

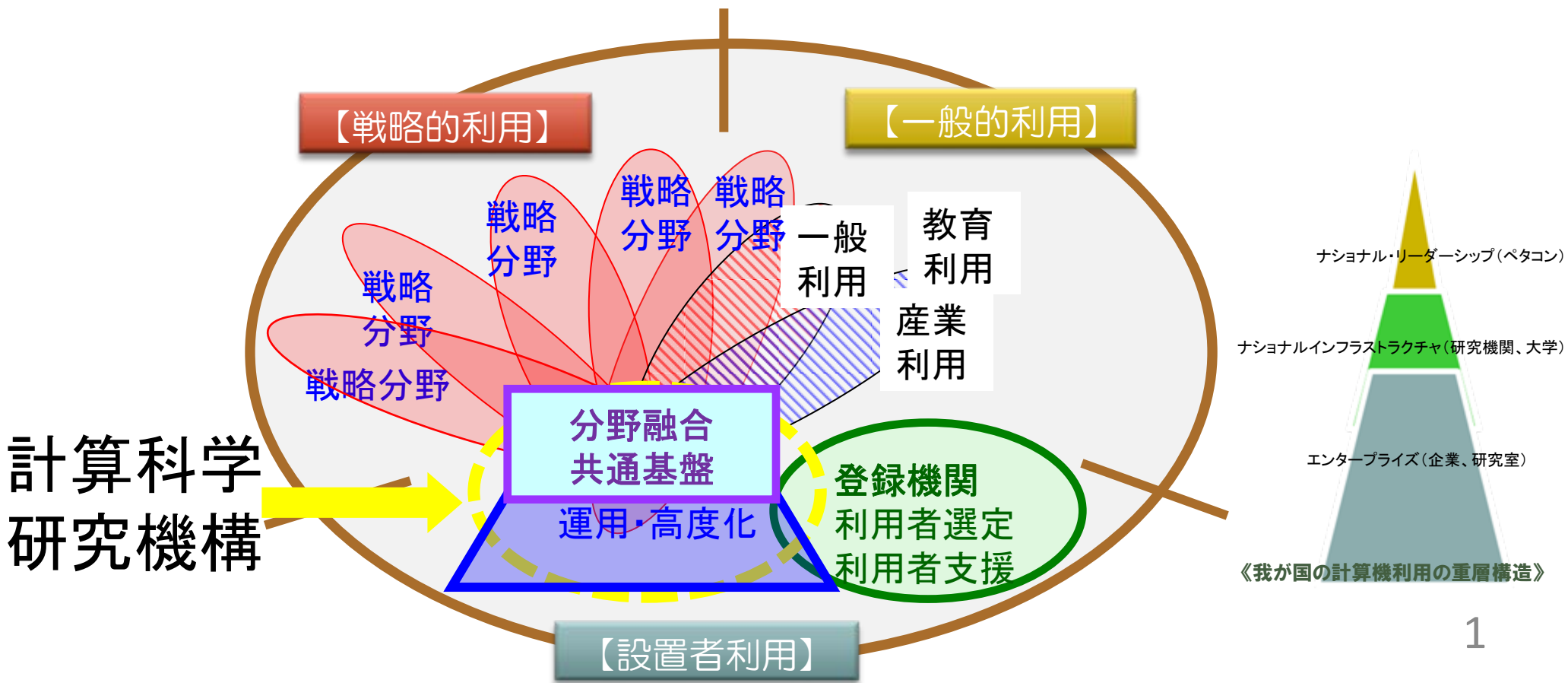
次世代スパコンを中核とした拠点のあり方と 計算科学研究機構の役割について

計算科学研究機構設立準備室
平尾 公彦

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. 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
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



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(作業部会報告書)

(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。

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を立案するとともに、その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. 計算科学者・計算機科学者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. 次々世代機開発構想を含む、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の強化に貢献、コミュニティの意見集約
6. 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

関係機関の役割分担



国(戦略委員会):

