

参考資料 各計算科学分野での課題解決に必要な計算機性能

本概要版では、将来において計算科学が貢献し得る社会的課題の具体例と、従来は異なる研究分野と見なされていた諸分野が有機的に結合することによって実現する新しい科学的課題について紹介した。ここで紹介した社会的および科学的課題の解決には、基礎となり得るさまざまな計算科学分野における研究課題への取り組みが必須である。その詳細は「計算科学ロードマップ」本編の4章に記載するが、ここでは、それら課題解決に必要な計算機性能への要求を参考として示す。

なお、ここで示す計算機性能への要求は、9月末日での見積りである。未だ精査の余地があり、最終版では、より精度の高い数値を記載する予定である。

■ 生命科学

課題	要求性能 (PFLOPS)	要求メモリアンバンド幅 (PB/s)	要求ファイルI/O性能 (TB/s)	メモリ量/ケース (PB)	ストレージ量/ケース (PB)	計算時間/ケース (hour)	ケース数	総演算量 (EFLOP)	概要・計算手法	問題規模	備考
生体分子機能解析	8.3	15	2	0.0084	1.2	240	100	720,000	分子動力学計算(全原子(代表)、QM/MM,粗視化MDなど)	対象:100万原子,100レプリカ	サブマイクロ秒以下のネットワークレイテンシが必要
細胞環境・ウイルス	1,000	500	2	4	1.2	48	10	1,700,000	全原子/粗視化分子動力学シミュレーション	~1億粒子	上記のタンパク質機能解析の例
創薬などMD・自由エネルギー計算	1	0.5	-	0.001	0.001	1.2	100,000	430,000	全原子分子動力学シミュレーション	~10万原子	>16GB/node
細胞の分化、癌化、増殖機構解明	420	100	-	10	10	240	10	3,600,000	一分子粒度細胞シミュレーション(格子法)	1000 から 10,000 細胞で構成される細胞集団	格子法・整数系の演算性能を要求
細胞の分化、癌化、増殖機構解明	420	0.01	-	0.001	0.001	240	100	36,000,000	一分子粒度細胞シミュレーション(粒子法)	グリーン関数反応動力学法・百万分子程度	共通・低ネットワークレイテンシを要求
血流シミュレーション	400	64	-	1	1	170	10	2,500,000	差分法、準陽解法(構造・流体・化学連成シミュレーション)	100mm長 x 100um径生0.1um格子,流速10 ⁻² m/s, 解像度1us, 10秒	
超音波シミュレーション	200	130	-	130	640	240	10	1,700,000	差分法、陽解法(音波・熱シミュレーション)		
脳神経系シミュレーション・ヒト全脳簡約モデル	0.0093	110	50,000	56	36,000	210	100	700	単一コンパートメントニューロンモデル	1,000億ニューロンニューロンあたり1万シナプス 10 ⁴ step	
脳神経系シミュレーション・ヒト全脳詳細モデル	93	770	6,000	250	250,000	30	1	10,000	5000コンパートメントニューロンモデル	1,000億ニューロンニューロンあたり1万シナプス 10 ⁴ step	
脳神経系シミュレーション・昆虫全脳詳細モデルリアルタイム	71	600	2	0.002	0.2	0.028	100	720	10000コンパートメントニューロンモデル	100万ニューロンニューロンあたり500シナプス	
脳神経系シミュレーション・昆虫全脳詳細モデル神経回路パラメータ推定	71,000	600	20	0.2	20	0.028	10	72,000		1,000ニューロン	
脳神経系シミュレーション・昆虫全脳詳細モデル生理実験とシミュレーションの通信	71,000	600	20	0.2	20	0.028	10	72,000		1,000ニューロン	100MB/s程度の外部との通信も想定
遺伝子ネットワーク解析	100	50	0	4.5	0.04	10	26,000	94,000,000	ベイジアンネットワークおよびL1正則化法	4万転写物 x 26,000 データセット・280万アレイ	メモリ量は140Knode X 32GBで計算

