

分科会D(計算物質科学)

寺倉清之

北陸先端大
産総研

2007/10/04

分科会Dのプログラム

はじめに 福山秀敏 (東京理科大)

前半 司会: 中辻 博 (量子化学研究協会)

現状の概観と次世代スパコンへの期待

科研費特定「量子デザイン」	赤井久純 (大阪大学)
科研費特定「分子理論」	榊 茂好 (京都大学)
次世代ナノ統合	平田文男 (分子科学研究所)
ソフトマター	土井正男 (東京大学)
計算機科学から	佐藤三久 (筑波大学)

後半 司会: 平尾公彦 (東京大学)

パネルディスカッション: 継続的に発展する計算科学コミュニティのために

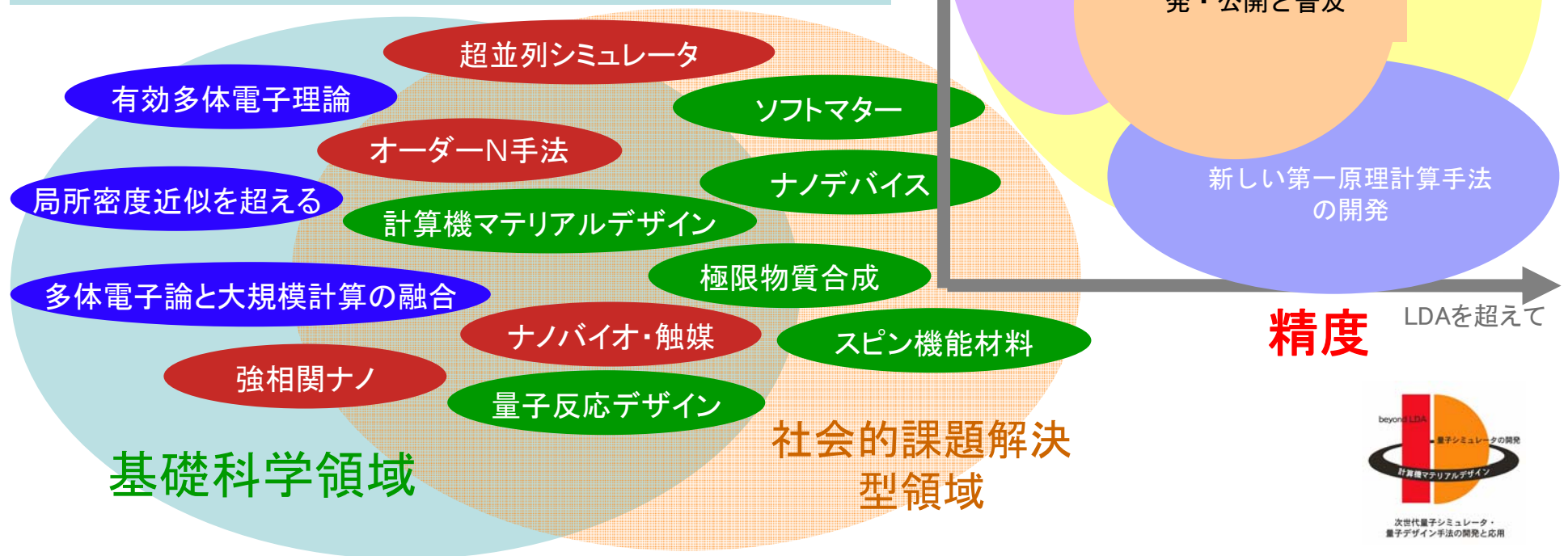
キーワード: 人材育成、ソフト開発・管理、共用に関する提言、産学連携

土井正男 (東京大学)
高塚和夫 (東京大学)
吉田 博 (大阪大学)
高田 章 (旭硝子(株))
岡部 豊 (首都大学東京)
尾崎泰助 (北陸先端大)

終わりに 平尾公彦 (東京大学)

研究の特性と方向性

- **基礎科学への貢献**
 - 次世代量子シミュレータは凝縮系の標準理論を提供
 - 次世代量子デザイン手法は新しい物質科学のパラダイムを切り開く
- **社会への貢献**
 - 「計算機マテリアルデザイン」を用いた新しい産業の創成
 - 高機能・高効率材料開発手法の提供



