

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。2024年度は、アーキテクチャ調査研究グループによって想定するアーキテクチャとシステム構成が絞り込まれたので、これに基づいて、アプリケーションの各サブグループにおいて、2030年頃に期待される成果に関して再度検討し、それを実現するために解決すべき課題について整理した。また、各サブグループにおいて、ベンチマークプログラムの整備を実施した。

4.1.1 ワークショップ

各サブグループにおけるワークフロー、GPU化の取り組みについてチーム全体で共有するため、表 4.1.1、表 4.1.2に示すワークショップを開催した。

表 4.1.1.1 ワークフローワークショップのプログラム

日付	時間	講演者	講演タイトル
5月7日(火)	10:00-10:25	金森逸作(理化学研究所 計算科学研究センター)	格子 QCD シミュレーションにおけるワークフローについて
	10:25-10:50	徳久淳師(理化学研究所 計算科学研究センター)	タンパク質の多様な立体構造をみるための WF 開発
	10:50-11:15	千葉峻太郎(理化学研究所 計算科学研究センター)	創薬 DX プラットフォーム
5月10日(金)	11:00-11:25	小玉知央(海洋研究開発 機構)	気象気候シミュレーション研究におけるワークフローの例～NICAMを題材として～
	11:25-11:50	荒川隆(東京大学)	大気モデル NICAM と AI のカップリング
	11:50-12:15	小野寺直幸(日本原子力 研究開発機構)	GPU スパコン向けの風況デジタルツインの開発
	12:15-12:40	長谷川昌樹(気象庁)	天気予報を支えるワークフロー ～大規模気象計算実験と、日々の予報計算の実行システム～

表 4.1.1.2 GPU 化ワークショップのプログラム

日付	時間	講演者	講演タイトル
7月17日(水)	15:05-15:35	金森逸作(理化学研究所 計算科学研究センター)	格子 QCD コードでの OpenACC を用いた GPU 化
	15:35-16:05	藤田航平(東京大学)	地震動・地殻変動の非構造格子有限要素シミュレーションの GPU 化
	16:05-16:35	小野寺直幸(日本原子力 研究開発機構)	GPU スパコン向けの格子に基づく数値流体力学アプリケーションの開発
	16:35-17:05	西澤誠也(理化学研究所 計算科学研究センター)	大気モデル SCALE の GPU 対応
	17:05-17:35	氏家将志(気象庁)	気象庁現業数値予報モデルの GPU 対応について

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、複雑かつ精緻な生命現象を解き明かすことで、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大きく貢献する。本分野の最大の特徴は、図 4.2.1.1 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時空間スケールの多層かつ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時空間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や心臓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。これらの技法は、新規医薬品の開発や個別化医療の基盤となるだけでなく、健康予測や社会全体のwell-beingの向上に向け大きな期待が寄せられている。

近年では、AI技術の飛躍的進歩が生命科学分野にも革命をもたらしつつある。2024年のノーベル化学賞は、長年の未解決問題であったタンパク質の構造予測を可能にしたAlphaFoldの開発者と、90年代から構造予測に取り組みつ近年ではAIにより設計された新規機能タンパク質・生体分子を次々と発表しているDavid Baker教授に与えられた。この背景にはもちろん2024年のノーベル物理学賞の対象となった深層学習、また近年発展を遂げている大規模言語モデル・拡散モデル等のAI手法の発展があり、またこれらの技術発展はGPUに支えられてきた。今後このようなAI手法が生命科学分野を変革することは疑いようがないものの、現時点でのAIの予測は万能ではない。例えば構造予測でも結晶構造データに基づく静的な構造の精度は高いが、機能を考える上で重要な運動性の予測はいまだに発展途上である。ここにシミュレーション技術とAIの連携による広大な研究・開発領域が広がっており、今後大規模計算機を用いた革新的な研究が多数生まれると期待される。他方で、生命科学の実験データ集積、マルチオミクスデータの統合、電子カルテや医療データの統合なども進んでいる。今後の生命科学分野では、これらのマルチドメインのデータ統合、AI技術の革新とシミュレーション技術の高度な連携が必須になる。

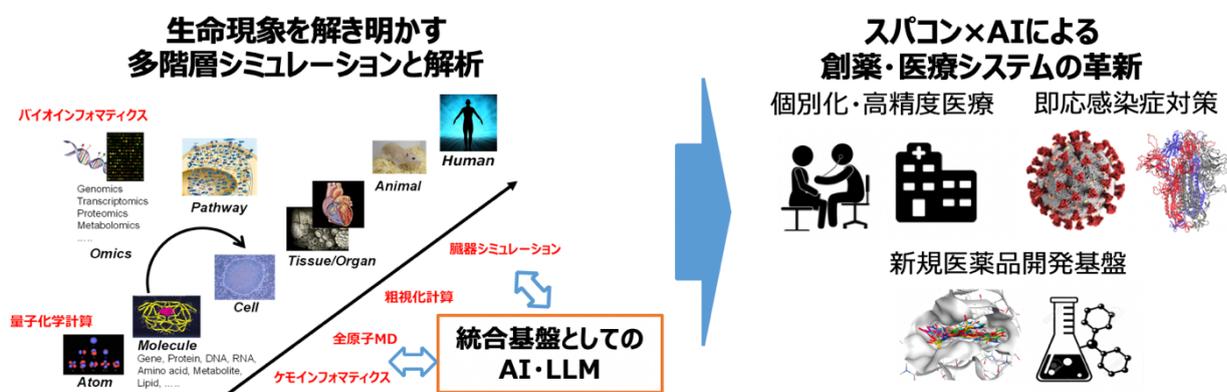


図 4.2.1.1 生命科学分野の概要 (理解・解析のための計算から、計算が先導する科学・医療へ)

4.2.2 現行システムにおける解析の現況

本分野では、オミクスデータ解析・分子シミュレーション・臓器シミュレーション・神経回路シミュレーションなどの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 4.2.2.1 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る課題を中心に、代表的な計算例に関して3種類示す。

- **代表的なコアアプリ**
 - 全原子分子動力学(MD)シミュレーション
 - GENESIS, Gromacs, AMBER, CHARMM, NAMD
 - ドッキングシミュレーション
 - Autodock Vina, Dock, ZDOCK
 - 量子化学シミュレーション
 - GAMESS, Gaussian, FMO, QM-MM
 - 疎視化分子動力学法
 - CafeMol, MARTINI
 - 細胞スケールシミュレーション
 - pSpatocyte
 - ゲノム解析・遺伝子ネットワーク解析
 - INGOR, Genomon
 - 臓器・脳・全身
 - UT-Heart, 全脳循環代謝シミュレータ
- **コアアプリを用いた複合的手法の例**
 - シミュレーション結果解析手法・AI連携
 - MSM, TS-MD, ChemTS
 - 実験連携
 - MD-SAXS, テンプレートマッチング(Cryo-EM連携, XFEL連携)
- **AI・最適化・統合フロー環境構築に必要な要素**
 - Python (Miniconda環境, pytorch, TensorFlow等ライブラリ), Julia, GPU連携



図 4.2.2.1 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

生体内化学反応を担うタンパク質の構造柔軟性や分子標的薬との結合親和性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。例えば現行アプリ GENESIS2.0.0betaを用いて、標準的な疾患関連タンパク質であるEGFR(約10万原子)のMDシミュレーション(1 μ 秒)を富岳24ノードを用いて実施した場合、8132NHの計算資源を要する。更に、タンパク質の構造柔軟性を明らかにするためには、複数のMDシミュレーションデータ(e.g. 1 μ 秒 \times 100本)を統合するためのMarkov State Model (MSM)解析が必要であるが、例えばEGFRに対して1 μ 秒 \times 128本のMDシミュレーションデータを富岳768ノードを用いて取得する場合、880,440NHを要し、1.5TBのデータが生成される。また、タンパク質と医薬品の結合シミュレーションを実施して、医薬品の結合ポーズや結合親和性を精密に推定する場合には、0.2 μ 秒 \times 100本のMDシミュレーションデータを必要とするが、これには25,200NH(GROMACS, 600ノード使用)を要し、1TBのデータが生成される。我々はこれまでに、複数の疾患関連タンパク質を対象に、図 4.2.2.1に記載したアプリケーションを富岳上で動作させることによって、タンパク質本来の機能メカニズムに加えてアミノ酸変異に起因する機能異常や薬剤耐性の分子メカニズムを明らかにしてきた。これらは基礎生命科学並びに医療・創薬分野の研究を大きく前進させる成果であり、数多くのハイインパクトジャーナルの掲載に至っている。そのうち主要なものを下記に示す。

アプリケーションの種類, 概要 (雑誌情報)

- MD, 新型コロナウイルスの形成に必須の膜(M)タンパク質の機能を解明 (Z. Zhang. et al., *Nature Communications*, 2022, 13, 4399)
- MD, 微小管による物質輸送制御のメカニズム解明 (*Science Advances.*, 2021, 7, 42)
- ドッキングシミュレーション, インシリコスクリーニングにより抗がん剤候補を発見 (*Bioorganic & Medicinal Chemistry*, 2021, 15, 116500)
- MD \times 量子化学計算, 抗がん剤に対する耐性獲得の分子メカニズムの解明 (*Nature Communications*, 12, 1-12 (2021), *npj Precision Oncology*, 5(32), 1-11 (2021)など)
- MD, 遺伝子変異に起因する癌化発症のメカニズム解明 (*Nature*, 582, 95-99 (2020), *Cellular Oncology*, 45(1), 121-134 (2022), *Cancer Research*, 82(20), 3751-3762 (2022)など)
- MD, タンパク質-医薬品の結合・解離反応を高速化する MD 手法を開発 (*Nature Communications*, 12(1), 2793 (2021))

- MD×AI, Cryo-EM データからの生体分子の構造柔軟性を予測する AI の開発 (*Nature Machine Intelligence*, 3, 153-160, (2021))
- 細胞スケール MD, 細胞質分子混雑環境における蛋白質の基質認識機構を解明 (*Nature Communications* 12, 4099 (2021))
- MD, 抗体ミメティクスによる医薬品の開発支援 (*Cancer Science*, 113, 12, 4350-4362 (2022))
- 量子化学計算, 新型コロナウイルスタンパク質の細胞認識に関わるホットスポット残基を特定 (*Chem. Sci.*, 12, 4722 (2021))
- MD, 膜タンパク質 GPCR における G タンパク質選択性の獲得メカニズムを解明 (*Nature Chemical Biology*, 1, 71-79 (2024))
- MD, タンパク質と医薬品の MD ドッキングを自動化し、低感受性薬剤における結合の微視的描像を解明 (*Journal of the American Chemical Society*, 146, 42, 28685-28605 (2024))
- MD, 将来の肺がん耐性変異とその耐性克服薬剤を提案に成功 (*Communications Biology*, 7, 412, 1-10, (2024))

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。現状、入出力のファイルはそれぞれ13MB、11MBと比較的小さい。我々はこれまでに、複数の疾患を対象にオミクスデータを用いた遺伝子ネットワーク解析を実施することで、各種疾患に対して創薬標的遺伝子を抽出し、疾患発症重要に関わる遺伝子変異の特定に成功してきた。また、AI駆動型プレシジョンメディスンの実現に向けて、遺伝子ネットワーク全体から患者個人に特徴的なサブネットワークの抽出する技術開発も行ってきた。これらの成果のうち、論文発表に至っている業績を下記に示す。

概要（雑誌情報）

- 特発性肺線維症の病態解明と治療標的遺伝子の特定に貢献 (*Scientific Reports*, 14:1315, (2024))
- 細胞内分子ネットワークを加味した AI 手法を開発し、がん発生に関わるドライバ変異を予測 (*BMC bioinformatics*, 24, 383, (2023))
- 遺伝子発現データの機能エンリッチメント解析結果に基づいて、遺伝子制御ネットワークを推測・視覚化するツールを開発 (*Bioinformatics*, 38(10):2959-2960, 2022)
- 遺伝子ネットワークからがん形質の個人差を決めるサブネットワークを特定 (*Scientific Reports*, 11:23653, 2021)
- SARS-CoV-2 感染に対する宿主遺伝子ネットワークの動的変化から炎症誘導に関わるサブネットワークを特定 (*Scientific Reports*, 11(1):11241, 2021)
- 遺伝子ネットワークから個人の遺伝子型に特徴的なサブネットワークを抽出する AI 手法を開発 (*Biomolecules*, 10(2):306, 2020)

4.2.2.3 心臓シミュレーション

心臓シミュレータUT-Heartは、基礎医学から、心毒性評価/創薬、臨床医学、個別化医療（デジタルツイン）まで目的に応じた幾つかのバージョンがあり、それぞれに「京」の時代から現在の「富岳」に至る計算技術の蓄積

が織り込まれている。特に心筋収縮の最小単位であるサルコメアを構成するアクチンフィラメントとミオシンフィラメント間の架橋運動に関しては、異なる3種類の力学（興奮収縮連関）モデルが用いられている。既に実績のある、個々のミオシン分子の運動を統計力学に則ったモンテカルロ法で表現する力学モデルを用いたUT-Heartは、小児複雑性心疾患の最適外科手術において、前向き介入型の特定臨床研究により有効性が証明され、2024年には治験届がPMDAに受理されるに至っている。一方、基礎医学では、計算科学としての挑戦を含む「究極のマルチスケールシミュレーション」に取り組んでおり、力学モデルとしてミオシン分子を826残基に粗視化した分子シミュレータCafeMolとUT-Heartを連成させ心拍動を実現している。これによりミオシン分子の変異や薬剤の結合が心拍動に及ぼす影響・メカニズムを明らかにすることが出来る。但し、「富岳」での計算負荷は、最も簡易なモデル(7,705有限要素/左右両心室、16分子/有限要素)で30,822ノードを用い約102時間、即ち314万ノード時間/心拍を要する。なお臨床医学、基礎医学共にこのような水準に到達している心臓シミュレータは欧米にも存在しない。

概要（論文情報）

- Langevin 方程式の準陰解法におけるランダム力補正によるタイムステップ拡大 (AIMS Mathematics. 2024, 9(8); 20793-20810)
- 熱力学的に整合するトラップ機構付きモンテカルロクロスブリッジモデルによる stretch activation の心拍動における役割解明 (Front Physiol. 2022;13(855303))
- 不完全 Cholesky 分解による分子動力学シミュレーションのタイムステップ拡大 (Journal of Computational and Applied Mathematics. 2022; 415:114519)
- 分子動力学シミュレーションにおけるヘッセ行列固有値修正付き準陰解法によるタイムステップ拡大 (Journal of Chemical Theory and Computation. 2021;17(9):5792-804)
- 心筋フィラメントの力発生を特徴付ける reverse stroke による心機能の理解 (Proceedings of the National Academy of Sciences. 2021;118(23): e2011659118)
- 心臓シミュレーションにおける確率的クロスブリッジモデルと連続体力学を連成させる複数ステップ能動剛性積分 (Frontiers in Physiology. 2021;12(1179))
- 大血管右室起始症の個別周術期マルチスケール・マルチフィジックス心臓シミュレーション (Annals of Biomedical Engineering. 2020. DOI:10.1007/s10439-020-02488-y)

4.2.3 ベンチマーク

2023年度に引き続き、以下の表 4.2.3.1に示すようにベンチマークアプリケーションの整備を実施した。

表 4.2.3.1 ベンチマークアプリケーションの整備状況

名称	目的・内容	整備状況	ベンチマーク等
GENESIS	MDシミュレーション (特に大規模な生体分子系向け)	評価チームと共有済み。 GPU版も共有済み。	標準的な疾患関連タンパク質であるEGFR(約10万原子)のMDシミュレーション(1μ秒)を富岳24ノードを用いて実施した場合、8132NHの計算資源を要する。
Gromacs	MDシミュレーション (特に小・中規模生体分子向け)	複数の系を評価チームに共有済み。GPU版も共有済み。	5,000原子からなるタンパク質(水を含めて70,000原子系)では、1μsのシミュレーションを富岳上で実行するのに1,380ノード時間要した。また、上記のシミュレーションをCPU(Intel(R) Xeon(R) CPU E5-

		み。	2680 v4 @ 2.40GHz) を7コア及びGPU (NVIDIA Tesla P100-SXM2-16GB) を1基使用して行った場合、193時間を要した。(計算機:TSUBAME)
INGOR	各種疾患に対して遺伝子ネットワークを推定	評価チームに提出済(富岳に実装済み)	対象データセットの平均サンプル数である 100サンプルのヒト全遺伝子ネットワーク推定計算を富岳上で実施したところ、約250NHを要した。また、ひとつのデータセットに対するネットワーク推定は、ネットワーク推定の安定性評価のために推定を3回実施することが必要であるため、1疾患あたりの遺伝子ネットワークの推定には750NH(=250NH×3回)が必要である。
ChemTSv2	生成モデルと強化学習による分子構造設計・最適化	評価チームに共有済み。GPU版も共有済み。	計算条件: LogPを含むJscore最適化 CPUとしてXeon Gold 6248で1974分子/min.
テンプレートマッチング計算フロー	シミュレーション・AIの連携により、Cryo-EM画像やXFEL画像を標的に構造探索を実施することで生体分子の多様な構造とダイナミクスを推定	評価チームに提出済(富岳に実装済み)	Spike-protein(約53,000原子系)の構造と実験画像(128x128pixel)を対象とした、cryoEM-Matchngの富岳実施例を示す。4,600万対の画像類似判定計算の実施は1,126ノードを用いた場合、14分44秒であった。24年度に共有テンポリからノード内テンポリ領域に変更することで大規模実施の効率が向上した。 本技術の要素技術である、画像類似判定法と構造サンプリングのためのMDシミュレーションに関してはGPU化で高速化の可能性はある。
UT-Heart	心臓の拍動シミュレーション	評価チームに共有済み。GPU版も共有済み。	GPU化の評価用にモンテカルロ計算カーネルと分子計算カーネルの2種のベンチマークを用意し、NVIDIA A100環境でチューニングを行い、Xeon (32-core) 環境と性能比較を行った。 モンテカルロ計算部では、Xeon環境に対して約3.24倍、分子計算カーネルでは、OpenACC利用で最大4.8倍、さらにCUDAによる指示を加えることにより最大5.6倍の性能向上を確認した。
MONET, NEST	神経回路シミュレーション	ベンチマークとして利用可能な箇所を準備中。	MONETは富岳150,544ノードを用いて、445億神経細胞と35兆本の結合からなる大脳皮質-視床-小脳神経回路モデルのベンチマークにおいて、生物学的な1秒分のシミュレーションを12秒間で実行。NESTは富岳1,152ノードを用いて、1,357万神経細胞からなる大脳皮質-基底核-小脳-視床神経回路モデルを実行。
KMOL	グラフニューラルネット	評価チームと	-

	トワークによる分子やタンパク質の性質予測	共有済み。	
VFVS-docking	大量ドッキングシミュレーションワークフロー	評価チームと共有済み。	-

4.2.4 2030年頃のアプリ像とそれを実現するために必要な計算環境と解決すべき課題

2023年度の検討に引き続き検討を行なった。今年度の検討結果を以下に示す。

4.2.4.1 次世代計算機で期待されるブレークスルー

2030年頃には、生命科学分野におけるAI技術とシミュレーションの融合が一層進展し、計算機の活用が不可欠な研究が飛躍的に増加すると考えられる。現在、シミュレーション技法の基本原理はすでに確立されており、典型的な生物学的イベントについてはある程度計算可能な段階に達している。しかし、これまでの研究は主にパーツレベルの理解に留まり、単一の分子やその周辺環境を対象とした解析が中心であった。現実的な生命現象を解明し、創薬や医療応用を実現するためには、パーツ単位の理解から脱却し、実験データ・AI/基盤モデルをフル活用しながら、より大規模かつ複雑な相互作用を解析する必要がある。また、創薬分野においても、計算手法の進化が求められている。現在は数十万から数十億規模の分子ライブラリから探索を行っているが、2030年には兆・京単位の分子が対象となると予測される。この規模の探索を実現するためには、計算効率の向上と大規模な並列化が不可欠である。また、創薬プロセス全体の効率化のため、プロセス全体を自動化し、ターゲットの策定から分子デザインまでのフローをAIとシミュレーションで一貫して実行できる環境の構築が求められる。

