

2022/10/4 2022年度第1回計算科学フォーラム

計算科学ロードマップ2022について

各分野まとめ役より

計算科学ロードマップ2022 - 分野の構成

- 変更点: 脳科学・人工知能を2つに分割
- 分野・節の構成 (本日の報告者)
 - 2.1 素粒子・原子核 (山崎・筑波大)
 - 2.2 ナノサイエンス・デバイス (藤堂・東大)
 - 2.3 エネルギー・資源 (中嶋・理研)
 - 2.4 生命科学 (小林・理研)
 - 2.5 脳・神経科学 (五十嵐)
 - 2.6 創薬・医療 (須永・RIST)
 - 2.7 設計・製造 (大西・理研)
 - 2.8 社会科学 (伊藤・理研)
 - 2.9 地震・津波 (堀・JAMSTEC)
 - 2.10 気象・気候 (足立・理研)
 - 2.11 宇宙・天文 (滝脇・天文台)
 - 2.12 人工知能

計算科学ロードマップ 素粒子・原子核パート更新

計算科学フォーラム 2022年度第1回講演会・討論会

取りまとめ	山崎剛(筑波大学)
素粒子	金森逸作(理研計算科学研究センター)
原子核	宇都野穰(日本原子力研究開発機構)
アドバイザー	石川健一(広島大学)

ロードマップ2017 素粒子・原子核パート執筆体制

とりまとめ:石川, 素粒子:山崎, 原子核:宇都野

素粒子・原子核パート更新

基本方針: 前回ロードマップの構成を踏襲

2026年から2032年の課題へ更新+新規課題追加

現状: 執筆協力者からの更新、追加情報収集完了→執筆者による推敲終了
暫定版公開中

https://www-het.ph.tsukuba.ac.jp/~yamazaki/Roadmap2022/220908_pre_final/Roadmap_pre_final_20220908.pdf

– 2章 各計算科学分野の課題

- 2.1 素粒子・原子核 12p

- 2.1.1 「分野概要」(3p)
- 2.1.2 「長期目標と社会貢献」(3p) 課題について記述
- 2.1.3 「課題とその解決に必要な計算手法・アプリケーション」(4p)
課題とアプリケーションを概略。詳細は4章へ
- 2.1.4 「ロードマップ」(1p) 全課題のロードマップ 2026年から2032年にかけて
- 2.1.5 「必要な計算機資源」(1p) 主なアプリケーションプログラムを記述

- 2.12 計算機要求性能まとめ

- 素粒子・原子核の5課題について要求性能見積もり [アプリ名追加]

– 4章 各課題の詳細

- 4.1 素粒子・原子核 各研究課題とアプリの詳細

新規6課題 (テンソルネットワーク、機械学習・量子計算含む)

2017ロードマップ 18課題 → 22課題

4.1. 素粒子・原子核 各課題の詳細

課題名 新規課題は水色

(a) 強い力が創り出す階層構造の非摂動的な理解

格子QCDを用いたバリオン有効相互作用の決定
ハドロン階層の理解へ向けた格子計算の進化

格子QCDを用いた核子構造の理解

深層学習を利用したハドロン散乱振幅の構築

格子QCDを用いた QCD 熱力学

格子QCDを用いた QCD 相構造の解明

高エネルギー重イオン衝突実験

少数多体系計算

QCD に立脚した原子核反応計算

核力に基づく核物質の状態方程式

配位間相互作用計算

原子核密度汎関数計算

揺動散逸理論による

重イオン反応・核分裂・新元素合成

微視的クラスター模型

(b) 標準模型を超えた物理の探索

新物理探索・解明のための

精密格子QCDシミュレーション

量子電磁力学(QED)の高次補正計算

ファインマン振幅自動計算

超弦理論シミュレーションで探る時空の

量子ダイナミクス

超対称ゲージ理論の非摂動ダイナミクス

将来発展テンソル繰り込み群による

素粒子物理学および物性物理学の研究

その他

将来発展が期待される計算手法

(機械学習, 量子計算)

データグリッド

素粒子・原子核パート更新活動履歴

- 2021年11月12日 素粒子・原子核理論グループメーリングリストで更新案内+意見募集
前回執筆協力者+新規課題候補者へ協力依頼
- 2021年12月14日 オンライン意見交換会
計算科学ロードマップ更新案内+意見募集
コミュニティからの意見修正、新規課題候補者追加
- 2021年1月17日 計算基礎科学連携拠点シンポジウム (宇宙分野合同)
計算科学ロードマップ更新案内+意見募集
- 2022年3月7日 ロードマップ素粒子・原子核パート更新案暫定版 ver.1 公開
- 2022年3月19日 日本物理学会インフォーマルミーティング(オンライン)
計算科学ロードマップ素粒子・原子核パート更新 意見交換会
- 2022年4月12日 ロードマップ素粒子・原子核パート更新案暫定版 ver.2 公開
- 2022年4月28日 新規課題受付終了
- 2022年9月9日 ロードマップ素粒子・原子核パート更新案暫定最終版公開
- 2022年9月16日 計算基礎科学連携拠点HPC-Phys勉強会 (宇宙分野合同)
ロードマップ素粒子・原子核パート更新案暫定最終版報告+意見交換
NGACI(佐野さん): アプリとの情報交換の場を求めている

計算科学ロードマップ2022 - 準備状況

- 「ナノサイエンス・デバイス」分野
 - 「富岳」成果創出加速プログラム課題、計算物質科学協議会などから、計8名の執筆者
 - 藤堂眞治(東大)、山田俊介(QST)、松下雄一郎(東工大)、小野倫也(神戸大)、福島鉄也(物性研)、山地洋平(NIMS)、井戸康太(物性研)、星 健夫(鳥取大)
 - 課題: 半導体電子デバイス、光・電子融合デバイス、量子物質、永久磁石・スピントロニクス材料、構造材料
 - 計算手法・アプリケーション: 第一原理計算(平面波 $O(N^3)$, 実空間 $O(N)$)、電子・電磁場ダイナミクス、変分モンテカルロ法、厳密対角化、テンソルネットワーク、フェーズフィールド法
 - 機械学習の利用シナリオ・量子コンピューティングの活用についても言及

