多体問題のための超高速専用計算機

東大・教養・宇宙地球科学 戎崎俊一

1. はじめに

われわれのグループでは重力多体問題専用計算機, GRAPE を開発している. これがタンパク質などの分子動力学シミュレーションにも使えそうなので, ここで報告したい. タンパク質との関係は後で論ずることにして, 重力多体問題についてまず述べよう.

重力多体問題とは多数の質点がお互いの重力で相互作用している系 (重力多体系) の振舞いを調べる問題である. 重力多体系は運動方程式

$$m_i \frac{d^2 \mathbf{r}_i}{dt^2} = \mathbf{F}_i \quad (1)$$

と万有引力の式

$$\mathbf{F}_i = - \sum_{j \neq i} \frac{m_i m_j (\mathbf{r}_j - \mathbf{r}_i)}{|\mathbf{r}_j - \mathbf{r}_i|^3} \quad (2)$$

に従うもっとも古典的な多体系である. 例えば, 宇宙に存在する銀河は多数 (10^{11} 個ぐらい) の星の集まりである. 銀河の大きさに比べて星は質点と見なせるので, 銀河は重力多体系で近似することができる.

重力多体系は非線形で奇妙な振舞いを示すことが多い. また, 3 体以上では解析解がないことが知られているので, 専ら数値シミュレーションによって調べられている.

しかしながら, 数値シミュレーションもそう簡単ではない. 重力は逆自乗則に従う遠距離力である. つまり, 粒子の分布に構造がある限りどんなに遠くの粒子からの寄与も考慮しなければならない. 粒子の数を N としよう. N 個の粒子に働く他の $(N-1)$ 個の粒子からの重力の寄与を足し上げるのに $N(N-1)/2$ 回の演算をこなさなければならない. このため現在最高速のスーパーコンピュータをもってしても数万体の銀河シミュレーションが精一杯であった. 一方, 現実の銀河を構成している星の数は 10^{11} 個ぐらいである. これを実現するのはとても無理としても, 銀河の 3 次元構造を明らかにして観測と比較するには最低 100 万個ぐらいのシミュレーションをする必要がある. つま

り, 現在最高速のスーパーコンピュータの百倍から千倍速いテラフロップスマシンが必要になるのである.

テラフロップスマシンが実現するのは早くても 10 年後, 場合によっては 20 年後と思われる. われわれはそれまでじっと我慢していなければならないのだろうか. そんなことはない. よく考えるとまい抜け道がある. 重力多体問題ではほとんどの計算時間は重力計算に費やされる. したがって, 重力計算さえ速ければ, 他の計算は遅くてもいい. そこで, われわれは重力を計算する専用の演算装置, GRAPE (GRAVity PipE) をつくり, 重力計算を飛躍的に加速することに成功した^{1), 2)}.

2. GRAPE の概念

図 1 は GRAPE の概念を示している. 専用の演算装置 (GRAPE) がホストコンピュータ (パーソナルコンピュータ, ワークステーションなど) にインターフェースを通して接続されている. ホストコンピュータから粒子のある時刻の位置座標を与えられた GRAPE は, これらの粒子からの重力を計算して足し上げ, ホストに送り返す. ホストコンピュータはそれを使って粒子の位置を更新する.

この様な構成はハードウェアの観点からみて望ましい性質を持っている. GRAPE が N の自乗に比例する計算をこなすのに対し, ホストコンピュータやインターフェースにかかる負荷は, N そのものにしか比例しない. 重力多体問題では N は非常に大きいから, ホストやインターフェースが遅くても, 全計算システムの足を引っ張ることはない. GRAPE システムはいわゆるコミュニケーションボトルネックを回避して性能を上げることができる.

また, ソフトウェアの観点からみても望ましい点がある. GRAPE はプログラム不可能である. つまり, プログラムを作らなくても勝手に動く. 重力の計算式はニュートン以来確立していて変更の余地はないから, これは重要な長所である. 一方, 重力以外の計算は高級言語でプログラムできるホストコンピュータで行われる. プログラマーは内部の詳細を知らなくても一種のサブルーチンとして GRAPE を使うことができる. 重力計算用のサブルーチンに代えて, GRAPE を呼ぶ

図 1

A super high-speed computer specialized to the many-body problems

Toshikazu EBISUZAKI

Department of Earth Science and Astronomy

College of Arts and Sciences University of Tokyo

図2 逐次方式とパイプライン方式

サブルーチンを使うことで既存のプログラムが直ちに走り始める。一般に、専用計算機の開発ではソフトウェアがネックになっている場合が多いと聞く。GRAPEではソフトウェアの問題は起こらない。

