

計算と物理

—PACSへの道—

川合 敏雄

千歳科学技術大学

手回し計算器の時代から自然を対象とする科学技術計算者として一生を貫いた著者が、いかにしてPACSへの道に至ったかを回顧し、理想的自然シミュレータ(格子状超並列計算機PACS, 自動プログラミングつき)の実現によって世界の文化に寄与する願いを訴える。

目次

- | | |
|-------------|------------|
| 1. 序 | 6. 汎用大型機 |
| 2. 電動計算器 | 7. PAD |
| 3. リレー式計算機 | 8. PACS |
| 4. アナログ計算機 | 9. distran |
| 5. パラメロン計算機 | 10. 結び |

Computation and Physics

—A Way to PACS—

Toshio Kawai

Chitose Institute of Science and Technology

The author, one of the first generation computational physicists, retrospects how he has been lead to the idea of PACS (Processor Array for Continuum Simulation). He then wishes that we will contribute to the world culture through the realization of an ideal nature simulator, a set of Tera Flops Grid Type MPP and Automatic Program Generator.

1. 序

物理学の発見した法則は数の間の関係を表していて、それを計算すれば、発見や、予言ができるはずである。しかし50年前までは、これは殆ど不可能だった。だから学者は計算などしないものだと言われ、計算は卑しまれていた。私は計算だけで一生を過ごすことができた第一世代の一人である。これはこの50年間の計算機の成長のおかげである。一人の計算機ユーザーのケースが、専門家にとってご参考になれば幸いである。

2. 電動計算機の頃

1955年 物理学科の磁性実験室を出た私は日立中央研究所の光学研究室に配属された。初仕事は佐久間ダムの水門を監視する工業用TVの光学系として、ズームレンズを設計することだった。当時日本には家庭用テレビもズームレンズもなかった。光線追跡をすれば良いレンズができる。レンズ設計は工業的に計算が役立つ例外的な分野だった。大学ではタイガーという手回し計算器を使っていたが、さすがに日立には35万円もするスイス製の電動計算器があった。しかし電動式は腕力の部分を電氣におきかえたにすぎず、本質的には手回しと同じ手間がかかる。厚さが10cmもある8桁三角関数表をめくり、暗算で内挿しながら8桁の数を間違いなくセットし、結果を書き写すのは容易ではない。11面のレンズ系に3本の光を通すのに一日が暮れる。私は

1. 6桁と8桁では計算時間が5倍も違う。

2. 人間の計算速度のオーダーは、毎秒0.001演算である。
3. 整然たる計算表を作って、そこに数値を埋めてゆくと能率が上がる。表の様式作成がプログラミングに相当し、そのために費やす時間は無駄ではない。
4. 計算は高くつく。ツァイスが永年レンズ王国を独占できた一つの理由であろう。

といったことを悟った。

あとで聞いたが富士写真フィルムの岡崎紋次氏は光線追跡用計算機を作っており、また光学の分野でもホログラフィやメーザーの胎動もあった。計算に埋没せず、じっくり勉強したらよかったものを、私の青春の一年間は、今ならばパソコンで1秒もかからない計算に費やされた。

しかしこの努力はささやかながら報われた。

1. 研究発表会で講師に立たれた大久保先生(光学専門の東北大学名誉教授)の過分のおほめをいただき、社員生活を順調にスタートできた。
2. キヤノンの山路敬三氏(のち社長)を力づけ、本邦初のズームレンズが実用化された。
3. その後の私を計算人生に導いた。

3. リレー式計算機の頃

1956年秋、我が国で初めての計算センターが飯田橋に開業した。この有隣電機に置かれたのはリレー式のFACOM128である。これは紙テープに穴をあけたプログラムを読みとり、掛け算なら毎秒3回、割り算なら3秒に1回の演算速度を誇った。人間を3桁上回る速度革命だった。

画期的だったのはプログラムによる自動計算と、間違いがない信頼度である。尤も計算結果は予想とはまるで違うことが多い。私は光から移って原子炉の安全性などを解析するために微分方程式を解いていた。事故が発生し、緊急停止をすると、下がる筈の出力が逆に急上昇する。ハードの故障だ、と思ってやり直すと最後の桁までビットリと同じ暴走を再現する。私は数値解析的安定性を教科書からではなく、このとき初めて体験した。

しかし多くのユーザーは機械語で書いた自分のプログラムには自信があつて“又ハードのエラーだ”とわめく。保守を担当していた山下真一郎氏はついにソフトのデバグのベテランとなり、後に日大の教授になった。

有隣電機は東大の森口先生の一門など、日本の数値解析の草分けとなった人々の熱気に溢れていた。IBMの計算センターが四谷にでき、Fortranというコンパイラが人々を驚かしたのは約二年後である。

私は核設計を自動化し、パラメータの感度解析や設計を最適化した。これらは1 FLOPSの計算機で可能だった。社会的、学問的に大きな変化の始まりを予感したが、自ら進んでこの時流に身を投じるほどの才覚はなかった。

