

計算科学ロードマップ 概要

～大規模並列計算によるイノベーションの
目指す社会貢献・科学的成果～

平成 26 年 5 月

将来の HPCI システムのあり方の調査研究
「アプリケーション分野」

目 次

はじめに	1
1. 計算科学をめぐる背景	3
1.1 HPCI を用いた計算科学のこれまでの経緯と今後の展望	3
1.2 「京」による重点分野での研究の成果	3
1.3 次世代の HPCI 計画	4
2. 今後の計算科学が貢献し得る社会的課題	5
2.1 創薬・医療	5
2.2 総合防災	8
2.3 エネルギー・環境問題	13
2.4 社会経済予測	16
3. 分野連携による新しい科学の創出	18
3.1 基礎科学の連携と統一理解	18
3.2 ビッグデータの有効利用	24
3.3 大規模実験施設との連携	30
4. 各計算科学分野の社会的・科学的課題	32
4.1 生命科学	32
4.2 物質科学	34
4.3 地球科学	36
4.4 ものづくり	40
4.5 基礎物理	43
4.6 社会科学	51
おわりに ~計算科学の更なる発展に向けて~	52

はじめに

現代の科学技術における知識の獲得、発見には、スーパーコンピュータは必須となってい。同時に、スーパーコンピュータは一般市民の毎日の生活を陰で支えてもいる。わが国は現在、東日本大震災からの復興、福島原発事故の収束や環境浄化、エネルギー問題、少子高齢化、財政逼迫など山積する難題に直面している。スーパーコンピュータによる大規模シミュレーションは、科学技術を牽引するとともに、我々が直面しているこれらの困難な課題解決にも重要な役割を果たしている。日本社会を力強く支え、明日の時代を切り開くためにスーパーコンピュータは不可欠の基盤技術である。

国の主導で導入されるスーパーコンピュータにより得られる研究成果や研究手法は、科学技術の最先端を更に伸ばし、次の時代には、企業自身がスーパーコンピュータを導入することによる産業活性化に展開し得る。また、医療の現場や気象予報などの現業におけるスキルの大幅な向上につながる可能性がある。スーパーコンピュータで培った技術が、最終的に産業や社会の現場で利用されること、すなわち計算科学の下方展開の重要性は今後ますます増加し、シミュレーションや大規模データ処理の果たす役割は更に拡大し、その結果は社会に大きな恩恵をもたらすであろう。

このように社会に貢献する基盤技術としてのスーパーコンピュータが重要性を増すなかで、平成 23 年、HPCI 計画の推進にあたり国として今後の HPC 研究開発に必要な事項等を検討するため、文部科学省研究振興局長の諮問会議「HPCI 計画推進委員会」のもとに「今後の HPC 技術の研究開発のあり方を検討する WG」が設置された。そして、同 WG からの提言により「アプリケーション作業部会」と「コンピュータアーキテクチャ・コンパイラ・システムソフトウェア作業部会」が設置され、両者の緊密な連携のもと「計算科学ロードマップ白書」がとりまとめられた¹。同白書は、平成 24 年 3 月に公開されている。更に、作業部会での議論の更なる精査を目指し、文部科学省委託研究「将来の HPCI システムのあり方の調査研究（アプリケーション分野）」が平成 24 年 7 月にスタートした。そこでは、計算科学が貢献し得る社会的課題・科学的ブレークスルーの課題抽出が行われ、その成果として新たな「計算科学ロードマップ」の取りまとめが行われてた。同ロードマップをまとめるにあたっては、計算科学分野はもとより、実験・観測・理論の研究者、ならびに、各学術コミュニティの第一線で活躍する大学・研究機関、企業の現役研究者約 100 人が一堂に会し、演算性能だけではなく、解決すべき社会的課題・期待される科学的ブレークスルーのために必要となる計算機システム全体のバランスを踏まえた適切な性能について深い議論が行われてきた。

本文書は、現在取りまとめられている「計算科学ロードマップ」の概要版として、今後の計算科学が目指すところについて、5~10 年程度の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する。なお、概要版で紹介する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の深化が必須である。詳細は「計算科学ロードマップ」の第 4 章に記載しているが、本概要版でも、第 4 章にて各分野における個々の研究課題の概要を示す。

¹ <http://www.open-supercomputer.org/workshop/sdhpc/>

はじめに

なお、「今後の HPCI 計画推進のあり方に関する検討ワーキンググループ」が平成 25 年 6 月 25 日に公開した「今後の HPCI 計画推進の在り方について（中間報告）²」では、スーパーコンピュータを先導するエクサスケールの計算機だけでなく、第二階層のスーパーコンピュータ群の必要性も言及されている。本書が示す大規模計算科学の可能性は、将来サイエンスとして何が必要かを純粋に議論して明らかにするものであり、決して最高性能のトップマシンだけを意識したものではない。

なお、第 2 章から 4 章にかけて、次世代に解決すべき課題を遂行するために必要なアプリケーション群について、どの程度の計算機資源が必要かを検討し、要求表としてまとめた。要求表には計算手法や現状のプログラムおよび実機を用いたプロファイルから見積もった実効演算性能（浮動小数点演算性能もしくは整数演算性能）や必要メモリ容量等の値を掲載した。これは一般的には実際の計算機の理論性能とは異なること、また将来に対する推定であることから数倍程度の変動は無視した推定であることに注意されたい。

本ロードマップ記述された内容は、平成 26 年 5 月時点のものであり、今後更に精査されていく予定である。最新の計算科学ロードマップについては、Web 上で随時公開³してゆく。

² http://www.mext.go.jp/b_menu/shingi/chousa/shinkou/028/gaiyou/1337595.htm

³ <http://hpci-aplfs.aics.riken.jp/>

1. 計算科学をめぐる背景

1.1 HPCI を用いた計算科学のこれまでの経緯と今後の展望

今日、スーパーコンピュータ等を用いた計算科学は、理論・実験と並ぶ科学技術の第 3 の手法として、最先端の科学技術や産業競争力の強化に不可欠な研究手法として欠くことのできないものとなっている。計算科学の発展により、我々は、自然現象や社会現象をモデル化し、シミュレート（計算）することにより、将来を予測することが可能となった。例えば、天気予報や地球温暖化予測等は、計算科学なしには実現できない。また、我々にとって、未踏の領域である基礎物理の解明にとっても、精緻な理論の検証や、理論を現実の複雑な系に適用する際にも計算科学が不可欠である。ヒッグス粒子の発見で著名な、欧洲原子核研究機構が進めている大型ハドロン衝突型加速器 (Large Hadron Collider : LHC) は、巨大科学の成果と言えるものであるが、これも、計算科学の力なくしては機能しない。更に、遺伝情報や、経済・金融・交通動態の解析にも計算科学の力が必須となっている。

近年の飛躍的な計算機の性能向上にともない、計算科学の適用領域は深まり、また広がっている。1970 年代に最初のスーパーコンピュータが誕生した当初は、建築物の強度計算や、比較的単純な流体解析等、応用領域は限定されていたが、現在では多様な物質・材料の構造・物性および機能の解析や、遺伝子レベルおよび人体全体の解析が実施可能になりつつある。

このような状況下において、多様な分野の研究者・技術者に世界最高水準の計算環境を提供することで、さまざまな社会課題の解決や産業利用の加速につながる成果を創出することを目的に、理化学研究所の「京」と全国 9 大学の情報基盤センターが中核機関となり、革新的ハイパフォーマンス・コンピューティング・インフラ (HPCI) が構築されている。

1.2 「京」による重点分野での研究の成果

「京」は HPCI の中核となるスーパーコンピュータである。この「京」の能力を最大限に活用して世界最高水準の研究成果を創出するとともに、その分野において計算科学技術推進体制を構築する取り組みを支援するため、2009 年に 5 つの戦略分野が設定され、重点的な取組みが開始されている。

「京」は 2012 年秋から本格的に稼働しており、従来は演算能力の不足によって実現できなかった詳細なモデルでの計算、あるいは現象全体を対象とした計算が実現しつつある。

- 戦略分野 1 予測する生命科学・医療および創薬基盤：細胞レベルでの生命現象の精密な理解等、生命の本質を理解するための基礎研究に加え、医薬品の開発の大幅な加速や、個別化医療等の実現といった社会課題の解決のための基礎的知見を得るために研究が進められている。
- 戦略分野 2 新物質・エネルギー創成：物質・材料の機能やナノ構造デバイスの電子機能を、基本理論に基づき解明・予測するための研究が進められている。高温超伝導材

1 計算科学をめぐる背景

料や高効率熱電変換素子、燃料電池用触媒等の探索のための重要な技術として期待されている。

- 戦略分野 3 防災・減災に資する地球変動予測：地球規模の環境変動シミュレーションをより精密に行うための研究、集中豪雨の直前予測につながる研究が行われている。また地震や津波などの被害予測につながる研究が進められている。
- 戦略分野 4 次世代ものづくり：先端的な流体機器やナノカーボンデバイスの設計・開発プロセスの大幅な高速化とコストダウンのためのシミュレーション技術、原子炉プラント丸ごとの耐震シミュレーションといった、ものづくりの高度化につながる研究が進められている。
- 戦略分野 5 物質と宇宙の起源と構造：素粒子加速器実験やブラックホール、超新星爆発といった極限的天体现象の観測を通して、宇宙の起源・物質の起源やそれらを支配する法則を理解するためのシミュレーションによる研究が進められている。

1.3 次世代の HPCI 計画

今後も、スーパーコンピュータの処理能力は飛躍的な進歩を遂げると期待されているが、計算機の進化にともない、計算科学が活躍する領域はますます拡大し、社会のさまざまな課題や産業競争力に直結する成果が創出されると期待される。

このような状況を鑑み、わが国としても引き続き長期的な視点から戦略的に研究開発を推進することが必要であるとの考え方のもと、次世代 HPCI 計画についての検討が進められている。

次世代の HPCI 計画では、従来にも増して計算科学からの社会貢献が重視されており、その認識のもと、以下のような基本合意が形成されている。

- 単にピーク性能の達成を誇るのではなく、HPCI を駆使して解決すべき社会的課題・期待される科学的ブレークスルーについて十分に検討・吟味のうえ、これを実現するためのシステムを構築する。
- 現時点での「京」などの HPCI を利用しているユーザーだけでなく、中長期的視野にたって HPCI を必要とする可能性のある研究課題をできるだけ抽出していく。
- アプリケーションのタイプによっては、汎用マシンで計算するよりも、専用に設計されたマシンを活用するほうがはるかに高速かつ効率的に計算できることが知られている。計算資源の有効利用のためには、汎用のアーキテクチャに加え、複数のアーキテクチャの導入を想定する。
- HPCI 技術を必要とするアプリケーションとして、大規模シミュレーションだけに限定せず、各分野で進行中の大型実験（観測）施設などで得られる大規模データをいかに効率よく解析していくかについても考察する。

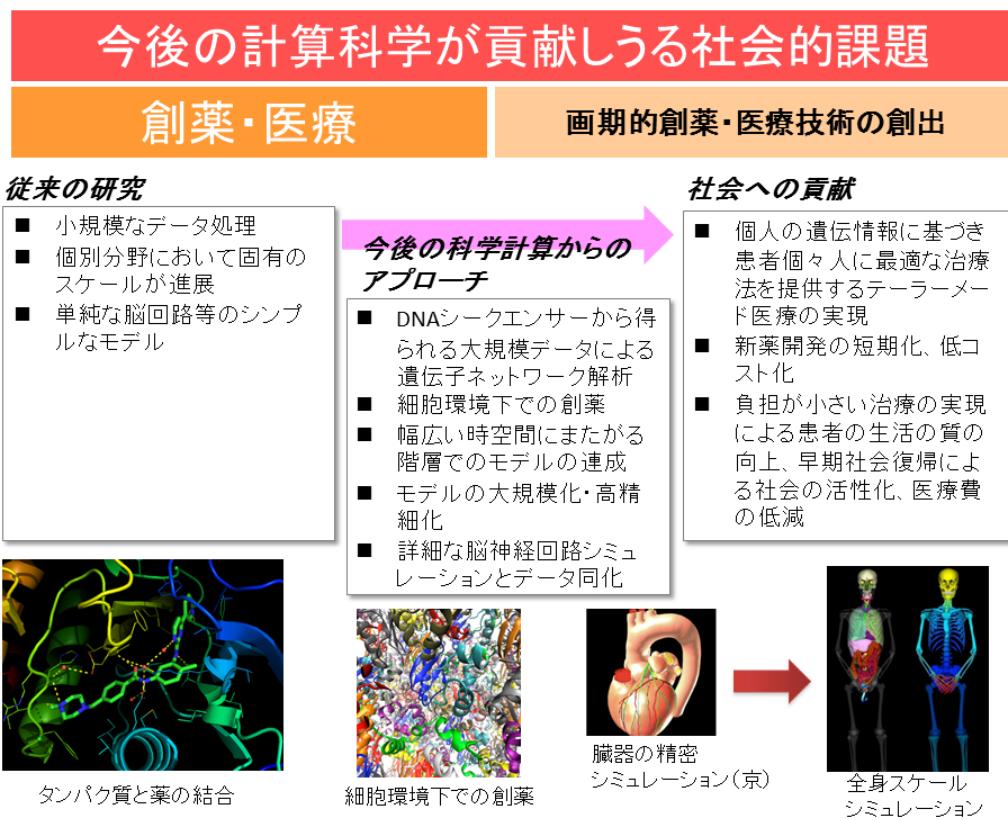
2. 今後の計算科学が貢献し得る社会的課題

大規模数値計算が、現在の我々の社会生活を支える産業や経済活動に不可欠な貢献をしていることは紛れもない事実であり、今後のスーパーコンピュータの性能向上により得られる成果は、現在の社会が抱えるさまざまな課題の解決に貢献し得る。ここでは、「創薬・医療」「総合防災」「エネルギー・環境問題」「社会経済予測」の4つの分野における社会的課題に対して、今後の計算科学により実現を目指す具体的な貢献について記述する。

社会的課題	具体的貢献
創薬・医療	画期的創薬・医療技術の創出
総合防災	科学的知見に基づく災害予測のシステム化
エネルギー・環境問題	エネルギー技術と環境との調和
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

2.1 創薬・医療

わが国はこれから急速な高齢化社会を迎える、国民の健康の増進はきわめて重要な国家的課題となる。健康の増進に資する画期的創薬・医療技術の創出には、その基盤として人体等における生命現象の理解が不可欠である。しかし、生命現象はあまりに多くの要素が絡み合って複雑に関係している現象であり、遺伝情報などの大規模データの解析、生命科学と物質科学との連携によるシミュレーション、分子から細胞・臓器・脳・全身スケールに至るマルチスケールシミュレーションとその医療応用などが不可欠となる。具体的には、ゲノム情報を超高速に読み取る次世代のDNAシークエンサーにより得られる膨大な個人ゲノム情報を用いて、複数の遺伝子が連携する遺伝子ネットワーク等を解析することで、がんなどの複合因子が関わる疾患の原因を明らかにし、個人の遺伝情報に基づき患者個々人に最適な治療法を提供するテーラーメイド医療の実現を図る。また、物質科学等で利用されてきた信頼性の高いシミュレーション手法を用いてタンパク質・薬剤結合予測を行うとともに、細胞・ウイルスまるごとの環境下でのシミュレーションを行うことで、新薬開発に必要なコストを大幅に低減、期間を大幅に短縮する。これらのシミュレーションは、生体分子を応用した新しい機能性を持つナノ分子材料の開発への展開も目指している。更に、分子から細胞・臓器・脳・全身に至るマルチスケールのシミュレーションは、例えば、心筋梗塞・脳梗塞などにおける血液中の血栓形成の理解など、複雑な疾患機構の解明に役立ち、患者への負担が小さい低侵襲治療やそれに必要な医療機器開発による患者の生活の質 (Quality of Life : QOL) の向上、更には早期社会復帰による社会の活性化、医療費の削減等の効果へつながる。



