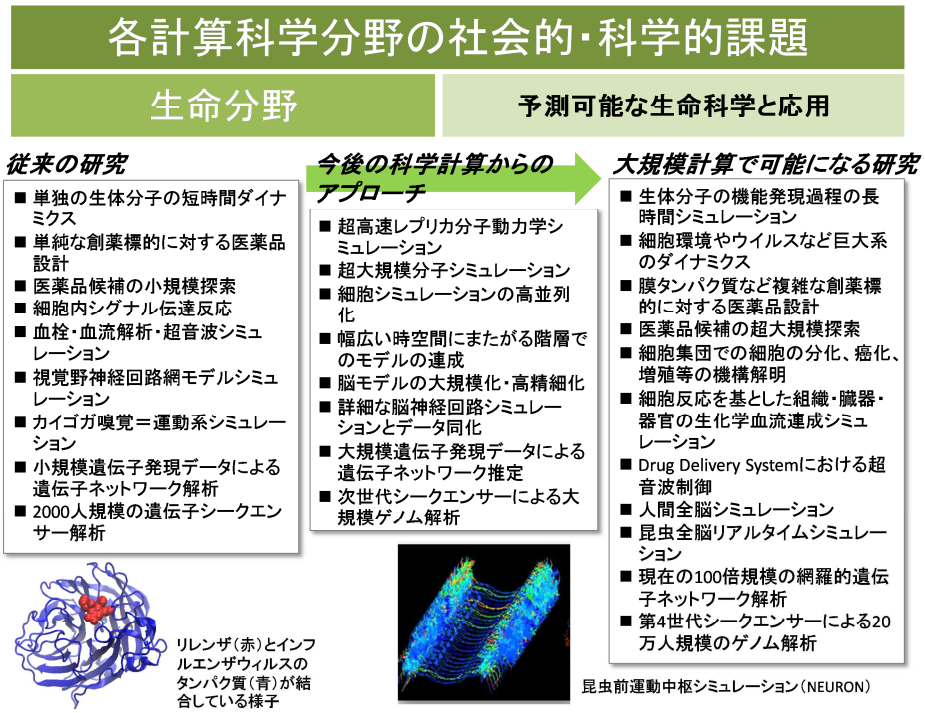
4. 各計算科学分野の社会的・科学的課題

本概要版では、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した。ここで紹介した社会的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が必須である。その詳細は「計算科学ロードマップ」本編の 4 章に記載するが、ここでは、現在の研究と計算機の進歩で可能になる新たな研究、今後必要となる計算機性能への要求を参考として示す。

