

計算科学のための専用計算機

統計数理研究所 泰 地 真 弘 人

(受付 1998 年 4 月 14 日; 改訂 1998 年 7 月 7 日)

要 旨

科学計算用の専用計算機, 特に古典粒子系の動力学計算専用計算機とその周辺について述べる. GRAPE (GRAvity PipE) は特に重力多体問題のシミュレーションのために設計された計算機で, 重力・クーロン力を高速に計算するためのアクセラレータである. その中でも GRAPE-4 システムはテラフロップスを世界で初めて越えた計算機として特記される. こうした高い性能を達成するための鍵となるのは, 長いパイプラインの利用とブロードキャスト・メモリ・アーキテクチャである. 特に後者によってメモリ・ボトルネックの問題を解決することができる. ブロードキャスト・メモリ・アーキテクチャが有効な問題は粒子シミュレーションに限らず, 例えば密行列計算などもこの方法で加速できる. こうしたアーキテクチャを持つ汎用計算機の製作についても論ずる.

キーワード: 専用計算機, 重力多体問題, 密行列計算, 古典粒子シミュレーション.

1. はじめに—ユニバーサリティの神話

電子計算機の性能の急速な発達には凄まじいものがある. 実際その発明以来, ピーク演算性能は実に 10^9 倍近くにもなった. この間の発展は基本的にハードウェア技術の進歩に因るところが大きい. 計算機のアーキテクチャ面でもベクトル演算器・RISC などの貢献があったとはいえ, その基本構成は最初の「プログラム可変内蔵型計算機」であった EDSAC 以来驚くほど変わっていない. これらの計算機は「Universal」であるから, プログラムを変えれば(資源の範囲内で)計算可能なものは何でも計算できる. このことはもちろん正しい. そこで何でも計算できるのだからとにかく速い計算機を一台作ればいい, という思想, いわば「ユニバーサリティの神話」とでもいうものが陰に陽に計算機の世界を支配してきたように思う. しかし, 本当に「何でも計算できる」計算機のほうがよいのか, それとも特定の用途にあった計算機を作った方がよいのかは実はそんなに自明ではない. 鶏を割くに牛刀を用いるようなことをしても仕方がない. 特に近年並列処理が重要になってきたが, ある種の問題に対しては通常と異なる, 効率がよい並列計算機のアーキテクチャがあることがわかってきた. 例えば古典粒子系の動力学計算, 密行列演算などがこうした問題の例に属する. 本論文ではこうした専用計算機の方法について論ずる. 計算統計学においても例えば密行列計算などが計算量の主要な部分になる場合などでは専用計算機が有効であろう.

科学計算用の専用計算機には長い歴史がある. そもそも電子計算機の先駆けであった Atanasoff-Berry の ABC マシン (モレンホフ (1994)) はガウス消去法を主目的とする計算機であったし, 暗号解読用計算機 Colossus (注 1) なども作られた. その後半導体集積回路が安価

に入手できるようになってからは、特に物理学の分野で現代的な科学計算専用計算機の製作が始められるようになった。盛んに専用計算機の製作がおこなわれた用途が三つある。一つはイジングモデルのモンテカルロシミュレーションである。イジングスピン系では各スピンの状態は $\pm 1/2$ の二つしかないので、デジタル回路に簡単に実装できる。こうした計算機は通常の計算機にくらべて低いコストで実現可能であるため、数種類の専用計算機が製作された(Hoogland et al. (1998); Taiji et al. (1998))。もう一つは、QCDPAX (Hoshino (1992)) などの格子ゲージ理論の計算のために作られた並列計算機である。これらの計算機は、比較的規則的な粗行列を扱うのに適しており、現在の並列計算機の基礎となったものも多い。最後は、古典粒子系の分子動力学計算のための専用計算機である。これは Delft 工科大学の Bakker らの DMDP (Bakker and Bruin (1988)) が最初のものであるが、後に詳述する GRAPE で大きく発展した。

専用計算機が現在見直されつつあるのには、技術的な理由がある。それはメモリボトルネックの問題である。マイクロプロセッサの速度は現在もほぼ5年で10倍のペースで順調に伸びている。しかし、メモリの速度はそれに見合った速度では伸びない。初期のマイクロプロセッサの場合、命令実行時間はマイクロ秒のオーダーであり、それに比べてメモリの速度は十分に速かった。しかし、現在のマイクロプロセッサは2~3ナノ秒周期で処理をおこない、さらに複数命令を同時に処理する。これに比べメモリの読み書きに要する時間は10ナノ秒程度である。プロセッサの並列度・速度を上げても、メモリの速度がついてこないのである。こうした困難に対処するために、キャッシュメモリを搭載したり、高速な入出力をもつメモリなどの新しい技術が開発されているが、この問題は今後ますます深刻さを増すであろう。ところが、先に挙げた動力学計算や密行列演算ではこの困難を回避することができる。簡単にいえば、これらの問題ではデータ量 N に対し演算量がそれぞれ $O(N^2)$, $O(N^{1.5})$ となるので、演算量のほうが通常圧倒的に多い。こうしたいわば「密な問題」ではデータ転送能力を実質的に落とした計算機を構想することができる。どのように構成するかについては後に具体的に詳しく論ずる。これに比べて流体計算に代表される「粗な問題」では、データ量 N に対し、基本的な演算量も $O(N)$ になるので、結局データ転送能力で実効性能が制限されることになる。

