次世代超並列計算機開発
—多粒子系向け超並列計算機の開発

Next-Generation Massively Parallel Computers
— Massively Parallel Computer for Particle-based Simulations

牧野淳一郎 (東京大学大学院理学系研究科)

1　研究組織

サブリーダー	牧野淳一郎	東京大学大学院理学系研究科助教授 重力 / クーロン力専用計算機開発
	蜂巣泉	東京大学大学院総合文化研究科助教授 応用ソフトウェア開発
	船渡陽子	東京大学大学院総合文化研究科助手 応用ソフトウェア開発
	福重俊幸	東京大学大学院総合文化研究科助手 重力 / クーロン力専用計算機開発、FPGA システム開発

2　研究の目的および概要

この研究の目的は、粒子系に特化した次世代超並列計算機を開発し、汎用計算機では不可能な規模のシミュレーションを可能にするとともに、その応用範囲をさらに拡大することである。多粒子系の場合は、粒子間相互の計算に専用化したプロセッサを作ることでコスト・パフォーマンスを大幅に向上させることができることがわかっている。我々が 1995 年に完成させた GRAPE-4 は、世界で初めてテラフロップスの速度を達成した計算機となった。

本研究では、GRAPE-4 の性能を 100 倍以上向上させたサブペタフロップスの計算速度をもつ専用計算機を実現する。さらにその専用計算機と、汎用の超並列計算機、さらにこの二つの中間に位置する FPGA を用いた再構成可能論理を使った多目的計算機を組み合わせてヘテロジニアス・マルチコンピュータを構築する。このシステム全体を GRAPE-6 と呼ぶ。

以下に、汎用の高速計算機に比べた GRAPE-6 システムの位置づけと、高速が実現できる理由を簡単にまとめる。 GRAPE-6 のピーク性能は既に述べたように 100 Tflops 程度を予定しており、これは計画の最終年度をもって実現できるみこみである。その時点での最高速の汎用超並列計算機はいわゆる ASCI プロジェクト、あるいは地球シミュレータにより実現されるであろう。いずれも速度は 3–10 Tflops 程度、コストは 100 億円以上と見込まれる。これに対して本プロジェクトの総予算は 5 億円である。すなわち、価格性能比で GRAPE-6 は汎用並列計算機の 400 ないし 1000 倍以上よいことになる。GRAPE-4

ではこの比は 100 ないし 200 程度であったので、 GRAPE-6 ではいっそう改善していることがわかる。

差が広がっていく本質的な理由は、汎用計算機では使っている半導体の面積のうち有効な計算に使える割合が次第に減少していくからである。 1990 年代の間に、1 つのマイクロプロセッサに使われているトランジスタの数は 20 倍以上に増えた。しかしながら、実装されている浮動小数点演算器の数は 1 から多くて 2 でこの 10 年間ほとんど変わっていない。つまり、相対的には演算器の占める割合は 10 年前の 1/10 以下になったわけである。このように演算器が増えない理由は、並列化が難しいこととメモリ転送速度が追いつかないことの 2 つであり、メモリ転送速度のほうが解決が困難である。

これに対し、 GRAPE ではメモリとプロセッサ間の転送速度を押えたままで、プロセッサチップ内のほとんどのトランジスタを有効に演算に使うことができる。これは、根本的には、対象とする物理系の性質、すなわち多数の粒子が長距離相互作用によって影響しあい、しかも高精度の計算が必要であるということによるものである。このために、データ量は粒子数に比例するのに対し、演算量は粒子数の自乗に比例する。この性質をうまく生かしたアーキテクチャを構成することで、増えたトランジスタを有効に使えるのである。このために、専用計算機の相対的な優位性は、これから大きくなりこそすれ小さくなることはない。

すなわち、今後の計算科学研究の進展に対して、専用計算機のアプローチが果たす役割はますます大きくなるものと考えられる。これは、汎用計算機に比べた相対的な利益が大きくなっていくからである。このことを実証し、専用計算機の開発の一つのモデルを提供することが、本研究の目標の一つである。

もう一つの目標は、FPGA を使った粒子系向け多用途計算機の構築である。FPGA とは、内部回路を書き換え可能な LSI であると思ってよい。通常のカスタム LSI に比べると集積度、速度に大きなペナルティがあるが、そのかわりに開発の初期コストがかからない、また、間違えても修正可能であるといった、少数生産に向いた特長を持つ。このため、粒子系計算でも重力 / クーロン力計算ほどコストがかからない、そのかわり演算自体は複雑で多様性がある相互作用に使うのに適していると考えられる。

