

天文・物理学における専用計算機

—いかにして手を抜くか—

牧野 淳一郎

〈東京大学教養学部 情報図形科学教室 〒153 東京都目黒区駒場 3-8-1〉

天文・物理学におけるシミュレーションの専用計算機を概観し、いかにすれば専用計算機で研究成果をあげられるかを論じる。取り上げるのはイジングモデル専用機、QCD 計算専用機、多体問題専用機である。成功するためにもっとも重要なことは、たいへんな計算だけを取り出してそこだけ専用化し、それ以外の計算は汎用の計算機をつないで置いてそれにやらせるということである。シミュレーションの計算全部をやってくれる計算機をつくと、汎用的になってコストのわりには性能がでないかまたは柔軟性がなくなって適用範囲が限られるかのどちらかになってしまう。またハードウェアやソフトウェアの開発もたいへんになる。

1. はじめに

科学、工学の様々な分野で、計算機によるシミュレーションはますます重要になってきています。これはシミュレーションが実験とくらべていくつかが優れた点をもっているからです。

多くの分野では、シミュレーションはなにを実験するべきかを定めるのに使われます。飛行機や自動車の設計をするためには、どういう形にしたら流体力学的な特性がどう変わるか、最終的にはどういう形にするのが一番いいかを知る必要があります。模型を作って風洞実験をやるのは莫大なコストがかかります。計算機を使ってシミュレーションしてやれば、いろんな形をそれほどコストを掛けずにテストできます。シミュレーションの答えが十分信用できるとわかっていれば実験なしで本番の飛行機なりなんなりを作ることもできます。

これに対し天文や物理の分野では、そもそも実

験することが不可能な現象をシミュレーションしたいことが普通です。例えば天文学の場合、実験というのはおよそ不可能です。星がどのようにして進化するかを調べるためにちょっと実験室で星を作ってみてというわけにはいきません。このために計算機を使ってシミュレーションをするのが、観測された現象を理解する上で非常に重要な役割を果たします。

物理の場合もおなじようなことが起きます。物理学では実際の現象をなるべく単純化した数学モデルで理解しようとしています。この数学モデルがどうふるまうかが計算機を使わなくてもわかればいいのですが、非常に簡単なモデルであっても計算機を使ってシミュレーションしてはじめてそのふるまいがわかるということも往々にしてあります。

分野によらず、計算機シミュレーションは大変な計算になります。これは、いまの計算機の能力ではまだまだ十分な分解能や計算精度をもった計算ができないからです。十分ではないので、少しでもよくしようとして何日も（場合によっては何ヶ月も）計算機を走らせ続けるわけです。

Junichiro Makino: Special-Purpose computers in astronomy and Physics — How to get maximum results with minimum effort

数日くらいならまあ待てばいいのですが、何ヶ月ともなると話が違ってきます。1つが数日の計算でも100個とかしないとイケなかったとすれば1年になってしまいます。そういうわけで何とかしてもっと速く計算したくなります。

それではどうやって速くするかということになりますが、基本的には簡単で、いま使っているのよりも速い計算機を使えばいいわけです。問題はいま使っているのよりも速い計算機はまだ存在しない場合です。こうなると我慢して使うか、それとも自分でもっと速い計算機を作るかしかなりません。自分で作るなら、当面自分が解きたい問題さえできればいいわけです。そこで「専用計算機」というものがうまれてくることになります。

ここでは、その様な天文や物理向けの専用計算機の試みをいくつか紹介します。2節では、イジングモデル専用機についてまとめます。イジングモデルというのは、磁化のような現象の非常に単純化したモデルで、2次元とか3次元の格子上の各点がそれぞれ-1か1かのどちらかの値を持ち、まわりの状態と自分の状態とで次に自分がどうなるかがきまるというものです。3節ではQCD(量子色力学)専用機ということで開発されたいくつかの計算機についてまとめます。4節では重力多体問題専用計算機、すなわちわれわれのGRAPEシステムと、同じようないくつかの試みについてまとめます。最後に、専用計算機を使って成果をあげるための条件を考えてみます。