本論文ではまず重力多体問題専用計算機 GRAPE について詳しく論ずる。特にテラフロップスの性能を持つ GRAPE-4 に焦点をあてる。次に3節でその他のシミュレーションで GRAPE の考えを拡張できるものにはどんなものがあるかを論ずる。4節では専用計算機での経験に基づいて、「密な問題」に適した汎用計算機を構成する可能性について検討する。

2. GRAPE

GRAPE (GRAvity PipE (Makino and Taiji (1998))) は、古典粒子系の動力学シミュレーション、特に重力多体問題のための専用計算機である。GRAPE は専用機の中でも例外的といっていいほど成功したといえる。動力学シミュレーションは天文学、物理学、生物物理学、流体力学など様々な理学・工学の分野で用いられている。こうしたシミュレーションでは、ほとんど全ての計算能力が粒子間の長距離相互作用を計算するために費やされている。粒子数を N としたとき、 N^2 個の全ての粒子対に関して長距離相互作用を計算しなければならないためである。現実的な系のシミュレーションを行うためにはテラフロップスを越える性能をもつ計算機が必要になる。こうした高い性能を安価に実現するために、専用計算機システム GRAPE の開発が進められた。

GRAPE はホスト計算機(ワークステーション)と接続してもちいる。GRAPE は粒子間の相互作用(粒子の加速度)のみを高速に計算し、その結果からホスト計算機が粒子の位置や速度の計算を行う(図1)。GRAPE は深い専用パイプラインによって1クロック周期に(1パイプ

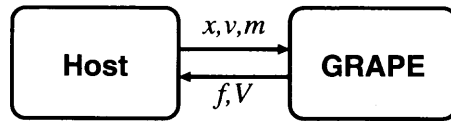


図1. GRAPE システムの構成。ホスト計算機と専用機 GRAPE を組み合わせて使う。ホストが粒子の位置などを送ると、専用機が力などを返す。

ラインあたり) 20~30 回の演算をおこなう。したがって 10 MHz 程度の遅いクロック周波数でもスーパーコンピュータに匹敵する性能を得ることができる。また計算量のほとんどの部分は相互作用の計算によって占められるので、ホストの計算速度は GRAPE の計算速度に比べてずっと遅くてよい。したがってテラフロップスの性能を持つ GRAPE-4 の場合でも、ホストとしては実効数十メガフロップス程度のワークステーションで十分である。また GRAPE とホスト計算機間のデータ転送量は粒子数 N のオーダーであり、専用パイプラインでの計算量に比べて小さいので、超並列機といっても接続の問題はさほど深刻ではない。こうしたホスト-専用機の構成には大きなメリットがある。一つは、プログラムの容易さである。ホスト側のプログラムを変更するだけで、いろいろな問題に対処できる。また、OS やコンパイラなどの面倒な部分を作る必要はない。もう一つは、開発期間の短縮である。専用計算機の部分は比較的単純なので、規模の割には開発に必要な工程は少ない。計算機の開発において開発期間の問題は重要である。開発している間にどんどんハードウェア技術が進歩するために、専用計算機の技術的なメリットより開発期間の短縮による加速のほうが大きくなってしまっている。実際に初期の分子動力学専用計算機の場合、開発期間の長さのために随分と損をしている。GRAPE のようにホスト計算機に委せられるところはなるべく委せてしまえば、より簡単に専用計算機を製作できるのである。このような構成が有効になった背景にはワークステーションやパーソナルコンピュータが手近になったことがある。ホスト計算機を有効に利用した最初の例は、筆者と伊藤伸泰(現東京大学工学系研究科)の製作したイジングモデル専用計算機 m-TIS であった (Taiji et al. (1988))。ホストにパーソナルコンピュータを用い、制御に積極的に利用することで開発期間は約 6 ヶ月と非常に簡単に製作することができた。しかしながら、イジングモデルのモンテカルロシミュレーションの場合、データの転送量と計算量がほぼ比例する「粗な問題」に属する。このため、GRAPE の場合に比べてこの構成を生かせないという問題点があった。