半導体電子デバイス

- 目標
 - デバイス構造のダウンサイジング
 - シリコン、その酸化膜、ドーピングする不純物元素や水素、ゲルマニウム、各種高誘電率絶縁膜、化合物半導体、カーボンナノチューブなどのデバイス材料開発
 - 平衡状態に近い条件下だけでなく過渡的現象を含む非平衡状態に近い条件下での予測
- 計算手法・アプリケーション
 - $O(N)$ 第一原理計算、古典的分子動力学法：より原子数が多く複雑な系の電子構造、非平衡グリーン関数法による電気特性の予測、動的性質
 - $O(N^3)$ の第一原理計算：半導体金属界面における金属誘起ギャップ状態、量子ドット、、相転移の核形成、合金における塑性変形特性・弾性特性、固液界面、統計量の抽出、反応経路探索

光・電子融合デバイス

- 目標
 - 光磁気効果を利用した光・電子スピン機能性デバイス開発
 - 磁性ナノ構造体を活用した超低消費電力デバイスの実現
 - メタマテリアル技術を活用した3次元光メモリ、ナノアンテナなどの設計
- 計算手法・アプリケーション
 - 電子・電磁場ダイナミクス法：時間依存密度汎関数法によるスピン自由度を含めた電子ダイナミクスとマクスウェル方程式によるマイクロスコピックな電磁場ダイナミクスの結合、磁性体のための電子スピン自由度を考慮、メタマテリアルに用いられる金属粒子等の量子効果の計算

量子物質

- 目標
 - 粒子間の相互作用の強い分子系や凝縮物質を取り扱う強相関多体量子科学・計算科学の汎用手法の確立
 - 多体集団の励起状態や非平衡ダイナミクスに対する飛躍的な理解
 - 高温超伝導・高効率熱電素子・マルチフェロイクスなどの強相関新物質開発
- 計算手法・アプリケーション
 - 厳密対角化、量子モンテカルロ法：種々の量子スピン模型、低次元系理論模型のランダムネスの効果も含めた大規模シミュレーション
 - 変分モンテカルロ法：新機能を持った強相関物質材料の物性を高い精度で予測・解明
 - 第一原理ダウンフォールディング法：数千バンド、単位胞当たり数百原子以上を含む系の有効模型の第一原理的導出
 - テンソルネットワーク法：二次元以上の系やフェルミオン系への拡張、分子科学、素粒子物理分野への応用

永久磁石・スピントロニクス材料

- 目標
 - 省レアアース・省レアメタルの高性能永久磁石開発
 - 半導体スピントロニクス技術による省エネルギーデバイス開発
 - インフォマティクス的手法による永久磁石・スピントロニクス材料開発速度の加速
- 計算手法・アプリケーション
 - 第一原理計算：コヒーレントポテンシャル近似による不規則系の計算、f電子系を取り扱える決定的な交換相関ポテンシャルの開発、フォノン・マグノンなどの素励起有限温度特性の計算
 - 全電子 $O(N)$ でスピン軌道相互作用とノンコリニア磁性を取り扱える計算コードの開発
 - 第一原理計算と久保公式による電子散乱過程を考慮した伝導特性計算

構造材料

- 目標
 - 熱エネルギーを効率的に機械・電気エネルギーに変換する熱電材料開発
 - 低燃費・省エネルギーに寄与する高比強度軽量材料開発
 - メゾスケールの内部組織の安定性、微細構造、強度、諸特性の解明、系統的な設計・制御
 - 自由エネルギー計算、ミクロからメゾ、マクロをつなぐマルチスケール計算の確立
- 計算手法・アプリケーション
 - 高精度自由エネルギー計算、第一原理計算、フェーズフィールド法などを連成したマルチスケール計算：結晶相・化合物相、粒界・界面・欠陥の安定性・強度特性の予測
 - アレイジョブ(パラメータを変えた互いに独立で比較的小～中規模のジョブ)の複数(数十～数万)実行

エネルギー・資源

ロードマップ2022における前回のロードマップからのアップデート

2章

1 分野の概要

前回分を踏襲して若干修正・追記済。完成。

2 長期目標と社会貢献

成果創出加速プログラムの関連課題について記載。富岳NEXTでの目標と社会貢献を記載。完成。

3 課題とその解決に必要な計算手法・アプリケーション

富岳と富岳NEXTで必要な計算手法・アプリケーションを記載。完成。例として成果創出加速プログラムの関連課題で必要な計算手法・アプリについて記載。完成。

4 ロードマップ図

未完成。全部が集まってから作成予定。

エネルギー・資源

4章

1 現在行われている課題

富岳での現状課題に修正・加筆済。ほぼ完成。NTChemの最新結果に入替え予定。MATLANTISに関して記載する？(ENEOSには打診済)。MIに関しても記載する？(藤井先生, 原嶋さんには打診済, デバイス分野との兼ね合い)。

2 長期的目標と次世代に解決すべき課題

近年求められるようになってきた目標と課題に修正・加筆済。完成。

3 課題を解決するために必要なアプリケーション群 (要求性能)

必要アプリに関する記載は最新のものに修正・加筆済。大規模計算に関するNTChem最新版での取組みと高性能計算に関するFS2020での高度化結果を付録として追加。要求性能の見積り以外はほぼ完成。要求性能の見積りは依頼済, あるいは今後依頼(小林さん, 曾田さん, 岡崎Gの誰か, QCRI・中嶋さん)

Roadmap2022

「生命科学」 ・ 「創薬 ・ 医療」

理化学研究所 杉田有治
(代理: 理化学研究所 小林千草)

