

今後のハイパフォーマンス・コンピューティング技術の研究開発について

平成 23 年 7 月

今後のハイパフォーマンス・コンピューティング技術の研究開発
の検討ワーキンググループ

目 次

はじめに	2
1. 議論のまとめ	3
(1) 今後の取組みの方向性	3
(2) 戦略分野における重要課題と必要な計算機所要	4
2. 今後の取組み	8
(1) 基本的な考え方	8
(2) 今後の検討の方向性	9
(3) 具体的な取組み	9
(4) 今後のスケジュール	10
参考資料 1 H P C I 計画推進委員会 今後のハイパフォーマンス・コンピューティング技術の研究開発の検討ワーキンググループの設置について	11
参考資料 2 審議経過	13
参考資料 3 これからのスーパーコンピューティング技術の展開を考えるシンポジウムの開催について	15
参考資料 4 今後 5 ～ 10 年の重要課題と必要な計算機所要	17

はじめに

ハイパフォーマンス・コンピューティング（以下「HPC」という。）技術は、科学技術、産業、安全・安心の確保などを支える基盤であり、我が国の国際競争力を強化し、国民生活の安全を確保していくために必要なものである。このため、長期的視点に立って継続的に研究開発を推進し、世界最高水準の成果を蓄積していくことが求められる。また、本年3月11日に発生した東北地方太平洋沖地震は、これにより引き起こされた津波とともに甚大な被害をもたらした。未だ収束をしない福島原発の事故もあり、その影響は東日本のみならず我が国の社会経済及び国民生活の広範囲に及んでいる。HPC技術は、今回の震災への対処や復興、今後起こりうる同様な震災への備えに大きく貢献するものであり、この観点からも不断の研究開発が求められる。

第3期科学技術基本計画（平成18年3月28日閣議決定）においては、次世代スーパーコンピューティング技術を国家基幹技術に選定し、「京」の開発やグランドチャレンジアプリケーションの開発に取り組んだ。今後のHPC技術の開発については、その成果を最大限に活用しつつ、世界の科学技術や産業の状況を踏まえながら進めていくことが必要である。また、東日本大震災の経験から見てきた課題への対応も、あわせて検討していくことが求められる。我が国としては、以上を踏まえたHPC技術の推進方策を早急に定める必要があり、このため、HPCI計画推進委員会のもとに「今後のハイパフォーマンス・コンピューティング技術の研究開発の検討ワーキンググループ」（以下「ワーキンググループ」という。）を設置し、今後のHPC技術の研究開発のあり方について検討することとした（参考資料1）。

ワーキンググループにおいては、国内外の研究開発状況及びHPC技術の現状を把握するとともに、HPC技術の利用の観点から、重要分野における現状と今後の取組を把握し、当該分野における今後の研究を可能とするために必要と思われる技術課題について検討を行った（参考資料2）。本中間報告は、7回のワーキンググループにおける検討結果を踏まえ、今後のHPC技術の研究開発について当面の取組みをまとめたものである。

1. 議論のまとめ

(1) 今後の取組みの方向性

- ・ この先5年から10年程度を見据えた上で、HPC技術に対するニーズと本当にやらなくてはならない問題の設定を明確にすることが必要。
- ・ 研究開発を進めるにあたっては、HPC技術を如何に活用するのかという検討を出発点とすべき。
- ・ 解くべき問題に適したアーキテクチャで計算機を開発する必要がある。このため、今後のHPCシステムとしては、目的別に特徴のある複数のシステムを検討していくことが望ましい。
- ・ エキサフロップスを当面の目標にしつつも、途中の数10ペタフロップスから100超ペタフロップスをまず開発し、ハード面、ソフト面の課題を検証すべき。
- ・ ハードウェア単独の技術開発ではなく、システムソフトウェア、アプリケーションソフトウェア、ネットワーキングの開発と一体となって開発を進めるべき（コデザイン）。
- ・ ハードウェア、ソフトウェア、アプリケーションの全ての面において、どの部分をスパコン専用開発しなければならないのか、また、どの部分を日本の技術として開発しなければならないのかについて、産業界の状況も勘案しながら決めていくことが必要。
- ・ 上記により定められる技術の1つとして、プロセッサの開発に必要な中核技術は産業面での波及効果も大きく、我が国として取り組んでいくべき。高速・小型・低消費電力を実現する我が国発のマイクロアーキテクチャ技術、アクセラレータ技術、システムオンチップ技術などの採択が望まれる。
- ・ また、インターコネクト技術、ネットワーク技術の革新も望まれる。
- ・ さらに、各利用分野の目標達成のためには、コンピュータアーキテクチャやシステムソフトウェアのみならず、モデル化の再検討や新しいアルゴリズムの開発も必要。
- ・ 開発したHPC技術を産業界に展開し、スーパーコンピュータに限らずその技術を波及していくことが必要。これにより、HPCベンダーを含む我が国産業界の競争力の強化、ひいては我が国の国際競争力の強化につながるようなシステムを確立することが必要。
- ・ 津波予測など緊急的に極めて重要な処理が必要な場合に、専有して計算するというコンピュータが必要。また、即時的な地震・津波予測のためには、オンラインでセンサーからのデータをリアルタイムに集めながらシミュレーションしていく必要がある。センサーデータのオンライン処理やリアルタイム性を念頭に置く

ば、CPS（サイバーフィジカルシステム）の中核としてのスーパーコンピュータの活用という観点が重要。

- ・ データの爆発を考えると、データの取り扱いが重要な開発要素となる。階層的なデータをうまく取り扱うプラットフォームが必要。
- ・ 10万並列単位のマシンでのアプリケーションの開発にまじめに取り組むことがエクサフロップスに行く近道と考えられる。また、超並列化をスムーズに行い得るシステムソフトウェアの開発が重要。
- ・ HPCシステムの利用面を考え、関係府省と連携した体制を構築していくことが求められる。
- ・ 今後を担う若手研究者、技術者の積極的な参画を得た研究開発体制を構築することが、人材育成の観点からも重要。

（２）戦略分野における重要課題と必要な計算機所要

重要分野における現状と今後の取組を把握し、当該分野において必要になるHPC技術の課題を検討するために、次世代スーパーコンピュータ「京」の開発にあたって定めた戦略分野1～5の各戦略機関に、今後5～10年の重要課題と必要な計算機所要に関する調査票の作成を依頼した（参考資料3）。また、これについて各戦略機関の研究者と意見交換を行った。以下に、各戦略分野における検討の概略を記す。

○ 分野1 予測する生命科学・医療および創薬基盤

- ・ 分野1の課題を大きく分けると、分子レベルでのシミュレーション、人体のレベルのシミュレーション、バイオインフォマティクスの3つ。
- ・ 分子シミュレーションは、分子レベルから細胞機能の予測へ向かうものと創薬応用への展開の2つの可能性がある。細胞機能の予測は、生命科学の一分野として一分子計測などと連携し細胞動態の理解、疾患の解明や再生医療などに貢献することをめざしている。創薬応用は大きな可能性を持つものの、現状では、情報セキュリティの問題とテラフロップスのシミュレーションが役に立つレベルに到達していないために、創薬に計算科学を取り入れようという製薬企業は日本には少ない。セキュリティが守られて、ペタフロップスレベルの計算が迅速かつ安価に実現できれば、企業の参入が見込まれる。
- ・ 人体のレベルのシミュレーションについては、全身レベルのスパコンによるシミュレーションと医療現場とを接続したいと考えている。これにより、患者の身体的負荷を軽減した治療が可能になると考えられる。この場合、大量の患者データを保存するための大規模データサーバ、可視化システムの整備が必要。

- ・ バイオインフォマティクスについては、次世代シーケンサーから出てくる1サンプルあたりの解析データが2017年には10～100テラバイトとなると見込まれており、それを処理するためのストレージとエクサフロップスの計算能力が必要となる。また、これらは単に情報処理だけではなく、蓄積された巨大なデータベースと比較する情報処理が必要。これらのデータベースの扱いと演算をどのように扱うかが大きな課題。
- ・ これらを実現するための最大の障壁はスパコンの能力ではなく、ソフトウェアを開発する人材の数であり、継続的な人材育成が重要な課題。

○ 分野2 新物質・エネルギー創成

- ・ 分野2における主な課題は、科学的意義と社会的意義の両面から検討し、量子多体系の基礎理論に基づく電子デバイスやエネルギー変換デバイスなどの開発、強相関効果を用いた新規光学素子材料等の開発、元素戦略や創薬・生命科学への応用など日本の産業基盤に由来したものに取り組んでいる。
- ・ 計算の手法としては、主に①第一原理に基づき電子状態の精密な計算を目指す、いわゆる第一原理電子状態計算、②分子動力学計算、③量子多体問題の新しい解法の3つに分けられる。①については系のサイズはそのままに計算を高速化したいという要望が強く、③については大量のメモリと高並列計算を必要とする。
- ・ 量子多体系は近似をして計算をしているが、より高速のスパコンで計算ができるようになれば、近似をせずに系のサイズ（原子数）を大きくして計算をすることができるようになる。こうなれば、新しい現象が出てくると思われる。
- ・ 京と同程度の問題サイズで100倍から1000倍速く計算できることを、多くの研究者が期待している、すなわちストロングスケーリングで性能が出せること。あるいは新しいアルゴリズムを考える場合のビルディングブロックとなる基礎的なアルゴリズムが、100倍から1000倍の性能を発揮すること。その場合、ソフト、ハードだけでなく、新しいアルゴリズムを開発する必要がある。アルゴリズムの開発をハード開発を融合させる必要がある。また、大規模数値計算に特化した機能制限なども視野に入れ、OSの改良によってレイテンシを向上させる技術開発も必要。
- ・ スパコンでの計算のハード、ソフトを、研究所レベルのPCクラスターでも利用できるように、下方展開ができるように考慮しないと普及しない。
- ・ 分野2では、超伝導やエネルギー等、いろいろな重要課題で様々な計算手法にスパコンを用いているので、特定の用途に限ったスパコン開発より、ある程度の領域をカバーできる装置を求める。

○ 分野3 防災・減災に資する地球変動予測

- ・ 分野3については、気象予測、地震・津波予測に大きく分かれている。
- ・ 気象関係の課題については、より精度のよい予測のためにメッシュを細かくしていくことが昔からの課題であるが、最近では、環境問題に関する値も計算に入れることが必要になってきている。様々な条件の下で計算をする必要があることから、プロセスが非常に多くなっている。
- ・ 地球観測したデータを同化する必要があり、最適化問題として予測を行う必要があり、並列計算の重要度が増している。
- ・ 天気予報では、雲を解像できるようにモデルの解像度を上げるとともに、レーダー一等の観測データをアンサンブル同化で初期値に取り入れることができるようになれば、予測誤差を含めた市町村単位の定量的な予報が可能となる。そのためには京速機の100倍から1,000倍くらいの計算速度が必要。
- ・ 地震・津波については、地震や津波を関知してからリアルタイムで計算して情報発信する必要がある。また、津波については、今のように高さだけの予測ではなく、流体力の評価などを行い被害想定的高度化をすることが必要。
- ・ これから起こる地震の予測のためにはまずは観測網の整備が必要。測定したデータとの同化を20回から30回くらい行うことで予測精度を上げていくことができる。さらには地球構造の理解につながり、地震のメカニズム解明にもつながる。
- ・ 地震発生の短期的予測そのものは難しいが、起こった地震のデータをリアルタイム同化して強振動や津波の伝播シミュレーションを行い、先を予測して災害軽減に活かすことはできる。基礎方程式に戻って計算を行うことで、地震・地殻変動・津波の複合災害の予測ができるようになる。アルゴリズムの高速化だけでは限界があり、汎用ではなく連続体方程式の計算（差分法など）の専用ハードウェアが必要。

○ 分野4 次世代ものづくり

- ・ ものづくり分野においては、①製品試作を極力行わないことによる開発期間・コストの低減、②計算科学シミュレーションによる最適化、③新たな現象の解明・材料の開発がHPCを推進する意義。また、産業界は最大のHPC利用者のボリュームゾーンといえる。
- ・ 分野の特徴としては、①1回の計算だけで大きな成果が出ることはないこと、②世界のトップエンドの計算機の1/10の計算機が3年後に実用化すること、③

演算量とデータ量が比例する計算（熱・流体・構造・音響・電磁気）が多いことがあげられる。

- ・ 超大規模データを設計現場で扱える革新的技術やメモリーバンド幅比 Byte/Flops=0.1 に耐えうる新規アルゴリズム開発など、時代の牽引役としてのシミュレーション技術を推進していく必要がある。また、1 PFLOPS 級の計算機を利用した HPC の普及も重要であり、100社～1,000社でペタフロップス級の計算が設計現場で実用化されることを目指す必要がある。
- ・ 分野4が希望する5年後の計算機は、①数100 PFLOPS の計算機（トップエンド）と②1 PFLOPS の計算機である。
- ・ ①数100 PFLOPS の計算機は、ウィークスケーリングでコア数1,000万以上かスレッド数で1億以上のスケーラビリティを有するものが望まれる。ここでの Byte/Flops は可能であれば0.2～0.4を有し、GB/GFLOPS は1/8以上であることが望まれる。また、ネットワークバンド幅は、メモリーバンド幅の1/10以上を有して欲しい。
- ・ ②1 PFLOPS の計算機は、現状と同程度の Byte/Flops を確保しつつ、10ラック程度の容積で、空冷タイプのもので2億円程度であれば、産業界も導入しやすいと考えられる。取り扱うデータ量が非常に大きく、前処理・後処理に時間がかかるため、ストレージには20 GB/s のスループットを望む。また、ネットワークバンド幅は、ストロングスケーリングが望まれ、メモリーバンド幅の1/5程度を有して欲しい。
- ・ アクセラレータを使用してもかまわないが、ソフトウェア開発者が利用しやすいことを望む。