東京大学総合文化研究科のグループでの粒子シミュレーション用専用計算機開発の歴史を図 2 に、その性能を図 3 に示す。大まかに 3 つの系列の計算機を開発してきた。ひとつめは低い精度で重力などの逆自乗則専用のマシン GRAPE-1 (Sugimoto et al. (1990)), GRAPE-3 (A) (Okumura et al. (1993)) である。GRAPE-3 (A) は現在世界中の多くの研究機関で使用されている。次は高精度の逆自乗則専用マシンである。1995 年 7 月に約 1 テラフロップスのピーク性能を持つ超並列重力多体問題専用計算機 GRAPE-4 (Taiji et al. (1994a)) を完成させた。この GRAPE-4 をもちいて行った計算で、東京大学の牧野淳一郎と筆者は 1995 年度の Gordon Bell 賞を受賞した (Makino and Taiji (1996))。この賞はその年の世界一高速な実用計算に対して与えられる賞である。本節では以下この GRAPE-4 の構成を中心に述べる。三番目は任意の中心力を計算できる専用計算機 GRAPE-2A (Ito et al. (1993)), MD-GRAPE (Fukushige et al. (1996)) である。これらは分子動力学計算や、周期境界条件の下での計算を行うために開発された。また、Ewald 法による周期境界条件下での計算を加速するため、Ewald 法の波数空間での和を加速するための専用計算機「WINE」(Fukushige et al. (1992)) の開発もおこなわれている。

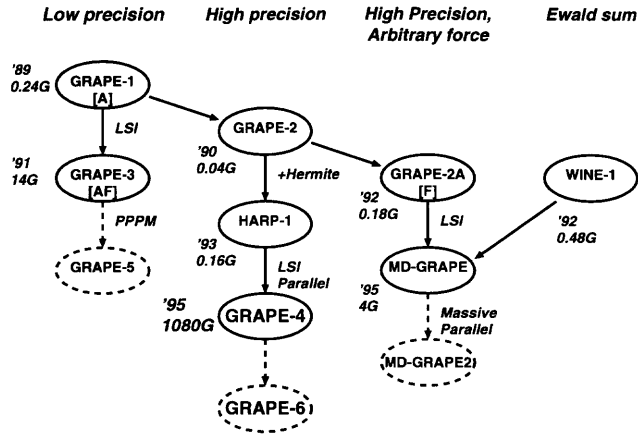


図2. GRAPEの開発.

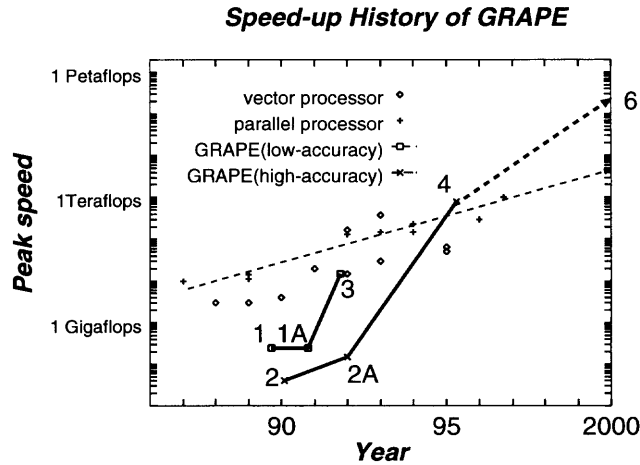


図3. GRAPEの速度と汎用計算機との比較.

2.1 GRAPE-4

以下 GRAPE-4 を例にとり GRAPE の特徴を述べていこう。まず GRAPE-4 で計算できる式について述べる。GRAPE-4 は粒子 i の位置 $\mathbf{x}_i(t_i)$ 、速度 $\mathbf{v}_i(t_i)$ 、および質量 m を受けとり、以下の式にしたがって粒子 i の単位質量あたりの力 \mathbf{f}_i 、力の時間導関数 $\dot{\mathbf{f}}_i$ 、ポテンシャルエネルギー ϕ_i を計算する。GRAPE-4 では 94 個の粒子に対する力を同時に計算する。

$$\begin{aligned}
 \mathbf{f}_i &= \sum_j m_j \frac{\mathbf{r}_{ij}}{(r_{ij}^2 + \epsilon^2)^{3/2}}, \\
 \dot{\mathbf{f}}_i &= \sum_j m_j \left[\frac{\mathbf{v}_{ij}}{(r_{ij}^2 + \epsilon^2)^{3/2}} - \frac{3(\mathbf{v}_{ij} \cdot \mathbf{r}_{ij})\mathbf{r}_{ij}}{(r_{ij}^2 + \epsilon^2)^{5/2}} \right], \\
 \phi_i &= \sum_j m_j \frac{1}{(r_{ij}^2 + \epsilon^2)^{1/2}},
 \end{aligned}
 \tag{2.1}$$

