

コンピューター・シミュレーションが切り拓く天文学——星から宇宙の果てへ——(8)

重力多体問題専用計算機 GRAPE

戒崎俊一*・伊藤智義*・牧野淳一郎*・杉本大一郎*

宇宙には、球状星団、銀河、銀河団、超銀河団等、多くの質点が互いに万有引力(自己重力)を及ぼし合っている重力多体系が数々ある。このような系をシミュレートしようとする、計算時間が膨大にかかり、これまでは1万程度しか計算できなかった。いま、天文の世界ではこのような重力多体系専用の計算機を作る計画が進行しており、既にワークステーション用の GRAPE-1 が動きだしている。今後専用チップを制作すれば 1 Tflops (テラフロップス=1000 Gflops) の極超高速計算機が実現し一気に百万体の計算が可能になる。

重力多体系は、重力で相互作用しているたくさんの粒子からなる系である。銀河や球状星団などが天体重力多体系と見なすことができる。重力多体系はニュートンの運動方程式と万有引力(重力)だけに支配されるきわめて単純な系であるにもかかわらず、非線形性に富んだ奇妙な振舞いをすることが多い。3体以上の場合解析解がないので数値実験で研究することになるのだがこれがまた大変である。重力は遠方まで届くので、 N 個の粒子の位置を更新するのに $N(N-1)/2$ このペアに働く相互作用を全部考慮しなければならない。 N が大きいときにはその計算が膨大になるので、現在最高速のスーパーコンピューターをもってしても数万体の計算が限度である。そのとき計算時間の大部分は重力計算に費されることになる。一方、重力多体系の三次元構造を明らかにし、銀河の観測と比較するためには、最低百万体の数値実験をしなければならない。このためには、現在最高速のスーパーコンピューターの千倍の演算速度を持つ計算機テラフロップスマシンが必要となる。汎用の大型計算機がこのレベルに到達するのは早くとも10年後であると推測される。われわれはそれまで待たなくては行かないのだろうか?

よく考えてみると、うまい抜け道があることに気が付く。計算時間の大部分を占めるのは重力計算だから、汎用機のように任意の計算が速い必要性は必ずしもない。はっきりいえば、重力計算だけが十分速ければ他の計算はいつでも良いことがわかる。幸いなことに重力を計算する式は比較的単純で変更の余地はない。そこでわれわれは、重力計算専用の演算装置 GRAPE (GRAvity PipE) を自作し重力計算を飛躍的に加速することを試みている^{1),2)}。

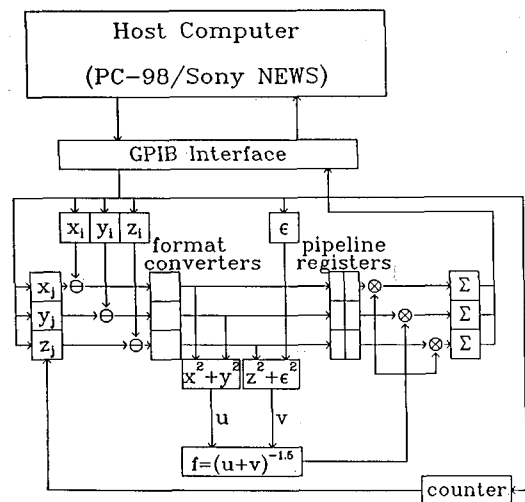


図1 GRAPE-1のブロック図

試作一号機 GRAPE-1

GRAPE-1は重力を計算するパイプライン GRAPE、重力以外の計算を実行するホストコンピューター、両者をつなぐインターフェースからなっている(図1)^{3),4)}。まずホストはGRAPEに、力を計算したい位置座標(X, Y, Z)をインターフェースを通じて送る。GRAPEはこれを元にパイプライン方式で重力を計算する。つまり、すべき演算を D 個の演算素子に分担して流れ作業で実行する。各素子のタイミングは共通のクロック信号でとる。一クロック毎にある素子における演算結果が次の段に入力される。このようにして一クロック毎にある位置におけるある一つの粒子からの力が計算されてパイプラインの最後にある積算器で足し込まれる。 $N+D$ クロックの後、座標(X, Y, Z)における全重力が積算器の中に得られホストに返される。ホストはこの力をもとに粒子の位置を更新し、GRAPE上のメモリーに書き込む。これを繰り返しながら数値実験が進んでいく。この

* 東大教養 Toshikazu Ebisuzaki, Tomoyoshi Ito, Junichiro Makino, Daiichiro Sugimoto: A Special Processor for Gravitational Many-Body Problems—GRAPE

ような構造では N 個の粒子の位置を更新するために必要なホストの計算量と GRAPE とホストの間の通信量は、粒子数 N に比例して増加するが GRAPE が行う計算量は N の自乗に比例してもっと速く増加する。 N が十分大きいときホストコンピューターとインターフェースはそれほど速くなくても全体の計算速度に影響を与えない。

GRAPE-1 では、一クロック (250 ns) でやっている演算は、30 浮動小数点演算ぐらいに相当しているので 120 Mflops 相当の性能がある。これは、一世代前のスーパーコンピューターと同程度の性能である。製作に要した材料費が 20 万円強であることを考えると極めてコストパフォーマンスがよい。

