

Tflops 重力多体問題専用計算機 GRAPE-4 の開発

戎崎俊一¹、牧野淳一郎²、泰地真弘人¹、杉本大一郎¹

¹東京大学教養学部宇宙地球科学教室

²東京大学教養学部情報図形科学教室

私たちは、高並列 Tflops マシン GRAPE-4 を開発している。これは銀河や球状星団のようなたくさんの星でできている重力多体系のシミュレーション用の専用計算機である。世界に先駆けて Tflops の実効性能を達成することを目指している。GRAPE-4 のために二つのカスタム LSI、粒子の加速度とその時間微分を計算する HARP チップと粒子の位置と速度を予測する PROMETHEUS チップを開発した。GRAPE-4 では PROMETHEUS チップを約 40 個、HARP チップを約 2000 個使用する。本稿では GRAPE-4 プロジェクトの概要を説明する。

GRAPE-4: THE TERAFLOPS MACHINE FOR GRAVITATIONAL MANY-BODY SIMULATIONS

Toshikazu Ebisuzaki¹, Junichiro Makino², Makoto Taiji¹

and

Daiichiro Sugimoto¹

¹Department of Earth Science and Astronomy

²Department of Information Science and Graphics

College of Arts and Sciences, University of Tokyo

We are developing GRAPE-4, the teraflops machine for gravitational many-body simulations. Gravitational many-body systems, such as galaxies and globular clusters, consists of a lot of stars, which interact each other through gravitational force. We developed two custom LSIs, HARP chip and PROMETHEUS chip. HARP chip calculates force and time derivative of force, while PROMETHEUS chip performs predictor calculations of positions and velocities of particles. We use about 2000 HARP chips and about 40 PROMETHEUS chips. In the present paper, we briefly describe the GRAPE-4 project.

1 まえがき

重力多体系は銀河や球状星団などたくさんの質点が集まってお互いの重力で引きつけ合っている系である。重力多体系はニュートンの運動方程式

$$m_j \frac{d^2 \mathbf{r}_j}{dt^2} = m_j \mathbf{a}_j \quad (1)$$

とニュートンの万有引力の式

$$\mathbf{a}_j = \sum_{i=1}^N \frac{G m_i (\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j)}{|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|^3} \quad (2)$$

で支配される。プラズマなどのクーロン多体系に対する重力多体系の違いは、クーロン力には斥力と引力があって打ち消し合うのに対し、重力には引力しかないので打ち消し合わず遠くまで届くことである。また、プラズマには量子力学的な効果で原子の大きさに下限があるのに対し、重力多体系では大きさの下限が実際上ないことも大きな違いである。例えば、球状星団内の平均星間距離は 10^{15} m 程度なのに対し、典型的な恒星の半径は 10^9 m 程度と6桁も小さい。系の大きさに比べると恒星は質点と思ってよい。このため、典型的な近接連星系の単位質量あたりの束縛エネルギーは典型的な星団中の星のそれより遥かに大きい。

これらの理由から重力多体系は非線形で非平衡な振る舞いを示し、解析的なアプローチが余りうまく行かない。したがって、重力多体系の研究は、実際にたくさんの粒子間の力を計算し、その軌道を追いかける重力多体シミュレーションによってもっぱら進められてきた。

ところが、この重力多体シミュレーションは膨大な計算パワーを必要とする。それは重力が遠距離まで到達するので、式2の右辺の和は全ての粒子について計算しなければならないからである。N個の粒子の力を計算するためには $O(N^2)$ の計算量を必要とする。例えば、典型的な銀河の進化の計算は最高速のスーパーコンピューターを使っても粒子数は数万個に限られてきた。しかし現実の銀河を作っている恒星の数はもっと多い。例えば、銀河は典型的には 10^{12} 個の恒星の集まりである。 $N = 10^{12}$ のシミュレーションはとても無理としても、100万個ぐらいの粒子がないと重力多体系の三次元構造の進化を明らかにして、銀河などの観測と比較することができない。テラフロップスぐらいの演算速度を持つ計算機が必要になる。

しかし、この計算パワーの問題を解決するうまい手がある。重力多体シミュレーションの計算時間のほとんどは重力計算に費やされている。したがって、重力計算だけが高速に処理できれば他の計算は遅くてもよい。私たちはこの点に着目し、重力計算だけを非常に高速に行うハードウェア GRAPE を開発している [15]。図1は GRAPE の基本概念を表している。GRAPE はホスト計算機と分業して計算を行う。ホスト計算機には市販のワークステーションやパソコンを用いる。ホスト計算機がインターフェースを通じて GRAPE に粒子の位置と質量を送る。GRAPE はそれを使って、各粒子に働く重力を

