

自然科学からIT社会までを切り拓く 「学際計算科学」の可能性

科学技術は20世紀に目覚ましい発展を遂げましたが、21世紀のいま新たな課題がいくつも浮かび上がってきています。「学際計算科学」は、スーパーコンピュータを使った高度なシミュレーションを通じて科学の各分野が協力し合い、新たな課題に挑戦する最先端の試みです。

HISTORY of THE UNIVERSE 宇宙の成り立ち

複数の研究分野をつなぐ

20世紀前半まで、科学の研究分野の壁はずっと低いものでした。理論物理学者として量子力学の確立に貢献したシュレーディンガーは晩年、生命現象に関心を移し、分子生物学に大きな影響を与えました。

20世紀後半になると、科学は「理論」と「実験・観測」という2つの研究手法を洗練させ、目覚ましい発展を遂げる一方、各研究分野の細分化が進みました。それぞれの分野における研究は深化しましたが、相互の交流は次第に少なくなっていたのです。

しかし、21世紀に入り、宇宙の成り立ちや生命の起源、地球環境変動、IT社会の未来などひとつの研究分野だけでは解明したり分析したりできない巨大なテーマが次々に現れてきています。

これらのテーマに取り組むには、関連する複数の研究分野が協力していくことが不可欠です。そのためいま、注目を集めているのが「学際計算科学」なのです。

ORIGIN of THE LIFE 生命の起源



※元素の模式図
(陽子と中性子からなる原子核のまわりを電子が回っている)

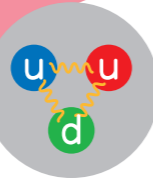
現在118番元素までが発見・観測されています。様々な元素が最も軽い水素からどのように作られたかは、宇宙の進化と深く関わっています。



