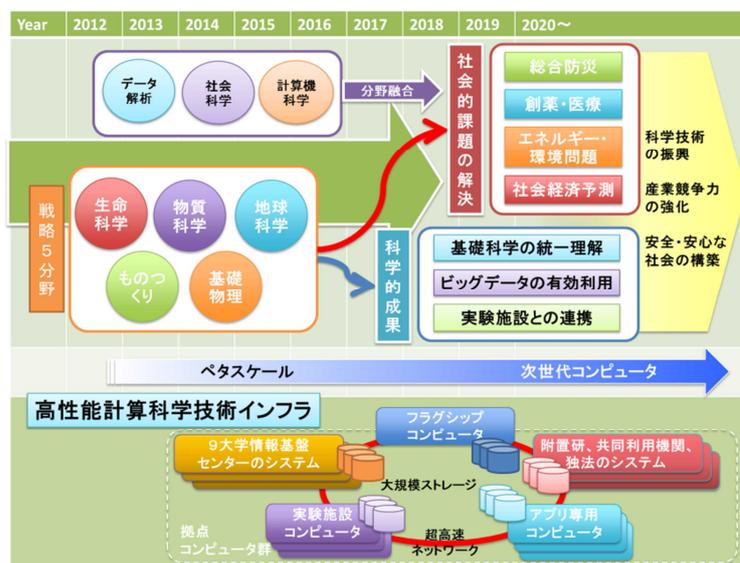


おわりに ～計算科学の更なる発展に向けて～

計算科学の劇的な進歩にともない、従来は演算能力の不足によって実現できなかった詳細なモデルでの計算、現象全体を対象とした計算が実現しつつある。平成24年秋に「京」が本格稼働し、HPCIでは現在、5つの分野での戦略プログラムにより、ペタスケールの演算性能を利用したさまざまな研究開発が行われている。そしてこれらの研究開発からは、創薬・医療、エネルギー、ものづくり、防災等の多岐にわたる分野において、我々が営む社会経済活動の向上に有益な成果が生まれつつある。しかしながら、複雑化、グローバル化が進む現在の社会が抱える課題に対しては、次世代のスーパーコンピュータがもたらす更なる高性能な計算環境に期待されるところも多い。

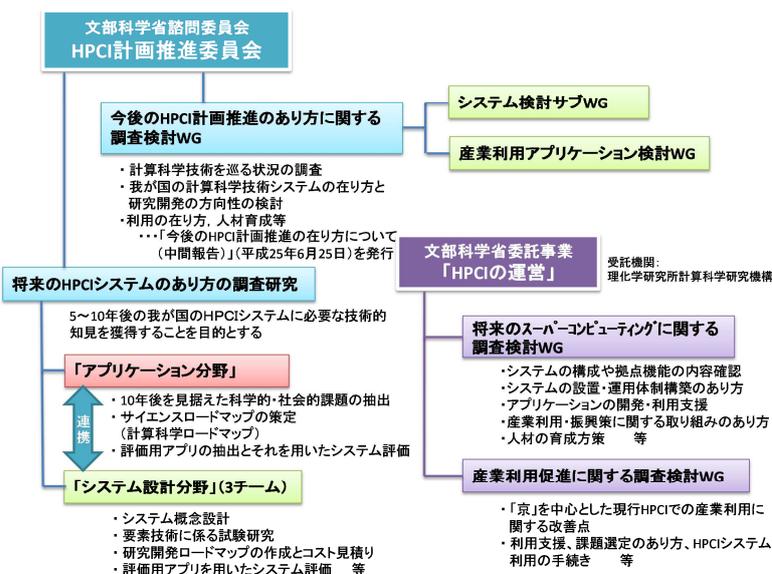
大規模数値計算が、現在の我々の社会生活を支える産業や経済活動に不可欠な貢献をしていることは紛れもない事実であり、今後のスーパーコンピュータの性能向上により得られる成果は、社会が抱える様々な課題の解決に貢献し得る。本書の第2章では、将来において計算科学が貢献し得る社会的課題の具体例を示した。第3章では従来は異なる研究分野と見なされていた諸分野が、計算科学を通じて有機的に結合する事により、新しい科学が創出されることへの期待を示した。そして、第2章および第3章で示したこれらの社会的課題の解決や新たな科学の創出には、基礎となり得るさまざまな計算科学分野における研究課題への取り組みが不可欠であり、第4章において各分野における現状の課題、今後の中長期的目標、そして解決すべき課題等についての詳細を記述した。今後、計算科学を更に発展させ、社会に山積する課題を解決し、生活の質の向上、安心・安全の確保、そして、産業の更なる発展や振興の礎となる技術基盤として確立するためには、社会における課題解決のために必要な技術革新を目指す研究開発と、それを後押しする基礎科学が相互に密接に連携して推進されることが極めて重要である。