※ 本見積りは、9月末日での見積りである。未だ精査の余地があり、最終版では、より精度の高い数値を記載する予定である。

■ 物質科学

課題	要求性能 (PFLOPS)	要求メモリ/バンド幅 (PB/s)	要求ファイル/IO性能 (TB/s)	メモリ量/ケース (PB)	ストレージ量/ケース (PB)	計算時間/ケース (hour)	ケース数	総演算量 (EFLOP)	概要・計算手法	問題規模	備考
次世代先端デバイス	100	100	10	1.2	10	96	10	350,000	第一原理計算 RSDFT(擬ポテンシャル法、実空間基底)	原子数: 10万	
次世代先端デバイス	100	100	2.5	2	15	60	100	2,200,000	第一原理計算 PHASE(擬ポテンシャル、平面波基底、 $O(N^3)$ 法)	原子数: 1万 100MDを同時実行	
次世代先端デバイス	100	100	2.5	2	15	60	100	2,200,000	第一原理計算 xTAPP(擬ポテンシャル、平面波基底、 $O(N^3)$ 法)	原子数: 1万 100MDを同時実行	
次世代先端デバイス	100	200		5	10	240	10	860,000	第一原理計算 CONQUEST(密度行列、最適化による $O(N)$ 法)	原子数: 1億 2fsの時間刻みで25000でナノ秒オーダーを想定 計算時間は要注意	
光・電子デバイス	1,000	1	0.01	10	0.1	1	100	360,000	高精度分子軌道法	2万基底、100万求積点	
分子機能	1,000	0.4	0.0001	4	0.0001	15	10	540,000	大規模分子軌道法	原子数: 1万	
分子機能	10	1		0.03	1	2	100	7,200	フラグメント分子軌道法	数百残基のタンパク質、数千次元の密行列の固有値問題	
熱交換デバイスの安全性向上・特性解析	200	200	100	100	10	70	10	500,000	短距離古典分子動力学	粒子数: 50兆	同上
分子機能と物質変換	1,000	100		8	1,000	150	10	5,400,000	長距離古典分子動力学	原子数: 10億	
光・電子材料	1,000	480		210	300	28	10	1,000,000	ナノ構造体電子・電磁波ダイナミクス法	原子数: 162万, 時間は1ステップあたりの計算量2 EFLOPSで、これを50000ステップでおよそ28時間	原子数: 162万, 時間は1ステップあたりの計算量2 EFLOPSで、これを50000ステップでおよそ28時間
強相関電子系の機能解明	3	400		10	10	10	100	11,000	クラスターアルゴリズム量子モンテカルロ法	原子数: 1億	整数演算がメイン
強相関電子系の機能解明	1,000	300		10		8	100	2,900,000	変分モンテカルロ法	原子数1万	
物質・エネルギー変換	2,000	100		8	1,000	3	10	220,000	量子分子動力学法	100レプリカ、100万ステップ	
物質・エネルギー変換	1,000	1		10	0.1	24	10	860,000	化学反応動力学・量子分子動力学法(分子軌道計算またはQM/MM)	10000レプリカ	
物質・エネルギー変換	250	100	2.5	2	15	24	10	220,000	化学反応動力学・量子分子動力学法(第一原理計算) χ	数万レプリカ	
分子構造・分子機能	1,000	0.5		0.04		24	1	86,000	分子動力学法(feramIによるリアクサー強誘電体の誘電率の周波数依存)	512x512x512	アレイジョブでノード間通信なし
新物質探索	100	2		0.12		24	1	8,600	クラスター展開法(第一原理計算)	原子数: 1万, 100イオン配置の同時実行	
新材料	0.1	0.02		0.00012		24	10,000	86,000	第一原理計算(凍結フォノン法)	原子数: 1万	PHASEの1/10の規模であることから、同時実行はこの表では想定していない
強相関電子系の機能解明	82	130	23	82	41	42	10	120,000	厳密対角化(ランチョス法)	54サイトのスピン系 ($Sz=0$)	

