

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

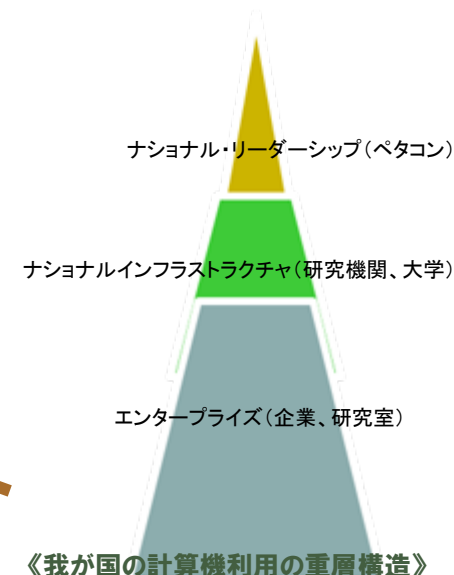
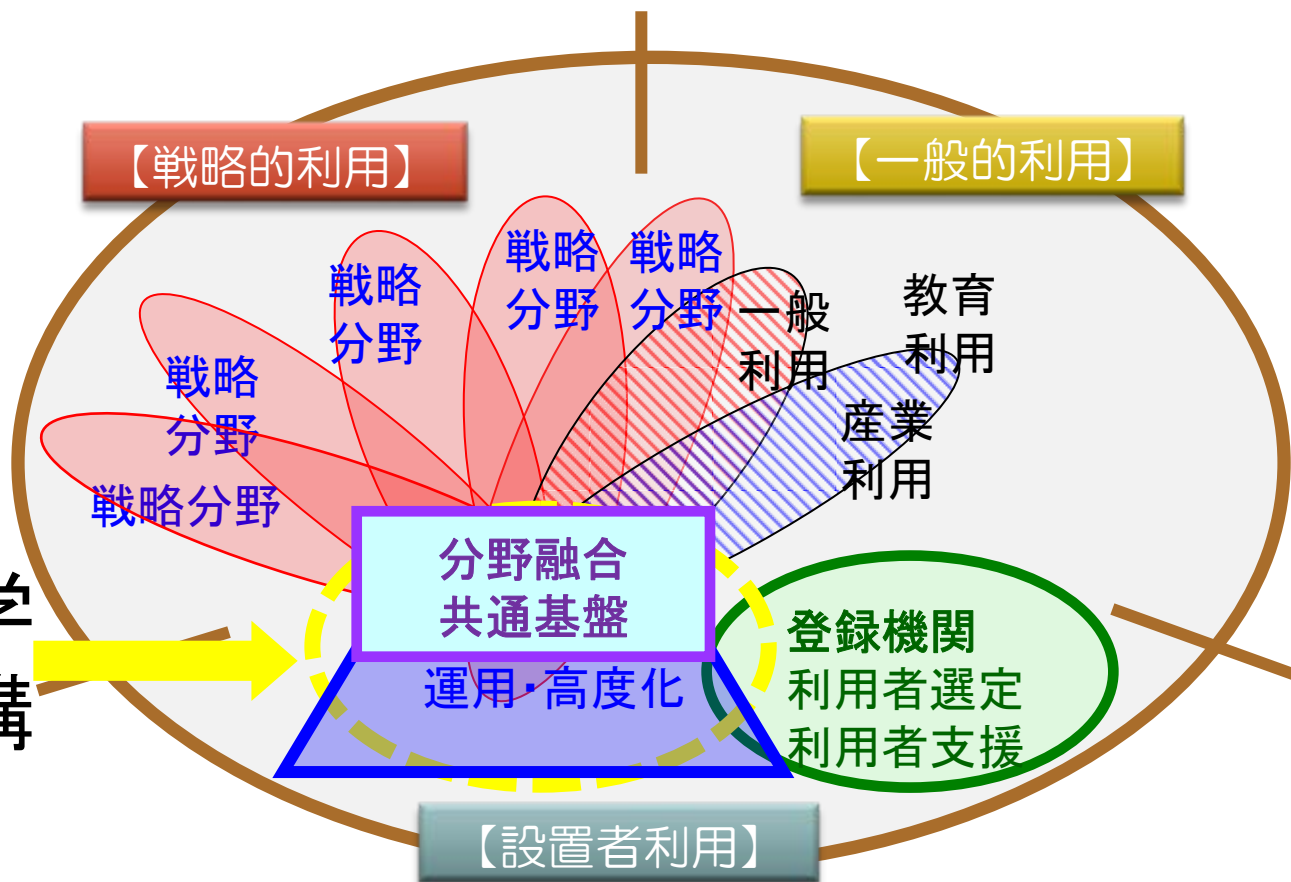
計算科学研究機構設立準備室
平尾 公彦

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

計算科学
研究機構



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、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

