカ交換分子動力学法を用いました。その結果、野生型では、2 つのペプチド間で特異的な水素結合をしている一方で、変異型では、酸化の疎水性相互作用で結合しているということがわかりました。この二量体化の原動力の違いが、A $\beta$  ペプチドの生成に影響を及ぼしているということがわかりました。

### P-13 「格子量子色力学を用いたメソン・バリオン結合定数の研究」

高橋 徹（京都大学 基礎物理学研究所）



原子核は陽子や中性子できているわけですが、この性質を決めるのは陽子や中性子の間に働く核力で、この核力は、湯川秀樹の中間子論の言葉でいえば、その間で $\pi$ 中間子などの中間子がバーチャルに交換されることによって引き起こされるといわれています。つまり、原子核などの系は、陽子や中性子など、バリオンやメソンの多体系です。しかし、この多体系の相互作用は中間子論の枠内では説明することはできません。そこで、我々はそのもう一段奥の階層、クォークやグルーオンの世界に対する第一原理計算を、量子色力学、スーパーコンピュータを使って解析しました。具体的なターゲットは、陽子や中性子などに加えて、第 2 世代であるストレンジクォークを含むハドロン、これらの相互作用を研究しました。これらの相互作用は、中性子内部での状態方程式やブラックホール形成過程などにも影響して、非常に重要な役割を果たすと思われています。

### P-14 「オイラー型統一解法による固体－流体連成解析手法」

中尾賢司（広島大学 大学院工学研究科）



医療支援のツールとして、患者個人個人の人体データに対して生体力学シミュレーションを行うことは非常に重要な意義を持っています。通常、患者の人体データは CT や MRI から得られる医療画像から生成します。本研究は、この得られた CT や MRI 画像を直接モデリングとして、生体力学シミュレーションを行うことを目的としています。そのために、CT や MRI のデータ形式であるボクセルデータと相性のよいオイラー型解法を用いて、スキームの展開を行っています。ポスターでは、オイラー法をベースとしたスキーム、固体－流体連成解析手法の方法を紹介しています。これはまだ開発中のスキームであるため、実用的な大規模計算は実施できていないのが実情ですが、今後の展望も含めて報告したいと思っています。

#### P-15 「低温領域に対応した新しい動的密度行列繰り込み群法」

曾田繁利（京都大学 基礎物理学研究所）



これまでの密度行列繰り込み群法で計算の難しかった低温領域を効率的に計算する計算手法を開発しましたので、その報告をします。密度行列繰り込み群法は数値繰り込みの方法で、ターゲットとなる状態を最適に再現するための情報圧縮を行います。そこで、本研究では、有限温度の物理量を計算するのに適したターゲット状態を選択し、このターゲット状態を直交多項式展開法によって効率的に計算します。行列を各 CPU に分割することによって、大規模行列の取り扱いを可能にします。そして、密度行列繰り込み群法の手法に従って数値繰り込みを行い、最後に物理量の計算を行います。計算のインプットとなるベクトルにランダムネスを導入し、物理量の平均をとることによって、さまざまな物理量の計算を可能にします。本手法は簡便で、周波数に依存する物理量の計算も可能です。周波数に依存する電流-電流相関関数を計算した結果、低温領域で直接対角化による厳密解を完全に再現することができました。

#### P-16 「GRAPE-6 を用いた三次元プラズマシミュレーションによるパルサー磁気圏の大局的構造の解明」

和田智秀（山形大学 理工学研究所）



かに星雲は 1032 ワットに及ぶ膨大なエネルギーを開放する星雲で、内部にはブラックホールに次ぐ高密度天体である中性子星が、周期 33 ミリ秒という極めて速い速さで回転しています。この中性子星の近傍からは電磁波がビーム状に放射されており、我々はこれらをパルスとして観測します。このような天体パルサーの発見は 1967 年で、40 年以上たった現在でも、パルサーの持つ膨大な回転エネルギーがどのように星雲に向かって開放されているのか理解されておりません。この問題解決には、磁気圏のプラズマのダイナミクスと電磁場をコンシステントに解く大規模なシミュレーションが必要です。我々は、重力多体系専用計算機 GRAPE-6 をプラズマのシミュレーションに応用することにより、この計算を実現し、活動的な性質を示すパルサー磁気圏の存在を初めて示すことに成功しました。今後は、さらに大規模化した計算により詳細な調査を行うとともに、他の天体における未解決の問題への応用を模索していきたいと考えております。

#### P-17 「高分子系の粗視化分子動力学法の超並列大規模コードの開発」

萩田克美（防衛大学校 応用物理学科）



我々の目的の 1 つは、革新的なタイヤをつくることです。CO<sub>2</sub> 排出の 3% をタイヤが担っています。この低減は、計算機で予測するという領域に入ってきています。そういう中で我々は、摩擦、摩耗とか燃費に関係するところを微細に知りたいのです。そのために計算機シミュレーション及び Spring-8、J-PARC といった大型施設を使っていくことが重要であると考えて、超大規模なシミュレーションを可能にするスキーム及び仕組み、いわゆる道具立てを完全につくりました。これは欧米に比べて、一歩先に出ています。我々は次世代スパコンを使って、タイヤの中にあるゴムの高分子と大きなナノフィラーがつくる複雑な物理のサブマイクロスケールでの材料開発、いわゆるデジタルエンジニアリングを実現したいと考えています。

#### P-18 「数値細胞モデルからの心筋細胞収縮力を用いた左心室拍動の流体・構造連成解析」

熊畑 清（北陸先端科学技術大学院大学 情報科学研究科）



我々の目的は、医療用の CT や MRI などの画像を用いて再構成した実際の患者の形状を用いた血流シミュレーションを行い、より高度な医療を提供する一助となることです。収縮、弛緩を繰り返す心臓内の複雑な血流を 3 次元的に測定することは非常に困難です。そこで、我々は、心臓内血流のより高度な理解を得るために、心臓の収縮及びそれによって発生する血流の連成シミュレーションについて検討を行っております。心臓の収縮を再現するために、測定された心臓の変形のデータなどを用いず、心臓を構成する心筋細胞の数値モデルにより計算された心筋細胞収縮力を用いて心臓を変形させ、それによって血流を発生させるという、測定データを使わない第一原理的な計算を行っております。今回、非常にシンプルな形状ではありますが、心臓のエッセンスを抽出した形状に対して以上の方法を用いて、まだ定性的ではありますが、心臓内の血流の再現をすることができましたので、ポスターで発表させていただきたいと思っております。

#### P-19 「新奇ナノ炭素物質創製のための大規模並列探索シミュレーション」

牧野浩二（高度情報科学技術研究機構）



ナノテクでは、新物質の生成経路の発見が重要なかぎとなっております。そこで、その経路を探索する大規模シミュレーションを開発しました。炭素物質中の原子間結合では、高温高圧になると結合が組み変わり、ねずみ算式に新しい物質が生まれます。この中から安定な物質やそれに至る経路を軌道エネルギーをもとに探索するには、大規模な計算が必要となります。例えば固有値計算を 32 億回、1700 万通りの候補から経路を選ぶといったぐあいで、高性能なスパコンが必要となります。地球シミュレータを用いた例では、約 4000 個の CPU を用いて、9 テラ FLOPS で、90 分で探索できました。これを応用して、磁石や半導体の性質が予言される新物質であるマッカイ構造の生成経路を世界に先駆けて発見しました。今後、次世代スパコンになれば、さらなる未知の新物質を発見できることと考えています。

#### P-20 「高解像度海洋生態系－水産資源モデルによる地球温暖化の影響予測」

橋岡豪人（地球環境フロンティア研究センター／海洋研究開発機構）



本研究では、気候モデルによって予測された温暖化の物理場を使って、海洋の生態系、水産資源が温暖化に対してどのように応答するのかということ、数値シミュレーションによって研究しております。物理環境の変化に伴って、物質循環、生態系は複雑に絡み合って変化します。したがって、どういうプロセスが、どういう海域、季節によって重要なのかを理解する必要があります。そこで、本研究では、これまで別々の分野で開発されてきたモデルを結合し、1 つの統合的なフレームワークを構築しました。一番の特徴は、従来の研究では実現できなかった高解像度のモデルをつくることによって、地域的な影響評価がようやく可能な段階に入ってきたということです。実験の結果は、ポスターで紹介させていただきます。

### P-21 「ベクトルプロセッサ用キャッシュメモリによる MSHR の性能評価」

佐藤義永（東北大学 大学院情報科学研究科 小林研究室）



演算性能当たりのメモリバンド幅である B/flop は、物理的制約によって年々低下しており、その影響で実アプリケーションでの実行効率が低下しています。そこで、私たちの研究では、B/flop の低下の影響を緩和するために、ベクトルプロセッサにキャッシュメモリを設けました。さらに、キャッシュヒット率の向上を目的として、Miss Status Handling Register (MSHR) を設けました。性能評価では姫野ベンチマークを用い、問題サイズやキャッシュサイズごとの実行効率や、MSHR の有効性について評価しました。結論としては、2B/flop のシステムで 4B/flop と同等の実行効率を達成しました。また、短ベクトル時においても、メモリアクセスレイテンシの短縮により、実行効率の向上が得られることがわかりました。ベクトルキャッシュはペタ FLOPS 級の計算においても高い実行効率を達成するという目標に対し、大きなブレークスルーを与える技術です。

### P-22 「並列化密度行列繰り込み群法による光学格子中フェルミ原子気体の解析～高温超伝導へのアプローチ～」

奥村雅彦（日本原子力研究開発機構 システム計算科学センター）



高温超伝導体は発見されてから 20 年以上たちますが、いまだに室温超伝導は得られていません。それは、高温超伝導の機構解明がいまだになされていないからです。一方、最近、レーザーと原子を使い、個体と同等の系をつくることに成功しています。この系は、個体と違って、人間が物性をコントロールできるという非常にすぐれた特性があり、物性を調べて高温超伝導のなどに迫ろうという実験研究がなされています。高温超伝導の舞台である 2 次元系はシミュレーションが非常に困難でしたが、我々は、1 次元系で成功をおさめている密度行列繰り込み群法を、オリジナルルーチンを用いて初めて並列化に成功し、そのルーチンによって 2 次元系を調べていくという研究をしました。そこでは新しいペアリングとか、新しい磁性という、今までの計算方法では得られなかった、世界で初めての結果が得られています。

### P-23 「地球規模を指向した大規模マルチエージェントシミュレーションの実現」

森下仙一（関西大学 大学院総合情報学研究科）



近年、環境政策にマルチエージェントシミュレーションを利用することが試みられています。国際的な視点から議論するためには、地球規模のシミュレーションを実施する必要があり、地球規模の情報の取り扱い、世界人口規模のエージェント意思決定処理の取り扱いが問題になります。これらの問題を解決するためのプログラミングモデルの確立を行うのが、本研究です。我々のプログラミングモデルは、マスタ、ワーカとメッセージパッシングを組み合わせています。環境空間情報を複数のマスタプロセッサで分割配置し、大規模な記憶領域の確保を行います。そしてマスタプロセッサの部分でマスタ、ワーカを利用したエージェント意思決定処理の並列実行を行っています。

#### P-24 「仙台空港における後方乱気流の計測融合シミュレーション」

三坂孝志（東北大学 流体科学研究所）



飛行機が空中を飛ぶと、その後方に乱れた流れ、後方乱気流が生じます。特に空港で離発着時に強い後方乱気流が生じて、空港での離発着間隔の制限となっています。さらに効率的な離発着を行うためには、後方乱気流の状況に応じて離発着の間隔を自由にコントロールする必要があります。本研究の目的は、CFD（数値流体力学）シミュレーションを用いて後方乱気流の軌道を予測し、その結果を航空管制に生かすことです。本研究では、実際の後方乱気流の計測値をシミュレーションに融合する計測融合シミュレーション手法を適用して、シミュレーションのみでは再現が難しい実環境下の現象の解析を行うだけでなく、解析結果をバーチャルリアリティによる協調的可視化によって効果的に管制官に提供するというところまで考えています。データ同化の計算コストから、現状ではかなり計算時間がかかります。4次元変分法で10回程度の反復を行った場合、実時間の1200倍の時間がかかります。

#### P-25 「第一原理計算による局所応力解析」

椎原良典（産業技術総合研究所・計算科学研究部門）



第一原理計算は、大規模な原子系を相手にする場合は計算量が非常に膨大となって、スパコンによる支援が必要不可欠です。本研究は、第一原理計算による応力シミュレーションに関するものです。応力とは、ひずみに対する応答をあらわすもので、目的は、マテリアルデザインの指針となるような応力分布から、ひずみと物性の関係を得ることです。従来の手法では、そのシミュレーションセルの全体の平均値としての応力しか得られず、応力分布としては得られません。そこで我々は、局所応力計算法を提案しています。詳細についてはポスターで発表しますが、幾つかの原子系において、物理的に非常にリーズナブルな結果を得ています。次世代スパコンのアプリケーションであるナノデバイスの設計において、その構造信頼性は必ず議論される話題ですが、本研究は、その評価に関して中核的な役割を果たすと考えています。

#### P-26 「実時間-実空間法による分子ダイナミクスの第一原理シミュレーション—大規模並列計算へ向けてのアプローチ—」

川下洋輔（筑波大学 大学院数理物質科学研究科）



我々は、ナノサイズ物質の光に対する応答を、第一原理的な手法を用いてシミュレーションしています。そもそもナノサイズ物質は、電子とイオンの性質が顕著にあらわれる系で、我々は、その電子の記述を時間依存密度汎関数法を使って量子論的に記述し、同時に、イオンに関して、古典的な方法で記述するという手法をとっています。また、イオンの力に関しては、電子の状態を考慮することによって電子ダイナミクスを記述したものとなっています。また、効率的な並列計算という観点から見ると、我々の用いている実空間法は、空間分割による効率的な並列化が可能であるといえます。我々の手法の応用例として、1つは、外場を磁気力的な形にすることによって、物質の光吸収のスペクトルを得ることができます。また、外場をレーザーパルス的な振動電場にすることにより、レーザーパルス下の分子ダイナミクスのシミュレーションをすることができます。



## P-27 「衝突銀河の超高分解能シミュレーション：スターバーストと星団形成」

斎藤貴之（国立天文台 天文シミュレーションプロジェクト）



現在の標準的な銀河形成シナリオによりますと、銀河は合体、成長を経て、階層的に形成されます。したがって、銀河同士の衝突は、銀河形成、進化過程を理解する上で極めて重要な過程となっています。このような銀河衝突は現在でもしばしば起きていて、そこでは、円盤銀河から楕円銀河へとダイナミックな構造の変化が起きます。その中では、さらにスターバースト（爆発的星形成）と、コンパクトで大変重たい星団ができることがわかってきました。このような天体现象の実験はできませんし、従来のシミュレーションでも再現できていませんでした。我々は、独自のシミュレーションコードを開発し、分解能で従来のシミュレーションを2桁上回る衝突シミュレーションを行い、そこで初めて銀河衝突時の爆発的星形成と星団形成を再現し、かつ、この過程を解明しました。

## P-28 「大規模数値解析によるロケット打ち上げ時の音響環境予測」

福田紘大（宇宙航空研究開発機構、情報・計算工学センター）



ロケット打ち上げ時には、排出ジェットから強い音波が発生します。その音波がロケット先端に搭載されている衛星を加振することから、ロケット開発においては、その音圧レベルを正確に把握することが大変重要です。しかし、これまで世界的に約30年間使われてきた予測手法では精度が不十分で、スケールモデルをつくり、検証試験を行うことが不可欠でした。そこで、我々のグループでは、大規模数値解析を行い、音響の発生、伝播現象を解明するとともに、新たな予測手法の開発を行ってきました。その結果、これまでより高精度の予測で音響現象を再現できることが確認できました。また、実機射点における音響解析を行った結果、ロケット及びロケットの射点ごとに異なる音響の発生・伝播メカニズムの解明に成功しました。現在、これらの知見を開発中のロケットの最適射点形状の評価に用いています。今後、ペタスケール計算では、衛星設計で要求される機械環境条件が、解析のみで算出できると考えています。

## P-29 「白金表面上鉄の電子状態と磁気異方性」

辻川雅人（金沢大学 自然科学研究科）



表面ナノ構造の磁気異方性のデザインシミュレーションを行いたいと考えていて、磁気記録メディアやスピントロニクスデバイスの材料として注目される鉄白金系について、密度汎関数法に基づく第一原理計算により、表面構造と磁気異方性の関係について調べました。磁気異方性エネルギーは、磁化が面内と面直のときのエネルギー差で、値が負のときに容易軸は面内、正のときに面直としております。111面を鉄で覆った系、鉄の鎖を置いた系、鉄が孤立した系、001面を鉄で覆った系、鉄の層が白金に挟まれた系について計算を行いました。白金表面の違いにより容易軸が面内と面直で全く異なっているだけでなく、表面構造の違いでさまざまな磁気異方性があらわれています。2次元表面上の1次元系ということで非常に興味深い白金微斜面段差端の鉄鎖についても磁化容易軸を見積もりました。鎖に垂直な方向で鎖に垂直な面内で調べると、表面緩和をすると-85°の実験に近い方向の結果が出てきました。

### P-30 「微粒子・溶媒・熱揺らぎの直接数値シミュレーション」

岩下拓哉（京都大学 大学院工学研究科化学工学専攻）



我々の研究対象は、微粒子分散系といって、数 $\mu\text{m}$ の小さな微粒子が水のような溶媒の中に分散している系です。身近では、牛乳や乳製品や化粧品などが挙げられます。微粒子分散系の流動挙動を理解・予測することは、工学的・基礎科学的立場から大変重要にもかかわらず、その振る舞いは非常に難しいために現在でも十分な理解に至っておりません。我々は、この微粒子分散系に対して、Smoothed profile 法といわれる新規なシミュレーション法を開発しました。この手法は、溶媒と微粒子を同時に解くという連成問題に対し、物理的に正しく、さらに効率のよい計算を可能にした新しい計算手法です。この手法を、せん断流下のレオロジーの問題と、重力を受けている沈降粒子の問題という、2つの工学的に重要なプロセスに適用しました。また、さらに大規模な計算をするために並列化を行い、これまで計算されていないような大きな計算をしています。

### P-31 「ソフトマターに対するハイブリットシミュレーション法のモデル」

安田修悟（京都大学工学研究科 化学工学専攻）



ソフトマターとは、高分子やコロイド、液晶といったやわらかくて変形しやすい物質を総称する言葉です。こういったものは我々の身近に多数あるわけですが、通常の流体シミュレーションでは扱っていない複雑なレオロジー現象や、分子シミュレーションに対してはスケールが大き過ぎる特徴的な大規模協調運動があるために、現状では、有効なシミュレーションがなかなか難しいという問題があります。そこで我々は、局所サンプリング法という流体シミュレーションと分子シミュレーションのハイブリット法の開発に取り組みました。アルゴリズムについて1点だけ特徴を挙げますと、我々の方法では、多数のMDを流体の各タイムステップに置いて一斉に同時に計算するので、ベクトル演算子による超並列計算機に対しては、ほぼ理想的なパフォーマンスが達成できると期待しています。したがって、次世代のスパコンへの有力なアプリケーションの1つになると考えております。

## 6. テーマ別セッション（分科会）

### 6.1. 分科会 A :

「次世代の産業界をリードする人材の育成を目指して」

日時 2008年9月16日（火）14:30～18:00

会場 MY PLAZA 会議室 6・7

モデレータ：加藤 千幸（東京大学 生産技術研究所副所長・教授）

パネリスト：賀谷 信幸（神戸大学 大学院工学研究科 教授）

善甫 康成（住友化学株式会社 筑波研究所 上席研究員）

田中 和博（九州工業大学 情報工学研究院長・情報工学部長）

中村 道治（株式会社日立製作所 取締役）

吉岡 信和（国立情報学研究所 GRACE センター 准教授）

加藤 千幸（東京大学 生産技術研究所副所長・教授）

5名のパネリストの方、学は3人、産は2人です。産の方は主に会社で、あるいはご本人が計算科学シミュレーションを強力に推進され、深い知見等をお持ちの方をお呼びしております。学の方は、最近文部科学省等の大学院改革、IT関係の教育プログラム、人材育成プログラムの事業を担当されている方にお集まりいただいております。

グローバル化の中で国際競争に勝つためには、産学が強力に連携した人材育成が必要です。ただ、人材育成といっても、大学で輩出している人材と産業界が求めている人材は乖離しているのではないかと、産業界は大学での人材育成に期待しているのかいないのかをも含めて明確にしたいと思えます。

このパネルの目的は、計算科学分野において、次世代の産業界をリードする人材を育成し、産業界の国際競争力強化に資することですが、経験上、人材育成の議論をしていると、必ず議論が散漫になります。散漫になる一番の原因は、バウンダリーコンディションを明確に定義しないで議論を始めるからだと思えます。

計算科学の人材といっても、ありとあらゆる人がいるので、ここでは議論の対象を計算科学シミュレーションに基軸を置きます。ですが、大規模なデータのハンドリングやネットワークも大事なので、その周辺技術も含めます。計算科学シミュレーションの人材といっても、ソフトウェアを開発する側と利用する側がありますが、あくまでも産業界への出口を見据えた議論を展開していただきます。また、人材を育成した後のキャリアパスとか処遇に関しても議論に含めます。育成する対象ですが、あえて高等教育に限りませんでした。主に大学院や学部等、あるいは社会人になった人たちの人材育成とします。

前半の議論は、産業界が期待する人材像や、企業の中でそのような人材を育てるためにどのような教育をしているか、大学に対する期待、要望をお聞きできればと思います。それを受けて、大学側で取り組んでいる人材育成の実例をご紹介します。

後半の議論は、誰を対象に育成するか、育成する人は具体的にどのような素養を持っておくべきか、いつ教育するかです。大学では何をやって、あるいは産学連携で社会人に対して何をやるか、誰が教育するか、どのように教育すべきかの議論を進めていきたいと思えます。

中村 道治（株式会社日立製作所 取締役）

私は企業の立場でお話しさせていただきます。スーパーコンピューティング技術産業応用協議会の副会長をここ2年半ほどやっているのですが、その関連のこともお話ししたいと思います。

産業界においてシミュレーションをもっと使うべきだということは、私自身もこの10年来いい続けてきました。自分の会社においても、一部の、特に電力機器等やっている機械系の者、半導体で一部、TCAT等で使ってきた





したが、なかなか広がらない。人がいなくなると、そのグループが知らないうちになくなってしまうということで、これは何とかしたいと思っていました。現在、産業界で取り組んでおります製品とかシステムを見ると、高度シミュレーション技術はその製品システムの信頼性を高め、世の中に先駆けて製品を出すことにも不可欠ではないかと思えます。

シミュレーションは会社の中でも少しずつ認知されるようになってきています。最近ですと、例えばエネルギー分野の燃料電池の開発では、電極材料あるいは電解皮膜等については材料あるいは化学の専門家が試行錯誤するのですが、第一原理から電極材料の最適化を実際やってみると、実に計算とよく合います。解析主導型設計を、従来の機械系のみならず、エレクトロニクス系の事業、あるいはそれ以外の幅広いところにも使っているという状況にあります。私の周りでは、シミュレーションを使うのは大体認知されたと見ておりますが、本当にそれを戦力として使うという意味では、人材の育成を含めて、これからもうワンステップ飛躍が要るのかなと思っております。

企業における課題と人材育成の必要性ですが、これからのものづくりでグローバル競争に勝つために、性能とかコストとか信頼性とかタイム・ツー・マーケットが非常に大事です。単に性能とかコストだけではなくて、省資源・省エネルギーで、かつ性能を上げる、そういう新しい研究開発のパラダイムが今求められています。対象が非常に複雑化してきたことで、複雑・複合現象を取り扱います。シミュレーションをやって、それを解析し、理解し、活用できる、応用できる人が産業界の場合には必要です。

ここで少し違う観点を入れたいと思います。シミュレーションというのは、あるモデルを仮定して、メッシュを切ってやれば、その結果は出て、それをきちんと表示すると、一見正確な解が出たように我々はすぐ思ってしまうのですが、そうはいかない。第一原理法で実際計算しても、モデリングあるいは方法によって違う結果が出ます。確立された分野では、何もかも決まっていると思われるかもしれませんが、そういうことではないということをする必要があると思います。私が最近、読んだ本で、E・S・ファーガソンが1995年に出した『エンジニアリング・アンド・ザ・マインズアイ（技術屋の心眼）』では、過去の設計の不具合とか事故とか事例を分析してみると、心眼がもっと必要なんじゃないか。心の中であるイメージを持ち、そのイメージから見て何かおかしいというような計算結果はやっぱりおかしいということを言っておりました。物理的イメージを持ってシミュレーションする観点が非常に大事であるということで、相通ずると思います。

これからの技術者は、理論とか実験とかシミュレーションを活用し、過去の知識の蓄積の上に仕事をやっていくわけですが、特にシミュレーションを軸足に置く技術者にとっては、2つの点が重要ではないか。1つはモデリング技術で、モデルの限界とか近似の階層をよく理解してもらおう。もう1つは、大規模な解析データからいかに役立つ知見を抽出するか、この面でも深い技術、知識が必要で、モデリング理解と情報分析・解釈を極めることが完成度の高い設計だと考えます。

企業では、既に大学である程度の技術を身につけた方を迎え入れているわけです。必ずしも全部の技術ができることを期待しているわけではありませんが、ある分野を極めてここに挙げたような技術もある程度理解できる方を期待したいと思います。

最後の提言ですが、先ほどの心眼の話も含めて、企業と大学・国研が互いに交流しながら教育するシステムが有効ではないかと思えます。その中で技とか体験とか喜びを企業から伝えることができますし、大学・国研から新しいコンセプトとか革新的研究を教えていただくことができます。もう1つは、異分野融合の共同研究開発の場を国として設けて、いろんな分野の人が集まって切磋琢磨することが非常に有効ではないかと思えます。

シミュレーションを産業界に定着させたいということで、産応協は国で開発されたソフトウェアを民間でいかに普及させるかという活動を現在やっています。そういう面でも産業界としてはお役に立ちたいと思っています。

（加藤） シミュレーションの適用や結果の解釈に対する心眼が必要であるというご指摘、さらには計算だけではなく、計算機や情報、計測等の学際的な連携も必要であるということでした。具体的な提言としては、相互教育システムと共同研究の場がポイントになるかと思えます。

先ほど重要な点として、モデリング技術と知見の抽出技術、特に設計に生かすための知見の抽出技術というの

がありました。既存のプログラムを使うという意味でのモデリングもあるし、自分でソフトウェアをつくるというモデリングやプログラミング技術もあると思うのですが、企業としての立場だと、その2つはどのようなプロポーシオンでしょうか。

(中村) 私どものところですと、機械系のシミュレーションについては、かなり世の中で完成されたシミュレーションをいかに使いこなすか。ただし、複合現象、連成解析ということではソフトウェアの開発も含まれますが、個々の要素についてはかなりエスタブリッシュされたものを使うことが多いのではないかと思います。

それに対して、例えば加藤先生が東大生研でやっておられるような、あるいは分子研、理研でもやられるような新しい分野については、国研・大学で開発されるのを待ちながら、我々自身もそこに参加して、ソフトウェアの開発までやろうとしているところです。

#### 善甫 康成 (住友化学株式会社 筑波研究所 上席研究員)



私は、今まで私がやってきた材料で、自分の経験に基づいて、身近なところから考えてみたいと思います。特に、いかに材料を早く開発するかという観点から、有機 EL を例として、産業界がどのような人材が欲しいかということをご紹介できればと思います。

今、液晶ディスプレイは、平面ディスプレイとしては非常にたくさん出ています。こういった平面のものはかなり多層になっています。発表資料には簡単に5~6層で書いてありますが、光学的に見ると実際には30から40の層からできています。代表的なものは偏光フィルム、液晶、あるいはカラーフィルターですが、これらは非常にエネルギーの利用効率が悪く、ランプから出るエネルギーの大体2~3%くらいしか使っていません。ですから、効率よく、あるいは安く大きなものをつくらうとすると、できるだけ簡単な構造が良いわけです。

こういったものを横から見ると何も見えないのですが、自発光のものは横からも見ることができます。そういう意味で、有機 EL は非常に期待が持てると思います。特に私たちが開発している有機 EL は高分子タイプです。高分子ということはインクにできます。インクにできるということは、塗れるということです。塗ることができれば、部屋の中あるいは天井、床に塗ることができるのではないかと。そうすると、東京にいてハワイを楽しむことができるはずで、これをやるのが私の夢です！

発光材料ですから、光のどんな色が出てくるかということが重要です。右上にあるのが最初に有機 EL になりそうな高分子材料です。PL でプラスチックが光って見えます。それを使って最初に試験的につくってみた素子が「SC」という青いものです。しかし、これはこの材料のままでは使えません。こんな薄い青だったら、いい色にならない。もっと深い色が欲しい。いろいろシミュレーションし、その結果を材料の改良にも反映してきて、色が大分深くなってきたのがおわかりいただけると思います。

このような成果が現れてくると、言い換えれば、大体先が見えてくると、大きなシミュレーションをすることができます。しかし、実際の開発には20年以上もかけてやっています。材料開発というのはこんなに長い時間がかかるのです。その中でいかに速くやるかということで、計算機を使う意味が出てきます。

ただ、開発のプロセス、シミュレーションして、デザインして合成して、構造解析して、特性評価して、こういうことを順番にやっていったら、スピードがついていきません。これでは役に立ちません。そこで、普通の企業なら、プロジェクト体制をつくり、一緒にやります。かなり議論して進めますので、材料のセンスも当然つてきます。こういった工夫をしないと、とても間に合わないのです。

ここに描いた図が、いわゆる開発の山です。最初に着手する段階で重要になってくるのは概念とかイメージ、どちらかというアイデアが重要な段階です。ある程度方向性がわかってくると、そのメカニズムとか制御因子は何だろうとなってくると、先が見えてきて、もうこれに投資してもいいという判断ができるわけです。多数の解析や計算など、しなければならぬことが急に増えてきます。しばらくすると、今度は製品の質を上げるというふうに変化してくる。そうすると、精度は上げなければなりません、しなければならぬ解析などの仕事や計算量は減ってくるので、このような形になろうかと思います。

我々材料屋は着手段階の期間が非常に長い。有機 EL が 20 年以上かかっているときましたが、化合物半導体のエビの事業でも 17 年から 18 年、あるいはエンジニアリングプラスチックですと 20 年近くかかります。ですから、シミュレーションを使って着手この山を越えるまでをできるだけ前へ持つてくるのが重要ではないかと思ひます。

私が欲しいと思うのは、(中村さんのお話の中にあつた)心眼を持った技術者、材料の感覚を持った人です。私は、企業で求める人材はいわゆる T 型の人材かなと思ひます。T 型とはある分野だけでなく、かなり幅広い分野の知識を持っていて、深い専門性に軸足を持つ方、こういう方が何人もいれば、異なる分野の方々と議論することによって、様々な視点からものを見ることができるようになるので、研究開発はかなりスピードアップできると思ひます。先ほどの心眼を持った方というのは、この両方が見える方だと思ひます。このような人材がいて初めて産業界の技術アップ、レベルアップにつながるのではないかと思ひます。

(加藤) 単に幅広い知識を持っているだけでもダメで、きちんと根っこを持ち、かつ周りが見渡せる必要があるということはわかりますが、深い根っこは何でしょうか。例えば材料化学の専門的知識が必要なのか、それともシミュレーションに対する専門的知識が必要なのか、その辺はいかがでしょうか。

(善甫) 論理的な思考ができれば、どんな分野でもいい。論理的でない、その心眼も効いてこないだろうと思ひます。

#### 賀谷 信幸 (神戸大学 大学院工学研究科 教授)



我々は去年、文部科学省の大学院教育改革支援プログラム (大学院 GP) に、「大学連合で計算科学の最先端人材育成」というテーマで申請しました。九州大学の青柳先生、愛媛大学の村田先生、金沢大学の長尾先生と神戸大学の 4 大学でこの取り組みをスタートしております。

計算科学の学問体系はあるのか、研究分野横断型の教育はできるのかということをもととして我々はプロジェクトを開始しました。

よく計算科学は第 3 の研究手段だといわれます。それぞれの研究分野でそれぞれの計算シミュレーションがあつて、それを統合するような話はないのではないかとよく議論になります。実験で考えると、私の出身は電気ですので、化学のビーカーの洗ひ方は習う必要がないといわれます。同様に、他分野の計算科学は必要ないと思われがちですが、知つておくこと、それをうまく利用することで新しい見地が生まれるのではないかという逆の発想をしております。

大学院 GP の目的ですが、計算科学のカリキュラムの構築をして、それをあと 1 年とちょっとでご報告できればと思ひます。その中では、まず計算科学専攻のカリキュラムをどういうふうに構築したらいいか。また、大学は社会に学生を送り込みますが、社会人にも我々は教育する義務、必要性があるのではないか。例えばシミュレーション・スクールのような単発的な教育ができないか。その中でのカリキュラム、教育も考えてみたいと思つております。

実際にどういふ取り組みをしているかということですが、まず分野横断型の教育ができるのかどうか、アドバイザリーボードをつくつて、そこで議論をしております。

2 番目に、分野横断型教育のための教材作成、e-Learning があります。ただ、教材をつくるだけでなく、それが本当にうまく利用できるのか、そこまで検証しなければいけないと思ひます。

3 番目に、カリキュラムの案がいろいろあります。我々はシミュレーション・スクールをやつて、そこでテストをしております。このカリキュラムで学生がどういふ反応をするかを検証をしております。また、4 大学で連合して授業を行いますので、テレビ会議システムでの大学間共同授業の実施を念頭に検討をしております。

生体、材料・ナノ、流体、宇宙、海洋、経済、それぞれの分野で計算機シミュレーションを教育をしております。従来のシミュレーション研究者というのは、どちらかという研究分野、応用分野に入つていられる方々ではないでしょうか。モデリング、アルゴリズム、いろいろな分野のいろいろな手法を学んだ者をシミュレーション専門家として企業、社会に輩出できたら、たいへん有用な人材になると思ひます。育成人材像として、「専門分野の基礎

と計算機の知識を有し、並列アルゴリズムを設計できる人材」と考えております。

教育方針ですが、今までは「講義で学ぶ」だけで終わったのですが、その後の復習、「自ら学ぶ」というのが大事かと思います。最後に、学んだ成果で次の世代、学生を指導し、質問に答えられるようになって初めて修了という教育方針を考えました。

「講義で学ぶ」では、シミュレーション・スクールでの講義があります。「自ら学ぶ」では、e-Learning を使った実習やプログラム演習をやります。プログラム演習をやり、いろんな問題を解いて、最後に TA とか質問室で実際に演習指導を行う。十分に質問に答えることができれば、卒業と考えました。

シミュレーション・スクールですが、講義の試行のためのシミュレーション・スクールで、去年の 10 月からこのプロジェクトをスタートし、3 回のシミュレーション・スクールをやりました。

1 回目のシミュレーション・スクールは今年の 3 月中旬にやりまして、ここではいろんなシミュレーションの紹介をしました。スーパーコンピュータ開発とその周辺、ソフトウェア、流体、乱流、天体、生体分子、ナノサイエンス、社会科学現象のシミュレーションの話をしていただきました。

2 回目は、他分野の計算シミュレーションを学ぼうということで、6 月に行いました。流体シミュレーション、モンテカルロ法シミュレーション、粒子シミュレーションといった他の分野の授業だけではなく演習を取り入れました。

3 回目は「SMASH」の一番下くらい、計算科学の基礎から並列シミュレーション、MPI とか OpenMP の授業をしました。

e-Learning ですが、小柳先生の生の講義を、MP-Meister で e-Learning コンテンツ化しておりますし、愛媛大学ではスタジオでの授業収録しております。コンテンツを講演者以外が講演できれば、いろんなところで活用できるのではないかと思います。

演習のシミュレーションも、シミュレーション・スクールの終わった後、フォローアップの課題を出します。他人のプログラムを理解するとか、計算精度を理解するような演習問題、できたら企業から問題をいただいてチャレンジする、そういうものがないかと模索しております。離れた学生には、インターネットを介して PC などでのコミュニケーションをとります。写真の例は、テレビ会議システムを使った金沢大学における授業風景です。

人材育成の目標としては、アルゴリズムとかソフトウェアの基礎的な技術をもって、科学に対する飽くなき探究心と豊かな発想力を持つ人材を養成したいというのが我々の目標です。

(加藤) そもそも計算科学にはまだ学問体系がないので、分野横断的な学問、カリキュラムを構築し、実践に移していく中で e-Learning 等も活用しているというお話でした。

## 質疑応答

(フロア 1) 中村さん、善甫さんのお話では、企業におけるシミュレーションをやっている人は、実験をやっている人たちと一緒にあって、時には実験室をのぞいて一緒に議論しながら、どういうシミュレーションにしようかと考える能力が必要だと思うのです。今回のカリキュラムを見ますと、とりあえず IT 技術の方から入っていくかという感じで、学生が実際の実験の現場を知る機会はないと思うのですが、今の教育プログラムの合間に、実際に学生たちがどれくらいの実験の教育もできているかということも非常に興味があったので、その辺を教えてくださいませんか。

(賀谷) 教育する学生ですが、計算機科学というか計算機工学をやってきた学生を教育するというよりも、どちらかというと機械の流体をやっている学生とか、たんぱくの計算をしている学生とか、いろいろな分野の学生に計算機シミュレーションの手法を教え、それぞれの分野でまたその手法をうまく利用して活躍していただきたいというのが趣旨です。

(フロア 1) 基本的には理論物理であるとか計算科学をベースにしている学生を対象とした教育であって、いわゆる実験コースに進んだ学生に開かれた門戸ではないわけですか。

(賀谷) 我々の考え方は、広く門戸を広げたい。それぞれの学生にはいろいろと異なる要求、状況がありますので、短期養成とかいろんな教育法を開発して、それぞれに適した教育を行っていきたいと思っています。

(加藤) 多分、おふたりがおっしゃっている観点が少しずれていると思います。実際の企業の現場で役に立つためにはシミュレーションだけではダメで、現場の実験とかも含めた学際的な教育が必要ではないか、多分そういう趣旨でおっしゃっているので、このスクールではそういうことをやっていらっしゃるのか、まずイエスカノーカだけでお答えいただければと思います。

(賀谷) そういう学生を募集しています。自分でいろんな問題、実験している学生もおりますし。

(加藤) ということは、スクールの中では実験技術等はやってないけれども、もともとそういう素養も持っている人を教育しているということですね。

(賀谷) そうです。そういう学生を集めています。

(加藤) その辺は、後半で議論すべきかと思います。企業では最終的には、開発や設計、研究開発に生かす必要があります。結果から有意な事実を抽出できないといけません。そのためには適正な計算ができないとならなくて、さらにモデリングも必要でしょう。

プログラムを開発するというのであれば、アルゴリズムやプログラミングの技術も必要ですし、現在、本当に意味のあるプログラムを作ろうとしたら、当然 B/F とかコア何個あって何ギガで動いているとか、コミュニケーション・バンド幅はどれくらいあるとか、そういった幅広い知識がないとできません。そこを計算機屋に任せるのか、それともシミュレーション屋がやるのかという、非常にブロードバンドな領域の話になってしまうので、それはこの議論が終わったところでもう一回整理させていただきたいと思います。

#### 田中 和博 (九州工業大学 情報工学研究院長・情報工学部長)



九州工業大学の情報工学府は、九州大学の大学院システム情報科学府と一緒に、3年前から、文科省が進めている先導的 IT スペシャリスト育成推進プログラムの遂行をしておりますので、その関係からお話したいと思います。

現在、九州地区では、2つの大学院が協力し、さらに2つの大学を巻き込む形で、情報化社会を牽引する ICT アーキテクト育成プログラムを遂行しています。これは文科省と日本経団連が力を入れて応援をしてくれています。次世代のリーダーをつくるということで、企業の方々にも講師に来てもらい、あるいは PBL のメンターにもなっていただき、最終的には学期末の PBL の発表会でコメントをいただくことで、産学が一体となって人材を育成しています。

この取り組みをする中で、情報系のカリキュラムを少し勉強しました。情報科学と情報通信系の内容というのは、恐らく皆さんの感覚の中では違っていると思われると思いますが、情報系のカリキュラムはどんどん発達して、一部は情報科学のベースとなるべき分野になろうとしているのではないかと思います。

アメリカの ACM がカリキュラムをどんどん発表していますが、日本はそれに追従する形でやっています。コンピュータ・カリキュラム CC2001 では、情報系はコンピュータサイエンス(CS)という取り扱いでした。しかしながら、その段階では、既に情報系は CS だけではなくて、電気系から派生したコンピュータエンジニアリング、ソフトウェア・エンジニアリング、インフォメーションシステムの4分野ということが既に明らかにされていました。CC2005 ではさらに IT まで入ります。この分野の発展は激しいので、6番目の分野が必ず出てくるであろうという評が出ております。

この中で、いわゆる情報科学と呼ばれている CS というのは、この5つの分野の1つにすぎない。ソフトウェア・エンジニアリング(SE)という分野が計算科学にかなり大きく寄与するのではないだろうか。プログラムが大きくな



ればなるほど、ソフトウェアの作り方、構成の仕方、データ構造、アルゴリズム、プログラミング、こういったところの筋をある程度勉強しておかなければ、すぐれたプログラムはなかなか作れないのではないだろうかという気がします。

この表を見ますと、6番目の中で、次に新たな分野の出現を予期しているということですが、プログラムがどんどん大きくなっています。そういう大きくなったプログラムをどういうふうに取り扱っていくのか、あるいはどう構成していくのかに関連して、新しい分野が出てくる可能性がある。こういうことを、情報科学を学ぶ人たちもある程度ベースを勉強すべきだと思って、カリキュラムの修正を今急いでいるところです。

環境が著しく変化すると、その中で学ぶべき量が著しく増加していきます。そういう意味では、狭い分野について多くの知識というよりも、将来の技術変化に対応できる能力と継続して学ぶシステムが必要であろう。あるいは、社会と工学が非常に密接に結びついてきますので、プロジェクト管理能力が必要だろう。こういうベースに従って教育システムを構築していく必要があるかと思えます。

九州工業大学の情報工学部の一例を示します。実践的な立場で契約して外部資金をもらって、責任を持って計画的にソフトを実行するというPBL(Real PBL)をやっています。企画、設計、実装、評価の過程において、各過程で企業の協力を得ながら学生数名のグループ単位で行うという教育をやっております。

イギリスのUK-SPECでも、大学あるいは大学院を出るときに最低限どういう項目を獲得しておかなければならないかが明示されています。何を学んだかではなく、何ができるかですので、情報科学を学ぶ、あるいは職業にする若い人たちには、最低限のこういう項目を今後考えていく必要があるのではないのでしょうか。

最初に加藤先生から、産業界から人材育成に関して、大学に対する批判があるということでしたが、既に20年も前にアメリカでもこういうことは言われており、このような批判は従来からなされています。しかしながら、欧米では数多くの推奨カリキュラムが提案され、先進的なカリキュラムが実施されて、これらの問題が各面で改善されてきています。これからスーパーコンピュータで米国を抜こうということであるならば、米国のカリキュラムの改善の歴史とかを学ぶ必要があるでしょう。現在、情報処理学会等でも盛んにいろいろ学習が行われていますが、そういう動きに連動する形で情報科学分野の最低限必要なコア・カリキュラムを、大学と学会とが協力し大同団結して検討していくことが必要ではないかと思えます。

(加藤) 欧米の方がはるかにこういう議論が進んでいると思うのですが、特にプログラム開発側というか情報系の人間として、どういうことができないといけないか、その明確化さえもまだ行われていないので、まずはそこをきちっと明確にするということでしょうか。

(田中) 情報系でも強弱がありますので、その強弱は認めつつも、最低限これだけの項目は要りますというのは明確化されています。それは情報系の話で、情報科学というのは現象だとか力学だとか、いろんなものをベースにし、情報系を織り交ぜてすぐれたソフトウェアをつくる、あるいはそのユーザーになるということだと思えます。そういう点で、ソフトウェアとかそういうものの素養をきちんと身につけておく必要があるだろうと思えます。

#### 吉岡 信和 (国立情報学研究所 GRACE センター 准教授)



できます。

国立情報学研究所ではトップエスイーというソフトエンジニア向けの教育プログラムをやっております。トップエスイーでは、コンピュータサイエンスに基づいていろんな実践が行われます。ソフトウェアの開発現場で最新の研究成果を導入できる人材とか、大学教育の中でサイエンスに実践寄りの考え方をきっちりとりえることができるという目的でプログラムを開発しています。シミュレーションは特に教えてなくて、ソフトウェア・エンジニアの教育を産学連携しています。学と産がタッグを組んで実践的な教育、人材を育成しているという観点で話させていただきます。

実績としては、社会人、メーカーの方やソフトウェア会社の方が殆どです。最先端の技術を使える人というこ

とで、人数は非常に少なく、毎年 30 人前後を育成しています。ただ、開発した教材をいろんな大学で使えるようにカスタマイズして、先導的 IT スペシャリストという文科省のプログラムの講座でも大学生向けに使っています。

産学連携の意味は 2 つあります。まず 1 つは教育や教材の開発を産学で一緒に行っている。あとは受講生です。各企業で 2 名、多いところは 3 名くらい派遣していただいて、教育しています。

われわれの問題意識も産と学とのギャップです。産業界では、これはソフトウェア・エンジニアリングに関して、科学を余り踏まえずに現場に対応している。高い品質とか先端的な技術、ツール、方法を、タイムリーに複雑なソフトウェアに生かし切れてないという状況がありました。実際にソフトウェアの開発者に求められるスキルということで、ソフトウェア・エンジニアリング・センターの方で IT スキル標準がまとめられていますが、そのようなスキルをどのようにして持つべきかが余り語られてなかった。

逆に大学では、いろんなコンピュータサイエンスの個々の専門家がいますが、実際の産業界の現状に即した実践が余りない。さまざまなツールとか手法が研究レベルでは提案されていて、実際企業でも使える可能性もあるものが存在するのですが、それがなかなか活用して実践に結びついていないという現状がありました。

それに対して、トップエスイーというプログラムでは、大学と産業界がタッグを組んで、大学や研究の分野で先端的なツールとか手法の中から実践に使えるものを産業界と一緒に議論して、産業界の方で考えられる 2~3 年先の問題に関してそれらを適用することで教材を開発していくことをやってきました。

技術を使うためのノウハウや実践を授業の中で教えるために、こちらの教育では演習主体の教育プログラムになっています。実際に技術に関する座学は最小限にして、基本的には演習中心で、産業界の問題に近いものに関して実際にやってみて議論します。このプログラムではいろんな企業の方が参加されていますので、ふだんの企業のセミナーではできないような、他分野の会社の人と一緒に議論することで、いろんな視点で議論をしてどう実践に生かせるかという議論が進むことが特徴となっています。

ソフトウェア開発に限った話ですが、ソフトウェア開発ではさまざまな要求とか複雑なものを最終的にはコンピュータで実行できるプログラムなり言語に落とすのですが、要求からプログラムに落とすギャップを埋めるために、途中でモデルをつくることが重要になってきます。例えば、要求とは何かという分析の結果のモデルであったり、どういうふうに設計するかというモデルであったりします。

ここでソフトウェア開発に必要な能力として、中間生成物であるモデルをいかにうまく適切なものをつくるかという能力を重要視しております。モデルをつくる、あるいは適切であることを確認するために、先端的なツールとか手法とかを用いることで、ソフトウェア開発に必要な問題解決能力というのはモデリングをいかにうまくできるか。モデルというのは、センス、心眼という話もありましたけれども、いかにうまく抽象化するかという抽象化能力と、抽象化したものをいかに自分の個々の状況にアプライできるかという詳細化の 2 つの能力が非常に重要になってきます。

こちらではその能力を養うために、サイエンスの基本的なところを勉強した後に、演習中心あるいは実際のさまざまなツール、先端的なツールとか手法を自分なりにアプライして、いろんな観点から企業の人たちが、どういうモデルをつくれればいいのかとか、どう確認すればいいのか、適切なモデルは何かを議論しながら、ソフトウェア開発の問題発見、解決能力を養うということが特徴となっています。それによって、ソフトウェアの大規模化とか複雑化に対しても、あいまいな要求を自分なりに固めていって、適切なモデルに変換していくことができるエンジニアを育てることを目指しております。

われわれは教育だけではなくて、ソフトウェア工学に関する研究センターを立ち上げております。教育とともに新しいツールとか手法が生み出せる先端的な技術開発とその実践という両面で、研究、教育、実践を柱に、センターとしてトップエスイーを位置づけております。

(加藤) 対象は産業界の人ですか。

(吉岡) 基本は産業界です。学生も来てもいいということになっていますが、殆どは産業界の方です。

(加藤) これで前半のプレゼンテーションは終わりましたので、皆様の議論を私なりに振り返ってみます。

日立の中村さんからは、シミュレーションの適用とその結果の解釈に心眼を持った人がまず必要であり、技術

者の素養として、モデリング技術と解析データからの知見の抽出、さらにそれを設計に生かせることが必要となる、とのお話でした。ソフトウェアの開発とソフトウェアの適用は連続的なところがあって、適用する人もモデリングまではできないといけません、その後のアルゴリズムを考えてプログラムを開発する人は、そこまでは必要ありません。本当にプログラム開発しようとする、と、計算機に関するかなり高度な知識が必要であるという点が明確になってきたかと思います。また、技術の学際的な連携も必須であって、単に計算だけではなく、計測や計算機、計算情報科学、この辺の領域との連携も必須となります。ただ、私の理解では 1 人の人が全部やるというわけではなくて、こういうクロスオーバーも考えた人材育成をしないといけないということだと思います。具体的な提言として、相互教育システムと、共同研究の場を国が設置したらどうかという話です。企業におけるソフトウェアの開発と利用のプロポーショナルですが、新分野であれば自分のところで開発もするという話がありました。

