

「計算科学ロードマップ」アプリケーション毎の計算機要求性能一覧

2014/5/20

前番号		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	演算量、メモリアクセス量、メモリ量、ストレージ量に関して精査中の項目	
2.1	創薬・医療	個人ゲノム解析	0.0054	0.0001	1.6	0.1	0.7	200000	2700	シーケンスマッピング	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	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			
		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行うことを想定している。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・ウイルス	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	水と条件下、500残基タンパク質+リガンド	ファイル/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/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×100um径、0.1um格子、流速10 ⁻² ~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。			
2.2.1	地震・津波防災	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があるとすると、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	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 (125mx125mx82.5m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もので小さい。 演算量はプロファイルからの外排と一致、メモリ転送量はプロファイルからの外排		
		(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排。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排		
		2.2.2	気象災害	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、)	
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、SR1600でのプロファイルを元に外排。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)	メモリアクセス量	
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)		
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			
2.3	エネルギー・環境問題	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+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、スピンアップ24時間含)	1土地のアセスメントに約1000ケース(200日)必要。これを土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)、1007サンプリング同時実行	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排		
		2.4	社会経済予測	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 台 × 10 ³ 演算 × 10 ³ step × 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	1E-08		0.0024	10000	180000	1取引所の1000銘柄について、1日分の取引をレシ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 × 3600秒/時間 × 1000 注文機会/秒 × 10 ⁴ 演算/注文機会 × 10トレーダー × 10 ⁴ サンプル × 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		
3.1.1	基礎物理における連携	カイラル対称性とQCDに基づく有効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 ⁴ x32、格子間隔: 0.1 [fm] 以下			
		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。	ストレージ量	
		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究	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、主記憶100GB/ノード、主記憶バンド幅 20TB/s/ノード、オンチップメモリ容量 2MB/コア、通信速度80GB/s/ノード		
3.1.2	宇宙科学・地球科学の連携による惑星科学	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排		
		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排		
3.1.3	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	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行うことを想定している。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・ウイルス	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		
3.2.1	計算科学基盤技術の創出と高度化	並列レンダリング	200	61	0.8	10	0.5	1	360	ボ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	ボ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		
3.2.2	ビッグデータの有効利用①: 衛星・観測データの有効利用	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		
		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排		
		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	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)。		

節番号		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	演算量、メモリアクセス量、メモリ量、ストレージ量に関して精査中の項目
3.2.3	ビッグデータの有効利用②:ゲノム解析・バイオインフォマティクス	個人ゲノム解析	0.0054	0.0016	1.6	0.1	0.7	200000	2700	シーケンスマッピング	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	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。京ではローカルリティを考慮したI/Oにより最適化している。	
3.3	X線自由電子レーザー施設SACLA等の大型研究施設との連携	大量実験データ解析による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		
		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	
4.1	生命科学	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レプリカ	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・ウイルス	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標的蛋白質(10万原子程度)	B/F=0.4。数百から数千ケース同時実行することを想定している。実行時に必要な全メモリ量、各ケースの実測の実計算時間、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。格子法・差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	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		
		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		
		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 m/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 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・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(局所クランクニコルソン) 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 ⁵ step	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	演算量、メモリアクセス量、メモリ量、ストレージ量
		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(局所クランクニコルソン) 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	演算量、メモリアクセス量、メモリ量、ストレージ量
		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	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	通信パターンの設計に工夫の余地がある	演算量、メモリアクセス量、メモリ量、ストレージ量
		脳神経系シミュレーション・昆虫全脳詳細モデル 生理実験と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	演算量、メモリアクセス量、メモリ量、ストレージ量
		遺伝子ネットワーク解析	2900	1500	0.08	0.016	0.34	26000	94000000	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		
		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		演算量、メモリアクセス量、メモリ量、ストレージ量
		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		演算量、メモリアクセス量、メモリ量、ストレージ量
		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		演算量、メモリアクセス量、メモリ量、ストレージ量
4.2	物質科学	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	演算量、メモリアクセス量、メモリ量、ストレージ量
		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	1000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の部分は東大遼辺による短距離古典MD(東大遼辺さん)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の部分は東大遼辺による短距離古典MD(東大遼辺さん)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の部分は東大遼辺による短距離古典MD(東大遼辺さん)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(feramiによるリラクス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	演算量、メモリアクセス量、メモリ量、ストレージ量
		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	演算量、メモリアクセス量、メモリ量、ストレージ量
		強相関電子系の機能解明	82	130	82	41	42	10	120000	厳密対角化(ランチョス法)	54サイトのスピン系(Sz=0)		演算量、メモリアクセス量、メモリ量、ストレージ量
4.3.1	気象・気候科学	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	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	
		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:1兆(水平解像度220m、鉛直84層)、ステップ数:520万(dt=1秒、)	10万ノードを仮定(ノードあたり隣接通信1GB/s)	
		地球環境変化予測	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)、1007アンサンブル同時実行	演算量、メモリ量に関しては、SR1600でのプロファイルを用いて見積もった。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)	メモリアクセス量
		データ同化を用いた気象予測精度向上	2.5	5	4.8	0.0003	0.5	6100	28000	モデル名JNoVA、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	計算の大枠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用いて外挿	メモリアクセス量
4.3.2	固体地球	防災連携シミュレーション(地震直後の被害状況予測)										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、地震構造や建物劣化、海底地形の不確実さを考慮するために数千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。	
		内訳は以下(1)～(6)	7	15	0.1	9	3		310000			アプリの最大BF値=4	
		(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		
		(2) 波動伝播			0.1	0.5		100	1400	差分法による弾性波動伝播計算	1200x1000x200Km ³ (125mx125mx62.5m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100万様	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	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。	
		マンホール対流	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	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	演算量、メモリアクセス量、メモリ量、ストレージ量
		ダイナモ			0.053	4		1		陰陽格子	格子点:2000x2000x6000x2、8変数		演算量、メモリアクセス量、メモリ量、ストレージ量
4.4.1	熱流体	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	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		