※ 本見積もりは、9月末日での見積もりである。未だ精査の余地があり、最終版では、より精度の高い数値を記載する予定である。

■ 地球科学

(1) 気象・気候科学

課題	要求性能 (PFLOPS)	要求メモリバンド幅 (PB/s)	要求ファイルI/O性能 (TB/s)	メモリ量/ケース (PB)	ストレージ量/ケース (PB)	計算時間/ケース (hour)	ケース数	総演算量 (EFLOP)	概要・計算手法	問題規模	備考
高解像度気象予報(全球)	120	360	0.2	3	0.04	340	1	140,000	モデル名NICAM, 有限体積法	格子点数: 1兆(水平解像度220m, 鉛直94層)、ステップ数: 520万 (dt=1秒、2ヶ月)	10万ノードを仮定(ノードあたり隣接通信1GB/s)
高解像度気象予報(領域)	170	160	0.17	0.11	0.3	0.5	1	300	モデル名ASUCA, 有限体積法	格子点数: 7500x7500x500、ステップ数: 13万 (dt=1秒、36時間)	10万ノードを仮定(ノードあたり隣接通信14GB/s)
地球環境変化予測	0.41	1.6	0.04	0.003	0.8	720	100	110,000	モデル名MIROC-ESM, スペクトル法(大気)	格子点数: 2000x1000x200、ステップ数: 5300万 (dt=60秒、100年)	計算の大半を占める大気モデルのみで見積もり。100ケース全体が1ヶ月で計算完了することが必要。ネットワークは1000ノードを仮定(ノードあたり大域通信1TB/s)
データ同化を用いた気象予測精度向上	2.3	5.6	0.000017	5	0.0003	0.5	1	4.2	モデル名JNoVA, 四次元変分法(同化モデル)	格子点数: 4000x3000x150、ステップ数: 2700	探索回数50、実行時間のうち70%が演算として見積もり

※ 本見積もりは、9月末日での見積もりである。未だ精査の余地があり、最終版では、より精度の高い数値を記載する予定である。

(2) 固体地球科学

課題	要求性能 (PFLOPS)	要求メモリバンド幅 (PB/s)	要求ファイルI/O性能 (TB/s)	メモリ量/ケース (PB)	ストレージ量/ケース (PB)	計算時間/ケース (hour)	ケース数	総演算量 (EFLOP)	概要・計算手法	問題規模	備考
防災連携シミュレーション	11以上	80以上		0.1	5	3 (15000=約20か月)	5000	120			1領域1000ケースを5領域行つ。アプリの最大BF値=8.0
地震発生				0.02	0.02				4 境界積分法による地震サイクル計算	面素数10 ⁶	アプリの最大BF値=8.00
波動伝搬				0.1	0.5				12 差分法による弾性波動伝搬計算	1200x1000x200Km ³ (125mx125mx62.5m格子)	アプリの最大BF値=2.14
地震動増幅				0.07	2				40 有限要素法による地震波動計算	30億節点 (300x250x10km ³)	アプリの最大BF値=8.00
				0.07	2				40 有限要素法による地震波動計算	30億節点 (30x25x1km ³)	アプリの最大BF値=8.00
建物震動				0.05	0.05				10	構造物100万棟	-
津波遡上				0.004	0.5				10 Navier-Stokes方程式複数モデル(静水圧近似、非静水圧、VOF法)計算	3x3x0.08Kmから1400x1100x10Km (1mから5.4Kmの格子)	アプリの最大BF値=2.63
マントル対流	1,000			0.01		0.083	1	300	流れ場の反復求解、格子法差分計算?	格子数: 290x4000x2000, 4変数	
ダイナモ				0.053	4		1		陰陽格子	格子点: 2000x2000x6000x2, 8変数	