計算し、ホスト計算機に送り返す。ホスト計算機はこの力を使って粒子の位置を更新する。1ステップあたり GRAPE が $O(N^2)$ の計算を行うのに対し、ホスト計算機が行う計算やインターフェースが送るべきデータの量は $O(N)$ である。したがって、 N が非常に大きいときホスト計算機やインターフェースのスピードに足を引っ張られずにシステムの計算速度を向上することができる。

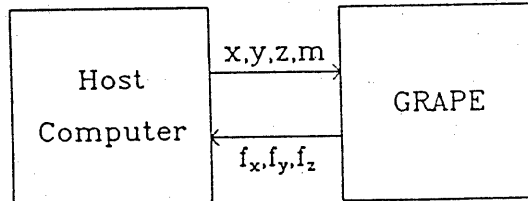


図 1: GRAPE の基本概念

1989年4月に開発をスタートして半年後、9月に最初の GRAPE システム GRAPE-1 を完成させた [15, 4]。GRAPE-1 の製造コストは約 20 万円と安いにもかかわらず、その性能は初期のスーパーコンピューターと匹敵し、GRAPE の概念の有効性を示した。1991年には低精度型の重力計算パイプラインを納めた専用 LSI を富士ゼロックス電子技術研究所と共同で開発し、これを 48 個並列接続した GRAPE-3 を開発した [12]。そのピークスピードは 15Gflops に相当する。また、高精度で任意関数形の中心力を計算できる GRAPE-2A を開発した [6]。GRAPE-2A は重力の他に原子の間に働くファン・デア・ワールス力や周期的境界条件を課したときに現れる Ewald 力 [2] も計算できるので、タンパク質や結晶の分子動力学シミュレーションにも使用できる [3]。1993年には加速度の他に加速度の時間微分を計算する HARP (Hermite AcceleratoR Pipe)-1 を開発した [7]。加速度の時間微分は Hermite 積分法で使われる。

1992年度から文部省科学研究費補助金特別推進研究を受けて、GRAPE-4 計画がスタートした [14, 11]。1994年度までにその実効性能がテラフロップスを超える GRAPE-4 を完成させる予定である。たぶん実効性能がテラフロップスをこえる世界最初の計算機になるであろう。GRAPE-4 を使い、球状星団の進化や惑星の集積過程、銀河中心巨大ブラックホールの進化、宇宙背景放射の重力散乱による等方化などを本格的に研究する予定である。

本稿では GRAPE-4 プロジェクトの概要を説明する。2 節では Hermite 積分法と HARP チップについて、3 節では Individual 時間ステップ法と PROMETHEUS チップについて説明する。4 節では GRAPE-4 の構成、5 節では計画の進行状況について述べる。

2 Hermite 積分法と HARP チップ

GRAPE-4 では粒子の加速度とその時間微分を使って粒子の新しい位置を計算する Hermite 時間積分法を採用することにした [8, 10]。j 粒子の加速度の時間微分

$\dot{\mathbf{a}}_j$ は i 粒子との相対位置 $\mathbf{r}_{ij} = \mathbf{r}_j - \mathbf{r}_i$ と相対速度 $\mathbf{v}_{ij} = \mathbf{v}_j - \mathbf{v}_i$ を使って

$$\dot{\mathbf{a}}_j = \sum_{i=1}^N Gm_i \left[\frac{\mathbf{v}_{ij}}{|\mathbf{r}_{ij}|^{3/2}} - 3 \frac{(\mathbf{v}_{ij} \cdot \mathbf{r}_{ij})\mathbf{r}_{ij}}{|\mathbf{r}_{ij}|^{5/2}} \right] \quad (3)$$

で計算できる [7]。

計算時間の大部分を占める式 2、3 の計算を加速するため、HARP チップを開発した [13]。HARP チップは相対位置 \mathbf{r}_{ij} と相対速度 \mathbf{v}_{ij} から \mathbf{a}_j と $\dot{\mathbf{a}}_j$ を計算する。図 (2) は HARP チップの構造を表している。HARP チップの製造は (株) LSI ロジックが担当した。1 μm のルールでデザインされ、約 10 万ゲートを使用している。30 MHz 以上のクロック振動数で動作するように設計した。ダイサイズは 14.2 mm \times 14.2 mm である。HARP チップは 30 MHz で動作した時、約 600 Mflops の計算能力を持つ。8 個の HARP チップが 1 つのマルチチップモジュール (HARP モジュール) に納められる (図 3)。HARP モジュールの製作は (株) 京セラが担当した。

