

# 将来のHPCIシステムのあり方調査研究 「アプリケーション分野」 キックオフミーティング

理化学研究所・計算科学研究機構  
複合系気候科学研究チーム  
富田浩文

# 今日の目的： 意識共有と役割分担

- これまでの流れ説明(富田)
- サイエンスロードマップ<sup>®</sup>再構成方法(杉田)
- システム評価の方法(松岡、丸山)
- 役割分担確認

# 将来HPCIあり方調査研究「アプリ分野」キックオフミーティング・アジェンダ

- キックオフミーティング:
  - 13:30 – 14:00 :これまでの経緯と本調査研究概要説明&ロジ(富田)
  - 14:00 – サイエンスロードマップ班:昨年度「計算科学ロードマップ白書」のおさらい(進行:杉田)
    - 14:00 – 14:10 :生命科学 (杉田(池口代理))
    - 14:10 – 14:20 :物質科学 (藤堂)
    - 14:20 – 14:30 : 地球科学 (富田(河宮代理)、堀)
    - 14:30 – 14:40 : ものづくり(高木)
    - 15:40 – 15:00 : 宇宙・原子核・素粒子(石川、牧野)
    - 15:00 – 15:15 : 役割分担決めと進め方議論
  - 15:15-15:45 休憩
  - 15:45 – システム評価(進行:小野)
    - 15:45 – 16:15 システム評価法の確立(松岡)
    - 16:15 – 16:40システム評価手順(丸山)
    - 16:40 – 17:00役割分担決めと進め方議論
  - 17:00 – 17:30 全体議論(進行:富田)
- 「京」の見学会 17:30 –
- 懇親会@FOCUS : 18:00-20:00 (お一人3000円)

# 昨年度からの次期HPCの流れ

- 文部科学省主催の二つの作業部会：
  - アプリケーション作業部会
  - コンピューターアーキテクチャ・コンパイラ・システムソフトウェア作業部会
  - 2部会の合同作業で今後のHPCのあり方を考える。

# 昨年度作業部会発足の経緯

- 2011年：
  - HPCI計画の推進にあたり、国として今後のHPC研究開発に必要な事項等を検討が始まる。
  - 研究振興局長の諮問会議「HPCI計画推進委員会」のもとに「今後のHPC技術の研究開発のあり方を検討するWG」が設置され、以下の作業を行うことが決まった
    - 「アプリケーション」、「コンピューターアーキテクチャ」、「コンパイラ・システム」、「ソフトウェア」の作業部会が緊密に連携しながら検討を進めていく体制を立ち上げ
    - **アプリケーション作業部会**と**コンピューターアーキテクチャ・コンパイラ・システム**、「ソフトウェア」の作業部会の二つの部会を発足。
    - それぞれの議論を踏まえ、2部会協同作業により**複数の追求すべきHPCシステム**の検討とこれを開発していく体制案をとりまとめることになった。

# 作業部会での活動の流れ

- コンピューターアーキテクチャ・コンパイラ・システムソフトウェア作業部会:
  - 「戦略的高性能計算システム開発に関するワークショップ」で検討されてきた内容を基に大学・研究機関、企業などで、6回の集中討論
- アプリ作業部会: 計4回 大学・研究機関、企業などで集中討議  
(8月8日、9月1日、10月4日、11月21日)
  - サブWG(要求スペック検討): 9月17日、10月4日
  - アプリ特性の分析をもとに4つ程度のタイプに分類
- 10月15日: 合同作業部会
  - アプリ側としての4つのシステムパターンをアーキテクチャ側へ提示
- 10月下旬以降: これを受けて、アーキテクチャ作業部会から現時点の外挿で2018年にコモディティレベルで可能なシステムの予想を行い、何が足りないかを議論
  - 11月26日: 合同作業部会
  - 12月27日: 合同作業部会 (最終的合意)