※ 本見積もりは、9月末日での見積もりである。未だ精査の余地があり、最終版では、より精度の高い数値を記載する予定である。

■ ものづくり

(1) 熱流体

課題	要求性能 (PFLOPS)	要求メモリバンド幅 (PB/s)	要求ファイルI/O性能 (TB/s)	メモリ量/ケース (PB)	ストレージ量/ケース (PB)	計算時間/ケース (hour)	ケース数	総演算量 (EFLOP)	概要・計算手法	問題規模	備考
ターボ 機械の熱流動、振動、音響解析	120	50	70	16	500	120	20	1,000,000	有限要素法	10 ¹³ 格子	B/F=0.5として計算
自動車の空力解析、流体振動解析、車室内の騒音解析、エンジンルームや車室内の熱解析	10	20	16	0.05	4.8	28	1,000	1,000,000	Re=10 ⁶ ~10 ⁷ のLES流体計算	10 ¹¹ 格子	BF=2として計算
電子機器の熱流体解析、騒音解析	14	20	25	0.01	1.6	2	1,000	100,000	有限要素法	10 ¹⁰ 格子	
航空機の翼設計、機体設計、エンジンや機体の空力・騒音解析	23	23	25	0.1	8	24	1,000	2,000,000	差分法	10 ¹¹ 格子	
宇宙機の熱流体設計、推進系解析、全機システム解析	58	57	25	1	80	240	10	500,000	差分法	10 ¹² 格子	
都市や建築物内の空気の流れや汚染物質の拡散解析	930	500	20	50	160	96	10	3,200,000	有限要素法	10 ¹³ 格子、10 ⁴ ステップ	

※ 本見積もりは、9月末日での見積もりである。未だ精査の余地があり、最終版では、より精度の高い数値を記載する予定である。

(2) 構造解析

課題	要求性能 (PFLOPS)	要求メモリバンド幅 (PB/s)	要求ファイルI/O性能 (TB/s)	メモリ量/ケース (PB)	ストレージ量/ケース (PB)	計算時間/ケース (hour)	ケース数	総演算量 (EFLOP)	概要・計算手法	問題規模	備考
衝突解析	210	5	100	1	100	24	10	180,000	有限要素法(陽解法)	10 ¹¹ 節点	
弾塑性解析	21	5	1	1	1	24	10	18,000	有限要素法(陰解法)	10 ¹⁰ 節点	
丸ごと詳細解析	210	50	10	10	10	24	10	180,000	有限要素法(陰解法)	10 ¹¹ 節点	

※ 本見積もりは、9月末日での見積もりである。未だ精査の余地があり、最終版では、より精度の高い数値を記載する予定である。

(3) 機械材料

課題	要求性能 (PFLOPS)	要求メモリバンド幅 (PB/s)	要求ファイルI/O性能 (TB/s)	メモリ量/ケース (PB)	ストレージ量/ケース (PB)	計算時間/ケース (hour)	ケース数	総演算量 (EFLOP)	概要・計算手法	問題規模	備考
電子部品用機能性材料に関する強度評価	1,000	50	10	10	500	12	10	430,000	加速分子動力学法	粒径50nm、10マイクロ秒、レプリカ数1000の銅粒界引張シミュレーション	レプリカによる加速率は1000並列あたり666倍と仮定
炭素繊維強化プラスチック開発	200	50	10	30	500	12	10	86,000	非線形有限要素法	試験片20cm、欠陥サイズ50μm、4000ステップの陰解法シミュレーション	反復解法における反復回数は4000として見積もり

