

今後のHPCI計画推進のあり方に関する
検討WG
将来HPCIのあり方調査研究
アプリケーション分野
説明資料

理化学研究所・計算科学研究機構
富田浩文

アプリチーム研究概要

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：

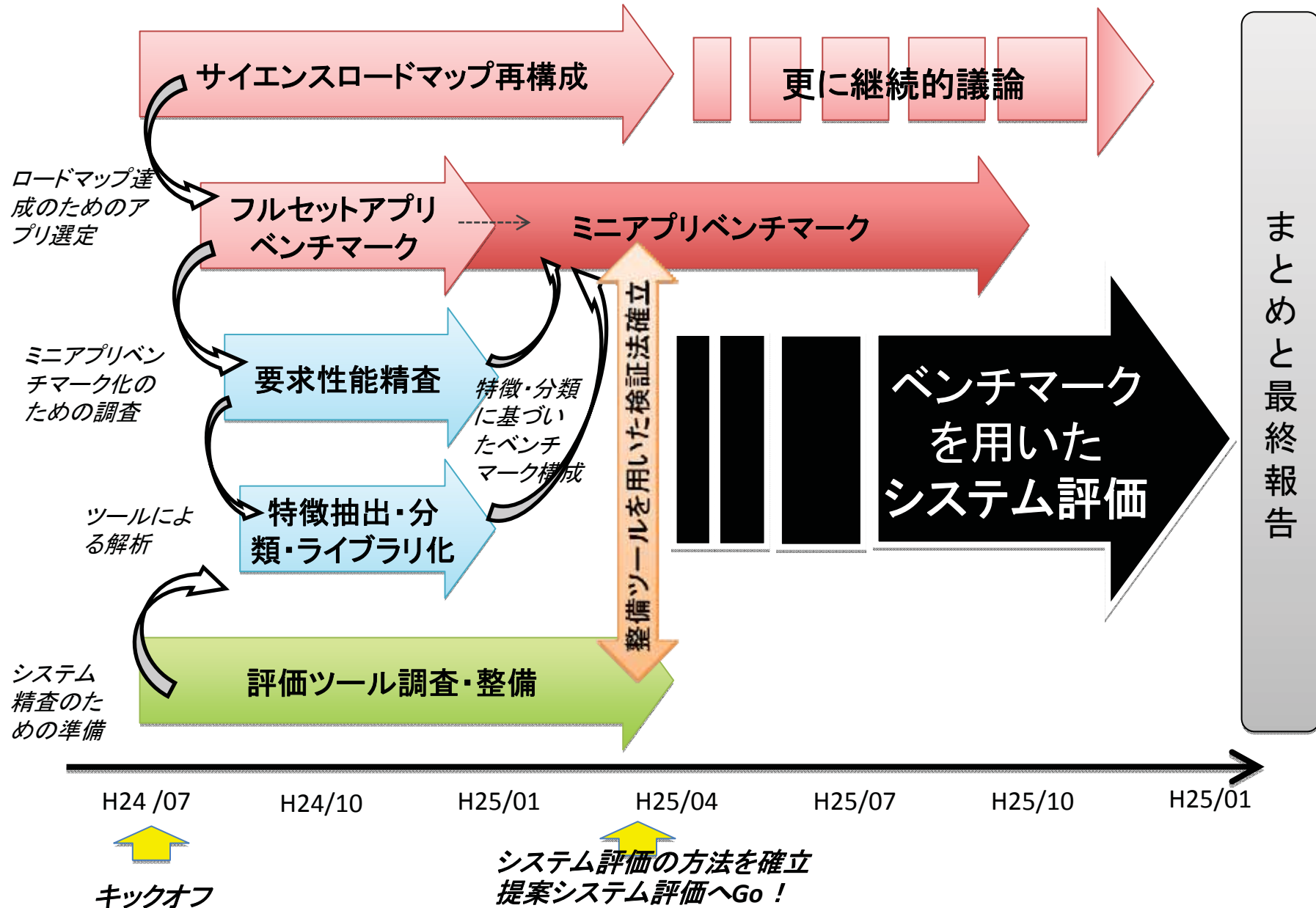
- 戦略5分野を中心に計算科学分野を網羅
- 各分野には、取りまとめ役を配備

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

実施手順概観



アプリケーションFS体制図

システム設計3チーム

共通事項・連携

主管事業実施機関
 (独)理化学研究所・計算科学研究機構
 全体取りまとめ: 富田浩文

社会的・科学的課題抽出班
 取りまとめ: 杉田有治

システム評価班
 取りまとめ: 丸山直也

共同事業実施機関
 東京工業大学・学術国際情報センター

システム評価ツールの作成班
 班長: 松岡聡

事務局

新設

事務統括役

+事務実働
 +AICS連携促進課
 +AICS広報国際室
 +東工大松岡研究室

課題抽出各分野取りまとめ役:
 池口満徳・藤堂眞治・柚木清司・堀高峰・河宮未知生・高木亮治・石川健一
 ※モノづくり分野などでさらに拡充予定

協力要請:
 ・計算科学白書精査・確認
 ・社会的・科学的課題抽出
 ・フルベンチマークコードの整備・提供

協力要請:
 システム評価アドバイス

協力機関・計算科学系

36
 研究機関

協力機関・システム評価系

全体アドバイザー
 平尾公彦
 米澤明憲
 牧野淳一郎

各システム設計チームからのアドバイザー
 江川(東北大)
 中島(東大)
 高橋(筑波大)

構成員

アプリ分野研究者/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分野の精鋭
- ・ **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: 丸山(計算機構)、松岡(東
工大)、
- ・ 実働: 計算機構・東工大の計算機科
学研究
- ・ 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)

社会的・科学的課題抽出班の ミッション

1. より精査された「計算科学ロードマップ白書」:
 - 昨年度の「白書」(アプリケーション作業部会)をベース。
 - コメントなどを参考とし、広く学会などにオーソライズされた形の「白書(第二版)」を作成する

