

参考資料 1

(ポスト「京」で重点的に取り組むべき
社会的・科学的課題についての検討委員会
(第1回)(2014.4.4)机上配布資料)

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 システムのあり方の調査研究
「アプリケーション分野」

目次

はじめに.....	1
1. 計算科学をめぐる背景.....	3
1.1 HPCI を用いた計算科学のこれまでの経緯と今後の展望.....	3
1.2 「京」による重点分野での研究の成果.....	3
1.3 次世代の HPCI 計画.....	4
2. 今後の計算科学が貢献し得る社会的課題.....	5
2.1 創薬・医療.....	5
2.2 総合防災.....	8
2.3 エネルギー・環境問題.....	13
2.4 社会経済予測.....	16
3. 分野連携による新しい科学の創出.....	18
3.1 基礎科学の連携と統一理解.....	18
3.2 ビッグデータの有効利用.....	24
3.3 大規模実験施設との連携.....	30
4. 各計算科学分野の社会的・科学的課題.....	32
4.1 生命科学.....	32
4.2 物質科学.....	34
4.3 地球科学.....	36
4.4 ものづくり.....	39
4.5 基礎物理.....	42
4.6 社会科学.....	50
おわりに ～計算科学の更なる発展に向けて～.....	51

はじめに

現代の科学技術における知識の獲得、発見には、スーパーコンピュータは必須となっている。同時に、スーパーコンピュータは一般市民の毎日の生活を陰で支えてもいる。わが国は現在、東日本大震災からの復興、福島原発事故の収束や環境浄化、エネルギー問題、少子高齢化、財政逼迫など山積する難題に直面している。スーパーコンピュータによる大規模シミュレーションは、科学技術を牽引するとともに、我々が直面しているこれらの困難な課題解決にも重要な役割を果たしている。日本社会を力強く支え、明日の時代を切り開くためにスーパーコンピュータは不可欠の基盤技術である。

国の主導で導入されるスーパーコンピュータにより得られる研究成果や研究手法は、科学技術の最先端を更に伸ばし、次の時代には、企業自身がスーパーコンピュータを導入することによる産業活性化に展開し得る。また、医療の現場や気象予報などの現業におけるスキルの大幅な向上につながる可能性がある。スーパーコンピュータで培った技術が、最終的に産業や社会の現場で利用されること、すなわち計算科学の下方展開の重要性は今後ますます増加し、シミュレーションや大規模データ処理の果たす役割は更に拡大し、その結果は社会に大きな恩恵をもたらすであろう。

このように社会に貢献する基盤技術としてのスーパーコンピュータが重要性を増すなかで、平成 23 年、HPCI 計画の推進にあたり国として今後の HPC 研究開発に必要な事項等を検討するため、文部科学省研究振興局長の諮問会議「HPCI 計画推進委員会」のもとに「今後の HPC 技術の研究開発のあり方を検討する WG」が設置された。そして、同 WG からの提言により「アプリケーション作業部会」と「コンピュータアーキテクチャ・コンパイラ・システムソフトウェア作業部会」が設置され、両者の緊密な連携のもと「計算科学ロードマップ白書」がとりまとめられた¹。同白書は、平成 24 年 3 月に公開されている。更に、作業部会での議論の更なる精査を目指し、文部科学省委託研究「将来の HPCI システムのあり方の調査研究 (アプリケーション分野)」が平成 24 年 7 月にスタートした。そこでは、計算科学が貢献し得る社会的課題・科学的ブレークスルーの課題抽出が行われ、その成果として新たな「計算科学ロードマップ」の取りまとめが行われてた。同ロードマップをまとめるにあたっては、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、演算性能だけではなく、解決すべき社会的課題・期待される科学的ブレークスルーのために必要となる計算機システム全体のバランスを踏まえた適切な性能について深い議論が行われてきた。

本文書は、現在取りまとめられている「計算科学ロードマップ」の概要版として、今後の計算科学が目指すところについて、5~10 年程度の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と、従来は異なる研究分野と見なされていた諸分野が有機的に結合することによって実現する新しい科学的課題について紹介する。なお、概要版で紹介する社会のおよび科学的課題の解決には、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の深化が必須である。詳細は「計算科学ロードマップ」の第 4 章に記載しているが、本概要版でも、第 4 章にて各分野における個々の研究課題の概要を示す。

¹ <http://www.open-supercomputer.org/workshop/sdhpc/>

なお、「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」が平成 25 年 6 月 25 日に公開した「今後の HPCI 計画推進の在り方について（中間報告）²⁾」では、スーパーコンピュータを先導するエクサスケールの計算機だけでなく、第二階層のスーパーコンピュータ群の必要性も言及されている。本書が示す大規模計算科学の可能性は、将来サイエンスとして何が必要かを純粋に議論して明らかにするものであり、決して最高性能のトップマシンだけを意識したものではない。

なお、第 2 章から 4 章にかけて、次世代に解決すべき課題を遂行するために必要なアプリケーション群について、どの程度の計算機資源が必要かを検討し、要求表としてまとめた。要求表には計算手法や現状のプログラムおよび実機を用いたプロファイルから見積もった実効演算性能（浮動小数点演算性能もしくは整数演算性能）や必要メモリ容量等の値を掲載した。これは一般的には実際の計算機の理論性能とは異なること、また将来に対する推定であることから数倍程度の変動は無視した推定であることに注意されたい。

本ロードマップ記述された内容は、平成 26 年 3 月 10 日時点のものであり、今後更に精査されていく予定である。最新の計算科学ロードマップについては、Web 上で随時公開³⁾してゆく。

