

技術解説

スーパーコンピュータ 理解のための 基礎知識

2010年9月に、次世代スーパーコンピュータ「京」の出荷が始まった。また、同年11月には、中国のスーパーコンピュータが世界スパコンランキングTOP500の1位に躍り出るなど、現在、スーパーコンピュータの世界はダイナミックに変化しようとしている。今回は「スーパーコンピュータ」とは何か、どのような技術が利用されているのか、そして、どのような分野に利用されているのかを紹介する。

● スーパーコンピュータとは何か

スーパーコンピュータの定義

通常、その時代の一般的なコンピュータでは解くことが困難な大規模で高度な計算を高速に処理できるコンピュータのことをスーパーコンピュータと呼んでいる。

スーパーコンピュータの性能は浮動小数点演算を1秒間に何回実行できるかを示す FLOPS (FLoating OPERations per Second、フロップス) という単位で表されることが多い。

浮動小数点演算とは、コンピュータ内部での数値表現の1つである浮動小数点数を用いて加減乗除などの演算を行うことであり、科学技術計算に多用される。

一般のコンピュータとの違い

スーパーコンピュータは、一体どのようにして高い処理能力を実現しているのだろうか。そして私たちが普段利用しているコンピュータとは、どこが違うのだろうか。

最も大きな違いは、スーパーコンピュータが高度な並列処理を行えるように、さまざまな工夫がなされているという点だ。

私たちが普段利用している PC でも、最近では1つの CPU に複数のコアを内蔵するマルチコア CPU が搭載されている。また、サーバ用途のコンピュータでは1つのサーバ内に複数のマルチコア CPU が搭載されているものもあり、既に並列処理は実現されている。

しかし、スーパーコンピュータの並列処理はスケールが異なる。数十から多いものでは数万台ものコンピュータを1台のコンピュータとして協調動作させることで高い処理能力を実現しているのである (図1)。

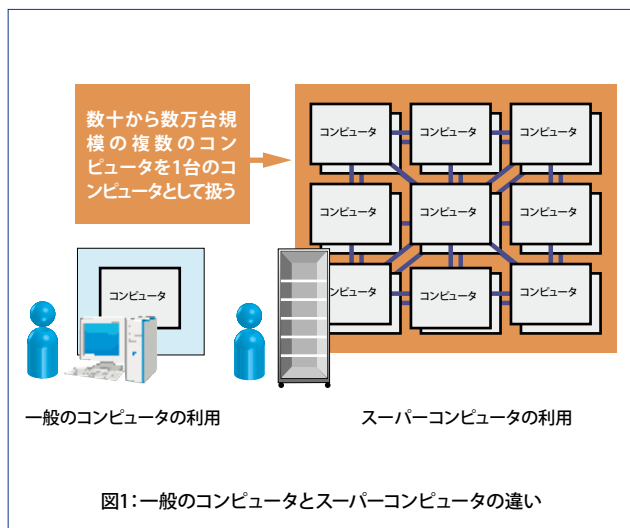
このように、スーパーコンピュータでは桁違いに規模の大きい並列処理を行うために、ハードウェア、OS、ミドルウェア、アプリケーションに至るまでチューニングされていることも多い。

スーパーコンピュータの個別の技術要素については後述する。

ベクトル型計算機とスカラー型計算機

かつて、スーパーコンピュータはベクトル型計算機とスカラー型計算機に大別された。ベクトル型計算機は、ベクトル演算すなわち一次元配列の演算を効率よく行うことを目的に設計されたベクトルプロセッサを搭載していた。これに対してスカラー型計算機は、PC やサーバ機に使用されるような汎用型のプロセッサを搭載している。

1990年代に入ると、これらベクトル型やスカラー型のプロセッサを並列動作させるベクトル並列型コンピュータ、スカラー並列型コンピュータが登場するが、1990年代後半から、スーパーコンピュータの主流はスカラー型に移っている。その理由として、スカラー型並列計算機で利用されている汎用 CPU の性能向上と価格の下落により、比較的低コストなシステムでも高い処理能力を発揮しやすくなったことが挙げられる。



● スーパーコンピュータは何をするのか

スーパーコンピュータの役割

スーパーコンピュータの役割は人間が見えないものを可視化することにある。たとえばエンジンの内部での燃料の気化や燃焼が起きる様子などは一瞬のできごとであり、人間の目で捉えることはできない。また、数百年から数億年かかるような、たとえば気候の温暖化や惑星誕生の様子についても同様である。これらの様子をシミュレーションすることで、人間の目で確認できる時間で再生することができ、新しい技術が生み出されていくのである。

