

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 (PFLOPS)	要求メモリアンバンド幅 (PB/s)	要求ファイルI/O性能 (TB/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・計算手法	問題規模	備考
個人ゲノム解析	100	50	0.5	9	100	700	200	50,000,000	がんゲノム解析 200,000人分のマッピングおよび変異同定		変異検出に最低1000人の解析が必要なのでそれを1ケースとした。メモリ量は140Knode × 64GBで計算
遺伝子ネットワーク解析	100	50	0	4.5	0.04	10	26,000	94,000,000	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	メモリ量は140Knode × 32GBで計算
創薬などMD・自由エネルギー計算	1	0.5	0	0.001	0.001	1.2	100,000	430,000	全原子分子動力学シミュレーション	~10万原子	>16GB/node
細胞環境・ウィルス	1,000	500	2	4	1.2	48	10	1,700,000	全原子/粗視化分子動力学シミュレーション	~1億粒子	メモリ量について、全粒子の静的な情報をすべてのノードで持たせるため、最低限必要なメモリ量(8GB) × ノード数になっている(ノード数は50万を想定)
高精度創薬	10	1	1	1	0.001	1	100	3,600	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	
バイオデバイス設計	100	1	1	1	0.001	1	100	36,000	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	
血流シミュレーション	400	64		1	1	170	10	2,500,000	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	200	130		130	640	240	10	1,700,000	差分法、陽解法(音波・熱シミュレーション)	400mm ³ 、+軟組織?、+マイクロカプセル干渉音場?	
脳神経系シミュレーション	10	100		56	0.2	210	30	230,000	単一コンパートメントニューロンモデル	1000億ニューロンニューロンあたり1万シナプス	100MB/S程度の外部との通信も想定

※ 本見積もりは、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。

2.2 総合防災

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、グローバルゼーショ

今後の計算科学が貢献しうる社会的課題

総合防災

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的高度化



ン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をより深刻なものとすることが指摘されている。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。

総合防災分野において今後、必要となる計算機性能を下表に示す。