なお、ここで示す計算機性能への要求は、9 月末日での見積もりである。未だ精査の余地があり、最終版では、より精度の高い数値を記載する予定である。

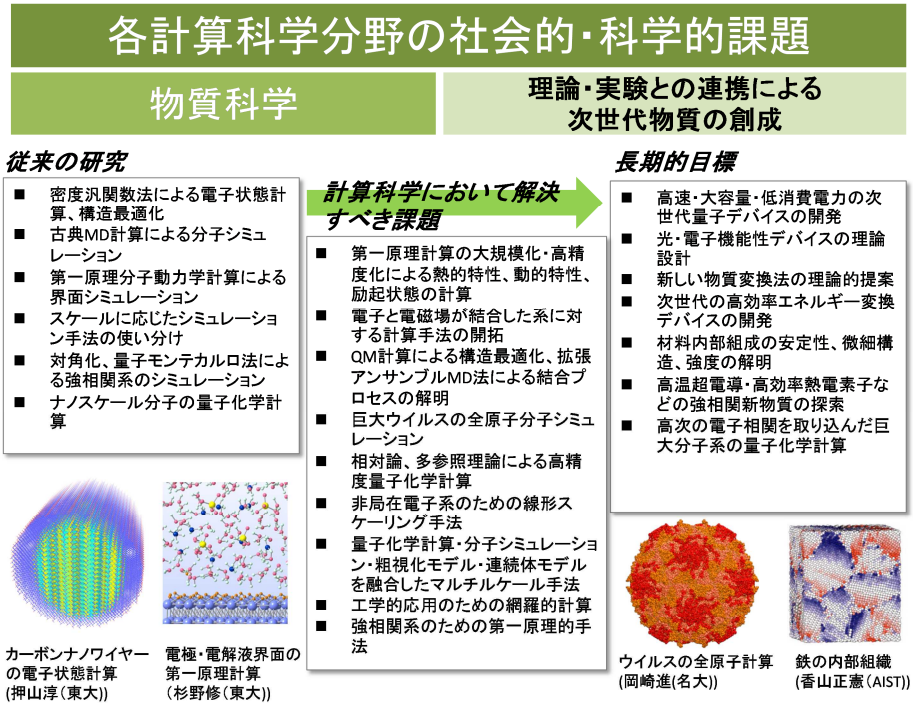
4.1　生命科学



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
生体分子機能解析	29	12	0.0084	1.2	240	10	250000	分子動力学計算(全原子(代表),QM/MM,粗視化MDなど)	対象：100万原子,100レプリカ	サブマイクロ秒以下のネットワークレイテンシが必要。メモリ量/ケースは10万ノード実行を想定。
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
創薬などMD・自由エネルギー計算	1000	400	0.0001		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x10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ので，実行時に必要な全メモリ量，各ケースの実際の実計算時間は，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 細胞で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。
細胞内信号伝達経路シミュレーション	420	0.010	0.001	0.001	240	100	36000000	一分子粒度細胞シミュレーション（粒子法）	グリーン関数反応動力学法·百万分子程度	共通·低ネットワークレイテンシを要求
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x100um径，0.1um格子，流速10^−2m/s，解像度1us，10秒	
超音波シミュレーション	380	460	54	64	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 10^5step	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・ヒト全脳詳細モデル	71	78	250	25000	39	1	10000	マルチコンパートメントH-H(局所クランクニコルソン） シナプス通信	1000億ニューロンニューロンあたり1万シナプス 10^5step	ストレージ量は最大想定　ネットワークはレイテンシーの影響も大きいと予測
脳神経系シミュレーション・昆虫脳全脳詳細モデル リアルタイム	71	60	0.002	0.2	0.028	100	720	マルチコンパートメントH-H(局所クランクニコルソン） シナプス通信	100万ニューロンニューロン（10000コンパートメント）あたり500シナプス	通信パターンの設計に工夫の余地がある
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	71	60	0.2	20	28	10	72000	マルチコンパートメントH-H(局所クランクニコルソン） 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	通信パターンの設計に工夫の余地がある
脳神経系シミュレーション・昆虫全脳詳細モデル生理実験とシミュレーションの通信	71	60	0.2	20	28	10	72000	マルチコンパートメントH-H(局所クランクニコルソン） 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	1OOMB/S程度の外部との通信も想定
遺伝子ネットワーク解析	2900	1500	0.08	0.016	0.34	26000	94000000	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	