2022/10/04 2022年度第1回計算科学フォーラム

「生命科学」分野

- CMSIのGithub repository内のbioブランチに原稿（「生命科学」「脳・神経科学」「創薬・医療」）をアップロード済
- 2.4/4.4 「生命科学」
 - 生体分子シミュレーション: 杉田（理研）, 泰地（理研）, 小林（理研）
 - AI・機械学習: 寺山（横浜市立）, 松永（埼玉）
 - BD・実験科学との連携: 宮下（理研）, 森（理研）, 松永（埼玉）, 池口（横浜市立/理研）, 浴本（横浜市立）
 - 分子細胞シミュレーション: 河野（量研機構）, 笠原（大阪）
 - 拡張アンサンブル: 杉田（理研）
 - マルコフ状態遷移モデル: 池口（横浜市立/理研）, 浴本（横浜市立）
 - 創薬MD: 奥野（京都/理研）, 荒木（京都）（敬称略）
- ゲノム解析・遺伝子ネットワークは別に紹介

「創薬・医療」分野

- 2.6/4.6 「創薬・医療」

- 創薬MD: 奥野（京都/理研）, 荒木（京都）
- フラグメント分子軌道法: 望月（立教）, 福澤（星薬科）, 本間（理研）
- QM/MM: 八木（理研）

- 細胞・臓器シミュレーションは別に紹介

(敬称略)

- 2.5 「脳・神経科学」は別に紹介

前回のロードマップからのアップデート: 脳・神経系分野 執筆者・分野

- 執筆者
 - 五十嵐潤(理化学研究所): 脳シミュレーション
 - 山崎匡(電気通信大学): 脳シミュレーション
 - 木村睦(龍谷大学): ニューロモーフィックシステム
 - 協力者: 加沢知毅(東京大学): 脳シミュレーション、小林泰良(山口大学): 脳シミュレーション
- 分野
 - 前回、“脳・神経系と人工知能”という分野割りであったが、今回、人工知能の広範な分野への急速な広がりから、神経科学と紐づけた章構成は限界と考え、取りまとめの藤堂先生に相談し、脳・神経系のみ限定した。
 - ニューロモーフィックチップの情報を追加した。

前回のロードマップからのアップデート: 脳・神経系分野 主なアップデート内容

- 2章分野の概要: 神経科学分野は、最近の分野の位置づけ、新たな成果、海外動向、他分野とのかかわりについて、改めて情報を収集、精査し、情報を更新した。ニューロモルフィックシステムの情報を新たに加えた。
- 2章長期目標と社会貢献、課題とその解決に必要な計算手法・アプリケーション: 神経科学分野は前回の内容を概ね踏襲しつつ、富岳による計算結果などの最新の情報を加えて更新。ニューロモルフィックシステムの情報を新たに加えた。
- ロードマップと4章: 前回の内容を概ね踏襲しつつ、ロードマップは2032年を目標に更新。2030年頃に10 EFLOPS(単精度)の計算機で生物学的1秒間、実効効率10%を想定し、いくつかのアプリを見積もった。最大規模の詳細なヒト全脳モデルシミュレーションの場合、740 EFLOPで10分程度で実行と見積もり。

前回のロードマップからのアップデート: 脳・神経系分野 ロードマップ

年代 課題	2022 ~	2024 ~	2026 ~	2028 ~	2030 ~	2032 ~
哺乳類大脳皮質神経回路シミュレーション	LIFヒト全大脳皮質	HHヒト全大脳皮質			MCHIT全大脳皮質	
哺乳類小脳皮質神経回路シミュレーション	LIFヒト全小脳	HHヒト全小脳	HHヒト全大脳皮質		MCHIT小脳	
哺乳類全脳神経回路シミュレーション	LIFヒト全脳	MCマウス全脳			MCHIT全脳	
昆虫全脳リアルタイムシミュレーション	昆虫全脳規模マルチコンパートメント確率的モデル(100万ニューロン規模)シミュレーション			昆虫全脳規模マルチコンパートメント確率的モデル(100万ニューロン規模)シミュレーションx10		
ニューロモーフイックチップ	材料・デバイス・プロセス・アーキテクチャ・システム・アプリケーションなど要素技術の研究開発				超コンパクト・ローパワー・ハイスピード化と汎用人工知能(AGI)への搭載	

創薬・医療

これまでの概要

- 分子スケールから臓器スケールまでを対象領域

主な二つのプロジェクト

- **ISLiM** 次世代生命体統合シミュレーションソフトウェアの研究開発
- 予測する生命科学・医療および創薬基盤
(**SCLS**)

今回のアップデート概要

- 全体について前回資料からのアップデート情報に更新
- 新たな情報としてUT-HEARTについて追記
(心臓シミュレーション)
- 新たな情報として薬学(計算薬学)を追記
- 細胞スケールのうち、1分子粒度モデルを対象としたものは創薬・医療から生命科学に移動

執筆者一覧

- ゲノム(→生命科学)
伊東聡 ・ 宮野悟(東京医科歯科大)
- 遺伝子ネットワーク(→生命科学)
玉田嘉紀 (弘前大)
- 細胞シミュレーションの一部(→生命科学)
海津 一成 (理化学研究所)
- 臓器シミュレーション
伊井 仁志 (東京都立大)
- 心臓シミュレーション(UT-HEART)
千葉 修一 (ジャパンメディカルデバイス株式会社)
- 計算薬学
川下 理日人 (近畿大)
- HIFU
沖田 浩平 (日大)

設計・製造分野

◎構成

- 基本的に前回2017年度版を踏襲
 - 2章：全体のまとめ
 - 4章：個別分野の詳細
 - 分野の概要，次世代の課題とその解決に必要な計算手法，ロードマップ，必要な計算資源

◎とりまとめ担当

- R-CCS 大西

◎主なアップデート

- 分野構成の見直し
 - アプリ別から産業別に変更
 - 連成解析やデータ科学連携の重要性が増加したことを考慮

(前回) 熱流体，構造，機械材料，核融合，電磁界，可視化・データ分析（6分野）

(今回) 自動車，ターボ機械，航空機，核融合研究，構造解析，可視化・データ処理（6分野）

- 次世代機への要望等を含め，分野の最新の状況を記載
 - B/F比の維持
 - メモリ容量の維持，もしくは増加
 - 通信性能の向上（レイテンシの低減，負荷バランスの制御）
 - 高速通信可能な演算加速装置を多数搭載したFatノード採用によるノード数削減を想定した新しい方向の研究開発の事例あり

