未来開拓「計算科学」
次世代超並列計算機の開発 中間成果報告
— 多粒子系向け超並列計算機の開発

牧野淳一郎

東京大学大学院理学系研究科

概要

1. 研究の目標・方法
2. 年次計画・研究組織
3. 現在までの進捗状況

研究の目標・方法

粒子モデル：

- 粒子系、長距離相互作用の自然なモデル
  - 重力、クーロン力（天体、分子）
  - 渦糸法
- 短距離相互作用への適用
  - 圧縮性流体： SPH 等
  - 非圧縮性流体： MPS 等
  - 構造解析： Element-Free Galerkin method 等

計算法の特性

- 計算量が多い ＝ メモリ量、メモリバンド幅ではなく計算速度がボトルネック
- 規則的な計算の繰り返し

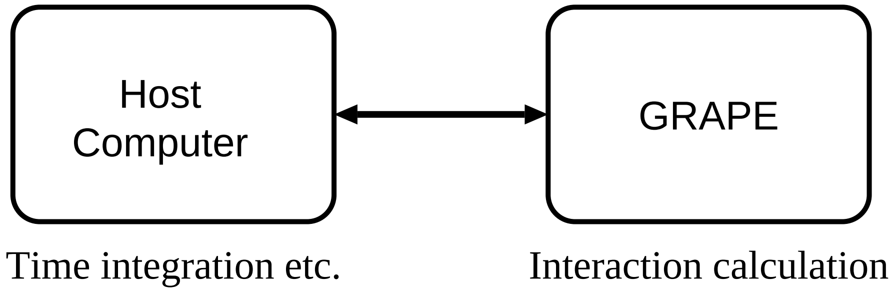
粒子間相互作用を計算する専用ハードウェアによって加速する

これまでの粒子系向け専用計算機

- DMDP
  - 1980 年代初め、デルフト工科大学
  - 2 体ポテンシャルでの MD 計算専用
- GRAPE
  - 1980 年代終り —— 現在
  - 重力 / クーロン力専用
  - 時間積分等を汎用計算機で：多様な応用を可能にした

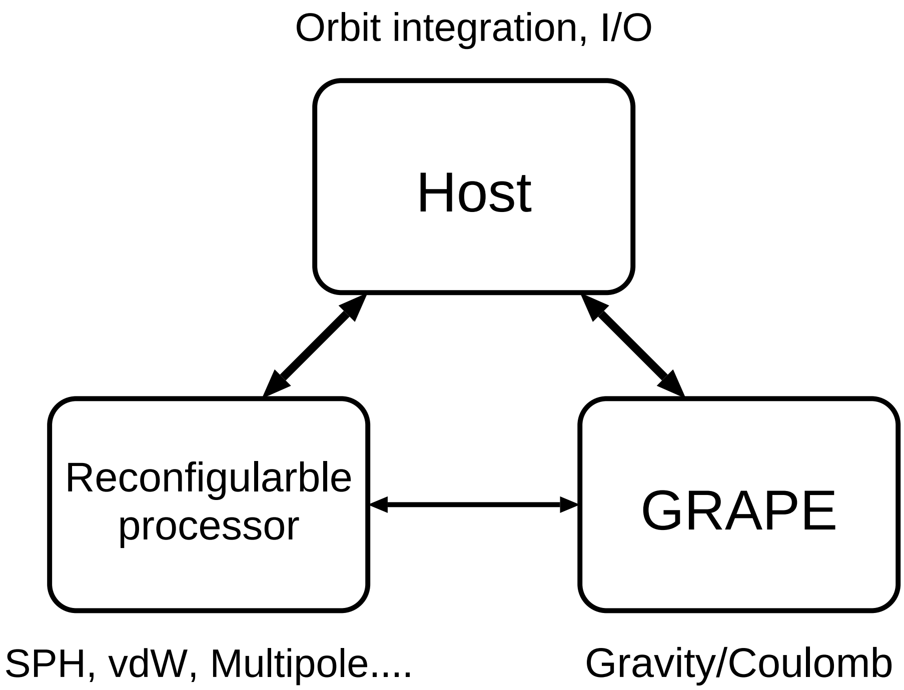
粒子系向け専用計算機の基本的考え

(GRAPE, GRAvity PipE)



