

PLAINセンターニュース

Center for PLAnning and INformation Systems

数値シミュレーション専用エンジン (1)
なぜ専用エンジンを使うか

数値演算専用エンジンは特定の種類の計算だけを CPU に代わって高速に計算するものです。数値演算は普通 CPU を使って行いますが、用途によっては専用エンジンの方が適しています。数値演算専用エンジンの身近な例はパソコンやゲーム機の画像処理です。本記事では数値シミュレーションを目的とする代表的な専用エンジンとして、重力多体シミュレーション専用エンジン GRAPE と重力以外に分子間力なども計算できるように拡張したタイプの分子シミュレーション専用エンジンを中心に扱います。これらは研究目的に開発されたものと商用に販売されているものがあります。

専用エンジンの利点は目的とする用途において汎用コンピューターよりも高い計算性能が得られることです。GRAPE の最新機種である GRAPE-6 は、重力を計算する場合、1 プロセッサあたり 31 Gflops の理論性能をもっています。これはスーパーコンピューター日立 SR 8000 の 1 ノードの理論性能の 2 倍以上にあたります。GRAPE-6 システム全体(1024 プロセッサ)の理論性能は 32 Tflops で、汎用コンピューターでは最速の ASCI White の理論性能が 12 Tflops ですから、その 2 倍以上あります。しかも GRAPE-6 の開発費は推定される ASCI White の価格の 25 分の 1 程度です。分子シミュレーション専用エンジン MDGRAPE-2 (図) はクーロン力や分子間力を計算する場合、1 プロセッサあたり 16 Gflops の理論性能をもっています。専用エンジンは 1000 プロセッサを超える大きな構成以外にシミュレーション規模に応じて数個～数 10 個のプロセッサの小さい構成でも使われています。

これらの専用エンジンは理論性能が高いだけでなく、これを使って実際のシミュレーションを高速に実行することができます。重力多体シミュレーションでは計算時間のほとんどが各質点に働く重力の計算にかかります。重力多体シミュレ

ーション専用エンジンはこの計算を高速に行いますので、全体のシミュレーション時間を短縮できます。クーロン力の計算が含まれる分子シミュレーションの場合も計算時間のほとんどが各粒子に働く力の計算にかかります。分子シミュレーション専用エンジンはこの計算を高速に行いますので、全体のシミュレーション時間を短縮できます。汎用 CPU で大きい系の重力やクーロン力を高速に計算するためにいろいろな高速アルゴリズムが考案されていますが、よく使われる高速アルゴリズムについては、アルゴリズムの一部を変更して専用エンジンでも高速に実行できることがわかっています。

専用エンジンには複数のプロセッサがありますが、これらは効率よく並列動作させることができます。各質点に働く重力はそれぞれ独立に計算できるので、各プロセッサにそれぞれ別の質点に働く重力の計算を割り当てると、各質点に働く重力を並列に計算できます。分子シミュレーションの場合も同様に各粒子に働く力を効率よく並列計算できます。

専用エンジンの欠点は既存のプログラムを変更する必要があることです。専用エンジンを使って力の計算をするには CPU を使って行っている部分を専用エンジンを使うように変更しなければなりません。しかし、力の計算を行っているのは普通、シミュレーションプログラムの一部ですので、短期間で変更できる場合も多いでしょう。

これらの専用エンジンはいろいろな研究に使われています。最初の GRAPE である GRAPE-1 は 1990 年につくられました。GRAPE は年々性能を向上しながら、これまでに惑星形成、球状星団の進化、銀河衝突、銀河形成、銀河団の進化などの研究に使われています。これらの研究では数万個以上の質点の重力多体シミュレーションが行われています。分子シミュレーションにも使える GRAPE 型の最初の専用エンジン GRAPE-2A は

[裏へ続く]

1993 年につくられました。その後開発された分子シミュレーション専用エンジンはこれまでにタンパク質の構造やイオン結晶の相転移などの研究に使われています。これらの研究ではクーロン力が働く数万個の原子やイオンの様子をシミュレートする必要があります。MDGRAPE-2 は最近、分子シミュレーション以外に、渦法による数値流体シミュレーションや中性子星内部のシミュレーションにも使われています。これはこれらのシミュレーションに必要な計算が分子シミュレーションにおける力の計算と同様な式で表されるためです。分子レベルのシミュレーションはこれ以外の様々な分野で行われていますので、分子シミュレーション専用エンジンが使われる範囲は今後さらに広がるでしょう。

