4. アプリケーション調査研究グループ

4.1 概要

アプリケーション調査研究グループでは、計算科学・社会科学・データ科学のアプリ分野から構成するサブグループに おいて、次世代計算基盤により最先端の研究成果を実現するために必要な計算資源に関する調査を行う。本グルー プには、主にアプリ分野で活動する① 生命科学、② 新物質・エネルギー、③ 気象・気候、④ 地震・津波防災、⑤ ものづくり、⑥ 基礎科学、⑦ 社会科学、⑧ デジタルツイン・Society 5.0の8つのサブグループとこれらのサブグループの 活動を支援し、他グループとの連携を図る計算機科学分野の⑨ 科学技術計算アルゴリズム、⑩ 機械学習アルゴリズ ム、⑪ ベンチマーク構築、⑫ 性能モデリング技術の4つのサブグループが置かれている。本グループの調査では、各分野 のアプリケーションについて、総演算量、演算性能、メモリ使用量、ノード間通信性能といった一般的な指標に加え、 Byte/Flops値やSIMD命令の活用率、生産性といったアプリケーションプログラムの性質を規定する様々な指標の調 査を行う。また、アプリ分野における代表的なプログラムの特性を反映したベンチマークプログラムの整備を行う。本ベンチ マークプログラムはアーキテクチャ調査研究グループ、システムソフトウェア・ライブラリ調査研究グループに提供し、これらの 調査研究の推進に役立てる。また、2023年度以降では、アーキテクチャ調査研究グループの調査研究結果に基づく、 アプリ分野におけるサイエンスロードマップの改訂や新しいアルゴリズムの導入可能性の調査を予定している。

4.2 生命科学分野調査研究サブグループ

4.2.1 研究分野の概要

生命科学分野は、複雑で精緻な生命現象を解き明かし、精密医療やインシリコ創薬を通じて健康・長寿社会の実現に貢献する。本分野の特徴は、図 4.2.1に示すように原子レベルの生体分子から、細胞、臓器、個体のレベルまで異なるスケールの多層的で複雑な現象を扱う点にある。特に、実験では解き明かすことのできないダイナミクスを解析するために、分子動力学シミュレーションをはじめとする多種多様なシミュレーション技法が開発・活用されている。また、シミュレーション技術とAIによる新規医薬品の開発、医療・ゲノムデータ解析に基づく健康予測・個別化医療などが社会的に重要な応用例として期待される。



図 4.2.1 生命科学分野の概要

4.2.2 現行システムにおける解析の現況

本分野では多数のアプリケーションプログラム・計算対象が存在する。まず、代表的なコアアプリとそれらを組み合わせた手法の例について、特に無償利用可能なものを中心に図 4.2.2に示す。多岐に渡るため網羅することは困難であるが、計算対象と目的に応じて適切なアプリケーションを選択する必要がある。以下では富岳で実施されてい



図 4.2.2 代表的なアプリケーションの例

4.2.2.1 生体分子・生体内環境の分子動力学シミュレーション

タンパク質の機能を解析したり、薬剤分子との相互作用を推定するために用いられる分子動力学(MD)計算 は本分野の代表的なシミュレーション手法の一つである。例えばコアアプリGENESIS2.0.0betaを用いて、癌 治療の標的タンパク質であるEGFRを対象に(約10万原子)、標準的計算時間である1µ秒の計算を富岳24 ノードを用いた場合8132NHを要する。これは比較的小さな系であり、変異の入った多数のタンパク質や多数の 薬の候補(100~最大数十億)を検討する場合、より多くの計算を要する。またMDを用いてタンパク質の性質を 解析する手法(MSM解析)を行う際には同様のEGFRの系でGENESIS2.0.0betaを用いて、総計で128µ 秒の計算が必要となる。この場合768ノードを用いて880,440NHを要し、生成データ量は1.5TB程度になる。 計算コストだけではなく、計算結果を手元のサーバに移動し解析する必要があり、データ転送もボトルネックの一 つとなっている。

4.2.2.2 遺伝子ネットワーク解析

疾患に関わる遺伝子の同定や遺伝子相互の発現制御の関係性を解析するために、多数の遺伝子の発現 データから遺伝子の制御関係のネットワークを推定する必要がある。ベイジアンネットワークに基づく遺伝子ネット ワーク推定手法INGORでは、100人(サンプル)分のデータからのネットワーク推定で、256ノードを用いて計 200NH程度を要する。入出力のファイルはそれぞれ13MB、11MBと比較的小さい。しかし、今後遺伝子発現 データは増大し続けると考えられ、それに対応した解析計算が必要となる。

4.2.2.3 臓器シミュレーション

心臓シミュレーションUT-Heartにおける計算資源は、分子数に比例したノード数が必要となる。有限要素数 は5,000~7,705要素、1要素内の分子数は再現精度に応じて16~75分子となる。「富岳」では、1ノード4 プロセス(プロセス内12スレッド)で心臓の拍動1.0秒に約240時間を要する。最小規模5,000要素16分子で 480万ノード時間、最大規模7,705要素75分子で約3,467万ノード時間が必要となる。ただし全ての研究ケ ースにおいて拍動1.0秒が必要ではなく、0.1~0.5秒分のデータが標準的となる。 4.2.3 2030年頃に期待される成果と必要な計算資源

本分野ではシミュレーション技法の基本原理はかなり確立されており、短時間に起こる典型的な生物学的なイベ ントについてはある程度計算可能になりつつある。ただし、計算対象の規模は小さく、単純化されたパーツレベルでの 現象理解に留まることが多い。また、創薬応用においてもパーツレベルで有用な手法は存在するが、計算コスト・精 度の面で改善の余地が多い。一方、AlphaFold2に代表されるように、大量の生命科学データとAIを組み合わせ ることで、これまで不可能と思われていたタンパク質の構造等の生命現象に関わる重要な要素の予測や解析が可 能になりつつある。データを活用したAI開発は重要ではあるが、一方で実験データの増加自体も問題になりつつあり、 実験データをいかに効率的に処理し、統合するかも今後大きな課題になると考えられる。

本サブグループでは2030年頃に期待される成果として、前提として富岳のおおよそ100倍程度(アプリの改善含 む)の規模の計算機を想定しつつ、様々な期待される成果を検討した。将来を見据えると、個別アプリの高速化・ 高性能化は必要条件に過ぎず、複数のアプリ・データベース・AI等を容易かつ柔軟に組み合わせられる計算環境・ ワークフローなしには本来解決すべき課題を解けない状況になると想定される。様々な生命科学データと連携しつつ、 複数のアプリケーションを有機的に駆動させる、あるいはアプリケーションが処理できる対象の規模をより大きく現実的 なサイズに拡張する必要がある。ここでは特に4つの代表的な期待される成果を示す。

4.2.3.1 時空間大規模シミュレーションに基づく細胞デジタルツイン

2030年ごろでも、複雑に混み合った細胞内環境には実験では捉えられない動的要素が多数存在すると想定される。細胞を丸ごとシミュレーションすることで、分子レベルでの生命現象の理解が大きく進むと期待される。 計算手法としては、GPUを利用したMDシミュレーション・疎視化シミュレーションが基本となるが、巨大系に対応 するためにはメモリ転送・インターコネクトの問題が深刻になる。計算量の見積もり例として、1細胞(10億原子 系)を1µs計算するとした場合1370万NHを要する。一方、メモリやストレージに関しては対応可能と考えられる。 また開発環境として、疎視化MD・AIを含むシミュレーション全般の開発のためにはPython, Julia等を用いた

既存フレームワークが高速に動作する環境が必要になる。

また、近年クライオ電子線トモグラフィー(cryo-ET) が急速に発展しており、細胞環境の3次元構造の取得 が徐々に可能になりつつある。しかし実験で得られる像 は空間・時間分解能の点で課題が残ると考えられ、シミ ュレーションで時空間のスケールを埋めることができれば (細胞デジタルツイン)細胞内環境の理解が飛躍的に進 むと期待される(図 4.2.3)。対象例として神経細胞の シナップスの構造モデリングの場合、構造推定のために1 億原子系で10µ秒程度の計算を要する。富岳では 16386ノードで1日に0.0012µ秒しか計算できないが、 100倍程度の速度で計算できれば数ヶ月程度で達成 できると期待される。



図 4.2.3 現状の計算・実験間のスケール解離 と大規模シミュレーションによるスケール融合に 基づく細胞デジタルツインの模式図

4.2.3.2 計算が可能にするゲノム医療・精密医療

疾患に関わる遺伝子の同定や遺伝子相互の発現制御の関係性を解析するためには、遺伝子発現データから遺伝子の制御関係のネットワーク推定が重要になる。2030年ごろの公共DBに新規登録される遺伝子発現 データを100万サンプルとし、これを1年間で解析するためには220PFLOPSを要する。必要なメモリは1PB程度 であるが、ネットワーク性能は110PB/s程度となる。また外部とのデータ転送も問題となるため、将来的には後 処理も同じ計算機上で実施することが望まれる。

また、ゲノム医療を行っている臨床現場では、患者のゲノム解析によって臨床的な意義が未知の変異(意義 不明変異)が多数検出される。これら変異の意義が計算により明らかになれば個人ごとの疾病の原因・治療に 役立つと期待される。例えば、10万種類のタンパク質変異体(平均で5万原子系)に対する医薬品10種の結 合自由エネルギー計算(MP-CAFEE)を想定した場合、1タンパク質で384NHを要するため、3.84億NHが必 要となる。一分子あたりのディスク容量は19GB程度のため、全体で約1.9PB必要となる。

4.2.3.3 全自動インシリコ創薬・分子デザインの実現

低分子創薬において、現状のインシリコスクリーニングでは主にドッキングシミュレーションが用いられるが、精度 が低いという問題点がある。そこで、ドッキング後にMDシミュレーションに基づくスクリーニングを行い分子の安定性 や結合親和性を見積もることで、精度の向上が期待される。対象として、10種類の標的タンパク質に対する10 万種類の化合物を対象とした場合、1分子(タンパク質含め7万原子系)あたり富岳1260NH (60ノード ×21h)となり、100万分子で12.6億NHを要する。

また、近年新たな創薬モダリティとして中分子・抗体医薬品に注目が集まっている。現状では生体分子の機 能改変は実験的に行われており、専門家が設計・実験を行うため効率が悪く、実験のためのコストも高い。そこ で、長時間MDによる機能解析に基づき、AI(ベイズ最適化・巨大言語モデル等)を用いることで、目標とする 機能を実現するアミノ酸配列の最適化を目指す。対象としては、トランスポータ、ポンプ、遺伝子改変ツール等 が考えられる。構造・機能評価に1つあたり100万NH.最適化の過程で500候補程度必要とすると 500×100万NH=5億NH程度を要する。プログラミング環境として、FORTRAN、CUDAと同等のGPUカー ネル用言語拡張、Python、Julia、またツール・ソフトウェアとしてPyTorch/JAX、GENESISなど多数の環境・ 手法を組み合わせる必要がある。更に、巨大なタンパク質複合体抗原と抗体の3体以上の相互作用の解析 が可能になれば、より実践的な抗体設計の基盤になると期待される。例として、抗体を含む系(100万原子)は 自由エネルギー計算に80万NHを要し、100個の変異を入れた設計を考えると8000万NHが必要となる。1分 子あたり500GB、メモリは200gB程度を要する。

また、近年新たな創薬モダリティとして中分子・抗体医薬品に注目が集まっている。巨大なタンパク質複合体 抗原と抗体の3体以上の相互作用の解析が可能になれば、より実践的な抗体設計の基盤になると期待され る。例として、抗体を含む系(100万原子)は自由エネルギー計算に80万NHを要し、100個の変異を入れた 設計を考えると8000万NHが必要となる。1分子あたり500GB、メモリは200GB程度を要する。

4.2.3.4 臓器全体シミュレーション UT-Heart による心疾患発症メカニズムの解明と個別心不全リスク予測 肥大型心筋症など指定難病となっている心疾患の発症メカニズムの解明に心臓の詳細な拍動シミュレーショ ンは有効であると期待される。また、インシリコでの様々な拍動データを蓄積することで、個別心不全リスクや創

薬で問題になる心毒性の評価にも活用できると考えられる。これらを実現するために疎視化分子動力学法と融合した心臓シミュレーション(図 4.2.4)を想定した場合、演算量として最大400万程度の分子ごとの計算を行い、1拍/ケース = 11.1 × 1021 [FLOP] (富岳では、ピーク性能比 10%程度)を要する。ディスク容量としては、1拍の計算に900TB、多数のデータを蓄積するデータベースでは総計100PB程度を必要とする。



図 4.2.4 疎視化分子動力学計算と融合した心 臓のシミュレーションの模式図

4.2.4 ベンチマークの整備計画と状況

以下の表 4.2.1に示すようにベンチマークアプリケーションの整備を進めている。

名称	目的·内容	整備状況
GENESIS	MD シミュレーション(特に大規模な系向	評価チームに 提出済
	け)	
Gromacs	MD シミュレーション(特に小・中規模向け)	複数の系を評価チームに 提
		出済
INGOR	遺伝子ネットワーク推定	評価チームに 提出済
ChemTS	AI(RNN)と強化学習による分子デザイ	評価チームに 提出済
	ン	
kMOL	グラフニューラルネットワークによる分子やタン	現在準備中
	パク質の性質予測	
VFVS-	大量ドッキングシミュレーションワークフロー	評価チームに 提出済
docking		
テンプレートマッ	テンプレートマッチング法を用いた XFEL 画	ベンチマークとして利用可能な
チング計算フロー	像に対するタンパク質構造の推定	箇所を準備中
UT-Heart	心臓の拍動シミュレーション	現在準備中

表 4.2.1 整備予定のベンチマークアプリケーション及びその整理状況

4.3 新物質・エネルギー分野調査研究サブグループ

4.3.1 研究分野の概要

結晶固体、アモルファス、分子に閉じ込められた多体電子に対するシュレディンガー方程式を解いて電子物性を 予測する。半導体や金属、分子について第一原理電子状態計算、中でも密度汎関数理論に基づく近似手法が 広く成功を収める一方、大規模な不規則系や分子系への応用には困難があり、電子の運動エネルギーと電子間 相互作用の競合が物性に重要な影響を与える量子物質では、非自明な量子縺れの効果を取り入れる手法が必 要となり、配置間相互作用法や量子モンテカルロ法などが用いられている。

様々なアルゴリズム、計算手法が用いられている中、第一原理電子状態計算に限っても、そのアルゴリズムは、1 電子の波動関数をどのような基底関数系によって記述するかに大きく依存している。実空間基底系を基礎とする第 一原理計算コードRSDFTが「京」コンピュータで成功を収めたことから、RSDFTが「富岳」のコデザインに用いられた 一方、様々なユーザが用いているVASPやQuantumEspressoなど平面波基底系に基づくアプリケーションが「富 岳」のアーキテクチャに適合にしているか否かについては議論がある。そこで本調査研究では、幅広い基底系のコード を取り上げることとした。本節では、NTChem (ガウス基底), BigDFT (ウェーブレット基底), AkaiKKR (グリーン 関数), QuantumEspresso (平面波基底), およびOpenMX (局在・平面波の混合基底)について以下に調 査結果を述べる(ただし、括弧内は基底名とする)。

また量子多体波動関数計算については、行列式の平方根にあたるパフィアン計算とモンテカルロ法を基礎とする mVMCとクリロフ部分空間法に基づくHΦを調査する。特に行列式やパフィアンは、電子数に対して指数関数的に 増減するため、倍精度実数による演算が電子数の大きな大規模計算には不可欠となっている。 加えて、本調査研究では、NTChem、BigDFT、AkaiKKR、SALMON(実空間基底)、mVMC、HΦについてベンチマークセットを用意する。

- 4.3.2 現行システムにおける解析の現況
 - (i) NTChem (ガウス基底)