※ 本見積もりは、9月末日での見積もりである。未だ精査の余地があり、最終版では、より精度の高い数値を記載する予定である。

(4) プラズマ・核融合

課題	要求性能 (PFLOPS)	要求メモリバンド幅 (PB/s)	要求ファイルI/O性能 (TB/s)	メモリ量/ケース (PB)	ストレージ量/ケース (PB)	計算時間/ケース (hour)	ケース数	総演算量 (EFLOP)	概要・計算手法	問題規模	備考
プラズマ乱流計算・マルチスケール乱流	100	200	10	0.5	0.1	24	50	430,000	ボルツマン方程式の5次元計算 (スペクトル法+差分法)	10 ¹² 格子、10 ⁶ スケール	B/F=2として計算
プラズマ乱流計算・大域的非定常乱流	100	200	10	0.5	1	170	10	610,000	ボルツマン方程式の5次元計算 (差分法)	10 ¹² 格子、10 ⁷ スケール	B/F=2として計算

※ 本見積もりは、9月末日での見積もりである。未だ精査の余地があり、最終版では、より精度の高い数値を記載する予定である。

(5) 電磁界解析

課題	要求性能 (PFLOPS)	要求メモリバンド幅 (PB/s)	要求ファイルI/O性能 (TB/s)	メモリ量/ケース (PB)	ストレージ量/ケース (PB)	計算時間/ケース (hour)	ケース数	総演算量 (EFLOP)	概要・計算手法	問題規模	備考
サーバの装置全体レベル解析	2	2	-	0.05	0.1	1	20	140	陽解法と陰解法の混合	10 ¹² 格子	

※ 本見積もりは、9月末日での見積もりである。未だ精査の余地があり、最終版では、より精度の高い数値を記載する予定である。

(6) 可視化・データ処理

	ファイルベース可視化	In situ可視化
想定する演算性能(ノード当たり)	100TFLOPS	100TFLOPS
ネットワークバンド幅(ノード当たり)	500GB/s	2TB/s
メモリ容量(ノード当たり)	50GB	100GB
メモリバンド幅(ノード当たり)	0.2TB/s	20TB/s
ストレージ容量	各シミュレータが生成する最大容量×2	各シミュレータが生成する最大容量×2
ストレージの帯域	0.1 PB/s	0.01 PB/s