ここでは、スーパーコンピュータが具体的にどのように利用されているのか、そして今後どのような利用が期待されているのかを例を挙げて紹介する(図2)。

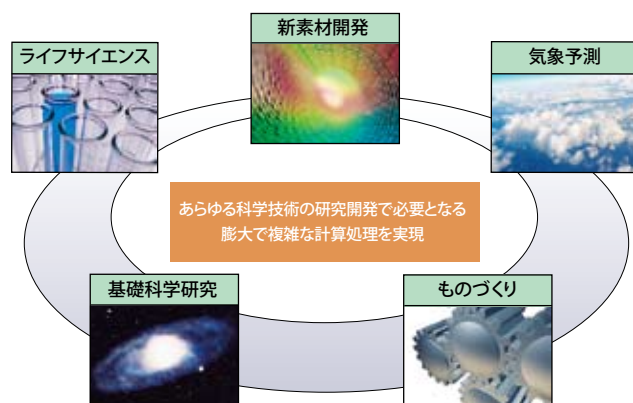


図2: 科学技術から産業までを支えるスーパーコンピュータ

① ライフサイエンス

新薬の開発など。分子の動きをシミュレーションし、病理の振る舞いや薬の効果を解析することで、新薬開発にかかる時間を大幅に短縮し、コスト削減を行う。現在は、スーパーコンピュータの処理能力向上により、たんぱく質のような高分子のシミュレーションも短時間で行うことができるようになり、ヒトゲノムの解析結果を利用した、まったく新しい薬の研究開発も進んでいる。また、診断や手術計画の立案に役立つ、全身スケールでの循環器などの血流解析なども期待されている。

② 新素材開発

私たちの身の回りの製品や特殊な用途向けの製品に利用される新素材の開発など。カーボンナノチューブに代表される、ナノテク分野の新素材の基礎研究・開発などが代表的。分子レベルのシミュレーションにより、鉄よりも10倍丈夫な素材や、現在より2倍の効率を持つ太陽電池の開発など、幅広い分野での効果が期待されている。

③ 気象予測

天気予報や地球温暖化の影響の予測など。地球表面全体を、さいの目状に分割し、それぞれの要素について計算を行い地球規模での気候の変動をシミュレーションし解析を行うことで気候変動や気象予測を行う。今後スーパーコンピュータの処理能力が向上すれば、この分割サイズをより細かくすることができるため、精度の高いシミュレーションが可能になり、局地的な気象予測や予測精度の向上が期待されている。

④ ものづくり

家電、住宅、自動車、列車、航空機、船舶、ロケットの設計など。現在、ものづくりの多くの分野でスーパーコンピュータが利用されている。たとえば自動車開発における衝突実験や風洞実験は、その大部分がスーパーコンピュータのシミュレーションに置き換えられている。また、自動車、列車、航空機、船舶、ロケットのエンジンの燃焼解析、車体や機体、プロペラやスクリューなどの流体解析が進むことで、低燃費、高出力、低騒音なエンジンや機体の開発が期待されている。

⑤ 基礎科学研究

宇宙初期の素粒子の振る舞い、惑星の成り立ち、銀河の形成など、物質の起源から宇宙の構造にいたる全体像の理解の鍵となる重要な物理過程のいくつかは、未解決の謎として残されている。スーパーコンピュータによる大規模な数値解析により、素粒子から宇宙全体までを統一的に解明するなど、さまざまな基礎科学研究の進展が期待されている。

● スーパーコンピュータの技術要素

CPU

コンピュータの心臓部であるCPU (Central Processing Unit) には、前述のベクトル型計算機の場合、メーカーが独自に開発した専用のプロセッサを使用していた。一方のスカラ型計算機では、Xeon や Opteron などの x86 系、POWER、SPARC などの汎用的なアーキテクチャのCPUが使用されている。また、最近ではCPUではなく画像処理用のGPU (Graphics Processing Unit) を計算処理に利用するスーパーコンピュータも登場している。

ノード

現在のスーパーコンピュータはほぼすべて、コンピュータを多数接続して1つのシステムを構成している。一般にその1台1台のコンピュータのことをノードという。汎用のPCサーバをノードとして用い、これを多数接続してスーパーコンピュータを構成することも多い。

インターコネク

一般に、スーパーコンピュータ内部でノード間を接続する専用ネットワークのこと。計算中のデータのやりとりや結果の集約、各ノード間の同期などを行う。そのため、高い処理能力を実現するためには、広帯域かつ低遅延なインターコネクが必要になる。

インターコネクは、スーパーコンピュータの高度な並列処理を実現するために、InfiniBand などの一般的な高速通信技術が利用されるほか、各社スーパーコンピュータ専用に独自技術で開発された高性能インターコネクが利用される場合もある。

接続の形態(トポロジという)はいくつかあり、クロスバー、メッシュ、トーラス、ファットツリーなどが代表的である(図3)。クロスバーやファットツリーは、間接網であり、スイッチを介してどのノードとも直接通信できるが、多数のスイッチが必要になりコスト高につながる。メッシュやトーラスは直接網であり、隣接するノードとしか直接の通信は行えないが、非常に多くのノードを接続できる。