但し $\mathbf{r}_{ij} = \mathbf{x}_i(t_i) - \mathbf{x}_j(t_i)$ 、 $\mathbf{v}_{ij} = \mathbf{v}_i(t_i) - \mathbf{v}_j(t_i)$ 、 ϵ は発散を避けるためのソフトニング因子である。力の時間導関数はエルミート補間に基づく積分公式を使う際に必要になる。このエルミート公式は簡明で精度がよいため重力多体問題の数値積分に適している (Makino and Aarseth

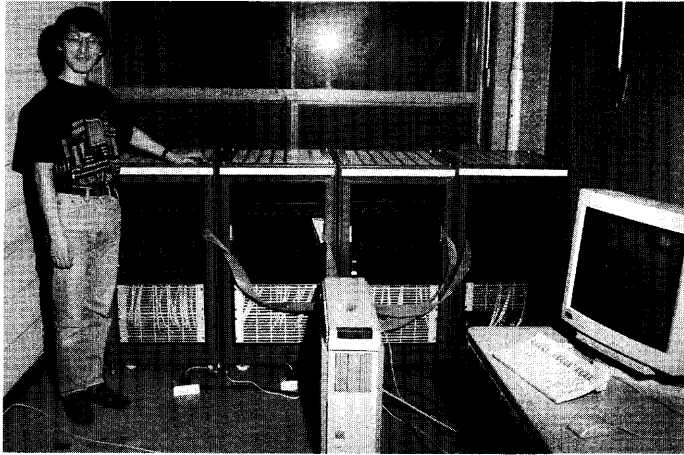


図4. GRAPE-4の全体写真(人間は開発者の一人, 牧野淳一郎).

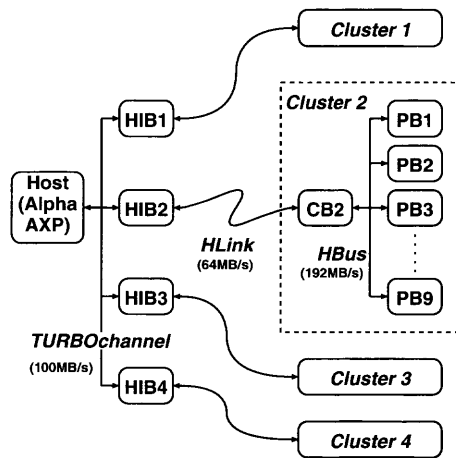


図5. GRAPE-4のブロック図.

(1992)). 上式の計算をハードウェア化し高速に計算するために, 専用LSI「HARP chip」を開発した. この式中で, 時刻 t_i での位置と速度 $(x_j(t_i), v_j(t_i))$ は時刻 t_i での値からの予測値を用いる. この予測子の計算も専用LSIで高速に行っている.

次に GRAPE-4 の全体構成について述べる. 図4に GRAPE-4 の全体写真, 図5に GRAPE-4 システムのブロック図を示す. GRAPE-4 システムは, ホスト計算機(DEC Alpha ワークステーションなど)と4つのクラスタからなる. PCIバスを持つ計算機にもつなぐことができる(Kawai et al. (1997)). 各クラスタは9枚のプロセッサボード(PB)と1枚のコントロールボード(CB)からなる. 各プロセッサボードは47個の力の計算専用LSI「HARP chip」(Taiji et al. (1994b)), 一個の予測子計算専用LSIおよび43,690粒子分のメモリを持つ. したがってシステムは合計1,692個のHARP chipをもち, 150万粒子の系まで扱える. コントロールボードはホスト計算機との通信をおこなうほか, それぞれのプロセッサボードからの結果を加算してまとめた結果をホストに返す機能を持っている. 力の計算専用LSI「HARP chip」は640メガフ

ロップスの性能を持つ。GRAPE-4では1,692個のLSIが並列に動作するので、そのピーク性能は1.08 Tflopsに達する。高い性能にもかかわらず、消費電力は約10 kW程度と非常に少ない。GRAPE-4の開発に要した費用は合計約1億5千万円で、要した労力はおよそ1.5人×3年間である。このようにGRAPEが汎用並列計算機に比べて簡単に高い価格性能比を得られる理由は二つある。一つは非常に長いパイプラインの利用、もう一つはブロードキャスト・メモリ・アーキテクチャである。以下これらの特徴を論じよう。

