

# 計算科学ロードマップ紹介

(背景・経緯・進捗)

理化学研究所

計算科学研究センター

足立幸穂

# 本発表での話題

---

## 1. 「計算科学ロードマップ」とは？

- ◆ これまでの「ロードマップ」
- ◆ HPCIC計算科学フォーラムの紹介

## 2. 「計算科学ロードマップ2022」（現在執筆中）について

- ◆ 気候気象分野の章立てと進捗

# 「計算科学ロードマップ」とは？

計算科学各分野の今後5～20年程度先の(計算科学面からの)サイエンス目標と目標実現のために必要な計算機性能や取り組みを取りまとめた白書

## 計算科学ロードマップ

<https://cs-forum.github.io>

### ■ 計算科学ロードマップ2012

今後のHPC技術の研究開発のあり方を検討するWG

### ■ 計算科学ロードマップ2014

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)

### ■ 計算科学ロードマップ2017

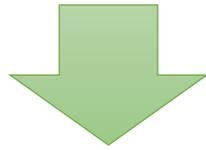
今後のHPCIを使った計算科学発展のための検討会

### ■ **計算科学ロードマップ2022 (現在、執筆中)**

HPCIコンソーシアム 計算科学フォーラム

# 「計算科学ロードマップ」の背景（2010年前後）

- 技術的背景：演算性能の加速度的向上が見込めない？
  - ムーアの法則の終焉？
- 社会的背景：何のためのHPCか？
  - 2009年 事業仕分け、



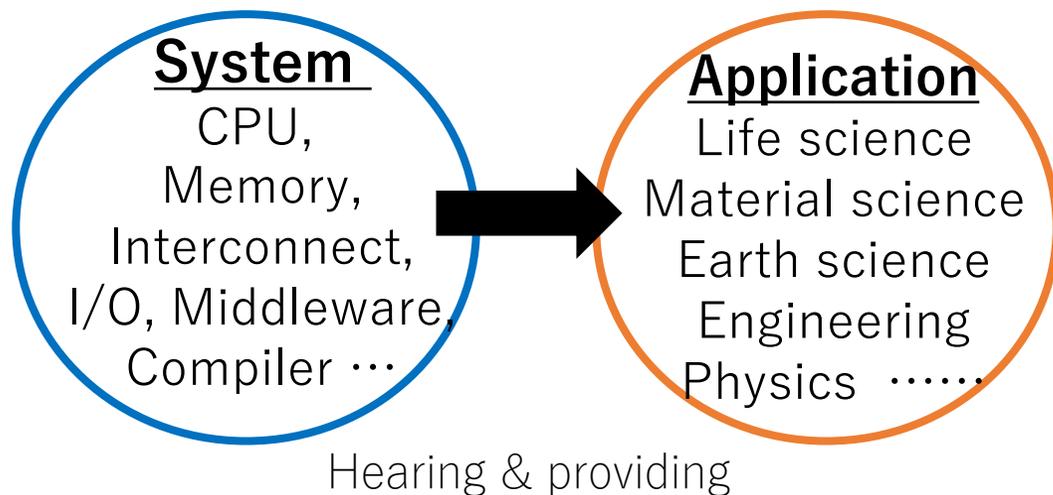
- 開かれたHPC、サイエンスドリブン・アプリケーションファーストの流れ
  - HPCI (High performance computing infrastructure)の構築
    - 大学・各研究所の大型コンピュータをハイスピードネットワーク (SINET)でつなぐ
    - 課題公募（一般・若手・産業、年2回公募、お試しも有り、<https://www.hpci-office.jp>）
  - コデザインの重要性

