GRAPE プロジェクト

牧野淳一郎 (東京大学)

平成11 年 6 月 14 日

1 はじめに

本稿では、我々が開発してきた多体問題専用計算機 GRAPE (GRAvity PipE) について、その歴史に沿って概要を紹介する。まず、どのようなきっかけで GRAPE の開発を始めることになったか、そもそも解きたい問題（重力多体問題）とはどんなものかということから始め、GRAPE-1 から現在開発中の GRAPE-6 に至るながれ、天文学以外への応用、専用計算機と汎用計算機の違い、半導体技術との関係や将来の方向についてまとめる。

2 恒星系の進化計算

GRAPE プロジェクトが始まったのは、必然というよりは様々な偶然の結果であった。1985 年に大学院に進学した私は、天体物理学の世界的権威である[1]杉本大一郎の下で、球状星団の力学的進化の直接 N 体計算による研究というテーマをやっていくことになった。球状星団というのは、古い星が典型的には 100 万個位集まって出来ているシステムで、我々の銀河系のなかには 150 個ほどある。大きな銀河では数千個の球状星団を持つものもある。

球状星団のような恒星系がどのように進化[2]していくかというのかというのは天体物理学的には大変重要な問題であるが、それにもかかわらず当時は（実は現在でも）かなり大雑把なことしかわかっていなかった。

一つの恒星については、フォン・ノイマンの意向もあって 1940 年代末に電子計算機が利用可能になるとすぐ、その構造、進化の計算がマーティン・シュワルツシルドらによって精力的に進められた。その結果、1960 年代始めにはほぼ基本的な理解が出来上がっていた。それに対し、重力でまとまっているという面では一つの恒星と同じようにも見える恒星系については、1960 年代始めに数値計算による研究が始まったものの、その理解は遅々として進んでいかなかった。

理解がなかなか進まなかった理由の大きなものは、「計算できなかった」ということである。星はガスが重力でかたまって出来ている。球対称を仮定して回転等を考えなければ、解くべき方程式は 1 次元の流体力学の式であり、力学的なつりあいや熱力学的な進化を数値計算することはそれほど難しくない。このために、初期の電子計算機が理解の飛躍的な進歩をもたらした。

---

[1] と自分の指導教官のことを書くのはなんとなく恥かしいが、他にちょっと書きようがない。

[2] 天体物理学では、一つの恒星や銀河系が時間とともに内部構造などを変えていくことを evolution 進化という。生物進化のように世代が変わるにつれて変化していくことではないので注意。

ところが、恒星系では星は星団の中全体を他の星とぶつからないで動き回る。このために、温度とか圧力といった熱力学的な概念がなりたたず、星団の構造を記述するためには星の分布関数(位置と速度の6次元空間で)を知る必要がある。またその進化を表現する方程式も6次元空間のなかでの分布関数の偏微分方程式となる。分布関数をモンテカルロ積分するとか、あるいは角運動量を無視して次元を減らすとかの方法で近似的な計算が可能になったのが1970年代から1980年代にかけてであった。

近似的な計算でわかったことは、球状星団のような恒星系は「重力熱力学的カタストロフ」という特異な現象を起こすはずであるということだった。恒星系では局所的な温度という概念はないが、系全体としては熱力学第二法則にしたがってエントロピーを生成し、熱平衡にむかって進化しようとする。これは、平均的には星団の中心付近の速度の大きい星から、外側の速度の小さい星にむけてエネルギーが流れるということである。ところが、重力が働いているために、中心付近の速度の大きい星はエネルギーを失った結果軌道が縮まって、その分重力が大きくなりますます速度が上がる[3]。これに対し、外側は逆に軌道が膨らんで速度が下がる。このため、エントロピーを生成したのにいっそう熱平衡から遠ざかるという不安定現象が起きるのである。この現象は「重力熱力学的カタストロフ」と名付けられた(例えば[7])。

