

CP-PACS の思い出

金谷和至

筑波大学物理学系／計算物理学研究センター(当時)

筑波大学数理物質科学研究科(現在)

CP-PACS プロジェクトには、その開発計画の最初の立ち上げから、物理の実計算で実効性能を出すためのプロセッサ・アーキテクチャの検討、マシンとしての完成、それを使っての格子 QCD の大規模シミュレーション、最後のシャットダウン、さらには科学博物館への寄贈や、現在計算科学研究センターのエントランスホールに設置されている展示モデルの製作に至るまで、思えば18年間も参加させていただきました。私にとってこの18年は、研究者としての業績の大部分を積み上げた重要な時期であり、CP-PACS はいつもその中心にありました。

私は、CP-PACS の先代の QCDPAX から、物理と計算機工学が交錯したこの奇妙な世界に住んでいます。元々は計算機そのものが特に好きというわけでもなく、まわりでPC98 や Windows を使っている人たちもいましたが、その場でしか使えない呪文だらけの世界には馴染めませんでした。研究のために、純粋にユーザとして Cyber 205 や CRAY X-MP を使って、格子ゲージ理論のシミュレーションをしていたのですが、なかなか職が見つからず、ポスドクとしてドイツやスイスを放浪していたところを岩崎先生に拾っていただき、1988 年の末に筑波に来ました。そこで、QCDPAX プロジェクトに途中から参加し、生まれて初めて、計算機も誤動作しうることを学びました。QCDPAX をプログラムどおりに動作する計算機にするために、四苦八苦しながらコンパイラのバグや確率的に出現するハードの誤作動と戦い、また、計算機のハードウェアの制限内でどうすればやりたい計算を最も高速に実行できるかのパズルに挑戦したり、毎日新しいことと格闘しました。そして、正しく動作するところまで持ってきた後に初めて、それまで押さえていた物理の計算を走らせて、誰も出来なかった規模でいろんなアイデアを試してみる。その結果を発表したときには、本当にゼロから研究したの

だという、単なるユーザとしてスパコンを使っていたときには感じられなかった強い充実感が得られたのを憶えています。

と、このように、住み慣れた物理の世界の外側で、命令に従わない電子回路や想定外のアセンブラをはき出すコンパイラと格闘することにも結構楽しんでいましたが、QCDPAXの次のプロジェクトとしてCP-PACSプロジェクトが開始したときには、こうした苦労はほとんど無くなるのだろうと思っていました。計算機としての規模と集積度が格段に大きくなり、QCDPAXにまだ残っていた手作りの要素が排除されて、大メーカーが完璧なものを持ってきてくれるだろう。だから、物理のプログラムで実性能が出るよう、ハードとソフトの基本設計の所さえ注意して押さえれば、あとは物理を考えるだけで良いだろう。

実際は、技術の限界に挑みながら最高性能を引き出そうとしているのだから、思いどおりに動くものがそのまま出来るはずもありませんでした。むしろ、規模と集積度が大きくなった分だけ、ハードやソフトがよりブラックボックス化し、誤動作の原因をさぐるのがもっと難しくなりました。幸い、日立の有能な技術者集団がいつも近くでインテンシブに取り組んでくれたので、いっしょに一つ一つ問題を解決してゆくことが出来ました。

関連するエピソードはいっぱいありますが、特に印象に残っている中では、こんな事がありました。開発の初期には、日立のハード・ソフトの専門家と、2週間に1回くらいのペースで、濃厚な技術的検討会議をもっていたのですが、あるとき、私がやった試験計算の報告の中で、通常の組み込み関数を使った結果と、疑似ベクトル化された高速なライブラリ関数を使った結果とで、有効桁数の最後の方がわずかにずれていたことに言及しました。私自身は、関数によって内部の計算の順番が違うだろうから、こんなこともあると思って、バグを指摘したつもりではなかったのですが、それを聞いていた日立の方がすぐに、全ての桁で同じ結果になるはずだと気付かれて（演算の順番が同じという意味か、内部の有効桁数に余裕を持たせてあるという意味か忘れましたが）、それから、疑似ベクトル関数ライブラリのバグがいくつか見つかりました。