生命科学分野は多岐にわたるため、ブレークスルーに必要なアプリも多数存在する。表 4.2.4.1に、典型的なアプリの例を示す。また、以下では代表的な個別アプリでの期待されるブレークスルーと必要な計算資源を述べる。

例：細胞環境シミュレーション：機能発現・細胞内薬物動態解析

細胞内で起きている現象を詳細に捉えることは、生命現象や疾病の理解のために本質的に重要であるが、2030年ごろでも実験では捉えられない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進むと期待される。具体的には、過渡的なタンパク質複合体形成によるタンパク質の拡散速度低下のメカニズム、混雑化に伴う標的タンパク質の局所的な構造平衡シフトによる結合経路の変化や標的タンパク質周囲の薬剤分子濃度の低下(薬効低下メカニズム)などが解明・解析例としては想定される。手法としては、GENESISなどのMDシミュレーション、疎視化シミュレーションで、近年GPUを使ったシミュレーションが主流になりつつあるが、巨大系のシミュレーションのためにはメモリ転送(加速器とホスト間の転送)やインターコネクトの問題がより深刻になる。現状の富岳では、細胞を模した10億原子系に対し、16,386ノードで一月で約0.04 μ sの計算が可能であるが、次世代機で効率的な計算ができれば、生命現象の理解に必要なマイクロ秒オーダーに近づけると期待される。

例：MD計算による意義不明変異の解明

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。これらの解析・理解により、ゲノム変異の生命科学的な理解が進むとともに、治療や創薬などの臨床的な応用も可能である。例として、10万種類のタンパク質変異体に対する医薬品10種の結合自由エネルギー計算(MP-CAFEE)を行うとすると、1分子(タンパク質含め5万原子系)あたり富岳384NH(192ノード

×2h)、100万分子で3.84億NHが必要となる。使用するアプリは、GENESIS, GROMACS等(表 4.2.4.1参照)で、ディスク容量は19GB/分子, メモリ38GB/分子, B/F=0.1程度である。次世代機でシステムとアプリの機能向上により富岳の10倍程度になれば、現実的に計算できる範囲になる可能性があり、個人ごとの疾病の原因・治療に役立つと期待される。

例：心臓シミュレーション

既に、4.2.2（現行システムにおける解析の現況）で述べたように、UT-Heartには目的に応じて幾つかのバージョンがあるが、ここでは紙面の都合上、粗視化分子シミュレータCafeMol（マイクロ）と有限要素法に基づくUT-Heart（マクロ）を連成させ心拍動を実現する「究極のマルチスケールシミュレーション」に話題を限定する。マイクロとマクロの現象は相互に影響を及ぼしあうため、両者の計算を交互に実行する必要がある。先ずマイクロの計算については、これまで数々の工夫により時間ステップをオリジナルの陽解法の4,000倍まで拡大することに成功しているが、マクロと生理学的に矛盾の生じない連成をさせるため、CafeMolのポテンシャル関数の調整等がなお必要となっている。更に、現在のモデルでは、一つの有限要素にミオシン分子が16個配置されているが、ミオシン分子間の協調性を正確に反映した拍動解析を実現するには、アクチン螺旋のピッチやミオシンの配置間隔を取り入れた立体構造をモデル化する必要がある、このためには最低でも75個のミオシン分子を用いなければならない。今後更に計算時間短縮を図るが、既述のように最も簡易な16分子モデルでも314万ノード時間/心拍を要することを考慮すると、将来はマイクロについてはGPU、マクロについてはCPUを用いたヘテロな構成で計算を行うことが望ましいと考えられる。これはマルチスケール解析全般に言えることであるが、数の多さからマイクロが殆ど総ての計算ノードを占めることになる。しかし、マクロの計算中マイクロは待機せざるを得ず、この観点から実はマクロの有限要素解析を高速で実行できるCPUを採用することがコストパフォーマンス上重要となる。原理的に有限要素法の並列化には限界があるので、CPUのノード数は少数でよく、その代わり適宜最新の高速度CPUに更新できる柔軟なシステムとすることが、膨大なシステム全体の性能を時代遅れにさせない鍵になると考えられる。このようなヘテロ計算機によりUT-Heartマルチスケールシミュレーションが現実的計算時間で日常的に行えるようになれば、遺伝子と心拍動を結ぶ基礎医学研究、強心薬の開発等が長足の進歩を遂げると考えられる。

例：脳シミュレーション

脳・神経の仕組みの理解は、医療費の大きな割合を占める脳疾患についての効率的な治療法の開発や、脳の超省エネルギーな機構によるAIの電力削減など、社会的な波及効果が大い。しかし、複雑な形態と非線形ダイナミクスをもつ神経細胞が、膨大な数の結合を介して行う相互作用の理解は難しく、情報処理機構の解明には至っていない。全脳シミュレーションは、その神経相互作用を明らかにすることが期待されている。

現在、ヒトの脳の半分に相当する445億個の神経細胞と約35.4兆本の結合のモデルが、富岳全ノードで実行されている。次世代計算機では、富岳の10倍相当の10 EFLOPS(FP32)で、実用的にヒト全脳シミュレーションが利用可能になると考えられる。また、脳計測データをもとにしたデータ同化が取り組まれていて、10 EFLOPSで、小型霊長類全脳モデルのアンサンブルカルマンフィルターが実行可能になると推定される。細胞形態を詳細に模擬したマウス全脳モデルシミュレーションも実用的な利用が可能になると推定される。脳のシミュレーションではGPUの適用が進んでおり、上述のシミュレーションはGPUなどのアクセラレータで効率的に実行可能である。これらの結果、げっ歯類や小型霊長類における神経相互作用の詳細が明らかになり、パーキンソン病などの脳疾患の機序解明、脳の情報処理機構の構成論的理解、超省電力な脳型人工知能開発へのヒントとなり、ヒト全脳の情報処理機構解明への突破口になると期待される。

例：中分子・抗体医薬品創出シミュレーション

2030年の創薬においては低分子創薬から、中分子・抗体医薬品へ加速的にモダリティシフトが起こることが予想される。中分子・抗体医薬品ではその多様な構造状態を高分解能で解明することが重要となる。究極的には細胞環境下における、標的タンパク質と抗体医薬品候補の複合体解析を実施する創薬DX基盤の構築が必要となる。解決手段の一つとして、低分解能であるが多様な構造を観測可能なcryoEM実験データ等と、高分解能の構造サンプリングを実現するMDシミュレーション計算を相補に利用する融合手法が重要な役割を担う。複合体解析においては、その組み合わせは膨大となり、実験データを標的とした構造探索ワークフローの計算負荷の増大が懸念される。精度と計算コストを高度にバランスする必要があり、生成AIを活用したサンプリングエンジンの開発や、サイズ最適化による探索問題の効率化の導入は必須で、AI技術とシミュレーション技術を有機的に組み合わせたワークフローが実質的に高効率で動作する計算機環境が重要と考える。また、探索問題において量子コンピュータの活用も期待することができ、それらを効率的に制御するワークフローツールの開発が望まれる。また、計算処理能力に加え大規模並列計算においても耐えうる、高効率で頑強なIOシステムの構築も重要と考える。

表 4.2.4.1 次世代計算機で期待されるアプリケーションの例

名称	目的・応用例	内容
GENESIS	生命科学全般・創薬	理研を中心に開発されているMDシミュレーションエンジン(特に大規模な生体分子系向け)
Gromacs	生命科学全般・創薬	MDシミュレーション(特に小・中規模生体分子向け)
UT-Heart	生命科学全般・個別化医療・創薬	スケール横断的な心臓の拍動シミュレーション
MONET、NEST	医療・生命科学・人工知能	パーキンソン病などの脳疾患の機序解明、脳の情報処理機構の構成論的理解、超省電力な脳型人工知能開発。
McMD (マルチカノニカルMD)	生命科学全般・創薬・医療(精密・個別化医療)	標的タンパク質-医薬品候補複合体構造を推定する。
gREST/REUS	生命科学全般・創薬(中分子創薬)	標的タンパク質に対する低分子・ペプチド医薬品の結合ポーズ・結合経路を精密に推定する。
a/dPaCS-MD	生命科学全般・創薬(高分子創薬・抗体医薬)	標的タンパク質に対するペプチド・タンパク質の相互作用・結合経路を高精度に推定可能。高分子医薬品への応用が期待される。
OpenFE	創薬	標的タンパク質に対する低分子の結合親和性・結合ポーズを精密に推定する。
テンプレートマッチング計算フロー	生命科学全般・創薬	テンプレートマッチング法とシミュレーション・AIの連携によるCryo-EM画像やXFEL画像に対するタンパク質構造とダイナミクスの推定
ColDock	創薬・生命科学	医薬品ライブラリの中から、標的タンパク質に結合する医薬品シードを効率的かつ高精度に推定する。
Hypersound-Coldock	創薬・生命科学	標的タンパク質に対する医薬品候補の結合ポーズ・結合親和性・結合解離速度・及び副次的結合部位を高精度に推定する。
MP-CAFE・OpenFE	創薬・生命科学	標的タンパク質に対する医薬品候補の結合親和性 (結合自由エネルギー) を精密に推定する。
VFVS-docking	創薬	大量ドッキングシミュレーションワークフロー。医薬品ライブラリの中から、標的タンパク質に結合する医薬品シードを高速に推定する。
ChemTSv2	創薬・材料科学	生成モデルと強化学習による分子構造設計・最適化。

INGOR	医療・生命科学全般	各種疾患に対して遺伝子ネットワークを推定する。
KMOL	創薬・医療・生命科学全般	グラフニューラルネットワークによる分子やタンパク質の高精度な性質予測

4.2.4.2 ブレークスルーに必要な計算環境、解決すべき課題

【全体像】

生命科学分野は多様で、代表的な応用例である創薬・医療分野も多様かつ複合的である。つまり、一つの手法やデータベースで劇的に解決するものではなく、AIやデータベースを含む多数のアプリケーションを適切に組み合わせた時に初めて価値のある研究が生まれる。個別アプリの高速化は必要条件に過ぎず、複数のアプリを容易かつ柔軟に組み合わせられる計算環境なしには解決すべき課題を解けない。したがって、このように複数のアプリやAIを大規模かつ自由に連携して動作される計算環境が強く望まれる。また近年、NVIDIAのGPUやCUDA等の開発環境を中心としてGPUを用いた高速で有用なアプリケーションが世界中で開発されており、次世代計算機でもそれらをシームレスに、可能な限り特段の改変なく利用可能な計算機環境が強く望まれる。また、中長期的な視点と予算に基づき安定的な人材の確保・育成が可能な状況を維持すること、産官学での好循環する連携体制の構築が望まれる。

【特に解決すべき課題】

現状の多くのGPUベースのアプリケーション(AIとシミュレーションの両方で)はNVIDIA (CUDA環境)を前提としている。NVIDIAと異なるGPUが搭載される場合、移植対応が非常に大きな課題となる。例えば、表 4.2.4.1に記載したGPU対応のアプリのほとんどがNVIDIAのGPUを前提としており、移植に大きな負荷が掛かると想定される。一方で、生命科学分野では、移植を実施しただけでは科学的・アカデミックな評価は基本的に非常に小さい。したがって、アカデミア研究者が移植対応するモチベーションは低くなる。また、GPUを用いたアプリは毎年・毎月新しいバージョンや手法が出てくるので、移植が終わった頃にはそのアプリはすでに古い、という状況も十分に想定される。CPUやシステム全体の環境を含め、可能な限りアプリの移植に負荷のかからない状況が、非常に強く望まれる。

【個別の課題】

表 4.2.4.1に挙げたような個別アプリでは、個々の高速化・大規模並列化は現実的な生命科学・創薬・医療の課題解決のために必要不可欠である。次世代機で想定される大規模なCPU+GPU環境により、計算規模により解決が困難な課題が解消されると期待される。各アプリにより次世代環境における課題は異なるため、アーキテクチャチームとの連携を含め個別での実装・高速化対応が必須となる。

また、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る、データ転送もボトルネックの一つとなっている。従って、今後は次世代計算機上で実行することを視野に入れ、ハードウェアのコーデザインを検討していく必要があると思われる。シミュレーション部分のみならずプレポスト処理・解析過程も含めて次世代計算機上で一気通貫にワークフローを実行できる計算環境が必要となる。

4.3 新物質・エネルギー分野調査研究サブグループ

新物質・エネルギー分野では、多数の電子やイオンの量子力学的な振る舞い、あるいは量子力学的な電子状態から得られた原子間ポテンシャルに従う原子集団の古典的な振る舞いをシミュレーションすることで、原子・分子、結晶・非晶質固体の性質を予測することを目指してきた。

4.3.1 研究分野の概要

本研究分野では、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、それらの電子物性を予測してきた。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、非自明な量子纏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、AkaiKKR、mVMC、HΦ、さらに、ワークフロー型アプリケーションとして、HΦとベイズ最適化ライブラリPHYSBOを組み合わせたBEEMs、および第一原理計算による訓練を組み込んだAI加速分子動力学のベンチマークセットを作成した。実空間基底を用いているSALMONについても、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、調査研究にご協力いただいた。

加速部への対応状況についても調査研究を行い、新物質・エネルギー分野での対応状況について以下で報告する。特に、当分野で課題となっているのは以下の5点である。これらの課題克服には、分野を横断した開発者コミュニティの(再度の)形成が必要と考えられており、新たな開発者の育成を含め対応が検討されている。

- CPUと加速部間のデータ移行を明示的に行うか否か(OpenACCかOpenMP)の選択: 今後の国内での計算機環境が、unified memoryアーキテクチャが多数派となるのか否かが不透明なため、決断が難しくなっている。
- 開発環境の不足: 加速部を搭載する大規模並列計算機はまだノード数が少なく、欧米で普及し始めたAMD社の加速部については一部にしか導入されていないため、大規模な計算の実行は未だに難しい。
- 加速部対応ライブラリあるいはAIライブラリの導入: 開発者コミュニティ全体で加速部対応を測ってきたライブラリによって線形演算を実行することで、効率よく加速部を活用できると期待されている。しかしながら、ライブラリが主にC++やPython向けに開発されていることから、国内のFortranで書かれたコードや10万行を超える規模の大きなコードでは対応が難しくなっている。

- 加速部による効率的な倍精度演算: 新物質・エネルギー分野では、行列式/パフィアの演算が頻出するため、倍精度演算が必要不可欠である。そこで、加速部の演算性能を使い切るためには、加速部が得意とする単精度/半精度演算などによって倍精度演算を行うライブラリが必須となる。
- 継続的な開発の難しさ: 環境が更新される度に頻出するバグへの対応や人的リソースの不足(加速部への対応が将来のキャリアにつながらない現状)が、加速部への対応をさらに難しくしている。

4.3.2 現行システムにおける解析の現況

2022年度、2023年度における加速部を含まないシステムでの調査結果を以下に示す。

4.3.2.1 NTChem (ガウス基底)

標準的な解析

NTChem [hybrid O(N) DFT] の標準的な解析に関する情報:

- (1) 計算条件: 8000原子、ダブルゼータ基底
- (2) メモリ要求: 16TB程度
- (3) B/F: 不明
- (4) プロセス間通信: MPI_IAllGatherv
- (5) 6144ノード時間 (1ジョブ6時間@1024ノード)

NTChem (RI-MP2) の標準的な解析に関する情報:

- (1) 計算条件: 360原子、9840軌道(最大: 720原子、19680軌道)
- (2) メモリ要求: 16GB/node (最大: 25GB/node)
- (3) B/F: 不明
- (4) プロセス間通信: MPI_Isend/Irecv, MPI_Allreduce
- (5) 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。

4.3.2.2 BigDFT (ウェーブレット基底)

標準的な解析

- (1) 5000原子 (最大: 50,000原子)
- (2) メモリ要求: 24GB程度/node
- (3) B/F: 不明
- (4) プロセス間通信: MPI one sided communication
- (5) 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。

4.3.2.3 AkaiKKR (グリーン関数)

標準的な解析

- (1) 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

- (2) 材料パラメータ並列には、MPIもしくはArray Jobを利用
- (3) 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
- (4) 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」）
- (5) 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」）
- (6) データ転送量：不明
- (7) 通信量：OpenMPのReduction
- (8) 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）
- (9) 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。

4.3.2.4 QuantumEspresso (平面波基底)

標準的な解析

- (1) 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
- (2) ホットスポットはFFT、直交化など
- (3) 演算量：不明
- (4) データ量：113.48 GB (下記リンクのベンチマークの「PSIWAT」)
- (5) データ転送量：不明
- (6) 通信量：MPIの1体1通信、集団通信
- (7) 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
- (8) 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

4.3.2.5 OpenMX (局在・平面波の混合基底)

標準的な解析

- (1) ハイブリッド並列。
通常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-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
- (2) ホットスポットはLAPACKによる対角化
- (3) 演算量：不明
- (4) データ量：メモリ使用量はCPUコア当たり1~2GB

- (5) データ転送量: 不明
- (6) 通信量: MPI、1体1通信、集団通信
- (7) 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。
- (8) 1解析あたりの計算時間: Siの大規模系で1 SCF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

4.3.2.6 mVMC

標準的な解析

- (1) 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
- (2) 136GFLOPS/node (ピーク性能比6%、ピーク性能3.3792TFLOPS)
- (3) メモリ要求: 2BG/node
- (4) B/F値: 1.6
- (5) 実測メモリスループット215.7GB/s (ピーク性能比21.1%)
- (6) ノード間通信: Reduction
- (7) 通信量: $1000 \times 900 \times 42 \times 16 = 0.56\text{GB}$
- (8) I/O量: 0.2GB
- (9) 1解析あたりの計算時間: 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 1.6×10^5 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電子系の高温度超伝体のシミュレーション。

4.3.2.7 HΦ

標準的な解析

- (1) 計算条件: 24量子ビット(2^{24} 次元)、1000回の疎行列-ベクトル積
- (2) 21.7GFLOPS /node (ピーク性能比9.1%)
- (3) 要求メモリ: N量子ビットについて $(16 \times 2N / \text{プロセス})\text{B/core}$
- (4) B/F 1.9
- (5) メモリスループット 40.4GB/s
- (6) 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 $[(2^{24}) / \text{プロセス}]$ 数回
- (7) I/O量: ほぼ無視できる
- (8) 1解析あたりの計算時間: 0.4ノード時間@FX10 1ノード(16スレッド)
- (9) バイズ最適化の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 新物質・エネルギー分野におけるソフトウェアの演算加速部への対応状況

ソフトウェアごとに異なる構造の演算が律速過程となるため、演算加速部とCPUとのデータ転送頻度や、加速部メモリ上のデータの再利用可能性に差異があり、演算加速部（主にGPGPU）への対応にはばらつきがある。

国外ではライブラリによる加速部対応も検討されている一方、国内のソフトウェアではCUDAあるいはOpenACCを用いたコードの更新によって加速部対応が主に図られている。ただし、言語やライブラリ、アーキテクチャが更新される度にバグが頻出する状況が報告されており、継続的な開発を難しくしている。また、人的リソースの不足もあり、研究者自身の手による加速部対応が難しくなっている。加えて、「OpenACCとOpenMPのどちらを選択するか」、あるいは、「CPUから加速部へのデータ移動を明示的に行うのか、unified memoryアーキテクチャ向けに開発を行うのか」、などの選択に直面している。