1. システム評価に必要なアプリの情報の提供:
 - システム評価班の依頼に応じて、フルアプリのドキュメント、ソースコードの提供を行う。
 - システム評価班へのインプット

社会的・科学的課題抽出班現状報告

- 社会的・科学的課題抽出
 - 昨年度の作業部会方式(とりまとめ中心に各分野で動く)はベース
 - **現在、実験・理論家の拡充中。**
 - **毎回全体ミーティングでは、実験家・理論家を招いてレクチャーしていただく予定。**
- 分野連携課題抽出
 - 白書で議論されていた3課題
 1. 地震における構造物の耐震性解析(「防災減災」、「ものづくり」)
 2. タンパク質やDNAなどの生体分子・複合体の立体構造に基づく解析(「生命科学」、「物質科学」)
 3. 惑星系の形成、惑星の多様性、構造の理解(「宇宙科学」、「地球科学」)
 - **現在、より具体的な方法、実現可能性を含めて次回全体ミーティングへ持ち込み議論**
 - 新規課題の抽出
 - **次回全体ミーティングまでに各分野で可能性、具体案を持ち込み議論。**
 - **同時に、web上で情報交換を促進(予定)**
- そのほか、抜け落ちている分野はないか?
 - どの分野にどの程度計算機が利用されているかを調べることにより、漏れている分野がわかるはず。
 - 各基盤センターでの過去の課題名から分類する作業
 - **現在、小野氏に調査を依頼中**

社会的・科学的課題抽出班現状報告2

- 工学系分野の意見の取り入れ
 - 材料科学、建築・土木など工学分野の拡充
 - 「物質科学」と「ものづくり」分野の話し合い、議論を活発化
 - 必要であれば、分科会を開く
 - 適切なとりまとめ役を配置する予定。
 - 現在、分野4の取りまとめ役高木氏に動いてもらっている。
- そのほか、抜け落ちている分野はないか？
 - どの分野にどの程度計算機が利用されているかを調べることにより、漏れている分野がわかるはず。
 - 各基盤センターでの過去の課題名から分類する作業
 - 現在、小野氏に調査を依頼中
- 広く学術コミュニティーの意見の取り入れ
 - 各学会等で、次世代の計算機を用いたシミュレーションの必要性を議論予定
 - 各分野取りまとめ役に依頼
 - 学会でセッションを設けるなど……
 - 次回のミーティング(9・19)にて、各分野取りまとめ役が、学会等での議論状況、その計画を報告する。
- 幅広い意見集約:
 - Webでのフォーラムを予定。近日開設
 - レジストレーション後、所属・氏名が確認できれば誰でもオープンに。