- 専用ハードウェア
  - ・ハードウェア化した論理 $\longrightarrow$ ソフトウェア不要
  - ・相互作用計算専用のパイプライン $\longrightarrow$ 高い性能
- 汎用ホスト計算機
  - ・高レベル言語が使える (Fortran, C, C++...)
  - ・既存のプログラムが多少の手直しで使える
  - ・ツリーコード、 FMM、独立時間刻みなども使える

本プロジェクトの目標

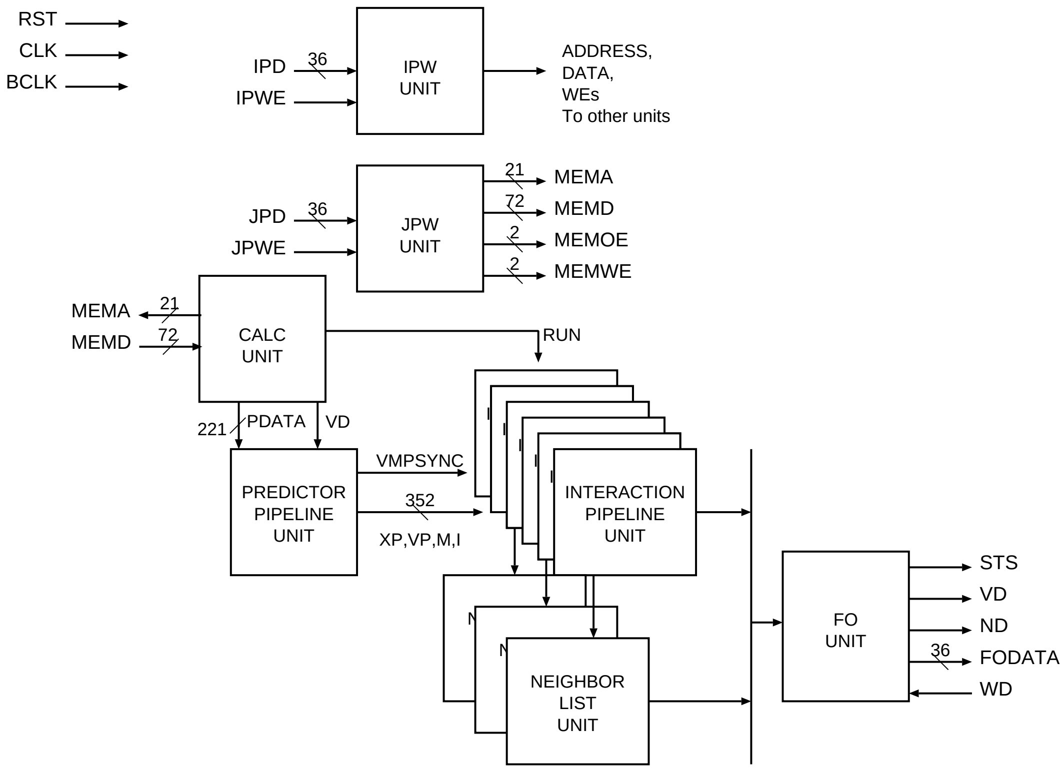


1. 重力計算用に GRAPE-4 から100 倍以上 性能を向上させた、サブペタフロップス計算機を実現し、粒子系向け専用計算機の可能性を実証する
2. FPGA を使った粒子系向け多用途計算機を構築する
3. 上の 2 つを組み合わせて、高速で応用範囲の広いシステムを構築する