標準的な解析

- (i)-1. NTChem [hybrid O(N) DFT] の標準的な解析に関する情報:
 - 計算条件: 8000 原子、ダブルゼータ基底
 - メモリ要求: 16TB 程度
 - B/F: 不明
 - プロセス間通信: MPI_IAllGatherv
 - 6144 ノード時間 (1 ジョブ 6 時間@1024 ノード)
- (i)-2. NTChem (RI-MP2) の標準的な解析に関する情報:
- 計算条件: 360 原子、9840 軌道(最大: 720 原子、19680 軌道)
- メモリ要求: 16GB/node (最大: 25GB/node)
- B/F: 不明
- プロセス間通信: MPI_Isend/Irecv、MPI_Allreduce
- 170.7 ノード時間@1280 ノード(最大: 5021 ノード時間積@17720 ノード)

大規模な解析

hybrid O(N) DFT [(i)-1.]については100万原子系、RI-MP2[(i)-2.]については2000原子系が大 規模な解析となる。

(ii) BigDFT (ウェーブレット基底)

標準的な解析

- 5000 原子 (最大: 50,000 原子)
- メモリ要求: 24GB 程度/node
- B/F: 不明
- プロセス間通信: MPI one sided communication
- 1 ジョブ 1 時間程度[64 ノード時間@富岳 (最大: 768 ノード時間@AMD Irene ROME, TGCC Joliot Curie)]

大規模な解析

50,000原子系のO(1000)回計算によるhigh throughput mutation screening。

(iii) AkaiKKR (グリーン関数)

標準的な解析

- AkaiKKR 自体はグリーン関数の k 点・エネルギーメッシュ点のグループに対して OpenMP 並列を適用
- 材料パラメータ並列には、MPI もしくは Array Job を利用
- AkaiKKR のホットスポットはダイソン方程式を解く際の逆行列計算
- 演算量: 不規則系磁石材料(2-17-3 系)を対象とした 5 万件の計算で 4 万ノード時間(富岳)
- データ量: 不規則系磁石材料1件当たり12GB メモリを使用(富岳)
- データ転送量:不明
- 通信量: OpenMPのReduction

- I/O 量:不規則系磁石材料1件当たり:インプット(数 KB)、アウトプット(数百 KB)、ポテンシャル(数 MB)
- 1 解析あたりの計算時間: 不規則系磁石材料1件当たり1時間程度@富岳

大規模な解析

約15万件の不規則系磁性材料を対象とした、「富岳」における自動網羅電子状態計算による物性デー タベースの構築。

(iv) QuantumEspresso (平面波基底)

標準的な解析

- ハイブリッド並列になっている(MPIとOpenMP)、バンド、k 点メッシュ、スピン、基底、FFT
- ホットスポットは FFT、直交化など
- 演算量:不明
- データ量: 113.48 GB (下記リンクのベンチマークの「PSIWAT」)
- データ転送量:不明
- 通信量: MPIの1体1通信、集団通信
- I/O 量(PSIWAT):擬ポテンシャル(入力)=1.5MB、電荷密度(出力)=59MB、波動関数(出力)=9GB
- 1 解析あたりの計算時間:基本的な系の SCF 計算、もしくは大規模系の SCF 計算について、以下に 報告されている。

https://www.hpci-

office.jp/documents/appli_software/Fugaku_QE_performance.pdf

大規模な解析

100原子程度の系のハイブリッド汎関数計算、フォノン計算。

(v) OpenMX (局在・平面波の混合基底)

標準的な解析

● ハイブリッド並列。

通常の DFT: MPI はスピン、k 点、LAPACK の対角化ルーチンの並列化を使用し、OpenMP も併用 オーダーN の DFT: MPI はスピン、原子数、LAPACK の対角化ルーチンの並列化を使用し OpenMP も併用

例えば 1000 原子系であれば並列計算において約 40000 CPU コアまで加速

- ホットスポットは LAPACK による対角化
- 演算量: 不明
- データ量: メモリ使用量は CPU コア当たり 1~2GB
- データ転送量: 不明
- 通信量: MPI、1 体 1 通信、集団通信
- I/O 量: Fe1000 原子、Si1280 原子の周期系計算をオーダーN で行うと、電子密度などで 1GB。
- 1 解析あたりの計算時間: Si の大規模系で1SCF ステップ1.5 秒、5000MD ステップ(5ps)の計算 で 20 時間

大規模な解析

10万原子を超える大規模系のオーダーN計算、機械学習ポテンシャルを用いた高速化、および2次元材料の物性データベース(通常のDFT計算×約12000種類の化合物候補)作成。

(vi) mVMC

標準的な解析

- 計算条件: 900 電子系(2 次元ハバード模型)、1000MCS、1000 最適化ステップ
- 136GFLOPS/node (ピーク性能比 6%、ピーク性能 3.3792TFLOPS)
- メモリ要求: 2BG/node
- B/F 値: 1.6
- 実測メモリスループット 215.7GB/s (ピーク性能比 21.1%)
- ノード間通信: Reduction
- 通信量: 1000×900×42×16=0.56GB
- I/O 量: 0.2GB
- 220 ノード時間@東京大学情報基盤センター Wisteria/BDEC-01、A64FX1 ノード (8 スレッド、6 プロセス)

大規模な解析

● 計算条件: 10,000 電子系の計算: 変分パラメータ数 160,000 超すなわち 1.6×10⁵ 次元の CG 法計算、1000 倍の演算量。最大の I/O 量が 1TB に達する 1,000 電子系の高温超伝体のシミュレ ーション。

(vii)HΦ

標準的な解析

- 計算条件: 24 量子ビット(2²⁴次元)、1000 回の疎行列-ベクトル積
- 21.7GFLOPS /node (ピーク性能比 9.1%)
- 要求メモリ: N 量子ビットについて(16×2N/プロセス)B/core
- B/F 1.9
- メモリースループット 40.4GB/s
- ノード間通信: 複数プロセスの場合:ステップごとに 16Byte の 1 対 1 通信を各ノード[(2²⁴)/プロセス] 数回
- I/O 量: ほぼ無視できる
- 0.4 ノード時間@FX101 ノード (16 スレッド)
- ベイズ最適化の1ステップに使える計算規模

大規模な解析

50量子ビットを超える計算(メモリ要求量1024PB)。

- 4.3.3 2030年頃に期待される成果と必要な計算資源
- (i) NTChem

期待される成果

● 100 万原子系の密度汎関数理論(DFT)計算による生体分子系の電子物性解析

必要資源

● 10¹⁰ノード時間積

(ii) BigDFT

期待される成果

● 5万原子からなる現実的なデバイスサイズのモデルを用いた物質へのドーピング効果の解析 必要資源

● 3×10⁷ノード時間積

(iii) AkaiKKR

期待される成果

- マテリアルズインフォマティクスに資する高品質の物性データ創出 ポスト「富岳」では、大規模ハイスループット計算によって無機材料分野の「スモールデータ問題」を解決し 物性ビッグデータを実現することが可能になり、広範囲の材料空間を効率的に探索できる。
- 有限温度における磁性・スピントロニクス材料のデザイン ポスト「富岳」では、有限温度における素励起を考慮した物性(電子、磁気、伝導特性)が計算可能 になる。バルクのみならず MTJ 素子構造等をデザインするための、ハイスループット計算が期待できる。

必要資源

- 計算資源: 不規則系バルク 200 万個、不規則系超格子 5 万個を対象としたハイスループット計算を 行うため、
 - ▶約4×10⁷ノード時間積
 - ▶ メモリ要求: 1 プロセスあたり O(10~20)GB
- プログラム・スクリプト言語: Fortran、Python
- 並列化: 1 つの材料に対しては OpenMP、材料パラメータ並列には MPI か Array job (iv) mVMC

期待される成果

● 強相関量子物質の分光学スペクトル

量子物質に創発する情報キャリアの素性を解明する上で重要な役割を果たしてきた中性子/X線散乱実 験や光電子分光測定とシミュレーションの定量比較が可能となる。それによって、高温超伝導体の発現機構、 および量子スピン液体候補物質における(マヨラナ粒子をはじめとする)分数粒子発現が検証可能となる。 <u>必要資源</u>

- ・計算資源: 144 電子の共鳴非弾性 X 線散乱スペクトル 1 計算条件あたり
 - ▶ 5×10⁷ノード時間
 - ▶ メモリ要求: 1 プロセスあたり O(100)GB
 - $[O(10) \times N_{s}(2N_{ET}N_{s}^{2} + 1) \times N_{MCS}, N_{s}=144, N_{ET} = 9, N_{MCS}=10]$
- プログラム・環境: C 言語、機械学習最適化(python/julia)、及び外部の古典/量子アニーラとの接続

4.3.4 ベンチマークの整備計画と状況

NTChem, BigDFT, AkaiKKR, mVMC, HΦについて、3月末のベンチマークセット提出のため、新物質・エネ ルギー分野調査研究サブグループにおいて準備を進めている。また、SALMONについて、コード開発者である量子 科学技術研究開発機構の山田俊介博士、乙部智仁博士、および筑波大学の矢花一浩教授からベンチマークの 提供を受けている。

4.4 気象・気候分野調査研究サブグループ

4.4.1 研究分野の概要

気象現象や気候・地球システムの理解・予測のため、対象とする時空間スケールや主な用途(研究・現業)に 応じて多種多様な気象・気候モデルが開発されている(図 4.4.1)。基礎的な研究とともに、現業予測での利 活用や気候変動適応策といった社会実装も活発に進められていることが分野の特徴である。スーパーコンピュータの 黎明期からのヘビーユーザであり、モデルの高解像度化、大アンサンブル化、長期積分化、プロセス精緻化などの有望な施策を今後も着実に推進するため、HPCへの期待は今後も高まり続けるだろう。



図 4.4.1 様々な時空間スケール・用途における気象・気候モデルの概要。アプリ情報を提供した各モデルグループの 資料から作成。

国内におけるモデルの開発・利用現況を俯瞰し、今後のco-designに向けたターゲットアプリの選定や分野の振 興につなげるため、以下のモデルについてアプリ情報を収集した。

- 気象庁の現業予報モデル
 - > asuca:主に領域を対象とする非静力学大気モデル
 - ▶ asuca-Var: asuca ベースの変分法データ同化システム
 - GSM: 全球を対象とする大気モデル
- 領域モデル
 - ▶ SCALE-LETKF: 非静力学大気モデル(SCALE) および局所アンサンブル変換カルマンフィルタ (LETKF)に基づくデータ同化システム
 - > SCALE-LT: SCALE に雷の頻度・分布の計算部分を追加(気象雷モデル)
 - > SCALE-SDM: SCALE に粒子法に基づく雲微物理スキーム(超水滴法)を追加
 - ▶ kinaco: 非静力学海洋モデル
- 全球モデル・マルチスケールモデル
 - NICAM, NICOCO: 非静力学大気モデル(NICAM)、および NICAM と海洋モデル COCO が結合した大気海洋結合モデル(NICOCO)
 - > NICAM-LETKF: NICAM および LETKF に基づくデータ同化システム
 - > MRI-ESM: 大気・海洋・化学・エアロゾルモデルが結合した地球システムモデル
 - > GAIA: 大気大循環、電離圏、電気力学モデルが結合した大気圏電離圏結合モデル
 - > MSSG:全球・メソから都市街区までをカバーするマルチスケール大気海洋モデル
- 力学コア
 - ISPACK3/SPML: スペクトル変換ライブラリ(ISPACK3) およびその Fortran90 ラッパー (SPML)
 - > SCALE-DG: 不連続ガラーキン法に基づく大気力学コア

これらに加えて、全球モデルとしてA/O/CFESグループから協力者が議論に参加した。

4.4.2 現行システムにおける解析の現況

個別モデルの標準・大規模解析の現況を節末尾および表4.4.1に示す。大きな傾向としてはTime-tosolutionが重要な現業モデルでは1解析あたりのノード数やノード時間積が小さい。研究モデルでは1解析あたり数 Nhから最大1600万Nh程度(富岳一般課題の年間上限近く)までと幅広い。一般に気象・気候モデルは要求 B/F比が高く実行性能は数%止まりという特徴があるが、SCALE-LT/-DGなど精緻なスキームを用いたモデルでは その限りではない。ノードあたりのメモリ使用量について1 GBを切るモデルがある一方で数十GBを必要とするモデル もある。通信パターンについては格子法ベースのモデルでは隣接1対1通信、スペクトル法ベースのモデルでは全通信 が基本であり、特に後者は一般に通信負荷が大きいと考えられる。IOノードを用いる場合は、計算ノードとの大容 量通信も生じうる。入出力サイズについては1解析あたりGBからPBオーダーと幅広いが、富岳で一般的な計算資 源量に換算すると多くのモデルでPBオーダーの入出力を要するためI/O負荷は高い。なお、一部のアプリは OpenACCによるGPU化に対応している。

個別モデルの現況(標準解析・大規模解析)

asuca:(標準)東アジア域5 kmメッシュ、78時間積分(メソモデル)

(大規模)1 km局地モデル(格子数1,400×1,400×76)リアルタイムシミュレーション
 asuca-Var:(標準)東アジア域5 kmメッシュ(メソ解析)

(大規模)ハイブリッド同化のための30メンバのメソ解析

GSM: (標準)水平解像度20 km、264時間積分。(大規模)水平解像度5 km

SCALE-LETKF: (標準) 解像度500 m、50メンバ、30秒サイクルを1時間分実行

(大規模)解像度500 m、1,000メンバ、30秒サイクルを合計30日分実行

SCALE-LT: (標準) 36時間積分。(大規模) 格子数1200×600×60、24時間積分

SCALE-SDM: (標準)領域サイズ60 km×60 km×20 km (解像度125 m、3,700万格子)、 超粒子密度128/格子 (47億個)、2時間積分 (72,000時間ステップ)

(大規模)領域サイズ60 km×60 km×20 km (解像度62.5 m、3億格子)、超粒子密度128/格子(377億個)、2時間積分(72,000時間ステップ)

kinaco: (標準)解像度100 m以下で数100 kmスケール領域、もしくは解像度1 m以下で数kmスケール領域の積分。(大規模)標準的な解析の100倍程度

NICAM: (標準) 3.5 kmメッシュ (格子数10×4¹¹×78) を用いた1月積分

(大規模) ① 220 mメッシュ(格子数10×4¹⁵×78)実験、2時間積分。② 3.5 kmメッシュ(格子数10×4¹¹×78)、10年実験(4200万時間ステップ)

NICAM-LETKF: (標準)格子数267,632,640、256メンバ

(大規模):格子数4,282,122,240、256メンバ

MRI-ESM: (標準) 大気120 kmメッシュ、海洋1×0.5度メッシュを用いた1ヶ月積分

(大規模)大気10 kmメッシュ、海洋10 kmメッシュを用いた11日積分

GAIA: (大規模) T42、12年データ同化計算

MSSG: (標準)領域サイズ2 km×2 km×400 m、2 m解像度(格子数1,000×1,000×200)
(大規模)①領域サイズ40 km×40 km×20 km、2 m解像度(格子数20,000×20,000×340)、
6時間積分。②領域サイズ35 km×25 km×2.5 km、2 m解像度(格子数17,500×12,500×270)、24時間積分

ISPACK3/SPML: (標準) T682の解像度で2次元乱流の数値計算、100万ステップ (大規模) TL524287(格子数1,048,576×524,288)、球面調和関数①逆変換、②正変換 **SCALE-DG**: (標準)領域サイズ10 km×10 km×3 km、10 m解像度(節点数2.5×10⁸)、4 時間積分。(大規模)標準的な解析をベースに2.5 m解像度、30分積分

4.4.3 2030年頃に期待される成果と必要な計算資源

個別モデルから期待される成果の概要については節末尾に、必要な計算資源については図 4.4.1と 表 4.4.2 に示す。研究モデルの観点では、これまでにない新たな予報・予測による社会貢献を目指す取り組みや、これまでに ない大規模計算による現象の理解、これらを支える基盤ライブラリ開発などが想定成果として挙げられている。現業 モデルについては、線状降水帯等の現業予測精度の大幅な向上等を目指し、高精度なデジタルツインの構築やワ ークフロー最適化による早期情報提供などが期待されている。

