

プロジェクト進捗状況報告その1

次世代スパコンを中核とした拠点のあり方と 計算科学研究機構の役割について

計算科学研究機構設立準備室
平尾 公彦

コミュニティの力を結集して、世界に誇れる 計算科学・計算機科学の拠点をつくりたい

次世代スーパーコンピュータが設置される神戸に計算科学、計算機科学の研究教育拠点をつくる。世界から優れた人材を受け入れ、ペタスケールコンピューティングという基盤技術を利用してニューフロンティアに挑戦し、未踏分野を切り拓くとともに、地球環境問題、資源エネルギーなど人類が直面している課題解決に貢献したい。

開発日程

		平成18年度 (2006)	平成19年度 (2007)	平成20年度 (2008)	平成21年度 (2009)	平成22年度 (2010)	平成23年度 (2011)	平成24年度 (2012)
システム	演算部 (スカラ部による 単独構成)	概念設計		詳細設計		試作・評価	製造・据付調整	
	制御フロントエンド (トータルシステム ソフトウェア)		基本設計	詳細設計	製作・評価		性能チューニング・高度化	
	共有ファイル		基本設計	詳細設計	製造・据付調整			
ソフトウェア (アップリケーション プラットフォーム チャレンジング)	次世代ナノ統合 シミュレーション	開発・製作・評価					実証	
	次世代生命体統合 シミュレーション	開発・製作・評価					実証	
施設	計算機棟		設計		建設			
	研究棟			設計	建設			



2010年10月
計算科学研究機構

計算科学研究機構



2010年5月竣工予定

スパコン開発競争の激化

スパコン開発競争

超並列コンピューティングを科学技術や産業イノベーションに利用すべく、日米欧で熾烈な開発競争、中国の追い上げも激化

次世代ペタスケール・スパコン

○我が国では、国家基幹技術として「最先端・高性能汎用スーパーコンピュータの開発利用プロジェクト」を推進。2011年に10ペタのスパコンを一部稼働予定

○米国科学財団(NSF)は Blue Waters(10ペタ)を2011年に稼働



Kobe

○米国エネルギー省(DOE)のASC計画 Sequoia(20ペタ)を2012年に稼働



Blue waters

○欧州PRACEは2011年に10ペタを計画

○中国、インド、ロシアも国を挙げて投資

○現在の最速マシンは IBM Roadrunner、2008年6月 初めて1PFlopsを越える性能を達成

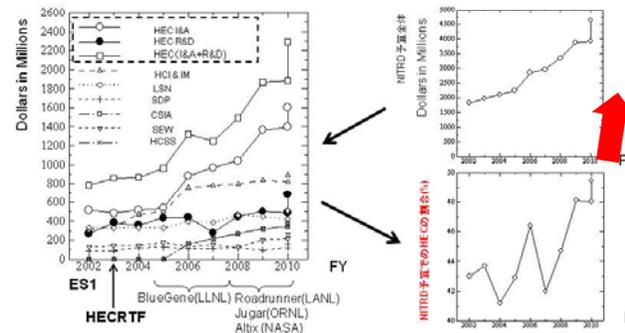
オバマ政権「新しい科学」に重点

大規模計算技術(HEC)の重視政策は、ブッシュ政権からさらに加速し、大規模な計算資源を導入。

オバマ政権がグリーンニューディール政策を打ち出し、21世紀型新エネルギー開発戦略を推進していることがその背景。

その要として、理論・シミュレーションに先導される新しい科学研究手法(「新しい科学」)を重要視。

NITRDのHEC予算の推移



HECに重点。
オバマ政権でさらに加速。

NITRD : The Networking and Information Technology Research and Development
HEC: High End Computing

高性能スパコンは現代の科学技術、産業に不可欠
ブレークスルーの鍵を握る基盤技術

大規模シミュレーションの意義と可能性

コンピュータ・シミュレーションは第三の科学

- シミュレーションの魅力は時空間を容易に超えられることにある
- シミュレーションは従来の実験、理論とは異なる新しい研究手法を実現
- 科学にブレークスルーをもたらすことが期待される

ペタコンは予測の科学を切り拓く

- ペタコンはシステム全体のシミュレーションを可能にし、予測能力を飛躍的に拡大
- これまでのシミュレーションの”質”を抜本的に変える可能性大

計算科学・計算機科学・数理科学の連携・協働が必須

- ペタコンは超並列コンピュータ、それを使いこなすには高性能計算技術が不可欠
- 分野融合・分野連携には強い意志が必要



人類は新しい認識を獲得する強力なツールを手にすることができる

学際計算科学—分野連携の必要性



学問は継続的には発展しない。質的に新しい可能性を誘起していく研究システムと環境を整備しなくてはならない。

次世代ペタコンを活用し、計算科学によって未踏分野を開拓するには、新しい学術領域としての「学際的計算科学」を確立し、継続的に発展させることが重要

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」
- 個々の短期的プロジェクトとして推進
- 大学基盤センターなどのスパコンを利用