2. イジングモデル専用機

イジングモデルというのは図1のようなものです。2次元とか3次元の格子の各点がスピンという量をもっていて、それが-1(下向き)または1(上向き)の値をとります。この向きが例えば磁化の向きを表すわけです。系の温度が低いとそれぞれのスピンはあまり動きませんが、動くときにはどちらかといえばまわりと同じ向きになろうとします。しかし、温度が高くなるとまわりの影響



図1 イジングモデルの概念図。矢印がスピンの向きを表わす。

を受けないで勝手にパタパタ動くようになります。こうして、低い温度では全体がそろった動きを示すのに、ある限界を越えるとぐちゃぐちゃになってしまうわけです。たとえば鉄の場合、臨界温度である770度以上の温度にすると突然磁力がなくなります。これを相転移といいます。イジングモデルは、このような相転移現象の一般的な性質を探るのに使われています。

このような系のシミュレーションには、モンテカルロ法という方法を使います。まず2次元とか3次元の格子のなかからランダムに一点を選んで、その値を変えるかどうかをまたある条件に従って確率的にきめるという操作を繰り返します。

図2はオランダのデルフト工科大学のグループが10年ほど前につくったイジングモデル専用機DISP¹⁾の概念図です。これは上に書いた手続きをそのままハードウェアにしたもので、まずランダムにスピンを選び、そのスピンとまわりのスピンをメモリから読みだし、遷移確率を求め、別に発生させた乱数を使って実際に反転させるかどうかを決め、その値をメモリに書き込むということを繰り返すわけです。DISPの場合はこの処理はすべてホストコンピュータとは独立に行われます。

図3は東京大学(現在原研)の伊藤らが87年に作ったm-TIS²⁾です。m-TISの場合は専用計算機はスピンをしまうメモリを持っていません。ホス

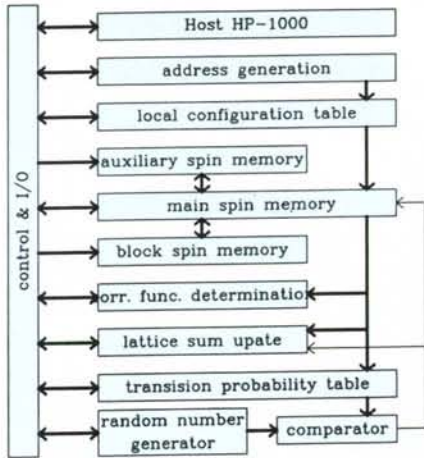


図2 Delft Ising System Processor (DISP).

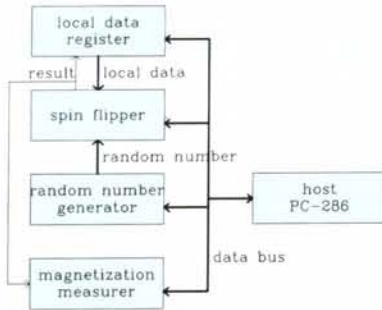


図3 mega-spin model of Tokyo University Ising Spin Machine (m-TIS).

ト計算機 (NEC の PC 98 の互換機) から 16 個のスピンのまわりの必要なスピンをまとめて送り、その 16 個を順に反転させてホスト計算機に送り返すという構成になっています。このために、スピンを端から順になめていきます。これは別にこういうやりかたでもいいことがわかっています。ランダムにスピンをよむのをあきらめたために、m-TIS は DISP に比べてずっと小規模なハードウェアでより高い計算速度を得ることに成功しています。

これらはそれぞれ、当時の汎用計算機なみの性能をはるかに安価に実現しています。しかし、残念ながら、必ずしも「イジングモデルなら専用機」というふうになったわけではありません。

いずれのマシンも、速度はその当時の第一線のスーパーコンピュータに比較すると見劣りのするものでした。極端なのは m-TIS の場合で、m-TIS の速度が 1.8×10^6 スピン毎秒に過ぎないのに対し、スーパーコンピュータで伊藤自身が 8.5×10^8 スピン毎秒の計算速度を得ています。つまり 500 倍も速度が違うわけです。これでは m-TIS を使う意味がほとんどないことになります。もちろん m-TIS は伊藤らが初めて作ったマシンであり、試作 1 号機としては十分な性能を持っているといえます。しかし改良形の m-TIS II でも、汎用性こそ増したものの速度自体は速くなっていません。

