

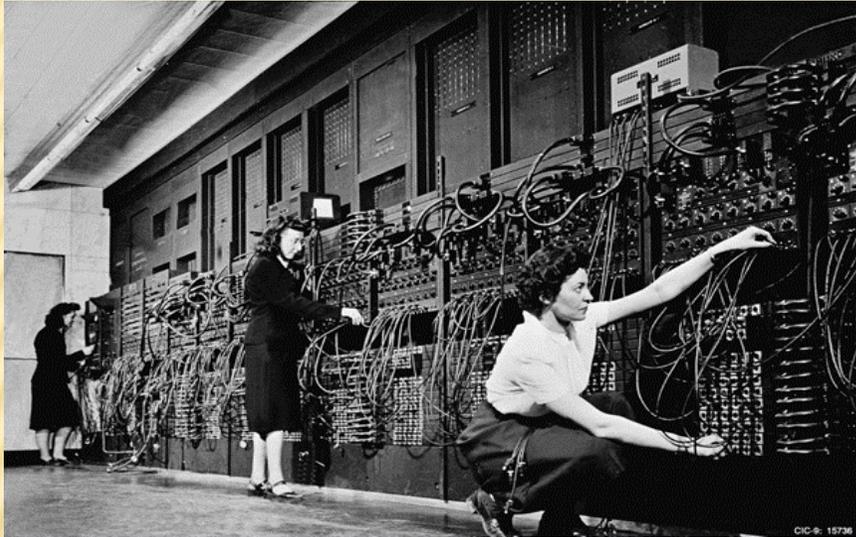
スーパーコンピュータの贈り物 —過去、現在、未来—

江口 至洋
理化学研究所
HPCI計算生命科学推進プログラム

**Today's supercomputers
may be
tomorrow's PCs.**

スーパーコンピュータの贈り物 —過去—

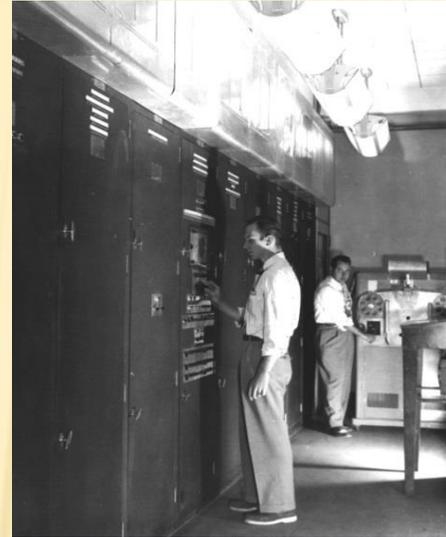
コンピュータの黎明期（1）



計算機ENIAC(1945年)

