

# 開発目標

- 重点課題のターゲットアプリケーションとシステムのCo-designにより、以下の性能目標を実現
- ⇒ 多重ケース処理型計算で最大「京」の100倍、大規模単一問題型計算で最大「京」の50倍
- 消費電力は30～40MW（※「京」の消費電力は約13MW）

カテゴリ	重点課題	目標性能 (対「京」比)	目標性能によって可能となる計算例と想定できる アウトカム	計算の種類	想定 プログラム
健康長寿 社会の実現	① 生体分子システムの機能制御による革新的創薬基盤の構築	100倍	全原子分子動力学シミュレーションにおいて、10万原子の10万ケース計算によるスクリーニングにより、より効果的で安全な創薬候補物質のスクリーニングが可能に。（「京」では1000ケース程度の計算スクリーニングまで。）	多重ケース処理型計算	GENESIS
	② 個別化・予防医療を支援する統合計算生命科学	15倍 * 注1	個人ゲノム解析（パターンマッチング）については、20万人規模を目指す。（「京」では数千検体の解析まで。）	多重ケース処理型計算	Genomon
防災・環境 問題	③ 地震・津波による複合災害の統合的予測システムの構築	15倍 * 注2	有限要素法（複雑な要素を表現できる計算法）を用いた複雑な地盤構造および建物の振動の1領域につき1000ケース程度を目指したシミュレーションにより、想定外を出来るだけ無くした地震災害想定が可能に。（「京」では、数十ケースの予測まで。）	多重ケース処理型計算	GAMERA
	④ 観測ビッグデータを活用した気象と地球環境の予測の高度化	75倍	構造格子の有限体積法による3.5km解像度での1000のアンサンブル計算と次世代観測データ用いたデータ同化により、局地的豪雨や竜巻などの高精度な予測を実現。（「京」では、数十アンサンブル程度で雲や台風の構造の再現まで。）	多重ケース処理型計算 +大規模単一問題型計算	NICAM +LETKF

## ※多重ケース処理型計算（Capacity Computing）：

小・中規模のプログラムを大量に実行する計算。分子動力学シミュレーションや気象、気候シミュレーションなどの分野では、初期パラメータを変えてシミュレーションし、それらの結果から予測値を得る手法が取られる。（例：「京」で80ノード使って動作するプログラムを1000個同時に動かす。）

## ※大規模単一問題型計算（Capability Computing）：

従来技術でなし得なかった規模の計算。（例：「京」で8万ノード使わないと動かせないプログラム）

\* 注1 本暫定版目標性能では、Genomonで使われているゲノム配列アライメントアプリBLATを扱った。今後、アプリ全体の目標性能を決める。

\* 注2 昨年度評価時に100倍向上するアプリ例として挙げていたが、その時の当該重点課題アプリは演算加速部で高速に実行可能な差分法に基づくアプリであった。今回想定しているアプリはポスト「京」ではメモリバンド幅律速となるアプリのため目標性能が下がっている。

# 開発目標

カテゴリ	重点課題	目標性能 (対「京」比)	目標性能によって可能となる計算例と想定できる アウトカム	計算の種類	想定 プログラム
エネルギー 問題	⑤ エネルギーの高効率な創出、変換・貯蔵、利用の新規基盤技術の開発	40倍	量子力学に基づく700原子規模の20ケースのシミュレーションにより、光化学反応のメカニズムを解明し、光エネルギー変換ための材料候補物質のスクリーニングが可能に。(「京」では、数百原子程度の数ケースまで。)	多重ケース処理型計算	NTChem
	⑥ 革新的クリーンエネルギーシステムの実用化	20倍	有限要素法に基づき、複雑な形状の構造物まわりの流体(例えば、ターボ機械の熱流動など)を1兆要素規模で計算することにより、熱発生率、冷却・排気損失、ノッキング、サイクル変動等の予測の正確な評価が可能。(「京」では、数百億要素規模で予測技術の確立まで。)	大規模単一問題型計算	FFB
産業競争力の 強化	⑦ 次世代の産業を支える新機能デバイス・高性能材料の創成	35倍	量子力学的第一原理計算に基づき、10万原子のシミュレーションを10ケース程度行うことにより、複数の異種物質から構成されるナノ界面を解明。(「京」では、ナノ界面の一部を切り出した部分系での理解。)	多重ケース処理型計算	RSDFT
	⑧ 近未来型ものづくりを先導する革新的設計・製造プロセスの開発	15倍	有限要素法に基づき複雑な形状の構造解析(例えば、ターボ機械全体)を10~20億要素規模で時空間的に予測する計算を大量に行うことにより、最適な全体設計を実現。(「京」では、個別のシミュレータまで。)	多重ケース処理型計算	Adventure
基礎科学の 発展	⑨ 宇宙の基本法則と進化の解明	50倍	クォークを $192^4$ 個の格子上的場として計算することにより、素粒子から宇宙全体にわたる物質創成史を解明。(「京」では、 $96^4$ 格子上で、星、銀河、巨大ブラックホールなど、宇宙における諸階層の構造形成過程まで。)計算量は「京」時代の計算内容の60倍程度。	大規模単一問題型計算	CCS-QCD

## 注：

- 表中の記載内容は、新構成の総演算性能に基づき、概念設計レベルにおける性能予測を行ったもの。
- 今後は、本暫定版目標性能に基づく基本設計を進め、重点課題実施機関決定後、速やかに再見直しを行い当該実施機関の提案に基づき修正。これをもって最終的な開発目標とする。

# 開発目標

## システムソフトウェアの開発目標

- ① CPUコア1000万基以上並列での効率的動作が可能なシステムソフトウェアを開発し、ポスト京において運用に供する。
- ② 開発するシステムソフトウェアは、他のシステムで開発された、既存OSSなどのソフトウェアを簡単かつ効率的に実行できるようにする。
- ③ CPUコア1000万基以上並列での効率的動作が可能なプログラミング環境を実現するために、並列プログラミングを容易にする並列プログラミング言語やアプリケーション分野に適したプログラミング言語（DSL:ドメイン特化言語）等を開発し、ユーザーに供する。
- ④ 開発するソフトウェアはオープンソース化し同時に国際連携することによって、最先端システムソフトウェア技術をいち早く取り込みユーザーニーズに応えられるようにする。

## システムの拡張性と機能拡張可能性

- ボード交換および機能拡張でポスト京の次世代CPUにアップグレード可能な設計としている。
- 次世代CPUにおいて、ポスト京で利用予定の10nmテクノロジーの次の7nmテクノロジーが利用可能となる見込み。
- 次世代CPUのボードに交換できれば、電力性能をさらに向上できる可能性がある。  
⇒ 同じ電力であれば、全体性能が向上。 同じ性能であれば、電力削減が可能

## システムの下方展開・海外展開

- 標準ラックに搭載できる、小規模なシステムへダウンサイジングできる設計とする計画  
⇒ 1ラックでも商用展開可能に！
- ポスト京導入開始と同期をとった商用機導入を国内外へ働きかけ  
⇒ 国際的HPCエコシステム構築の推進（システムソフトウェアの国際協力とともに）