4.3.3.1 量子化学・分子化学

量子化学・分子化学では、Hartree-Fock(HF)近似や多体摂動論(MP2など)が多用される。これらの計算では四つ足のクーロン行列の計算が多くの計算時間を占める場合があり、国内外で演算加速部の利用が進んでいる。

特にGAMMESS ECPなど、米国DOEが主導する国際プロジェクトにおいて、 $O(10^4)$ のGPUを用いた大規模なHFおよびMP2計算のためのプログラム整備が行われている。同時に、アーキテクチャに依存しない加速部への対応のためにkokkosを始めとする演算加速部の利用を前提としたC++ライブラリ整備が進んでいる。それと同時にプログラミング言語におけるC/C++のシェアが増えている。

NTChemについても、4,000 GPU上でのMP2計算が行われている。またBigDFTでは、SYCLを用いてhybrid functional計算部分の演算加速部への対応が図られている。

4.3.3.2 物質科学のための第一原理

密度汎関数理論に基づくコードの多くで高速フーリエ変換FFTがよく用いられているため、量子化学分野とは異なるアプローチが必要となる。国内外で広く用いられているオーストリアの第一原理計算ソフトウェアVASPについては、NVIDIAの開発者によって同社のGPGPU向けのチューニングが行われている。

国内ではFortranを用いたコードが多く現存するが、GPUの利用に向けたチューニングが進められている。

筑波大学/QSTに開発拠点を置くSALMONでは、OpenACCによるGPGPUへの対応が進んでいる。unified memoryアーキテクチャ向けに開発が行われ、2から3倍の加速が報告されており、2025年度にはコード全体の対応を目指している。AkaiKKRについてもCUDAによるGPGPU対応が進んでいる。他の第一原理計算コード(RSPACEなど)についてもOpenACCによる加速部対応が進められている。

4.3.3.3 物質科学のための量子多体計算

量子多体系のための計算では、演算密度に比べデータ移動が多い。そのため、HΦやmVMCでは演算加速部への対応に遅れが見られる。

HΦは疎行列-ベクトル積によるクリロフ部分空間法が核となるコードであるが、密行列対角化部分のみGPGPU向けライブラリMAGMAに接続されている。

一方で、mVMCでは一部の線形演算のみGPGPU化が図られている現状となっている。mVMCでは多体波動関数としてパフィアンに基づく表現が用いられているが、国外では、深層ニューラルネットワークが用いられ始めており、コード自体がAI向けライブラリで書かれていたため、そもそも並列GPU環境に対応できている。

今後、国内のソフトウェアもPyTorchなどのAI向けライブラリによる実装を検討していく必要がある。mVMCについては、理論実証のためのPyTorchによるテストコードの開発が行われている。また、Ozakiスキームなど低精度演

算を用いて倍精度演算を実現する加速部対応のライブラリを接続することで、パフィアン計算や共役勾配法の演算を加速することが検討されている。

4.3.4 ベンチマーク

AkaiKKR、mVMC、HΦについて、2022年度末にベンチマークセットを提出した。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た。2023年度は、ベイズ最適化アプリケーションPHYSBOと量子多体問題ソルバーアプリHΦとを統合するpythonコードBEEMs、および第一原理計算によって訓練を行うAI加速分子動力学法に基づくワークフロー型ベンチマークを作成した。2024年度には、AIライブラリを用いた量子多体計算ソフトウェアの実証コードについてベンチマーク作成へ向けた調査を行った。

4.3.4.1 BEEMs

BEEMs (<https://github.com/k-yoshimi/BEEMs>)は、図 4.3.4.1のようにHΦによるクリロフ部分空間法を実行するinner loopとPHYSBOによるベイズ最適化を行うouter loopからなる。BEEMsでは、inner loopの物理量計算結果と所与の実験データとの二乗誤差を目的関数として、多体電子系の有効ハミルトニアンを最適化する。outer loopはinner loopの結果に基づく目的関数を最大化する有効ハミルトニアンのパラメータをベイズ最適化によって探索することになる。BEEMsでは、inner loopとouter loopのインターフェイスでは目的変数のみを受け渡すため、inner loopの計算はほぼ独立に実行される。

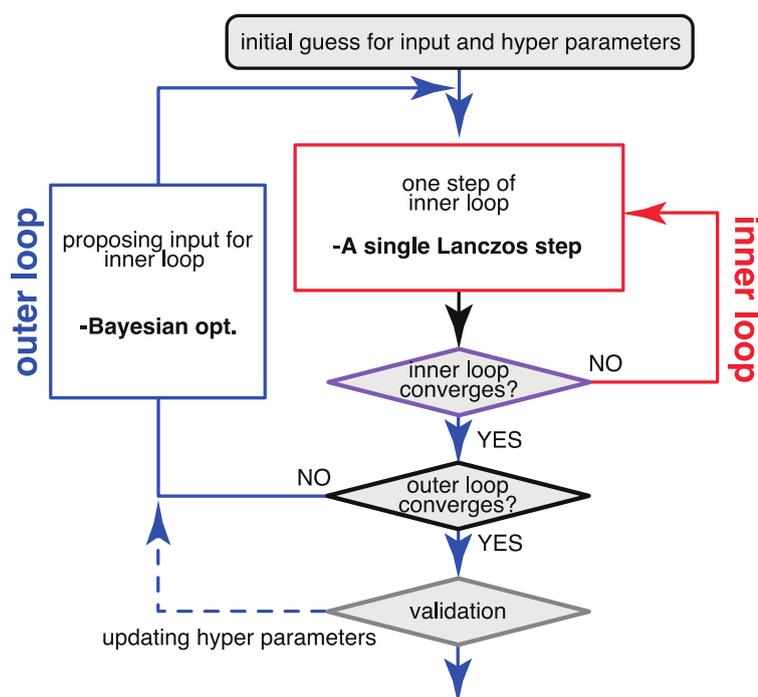


図 4.3.4.1 BEEMs における inner loop と outer loop の概要

4.3.4.2 AI 加速分子動力学

分子動力学を用いて結晶構造最適化を行うために、人工ニューラルネットワーク原子間ポテンシャルを学習するワークフロー型アプリケーションであるPIMD (<https://ccse.jaea.go.jp/software/PIMD/index.jp.html>)を用いた自己学習ハイブリッドモンテカル (SLHMC) 法のベンチマーク作成を行った。PIMDから第一原理計算を

呼び出す際、Quantum Espressoは内部でリンクを行い、VASPなどは外部リンクとなる。後者ではディスクIOを用いることになる。

本ベンチマークセットでは、DFT計算部分にQuantum ESPRESSO (<https://www.quantum-espresso.org/>) を使い、人工ニューラルネットワーク (ANN) ポテンシャル作成及びそれに基づく機械学習分子動力学 (MLMD) 計算については、aenet (<http://ann.atomistic.net/>) を使用している。

4.3.5 2030年頃のアプリ像とそれを実現するために必要な計算環境と解決すべき課題

富岳NEXTは新物質・エネルギーの分野に以下のような様々なインパクトをもたらすことが予測される:

- (1) 不規則系磁性材料の大規模物性データベース構築による新永久磁石材料およびスピントロニクス材料開発期間の短縮
 - (2) AIで加速された第一原理シミュレーションによる全固体電池材料の性能劣化および太陽電池材料の量子収率予測
 - (3) トポジカル電子状態の超高速光応答の第一原理シミュレーションによる新規量子デバイス動作原理の開拓
 - (4) 極短パルスレーザーと固体との相互作用の第一原理シミュレーションによる高精度な微細加工の開拓
 - (5) 高温超伝導体やトポジカル量子計算基盤(量子スピン液体)における量子縫れ構造の観測と制御
- これらの成果が、高性能・高信頼性蓄電池、高性能モータ、省電力スピンドバイスの開発、量子デバイスにおける量子縫れ制御技術に波及することが期待される。

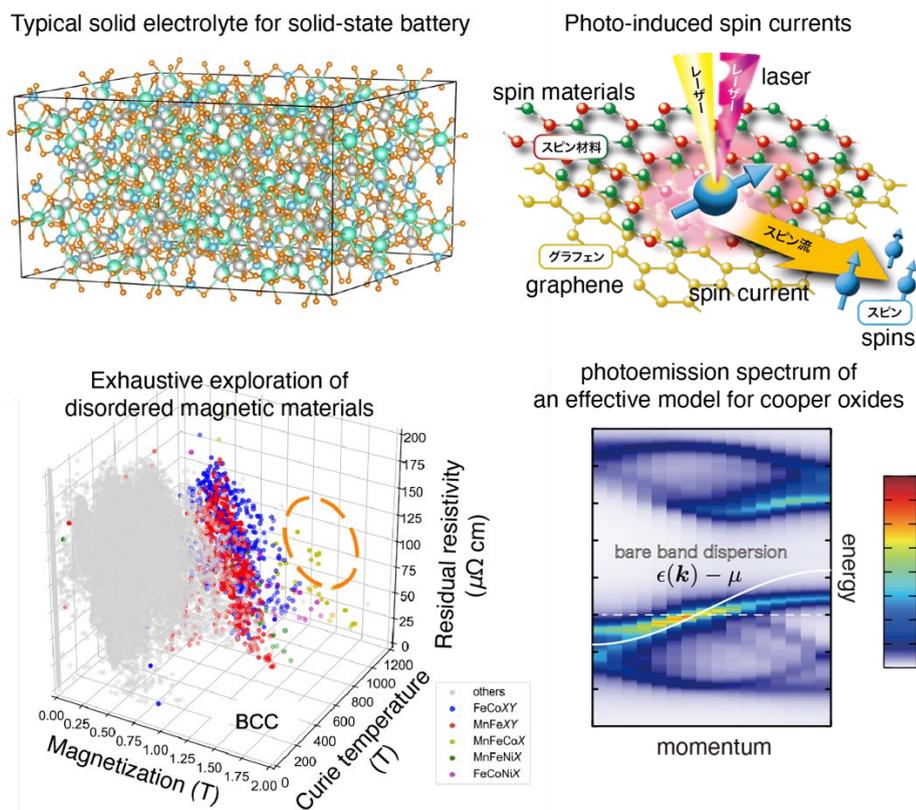


図 4.3.5.1 高性能・高信頼性蓄電池のための電解質(左上)、磁性材料データベース(左下)、省電力スピンドバイス原理の提案(右上)、量子もつれ状態の分光スペクトル計算(右下)

上記のブレイクスルーをもたらすためには、「富岳」数千ノードを擁する計算を日常的に数十個並列実行可能な計算能力が、富岳NEXTに期待される。加えて、演算加速部の有効利用を可能とするコンパイラが必要となるとともに、アプリケーション開発者は演算加速部を有効に活用するため、チューニング並びにアルゴリズム改変による演算密度の向上が必要となる。

以下では、2024年度までに調査を行った、ソフトウェアごとに期待される成果と必要資源を列挙する。下記の必要資源については、「富岳」を基準に算出されたものから、富岳NEXTの1ノードで「富岳」と同程度の実行性能が得られたと仮定して見積を行った。

4.3.5.1 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

- 2×10^8 ノード時間積 (「富岳」 10^{10} ノード時間積)

4.3.5.2 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

- 6×10^5 ノード時間積 (「富岳」 3×10^7 ノード時間積)

4.3.5.3 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
富岳 NEXT 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
富岳 NEXT 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、
 - 7×10^5 ノード時間積 (「富岳」約 4×10^7 ノード時間積)
 - メモリ要求：1 プロセスあたり $O(10 \sim 20)$ 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

4.3.5.4 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。

必要資源

- 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
 - 10^6 ノード時間積 (「富岳」 5×10^7 ノード時間)
 - メモリ要求: 1 プロセスあたり $O(100)$ GB
- プログラム・環境: C 言語、機械学習最適化(python/julia)

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（最後の段落を除き 2023 年度報告書より再掲）

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。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。

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、昨年度までに以下のモデルについてアプリ情報を収集済みである。

- 気象庁の現業数値予報モデル
 - **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

以上に加えて、**AFES**（全球モデル）の開発者が協力者として議論に参加している。

2024年度は、各モデル関係者間での情報共有・議論を深めるため、これまで4回にわたり気象・気候SG研究会を開催した。また、気象・気候コミュニティ全体を対象とする公開研究会を2025年2月に開催し、オンライン約65名、現地25名（一部重複あり）が参加して活発な議論が行われた。

4.4.2 現行システムにおける解析の現況

気象・気候分野のモデルの大きな傾向として、Time-to-solution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1,600万Nh程度（富岳一般課題の年間上限近く）まで幅広い。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は1GB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り多様である。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。I/O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。

4.4.2.1 個別モデルの現況（標準解析・大規模解析）

（個別モデルの詳細については2022年度報告書の表4.4.1を参照）

asuca：（標準）東アジア域5kmメッシュ、78時間積分（メソモデル）

（大規模）1km局地モデル（格子数3,161×2,601×76）リアルタイムシミュレーション

asuca-Var：（標準）東アジア域5km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20km、264時間積分（2024年3月時点の最新現業モデルでは水平解像度13kmに高解像度化している）。（大規模）水平解像度5km

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

（大規模）解像度500m、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1,200×600×60、24時間積分

SCALE-SDM：（標準）領域サイズ60km×60km×20km（解像度125m、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60km×60km×20km（解像度62.5m、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100m以下で数100kmスケール領域、もしくは解像度1m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 $10 \times 4^{11} \times 78$ ）を用いた1月積分

（大規模）① 220mメッシュ（格子数 $10 \times 4^{15} \times 78$ ）実験、2時間積分。② 3.5kmメッシュ（格子数 $10 \times 4^{11} \times 78$ ）、10年実験（4,200万時間ステップ）

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120km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10kmメッシュ、海洋10km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2km×2km×400m、2m解像度（格子数1,000×1,000×200）

（大規模）①領域サイズ40km×40km×20km、2m解像度（格子数20,000×20,000×340）、6時間積分。②領域サイズ35km×25km×2.5km、2m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10km×10km×3km、10m解像度（節点数 2.5×10^8 ）、4時間積分。（大規模）標準的な解析をベースに2.5m解像度、30分積分

4.4.3 ベンチマーク

ベンチマークセットについては前年度までにベンチマークGへ提出済みである。本年度は、主要なベンチマークモデルであるSCALEについて、GPU最適化を実施するとともに、全系システム性能推定に向けた設定を作成した。

4.4.3.1 SCALE-LETKF の GPU 最適化

昨年度は、SCALE-LETKFの気象シミュレーションパートであるSCALE-RMに対して、OpenACCを用いたGPU対応を実施した。本年度は、SCALE-RMの中の放射コードに焦点を当て、計算効率の向上に取り組んだ。放射コードは、計算負荷の大きく、GPUの並列計算能力を活用することで大幅な高速化が期待できる部分である。

オリジナルの実装では最内ループのループ長が短く、GPUの演算器を十分に活用できていなかった。この課題を解決するため、外側のループをブロッキングし、ブロック内のループを最内ループとして再構築した。また、この新たなループ長をGPUのSIMD (Single Instruction, Multiple Data) 幅に合わせて調整し、SIMD演算器の効率向上を図った。一方で、ブロッキングにより外側ループの長さが短くなることで、OpenACCの用語で言うギャング並列性が低下し、GPUのOccupancy (占有率) が減少する場合があった。このため、ブロック長の設定には並列性とSIMD効率のバランスを考慮する必要があり、問題サイズに依存した最適化が必要となる。そこで、問題サイズとブロック長を変化させながら性能計測を行い、最適なブロック長を探った。計測は、東京大学情報基盤センターのWisteria/BDEC-01スーパーコンピュータ上のNVIDIA A100 GPUを用いて実施した。その結果、問題サイズが十分に大きい場合には、ブロック長をWARP長 (SIMD幅) である32に設定することで最大の実行性能を達成できることが分かった。一方、問題サイズが小さい場合には、より短いブロック長が適していることが確認された。これらの結果を基に、問題サイズに応じて内部で最適なブロック長を動的に決定する実装を開発した。

4.4.3.2 全系システム性能推定に向けた設定の作成

富岳NEXT全系システムを対象とする性能推定に向け、大規模な対流システムであるスーパーセルをターゲットとしたSCALE-RM (水平解像度100m) のパラメータ設定を作成した。富岳の全系を基準 (1倍) とし、アンサンブル数を増加させることで富岳比4倍、10倍の設定を作成し、ベンチマークGへ提供した。

- 1倍 : MEMBER=1600, IMAXG=1280, JMAXG=1280, PRC_NUM_X=20, PRC_NUM_Y=20 (160,100 ノード)
- 4倍 : MEMBER=6400, IMAXG=1280, JMAXG=1280, PRC_NUM_X=20, PRC_NUM_Y=20 (640,400 ノード)
- 10倍 : MEMBER=16000, IMAXG=1280, JMAXG=1280, PRC_NUM_X=20, PRC_NUM_Y=20 (1,601,000 ノード)

このような設定は計算量のみを基準にしていることから、メモリや通信、IO効率の観点から現実的に実現可能かどうかは今後の検討課題である。

4.4.4 2030年頃のアプリ像とそれを実現するために必要な計算環境と解決すべき課題

今年度明らかになった想定システム構成、気象・気候SG研究会での議論、およびアンケート結果を踏まえ、2023年度報告書における該当箇所を改訂した。特に、AI for Science時代におけるグランドチャレンジ、および異なるGPUベンダに対応するための持続可能なソースコードの在り方が主な論点である。

次世代計算機で期待されるブレイクスルーとしては、

- 毎年災害をもたらす集中豪雨・台風の予測精度の大幅向上に向けたリアルできめ細やかな気象予測システムの開発。竜巻・雷頻度予測の実用化、シナリオを網羅する確率予測、3次元高密度観測とデータ科学による高頻度リアルタイム予測の実現。
- 気候変動の理解と予測を質的に高める精緻な地球システムモデルの実現。特に、気候変動適応策で実利用可能な台風・極端現象・都市気候予測、パリ協定へ資する温室効果ガス吸排出量推定、気候系における海

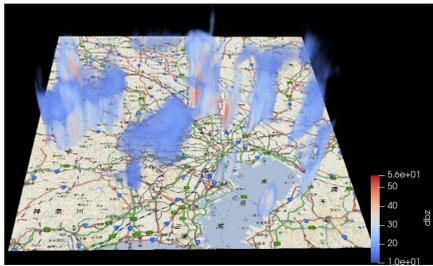
洋中規模渦の役割の解明。AI 超解像によるさらなる詳細予測、物理スキームの AI 代理モデル化によるさらなる長期積分の実現。

- これまで不可能であった大規模数値実験の実現による、微小から惑星スケールに至るまでの現象の包括的理解の獲得。
- さらに精緻な物理的表現が可能な次世代型の力学、雲微物理、放射スキームの開発と実証。低精度、AI 代理モデル等の加速による富岳比 5-10 倍以上の大規模計算の実現。

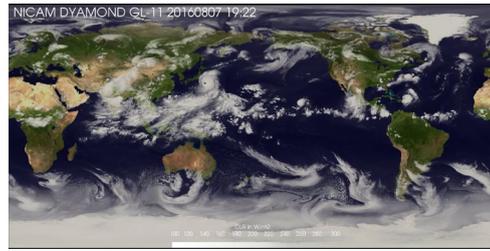
と包括的にまとめることができる。ブレイクスルーの具体例を図 4.4.4.1 に示す。