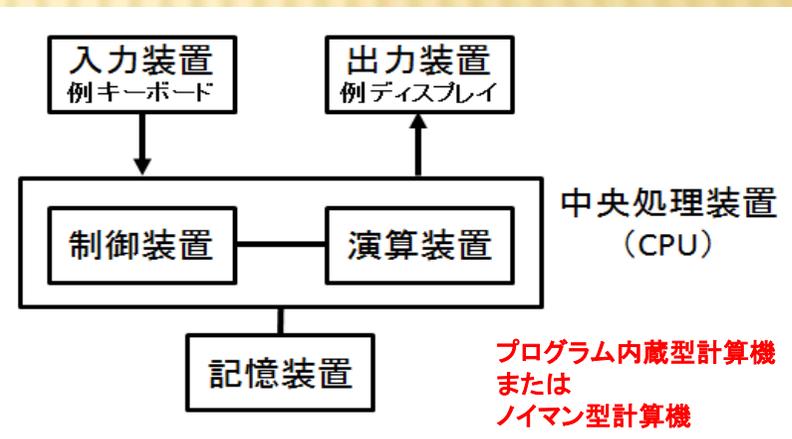
アメリカ陸軍が大砲の弾道計算を目的にペンシルバニア大学と共同開発

Courtesy of Oak Ridge National Laboratory, U.S. Dept. of Energy

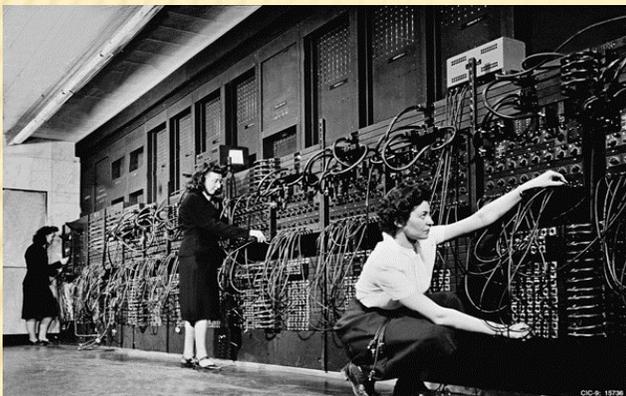


プログラム内蔵型計算機
EDVAC(1951年)

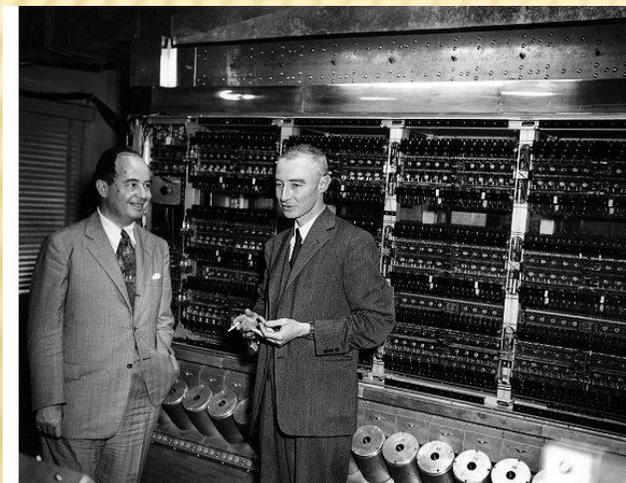
アメリカ陸軍とペンシルバニア大学との共同開発



コンピュータの黎明期（2）

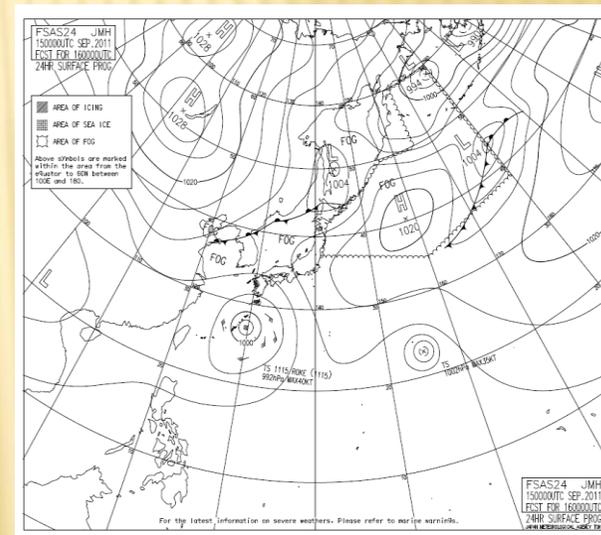


ENIAC計算機



IAS計算機

フォン・ノイマンはプリンストン高等研究所で新しく開発されつつあった電子計算機の研究対象に、天気予報を取り上げ、気象学者からなる研究チームを立ち上げたのです。そして、1950年には電子計算機ENIACを用いて世界初の数値天気予報に成功し、さらに、1952年夏には自前の電子計算機を用いてアメリカ東部を襲った大嵐の予報に成功します。