2.2 長いパイプラインの利用

GRAPEで計算する対象は式(2.1)のような式に固定されている。したがってハードウェアとしては上式を計算するための長い専用パイプラインを作ればいいわけである。こうした長い専用パイプラインは、LSI化することによって非常に大きな性能向上をはかることができる。主な理由として、専用計算機では演算器の精度や機能をアプリケーションに応じて変更できること、LSIと外部の間の入出力の速度を抑えることができることの二点があげられる。現在最先端のLSI製造技術を用いれば、数十から数百個もの浮動小数点演算器をひとつのLSIにおさめることができる。しかし、汎用のプロセッサでたくさんの演算器を効率よく利用するためには、どうしてもメモリとのデータ転送の性能を上げる必要がある。一方専用計算機では、効率を最大限にするように演算器をつないでおけばそれほど入出力の速度は必要でない。また、メモリアクセスのパターンが決まっているのでキャッシュメモリも必要ない。したがってLSIの中のほとんど全部を演算器で埋めつくし、それら全てを効率よく動作させることができる。このような理由で、同じ製造技術を使ったときでも汎用プロセッサの十倍以上もの数の演算器をひとつのLSIにおさめ、効率よく動かすことができる。GRAPE-4で使用されているHARP chipは15個の浮動小数点演算器と1個の関数評価器をもち、1周期あたり約20浮動小数点演算をおこなう。チップの動作周波数は32 MHzであるから、HARP chipの性能は640メガフロップス相当になる。これは製造技術の水準が1990年ごろのもの(1.0 μ m CMOSセルベースIC)であることを考えると非常に高い性能であるといえる。また必要なデータ入力レートは220 Mbyte/secであり、性能に比べ非常に低い値で済んでいる。

2.3 ブロードキャスト・メモリ

次に、ブロードキャスト・メモリ・アーキテクチャについて説明しよう。序で述べたように、現在計算機システムでもっとも深刻な問題はメモリボトルネックである。高速化する演算器の速度に見合っただけのメモリの速度を得るのは大変である。しかし、古典粒子系のシミュレーションの場合にはブロードキャスト・メモリ・アーキテクチャによってこの問題を解決することができる。

例えばGRAPE-4の場合、一つのプロセッサボードには47個のLSIがあるが、これらのLSIは異なる粒子に働く力 f_1, f_2, \dots を同時に計算する。LSIの内部には力を計算する対象となる粒子の位置、速度が書きこまれる。力をおよぼす側の粒子の位置、速度、質量はメモリから供給される(正確には今の場合は予測子計算LSIから)。別々のLSIは別々の粒子への力を計算するので、力をおよぼす粒子についての位置等の情報はこれらのLSIの間で共有することができる。つまり、図6に示すように、メモリからのデータを全てのLSIに同時に送るだけでよいのである。このブロードキャスト・メモリ・アーキテクチャではメモリのほうは一つのみままで、演算器の数をどんどん増やしていくことができる。また、各パイプラインへの入力を共通にすることができるため、たとえば複数のパイプラインを一つのLSIに入れる場合でもピン数を増やす必要はない。GRAPE-4の場合には図7に示すようなマルチチップモジュールを利用して集積度を上げているが、この場合もモジュールのピン数は非常に少なく抑えることができる。