今後のスーパーコンピュータがもたらす莫大な計算能力が、神経系や細胞の詳細なシミュレーション、幅広い時空間にまたがるシミュレーション、そしてそれらのリアルタイムに近いデータ同化⁴などさまざまな面で生命分野の発展に大きく寄与することは間違いないなく、ひいては画期的創薬・医療技術創出の重要な科学基盤となり得るものである。

創薬・医療分野において今後、必要となる計算機性能を下表に示す。

⁴ 異なった観測・実験データと数値モデルを高度に融合する方法の一つ。

計算科学ロードマップ 概要

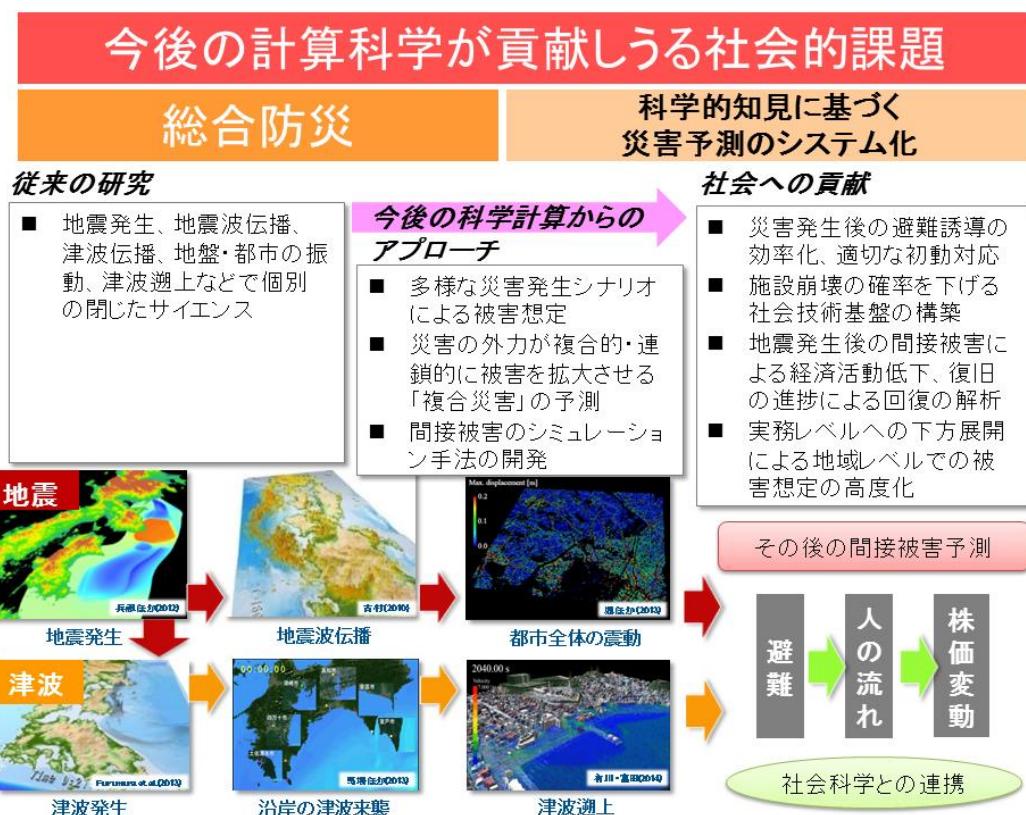
課題	要求性能 (PFLOPS)	要求メモリ バンド幅 (PB/s)	メモリ量 (PB)	ストレージ量/ ケース (PB)	計算時間/ ケース (hour)	ケース数	総演算量 (EFLOP)	概要と計算手法	問題規模	備考
個人ゲノム解析	0.0054	0.0001	1.6	0.1	0.7	200000	2700	シーケンスマッチング がんゲノム解析200,000人分のマッピングおよび変異同定	1人分の解析を1ケースとした。入力データを分割することで、細かい単位での実行、拠点をまたいだ実行も可能。整数演算中心のため「総演算量」はInstruction数とした。総浮動小数点演算量は45.864EFLOPとなる。	
遺伝子ネットワーク解析	25	89	0.08	0.016	0.34	26000	780000	ペ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		
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種の蛋白質(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	
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。	
高精度創薬	0.83	0.14	1	0.001	1	100	300	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	ファイルI/Oは終了時に1TBを1秒で書き出すことを想定し、1TB/s必要とした	
バイオデバイス設計	1.1	0.19	1	0.001	1	100	400	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	ファイルI/Oは終了時に1TBを1秒で書き出すことを想定し、1TB/s必要とした	
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 ⁻² ~2m/s、解像度1μs、10秒		
超音波シミュレーション								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)	※ 6.9	※ 7.6	※ 56	※ 3600	0.28	100	700	單一コンバートメント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 ⁻⁵ step	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・昆虫全脳詳細モデル 神経回路パラメータ推定・生理実験とシミュレーションの通信	※ 71	※ 60	※ 0.2	※ 20	28	20	140000	マルチコンバートメント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	100MB/S程度の外部との通信も想定	

※印の値は未だ精査中である。より精度の高い数値は Web で隨時公開する。

2.2 総合防災

(1) 地震・津波防災

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、大地震の備えを不斷に行な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の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、グローバリゼーショ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

計算科学ロードマップ 概要

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。

課題	要求性能(PFLOPS)	要求メモリ/バンド幅(PB/s)	メモリ量/PB	ストレージ量/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	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 (125m×125m×62.5m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(東北大震ペ)。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値はキャッシュに戻るので小さい。 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

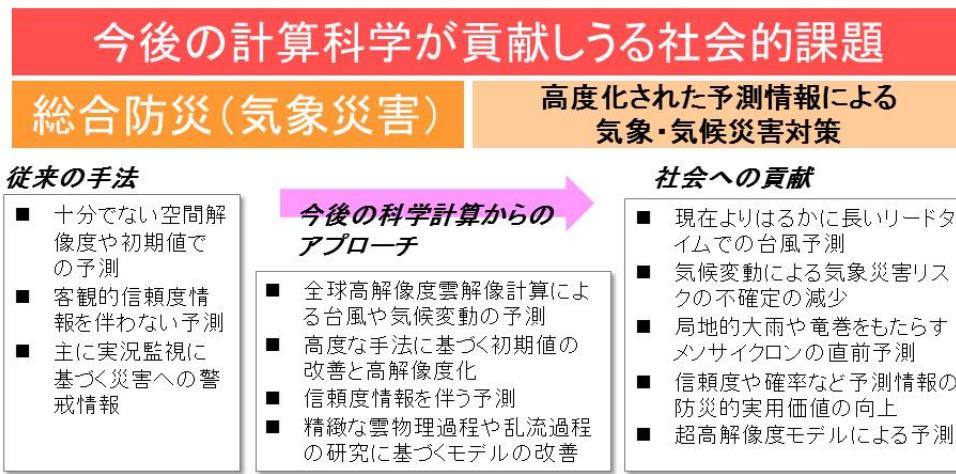
(注：地震発生から津波遡上は防災連携シミュレーションの内訳である)

(2) 気象災害

我が国は、集中豪雨などさまざまな気象災害にも見舞われやすい。国土の約7割を山地・丘陵地が占めるため土石流や地すべり・崖崩れが起きるリスクが大きい一方、人口や社会資産が平野部に集中しているため、洪水や高潮の危険にもさらされており、高い風水害リスクを抱えている。気象災害をもたらす現象は、比較的時間スケールの短い台風や集中豪雨、更には竜巻などの局地的な顕著現象だけではなく、積雪や干ばつなどより長い時間スケールの現象もある。これらによってもたらされる経済損失の軽減には、数十分先から数ヶ月先と、幅広い時間スケールの予測が不可欠である。これらの気象・気候現象が地球温暖化の進行によってどのように変化するのか予測を行い、またその精度を上げることは、防災対策の将来展望を見据えるうえで、我が国にとって喫緊の課題と言えよう。また、環境問題に関しては、現在、PM2.5のような越境大気汚染が深刻化している。これらの課題に取り組むため、その時代の最高性能の計算機を利用することにより最先端の研究開発をオールジャパンで推進していくことが、将来の減災のために重要である。

このような現状を踏まえて、気象災害の減災のために次世代スペコンで行うべき研究課題として、より高度化された初期値作成手法に基づく顕著な気象現象の予測研究、全球高解像度雲解像計算による気候変動予測研究、精緻な雲物理過程や乱流過程についての研究が挙げられよう。

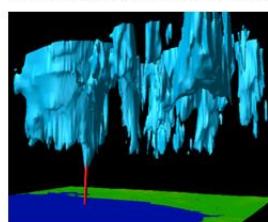
はじめに、数値モデルによる気象予測で大きな課題は、初期値の精度の問題である。短期予報では初期条件が支配的であり、4次元変分法やアンサンブルカルマンフィルターなどデータ同化手法の研究は、次の時代の計算機環境での大きなターゲットとなる。



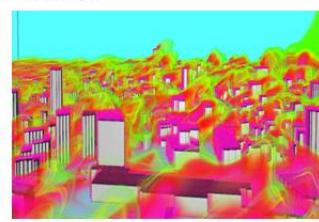
図の提供:AICS 吉田龍二(左), 気象研究所 益子涉(中央), 東北大 Guixing Chen(右)



台風予測、気候変動



局地的大雨や竜巻



超高解像度シミュレーション

次に、気象・気候に用いられる数値モデルの空間解像度は未だ十分ではない。数値モデルでは、細かい現象は何らかの粗視化による近似が行われるが、それが予測の不確実性の大きな原因となっている場合がある。歴史的には、積雲対流を粗視化してきた。この手法は、中緯度の総観規模現象を対象とする予測では十分に有効であるが、気象災害に直接つながる顕著現象を引き起こす積乱雲を直接表現するためには適用できない。このため、気象災害を引き起こす台風などの顕著現象の将来予測を行うためには、積雲対流を粗視化せずに直接表現する全球高解像度雲解像計算による気候変動予測を行うことが必要となる。

また、積雲対流だけでなく、これまで粗視化されてきた雲粒・雨滴の物理そのものや、大気境界層での乱流についても、より精緻化した数値モデルの開発・検証が急ピッチで進められている。

上記の課題に対する今後の期待は大きい。京や次世代スパコンにおける気象・気候分野での先駆的な試みの成果は、必ず、将来の気象・気候予測へ寄与する。例えば、2002年の地球シミュレータの登場により、気候変動に伴う台風の強度や強雨の出現頻度についてのより信頼性の高い情報が得られるようになった。これらは IPCC 報告書に直接的に寄与するとともに、気象庁の現業数値予報システムの開発にも重要な技術情報を提供した。

次世代スパコンでは、京での大規模計算が、多くの事例で行えるようになることが期待され、現在よりはるかに長いリードタイムでの台風予測や、局地的大雨や竜巻をもたらすメソサイクロンの直前予測などについての本格的な実証研究が可能となる。ストームスケール気象災害予測の実用化には、高頻度高密度の観測データをいかに同化するかという技術的な問題についての研究の進展とともに、そのようなデータを観測しつつ迅速に収集するシステムの構築が不可欠であり、ビッグデータの有効利用が一つの鍵となる。更に、アンサンブル予報によるあらゆるスケールでの予測誤差の定量評価は、数値予報による予測情報の防災的実用価値を大幅に高める。現在は主として実況監視に基づいていたり、警戒情報を、リードタイムに応じた確率的予測情報や最悪シナリオの提示で補えれば、コストとリスクの大きさに基づいた防災対策が可能となり、気象災害に伴う被害を大きく軽減できる可能性がある。

今後これらのテーマを遂行するのに必要な計算機要求は以下にまとめてある。

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)	メモリ量 (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、SR16000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)
局所的・集中的大雨、 熱帯気象の高度予測	220	270	0.7	5	580	2	900000	大気モデル: NICAM(有限体積法), アンサンブルデータ同化: LETKF	水平解像度3.5km、鉛直100層、1000アンサンブルメンバー、3時間おきの同化サイクル、2ヶ月積分	10万ノードを仮定(大気モデルのノードあたり隣接通信1GB/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

※印の値は未だ精査中である。より精度の高い数値は Web で隨時公開する。

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

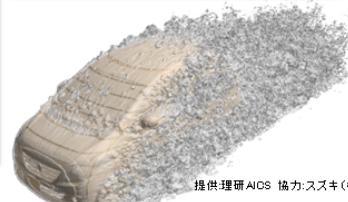


今後の科学計算からのアプローチ

- 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
- 二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



提供:理研AICS 協力:スズキ(株)
自動車のフルスケール詳細空力解析。
自動車の燃費向上に貢献。

2 今後の計算科学が貢献し得る社会的課題

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る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。

計算科学ロードマップ 概要

課題	要求性能 (PFLOPS)	要求メモリ バンド幅 (PB/s)	メモリ量 (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・大域的非定常乱流	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	41000	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
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=10^6～10^7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、スピナップ24時間間)	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	110	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

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。

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

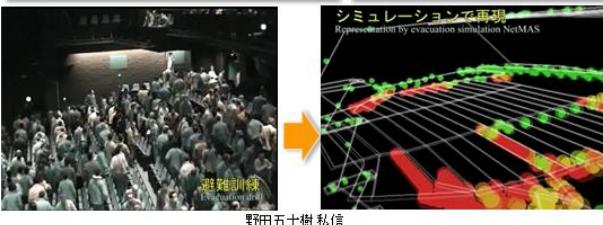
- 交通・経済・電力といった個々の現象ごとにモデルをつくりシミュレーション
- エージェントモデルは、メカニズムの把握が中心
- モデル間の相互作用について客観性・信頼性を持つ基本法則がない

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、今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
野田五十樹 私信



目的を持って移動する自動車の
交通シミュレーション
服部宏充 私信

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、現象を不斷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

計算科学ロードマップ 概要

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、今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。

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)	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
自動車交通流のリアル タイムシミュレーション	1000	※ 100	※ 0.00011	0.001	2.8E-08	1000	0.1	地球上の全自動車交通 規模(10万台、道路総延 長3400万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 10^7 台と推定)	10^7 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。一台あたり 10^3 FLOPと推定。
株式取引所ルールの 最適化	2100	0.0001	0.00000001		0.0024	10000	180000	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 10^4 ケース計算 する	整数演算が中心 「要求性能」「総演算 量」はインストラクション 数

※印の値は未だ精査中である。より精度の高い数値はWebで隨時公開する。

3. 分野連携による新しい科学の創出

従来は異なる研究分野と見なされていた諸分野を有機的に結合することにより、新しい科学を創出することが期待できる。ここでは、新たな学術フロンティアを切り開く「基礎科学の連携と統一理解」、近未来に重要性が増すと考えられている「ビッグデータの有効利用」、そして、大規模データ処理が発生するため計算科学との連携が必須となる「大規模実験施設との連携」について記述する。

分野	連携例
基礎科学の連携と統一理解	基礎物理における連携 宇宙科学と地球科学の連携による惑星科学 生命科学、物質科学、ものづくりの分野横断連携
ビッグデータの有効利用	計算科学基盤技術の創出と高度化 有効利用例①：衛星・観測データの有効利用 有効利用例②：ゲノム解析
大規模実験施設との連携	X線自由電子レーザー施設 SACLAC 等の大規模実験施設との連携