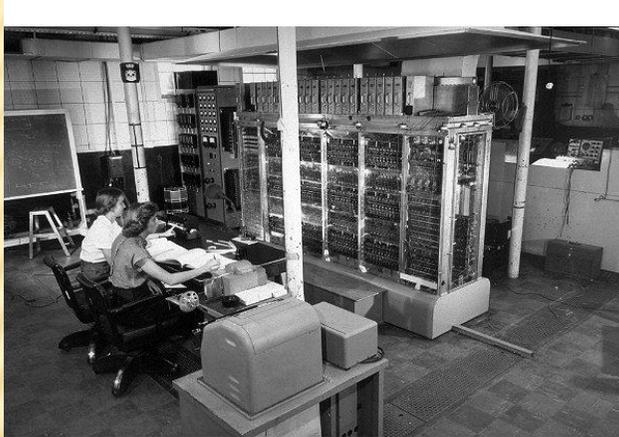
気象庁の資料から

ENIAC : Courtesy of Oak Ridge National Laboratory, U.S. Dept. of Energy

IAS計算機: Courtesy of the Shelby White and Leon Levy Archives Center, Institute for Advanced Study (IAS)

<http://www.computerhistory.org/revolution/supercomputers/10/28/46>

コンピュータの黎明期（3）



Los Alamos MANIAC計算機(1952年)

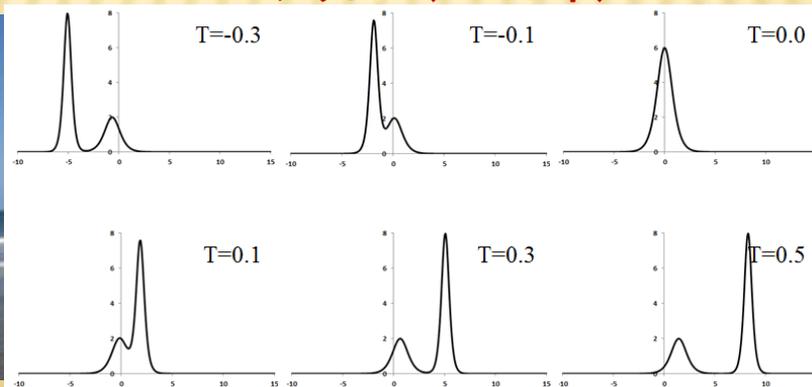
フェルミらは、当時の高性能計算機であるMANIACでなければ解けないような問題を探し、多くの粒子（質点）が直線状にバネで繋がれたモデルを考えました。そして、予想もしなかった「フェルミ・ Pasta・ウラムの再帰現象」を発見します。

「フェルミ・ Pasta・ウラムの問題」
(1955年)



フックの法則 $F=-kx$
 \Rightarrow
 $F=-k(x+cx^2)$

ソリトン(1965年)



ザブスキーとクルスカルは、「フェルミ・ Pasta・ウラムの問題」が連続体近似ではコルテヴェークとド・フリースの方程式（KdV方程式）で記述されることを見出し、数値実験を行い、今までにない波、ソリトンを発見しました。