この後の時間発展を近似的な計算で追跡すると、宇宙の年齢よりも短い時間で恒星系の中心密度が無限大になってしまう。そのあとはどうなるかについては様々な理論が建てられた。ブラックホールが生成される、あるいは核融合反応で水素からヘリウムが出来るように、星同士の3体重力散乱で連星が出来てこれが星団を安定な定常状態にする、あるいはこの定常状態がまた熱的に不安定で、「重力熱力学的振動」と名付けられた非線形振動を起こすなどである。

球状星団の星の数は100万個程度である。従って、100万体問題を数値計算してしまえば、なにが起きるか原理的にはすべてわかる。私が大学院に入った時に始めた研究は要するにそういうことをやろうとしたのである。しかし、1980年代終りに至っても、当時のスーパーコンピュータを数百時間使ってさえ、扱える星の数はわずか3000程度であり、これでは100万体問題でなにが起きるかについてはっきりしたことはいえなかった。

このように扱える星の数が少ないのは、基本的には時間積分のタイムステップ数が多いからである。重力熱力学的不安定の成長するタイムスケールは、ほぼ粒子数に比例して長くなるということがわかっている。このために、粒子数の3乗に比例して計算量が増える。

並列計算や高速アルゴリズムに詳しい読者の方はなぜBarnes-Hutツリー[4]やFMM(高速多重極展開法)[5, 3]を使わないのだと思われるであろう。その理由は、積分時間が長いために高精度が必要で、そのためにこれらの近似算法による利得があまり大きくないことが一つである。もう一つは、上に述べたように中心の密度がどんどん上がっていくという特性のために、星ごとにばらばらにタイムステップを変える必要があり、その場合にはFMMのような方法をベクトル計算機や並列計算機で効率良く使うのは難しいということである。

---

[3] 人工衛星が、空気抵抗で軌道を下げるに従って速度が大きくなるのと同じである。

3 多体問題専用計算機 GRAPE

そのようなわけで、1980 年代終りに、我々の研究は一種の手詰り状態にあった。ベクトル計算機や並列計算機を使ってそれなりの成果をあげたものの、球状星団について決定的な結果を得るには粒子数であと 10 倍大きな計算をする必要があるということがわかってきた。これは計算速度で 1000 倍ということになる。このころのベクトル計算機の実効性能は数百 Mflops であったので、1 Tflops 程度の計算機が欲しかったということになる。

汎用計算機のピーク速度はだいたい 10 年で 100 倍速くなるので、1000 倍は 15 年に相当する。これはちょっと長過ぎる。また、もうひとつの問題があった。当時の高速計算機の発展は、必ずしも我々のやりたいような計算が効率的に出来るような方向に向いていなかった。当時はマイクロプロセッサを多数使った分散メモリ型の並列計算機が急速に発展しつつあった。このような計算機は、ピーク性能は非常に高いが通信に掛かる時間がハードウェア、ソフトウェア上の制限から大きくなる。また、ハードウェアの並列度も高いものとなる。

恒星系の問題は粒子数がそれほど大きくなく、そのために並列度が小さい。せいぜい数万粒子の計算をするのに、通信が遅い上にプロセッサが数千台もあるような機械を使うのは不可能に近い。粒子毎にタイムステップが違うとなればなおさらである。

1988 年秋のある日、杉本のところに、野辺山宇宙電波観測所の近田 (現国立天文台) から、研究会集録原稿のコピーが送られてきた。それは、「理論シミュレーション用の専用計算機を作れば、効率は 1000 倍あげられる」という主張が、野辺山の電波干渉計用のデジタル相関器を開発した経験を元に述べたものであった。

実はシミュレーション用の専用計算機という考え自体は昔からあり、我々が良く知っていたものとしては MIT の G. Sussman らが開発した Digital Orrery [1] がある。これは、太陽系の惑星の軌道の長時間積分をするための専用計算機であり、冥王星の軌道がカオティックであるということを決定的に示した [9] ということで有名である。

