

# 大規模数値計算による天体現象の研究

牧野淳一郎

国立天文台理論研究部/天文シミュレーションプロジェクト



# 発表構成

1. プロジェクトの名前とか
2. プロジェクトの概略
3. 神戸ペタコンとの関係
4. 研究体制
5. 予算規模とその実現方法
6. 年次計画
7. まとめ

# プロジェクトの名前とか

|             |                   |
|-------------|-------------------|
| プロジェクト名     | 大規模数値計算による天体現象の研究 |
| プロジェクトリーダー名 | 牧野淳一郎             |
| 講演者名        | 牧野淳一郎             |

# プロジェクトの概略

- 研究の目的と意義
- 研究方法
- 国際競争力

# 研究の目的と意義

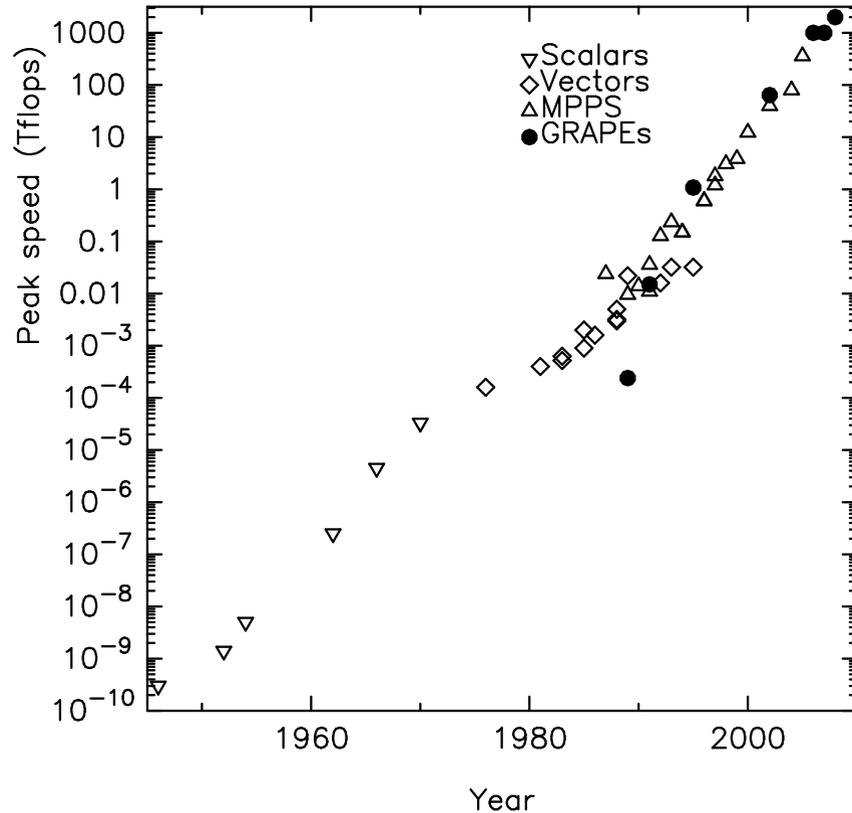
目的:

大規模 (=高分解能) シミュレーションが可能になれば現象の理解が大きく進むと考えられるいくつかの分野について、数値アルゴリズムの開発、ハードウェア開発、ソフトウェア開発とサイエンス研究を密接に連携して進めることで過去のトレンド以上の進歩を可能にし、現象の理解を進める。

想定する分野

- 銀河形成
- 星形成
- 惑星形成
- その他

# 計算機の速度の進歩



- 過去 60 年間、10 年で 100 倍
- 進歩の主な理由: デバイスの速度、集積度の向上
- まだ 15 年くらいは続く?

他力本願でよい?

# 計算機の速度と値段

2008年現在

|          |               |              |
|----------|---------------|--------------|
| NEC SX-9 | 1.5-3億/Tflops | 30KW/Tflops  |
| 富士通 FX   | 1億/Tflops     | 10KW/Tflops? |
| Cray XT4 | 3000万/Tflops  | 5KW/Tflops   |
| PC クラスタ  | 500万/Tflops   | 5KW/Tflops   |
| GRAPE-DR | 100万/Tflops   | 200W/Tflops  |