スーパーコンピュータの贈り物（1）

1 実験を助け、補完します

ヒトゲノムのビッグデータを解析します
コンピュータなしに新しい自動車を設計することはありません

2 実験できないものを、「実験」します

計算機顕微鏡でタンパク質の動きを見ます
コンピュータが津波の襲来を予測します

3 人間の予測能力を向上させます

今やスーパーコンピュータなしに天気予報はできません

4 人間の思考能力を超える？

計算機と人間の知的な対話が数学の難問を解きました
コンピュータチェスが世界チャンピオンに勝ちました

5 新しい発見をもたらします

予想もしなかった新しい現象、ソリトンを発見しました

6 学問を結び付け、学際性を強めます

生物学と化学、物理学は陸続きです

スーパーコンピュータの贈り物（2）

1852年

ド・モルガンからハミルトンに宛てた手紙で四色問題が提起される。

1879年

ケンペによって「紙と鉛筆」で「証明」される。

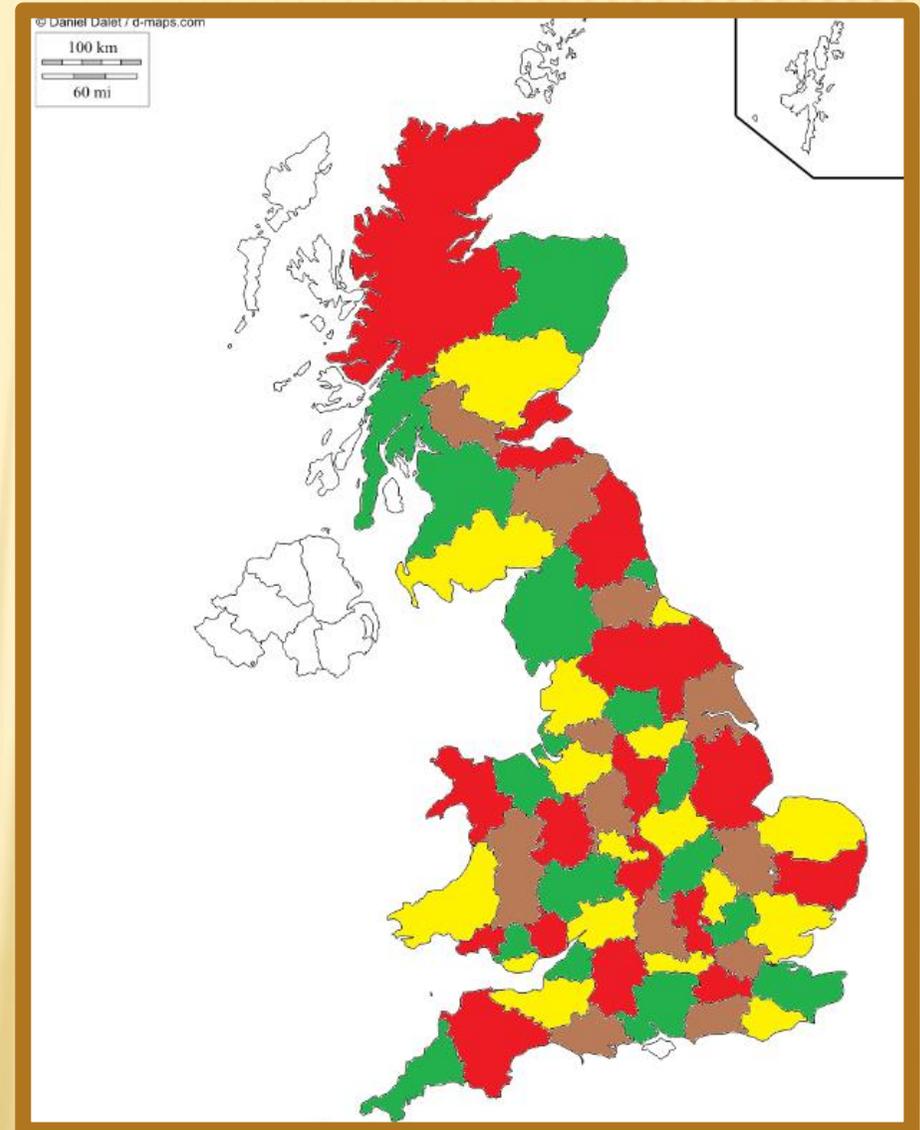
1890年

ヘイウッドがケンペの「証明」の間違いを発見する。

1976年

アップルとハーケンらが当時のスーパーコンピュータを1,200時間も使用して『証明』する。

この『証明』は証明でしょうか？との議論の余地はありますが。



スーパーコンピュータの贈り物（3）

1997年 IBMのDeep Blue

アメリカのIBM社はチェス専用のスーパーコンピュータとしてDeep Blue I の開発を始めました。1996年2月勝負としては1勝3敗2引き分けで負けはしたのですが、世界チャンピオン相手に1勝を挙げる事ができなした。その後、IBMのチームはさらに高性能なDeep Blue II の開発を進め、1年後の1997年5月、世界チャンピオンに再挑戦し、2勝1敗3引き分けで勝利します。コンピュータプログラムが世界チャンピオンに初めて勝利したのです。