※ 本見積もりは、9月末日での見積もりである。未だ精査の余地があり、最終版では、より精度の高い数値を記載する予定である。

■ 基礎物理

(1) 宇宙研究

課題	要求性能 (PFLOPS)	要求メモリ/バンド幅 (PB/s)	要求ファイルI/O性能 (TB/s)	メモリ量/ケース (PB)	ストレージ量/ケース (PB)	計算時間/ケース (hour)	ケース数	総演算量 (EFLOP)	概要・計算手法	問題規模	備考
自己重力N体/流体シミュレーション	1,000	0.6		1		1,000	1	3,600,000	独立時間刻みとツリーのハイブリッド	1015粒子	100Tflops/ノード × 10000ノード、主記憶100GB/ノード、主記憶バンド幅60GB/s/ノード、オンチップメモリ容量100MB/コア、1000コア/ノード、通信速度30GB/s/ノード
輻射流体力学による銀河と巨大ブラックホール形成のシミュレーション	1,000	0.2		2		2,000	1	7,200,000	Tree radiation SPH	1011粒子 + 5x108光源	100Tflops/ノード × 10000ノード、主記憶200GB/ノード、主記憶バンド幅20GB/s/ノード、オンチップメモリ容量500MB/コア、1000コア/ノード、通信速度100GB/s/ノード
6次元位相空間上のBoltzmann方程式による自己重力系・宇宙プラズマの数値シミュレーション	1,000	0.3		20		80	1	290,000	有限体積法	位置空間2563個	100Tflops/ノード × 10000ノード、主記憶2000GB/ノード、主記憶バンド幅30GB/s/ノード、オンチップメモリ容量512MB/コア、1000コア/ノード、通信速度1000GB/s/ノード
宇宙暗黒時代の進化の解明	1,000	1.3		1.3		100	1	360,000	Particle-Mesh + FFT	10兆粒子+10万光源	100Tflops/ノード × 10000ノード、主記憶128GB/ノード、主記憶バンド幅128GB/s/ノード、オンチップメモリ容量2048MB/コア、1000コア/ノード、通信速度128GB/s/ノード
自己重力輻射流体シミュレーションによる銀河スケール星間ガスシミュレーション	1,000	0.3		2		1,000	1	3,600,000	Tree-Based Radiation Transfer + mesh流体 (AMR)	81923メッシュ+108光源	100Tflops/ノード × 10000ノード、主記憶200GB/ノード、主記憶バンド幅30GB/s/ノード、オンチップメモリ容量200MB/コア、1000コア/ノード、通信速度128GB/s/ノード
天体降着流・噴出流の輻射磁気流体計算	1,000	1		0.02		300	1	1,100,000	相対論的磁気流体方程式の近似リーマン解法+輻射輸送の6次元計算	5123格子点、1000光線方向、100振動数、108時間ステップ	100Tflops/ノード × 10000ノード、主記憶2GB/ノード、主記憶バンド幅100GB/s/ノード、オンチップメモリ容量10MB/コア、1000コア/ノード、通信速度30GB/s/ノード
ブラックホールの形成と強重力場の解明	1,000	1		0.04		500	1	1,800,000	4次元RK、Rad-HRSC	1000 ³ 、10 ⁷ step	100Tflops/ノード × 10000ノード、主記憶4GB/ノード、主記憶バンド幅100GB/s/ノード、オンチップメモリ容量5MB/コア、1000コア/ノード、通信速度2.88GB/s/ノード
超新星爆発のシミュレーション	1,000	200		1	1.3	1,200	1	4,300,000	ニュートリノ輻射輸送計算(超新星爆発)	空間512x64x128位相空間24 ³ で120TB/ノード、オンチップメモリ容量秒分の時間を計算	100Tflops/ノード × 10000ノード、主記憶100GB/ノード、主記憶バンド幅100GB/s/ノード、オンチップメモリ容量2MB/コア、1000コア/ノード、通信速度60GB/s/ノード
超高エネルギー現象と粒子加速	1,000	1		0.06		200	1	720,000	Particle-in-Cell法	40963グリッド、1015粒子	100Tflops/ノード × 10000ノード、主記憶6GB/ノード、主記憶バンド幅100GB/s/ノード、オンチップメモリ容量1MB/コア、1000コア/ノード、通信速度1GB/s/ノード
6次元プラズマシミュレーションによるプラズマ非熱的分布形成の解明	1,000	0.01		0.32		1,400	1	5,200,000	セミ-ラグランジュアン法	実空間10243点、速度空間2653点の6次元計算	100Tflops/ノード × 10000ノード、主記憶32GB/ノード、主記憶バンド幅1GB/s/ノード、オンチップメモリ容量10MB/コア、1000コア/ノード、通信速度1GB/s/ノード
宇宙アミノ酸の量子計算	1,000	0.1		1		600	1	2,200,000	量子ダイナミクス計算サーフェスホッピング法	20アミノ酸x10初期状態x3000サーフェスホッピング	100Tflops/ノード × 10000ノード、主記憶100GB/ノード、主記憶バンド幅10GB/s/ノード、オンチップメモリ容量100MB/コア、1000コア/ノード、通信速度100GB/s/ノード
太陽恒星ダイナモ	1,000	3		0.3		240	1	860,000	音速抑制法	10000 ³	100Tflops/ノード × 10000ノード、主記憶30GB/ノード、主記憶バンド幅300GB/s/ノード、オンチップメモリ容量30MB/コア、1000コア/ノード、通信速度1GB/s/ノード
無衝突衝撃波:太陽圏から宇宙まで	1,000	1		0.6		1,400	1	5,200,000	Particle-in-Cell法	72000x3072 ² グリッド点(粒子数10 ¹⁶ 個)	100Tflops/ノード × 10000ノード、主記憶60GB/ノード、主記憶バンド幅100GB/s/ノード、オンチップメモリ容量1MB/コア、1000コア/ノード、通信速度1GB/s/ノード
太陽系環境科学の推進	1,000	2		2		100	1	360,000	電磁流体力学有限要素法・有限差分スキーム、ハイブリッドスキームPIC等	30003格子	100Tflops/ノード × 10000ノード、主記憶200GB/ノード、主記憶バンド幅200GB/s/ノード、オンチップメモリ容量100MB/コア、1000コア/ノード、通信速度100GB/s/ノード