ブレイクスルーを達成するために必要な計算環境および解決すべき課題は、ターゲット問題によって事情が異なるものの、概ね以下のようにまとめることができる。

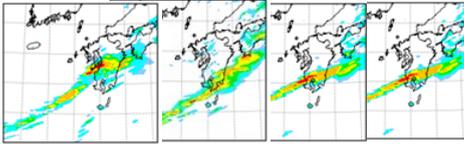
- 計算規模：富岳と比較して 10 倍から数千倍程度
 - 物理ベースに基づく気象・気候モデルの一部あるいは全ての AI 代理モデルへの置き換え。問題に応じてどの程度まで AI で置き換え可能かは未だ評価途上。
 - 混合精度（FP64/FP32）への対応とさらなる低精度化の検討。
- プログラミング環境：Fortran が必須。C/C++、python、ruby、Julia、PostgreSQL などの利用もある。
- 並列化手法：MPI+OpenMP が標準的
- ライブラリ・フレームワーク：NetCDF、HDF5、pytorch、scipy、fftw、BLAS、JAX など
- GPU 対応：OpenACC
 - 書き換えコストおよび効率的利用に向けた大幅なアルゴリズム改変。コードが膨大であるため、GPU 対応が進んでいないモデルも未だ多い。
 - OpenMP offloading への書き換え事例は現時点ではほぼ皆無。
 - ドメイン特化言語や python（+JAX 等）、Julia 等の活用による性能可搬性の向上も検討課題。
- 演算精度：FP64 が必須。一部モデルで混合精度（FP64/FP32）が利用可能
- 可用性：リアルタイム予測や全系実験ではシステム高可用性が重要
- ストレージ：高速・大容量な global/local ストレージ、解析のための一定期間のデータアーカイブに期待
 - Jupyter などを活用したサーバーサイド解析（大容量のデータを転送するのは困難になりつつある）
- 多様な力学・物理スキームやターゲット問題に対応可能な、メモリバンド幅、メモリ量、キャッシュ、IO、通信等の設計。



データ同化



全球雲解像モデル



大アンサンブル

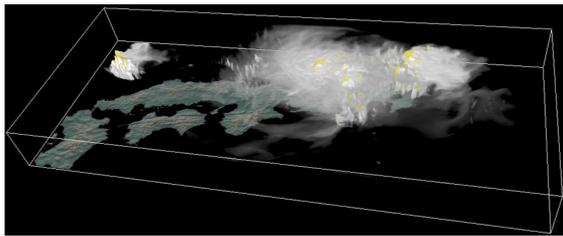


図1: 気象雷モデルの計算例。日本を横断した台風周辺の(白)雲と(黄色)雷の分布

気象雷モデル



超水滴法による雄大積雲のシミュレーション結果。松嶋(神戸大)作成。

粒子法雲微物理スキーム

図 4.4.4.1 期待されるブレイクスルーの例 (2023 年度報告書と同様)

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（2023年度報告書より再掲）

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（2023年度報告書より再掲）

- 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73,728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55,296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 ベンチマーク

本サブグループにおいては2022年度において並列非構造格子有限要素法プログラムにおけるCPU用、および、GPU用に主要計算部である疎行列ベクトル積のカーネルプログラムを整備した。また、2023年度においてフルアプリケーションの性能評価のため主要機能のみを残したアプリケーションプログラムをCPU用及びGPU用に整備した。2024年度においてはベンチマークの更新はせず、想定する将来アーキテクチャ（CPU-GPUのヘテロジニアスアーキテクチャ）にむけアプリケーションプログラム全体のアルゴリズム開発を実施した。このアルゴリズムにおいても、これまで整備してきた疎行列ベクトル積カーネルがGPU計算の主要なコストとなるため、引き続き本ベンチマークでの性能推定がアプリケーション全体の性能推定において有効である。CPU-GPUのヘテロジニアスアーキテクチャにむけたアルゴ

リズムの詳細は「4.5.4.2 将来アーキテクチャに向けたアルゴリズム開発」にて説明する。

4.5.4 2030年頃のアプリ像とそれを実現するために必要な計算環境と解決すべき課題

4.5.4.1 課題の概況

- 次世代計算機で期待されるブレイクスルー
 - 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マイクロ地殻変動・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
 - これにより、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
- ブレイクスルーに必要な計算環境、解決すべき課題
 - ① 上記のブレイクスルーに必要な計算機について：富岳の5~10倍のメモリ容量・5~10倍程度のメモリ帯域、15~30倍程度の演算性能を想定(B/F 0.1程度)。ただし、ランダムアクセス・データレイアウトにより性能が著しく劣化しない計算機構が必要(hardware accelerated atomic add機構など)
 - ② 将来アプリに向けての課題、ロードマップ等：ブレイクスルーの実現に向け、観測データの高効率な取り込み方、また、B/Fの小さい将来システムにおいては従来の計算アルゴリズムでは性能を出し切れなくなることが課題として予想されるため、これらの課題の解決に向け手法開発を進める計画である。想定システムのハードウェア性能と、上記①のブレイクスルーに必要な計算資源の間にギャップがあるため、後述の「4.5.4.2 将来アーキテクチャに向けたアルゴリズム開発」のようなハードウェア資源をより有効活用するようなアルゴリズム開発を進めることが重要となる。
- 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ッ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(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のが重要)。

4.5.4.2 将来アーキテクチャに向けたアルゴリズム開発

本節においては、想定システム構成がCPU+GPUのヘテロジニアス計算環境になることが決まったことを受け、これらのヘテロジニアスシステムでの性能改善に向けて実施したアルゴリズム開発・性能測定結果について記す。ここでは、大容量のメモリを持つCPUと、高速演算可能なGPUを同時に用いるアルゴリズムを開発することで、GPUのみを利用した場合と比べて計算スループットの向上を図る。

地震分野で用いられる時間発展問題の偏微分方程式を数値解析により精度を保証しつつ求解することは、計算機能力の増大と共に単に順解析に用いられるだけではなく、それを用いたアンサンブル評価、最適化問題、逆問題、サロゲートモデル構築など多種多様な用途へ広がっている。そのため、そのtime-to-solutionの短縮やエネルギー消費効率化など解析コスト軽減へのニーズはさらに高くなってきている。このようなニーズに応える計算機環境

の進歩として、例えば、CPUメモリの増加やGPU computingがあげられる。1計算ノードあたりのCPUで使用可能なメモリが増加したことにより、より多くのデータを用いた解析が可能となり、例えば、時間発展問題の偏微分方程式の典型的な数値解析をdata-driven的な手法で効率化する方法などが提案されている。また、directiveによりGPU computingの開発コストが低減されたことにより、GPU computingが普及し、一般的な演算であれば、CPUよりも高速なGPU演算性能の恩恵を受けやすくなっている。しかしながら、上記のようにCPUによる解析であれば潤沢なメモリを用いたdata-driven的な手法による効率化なども期待されるが、CPUの演算性能自体がGPUよりも低いいため、その効率の向上はGPUと比較して限定的となる。また、GPUによる解析であれば、GPUの演算性能が高く、CPUとGPU間の通信性能が相対的に低いため、GPUのみを用いて解析をすることが多く、そのメモリ容量がCPUメモリと比較して少ないため、解析対象の問題規模を維持しつつdata-driven的な手法の導入による効率化を図るのは難しい。一方で、計算機の進歩は著しく、CPUとGPU間の通信性能が非常に速いものが開発されてきつつあり (e.g., GH200)、また、GPU等では相対的にメモリ容量・メモリ帯域が小さくなるほど演算性能の高速化が進みつつある傾向がある。このようにheterogeneousな環境を有する様々な計算機システム・演算機構の開発が進んできている中、これらを活用しうるheterogeneous computing手法は解析手法の能力向上を図っていくひとつの方向性と考えられる。本節では、時間発展問題を多数回解く一般性の高い問題設定を題材として、CPUとGPU間的高速通信を踏まえ、潤沢なCPUメモリを活用したdata-driven的な手法と高速なGPU computingを活用したequation-based modelingを両立可能なheterogeneous computing手法を提案することで、解析が加速されることを示す。なお、data-driven的な手法を用いているものの、equation-based modelingと併用することにより精度保証した数値解析がなされるため、本手法により得られる解析結果の精度は通常のequation-based modelingと同等の精度が保証されたものとなる。

本節では、時間発展問題の偏微分方程式を離散化して得られる一般的形式である

$$Ax^{it} = f^{it} \quad (1)$$

を多数ケース高速に解くための、strongly-connected CPU-GPU environmentのもとで、equation-based modelingをdata-drivenにより加速するHeterogeneous computingを示す。ここで、 it は時間ステップであり、 A は非対角成分をもつ定数行列、 x^{it} は it 時間ステップでの解、 f^{it} は it 時間ステップでの外力及び it 時間ステップ以前の応答により定まる定数ベクトルである。 nt 時間ステップ分の応答を1時間ステップから順次解いていく問題である。なお、 x^{it} の自由度が大きいことを想定し、式(1)の求解には反復解法を用いることとする。Data-driven methodは多々提案されており、例えば、実施済みのシミュレーション結果を学習したsurrogate modelによりシミュレーション挙動を直接推定するなどがあるが、本手法ではシミュレーション結果の精度を担保するため、反復法による式(1)の求解における初期解の推定に、計算済みの過去ステップのシミュレーション結果を用いるdata-driven methodを用いる。Data-driven methodにより高精度な初期解を得ることができれば式(1)の求解における反復数が削減され計算精度を担保しつつ計算が高速化される。従来から主に使われてきたdata-driven methodによる少数ステップ・ポイントワイズの時間発展の予測だけでなく、近年では向上した計算機性能・メモリ容量を生かす方法として多数ステップの大規模時系列データを学習して解を予測する方法も開発されてきており、これを活用することでより高精度な初期解予測が期待できる。例えば、Ichimura et al. [HPC Asia 2022]では、直近の過去 s ステップの解を入力に次ステップの解を予測する方法を提案しており、高精度の初期解を推定することで反復法ソルバの反復数およびtime-to-solutionを1/3に削減している。これらの予測手法を一般的な形で表すと、直近の過去 s ステップの入力 $F^{it} = \{f^{it-s}, f^{it-s+1}, \dots, f^{it-1}\}$ 及びその解 $X^{it} = \{x^{it-s}, x^{it-s+1}, \dots, x^{it-1}\}$ をメモリに格納し、これを使って反復法の高精度な初期解 $x^{it} \leftarrow \text{predictor}(X^{it}, F^{it}, f^{it})$ を予測する方法として記述できる。未知ベクトルの自由度を n とした場合、格納するデータ量が $n \times s$ に比例するため高精度な初期解予測に必要な s ステップを担保しようとするGPUの限られたメモリに載せることが難しく、通常、学習・予測は大容量メモリに近いCPUで実行することとなるが、その場合は予測の入力となる f^{it} およびその予測結果 x^{it} 、また、学習用に用いる求

解後の解析結果 x^{it} をGPUとCPU間で受け渡す必要があり、従来のGPU計算ではここがボトルネックになりがちであった。同時に、CPUにおける学習・予測コストも反復法ソルバに対して無視できない時間を要することとなるため、CPU-GPU間の通信コストとCPUでの学習・予測コストが計算のボトルネックとなる。

本手法では、近年開発が進むstrongly-connected CPU-GPU environmentを念頭に、CPUとGPUの並行計算を実施することでPDEの時間発展問題を高速求解する。ここでは、同程度の問題規模を持つ2セットの時間発展PDE問題を同時に求解する。この際、片方の問題で反復法ソルバをGPUで実行している間に、もう片方の問題における解の学習・予測をCPU上で実施し、ソルバと学習・予測が完了した段階でCPU-GPU間のstrongly connected interconnectを用いて求解結果・予測結果を高速に同期する。具体的な計算アルゴリズムを図 4.5.4.1に示す。ここでは、二つのプロセスを同一の計算ノード(単一のGPU)上で実行する。ここで it は時間ステップ it の計算を示し、矢印はCPUとGPU間でのデータの受け渡しを示す。PredictorおよびsolverにおいてCPUとGPUが同時に使われており、その前後でCPU-GPU間でデータ受け渡しが行なわれる。PredictorおよびSolverにおいてCPUとGPUを同程度の時間を用いる場合、CPUとGPUをフルにオーバーラップ可能となる。例えば、data-driven methodの活用により反復数が1/3などになると、strongly-connected CPU-GPU environmentの活用により、学習部分の隠ぺいが可能となり、従来法と比較して1/3程度の時間で解析できるようになると期待される。

```

1: for  $it \leq nt$  do
2:   process synchronization
3:   (CPU side, process #0)
4:    $\bar{x}_0^{it} \leftarrow \text{Data-driven}(x_0^*)@CPU ! \text{Predictor}$ 
5:   (GPU side, process #1)
6:    $x_1^{it} \leftarrow \text{CRS-CG}(A, f_1^{it}, \bar{x}_1^{it})@GPU ! \text{Solver}$ 
7:   process synchronization
8:   (process #0) transfer  $\bar{x}_0^{it}$  from CPU to GPU
9:   (process #1) transfer  $x_1^{it}$  from GPU to CPU
10:  process synchronization
11:  (GPU side, process #0)
12:   $x_0^{it} \leftarrow \text{CRS-CG}(A, f_0^{it}, \bar{x}_0^{it})@GPU ! \text{Solver}$ 
13:  (CPU side, process #1)
14:   $\bar{x}_1^{it+1} \leftarrow \text{Data-driven}(x_1^*)@CPU ! \text{Predictor}$ 
15:  process synchronization
16:  (process #0) transfer  $x_0^{it}$  from GPU to CPU
17:  (process #1) transfer  $\bar{x}_1^{it+1}$  from CPU to GPU
18:  process synchronization
19: end for

```

図 4.5.4.1 CPU と GPU を同時に使った時系列 PDE 問題の求解アルゴリズム(CRS-CG@CPU-GPU)。ここでは、二つのプロセスを用いて二つの問題を同時に求解する(添え字 $i=0,1$ はケース番号を示す)。過去 s ステップのデータを用いて解 x^- を CPU で予測し、これを GPU 上での反復法ソルバ(CRS-CG)の初期解に用いる。

線形動弾性問題でのアンサンブルシミュレーションを例に、提案手法の具体形を示し、従来法と性能を比較することで提案手法の有効性を示す。ここでは、弾性波動方程式 ($\rho \ddot{u} - (\nabla \cdot c \cdot \nabla) \cdot u = f$, ここで、 ρ は密度、 u は変位ベクトル、 c は剛性テンソル) を空間方向を四面体二次要素で離散化し、Newmark- β 法による陰的時間積分を適用した結果得られる正定値対称な大規模疎行列に関する連立方程式 $Ax^i = b^i$ を各時間ステップ i について求解する問題に対して開発手法を適用する。初期解推定には先述のHPC Asia 2022の方法で開発された

predictorのマルチコアCPU実装(OpenMP)を用い、方程式求解には3x3ブロックヤコビ前処理を用いた共役勾配法ソルバのGPU実装 (OpenACC) を用いる。共役勾配法ないでの疎行列ベクトル積においてはメモリ上に格納したCRS形式の行列データを用いて実施する。図 4.5.4.2に性能結果を示す。ここでは、GPUのみを用いる通常のアプローチ(baseline method: CRS-CG@GPU)と、CPUとGPUを同時利用する提案手法 (developed method: CRS-CG@CPU-GPU)の性能を示している。従来手法ではGPU 1枚を用いて1ケース計算しているのに対し、提案手法ではCPUとGPUを用いて同時に2ケース計算しており、縦軸ではケースあたりの実行時間を示している。図から、従来手法をGH200のGPUのみを用いた場合は、A100 GPUを使った場合と比べてハードウェアのメモリバンド幅向上率とほぼ同等の2.1倍の高速化にとどまるのに対し、提案手法をGH200のCPUとGPUで用いることでGH200のGPUを用いた場合からさらに2.96倍の高速化が得られていることがわかる。これは、CPUによる初期解推定により反復法ソルバの反復数が1/3.16に削減されていること、また、この predictor@CPUの計算時間がGPUでのソルバ計算に隠蔽されているためである。結果として、GPUのメモリバンド幅向上率とCPUも活用するアルゴリズム開発により、A100 GPUに対して合計で6.23倍の高速化が得られている。

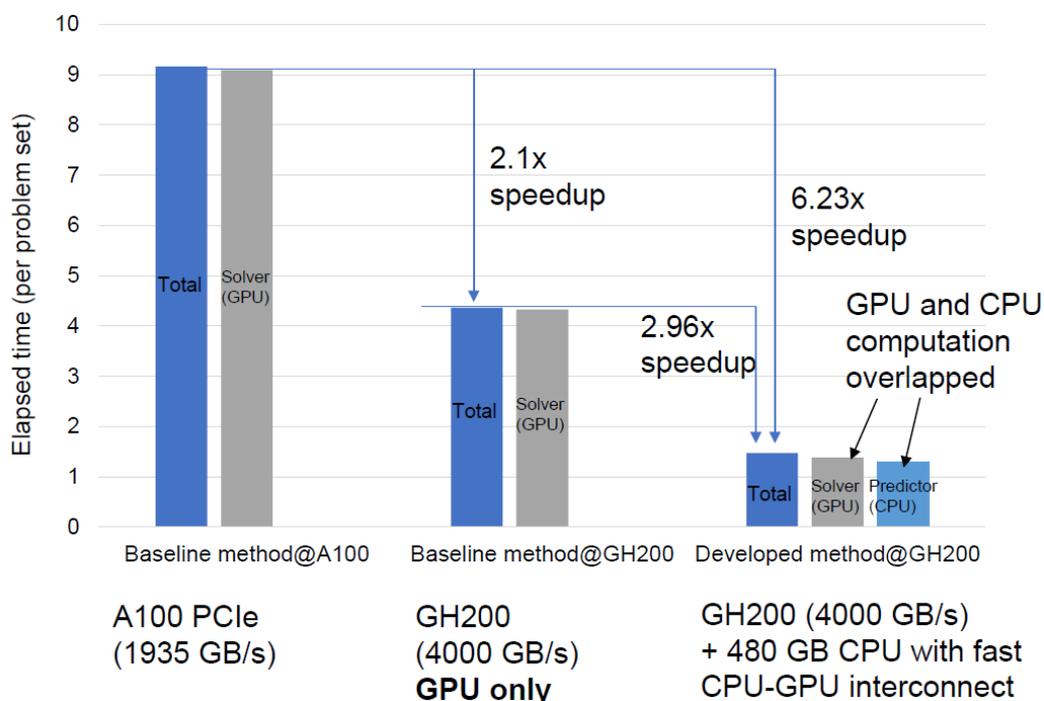


図 4.5.4.2 CPU-GPU の同時活用アルゴリズムを用いた波動解析問題の高速化結果。GPU のみを用いる通常のアプローチ(baseline method: CRS-CG@GPU)と、CPU と GPU を同時利用する提案手法 (developed method: CRS-CG@CPU-GPU)の性能を示している。従来手法では GPU 1 枚を用いて 1 ケース計算しているのに対し、提案手法では CPU と GPU を用いて同時に 2 ケース計算している。提案手法を用いることで、縦軸に示すケースあたりの実行時間が削減されていることがわかる。

上記の性能計測においては性能比較の単純化のため、GPUにおけるソルバ部に用いる疎行列ベクトル積においてメモリバンド幅に比例して性能がでるCRSによる疎行列ベクトル積を用いた。その一方で、CRS等メモリに全体行列を格納するタイプの計算手法は限られたGPUメモリを圧迫すること、また、時間ステップ毎に行列を構築するコストがかかることから性能改善の余地がある。すなわち、全体行列を格納するのではなく行列ベクトル積の都度行列を生成し右辺ベクトルにかけ合わせるElement-by-Element法などのマトリクスフリーの疎行列ベクトル積手法を用いることで、より大規模な問題を解くことや、複数ケース同時求解することでランダムアクセスを減らしさらなる高速化