²⁾ http://www.mext.go.jp/b_menu/shingi/chousa/shinkou/028/gaiyou/1337595.htm

³⁾ <http://hpci-aplfs.aics.riken.jp/>

1. 計算科学をめぐる背景

1.1 HPCI を用いた計算科学のこれまでの経緯と今後の展望

今日、スーパーコンピュータ等を用いた計算科学は、理論・実験と並ぶ科学技術の第 3 の手法として、最先端の科学技術や産業競争力の強化に不可欠な研究手法として欠くことのできないものとなっている。計算科学の発展により、我々は、自然現象や社会現象をモデル化し、シミュレート（計算）することにより、将来を予測することが可能となった。例えば、天気予報や地球温暖化予測等は、計算科学なしには実現できない。また、我々にとって、未踏の領域である基礎物理の解明にとっても、精緻な理論の検証や、理論を現実の複雑な系に適用する際にも計算科学が不可欠である。ヒッグス粒子の発見で著名な、欧州原子核研究機構が進めている大型ハドロン衝突型加速器 (Large Hadron Collider : LHC) は、巨大科学の成果と言えるものであるが、これも、計算科学の力なくしては機能しない。更に、遺伝情報や、経済・金融・交通動態の解析にも計算科学の力が必須となっている。

近年の飛躍的な計算機の性能向上にともない、計算科学の適用領域は深まり、また広がっている。1970 年代に最初のスーパーコンピュータが誕生した当初は、建築物の強度計算や、比較的単純な流体解析等、応用領域は限定されていたが、現在では多様な物質・材料の構造・物性および機能の解析や、遺伝子レベルおよび人体全体の解析が実施可能になりつつある。

このような状況下において、多様な分野の研究者・技術者に世界最高水準の計算環境を提供することで、さまざまな社会課題の解決や産業利用の加速につながる成果を創出することを目的に、理化学研究所の「京」と全国 9 大学の情報基盤センターが中核機関となり、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 (HPCI) が構築されている。

1.2 「京」による重点分野での研究の成果

「京」は HPCI の中核となるスーパーコンピュータである。この「京」の能力を最大限に活用して世界最高水準の研究成果を創出するとともに、その分野において計算科学技術推進体制を構築する取り組みを支援するため、2009 年に 5 つの戦略分野が設定され、重点的な取り組みが開始されている。

「京」は 2012 年秋から本格的に稼働しており、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、あるいは現象全体を対象とした計算が実現しつつある。

- 戦略分野 1 予測する生命科学・医療および創薬基盤：細胞レベルでの生命現象の精密な理解等、生命の本質を理解するための基礎研究に加え、医薬品の開発の大幅な加速や、個別化医療等の実現といった社会課題の解決のための基礎的知見を得るための研究が進められている。
- 戦略分野 2 新物質・エネルギー創成：物質・材料の機能やナノ構造デバイスの電子機能を、基本理論に基づき解明・予測するための研究が進められている。高温超伝導材

1 計算科学をめぐる背景

料や高効率熱電変換素子、燃料電池用触媒等の探索のための重要技術として期待されている。

- **戦略分野 3 防災・減災に資する地球変動予測**：地球規模の環境変動シミュレーションをより精密に行うための研究、集中豪雨の直前予測につながる研究が行われている。また地震や津波などの被害予測につながる研究が進められている。
- **戦略分野 4 次世代ものづくり**：先端的な流体機器やナノカーボンデバイスの設計・開発プロセスの大幅な高速化とコストダウンのためのシミュレーション技術、原子炉プラント丸ごとの耐震シミュレーションといった、ものづくりの高度化につながる研究が進められている。
- **戦略分野 5 物質と宇宙の起源と構造**：素粒子加速器実験やブラックホール、超新星爆発といった極限的天体現象の観測を通して、宇宙の起源・物質の起源やそれらを支配する法則を理解するためのシミュレーションによる研究が進められている。

1.3 次世代の HPCI 計画

今後も、スーパーコンピュータの処理能力は飛躍的な進歩を遂げると期待されているが、計算機の進化にともない、計算科学が活躍する領域はますます拡大し、社会のさまざまな課題や産業競争力に直結する成果が創出されると期待される。

このような状況を鑑み、わが国としても引き続き長期的な視点から戦略的に研究開発を推進することが必要であるとの考えのもと、次世代 HPCI 計画についての検討が進められている。

次世代の HPCI 計画では、従来にも増して計算科学からの社会貢献が重視されており、その認識のもと、以下のような基本合意が形成されている。

- 単にピーク性能の達成を誇るのではなく、HPCI を駆使して解決すべき社会的課題・期待される科学的ブレークスルーについて十分に検討・吟味のうえ、これを実現するためのシステムを構築する。
- 現時点で「京」などの HPCI を利用しているユーザーだけでなく、中長期的視野にたつて HPCI を必要とする可能性のある研究課題をできるだけ抽出していく。
- アプリケーションのタイプによっては、汎用マシンで計算するよりも、専用に設計されたマシンを活用するほうがはるかに高速かつ効率的に計算できることが知られている。計算資源の有効利用のためには、汎用のアーキテクチャに加え、複数のアーキテクチャの導入を想定する。
- HPCI 技術を必要とするアプリケーションとして、大規模シミュレーションだけに限定せず、各分野で進行中の大型実験（観測）施設などで得られる大規模データをいかに効率よく解析していくかについても考察する。

2. 今後の計算科学が貢献し得る社会的課題

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、現在の社会が抱えるさまざまな課題の解決に貢献し得る。ここでは、「創薬・医療」「総合防災」「エネルギー・環境問題」「社会経済予測」の4つの分野における社会的課題に対して、今後の計算科学により実現を目指す具体的な貢献について記述する。

社会的課題	具体的貢献
創薬・医療	画期的創薬・医療技術の創出
総合防災	科学的知見に基づく災害予測のシステム化
エネルギー・環境問題	エネルギー技術と環境との調和
社会経済予測	社会経済活動に柔軟に対応する予測システム