## 参考資料：

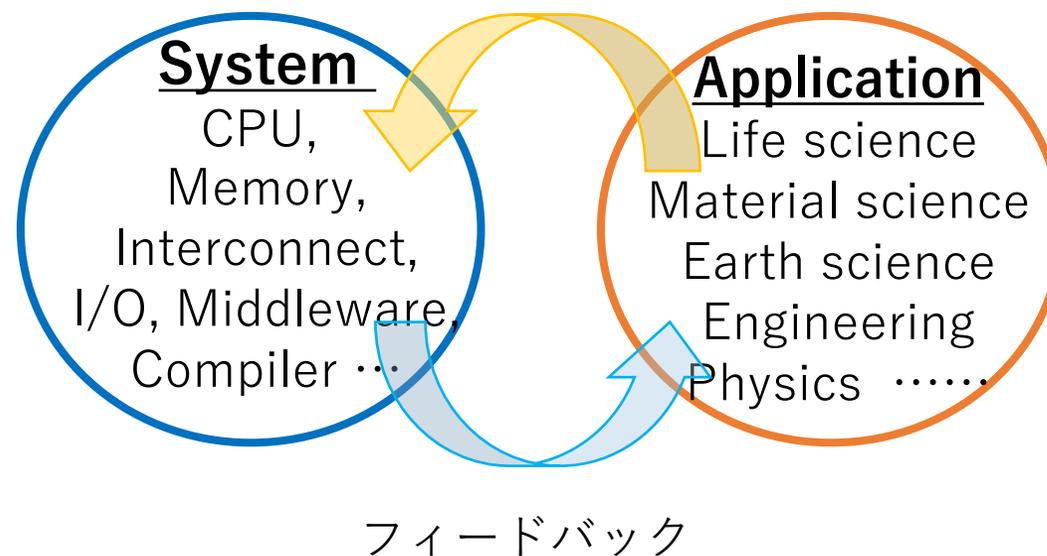
- アプリケーション作業部会 (2012): 「計算科学ロードマップ」、第1章
- 富田 (2021): 「富岳開発における協調設計」, 日本気象学会2021年度秋季大会

# コデザインの重要性：「計算科学ロードマップ」の背景

従来のコンピュータ開発



コデザイン(強調設計)



図：富田(2021)より

# 「計算科学ロードマップ」の執筆者

## ■ 「計算科学ロードマップ白書」（アプリケーション作業部会）

- 2011年「今後のHPC技術の研究開発のあり方を検討するWG」
  - アプリケーション作業部会
    - 執筆者：5つの戦略分野関係者、大学・研究機関、企業で活躍している現役の研究者
    - 気候気象分野：分野3 防災・減災に資する地球変動予測
  - コンピュータアーキテクチャ・コンパイラ・システムソフトウェア作業部会

## ■ 「計算科学ロードマップ2014」

### （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」）

- 2012.7-2014.3「将来のHPCIシステムのあり方の調査研究」（文科省委託研究FS）
  - アプリケーションソフトウェア分野（アプリFS）
    - 計算科学が貢献し得る社会的課題・科学的ブレークスルーのための課題
    - 2018年から2020年頃のスーパーコンピュータなどの計算インフラに求められる機能・性能
    - 執筆者：HPCI戦略プログラムや計算科学の研究者と理論や実験の専門家
    - 気候気象分野：分野3 防災・減災に資する地球変動予測

# 「計算科学ロードマップ」の執筆者

## ■ 「計算科学ロードマップ2017」

### （今後のHPCIを使った計算科学発展のための検討会）

- 2014年度-2016年度 「今後のHPCIを使った計算科学発展のための検討会」（計算科学検討会）
  - 文部科学省委託事業の「HPCIの運営」の枠組みの中で実施
  - 検討会目的：計算科学分野における横断的なコミュニティの育成・維持・発展、若手の発掘、情報交換・成果発表の場の創出、計算科学のための計算資源の確保
    - 執筆者：検討会参加者？、重点課題？
      - 気候気象分野：富田、河宮、小玉、滝川、三好、大塚、寺崎、足立、（西澤、三浦、八代）

## ■ 「計算科学ロードマップ2022」（HPCIコンソーシアム 計算科学フォーラム）

- 2017年度～ HPCIコンソーシアム 計算科学フォーラム
  - 「今後のHPCIを使った計算科学発展のための検討会」の後継
  - 検討会目的：計算科学分野における横断的なコミュニティの育成・維持・発展、若手の発掘、情報交換・成果発表の場の創出、計算科学のための計算資源の確保
  - 有志参加
  - 年2回の研究会：<https://hpcic-kkf.com>

# HPCIコンソーシアム 計算科学フォーラム

<https://hpcic-kkf.com> (代表：東京大・藤堂先生)