○ 分野5 物質と宇宙の起源と構造

- ・ 分野5の基礎科学研究は、基本的な物理法則から出発して素粒子から宇宙全体にいたる幅広い階層での物質構造の理解を目指すものである。計算機の能力が向上することで、素粒子分野では格子QCD計算によって新しい物理法則の探索に必要な精密計算が可能になるほか、核力を実験からのインプット無しに詳細に決定して原子核物理学の基礎を確立することもできる。また、実験のできない高温、高密度の計算によって、宇宙初期の相転移や中性子星の内部構造、超新星爆発の理解も飛躍的に進む。宇宙物理では、星・惑星形成や銀河形成・進化の直接計算が可能になる。つまり、これらの基礎科学分野の革新的進歩が計算科学の進展によってもたらされることが期待される。
- ・ これらの課題はもとより人類の知的好奇心に基づくもので、産業や社会への直接

的な応用に繋がるものではない。しかし、ここで培われた問題解決手法が科学技術の幅広い分野で有効に活用されるのは、歴史の示すところである。

- ・ 分野5の中でも、量子色力学（QCD）と宇宙物理でのN体計算では、コスト効率や電力効率の点で最適な計算機アーキテクチャは全く異なる。同様の違いは他のアプリケーションにもあり、全てを単一アーキテクチャでカバーするのは費用対効果の点で得策でない。京の次の世代ではこの問題はさらに極端になることが技術的に予想されるため、複数のアーキテクチャの計算機開発を同時に推進することが不可欠である。そのためには、主要な計算アプリについて必要なアーキテクチャを詳細に検討することが早急に必要である。
- ・ 筑波大は、計算科学者と計算機科学者が共同でQCD向け計算機を開発した実績を持つ。東大・国立天文台では、高い価格性能比を実現する重力多体問題専用機を継続して開発してきた。これら進め方の利点は、明確な目標を設定することで、そのためにベストの設計や問題解決を選択できる点にある。あるアプリに徹底的に最適化した計算機が、結果的に他のアプリでも良い性能を示すことは、上記に限らず米国のブルージーンでも同様であった。
- ・ 代表的なアプリの特性解析及び高速化アプローチを徹底的に追求し、計算機アーキテクチャにおけるイノベーションを目指すことにより、同種の手法を適用可能な幅広いアプリへの対応も可能となる。革新的なアイデアは、例えばCPUとメモリバンド幅とノード間通信のバランスを考えるだけは決して生まれにくい。日本発の新しい計算機アーキテクチャを目指し、ハードウェアからアプリまでが一体となったアプリ志向の開発体制を組むことで、結果的に多くのアプリが高速に動作するシステムを開発することを指向すべきである。
- ・ これらのことを実現するには、アプリ研究者の意見を単に聞くだけでなく、具体的な開発課題を設定して計算科学と計算機科学の専門家が直接密接に議論する場を早急にもつことが重要である。

2. 今後の取組み

(1) 基本的な考え方

我が国として、HPC技術を更に発展させていくことは、科学技術の発展、産業競争力の強化、社会の安全・安心の確保等を高いレベルで達成していくためにも必要不可欠である。HPC技術は、コンピュータアーキテクチャ設計、プロセッサの設計・開発、ネットワーク、データ処理、ファイル管理、大規模コンピュータシステム構築、システムソフトウェア開発、コンピュータアルゴリズム開発、アプリケーションソフト

トウェア開発など、幅広い技術分野に及ぶ。これら技術は、個々にも重要な技術開発要素を含んでいるが、HPC技術の社会や研究開発への適用を考えれば、これらの開発に総合的に取り組み、全体として最適に機能するようにしていくことが重要である。このため、HPC技術の開発に取り組むにあたっては、まず、社会的・科学的課題を如何に解決するのかという視点に立ち、このためにどのようなHPC技術が必要なのかを考える、いわば、利用側の視点からのアプローチを取るべきである。また、持続的なHPC技術の発展のためにも、開発されるHPC技術が、重要なコア技術として我が国の企業において広く展開されることが求められる。

以上を踏まえれば、産学官の関係者を結集し、まずは、利用の観点からアプリケーション分野の検討を行い、社会的・科学的課題に取り組むに当たりどのような技術が求められるのかを具体化することが必要である。その上で、コンピュータアーキテクチャ、システムソフトウェア、半導体設計等関連の研究者、技術者と共同作業をしていくことが望まれる。

(2) 今後の検討の方向性

以上のように、アプリケーション分野の検討を元に今後の研究開発について具体化していくことが必要であるが、これまでの本ワーキンググループにおける検討を踏まえれば、今後のHPCシステムは、解くべき課題の内容・性質に応じて複数の方向性に分かれると考えるのが妥当である。取り扱うデータが非常に大規模となり、また、複数の物理を様々なスケールで高精度に計算する必要がある、ペタスケールを超えた今後の計算科学において、1つの汎用システムで全てに対応することは計算技術や経済性の観点から効率的ではない。一方、解くべき課題のバックグラウンドとなる科学原理、計算アルゴリズム、取り扱うデータの規模、リアルタイム性が求められる等の課題に応じた要因により、追求すべきHPCシステムの姿は一定数に絞り込むことが可能と考えられる。これからの検討においては、以上のことを踏まえ、課題に応じた複数のHPCシステムを追求するというスタンスに立つことが適当である。また、この検討においては、スーパーコンピュータのみならず、データ収集に必要なセンサーやネットワーク技術、大規模データ処理に必要なデータ処理技術などについても、あわせて検討する必要がある。

(3) 具体的な取組み

今後のHPC開発のあり方を具体化していくため、以下の3つの作業部会を設置する。まずはアプリケーション作業部会における検討を進め、取り組むべき課題に必要なHPCシステムとこれに要求される事項を検討する。この結果を受け、コンピュー

タアーキテクチャ作業部会、システムソフトウェア作業部会が緊密に連携をしながら必要な検討を進めることとする。また、必要に応じ、アプリケーション作業部会とも合同で検討を進めることとする。

○ アプリケーション作業部会

主要分野の研究者及びアプリケーションソフトウェア開発者を中心に構成。今後必要とされる課題解決に取り組むにあたり、HPCシステムに要求される事項を検討・整理。部会の構成及び検討の進め方については、戦略分野を中心としつつもこれに限定せず、また、異なる分野間の密接な連携が図られるようにすべきである。

○ コンピュータアーキテクチャ作業部会

スーパーコンピュータ開発者、プロセッサ開発者、コンパイラ開発者を中心に構成。アプリケーション作業部会から提示された事項を達成するために必要なCPUとコンピュータアーキテクチャ、データストレージ、インターコネクト、ネットワークを検討。必要に応じアプリケーション作業部会にコンピュータサイエンスの観点からの再検討を促したり、合同で検討を進める。

○ コンパイラ・システムソフトウェア作業部会

アプリケーション作業部会及びコンピュータアーキテクチャ作業部会と連携し、コンパイラ開発、ライブラリ開発、新規並列言語開発等も含め、必要なシステムソフトウェア開発の検討を行う。

(4) 今後のスケジュール

- | | |
|-------|---|
| 7月 | 3つの作業部会発足 |
| 7～9月 | アプリケーション作業部会においてHPCシステムに求められる事項を検討・整理 |
| 9～10月 | アプリケーション作業部会の検討を受け、コンピュータアーキテクチャ作業部会及びシステムソフトウェア作業部会の検討を進める |
| 12月 | 3つのワーキンググループの共同作業を通じ、複数の追求すべきHPCシステムとこれを開発していく体制案をとりまとめ |

ＨＰＣＩ計画推進委員会
今後のハイパフォーマンス・コンピューティング技術の研究開発
の検討ワーキンググループの設置について

平成 23 年 4 月 5 日
文部科学省研究振興局

1. 設置の趣旨

世界最高水準のハイパフォーマンス・コンピューティング技術は、我が国が国際的な優位性を保持し、国民生活の安全を確保していくため、長期的視点に立って継続的に研究開発を推進し、成果を蓄積していくべきものである。このような技術の研究開発の推進については、第3期基本計画で国家基幹技術に選定された次世代スーパーコンピューティング技術の成果を最大限活用していくことが必要である。

このため、ＨＰＣＩ計画の推進にあたり必要事項を検討するために研究振興局長の諮問会議として設置されているＨＰＣＩ計画推進委員会のもとに、今後のハイパフォーマンス・コンピューティング技術の研究開発のあり方について検討を行うワーキンググループ（以下「ワーキンググループ」という。）を設置する。

2. 調査事項

- ・ 国内外の研究開発状況及びハイパフォーマンス・コンピューティング技術の現状の把握
- ・ 今後の研究開発課題の検討
- ・ その他今後のハイパフォーマンス・コンピューティング技術の研究開発に関すること

3. 構成

ワーキンググループの構成員は、別紙のとおりとする。

4. 設置期間

平成 23 年 4 月 13 日～調査事項の終了までとする。

5. その他

ワーキンググループの庶務は、文部科学省研究振興局情報課計算科学技術推進室が処理する。

(別紙)

今後のハイパフォーマンス・コンピューティング技術の研究開発
の検討ワーキンググループ 委員名簿

浅田 邦博 東京大学大規模集積システム設計教育研究センター教授
宇川 彰 筑波大学副学長・理事
小柳 義夫 神戸大学大学院システム情報学研究科特命教授
笠原 博徳 早稲田大学理工学術院教授
下條 真司 大阪大学サイバーメディアセンター教授
関口 智嗣 産業技術総合研究所情報技術研究部門長
関口 和一 株式会社日本経済新聞社産業部編集委員兼論説委員
鷹野 景子 お茶の水女子大学大学院人間文化創成科学研究科教授
所 眞理雄 株式会社ソニーコンピュータサイエンス研究所代表取締役社長
主査 土居 範久 慶應義塾大学名誉教授
土井美和子 株式会社東芝研究開発センター首席技監
中島 浩 京都大学学術情報メディアセンター長
根元 義章 東北大学理事
平尾 公彦 理化学研究所計算科学研究機構長
平木 敬 東京大学大学院情報理工学系研究科情報科学科教授
松岡 聡 東京工業大学学術国際情報センター教授
村上 和彰 九州大学大学院システム情報科学研究院教授
矢川 元基 東洋大学計算力学研究センター長
米澤 明憲 理化学研究所計算科学研究機構副機構長

(50音順)

審議経過

第 1 回 平成 23 年 4 月 13 日（水）

- 今後のハイパフォーマンス・コンピューティング技術の研究開発の検討ワーキンググループについて
- 今後の研究開発課題について
 - ・「京」の成果及び今後の研究開発課題（理化学研究所 平尾公彦）
 - ・エクサフロップへ向けた研究開発課題と国際的な現状（東京工業大学 松岡聡）
- 検討の進め方について

第 2 回 平成 23 年 4 月 18 日（月）

- 今後の研究開発課題について
 - ・ナノ・物質科学分野の課題と求められる HPC 技術（東京大学 常行真司）
 - ・ライフ分野の HPC と今後（理化学研究所 姫野龍太郎）
 - ・地震津波災害軽減に向けた HPC 技術への期待（東京大学 古村孝志）

第 3 回 平成 23 年 5 月 11 日（水）

- 今後の研究開発課題について
 - ・気候変動予測に関する計算機検討会報告（神戸大学 小柳義夫）
 - ・宇宙シミュレーションの観点から（東京工業大学 牧野淳一郎）
 - ・次世代超低消費電力スーパーコンピュータの基礎検討（東京大学 平木敬）
 - ・プロセッサの「設計力」（東京大学 石井康雄）

第 4 回 平成 23 年 5 月 20 日（金）

- 今後の研究開発課題について
 - ・戦略的高性能計算システム開発に関するワークショップ（京都大学 中島浩）
- 検討の進め方について
 - ・今後 5～10 年後のシミュレーション計算所要

第 5 回 平成 23 年 5 月 30 日（月）

- 今後の研究開発課題について
 - ・我が国の HPC インフラに関する将来ビジョン、および、それを実現する HPC プロジェクトの在り方～4 つの提言～（九州大学 村上和彰）

- ・ 今後5～10年後のシミュレーション計算所要（戦略分野1、戦略分野5）

第6回 平成23年6月8日（水）

○ 今後の研究開発課題について

- ・ 今後5～10年後のシミュレーション計算所要（戦略分野2、戦略分野3、戦略分野4）

第7回 平成23年6月17日（金）

○ これまでの議論のまとめ

- ・ 2018年のシステム予測（東京大学 平木敬）
- ・ 今後のハイパフォーマンス・コンピューティング技術の研究開発について

これからのスーパーコンピューティング技術の展開を考える シンポジウムの開催について

幅広く関係者を結集し、社会におけるスーパーコンピューティング技術のあり方や今後の展開を議論するシンポジウムを、関係府省等の主催、共催により開催した。

最後のパネルセッション「将来のスーパーコンピューティング技術の取組について」では、本ワーキンググループにおける検討結果も紹介した上で、シミュレーションとそれを支える基盤（スーパーコンピューティング技術）の必要性、解決すべき課題、今後の取組の方向性について聴衆も含めた議論が行われた。

1. 日時・場所

平成23年6月27日（月曜日）、28日（火曜日）

東京大学 武田先端知ビル5階 武田ホール

2. 主催者等

主催：内閣府/文部科学省/HPCIコンソーシアム

共催：総務省/経済産業省

後援：産業技術総合研究所/情報通信研究機構/国立情報学研究所/理化学研究所/日本経済団体連合会/電子情報技術産業協会/スーパーコンピューティング技術産業応用協議会/応用物理学会/高分子学会/情報処理学会/ターボ機械協会/日本応用数理学会/日本化学会/日本シミュレーション学会/日本ソフトウェア科学会/日本物理学会/分子科学会/分子シミュレーション研究会/溶液化学研究会