成果創出に必要な計算資源については、現時点では富岳の拡張を想定したモデルが多い。ベンチマーク結果や アクセラレータ等の動向を踏まえながら、計算資源の見積もりを現実的なアーキテクチャに合わせていく必要がある。 現業モデル特有の視点としては、リアルタイム実行のためにシステム全体の可用性を重視している。プログラミング言 語としてはどのモデルでもFortranは必須としている。また、MPI、OpenMP、Pythonも業界標準として利用されて おり、今後はOpenACCもこれに加わる可能性が高い。C/C++、Ruby、NetCDFライブラリの利用頻度も高い。 可視化環境としては伝統的なGrADSに加え、ParaView等の並列化環境が求められている。

個別モデルから期待される成果の概要

asuca:高精度モデルによる現実大気デジタルツイン構築(asuca-Var, GSM共通)。①水平解像度 1 km 1,000メンバ18時間予測。②水平解像度200 m 18時間予測

asuca-Var: インナーモデルの水平解像度15 km(アウターモデルの解像度5 km)、40万程度の観測 データを同化するアンサンブルメンバ数1,000のハイブリッド同化モデル

GSM:水平解像度5 km 1,000メンバ 132時間予測

SCALE-LETKF: 30秒更新の竜巻予報システム。解像度10 m (アダプティブメッシュ的なネスティングを 想定)、1,000メンバ、30秒サイクル、30日分実行

SCALE-LT: 雷の頻度・分布および関連現象の予測と社会実装。格子数1,200×1,200×90、72時間 積分

SCALE-SDM:積乱雲集団のライフサイクル再現と形成メカニズム理解。格子数147億、超粒子数1.89 兆、時間ステップ数720万、200時間積分、領域サイズ1,200 km×1,200 km×20 km、格子サイズ 125 m、超粒子数密度128 /grid

kinaco: ① LES スケールでの沿岸域シミュレーション。1 mメッシュ、領域サイズ30 km×30 km (30,000×30,000×100格子)、dt=0.1秒、10日積分程度。② 非静力学スケールでの広域シミュレー ション。30 mメッシュ、1,000 kmスケール、dt=5秒、1年積分程度

NICAM, NICOCO: ① 全球LES。110mメッシュ、398層、2日積分、dt=0.25秒。② 全球雲解像 渦解像気候実験。大気3.5 kmメッシュ・78層、海洋0.1度メッシュ、100年積分

MRI-ESM: 超高解像度地球システムモデル。大気・海洋の水平解像度10 km (目標は大気・海洋の水平解像度kmスケール)。

GAIA:1太陽サイクル分のデータ同化・予測実験による超高層大気・宇宙天気予測の改善

MSSG: ① 都市型豪雨を対象とした建物・雲解像豪雨シミュレーション。領域サイズ40 km×40 km× 20 km、解像度1 m(格子数40,000×40,000×370)、6時間積分。② 自治体スケール領域を対象 とした建物・樹冠解像の微気候シミュレーション。領域サイズ35 km×25 km×2.5km、解像度1 m(格 子数35,000×25,000×300)、24時間積分

ISPACK3/SPML: 超高解像度の球面調和関数変換の高速化実現による、スペクトル法モデルやスペク

トル解析の超高解像度化・高速化

SCALE-DG: 高精度化した力学コアによる広範囲での大気 LES 実験。領域サイズ800 km×800 km ×15 km、解像度50 m(節点数640億)、20時間積分

4.4.4 ベンチマークの整備計画と状況

6モデル(SCALE-LETKF、SCALE-LT、SCALE-SDM、ISPACK3/SPML、SCALE-DG、NICAM)が ベンチマークを提出済みである。2023年1月に開催した研究会での議論も踏まえ、来年度にかけて各モデルのボト ルネック調査を実施してモデルの特徴づけを行う予定である。また、ワークフローのベンチマークについても検討を進め ている。 表 4.4.1 現行システムにおけるモデル毎の解析の現況(標準・大規模解析における必要な計算機資源)。数値 は概算であり、推定値や換算値を含む。PE: MPI プロセス(ランク)、Nh: ノード時間積。

	備考	ノード数は富岳換算の値	ノード数は富岳換算の値	ノード数は富岳換算の値	ノード数は富岳換算の値	ノード数は富岳換算の値 予測計算部分における実行時間の40%が通信	ノード数は富岳換算の値 予測計算部分における実行時間の35%が通信																									
■ジー	(出力)	100 GB	12 GB	0.5 GB	0.5 GB	100 GB	1400 GB	15 GB).3 TB/時間 × 720 時間	210 GB		TB	TB	TR	2		16 TB		1920 TB			7 GB	1 TB	88 TB	1.6 TB						250 GB	
ストレー	(4人)	150 GB	170 GB	2 GB	6 GB	7 GB	72 GB	130 GB	2.6 TB/時間 (× 720 時間			0.16	1.28	(010)	(01)0		0.3 TB		36 TB			3 GB	150 GB		440 GB							
ti bitina (主要通信	1対1隣接、1対1(計算・IO間)	reduce(計算PE間)	1対1隣接、1対1(計算・IO間)	1対全(計算PE間)	全対全	(isend/irecv, alltoall, allreduce)			1対1隣接(5.6 TiB/ノード) allreduce(40M回)		1対1隣接 (553 MB/step×72,000 step=39.8 TB)	1対1隣接 (3.3 GB/step×72,000 step=238 TB)	1対1隣接 (O(10) MB/PE/step)	reduce (10回/step)		1対1隣接(512 GB)	1対1隣接	1対1隣接(61TB)			全通信的(isend 7.0 TB、 ssend 4.9 GB、gather 4.3 GB)	全通信的 (isend 596 TB、ssend 1.2 TB)	全通信 (allgatherv, allreduce, sendrecv)	1対1 (4,410 TB) 、allreduce (331 TB)						1対1隣接 (4.3 TiB/node)	
	要求B/F									1.4							2.1		2.1			2.5	5.8		8.04			4 (L1)			0.61	
メモリ	転送量									370 PiB												623 TB	98 PB								1.77 PiB	
メモリ量	(計算) (10)	00 MB/PE 5 GB/PE		8 GB/PE 12 GB/PE		7 GB/PE 12 GB/PE	≤ 7 GB/PE 14 GB/PE			120 GiB		1.1 TB	9 TB	格子点O(100 GB)	粒子追跡O(10 GB)	(標準×100倍程度)	470 MiB/ノード		470 MiB/ ∕ − F			189 GB	3.1 TB		3460 GB	2.2 PB	1.0 PB				170 GiB	
演算性能	(実行効率)											8.1 TFLOPS (3 %)	16.2 TFLOPS (3 %)																	(43%)		
演算量	/解析									260 PFLOP												249 TFLOP	17 PFLOP					10 PFLOP			289 PFLOP	
計算資源	/解析	37 Nh	256 Nh	12.5 Nh		54 Nh	6,724 Nh	400 Nh	650万Nh	1,350 Nh	8,100 Nh	1,980 Nh	1.8万Nh				115,200		1,440万Nh			1.9 Nh	187 Nh	1,642万Nh	1,700 RSh	$1.6 \times 10^7 \text{ RSH}$	2.8×10^7 RSH		35 Nh	30 Nh	1.2万 Nh	38.4 万Nh
	計算時間/解析	0.42 時間	0.5 時間	0.25 時間		圓軩 29:0	1.75 時間	10-20 秒/cycle × 120 cycle	10-20 秒/cycle × 86400 cycle	6時間	36 時間	22 時間	100 時間				45時間		225 E	37.8 秒	39.2 秒	406秒	8,880秒	72 E	17 時間				123 秒	107秒	30 時間	60 時間
I PE数	(0)	5 20		9		1	0										,240	7,680	,240	,768	4,288											
MP	数 (計算)	1,036		594		320	15,360										10	32.	10	32	2 52,											
	*_ \	88	512	20		81	3,842			225	225	06	180				2,560	81,920	2,560	8,192	131,07	17	76	9,504	100				1,024	1,024	400	6,400
1	解析	標準	大規模	標準	大規模	標準	大規模	標準	大規模	標準	大規模	標準	大規模	東運	1示牛	大規模	標準	大規模①	大規模(2)	標準	大規模	標準	大規模	大規模	標準	大規模①	大規模(2)	標準	大規模①	大規模(2	標準	大規模
想定実行	環境	気象庁スパ	コン、冒日	気象庁スパ	コン、温臣	気象庁スパ	国 て、 目 し、 こ	۱۲ ال	日 囲	田 画		北海道大学	Chariot					山 画		山 心	Ξ	気象研究所 ユジョン		田	i L	ES4			田		山 他	扫 亜
	アブリ名		asuca	The Maria	asuca- var	T T C C	Nop		SOALE-LEI NT	SCALE-LT					kinaco		NICAN	NICOCO		NICAM-LETKE		MRI-ESM		GAIA		MSSG		ICDVCK3/	SDMI	JL IVIL	SCALF_DG	SUALE-DG

表 4.4.2 2030 年頃に期待される成果を達成するために必要な計算資源(モデル毎)

				MPI F	PE数					ХŦ	リ量			ストレー	ジ量/解析
アプリ名	問	必要	ノード			計算時間/解析	計算資源	演算量/解析	要求性能			要求メモリ	主要通信、		
	題	解析数	数	(計算)	(10)		/解析		(実行効率)	(計算)	(10)	バンド幅	要求バンド幅	(入力)	(出力)
	1	1,000		9,100	116				0.75 TFLOPS/PE	8 GiB/PE	16 GiB/PE	0.5 TB/s/PE	20 GB/s/PE(1対1)	1200 GB	400 GB
asuca	2	1		910,000	11,600										
asuca-Var		1		475,000	5,000				0.75 TFLOPS/PE	10 GiB/PE	15 GiB/PE	0.5 TB/s/PE	20 GB/s/PE(1対1)	140	GB
GSM		1,000		3,840	5				0.75 TFLOPS/PE	32 GiB/PE	280 GB/PE	1 TB/s/PE	40 GB/s/PE (全体全)		
		1				20-30 秒/cycle								30 TB/時間	3 TB/時間
SCALL-LLTRI		1				imes86400 cycle	3000/31411							×720 時間	×720 時間
SCALE-LT		1				<72時間		2340 PFLOP		360	GiB				
		1	26 5			220 時間	7000 ENI		32.4 PFLOPS	45	тр		110 GB/step ×	6.4	DD
SCALL-SDIM		1	30/3			220 时间	7500/51411		(3 %)	40.	510		720万step(1対1隣接)	0.4	FD
kinaco	1	1				24 時間			500 PFLOPS	10() TB				
Kindeo	2	-				2 T PUIN			(10 %)	100	510				
NICAM/	1	1	327,680	1,310	,720	240 時間	5.8億Nh			120 GiE	3/ノード		1対1隣接	1.6 PB	33 PB
NICOCO	2	1	2,816	11,2	64	2250 日	1.7億Nh			470 Mie	3/ノード		1対1隣接	0.3 TB	19 PB
MRI-ESM		1						112 EFLOP							
GAIA															
								950万PFLOP							
	1	1						(ES4VE換算		10	PB				
MSSG								1.4億RSH)							
101330								1700万PFLOP							
		1						(ES4VE換算		4.3	PB				
								2.5億RSH)							
ISPACK3/SPML															
SCALE-DG		1					300万Nh	75 EFLOP		40	РВ				

上の続き。

	備考						ツール等		
アプリ名		Fortran	C/ C++	Python	Ruby	NetCDF	GrADS	並列可視化 (ParaView 等)	その他
asuca asuca-Var GSM	要求ファイルIO性能125 GB/s/PE。 アクセラレータを利用する場合は、メモリ32 GiB/PE、CPUとの通信が0.5 TB/s/PE アクセラレータを利用する場合は、メモリ10 GiB/PE、CPUとの通信が0.5 TB/s/PE アクセラレータを利用する場合は、メモリ32 GB/PE、CPUとの通信が4 TB/s/PE	≧2003		要	要				最新のopenMP、MPI、 openACC。postgresql、 web環境。高い可用性
SCALE-LETKF		要	要	要	要				シェルスクリプト
SCALE-LT		要		要				要	openACC
SCALE-SDM		要							
kinaco	非同期I/O、10PBクラスのストレージ	要		要				要	OpenMP、MPI
NICAM/ NICOCO	ノード故障率の低減、ファイルシステム間の転送エラーの低減、 高速アクセス可能な大規模ストレージ、大規模解析環境 十分なメモリバンド幅、strong-scale確保のしやすさ、 高速アクセス可能な大規模ストレージ、大規模解析環境	·≧2003	要	要		NetCDF4 +HDF5		要	openACC、Jupyter Labo
MRI-ESM		要	要	要		要	要		wgrib2、Linux標準ツール
GAIA		要				要			IDL
MSSG		- 要		要			要		MPI
ISPACK3/SPML		≧2003			要	要			
SCALE-DG		2003/ 2008		要				要	Matplotlib

4.5 地震・津波防災分野調査研究サブグループ

4.5.1 研究分野の概要

それぞれ1,000点前後の観測点がある地震波形観測のためのHi-netや地表面変形観測のためのGEONET などをはじめとして、日本列島には多くの観測網が設置されている。本分野では、これらをさらに有効活用するために 必要とされている数値解析手法の準備を、「京」・「富岳」プロジェクトを通じて進めてきている。観測データと大規模 シミュレーションの融合は、地震分野における様々なサイエンスへの貢献が期待されており、例えば、日本列島島弧 の挙動予測、地震活動度推定、活動帯の高解像地殻変動・地震動を介したメカニズム解明、津波評価に必要 な地殻変動推定、さらには、重要かつ困難な課題である地震発生予測をも視野に入れるインパクトのある成果が 期待される。これらの解析を行う上で、不確定性を考慮するため、地殻構造や初期応力の異なるアンサンブル計算 が必要となる。さらに、連続リアルタイムデータに対して適用し続けるために超大規模計算を高速に行うことが求めら れるため、次世代計算基盤への強い期待がある。

上記のような3次元複雑形状・非均質構造を求解対象とする地震分野においては、陰解法の低次非構造格 子有限要素法が主要な計算手法の一つとなる。低次構造格子有限要素法に基づく地殻変動解析(静弾性解 析・粘弾性解析)・地震動解析(動的な線形・非線形波動場解析)において基礎アルゴリズム・カーネルは共通で あり、反復法ベースのソルバ内での疎行列ベクトル積が主要カーネルとなる。このカーネルにおいてはランダムアクセ ス・データレカレンスが卓越し、メモリバンド幅ネックのカーネルとなる。また、疎行列ベクトル積における1対1通信と反 復法ソルバにおける1要素のAllreduceが主要な通信パターンとなる。本サブグループにおいては上記アプリケーショ ンの調査・検討を実施した。

