

スーパーコンピュータの利用技術に関する計算工学ロードマップ策定に向けて

日本計算工学会 スーパーコンピュータの利用技術に関する
アカデミックロードマップ諮問委員会

計算工学は、人類共通の諸問題、地球環境問題、エネルギー開発、人工物の設計・開発・保守、新材料の開発、災害の予知と防御さらには安全性などの課題に対して、対象をモデル化し、コンピュータによるシミュレーションで解決することを目指す学際的な学問領域である。日本計算工学会は、このようなシミュレーション技術の開発、利用を目指す科学者、技術者と、シミュレーションの実行環境としてのコンピュータのハードウェアおよびソフトウェアを開発する科学者、技術者が、個別専門分野を超えて先端科学技術開発の基盤となる計算工学の創生と興隆をはかることを目的とし、活動を行っている学会である。

コンピュータの利用を前提とする計算工学は、コンピュータの登場とともに生まれ、コンピュータの発達と能力向上によりその技術の発展が牽引されてきた歴史を有している。また、計算工学によって得られた技術は、建設、原子力や自動車産業等において研究開発、設計等でその技術を実用化するための科学技術計算用コンピュータの需要を創出し、その結果、コンピュータの高性能化が促進されることにもつながってきた。したがって、その時代の最新技術が投入され、一般に使用されるコンピュータと比べて飛躍的に高性能なコンピュータであるスーパーコンピュータは、計算工学の技術開発の原動力となる研究資源であり、計算工学で得られた成果を実際に産業等で活用するために不可欠な装置と位置づけられる。

昨今の社会的議論、状況からは、スーパーコンピュータとそれを利用する一つの分野である計算工学は、残念ながら社会的に十分に理解されていないと認識される。日本計算工学会は、このような状況をもたらした一因が、計算工学の役割と計算工学の発展に不可欠なスーパーコンピュータの重要性について、社会的な理解を醸成する役割を、学会が十分に果たしてこなかったことにあるものと反省し、今後、学会の活動内容およびその社会的な重要性を、積極的に広く社会に説明してゆくことが必要であると考えている。そこで、このような学会の活動の一つとして、本会ではスーパーコンピュータの利用技術に関する計算工学のロードマップを策定する。このロードマップでは、スーパーコンピュータの利用と密接に関係する計算工学の分野において、過去の実績および成果と、将来的に開発され社会に貢献することが期待される技術を具体的に紹介する。このロードマップにより、計算工学の社会的な役割とそこで必要となるスーパーコンピュータの重要性について、社会的理解が促進されることを期待したい。

以下では、今回の計算工学ロードマップに盛り込むことを予定している内容の一部を紹介する。

1. 過去の実績および成果

いわゆるスーパーコンピュータとして、CRAY社等のコンピュータ（例：Cray-1 1976年）が市場に現れたのは、およそ30年前である。スーパーコンピュータによる飛躍的な計算速度の向上により、それまで問題設定を単純化、簡略化することなしには計算結果を得ることができなかつた状況から、実現象に即したシミュレーションの世界への扉が一気に開かれたものと振り返ることができる。その後のコンピュータの性能向上は目覚ましく、現在のパーソナルコンピュータの性能は20年前のスーパーコンピュータを遙かに超えている。近年では、PCクラスタと呼ばれる多数のパーソナルコンピュータを連携させ、スーパーコンピュータに準じる

高い性能を発揮するシステムも広く普及している。その結果、スーパーコンピュータの利用によって獲得された技術は、スーパーコンピュータ、PC クラスタ、パーソナルコンピュータなどを計算規模に応じて使い分けることで、合理的なコストで日常的に利用可能となり、製品の開発、設計の期間短縮と経費削減に大きく貢献している。