※ 本見積もりは、9月末日での見積もりである。未だ精査の余地があり、最終版では、より精度の高い数値を記載する予定である。

(2) 素粒子

課題	要求性能 (PFLOPS)	要求メモリバンド幅 (PB/s)	要求ファイルI/O性能 (TB/s)	メモリ量/ケース (PB)	ストレージ量/ケース (PB)	計算時間/ケース (hour)	ケース数	総演算量 (EFLOP)	概要・計算手法	問題規模	備考
カイラル対称性とQCDに基づく有効バリオン間相互作用の決定とその応用	500	8.4		0.066	0.00016	0.28	32,000	16,000,000	格子QCD (カイラル5次元型)	問題規模 格子点: 128 ⁴ ×32、格子間隔 0.1 [fm] 以下 計算手法	200MB、6TB/s の on-chip memory が必要。実効で総演算量100PFlops*年とし、実行効率20%を仮定。ネットワークレイテンシ 1μsec程度の性能が必要。ノード数は16 ⁴ ノードを仮定。メモリ量はノードあたり1GB、バンド幅はノードあたり128GB/sを仮定。モンテカルロ法のためケース数はある程度まとめなければいけない。パラメータのケース数は約10/パラメータほど。
重いクォークの物理	790	42		0.33	0.0001	0.088	100,000	25,000,000	格子QCD (ウィルソン型)	192 ⁴	200MB、18TB/s の on-chip memory が必要。実効で総演算量5*10 ⁶ EFlopとし、実行効率20%を仮定。ネットワークレイテンシ 1μsec程度の性能が必要。ノード数は24 ⁴ ノードを仮定。メモリ量はノードあたり1GB、バンド幅はノードあたり128GB/sを仮定。ケース数については同上。
極限状態でのミクロの階層構造と物質の物理	790	8.4		0.066	0.00002	0.088	100,000	25,000,000	格子QCD (ウィルソン型)	256 ⁴	200MB、18TB/s の on-chip memory が必要。実効で総演算量5*10 ⁶ EFlopとし、実行効率20%を仮定。ネットワークレイテンシ 1μsec程度の性能が必要。ノード数は16 ⁴ ノードを仮定。メモリ量はノードあたり1GB、バンド幅はノードあたり128GB/sを仮定。ケース数については同上。
テクニカラー理論の非摂動ダイナミクス	790	8.4		0.46	0.00002	0.35	25,000	25,000,000	格子QCD (カイラル5次元型)	964×32	200MB、18TB/s の on-chip memory が必要。実効で総演算量5*10 ⁶ EFlopとし、実行効率20%を仮定。ネットワークレイテンシ 1μsec程度の性能が必要。ノード数は16 ⁴ ノードを仮定。メモリ量はノードあたり7GB、バンド幅はノードあたり128GB/sを仮定。ケース数については同上。
量子電磁気学 (QED) の高次補正計算								10,000	モンテカルロ法による多次元積分	1万個以上の多次元 (8~13次元)積分	1万個以上の単体ノードジョブのレイアウト、SIMDとコア並列が必要、プログラムが巨大なためコンパイル速度が重要、高度に最適化された4倍精度ライブラリが必要。ケース数は独立なノードジョブの個数である1万程ともいえる。2から3年かけて計算を終えるようにしたい。
ファインマン振幅の自動計算								10,000	モンテカルロ法による多次元積分	2ループ図形	同上、QEDの高次補正計算と同程度の計算性能が必要