- ペタコンで沢山お金かけてるからそっちですむ、という話ではない。
- 国立天文台における計算機の大きさは計算機の値段だけでなく給電設備、電気代で決まる。

自前で作れると非常に有利

# 速くなった御利益は？

$10^{15}$  倍計算機が速くなったからといって  $10^{15}$  倍論文が書けるわけではない。

- 今まで扱えなかった問題を扱う
- 怪しい近似を第一原理からの計算に置き換える

# 例:銀河形成

構造の形成、進化と恒星進化のカップルしたモデル: 1990年代初め、 $N$ 体+SPH

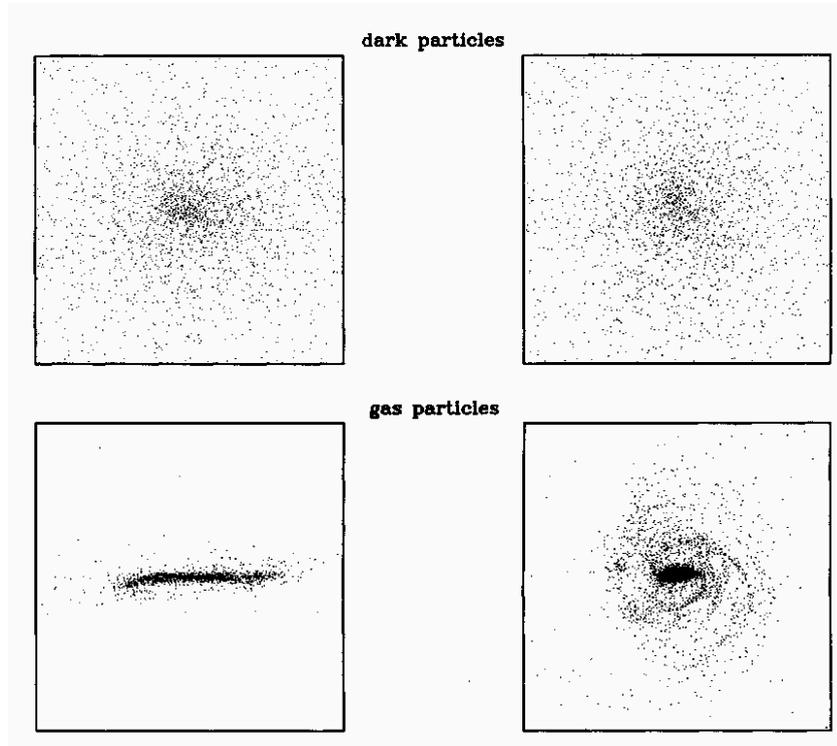
- 当初  $10^4$  粒子くらい: ガス粒子 1 つが  $10^7$  太陽質量
- 現在  $10^6$  粒子くらい: ガス粒子 1 つが  $10^5$  太陽質量

## 現状

- 色々ヒューリスティックなモデルをいれて微調整すると銀河のようなものが作れなくもない。
- 分解能 (計算精度) の問題とモデルの問題を分離できない  
= 何が正しいのかよくわからない

粒子数 (分解能) を上げることができれば解決する問題もある

# Katz and Gunn 1992



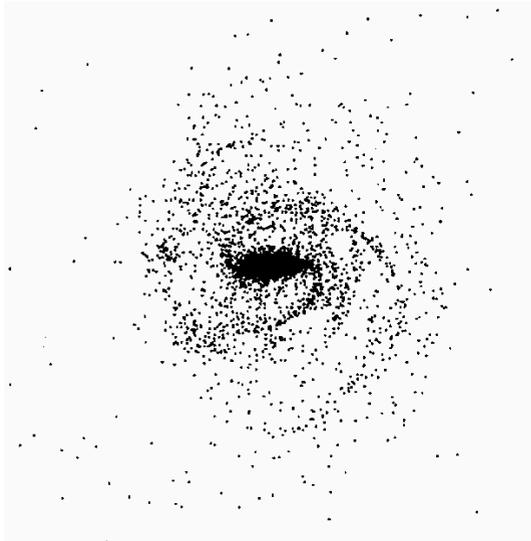
- Dark Matter + ガス + 星
- DM, 星: 粒子、  
ガス:SPH 粒子
- $10^4$  粒子、Cray YMP  
500-1000時間
- 質量分解能:  $10^7$  太陽質量  
くらい

# Saitoh et al. 2005



- Dark Matter + ガス + 星
- DM, 星: 粒子、  
ガス:SPH 粒子
- $2 \times 10^6$  粒子、GRAPE-5 11 ヶ月
- 質量分解能:  $10^4$  太陽質量くらい