重力専用計算機

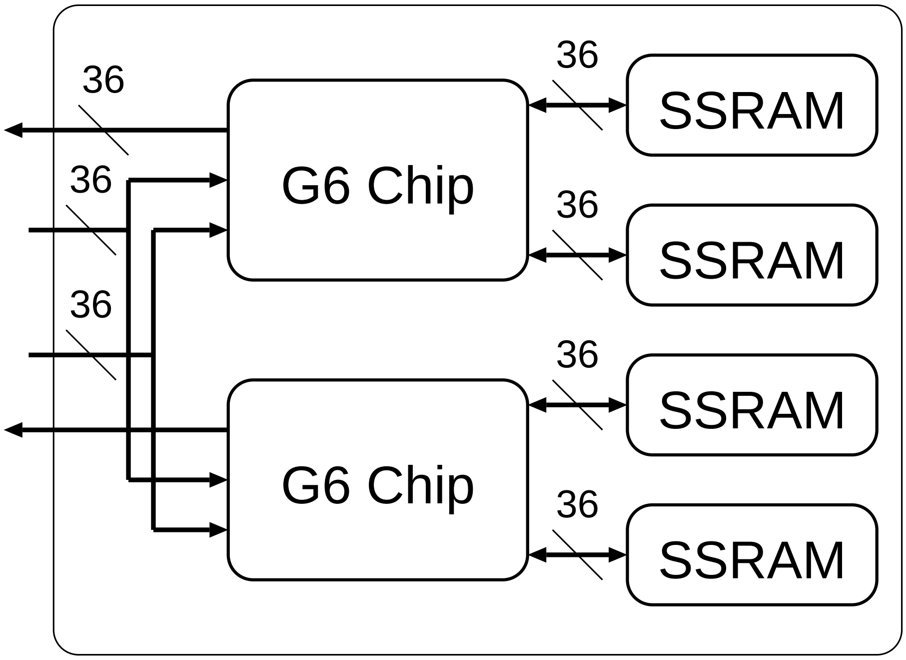
- GRAPE-4 の後継
- 計算速度の向上 (チップ単体で 50–70 倍)
- 全体の性能 $>$ 200Tflops
- 通信速度の向上 ($>$ 2GB/s)
- メモリインターフェース等の機能をプロセッサチップに集積
- ボード、クラスタはツリー型ネットワークを構成

プロセッサ LSI



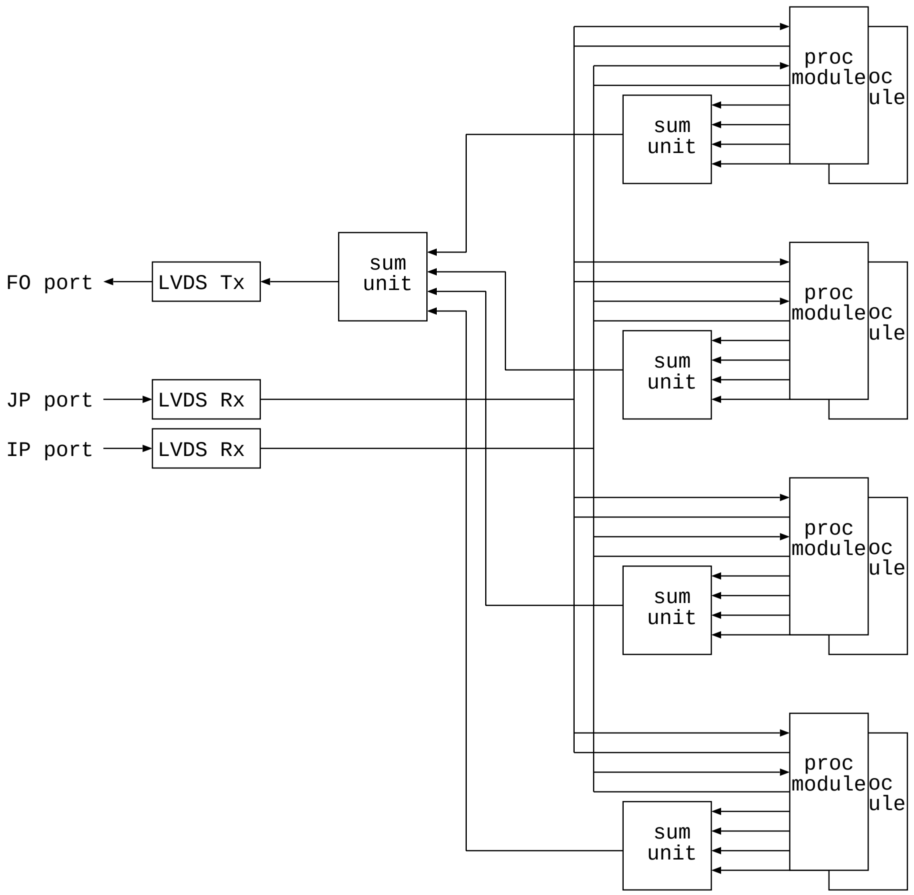
- 0.25 μm custom design (東芝 TC240, 1.8M gates)
- 2.5 V power supply, 100 MHz operation (worst case ...)
- 6 pipelines in a chip
- 30 Gflops (equivalent) per chip
- system clock: 25 MHz