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

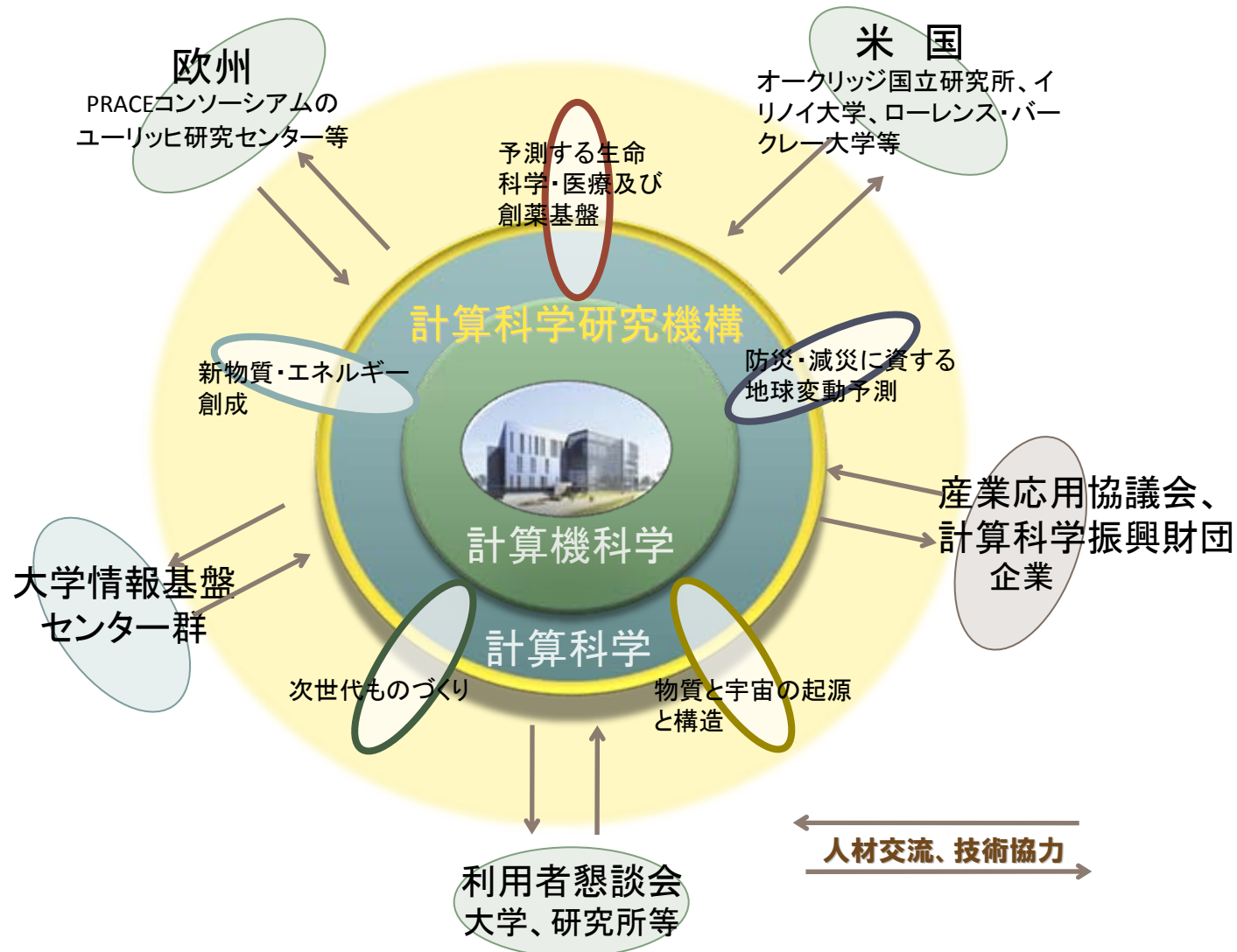
- ・次世代スーパーコンピュータを維持管理、高度化し、効果的かつ効率的に利用者に供す
- ・共通基盤的な研究開発、分野融合研究、将来重要となる領域の開拓を行い、計算科学及び計算機科学を先導
- ・理論研究者・実験研究者との密接な連携
- ・将来の計算科学技術を担う人材を育成
- ・計算科学技術全体の戦略構想
- ・計算科学技術のコミュニティーの強化に貢献
- ・産学の関係機関の協働を支援
- ・国際研究拠点を構築
- ・戦略機関や登録機関からなる連携推進会議の設置事務局
- ・利用者懇談会の設置支援と連携・協力

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

機構の組織体制のイメージ(1)

【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。

機構長

アドバイザリ・ボード(仮称)

副機構長

企画戦略部門

計算科学部門(12チーム)

- ー 量子系計算科学研究グループ
 - ー 粒子系計算科学研究グループ
 - ー 連続系計算科学研究グループ
 - ー 複合系計算科学研究グループ
 - ー 離散系計算科学研究グループ
 - ー 戦略機関との共同研究型グループを複数設定
- 共同研究型、in-house型を想定。
戦略機関には共同研究型への参画を義務づけ。