4.5.2 現行システムにおける解析の現況

- 当該計算手法で現在行われている標準的な解析例
 - ▶ 地殻変動解析・地震動解析ともに富岳数百~数千ノード・GPU 数十~数百枚を使った解析規模となる。計算特性は後述の大規模解析、グランドチャレンジ解析例と同様である。
- 当該計算手法で現在行われている大規模解析、グランドチャレンジ解析例
 - ▶ 地殻変動解析:問題サイズは 0.54 兆自由度、20 年間の解析で、現状、富岳 73728 ノードにて 3 時間程度の解析規模となる。メモリは各計算ノードあたり 16GB 程度使用している。通信時間のほとんどは疎行列ベクトル積における 1 対 1 通信に要しており、全計算時間の 10%程度を占めている。I/O 量は数十 TB オーダーとなる。
 - ▶ 地震動解析:問題サイズは 0.32 兆自由度、48 秒間の解析で、現状富岳 55296 ノードにて 4.5 時間程度の解析規模となる。メモリは各計算ノードあたり 16GB 程度使用している。通信時間のほとん どは疎行列ベクトル積における 1 対 1 通信に要しており、全計算時間の 10%程度を占めている。I/O 量は数十 TB オーダーとなる。
- 4.5.3 2030年頃に期待される成果と必要な計算資源
 - ●期待される成果:全球スケールの大規模マクロ地殻変動シミュレータと特定地域に絞った高解像度ミクロ地殻変動・地震動のシミュレータを組み合わせたマルチスケールの3次元地殻変動・地震動シミュレータを開発し、日本列島における地震波形データと地殻変動データの双方に整合するマルチスケールモデルを構築することで、一定規模の地震が発生した後、周囲での地震発生の推移を予測できるか検証できるようになると期待される。
 - 必要な計算資源

- ▶ 全球スケールの大規模マクロ地殻変動解析:マントルの底までを対象とした重力下での粘弾性応答計算・粘弾性完全緩和のため長期間の応答計算における必要計算資源量は先述の富岳全系の Grand Challenge Capability 問題の 30 倍程度(演算数 30 倍、必要メモリ容量:富岳全系の約 15 倍)と見積もっている。
- ▶ 特定領域のミクロ地殻変動・地震動解析:南海トラフなど、1,000 km×1,000 km×500 km オー ダーの解析における1ケースあたりの必要計算資源量は富岳全系のGrand Challenge Capability 問題と同様だが、多数ケースを実施することとなる。
- 計算資源に関する要望:本サブグループにおいては、計算資源量の見積もりと共に、次世代計算基盤において上記の計算を実施するにあたり重要となると考えられる性能項目について検討した。その結果、計算加速器(accelerator)において演算性能だけでなくメモリ容量・メモリ帯域も確保される構成が望ましいことが分かった(演算性能あたりメモリ容量・帯域が富岳と同等から1/2 程度までに保たれることが理想的)。また、疎行列ベクトル積の計算においては足しこみ競合が発生するため、高速なhardware accelerated atomic add が実装されていることが性能上重要となることがわかった。また、1 対 1 通信においてはインターコネクトのバンド幅だけでなく計算加速器と CPU 間のバンド幅が律速になることが多いことから、計算加速器から CPU を介さずに通信するなど計算加速器からの通信性能が最大化される構成が望ましい。また、上記の計算を実施するにあたり、高速計算用の native なプログラミング環境・コンパイラに重点を置いた開発をすることが性能向上において重要であると考える(計算加速器/CPUの双方で実行可能なプログラミング環境(OpenACCや OpenMP)もあると良いが native なプログラミング環境で性能が出ることが重要)。

4.5.4 ベンチマークの整備計画と状況

これまで富岳をはじめとしたCPU用、及び、GPU用に開発されてきた並列非構造格子有限要素法を対象に、ベンチマーク用カーネル切り出しを進めた。具体的には複雑形状問題において使われる四面体二次要素の疎行列ベクトル積カーネルの切り出しを進めている。ベンチマーク問題を設定し、アーキテクチャ調査研究グループに提供した。

以下、疎行列ベクトル積カーネルの概要を説明する(図 4.5.1)。本研究においては、疎行列ベクトル積カーネル のうち、要素行列Aeを行列ベクトル積の度に生成し、左辺ベクトルに足しこむElement-by-Element (EBE)法 を対象とする。この方法は、メモリに直接全体行列を格納し疎行列ベクトル積の度にメモリから読み出し右辺ベクト ルとかけ合わせる方法(e.g., CRS形式)と比べ、要素行列を計算するために演算量は多くなるもののメモリ使用 量・メモリ読み出し量を削減することができ、演算性能に対してメモリ量・メモリ帯域が限られると予想される次世代 計算基盤において適した方法となる。この方法においては、要素毎の結果ベクトルApeを全体左辺ベクトルApに足 しこむ際に足しこみ競合が起きるため、この部分の扱いが性能向上に重要となる。これまでCPU用にはスレッド数に 応じた要素ループieのカラリング、GPU用ではApの足しこみ時にhardware accelerated atomic addを活用す ることで高性能を得ていた。本調査研究においてこれらCPU用・GPU用カーネルを提供し候補となる計算アーキテ キチュアにおける性能評価に用いる計画である。

```
Ap(:) = 0
do ie = 1, ne
   Ae(1:m,1:m) = element_wise_matrix(ie)
   do j1 = 1, m
        pe(j1) = p(local_to_global(j1,ie))
   enddo
   Ape(1:m) = matrix_vector_product(Ae,pe)
   do j1 = 1, m
        Ap(local_to_global(j1,ie)) += Ape(j1)
   enddo
enddo
```

local_to_global: mapping from element-wise index to global indexne: number of elementsAe: element-wise matrixm: number of DOF per elementAp: results of the matrix vector productp: a vector to be multiplied by A

図 4.5.1 非構造格子有限要素法における疎行列ベクトル積カーネル(EBE 法)の概要

4.6 ものづくり分野調査研究サブグループ

4.6.1 研究分野の概要

ものづくり分野においては、現象解明を目的とした第一原理的な高精度解析や、様々な拘束条件を考慮した 多目的最適化に対して、HPCの適用が進んでいる。特に近年では、多種・多様な市場ニーズを満たすために製品 開発期間の短縮が求められていることから、HPCを活用した設計プロセスの革新への期待が高まっている。本サブグ ループでは、ものづくり分野において用いられるアプリケーションを対象として最新の動向やニーズを調査し、その結果 を踏まえ、次世代計算基盤におけるターゲット問題やそのために必要な計算資源をまとめた。また、対象アプリケー ションを用いてベンチマーク問題を設定し、アーキテクチャ調査研究グループに提供した。

調査対象アプリケーションは、ものづくり分野における主要課題である乱流解析から選定した。この理由は、乱流 解析ではメモリサイズやメモリバンド幅、ノード間通信性能がアプリケーションの適用範囲を決めることが多く、データ移 動を重視する次世代計算基盤のアーキテクチャにより大幅な性能向上が期待できるためである。このことから、メモリ アクセス特性の異なる2つアプリケーション、具体的には、FrontFlow/blue (以下、FFB)およびFFVHC-ACEを調 査対象とした。

FFBは非圧縮性・圧縮性流体の非定常流動を高精度に予測可能なLarge Eddy Simulation (LES)に基 づいた汎用流体解析コードである。形状適合性に優れた有限要素法を採用し、ファン/ポンプ等の流体機械や複 雑形状周りの非定常乱流解析および流れから発生する騒音の予測が可能である。また、FFBはベクトル計算機お よびスカラー型超並列計算機上で高速動作するように最適化されており、自動化された最適領域分割・統合処理 を実装した領域分割法によって、大規模超並列計算に対応する。実際、「京」、「富岳」をはじめ多くの大規模並 列計算機での実績があり、International Conference for High Performance Computing, Networking, Storage, and Analysis (SC20) では、ゴードン・ベル賞の最終候補に選出されている。一方、 FFVHC-ACEは航空機前期複雑形状周りの高忠実な圧縮性流体LES解析を実現する流体解析コードであり、 3つのキー技術、(1)複雑形状に対して完全自動格子生成を可能とする階層型等間隔直交格子法、(2)高レイ ノルズ数流れのLES解析を可能とする壁面モデルLES、(3)高忠実な圧縮性流体LES解析を実現する数値計算 スキーム (KEEPスキーム)を持つことを特徴とする。FFBとFFVHC-ACEの大きな違いは、流体場情報を格納す るための内部データ構造である。FFBは非構造データを持つ。そのため、主要な演算部ではリストベクトルが多用さ れている。一方、FFVHC-ACEは構造データを持ち、ステンシル計算が主となる。

次年度以降は、アーキテクチャ調査研究グループの調査結果を踏まえ、次世代計算基盤のアーキテクチャに適し

- 4.6.2 現行システムにおける解析の現況
 - 1 FFB
 - ▶ 概要
 - ◆ 非圧縮性流体、圧縮性流体を計算対象とする汎用流体解析コード。乱流中の渦のダイナミクスを 直接計算することにより乱流現象を高精度に予測。
 - ▶ 計算手法
 - ◆ 空間離散化:有限要素法
 - ◇ 計算要素タイプ:六面体、四面体、三角柱、ピラミッド
 - ◆ 乱流解析:ダイナミックスマゴリンスキーモデルによる Large Eddy Simulation。
 - ◆ マトリックスソルバー:残差切除法を内部ソルバとする BCGSTAB法
 - ▶ 標準的な解析
 - ◆ 解析規模: 200 億グリッド、200,000 ステップ

 - ◆ 通信量: 24 EB (種類: 1対1)
 - ♦ I/O 量: 80 TB
 - ◆ 1 解析あたりの計算時間: 24 hour
 - ◇ ノード数: 10,000
 - ▶ 大規模解析、グランドチャレンジ解析
 - ◇ ループ試験の代替計算
 - ポンプ・圧縮機の実機等レイノルズ数 10⁷以上の流れに対し、最大 20 兆グリッド規模の準直接 計算を実施する。これによりループ試験の代替を実現することができ計測に匹敵する性能評価が 可能となる。
 - ◆ ターボ機械のデジタル試作
 - ・ 圧縮機、ポンプ、船舶用プロペラ等、レイノルズ数10⁶ 10⁷オーダーのターボ機械内部流れに 対し、数100億グリッド規模の計算格子を用いた準直接計算を実施し、一般性能・吸込み性 能・騒音等を目的関数とした多目的最適計算により、数百個体のターボ機械をデジタル試作す る。
 - 2 FFVHC-ACE
 - ▶ 概要
 - ◇ 階層型等間隔直交構造格子法を用いた圧縮性流体解析プログラム。流体現象の本質をとらえた 準第一原理的手法を用いて航空機実機フライト環境を忠実に再現し、かつ高速に解析することが 可能。
 - ▶ 計算手法
 - ♦ 階層型等間隔直交構造格子法
 - ♦ 高精度圧縮性解法
 - ◆ 壁面形状モデル
 - ◆ LES (Large Eddy Simulation)壁面モデル

- ▶ 標準的な解析
 - ◇ 解析規模: 650 億グリッド

 - ◆ データ量: 0.26 PB

 - ◆ 通信量: 36 EB (種類: 1対1)
 - ◆ I/O 量: 1 PB
 - ◆ 1 解析あたりの計算時間: 340 hour
 - ◇ ノード数: 15,360
- ▶ 大規模解析、グランドチャレンジ解析
 - - ・ 遷音速バフェット、騒音解析: 100-1000 億格子規模の壁面モデル LES 解析
 - ・ 飛行領域全体解析(含フラッター、運動解析): 1-10 兆格子規模の壁面モデル LES 解析
 - ◇ 飛行条件全体における性能や安全性に関する要求を統合的に評価する多目的・多設計変数の機体設計
 - ・ 100 億格子規模の壁面モデル LES、1000-10000 個体規模の統合的多目的・多設計変数 最適化
- 4.6.3 2030年頃に期待される成果と必要な計算資源
- ① FFB
 - ▶ 成果
 - ◆ 30 倍程度のウィークスケーリング
 - ▶ 必要な計算資源

 - ◆ 通信量: 720 EB
 - ♦ I/O 量: 2.4 PB
 - ◆ 1 解析あたりの計算時間: 24 hour
- ② FFVHC-ACE
 - ▶ 必要な計算資源

 - ◆ 通信量: 283 EB(1対1)
 - ♦ I/O 量: 23PB
 - ◆ 1 解析あたりの計算時間: 969 hour
- 4.6.4 ベンチマークの整備計画と状況

メモリアクセス特性の異なる2つの流体解析アプリケーションコード、FFBとFFVHC-ACEについてそれぞれベンチ

マーク問題を設定し、アーキテクチャ調査研究グループに提供した。

4.7 基礎科学分野調査研究サブグループ

4.7.1 研究分野の概要

基礎科学分野は素粒子のミクロな基本法則の検証に始まり、基本法則の(準)第一原理計算に基づく<u>素粒子・</u> 原子核のミクロと<u>惑星・宇宙</u>のマクロな物理現象をカバーし、物質と宇宙のなりたち、またそこに登場する様々なスケ ールの物理現象の理解を目指す。

素粒子原子核における大規模数値計算としては、格子量子色力学(LQCD)に基づく3つの典型的な計算と原子核殻模型に基づく原子核計算の合計4つを代表アプリとして選定した。

量子色力学(QCD)はミクロな世界の物理法則である素粒子標準模型中、クォーク、グルオンの動力学を司る。 力学を特徴付ける「カイラル対称性」が自発的に破れることにより原子核に質量が与えられ、ひいては目に見える宇 宙の99%の質量を説明することになる。この動力学は遠距離では強大な引力と複雑な量子効果が渾然一体とな り、遠距離相関から求められる核子質量や崩壊、散乱の定量的理解には大規模数値計算が唯一の武器となる。 この数値計算を実現する理論が連続時空を4次元格子グリッドに分割して定義した格子量子色力学(LQCD)で ある。LQCDのアプリとして、カイラル対称性が重要な問題にはカイラルフェルミオンの一つであるドメインウォールフェル ミオン(DWF)が用いられる。一方、格子上のカイラル対称性を犠牲にしても、体積、統計量、小さい格子間隔など を優先すべき問題には、DWFより低コストなWilsonフェルミオン(WF)が用いられる。DWFでは標準模型の検証と それを超える物理の探索、また、初期宇宙で起こったであろう高温でのQCD相のカイラル転移を扱う。WFでは、核 力やハイペロン力、また重クォークハドロン間相互作用など、様々なハドロン間力を決定する。これにより、QCDに直 接基づく原子核物理学の構築を行うと共に、中性子星の構造など、宇宙天文物理の謎を解明する。

QCDの動力学の産物である原子核の多体系を扱う殻模型計算とは、与えられた少数個の軌道からなる模型 空間の多体問題を正確に解く手法である。十分に多くの軌道をとることで第一原理的な核構造計算にも応用でき る。厳密対角化計算の限界を超えるため、少数の精選された多体基底によって原子核の波動関数を構成する、 モンテカルロ殻模型および準粒子真空殻模型が提唱されている。

天文学、宇宙物理学はギリシア時代から続く歴史ある学問である。古くはニュートンが微積分学を発達させた経 緯となるなど、基礎科学を進める原動力となっている。主要な研究対象は太陽などの星やその集合体である銀河 などである。他にも銀河ができる前のガス、星が重力崩壊後成長したブラックホールなども対象になる。研究手法とし ては物質の塊やガスの時間進化を追うメッシュ法の流体計算や N 体計算が主となる。一般にメッシュ法の計算で はメモリバンド幅が不足しがちであり、N 体計算では演算力が不足しがちになるが、研究対象によっては違うボトル ネックが現れる。宇宙分野では全てのスケールを第一原理的に解けないことが多く、一段階小さいスケールの物理を 導入するためサブグリッドモデルが用いられることが多い。そのようなサブグリッドモデルによって、計算上のボトルネックの 箇所が変わり得ることに注意されたい。

天文学、宇宙物理学のコミュニティでは研究対象によって独自にコード開発することも多く、典型的なアプリを選ぶ ことは難しい。このベンチマークでは富岳で高い性能を実現したアプリ2つ、音速抑制法を用いた太陽シミュレーショ ンと Vlasov 法を用いたニュートリノダークマターシミュレーションと、より複雑なメモリアクセスパターンをもつ二つのアプ リ、Athena++コードを用いた銀河シミュレーションと ASURA-FDPS コードを用いた銀河シミュレーションを紹介す る。前者はメッシュ法が使われており、後者はN体法の SPHを用いており、メモリアクセスパターンが異なる。