DISP の場合、速度が遅いのは一般性を持たせることにこだわり過ぎたためです。つまり、ランダムにスピンを選ぶやりかたをそのままハード化したために、極端に無駄の多いシステムになっているのです。m-TIS はシーケンシャルにスピンを反転させるという方法をとったためにずっと小さなシステムですんでいます。

m-TIS の問題は、ホスト計算機の上にデータがあるのでシステム全体の性能がホスト計算機の性能に制限されるということです。スピンは隣りとしが相互作用しないので、スピンを一回反転させるための計算量はそれほど大きくはありません。ホストのほうは一回反転させるためには 1 ビット送って 1 ビットもらう必要はあるわけですから、少ないとはいえそれなりの仕事をしています。m-TIS でこのような構成をとったのは、予算が極端に限られていたのがおおきな理由のようです (わずか 10 万円程度)。

3. QCD

QCD 計算というのは、格子ゲージ理論という素粒子論の基本原則となっている理論から、直接に例えば陽子のような素粒子のいろいろな性質 (例えば質量) をきめることができるものだそうです。私は詳しくは知らないのですが、QCD 自体に興味のあるかたはなにか別の本を見てください。

計算自体はイジングモデルの場合と同じくモンテカルロ法を使います。やはり格子を作ってその各点に値があり、その値を変えては繰り返し計算します。しかしイジングモデルの場合とは違ってたくさんの場所の値を並列に更新する方法を取っています。また、イジングマシンではスピン反転や磁化の計算のための専用回路を組んでいたのに対し、QCDマシンではいずれも汎用の演算回路をもったプログラム可能な計算機をたくさん並べることで高い性能を実現しようとしています。

QCD用の専用計算機を作っているのは世界に4~5グループありますが、どれもよく似た構成になっています。例えば筑波大で開発したQC DPAX³⁾(図4)の場合は、480枚のボードから構成されています。この1つ1つのボードには、CPU、浮動小数点演算LSIとメモリ、それからプロセッサ間通信のために必要な回路が乗っています。このボードを24×20の2次元格子につないで計算を分担します。ボード1枚あたり30 Mflopsで、全体で14 Gflopsの性能です。イタリアで作っているAPE-100ではトータルで4096個の演算器を3次元格子につないで、約100 Gflopsの性能をめざしています。

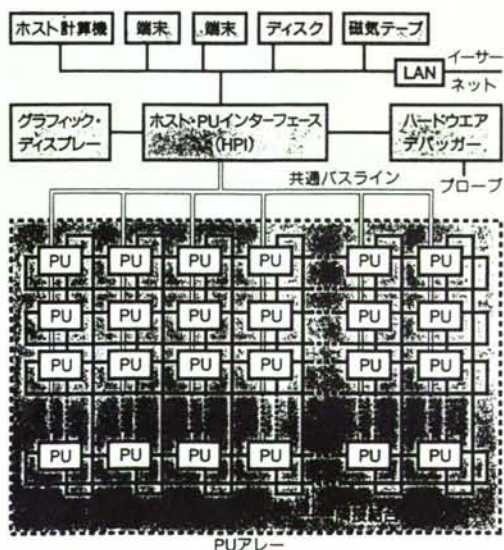


図4 QC DPAX.

これらの並列計算機では要するに普通の計算機をたくさん並べています。従って全体としての性能価格比は普通の計算機と同じ、言い替えれば商用の並列計算機やスーパーコンピュータと大きくは変わらないものになります。それでも10倍程度はいいですが、イジングマシンでは2~3桁よかったのにくらべると損な感じがします。もちろん10倍の違いはとても大きいのですが、もう少しやり方に工夫の余地がありそうです。

QCD計算機のプロジェクトは、どれも予算の規模がかなり大きいということも大きな特徴です。数億円程度のコスト、10 Gflops オーダの性能というのが現在できている、あるいは開発中のマシンの典型的なスペックです。このように大規模な予算を使ってスーパーコンピュータを越える性能を実際に達成したことはこれらのプロジェクトの大きな成果といえます。