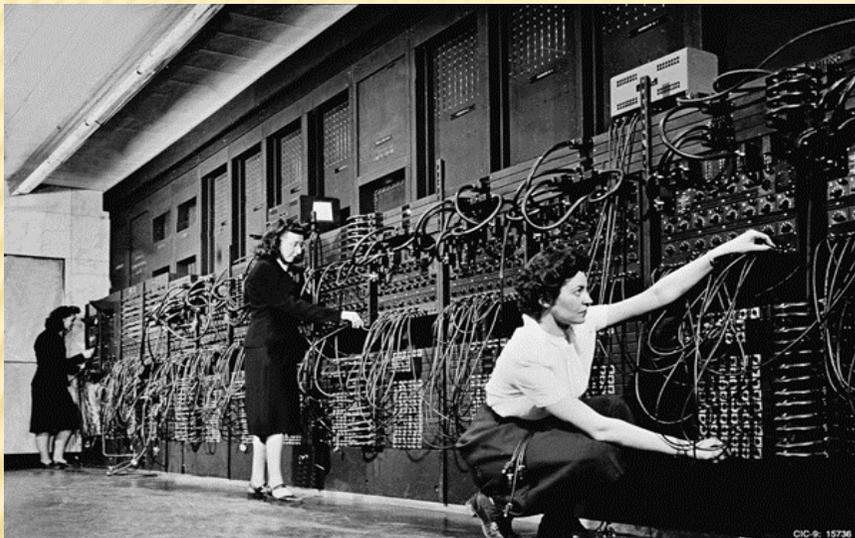
無理かも



2013年 プロ棋士連合に勝利

	9	8	7	6	5	4	3	2	1	
先手	金					角	車	皇		一
							馬	王		二
	車	車	車			馬	馬	車		三
	皇	馬		車	車	車			車	四
	桂		歩	歩				歩		五
	玉		馬		歩		歩		歩	六
	歩	歩				歩	銀			七
				角				飛		八
								桂	香	九
後手										

スーパーコンピュータの現在



計算機ENIAC(1945～1955年)