善甫さんから、まずは背景となる話として、新材料の開発は、非常にロングタームで、先が見えないうちはなかなか資金を投入できない。シミュレーションとしても、開発フェーズにより PC クラスを使ったようなものから大規模なものまであることをお話いただきました。つまり、開発のフェーズの初期の段階、概念とかイメージのころは手軽なシミュレーションで行い、開発が本格化してきたら、メカニズムの解明とか制御因子を抽出して、最後に仕上げるところで高精度の設計のシミュレーションが必要になります。つまり、フェーズごとにシミュレーションの性質が異なるということでした。必要とされる人材は一言でいうと T 型人間で、分野は何でもいいが、とにかくきちっとした物の考え方ができる人、論理的な思考能力がある人、そういうお話でした。

ここまでは産の話で、次は、学が何をやっている、あるいは何を考えているかでした。

まず神戸大の賀谷先生から、そもそも計算科学にはまだ学問体系がないため、これを構築することが非常に重要であり、その構築に向けた分野横断的なカリキュラムの開発と実践をしていることをお話いただきました。これを大学連合で行っていて、特にカリキュラムをつくるだけではなくて、本当にそれが効果的であるかということやシミュレーション・スクールで実践をしており、プログラミングは計算機科学屋、計算科学を知っている人に任せるとおっしゃっていたかと思います。それから、異分野のシミュレーションも実践をしていること、e-Learning を活用してそのフォローアップもやっていることをお聞かせいただきました。

田中先生は、SE、特にソフトウェア・エンジニアを中心に、まず情報系のカリキュラムの歴史の紹介から始めて、欧米では既にこういうことが行われているが、日本はちょっと出遅れている、そういう中で一番大事なことは、大学を出るときに何を身につけてないといけないかの明確化であるということでした。情報科学や既往の専門分野に関しては明確化されているけれども、特に計算科学などの新しい分野では、それさえもまだ確立されていないので、その確立が必要であり、欧米では既にカリキュラムの改善が進んでいるということをお話いただきました。

最後の吉岡先生からは、トップエスイーという最先端の技術を使える人の育成を産学連携でやっていて、対象は特に企業人で、実践的なカリキュラムをしているというお話がありました。

ここまでの話を総合すると、大学側はどちらかというとソフトウェア・エンジニアとかプログラム開発者というところに軸足があるけれども、産業界側としては、必要とされる素養というのは実はそれだけでないということでした。もう 1 つ大きな点として、そもそも計算科学全体の体系というか、カリキュラム全体がまず大学側でもまだつくり切れてないという意見です。いろいろな観点があって、それぞれのフェーズで、大学なら大学、あるいは産業界と連携して、一体どういう人たちを育成していくのか、さらに、産業界に入ったときにそういう人がどういうキャリアパスをとっていくのかということも、重要なことではないかと思います。後半の議論でぜひ皆様からのご意見をいただきたいと思います。今のようなプレゼンテーションを受けて、一体どういう人材、どういう素養を持った人を育成するのか、どうやって育成していくのかということがポイントになるかと思います。

(休 憩)

(加藤) 先ほどの議論をもう一回まとめてみると、特に産業界で求める人材は、先端的なシミュレーションを真に設計開発に生かして、何か変革ができる人ということでした。シミュレーションは市民権を得たけれども、まだブレークスルーを起こすまでには至っていません。ブレークスルーを起こすためには人材の育成が必須とな

ります。企業の活動は、プロジェクト的に行うことが多いので、ラインの中でシミュレーションを生かす人はどういう人か、議論を進めていかななくてはなりません。学際的な連携も必要です。先ほど、計測、計算、計算機、情報という話がありました。単純に挙げただけでも、かなりいろいろな能力が必要とされます。ですから1人の人が全部をやらなくてはならないとは言っていないですが、設計開発で本当にシミュレーションを生かすためには、当然いいソフトウェアがないといけません。いいソフトウェアをつくるためには、計算機に関する相当な知識も必要ですし、プログラミングの能力も必要です。当然、アルゴリズムの開発能力も必要で、もっと上流側だと、現象の中からこの部分を抽出してモデリングするかが重要です。私は計算の実践能力も必要だと思っています。いかに効率的に間違いなくきちんと計算するかという技術は非常に重要ですので、あえて追加しておきます。また、これからは膨大なデータが出てきますから、それを設計や開発に反映させないといけないのですが、この判断能力が要ります。最後に、ここが一番重要だと思うのですが、現象がわかっただけではダメで、それから先のアイデアが出なければ、結局わかったところでとまってしまいます。ちょっと考えても上流から下流まで、これだけの能力が必要で、この中で産と学がどういう連携をして人材教育を進めていくかということがポイントかと思えます。

もう1つ、学は今、どんな認識をしているか、どんな実践をしているかという点がありました。九州工大の田中先生からご指摘がありましたが、情報とか数学とか流体工学とか、それぞれの専門分野には学問体系があります。多分、計算機科学にはあるかと思うのですが、私の知る限り、計算科学には学問体系はありません。だから、それをつくっていかないといけないのですが、では一体どんな体系にすべきかを考える必要があります。大学側も、実践力が重要だということはおっしゃっています。ただ、どのような実践力が重要なのか、多分ここが、まだ産と学の間には相当なギャップがあるかなと思っています。計算科学者の認知的な話が田中先生からあったと思うのですが、大学側が、この人は計算科学を専攻しましたと言った時に、どういう知識なり実践力を身につけていれば、その人を計算科学の専門家として自信を持って世の中に出せるかということも重要であって、これに関してもまだ具体的に滋養すべき素養は明確になってないのではないかと思います。

前の議論に戻りますが、例えば、アイデアの提案能力があります。アイデアの提案能力を大学で本当に教えられるのかということ考えた時、私は大学ができることには、限界があると思います。ですから、必ずしも1つの機関で、あるいは1つのチームの中でやる必要はありません。大学ではこういうところを中心にやって、さらにそれから先は企業と連携した共同研究の場でやるという考え方もあります。あるいは大学側で、計算機、プログラミング、アルゴリズム、モデリング能力くらいまでの人と、モデリング能力からアイデアの提案能力までの人と、2つのカテゴリーに分けて、2つのタイプの人材を育成していくという考え方もあります。それぞれのカテゴリーごとに受容すべき能力というのは何か、そういう議論もできると思うのです。つまり、空間的に分類することもできるでしょうし、時間的にここまでは大学でやって、ここからは企業と大学が連携してやることもできるかと思えます。

もう1つ重要なことは、次世代の計算科学分野をリードする人の具体的なキャリアパスが一体どうなっていくのかということです。計算をする人とプロジェクトを仕切る人、あるいは設計開発をやる人は同じキャリアパスでいいのか。計算科学に関する非常に高い能力があっても、使い捨てになりはしないかという危惧もあります。ですから、産学官が連携して正のスパイラルを構築しないと、この分野はなかなか進展しないのではないかと思います。

ここまでは前半の議論を私なりにまとめた問題認識ですが、それを受けて、後半の議論は、どのようにして人材を育成していくかをまとめていきたいと思っています。

まず、こういう議論の進め方と問題の認識でよろしいですか。

(フロア：茅) 私自身、産学連携の問題がいかに難しいかというのをいろいろ経験しております。今回の1000億のプロジェクトに関して、私自身が心配しているのは、どうしたら本当の意味で産業界がこれをちゃんと使う方に行くのか。

特に私が申し上げたいのは、我々税金をいただいている人間として協力させていただくことはもちろんいたしますが、いかにして産業界の方がもう少し長期的にこういう問題で乗り出していただけるか。学問体系もよろしいのですが、それ以上に、いかにすればコンピュータを使う方向に明るさを見出すことが産業界から起こるか

いう議論をもう少し強調していただければありがたいと思います。

(加藤) 産業界からもうちょっとハイエンド・コンピューティングに対する積極的な関与というか姿勢が欲しいという話だと思うのですが、他に何かございますか。

(フロア2) 産業界から積極的な関与は一部したいと思っている人間もいるのですが、実際に産業界にその基盤ができてない。人材育成もまさにそうで、一挙には飛び越えられなくて、自分たちの企業の中でそういう環境をつくっていくところにも今苦慮しているところです。

これからどういう人材を育てたいか、私は多様性がはぐくまれるような人材育成が重要じゃないかと考えています。同じ企業の中でも、要求される人材や技術というのは少し異なっている場合もあります。ましてや、産業と一言でいっても、非常にいろんな種類の人間を要求しておりまして、さっき T 字型と言いましたけれども、それぞれに専門性を持ちながら、ある程度横に連携ができることは非常に重要だと思います。

中村さんや吉岡先生が話されているように、社会人と学生が一緒になって課題を共有化して欲しいですね。単に一緒に交流するというより、こんな課題を解くことに意味があることが学生の方にわかれば、案外、自分が得意あるいは必要とする技能の文化が育てられるのではないかなと思ひまして、ぜひ多様性の容認も含めて議論をして欲しいと思います。

(加藤) どういう意味での多様性ですか。

(フロア2) コースを選ぶことが最初の段階でできるかどうかというのは結構難しいと思っています。例えば企業の方との接触によってコースみたいなものを選ぶとか、実際に企業の中で持っている課題意識なんかを伝えることができ、コースをそこから組むのはどうでしょうか。

(加藤) おっしゃることはわかります。要はフレキシブルなカリキュラムにしておいて、自分の適性とか自分が伸ばしたいところがそのカリキュラムの中で判断できて、終わったときにはそれなりの素養ができていたというようなイメージですか。

(フロア2) そうですね。それは一例で、それ以外にもそれぞれの多様性を少し早い段階から伸ばすような形がないだろうかという投げかけです。

(加藤) 先ほどの茅先生の話は、直接的には次世代スパコンをもっと産業界で積極的に活用できないかとか、産業界のコミットメントということだと思うのですが、人材育成という枠に落とし込むと、次世代スパコンを積極的に使えるような人を産学官連携でどういうふう育成していけるかが課題です。それが具体的に「する」という提言になっていけば、茅先生の心配もなくなると思うのです。

(フロア3) 茅先生の、次世代スパコンはいかにすれば産業界で活用できるかという問いの仕方が余り適切でないと思われま。つまり、次世代スパコンそのものを直接活用できる産業界のセクターはそれほど大きいとは思えない。大事なことは、次世代スパコンを頂点とする日本の HPC 全体をいかに産業界、学界が、活用できるかという話でないといけない。人材養成もそういう多様性のある階層構造の中で考えるのが正しい道ではないかと思ひます。

(フロア：茅) もちろん、その通りだと思いますが、私が心配している問題は、今、部品の科学からシステムの科学になっているという問題で、つまり全体としてもものをつくるということが、いろんなものの相互作用を入れてちゃんとやらなくてはならない。そういう問題まで取り入れた大きな問題を産業界がこれからつくっていく限り、世界的に見て負けていくのだということを申し上げたいです。

(加藤) 御二方がおっしゃることはごもっともで、次世代スパコンだけでものができるわけでもないですが、次世代スパコンを本当に活用するという気概を持った企業が出てくる必要もあると思います。両方のご意見とも正しいご指摘ですので、このまま進めたいと思います。

(フロア1) 今までの産学連携では、大学で非常に基礎的なことをやって、企業でその応用先を考えてもらうという連携が主なイメージだと思うのですが、企業の方でも大学が取り入れるような基礎的な発見が起きますので、産業界から積極的に大学に関与することは逆に可能だと思います。基礎科学領域に近いものは逆に学へ還元もできる。そうすると、どんどん産学連携の枠が広がると思います。

(加藤) 観点はわかりますが、人材育成という議論の中にどういうふうに組み込んでいけるでしょうか。

(フロア1) 人材育成の場も大学だけに限った話ではなくて、実際の企業の中でも行われていることです。そういう双方向のやりとりがあれば。

(フロア4) 今まで議論されてきた中で、多様性という言葉も出ていますが、望ましい人材の姿を1つに決める必要もないですし、会社から見てどういう人材が欲しいかは、きっと1つではない。会社の置かれた状況とかもあると思うのです。

もう1つ、先ほど次世代というお話をされましたが、今、どのフェーズのソフトなりハードを議論しているから、どういう人材とか、何をしなければいけないかということは決まってくると思います。何か1つの像という特定したことでなくて、どういう時間軸でどのポイントを見ているかということを考えて議論しなきゃいけないのかなと思います。

(加藤) フェーズが違えば、求められる人材像は異なるということですね。では、この辺で議論に入りたいと思いますが、多様性ということ、フェーズによってもニーズが違うことや、1つのステレオタイプの人材を育成するのではなく、また育成の仕方最初から決めてしまわずに、途中でPBLや実践を介して適性を判断しながら育成するという観点が1つあります。それから、産学連携の新しいあり方ですね。実際にどんな能力が必要なのでしょう。

(賀谷) 実際に必要な能力の中に計算機、プログラミング、アルゴリズムとかいう話はわかるのですが、それよりも問題意識とかサイエンスの部分がないといけません。結局、計算機科学をやるにしても、全体的な知識を必要とします。ただ、それを実際にどういう課題にアプライズするか、そういう訓練もしないと、計算機科学を実際にいろんな分野で応用していく能力に欠けると思うのです。

(加藤) ちょっと私の書き方が悪かったと思うのですが、それはモデリング能力の中を含めたつもりです。もちろんモデリングするためには、現象の基礎がわかってないといけません。現象の基礎学理ですね。それから、当然ですけれども、プログラミング能力には数学が必要です。そういうものは含めたつもりです。

(善甫) ここに挙げていただいたのは、確かに幅広い知識として学ばないといけないこと、いわば理想的なことだと思います。しかし、大学で学ぶあるいは研究するのは、人生の中でわずか数年です。その間に、いろんな分野と交わることによって幅広くなっていくことがあると思うのです。

先ほどキャリアパスと言われましたが、これをずっとしていくと、キャリアパスはある領域に限定されてしまいます。そうではなくて、わずか大学で2~3年やったことだけでそのままずっと一生できるかといったら、できっこないですね。何かやろうとしたら、1つだけではできないから、いろんな分野のことをやっていく中で、自分に合った分野を見つけ出すことがキャリアパスにつながるし、またその過程が企業での仕事にも役立つ、あるいは大学での指導にも役立つということではないかと思います。

つまり必要とされている能力は、人の意見を聞いて、それを正しくちゃんと理解できて、自分の意見をちゃん

といえる。あと、まとめる能力、こういった基本的な議論できる能力があればいいのかなと、私はそこまで基本的なことから議論すべきであると思っています。

(加藤) ただ、そうはいつでも、何らかのカリキュラムがないと実践に移せないのも事実で、論理的な思考力とかまとめる能力を具体的にどうやって身につけさせるかという議論になるわけです。プログラミング能力の重要な観点として、非常に大規模なプログラムをどうやって開発していくかという話もありますね。

(田中) ソフトウェア技術というのはどんどん広がる。今までは予測可能な組み合わせでコントロールできるという感覚でソフトはつくられてきたわけですが、これからはウルトララージ・スケール・システムで、例えばプラットフォームがオープンされて、みんながアクセスしながら、いろんなところでいろんなプログラムがつくられていく。そうすると、全体像が見えないけれども、いろんな機能を有していろいろ動くという時代に突入していくだろう。そういうものが国際共同でプラットフォームがオープンになって、いろんなところでプログラムが提案されて、いろんなものを組み合わせると、また違う概念の勉強が要るのではないと言われております。トータルクオリティをどういうふうに調整するかという概念から、1つ1つのプロセスをどう改善するかということが非常に重要だという感覚で米国は動いている。モンスタークラスのプログラムに対する何らかの基軸みたいなものが、ディベロッパーには要るのかもしれない。

(加藤) そうすると、もうちょっと中身をブレイクダウンしておいた方がいいかもしれないですね。まずは母集団を抜けがないように明確に定義する。その上で、2年間でできる量なんてたかが知れているのだから、あるいは多様性のある教育プログラムはどうしたらいいかということも含めて、学はどんな具体的なカリキュラムを組めばいいかの議論を進めましょう。

必ずしも大学だけでやる話ではないので、企業との共同研究なり、あるいは何か別な場で実践能力を身につけさせることになります。私は、ボトムラインとしては2つの場が必要になるのではないかなという気がしています。1つは、大学が基本的には独自に設定をしたカリキュラムで、ある素養を持った人材を輩出する。その時に、その素養とは何かということですね。

もう1つは、大学のカリキュラムだけでは恐らく産業界のリクエストには応えられないので、大学だけではできないところを、産学でどういう具体的なやり方で育成をしていくのかということです。

まずは計算機に関する知識として、メモリーウォールの話とか計算機のアーキテクチャの話ですね。アーキテクチャとプログラムの性能が一番重要になると思います。それから、ネットワークというのがあります。グリッドコンピューティングとか、ネットワークコンピューティングなどの知識です。

ソフトウェア技術として、さっき田中先生がおっしゃっていたのは、部分しか開発しないという前提に立ったとき、どうやってソフトウェアを開発するかというお話でした。

(田中) 要するに全体をなかなかコントロールできない中で、自分のソリューションを身につける。

(加藤) それは今、ものづくりでも非常に問題になっている話だと思いますが、全体が見えない中でいかに技術者が自分のところをちゃんと最適化するか。全体が見えなかったら、それは難しいのでしょうか

(田中) そうですね。でも、実際に研究で国際協力とかいう話になったときに、1つのプログラムを誰が管理して、どういうふうにみんなで共有するのかということ、多分開発の速度が遅くなる。リナックスなんかは皆勝手に開発したソフトを使う。そういう可能性があると思えるのです。

(加藤) わかりました。これからのプログラミングはとにかく大規模なプログラムを開発しないといけなくなります。特にソフトウェア工学的な知識が、チーム開発という上では必須になる、そういう観点だと思います。

アルゴリズムに関しては、どなたかコメントがありますか。計算機のボトルネックはメモリーウォールで、データが来ないということですね。ハードウェアメーカーはどこまでデータの転送能力を保证するのか、そのボトル

ネックを押さえた上で、アルゴリズムも取捨選択しないとはいけません。アルゴリズムの開発もありますが、アルゴリズムを捨てることも多分あり得ると私は思っています。

モデリング能力と一言でいってもいろいろあると思うのですが、基礎的な専門学術がありますね。モデリングというのは2つの意味があって、開発する上でのモデリングもあるでしょうし、既存のプログラムを実際に使って現場に生かすという意味でのモデリングです。具体的にどのような能力でしょうか。

(フロア1) モデリングに関しては重要で、実際に起きていることをどこまで抽象化して表現できるかということに尽きると思います。実験家が見ても納得というようなモデルを抽出する能力。

(加藤) 当然抽出能力は必要です。けれども、例えばこの部屋の気流を計算するとき、酸素分子の原子状態の理解が必要かということ、100人中100人が必要ないと思うのですが、極論すればそういう話だと思います。ただそうは言っても、適正な計算手法を使ってないと、モデリングしたつもりでもモデリングできてないということになる問題点もあります。

(田中) 近似のレベルというか、モデリングのレベルが多分重要だと思うのです。そこを正確に理解して、モデル化しているかどうかということだと思います。

(フロア3) 別のセッションでモデリングについて大分議論がされていて、モデリングには何種類かあると、ある人がパネルとして強調していました。つまり現実にはできるだけ近づくというモデリングもあるし、むしろもっと抽象的に、必要なものを抽出して、本質は何かを見定めるモデリングもあるので、その見定め、心眼といえればそれまでですが、モデリングの場合にもそういう観点が必要ではないかと思えます。

(加藤) つまり、シミュレーションの目的に応じた適切なモデリングということですね。

(フロア3) そうです。余り現実に近づけるとということだけに集中し過ぎると、本質的なものが見られないことがあるので、非常に微妙なバランスと配慮が必要ではないか。

(加藤) 大変重要な観点だと思います。

(フロア5) 計算する時に、何の現象を解こうとするかによってモデリングも違うと思います。明確な目的のもとにツールを選んだり、はっきりとした境界条件がないと、自分の意図した現象をあらわしてない結果が出てきて、何を言っているかわからない状態になってしまうことがあると思います。

(加藤) 解こうとしている現象がきちっと理解できるかということですね。それに対して適切なモデリングがされているかということも重要で、それに応じたプログラムの選択なり境界条件の選択ができていないということだと思います。

他に、計算機に関する知識、特にアーキテクチャとプログラムの実効性能の関係の理解とか、ネットワークコンピューティングに関する理解も必要です。セキュリティなども入るかと思えます。

プログラミング能力としては、大規模なプログラムの開発能力と、ソフトウェア工学的な知識で、特にチーム開発をするときの知識ですね。

アルゴリズムですけれども、計算機のボトルネックを理解しなければアルゴリズムは開発のしようがありません。それから、新規のアルゴリズムの開発もあるでしょうし、これまでに開発したアルゴリズムを取捨選択する、一番適切なアルゴリズムの選択、そういう能力が要りますね。

モデリングのところがちょうど産と学の間点というか、これはどちらも必要なので、特に重点的に議論すべきだと思います。

今まで出た話は、まず専門学術の理解は必須であるということ。それから、本質的な現象の抽出ができるか、



またそれをモデリングできるかということでした。実はシミュレーションというのはそれぞれの目的によって大分やることが違うので、それに適したレベルのモデリングができるかという話ですね。

次の観点に進みたいと思いますが、計算の実践能力に関して、何かコメントなりありますか。

それから、私は本当に使えるかどうかかわからないと思っているのですが、ネットワークコンピューティングの利用という話もありました。

結果の判断能力は、これはなかなか難しいですね。これはどうやってこういう実践するかという話になってしまっても、これ以上余りブレイクダウンはしようもないですかね。

アイデアの提案能力についても、これ以上ちょっとブレイクダウンのしようがありませんが、こういう能力がとにかく必要ではあります。

(フロア 6) 今のモデリング以下のところに関して考えがあります。このセッションは、計算科学をベースにして次世代の自動車であるとか鉄鋼であるとかの人材育成ということだと思います。したがって、計算の実践能力は別として、結果の判断にしてもアイデアの提案にしても、産業界の人材の育成という点では、その製品にかかわる基礎学理がベースというのは大前提だと思います。

それに加えて、コンピュータがこれだけ進歩したときに、それに加えて計算科学特有のこういう能力を教育すればいいのではないかと、そういうことを言っていたらよいと思います。

それぞれの分野の技術をリードする人間、人材育成のときに、計算科学がこれだけ進んだときに、それに加えて、計算科学的な知識を教える。教えると、今までの仕事が非常に早く効率的にできるとか、計算できにくかったことが、その人に聞くと提案できるとか。

(加藤) それは恐らく今までの議論の中に含まれていると思います。実際の身につけさせ方で、計算科学的な新しいやり方がないかということだと理解しました。それも含めて、先ほど多様化の話もありましたが、まず学はどこまでやるべきか、そこを議論したいですね。これだけのメニューをこなさないといけない中で、まず大学が主体であれ、大学が単独でどこまでこれに踏み込んだコミットメントをするのか、皆さんの考えをお聞きしたい。つまり、人によっては、計算科学からプログラミング、アルゴリズム、モデリングまででいいという考えもあるでしょうし、いや、そんなものは要らないから、モデリングから始めて、もっと実践能力を大学で身につけさせるべきだというご意見もあろうと思います。さっきは多様性を認めるべきであるという話がありました。

ただ、1つ言えるのは、大学を出た人は必ずしも産だけに行くわけではありません。したがって、プログラムをつくる人材の育成も必要となりますので、そういったことも踏まえて、今後学は何をどうしていくべきか、全体的なコメントがあればお願いします。

(フロア 7) まず学でやっていただきたいのは、全体を計算、シミュレーションというか、そういうものに対して必要だということを徹底していただきたい。どれが欠けてもダメだということです。

例えば産でシミュレーションを使うとすると、前半の2つ半くらいまでは、買ってきたプログラム、ソフトウェアを使えば、余り関係ないです。でも、産の中でも基礎をやっている方がおられますから、将来どこに重点を置くかということがあって、それによって多分重点が違うと思います。少なくとも産であれば、下側は非常に重要です。その辺の重要性はぜひ教育していただきたいのですが、まずは全体として、あなたがこの分野に入ろうとしたら、これは絶対必要ですよということは教育をしていただいて、なおかつ知識として、各々について重要な項目については教えておいていただきたい。

学生の時代はたかだか数年、そのときに何か記憶をしてあれば、将来は多分それをもとに自分で勉強すると思います。あるいは、その後どこかで OJT でも何でも教育を受けたときに、ああ、そうだったということを思い出しますので、それは非常に重要だと思います。

個々については、学生時代もしくは会社に入った後に、非常に専門的なこともやるでしょうし、その途中で自分の興味があれば、そこで勉強すると思いますので、専門的に教育ができる場を設けていただければいいかなと思っています。

(加藤) 時間も押してきましたが、ソフトウェアの利用は、結果の判断能力か、モデリングから始まると思いますが、このあたりはどうやっていけばいいとお考えでしょうか。

(フロア4) 会社はソリューションというか、問題解決したいということがベストですね。研究者から見たときに、自分の問題を解決したいという熱意を持ったときに、それが実践できる場を提供していただけるのが一番ありがたいと思います。先生方は一生懸命、学生に動機づけをされようとしています。短期間では難しいと思います。一旦会社において、自分はこのことをやるのがすごく大事だ、自分もその熱意を持ってぜひやり遂げたいと思ったときに、大学に戻るなり、共同研究させていただいて、そのソフトを使うことが、ソフトウェアを実践することにもなるし、モデルの能力を上げることにもなると思います。その人がせっぱ詰まって、ある意味では真剣勝負で臨む時期が来たときに、産学がうまい形で連携できるようなフレキシブルな仕組みができないものかと思っています。

(加藤) 産学が連携して、主に社会人というか、企業の人を対象として、ソフトウェアの実践の共同研究をする場を大学側が提供するというのでしょうか。

(フロア4) 恒久的な拠点をつくっていただきたいということです。

(賀谷) 大学でも企業からの質問とかディスカッションを大いに受けたいという思いを持っているのですけれども、それが多分まだ伝わってないんじゃないかなと思います。だから、我々ができることであれば、どんどんコミュニケーションをとりたいなどは常々思っております。どこの大学でも同じだと思います。

(吉岡) われわれのプログラムは大学生向けというよりも企業向けですが、大学で学んで就職するというだけではなくて、企業からまた大学に戻ったり、大学から企業に行くという、行ったり来たりしながらいろいろ学んでいくという文脈で、何を、どういうタイミングで学ぶかということを考えた方がいいかなと思っています。そういう意味で、企業で2~3年働いて問題意識を持った人がまた大学で学ぶというコースとして、プログラムをつくっております。

(加藤) いずれにしても、対象は企業の方で、大学と一緒に、特に共同研究を介して実践能力を身につけさせるということだと思うのですが、学が主体でこういう3つくらいのプログラムを用意したときに、果たしてどこまで実践能力が身につくかについてはどうでしょうか。

(フロア8) 3人の大学の先生方がパネリストでいらっしゃるの、ぜひお聞きしたいことが1つあります。それは、先ほど加藤先生に挙げていただいたように、多分多くのメニューが必要です。賀谷先生にしても田中先生にしても吉岡先生にしても、非常に特徴のあるプログラムをやっておられるのですが、それぞれに関して少しずつ内容が違って、オーバーラップしていないですね。けども、全部が重要な技術になっている。逆にいうと、自分のプログラムでやらないものに関して、それぞれの先生方はどのようにお考えになっているのでしょうか。つまり、やらないということに関して、やらないから知らないのか。実は産業界側にいるとやらなかった項目も重要ですから、最低限言葉は通じて欲しい。お互いに言葉が通じないと非常に困るので、大学の中である程度通じる必要があるのではないのでしょうか。

(賀谷) 我々は今、大学でカリキュラムを考えて、それをベースに産業界のいろんなニーズを聞き始めようと思っています。そういう意見を聞いて、よりよいカリキュラムをつくっていきたいと思っています。

(加藤) 学生にどうやってソフトウェアの実践能力を身につけさせるかは結構大変だと思っています。例えば企業に派遣することも考えられます。1つはインターンシップですかね。

(フロア2) インターンシップみたいなものもあります。賀谷先生のシミュレーション・スクールの中にありますように、課題を出してもらって、それを解くという中で、現場の問題を解くのに境界条件をどう与えるかとか、物性をどう使うか、そんなところで苦労したりすることがあって、そういう問題に取り組むというようなやり方で実践する。実際の問題を、企業内秘密にならない程度に出していただく。あるいは、講師というほどではないですけども、来ていただいて、実際に学生と話をして、こんな問題が解けないかというのを投げかける、そんなような場が幾つかあれば。

余り形にとらわれないで、企業からの問題か、人が大学にお邪魔する、相談に乗っていただくというやり方でも、比較的伝わるのではないかなと思っています。

(賀谷) シミュレーション・スクールで企業の方に来ていただいて講演するとか、実際に課題を提供していただくとかいうことを始めております。

(フロア2) 学生の反響はいかがですか。

(賀谷) やっぱり実践の話は、学生は非常に興味があります。ですから、非常にいいレスポンスがあると思います。

(加藤) 時間になりましたので、これで議論は打ち切りたいと思いますが、終わる前に今日の議論をまとめたいと思います。今日の議論で、計算科学の基軸、特に産業の目で見たときに、どういう能力が必要かという全体像は見えてきたと思います。ただこれを一度に教育することは絶対できません。できないけれども、まずは全体像をきちっと定義しないといけないということでした。私は、それが学問の体系になるのではないかと考えています。そういうことを意識した上で、3つくらいのプログラムを用意し、特にソフトウェアの利用を重視したプログラムでは、インターンシップや産学の相互乗り入れ講座、企業の人々の講演を行っていくことが重要かと思えます。

産と学が連携して何をやるべきかという議論では、茅先生のご心配の、次世代スパコンの本格活用も、共同研究という枠組み内で使っていけばいいということで、特にモデリングから計算の実践、結果の判断、特に心眼を身につけさせる。アイデアをテーマに結びつけられるような、産学が共同するような場を、国が中心になって設ける。理化学研究所でもぜひそういうことをご推進いただければと思います。

以上、今までに殆ど議論してこなかったことを、この4時間で結論を出すのはなかなか難しいのですが、多少議論が進んで、皆さんのご参考になったことを祈念して、この会を終わりたいと思います。(拍手)

## 6.2. 分科会 B :

「計算機科学と計算科学の学際融合—その意義と人材育成を考える—」

日時 2008年9月16日(火) 14:30~18:00

会場 MY PLAZA ホール

モデレータ : 宇川 彰 (筑波大学 教授・学長特別補佐 計算科学研究センター)

パネリスト : 久門 耕一 (株式会社富士通研究所 IT システム研究所 主席研究員)

常行 真司 (東京大学 大学院理学系研究科 教授)

中島 研吾 (東京大学 情報基盤センター 特任教授)

中島 浩 (京都大学 学術情報メディアセンター 教授)

室井ちあし (気象庁 予報部数値予報課 予報官)

宇川 彰 (筑波大学 教授・学長特別補佐 計算科学研究センター)

分科会 B「計算機科学と計算科学の学際融合」のパネルディスカッションの問題提起をします。

計算機科学、すなわち計算機のハード、ソフトの研究開発や運用に携わる側、それから計算科学、すなわち計算を主たる手段としてサイエンスのさまざまな分野を研究する側、この両者の間に乖離があるのではないか。極端な言い方をすれば、我が国ではこの 2 つのコミュニティ間に殆ど交渉がない。

そのため、計算科学ユーザー側は、システムをブラックボックスとして見がちで、システムのポテンシャルを生かし切れない。その結果、革新的な成果に結びつく計算がなかなかできない。一方、計算機科学側は、計算ニーズを明確にとらえられず、技術発展と革新のポテンシャルをシステム開発に完全に生かし切れない。その結果、計算ニーズにこたえる革新的なシステムが建設できないという側面があると思います。

こうした乖離は、計算機システムの高性能化、それに伴う高度化・複雑化とともにますます広がっているように思います。したがって、計算科学における革新的な成果、それを生み出す革新的な計算機システムの創出もまた困難さを増している、これが問題意識です。

数年のうちにペタ京速計算機が稼働し、その先にはもっと高速の計算機の開発も予想される中、計算科学が科学の中で革新をもたらしていくために、前述の問題意識に立って、計算科学と計算機科学の融合はどういった意味合いで必要なのか。計算機科学と計算科学の学際融合を支える体制や人材育成はどのように行えばいいのか。学際融合のために我々が今とるべきアクションは何かを考えていきたいと思います。

パネリストは 5 名の方です。久門さんにはベンダーの観点から、常行さん、室井さんにはそれぞれの科学分野の専門家の観点から、また中島浩先生、中島研吾先生にはむしろ計算機科学寄りの立場からのご発言を期待しています。また、フロアからのご発言も頂戴したいと思います。

久門 耕一 (株式会社富士通研究所 IT システム研究所 主席研究員)

私は、株式会社富士通研究所 IT システム研究所におります。富士通という会社は、ハードウェアからアプリケーションまでオールラウンドでやっているように見えますが、その見かけとは異なり、それぞれの担当は独立した部署で、互いの交流は疎です。

ハードウェアを設計する側は、従来動いていたアプリケーションとの関係で、過去との互換性がなければいけないとかたく信じているので、従来のコードを高速に動かすことを念頭にアーキテクチャを開発しています。VP の時代は、アプリケーションになるべく負担をかけないように、コンパイラが頑張ることでアーキテクチャを隠蔽し、多少の書き直しで済んでいました。もちろん最高性能は出せませんが、ユーザーは計算機を余り意識する





ことなく、それなりの性能が得られました。

ところが、現在は MPI がアーキテクチャの主流になっています。富士通を含めて日本のベンダーは、アプリケーションに大きな負担をかける MPI が広く普及することはないと考え、MPI に余りまじめにかかわってきませんでした。今後 MPI のシステムをさらに次世代に持っていくためには、アーキテクチャの方も、新しいアプリケーションをどう書くべきか、アプリケーションの書き方から含めて考えていかなければいけません。

一方、アプリケーションをつくる側は、アプリケーションをどうやって既存ハードウェアに乗せるかを念頭に最適化を行います。最適化するためには、アーキテクチャのさまざまな細かいことを知る必要がありますが、アプリケーション側とアーキテクチャ側は分離していますので、互いの知見が広く共有されているとはいえません。最適化のためのアプリケーションの開発もしくは書きかえができる人間はそれほど多くありません。MPI の次を考えると、企業においても設計とアプリの融合は課題だと思えます。

革新的技術開発では、何を解きたいかということが最初にあるべきだと考えています。問題が何であるかをきちんと定義し、その解決のために最適なものは何かを考えていくことが重要です。何を解きたいかがあらかじめ決まっていて、それさえ解けるのであれば、タイガー計算機を持ってきても、ソロバンを持ってきても、手段は何でもいい。アプリケーションにはそうした自由度があるのです。

富士通も含めたベンダーは、最近殆どの部分が水平分業になっています。つまり、アーキテクチャを誰かがつくって、その上にコンパイラなり OS なりソフトウェアを誰かがつくって、さらにその上に应用を乗せるというプラットフォームありきの考え方、プラットフォーム起点設計を行っています。しかし、本当にやりたいことは、プラットフォームを使うことではなく問題を解くことですから、何を解きたいかを最初に決めて、それを解くためにはどんなアプリケーション、ソフトウェア、アーキテクチャが必要かという順で思考する応用起点設計に変えていくことが重要だと思えます。

実際の作業上は、水平分業から、それぞれの分野のエキスパートが互いに交流し、それぞれが複数のドメインにわたって理解しながら物をつくり上げていく傾斜分業という考え方になるだろうと思います。その場合、アーキテクチャはハードウェアですので、電線やトランジスタなど物理的なものに強く縛られます。アプリケーションは解きたいものですから、これも後で勝手に変えることはできません。アーキテクチャとアプリケーションはある程度フィックスされています。一方、ソフトウェアは人造物で自由度が高く、それでできないことは少ないですので、ソフトウェアが媒介としてアーキテクチャと应用を取り持つ形が好ましいのではないかと思います。

ただ、人材の育成は難しいです。アプリケーションはバグがなかったとしても、書いてすぐはなかなか性能が出ません。企業内では高速化するチューニングを必死に行っているのですが、チューニングが最も頻繁に行われるのはハードウェアの調達時期で、そのノウハウが公表されることは余りなく、企業の中で細々とやっている状態です。

一方、パブリックにできる大学側では、アプリケーションで何かアウトプットが出た場合、例えば元素でも素粒子でも、自然のものの構造を発見したという場合は評価されます。しかし、今まで 1 時間かかっていたものが 10 分になったという最適化、既存製品もこうなると速くなるというノウハウを発見しても、リバースエンジニアリングと呼ばれ、なかなか評価がされない。昔、金融は金儲けといわれて余り評価されていませんでしたが、金融工学、「工学」と名がついてから評価が向上しました。アプリケーションの最適化が評価されないのは、学問としてみなされていないからです。性能を向上させる技術は学問であるとみなしていただきたいと考えています。

我々がとるべきアクションとしては、アプリケーションとアーキテクチャの並行開発、もしくはアプリケーションをフィックスしてからハードウェアを開発することが本筋だと思いますが、残念ながら、次世代スパコンのハード設計は既に進んでいますので、現在できることは限られています。

一番重要なことは、アーキテクチャ情報の公開と、これに基づいた既存アプリケーションの書き直し、あるいは新規アプリケーションの発掘です。つまり、何をつくっているのか、それはどういう使い方をすれば性能が出るのかを今すぐ考えることです。広くアプリケーションを使える環境をつくることによって普及させ、ソフトを開発する人を増やしていくことが重要です。

性能面に関しては、今後ますます難しくなっていくアプリケーションチューニングに対応して、さまざまな性

能を理解し、性能がどうして悪いのかを把握できるようにする道具を準備していく必要があると思います。

常行 真司（東京大学 大学院理学系研究科 教授）



私は、東京大学大学院理学系研究科の物理学専攻で物質科学をやっています。物質科学のシミュレーションにはいろいろなタイプがありますが、よくやられるのはモデルハミルトニアンのようなモデル計算です。物理ですから自然界を知りたいわけですが、物すごく単純化して現象を理解しようとする。大胆なモデル化を行うことによって、多体問題、要するに原子や分子や電子がたくさん集まったときに一体何が起るのか、そういったことに直接切り込んでいくタイプの計算です。

一方、自然を計算機中に再現し、虚心坦懐に自然の理解を試みようという立場から、できる限り現実に忠実なシミュレーションを行う第一原理計算があります。この計算手法は実験情報が足りないときに特に有用です。また、モデル計算と第一原理計算の中間的な方法もあります。私は主に第一原理計算の世界で仕事をしていますので、この分野に近い発言になるかと思います。

物質科学の世界ではこれまで計算機科学との協力が余り進みませんでした。その理由の第一は、科学というのは、物質科学の世界だけに限っても非常に多くの基礎方程式が存在します。たくさんの粒子の問題を扱うわけですから、そこには何らかの近似を持ち込まないとどうしようもない。その近似の持ち込み方によって全く違うタイプの方程式が出てきます。それらの方程式はいずれも不完全で発展途上です。

このようにものすごくたくさんの方論があるので、みんなで1つの方法論に特化して、そこを集中的にやるということが進まなかった。みんなそれぞれ考え方があって、大きな成果をもたらすと思って自分の仕事に取り組んでいますから、ブレイクスルーの種はいっぱいあるのですが、みんなで同じことをやるわけにいかないのです。

第二に、特定の理論に基づくプログラムを高速化するよりも、理論自体の改良の方が効果が大きいことが、少なくともこれまでは多かった。

第三に、高速化よりもプログラムの多機能化、それを使ってどういう物理量を計算するかということが評価される傾向が強い。

第四に、一発計算だけやってもブレイクスルーにならない。例えば1つの現象を理解しようとしても、通常は、初期構造とか、温度、圧力、組成とか、物理パラメータを変えた計算をたくさん実行しなくてはいけない。ということは、1点計算の計算量に限界があって、どうしても小さい方向にシュリンクする傾向があるわけです。

第五に、物質科学研究者は、小さいグループを組んで、その中で仕事をまとめようとする割とちぢんまりしたメンタリティーなのではないかと思います。また、計算機科学者を自分の研究に巻き込むときに、果たしてこれが彼らにとって業績になるのだろうか、つい遠慮してしまうメンタリティーもあるかもしれません。

今、物質科学ではどういふところに学際融合による高度なプログラム開発のニーズがあるかという、いろいろな方法論がある中でも、非常に多くのユーザーがあると思われる重要な方法論が幾つか確立してきましたので、それらの方法論をみんながもっと高速に使えて、大きなものに適用できるようにする。そして、基礎研究に限らず、具体的に物質開発というかなり応用に近いところでも役立てていきたいというニーズがあります。

もう1つは、計算機の能力がふえれば、それに応じて新しい理論の範囲ももっと膨らませることができる。新しい全く違うタイプの方法論もトライしてみることができます。その意味で、ムーアの法則に従ったコンピュータの性能向上だけ待っていたのではとても間に合わない。次世代スーパーコンピュータには大変期待しています。

私の周りで見られる学際融合や人材育成に向けた動きとしては、まずナノ統合シミュレーション。これは次世代スパコンのアプリケーション開発プロジェクトの1つで、分子研を拠点として、押山先生のグループのHP-RSDFT、平田先生のRISMを初め、選ばれた6本の中核アプリの高速・高性能化を目指して、理研あるいは筑波大学計算科学研究センターとの共同研究が始まっています。宇川先生の筑波大学の計算科学研究センターは、計算機科学者と物理学者の連携が非常にうまくいっているいい例だと思います。

計算物性科学ワーキンググループは、ナノ統合シミュレーション・プロジェクトの一部として始まりました。物性研に事務局を置き、北陸先端科学技術大学の寺倉先生を主査として、国内の研究者の組織化と研究教育にお

ける連携推進が試みられています。また最近、物質科学シミュレーション基礎講座（仮称）も始めようとしています。これは大学、研究機関だけではなくて、企業まで巻き込んでシミュレーション研究をやろう、あるいは一般向け講習会も含めて基礎講座を開講しようという試みです。分子科学の方でも同様のワーキンググループが分子研を拠点として始まっています。

東京大学の計算物理・化学研究連絡会は、物理の G-COE（グローバル COE）の採択を期に、学内の理工連携で教育と研究推進をやりたいということで結成されました。

東京大学の学際計算科学・工学人材育成プログラムは、平尾先生の基調講演でも触れられたように、学内の計算科学の教育を推進しようというものです。

この 4 つは、直近の次世代スパコンの話、全国のコミュニティ、産業との連携、学内の研究者教育、基礎科学の進化、学生・院生の基礎教育を目指しています。人材育成、学際融はこうしたいろいろなレベルで進めていかなければならないと思います。

#### 中島 研吾（東京大学 情報基盤センター 特任教授）



東大では今、本学の各部局が連携した「学際計算科学・工学人材育成プログラム」を策定中です。人材育成でも大学教育に特化したお話をします。

副題は「HPC 技術を使いこなせる計算科学分野の人材育成」です。「計算科学分野」は、ここでは科学、工学というアプリケーション分野を指しています。科学、工学の専門家が専門外の計算機科学を学ぶ場合、ある意味で一生勉強し続けなければなりません、一方で時間的余裕はそれほどありませんので、効率よく勉強できる環境整備が非常に重要ではないかと思えます。そこで、第一に HPC 教育プログラムを整備する。第二にプログラム開発基盤、これは HPC ミドルウェアとか GeoFEM といった、並列の大規模なコードの開発基盤を整備する。第三は、実際にそれを使ったオープンソースの大規模シミュレーションコードも整備していく必要があると思います。これはそのまま使うこともありますし、改良しながら使っていくこともあります。

教育プログラムとしては 4S 型人材育成戦略を考えています。4S とは、System、Stage、Status、Style です。1 つ目の System は、SMASH (Science, Modeling, Algorithm, Software, Hardware) です。科学技術計算の真髄は SMASH であるという言葉があります。これは非常に含蓄の深い言葉で、並列プログラムは SMASH を全部やっていないとつukれないという言い方もできますし、SMASH の一部をちゃんとカバーしておけば協力によってできるという考え方もできます。また、分野外の人と「私は M が専門です」「私は A が専門です」という形で話ができるという点で、非常に便利な言葉です。

Stage は、並列プログラミングに至る 4 つの段階です。①最初は言語とかエディターの使い方から始めて、②LU 分解とかルンゲクッタという基本的な数値解析を学んで、③その次に実際のアプリケーションをつくって、④それを並列にしていくという段階です。①②③④のそれぞれの段階でカバーしなければいけない S、M、A、S、H があるわけですが、③④段階になると、S も M も A も S も H もある程度カバーしてこななければいけないということになります。

私のこれまでの経験では、並列プログラミングは、単体のプログラムを理解していればそれほど難しくないと考えていますが、少なくとも今の本学の講義や演習では理論とかアルゴリズムで終わってしまって、プログラミングまでちゃんと教えていない。現状では③段階の教育が非常に大変だと思っています。

Status は、A 型、B 型、C 型、S 型という 4 つのレベルの人材です。研究者になる人、会社に入って仕事をする人、いろいろなタイプの人がいると思います。基本はスクラッチからプログラムをつくれるような A 型、B 型ですが、既存の商用プログラムを使う場合は C 型の教育も必要ではないかと思えます。S 型は、単にサイエンスを切り開くだけでなく、ライブラリや開発基盤の開発など、コンピュータサイエンスの発展にも貢献できる究極の人材で、この戦略の 1 つの目的です。これらの 4 つのレベルに対応した教育プログラムを提供することが重要だと思えます。

Style は、教育の形態です。基本はなるべくコマ数をふやさない。受講者の負担を極力減らしたいと思っています。また、どの専攻も、どの研究科も講義がいっぱい、これ以上ふやせないという現状もありますので、講義

や演習だけでなく、集中講義、遠隔の講習会、あるいは e-Learning も取り入れて、ある程度柔軟に対応したいと考えています。

大学の現状は、①②段階は既に各学科・専攻でかなりやられています、チューニングの視点が抜けていますので、その辺を取り込めるようなガイドラインをつくり、それぞれの講義や演習をそれにそって修正していただくことを考えています。③④段階に関しては、各研究科ぐらいところで基礎的な事項を教えるような共通講義を今策定しているところです。

スケジュールとしては、3年、4年から始めて、M2、修士の2年までにとりあえず④段階まで終えて、ドクターに進んだ人はそれを使ってサイエンスをやろうということを目指しています。来年度から本格始動の予定ですが、ことしの冬学期から一部開始します。カリキュラムの設定は、割と簡単そうな連続体力学とか数値解析が中心です。

それから、東大は T2K の連携の中で人材育成を担当することになっていますので、その核にもなっていくながら、他の大学とも協力していこうと考えています。

あと、今までお話ししたのは計算科学の人材育成プログラムですが、計算機科学の人にどうやってアプリケーションを勉強してもらうかということが結構重要ですので、それについても今後いろいろと検討していく必要があると思っています。

(宇川) 久門さんからは、アプリケーション、ソフトウェア、アーキテクチャを考えたときに、従来の水平型の分業から、むしろ斜め分業に行かなければいけないのではないかという視点。それから、最適化は学問になっていないので評価されないのではないかという視点がありました。

常行さんからは、物質科学に関して、その学問の性格、多様性とか、割と少人数規模でやっていることが、ある意味、計算機科学と物質科学の融合のハードルになっていたのではないかという視点。とはいえ、新しい方法論と計算機の能力向上がうまくスパイラルをつくるためには、融合はぜひとも必要だという話もございました。

中島研吾さんからは、教育という視点から、東大での具体的な HPC 教育の試みに関するお話、特に S 型人材が必要ではないかというお話がございました。

ここで一旦パネリストのご発言は切ります。フロアからご質問、ご意見をどうぞ。

(フロア 1) 教育の観点から、計算機科学や計算機工学に関して、これを 100 冊通して読めば全貌がわかるというような講座をつくれないうか。ハードウェアに 1000 億円かけられるのだったら、1 冊 1000 万円でも 100 冊で 10 億円でしかない。3 年か 5 年ごとに改訂版も出るし、フリーソフトウェアがおまけでついてきたりする。あるいは本屋に行かなくてもネットワークからダウンロードできるようにすると、必要な人は誰でも情報を手に入れられて、読んだだけではわからない場合は大学で学ぶようなアプローチもできる、そういう形も考えられると思います。

(中島 (研)) 東大ではそうしたことも当然スコープに入っています。私たちの教材は学内だけでなく、全国の大学、あるいは企業も含めて公開します。教材は本にするのは大変なので、e-Learning など 1 人でも勉強できる形にして普及したいと考えています。

(宇川) 私自身は物理ですが、「20 世紀は物理学の時代」といわれ、「〇〇物理学講座」なるものが戦後の時期から 1960 年代ぐらいまで出たと思います。それこそ朝永先生とか湯川先生とか当時の第一線の先生方が執筆されたそういう本で随分勉強した経験が我々自身にもあります。講座のようなものを出版するのも 1 つの大きな試みかもしれません。