OS、ミドルウェア

OSにはUNIXやLinuxが利用されているケースが多い。ただし、最近ではマイクロソフト社のWindows HPC Serverを採用しているものもある。いずれの場合でも、スーパーコンピュータを効率よく運用・利用するための、スケジューラなどのミドルウェアがインストールされる。

アプリケーションは通常、バッチ処理により実行される。したがって、システム全体の効率を向上させるために、スケジューラもチューニングし、ジョブを巧みに配置している。

開発環境

アプリケーションの開発には、FORTRANが古くから多用されてきたが、C、C++などが用いられることも多くなっている。スーパーコンピュータのハードウェア性能を最大限に引き出すため、並列処理を最適化するコンパイラや各種ライブラリなどが揃って

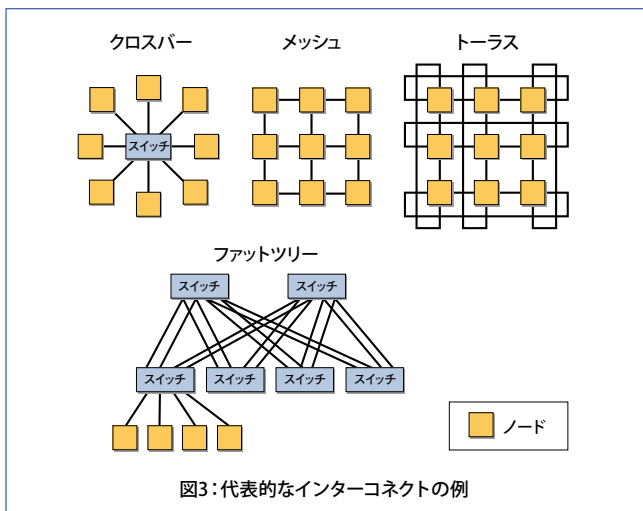


図3: 代表的なインターコネクの例

いるかどうか、デバッグやチューニングツールなどが整っているかどうかなど、開発環境が運用を大きく左右する。

スーパーコンピュータランキングの動向

スーパーコンピュータの国別ランキングはどのようになっているだろうか。スーパーコンピュータの性能ランキングサイト「TOP500」^{※1}の2000年～2010年までのデータの中から、国別に上位10位以内の最高順位を抽出し、グラフ化したものを図4に示す。

米国は constants に1位ないし2位の座をキープし続けているだけでなく、上位10位以内に占める同国の割合も高く、層の厚さをよく表している。

EU諸国は、ドイツ、フランスなどを中心に、constants に10位以内にランキングされているものの、最上位は2009年の3位にとどまる。

注目すべきは中国だ。これまで10位以内にランキングされることがほとんどなかったが、2010年6月に2位、同年11月には1位へと上り詰めている。さまざまな分野で著しい伸びを見せる中国だが、今後はスーパーコンピュータの分野でも、主要なプレイヤーとして台頭してくるものと考えられる。

日本は2002年～2004年にかけて世界ランキング1位の座を奪うことに成功したものの、その後は次第に順位を下げ、2007年以降は上位に食い込めない時期が続く。ようやく2010年の11月に4位へと返り咲いた。次世代スーパーコンピュータ「京」が本格稼働する2012年に向けて、日本の躍進が大いに期待されている。

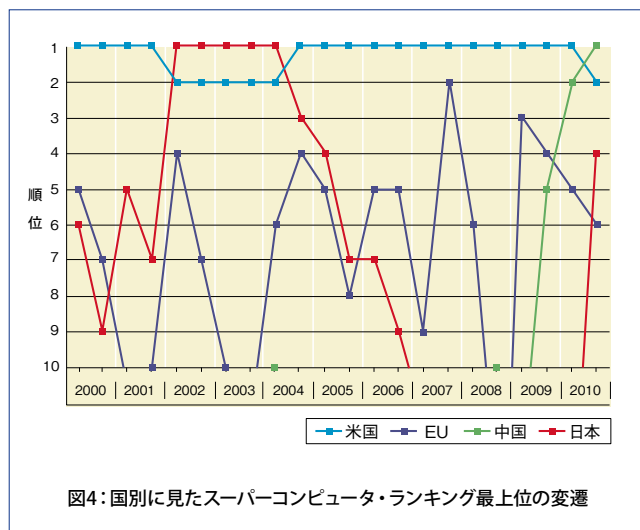


図4: 国別に見たスーパーコンピュータ・ランキング最上位の変遷

スーパーコンピュータの課題

スーパーコンピュータが抱える課題はいくつかある。そのうちの代表的なものを紹介する。

※1 [TOP500 SUPERCOMPUTER SITE] (<http://www.top500.org/>)

