

計算機科学と計算科学の連携について

佐藤三久

筑波大学 計算科学研究センター

計算機科学と計算科学の連携の取り組み

- 筑波大学計算科学研究センター(CCS) 「学際共同研究プログラム」
- CCSでの連携の取り組み
- e-scienceプロジェクト
 - e-サイエンス実現のためのシステム統合・連携ソフトウェアの研究開発、高生産・高性能計算機環境実現のための研究開発「シームレス高生産・高性能プログラミング環境」
- IESP (International Exascale Software Project)

共同利用・共同研究の枠組み「学際共同研究プログラム」

■ 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

■ 学際開拓プログラム

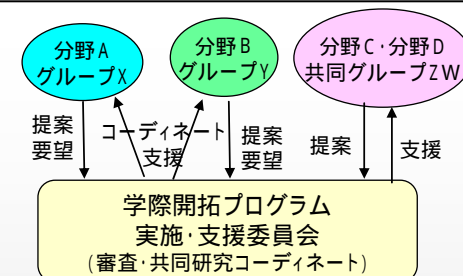
- 学際的な共同研究を推進するネットワークの構築を支援、学際的な計算科学の課題を推進し、未踏領域の計算科学を開拓

- 異分野グループの共同プロジェクト提案を推奨・促進

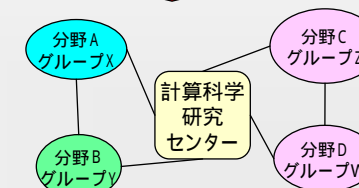
- 計算機分野と応用分野 (e.g 素粒子分野と数値解析)
- 異なる計算科学分野 (e.g 宇宙物理と気象の輻射流体計算)

- 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



学際的な共同研究を推進するネットワークの構築



■ 学際共同研究推進プログラム

- 本センターのスタッフと共同で、自然科学や工学等における計算科学的手法の開発や先端研究を推進 (ソリューション提供型)
- 理論研究者に閉じるものではなく、実験・観測と計算科学の共同研究によって飛躍的な展開へつながる研究課題の提案も期待

- 数値モデル (WRF 等) を用いた都市気候および局地気象の研究
- QM/MM ハイブリッド分子動力学シミュレーションを用いた生体機能情報高分子の機能発現機構の研究
- 6次元輻射輸送および6次元ボルツマン方程式による宇宙構造形成の研究

共同研究の実施状況

- 「学際共同研究プログラム」は、PACS-CSを対象に平成19年度後期から開始
 - 「学際共同研究プログラム」プロジェクトを対象に派遣・招聘を支援
 - 国際・国内研究集会支援を実施
- 「重点課題」は、大規模並列を重視
 - 土日には、大規模ジョブが流れるように工夫。
 - スキルの違いがある。なんらかのユーザのスキルを計る「制度」が必要かも。
- 「学際開拓」は、3件程度、だが潜在的な需要が大きい

年度	17年度	18年度	19年度	20年度
件数	2件		13件	38件
システム	CP-PACS 10月で休止	システム休止	PACS-CS 10月から	10月から T2Kが加わる

CCSでの計算機科学と計算科学の連携の取り組み

■ 次世代スパコン・ナノ拠点での共同研究

- 「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、次世代ナノ統合シミュレーションソフトウェアの研究開発中核アプリケーションの高度化
 - 「中核アプリケーションの大規模並列化支援」
- RISM: 3D-FFTの高速化
- RS-DFT: ハイブリッド並列化、固有値解法の高速化
- FMO: 通信ライブラリ(DDI)の利用法
- 動的密度行列繰り込み群法: 疎行列ベクトル積の効率化