3.1 基礎科学の連携と統一理解

基礎科学におけるあくなき知の探求は、どの時代においても科学技術を発展させる強い動機づけとなっている。一見すると応用には結びつかないような基礎科学的研究が、次世代の応用につながり我々の生活を豊かにしてきた例も少なくない。これまで、細分化され分野ごとに発展・深化してきた基礎科学の各分野を、計算科学の手法により強く連携させ、新たな学術フロンティアを切り開いていくことが期待されている。ここでは、宇宙・物質・生命に関連する3つの連携事例を代表例として示す。

(1) 基礎物理における連携

素粒子・原子核・宇宙天文物理などの基礎物理分野では、究極的な物理法則を見つけること、そしてその物理法則を用いて多様な物理現象を理解することを目指してきた。

従来は、各分野に細分化され、計算機性能の限界などの要因もあり個別分野において基礎法則の確立が行われてきた。しかし、科学技術の進歩により、各分野の基礎法則のみでは理解できない新たな実験事実や観測事実が明らかになってきている。そこで、分野ごとに発展・深化してきた各分野を計算科学の手法により強く連携させ、新たな学術フロンティアを切り開いていくこと（未知への挑戦）、そして各分野の基礎法則のみでは理解できない新たな実験事実や観測事実を明らかにし、理解すること（森羅万象の統一理解）を目指している。そのためには、さまざまな未解決問題を克服する新しい理論を見つけ、スーパーコンピュータによる大規模な数値シミュレーションを用いて実際に計算していくことが必要である。近年の大規模計算によりこれまで定性的な理解にとどまっていた事象につい

分野連携における新しい科学の創出

**基礎科学の連携と
統一的な理解**

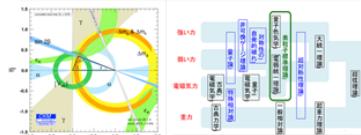
目標・目的、克服すべき学術的課題

- 細分化し分野ごとに発展・深化してきた基礎物理の各分野を計算科学の手法により強く連携させ、新たな学術フロンティアを切り開いていくこと(未知への挑戦)
- 各分野の基礎法則のみでは理解できない、新たな実験事実や観測事実を明らかにし、究極的な物理法則の解明と多様な物理現象を理解すること(森羅万象の統一理解)

基礎物理(素粒子・原子核・宇宙天体物理)における連携

従来の研究

- 個別分野での物理法則の理解(計算機性能の限界による単一の時間または空間スケールにおける物理学)

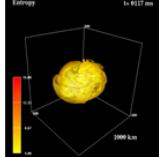


小林・益川行列要素の決定※1

究極の統一理論の探求

大規模計算で実現されること

- 究極的な物理法則の解明と多様な物理現象の理解
- 重大未解決問題解明に向けた知的フロンティアでの研究の促進
- 大規模計算により、定性的理解から定量的理



※1: CKMfitter Group (J. Charles et al.), Eur. Phys. J. C41, 1-131 (2005) [hep-ph/0406184],
updated results and plots available at: <http://ckmfitter.in2p3.fr>

超新星爆発の3次元液体シミュレーション(瀧脇 et al. 2013年)

ても定量的理解への転換が可能となりつつある。

基礎法則の連携と計算科学の手法を仲立ちとした分野連携により、重大未解決問題の解明に向けた知的フロンティアでの研究が促進され、究極的な物理法則の解明と多様な物理現象の理解につながっていく。

基礎物理における連携において今後、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)	メモリ量/PB	ストレージ量/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
カイラル対称性とQCDに基づく有効バリアン間相互作用の決定とその応用	510	390	0.066	0.5	880	10	16000000	格子QCD(カイラル5次元型),ハイブリッドモンテカルロ法,CG法	問題規模 格子点: 128^4x32、格子間隔: 0.1 [fm] 以下	ノード数を10^4ノードを仮定しノードあたり性能を、オンチップメモリ容量 200MB, オンチップメモリバンド幅 6TB/s, ネットワーク帯域 1μ sec程度、ネットワークバンド幅128GB/sを想定。
閉殻を仮定しない殻模型計算	100	10	0.1	※ 0.0001	28	100	1000000	モンテカルロ殻模型法による原子核の構造計算、軽い核	空間を調和振動子基底で展開し、7~8主殻までを考慮。10^9ステップ数。	メモリ量は10000ノード × 10GBで計算。ただし、問題をノード間で分割して持つことで削減可能。
相対論的輐射流体計算による超新星爆発メカニズムの探究	18	70	1.6	1.3	1200	10	780000	ニュートリノ/輐射輸送計算(超新星爆発)	空間512x64x128位相空間24^3で1秒分の時間を計算	100Tflops/ノード × 10000ノード、通信速度60GB/s/ノード

※印の値は未だ精査中である。より精度の高い数値はWebで隨時公開する。

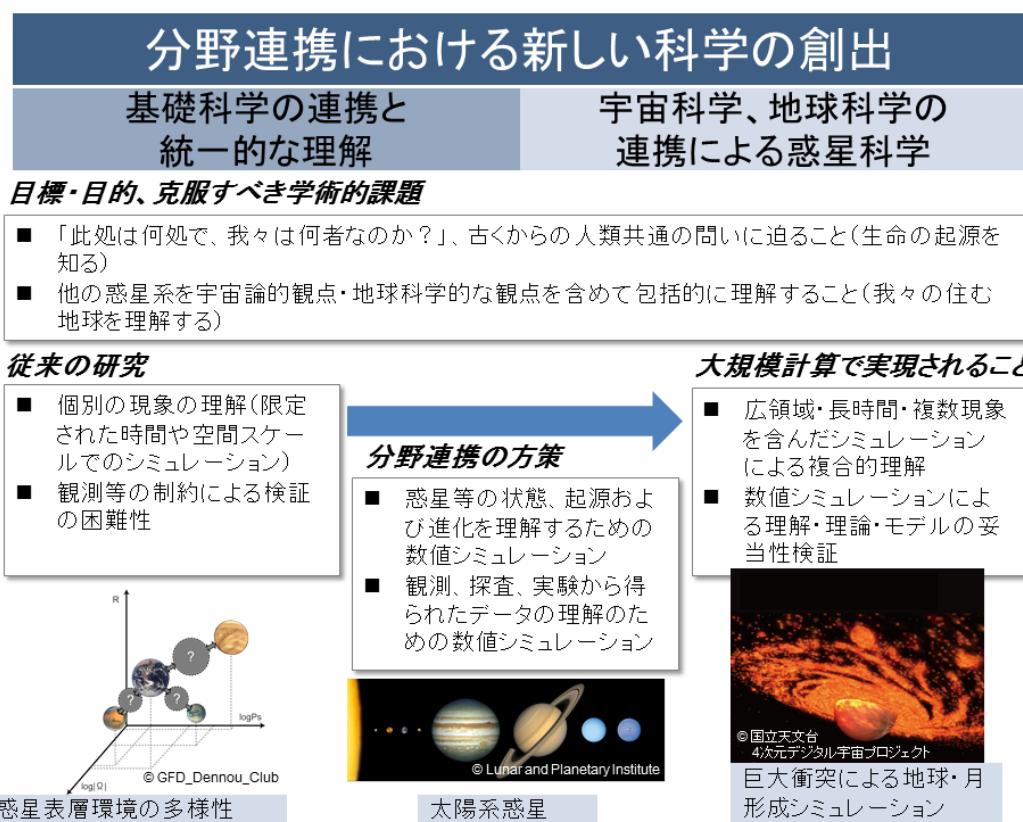
3 分野連携による新しい科学の創出

(2) 宇宙科学、地球科学の連携による惑星科学

「此処は何処で、我々は何者なのか?」、古くからの人類共通の問い合わせに迫ることが宇宙科学、惑星科学の究極の目標である。近年の太陽系探査ならびに太陽系外惑星観測などにより、この問い合わせを具体的かつ科学的課題として考えることが可能になりつつある。更に、他の惑星系を宇宙論的観点・地球科学的な観点を含めて包括的に理解することは、我々の住む地球を理解することにつながる。今後、国内外で、多くの惑星探査が計画・実施されていくが、計算科学であるシミュレーション技術や、現実世界の影響をモデリングに適用するデータ同化技術がこれらの企画立案と実施には必須であり、深く寄与・貢献することが期待されている。

宇宙科学および地球科学と計算科学との連携により広領域・長時間・複数現象を含んだシミュレーションが可能となり、複合的な理解が可能となる。また、数値シミュレーションによる理解・理論・モデルの妥当性検証も可能となり、我々の住む地球を理解し、我々生命の起源を知る大きな一歩へつながっていく。

宇宙科学、地球科学の連携による惑星科学において今後、必要となる計算機性能を下表に示す。



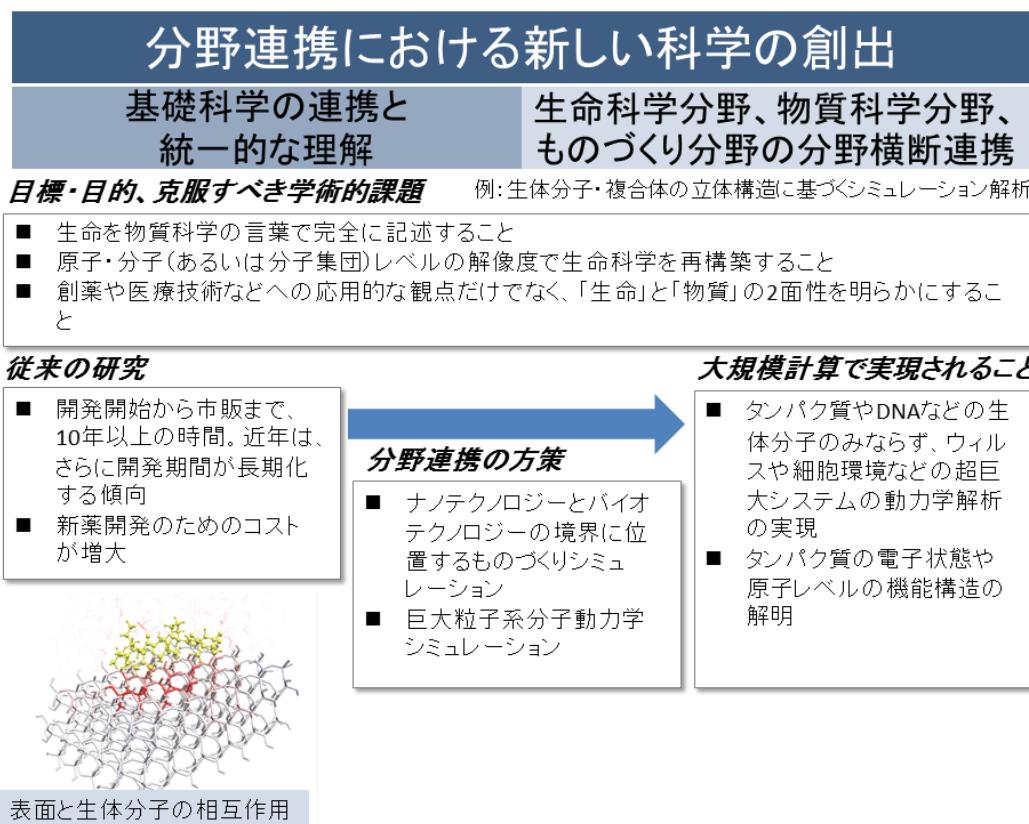
計算科学ロードマップ 概要

課題	要求性能 (PFLOPS)	要求メモリ バンド幅 (PB/s)	要求メモリ量/ 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
惑星系形成のシミュレーション	4.2	0.021	0.00001	0.05	1000	100	1500000	N-体 シミュレーション	粒子数: 1億体 積分時間: 1億年 (ステップ数: 10G)	論文で報告されているアルゴリズムとGRAPEにおける計測結果から算出。1ステップ1粒子あたり1万5千演算、グループ内粒子数 128。メモリアクセスは6000 演算あたり32 バイト
地球・惑星の形成シミュレーション	520	29	0.001	1	24	100	4500000	SPH 計算	粒子数: 10億体 積分時間: 数ヶ月 (ステップ数: 100M), 演算量 NlogN	演算量、メモリ転送量、メモリ使用量は、TSUBAMEでのプロファイルを元に外挿
惑星表層環境の形成と進化シミュレーション	5.6	25	0.01	4	100	1000	2000000	流体計算 + 輻射計算 (スペクトル法+差分法)	格子数: 3840x1920x192, 100 ケース × 10 惑星, 積分時間: 10年 (ステップ数: 30M), 1ステップ1格子あたりの演算量: 50K	演算量、メモリ使用量は、TSUBAMEでのプロファイルを元に外挿

3 分野連携による新しい科学の創出

(3) 生命科学分野、物質科学分野、ものづくり分野の分野横断連携

タンパク質やDNAなどに代表される生体分子は、生命科学的側面から見ると「生命」を構成する基本単位に位置づけられるが、物質科学的側面から見ると対称性の少ない非常に複雑な「物質」であり、「生命」と「物質」の二面性を持つ存在である。したがって、タンパク質やDNAなどの生体分子の研究、特にその立体構造に基づく解析は、生命科学と物質科学という大きな2分野の境界に位置する課題であり、それぞれの分野で培ってきた方法を横断的に集約し駆使することで、大きなブレークスルーが期待できる。



「生命科学的側面」と「物質科学的側面」は相補的であり、この二つを融合することによって、創薬や生体分子を活用したものづくりなど社会的に重要な課題において飛躍的な発展が可能になる。例えば、薬剤のターゲットであるタンパク質の生命活動における働きは生命科学的な研究対象であるが、薬剤とタンパク質の結合は物理化学的相互作用であり、そこでは物質科学的方法論が有効である。今後のスーパーコンピュータの高度化と合わせ、物質科学分野で培われた精度の高い計算方法をタンパク質-薬剤結合解析に応用していくことで、創薬分野でのブレークスルーが期待できる。更には、タンパク質やDNAなどの生体分子のみならず、ウィルスや細胞環境などの超巨大システムの動力学解析が実現し、タンパク質の電子状態や原子レベルの機能構造を解明することが想定される。