---- 1月から、まとめ作業開始 ----

- 2月10日: HPCI計画推進委員会で最終報告、受理
- 2月24日: 情報科学技術委員会で報告

# 両部会での基本的な合意事項

- 今後のHPC施策は、期待されるサイエンスでのブレークスルー、社会的な要請を踏まえて、トップダウン的に行うべき。
  - サイエンスドリブン
- そのため、5年から20年先の現時点での各分野のサイエンスロードマップをおおもととする。
  - 一つのマイルストーン：2018年頃に到達するであろうエクサフロップス性能を念頭に置く。
    - ただし、ピーク性能ありきではない。
  - サイエンスロードマップ自体は、時代の変遷によって修正が必要。
    - 継続的な議論が必要。
- サイエンスロードマップを実現するための主要アプリケーションから要求される性能を見積もりを行う。
- 複数のアーキテクチャの可能性を含めて、アーキテクチャ作業部会と技術的な実現可能性の議論する。

短期間で議論されつくされなかつた部分は日々  
将来HPCIのあり方調査研究へ

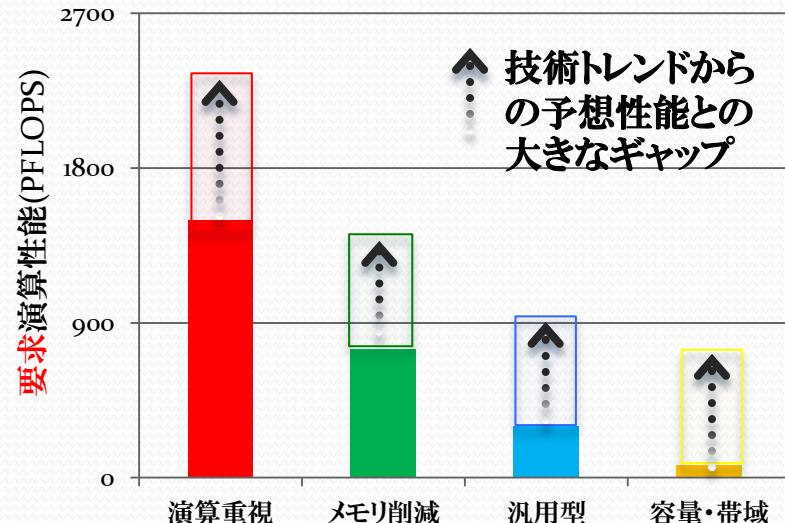
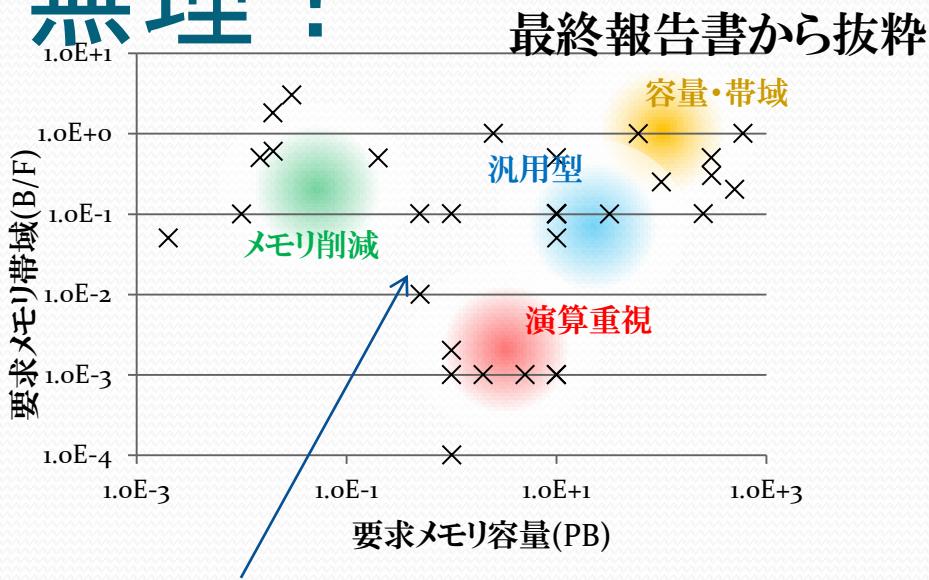
# 計算科学分野は多岐にわたる！