もっと粒子数の多い球状星団の計算でも、専用計算機が有効でありうることはベクトル計算機等の経験からわかってはいた。が、我々は、そんなことはちょっと素人が手を出せるものとは思っていなかった。が、上の集録原稿を読んで近田さんといろいろ議論した結果、近田さんがいろいろ助けてくれるならということで、やってみようかということになった。なお、ハードウェア設計、製作の具体的な部分では、当時慶応大学川合研究室の助手であった朴さん (現筑波大学助教授) にもいろいろお世話になった。計算機には、重力を計算するパイプライン (GRAvity PipE) ということで、GRAPE という名前をつけた。以下簡単に現在までの歴史をまとめる。より詳しくは [2, 8] 等をごらんいただきたい。

4 GRAPE-1 と GRAPE-2 — 手作りの時代

最初に作ったのは GRAPE-1 というもので、これはホスト計算機と GP-IB インターフェースでつながれる。ホスト計算機から粒子の位置を送ると、粒子間の重力を計算し、合計しておくり返すわけである。この基本的な構成は現在開発中の GRAPE-6 にいたるまで基本的には変わっていないので、ここで少し詳しく説明しておく。

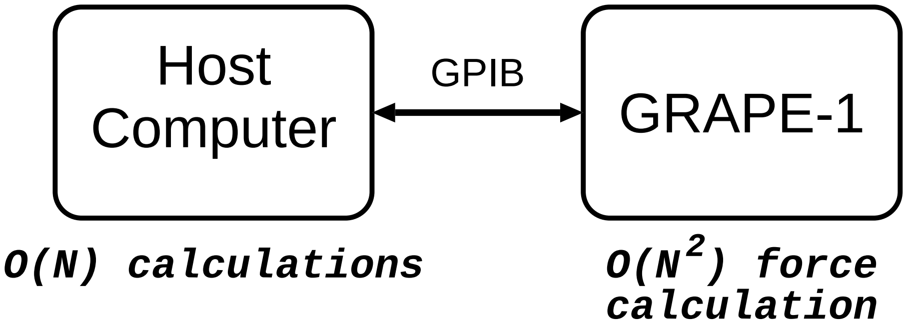

図 1: GRAPE-1 システム。

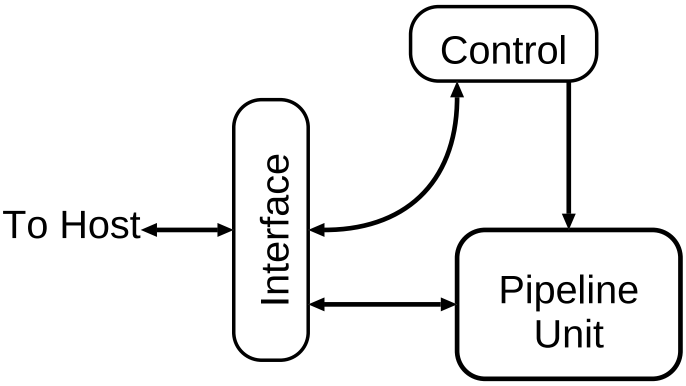

図 2: GRAPE-1 ボード。

図1は GRAPE-1 システム全体の概念図、図2は GRAPE-1 ボードのブロック図である。ボードは、制御回路のほか粒子の位置座標をしまっておくためのメモリと実際に相互作用を計算し、積算するためのパイプライン回路からできている。パイプラインの概念図を図3に示す。

1ステップの計算は、以下のように進む。まず、ホストが粒子の座標をメモリ (Xj mem) に送る。これらの粒子からの重力が計算される。その後、ホストが別の座標をパイプラインの入力レジスタ (Xi) に書き込み、計算開始命令を送ると、その座標とメモリからの座標の差を計算し、2乗して和をとり、、、といった一連の作業をパイプラインが行ない、クロックサイクル毎に粒子１つからの重力が計算されることになる。計算が終ると、求まった重力 (Fi) をホスト計算機に送り返す。