宇宙は約138億年前のビッグバンから始まり、いまだ膨張を続けています。近年の観測装置の急速な発展により、130億年前の銀河まで発見されています。

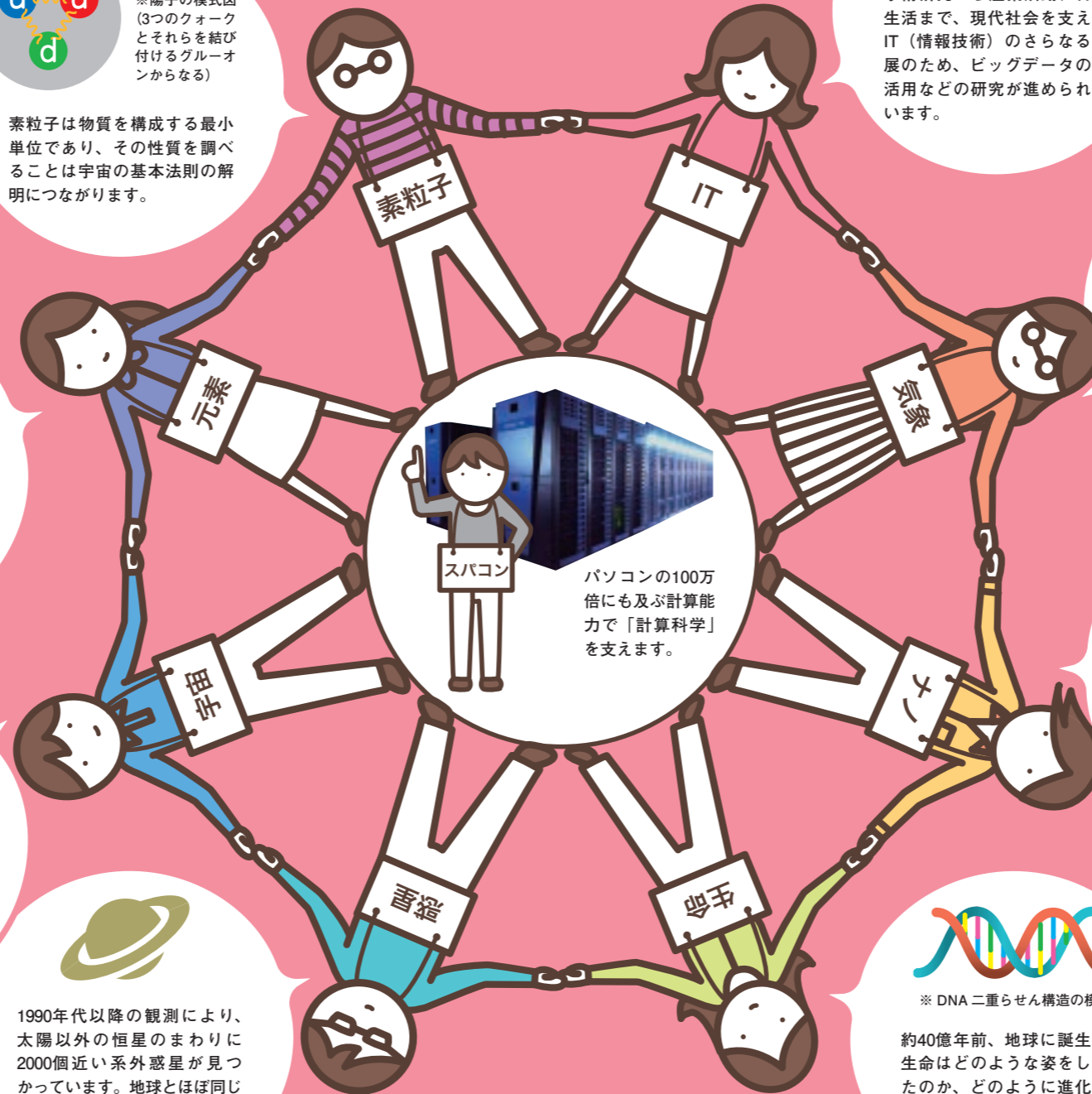


1990年代以降の観測により、太陽以外の恒星のまわりに2000個近い系外惑星が見つかっています。地球とほぼ同じ大きさの惑星もあり、生命の証拠の探査が進められています。



※陽子の模式図
(3つのクォークとそれらを結び付けるグルーオンからなる)

素粒子は物質を構成する最小単位であり、その性質を調べることは宇宙の基本法則の解明につながります。



スパコン
パソコンの100万倍にも及ぶ計算能力で「計算科学」を支えます。

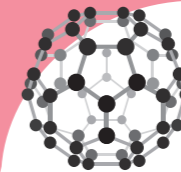


学術研究から産業活動、日常生活まで、現代社会を支えるIT(情報技術)のさらなる発展のため、ビッグデータの利活用などの研究が進められています。

FUTURE of IT SOCIETY IT社会の未来



集中豪雨やヒートアイランド現象、さらには地球温暖化まで、シミュレーションによって様々な大気の変動を解析、予測できるようになっています。



※フラレンの模式図
(60個の炭素原子できている)

物質の性質を原子レベルから解明することで、ナノサイズの新物質や新構造体を生み出すことが期待されています。



※DNA二重らせん構造の模式図

約40億年前、地球に誕生した生命はどのような姿をしていたのか、どのように進化したのか。まだ多くの謎に包まれています。

GLOBAL ENVIRONMENTAL CHANGE 地球環境変動

「学際計算科学」の先駆者として

筑波大学計算科学研究センターは「学際計算科学」に10年以上前から取り組んできました。「計算科学」は、あるテーマの数値モデルを組み立て、スーパーコンピュータでシミュレーションするもので、「理論」「実験・観測」に次ぐ第三の研究手法と呼ばれます。これまで交流がほとんどなかった研究分野が、「計算科学」とスーパーコンピュータの仲立ちにより、力を合わせて新たなテーマに挑むことが可能になっています。

筑波大学計算科学研究センターは、「学際計算科学」において数多くの実績を上げてきました。1996年には素粒子物理学の計算用に開発したCP-PACSがスーパーコンピュータの国際ランキング・トップ500の第1位を獲得しました。2010年からは文部科学省の共同利用・共同研究拠点「先端学際計算科学共同研究拠点」として、またHPCI戦略プログラム分野5「物質と宇宙の起源と構造」の代表機関として、国内基礎物理分野の学際計算科学の中核を担ってきました。また、スーパーコンピュータのプログラム実行性能に関する世界的コンテスト「ゴードン・ベル賞」を2011年と2012年に2年連続受賞しています。

システムとアプリケーションによる「コ・デザイン」の力

2004年に現在の形に改組された筑波大学計算科学研究センターは、前身の計算物理学研究センター(1992年設立)の時代から、科学の各分野がスーパーコンピュータを単に利用するのではなく、計算機科学との協働によってそれぞれの探究に最適なスーパーコンピュータの開発・製作を行ってきた点に大きな特色があります。こうした計算機科学と応用分野の協働関係は「コ・デザイン」と呼ばれ、優れたスーパーコンピュータを開発・製作するとともに、その能力を最大限に活用して研究を進める上で大きな力となっています。

研究者の物理的融合をベースに

今日、多くの大学や研究機関には、科学技術研究に必要な計算資源を提供する計算機センターが設けられています。それらはスーパーコンピュータなどのハードウェアとそれを運用するスタッフから構成され、計算機センターとは別組織の研究者たちが必要に応じて利用するという形が一般的です。

