

2.3 エネルギー・環境問題

(1) 社会的貢献 ―エネルギー技術と環境との調和を目指して―

エネルギー資源小国である日本にとって、エネルギー問題は最重要課題の一つであり、今後も、あらゆる科学技術を駆使してエネルギー利用技術を高めていく必要がある。更に、わが国のみならず今後地球規模のエネルギー問題を解決するには、全世界が進むべき道として低炭素社会・省エネルギー社会を目指していかなければならない。この点においても我が国の科学技術・計算科学の果たすべき役割は大きい。このためには幅広い観点からさまざまな取り組みが必要であるが、ここでは計算科学の役割をエネルギーのライフサイクル（創成、変換・貯蔵・伝送、利用）の観点とライフサイクルの各段階での環境との調和の観点とから述べていく。

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。太陽光発電技術の鍵となる太陽電池・人工光合成素子の開発では、光吸収過程、電流を担う電子やホールダイナミクスの理解と予測が必要である。また、熱エネルギーを電気エネルギーに変換する熱電変換素子の開発では、その変換効率を決める、電気伝導度に対する熱伝導度の比率を極力下げることが要求される。これらに共通して必要なのは、デバイス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であり、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である。また、メタンハイドレートやバイオマス利用技術の進歩のためには、熱力学過程や酵素反応過程の解明が不可欠である。ここでも、分子動力学法などの計算科学の手法が重要な研究手段となっている。

一方で、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。メガソーラー設置地点や集成的風力発電所（ウインドファーム）のアセスメントでは、年平均の日射量や風速の調査が重要となるため、長期観測や局地気候シミュレーションが必要となる。また、効率的な太陽光・風力発電量予測を行うためには、精度のよいピンポイント気象予測が不可欠となる。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。

長期的代替エネルギー源のもう一つの候補は核融合炉である。現在、日本、米国、欧州、ロシア、中国、韓国、インドが共同で取り組んでいる国際熱核融合実験炉（International Thermonuclear Experimental Reactor: ITER）計画は、核融合出力 50 万キロワットの長時間運転を実現し、核融合炉を科学的・技術的に実証することを目標としている。この目標を達成するうえで、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となっている。プラズマ乱流現象は装置サイズに依存するため、ITER のような大型装置を小規模な実機試験で評価することは難しく、計算科学が必要不可欠である。特に、ITER 規模のシミュレーションにはペタスケールを超える計算資源が必要とされるため、次世代の HPC 技術が重要な役割を果たす。

エネルギー変換・貯蔵・伝送の観点からも、より一層の技術開発が必要とされる。例えば炭化珪素（SiC）や窒化ガリウム（GaN）を使った低損失なパワーデバイスの実用化は大きく省エネルギーに寄与すると期待されており、精力的な研究開発が行われている。また、風力発電や太陽光発電などの再生可能エネルギーは気候・地形・時間に依存して生産量が大きく変動する特性がある。このため、化石燃料エネルギーや原子力エネルギーを代替する割合を増やすには、各種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必要である。ここに挙げたパワーデバイス材料の特性解析、燃料電池や2次電池における電気化学過程の解明、あるいは触媒や電極として用いられる白金・リチウム・インジウムなどの希少元素の代替物の探索においては、第一原理に基づく電子状態計算が広く使われるようになってきており、大規模シミュレーションによる物質設計は、次世代の素材やデバイス開発の主流となりつつある。更には、近年発見された、鉄や銅を含む高温超伝導体や表面や端のみで電流が流れるトポロジカル絶縁体、強磁性や強誘電性を同時に備えるマルチフェロイクスなど、いわゆる「強相関量子多体系」は新しい現象と概念の宝庫であり、全く新しいエネルギー変換・伝送技術へとつながっていく可能性を秘めている。ここでも、量子多体系に対するモンテカルロ法などのさまざまな計算科学の手法が開発され、それらを用いた大規模シミュレーションによる研究が発展している。

次にエネルギー利用（省エネルギー）の観点から考える。多岐にわたる工業製品によって現代社会は支えられているが、これらは多くエネルギーを利用している。エネルギーは「動かす力」であるが、現代において重要な形態は「情報＝ソフト」を動かすものと、「物体＝ハード」を動かすものの二つに分けられる。

