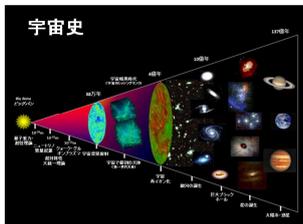
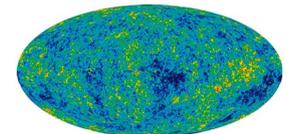
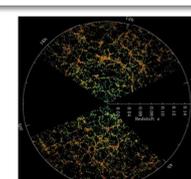


4 各計算科学分野の社会的・科学的課題

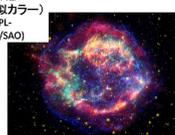
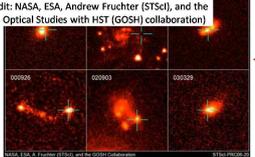
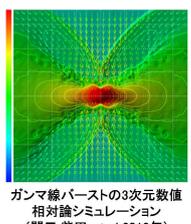
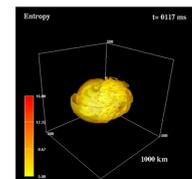
4.5 基礎物理

(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
<p>従来の研究</p> <ul style="list-style-type: none"> ■ ビッグバ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・プラズ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 	<p>社会への貢献</p> <ul style="list-style-type: none"> ■ 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
<p>今後の科学計算からのアプローチ</p> <ul style="list-style-type: none"> ■ 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 	<p>宇宙史</p> 
 <p>宇宙背景放射の分布 (Credit: NASA / WMAP Science Team)</p>	 <p>宇宙の大規模構造 (銀河分布) (Credit: M. Blanton and the Sloan Digital Sky Survey.)</p>

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
<p>従来の研究</p> <ul style="list-style-type: none"> ■ 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入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 	<p>社会への貢献</p> <ul style="list-style-type: none"> ■ 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
<p>今後の科学計算からのアプローチ</p> <ul style="list-style-type: none"> ■ 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 	<p>超新星爆発の残骸 (カシオペア座A, 疑似カラー) (Credit: NASA/JPL-Caltech/STScI/CKC/SAO)</p> 
<p>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)</p> 	<p>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)</p>  <p>超新星爆発の3次元流体シミュレーション (瀧崎 et al. 2013年)</p> 

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
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	1,500,000	独立時間刻みとツリーのハイブリッド	10^{14} 粒子	100Tflops/ノード × 10000ノード、1000コア/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	1000	0.2	2	1	2000	1	7,200,000	Tree radiation SPH	10^{11} 粒子 + 5×10^8 光源	100Tflops/ノード × 10000ノード、1000コア/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	130	0.3	20	2	80	10	360,000	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、1000コア/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	140	1.3	1.3	1	100	10	500,000	Particle-Mesh + FFT	10^{13} 粒子 + 10^5 光源	100Tflops/ノード × 10000ノード、1000コア/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	100	0.3	2	10	1000	10	3,600,000	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、1000コア/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	560	4	0.08	200	500	4	4,000,000	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、 10^8 時間ステップ	100Tflops/ノード × 10000ノード、1000コア/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	1,000,000	4次元RK、Rad-HRSC	$1000^3 \cdot 10^7$ step	100Tflops/ノード × 10000ノード、1000コア/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	780,000	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 24^3 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、1000コア/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究	680	68	68	700	200	1	490,000	Particle-in-Cell法	4096^3 グリッド、 10^{15} 粒子	100Tflops/ノード × 10000ノード、1000コア/ノード、通信速度1GB/s/ノード
6次元プラソフ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	300	4	320	3200	1400	1	1,500,000	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	100Tflops/ノード × 10000ノード、1000コア/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	100	0.1	1	10	6000	1	2,200,000	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 $\times 10$ 初期状態 $\times 3000$ サーフェスホッピング	100Tflops/ノード × 10000ノード、1000コア/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究	100	88	7	13	410	1	150,000	音速抑制法+Yin-Yang grid	格子点 $1024 \times 8192 \times 24576 \times 2$ 、 5×10^7 step	100Tflops/ノード × 10000ノード、1000コア/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	70	9	6	120	1400	2	710,000	Particle-in-Cell法	72000×3072^2 グリッド点(粒子数 10^{16} 個)	100Tflops/ノード × 10000ノード、1000コア/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	17	2	2	1	100	100	600,000	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、1000コア/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

課題	要求性能 (PFLO PS)	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: $128^3 \times 32$ 、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 $1 \mu\text{sec}$ 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	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 $1 \mu\text{sec}$ 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	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 $1 \mu\text{sec}$ 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	$96^4 \times 32$	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 $1 \mu\text{sec}$ 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	1000	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。
ファインマン振幅の自動計算 (4倍精度演算)						1	1000	モンテカルロ法による多次元積分	2ループ図形	同上、QEDの高次補正計算と同程度の計算性能が必要

※ 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。

(3) 原子核物理

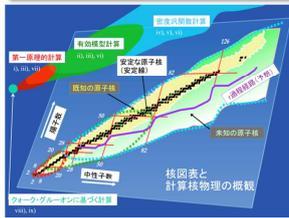
各計算科学分野の社会的・科学的課題

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殻模型計算
- 核内有効相互作用理論の発展
- 不定性の大きな3体力