(フロア 2) 4S 型人材育成で、Status A 型や C 型の人間は学術の世界で食べていけると思うんですが、人間の能力は一定ですから、S 型人間はオールラウンドといっても、相当のスーパーマンでない限り、どれもその道一筋の人にならなくて、結局キャリアパスが何もなくて自滅するしかないのではないかと。S 型人間として育てられても、彼らが受け持つような講座は日本の大学には一切ないし、将来の行き場がどこにもないんじゃないか。例えば物



理をベースとして学んだ後に A 型人間、計算機科学者として大成するとか、そういう人材を育てた方がいいのではないかと私は思ったんです。

(宇川) 学際融合を考える上での 1 つの大きなポイントだと思います。

(中島 (研)) S 型は最初から育てようと思って育つものではありません。おっしゃるように、物理なりある一分野をきわめた人が計算機もやるというのが今までの普通のやり方だと思いますが、そういう人にしても、「あいつは科学をやっていない」とか、そのコミュニティの中ではつまはじきにされてきたのではないかと思います。今も指導教員に白い目で見られているコンピュータ好きの学生がいます。少なくとも彼らを白い目で見ないようにしたい。そのためにもお話しした人材育成プログラムを進めたいと考えています。

(フロア 3) ポスドクが 10 年後に研究者として残れる割合は全体の数割にすぎない。私たちがネットワーク管理やシステム運営で公募を打つと、物理や化学や生物のポスドクの方がすごく応募してきて、「着任してから頑張ります」とおっしゃる方が多い。それを考えると、こういう学際融合教育で S 型を育成することは有効であり、キャリアパスというすごくネガティブな側面では実はポジティブなのではないか。

先導的 IT では優秀な人が極端に足りない。はっきりいって全然人材とはいえない人にソフトウェアのつくり方を教えています。それだったら、非常に優秀な博士の人材の方に日本の実際の産業を支えていただくことはポジティブかなとも思うわけです。その辺のバランスをどう考えるか。実はこれがこういうコースをつくらうときに考えなきゃいけない重い課題じゃないかと思うんです。

(宇川) 日本ではえてしてきわめることが評価されて、幅広くやれることが必ずしも評価されない。ここは久門さんの傾斜分業モデルのお話もつながると思います。

(久門) 私だったら、専門しかできない人は採りません。会社では仕事の分野が変わることが結構あるので、そのときに一点突破の人は行き場なくなってしまうのです。ただ、やっぱり 1 つは専門を持っていて欲しい。専門に対する深い知見があると、その知見は他に応用がききますから、幅広く自分の専門分野以外の物事もいろいろ見ることができる。高望みですけれども、ある意味でとんがっている、でも、とんがっている以外のところも見たいということです。S 型がもし幅広いだけだったらどうかといわれたら、その人とお話ししてみたいと思います。

(フロア 2) 上の立場の人間の再教育も必要ではないか。サイエンスの大御所の先生もしくは中堅どころの教育やポスドクが、古いプログラミングモデルや効率の悪いプログラミングツールを若い研究者にそのまま上から下へと押しつけている。その悪循環を次世代スパコン導入のついでに断ち切らないといけないと思うんです。

(中島 (浩)) 古い人の再教育は多分無駄です。私も 52 歳になりましたが、この年になって新しいやり方をやれといわれるのは非常に辛い。古い人間は放っておいて、学生さんをこっそり招いて、「あの先生が書いているプログラム、あれはあかんで」といってやった方が結果的に効果的ではないかと思います。

中島研吾さんのカッコいい計算科学の人材育成カリキュラムは素晴らしいんですが、これを学問だと思ってしまうと色々難しくなるし腹も立つ。ソフトウェア・エンジニアリングが学問としてちゃんと成り立っていないような日本の現状なので、学問だと思わずに、プログラミング作法とか開発手法とかコンピュータリテラシーを学ぶ、要するに歩き方だったり、電車の乗り方だったり、生きていくための方法を学ぶのと同じだと思えばいいと思います。

(フロア 4) あえて申し上げますと、計算科学、アプリケーションの人が、自分のアプリのチューニングを速くしたいけれども、それができなくて、もどかしく思っているというのは、性善説的な言い方だと思います。果たして本当にそう思っているのか。

我々計算機屋には、使って欲しいと思っているけれども、本当にどれだけ努力して売り込んでいるかという努力不足があります。一方、アプリケーションの人は、使うことで精いっぱい、どうやって性能を出すかというところまで踏み込んでできている人たちは、ほんの一握りだと思います。本質はもうちょっとドロドロしていて、性能を出すことを自分の仕事だと思っていない。そこをちゃんとコストをかけて埋められるか。その意識がまだまだ足りないのではないか。そこはすき間的という言い方は悪いけれども、別にドクターを持っていなくてもいい。だけど、プロの仕事として周りからリスペクトされる。その最大限の努力をアプリの人もしていただきたいと思うんです。

(宇川) では、またパネリストのご発言に戻ります。中島(浩)さん、室井さんどうぞ。

#### 中島 浩(京都大学 学術情報メディアセンター 教授)



コンピュータサイエンティストの視点から、計算機科学と計算科学の学際融合についてお話しします。

まず、我々側の融合に対するニーズですが、コンピュータサイエンスは真理を追究する学問ではありません。真理はもう追究され尽くしていて、あとは50万プロセッサで50万倍のスピードを出すとか、要するに最適化技術、わざの世界です。

ところが、この2年ぐらいスパコン屋さんをやってわかったのは、世の中には本物の科学がある。計算科学の人、例えば常行先生とつき合ってそのプログラムを速くすると、もしかしたら私の名前が「Nature」や「Science」に載るかもしれない。コンピュータサイエンスを一生やっても、これから「Nature」に載るコンピュータサイエンスの論文を書くのはかなり難しいと思いますので、これが私の1つのニーズです。

もう1つは、我々はコンピュータの上でいろいろな応用が走ることはわかっているんですが、1万行のFORTRANコードがあったり、逆に3000ファイルの140行ずつのFORTRANコードがあったり、想定をはるかに超えた非常に多様性のあるリアルワールドが見える。そうすると、1万行のFORTRANコードでも、10万個のFORTRANファイルでもいいじゃんとか、FORTRANプログラムのコンパイルが遅いのだったら、その遅いFORTRANコンパイラがこうなるとか、我々があるべき姿を求める自発的動機になる気がします。

それから、身内ではない本物のユーザーに出会えます。かつ、多くの場合、「先生のおかげで」とちゃんと喜んでいただけます。私の場合、LATEXという文書作成プログラムのスタイルをよく書いていて多くのユーザーに使ってもらってるんですけども、これに匹敵する喜びが得られます。

我々が計算科学に与えられるシーズは、コンピュータサイエンティストならではの魔法です。例えばシームレス高生産・高性能プログラミング環境という省力術。それから、何が遅くて何が速いかなど、性能に対する直観を我々は計算科学の方々よりもたくさん持っていると思います。また、長い間生きていると、皆さんが思いもつかない変なテクニック、わけのわからない方法、学問ではない裏わざみたいなものをいろいろ持っています。

T2Kの融合活動については、高性能計算に関するアクティビティを盛り上げるべく東大、筑波、京大の3者が協力し、研究推進、人材育成、支援体制整備の3本柱を掲げて日々努力中です。支援体制整備を担う京大は、3000万円の経費をいただいて、ことしからプログラム高度化支援事業、あなたのプログラムをただで速くしてあげますという事業を始め、8件のプログラムを対象に実施しています。

一種の持ち出しみたいになってはいますが、これをやることによって、高性能プログラミングとはこういうものだというツボを計算科学の方々に伝授できる。その結果、500万円じゃ大した計算機は買えない、だけどMPI化してセンターマシンで実行はできる、ラッキー、だったらやろうぜという気になってもらえるかもしれないわけです。一方、我々側は、新しい論文ネタ、研究ネタを発掘できるかもしれない。そういう期待があってこういう事業をやっています。

#### 室井 ちあし(気象庁 予報部数値予報課 予報官)

私は、気象庁のスパコンで動作するアプリケーションの開発、その運用と管理を担当しています。2年前まで気



象研究所にて、地球シミュレータを使った地球温暖化予測研究にも携わりました。そうした経験も踏まえてお話をさせていただきます。

どのアプリケーションも、もともと小ぢんまりした町工場的なものからスタートしていると思います。気象アプリケーションも、1920年代にリチャードソンが、方程式を離散化して数値的に解けば天気予報ができるのではいかと提案し、それが計算機の出現と観測網の整備で1950年代にやっと実現しました。以後、手計算から解放され、ノウハウを蓄積し、世界で競い合って優秀なシミュレーションプログラムが次第にでき上がっ

ていきました。

気象シミュレーションは今や盛大になり、気象庁も当初は数人だったのが、気象研究所等も含めれば100人の体制で開発しています。気象庁だけでなく、大学や研究機関でもいろいろなものが開発されています。気象学会でも3分の1がシミュレーション関係の発表です。ですから、人材は実はいるんです。小ぢんまりした研究室にいらっしゃるし、全国にたくさん散らばっているので見えないだけなんです。

地球シミュレータは気象シミュレーションの発展に多大な貢献をしました。そのハードが世界一であったことは間違いありませんが、そこで動作したアプリは本当に世界一だったかといえば、反省すべき点はあると思います。結局、規模にふさわしい研究開発体制にできるかどうか成否のかぎです。個々人がばらばらに自分の興味で動いていれば、決していいアプリはできないと思います。

今トップを走るスパコンはこれからもF1マシンだと思います。「誰でもスパコン」はうそで、家電のように簡単に使える時代は決して来ないと思います。F1マシンは運転免許を持っていれば運転できるかもしれませんが、性能をいかに発揮するにはそれなりの勉強が要ります。次世代スパコンにふさわしいアプリケーションの開発は、それにふさわしい開発体制をとらなければなりません。

その場合、職人はそれなりにいますので、問題はそれを束ねる「1級建築士」です。全体をきちんと設計できて、仕事をちゃんとおろせる人が必要になると思います。その意味でも「融合」は重要なキーワードになります。もちろん1級建築士だけいても仕事ははかどりません。大工を確保して、マネジメントをきちんとする。大規模なプロジェクトほど工程管理が大事になってきます。融合しただけではダメということです。

次世代スパコン向けアプリの開発は、稼働期間が決まっているので、既存のアプリでできることもあると思いますが、大規模計算は、新規開発もしくは既存のものを新しい計算機向けに再構築したアプリが絶対に必要になると思います。その場合、アプリの進化速度はハードのそれよりもはるかに遅いので、計算機アーキテクチャの先を見て開発しないと、そのアプリは長持ちしない。その意味でも融合が必要だと思います。

応用の立場から融合に期待するのは、まず計算アルゴリズムと演算・通信性能です。天気予報では基本的に解くべき方程式はわかっています。雲の取り扱いとか、海の上は観測データがないなどということがありますが、そうした細々した問題はアプリの大きな枠組みに殆ど影響を与えません。異分野でも同じような方程式を解いていると思います。解くべき方程式をどう解くかが一番問題になります。通信性能も、通信を減らす、回数をまとめるというのは我々もできます。「ここにセンドレシーブが要る」といわれたら、それも入れられますが、センドよりIセンドの方が速い、センドレシーブよりレシーブセンドの方がいいといわれたら、はっきりいって手に負えない。我々だけでは限界があると思います。

もう1つは、データハンドリングに期待しています。我々は非定常の問題を扱っています。時系列にいろいろな場を見ます。問題のサイズが大きくなれば当然見たいデータも飛躍的にふえますので、大きなデータは扱えないとか、1つのファイルシステムにおけるファイル数が限られているとか、ハードの問題で設計をやり直すことが多くあります。ですから、膨大な出力へのニーズがあります。

最適なプログラミングモデルは、わかっている人ほど、どういうものを使えばいいか心配しますので、ぜひ一緒に議論したいと思います。

効果的な融合、人材育成のために望むことは、新しいことをやる人は、最初のうちはレビューをしたり、キャッチアップをしたりで、成果がどうしても少なくなります。開発組織を維持するために、新しい人をきちんと評価する仕組みを整えて欲しいと思います。

それから、適当にアプリケーションのコードを渡して「これを高速化してください」「並列化してください」。

半年とか1年ぐらいたってから「できましたよ」といわれても、こちらもその間にプログラムを書き直していませんので、それをマージするという不毛な作業だけが残ります。融合の成果をきちんとまじめに生かそうと思ったら、随時フィードバックする仕組みが必要だと思います。

また、まさにこの場のような、ワクワクするコミュニティ形成が必要です。私はこういう場でコメントを述べ、意見もいただいて、元気をいただいています。そういうエンカレッジされる場がないと、私を含めてすき間で生きていく人間は居場所がありません。ぜひそういうコミュニティを皆さんそれぞれの立場でつくっていただきたいと思います。

(宇川) 中島(浩)さんからは、計算機科学の立場からのニーズとシーズということで、いろいろと新しい観点がありました。室井さんからは、現業もしている立場から、大規模プログラムをつくるということは一体どういうことか、随分新しい観点がありました。また、勇気をもらえるコミュニティの継続的形成という観点もありました。フロアからご意見、ご質問等をお受けします。

(フロア5) 素粒子分野で今一番必要なのは、プログラムモデルというか、大規模なプログラム体系の開発、その維持改良、学生への教育について、どういうものが一番いいのかということの研究する学問です。我々はアプリのソフトウェアを何か指導原理があって書いているわけではなくて、試行錯誤でやっています。定常的じゃなくて、どんどん新しいことを加えていくので、膨大になって手に負えなくなる。そういうものを教育に使うのはなかなか大変なので、それをいかに容易にできるかということをお教えられるものがあると非常に助かります。

(中島(浩)) その魔法はまだないですよ。それは本当はソフトウェア工学が担っていてしかるべきなんです。私の知る限り、それが実用的になった話は聞かないです。もちろんオブジェクト指向の設計論とか本はたくさん出ていますが、それが例えば3万行のシミュレーションコードの開発に直ちに役に立つものなのか。

(室井) 気象大学校というトレーニングの場があるんですが、だんだん拡張していくと、やっぱり難しくなりますね。スパコン用にチューニングしようと思うと、大抵プログラムがぐじゃぐじゃになります。なるべく理想的に読みやすいコードと最適化されたコードは余り両立しないと思うので、ある程度成果を求めるものと、それ自体は当たり前結果しか出ないけれども勉強用のプログラムと、目的を分けなければいけない。気象庁の中では研修も含めて幾つか取り組みをやっていますし、地球環境関係では、複数の大学をまたいで、インターネットを駆使して理想的なモデルを整理しようと取り組まれている大学の先生がいらっやいます。

(宇川) 大規模プログラミングをやる上で計算機科学の方はどういうふうに絡んでいけるのかといった観点は、いかがでしょうか。

(中島(浩)) 一般の大規模ソフトウェア開発は、性能要求が余り厳しくない。唯一組み込みソフトウェアの世界は非常に厳しい要求があって、実はそれで組み込みソフトウェアのエンジニアリングが非常にホットな話題になっている。我々もホットな話題にしていかなきゃいけないだろう。スーパーコンピューティングにおけるスーパーソフトウェア・エンジニアリングなるものを、スーパーコンピュータサイエンスの1つの分野として打ち立てていって、性能と、メンテナンスアビリティとかリーダビリティといったものを両立させるような開発手法を今後考え出していく必要があると思っています。

(フロア3) 非常に大規模な銀行の業務ソフトは、落ちたらその会社が終わるような世界ですので、全体の性能を10分の1にしても動く方を選ぶ。ところが、私がスパコン業界に入って一番感じることは、性能に対する要求のケタが違う。倍遅くするといったら、その技法は直ちに否定されるという世界をまだ生きているのではないかと。この辺を改良していただくと、いわゆる伝統的または我々が使っているようなソフトウェア・エンジニアリング、ソフトウェアサイエンスの有効な開発手段を使うことができるわけです。

現在、パーソナルコンピュータや業務用サーバの世界では、もはや性能は安全性を打ち立てるために全体の 9 割ぐらいが使われていて、本当の仕事は 1 割がする。それでみんながとても幸せになれるので、是非とも次の次ぐらいのスパコンは、FLOPS が 100 ペタあるけれども、そのうち 90 は安全性に使われて、10 で有効な仕事をす。だから、スパコンが今よりも 10 倍売れるという世界が来て欲しい。今のスパコンは無駄が許されない。そうではなくて、むしろ「性能は無駄に使うのが普通です」といって売り込むような時代が来て欲しいと思っているのです。

(フロア 5) 非常に時間がかかるルーチンを、我々が頑張ってマシンごとに最適化することは問題ないんですが、その上にいろいろなアプリを乗せたいときは、その部分を変えていたらやっつけてもらえない。最適化は頑張っ自分たちでやるけれども、どうやって全体の改良や保守管理がうまくいくようにつくるか。教科書があっても非常に抽象的で、実際の場合でどうやっていいかわからないので、こういうアプリで、こういうふうにつくりましたという例が何かあると、多分参考になると思うんです。

(宇川) むしろ QCD でそれを一緒にやるというのも 1 つの考え方ですね。

(フロア 5) 1 つ考えているのは、計算機工学の方に協力していただきたいということなんですが、我々が欲しいところと、計算機工学がやりたいと思うところの視点がちょっとずれているというのを非常によく感じます。

(フロア：渡辺) 過去のコンピュータはシーズオリエンテッドで、出せばそれをユーザーが使ってくれた。HPC の世界も、かつてはスカラーマシンで、アプリケーションを FORTRAN で標準的にコーディングしておけば、あとはコンパイラが全部最適化してくれるという時代でした。それからだんだん並列化になり、プロセッサの中も複雑になり、こうした学際融合の話が出てきたと思います。

コンピュータサイエンスの立場からいくと、平木先生がいわれたように、抽象化のレベルを上げれば上げるほど、「あなた任せ」でコンピュータは使いやすくなるけれども、コンピュータの潜在的なポテンシャルは引き出せない。性能をフルに発揮させることは極めて難しくなります。特に HPC の分野では、そのギャップが開くとポテンシャルを引き出せないということで、よりコンピュータの中身を知らないと有効に使えない世界になってきた。その観点から、久門さんがいわれたように、我々も情報提供して、これからすぐ使えるようにしなきゃいけないと思っておりますが、それもずっと長い将来を考えたときには我々だけでは限界があると思います。

結局、座学ではダメだ、実際に使ってみないとダメだということもあります。身近に使えるマシンがあり、そこにアプリケーション屋さん、コンピュータ屋さんも交わり、有効に使うやり方、あるいはアプリケーションの開発の仕方を学んでいく実際の場合が必要ではないか。また、人材育成も考えれば、大学のセンターの役割は非常に重要だと思います。

(フロア 6) 計算機科学側とアプリケーション側の努力不足というか、お互いに知らないところは確かにあると思います。私もど素人のつもりじゃなかったんですが、キャッシュの当たり方とか同期のとり方を変えたら、並列プログラムが 2 割速くなった、3 割速くなったとか、1 日で倍ぐらい性能が速くなったとか、計算機科学側の魔法を目の当たりにしました。本当のウィザードはすごいと思いましたが、そういう魔法はわかる形でみんなに見せるべきだと思います。こういうテクニックを当てたらこれぐらい速くなるという実例集みたいなものがあると、もうちょっと実感できるんじゃないかと思えます。

ただ、一方で、そういう歩み寄りも重要なんですけれども、まだ 1 個だけ、どうしてもひっかかっていることがあります。

昔と今とでアプリケーションプログラムの性質が少し様変わりしていて、計算機科学の人に相談しに行かない言いわけが 3 つぐらいあるんじゃないか。一つめは、1 回答えが出ればいいというやつつけ仕事もあります。そのプログラムを何倍か速くしても、そのプログラムの次のユーザーは自分のライバルです。自分だけ答えが出ればいいという仕事もあります。二つめは、まだプログラムが指数関数的に速くなる可能性が残っていて、なかなかご相談に行けない。三つめは、地球に優しくないですが、並列計算機がそこにあって、100 台より 200 台借りれば

もっと速くなるということであれば、ソフトウェア自体を速くする方向に自分の時間を使いたくないということがあります。

こうしたお気楽な、コンビニな感じのソフトウェアがサイエンスの中で重要でないかという、実はサイエンスの中の重要な部分に、そういうライフタイムの短いソフトウェアがどんどん入ってきているんじゃないかというのが私の周りでの感覚です。これはアプリケーションエリアのエコノミクスみたいなことなので、そういう分析ができる方に分析してもらわないとわからないんですが、お互いの努力不足だといってしまうと、それはちょっと昔のモデルなんじゃないか。どうしてもそれではすくい取れない何か新しい動きのようなものもあるんじゃないかと思っています。ただ、それでも、HPCの専門家の門をたたけるように、相談の窓口はどんどん広くしていただければと思います。

(宇川) 密度の高い意見のイクスチェンジがありました。ここで休憩します。

(休憩)

(宇川) 余り詳しいものではありませんが、米国と欧州の学際融合の事例を紹介します。米国では Oak Ridge National Lab、Argonne National Lab、ヨーロッパでは Edinbrugh のパラレルコンピュータセンター、ドイツの Juelich のスーパーコンピュータセンターから回答がありました。

まず、人員構成ですが、米欧の大きなところは、総勢 50 人～100 人規模です。その中で、システムの運用をしている人たちが 10 人～20 人。コードのチューニングとか運用支援をするユーザーサポートスタッフも 10 人～20 人。計算機科学、計算科学の人はそれほど多くないですが、それでも 10 人～20 人規模の人たちが働いています。



日本の大学あるいは研究機関に附置された情報基盤センターの場合、大きなところは教員が 20 人、技術職員の方が 20 人～30 人だと思います。その中で HPC はかなり人数が減って、システムとユーザーサポートがそれぞれ数人、計算機科学・計算科学の教員の方も数人規模かと思います。人員規模で欧米とかなり差があることが 1 つ大きな印象です。

日本で問題になるシステム運用あるいはユーザーサポートスタッフのキャリアパスですが、欧米では最終的に組織自体の CIO にまでなる場合もあります。実際にうまく機能しているかどうかは個々の研究所によってかなり状況が違うようですが、サポートスタッフのキャリアパスはちゃんとできています。

計算機科学と計算科学の学際的な活動ですが、米国では、コンピュータサイエンティストとアプリケーションドメインの人たちが一緒にやるということ、プロジェクトごとはもちろん、制度的にも実施しています。Oak Ridge では、スーパーコンピュータセンターのコンピュータサイエンティストが、計算するアプリケーションドメインの人たちに張りついて、さまざまなチューニングやアルゴリズム開発を行う制度があります。米国では Oak Ridge 以外でもこれと似た制度が随分広がっているといっていました。

ヨーロッパは、かけ声倒れに終わっている場合が多いという回答が多かったのですが、Juelich では、シミュレーションラボという名前をつけて、両分野が協力する体制はつくっているようでした。

教育・人材育成活動に関しては、アメリカもヨーロッパも、それぞれワークショップ、チュートリアル、クラスといったものを適宜、夏の学校、冬の学校という格好で実施しています。Edinbrugh はコンピュータサイエンスの修士コースを既に運用しています。

日本の場合、学際的な活動は、個別分野、個別プロジェクト、あるいは個別組織という形がまだ強いかと思います。教育・人材育成活動については、今日東大のお話がありましたが、ようやく始まりつつある状況かと思います。

国としての学際融合の試みに関しては、ヨーロッパは、融合の必要性は前からわかっているけれども、うまいかないというコメントが多かったです。アメリカは、SciDAC がもう 8 年近く走っています。

全体として、サポートスタッフも含めて、学際融合的な活動を一番積み重ねてきているのは、やはりアメリカ

という印象が強かったです。ヨーロッパは、日本をさほど変わらないけれども、少し先を行っているのではないかと。日本は残念ながら、組織的、体制的な取り組み、また活動も遅れているという印象です。

米国の SciDAC について少し紹介しますと、その目的は、実験あるいは理論だけではどうしても解けない問題に対して、HPC を組み合わせてサイエンスのイノベーションをやるということです。少人数規模の研究グループではなくて、分野全体を対象にして支援することが大きな特徴です。ソフトウェアやアルゴリズムに関しても研究します。

また、支援の申請に当たっては、サイエンスのアプリケーションドメインは応用数学、計算機科学とパートナーシップを組まなければいけない。計算機科学、応用数学と学際的な体制を組んで申請することが義務化されています。

さらに、ハードウェアあるいはソフトウェアのインフラストラクチャを築き上げていくという特徴があります。

第1期は2001年から5年間で終わりました。現在は第2期目です。予算規模は年額約60億円程度。分野は、フィジックス、クライメット、グランドウォーター（オイル）、フュージョン、ライフサイエンス、マテリアリズム、ケミストリーで、現在、30 くらいのパートナーシップが走っています。それぞれ年間数億円の予算規模で4~5年間走り、インフラストラクチャも含めて各分野の計算科学を推進しています。出てきた成果はその拠点だけのものではなくて、全米全体の共有物です。応用数学、計算機科学がかかわって、サイエンスの分野全体が計算科学で発展していくというプロジェクトで、うまくいっているのではないかとというのが私個人の感想です。

（中島（研）） SciDAC の教育について私からコメントしますと、アメリカでは1990年代から、計算機科学の学生にアプリケーションを教えるサイエンティフィックコンピューティングという大学院のプログラムが1990年代ぐらいからあります。最初は中途半端な人材を育てるのではないかと不安があったようです。プログラムの初期の卒業生は、40代を迎えようとしています。SciDAC で言うところのサイエンスとコンピュータサイエンスをつなぐ人材に育ってきているようです。そうした息の長い取り組みが SciDAC につながっているのではないかと。SciDAC が急にできたものではないと思います。

（宇川） 海外事例に関して、ご質問、コメントをお願いします。

（フロア7） ヨーロッパの幾つか試みられた学際融合はどれもいまひとつということでしたが、その具体的な情報はお持ちでしょうか。

（宇川） イギリスで70年代でしたか、学際的なプログラムを始めたけれども、予算が終わった途端に元の木阿弥に戻ってしまった。あるいは、e-science プログラムは多分現在も走っていると思いますが、当初のかけ声ほど学際的な成果につながっていない印象があります。イギリスは予算的な面が結構厳しくなっていることもあって、結局うまくいっていないということでした。

（フロア7） 枠組みと実質のずれという感じですか。

（宇川） そうだと思います。

（フロア8） SciDAC は、計算機科学と計算科学の融合というより、計算と科学の融合という面の方が強い印象を私は受けています。計算という意味は、応用数学の専門家が科学分野の専門家をアルゴリズムの面で助けることが非常に役に立ったと聞いています。全体としてはいかがなんでしょうか。

（宇川） 素粒子分野はグリットとかそういった面が大きな話題で、アルゴリズムに関してはそれほどインパクトはなかったと思います。全体については、私は存じ上げません。

（フロア8） 私どもの原子力分野でも、計算機までいかないで、いろいろな数値計算上の手法に非常に詳しい応

用数学の方と組んで、コードが2倍、3倍速くなった事例はたくさんあるようです。日本でもそうしたことができないかと思うんですが、パートナーを組める人をどうやって見つけるか。それからして日本では難しいかなと思います。

(宇川) 大昔、小柳先生と組んで5倍ぐらい速くしたことがあります。最近はそのようなことは余りやっていません。

次に、改めて計算機科学と計算科学が学際融合することの意義は何なのか。現在まで我が国で融合が必ずしもうまく進んでいない理由は何か。融合を促進するためにはどういうことをすればいいのか。この3点に論点を絞って、パネリストのご意見を伺い、その後フロアの皆さんと議論したいと思います。

(中島(浩)) 最近スパコン屋さんをやって、現場、リアルアプリケーションは研究ネタの宝の山であるという意識を持っています。もちろん「Nature」「Science」論文への唯一の道であるというのは重要なポイントです。計算機科学側はそのことがわかっていないと思います。一方、計算科学側は、計算機科学の魔法なり裏わざなりの威力、おいしさを余り認識されていないと思います。

具体的にどうするか。今現在、私なりにいろいろな営業をやっています。ただで速くしてあげるといって餌をばらまいて、計算機科学と一緒にやると、計算科学でもいいことがあるよ、みたいなことで当面ジタバタ頑張ろうと思っています。

計算科学にやって欲しいことは、リスペクトしていただきたいということです。謝辞は要らないから、少なくとも共著論文にしてくれ(笑)。感謝していただくのは結構ですが、感謝だけでまっぴりは何の意味もないわけです。

あと、一緒にカネを取ってくるというのは結構モチベーションになります。また、できれば学位論文の共同指導がやればいいのかと考えています。博士論文は共著できないので、その場合は謝辞で結構です。そういう形で一緒にやる場をどんどん増やす。そのためには我々は営業努力、計算科学の方にはリスペクトしていただくことだと思います。

融合する最大の意義は、スーパーコンピュータサイエンスの確立です。世の中の最先端のものは大概大学以外のところにあります。ところが、スパコンは大学がF1を持っている稀有な学問分野です。最近ではコンピュータが一家に5台などという時代で、コンピュータサイエンスへのワクワク感が薄れています。学生にも人気がありません。さすがにスパコンは「一家に5台」はあり得ない。世界で一番速い計算とか、世界で一番大きな計算とか、ワクワク感を持たせられる現場がある。これを前面に押し出してコンピュータサイエンスの再度の興隆を図るという意味でも、融合する意義は非常にあると思います。

(常行) 学際融合がうまく進まない理由は、我々計算科学側は、計算機科学の方はどういうことをすれば業績になるのか、何をやりたいと思われているのか、いまひとつ理解できない。この逆もあると思います。価値観をなかなか共有できないことがコミュニケーションを難しくしていると思います。

また、我々がやろうとしているアプリケーションを細かく切り分けて、計算機科学の方にわかっただけの内容のものを落とし込んでいく、モジュール化していくところで我々の努力不足があると思います。

それから、業績評価とキャリアパスの問題もあります。一緒にやってアプリケーションが速くなるとすれば、我々にとっては大変ありがたいのですが、それが計算機科学の方にとってどういう業績になるのか、私にはよくわかりません。

融合促進のアクションアイテムとしては、もちろん予算措置やカリキュラムの整備が大事ですが、大学は学生がやろうと思ってくれないと困るので、ダブルメジャーやメジャー・マイナー制を導入したらどうか。この場合、両方やろうとして両方ダメになるパターンも大いにあり得ます。ダブルマイナーにならないための努力をしないといけないのですが、それはどうすればいいのか、私もよくわかりません。

融合する最大の意義は、学問的な面で、新しい理論、これまで試すことができなかった方法論を計算に乗せて試すことができる。第一原理計算の世界では、密度汎関数理論が出てから、ちゃんとしたシミュレーションが始めるまでに約20年かかりました。紙と鉛筆の理論が実用化されるまでの期間が短縮されるだろうと非常に期待



しています。逆に、我々が計算機科学について学ぶことによって、そちらを出発点にした新しい理論もこれから出てくだろうと期待しています。

(久門) 融合がうまく進まないのは、会話をするための共通言語や認識が乏しく、アプリからはアーキテクチャが、アーキテクチャからはアプリがブラックボックスになっていることが最大の問題です。

実はソフト的な計算機科学とハード的なアーキテクチャの間でもギャップがあるように感じます。実際、私自身もアプリケーションとして実用される結構大き目のプログラムをつくったのですが、机上でこういう点のアルゴリズムを高速化しなきゃいけないと考えて、実際にそれをアプライしようとしたら、全然関係ないところを解決しなきゃいけないということがありました。そのくらいですから、計算科学で使われるアプリケーションと、我々のアーキテクチャなり計算機のアルゴリズム等との間にはミスマッチがかなりあるはずで、それを埋めるには実際に首を突っ込んでみるしか手がない。その意味でも学際融合は絶対に必要だと思います。

融合促進のアクションアイテムは、マクロ的には何をしたいのかという目的を共有することです。平木先生もいわれたように、問題のドメインをなるべく抽象的に上位に据えれば、汎用になって、計算機科学的にもアウトプットを出しやすくなるんですが、性能は劣化する一方です。逆にドメインをどんどん小さくしていくと、性能は容易に上げられるけれども、ドメインが狭いために特定用途にしか使えなくなる。このどこに線を引くかが一番難しく、かつセンスの要求される場所なのですが、この嗅覚を持った人間を育てることが融合促進で一番重要だと思います。

融合する最大の意義は、アプリケーションにはこれを解きたいというニーズがあります。それをソフトウェアで解決するのか、ハードウェアで解決するのか。あるいは、全然違うアプローチ、それは計算機ではないかもしれませんが、何をを使うかという選択の範囲を広げることによって革新的な手法の創出が可能になるわけですから、アプリケーションの目的をどうやって解くかをありとあらゆるレイヤーの専門家がみんなで協調して考える、それが最大の意義だと考えています。

(室井) なぜ融合が進まないか。私は違いますが、融合に反対する人の価値観をあえて語ってみると、組織にはミッションがあり、それなり長年引き継がれている価値観があります。応募できる予算枠もありますから、そういうものにとらわれてしまう。特に最近の独立行政法人化で、すぐ目に見える形の成果を要求されるようになったので、融合なんかやっている場合じゃないということになるわけです。

それから、もともと町工場的ですから、どこかで融合が起きると、そこだけファンドが投入されて大企業になり、自分の仕事がなくなると危惧する。実際はなくならないんです。町工場は町工場です。価値はあるんですけど、融合は反対しないけれども賛成はしないということになります。

また、計算機の高速化、最適化はカネを払って解決するものだ、それはSEの仕事で、自分の仕事じゃないと、計算機科学をサイエンスと思っていない人がいます。カネを払う人はまだましです。「私のプログラムが速くないと計算機じゃない」とか、調達のときにベンチマークに出して「速くして持ってこい」。確かに調達でカネを払いますが、それは正当な手段ではない。実際はそういう人がかなりいらっしゃると思います。それも価値観の問題で、私は彼らを再教育しても無駄だと思っています。

融合促進のアクションアイテムとしては、既存組織は価値観とかミッションに縛られているので、融合のための組織を新しくつくるのがいいと思います。できなければ、日本では数が少ないと思いますが、理化学研究所のように、複数の分野、しかもメーカーさんも巻き込んでいけるところが中心になって人や評価の見直しを加速させる。それから、随時フィードバックの仕組みをつくることだと思います。私がどこかのベンダーさんに「アプリケーションをつくりましょう」と声をかけたら、融合ではなく、談合とか癒着とかいわれてしまいますので、しかるべきところに音頭をとっていただきたいと期待しています。

融合する意義は、次世代スパコンではグランドチャレンジに向けてアプリケーションをつくっていきます。それはそれぞれの分野だけではやれない大きな成果、単なる合計ではなくて必ず相乗作用があると私は信じています。

(中島(研)) 融合が進まない理由は、やはりコミュニケーション不足、理解不足だと思います。お互いに相手

が何をやっているのかよくわかっていない。「ここは自分がやることじゃない」ということで、それっきりになってしまうんじゃないかと思います。また、アプリケーションの人は自分の問題が解ければいい、計算科学の人はある程度汎用性を追求したいという研究業績の方向性の違いもあると思います。

ただ、私の見る限り、計算科学の人は、リスペクトを含めて、理解のための努力を結構していると思います。私が4年ほどいた地球物理は、最適化しないと地球シミュレータを使わせてもらえないので、定年間際の偉い先生も端末室に来て一生懸命ベクトル化などをやっていました。そうしたことがいかに大事かをわかっている人が多いと思います。

融合を促進するためには、組織づくりや予算措置も非常に重要ですが、私はまず具体的に何かやることじゃないかと思っています。計算科学側はミドルウェア、といってもコンパイラよりはもっとアプリケーション寄りの、並列シミュレーションコードを開発する基盤を開発しました。処理、可視化、適応格子、連成とか結構いろいろなことをやらなければいけないんですが、これまではアプリケーション側の人が何とかやってきました。こういうところにもう少し計算科学の人が入ってきてくれるといいんじゃないか。同時に、計算科学でもこうしたことが研究として認められる土壌をつくっていくことも大切ではないかと思っています。

また、こうしたことをやってもらうためには、計算科学の人にもアプリケーションについて、「何となくわかっている」ではなくて、ちゃんと勉強していただく必要があります。東大では、細々とですけれども、学際計算科学・工学人材育成プログラムの一環として、コンピュータサイエンスの学生にアプリケーションのプログラミングを教える講義をこの冬学期から始めます。計算科学と計算機科学の微妙な隙間を埋める人材の育成は、そんな半端な人間をつくってどうするんだという意見もちろんあるわけですが、(この部分全く意味不明のため削除)非常に重要だと思います。

融合の最大の意義は、新しい発想が得られることです。また、短期的には多分仕事はすごくふえるんじゃないかと思いますが、長い目で見ると減って、すごく楽になっていくのではないかと思います。

(宇川) 3つの論点を1つ1つ議論したいと思います。まず、計算機科学と計算科学の学際融合の意義とは一体何か、改めて考えて本当にやるべきことなのか、どのあたりに本当に意義があるのかという点について、ご意見をどうぞ。

(フロア9) 我々は分子と分子の結合をシミュレーションしたい。それをその時点で一番速くやるとなると、例えばMDのプログラムだったら、それをチップに落とそう。あるいはMO計算なら、できるだけ速くハードウェアに落としていこうという話で、我々はソフトウェア、相手はコンピュータ関係、ある意味、学際的なことをやってきました。ですから、我々は必ずしも融合しないわけではありません。

しかし、我々は薬屋ですし、相手はコンピュータ屋さんです。融合の意義、それがそれぞれにどう役に立つのかということを経営者になかなか説明しにくい。「コンピュータでこういうことができますと、こういう薬を開発する上で非常に楽になるんです」という説明はできますが、「それはいつできるのか」という話になる。費用の問題がつきまわって、民間だけでやるとなると、我々はいつもかなり困るわけです。そこに例えば国からの研究費をもらうとかいう保証がないと、現場ではなかなか進まないのです。最速のスーパーコンピュータを1台つくって、我々産業の何の役に立つのかという問題も実はあって、現実に役立つようなところに研究費を出すシステムを今後文科省も考えていかないといけないと思います。

(宇川) 学際的な活動の必要性は認めつつも、それにかかる費用等を勘案したときに、どこに落としどころを見つければいいのか。特に産業界にとっては、そこはやるか、やらないかの分かれ道にもなる難しい問題かと思っています。

(フロア9) もう1ついうと、我々は量子力学の積分のところだけ速くしてもらえばいい。なぜ汎用をそんなに追求するのか。

(中島(浩)) それは御社が1000億円なり1兆円なり積んでくれれば、みんな必死でやります。なぜ専用であつ

てはならず、汎用でなければならないか。結局コストの問題なんです。

(宇川) 他のご意見を伺いたいと思います。学際融合は必要であるというご発言の方が多かったと思いますが、もう一步踏み込んで、どういうことで本当に必要なのか。

(フロア 10) 違う文化や性質を持った者が一緒になると、新しいもの、新しい世界が創出されるというのは間違いありません。ただ、その具体例をつくっていかないと、単なる抽象論になってしまう気がします。

と偉そうなことをいいながら、私は今具体的なアイデアを持っていないんですが、例えば会社で製品開発のプロジェクトが立ち上がると、プロジェクトリーダーが任命されて、その下に必要なメンバーを集めます。メンバーはみんなそれぞれ異分野出身です。最初はお互いに言葉が通じないんですが、この目的をいつまでに達成しなきゃいけないということで必死に議論しているうちに、だんだん話が通じるようになる。結果的に異分野からいろいろなことができる人が集まっているので、革新的な製品を期限までに開発できた、そういう設定ができれば、意義ある融合の具体的になるんじゃないかと思います。

(フロア 4) アプリが計算機システムと学際融合をやってどれくらい有効かというのは、例えば「この人に 1000 万円突っ込んだら、自分のプログラムが数倍速くなりました。それは CPU 費に換算したら 3000 万円です」ということで、少なくともある分野については定量評価ができる。もちろんお金や速さの話だけでは新しいことは進みませんが、「新しいことをやる」と大上段で形而上学的に話しても、誰もついてこないで、明らかにメリットがあるという証拠を幾つか積み上げることだと思います。

ある程度予算があって枠組みとしてやらせることと、スピードアップならスピードアップでいいから、過去に既に成果が出ていることを見せる。先ほどの製薬もそうですが、それが役に立つことを会社に説明するのだったら、一番簡単なのは経済効果です。そういうことを証拠として出した後で、そこからもうちょっと膨らませていく。アプリの人はそれで説明できると我々は思っています。

問題は、アプリ屋さんたちに歩み寄ったことで、計算機屋にはどんなメリットがあるのかということです。私は、タコつぼを掘って箱庭で住まないようにするために、リアルアプリの役に立つことをやっているということを負負することだと思います。それはサイエンスの立場です。計算機屋はそういう考え方でいくのがいいと思います。

(中島 (浩)) 本音をいうと、コンピュータサイエンティストは、クロックスピードの伸びが止まる、コア数がふえるという技術は今後本当に使いものになるんだろうかという危機感を非常に持っています。その意味で、我々の飯の食い扶持はもしかしたら計算科学にしかないのかもしれない。計算科学に食い扶持が存在することが証明できれば、もう 10 年、20 年飯が食えるというような危機感も持って、計算科学とつき合おう、というわけです。自分の周りのタコつぼを掘っても、なかなか 1000 コアとか 10 万コアとか使うアプリケーションは見つからないで。

(宇川) 私がやっている素粒子は、ハミルトニアンがもう決まっていて、これをベースに計算すれば本当の意味での第一原理で物事がわかる、そういう 1 つのテーマがあって、そのためには計算機をつくってもいいし、コンパイラをアセンブラで書いてもいい、何でもやるという分野かもしれません。自分が最初にある現象を計算して「こうなんだ」といいたいと思ったときに、コマースなマシンができてくるのを待ってられるかといった立場もあり得るわけです。

もちろん物質科学のように対象とするものが多様で、さまざまな計算をしなくちゃいけない。だから、全体性能は高くなきゃいけないけれども、1 つ 1 つの計算は小さいという分野もあります。でも、それでもトータルなリソースとしては、今の計算機では全然足りない。あるいは今の計算機の効率を 10 倍にしないとダメだという状況を考えると、やはり計算機科学の方々と一緒にやらないと、あくまでもブラックボックスを使うという立場にしか立てない。それでは世界で最初に計算して「これはこうだ」とわかる感激を味わうことはできないんじゃないか。多少理学、純粋科学の立場からの視点かもしれませんが、そういった観点はあるだろうと思います。

次に、学際融合がなぜうまく進まないのかということについて議論したいと思います。お互いがお互いをまだ十分に知り合っていないために、距離が遠いままでいるという印象が比較的強いように思いますが、ご意見をどうぞ。

(フロア 3) 日本ではポストの問題が殆どすべてだと思います。日本には計算科学の研究所はたくさんありますが、そこでは決して CS (計算機科学) の人は採用されない。「この人はネットワークと計算をする」というポストですら、CS 以外の分野の方がつく組織もあります。この状態を打破しない限り、キャリアパスが描けないので、優秀なドクターが出て研究組織に行かないという悪循環が続くと思います。

今、我々 CS のドクターは数が少なく、結構贅沢をいえる立場にいます。例えば 5 年とかの時限ポストですと、たとえ 1000 万円の給料をもらっても魅力が減ってしまいます。継続性がある、何らかのよいポストをある一定の比率で CS に分けていただくのが学際融合に一番必要ではないか。折角すばらしいスーパーコンピュータができるわけですから、それにチャレンジする CS の人が活躍できる場面をつくって欲しい。これは特に理研さんに期待します。

(フロア 11) 今の意見に全く同意します。今回のスパコンは、人材育成はいうけれども、ポストはない。ポストをよこせというと、成果が先だといわれます。一般論はそうかもしれませんが、僕はポストが先だと思います。ポストがないと、そもそもそこに人が進まないわけです。CS のポストがないために、CS で生きていく人が物理なら物理のポストにアプライして、物理の人と戦ってそのポストをとらなきゃいけないということをやっている限り、学際融合は進まないと思います。まずある程度パーマメントに近いポストをどこかに用意して欲しいということをお願いいたします。

(フロア 12) 私は学位を持っていませんが、計算機センターでネットワークや大型計算機の立ち上げをやってきました。脳科学、ゲノム科学とやってきて、今は 3 つ目の研究所です。次のところに移るまでは失業していました。また、ベンチャーとかに入っていました。安定的なポストは非常に切実な問題です。

それから、私が今やっていることは、研究者の望む計算機システムをより現実的なシステムとして仕様書に落とすことです。そういう観点で仕事をしている方は非常に少ないと思います。現実には周りを見ても人は足りません。その意味では、隙間的な業種だと思います。この業種は研究者や計算機メーカーさんとコミュニケーションする必要がありますから、隙間的な技術者もしくは研究者的な人を育成する際は、人が好きかという観点をぜひ入れてください。

(フロア 3) 筑波ではどうして計算機科学のポストをつくることができるのか。

(フロア 13) 計算機科学を必要とする分野とうまくいったことが一番大きな理由だと思います。素粒子分野は逆に計算機がないと生きていない。そういうところでお互いを必要としていたわけです。それから、コラボレーションの経験があることが他の分野でもうまく秘訣ではないか。我々計算機の方も、こういうときはアプリケーションに対してこういうアプローチ、こういう協力をすればいいということがよくわかるわけです。

私もポストは必要だと思います。その価値も認めますけれども、計算機も計算機として食っていかないといけない。中島 (浩) さんもいわれたように、我々はヘルパーではなくてコントリビューターでないといけない。計算科学のアプリケーションを見て、計算機の研究テーマとしてちゃんと成り立たせる努力ができる人でないとやっていけないんじゃないかと思っています。我々計算機側もそういう努力はしていく必要があると思います。

(フロア 14) 私は、化学の分野で理論化学あるいは計算化学をやっています。理論化学も計算化学も実験化学に比べるとまだ圧倒的に小さくて、ポジションもそんなにたくさんありません。多分物理の分野でもそうではないかと思っています。実は我々計算科学者自身もそういう問題を抱えている状況です。

我々理論化学・計算化学者としては、我々の分野はこんなに役に立つということで学問の価値、必要性を示し、ポジションを実験化学者に認めていただく以外に恐らく方法がないだろうと思っています。分子科学研究所では割と早くから理論化学ができたのですが、計算センターを通じて実験家に認めていただく努力を続けています。

これと同じことが計算科学と計算機科学の関係でもいえると思います

実は私が開発している RISM というプログラムは、次世代スパコンでペタ級の性能を出すことは殆ど不可能だとレッテルを張られていました。3次元のFFTをどうしても使わなければいけないということで、実行性能を出すのが非常に難しいと思われていたのですが、筑波大学にその分野の専門家で、国際的にも非常に評価の高い研究者がおられて、その方に協力していただくことになって、一挙に実行性能を出せる目処がつかしました。

計算科学者としての私が全く諦めていたことが計算機科学者との協力で可能になった。それは計算機科学者の方で私どものプログラムの価値を認めていただいて、将来有望であると認識していただいた結果だと思えます。そうしたことが分野間で大規模にいろいろなアプリケーションに関して行われていけば、将来の展望はもっと明るくなるのではないかと考えています。

(宇川) いろいろお話を伺っていると、体験を共有することがまず出発点で、そこに成功体験が加わればますますいいということが1つのポイントのような気がいたします。

それでは、3つ目の論点、融合を促進するためのアクションアイテムについて議論したいと思います。目的の共有、融合プロジェクト、教育、ミドルウェアの開発基盤、ヘルパーではなくてコントリビュータ、真の共同意識の醸成、融合のための組織づくりなどが挙げられていますが、今後、具体的にどんなことをやっていくべきか、ご意見をどうぞ。

(フロア6) 中島(浩)先生のスライドの「同情するなら共著くれ」を見て、私は「あっ、これだ!」と思いました。共著はアクションアイテムの結果だろうと皆さん思われるかもしれませんが、私は、とにかくまず最初に共著を増やすことを打ち出したらどうかと思います。

私はバイオと計算の中間のところにはいますが、ある微生物のゲノムを持って行って「このDNAを全部解析してくれ」と頼んだら、「解析したのは機械であって、おまえじゃない」なんて絶対いいません。たんぱく質のX線結晶構造解析を頼んで「共著に入れません」なんていうことは、絶対許されないはずで。何でコンピュータに限って、これだけの専門家が一緒に何日間も使って共著にならないのか。コントリビュータではなくてヘルパーだと誤解している人が非常に多いです。

遺伝子の計算機解析、ホモロジーサーチは、10年ぐらい前、本当に簡単な計算をするだけだったところにむしろ共著にしてもらっていました。ところが、今はネット上でそのページに行って、カット・アンド・ペーストしてボタンを押すと出るものですから、10年前の何百万倍も複雑な計算をしても「ありがとう」といわれて終わる場合があります。そのときの市場原理というか、向こうの意識で決まっているようなところがありそうです。

とにかく共著をするのが当たり前。できたら学会で、我々はこれだけのエキスパタイズを持っていて、HPCで扱っていることは、そこらのPCでやっていることとはこんなに違うんです、だから是非共著をしましょうとかいう宣言でも出して欲しいです。見ればその精神がわかるWebページもあればいいと思います。あとは、ちょっと世知辛いですが、計算機科学者と共著じゃないと通らないファンディングとか、計算機科学者と共著の論文を年に1本出さないと、ただで使えなくなるペタコンとか(笑)、そうやって共著を増やすことがまず最初かなと私は感じました。