現在の分子理論に要求される条件

電子状態理論

大規模化
高精度化

ダイナミクス理論

大規模化
電子ダイナミクス

量子論と統計理論の融合・統合

分子基礎理論

理論の深化
Beyond BO近似
相対論効果

統計理論

置換基などのゆらぎ
統計性、溶媒効果

多種・多様な元素
大規模系
複雑な構造
複雑な電子状態
フレキシブルな構造
高速過程

スパコンからPCまで広がるソフト群の
有効な利用方策は？



リソース・インフラの有効利用は？
運用方法はどうかなるの？



世界最速のハード、
高度なインフラ

産業応用される
ソフト群



開発ソフト vs 市販ソフト？



コンピュータ、高度情報を
使いこなせる人材

膨大な投資をしなくても
利用できる仕組みはできないの？



リソースは増大するが、
つかいこなせる人材は？



次世代スパコンプロジェクトをきっかけとして

以下の問題意識が明確になった。

- 有効活用を目指した、コミュニティの形成
計算物質科学連絡会議
- 計算科学の継続的发展を目指して
教育・人材育成
ソフト開発、普及、管理
- 超並列計算機への対応
計算科学と計算機科学の連携

緊急



計算物質科学連絡会議

- ・ 次世代スパコンプロジェクトを視野に入れて、計算物質科学の研究・教育活動に関する全国的な情報および意見交換の場
- ・ 計算物質科学コミュニティーの窓口
- ・ 年に一度、全体シンポジウムを開催
- ・ 事務局を設置（世話人：福山、平尾、中辻、榊、土井、寺倉）

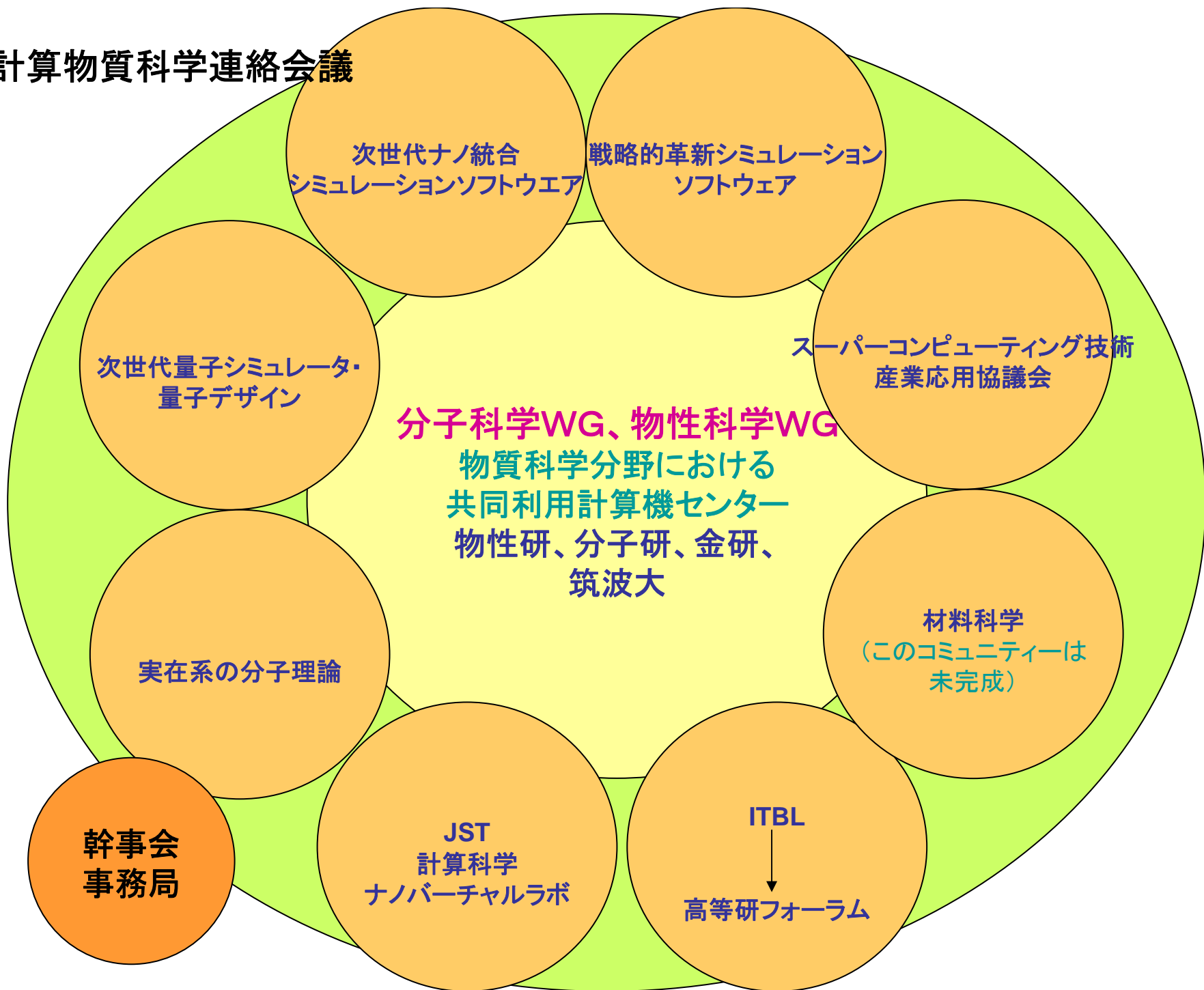
—WEBページの充実により、
情報公開に努める。特に、
次世代スパコンについては、
理研との協力によりコミュニティー
への情報伝達を行う。