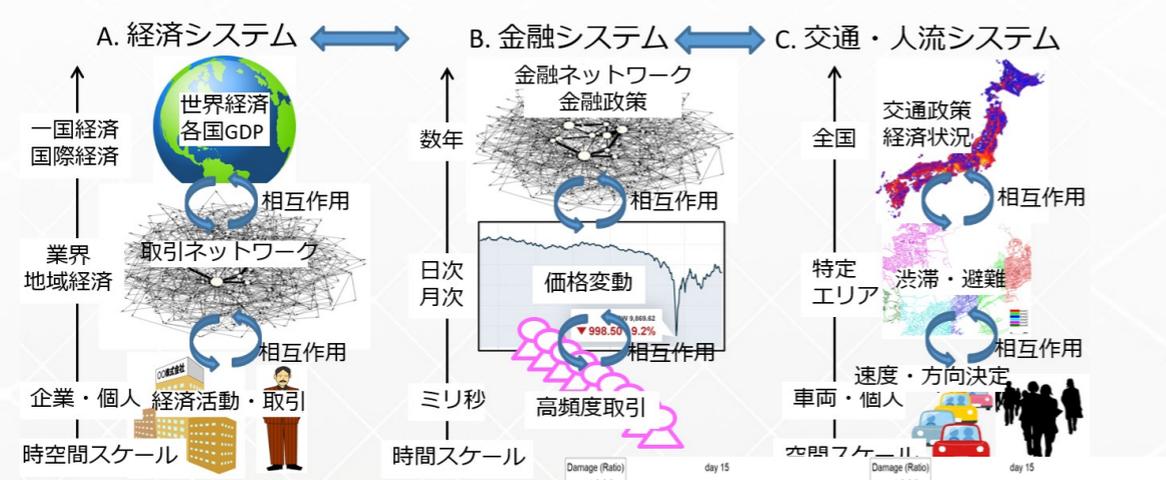


計算科学ロードマップ2022・社会科学
理化学研究所・伊藤伸泰
北海道大学・野田五十樹

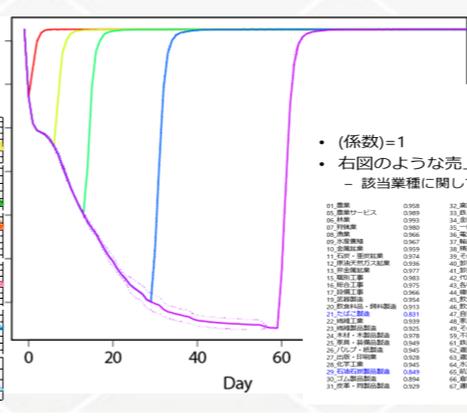
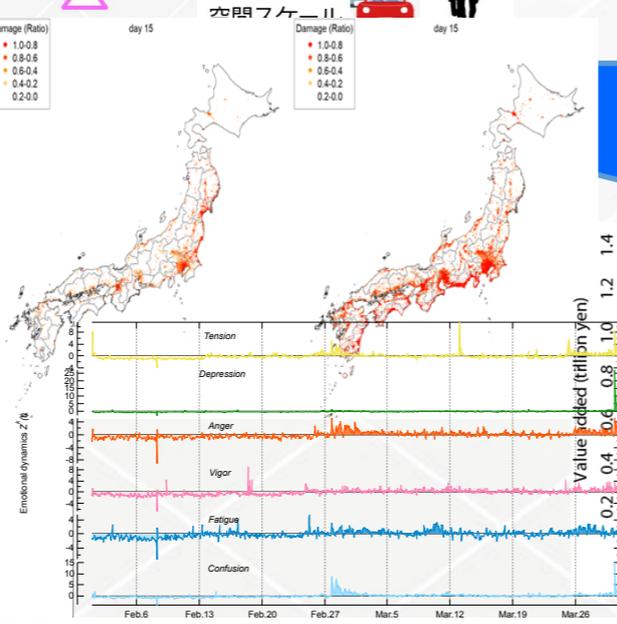
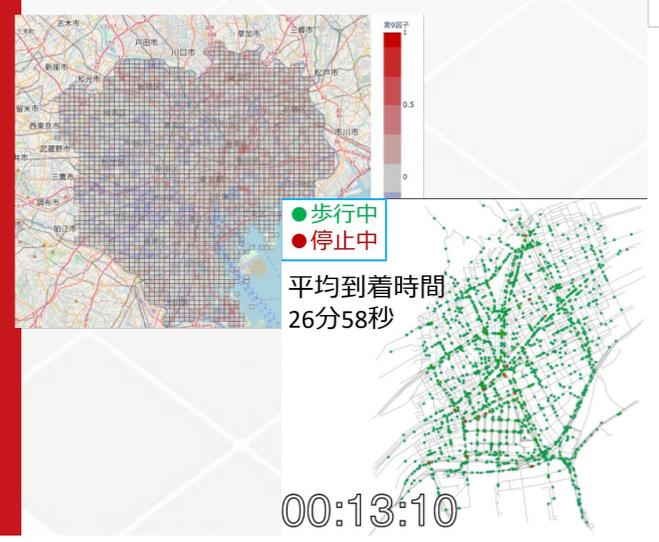
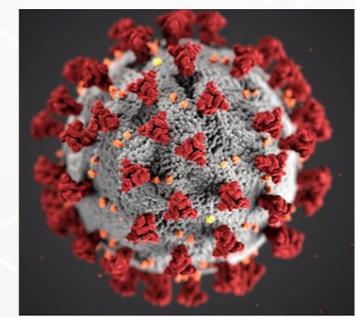