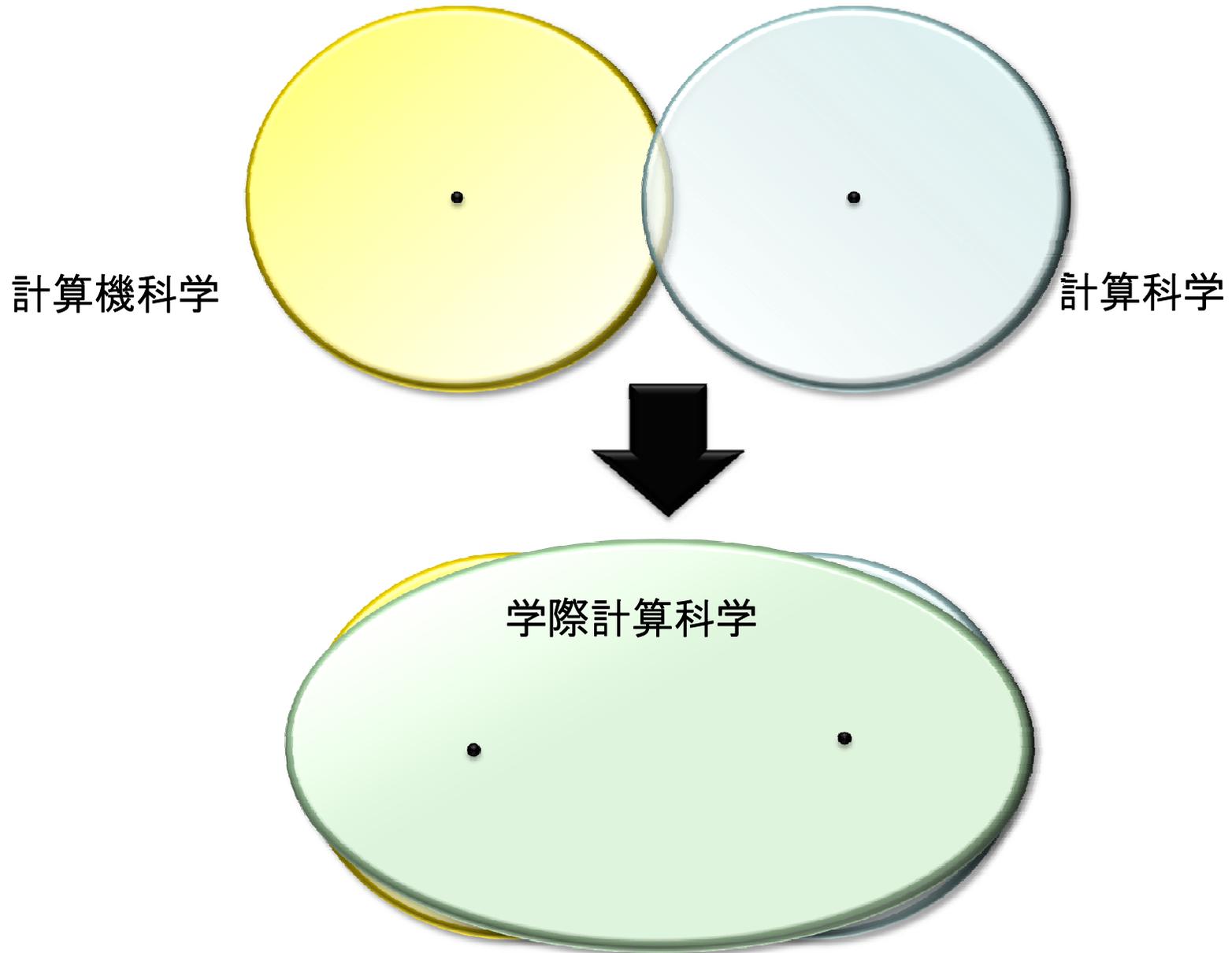


学際計算科学へ

- 計算科学諸分野と計算機科学の連携・協働
計算機システムの大規模化、高性能化に伴い、使いこなす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・計算科学の研究開発が必須
- 計算科学の諸分野を横断的に捉える学際計算科学
方法論、モデリング、共通技法、数値解析を共通軸とする計算科学は、科学諸分野を横断的、包括的に捉える事が可能

計算科学を連携軸として、科学全般に対する俯瞰的視野を持った人材の育成

分野連携



「計算科学研究機構」

計算科学研究機構設立準備室

平尾 公彦

米澤明憲(東大)、宇川 彰(筑波大)

加藤千幸(東大)、泰地真弘人(理研)

計算科学研究機構の使命



(機構の使命);

次世代スパコンプロジェクトの果たすべき役割を最大限に引き出し、それを通じて我が国の計算科学技術を強
力に推進することを目的とする

- 世界最高性能の次世代スパコンを維持管理、高度化し、効果的かつ効率的に利用者の利用に供する
- 自ら計算科学技術を先導し、拠点のハブとして世界最高水準の計算科学技術のCOE形成を主導
- 我が国の計算科学技術の戦略の策定に貢献するとともに、その実施において主導的な担い手となる