生命科学分野、物質科学分野、ものづくり分野の分野横断連携において今後、必要となる計算機性能を下表に示す。

計算科学ロードマップ 概要

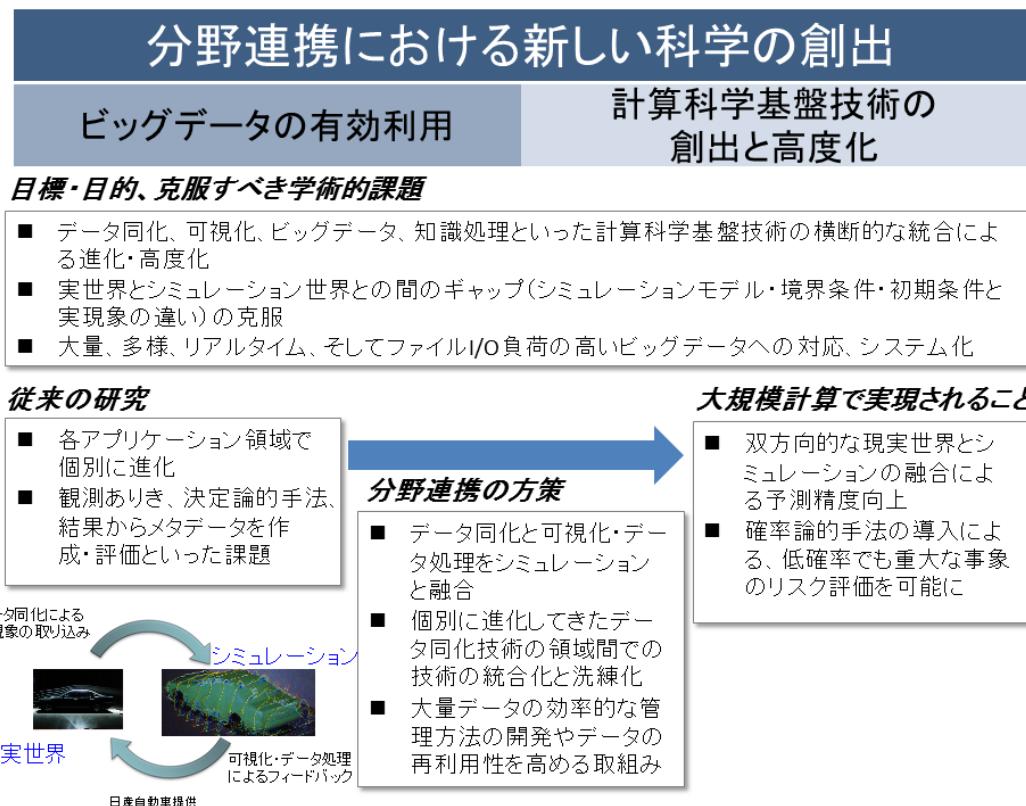
課題	要求性能 (PFLOPS)	要求メモリ バンド幅 (PB/s)	メモリ量/ ケース (PB)	ストレージ量/ ケース (PB)	計算時間/ ケース (hour)	ケース数	総演算量 (EFLOP)	概要と計算手法	問題規模	備考
創薬などMD・自由エネルギー計算	1000	400	0.0001		0.0012	1000000	4300000	全原子分子動力学シミュレーション	ケース数:10万化合物×10標的蛋白質(10万原子程度)	B/F=0.4, 数百から数千ケース同時に実行することを想定しているので、実行時に必要な全メモリ量。各ケースの実際の実計算時間は、表の値の数百～数千倍となる。メモリ量/ケースは100ノード実行時を想定。
高精度創薬	0.83	0.14	1	0.001	1	100	300	薬品とタンパク質間相互作用の量子化学計算	フラグメント分子軌道法で～500残基程度までの計算を統計的ゆらぎを含めた複数サンプルで行う	計算要求は「物質科学」のフラグメント分子軌道法のところを参照
バイオデバイス設計	1.1	0.19	1	0.001	1	100	400	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	計算要求は「物質科学」のフラグメント分子軌道法のところを参照
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

3.2 ビッグデータの有効利用

社会的課題の解決を促進する研究や、従来の計算技術の限界を超えた知の探求を行うためには次世代の計算科学技術基盤が必要である。特に近年、大規模数値シミュレーション、衛星・観測データ、個人のゲノム情報、大規模実験施設で得られる実験データなどの量が飛躍的に増加しており、いわゆるビッグデータの効率的な利用技術などの計算科学技術基盤が求められている。ここでは、冒頭に必要な計算科学技術基盤のあり方と高度化について述べ、その後、2つの代表的な連携事例を示す。

(1) 計算科学基盤技術の創出と高度化

実世界で起こる現象は現象自体が複雑であり、その因果関係を正確に把握することは難しい。多くの場合、現実世界のありのままを模擬することはできず、シミュレーションは対象とする実現象（問題）を理想化して計算することになる。したがって、現実世界で起こる現象とシミュレーションする現象との間には、少なからずギャップが存在する。現実世界の問題の特徴をうまく再現できるような方程式群の形式を選定し、関連するパラメータを決めるプロセスをモデリングと呼ぶ。モデリングは観測や実験結果に対する洞察から得られた知見を基にしているが、シミュレーションの正しさや精度に影響する非常に重要なプロセスである。



計算科学ロードマップ 概要

従来、モデリングおよびそれに関わる各種技術は各アプリケーションの分野ごとに個別の技術的進化を遂げてきたが、共通部分も多い。例えば、現実世界の影響をモデリングに適用する技術であるデータ同化は、気象をはじめ、石油掘削、制御、ものづくり、創薬や分子シミュレーションなどの分野でも研究・活用されている。また、結果の解釈の一助となる可視化技術もさまざまな研究領域で利用され、個別の現象に適した表現方法が研究されている。

計算科学基盤技術の創出と高度化において今後、必要となる計算機性能を下表に示す。

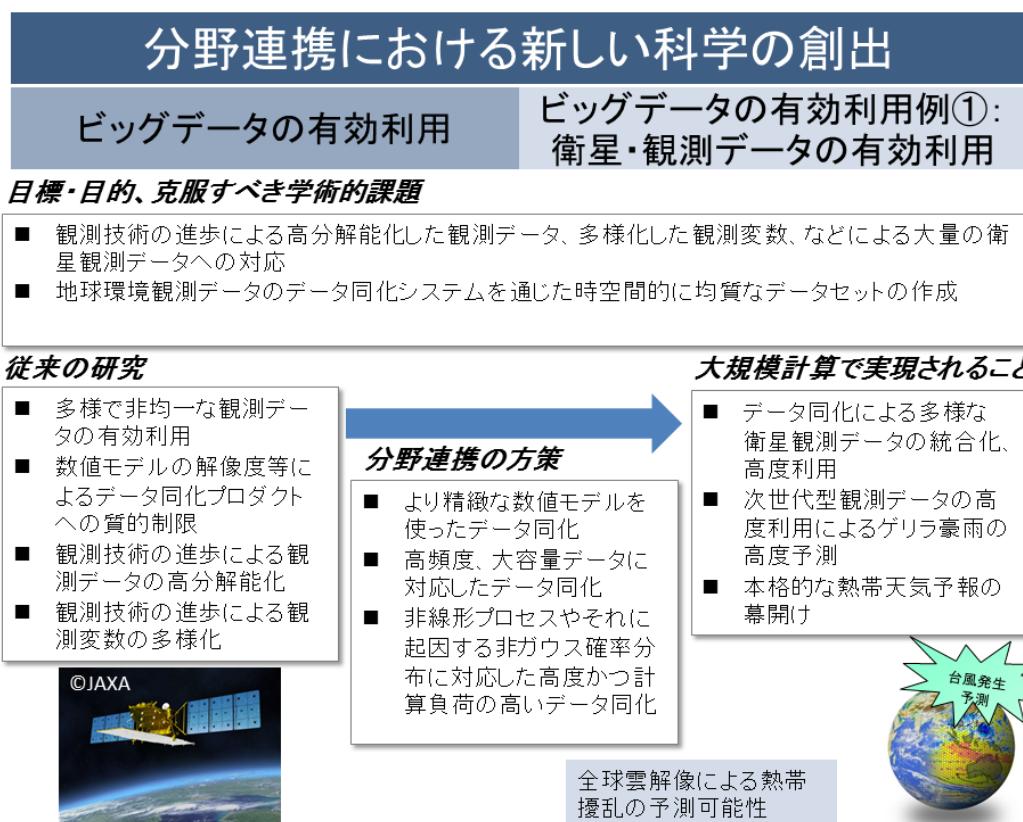
課題	要求性能 (PFLOPS)	要求メモリ バンド幅 (PB/s)	要求メモリ量/ ケース (PB)	ストレージ量/ ケース (PB)	計算時間/ ケース (hour)	ケース数	総演算量 (EFLOP)	概要と計算手法	問題規模	備考
並列レンダリング	200	61	0.8	10	0.5	1	360	ポリュームレンダリング(レイキャスト、ファイルベース)		対象によって問題規模等は異なるため、典型的な例で概算
並列レンダリング	200	61	2	1	0.5	1	360	ポリュームレンダリング(In situ)		対象によって問題規模等は異なるため、典型的な例で概算
データ圧縮	500	25	8	10	0.5	1	900	POD圧縮(ファイルベース)		対象によって問題規模等は異なるため、典型的な例で概算

3 分野連携による新しい科学の創出

(2) ビッグデータの有効利用例①：衛星・観測データの有効利用

大気、海洋、陸域の物理・化学および生物環境に関する観測データは、環境変動の監視・検出や影響予測のための基礎データとして重要な役割を果たしており、日々の天気予報から地球規模の気候変動まで幅広い環境問題に適切に対処することに貢献している。これらのデータは、現場における直接観測に加え、人工衛星からのリモートセンシングなどさまざまな方法により観測が行われ、その利用分野も広い範囲に及んでいる。ただし、それぞれの観測データは異なる場所、時間で得られており、また観測される物理量変量や精度等もさまざまであるため、単に既存の観測データをまとめただけではそのまま実際に利用することは難しい。そこで、データ同化と呼ばれる、数値モデルを用いて異なった観測データを統合する手法により、より使いやすいデータセットに加工されている。

大規模なデータ同化は、これまで気象・気候分野での技術的発展が顕著であった。しかし、最近では、設計制御、石油掘削、分子シミュレーションなど他の分野においても適用が図られており、各アプリケーション分野のコミュニティに閉じていたデータ同化技術は、コミュニティを越えて共通化する動きが起きている。また、観測技術の進歩による高分解能化した観測データ、多様化した観測変数などによる大量の衛星観測データおよびそのデータを用いたシミュレーションの双方の桁違いの大容量化に対応するために、ビッグデータを扱うデータ同化技術のイノベーションが起こりつつある。



計算科学ロードマップ 概要

データ同化技術の進化にともなって、シミュレーションが高分解能化・精緻化することにより、ゲリラ豪雨や熱帯天気予報と言った社会的インパクトの高い局所的な気象現象の予測などに正面から取り組むことが可能となっていく。

衛星・観測データの有効利用において今後、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)	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
局所的・集中的大雨、熱帯気象の高度予測	220	270	0.7	5	580	2	900000	大気モデル: NICAM(有限体積法)、アンサンブルデータ同化:LETKF	水平解像度3.5km、鉛直100層、1000アソサンブルメンバー、3時間おきの同化サイクル、2ヶ月積分	10万ノードを仮定(大気モデルのノードあたり隣接通信1GB/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
統合地球環境再解析	3.1	13	0.018	0.022	18	240	48000	4次元変分法	格子点: 大気 640x320x150, 海洋 3600x1800x150 Δt : 大気1min, 海洋 30sec. 結合 10min 100イタレーション 積分時間: 3month	B/F値: 大気4.66, 海洋4.24 演算量、メモリ使用量は、ES2のプロファイルを元に精査。メモリ転送量は、ソースから見積もったB/F値をもとに、演算量から算出(キャッシュは考慮していない)。

3 分野連携による新しい科学の創出

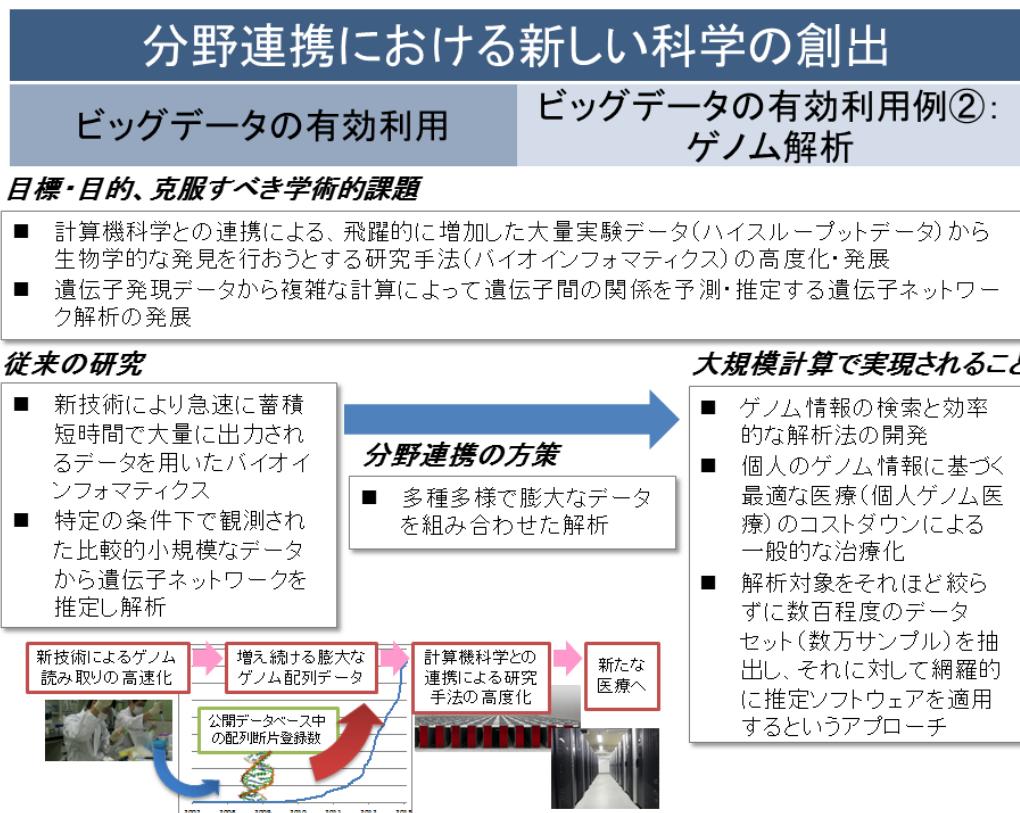
(3) ビッグデータの有効利用例②：ゲノム解析

ヒトゲノム計画は、分子生物学におけるマイルストーンの一つであり、たった一人のDNA解読に世界の多くの分子生物学者が関わり長い年月を要した。しかし、近年になって次世代DNAシークエンサーと呼ばれる超高速かつ低コストでDNAを解読する装置が開発され、個人のゲノム情報を含むさまざまな細胞のゲノム解析が容易に行うことが可能となった。

分子生物学では、細胞内の大量の遺伝子発現を同時計測可能なDNAマイクロアレイなどの登場により、実験で得られるデータの量が飛躍的に増加している。それらの大量データ、いわゆるハイスループットデータから計算科学を用いて生物学的な発見を行おうとする研究手法（＝バイオインフォマティクス）が行われるようになっており、計算科学との連携が必要な重要な1分野として認識されている。

生命科学におけるデータ解析では、ゲノム配列データだけではなく遺伝子発現データやDNA修飾のデータ（エピゲノム）、タンパク結合など多種多様で膨大なデータを組み合わせて解析が行われる。今後開発される観測技術によってより多くのデータが蓄積されることが予想され、観測技術の進展にしたがって多様な解析ソフトウェアが組み合わされて利用していくことになる。

本分野の研究の進展により、ゲノム情報の検索と効率的な解析法が開発され、現在は極めて高価な治療である個人のゲノム情報に基づく最適な医療（個人ゲノム医療）が、一般的な治療へとコストダウンを図ることができるようになる。



