専用計算機による宇宙物理

[1] 東京大学大学院総合文化研究科　牧野淳一郎

1　専用計算機とは

ここでは、専用計算機によるシミュレーションというものの考え方について簡単にまとめる。我々のグループでつくってきた専用計算機のより詳しい解説には杉本[(1)]が、また、最新の成果については牧野・泰地[(2)]がある。

1940 年代に電子計算機が登場して以来、ほとんどの大規模シミュレーションは「汎用」計算機で行なわれてきた。汎用計算機というのは、要するに演算回路とメモリをつなぎ、指定した順序で指定した演算ができるような制御回路をつけたものと考えることができる。(図 1) これは 1940 年代から今に至るまで基本的には変わっていない。

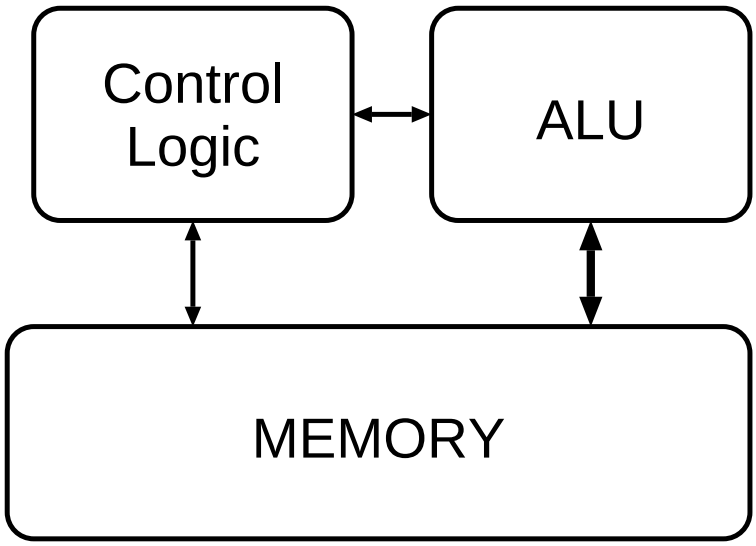

図 1: 汎用計算機の概念図

[1] 〒 153 東京都目黒区駒場 3-8-1
Email: makino@chianti.c.u-tokyo.ac.jp

これに対し、 専用計算機」というのは、計算アルゴリズムをある程度まで直接ハードウェアで実現したものということになろう。

1970 年代までは、ハードウェア規模の大きさのために、問題向けの専用計算機というのは現実的なアイディアではなかった。アルゴリズムをハードウェア化するというのは、要するにいくつかの演算器を演算の順番に従って並べたパイプラインを作るということである。ところが、1970 年代までは汎用計算機でも 1 クロックに 1 演算はできていない。これは、1 クロックに 1 演算できるようなハードウェアが、当時の技術では現実的なコストで作れなかったためである。

この状況は、半導体製造技術の発展により大きく変った。過去 25 年間、半導体の集積度は 3 年で 4 倍というほぼ一定の速度で上がってきた。このために 80 年代にはアルゴリズム自体をハードウェア化した専用計算機が可能になった。デルフト工科大学の Bakker らが 82 年頃に完成させた DMDP[3] と、野辺山宇宙電波観測所 (現在は国立天文台) の近田らが 84 年に完成させた FX[4] がその例である。

DMDP は分子動力学法の専用計算機であり、相互作用の計算、粒子の位置、速度の更新、相関関数など結果の計算のそれぞれのために専用のパイプラインを持つ。演算パイプラインは市販の乗算器 (8 ビット) などを使って構成された。計算速度は約 150 Mflops 程度であり、当時のベクタプロセッサの理論ピーク性能と同等であった。

FX は電波干渉計のための相関器であり、その基本的な機能は各アンテナからの信号をリアルタイムでフーリエ変換することである。これは、当時利用可能になりだした数千ゲート規模のゲートアレイを約 5000 個使った大規模な機械であり、100 GOPS 以上という驚異的な演算速度を達成した。これは基本的にはハードウェア ・パイプラインによって FFT を行なう専用計算機である。

表 1: GRAPE の概要

名称	完成年	ピーク速度	その他
GRAPE-1	1989	240 Mflops	低精度、GPIB インターフェース
GRAPE-1A	1990	240 Mflops	低精度、VME インターフェース
GRAPE-3	1991	15 Gflops	低精度、48 カスタム LSI
GRAPE-3A	1993	5 Gflops/board	低精度 8 LSI、プリント基板化
GRAPE-2	1990	40 Mflops	単 / 倍精度浮動小数点
HARP-1	1993	180 Mflops	高精度エルミート公式用
HARP-2	1993	2 Gflops	GRAPE-4 用 LSI テスト用システム
GRAPE-4	1995	1.1 Tflops	テラフロップスシステム
GRAPE-2A	1992	180 Mflops	プログラム可能な相互作用
MD-GRAPE	1995	4 Gflops	カスタム LSI、 プログラム可能な相互作用