自己重力系、プラズマ物理、分子動力学シミュレーションなどでは、ミクロレベルで粒子として表現されている、あるいは遠隔相互作用が卓越するといった理由で従来から粒子モデルが主に用いられてきた。これに対し、連続体を扱う構造計算や流体計算では、従来は、構造格子による差分法、あるいは非構造格子による有限要素法が主な解析手段であった。しかしながら、これらの分野においても、近年粒子的アプローチを使った計算法 (メッシュレス法、エレメント・フリー法など様々な名称がある) が注目されている。これは、複雑な境界条件 (移動、変形するものを含む) の実現が容易であること、並列化もそれほど複雑ではないことによるもののようである。

そのような利点があるものの、格子を使った方法に比べて粒子法では本質的に計算量が多くなる。この計算量の増大に対して、FPGA を使った粒子系向け多用途計算機は極めて有効な解決策になると期待できる。

FPGA を計算に使う試みは非常に多数あるが、現在までのところ、非常に限られた応用、例えば DNA のシーケンスマッチングなどを除いてはさほどの成果を上げていない。これは、基本的にはこれまでは FPGA の集積度が小さかったことにもよる。もちろん、FPGA の集積度が上がると同時に通常のマイクロプロセッサの集積度も上がるが、すでに述べたようにマイクロプロセッサの性能は集積度に比例しては上がらない。このために、当面は FPGA が相対的に有利になっていくのである。

現在の FPGA でも、まだ通常の浮動小数点演算を行なうのは困難である。しかし、多くのアプリケーションで、すべての演算に高い精度が必要なわけではない。実際、 GRAPE の場合には、演算パイプラインの中で必要に応じて演算精度を変化させることで回路規模を大幅に小さくすることができている。 従って、同様な最適化を行なうことが可能なアプリケーションにおいては FPGA が汎用計算機に比べて有利になってきていると考えられる。このことを実証することが、本研究の第二の目標である。

3　研究計画の概要

まず、重力・クーロン相互作用に専用化した、ピーク性能 100 テラフロップス程度の専用プロセッサを開発するとともに、粒子系に専用化したアーキテクチャを持つが相互作用を計算するパイプラインを再構成可能論理 (FPGA、Field Programmable Gate Array) で実現した多用途粒子系プロセッサを開発する。このプロセッサの性能は、応用にもよるがテラフロップス程度となろう (図 1)。さらに、これらと汎用の並列計算機を組み合わせたヘテロジニアス・マルチコンピュータを実現し、天体シミュレーション、分子動力学計算、粒子的アプローチでの流体計算などに応用する。

4　平成１４年度の研究成果

本年度はプロジェクト自体は既に終了しており、プロジェクト自体の直接の成果というべきものは特にないが、関連するもの、昨年度の報告書ではカバーできなかったもの等について簡単にまとめる。

4.1　64 Tflops の GRAPE-6 完成

昨年度の報告書の時点では、 GRAPE-6 のうち重力プロセッサ部分は 32 ボードからなり、ピーク性能は 32 Tflops であったが、2002 年 4 月に 64 ボード、64 Tflops のシステムが完成した。

64 Tflops システムは論理的には 4 クラスタからなる。1 クラスタは 16 ボードから構成され、これがさらに 4 分割されてボード 4 枚毎にホスト計算機がつく。クラスタ内の各ボードは重力計算に適したマルチキャストが行える専用ネットワークで接続されている。ホスト計算機は AMD Athlon XP 1800+ を CPU とする Linux PC である (図 2 の前に