3. プログラム

1日目

【基調講演1】「科学技術駆動型イノベーション創出能力の強化に向けて
～スーパーコンピューティング技術への期待～」

【基調講演2】「イノベーションで日本再生～人と社会とICT～」

『スーパーコンピューティングの果たす役割と今後の展開』

【特別講演1】「安全・安心確保（防災・減災、国土管理等）の観点から」

【特別講演2】「科学技術基盤としての観点から」

【特別講演3】「産業利用の観点から」

【特別講演4】「情報インフラ活用（クラウド、ネットワーク等）の観点から」

2日目

【特別講演5】「海外のスーパーコンピューティングの状況」

【パネルセッション1】「将来のスーパーコンピューティングへの挑戦」

- ・ 先端研究者からの提言とディスカッション

【パネルセッション2】「将来のスーパーコンピューティング技術の取組について」

- ・ シミュレーションとそれを支える基盤（スーパーコンピューティング技術）の必要性、解決すべき課題、今後の取組の方向性について議論。

4. パネルセッション「将来のスーパーコンピューティング技術の取組について」のまとめ

- ・ 取り組む課題を見据えた上で複数のHPCシステムを検討すべき。
- ・ 具体的なHPCシステムの検討は、これをどのように活用するのかということを出発点とする。
- ・ このため、まずは、計算科学研究者による必要なHPCシステムの提案を期待する。
- ・ 産学官の関係者を結集し、アプリケーションソフトウェア開発者、コンピュータアーキテクチャ開発者、システムソフトウェア開発者が一体となった開発体制を構築することが必要だと考える。
- ・ 以上のため、オールジャパンの関係者の迅速な行動を期待。

(参考) 参加人数

登壇者・講演者を含め262名

今後5～10年の重要課題と必要な計算機所要

※今後5～10年に実施されるシミュレーション計算所要について、現状から外挿していただき回答しやすい単位にて以下の項目に記載願います。

※シミュレーション毎に記載しやすい項目を選んでいただき記入していただいても構いませんが、①から⑥、⑦-①、⑧-①、⑧-④、⑨-①、⑪-①、⑫、⑬については必ず記載願います。必要な項目がない場合は、⑭その他に追記してください。

項番	①課題	②意義(社会的、科学的)	③必要となるサイエンス	④シミュレーション/アプリケーション/アルゴリズム	⑤問題サイズ/メッシュサイズ	⑥必要となるコンピュータ環境(アーキテクチャ、システム構成等)	⑦演算量		⑧希望実行時間				⑨必要メモリサイズ		
							⑦-①総演算量	⑦-②演算量/ステップ	⑧-①総時間	⑧-②時間/ステップ	⑧-③ステップ回数	⑧-④実行回数	⑨-①システム全体	⑨-②ノード単位	
1	患者個々の医用画像を基に、心臓も含め全身の血管網を再現し、心臓の拍動から、動脈については血管の脈動も含め詳細な非定常3次元計算を行い、病態の予測、手術の支援や治療後の評価、薬効の評価を行う。	病態の早期発見・早期治療に役立てる。	流体-構造連成を扱う連続体力学と生化学に関する化学反応式の連成	血流シミュレーション/(有限差分法の3次元血管網)+(有限要素法の心臓)+(末梢血管および静脈を1次元の血管網で近似した手法)、この3つを連成させる手法	50cmx50cmx200cm/格子点数 10 ¹⁵ 点	大量の患者データを保存するための大規模データサーバー、可視化用ソフトの整備	1EFLOPS × 6時間		6時間				可能な限り多く	100PetaByte	
2	体内を伝播する超音波の挙動を、温度上昇も含めて詳細に計算し、焦点制御の方法を検討するとともに実際の治療器の設計に役立てる。	患者の身体的負荷の軽い低侵襲治療法の確立。	超音波伝播に関する連続体力学に基づく計算とタンパク質の変性による音響特性の変化も含めたシミュレーション	超音波治療シミュレーション/有限差分法に基づく、陽的時間発展法による計算。	30cmx30cmx30cm/メッシュサイズ 10ミクロン	大量の患者データを保存するための大規模データサーバー、可視化用ソフトの整備	100PFLOPS × 時		1時間				可能な限り多く	10PetaByte	
3	神経系、循環器系をともなう全身筋骨格系のシミュレーションにより、神経系の効果を考慮して転倒時や事故時などにおける身体の損傷を予測する。	高齢化社会における老人の転倒予測や、交通事故時における損傷の予測。	脳神経系の数理モデルと筋繊維へのシグナル伝達モデルを用いて、筋骨格系の連続体力学計算を実施	筋骨格-神経-循環器系統合シミュレーション/有限差分法を基本にし、筋繊維レベルから組み上げた全身筋骨格モデルに、脳神経系の階層構造を取り込んだ数理モデルが結合された計算手法	50cmx50cmx200cm/メッシュサイズ 10ミクロン	大量の患者データを保存するための大規模データサーバー、可視化用ソフトの整備	1EFLOPS × 6時間		6時間				可能な限り多く	100PetaByte	
4	生体内化学反応機構を明らかにして、産業利用する道を開く	病気発生メカニズムの解明、生体内反応のバイオテクノロジー応用、地球温暖化防止	生体高分子の化学反応ダイナミクス解明	分子動力学と電子構造計算の融合	数億個の原子	GPGPUやANTONなどの様な特殊な演算機能を内包した新しいスーパーコンピュータのアーキテクチャが必須	100EFLOPS × 数ヶ月		数ヶ月				数百回	200テラバイト	
5	細胞動態の解明に向けた分子シミュレーション(タンパク質の変化が細胞に及ぼす影響を量子的な過程も含めて解明する)	例えば、アルツハイマー病の原因と考えられているアミロイドの凝集機構の解明が行えれば、病気の予防やより適切な治療方法の開発に役立てることができる。	生命システム科学と分子科学	分子動力学計算、量子化学計算、QM/MM、粗視化モデル計算	数百万～数千万粒子(古典系:原子、粗視化粒子)数千原子(量子系)	古典系-(長時間計算が可能な環境)・高速な専用計算機環境 量子系(高並列計算が可能な環境) ・使い勝手の良い、分散メモリ対応の行列演算ライブラリー ・バーチャル・シェアード・メモリーをサポートするハードやシステムソフト	1EFLOPS × 月		数日～数ヶ月(シミュレーションする現象によって異なる)				数百回	1PetaByte	
6	DNA情報と医療情報に基づいた個別化医療の推進	個別化医療の推進により、病気になってからの医療に加え、予防医療により、人口が減少していく中、日本全体の活性度を向上。	ゲノム医科学、メディカルインフォマティクス、バイオインフォマティクス	超高速シーケンサー技術等を駆使して、個人個人のゲノム情報・エピゲノム・トランスクリプトーム・プロテオーム・メタボロームなどの違いと、がんや成人病等の病気、薬、環境因子との繋がりを解明し、それを診断、予防、治療へと翻訳する技術。超並列関連解析アルゴリズム、ネットワーク推定アルゴリズム、データ同化アルゴリズム、ベイジアンネットワーク、状態空間モデル。	10万～100万人のゲノム及び関連データ2ExBデータ	ヒト大規模ゲノム関連データベース(数十万人)、副作用情報データベース、大規模生命・医療データ解析技術、ソフトウェア等の情報基盤技術を整備。このために、スーパーコンピュータシステム(1エクサ・フロップス)、及び大規模ストレージ(2エクサ・バイト)がインフラ設備として必要	1ExFLOPS		恒常的データ解析				恒常的	10TB	

項番	⑩通信量			⑪入出力量					⑫高並列化作業時に問題となっている事項	⑬分かっている解決方法	⑭その他	備考
	⑩-①1対1通信	⑩-②全対全通信	⑩-③1対全通信	⑪-①総容量	⑪-②容量/ステップ	⑪-③回数/ステップ	⑪-④ステップ数	⑪-⑤ファイル数				
1				300PetaByte					超並列のマシンでポアソン方程式を高速に解くのが難しい	ポアソン方程式を解かずに、楕円型方程式を擬似的な双曲型方程式に書き換え、陽的に時間積分して解く。	有限差分法の3次元血管網に、有限要素法の心臓、さらには末梢血管および静脈を1次元の血管で近似して表したような複数の計算手法が混在する方法になると考えられる。	
2				30PetaByte					薄い皮膚のところでの発熱を計算するのが難しい	皮膚の発熱の理論モデルを構築し、発熱量を評価。そのあたいをエネルギー保存式に生成項として加える	焦点制御の方法の検討の方は比較的容易だが、実機設計用のための装置近傍の音場計算は細かな解像度が必要となり計算負荷が大きくなる。	
3				300PetaByte					筋繊維どうしの相互作用を計算する連続体計算の部分	詳細計算をせずに均質化法などの導入による粗視化	脳神経系のモデルはまだまだ未知な点が多く、実際に計算してみないとどこまで達成できるか推測しづらい。	
4				500テラバイト					計算対象の物理モデル自体、例えば全ての原子が量子的に結合している為に、遠くの原子の移動が影響する。	物理法則を利用した新しい並列アルゴリズムを開発する。		
5				3PetaByte					超並列のマシンでFFTを高速に解くのが難しい。	FFTを必要としないアルゴリズムを利用する。	分子と細胞の階層を接続するために必要なモデルの開発は今後の課題である。	
6				1ExBストレージ					1. ストレージへの高速同時並列アクセス 2. データ並列性がある問題に対しては、個々の計算時間が不均一であるため、その並列化効率を上げることが難しい場合がある 3. 巨大な共有メモリ(4TB以上) 4. ネットワーク推定アルゴリズムでのノード間通信の負荷が大きい	1. Lustreシステムのようなものを使う。 2. データに応じたまめなプログラム作成で対応 3. 分散メモリに対応したプログラムの書き換えで対応 4. ノード間通信を抑えた近似的手法を導入したプログラムを作成することで対応		

項番	①課題	②意義(社会的、科学的)	③必要となるサイエンス	④シミュレーション/アプリケーション/アルゴリズム	⑤問題サイズ/メッシュサイズ	⑥必要となるコンピュータ環境(アーキテクチャ、システム構成等)	⑦演算量		⑧希望実行時間				⑨必要メモリサイズ	
							⑦-①総演算量	⑦-②演算量/ステップ	⑧-①総時間	⑧-②時間/ステップ	⑧-③ステップ回数	⑧-④実行回数	⑨-①システム全体	⑨-②ノード単位
1	エネルギー変換デバイス(電池、人工光合成等)の機能発生メカニズムの解明	革新的エネルギー変換デバイス開発の礎となる理論を構築。将来のエネルギー問題解決の一助とする	固体電子論と溶液論や輸送論の高いレベルでの融合	第一原理分子動力学シミュレーション+自由エネルギー計算コード(マルチオーダー等)	10nm ³ x100ピコ秒x10 ⁵ 状態	密結合型ノードを状態数(10 ⁵)疎結合させたものを月、年にわたって利用できる環境。	200PFLOPS x 2週間		実時間で二週間			年間100回	10PetaByte	密結合ノードあたり1TByte
2	ナノテクノロジー基幹デバイスの加工プロセスおよび動作シミュレーションとナノ科学の進展	今世紀の新たな産業創出、未踏の学術領域 computics の創出、量子論に基づき演繹的パラダイムの提示	量子論の第一原理に立脚した電子状態理論の構築、系のダイナミクスを追跡可能な高速計算手法の開拓、多階層超並列アーキテクチャのコンピュータでの高性能計算手法の開拓	RSDFT+非平衡グリーン関数輸送コード [開発予定] 実空間密度汎関数理論(RSDFT)による全エネルギー・電子状態計算手法と非平衡グリーン関数理論による輸送係数計算手法を結合させたもの	10,000 - 100,000 原子ナノ構造	超並列マルチコア+個別アクセラレータ 5年後のピーク性能=100 PFLOPS、10年後のピーク性能= 10 EFLOPS	100 PFLOPS x 2000 HOURS		2, 3日			30回	100 PByte	
				(Real-Space Car-Parrinello MD) + TDDFT [開発予定] Car-Parrinello分子動力学法を実空間処理する新手法と、時間依存密度汎関数理論とを組み合わせた手法	10,000 原子表面・界面ナノ構造		1000 PFLOPS x 3000 HOURS		2, 3日		30回	1000 PByte		
3	構造材料の内部組織の構造と特性を組成・熱処理・加工のパラメータに対して、高精度に予測・設計する。	強度や耐久性、耐熱性を併せ持つ材料や軽量高強度の材料の開発が飛躍的に進み、高効率で安全なエネルギー変換(火力発電、エンジン)、輸送技術(軽量車体)が可能となる。	様々な結晶相・化合物相の第一原理からの安定性の予測。粒界・界面・欠陥の安定性・強度特性の第一原理からの予測。これらに基礎をおくマルチスケール計算技術の開発。	様々な結晶相・化合物相の高精度自由エネルギー計算、大規模な界面・粒界・欠陥系の第一原理計算、第一原理計算と連成したフェーズフィールド法などマルチスケール計算	第一原理計算ではセル当たり数百原子以上。フェーズフィールド法では実空間サイズでナノからミリまで。	第一原理計算は、並列最適化して実行する。自由エネルギー計算や大規模系の変形計算は、大規模並列計算をさらに多重に実行する。フェーズフィールド法計算も、並列化して大規模系に対応する。	4000ノード x 2000時間		4000ノード x 20時間			100回程度/年	8000GB	
4	光・電子機能性を持ったナノ構造体量子デバイス開発に資する電子・電磁場ダイナミクスシミュレーション	高い機能性を備えたデバイス開発を計算科学的な観点から支援する。	量子多体系ダイナミクスと電磁場ダイナミクス	実時間・実空間電子-電磁場ダイナミクス法/実時間・実空間グリッド上において偏微分方程式(時間依存コーンシャム方程式及びマクスウェル方程式)を差分法に基づいて解く。	50 nm x 50 nm	実在系(数十ナノメートルサイズ)に即したナノ構造体を直接扱えることを可能とする大容量メモリを備えた超高速次世代スパコン。また高速のノード間通信が必須。	100PFLOPS x 100時間		100時間			50回	3 PB	
5	有機系太陽電池の第一原理計算による包括的シミュレーション	光電エネルギー変換に関わる光捕集・電荷対生成・電極における電荷捕集等の複数の素過程を包括的に扱うことにより、素過程同士の競合を解明する。それにより、エネルギー変換デバイス作成における材料毎の特性を明らかにし、高効率新材料デバイスの開発が可能となる。	電子の実時間動力学。特に電子と核が相互作用する系における実効的運動方程式とその数値解法。	光捕集から電流生成までの第一原理電子核動力学シミュレーション(計算方法:密度汎関数理論・波動関数理論・核波束理論・平均場理論・経路積分法)。	数百から数千分子	ノード間メモリ共有システム、高速ノード間通信。	10の5乗PFLOPS x 数百時間		数百時間			百回	数十TB	
6	原子レベルの蛋白質の立体構造予測と創薬設計に向けた分子シミュレーション。蛋白質の立体構造をそのアミノ酸配列の情報のみから予測し、更に、その情報とともに、新しい薬剤候補選定のためのドッキングシミュレーション手法を開発する。	蛋白質の立体構造をそのアミノ酸配列の情報のみから予測できるようにすれば、基礎研究の大きな発展とともに、更に、その情報を使いながら、薬剤候補選定のための新しいドッキングシミュレーション手法が開発されれば、創薬分野に大きな革命を起こすことになる。	分子シミュレーション	モンテカルロ法や分子動力学法に基づく分子シミュレーション/拡張アンサンブル法	100万原子系	100万並列以上の超並列計算環境	100PFLOPS x 3月		3か月	0.01 秒 / ステップ	1000万回	100回		

