

2 今後の計算科学が貢献し得る社会的課題

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
電子材料の電子状態計算・手法1	100	20		5	15	240	10	860,000	第一原理分子動力学計算	原子数:1億	
電子材料の電子状態計算・手法2	100	10		1.2	12	96	10	350,000	実空間基底O(N3)法分子動力学計算	原子数:10万	
強相関電子系の理解	82	130	23	82	23	42	10	120,000	手法:厳密対角化	計算規模: 2.0 ¹⁵ ×2.0 ¹⁵	
プラズマ乱流計算・マルチスケール乱流	100	200	10	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	
プラズマ乱流計算・大域的非常乱流	100	200	10	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	
熱流体シミュレーション(自動車、実際の設計、最適化問題)	10	20	16	0.05	4.8	28	1,000	1,000,000	Re=10 ⁶ ~10 ⁷ のLES流体計算	10 ¹¹ 格子	
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)	100	200	27	0.5	48	28	10	100,000	Re=10 ⁶ ~10 ⁷ のLES流体計算	格子点数:10 ¹²	構造格子でBF=2、1,000ショットを30分で出力と想定
風力発電立地条件アセスメント	29	90	0.5	0.01	0.07	72	100	760,000	高解像度LES流体計算(差分法)	3300×3300×300格子点(30×30×10m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	0.41	1.6	0.04	0.003	0.8	720	100	110,000	モデル名 MIROC-ESM、スペクトル法(大気)	格子点数:2000×1000×200、ステップ数:5300万(dt=60秒、100年)	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)

※ 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。

2.4 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

今後の計算科学が貢献しうる社会的課題

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

従来の研究

- 交通・経済・電力といった個々の現象ごとにモデルをつくりシミュレーション
- エージェントモデルは、メカニズムの把握が中心
- モデル間の相互作用について客観性・信頼性を持つ基本法則がない

今後の計算科学からのアプローチ

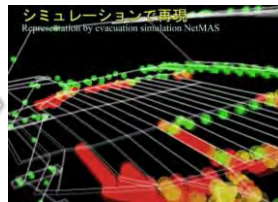
- 各々の社会システムの構成要素をエージェントモデルとして捉えて、統合的に記述
- 莫大かつ離散的な最適パラメータを同定するため大量のデータを同化

社会への貢献

- 社会の多様な課題に柔軟に対応し、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



避難訓練での人の動きのシミュレーションによる再現



目的を持って移動する自動車の交通シミュレーション

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。

2 今後の計算科学が貢献し得る社会的課題

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 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
自動車交通流 のリアルタイム シミュレーション	1	0.1		0.00011	0.001	0.000028	1,000	0.1	地球上の全自動車交通規模 (10億台、道路総延長400万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日分あたりとする。
株式取引所 ルールの最適化	0.21	0.00000001		0.00000001		24	10,000	180,000	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で計算する	

※ 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。