節番号		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	演算量、メモリアクセス量、メモリ量、ストレージ量に関して精査中の項目
4.4.2	構造解析	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 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 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 11 節点		
4.4.3	機械材料	電子部品用機能性材料に関する強度評価 炭素繊維強化プラスチック開発	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1000の銀多結晶体引張シミュレーション試験片30cm、欠陥サイズ50μm、10000ステップの陰解法シミュレーション	レプリカによる加速化率は1000並列あたり666倍と仮定	
			3.3	160	0.03	500	2	30	720	非線形有限要素法	10 ¹² 格子、10 ⁶ ステップ		
4.4.4	プラズマ・核融合	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 ⁷ 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	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	B/F=2として計算	
4.4.5	電磁界解析	サーバーの装置全体レベル解析	3.2	5.3	0.072	0.6	1	20	230	陰解法と陰解法の混合	10 ¹² 格子		演算量、メモリアクセス量、メモリ量、ストレージ量
4.5.1	宇宙研究	自己重力N体ノ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 ¹⁴ 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 ³ 粒子 × 6x10 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究	45	34	2	2	3.3	10	5400	有限体積法	位置空間256 ³ 個 速度空間256 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 ³ メッシュ × 10 ⁸ 光源	100Tflops/ノード × 10000ノード、通信速度128GB/s/ノード	演算量、メモリアクセス量、メモリ量、ストレージ量
		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 ³ 格子点、1000光線方向、100振動数、3.6x10 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 ³ 10 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究	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、主記憶100GB/ノード、主記憶バンド幅20TB/s/ノード、オンチップメモリ容量2MB/コア、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究	310	92	96	1000	200	2	450000	Particle-in-Cell法	4096 ³ グリッド、10 ¹⁵ 粒子、10 ⁵ ステップ	100Tflops/ノード × 10000ノード、通信速度1GB/s/ノード	
		6次元プラズマ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 ³ 点、速度空間265 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究	1000	0.1	1		600	1	2200000	量子ダイナミクス計算サーフェスホッピング法	20アミノ酸x10初期状態x30000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	演算量、メモリアクセス量、メモリ量、ストレージ量
		輻射磁気流体計算による太陽恒星ダイナモの探究	100	88	7	13	410	1	150000	音速抑制法+Yin-Yang grid	格子点1024x8192x24576x2、5x10 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	72000x3072 ² グリッド点(粒子数10 ¹⁵ 個)、10 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 ³ 格子	100Tflops/ノード × 10000ノード、通信速度100GB/s/ノード	演算量、メモリアクセス量、メモリ量、ストレージ量
4.5.2	素粒子	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 ⁴ x32、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、ネットワークレイテンシ1μsec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QCD(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 4	ノード数を12 ⁴ ノードを仮定し、ノードあたり性能を、オンチップメモリ容量200MB、オンチップメモリバンド幅18TB/s、ネットワークレイテンシ1μsec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QCD(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 4	ノード数を16 ⁴ ノードを仮定し、ノードあたり性能を、オンチップメモリ容量200MB、オンチップメモリバンド幅18TB/s、ネットワークレイテンシ1μsec程度、ネットワークバンド幅128GB/sを想定。	
		テクニカラー理論の非摂動ダイナミクス	510	1200	0.46	0.05	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	96 ⁴ x32	ノード数を16 ⁴ ノードを仮定し、ノードあたり性能を、オンチップメモリ容量200MB、オンチップメモリバンド幅18TB/s、ネットワークレイテンシ1μsec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、高度に最適化された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ループ図形 総数約350,000ダイアグラム(ILCでのBhabha ZH過程、370GeVでのBhabha ZHトップクォーク対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。	
4.5.3	原子核物理	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 X 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。	
		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、バレンス殻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 X 32GB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・反応の統一的理解 原子核応答関数の系統的記述と計算核データ構築	53		0.03		100	50	950000	生成座標法を用いた第一原理的CI計算	空間格子点1万点、配位数100程度		演算量、メモリアクセス量、メモリ量、ストレージ量
			46	0.22	0.03	0.1	0.1	10000	160000	実空間表示準粒子による線形応答行列対角化	10000核種に対して特定の一体場に対する応答関数を系統的に計算	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、3x10 ²¹ 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2万の場合のそれぞれについて30万ステップの時間発展を計算する。	
		ハイベ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x6400万並行列の一般化固有値問題)	固有値計算ライブラリEigenExaの実行性能値(100万x100万、10万x10万を元に外挿)	ストレージ量
		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の回避が必要。	演算量、メモリアクセス量、メモリ量、ストレージ量
		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次元の複素逆行列の逆行列を6000回計算する。そのchi-2乗値の計算を2.5x10 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	
4.6	社会科学	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 8台 x 10 ³ 3 演算 x 10 ³ 3step x 10 ³ 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	1E-08		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 × 3600秒/時間 × 1000 注文機会/秒 × 10 ⁴ 4 演算/注文機会 × 10 トレーダー × 10 ⁴ 4 サンプル × 10 ³ 3 銘柄 = 1.8 x 10 ¹⁹ 19 演算 これを24hで10 ⁴ 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 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	演算量、メモリアクセス量、メモリ量、ストレージ量