項番	⑩通信量			⑪入出力量					⑫高並列化作業時に問題となっている事項	⑬分かっている解決方法	⑭その他	備考
	⑩-①1対1通信	⑩-②全対全通信	⑩-③1対全通信	⑪-①総容量	⑪-②容量/ステップ	⑪-③回数/ステップ	⑪-④ステップ数	⑪-⑤ファイル数				
1				10TByte程度					単純な並列軸がもはや存在しない。メモリ不足も問題。	演算をライブラリ・コールの形に書き換えて行う。多重計算を多用するのがとれない有効策。		
2				1 PByte 程度(推定)					輸送係数計算コードのマルチコア超並列アーキテクチャ上でのチューニングが課題。	未踏の課題		
				100 PByte 程度(推定)					実空間CPMDでの精度の保証。RS-CPMD、TDDFTはいずれもハミルトニアン演算(行列 * ベクトル計算)が主要な計算であるが、その高並列化は未着手	精度の保証は実空間メッシュの多重化で対応可能かもしれない。ハミルトニアン演算を行列 * 行列演算に返還できれば、BLAS3の活用が可能になる。		
3									平面波基底第一原理計算コードは、ノード数がある程度増えると並列化効率が落ち、各ノードのメモリー上限に引っかかるようになる。自由エネルギー計算コードは、ワンショット計算自体の並列化に限界がある。	自由エネルギー計算では、多重計算を多用して、実質的な作業効率を上げる。		
4				100 GB					ポアソン方程式の解法において、コア数が1万コア程度を超える辺りから、ノード間通信に掛かる時間が相対的に増ってきており、通信スピードが大きな問題となっている。また、十数ナノメートル程度のナノ構造体では、現状のメモリでは限界を超えると予測している。	ポアソン方程式の別の解法アルゴリズムを実装中。		
5				数十GB					電子・核両方の場合において、量子計算は基底関数が非常に大きくなるために、ノード間をまたがったメモリ上に分散配置する事になり、逐次計算等では1ステップ毎にデータ通信が発生してしまう。	核ダイナミクスについては、経路積分を基礎とする量子モンテカルロ法や半古典法等の方法で、メモリ使用料を減らせる可能性がある。電子状態計算については検討中である。		
6									レプリカ交換法は理論的には100パーセントの並列化が可能だが、可能な超並列マシンに適したアルゴリズムであるが、現状は、各レプリカにおける計算時間が完全には一致していないので、1000並列近くなると100パーセントの並列化率が得られない。	レプリカ交換法で使う分子動力学プログラムやモンテカルロプログラムの改良によって、計算時間のレプリカ依存性を少なくする。		

項番	①課題	②意義(社会的、科学的)	③必要となるサイエンス	④シミュレーション/アプリケーション/アルゴリズム	⑤問題サイズ/メッシュサイズ	⑥必要となるコンピュータ環境(アーキテクチャ、システム構成等)	⑦演算量		⑧希望実行時間				⑨必要メモリサイズ		
							⑦-①総演算量	⑦-②演算量/ステップ	⑧-①総時間	⑧-②時間/ステップ	⑧-③ステップ回数	⑧-④実行回数	⑨-①システム全体	⑨-②ノード単位	
7	全原子シミュレーションにより、インフルエンザやHIVなどのエンベロープ(細胞膜や表面タンパク質)を有する大きなウイルスの営みの分子科学を確立する。	感染症克服の基礎が確立される。	分子動力学法による全原子シミュレーション	分子動力学シミュレーション/modylas/現在のFMMを越えた長距離計算の新アルゴリズム	10億原子系	10億原子系の力計算、運動方程式の数値解を、1ステップ5msで実行できる環境。	100PFLOPS~1000PFLOPS								
8	分子内・分子間相互作用(ミクロ、普通の化学)とモルフォロジー(nm~μmレベル)を共に制御することで、新たな物質集団機能を設計する	これまでに蓄積された分子間相互作用の知見を、μmレベルの分子集団機能の設計に活かす。熱エネルギーと同じぐらいの大きさの相互作用を駆使する物質設計は、様々な相関を精度良く取り扱う必要があるという意味で科学の最先端課題であると同時に、小さいエネルギーを有効利用するという意味で、省エネルギー社会の貢献に役立つ	多形態の多成分混合系の分子/粗視化シミュレーション	分子シミュレーション(分子動力学シミュレーション、自由エネルギー計算、エネルギー表示法、拡張アンサンブル法)	0.1 μm	数十億粒子系の超並列シミュレーションおよびそのトラジェクトリ解析のための巨大データシステム	100PFLOPS×日		1日			100回	1 TB		
				粗視化シミュレーション(分子動力学シミュレーション、粒子・連続場ハイブリッド法)	10 μm	100PFLOPS×日		1日		100回	1 TB				
9	強相関効果を用いた新規光学素子材料・新規熱電材料を設計する。	新しい機能性材料の設計指針を解明し、次世代情報・エネルギー機能性デバイスの基盤を構築する。	強相関効果を取り入れた大規模格子模型に対する厳密な励起ダイナミクスの計算手法	動的密度行列繰り込み群法、時間発展密度行列繰り込み群法、厳密対角化法	1000格子点	膨大な数の状態情報を保持するため大規模メモリを搭載した環境。またその状態情報を分散させるための大規模並列環境。さらにノード間の高速度通信が可能な環境。	100PFLOPS×日		24時間			50回	20PB		
10	すぐれた半導体特性、磁気特性、超伝導特性、力学特性を持つ新しい物質・材料を、基礎科学の知見と計算科学的手法を用いて探索・提案する	日本の産業基盤として重要。	信頼性が高く実用的な多体電子状態理論	第一原理電子状態計算(密度汎関数理論、波動関数理論、量子モンテカルロ法)		1~10PFLOP級のマシンを少数グループで年間利用。	1000PFLOPS×day(1~10PFLOP級のマシンを年間利用)	対象とする物質による	24h			100回程度/年	1PB		
11	強相関電子系の電子状態計算。超伝導体、磁性体、熱電素子などの物性予測、物質デザイン	新機能を持った物質材料の可能性を提示し、材料開発や新機能デバイス開発を加速する。物理学の基礎理論の発展に寄与する。	量子多体問題を解くための量子力学、統計力学	第一原理電子状態計算 1. 密度汎関数法に基づく局所密度近似計算 2. 制限された乱雑位相近似計算(分極計算および射影相互作用計算) 3. GW計算	数千バンド、単位胞あたり数百原子以上	網羅探索のために、高速ネットワーク、多数回の試行錯誤の可能な環境	100PFLOPS×100時間		100時間			10回以上	100Tbyte		
				量子多体理論模型計算 クラスター拡張動的平均場近似、多変数変分モンテカルロ法、経路積分繰り込み群法	数千サイト自由度	100PFLOPS×数百時間		数百時間		10回以上	特に大きなものは必要ない				
12	電子状態制御による新化合物の設計と合成予測	人間の生活基盤である物質や分子の世界で、未知の分子の機能や状態を享受できることになる。新しい合成化学が創成される。	電磁場などの外場に応答する非断熱電子動力学理論とシミュレーション技術	電子動力学シミュレーション、超多体半古典力学シミュレーション、高塚らによる「超ボルン・オープンハイマー理論」とAction Decomposed Function の理論を使う。	特になし	巨大並列計算が安定的に確保できること。メモリの大きくて速いものが必要。メモリ間の通信速度は、この計算では絶対的な重要性を持たない。	100PFLOPS						特に緊急性はなし		現時点では算定できない

項番	⑩通信量			⑪入出力量					⑫高並列化作業時に問題となっている事項	⑬分かっている解決方法	⑭その他	備考
	⑩-①1対1通信	⑩-②全対全通信	⑩-③1対全通信	⑪-①総容量	⑪-②容量/ステップ	⑪-③回数/ステップ	⑪-④ステップ数	⑪-⑤ファイル数				
7									エクサスケールの並列度、アーキテクチャに整合した長距離力計算の新アルゴリズムの開発	アルゴリズム的にはFMMの高階層化、ハード的には3Dトラスに加えて、長距離通信の付加		
8				10 TB					大容量メモリ(特に分布関数の取扱いの場合)、および、トラジェクトリ/Oのスピード	粒子種のグループ化、および、組み込み運用		
				10 TB								
9				100GB					行列・ベクトル積、行列・行列積の繰り返しの際に発生する通信量。	二次元分割化など通信量を減らすための手法の適用。		
10	複数の手法があり、手法に依存			100PB程度					密度汎関数法は基底関数によらずノード数の増加によって並列化効率が低下する。波動関数理論と量子モンテカルロ法はより高並列化が可能だが、FFTがさらに高並列化できることがのぞましい。	3次元版高並列FFTの利用。平面波基底から局在基底への変更。構造探索や統計量の計算など、実際的な問題解決にはパラメータ並列も併用できる。		
11									特になし			
									逆行列等、行列演算の高並列化	逆行列等の高並列コードの開発		
12				現時点では算定できない					電子波動関数を基底関数によって展開した場合、それらの原子核座標による微分の行列の計算が巨大かつ、並列化を難しくする。	模索中。		

項番	①課題	②意義(社会的、科学的)	③必要となるサイエンス	④シミュレーション/アプリケーション/アルゴリズム	⑤問題サイズ/メッシュサイズ	⑥必要となるコンピュータ環境(アーキテクチャ、システム構成等)	⑦演算量		⑧希望実行時間			⑨必要メモリサイズ		
							⑦-①総演算量	⑦-②演算量/ステップ	⑧-①総時間	⑧-②時間/ステップ	⑧-③ステップ回数	⑧-④実行回数	⑨-①システム全体	⑨-②ノード単位
1	明日の大気汚染予測から数百年先の温暖化予測までシームレスにカバーする地球環境変動監視予測システム(全球システム)	自然および人為起源の地球規模の気候・環境変動の過去の経緯と現況を、観測データと数値モデルを最大限活用することによって総合的に把握、監視する。さらに、将来への予測を提供して社会・産業界での意思決定を支援する。	静力学平衡を仮定しない大気・海洋シミュレーションにおける雲微物理、乱流、大気中での化学反応過程、微粒子の放射、雲微物理への影響 陸面、海洋中での生物化学過程、大気との交換過程 雪氷、海水の力学、熱力学過程	全球雲解像モデル、全海洋渦解像モデル、海水・雪氷圏モデル、大気化学・物質循環モデル、海洋・陸面生物化学過程モデル(流体計算) 衛星データを含むアンサンブルデータ同化技術(最適化アルゴリズム)	全球 水平解像度1km、鉛直150層 100メンバーアンサンブル	京コンピュータの100倍以上の計算能力 ~京コンピュータで短期間なら走らせることのできるモデルでのO(100)個のアンサンブル積分が実時間の1/100以下の速度で実行でき、かつその結果を集積できる環境。	1000PFLOPS超 ×3月		実時間での運用を可能にするには、100年分のデータ同化、予測計算が3か月程度で実行できる環境が必要			予測・監視の用途によって異なるが、大雑把には1日1回	5000TB	
2	上記地球環境変動監視予測システムの精度向上のための最先端プロセス解像シミュレーション	社会に提供される地球環境変動予測システムの精度が向上する	静力学平衡を仮定しない大気シミュレーションにおける雲微物理、乱流、大気中での化学反応過程、微粒子の放射、雲微物理への影響 陸面、海洋中での生物化学過程、大気との交換過程 雪氷、海水の力学、熱力学過程	Bin法雲微物理、エアロゾル等微粒子と雲微物理の相互作用、ラージエディシミュレーション(LES)モデル(流体計算)	O(数千km) × O(数千km) 水平解像度O(100m)、鉛直200層	京コンピュータの100倍以上の計算能力	1000PFLOPS超 ×数ヶ月		数か月/年			O(10)例/年 *研究なので、何回計算して終わり、という訳にはいかない(いくらでもやることはある)	5000TB(?)	
3	市町村以下のスケールでのナウキャストとシームレスにつながる量的短時間予報を誤差情報を含めて実現する	集中豪雨、局地的大雨、竜巻など気象災害につながる顕著現象の力学予測とリスクマネジメントが可能になる。 大気汚染拡散モデル予測の精度が飛躍的に向上する。 都市の電力需要と太陽光や風力等の自然エネルギー発電量の両方を、高精度にかつ信頼度情報を伴って予測可能になる。	あらゆるスケールの観測データの迅速な集信水相を含む湿潤過程を考慮したナウキャスト技術とストームスケールのデータ同化技術の開発と統合 上記客観解析同化技術を超高解像度アンサンブル解析予測システムへの応用 乱流スケールのgray zoneの扱いについての解決	湿潤LESモデル、雲解像モデル(ナビエ・ストークス偏微分方程式についての流体計算、水平陽解法、鉛直陰解法) アンサンブルカルマンフィルタ、変分法的アンサンブル同化技術、粒子フィルタ	2500kmx2500km 水平解像度500m、鉛直100層 100メンバー	国内とその周辺のあらゆるスケールの観測データを数分以内に集信できる環境 観測データの品質管理を並列処理出来る環境x 京コンピュータの約100倍の計算能力	1000PFLOPS × 2 時		観測データを5分スロットで同化し、毎30分に解析を作成する処理を15分以内に行う。解析からの15時間延長予報を1時間で終了、最初の3時間を15分で出力。			1日48回	5000TB	
4	M9超巨大地震の発生時に想定される強震動と津波をリアルタイムに予測し、各地の揺れと沿岸津波高・浸水を緊急速報する。	緊急津波警報により国民の安全を守る。巨大地震の震源破壊過程の詳細を即座に把握する	重力項付きの運動方程式による、地震-津波同時シミュレーション	地震-津波同時シミュレーション/重力項付運動方程式の陽的FDM計算	1200Km × 600Km	巨大地震発生後、強震計や海底ケーブル津波計の観測データを受けて、すぐに津波波源を特定して、これから沿岸に到来する津波を2分以内に処理可能な環境。	100PFLOPS × 数 秒		地震発生後数秒以内			数回	10 PBYTE	
5	全球地球内部構造モデルを地震波伝播理論に基づくインバージョンにより実体波の精度で構築する。	固体地球の動的過程を支配する地球内部物質構造に対する新たな視点を与える。	三次元不均質媒質中の地震波動理論と地球内部構造推定	地球内部構造インバージョン/スペクトル要素法による理論波形計算とアジョイント法による波形インバージョン	全球格子点間隔1km以下	分散メモリによる大規模並列計算機。ノードごとにPF規模のディスク容量。	1EFLOPS × 1000時間		1000時間			20回	10PB	
6	震度7前後の大地震動を受けた場合、土木・建築構造物の部分的損傷過程やその結果引き起こされる全体的崩壊過程を、ばらつきも含め計算する	耐震設計に利用される各種数値解析手法のベンチマークを提供する。	損傷・破壊過程を支配する、数センチスケールでの亀裂発生・進展のメカニズム解明	構造物地震応答シミュレーション/有限要素法	空間サイズ: 10x10x100m メッシュサイズ; 0.01x0.01x0.01m	10億程度の自由度を持つ非線形解析を日単位で行える計算環境(10億自由度の非線形方程式を、0.01秒の時間ステップで計100秒間計算。損傷・破壊過程に必要な1ステップ毎の繰り返し回数を100程度に抑えることができれば、総計算回数は100万回程度)	CG法の計算回数 10 ⁶ 回:0.01秒時間ステップ、100秒、1ステップの繰り返し100回 CG法1回の演算量 10 ¹¹ 演算/回:10億自由度のベクトルと10 ² x10 ⁹ のマトリクスの積 CG法の総演算量 10 ¹⁷ 演算	10 ¹³ 演算量/ステップ (0.01秒時間ステップ、100秒)	ベタフロップスの性能が出されれば100秒。見込みは0.1~0.01ベタフロップスの実行性能で、1000~10000秒(0.5時間~5時間)			損傷・破壊過程のばらつきの評価には100回程度の実行が必要	主要変数 10億(変位ベクトル3成分) 補助変数 80億(応力テンソル6成分、弾性歪テンソル6成分、材料状態パラメータ10) CG法に利用するマトリクス 1000億(100x10億) 計 1000億 10テラバイト	