(フロア13) アクションアイテムについては是非いいたいことは、もう少し制度として支えるメカニズムがないといけないということです。秋山さんもいわれましたが、SciDACでやられているように、両方来ないと通さない制度とか、そういうあるメカニズムをつくって回していかないといけないんじゃないかと思います。

先週フランスで、グリット関連の研究所のレビューのようなのをやりました。そのときに、大学から「スパコンに何十億円もかけて、本当に役に立っているか」と言われるのはヨーロッパも同様らしく、その話で盛り上がりました。その中で、共著にしろという話と似ているのですが、とにかく自分のところの計算機を使ったら、謝辞じゃなくてレファレンスに入れてくれ。そうすると、自分たちの計算機がどのくらい使われているか全部トレーサブルになる。それで使われていけば財務省あるいは文科省にいろいろな要求ができるという発言があって、大変感心しました。アクションアイテムをつくるときには、もちろん精神の部分はいいいんですが、みんなでのメカニズムを考える必要があると思います。

(フロア 15) あえて共著は実はよくないんじゃないかという意見を述べます。

筑波大の佐藤先生から、計算機科学者は計算機科学者として、計算機科学分野で研究できなきゃいけないという話がありました。私は確かにそうだと思います。私は計算機科学ですが、計算科学者と一緒にやっていきたいのは、新しいプログラミング言語をつくること、あるいはもっと新しい計算機を考えることです。なぜなら、計算科学者の書いているコードを時たま見ると、「うっ」と思うことが結構あるし、最近の FORTRAN のプログラムを書いている方でも、メモリーリークしていても気にせずに行っている人を見るからです。

そういった視点でやったときに共著論文はどういうふうに出てくるのか。少なくとも計算科学分野の雑誌には出ないだろう。私はそれぞれの分野で論文が出ればいいと思います双方ともにいろいろと議論して、新しいことがやっていけばいいんじゃないかと思います。最初のとりかかりとして共著もあるのかもしれませんが、共著、共著というと、ちょっと間違った方向に行くんじゃないかと思います。

ついでにもう 1 つ。アクションアイテムとしていろいろなことが言われていますが、じゃ、そもそもどなたがこういうことを実際にやっていくのか。誰がどう進めていくのかということを確認していかない限り、次回、来年の今日も同じようなことをいっているんじゃないか。それでは何も進まないの、来年は、アクションアイテムを誰がどこまで進めたかという議論にしないといけないんじゃないかと思いました。

(中島 (浩)) おっしゃりたいことはよくわかります。私も自分がやっている仕事の中では、コントリビューションをいかに計算機科学の論文にして通すかということは当然考えます。ただ、最低限の話として、A と B とがマッチして研究が進んだら、論文は共著でせと。逆に、例えば石川さんのつくったプログラミング言語があって、それを常行さんが使ったことによってその価値が評価されたら、石川さんは当然コンピュータサイエンスの学会に共著で持っていかなきゃダメです。それが共同研究というものです。論文を書く、研究を発表するというのはそういうものだとは僕は思っています。「Nature」が欲しい、「Science」が欲しいというのは当然、本音としてありますけれども。

(宇川) ちなみに、計算機科学と科学のどんな分野でもいいんですが、一緒に論文を書いた経験がおありの方は挙手していただけますか。「Nature」じゃなくてもいいです。——まだまだ数が少ないですね。

それでは、まとめに入ります。

2 つ大きな項目を立てています。まず学際融合は一体どういう意味合いで必要なのか。融合するにせよ、それは計算機科学と計算科学の両方から見たときに意味のあるものでなければならぬ。つまり、単なるヘルパーではなくて、お互いがコントリビュータであるという観点はつけ加えたいと思います。

では、融合は必要であるとして、実現の方策はいかに。ここが今後に向けて大事になるのですが、3 点まとめてみました。

まず 1 点目は、計算機科学と計算科学が共同する場がなければいけない。具体には、現在、次世代スパコンのプロジェクトが進んでいます。その中のナノ統合シミュレーションとか、ライフ統合シミュレーションとか、走っているプロジェクトに融合を制度的あるいは予算的に組み込むことはできないかということが 1 つの観点かと思っています。

もう少し長い目で次々世代ということも考えると、もう少し幅広く融合を促進するプログラム、ご紹介した SciDAC が 1 つの例だと思いますが、例えばそのクエストの中に両分野と一緒に提案するものを組み込む。あるいは、科研費の新領域が今年から始まっていますので、そういった分野で融合する申請を出して、それを認めてもらうということがあるのではないかと思います。これは、まずは体験を共有する場を具体的につくってこういうアクションアイテムだと私は思います。

2 点目は、教育・人材育成プログラムの組織的強化です。これは確かに大学の任務だと思います。計算機科学、計算科学の両者を何らかの意味でカバーするようなプログラムを充実する。東大では既に始めていますし、京大でも多少違った形かもしれませんが始まっています。また、筑波大にもあります。さらに、こういったことを個別の大学でそれぞれやるのではなくて、大学間連携を組んではどうか。もう少し幅広く言えば、次世代スパコンの神戸のセンターもそのネットワークの 1 つの中に入るものだろうと思います。

3 点目は、計算機科学と計算科学をつなぐ人材のキャリアパスの創出。「つなぐ」は言い過ぎかもしれませんが。計算機科学の研究者をきちんと処遇するポストがそもそも足りないのです、それを確保する必要があるというご意見もありました。

これはすごく難しい問題だと思いますが、まずは、例えば 5 年なり何年りの融合プロジェクトが何本か走ることによって、任期つきかもしれませんが、一定のポストを確保する。

それから、大学あるいは研究機関で、こういった人材はプロである、きちんと職を担保して処遇する必要がある方々であるという考え方を醸成する。そのためには、単に考えだけではなくて、給与制度とかいろいろな問題があります。それを少しずつでもやっていく必要があるのではないかと。

もう 1 つは、アカデミアだけに閉じていたのではどうしても広がりが出ない。産業界でも計算科学は既にいろいろな方面で使われていると思いますが、長い目で見れば、よくいわれるように、今後一層、計算科学を使うことが産業界の開発力強化につながっていくのではないかと。したがって、産業界でもこうした人材が必要とされていくであろう。そこで必要とされるような方々を教育して送り込んでいくことも、キャリアパス創出の 1 つのルートではないかと思えます。

以上のまとめにコメントがあればお願いします。

(フロア 16) 計算機科学の人材のキャリアパスは、大学はもちろん必要ですが、それだけではなくて、例えば JAXA とか、ミッションオリエンテッドの研究機関におけるキャリアパスも必要だと思います。アメリカでも Berkeley や Argonne は、大学自体じゃない形、業務として評価されるような形がとられていると思います。日本の気象庁も恐らくそうだと思います。論文が必要な部分もありますが、論文だけじゃなくて、業務としていかにやっているかということが評価の対象になる。大学での人材育成と同時にそういう方面の部分も進めないと、枠が広がらないし、人材が集まらないんじゃないか。その辺をつけ加えていただければと思います。

(宇川) 随分いろいろな意見が出て、それなりに有意義なディスカッションができました。これで分科会 B を閉会します。(拍手)

### 6.3. 分科会 C：生命体統合シミュレーション

「来たれ 若人」

日時 2008年9月17日(水) 10:00~12:00

会場 MY PLAZA 会議室 6・7

挨拶：茅 幸二（理化学研究所次世代計算科学研究開発プログラム プログラムディレクター）

このシンポジウムは3年目でございますが、昨日、第1日は非常に盛り上がりました。理研、文科省によるペタコン全体の説明と、平尾先生の一般講演の後、分科会 A は、計算機科学と計算科学をどのように融合するか、分科会 B は、産学連携をどう行うか、そこにどういう人材をつけていくかという、かなり重要な議論が行われました。

あらゆる分野において、計算機科学、計算科学がいかに重要な位置を占めるかについて、多くの方がそれを未来として既に考えておられることを実感いたしました。具体的には大変大きな問題がたくさんございます。

例えば産業界において、世界的に調べてみても、大型のコンピュータを使っている例は既に多く見られるが、日本においてはその例が余り見られないという経産省の方のご指摘もありました。今日の生命科学の議論で、医薬の世界においても、外国でこのようなことが行われる割合に対して、日本は明らかにまだ問題があるような気がいたします。

本日は、分科会 C では生命体統合シミュレーション、D ではナノ統合シミュレーション、E では素粒子・原子核・天文学という3つのセッションがございます。いずれも今後のペタコン時代に備えて、その未来をどうするか、どうやったら若い人がそこに集まるかというような議論が行われることになっております。

私の専門のナノに関しては、個体物理でいえば、当然個体のフェルミレベルを知るという問題、分子科学においては、分子また分子集合体を厳密に知るという問題では基本的な方程式があります。量子力学的な意味では基礎的な方程式であり、もともとのニュートン方程式、そのたぐいの方程式があつて、それを解いていくという問題、多々ある問題に挑戦するという意味では既になんか進化しておりまして、特に今では現実にディラック方程式がソフトとして存在する世の中になっております。一方、天体のことはよくわかりませんが、素粒子の部分でも、QCD といつか、例えばブルックヘブン・ナショナルラボという中で、特有のコンピュータを使いながら、かなり厳密な素粒子計算が集合体として行われていますし、それはペタに十分に値する仕事であるとみなされています。

本セッションの生命科学の分野は、生命体全体としては階層問題があつて、分子レベルから実際の人体に近いところまでのさまざまな問題が提起されております。例えば分子レベルは、分子科学そのものの問題を生命科学に拡張しようとするもので、いかに厳密解を大きなところまで持ってきて、フィジックスをちゃんとやるかという分野、またそれを含めてタンパクの医療に対する応用という問題が議論できるし、さらに大きな血管その他になりますと、それなりに流体力学の方で、ナビエーストークスの式を使うことで、医療にかなり役に立つ仕事が可能であります。

実際に本当の生命体の問題、まさしく生命の神秘と呼ぶような問題に対してどこまで挑戦できるかは、恐らくペタフロックスの問題とは思いませんが、そういう定量化問題の時代が来ているときに、本当に計算機科学がどのぐらいのコントリビューションをするか。今測定という意味では、細胞丸ごと、分子レベルの測定がかなり可能になってくると考えますと、測定の定量化がかなりされた現状で、挑戦しなくてはいけないターゲットだとは考えておりますが、多分1年、2年というスケールではなくて、もっと長期的な問題であり、いろいろな分野の若い方が参加をされる必要があると思います。

本日の議論は、将来的にいろいろな分野の中で基本的な問題という意味で、一番重要な分野だと考えておりますので、是非激しい議論をしていただければありがたいと思います。





## 生命体統合シミュレーション進捗状況報告：

姫野 龍太郎（理化学研究所次世代計算科学研究開発プログラム 副プログラムディレクター）

私は理化学研究所で、次世代スーパーコンピュータの開発プロジェクトの中で、生命体統合シミュレーションというライフサイエンスの分野でのグランドチャレンジを担当しています。そこで開発が進んでいる次世代生命体統合シミュレーションについて、現在の進捗状況をご紹介します。



「研究開発の概要と達成目標」ですが、ライフサイエンスの分野でのスーパーコンピュータを使ったシミュレーション解析、大量のデータ処理を一体どのように行うかを考えたとき、1つは解析的アプローチ、微分方程式が既知の方程式に基づきアプローチする方法、もう1つは大規模なデータ、ハイスループットの実験に代表されるたくさんのデータから、その中に隠された未知の法則を導き出そうというアプローチの2つが考えられるだろう。

「解析的アプローチ」に関しては、大きさのスケールが、 $10^9$  から  $10^0$  のオーダーまでであるわけで、 $10^9$  の開きがあります。これらを同一の方法でそのまま解くのは、今の計算機ではとても無理ですし、当然次世代でも、次々世代でも恐らく無理なんです。

そこで、大きさのスケールに関しては3つの段階に分けました。概念的には  $10^9$  の開きですから、 $10^3$  分ずつ担当するとぴったりいくわけですが、それではオーバーラップがないので、できれば4桁ずつ担当して、それぞれの重なる分野で互いに情報をやりとりし、スケール間をつなぎながらアプローチしようというのがベーシックなアイデアです。

「ペタスケール・シミュレーション」は、単純にこれまでどおりのソフトウェアの開発をやったのでは、次世代のスーパーコンピュータの性能をフルに発揮できません。そこで、ペタスケールに対応したシミュレーション技術を駆使し、最終的な目標である生命現象の統合的な理解、そのヘルスサイエンスへの貢献、先端医療等への技術基盤の構築を目標として掲げています。

「生命現象の統合的な理解」ですが、1つ1つの現象に着目すると、これまでも実験的にいろいろな方法で解析が試みられ、その現象の記述が行われてきています。ところが、生体の中では、それらのいろいろな反応が互いに拮抗する関係にあたり、1つの細胞で同時にたくさんの反応が起こっていたり、実際の生命現象の現場ではもっと複雑なことが行われていながら秩序立ったことが行われている。それらがあるがままに記述し、かつそれが予測できるまで持っていきたい。さらには予測から制御へ向けて進めていくことが、ここでやっていることです。

現在の「研究開発体制」ですが、分子スケール、細胞スケール、臓器・全身スケール、これらの3つがスケールに対応した研究開発を行うチームです。データドリブンのアプローチをとりますデータ解析融合研究開発チームがありまして、昨年11月に追加した生命体基盤ソフトウェア開発・高度化チーム、さらに事務体制として企画調整グループを置いています。それぞれのチームと対応したワーキンググループには、オールジャパンの体制をしくために、この分野でご活躍されている研究者の方に入っています。

まず分子スケールは、量子化学計算、分子動力学計算、粗視化モデルによる計算、この3つのスケールに分かれたアプローチがありまして、これらの手法を使いながら総合化する技術を開発しているということです。これによってタンパク質や細胞の機能発現過程のシミュレーションを行い、細胞スケールとの有機的な連携を図るのが「開発目標」です。

「開発計画」は、非常に微視的に見て、電子の場も考慮した量子化学計算をし、化学反応も含めて計算する量子化学計算と、それらを簡略化した分子動力学計算、さらには分子動力学計算を粗視化したモデルである粗視化モデル計算の3つをそれぞれ連携しながら計算していく。現在この3階層それぞれの計算方法をプログラム化し、テストを続けながら開発を行って、基本的な手法のプログラム開発は終わり、大体128から512並列程度までは性能が出るようになっていきます。数万並列でも性能を出すのが最終的目標です。

「細胞スケール研究開発」ですが、細胞スケールでのシミュレーションのアプローチが恐らく一番難しいチャレンジングな部分です。空間をボクセル空間に分割し、それぞれの細胞内の器官をこの空間内に配置したモデル

によって表現し、いろいろな物質の移流、輸送、反応を計算していくもので、これはとりあえず現在考えられる1つのアプローチですが、この他にも幾つかのアプローチをすべきであると、理研の内部で行われた評価委員会でも指摘をされております。

ここでの方法は、細胞内の空間を  $100 \times 100 \times 100$  という 100 万のボクセルに分割し、それぞれのボクセル空間の中でいろいろな物質の輸送と反応を E-CELL3 を拡張して行っています。これまでのところ、基礎的なものができ、3 万個のボクセルで計算をするシミュレーションプラットフォームができています。今後さらにいろいろな機能をつけ加えることで機能拡張を図り、高速化を図っていきます。同時に、この空間に切って輸送と反応を表現する方法だけではなく、幾つかの新しい方法について今検討を進めていて、来年度ぐらいから、そういう新しい方法について取り組めるかと思えます。

「臓器全身スケール研究開発」。これはもともと医療に対して工学的なアプローチをする目的で、これまでもいろいろ挑戦してきていましたが、血流、骨折、外科手術に対する臓器に力を加えたときの臓器の移動、外科手術のときの切断や、ピンセットでつかんで移動させるというようなシミュレーションにつなげられるものです。

現在力を入れているのは循環器系の疾患に対するシミュレーションで、心臓とか脳の血管での循環等、これにさらに血栓の形成とその輸送についてのシミュレーションモデルを組み込むことで、脳血管疾患と心臓血管疾患に関したものが日本人の死因の約 3 割を占めているので、それに対するシミュレーションを行ってこういうものです。

もう 1 つは、超音波を使った、がんを焼くような治療器具の開発、あるいは重粒子線を使った放射線によるがんの治療をシミュレーションする技術を対象にしています。現在、1 ミリ分くらいの全身ボクセルモデルを開発すると同時に、新しい構造流体連成手法、これは心臓が拍動するときに血管を押し広げながら動く、流れることをシミュレーションできる技術で、それと多媒質内の超音波伝搬解析手法を開発しています。

「データ解析融合研究開発」では、ペタフロップス級の計算によって、創薬ターゲット探索や個人差を考慮した医療のための基盤情報技術の構築を目指しています。これによってヒト全遺伝子を対象とした創薬ターゲット遺伝子探索の実現につなげるのが、達成手法としての目標であります。現在、分子のネットワークを地図として抽出するための方法として、大規模遺伝子ネットワーク探索及びタンパク質構造に基づく相互作用予測の研究を行い、新たな技術開発の成功と新たな並列プログラムの開発を行っておりまして、これらのプログラムが大体 128 並列から 512 並列で動くようになってきています。

「生命体基盤ソフトウェア開発・高度化」のチームが昨年 11 月からスタートしていますが、現在、分子動力学計算ソフトウェアの解析・開発を行っており、基盤ライブラリ、特に可視化とかデータの互換性を保つためのソフトウェアの開発をここで行っています。昨年 11 月に活動を開始して以来、既にかんりのソフトウェア開発を手がけていて、今後さらにそれぞれのチームに高速化で貢献していくことを期待しています。

「中間評価を受けての見直し」ですが、中間評価を受けて、ある部分では大幅に変更を行いました。昨年度末の中間評価を受けて、開発対象の重点化による見直しを行い、細胞スケールと臓器全身スケールではターゲットの絞り込みを行いました。分子スケールでは、それぞれの手法の開発を個別に行うのではなくて、チーム全体として膜タンパクと代謝酵素を対象を絞った解析を行うことで、チームとしてのアクティビティを明確化しました。データ解析融合のチームも、それぞれ個々ばらばらに見えるソフトウェアの開発を目標として掲げているように見えますので、チームとしては、「肺がんと薬」の関係で、実用レベルで役に立つようなソフトウェアの開発とテストを行っていくことにしました。

最後に脳神経系チームをつけ加えることとして、現在計画変更を行っているところです。脳神経系チームは、これらのスケールに対応した 3 つのチームと、データドリブンのチームという分類からすると、若干毛色が変わったような感じがしますが、人の生命現象だけではなく、人間を考えることの根源的な問いが脳のシミュレーションにあるわけですが、そこに至るのはかなり難しいわけで、次世代スーパーコンピュータの計算能力から考慮して、どこまで達成できるかということを考えて目標設定を行いました。

「チーム目標と共通目標」については、脳神経系は情報処理に特化



した部分と、神経細胞ということで、細胞のチームと、細胞チームのある機能をこちらでさらに深く精密にシミュレーションしていくというアプローチがあります。これらが互いに関連を持ちながら、10年から20年かけて統合的解析による生命現象の理解の深化、ヘルスサイエンスへの貢献に向かって進んでいきます。単純に今のソフトウェア開発を進めただけではダメで、生命現象を記述する数理モデルの発展、いろいろな生命システムに関する定量的な計測、あるいはデータベースがどうしても必須になる。それらを含めて発展させることで、行く行くはこういう高い目標へ進めるのではないかと考えています。

このプロジェクト自身は、あと3年で実用的なところまで持ち込むためのソフトウェア開発が主であります。現在どんなプログラムが、どのくらいの段階まで次世代スーパーコンピュータでできるかということ、ここで一覧表にまとめています。

## 質疑応答

(フロア1) 「中間評価を受けての見直し」について、いわゆる膜タンパクは、今なかなか容易に構造を決められないということで非常にいい方向に向いていると思うのです。また代謝酵素とか肝細胞はあらゆる薬剤がかかってくるということで、これも大変重要だと思います。循環器系はもちろんそうだと思う。1個飛ばして下の脳全体というのは、理研が脳センターを持っていますし、そこに大量の精力を使っているのです、ぜひともそこまでリンクしてやるべきだと思います。その上の「肺がん薬」は、あえて着目した根拠とその波及効果についてご説明願いたいと思います。

(姫野) データ解析融合チームのリーダーの宮野先生にお答えいただければと思います。

(フロア：宮野) 別に肺がんである必要はないのですが、メンバーが私と理研のゲノム医科学研究センターの鎌谷先生、統計数理研究所の樋口先生、東工大の秋山先生方で、共通の課題として、実際に実験系の中に組み入れるということで選びました。薬としては、抗がん剤はいろいろありますが、イレッサを初めとする薬を使った実験系が実際にございますので、それを使う形でチームの中で全部連携をとってやる体制をつくったわけです。



肺がんという言葉にしておりますが、EGF レセプターは非常に多様性があり、20 ぐらいタイプがあるといわれていますが、個人個人ですごく違うわけです。それにデータ同化の技術を使って個人のデータを同化して、どのようにパスウェイが違うのかを解析するには、それと EGF レセプターパスウェイの部分は非常に多くのバイオリジカルな知見がたまっていますので、このソフトウェア開発の研究が恐らく一番やりやすい、ベストな系だということで選びました。これが例えば肝臓細胞であろうが、他の薬であろうが、抽象化してそちらへ適用できるような形で考えているものでございます。

(フロア1) 国民的な死亡例からいって、がんはもちろんトップだし、厚労省の10年戦略にも入っているというバックグラウンドで、がんを持つてくるのはわかるし、今の実際のお話を聞くと納得するけれども、いきなり「肺がん薬」を持つてくると、何か大きな思惑があるのかなというので、その表現は考慮した方がいいと思います。

(姫野) 余りに具体的で刺激的かもしれません。

(フロア：宮野) 実際のところの研究はもう少しジェネラルな形で進んでおりますが、最後の落としどころ、どなたでもわかる形のメッセージというのは、こういう出し方をせざるを得ないのかなということで、こういうところに落ちつきました。

(フロア：北村) 逆に僕らから見ると、どこにフォーカスを当てているのかがはっきりわかれば、別に肺がんであろうが、何だろうが構わないのです。

(姫野) 見直しを行う過程で、チーム全体として一体何に取り組むのか、このプログラムそのものが一体何に使われるのかが見えにくいので、チームとして生命科学上の問題に取り組むわかりやすい一例として、具体的な名前を出しました。

(フロア：北村) 何で一番薬が効きそうにない肺がんを取り上げるのかという話です。

もう1つ、循環器系のシミュレーションという話は非常に面白い。それは手術にも関係してくる話ですからね。

もう1つは、多分回答が得られるであろうというシミュレーションもあるのではないかと。その1つは糖尿病の世界だと思います。ある意味では糖尿病はバイオマーカーが明快なんです。それに対するメカニズムがあるとわかっている話なので、それに対して具体的な数値を出せるという特徴があります。そういうのは比較的成果が出しやすい領域だと思います。

(姫野) わかりました。ありがとうございます。

#### パネルディスカッション

モデレータ：中村 春木（大阪大学 蛋白質研究所附属プロテオミクス総合研究センター長・教授）

パネリスト：北川源四郎（統計数理研究所 所長）

北村 一泰（大正製薬株式会社 取締役）

下條 真司（情報通信研究機構 上席研究員）

中野 明彦（理化学研究所 基幹研究所 中野生体膜研究室 主任研究員）

安井 正人（慶應義塾大学 医学部薬理学教室 教授）

中村 春木（大阪大学 蛋白質研究所附属プロテオミクス総合研究センター長・教授）

分科会Cは、「来たれ 若人」と題して、主に人材育成、人材養成に焦点を絞って、パネルディスカッションを進めていくことになっております。

最初に生命体統合シミュレーションの価値は、実験、理論科学と並ぶもう1つの科学といわれていますが、特に生物学の方では対象自身が非常に複雑ですので、理論生物学というのは殆どなくて、むしろ本当にシミュレーションをやっていないと理解できない部分だと思っております。その生命の理解とか応用としては、疾病や病態の予測、それらの臨床手術などの準備、そういったことの応用として、その役割は非常に多くの人が認めつつあるところではあります。

しかし、生命体シミュレーションは、もともとの生物学と、一方で数理科学、物理科学、情報科学などさまざまな違う分野との学際領域でありまして、バックグラウンドも違えばスキルも違うので、生命体シミュレーションそのものを専門とする研究者の絶対数が日本では少ないことがまずある。一方では、専門家の研究者がいろいろな領域に分散しています。例えば数理科学ですと、数理生物学という分野、物理科学では生物物理学、情報科学ではバイオマティクス、それぞれそれなりの分野をつくっているのですが、シミュレーションという言葉で融合していくのはなかなか難しい。

今日のパネルディスカッションでは、そういう問題意識をもとにして、研究者を育てるには何が問題か、今後何をすればいいか、問題点をはっきりさせていきたいと思っております。まず中野先生からお願いいたします。





私は非常にベーシックな生物学、細胞生物学が専門です。そんな人間がどうしてスーパーコンピュータなどというところに出てくるのか、プロジェクトのコーディネーターまで仰せつかっているのですが、自分でも意味がわからない(?)。

実は私は物理屋になろうと思って大学に入ったのですが、大学に入学したときにもう既にこれからは生物だよとすっかり転向していました。それでも物理に対する魅力はずっと捨て切れずに、今でいう構造生物学ですが、NMRを使ってタンパク質の構造を解析するという、今や非常に大きな分野の先駆けの研究室に入って、修士課程では<sup>1</sup>H-NMRの縦緩和時間のシミュレーションをやってプログラムも書きました。

今考えてみると、これは非常に間違っただけのやり方です。シミュレーションでありがちなのは、現象を記載するのに都合のいいパラメータで、これで説明できたとして満足してしまう。なぜそのパラメータで合うかという裏づけもない。こういうことをやっていたのでは生物の理解にはつながらないという自分の大きな反省点であります。

その後もしばらくNMRの仕事が続けたのですが、就職してからは物理化学からきっぱり足を洗い、もっともどろどろした生物の世界に入りました。生物はそんなに生易しいものではないということを当時の上司に強烈に仕込まれて、確かにやってみると、本当に恐ろしいほど複雑です。特に私は遺伝学に非常に魅力を感じたのですが、生物に問いかけて、たった1つの変異がある現象を引き起こしている。それはある答えを生物がくれているのだ。そういうことがおもしろくてどんだんのめり込んでいきました。

細胞生物学という世界に入っていったわけですが、細胞の現象では特に理論生物学は難しい。そもそも学問分野としてあるのだろうかということは、多分10年ぐらい前だったらみんな無理だと言っていたと思います。ましてや計算で何かできるということは、私にとってはまだ遠いことのような気がしていました。しかし、近年の計算機科学の進歩、計測の進歩は、いろいろな意味で新しい世界を切り開きつつあると思います。

私は細胞生物学と発生生物学にかかわっていますので、そういう分野における計算機科学、数理科学、理論生物学という観点で提案させていただきたいと思います。生命には、ゲノムというバックグラウンドがあった上にさまざまな階層性があります。まずDNAとそれから作られるタンパク質の構造を、精密に動力学的にシミュレーションする。今スーパーコンピュータのテーマとして最も期待されている分野で、関連の方も多いと思います。

分子複合体ぐらいまでのところは、確実にこれからの計算機科学でやらなければいけない、手が届くところだと思います。また、非常にマクロの、例えば生態系のシミュレーションは、かなり古くから数学の対象になりましたし、循環器系のような流体力学、あるいは連動体力学という力学的アプローチによるシミュレーションも、いろいろな方法が適用できていますので、これもスーパーコンピュータの対象になる。

ところが、その間に挟まる細胞生物学、発生生物学が対象とするようなオルガネラから細胞、細胞から組織、器官のところ非常に大きなギャップがあります。この辺は計算機を使うにも基礎となる方程式がない。どんなに大型の計算機を振り回しても解くべき式が見当たらない。それを見つけていくことが多分これからのライフサイエンスと計算機科学を結びつける上で最も重要ではないかと思っています。

実際にいろいろな問題が計算機の対象になるためには、とにかくその陰に潜む根本原理を推測する。それに対する数理モデルを立て、その方程式を仮定するという過程が絶対に必要になります。これができているところが非常にマイクロあるいはマクロのところにあるわけですが、その中間がごっそり抜けている。そこで方程式が仮定できても、生命活動のデータは膨大なものがありますから、やみくもに何でも集めていいわけでは絶対になくて、本当に必要なものをきっちりと選んで得る必要がある。そこで初めてシミュレーションが意味を持つ。最初に原理を推測するところと、そこで数理モデルを持っていくところにもものすごく大きなギャップがあります。ここを何とかしなくてははいけません。まさにこれからそういう分野に飛び込んでいく人たちが育つことが、すごく大事ではないかと考えています。

例えば細胞生物学の中で、細胞小器官、ゴルジ体の中をタンパク質がどのように通っていくか。1990年ぐらいから世界中を巻き込んだ大論争があって、非常におもしろい問題です。光学顕微鏡で回折限界を超えるというのも数学、物理のとてもおもしろい問題ではあるのですが、それはさておいて、実際に超高分解能のレーザー顕微

鏡を開発して観察してみると、ゴルジ体の1つのシスターナが、性質を変えて成熟していくことがわかりました。どうやって荷物が運ばれていくかについて2つのモデルがあったのですが、小器官の中でシスからトランスという方向性に沿って、非常に見事に成熟が起こる。

生きたままで観察しているので間違いはないはずですが、こうやってシスができてトランスに変わっていく成熟が起こるのが本当だとして、次の謎が山ほど出てきます。なぜこういうことが一方的にできるのか。これは明らかに動的平衡の状態にあるのですが、そこで常に方向性が保証され、しかも最終的な平衡状態は流れの中で必ず決まるのです。基本的にはタンパク質と膜だけで行っている現象ですから、論理的に説明できるはずなのですが、そこにはおそらく数理モデルが必要です。

そこを何とかしたいというのが今の僕の個人的な興味ですが、この問題に限らず、細胞生物学、発生生物学というバイオロジーの非常に根幹的な部分において、こういう問題を本当に理論として考えていくことが必要ではないかと思っています。

#### 安井 正人（慶應義塾大学 医学部薬理学教室 教授）

私も計算科学をずっとやってきた人間ではありませんで、医学部を出てからしばらく小児科医をしておりました。医者がどんな生活を送っているか、皆さんも何となく想像いただけるとは思います。とても理論云々という時間はないのが現状です。ただ、医学部に来る学生は、高校で数学、物理、化学を一生懸命やってくる人間が多いので、キャパシティーはあるのですが、学年が進んでいくと、数学、シュレーディンガー方程式、何のこともやらなくなってしまいます。でも、キャパシティーがあるので、学生に自主学習をさせると、かなり突っ込んで興味を持ってやる学生も出てきて、驚いている次第です。



特に臓器シミュレーションをやっていくときに、その評価をどうしていくのか。実際に臨床の現場で診断あるいは治療の評価に使えるようになっていくのか。これは実際の臨床の現場に立っている患者さんと接しているのは、やはり医者ですので、医者がそういうものをどこまで理解できるようになるのかが、非常に重要な問題だと思っています。

私どもはウェットとドライの融合型の研究室を2年前に立ち上げました。私どもの薬理学教室は500平米のスペースをいただいて、この中で生物学の研究、細胞や動物実験などのDNAを扱う人間と、コンピュータサイエンスを主にやる人間が、両方入って一緒にやっております。今のところ、ウェット中心で、ドライはまだマイノリティーですけれども、共通のテーマを持って取り組むことが、こういうことをする上で重要だと考えております。

もう1つは、異分野の研究者が同じ研究室の中に混在する。少なくともある程度込み入ったコミュニケーションができるぐらいお互いを理解することが必要だろうと思います。

ただ、こういうことを実現する上で、若手育成という今日のテーマで私が思うのは、まず自分の分野を確立することが重要ではないか。どれも中途半端にいろいろかじって、自分のちゃんと立つ場所がないというのは、若手をこういう異分野研究で育成していく上では少し問題ではないか。まず自分の分野を確立した上で、異分野融合を研究している場を共有することで、さらに研究の幅が広がっていくのではないかと思います。

私はもともと小児科医で、赤ちゃんが生まれてくる時の体の中の水の分布がどう変わっていくのかということにすごく興味を持ちました。アクアポリンというのは、細胞の膜にあって水、 $H_2O$ だけを通すチャンネルです。これが約十数年前に発見されて、その研究室にずっといたということもあって、アクアポリンの生理的な役割、構造、機能相関の研究をしてまいりました。

人間の体の中の約3分の2は水でできています。実は毎日3リッターぐらいの水を入れかえているわけですが、ここにすごいポイントがあると私は思っております。ドライの部分とウェットの部分の分布がなされており、非常にうまくレギュレーションされていて、その上でアクアポリンは重要な働きをしているのです。

例えばMRIでどうしてがんや炎症が診断できるのか。これはとりもなおさず、我々の体はマジョリティーが水でできているからでありまして、がん細胞は、そういった水の含有量やその状態が周りの正常組織と違うのです。そういうことがどうして起きるのか。それが原因なのか結果なのか、まだよくわかっていないことだらけです。

いずれにしてもアクアポリンのおかげで体の中の水の分布の違いができてくる。

統合失調症、脳浮腫、感情障害、いろいろと出ておりますが、実は脳の中における水の分布、ドライ空間とウェット空間をつくるということは、脳の普通の神経細胞の機能にも非常に重要なことがわかってきております。研究の内容はともかくとして、アクアポリンという分子生物学といったところから入って、我々のところでは水の生命科学プロジェクトを立ち上げておりますが、そこにはどうしてもシミュレーションによるより深い理解、あるいは非線形レーザー顕微鏡を使った水分子動態の可視化、イメージングというのは非常に重要でありまして、その辺に力を入れております。

我々は、生体における水分子動態というテーマで、コンピュータ・シミュレーションと非線形光学レーザー顕微鏡を使って水分子を可視化するという両側面から異分野融合研究を進めています。

#### 北川源四郎（統計数理研究所 所長）



昨日のお話を伺っておりますと、計算科学一色でした。それ自体何ら異論を唱えるつもりはないのですが、私は、統計数理研究の立場から発言させていただきます。

非常に大胆に言えば、19世紀までの科学はニュートン・デカルトパラダイムあるいは、機械的な世界観のもとで研究が行われ、そこでは微分方程式のような数学が、科学の言語として重要な役割を果たしてきたと考えられます。ところが、19世紀の中ごろ、ダーウィンの進化論の提唱があって、世の中では、生命は進化し、変化することを示したわけです。現在では地球や宇宙そのものも進化するといわれていますが、あらゆるものが進化し、変化するといっても過言ではないと思います。

従来の普遍の真理とは少し違ったこのような進化するものの存在に触発されて、1892年にカール・ピアソンが「科学は対象でなく、その拠るところの方法によって定義される」と宣言して、そういった対象に対する研究の方法として科学の文法が必要であると提案しました。数理統計学はそれを実現するものの1つとしてその後発達してきたものです。

20世紀の科学は、理論科学と実験科学という2つの方法でドライブされてきたと思うのですが、20世紀の後半になると、非線形現象あるいは複雑システムの理解のために、計算科学あるいはシミュレーションが飛躍的に発達したことはご承知のとおりです。

しかし、21世紀の現在、世の中はさらに進んできています。それはICTの発達によって、大量で大規模なデータが集積しているということです。特にライフサイエンス、ゲノム解析等の分野を考えますと、大量で大規模のデータが取得され、データベースが構築されてきています。もう1つは、ライフサイエンス、ゲノムサイエンス等では、従来の普遍の真理というよりは、個性を持った個の情報が必要だということで、大量のデータを用いてそれに対する答えを出すことが必要になってきています。これは何もライフサイエンスに限ったことではなく、最近国家的にも重要なサービスサイエンスにおいても極めて重要です。

このような科学の拡大に伴って重要なポイントは、モデルの概念自体が変化してきたことです。従来の物理的なイメージの場合は、モデルは普遍の真理や実体をあらわすものでしたが、進化する対象から、複雑システムとなり、さらには有益な情報をとるための便宜的な機能をとらえるモデルというように、近年は実体をとらえるものというよりは、ある対象の1つの側面を機能としてとらえるものとして考えられるようになりました。

このように、モデルは科学研究において非常に重要な役割を果たしますが、モデル自体のコンセプトが変わってきていることが重要だと思います。こういう2つのことも相まって、昨日は計算機が可能にする新しい科学的方法という話でしたが、それが今や確立できるようになりつつあります。1つは、いうまでもなく計算科学ですが、もう1つは、大量で大規模なデータに支えられた大規模データ科学だと考えております。この図の左側は、理論科学、また実験科学という従来の研究者のインスピレーションに基づく科学研究の方法です。それに対して計算科学と大規模科学はサイバースペースですが、計算機が可能にする新しい科学的方法論で、今後はこの4つを完備させることによって、科学研究が効率的に推進できると考えます。

それから、生命体のシミュレーションにおいては、10の9乗のスケールを原理主導で積み上げていくことは不

可能ですので、原理主導型とデータ主導型を統合する、いわゆるデータ同化が極めて重要になってくると思います。

こういう新しい形の研究を推進していくに当たって必要な人材ですが、融合研究を可能にするポイントは、領域の研究から方法の研究までを見通せる人材、特に一番ポイントとなるモデリングができる人材が必要ですが、その見通しができるという意味で、特にサイエンティフィックなコーディネーターが必要だと思います。このためには計算科学、数理科学、統計科学を熟知し、しかもライフサイエンスのことをよく知っていて、さらに柔軟な物の考え方、見方ができる人、いわゆる従来のタコツボ型の I 型人間に替った T 型人材、あるいは II 型の人材が必要になってくると思います。

#### 北村 一泰（大正製薬株式会社 取締役）

私は、会社では、臨床開発と創薬研究の両方の本部長をやっております。

結論から申しますと、創薬というのは医薬品とはまた違いますけれども、これからの創薬、薬の候補をつくっていくレベルにおきましては、僕自身は 10 年前から、基本的には物理の力がどうしても必要だとずっと考えております。科学というのは合成、薬物をつくるという話です。薬理というのは薬効を確かめる。もちろん薬理の意味にはターゲットを探すというのも若干入っていますが、物理がなぜ必要なのかというと、コンピュータが速くなれば、そういう物理的なシミュレーションから薬理効果のある程度ダイレクトに予測できる。そういう意味でかなり重要であろう。もちろんこの物理は、統計力学的な物性物理もありますし、量子化学的なものもこちらの分野に含めています。



我々の総合研究所は 700 名ぐらいおります。そこではいろいろな研究をやっておりますが、その中で計算機科学を看板に掲げてやっている人間は、分子レベルでは 10 人です。あとシークエンス、いろいろな配列解析、あるいはターゲットの探索をコンピュータでやるのが 2 名で、データベースのいろいろなことをやっているのが 1 名です。

この 10 名になぜこの分野に入ってきたのか動機を聞いてみました。基本的には 2 つのパターンに分かれます。結局、現象を説明するためにはコンピュータを使わざるを得ない。そういう現象に興味があるという話で、手段として計算をやりましょうという話です。もう 1 つは、プログラミングに興味があって、対象として分子計算という話になるということです。たった 10 名ですが、多分これは他の製薬会社に比べても数は多いと思います。

「代表的医薬品の医療貢献」について、ここは僕の独断で書きましたが、いろいろな疾患があって、その 1 つの薬が非常に大きな社会貢献をしているわけです。統合失調症、上 2 つは精神病で、循環器もそうです。こういう薬がないことを仮定したら、どれだけ薬が必要かがわかりますし、それをどうやってつくっていくのかという話に展開していきます。

例えば図の中で左の化合物がありますが、これは阻害活性が非常に弱い。マイクロレベルですから薬には当然なりません。どうしたらもっと相手のタンパク質の機能をとめられるかという話になりますと、白い空間のところをもっと埋めてしまえ。赤が薬です。それを埋めるようにこの構造をつくっていく。そうすると、これは 7.7 モノという薬にしてもおかしくないぐらいの阻害活性を持つ。合成の経験によってこういうことをやっています。

我々が薬という候補分子を見つける最初は、あるスクリーニング、それはもうウェットですが、実験をやって 10 万、100 万の化合物をそのスクリーニングにかけます。1 系をやるのに 1 億ぐらいかかるし、100 万掛けますと、何系もありますので、かなり莫大な数だろう。その中から 1 つをケミカルにモディファイすればいいだろうというのは探してくるのですが、コンピュータでできるのではないかというのが 1 つの課題です。

右上の絵は実際に我々が昔やった結果で、これはクラシカルな MD を使っていますので、ドッキングまではできませんけれども、ある程度どこに収束するのかということ是可以する。その次に、実際に結合するにはどういう状態なのかということも、今はできません。量子化学計算が高速に計算できるようになると、ここは重要な意義が求められますから、それはできるだろう。将来ここを目指すべきだろうという課題ができます。また、いろいろなモディフィケーションのところで、最適化のところにもコンピュータはもっと使えるはずだろうという見通しを持っています。また、分子というのは、口から薬を飲みますと、それが腸壁から中に吸収されないといけま



せん。そういった膜を通りやすいかどうかとも非常に重要な話なので、それも多分コンピュータ次第ではできるようになるだろうと考えます。

もう 1 つ、入ってくる人のモチベーションを上げるためには、実は今のペタコンというのは非常に重要な話があります。表の上欄は、現在の計算する時間ですが、我々がつくったのは、ここが 10 日かかります。これは少しかかり過ぎですが、ペタコンができれば、1 分ぐらいでできるはずだろうという話です。

どういプロセスを追いかけるかにもよりますが、そのプロセスを簡単にすれば 1 年だ。例えば見えてきているのですが、100 年ではやる気がしないという話です。いろいろな方の努力がありまして、タンパクの原子配置の計算は、今度のペタコンを使うと、10 分程度でできるようになる。これはやる気を出すという話では、道具をつくるというのは非常に重要な話であります。だから、興味のある人は、こういう領域にどんどん入ってくるだろうと思っています。そういうジオメトリックの計算ができるようになりますと、いろいろな創薬において、重要な知見がコンピュータの中でできていくという話です。

結局、そういう現実の問題と、問題解決すべき課題を明快に示していくことが、これからの「来たれ 若人」には必要であります。だから、学生の間から現場に来ていただくと非常にありがたいです。

#### 下條 真司 (情報通信研究機構 上席研究員)



私は去年まで大阪大学にいましたが、今は情報通信機構にいまして、中村先生とはバイオグリッドというプロジェクトで私は情報側として参加させていただき、先ほどの北川先生のお話のまさに T 型人間をどうつくったらいいかというのをいろいろやらせていただいております、その中で大阪大学の取り組みについて少し話をさせていただきます。

PRIUS の取り組みですが、そもそものきっかけは、たまたま私どもに超高压電子顕微鏡がございまして、それを使って、アメリカのマーク・レスマンという UCSD のニューサイエンティストが、アルツハイマーのネズミの神経のスパインを見たいということで声をかけてきて、インターネットを使って、ただ見るだけではなくて、3 次元の立体再構築をやりたいということで、ステージを傾けながら写真を撮って、そこからコンピュータで処理して立体画像を得る、そういうので始まりました。

僕がこういう世界に巻き込まれたきっかけは、後にグリッドとかいろいろな動きにつながっていくのですが、E-Science ということで、この中には、例えば通信のテクノロジーとか、コンピュータの画像処理のテクノロジー、電子顕微鏡の光学の話、いろいろな要素がバイオロジーをするために必要であるという 1 つの例になっています。

こういういろいろな専門家を組み合わせて 1 つの仕事をしたくない。そういうチームをどうつくったらいいか。あるいはそのチームに入るような人材をどう育てればいいのかというのが我々のテーマです。この写真の中に並んでいる人たちは、計算機科学とか、ネットワークをやっている人、バイオロジスト、ウェブをやっている人、まさにいろいろな人が集まってそういうことが達成できたということです。

そういうエフォートを少し広げていこうというので、PRAGMA というコミュニティがアジアパシフィックにできました。これはアメリカの NSF のプロジェクトとして、ピータ・アルツバーガーという人が始めたのですが、僕らもバイオグリッドをやっていたので、たまたまそれに巻き込まれたのですが、その中で地球科学とともに、バイオサイエンスというのは、こういう計算科学を利用する 1 つの分野として非常に注目されまして、ワーキンググループができています。

その中で、E-Science は、もともとはネットワークがあって、いわゆるここでいうペタコンとか、電子顕微鏡のデバイスとか、そういうものを共有しようということで始まったわけですが、実はそこからデータとかビデオの共有が始まって、知識、ソフトウェア、人々というものを共有するというのが E-Science の 1 つの様相だろうと思います。

最近はこの幅広い分野のテクノロジーを統合するのにマッシュアップという言葉をよく聞かれると思いますが、いろいろなコンポーネントを組み合わせて 1 つのものがどんどん成長し進化していく。ある種のソフトウェアのプロセスがこの中に入っているということです。今後、計算科学とバイオロジーがつき合っていくには、バイオロジーもある種のソフトウェアの進化に巻き込まれていくことがあると思います。その中で、ミドルウェア、

ここでいうサービスが非常に重要なコンポーネントになってきたということです。

そういうところに入る学生とか若い人材をどう育てるかですが、そのために実は UCSD の方で、PRIME というプログラムを、NSF の支援を受けて始めました。もともとはアメリカの学生が、当時ブッシュ政権最盛のころで、余りにもアメリカの人たちは外を見ないということが危機感としてありまして、アメリカの学生を外に派遣しよう。ただ派遣するだけではなくて、インターディシプリナリーでインターナショナルのチームの中に学生を入れて、その中で融合科学そのものを体験させるというプログラムとして始まりました。例えば我々のところでは、毎年3名の学生が UCSD、これはアメリカの場合は、学部と大学院の境が非常にあいまいで、5年とか6年でマスターをとる感じなので、少し余裕がありまして、4年生とか5年生が来て、夏の9週間を使って、ある種のプロジェクトをこなして帰っていくというようなことをやります。

いろいろな学生を受け入れると、日本の学生とかなり違うことはよくわかります。それにインスパイヤーされて、大阪大学でも今度逆をやってみよう。我々の学生を今度は世界中に派遣して、同じようなことを体験させようというのが始まりました。104件の申し込みに対して15件採択されて、それを PRIUS というプログラムで始めました。

ちょうど PRAGMA という大人の人材ネットワークがありましたので、そのプロジェクトに学生を放り込むという形でやったわけですが、PRIUS から1つ進化したのは、学生を放り込む前に、まずその人たちを呼んできて、実際に何をやっているのか、講義で聞いてもらって、おもしろそうなところに参加してもらおうというような形でプロジェクトを始めました。いろいろな人たちを世界中から呼んで、実際に英語で講義をしてもらって、おもしろいところの研究室に学生が選抜されて行くということです。

今後のバイオロジーも含めて、我々の世界に必要な人材は、当然インターナショナルで、クロスカルチャーであること、またインターディシプリナリーである。その中でリーダーシップをとれる。これは実はそんなに単純ではなくて、ソフトウェアのマッシュアップの世界でリーダーシップをとるということは、いろいろな活動をアプリシエートしながら全体を取りまとめて1つの絵をかくという形のリーダーシップをとる人材がマスターに求められるのではないかと思います。

ICT の分野で、最近、技術鎖国といわれておりまして、日本でつくった技術が全然外へ出ていかないことが問題になっていますので、技術開国を世界に向けてできる人材、イノベーションをデザインできるような人材がまさに必要ではないか。実は米国では例えば D'institute をスタンフォードが始めております。何かをデザインするというプロセスだけをやらせるようなところでできています。我々も実はそういうものを大阪につくることを企画しております。そんな感じで新しい人材がこの中に入っていけばいいなと思います。

(中村) 私の方から少し補足をしたいと思います。安井先生はすごいなと思うのですが、自分の研究室でドライとウェットの両方の学際をされております。北村先生のところではオン・ザ・ジョブ・トレーニングという形で、もともとスキルのある方を創業という方向へ持って行っておられます。下條先生は国際連携という形の中での人材育成でした。

では、大学は組織として、そういう人材養成を学際領域でやれないのか。いろいろところでやっているとは思っているのですが、私のそばで、あるいは私がかかわっていることを少しだけ紹介したいと思います。

1つは、大阪大学では MEI (臨床医工学融合研究教育) センター、M はメディカル、E はエンジニアリング、I はインフォマティクス、そういう3つの学問領域の分野横断、部局横断の大阪大学の大学院教育で、大学の学部のスキルは一応持ったという人に対する異分野の教育をしていこうというもので、単位を互換する。さらに、社会人を対象とした学際領域の人材育成。要するに、折角こういう授業をするのであれば、社会人も対象にしようということで、それが膨らみ、さらには関西一円の私立大学と同じ授業をとっていただいて単位も互換する。こういう地域連携も始まって、もう3~4年動いております。

もう1つは少し毛色が違って、経済産業省系の NEDO がお金を出して、東京大学、京都大学、大阪大学の3つの大学の研究室が、蛋白質立体構造解析 NEDO 特別講座というタイトルで、主に社会人の人材養成ですが、授業と実習をする。これは私のところでやっております蛋白質計算科学講座で、大学院の学生の授業も兼ねる形で実習をする。

こうした非常に新しい学際的な分野において、大学で新しい講座をつくるのはなかなか大変ですけれども、こ

ういう形で外部資金を得ながら始めるという動きが今大学では起きております。これから神戸でペタコンのセンターができたときに、関西だけではなくて関東の大学も一緒に加わって、共通の土台の教育ができるのではないかと思います。