を図ることも可能である。これらの内容については、Heterogeneous computing in a strongly-connected CPU-GPU environment: fast multiple time-evolution equation-based modeling accelerated using data-driven approach (Tsuyoshi Ichimura, Kohei Fujita, Muneo Hori, Lalith Maddeggedara, Jack Wells, Alan Gray, Ian Karlin, John Linford), *Eleventh Workshop on Accelerator Programming and Directives (WACCPD 2024)*にて発表しており、詳細は当該論文を参照されたい。

上記のCPU-GPUの同時活用アルゴリズムは想定将来システムにおいてそのまま活用されることが期待できるだけでなく、CPUが得意とする計算はCPUに、GPUが得意とする計算はGPUで実施するというヘテロジニアス計算環境を活用するアルゴリズム開発は地震分野以外の他分野の問題の求解においても有効と期待される。この際、高速化(time-to-solution)だけでなくエネルギー効率(energy-to-solution)の改善も期待され、今後のsustainable computingにおいて有効な方法の一つになると期待される。

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（2023 年度報告書より再掲）

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る。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よるベンチマークテストの結果を踏まえ、アルゴリズムの検討、必要計算資源の見直しを行う。

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は航空機全機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。

4.6.2 現行システムにおける解析の現況（2023 年度報告書より再掲）

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マによる Large Eddy Simulation。
- マトリックスルバー：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
- 演算量：80 EFLOP

- データ量：120 TB
- データ転送量：320 EB
- 通信量：24 EB (種類：1対1)
- IO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 10^7 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 $10^6 - 10^7$ 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 FVHC-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 KEEP スキーム
 - 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
 - 演算量：56 ZFLOP
 - データ量：0.26 PB
 - データ転送量：364 ZB
 - 通信量：36 EB (種類：1対1)
 - IO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
 - 高速飛行性能を決める高速遷音速バフェット境界ならびにフラッター境界の予測評価、離着陸時の航空機機体騒音の予測評価
 - ◇ 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
 - 飛行領域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 ベンチマークの整備計画と状況

昨年度の研究では、アーキテクチャ調査研究グループおよびベンチマーク構築サブグループによるヒアリングを受け、優先ベンチマークとしてFFBを選定した。選定した理由は以下の通りである。

- FFBの主要演算部ではリストベクトルが使用されており、メモリ性能を評価するのに好適
- FFBは富岳全資源の10%以上を使用するほどユーザが多い
- FFBはすでにGPU対応が済んでいる

また、全系システムの性能推定に関するヒアリングにおいて、以下の点を踏まえ、FFBのウィークスケール特性を評価することとした。

- ものづくり分野ではなるべく解像度の高い計算がしたいという需要がある（キャパシティコンピューティング）
- その実現には、ノード内のメモリ容量を増やすことが望ましい

今年度は、ベンチマーク構築サブグループによって実施されたベンチマーク結果について、妥当性を検証した。その結果、特にGPUシステムにおける実行性能について、以下の点が確認された。

- FFBの実行性能は、「富岳」をはじめとしたCPUシステムと同様、概ねメモリバンド幅に律速される
- MPS機能を利用しない場合、プロセス間の競合が発生し、性能が低下する

なお、ベンチマーク計測結果の詳細は4.11節にて示されているので、本節では割愛する。

4.6.4 2030年頃のアプリ像とそれを実現するために必要な計算環境と解決すべき課題

(4) 次世代計算機で期待されるブレイクスルー

- HPCを活用した現象解明とそれに基づいた最適設計が様々な産業分野の設計・製造プロセスで実用化されることで、製品の更なる高性能化や、多種・多様なニーズに対応した製品設計の迅速化等の実現が期待される
- ポンプ・圧縮機の実機等におけるレイノルズ数 10^7 以上の流れに対し準直接計算を実施することで、計測に匹敵する性能評価が可能となり、ループ試験の代替が実現
- 圧縮機、ポンプ、船舶用プロペラ等ターボ機械内部におけるレイノルズ数 $10^6 - 10^7$ オーダーの流れに対し、準直接計算に基づいた多目的最適化計算を実施することで、数百個体のターボ機械のデジタル試作が実現
- 航空機の高速飛行条件に関して、遷音速バフエット境界ならびにフラッター境界の予測評価、離着陸時の機体騒音の予測評価が実現。
- 飛行領域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が実現

(5) ブレイクスルーに必要な計算環境、解決すべき課題

(2-1) 必要計算資源

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
 - 演算量：2.4 ZFLOP
 - データ量：3.6 PB
 - データ転送量：1.0 ZB

- 通信量：720 EB
- IO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
 - 演算量：3.7 YFLOP
 - データ量：6.0 PB
 - データ転送量：24 YB
 - 通信量：283 EB (1対1)
 - IO量：23PB
 - 1解析あたりの計算時間：969 hour

(2-2) 将来アプリに向けての課題

- ウィークスケーリング向上のためのプロセス間通信の効率化（ランクマップの最適化等）
- 前後処理（格子生成、可視化）の高速化、および、各処理間のデータフローの効率化（ファイル I/O の削減）
- データ科学との連携による設計空間探索の効率化（設計空間の次元縮約、サロゲートモデルの構築、不確実性解析等）

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

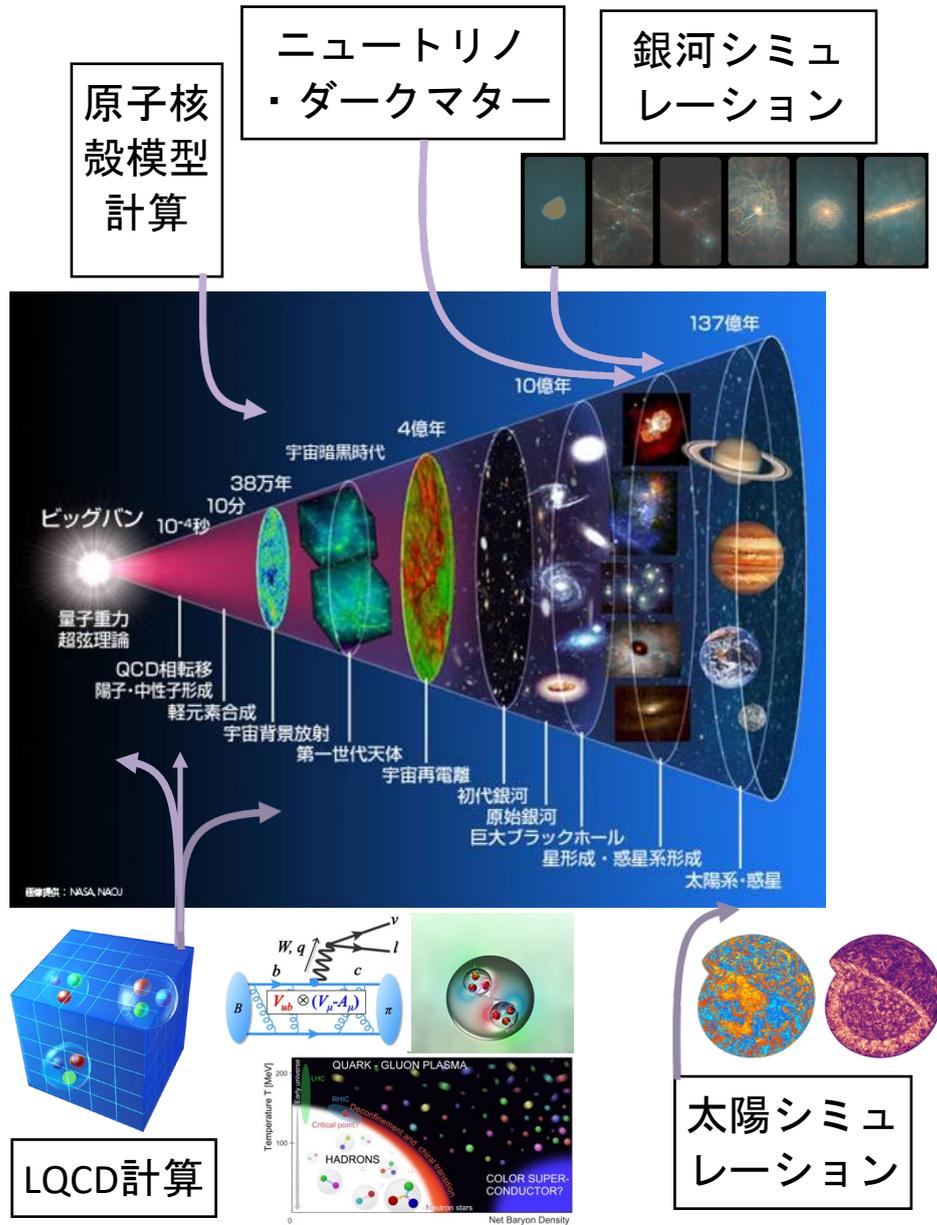


図 4.7.1.1 基礎科学ランドスケープ

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素粒子・原子核のミクロと惑星・宇宙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

● 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643×16×12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60,000EFLOP。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がある capability

computing。コードはLDDHMC (QWS機能取り込み)を用いる。(2023年度からの変更なし)

- 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。(2023年度からの変更なし)

- 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。(2023年度からの変更なし)

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統合的に理解する。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。(2023年度からの変更なし)

- 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1ステップあたりの演算数は63 PFLOPS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。(2023年度からの変更なし)

- R2D2-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・コロナ質量放出といった爆発現象は、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。(2023年度からの変更なし)

- 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。(2023年度からの変更なし)

4.7.3 ベンチマーク

2022年度に全てのアプリケーションのカーネル部分の提出を完了、2023年度は素粒子原子核分野の一部のアプリの機能追加、さらにはワークフローの追加を行った。2024年度は以下の機能追加／整備を行った。

機能追加

- LQCD:DWF-HMC(カーネル) - 既提出の「富岳」最適化バージョン、x86 最適化バージョン、OpenACC による GPU オフロードバージョンに加え、2024 年度は CUDA を用いた GPU オフロードバージョンを提供した。

計測結果はベンチマークグループから各ハードウェアベンダに評価の目的で提供されており、結果のレビューを行った。また、ベンチマークグループと連携して上記GPU版に詳細なタイマーを追加した。kokkosを用いたベンチマークコードの作成にも協力している。

なお、これまでに整備済みのベンチマークは以下のとおりである

素粒子原子核分野

LQCD:DWF-HMC

LQCD:Wilson-HMC

LQCD:配位解析

原子核殻模型

宇宙惑星分野

Athena++ (銀河シミュレーション)

ASURA-FDPS

R2D2-太陽恒星

Vlasov - ニュートリノダークマター

4.7.4 2030年頃のアプリ像とそれを実現するために必要な計算環境と解決すべき課題

素粒子原子核分野

- **カイラルフェルミオンを用いた精密カイラル QCD 計算 (LQCD: DWF-HMC)**

カイラルフェルミオンを用いた理想的なシミュレーションにより、素粒子標準模型の超精密検証と、標準模型を超える物理を探求する。また、初期宇宙の物質創成の理解に重要なQCD相転移の究極の理解を目指す。2023年度報告では、計算科学ロードマップ2023の試算に基づき、ハードxソフト性能が富岳の100倍程度で実現できる計算として、前者では、u,d,s,c,b クォーク物理点直上計算を、後者では、QCD有限温度相構造の解明、ダークマターの制限を挙げた。現行「富岳」上では、u,d,s クォーク直上計算が、前者では、1つの格子間隔について、後者では、2つの格子間隔について可能になっている状況からのブレークスルーを期待していた。ポスト富岳の目標性能がHPCアプリで富岳の5~10倍程度と設定された事を受けて、前者では、 $132^3 \times 240$ 格子でu,d,s,c クォークの物理点直上計算を行い、コデザインによる加速に加えAIの活用などアルゴリズムの革新的改良により、より大きな格子でボトムクォークまで含めた u,d,s,c,b クォーク物理点直上計算を目指す。後者では、物理点直上の高精細格子(「富岳」での $48^3 \times 12$, $64^3 \times 16$ よりも細かい $80^3 \times 20$ 格子)を用いた計算により、カイラル対称性の重要な物理課題(対称性の破れ、回復、拡大や、アクシオンダークマターに関わるQCDトポロジなど)の系統的な連続極限が可能になることから、格子誤差が大きいこれらの物理の議論を精密科学として扱う事を可能にする。

これらを実現するために必要な計算環境として、u,d,s,c クォークでの計算、有限温度の計算のいずれも富岳の資源量で 2×10^6 EFLOPS (演算量にして 1.2×10^5 EFLOPS程度)の計算資源が必要になる。アプリの特性として、演算よりもメモリ帯域幅律速である。富岳では多くの場合メモリ帯域の半分以下の性能しか出せていないので、メモリ帯域通りの性能が出る計算環境であることが望ましい。また頻繁な隣接通信が生じるため、とくに複数ノードの計算では通信が低遅延であることも重要になる。

解決すべき課題は、まずはGPU内・ノード内・ノード間という階層性を踏まえたアルゴリズムの改良があげられる。アルゴリズムでは領域分割やマルチグリッド法といった手法といった従来の手法の延長線にあるものや、GPU内の低精度だが高速な演算を活用したものが考えられる。さらにbクォークを取り込むような計算のためには、AIの活用を含むアルゴリズムの革新的な改良が不可欠になる。

さらに、これらのアルゴリズムを実装し最適化する人材の確保・育成も大きな課題である。

- **大体積ウィルソンフェルミオンを用いた精密 QCD 計算 – ハドロン相互作用 (LQCD: WF-HMC, LQCD: 配位解析)**

ウィルソンフェルミオンを用いた大体積シミュレーションにより、ハドロン間相互作用の精密決定を行う。ハドロン間相互作用は、QCDに基づき原子核物理を構築し、またエキゾチックハドロンを含む様々なハドロン状態を解明する上で最も重要な物理量であり、さらに中性子星の構造や元素合成など宇宙天文物理における諸現象の解明においても必要不可欠である。富岳においては格子間隔 1 点における計算であったため、離散化誤差が系統誤差として含まれる結果であった。この状況に対し、計算科学ロードマップでは、格子間隔3点を取り連続極限を取ることを目標としていたが、富岳NEXTでは計算性能が富岳の 10 倍程度になると想定されることから、格子間隔 2 点の計算による離散化誤差の見積もり・連続極限における評価を目指す。また、富岳においては u, d, s クォークについて物理点直上計算を行ったが、富岳NEXTにおいては u, d, s, c クォークの物理点直上計算を目指す。さらにより挑戦的計算として、P波相10相互作用や三体力について、クォーク質量が大きいところでの計算から始め、物理点に向かってクォーク質量を軽くしながらそのクォーク質量依存性を調べていきたいと考えている。

必要な演算量は、ロードマップによると2点のうち格子間隔が狭い方で、配位生成 (WF-HMC) で

5×10^6 EFLOPS、測定 (LQCD配位解析) で 1×10^7 EFLOPSとなる。測定では高速なFFTが提供されることを想定している。演算量については、これが倍精度演算のみであれば一アプリが使えるであろう資源量としては無理がある。本アプリは従来から単精度計算を用いた混合精度計算による加速が行われているので、引き続き同様な加速を用いることが前提となる。さらに、ノード間通信の影響を抑えるべく、領域分割を持ちいたアルゴリズムの開発・実装、マルチグリッド法や複数の右辺に対して同時に線型方程式を解く手法の活用といった、アルゴリズム上の改良と効率の良い実装が課題となる。

- 原子核殻模型:

原子核分野では、核子(陽子と中性子)を構成要素とした原子核を対象とした量子多体問題を解く。量子色力学に基づいた核力による第一原理計算のますますの発展が見込まれている。調和振動子ポテンシャルの1粒子波動関数で空間を展開し、配位混合計算による第一原理計算がなされている。現行の富岳では、モンテカルロ殻模型によって7主殻模型空間で質量数16までの軽い核の構造計算がなされており、自然軌道の導入など、方法論も進展している。並行してPegasusスパコン(NVIDIA GPU H100)を用いて、モンテカルロ殻模型コードのGPU対応を進め、加速部(GPU)を用いて性能を発揮できることを確認している。2030年ごろの富岳NEXTでは8主殻、9主殻を模型空間とした殻模型計算が可能になると見込まれる。この模型空間では、質量数40までのsd殻核と呼ばれる核種の第一原理計算が可能となると期待される。ブレークスルーとして、旧来の他の第一原理計算手法では取り扱いが困難であったこの領域での変形核種や、クラスタ構造を持つようなエキゾチックな核構造、電磁遷移の媒質効果の理解が進むであろう。

上記殻模型の計算は、ロードマップによると演算量で 3×10^6 EFLOPS 必要と見積られる。この計算は Level3 BLAS (密行列積) を多用するため、課題としては、ライブラリに対する課題になるが、高速なBLASチェーンになる。

宇宙惑星分野

- 銀河シミュレーション/銀河形成

- Athena++: 銀河全体から分子雲の内部構造まで一貫したシミュレーションを行う
- ASURA-FDPS: 宇宙に存在する多様な銀河の形成進化史を論じられるようになる

- R2D2 - 太陽恒星

太陽物理学では、内部での乱流と磁場の相互作用を精密に扱うことが重要な課題となっている。太陽内部では、乱流がエネルギー輸送を担い、その1次元的な構造を規定している。また、乱流は大規模な流れ場の形成や、未解決問題である太陽活動の11年周期にも本質的に関わっていると考えられている。

一方で、観測と数値シミュレーションの間には大きな乖離があり、これは「熱対流の難問」として知られ、太陽物理学における大きな障壁となっている。スーパーコンピュータ「富岳」では、現状で386億格子点・3,000万時間ステップという超大規模なシミュレーションが実現されているが、乱流の性質に関しては数値的収束には未だ達していない。次期システムでは、さらに大規模な計算によって太陽内部乱流の性質をより忠実に再現し、「内部構造」「大規模な流れ」「活動周期」といった根本問題の理解に迫ることが期待される。

また、太陽内部・表面・大気・太陽風といった、極端に異なる空間・時間スケールを持つ領域を結ぶ統合的なモデルは、宇宙天気予測の観点から極めて重要である。富岳ではすでに、太陽内部と表面、あるいは表面と太陽風といった近接領域の結合計算に成功している。次期システムでは、これをさらに拡張し、宇宙天気に資する真に包括的なシミュレーションを実現することが期待される。

- ニュートリノ・ダークマター

➤ 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

全般的な課題

- ソフト(アプリ側、システム側)
- 通信隠ぺいのためには、ノード間通信が広帯域だけでなく低遅延であることが望ましい。複数ノードにわたる、高速な FFT が必要。高速な Level 3 BLAS ルーチンが必要。
- ハード
- コデザイン(ソフトの協調設計にあたって何が必要か: アプリ側、システム側)
- コデザインに関わる人材の確保・育成。

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シンプルな法則性を仮定し、エージェント・ベース・モデリング(以降、ABM)などで解析されることも多い。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、パラメータ数が多くなる傾向がある。したがってABMの系全体が示す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のため、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りうて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おり、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予測に耐え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り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ばよいか推定できる可能性がある。さらに、こうした法則性を見出すことの利点は、現実には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。

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。当該分野のアプリケーションは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。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が必要になり、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るなどの課題がある。富岳ではSingularity仮想技術が投入され、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も明らかとなった。一方で、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もあるため、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、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