※ 本見積もりは、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。

4.2　物質科学


各計算科学分野の社会的･科学的課題
物質科学
理論･実験との連携による
次世代物質の創成
従来の研究
■ 密度汎関数法による電子状態計算、構造最適化
■ 古典MD計算による分子シミュレーション
■ 第一原理分子動力学計算による界面シミュレーション
■ スケールに応じたシミュレーション手法の使い分け
■ 対角化、量子モンテカルロ法による強相関系のシミュレーション
■ ナノスケール分子の量子化学計算
計算科学において解決すべき課題
■ 第一原理計算の大規模化･高精度化による熱的特性、動的特性、励起状態の計算
■ 電子と電磁場が結合した系に対する計算手法の開拓
■ QM計算による構造最適化、拡張アンサンブルMD法による結合プロセスの解明
■ 巨大ウイルスの全原子分子シミュレーション
■ 相対論、多参照理論による高精度量子化学計算
■ 非局在電子系のための線形スケーリング手法
■ 量子化学計算･分子シミュレーション･粗視化モデル･連続体モデルを融合したマルチルケール手法
■ 工学的応用のための網羅的計算
■ 強相関系のための第一原理的手法
長期的目標
■ 高速･大容量･低消費電力の次世代量子デバイスの開発
■ 光･電子機能性デバイスの理論設計
■ 新しい物質変換法の理論的提案
■ 次世代の高効率エネルギー変換デバイスの開発
■ 材料内部組成の安定性、微細構造、強度の解明
■ 高温超電導･高効率熱電素子などの強相関新物質の探索
■ 高次の電子相関を取り込んだ巨大分子系の量子化学計算
カーボンナノワイヤーの電子状態計算
(押山淳(東大))
電極･電解液界面の第一原理計算
(杉野修(東大))
ウイルスの全原子計算
(岡崎進(名大))
鉄の内部組織
(香山正憲(AIST))

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
次世代先端デバイス	100	100	1.2	10	96	10	350000	第一原理計算RSDFT(擬ポテンシャル法、実空間基底)	原子数:10万	
次世代先端デバイス	100	100	2	15	60	100	2200000	第一原理計算PHASE(擬ポテンシャル、平面波基底、O(N^3)法)	原子数:1万　100MDを同時実行	
次世代先端デバイス	100	100	2	15	60	100	2200000	第一原理計算xTAPP(擬ポテンシャル、平面波基底、O(N^3)法)	原子数:1万　100MDを同時実行	
次世代先端デバイス	100	20	5	10	240	10	860000	第一原理計算CONQUEST(密度行列、最適化によるO(N)法)	原子数:1億　2fsの時間刻みで25000でナノ秒オーダーを想定　計算時間は要注意。時間ステップ数10^4。電子材料の電子状態計算・手法1と同じ計算だが、こちらは個々のケースを高速に計算する必要があり、ネットワーク性能をより要求する。ストレージ量の違いは出力頻度の違いによる。	
光・電子デバイス	1000	1.0	10	0.1	1	100	360000	高精度分子軌道法	2万基底、100万求積点	100～1000くらいのアレイジョブを想定
分子機能	300	18	4	0.0001	15	10	160000	大規模分子軌道法	原子数:1万	
分子機能	10	1.0	0.03	1	2	100	7200	フラグメント分子軌道法	数百残基のタンパク質、数千万次元の密行列の固有値問題	
熱交換デバイスの安全性向上・特性解析	200	200	100	10	70	10	500000	短距離古典分子動力学	粒子数:50兆	同上
分子機能と物質変換	1000	100	2	1000	150	10	5400000	長距離古典分子動力学	原子数:10億	
光・電子材料	600	200	200	33	14	10	300000	ナノ構造体電子・電磁波ダイナミクス法	原子数:96万, 時間は1ステップあたり1秒で計算量は0.63EFLOP。これを50000ステップでおよそ14時間	
強相関電子系の機能解明	3	390	10	10	10	100	11000	クラスターアルゴリズム量子モンテカルロ法	原子数:1億	整数演算がメイン
強相関電子系の機能解明	1000	300	0.20		8	100	2900000	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
物質・エネルギー変換	2000	100	8	1000	3	10	220000	量子分子動力学法	100レプリカ、100万ステップ	
物質・エネルギー変換	1000	1.0	10	0.1	24	10	860000	化学反応動力学・量子分子動力学法(分子軌道計算またはQM/MM)	10000レプリカ	
物質・エネルギー変換	250	100	2	15	24	10	220000	化学反応動力学・量子分子動力学法(第一原理計算)¥	数万レプリカ	
分子構造・分子機能	1000	0.50	0.04		24	1	86000	分子動力学法(feramによるリアクサー強誘電体の誘電率の周波数依存)	512x512x512	アレイジョブでノード間通信なし
新物質探索	100	2.0	0.12		24	1	8600	クラスター展開法(第一原理計算)	原子数:1万, 100イオン配置の同時実行	
新材料	0.1	0.020	0.00012		24	10000	86000	第一原理計算(凍結フォノン法)	原子数:1万	PHASEの1/10の規模であることから、同時実行はこの表では想定していない
強相関電子系の機能解明	82	130	82	41	42	10	120000	厳密対角化(ランチョス法)	54サイトのスピン系(Sz=0)	
新物質探索	1000	10	1.5	20	24	20	1700000	フェーズフィールド法	10^14空間メッシュ、10^7時間ステップ	