2 GRAPE

近田[5] は、FX のような専用パイプラインプロセッサのアイディアを、シミュレーションに適用するという提案をした。そのなかで、一例として、粒子間の重力相互作用だけを計算するハードウェアの大雑把な仕様について述べている。それを受けて始まったのが我々の GRAPE (GRAvity PipE) プロジェクトである。

表 1 と図 2 に、我々がこれまでに開発したシステムの計算性能と計算精度などを簡単にまとめる。GRAPE-1 と GRAPE-2 は、DMDP と同じように市販の LSI を使っている。これらはどちらも重力計算のためのパイプライン一本だけの計算機であり、計算速度は DMDP と大差ない。GRAPE-1 では、演算毎に違うデータ形式を使い、配線や IC の数を極力小さくする努力をした。これに対し、GRAPE-2 では市販の浮動小数点演算 LSI を使った。

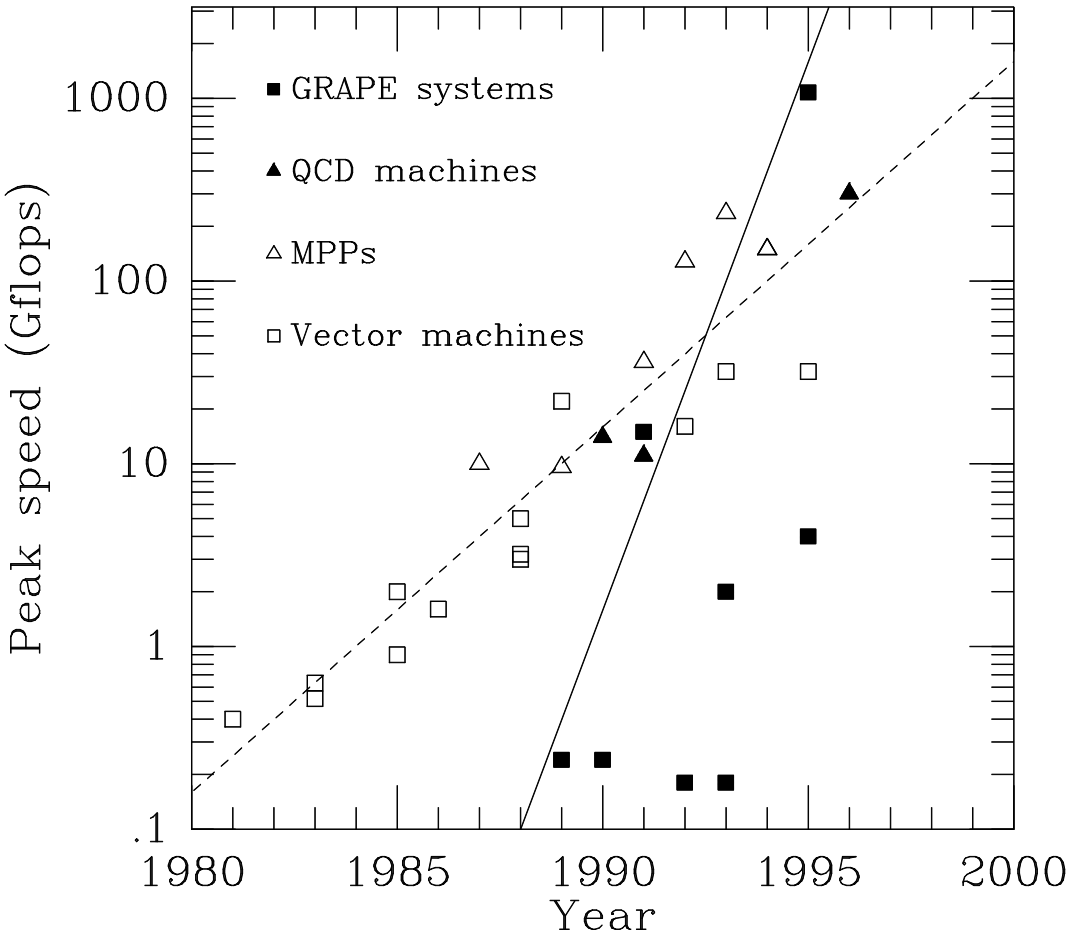

図 2: GRAPE のピーク性能と他のシステムとの比較

GRAPE-3 と GRAPE-4 では FX と同じように専用 LSI を開発した。しかし、FX ではいくつかの LSI を設計し、それを多数組み合わせて 1 つの演算パイプラインを構成したのに対し、GRAPE-3/4 では基本的に演算パイプラインを 1 チップにおさめ、多数のパイプラインは SIMD 的な処理を行なう。これはもちろん 10 年間のあいだの半導体製造技術の進歩による。大雑把にいうと、GRAPE-3 は GRAPE-1 を、4 は 2 をそれぞれ LSI 化し、並列化したものである。