《各グループのイメージ》

量子系計算科学研究グループ

シミュレーション研究チーム【共同研究型】

TL:1名、副 TL:1名、Posdoc含む研究員:3名～5名、その他数名
※経費を戦略機関等と理研が折半することを想定

理論・モデル・アルゴリズム研究【in-house型】

TL:1名、副 TL:1名、Posdoc含む研究員:3名～5名、その他数名
※経費は全て理研が措置

計算機科学部門(8チーム)

- ー 基盤ソフトウェア研究開発グループ
- ー 高性能プログラミング環境研究開発グループ
- ー 並列アルゴリズム・数理科学研究開発グループ
- ー アーキテクチャ研究開発グループ

運用技術部門

- ー オペレーショングループ
- ー システム高度化グループ
- ー 利用高度化グループ

この他、実運用に当たり
保守などをアウトソーシング(H23FY～)

機構の組織体制のイメージ(2)

〔補足〕

● 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

- ・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

- | | |
|------------------------|---------------------------------------|
| ・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 (別添)

運用について



1. 運用のポイント

理研は施設設置者として、次世代スパコンの能力を最大限に活用し、利用者が必要とする計算機資源等を提供をするために、次世代スパコン及びその施設の運用（維持管理、保守改善、高度化等）を行わなければならない。運用にあたっては以下の点に留意が必要。

○次世代スパコンそのものが、これまでに例のない極めて大規模なシステム（計算機系のほか冷却・電源系を含む）であることから、トラブル発生時のシステム状況の正確な把握、適切な対応などにあたり、これまでの経験が参考にならず、常に模索しながらの運用となる。（安定した運転を行う上で、日々改善、高度化を図りながら次世代スパコンの能力を活かす必要がある。）

○利用者のニーズに十分配慮し、次世代スパコン及びその施設の性能向上といった観点も含め、運用を行うことが重要である。そのためには、登録機関とも密接な連携が必要。

2. 運用技術部門の業務イメージ

◆オペレーショングループ

システム管理・運用、ハードウェア保守解析、ネットワーク管理など

◆システム高度化グループ

システム性能予測解析、システムソフトウェアの保守管理・高度化など

◆利用高度化グループ

ユーザ特性・ユーザニーズ解析など

共用に必要な業務について

(全体像)

○理研は施設設置者として、共用法第5条に規定する業務を実施する。

(超高速電子計算機を開発し、特定高速電子計算機施設の建設及び維持管理を行い、並びにこれを研究者等の共用に供すること)

○登録機関は設置者が実施する業務のうち、共用法第8条に規定する業務を実施する。

(施設利用研究を行う者の選定及びこれに附随する業務【利用者選定業務】、施設利用研究の実施に関し、情報の提供、相談その他の援助を行う【利用支援業務】こと)

→ 利用支援にあたっては、登録機関が一元的な窓口となり、理研と分担・協力して対応。また、登録機関はアプリケーションの高性能化の支援に注力。

計算科学研究機構

企画戦略

- ・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 等

計算機科学

- ・基盤ソフトウェア研究開発
- ・高性能プログラミング環境研究開発
- ・並列アルゴリズム・数値科学研究開発
- ・アーキテクチャ研究開発

計算科学

- ・量子系計算科学研究
- ・粒子系計算科学研究
- ・連続系計算科学研究
- ・複合系計算科学研究
- ・離散系計算科学研究
- ・戦略機関との共同研究

運用技術

- ・オペレーション
- システム管理・運用、ハードウェア保守解析、ネットワーク管理等
- ・システム高度化
- システム性能予測解析、システムソフトウェアの保守管理・高度化等
- ・利用高度化
- ユーザ特性・ユーザニーズ解析等

登録機関

利用者選定

- ・課題選定
- (選定委員会の開催等、審査体制の整備等)

利用支援

- ・利用者への情報提供
- 利用マニュアルの作成、
- 施設や施設利用に関する最新情報の提供、
- 次世代スパコンシステムに関する技術情報の提供、
- 利用者講習会の実施 等
- ・利用に関する相談及び利用支援
- 研究課題の申請の前段階での技術的相談、
- アプリケーションの実行やデータ処理、可視化、ならびに利用者が利用する
- 機器の操作等に関する支援
- アプリケーション高性能化の支援 等
- ・その他の援助
- セキュリティ事項の問い合わせ窓口、情報提供
- ネットワークを介したリモートアクセスに関する支援 等