GRAPEではパイプライン方式で重力を計算する。図2はパイプライン方式の原理を示している。いま、 m 個のデータについて計算機が D 個の仕事をこなさねばならないとしよう。普通のスカラーコンピューターでは、図2aのように1個の中央演算装置が逐次仕事をこなして行く。1つの仕事にかかる時間を t とすると、全ての仕事が終わるまで Dmt の時間がかかってしまう。しかし、パイプライン方式では、図2bの様に D 個の計算を D 個の別々の演算装置に割り当て、流れ作業で処理する。こうすれば D クロック目から毎クロック毎に答えが出始め、 $(m+D)t$ の時間で全計算が終わる。つまり、 m が D に対して十分大きければ、スカラーコンピューターで行ったときの D 分の1の時間で計算が終わる。 D 個の演算装置が同時に働いたおかげである。

パイプライン方式を使うためには、あらかじめ計算手順がはっきりわかっていること、分けた仕事は独立で干渉しないことが必要である。重力計算はこの条件を満たしている。つまり、式は変更の余地はないし、1つの粒子ペアに働く重力はそれぞれ独立に計算できる。重力計算はパイプライン処理により加速することが容易である。

3. 低精度型：GRAPE-1

試作一号機 GRAPE-1は1989年の春から設計を始め、同年9月に完成した(図3)^{3),4)}。GRAPE-1は約30cm

×40cmの一枚の基板の上に作られている。当初4MHzのクロックで動作していたが、1990年5月からはICを速いものと置き換え8MHzのクロックで駆動することに成功した。GRAPEが1クロックで行う演算は普通の計算機では30浮動小数点演算ぐらいに対応しているのでGRAPE-1は約240MFlops程度に相当するピーク演算速度を持つことになる。粒子数1万のシミュレーションで約200Mflopsの実効性能を実現している。材料費は約20万円であることを考えるとときわめてコストパフォーマンスがよい。

図4はGRAPE-1のブロック図である。ボード上のメモリーに全粒子の位置が記録されている。ホストコンピューターがGRAPE上のレジスターに重力を計算したい粒子の位置座標を書き込むと、GRAPEが重力を計算し始める。1クロック毎にカウンターの出力が1つずつ増える。メモリーはそれに応じて新しい粒子の位置座標を出力する。パイプラインは流れ作業で座標データーを加工し最終段で力を積算して行く。 $N+D$ クロック後、全重力が最終段に得られているので、これをホストコンピューターに送り返す。

回路を配線する手間を考えると、計算する語長(精度)はできるだけ短いことが望ましい。GRAPE-1では力を計算する精度を8ビットまで切り詰めた部分もある。もちろん、精度が要求されるところには十分な長さの語長を使っている。それでも、銀河同士の衝突など激しい現象が起こっている場合には十分な精度で計算できることが詳しい誤差解析で分かった⁵⁾。念のため、スーパーコンピューターとGRAPE-1で同じ計算を行い、問題がないことを確かめた。

図3

図4a GRAPE-1 (表)

図4b GRAPE-1 (裏)

図5a GRAPE-2 (表)

図5b GRAPE-2 (裏)

4. 高精度型: GRAPE-2

もちろん、問題によっては重力を高い精度で計算する必要がある。銀河の中には100万個ほどの星が球状に集まった球状星団と呼ばれる天体がある。球状星団の熱的進化には星同士の二体重力散乱による緩和が重要な役割を演ずる。この場合、星同士の重力散乱を精度よく計算する必要がある。この様な問題にGRAPEを適用するため、高精度型のGRAPE-2を試作した(図5)⁶⁾。

GRAPE-2では力の計算を32ビット浮動小数点(単精度)で、桁落ち等が起こる最初の引算と最後の積算だけ64ビット浮動小数点(倍精度)で行っている。得られた全重力の精度は全演算を倍精度で行ったのと同じくらいである。演算には市販の浮動小数点演算素子を用いた。 r^2 から r^3 を計算する部分では浮動小数点部を指数部と仮数部に分ける。仮数部は2枚の1Mbitのテーブルを使った一次補間で、指数部は一枚のテーブルで変換する。GRAPE-2では x, y, z の3つのサブパイプラインを一本にして順次各方向の計算をすることにした。このため、GRAPE-1とは違い、3クロックに1回ずつ1つの粒子ペアの相互作用が計算される

ことになる。この結果、精度が4倍になったにもかかわらず、配線数は人間が手配線できる程度に留まった(約3000本)。また、約30×40cmの市販の基板一枚に収めることができた。