※ 本見積もりは、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。

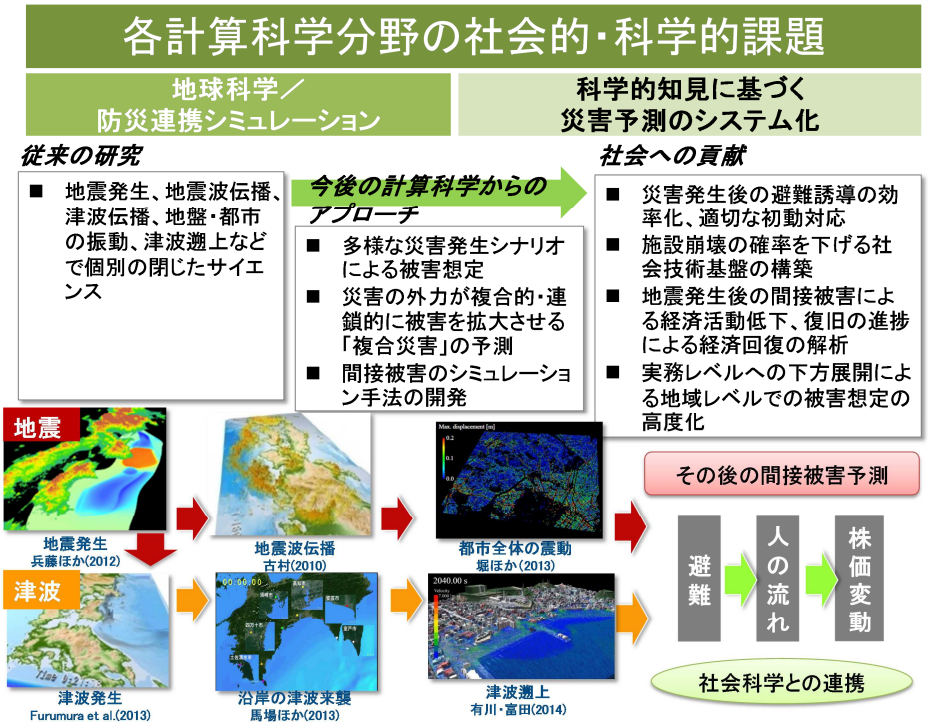
4.3　地球科学

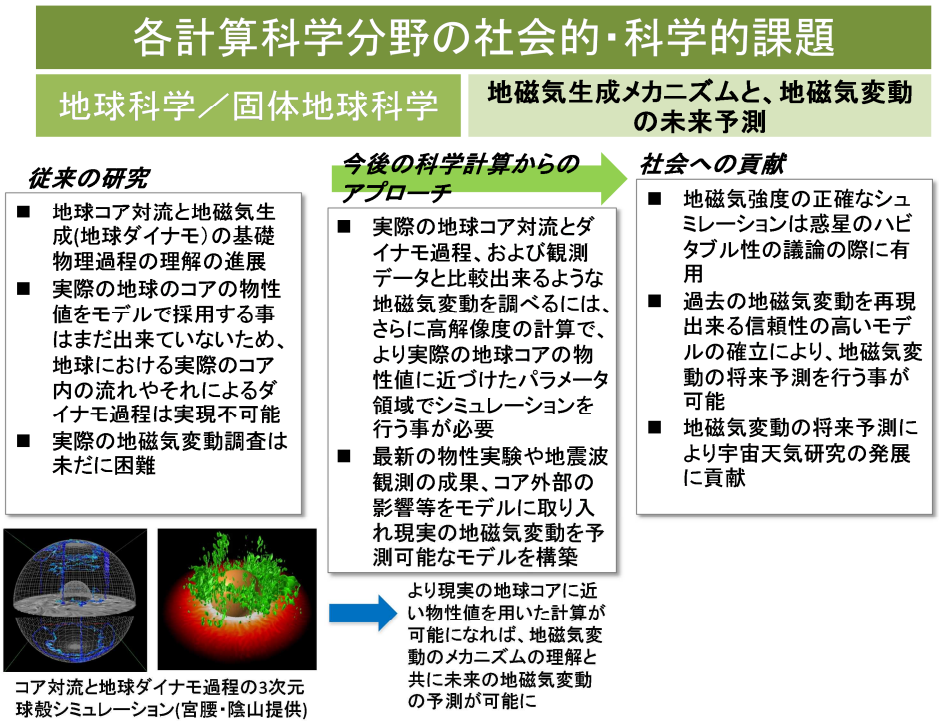
（1）気象・気候科学

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
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)
地球環境変化予測	56	110	0.60	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
データ同化を用いた気象予測精度向上	2	5.6	5	0.0003	0.5	1	4.2	モデル名JNoVA，四次元変分法（同化モデル）	格子点数：4000x3000x150、ステップ数：2700	探査回数50、実行時間のうち70%が演算として見積もり

※ 本見積もりは、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) 固体地球科学


各計算科学分野の社会的・科学的課題
地球科学／
防災連携シミュレーション
科学的知見に基づく
災害予測のシステム化
従来の研究
■ 地震発生、地震波伝播、津波伝播、地盤・都市の振動、津波遡上などで個別の閉じたサイエンス
今後の計算科学からのアプローチ
■ 多様な災害発生シナリオによる被害想定
■ 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」の予測
■ 間接被害のシミュレーション手法の開発
社会への貢献
■ 災害発生後の避難誘導の効率化、適切な初動対応