これらの専用エンジンのプロセッサの性能が汎用 CPU よりも優れている理由は 2 つあります。1 つは汎用 CPU は必要な回路の種類が専用エンジンよりも多いためです。まず、メモリから実行プログラムを読んで解析し、それにしたがって動作を制御する回路が必要です。専用エンジンでは行う演算は決まっているので、メモリから実行プログラムを読むことはなく、これらの回路は必要

ありません。また汎用 CPU は整数と浮動小数点の加減乗除のすべての種類の演算ができることが必要です。専用エンジンにはその用途に必要な種類の演算回路しか必要ありません。汎用 CPU の性能を高めるためにキャッシュなどの機能を入れると、さらに多くの回路が必要になります。専用エンジンではこれらの回路が不要な分、他の演算回路やチップ内部のメモリを増やすことができます。もう 1 つはこれらの専用エンジンに要求される演算精度が汎用 CPU よりも低いからです。汎用 CPU はいろいろな用途に使われますので、浮動小数点計算を倍精度またはそれ以上の精度で計算できるようになっています。これに対して、GRAPE-6 や MDGRAPE-2 では演算を単精度相当で行います。重力多体シミュレーションや分子シミュレーションでは力の計算精度は単精度で十分なことが多いからです。単精度よりも低精度の専用エンジンもあります。倍精度よりも単精度の方が小さい回路で行えますので、これによって 1 演算あたりの回路規模を減らして、1 つのプロセッサが同時に実行できる演算数を増やすことができます。

(理化学研究所・計算科学技術推進室

薄田 竜太郎)

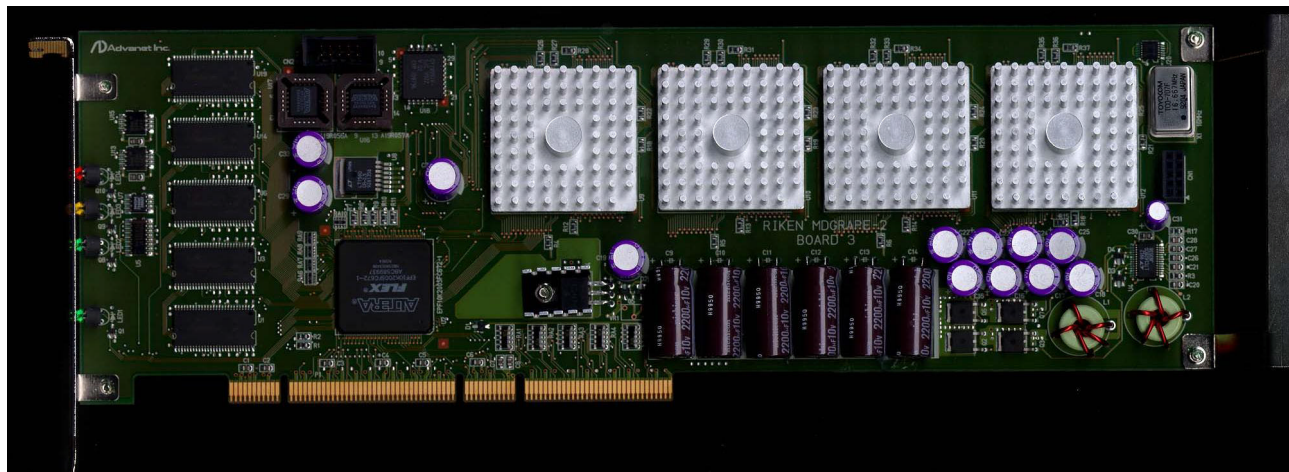


図 MDGRAPE-2 ボード(4 プロセッサ)

大型計算機に関するお知らせ

大型計算機の 10 月・11 月の保守作業の予定

ホスト名	10月15日(月) 8:00~15:00	11月19日(月) 8:00~13:00
AlphaServer GS 60	M	
GS 8300/10N		M

M:システムメンテナンス

(三浦 昭)

大型計算機利用上の質問・トラブルなどは高橋氏・梶沼氏(内線8391)、ネットワーク関係の質問・トラブルなどは神林氏・杉井氏(内線8393)までお願いします。

編集発行：文部科学省宇宙科学研究所 宇宙科学企画情報解析センター

〒229-8510 神奈川県相模原市由野台 3-1-1 Tel. 042-759-8352 e-mail: news@plain.isas.ac.jp