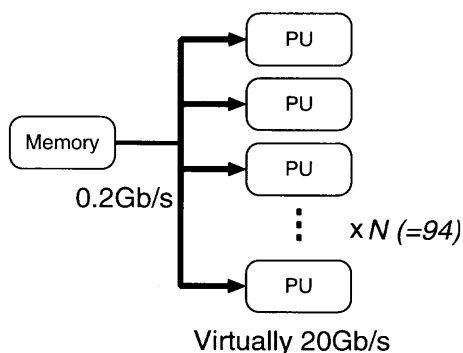


図6. GRAPE-4 プロセッサボードでのブロードキャスト・メモリ・アーキテクチャの説明。

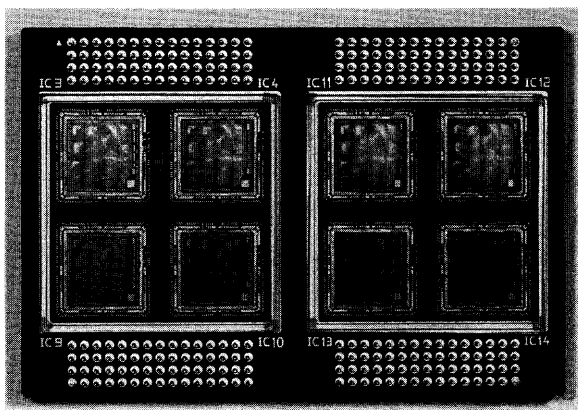


図7. HARP チップのマルチチップモジュール。二つのキャビティに合計 8 個の LSI を詰め、大きさは 75 mm×110 mm、ピン数は 240 ピン。

さらに、時間軸方向に「同時供給」することも可能である (Makino et al. (1993) ; Taiji et al. (1994a))。各 HARP chip は 2 つの粒子への力を交互に計算する。この場合にも入力データは共有できるから、データ入力は 2 サイクルで 1 回で済むことになる。実際 LSI の内部は 32 MHz で動作しているが、メモリは半分の 16 MHz で動作している。このような並列化はハードウェアのコストをあまり増やさずにおこなえるため、GRAPE の場合性能を簡単に上げていくことができる。この工夫により、実際のメモリ部分の転送能力は 0.2 ギガバイト/秒足らずであるにも関わらず、94 本の並列パイプラインにデータを同時に供給することによって 20 ギガバイト/秒相当の転送能力を持つことになる。現在の商用ベクトル計算機では演算量とデータ転送量の比は約 1 演算/1 ワード (= 8 バイト), ワークステーション等では 10~30 演算/1 ワード程度である (注 2)。これに比べると、GRAPE-4 の場合には 560 演算/1 ワード (= 4 バイト) と圧倒的に有利である。こうしたメモリアーキテクチャは古典粒子系のシミュレーションなどの限定された問題だけで有効であるので、市販の汎用計算機ではみられない。専用計算機を作らねばならぬ所以である。

3. その他の専用計算機

ここでは GRAPE と同じような専用計算機の方法で加速できる問題はどんなものがあるかを考える。まず GRAPE の自明な拡張は、重力以外の力計算への適用である。物性計算では、分子間力や周期境界条件下での計算に必要なカットオフされたクーロン力などを計算できる必要がある。これらの計算を可能にしたものが MD-GRAPE である (Fukushige et al. (1996))。これは商品化されて販売されている。

次に、密行列計算用の計算機を考える。東京大学の清木らは密行列であらわされる連立一次方程式を解くための専用計算機 GENERAL-1 の試作を行った (清木 (1996))。ここでは簡単のため行列の積を計算する場合を考えよう (但し Strassen のアルゴリズムは考えない)。 $C=AB$ の積の計算はつまり

$$(3.1) \quad c_{ij} = \sum_k a_{ik} b_{kj}$$

と書ける。今、複数の i について別々のプロセッサで計算するとする。このとき、個々のプロセッサは内部に a_{ik} を一行分だけもち、 b_{kj} は各プロセッサで共通でよい。従って、先ほど述べたブロードキャスト・メモリ・アーキテクチャをこの場合にも使うことができる。Gauss の消去法を Crout 法を用いて計算する場合も基本的には上記のような内積演算が基本となる。この場合も多段同時消去を行うことにより複数の演算器を並列で効率よく動かすことができる。このような計算機は計算統計学においても有効であろう。

また、遺伝情報のホモロジー検索・アライメント計算を動的計画法で行う場合にもこうした専用計算機の方法が適用できる (加藤 (1995))。

4. 「密な問題」のための汎用計算機

今まで述べてきたように、GRAPE が成功した上で最も重要な要因は長いパイプラインとブロードキャスト・メモリ・アーキテクチャであった。そこで、これらのアーキテクチャをもつ汎用計算機を製作すれば有効ではないかと考えられる。この節ではこうした汎用計算機とでも呼ぶべきものについて考察する。こうした計算機はもちろん「密な問題」にのみ有効であろう。

4.1 プログラム可能な浮動小数点演算器列

まず長いパイプラインをもつ汎用計算機について考えよう。これはつまりプログラム可能な長いパイプラインを作るということである。従って、唯一の可能性は FPGA (Field-Programmable Gate Arrays, ユーザーが書き換え可能なゲートアレイ) のようなプログラマブル素子を使うほかない。しかし、現在のところ FPGA は十分な数の浮動小数点演算器を持つだけの容量がない。そこで、数十個の浮動小数点演算器を持ち、自由に組み合わせ可能な LSI を製作すれば有効であると考えられる。こうしたデバイスは命令長が非常に長いベクトル計算機と見なすことができる。

4.2 ブロードキャスト・メモリ・アーキテクチャをもつ SIMD プロセッサ

次に、ブロードキャスト・メモリ・アーキテクチャをもつ汎用計算機について考えよう。これはつまり、共通の入力をもつ複数の浮動小数点・固定小数点演算器を一つの LSI に詰め込んだものである。共通の入力を効率よく活かすという前提から、全てのユニットが同じ命令を実行することにする。見方を変えれば、一つの LSI 内での命令実行の効率はどうせメモリアク