しかし、当センターの前身である計算物理学研究センターでは、同じ建物にスーパーコンピュータを専門とする計算機工学者のほか素粒子物理、宇宙物理の専門家が研究室を構え、一緒になってスーパーコンピュータを開発し、これを使って成果を上げてきました。

当センターに改組拡充された2004年からは、物質、生命、生物、原子核、地球環境、データ基盤、計算メディアの各分野が加わっています。このような研究者どうしの物理的な融合にこそ「コ・デザイン」のベースがあるのです。



センター長
うめむらまさゆき
梅村雅之教授

システム



プロセッサの単体性能には消費電力の限界があるし、メモリがネックになることも少なくない

電力、性能、スペース、そしてコストのバランスが大事なんだ

次世代のスパコンは演算加速装置の使い方が鍵を握っている

ノード間の通信量を減らすには、プログラムやアルゴリズムから工夫しないとイケないよ

CO DESIGN



生命誕生の
かぎとなるプロセスを
シミュレーションで検証するには
どんなアルゴリズムが
考えられるかな？



市街地での気象変化を
1mメッシュで予測できる
モデルをつくりたいな



重力多体計算が
得意なコンピュータが
あると便利なんだけど

次世代の
数百ベタFlops級
スパコンで
どんな計算をしようかな？



スーパーコンピュータの未来へ向けて

スーパーコンピュータはプロセッサ、メモリ、ネットワークを高密度に実装した「計算ノード」を大量につなぐ超並列型の構成により、一般のパソコンに比べていまや100万倍の性能を発揮します。並列性が高い科学計算が非常に得意で、大規模問題も細かく分割して素早く解くことができます。

しかし、計算ノードの実装密度も並列構成も、消費電力やネットワーク速度の点で限界に近づきつつあります。次世代のスーパーコンピュータには、GPU（グラフィックプロセッサ）に代表される演算加速装置を用いた一層の高速化とともに、アプリケーションそのものの高性能化が欠かせません。

当センターでは、計算機工学と各科学分野との密接な連携でこうした課題に取り組んでいます。



副センター長
ほくたいすけ
朴泰祐教授

当センターにおいて
「コ・デザイン」で
開発された
スーパーコンピュータ



CP-PACS

1996年、素粒子物理学における格子量子色力学の研究のために開発されたスーパーコンピュータです。「トップ500」リストにおいて世界第1位を獲得しました。



宇宙シミュレータ
FIRST

宇宙第一世代天体の誕生を直接計算することを目的とし、2007年に完成したスーパーコンピュータです。



HA-PACS

GPUを搭載したスーパーコンピュータで、2012年より運用を開始し、計算科学の重要アプリケーションの革新に取り組んでいます。

※<http://www.ccs.tsukuba.ac.jp/research/computer>



研究 TOPIC 1

集中豪雨の 謎に迫る

近年、異常気象現象が増えている中、
日下准教授は独自の気象モデルとスーパーコンピュータを使って
集中豪雨の原因を探る研究などに取り組んでいます。

都市は集中豪雨を 増加させているのか？

急速な積乱雲の発達により、局所的に大量の降水をもたらす「集中豪雨」。メディアでは都市化の影響がよくいわれますが、本当に都市が降水を増やすのか、強めるのかはよく分かっていません。

そこで日下准教授のチームでは、**都市がある場合とない場合の気象モデル**をつくり、夏期の1カ月間、どのような気象になるのかスーパーコンピュータでシミュレーションを行いました。シミュレーションでは精度をあげるため、条件を変えて同様の計算を32回実施しました。

その結果、商業地で排熱が2倍の都市では、明らかに夏の降水が増加することが判明。また、弱い降水よりも強い降水が特に多くなることも分かりました。

これは、都市があることによって海風が内陸に侵入しにくくなり、海風による水蒸気の輸送量が都市で増えるためと考えられます。

夏の街中で体感温度を 効果的に下げるには？

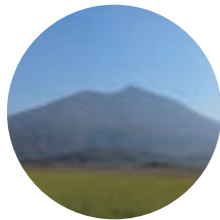
日下准教授は、夏の街中で体感温度を効果的に下げるにはどうすればいいかという研究も行っています。しかし、従来の数値気象モデルの解像度は1km程度しかなく不十分。そこで、建築工学と計算科学の専門家に協力を頼み、**次世代の都市街区気象モデル (City-LES)**を開発。このモデルを実際の都市の地表状況に当てはめ、スーパーコンピュータでシミュレーションすれば、建物や街路樹による日陰の効果を考慮しつつ、時々刻々と変化する風の流れ、気温、湿度、日照などを予測・再現できます。