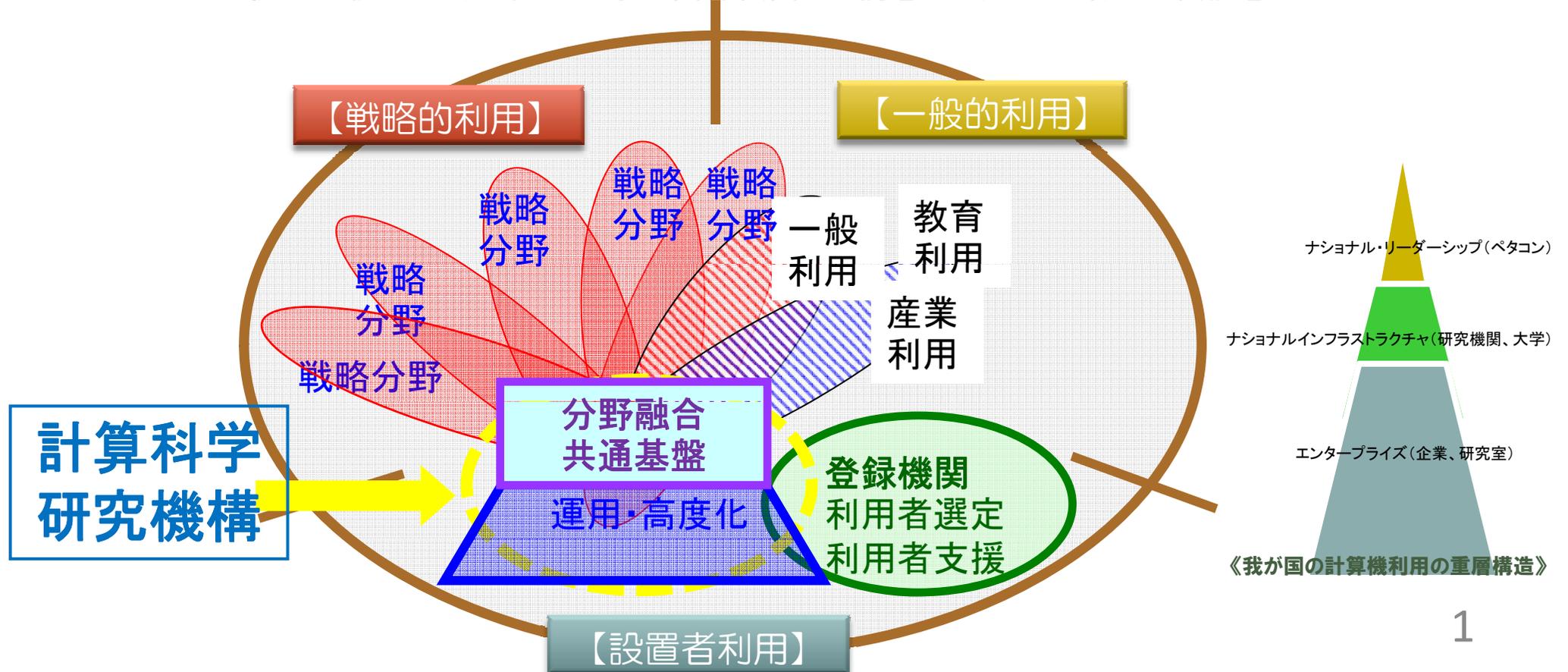
以上の実現のためにコミュニティー全体で機構をつくり、支える体制を確立

1. 共通基盤技術開発、分野融合研究、将来重要となる領域の開拓を行い、計算科学及び計算機科学を先導
2. 理論研究者や実験研究者との密接な連携により、科学技術のブレークスルーを目指す
3. 計算科学、計算機科学の両方がわかる人材等、将来の計算科学技術を担う人材を育成
4. 次々世代スパコンの開発構想を含む、計算科学技術全体の戦略構想
5. 計算科学技術のコミュニティーの強化に貢献、コミュニティーの意見集約
6. わが国の計算機利用の健全な重層構造の構築、共同利用のスパコンセンター等との連携の促進、ネットワー
ク整備による地域格差のないAll Japanの研究体制
7. 先端的なテーマの下での産学の関係機関の協働を支援
8. 世界中から優れた人材が参集する国際研究拠点を構築
9. 戦略機関、登録機関の緊密な連携・協力の核の役割

次世代スパコンを中核とした利用研究と体制

(拠点全体のあり方)

1. 計算科学研究機構、戦略機関、登録機関の協働により、世界最高水準の科学的成果を達成
拠点全体でグランドチャレンジに挑む、ペタコンを利用した挑戦的研究を実施
2. 地球温暖化など人類共通の課題解決と、我が国の国際競争力強化への貢献
3. 次世代スパコンを中核とした研究開発、産業利用、人材育成等の機能形成
4. 利用者にとって使いやすく、優れた成果の創出につながる仕組みづくり
5. 拠点が核となり、全国の産学の関係機関と連携を図り、より重層的な機能を形成



