

我が国におけるスーパーコンピュータの 開発の必要性について

平成 16 年 1 月 5 日

筑波大学物理学系

岩崎洋一

目次

1. スーパーコンピュータの位置付け	3
2. スーパーコンピュータ開発における国の役割	3
3. 今後取るべき戦略	4
3-1. 中長期的戦略（5～10年）	4
3-2. 短期的戦略（3～5年）	5
3-3. 重点分野と配備の方針について	5
付録 中長期的戦略の概要	6
A.1 我が国独自のマイクロプロセッサ開発の必要性	6
A.2 開発体制	7
A.3 開発ロードマップ	7
A.3.1 プロセッサ	7
A.3.2 ネットワーク	8
A.3.3 ロードマップ試案	8
A.3.4 システムイメージと配備	8
A.4 波及効果	9

1. スーパーコンピュータの位置付け

スーパーコンピュータは、科学技術のあらゆる分野において、最先端の研究と開発を切り開くために必須の装置である。その適用分野は、物理・化学等の基礎科学は言うに及ばず、物質・材料科学、生命科学、地球環境科学等、枚挙に暇が無いほど科学と技術のあらゆる分野に広がっている。そしてこれら多くの分野において、重要課題を解決するために、地球シミュレータを越える計算能力が必要とされている。表1に例を示す。

表 1: 大規模計算を必要とする課題例

項番	テーマ	分野	仮定実効性能 TFLOPS	問題サイズ	計算時間	主記憶容量
1	格子量子色力学	基礎科学 (素粒子物理)	131	48 ³ x96	409 日	176GB
2	宇宙史のシミュレーション	基礎科学 (宇宙物理)	131	256 ⁵ x12	24 日	3.6TB
3	半導体の構造決定	物質・材料科学	100	2000 原子	127 日	115GB
4	蛋白質折り畳み機構	生命科学	500	アミノ酸 200 自由度 50000	260 日	50GB
5	生体化学反応の第一原理計算	生命科学	160	5000 原子	50 日	718GB

さらに、コンピューター一般は、情報化社会のあらゆる面で必要とされ、様々な形態・機能・性能を持って社会の隅々にまで浸透している。スーパーコンピュータは、コンピューター技術の頂点に立ち、コンピューター技術及びコンピューター産業・関連産業全体の牽引車としても、必須の重要性を持っている。

従って、地球シミュレータを越えるスーパーコンピュータの開発は是非とも行う必要がある。

2. スーパーコンピュータ開発における国の役割

1980年始めにベクトル型スーパーコンピュータCRAYが初めて開発されて以来、我が国においては、富士通・日立・NECのメーカ三社により、20年近くにわたってスーパーコンピュータの開発と製作が行われてきた。

1990年代前半までは、汎用大型計算機に大きな需要があり、メーカ各社は、汎用大型計算機

の開発・製作を行う中で培われたハードウェア・ソフトウェア技術に基づいて、スーパーコンピュータを開発することが可能であった。また、スーパーコンピュータ市場は汎用大型計算機市場に比べて著しく小さく(約 50 分の1程度)、スーパーコンピュータの売り上げで、スーパーコンピュータの開発費を賄うことは困難であったが、汎用大型計算機の販売による利益を投入することにより、スーパーコンピュータ開発を行うことができた。

しかし、最近10年で汎用大型計算機の需要は高性能 UNIX サーバに取って代わられて激減し、開発・製造費用の面から、最早メーカ独自でスーパーコンピュータ開発を支えられる状況は消滅している。スーパーコンピュータの開発製作には、100 人規模の研究開発陣と、1000億規模の設備投資を必要とする製造ラインが必要であり、これを支えるには年間100億円規模の予算投入が必要である。一方、スーパーコンピュータのマーケットは、我が国においては大学・国立研究機関を中心として、年間約 200億円規模、全世界でも年間約1000億円規模である。

この傾向はすでに1980年代後半から顕著になり始め、国費によるプロジェクトとそこで培われた技術に基づく商用スーパーコンピュータの製作というシナリオが取られてきた。航空技術研究所に置ける数値風洞の開発と富士通による VPP シリーズの製作・販売、筑波大学における CP-PACS の開発と日立による SR シリーズの製作・販売、海洋科学技術センター他の3研究所による地球シミュレータの開発と NEC による SX シリーズ(SX-6 及び SX-7)の製作・販売がその例である。これらのプロジェクトが仮になければ、日本におけるスーパーコンピュータの開発・製作はもっと早い時期から困難な状況に陥っていたであろう。

ただし、それぞれのプロジェクトが単発のプロジェクトであり、国としての科学技術におけるスーパーコンピュータ整備の長期的な戦略があらかじめ想定されていて、それに則した形で遂行されたわけではない点が、これらの過去の開発の問題点である。