4.7.2 現行システムにおける解析の現況 素粒子原子核分野

143

• LQCD: DWF-HMC

DWFは4次元時空に仮想5次元を加えカイラル対称性がほぼ厳密な格子フェルミオン法で、統計アンサンブ ル生成に分子動力学を確率棄却と組み合わせたハイブリッドモンテカルロ法(HMC)を用いる。律速個所はまず は5次元フェルミオン大規模疎行列線形ソルバ(ステンシル計算)と、次いでゲージ場スメアリングの逆解法が上げ られる。現時点での大規模計算の典型的な計算量は、ゼロ温度の1パラメータあたり15,000EFLOP、有限温 度では 10-100 EFLOP × O(100)パラメータほどである。演算あたりのメモリデータ転送量は1.8Byte/Flop、 通信量は0.03Byte/Flop(隣接通信)。問題サイズはゼロ温度では最大 72³×144×12、有限温度では 48³×12×12となる。コードセットは Grid, Bridge++ (どちらもC++)を用いている。

• LQCD: Wilson-HMC

Wilsonフェルミオンを用いたハイブリッドモンテカルロ計算により様々な物理量計算で用いられる配位を生成す る。4次元フェルミオン大規模疎行列線形ソルバ(ステンシル計算)とそれに次いで、ゲージ場スメアリングの逆解 法が上げられる。演算量は60,000 EFLOP。演算あたりのメモリデータ転送量は0.84Byte/Flop、通信量は 0.011Byte/Flop(隣接通信)。問題サイズは96⁴。逐次的にジョブを実行する必要のある capability computing。コードはLDDHMC (QWS 機能取り込み)を用いる。

● LQCD:配位解析

現在行っている大規模計算においては、Wilson-HMCで生成した配位を用い、1ジョブあたり富岳の600ノ ード程度の並列計算を行っている。こちらは並列に多数のジョブを実行できる capacity computing であり、 律速箇所がHMCと異なり、HMCと同等以上の演算量が必要な典型的な例として、ハドロン相互作用を選定 した。より小さな規模の計算は、上記の数分の1から数十分の1の規模となる。コードはLDDHMC+ Hadron-Force code。

● 原子核殻模型: モンテカルロ殻模型計算コード「rmcsm」

現在富岳にて行われている大規模な解析として、核力に基づいた第一原理的な計算を想定する。模型空間を調和振動子基底 7 主殻とし、核子数 10-20 程度、モンテカルロ殻模型の基底数 200 とする。1 解析 あたりの演算量は 70EFLOP となる。メモリ量は 1 ノードあたり 20GB、B/F 値は最低でも 0.1 必要となる。 通信の種類は Reduction、通信量は 1 ノードあたり 100GB 程度。I/O 量は無視できるほどに小さい。

宇宙惑星分野

● Athena++ - 銀河シミュレーション

Athena++は国際共同研究で開発している公開コードで、宇宙物理学の様々な問題で利用されている。 ここでは銀河スケールの星形成シミュレーションを例にとり記述する。計算の目的は半径~30kpc、厚み数百 pc 程度の銀河円盤を 4pc 以下の高分解能で分解した磁気流体計算により、銀河全体の構造と分子雲ス ケールの星形成過程を整合的に理解する。以下のインプット物理が考慮されている。磁気流体力学、銀河重 力、加熱・冷却、超新星爆発、(自己重力)。流体のソルバは以下である。磁気流体部-HLLD+CT 法

(2次精度)、自己重力-Multigrid 法(2次精度)。適合格子法で効率的な計算を行うため、タスクリストによる動的スケジューリングをするのが Athena++の大きな特徴となっている。10⁹ yr 程度計算し、準定常的な構造が実現するまでシミュレーションを行う。

● ASURA- FDPS – 銀河シミュレーション

宇宙項があり、質量としては冷たい暗黒物質が支配的な宇宙において、宇宙初期からの暗黒物質およびバリオン(通常の物質)の重力流体力学的進化を解き、銀河形成過程を明らかにする。シミュレーションのコア部分は、遠距離力である重力と近距離力である流体相互作用からなる。重力計算はツリー法を用いた N 体計算を、流体力学計算には Smoothed ParticleHydrodynamics 法を用いる。重力計算には全ノード通信が、流体力学計算には近接ノードへの 1 対 1 通信が必要となる。現在の銀河形成シミュレーションのグランドチャレンジになる銀河の恒星一つ一つを分解できる質量分解能を用いると、暗黒物質およびバリオンの計算に一ステップあたりの演算数は 63 Peta flops となる。宇宙年齢のシミュレーションにはおよそ 10⁷ ステップ必要になるため、総演算数は 6.3 Yotta flops となる。かなりの計算時間が必要になるため、時間刻み幅の短い領域と長い領域をハミルトニアン分割テクニックを使って分割し、独立に計算することで時間刻み幅を長く取る方法を実装している。

● 音速抑制法-太陽恒星

太陽表面にしばしば現れる強磁場領域である黒点は、11 年の周期を持って変動するが、この周期維持の ための物理機構は未だ明らかになっておらず問題となっている。この周期は乱流と磁場、回転の相互作用の結 果として発現すると考えられている。しかし、観測を定量的に説明できるような首尾一貫したモデルは提示されて いない。未だ太陽内部の理解には大きく改善の余地がある。この周期に関係するフレア・コロナ質量放出と言っ た爆発現象は、地球を含んだ太陽系環境に直接影響する。11 年周期の解明は、これらの現象の根源的理 解、長期予測にも関連し、宇宙環境学の推進への貢献も大きい。この問題を音速抑制法を用いた3 次元高 解像度磁気流体計算を用いて解明する。

● Vlasov – ニュートリノダークマター

従来の宇宙大規模構造形成の数値シミュレーションでは、物質分布を座標空間・速度空間からなる 6 次 元の位相空間上で超粒子近似によって統計的にサンプリングする N 体シミュレーションが行われてきたが、計算 結果に数値的ノイズが内在するのが最大の欠点である。その結果、自己重力系における無衝突減衰や 2 流 体不安定性を精度良く取り扱うことができない。特に、宇宙空間に多量に存在すると考えられるニュートリノの宇 宙大規模構造形成での無衝突減衰は、N 体シミュレーションでは精度よく計算することが困難な物理課程であ る。宇宙大規模構造形成におけるニュートリノの力学的影響を調べるシミュレーションでは、ダークマターやバリオ ンの運動は従来の N 体シミュレーション、ニュートリノの運動を Vlasov シミュレーションで解くハイブリッドシミュレ ーションを行う。

4.7.3 2030年頃に期待される成果と必要な計算資源

素粒子原子核分野

• LQCD: DWF-HMC

ゼロ温度QCDでは、u, d, s, c, b (tを除く)全てのクォークの物理点直接計算が可能になる。必要な格子 間隔は a = 0.033 fm (a⁻¹ = 6.0 GeV; 180³ × 360 × 8) を含めた4点で、総演算量として **1.5 × 10⁷ EFLOP** (効率10%仮定→50EFLOPSの計算機の3%を3年占有相当)。当該格子間隔は bクォーク 直上がギリギリ可能になる位であり、理想的にはさらに細密な格子間隔が望まれるが、計算量が増大する。科 学成果として、Bメソン崩壊形状因子(黄金~希モ-ド)の実験精度に比肩する精密計算による標準模型の超 精密検証が可能になる。その他、カイラル対称性が重要な様々な物理量から新物理探索が高精度で行える。

有限温度QCDでは、カイラル相転移のカイラル対称性の完全制御計算に基づく理解が、格子間隔 a = 0.08 fm ($a^{-1} = 2.5$ GeV; $90^3 \times 18 \times 12$), ud $7\pi - 7$ 質量:物理より軽い(1/3程度)点も含む一連

の計算により可能となる。総演算量は **1.4 × 10⁷ EFLOP** と見積もられる。より質量が軽いカイラル極限に近 づける計算も結果によっては必要となり、問題解決に必要な計算量が増加する可能性がある。この過程で得ら れる、物理点、相転移近傍のQCD熱力学の解明により、アクシオン暗黒物質モデルの制限も可能になる。

• LQCD: Wilson-HMC

物理体積 (8 fm)⁴ 以上、ud クォーク質量が物理点での配位生成、各格子間隔で5000配位を行う。格 子間隔は二つ: a = 0.064 fm ($a^{-1} = 3.1$ GeV; 128^{4} 格子)、 0.043 fm ($a^{-1} = 4.6$ GeV; 192^{4} 格子)から連続極限を求める。総演算量は**1.9 × 10^{7} EFLOP** (効率15%仮定→50EFLOPSの計算機の 3%を3年占有相当)。この配位を用いて、以下に示すハドロン間相互作用の決定を行う。

● LQCD: 配位解析

二体ハドロン間相互作用のうち、S波・D波成分を精密に決定し、ストレンジ核物理実験結果や、連星中性 子合体での重元素合成を説明するための理論的基礎を築く。また二体ハドロン間相互作用のP波・F波成分 や三体ハドロン間相互作用の計算も目指す。Wilson-HMCで生成した配位を用いた解析に必要な演算量は、 3 × 10⁷ EFLOP程度。

● 原子核殻模型: モンテカルロ殻模型計算コード「rmcsm」

第一原理的な計算で、カルシウム周辺核までの軽い核を系統的に計算し、中性子過剰核の存在限界やクラスタ構造を、QCD に基づく核力により明らかにする。重い核では、核子間有効相互作用を用いて、ウラン領域や超重元素領域の存在範囲や性質を解明することを目指す。必要な計算資源の一例として、模型空間を調和振動子基底 8 主殻とし、核子数 10-20 程度、基底数 400 とした計算では、1 解析あたりの演算量は 3000EFLOP となる。

宇宙惑星分野

● Athena++ - 銀河シミュレーション

上記では 4pc の解像度で行なっていたが、1-2pc の解像度を目指す。空間をカバーするためにメッシュが増える他、時間刻みも 1/4 になり、同じ分の時間発展を計算するためには 4倍の計算資源が必要となる。

● ASURA- FDPS - 銀河シミュレーション

個別の恒星スケールを分解した銀河形成シミュレーションは、現状は天の川銀河の 1-2 桁質量の小さい銀河で行っているのが最新のシミュレーションである。2030 年ごろでは天の川銀河スケールのシミュレーションを複数モデル計算することで多様な銀河の形成進化史を論じられるようになるだろう。

● 音速抑制法-太陽恒星

対流層の底から太陽表面までを含んだおよそ 10 年分の計算を行う。11 年周期を追うことができる。太陽 内部での磁場生成から黒点形成までを一貫して追うことができる。

● 宇宙 4 - Vlasov - ニュートリノダークマター

ダークマターの散乱を考慮した宇宙大規模構造形成の数値シミュレーションを Boltzmann方程式の直接 数値シミュレーションを用いて銀河団・銀河群スケールのダークマターハローを分解できる数値シミュレーションを行 う。 4.7.4 ベンチマークの整備計画と状況

素粒子原子核分野

- LQCD:DWF-HMC 提出済み¹
- LQCD:Wilson-HMC 提出済み
- LQCD:配位解析 提出済み
- 原子核殻模型 提出済み

宇宙惑星分野:以下全て提出済み

- Athena++ (銀河シミュレーション)
- ASURA-FDPS
- 音速抑制法-太陽恒星
- Vlasov ニュートリノダークマター

神戸大学牧野チームのFSと共通のベンチマークは、現時点で、宇宙惑星分野の全て。また、素粒子原子核分野のLQCD:Wilson-HMCのカーネル部分については、パッケージは異なるものの同じコードをベースに構成している。

4.8 社会科学分野調査研究サブグループ

4.8.1 研究分野の概要

数理的に社会を理解し、取り扱うための方策として、直接社会を操作する代わりにシミュレーションを実装すること で、多様な事例・事象を発生させ、社会を再現し、ある事象の原因や結果を分析することができる。これら多数の 事象と予め設定したパラメータの間には、何らかのシンプルな法則性が成り立っている可能性がある。この分野では エージェント・ベース・モデリング(以降、ABM)がよく用いられる。このモデルの特徴は、人間や車ひとつひとつを個別に コンピュータ内で再現するもので、極めてパラメータ数が多くなる傾向がある。したがってABMの系が全体として生じる 法則性は数学的には自明であるかもしれないが、簡単に相図を書くこともできない複雑さを有する。加えて、各事 象があるパラメータセットに対してユニークなものとなりがちであるため、これらの中から統計則を導き出すには各パラメ ータに乱数で幅を持たせたうえできわめて多数回実行することが必要となる。これらの複雑性に対処し、有意な法則 性を抽出するためには、大きな計算能力が必要となる。

上記の社会シミュレーションの試みの中で、現在、検証込みでもっともうまくモデル化できているのが交通流の分野である。1本道の直線道路における渋滞は「基本図」等として挙げられる数理的なモデル化によりかなりよく理解されていて、ABMを用いて再現できることが確かめられ、校正もなされている。こうしてモデル化された多数の自動車・ 道を相互につなげたネットワークを構築することで、仮定した交通需要が正しければ、都市スケールのデジタルツイン が構築できる。一方、こうした都市スケールの道路ネットワークの中で何が起きるか、パラメータに対してどのように応答するかについてはあまり分かっておらず、予測に耐えうる精度を持つ基礎方程式が存在しない段階にある。

上記の状況において、無数にあるパラメータセットから生じた大量のシミュレーション結果をたとえば機械学習による次元削減等の手法で処理し、社会の事象をいろいろな「相」に分離することが考えられる。これにより、パラメータ セットを設定した際に、社会がどの相に位置しているのか、そして別の相へと転移するにはどのパラメータを変化させれ

¹ インテル向け高速版と OpenACC を用いた GPU 版は 2023 年度提出予定

ばよいのか推定できるようになることが望ましい。さらに、こうした法則性を見出すことの利点は、現実に起こりうること は十分考えられるものの、実は一度も生じていないという、現実の外側を含む空間をサーチできることである。たとえ ば、多数のシミュレーション結果から極端事象を抽出し、その発生条件を特定することで、災害時や、自発的に生じ る混乱の兆候を前もって察知することが可能となるため、そこに期待される社会的価値は大きい。

計算機資源の観点から述べると、本分野においては基礎方程式が明らかでないために、我々の実行したい計 算は「精度が保証されている複雑な連立(微分)方程式を多重並列させて解くための、HPCに特化した標準的なア プリケーションが与えられていて、その実行により高精度な予測が可能」という性質のものではなく、むしろ比較的単 純な系をきわめて多数個用意し、多様なパラメータセットから結果への写像を獲得し、法則性を見出す手法が高い 価値を持つ性質のものである。このため単純並列計算能力、および、各パラメータセット(シナリオ)を計算時間制限 内で取り扱えるだけの十分な計算能力があることが望ましい。

上記の性質はアプリケーション開発の姿勢にも影響を与えてきた。これまで、色々なオープンソース・アプリケーショ ンが開発され、これらを乗り継いで研究が進展してきた背景がある。例えば次章で紹介するSUMOやCrowdWalk 等の交通シミュレータ(いずれもABM)はオープンソースソフトウェアであり、広く使われていて無料で公開されているた め追試も容易であり、バグ出し等・Fix等のリソースもコミュニティの活動に期待することができる。これらの整備状況・ 開発能力は我々の社会における重要な資産であり、研究の要である。これらは一般的なPC、ワークステーション、ク ラスタ等で数個程度のシナリオについて計算させることが想定されていて、HPCに特化しているわけではないため、こ れらをHPCにおいて利用しようとする際には困難が生ずる。使用する側の立場から見ると、公式で提供されている標 準的なインストール方法を忠実になぞる作業によりインストールできることが望ましいが、京・富岳等へのインストール はそうした例に該当しない。パッケージに同梱されたmakefile・シェルスクリプトなどを、エラー出力を頼りに丹念に書 き換えコンパイルする作業コストが発生し、動作させるまでに数ヶ月程度を費やす必要が生じるか、あるいは使用を 断念する等の問題が生じてきた。