次世代スーパーコンピュータ戦略分野

予測する生命科学・医療
および創薬基盤

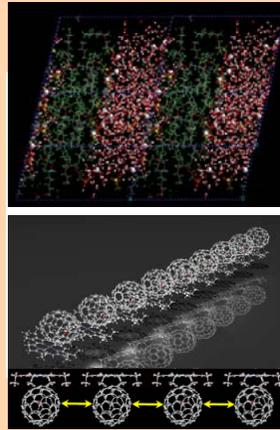
新薬の開発



生体分子から細胞、臓器、全身にわたる多階層の生命現象を予測し、副作用のない革新的な医薬品が開発できる。

新物質・エネルギー創成

新しい材料・デバイスの開発



電子、原子一つ一つをシミュレーションすることにより、これまでになかった全く新しい材料やデバイスの開発が可能となる。

防災・減災に資する
地球変動予測

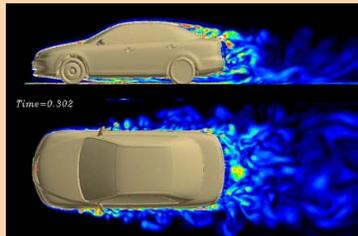
台風の進路や集中豪雨の予測



台風の進路や集中豪雨の高精度予測が可能となり、効果的な防災・減災対策に資する。

次世代ものづくり

設計開発における最適化

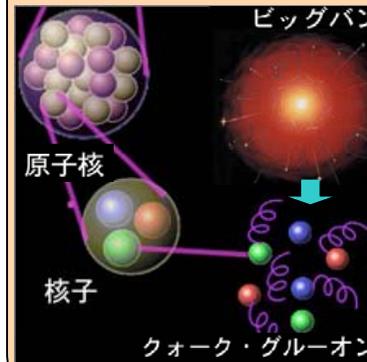


自動車の非定常空力解析

組合せ最適化や丸ごと性能評価を導入し、これまでにないスピードで製品設計・開発を行う。

物質と宇宙の起源と構造

標準理論の検証

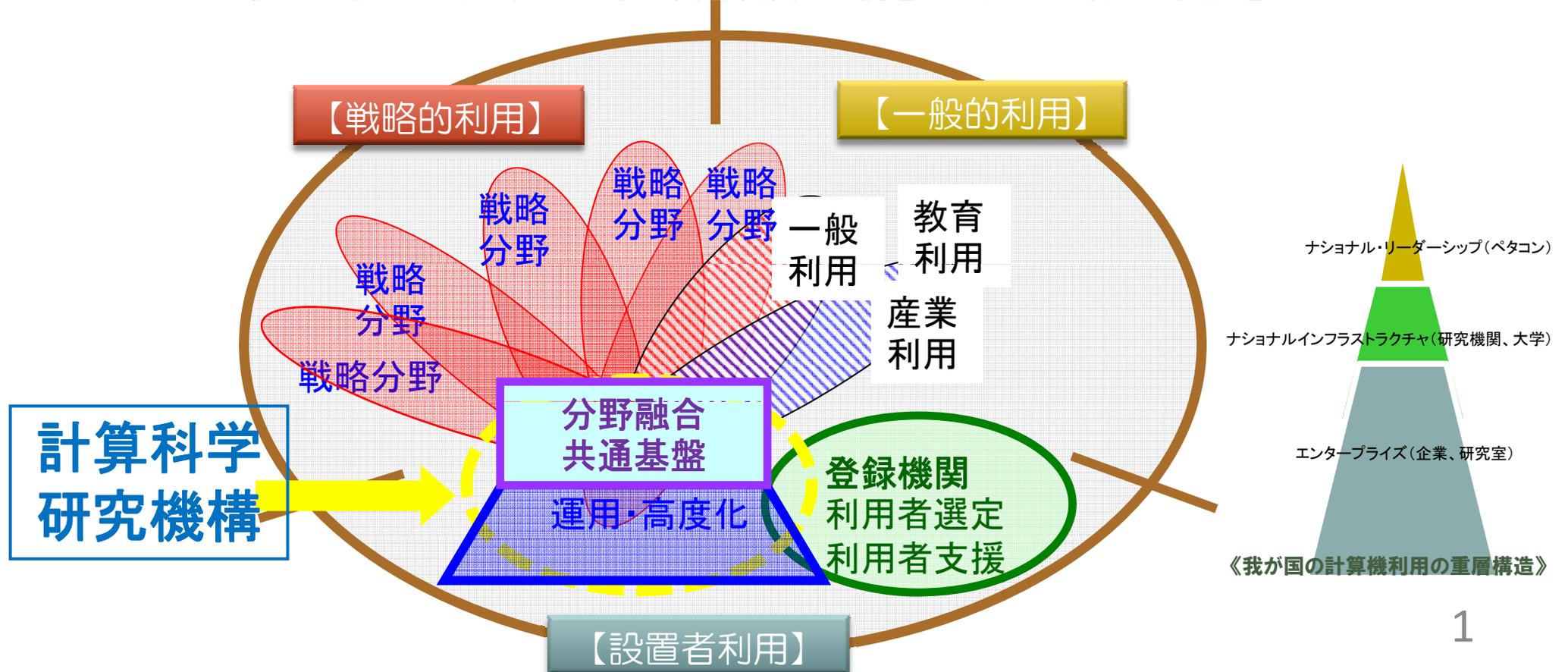


素粒子標準理論、宇宙形成理論の精密検証とこれを超える探究に必要な予測を行う。

次世代スパコンを中核とした利用研究と体制

(拠点全体のあり方)

1. 計算科学研究機構、戦略機関、登録機関の協働により、世界最高水準の科学的成果を達成
拠点全体でグランドチャレンジに挑む、ペタコンを利用した挑戦的研究を実施
2. 地球温暖化など人類共通の課題解決と、我が国の国際競争力強化への貢献
3. 次世代スパコンを中核とした研究開発、産業利用、人材育成等の機能形成
4. 利用者にとって使いやすく、優れた成果の創出につながる仕組みづくり
5. 拠点が核となり、全国の産学の関係機関と連携を図り、より重層的な機能を形成



関係機関の役割分担



国(戦略委員会):

共用の基本的な方針、実施計画の認可(設置者理研及び登録機関)
 戦略分野・目標、計算資源等リソース配分の考え方等の検討・決定

戦略目標

機構は共通基盤を支えるとともに計算科学・計算機科学の先導的役割を果たし、戦略機関は各戦略分野における成果を創出

新たな戦略分野の提案等

戦略機関

- ・戦略分野における世界最高水準の研究成果の創出
- ・当該分野の研究をけん引する拠点の形成
- ・次世代スパコンと他の計算資源の効率的な利用
- ・人材育成
- ・人的ネットワークの形成(研究会、セミナー等の開催)
- ・研究成果の普及
- ・分野を超えた取組の推進(機構と協力)