計算科学ロードマップ 概要

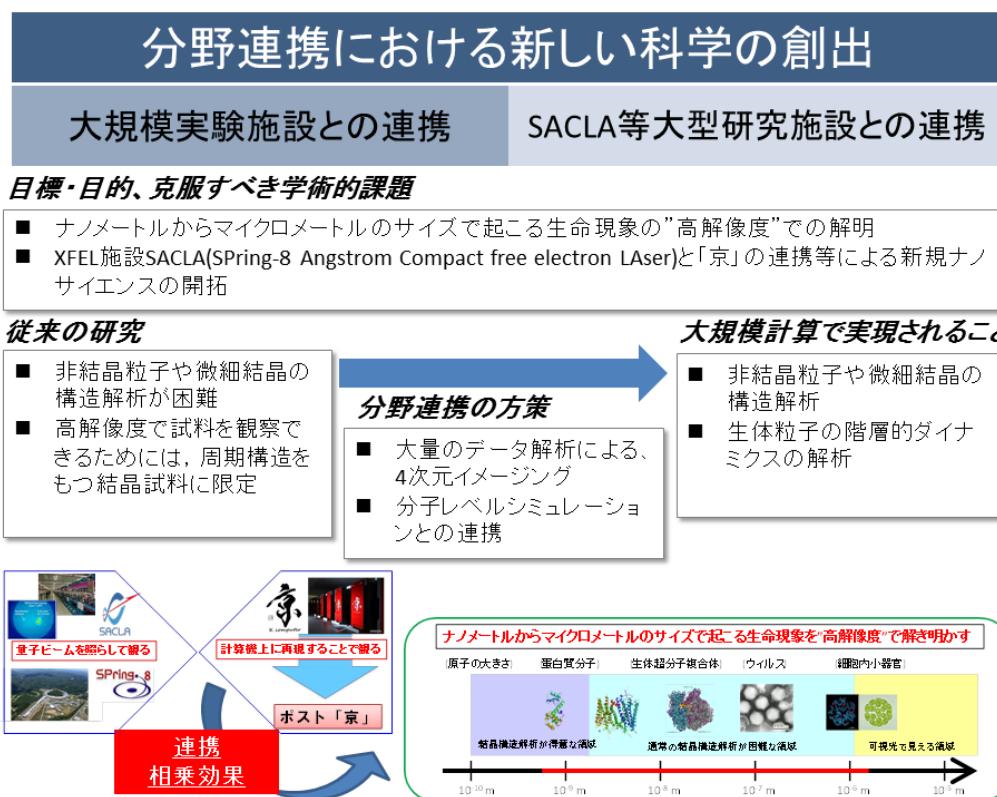
ゲノム解析において今後、必要となる計算機性能を下表に示す。

課題	要求性能 (PFLOPS)	要求メモリ バンド幅 (PB/s)	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
個人ゲノム解析	0.0054	0.0016	1.6	0.1	0.7	200000	2700	シーケンスマッチング がんゲノム解析200,000人分のマッピングおよび変異同定	1人分の解析を1ケースとした。入力データを分割することで、細かい単位での実行、拠点をまたいだ実行も可能。整数演算中心のため「総演算量」はInstruction数とした。総浮動小数点演算量は45.864EFLOPとなる。	
疾患遺伝子発見のための統計的解析	9.9	0.0002	200	2	140	5	25000	ゲノムワイド連鎖解析 (GWAS)	ヒトゲノム3Gbp x 200,000人分、1ケース4万人	メモリ量は800GB/node、ノード数25万を仮定

3.3 大規模実験施設との連携

(1) X線自由電子レーザー施設 SACL A等の大型研究施設との連携

XFEL (X線自由電子レーザー) は、波の位相がきれいにそろったレーザーの性質を持つ超高輝度の X 線を発生させることのできる光源であり、これまで構造を解くのが難しかった非結晶粒子や微細結晶の構造解析に威力を発揮すると期待されている。2011 年 3 月に完成した XFEL 施設 SACL A(SPring-8 Angstrom Compact free electron LAs er)では 1 日に最大で約 500 万枚の回折パターンが得られるため大量のデータ処理を行う必要があり、計算機科学技術との連携の重要性が謳われている。特に、生体粒子の動態をも含めた 4 次元イメージングに期待が高まっている。



また、SACL A による非結晶試料のイメージング実験では、10 ナノメートルからマイクロメートルのサイズの生体粒子の姿を、ナノメートル程度の解像度で捉えることが可能である。この空間スケールは、粗視化 MD 法⁵など分子シミュレーションのよいターゲットとなる。大規模分子シミュレーションを用い、SACL A の実験データを解析することで、生体粒子の階層的ダイナミクスの研究が進み、この空間スケールで起こる生命現象の理解につながる。

大型研究施設と計算科学の連携により、新規ナノサイエンスが開拓され、ナノメートル

⁵ 数から数十の原子を 1 つの単位として表現したモデルを用いて計算を行う手法。目的に応じて、どのくらいの原子数を粗視化の一単位とするかが決定される。

計算科学ロードマップ 概要

からマイクロメートルのサイズで起こる生命現象の高解像度での解明へとつながっていく。
大規模実験施設との連携において今後、必要となる計算機性能を下表に示す。

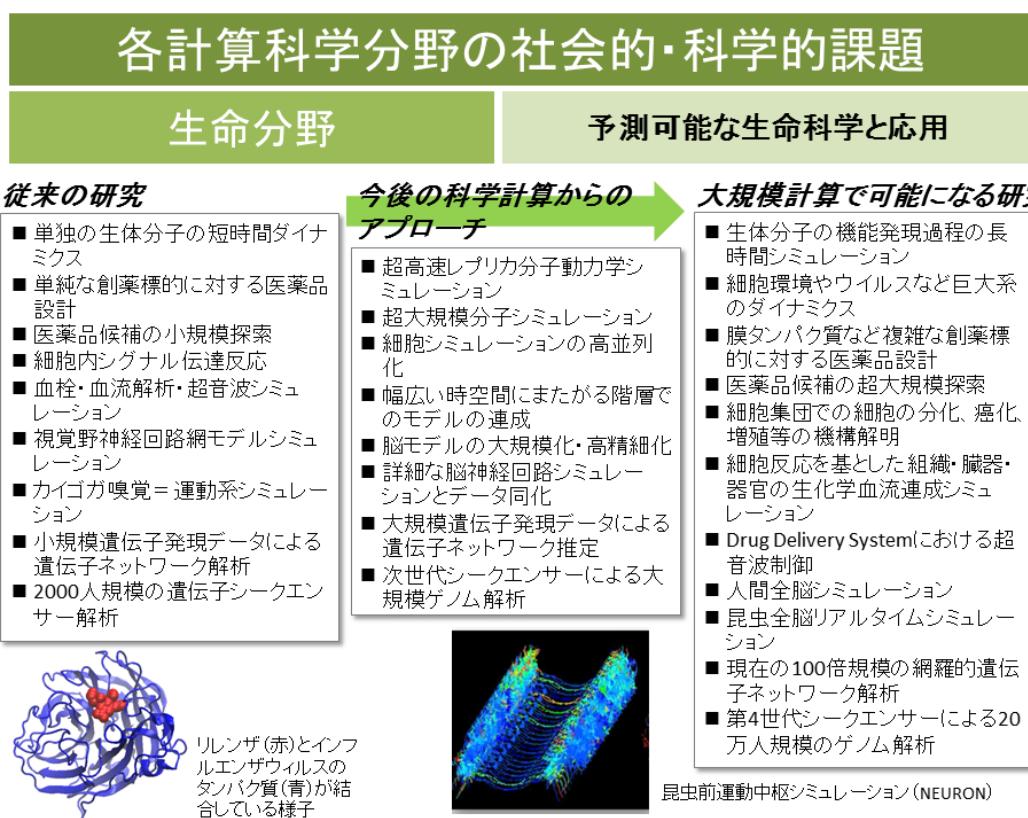
課題	要求性能 (PFLOPS)	要求メモリ バンド幅 (PB/s)	メモリ量/ ケース (PB)	ストレージ 量/ケース (PB)	計算時 間/ケー ス (hour)	ケー ス数	総演算量 (EFLOP)	概要と計算手法	問題規模	備考
大量実験データ解析に による4次元イメージング	2	0.01	0.000001	0.000001	2.8E-11	1E+12	200	構造分類、3次元構造構 築、時間軸推定のための 統計処理	10^7 イメージ× 10^5 イ メージの相関計算で、 合計 10^{12} 回の相関 計算。1回の相関計 算を1ケースとした。1 イメージあたりのサイ ズは数百MB	通信、ファイルI/Oは引き続き調 査必要。特にファイルI/Oがボト ルネックとなる可能性あり。京で はローカリティを考慮したI/Oに より最適化している。
実験解析結果に基づく 動的構造モデリング	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

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、平成26年5月末日での見積もりである。未だ精査の余地があり、隨時、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

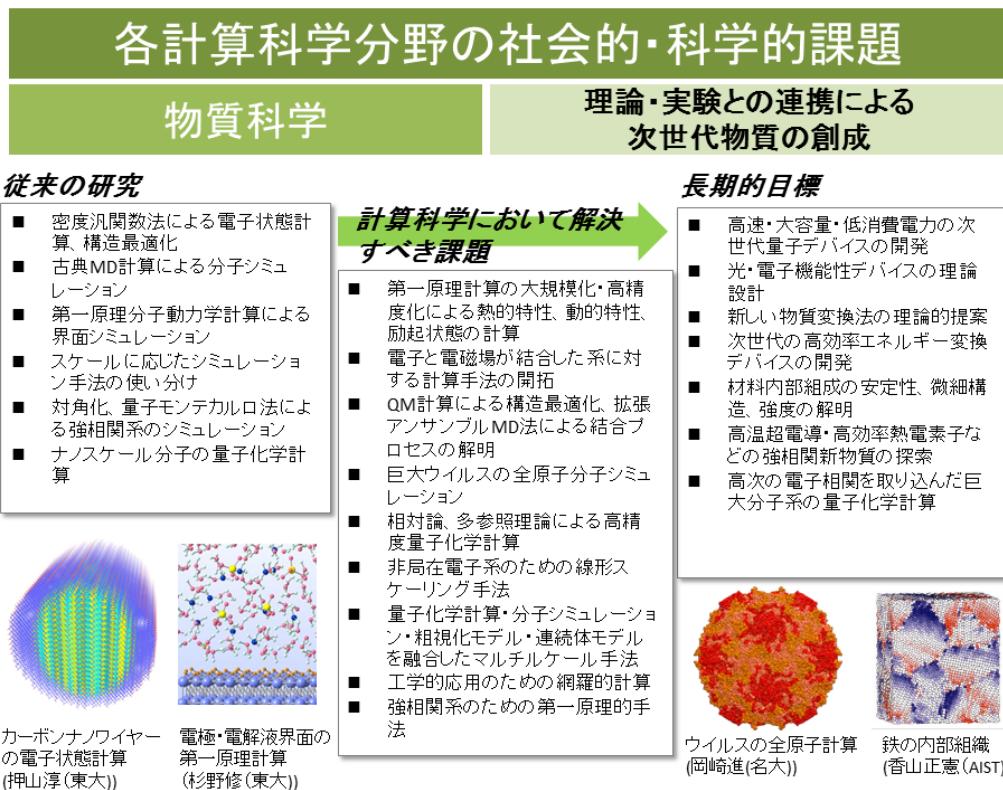


計算科学ロードマップ 概要

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レブリカ	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標的の蛋白質(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10000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	0.01	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・液体・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	6.9	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(局所クラシックニコルソン)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(局所クラシックニコルソン)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 神經回路/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(局所クラシックニコルソン)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・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(局所クラシックニコルソン)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	100MB/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	ペ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



計算科学ロードマップ 概要

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(擬ボテンシャル法、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(擬ボテンシャル、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(擬ボテンシャル、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	10	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(タンパク質の電子状態)	1.1	0.19	1	0.001	1	100	400	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	20	6.4	51	44	24	10	17000	短距離古典分子動力学	粒子数:4000億	
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	0.2		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	500	50	0.008	6.4	2.8	10	50000	量子分子動力学法	100レプリカ、100万ステップ	電子状態計算の要求性のは第一原理計算のxTAPP、古典MDはMODYLAS、I/Oの部分は東大渡辺による短距離古典MD(東大渡辺さん)のデータをベースに概算
物質・エネルギー変換	690	69	2	3.2	300	10	7400000	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)	QM1000原子、10000レプリカ、10000step、MM100,000原子(roadmap)	電子状態計算の要求性のは第一原理計算のxTAPP、古典MDはMODYLAS、I/Oの部分は東大渡辺による短距離古典MD(東大渡辺さん)のデータをベースに概算
物質・エネルギー変換	410	41	0.02	0.05	20	10	300000	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	電子状態計算の要求性のは第一原理計算のxTAPP、古典MDはMODYLAS、I/Oの部分は東大渡辺による短距離古典MD(東大渡辺さん)のデータをベースに概算
分子構造・分子機能	1000	0.5	0.04		24	1	86000	分子動力学法(foramによるリラ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	4100	41	20		0.5	1	7400	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	0.02	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(ランチヨス法)	54サイトのスピニ系(Sz=0)	
新物質探索	690	1600	1.5	20	24	20	1200000	フェーズフィールド法	10^13空間メッシュ、10^7時間ステップ	1ノード100TFLOPS、10000ノード並列を仮定

* 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

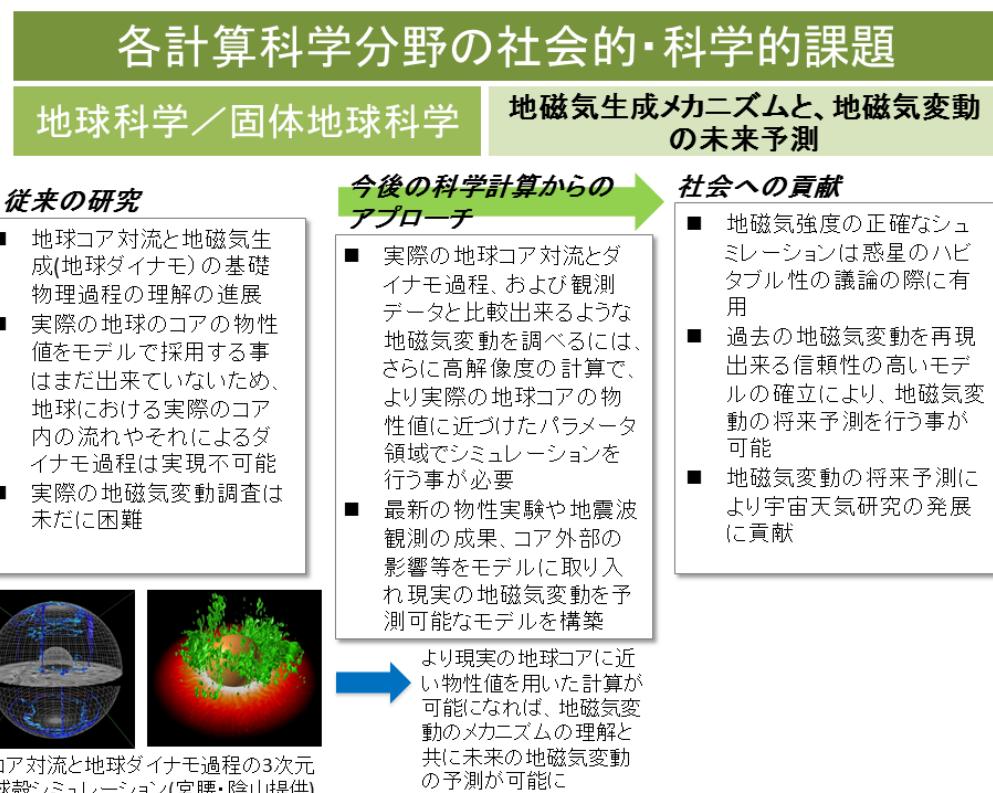
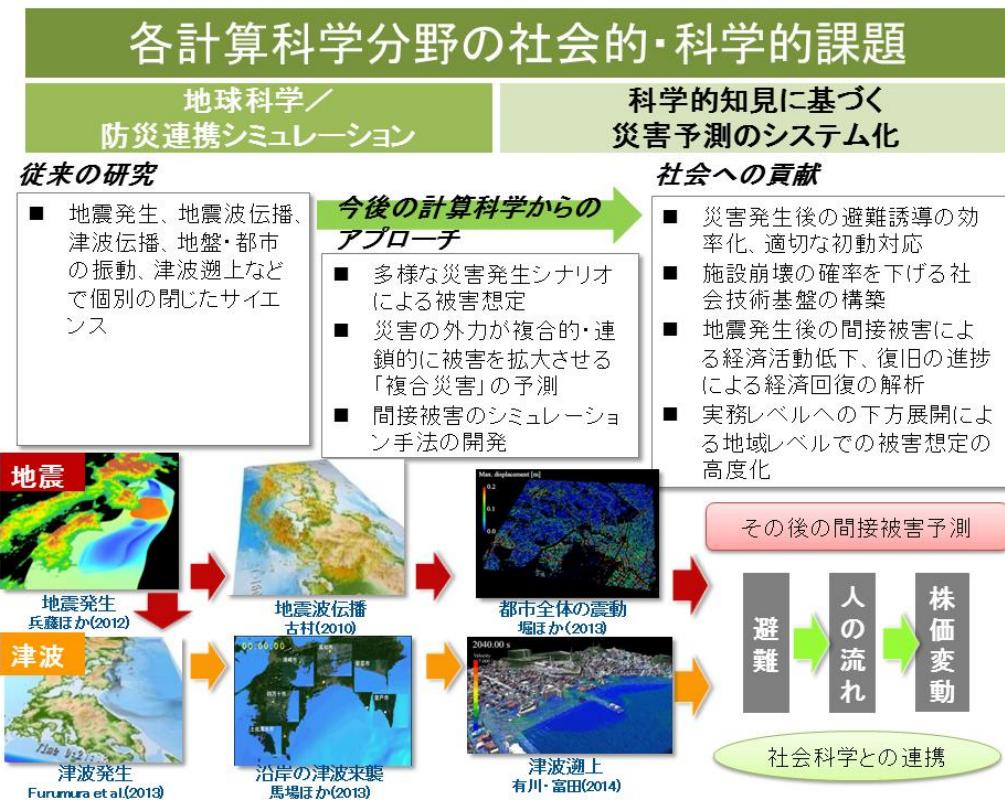
(1) 気象・気候科学



