

次世代スーパーコンピュータに向けての計算科学の課題

寺倉清之 北大創成科学共同研究機構、産総研

1. はじめに

今回の京速計算機プロジェクトの特色は、その目覚ましい性能だけではなく、将来にわたって最先端の計算機を国が設置し続けることを保障するという政策にある。アプリケーションとしての計算科学とか計算工学とかの研究分野への強い影響が期待され、長期的な観点からの研究計画の検討が求められている。京速計算機プロジェクトの成否は、今後の関連分野の展開を左右するものである。

最近、研究の成果が実生活や企業活動に反映されることが強く求められるようになってきている。その傾向は計算科学や計算工学においても見られることである。現実の問題は種々の要因からなっているので、計算機シミュレーションにおいても、マルチスケールとかマルチフィジックスとかいうキーワードが重要視されるようになった。種々の要因からなる包括的で重要な問題は、グランドチャレンジと呼ばれることがある。大雑把に掴むことにすると、図1のような階層構造を考えることができる。この図では、マルチスケール（多重スケール）とかマルチフィジックス（多重物理）に対応させて、敢えて単一スケールとか単一物理とかいう言葉を使っている。

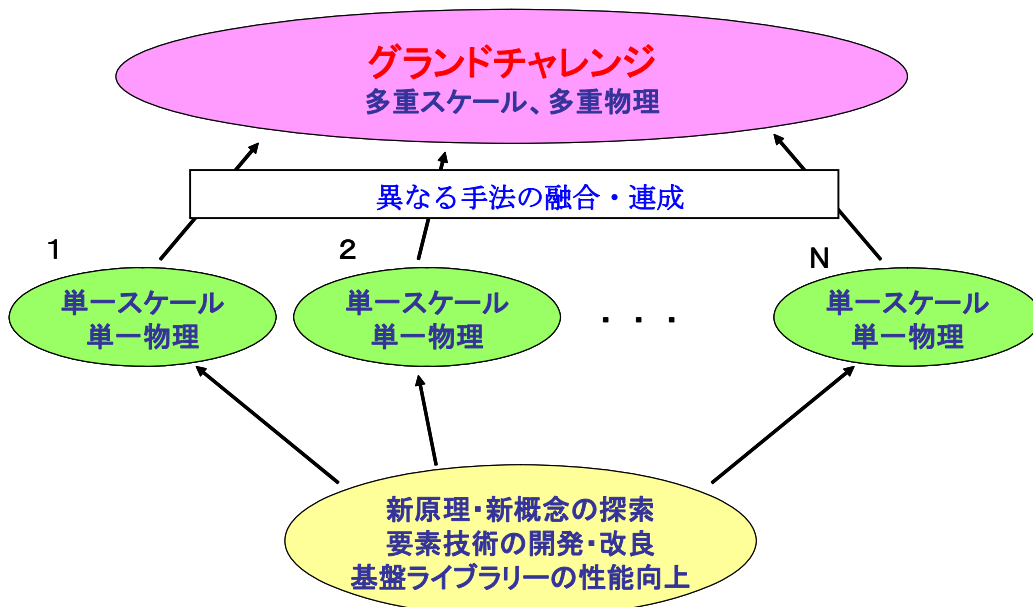


図1 プロジェクトの階層的構成

挑戦的な計算機の設置が継続的に進められ、グランドチャレンジが次々に遂行されるためには、それを支える基盤もまた進化しなければならない。勿論、既存の構成要素の新規な組み合わせによって、新しいグランドチャレンジが生まれることも多いだろうと思われるが、本当に革新的な発展のためには、基盤となる構成要素においても革新的な発展がなければならない。

一般的に云って、出口に近いところの研究は計画的に進めることが可能なように思われるが、基盤的なところでの革新的な発展は計画的に進めることはなかなか容易ではない。このことから、グランドチャレンジを次々に遂行していくには、広い研究コミュニティとのオープンな関わりが確保されることが必須である。