共用の基本的な方針、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

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

新たな戦略分野の提案

計算科学研究機構

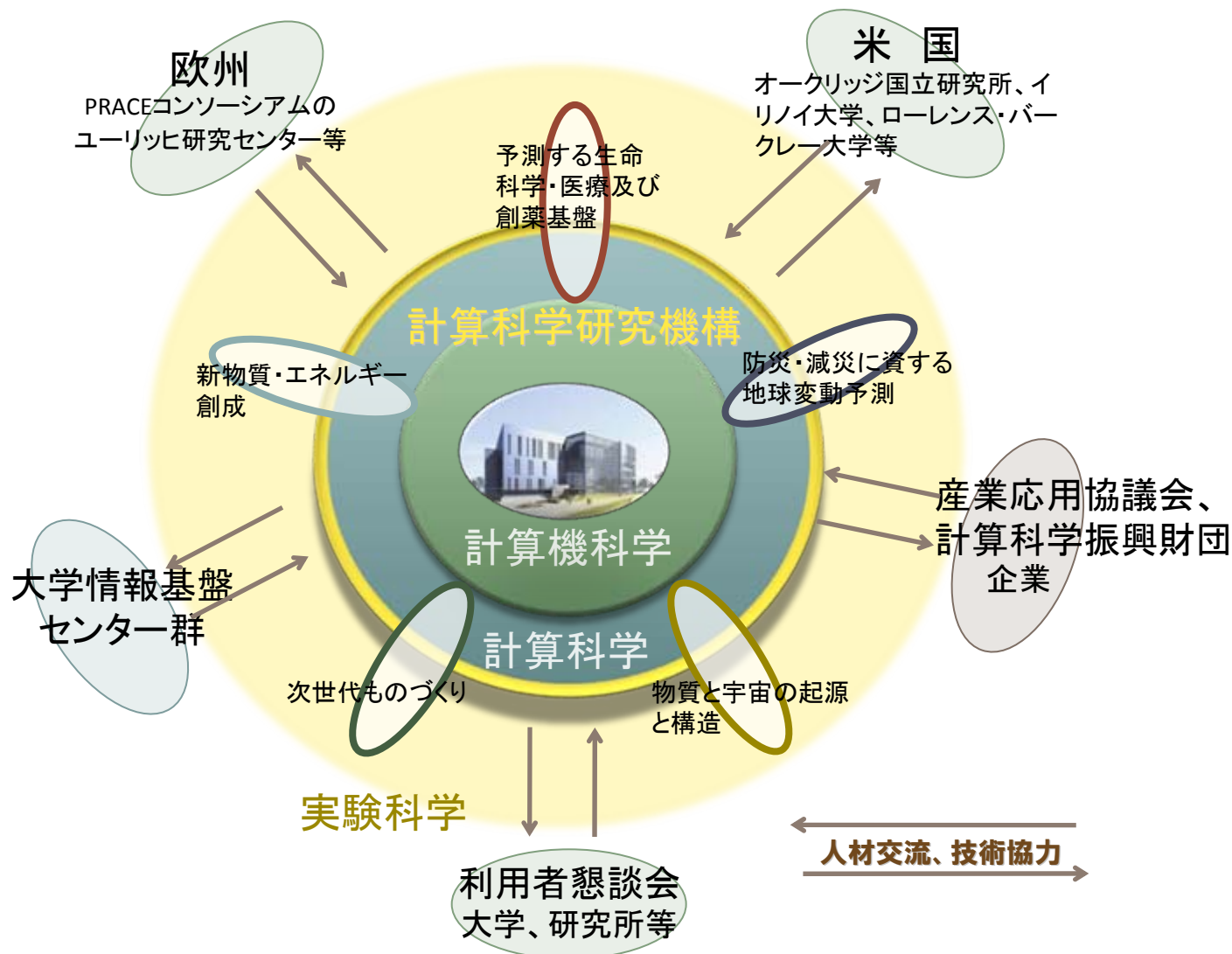
- ・ 次世代スーパーコンピュータを維持管理、高度化し、効果的かつ効率的に利用者へ供す
- ・ 共通基盤的な研究開発、分野融合研究、将来重要となる領域の開拓を行い、計算科学及び計算機科学を先導
- ・ 計算科学者・計算機科学者の密接な連携
- ・ 将来の計算科学技術を担う人材を育成
- ・ 計算科学技術全体の戦略構想
- ・ 計算科学技術のコミュニティーの強化に貢献
- ・ 産学の関係機関の協働を支援
- ・ 国際研究拠点を構築
- ・ 戦略機関や登録機関からなる連携推進会議の設置事務局
- ・ 利用者懇談会の設置支援と連携・協力

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)