2.1 創薬・医療

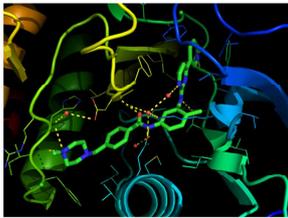
わが国はこれから急速な高齢化社会を迎え、国民の健康の増進はきわめて重要な国家的課題となる。健康の増進に資する画期的創薬・医療技術の創出には、その基盤として人体等における生命現象の理解が不可欠である。しかし、生命現象はあまりに多くの要素が絡み合って複雑に関係している現象であり、遺伝情報などの大規模データの解析、生命科学と物質科学との連携によるシミュレーション、分子から細胞・臓器・脳・全身スケールに至るマルチスケールシミュレーションとその医療応用などが不可欠となる。具体的には、ゲノム情報を超高速に読み取る次世代の DNA シークエンサーにより得られる膨大な個人ゲノム情報などを用いて、複数の遺伝子が連携する遺伝子ネットワーク等を解析することで、がんなどの複合因子が関わる疾患の原因を明らかにし、個人の遺伝情報に基づき患者個人に最適な治療法を提供するテーラーメイド医療の実現を図る。また、物質科学等で利用されてきた信頼性の高いシミュレーション手法を用いてタンパク質・薬剤結合予測を行うとともに、細胞・ウイルスまるごとの環境下でのシミュレーションを行うことで、新薬開発に必要なコストを大幅に低減、期間を大幅に短縮する。これらのシミュレーションは、生体分子を応用した新しい機能性を持つナノ分子材料の開発への展開も目指している。更に、分子から細胞・臓器・脳・全身に至るマルチスケールのシミュレーションは、例えば、心筋梗塞・脳梗塞などにおける血液中での血栓形成の理解など、複雑な疾患機構の解明に役立ち、患者への負担が小さい低侵襲治療やそれに必要な医療機器開発による患者の生活の質（Quality of Life : QOL）の向上、更には早期社会復帰による社会の活性化、医療費の削減等の効果へとつながる。

今後の計算科学が貢献しうる社会的課題

創薬・医療
画期的創薬・医療技術の創出

従来の研究

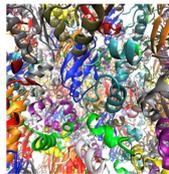
- 小規模なデータ処理
- 個別分野において固有のスケールが進展
- 単純な脳回路等のシンプルなモデル



タンパク質と薬の結合

今後の計算科学からのアプローチ

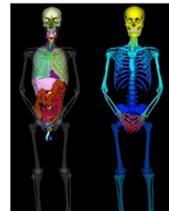
- DNAシーケンサーから得られる大規模データによる遺伝子ネットワーク解析
- 細胞環境下での創薬
- 幅広い時空間にまたがる階層でのモデルの連成
- モデルの大規模化・高精細化
- 詳細な脳神経回路シミュレーションとデータ同化



細胞環境下での創薬



臓器の精密シミュレーション(京)



全身スケールシミュレーション

社会への貢献

- 個人の遺伝情報に基づき患者個々人に最適な治療法を提供するテーラーメイド医療の実現
- 新薬開発の短期化、低コスト化
- 負担が小さい治療の実現による患者の生活の質の向上、早期社会復帰による社会の活性化、医療費の低減

今後のスーパーコンピュータがもたらす莫大な計算能力が、神経系や細胞の詳細なシミュレーション、幅広い時空間にまたがるシミュレーション、そしてそれらのリアルタイムに近いデータ同化⁴などさまざまな面で生命分野の発展に大きく寄与することは間違いなく、ひいては画期的創薬・医療技術創出の重要な科学基盤となり得るものである。

創薬・医療分野において今後、必要となる計算機性能を下表に示す。

⁴ 異なった観測・実験データと数値モデルを高度に融合する方法の一つ。

計算科学ロードマップ 概要

課題	要求性能 (PFLOPS)	要求メモリ バンド幅 (PB/s)	メモリ量/ ケース (PB)	ストレージ量/ ケース (PB)	計算時間/ ケース (hour)	ケース数	総演算量 (EFLOP)	概要と計算手法	問題規模	備考
個人ゲノム解析	0.0054	0.0001	1.6	0.1	0.7	200000	2700	シーケンスマッピング	がんゲノム解析200,000人分のマッピングおよび変異同定	1人分の解析を1ケースとした。入力データを分割することで、細かい単位での実行、拠点をまたいだ実行も可能。整数演算中心のため「総演算量」はInstruction数とした。総浮動小数点演算量は45.864EFLOPとなる。
遺伝子ネットワーク解析	25.0	89.0	0.08	0.016	0.34	26000	780000	ベイジアンネットワークおよびL1正則化法	4万転写物×26,000データセット・280万アレイ	
創薬などMD・自由エネルギー計算	1000	400	0.0001	0	0.0012	1000000	4300000	全原子分子動力学シミュレーション	ケース数:10万化合物×10標的蛋白質(10万原子程度)	B/F=0.4. 数百から数千ケース同時に実行することを想定している。実行時に必要な全メモリ量、各ケースの実際の実算時間は、表の値の数百~数千倍となる。メモリ量/ケースは100ノード実行時を想定。
細胞環境・ウィルス	490	49	0.2	1.2	48	10	850000	全原子/粗視化分子動力学シミュレーション	~1億粒子	B/F=0.1
細胞内信号伝達経路シミュレーション	42	100	10	10	240	100	3600000	一分子粒度細胞シミュレーション(格子法)	1000 から 10,000 細胞構成される細胞集団	格子法・整数系の演算性能を要求。ケース数は最低10回、100回程度が望ましいため100回とした。
高精度創薬	0.83	0.1	1	0.001	1	100	300	薬品とタンパク質間相互作用の量子化学計算	水和条件下、500残基タンパク質+リガンド	ファイルI/Oは終了時に1TBを1秒で書き出すことを想定し、1TB/s必要とした
バイオデバイス設計	1.1	0.2	1	0.001	1	100	400	200-500残基程度のタンパク質の分光計算	電子軌道数10万超	ファイルI/Oは終了時に1TBを1秒で書き出すことを想定し、1TB/s必要とした
血流シミュレーション	400	64	1	1	170	10	2500000	差分法、準陽解法(構造・流体・生化学連成シミュレーション)	100mm長×100um径、0.1um格子、流速10 ⁻² m/s、解像度1us、10秒	
超音波シミュレーション	380	460	540	640	240	10	3300000	差分法、陽解法(音波・熱シミュレーション)	400mm ³ の計算領域を軟組織とマイクロカプセル干渉音場を捉えるため、225兆点の格子と時間ステップ数として1459200ステップが必要である。また、1格子点あたり演算数1000程度となる。	
脳神経系シミュレーション(ヒト全脳簡約モデル)	※7	※7.6	※56	※3600	0.28	100	700	単一コンパートメントIFモデル シナプス可塑性・通信	1000億ニューロン ニューロンあたり1万シナプス 10 ⁵ step	ネットワークのボトルネックはレイテンシー
脳神経系シミュレーション・昆虫全脳詳細モデル 神経回路パラメータ推定・生理実験とシミュレーションの通信	※71	※60	※0.2	※20	28	20	1400000	マルチコンパートメントH-H(局所クラシカルニコルソン)シナプス通信 進化的アルゴリズム	1000ニューロン 10 ⁶ 遺伝子 100世代	100MB/S程度の外部との通信も想定