連携推進会議

関係機関間の連絡調整

連携・協力
 研究、人材育成等

連携・協力
 技術、知見の提供

登録機関

- ・利用者選定業務(課題選定、計算リソース配分、スペース配分)
- ・利用者支援業務(利用者への情報提供、利用に関する相談・アプリケーションのチューニングなど利用支援等)
- ・研究成果の公開や理解増進活動
- ・ソフトウェアの管理とデータベース化

業務の代行

代行に必要なマシンタイムの提供、スペースの貸与

計算科学研究機構

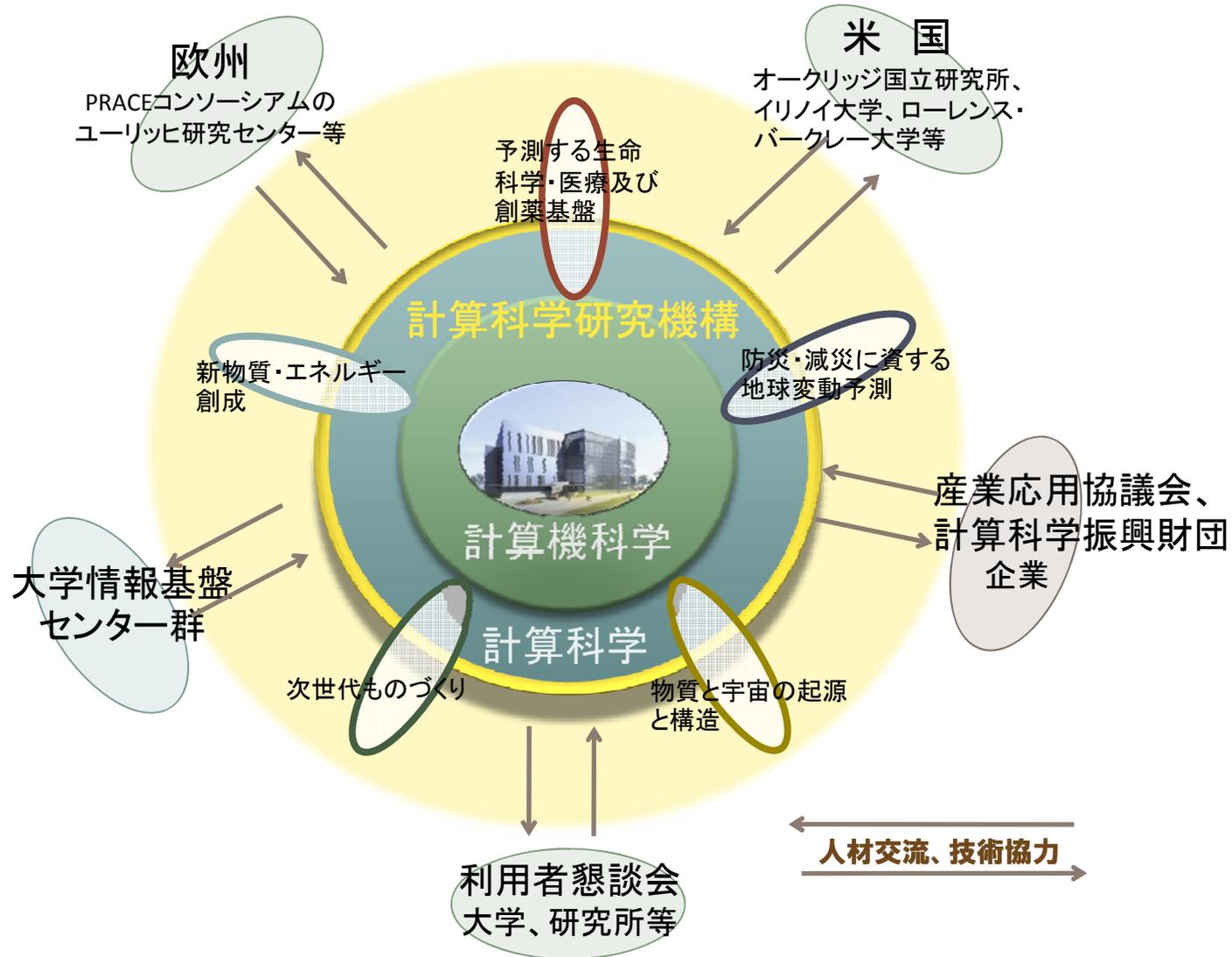
- ・次世代スーパーコンピュータを維持管理、高度化し、効果的かつ効率的に利用者へ供す
- ・共通基盤的な研究開発、分野融合研究、将来重要となる領域の開拓を行い、計算科学及び計算機科学を先導
- ・理論研究者・実験研究者との密接な連携
- ・将来の計算科学技術を担う人材を育成
- ・計算科学技術全体の戦略構想
- ・計算科学技術のコミュニティの強化に貢献
- ・産学の関係機関の協働を支援
- ・国際研究拠点を構築
- ・戦略機関や登録機関からなる連携推進会議の設置事務局
- ・利用者懇談会の設置支援と連携・協力

大学、産業界 一般的利用

利用者支援

〔産学連携のコーディネートに関して、関係機関・団体と連携して実施する。〕

計算科学研究機構のかたち(イメージ)