費用対効果

スーパーコンピュータのなかでも、特に世界ランキングでトップになるような大規模なスーパーコンピュータの開発・設置には多大な費用がかかり、それに見合う成果を出して行くことが必要である。他方、成果を出すためには、優れた研究者あるいは研究テーマに利用されなければならない。そのためにも「世界一」の性能を目指し、実際に世界一の称号を獲得することは、大きな価値を持つ。

消費電力

CPUの動作クロックの向上やノード数の増大により、消費電力量の増大が課題となっている。コンピュータそのものに必要な電力に加え、システムの冷却に必要な電力も増大する。電気料金などの運用コスト削減だけでなく、温室効果ガス削減という社会的な要請もあり、低発熱・低消費電力のプロセッサの採用や、高効率な冷却システムの採用などが求められている。それらがスーパーコンピュータの備えるべき能力として重視されるようになってきている。

信頼性

複数のノードを束ねて1システムとして運用するため、システムの規模が大きくなるに従い、部品点数が増え、故障する確率が大きくなる。単純計算でも1万ノードで構成されるスーパーコンピュータの故障の確率は1万倍になる。並列計算では、使用するすべてのノードがエラーを出さずに計算を完了しないと結果が得られないから、1ノードの故障が全体の計算結果に影響する。個々のノードの信頼性を高めて故障を減らす、故障を確実に検出して保守を可能にする、一部の故障がシステム全体の運用に影響しないようにするなどの課題がある。

● 次世代スーパーコンピュータとは

次世代スーパーコンピュータとは、文部科学省が推進する「革新的ハイパフォーマンス・コンピューティング・インフラ (HPCI) の構築」計画に基づいて開発が進められているスーパーコンピュータである。性能目標10PFLOPS (ペタフロップス、1秒間に10の16乗回 (1京回) の浮動小数点演算) の達成と2012年の完成をめざして、理化学研究所と富士通が共同で開発を進めている (写真1)。

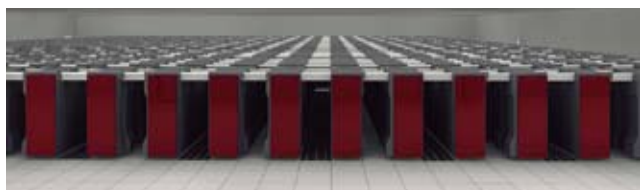


写真1: 次世代スーパーコンピュータ「京」(イメージ図)

※2 SIMD: Single Instruction Multiple Data、1回の命令で複数のデータを処理する演算方式

「京」で採用されているCPU SPARC64 VIIIfxは、クロック2GHz、8つのコアを内蔵する (写真2)。また、1コアで2個のSIMD^{※2}命令を並列実行できる。

1プロセッサ当たり128GFLOPSの処理能力を持つと同時に、1ワット当たり2.2GFLOPSという高い消費電力あたりの性能も実現している。

「京」では、同CPUを8万個以上搭載し、各CPUは、富士通が独自に開発した革新的なインターコネク (6次元メッシュ/トラストポロジ) で相互接続される (写真3/ユーザービューは3次元トラス)。

6次元メッシュ/トラスは、ノード間接続を多次元化することで、従来の3次元トラスに比べ、より柔軟性の高いルーティングを可能としている。そのため、稼働中に一部のノードが故障しても、迅速に故障箇所を回避してシステム処理を継続できるなど、超大規模システムに必要な高いスケラビリティを備え、高い運用効率と可用性を確保している。

また、発熱源となるプロセッサなどの主要部品を冷却する技術として水冷方式が採用され、高密度実装の実現に加え、消費電力を低減し、さらに部品寿命を向上させている。その結果、膨大な数の部品で構成されるシステムにとって不可欠な低故障率を実現するなど、運用における可用性を見据えた設計となっている。

* * * *

スーパーコンピュータの演算性能は、およそ11年間で1000倍向上すると言われており、TOP500の世界一の座も毎年のように変わる。

性能が高くなれば、今までできなかったことが可能になり、利用用途がさらに拡大する。しかし、それにつれて、演算性能だけでなく、使いやすさ、環境への対応、小型化、運用・保守性など求められる性能も多様化する。将来登場してくるスーパーコンピュータが、こうした要求にどう対応していくのか目が離せない。

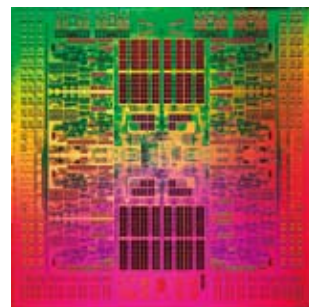


写真2: 「京」で採用されたプロセッサ SPARC64 VIIIfx



写真3: 「京」で採用されたインターコネク・トポロジ (概念模型)