「ソフト」の代表例は、半導体をはじめとする電子デバイスである。省エネルギーはここでも重要な課題であり、より高機能で高速な半導体デバイスの実現に際しては、低消費電力化、熱対策などが解決すべき大きな課題となっている。シリコンデバイスに関連する材料はシリコン、その酸化膜、添加する不純物元素や水素だけでなく、ゲルマニウム、各種高誘電率絶縁膜、化合物半導体、カーボンナノチューブなどに広がっている。またデバイス性能も、平衡状態に近い条件下だけでなく、過渡的現象を含む非平衡状態に近い条件下での物性が重要となってきた。これらの材料・現象を原子レベル、量子力学のレベルで理解・予測することが重要となっており、このための計算科学の重要性は増大している。ここでは、より大きな系の電子構造を求めるということだけでなく、異種材料界面や電子励起された状態の熱的特性、電気的特性、分光学的特性を長時間測定することも求められている。他に、電子デバイスにはない高機能性を備えた次世代量子デバイスの一つの候補として、ナノ分子構造体を利用した、光・電子機能性デバイスが提案されている。電気・光学・磁気特性それぞれ単独の機能性だけでなく、光と電子のダイナミクスが密接に絡み合って生まれる新しい機能性が計算科学により明らかにされることにより、広帯域・高効率光エネルギー変換デバイスや量子データ転送素子の開発などにつながる理学・工学の新たな研究領域を切り開くことが期待でき、その学術的意義は非常に高い。これらはいずれも次世代量子デバイスの設計原理に大きく関わる現象であり、計算科学を通じて「ものづくり」の観点から社会へ大きな還元ができると考える。

一方の「ハード」の代表例としては、輸送機械が挙げられる。自動車や航空機などの輸送機器が最終エネルギー消費に占める割合は大きいですが、低損失なパワーデバイス、高効率で希少元

素を使わないモーター（磁石）、高比強度かつ軽量な材料などがエネルギー利用効率を大幅に向上させると期待されている。また、これらの実用化は、エネルギーの利用段階だけでなく、発電機の高効率化や風車の軽量化など、エネルギーの生成段階においても省エネルギーや二酸化炭素排出抑制に大きく寄与する。こうしたデバイスや材料の物性は、原子間結合のみならず、サブミクロンスケールの内部組織（界面・転位・不純物など）に大きく支配される。それらの系統的な理解・設計・制御には、第一原理に基づく電子状態計算や自由エネルギー計算、加えてマルチスケール計算など計算科学の手法の確立と、それらによる大規模なシミュレーションが重要な役割を果たす。

これまで工業製品の開発・改良は、理論、実験ベースの設計手法で行われてきた。しかしながらその努力も限界に近づいており、今後、飛躍的な性能向上の実現にはシミュレーションに基づく革新的設計技術やそれを駆使した新たなる発想が必要である。シミュレーションを設計に適用することで、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設計や、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最適化できる最適設計技術を活用することが可能となる。また、シミュレーションを用いることで、革新的な製品のアイデアやコンセプトを効果的に検証することが可能となり、これまでにない革新的な工業製品を実現することも可能となる。そして、これらを実現するためには、工業分野ごとにそれぞれの課題やブレークスルーが存在し、例えば、輸送機械などと深く関わる熱流体分野では、乱流輸送現象の解明がブレークスルーとなる。この乱流輸送現象の予測と制御は、他にも気象・気候分野、土木・建築分野、地震・津波分野、核融合分野、宇宙分野、物質科学分野などきわめて幅広い分野でも重要な課題となっている。大規模な計算科学によって乱流の基礎科学を推進、解明することはさまざまな乱流のより確かな予測と制御に向けての学際的共通基盤をより強固なものとするうえでも大いに意義のあることである。

最後に、エネルギーライフサイクルと環境との関わりについて考える。化石燃料の燃焼による二酸化炭素排出に起因する地球温暖化問題は、エネルギーを利用することが環境に影響を及ぼす一例である。また、太陽光や地熱など自然エネルギーの利用も、自然界に起源を持つエネルギーの変換過程に人間が介入することを意味しており、少なくとも地域規模でのある程度の影響は避けられないだろう。したがって、新エネルギーの創出にあたり地域から地球規模までのさまざまな空間スケールでの環境影響を、気象・気候シミュレーションモデルを駆使して予測することは、自然環境と調和した社会の健全な発展にとって不可欠と言える。また、気象・気候シミュレーションの性能向上は、風力や波力、潮流といった自然エネルギーの利用を効率化することにもつながる。

更に地球規模の環境問題に関しては、国際問題となっている地球温暖化対策に関する意思決定の基盤情報を構築するため、生物・化学過程を含む大気海洋結合大循環モデルである地球システムモデルをベースに、データ同化技術も取り入れ地球環境の状態を診断し、将来予測も行う「地球環境監視予測システム」を開発することが急務である。これまでの数百年スケールの温暖化予測モデルは、将来の地球環境に対する基礎的理解の増進に貢献してきたが、これに観測データを同化することにより、精度が高くより実践的な「近未来予測」も可能になる。このような新しい科学的成果を社会への気候予測情報の提供という形で実現させる仕組みの構築は、気候変動への適応、緩和という人類喫緊の課題に対し、地球環境の観測ネットワークと大

