

重点課題（1/2）

<重点課題（9課題）>

- ①社会的・国家的見地から高い意義がある、②世界を先導する成果の創出が期待できる、③ポスト「京」の戦略的活用が期待できる課題を「重点課題」として選定。
- 重点課題の中からターゲットアプリケーションを選定の上、コデザイン及び性能目標の明確化に活用する。公募による代表機関決定後、代表機関により実施計画を策定し、平成27年度からアプリケーション開発に着手する。

カテゴリ	重点課題
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 超高速分子シミュレーションを実現し、副作用因子を含む多数の生体分子について、機能阻害ばかりでなく、機能制御までも達成することにより、有効性が高く、さらに安全な創薬を実現する。
	② 個別化・予防医療を支援する統合計算生命科学 健康・医療ビッグデータの大規模解析とそれらを用いて得られる最適なモデルによる生体シミュレーション（心臓、脳神経など）により、個々人に適した医療、健康寿命を延ばす予防をめざした医療を支援する。
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 内閣府・自治体等の防災システムに実装しうる、大規模計算を使った地震・津波による災害・被害シミュレーションの解析手法を開発し、過去の被害経験からでは予測困難な複合災害のための統合的予測手法を構築する。
	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 観測ビッグデータを組み入れたモデル計算で、局部的豪雨や竜巻、台風等を高精度に予測し、また、人間活動による環境変化の影響を予測し監視するシステムの基盤を構築する。環境政策や防災、健康対策へ貢献する。

重点課題 (2/2)

<重点課題 (9 課題) > (つづき)

カテゴリ	重点課題
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 複雑な現実複合系の分子レベルでの全系シミュレーションを行い、高効率なエネルギーの創出、変換・貯蔵、利用の全過程を実験と連携して解明し、エネルギー問題解決のための新規基盤技術を開発する。
	⑥ 革新的クリーンエネルギーシステムの実用化 エネルギーシステムの中核をなす複雑な物理現象を第一原理解析により、詳細に予測・解明し、超高効率・低環境負荷な革新的クリーンエネルギーシステムの実用化を大幅に加速する。
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 国際競争力の高いエレクトロニクス技術や構造材料、機能化学品等の開発を、大規模超並列計算と計測・実験からのデータやビッグデータ解析との連携によって加速し、次世代の産業を支えるデバイス・材料を創成する。
	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 製品コンセプトを初期段階で定量評価し最適化する革新的設計手法、コストを最小化する革新的製造プロセス、およびそれらの核となる超高速統合シミュレーションを研究開発し、付加価値の高いものづくりを実現する。
基礎科学の発展	⑨ 宇宙の基本法則と進化の解明 素粒子から宇宙までの異なるスケールにまたがる現象の超精密計算を実現し、大型実験・観測のデータと組み合わせ、多くの謎が残されている素粒子・原子核・宇宙物理学全体にわたる物質創成史を解明する。

萌芽的課題

<萌芽的課題（4課題）>

ポスト「京」で新たに取り組むチャレンジな課題として、今後、調査研究を通じて実現化を検討する。調査研究終了後に、ポスト「京」における研究開発実施について決定する。

萌芽的課題	
将来性を考慮し、 今後、実現化を 検討する課題	⑩ 基礎科学のフロンティア – 極限への挑戦 極限を探究する基礎科学のフロンティアで、実験・観測や「京」を用いた個別計算科学の成果にもかかわらず答の出していない難問に、ポスト「京」のみがなし得る新しい科学の共創と学際連携で挑み、解決を目指す。
	⑪ 複数の社会経済現象の相互作用のモデル構築とその応用研究 複雑且つ急速に変化する現代社会で生じる様々な問題に政策・施策が俊敏に対応するために、交通や経済など社会活動の個々の要素が互いに影響し合う効果を取り入れて把握・分析・予測するシステムを研究開発する。
	⑫ 太陽系外惑星（第二の地球）の誕生と太陽系内惑星環境変動の解明 宇宙、地球・惑星、気象、分子科学分野の計算科学と宇宙観測・実験が連携する学際的な取り組みにより、観測・実験と直接比較可能な大規模計算を実現し、地球型惑星の起源、太陽系環境、星間分子科学を探究する。
	⑬ 思考を実現する神経回路機構の解明と人工知能への応用 革新技术による脳科学の大量のデータを融合した大規模多階層モデルを構築し、ポスト「京」での大規模シミュレーションにより思考を実現する脳の大規模神経回路を再現し、人工知能への応用をはかる。

ターゲットアプリケーション候補と今後の流れ

- 各重点課題において要となると想定される計算手法を有するアプリケーションから、暫定的にターゲットアプリケーション候補を選定。

重点課題	主な計算手法	Co-design観点 (重要なアーキテクチャパラメータ)	ターゲットアプリ 候補名称	グループ
①	分子動力学法	局所および集団通信レイテンシ、 演算性能	GENESIS	グループ I
②	大容量データ解析	入出力	Genomon	グループ II
③	非構造・構造格子ステンシル複合の有限要素法	通信・メモリバンド幅	GAMERA	グループ I
④	構造格子ステンシル有限体積法+局所アンサンブル変換カルマンフィルター法	通信・メモリバンド幅、 入出力、SIMD幅	NICAM +LETKF	NICAMはグループ I、 LETKFはグループ II
⑤	高精度分子軌道法 (疎+密行列計算)	演算性能/SIMD幅/集団通信レイテンシ	NTChem	グループ I
⑥	非構造格子・有限要素法	通信・メモリバンド幅SIMD幅	FFB	グループ I
⑦	密度汎関数法 (密行列計算)	演算性能/集団通信レイテンシ	RSDFT	グループ I
⑧	非構造格子・有限要素法	通信・メモリバンド幅、SIMD幅	Adventure	グループ I
⑨	構造格子経路積分モンテカルロ法	通信・メモリバンド幅、局所および集団通信レイテンシ	CCS-QCD	グループ I

(※) グループ I ……ハードウェアの根幹に関わるため詳細に取り組むべきアプリケーション、グループ II ……グループ I 以外のアプリケーション

- 今後、公募による重点課題の代表機関決定後、代表機関の意見や選定基準等も踏まえ、必要に応じて見直しを行い、ターゲットアプリケーションを決定する。
- 重点課題決定後速やかに、各ターゲットアプリケーション候補の目標性能を設定。この際、問題規模等は、「計算科学ロードマップ」を参考にする。
 - ・重点課題代表機関決定後ターゲットアプリケーションの見直しが行われた場合でも、先に進めているCo-designやチューニングのノウハウが新しく選定されたターゲットアプリケーションへ反映できるよう留意してCo-designを進める。
 - ・選定基準を遵守することにより、ターゲットアプリケーションの入れ替えがあったとしても、掲げた目標性能が大幅に下方修正されることがないようにする。