一方で、富岳にはSingularity仮想技術が投入されており、これによってオープンソース・アプリケーションの移植 が飛躍的に容易となった。市販のノートPCの上で、標準的なインストール手順により構築したDockerイメージをアッ プロードし、Singularityイメージに変換することで、実行したい計算が実行できる環境が1週間程度で整備できる ことが明らかとなった。一方で、次章で述べる通り、これらの実行は一般的なPCで実行したものに対して、数倍程度 の計算時間を要する傾向にあるため、CPUの計算能力の向上、あるいはこれらの仮想化のさらなる最適化が望ま しい。

今後10年程度、あるいはそれ以上にわたり「社会の基礎方程式」は不明であり続ける一方、研究は進展するた め、部分的に法則が発見される可能性がある。その場合、新たなモデル・アルゴリズムを導入した新たなアプリケーシ ョンが開発され、そちらへの乗り換えが必要となる可能性も考えられる。それらのオープンソース・コミュニティによって開 発されたパッケージを少ないリソースで導入できれば、社会シミュレーション・デジタルツインの研究開発において計算 資源の利用価値が飛躍的に高まると考えられる。

4.8.2 現行システムにおける解析の現況

人流シミュレータと自動車交通シミュレータをとりあげる。手元のPCで標準的な解析、大規模なものとしては単純 並列でパラメータを変えながら極めて多数のシナリオを投入する点は同様である。

4.8.2.1 SUMO(自動車交通シミュレータ)

オープンソースABMシミュレータである。自動車交通の研究業界でよく使われている。OSM、GISデータをイン ポートする機能が実装済みであり、任意の都市・地図における自動車交通を再現できる。

標準的な解析は、区ないし市程度の広がりをもつ領域を、数シナリオについて再現する規模である。例として、 神戸市中心部のみを再現したシミュレーションを、現実に近い平常時の交通(約1万台)を投入し、シミュレーショ ン内時間を6時間、学習に基づく渋滞回避を繰り返し回数を6回に設定して実行すると、2007年当時において一般的だったPC・クラスタにおいて約4時間を要した。出力データは約2GB/コアである。京では約8時間を要した。記憶容量の問題から、1ノードにつき2ないし4並列でシナリオを投入していた。また、最大で約1200個の試行(パラメータセットを乱数で振ったもの、計算が軽いものも含まれる)を単純並列で投入し、12時間以内に全て完了した実績がある。

これと同一のシミュレーションを、富岳と同一のCPUをもつFX700上でSingularityイメージにインストールして 実行すると、約14時間を要した。富岳が京に比べて若干長い実行時間を要するのは、仮想化によるオーバーへ ッドのほか、ABMであるためエージェントの行動を決定するif文が大量に含まれ、複雑な処理を要する箇所が、 Arm CPUアーキテクチャに対して最適化されていないことに起因する可能性がある。それぞれについて約5倍程 度、計算時間が延長すると仮定すれば、富岳は実質的に京の5~10倍程度の能力で計算できていると推定 される。

2022年度にはより広いシミュレーション内の領域を実装すべく、神戸市中心部から近畿全域に拡大した新た なシミュレーションを構築した。道路は緊急輸送道路(主要国道など)のみに限定し、近畿地方の自動車登録 台数の10%(約10万台)を12時間にわたって走行する設定で、現行のPC・クラスタを用いてこのシミュレーション を実行すると約22時間を要した。出力データは約1.4 GB/コアである。

大規模な解析は、上記のシナリオ数を標準解析における数個程度から、数千~数万程度に単純並列で増加させるものである。近未来において近畿全域を含むシミュレーションを100万シナリオ実行し、統計分析・機械学習によって処理し、相図を抽出する計画である。

4.8.2.2 CrowdWalk(人流シミュレータ)

オープンソースABMシミュレータである。OSM、GISデータをインポートする機能が実装済みであり、任意の都市・地図における人流を再現できる。

標準的な解析として、ポートアイランドを除く神戸市中央区をほぼ全域再現し、平常時・イベント開催時・災 害発生時について、数シナリオ程度を再現するものである。実行時間はおおむねエージェント数に比例する特徴 がある。2300人が避難し、完了するまで打ち切らないシナリオを設定すると、手元のArm アーキテクチャのPC (apple M1 max Macbook Pro)においては30・15分程度(それぞれGUI・CLIモード)を要し、富岳上で約 50分(CLIモードのみ実行可能)を要した。富岳における実行は手元のPC(GUIモード)の約2倍の時間を要す ると考えられる。さらに、上記を拡張した解析として、地図は変更せず、9万人が帰宅困難者となって運行を停 止した電車が来るのを待ち、駅周辺で大混雑が発生するシナリオでは、GUIモードで約20時間を要した。富岳 で実行していないが、先ほど述べたように倍の時間を要すると考えると、約40時間と予想できる。

大規模な解析は、上記のシナリオ数を標準解析における数個程度から、数千~数万程度に単純並列で増加させるものである。近未来において、現行の1.5倍程度のエージェントを追加したシミュレーションを数万シナリオ実行し、統計分析・機械学習によって処理する計画である。ただし、上記計算時間ではsmallのWall Timeの制限から通常実行が難しくなるため、可能であれば地図を複数の場所に分割し、それぞれについてシミュレーションを実行する計画である。その場合、1つのシナリオを複数のノード(またはコア・スレッド)に分割して実行することになるため、確保が必要となる資源数はさらにファクター倍になると予想される。

4.8.3 2030年頃に期待される成果と必要な計算資源

自動車交通について、主要国道等のみを抽出して粗視化すれば、市区にとどまらず地方レベルまでは計算可能 であるが、通常実行の限界に近いことを上記で示した。2030年頃には、CPU能力の向上により、粗視化しない全 ての道路を含んだ地方レベルのシミュレーション、もしくは全国を対象とする粗視化されたABMモデルが構築・計算 可能となるのではないかと考えられる。上記の例で見た近畿地方は5県を含み、全国の軒数と比較すると10倍程度の計算規模が必要で、粗視化しない道路の数もその程度に収まる(収める)と考えられるからである。また、広くなったシミュレーション領域に応じてパラメータも増えると考えられるため、並列数も10~100倍程度に増やす必要があると考えられる。6時間あれば東京・大阪間を車で移動することが可能だが、そのような広域のシミュレーションに市街地まで含まれていた例はこれまでに存在しない。これが可能となれば、災害によって発生した広域の避難や物資輸送などにおいて、きちんと繋がった(省略によって途切れていない)ネットワークを前提に、どこにどのような渋滞が生じるか、その渋滞の原因は何であるか(ネットワークのどこに設計の良くない点があるか)等が推定可能となる。

人流シミュレーションについても、神戸市中央区のみを再現するという計算量を下げる方向に作用する制限が 存在するにも関わらず、現時点の9万人でもかなり通常実行計算時間の限界に近いが、倍以上の(現実的な見 積りに基づく)23万人を投入したい、という希望が行政から寄せられている。2030年頃にはこれらの制限が撤廃で き、県レベルでの人の移動をシームレスに再現できる可能性が高い。これは、交通インフラの計画・需要予測や、災 害が生じた際の大規模な人の避難計画等に資すると考えられる。

4.8.4 ベンチマークの整備計画と状況

上記、SUMOについてはArmアーキテクチャで動作するコンテナイメージ・実行に必要な設定ファイルを提出済み である。X86アーキテクチャで動作するコンテナイメージは準備中である。CrowdWalkについてはArmアーキテクチ ャで動作するコンテナイメージの作成が完了し、シミュレーション設定などを加えたパッケージを提供した。また、X86ア ーキテクチャで動作するコンテナイメージも提供した。

4.9 デジタルツイン・Society 5.0 分野調査研究サブグループ

4.9.1 研究分野の概要

近年、センサから取得したデータを用いシミュレーションや機械学習などによってサイバー空間に現実世界を再現 するデジタルツインや、そのサイバー空間とフィジカル空間を高度に融合したシステムを形成して実現する Society 5.0 の実現に向けた取り組みが始まってきている。デジタルツイン・Society 5.0は、気象・気候、マテリアル、ものづ くり、創薬、都市計画、社会基盤などの様々な分野で活用されることが期待される。この分野では、アプリケーション を実行し、現状分析や将来変化の予測を行う。将来的には、これらのアプリケーションを高度化し、大規模に実行 することが予想される。

本分野調査研究サブグループでは、デジタルツインがどのように構築され、どのように活用されているか、Society 5.0を実現するシステムがどのように構築されているか、を調査し、それに必要な計算資源や高度な融合を実現する ために必要な周辺技術の調査・分析を行う。特に、デジタルツイン・Society 5.0では、データ取得、シミュレーション、分析、機械学習、データ処理、可視化など、計算や通信特性が異なる複数のアプリケーションを組み合わせて 実現されることが多く、そのワークフローの分析が重要となる。

4.9.2 現行システムにおける解析の現況

本調査研究で調査したアプリケーションについて説明する。

(a) NICAM-AI

全球非静力学大気モデルNICAMの計算プロセスの一部(現在は雲物理計算を対象)をAIによる計算で 代替する。計算は(1)対象プロセス(雲物理計算)の入力変数から出力変数を再現するようにAIに学習さ せる学習フェーズと、(2)学習結果を用いて入力変数からAIによって計算された出力変数を返す計算フェーズ に分けられる。なお、現在の調査は学習フェーズに限定したうえで更に予備実験段階の結果を対象としている。 図 4.9.1左半分の学習フェーズ では高解像度NICAMの雲物理計 算の入力変数と出力変数が図中央 緑色で表されるAIに送られる。この 際、カプラの機能によって高解像度 格子のデータは低解像度格子に変 換(補間)される。変換されたデー タはAIに渡され入力変数から出力 変数を再現するように学習が行われ る。計算フェーズ(図 4.9.1の右半



図 4.9.1 NICAM-AI の学習フェーズと計算フェーズ

分)では低解像度NICAMの雲物理計算の入力変数をAIに送り、AIが再現した出力変数がNICAMに返される。

現在は予備実験段階であり、次の条件および資源量で計算されている。NICAM側は、水平格子数 163840、鉛直層数78の計算領域に対して東京大学情報基盤センターのWisteria-Odyssey 40ノードを 用い160プロセスで実行される。プログラム内の通信は袖領域の1対1通信である。一方で、AI側はPyTorch で実装されており、水平格子数10240、鉛直層数40の計算領域となっている。東京大学情報基盤センターの Wisteria-Aquarius 1ノードを用いて20プロセスで実行される。なおPyTorchによる学習計算は1プロセスで 行っている。そのためデータ集合通信を行っている。

現状の学習フェーズの計算では、6時間積分の計算に対して、NICAM側で時間ステップ120秒で実行し、 AI側は時間ステップ3600秒で実行している。1時間積分ごとに通信し、合計7回のNICAM側とAI側で通信を 行い、通信に約20秒、エポック数を100として学習に約45秒程度かかっている。NICAMによる計算は通信の 時間内で終わる。

(b) NHM-LETKFおよび asuca-LETKF

気象モデルによる予報とそこへの観測データの統合を繰り返す、気象予報の標準的なワークフローである。 NHM、asucaはそれぞれ気象庁の旧版、新版の領域気象モデルであり、LETKFはアンサンブルカルマンフィルタ ーの一種である。

富岳による計算では、1000アンサンブルメンバで1サイクル3時間積分を行うと、計算量は2500ノード時間 程度で、気象モデルとLETKFで1対5程度の割合で資源を使う。典型的には900ノードを利用する。データは、 ほとんどが273×221×40 自由度のモデル出力で、合計200GB程度利用する。気象モデル(NHM、asuca) とLETKFの間の通信はI/Oを用いて行う。LETKFは、モデル出力である200GBとデータ同化のために用いられ る観測データを受け取る。通信には、1分から最大10分程度の時間を要する。



図 4.9.2 NHM-LETKF および asuca-LETKF の計算フロー

(c) WRF-UQ

気象モデルWRFの物理パラメタリゼーション選択や、モデルパラメータを観測データに基づいて最適化する。 UQは Uncertainty Quantificationの略であり、パラメータの事後確率分布をベイズ推定するところが特徴で ある。計算コスト削減のため、パラメータと評価関数の関係を機械学習で近似し、また感度解析によりパラメータ の次元削減を行っている。

富岳を用い、一度に生成する学習データを4000アンサンブルメンバとし、72時間先の降水量分布を評価関数として35パラメータを求める問題では、計算量は感度解析およびMCMC部分を除いて4000ノード時間程度必要とする。感度解析およびMCMCは、現時点では数ノード時間程度必要とするが、まだ試行錯誤している段階であり、今後、増減する可能性がある。特にデータ量が大きくなれば必要とする計算資源は増加する。データは、ほとんどが273×221×40 自由度のモデル出力で、合計8000GB程度出力する。通信は、学習データのための受け渡しが主であり、これは出力データのごく一部のみである。



図 4.9.3 WRF-UQ の計算フロー

(d) CityLBM

メソスケール気象データを同化した局所風況シミュレーションである。シミュレーションを格子ボルツマン法 (LBM) で実行し、これにデータ同化を併用する。2m解像度の計算の場合、典型的な利用ノード数とGPU 数は、Wisteria-Aquarius (NVIDIA A100搭載)を用いると、アンサンブルメンバあたり1ノード(8 GPU)、8アンサンブルメンバで合計 8 ノード(64 GPU)を用いる。JAEA SGI8600(NVIDIA V100搭 載)を用いると、アンサンブルメンバあたり4ノード(16 GPU)、16 アンサンブルメンバで合計64ノード(256 GPU)を用いる。

HPE SGI8600搭載のV100利用において、1解析あたりの計算時間は24時間で、1日の風況シミュレーションが可能である。1プロセスで利用している計算資源は次の通りである。LBMでは演算数が多いCumulantカーネルとメモリバンド幅を要求するstreamingから構成されているため、V100の演算性能 15.7 TFlops(単精度)、メモリバンド幅 0.9 TB/s により、高速な計算が初めて実現している。データ同化は、アンサンブル数の大きさの密行列(~642)の固有値を格子点数だけ計算する必要があり、演算性能 125 TFlops(テンソル演算)を利用した高速な行列演算積が用いられている。全体の計算コストの割合は、LBM対LETKF で3対1である。また、AlltoAll通信が用いられ、InfiniBand EDRではプロセスあたり通信時間のデータ同化処理に占める割合は10~50%(8~64アンサンブル)である。計算、通信、I/Oのコデザインに取り組んでおり、メモリを使い切ることで通信領域の割合を減らしている。ノード内4GPU(8GPU)の計算・通信のバランスでも問題ない。また、I/Oに関連したデータはCPUメモリに退避し、計算とI/Oをオーバーラップを実現し、出力データは1プロセスあたり16GBで30分程度要する。

1プロセッサあたりの計算性能の実績(単位: MLUPS=Mega lattice update per second)は、498 (NVIDIA V100)、732(NVIDIA A100)、432(AMD MI100)、10(Fujitsu A64FX、4CMG) である。富岳型プロセッサでは大きな性能劣化があり、コンパイラの不備およびレジスタ不足によるものと考えてい 4.9.3 2030年頃に期待される成果と必要な計算資源

見積もりが可能であった(a)、(c)、(d)について2030年頃に期待される成果と必要な計算資源について説明する。

(a) NICAM-AI

現状におけるシミュレーションと機械学習の連携は、ある物理コンポーネントの低空間解像度での再現性向 上を目指し、データ駆動型のパラメタリゼーションモデルを構築することを目的としている。2030年前後にはこれを 発展させ、複数の物理コンポーネントをデータ駆動型モデルで代替すると共に、教師データとするシミュレーション を数km~数百mスケールまで高解像度化し、数十km~数百kmスケールの計算のためのモデルを学習させる。 このモデルを用いることにより、現行の100倍~1000倍高速な長期間(100年~1000年)気候計算を実現 する。所要計算量としては、次の通り見積もっている。シミュレーション側は、全球870m 190層 1300億格子 点 4万プロセス、AI側は、全球14km 190層 6億格子点 3千プロセス、シミュレーション側からAI側への転送 格子数は、1つの3次元変数あたり3百万格子点である。