# 分解能をあげたことの御利益



- たいして変わらない？
- 実はこの計算では本当はたいして変わらない。
- 本当の利益: 星形成等のモデルパラメータ排除

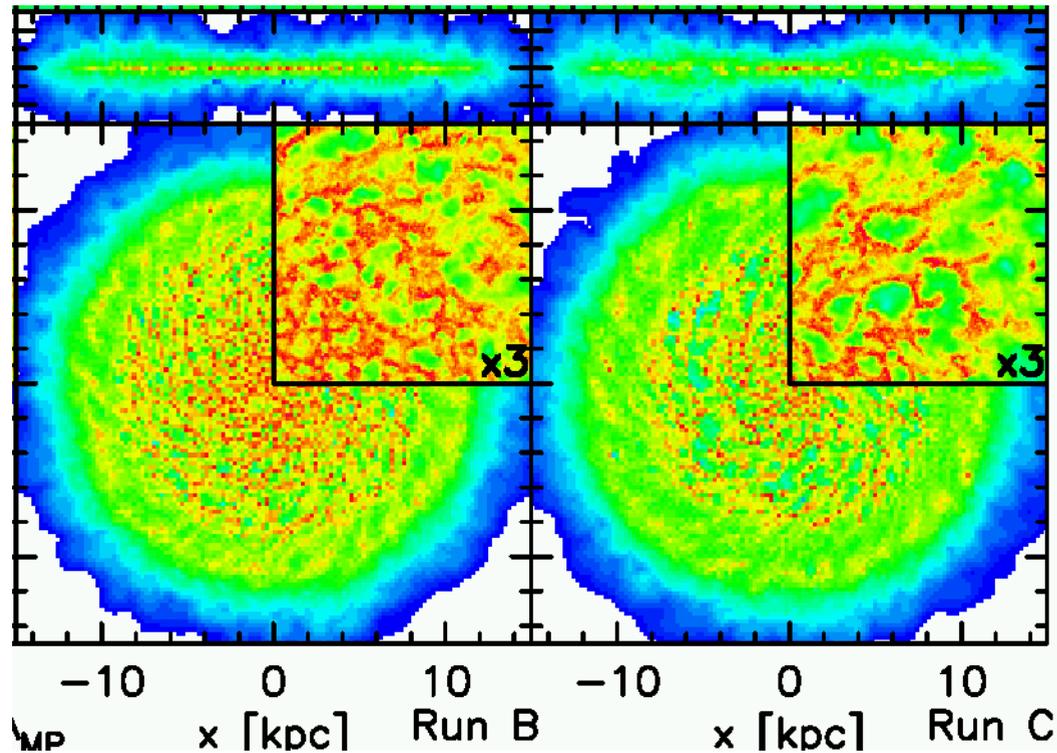
# 星形成のモデル

- 星形成シミュレーションに必要な質量分解能: 最低限  $10^{-4}$  太陽質量くらい
- 現在の銀河形成シミュレーションの最高の分解能:  $10^5$  太陽質量
- 「適当に」星を作る必要あり
  - ガスの密度、温度、速度場の発散がある条件を満たしていると、「適当な」タイムスケールで星ができる、とするのが普通
  - パラメータ 3 個くらい
  - パラメータの選び方でどんな銀河ができるかが変わる
- 超新星爆発の扱いも同様な問題あり

# どこまで分解能上げる必要があるか？

- やって見ないと本当はわからない
- 理論的には、「ある程度密度が上がればそこから先は全部星になる」でいいはず？
- そういうきざしが見えかけてきている
- あと 1-2 桁？

# Saitoh et al. 2007

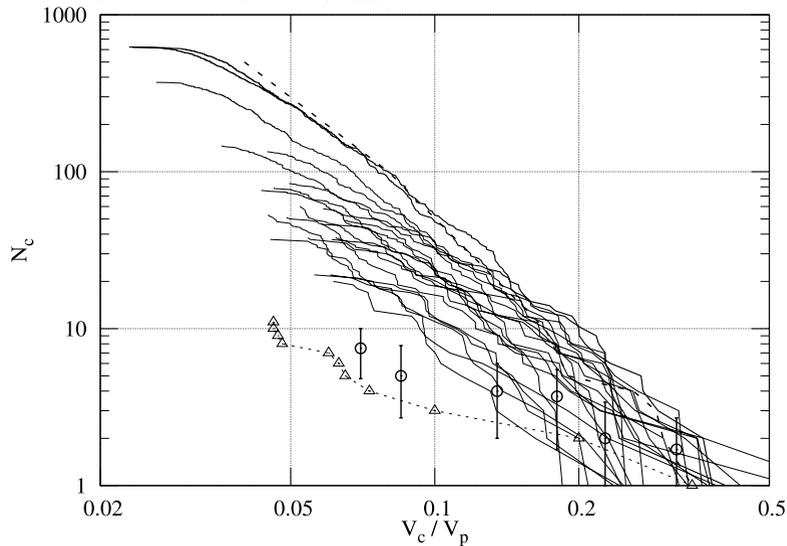


ガスディスクだけの超高分解能計算 (3000 太陽質量)  
星形成率パラメータ 15 倍変えている  
結果に大きな違いはない

# ダークマターだけの計算例

石山他 2008 (PASJ accepted)