今後は、国としての長期的戦略を描き、それに則した形で一定額の国費を継続的に投入してスーパーコンピュータの開発と整備を継続することが是非とも必要である。また、その投資が我が国コンピュータ産業全般の抜本的強化に繋がる方向で当該開発を進めるべきである。

3. 今後取るべき戦略

3-1. 中長期的戦略 (5~10 年)

スーパーコンピュータ整備の戦略には、スーパーコンピュータ開発と、科学技術応用分野での実際の計算を進めるための計算リソースの整備計画の二つの面があり、これらを総合的に考える必要がある。

スーパーコンピュータ開発については、マイクロプロセッサをベースとしたシステムが今後取るべき方向である。特に、大規模計算に対して高い実効性能を持つ、我が国独自のマイクロプロセッサ系列の継続的開発を軸として、スーパーコンピュータ開発計画を組み立てる必要があると考える。我が国独自のマイクロプロセッサ開発の必要性、開発体制、開発ロードマップ、波及効果などに関して付録で詳細に記述する。

この計画によるスーパーコンピュータの実現には比較的長期(4~6 年)を要すると考えられるが、

4年後には第一世代のプロセッサを用いてピーク性能200Tflops、実効性能70Tflopsのスーパーコンピュータを開発可能とし、さらにその2年後には第二世代プロセッサによって、ピーク性能300Tflops以上、実効性能100Tflops以上の実現を目標とする。さらにその後は、約2年のサイクルでマイクロプロセッサの性能アップを図り、継続的にスーパーコンピュータの性能を上昇させて行くことにより、2010年台の早い時期にPflopsの壁を破ることも可能と考えられる。

3-2. 短期的戦略（3～5年）

マイクロプロセッサ開発を軸に4～6年後に200～300Tflopsクラスのシステムを目指すとするれば、その間の科学技術計算のためのスーパーコンピュータリソースの整備は別途行う必要がある。この目的には、性能価格比に優れた、コモディティのプロセッサとネットワークを用いたクラスタシステムが適当である。

現在、我が国のスーパーコンピュータ設備は、ピーク性能40Tflopsの地球シミュレータを先頭に、主要研究機関・大学には数Tflopsクラスのスーパーコンピュータが設備されている。今年度になってからは、5～10Tflopsクラスのクラスタシステムの整備の進展が著しい。今後3～5年の期間を考えるならば、コモディティプロセッサの性能向上は、ほぼムーアの法則に従うと予想される。従って、例えば3年後には、ピーク性能が20～40Tflopsのクラスタシステムは十分に考えられる。

現在のクラスタシステムは、ネットワーク性能が必ずしも十分でない。また、長期にわたる安定稼働、障害発生時の対策など、大規模科学技術計算用システムに必須の運用面での技術が未成熟である。これらの点に重点を置いて性能価格比に優れたクラスタシステム開発を行うことにより、短期的に必要とされる計算リソースを供給すると共に、将来的にはミッドレンジからローエンドの科学技術用計算システム技術の確立に資することができる。

3-3. 重点分野と配備の方針について

既に述べたように、科学技術の様々な分野で、地球シミュレータを越える能力のスーパーコンピュータが必要とされている。問題の規模と困難の度合いは様々であり、また分野の進展の度合いによりスーパーコンピュータによる研究から期待される成果の量と質も一様ではない。さらに、これらの要素は研究の進展と共にダイナミックに変化していく要素を持っている。

従って、単一分野に特化して単一の超高速スーパーコンピュータを配備する方針は、科学技術全体のバランスの取れた進歩をもたらすためには、必ずしも最適な方法ではない。主として重点分野に集中的に利用させる最高性能のシステムに加えて、異なる諸分野に対して、例えば1/4～1/5規模のシステムを複数配備して、それぞれの研究の推進を図り、その中から、次世代の最高性能システムの重点テーマとなる分野が成長してくる、といったシステムが遥かに効果的と考えられる。

付録 中長期的戦略の概要

A.1 我が国独自のマイクロプロセッサ開発の必要性

コンピュータの基本はプロセッサとメモリ、及びネットワークであり、スーパーコンピュータは、これらの性能が最先端にある機種である。特に、メモリからプロセッサへデータを供給する能力がコンピュータの性能の基本を決める。

現在、プロセッサ開発は完全に二極分化している。その一極はデータ供給能力をキャッシュに頼るマイクロプロセッサであり、対極は多数バンクのメモリを擁するベクトルプロセッサである。

マイクロプロセッサは科学技術用ハイエンド品から各種サーバ及びPCに至る民生需要品まで米国のIntelとIBMの独占状態になっている。米国は一方で国費を投入して、CRAY社にベクトルプロセッサの開発を継続させている。

