

プロフィール



佐藤 三久(さとう みつひさ)

【現職】

筑波大学 計算科学研究センター センター長・教授

【略歴】

昭和57年東京大学理学部情報科学科卒業。昭和61年新技術事業団後藤磁束量子情報プロジェクトに参加。平成3年、通産省電子技術総合研究所入所。平成8年、新情報処理開発機構並列分散システムパフォーマンス研究室 室長。平成13年より、筑波大学システム情報工学研究科 教授。平成19年より、同大学計算科学研究センターセンター長。理学博士。並列処理アーキテクチャ、言語およびコンパイラ、計算機性能評価技術、グリッドコンピューティング等の研究に従事。情報処理学会、IEEE、日本応用数理学会会員。



平成19年10月3日
次世代スーパーコンピューティング・シンポジウム2007

分科会D(計算物質科学)
「計算物質科学の課題と次世代スーパーコンピュータ」
第I部 現状の概観と次世代スパコンへの期待
～計算機科学の立場から～

佐藤 三久

筑波大学 計算科学研究センター

次世代スパコンはあなたの(逐次)プログラムを
早く実行してくれるか？

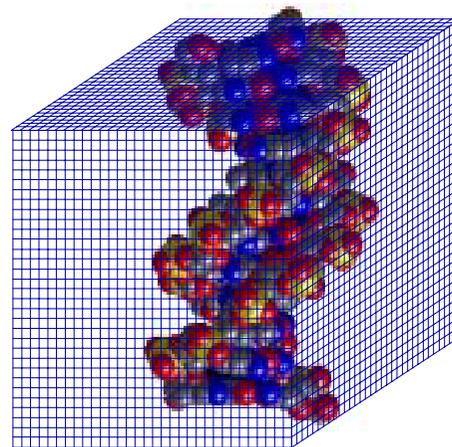


(多分)No!

- 10PFLOPS超のシステムの実現に当たって最も重要な課題は
消費電力と設置スペース
 - 現在のPC(10GFLOPS/100W)で10PFLOPSシステムを作ると、100MW必要
 - 1PFLOPSならば、現状の延長線にあるが、10PFLOPSでは再検討が必要
- 個々のプロセッサはむしろ遅くなる傾向
 - 低電力化のため、電圧を下げる必要
 - ➡ 逐次プログラムはむしろ遅くなる(こともある)
- プロセッサの演算性能に比べてメモリバンド幅が足りなくなる

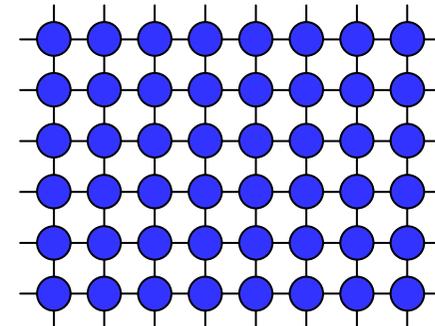
次世代スパコンでの高速化には、並列化は必須

- 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)



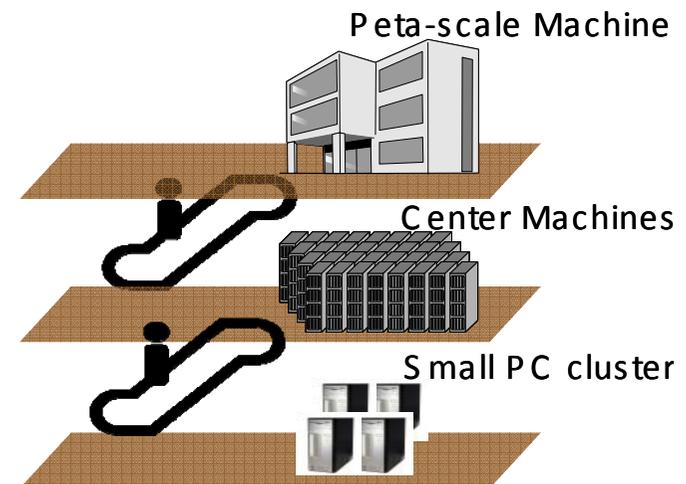
実空間離散化
から直接マップ

物理空間を直接
シミュレーション



次世代スパコンと大学センタースパコンの 使い分けと役割の明確化をすることが必要

- 資源の有効利用の観点から、次世代スパコンは次世代スパコンでしかやれない計算を優先すべき
 - グランドチャレンジ、そのためのペタをこなすアプリの開発を進める
 - 安易な次世代スパコンの利用は、貴重な計算資源の無駄づかいだけでなく、大学センタースパコンを「つぶす」恐れがある
- 大学センタースパコンは、計算科学の人材養成および研究基盤として重要
 - 次世代スパコンとの役割の観点から、運営体制の見直しも必要か
 - 研究開発に重点
- 研究室の計算機から、センタースパコン、次世代スパコンまでのシームレスな連携（開発、利用の両面から）が望ましい
 - グリッド技術、並列ソフトウェア
開発環境の研究開発



Productivityを向上させるためには、並列プログラミングの言語および環境、ライブラリの“実践的”な研究開発が必要

■ Another HPC: High Productivity Computing

- 性能だけでなく、それを使ってなにができるかが問題
- “Life is too short for MPI” (by T-shirts message@WOMPAT2001)
- 「欧米はMPI ベースで良いが、日本で分散メモリマシンを普及させるには、ユーザフレンドリーな並列化インタフェースが不可欠」 (故 三好先生@ES)