■ 理研・CCSの共同研究

- QCDとRS-DFTのチューニング

■ 「高性能計算加速研究会」

- これからの超高速の計算プラットフォームを目指して

「シームレス高生産・高性能プログラミング環境」

PCクラスタから大学情報基盤センター等に設置されているスパコンまで、ユーザに対するシームレスなプログラミング環境を提供

- 高性能並列プログラミング言語処理系
 - 逐次プログラムからシームレスに並列化および高性能化を支援する並列実行モデルの確立とそれに基づく並列言語コンパイラの開発
- 高生産並列スクリプト言語
 - 最適パラメータ探索など粗粒度の大規模な階層的並列処理を、簡便かつ柔軟に記述可能で処理効率に優れたスクリプト言語とその処理系の開発
- 高効率・高可搬性ライブラリの開発
 - 自動チューニング(AT)機構を含む数値計算ライブラリの開発
 - PCクラスタでも基盤センタースパコン(1万規模CPU)でも単一実行時環境を提供するSingle Runtime Environment Image環境の提供

高性能並列プログラミング
言語処理系の開発
筑波大学
東京大学

次世代プログラミング
言語仕様検討会
(主査:佐藤@筑波大)
NEC, 富士通, 日立
JAXA, JAMSTEC,
核融合研, 筑波大,
東大, 京大, 九大

高生産並列スクリプト
言語の開発
京都大学

普及活動
PCクラスタ
コンソーシアム
(会長:石川@東大)
富士通, 日立, NEC
など27社・機関

高効率・高可搬性
ライブラリの開発
東京大学

富士通研究所

日立中央研究所

E-science: 全体スケジュール

平成21年7月25日

H20	H21	H22	B23
並列言語仕様設計 & プロトタイプ実装	並列言語仕様設計 & プロトタイプ実装の継続	並列言語仕様確定 & 並列言語向けライブラリ整備 & 性能チューニング環境整備と評価 & 並列言語拡張機能検討	並列言語拡張機能実装と最適化 & 並列言語ベンチマークによる総合評価 & 並列言語向けライブラリ整備の継続
並列スクリプト言語仕様設計	並列スクリプト言語仕様設計の継続 & 並列スクリプト言語プロトタイプ実装	並列スクリプト言語開発 & 並列スクリプト言語検証	並列スクリプト言語開発および追加機能実装 &
自動チューニングライブラリ仕様設計 & プロトタイプ実装	自動チューニングライブラリ仕様設計の継続 自動チューニングライブラリ開発	自動チューニングライブラリチューニング環境整備と評価	自動チューニングライブラリ高度化
単一実行時環境実行方式設計 & プロトタイプ実装	単一実行時環境実現方式設計(H20年度継続) ・ 単一実行時環境開発	単一実行時環境チューニング環境整備と評価	高効率ライブラリ統合

IESP (International Exascale Software Project)

- エクサスケールのソフトウェア開発を国際協力で組織しようというプロジェクト
- 経緯：
 - Jack Dongarra(U Tenness/ORNL)やPete Beckman(ANL)の呼びかけにより、SC08にて、最初のMeetingが開催される。(DOE Office of ScienceとNSFがバックアップ)
 - 日本からは、松岡@東工大がExecutive SCに、佐藤@筑波大がOCに参加
 - 1st workshopが、4月6-8日、Sante Feで開催。
 - 2nd workshopは、6月28-29日、パリ(ヨーロッパラウンド)
 - 3rd workshopは、10月19-29日つくばで予定。(Asia ラウンド)
- 課題：
 - ソフトウェアでは、世界的な規模での協力をしようというトレンドに、日本としてどのように対応するのか。
 - 特に、funding agencyレベルでのcomittementが、要請されている。研究者レベルだけでなく、multi-agency、multi-fund、internationalなfundingが、議論されている。
 - 次世代だけでなく、次々世代のスパコンがターゲット
 - 日本としての具体的なアクション
 - 研究者レベル
 - funding agency レベル(どのようなfundingスキームがあるのか)

IESP (International Exascale Software Project)

- <http://icl.cs.utk.edu/iesp/>
- Mission:
 - The mission is to lay the foundation for exascale computing by mobilizing the global open source software community to combine and coordinate their collective efforts far more efficiently and effectively than ever before.
- Goals:
 - Assess the short-term, medium-term and long-term needs of applications for peta/exascale systems
 - Explore how laboratories, universities, and vendors can work together on coordinated HPC software
 - Understand existing R&D plans addressing new programming models and tools addressing extreme scale, multicore, heterogeneity and performance
 - Start development of a roadmap for software on extreme-scale systems