パネリストの方々のご意見をまとめてみますと、まず生命体シミュレーションでは、数理モデルをどう構築するのが非常に重要ですし、意味のある正しいモデルをつくるには、非常に学際的な融合が実現しないといけないことが強調されました。では、そういう学際分野の人材をどう育てていくかというのは、まず自分の専門が確立していることをもとにして個別の問題への対応、方法論と領域論という縦糸と横糸の関係を上手く紡いでいく。

最後に、若い人にこの分野に来て欲しいという以上は、将来のイメージを見せないといけないと思うのです。それは学問的な将来が、当然まず第一にあります、身分、ポスト、あるいは将来ということも非常に大事だと私は思っております。

## 質疑応答

(フロア 1) アカデミックの方から安井先生、企業として北村先生にお聞きしたいのですが、人材を育てるときの研究者の 5 年、10 年というスパンを考えたときに、例えば計算シミュレーションの専門家はもちろん重要だと思うのですが、例えばインシリコという世界を十分知っているときに、インビトロとかインビボの世界を経験しているというのは大きいと思うのです。この経験をいつ積ませるかというタイミングで、例えば企業の新入社員のと時から 1 年、2 年はとにかくあえて違うことをやらせて、専門分野へ戻すのか。ある程度インシリコがわかってきて、当人が壁にぶつかったという状況を見てか、あるいはその時にインビボ、ビトロに行って、現場を学ばせて戻すか。そのタイミングを間違えると、当人が折角やってきたことが意気消沈してしまうのではないか。その辺のお考えをお聞かせいただければと思います。

(安井) 私の個人的な考え方は、ある程度のバックグラウンド、少なくとも自分の専門分野の確立は必要ですけども、それをどこまで確立するかといたら、どんどん年限がたってしまうので、比較的早期の段階で入ってきてもらう方がいいと思っています。

でも、大事なのは、共通の興味、おもしろいと思えるものが共通のテーマで来てもらう。我々の場合は水ですが、それをどういう角度からさらに深めていくか、いろいろなものをさらに膨らませながらやっていくのが大事です。ただ、弱点なのは、それぞれの本当の最先端、トップの人が育っていくかというのは難しい面もありまして、国際間も含めたコラボレーション、例えば計算科学をやる上で、理化学研究所あるいは IBM と共同研究として進めていますが、そういうコラボレーションで補う部分がどうしても必要になってくると思います。そういうことがあれば、できるだけ早いタイミングが望ましいと思います。

海外の場合は、もう少しバラエティーに富んでいるのと、アカデミックとそうでない産業側との垣根が余りないので、人の行き来がある点が日本との大きな違いだと思います。

(北村) これは何パターンかあるのですが、実際我々のところで起こっていますのは、量子学出身の若手がいろいろな計算をする。そこで現実には、実際に 1 点計算だけでは必ずしも設計できないのです。こうだと思っても、逆に阻害活性が悪くなる場合がありますので、自分で合成するというわけです。合成の部屋に行かせてくれというのが 1 つあります。

もう 1 つは、例えばあるこういう薬をつくりたいという 1 つのプロジェクトがありますので、その中に計算ネットも強引に入れてしまう。それで合成と計算とのコラボレーションでやる。もちろん薬理も入っていますが、そういう育て方を実際やって、どういうデータ、どのぐらいの精度で取り扱っているのか。したがって、計算はどのぐらいの精度でやらないといけないのかという話になるのですが、量的に取り扱うためには、実際は計算の精度が悪過ぎてダメなんですけれども、基本的にはその 2 つが一番大きいです。

もう 1 つは、方法論をつくることも重要です。そういう形で特徴を伸ばしていく。そういう 3 つのやり方を今実際やっています。

(フロア：木寺) 一番上の生命体シミュレーションにおいて数理モデルをどう構築するか。教育ということを考えると、例えば物理化学というのは実体を教える学問。数理科学、情報科学といわれるようなものは、むしろ機能をモデルにする。当然それは重要だけれども、中野先生がおっしゃられたようにパラメータ合わせのシミュレーションがナンセンスだというのは、私もそうだと思う。

そこをどう埋めるのか埋めないのか。北川先生はそこに棒を書かれて、例えばデータ同化という技術は、そこを結び得ると言われた。多分私の感覚でいうと、マルチスケールと同じ話だと思うのですが、それを実現するひとつの手としてデータ同化があるとおっしゃられた。

例えば分子スケールは実体なわけですが、多分システムというイメージのむしろ数理的なモデルに近いところにある。細胞レベルでそのギャップをどう埋めるかということが、まさに一番難しいところだと思うのですが、そこをどうしたらいいかということが、本当にこれから考えなければいけない最も重要なところだと思うのです。

(北川) モデリングのところをどうすればいいかという答えはなかなか難しいわけですが、昨日、計算科学と計算機科学の間に厚い壁があるという話がありました。そこを超える問題として、例えば会話が難しい、文献が認められないなどが指摘されていました。なぜそうなるかは、私が見るところ割と簡単で、モデリングのところに関与していないからだと思うのです。そこに積極的に関与していけば、計算機科学の方でも、実際のサイエンスの方にもかなり貢献したということが認められると思います。

モデリングはどうしたらできるかですが、いろいろな階層があって、要するに、分子スケールの方は第1原理がかなり働くと思うのですが、上に行けば行くほど機能を見ていかないといけない。そこにおいては、方法の研究者、すなわち数理科学、統計科学、情報科学の人間が、従来の汎用的な知識を使ってモデリングに貢献することができると思います。

(中野) 私も答えを持っているわけではないのですが、そういう人を育てるためには、インターディシプリンが重要なのはいうまでもなくて、例えば東大にも理学部に生物情報という新しい学科ができましたし、狭い意味でのバイオインフォマティクスだけではなくて、いろいろな生物現象を、数学あるいは情報、物理という目で見えていくことです。

ただ、これまで余り上手くいっていなかった理由は、例えば物理分野、数学数理の人たちは、その目で生命現象を見て、これはおもしろいかもしれないということで浅く入ってこられるけれども、そこで実際の生物の複雑さとのギャップが余りにも大きい。

我々生物をやっている人間からすると、そんなことをやってもたいしたことはわからないよというところで満足されてしまうことが多い気がするので。逆に生物屋の方が余りに複雑なものを見てしまって、数学、物理ではとても手が出ないというトラウマがあって遠ざかってしまった。東大がその典型なんですけれども、理Ⅲに行く学生は、もともとのすごく数学が強いんですね。ものすごく成績が優秀なので、しょうがなくて医学部に行ってしまったというのが多いぐらいなんです。

その力を、本当にまだ頭がやわらかいうちに発揮してもらえば、生物にも物理が得意な人もたくさんいますし、その人たちが自分の周りの現象をそういうもので考えたらどうなるか、そういう刺激を受けて生物屋がもっとそういう世界に触れる必要があると思います。

(北村) 何でわかるのかという話ですが、例えばバイオマーカーとしてとれる場合は、ヘモグロビンというタンパクがどれだけ透過されるかというパーセントで糖尿病の程度をあらわす。非常に明快な尺度です。砂糖とヘモグロビンの結合乗数とか、反応乗数は、実験でわかっておれば、あとは臨床結果まである程度の予測ができてしまう。あとはどれだけ薬が体内に入るか。あるいは1日にどれだけ糖が摂取されるのかということさえわかりましたら、結果はわかってしまう。そういうことに関しては、非常に簡単なモデルで、計算の方から結果を予



測してしまうということは、これからはどんどん起こってきます。

これは非常にシンプルなモデルですが、そういう薬理のところに、それなら結合乗数をはかりましょうというのはあるけれども、それは計算の方からの発想なんです。そこでモデルを立ててしまうと、大体臨床結果まで糖尿に関しては予測できる。そういうこともこれからは起こってくると思います。

(フロア：秋山) 我々のデータ解析融合チームというのは、データマイニングだけをやるというチームではないのです。最後の融合という意味は、物理的な原理に基づくシミュレーションとの間で、データ同化といわれる手法でつないでやるという新しいチャレンジを、このプロジェクトの中でしようということです。

生物の問題の中で行うデータ解析は、例えば社会科学における方法とは少し違うような気がします。我々は遺伝子間のネットワークをやっているけれども、その実験がどんどん進歩して行って、はかろうと思えば、1つ1つのマイクロの点もはかれるのです。

ただ、そうではなくて、今マイクロアレーのデータとか、さまざまシステム全体のデータが出ている中で、数理的な手法で全体のモデルを何とかつくってやろう。下手にマイクロなモデルにし過ぎると、つじつま合わせ、パラメータ合わせのモデルになってしまうので、本当はここで転写因子がこうしてシグナル伝達だというのはわかっているけれども、そこをわざとただの1本の線に書いて、その係数だけを決めることをやっているのです。

人材養成では、伝統的な数理学的手法についてももちろん勉強して、その最先端を切り開くような方が我々のグループの中にたくさんいらっしゃいますが、それだけではなくて、本当の分子生物学の勉強もしてもらって、マイクロなところの理屈もちゃんとわかっている。自分たちのモデルがどれぐらい変なことをいっているのかということ、ちゃんとマイクロにも理解しながら、統計解析をやるのが我々のチャレンジなんだろうと思います。どうしても両方やってもらう人材を育てる必要があるのですが、その方法論については若者の自主性に任されていて、余りシステムチックな教育はできていないと思います。

(フロア：泰地) 研究所の若手育成は、オン・ザ・ジョブ的になるという感じで、特にこの辺の分野のという人が少なく、しかもこのプロジェクトのおかげで、かなりポストドクでみんな引っこ抜かれているのもありまして、僕らのところで計算関係のことをやってくれる人は、この人だったら大丈夫だろうという人を他の分野から引っこ抜いてくる。その人を、最適化とか計算とか、生物のこともちゃんとわかるようにしようということをやっております。

学際分野の人材をどのように育成するのかという問題は、自分の専門、方法論の確立、これは僕はちょっとふざけているとしか思えなくて、学際分野というのは、その部分に新しい領域が立ち上がってくるんだから、その部分をどういうふうにつくっていくという戦略みたいなのをちゃんと考えるのが大事なのであって、それを少し引き戻して、自分の分野でやりなさいというのは、余りエンカレッジではない。生物学がこれから新しい領域として立ち上がるのだという方向性をちゃんと示していかないと、若い人はついてこないのではないかと思います。

(中村) 私が確立と書いたのは、きちんとつくらなければいけないというよりは、まずは自分の専門は何かということ、それなりにちゃんとある時間をかけて勉強して欲しい。そういうことがあった上に、新しい分野へ行くことが必要だろうということで、最初から学際分野の講座を開いて、そこでいろいろなものを教えても、何が本当に自分の専門なのかがわからなくなってしまう、そういう問題をちょっと危惧して書いたところです。

(安井) 私も別にレトロスペクティブなあれは全くありません。ただ、自分がそういういろいろなことをやる研究室をオーガナイズする立場で、みんなが同じようなバックグラウンドを持っている人が集まってきたら、これはまたおもしろくないなというのがあります。やはりそれぞれ強いところがあって、それをより強め合い、弱いところを補うような環境を提供するのが自分の役目だなというイメージです。

(中村) これで午前中のパネルディスカッションを終わります。(拍手)

#### 6.4. 分科会 D：ナノ統合シミュレーション

「計算科学者、計算機科学者、実験研究者および産業の接点と人材育成ーナノ統合ソフトについてー」

日時 2008年9月17日(水) 10:00~12:00

会場 MY PLAZA ホール

モデレータ：平田 文男(分子科学研究所 教授)

パネリスト：青野 正和(物質・材料研究機構 フェロー)

潮田 資勝(物質・材料研究機構 フェロー)

岡崎 進(名古屋大学 大学院工学研究科 教授)

押山 淳(東京大学 大学院工学系研究科 教授)

金田千穂子(株式会社富士通研究所 ナノテクノロジー研究センター 主管研究員)

栗原 和枝(東北大学 多元物質科学研究所 教授)

佐藤 三久(筑波大学 計算科学研究センター長・教授)

高田 章(旭硝子株式会社 中央研究所 特任研究員)

兵頭 志明(株式会社豊田中央研究所 計算物理研究室長・主席研究員)

平田 文男(分子科学研究所 教授)

今日は、実験研究者、特にナノ分野の実験研究者、産業で計算科学をされる方々との接点で、どう人材を育成するかという問題について議論を深めていただきたいと思います。

私どもは、次世代スパコンの中でナノ分野のアプリケーションを構築し、次世代スパコン上で最大の性能を発揮できるソフトウェアをつくらうとしています。ターゲットとして、現在、社会や国家で非常に大きな技術的な要請になっている、あるいは学術的にも重要な分野である3つのグランドチャレンジ課題、「次世代ナノ情報機能・材料」「次世代ナノ生体物質」「次世代エネルギー」を掲げています。我々の人材育成、産学連携、実験研究者との接点も、この3つのミッションを遂行する過程でおのずと醸成されていくと考えます。

我々が現在ナノ統合拠点において「計算科学者、計算機科学者、実験研究者および産業の接点と人材育成」という課題にどう取り組んでいるのかを具体的に5点にまとめます。

##### (1) 「分子科学、物性科学ワーキンググループ」

我々のナノ統合拠点の中に分子科学、物性科学という2つのワーキンググループをつくり、計算科学者、実験研究者などとの共同あるいは連携を進めます。特に、ナノ分野の実験研究者で組織されている、文科省のナノテクノロジー・材料開発推進室の先生方を中心に、ナノ分野の実験研究者との連携を進めます。

##### (2) 「プログラム高度化ワーキンググループ」

我々は現在、ナノ分野で非常に重要であると思われる6本のアプリケーションを中核アプリと位置づけ、次世代スパコンで最大の性能を発揮できるよう、超並列に対応するプログラムをつくらうとしています。理研との連携だけでなく、筑波大学計算センターの計算機科学者と連携して高度化を進めていきます。

##### (3) 「ナノ設計実証」

これは次世代スパコンの前身のNAREGIプロジェクトを引き継ぎ、企業の研究者に課題を提案して研究を推進していただき、連携を推進していきます。

##### (4) 「次世代ナノアプリケーション連携ツールの開発」

マルチフィジックスの問題を解決すべく、先ほどの6本の中核アプリを任意に結合し、複雑な問題を解決してシームレスに走らせるツール群を開発していきます。



(5) 『次世代スパコン』の有効利用に向けての取り組み

現在神戸にできつつあるセンターを有効に活用していくシステムで、次世代スパコンを本当に有効に活用できる人材を育成しようという取り組みです。

例えば分子科学、物性科学ワーキンググループでは、セルロース分解酵素反応の実験研究者と共同で反応中間体を同定することに成功しました。反応中間体を同定するのは実験では非常に難しいので、計算科学が有効であることを証明した研究です。

これ（web 公開版プレゼン資料スライド#5 参照）は、たんぱく質の酵素の中に水がトラップされている様子をあらわしています。黄色で囲んでいる枠の中、赤丸として強調されているのが反応中間体としての水です。

ナノ設計実証では、NAREGI プロジェクトで実施された企業研究者による RISM 勉強会が行われ、勉強会に参加した研究者の中から既に幾つか研究成果が出ています。一定の教育期間を設ければ、企業研究者も学術レベルの研究が可能になることを意味します。

プログラム高度化ワーキンググループでは、筑波大学、理研、計算機メーカーとの共同により、これまで不可能だとみなされていた 3 次元 RISM プログラムの高並列化に見通しが出てきました。このプロセスは、筑波大学の計算科学者の専門性が非常に重要な役割を果たしていて、RISM だけでなく RSDFT とか、FMO 関係の行列の対角化なども、この共同研究、協力により高度化が可能になっていくと思います。

特に、筑波大学の計算科学者が 3 次元 RISM の高並列化をみずからの研究テーマとして取り組んでいることが非常に重要です。分科会 B で、計算科学者が計算科学者に奉仕をしているような状況ではとても長続きはしないというお話があったとおり、計算科学者がみずからの研究テーマとしてこういった問題に取り組むことが大事だと思います。

私どもは計算科学をしています、実際にそれが物づくりなどに役に立つためには、やはり実験研究と連携していかなければいけない。計算科学は計算科学を通じて物づくりなり実験研究に寄与できる。こういった関係が重要だと思います。

潮田 資勝（物質・材料研究機構 フェロー）



私がおこへ呼ばれた理由は、1つは4月から物質・材料研究機構のナノテクノロジー拠点長という仕事をしているので、文科省のプログラムでナノテクノロジーを担っているという立場、もう1つは去年までさきがけプロジェクトのナノテクノロジーのシミュレーションのグループのお世話もしていたので、自分でやるわけではなくいろいろな方のお世話をしてきたという立場からだと思います。

私はコンピュータサイエンスは別の分野と見ていて、こういうコンピューテーショナルサイエンス、コンピューテーショナルフィジクスなりケミストリーで一番大事なのは実験家との連携であり、実証であると思います。普通の実験はプロセスが早いことが多いので、化学反応で初期状態と終状態は測定可能であるが、その間はどうかしているのかがしばしば問題になります。

例えば酵素反応の話で、どこで電子輸送して、何ピコセカンドでどちらへ動いてと、よくその周期を変えますが、そういうことがシミュレーションや他のプロセスでもできるようにすると非常におもしろいと思いますので、実験でえないようなパスを実際にフォローしてみることに、私は非常に興味を持っています。

Brute force でない計算手法の開拓とは、コンピュータが速くなって能力が高くなると、今までできなかったことができるようになるので、コンピューテーショナルサイエンスとしては新しいアルゴリズムをどんどん開発して欲しいと思います。コンピューテーションだけで閉じているわけではないので、実験家に使えるようなプログラムをどんどん開発して欲しい。つまり、専門家でないといけない計算が今たくさんありますが、例えばそれを物理の実験家のような人にも使えるようにして欲しいということです。

私は NIMS へ来て、物質と材料について考えさせられています。物質とは自然にあるものをいっているので何でも物質ですが、材料という以上、人間が使えるという価値が入るわけです。「使えてこそ材料」と NIMS ではありますが、要するに複合的な物質のシミュレーションができることが望ましいと思います。プロセスのダイナミ

クス、発光、電子放出、生体中のプロセス、非平衡な状態、そういうのもどんどんやって欲しいと思います。

#### 青野 正和 (物質・材料研究機構 フェロー)



オーガナイザーから私に与えられたテーマは、私の所属している物質・材料研究機構 (NIMS) における計算科学と実験研究との連携です。私自身のナノの実験研究者としての意見を少し述べさせていただきたいと思っています。

その前に、NIMS ではいろいろなナノテクノロジー関連の研究が行われています。中心となるナノテクノロジー基盤領域では造形・加工、計測・分析、理論・設計があって、その中に計算科学センターがあります。

昨年 10 月に発足した私が拠点長をしている国際ナノアーキテクトゥクス研究拠点 (MANA) では、4 つのキーテクノロジーの他に理論のグループがあります。どういう研究が行われているかは省略しますが、それがナノシステム、ナノマテリアルあるいはナノバイオ、ナノグリーンの実験を支えています。

NIMS のナノテクノロジー基盤領域にしても MANA にしても、理論の研究は実験研究と非常に密接に連携をとっています。例えば、この超高压合成された新しい物質は、その物性を理論的に解くとか、酸化物高温超伝導体素子のジョセフソン接合を使ったテラヘルツ発振の理論的な解析が行われています。

我々 MANA では、世界トップクラスの研究の他に人材育成を柱の 1 つとしています。若手、独立研究者を 10 名置き、International Center for Young Scientists という組織を継続する形で、11 人のすぐれたポストドクを育成しています。

私たちは日ごろ計算科学に非常にお世話になっています。私ども実験屋が相談する相手は理論と計算があって、私は個人的に理論と計算はちょっと違うといつも感じています。それはともかくとして、我々実験屋は、我々の存在価値がなくなるので、次世代のコンピュータがすべてを解析することは望んでいません。半分冗談ですが、しかし我々は、そうはならないだろうと安心しています。例えば、DNA の構造など予言できるはずがないし、我々の脳は驚くべき能力を持っている。

ポイントは、計算科学で解決できることとできないことの明確化です。これからのナノテク、ナノサイエンスの分野はどこへ向かうのか。私が日ごろから感じているのは、これまでのナノ構造からナノシステム構造へ。ナノ構造の相互作用による新機能発現。じっとしているナノ構造から変化するナノ構造へ。化学反応の自由度が入ってきて、非常におもしろいことが起こると思います。それから、エレクトロニクス。これまでは電子の制御だったわけですが、イオンの制御が重要になってくると考えています。

ナノ現象の多くは動的で励起状態を含み、外場の影響下で起こります。3 次元のバルク物質と違って外場の影響をまともに受けるので、この 3 つが非常に重要で、これらをいずれも計算できるように、これらのメカニズムを計算機シミュレーションにより正しく理解したいと思います。それによりメカニズムの制御が可能になります。

これは、分子に連鎖重合反応を使って配線する実験です。フタロシアニンの分子、下地はジアセチレンの分子ですが、1 点の刺激で導電性のワイヤーが生成する。その結果、STM 像がこれです。もう 1 本やってやろうと反対側から刺激を与えると、連鎖重合反応が起こり、導電性のナノワイヤーが結線されます。これを見せたら「これはシミュレーションですか」と質問があり、「いや、これはアニメーションです」と答えたら、質問した人が失望とも安堵ともれない顔をしていました。

ナノでは局所の化学反応が非常に重要です。これはアニメーションではなく実験事実です。C<sub>60</sub> の膜に STM の針から電子線 (ビーム) を与えると、極性を逆転するだけで書いたり消したりできる。こういう動的で励起状態を含む計算をぜひ可能にしたいです。

最後に、計算の方法に関しては、単に容量を増やすだけでなく、Neumann 型から非 Neumann 型に発想の転換をしていくような新しい計算手法を開発していくべきだと思います。我々もそういう計算ユニットをつくる研究をしています。



栗原 和枝（東北大学 多元物質科学研究所 教授）



私を与えられた課題は、実験科学研究者と計算科学研究者との共同研究、ナノ分野の研究発展の可能性と、その中で計算科学の若手を育成していく必要性についてということでしたので、界面科学の実験科学者という立場で、我々の実験と計算を対応させた例を中心にご紹介します。

一般論としては、ナノ科学や技術、ナノサイエンステクノロジーは、1つはナノスケール、メゾスコピックスケールの材料をつくってその現象を解明していくことです。そういうものに使われる計測技術を使って、従来巨視的に考えてきた現象を分子・原子レベルで考えるパラダイムシフトを起こしています。

これら複雑系は、マクロにとらえる複雑系でもあるし、メゾスコピックなナノ粒子でもいいですが、現象の理解、一般化には計算科学が必要です。こういう現象は分子・原子数、要素が多いので、一般化はそう簡単ではないので、計算科学が必要です。

例として、私どもは液体が気体から吸着する現象を分子レベルで解明しようとしています。現象としては、例えばガラスをシクロヘキサンの中に漬け、そこにエタノールを垂らすとエタノールがガラスの上に濃縮していくことは従来から知られていましたが、それがどんな構造をつくるのかは考えたことがありませんでした。我々は、この表面のシラノールからアルコールが15ナノメートルという非常に長距離にわたって水素結合で、例えば平均的な配向角が求められる程度に規則的な構造をつくることを見出しました。

そのとき、吸着層の間には長距離の引力が働きますが、バルクのアルコール濃度を変えるとこの引力は消えて、それはバルクのクラスターと界面の、我々はマクロクラスターと呼んでいます、この水素結合体の間のアルコールの交換によるという説明と、ある程度それを支持する実験事実を得ています。

計算でクラスターの構造や系の動的性質を調べ、微視的視点でどう理解できるかという目的で、慶應義塾大学の泰岡先生と共同研究をしました。計算としての課題は固体表面の現実的なモデリング、それからこれは非常に系が大きいです、我々がやった大規模系の計算、37,000 原子の計算では結構長い時間がかかるため、理研で開発されたいろいろなボードを使って計算しました。

そのとき私は実験屋として非常に嬉しい経験をしました。シリカ表面のモデル化をするとき、表面の電荷を+Qとするか、-Qとするか、0とするか。エタノールのOHの配向角は実験的には40度と求められています。これに合うためには+Qと置かなければいけない。我々は最初0でいいと思いましたが、固体表面のモデル化には、実験データにより恣意的な+Qを入れないと合わないことがわかりました。

実は、表面に電荷を与えることは、表面の酸性を取り入れることではないかと考えています。この計算により、実験では得られない、水素結合の組みかえや、どういう状態で直線的になりやすいかもわかりましたし、自己拡散係数もわかりました。

ダイナミクスが実際にはどんな構造になっているのか。実験ではこの部分はわかりませんでしたが、このようなぼわっとした構造が出てきて、人間の想像だけでは絵が描きにくい。そういうものに対して理解を助けます。

ナノ分野の研究発展の可能性としては、実験との共同研究に現実的なモデルの構築が可能で、特に複雑系の場合はパラメータが多いので現象の法則化は不十分ですが、実験との対比によって初めて計算に取り入れるべき因子が明らかになります。また、複雑系の現象は微視的挙動、特にダイナミクスに関しては具体的な分子レベルの描像が描きにくいけれども、計算によってこれらの描像が描けるとともに一般化が可能になると思います。

実験研究者の中に計算科学の若手を育成していく必要性については、対象を理解するためには物質について実感できることが必要で、それは実験によって養われる感覚です。複雑な物質を対象とする場合、実験と計算の両方が理解できる研究者を育てることにより、さらなる発展が期待できます。

（平田） 次に、産学の連携という観点から、企業の中で研究活動をしておられる3人の先生方にお話を伺います。

高田 章（旭硝子株式会社 中央研究所 特任研究員）

産との接点、人材育成という宿題をいただいたので、最初に産業界における人材育成の問題点、次に私自身の



経験を踏まえた話、最後に世界水準の人材育成を目指す上で海外のことを考えなくていいのか、問題提起も含めてお話しします。

最初に、人材育成の問題点です。私の経験では3つあると思います。

1 番目。私が会社に入ったころは利用できるソフトがなく、自分でプログラムをつくりました。今は外部のソフトウェア開発者がいいソフトをつくり、会社は開発のスピードが大事なので、ソフトを利用するだけの人が増えています。これが非常に問題です。

2 番目。昔はシミュレーションをするときには現象をよく見ましたが、今は時間を短縮することが会社の大きな命題になり、結果も早く出さなければいけません。そういう意味で、本当に的確に現象をモデリングできているのか。特にナノ分野は、人間が本当に現象を理解しているかどうかというギャップも出てくるので、非常に危惧しています。

3 番目。昔は計算工学とアプリケーションの分業が無く、システムプログラミングも含めて、実際にコードを書いたりアプリケーションを作るのも全部自分でやっていました。しかし、今は1つ1つの技術がすごく深くなっていることもあり、それが許されなくなっています。企業にいと、結局ジェネラリストになるのかスペシャリストになるのか、大学の先生の力を個別に借りるのかもっと大きな共同研究の場に参加するのかがという大きな問題になってきます。

これらの問題に対して私がどう思っているかを書きます。1) は、やはりソフトをブラックボックスだけで利用してはダメだというのが私の結論です。2) は、シミュレーションをする人でも、実現象をちゃんと見ていく。自分で測定したり、評価しなければいけません。3) は、キャリアパスをどう考えるかによって違ってきます。技術者としては自分の専門性は深くしなければいけないが、それだけではできることは限られるので、外の力を状況に応じて借りなければいけないと思います。

私自身が育成していただいたと感謝しているところが2つあります。1つは化学系の集まりの新化学発展協会、もう1つは企業研究会のCAMMの会です。両方とも20年以上の歴史を持っています。企業の人たちが集まって、ソフトの使い方、原理も含めて勉強会をし、先生方とのネットワークも広げてきたという実績があります。

活動を振り返ってみると、3つポイントがあります。プログラムをブラックボックスで使うだけではうまくいかないという意味で、きちんと背景、理論を勉強して、アプリケーションを考えていくことです。

産学連携も大事ですが、産産の連携も非常に大事です。それも含めて産学官が連携できる場をつくっていくことが必要です。私自身、スーパーコンピューティング技術産業応用協議会の中で、RISMと革新のプロジェクトに参加しています。今回はナノということなので、RISMのお話をします。

サイエンスの段階にあるソフトと定義していいのかどうか、これから非常に楽しみな新しい学問の分野は、私たち自身も時間をかけてきちんと理論を勉強しないと、とても応用まで持っていきません。もちろん市販のソフトとして使えるものもありません。そこでまず勉強する場をつくり、今できるソフト、これからできるソフトのシーズと私たちが潜在的に持っているニーズをマッチングさせ、さらに次のステップに進んでいくべきだと思います。

最後に海外です。海外は、特にシミュレーションソフトについては長い歴史があるなど、日本よりも良い面があります。人材育成を考えると、海外も日本も共通して言えることですが、組織のオープン性とか、フェース・ツー・フェースのディスカッションをすることが非常に大事だと痛感しています。ただ、海外はアカデミア主体のネットワークが主なので、産官学が連携した組織をつくるという意味では、日本は頑張れば世界一で走っていけると思います。是非このような場を發展させて、そういう場づくりに貢献したいなと思います。

#### 兵頭 志明（株式会社豊田中央研究所 計算物理研究室長・主席研究員）

私は企業にいて、学会などによく顔を出して基礎寄りの報告をしますが、何でそんな基礎的なことができるのかという質問をよく受けるので、まずは私どものしている階層化、大規模化、粗視化シミュレーションの会社での位置づけを簡単にご紹介します。

実用材料における階層構造の例として、固体高分子型燃料電池の構造を示します。1つ1つの材料や物質を考えると、燃料電池のセルはいろいろなもので構成されていて、それぞれの材料がいろいろな空間スケール、時間ス

ケールで特徴的な構造を持っています。

空気極に、ガス拡散層、そこにガスを供給する部分、電極にはさまれているのはプロトンが電導する部分の電解質膜です。材料を合成する意味では原子、分子の世界でどういう構造をとるかを考えなければいけません、そういったものが階層的な構造を持って 1 つのシステムを構成しています。

1 つ 1 つの材料も複雑で、それぞれが階層的な構造をもっています。1 つ 1 つの材料でもシミュレーションで頑張っただけで計算することも含めて研究する必要がありますが、実用的なことを考えるとさらにいろいろな階層で相互作用し合っただけで全体のパフォーマンスを決めていくことになります。ただでさえ難しいところを全体の構造もバランスよく、もしくは最高のパフォーマンスを出すシステムや商品をつくらうとすると、シミュレーションを使わないと全体の中での関係が分からなくなってしまいます。そこで、それぞれの材料や階層で必要なシミュレーションのコード開発をしたり、それらを相関させる手段を考えたりすることで、例えばセルのパフォーマンスを予測しています。

一方、これはグランドチャレンジにて行った摩擦潤滑というか、動力伝達系の潤滑オイルの計算です。こういう問題では、今お見せしているのは厚みが 430 ナノ、サブミクロンの潤滑油膜です。それだけの全原子分子動力学計算をやった結果です。こういう大規模シミュレーションも実用的なところでは要求されています。オイルの開発に参考になる情報が出せています。

おもしろいのは、マクロスコピックに流体力学で定義されるような、パラメータとして与えられる境界条件は、これだけ厚い計算をすると自然に出てきます。実用材料をシミュレーションで一生懸命やると、基礎的にもおもしろいものが見えるという例です。ただし、今の計算だと 430 ナノというサブミクロンの厚みをとっていますが、幅が 2 ナノで、今分子研にあるコンピュータでは精一杯です。このために粗視化もやっただけでいかなければいけない。粗視化の例として挙げている図は、先ほどの燃料電池の中の電解質膜の問題です。

人材育成についてです。システムを総合的に見ようとすると、自分の得意分野はあっているのですが、実験や理論やシミュレーションや計算にこだわりなく、いろいろな基礎的なことをわかっていないといけません。企業だと、給料を払っているのだから役に立てと、専門性と総合力を同時に満たせるスーパーマンを求めます。

私どものところで、ポスドクではありませんが契約社員で 3 年ぐらいの研究者を雇って感じたことです。採用のとき、私はチャレンジ精神があります、何でもやりますという方がよくいらっしゃいます。何でもいってください、与えられたことにはチャレンジしますという方が多い。それだと与えられた問題は解決できて問題がつかれないのです。新しいものができてこない。そういう意味で、チャレンジ精神だけではなくて冒険心、誰もやっていないところに手を出せる人が要求されていると思います。

カスタマーサティスファクションという言葉があります。モノを出す側としては大事な心構えなのですが、皆さん自分がお客さんになりたがってしまう。計算科学と計算機科学というのもそういう面があると思いますが、もし計算科学が計算機科学のお客さんの立場になってしまうと、多分うまくいかない。お互いがお互いのところへ踏み込んでいく必要があると思います。

#### 金田 千穂子（株式会社富士通研究所 ナノテクノロジー研究センター 主管研究員）



私は、計算科学の産業応用という観点から、人材育成について考えてみました。

まず、計算科学の産業応用への期待です。半導体分野を例にして現状をご紹介します。左下の絵がデバイスの最小単位であるシリコンのトランジスタの模式図です。このシリコンの基板とゲート電極の間に薄い絶縁層はさまれていて、デバイスの微細化とともに非常に勢いでサイズが小さくなっています。

「ソース」「ドレイン」と書かれた部分の間がチャンネルと呼ばれて電荷が流れて動作しますが、現在では、この部分が数十ナノメートル。ゲート絶縁膜に至っては数ナノメートルの厚みまで薄くなり、原子の数に換算して数 10 個弱ぐらいのレンジに入っています。このため、いろいろなことを原

子スケールで考えなければいけません。

半導体開発の際に皆が参照する半導体ロードマップも、何年も前からナノスケールシミュレーションや量子力学シミュレーションという用語が踊っています。このロードマップは解が見つかっているものと見つかっていないものが色分けされていて、まだ確定したソリューションがないという意味で、この部分は真っ赤に塗られています。開発ツールとしてのナノスケールシミュレーションへの期待は高いのですが、これといった決め手になるようなものはまだ存在しないのが現状です。

次世代スーパーコンピュータの開発という追い風を受け、ソフトウェアの開発も盛んですが、それを産業へ普及していくために何が必要かを述べます。学と一番異なる点は、産は時間的制約が非常に強いので、ある程度高速に問題を解決する手法が求められます。ソフトウェアで解決してもハードウェアで解決してもよいと思います。極端な表現ですが、“何で昨日のうちに解決していないのか”というようなことをいわれることも珍しくありません。

先端的な研究には、できたての非常に新しい手法を盛り込んだソフトウェアも重要ですが、産業の近くまで普及させるには十分な実証事例が必要です。結果も、いろいろな場合に精度がばらつくのではなく、ある程度安定した結果を与えてくれるものです。

1つのソフトウェアですべてのナノテクノロジーの問題が解決するわけではなく、幾つかの複数の手法を組み合わせさせて問題を解決するので、組み合わせ可能な複数の手法が必要です。先端的な研究ベースではソフトウェアの普及がかなり限定されるので、実験の研究者や企業でも開発の技術者などが使えるソフトウェア。そんなに高度な専門知識を要求されないレベルでの普及も視野に入れる必要があります。それから、これは学より産の役割だと思いますが、プログラムの使い勝手をよくすることも重要だと思います。

計算科学の産業応用については、産官学それぞれに役割があります。私が学に期待するのは、長期的な課題のもとでじっくり腰を据えて本当に新しい手法を創出し、そこで得られた知識をプログラムに盛り込んで欲しいということです。産側がやるべきことは、実証事例の積み重ねと、産業応用上で、学でつくられたプログラムをカスタマイズすることです。それくらいの技術は産側でも勉強していく必要があると思います。それから、実例に基づいた新たな課題抽出。このサイクルを回すことで、健全な発展が期待できます。

最後に人材育成です。1つ専門領域を持つ他に、実験でも異なった計算手法でもいいのですが、他の領域に関心を持ち、使いこなしていける人材が望まれます。それから、多分プログラムを完全なブラックボックスとして使っている人は少なく、かなりグレーな部分を残しながら大体わかっている状態で使っているのではないかと思います。私はその辺は楽観的に考えていて、そういうことに余り神経質になる必要はないと思います。多分、健全な方向へ淘汰されていくと思います。

最後に、工学系の学部でナノスケールシミュレーションの教育拠点を是非つくって欲しい。工学部で理学としてシミュレーションをしていらっしゃる方はたくさんいますが、本当にテクノロジーを専門にしている方はまだ少数派だと思います。このあたりをもっと補強し、ナノシミュレーションの層の厚みを増していくことを期待しています。

(平田) 次に、計算科学と計算機科学の連携について、進めてまいりたいと思います。

#### 佐藤 三久 (筑波大学 計算科学研究センター長・教授)



私は計算機屋です。実験屋さんがいて、理論、計算科学をしている方がいて、計算機屋はその一番端っこにいますので、その立場から述べます。

私の所属している計算科学研究センターの宣伝をします。この組織は、基本的には計算科学と計算機科学が一緒に計算科学をするセンターで、いわゆる従来の大型のスパコンセンターとは少し違い、計算科学で共同研究をしようというセンターです。

我々は学際計算科学の必要性を訴えています。一般的に、これまでの計算機科学は、大型計算機センターへ行って一ユーザーとしてジョブを流すというスタイルでしたが、皆さんがお使いのコンピュータが非常に速くなって、もう計算センターへ行かなくて

もよくなっている。片や、ハイエンドのコンピューティングだと、今や 1000 プロセッサとか 1 万プロセッサ、次世代のスパコンだと 10 万プロセッサが期待されています。そこでは、単にプログラムを持っていくのではなく、実際に超並列化やそれに近いところまで計算科学の方々にコミットしてもらい、我々と一緒にプログラム開発をしていくことが必要です。そこでしかやれない計算をするためには、こういうことが必要になると考えます。

これも宣伝ですが、我々の計算科学研究センターの新しいマシン、T2K Tsukuba システムです。T2K とは、筑波と東大と京大で、共同で調達したシステムということです。我々の Tsukuba システムは、コア数にして 1 万プロセッサです。国内の規模では、ワンシステムでは最大で、これをナノ拠点の方々にも使っていただき、超並列に向かってプログラム開発を進めていこうと計画しています。

連携については、全国共同利用施設なので、皆さんに利用していただく枠組みとして学際共同プログラムをしています。2つのカテゴリーがあり、重点課題推進プログラムは従来どおりそこへ重要な問題を持ってきてやりますが、学際共同なので、計算科学と計算機科学の人たちをコーディネーションし、一緒にプロジェクトを組むカテゴリーも用意しています。ご興味のある方は是非我々のセンターのホームページをご覧ください。

ナノ拠点での協力活動についてご紹介します。もともと実空間の DFT プログラムは、押山先生が筑波大にいらっしやったときから当センターで開発してきたものです。他に、中核アプリの大規模並列化ということで、平田先生の RISM の 3 次元 FFT やマルチコアやスケラビリティについて、こちらでもチームを組んで協力体制をしています。

人材育成については、セミナーやチームの中でポスドクの方も含めてアプリケーションのコードを見て、実際の大規模並列についての経験を積んでもらう。今、実際に共同作業をしてもらっています。

筑波大学としては、1つはセミナーを開いて、並列プログラムやチューニングの仕方について、メーカーも含めて夏にこういうことをやっています。インターネット中継でもご覧いただけます。大学院には共通科目があり、大学院のレベルでリテラシー教育をします。来年から始めようとしているのはデュアルディグリープログラムです。主にナノなど物理の博士課程の人をターゲットとして、CS の修士課程に入ってデュアルアビリティを習得してもらおうというものです。

これは、HPC の分野では一番メジャーなスーパーコンピューティングという会議で 2004 年に出た絵ですが、現在も余り状況は変わっていません。「ジョブ件数」を縦軸にとり、「ジョブあたりのプロセッサ」数をとると、大体こんな感じになります。つまり、並列で動かしている人は余りいなくて、一部の人たちが超並列のエクスパイザを持っている。そのすそ野を広げるためには、そのときは“Blue Collar” Computing といっていました。1000 プロセッサの領域の人たちをちゃんと養成することが必要です。

CS 側としては、今並列プログラミングをしようと思うと余計なことをいろいろ学ばないといけません。それを言語でサポートする。あるいは並列プログラミングは難しいという印象がありますが、もう少しパターンとして教えるとか、ライブラリを充実させるとか、そういうことを通じて並列化を支援して、高性能な計算科学のプログラムを開発していただく。それを一緒になって開発していきたいと思います。

#### 押山 淳（東京大学 大学院工学系研究科 教授）



現時点でどんなコラボレーションがあるのか、また欲しいのか、最後にコラボレーションのための人材育成はどうあるべきかというお話します。

まず、計算物性科学と半導体工学あるいは産業とのコラボレーションのお話をします。これは半導体先端テクノロジーズ株式会社 (Selete) での計算科学と実験科学の成功事例です。次世代の MOS デバイスのチャンネル長は、試作段階ではもう数ナノメートルのものできていて、SiO<sub>2</sub> という絶縁膜も薄くなり過ぎてどうにもしようがないので、High-k、誘電率の非常に高い物質をやらなければいけないということになっています。

Selete では、ここ何年間か High-k ネットワークというものが走っていました。そこでは HfO<sub>2</sub> という High-k の材料が有力視されていますが、これはシリコンテクノロジーにおいては材料として新参者であって、何がどうなっているのかよくわからない未経験物質です。そこで、非経験的な計算の果たす役割が非常に大きかったわけです。

この右の下に書いてあるのは梅澤さん、白石さんの計算です。HfO<sub>2</sub> の中に酸素の空孔ができると、ゲートのポ

リシリコンから電子が移ってきて、エネルギー的にどんどん安定化して、原子空孔ができて、リーク電流が流れますが、それに窒素を添加するとベークンシーができにくくなります。こういう計算を用いて、例えば窒素を添加するとデバイスの特性がよくなる、ポリシリコン電極はダメで金属電極にしなければいけないといった次世代のテクノロジーへの技術動向を先導するようなコラボレーションがされました。

私が傍らで見ていると、毎週のように産、独立法人、いろいろな大学の実験の方々が集まって非常に密なコラボレーションをしている 1 つの成功例であると思います。これは新聞発表で、実際こういうことが役に立つ、計算が役に立つという事例です。

我々は、計算科学をさらに推進したいのです。例えばダイナミクスは赤い軸で長時間計算をする（web 公開版プレゼン資料スライド#4 参照）。量子論的にダイナミクスを追うことがあるでしょうし、励起状態やさまざまな現象に対する軸はともこの 3 つでは書き切れない、たくさんの軸があると思います。1 つの軸として、例えばシリコン結晶 10 ナノメートル立方には 5 万原子があります。5 万原子を量子論的に扱うのは青い軸、大規模計算がとも重要になります。ではそれは次世代スパコンあるいはエクサコンでできるかということ、そんなことはできるわけがない。

例えば、普通のプログラムを 10 ペタフロップスで動かしていて、そんなものは 1%、10%の効率にしかなりません。宇川先生のセッションで平木さんが 10%ぐらいしか演算には使わない方がいいとったのは別の意味で、たくまずして演算には使われないのが普通です。しかしながら、計算機科学とのコラボレーションでそれを 20%、40%にすることが非常に重要になります。

comas-dft collaboration です。筑波大学に月に 1 遍集まって、次の月に何をすべきかという宿題を皆に出し、それを 1 年間以上続けることにより、RSDFT は超並列アーキテクチャのコンピュータの中で非常に高い性能を出すようになりました。

そういったコラボレーションは非常に重要で、それをやるためには何が必要か。例えば、大学院レベルでは主専攻、副専攻、要するに複数の分野に造詣がある学生を育てるべきだと思います。どちらつかずで、どちらも余りきわめられないようでは困るという話がありましたが、それは主と副ということである程度回避できるように、これからの社会は、きわめなくてもある程度知っている人を重用しないとイケないと思います。

もう 1 つ、若手研究者のレベル、いわゆるポスドクというレベルは、今のように 1 つの研究室でボスのいう仕事をするのではなくて、大型なプロジェクトを企画し、複数分野の人がコミットする中で育てていくことが大事ではないかと思います。

最後に、次世代スパコンプロジェクトを契機として、そういうことができる機構をつくるべきだと思います。私は統合計算科学研究開発機構をつくりました。76 年代、80 年代には旧通産省に超 LSI 技術研究組合ができ、LSI の技術が非常に発展して、80 年代後半は日本の半導体は世界を席卷したわけです。今は計算機科学や計算科学という新しい技術をつくる時期だと思いますので、研究開発組合のようなものが欲しいと思います。

そこでのミッションは、先端的なプログラムだけを考えていてもビジネスチャンスにはならないので、先端的プログラムから下方展開して、誰でもが使えるバーチャルラボみたいなものが、実際ペタコン、エクサコンの能力では可能になると思います。そこにビジネスチャンスもキャリアパスもできてくると思います。

#### 岡崎 進（名古屋大学 大学院工学研究科 教授）



ナノサイエンス、特に分子科学の立場から、分野拠点における研究体制と人材育成についてです。今までこのプロジェクトで活動してきたこと、これまでいただいたご意見、ご提言に沿って具体的にどう人材を育成していくか、特に神戸の大きなセンターと協力しながらどういう立場で分野拠点としてやっていくかをお話しします。

神戸に次世代スパコンの大きなセンター（神戸センター）ができます。その周りに設置されるさまざまな分野拠点は戦略機関とも呼ばれ、その中で当然ナノサイエンスが考えられます。神戸センターと分野拠点の相違を

考えると、神戸のセンターは計算にかかわる共通基盤的、つまり計算機の提供、管理、運営、それ以外にも高速化、高並列化といったものが主体となっていきます。その中でも特に高並列で動く数学ライブラリを用意してい

ただることが不可欠となります。それに対して分野拠点は、高度に専門化された 1 つの分野について計算科学を担っていくような役割だろうと思います。

これが大きくまとめたものです。研究開発機能は当然持ちながら人材育成を考えてみると、大きく 3 つに分けられると思います。1 つは若手研究者の育成。1 つは計算工学技術者の育成。これは計算機とサイエンス研究、計算科学研究との中間に位置するもの。最後にユーザーの育成です。これは実験研究者、企業研究者の育成という位置づけになります。

まず、若手研究者の育成です。研究者に限定した場合でも、やはり 3 つに分かれます。1 つは若手の研究リーダーの育成。分子科学の分野においては、若手が独立研究グループを設定して活動できる仕組みをつくります。2 つ目は、ポスドクや大学院の博士課程に相当する若手の研究者は、実践的な教育で初めて達成できるのではないかと。3 つ目は、学部、学生あるいは修士課程の学生あたりになると、教育カリキュラムや講義が重要になります。

2 番目の計算工学技術者に関しては、アプリケーションをしているサイエンス研究者と計算工学の先生方の中間に位置する技術者の育成です。計算機に詳しい科学者でもサイエンス研究者でもサイエンスに詳しい計算工学者でもいいですが、そういった人たちをどう位置づけていくかというポジションの問題が非常に重要です。

3 番目の実験研究者・企業研究者は、非常に複雑で高度に専門化された個別の問題なので、共同研究体制が不可欠です。現在プロジェクトの中で連続的に研究会を開いて課題を設定し、アプリケーション実証という位置づけで出発しようと計画を立てています。

こういったことは分子研で単独ではできず、大学との連携が必要ですが、幸いにも分子研は設立来 30 年間、全国の大学との連携をしていて、かなりの蓄積があります。さらに、筑波大の計算機センターや名古屋大学にも 10 月 1 日から計算科学研究教育センターが新たに設置されますので、それらと連携をしながら教育に関しての話を進めたいと思います。

これらを実現するため、分子科学研究所では、研究開発部門から技術開発部門、人材育成部門を含めた新たな理論・計算ナノサイエンス特別研究センターを設置しようと、コミュニティからの要望を受けてオフィシャルな設置準備委員会を立ち上げようとしています。

(平田) それぞれの分野の先生にそれぞれの立場からご発言いただきました。

これからディスカッションを開始します。3 つ分野ですので、実験研究と計算科学、産と学、計算科学と計算機科学という 3 つに分けて議論を進めたいと思います。

まず、実験研究と計算科学の連携及び人材育成をいかに推進すべきかということについて、何かご意見、ご質問がありましたらお願いします。

(フロア 1) 先ほど実験家の先生方からダイナミクスや外場に対して非常に興味あるモチベーションがあり、先生方がそういうモチベーションで実験をしていると、その実験グループの学生さんもそういった理論的背景に興味を持ちながら卒業していくと思います。最初から計算科学にいる人たちは従来の方法にとらわれて新しいことをやらない可能性もありますので、実験から計算に移った人たちが起爆剤となる気がします。コンピュータの操作の仕方から入る人もいますが、コンピュータに疎遠だった人がコンピュータをさわようになるパスを重要視したいと思いました。

(平田) 栗原先生、今の発言は非常に近いと思いますが、そういうご経験はありますか。

(栗原) 私のところには、逆に計算をしていた方が実験をやりたいと来られて、大学院のドクター課程の 3 分の 2 は計算をし、3 分の 1 は実験をして卒業されました。私どもは精密測定で、世の中では結構難しい測定と理解されていますが、意欲はすごくて、「Physical Review Letter」に論文が載るような立派な新しいデータをとられました。ですので、必ずしも実験から計算だけではなくて、計算の方もやりたい方を受け入れるべきだと思います。