3 Individual 時間ステップ法と PROMETHEUS チップ

また、Individual 時間ステップ法を採用した。衝突系では近接散乱中の粒子や近接連星系を作っている粒子は非常に短い時間ステップで積分する必要がある。近接連星の周期は数日である。これに対し球状星団の進化する時間尺度は 10 ~ 100 億年である。両者の間に 12 桁のギャップがあるので、全部の粒子を同じ時間ステップで計算することは非常に効率が悪い。しかし、幸いなことに短い時間ステップを要求する粒子は非常に少ないので Individual 時間ステップ法を用いて系のシミュレーションを効率よく行うことができる [1, 8]。Individual 時間ステップ法では粒子はそれぞれ固有の時間 t_j と時間ステップ Δt_j を持っている。もちろん、短い時間ステップを要求する粒子には、短い Δt_j を与える。 $t_j + \Delta t_j$ が小さい粒子から順に速度と位置を更新して行けば、短い時間ステップを必要とする粒子は頻繁に、そうでない粒子はときどき時間積分を進めることになる。ある j 粒子の加速度と加速度の微分を求める時は、他の粒子の位置と速度は j 粒子の時間に併せておく必要がある。その時粒子の位置と速度は、その粒子の時間における位置、速度、加速度、それに加速度の時間微分を使って外挿する。

この外挿計算を加速するため、PROMETHEUS チップを開発した。PROMETHEUS チップはその粒子の時間における位置、速度、加速度、加速度の時間微分から、現在の時刻における粒子の位置と速度を予測する。図 4 は PROMETHEUS チップの構造を表している。PROMETHEUS チップは 1 μm CMOS ゲートアレイで作られ 391 ピン CPGA パッケージに納められている。製作は (株) LSI ロジックが担当した。

4 ハードウェア

図5は GRAPE-4 の全体構成を表している。5つのコントロールボードがホスト計算機に TURBOchannel を通して接続されている。ホスト計算機には DEC Alpha AXP ワークステーションを使う。1つのコントロールボードは8つのプロセッサボードを制御している。図6はプロセッサボードの構造を表している。プロセッサボードは6個の HARP モジュールと1つの PROMETHEUS チップを持っている。HARP モジュールは8つの HARP チップを納めている。全体で $8 \times 6 \times 8 \times 5 = 1920$ 個の HARP チップが並列接続されることになる。30 MHz で動作したとき、HARP チップは約 600 Mflops の計算能力を持つ。これが 1920 個並列動作すれば、全体の計算能力は約 1.15 Tflops となる。

5 計画の進行

GRAPE-4 計画は 1992 年の夏にスタートした。HARP チップと PROMETHEUS チップのサンプルは 1993 年 7 月に完成し、同年 8 月に試作ボード上で、PROMETHEUS チップは 25 MHz、HARP チップは 50 MHz で正常に動作することを確認した。コントロールボード 1 枚、プロセッサボード 1 枚を、ホスト計算機に接続したプロトタイプシステムはデザインどおりに動くことを確認した (1993 年 12 月)。現在、40 枚のプロセッサボードを製作中である。

参考文献

- [1] Aarseth, S. J., 1985 in *Multiple Time Scales* ed. by J.U. Brackhill and B.I. Cohen (Academic Press).
- [2] Ewald, P.P., 1921, *Ann. Phys.*, **64**, 253
- [3] Fukushige, T., Makino, J., Ito, T., Okumura, S.K., Ebisuzaki, T., and Sugimoto, D., 1993, *Publ Astron. Soc. Japan.*, **45**, 361.
- [4] Ito, T., Makino, J., Ebisuzaki, T., and Sugimoto, D., 1990, *Computer Physics Communications*, **187**,60.
- [5] Ito, T., Ebisuzaki, T., Makino, J., and Sugimoto, D., 1991, *Publs. Astron. Soc. Japan*, **43**, 427.
- [6] Ito, T., Fukushige, T., Makino, J., Ebisuzaki, T., Sugimoto, D., 1993, *Publs. Astron. Soc. Japan*, **45**, 339.
- [7] Kokubo, E., Makino, J., and Taiji, M. 1994, in *Proc. of 27-th Hawaii International Conference on System Sciences*, Wailea, Hawaii, Jan. 4-7, 1994.