■ 施設崩壊の確率を下げる社会技術基盤の構築
■ 地震発生後の間接被害による経済活動低下、復旧の進捗による経済回復の解析
■ 実務レベルへの下方展開による地域レベルでの被害想定の高度化
地震
地震発生
兵藤ほか(2012)
地震波伝播
古村(2010)
都市全体の震動
堀ほか(2013)
その後の間接被害予測
津波
津波発生
Furumura et al.(2013)
沿岸の津波来襲
馬場ほか(2013)
津波遡上
有川・富田(2014)
避難
人の流れ
株価変動
社会科学との連携


各計算科学分野の社会的・科学的課題
地球科学／固体地球科学
地磁気生成メカニズムと、地磁気変動の未来予測
従来の研究
■ 地球コア対流と地磁気生成(地球ダイナモ)の基礎物理過程の理解の進展
■ 実際の地球のコアの物性値をモデルで採用する事はまだ出来ていないため、地球における実際のコア内の流れやそれによるダイナモ過程は実現不可能
■ 実際の地磁気変動調査は未だに困難
今後の科学計算からのアプローチ
■ 実際の地球コア対流とダイナモ過程、および観測データと比較出来るような地磁気変動を調べるには、さらに高解像度の計算で、より実際の地球コアの物性値に近づけたパラメータ領域でシミュレーションを行う事が必要
■ 最新の物性実験や地震波観測の成果、コア外部の影響等をモデルに取り入れ現実の地磁気変動を予測可能なモデルを構築
社会への貢献
■ 地磁気強度の正確なシュミレーションは惑星のハビタブル性の議論の際に有用
■ 過去の地磁気変動を再現出来る信頼性の高いモデルの確立により、地磁気変動の将来予測を行う事が可能
■ 地磁気変動の将来予測により宇宙天気研究の発展に貢献
コア対流と地球ダイナモ過程の3次元球殻シミュレーション(宮腰・陰山提供)
より現実の地球コアに近い物性値を用いた計算が可能になれば、地磁気変動のメカニズムの理解と共に未来の地磁気変動の予測が可能に