密接な連携



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。

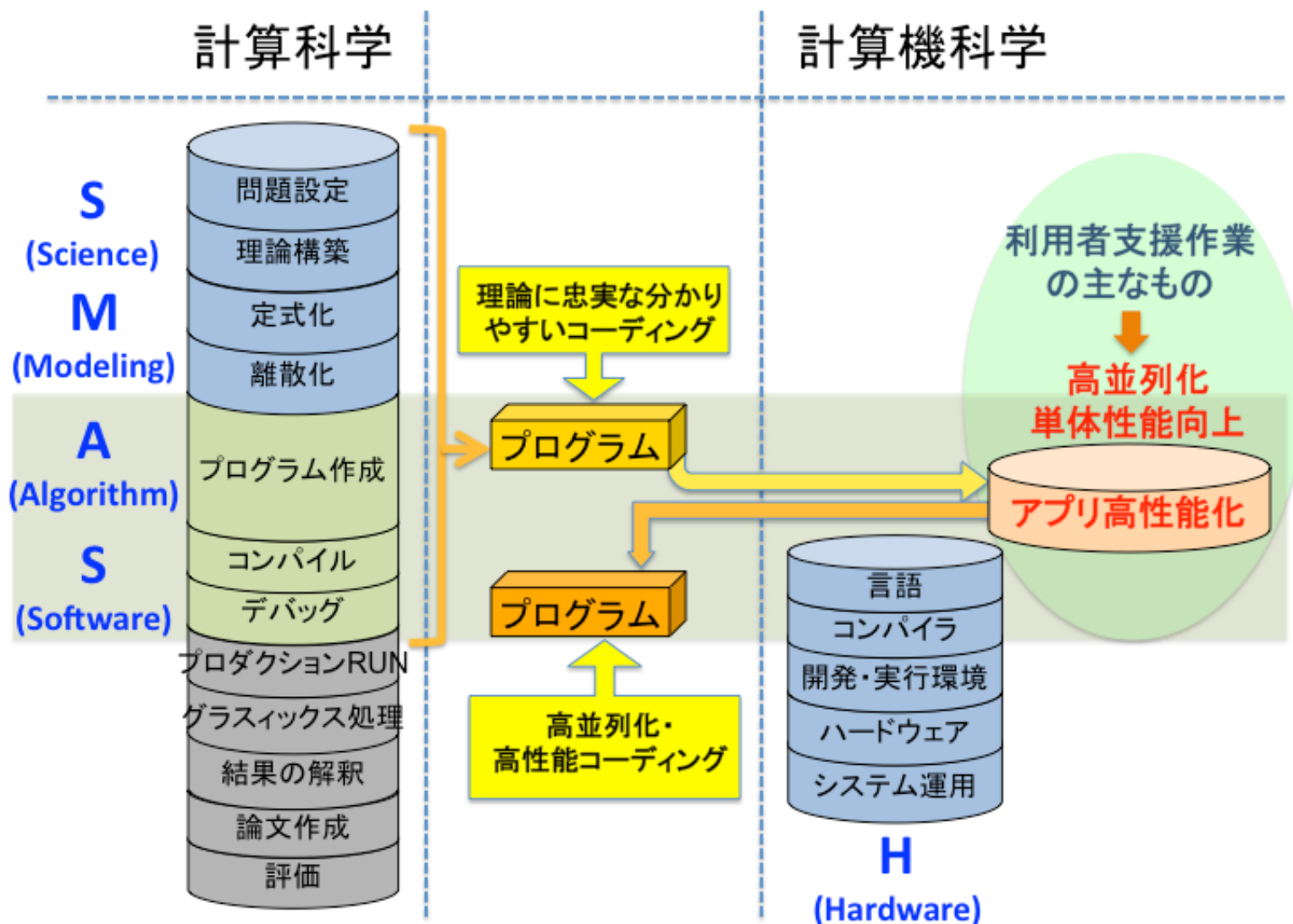
2. 利用者のアプリケーション高性能化

- ・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。

