

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)	要求メモリバンド幅 (PB/s)	要求ファイル/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
防災連携シミュレーション(地震直後の被害状況予測)	11以上	80以上		0.1	5	3 (15000 =約20 か月)	5000	120			1領域1000ケースを5領域行う。 アプリの最大BF値=8.0
地震発生				0.02	0.02			4	境界積分法による地震サイクル計算	面素数 10^6	アプリの最大BF値=8.00
波動伝搬				0.1	0.5			12	差分法による弾性波動伝搬計算	$1200 \times 1000 \times 200 \text{ km}^3$ ($125 \text{ m} \times 125 \text{ m} \times 62.5 \text{ m}$ 格子)	アプリの最大BF値=2.14
地震動増幅				0.07	2			40	有限要素法による地震波動計算	30億節点 ($300 \times 250 \times 10 \text{ km}^3$)	アプリの最大BF値=8.00
				0.07	2			40	有限要素法による地震波動計算	30億節点 ($30 \times 25 \times 1 \text{ km}^3$)	アプリの最大BF値=8.00
建物震動				0.05	0.05			10		構造物100万棟	-
津波遡上				0.004	0.5			10	Navier-Stokes方程式複数モデル(静水圧近似, 非静水圧, VOF法)計算	$3 \times 3 \times 0.08 \text{ km}$ から $1400 \times 1100 \times 10 \text{ km}$ (1 m から 5.4 km の格子)	アプリの最大BF値=2.63
避難誘導シミュレーション	0.1	-		0.0001	-	-	1 5000	360	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		

※ 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。

2.3 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



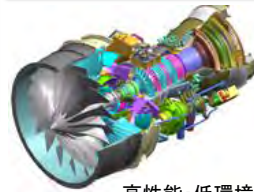
高精細な風況評価による
風力発電サイトの適切な立地

今後の計算科学からのアプローチ

- 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
- 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
- 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・予測



高性能・低環境負荷・
高信頼性エンジン開発

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