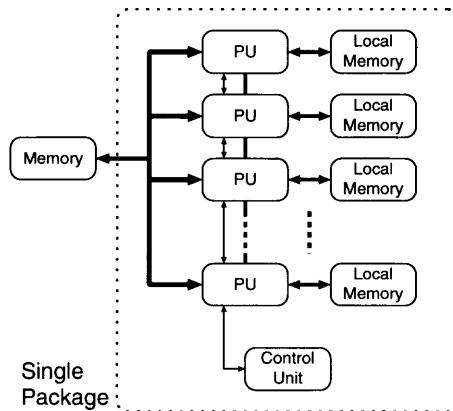


図8. ブロードキャスト・メモリ・アーキテクチャをもつSIMDプロセッサの設計例。

セスの能力で決まってしまうのであるから、有効な並列度もそれに合わせて調節すればよい。並列性が活かさない場合には、結局単一プロセッサとしてしか動作しなくとも問題はないのである。

こうした演算装置の例を図8に示す。複数のプロセッサユニットを一つのモジュールにつめこみ、それを一つのメモリユニットにつなぐ。各ユニットはローカルメモリとプロセッサの組み合わせである。プロセッサはメモリバンド幅によってRISCもしくはVLIWの構成にする。各プロセッサは5万から10万ゲートで、ローカルメモリにもほぼ同じだけの面積を使うとすると、現在の技術でも一つのLSIに10~20プロセッサユニットは軽く埋め込むことができる。動作周波数300MHz、各プロセッサが一周期あたり2演算するとすると、LSIのピーク性能は6~12ギガフロップスとなる。さらに複数のLSIを同一のメモリユニットにつなげば、1ボードあたりの性能を簡単に上げることができ、コンパクトなテラフロップスシステムが構成できる。こうしたシステムの価格性能比はGRAPEに比べると10倍から20倍程度悪い。倍精度演算のために約5倍のトランジスタ数が必要であり、さらにローカルメモリが加わって演算器あたりのチップ面積が合計10倍程度必要になるためである。しかし、古典粒子系の問題だけでなく、他の用途にも使えるという利点がある。特に密行列演算を扱う場合には、完全な専用機にするのに比べたハードウェアのコストはほぼ同じである。しかも、通常の汎用計算機に比べて10倍以上の価格性能比を保てるであろう。プロセッサLSIの性能自体が5倍以上あり、アーキテクチャが簡素でさらにメモリの量も比較的少なくてよいためである。こうしたブロードキャスト・メモリ・アーキテクチャをもつ準汎用計算機を製作してみる価値は十分にある。

5. 専用計算機の将来

今後専用計算機はどのように発展していくであろうか？ GRAPEなどの「密な問題」に対する専用計算機は今後ますます重要性を増すと思われる。当面半導体技術の発展はペースを緩めず続くであろう。しかし、汎用計算機ではこの進歩を直接性能向上に結び付けることが困難になってくる。動作速度の向上については問題ないとしても、トランジスタ数が増えても並列化する以外に使いようがない。ところが並列化して効率よく使うためにはデータ転送のボトルネックが問題となってくる。一方、GRAPEなどの専用計算機の場合にはトランジスタの増加に比例して性能を上げることができる。既に述べたように、ブロードキャスト・メモリ・アーキ

テクニクによりデータ転送の能力を固定したまま並列化することができるからである。半導体の性能(速度×集積度)はおよそ毎年2倍になる。したがって専用計算機の性能はおよそ10年で1000倍になる。一方、汎用計算機の速度は10年で100倍程度の伸びであるから、専用計算機は今後より一層有利になる。GRAPE-4は1990年ごろの1.0 μ mの技術を使って製作した。現在東京大学の牧野らは次世代機GRAPE-6の設計を行っている。2000年ごろに完成し、200テラフロップスの性能を持つ予定である。このように専用計算機は将来にわたって重要な意味をもつ。今後こうした方法がどんな問題に適用できるかを考え、幅広い応用を考えていくことが必要であろう。

注.

- 注1. Colossusについては長らく秘密にされていたが、最近再現されたようである。
<http://www.cranfield.ac.uk/cc/bpark/colossus.htm>
 注2. Stream benchmark homepage, <http://www.cs.virginia.edu/stream/>

謝 辞

ここで解説した研究のほとんどは東京大学の牧野淳一郎助教授、およびそのグループと行ったものである。ここに記して感謝したい。GRAPE-4の製作に当たっては文部省科学研究費特別推進研究(04102002)の補助を受けた。