規模な計算機資源およびそれらを活用する人的資源をすべて有するわが国が国際社会においてイニシアチブを示す絶好の機会である。基礎理論の発展のみならず、計算機能力の向上に呼応したモデルの高解像度化や、数値計算技術、データ同化技術の向上、更には革新的設計技術の導入により、エネルギーをつくり、変換し、使うという一連のサイクルが人類にもたらす便益を、社会と自然環境という大きな系の中で総合的に捉え、永続的な営みへとつなげていくことが可能になる。



図 2.3-1 エネルギー・環境

(2) サイエンスの質的变化

次世代の HPC を活用することで、これまでの要素解明中心の科学から、さまざまな要素が複雑に絡み合う集団・階層解明の科学へと本質的な変化が期待される。すなわち、これまでに確立された古典力学、量子力学、統計物理学に基づいた、ナノ材料の物性・化学のボトムアップ的な予測が可能となり、シミュレーションによる新しい半導体デバイス、触媒材料、各種電池、構造材料などの物質設計・開発へとつながると期待される。

次に、核融合分野のシミュレーションについて説明する。ITER において世界で初めて実現する核燃焼プラズマ実験を解析するには、燃料の重水素、三重水素、および、核融合反応で発生するヘリウムを含む多種イオン系のプラズマ乱流現象の解明が必要となる。更には、核融合反応による熱源・粒子源の変化と乱流輸送による燃料密度・温度の分布形成の自律的な振る舞いに至る幅広い時空間スケール(マルチスケール)の複合的な物理効果(マルチフィジックス)を模擬することが必要となる。これらはシステムサイズ、分解能、時間スケール、どれをとっても従来のシミュレーションに比べてきわめて高い計算コストを要求する。この壁を次世代の

HPC 技術で乗り越えて核燃焼プラズマ実験を模擬することができれば、その核融合エネルギー開発に対するインパクトはきわめて大きいと考えられる。

ものづくりにおける計算科学は、これまでは補助的手段として開発途中での不具合や各種試験でのトラブルなどの原因究明など、課題解決のためのツールとして使われてきた。しかしながら HPC の発達とともに、適用分野・範囲、解析精度・速度などが大幅に向上した結果、従来の簡易理論や実験ベースの設計に代わって、計算科学による設計というパラダイムシフトを実現しつつある。また、これまでは要素レベルへの適用だったものが、それらを組み合わせたシステムへの適用としてマルチスケール、マルチフィジックスシミュレーションへと変化し、これまで未解明だった複雑系システムの複合要因の解析などに有効活用されつつある。

また地球規模環境問題への対応のため、生物地球化学的な物質循環と気候変動との相互作用を取り入れた地球システムモデルの開発を進めることで、人類が自然界に排出したさまざまな物質の循環とその気候や生物多様性への影響を把握し、人類の将来に関する意思決定につなげることができる。例えば、改善された地球システムモデルを用いた予測システムをベースに、現状下における二酸化炭素収支の診断による排出削減政策の効果の確認や、二酸化炭素濃度や気温等の将来予測、そして予測結果に基づいて社会に警告を発したり、地球温暖化対策立案に際し助言を行ったりといった役割を果たし得るシステムも構築できよう。更に、人類が地球環境の形成に大規模な変化を引き起こすようになった現代を「人新世」(Anthropocene) という新たな地質年代として捉えるべき、という議論がある。地球システムモデルによる古環境の再現実験や、人類の影響を加味した現在気候の再現・将来予測実験などを通じた視点で、地球環境研究に取り組むことが可能となる。ここで提案しているシステムは、地球史における人新世の位置づけや人類の存在意義、といった根源的問題に対する考察の一助ともなるであろう。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流体的手法を共有し、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とが求められる。この実践を通してエネルギーをつくり、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。

(3) コミュニティからの意見

上記課題についてのコミュニティからの意見の詳細は、第4章(4.2, 4.3.1, 4.4.1, 4.4.4など)を参照されたい。代表的な意見としては、J-PARC、SPring-8、SACLA といった大型実験施設との連携、元素戦略(磁石、触媒・電池、電子材料、構造材料分野)における計算科学からの貢献、コミュニティソフトウェアの整備への期待などが挙げられる。