振り返って、我が国は、独自マイクロプロセッサの系列を持たず、ベクトルプロセッサ開発はNECのみとなっている。富士通・日立の両者もベクトルプロセッサによるスーパーコンピュータ開発を行っていたが、1990年代後半からマイクロプロセッサベースのアーキテクチャに転換した。地球シミュレータが無ければ、NECのベクトルプロセッサ開発も継続することは不可能であったと思われる。

ベクトルプロセッサの最大の問題は、開発技術がスーパーコンピュータにしか使えないために、スーパーコンピュータ以外のコンピュータの高性能化にも技術の向上にも繋がらないことにある。スーパーコンピュータのマーケットだけでは開発コストを吸収できない以上、ベクトルプロセッサによるスーパーコンピュータの開発は、毎回国費に頼らざるを得ず、そのコストは地球シミュレータの開発コストを下回ることはない。このような路線でのスーパーコンピュータ開発は、メーカーに取っても国に取っても限界に来ていると思われる。

一方、マイクロプロセッサベースのスーパーコンピュータの場合、同じマイクロプロセッサを用いてクラスタやサーバ等のローエンドシステムへの技術の下方展開を行うことができ、コンピュータ技術全般への波及効果がある。しかしながら最大の問題は、我が国独自のマイクロプロセッサの系列がないことである。この問題はスーパーコンピュータに限られた問題ではない。我が国の今後の情報関連産業全般にとり、コンピュータ全般に繋がる独自のマイクロプロセッサの系列を持たないことは致命的である。

従って、我が国のスーパーコンピュータ開発が目指すべきは、持続的に発展可能な我が国独自のマイクロプロセッサ開発のロードマップを立てて、それと結合した高性能スーパーコンピュータシステムの開発製作プロジェクトを計画し、さらにそれを国内にどのように配置するかまでを考えた、長期的総合的戦略である。

現在のキャッシュに頼るマイクロプロセッサは、データサイズがキャッシュサイズを越えると全く性能が出ない。また複雑なキャッシュ制御回路を実装する必要からダイサイズが大きくなり消費電力も増大の一方である。今後目指すべきは、スカラープロセッサとベクトルプロセッサの中間にあって、高度のデータ供給性能を持つマイクロプロセッサである。これにより、スーパーコンピュータからサーバまでを対象とした長期的展望を描くことができる。

A.2 開発体制

マイクロプロセッサの開発は長期にわたり大きな投資が必要となるため一社のみでの開発では困難である。さらに、これまでスーパーコンピュータを開発してきた国内のメーカーの技術力を統合する手段が必要である。従って、これまでの国内スーパーコンピュータベンダー(富士通、日立、NEC)を中心に、大学・国研も参加して、科学技術計算応用に用いることができるマイクロプロセッサの開発とネットワークの開発を推し進める組織を作ることが望ましい。

また、必要であればマイクロプロセッサ開発メーカー(ルネサス・テクノロジーズ社など)に協力を仰ぐことを検討すべきである。マイクロプロセッサの開発は組み込み機器市場での応用においては活発に行われており、我が国が強い分野でもあるので、これらのプロセッサをベースに開発することも考えられる。

大学・国研側からは基本的なアーキテクチャ、ソフトウェアについて基本的なアイデアでの研究協力を行うとともに、アプリケーションユーザからのアーキテクチャへの要請を取りまとめ開発に反映することが必要である。

A.3 開発ロードマップ

A.3.1 プロセッサ

我が国独自のマイクロプロセッサを開発するに当たり、最も重要な点は現在ほぼ独占状態にある米国製マイクロプロセッサとの差別化である。プロセッサの周波数及びピーク性能(カタログスペック)を追い求めるには、現状の格差はあまりに大きい。「実質的に従来のスーパーコンピュータの置き換えを図る」ことを目的とした、名目数値ではない本当の意味のハイパフォーマンスコンピューティング向けマイクロプロセッサを開発することを目指すべきである。

設計上のキーポイントは、(1)プロセッサ内パイプライン数の増強、(2)それを支えるオンチップメモリ容量の増強、(3)オフチップメモリのバンド幅増強のためのメモリシステム設計である。

(1)はプロセッサの基本性能を上げるために必要不可欠な要素である。米国型マイクロプロセッサはデータ供給バンド幅の制約からこの部分がある程度に抑えているが、本プロセッサではこの点を拡大し、縮小されたベクトル機能を持たせる。

(2)はオンチップメモリの絶対容量を極力拡大する以外にも、これを単純にキャッシュのみに使うという方針の他に、その一部をソフトウェア制御可能として科学技術計算特有のデータパターンを効率的に利用するというアーキテクチャ的な工夫を検討する。

(3)はメモリバンド幅を従来以上に飛躍的に増強させるため、ベクトル型計算機のような連続データアクセスを支援するためのマルチバンクメモリを想定したメモリシステムを開発する。ここで重要なのは「キャッシュ依存型マイクロプロセッサとベクトル型計算機の両者の要求するメモリバンク数の中間的なバンク数(10程度)を提供できるメモリチップとその周辺回路」を提供することである。