システム評価班作業概要

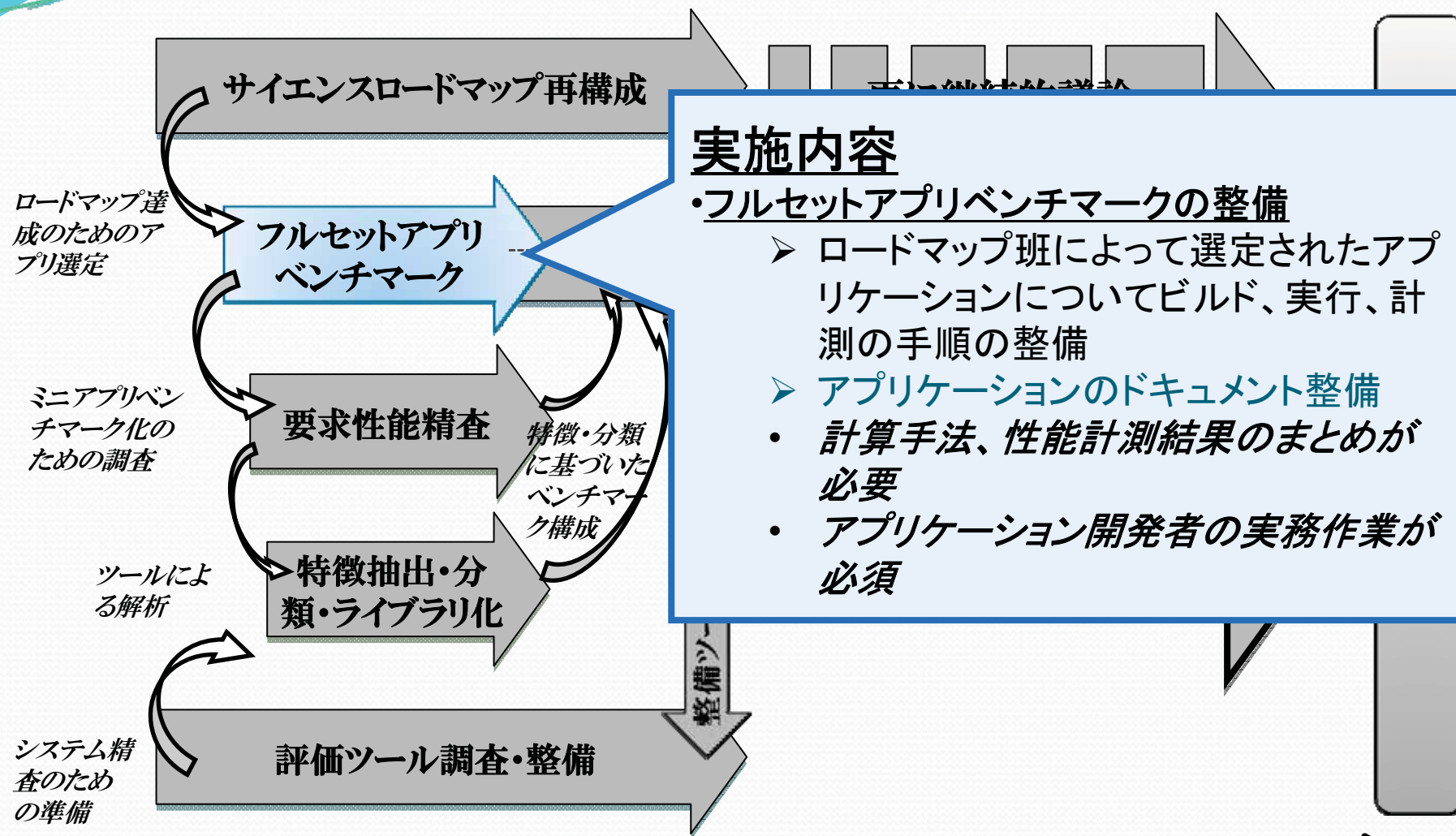
- 目的

「システム設計提案チームの提案システム」+「ロードマップの実現に必要なアプリ」→ 目標性能を達成可能か？

- 手段

- ロードマップからのアプリを用いて提案システムを評価
- ただ単にアプリを出せば済む話ではない