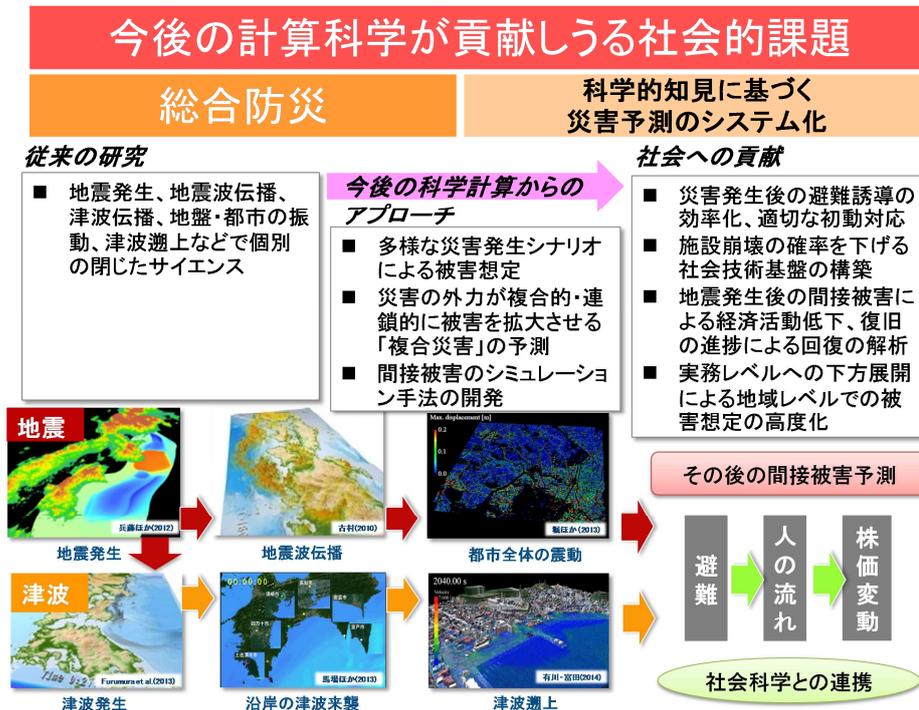
※印の値は未だ精査中である。より精度の高い数値は Web で随時公開する。

2 今後の計算科学が貢献し得る社会的課題

2.2 総合防災

(1) 地震・津波防災

2011年3月11日にわが国を襲った東日本大震災以降、防災・減災がわが国の喫緊の課題であることは言うまでもなく、南海トラフの巨大地震や首都直下地震等、大地震の備えを不断に行うことはわが国に課せられた宿命である。合理的に備えるためには精度の高い被害想定が必要であり、合理的・科学的な地震災害の想定・予測が必要とされているが、大規模数値計算による地震・津波とそれにともなう災害のシミュレーションはこのための切り札となり得る。



現時点では、地震・津波を直接的に予測することは難しいと考えられるが、計算科学を用いた大規模数値計算によって、地震・津波などの災害発生のシナリオから多様な被害想定を行うことや、災害の外力が複合的・連鎖的に被害を拡大させる「複合災害」を予測することなどは可能である。これらは、災害発生後の避難誘導の効率化や、地震の発生直後の適切な初動対応のための準備に直接役立つ。また、災害による被害を予測することで、建築施設や沿岸の防波堤等の強度向上や、崩壊に至る確率を少しでも減らすような社会技術基盤の構築に役立つ。具体的には、最先端の計算機とそれを生かす計算科学技術によって、1000を超える多様な災害発生シナリオとそれによる被害想定が計算できるため、これらをデータベース化して直ちに利用できる体制整備を図る。一方で、グローバル化が進む経済活動の発展を考えると、将来の地震災害は、構造物や都市の被害という直接的な被害に加えて、この被害がもたらす都市や地域の経済活動の低下といった間接的な被害

害をより深刻なものとするのが指摘されている。このため、地震発生直後の経済活動の低下と、被害からの復旧の進捗による経済活動の回復を解析できる間接被害のシミュレーション手法の開発も重要な課題と言える。