参 考 文 献

- Bakker, A. F. and Bruin, C. (1988). Design and implementation of the Delft molecular-dynamics processor, *Special Purpose Computers* (ed. B. J. Alder), 183-232, Academic Press, San Diego.
- Fukushige, T., Makino, J., Ito, T., Okumura, S. K., Ebisuzaki, T. and Sugimoto, D. (1992). A special purpose computer for particle dynamics simulations based on the Ewald method: WINE-1, *Proceedings of the 26th Hawaii International Conference on System Sciences* (eds. V. Milutinovic and B.D. Shriver), 124-133, IEEE Computer Society Press, Los Alamitos.
- Fukushige, T., Taiji, M., Makino, J., Ebisuzaki, T. and Sugimoto, D. (1996). A highly-parallelized special-purpose computer for many-body simulations with an arbitrary central force: MD-GRAPE, *Astrophysical Journal*, **468**, 51-61.
- Hoogland, A., Compagner, A. and Blöte, H. W. J. (1988). The Delft Ising system processor, *Special Purpose Computers* (ed. B. J. Alder), 233-280, Academic Press, San Diego.
- Hoshino, T. (1992). The PAX project, *High Performance Computing* (ed. R. Mendez), 239-256, Wiley, New York.
- Ito, T., Makino, J., Ebisuzaki, T., Okumura, S. K. and Sugimoto, D. (1993). A special-purpose computer for N -body simulations: GRAPE-2A, *Publications of Astronomical Society of Japan*, **45**, 339-347.
- 加藤 剛 (1995). 配列アライメント専用計算機の開発, 修士論文, 東京大学大学院総合文化研究科.
- Kawai, A., Fukushige, T., Taiji, M. and Makino, J. (1997). The PCI interface for GRAPE systems: PCI-HIB, *Publications of Astronomical Society of Japan*, **49**, 607-618.
- Makino, J. and Aarseth, S. J. (1992). On a Hermite integrator with Ahmed-Cohen scheme for gravitational many-body problems, *Publications of Astronomical Society of Japan*, **44**, 141-151.
- Makino, J. and Taiji, M. (1996). Computational astrophysics on a special-purpose machine, *Computers in Physics*, **10**, 352-358.
- Makino, J. and Taiji, M. (1998). *Scientific Simulations with Special-purpose Computers*, Wiley, Chichester.
- Makino, J., Kokubo, E. and Taiji, M. (1993). HARP: a special-purpose computer for N -body simulations, *Publications of Astronomical Society of Japan*, **45**, 349-360.
- モレンホフ, C. R. (1994). 『ENIAC 神話の崩れた日』(最相 力・松本泰男 訳), 工業調査会, 東京.
- Okumura, S. K., Makino, J., Ebisuzaki, T., Fukushige, T., Ito, T., Sugimoto, D., Hashimoto, E., Tomida,

- K. and Miyakawa, N. (1993). Highly parallelized special-purpose computer, GRAPE-3, *Publications of Astronomical Society of Japan*, **45**, 329-338.
- 清木 泰 (1996). A Special-purpose computer for solving dense matrix based on Gaussian elimination algorithm: GENERAL, 修士論文, 東京大学大学院総合文化研究科.
- Sugimoto, D., Chikada, Y., Makino, J., Ito, T., Ebisuzaki, T. and Umemura, M. (1990). A special-purpose computer for gravitational many-body problems, *Nature*, **345**, p. 33.
- Taiji, M., Ito, N. and Suzuki, M. (1988). Special-purpose computer system for Ising models, *Review of Scientific Instruments*, **59**, 2483-2487.
- Taiji, M., Makino, J., Ebisuzaki, T. and Sugimoto, D. (1994a). GRAPE-4: a teraflops massively parallel special-purpose computer system for astrophysical N -body simulations, *Proceedings of the 8th International Parallel Processing Symposium* (eds. H. J. Siegel and Purdue University), 280-287, IEEE Computer Society Press, Los Alamitos.
- Taiji, M., Makino, J., Kokubo, E., Ebisuzaki, T. and Sugimoto, D. (1994b). HARP chip: a 600 Mflops application-specific LSI for astrophysical N -body simulations, *Proceedings of the 27th Hawaii International Conference on System Sciences* (eds. T. M. Mudge and B. D. Shriver), 302-311, IEEE Computer Society Press, Los Alamitos.

Special-purpose Computers for Scientific Simulations

Makoto Taiji

(Institute of Statistical Mathematics)

We have developed parallel special-purpose computer systems for classical particle simulations, GRAPE. GRAPE is an accelerator for calculations of two-body central forces such as gravitational, Coulomb, or Van der Waals forces. The GRAPE-4 system for astrophysical N -body simulations achieved teraflops speed first in the world. Such high-performance was achieved by the very-long-pipeline architecture and the broadcast memory architecture. The memory bottleneck problem can be solved by the broadcast memory architecture for some scientific simulations. The possibility of programmable semi-general-purpose computers for dense problems is also discussed.

Key words: Special-purpose computer, gravitational N -body problem, dense linear system, classical particle simulations.