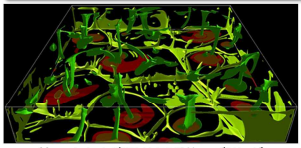
各計算科学分野の社会的・科学的課題

地球科学／固体地球科学

マントルのダイナミクスによる地球内部の物質循環過程の解明

従来の研究

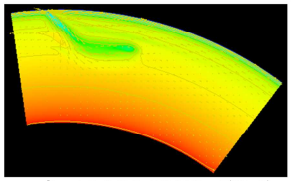
- 対象とする時空間スケールに強いトレードオフ
- プレート・核の相互作用の「一方向」のみのモデル化
- 「熱輸送と比べて圧倒的に遅い」流れ場の求解に要するコストが膨大
- レオロジーの大きく異なる物質 (マントル、マグマ、プレート境界等) の流れ場を矛盾なく解くことが困難



核・マントル境界の局所的モデリング

今後の科学計算からのアプローチ

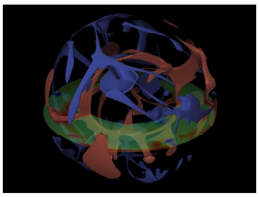
- 悪条件の楕円形偏微分方程式を高効率かつ高精度で解く手法の開発・採用
- 複数の偏微分方程式を効率的にカップルさせて解く手法の開発
- 階層的な空間解像度を持つモデリング
- 流体的な手法と粒子的な手法との併用



プレート沈み込みの地域的モデリング

長期的目標

- マントルとプレート・核の相互作用の自己無撞着な取り扱い
- 表面 (地形・気候) や内部 (温度・化学組成) での環境要因の変化と流れとの間のフィードバック
- 惑星サイズの効果の検討 (特にスーパー地球の居住可能性について)