以上のような地震発生シナリオから被害想定に至る一連のシミュレーションは、わが国の危機管理にとってきわめて重要なものである。一方で、自然の中の複雑な人間活動を丸ごと計算機で追跡することはきわめて困難であり、その時代の最先端のスーパーコンピュータ上で、継続的に解析手法・モデルを高度化しつつ開発を行うべきである。それと同時に、5年、10年単位でのスーパーコンピュータの高速化に応じて、一時代前に最先端スーパーコンピュータ上で開発したシミュレーションツールを個別の地域を対象とした研究機関や大学での研究レベルや実務レベルへと順次下方展開していくことも重要である。これによって、国レベルでの被害想定はもとより、各地方自治体や企業レベルでの被害想定が継続的に高度化され、信頼性を高めていく流れができる。

課題	要求性能 (PFLOPS)	要求メモリ帯幅 (PB/s)	メモリ量/ケース (PB)	ストレージ量/ケース (PB)	計算時間/ケース (hour)	ケース数	総演算量 (EFLOP)	概要と計算手法	問題規模	備考
防災連携シミュレーション(地震直後の被害状況予測) 内訳は以下(1)~(6)	7	15	0.1	9.00	3	310000				地震発生は1領域1000シナリオを5領域行う。各領域について1000シナリオ中、観測に基づき20シナリオを選び、波動伝播計算を行う。一方、地震動増幅や建物震動・津波遡上については、地盤構造や建物劣化、海底地形の不確かさを考慮するために数十ケース計算するとともに、複数の都道府県の都市(例えば南海トラフ地震の場合に、東海・近畿・四国・九州の4都市)を一度に計算する必要を考慮すると、結果的に各領域で1000ケース程度は計算が必要。アプリの最大BF値=8.0
(1) 地震発生			0.00086	0.00086		5000	48	境界積分法による地震サイクル計算	面素数10 ⁷	アプリの最大BF値=4
(2) 波動伝播			0.1	0.5		100	1400	差分法による弾性波動伝播計算	1200x1000x200Km ³ (125mx125mx62.5m格子)、ステップ数24万回	アプリの最大BF値=2.14、京での実測1.4。1ケースあたり演算量14EFLOP(東北大調べ)。東大前田先生による新バージョンを京でも主に利用。そちらは20EFLOP。
(3) 地震動増幅			0.01	4		5000	130000	有限要素法による地震波動計算	30億節点(300x250x10km ³)	アプリの最大BF値=8.00
(4) 地震動増幅			0.01	4		5000	130000	有限要素法による地震波動計算	30億節点(30x25x1km ³)	アプリの最大BF値=8.00
(5) 建物震動			0.05	0.05		5000	500		構造物100万棟	BF値=0.26(実測値)。メモリ転送量はBF値と演算量から逆算。BF値はキャッシュに載るので小さい。演算量はプロファイルからの外挿と一致、メモリ転送量はプロファイルからの外挿
(6) 津波遡上			0.002	0.5		5000	50000	Navier-Stokes方程式複数モデル(静水圧近似、非静水圧、VOF法)計算	3x3x0.08Km(1都市領域を1m格子幅から1400x1100x10Km(5.4Km格子)の複合格子、7都市同時計算、72万ステップ	演算量、メモリ転送量、メモリ量は実測値からの外挿。BF値=10(実測値)
避難誘導シミュレーション	3.3	0.28	0.3	0.006	1	5000	60000	マルチエージェントモデルによる行動シミュレーション	300,000 agents, 18,000 steps (1 hour simulation), 1,000 Monte-Carlo members	演算量は命令数である。浮動小数演算は命令数のおよそ1/40。演算量、メモリアクセス量、メモリ使用量は京でのプロファイルから外挿

(注：地震発生から津波遡上は防災連携シミュレーションの内訳である)

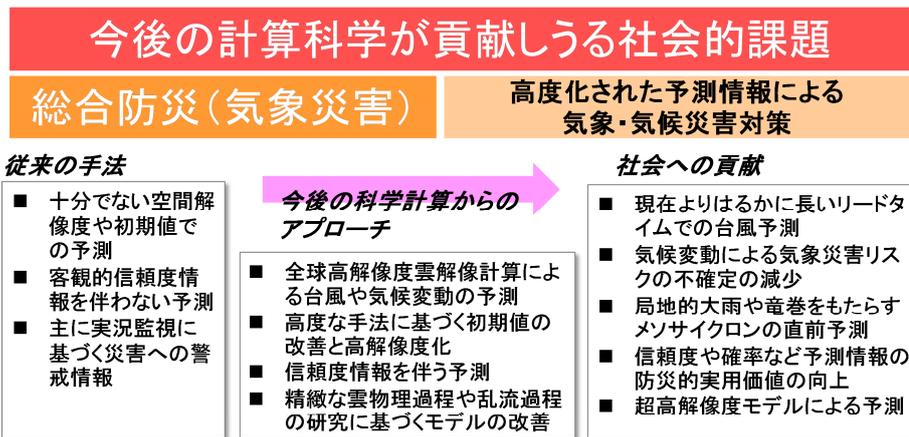
2 今後の計算科学が貢献し得る社会的課題

(2) 気象災害

我が国は、集中豪雨などさまざまな気象災害にも見舞われやすい。国土の約7割を山地・丘陵地が占めるため土石流や地すべり・崖崩れが起きるリスクが大きい一方、人口や社会資産が平野部に集中しているため、洪水や高潮の危険にもさらされており、高い風水害リスクを抱えている。気象災害をもたらす現象は、比較的時間スケールの短い台風や集中豪雨、更には竜巻などの局地的な顕著現象だけではなく、積雪や干ばつなどより長い時間スケールの現象もある。これらによってもたらされる経済損失の軽減には、数十分先から数ヶ月先と、幅広い時間スケールの予測が不可欠である。これらの気象・気候現象が地球温暖化の進行によってどのように変化するのか予測を行い、またその精度を上げることは、防災対策の将来展望を見据えるうえで、我が国にとって喫緊の課題と言えよう。また、環境問題に関しては、現在、PM2.5のような越境大気汚染が深刻化している。これらの課題に取り組むため、その時代の最高性能の計算機を利用することにより最先端の研究開発をオールジャパンで推進していくことが、将来の減災のために重要である。