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、SR16000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枚(=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)
地球環境変動予測	56	110	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
データ同化を用いた気象予報精度向上	2.5	5	4.8	0.0003	0.5	6100	28000	モデル名 JNvVA, 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回	演算量、メモリ量に関しては、SR16000でのプロファイルを元に外挿。メモリ転送量はB/F値を2として見積もった

※ 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／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

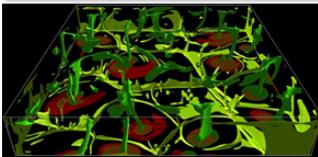
- 対象とする時空間スケールに強いトレードオフ
- プレート・核の相互作用の「一方向」のみのモデル化
- 「熱輸送と比べて圧倒的に遅い」流れ場の求解に要するコストが膨大
- レオロジーの大きく異なる物質(マントル、マグマ、プレート境界等)の流れ場を矛盾なく解くことが困難

**今後の科学計算からの
アプローチ**

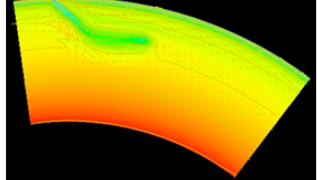
- 悪条件の楕円形偏微分方程式を高効率かつ高精度で解く手法の開発・採用
- 複数の偏微分方程式を効率的にカップルさせて解く手法の開発
- 階層的な空間解像度を持つモデリング
- 流体的な手法と粒子的な手法との併用

長期的目標

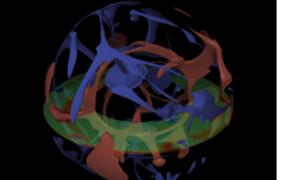
- マントルとプレート・核の相互作用の自己無撞着な取り扱い
- 表面(地形・気候)や内部(温度・化学組成)での環境要因の変化と流れとの間のフィードバック
- 惑星サイズの効果の検討(特にスーパー地球の居住可能性について)



核・マントル境界の局所的モデリング



プレート沈み込みの地域的モデリング



全地球惑星スケールでの自己無撞着なモデリング

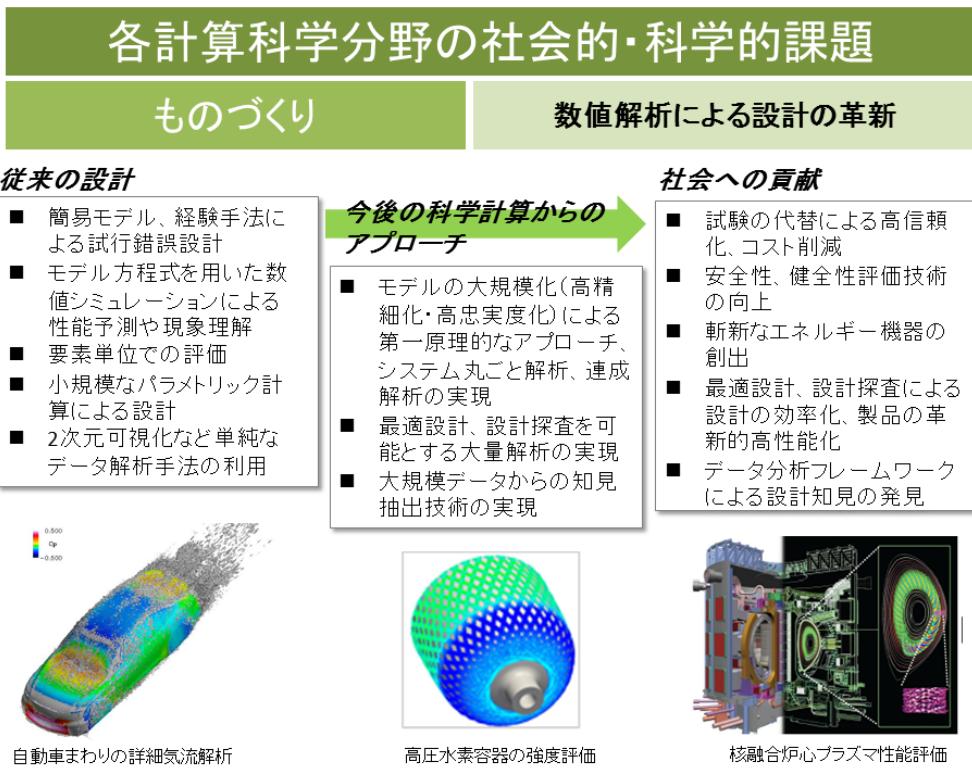
図は亀山氏提供

計算科学ロードマップ 概要

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	3		310000			地震発生は1領域1000シナリオを領域行う。 各領域について1000シナリオ中、親測に基づき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、海底地形の不確実性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	面要素数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 (125m×125m×62.5m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) 热流体

課題	要求性能(PFLOPS)	要求メモリバンド幅(PB/s)	メモリ量/PB	ストレージ量/PB	計算時間/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	18	100	5	10	120	20	160000	有限要素法	10^{12} 格子	演算量については、アルゴリズムそのものの変更についてコミュニティ間で議論が進んでいるところであり、将来大幅な増減の可能性あり
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	0.46	2.5	0.1	1.6	12	1000	20000	有限要素法	10^{11} 格子	演算量については、アルゴリズムそのものの変更についてコミュニティ間で議論が進んでいるところであり、将来大幅な増減の可能性あり
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	7.9	20	0.092	8	24	1000	680000	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	40	99	0.92	80	240	10	340000	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	120	490	4	160	96	10	430000	有限要素法	10^{12} 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
自動車の衝突解析	540	27	1	100	24	10	470000	有限要素法(陽解法)	10~11節点	
薄鋼板部品の弾塑性解析	54	2.7	1	1	24	10	47000	有限要素法(陰解法)	10~10節点	
原子炉の丸ごと詳細解析	540	27	10	10	24	10	470000	有限要素法(陰解法)	10~11節点	

(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	31	38	0.2	500	10	10	11000	加速分子動力学法	粒径40nm、1マイクロ秒、レプリカ 数100の銅多結晶体引張シミュ 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	3.3	160	0.03	500	2	30	720	非線形有限要素法	試験片30cm、欠陥サイズ50μm、 10000ステップの陰解法シミュ レーション	

(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	430000	ポルツマン方程式の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	610000	ポルツマン方程式の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

4 各計算科学分野の社会的・科学的課題

(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	3.2	5.3	0.072	0.6	1	20	230	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
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。

4.5 基礎物理

(1) 宇宙研究

各計算科学分野の社会的・科学的課題

基礎物理／宇宙研究

宇宙史の探究

従来の研究

- ピックパン理論の確立と軽元素合成の理解・宇宙背景放射などの観測による未知のダークマターやダークエネルギーの発見
- 宇宙構造形成・天体形成と、ダークマター、ダークエネルギーとの関連が未解決
- 大ステップサイズ短時間の自己重力N体／流体計算による、構造形成シミュレーション
- 近似的輻射流体計算による、銀河内星形成・巨大ブラックホール形成・銀河間星間ガスシミュレーション
- 低解像度のBoltzmann方程式による宇宙大規模構造シミュレーション・プラスマ衝撃波粒子加速シミュレーション
- 個々の初期天体の形成シミュレーション・宇宙進化の限定的な期間での宇宙の水素分布シミュレーション

今後の科学計算からのアプローチ

- 大粒子数・長期間のシミュレーション
- 大規模宇宙構造形成・銀河形成・恒星形成における、輻射輸送方程式の規模と解法・手法の高度化
- ダークマター粒子による重力と初代銀河形成、銀河間ガスの統合計算による、宇宙大規模構造形成・銀河形成・恒星形成シミュレーション

社会への貢献

- 宇宙の歴史を紐解くことにより、人類の自然観の醸成に寄与
- 人類の知的財産としての貢献

宇宙背景放射の分布
(Credit: NASA / WMAP Science Team)

宇宙の大規模構造(銀河分布)
(Credit: M. Blanton and the Sloan Digital Sky Survey.)

各計算科学分野の社会的・科学的課題

基礎物理／宇宙研究

新たな物理の探究

従来の研究

- 宇宙で最もエネルギー密度の高いガンマ線バースト現象の発見とその起源
- ブラックホール形成やブラックホールが引き起こす現象
- 超新星爆発機構
- ダークマター・ダークエネルギーの起源
- 超高エネルギー宇宙線の起源
- 数値相対論計算と相対論的流体計算を結合した近似的計算(3次元)による天体降着流・噴出流シミュレーション
- 近似ニュートリノ輻射輸送をとりいれた超新星爆発のシミュレーション
- 低分解能電磁プラズマ粒子シミュレーション

今後の科学計算からのアプローチ

- ガンマ線バースト現象や超新星爆発現象の理解のための、数値相対論・相対論的流体計算に加えて完全なニュートリノ輸送の効果も取り入れた計算
- 超高エネルギー宇宙線起源解明のための高解像度の電磁プラズマ粒子シミュレーション

社会への貢献

- 物理学の基本法則が織りなすさまざまな現象の理解から法則の確立と新しい物理の基本法則の獲得
- 物理の基本法則による長期的な人間生活への貢献の可能性

**ハッブル宇宙望遠鏡による
ガンマ線バーストの写真**
(Credit: NASA, ESA, Andrew Fruchter (STScI), and the GRB Optical Studies with HST (GOSH) collaboration)

**ガンマ線バーストの3次元数値
相対論シミュレーション**
(関口, 柴田 *et al.* 2012年)

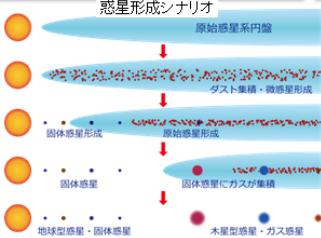
**超新星爆発の3次元流体
シミュレーション**
(滝脇 *et al.* 2013年)

各計算科学分野の社会的・科学的課題

基礎物理／宇宙研究
惑星形成と宇宙生物学の探究

従来の研究
今後の科学計算からのアプローチ
長期的目標

- 原始惑星系円盤内のダスト集積による惑星形成
- 狹い円環領域での複数個の惑星系形成シミュレーション
- 原始惑星の巨大衝突による月形成シミュレーション・地球内部構造形成過程の計算
- 観測による系外惑星の発見と第2の地球(ハビタブルプラネット)と宇宙生物学の進展
- 地球表層環境シミュレーションの系外惑星表層環境への展開
- アミノ酸の鏡像異性体過剰の起源と生命の宇宙紀元説と量子化学計算



- 10天文単位以上の広い円環領域を対象とした長時間惑星系形成シミュレーション
- 原始惑星の巨大衝突による月形成と地球内部構造・表層環境の統合シミュレーション
- 多様な条件での惑星表層環境シミュレーション
- 宇宙空間環境を考慮した円偏光波によるアミノ酸鏡像異性体過剰生成の量子多体直接計算

- 地球以外に地球型の惑星は存在するか、地球以外の惑星に生命は存在するか、等の疑問の解決
- 宇宙における生命存在の意味の認識と生命誕生過程の本質の探究

ハビタブルプラネット(第2の地球)
(Credit: Kepler/NASA)

Current Potential Habitable Exoplanets Compared with Earth and Mars and Ranked in Order of Similarity to Earth						
#1	#2	#3	#4	#5	#6	#7
0.92	0.85	0.81	0.79	0.77	0.72	0.72
Gliese 581 g*	Gliese 667C c	Kepler-22 b	HD 40307 g*	HD 85512 b	Gliese 163 c	Gliese 581 d
Sep 2010	Nov 2011	Dec 2011	Discovery Date	Sep 2011	Sep 2012	Apr 2007

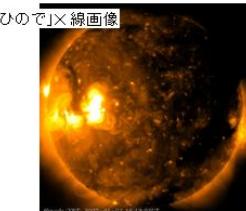
*planet candidates
CREDIT: PM, @EPIC-Arcadio (PM-LSPR) Nov 19, 2012

各計算科学分野の社会的・科学的課題

基礎物理／宇宙研究
宇宙環境学の推進

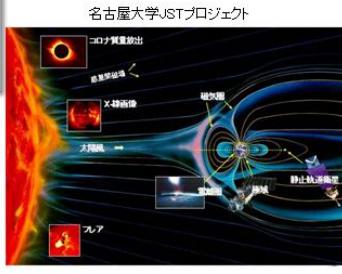
従来の研究
今後の科学計算からのアプローチ
社会への貢献

- 太陽系環境の理解、太陽活動と地球の気候変動の関係
- 太陽磁気活動の起源、太陽フレア現象と宇宙環境
- 太陽恒星ダイナミクス計算:低解像度・低レイノルズ数 3次元拡散入り磁気流体方程式計算
- 太陽風による衝撃波の生成と粒子加速
- 少粒子数(10^{14})プラズマ粒子コードによる太陽圏衝撃波粒子加速計算
- 宇宙天気予報の予測技術開発・実験的取組み



- 太陽の磁場生成維持機構を3次元拡散入り磁気流体方程式を高解像度・大レイノルズ数で乱流を十分発達させる計算
- 大粒子数(10^{16})プラズマ粒子コードによる超新星までカバーした衝撃波粒子加速計算
- 太陽面とコロナの精密観測を取り込んだデータ駆動シミュレーションによる宇宙天気予報