また、スーパーコンピュータの利用は、単体として高性能な計算環境を与えるのみならず、大規模実験施設と連携することによる成果が幅広い分野で期待されている。本書では、生命科学関連の大規模データ処理が必要となる構造解析やイメージングに大きな成果が期待される SACLA と計算科学との連携について紹介しているが、他にも高分子材料など、幅広い分野でも大規模実験施設との連携が更なる科学技術の発展につながることを期待される。

一方で、本書が示す社会における課題解決に計算科学が貢献する成果を得るためには、単に高性能で大規模な計算機を構築することだけでは不十分であり、高性能の計算機を使いこなす優秀な人材の育成やモデル開発、運用のための十分な人的資源の確保や適切な組織体制の準備などのソフト面での対応を十分に行うことも必要である。人材育成を含めたこのような大規模数値計算に係わる全体的な施策については、本調査研究を推進するうえでの上部組織である「今後の HPCI 計画推進のあり方に関する検討ワーキンググループ」で議論され、平成 25 年 6 月 25 日に公開された「今後の HPCI 計画推進の在り方について（中間報告）」⁶で報告されている。また、平成 25 年 7 月に行った、本ロードマップのパブリックコメント募集では、計算科学の更なる発展のためには、開発されたソフトウェアを（無償で）提供し大学、中小企業で利用できるようにすることの重要性や、開発したソフトウェアが PC からスーパーコンピュータまでを含めたマルチプラットフォームで利用できるようにすること、継続的なサポートを行うこと、ホームページや書籍等で広く情報を提供することなど、利用者の裾野を広げるための努力も必要であるとのコメントがあった。また、大規模計算科学は、その扱いによっては社会経済活動に大きな打撃を与えるリスクをはらんでおり、新たな技術の開発に対しては、その倫理的問題について十分に考察することの必要性を問う声もあった。

上述のように、将来の計算科学の発展に向けては、ハード、ソフトを含めた多面的な検討が必要であり、今後の HPCI の利用、運用については、本書の作成を行っている「将来の HPCI のあり方の調査研究（アプリケーション分野）」の活動以外にも様々な調査検討を行う体制が構築され、人材育成やアプリ開発、産業利用の促進などを含めた検討が行われている。下図に、今後の HPCI の利用・運用に関する検討体制の全体像を示す。



⁶http://www.mext.go.jp/b_menu/shingi/chousa/shinkou/028/gaiyou/1337595.htm

本書は、計算科学分野はもとより、実験・観測・理論の研究者、ならびに、各学術コミュニティの第一線で活躍する大学・研究機関、企業の現役研究者約 100 人が一堂に会し議論が行われるという画期的な取り組みの成果として取りまとめられている。今後も、計算科学の更なる発展のため、このような取り組みを定期的に継続的に実施していくとともに、成果を創出する計算科学とハードウェアを設計するシステム設計分野をはじめ、様々な観点で検討を行う他の体制との連携をより一層強化していく。

計算科学ロードマップ 概要

～大規模並列計算によるイノベーションの目指す社会貢献・科学的成果～

平成 26 年 3 月

将来の HPCI システムのあり方に関する調査研究「アプリケーション分野」

<http://hpci-aplfs.aics.riken.jp/>