このような現状を踏まえて、気象災害の減災のために次世代スパコンで行うべき研究課題として、より高度化された初期値作成手法に基づく顕著な気象現象の予測研究、全球高解像度雲解像計算による気候変動予測研究、精緻な雲物理過程や乱流過程についての研究が挙げられよう。

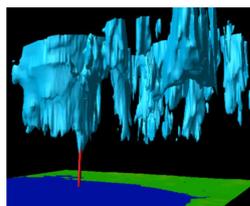
はじめに、数値モデルによる気象予測で大きな課題は、初期値の精度の問題である。短期予報では初期条件が支配的であり、4次元変分法やアンサンブルカルマンフィルターなどデータ同化手法の研究は、次の時代の計算機環境での大きなターゲットとなる。



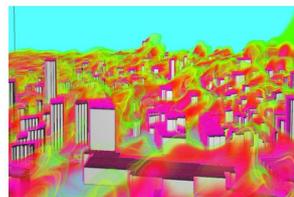
図の提供: AIGS 吉田龍二(左), 気象研究所 益子渉(中央), 東北大学 Guixing Chen(右)



台風予測、気候変動



局地的大雨や竜巻



超高解像度シミュレーション

次に、気象・気候に用いられる数値モデルの空間解像度は未だ十分ではない。数値モデルでは、細かい現象は何らかの粗視化による近似が行われるが、それが予測の不確実性の大きな原因となっている場合がある。歴史的には、積雲対流を粗視化してきた。この手法は、中緯度の総観規模現象を対象とする予測では十分に有効であるが、気象災害に直接つながる顕著現象を引き起こす積乱雲を直接表現するためには適用できない。このため、気象災害を引き起こす台風などの顕著現象の将来予測を行うためには、積雲対流を粗視化せずに直接表現する全球高解像度雲解像計算による気候変動予測を行うことが必要となる。

また、積雲対流だけでなく、これまで粗視化されてきた雲粒・雨滴の物理そのものや、大気境界層での乱流についても、より精緻化した数値モデルの開発・検証が急ピッチで進められている。

上記の課題に対する今後の期待は大きい。京や次世代スパコンにおける気象・気候分野での先駆的な試みの成果は、必ず、将来の気象・気候予測へ寄与する。例えば、2002年の地球シミュレータの登場により、気候変動に伴う台風の強度や強雨の出現頻度についてのより信頼性の高い情報が得られるようになった。これらは IPCC 報告書に直接的に寄与するとともに、気象庁の現業数値予報システムの開発にも重要な技術情報を提供した。

次世代スパコンでは、京での大規模計算が、多くの事例で行えるようになることが期待され、現在よりはるかに長いリードタイムでの台風予測や、局地的大雨や竜巻をもたらすメソサイクロンの直前予測などについての本格的な実証研究が可能となる。ストームスケール気象災害予測の実用化には、高頻度高密度の観測データをいかに同化するかという技術的な問題についての研究の進展とともに、そのようなデータを観測しつつ迅速に収集するシステムの構築が不可欠であり、ビッグデータの有効利用が一つの鍵となる。更に、アンサンブル予報によるあらゆるスケールでの予測誤差の定量評価は、数値予報による予測情報の防災的実用価値を大幅に高める。現在は主として実況監視に基づいている災害への警戒情報を、リードタイムに応じた確率的予測情報や最悪シナリオの提示で補えれば、コストとリスクの大きさに基づいた防災対策が可能となり、気象災害に伴う被害を大きく軽減できる可能性がある。

今後これらのテーマを遂行するのに必要な計算機要求は以下にまとめてある。

2 今後の計算科学が貢献し得る社会的課題

課題	要求性能 (PFLO PS)	要求メモリ バンド幅 (PB/s)	メモリ量/ケース (PB)	ストレージ量/ケース (PB)	計算時間/ケース (hour)	ケース数	総演算量 (EFLOP)	概要と計算手法	問題規模	備考
高解像度気象予報 (全球)	130	360	3	58	340	1	150000	モデル名NICAM, 有限体積法	格子点数: 1兆 (水平解像度220m, 鉛直94層)、ステップ数: 520万 (dt=1秒、2ヶ月)	10万ノードを仮定(ノードあたり隣接通信1GB/s)
高解像度気象予報 (領域)	33	※33	0.09	0.3	0.5	2700	160000	モデル名ASUCA, 有限体積法	格子点数: 7500x7500x500、ステップ数: 13万 (dt=1秒、36時間)	演算量、メモリ量に関しては、SR1600でのプロファイルを元に外挿。メモリアクセス量は、B/F値が1と仮定して見積もった。出力は、25変数は10分毎に出力する。通信に関しては、22500ノードを仮定(ノードあたり隣接通信40GB/s)
局所的・集中的大雨、熱帯気象の高度予測	220	270	0.7	5	580	2	900000	大気モデル.NICAM(有限体積法)、アンサンブルデータ同化.LETKF	水平解像度3.5km、鉛直100層、1000アンサンブルメンバー、3時間おきの同化サイクル、2ヶ月積分	10万ノードを仮定(大気モデルのノードあたり隣接通信1GB/s) 演算量、メモリ転送量、メモリ使用量は、京でのプロファイルを元に外挿