項番	⑩通信量			⑪入出力量					⑫高並列化作業時に問題となっている事項	⑬分かっている解決方法	⑭その他	備考
	⑩-①1対1通信	⑩-②全対全通信	⑩-③1対全通信	⑪-①総容量	⑪-②容量/ステップ	⑪-③回数/ステップ	⑪-④ステップ数	⑪-⑤ファイル数				
1				5000TB					流体計算なので通信負荷が大きい	全体通信のできるだけ少ないアルゴリズムを用いる		
2				5000TB(?)					同上	同上		
3				5000TB					予報部分は流体計算であり、全球モデル同様の通信負荷がある。解析部分は観測データの読み込みや品質管理など非常に多くのステップに分かれている。マルチスケールに応じた局所化と並列アルゴリズムの問題。アンサンブルメンバーを各ノードに振り分けるジョブスケジューリング	予報モデルや局所化については同上他の部分については、アーキテクチャに応じた開発が必要		
4				100GB								
5				1TB					理論波形計算では全球をブロックに分割しブロックごとにCPUコアを割り当て、ブロック境界で変位と応力の連続条件を満たすように時間積分を進めていく。並列度がきわめて大きくなった場合は、境界条件の適合のためにノード間の通信コストが増大する。	境界条件を合わせるブロックをノード内のCPUコアに配置することでノード間通信を削減するなど		
6				主要変数 10億(変位ベクトル3成分) 補助変数 80億(応力テンソル6成分, 弾性歪テンソル6成分, 材料状態パラメータ10) 計 90億 0.1テラバイト					損傷・破壊過程の亀裂発生・進展の非線形解析(非線形偏微分方程式の係数が、亀裂発生・進展による剛性低下の結果0.01倍に減少。さらに亀裂面の再接触によって100倍程度に増大)。	非線形方程式を陽的に解くことで対応可能。その代り、時間ステップをどの程度細かくするかが問題となる。		

項番	①課題	②意義(社会的、科学的)	③必要となるサイエンス	④シミュレーション/アプリケーション/アルゴリズム	⑤問題サイズ/メッシュサイズ	⑥必要となるコンピュータ環境(アーキテクチャ、システム構成等)	⑦演算量		⑧希望実行時間			⑨必要メモリサイズ		
							⑦-①総演算量	⑦-②演算量/ステップ	⑧-①総時間	⑧-②時間/ステップ	⑧-③ステップ回数	⑧-④実行回数	⑨-①システム全体	⑨-②ノード単位
7	想定された巨大地震に対し、都市域での地震動分布、構造物応答、避難行動を計算し、物的・人的被害を評価する。地震の他、津波・洪水が都市を襲う場合の、避難行動を評価する。	常時は次世代型ハザードマップとして利用する。シナリオベース、動的、高分解能、という点で従来のハザードマップと差別化される。巨大地震発生は、利用できる計算環境があることを前提に、最長半日程度で被害の緊急評価を行う。	エージェントシミュレーションの高度化、人工知能分野との連携が重要。	地震動分布・構造物群地震応答の物理シミュレーションと避難行動のマルチエージェントシミュレーション/地震動分布は有限要素法、構造物群地震応答は非線形ファイバーモデル、避難行動シミュレーションはマルチエージェントシミュレーション	10kmx10km程度の都市域	地震動分布シミュレーションは10億自由度の線形解析。構造物群地震応答シミュレーションは100万戸の建物群の非線形解析。一戸の自由度は1000(利用できる都市データの質・量に応じた高度化によって自由度を10000超にすることは可)。避難行動マルチエージェントシミュレーションは100万程度の個人を対象(1エージェントのパラメータは100。エージェントの高度化によってパラメータを1000超にすることは可)。	2つの物理シミュレーションは、各々、10 ¹⁶ の総演算の見込み。マルチエージェントシミュレーションは不明。		ペタフロップスの性能が出されれば100秒。見込みは0.1~0.01ペタフロップスの実行性能で、1000~10000秒(0.5時間~5時間)			次世代型ハザードマップは100程度の地震シナリオを想定。	物理シミュレーション・マルチエージェントシミュレーションとも、1テラバイト程度の見込み(高度化に合わせて10テラバイト)。	
8	南海トラフ、千島海溝、日本海溝等を対象に、プレート境界における巨大地震について、起こりうる複数のシナリオを想定し、それぞれについて被害想定をするもとなる震源過程を計算する。	多様なシナリオ毎に震源過程を与えることで、科学的に妥当かつ具体的な被害想定をそれぞれに対して行うことが可能となり、各地域で具体的な防災減災対策を講じることができる。	短周期波源を考慮したプレート境界の摩擦モデル、地形や不均質媒質を考慮したすべり応答関数	地震発生サイクルシミュレーション	最大1200km x 500km(地域毎に異なる)/100mオーダー	被害予測に必要な短周期強震動計算のもとになる高解像度(100mオーダー)の地震発生サイクル(破壊伝播を含む)の計算が可能な環境。	100PFLOPS x 日		24時間以内			数十回(5~6地域、数ケース)	50TB	
9	プレート境界の固着すべりと周囲の地震活動の状態を常にモニタリングしつつ、その後の推移を予測する。変化が見られた場合に、時空間分解能を自動的に上げる。	地殻活動を雲の動きを見るようにいつも国民が知ることができる。長期評価を観測データと物理モデルにもとづいて更新できる。普段と違う活動が起きた場合や地震後の推移を専門家が検討でき、国民に知らせることができる。	プレート境界摩擦モデル、地震活動モデル、地形や不均質媒質を考慮したすべり応答関数、データ解析と逐次同化の自動化	地震発生サイクルシミュレーション、固着すべりデータ解析、地震活動データ解析	2000km x 2000km	1日数回GPSや海底地殻変動、震源データをとりこんで、固着すべりと地震活動のデータ解析を自動で行うとともに、必要に応じて逐次同化による推移予測の計算を1時間以内に処理することが可能な環境。	1PFLOPS x 時		1時間以内			1日数回	200TB	

項番	⑩通信量			⑪入出力量					⑫高並列化作業時に問題となっている事項	⑬分かっている解決方法	⑭その他	備考
	⑩-①1対1通信	⑩-②全対全通信	⑩-③1対全通信	⑪-①総容量	⑪-②容量/ステップ	⑪-③回数/ステップ	⑪-④ステップ数	⑪-⑤ファイル数				
7				都市データの入力となるGISは100ギガバイト程度。出力はその1000倍の100テラバイト。					物理シミュレーションでは基本コードを大幅に改良し高並列化に支障はないと思われる。マルチエージェントシミュレーションは、正直、京計算機で動かしてみないと分からない点が多い。エージェントを高度にすると他のエージェントとの情報のやりとりの結果、通信負荷が増大するが、高度化と通信負荷の関係を定量的に把握しずらく、高並列化の見込みを立てづらい。	計算環境に応じて、エージェントの高度化を調整する。エージェントの具体的な高度化とは、1)他の何人のエージェントの状態を調べるか、2)どの範囲の環境の状態を調べるか、3)避難行動オプション(移動、停止、情報収集等)の数をいくつにするか、である。		
8				100TB					ハイブリッド並列の際の、ノード内並列におけるロードバランスの悪さ	<ul style="list-style-type: none"> ・自動並列をやめてOpenMPを用いる ・thread 0の負荷の原因の検討 		
9				500TB					ハイブリッド並列の際の、ノード内並列におけるロードバランスの悪さ	<ul style="list-style-type: none"> ・自動並列をやめてOpenMPを用いる ・thread 0の負荷の原因の検討 		

項番	①課題	②意義(社会的、科学的)	③必要となるサイエンス	④シミュレーション/アプリケーション/アルゴリズム	⑤問題サイズ/メッシュサイズ	⑥必要となるコンピュータ環境(アーキテクチャ、システム構成等)	⑦演算量		⑧希望実行時間				⑨必要メモリサイズ	
							⑦-①総演算量	⑦-②演算量/ステップ	⑧-①総時間	⑧-②時間/ステップ	⑧-③ステップ回数	⑧-④実行回数	⑨-①システム全体	⑨-②ノード単位
1	風車, ファンなどのレイノルズ数が 10^6 規模の非定常流れ場に対しパラメトリックな複数のDNSを行い, 性能や騒音の評価を行う。	・日本の産業競争力の大幅な強化 ・国民の豊かな生活	流体力学, 流体音響学	流体シミュレーション/LANS3D/差分法、高解像度スキーム、陽解法	レイノルズ数= 10^6 100億格子点程度を100ケース程度	数1000node並列計算機	10EFLOPS × 数ヶ月		数ヶ月			100回	100TB	
2	飛行機の高揚力装置や, 宇宙輸送機などレイノルズ数が 10^7 規模での非定常流れ場のDNSを行い, 性能評価を行う。	・日本の産業競争力の大幅な強化 ・国民の豊かな生活	流体力学	流体シミュレーション/LANS3D/差分法、高解像度スキーム、陽解法	レイノルズ数= 10^7 10兆格子点程度	数10000node並列計算機	50EFLOPS × 数ヶ月		数ヶ月			2, 3回	10PB	
3	製品の設計開発に役立つ知見をオンタイムに獲得する	・日本の産業競争力の大幅な強化 ・国民の豊かな生活	・大規模多目的最適化問題の効率的な解法 ・大規模データからの設計に役立つ知見の効率的抽出法	・多目的進化計算 ・データマイニング	・目的関数の数: ~5つ ・設計変数の数: ~1,000	1週間程度で設計に役立つ知見が得られる環境(ノード数10万)	40EFLOPS × 週	250PFLOPS	1週間程度			5回程度	1PB	
4	実車スケール風洞試験代替計算技術の設計ツール化(準直接計算を1ケース/日で実施)	産業競争力の強化	流体力学, 乱流	乱流の準直接計算ボクセルメッシュベースの全自動メッシュ作成技術	レイノルズ数 5×10^6 グリッドサイズ 1000億~1兆	1億コア 1エクサFLOPS	2×10^{21} FLOP	2×10^{16} FLOP	5.5時間/case	0.2 sec/step	10^5	1日/ケース 20ケース/月 100ケース/年	4PB	40MB/コア
5	実機スケール水力機械(ポンプ・水車)のループ試験代替ツール	産業競争力の強化	流体力学, 乱流, キャビテーション	乱流の準直接計算ボクセルメッシュベースの全自動メッシュ作成技術 界面補足ベースの新たなキャビテーションモデル	レイノルズ数 10^7 グリッドサイズ 10兆	1億コア 1エクサFLOPS	2×10^{22} FLOP	2×10^{17} FLOP	2日/case	2.0 sec/step	10^5	2日/ケース 4ケース/月 20ケース/年	40PB	400MB/コア
6	低エネルギーインパクトなものづくり技術	製造過程やランニングコストを抑えることにより, エネルギー問題に貢献する	物理, 化学, 計算科学, 情報科学など複数分野の融合	構造, 熱, 流体, 材料, 分子などの連成シミュレーション	$10k^3=1$ 兆要素	汎用+専用チップの構成(HWデータ圧縮など), 計算だけでなくポスト処理(可視化, 分析)などが迅速に行える大規模分散ストレージ	100PFLOP		1H/検討			10回/ケース × 10ケース	10PB	
7	高精度の数値シミュレーションを実施することにより, 液体燃料や固体燃料の燃焼・ガス化を扱う装置の設計や最適操作条件の選定を支援する。	省エネおよび地球温暖化ガスの削減に寄与する。	混相乱流燃焼機構の解明、および高精度の乱流燃焼モデル、分散相追跡モデルの確立	混相乱流燃焼シミュレーション/有限体積法/SMAC法	数m × 数メートル、数十メートル × 数十メートル	大学および企業から大容量データを取り出しできる環境、大容量データを可視化できる環境			半日程度			数十回		
8	不確実性情報のもとでの構造・流体連成下における大規模アセンブリ構造解析	ものづくりにおける信頼性評価において、シミュレーションの精度向上とともにリスクマネジメントの要素を取り込むことに資する。	確率論、不確実性解析、構造力学、流体力学	近接相互作用連続体力学解析、自動チューニング、有限要素法(構造解析、流体解析)	1千万自由度×1千万回(=解析自由度(決定論的問題の規模)×摂動自由度(確率論的問題の規模))	ハードウェア上のB./F値とソフトウェアのB./F値のバランスがとれた計算機。とくに間接参照の多いデータ構造のもとで実行性能が良好な計算機。	10EFLOPS × 10時間		1週間程度			5回程度	~100TB	
9	FRP製高圧水素容器の軽量化設計を行うため製造プロセスで発生する欠陥まで含めた的確な強度評価を行う。	燃料電池自動車の普及による低炭素社会の実現	樹脂硬化時の相変化と発熱を組み込んだ温度履歴と応力・ひずみシミュレーション、樹脂単体および炭素繊維単体に対する損傷則に基づく合理的強度評価。	・硬化プロセスシミュレーション(非定常熱伝導・硬化度有限要素解析、幾何学的/材料非線形有限要素解析) ・損傷発展シミュレーション(幾何学的/材料非線形有限要素解析、動的有限要素解析)	300 mm × 40 mm × 1000 mm / 0.1 mm 400 億要素、600 億節点を想定	600億節点規模の超高圧水素容器に対して、硬化時間、コスト最小化を目的とした最適硬化パターン探索を可能とするためには、繊維束形状、ワインディングパターン、樹脂の種類、硬化パターンをパラメータにとった硬化プロセスシミュレーション 1 回分を 1 日以内で実施可能な環境が必要	300 PFLOPS × 日		1 日以内			15回	1.2 PB	
10	リアル系にフィードバック可能な酵素反応シミュレーション	究極的な生体分子シミュレーション、本格的なナノスケールものづくりへの展開	第一原理分子動力学による生体分子シミュレーション	ボルン・オープンハイマー分子動力学法/生体分子を丸ごと量子化学で扱えるソフトウェア/力を量子化学で計算する分子動力学計算アルゴリズム	“最低でも”5000原子の生体分子+5000個の水(15000原子)を周期境界条件で100ns	リアルなものを作るより格段に様々なトライアル実験が行えるよう、⑤の計算を数時間で処理可能な環境。	200EPFLOPS × 100分	1000PFL OPS	100分	1分	100回	100回	1PB × ノード数	1PB