(兵頭) まだシステマチックにできているわけではありませんが、高分子材料の合成している人間がメソスケールのシミュレータを使い始めています。自分で使いながら、自分で発想したターゲット、分子構造を想定して、

シミュレーションを回してみても、うまくいきそう、いきそうではないとあらかじめ当たってから合成にかかるということは始めています。どうするといいかというより、やってしまった方が早いというのが正直なところ。やってみるとそれなりに使えますし、どの程度参考にできるのかが実感できます。

我々のところは企業なので、自分の専門は何だというより必要なことをやれと、計算専門といっても実験をやることを要求されることもあります。フットワークよく動くことが望まれています。

(高田) いい仕事ができる原動力というのは、自分が何か問題意識を持ったときに、それを解決してやろうという気持ちです。そのとき、必ずしも方法が最初にあるわけではありません。いい道具があっても問題意識がなければ何もできません。本当に解きたいと思ったときに、それがシミュレーションであれば一生懸命シミュレーションに向かうし、実験であれば、今まで計算していても実験に向かう。その気持ちを大事にします。そのようなモチベーションを活かせるシステムをうまく持てるようになるのが一番望ましい。得手不得手はあっても自分の夢や、やろうという気持ちを生かせる場を提供することが、人材育成にとって一番大事だと思います。

(平田) 計算科学をしている人たちは、自分でかなりいい方法論をつくって、それを適用してできるところはないかとか探しています。一方、実験をしている方々は、物をつくったり、物を見たり、そういうところで問題に突っかかって、それを解決するいい方法を探しています。そういうところでお互いに接点を求めていると思います。

(フロア 2) 例えば分子科学がテーマの分子研には実験屋さんもたくさんおられますが、あるホットな課題を対象にして十分ブレイクストームする時間はあるのでしょうか。アメリカではゴードンコンファレンスというのがあり、専門分野の違う人が集まって、課題について2~3日徹底的に議論して、展開の方法をそれぞれ持ち帰って行くというのが趣旨です。実験研究者と計算科学者がある課題についてどうやったら解けるのかいろいろ案を出し合って、到達すれば、計算科学で何をすべきかということももっとクリアになってくると思います。

(平田) 分子科学研究所では、実験研究が主体で計算科学が少しある、理論計算が少しあるという感じです。実験と理論の間の交流は、残念ながら余り盛んでないのが現実です。それは、計算科学が対象としている問題がまだちょっと貧弱というか、実験で実際問題にされるところまで行き着いていないことが一番大きな原因です。私も分子研の中で幾つか共同研究をしていますが、今つくっているプログラムを使えばこれからはそういう問題が解けるかなという感じになっています。現実はなかなか簡単ではありません。

(フロア 2) スーパーコンピューティングの中で戦略拠点をつくられていくときに、同じことを展開していただければ、もっとホットな課題が……。

(平田) そのことでは、ナノ統合拠点と文科省ナノ室が連携し、ナノ分野の実験研究者を中心に、実験と計算科学の、対象を幾つかに絞って課題ごとに小規模の連続研究会を持っていく。その中で、実験研究者が問題にしている課題と計算科学がどう解決できる手法まで行っているのかをすり合わせ、実験研究者が実際に問題にしていることを解決していくような計算科学を発展させようとしています。10月ごろから開始します。是非産業界、実験研究者の方にご参加いただき、新しい計算科学のネタをつくって欲しいと思います。

(金田) 私は企業にいて、開発の方と接しています。原子スケールの物づくりをしていると、彼らも実験だけではわからない疑問をたくさん持っています。そういうとき、手軽に使えるパッケージソフトが入り口として便利です。それには大体可視化する部分もついているので、少し動かして多少なりとも疑問を解消してもらうことを戦略的に勧めています。そういう人たちが育てば、もう少し高度なプログラムも使えるようになると思います。

(青野) 実験研究と計算科学の連携で、私としては、ブラックボックスでもいいから高度なソフトを使いやすく我々に提供して欲しいと思います。我々が開発した顕微鏡は、原理を理解していなくても、試料を置いてスイッ



チを入れれば誰でもオングストローム分解能の像がとれ、それを見ればある程度の判断ができる。計算に関しても、実験屋が隔々まで理解できるようなソフトはきつとたいしたことないと思います。ブラックボックスでもいいから高度なソフトを使い易くして我々に提供して欲しいと思います。

人材育成ですが、我々は理論の人といろいろ相談し、計算の人とよく議論します。NIMS では実験と理論の研究が割合うまく連携しています。例えば、新しい物質が実験的に合成されると、それはどうなっているのかを理論で、NIMS の中で解決する。また、外部との共同で、テラヘルツ発振が出たことを NIMS の中で解き明かそうとしています。

ある実験結果を理論の人と相談するとき、我々がして欲しいのは計算ではありません。理論的なアイデアやサジェスションを出して欲しい。計算科学者はたくさんいますが、理論科学者と両方の才能を持った人は案外少ないので、その育成をして欲しいと思います。

(平田) 次の産と学の連携に移ります。

(フロア 3) 産学連携には当然いろいろなケースがあり、いい場合もうまくいかない場合もあります。日本の企業は海外の大学とも連携をとって研究を進めていますが、日本の大学より海外にお願いした方が成果が出やすいというのが最近の傾向としてあります。その原因は、産業界にも問題があるし、大学の方にもお願いしたい点があります。大学から見ると、日本の企業は非常に意思決定が遅い。企業側から見ると、何かお願いしたときに、奨学寄付金みたいな意識がまだかなりの先生に残っていて、何か成果を出そうという気持ちがお互いに合意できない。

具体的にいうと、インターンシップという制度があります。これも海外の大学の方がかなり機能しています。企業は海外の大学のインターンシップ制度を活用している例が多いので、うまくいっていない部分をどうするか、今後両方で考えていきたいと思います。

(金田) プログラムを開発するとそれは長く使えますが、私は、学には新しい知見なりアイデアを盛り込んだものを是非じっくり開発して欲しいと思います。それが産に普及していくには時間がかかるかもしれませんが、そこは産側も理解すべきだと思います。

(兵頭) 今の産学連携で、海外の方がうまくいっているというご発言でした。自分が見た範囲ですが、海外と共同研究をしてうまくいっているのは、割と短期で具体的にターゲットが決まったものが多いと思います。日本国内の大学との共同研究は、具体的なターゲットがあっても、基本的なところをしっかりとやらなければいけないからスパンが長くなっているという感じを持っています。早く成果が欲しければ海外、じっくりやりたければ国内と分かれかかっている気がします。

(青野) 私は海外の企業と連携したことはありません。日本の企業とは幾つか連携していますが、今おっしゃったこととは反対の感じを持っています。日本の企業には、非常に短期的に結果を求められる。我々としては、もう少しゆっくりやろうではないか、その先に非常におもしろいことが起こるのではないかというのですが、5年先にどれだけビジネスにつながるかということを見られて、なかなかじっくりと連携はできません。

(フロア 4) 産と学の連携において、まず認識しないといけないことは、産の時間の進み方と学の時間の進み方が違うということです。産業では物を開発するとき、とにかく時間がお金です。例えば、産側は中期計画という1~2年ですが、学側は5~6年です。この差が大きいのです。まず何がやりたいかを考えた上で、どれぐらいの精度が要るのか。これをやりたいというときに、アイデアの段階だったらそんなに細かいことは要りません。

いかにお互いの立場の違いを認識して打ち合わせ、それを進めていくかで、海外へ行くのも、国内でやるのもあると思います。私の経験からいうと、うまくいったところは必ずその時間の差をお互いに理解しています。この時間の進み方の差、時間に対する認識の差は、私は一番の大きなポイントだと思います。

(押山) 時間の差は大変重要だと思いますが、それは暮らしている場が大学と会社で随分違うからだと思います。それを克服するには、大学の人が会社へ行く、会社の人が大学へ行くという社会の交流が必要だと思います。その交流の1つの段階として、会社は博士課程の学生をどんどん採って欲しいと強く思います。

私は NEC にいました。その研究所では、博士の学位を取った学生の方が自分で動くから非常によかったし、会社もそう思っていると思いますが、大学や学生はそう思っていない。会社は博士まで取ってしまったら採らないだろうと固く信じています。東大の教員の方々にも信じている方がいらっしゃる。ドクターを採ると周知せしめるためには、普通のアカデミックポジションと同様に公募を出せば、学生もこういうジョブオポチュニティーがあると意識するようになると思います。

(平田) 非常に積極的なご提案だと思います。インターンのレベルだからパーマネントではないと思いますが、そういうことを含んでいますね。博士を取った人を研究者として本当に企業で雇っていただければ、我々のいろいろな問題もかなり解決するし、若手の研究意欲という点でも非常に大きなファクターになります。

(栗原) 産と学の時間の差に戻して発言します。

私は表面力測定という固液界面の計測をしています。数年前までは、私たちからすると手が出ないような課題を相談に来られる方が多かったけれども、最近は私たちがやれそうなことを持ってこられ、実際に現場で使っていただいています。だんだん課題が具体的になっています。産業界でナノテクのサイエンスとテクノロジーが裏表になって近づいてきました。我々の実力も大分上がってきています。

シーズとニーズといったら変ですが、例えば産の側から課題を提示されたらちょっとやってみることは、学の側としては大事です。産の側は、なるべくそこでできるものを活用していただけるよう、丁寧に考えていただきたい。そういうキャッチボールをしていくと、学は産を支援したいと思っていますし、特にナノの領域はサイエンスとテクノロジーが非常に近いので、先ほどの時間軸も近づいてきていると思います。

(岡崎) インターンシップに戻ります。

計算科学を専門とする学生がインターンシップで企業に行った場合、どういうことが具体的な課題となり、企業ではどういうことを教育していただけるのでしょうか。

(フロア3) それは受け入れる側の分野によっていろいろです。希望に沿えるような分野を選んでいただくことです。一番の問題点は、日本の大学は海外に比べて日数が短いことです。日本は普通で大体2週間、長くて1カ月ですが、海外は2カ月、3カ月、場合によってはそれ以上来ていただくケースもある。そこでテーマがおのずと違ってきます。企業側の問題としては、守秘義務を要求する。中には論文発表ができない場合もあります。全部がそうではないのですが、学生さんに来ていただける分野はまだ限られています。

(岡崎) 学生は具体的に何を学んで大学に戻ることになるのでしょうか。

(フロア3) それぞれの会社でいろいろな分野があります。私どもは、2カ月あれば論文を書けるレベルまでしていただけます。

(兵頭) 何を学べるかは、具体的なスキルより、先ほどの時間感覚の差や、社会人として普通に人と話ができることが大事だとよくわかるとか、そういうことだと思っています。

(平田) 学ぶことはたくさんあると思います。実際に企業の物づくりで何が問題かという課題を把握するのは非常に重要なことだと私は個人的に思います。

最後に、計算科学と計算機科学の連携及びその中での人材育成、これをどう推進していくかということについて、ご発言をどうぞ。

(フロア 1) 佐藤先生のお話を伺って、非常に具体的で頼りになると思いました。しかし、我々は既存のアーキテクチャの中で何ができるか、具体的なプログラムをどうするかを提案していただきたいのに、「いや、もうこれからは MPI の時代ではない。今その新しい言語をつくっているところです」という計算機科学の先生もいて、この先生と協力するよりはうちの会社の SEの方がいいかなと思ったりします。どの程度まで現実路線の方と協力するのがいいか、サジェスチョンをいただければありがたいと思います。

(佐藤) 我々の分野で HPC はハイパーMOS コンピューティングと呼んでいますが、少なくともそこにいる人たちはそんな現実離れた話はしないと思います。自称 HPCの方を見抜くには、やはりおつき合いをしていただくしかないと思います。

(押山) おつき合いは大事だと思いますが、一番の問題は言葉です。少なくとも language を説明してくれる方でないとまずいと思います。

(佐藤) 計算科学研究センターはもともと素粒子物理から始まったセンターなので、素粒子物理の人たちとナノ、計算、化学、物性の人たちのつき合い方は随分違うと感じます。素粒子は割と基礎方程式が定まっていて、それをチューニングすればいいのですが、ナノは物質も現象もプログラムもいろいろあって、なかなかターゲットが定まらない。物量をふやさないとそういうものに対応できないので、やはり人材育成が大切だと思います。

もう 1 つ。次世代の性能は 10 ペタです。今の計算機センターにあるマシンは 10 テラなので、1000 倍です。1000 倍をどうやって使うのか。シミュレーションを速くしようという発想が一番大きいです。ある 1 個のプログラムのスケールを大きくしたときどこがネックになるかというチューニングをしていきますが、それだと追いつかないプログラムがたくさんあるので、我々ではなくてアプリケーションの人たちから発想の転換を期待したい。

素人考えですが、いろいろなケースについて探索的に流すとか、全然違った発想で計算機を使うことを少し考えないと、これからのコンピューティングを有効に活用できません。今、我々 HPC の業界のパネルに行くと、もうペタではなくエクサフロップスをどうするかという話になっています。さらに 1000 倍です。カッティングエッジをどんどん伸ばしていく方向へ行くので、アプリケーションやナノの方も、従来のプログラムを超えて、こうやって使えば今までできなかったプログラムもできる。例えばホールディング・アット・ホームというプログラムがありますが、折りたたみの過程をぶった切っているところへ投げてそれをつなげるという話については信憑性に議論があると思いますが、ああいう大胆な発想をしていただければ、いろいろおもしろいことができると思います。

(青野) これからは、世界ではどういうハードの水準になりますか。

(佐藤) 10 ペタは多分 3 年後、4 年後にできる。10 年先はその 1000 倍だといっています。

(青野) 日本は外国と比べるとどうですか。

(佐藤) それは、渡辺プロジェクトリーダーの頑張り次第ではないでしょうか。

(平田) 筑波大学の計算センターの経験は、計算科学と計算機科学を非常にスムーズにつないだ例だと思います。私はこの筑波大学の経験は 1 つの突破口というか、新しい計算センターのあり方を示していると思います。それについて、計算機科学サイドではどのように議論されているのでしょうか。

(フロア 5) 大計センターが今後、筑波みたいになるかというお話ですが、研究機能や計算機科学と計算科学のハブ機能とか、計算科学分野の各大学、センターがあるわけですから、地理的にそこを中心にしたコミュニティの育成機能とか、センター間の連携も、例えば我々は筑波と東大と一緒に T2K をやっていますが、そういうのを通じてフィージビリティを上げていく。その面からも底上げは図っていきたいと思います。

(フロア 6) 計算機科学者と計算科学者が連携した場合、計算科学者の成果は見えやすいけれども、計算機科学者は何が成果になるのか。人材育成では、計算科学者とコラボレートして成果を出して、ちゃんとキャリアパスがあるのか。計算機科学というのはどちらかというハードウェアや、ソフトウェアでもコンパイラや OS の要素が大きいという印象があり、アプリというか計算科学者と連携した場合にちゃんとキャリアパスがあって、ちゃんと成果を認めてもらえる環境があるのかどうか、お伺いします。

(佐藤) いろいろなレベルがあると思います。我々が研究のテーマとしていくのは、こちらサイドの研究テーマの立て方など、ある程度経験を持ってやっていく必要があります。東大の大型計算機センターが最初に来たとき、初代センター長の高橋秀俊先生は、大型計算機センターは附属病院のようなもの、我々の計算機科学の現場をちゃんと知るようなところだと。そういう意味で、実際のニーズを踏まえた計算機科学のアプローチを我々のカルチャーとしてやっていかなければいけないと思います。



(平田) 確かに計算科学の方がビジュアルリティーが高い。物質関係の論文として発表する機会も圧倒的に多いです。その結果を出すまでに計算機科学のノウハウや技術がいっぱい含まれているのに、なかなかそれが見えてこないのが非常に大きな問題だと思います。それをどうやって見せていくか、研究としてちゃんと確立していかなければいけません。計算機科学でもそれが論文、業績として認められれば、その分野は確立していきます。

例えば、計算科学には「Journal of Computational Chemistry」や「Journal of Computational Physics」という雑誌があり、物質科学やコンピュータのいろいろなアルゴリズムなどを発表する機会があります。一方で、計算機科学にはそういうジャーナルがあるだろうか。計算機科学でアルゴリズムや一般的な計算機の手法を追求して、ある特定の物質科学の問題に特化した論文を発表して、それが通って重要な論文として位置づけられることがあれば、学問として、分野として大きな発展を遂げる可能性があると思います。今後、計算機科学を物質科学寄りの分野として確立していくことが求められ、キャリアパスもおのずと広がっていくと思います。

(岡崎) 今、佐藤先生にいろいろご指導いただいて、超並列などを一生懸命やっていますが、化学の人間がそういうことをやると、どちらかというプログラムの高度化が主体になり、化学の研究はできなくなります。それは化学の中でもキャリアパスにはなりにくく、ポストが得られる性格のものでもない。これは恐らく計算工学側、計算科学側も同じ悩みを持っていると思います。日本にはそういったことをなりわいとする大学の教育システムや大学のポストがないというのが、我々の立場からすると一番大きな問題です。

次世代スパコンプロジェクトを 1 つの機運として、大学の中にそういう講座をつくり、企業の中にもそういう部署をつくっていくことが一番重要です。そこが保障されない限り、幾ら個人的努力をしても、幾ら優秀な技術者が育っても、すぐに消えてしまいます。

(平田) 今の岡崎先生の発言をまとめとして、このパネルディスカッションを終わります。今日は本当にどうもありがとうございました。(拍手)

## 6.5. 分科会 E: 素粒子・原子核・天文宇宙

「次世代スパコンで物質と宇宙の進化を探る」

日時 2008年9月17日(水) 10:00~12:00

会場 MY PLAZA 会議室 8・9

講演

「格子 QCD の今後に向けて」

蔵増 嘉伸 (筑波大学 大学院数理工学物質科学研究科 准教授)



格子 QCD とは何かということですが、一言でいうと、強い相互作用の非摂動的な研究で、基礎科学の 1 つです。強い相互作用とは自然界を支配する 4 つの基本的な力の 1 つで、クォークとグルーオンが基本的な自由度です。この 4 つの力は、重力、電磁力、強い力、弱い力から成っています。原子核は核子から成り立っていますが、核子はクォークとグルーオンから構成されています。

ここでいう非摂動的な研究とは、空間 3 次元と時間 1 次元を離散化して 4 次元格子にし、その 4 次元格子の上にクォーク、グルーオンを載せて、モンテカルロシミュレーションを行うことを指します。目的は、クォーク、グルーオンを自由度とした第一原理計算により、より大きなスケールである原子核・宇宙と、より小さなスケールである超対称性、大統一理論の物理を探ることです。

格子 QCD 計算の特徴ですが、パラメータと呼ばれるものは大体 4 つしかありません。4 次元体積、格子間隔、フレーバー数、さらに、クォーク質量です。フレーバー数ゼロの場合はクエンチ近似と呼び、3 の場合をフル QCD と呼びます。図は 3 次元の正方格子ですが、実際には 4 次元格子を考えます。基本的な自由度はクォークとグルーオンです。

並化ですが、相互作用は基本的に近接相互作用です。これは 4 次元空間の中での近接相互作用なので、物理プロセッサの間が必ずしも近接しているわけではありませんが、今までクリティカルな問題になったことはありません。マッピングの仕方によって、高い並列性と容易な拡張性を得ることができます。

計算負荷の主要部分、つまりカーネル部分は、通称 MULT と呼ばれていて、実行時間全体の 50% 強を占めます。MULT は、 $12 \times V$  次元の複素数の行列・ベクトル積です、 $V$  は 4 次元体積です。ただし、非ゼロ要素は  $40 \times 12 \times V$  の疎行列です。

スライド (web 公開版プレゼン資料スライド #7) は、行列・ベクトル積が格子 QCD 計算の主要ログです。ボトルネックはメモリバンド幅です。MULT の Byte/Flop 値は約 2.7 と、かなり大きいのが特徴です。一方ハードウェアの Byte/Flop 値は PACS-CS では 1.14、T2K は 0.29 と、かなり落ち込んできています。次世代機では一体どのぐらいの値になるのだろうかという不安があります。

QCD の歴史を概観してみます。1981 年にクエンチ近似による最初のハドロン質量計算が Hamber と Parisi によってなされました。これは第一原理計算の可能性を示唆したという意味で歴史的に非常に重要な仕事です。1996 年から 2000 年にかけてクエンチ近似による精密計算 (CP-PACS) が行われ、クエンチ近似の限界を示しました。2000 年から、2+1 フレーバーシミュレーションが MILC や CP-PACS/JLQCD グループによって創始されました。残された最大の課題は  $u, d$  クォーク質量に関する外挿誤差です。2008 年から、我々 PACS-CS グループは、物理点での 2+1 フレーバーシミュレーションに取りかかりました。これが究極の第一原理計算になります。

なぜクエンチ近似を超える計算が必要かということですが、クエンチ近似計算は、我々の言葉では第一原理計算ではありません。系統誤差の定量的評価が不可能で、クエンチ近似の誤差は実験と比較しなければわからないからです。そういう意味で予言能力はありません。第一原理計算は、近似を排し、系統誤差の定量的評価が可能であるという意味で、実験と同じといえます。ただし、フル QCD の計算量は、クエンチ近似の約 100 倍から数百倍程度を必要とします。しかしながら、先に述べたように、第一原理計算とモデル/近似計算は、サイエンスとして全く別次元です。クエンチ近似には予言能力はありませんが、第一原理計算は実験と同じといえるという意味では両者の差異は定量的問題ではなく、仮に計算量が 100 倍かかったとしてもフル QCD 計算をやってみる価値

があると考えています。

PACS-CS プロジェクトでは、物理点での 2+1 フレーバーシミュレーションの実現を目標としています。これまでの成果は、領域分割 HMC (DDHMC) のアルゴリズムを用いて  $u, d$  クォーク質量を徐々に小さくし、物理点付近でのシミュレーションを行いました。その際、理論的に予測される、物理点近傍における物理量の対数的クォーク質量依存性を確認しています。さらに、ハドロン質量を計算し実験値と比較したところ、ズレは最大で 3% であることがわかりましたが、有限体積や格子間隔効果という主要な系統誤差はまだ完全にはコントロールできていないことを考えると期待以上に一致していると言えます。この結果を受けて 2008 年から、いよいよ物理点での 2+1 フレーバーシミュレーションを開始しました。

今後の課題と展望です。CP-PACS のピーク性能は 1TF よりも小さく、物理的ターゲットはクエンチ近似の限界を示すことと、2+1 フレーバーシミュレーションの創始でした。現在我々が扱っている PACS-CS はピーク性能が 14TF で、目標は物理点でのシミュレーション実現です。T2K 筑波大サイトでのピーク性能は 95TF で、物理的ターゲットとしては、ハドロン一体問題の解決と、軽い原子核の生成と考えています。次世代機のピーク性能は O (10) PF と期待されているので、主要な物理的ターゲットは高温・高密度下のシミュレーションと核子の多体問題になるだろうと考えています。

今後のスパコン計画への要望です。私個人の意見としては、スパコンは Formuar1 であるべきであるということです。まず第 1 に、エキサイティングで、夢やワクワク感を与えることができます。また、テクノロジーとユーザーが一致協力して最速を目指すことで、必然的に分業と協力と信頼関係を生んでいくと思っています。

格子 QCD ユーザーの立場としては、アプリを前提としたスパコンづくりをやっていただきたいという願望があります。つまり、演算性能とメモリバンド幅とノード間・プロセッサ間通信の性能の 3 要素のバランスが良い計算機を望みます。スパコンは旬のものでスタートダッシュがカギなので、少なくとも稼働開始の数カ月前には、アプリ開発者がテスト機にアクセスし、チューニングを進められる環境があることが必要です。また、すぐれたプロファイラーも非常に重要です。QCD では MULT 以外の計算も 50% 弱存在しているので、その部分を最適化するために、最低でもループ単位で実行時間と実行性能が表示されるものが必要と考えています。

基礎科学における格子 QCD の位置づけです。素粒子物理学の基礎理論である場の理論は電磁相互作用の研究を通して確立・発展し、その後他分野に応用されていきました。同じように、50 年後に歴史を振り返った時に、格子 QCD は大規模数値計算による素粒子の非摂動的効果の研究は強い相互作用を対象として確立・発展し、その後、研究手法も含めて他分野に応用されていった、といわれるようになれば理想と考えています。

そのためには我々のアイデンティティを貫き通す必要があると考えていて、まず近似を排した第一原理計算を徹底的にやってみるということです。さらに、大規模計算科学における研究手法・体制の確立を試行錯誤しながら目指していくことが重要ではないかと考えています。

## 質疑応答

(フロア 1) ハドロン物理での最近の 1 つの興味として、マルチクォークとかハイブリッドの状態があります。これはなかなか実験的にも検証しにくいので、そこを理論的に第一原理の計算である程度示唆していくことができると、その分野の発展があるのではないかと思います。いかがでしょうか。また、この点に関して、こういうエキゾチック状態は大方励起状態なわけで、その辺の格子 QCD による予言能力についてのご意見をいただけますか。

(蔵増) 未知の領域や実験で難しいことを調べるのが格子 QCD の使命だというのは、私も全く同感です。ただ、現時点では第一原理計算としての成熟度がいま一つなので、まずは物理点でシミュレーションをやって、1 体問題がきちんとできることを示す方が先かと思います。

励起状態の話については、筑波大学の中にもやっているグループがありますが、実験的に未知の難しいことや不可能な領域を調べることと、第一原理計算としてきちんと計算をすること、この両方を並行してやっていくことがまだ重要なのではないかと考えています。

(青木) 実機に近い環境でテストをしたいという話が出たんですが、その場合は単体でも有用なんでしょうか。

(蔵増) ネットワークもあった方がいいのは確かですが、私自身は単体でもやってみる価値はあると思います。

### 「原子核研究における数値計算の現状と今後」

延与 佳子 (京都大学 基礎物理学研究所 准教授)



ミクロの世界を追究するとどんどん階層を超えていきますが、この現象の中で我々が研究対象としているのは原子核とそこにあらわれる多様な現象で、これは陽子と中性子で構成された陽子フェルミオンの世界です。

原子核物理は、いろいろな分野と直接的、間接的なかかわりを持っています。素粒子・宇宙との密接なかかわりだけでなく、量子多体系というアプローチの観点では物性の分野とも深いかかわりがあるし、社会への応用という面では、原子力・エネルギー・医療・工業において原子核の反応データが必要な場合があり、それに理論的なシミュレーションが応用されたり、

基礎科学で原子核の解明で発展したシミュレーションが10年後、20年後に結果的に応用されるケースもあります。もっと直接的かかわりを持つのは素粒子物理や宇宙物理です。素粒子物理とは、原子核を構成する陽子や中性子が支配されている世界は強い相互作用なので、密接なかかわりがありますし、宇宙物理とは、星の進化、星の中での元素構成を研究するような場合には、原子核における系統的な核データが必要になります。特に実験値のない領域で膨大な数値データが必要になる場合は、理論計算によって系統的な核データを提供することが緊急に要請される場合があります。特に、物質創生史の探求の中で欠かせないデータになっており、大規模な素粒子計算が重要になります。

原子核の種類は大量にあります。中性子数、陽子数、それぞれの個数が1つ違えば、違う核子が存在していて、現在2000種以上観測されていますが、短寿命でも存在できる原子核には8000個から1万個以上の同位体があるといわれています。

ところが、実験値のない未知のエリアの場合は、定量的に予言性のある数値シミュレーション、しかも、原子核そのものの核子多体系のダイナミクスをシミュレーションすることが必要になってきます。それぞれの陽子や中性子数に依存してそれぞれの原子核が個性を持っていて、その中に未知の現象が見つかる場合もあります。そういう意味で数値計算の役割は非常に重要です。

また、陽子数・中性子数の2つの軸だけではなく、1つの元素の中に励起エネルギーという軸もあります。我々がターゲットにするのは、この3次元の世界について理論的な計算を進めて、系統的な研究を行っていくことです。

例えば、安定核よりも中性子の方が多い中性子過剰核について今まで知られていなかった新しい現象が見つかっていきますし、さらにエネルギーを高くしていけば、共鳴状態や原子核の捕獲反応、あるいは、融合・分裂についての現象につながっていきます。実際に構成されている核子多体系のダイナミクスの中でこういう多様な現象を理論的に解明していくため、数値シミュレーションの手法が適用されていくことになります。

核子多体系、原子核を研究する、数値シミュレーションするということは量子多体系の問題を解くことになるので、大規模な数値計算が必要になります。なぜ大規模になるかということ、量子多体系の計算は、厳密に解けば粒子の個数のべき乗に比例するからです。さらに、相互作用が複雑なものも原子核の特徴で、一口に量子多体系の問題を解くといっても、完全に精密に計算できるのは、核子の数が3~4個の非常に少数のものに限られています。実際には何千個というアイソトープを計算したいわけで、そのためにさまざまなモデル化が行われます。例えば、平均場近似、波動関数のトランケーション、モンテカルロ的な手法などがあり、それぞれの現象に即したモデル化が行われているのが核物理分野の特徴と言えます。近年10年、20年は、計算機の発達、計算方法の開発や理論モデルの進化に直結しているという歴史もあります。逆にいえば、理論モデルや計算コードの変化が頻繁に起こる分野という特徴も持っています。

多様なモデルについてももう少し説明しますと、例えば少数系というのはサイズと斥力芯を持ったものを解くこ

とになりますが、これを完全に解こうと思うと、4個ぐらいでも、かなり大規模な計算になります。それに対して、制限されたモデルの中でできるだけその構成要素の粒子の自由度を全部取り扱うというのがモデル化です。反応の場合には、少数系に落としてしまおうとか、量子的な干渉を無視した分子動力学的手法も使われています。こうしたものは、現在はTF級のスパコンで行われていますが、ペタになったときにさらに大規模な計算が必要になるのは、非常に多くの粒子をより微視的に扱ったモデルで核構造や核反応の研究をするケースだと思われます。ここがまさにこれから計算機の発展とともに伸びていく分野といえます。

この分野についていくつか紹介したいと思います。我々は3次元の世界を研究対象としていますが、質量数という粒子の数を縦軸にLogでプロットし、より第一原理的なモデルを横軸にとると、モデルによってカバーされる領域がいろいろ違います。構造から反応まで横軸に質量数をとった図でも、ターゲットにしている現象に応じていろいろなモデルがあることがわかると思います。

さまざまな現象を多様な理論模型でカバーしていることから、ユーザーは小規模から大規模まで連続的に分布しているという特徴があり、必要とする計算資源もスパコンから身近なPCまで広範囲に渡っています。

一方、核物理において今すぐペタ級の大規模計算をやらなくてはいけないのは、確立した模型で広範囲な核データを提供するところで、その必要条件は大プロジェクトを実現できるチーム体制ということになります。現在、核物理でそういうチーム体制を持っていて、すぐにスタートできる系統的な研究としては、シェルモデル計算と密度汎関数の平均場の計算の2つが挙げられます。この2つは、大塚さん率いるシェルモデルのグループと中務さん率いる密度汎関数のグループがツートップ体制ですが、さらに現在テラを使っている、これから伸びていこうというグループも幾つかあります。

シェルモデル計算は、大次元の対角化が必要になります。モンテカルロシェルモデルという手法が数年前に開発され、そこから一気にブレイクスルーが起こって大規模な計算が可能になりました。これは、実験値のなかったものに対して理論データを予言し、その後の実験で確かに観測されているという意味でも、予言力のある手法です。

もう1つは、密度汎関数を用いたミュレーションで、これは何千個という核データの基底状態の系統的な計算ができる手法です。さらに、時間依存の理論を組み合わせることにより、反応に応じた光吸収断面積の系統的な計算ができます。

現状、軽いところはTF級のマシンで実現されていますが、膨大なデータを完成しようと思えば、この100倍、1000倍のマシンが必要になります。

まとめると、現状としては数値計算が主流で、現象に応じてさまざまな理論計算が多数ありますが、今後は計算環境のすそ野をさらに広げ、理論模型の進化あるいは新しい模型の開発、萌芽的な研究を促進し、これからのブレイクスルーが生まれる環境も与えないといけないわけですが、その一方で大プロジェクトを推進するチームづくりも当然必要で、既存の模型で広範囲のデータを提供するプロジェクト、あるいは、次のステップを狙うプロジェクトを目指して、チーム体制を構築していかなければいけないと思います。

## 質疑応答

(フロア1) いろんな手法、モデルが、それぞれのハミルトニアンを使って模型空間を使ったりして解いていくと思うが、現状はそういう限られたモデルの中でもやるべきことはたくさんあり、それぞれのモデルに基づいて未知のものを予言していくというのが現状だと思いますが、いずれこれが解けるようになり、模型の適用限界が明らかになったとき、多分方向性としてはよりマイクロな方向に行くと思うわけですが、その辺の今幾つかあるような手法が将来的にどういうふうに行くことを核物理として目指していくのでしょうか。

(延与) 今後は、より第一原理的な理論計算というプロジェクト、あるいは多様な理論研究を連携させることが重要で、いろんなモデルがオーバーラップしている領域、つまり、両方のモデルで書ける領域を大事にしながら、次のステップを考えなければいけないと思います。例えば、第一原理とシェルモデルがオーバーラップする領域で、同じ現象を違う手法で見ても、全体としてカバーするとか、次のステップにつながるという意味でも、やはり連携が重要だと思います。



## 「超新星爆発の数値シミュレーションの現状と将来の課題」

住吉 光介（国立沼津工業高等専門学校 教養科物理学教室 准教授）



超新星というのは、あるとき星がパッと明るくなって消えてしまって、最後には残骸になる現象で、年間に数百個ぐらい観測されている非常にポピュラーな現象です。この現象は、星の最期に起こる爆発ですが、実はこのメカニズムはわかっていません。爆発メカニズムを調べるには、非常に大規模な計算が必要だということと、原子核、素粒子、宇宙、そして計算科学が非常に重要だということをお話ししたいと思います。

重力崩壊型超新星爆発は、太陽の 20 倍程度の大質量星が進化して最期に起こる大爆発で、ウラン、金、プラチナ、またレアメタルなど重元素の起源と考えられています。爆発の後には中性子星（パルサー）や、ブラックホールが誕生します。そういったことを通じて、銀河全体の進化が進みますし、宇宙線とか重力波の源にもなります。

こういう現象がどういうふうにかかるのかということですが、星が進化して、最後にもう燃やす燃料がなくなつてつぶれて、もう圧縮できないというところで中心コアがバウンスします。そのとき衝撃波ができて外へ伝搬して、最終的にうまく星を飛ばしてくれ、最後に中性子星が残される、これが全体的なシナリオです。

この爆発では、ニュートリノという粒子がたくさん出ます。これが超新星ニュートリノで、1987 年の 2 月に初めて観測されました。ニュートリノ放出がわかったことで、中がどうなっているかが大分わかりました。

爆発エネルギーは  $10^{51}$ erg で、これは太陽が 45 億年ずっと燃え続けたエネルギーに匹敵します。これに対してニュートリノが出るときのエネルギーは  $10^{53}$ erg です。このエネルギーがどこから来るのかということですが、星が進化して重力崩壊すると、ぐっと収縮して中心コアの半径が 10 キロぐらいになります。中心は  $10^{15}$ g/cm<sup>3</sup> とか  $10^{11}$ K と非常に高温・高密度で、ニュートリノすら逃げられなくなります。その後解放されるエネルギーは  $10^{53}$ erg で、ニュートリノになって殆ど出てくるということは、 $10^{51}$  erg の爆発エネルギーはその 100 分の 1 で、殆どニュートリノが持って行ってしまって、ごく一部をどこかで相互作用して物質に与えて、それでやっ飛ばすということになります。したがって、ニュートリノと物質がどう相互作用しているかは非常に重要な話です。

超新星爆発を解明するのに大枠としては、多次元の流体力学とニュートリノ輻射輸送の扱いが必要になりますが、これが数値計算のチャレンジになります。一方、非常に高温で高密度になるので、原子核ハドロンの QCD 物理が非常に重要になります。実験では到達できないところなので、理論による高温・高密度での物質科学の解明が重要になります。その物理を含めた上で大枠の数値シミュレーションをするのが超新星爆発のシミュレーションです。

最近日本でよく研究が進んでいるのは、原子核ハドロンの物理です。極限状態というのは、原子核の内部の密度よりも高く、なおかつ原子核として通常存在するより中性子量が非常に多い状態で、その中で物質の圧力とか組成を与えないといけませんが、それを総称して状態方程式と呼びます。それを与えると星の構造とかダイナミクス、ニュートリノの反応率が決まります。

状態方程式を与えることは難しいのですが、日本の研究所（理研・KEK など）の加速器によって、非常に不安定な原子核とかハイパー核の実験データが大分出てきて相互作用に制限をつけることができるようになり、その中で状態方程式の系統的なデータが与えられるようになりました。そういうものについては実は日本が世界より非常に進んでいて、それをつぎ込んで爆発するかどうか、ここ数年計算をやってきましたが、実はまだ飛ばないのが現状で、爆発メカニズムは未解決です。

球対称の場合、我々は一般相対論のもとでニュートリノ輻射流体計算を行うことができるようになりました。星がバーンとつぶれて、衝撃波が遠くへ飛んでいくときに、グーツと上に向かって飛んで欲しいわけですが、途中で沈んでしまうという結果になってがっかりしているところです。しかし、これは第一原理計算なので、ニュートリノとか原子核物理を吟味する非常によいテストになっています。

では、多次元ではどうか。上下非対称になっているのが重要だということが最近わかってきましたが、この場合にはニュートリノの扱いは近似的にしか現在行われていません。なおかつ、現実的に爆発したかどうかを確認できる例が、米国とドイツで 3 例ぐらいしかありません。しかし、この 2 つのグループの数値計算方法とモデルは互いに違っています。爆発するといっているのですが、提唱しているメカニズムが全く違って、追計算も

まだできていません。

では、なぜ爆発しないのか。実は、そのギリギリのところにあります。爆発するかどうかは非常にいろいろなファクターがあって、それが同じぐらいのプラスとマイナスのエフェクトがあり、微妙な問題です。その中で重要と考えられている要因の一つに「ニュートリノ加熱」という現象があります。これは、爆発が失敗して衝撃波が途中で止まってしまったときに、真ん中には中性子星ができて、そこからニュートリノがいっぱい飛んでくる、それが衝撃波の下の部分を温めて、衝撃波を押し上げる効果です。ニュートリノが核子に吸収されて、物質にエネルギーを落とします。これは実に  $2 \times 10^{51}$  erg というエネルギーになるのですが、どれぐらいの時間、どれぐらいの量、温められるかというのはやってみないとわかりません。

この効果が大きければ、爆発するというのも昔からわかっていて、私はニュートリノ加熱をちょっと大きくしてみる実験をしてみました。加熱の率を人工的に 30%増やすと、中でちょっと変動が見られます。50%にすると、ここからグーッと上がって行って、ちょっと爆発しそうな感じになる。70%までやると、さらに爆発しそうになる。これは人工的にやっているからダメですが、これぐらいのセンシティブティティーがあります。

この時に重要となるニュートリノ輻射輸送とは何かということですが、中心にいっぱいいるニュートリノは高密度高温の中にいるので、拡散的にジワジワと出てきて、一番外へ来るとシューッと真つすぐ飛んでいきます。問題なのは途中のところで、衝撃波の近くで途中からヒョロヒョロと出てきてだんだん散乱しなくなり、非平衡な状態が出てきたものが吸収されてニュートリノで物質を温めるところ、この部分のきちんとした計算が必要だということです。

つまり、ボルツマン輸送方程式を解くということで、ニュートリノの場合、ニュートリノ輻射輸送方程式になります。左辺はニュートリノが伝搬していき、右辺はニュートリノが吸収・放出・散乱されて数が変わるのを表します。式で見ると単純ですが、この中身は、空間が 3 次元、ニュートリノの運動量が 3 次元で、全体として 6 次元の位相空間で時間発展を解く 6 次元問題です。

ニュートリノ反応はエネルギーに強く依存しているので、エネルギーごとの方程式を連立して扱うわけです。等方性とか角度の独立性は使えないので、非常に難しいです。

この計算の方程式はスティフな方程式なので、安定的に解くには陰解法が必要です。そのための計算の主要部分は大規模行列の解法です。球対称の例では、小行列が  $350 \times 350$  ぐらいが 255 個並んでいるようなブロック三重対角行列を解きます。この大きさは空間とニュートリノのエネルギー・角度・種類から決まりますが随分大きな行列です。1 回ひっくり返すだけでも数十ギガオペレーションぐらいあります。

2 次元、3 次元になると、こういう行列のサイズはさらに大きくなり、小行列の並びは 1 万とか 100 万になり、3 次元でざっと見積もると 1 ペタオペレーションぐらいです。だから、多次元のニュートリノ輸送問題をやる時には、やはりペタクラスのスーパーコンピュータが必要です。

こういう計算をする場合、チューニング技術が非常に重要になってきます。今の計算でもベクトル並列化を使っていて、昔、並列巡回縮約法を使った例を理研の計算機で性能テストをしました。小行列のサイズを横軸にしてスピードをはかると、小行列のサイズが大きくなればベクトル性能が高くなり、CPU の数を 1、4、8、16 とふやしていくと、だんだん速くなりますが、余り大きくすると並列効果が悪くなります。そのときの経験が非常に役立ちました。

超新星爆発の計算は、爆発するかどうかを確認するぐらいまで時間を長く追わないといけないのですが、富士通 VPP5000 の 8PE では約 1000 時間ぐらいです。

こういう計算をやったときに、爆発するかどうか以外にも、超新星ニュートリノの予測ができます。例えばブラックホールが形成される際の、ニュートリノの特徴を予測することができます。仮に銀河の中心で起きたら、1 万個ぐらいニュートリノが検出されると予測しています。我々はニュートリノのエネルギーのスペクトラムも計算しているので、どういうエネルギー分布かもわかるし、時間発展もわかっています。ニュートリノのエネルギーがどんどん上がって行って、ブラックホールができたところで消えると予測されているので、1 秒ぐらいの短いニュートリノの放出があったらブラックホールであろうと特定できると予想しています。それから、中にハイペロンという別の粒子ができたなら、その時間はもっと短くなることも予測しています。こういうことがいずれ観測されれば、内部の様子を探ることにもつながると思います。

超新星爆発メカニズムの解明ということですが、実は誰もまだ爆発を再現できていません。球対称の範囲では

第一原理計算が行われており、これを現実的なものとして検証するには多次元のニュートリノ輻射輸送が必要で、そのためには大規模行列というのも扱わなければなりません。物理だけではなくて計算科学の領域が非常に重要な話なので、そういう方々と連携してこの問題に取り組みたいと思っています。

## 質疑応答

(フロア：富阪) 超新星爆発の問題は、飛ぶ飛ぶといわれているながら爆発していないという、天文学に残された難問題の 1 つですが、第一原理からやるのは計算が大変で、かつプログラムをつくっていったりするのも大変なわけですが、ペタコンの次ぐらいを見据えて住吉さんと一緒になってやっていこうという若い人はどれぐらい参入してきているのでしょうか。

(住吉) 計算コードを変えて動かすのは難しい問題で、ある意味、誰か 1 人が頑張らなければならないとなかなか先へ進まないという感じです。ただ、こういう問題は非常に複合的なので、こういうシミュレーションをやるという柱がある脇に、状態方程式の問題とか、ブラックホール形成の場合のシグナルはどうかという問題もあります。そういう幾つか周辺のテーマで成果を出しながら計算もやってみるということをやっています。走りながらもやるべきことは幾つか並列にあるので、そういうものでなるべく取り込んで、何人かは割と自然に入って一緒にやってくれています。

ただ、一番コアの部分はどうするかは、やはり課題だと思います。だから、そういうこともいろいろやりながら、こういうことをやりたいという人が出るのを待っている状況です。誘ってはいますが、それに捧げるのは、キャリアパスとかを考えるとなかなか難しいので、成果が出るような問題をやりつつ、何人かでトーチを持って走っていくのかなと思っています。

(フロア 2) この種の計算は、原子核とかハドロンにかかわらない部分は流体力学の計算とオーバーラップするところが大きいと思うのですが、流体力学はシミュレーションの専門家がたくさんいるし、高温・高密度もそれなりの専門家がいるので、そういう方々との特に大規模計算に注目しての連携は、これまでであったのでしょうか。また、今後ペタコンをやるときにはそういう連携が出てくるのでしょうか。

(住吉) 流体の計算の方々とは一緒にやっているのですが、流体力学的な効果だけを取り出して、ニュートリノの扱いを簡単にしてどういうふうになるのかということで、そういうシミュレーションの計算をしている方が何人もいます。

ニュートリノをどういうふうにフレームワークに組んで計算機に乗せるかは、実はまだ世界中の課題です。それができた段階でポンと流体と組み合わせるようになっていけば大丈夫で、流体の方々とそういう連携を組んでいます。

## パネルディスカッション「計算基礎科学における人材育成の現状と課題」

モデレータ：青木 慎也（筑波大学 大学院数理物質科学研究科 教授）

パネリスト：出渕 卓（金沢大学 理工研究域 素粒子論研究室 助教）

富阪 幸治（国立天文台 理論研究部 教授）

中原 康博（キヤノン株式会社 解析技術開発センター 研究員）

八尋 正信（九州大学 大学院理学研究院物理学部門 教授）

(青木) 出渕さん、八尋さん、富阪さんから、素粒子・原子核・天文学の現状の紹介と課題と提言を、中原さんから、大学で学んだことが企業で役立ったこと、また、改善すべき点の提言をお話していただきたいと思っています。



僕は格子 QCD の分野をやっていますが、これはいかに精密に第一原理からやっていくかという分野で、非常に手間がかかります。ソフトウェア開発・保守体制とか、質・量ともに豊かな人的資源の確保をどのようにやっていくかということを見近でつぶさに見ることができた米国エネルギー省科学局の SciDAC 計画と、金沢大学理学部の計算科学科についてお話ししたいと思います。

SciDAC は、現在、5 年計画の第 2 期目に入ったところです。ソフトウェアのプロジェクトで、ハードは別調達です。参加機関は 56 大学、17 研究所、3 民間企業で、年間総予算が \$70M から \$80M ぐらいです。

何をやっているかという、科学プログラムを公募して、それを採用しています。応募総数は 250 課題で、採用された課題数は 35、最終的には多分 50 ぐらいに増やすと思われます。1 課題当たり年に \$0.5M から \$5M の予算規模です。選考プロセスは日本の科研費と似ていますが、少し違うところは、応募書類が論文形式であるという点です。例えば USLQCD というグループは、20 ページプラス 8 ページの論文を書いて応募しました。それが通ると半日のヒアリングが行われて、それを分野内外のパネルで審査します。なるべくグループ間の競合を排し、連携を推進しています。

科学プログラム以外にも、SciDAC の 2 期目になって計算速度がペタになって、それにソフトウェア的についていけないグループが出てきたことから、ペタに移行できる分野を広げるために、4 大学に 13 大学が連携した SciDAC Institute をやっています。この予算は \$8M/年で、大学院・学部レベルの幅広い教育と研究、スクール、講習会、あるいはコードキャンプをやっています。これは神戸、九州、金沢、愛媛大学によって行われている「大学連合による計算科学の最先端人材育成」と同じようなものだと思います。その他に共同利用、あと Center for Enabling Technologies という計算科学のプログラムがあります。

納税者へのアカウントビリティとして四半期ごとに報告書を提出し、約 70 ページの季刊誌も発行しています。その他にカンファレンスが、年 1 回、1 週間規模、講演数 100 ぐらいで、全計算科学分野に対して行われます。さらに学識経験者のディレクターとプログラムマネージャーが、形式的議論に終わらないようにチェックや助言を行っています。全体として、計算科学の新時代を開いて、新しい学会をつくるんだという感じを受けます。

科学プログラムの 1 つのプロジェクトである USLQCD (US Lattice QCD Infrastructure Project) は、ソフトウェアとハードウェア開発、サイエンス、CPU 時間の配分をやります。科学プログラム委員会というのがあり、その中でとってきた計算資源、約 50 テラフロップスを分配します。ソフトウェア委員会もあり、予算規模は \$2.5M/年で、18 人のフルタイムのポスドクを雇えます。プログラムライブラリーの開発・保守とハードの研究開発の 2 つの重点があって、ソフト保守専用のサポートスタッフを雇用しています。この人たちは大体期限つきで、アカデミック出身で、各研究機関、大学に所属させて、ソフトウェアライブラリーの保守や研究のサポートをしたり、ドキュメンテーション、マニュアルの整備を行います。週に 1 回電話会議をやって情報交換をし、プロジェクト全体としてのコヒーレンスを保ちます。

SciDAC のソフトウェア計画で開発に雇われた人たちがどのようなキャリアパスをとっているのかということですが、まだ 2 期目なので統計が十分ではないですが、私は 5 年のフェローを 3 人知っています。全体で 16 人で、この人たちはライブラリーの保守・管理とか、計算 Job のお守りとか、新規設置の計算機が動き出すときの試行錯誤とか、一番大変で完全にサイエンスともいい切れないところをやっていて、手放せない人材になっています。彼らは、たとえパーマネントじゃなくても、一番速い機械の近くにいられるのは幸せだといっていました。

その他に 3 年ポスドクがいて、次のサイエンスポスドクに行ったり、コンピュータサイエンスの分野にいった人が 1 人います。

ソフトウェアの開発にはオブジェクト指向言語 C++ を使っています。この一番の理由は、計算機企業やウォールストリートに就職する大学院生に有利だという配慮からだそうです。