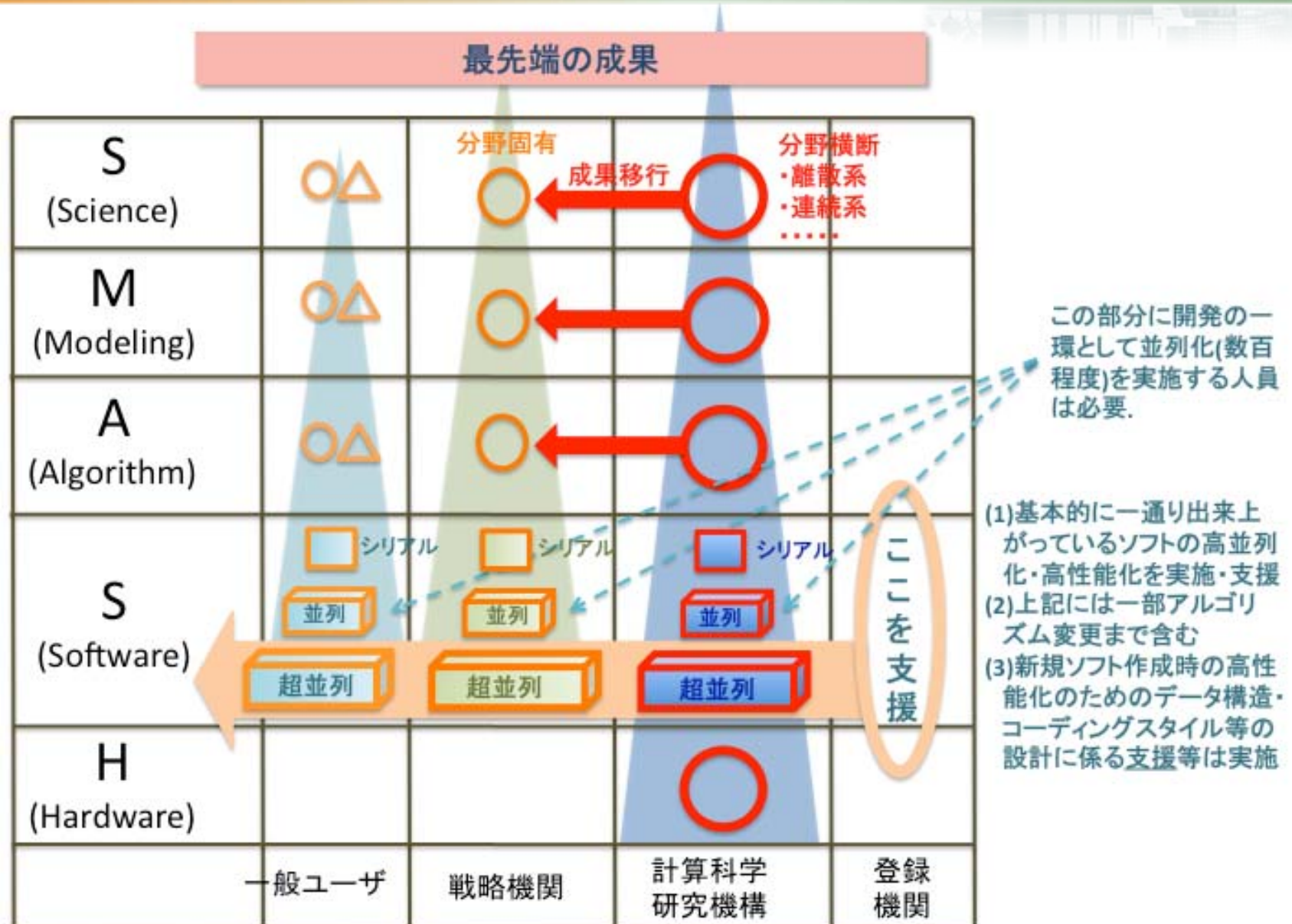
共用に必要な業務について

(利用支援業務 その1)



共用に必要な業務について

(利用支援業務 その2)

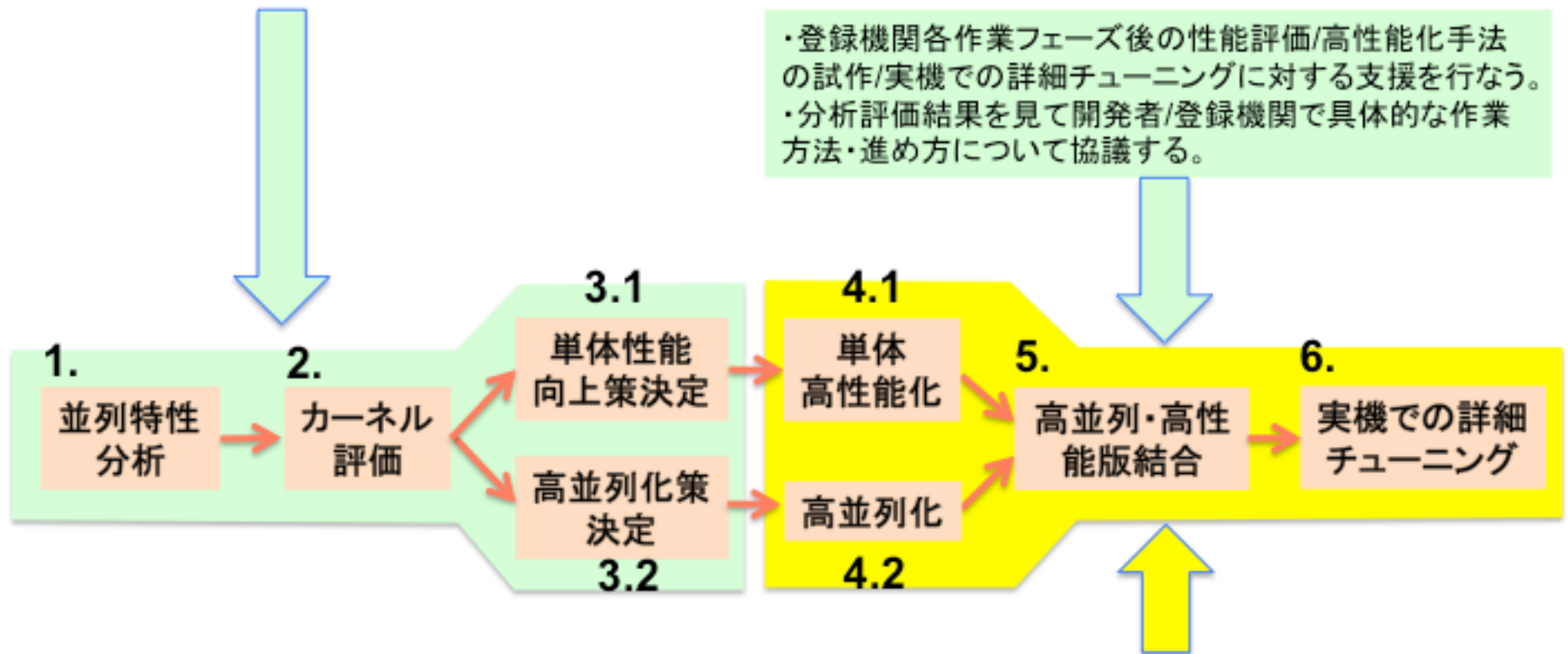


共用に必要な業務について

(利用支援業務 その3)