項番	⑩通信量			⑪入出力量					⑫高並列化作業時に問題となっている事項	⑬分かっている解決方法	⑭その他	備考
	⑩-①1対1通信	⑩-②全対全通信	⑩-③1対全通信	⑪-①総容量	⑪-②容量/ステップ	⑪-③回数/ステップ	⑪-④ステップ数	⑪-⑤ファイル数				
1				1EB					<ul style="list-style-type: none"> 計算格子の作成や可視化など計算の前後処理 同期や大域通信のオーバーヘッドを如何に減らすか。 	<ul style="list-style-type: none"> 陰解法などの大域通信が必要な解法から陽解法のように局所通信で済む方法に切り替える。 前後処理の並列化や局所的な処理に分割する。 		
2				1EB					<ul style="list-style-type: none"> 計算格子の作成や可視化など計算の前後処理 同期や大域通信のオーバーヘッドを如何に減らすか。 	<ul style="list-style-type: none"> 陰解法などの大域通信が必要な解法から陽解法のように局所通信で済む方法に切り替える。 前後処理の並列化や局所的な処理に分割する。 		
3				1PB					<ul style="list-style-type: none"> 超大量解析の実施および結果の効率的なハンドリング 			
4	ステップあたり約100回の隣接通信(通信量はおよそ0.1MB/回)	ステップあたり約200回の全体通信	なし	10PB					<ul style="list-style-type: none"> 全体通信の負荷がボトルネックとなる。 大規模データのハンドリング技術 	<ul style="list-style-type: none"> 全体通信が必要のない(内積演算を伴わない)アルゴリズムへの移行 ボクセルメッシュベースのメッシュ作成ツールの整備 		
5	ステップあたり約100回の隣接通信(通信量はおよそ1.0MB/回)	ステップあたり約200回の全体通信	なし	100PB					<ul style="list-style-type: none"> 全体通信の負荷がボトルネックとなる。 大規模データのハンドリング技術 	<ul style="list-style-type: none"> 全体通信が必要のない(内積演算を伴わない)アルゴリズムへの移行 ボクセルメッシュベースのメッシュ作成ツールの整備 		
6				1PB~100PB					<ul style="list-style-type: none"> ①Euler-Lagrangian連成時のロードバランス, ②MPIのテーブルの大規模化, ③領域分割計算での通信量の削減, ④動的に変化する問題のロードバランス, ⑤並列化支援ツール 	<ul style="list-style-type: none"> ①空間並列と粒子並列のハイブリッド化, ②未, ③物理空間の分割トポロジと計算コアの接続トポロジのグラフマッピングによる通信量経路の最適化, ④未, ⑤未 		
7									<ul style="list-style-type: none"> オイラー・ラグランジュ相のカップリング法の効率化(粒子数の多いセルを受け持つCPUの負荷が増大する) 	<ul style="list-style-type: none"> CPUのバランス化を図る 		
8				~1PB					<ul style="list-style-type: none"> メモリウォール問題、レジスタ・キャッシュの有効利用、小粒度の並列環境でのオーダリング(依存性の排除) 	<ul style="list-style-type: none"> 自動チューニングと大規模シミュレーションコードとの連携を支援するミドルウェア、複数スパコングリッドでの分散計算が可能なシステム管理体制とミドルウェア、スカラとベクトルのマトリックス構造をもったレジスタ開発 		
9				4.6 PB	230 GB		20000	49000	<ul style="list-style-type: none"> 複合材料の場合、単一材料の場合と比較しても、熱伝導・硬化度解析および応力解析ともに、並列化効率の低下は否めません。また、領域分割演算の高効率化も必要となるでしょう。参考までに、T2K、512ノード(8192コア)の使用を想定し、5.56h、時間増分1.0s、20000ステップの硬化プロセスシミュレーションに、熱伝導・硬化度解析で2000日、ひずみ・ひずみ緩和解析で2000日、合計4000日かかる試算です。 	<ul style="list-style-type: none"> 計算実行時の並列化効率向上、領域分割演算実行時の高効率化とともに、現段階では、今後解決されなければならない課題です。 		
10				200PB	2PB	2	100		<ul style="list-style-type: none"> ノードあたりのメモリサイズ、コンパイラ・ライブラリの充実 	<ul style="list-style-type: none"> ノードあたりのメモリサイズ、コンパイラ・ライブラリの充実 		

項番	①課題	②意義(社会的、科学的)	③必要となるサイエンス	④シミュレーション/アプリケーション/アルゴリズム	⑤問題サイズ/メッシュサイズ	⑥必要となるコンピュータ環境(アーキテクチャ、システム構成等)	⑦演算量		⑧希望実行時間				⑨必要メモリサイズ	
							⑦-①総演算量	⑦-②演算量/ステップ	⑧-①総時間	⑧-②時間/ステップ	⑧-③ステップ回数	⑧-④実行回数	⑨-①システム全体	⑨-②ノード単位
11	タンパク質の立体構造観測において、実験とシミュレーションの電子密度を組み合わせ、これまで観測が困難だった部位の原子座標を決定する。	タンパク質の立体構造データがより正確に得られ、創薬や材料設計の基盤技術の向上に貢献できる。	量子化学によるタンパク質の電子密度の計算	タンパク質の全電子シミュレーション/ABINIT-MP/フラグメント分子軌道法	原子数が数万を超える超大規模タンパク質	並列計算が可能な大規模計算機クラスター	数百TFLOPS~数PFLOPS		~数分以内/1スナップショット			数十回	1ノード数GBから数十GB×数百から数千ノード	
12	インフルエンザの変異予測と抗インフルエンザ薬の開発に寄与する。	インフルエンザの予測や治療に役立つ。	量子化学によるタンパク質の薬の相互作用解析	タンパク質の全電子シミュレーション/ABINIT-MP/フラグメント分子軌道法	原子数が数万を超える超大規模タンパク質	並列計算が可能な大規模計算機クラスター	数百TFLOPS~数PFLOPS		~数分以内/1スナップショット			数十回	1ノード数GBから数十GB×数百から数千ノード	
13	生体分子の水中での動的挙動を全電子レベルで明らかにする。	化学反応を含む生命現象を全電子レベルで解明できる。	量子化学によるタンパク質のダイナミクス計算	タンパク質の全電子シミュレーション/ABINIT-MP/フラグメント分子軌道法	原子数が数万を超える超大規模タンパク質	並列計算が可能な大規模計算機クラスター	数PLOPS~数百PFLOPS		数週間	数分	数万回	数回	1ノード数GBから数十GB×数百から数千ノード	
14	環境場を考慮した触媒反応シミュレーション	燃料電池、太陽電池等のエネルギー変換デバイスの高性能化に寄与する。	第一原理分子動力学法による化学反応解析	大規模第一原理解析・反応経路解析・マルチスケール解析	電極触媒・電解質・ガスを含んだ数万原子系の長時間解析・統計解析	大規模原子系の統計的解析が可能な計算環境	10EFLOPS×10時間		数週間			100回	~100TB	
15	ナノ構造デバイスのデバイス・プロセス・シミュレーション	デバイスの高機能化・省エネルギー化に貢献する。	第一原理解析による反応解析、電気特性等の物性解析	大規模第一原理解析・機能解析・反応解析・マルチスケール解析	基板・チャネル・電極・配線などを含むナノ構造デバイス(数万原子数程度)	設計支援ツールとなるため、特性解析を1日以内で完了する計算環境	10EFLOPS×10時間		数週間			100回	~100TB	
16	核融合炉心プラズマの第一原理乱流輸送シミュレーションによる燃焼プラズマ実験支援および炉設計支援	核融合炉の成立性を左右するプラズマ乱流輸送特性に関する知見を設計コードとして確立することによって、核融合エネルギー開発に貢献する	5次元運動論モデルによる第一原理乱流シミュレーション	核融合プラズマ乱流シミュレーション/GT5D/差分・半陰解法	装置半径6m・プラズマ半径2m/~2.5Tgrids、~10万ステップ(定常解析)	ITERにおける燃焼プラズマ実験のショット間解析や炉設計のパラメータスキャンを目的とする定常解析を1時間以内に完了。また、新しい運転方式開発等を目的とする非定常解析を1週間以内に完了できる計算環境。	~10 ²¹ floating count operations		~1時間/ショット			数百回	~300TB	
							~10 ²³ floating count operations		~1週間/ショット		数十回	~300TB		
17	電磁粒子シミュレーションによる核燃焼プラズマにおける高エネルギー粒子輸送評価	高エネルギー粒子輸送予測の信頼性をさらに向上し、ITERにおける核燃焼プラズマ実験を支援する	5次元運動論モデルによる電磁粒子シミュレーション	電磁粒子シミュレーション//PIC(Particle-in-cell)手法	1G格子点、100G粒子、100万ステップ	ITERにおける核燃焼プラズマ実験の解析が2日以内に完了できる計算環境。	~10 ²¹ floating count operations		~2日/ショット			3回	~100TB	
18	核燃焼プラズマ統合シミュレーションによる炉心プラズマの総合的解析と制御手法の開発	核融合炉心プラズマ全体の全放電時間にわたる総合的解析により、実験シナリオの最適化や制御手法の開発を実現し、核融合エネルギー開発に貢献する。	炉心プラズマにおける平衡、輸送、安定性、加熱、壁との相互作用等を記述する統合シミュレーション	核燃焼プラズマ統合シミュレーション/TASK/差分・有限要素法・完全陰解法	装置半径6m・プラズマ半径2m/~50Mgrids、~100万ステップ(時間発展解析)	ITERにおける燃焼プラズマ実験や原型炉設計のためのパラメータスキャンを目的とする時間発展解析を10分間以内に完了。	~10 ²⁰ floating count operations		~10分/ショット			1000ショット	~10TB	
19	ディスラプション統合コードによる炉心健全性評価	ディスラプションによる壁負荷を評価し、炉心健全性を評価するとともに、ディスラプションを回避、あるいは熱負荷軽減の手法を開発する。	バルクプラズマは放射MHDモデルで記述し、逃走電子は相対論的ドリフト運動論モデルで記述、ハイブリッド型モデル	ディスラプション統合シミュレーション(運動論的MHDシミュレーション/Gpic-MHD/ジャイロ運動論的粒子コード)MHD陰解法、有限要素法+ベクトル分解、GpicMHD/粒子コードトロイダルとポロイダル方向擬スペクトル法。半径方向差分。陽解法による時間積分。	装置半径6m・プラズマ半径2m/~100Mgrids、~100トロイダルモード数、~100万ステップ(時間発展解析)、高速電子1G粒子	ITERにおける燃焼プラズマ実験や原型炉設計のためのパラメータスキャンを目的とする時間発展解析を一週間以内に完了。	~10 ²¹ floating count operations		~1週間/ショット			2回		