- ライフサイエンス
  - 分子・細胞(粒子)
  - 細胞・臓器(連続体)
  - ゲノムデータ解析
  - 脳神経科学
- 物質科学
  - 物性物理
  - 分子科学
  - 材料科学
- 地球科学
  - 地震・津波科学
  - 気象・気候科学
- 地球科学
  - 地震・津波科学
  - 気象・気候科学
- 宇宙・物質の根源
  - 素粒子
  - 原子核
  - 宇宙
- ものづくり
  - 流体(空力、音響、燃焼、...)
  - 構造(FEM系)
  - プラズマ、核融合
  - 構造(ナノ系)・材料
  - デバイスプロセス
  - たんぱく質・酵素
  - 可視化

各分野で、短期戦略・長期戦略を「計算機ロードマップ白書」にまとめ

<http://open-supercomputer.org/wp-content/uploads/2012/03/science-roadmap.pdf>

# 結論：このままの技術トレンドでは無理！



- 各分野で本当に行うべきサイエンス、社会的ニーズを実現するには、  
現状の技術トレンドの外挿では、実現不可能！
- 早急に、要素技術開発をテコ入れしていく必要がある。

# 将来HPCIのあり方調査研究スタート！

## 位置づけ：

1. 作業部会議論のさらなる精査
  2. ベンダーを巻きこみ、現状を打破する要素技術の可能性研究
- 6月初旬採択
    - [http://www.mext.go.jp/b\\_menu/houdou/24/06/1322138.htm](http://www.mext.go.jp/b_menu/houdou/24/06/1322138.htm)
    - アプリケーション分野1チーム：
      - 理研・計算機構 + 東工大
    - システム設計チーム3チーム：
      - 東大 + F: 汎用系？
      - 筑波大 + H: アクセラレータorSOC系？
      - 東北大 + N: ベクトル系？
  - 何をするか？
    - システム設計チーム：次世代のシステムの提案
    - アプリケーションチーム：
      - アプリ観点から、提案システムを評価
        - どのシステムはどのアプリ系にフィットするか？
      - 社会的科学的課題の抽出、特に分野横断的課題

# 本研究課題概要

目標

1. 今後5~10年にわたる社会的・科学的貢献課題の抽出
  - H23「計算科学ロードマップ白書」を更に精緻化、再構成
  - 特に、連携が必要な分野横断的課題の抽出を念頭に置く
  - 科学分野全般での方向性の議論と合意
2. システム設計チームが提案する計算機システムの評価
  - 社会的・科学的貢献課題解決は実現可能か？
  - 消費電力に対しての効率性はどうか？
  - どの計算機システムがどの科学課題に向くか？

体制

## 2班構成による相互連携作業

### サイエンスロードマップ再構成班：

- 戦略5分野を中心に計算科学分野を網羅
- 各分野には、取りまとめ役を配備

連携

### システム評価班：

- 理研・計算機構と東工大学術国際情報センターが中核
- 協力機関多数参画

# 構成員

## アプリ分野研究員/理論・実験・観測研究者/計算機科学研究者

### サイエンスロード マップ班の構成員

- ・ **アプリケーション分野の計算科学研究者**
- ・ 計算機構内: 各計算科学のTL、研究員  
気候科学、連続系場の理論科学、生物  
物理、宇宙科学、物質科学、分子科  
学、
- ・ 計算機構外: 戦略5分野の精銳
- ・ 第一線の実験、理論、観測の  
研究者
- ・ 野地(東大)、市川(九大)、  
日野(東北大)、高見(玉立大)他

#### 計算機・計算科学との境界領域研究者

ライブラリー、大規模並列計算手法など  
小野(計算機構)・今村(計算機構)