- ・超高並列への問題点/対処案、単体性能向上のための対処策等について分析評価する。
- ・この部分は高並列計算機で高性能化を実現する上の重要課題であり主に**登録機関が責任主体**として実施する。ただし作業方法等を示し開発者側で実施可能な場合は開発者側で実施する。
- ・コードの処理内容の説明等については、登録機関は開発者側の支援を受ける。

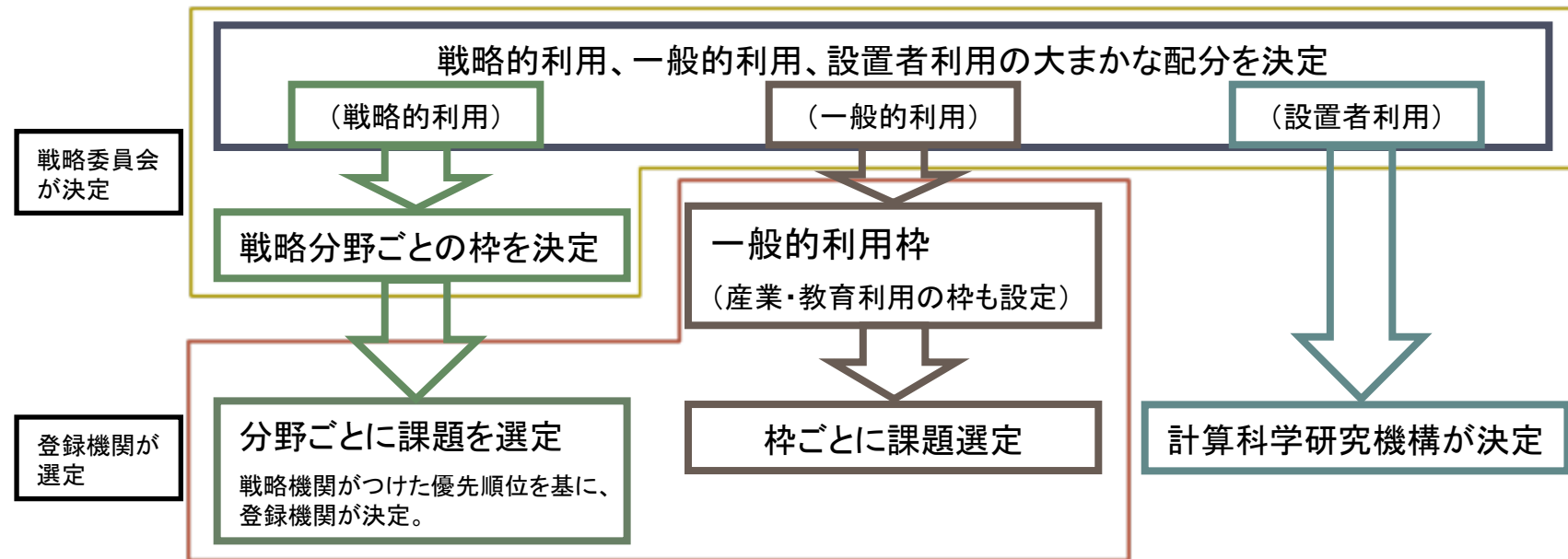


- ・基本的にプログラムの大規模な書換え作業と動作確認作業となるので**開発者が責任主体**として実施する。分析評価結果を元にこれらの作業を実施する。
- ・開発者側でも数百程度の並列化に対応できる人材を確保する必要あり。