—全体シンポジウムのアレンジ

<http://www.jaist.ac.jp/cmsf/>



計算物質科学連絡会議



吉田博

ナノマテリアルデザインと実証 教育研究トレーニングネットワーク (RTN)

大学間連携

広島大、神戸大、東大、
東北大、東京理科大
筑波大

企業連携

富士通、松下電器
豊田中研、日本電気
NTT、その他

外国研究機関連携

EU-Psi-k Node
USA-Node
Asian-Node

ネットワーク型

人材育成（高度専門職業人、
デザイナー、プログラマー、
シミュレーター、
実証）

国立研究機関連携

物質材料研究機構
理研（次世代スーパーコン
ピューティング研究
開発センター）*

地域機関連携

国際高等研究所
日本原子力研究開発機構
(SPring-8)

（仮称）大阪大学
計算機ナノマテリアル
デザインセンター

産研・理学・
工学・基礎工学

教育・人材育成

- 理論化学・量子化学のコミュニティからの必要性
計算機の使い方以前の問題として、理論をしっかりと教育する
必要がある(シミュレーション中心主義では危ない)。-- 高塚

計算科学では、シミュレーションそのものが目的ではなく手段
である。このことが、現実の計算科学の教育プログラムを複
雑にする。

例:理論化学・量子化学 ……主専攻
計算科学 ……副専攻

**O. Yasar and R. H. Landau: “Elements of Computational Science
and Engineering Education”
SIAM Review 45, 787-805 (2003)**

概念の変革が必要か！

成果物としてのソフトウェアの特質

- 強い伝播力を持っている
 - それ自身で有用な成果物
 - インターネットで配布可能
 - 大規模かつ短期間の展開が可能
 - 商用化だってできるかもしれない
- しかし、伝播には高い障壁がある
 - 論文と比較にならないくらい、
 - 細部にわたって、正しさが要求される
 - 大部の使い方説明書が必要
 - 労力が要求される
 - 大きな苦勞のわりには、その善意が報われない
 - 損得を考えない“変人”が支えている現状