### システム評価班の 構成員

- ・ **計算機科学者**
  - ・ 取りまとめ: 松岡(東工大)、丸山(計算  
機構)
  - ・ 実働: 計算機構・東工大の計算機科  
学研究者
  - ・ アドバイザー: 九大・東大・筑波大・東  
北大から計算機科学者
- ・ **運用技術からの研究者**
  - ・ 南(計算機構)、庄司(計算機構)  
松岡(東工大)

# 主管事業実施機関の役割

事業代表者： 富田（計算機構）

## ① サイエンスロードマップ再構成班の統括：

- 取りまとめ：杉田（計算機構）
  - ロードマップ全体会議の主宰

## ② 計算機システム評価班の統括：

- 取りまとめ：丸山（計算機構）
  - 各システム評価項目の進捗管理
  - 東工大松岡チームとの連携によるシステム評価

## ③ アウトリーチ、広報：

- 調査研究進捗の透明性を担保
  - web運営など

## ④ 本チーム事務機能の一元化：

- 多機関にまたがる大所帯への対応
  - 機構内部署連携によるプロジェクト事務体制を構築

# 共同事業実施機関の役割

共同事業代表者： 松岡(東工大)

## ① 計算機システム共通評価法の確立

(アプリケーション間共通の性能評価メトリックおよびモデル確立)

(丸山(計算機構)と共同)

- 複数のペタスケールのHPCI・スパコン共通の評価ツールの調査
- 必要に応じた追加開発

## ② 現存HPCI環境でのアプリ評価

- ミニアプリ等のペタスケールクラスでの性能評価
- 京・TSUBAME2.0/他のHPCIセンターとも連携強化  
→一般公募枠へ応募の検討開始

## ③ TSUBAME1.0/2.0および3.0の種々の知見の利活用

- 提案システムの実際的評価には、経験もとづく知見の活用が不可欠

# 各協力機関の役割

## ① サイエンスロードマップ再構成作業の担い手：

- 各分野の取りまとめ役：
  - 池口(横浜市立大)、杉田(計算機構)、藤堂(東大物性研)、柚木(計算機構)、堀(海洋機構)、河宮(海洋機構)、高木(宇宙航空機構)、石川(素粒子・原子核)、牧野(東工大/計算機構)  
は各分野での合意取り付け・総意を取りまとめる。
- 実験・理論・観測研究者：
  - 野地(東大)、市川(九大)、日野(東北大)、高見(天文台)らは、全体会議において、広く科学的な見地から今後の計算科学への助言を行う。

## ② 計算機システム評価作業への積極参画：

- HPCI戦略分野からの実務担当者は、
  - フルアプリケーションセットの整備と提供
  - 必要に応じて、
    - アルゴリズム改良要請に応える。
    - ミニアプリ化作業要請に応える。