計算科学研究機構の組織体制のイメージ

● 企画戦略部門

- ・オールジャパンでの拠点の運営方針の企画・立案
- ・オールジャパン(大学、関係機関)の体制構築や連携の推進
- ・戦略的な広報、アウトリーチの推進
- ・国際協力・交流の推進など

● 計算科学部門(12チーム)・・・理論、モデリング、手法等の高度化

- ・量子系計算科学研究グループ : 原子核生成、反応・触媒設計、機能性材料、ナノデバイスデザイン、タンパク質酵素反応等の研究高度化
- ・粒子系計算科学研究グループ : 宇宙の構造形成、タンパク質ダイナミクス、超軽量材料開発、ドラッグデザイン、ウイルス機能等の研究高度化
- ・連続系計算科学研究グループ : 次世代自動車、血流、地球規模気候変動、巨大地震時危機管理、異常気候変動等の研究高度化
- ・複合系計算科学研究グループ : 太陽電池、蓄電池、燃料電池、次世代交通システム、災害予測避難誘導、核融合、細胞、人体等の研究高度化
- ・離散系計算科学研究グループ : ゲノム、社会現象・経済予測、セキュリティ、感染症・ウイルス感染予測等の研究の高度化
- ・戦略機関との共同研究型グループを複数設定

● 計算機科学部門(8チーム)・・・基盤ウェア等の開発・高度化

- ・基盤ソフトウェア研究開発グループ : 並列システムソフトウェア研究開発チーム、並列ミドルウェア研究開発チーム
- ・高性能プログラミング環境研究開発グループ : 並列言語コンパイラ研究開発チーム、並列プログラム環境研究開発チーム
- ・並列アルゴリズム・数理科学研究開発グループ : 並列アルゴリズム研究開発チーム、性能チューニングシステム研究開発チーム
- ・アーキテクチャ研究開発グループ : 並列計算システム研究開発チーム、高性能プロセッサ研究開発チーム

● 運用技術部門

【組織編成のポイント】

- ・共用施設を核としたオールジャパン体制での構築・運営において、主導的な役割を果たすため、事務部門とは独立して企画戦略部門を設置。
- ・計算科学部門と計算機科学部門では、重要なテーマについて、目標を決めて実施。数理科学とも十分に連携。
- ・プロジェクトを設定する等により、計算科学と計算機科学の両部門間及び部門内で連携して取り組む。
- ・2つの部門には部門長を置かない。機構長が各グループを総括。

人材育成のための仕組みづくり



- 拠点では、高い研究機能を有するとともに、優れた研究環境の中で人材育成を行う
- 特に超並列型スパコンの利用では、**計算科学と計算機科学の両方が解る人材**育成が緊急の課題。大学院生及び若手研究者を対象とし、数年後には産学に輩出していく
- その両者が一体的に研究を進める機構が、ポテンシャルの高い大学と協力して人材育成を重点的に行うことが求められる

具体例(イメージ)

- **1つの大学では実施できない教育**を目指す。大学と機構で教育コンソーシアムを形成。
- 大学、公的研究機関等連携機関の関係者が機構の構成員となるとともに、機構職員が大学等機関の職員として教育研究に関与。
- 大学等連携機関は神戸に一定規模の出先を設ける。



大学情報基盤センター等との連携

◆基本的考え方

オールジャパンで次世代スパコンの効果的な活用を図るため、スパコンを有する大学(情報基盤センター等)、大学共同利用機関法人、独立行政法人等との連携・協力の仕組み作りが必要である。

①我が国全体として、次世代スパコンへのシームレスな利用を支える拠点を連携して構築

次世代スパコンの利用に先立ち、大学の情報基盤センターやスパコンを有する共同利用機関・独立行政法人等において、各機関の協力を得てアプリケーションの高並列化など次世代スパコン利用に必要な研究や技術開発が行われるようにすることが、次世代スパコンの効果的活用のために必要。情報基盤センター等有する計算機資源や、人材、技術等を活かし協力やサポートをすることで、研究室レベルから次世代スパコンレベルまでのステップアップを効率的に行う拠点となることを期待。機構は、この拠点構築を共同研究等により連携して構築する。

②利用者の裾野の開拓のための利用環境の整備・充実

次世代スパコンの幅広い分野における利用を促進する必要がある。情報基盤センター等有する計算機資源や、人材、技術等を活かして、次世代スパコンを含めたスパコン利用の意義や効果について、理解を深めるとともに、スパコン利用に係る知識や技術の習得・向上の支援を期待。機構は、登録機関や、産業利用の支援に取り組む関係機関とも連携して、相互の連絡・連携のネットワークの構築や登録機関における相談窓口の設定等、利用環境の整備・充実に取り組む。