以下は、スーパーコンピュータを利用した計算工学が産業界に重要な成果をもたらしているほんの一部の例である。

(1) 自動車の衝突シミュレーション

スーパーコンピュータの出現により、試作車両による実験が行われてきた自動車の衝突試験をコンピュータによるシミュレーションで再現することが可能となった。この結果、非常にコストの大きな衝突実験がシミュレーションに置き換わることで、車体設計における経費削減、開発期間短縮が達成された。衝突シミュレーションの実用化が開始された頃には、スーパーコンピュータは簡略化された自動車車両か、車両の一部に対するシミュレーションを実施する能力しか持っていなかったが、性能の向上により現在では詳細にモデル化された車両全体を短時間で計算することも可能となっている。さらに、当初はスーパーコンピュータの能力であっても製品設計の最終段階の確認に限定せざるを得なかった衝突シミュレーションは、現在では PC クラスタやパーソナルコンピュータにより設計の検討段階で繰り返し実施することが可能となっており、シミュレーションは車両設計を洗練されたものとするにも大きく寄与している。現在の自動車車両の衝突安全性を非常に高いものとしている技術のひとつは、様々な改良を衝突シミュレーションで確認しながら車体設計を行うことを可能にしたシミュレーション技術と、それを支えるコンピュータの高性能化にある。

(2) 飛行機設計に利用されるシミュレーション

飛行機が飛ぶと、翼に沿って流れる空気が力を生み出し、この力によって飛行機は空中に支えられる。一方、この力は抵抗となる成分も生み出すので、エンジンで常に加速してやらないと、空中を一定速度で飛ぶことができない。従って、空気が生み出す力の鉛直方向の成分と水平方向の成分の比が、飛行機の性能を決める。そこで、飛行機の設計では、飛行機周りの空気の流れを詳細に調べる必要がある。ライト兄弟の昔から飛行機を設計する人たちは、風洞と呼ばれる風を起こす装置を使って、飛行機の性能を調べてきた。しかし、飛行機の高速化・大型化に伴い、風洞実験にかかる費用はうなぎ登りとなってしまった。そこで、風洞実験をコンピュータシミュレーションで行うことが提案され、1990年代に開発されたボーイング 777 ではスーパーコンピュータで空気の流れを調べて設計する技術が本格的に取り入れられた。2003年にスタートした我が国の国産旅客機開発の研究では、空気の流れを調べるのと同時に、機体構造の軽量化や安全性確保を行う技術がスーパーコンピュータ上で開発され、新しい飛行機の燃費向上や環境適合性向上に大いに貢献した。その成果は、MRJ という飛行機になり、2012年の初飛行を目指して、現在開発が進められている。

2. 計算工学のロードマップ

現在、複雑な現象を対象としたシミュレーション技術が確立されつつあるが、実際にシミュレーションを実施する場合、あるいはそれを実用化する場合にコンピュータの能力が不足していることも多い。したがって、このような課題に対応するために、現時点ではスーパーコンピュータの利用環境が研究開発に必須である。以下の例は、現在スーパーコンピュータによる研究・開発が進められ、近い将来実用化に移行するであろうと考えられる技術である。

(1) 材料のマルチスケール解析

機器や構造物を形作っている材料に対して力が加わることにより形が変わったり、壊れたりする現象は、根源的には電子、原子、分子の振る舞いによって決定されていると考えることができる。しかしながら、材料は規則正しく並んだ原子、分子ですべて形作られているものではなく、観測者が注目する大きさ（スケール）毎に結晶の粒や異なる材料の混ざり具合などさまざまな様態が観察され、その様態に起因する現象すべてが最終的な機器、構造物の挙動に影響を与えている。したがって、材料の挙動をシミュレーションする技術として、マルチスケール解析と呼ばれるスケールが異なる現象を関係付けながらシミュレーションする技術の開発が様々な分野で盛んに研究されている。