Courtesy of Oak Ridge National Laboratory, U.S. Dept. of Energy



65年間で計算性能は10兆倍以上も進歩

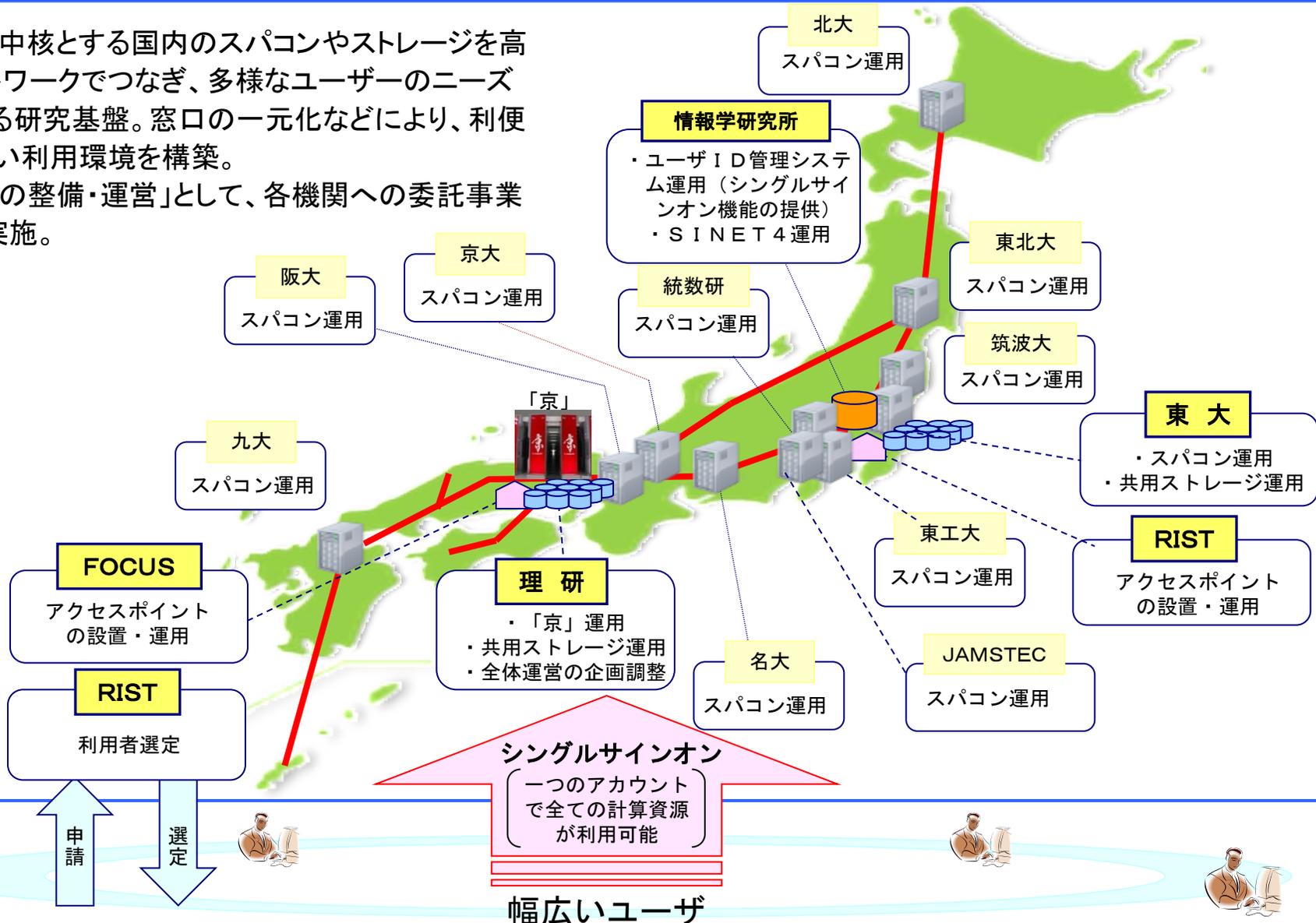


スーパーコンピュータ「京」(2011年～)

スーパーコンピュータの贈り物 —現在—

HPCI:革新的ハイパフォーマンス・コンピューティング・インフラ

- 「京」を中核とする国内のスパコンやストレージを高速ネットワークでつなぎ、多様なユーザーのニーズに応える研究基盤。窓口の一元化などにより、利便性の高い利用環境を構築。
- 「HPCIの整備・運営」として、各機関への委託事業により実施。



「京」による画期的な成果創出を目指す戦略分野

予測する生命科学・医療
および創薬基盤

新薬の開発



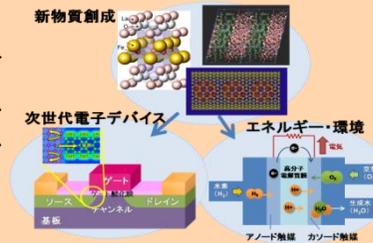
生体分子から細胞、臓器、全身にわたる多階層の生命現象を予測し、副作用のない革新的な医薬品が開発できる。

【戦略機関】
・理化学研究所

新物質・エネルギー創成

新デバイスとエネルギーの開発

新物質・新現象の探索を基盤とし、次世代電子デバイス開発の指針を与え、クリーンエネルギーの生成の高効率化に資する。



【戦略機関】
・東京大学物性研究所(代表)
・自然科学研究機構分子科学研究所
・東北大学金属材料研究所

防災・減災に資する
地球変動予測

台風の進路や集中豪雨の予測



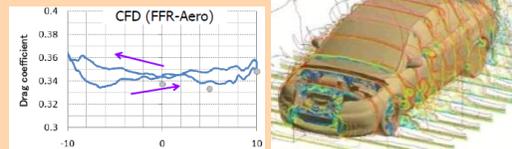
全球雲解像モデルにより台風の進路や集中豪雨の高精度予測が可能となり、効果的な防災・減災対策に資する。