③次世代スパコンの開発・利用高度化を推進

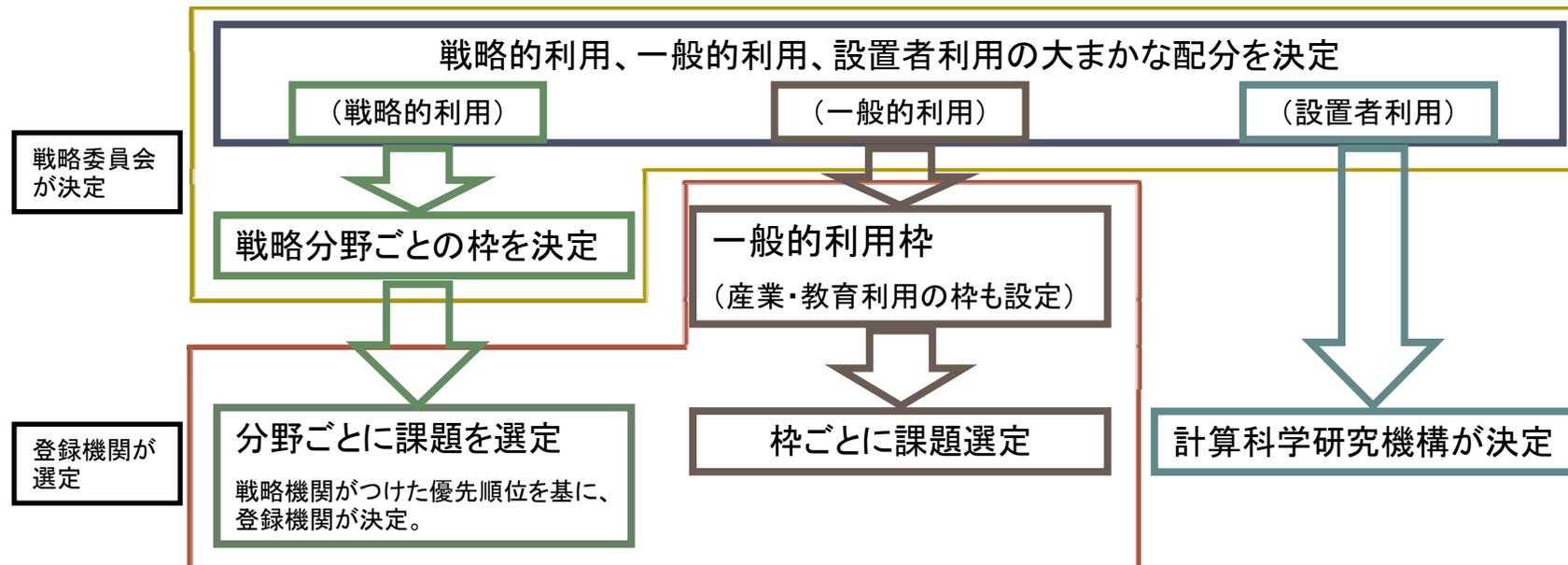
次世代スパコンの開発・利用高度化に向けて、オールジャパンの観点から重要な研究課題を決めて、情報基盤センター等と共同研究等の枠組みで連携・協力して取り組む。

(例)システム開発、アプリケーションソフト開発・高度化、遠隔可視化技術 等

戦略的かつ重点的なマシンタイムの配分(1)

1. 利用者選定の流れ

1. 戦略委員会で戦略的利用、一般的利用、設置者利用の大まかな配分を決定
2. 一般的利用については、登録機関に置く委員会で検討し決定
3. 設置者利用については、計算科学研究機構と登録機関の協力の下、利用



（登録等）第八条 文部科学大臣は、その登録を受けた者に、第五条の規定により特定先端大型研究施設の設置者として理化学研究所が行うものとされた業務のうち、次に掲げる業務の全部を行わせることができる。一 施設利用研究を行う者の選定及びこれに附帯する業務を行うこと。

共用法

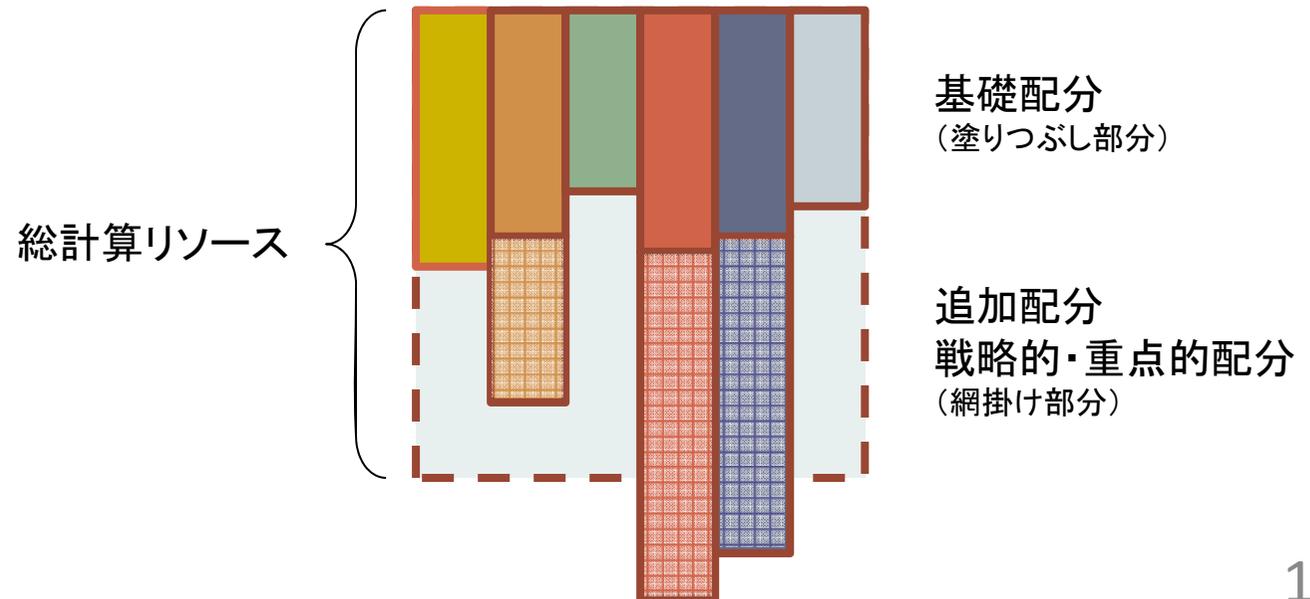
（選定委員会）第一六条 登録施設利用促進機関は、第八条第一項第一号に規定する選定を行う場合には、施設利用研究に関し学識経験を有する者からなる選定委員会を設け、その意見を聴かなければならない。