次に、金沢大学の計算科学科の話をしてします。平成 8 年設立の国内唯一の計算科学専攻の学科で、学部から大学院まであり、卒業生は 240 人です。19 年から走っている大学院 GP の支援プログラムは、神戸大学が代表になって、教育用スーパーコンピュータと e-Learning による新しい授業体系をやっています。講義と実習の 2 本立てで、

MD とか、第一原理計算とか、MPI とか、共通項を串刺して抽出してカリキュラムを立てています。

e-Learning についてですが、金沢には、電子出版株式会社という大学ベンチャーが 2005 年からあります。正社員は約 20 人で、博士とポスドクを採用しています。今期初めて黒字になりました。

物理が 300 年、数学が 2000 年以上の歴史があるのに比べて、計算科学はたかだか 50 年ぐらいで、定番カリキュラムや教科書が少ないという大きな困難があり、長い時間をかけて育んでいくことが必要だと思います。また、所属員にとっては、計算学会がなく、どこで発表していいかわからないので、どうしても母体の物理とか数学などの科学の方だけに向きがちになるというのも問題だと思います。US SciDAC はある意味で計算学会を作っていることになるので、日本でもそういうものができるといいと思います。また、この大学院 GP ではハードの特性を意識できるようになりテラシー教育とか、企業のプロダクトまで見据えた教育を将来構想としては持っているそうです。

#### 八尋 正信（九州大学 大学院理学研究院物理学部門 教授）

九州大学理学部の物理学科では物理学コースと情報理学コースの 2 コースを設けていて、一般教養科目が終わる 2 年の後期から、学生の希望を聞いてコース分けをします。物理学コースが 55 名程度、情報理学コースが 10 名程度です。工学部にも情報科学の専門の学科がありますが、従来の情報工学に比べると、理学的な、より基礎に力点を置いたカリキュラムになっています。

情報理学コースは、アルゴリズムとか、ソフトウェア工学とか、知能情報学とか、情報理論とかいう科目が入っています。

物理学コースは、主に数値計算の基礎的な言語を教えて、典型的な数値微分とか数値積分をマスターさせます。4 年生になると計算物理学が入り、物理の典型的な幾つかの問題を取り上げてコンピュータを使って解くということをやっています。典型的な課題として、シュレディンガー方程式を代表とする微分方程式の解法とかモンテカルロ法などがあります。

学生はこの 2 つのコースを互いに行き来できるんですが、現実にはコースをまたがって受講する学生は少ないです。この講座分けができて十数年たっていますが、特に最近になって、またがって受講する学生が少なくなったという傾向があります。その理由としては、物理学科の場合は 8 割の学生が大学院に行きますが、物理学コースの場合は理学研究院の物理学専攻に行き、情報理学コースの場合はシステム情報科学研究院に行くというシステムになっているために、学生はそれに向けて勉強するので、どうしてもまたがって受講をしている余裕がないという現状があります。

しかし、物理学コースの学生に聞き取りをしたら、約 2 割の学生は、物理と同じぐらいコンピュータに関心があるかといっていたので、潜在的には両方に興味がある学生はいると思います。物理学と計算機科学をまたがって人材育成をどうやるかが今回のテーマだとすると、そういう方向で将来大きな流れができれば、九大の場合は学部レベルでは十分それに対応できる組織化はできていて、それに合わせた学生とのコミュニケーションにより、そういう学生をつくっていくことは可能です。

大学院教育は、物理学専攻では情報関係に関しては、すべて研究室単位で教育しています。僕の研究室の構成員は 15 名で、スタッフが 3 名、ポスドクが 1 名、大学院生が 11 名です。計算機環境としては、教育レベルでは 12 台のパソコンをネットワークで組んで行っていますが、ドクターコースへ入っていくと、これだけでは不十分なので、九大の情報基盤センターを使うことが一番多いです。CPU 専有型になっているために、待ち時間がなく、使いたいときにフルに使えるということで非常に人気があります。また、大阪大学の核物理研究センターで共同利用の形で計算機をオープンにしているため、そこも使わせていただいています。

情報教育の具体的な進め方は、物理のセミナーを週に 1 度から 2 度やっていますが、それだけだと具体的な知識が身につかないので、そこで学んだものを必ずコンピュータを使って実体験することをします。そのときに計算機の基本を、場合によってはアルゴリズムまでスタッフの方が教えます。具体的には、シュレディンガー方程式の散乱解の解法とか、光学ポテンシャルによる散乱問題の解法、さらには実験結果との比較などをやっています。

この内容は主にマスター 1 年の学生の話を話したんですが、初期段階では、自分の出した結果を自分で正しいと判断できるようなステートメントを必ず本人に行わせることが非常に重要だということを実感しております。



小規模パソコンレベルのものと、中規模計算に関しては、院生は順調に育っていると思います。一方、僕の研究室は、核反応論ではおそらく世界で3本の指に入る大規模計算をやっているグループの1つですが、実はベクトル化が余り効率的でないということが過去の経験でわかっているため、ベクトル化は行っていません。課題は、ベクトル化の具体的な経験がないことと、大規模計算の実際の経験がないことです。しかし、大規模計算が必要なグループに入れば、十分やっていくだけの資質、ポテンシャルは身につけていると思っています。

大規模計算を推進した場合の人材育成に関する課題についてです。幾つかのトップを走っているグループは大きな計算をやっていますが、おそらく核物理全体では中規模計算をやる人がメインだと思います。その一番大きな要因は、スタッフも院生自身も、自分は物理学者として立っていきたい、計算機物理をやるのはあくまで従だという意識があることで、実際に人事もそういう観点で行われます。そうすると、どうしても中規模レベルで対応せざるを得ないわけです。

とはいえ、幾つかのグループがリーダーシップをとって、将来、大規模計算が本格的になっていくと思います。大規模になればなるほど分業制が進み、物理よりも計算機の方にウェイトの高い人材が出てくると期待されますが、核理論のコミュニティでそういう人たちをカバーするのは現状としてはかなり難しいので、もっと分野をまたがった意識での処遇をどうするかという問題が出てくると思います。

また、民間との連携を深めて、民間にも行きやすい環境づくりが必要ではないかとおもいます。そのために、そういう人たちに一定の教育を与えて、それを資格という形で目に見えるようにして、民間の企業の方々に関心を持ちやすい、評価しやすい体制づくりがあればいいと思っています。

大規模計算は、すなわち大プロジェクトということになりますから、かなり人材が必要になってきます。成果主義にならずに、バランスを考えた、若者の将来も考えた視野での人員配置、すなわち、ある程度用意できるポストをにらんだ上での人員配置をやっていくことにより、本当に有効な研究プロジェクトができるのではないかと思います。

#### 富阪 幸治（国立天文台 理論研究部 教授）

私は国立天文台で理論研究部に所属していますが、同時に天文台がやっているシミュレーションプロジェクトのメンバーでもあり、シミュレーションのための計算機資源を専門のコミュニティに提供していく仕事もしています。

今年の春に国立天文台では計算機をリプレースして、ヘテロジニアスなシステム構成になりました。今まではVPP5000というベクトル並列コンと、重力の多体問題を計算する専用計算機のGRAPEの2本柱でしたが、今回のリプレースで、CrayのXT4というスカラ並列型の計算機も入れて、ベクトルコンとスカラコンと専用計算機と汎用のPCクラスターがヘテロにつながったものになりました。

こういう構成になったのは、流体力学とかを格子法で計算するにはベクトルコンが非常によかったんですが、重力だけで相互作用するようなシステムとか、ダークマター系の動力学などのN体問題を計算するためにはスカラ型の計算機の方がいいというコミュニティの要望があったからです。

天文の中のシミュレーションは構成要素によっていろんな計算があって、それに合わせていろいろなアーキテクチャを準備していきます。天文学で取り扱う問題は、構成要素が複雑になってきています。私が大学院生でシミュレーションを始めたころは、物理的な要素もそんなにたくさんはないし、1次元問題だったりして、先輩からプログラムを習うと割と簡単に動いたんですが、最近はやがやそういうわけにはいなくなってきました。

法政大学の松本倫明さんがつくったSfumatoというAMR (adaptive mesh refinement) のプログラムがあります。AMRというのは、格子法の流体スキームです。分解能の必要なところにだけ細かいグリッドを張り込むというやり方です。天体现象を扱うときには非常に大きなスケールから非常に小さなスケールまで扱わないといけないので、最近では非常に重要な方法論の1つと思われている方法です。

しかし、こういう複雑な格子の上で計算するのは非常に大変だし、データハンドリングも非常に難しいので、院生が思いついてできるような代物ではありません。かつ、AMRのタイプである「格子」をつくったり、構成要

素として磁場の効果を取り扱わないといけなかったり、内場としての重力を取り扱わないといけなかったり、普通の流体だけではなくてダークマターを入れないといけなかったり、ニュートリノや輻射輸送を取り扱わないといけなかったりします。こんなにいっぱいあると、大学院生とか先輩から習って何とかというレベルではないので、プログラムをつくるのに非常に大きなマンパワーが必要になります。我々のシミュレーションプロジェクトでも、ユーザーの平均年齢が毎年上がっていくことを非常に心配していて、この分野に若い人にいかに参加してきてもらうかを考えないといけなくなっています。



天文学は、苦しいコード書きなどをするよりは、ハワイの山の頂上に行ってすばる望遠鏡で観測すると結果が出てくるという楽しい分野がすぐ横にあるので、参加してくる人を確保するのはそれなりに大変だろうと思っています。

国立天文台は、共同利用研究所ですが、計算機を使って天文学をやっていくためのスクールを開いています。1つはN体系のもので、天文台の牧野が主にやっています。中身としては、まず最初に、重力多体系の基礎をスピッツァーなどの基礎的な理論に基づいて講義をします。次に計算物理学であるN体シミュレーションの基礎を教え、最後に計算機の演習をやるというような方法を行っています。

格子系の方も同じようなものがあって、総合研究大学院大学でアジア冬の学校を開催しました。これは、差分法の講義とか、幾つかの演習から成っていて、演習問題は天文学の問題です。この学校では、まだ解けていない問題を演習問題としてやってみるということをやっています。ガスと銀河の円盤の衝突問題を流体力学でやってもらうとか、幾つか考えて、そういうのを体験していただいて、それについて研究発表をしてもらいます。ただし、これはプログラムをつくるどころからはやれないので、千葉大学の松元先生がつくったCANSというMHDの磁気流体力学のコード集を使ってやっています。ここで作った教材の一部は書籍化されています。

天文の分野でもシミュレーションがどんどん複雑化してきていて、なかなか簡単に参入するわけにはいかないというところを何とかしたいというのがモチベーションです。とはいっても、問題から離れてコード開発だけを誰かにやってもらうのはいけないだろうと考えていて、何らかの形で新しいものをつくっていくことに対するインセンティブが与えられる開発体制を、特に次世代コンの中でちゃんとやっていく必要があると思っています。

例えば、すぐれた方法とか、すぐれたプログラムに資源配分をするということです。もうそういうのが決まっていて、そこをどうやって次世代コンとかに載せていくかという考え方もあるかと思いますが、やはり競争の中でよいものを探し出していくことも必要なと思っています。世界遺産というのは、ユネスコがお金を出して整備するわけではなくて、その国の人が整備して、ユネスコがそれを認めるわけで、そういう世界遺産的方法はできないかなとも考えています。

大体どこの分野でも、こういう方法を習得してやれば動かせる、少し変えるとシミュレーション研究ができるようになるという部分は、ある程度教程化されていると思いますが、その次の段階の、新たな研究法を開拓して、今まで不可能であったようなシミュレーションが実現するというところを若い人たちが学んでいく道筋は、まだまだ組織化はされてなくて、手探り状態です。教程化されている段階は広くやれると思いますが、後段のところは全員がやれるわけではないので、その中で育ってきた人がやれる拠点みたいなものが新しいスパコンのプロジェクトの中でできてくればいいと思っています。

最後に紹介ですが、「最新の天文学を家庭に」というプロジェクトを国立天文台でやっていて、その中の殆どのコンテンツは第一原理シミュレーションから得られた結果がウェブにも上がっていますし、天文台のドームで立体視で見れるようになっていました。最初に思いついた人は最新天文学と想ったらしいんですが、やってみますと、殆ど第一原理シミュレーションを家庭にというプロジェクトになっていて、今我々の周りには若い人たちが進んでいく道がこういう方向にもあるんじゃないかと思っています。

中原 康博（キヤノン株式会社 解析技術開発センター 研究員）

まず、大学や大学院の教育・研究で、企業に入ってから有効だったことについて話します。大学の情報基盤センターでFORTRANプログラミングを学び、C言語とかC++オブジェクト指向は、同じ時期に自習しました。大

学院に入って、Lattice QCD の研究をする機会がありました。並列プログラミングで何かおもしろい計算ができな  
いかなというモチベーションで始めたのですが、最初は基礎物理研究所での講習会に行って、MPI や PVM を使っ  
てやってみました。実際に聞いてみると、難しいという印象もなかったので、こういう講習会は初心者にとって  
非常にいいと思います。

その後、小規模、中規模の基研のマシンを共同利用という形で自由に使うことができ、これは失敗したりし  
ても全然問題なく、非常に勉強になりました。実際に研究するときになって、CP-PACS、KEK、RCNP 等、ネット  
ワークを使っているいろいろなマシンが使えるのは、研究を進めるのに非常に有効だったと思います。

大学・大学院で不足を感じたのは、信頼性の高いソフトウェアを早い段階から設計するにはどうしたらいいか  
というソフトウェアをつくる知識です。

情報技術という観点で見ると、物理だけではなくて化学とか生物とか、いろんな知識を持って、いろんな分野  
にかかわるのもおもしろいと思いました。

産業界から見て計算基礎科学の大事な役割は、産業界は応用ということがどうしても多く、発見的なところか  
ら何かつくろうということとは少し違うので、確立されたものをちゃんと集約していただくという役割だと思  
います。一方、確立されていない知の正しさを確かめることもやっていかないと、産業界も弱くなるんじゃないか  
と思います。新現象とか新法則とかいった個々の分野も重要だと思われま

企業に入ってから一番役立ったのは、数学（数値計算、物理（応用）数学）と、ハードウェアとソフトウェア  
の計算機関連の技術と、物理的な考え方です。保存則とか対称性をちゃんと考えることは信頼性向上にもつな  
がると思います。また、十分に確立された物理法則は、企業の中でそういうものを使ってシミュレーションするの  
に重要です。ただ、最先端の極限的な科学は、すぐに使うのは難しいかなという印象です。

企業に入ってから考え方の変更を要すると思ったことは、十分高精度に計算するのは、実際いろいろ対象を扱うと、  
計算機の能力限界等もあり、容易ではないということです。かなり経験的なものをやらなければいけないことも  
あります。

計算結果を出すことは企業の最終目的ではないので、広い視点で業務を進めるのがいいと思います。時には実  
験の方をちょっと見てみるのもいいでしょう。それから、基本法則がわかっている、それを思いのままに使う  
ためにはシミュレーションが必要です。

計算機科学技術では、モデリング、数学、計算機の 3 つのバランスが大事です。企業でも、いろいろなレベ  
ルで自らモデルをつくることがあります。重要な自由度を取り出すということ、それから、そのモデルの適用限界  
はどこにあるかを高精度のモデルや実験から見極めなければいけないことがあると思います。

数学でいえば、FFT や FMM、のような計算量を削減するような数学も知っておかないと、計算時間を食うよう  
なものをつくってしまいかねません。線形演算は共通する部分で、企業に入ってからでもよく使われます。

計算機の技術に関しては、信頼性の高いソフトウェアをつくるには、ソフトウェア工学やドキュメントを書く  
技術が必要です。バグに対しては、焦って修正したりすると 2 次的なバグを起こしたりするので、客観的で確実  
な対応体制も重要です。あと、誰が使っても使いやすいインターフェースも考える必要があります。OS、コンパ  
イラの知識も重要です。並列化率、ベクトル化率、キャッシュヒット率をただ高くすればいいというものではな  
く、最終的には計算時間の短縮が望まれます。

あと、国産 CPU のハードウェアマニュアルが簡単に手に入らなかったりするので、すぐれたものをつくって  
いくためには、そういうところも整備していただきたいと思います。

## 質疑応答

(青木) 質問、コメント等をお受けします。パネリストの方もいかがですか。

(出淵) 富坂先生の話に、コードを書くことにインセンティブを与えるべきということについてコメントしま  
す。SciDAC には、問題とは離れてコードの保守だけに専念するメンテナがおり、プロジェクトに対して重要な役  
割を果たしていると認識されています。日本にもこのようなキャリアパスもあっていいのではないかと思います。



(フロア 3) 理論物理をやっている人間は大学院時代に大規模計算を余りやりたがらないという傾向がどうしてもあって、大規模計算プログラムを開発するのに必要な人材を育成するには大学院時代に大規模計算をさせることが本当にいいことなのかどうかかわからないんですが、どういう形のトレーニングが将来必要とお考えでしょうか。

(八尋) 未経験の学生の段階では、非常に初歩的なことでコケたりするので、いきなり大規模計算に入ってしまうと、本当の意味の応用力というのはつきにくいと思います。だから、中規模ぐらいから始めて、一通りわかってから、ある大規模計算の担当をするのがいいのではないかと思います。そういう意味では、ポストドク前後から大きなプロジェクトに入ってやるのが一番身につくんじゃないかと思います。

(富阪) 最近は、コードを書けないけどシミュレーションをやる大学院生も見受けられます。いろんな物理の問題をモデル化してシミュレーションすることはできるのですが、新しい計算法についてプログラムをつくってみることはできない人もるので、どこまでその人が行けるのかを指導者がちゃんと適性を見きわめて考えてあげる必要があると思っています。

(フロア 4) 大規模計算と本人の専門性の関係ですが、大規模計算をしているかどうかと本人がどのくらいの視野を持っているかは殆ど関係がなくて、大規模計算をしたからといって、本人が非常に特定の分野だけに特化してしまうことはありません。もしあるとしたら、原因は他のところにあるはずだと思います。

一方では、まだ日本には少ないですが、途中まで基礎的な科学もやって、ある人生の段階から計算にウェイトを移した人の存在が非常に重要です。これからは、ソフトの専門家だが基礎の素養を持っていて、広い視野で計算も知っている人が必要になってくると思うんですが、そういう人をどうやって育てていったらいいでしょうか。

(出淵) アメリカの事例として、物理を続けるのもおもしろいが、やはり HPC の世界は熱いな、これをやると世界が取れるなと思って計算プロパーの方にシフトして、フェローになった人もいます。大事なのは、そういう人が出たときに充てられるポストで、それができていたら、どんどん育て、パーマメントになっていくと思います。

(青木) パネルディスカッションは、これでおしまいにします。ありがとうございました。

## 7. 全体セッション：全体討議

### 7.1. 全体討議「次代を担う世界水準の人材育成に向けて」

日時 2008年9月17日（水）13:30～16:00

会場 MY PLAZA ホール

座長：土居 範久（中央大学 理工学部 教授）

参加者：青木 慎也（筑波大学 大学院数理物質科学研究科 教授）

宇川 彰（筑波大学 教授・学長特別補佐 計算科学研究センター）

岡崎 進（名古屋大学 大学院工学研究科 教授）

加藤 千幸（東京大学 生産技術研究所副所長・教授）

中村 春木（大阪大学 蛋白質研究所附属プロテオミクス総合研究センター長・教授）

土居 範久（中央大学 理工学部 教授）

今年のスーパーコンピューティング・シンポジウムは、人材育成にフォーカスを絞り、5つの分科会で、その分野における人材育成についてご検討いただきました。そのサマリーを、各分科会の座長をお務めになった先生方からご紹介をいただきます。

その後、第1回から恒例の「提言」を取りまとめて、しかるべきところに物を申したいと思っています。今年は特に人材育成に関して、それぞれのところでこういうことをしていただきたいという趣旨の「提言」を、シンポジウム参加者有志一同として提出することになります。後ほど、オンラインでエディターを務めていただいて、この場で文言を加除したりしながら最終案に持っていきたいと思っていますので、よろしくお願ひします。

さて、世の中の事情をご紹介しますと、スパコンをつくっているのは日本とアメリカで、日米で開発競争をしています。日本の場合は間欠的に火花を打ち上げているような感じになっていますが、米国の場合は一定の戦略に基づいて開発を進めています。その戦略のもとになっているのは当初はDOE（エネルギー省）でしたが、それがNSF、DOD、NASAへと広がって開発計画が進められています。我々が発表すると、米国もすぐ追いかけてきます。例えば、ソニーのゲームマシン用に開発されたCPUをもとにしてロードランナーをつくったり、米国は手のかえ品をかえて開発してきています。

現在日本が開発を進めている次世代スパコンは10ペタで、あだ名は「京速コンピュータ」です。スパコンランキングのトップ10の変遷を見ると、以前は日本のものが日立、日電、富士通等6つありましたが、すべていなくなった。地球シミュレータは、コンテストでトップを5回とり、平成16年6月にはトップでしたが、平成20年には10位になり、今年6月には49位になった。こういう日本の現状を打破しようという国家プロジェクトが始まっています。

昨年の「提言」の成果としては、「アプリケーション研究開発の戦略的拡大」に対応しては「イノベーション創出の基盤となるシミュレーションソフトウェアの研究開発プロジェクト」を公募して実施することになりました。JSTのCRESTで矢川先生が総括されている「マルチスケール・マルチフィジックス現象の統合シミュレーションのアプリケーション」では次世代スパコン向けの高度化作業が具体化し始めています。個人研究の「さきがけ」でも、数学を中心としたものが走り始めています。

「優れた研究開発成果の創出を可能とする利用環境の整備」に対しては、次世代スパコンが出てきたら、すぐそれに対応しなければいけないということで、私が委員長を仰せつかっている文部科学省の審議会である情報科学技術委員会のもとに次世代スーパーコンピュータ作業部会を設置しまして、大枠をどのようにするかという報告書が出てきています。

「研究教育拠点整備に関する検討の加速」についても、具体的に進めることが行われています。それとともに



次世代スパコンが研究開発を含めてどのような運用体制になるかに関しても、作業部会で検討し、報告をまとめました。その具体的な内容は、共用のあり方としては、「次世代スパコンは多くの研究者等に活用されるとともに優れた成果が創出される環境であるべきとの観点から、下記の仕組みを設けることが必要である」。要するに、戦略的利用である国家的見地から定める課題と同時に、ボトムアップの研究課題を進展させていくための一般的利用の2種類を設ける。また、次世代スパコンを最大限に活用するためには、利用者へのきめ細かい研究支援が不可欠であるということで、産業界への応用を含めた研究支援を行うということです。

「次世代スパコンと大学や公的研究機関等が有する計算機資源との適切な役割分担と有機的な連携を図ることが不可欠」については、大学・研究機関と密接な連携をとって進める必要があるということで、その機能を構築するために、文部科学省の中に戦略委員会というものが間もなく誕生します。そこで戦略分野や戦略目標を検討し、それを国が決定し、公募し、選定はその戦略委員会が行い、それに基づいて決定を国が行うこととなります。それぞれの戦略分野に対応して1つ以上の戦略機関を置き、その戦略機関はかなり大きな塊を想定しています。その戦略機関が1つの塊として存在する場合もあれば、バーチャルで存在する場合もあるわけですが、そのような形をとった上で戦略目標に従った戦略的な分野における研究開発を進めていただく、これがおおよその枠組でございます。

計算科学に関する教育プログラムは、少しずつ大学でもふやされてきてはいますが、まだなかなかというのが現状であります。したがって、今年度は人材育成はいかにあるべきかに特化して、5年をめどにした短期の人材育成、それから、今までのような間欠的な開発ではなく連続的に開発していくための長期にわたる人材育成、この両方を進めなければいけないのが現時点だということを理解いただいた上で、各分科会の先生方からご発表いただければと思います。

#### 加藤 千幸（東京大学 生産技術研究所副所長・教授）



分科会 A では、「次世代の産業界をリードする人材の育成を目指して」というテーマで議論しました。

今、大学が輩出している人材と産業界が求めている人材は一致しているのかどうか。産業界は大学の人材育成に期待しているかもしれないし、していないかもしれない。そんなあやふやな状態では、このグローバル化の中でなかなか国際競争力を得ていくことはできない。だから、もっと産・学・官が連携した人材育成が必須ではないか。これがこのパネルをやった背景です。

パネルのテーマは、「計算科学分野において次世代の産業界をリードする人材を育成し、産業の国際競争力の強化に資する」です。議論の境界条件としては、計算科学シミュレーションに基軸を置きましたが、周辺のストレージとかネットワークも含めることにしました。それから、ソフトウェアは開発と利用という2つのスタンスがあるので、その両方を議論しましたが、あくまでも産業界への出口を見据えた議論を進めることにしました。それから、人材の議論で一番忘れてはいけないのはキャリアパスとか処遇なので、それに関しても議論しました。育成する対象は、主に学部・大学院学生と社会人としました。このような前提条件の中で上記の議論を進めました。

前半では、産業界のお二方から、産業界が期待している人材像は何で、大学に対してどんなことを期待しているか、自分のところでは何をやっているかをお話いただきました。また、大学では、現在どんな取り組みをしているかを、大学側からご紹介いただきました。それらがマッチしているかないかを整理してから、後半で実際の人材育成像、育成すべき素養、誰が、どうやって育成するのかということを議論しました。

産業界側が求めている人材像は、一言で言うと、先端的シミュレーションを真に設計・開発に生かして変革ができる人です。特に、産業界の中ではプロジェクトで動くことが多いので、プロジェクトの中できちっとシミュレーションを活かせる人でないといけない。必ずしもシミュレーションだけではなくて、計測、物づくり、加工、いろいろ含めて学際的な連携が重要であるというご意見が出ました。

そこで、実際に設計開発でシミュレーションを活かすには一体どんな素養を持っていないといけないのかということを議論しました。計算科学シミュレーションを本当に設計に活かそうとすると、計算機に関するかなりの深い知識がないと、まともな実用的なプログラムはできません。プログラミング技術も要るし、アルゴリズム開

発能力も要ります。多分モデリングがちょうど産と学の接点ぐらいになると思うのですが、モデリングには、ある現象の本質的なところを抽出するというのと、それを数学的にモデリングするという2つの意味があります。産業界の場合は、計算をどうやって実践するかとか、結果の判断、意味のあることを結果から抽出する能力、最終的にそれを物に活かすという意味では、アイデアの提案能力が必要になります。

これだけ多くの素養が必要なのは明らかですが、では、これを1人の人で全部担えるのかとか、それをどうやって身につけさせるのかということが、これが前半の議論のポイントになりました。

一方、学側の認識として、一番大きな話は、計算科学は名前はあるが、いまだに学問としての体系化がされていないので、明確な体系をつくっていくことが必要だということです。また、学も実践力は非常に大切だと認識していて、産業界とともにいろいろなことに取り組んでいるが、どのような実践力を本当に滋養すべきかをもう少し明確にすべきではないか、学がどこまでをやり、産が独自にどこまでをやり、産と学が連携して何をすべきかについても、明確に分けて議論すべきではないかという話が出ました。また、産業界をリードする人のキャリアパスも考えようということになりました。

会場からも、数多くの貴重なコメントをいろいろいただきました。まず茅先生から、次世代スパコンの産業界での積極的な活用も視野に入れて議論をして欲しいというご意見をいただきました。また多くの方から、求められる人材像は必ずしも1つではなく、製品開発のフェーズによって変わるので、そのことを意識して育成するプログラムの多様性を考慮して欲しい。具体的には、解析技術者、プロジェクトマネジャー、全体的に指揮する人、それぞれにより持っておくべき素養が違うので、そのことをちゃんと認識してから議論すべきだというご意見です。また、企業内のソフトウェアを学で使うこともあるというお話もありました。

こういうご意見を受けて、産業界として見たときに、全体像としてどういう技術、知識、素養が一体必要なのか。それを踏まえて、どのように産学が連携して人材を育成していくかを、分科会の提言として以下のようにまとめました。

まず、計算科学シミュレーションで産業界を牽引できる次の時代の人材が持っているべき素養を明確にする。大学と研究機関並びに産業界は、その認識を共有することから始めるべきである。

そのような素養を習得させるためには、2つの大きなプログラムを用意すべきである。1つは、大学等の研究機関が主体的に実施する学生を対象とした教育プログラム、もう1つは、共同研究等の場で産・学が連携して実践する人材育成プログラムです。そのいずれのプログラムを構築する場合も、余りリジットにすべきではなく、多様性を許容するようなプログラムを提供すべきである。

大学等の研究機関が主体として実践する教育プログラムでも実践力は非常に重要で、実践力をつけるために、インターンシップ、産業界の講師を大学等に招聘する、産業界で開発したプログラムを利用する等の具体的方法が提案されました。

一方、産学連携の共同研究等の場では、次世代スパコンの積極的な利用も検討し、そのような最先端のシミュレーションがあつてこそ実現できるようなサクセスストーリーをつくることが極めて重要である。このことにより、企業幹部の計算科学シミュレーションに対する理解が深まり、産業界におけるより積極的な計算科学の活用と、それにかかわっている人の正のキャリアパスが構築できるだろう。以上が我々の分科会の主な議論の内容と結論（提言）です。

#### 宇川 彰（筑波大学 教授・学長特別補佐 計算科学研究センター）



分科会Bでは、「計算機科学と計算科学の学際融合」というタイトルで、5人のパネリストで議論を行いました。

まず計算科学の定義ですが、ここでいう計算科学とは、例えば計算物理、計算化学、計算力学といった分野の総体としての計算科学で、計算機科学や数理科学は、この定義では計算科学の中には入っていません。その意味で、コンピュータに関するサイエンスである計算機科学と、今述べた意味での計算科学の学際融合は一体何かを考えることが主題です。視点としては、大学・研究機関で行われている研究開発以外に計算機メーカーという視点もあるし、例えば気象庁での業務という側面もあります。

計算機のハード・ソフトの研究開発や運用に携わる側と、計算機を主たる手段として科学の研究をする側の間にいろいろな意味で乖離があるのではないかと、これが問題意識の出発点です。我が国では、この2つのコミュニティの間に今まで殆ど交渉がなかった。計算機科学ユーザー側では、システムをブラックボックスとしてとってしまっ、自分のプログラムをすぐ流して、答えは出てくるだろう。しかし、それではシステムのポテンシャルを生かし切れず、サイエンスの意味での革新的な成果に結びつく計算がなかなか難しい。逆に計算機科学側では、計算科学のことがよくわからないので、計算ニーズを明確にとらえたシステム開発ができない。あるいは計算ニーズにこたえる革新的なシステム開発ができない。したがって、高度な技術発展があっても、革新的なポテンシャルを生かしたシステム開発ができていない。

我が国におけるこのような乖離は、計算機システムの高性能化に伴う高度化、複雑化とともに、ますます広がっていつているのではないかと懸念がある。このような状況では、計算科学の両輪である計算科学における革新的な成果と、それを生み出す革新的な計算機システムの創出は困難ではないか。このような問題意識に立ち、(1)計算機科学と計算科学の学際融合の意義は一体何なのか、(2)今まで学際融合はなぜうまく進まなかったのか、(3)今後学際融合を促進するためにアクションアイテムとして今何を行うべきなのか、以上の3点を中心にご議論いただきました。

米国では、サポートスタッフが非常に充実しており、国として学際融合を促進するようなプログラムを推進しているのに対して、日本は少し個別的な対応に終わっているのではないかと。例えば、DOEによるSciDAC (Scientific Discovery through Advanced Computing) は2001年から始まって、現在第2期目です。年間予算は50億円から60億円出ていますが、プログラム申請をするときに、そのアプリケーションドメインは、アプライドマセマティクス及びコンピュータサイエンスといかなる意味で協力をしてその領域を推進するのかをきちんと書かなければいけない。つまり、協力が義務化されているという面に非常に特色のあるプログラムです。

先ほどの3点に沿ってパネリストの方々の意見、フロアからの意見をまとめると、学際融合の意義に関しては、革新的な性能向上を実現するアーキテクチャ等の実現、お互いのシーズとニーズのマッチング等々ありましたが、大きなポイントとして次世代スパコンに限らず、大規模計算科学において革新的な成果を得るには、やはり両分野が融合するしかあり得ないという意見が非常に出ました。

次に、計算科学と計算機科学の学際融合がなぜうまく進まないのか。まず、その価値意識が異なる。それぞれの分野が、何が学術あるいは技術として大事か。あるいは、それに基づく業績評価の物差しが違う。お互いの分野でそれが相手に対してどうなっているかわからないことから来るコミュニケーションの難しさ。それから、方向性の違い。計算機科学は汎用性を追求するが、計算科学の個々の分野の研究者は、自分のテーマを解きたいということが主になる。両者が協力するためには、それぞれにとって値打ちがなければいけないが、計算機科学側と計算科学側、それぞれの観点から見たときに、意義のあるテーマの共有が容易ではない。

それから、融合の活動がすき間産業にとられる。どちらから見ても、それは相手がする仕事ではないかという見方なり観点があつて、結局、その間をやる人の業績自身がプロのやることとして十分に評価されるシステムができていないのではないかと。

ポストの問題も随分議論されました。ポストがあつても、なかなか計算機科学に回ってこない、あるいは、計算科学の中でも、例えば計算化学は実験化学に比べてまだまだ分野としては小さくて、ポストを確保するのが容易ではない。さらに、キャリアパスの問題もあります。

そういった議論を踏まえて、ではどうすればいいのか。まず、目的の共有が大事ではないか。何を解くのかを共有して、そのために計算科学側、計算機科学側はどういう形で協力をするか。それには真の共同研究意識の醸成が必要で、単なるヘルパーではなく、真の意味でのコラボレーターとしての共同体ができなければいけない。そうはいつても、実際に具体的なものをやる上では、融合プロジェクトが走らなければならないし、それに伴う予算措置も必要だろう。

それから、先ほど計算科学は学問体系になっていないということが指摘されましたが、非常に簡潔にして要を得た言い方でして、大学・大学院での教育カリキュラムの整理、ディグリーによってそういう教育を認定する制度、ダブルメジャーやメジャー・マイナー制の導入も必要だろう。また、余りにもお互いのことを知らなさ過ぎる。これでは協力もできないので、お互いがお互いを教育することも必要だろう。そういったことを通じてすき間を埋めるような人材をきちんと育てて、それを評価していくことが必要ではないかと。

そうやって教育されてきた人たちを支えていくための制度的な整備、あるいは、そのプロジェクトを支えるための制度的な整備も必要で、それは結局組織づくりとか、人評価の見直しの加速、それから、成果を両分野にフィードするための仕組みの確保という観点が大事ではないかということになりました。

議論の結論としては、第 1 に、計算機科学と計算科学の学際融合は、どういう視点から今後重要なのか、まずは新しい統合領域としての「学際計算科学」。これは新しい言葉で、先ほど計算科学は個別分野の相対としての計算科学といいましたが、ここで言う「学際計算科学」は、計算機科学あるいは数理学も包含した新しい分野という意味で、こういう分野が革新的な成果を出していくためには必須である。このような複数の分野が複数の目的価値を共有する分野をつくっていくのはなかなか難しいが、鍵は成功体験の共有によるコミュニティの成長ではないか。例えば、数値風洞は CFD を離陸させたと思うし、素粒子宇宙では CP-PACS が成功体験のいい例だ。また、地球シミュレータは気候気象に関して同じような役割を果たしてきた。その意味で、今回の次世代スパコンは、ライフあるいはナノ分野において融合が離陸するための非常にいい機会ではないかと思っています。

一番肝心な実現の方策です。まず、計算機科学と計算科学が協働する場の創出。具体策として、現在、次世代スパコンプロジェクトが推進されて、さまざまなプロジェクトが走っていますが、そこで融合をすることの制度的あるいは予算的組み込みをする。あるいは、SciDAC のように、次々世代も踏まえて融合を促進するようなプログラムをクレストあるいは科研費の中で実施していく。

2 点目に、教育人材育成プログラム。これは組織的な強化が必要で、大学における計算機科学、計算科学の学際教育プログラムの充実、次世代スパコンのクラスター・オブ・エクセレンス、それから、大学基盤センター、研究機関との連携を図ったプログラム作成。

3 点目に、計算機科学と計算科学にまたがる人材のキャリアパスの創出。ここが一番難しいところで、例えば、融合プロジェクトを多様にかつ長期的に実施することによって、まずはポストを確保する。大学、研究機関等で研究や業務を遂行するプロとしての位置づけと、給与・職の処遇体制を少しずつでもいいからつくっていく。さらに、産業界での計算科学の利活用の推進と、それによる部署の配置を目指すべきでないか、このような議論が出ました。

#### 中村 春木（大阪大学 蛋白質研究所附属プロテオミクス総合研究センター長・教授）



分科会 C では、「来たれ 若人」というタイトルで、生命体統合シミュレーション分野として若い人材をどう育成するかを議論しました。

生命体統合シミュレーションは、実験理論科学と並ぶ新しいもう 1 つの科学として、最終的には生命の理解、あるいは応用としての創薬とか病態の予測を目標としていて、多くの人がこの価値を認めつつある分野です。

生命体シミュレーションは、生物学というと非常にウェットなイメージが強い分野と数理学、物理化学、情報科学などさまざまな分野との学際領域で、この学際領域そのものを専門とする研究者の絶対数が少なく、また分散している。例えば、数理学だと数理生物学、物理化学だと生物物理学、情報科学だとバイオマティクス、それぞれの分野として既にできつつあって、必ずしもそれぞれが融合していないという問題も抱えています。

このようなことを背景にして、この融合分野の（若い）研究者を育てるには何をすればいいのか、あるいは何が問題であるのか、そして将来に向けてどういう提言を行うべきか、議論しました。「若い」を括弧に入れたのは、本当にものすごく若い人はちょっと向かないのではという意見もあったからです。

まず最初に、生命体のシミュレーションでは、どういう数理モデルを構築できるかが非常に重要であって、意味のあるモデル構築を可能にするためにこそ学際融合が大事であるという意見が何名かの方から出ました。

最初に中野先生から、細胞生物学あるいは発生生物学が計算科学の対象になるために何が問題かということで、非常に複雑な階層的システムをつくっている生物の生命現象に潜む根本原理を推測し、数理モデルを立てて記載する方程式を仮定する。あとはデータを収集してシミュレーションができるだろう。最初にどういう数理モデルを立てるかによって、後の研究の正しさというのが出てくるということを紹介されました。

安井先生からは、研究室の中でウェットとドライの融合型の研究を行っているが、異分野融合のためには「共

通のテーマ」と「場の共有」が非常に重要である。そのため、自分の研究室の中で、ウェットとドライの両方の分野の研究者を集めて研究をしている。若手の育成ステップとしては、若い人が最初から学際的なことを学ぶのはなかなか難しいので、まず自分の専門分野をある程度確立していることが非常に大事である。2つ目のステップとして共通のテーマ、共通の場に身を置くことで、異分野融合が可能になっていく。自分の研究室は水分子の生命科学が共通の問題意識になっているので、非線形光学とか、シミュレーションとか非常に先端的な測定技術、中心になる分子生物学、構造生物学、これらを同時に1つの研究室でやっている、そういう紹介をされました。

北川先生からは、学際融合という点では、生物学は分野の距離がはるかに離れており、その学際分野の人材をどのように育成するかが非常に問題である。方法論的研究を横糸にすると、その上に縦糸として領域研究がある。そのような領域研究と方法論的研究が両方うまく動くことが必要で、そのための T 型の人材育成が大事であるということを紹介されました。

私からは、実際に生物学、医学、工学及び情報科学の分野横断的な教育を組織的にやっている大阪大学の例を紹介しました。大阪大学の臨床医工学融合教育センター（MEI センター）で、メディカルとエンジニアリングとインフォマティクスの3つが融合して、まず大学院の教育を行い、単位を互換にします。先生方は、医学部、工学部、情報科学部から来られます。この授業は公開にして、社会人の人材育成に使ったり、関西一円の私立大学の学生さんにも聞いていただいて単位互換しています。

また、NEDO で行われたプロジェクトをもとにして、東京大学と京都大学と大阪大学の3つの大学のそれぞれの研究者が集まって、人材養成の場を設けています。今度神戸に新しい拠点ができますが、やり方さえ考えれば、複数の大学がそういうところを使いながら人材養成をしていくことが十分可能ではないかと思います。

若人に来てもらうためには、将来のイメージを見せて、国際化とか研究環境を整備する必要があるのではないか。これに関しては、大正製薬の北村先生から、創薬の分野でどういうスキルを持った方々、修士あるいは博士の学位を持った方々を採用して創薬の研究をされているかという紹介がありました。具体的には、大学・大学院のときには量子科学の計算や数理学の計算の専門家だった人たちは、スキルとして計算機をいじることがあるので、そういう方々に問題意識を持っていただいて創薬を進めているということでした。

最後に下條先生から、大阪大学とサンディエゴの大学、UCSD とで、環太平洋のさまざまな大学間で大学院の学生の交換を行う PRIUS プロジェクトを具体化している。そこでは、語学とともに文化的背景、あるいは最先端技術に対する理解をオン・ザ・ジョブ・トレーニングでやったり、チームプレーも学ぶ。そういうことによって、グローバル社会でのリーダーシップを発揮できるような学生を育成していることを紹介されました。

#### 岡崎 進（名古屋大学 大学院工学研究科 教授）



分科会 D では、「計算科学者、計算機科学者、実験研究者および産業の接点と人材育成」というテーマでパネルディスカッションを行いました。

現在私どもは、次世代スパコンの中のナノ統合拠点として具体的にミッションを進めています。その内容は、次世代ナノ情報機能材料、次世代ナノ生体物質、次世代エネルギーの3つの課題を解決する方法論あるいはアプリケーション、ソフトウェアを開発し、この遂行を通じて人材育成を進めるということです。ナノサイエンス、ナノテクノロジーという具体的な課題、それから、現在既に走っているプロジェクトの一環として人材育成がどうあればいいか、そういう観点から議論しました。

プロジェクトは、まず計算科学者と実験研究者との連携という意味では、現在、分子科学・物性科学ワーキンググループで、この連携とか共同研究の推進について着手したところで、ナノ分野の実験研究者との連続研究会を企画しています。それを経まして、共同研究としてプロジェクトの中で幾つかの重要な課題を設定して、具体的に実験研究者との共同研究を開始していこうという試みを始めています。

2番目が、計算機科学者との連携です。次世代スパコンは非常に大きなマシンで、私どもが開発しているプログラムもそれに乗って動かなければいけないとすると、計算機科学者との連携が必要不可欠になってきます。現在、理研あるいは筑波大、特に筑波大の計算機センターの佐藤先生等と連携しながら、超並列に対応するプログラムの高度化を推進しています。

企業研究者との連携についても、既に企業研究者との共同研究プログラムを発足させていて、これからさらにそれを拡大していこうということです。

こういった中で、あるべき人材の姿を明らかにした上で、プロジェクトとして人材育成をどうやっていけばいいのか、ということを提案させていただきます。

まず実験の立場からは、ナノにおける物質の振る舞いは非常に多様で複雑なものであり、これらはすべて、今のところ個別の課題としてとらえられている。しかし、これは実験だけでも計算だけでもダメで、研究を進めるためには、この2つの方法論をもって連携協力することが絶対に必要であるという共通認識に至った。これからどういう計算科学の人間が必要か、あるいは実験研究者が必要か。物質をよく理解している計算科学者、あるいは計算のできる実験科学者を育成していかなければいけない。特に実験研究者の中から計算のできる人間を育てていくことが重要になるだろうという議論になりました。

産業からは、実験研究者がピュアなサイエンスに対する問題の設定なのに対して産業は製品開発で、系はさらにとても複雑である。一番大きな要因として、時間的制限がある。時間はお金である。そういう意味で、ある1つの単一の方法論を深く掘り下げていくというよりは複数の方法論を組み合わせで何とか上手にやっていくことが必要で、そういうことができる人間が重要である。教育についても同様で、工学的センスを持った計算科学者が必要で、工学部にもシミュレーションに携わる学科があってもいいのではないかと。さらに、企業の空気を吸うためにインターンシップを利用されてはいいかというご提案がありました。

これら2つの分野に共通する計算科学者に求められる人間像としては、まず、ブラックボックスとして計算をするのではなくて、ちゃんと中身も知って、自分でプログラムをつくれる人。ちょこまか改良しながらでもやっていける人。2番目に、専門性が重要で、計算だけできるのでは困る。物質と計算と両方できる人でないといけない。3番目は、問題設定のできる人。それを計算科学的にそしゃくした上で方法論を選んでいけるような人。さらに、計算を使って本質が見抜ける人、概念をつくれる人、理論をつくれる人、そういった人が全く望ましいということです。

計算機科学の立場からは、ニーズに根差した新しいテーマとしてアプリケーションをとらえているというご報告で、とにかく共同で一緒にやっていく。1つの事例として、筑波大学では中核アプリの高度化を計算機科学者と私ども計算科学者と共同でやっています。東大の押山先生のRSDFTはプロジェクト以前から既に継続してやっていますし、平田先生のRISMにおけるFFTの問題は、かなりうまいこと既に進んでいて、残りについても、現在いろいろと検討を進めているところだということです。

研究者は計算だけではなくアプリケーションにおけるそれぞれの専門分野の両方の知識が必要であり、教育という意味でも両方からやっていかなければいけない。また、次世代スパコンは従来のスパコンとは全く異なる計算機で、全然違う技術が必要だという認識が重要で、そういうこともこなしていける人材をつくっていかなければいけない。

ただし、ここでも計算機科学と計算科学の間の人間が必要なわけで、その間の人間のキャリアパスをどうとらえていくかも議論となりました。

結論としては、計算工学にも通じて、物質に根差した計算科学のできる人が必要だということです。1人1人に還元すれば、どこに重心を置くのかという問題になるかと思いますが、これを1人でやるのかチームを組んでやるのかという問題もあると思います。

人材育成という意味では、若手研究リーダーの育成、それから、若手研究者、ポスドク、大学院生の育成。超並列とか高速化に対応する技術者の育成。それから、連携ツールのあり方。実験研究者、企業研究者との連携では、共同研究体制がまず第1番で、その上で、広く広めるという意味では研究会とか講習会を行う。このようなことを現在のプロジェクト、あるいは、今、議論されている戦略機関で実現していければと考えています。

#### 青木 慎也 (筑波大学 大学院数理物質科学研究科 教授)

分科会Eでは、3つの講演と1つのパネルディスカッションをやりました。パネルディスカッションの題名は、「計算基礎科学における人材育成の現状と課題」です。計算基礎科学というのは、計算科学の分野のうちですぐには役に立たない分野というのが定義です。

まず教育・人材育成の現状の紹介です。各研究室で専門分野、例えば物理の場合なら素粒子とか原子核とか天



文字宇宙とか、その分野の専門教育を行い、研究室によってはシミュレーションの簡単な原理の勉強やパソコンなどを用いたコード作成・計算の実行も行われています。それ以上の中規模の計算は全国共同利用研究所の計算機を使うことが多いです。また、簡単なベクトル化とか並列化などは全国共同利用研究所での講習会などで習います。しかし、それだけでは不十分なので、自習したり、研究室の先輩や先生に聞いたりして、勉強することになります。分野によっては、シミュレーションのスクールが分野全体で行われているところもあります。このようにシミュレーションなどの知識の習得は一応可能ですが、大規模な計算は所属の 1 つの研究室だけでやるのは難しく、大きな研究グループに参加してやることになります。



このような教育体制のなかでどういう問題点が指摘されたか？①専門分野の知識の習得に手いっぱい、計算機に関する勉強がなかなか系統的にできない。②物理の人が計算機、計算機の人が物理を学ぶ機会もあるが、一般に物理の学生は余り計算機に興味を持たないし、計算機科学の学生は個別の物理の問題には余り興味がない。このようなことが現状の問題点として挙げられました。

このような現状では、必要になって勉強はする場合、先輩からちょっと聞くとか、コードを見てやるとか、で全然系統的ではない。特に、ソフトウェア工学とかハードウェアの知識が不足しているので、コードを作ってもチューニングとか信頼性の向上がうまくできない。何かやったら速くなったみたいな感じで試行錯誤しながらコードをつくるので、うまくできない場合が多く、また、所属研究室によって出来るコードの質が変わってしまうことなども、問題点として挙げられました。

一方、大規模プロジェクトの場合、計算コードが複雑になるために開発が専門化、長期化して、大学院生などの参入が非常に難しくなることが問題になります。また、コードが膨大で複雑なため、伝達が非常に難しい。さらに、その膨大なコードの保守管理や改良が非常に難しくなっています。特に、コード作成やその保守管理を専門にやる人が物理の分野の中では評価されにくく、そういうことをやる人材のキャリアパスが少なく、人材不足である問題も指摘されました。

米国の SciDAC (Scientific Discovery through Advanced Computing) の例を紹介します。全体の予算は、年\$80M×5年であり、非常におもしろいのはどんな新しいハードが出てきても対応できるようなソフトウェアをつくる体制をつくらうとしていることで、それは非常に重要な視点だと思います。

USLQCD という SciDAC の中の科学プログラムの予算は年\$2.5M×5年で、そのお金は殆どコード開発と保守に使われています。特に保守に関しては、開発はせずにメンテナンスだけをする専用のスタッフを雇用しています。5年計画なので身分は期限付きなのですが、非常に有用だということがわかって来て、既に常勤になりつつある人が何人もいるということです。どういう人を雇うかという、計算科学と計算機科学の両方を知っているアカデミック出身の人で、彼らを科学者がいる各研究機関に張りつけて、そこで連携をとりながら保守をしています。