GRAPE のパイプラインは、 DMDP の相互作用計算のためのパイプラ

インとほとんど同じものである。が、基本的な違いは、「汎用計算機につないで使う」という思想にある。

DMDP もホスト計算機を持つが、これは初期条件やシミュレーションのパラメータをロードしたり、計算の最終結果を回収したりするのが主な目的であり、計算実行中にはホストがすることは何もない。これに対して、GRAPE では相互作用の計算以外のことはすべてホスト計算機が行なう。

「重力多体系のシミュレーション」といってもいろいろであり、惑星数個の軌道の長時間積分 (10^9 ステップ以上) といったものから、宇宙の大規模構造の形成のシミュレーションの場合のように 10^7 個もの粒子を使う代わりに時間ステップの数は 1000 に満たないというものまである。これらは、時間積分につかう積分公式も違えば重力計算に必要な計算精度も違う。

ハードウェアにするところを重力相互作用の計算だけにして、時間積分などはホスト計算機が行なうことにすれば、どんな積分公式でも使える。そればかりか、プログラム自体はホスト計算機の上で動くので、開発、デバッグは普通のプログラムと同じようにできる。また、すでにあるプログラムを手直しして使うこともできる。

計算精度に関しては、高精度にしておけばもちろん何にでも使えるが、低精度のものはハードウェアが小さくて済むために価格当たりの性能をあげられるし、開発も楽になる。このために、われわれは、まず簡単な精度の低いものを作り、その経験をもとに高精度の機械を作るようにしてきた。

GRAPE は、これまで、さまざまな計算に使われてきた。我々のグループで行なったものでは、例えば惑星形成過程のシミュレーション、球状星団の進化、銀河中心におけるブラックホール連星の形成とその進化、銀河同士の衝突、合体、銀河団の進化、多重重力レンズによる 3K 背景放射の非等方性の変化、などがあげられる。また、GRAPE-3A はコピーをコマーシャルベースで購入することができるので、他のグループによっ

て宇宙の大規模構造の形成、銀河や球状星団の形成などのシミュレーションが行なわれている。現在では GRAPE-3A を導入した研究グループは 20 以上になった。また、渦糸法を使った 3 次元流体のシミュレーションにも使われるようになりはじめている。GRAPE-4 も、小規模なシステムがイギリス、ドイツにあり、フランスにも導入される予定である。さらに、分子動力学計算用に重力以外の相互作用も計算できるようにしたものが、画像技研と富士ゼロックスの 2 社から販売されている。

このように広くさまざまな問題に使うことができるのは、重力計算以外のすべてをホスト計算機が行なうからである。例えば、ブラックホールを持つ系の計算や惑星形成の計算では、ブラックホールや太陽からの重力は高い精度を必要とするためにホスト計算機で直接計算する。銀河形成のシミュレーションでは、SPH 法 を使った自己重力流体計算をする。重力は GRAPE が扱い、計算量の少ない流体計算の部分はホストで行なう。渦糸の場合には、渦度の 3 成分を別々に計算する。分子動力学計算の場合、クーロン力や分子間力は専用機で計算し、より複雑な分子内の結合の処理はホストで行なっている。

GRAPE-4 は科学技術計算用の計算機としては現時点では世界最高速のものを、総費用 1.8 億円で実現した。科学的な成果もすでにかなり上がっている。また、1 テラフロップスという速度は、今後 5-10 年に渡って GRAPE-4 が有用であることを意味するものであり、これからいっそうの成果をあげることができると期待している。

3 今後

GRAPE-4 は 1992 年に利用可能であった技術に基づいている。例えば 2000 年に完成することを目指して同程度の予算で新しい機械を作ると、1998 年ころの技術を使うことになる。この場合、ほぼ 100 倍程度の速度向上が可能になる。仮に 10 億円程度の予算を使うとすれば、1 ペタフロップスの速度が実現できよう。

同じ予算で速度を 100 倍にするには、まずクロックを 5 倍程度にあげる。現在の GRAPE-4 パイプラインのクロックは 32 MHz である。最近の高速 CPU では 200 MHz 以上が普通になっているので、1998 年の技術で 160 MHz は容易であろう。さらにパイプラインを 1 チップに複数収納する。使えるトランジスタ数は約 20 倍になっているので、クロックの 5 倍と合わせて 100 倍が実現できる。