※ 本見積もりは、9月末日での見積もりである。未だ精査の余地があり、最終版では、より精度の高い数値を記載する予定である。

(3) 原子核物理

課題	要求性能 (PFLOPS)	要求メモリ/バンド幅 (PB/s)	要求ファイル/I/O性能 (TB/s)	メモリ量/ケース (PB)	ストレージ量/ケース (PB)	計算時間/ケース (hour)	ケース数	総演算量 (EFLOP)	概要・計算手法	問題規模	備考
原子核構造の第一原理的説明	100	10	0.0001	1	0.0001	28	100	1,000,000	モンテカルロ殻模型法による原子核の構造計算、軽い核	空間を調和振動子基底で展開し、7~8主殻までを考慮。	メモリ量は10000ノード x 100GBで計算
原子核殻模型計算の適用領域の拡張	2.2	0.001	0.0001	0.32	0.0001	10	800	63,000	モンテカルロ殻模型法による原子核の構造計算、中重核領域	模型空間は、パレンス殻2主殻や、一部それを越えるものを想定。	メモリ量は10000ノード x 32GBで計算
原子核構造・反応の統一的説明	53			0.03		100	50	950,000	生成座標法を用いた第一原理的CI計算	空間格子点1万点、配位数100程度	
原子核応答関数の系統的記述と計算核データ構築	32			0.03	0.1	0.1	10,000	120,000	実空間表示準粒子による線形応答行列対角化	10000核種に対して特定の一体場に対する応答関数を系統的に計算	1核種あたり10分以内での計算が可能になれば、系統的な計算による計算核データ構築が現実的になる。現在、反復解法などが改良されており、将来的には行列対角化に頼らない方法になる可能性あり。
核分裂現象の微視的記述	35	0.3		0.04	10	24	100	300,000	実空間・実時間発展計算	空間格子点数、準粒子数、時間ステップ数、それぞれ10万	時間発展1ケースあたり、3x10 ²¹ FLOP
核物質の相構造・状態方程式の解明	23					24	100	200,000	分子動力学法による熱平衡の計算		
ハイベロンを含む軽い核の構造・反応の解明	21	10	0.00001	0.4	0.00001	4	200	60,000	量子少数多体系の厳密計算	7体系への応用	
相対論的重イオン衝突とクォーク・グルーオン・プラズマ物性の解明									高エネルギー重イオン衝突実験の流体シミュレーション計算	実験においても初期状態の揺らぎが注目されるなど、理論の枠組み自体の発展も激しい。現在確立している物理状況を取り入れた模型における計算を目指している。	(課題解決に向けた現在の取り組み) 衝撃波を扱った相対論的粘性流体枠組みのアルゴリズム開発。数値解の安定性、初期条件等の吟味。(手入れた模型における法確立に必要な知見) 粘性が有限の場合の低温での数値不安定性の回避が必要。
多粒子生成反応で探るハドロン共鳴と相互作用の新たな展開									大量の散乱現象のデータと理論計算とを比較することで、励起バリエーションに関する知見を得るための計算。微視的な多チャンネル動的な反応模型を用いた数値計算。	chi-2乗最適化による模型パラメータの決定のため、10 ⁴ 個程度のデータと多チャンネル散乱方程式の解とを比較し、極小値を見つけるために、これをおよそ10 ⁹ 回程度繰り返す。模型パラメータ空間は数百次元。	(課題解決に向けた現在の取り組み) 誤差評価を含めたchi-2乗最適化への取組の問題解決。(手法) 確立に必要な知見) 多次元パラメータ空間上での極小値サーチの効率的な手法。chi-2乗計算の高速化。(実計算への見込み) 現在のチームで4-5年程度と予想。

※ 本見積もりは、9月末日での見積もりである。未だ精査の余地があり、最終版では、より精度の高い数値を記載する予定である。

計算科学ロードマップ 概要

～大規模並列計算によるイノベーションの目指す社会貢献・科学的成果～

平成 25 年 9 月

将来の HPCI システムのあり方に関する調査研究「アプリケーション分野」

<http://hpci-aplfs.aics.riken.jp/>