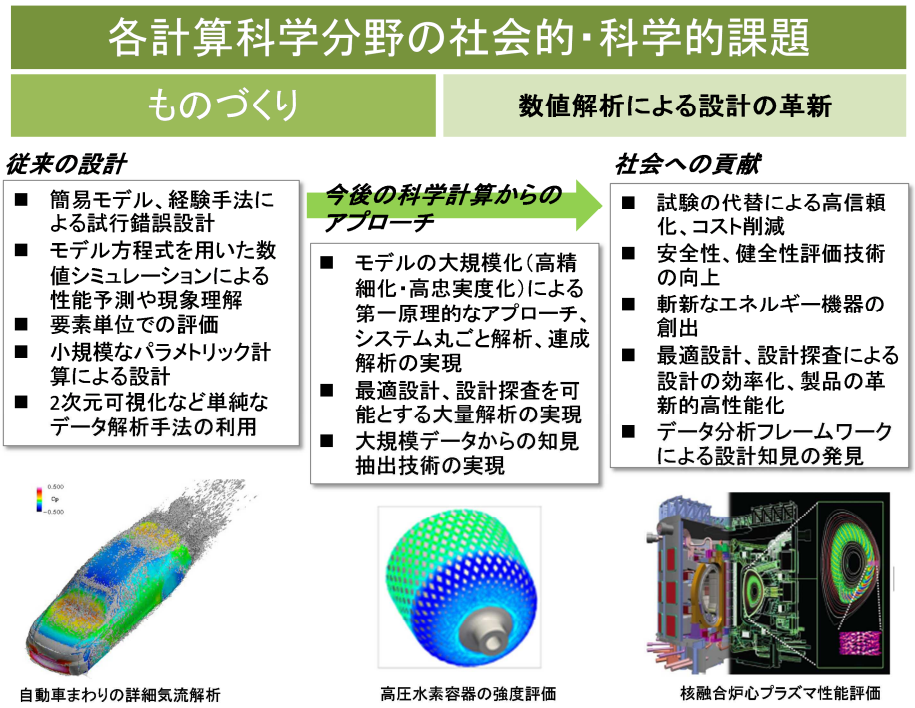
全地球惑星スケールでの自己無撞着なモデリング

図は亀山氏提供

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
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、海底地形の不確実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) 波動伝搬			0.1	0.5		100	1400	差分法による弾性波動伝搬計算	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格子幅)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
マントル対流	1000		0.01		0.083	1	300	流れ場の反復求解、格子法差分計算	格子数: 290x4000x2000, 4変数	
ダイナモ			0.053	4		1		陰陽格子	格子点: 2000x2000x6000x2, 8変数	

※ 本見積もりは、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。

4.4 ものづくり



（1）熱流体

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
ターボ機械の熱流動、振動、音響解析	120	51	16	500	120	20	1000000	有限要素法	10^12格子	B/F=0.5として計算
熱流体シミュレーション（自動車、実際の設計、最適化問題）	280	560	0.04	4	1	100	100000	Re=10^6～10^7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
電子機器の熱流体解析、騒音解析	14	19	0.01	1.6	2	100	10000	有限要素法	10^10格子	
航空機の翼設計、機体設計、エンジンや機体の空力・騒音解析	23	23	0.1	8	24	1000	2000000	差分法	10^11格子	
宇宙機の熱流体設計、推進系解析、全機システム解析	58	57	1	80	240	10	500000	差分法	10^12格子	
都市や建築物内の空気の流れや汚染物質の拡散解析	930	490	50	160	96	10	3200000	有限要素法	10^13格子、10^4ステップ	

※ 本見積もりは、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）構造解析

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
衝突解析	210	5	1	100	24	10	180,000	有限要素法（陽解法）	10^11節点	
弾塑性解析	21	5	1	1	24	10	18,000	有限要素法（陰解法）	10^10節点	
丸ごと詳細解析	210	50	10	10	24	10	180,000	有限要素法（陰解法）	10^11節点	

※ 本見積もりは、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。

（3）機械材料

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
電子部品用機能性材料に関する強度評価	1,000	50	10	500	12	10	430,000	加速分子動力学法	粒径50nm、10マイクロ秒、レプリカ数1000の銅粒界引張シミュレーション	レプリカによる加速化率は1000並列あたり666倍と仮定
炭素繊維強化プラスチック開発	200	50	30	500	12	10	86,000	非線形有限要素法	試験片20cm、欠陥サイズ50μm、4000ステップの陰解法シミュレーション	反復解法における反復回数は4000として見積もり

※ 本見積もりは、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。

（4）プラズマ・核融合

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
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	430,000	ボルツマン方程式の5次元計算（スペクトル法+差分法）	10^12格子、10^6ステップ	B/F=2として計算
プラズマ乱流計算・大域的非定常乱流	100	200	0.5	1	170	10	610,000	ボルツマン方程式の5次元計算（差分法）	10^12格子、10^7ステップ	B/F=2として計算

※ 本見積もりは、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。

（5）電磁界解析

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
サーバの装置全体レベル解析	2	2	0.05	0.1	1	20	140	陽解法と陰解法の混合	10^12格子	

※ 本見積もりは、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。

（6）可視化・データ処理

	ファイルベース可視化	In situ可視化
想定する演算性能（ノード当たり）	100TFLOPS	100TFLOPS
ネットワークバンド幅（ノード当たり）	500GB/s	2TB/s
メモリ容量（ノード当たり）	50GB	100GB
メモリバンド幅（ノード当たり）	0.2TB/s	20TB/s
ストレージ容量	各シミュレータが生成する最大容量×2	各シミュレータが生成する最大容量×2
ストレージの帯域	0.1 PB/s	0.01 PB/s

※ 本見積もりは、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。