【戦略機関】
・海洋研究開発機構

次世代ものづくり

設計プロセスの革新

独自の要素技術の創造、組合せ最適化、丸ごと性能評価を可能とし、ものづくりプロセスの革新とイノベーション創出に資する

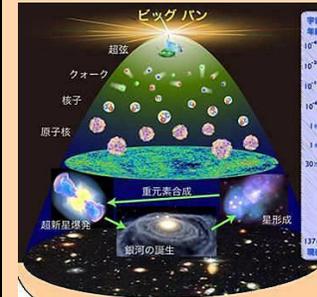


非定常空力・振動連成解析による、低空気抵抗、低揺動車の開発

【戦略機関】
・東京大学生産技術研究所(代表)
・宇宙航空研究開発機構
・日本原子力研究開発機構

物質と宇宙の起源と構造

物質の起源と宇宙の構造形成



ビッグバンに始まる宇宙において、極微の素粒子から元素合成、そして星・銀河形成に至る物質と宇宙の起源と構造を統一的に解明する。

【戦略機関】
・筑波大学計算科学研究センター(代表)
・高エネルギー加速器研究機構
・自然科学研究機構国立天文台

資料提供：大阪大学、理化学研究所、分子科学研究所、東京大学、海洋研究開発機構、東京大学生産技術研究所、筑波大学他

シミュレーションが未来をひらく

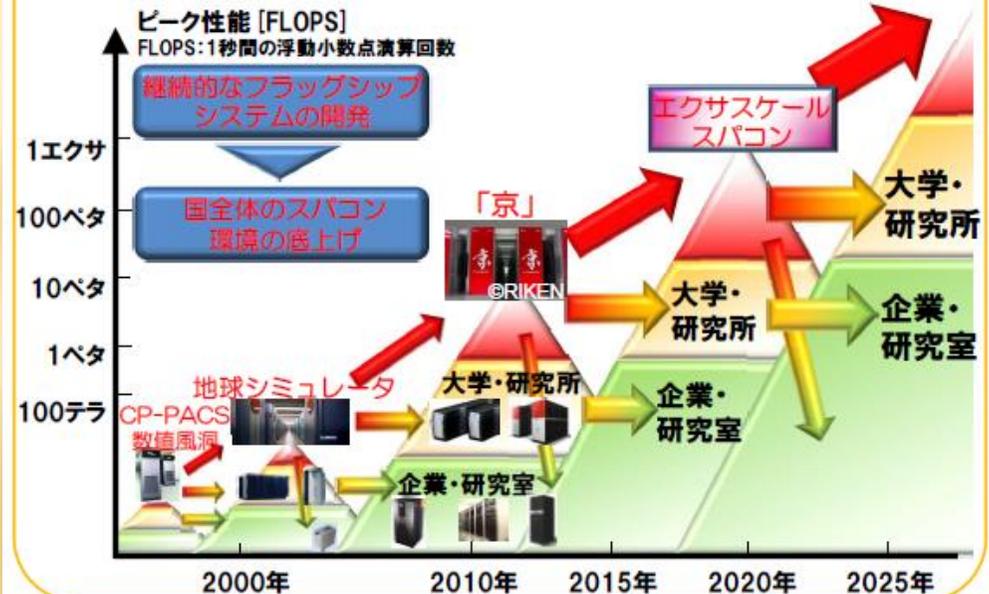