GRAPE-2は現在4MHzのクロックで駆動されている。3クロックで1相互作用計算していることを考慮すると約40Mflops程度の能力を持つことになる。GRAPE-2は国立天文台の援助を得て1989年夏から設計を始め1990年春に完成した。材料費は約百万円である。

5. 並列型: GRAPE-3

重力計算は容易に並列処理することができる。ある粒子に対する各粒子からの重力については加法定理が成立する。したがって、多数のパイプラインが別個に求めた重力の部分積和をホストコンピューターが回収し最後にこれを足し挙げればよい(図6a)。また、時間積分法によってはいくつかの粒子に対する重力をたくさんのパイプラインで並列的に計算することも可能である(図6b)。

GRAPE-3ではこのような並列処理により重力計算を加速しようとしている。ほぼGRAPE-1とほぼ同等の

図6 2つの並列化法

パイプライン一本が入った専用 LSI を富士ゼロックス社と共同で開発している。この GRAPE チップを約 50 個並列接続し、20MHz のクロックで駆動する。そのピークスピードは 30Gflops 程度に相当し、専用計算機ながら NEC のスーパーコンピュータ SX-3 (22Gflops) を抜いて世界最高速になる。GRAPE-3 は今年の夏ごろ完成する予定である。

また、われわれはこの方向を押し進めてテラフロップス GRAPE システムも計画している。高精度型の GRAPE パイプラインを収めた専用 LSI を約千個並列接続し 30MHz のクロックで駆動すればテラフロップスのピークスピードを持つことになる。現在、クロック 30MHz を持つコンピューターはそう珍しくない。すなわちこのテラフロップス GRAPE は、現在普通に使われている技術を使って実現可能である。ホストコンピューターを含めた全システムの費用は約 3 億円である。

6. 分子動力学計算への発展

GRAPE は、タンパク質などの高分子化合物の分子動力学計算にも使える^{11,8)}。分子動力学計算では原子を質点として表現し、その運動方程式を時間積分する。粒子の間に働く力は古典的な力で近似する。このとき計算のネックになっているのは、クーロン力やファンデアワールス力などの非結合性の力である。特にクーロン力は重力と同じ逆自乗則に従うから、到達距離が長い。このため1つの粒子に働く力を正しく計算するためには、多数の遠くの粒子からの寄与を考えにいれなければならない。粒子の分布に構造がある限りどんなに遠くの粒子でもその寄与は無視してはいけない。これに対し、結合性の力（共有結合、結合角、二面角など）には近距離の数個の粒子しか寄与しないのでこれに要する計算量は大幅に減ることはない。表1はスーパーコンピュータ FACOM VP400E による計算時間の測定結果である⁹⁾。結合性の力の相互作用数は原子数 N の3倍程度なのに対し、非結合の力の相互作用数は $N(N-1)/2$ 程度もあり、巨大になっていることがわかる。非結合力の計算はベクトル長を長くできるのでかなり加速しているが、それでも全計算時間の99.95%は非結合性の力の計算に費やされる。粒子の位置更新にかかる時間は結合力計算に要する時間より少ない。まとめると、重力多体系の問題と同じように、タンパク質の分子動力学計算は非結合性の力さえ速くすれば後の計算は遅くてもよいことが分かる。

クーロン力は重力と同じ逆自乗則に従うので、GRAPE がそのまま使える。一般に粒子間の距離だけによる任意の関数形を持った中心力を計算するパイプラインを作ることは簡単である。ファンデアワールス力のような巾関数形の場合は GRAPE-2 の r^2 から r^{-3} への変換部にあるテーブルを書き直すだけでよい。遠くで指数関数的に減少する力の場合は距離に指数関数

表1 タンパク質シミュレーションに必要なCPU時間*
(ヒトリゾチーム+8175水分子 原子数 25824個)

	相互作用数 (10 ⁶ 個)	CPU 時間 (秒)		加 速 率
		ベクトル	スカラー	
結合性力	0.031	0.072	0.36	4.6
非結合性力 (15Åカット)	17	6.6	129	20
非結合性力 (カットなし)	330	130	2600	20

* 1ステップあたり, FACOM VP-400E 使用.
分子力場パラメーターは, ヒトリゾチームに関しては AMBER/OPLS, 水分子に関しては TIP3P を用いた.