これまで、解析プログラムの現状としては、AMBシミュレータについて調査研究を行ってきた。ABMの並列化は高性能な実装が困難であるため、シナリオ別に自明的な並列処理を用いることが多い。シナリオは多数あり、大規模並列処理が可能である。現在は倍精度浮動小数点数を用いているが、単精度演算の利用は考えられる。それ以下の精度の演算では問題が発生する可能性がある。シミュレーション全体としては、高速なソーティングアルゴリズム

があるとよく、またIOへの要求も比較的高いと考えられ、例えば20万エージェントのシミュレーションでは、30時間で1TBを書き出すこともある。これまで行ってきた人流シミュレータと自動車交通シミュレータの解析結果を以下にまとめる。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。

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ヘッドのほか、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/コアであった。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。

オープンソースABMシミュレータでの例を述べる。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。2,300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年頃のアプリ像とそれを実現するために必要な計算環境と解決すべき課題

今年度は、これまで調査してきたアプリケーションに加えて、自動運転制御のためのデジタルツイン技術や災害時

の避難誘導に資する災害時デジタルツイン技術、小型衛星のフォーメーションによる編隊飛行のためのシミュレーション技術などをヒアリングにより新たに調査した。例えば、自動運転制御のためのデジタルツイン技術では、図 4.8.3.1 に示すように、NVIDIA Sionnaによる5G電波伝搬シミュレーション（+Plateauなど3Dデータ取込）、OMNet++による通信シミュレーション、SUMO+TraCIによる交通流シミュレーション（+PedSimによる歩行者シミュレーション）、Carlaによる3次元運転シミュレーションを統合したデジタルツイン化が行われている。その際には、一部をサロゲートモデル化して高速化を図ることも行われている。

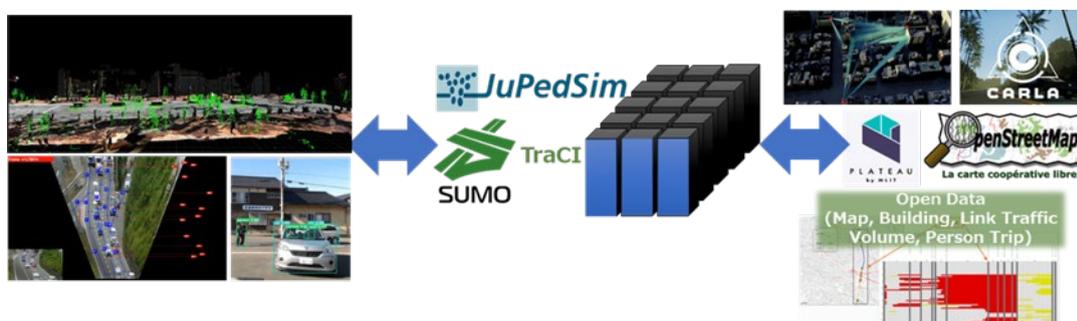


図 4.8.3.1 自動運転制御のためのデジタルツイン技術の概要

災害時デジタルツイン技術については、例えば個々の地域で得られる地域依存のデータや機械学習モデルを、特定地域とは非依存化したデータや機械学習モデルに転移し、共有化することで個人特定につながるリスクを低減しつつ活用する方法なども研究されている。その応用の一つとして、神戸市と連携した避難訓練も行われた。テレビでの個別通知～スマホによる避難誘導～避難所チェックインなどが実証され、その際にはGPS避難データの収集をしつつ、人口分布と避難率に基づくシミュレーションも同時に行いながら実験が行われるなど、社会展開に向けた取り組みが進みつつある。これら技術の進展により、将来的にはLLMをベースとしたエージェントシミュレーションとの連携により、災害時などの特定状況下のみならず、平常時での人の行動シミュレーションが行えるようになり、例えば都市計画への応用なども想定される。

また、これまでの調査結果も以下にまとめる。2030年頃には、計算能力の向上により、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。

4.9 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（2023 年度報告書より再掲）

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（2023 年度報告書より再掲）

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 4.9.2.1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、カブ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 4.9.2.1の右半分）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。

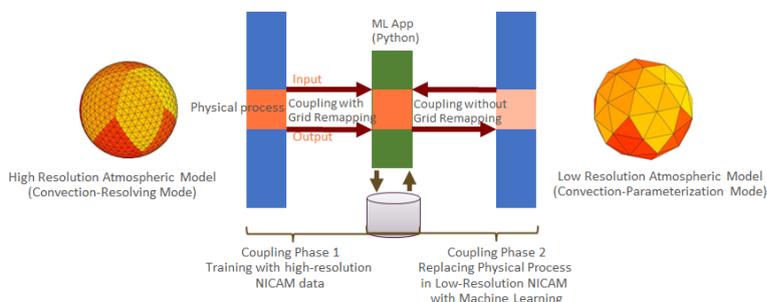


図 4.9.2.1 NICAM-AI の学習フェーズと計算フェーズ

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 163,840、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10,240、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/BDEC-01-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3,600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の一種である。

富岳による計算では、1,000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2,500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。

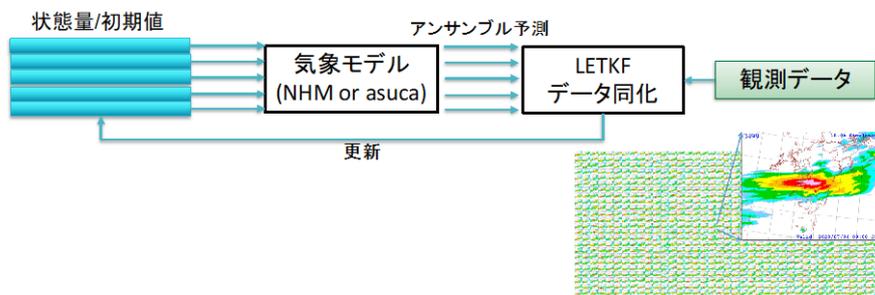


図 4.9.2.2 NHM-LETKF および asuca-LETKF の計算フロー

(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4,000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8,000GB程度出力する。通信は、学習データのための受け渡し为主であり、これは出力データのごく一部のみである。

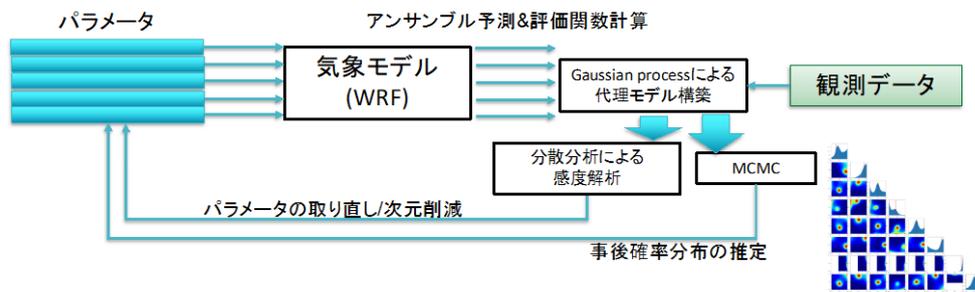


図 4.9.2.3 NHM-LETKF および asuca-LETKF の計算フロー

(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15.7TFLOPS (単精度)、メモリバンド幅0.9TB/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125TFLOPS (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る。

4.9.3 ベンチマーク

2023年度末までに、ベンチマークとして、(a)、および(d)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。2024年度は大きな変更は行っていない。

(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。今年度は、WaitIOについて、新たな通信手法としてVerbs(InfiniBand, RoCE)とTofu(uTofu)に対応した。今後、両者を融合するライブラリを開発し、そのライブラリを用いたベンチマークコードの動作検証を行う予定である。

(d) 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。現在は諸事情により公開を停止している。

4.9.4 2030年頃のアプリ像とそれを実現するために必要な計算環境と解決すべき課題

2030年頃のアプリ像とそれを実現するために必要な計算環境と解決すべき課題について述べる。

(a)では、大気モデルにおける複数の物理コンポーネントをAIを用いたデータ駆動型モデルで代替する。大気モデルとAIアプリケーションは並列に実行され、大気モデルとAI側で相互にデータ交換しながら時間積分を進める。学習に際しては、教師データとするシミュレーションは数km～数百mスケールの解像度で実行し、AI側は数十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～1,000倍高速な長期間(100年～1,000年)の気候計算を実現する。想定している計算規模は、全球870m 190層1,300億格子点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。雲物理過程を詳細に再現できる高解像度で学習した結果を低解像度の計算に適用することにより、100年～1,000年スケールの気候計算を高精度かつ高速に実現でき、より精緻で確度の高い気候変動予測が可能となる。

ターゲット問題はCPUノードとGPUノードの連携が必要なため、富岳のアーキテクチャでは実現できず、実現にはGPUノードが必要である。現状では富岳と同等のCPUノードを持ちGPUノードとの連携が可能な東大のWisteria/BDEC-01では大気モデル側が水平格子点数163,840、鉛直層数78の計算領域に対して40ノード160プロセスで実行している。一方、AI側は水平格子数10,240、鉛直層数鉛直総数78の計算領域を20プロセスで実行している。大気モデル側はFortranで記述され、MPIを用いた領域分割とOpenMPを用いたスレッド並列により並列化されている。AI側はPythonで記述され、MPIを用いた領域分割とAIライブラリの並列処理機能を併用している。大気モデル側はNetCDF、AI側はPytorchやScipyなど機械学習に必要なライブラリを用いている。大気モデル側は倍精度実数と単精度実数の混合精度計算が可能となっている。AI側も倍精度実数と単精度実数を用いている。大気シミュレーションは多種大容量のデータを出力するためファイル入出力の性能は極めて重要である。二階層ストレージが採用された場合、ヒストリデータの出力等で積極的に活用する予定である。AIによる物理過程の代替計算では大気モデル側とAI側で大容量のデータを高頻度に交換する必要があるため、十分なノード間通信性能が要求される。また大容量の計算結果を解析する場合にローカルマシンへのデータ転送は現実的ではないため、Jupyterなどサーバーサイドで解析処理を行う仕組みが求められる。計算結果の処理はPythonが多用することになると考えられる。Jupyterなどサーバーサイドでの解析処理を実行できる環境が求められる。

(c)の気象モデルの不確実性定量化/パラメータ最適化では、1,000×1,000×50格子程度の気象シミュレーションを最低でも72時間分時間積分する。この計算を1,000メンバ以上で行うことで大アンサンブルのデータセットを生成する。このデータセットを機械学習することで代理モデルを構築し、代理モデル上でモデルパラメータやモデル選択をベイズ推定することで気象モデルの高性能化を達成する。必要に応じて代理モデルの性能向上を企図し、代理モデルによる学習と気象アンサンブルシミュレーションを繰り返す。これにより非常に高次元な気象シミュレーションのパラメータ空間を効率よく探索し、性能向上が達成できることが期待される。計算規模としては、現状の東京大学情報基盤センターのWisteria/BDEC-01で実施しているものに比べて8倍程度である。

利用するプログラムは、Fortranで記述され、MPI/OpenMPでハイブリッド並列されている。NetCDFなど気象シミュレーションでよく使われるものに依存している。近年では、気象シミュレーションの混合精度化が進んでおり、混合精度の利用が可能であればその利用を検討する。GPU利用については、機械学習部分はGPUの利用を前提としている。気象シミュレーションは近年GPU化が進んでいるため、2030年頃には、その開発成果を利用することですべ

でのワークフローをGPUで行える可能性がある。代理モデル構築にAIを活用する。ただし、いわゆる深層学習が必要であるか、ガウス過程回帰などの手法で十分であるかは解きたい問題による。気象シミュレーションの多様な出力のうち、ワークフロー後半で機械学習に使うものだけを速いアクセスのストレージに出力できれば計算が効率化できる可能性がある。観測データと比較可能な出力だけが機械学習側では必要なことが多いため、容量は小さいがアクセスは速いストレージが学習に有効活用できる可能性がある。

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、次世代計算基盤のアーキテクチャ候補に合わせた、将来アプリケーションで用いられると想定される科学技術計算アルゴリズムの調査を行った。その上で、次世代計算基盤のアーキテクチャ候補における科学技術計算アルゴリズムの性能解析と改善について検討を行った。

アプリケーション調査研究グループの純アプリサブグループ（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・Society 5.0分野）において、線形代数演算ライブラリのBasic Linear Algebra Subprograms (BLAS) または Linear Algebra PACKage (LAPACK) は気象・気候分野のGSM/asuca、デジタルツイン・Society 5.0分野のNICAM-AIおよび都市気流計算、生命科学分野のGENESIS、新物質・エネルギー分野のmVMC、HΦおよびSALMONで用いられている。また、高速フーリエ変換 (Fast Fourier Transform、以下FFT) は気象・気候分野のGSM/asuca、生命科学分野のGENESISおよびテンプレートマッチング、新物質・エネルギー分野のSALMONで用いられている。

次世代計算基盤の将来アーキテクチャ候補の計算ノードにおいて、CPU部はメニーコアCPU、加速部はGPUなどが想定されており、演算コア数をさらに増やすことで性能向上を図ることが予想される。そこで、問題サイズが小さい場合に演算コアを有効に活用する手法について検討を行った。

線形代数演算において、行列サイズを $n \times n$ とすると密行列積の計算量は $O(n^3)$ であるのに対して、メモリアクセス回数は理想的には $O(n^2)$ であることから演算密度が高く、アクセラレータに適していることが知られている。また、 p 個のMPIプロセスを用いて $n \times n$ の密行列積を計算する場合、各MPIプロセスにおける並列度は $O(n^3/p)$ となる。純アプリサブグループの多くのアプリケーションにおいて密行列積が使われており、密行列が使われている計算に対しては問題サイズが比較的小さい場合でも演算コアの有効活用が期待できる。

一方で、3次元FFTの問題サイズを n^3 とすると計算量は $O(n \log n)$ であるのに対して、メモリアクセス回数は理想的には $O(n)$ であることから、密行列積に比べると演算密度が低くなる。昨年度の調査研究で検討した手法により、3次元FFTにおいて二重ループを一重化することで並列度を $O(n^2)$ から $O(n^3)$ に増やすことができることが明らかになったが、この手法を p 個のMPIプロセスを用いて3次元FFTを実行する場合に適用したところ、各MPIプロセスにおける並列度を $O(n^3/p)$ とすることができ、問題サイズが小さい場合において性能を改善できることが分かった。

また、並列3次元FFTにおいて n^3 個のデータを $\sqrt{p} \times \sqrt{p}$ 個のMPIプロセスで2次元分割した場合には全対全通信のメッセージサイズは $O\left(\frac{n^3}{p}\right)$ であるため、通信レイテンシの影響はそれほど大きくはならないが通信量は $O(n^3/p)$ となる。GPUクラスタにおける並列3次元FFTの性能解析を行った結果、実行時間において全対全通信に要する時間が大部分を占めることが分かった。

4.10.2 機械学習アルゴリズム調査研究の成果

NVIDIAのH100はFP8での理論性能が極めて高く、ピークで約2,000TFLOPS（構造的スパース化利用時は4,000TFLOPS）に達する。AMDの最新GPUであるInstinct MI300XもFP8演算をサポートし、その理論性能はH100を上回る約2,615TFLOPSに及ぶ。Habana Gaudi2もFP8対応が追加されており、理論性能は約865TFLOPSとやや劣るものの、実際のLLM学習ではH100に次ぐ高いチップあたり性能を示している。GoogleのTPU v5pなど競合アクセラレータもスパース演算や低精度演算で対抗しており、TPU v5pは前世代比2.8倍のLLM学習性能と優れた費用対効果をもつ。FP8は8ビット長の浮動小数点で、E4M3（指数部4ビット・仮数部3ビット）とE5M2（指数部5ビット・仮数部2ビット）の2種類のフォーマットが提案されており、E4M3はダイナミックレンジは狭いものの精度が高く、E5M2は広いレンジを持つ代わりに精度がやや低いという特性がある。NVIDIA H100やIntel Gaudi2ではこの両形式を用途に応じて使い分け、例えば重みや活性化にはE4M3、勾配には

E5M2を用いるハイブリッド方式で高い精度を確保している。

大規模モデル学習においてもFP16/BF16と遜色ない精度（誤差1%未満）で収束可能な例も報告されている一方、FP8を用いると学習が不安定になるというケースも多数報告されている。特に、極端な長時間学習ではSwiGLUのような活性化関数で外れ値の増幅による不安定性が指摘されており、Smooth-SwiGLUの導入などアルゴリズム面での工夫も進められている。本調査研究では、Llama3 70Bの継続事前学習においてFP8の学習の安定性に対する影響を調べた。図4.10.2.1に示すようにBF16ではスパイクがおこらないのに対して、FP8ではスパイクが発生している。スパイクが発生すると破滅的忘却が起こり、モデルの性能が大幅に低下するため、このような安定性への影響は引き続き検討する必要がある。

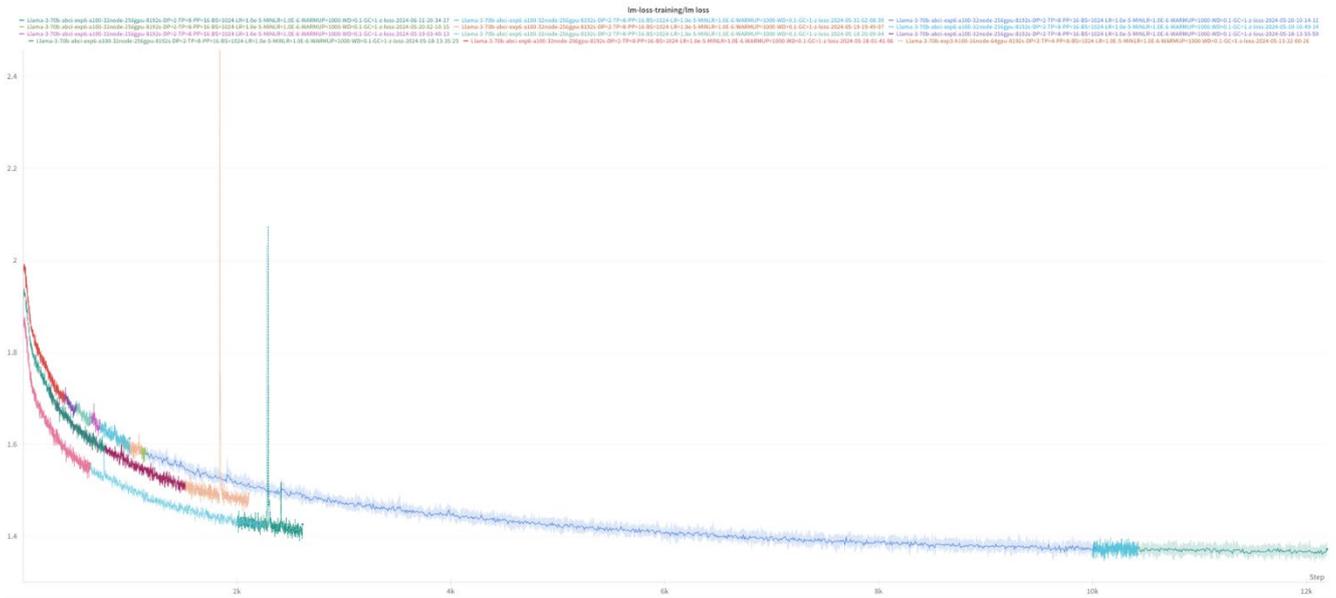


図 4.10.2.1 FP8 による混合精度演算が Llama3 70B の継続事前学習の安定性に及ぼす影響

NVIDIAは2024年発表の次世代アーキテクチャ「Blackwell」でFP8に加えて4ビット浮動小数点（FP4）のサポートを打ち出している。AMDも最新のCDNA3世代(GPU部分)でFP8対応を実現しており、訓練用にE5M2、推論用にE4M3を採用する実装でIEEE規格策定にも準拠している。今後のCDNA4世代でも低精度演算の強化が予想され、FP8やFP4によるさらなる性能/効率向上がロードマップ上示唆されている。IntelはHabana GaudiシリーズでFP8を導入済みで、2024年発表のGaudi3では2ダイ統合設計によりGaudi2比2倍のFP8性能(約1835TFLOPS)を達成しており、加えて将来のFalcon ShoresプラットフォームなどAI特化型アクセラレータを構想中である。今後のAIハードウェア市場は、FP8を共通基盤としつつ、より低ビットの演算やスパース化技術で性能を伸ばす路線と、新規アーキテクチャへの挑戦が並行して進むと考えられる。