GRAPE-1 でおこなった連銀河の合体と銀河群の進化のシミュレーションがそれぞれ図 2 と図 3 に表わされている。合体して落ち着いたあとの構造は、楕円銀河の構造とよく似ているので、楕円銀河はこうしてできたのではないかといわれている。GRAPE-1 の力の計算精度は悪いが、このような集団的で激しい緩和の数値実験では十分であることが誤差解析によりわかった⁵⁾。実際、上の数値実験を通じ系の全エネルギーは数パーセントの精度で保存している。また、スーパーコンピューターを用いて同じ初期値から出発した計算結果は、GRAPE-1 を使った結果とよく一致している。

将来計画——テラフロップスマシン

2 号機の GRAPE-2 は国立天文台の共同開発研究で完成した。現在、科学計算に向けて調整中である。GRAPE-2 では、重力を単精度 (32 ビット) で計算する。ただし、精度が必要な部分は倍精度 (64 ビット) で行う。演算には、市販されている浮動小数点演算素子を用いる。GRAPE-2 は GRAPE-1 の精度ではできなかった 2 体衝突による緩和を正しく数値実験できる。

GRAPE-2 が完成した後は、複数の GRAPE をホストコンピューターに並列に接続することを考えている。各 GRAPE は自分に割り当てられた粒子からの重力をたしあげて、ホストに返す。ホストが最後にそれらを足し合わせた後、粒子の位置を更新すればよい。このようにすれば、GRAPE の本数に比例して、計算速度を速めることができる。現在の VLSI 技術を使えば GRAPE 一本を一つの素子の中に押し込めることが可能である。このような素子を千個程度使えば、現在最高値のスーパーコンピューターの千倍速いテラフロップスマシンを作り百万体の数値実験をすることも夢ではない。

他分野への応用

GRAPE の利用は銀河衝突の数値実験にとどまらない。

まず、星などの自己重力流体系の数値実験でも重力計算がネックになっている。そのような問題は、GRAPE を使って要素数を増やし、精度を飛躍的に上げることが可能であろう。

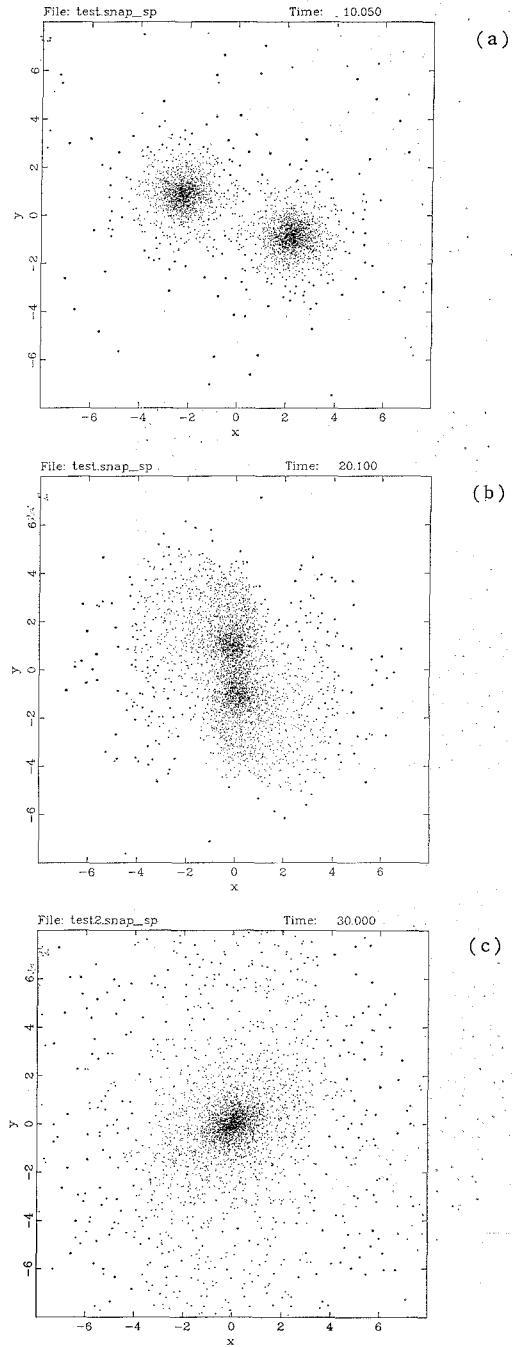


図 2 連銀河の合体の数値実験。(a) 初期条件。二つの銀河がお互いの周りを公転している。それぞれ4000個の粒子でできている。(b) 粒子をはじき飛ばした銀河同士は近づく。(c) 合体して1つの楕円銀河となった。