## 矮小銀河問題



高分解能で無バイアスのハロー  
サンプル

銀河サイズハローには色々ある

Moore et al は何故かサブハ  
ローが多いのをひろっていた

無バイアスでサンプルすると局  
所銀河群と大きくずれないのも  
ある

# 研究方法

- 銀河形成、星形成等、いくつかの分野に対して、大規模シミュレーションが可能な並列計算コードを開発する
- 並行して、それらのアルゴリズム向けに最適化されたハードウェアを開発する
- ハードウェアのベースは 現在天文台で開発中 (ほぼ完成) の GRAPE-DR システム



現時点で1チップ世界最高性能

東大・天文台の共同研究、今年度末に  
1Pflops が目標

# 国際比較

- 天文の理論/シミュレーション向けの計算機を成功裡に開発できているのは世界で GRAPE のグループのみ
- 星団の力学進化・惑星形成では日本のグループが世界をリード
- 銀河形成シミュレーションで大規模計算ができるコード
  - Gadget (MPA)
  - pkdgrav/Gasoline (Zurich)
  - ASURA (NAOJ)
- ソフトウェア開発は急速に大プロジェクト化 (FLASH, Virgo Consortium, ....)

# 研究体制

|      |               |                   |
|------|---------------|-------------------|
| 銀河形成 | 国立天文台<br>東京大学 | 牧野、和田、齋藤、、<br>吉田他 |
| 惑星形成 | 国立天文台<br>東工大  | 小久保他<br>井田他       |
| 星形成  | 国立天文台<br>法政大  | 富阪他<br>松本         |

国際協力: Cosmogrid project (DEISA + NAOJ) 他  
Distributed European Infrastructure for  
Supercomputing Applications

ソフトウェア

MUSE (Multiscale Multiphysics Scientific  
Environment for simulating dense stellar systems)

# 予算規模とその実現方法

予算はそもそも何に必要か？

- 計算機調達・開発。  
調達はあるだけ使いたい。開発は1プロジェクト10億程度(半導体テクノロジー依存)
- 人 — 金額としては人のお金は小さい
- 計算機調達
  - 国立天文台 運営経費 (年数億)
  - 神戸ペタコン利用 (年200億くらい × 天文の取り分)
- 開発
  - 各種競争的資金
  - その他

# 年次計画

|      | 天文台計算機           | 神戸   | SPH 粒子数    | DM 粒子数      |
|------|------------------|------|------------|-------------|
| 2008 | 汎用 30T, GDR 500T | —    | $10^7$     | $10^{10}$   |
| 2010 |                  |      | $10^8$     | $10^{11}$   |
| 2012 | GDR2 10P         | 10P? | $10^{8.5}$ |             |
| 2014 |                  |      | $10^{10}$  | $10^{12}$   |
| 2016 | GDR3 200P        |      | $10^{11}$  | $10^{13.5}$ |

2012 年頃を目処に銀河形成コードと星形成コードをリンクさせる

# まとめ

- 計算機の世界向上、シミュレーションコード開発はシミュレーション研究の生命線
- ペタコンだけに期待をかけるのはかなり危険
- ハードウェア開発のコストは 10 億前後。
- 予算ソースは色々