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

4.11.1.1 ベンチマークの整備

昨年度までに収集済みで、GitHubリポジトリ https://github.com/RIKEN-RCCS/FS_Benchmarks で既に限定公開している以下のベンチマークコードの整備を引き続き行なった。

- CUBE
- ChemTS
- EbE-method
- FFVHC-ACE
- FrontFlow_blue
- GENESIS
- Gromacs
- ISPACK
- LLM
- LQCD-DWF-HMC
- LQCD-Measurement
- LQCD-Wilson-HMC
- NICAM
- NICAM-AI
- QWS
- RMCSM
- SALMON
- SCALE-DG
- SCALE-LETKF
- SCALE-LT
- SCALE-SDM
- asura-fdps
- athena-benchmark
- mVMC
- qNET_kernel
- vlasov_refact

4.11.1.2 フルシステム性能推定

昨年度には、GENESIS、FrontFlow/blue、LQCD-DWF-HMCおよびMegatron-LM DeepSpeedについて、フルシステム性能推定手法を定めた。今年度には、それらに加え、SALMON、SCALE-LETKFおよびEbE-methodのフルシステム性能推定手法を定めた。

それらの方法に基づいてアーキテクチャ調査研究グループが実施したフルシステム性能推定に関し方法と結果を分析し、その妥当性を検証した。

4.11.1.3 GPU 評価

OpenACCで記述されたプログラムの、種々のGPUシステムにおける性能を確認することを主たる目的として、優

先ベンチマークのうちGENESIS、SALMON、SCALE-LETKF、FrontFlow/blue、LQCD-DWF-HMCの5つに関し、表 4.11.1.1に示すGPUシステムにおいて性能の評価を行った（ただし、現在のところ、AMD機では有効な結果は得られていない）。また、比較のため、富岳における性能も併せて評価を行った。

表 4.11.1.1 評価環境

Machine	CPU	# of CPUs	cores/CPU	Total	GPU	GPU
Fugaku	Fujitsu A64FX	1	48	48	N/A	0
a100	AMD EPYC 7763	2	64	128	NVIDIA A100	8
qc-a100	AMD EPYC 7713	2	64	128	NVIDIA A100	8
qc-h100	AMD EPYC 9534	2	64	128	NVIDIA H100	4
qc-gh200	NVIDIA GH200 Grace	1	72	72	NVIDIA H200	1
HBW2	Intel Xeon Platinum 8480+	2	56	112	NVIDIA H100	4
qc-mi250	AMD EPYC 7713	2	64	128	AMD MI250	8
LUMI-G	AMD EPYC "Trento"	1	64	64	AMD MI250X	4

(a) GENESIS

GENESISの評価結果を表 4.11.1.2に示す。GPUシステムにおける性能は、絶対性能およびスケーラビリティのどちらも良好であった。なお、GENESISのGPU向け実装はCUDAによる。

表 4.11.1.2 GENESIS 評価結果

MACHINE	Compiler	# of nodes	# of cores	# of GPUs	# of MPI procs	# of OMP threads	Time (sec)
Fugaku	FJ	1	48	0	16	3	124.4
Fugaku	FJ	2	96	0	32	3	73.4
Fugaku	FJ	4	192	0	64	3	42.7
qc-a100	GNU+CUDA	1	128	8	16	8	25.6
qc-a100	GNU+CUDA	2	256	16	16	16	20.1
qc-gh200	GNU+CUDA	1	72	1	4	18	25.5
qc-gh200	GNU+CUDA	2	144	2	8	18	23.1
qc-gh200	GNU+CUDA	4	288	4	16	18	20.0
qc-gh200	GNU+CUDA	8	576	8	32	18	18.6
HBW2	Intel+CUDA	1	112	4	8	14	18.6

(b) SALMON

SALMONの評価結果を表 4.11.1.3に示す。SALMONは、大きく時間発展計算(Time evolution)と基底状態計算 (Ground state) から成る。富岳における性能と比較したとき、GPUにおいて時間発展計算 (Time evolution) については良好な性能が得られているものの、基底状態計算については富岳よりも遅い結果となっている。これは、基底状態計算で用いられる固有値ライブラリがGPU向けに最適化されていないためであることがわかっている (富岳で使用したライブラリは十分に最適化されたものである)。

表 4.11.1.3 SALMON 評価結果

MACHINE	Compiler	# of nodes	# of cores	# of GPUs	# of MPI procs	# of OMP threads	Ground state (sec)	Time evolution (sec)
Fugaku	FJ	1	48	0	4	12	133.93	13.982
Fugaku	FJ	2	96	0	8	12	72.248	7.682
Fugaku	FJ	3	144	0	12	12	55.409	5.385
Fugaku	FJ	4	192	0	16	12	39.396	4.343
a100	nvfortran	1	128	8	1	1	442.443	4.275
a100	nvfortran	2	256	16	2	1	227.794	3.068
qc-gh200	nvfortran	1	72	1	1	1	319.059	2.405
qc-gh200	nvfortran	2	144	2	2	1	177.114	1.407
qc-gh200	nvfortran	3	216	3	3	1	111.513	1.182
qc-gh200	nvfortran	4	288	4	4	1	86.185	1.013

(c) SCALE-LETKF

SCALE部の評価結果を表 4.11.1.4に、LETKF部の評価結果を表 4.11.1.5に示す。SCALE部分について、最適化が済んでいる富岳版と比べるとやや性能が劣っているが、GPU対応は現在進行中であり今後改善が期待される。LETKF部分はGPU対応が行われておらず、性能を引き出せていない。こちらも今後GPU対応を進めて改善する予定である。

表 4.11.1.4 SCALE 評価結果

MACHINE	Compiler	# of nodes	# of cores	# of GPUs	# of MPI procs	# of OMP threads	Time (sec)
Fugaku	FJ	2	96	0	12	8	85.66
Fugaku	FJ	3	144	0	12	12	46.86
Fugaku	FJ	4	192	0	12	16	41.316
qc-a100	nvfortran	2	256	16	12	1	76.2

表 4.11.1.5 LETKF 評価結果

MACHINE	Compiler	# of nodes	# of cores	# of GPUs	# of MPI procs	# of OMP threads	Time (sec)
Fugaku	FJ	2	96	0	12	8	43.565
Fugaku	FJ	3	144	0	12	12	38.299
Fugaku	FJ	4	192	0	12	16	34.39
qc-a100	nvfortran	2	256	16	12	1	41.629
qc-gh200	nvfortran	2	144	2	12	1	34.951
qc-gh200	nvfortran	3	216	3	12	1	34.197
qc-gh200	nvfortran	4	288	4	12	1	34.055

(d) FrontFlow/blue

FrontFlow/blueの評価結果を表 4.11.1.6に示す。富岳と比較して、GPUシステムにおける性能は良くない。この原因は、Multi-Process Service (MPS) 機能を無効であったことだとわかっており、改めて評価を行うことを予定している。

表 4.11.1.6 FrontFlow/blue 評価結果

MACHINE	Compiler	# of nodes	# of cores	# of GPUs	# of MPI procs	# of OMP threads	Time (sec)
Fugaku	FJ	1	48	0	4	48	28.5
Fugaku	FJ	2	96	0	8	96	30.5
Fugaku	FJ	4	192	0	16	192	32.2
a100	nvfortran	1	128	8	4	4	107
a100	nvfortran	2	256	16	8	8	134
qc-gh200	nvfortran	1	72	1	4	4	89.8
qc-gh200	nvfortran	2	144	2	8	8	114
qc-gh200	nvfortran	4	288	4	16	16	126
HBW2	nvfortran	1	112	4	4	4	90.3

(e) LQCD-DWF-HMC

LQCD-DWF-HMCの評価結果を表 4.11.1.7に示す。各GPUシステムにおけるOpenACC版の性能は、同一システム上のCUDA版と同程度であった。GPUの世代が進むにつれて性能が向上し、特にqc-gh200では富岳と比較して数倍から10倍の性能を示した。ウィークスケーリングはGPUシステムにおいても良好であったが、ストロングスケーリングは十分に得られず、問題サイズや計算戦略の見直し、さらにはアルゴリズムの改良が求められる。

表 4.11.1.7 LQCD-DWF-HMC 評価結果

MACHINE	Compiler	# of nodes	# of cores	# of GPUs	# of MPI procs	# of OMP threads	32x8x8x12 /node (GFLOPS)	64x32x16x12 /node (GFLOPS)
Fugaku	FJ	1	48	0	4	12	397	422
Fugaku	FJ	2	96	0	8	12	402	426
Fugaku	FJ	3	144	0	12	12	401	411
Fugaku	FJ	4	192	0	16	12	397	420
qc-a100	nvhpc-hpcx/24.9	1	128	1	1	NA	699	1831
qc-a100	nvhpc-hpcx/24.9	2	256	2	2	NA	265	492
qc-gh200	nvhpc-hpcx/24.9	1	72	1	1	NA	1123	4077
qc-gh200	nvhpc-hpcx/24.9	2	144	2	2	NA	521	1730
qc-gh200	nvhpc-hpcx/24.9	3	216	3	3	NA	499	1723
qc-gh200	nvhpc-hpcx/24.9	4	288	4	4	NA	470	1649
qc-h100	nvhpc-hpcx/24.9	1	128	1	1	NA	983	2287
HBW2	nvhpc/24.3	1	112	1	1	NA	915	3303

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応用分野に簡単に適用できるわけではないため、目標は応用分野に適したモデリングアプローチを決定することである。したがって、性能モデリング研究開発は、ターゲットとする応用分野、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、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必要がある。目標は、確立された指標と技術予測に基づいて、候補となる設計の「what-if」分析を迅速に実行する方法と、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) 将来のHPC CPUアーキテクチャにおけるデザイン空間探索のための性能予測の利用

コード設計環境では、ハードウェア、ソフトウェアスタック、アプリケーションの変更が性能に及ぼす影響を評価することが極めて重要である。マルチコアノードおよびマルチスレッドアプリケーションに特化した初期設計空間探索フェーズを容易にする、性能予測のためのワークフローを説明する。最初に、入手しやすいマシンで実施した分析を通じて、アーキテクチャの効率を決定する。その後、スレッド単位のソフトウェアスタックに基づいて、仮想ターゲットマシンの持続可能なピーク性能を評価する。これらの評価を利用して、アクセス可能なソースマシンから目的のターゲットマシンまでの予想される性能の進化を予測する。

本手法の有効性を評価するため、NAS Parallelやccs-qcdなどのベンチマークを使用し、gem5を使用したサイクルレベルのシミュレーションと、MCA (Machine Code Analyzer) に基づく高速探索手法との精度とオーバーヘッドを比較した。本手法のアプローチは、特にQWSとgenesisのコンテキストにおいて、gem5で実現可能なものよりも大規模で代表的なアプリケーションを解析する能力が向上していることを示す。MCAの速度とgem5の精度の中間に位置する本手法は、一般的に低速なgem5を用いたシミュレーションでは実用的ではない、より多様なアプリケーションやワークロードに適用可能なバランスの取れたソリューションを提供する。

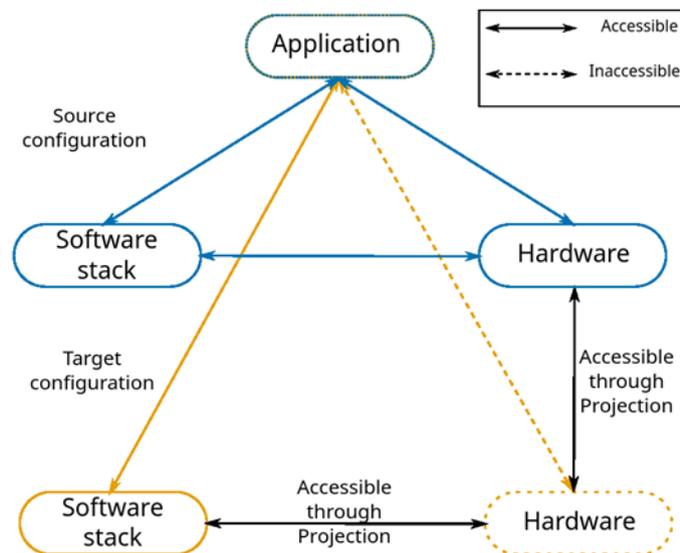


図 4.12.1.1 提案する性能予測のためのワークフロー

表 4.12.1.1 GEM5、MCA、および我々のワークフローの実行時間オーバーヘッド

Application	Source time (s)	gem5 overhead	Projection overhead	MCA overhead
IS-OMP	0.41	510000×	18000×	320×
CG-OMP	12.57	140000×	1000×	23×
MG-OMP	0.49	380000×	26000×	300×
FT-OMP	1.60	250000×	4000×	63×
EP-OMP	11.13	80000×	1000×	120×
ccs-qcd	40.74	200000×	430×	67×
QWS	811.7	Too long to run	530×	1800× for the small input
genesis	260.2	Too long to run	380×	Unknown

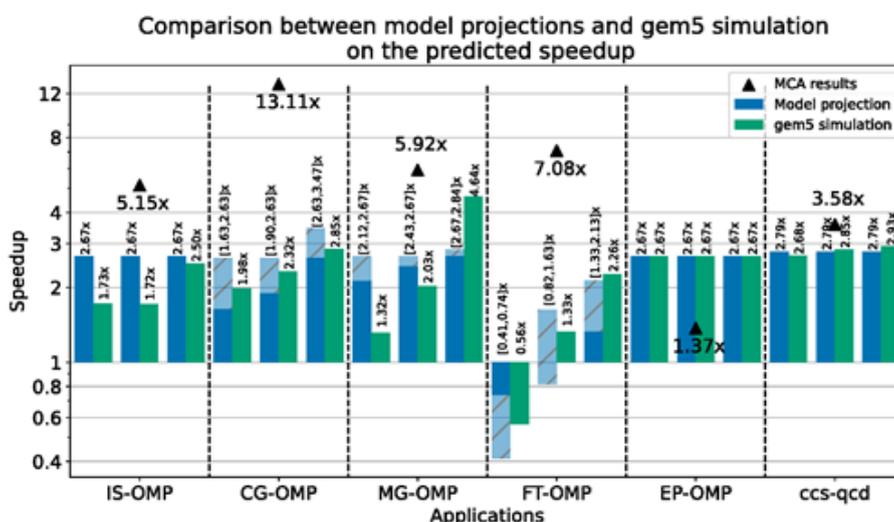


図 4.12.1.2 アプローチの予測精度

2) HPCジョブの特徴づけと分類

高性能計算（HPC）ジョブを、ユーザの介入を必要とせず、実行前にメモリ律速ジョブと計算律速ジョブのいずれかに分類するように設計された、革新的なオンラインデータ駆動型フレームワークであるMCBoundを説明する。この分類は、様々な科学的領域における相反する計算要求を管理し、リソースの使用効率を高め、エネルギー消費を削減するのに役立つ。

主な貢献

1. 新しいフレームワーク：MCBoundは、HPC環境における実行前のジョブ分類が可能な最初のシステムである。
2. データ駆動型アプローチ：モデルトレーニングのために過去のデータから参照データセットを生成する。
3. 実証検証：理化学研究所計算科学研究センターのスーパーコンピュータ「富岳」で220万回のジョブ実行を解析。0.89以上のスコアと最小限のシステムオーバーヘッドで効果的な分類を実証。
4. 幅広い適用性：Pythonベースの実装は、他のHPCシステムにも容易に適応可能。

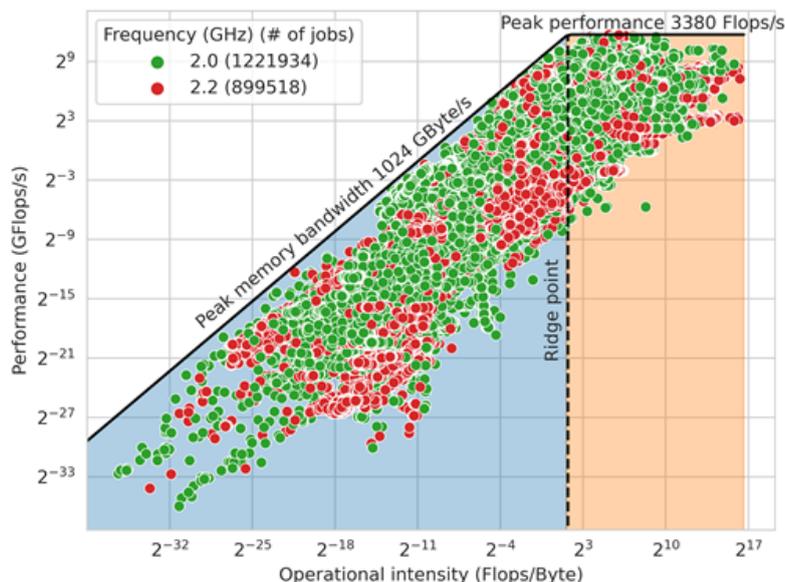


図 4.12.1.3 スーパーコンピュータ「富岳」のジョブミックスのルーフライン

MCBoundは、情報に基づいた実行決定を可能にすることで、リソース使用における非効率性に対処し、最新のHPCインフラに依存する科学コミュニティに大きな利益をもたらす。MCBoundフレームワークは、HPCシステムにおけるジョブの分類効率を向上させるだけでなく、ジョブのパターンやユーザの行動に関する貴重な洞察を提供する。過去のデータを分析することで、管理者はリソースの利用傾向を理解し、それに応じてスケジューリング戦略を最適化することができる。自動化された頻度セレクトとして導入された場合、MCBoundはジョブの分類に基づいて実行パラメータを調整することで計算時間を大幅に削減し、不要なリソースの割り当てを最小限に抑える。この的を絞ったアプローチは、計算時間を節約するだけでなく、システム内の大幅なエネルギー節約にも貢献し、最新のコンピューティング環境における持続可能性の目標に合致する。