の距離定数をかけ固定小数点化する。これを2枚のテーブルを使って一次補間をすれば十分な精度を得られる。これらの過程で使われるテーブルにRAM(ランダムアクセスメモリー)を使えば、ホストコンピュータからテーブルの中身を書き込むことができるので任意の関数形に対応できる。紙面の都合で詳しくは説明できないが、GRAPEは周期的境界条件にも対応できる。

また、ある粒子の近くの粒子のリスト(近接粒子リスト)を作る回路を付加することも可能である。ホストコンピュータは、これを使って近距離で急激に変化する力や多体力の計算を高速に実行できる。

現在、GRAPE-2を改良して任意の関数形を持つ中心力を計算できるGRAPE-2Aを設計中である。また、これをプリント基板で10枚程度作って並列につなぎ、数ギガフロップス程度の計算速度を持つシステムGRAPE-4も計画している。

7. 専用計算機の時代

少なくとも科学計算の分野では、専用計算機の時代がやって来る。物理実験や天体観測では、実験装置や観測装置の重要な部分は、自分たちが開発・設計するのが常識である。そうしなければ実際問題として世界に誇れる仕事ができない。一方、数値実験の分野では、計算コードはともかく計算機は市販品を買って来るに過ぎなかった。そのような甘えが許されない時代がやって来る。

市販されている汎用計算機(スーパーコンピュータを含む)は、その汎用性のためにそのコストパフォーマンスが非常に悪くなっている。科学における計算機ユーザーは要するに自分のやりたい計算が速ければ良いのである。にもかかわらず、何でも速い汎用計算機を高いお金を出して買うのは大変もったいない話だ。その点自分で良く考えて専用・半専用システムを設計すると、無駄がないのでコストパフォーマンスが劇的によくなる。GRAPE-1を考えてみよう。GRAPE-1は初期のスーパーコンピュータ、クレイ-1とはほぼ同程度の性能をもつ。十億円以上もするクレイ-1に対しGRAPE-1はたったの20万円である。3億円ぐらい使えばスーパーコンピュータよりずっと速いテラフロップスマシンを作ることができる。

マイクロ・エレクトロニクスの進歩で計算機の素人でもかなりの性能を持った演算装置を作るのが可能になった。浮動小数点素子が市販されるようになったので誰でもこれを組み合わせて演算パイプラインを作ることができる。また、LSI技術の詳細を知らなくても

ワークステーションの上で比較的簡単にLSIを設計できるソフトウェア、シリコンコンパイラーが充実してきている。これを使えば用意されたライブラリーを組み合わせて専用LSIを作ることができる。デザインセンターを利用すれば専門家の助言を受けることもできる。

われわれはエレクトロニクスに関してはまったくの素人だった。それが2年間でここまで来れたのは要するに専用計算機作りが簡単だったからである。誰でもその気になれば自分だけのスーパーコンピュータを作ることができる。産業界では専用LSIを使ってコストパフォーマンスが高いヒット商品がどんどん作られている。われわれ科学者もその大きな潮流に乗らない手はない。

文 献

- 1) Sugimoto, D., Chikada, Y., Makino, J., Ito, T., Ebisuzaki, T., Umemura, Y. (1990) *Nature*, **345**, 33.
- 2) 杉本大一郎 (1989) パリティ, **4**, 74.
- 3) Ito, T., Makino, J., Ebisuzaki, T., Sugimoto, D. (1990) *Comp. Phys. Commun.*, **60**, 187.
- 4) 戎崎俊一 (1990) パリティ, **5**, 54.
- 5) Makino, J., Ito, T., Ebisuzaki, T., *Publs. Astron. Soc. of Japan*, **42**, 717.
- 6) Ito, T., Ebisuzaki, T., Makino, J., Sugimoto, D. (1991) *Publs. Astron. Soc. of Japan*, in press.
- 7) 戎崎俊一 (1990) 日本物理学会誌 **45**, 812.
- 8) 戎崎俊一: 国立天文台研究会「専用計算機GRAPEによる天体物理学」(東京, 1990年7月).
- 9) 齊藤稔, 森上賢治 (1991) private communication.

編集委員ノート

この重力相互作用のシミュレーションのための専用計算機は、今はまだ生物物理の問題には直接は使われていませんが、蛋白質分子の分子動力学シミュレーション等、生物物理の中心問題に関わることが十分にその応用範囲にあります。

1号機の“GRAPE”は、2年前に 2×10^8 FLOPSの性能を20万円の製作費で達成、2~3年のうちに 10^{12} FLOPS(現在最高速のスーパーコンピュータの50倍)に到達する予定で、しかも予算はたった2~3億円という、夢のようなしかし現実の話です。

『物理屋が実験装置を作り、天文屋が観測装置を作るのと同じように、今や理論屋が専用計算機を作るのは当然だし、それが可能な技術的基盤が世の中にはすでに存在します。』といった研究に対する姿勢も非常に魅力的でありました。

難波啓一