項番	⑩通信量			⑪入出力量					⑫高並列化作業時に問題となっている事項	⑬分かっている解決方法	⑭その他	備考
	⑩-①1対1通信	⑩-②全対全通信	⑩-③1対全通信	⑪-①総容量	⑪-②容量/ステップ	⑪-③回数/ステップ	⑪-④ステップ数	⑪-⑤ファイル数				
11				~100TB					ノード当たりのメモリサイズ、各ノードの計算負荷の偏り、1構造当たりの計算時間の短縮	変数の最適化による省メモリ化、フラグメントへのノード割り当ての最適化によるロードバランスの改善、多重極展開によるダイマー計算の高速化		
12				~100TB					ノード当たりのメモリサイズ、各ノードの計算負荷の偏り、1構造当たりの計算時間の短縮	変数の最適化による省メモリ化、フラグメントへのノード割り当ての最適化によるロードバランスの改善、多重極展開によるダイマー計算の高速化		
13				~1PB					ノード当たりのメモリサイズ、各ノードの計算負荷の偏り、1構造当たりの計算時間の短縮	変数の最適化による省メモリ化、フラグメントへのノード割り当ての最適化によるロードバランスの改善、多重極展開によるダイマー計算の高速化		
14				~1PB					第一原理計算でのFFT、行列演算の高並列化、マルチスケール解析での高効率化、ノード当たりのメモリ量	今後の課題		
15				~1PB					第一原理計算でのFFT、行列演算の高並列化	今後の課題		
16				~10TB					①通信ネットワークポロジに適合した多次元領域分割。②通信の隠蔽手法。③陰解法の連立一次方程式に対する大規模並列アルゴリズム。	①5次元モデルの特徴を生かした多次元領域分割とマシン依存のプロセスマッピング手法開発。②非同期通信の実装。ただし、計算と通信でキャッシュの効率的共有を可能とする計算機環境が必要。③未解決。GMRES等、既存アルゴリズムをテスト予定。		
				~1PB								
17				~100TB					楕円型方程式の高速な大規模並列計算法	未解決		
18				~10TB					陰解法における複素非対称連立一次方程式に対する大規模並列アルゴリズム	GMRES等、既存アルゴリズムを比較し、最適化を試みる。		
19				~200TB					2次元領域分割に適応したポアソンソルバーが十分に並列計算に対して最適化されていない。各コアに対する負荷の非一様性が残っている。	種々のアルゴリズムをテストすることにより最適のポアソンソルバー開発する。粒子と場の量に対する負荷を全体として一様にコアに分散させるアルゴリズムの開発。		

項番	①課題	②意義(社会的、科学的)	③必要となるサイエンス	④シミュレーション/アプリケーション/アルゴリズム	⑤問題サイズ/メッシュサイズ	⑥必要となるコンピュータ環境(アーキテクチャ、システム構成等)	⑦演算量		⑧希望実行時間				⑨必要メモリサイズ	
							⑦-①総演算量	⑦-②演算量/ステップ	⑧-①総時間	⑧-②時間/ステップ	⑧-③ステップ回数	⑧-④実行回数	⑨-①システム全体	⑨-②ノード単位
20	多成分核燃焼プラズマの局所乱流輸送の定量的評価	多成分イオンに加え電子スケールの局所乱流による粒子・熱輸送の定量的見積もりを可能にし、閉じ込め性能予測の評価性能向上寄与する。	5次元運動論モデルによる多成分プラズマの第一原理乱流シミュレーション	核融合プラズマ局所乱流輸送シミュレーション/GKV/差分・スペクトル法	~1T格子点, ~100万ステップ	電子スケール乱流を含めた核燃焼プラズマの輸送シミュレーション解析が1週間以内に完了できる計算機環境。	~10 ²¹ floating count operations		~1週間/ショット			2回	~300TB	
21	原子力耐震シミュレーションによる被災時の状態予測	熱・流体・構造を高度に連成した耐震シミュレーション技術を開発し、被災時の原子炉の状態を予測し、対策の検討・被害の緩和に貢献する。	原子力発電施設規模での効率的な熱・流体・構造を連成シミュレーション	熱・流体・構造連成シミュレーション/Di-STEP/有限要素法(バランシング領域分割法ソルバ)	100億自由度~	巨大地震による原子力施設被災時の被災シナリオを予測し、代表炉型での予測事例をデータベース化できるシステム。1ショットの解析を1時間以内で処理可能なシステム。	300PFLOPS×時		~1時間/ショット			1000ショット以上	~100TB	
22	構造材料のマルチスケールシミュレーションによる健全性評価	構造材料における環境依存の経年劣化メカニズムの理解と予測は、原子炉のような巨大なプラントから自動車、携帯電話に至るまで、普遍的で且つ重要な課題であり、シミュレーションによりその課題解決が可能となれば、社会的インパクトは極めて大きい。	用いる材料や環境の効果を原子・分子レベルで根幹から理解するアプローチが最も精度が高く、超並列第一原理計算の開発とメゾ・マクロ計算手法の開発、そして、それらの統合が必須である。	金属粒界等欠陥の第一原理計算/超並列大規模第一原理計算/多項式展開・実空間差分等	10,000~100,000個の原子・分子の第一原理計算	計算の核は、行列ベクトル積であり、それを高効率で計算できるアーキテクチャー。	~10 ²¹ floating count operations		~1週間/ショット			数千ショット	数百TB	
23	機能材料(核燃料、熱電材料、超伝導材料等)の電子相関を考慮した高精度物性予測とデバイス性能推定	新エネルギーの開拓や、原子力エネルギーに代表される既存エネルギーの安全且つ安定供給を抜本的に改善するためには、キーとなる機能材料を開発することが最も重要である。シミュレーションにより、材料の構造と機能の予測が高精度で可能となれば、その社会的インパクトは極めて大きい。	機能材料は、結晶構造とその構造中を渡り歩く電子の両者により、機能が決まる。しかし、電子の量子状態を高精度に計算するには、電子間の相関効果を求める必要がある、その自由度は膨大であり、如何に計算資源に併せた有効な近似法が必要となる。	表面・界面も含めた大規模第一原理計算/超並列大規模第一原理計算+高精度電子相関ソルバー/疎行列対角化+実空間差分等	10,000個程度の原子・分子の第一原理計算と数千億次元疎行列の行列演算	計算の核は、行列ベクトル積であり、それを高効率で計算できるアーキテクチャー。	~10 ²¹ floating count operations		~1週間/ショット			数千ショット	数百TB	

項番	⑩通信量			⑪入出力量					⑫高並列化作業時に問題となっている事項	⑬分かっている解決方法	⑭その他	備考
	⑩-①1対1通信	⑩-②全対全通信	⑩-③1対全通信	⑪-①総容量	⑪-②容量/ステップ	⑪-③回数/ステップ	⑪-④ステップ数	⑪-⑤ファイル数				
20				~200TB					①ノード間通信に適合した領域分割パターンの最適化②通信コスト削減のための隠ぺい方法③多重2次元FFTの高効率化	①4次元領域分割による通信コストの最適化(未実装)②非同期通信(実装済みだが実機でのテストが必要)。計算との多重化にはハードウェア環境に応じた最適化が必要③上記①、②の施策が効率向上に寄与する。さらに既存ルーチンの実機でのテストが必要		
21				~20PB					通信性能。100億自由度規模の問題に対するストロングスケーリングでの性能維持。	システムの通信性能向上とアルゴリズムの高度化。		
22				数PB					超大規模疎行列Xベクトル演算の超並列化と高速化(第一原理計算等の量子力学計算においては、普遍的な問題となる)	疎行列の2次元分割と通信ネットワーク構造に依存したデータの分配等(想像可能な範囲で)		
23				数PB					超大規模疎行列Xベクトル演算の超並列化と高速化(第一原理計算等の量子力学計算においては、普遍的な問題となる)	疎行列の2次元分割と通信ネットワーク構造に依存したデータの分配等(想像可能な範囲で)		

項番	①課題	②意義(社会的、科学的)	③必要となるサイエンス	④シミュレーション/アプリケーション/アルゴリズム	⑤問題サイズ/メッシュサイズ	⑥必要となるコンピュータ環境(アーキテクチャ、システム構成等)	⑦演算量		⑧希望実行時間				⑨必要メモリサイズ	
							⑦-①総演算量	⑦-②演算量/ステップ	⑧-①総時間	⑧-②時間/ステップ	⑧-③ステップ回数	⑧-④実行回数	⑨-①システム全体	⑨-②ノード単位
1	(カイラル対称性に基づいた)格子QCDによるバリオン間相互作用の決定とその応用	強い相互作用の究極の理論である量子色力学に基づいた原子核・ハイパー核の統一的記述を可能にする。実験データ量の不足から不定性が大きいハイペロン間力や三核子間力に対し、量子色力学に基づいたデータを安定して提供することで、天体物理でも重要な役割を果たす不安定核やハイパー核の理解を進展させる。バリオン間相互作用を応用して状態方程式を決定し、中性子星の構造や超新星爆発の理解を進める。同時に、アルゴリズムの開発を進め、直接格子QCD第一原理計算による有限密度状態方程式の決定に取り組む。散乱理論と量子色力学に基づいて、多様なエキゾチック・ハドロン構造の理解を進める。	相対論的量子場の理論、格子量子色力学、散乱の量子論、原子核構造・反応理論。これらすべてをフルに活用する必要がある。	格子QCD Monte Carloアルゴリズム+HALQCDハドロン間相互作用生成アルゴリズム	空間サイズは 12 fm^4 (128^4) / メッシュサイズは 0.1 fm 以下	強力な超並列スーパーコンピュータあるいはGPGPUを駆使した強力なスーパーコンピュータが必要。Nambu-Bethe-Salpeter(NBS)波動関数の計算に3次元FFTを多用するので、3次元FFTを効率的に行える環境が理想的である。巨大な三体NBS波動関数を効率的に空間回転させるため、ノード間の通信速度は強力であるのが理想的である。	100PFLOPS × 数年		数年規模			16000回(500ゲージ配位 × 32 source point)	10PBバイト規模	
2	スーパーBファクトリーが実現する超精密素粒子実験の理論解析で必要となるハドロン行列要素の精密理論計算	現在建設中のスーパーBファクトリー実験を、精密な理論計算で補完することで、素粒子標準模型を超える新しい物理法則の発見に寄与する。	格子量子色力学(QCD)の精密シミュレーション	格子QCDシミュレーション(モンテカルロ法、分子動力学、大規模線形方程式の解法、固有値解法などが含まれる)	$4\text{fm} \times 4\text{fm} \times 4\text{fm} \times 8\text{fm}$		10PFLOPS × year		1年程度かかってもよい				1 PB	
3	強い相互作用が織り成す様々な物質形態をQCDに基づいて統一的に研究する。	クォーク⇒陽子・中性子⇒原子核へと構成されるミクロの世界の階層構造と、宇宙初期や中性子星内部などの有限温度・有限密度下の状態を解明する。	量子色力学(QCD)の経路積分による定式化を第一原理とするシミュレーション	格子QCDシミュレーション	$10\text{fm} \times 10\text{fm} \times 10\text{fm} \times 10\text{fm}$	演算性能・メモリバンド幅・ネットワークバンド幅のバランスがとれたアーキテクチャ	数十PFLOPS × 月		数ヶ月程度占有			継続実行	200TB	
4	微視的に導かれた核力から出発する第一原理的な量子多体計算を質量数が30を越す中重核領域でも実行可能にし、そのような原子核の構造の統一的な説明とエキゾチックな原子核の構造を予言する。	今後実験がなされるやや重いエキゾチック原子核の物性の予言が可能になり、さらに、元素合成や二重ベータ崩壊(Nd-150など)など宇宙や素粒子分野に必要な計算結果を生み出す。社会的意義として、Sn-126などの放射性廃棄物処理などに必要でありながら実験が難しい核種の性質が明らかにできる。	三体力を含んだ現実的核力から出発して、模型空間へ繰りこむための有効相互作用理論。多核子相関をとりこんだ非摂動的な原子核殻模型計算。	原子核殻模型計算における改良されたモンテカルロ殻模型法	一粒子波動関数は調和振動子基底にして、最大6, 7主殻。10の12乗から20乗次元に相当するエルミート行列の固有値問題	高速なCPU及びメニーコア環境大規模並列により多数のCPUを数時間～数十時間占有する必要がある。	5~50PFLOPS × 数ヶ月		数か月			数百回	~1PB、並列度におおきく依存	
5	核分裂現象の微視的計算	多粒子が関与する大振幅集団運動の典型である核分裂の量子力学に基づく微視的計算は原子核理論の大きな目標。核エネルギー生成メカニズムの解明。	対相関を記述できる時間依存密度汎関数理論を用いて巨大な模型空間での数値計算が必要。	TDDFTによる実時間発展シミュレーションを3次元空間メッシュ表示で計算。差分計算とクーロン場計算のためのPoisson方程式の反復解放が計算の主要部。誘起核分裂を記述するため、これにチャネル分岐を記述する確率的計算とを組み合わせる。この部分は各時間ステップにおいて確率的に波束の収縮を確率的に組み込むアルゴリズムを採用する予定。	$(100 \text{ fm})^3 / 1\text{fm}$ 以下	並列化することが不可能な時間発展があるので、1タイムステップを1分以内に計算できる計算能力が望ましい。	約100PFLOPS × 数百時間		数百時間程度			応用上重要なものから順番に1~数十回	10TB	