オープンソースコード開発における所感

正の効用

知識の共有化

知識の融合化

$\frac{\text{仕事量}}{N}$

N: 人数

負の効用

コミュニケーションの増大: αN^2

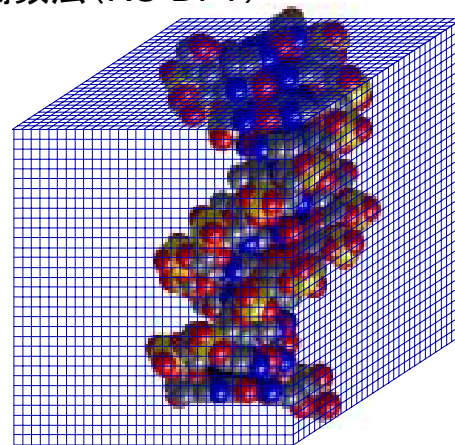
GNU-GPL的な自由スタイルを取りつつも、現実には開発責任者がコードの整合性、手法開発の妥当性等の責任を払う必要がある。現実的な解は外との連携を保った家内工業的な教育・開発体制。

コミュニティとして何をなすべきか？

- ソフトウェア開発を尊重する文化をつくる
 - 論文にならない仕事は評価しないという風習を改める
 - 良質のソフトを顕彰し、後世に残す
- ソフトウェアの開発者が互いに協力し合える環境をつくる
 - 開発者の健全な競争と協力ができる環境
 - 善意の開発者を生かす環境

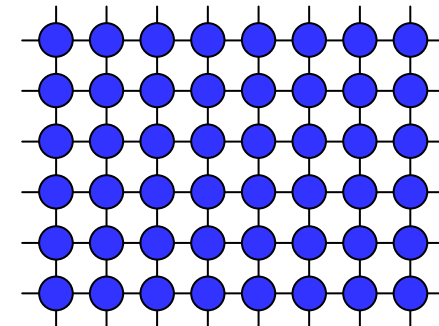
次世代スパコンでの高速化には、並列化は必須

- **まず、並列化ができる計算科学の人材の育成が必要**
 - 並列プログラミングMPI, OpenMP ...
- **計算科学の研究者と計算機科学の研究者が協調**して、問題の定式化、アルゴリズムの再検討を行いアプリケーション開発を進めることが必要
 - PFLOPSの性能を必要とする問題は潜在的に膨大な並列性を内在する(はず)
 - 例:FFT(全対全通信)を必要としないスケーラブルなアルゴリズム
- 近接相互作用を中心に並列処理を行う「**実空間アプローチ**」(超並列向き)
 - 物理の様々な問題に対して応用できる
 - 境界条件を現実に合わせて設定できる
 - 例;実空間密度汎関数法(RS-DFT)



実空間離散化
から直接マップ

物理空間を直接
シミュレーション



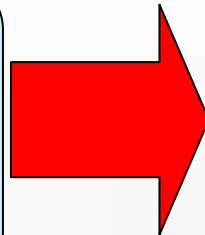
「学際計算科学」の必要性

計算科学は、21世紀の科学技術を牽引する
最先端・最重要分野の一つ

- 自然・人間・環境のグランドチャレンジを解決する鍵としての計算科学
- これを実現する、科学と計算機科学・情報科学の融合
- 計算科学を連携軸とする、科学全般に対する俯瞰的視野を持つ人材の育成

これまでの「計算科学」

- 個々の分野の一部としての「計算科学」
- 個々の短期的なプロジェクトとして推進
- 「大計センター」等の計算機施設を利用



学際計算科学へ

- 計算科学諸分野と計算機科学の融合・連携
 - 計算科学のための計算機システムは、大規模化、多様化。使いこなすためには高性能計算技術が不可欠
 - 次世代、次々世代の計算科学を可能にする持続的な計算技術・計算機システム・計算科学応用の研究開発が必須
- 計算科学の分野を包括的に捉える
横系としての計算科学が必要
 - 大規模数値解析を共通軸とする計算科学の方法は、科学諸分野を分野横断的に捉えることが可能

次世代スパコンを十分に活用し、計算科学により未踏領域を開拓するためには、新しい学術領域として学際的な「計算科学」を確立し、継続的に発展させることが重要

次世代スパコンプロジェクトがもたらす変革

- 必要が認識されながら進展しなかった問題
 - ソフトウェアの開発、普及、管理
 - 計算科学の教育・人材育成
 - 計算科学と計算機科学の密接な連携
- 「計算科学」が「道具」ではなく、より主体的なものとして、概念と実体を実質的に変える必要がある。
これは、佐藤先生の「学際計算科学」に通じるか？

