



特集：スーパーコンピュータと計算科学

## ハイパフォーマンスコンピューティング 技術の進展と計算科学への展開

「応用物理」編集委員会

計算科学は、解析的に解くことが困難な多自由度系の物理・化学モデルや非線形応答などに基づく現象を、計算機を駆使して数値的に解明する研究分野であり、今日では理論、実験と並ぶ第3の科学として重要な役割を果たしています。そして、この分野にはスーパーコンピュータ\*を用いたハイパフォーマンスコンピューティング (High-Performance Computing : HPC)\*\* 技術が欠かせません。今日では優に1 TFLOPS\*\*\* を超える演算速度をもつコンピュータが数多く存在し、近年では1 PFLOPS を超えるものもあります。例えば、現在最速のスーパーコンピュータ\*\*\*\* は、中国国防科学技術大学で稼働する「Tianhe-1A」で、2,507 PFLOPS の処理能力をもっています。また、2012年に神戸ポートアイランドで稼働予定の次世代スーパーコンピュータ「京(けい)」では10 PFLOPS の処理能力を目指しています。

HPCによる計算量が大幅になるにつれて、さまざまな現象をより正確に再現・予測することができるようになりました。第3の科学と呼ばれるゆえんです。数値計算という言葉で応用物理の読者が思い浮かべる研究分野は、素粒子物理、固体物理や量子化学といった基礎科学かも知れませんが、しかし、今日のHPCの能力はそれら基礎科学の分野にとどまらず、電池・触媒などすぐにでも実用可能な材料設計、医薬品と生体の適合可否の判定、来るべき災害に備えた気象予測など、我々の社会生活に直結する計算を可能にしています。そして、これらの研究が重要な成果を生み出すに従って、計算機の性能向上に対する要求がますます高まっています。

本特集では、HPC技術の進展と、これを用いてさまざまな現象を解析・解明した最先端の研究を紹介し、HPCによる計算科学の未来を展望します。また、HPCを用いて大規模計算を始めたと考えている会員の皆様に、よい契機となることを心がけて、その歴史的発展や演算素子技術、利用方法などを紹介する記事を掲載しています。応用物理からHPCを利用した新しい研究が生まれることを期待しています。

◆的場 修, 吉田親子, 下村 哲, 鍋川康夫

\* スーパーコンピュータ：Supercomputer の日本語表記については、応用物理用語大事典での語尾表記規則にならない、本特集号ではスーパーコンピュータ (略称：スパコン) で統一して記載することにした。

\*\* ハイパフォーマンスコンピューティング：高速コンピュータ上で先進的なアプリケーションを実行して行う計算。大まかには1 TFLOPS (脚注\*\*\*参照) を超える計算速度をもつコンピュータで行われる計算を指す場合が多い。

\*\*\* FLOPS：FLloating point Operations Per Second の略語で、浮動小数点演算を1秒間に行う回数。M (メガ) は $10^6$ 、T (テラ) は $10^{12}$ 、P (ペタ) は $10^{15}$ を表す。京は $10^{16}$ を指し、10ペタに相当する。

\*\*\*\* 最速のスーパーコンピュータ：ここでは、世界中のスーパーコンピュータの性能を計測し、そのランキングを公表するプロジェクトである Top500 (<http://www.top500.org/>) の2010年11月現在のデータを参照した。