- 評価に適切な形態に落としこみ→ミニアプリ

システム評価の項目0



H24 /07

H24/10

H25/01

H25/04

H25/07

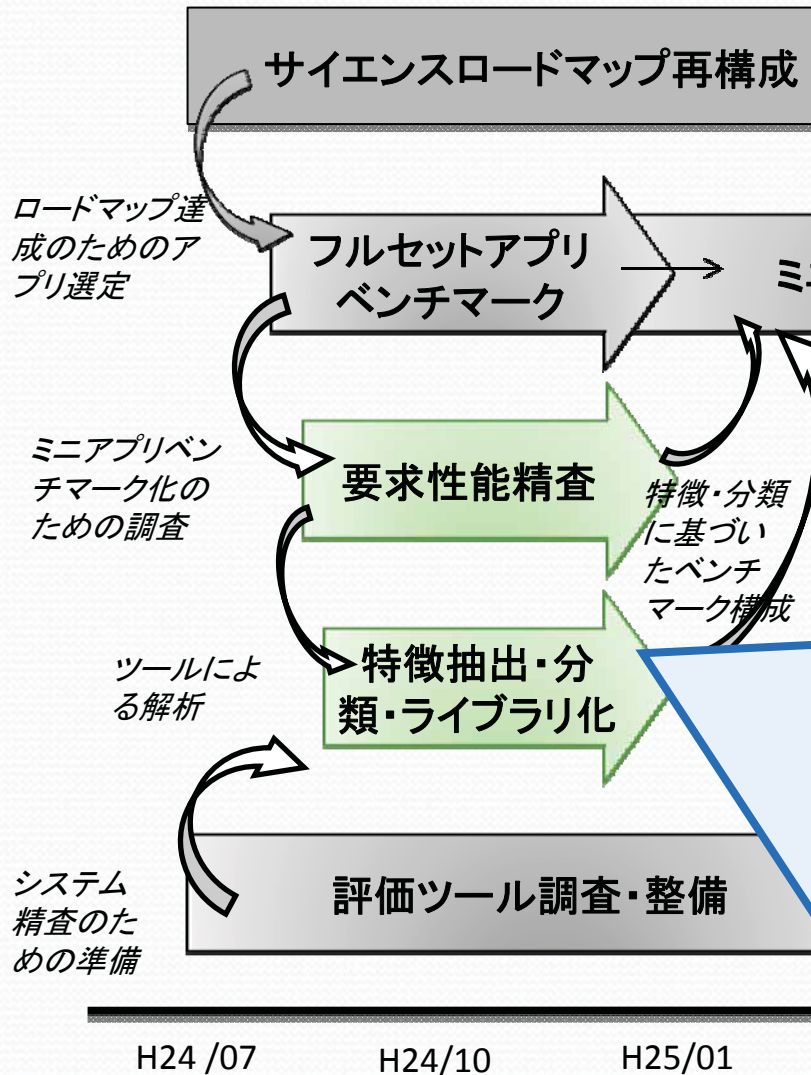
H25/10

H25/01

↑
キックオフ

↑
システム評価の方法を確立
提案システム評価へGo!