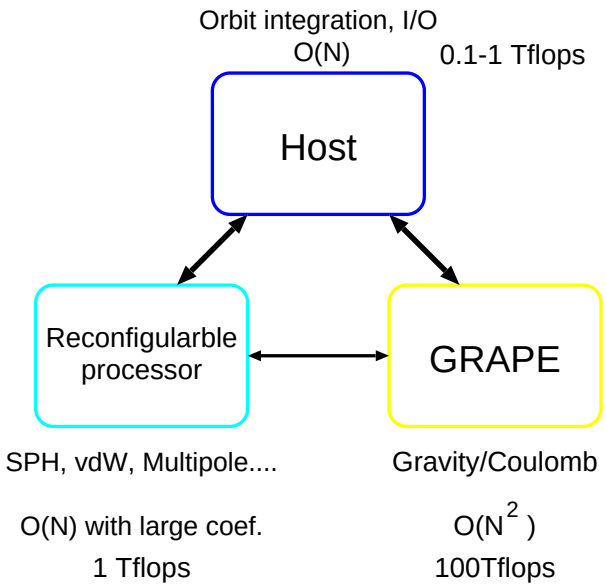

図 1: システム全体の構成

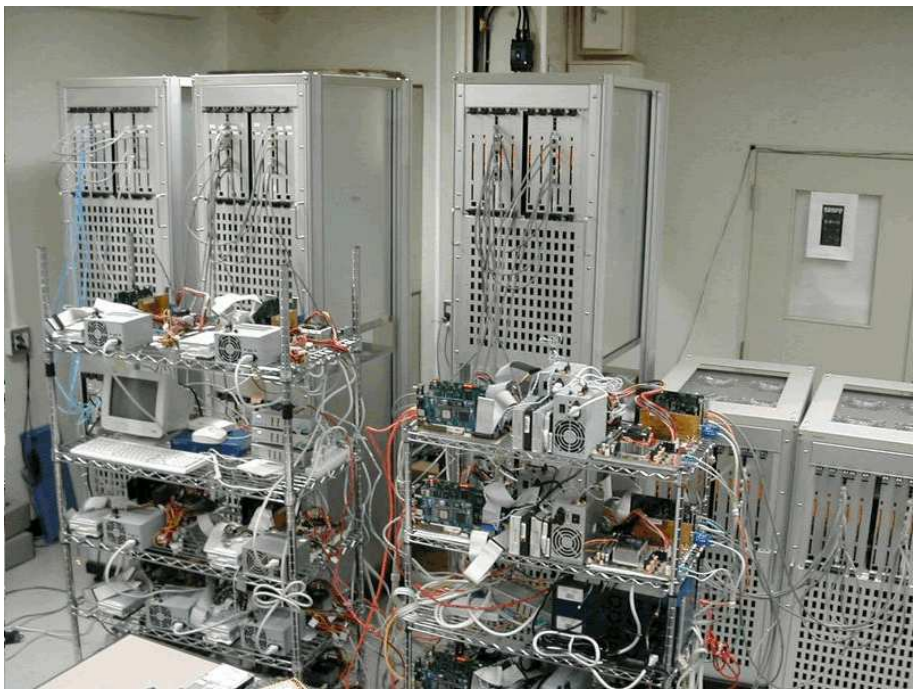

図 2: 64 Tflops 重力プロセッサの全体。

図 3: (株) 浜松メトリックスの製品版 GRAPE-6。

見えている)。

クラスタ間の通信はホスト計算機の持つ Gigabit Ethernet (GbE) ネットワークで行う。並列プログラムの開発自体は MPI (MPICH/pr over TCP/IP) で行ったが、MPI の通信関数では GbE カードの性能を引き出すことができなかったため、TCP/IP ソケットをアプリケーションプログラムが容易に利用できるようにするための関数群を定義、実装した。これにより 60MB/s 程度の実効転送速度が実現できた。

このシステムにより、太陽系のカイパーベルト領域の 180 万粒子を使ったシミュレーションで、29.5 Tflops と科学技術計算で報告された限りでは世界最高速を達成した。[1] この成果により 2002 年ゴードンベル賞のファイナリストに選ばれた。なお、ゴードンベル賞 (ピーク性能部門) は地球シミュレータが獲得した。これは、地球シミュレータの技術的達成を評価したものであるというのが審査委員会の見解である。

4.2 多用途プロセッサ

50 万ゲート規模の FPGA を実装した多用途プロセッサモジュールが完成し、SPH 法等の計算機アルゴリズムを実装した。

4.3 GRAPE-6 の普及

本プロジェクトで開発したプロセッサボード等の量産は、(株) 浜松メトリックスが行った。この経験を生かして浜松メトリックスは GRAPE-6 を製品化し、国内外の研究機関に販売している。販売台数は 30 を超えており、世界の天文学研究に大きな貢献をしている。

[1] 地球シミュレータが全球モデルで達成した 26.5 Tflops を上回っている。

4.4 GRAPE-6 の科学的成果

前節で述べたように GRAPE-6 は東大のみならず世界各国で利用され、天文学研究に大きな成果をあげている。ここでは、主に東大での成果について簡単に触れたい。

大きな成果の一つは、現実的な条件化での球状星団の進化の解明である。これは主に現在学振外国人特別研究員である Holger Baumgardt によってなされたものであるが、10 万粒子程度を使って銀河の潮汐力や恒星進化の影響などの現実的な効果をとりいれた星団進化の計算を系統的に行い、球状星団の誕生から蒸発までの進化、特に寿命の初期条件への依存性を初めて N 体計算により求めることができた。

この他、銀河内での衛星銀河の軌道進化について新しい知見を得る、あるいは惑星の周りのリング系について、楕円リングが発生する新しいメカニズムを発見するなど、多彩な成果をあげつつある。