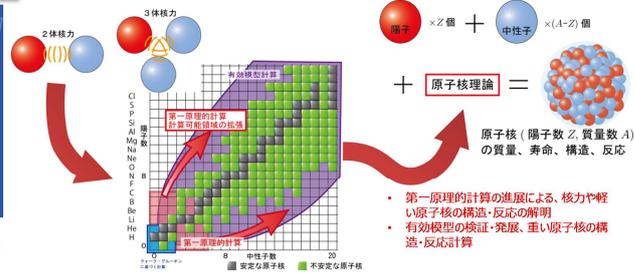
計算核物理学の分類と核図表
 [G.F.Bertsch, D.J.Dean, W.Nazarewicz, SciDAC Review (UNED collaboration)より引用]

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有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
- 宇宙天体現象、原子力工学などへの応用



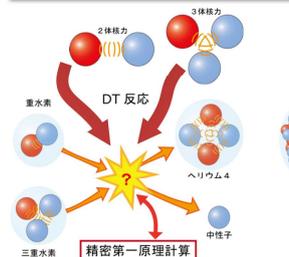
各計算科学分野の社会的・科学的課題

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

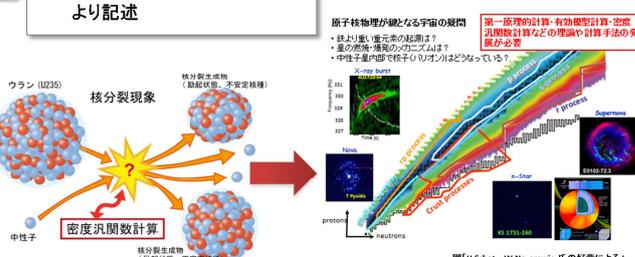


今後の科学計算からのアプローチ

- 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
- 宇宙天体現象、原子力工学などへの応用



図[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

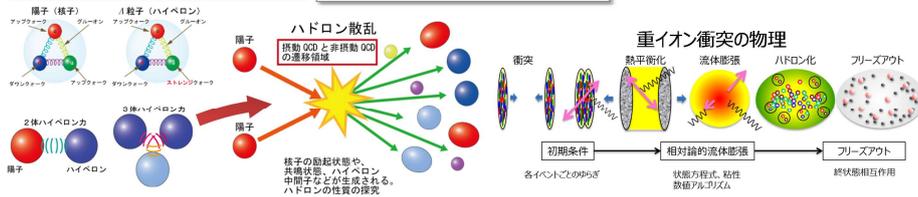
- 原子核・核子のクォークグルーオンによる記述の発展
- 格子QCDによるクォーク・グルーオンの第一原理計算による原子核へのアプローチ
- 有効模型に基づく高密度核物質の状態方程式
- 不定性の大きい3体核力やハイペロン力
- 重イオン衝突実験によるクォークグルーオンプラズマ生成実験の発展と困難な非平衡ダイナミクスのシミュレーション
- QCDとハドロン物理の遷移領域での散乱振幅計算

今後の科学計算からのアプローチ

- 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じた統合的計算
- 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

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
- 宇宙天体現象、原子力工学などへの応用



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説明	100	10	1	0.0001	28	100	1,000,000	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、7~9主殻までを考慮。10 ⁹ ステップ数。	メモリ量は10000ノード X 100GBで計算
原子核殻模型計算の適用領域の拡張	2.2	0.001	0.32	0.0001	10	800	63,000	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 X 32GBで計算
原子核構造・反応の統一的理解	53		0.03		100	50	950,000	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	
原子核応答関数の系統的記述と計算核データ構築	32		0.03	0.1	0.1	10,000	120,000	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線形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	35	0.3	0.04	10	24	100	300,000	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	23				24	100	200,000	分子動力学法による熱平衡の計算		
ハイペロンを含む軽い核の構造・反応の解明	21	10	0.4	0.00001	4	200	60,000	量子少数多体系の厳密計算	7体系への応用	
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。
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	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、励起バリオン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2.5x10 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ッチの効率的手法。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

各計算科学分野の社会的・科学的課題

社会科学

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

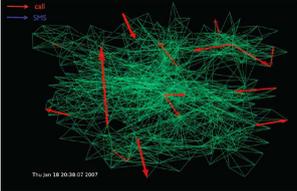
- 交通・経済・社会集団形成といった個々の現象ごとにモデルをつくりシミュレーション
- エージェントモデルも個々の現象の記述が中心
- モデル間の相互作用について客観的な基本法則がない

→ 今後の科学計算からのアプローチ

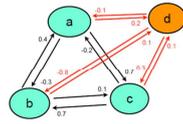
- 個々の社会現象を、社会全体のサブシステムとして捉え、統合的に記述
- 社会全体の構成要素としてのエージェントモデルの構築
- 莫大かつ離散的なモデルパラメータの最適化するため大量のデータマイニングおよび大規模並列探索

社会への貢献

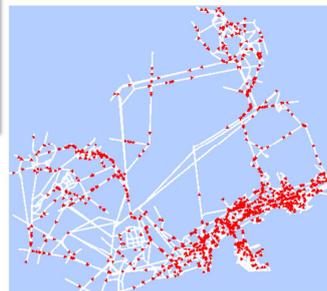
- 社会の多様な課題に柔軟に対応し、現在までのデータに基づいて一瞬先から将来までの予測を行うことができるシステムの実現



携帯電話通話による人間関係の可視化



社会的多様性の維持・増進



都市交通シミュレーション

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	0.000000028	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その演算量は1日あたり、とする。
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、1000 注文機会/秒 × 10 ⁴ 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 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
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 で随時公開する。