GRAPE-1 では、ハードウェアを可能な限り単純、安価にするために、データ内部表現に工夫を凝らしてビット長を切り詰め、ほとんどの演算を ROM を使ったテーブルルックアップで済ませた。このために、ハードウェアを作った経験が全くなかったにもかかわらず、比較的容易に動作するものを組み上げることができた。もちろん、そのために計算精度が低く、球状星団などには使えない。銀河同士の衝突のような、タイムステップ数が少なくて済む問題に応用が限られた。[4]

---

[4] 銀河は球状星団よりずっと大きく、そのなかの星の運動周期が長いため、タイムステップが長くてよいのであ

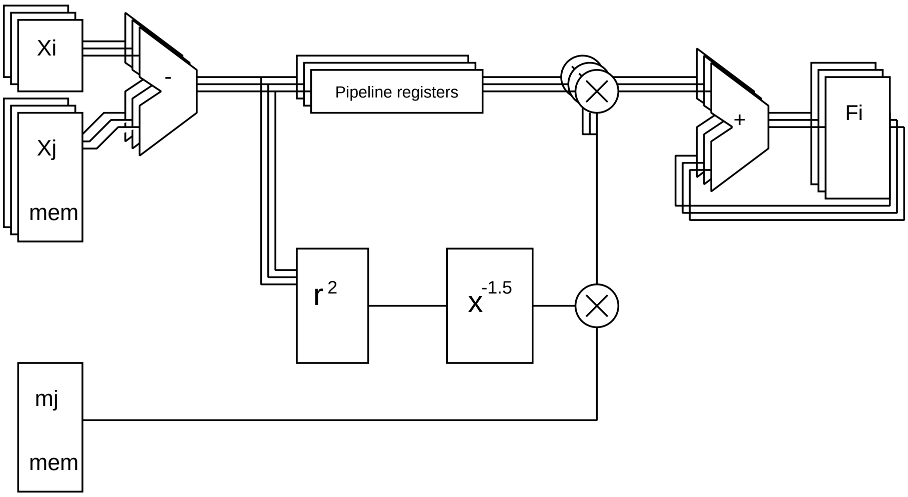

図 3: GRAPE-1 パイプライン。

GRAPE-1 は 1989 年 9 月に完成した。GRAPE-1 の最終的なクロック周波数は 8 MHz であり、ピーク計算速度はほぼ 240 Mflops であった。当時は、ワークステーションの演算性能が 1 Mflops 程度であった時代であり、それに比べれば画期的に高速であった。このために、非常に簡単なハードウェアであったにもかかわらず、実際に天文学研究に使うことができ、いくつかの論文につながった。

GRAPE-1 の開発中に、好運にも国立天文台から 200 万円ほどの研究費をいただくことができた。これを使って計算精度の高い GRAPE-2 の開発を始めた。GRAPE-2 では、演算に 32 ビットや 64 ビットの浮動小数点形式を使い、十分な精度を確保することにした。こちらの開発は、我々の技術力の不足もあってかなり難航し、とりあえず動くようになったのが 1990 年春であった。しかし、高精度をいかして惑星形成のシミュレーションや銀河中心核でのブラックホールの挙動のシミュレーションなど、高精度を要求するさまざまな問題に使われた。

5　GRAPE-3 と GRAPE-4 — カスタム LSI による超並列機

GRAPE-2 と同様に浮動小数点 LSI を使って、改良版の GRAPE-2A や HARP-1 などを作ったが、それらについては省略し、はじめてカスタム LSI を使った GRAPE-3 とその高精度版の GRAPE-4 をみていこう。

GRAPE-3 は富士ゼロックス電子技術総合研究所との共同研究で開発した。具体的な作業分担は、ビットレベルの演算仕様記述と C 言語によるそのシミュレータを東大側で開発し、それにもとづいてゼロックス側で詳細な論理設計をするというものである。 GRAPE-1 のパイプラインを若干高精度にし、また ROM による演算をロジックによるものに変更して回路規模を小さくした。