4. アナログ計算機の頃

digitalの計算センターが生まれる前から、実は計算センターというものはあつて、そこにはアナログ計算機が設置されていた。それは複数の入力電圧を加えて出力する加算器と、一つの電圧を時間について積分する積分器より成る。演算増幅器と係数器の精度が3桁程度で、計算の再現性やプログラムの保存に難点があつた。がそれに優る長所としては、入出力が容易で計算速度が速い。システムとは何かを教えるよい装置だった。

アナコンは連立一次常微分方程式を解くのが得意で、制御研究に活躍したが、私は設計計算にも使った。たとえば連立代数方程式は加算器だけの結合で解ける筈である。ところが実際には電圧は瞬時に100ボルトの上限を超えて発散してしまう。代数方程式はダイナミックスの定常値として求めなくてはならない。自然は原則として安定である。

アナログ計算機のリーダーは三浦武雄さんで、後に情報処理学会でも会長をされた。若い日の三浦さんに私はフローチャートを教え、彼は私に自然主義を教えてくれた。“君、自然というものは、解くものではないね。真似るべきものだ。”自然に依り頼むことの安全さ、汎用性は私の哲学となって、後にPACSやdistranをやる根拠となった。

5. パラメロン計算機の頃

国産初の電子計算機はパラメロン式だった。1958年パリに出典された日立と日電の計算機は会場で梱包を解いたとたんに順調に動き始めたという。HIPACmk1の記憶装置は磁気ドラムで1キロ語、アセンブラをもち速度はキロFLOPSのオーダーだった。

固定小数点演算のため、途中で現れる数はすべて1以下であるように計算を設計する必要がある。”そもそも、計算の途中で何が起こるかを把握してなくてどうする”というのが、作った側の言い分である。使う側も、アナコンで、変数の電圧が100ボルトを超えないように規格化することには慣れていた。

古い人間は困苦欠乏に耐える。FORTRANが現れたときも、”あんなものは、効率が悪い。自分はアセンブラで書く。”と頑張る人がいた。いま、いわゆる高級言語でプログラムを書いている人も、後世から見ると困苦欠乏に耐えている”つわもの”ではなからうか。

さて私はパラメロン計算機を使って、沸騰水型原子炉の二次元出力分布を求めた。出力分布が温度や泡を作り、それが中性子の分布にフィードバックするという、核・熱・水の現象をまとめたものであった。これは勧められて日本原子力学会誌の第一巻一号を飾った。当時は論文というものは一生に一つか二つ勧められて書くものという感じだった。原子力は期待され、輝いていた。いわゆる炉物理は、計算にとって特別相性が良く、いち早く計算機が活躍した。炉物理実験装置は50年代には世界にいたる所の大学やメーカーにあったが、数年のうちに破棄された。計算の方が早くて安全で、精度がよい。計算実験の曙である。

6. 汎用大型機の頃

いつしかトランジスタの時代となり、集積度が上がって計算速度はまた3桁上がった。汎用大型機のM Flopsの能力は、ちょうど銀行や証券業の要求に十分こたえることができ、大いに売れた。

しかし科学・技術の世界では、要求は遙かに大きかった。汎用大型機は炉物理・構造設計など2次元線形問題までにしか役に立たない。原子力でいえば、沸騰水が流れ、燃料棒を揺さぶり、材料が劣化してステンレスが割れる。こういう大切な問題に対して汎用大型機は全く歯が立たなかった。

この状況を見て、計算機メーカーは”科学計算に市場なし”と考えた。ここらで計算機の速度は頭打ちとなり、クレイのベクトル計算機は営業的には主流とならなかった。

科学計算ユーザーは、与えられた計算機を使うことに専念するのが常である。いわく”こんなに速くなったのだ。欲をいえばきりがなし。これからは頭を使う時代だ”。

大体頭のいい人がこの説に傾く。そして個別の問題に対して個別の工夫をこらし、プログラムのバグに悩まされることになる。この時代に計算工学者は、実験者・設計者にくらべて生産性が低いと評価された不運なケースが多いような気がする。私は設計屋に変身して原子力工場にまで行くものの、所詮は物理屋。研究所に送り返されて計算機利用の研究という看板を掲げるに至る。

7. PAD

研究所でやっている計算のプログラムをひとつみせてもらって フローチャートにすると、go to が乱れ飛んで麻のようにからんでいる。とくに上に戻ったり途中で抜け出す矢印。フローチャートでは大したことはないように見えるこの流れは、人間には考えられない程複雑なものだ。当のプログラマーがその複雑さを自覚していない。

私自身がそうだった。三日で出来ると安請け合したプログラムが、三週間しても三ヶ月しても動かないでよく叱られたものだ。いわく”ハードウェアなら思わぬ外力などで壊れるのはわかる。たかが論理の塊であるソフトに誤りがあるなど、たるんでいるとは思えない。一体お前には何の技術があるのか。ハードウェア伝統の生産技術に学べ。”

ハード屋さんは図面を見て設計を審査し、技術を伝える。ソフトには見てわかるものがない。プログラムが一見してわかる図面はないものか。

同じ部屋にいた二村良彦氏(数学者・現早大)が、構造プログラムを教えてくれた。ダイクストラという。人の頭は物理的にも論理的にも小さい、ソフトウェア工学は、この事実を謙虚に認める事から始めなくてはならない。従って複雑な現実に対処するには、階層的分割に限る。プログラムは反復・選択という二種類の枝の先に 処理の葉のついた木であって、麻ではない。