プロセッサモジュール構成



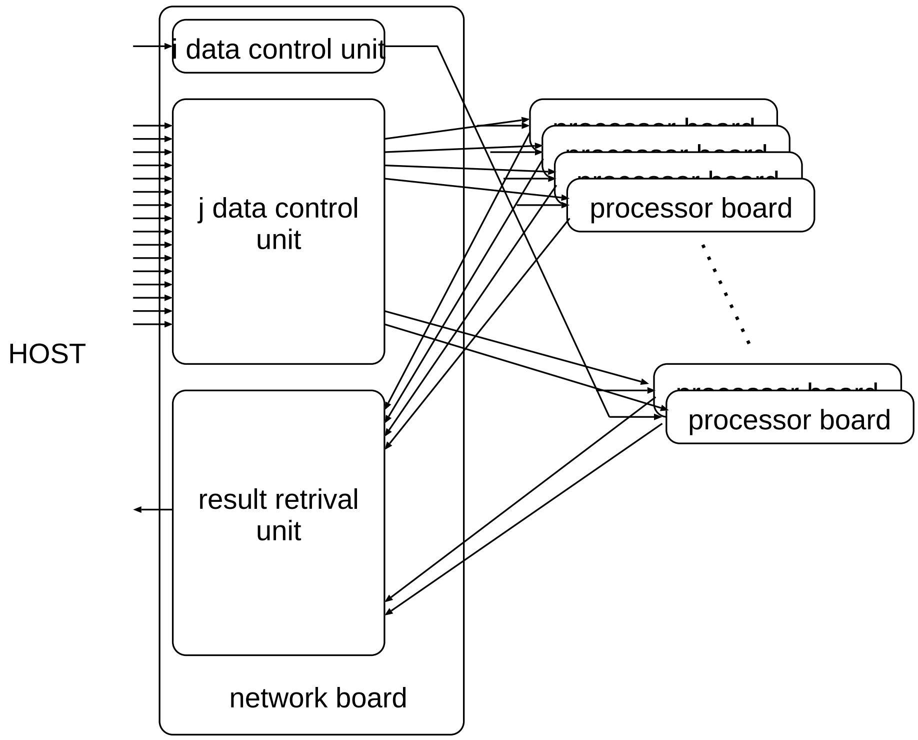
- 各プロセッサチップにメモリ直結

プロセッサボード構成



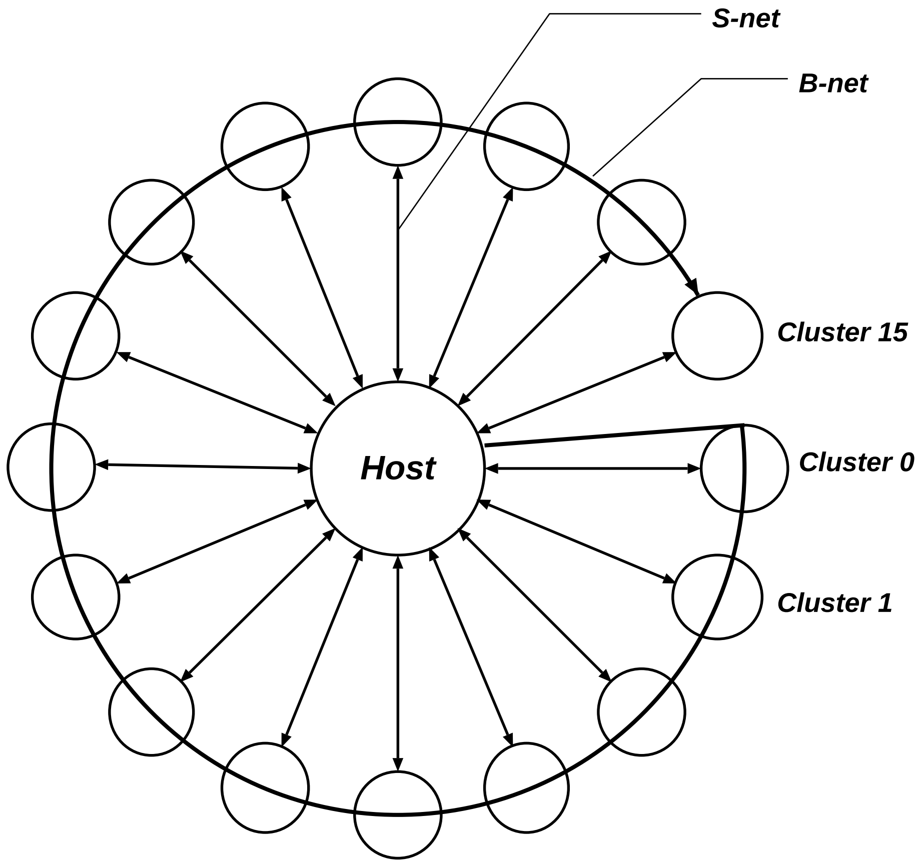
- 8 プロセッサモジュール (16 プロセッサチップ)
- 入力は放送
- 出力は縮約 (合計等)