普通の計算機ではこれほどの性能向上はできない。実際、過去何十年もの間、計算機の性能向上はピーク性能で 10 年で 100 倍、実効性能はさらに低いものであった。これは、根本的には、図 1 のような演算器とメモリという構成からくる制限である。トランジスタの数の増加を有効に生かすためには演算器の数を増やす必要がある。増やした演算器を有効に使うためにはメモリから十分な速度でデータを供給できないといけない。このために、仮にメモリと演算器の間の信号の周波数をチップ動作周波数に比例してあげられたとしてさえ、メモリと演算器の間の配線本数が演算器の数に比例して増えないといけない。

現在のマイクロプロセッサは 10 や 20 の浮動小数点演算器を集積できるだけの大きさをもっている。それにもかかわらず、多くのチップは依然 1 組の演算器しかもたず、しかも実際のプログラムでは多くの場合チップのピーク性能に比べてずっと低い性能しかでない。これは基本的にはメインメモリと CPU チップの間のデータ転送を速くすることが難しいためである。

GRAPE の場合、まず複数の演算器がパイプライン化されることで必要なデータ転送速度が減る。さらに、重力が遠隔相互作用であり、相互作用が N 対 N であるために、複数のパイプラインがメモリから同じデータを受けとる (それぞれ別の粒子への力を計算する) ことでさらにデータ転送速度を落すことができる。このために、並列度を増やしていってもデータ転送速度をそれほど増やす必要はない。

それでは、差分法による流体計算のような、近接相互作用の場合には GRAPE のような専用化したパイプライン、あるいはもっと違った専用

計算機は可能だろうか。

一つの方法は、現在の汎用並列計算機の構成を保って、プロセッサとメモリを 1 チップにするということである (Processor in Memory, PIM)。これまでは、SRAM はともかく集積度の高い DRAM と論理回路を 1 チップに集積するのは難しかったが、最近はそうでもなくなった。例えば東芝はゲートアレイと 16 Mbit の DRAM を集積したものを商品化している。このようなチップの場合、メモリと演算器の間の転送幅はほとんど無制限に大きくできる。

DRAM を集積できるゲートアレイで現状でどの程度の速度が実現可能か見積もってみよう。論理回路に使える部分を 50 万ゲートとすれば、64 ビットの浮動小数点演算ユニット (乗算器と加算器) が 8 個程度は実装できる。これらを 100 MHz で動かすとすれば、チップあたり 3.2 Gflops となる。LSI の量産価格は 1-3 万円程度と思われる。例えば 3,000 個程度 LSI を並べれば、 10 Teraflops の 「汎用」並列計算機が開発費を含めて 1-2 億円程度の製造コストで作れることになる。32 ビット精度ならその 4 倍の速度、チップ当たり 12.8 Gflops が実現できる。

このようなシステムの大きな問題点は、メモリ容量が小さいことである。3000 チップのシステムでも、メモリサイズは 6 ギガバイトにしかならない。外づけのメモリを使えば安価、大容量にはできるが、速度低化は避け難い。例えば同期 DRAM などを使っても、それほどコストをあげずに実現できるのは LSI 1 個あたり $1 \sim 2$ GB/s といったところなので、メモリアクセスに対して演算数が 10-20 倍は必要になる。GRAPE では、計算量が多いためにメモリ量はそれほど問題にならず、ペタフロップス計算機でも 100 ギガバイトもあればいいが、流体計算ではそうもいかないだろう。

GRAPE のような専用パイプラインはどうであろうか ?演算器の部分そのものは、必要な計算精度に最適化することなどで 5-10 倍程度性能をあげるのは難しくはない。しかし、メモリを外づけにすれば、メモリの速度が性能を決め、容量がコストを決めることになるのは汎用並列計算

機と同じなので、GRAPE の場合のように何桁も価格性能比をあげることはむつかしい。

まとめると、PIM あるいは GRAPE のような考え方で近接相互作用が主な系のための高性能のシステムをつくることは不可能ではないが、メモリ容量が大きくできないという問題がある。もちろん、これは DRAM 搭載のカスタム LSI と普通の DRAM の値段の比にもよるので、5-10 年先になれば、 十分なメモリー容量が安価に得られる可能性はある。しかし、その時には、汎用の並列計算機自体が PIM になっているかもしれない。

1) 杉本 (編著):専用計算機によるシミュレーション、(朝倉書店,1994).
2) 牧野、泰地:計算科学と 「専用」計算機, パリティ 11(1996), No. 4, 63-66.
3)A. F. Bakker and C. Bruin: A Special Purpose Computer for Molecular Dyanamics Calculations. *Special Purpose Computers* (ed. B. J. Alder, Academic Press, 1988) 183-232.
4) 近田: 天体観測用の信号解析スーパープロセッサ, 科学 54 (1984), 619-628.
5) 近田: 計算機を使う、計算機の技術を使う, 「恒星系力学」研究会集録 (昭和 63 年度科学研究費補助金研究成果報告書 「自己重力系としての恒星系の力学的進化」, 1989) 152-156.