さらに、機械学習との新たな連携として、シミュレーション結果からの極端現象検出や予兆検出などを、オンラ インで随時学習する。シミュレーション結果や学習結果を準リアルタイムで可視化するなど、大規模シミュレーショ ン結果のキュレーションを迅速に実施し、利用者に提供する。上記の所要計算量の場合、シミュレーションから 可視化への転送格子数は1つの2次元変数あたり1万6千格子点、プロセスあたり可視化する格子数は1つの 2次元変数あたり1千格子点を想定している。シミュレーション内30分の計算に対し、転送から可視化をシミュ レーション所要時間(1分、富岳実績の30倍高速)と同程度で実施することが期待される。

(c) WRF-UQ

2030年頃を目指して、一度に様々な気象事例(台風,、線状降水帯,、ゲリラ豪雨)でのパフォーマンスを 計測して、バランスの取れたモデル、または特定の現象の予測に優れた特化型モデルなどをベイズ推定により選 択できるようにする。一度に生成する学習データが10000アンサンブルメンバで、100事例の予測性能について 評価関数として35パラメータを求める問題を想定する。現行の富岳の利用を想定すると、必要とする計算量は 1,000,000 ノード時間程度である。これに加えて、ML100万点のデータの解析によるモデル置き換えや最適 化など、感度解析およびMCMCの計算量が必要となる。データは、273×221×40 自由度のモデル出力であ れば、合計2,000,000GB程度出力する。データ転送は、上記のなかの一部をWRF-ML間で転送する。全 出力データの1000~10000分の1程度を想定する。

(d) CityLBM

2030年頃の想定としては、東京都心部の10km四方、25cm解像度のリアルタイム風況デジタルツインの 構築を考えている。特に、IoT機器のデータをリアルタイムに同化やCityGMLのLOD4といった詳細なデータに対 応した建物内外と地上地下のシームレスな解析体系の構築を目指している。

成果創出に必要な資源量としては、ノード内に8GPUが搭載されており、GPU毎の性能がWisteria-Aquariusの1ノード(A100 × 8台)を想定している。システム全体が15,625ノード(125,000 GPU)で 10 EFlops以上(FP64)の性能を提供すると期待すると、25cm解像度で1アンサンブルメンバあたり488ノ ード使用して、32 アンサンブルを同時に計算できる。ノード理論性能(FP64)は640 TFlops、ノードメモリ帯 域:96 TB/s、ノードメモリ量:2.56 TB(0.32 TB/GPU)程度を想定している。特に、ノード内の性能が 重要であり、ノード性能が低い場合では、プロセスあたりに割り振る格子点数が少なくなり、計算性能の劣化が 引き起こされるため、低解像度のシミュレーションしか実現できず、期待する成果は達成できないと思われる。

4.9.4 ベンチマークの整備計画と状況

ベンチマークとしては、(a)および(b)を簡易的にした2次元マイクロベンチマークコードの2種類を整備した。

 (a) では、大気モデルNICAMとPyTorchを用いた機械学習プログラムを連成実行する。1)Wisteria-Odyssey内でMPIを用いて連成する場合、2)Wisteria-Odyssey内で異機種間通信ライブラリh3-Open-SYS/WaitIO(以下WaitIO)を用いて連成する場合、3)Wisteria-OdysseyとWisteria-Aquarius間で WaitIOを用いて連成する場合、の3通り実行可能となっている。これによって、同一機種および異機種間での連成 実行時の計算性能と通信性能についてベンチマークすることが可能である。

(b) については、データ同化の性能を測る目的でCityLBMを簡略化した2次元のマイクロベンチマークコードを整備した(https://github.com/hasegawa-yuta-jaea/LBM2D-LETKF)。2次元格子ボルツマン法(LBM) と局所アンサンブル変換カルマンフィルター(LETKF)を用いた乱流のアンサンブルデータ同化を行う。データ同化に 関連する計算、それに伴う通信、データ受け渡しに用いるストレージ性能に関して、それぞれの単体性能とそららの 性能のバランスを調査するベンチマークとなっている。

4.10 科学技術計算・機械学習アルゴリズム調査研究サブグループ

4.10.1調査研究の成果

科学技術計算アルゴリズムの調査研究として、純アプリグループ(生命科学分野、新物質・エネルギー分野、気象・気候分野、地震・津波防災分野、ものづくりアプリ分野、基礎科学分野、社会科学分野、デジタルツイン・ Socieity5.0分野)から提出され、ベンチマーク構築サブグループにおいて整備が進んでいるベンチマークプログラム を確認し、新しいアルゴリズムへの対応の可否について科学技術計算アルゴリズムの調査および検討を行った。

機械学習分野は急速に発展しており、ニューラルネットアーキテクチャやその中で用いられるアルゴリズムも日々変化している。特に最近はCNNやRNNからtransformerにアーキテクチャの流れが遷移しており、これからも数年単位で変化していく可能性がある。このような状況の中で、MLPerfは幅広い機械学習分野のアプリケーションから主要なものを継続的に抽出しており、ベンチマークとして広く用いられている。計画当初は、ベンチマークの選定に相当な時間をかける予定であったが、MLPerfの中から代表的なものを抽出する方向に方針を転換した。

MLPerfのベンチマークは「学習」と「推論」に分かれており、「学習」はdefaultとHPCの2種類があり、「推論」は Datacenter, Edge, Mobile, Tinyの4つに分かれている。今回は「学習」の中のdefaultから3種類

1. タスク:画像分類、データセット: ImageNet、モデル: ResNet-50 v1.5

2. タスク: セグメンテーション、データセット: KiTS19、モデル: 3D U-Net

3. タスク: 自然言語処理、データセット: Wikipedia、モデル: BERT-large

HPCから1 種類

4. タスク:量子モデリング、データセット: Open Catalyst 2020、モデル: DimeNet++ のベンチマークを抽出した。これらのベンチマークを抽出することでCNN、U-Net、transformerなどの代表的なニュ ーラルネットアーキテクチャをカバーできている。また、分野的にも画像処理、自然言語処理、科学技術計算をカバ ーできている。特に、defaultから抽出して3種類のベンチマークは多くの計算機アーキテクチャでの計測実績があり、 比較検討を行う際に参照できる既存データが豊富にある。

計画当初はベンチマークの選定とプログラムの準備のみを行う予定であったが、MLPerfから早々にベンチマークを 抽出できたため、今後の参考値となるようなA64fxとA100 GPUの比較実験を行った。ベンチマークとしては3の自 然言語処理のタスクを用いた。図 4.10.2にA64FXとA100の理論性能の比較、図 4.10.1に実効性能の比較 を示す。ただし、ここではA100のTensor Coreを用いない場合の比較を示している。理論演算性能の差に対して、

図 4.10.2 A64FX とA100の理論性能比較

図 4.10.1 A64FX と A100 の実効性能比較

実効演算性能の差の方が大きくなっており、A64fx上でのtransformerの性能に改善の余地があることが分かる。 GPTなどを含むtransformerはこれからの大規模深層学習の根幹となるニューラルネットアーキテクチャであり、経 済安全保障上の重点課題である。その性能を引き出すために必要な要件の定義は次世代計算機を設計する上 で最重要課題の一つであるといえる。

4.11 ベンチマーク構築サブグループ

4.11.1調査研究の成果

ベンチマーク構築サブグループは、アーキテクチャグループおよびシステムソフトグループの調査研究に用いるベンチマ ークの整備を担当する。これらベンチマークは、2030年頃に求められる/期待される計算資源に基づき、アプリケーシ ョングループの各サブグループより提出される。

今年度には、ベンチマーク公開用のGitHubリポジトリ <u>https://github.com/RIKEN-</u>

<u>RCCS/FS_Benchmarks</u>を準備した。ただし、現時点では、プライベートリポジトリとして設定しており、本調査研究の参加者に限定してアクセス権を付与している。

2023年3月現在、各サブグループより提出された以下の7つのベンチマークを上記のリポジトリで公開済みである。

名称	分野	サブグループ
SCALE-LT-kernel	気象気候科学ライブラリ	気象·気候
	SCALE の雷モジュール (カ	
	ーネル)	
ISPACK	流体解析カーネル	
CUBE	圧縮性流体解析	ものづくり
QWS	格子 QCD	基礎科学
qNET_kernel	密度行列繰り込み群法	
GENESIS	分子動力学	生命科学
Gromacs	分子動力学	

表 4.11.1

これらのベンチマークは、アーキテクチャグループに提供済みであり、既にアーキテクチャの調査研究に利用されている。 特に、先行して公開したSCALE-LT-kernel、CUBE、QWS、qNET_kernel、GENESISの5つについては、アーキ テクチャグループからの問い合わせに対応するとともに、参照のために富岳で採取した性能情報をリポジトリに追加した。 また、2023年3月現在、各サブグループより以下の8つのベンチマークを受領済みである。本サブグループにおいて動作の検証を行った後、順次に上記のリポジトリへ追加していく予定である。

名称	分野	サブグループ
SCALE-LT-miniapp	気象気候科学ライブラリ	気象·気候
	SCALE の雷モジュール (ミ	
	ニアプリ)	
SCALE-SDM	積乱雲の 2D 計算	
SCALE-DG	不連続ガラーキン法に基	
	づく力学コア	
SCALE-LETKF	SCALE+データ同化	
NICAM-AI	気候コードNICAMとAI	デジタルツイン・Society
	の連携	5.0
ChemTSv2	創薬向けの分子生成手	生命科学
	法	
VFVS-docking	超大量ドッキング手法	
INGOR	遺伝子ネットワーク推定	

表 4.11.2

4.12 性能モデリング調査研究サブグループ

4.12.1調査研究の成果

すべてのモデリングとシミュレーション手法がすべてのアプリケーション分野に簡単に適用できるわけではないので、本 調査研究の目標はアプリケーション分野に適したモデリングアプローチを決定することにある。したがって、性能モデリン グの研究開発は、実現可能でありながら正確なスーパーコンピュータ設計の予測を行うために、対象となるアプリケー ション分野、ベンチマーク、および提案されているアーキテクチャと整合させる必要がある。その目的は、確立された指 標と技術予測に基づき、候補となる設計の「what-if」分析を迅速に行う方法、およびアプリケーションが将来的に 高速化を得るために提案されたハードウェア機能を利用できるかどうかのベースラインアプローチを確立することである。

1) LARge Cache Processorの事前調査(MCAベースのシミュレーションによるgem5に関する知見)

残念ながら、ムーアの法則は終焉を迎えつつあり、量子コンピューティング、ニューロモルフィックコンピューティング、 リコンフィグラブルコンピューティングなど、多様なアーキテクチャが存在するポストムーア時代に突入している。これら のプロトタイプの多くは、有望ではあるが、まだ未成熟であったり、ニッチなユースケースに特化していたり、開発サイ クルが長かったりする。しかし、成熟度が高まりつつある重要なソリューションがある。それは、我々が慣れ親しんで きた古典的なフォン・ノイマンCPUでさえ、今後数十年のうちに性能向上を促進できる3次元集積回路(IC) スタッキングである。3次元集積回路とは、集積回路を垂直方向に構築する一般的な技術のことで、複数のディ スクリートダイを積層し、粗いシリコン貫通ピア(TSV)を使って接続したり、ウェハ上で3次元集積回路をモノリ シックに成長させたりするなどの方法がある。

最近の3次元集積回路の進歩により、オンチップメモリ(キャッシュ)の容量が従来のシステムの何倍にもなった(例: AMD V-Cacheなど)。直観的には、3D積層によるキャッシュの増大は、主要な科学アプリケーション

の性能ボトルネックを緩和するのに役立つと思われる。(i) 無限に大きなL1Dキャッシュを持つ仮想のプロセッサ上 で動作するHPCアプリケーションをシミュレートすることができる、新しい探索フレームワークを設計する。このフレー ムワークは、サイクル精度の高いシミュレータよりも桁違いに高速であり、キャッシュベースの改良の上限を推定す るために使用することができる。(ii) A64FXの設計をベースに、1.5nm製造を前提として8個のSRAMダイを積 層したLLC(Last Level Caches)を持つ仮想的なLARge Cacheプロセッサ(LARC)をモデル化したも のである。また、(iii) HPCプロキシアプリケーションとCPUマイクロベンチマークの多数のシミュレーションで研究を補 完し、最後に(iv) ベースラインA64FX CMGの1/4の面積しかないLARCのコアメモリグループ(CMG)上でシ ミュレーションアプリケーションの半分以上(52個のうち31個)が2倍以上の速度向上を達成していることが判 明した。より大きなキャッシュ容量に反応するアプリケーションの場合、理想的なスケーリングを想定し、フルチップレ ベルで比較すると、平均9.56倍(幾何平均)の改善につながる。

マシンコードアナライザー(MCA)ベースのアプローチ(図 4.12.1参照)は、逐次プログラムと並列プログラ ムの両方で動作する。Intel SDE(Armの場合はDynamoRIO)は、pthreads、OpenMP、TBBなどのス レッド並列プログラムの命令実行と呼び出し元/呼び出し先の依存関係を記録できる。さらに、個々のMPIラン クにSDEをアタッチして、そのデータを取得することができる。したがって、MPI+X並列化されたHPCアプリケーショ ンの実行時間を簡単に見積もることができるだけでなく、サイクルレベルのシミュレーションと比較して桁違いの速 度を実現することができる。

図 4.12.1

多数の重要なベンチマークとHPCプロキシアプリケーションを、我々の新しいMCAアプローチで詳細に分析した結果、図4.12.2に示すように、すべてのデータが「楽観的」なload-to-useレイテンシでL1Dに収まる場合、多くのアプリケーションで恩恵(最大20倍のスピードアップ)を受けることが分かった。このことから、ユーザーコードを計算バウンド型とメモリバウンド型に分類することができ、後者は将来のシステム設計の候補の一つであるメモリリッチなアーキテクチャから大きな恩恵を受けることができる。さらに、MCAツールは、MCAターゲットアーキテクチャを交換し、クロック周波数を変更するだけで、同じバイナリ/ワークロードの異なる(ISA互換)システムでのランタイムを推定することができる。ルーフライン解析をさらに詳しく見てみると、ルーフラインモデル上のこれらのアプリケーションの一と、L1Dキャッシュを使い切ることのみで期待される性能向上との間に強い相関関係がないことが明らかになった。我々は、データ依存性やアプリケーションの並列性の欠如など、MCAアプローチによって他の隠れたボトルネックが露呈し、期待される高速化を制限していると推測している。

図 4.12.2

MCAに基づく最初の仮設を検証するために、32個のA64FXに似たコアからなる仮想の1.5nmテクノロジ上 にLARC CMGを構築し、L1命令キャッシュとデータキャッシュをそれぞれ64KiBに抑え、CMGあたりの性能を約 2.5Tflop/s(IEEE-754倍精度)とすることに成功した。L2キャッシュは384MiBで、CMGの上部に8層の SRAMを介して縦に3Dスタックされている(また、外部HBMメモリの帯域幅は、A64FXの現在の値である 256GB/sに抑えており、大容量3Dキャッシュによる性能向上と、HBM帯域幅の拡大による性能向上とを分け て定量化できるようにしている)。要約すると、現在のA64FXと同様のダイサイズを持つ、仮想の16 CMG LARC CPUは、512個のコア、6 GBのスタックL2キャッシュ、ピークL2バンド幅24.6 TB/s、ピークHBMバンド 幅4.1 TB/s、合計36Tflop/sの倍精度計算を含むことになる。LARCプロセッサ(16CMG)は、547Wの 熱設計電力(TDP)で設計する必要がある。しかし、図 4.12.3のgem5シミュレーションによると、LARCでは、 ベースラインのA64FX CMGと比較して、半分以上のアプリケーション(52個のうち31個)が2倍以上の速度 向上を達成していることも示されている。これらのアプリケーションの3分の2以上(31個中24個)において、性 能向上はより大きな(3Dスタック)キャッシュに直接起因しており、すなわち、2つのLARC構成のいずれかが A64FXバリエーション(コア数は同じ)に対して少なくとも10%の向上を示している。A64FXとLARCのCMGが 理想的にスケーリングされ、フルチップレベルで比較されると仮定すると、2028年のLARCシステムは、より大きな キャッシュ容量に反応するアプリケーションで、(G=)9.56倍の平均的な改善をもたらすことができる。