2. 基盤的研究

2-1 新原理・新概念

新原理や新概念の発掘は、将来的に新しい地平の開拓のために重要である。比較的身近な例を挙げると、金属超格子の巨大磁気抵抗効果の発見は、もともとは基礎物性の研究の成果であったが、磁気メモリーに利用される重要技術となっている。基礎物理の典型のような量子ホール効果が、抵抗の標準に用いられているというのも興味深い例である。新原理・新概念が提案されたら、それらをまずは確固たる学理にまで発展させ、それらの持つ将来的な意義を見極め、重要と思われるものについては、応用にまでつなげるようなプロジェクトが立てられることが望まれる。基礎の段階ではシミュレーションの計算機への負荷は比較的小さいが、応用に繋げる段階ではマルチフィジクスとなって大規模計算が必要になる。スピントロニクスに関連しての、最近のこうした候補として

- ・ トポロジカルカレント：無散逸なカレント
- ・ 交差相関：電流で磁性を制御するなどスピントロニクスにおける必須技術を挙げておきたい。

2-2 計算要素技術

ナノテクとかナノバイオとか呼ばれる分野における、開発および改良が求められる計算要素技術として次のようなものが考えられる。

・ 電子状態計算

大規模計算

オーダーN法：計算負荷が系のサイズに比例

超並列可能な方法

高精度計算

強相関電子系の扱い：上記の交差相関にも関連

van der Waals 力の記述：ナノバイオにも本質的に重要

電子励起：特に、電子励起を利用した反応制御

- ・複雑系の処理

 - 位相空間の探索：一般的な最適化問題

 - 粗視化：マルチスケールの具体的な概念

 - 軽い原子の量子効果：生体におけるプロトン移動に関係

2-3 基盤ライブラリー

大規模数値計算における重要な基盤ライブラリーの改良は、高効率計算の実現には大変重要である。例えば、超並列計算用の FFT、固有値問題、逆行列などの高性能数値計算ライブラリーの開発は重要である。

3. 応用問題（単一スケール、単一物理）

多種多様な問題があるが、ナノテクに関連しての典型的な問題を挙げておく。

- ・伝導現象

 - 量子ドット、量子細線、分子素子：特にフォノンやマグノンによる非弾性散乱が問題になりつつある。試料の長さや平均自由行程の競合、発熱など。電極との接合も重要。

 - TMR, GMR, CMR：欠陥や界面の原子配列、界面磁性などによる影響。

 - 絶縁膜：欠陥の構造、界面の乱れによるもれ電流への影響

- ・クラスター、微粒子：実験的に構造を決めるのが困難なため、シミュレーションの役割が大きい。光学的性質や反応性に注目。

4. 応用問題（多重スケール、多重物理）

- ・材料バーチャルラボ

 - 複合材料：異なる性質の材料を複合化することによる新機能、界面特性。

 - マイクロ内部構造：実材料の特性は材料におけるマイクロ内部構造によって制御される。

 - こうした構造の安定性と形成過程の解析。内部構造による材料特性の制御。

- ・燃料電池

 - 電極の材料と構造の電極反応への影響

 - 電解質溶液や膜でのプロトン伝導の機構

5. まとめ

シミュレーションが現実の社会や企業活動で役立つには、殆どの場合にマルチスケール・マルチフィジックスということにならざるを得ない。しかし、それらを支えるものは物理の原理であり、シミュレーションの要素技術である。一方、それらの要素技術を融合して、マルチスケール・マルチフィジックスを扱うことは、まだまだ容易ではなく、融合技術の開発も挑戦的課題であることは強調しておく必要がある。

こうした階層的構造からなるものであることを認識すると、将来にわたる先端的計算

科学・工学を支える研究コミュニティとのオープンな関わりが確保されることが重要であると思われる。イギリスに存在するそうしたコミュニティの形成の例が次のホームページから見るることができる。

<http://www.ccp.ac.uk/>