ダイクストラが説いたこの部分を図にして PAD(Problem Analysis Diagram)と名付け、全国をまわった。ソフト危機の時代で多くの人が聞いてくれた。PADは木を上から下へ、左から右へと戻ることなく読める。部分は全体と ただ一点でつながっている。

制御の乱れは理想的に解決された。人によっては、”PADはわかりやすいというが、理論的に理由を述べよ”とか”プログラミングの生産性向上を定量的に示せ”といわれる。私は、”自分でやってみればすぐわかって救われるのに、ああ不信の輩よ”などと取り合えなかった。理論と数にこだわるのは現代人の病なのだと思います。良いものは黙っていても草の根で広がる。今、相当数のプログラマーが PADのおかげで毎日何時間かを節約していると思う。しかし他人の声にも耳を傾け調査とPRに力を入

れ、世界への普及を加速すべきであったかもしれない。

8. PACS

科学技術計算を担当する人の生産性を上げるために プログラムの作り方を述べた。しかし根本的にはプログラムを作らなくて済むのが理想である。その可能性は、テラ(ペタ)Flops機の実現にかかっている。自然の基礎は力学におけるニュートンの運動方程式、電磁気学における4元ベクトルAの発展方程式、量子力学におけるシュレーディンガー方程式の3つである。それらはいずれも時間についての微分方程式である。

現在の状態から一瞬のちの状態を作り出すルールといってよい。熱力学、弾性体力学、流体力学、分子動力学、それらの複合・連成問題は、すべて当然時間についてのダイナミックスの形をしている。定常状態だけが欲しいときも仮想的時間を導入してそのダイナミックスを計算し定常に達しさせればよい。スペクトルが欲しいときは、自然と同じように揺らげてから数値プリズムにかければよい。自然をシミュレートする方法は安全で汎用である。

自然は発展アルゴリズムを内蔵した巨大な並列計算機である。ところが自然の巨大な演算力を人間が真似るのは容易でなかった。典型的な3次元拡散方程式を分解能300で解くにはTera FLOPS機で1分間かかる。一台の計算機の速さは光速と原子の大きさの制約からGFLOPSが限度だから、1000台以上の並列化は不可避である。数値的自然観からいえば、演算器のつなぎ方は2次元格子で、隣接4方向とだけデータが転送できれば十分だ。分子動力学もPACSでゆける。

PACSの誕生日は1977年5月12日であった。ところがこの構想は計算機専門家の間で誠に不評であった。余りに単純で芸がなく、応用が限られるというのである。結局自分でやるしかないというので京大原子エネルギー研究所に居られた星野力先生が、PACS-9, -32, -128と育ての親となった。その実績と有馬・西島両先生のご推薦で当時珍しかった特別推進研究に採択されQCD-PAXがアンリツの協力で完成し、先日博物館に入った。これを継いでプロジェクトは更に大きくなり、今は日立の協力でCP-PACSが進んでいることはご存知の通りである。

9. distran

並列計算機は使いにくい。だから利用者がふえない。これが悪循環となって科学計算機の前途を危ぶむ向きもあるようだ。そもそもPACSは使いやすさを目的としている。時間発展法で分布系をシミュレートするのに、アルゴリズムを考えたりプログラムを書く必要はない。数値事故もなく、誰にでも使いやすく(材料研究を除く領域で)実物実験の半分は置き換えるものである。自動プログラミング(たとえばdistran)は並列計算機を必要とし、並列計算機はdistranを必要とする。二つは不可分の協力者である。

並列計算機を売るために、当然メーカーがdistranを開発すると思っていたが、未だにその動きがない。そこで小規模な50×50点の2次元版をパソコン用にとって玩具として使っている。講演当日はデモンストレーションをご覧頂くつもりである。パソコンとdistranで味をしめた技術者達はPACSの潜在顧客となるであろう。

10. 結び

物理学は自然の基礎法則を発見し終えた。にもかかわらずわれわれは、未知の、あるいは説明のできない現象に取り囲まれている。基礎法則は、無限に広く、無限に緻密な空間を舞台として踊る 無限箇の粒子の様を描き尽くしている。法則は単純だが、その意味は汲み尽くせない。

計算せずにわかるのは、線形の世界だけである。それは、九牛の一毛である。そのほかの広い世界は 実物実験・計算実験で探求すべく 残されている。計算実験装置としてのHPCCの出現は 歴史的必然ともみられる。実際、晩年の私は、土星環の成因や地球の生成についての研究を楽しんだ。凡人の私でも、マクスウェルやポアンカレのような巨人に見えなかった遠くまでを 見る事が出来た。計算機という巨人の肩に乗ったおかげである。

計算機はもっと強力である必要がある。並列方式でしかこれを達成できない以上、コストと信頼性を誇る我が国こそ 先頭に立ってこれを開発し 世界の文化に寄与していただきたく、皆様の一層の活躍を期待する。