- 太陽活動による宇宙環境の変化予測や、太陽活動の長期予測
- 宇宙天気予報を通じた人類の宇宙利用、宇宙活動の信頼性や安全性の向上



計算科学ロードマップ 概要

課題	要求性能(PFLOPS)	要求メモリバンド幅(PB/s)	メモリ量/PB	ストレージ量/PB	計算時間/hour	ケース数	総演算量(EFLOP)	概要と計算手法	問題規模	備考
自己重力N体／流体シミュレーションによる宇宙構造形成の解明	420	1.4	5	100	1000	1	1500000	独立時間刻みとツリーのハイブリッド	$10^{\sim}14$ 粒子	100Tflops/ノード × 10000ノード、通信速度30GB/s/ノード
輻射流体力学による銀河と巨大ブラックホール形成過程の解明	50	0.63	2	1.2	550	1	98000	Tree radiation SPH	$4096^{\sim}3$ 粒子 + $6 \times 10^{\sim}7$ 光源	100Tflops/ノード × 10000ノード、通信速度100GB/s/ノード
6次元位相空間上の Boltzmann方程式による無衝突粒子系力学の探求	45	34	2	2	3.3	10	5400	有限体積法	位置空間 $256^{\sim}3$ 個 速度空間 $256^{\sim}3$ 個	100Tflops/ノード × 10000ノード、通信速度1000GB/s/ノード
ダークマター宇宙における宇宙暗黒時代の進化の解明	420	1.4	1	2	20	1	30000	Particle-Mesh + FFT	10兆粒子+10万光源、10000時間ステップ	100Tflops/ノード × 10000ノード、通信速度128GB/s/ノード
自己重力輻射流体シミュレーションによる銀河スケール星間ガス進化の解明	1000	0.31	2	10	1000	10	36000000	Tree-Based Radiation Transfer + mesh流体(AMR)	$8192^{\sim}3$ メッシュ+ $10^{\sim}8$ 光源	100Tflops/ノード × 10000ノード、通信速度128GB/s/ノード
輻射磁気流体計算による天体降着流・噴出流の研究	100	20	0.2	200	1000	2	720000	相対論的磁気流体方程式の近似リーマン解法+輻射輸送の6次元計算	$512^{\sim}3$ 格子点、1000光線方向、100振動数、 $3.6 \times 10^{\sim}7$ 時間ステップ	100Tflops/ノード × 10000ノード、通信速度30GB/s/ノード
数値相対論によるブラックホールの形成と強重力現象の解明	1000	100	0.04	50	28	10	1000000	4次元RK、Rad-HRSC	$1000^{\sim}3, 10^{\sim}7$ step	100Tflops/ノード × 10000ノード、通信速度2.88GB/s/ノード
相対論的輻射流体計算による超新星爆発メカニズムの探求	18	70	1.6	1.3	1200	10	780000	ニュートリノ輻射輸送計算(超新星爆発)	空間 $512 \times 64 \times 128$ 位相空間 $24^{\sim}3$ で1秒分の時間を計算	100Tflops/ノード × 10000ノード、通信速度60GB/s/ノード
相対論的粒子計算による超高エネルギー現象と粒子加速機構の探求	310	92	96	1000	200	2	450000	Particle-in-Cell法	$4096^{\sim}3$ グリッド、 $10^{\sim}15$ 粒子、 $10^{\sim}5$ ステップ	100Tflops/ノード × 10000ノード、通信速度1GB/s/ノード
6次元プラソンシミュレーションによるプラズマ非熱的分布形成の解明	24	1.5	50	500	1400	2	240000	セミ・ラグランジュアン法	実空間 $1024^{\sim}3$ 点、速度空間 $265^{\sim}3$ 点の6次元計算、数万ステップ	100Tflops/ノード × 10000ノード、通信速度1GB/s/ノード
量子計算による宇宙アミノ酸生成と光不斉化過程の探求	1000	0.1	1		600	1	2200000	量子ダイナミックス計算サーフェスホッピング法	$207^{\sim}3$ ノ酸×10初期状態×3000サーフェスホッピング	100Tflops/ノード × 10000ノード、通信速度100GB/s/ノード
輻射磁気流体計算による太陽恒星ダイナモの探求	100	88	7	13	410	1	150000	音速抑制法+Yin-Yang grid	格子点 $1024 \times 8192 \times 24576 \times 2, 5 \times 10^{\sim}7$ ステップ	100Tflops/ノード × 10000ノード、通信速度1GB/s/ノード
プラズマ計算による太陽圏・宇宙空間無衝突衝撃波の研究	160	46	96	1000	1400	2	1600000	Particle-in-Cell法	$72000 \times 3072^{\sim}2$ グリッド点(粒子数 $10^{\sim}15$ 個), $10^{\sim}6$ ステップ	100Tflops/ノード × 10000ノード、通信速度1GB/s/ノード
宇宙天気予報に基づく太陽系環境科学の推進	1000	2	2		100	1	360000	電磁流体力学有限要素法・有限差分スキーム、ハイブリッドスキームPIC等	$3000^{\sim}3$ 格子	100Tflops/ノード × 10000ノード、通信速度100GB/s/ノード

※ 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 各計算科学分野の社会的・科学的課題

(2) 素粒子

各計算科学分野の社会的・科学的課題

基礎物理／素粒子

格子量子色力学(格子QCD)による複数階層・極限物理の理解

従来の研究

- 素粒子標準模型パラメータの決定
- ハドロン質量の精密計算
- 一つのエネルギー階層に注目した計算
- 有限温度でのクォーク物質の計算
- ハドロン間相互作用の計算手法の発展
- 荒い格子と小体積でのカイラル対称性を保持した計算
- 困難な有限密度での計算

今後の科学計算からのアプローチ

- 大体積で、カイラル対称性を保持した複数ハドロンを含む計算によるハドロン間相互作用の計算
- 重いbクォークを精度良く取り扱う細格子による計算
- 有限温度・有限密度の極限状態を取り扱う手法の発展

長期的目標

- クォークから、核子、原子核へつながる複数の物理階層の理解
- bクォークの物理を通じた標準模型を超える物理の探究
- 極限状態の物質の振る舞いの理解を通じた宇宙天体现象の理解

複数の階層構造
クォーク(素粒子)→ハドロン(核子)→原子核へ
核子・ハドロンのスケール
~ 10^{-1} fm
原子核のスケール
~ 10^{-3} fm
核子・12素子
電子
原子のスケール
 $\gtrsim 10^{-10}$ fm
原子・12素子
電子

予想されているQCD相図

各計算科学分野の社会的・科学的課題

基礎物理／素粒子

物質の起源の探究

従来の研究

- ヒッグス粒子発見と素粒子標準模型の確立
- 素粒子標準模型に内在する階層性の起源の謎
- テクニカラー模型の提唱と探索
- ミューオン磁気異常能率の量子電磁気学による高精度理論計算
- ファインマン図の1ループ自動計算
- 超弦理論の解析的手法と行列模型による数値計算の進展

今後の科学計算からのアプローチ

- 格子QCDの手法を用いたテクニカラー模型候補の精密探索
- ミューオン磁気異常能率の高精度実験に対応する高精度理論計算
- ILC実験で必要となる多終状態のファインマン図や2ループ図の自動計算
- 行列模型のシミュレーション手法の研究・実験

長期的目標

- 将来計画されている精密実験の結果と理論・数値シミュレーションの連携による、標準模型を超える階層性の発見や内在する階層性の起源の解明
- 標準模型を超えた、宇宙や時空、物質の起源の探究

素粒子一覧表

	第一世代	第二世代	第三世代	電荷	質量	力の媒介粒子
タガマ	u u u	c c c	t t t	2/3	1/2あり	強有力 クォーク
ヒゲン	d d d	s s s	b b b	-1/3	なし	弱い力 W, Z, 2粒子
ビアン	ν_e	ν_μ	ν_τ	0	1/2なし	電気力 Y
	e	μ	τ	-1	-1/2なし	重力 光子・フォトン
				標準模型に含まれる素粒子たち		質量をもたらす粒子 ヒッグス粒子

新しい階層構造の可能性

標準模型のヒッグス粒子
スピンをもつない素粒子 = スカラーパーティクルなので、内部構造がない
エネルギー 1 TeV を超えるエネルギー階層で新しい階層構造が見えてくる可能性
ヒッグス粒子の起源

標準模型を超える理論(テクニカラー理論)のヒッグス粒子
複合粒子
内部構造のある粒子
テクニクォークの束縛状態

標準模型のミュー (μ) 粒子
スピン 1/2を持つ荷電粒子
小さな磁石(荷電能率を持つ)
磁気能率は実験により精密測定可能
比較検証
QED の量子補正
ミューの精密計算

計算科学ロードマップ 概要

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
カイラル対称性とQCDに基づく有効バリオン間相互作用の決定とその応用	510	390	0.066	0.5	880	10	16000000	格子OCD(カイラル5次元型),ハイブリッドモンテカルロ法、CG法	問題規模 格子点:128^4x4,格子間隔:0.1 [fm]以下	ノード数を16^4ノードを仮定し、ノードあたり性能を、オンラインメモリ容量 200MB,オンラインメモリバンド幅 6TB/s,ネットワークレイテンシ 1μ sec程度、ネットワークバンド幅128GB/sを想定。
重いクォークの物理	510	370	0.021	1	880	10	16000000	格子OCD(「ウィルソン型」),ハイブリッドモンテカルロ法、CG法 BiCGStab法	192^4	ノード数を12^4ノードを仮定し、ノードあたり性能を、オンラインメモリ容量 200MB,オンラインメモリバンド幅 18TB/s,ネットワークレイテンシ 1μ sec程度、ネットワークバンド幅128GB/sを想定。
極限状態でのミクロの階層構造と物質の物理	510	1200	0.066	0.2	880	10	16000000	格子OCD(「ウィルソン型」),ハイブリッドモンテカルロ法、CG法、BiCGStab法	256^4	ノード数を16^4ノードを仮定し、ノードあたり性能を、オンラインメモリ容量 200MB,オンラインメモリバンド幅 18TB/s,ネットワークレイテンシ 1μ sec程度、ネットワークバンド幅128GB/sを想定。
テクニカラーリ理論の非摂動ダイナミクス	510	1200	0.46	0.05	880	10	16000000	格子OCD(カイラル5次元型),ハイブリッドモンテカルロ法、CG法	96^4x32	ノード数を16^4ノードを仮定し、ノードあたり性能を、オンラインメモリ容量 200MB,オンラインメモリバンド幅 18TB/s,ネットワークレイテンシ 1μ sec程度、ネットワークバンド幅128GB/sを想定。
量子電磁気学(QED)の高次補正計算(多倍精度演算)	1.8	1.3	0.00012		24	220	34000	モンテカルロ法による多次元積分	1万個以上の多次元(8~13次元)積分	1万個以上の単体ノードジョブのアレイジョブ、SIMDとコア並列が必要。プログラムが巨大なためコンパイル速度が重要、高度に最適化され4倍精度ライブラリが必要。ケース数は独立なノードジョブの個数である1万程ともいえる。2から3年かけて計算を終えるようにしたい。多倍長精度浮動小数点型の四則演算数を倍精度浮動小数点演算に換算したものを演算数として記載してある。多倍長精度浮動小数点型の四則演算数は倍精度浮動小数点演算数の約30倍に相当する。
ファインマン振幅の自動計算(4倍精度演算)	3.2	0.13	2E-09	0.0005	24	1000	280000	モンテカルロ法による多次元積分	2ループ图形 総数約350,000ダイラグラム(ILCでの重心系衝突エネルギー-250GeVでのBhabha.ZH過程、370GeVでのBhabha.ZH,トップクォーク生成過程に対応した理論計算に必要)	超並列化は極めて容易である。4倍精度については指数部15ビット(IEEE754-2008のbinary128形式)が不可欠であり、高速計算されることが必要である。プログラムが巨大なため演算命令数が極めて多い。コンパイルの速度も問題になる。場合によっては4倍精度以上の計算が必要になる。一つの素粒子反応過程についてには半年から1年を目処に計算を実施する。演算量は4倍精度浮動小数点型の四則演算数である。要求性能も4倍精度浮動小数点演算数/sである。一ケースあたり350ダイアグラムを計算する。

※ 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 各計算科学分野の社会的・科学的課題

(3) 原子核物理

各計算科学分野の社会的・科学的課題

基礎物理／原子核物理

原子核模型の第一原理計算の発展

従来の研究

- 多様な原子核構造の微視的な記述法の発展
- 陽子・中性子からなる量子多体系、複雑な核力の性質
- 核子数10程度の原子核の核力に基づく第一原理的計算
- 閉殻を仮定した小さい空間での原子核模型計算
- 核内効相互作用理論の発展
- 不定性の大きな3体力

今後の科学計算からのアプローチ

今後の科学計算からのアプローチ

- 閉殻を仮定しない殻模型とモンテカルロ・サンプリング法を組み合わせた手法による、核子数30程度の原子核の計算
- 6~8主殻以上の模型空間への拡張
- 計算コストを抑える手法と効相互作用の精密化

長期的目標

- 微視的計算核物理学の発展
- 新たな核現象・ハドロン現象の予言と発見
- 社会的要請に応じた核構造・核反応の性質の解明
- 宇宙天体现象、原子力工学などへの応用

Nucleus on demand

$$\text{陽子 } \times Z \text{ 個} + \text{ 中性子 } \times (A-Z) \text{ 個} + \text{ 原子核理論} = \text{ 原子核 (陽子数 } Z, \text{ 質量数 } A \text{) の質量、寿命、構造、反応}$$

第一原理的計算の進展による、核力や軽い原子核の構造・反応の解明
・有効模型の検証・発展、重い原子核の構造・反応計算

計算核物理学の分類と核図表
[G.F.Bertsch, D.J.Dean, W.Nazarewicz, SciDAC Review (UNEDF collaboration)より引用]

各計算科学分野の社会的・科学的課題

基礎物理／原子核物理

原子核構造・反応の統一的解明

従来の研究

- 多様な原子核構造の微視的な記述法の発展
- 陽子・中性子からなる量子多体系、複雑な核力の性質
- 核構造・核反応の統一理解に向けての有効模型の構築
- 重い原子核の計算のための密度汎関数計算等の発展と反応計算への発展
- 核分裂現象の巨視的模型による記述

今後の科学計算からのアプローチ

今後の科学計算からのアプローチ

- 軽い原子核の構造と核反応を有限レンジの現実的核力により計算
- 重い原子核の反応の大規模実時間発展シミュレーション計算
- 低密度における核物質状態方程式の解明
- 核分裂現象を微視的理論により記述

長期的目標

- 微視的計算核物理学の発展
- 新たな核現象・ハドロン現象の予言と発見
- 社会的要請に応じた核構造・核反応の性質の解明
- 宇宙天体现象、原子力工学などへの応用

原子核物理が観となる宇宙の範囲
・地上重い重元素の起源は?
・星の燃焼・爆発のメカニズムは?
・中性子星内部で核子リオノンはどうなっている?

第一原理的計算・有効模型計算・密度汎関数計算などの理論や計算手法の発展が今後どうなっていく?