# 主管・共同・協力各機関の連携体制図



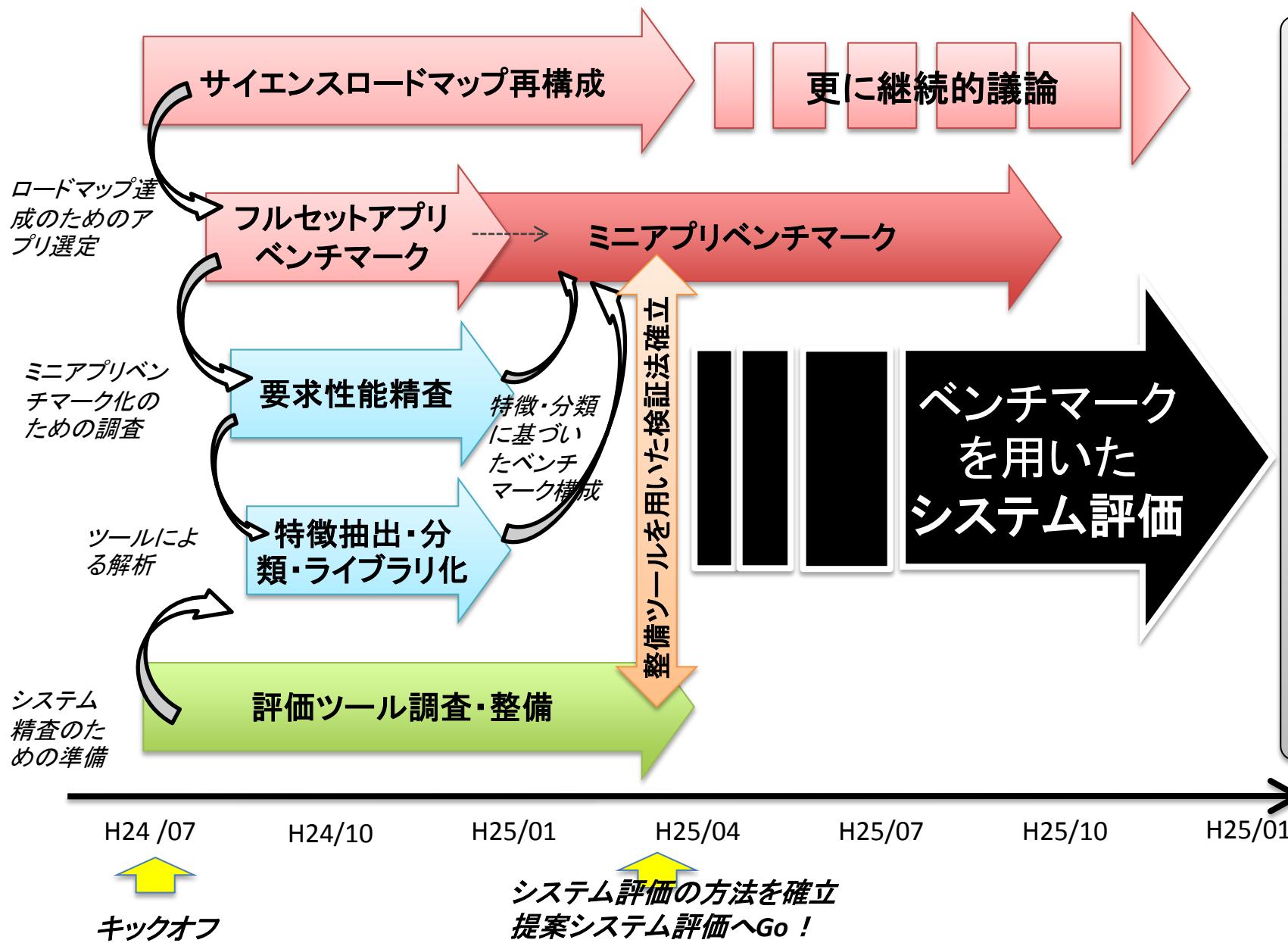
役割：各計算科学分野での社会的・科学的課題抽出作業のとりまとめ、フルセットアプリケーションベンチマークを計算機システム評価班へ受け渡し