予備スライド

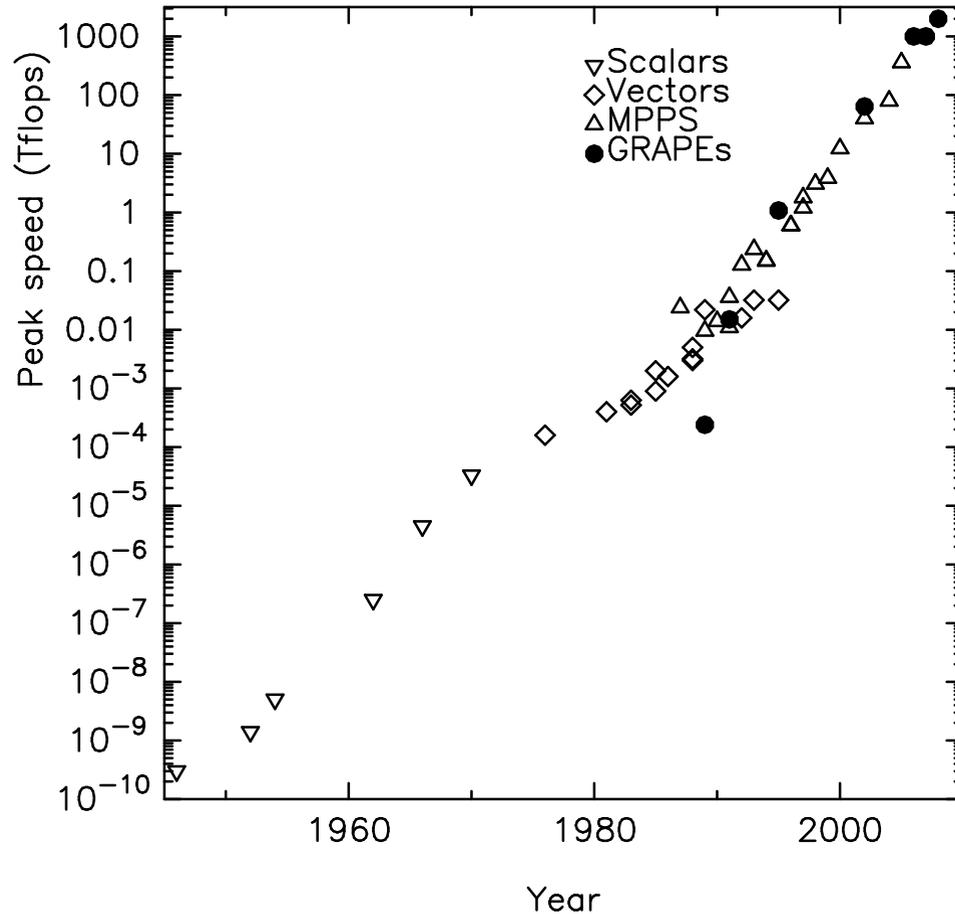
# シミュレーションの長期計画？

これまで:

- 速い計算機を買ってくる
- なにを対象にするか: 研究者の「自由」
- 原理的にはあらゆる現象が対象
- 現実的には
  - 計算できるもの
  - 新しい観測

「計算機を速くする」という以上の長期計画にはあまり意味がない？

# 計算機の速度の進歩



- 過去 60 年間、10 年で 100 倍
- 進歩の主な理由: デバイスの速度、集積度の向上
- まだ 15 年くらいは続く?

# 速くなった御利益は？

$10^{15}$  倍計算機が速くなったからといって  $10^{15}$  倍論文が書けるわけではない。

- 今まで扱えなかった問題を扱う
- 怪しい近似を第一原理からの計算に置き換える

# シミュレーション研究の現状

- 数値相対論
- 銀河形成
- 恒星進化、超新星爆発 (GRB)
- 惑星形成、星形成

殆どの分野で、

- 非常に粗い近似
- 未解決の問題

がある。(輻射、磁場、その他)

球対称の恒星進化計算は例外的に「良く理解されている」

# 銀河形成

構造の形成、進化と恒星進化のカップルしたモデル: 1990年代初め、 $N$ 体+SPH

- 当初  $10^4$  粒子くらい: ガス粒子 1 つが  $10^7$  太陽質量
- 現在  $10^6$  粒子くらい: ガス粒子 1 つが  $10^5$  太陽質量

現状:

- 色々ヒューリスティックなモデルをいれて微調整すると銀河のようなものが作れなくもない。
- 分解能 (計算精度) の問題とモデルの問題を分離できない  
= 何が正しいのかよくわからない

粒子数 (分解能) を上げることができれば解決する問題もある

# 計算機の進歩の方向

歴史的には:

- スカラー → ベクトル → 分散メモリ並列  
→ 分散並列+チップ内並列
- 大体 10 年毎にアーキテクチャが大きく変わる
- 新しいアーキテクチャを有効に使うには  
アルゴリズムから見直す必要あり
- 国内の天文研究者の多くはまだ分散メモリ並列に対応始めた段階
- アメリカでは大規模プロジェクト化  
(FLASH, CACTUS)

# シミュレーションの長期計画？

これまで:

- 速い計算機を買ってくる (あるいはどこかにあるのを  
使う)
- なにを対象にするか: 研究者の「自由」

「計算機を速くする」という以上の長期計画にはあまり意味がない？

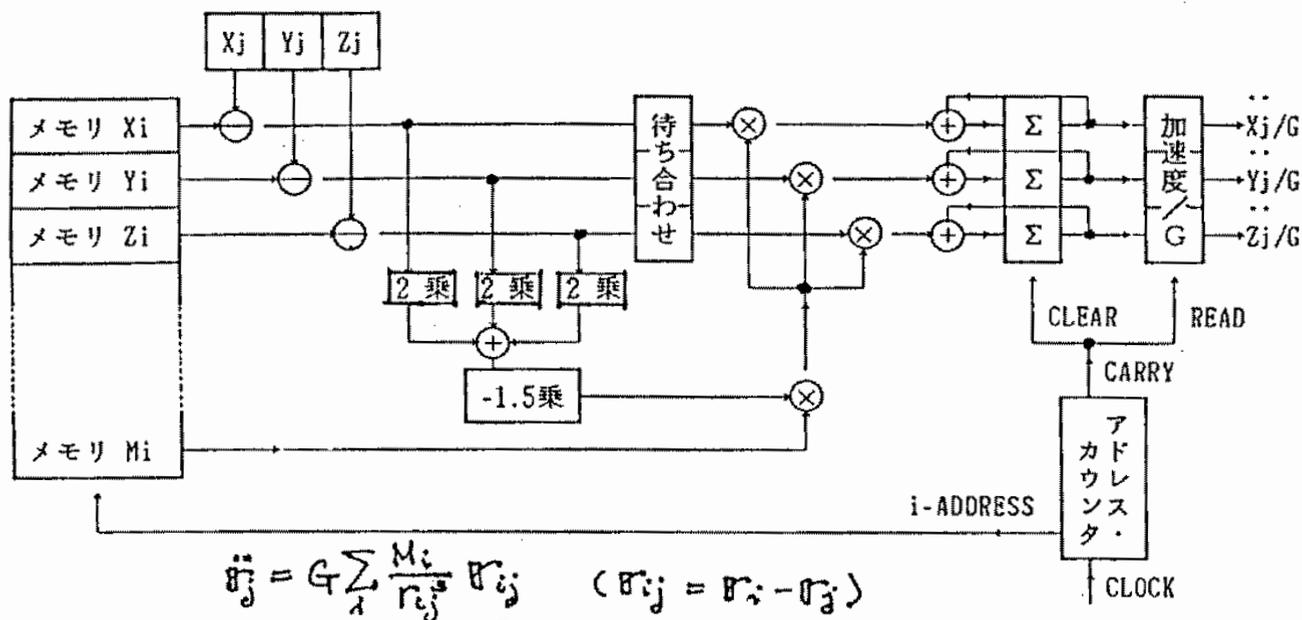
- GRAPE は？
- 今後も計算機は速くなるか？ (次世代スーパーコンピュータ)

# GRAPE プロジェクト

- 重力多体問題専用計算機
- 星団の力学進化のシミュレーションが当初の目標
- 他にも色々できた
  - 惑星形成
  - 星形成 (SPH)
  - 銀河形成
  - 宇宙論
- 速度が必要なところをハードウェアが面倒見るのでプログラム開発が楽
- 同じ価格なら汎用機の 100-1000 倍の速度

# 近田提案

1988年、天文・天体物理夏の学校



+, -, ×, 2乗は1 operation, -1.5乗は多項式近似でやるとして10operation 位に相当する。  
 総計24operation.

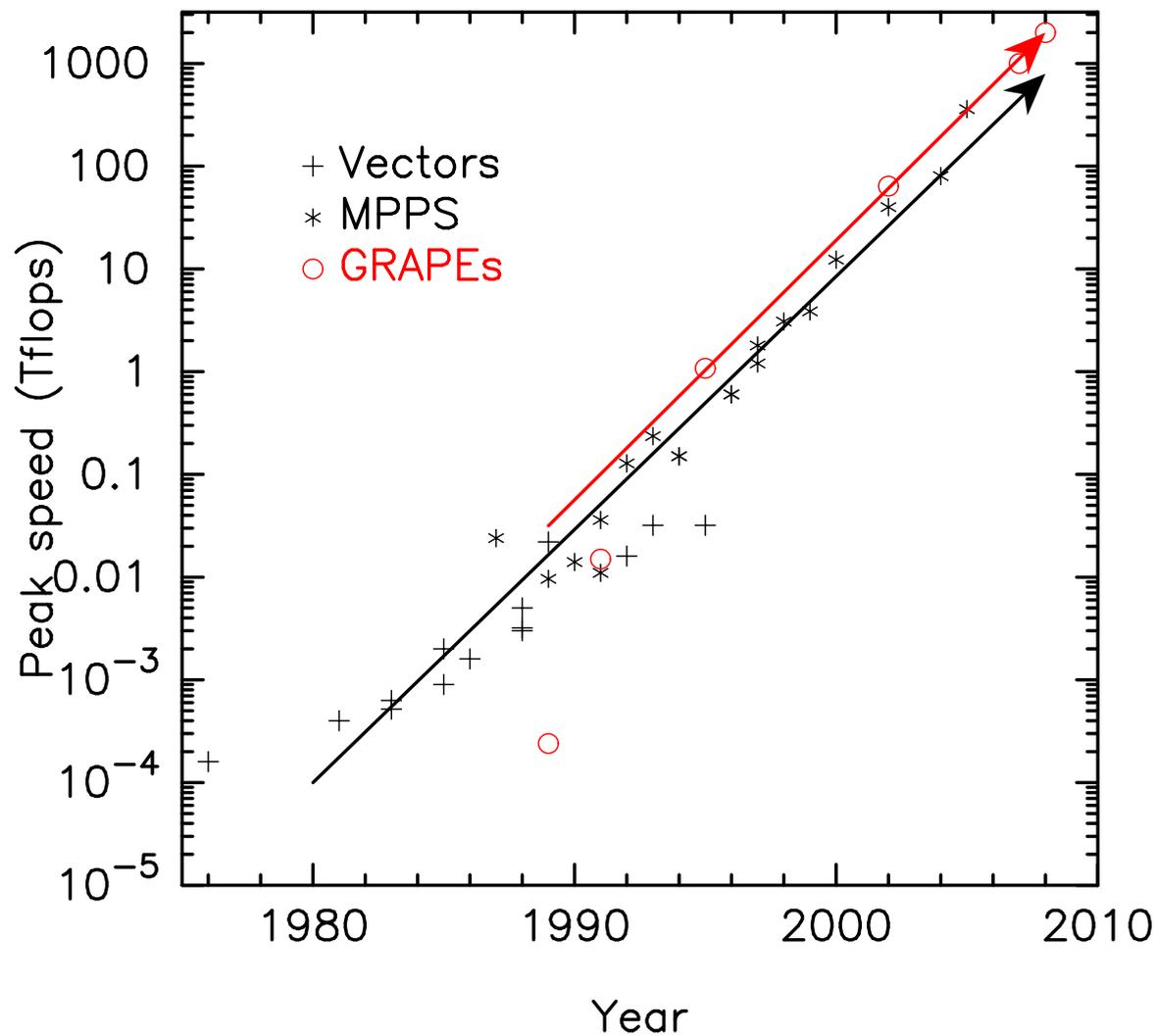
各operation の後にはレジスタがあって、全体がpipelineになっているものとする。