次の10年間のHPC課題
デジタルツインによるシミュレーションファースト型Society5.0の社会実装、そしてその先へ

これまでに途に就いた技術
経済・交通のマルチスケール・マルチレイヤーシミュレーション



社会課題



シナリオ 1

- (係数)=1
右図のような売上比率を仮定
- 該当業種に関して、約23%の売上減少の場合



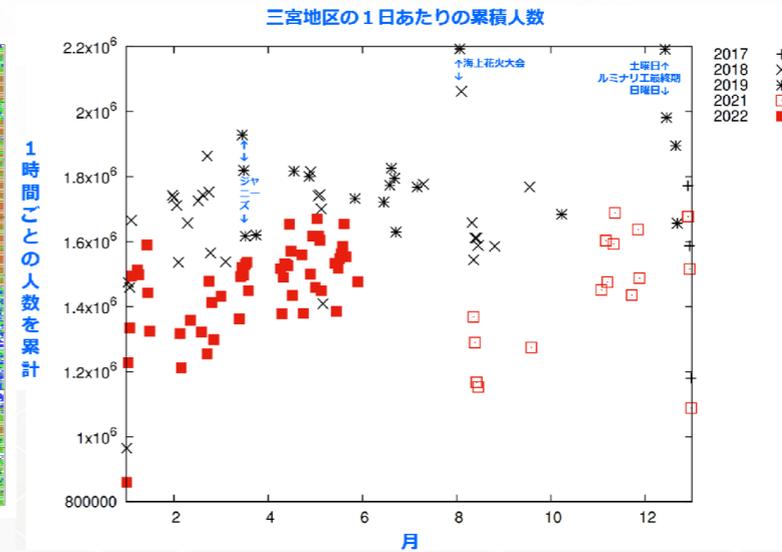
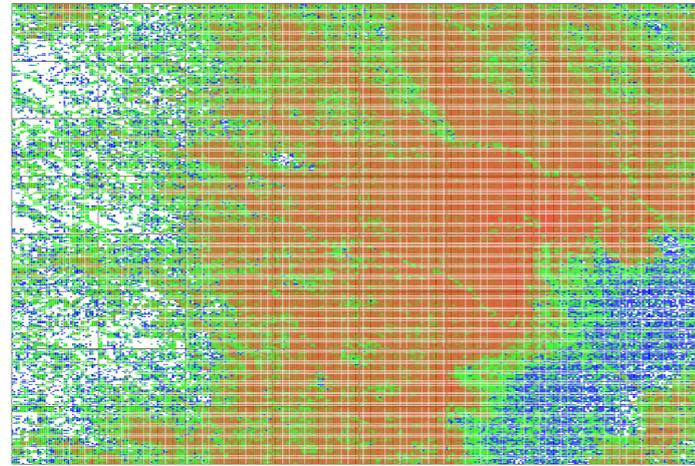
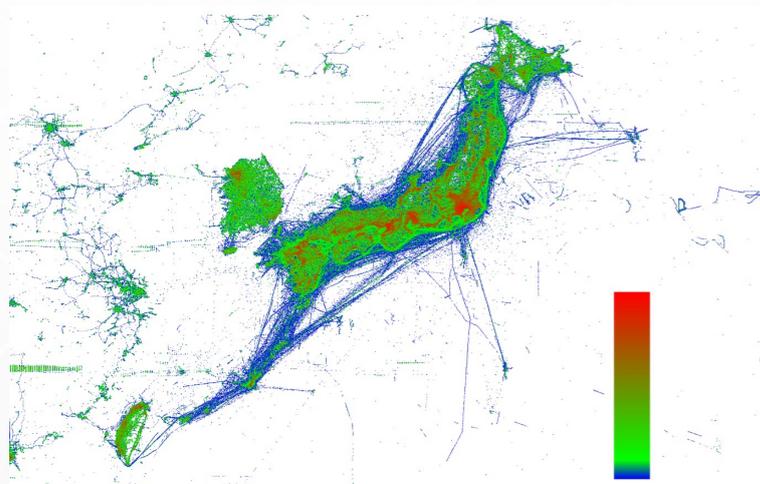
売上変動 直接:-3.3% 総合:-8.4%
GDP変動 直接:-3.4% 総合:-9.2%



デジタルツインによるシミュレーションファースト型Society5.0の社会実装の課題 ビッグデータのリアルタイム収集と可視化



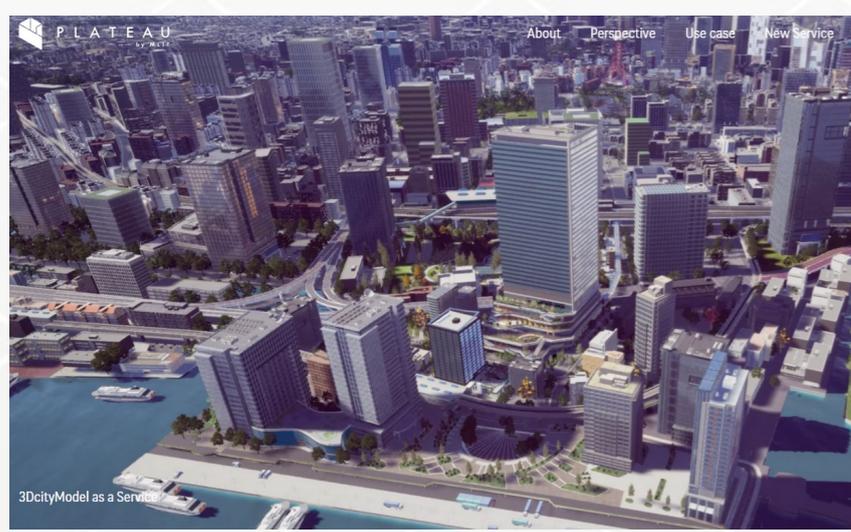
1. 関係各所に分散的に蒐集されているIoTビッグデータを有効なデータに加工し転送する技術の実現と標準化