※印の値は未だ精査中である。より精度の高い数値は Web で随時公開する。

2.3 エネルギー・環境問題

エネルギー資源が少ないわが国が持続的に発展するためには、エネルギー利用技術を高めて行くことで低炭素社会・省エネルギー社会を目指していかなければならない。そのためにはエネルギーのライフサイクルである創成、変換・貯蔵・伝送、利用の各段階を環境と調和のとれた形で再検討していくことが必要である。

エネルギー創成の観点からは、再生可能エネルギー（自然エネルギー）のより効率的な利用が第一の課題であり、太陽光発電や風力発電、バイオマス利用などに大きな期待が寄せられている。例えば、太陽光発電技術の鍵となる太陽電池・人工光合成素子や、熱を電気に変換する熱電変換素子などのエネルギー変換効率を高めるためには、素子全体を構成する複合材料のサブミクロンオーダーの構造とエネルギー変換効率との相関の理解、使用される材料性能の劣化機構の解明と予測が必要である。そのためには量子力学に基づく有機・無機材料の大規模な電子状態計算など計算科学の手法が必要不可欠となる。また、自然エネルギーを用いて安定的な電力供給を行うためには、事前に立地条件の環境アセスメントを行い、更には、実際の運用時に有効な発電予測技術を確立しておかねばならない。太陽光発電・風力発電、アセスメント・予測、のいずれの組み合わせに対しても、現在の領域気候モデル・天気予報モデルよりも高精度・高分解能な気象モデルが必要となる。また、長期的代替エネルギー源のもう一つの候補である核融合炉を科学的・技術的に実証するためには、燃料プラズマの閉じ込め性能を左右するプラズマ乱流現象の解明が重要な課題であるが、これを実機試験で評価することが難しく、計算科学が必要不可欠である。

今後の計算科学が貢献しうる社会的課題

エネルギー・環境問題

エネルギー技術と環境との調和

従来の研究

- 物質科学分野、ものづくり分野、気象・気候分野が独立して研究
- 理論・実験中心での研究



高精細な風況評価による風力発電サイトの適切な立地

今後の科学計算からのアプローチ

- 複合材料の構造とエネルギー変換効率との相関の理解、材料性能の劣化機構の解明と予測
- 高精度・高分解能な気象モデル
- プラズマ乱流現象の解明
- 電気化学過程の解明や、触媒や電極として用いられる希少元素の代替物の探索
- シミュレーションによるものづくり
- 高信頼性の気候システムモデルによる現状把握と予測

社会への貢献

- 安定的、高効率な再生可能エネルギーの創成
- 核融合炉の科学的・技術的実証
- 二次電池や燃料電池など電力を効率的に貯蔵し取り出す技術の開発
- 電子デバイスや輸送機器の省エネルギー化
- エネルギー利用による地球環境への影響の監視



自動車研究AIGS 協カススキ(株)
自動車のフルスケール詳細空力解析。
自動車の燃費向上に貢献。

2 今後の計算科学が貢献し得る社会的課題

エネルギー変換・貯蔵・伝達の観点では、2次電池や燃料電池など電力を効率的に貯蔵し取り出す技術の開発が不可欠であり、電気化学過程の解明や、触媒や電極として用いられる希少元素の代替物の探索において、大規模シミュレーションによる物質設計が主流となりつつある。

一方、エネルギー利用の観点では、「情報=ソフト」を動かす半導体等の電子デバイスと、「物体=ハード」を動かす自動車や航空機などの輸送機器のエネルギー消費量をいかに減らしていくかという観点が重要である。そのためには、従来の理論・実験ベースの開発プロセスから、数値シミュレーションなどの計算科学に基づく革新的開発プロセスやそれを駆使した新たな発想への転換が必要である。計算科学を開発に適用することで、これまで未解明であった複雑な物理現象を解明し、物理メカニズムを把握したうえでの製品開発や、試行錯誤に基づいて決定していた種々の設計パラメータを理論的に求める最適設計技術を活用することが可能となる。

低炭素社会・省エネルギー社会を実現した場合においても、我々のエネルギー利用は地球環境に多かれ少なかれ影響を与えるであろう。すでに国際問題となっている地球温暖化などに対する対策として、生物・化学過程を含む大気海洋結合循環モデルなどの複合的要因を取り込みながら現状の地球環境をより正確に把握し、将来的な予測へつなげることが必要である。

これまで、物質科学分野、ものづくり分野、気象・気候分野が独立して研究を行ってきた。しかし、対象は異なっても数理構造が同一ならシミュレーション技術は共有できる。この視点に立ち、個々の基礎理論の発展とモデルの高解像度化を進めると同時に、多くの分野に共通する手法の共有や他分野における数理モデルに学びながらシミュレーション技術・データ同化技術の向上を図る。この実践を通してエネルギーを作り、変換し、使うという一連のサイクルを一つの大きな科学として総合的に捉えることが可能となり、地球規模のエネルギー・環境問題に貢献することができる。