システム評価の項目1



実施内容

・フルセットアプリベンチマークの要求性能の精査

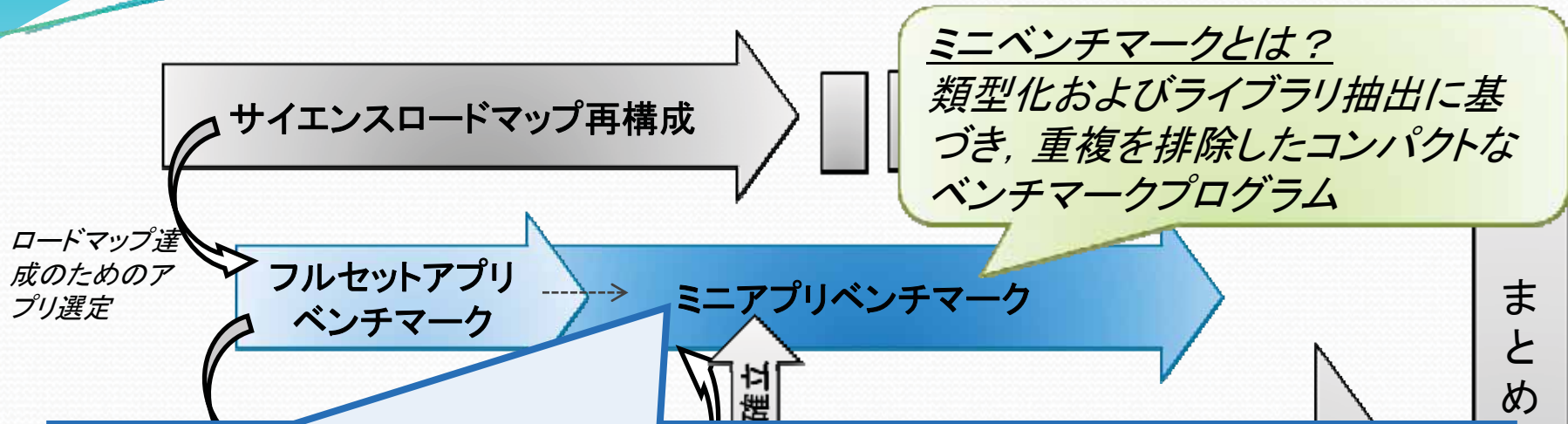
- 上記の性能、計算、メモリアクセス、I/Oなどの特徴を抽出
 - 上記を抽出した特徴に基づき類型化
 - ・ 特徴抽出にはアプリの理解と計算機の理解が必須
 - ・ 戦略分野を中心とした各アプリ分野と計算機科学者の協働作業として実施
- ・既存ライブラリの調査およびライブラリ化可能部分の抽出を同時に行う。

サイエンスロードマップ再構成班のフルセットアプリベンチマーク抽出とオーバーラップして進行

↑
キックオフ

システム評価の方法を確立
提案システム評価へGo!