4. 多体問題専用計算機

多体問題とは、 N 個の粒子があってそれぞれ相互作用しているときにどんなことがおきるかというものです。銀河系や銀河団は重力で相互作用する粒子の集まりと考えられます。このような多体系の場合、運動方程式は古典力学で与えられ、それを素直に時間積分していく方法をとります。

多体問題の特徴は、一つの粒子が他のたくさんの粒子からの力を受けるということです。例えば重力の場合では、基本的にすべての粒子からの寄与をいれなければなりません。原子や分子が集まってできている系の場合、ファンデルワールス力なら比較的近くで済みますがクーロン力が利く場合は結局全部いれることになります。このために、相互作用の計算のところが最もたいへんな計算になります。

図5はオランダのデルフトのグループが作ったDM DP⁴⁾です。これは、分子動力学のシミュレーション専用機です。このマシンもDISP(デルフトのイジングマシン)と同じように、すべての計算を

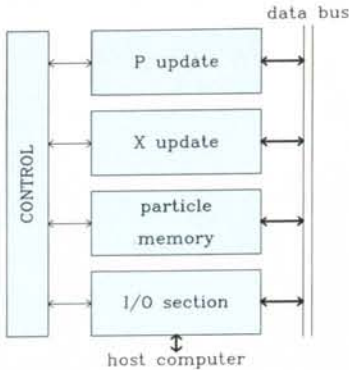


図5 Delft Molecular Dynamics Processor (DMDP).

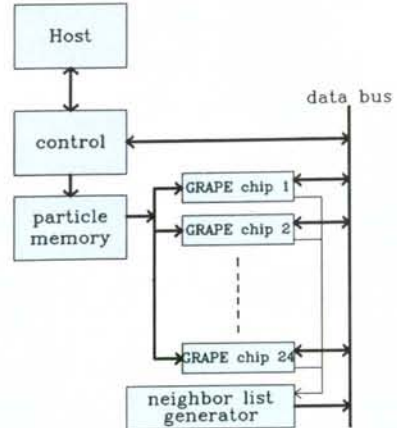


図6 GRAPE-3.

この専用機が行うようになっていきます。圧力、温度のような物理量の測定まで、この専用機がやります。ミニコンがつながっていますが、これは単にパラメータを渡したり最終結果を回収したりするだけです。ハードウェアは、37 cm×28 cmの基板10枚程度で、Cray-1と同等の速度を実現しました。

図6は我々が開発したGRAPE-3です。これは我々が開発してきたGRAPEシリーズの最新のもので、ピーク性能14 Gflops、実効性能10 Gflopsという現在の最高速のスーパーコンピュータをしのぐ速度を実現しました。GRAPEとDMDPとの違いは、イジングモデルでのDISPとm-TISの違いによく似ています。GRAPEでは、相互作用の計算という一番たいへんなところだけを専用のハードウェアでやり、それ以外の細かい計算はすべてそれにつないだホスト計算機（ワークステーション）でやるという構成になっています。このためにGRAPEのハードウェアはDMDPよりもずっと簡単で、GRAPE-3でもボード2枚(まったく同一のもの)で済んでいます。ハードウェアの開発のための人手は非常に少なく、数人のチームで半年に1台のペースで改良型を作っています。DMDPは一台のマシンを数年かけて開発し、そのあともう同じようなタイプのマシンは作っていません。

また、GRAPEでは時間積分や結果の処理のような計算はホスト計算機でやっているの、そのプログラムは普通の計算機で走るものがそのまま使えます。DMDPの場合は、積分のやり方を変えることはできないし、結果の処理もあらかじめ作りこんでおいたことしかできません。GRAPEは相互作用の計算以外はすべてワークステーションでやるので、プログラミングの自由度は非常に大きく、様々な問題に適用できます。実際、GRAPEは、銀河のような多体系だけではなく自己重力のある流体やクーロン力で相互作用するプラズマといったさまざまな問題に使われています。また、我々の研究室で作ったマシンが国立天文台をはじめいくつかの研究機関で使われています。