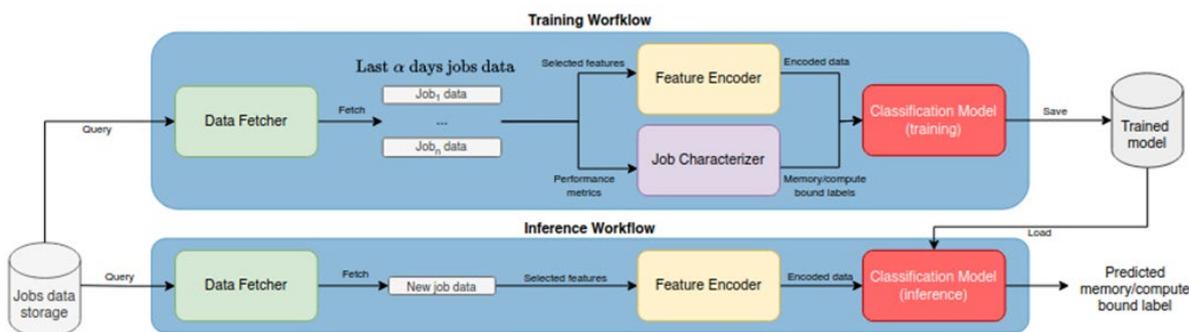


図 4.12.1.4 MCBound のコンポーネントとワークフローのハイレベル・スキーム

3) 継続：AI中心のワークロードのための相互接続とトポロジの要件

BF16の精度で1兆パラメータもの大規模言語モデル（LLM）を学習させることは大きな課題であり、ハードウェア資源を効率的に利用するための戦略的計画が要求される。このような大規模モデルの場合、必要なワーキングメモリはパラメータ数の約10～20倍になる。これは、テンソル並列（TP）、パイプライン並列（PP）におよそ2バイトを乗じたRAMの約10分の1が必要であることを意味し、その結果、20TB以上が必要と見積られるため、TPのスケールアウトが必要となる。データ並列（DP）をスケールアップするには、DPノード内でTP、CP/SP、PPの各次元

にわたってallreduce処理を行う必要がある。この複雑なオーケストレーションにより、ハードウェアの能力と革新的な並列化戦略の両方を活用し、最先端のLLMに必要な膨大なスケールを処理しながら、モデルを効率的に学習することができる。しかし、一般的にインジェクションバンド幅律速のMPI処理は、レイテンシ律速のアプリケーション向けに最適化された従来のHPCインターコネクトにとっては負担となる。

効果的なLLMトレーニングインフラ設計のためには、リダクションリングの基本要件として、少なくともデータ並列（DP）数のバイセクションバンド幅を確保することが重要である。しかし、様々な理由により、トポロジのわずかなオーバーサブスクリプションが必要である。

これらの要因の評価を支援するため、既存のツールを改良し、バイセクションバンド幅の推定値（現在はヒューリスティックベース）や、一般に入手可能なデータを使用したケーブル断線およびファブリックコストの概算値など、価値ある測定基準を提供している。このような改良により、期待される性能と経済的な影響に関する洞察を提供することで、十分な情報に基づいた設計の選択が容易になる。この情報によって初期選択を行うことができるが、システムによって、必要に応じてさらなる調整を行い、変化する要件や制約に最適化することができる。このアプローチにより、技術的仕様と実用的側面の両方がバランスよく考慮され、効率的で費用対効果の高いLLMトレーニングインフラの開発が導かれる。

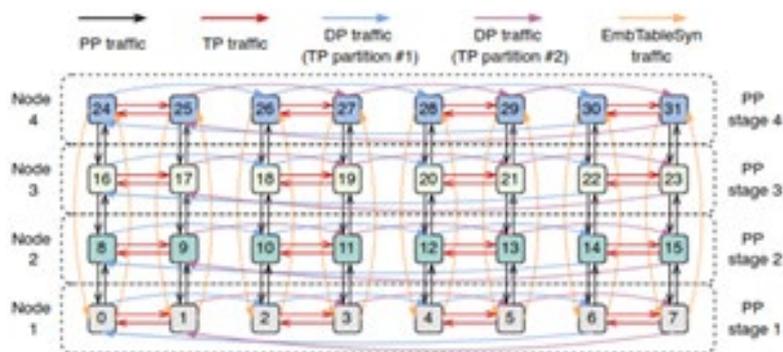


図 4.12.1.5 DeepSpeed の 32GPU への並列マッピング

4) 継続：精度操作と近似計算のためのツールチェーン

高性能計算（HPC）において様々な精度を実装するための現在の方法は、開発者にとって課題となっており、多くの場合、手作業による多大な労力を必要としている。これに対処するため、HPCアプリケーション内の浮動小数点の動作に関する包括的な洞察を提供することで、開発者の作業負担を軽減するLLVMベースの自動ツールチェーンを開発した。このツールは、C、C++、およびFortran言語における特定の演算、ループ、または関数全体のインストルメンテーションを可能にする。コンパイル時には、シャドウ変数を使用して数値誤差を監視しながら、ユーザが指定したレベルに自動的に精度を調整し、数値安定性の事後分析を行う。アルゴンヌ国立研究所のFlash-Xとの共同研究を開始し、将来の低精度アプリケーションに備える数値的懸念に対するツールの有効性を評価している。

さらに、精度を下げることは、エネルギー消費量の削減や実行時間の短縮につながるだけでなく、残念ながらシミュレーションや数値計算の誤差につながることもあるため、数値計算の誤差を回避するための高精度エミュレーションスキーム（Ozaki法など）をアプリケーションチームと積極的に検討している。

5) 継続：SimEng、VPSim、Qemu、SST gem5に代わるもの

サイクルレベルシミュレータであるgem5を使用した経験から、現実的なワークロードでは開発時間が長くなり、シミュレーションに時間がかかることが判明した。VPSim/Qemuベースの評価など、迅速で、一次近似の代替案を模索している。フランスCEAと協力して、以前の研究であるMCAベースの外挿をVPSimに統合し始めた。さらに、構造シ

ミュレータツールキット（SST）を使ったネットワークシミュレーションにも取り組んでいる。最後に、SimEngの開発者と協力し、HPCアプリケーション向けの長いベクトル（512ビット以上）とArm SME（行列ユニット）の研究にも注力している。

4.13 気象庁モデル評価・解析サブグループ

4.13.1 調査研究の成果

これまでに、気象・気候モデル中、特に気象庁モデルのベンチマーキング評価とその解析を行い、性能情報等の知見を基に次世代計算基盤に求められる性能・機能について調査を行うとともに、次世代計算基盤を対象にしたグランドチャレンジ級の成果が期待できる気象・気候モデルを選定し、そのベンチマーク候補を検討することを目的として本サブグループの調査検討を行ってきた。

具体的には、気象庁気象研究所から、気象庁モデルおよび関連する情報を提供してもらい、気象庁で実施した各種最適化の評価について議論・検討を行った。気象庁で運用中の数値予報モデルは、集中豪雨や突風など局地的な激しい現象から、暖・寒候期予報といった長期の現象まで、時間・空間スケールが多岐にわたる現象を対象としている。これらの予測対象に合わせて、モデル領域、解像度、予報期時間等も多岐にわたっており、対象に適した解析手法が選択されている。それらの中から、大規模計算が必要な問題規模にスケールアップできることや、気象庁側の将来的な取組も考慮したベンチマークとして、GSM、asuca、asuca-Varの三つのモデルの提供をうけ、検討を行った。

特に、提供された複数のベンチマーキングを「富岳」上で実施するとともに、詳細プロファイラを用いた評価を行い、そのベンチマークの特性や、ボトルネックとなっている箇所などの評価を行った。特に、ボトルネックの可能性の高い箇所については、コンパイル結果のメッセージを確認し、SIMD化やスレッド並列化、ソフトウェアパイプラインの適用などの最適化の詳細について調査し、これまでハードウェアバリアによるスレッド間同期の高速化が、スレッド実行にばらつきがある場合などに効果があることが明らかとなっている。この点と今後のアーキテクチャ候補について、気象庁気象研究所へフィードバックを行っている。

気象庁においても「富岳」の商用機であるFX1000が導入され、アプリケーションの移植や最適化が行われているため、これらの取組状況と評価結果や、将来の計算機システムを考慮したGPUなどのアクセラレータへの対応に向けた検討状況もヒアリングに基づいて調査した。本年度は、特にアーキテクチャ絞り込みの状況をフィードバックしつつ、気象庁モデルにおけるGPU化の状況やその性能についてヒアリング調査を行った。

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、口頭・ポスター発表の別）	発表者氏名	発表した場所（学会等名）	発表した時期	国内・外の別
ISC2024 に参加・発表しました #1 ～HPC システムの最新動向を知る！～（ブログ記事公開）	小田嶋 哲哉	Fujitsu TECH BLOG、 https://blog.fltech.dev/entry/2024/06/14/isc2024-1-ja	2024/6/14	国内
HOT CHIPS2024 に参加しました（ブログ記事公開）	児玉 宏喜	Fujitsu TECH BLOG、 https://blog.fltech.dev/entry/2024/10/09/hotchips2024-ja	2024/10/3	国内
DAC 2024 に参加しました #2（ブログ記事公開）	中村 洋介	Fujitsu TECH BLOG、 https://blog.fltech.dev/entry/2024/11/20/dac2024v2-ja	2024/11/20	国内
次世代計算基盤に係る調査研究における CPU に CPO を統合したインターコネクットの検討（口頭発表）	三木 淳司、稲垣貴範、加瀬 将、安島 雄一郎、草野 義博、水谷 康志	第 198 回ハイパフォーマンスコンピューティング・第 14 回量子ソフトウェア合同研究発表会	2025/3/19	国内
“HPC システム用ウェブポータルにおけるジョブスケジューラの抽象化” 口頭発表	谷澤悠太, 高橋慧智, 下村陽一, 滝沢寛之	情報処理学会ハイパフォーマンスコンピューティング (HPC)研究会	2024/8/1	国内

"ExpressHPC: towards "connected supercomputing" enabling on-demand job execution for disaster resilience" 口頭発表	Hiroyuki Takizawa, Tatsuyoshi Ohmura, Keichi Takahashi, Yoichi Shimomura, Ryusuke Egawa, Yoshihiko Sato, Junko Yoshino, Akihiro Musa, and Shunichi Koshimura	Fourth Combined Workshop on Interactive and Urgent High-Performance Computing (WIUHPC)	2024/11/22	国外
"データ駆動型大規模脳シミュレーションの現在と未来" 口頭発表	五十嵐潤	Future of Radiology	2024/6/20	国内
Data-Driven Functional Molecule Design through the Integration of AI and Simulation (口頭、招待講演)	Kei Terayama	The 2nd Korea-Japan Workshop on Artificial Intelligence, Jeju Island, Republic of Korea	2024/8/2	国外 (Zoom)
"高性能計算と人工知能で加速する脳シミュレーション"、口頭発表	五十嵐潤	サイエンティフィックシステム研	2024/10/28	国外
生成 AI と分子シミュレーションの融合による機能性有機分子の設計 (口頭、招待講演)	寺山慧	第 34 回 日本 MRS 年次大会、横浜	2024/12/17	国内
" Numerical Spectroscopy for Correlated Quantum Materials" 口頭発表	Youhei Yamaji	International Workshop on Massively Parallel Programming for Quantum Chemistry and Physics (MPQCP 2025)	2025/1/21	国内

"Evaluation of the performance of GPU-supported version of a meteorological model, SCALE"、ポスター発表	Asai, S, S. Nishizawa, K Yamazaki, S. Adachi, T. Yamaura, Y. Kawai, K-M. Kong, Y. Sato	JpGU annual meeting 2024、Makuhari、Chiba	2024/5/29	国内
大規模問題での実用化に向けた気象モデル SCALE への MG 法の実装、口頭発表	浅井颯馬、佐藤陽祐	日本気象学会北海道支部第 1 回研究発表会、札幌	2024/7/25	国内
SCALE 雷モデルに対する多重格子法の実装による大規模並列処理での計算効率向上の検討、口頭発表	浅井颯馬、佐藤陽祐	NHM-WS 2024, 京都	2024/9/19	国内
マルチグリッド法の導入による SCALE モデルの雷モデルの高速化、ポスター発表	浅井颯馬、佐藤陽祐	日本気象学会 2024 秋季大会、つくば	2024/11/15	国内
"Ensemble Coupling of Atmospheric Model NICAM"、ポスター発表	Takashi Arakawa, Hisashi Yashiro, Kengo Nakajima	Asia Oceania Geosciences Society 21th Annual Meeting	2024/6/25	国外
"Development of high-order atmospheric dynamical core using discontinuous Galerkin method considering global LES"、口頭発表	Yuta Kawai, Hirofumi Tomita	AGU24 Annual Meeting	2024/12/11	国外
"不連続ガラーキン法を用いた全球大気力学コアの開発: 乱流モデルの導入と検証実験"、口頭発表	河合佑太, 富田浩文	日本地球惑星科学連合 2024 年大会	2024/5/29	国内

"Development of an atmospheric model using discontinuous Galerkin method: Evaluation of the computational performance on A64FX"、ポスター発表	Yuta Kawai, Xuanzhengbo Ren, Takahiro Katagiri, Seiya Nishizawa, Hirofumi Tomita	16th JLESC Workshop	2024/4/16	国内
"Parallelized remapping algorithms for km-scale global weather and climate simulations with icosahedral grid system"、ポスター発表	C. Kodama, H. Yashiro, T. Arakawa, D. Takasuka, S. Matsugishi, and H. Tomita	AOGS2024	2024/6/26	国外
地震の大規模シミュレーション - データ駆動型手法による高度化 (口頭発表)	藤田航平	2024 年度第 1 回計算科学フォーラム	2024/11/13	国内
"Can we Accelerate HPL with DGEMM Emulation on Tensor Cores?" 口頭発表	横田 理央	SC24 Top500 BoF	2024/11/19	国外
"量子アニーリングにおける自動チューニングの適用について" 口頭発表	片桐 孝洋、森下 誠、河合 直聡、星野 哲也、永井 亨	神戸国際会議場 (第 29 回計算工学講演会)	2024/6/12	国内
"疑似量子アニーリングにおける自動チューニングの適用" 口頭発表	片桐 孝洋、森下 誠、河合 直聡、星野 哲也、永井 亨	京都大学(日本応用数理学会 2024 年度年会)	2024/9/14	国外
"SVM による誤差を含むクラス分類における多種疑似量子アニーラの性能評価" 口頭発表	水木 直也、森下 誠、河合 直聡、片桐 孝洋、椋木 大地、星野 哲也、永井 亨	北海道大学(第 198 回ハイパフォーマンスコンピューティング・第 14 回量子ソフトウェア合同研究発表会)	2025/3/18	国内
Challenges of Scaling Deep Learning on HPC Systems	Mohamed Wahib	SIAM Conference on Parallel Processing (SIAM PP'24)	2024/3/08	国外
"ポスト富岳へ向けて" 口頭発表	青木保道	東京、「富岳成果創出加速プログラム」基礎科学合同シンポジウム 2024	2025/1/10	国内

"GPU Implementation of Lattice QCD code with OpenACC" ポスター発表	Issaku Kanamori, Tatsumi Aoyama, Kazuyuki Kanaya, Hideo Matsufuru, Yusuke Namekawa, Keigo Nitadori and Hidekatsu Nemura	神戸市、「The 7 th R-CCS Intanational Symposium」	2025/1/23	国内
ポスト富岳が切り拓く格子QCDシミュレーション	金森逸作	東京、シンポジウム「アプリケーションの未来」	2025/3/25	国内
富岳からポスト富岳、CPUからGPUへ向けて	金森逸作	オンライン、2024年度第2回計算科学フォーラム	2025/3/31	国内

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 (学会誌・雑誌等名)	発表した時期	国内・外の別
次世代計算基盤に係る調査研究における CPU に CPO を統合したインターコネクトの検討	三木 淳司、稲垣 貴範、加瀬 将 安 島 雄一郎、草野 義博、水谷 康志	情報処理学会研究報告ハイパフォーマンスコンピューティング (HPC)	2025/3/10 (予定)	国内
Clustering Based Job Runtime Prediction for Backfilling Using Classification	Hang Cui, Keichi Takahashi, Yoichi Shimomura and Hiroyuki Takizawa	Workshop on Job Scheduling Strategies for Parallel Processing, LNCS 14591, pp.40-59	2024/5/30	国外
"Maximizing Energy Budget Utilization Using Dynamic Power Cap Control	Sho Ishii, Keichi Takahashi, Yoichi Shimomura and Hiroyuki Takizawa	Workshop on Job Scheduling Strategies for Parallel Processing, LNCS 14591, pp. 161-180	2024/5/30	国外
A Node Selection Method for on-Demand Job Execution with Considering Deadline Constraints	Daiki Nakai, Keichi Takahashi, Yoichi Shimomura and Hiroyuki Takizawa	Workshop on Job Scheduling Strategies for Parallel Processing, LNCS 14591, pp. 141-160	2024/5/30	国外
DRAS-OD: A Reinforcement Learning based Job Scheduler for On-Demand Job Scheduling in High-Performance Computing Systems	Hang Cui, Keichi Takahashi, and Hiroyuki Takizawa	2024 Twelfth International Symposium on Computing and Networking (CANDAR), pp. 21-29	2024/11/28	国内

Real-Time Phase Retrieval Using On-the-Fly Training of Sample-Specific Surrogate Models	Ryota Koda, Keichi Takahashi, Hiroyuki Takizawa, Nozomu Ishiguro, and Yukio Takahashi	2024 Twelfth International Symposium on Computing and Networking (CANDAR), pp. 59-66	2024/11/28	国内
A QA-Assisted Job Scheduler for Minimizing the Impact of Urgent Computing on HPC System Operation	Tatsuyoshi Ohmura, Keichi Takahashi, Ryusuke Egawa, Hiroyuki Takizawa	2024 Twelfth International Symposium on Computing and Networking Workshops (CANDARW), pp.197-203	2024/11/28	国内
Predicting condensate formation of protein and RNA under various environmental conditions	K.-Y. Chin, S. Ishida, Y. Sasaki, K. Terayama	BMC Bioinformatics	2024/4/2	国外
Future projections for mammalian whole-brain simulations based on technological trends in related fields.	Jun Igarashi	Neuroscience Research	2024/11/19	国外
A data-driven generative strategy to avoid reward hacking in multi-objective molecular design	T. Yoshizawa, S. Ishida, T. Sato, M. Ohta, T. Honma, K. Terayama	Nature Communications	2025/3/11	国外
QCforever2: Advanced Automation of Quantum Chemistry Computations	M. Sumita, K. Terayama, S. Ishida, K. Suga, S. Saito, K. Tsuda	Journal of Computational Chemistry	2025/1	国外

Self-Energy Spectroscopy and Artificial Neural Network	Youhei Yamaji	Journal of the Physical Society of Japan	2025/2	国外
Large Scale Ensemble Coupling of Non-hydrostatic Atmospheric Model NICAM	Takashi Arakawa, Hisashi Yashiro, Shinji Sumimoto, Kengo Nakajima	Proceedings of the International Conference on High Performance Computing in Asia-Pacific Region (HPCASIA '25)	2025/2	国外
Heterogeneous computing in a strongly-connected CPU-GPU environment: fast multiple time-evolution equation-based modeling accelerated using data-driven approach	Tsuyoshi Ichimura, Kohei Fujita, Muneo Hori, Lalith Maddeggedara, Jack Wells, Alan Gray, Ian Karlin, John Linford	Eleventh Workshop on Accelerator Programming and Directives (WACCPD 2024)	2024/11	国外
At the Locus of Performance: Quantifying the Effects of Copious 3D-Stacked Cache on HPC Workloads	Jens Domke, Emil Vatai, Balazs Gerofi, Yuetsu Kodama, Mohamed Wahib, Artur Podobas, Sparsh Mittal, Miquel Pericàs, Lingqi Zhang, Peng Chen, Aleksandr Drozd, Satoshi Matsuoka	ACM Transactions on Architecture and Code Optimization	2023/12	国外

Myths and legends in high-performance computing	Satoshi Matsuoka, Jens Domke, Mohamed Wahib, Aleksandr Drozd, Torsten Hoefler	The International Journal of High Performance Computing Applications	2023/4	国外
Lattice QCD code on GPUs: Implementation and performance comparison with OpenACC and CUDA	Wei-Lun Chen, Issaku Kanamori, Hideo Matsufuru	HPCAsia '25: Proceedings of the International Conference on High Performance Computing in Asia-Pacific Region	2025/3	国外

(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