システム評価の項目2



実施内容

•ミニアプリベンチマークの開発

- 各アプリ分野と計算機科学の協働作業とし、フルセットアプリベンチマークの要求性能を反映したものとして構築

•ミニアプリベンチマークの性能モデル・耐故障性評価用故障モデルの構築

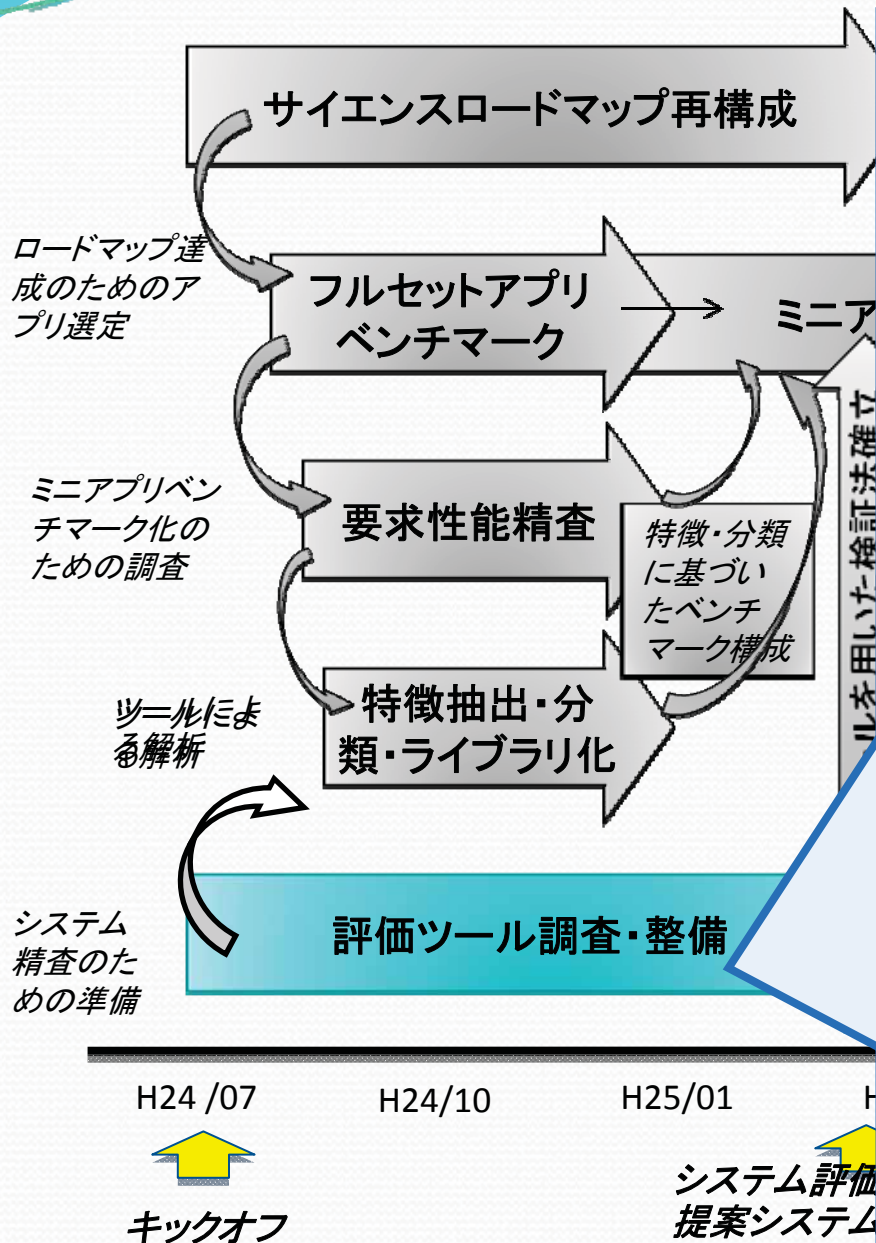
•ミニアプリベンチマークの性能評価・検証

- ミニアプリベンチマークの京・Tsubame2.0などの既存大規模スーパーコンピュータを用いた評価・検証

段取り

- H24年度末までにミニアプリベンチマーク初期プロトタイプを作成
- H25年度第1四半期にプロトタイプの改良・拡張,
- H25年度第2四半期に参照実装第1版

システム評価の項目3



実施内容

提案システムをフェアに評価するためには
評価ツールの早期整備、開発が試金石

・アプリケーションの計算パターンや性能特性などを調査するためのツールの調査・整備

- ・既存のツールの評価
- ・必要に応じた開発

段取り

➤平成24年10月まで:

- ・必要な性能評価機軸を得るための各種性能評価ツールの調査

➤平成25年3月まで:

- ・決定した評価ツールの京・TSUBAME2.0等HPCIスパコンへの整備、及び必要な修正に関する開発
- ・ミニアプリの初期バージョン等での評価環境の有効性の検証

最終段階：計算機システム評価

サイエンスロードマップ再構成

更に継続的議論

実施内容

・システム設計分野チーム提案システムのミニアプリベンチマークによる性能・電力・耐故障性の評価の実施

- ベンチマークの提案アーキテクチャへの移植を考慮した設計とする

本項目は、システム設計分野チームとの協働で実施

- システム設計分野チームとのミーティングをH24・7から定期的開催

ベンチマーク

ベンチマークを用いたシステム評価

まとめと最終報告

H24 /07

H24/10

H25/01

H25/04

H25/07

H25/10

H25/01

↑
キックオフ

↑
システム評価の方法を確立
提案システム評価へGo !