NSFにおけるペタプロップスマシン利用のプロジェクト公募

ACCELERATING DISCOVERY IN SCIENCE AND ENGINEERING THROUGH PETASCALE SIMULATIONS AND ANALYSIS (PetaApps)

Program Solicitation

NSF 07-559



National Science Foundation

Office of Cyberinfrastructure

Directorate for Computer & Information Science & Engineering

Directorate for Engineering

Directorate for Geosciences
Division of Earth Sciences

Directorate for Mathematical & Physical Sciences

計算物性科学WGの下記のホームページ

<http://www.issp.u-tokyo.ac.jp/public/cmp/>

次世代スパコン共用に対する提言の付録2
に詳細を載せている。

Full Proposal Deadline(s) (due by 5 p.m. proposer's local time):

July 23, 2007

- 科学技術の最先端課題の解決をめざす提案に重点が置かれている
- ペタスケールコンピューティング環境を使うコミュニティを作ることが目的の一つ

計算物性科学WG

<http://www.issp.u-tokyo.ac.jp/public/cmp/>

- 計算物性科学WGは、計算物性科学のよりよい環境を作るためのワーキンググループです。本WGは次世代スパコンプロジェクトのスタートをきっかけとして組織されました。物質科学の研究者であって、計算物性科学に関心のあるすべての方に開かれています。実験家も歓迎です。
- われわれはこのような状況に鑑み、計算物性科学に関心をおもちの国内すべての方々の連携、交流を深め、次世代スパコンプロジェクトを有意義な科学研究や技術開発につなげ、更にはその先のプロジェクトに備え、ひいては計算物性科学の一層の発展を目指します。
- 次世代スパコンの共用促進に関する提言を取りまとめた。上記ホームページに掲載。

NSF: Accelerating Discovery in Science and Engineering through Petascale Simulations and Analysis (PetaApps)

http://www.nsf.gov/publications/pub_summ.jsp?ods_key=nsf07559

- 科学技術の最先端課題の解決をめざす提案に重点が置かれている。
- ペタスケールコンピューティング環境を使うことのできるコミュニティを作ることが、このプログラムの目的の一つである。若手研究者からの、あるいは若手研究者を含む提案が推奨される。
- 開発されるコードは、特定の研究分野で幅広い影響をもたらさなければならないし、オープンソースライセンスの標準形で、自由に入手できるようにされなければならない。

次の分野の提案を推奨するが、他の分野の研究も考慮される。

- ・マルチスレッド、高度並列、階層的アーキテクチャを活用する技法を用いたアルゴリズムのスケラビリティを強化すること
- ・対話式のスケラブルな可視化ツールを含む、大量のデータのためのデータ抽出、解析、集積アルゴリズムを改良し創造すること
- ・ペタスケールシステムに相応しい革新的なモデリング、シミュレーション、最適化などのアルゴリズムを開発すること
- ・ペタスケールシステムを用いて最先端の科学的問題を解決するためのプラットフォームに依存しないソフトウェアを開発すること
- ・特定のペタスケールのハードウェア、あるいは最も確からしいと予測される将来のハードウェアのためにソフトウェアを最適化すること
- ・ハードウェアの能力の制限のために以前は実行可能でないと考えられてきた、革新的な計算技法を探索すること
- ・非常に多く使われているがスケラビリティ、ボトルネック、最適化を解析されることのなかったソフトウェアの性能解析を実施し、輪郭を作成すること
- ・現在機能している問題解決手法を、非常に大規模なスケールの計算機システムにより有効にスケールすることが情報科学研究で知られているアルゴリズムに置き換えることによって変更すること
- ・現在スーパーコンピュータでMPIを用いている研究用のコードを、特定のペタスケールの問題に有効な形でCo-Array Fortran, UPC あるいはTitanium の一つあるいはそれ以上に適合させること