最初はこのチップを 24 個載せたボードを 2 枚作り、 GRAPE-3 と名付けた (図 4)。これは

る。

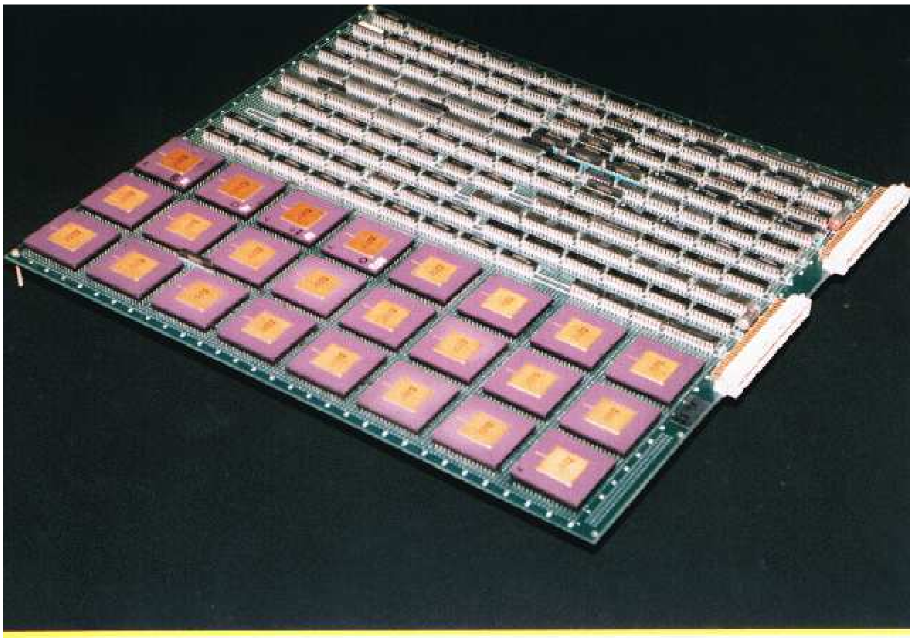

図 4: GRAPE-3。

いろいろ問題があり、クロック 10 MHz 程度でしか動作しなかったが、それでも2枚合わせたピーク性能が 14.4 Gflops とそれまでの GRAPE の100倍程度になった。その後、細かな設計変更をし、プリント基板化した GRAPE-3A を開発した。こちらは20-25MHz で問題なく動作するようになった。GRAPE-3A は現在も（株）ジャパン-EM から販売されており、現在世界各国の約30 箇所で計80枚ほどが使われているようである。

GRAPE-3 や 3A では複数のチップが並列に動作する。並列化のしかたは極めて安易であり、メモリはボード上の全パイプラインチップに、同一のデータを放送する。各チップのレジスタには別の位置データを書き、それぞれが違う粒子への力を計算するわけである。この形の並列化には、並列度を増やしても必要なメモリバンド幅が増えないという大きな特徴がある。

GRAPE-3 の成功もあって、首尾良く文部省から科研費特別推進研究をいただくことができたので、1992年度から高精度版の GRAPE-4 の開発にかかった。こちらは約2000 チップを並列化して 1 Tflops 以上を実現することを目指した。

ボード1つには48個の重力計算パイプラインを載せ、GRAPE-3 の場合と同様メモリを共有する。さらに、「仮想マルチパイプライン」名付けた方法を使って、重力計算パイプラインチップはボード全体の2倍のクロックで動作し、見かけ上2本パイプラインが入っているようにみえるようにした。このため、96個の粒子への力が並列に計算される。

システム全体は36枚のボードからなり、それらはそれぞれ違う粒子から同じ96 個の粒子への力を計算する。これを、途中の集計用のハードウェアとホスト計算機の2段階のツリー構造で合計する。このような階層的なネットワークを使うことで、2000 本近いパイプラインを効率的に利用できている。

GRAPE-4 は当初の計画通り1995年夏に完成し、ピーク速度 1.08 Tflops を実現した。これは

図 5: GRAPE-4。

専用計算機ではあるが科学技術計算用計算機としては世界で初めてテラフロップスを越える性能を達成したものであり、1995 年、1996 年と連続して IEEE のゴードン・ベル賞を獲得することができた。図 5 に GRAPE-4 を示す。