項番	⑩通信量			⑪入出力量					⑫高並列化作業時に問題となっている事項	⑬分かっている解決方法	⑭その他	備考
	⑩-①1対1通信	⑩-②全対全通信	⑩-③1対全通信	⑪-①総容量	⑪-②容量/ステップ	⑪-③回数/ステップ	⑪-④ステップ数	⑪-⑤ファイル数				
1				3体NBS波動関数が巨大である。長距離で三核子間力が消えるため、 $L < 3\text{fm}$ に限って波動関数を残すことにすると、260Pバイトのストレージが必要となる。					最も重たいのは三核子間力の計算である。ここで一番問題になるのは、単体あたりの計算量が膨大であることであり、次に問題なのが、巨大な三核子Nambu-Bethe-Salpeter(NBS)波動関数を構築する際のフーリエ変換や空間回転させる際の通信量である。straightforwardに実行したのでは、この体積で三核子間力の完全計算を遂行することは非常に困難である。	結果を見切って効率的に間引くことが重要である。三体力のrangeは短距離であると考えられている。短いrangeに焦点を絞り、ゼロになることが期待される外側の領域を見切って、計算から安全に省く方法を確立する必要がある。ここで問題となり得るのは、3体力には不明な点が多いためということ、rangeの評価は原理的にオフセルの選び方に依存し得る点であり、正確にrangeを評価するため小さな空間体積を使った様々な予備計算から情報を引き出す必要がある。		三核子間力の計算に徹底的に計算資源とストレージが必要となる。小さい空間体積の計算からノウハウを蓄積して、計算を効率的に合理化する必要がある。 【分野5】
2	ノードの構成に依存する。例えば2TFlops/node程度の場合は、200GB/s程度。			15 PB					ノード間通信のレイテンシ	システム設計時に考慮する		
3				2PB					(A)ノード内粒度が大きい場合:表皮効果を利用して通信と演算のオーバーラップが可能だが、B/F値を上げる必要あり。(B)ノード内粒度を小さい場合:キャッシュに載るようにすれば単体の実効演算性能は著しく向上するが、その場合ノード間通信レイテンシの隠蔽が必要。	演算性能・メモリバンド幅・ネットワークバンド幅のバランスはアプリによっても異なる。具体的なシステムを考える前に定量的見積もりが必要。		
4				あまり多くない(数十MB~数GB)					収束性の悪化による並列化効率の低下。波動関数は100前後の射影後スレータ行列式の線形結合によって表現されており、100次元程度の小行列を取り扱う演算部分は並列化できない。とりあつかう波動関数が複雑になることにより、この次元数が増加し、並列化できない部分の演算量が増大する。	準粒子真空基底などのより効率的な基底の表現による方法論の改良。スレータ行列式を使う場合より、さらに少数の基底で波動関数を表現することが可能となり、並列効率改善が期待できる。		
5				波動関数を書き出せば100~1000TB、そうでなければ問題にはならないほど小さい					時間発展は逐次的にやらざるを得ないため、1タイムステップの時間をいかに短縮できるかが鍵であり、このためにはハイブリッド並列が不可欠である。特に困難な点として認識しているものはないが、どの程度の効率が出るかはまだ未知な部分が多い。	空間並列と軌道並列をうまく組み合わせ、1ステップを1分以内にする。		

項番	①課題	②意義(社会的、科学的)	③必要となるサイエンス	④シミュレーション/アプリケーション/アルゴリズム	⑤問題サイズ/メッシュサイズ	⑥必要となるコンピュータ環境(アーキテクチャ、システム構成等)	⑦演算量		⑧希望実行時間			⑨必要メモリサイズ		
							⑦-①総演算量	⑦-②演算量/ステップ	⑧-①総時間	⑧-②時間/ステップ	⑧-③ステップ回数	⑧-④実行回数	⑨-①システム全体	⑨-②ノード単位
6	初代星から銀河形成、超巨大ブラックホール形成までの宇宙史を解き明かす。	宇宙の構造形成史の中でミッシングリンクとなっている時代を解明する	重力、流体、放射を十分な精度で扱う宇宙放射流体シミュレーション	ツリー化された宇宙放射流体スキーム	100億体	重力、放射計算において高い実効性能、メモリバンド幅、レーテンシー隠蔽が実現できる計算機	800PFLOPS × day							
		銀河団、銀河群の形成から現在までの進化を解明する	放射については簡略化した宇宙流体シミュレーション	N体+粒子法または適応格子法による流体計算	1兆粒子程度	一部の粒子のみが時間刻みが短い状況でも極端に効率がおちない、ある程度粒度が大きく低レーテンシなシステム	1EFLOPS × day程度	1E18演算程度				100回程度	1PB	
7	大質量星の重力崩壊から超新星爆発に至る全物理過程を首尾一貫したシミュレーションで明らかにし、次世代天文学(重力波、ニュートリノ、30m級望遠鏡)のターゲットとしての観測可能性を精査する	次世代観測・高密度物質の知見をフルに援用して、恒星進化論のファイナルフロンティア的課題である大質量星の最終段階に統一的な描像を与える。	星の中心部の計算に必要な現実的高密度核力状態方程式、精緻なニュートリノ反応を含んだ放射流体計算による超新星爆発のシミュレーションに加えて、星の外層で重要になる元素合成や光の放射流体計算。	空間3次元+ニュートリノ位相空間1次元の放射流体シミュレーションおよび元素合成と光の放射輸送	半径 $10^{10}\sim 10^{13}$ cm(大質量星の中心から外層部まで全ての領域を含んだ領域)	大質量星の重力崩壊の開始に始まり、ニュートリノ加熱による衝撃波の復活、衝撃波の外層への伝搬、ショックブレイクアウトに至るまでの全スケールをカバーできるシステム。京の次世代計算機を想定している。今までのものに比べて空間スケール100倍-10000倍、時間スケール100倍から1000倍の計算をすることができる並列計算機。	5EFLOPS × Year。京では0.5PFLOPS × yearで1000km, 1sの計算を行うことができる。水素層の剥がれたWolf-Rayet星でのtype Ic 超新星を想定すると空間100倍、時間100倍の計算規模となり、5EFLOPS × yearとなる。水素層が厚いtype II SNでは空間スケール1万倍、時間スケール10倍の計算となるが、空間スケールはメッシュの取り方で工夫できるので、時間スケールのみ問題とするとその場合50EFLOPS × yearとなる。				1 Year	2-3回	700 TB	
8	実空間3次元、位相空間3次元を完全に考慮しニュートリノ放射輸送に対するボルツマン方程式を解きながら、放射流体シミュレーションを行い、超新星爆発機構を第一原理的に解明する。	数値シミュレーションを行うのが最も困難な方程式と考えられるボルツマン方程式を、近似や対称性の仮定なしに初めて高解像度で解くことにより、未だに解明されていない、超新星爆発の機構を明らかにする。	ニュートリノ放射輸送のためのボルツマン方程式、流体力学方程式、原子核理論に基づく高密度物質に対する状態方程式、ニュートリノと物質の相互作用。	実空間3次元+位相空間3次元のニュートリノ放射輸送+流体シミュレーション。放射はインプリシット、流体はエクスプリシット・インプリシット混合解法を採用。	実空間10000km立法/球座標(r, theta, phi)に対して(500, 128, 256)グリッド、位相空間角度方向24 × 24、振動数方向24、ニュートリノは3種類考慮	10Pflops × 年程度の計算資源を使えばよい。大行列反転を効率よく行える計算機が望ましい。	10Pflops × 年				1年	5回	1PB	
9	大質量星の重力崩壊や二重中性子星の合体によるブラックホールの誕生過程を第一原理的に解明し、電磁波、ニュートリノ、重力波を用いた宇宙観測計画に対する予言および観測によるブラックホール検証に用いる。特に多数の重力波テンプレート、およびガンマ線バーストのモデルを作成。	宇宙において最も強重力が実現し、かつ極限状態が実現されると考えられるブラックホールの誕生過程を解明する。またブラックホールを観測するために必要不可欠となる知見(重力波テンプレート、電磁波、ニュートリノ放射量)を与える。	数値相対論的放射磁気流体シミュレーション: アインシュタイン方程式および放射磁気流体方程式を、高密度物質の状態方程式を考慮して解く。放射はニュートリノに3成分に対して、実空間3次元、エネルギー空間1次元を考慮して解く。	アインシュタイン方程式および放射磁気流体方程式を解く。アインシュタイン方程式は、時間空間4次精度のエクスプリシット解法で、放射磁気流体は時間精度4次、空間精度3次のエクスプリシット・インプリシット混合解法で解く。適合多層格子法を採用。	実空間10000km立法/実空間は直交座標で512 × 512 × 512グリッドで、適合多層格子法8段、エネルギー方向24。	1モデル1Pflops × 月程度の計算を100以上実行。10Pflops × 年以上の計算資源が必要。標準的な格子ベースの差分法を採用するので、ノード間の通信の速いものがより好ましい。	10Pflops × 年				3年	100回以上、できるだけ多数。	100TB	
10	太陽ダイナモを再現し、太陽活動の時間変動のメカニズムを解明する。	地球環境に影響を及ぼす太陽活動の数百年スケールの変動機構を解明する	磁気流体シミュレーション	音速を抑制した差分法による3次元磁気流体シミュレーション	太陽表面から20万kmの深さまでの球殻、100億格子点	差分法に基づく磁気流体計算において高い実効性能を得ることができる計算機	1PFLOPS × 年				2年	20回以上	10TB	
11	重力を及ぼす天体のまわりに形成される降着円盤の構造と進化を明らかにする	銀河中心核等に形成されたブラックホールが周辺環境に及ぼす影響を明らかにする。また、惑星形成の母胎となる原始惑星系円盤の進化を解明する。	放射磁気流体シミュレーション	放射輸送方程式と磁気流体方程式を同時に解く放射磁気流体シミュレーション。放射輸送については角度平均したモーメント式を解く方法と各方向の光線を解く方法を実装する。	降着円盤全体、10億格子点	差分法に基づく磁気流体計算において高い実効性能を得ることができる計算機。陰的な差分法を適用する際にあらわれる連立1次方程式を高速で解くことができるメモリバンド幅と通信性能を備えた計算機。	1PFLOPS × 年				2年	20回以上	10TB	
12	高マッハ数無衝突衝撃波による荷電粒子の加速メカニズムを明らかにする。	衝撃波におけるプラズマ粒子の加速メカニズムを明らかにすることで、地球に飛来する宇宙線の起源を解明する。	電磁プラズマ粒子シミュレーション	プラズマ粒子の運動と計算グリッド上に定義された電磁場をカップルして解く、電磁プラズマ粒子シミュレーション	衝撃波上流一遷移領域一下流全体、10億格子点、1兆個粒子数	粒子分布からのモーメント計算において高い実効性能が得られるような、高いメモリバンド幅を得ることができる計算機	2PFLOPS × 年				2年	10回以上	40TB	

項番	⑩通信量			⑪入出力量					⑫高並列化作業時に問題となっている事項	⑬分かっている解決方法	⑭その他	備考
	⑩-①1対1通信	⑩-②全対全通信	⑩-③1対全通信	⑪-①総容量	⑪-②容量/ステップ	⑪-③回数/ステップ	⑪-④ステップ数	⑪-⑤ファイル数				
6									局所的にタイムスケールが短い領域が発生するため、実効的な並列度が下がり、通信レイテンシの影響が大きくなる。	通信レイテンシを下げる。全体同期の回数が減るような時間積分アルゴリズムを開発する等。		
				1EB					局所的にタイムスケールが短い領域が発生するため、実効的な並列度が下がり、通信レイテンシの影響が大きくなる。	通信レイテンシを下げる。全体同期の回数が減るような時間積分アルゴリズムを開発する等。		
7				10PB					重力を記述するポアソン方程式を解く場合、全空間の密度情報が必要である。さらにニュートリノ、光子の輻射輸送計算は陰的解法で行われるが、そのときに全空間の情報を含んだ行列反転が必要になる。その際に全ノードからのデータ転送が必要になり、その速度で計算が律速される。	ポアソン方程式を並列計算機で解く場合、現状ではマルチグリッド法が一番の成功を収めている。本質的には、輻射輸送計算でも応用可能と考えており、またマルチグリッド法は適合格子法とも相性がよいことから、今後の導入を検討している。		
8				10PB					陰的解法の際に扱う必要がある大規模行列に対する線型方程式解法が、計算の大部分を占めている。これらは直接法で解くには、計算メモリもコストも莫大なものになる。これらは反復法で解く必要があり、最適アルゴリズムの探査が必要である。	大規模行列の反復法による解法により、並列化自体には問題がないと考えられる。ただし、前処理をどのようにするか、通信と演算のバランスをどのように保つか、などが計算機資源/アーキテクチャ/性能に応じて考える必要がある。		
9				10PB					ノード間通信のレイテンシ。適合多層格子法では、複雑なノード間の通信が不可避で、この通信速度がボトルネックになる。	1ノード当りのコア数が多く、共有メモリが多い方がよい。		
10				1PB					並列効率を高めるために踏的差分法を用いる場合、音速をそのまま使うとクラン条件のために時間ステップが小さくなりすぎる。	実際の値よりも音速を下げて計算を行う。		
11				1PB					輻射輸送の時間スケールが力学的タイムスケールに比べて短い場合、輻射エネルギー密度の時間発展方程式を陰的に解く必要があり、高速なマトリックスソルバーが必要になる。	中心天体がブラックホールの場合、典型的な速度が光速になり、力学的タイムスケールと輻射輸送のタイムスケールが同程度になる。このため踏的差分法が適用できる。陰的差分が必要になる場合はマトリックスソルバーの高速化。		
12				4PB					領域分割によって計算する場合の各領域に含まれる粒子数のバランスと領域間の粒子転送のための通信、粒子分布から電場・磁場を求める計算による並列効率の低下。	ロードバランサーを実装する。メモリバンド幅を増やす。		

項番	①課題	②意義(社会的、科学的)	③必要となるサイエンス	④シミュレーション/アプリケーション/アルゴリズム	⑤問題サイズ/メッシュサイズ	⑥必要となるコンピュータ環境(アーキテクチャ、システム構成等)	⑦演算量		⑧希望実行時間				⑨必要メモリサイズ		
							⑦-①総演算量	⑦-②演算量/ステップ	⑧-①総時間	⑧-②時間/ステップ	⑧-③ステップ回数	⑧-④実行回数	⑨-①システム全体	⑨-②ノード単位	
13	衝撃波や磁気リコネクションにおけるプラズマの非熱的分布関数の生成メカニズムを明らかにする。	プラズマ粒子のマクスウェル分布から外れた、べき乗分布関数の形成過程を明らかにする。	プラソフシミュレーション	空間3次元、速度空間3次元の6次元位相空間上に離散化された分布関数の時間発展を、プラソフ方程式に基づいて解く手法。セミ・ラグランジェアン法。	衝撃波・磁気リコネクション領域全体、100兆格子点(512 ³ ×128 ³)	セミ・ラグランジェアン法において高い実行性能が得られるような、高いメモリバンド幅をもつ計算機	2FPLOPS×年		2年				5回以上	1000TB	

項番	⑩通信量			⑪入出力量					⑫高並列化作業時に問題となっている事項	⑬分かっている解決方法	⑭その他	備考
	⑩-①1対1通信	⑩-②全対全通信	⑩-③1対全通信	⑪-①総容量	⑪-②容量/ステップ	⑪-③回数/ステップ	⑪-④ステップ数	⑪-⑤ファイル数				
13				100PB					粒子分布に応じて位相空間を動的に分割する場合の並列効率の低下	まず、位相空間を分割する格子を固定して並列度の高い計算を実施する。		