■ 評価は難しい

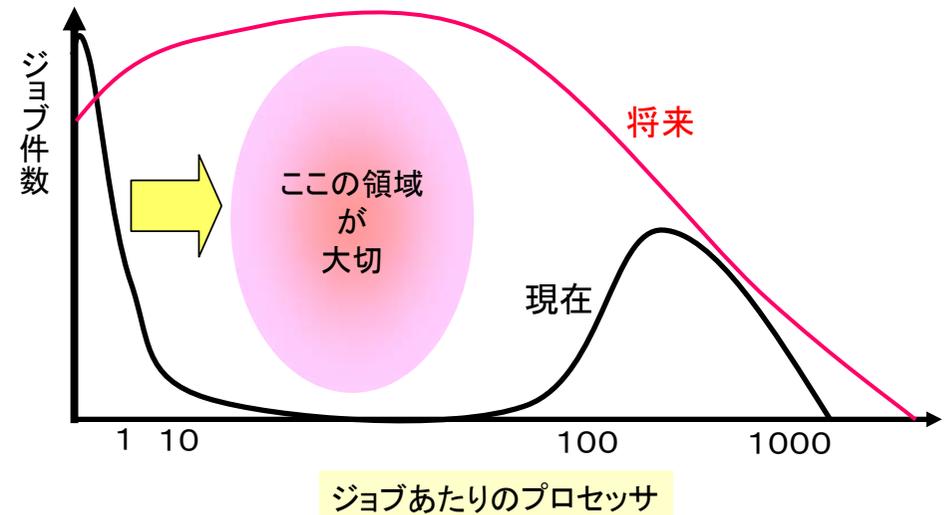
- これからのHPCに必要な並列化の場合
 - 2ヶ月かかって100倍 by MPI
 - 2日で、10倍 by OpenMP

■ ユーザはプログラミング環境に「最大公約数」を求める

- どこでも動く、最大の機能
- だから、現在は、MPI、OpenMP、...

■ そのためには、...

- 標準化
 - MPI Forum, OpenMP ARB
- ユーザコミュニティの形成、促進
- 教育・普及体制の確立



■ “Blue Collar” Computing

- In SC2004, Stan Ahalt @ OSC
- HPCの裾野を広げるべきである
- これが、High EndのHPCのEconomyにつながる！
- このためにはProductivity!

■ 並列プログラミングの新しい領域:

- 並列プログラミングの対象は確実に増えている
- Chip Multiprocessor (esp. for embedded!)
- Desktop HPC (Low Power Cluster, ...)

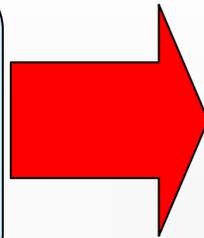
「学際計算科学」の必要性

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

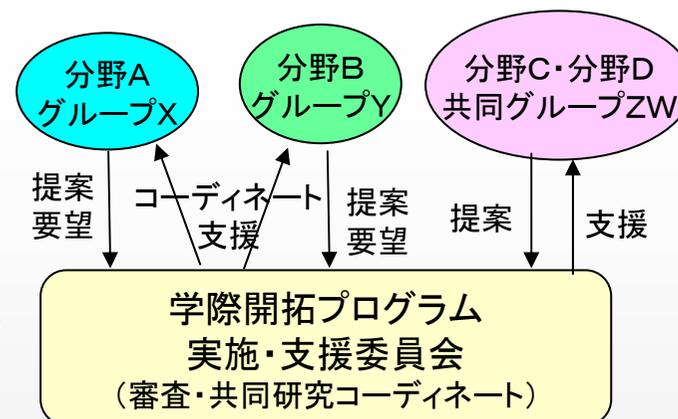
- 計算科学諸分野と計算機科学の融合・連携
 - 計算科学のための計算機システムは、大規模化、多様化。使いこなすためには高性能計算技術が不可欠
 - 次世代、次々世代の計算科学を可能にする持続的な計算技術・計算機システム・計算科学応用の研究開発が必須
- 計算科学の分野を包括的に捉える
横系としての計算科学が必要
 - 大規模数値解析を共通軸とする計算科学の方法は、科学諸分野を分野横断的に捉えることが可能

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

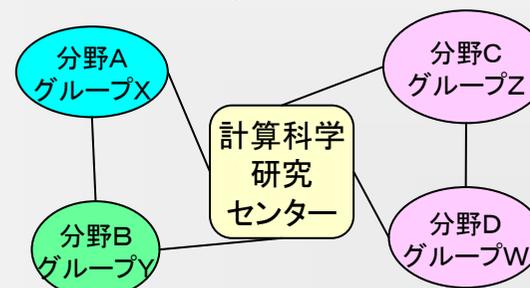
筑波大学 計算科学研究センターにおける新しい全国共同利用の枠組み 「学際共同利用プログラム」

■ 学際開拓プログラム

- 学際的な共同研究を推進するネットワークの構築を支援、学際的な計算科学の課題を推進し、未踏領域の計算科学を開拓
- 異分野グループの共同プロジェクト提案を推奨・促進
 - 計算機分野と応用分野 (e.g 素粒子分野と数値解析)
 - 異なる計算科学分野 (e.g 宇宙物理と気象の輻射流体計算)
- 異分野のグループの連携の要望をマッチアップ
 - 「学際開拓プログラム実施支援委員会」で学内外の専門委員による審査
 - 分野間のプロジェクトグループの関係をコーディネート
 - コーディネイトする専門知識、人的ネットワークを提供・仲介
- 計算資源の他に、共同研究を推進するための、プロジェクト経費(研究費、旅費、PDF雇用費)をサポート(予定)
- プロジェクトの共同研究の実施をフォロー



学際的な共同研究を推進するネットワークの構築



■ 重点課題推進プログラム

- 大規模な計算資源を用いてそれぞれの分野での重点課題の解決を目指す
- プロジェクト提案を審査の上、計算資源(PACS-CS)を集中的配分(時間貸ではない)
- 計算科学での成果を重視、フォロー