横浜市立大学 大学院生命ナノシステム科学研究所	池口 満徳	東北大学金属材料研究所	西松 育	立教大学理学部	望月 祐志
東京大学 大学院情報理工学系研究科	玉田 嘉紀	独立行政法人日本原子力研究開発機構 システム計算科学センター	町田 昌彦	東京大学 生産技術研究所	沖山 佳生
東京大学 大学院工学系研究科	野地 博行	大阪大学大学院工学研究科	稻垣 耕司	東京大学 生産技術研究所	山出 吉伸
独立行政法人理化学研究所 生命システム研究センター	高橋 恒一	(独) 海洋研究開発機構・地球環境変動領域	河宮 未知生	広島大学大学院理学研究科	石川 健一
独立行政法人理化学研究所 情報基盤センター	野田 茂穂	九州大学・応用力学研究所	市川 香	東京工業大学大学院理工学研究科	牧野 淳一郎
東京大学先端科学技術研究センター	山下 雄史	(独) 海洋研究開発機構 地震津波・防災研究プロジェクト	堀 高峰	国立天文台	高見 英樹
東京大学物性研究所	藤堂 真治	東北大学大学院 理学研究科	日野 亮太	東京大学大学院 原子核科学研究センター	清水 則孝
鳥取大学大学院工学研究科	吉本 芳英	(独) 海洋研究開発機構 地球シミュレータセンター	安藤 和人	筑波大学 数理物質科学研究科	藏増 嘉伸
自然科学研究機構分子科学研究所	信定 克幸	(独) 宇宙航空研究開発機構 宇宙科学研究所	高木 亮治	(独) 理化学研究所 仁科加速器研究センター	中務 孝
名古屋大学大学院 工学研究科	安藤 嘉倫	(独) 日本原子力研究開発機構	井戸村 泰宏	筑波大学 計算科学研究センター	梅村 雅之
独立行政法人産業技術総合研究所 ナノデバイスセンター	井上 靖朗	北海道大学大学院工学研究科	坪倉 誠		

役割：システム評価、システム評価ツール作成について、適切なアドバイスを行う。

九州大学情報基盤研究開発センター	南里 豪志
東京大学情報基盤センター	中島 研吾
筑波大学大学院システム情報工学研究科	高橋 大介
東北大大学院サイバーサイエンスセンター	江川 隆輔

# 実施手順概観



# 採択時の留意事項

- 材料等の基盤力学分野、建築土木等の応用分野など、より多くの工学系分野の意見を取り入れる体制を構築すること
- 社会的課題の抽出については、計算科学からのボトムアップ的に抽出する従来のアプローチに加え、ピュアな実験研究者や理論研究者も含め、より広い視点からトップダウン的に抽出するアプローチも取り入れること
- 学会との連携も含め、よりオープンな形で様々なコミュニティの意見を聞く体制を構築すること
- 研究代表者を補佐する体制を整えるなど、マネジメントを適切に実施すること

# 事務体制の強化

- 事務統括役:
  - 現在、公募中。現行、富田代行
- Web、経理管理など
  - 何人かパートタイマーを公募中
- メーリングリスト:
  - [aics\\_fs@riken.jp](mailto:aics_fs@riken.jp) : 将来HPCI調査研究「アプリ分野」事務局
    - 会議参加、旅費、など個々の対応。
  - [hpc\\_aplfs@riken.jp](mailto:hpc_aplfs@riken.jp) : 将来HPCI調査研究「アプリ分野」参加者全員(事務局含む)
    - 通達、議論

# ミーティング

- ・ 全体ミーティングは、2か月に一度ぐらいを想定
  - ・ 最初は、社会的・科学的課題抽出がメイン
  - ・ 徐々に、システム評価へシフト…
- ・ 全体ミーティング：9月20日頃想定
  - ・ ロードマップ・白書精査の進捗（合意が得られているかどうか？）
  - ・ AICSで作成されているプログラムの評価（たたき台）
    - ・ ドキュメント、プログラム、
  - ・ 体制・インフラ整備状況
    - ・ Webなどの整備（すぐにでも通達します）

# 次回のサイエンスロードマップ班会議 (9月20日(木)を想定)

- 各分野の議論の進捗
  - ロードマップの精査
  - 学会におけるオーソライズをどうするか？(計画)
- 分野横断課題の議論の報告
  - 「防災減災」&「ものづくり」
  - 「生命科学」&「物質科学」
  - 「宇宙科学」&「地球科学」
- 理論家、実験家の講演(数名招聘)
- システム評価に必要なアプリの議論
  - 具体的なアプリ課題(MD、MOなど)と代表的アプリを上げることができるか？
- 各分野のフルアプリ、ドキュメントの進捗
- フルアプリ・ミニアプリ化たたき台の報告