A.3.2 ネットワーク

プロセッサ間結合ネットワークも当然ながら重要な開発課題である。従来のマイクロプロセッサによるクラスタや、地球シミュレータでは、方法論に差はあるものの、共に「大域的に高いバンド幅を維持」することが求められてきた。しかし、これを PFLOPS クラスのマシンに押し広げるのはおそらく不可能である。現在の高性能ネットワークのスイッチに占める価格を考えると、中規模のスイッチの組み合わせによる、ある程度の局所性をもったネットワークが不可欠となる。このため、数十ポートを持つスイッチを基本単位とし、これを単純な階層構造ではなく多次元的に用いるネットワークポロジが有効となる。例えば、32ポートのスイッチを用い、3次元構造の多次元クロスバを構成すれば、理論上 32000 プロセッサ程度までの接続が比較的高い実効バンド幅の下に接続可能である。遠距離プロセッサ間の通信遅延は多少増えるが、システムコストを抑え、また科学技術計算に多用される近距離通信についてはフルクロスバと同等の性能が発揮できる。このようなポロジの上に、InfiniBand のような高速ネットワーク媒体、あるいは 10Gb イーサネットのトランクといった技術を組み合わせることで、スケラビリティのある大規模並列システムを実現する。

A.3.3 ロードマップ試案

マイクロプロセッサの開発はベクトル機よりも短いタイムスパンで考える必要がある。すなわち、1つの世代のプロセッサの開発を終えたらプロジェクトが終わるのではなく、継続するプロセッサシリーズがさらに上の性能・規模を実現するというシナリオが必要である。例えば、本プロジェクトの立ち上げとしての第一ステージには 4 年程度の時間が必要で、そのステージの最終年度には次期プロセッサの基本設計を開始し、第一ステージ終了後 2 年後に第二ステージ終了、以後このペースで 2~3 年単位でプロセッサの性能を上げていく。

このような基本思想の上で、第一ステージ(4 年間程度)で絶対性能よりもむしろ基本設計の確立を目指したプロセッサ及び周辺システムを実現する。この段階ではプロセッサ当たりのピーク性能 10GFLOPS、実効性能 3GFLOPS 程度の性能を目指す。ピーク性能としては、同じ頃に出る Intel 系プロセッサのそれを若干下回る可能性があるが、メモリバンド幅増強により実効性能はそれを大きく上回るものと期待する。このプロセッサ及びメモリシステムの開発により、基本路線を確立し、性能をより向上させ第二ステージにつなげる。第二ステージの開発は第一ステージの終盤に開始し、第一ステージ終了からさらに 2 年後の実現を目指す。想定される性能は、ピーク性能 15GFLOPS、実効性能 5GFLOPS 程度である。以後、この路線を性能的に拡張していき、2~3 年に1つの割合でプロセッサをシリーズ的に生産していく。

A.3.4 システムイメージと配備

第二ステージ(6 年後)のプロセッサを想定したシステム構成として、例えば高密度実装により 1U 当たり 16 プロセッサの実装を実現し、ラックマウント実装すれば、1 キャビネット当たり 512 プロセッサとなる。これを 40 キャビネット実装すれば、ピーク性能約 300TFLOPS、実効性能約 100TFLOPS のシステムが実現できる。これをフルシステムとして、例えばその 1/4 サイズのシステム(ピーク性

能 75TFLOPS、実効性能 25TFLOPS 程度)も併せて実現すれば、国内にフルシステム×1+1/4システム×4程度の「中央システム+サテライトシステム」のような形での配備が可能となる。

本システムはプロセッサ性能に見合うメモリシステムの開発が鍵となるため、いわゆるムーアの法則通りの実効性能をキープすることは容易ではない。しかし、この戦略でプロセッサシリーズを確実に育てていけば、最終的に10年後にピーク性能 1PFLOPS、実効性能 300TFLOPS 程度のシステムを実現することは夢ではない。

A.4 波及効果

マイクロプロセッサの開発は、本提案の科学技術応用のスパコンに限定されたものにするべきではなく、コモデティとして利用できるように開発するべきである。これにより、単体で用いて高性能なワークステーションを開発したり、ネットワークを安価なものにすることにより、いわゆるクラスタのノードのプロセッサとして用いることが考えられる。ハイエンドだけでなく、ローエンドをカバーすることはハイエンドのシステムへスムーズに移行することを可能にし、利用技術、ソフトウェアの蓄積を促進し、結果としてハイエンドのシステムを有効に利用することにフィードバックされる。従来のスパコンでは、ローエンドのシステムはなく、その利用はかぎられたものになりがちであった。技術を下方展開できるようにすることによって、大きな波及効果が得られると考える。