学際計算科学一分野連携の必要性

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

計算科学研究機構の組織体制のイメージ

企画戦略部門・・・拠点一体運営のための中枢部門として、事務部門とは独立して置く

ペタコンを核としたCOEの形成推進(COE全体の業務の調整等)、計算科学技術のオールジャパン体制の構築と支援、機構の運営方針の検討・立案、連携推進会議の運営・事務局 etc

計算科学部門・・・手法等の高度化

- 量子系計算科学研究Gr. : 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Gr. : 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Gr. : 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Gr. : 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Gr. : 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

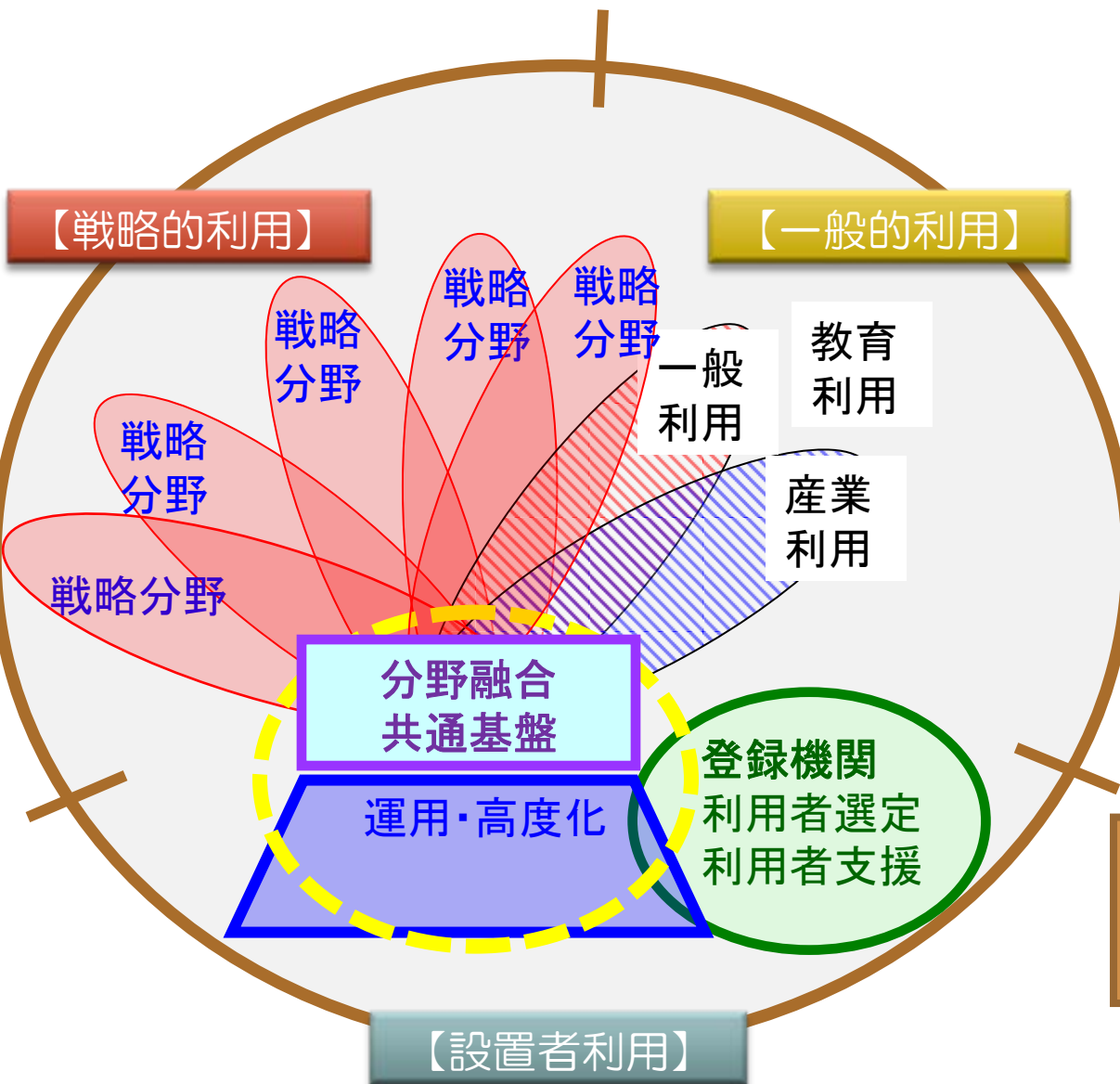
計算機科学部門・・・基盤ウェア等の開発・高度化

- 基盤ソフトウェア研究開発Gr. : 大規模計算を支えるI/O・通信系ソフトウェア高度化
- 高性能ソフトウェア開発環境研究Gr. : 並列ソフトウェア開発のための言語・コンパイラ等高度化
- 応用ソフトウェア開発基盤研究Gr. : 並列ソフトウェア開発のためのアルゴリズム・ミドルウェア等高度化
- アーキテクチャ研究開発Gr. : アプリケーションに根ざした高並列計算機アーキテクチャ等の開発

