



平成19年10月17日
次世代スーパーコンピューティング・シンポジウム2008

計算科学者、計算機科学者、実験研究者および
産業の接点と人材育成
ーナノ統合ソフトについてー

～計算機科学者側の立場から～

佐藤 三久

筑波大学 計算科学研究センター

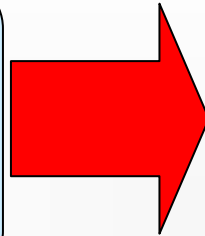
「学際計算科学」の必要性

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

「ナノ統合拠点」における高度化ワーキンググループの活動から

■ 計算機科学とナノ科学の共同研究の成果と活動

■ 実空間DFTプログラムの超並列化

- 古典Gram-Schmidt直交化を内積計算およびベクトル変換を行列-行列積(レベル3 BLAS)に帰着させることにより高速化
- 10,000原子レベルのDFT計算が可能に

■ 中核アプリの大規模並列化支援

- 大規模並列3次元FFTの検討(RISM)
- マルチコア・ノード内並列化
- スケーラビリティの分析

$$\begin{aligned}\psi'_1 &= \psi_1 \\ \psi'_2 &= \psi_2 - \psi'_1 \langle \psi'_1 | \psi_2 \rangle \\ \psi'_3 &= \psi_3 - \psi'_1 \langle \psi'_1 | \psi_3 \rangle - \psi'_2 \langle \psi'_2 | \psi_3 \rangle \\ \psi'_4 &= \psi_4 - \psi'_1 \langle \psi'_1 | \psi_4 \rangle - \psi'_2 \langle \psi'_2 | \psi_4 \rangle - \psi'_3 \langle \psi'_3 | \psi_4 \rangle \\ \psi'_5 &= \psi_5 - \psi'_1 \langle \psi'_1 | \psi_5 \rangle - \psi'_2 \langle \psi'_2 | \psi_5 \rangle - \psi'_3 \langle \psi'_3 | \psi_5 \rangle - \psi'_4 \langle \psi'_4 | \psi_5 \rangle \\ \psi'_6 &= \psi_6 - \psi'_1 \langle \psi'_1 | \psi_6 \rangle - \psi'_2 \langle \psi'_2 | \psi_6 \rangle - \psi'_3 \langle \psi'_3 | \psi_6 \rangle - \psi'_4 \langle \psi'_4 | \psi_6 \rangle - \psi'_5 \langle \psi'_5 | \psi_6 \rangle\end{aligned}$$

Part of the calculations can be performed as Matrix × Matrix operation!

■ 人材育成について

- 基本的な並列アルゴリズムの習得
- HPCセミナー
- 実際のアプリケーション・コードの並列化・高性能化の作業を通じて、実際に大規模並列に対する経験をつんでもらう
 - 計算機科学の研究者と計算科学の研究者の共同作業

筑波大学計算科学研究センターにおける 計算科学を担う人材育成の取り組み

■ HPCセミナー

- 高性能計算プラットフォームとして主流となっている最新マイクロプロセッサによる並列システムの基礎知識、プログラミング、性能チューニング技術を解説する。
- 全国の計算科学ユーザ(メーカーも含む)を対象
- 2007年7月開催(80名参加)、毎年開催
- インターネット中継を実施

■ 計算科学のための大学院共通科目

- 計算科学研究センターの教員で実施
- 大学院の単位として認定
- 科目
 - 「計算科学リテラシー」
 - 「計算科学のための高性能並列計算技術」(HPCセミナーと共通)
- 平成20年度から実施

■ デュアルディグリープログラム

- 研究科博士後期課程に在籍する大学院生が、他研究科博士前期課程にも所属し、両者の学位を同時に取得するプログラム
- 計算科学の観点から博士後期課程の専門と他研究科博士前期課程の教育カリキュラムを有機的に連携させた指導
- 科学と技術の両面でバランスの取れた能力を有し、グローバルな視点で科学の発展を考える人材の育成を行う。
- 平成20年度から、数理物質科学研究科(物理専攻)後期、システム情報工学研究科(コンピュータサイエンス専攻)前期、で実施予定

■ それぞれの分野での計算科学の 大学院教育

- センターに大学院生のスペースを用意、分野間の交流ができる雰囲気づくり

これからの計算科学と人材育成(CSの立場から)

- “Blue Collar” Computing (In SC2004, by 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!
- もっと、快適に並列プログラミングできる環境を！
 - (MPIよりもましな)並列プログラミング言語、ツール
 - 教育に使える並列プログラミングのパターン
 - 並列ライブラリの充実