5 まとめと今後の展望

本サブプロジェクトを振り返ってみると、 100Tflops クラスの専用計算機を開発するという計画当初の主目的を達成することができており、プロジェクトとしては成功であったといえるであろう。

また、本プロジェクトとほぼ同時期に始まった理研の MDM プロジェクトでも、名目ピーク性能 75 Tflops と本プロジェクトとほぼ同程度の性能をもつ分子動力学計算専用計算機システムを完成させた。これらと現時点での汎用並列計算機を比較すると、ピーク性能、実効性能、価格性能比のどれをとっても専用計算機の優位性は明らかであり、半導体技術の進歩に伴って専用計算機の優位性がより大きくなることも実証されたといえる。

今後の方向としては、優位性が実証され、科学的にも大きな成果をあげてきた重力多体問題専用機、分子動力学専用機の次世代機を開発することがまず重要なことである。いかに専用計算機が優れているとはいえ、半導体技術の急速な進歩が続く限り数年のうちに陳腐化することは避けられないからである。

さらに、応用領域を広げていくことも重要な課題である。これは、本プロジェクトで開発した多用途プロセッサに実際に様々なアプリケーションを実装し、有効性を実証していくと共に、重力プロセッサ、あるいはそれから性能を犠牲にしない範囲の変更で実現できるようなマシンでできる分野にも応用にも広げていく必要がある。これには境界要素法、プラズマシミュレーション、離散渦法による流体シミュレーション等がある。

6 学会発表・論文等

6.1 国際学会等における発表

[1] J. Makino, E. Kokobo, T. Fukushige and H. Daisaka, *A 29.5 Tflops simulation of planetesimals in Uranus-Neptune region on GRAPE-6*, SC2002, Baltimore, USA,

November 2002.

[2] J. Makino, *GRAPE Project–Future of High-performance Scientific Computing ?* Cool Chips V, Tokyo, Japan, April 18-20, 2002.

[3] J. Makino, *N-body similation with GRAPE*, IAU APRM, Tokyo, Japan, July 2002.

6.2 国内学会等における発表

[1] 牧野淳一郎、福重俊幸、泰地真弘人、自己重力多体系専用計算機 GRAPE-6 の開発状況、日本天文学会春期年会、茨城、2002 年 3 月 27-29 日。

[2] 台坂博、牧野淳一郎、衛星の影響を考慮した天王星楕円リングの N 体数値計算、日本天文学会春期年会、茨城、2002 年 3 月 27-29 日。

[3] 高橋広治、中心ブラックホールをもつ高密度恒星系の Fokker–Planck シミュレーション：方法、日本天文学会春期年会、茨城、2002 年 3 月 27-29 日。

[4] 福重俊幸、須藤靖、宇宙論的 N 体計算における平均特異速度場について、日本天文学会春期年会、茨城、2002 年 3 月 27-29 日。

6.3 学術雑誌論文等

[1] Hashimoto, Y., Funato, Y. and Makino, J., *To Circularize or Not To Circularize?-Orbital Evolution of Satellite Galaxies*, The Astrophysical Journal **582**, 196–201 (2003).

[2] Baumgardt, H., Hut, P., Makino, J., McMillan, S. and Portegies Zwart, S., *On the Central Structure of M15*, The Astrophysical Journal Letters **582**, L21–L24 (2003).

[3] Makino, J., *An efficient parallel algorithm for $O(N^2)$ direct summation method and its variations on distributed-memory parallel machines*, New Astronomy, **7**, 373–384 (2002).

[4] Takahashi, K., sensui, T., Funato, Y. and Makino, J., *Collisional Evolution of Galaxy Clusters and the Growth of Common Halos*", Publications of the Astronomical Society of Japan **54**, 5–20 (2002).

[5] Portegies Zwart, S. F., Makino, J., McMillan, S. L. W. and Hut, P., *The Lives and Deaths of Star Clusters near the Galactic Center*, The Astrophysical Journal **565** 265–279 (2002).

6.4　解説・著書等

[1] 牧野淳一郎、専用計算機の将来——GRAPE の挑戦、Computer Today **19** No. 5 (2002 年 9 月号)、4–10 (2002)。

[2] 牧野淳一郎、世界最高速の計算機を作る – 超高速科学技術計算への「手作り」アプローチ機の将来、学術月報 **55** No. 2 (2002 年 2 月号)、15–18 (2002)。

[3] 牧野淳一郎、 大質量ブラックホールの形成過程 — 恒星系の熱力学的進化の観点から、日本物理学会誌 **57** No. 5, 330–336 (2002)。