PB/日程度のデータストリームからデジタルツインに遅滞なく現状を反映させるために必要なデータに圧縮して転送する

統計処理

2. シミュレーション結果を直感的に伝える可視化技術の実現と標準化

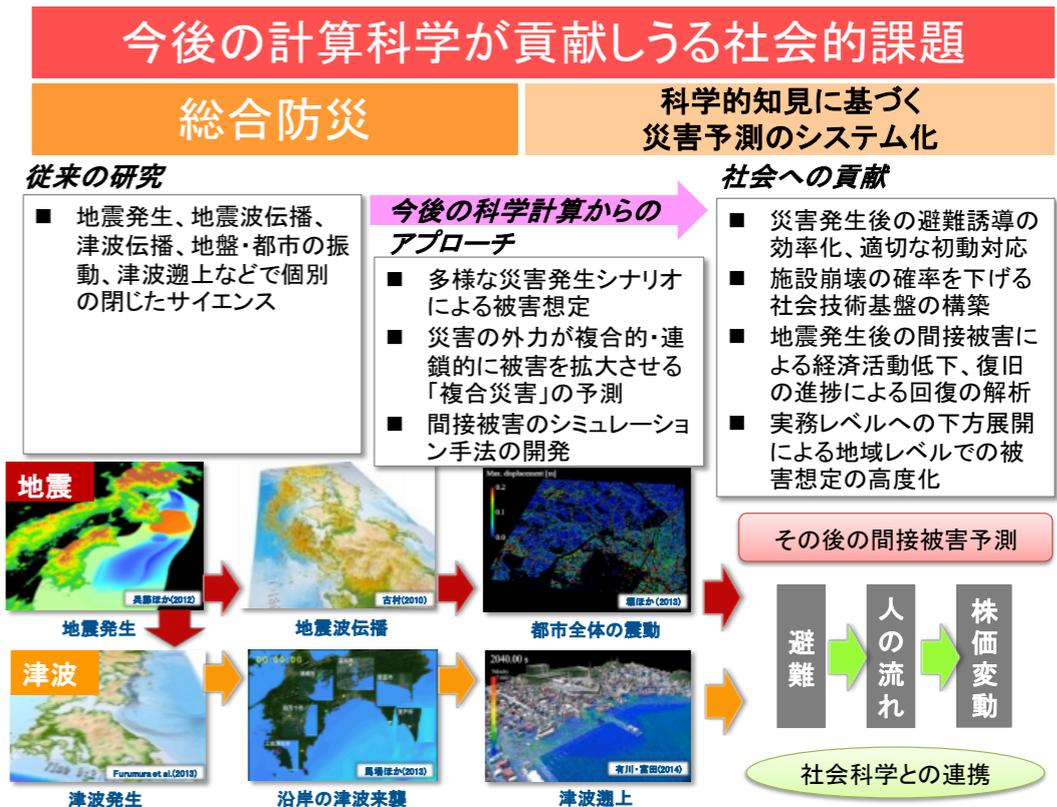


Plateau他のような直感的な可視化を推し進め、シミュレーション結果を直感的に伝える

BIMほかとの連携

地震・津波関連分野

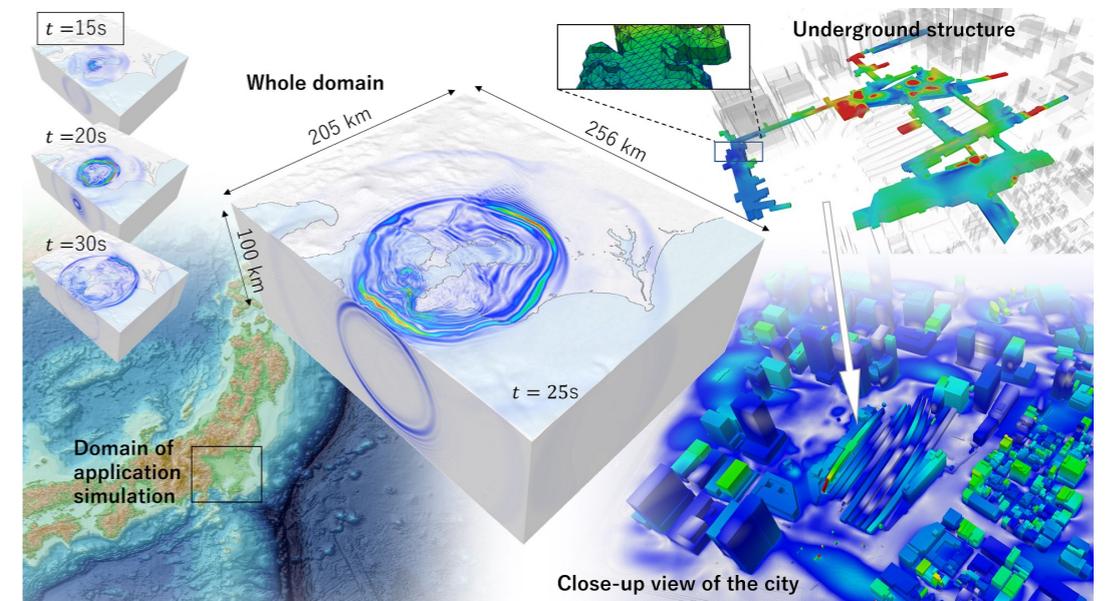
- 2017年ロードマップから**
 - 社会的貢献（科学的知見に基づく災害予測のシステム化を目指して）**
 - 国レベルでの被害想定 = 経験式の組み合わせ = ばらつきが大きいだけでなく、それを小さくするために何をすべきかを合理的に検討することが困難
 - より科学的・合理的な地震災害の想定・予測が必要
 - これらの状況は現在も同様
- その後のコード開発の進展**
 - ポスト京重点検討課題（～2019年度）**
 - 津波や建物等の計算は第2階層でかなり実用的な計算が実施可能に
 - 地震発生から地盤震動、構造物応答の計算、地殻変動計算等については「富岳」が必要 → 富岳加速P



ロードマップ2017より

地震・津波関連分野

- 富岳加速P（2020-2022年度）
 - 地震発生から地盤震動、構造物応答の統合計算を「富岳」で実施
 - ロードマップ2017の時点で「富岳」全系でも厳しいと考えていた計算について、アルゴリズムの大幅な効率化等によって、「富岳」で部分的に実現



Ichimura et al.
(HPC Asia 2022)