電子、原子、分子の視点から出発する場合には、電子、原子、分子が非常に多く集まったものとしてシミュレーションを行うことができれば、実際の材料における現象に近づいてゆくと考えられる。この場合には、扱うことのできる電子、原子、分子の数にコンピュータの性能が直接的に関係することから、スーパーコンピュータが不可欠なものとなる。スケールの拡大により実際の構造物の挙動まで結びつけるには、まだ、コンピュータの性能向上のみでは解決が困難な技術的な壁が多くあるが、このような壁を乗り越えるためにもスーパーコンピュータを利用してゆくことが必要である。

一方、機器、構造物の視点から出発して、スケールを小さくしてゆくマルチスケール解析を行うことにより、機器、構造物の力学的挙動をより正確に把握するシミュレーション技術の開発も盛んであり、産業界においてもその成果が生かされつつある。特に、近年ではカーボンファイバーとプラスチック樹脂から構成されるCFRP（炭素繊維強化プラスチック）のような複数の材料を組み合わせた複合材料が高性能化、軽量化やコスト、環境負荷の削減のため、機器、構造物で多く利用されており、この分野のマルチスケール解析技術の進歩も著しい。しかしながら、この分野でもスーパーコンピュータの利用は必須であり、マルチスケール解析を応用し、複合材料における材料の組成や幾何学的な組み合わせ方を最適に設計・制御することで優れた特性を持つ構造物の設計、製造につなげてゆくためにも、より一層のコンピュータの性能向上が期待されている。

（2） 生体内の力学現象のシミュレーション

生体力学分野では、現在、骨や軟組織の力学シミュレーションが盛んに行われている。転倒や衝突などによる骨折や損傷の程度を予測し、防護のための器具の開発などに利用されている。また、我々の体中の血流のシミュレーションも行われており、動脈瘤や血管狭窄における血流の状態が分かり、治療方法の検討ができるようになった。これらは現在ある状態でのシミュレーションであるが、医療現場で必要とされることは、今後どうなっていくかの予測であることも多い。生体は、ある状態に置かれると、それに対して適応する反応が起こる。例えば、骨が力学的負荷に対して成長したり、逆に退化したりする。このような適応のモデルは、例えば骨に関して実現象を良く表現するモデルが出来上がっており、人工関節などが適応によって逆に徐々に体に合わなくなる所もシミュレーションできるようになっている。しかし、適応のシミュレーションは骨以外のものでは、あまりうまくいっていない。正常な適応である運動負荷をかけることで筋肉が発達し、筋肉内の血管が発達する様子や、病変が進む過程では、動脈瘤が徐々に大きくなったり、コレステロールの蓄積によって血管が徐々に狭まったりすることなども、定量的な予測が可能なモデルはまだないことから、今はシミュレートすることができない。今求められていることは、このような生体の持つ適応のメカニズムや病気・病変の進行のメカニズムを明らかにして、それらをモデリングすることである。

現在、例えば心臓では、細胞内の電気化学的反応をモデル化し、力学モデルを融合させて心筋細胞モデルを作り、心臓シミュレータを構築するなど、細胞レベルから臓器を構築することが世界的にも行われるようになった。多くの研究者が実験的に種々の技法を用いて、細胞レベルの変化のメカニズムに迫っているところであ

る。これからの10年でこうした定量的に予測可能なモデルが開発され、スーパーコンピュータを用いたシミュレーションとして実用的に使われるようになるだろう。これによって、単に今の状態の診断だけでなく、これからどういう風に変化してゆくかが予測でき、必要なタイミングで適切な治療を行うことができるようになるだろう。

以上に挙げた例は、スーパーコンピュータの利用技術に関する計算工学のロードマップのほんの一端であり、実現すべき技術課題についてもここでは触れられていない。しかしながら、技術革新の基盤となる計算工学の発展は、将来的にもスーパーコンピュータの進歩とともにあるということに疑問の余地はない。本委員会の今後の活動では、より広範囲の問題に対して、具体的なマイルストーンの設定も含めたロードマップの策定を行ってゆく予定である。