年2回 研究フォーラム開催 (10月頃、2月頃)  
気象分野からの発表は、次は、1年半～2年後。

## 計算科学フォーラムワーキンググループ (敬称略)

1. 素粒子・原子核：石川健一 (広島大学)
2. ナノサイエンス・デバイス：藤堂眞治 (東京大学)
3. エネルギー・材料：中嶋隆人 (理化学研究所)
4. 生命科学：杉田有治 (理化学研究所)
5. 創薬・医療：野田茂穂 (理化学研究所)、須永泰弘 (高度情報科学技術研究機構)
6. 設計・製造：大西順也 (東京大学)、高木亮治 (宇宙航空研究開発機構)
7. 社会科学：伊藤伸泰 (東京大学)、野田五十樹 (産業技術総合研究所)
8. 脳科学・人工知能：五十嵐潤 (理化学研究所)
9. 地震・津波：堀高峰 (海洋研究開発機構)、堀宗朗 (東京大学/HPCIC担当理事)
10. 気象・気候：足立幸穂 (理化学研究所)、富田浩文 (理化学研究所)
11. 宇宙・天文：滝脇知也 (国立天文台)

# 「計算科学ロードマップ2022」：全体の章立て（仮）

## 目次

### 第1章 序論

### 第2章 各計算科学分野の課題

- 2.1 素粒子・原子核
- 2.2 ナノサイエンス・デバイス
- 2.3 エネルギー・材料
- 2.4 生命科学
- 2.5 脳・神経科学
- 2.6 創薬・医療
- 2.7 設計・製造
- 2.8 社会科学
- 2.9 地震・津波
- 2.10 気象・気候**
- 2.11 宇宙・天文
- 2.12 人工知能
- 2.13 計算機要求性能まとめ

### 第3章 アプリケーションの分類

### 第4章 各課題の詳細

- 4.1 素粒子・原子核
- 4.2 ナノサイエンス・デバイス
- 4.3 エネルギー・材料
- 4.4 生命科学
- 4.5 脳・神経科学
- 4.6 創薬・医療
- 4.7 設計・製造
- 4.8 社会科学
- 4.9 地震・津波
- 4.10 気象・気候**
- 4.11 宇宙・天文
- 4.12 人工知能

### 付録 A 用語集

### 付録 B 執筆者一覧

# 「計算科学ロードマップ2022」：気候気象分野の章立て(仮)

## 2.10節

- 2.10.1 分野の概要
- 2.10.2 長期目標と社会貢献
- 2.10.3 課題とその解決に必要な計算手法・アプリケーション
- 2.10.4 ロードマップ
- 2.10.5 必要な計算機資源

2章は4章の  
概要版的位置づけ

## 4.10節

- 4.10.1 分野の概要：数値気象気候学の発展
- 4.10.2 サイエンス的課題・目標と必要な計算性能**
  - 4.10.2.1 全球気象・気候**
    - 4.10.2.1a 高解像度全球シミュレーション
    - 4.10.2.1b 全球気候シミュレーション
  - 4.10.2.2 領域気象・気候
    - 4.10.2.2a 数値天気予報
    - 4.10.2.2b 領域気候予測
  - 4.10.2.3 大気モデルの精緻化：物理コンポーネント
  - 4.10.2.4 大気科学・大気環境
  - 4.10.2.5 海洋
  - 4.10.2.6 データ同化・データサイエンス（AI、機械学習）
- 4.10.3 世界の動向とハードウェアに求める計算機性能

4章は詳細説明

## 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)  
e.g. 格子サイズは、現在の1/2程度～1/10未満
  - (開発) 5年程度先の解像度がターゲット
- 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  
e.g. 現在の10倍
- アンサンブル数の増加

# 計算科学研究連絡会（申請中）に期待すること

---

- 「計算科学ロードマップ」の内容
  - “本書が示す大規模計算科学の可能性は、将来サイエンスとして何が必要かを純粋に議論して明らかにするものであり、決して最高性能のフラグシップマシンだけを意識したものではない”（「計算科学ロードマップ2017」第1.1節より）
- 計算科学ロードマップは、本来、分野としての合意が得られている目標が示せるとよい。
- HPC的知見の共有だけでなく、科学目標などについても、議論するような場が形成できると嬉しい。
  - 次期ロードマップでは、そこでの議論を反映したい。