さらに、電気力によって相互作用している系のシュミレーションにもそのまま使える。

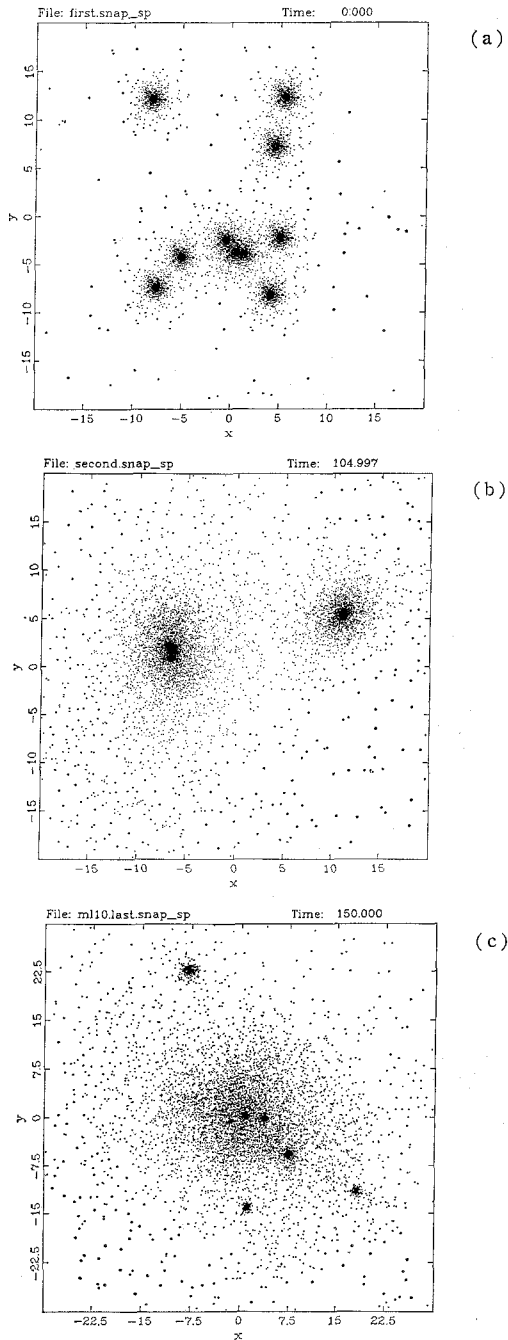


図3 銀河群の進化。(a) 初期条件。10個の銀河からなる銀河群、一個の銀河は1000個の粒子で表現されている。(b) 暗黒物質がない場合。銀河同士の衝突合体を繰り返し二つの巨大楕円銀河からなる連銀河に進化した。(c) 暗黒物質がある場合。暗黒物質の総量は可視物質の9倍とし、その重力場を外場として与えた。広がったハローの中に合体しきれなかった銀河の核が残っている。

強結合プラズマは、比較的、低温高密度で、静電エネルギーが熱エネルギーと同程度以上にある。重力エネルギーが熱エネルギーと同程度にある自己重力系と同様、強結合プラズマは密度ムラが生じ、非線形で奇妙な振舞いをすることが多い。GRAPEを使った強結合プラズマの大規模な数値実験は、慣性核融合実験で生ずるプラズマや中性子星の内部の物質の物性の理解を大いに進めるであろう。

また、希薄なプラズマでも強い不安定性が存在する場合は粒子の分布関数がマックスウェル分布からずれて、MHD近似が使えない。このようなプラズマの大規模な数値実験がGRAPEで可能になれば、無衝突衝撃波における宇宙線加速の問題も明らかになっていくと考えられる。

タンパク質は、たくさんの原子が集まってできた高分子化合物であり、酵素として生命現象に深くかかわっている。その三次元構造は、酵素としての機能に大きな役割を果たしていることが知られている。実は、静電的な相互作用がタンパク質分子の三次元構造に重大な影響を与えているらしい。タンパク質分子内の各原子の運動の数値実験にGRAPEはそのまま使えるであろう。

計算機も自作する時代

解くべき問題の本質を捉えて肝心の部分を自作すればその問題には世界一速い計算システムを作ることができる。最近のマイクロエレクトロニクス技術の進歩でこのような計算機を作って自作するやり方が十分なりたつようになった。FORTRANプログラムを書く代わりに市販の浮動小数点演算素子を組み合わせれば、そこそこの労力で専用演算機を作れるようになったのである。また、専用LSIを作ることもずいぶん簡単になった。

ハードウェアから設計する自由度を持つことは、計算手法に新しい可能性をもたらすことになるかも知れない。今までは、ハードウェアが与えられた中で最適な計算法を探してきた。しかし、ハードウェアも自由に変えられるとして計算法を考え直すともっとずっとうまい手が見つかる可能性がある。

このように、われわれが始めた専用計算機を自作する試みは今後数値実験物理の大きな流れになるのではないかと考えている。

- 1) Sugimoto, D., Chikada, Y., Makino, J., Ito, T., Ebisuzaki, T. and Umemura, Y., *Nature*, 1990, **345**, 33.
- 2) 杉本大一郎, *パリティ*, **4**, 74.
- 3) Ito, T., Makino, J., Ebisuzaki, T. and Sugimoto, D., *Computer Physics Communications*, in press.
- 4) 戎崎俊一, *パリティ*, **5**, 54.
- 5) Makino, J., Ito, T. and Ebisuzaki, T., Submitted to *Pul. Astron. Soc. Japan*.