エネルギー・環境分野において今後、必要となる計算機性能を下表に示す。

課題	要求性能 (PFLOPS)	要求メモリ帯幅 (PB/s)	メモリ量/ケース (PB)	ストレージ量/ケース (PB)	計算時間/ケース (hour)	ケース数	総演算量 (EFLOP)	概要と計算手法	問題規模	備考
電子材料の電子状態計算・手法1	100	20	5	15	240	10	860000	第一原理分子動力学計算	原子数: 1億、時間ステップ数 10^4	
電子材料の電子状態計算・手法2	100	10	1.2	12	96	10	350000	実空間基底 $O(N^3)$ 第一原理分子動力学計算	原子数: 10万、100ステップ	20SCF × 100ステップ
強相関電子系の理解	1900	2700	0.2		8	100	5500000	変分モンテカルロ法	原子数1万	メモリ使用量はMPIプロセス数に比例し最大使用量を記載した
プラズマ乱流計算・マルチスケール乱流	100	200	0.5	0.1	24	50	430000	ホルツマン方程式の5次元計算(スペクトル法+差分法)	10^{12} 格子、 10^6 ステップ	
プラズマ乱流計算・大域的非常乱流	100	200	0.5	1	170	10	610000	ホルツマン方程式の5次元計算(差分法)	10^{12} 格子、 10^7 ステップ	
熱流体シミュレーション(自動車、実際の設計、最適化問題)	110	230	0.04	4	1	100	410000	Re= $10^6 \sim 10^7$ のLES流体計算、パラメータスタディ、100ケースを4日	10^{10} 格子	BF=2として計算
熱流体シミュレーション(自動車、ハイエンドベンチマーク)	120	230	0.5	48	24	10	100000	Re= $10^6 \sim 10^7$ のLES流体計算、ストロングスケール	格子点数: 10^{12}	構造格子でBF=2、1,000タイムスライスを30分で出力と想定
風力発電立地条件アセスメント	29	89	0.01	0.07	72	100	760000	高解像度LES流体計算(差分法)	3300x3300x300格子点(30x30x10m解像度)、123万ステップ(dt=0.21秒、72時間、スピンアップ24時間含)	1立地のアセスメントに約100ケース(200日)必要。これを立地ごとに行うことが必要。
近未来地球環境予測システム	56.00	110.0	0.6	80	600	1	120000	モデル名MIROC-ESM	格子点数: 2000x1000x200、ステップ数: 5300万(dt=60秒、100年)、100アンサンブル同時実行	計算の大半を占める大気モデルのみで見積もり。100ケース全体が1ヶ月で計算完了することが必要。ネットワークは1000ノードを仮定(ノードあたり大域通信1TB/s)演算量、メモリ転送量、メモリ使用量は、京でのプロファイルを元に外挿

2 今後の計算科学が貢献し得る社会的課題

2.4 社会経済予測

社会経済現象は人間自身の行動の結果であるにもかかわらず、予測が困難であることが多い。これは、構成員の数が多く、また一人一人の持つ情報や行動が限られているためである。我々の社会経済は、交通・電力・上下水道・ガス・通信などの広域ネットワーク、家族・法人・自治・国家・政治といった社会集団、更に社会システムを前提として営まれる農林水産・工業およびそれらの産業が相互に関連する生産システム、商業・金融といった経済システムなどの集合体として形成される。これまで、社会経済現象の予測は個々のシステムに細分化して発展してきたが、これらは独立な事象では決してなく、相互に密接に連携している。そこでさまざまな社会課題を解決するためには、我々人間の社会経済活動をエージェント集団としてとらえ、それらを既存の物理的シミュレーションの手法と融合していくことが必要である。更に社会経済活動だけではなく、気象天候や地震・火山噴火といった地球物理的事象の予測との連携も目指している。



社会経済現象には、自然現象における物理法則に匹敵するような客観性・信頼性を持つ基本法則は確立されていないのが現状である。このため社会経済予測に際しては、現実の現象を精査し、実際の現象の多様性に匹敵する客観的なシミュレーションモデルを模索し続ける必要がある。このため自然現象以上に、現象を不断につぶさに見据えつつ予測モデルを調整し続ける必要がある。こうした緻密なデータ収集・解析を大規模に遂行し続けることが可能となったのは、コンピュータとネットワークとが発展し、社会経済データが蓄積されるようになったことによるものであり、今日ではこうした解析はビッグデータのマ

イニングとして日常的な手法となっている。

一方、経済変動がなぜ生じるのかを理解するため、経済活動の個々の主体をモデル化したエージェントを使った理論研究が進められており、データマイニングにより発見された諸現象に対して、現実の多様性に負けない表現力を持ったエージェントモデルが開発されつつある。こうした研究によって、現実の現象から諸データを柔軟にモデルパラメータに同化させ続けることにより、社会経済予測を実現するシミュレーションモデルが実現しつつある。

今後の計算科学により、種々のモデルを社会の多様な課題に柔軟に対応させ、現在までのデータに基づいて、一瞬先から遠い未来までの予測を行うことができるシステムの実現を目指している。

社会経済分野において今後、必要となる計算機性能を下表に示す。

課題	要求性能 (PFLOPS)	要求メモリ帯幅 (PB/s)	メモリ量/ケース (PB)	ストレージ量/ケース (PB)	計算時間/ケース (hour)	ケース数	総演算量 (EFLOP)	概要と計算手法	問題規模	備考
自動車交通流のリアルタイムシミュレーション	1000	※ 100	※ 0.00011	0.001	0.000000028	1000	0.1	地球上の全自動車交通規模 (10億台、道路総延長3400万 Km)、エージェントモデルによるシミュレーション (実際に計算対象となる稼働している車の台数は 10^8 台と推定)	10^8 台 \times 10^3 演算 \times 10^3 step \times 10^3 ケース (10秒分のシミュレーション) これを0.1 secで計算する	要求ストレージおよび総演算量は1日あたり、とする。一台あたり 10^3 FLOPと推定。
株式取引所ルールの最適化	2100	0.0001	0.00000001		0.0024	10000	180000	1取引所の1000銘柄について、1日分の取引をトレーダーエージェントモデルでモンテカルロシミュレーション	総演算量 5時間 \times 3600秒/時間 \times 1000 注文機会/秒 \times 10^4 演算/注文機会 \times 10 トレーダー \times 10^4 サンプル \times 10^3 銘柄 = 1.8×10^{19} 演算 これを24hで 10^4 ケース計算する	整数演算が中心 「要求性能」「総演算量」はインストラクション数

※印の値は未だ精査中である。より精度の高い数値は Web で随時公開する。