2. マシンタイムの配分

計算機の安定稼働後、全マシンタイムの80%を戦略的利用、一般的利用に供することを目指す。

戦略的かつ重点的なマシンタイムの配分(2)

- 戦略的利用をいかに効率的に推進するかが重要課題。
- 計算機利用の能力と準備状況は機関によってまちまち。
- 全体として計算リソースを余すことなく、早期に高質の成果を得るには、重要な課題に重点的に配分する仕組みが必要。
- 例えば、基礎的な配分は年度当初に決め、研究の進捗状況によって追加配分を実施。



スケジュール



- 22年 5月 計算機棟・研究棟竣工
- 22年10月 計算科学研究機構設立
- 24年 計算機稼動開始

戦略機関決定(21年10月)

登録機関発足(23年4月)

(※ 運用準備に関しては、事前準備が必要なため、機構発足前に組織化)

高い目標を掲げよう

人類に知的貢献をなし、国民、国際社会の期待に応える

日本人の独創性を世界に発信する

科学史・技術史の新たなページを開く

次世代を担う人材を育てる

基礎科学の進歩、産業の発展に貢献する

Challenge

Building a machine is a challenge,

Building the computer center that houses the machine is also a challenge,

But the biggest challenge is building the teams that can use the Next-Generation Supercomputer to carry out scientific & engineering research.

理研は共用法を踏まえつつ、次世代スパコンの設置者として スパコン利用を先導する役割・機能を担う

(1) 共通基盤的な研究開発

戦略プログラムを創設することにより、次世代スパコンには高い研究ポテンシャルを有する研究機関や研究者が集積するが、様々な分野を通じてレベルの高い研究を行っていくには、**計算科学技術の幅広い分野を支える共通基盤的な研究開発についても、研究ポテンシャルを蓄積・形成していくことが重要**である。こうした研究開発としては、たとえば、**計算機の開発・高度化等に関する研究開発、シミュレーション研究におけるモデル化やアルゴリズム等に関する研究開発、分野連携に関する取組等**が考えられる。

これらについては、**設置者である理研**が、次世代スパコンの高度化など施設運用の効率化や利用者の利便性の向上のための研究として、**実施することが適当**と考えられるが、今後、必要に応じて共通基盤的な研究開発を戦略分野に位置づけることもあわせて検討することが必要である。

(文科省・次世代スーパーコンピュータ作業部会報告書

平成20年7月)

共用に必要な業務について

(登録機関が実施する利用支援のポイント)



1. 利用者に対する窓口機能の一元化

- ・利用者にとって、一元的な相談窓口が存在することは極めて重要。
- ・しかしながら、施設やアプリケーションなど、幅広い内容についてすべて一元的に対応することは困難。
- ・そのため、次世代スパコンでは、登録機関が利用者の一元的な相談窓口機能を担い、自ら必要な情報提供や技術的支援を行うとともに、相談内容に応じて、施設設置者たる理研(計算科学研究機構)や、大学の情報基盤センター等の他の適切な機関とも協力して対応を図ることが肝要。

2. 利用者のアプリケーション高性能化

- ・次世代スパコンはこれまでに例のない極めて大規模なシステムであることから、登録機関による利用支援において、特に重要となるのが利用者のアプリケーションプログラムの高性能化(高並列化・単体性能向上)である。
- ・地球シミュレータの事例等を参考にすると、次世代スパコンでは、利用者のアプリケーションプログラム(年間約40プログラムを想定)の約半数程度について支援が必要と想定される。残りの半数は戦略機関などが自らプログラムの高性能化を実施することを想定。

☆登録機関には、以上の点を考慮した組織体制の構築が重要であると考えられる。

世界中から優れた人材を受け入れたい

組織は人によって決まる。世界中から優れた人材を機構に受け入れ、力を発揮してもらいたい。機構のマネジメントの原則は個々人が最大の能力を発揮できる環境を整えることにある。それによって優れた能力、高いモラルと研究に対する情熱を維持しなければならない。組織の活力はいかに多くの“輝いている”若手研究者を抱えるかにかかっている。

若手研究者に将来のキャリアへの道を開くインセンティブを与え、若手研究者が活躍できる組織をめざしたい。優れた若手研究者が自由な発想による新しい学問分野の創造に打ち込める環境を作る。適正な評価とそれに基づく処遇も必要である。新しい知的価値の創造と活用をめざす組織としたい。

大規模シミュレーションの意義と可能性

- ペタコンはシステム全体のシミュレーションを可能にし、これまでのシミュレーションの”質”を抜本的に変える可能性が大
- システム全体のシミュレーションは個々の複雑な現象を定量的に解明し、相互作用を理解しつつ、持続可能なシステムとして全体を創り上げることができる
- 科学的信頼度に基づく「予測の科学」、未来を予測する技術は未来をつくる技術
- ペタコンを使いこなすには、計算科学者、計算機科学者、応用数学者の密接な連携・協働がきわめて重要