

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。