すでに愛知県多治見市で City-LES を用いた暑熱環境緩和策の検討が行われ、将来的には東京オリンピックでの暑さ対策に活用することも考えられます。



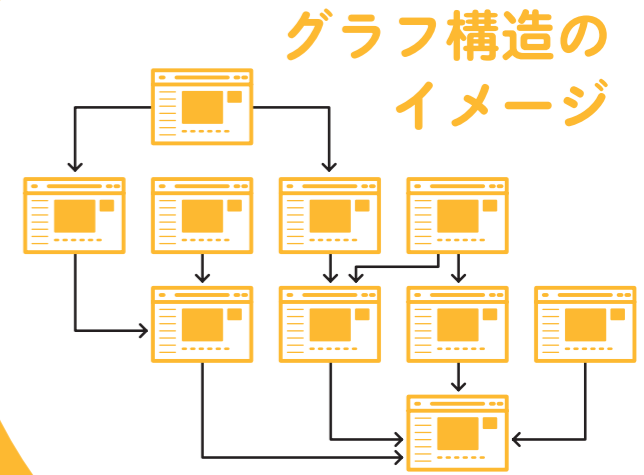
地球環境研究部門
くさかひろゆき
日下博幸准教授

気象予報士も注目する筑波山プロジェクト



関東平野の独立峰である筑波山（標高877m）では、100年以上にわたって山頂での気象観測が行われてきました。しかし、2001年に気象庁の観測地点から外れ廃止となりました。

5年後の2006年、筑波大学大学院生命環境科学研究科の大気科学・水文科学研究グループが、新たに天気計、画像カメラ、二酸化炭素測定、酸性雨観測なども加えて筑波山気象観測ステーションを始動させました。さらに、2012年4月より計算科学研究センターの事業「筑波山プロジェクト」(担当:日下博幸准教授)として引き継がれています。



研究 TOPIC 2

ビッグデータの 新しい読解法

現代社会では、インターネットや物理センサの発展・普及により
膨大な量のデータ（ビッグデータ）が生み出され、利活用されています。
天笠准教授はより効率のよいデータ統合や解析の研究を進めています。

グラフ構造の分析の効率化

ビッグデータの利活用には様々なケースがありますが、代表的なのはインターネットの検索エンジンでしょう。調べたい単語を入力すると、世界中のウェブサイトの中から重要度の高い順に表示してくれます。ウェブサイトどうしは網の目のようにつながっており、こうした節点（ウェブサイトなど）と枝（ページ間のリンクなど）からなる構造を「グラフ構造」といいます。検索エンジンは、こうしたグラフ構造を分析（グラフ処理）しているのです。

スーパーコンピュータは従来、科学技術分野の数値計算に使われてきましたが、最近は大規模グラフ処理も重要な応用分野になってきています。スーパーコンピュータのグラフ処理の性能を測る「グラフ500」という新しい指標も注目されています。

天笠准教授は現在、グラフ処理をより短時間・低コストで行うため、すべてのつながりをしらみつぶしに調べる代わりに、一定範囲のグラフを調べることで、特定の節点（ウェブサイトなど）の重要度を正確さを失わずに推定する

手法の研究を行っています。

この手法を使えば、ソーシャルネットワークにおける有名人のランク値を高速に推定したり、そのランク値が時間経過とともにどう変化するかを分析したりできるようになると期待されています。

大量のシミュレーションデータの 分析にも活用

グラフ構造はインターネットだけではなく、脳における神経細胞どうしのつながりやタンパク質の相互作用などにも見出すことができます。グラフ処理を効率よく行うことができれば、様々な科学分野における研究にブレークスルーをもたらす可能性があります。

天笠准教授のチームではいま、当センターの素粒子や生命科学、地球環境などの分野との間で、**スーパーコンピュータのシミュレーションで生まれる大量のデータの運営・管理や分析について連携**しつつあります。



計算情報学研究部門
あまがさとしゆき
天笠俊之准教授

文部科学省「実社会ビッグデータ利活用のための データ統合・解析技術の研究開発」事業



筑波大学のほか4大学が連携し、2014年から4年間行う文部科学省のプロジェクトです。当センターの計算情報学研究部門では、データ連携に関する事業を担当。実社会から生み出される様々なビッグデータの統合・解析技術に関する研究開発を行っています。

すでに、ストリーム処理エンジンの独自開発に着手したほか、ソーシャルメディアにおけるメタデータ推定、オープンデータを活用したデータ連携などの検討も進めています。