運用技術部門・・・計算機の運用

- オペレーションGr. : システム管理・運用、ハードウェア保守・解析、実システムソフトウェア保守・維持
- システム高度化Gr. : 高速システム適合技術、アプリ性能予測
- ユーザー利用高度化Gr. : ユーザー情報活用解析、利用高度化ニーズ解析

マシンタイムの配分の考え方



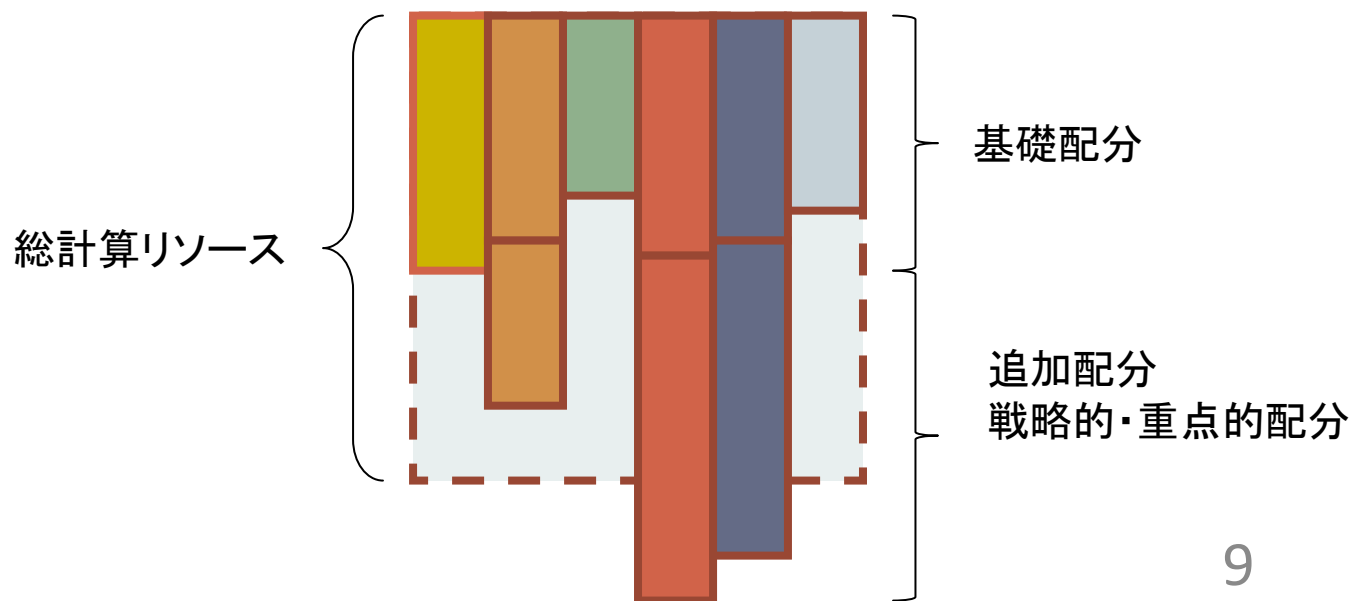
マシンタイムの配分の流れ

1. 戦略委員会で戦略利用、一般的利用、設置者利用の適当な配分を決定
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

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旨とする。

戦略的かつ重点的なマシンタイムの配分

- 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。



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
- 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が必要。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効果的に行うことが求められる

- 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。



拠点に関する検討課題



- 効果的かつ効率的なマシンタイムの配分方策
- 課金制度の考え方
- ソフトウェアの管理と大規模計算の出力アーカイブ
- 萌芽的産業利用促進方策
- 遠隔利用＋グリッド利用
- 人材育成のための仕組みづくり

等

スケジュール



22年 5月 計算機棟・研究棟竣工

22年10月 機構設立

24年 計算機稼動開始

戦略機関決定(21年10月)

(仮)登録機関発足(23年4月)

(※ 運用準備に関しては、機構発足前に現地で準備を開始。)