こんな事もありました。開発の終わり頃だったと思いますが、コンパイラが

新しい版が変わったときに、私の QCD テストプログラムの結果がおかしくなってしまう。この頃には QCD プログラムの高速化もかなり進めていて、プログラムセットとして複雑なものになっていたのですが、シンプルな初期のプログラムでは、新しいコンパイラでも正しい答えを出すことがわかった。そこで、それまでのバグ取りの定石に従って、まずプログラムを段々と元に戻して、おかしくなるぎりぎりをみつけ、次にそのプログラムのどの計算が変なのかを特定するために、新旧両方のプログラムセットで、プログラムを削って段々とシンプルな物にしてゆく。そんな作業を1日中やって、かなり簡単な計算でも結果が違うところまで来た。簡単な計算で結果が変わる理由がわからなくて、ここから先はインスピレーションの世界と、いろんな試行錯誤の結果、明け方近くの朦朧としはじめた頃にやっと、プログラム本体ではなく、そのセットに付いている Makefile のコンパイルオプションの違いが原因になっていることを見つけました。高速化のために、ループの書き方とコンパイルオプションの組み合わせを、ある版から変えていましたが、定石に従ってプログラムを小さくしているときには、そこまで気が回らなかった。元々のプログラムでコンパイルオプションをどうすれば変になるかまで確認して、結果を宇川さんに報告して、後は力尽きて研究室のソファに倒れ込みました。この後で、バージョンアップで改良された部分に、コンパイラのバグがみつかりました。

結局、一杯苦勞もしましたが、周りにいろんな分野の優秀な人たちが揃っていて、お互い得意なところで密接に協力して、全体として創造性と生産性が極めて高い開発が進められたと思います。実際、その後に動き出した CP-PACS は、プロジェクトで開発された計算機としては格段に安定しており、世界と戦う上で強力な武器になりました。

物理としては、プロジェクトの最初の立ち上げ時の目標に従って、クエンチ近似(クォークの対生成・対消滅を無視する近似)におけるハドロン質量の計算をやりました。王道の真ん中を圧倒的な計算力で押し開きながら進むような研究で、物理の進め方として私自身も一杯勉強になりましたが、その成果も、CP-PACS の名前を不動のものにするに十分なものでした。クエンチ近似は、格子 QCD を現実の計算機で計算可能にするために、格子

研究の最初期から広く用いられてきた近似法で、現実とそれほどずれないだろうと思われてはいましたが、どこまで正しいかは不明でした。CP-PACSにより、クエンチ近似の有効性と限界が同時に実証され、クエンチ近似の時代にある意味幕を下ろす事が出来ました。

私にとってこのクエンチ近似の研究以上に誇りに思える研究は、それに引き続いて行ったフル QCD の研究です。CP-PACS プロジェクトを立ち上げた当初は、CP-PACS の計算能力ではまだまだ難しいだろうとの判断で、クォークの対生成・対消滅の効果を正確に取り入れた格子 QCD (フル QCD) の本格計算は、プロジェクトの目的には含まれていませんでした。しかし、クエンチ QCD の研究と同時に進めた有限温度 QCD の研究などから、改良格子作用と新しいシミュレーションアルゴリズムを組み合わせれば、CP-PACS の計算能力でも、フル QCD で最初の系統的研究を実現できるかもしれないと考えるようになりました。そこで、クエンチ計算を完了させるとすぐに、フル QCD 計算に取りかかりました。そして、フル QCD でも、王道とは何かを示すような、最初の系統的大規模シミュレーションが行われました。つまり、1台の計算機により、その分野のマイルストーンとも言える業績を2つ続けて出すことができた。

これは、いくつか時代の幸運もプラスしていますが、岩崎先生と宇川先生がまとめた物理チームの創造性が極めて高かったことと、物理・計算機工学・メーカーの合同チームが開発した CP-PACS が高い性能を最初から安定して出し続けていたことの両方が、最良の形で組み合わせさせた結果と思います。このようにアクティブなチームに最初期から参加し、私にもいくらかは貢献することができたのは、幸福な経験でした。次の世代に、その経験のいくつかでも伝えられればと思っています。