図 4.12.3

2) 極端な不均一性および均質性システム設計におけるアプリケーション性能の評価

浮動小数点演算アクセラレータ、ベクトル・コプロセッサ、汎用グラフィックス・プロセッシング・ユニット(GPU)な ど、さまざまなタイプのアクセラレータがHPCシステムに導入された。最近では、マトリックスアクセラレータ、フィールド プログラマブルゲートアレイ、量子コンピュータなどの実験が行われている。これらのデバイスは、PCIeなどのI/Oバ スで接続されたコプロセッサやシステムオンチップ(SoC)として統合されたものだけでなく、中央処理装置

(CPU)の内部や近くにある特殊機能ユニットとして、優れたものが生き残るという進化の傾向を示している。 ユーザの立場からすると、研究業務を遂行し、科学や社会を発展させるための最適なツールは、ノートパソコン やスマートフォンなどの日常的なデバイスに近い、均一で複雑性のないシステムであるべきである。近年のGPUア クセラレーションによるアプローチから得られる教訓は、次の2点である。同じワークロードに対してCPUとGPUをバ ランスよく使用することを実現することは、特に実行中に異なるノード間でワークロードバランスが変化する場合、 オーケストレーションが非常に困難である。単一の「完璧な」アクセラレータ(m=1)、つまり、コードp1の並列化 可能な部分をすべてカバーすることで、加速度係数X1を変化させても、図 4.12.4に示すように大幅な高速化 を実現できる。しかし、スケーラビリティに問題がある場合(グスタフソンの法則)、または不完全なアクセラレータ を使用した場合(アムダールの法則)、高速性は大幅に低下する。また、複数のアクセラレータ(m>1)間の 不均衡や、アクセラレータ間および計算ノード間のデータ転送は、この悪影響をさらに悪化させる。

Amdahl's Law meets Gustafson's Law

図 4.12.4

そのため、ワークロード全体をメインメモリとGPUメモリの間で移動させることなく、最終的にアムダールの法則 による速度低下を回避するために、ノードあたりのGPU数を増やし、GPU上のメモリを増やすという傾向がある。 科学的なプログラムもCPUかGPUのどちらかを使う傾向があるが、グスタフソンの法則により両方を同時に使うこと はない。CPUとGPUのバランスが悪いと、問題のプログラムが多くの計算ノードにスケールしない可能性が高くなる。 2つ目の教訓は、プロセッサやアクセラレータの成功は、ハードウェアの性能だけでなく、主にソフトウェア・エコシステ ムに依存するということである。

極端な不均一性は、スマートフォンのSoCのような組み込み分野で成功を収めている。しかし、スマートフォンは規模の経済に従い、巨大な生態系を持つ。さらに、アムダールの法則に従うだけである。グスタフソンの法則を無視すると、極めてヘテロなシステムが成功した「汎用」スーパーコンピュータとして機能するという不完全な結論に至るのが一般的である。このように、アクセラレーションは一時的には有益で高性能ではあるが、ハイエンドスーパーコンピューティングの将来にとっては、手段であって、それ自体が目的ではない。アクセラレーションの状況に関わらず、成功する大規模システムはすべて、HPCシステム全体で均一な計算ノードの構成と、ノードとアクセラレータ間の最大帯域幅を維持するロバストなインターコネクトの原則に従う必要がある。

3) SimEngとSST gem5の代替となるもの

サイクルレベルシミュレータgem5では、開発期間が非常に長く、現実的なワークロードに対して不当に長いシ ミュレーションを行った経験から、代替案を検討する必要があると感じている。我々のMCAベースのアプローチは、 非常に高速な一次近似を得るために必要なツールの一つに過ぎない。このツールはgem5よりもシミュレーション 精度が若干劣るが、CPUのファンクションユニットよりもメモリに重点を置いており、シミュレーションをさらに高速化 するために並列化することができる。さらに、gem5よりも精度が高く、大幅な高速化が期待できるイギリスの大 学発の新型シミュレータSimEngを積極的に検討中である。SimEngの開発者とは、フィジビリティスタディに必 要な機能を追加する方法について議論しており、現在、Arm SME(行列ユニット)や異なるベクトル長など、 新しいタイプのCPUユニットの探索を共同で行っている。

SimEngの完成はまだ先であるが、イギリスとのコラボレーションによって、今後の性能モデリングの取り組みに 役立つツールがまた一つ増えることを願っている。

5. まとめと今後の課題

2022年度には、次世代計算基盤に係る調査研究(システム調査研究)理研チームの調査研究活動としてアーキテ クチャ調査研究グループ、システムソフトウェア・ライブラリ調査研究グループ、アプリケーション調査研究グループのそれぞれで、 様々な項目での技術動向や利用動向調査の他、将来アーキテクチャの検討、重要システム・ソフトウェアの評価に向けた 富岳へのポーティングの準備、ベンチマークセットの作成などを重点的に実施した。各調査グループの主要な成果は以下で ある。

- アーキテクチャ調査研究:半導体やパッケージング技術動向を踏まえたシステム全体やその構成要素の技術的 可能性や性能を調査しまとめた
- システムソフトウェア・ライブラリ調査研究:国内で開発すべきソフトウェアの明確化に向け既存ソフトウェアやその 利用動向を調査しまとめた
- アプリケーション調査研究:現状アプリの解析と将来の計算機資源要求を調査し、また様々なアプリ分野のベン チマークを作成した
- 2022 年度は以下を重点的な課題として、引き続き本調査研究を進めていく予定である。
- ワークロード解析・ベンチマーク評価に基づく次世代計算基盤向けのアーキテクチャ候補の絞り込み
- システム・ソフトウェアに関する必要要件整理と類似ソフトウェアの比較調査
- グループ間連携による主要アプリの分析と重要ワークロードの抽出、ベンチマーク更新

以上

様式第21

学会等発表実績

委託業務題目「次世代計算基盤に係る調査研究(システム調査研究)」 機関名 国立研究開発法人 理化学研究所

1. 学会等における口頭・ポスター発表

発表した成果(発表題目、	発表者氏名	発表した場所	発表した時期	国内・
口頭・ポスター発表の別)		(学会等名)		外の別
"次世代先端的計算基盤	佐野 健太郎	第 16 回 High	2022/9/16	国内
への期待と課題" 口頭発表		Performance		
		Computing Physics		
		(HPC-Phys) 勉強会		
世代情報基盤に関するコミ	近藤 正章	SS 研 HPC フォーラム	2022/9/26	国内
ュニティ活動と調査研究事		2022		
業について				
次世代の高性能計算機シ	近藤 正章	第 14 回材料系ワークショ	2022/10/26	国内
ステムの可能性と開発に向		ップ		
けた課題				
不連続ガラーキン法を用いた	河合佑太, 富田	日本気象学会 2022 年	2022/10/26	国内
大気モデルの開発: 湿潤過	浩文	度秋季大会		
程の導入、口頭発表				
Toward Next-	Masaaki	The 23rd	2022/12/9	国内
Generation	Kondo	International		
Supercomputer		Conference on		
Systems: Vision and		Parallel and		
Activities in Japanese		Distributed		
HPC Community		Computing,		
		Applications and		
		Technologies		
		(PDCAT'22)		
"Next Fugaku"に向けた	片桐 孝洋, 今村	第 14 回 自動チューニン	2022/12/23	国内
自動チューニング技術[パネ	俊幸, 岩下 武	グ技術の現状と応用に関		
ルディスカッション]	史, 佐藤 幸紀,	するシンポジウム		
	辻 美和子, 中	(ATTA2022)		
	島 研吾			

A study on Numerical	Kawai, Y.,	AMS 103rd Annual	2023/1/9	国外
Accuracy of Dynamical	Tomita, H	Meeting		
Core Necessary for				
Large-Eddy Simulation				
of Planetary Boundary				
Layer Turbulence、口頭				
発表				
「次世代計算基盤に係る調	佐藤 賢斗	科学技術計算分科会	2023/1/20	国内
查研究」		2022 年度会合		
理化学研究所チーム システ		「富岳」NEXT への挑戦		
ムソフトGの取組 [招待講		~現在から未来へ~		
演]				
「次世代計算基盤に係る調	岩下武史, 高橋	サイエンティフィック・システ	2023/1/20	国内
査研究」理化学研究所チ	大介	ム研究会 科学技術計		
ーム アプリGの取組、口頭		算分科会 2022 年度会		
発表		合		
"Feasibility Study at	Kentaro Sano	the 5th R-CCS	2023/2/6	国内
the Architecture		International		
Research Group"口頭		Symposium		
発表				
Feasibility Study	Kento Sato	The 5th R-CCS	2023/2/6	国内
at the System		International		
Software and Library		Symposium		
Research Group				
[Invited Talk]				
Feasibility Study at the	Takashi	The 5th R-CCS	2023/2/6	国内
Application Research	Shimokawabe	International		
Group、口頭発表		Symposium		
Bridge++ 2.0:	Tatsumi	The 5th R-CCS	2023/2/6	国内
Benchmark Result on	Aoyama,	International		
Supercomputer	Issaku	Symposium		
Fugaku、ポスター	Kanamori,			
	Kazuyuki			
	Kanaya,			
	Hideo			
	Matsufuru,			
	Yusuke			
	Namekawa			
	and			

De novo molecular design based on the collaboration of simulation and machine learning、口頭発表	Kei Terayama	The 5th R-CCS International Symposium	2023/2/7	国内
Bridge++ 2.0:	Tatsumi	R-CCS workshop on	2023/02/15	国内
Benchmark Result on	Aoyama,	Challenges and		
Supercomputer	Issaku	opportunities in		
Fugaku、ポスター	Kanamori,	Lattice QCD		
	Kazuyuki	simulations and		
	Kanaya,	related fields		
	Hideo			
	Matsufuru,			
	Yusuke			
	Namekawa			
	and			
	Keigo Nitadori			
Global cloud-resolving	C. Kodama,	SIAM Conference on	2023/3/3	国外
simulations with	H. Yashiro, T.	Computational		
NICAM on the	Suematsu, D.	Science and		
supercomputer	Takasuka, Y.	Engineering (CSE23)		
Fugaku、口頭発表	Takano, Y.			
	Yamada, R.			
	Masunaga, S.			
	Matsugishi, T.			
	Arakawa, T.			
	Seiki, M.			
	Nakano, H.			
	Miura, M.			
	Satoh, T.			
	Ohno, A.			
	Noda, W. Roh,			
	T. Nasuno,			
	and T.			
	Miyakawa			
Introduction of	Kento Sato	R-CCS Cafe	2023/3/4	国内
Research Activities at				
High Performance Big				
Data Research Team				
2023 [Oral				
Presentation]				

次世代計算基盤に係る調	近藤 正章	「HPCI システムの今後の	2023/3/6	国内
査研究での検討状況		在り方」に関する意見交		
		換会		
「富岳」利活用へ向けた量	山地洋平	第2回成果創出加速プ	2023/3/7	国内
子物質のための数値手法高		ログラム研究交流会「富		
度化、口頭発表		岳百景」		
Development of a	Takashi	HPC challenges for	2023/3/7	国外
Heterogeneous	Arakawa,	new extreme scale		
Coupling Library h3-	Shinji Sumimoto	applications		
Open-UTIL/MP、口頭発	Hisashi Yashiro.			
表	Kengo Nakajima			
Feasibility Study	Kento Sato	CEA-RIKEN	2023/3/16	国内
at the System		Workshop		
Software and Library				
Research Group [Oral				
Presentation]				
次世代計算基盤に向けたイ	三木 淳司 , 稲	第 188 回 HPC 研究発	2023/3/17	国内
ンターコネクトの調査および	垣 貴範 , 安島	表会		
初期検討 口頭発表	雄一郎,水谷			
	康志			
次世代計算基盤に向けた	稲垣 貴範 , 三	第 188 回 HPC 研究発	2023/3/17	国内
高速なデータ共有を実現す	木 淳司 , 安島	表会		
る記憶階層の調査と初期検	雄一郎,水谷			
討 口頭発表	康志			
ベイズ最適化を用いた有効	吉見一慶,田村	日本物理学会 2023 年	2023/3/22	国内
模型推定ツール(BEEMs)	亮, 山地洋平,	春季大会		
の開発、ポスター	三澤貴宏			
Numerical Linear	Toshiyuki	15th JLESC	2023/3/23	国外
Algebra Libraries	Imamura	workshop		
towards the Fugaku				
NEXT project [oral				
presentation] in BOS:				
Next-generation				
Numerical Linear				
Algebra Libraries				

BITFLEX - An HPC	Ryan Barton,	ISC HIGH	2023/5/25	国外
User-Driven Automatic	Mohamed	PERFORMANCE 2023		
Toolchain for Precision	Wahib, Jens			
Manipulation and	Domke, Ivan			
Approximate	Radanov			
Computing [Poster]	Ivanov, Lingqi			
	Zhang,			
	Satoshi			
	Matsuoka			

2. 学会誌・雑誌等における論文掲載

掲載した論文(発表題目)	発表者氏名	発表した場所	発表した時期	国内・
		(学会誌・雑誌等名)		外の別
Automatic Generation	Jintao Meng,	IEEE Transactions	2022/11	国外
of High-Performance	Chen Zhuang,	on Parallel and		
Convolution Kernels	Peng Chen,	Distributed Systems		
on ARM CPUs for	Mohamed			
Deep Learning	Wahib,Bertil			
	Schmidt,Haidong			
	Lan, Dou Wu,			
	Minwen Deng,			
	Yanjie Wei, and			
	Shengzhong			
	Feng			
A System-Wide	Shinji Sumimoto,	The 23rd	2022/12	国外
Communication to	Takashi Arakawa,	International		
Couple Multiple MPI	Yoshio Sakaguchi,	Conference on		
Programs for	Hiroya Matsuba, Hisashi Yashiro	Parallel and		
Heterogeneous	Toshihiro Hanawa,	Distributed		
Computing	Kengo Nakajima	Computing,		
		Applications and		
		Technologies		
		(PDCAT'22)		
Numerical Accuracy	Yuta Kawai,	Monthly Weather	2023/3	国外
Necessary for Large-	Hirofumi Tomita	Review		
Eddy Simulation of				
Planetary Boundary				
Layer Turbulence				
using Discontinuous				
Galerkin Method				
次世代計算基盤に向けた	三木 淳司 , 稲垣	情報処理学会研究報告	2023/3	国内
インターコネクトの調査およ	貴範,安島 雄一	ハイパフォーマンスコンピュ		
び初期検討	郎,水谷康志	ーティング HPC		
次世代計算基盤に向けた	稲垣 貴範 , 三木	情報処理学会研究報告	2023/3	国内
高速なデータ共有を実現す	淳司,安島 雄一	ハイパフォーマンスコンピュ		
る記憶階層の調査と初期	郎,水谷 康志	ーティング HPC		
検討				

Myths and legends in	Satoshi	The International	2023/4	国外
high-performance	Matsuoka, Jens	Journal of High		
computing	Domke,	Performance		
	Mohamed	Computing		
	Wahib,	Applications,		
	Aleksandr			
	Drozd, Torsten			
	Hoefler			

(注)発表者氏名は、連名による発表の場合には、筆頭者を先頭にして全員を記載すること。

以 上