スーパーコンピュータの贈り物 —未来—

日本での ポスト「京」計画

<我が国の計算科学技術インフラのイメージ>

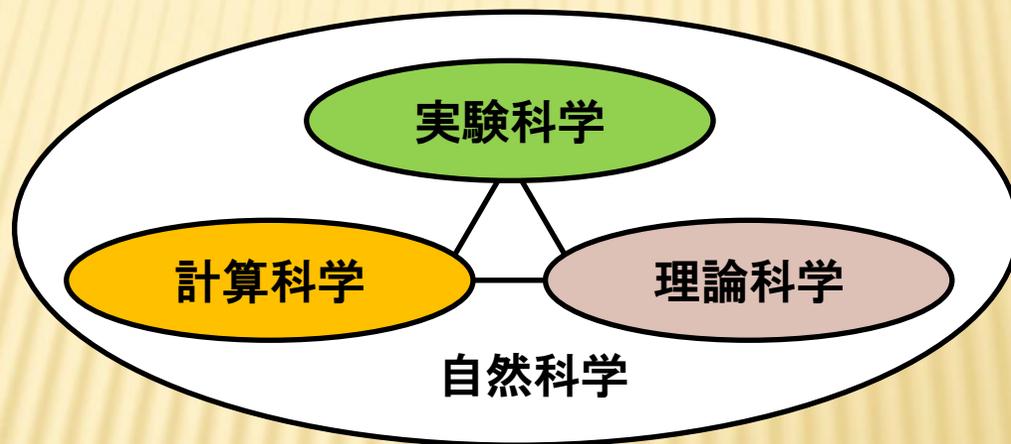


<計算科学技術インフラの継続的強化のイメージ>



再びスーパーコンピュータの贈り物

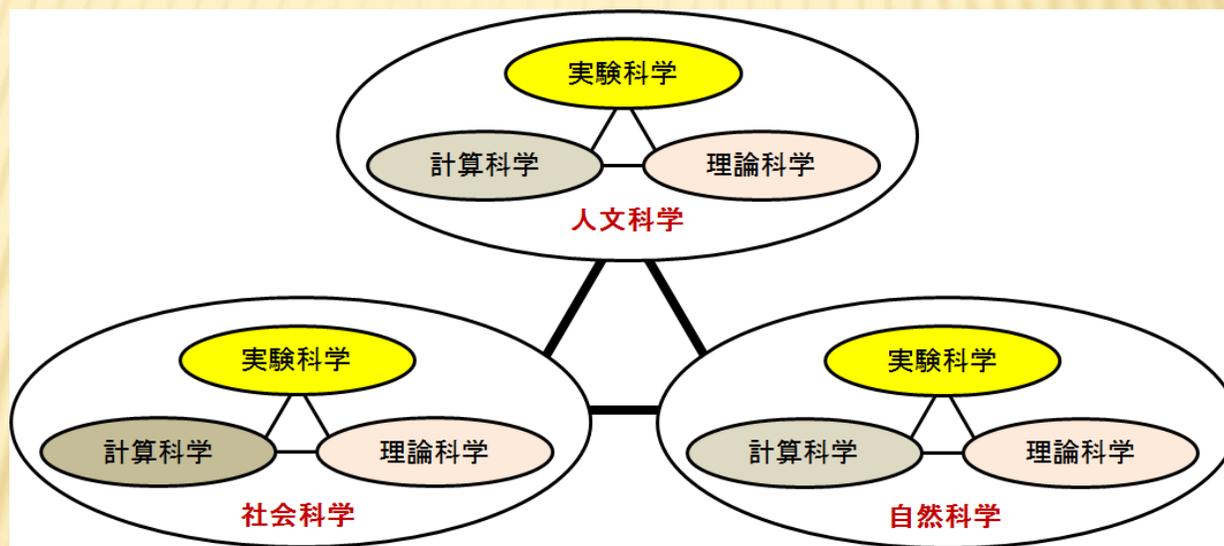
実験科学、理論科学、
そして計算科学の連携を強化しましょう。



実験科学と理論化学、そして計算化学との実りある協力関係を作り上げ、
「他の方法では解けない問題をも解く」、その道を切り拓いていく

再びスーパーコンピュータの贈り物

スーパーコンピュータを活用し
科学そのものを総合化しませんか。



科学の総合化が必要な研究課題の例

例1: より良い健康のための疾患関連遺伝子の探索研究と遺伝子診断

例2: 安心と安全のための津波予想と防災・減災

ありがとうございました。

戦略分野1「予測する生命科学：医療および創薬基盤」
理化学研究所 HPCI計算生命科学推進プログラム
のみなさんに感謝します