ロードマップ2017（「次の段階」として）

- 問題規模: 10兆自由度・120秒間
200 km × 200 km × 数100m領域、2.5mメッシュ
0.001秒 × 120,000タイムステップ
- ケース数: 1
- 計算時間: 50時間
- 演算量: 10^{23} FLOP = 100,000 EFLOP
- メモリ量: 15 PB
- ストレージ量/ケース: 1PB
- 想定するノード数: 200,000



「富岳」での実施

- 問題規模: 0.32兆自由度・48秒間
256 km × 256 km × 100 km領域、128~0.25 mメッシュ
0.005秒 × 9,550タイムステップ
- ケース数: 1
- 計算時間: 4時間36分
- 演算量: 12.2 PFLOPS × 4 h 36 min = 202 EFLOP
- メモリ量: 1.7 PB
- ストレージ量/ケース: 数十TB
- ノード数: 富岳52,992ノード

地震・津波関連分野

- **2026年-2031年に実行・解決したい具体的な研究課題**
 - 全球スケールの大規模マクロ地殻変動シミュレータと、特定地域に絞った高解像度ミクロ地殻変動・地震動のシミュレータを組み合わせたマルチスケールの3次元地殻変動・地震動シミュレータを開発し、日本列島における地震波形データと地表面での地殻変動データの双方に整合するマルチスケールモデルを構築する
 - これにより、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を検証するためのシステムのベースになる（地震分野における、重要かつ困難な課題である発生予測へ向けた検討が進むと期待される）
- **必要な計算機資源の見積もり（検討中）**
 - 全球スケールマクロ地殻変動シミュレータ
 - 高解像度ミクロ地殻変動・地震動シミュレータ
 - 高解像度地震動シミュレータ：ロードマップ2017の内容に相当

【気候・気象】 前回からのupdate 学術的課題

前回

- 全旧規模での防災（全球気候）（NICAM）
- 地域スケールでの気象気候予測（領域気候）（SCALE）
- 大気環境予測（CHASER-LETKF）
- データ同化（NICAM-LETKF）

執筆者：7名
執筆協力者：3名

今回

- 4.10.1 気象・気候シミュレーション
 - 4.10.1.1 全球高解像度シミュレーション（NICAM）
 - 4.10.1.2 全球気候シミュレーション（MIROC）
 - 4.10.1.3 領域気候予測（SCALE）
 - 4.10.1.4 数値天気予報（LA, LFM, asuca-Va, asuca-LES）
- 4.10.2 気象・気候モデルにおける物理コンポーネントの精緻化
 - 4.10.2.1 大気モデルの物理プロセス（雲・放射・雷コンポーネント）（SCALE-LT）
 - 4.10.2.2 大気化学（MIROC-CHASER）
 - 4.10.2.3 海洋（COCO/KINACO）
- 4.10.3 データ同化・データサイエンス（AI、機械学習）（NICAM-LETKF）
- 4.10.4 世界の動向とハードウェアに求める計算機性能

執筆者：15名
執筆協力者：4名

年代 課題	2022 ~	2024 ~	2026 ~	2028 ~	2030 ~	2032 ~
全球規模での 高解像度予測	← 全球LESモデル開発/全球200m実験 O(10 ³)アンサンブル予報実験 →			← 全球100m実験(LES) O(10 ³)アンサンブル全球雲解像予報実験 →		
全球気候 シミュレーション	← 適応データ セット公開 →	← 適応データ セット公開更 新用モデル 高解像度化 →	← 適応データ セット創出、 公開 →	← 次期適応データセット仕様検討、モデル開発 気候モデル・ESMIによる10年規模予測シ ステム実験 →		
気象予 報	← 1km狭領域 LFM試験運 用ハイブ リッドデータ 同化導入 →	← LFM 予報時間 延長 →	← LFM 高解像度化 LEPS 運用開始 →	← LFM改良 LEPS改良 アンサンブルデータ同化導入 →		
	← 様々な観測データの利用拡大・利用手法改良(断続的に実施) →					
	← 超高解像度シ ミュレーション 水平解像度<100m級LESの利用 →			← 水平解像度<50m級LESの利用 →		
← アンサンブル データ同化 asuca-based EnVar, EnKFの 開発 →		← 全現業データ同化(5km) 高解像度化(~1km) →		← 非ガウス性10万メンバー 同化 →		
領域気候予測	← O(10 ³ m)でアンサンブル気候計算 O(10 ² m)で現在気候再現実験 →		← O(10 ² m)で 気候実験 →	← O(10 ² m)でアンサンブル気候計算 →		
物理 モデル	← 3次元放射伝 達モデル(3D- RD) 3D-RDの開発 気象モデルへの実装 →		← 結合モデルを用いた 小スケールでの数値実験 →	← 実問題での数値実験 →		
	← 精緻な雲モデ ルの開発 精緻な雲モデルの開発と実事例での実行に向けた高度化 →			← 実問題での数値実験 →		
	← 気象雷モデル の実用化 ハインドキャスト実験と高速化 モデルの検証と改良 →		← 特定の地点を対象 とした実証実験 →	← 日本全体を対象とした予測 全球モデルへの拡張 →		
大気化学	← エアロゾル モデルの 高度化 高解像度衛 星データを用 いた高解像 度輸送検証 →		← 化学反応系 の精緻化 →	← 精緻化された モデルでの O(1km)での イベント実験 →	← 精緻化されたモデルでの 長期計算 →	
海洋 (長期気候予 測)	← 海洋全球10kmの気候モデル 北極3-5km/全球25kmの 気候モデル →		← 左記モデル のアンサン ブル実験 →	← 日本近海500m(多重ネスト)の 海洋モデル →		
データ同化 機械学習	← 地球システムモデルによる 強結合データ同化システムの開発 →			← 地球システムモデルによる 強結合データ同化実験 →		
	← 高解像度データ同化手法の開発 (解像度100m以下) →			← 高解像度データ同化手法の開発 (解像度10m以下) →		
	← データ同化とAIの融合研究 →			← AIを使った新しいデータ同化手法の開発 →		