GRAPE-4 の科学的な成果としては、最初に述べた球状星団の進化の計算を 3 万 2 千体まで行ない、「重力熱力学的振動」と名付けられた非線形振動が実際に起こるということを実証することができた。その後は、月の形成から銀河、銀河団まであらゆるスケールの問題に適用され、重要な成果をあげてきた。これらについては最近 Science 誌に書いたレビュー [6] をごらんいただきたい。

6 GRAPE-6 — 次世代機

GRAPE-4 でさまざまな新しい成果がでると、もっと速い計算機が欲しくなる。また、半導体技術はどんどん進んでいるので、新たに開発すれば GRAPE-4 よりもはるかに高速なものを作ることができる。GRAPE-4 の成果を評価して頂けたこともあってか、1997 年度からスタートした日本学術振興会未来開拓学術研究「計算科学」の下のプロジェクトのうちの一つ、「次世代並列計算機開発」のなかのサブプロジェクトとして、5 年計画で GRAPE-6 の開発をスタートさせることが出来た。なお、その間に GRAPE-3 の後継である GRAPE-5 も作った。GRAPE-6 では、GRAPE-5 よりさらに進んだ半導体技術を使うことで一層の高速化、高並列化をはかり、チップ単体あたり 40 Gflops 程度、システム全体としては 100 テラフロップス以上の性能を実現することを目標にしている。この原稿執筆時点 (1999 年 2 月) で近いうちにサンプルチップが入手できる見込みである。

なお、GRAPE-6 計画においては、重力計算だけでなく、様々な粒子間相互作用に対応できる多用途計算機も作ろうということで、カスタム LSI を使ったものの他にパイプラインチップに FPGA を使ったものも開発している。こちらは、集積度、動作速度の関係からカスタム LSI をつかった重力専用計算機に比べれば 1-2 桁性能がおちるものの、分子動力学計算におけるファン・デル・ワールス力や、粒子を使った流体計算、あるいはメッシュレス法による構造計算や流体計算などの様々な応用に利用出来るものとなる予定である。

7　分子動力学計算

タンパク質の分子動力学シミュレーションなどでは、恒星系とほとんど同じような多体系の数値計算をする。ファン・デル・ワールス力も計算できるようなものを作れば分子動力学にも使えるということで、GRAPE-2A(浮動小数点演算チップをつかったもの), MD-GRAPE (カスタム LSI) 等も開発してきた。現在は、1995 年に東大から理化学研究所に移った戎崎が分子動力学専用で 150 テラフロップスのピーク性能を目指す MDM (Molecular Dynamics Machine) を開発中であり、今年中にも完成する予定である。MD-GRAPE は商品化されている。MDM が完成すれば、その商品版は広く使われるようになるものと期待している。

8　専用か汎用か？

このような専用計算機と、汎用計算機はどういう関係にあるのであろうか?私は、双方が競争することによって初めて健全な発展が図れると考えている。汎用計算機の上でアルゴリズムを開発すると、どうしても現在利用可能な計算機アーキテクチャによって思考が制限される。現在利用可能な計算機アーキテクチャというのは必ずしも他にあり得ないという必然的なものではないので、これではいろいろな可能性を見落としていることになる。

それに対し、専用計算機を作るという場合には、今度はアーキテクチャが計算機を作る人のアルゴリズムや問題についての理解、さらには計算機技術に対する知識の程度によって制限される。その全体が統合されないと、なかなか満足に動くものはできないのである。そのかわり、汎用計算機とは全く違ったアーキテクチャをとることでより高い性能が実現できることもある。GRAPE ではそれなりの成功を収めたといってよいであろう。