非常に大事なのは、ハードウェアの開発とは別に、ソフトウェアの開発は持続的に行う必要があるということです。ある意味、「良いハードを作らないとソフト側としてはその計算機は使わないよ」といったような、ソフトとハードの緊張関係があると思われま。

さて、我々の分野としてどういう人材育成の提言をしていきたいのか？全部を1つの所でやるのは難しいので、3層構造の教育・人材育成体制の構築ということを提言したいと思います。

まず 1 層目、専門分野の教育は各研究機関、研究室で行い、できれば簡単なシミュレーションの知識などの教育も各研究機関や各研究室で行う。専門的な大規模シミュレーションに関する教育は、各研究分野内でスクールなどを開催して行い、これには学生だけでなく研究者も参加できるようにします。これが 2 層目です。例えば、国立天文台では、シミュレーションスクールというのが 2001 年から毎年行われています。また、国内だけでなくアジア全体も考えた国際スクールも重要だということで、2006 年にアジアウィンタースクールが行われました。

3 層目は、ソフトウェア工学とか計算機ハードウェアに関する系統的教育など各分野でやるのが非常に難しい教育を、計算機工学の研究者の協力を得て、全分野に対して行う体制を考えたいのではないかと思います。これも当然学生だけではなくて研究者も対象です。

例としては、筑波大学計算科学研究センターの HPC スクールとか、金沢大学理学部計算科学科での大学連合に

よる計算科学の先端的人材育成があります。後者は金沢大だけじゃなくて神戸大、九州大、愛媛大と一緒にやっているそうですが、そういう動きと合わせて、分野に限定しない計算科学全体での教育が非常に重要になると思います。

人材育成についての議論の中で、企業へのキャリアパスとも関係すると思いますが、そういう教育をしたときに何らかの資格を与えたらどうかという意見も出ました。

3層目の教育をやる組織として、今年5月に素粒子・原子核・天文宇宙の研究者が中心になって計算基礎科学コンソーシアムを設立しました。将来はいろいろな分野に広がっていくと良いと思います。

まとめますと、専門分野の教育や研究室シミュレーションの簡単な知識などの教育は各研究機関や各研究室で行う。シミュレーションの教育は、その分野全体で行う体制を作る。ソフトウェア工学、計算機、ハードウェアなどの系統的な教育は、例として計算基礎科学コンソーシアムのようなところで行う。筑波大学の計算科学研究センターとか金沢大学、東大、そういうところと協力して行われたら良いと考えています。

この教育体制を成功させるには、どういう内容を教えるかについて、各研究室と専門分野全体、専門分野と計算基礎科学全体の密接な連携が当然必要だと思われます。特に分野内のスクールの場合には、適切なカリキュラムの作成をきっちりやらなければいけないし、スクールを定期的開催する体制も必要です。その分野全体の組織といっても、具体的な組織があるわけではないので、ある意味、ボランティアベースになってしまうこともあるので、その負担分散をどうするかは課題だと思います。

また、一番上の層のソフトウェア工学、計算機ハードウェアに関する系統的な教育カリキュラムを作成する必要があります。これは非常に難しいのですが、計算機科学に共通するアルゴリズムの洗い出しなどをやることから始めることが考えられます。HPCの人には主体的にかかわってもらうためには、何らかの動機付けが必要だと思います。

計算機科学を通じた異分野間の実質的な共同研究を行い、異分野間の連携を図ることも重要です。研究で連携が行われると、必ず教育でも連携が行われます。例えば、素・核・宇宙連携で、最近、新学術領域での申請を出したという動きもあるので、計算機科学と計算科学だけではなく、計算科学の中でもだんだん融合を図っていければと思います。このような環境で育った人材が企業へ行き、異なった部署間プロジェクトの連携を図る役割を果たすことができれば、新しいキャリアパスとなる可能性もあります。

大規模で複雑なコードの作成・保守管理・改良には多大な労力と時間が必要になります。可能であれば、各研究室でやるのではなくて、第2層の研究分野全体で行って、それをフィードバックするという体制が望ましいと考えます。特に、ソフトウェア工学の専門家の協力を得て、わかりやすく、保守管理が容易で、移植性・拡張性の高いコードを作成すべきだと思います。これは実は研究効率にもかかわることです。ちょっとあるところを変えて新しいことをやりたいというときに、コードが複雑だと、非常に手間がかかってしまいます。そういうことなるべくないように、アイデアをすぐに試せるようなコード体系になっていると生産性が上がります。

こういうことをやるためには、SciDACのように、コード作成・保守管理・改良を行う専門の人材が必要になります。これは計算科学と計算機の両方がわかっている人材です。分野でそのような人材を評価して、常勤の職が得られるような体制をつくるのが望ましいと思います。ただ、正直なところ、今の大学では人員削減が厳しくてなかなか難しいので、例えば大学の研究センターなどでそういうことができないだろうかと思います。特に、今度できる神戸の新センターに是非そういう機能を担って欲しいと期待しています。また、こういうことができる人材が企業へ出ていくようなキャリアパスができると良いと考えています。

(土居) 各分科会から、それぞれの分野に関するご報告をいただきました。人材育成という点に関しては、表現は違えど、基本的には分野共通的な問題、またご提言がかなり多くあったのではないかと思います。

ご報告いただきました先生方、どうもありがとうございました。

次に、参加者有志一同という発信元で出します「提言」の「案」を表示します。これは各分科会で討論された結果を踏まえてつくり上げたものです。

## 提言（案）

計算科学は、予測の時代である 21 世紀の科学技術や先端産業を牽引する基盤である。これまで我が国が果たしてきた役割を継承し、さらに発展させていくためには、予測の時代を担う人材を輩出し、その活躍の場をこれまで以上に広げていくことが必要である。

21 世紀の科学技術を牽引する計算科学は、計算機科学とさまざまな科学技術領域の有機的・効果的学際融合と、それを支える人材育成を求めている。新しい学術分野の創成や、イノベーションによる産業の国際競争力の強化に果敢に取り組む世界水準の人材は、これからの我が国、ひいては人類・社会の発展に大きく貢献していくことになる。

以上の認識のもと、このシンポジウムでは、次世代スーパーコンピュータ開発利用プロジェクトを一つの契機に、次代を担う人材の育成に積極的に取り組む必要性を共通の理解として、以下のような取り組みを強力に推進すべきである旨提言する。

### 一、教育・人材育成プログラムの多様な展開

21 世紀の学術の展開を見据え、計算科学、計算機科学、さらには、その融合による新たな学術分野の展開を追究する研究科や専攻・教育研究の中核となる研究センターの設置が進展しつつある。また、大学院教育改革支援プログラムなどを活用したユニークな人材育成も進められている。

今後、進展する科学技術、産業の要請に適切に対応していくためには、将来の活動を支える人材に求められる素養を明らかにし、人材育成に係る関係者間でこの認識を共有することが必要である。大学・大学院教育では、確実にその素養を身につけさせる。

さらに、数理科学など関連する他分野との連携、国内の大学・研究機関間の連携、国際協力等の国際的視点を重視しつつ、計算科学と計算機科学の融合と、その推進を担う人材の育成を目指した教育研究プログラム、学際融合型プロジェクトの具体化、制度整備を強力に推し進めることが必要である。

このため、大学・研究機関の取り組みの一層の深化、全体としての多様化、その規模の拡大と分野を超えた連携を積極的に推進する。

また、教材の開発・共有、単位互換など、大学・研究機関間における具体的な協力を促進する。このような活動を通して、大学・研究機関におけるキャリアパスを確保する。

### 一、人材育成に係る一層の連携促進

人材育成における大学・研究機関間の協力はもとより、実践力の涵養を目的とした教育への人的な貢献やインターンシップの促進、共同研究の実施などを通じた大学・研究機関と産業界との間の相互協力を加速する。

また、産業界のスーパーコンピューティング技術の利用を促進し、それによってキャリアパスが確保されるという人材の育成・確保の正のスパイラルを確立することも必要である。

このため、次世代スパコン利用に係る戦略的研究開発プログラムにおいて、大学と産業界との連携を加速するための戦略分野を設定するなど、次世代スパコンを初めスーパーコンピューティング技術の利用による成果を速やかに創出するための具体的な措置を講じる。

### 一、拠点形成における人材育成機能の明確化・具体化

次世代スーパーコンピュータ開発利用プロジェクトは、施設を中核とした研究・教育拠点の形成を一つの目標としている。拠点形成に係る検討に当たっては、人材育成機能を明確化するとともに、計算科学に関する拠点や大学の情報基盤センターとの具体的な連携協力のあり方などを含め、関係機関が担うべき役割を早期に具体化する。

特に利用のあり方については、産・学・官を問わず、大学や大学院学生を含む若手研究者・技術者の利用機会の確保と、利用に当たっての支援体制などの充実を図る。

2008 年 9 月

次世代スーパーコンピューティングシンポジウム 2008

参加者有志一同

(土居) ご意見をいただいて修文したいと思いますが、まず前段の部分はいかがでしょうか。

(フロア 1) 「これまで我が国が果たしてきた役割を継承し」というのは、何に対してというのが入ってなくて、文章として非常に不安定な気がします。

(土居) 我が国が国内外に対して広く果たしてきたことを、よい点はよい点で継承していくということを、ざっくりいっています。

(フロア 1) 21 世紀が予測の時代であるという状況をつくる背景を培うことに果たしてきた役割、そう受けとめればいいのでしょうか。

(土居) それも含めた全般的な話とご理解いただいた方がいいと思います。

(フロア 1) 「これまで我が国が世界の科学技術の発展に果たしてきた役割」とすると、落ちついた文になると思うんですが。

(岡崎) 単純に、「これまで我が国がこれらの分野に対して果たしてきた」ぐらいでよろしいのではないのでしょうか。

(フロア 1) 私はアグリーです。

(加藤) 分野において何か果たすわけだから、「分野に」ではなくて「分野で」がいいような気がします。

(土居) 「分野で」の方が素直かもしれないですね。

(加藤) 私は、先ほどおっしゃられた「世界の科学技術の発展に対して」でも、「これらの分野」でも、どちらでもいいと個人的には感じています。

(土居) 岡崎先生、よろしいですか。

(岡崎) はい。

(加藤) 「予測の時代」という言葉が、もうちょっとインパクトのある言葉にならないか、これからの時代の香りというか、そういうニュアンスが出ないかなと思いますが、いかがでしょう。

(土居) 茅先生は、何かご意見ございますか。

(フロア：茅) 「予測の時代」というのは、そんなに間違った言葉じゃないと私は思っているんです。特に生命科学という問題を考えると、天気予報は昔は当たらなかったが今は当たるわけだし、生命科学をそれに近いレベルまで持っていくという意味で、「予測の時代」という言葉を理研の立場としては使いたいということが多少はあります。

この「提言」、私も今日初めて見せていただいたのですが、いいと思います。ただ、これだけ計算科学と計算機科学が密接にインタラクションしなければならない必然性がある時代になったときに、計算科学の人間から見ると、昔は計算機科学というと、提供された計算機を使うという上の立場で見ているような感じがなくて



もなかったのが全く違ってきているというニュアンスが、もっとあってもいいのではないかという気がします。

計算機を自前でつくるということを含めて、その中にある大きな科学技術を使いながら、今までできない計算をすることが計算科学の人間に託されているということを含めると、この共同作業は重要な問題で、それが昔の装置科学のひとと研究者の対論みたいな形で書かれているのは、私が思っている今度のコンピュータセンターのイメージとは少し違うような気がするので、それをもうちょっとうまく書いていただくことが重要ではないか。むしろ僕は宇川先生に、これでどうして黙っているのかと伺いたいと思っています。

(宇川) 確かに前文の2パラグラフあたりに、将来の可能性を切り開くような計算科学と計算機科学の融合という観点をもっと入れた方がいいですね。

(加藤) もし入れるのであれば、前文のところはさらっと入れておいて、むしろ「提言」として明確に書き込んだ方がいいのではないのでしょうか。

(土居) 極めて重要な点のご指摘をいただいたと思います。加藤先生がおっしゃったような形で、前文はこのまま流しておいて、「提言」のところで、宇川先生がいわれた程度のことは入れておきましょうか。

(宇川) それを項目として1つ立てるかどうかは、結構議論になると思うんですが。

(土居) 項目として立てるというより、項の中で適当なところへ追加するのがいいのではないのでしょうか。

(宇川) 前文の方で、そのことをさらに1~2行盛り込む。それから、人材育成の観点で、未来を切り開くような計算機と計算科学の融合をやっている人材を育てていく。その2つをうまく文章として入れるのがいいかもしれません。

(土居) 前文は、もう少し重要性をしっかりと表出せよ、こういうご意見ですね。

(宇川) 例えば、2パラグラフ目の一番先頭の「計算科学は」の後に、単なる装置ではないというニュアンスを入れたいわけです。

(土居) 「これからの研究、産業を牽引する重要な学問分野であるので」というような感じですか。

(加藤) 今までの計算科学のあり方ではダメで、これからの計算科学は非常に強力な計算機科学とか他の学際領域との融合が必要で、そういう場を提供すべきだ、そういうことが前文に入れればいいと思うんです。

(宇川) それ自体が融合することによって、新たな方法論とか新たな観点を生み出していくような意味での計算機科学と計算科学の融合、茅先生はそういうことをいいたいと思うし、私もそれは全く同感です。単に量的な推進ではなくて、質的な転換を実現していきたいということです。

(土居) それでは、この点は考えておいていただくことにして、次の「一、教育・人材育成プログラムの多様な展開」、その次の「一、人材育成に係る一層の連携促進」についてはいかがでしょうか。大学・研究機関と産業界との連携を相互に加速せよ。産業界のスーパーコンピューティング技術の利用を促進し、そこでキャリアパスを確保する人材の育成・確保の正のスパイラルをいかに進めるかというようなことを挙げていますが。

(加藤) 中を読むとそういうことが書かれているとわかるんですが、タイトルだけ見ると、「連携促進」で、その前にも「融合」とか「連携」とか「多様化」という言葉がいっぱい出てきているので、もう少しタイトルを工夫して、誰が誰に向けていっているパラグラフなのかがわかるようにできないかと感じてはいるんですが。

(中村) 「産・学」というキーワードが入っていればいいんじゃないでしょうか。

(土居) 「産・学の連携促進」。はい、ありがとうございます。

(岡崎) 「キャリアパスの確保」というのがどの分科会でも非常に強調されていたと思うんですが、この文章の中では最後にちょっと出てくるだけなので、ここを独立の段落にしてはいかがでしょうか。例えば、段落を変えて、「このような活動を維持発展させるためには、研究者の地位を保障することが不可欠である」、あるいは「研究者に長期的な保障」、あるいは「安定した地位を保障」とか、「このため、大学・研究機関において、このような新しい分野にかかわるキャリアパスを確保する」とか。

(加藤) 明確に書き込むことはいいと思うんですが、長期的な安定した地位を保障することとキャリアパスの確保は、殆ど同義のことをいっているような気がするので、どちらかでもいいのではないかと思います。キャリアパスを確保することが重要だというよりも、もっと具体的、直接的に、そういうポジションを用意すべき、あるいは用意する努力をすべきだと書き込んだ方がいいということであれば、先ほど先生がおっしゃられたことだけでもいいかなという気がするのですが。

(岡崎) いや、余り区別せずに使っています。表現の問題で、どちらかに分ける必要はないと思う。キャリアパス的な方がいいという方と、長期安定的な方がいいという方、いろいろいらっしゃるでしょうから。

(土居) 「このような活動を維持発展させるためには、研究者の長期的な安定した地位を保障することが不可欠である。このため、大学・研究機関において、このような活動に携わる研究者のキャリアパス」……。

(岡崎) 「このような新しい分野」ですね。融合分野の意味ですが、「分野にかかわるキャリアパスを確保することが重要である」。

(土居) 長期的で安定した地位がずっとあったら、パスができない。

(岡崎) そのあたりはお任せします。

(加藤) キャリアパスの確保にしてもポジションの確保にしても、融合する人をアクナレッジすることが重要であるということを書き込んで、その上で、そのパスを確保する、そういう書き方がいいと思います。

(土居) 「長期的な安定した地位を保障する」ということはどうでしょうか。

(加藤) むしろ「このような融合を担う人材の必要性、重要性を認識し、その人材のキャリアパスを保障することにより、その確保に努める」ではいかがでしょうか。重要性を認識しているから、キャリアパスをきちっと整備して、それによってそういう人材を育てる、あるいは、育つ素養をつくる、そういうロジックで書けばいいと思うのです。

(岡崎) 「融合を担う人材を確保するためには」で、よろしいんじゃないですか。

(加藤) 「確保するためには」を除いてしまって、「人材の重要性あるいは必要性を認識し、そのような人材のキャリアパスを保障することにより、人材の継続的確保を実現する。」としたらいいんじゃないですか。

(岡崎) お任せします。前段に理由みたいなものを書いた上で結論の方が読みやすいというだけです。

(加藤) その前に融合とかいう話がいろいろ出ていたような気がしたので、ここでは、そういう人を確保するためには「重要性を認識し」という言葉を入れたらどうかと思ったのですが。

(土居) ただ、「融合を担う」といきなり来たら、いかにも唐突ですね。

(加藤) おっしゃるように、いきなり「融合」だと、いかにも唐突だと思うので、先ほど茅先生からも、これからの計算科学は計算機科学とフィフティー・フィフティーの立場での連携や、特に生物系では異文化融合が必要というお話があったので、その融合を担う人材としたらよろしいかと思います。例えば、「計算科学と計算機科学の融合や異分野の学際的融合を担う人材の重要性を認識し、そのキャリアパスを保障することにより、この継続的な確保を実現する。」、そんな流れでいかがですか。

(土居) そしたら、「また」を取ろう。

(加藤) そうですね。

(土居) 最後に、「一、拠点形成における人材育成機能の明確化・具体化」について、いかがでしょうか。

(加藤) 形容詞なしで唐突に「施設」とあるので、どこの施設かという違和感があります。

(土居) 「次世代スーパーコンピュータが設置される施設を中核と」と書きますか。

(フロア2) 「インターンシップの促進」と書いてあるんですが、今の制度にちょっと不具合があるので、中身をちょっとご検討いただく必要があるはないかという業界の意見がありました。今、短期間で私どもの会社に来ていただいても、あまり身につけて帰っていただけるものがないような気がするので、ただ「促進」ではなくて、「インターンシップの充実」とか、ニュアンスを変えていただきたい。

(土居) 「充実」を入れますか。

(フロア2) はい。もう1つは、「大学・研究機関と産業界との間の相互協力を加速する」というについても、今、一番必要なことは、企業の人と大学の先生方でもっと議論をして、お互いの違いを認識することで、そういう場をつくる必要があるんじゃないかと思うので、「協力する」だけではなく、「大学のシーズと企業のニーズを議論できる場を増やす」とか、「交流の場をふやし、相互協力を加速する」という言葉を1行入れていただきたいと思います。

(加藤) インターンシップの充実も共同研究もかなり具体的な話であり、一方、シーズとニーズを共有する、理解する場をつくるというのは、もうちょっと概念的な話なので、入れるとすると、「加速する」の後に、さらにこういうことを進めるためには、こういう場の提供なり構築も必要である、そういうふうに入れられたらいかがですか。

(フロア2) 是非それを入れていただければと思います。

(土居) 「さらに、このような活動を進めるために、大学・研究機関と産業界の相互理解を深め、大学のシー



ズと企業のニーズを共有・理解する場をつくる」、こういうことでよろしいですか。

(フロア2) そうですね。

(フロア：文科省) 「加速する」、「つくる」という感じで終わっていると、受けた側は、誰がやるのかな、あなた方がやっていただけるんですかという感じに受け取ってしまいます。去年のものは、「べきである」、「必要である」という形になっているので、受けた側に何らかのアクションをとってくれという「提言」でしたら、そういう形の終わり方をしていただいた方が我々もわかりやすいかなと思いました。

(土居) ありがとうございます。極めて重要なご指摘で、すべての場所を、そのように修正しましょう。それでは、前文に戻って。

(宇川) 茅先生のご趣旨は、融合とは、単に装置をつくる側と使う側が融合することではなく、最先端技術としてのスーパーコンピュータをいかに使うかを通して方法論的にも新しいものが生まれ、それがまた自らにフィードバックして新しいものを生み出していく、そういう将来に向かっての膨らみがあるものでなければいけないんじゃないかということだと思うので、一応このように書いてみました。

「21世紀の科学技術を牽引する計算科学は、スーパーコンピュータに代表される最先端科学技術の発展を内在的基盤として、自ら発展する科学技術の革新的方法論へと飛躍すべく」で、いかがでしょうか。

(フロア：茅) 私が申し上げたかったことは、計算するとか計算機をつくるという概念が集まった集合が、今までにない21世紀の新しい分野として発展して行って、例えば物性物理とか分子科学の理論だったものが、それを超えたリジョンを持って、そこからいろんな領域にむしろ理論が行くという構図にだんだんくなっていくんじゃないか。いろいろな分野で発展した理論の方法論とか考え方が、お互いにやりとりすることによって、今ある物理・科学を超えた新しい分野の発展を促す、そのぐらいの気概を持って欲しい。今度の新しいセンターを含め、全体が一体どういうふうこれから変化していくかという1つのスタートになればいいということを書いていただければと思います。

ただ、大変心配なのは、そういうサイエンスの中で産業が取り残されているのではないかということで、産業も含めて全体的にこういう問題を進めていく組織として、みんながこういう機会に議論すべきだというのが私の意見です。

(土居) 宇川先生のおつくりになったところは、「21世紀を牽引する計算科学は、新たな科学技術の革新的方法論へと発展・飛躍すべき分野であり」、単にこういう1行だけではダメですか。

(宇川) それで結構です。

(加藤) どちらがよいのか難しいのですが、なぜ発展するか、よくわからないので、「計算機科学とさまざまな科学技術領域の有機的・効果的学際融合により、新たな科学技術の革新的方法論へと発展することが期待されている分野であり、それを支える人材育成を求めている」という書き方にしたらいかがという提案です。

(宇川) 私は「発展することが期待されている」というよりは、「発展すべき分野であり」と断定した方がよいと思います。

(フロア1) 今、修正されている文章は、あくまでも計算科学が主体で、計算科学は将来力を入れてやっていくべき分野である計算科学に対して計算機科学は従って回っているようで、一緒になってやっていくというのは流れが少し違うかなという気がするんですが、そういうスタンスでよろしいのでしょうか。



(土居) 私は計算機科学屋ですが、計算機科学屋としては、従になっているとは思っていません。計算科学が計算科学で閉じてはいけいない、対等になることにより、さらに計算科学がブレイクスルーする、そういう気持ちだと思ふんですが。

(フロア 1) 私もそう受けとめていたんですが、この文章だと、主語が計算科学で、計算科学の方が中心にいるように読めてしまうものですから。

(加藤) 「これらの分野とともに」と一文を入れれば、そういうご不満はなくなりますか。

(フロア 1) この定義で計算機科学をやっている方が不安定な感じを覚えなければいいんです。

(宇川) ある一部の分野では既に計算機科学と計算何とかが一体化したようなものになりつつあるし、今後、サイエンスのいろんな分野がそういう形で計算機科学と一緒にあって、全体が計算科学と呼ばれるようになるべきだと私は思っています。

この文章を読むと、一応「計算機科学とさまざまな科学技術領域の学際融合により」と書いてあるので、計算機科学が計算何とかに従っているというニュアンスは余り強くないのではないかと思います。

(フロア：渡辺) 「さまざまな科学技術領域、とりわけ計算機科学と」として計算機科学を際立たせることによって、今の部分はある程度は緩和できるんじゃないか。もう 1 つ、計算機科学を少し強調した格好で、「計算機科学と手を携え」という言葉を入れるという手もあるかなと思います。

(土居) 強調した意味で冒頭に取り出したんだと理解はできませんか。この「提言」には計算科学に計算機科学が全部乗っ取られているという話は書いてないんです。計算科学は、計算機科学その他とちゃんと融合して計算科学を確立させなさい、育ちなさい、計算機科学をきっちり尊重していきなさいという文章だと思ふんですが。

(加藤) 私もこの文章でいいと思います。特にこれで計算機科学の方が疎外感を持ったり、計算機科学が計算科学に取り込まれるとは思えないのですが。

(土居) 私は計算機科学屋ですが、乗っ取られるとか、下請になるとか、従属するような気分にはなっていないので、多分大丈夫なような気がするんですが、ダメですか。

(フロア 1) 見る立場とか考え方によって、スイッチしようと思えばできる表現になっているので、本当にいいんですねということを確認したくて発言させていただいたんです。本当に大丈夫ですね

(土居) 大丈夫です。(笑)

(フロア 1) わかりました。

(土居) 「革新的な分野に発展すべき分野で」と、「分野」が続くので、「分野に発展すべき領域であり」としたんですが、いかがでしょうか。

(加藤) 「領域」を取って、「革新的分野に発展すべきであり」としたらどうでしょう。

(土居) そうしましょう。 ということで、全体にわたりまして、これでよろしいでしょうか。



最後にもう一度読み上げをさせていただきますので、お聞きになって、さらなる何かがあったらおっしゃっていただければと思います。

## 提言

計算科学は、予測の時代である 21 世紀の科学技術や先端産業を牽引する基盤である。これまで我が国がこれらの分野で果たしてきた役割を継承し、さらに発展させていくためには、予測の時代を担う人材を輩出し、その活躍の場をこれまで以上に広げていくことが必要である。

21 世紀の科学技術を牽引する計算科学は、計算機科学とさまざまな科学技術領域の有機的・効果的学際融合により、新たな革新的分野に発展すべきであり、それを支える人材育成を求めている。新しい学術分野の創成や、イノベーションによる産業の国際競争力の強化に果敢に取り組む世界水準の人材は、これからの我が国、ひいては人類・社会の発展に大きく貢献していくことになる。

以上の認識のもと、このシンポジウムでは、次世代スーパーコンピュータ開発利用プロジェクトを一つの契機に、次代を担う人材の育成に積極的に取り組む必要性を共通の理解として、以下のような取り組みを強力に推進すべきである旨提言する。

### 一、教育・人材育成プログラムの多様な展開

21 世紀の学術の展開を見据え、計算科学、計算機科学、さらには、その融合による新たな学術分野の展開を追究する研究科や専攻・教育研究の中核となる研究センターの設置が進展しつつある。また、大学院教育改革支援プログラムなどを活用したユニークな人材育成も進められている。

今後、進展する科学技術、産業の要請に適切に対応していくためには、将来の活動を支える人材に求められる素養を明らかにし、人材育成に係る関係者間でこの認識を共有することが必要である。大学・大学院教育では、確実にその素養を身につけさせるべきである。

さらに、数理科学など関連する他分野との連携、国内の大学・研究機関間の連携、国際協力等の国際的視点を重視しつつ、計算科学と計算機科学の融合と、その推進を担う人材の育成を目指した教育研究プログラム、学際融合型プロジェクトの具体化、制度整備を強力に推し進めることが必要である。

このため、大学・研究機関の取り組みの一層の深化、全体としての多様化、その規模の拡大と分野を超えた連携を積極的に推進する。

また、教材の開発・共有、単位互換など、大学・研究機関間における具体的な協力を促進すべきである。計算科学、計算機科学などの異分野の融合を担う人材の重要性を認識し、人材のキャリアパスを保障することにより、人材を継続的に確保する必要がある。

### 一、人材育成に係る一層の産・学の連携促進

人材育成における大学・研究機関間の協力はもとより、実践力の涵養を目的とした教育への人的な貢献やインターンシップの充実・促進、共同研究の実施などを通じた大学・研究機関と産業界との間の相互協力を加速するべきである。

さらに、このような活動を進めるために、大学・研究機関と産業界の相互理解を深め、大学のシーズと企業のニーズを共有・理解する場をつくる必要がある。

また、産業界のスーパーコンピューティング技術の利用を促進し、それによってキャリアパスが確保されるという人材の育成・確保の正のスパイラルを確立することも必要である。

このため、次世代スパコン利用に係る戦略的研究開発プログラムにおいて、大学と産業界との連携を加速するための戦略分野を設定するなど、次世代スパコンを初めスーパーコンピューティング技術の利用による成果を速やかに創出するための具体的な措置を講ずるべきである。

### 一、拠点形成における人材育成機能の明確化・具体化

次世代スーパーコンピュータ開発利用プロジェクトは、次世代スーパーコンピュータ施設を中核とした研究・教育拠点の形成を一つの目標としている。拠点形成に係る検討に当たっては、人材育成機能を明確化するとともに、計算科学に関する拠点や大学の情報基盤センターとの具体的な連携協力のあり方などを含め、関係機関が担うべき役割を早期に具体化する必要がある。

特に利用のあり方については、産・学・官を問わず、大学や大学院学生を含む若手研究者・技術者の利用機会の確保と、利用に当たっての支援体制などの充実を図る必要がある。

2008年9月

次世代スーパーコンピューティングシンポジウム 2008

参加者有志一同

(土居) 接続詞を入れる等のマイナーな調整をさせていただくことを含めて、この「提言」をこの場の有志一同として出すことにご賛同いただけますでしょうか。(拍手)

どうもありがとうございました。おかげさまで、また立派な「提言」ができ上がったと思います。大変感謝いたします。それでは、全体討議はこれで終わらせていただきます。どうもありがとうございました。(拍手)

## 7.2. 提言

### 提言

計算科学は、「予測の時代」である 21 世紀の科学技術や先端産業を牽引する基盤である。これまで我が国がこれらの分野で果たしてきた役割を継承し、さらに発展させていくためには、「予測の時代」を担う人材を輩出し、その活躍の場をこれまで以上に広げていくことが必要である。

21 世紀の科学技術を牽引する計算科学は、計算機科学と様々な科学技術領域の有機的・効果的学際融合により、新たな革新的分野に発展すべきであり、それを支える人材とその育成を求めている。新しい学術分野の創成や、イノベーションによる産業の国際競争力の強化に果敢に取り組む世界水準の人材は、これからの我が国、ひいては人類社会の発展に大きく貢献していくことになる。

以上の認識の下、このシンポジウムでは次世代スーパーコンピュータ開発利用プロジェクトを一つの契機に、次代を担う人材の育成に積極的に取り組む必要性を共通の理解として、以下のような取り組みを強力に推進すべきである旨提言する。

#### 一、 教育、人材育成プログラムの多様な展開

21 世紀の学術の展開を見据え、計算科学・計算機科学、さらにはその融合による新たな学術分野の展開を追究する研究科や専攻、教育研究の中核となる研究センターの設置が進展しつつある。また、大学院教育改革支援プログラムなどを活用したユニークな人材育成も進められている。

今後、進展する科学技術、産業の要請に適切に対応していくためには、将来の活動を支える人材に求められる素養を明らかにし、人材育成に係る関係者間でこの認識を共有することが必要である。大学・大学院教育では確実にその素養を身に付けさせるべきである。

さらに、数理科学など関連する他分野との連携、国内の大学・研究機関間の連携、国際協力等の国際的視点を重視しつつ、計算科学と計算機科学の融合と、その推進を担う人材の育成を目指した教育研究プログラム、学際融合型プロジェクトの具体化、制度整備を強力に推し進めることが必要である。

このため、大学・研究機関の取り組みの一層の深化、全体としての多様化、その規模の拡大と分野を超えた連携を積極的に推進し、教材の開発・共有、単位互換など大学・研究機関間における具体的な協力を促進すべきである。また、計算科学、計算機科学などの異分野の融合を担う人材の重要性を認識し、人材のキャリアパスを保証することにより、人材を継続的に確保する必要がある。

#### 一、 人材育成に係る一層の産学の連携促進

人材育成における大学・研究機関間の協力はもとより、「実践力」の涵養を目的とした教育への人的な貢献や、インターンシップの充実・促進、共同研究の実施などを通じた大学・研究機関と産業界との間の相互協力を加速すべきである。さらに、このような活動を進めるために、大学・研究機関と産業界の相互理解を深め、大学のシーズと企業のニーズを共有・理解する場を作る必要がある。

また、産業界のスーパーコンピューティング技術の利用を促進し、それによってキャリアパスが確保されるという、人材の育成・確保の「正のスパイラル」を確立することも必要である。このため、次世代スーパーコンピュータ利用に係る「戦略的研究開発プログラム」において、大学と産業界との連携を加速するための戦略分野を設定するなど、次世代スーパーコンピュータをはじめスーパーコンピューティング技術の利用による成果を、速やかに創出するための具体的な措置を講じるべきである。

#### 一、 拠点形成における人材育成機能の明確化・具体化

次世代スーパーコンピュータ開発利用プロジェクトは、次世代スーパーコンピュータ施設を中核とした研究教育拠点の形成を一つの目標としている。拠点形成に係る検討にあたっては、人材育成機能を明確化するとともに、計算科学に関する拠点や大学の情報基盤センターとの具体的な連携協力のあり方などを含め関係機関が担うべき役割を早期に具体化する必要がある。特に、利用のあり方については、産学官を問わず、大学や大学院学生を含む若手研究者・技術者の利用機会の確保と、利用にあたっての支援体制などの充実を図るべきである。

2008 年 9 月 17 日

次世代スーパーコンピューティングシンポジウム 2008

参加者有志一同

## 全体討議

土居 範久	中央大学理工学部 教授、慶應義塾大学名誉教授
加藤 千幸	東京大学生産技術研究所副所長・教授、革新的シミュレーション研究センター長
宇川 彰	筑波大学教授・学長特別補佐 計算科学研究センター
中村 春木	大阪大学蛋白質研究所附属プロテオミクス総合研究センター長・教授
岡崎 進	名古屋大学大学院工学研究科教授
青木 慎也	筑波大学大学院数理物質科学研究科教授

## テーマ別セッション

### ○「次世代の産業界をリードする人材の育成を目指して」

加藤 千幸	東京大学生産技術研究所副所長・教授、革新的シミュレーション研究センター長
賀谷 信幸	神戸大学大学院工学研究科教授
善甫 康成	住友化学株式会社筑波研究所 首席研究員
田中 和博	九州工業大学情報工学研究院長・情報工学部長
中村 道治	株式会社日立製作所取締役
吉岡 信和	国立情報学研究所GRACEセンター准教授

### ○「計算機科学と計算科学の学際融合ーその意義と人材育成を考えるー」

宇川 彰	筑波大学教授・学長特別補佐 計算科学研究センター
久門 耕一	株式会社富士通研究所ITシステム研究所 首席研究員
常行 真司	東京大学大学院理学系研究科教授
中島 研吾	東京大学情報基盤センター 特任教授
中島 浩	京都大学学術情報メディアセンター 教授
室井 ちあし	気象庁予報部数値予報課予報官

### ○生命体統合シミュレーション「来たれ 若人」

茅 幸二	理化学研究所次世代スーパーコンピュータ開発実施本部 副本部長、次世代計算科学研究開発プログラム プログラムディレクター
姫野 龍太郎	理化学研究所次世代計算科学研究開発プログラム副プログラムディレクター
中村 春木	大阪大学蛋白質研究所附属プロテオミクス総合研究センター長・教授
北川 源四郎	統計数理研究所 所長
北村 一泰	大正製薬株式会社 取締役
下條 真司	情報通信研究機構 上席研究員
中野 明彦	理化学研究所基幹研究所中野生体膜研究室 主任研究員
安井 正人	慶應義塾大学医学部薬理学教室 教授

### ○ナノ統合シミュレーション「計算科学者、計算機科学者、実験研究者および産業界の接点と人材育成ーナノ統合ソフトについてー」

平田 文男	分子科学研究所 教授
青野 正和	物質・材料研究機構フェロー、WPIセンター国際ナノアーキテクトニクス研究拠点長
潮田 資勝	物質・材料研究機構フェロー、NIMSナノテクノロジー拠点長、ICYS-IMATセンター長
岡崎 進	名古屋大学大学院工学研究科教授
押山 淳	東京大学大学院工学系研究科教授
金田 千穂子	株式会社富士通研究所ナノテクノロジー研究センター 主管研究員
栗原 和枝	東北大学多元物質科学研究科教授
佐藤 三久	筑波大学計算科学研究センター長・教授
高田 章	旭硝子株式会社中央研究所 特任研究員
兵頭 志明	株式会社豊田中央研究所計算物理研究室室長・主席研究員

### ○素粒子・原子核・天文学宇宙「次世代スパコンで物質と宇宙の進化を探る」

青木 慎也	筑波大学大学院数理物質科学研究科教授
藏増 嘉伸	筑波大学大学院数理物質科学研究科准教授
延与 佳子	京都大学基礎物理学研究所 准教授
住吉 光介	国立沼津工業高等専門学校教養科物理学教室 准教授
出淵 卓	金沢大学理工研究域素粒子論研究室 助教
富阪 幸治	国立天文台理論研究部 教授
中原 康博	キャノン株式会社解析技術開発センター 研究員
八尋 正信	九州大学大学院理学研究院物理学部門 教授

## 8. ポスターセッション表彰式

審査委員長 小柳 義夫（工学院大学 情報学部 学部長・教授）

（高田） 2日間にわたり開かれたポスターセッションの審査結果を発表いたします。

10名の審査の先生方が、次世代のスーパーコンピューティングとその応用という観点、特に将来性や実現性、独創性、社会的分野横断的な波及効果、日本の計算科学全体に対する影響という観点からポスターの内容を評価し、A、B、C、Dの4段階の評価いただきまして、厳正な審査員の審査を行いました。

まず、一般参加の方々による投票によって決まった特別賞から発表いたします。

特別賞は、ポスターナンバー21番、東北大学大学院情報科学研究科の佐藤義永さんです。ポスターのタイトルは、「ベクトルプロセッサ用キャッシュメモリにおけるMSHRの性能評価」です。（拍手）

〔小柳審査委員長より賞状・トロフィーを授与〕（拍手）

（高田） それでは、佐藤さんから一言お言葉をいただきたいと思えます。

（佐藤） 私たちのポスターは、コンピュータのプロセッサのアーキテクチャに関するものです。アーキテクチャの発展は、アプリケーションのこれからのより高い性能を目指していく上で非常に支えになる、基盤になるものであると考えています。アーキテクチャというものに興味を持って、ポスターをたくさんの方に見ていただいて、さまざまなコメントをいただきました。その中で最も多かったものが、既存のベクトルプロセッサにキャッシュメモリを設けることで、何か今までのコードと変える必要があるのか、また、最適化等を強いるものであるのかということでしたが、既存のコード、アプリケーションをそのまま使って十分な性能を発揮できるものを念頭に置いて研究しております。これからも、よりよいプロセッサを設計できるように頑張っていこうと思えます。今日はありがとうございました。（拍手）



（高田） 引き続きまして、優秀賞2件を発表いたします。

優秀賞第1件目は、ポスターナンバー17番、防衛大学校の萩田克美さんで、ポスターのタイトルは「高分子系の粗視化分子動力学法の超並列大規模コードの開発」です。

もう1件の優秀賞は、ポスターナンバー19番、高度情報科学技術研究機構の牧野浩二さんで、ポスターのタイトルは「新奇ナノ炭素物質創製のための大規模並列探索シミュレーション」です。

〔小柳審査委員長より賞状・トロフィーを授与〕（拍手）

（渡辺） 理研から、テキサス州オースティンで開かれるSCにレポーターとして派遣します。世界の動向を肌で感じ、研究者仲間と交流を深めて、これからの研究の刺激として、よりよい研究をしていただきたいと思います。

〔渡辺プロジェクターより「SCレポーター派遣目録」を授与〕（拍手）

（高田） それでは、萩田さん、牧野さん、一言ずつ喜びの言葉をお願いします。

（萩田） 我々の研究は、高分子系の研究です。実はSpring-8とかJ-PARKとかEarth Simulatorとかいろいろ使わせていただいている、その中で実験技術者とか計算機の技術者の方に非常にいろんなアドバイスをいただけてきたものなので、チームビルディングというか、いろんな方の協力を得られたことは非常にうれしく思っており



ます。ありがとうございました。(拍手)

(牧野) 私の研究は新奇な炭素物質の生成経路を探るというもので、この研究結果が実験科の先生に示唆を与え、今まで全く未知だが有用であると考えられていた炭素物質の初期構造を見つけられたことが私のインパクトとなってします。実験の先生に非常に喜んでいただいて、計算機分野から実験への提案ができたという点で、私も非常にうれしく思っております。ありがとうございました。(拍手)

(高田) それでは、最優秀賞を発表いたします。

最優秀賞は、ポスターナンバー27番、国立天文台の齋藤貴之さんで、ポスターのタイトルは「衝突銀河の超高分解能シミュレーション：スターバーストと星団形成」です。

[小柳審査委員長より賞状・トロフィーを授与] (拍手)

[渡辺プロジェクターリーダーより「SC レポーター派遣目録」を授与] (拍手)

(高田) 最優秀賞を見事受賞されました齋藤さんに、一言お話ししたいと思います。

(齋藤) 我々のグループは、銀河がどのようにできるかを高分解能シミュレーションをもって明らかにしようとしています。従来、銀河形成シミュレーションというのは、自己重力系を扱うということで、粒子数が少なく、なかなか細かいところまで見ることはできませんでした。そこを計算機アルゴリズムを工夫し、より細かい構造を見ていき、本当の銀河ができる姿を明らかにするというプロジェクトです。今回は、ほぼ初期の成果として、幾つかこれまでと違う新しい成果が出てきたので、発表させていただきました。これからも銀河形成研究を進めていきたいと思っています。この度は本当にありがとうございました。(拍手)



(高田) ポスターセッション全体につきまして、小柳審査委員長からご講評をいただきたいと思っています。

(小柳) それでは、審査委員会を代表しまして、今回の審査結果、全体の概観についてお話ししたいと思います。

昨年に引き続き2回目のポスター展示ですが、計算機科学と計算科学の両者にまたがる若手研究者をエンカレッジすることを目的しております。今年も次世代を担う若い研究者が参加者の皆様といろいろディスカッションができたことは大変よいことだったと思います。今後ともポスターセッションを続け、計算科学、計算機科学、両方の研究者が集まって共通な話題について議論を深めていくことを進めていきたいと思っています。



全体としてアプリケーションの応募が非常に多く、コンピュータ寄りの話、HPC の分野のものが少なかったのが今年の特徴で、この点はもう少し改善をしていかなければならないのではないかと思います。ただ、特別賞を受けた研究はアーキテクチャに関する研究でした。これは参加者の投票ですので、こういうことに対して参加者の興味が大いであるということで、今後ともこの分野にも是非とも応募いただければと思っています。

ポスターセッションの審査は、次世代のスーパーコンピューティング技術とその応用にどれだけ寄与するか、特に将来性、実現性、独創性、社会的あるいは分野横断的な波及効果、日本の計算科学全体に対する影響という観点から総合的に評価を行いました。

今年度のはえある最優秀賞は、国立天文台の齋藤貴之さんの「衝突銀河の超高分解能シミュレーション：スターバーストと星団形成」で、このポスターは、サイエンスとしての結果も明らかで、内容としては並列シミュレーションのアルゴリズムのオリジナリティーと、その得られた並列性能並びにこれ自体が極めて大規模な計算結果

であること、そして次世代スパコンへの展開の可能性が高いということから、審査員一同の高い評価を得たものです。

続いて、優秀賞の防衛大の萩田さんの「高分子系の粗視化分子力学の超並列大規模コードの開発」というポスターは、産業と直結したタイヤのゴム材料設計の独自シミュレーションコードということで、エンジニアリングとしての応用も大変興味深く、並列化手法やアルゴリズムの次世代スパコンへの適用の可能性も高いこと、さらに、Spring-8 における実験との融合を企てているという点で大変高く評価されました。

同じく優秀賞の高度情報科学技術研究機構の牧野さんの「新奇ナノ炭素質創製のための大規模並列探索シミュレーション」というポスターは、実は審査委員会で大分議論がありました。超並列計算機の利用手法、それから数理的なアプローチという点でおもしろいという評価があった反面、本当に実験的にこういうものができるのかどうか、新しい炭素材料の物性としてこれが信頼に値するものであるのかどうかという点で評価は難しいのではないかという意見もあって、いろいろ議論した結果、大規模計算の実施例として大変興味深いということで、最終的に優秀賞に決まりました。

このシンポジウムは、特に「次代を担う世界水準の人材育成」がテーマでした。次世代スーパーコンピュータを核とする日本の計算科学、計算機科学の融合的連携を持った発展のために、いろいろな分野で研究を進めている若い世代が、スーパーコンピュータを使っているいろいろなシミュレーションを行う。単に自分の分野のみにとどまらず、自分がやっていることを他の分野の人に示す、あるいは、人がやっていることで何か自分に関係があるヒントがないかどうか。あるいは、計算機科学、コンピュータサイエンス的な分野の研究も自分との関係がないかどうか。そのような分野間の幅広い交流が大変重要で、これが今後の人材育成にもつながっていくのではないのでしょうか。そういう意味でも、このような企画は大変有意義なものだと思います。

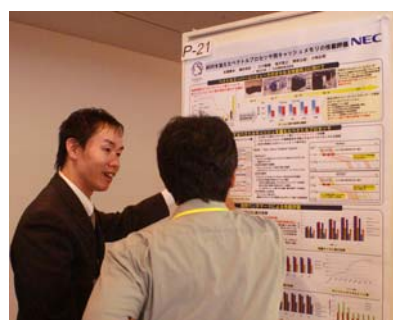
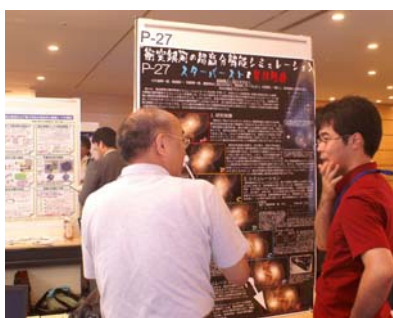
最後になりますが、ポスターセッションの参加者皆様、シンポジウムの参加者皆様、それから理研の事務局の方々に感謝しつつ、この講評を終わりたいと思います。ご協力いろいろありがとうございました。(拍手)

(高田) 最後に、今回のポスターセッションに参加いただきました皆様方、そして投票に参加いただきました方々に感謝申し上げます。どうもありがとうございます。

以上をもちまして、ポスターセッションの表彰式を終わりたいと思います。(拍手)



### 【ポスターセッション風景】





## 10. 閉会挨拶

藤嶋 信夫 氏（理化学研究所理事 次世代スーパーコンピュータ開発実施本部 副本部長）

閉会に当たりまして、主催者を代表して一言だけご挨拶させていただきます。

2日間にわたりまして、長時間、本シンポジウムにご出席いただき、真摯なご議論をいただきまして、誠にありがとうございます。私個人としても、これだけ長時間、一生懸命聞いたのは久しぶりの経験で、いろいろなことを理解することができました。私はスパコンに関しては非常に知識が乏しいのですが、計算機科学と計算科学の違いとか、その関係が非常によく理解できましたし、昔、SPring-8をやったときに、技術指導・



支援をしていただく方と実験をしていただく方の関係で非常に苦労しましたが、同じような問題があるのではないかと思いますので、今日勉強したことを今後のプロジェクト推進の上で役立てていきたいと思っております。

いただいた「提言」につきましては、理研だけでは背負い切れない部分もあるかと思いますので、政府や関係機関に取り組みを促し、具体的な成果を来年にご説明できるよう、理研としても誠意を持って対処をするということをお約束させていただきたいと思っております。

今回で2回目のポスターセッションは非常にすばらしい内容で、昨日も午後のセッションの前にちょっとしたぞかせていただきましたが、非常に多くの方が活発な議論をしておられまして、大変熱気にあふれた発表であったと感じております。小柳先生を初め審査委員の先生方には、次代を担う人材を発掘して鼓舞しようという強い意識のもとに審査に当たっていただき、本当にありがとうございました。次の世代を担う方々が着実に育っていることを感じ取ることができました。

今回のシンポジウムで知り合われた産業界、大学・研究機関の方々と連携を強めながら、今後さらに研究に取り組んでいただきたいと思いますと考えております。今回のシンポジウムでの議論や出会いが、参加いただいた皆様方を新たに触発して、新しい交流の機会になることを期待しております。

最後になりますが、もう一度、最後までご参加いただいた皆様方にお礼を申し上げるとともに、今、山場にかかっておりますこのプロジェクトの引き続きの支援を心からお願いしまして、閉会のご挨拶にさせていただきます。ありがとうございました。（拍手）

11. 収支報告

(1) 収入の部

理研	7,848,194	主催
分子研	1,276,800	共催
合計	9,124,994	

(2) 支出の部

会場借料等（本会場時間外借料、会議室借料、機材借料等）	2,244,450	
会場借料（本会場基本料金）	1,276,800	
会議運營業務委託費	2,786,994	
広報・配布物作成費	1,289,400	
旅費・謝金	1,527,350	
合計	9,124,994	

【付録】

レセプション概要写真



【挨拶：倉持隆雄文部科学省審議官】



【来賓挨拶：尾身幸次議員】



【来賓挨拶：後藤茂之議員】



【乾杯：茅幸二理研プログラムディレクター】



【来賓挨拶：中村道治産応協副委員長】



*The Next-Generation Supercomputing Symposium 2008*

次世代スーパーコンピューティング・シンポジウム2008  
～次代を担う世界水準の人材育成に向けて～ 報告書

編集・発行

理化学研究所 次世代スーパーコンピュータ開発実施本部

〒100-0005 東京都千代田区丸の内 2-1-1 明治生命館 6F

TEL: 048-467-9267 E-mail: nsc-sympo08@riken.jp

<http://www.nsc.riken.jp/>