(4) 計算機要求

個別の計算機要求は詳細については第4章に記載してあるので、ここでは代表的な例に絞り記述する。

電子材料の電子状態計算においては、 $O(N)$ 法を用いることにより、1億原子規模の第一原理分子動力学計算が視野に入ってくる。この計算には実効0.1EFLOPS程度の浮動小数点数演算性能が要求される。また総メモリ容量が5PB程度必要である。あるいは、実空間基底 $O(N^3)$ 法では10万原子規模の計算が可能となる。この場合、演算は行列行列積が主となるが、実効0.1EFLOPSの浮動小数点数演算性能に加えて、ノード当たり100GB/sのネットワークバンド幅が要求される。一方、高温超伝導体に代表される強相関量子多体系のモデル計算では、今後、多軌道効果や格子歪効果を取り入れた数万格子点規模の変分モンテカルロ法によるシミュレーションを進めていく必要があるが、この計算には2EFLOPS程度の浮動小数点数演算性能、0.2PB程度のメモリ容量、さらにメモリB/F値=1.4程度が要求される。また、クラスターアルゴリズム量子モンテカルロ法のように整数演算、ランダムアクセスが主体のアルゴリズムも今後主流となっていくと考えられ、浮動小数点数演算性能だけでなく、整数演算性能も強く求められる。

ITER規模の装置サイズにおいて単一イオン種の準定常乱流（ $\sim 10\text{ms}$ ）の数値実験を実施するのに「京」コンピュータ（10PFLOPS）で1日程度の計算が要求される。これに対して、10 \sim 100PFLOPS規模のポストペタスケール計算では多種イオン系の核燃焼プラズマの数値実験が実現し、更に、1 \sim 10EFLOPS規模のエクサスケール計算では核燃焼による炉心の自律的な振る舞いを模擬するのに必要な長時間スケール（ $\sim 1\text{s}$ ）の数値実験も視野に入ってくる。このような数値実験が実現すれば、より高性能な炉心プラズマの設計をシミュレーションで探索することが可能になると期待される。

熱流体分野の数値シミュレーションにおいてはものづくりでの利用に耐え得る解析精度を実現するためには微細な渦の運動まで直接計算する準第一原理的手法である Large Eddy Simulation (LES) が必要となる。乱流中の主要な微細渦まで計算する際の計算規模（格子点数や計算時間）は、流れの代表速度、代表長さ、および動粘度により決定されるレイノルズ数とよばれる無次元パラメータの大小により大きく異なり、レイノルズ数のほぼ3乗に比例して大きくなる。例えば自動車回りの流れではレイノルズ数は 10^6 程度となる。この流れにLESを行うためには数百億点の格子が必要となるが、数百PFLOPSの計算機を使えば1週間程度で解析が可能となる。実際の設計に用いるためには数百ケースのパラメトリックスタディが必要となるため、更に大きな計算機が必要となる。なお、本計算の予測ではシステム全体で10EFLOPS、ノード演算性能が100TFLOPSの計算機を想定し、ノードのスペックとしてネットワークバンド幅が0.5 \sim 5TB/s、メモリ容量は0.1 \sim 1TB、メモリバンド幅は50TB/s、I/O性能は0.1 \sim 1TB/sを想定した。

風力発電量予測のための気象LESでは、ウインドファームよりも広い領域を数十mの高い空間解像度で計算することが望ましい。例えば水平100km四方、地上高さ3km程度までの領域の局地気象について、水平30m、鉛直10mの分解能でスピニングアップ（助走計算）1日を含む3日間のシミュレーションを行うとした場合、必要な格子点数はおおよそ33億点、ステップ数は $dt=0.2\text{sec}$ としておおよそ123万ステップとなる。実行に必要なメモリ総量は倍精度の予報変数、診断変数および中間変数の総数が400であるとして10TB程度と見積もられる。この実験を1例当たり72時間で計算し、通年での統計的な風況アセスメントを行うために100例行うとす

る。これを実現する計算機は実効計算性能でおよそ 30PFLOPS、メモリ転送性能で 90PByte/s が必要である。ネットワークバンド幅は、隣接通信が主であるためトータルで 0.5~5PB/s 程度を必要とする。出力データは後半 48 時間のうち 20 変数を単精度で 10 分ごとに出力すると 70TB 程度となり、ファイル I/O 性能はトータルで 0.5TB/s あればよい。なお、この見積もりは立地アセスメント一つに対してであり、複数の立地に対してアセスメントを迅速に進めるためには、より高速な計算が求められる。一方、太陽光発電量予測のための計算の場合、大気放射過程を 3 次元的に計算するスキームの導入が必要となる。3 次元放射スキームはより多くの計算を必要とし、各ノードで受け持つ格子を大きく飛び越えて光が伝達するため大域通信を行う必要がある。また、降水時にはメソ降水系全体を表現できる更に広い計算領域が必要となる。このため、風力発電量予測のための気象計算の少なくとも 10 倍以上の計算量とデータ出力が必要となる。

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	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	0.5	1	170	10	610000	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)	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、スピニング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