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



共用法

（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。

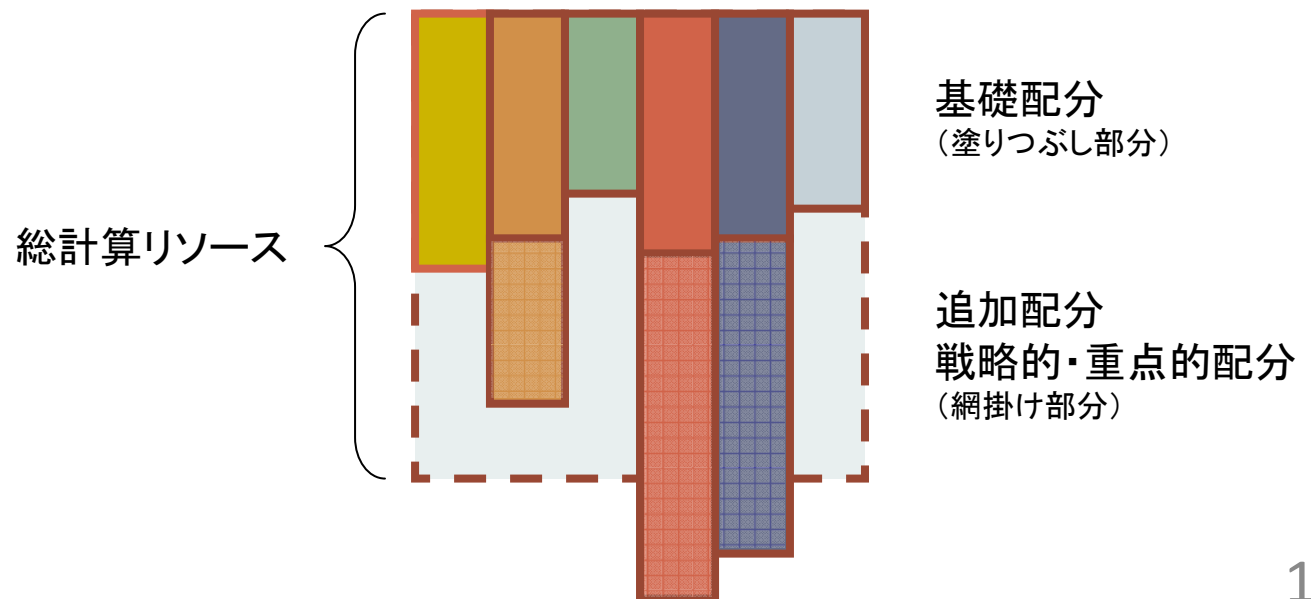
（選定委員会）第一六条 登録施設利用促進機関は、第八条第一項第一号に規定する選定を行う場合には、施設利用研究に関し学識経験を有する者からなる選定委員会を設け、その意見を聴かなければならない。

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。



人材育成のための仕組みづくり(1)

- 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。



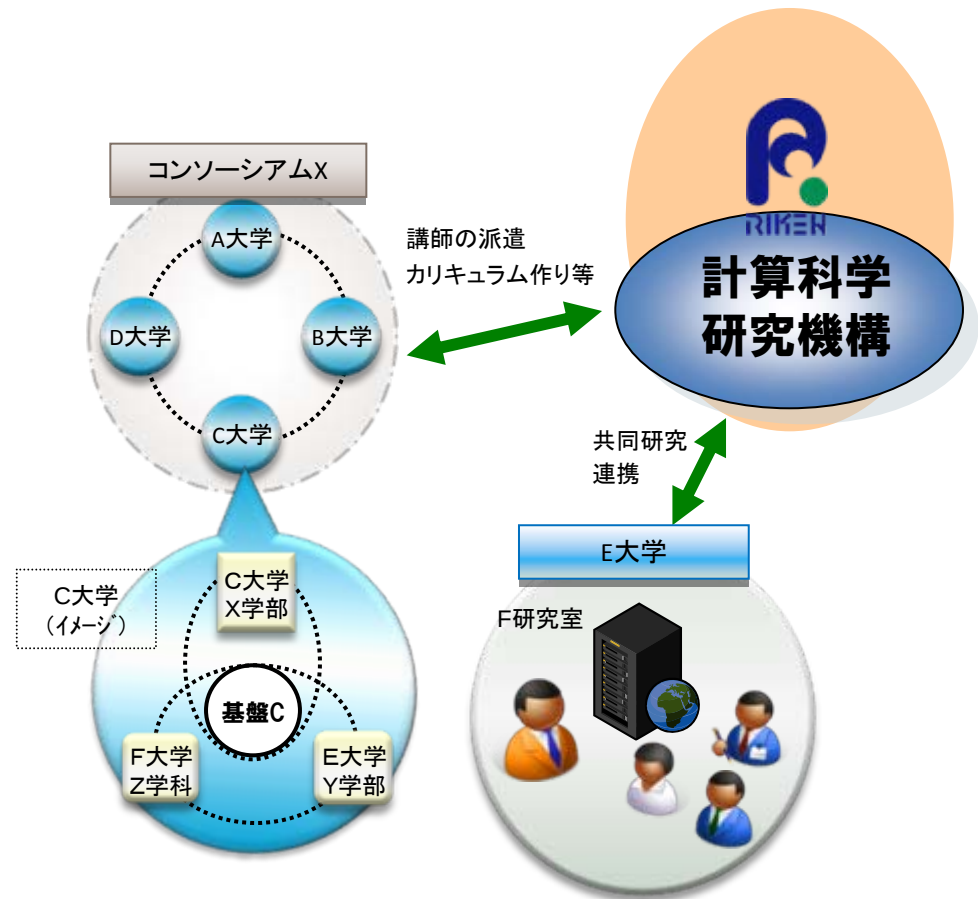
人材育成のための仕組みづくり(2)