「待ち合わせ」は2乗してMと掛け算する間の時間ズレを補正するためのFIFO (First-In First-Out memory).

「Σ」は足し込み用のレジスタ。N回足した後結果を右のレジスタに転送する。

図2. N体問題のj-体に働く重力加速度を計算する回路の概念図。

# ピーク性能の進歩



GRAPE-4 以降、完成した時点で世界最高速を実現

# GRAPE-DR 計画

「基本的には」次期 GRAPE 計画

- 2004年度から5年計画
- 目標ピーク性能: 2 Petaflops
- チップ数 4096
- 単体チップ性能 0.5Tflops

と、これだけなら今までの GRAPE が速くなっただけ。

**実際のアーキテクチャ: 今までの GRAPE とは全然違う**

- なぜ違うか
- それで何ができるか

# 「次期 GRAPE」の実際的な問題

天文だけ (しかも理論だけ (しかも  $N$  体だけ)) でもらうにはチップ開発コストが大き過ぎる

## チップ開発費

|      |              |        |
|------|--------------|--------|
| 1990 | 1 $\mu$ m    | 1500万円 |
| 1997 | 0.25 $\mu$ m | 1億円    |
| 2004 | 90nm         | 3億円以上? |
| 2006 | 65nm         | 10億円以上 |

ある程度広い応用を持つものでないと予算獲得が難しい

ALMA でも相関器は FPGA、、、

# 基本的な考え方

- チップに演算器を 2000 個くらい入れる
- それを (GRAPE が得意なタイプの問題に対しては) ある程度のプログラム可能性をもった形で使う。 GRAPE のようなハードワイヤードなパイプラインにはしない。

もうちょっとそれらしく言うと:

- 応用に特化し、多数の演算器を 1 チップに集積、並列動作させて高い性能を得た専用計算機の特徴を生かす
- しかし広い応用範囲を実現する

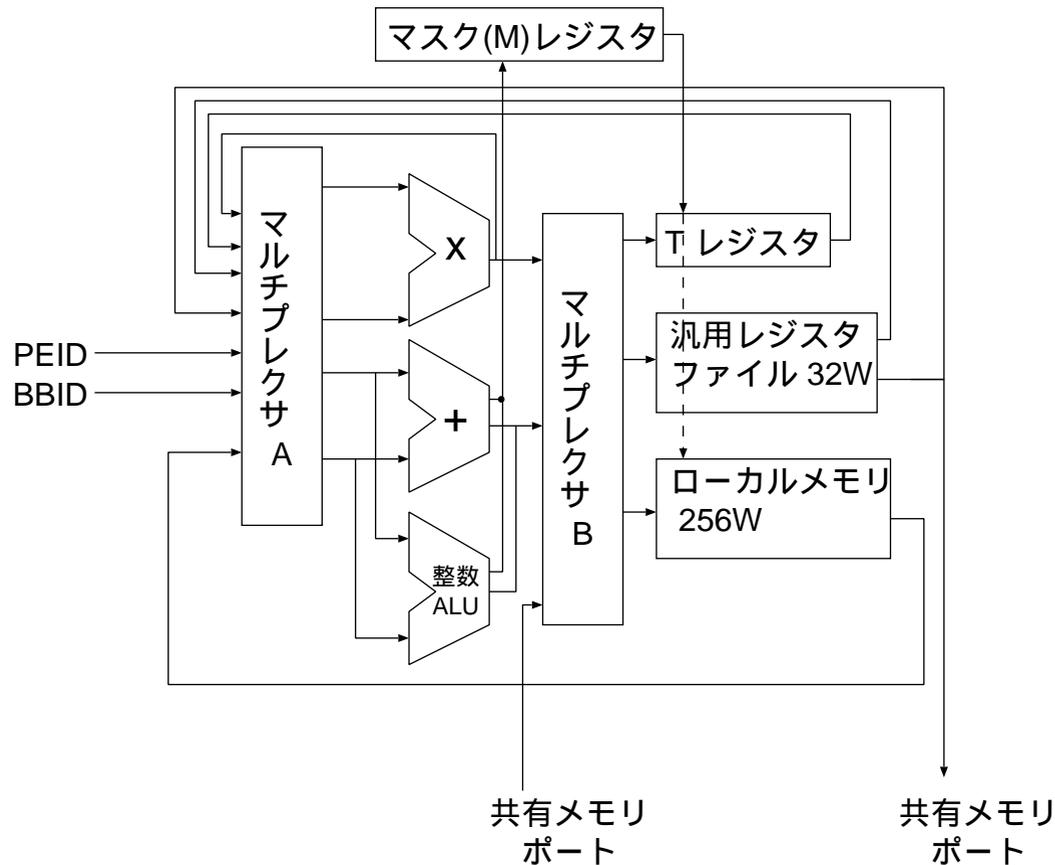
# SIMD 並列処理

パイプラインプロセッサをやめにして、「プログラム可能なプロセッサ」を沢山載せる。

SIMD (Single Instruction Multiple Data): 全プロセッサが同じ命令を実行

基本的には、全プロセッサがソフトウェアで GRAPE をエミュレーションする。

# GRAPE-DR プロセッサエレメント



- 浮動小数点演算器
- 整数演算器
- レジスタ
- メモリ (256語), K とか M ではない。

# GRAPE-DR の開発状況



シミュレーションデータと同じものを供給して同じ答がでる  
いくつかのアプリケーションが動作

# 原始的なコンパイラ

(中里 2006)

```
/VARI  xi, yi, zi, e2;  
/VARJ  xj, yj, zj, mj;  
/VARF  fx, fy, fz;  
dx = xi - xj;  
dy = yi - yj;  
dz = zi - zj;  
r2 = dx*dx + dy*dy + dz*dz + e2;  
r3i= powm32(r2);  
ff = mj*r3i;  
fx += ff*dx;  
fy += ff*dy;  
fz += ff*dz;
```

これから GRAPE  
並のことにするアセ  
ンブラ、インター  
フェースライブラリ  
を生成。

基本的なアイデアは  
PGR (FPGA を  
使った  
PROGRAPE 用  
コンパイラ、濱田 D  
論 2006) と同様

# 応用範囲

- 基本的には、データ量の割に計算量が多いものならなんでも
- むかないアルゴリズム: 大規模 FFT

天文では

- 重力多体問題
- 自己重力流体
- 輻射流体

# 次世代スーパーコンピュータープロジェクト

- 2006年度から7カ年計画 (2007年度 80億)
- 10 Pflops ?
- 総予算 1100億 ?
- 場所は神戸ポートアイランドに決定 (3/28)

# 位置づけ (公式)

- 数値風洞 (1993, 220Gflops)、地球シミュレータ (2002, 40Tflops) の後継
- 「これらのマシンが実現した世界をリードする地位を回復」

# 位置付け (実態)

- 1993 数値風洞は初めて分散メモリ+ベクトルを実現した革新的マシン
- 2002 地球シミュレータはその延長
- 2012 次世代: 何を作るか決められない(すでに1年半遅れ)

## 要因:

- 航技研・三好氏にあたる人がいない(現在のトップは元 NEC の渡辺氏)
- なんのために作るものかわからない

# 天文コミュニティとの関係

- アプリケーション検討部会、物理・天文分野 (宇川、観山)
  - 数値相対論、MHD、惑星・銀河形成を提案
  - ベンチマークに惑星・銀河形成
  - ある程度のマシンタイムは獲得できる？
- 理研・天文台共同研究 (2006 年度)
  - 「アクセラレータ」に関する検討
  - 今年度以降は？

# 天文台スパコンとの関係

- リプレース: 2008/3
- 演算性能 2T(ベクトル)+20T(スカラー)  
+ 1P(?, GRAPE-DR)
- その次のリプレースがあると: 2013/3, スカラー 0.5P  
程度?
- 次世代スパコンの天文コミュニティの取り分よりかなり  
大きい

現在の計画では、次世代スパコンは高い割に遅い

# 長期計画

- 計算機アーキテクチャの進歩をリードしてきたのは天文・物理
  - QCD (QC DPAX, CP-PACS, QCDOC)
  - GRAPE
- 次世代スパコンの次のための研究開発を目指すべき
  - GRAPE-DR の次の計画
  - スカラー並列