- [8] Makino, J. and Aarseth, S., 1992, *Publs. of Astron. Soc. Japan*, **44**, 141.
- [9] Makino, J., Ito, T., and Ebisuzaki, T., 1990, *Publs. Astron. Soc. Japan*, **42**, 717.
- [10] Makino, J., Kokubo, E., and Taiji, M. 1993, *Publs. Astron. Soc. Japan*. **45**, 349.
- [11] Makino, J., Taiji, M., Ebisuzaki, T., and Sugimoto, D. 1994, in *Proc. of the Supercomputing '94*, Washington, D. C., Nov. 14-18, 1994.
- [12] Okumura, S.K., Makino, J., Ebisuzaki, T., Fukushige, T., Ito, T., Sugimoto, D., Hashimoto, E., Tomida, K., and Miyakawa, N. 1993, *Publ. Astron. Soc. Japan*, **45**, 329.
- [13] Taiji, M., Makino, J., Kokubo, E., Ebisuzaki, T., Sugimoto, D. 1994, in *Proc. of 27-th Hawaii International Conference on System Sciences*, Wailea, Hawaii, Jan. 4-7, 1994.
- [14] Taiji, M., Makino, J., Kokubo, E., Ebisuzaki, T., Sugimoto, D. 1994, in *Proc. of the 8-th International Parallel Processing Symposium*, Cancun, Mexico, April 26-29, 1994.
- [15] Sugimoto, D., Chikada, Y., Ito, T., Ebisuzaki, T., Umemura, M., 1990, *Nature*, **345**, 33.

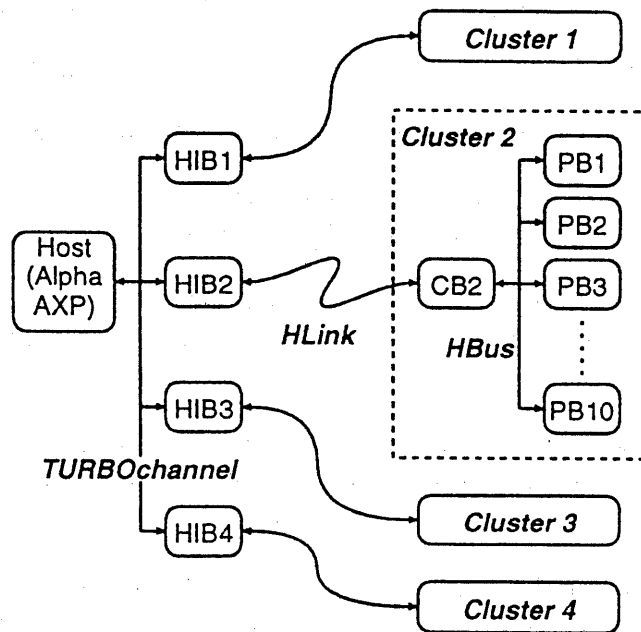


図 5: GRAPE-4 の構造

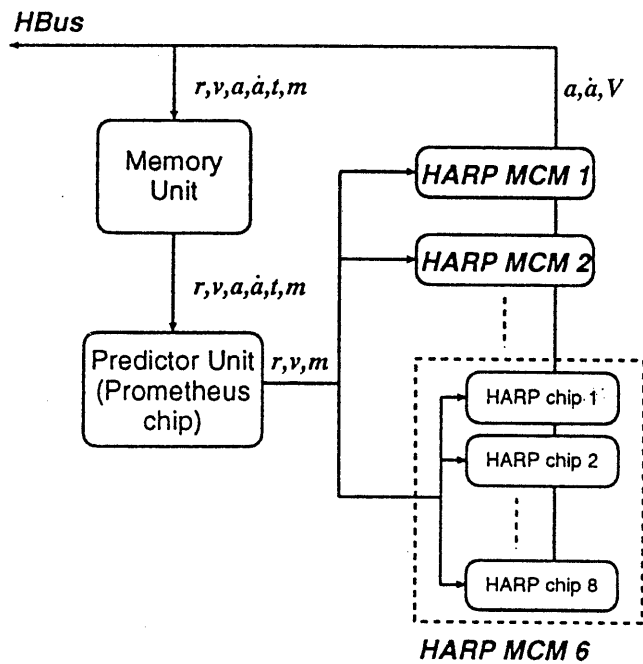


図 6: プロセッサボード