GRAPEとm-TISの違いは、GRAPEの場合はシステム全体の性能がホスト計算機の能力に制限されないということです。これは、GRAPEの場合は専用ハードウェアの仕事がホスト計算機よりもずっと多いからです。つまり、相互作用はすべての粒子のペアについて計算するわけですから、計算量は粒子数の2乗に比例します。これに対し残りの計算は粒子数に比例します。使う粒子数は数万とかそれ以上ですから、GRAPEの方が一万倍くらい速くなってはじめてホスト計算機の能力

が問題になってくるわけです。これがホスト計算機の数十倍しか速くできなかった m -TIS との違いであり、比較的容易にスーパーコンピュータ以上の性能を実現できた大きな理由です。

5. いかにして専用機で効率をあげるか

ここまで見たように、計算物理の分野ではさまざまな専用計算機を作る試みがありました。すべてが非常に成功したというわけではありません。ここで取り上げたものはそれでも一応の成果はあがって論文になったものばかりで、計画だけで終わったものとかハードウェアを作りかけたけど完成しないで終わってしまったものもたくさんあります。

我田引水になります。我々の GRAPE はかなり成功した例だと思います。GRAPE の場合、非常に専用化したハードウェアを作り、それにシミュレーションの計算のうちで最もたいへんなところだけをやらせて、それ以外のところはホスト計算機にまかせています。このために、専用化したことによる高い価格性能比や開発の容易さとプログラマブルな汎用計算機の柔軟性が両立しています。

もっともたいへんなところだけを専用化し、ほかのところは普通の計算機にやらせるというのが、専用機をつくって成功する秘訣のようです。多体問題では、相互作用の計算が他に比べて圧倒的にたいへんです。しかし、他の問題も、ここだけ速くすればいいというところは必ずあります。それをとりだして専用化することで2—3桁の高速化はそれほど難しくはないはずです。

他のグループでは、 m -TIS 以外はすべての計算を専用計算機にやらせています。これでは開発するハードウェア、ソフトウェアが膨大になり、かけた労力のわりにはなかなか成果があがらなくなってしまいます。

QCD の場合は、計算機の専門家と共同で開発するということによって物理学者の負担を減らして

います。しかし、このやり方にも問題はあります。一つは、計算機の専門家だからといってちゃんと動くマシンを作ってくれるとは限らないということです。これは、計算機屋さんにとっては計算機をつくること自体が研究だからです。研究だから絶対にできるとわかっていることをしてもしょうがなく、失敗するかもしれないことをすることになります。また、どうしてもかなり汎用的なマシンとなります。このために価格性能比は本当に専用化した場合に比べると悪くなります。

イジングモデルや多体系では、問題に非常に特化したマシンが作られています。しかしデルフトのグループの場合は計算すべてを専用計算機にやらせたために開発がたいへんになっています。 m -TIS の場合には逆にホスト計算機が遅すぎるのがネックになってしまいました。

GRAPE では短期間で高性能の計算機を作ること成功していて、これは基本的には上でもいったようにホストと専用機の仕事の切りわけがうまくいっているからです。これは、言い替えれば、うまく手を抜いたからということもできます。頑張っただけでもできる機械を作ると、作るのがたいへんな上に使い勝手が良くないというわけで二重に損をすることになります (GRAPE と DMDP をくらべてみてください)。結局、専用機を作る時に良く考えて、性能が犠牲にならない範囲で専用化しないですむところは出来合いの計算機にやらせるというのが成功の鍵になるようです。

参 考 文 献

- 1) A. Hoogland, A. Compagner, and H. W. J. Blöte 1988, *Special Purpose Computers*, ed. B. J. Alder, (Academic Press, San Diego), p233.
- 2) 伊藤伸泰他, 1988, 日本物理学会誌, 43, 709.
- 3) QCDPAX の最新の情報は, 立花隆, 1991, 科学朝日 43, No 12, 124 に詳しい.
- 4) A. F. Bakker and C. Bruin 1988, *Special Purpose Computers*, ed. B. J. Alder, (Academic Press, San Diego), p183.