精密第一原理計算

密度汎関数計算

核分裂現象

核分裂生成物 (崩壊状態、不安定核種)

核分裂生成物 (崩壊状態、不安定核種)

X-ray burst

Neutron

Proton

T process

r process

s process

p process

n process

alpha decay

Supernova

KS 3750-260

Figure by H.Schatz, W.Nazarewicz氏の好意による

各計算科学分野の社会的・科学的課題

基礎物理／原子核物理
宇宙初期の
クォーク・グルーオン・プラズマの理解

従来の研究
今後の科学計算からの
アプローチ
長期的目標

■ 原子核・核子のクォークグルーオンによる記述の発展

■ 格子QCDによるクォーク・グルーオンの第一原理計算による原子核へのアプローチ

■ 有効模型に基づく高密度核物質の状態方程式

■ 不定性の大きい3体核力やハイペロン力

■ 重イオン衝突実験によるクォーク・グルーオン・プラズマ生成実験の発展と困難な非平衡ダイナミクスのシミュレーション

■ QCDとハドロン物理の遷移領域での散乱振幅計算

■ 軽原子核の格子QCDによる精密核力に基づく相構造・状態方程式の計算

■ 格子QCDを用いたハイペロン力の解明

■ 揺らぎの効果を取り入れた相対論的重イオン衝突シミュレーションによる全体を通した統合的計算

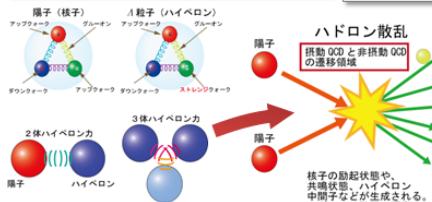
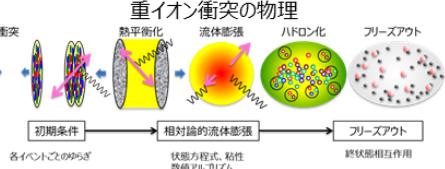
■ ストレンジネス生成を取り込んだ散乱振幅計算の理論基盤構築

■ 微視的計算核物理学の発展

■ 新たな核現象・ハドロン現象の予言と発見

■ 社会的要請に応じた核構造・核反応の性質の解明

■ 宇宙天体現象、原子力工学などへの応用

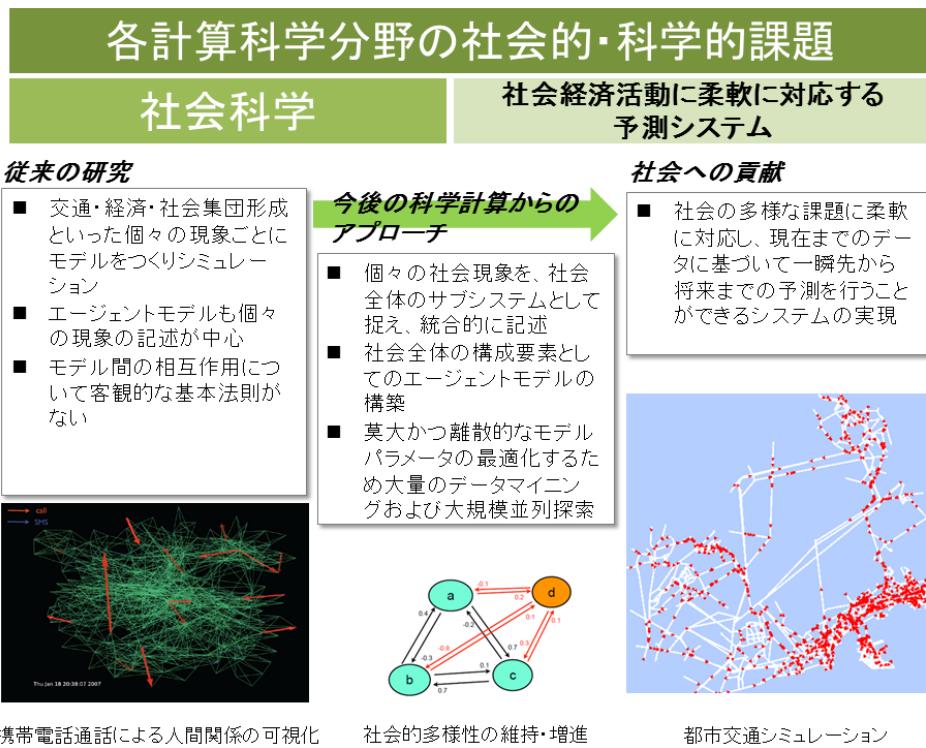



4 各計算科学分野の社会的・科学的課題

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
原子核構造の第一原理的解明	100	10	0.1	0.0001	28	100	1000000	モンテカルロ殻模型法による原子核の構造計算、軽い核	空間を調和振動子基底で展開し、7～8主殻までを考慮。10 ⁹ ステップ数。	メモリ量は10000ノードX10GBで計算。ただし、問題をノード間で分割して持つことで削減可能。
原子核殻模型計算の適用領域の拡張	14	0.69	0.32	0.0001	10	1000	500000	モンテカルロ殻模型法による原子核の構造計算、中重核領域	模型空間は、パレンス殻2主殻や、一部それを超えるものを想定。	メモリ量は10000ノードX32GBで計算。ただし、問題をノード間で分割して持つことで削減可能。
原子核構造・反応の統一的解明	53		0.03		100	50	950000	生成座標法を用いた第一原理的O計算	空間格子点1万点、配位数100程度	
原子核応答関数の系統的記述と計算 核データ構築										1核種あたり10分以内での計算が可能になれば、系統的な計算による計算核データ構築が現実的になる。現在、反復解法などが改良されており、将来的には行列対角化に頼らない方法になる可能性あり。
核分裂現象の微視的記述	42	0.021	0.04	10	24	100	360000	実空間・実時間発展計算	空間格子点数、準粒子数、時間ステップ数、それぞれ10万	時間発展1ケースあたり、3×10 ² FLOP
核物質の相構造・状態方程式の解明	20	2.1	2.4	0.02	24	100	170000	AMD法による熱平衡の計算	核子数3200の系の状態方程式を得る	密度・温度・量子中性子非対称度・有効相互作用の異なる2万の場合のそれれに2～30万ステップの時間発展を計算する。
ハイペロンを含む軽い核の構造・反応の解明	57000	17000	180	0.00001	24	200	980000000	量子少数多体系のガウス関数展開法による厳密計算	7体系(6400万×6400万密行列の一元化固有値問題)	固有値計算ライブラリEigen-xの実行性能値(100万×100万、10万×10万)を元に外挿
相対論的重イオン衝突とクォーク・グルーオン・プラズマ物性の解明								高エネルギー重イオン衝突実験の流体シミュレーション計算	実験においても初期状態の揺らぎが注目されるなど、理論の枠組み自体の発展も激しい。現在確立している物理状況を取り入れた模型における計算を目指している。	(課題解決に向けた現在の取り組み) 衝撃波を扱った相対論的粘性流体方程式解法のアルゴリズム開発。数値解の安定性、初期条件等の吟味。(手法確立に必要な知見) 粘性が有限の場合の低温での数値不安定性的回避が必要。
多粒子生成反応で探るハドロン共鳴と相互作用の新たな展開	1.1	0.24	0.0002	0.000005	720	10	29000	大量の散乱現象のデータと理論計算とを比較することで、励起パリオൺに関する知見を得るための計算。微視的な多チャンネル動的反応模型を用いた数値計算。	chi-2乗値を計算するために1000次元の複素密行列の逆行列を6000回計算する。そのchi-2乗値の計算を2.5×10 ⁻⁷ 回繰り返す	(課題解決に向けた現在の取り組み) 誤差評価を含めたchi-2乗最適化への収束の問題解決。(手法確立に必要な知見) 多次元パラメータ空間上での極小値サーチの効率的手法。chi-2乗計算の高速化。(実計算への見込み) 現在のチームで4～5年程度と予想。

※ 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。

4.6 社会科学



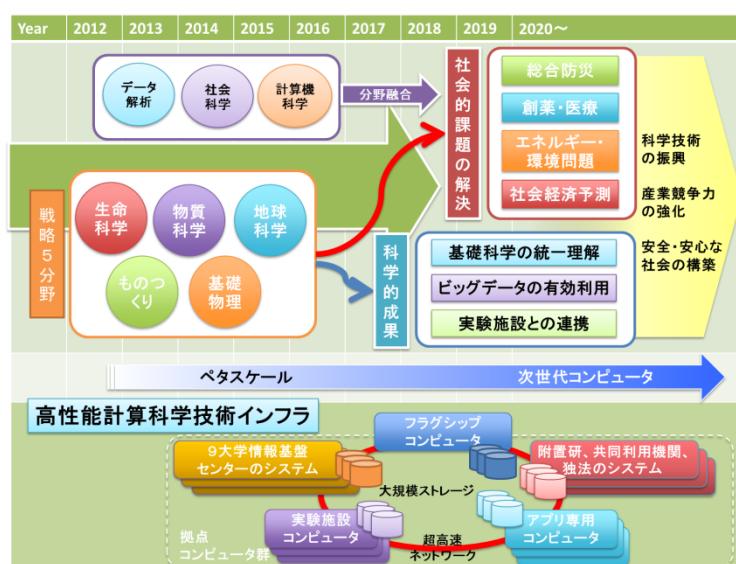
課題	要求性能(PFLOPS)	要求メモリ バンド幅 (PB/s)	メモリ量/ ケース(PB)	ストレージ量/ ケース(PB)	計算時間/ ケース(hour)	ケース数	総演算量(EFLOP)	概要と計算手法	問題規模	備考
自動車交通流のリアルタイムシミュレーション	1000	100	0.00011	0.001	2.8E-08	1000	0.1	地球上の全自動車交通規模(10億台、道路総延長3400万Km)、エージェントモデルによるシミュレーション(実際に計算対象となる稼働している車の台数は10^8台と推定)	$10^8 \text{台} \times 10^{-3}$ 演算 $\times 10^{-3} \text{step} \times 10^{-3} \text{ケース}$ (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。一台あたり 10^{-3} FLOPと推定。
株式取引所ルールの最適化	2100	0.0001	0.00000001		0.0024	10000	180000	1取引所の1000銘柄について、1日分の取引をトレーディング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 10^4 ケース計算する	整数演算が中心 「要求性能」「総演算量」はインストラクション数
人間関係シミュレーション								$10^{~10}$ 人程度の集団が、集団の規模に応じて異なる規則に従うエージェントシミュレーション		現時点において、問題を記述するモデルおよび数値計算モデルが確立していないため、要求計算リソースを見積もることが出来ない

※ 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 で隨時公開する。

おわりに ~計算科学の更なる発展に向けて~

計算科学の劇的な進歩にともない、従来は演算能力の不足によって実現できなかつた詳細なモデルでの計算、現象全体を対象とした計算が実現しつつある。平成24年秋に「京」が本格稼働し、HPCIでは現在、5つの分野での戦略プログラムにより、ペタスケールの演算性能を利用したさまざまな研究開発が行われている。そしてこれらの研究開発からは、創薬・医療、エネルギー、ものづくり、防災等の多岐にわたる分野において、我々が営む社会経済活動の向上に有益な成果が生まれつつある。しかしながら、複雑化、グローバル化が進む現在の社会が抱える課題に対しては、次世代のスーパーコンピュータがもたらす更なる高性能な計算環境に期待されるところも多い。

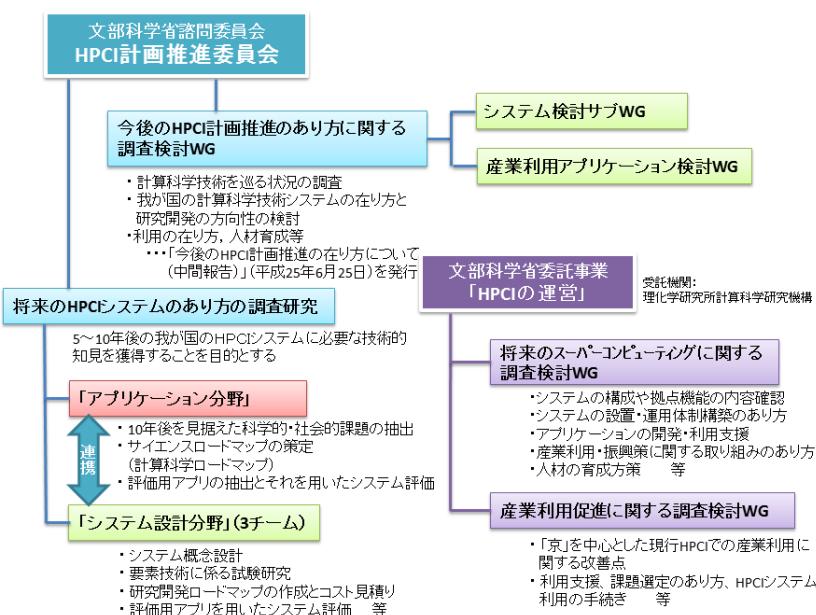
大規模数値計算が、現在の我々の社会生活を支える産業や経済活動に不可欠な貢献をしていることは紛れもない事実であり、今後のスーパーコンピュータの性能向上により得られる成果は、社会が抱える様々な課題の解決に貢献し得る。本書の第2章では、将来において計算科学が貢献し得る社会的課題の具体例を示した。第3章では従来は異なる研究分野と見なされていた諸分野が、計算科学を通じて有機的に結合する事により、新しい科学が創出されることへの期待を示した。そして、第2章および第3章で示したこれらの社会的課題の解決や新たな科学の創出には、基礎となり得るさまざまな計算科学分野における研究課題への取り組みが不可欠であり、第4章において各分野における現状の課題、今後の中長期的目標、そして解決すべき課題等についての詳細を記述した。今後、計算科学を更に発展させ、社会に山積する課題を解決し、生活の質の向上、安心・安全の確保、そして、産業の更なる発展や振興の礎となる技術基盤として確立するためには、社会における課題解決のために必要な技術革新を目指す研究開発と、それを後押しする基礎科学が相互に密接に連携して推進されることが極めて重要である。



また、スーパーコンピュータの利用は、単体として高性能な計算環境を与えるのみならず、大規模実験施設と連携することによる成果が幅広い分野で期待されている。本書では、生命科学関連の大規模データ処理が必要となる構造解析やイメージングに大きな成果が期待されるSACLAと計算科学との連携について紹介しているが、他にも高分子材料など、幅広い分野でも大規模実験施設との連携が更なる科学技術の発展につながることが期待される。

一方で、本書が示す社会における課題解決に計算科学が貢献する成果を得るためにには、単に高性能で大規模な計算機を構築することだけでは不十分であり、高性能の計算機を使いこなす優秀な人材の育成やモデル開発、運用のための十分な人的資源の確保や適切な組織体制の準備などのソフト面での対応を十分に行うことにも必要である。人材育成を含めたこのような大規模数値計算に係わる全体的な施策については、本調査研究を推進するうえでの上部組織である「今後の HPCI 計画推進のあり方に関する検討ワーキンググループ」で議論され、平成 25 年 6 月 25 日に公開された「今後の HPCI 計画推進の在り方について（中間報告）⁶⁾」で報告されている。また、平成 25 年 7 月に行った、本ロードマップのパブリックコメント募集では、計算科学の更なる発展のためには、開発されたソフトウェアを（無償で）提供し大学、中小企業で利用できるようにすることの重要性や、開発したソフトウェアが PC からスーパーコンピュータまでを含めたマルチプラットフォームで利用できること、継続的なサポートを行うこと、ホームページや書籍等で広く情報を提供することなど、利用者の裾野を広げるための努力も必要であるとのコメントがあった。また、大規模計算科学は、その扱いによっては社会経済活動に大きな打撃を与えるリスクをはらんており、新たな技術の開発に対しては、その倫理的問題について十分に考察することの必要性を問う声もあった。

上述のように、将来の計算科学の発展に向けては、ハード、ソフトを含めた多面的な検討が必要であり、今後の HPCI の利用、運用については、本書の作成を行っている「将来の HPCI のあり方の調査研究（アプリケーション分野）」の活動以外にも様々な調査検討を行う体制が構築され、人材育成やアプリ開発、産業利用の促進などを含めた検討が行われている。下図に、今後の HPCI の利用・運用に関する検討体制の全体像を示す。



⁶⁾http://www.mext.go.jp/b_menu/shingi/chousa/shinkou/028/gaiyou/1337595.htm

おわりに　～計算科学の更なる発展に向けて～

本書は、計算科学分野はもとより、実験・観測・理論の研究者、ならびに、各学術コミュニティの第一線で活躍する大学・研究機関、企業の現役研究者約100人が一堂に会し議論が行われるという画期的な取り組みの成果として取りまとめられている。今後も、計算科学の更なる発展のため、このような取り組みを定期的に継続的に実施していくとともに、成果を創出する計算科学とハードウェアを設計するシステム設計分野をはじめ、様々な観点で検討を行う他の体制との連携をより一層強化していく。

計算科学ロードマップ 概要

～大規模並列計算によるイノベーションの目指す社会貢献・科学的成果～

平成 26 年 5 月

独立行政法人 理化学研究所

『将来の HPCI システムのあり方に関する調査研究「アプリケーション分野」』

『HPCI の運用』

<http://hpci-aplfs.aics.riken.jp/>