◆人材の育成

- (1) 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。スクーリング(集中講義、特別講義、サマースクール等)を神戸で実施、遠隔講義を利用。実施の責任主体はコンソーシアム(カリキュラム作成、講師の手配等)。単位は各大学が認定、産業界からの受講者には修了証を出す。

また、各大学の共同利用の推進役として情報基盤センターは、人材育成について関係する大学や学部間の調整役として機能することを期待する。

- (2) 次世代スパコンの開発利用やその高度化にかかわる研究開発における人材育成の観点を重視し、機構は若手研究者(ポスドク)の参加機会の確保にも十分配慮するなどして、大学等との共同研究等を推進する。



大学情報基盤センター等との連携(1)

◆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(分子研等)、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。

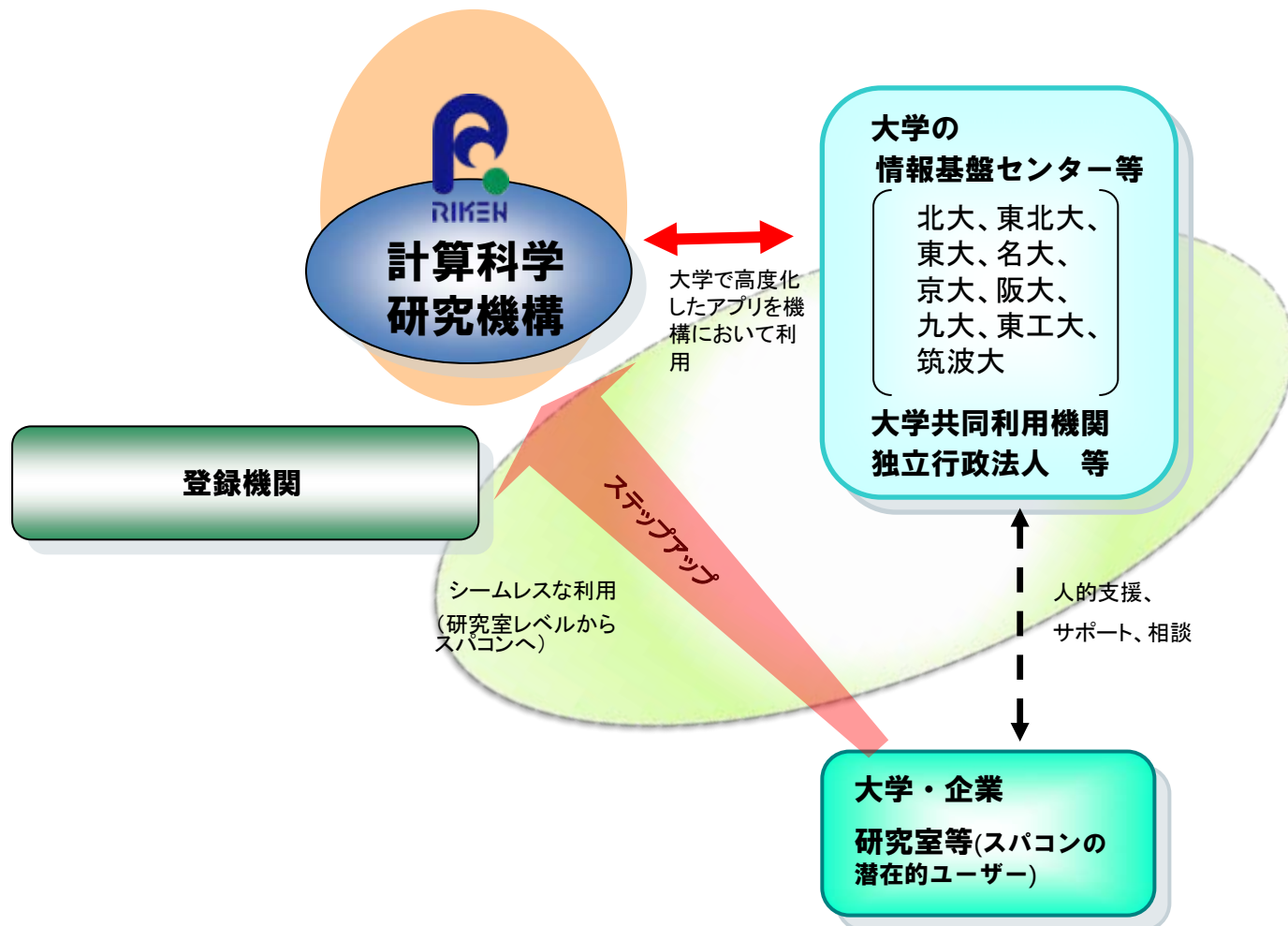
③次世代スパコンの開発・利用高度化を推進

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

大学情報基盤センター等との連携(2)

- ・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
- ・利用者の裾野の開拓のための利用環境の整備・充実
- ・次世代スパコンの開発・利用高度化を推進



拠点に関する検討課題



- 戦略機関との連携体制の構築
 - 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(キャリアパスの形成支援を含む)
- 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)

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)