GRAPE がそれなりの成功を収めたのは、粒子系のシミュレーションが専用計算機に極めて適した問題であったためという面は無視できない。粒子間相互作用の計算が計算全体のほとんどを占め、これはツリー法や高速多重極展開法などの洗練された方法を使っても変わりない [8]。このため、比較的簡単な粒子間相互作用を計算するハードウェアと、アルゴリズムの複雑な部分を処理する汎用計算機を組合わせることで、非常に多様な応用をもつシステムを構築できるからである。

これに対し、同じような大規模数値シミュレーションでも、格子を使った流体計算などの場合には、状況はかなり違ってくる。多くの場合に、計算のこの部分が一番大変といったものが明確ではなく、格子点の数が多いということで全体の計算量 (と必要メモリの量) が大きくなってい

るからである、この場合には、結局はプログラマブルな超並列計算機のようなものが有効であるように思われる。もっとも、非構造格子とか適応格子とかいう話になるとどうすればいいかよくわからないということもあり、なにか新しいアプローチが必要かもしれない。

9　半導体設計技術の変化と専用計算機の将来

我々は GRAPE-3 の 1 ミクロンから GRAPE-6 の 0.25 ミクロンまで、4 世代にわたる半導体技術の発展につきあってきたわけだが、実感としては LSI 開発は急速に困難になってきている。設計ツールは進歩した面もある。しかしながら、デバイス技術の進化が、設計、検証を極めて困難な作業にしつつあるのである。つまり、ハードウェアの規模に対して比例以上にシミュレーションや設計の計算量は増えるのに、設計に使う計算機の速度はせいぜい比例してしか上がらない。このため、シミュレーションやレイアウトなどに非常に時間が掛かるようになってきているのである。また、トランジスタが高速化した分、相対的に配線の影響が大きくなり、これもレイアウトを非常に難しくしている。また、開発コストが上昇したことも、カスタム LSI の敷居を高くしている。

これからさらに微細化がすすむと、上の問題はさらに悪化する。さらに、設計が困難になった分、LSI の開発数が減り、そのために開発ソフトウェアの進歩が遅滞し、一層設計が困難になるという悪循環に落ちいっているようにも思われる。マイクロプロセッサの世界で独占が進んだことの一つの原因はここにあるであろう。

これの解決というわけにはならないかもしれないが、一つの方向は大規模 FPGA による再構成可能計算機ということになるだろう。 現在の FPGA はかなりの規模の回路を集積出来るところまで大型化した。FPGA 上ではカスタム LSI 開発のコストをかけることなく、実際にハードウェアに様々なアルゴリズムをマップして評価したり、また実用に使ったりすることが可能になる。今後は専用計算機でも小規模なものは FPGA で実験され、そのなかで大規模化によって大きな利益があるものをカスタム LSI にしていくといった住み分けが重要になってくるものと思われる。

参考文献

[1] Applegate J. H., Douglas M. R., Gursel Y., Huner P., Seitz C. L., and Sussman G. J. (1985) A digital orrery. *IEEE Transactions on Computers* C-34: 822–831.

[2] 杉本大一郎 (1994) 専用計算機によるシミュレーション. 朝倉書店, 東京.

[3] 牧野淳一郎 (1998) 高速多重極展開法とツリー法—多体シミュレーションのための高速算法, 応用数理 8: 277–287.

[4] Barnes J. and Hut P. (1986) A hiearchical o(nlogn) force calculation algorithm. *Nature* 324: 446–449.

[5] Greengard L. and Rokhlin V. (December 1987) A fast algorithm for particle simulations. *Journal of Computational Physics* 73: 325–348.

[6] Hut P. and Makino J. (1999) Astrophysics on the grape family of special-purpose computers. *Science* 283: 501–505.

[7] Hachisu I. and Sugimoto D. (1978) Gravothermal catastrophe and negative specific head of self-gravitating systems. *Progess of Theoretical Physics* 60: 123–135.

[8] Makino J. and Taiji M. (1998) *Scientific Simulations with Special-Purpose Computers — The GRAPE Systems.* John Wiley and Sons, Chichester.

[9] Sussman G. J. and Wisdom J. (1992) Chaotic evolution of the solar system. *Science* 257: 56–62.