【気候・気象】 前回からのupdate ロードマップ

前回との比較

- 今回のロードマップは、前回のロードマップの延長線上にあり。
- サイエンス目標の大きな変化や技術革新などがなかったわけではない。
- 解像度は数倍細かく、アンサンブル数を増やす方向にある。
 - 解像度を1/10倍にするには、計算量はざっくり1000倍必要。

今回

2032年頃までの科学目標の傾向

- 高解像度化
 - (実験) サブkmが主流、(LES計算)
 - (開発) 5年程度先の解像度(100m以下)がターゲット
 - e.g. 格子サイズは、現在の1/2程度~1/10未満
- 数値計算手法等の精緻化
 - 新しい力学・物理スキームの導入
 - 新しい観測データの導入
- 積分期間(予報時間)の長期化
- アンサンブル数の増加

RANSモデル → LESへ。現在はグレーゾン解像度(1km~100m)。これまでのスキームは適さない? 学術的な進展も同時に必要。

計算科学ロードマップの
基礎科学分野の更新状況：
宇宙惑星

滝脇 知也

研究課題の紹介

1. (ダークマター) 自己重力 N 体シミュレーションによる宇宙構造形成の解明
2. (銀河) 自己重力流体シミュレーションによる銀河形成過程の解明
3. (星団) 球状星団におけるコンパクト連星の形成
4. (超新星) Beyond-Boltzmann: ニュートリノ輻射流体計算による超新星爆発メカニズムの解明
5. (粒子加速) 相対論的粒子計算による超高エネルギー現象と粒子加速機構の探究
6. (分子雲) 分子雲形成・破壊
7. (太陽) 輻射磁気流体計算による太陽恒星ダイナモの探求
8. (プラズマ) プラズマ計算による太陽圏・宇宙空間無衝突衝撃波の研究

もともとは20課題ほどをまとめる予定であった。もう少し原稿を収集したい。

スペックテーブルから

課題	アプリケーションの名称	概要と計算手法	(a) 問題規模	(b) ケース数	(c) 計算時間/ケース (hour)	(d) 演算量/ケース (EFLOP)	(e) メモリ量/ケース (PB)	(f) メモリ転送量/ケース (EB)	(g) ストレージ量/ケース (PB)	(h) 総演算量 (EFLOP)	(i) 要求性能 (PFLOPS)	(j) 要求メモリバンド幅 (PB/s)	(k) 要求ファイルI/O性能 (TB/s)	(l) 想定するノード数	(m) 通信にかけたよい時間 (%)	(n) 主要な通信パターン (ブルダウンより選択)
自己重力N体シミュレーションによる宇宙構造形成の解明	Greem	ツリーと階層的PMのハイブリッド。独立時間刻み	10 ¹⁵ 粒子	1	100	2500000	80	8000	1000	2500000	6944.444	22.22222	50	100万	10	all_to_all
自己重力流体シミュレーションによる銀河形成過程の解明	ASURA-FDPS	ガス、星、暗黒物質からなる系を、N体法による重力計算と流体粒子法による圧縮性流体で解く	恒星スケールを分解する10 ¹¹ 粒子の計算	10	100	1.00E+07	0.1	100	1000	1E+08	27777.78	0.277778	10-100	10000000	10	all_to_all
球状星団におけるコンパクト連星の形成	PeTar	高精度重力N体シミュレーション	恒星100万個、平均質量密度100Msun/pc ³ 、物理時間100億年	6	17000	6200	2.0E-07	1.1	0.009	37200	0.101307	1.8E-05	1	100	10	all_to_all
Beyond-Boltzmann: ニュートリノ輻射流体計算による超新星爆発メカニズムの	一般相対論的量子運動論方程式ニュートリノ輻射流体	超新星爆発メカニズムの解明: 一般相対論的量子運動論方程式によるニュートリノ輻射流体計	配位空間512x192x384、運動量空間24x24x24で1秒の時間発展を計算	3	8700	2.00E+07	90	60000000	638.5696	1277.139	10	100000	0.3	隣接通信		
相対論的粒子計算による	WumingPIC	particle-in-cell法、差分法、CG法	100000x1000x1000, 10兆個粒子、500万時間ステップ	5	240	10368	1	5000	50	51840	5.787037	5	10000	5	隣接通信	
プラズマ計算による太陽圏・宇宙空間無衝突衝撃波の研究	WumingPIC	particle-in-cell法、差分法、CG法	40000x1000x1000, 1兆個粒子、100万時間ステップ	16	12	500	0.1	500	5	8000	11.57407	11.57407	5	5000	5	隣接通信
銀河構造を考慮した高解像度星間媒質進化シミュレーションによる星形成過程	Athena++	時間空間2次精度磁気流体計算(近似リーマン解法HLLD+CT法)。自己重力(多重格子法)。	1ケースあたり、(16384) ³ の格子数で、10 ⁷ 時間ステップの計算を想定	4	720	3.0E+06	4.4	3.0E+06	100	12000000	1157.407	1157.407	2	4.4E+05	1	隣接通信
輻射磁気流体計算による太陽恒星ダイナモの探求	R2D2	太陽対流層の底から表面までを包括した計算。音速抑制法を用いた圧縮性磁気流体方程式を	2300億格子点について6億時間ステップの積分を行う	1	550	1000000	1.5	500000	3	1000000	505.0505	252.5253	0.2			隣接通信

この表は未チェックです

参考資料

- 今後のHPC技術の研究開発のあり方を検討するWG (アーカイブ)
 - <https://sites.google.com/view/ngaci/home/sdhpc>
- 将来のHPCIシステムのあり方の調査研究「アプリケーション分野」(アーカイブ)
 - <https://cs-forum.github.io/hpci-aplfs>
- 今後のHPCIを使った計算科学発展のための検討会 (アーカイブ)
 - <https://cs-forum.github.io/kentoukai/>
- HPCIC計算科学フォーラム
 - <https://hpcic-kkf.com>
- NGACI: 次世代先端的計算基盤に関する白書(ハードウェアロードマップ)
v1.0.0 (2020/11)
 - <https://sites.google.com/view/ngaci/home>