クラスタ構成



- 16 プロセッサボード
- ボード間接続：ツイストペア (STP) 上の LVDS
- ネットワークボードは、プロセッサモジュールの代わりにプロセッサボードがつく以外はほとんど同じ。

全体構成



- 16 クラスタ
- 直接計算、ツリー法の両方に対応したホスト接続
- ホストは共有メモリ、分散メモリの両方に対応
- ネットワーク物理層：ツイストペア (STP) 上の LVDS

粒子系向け多用途計算機の役割

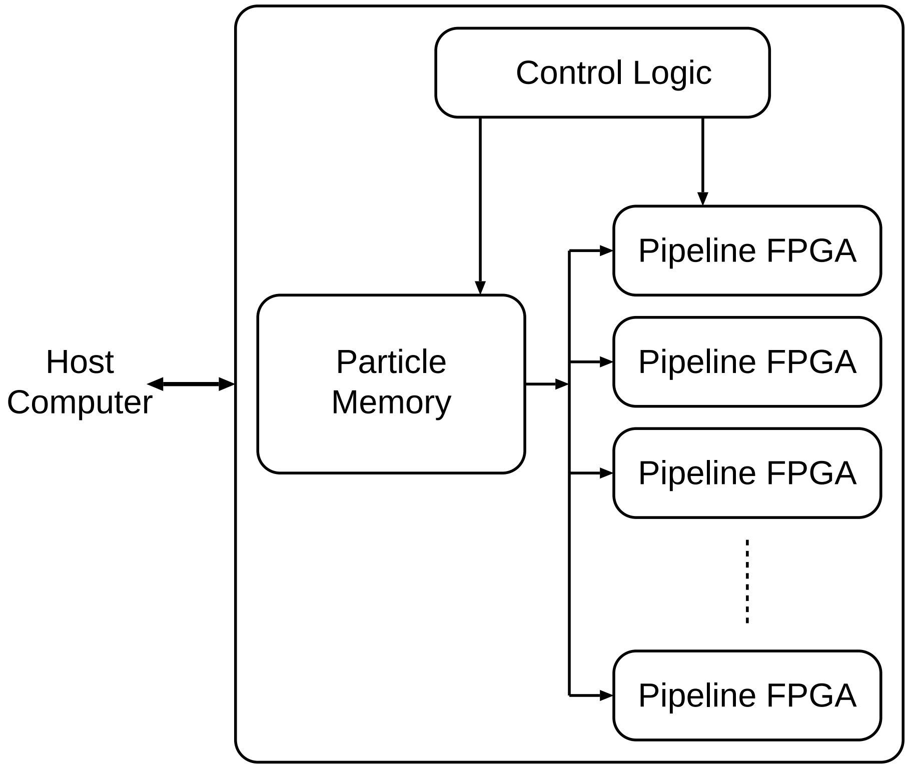
遠距離相互作用に比べて計算量が小さいが、そのかわり多種多様な近距離相互作用を扱う。

例

- SPH による自己重力流体シミュレーションでの流体相互作用
- 分子動力学計算での分子間力

多用途計算機の構成

- 基本的発想は GRAPE と同じ
- GRAPE の重力パイプラインの代わりに FPGA チップをおく



- ネットワーク、プロセッサボードは重力計算機のものを流用

研究計画

平成 9 年度

- 重力／クーロン力用計算機プロセッサチップ詳細設計
- 多用途システムの実験

平成 10 年度

- 重力／クーロン力用計算機全体の試作
- 多用途システムの性能評価とソフトウェア開発

平成 11 年度

- 重力／クーロン力用計算機全体の組み上げ
- 大規模多用途計算システムプロトタイプ開発

平成 12 年度

- 重力／クーロン力用計算機の増強
- 大規模並列多用途計算システム完成
- 筑波システムとの連係の検討

平成 13 年度

- システム全体の増強
- 筑波システムとの連係の実現

研究組織

牧野淳一郎	重力 / クーロン力専用計算機開発
蜂巣泉	応用ソフトウェア開発
泰地真弘人	プロセッサチップ論理設計
船渡陽子	応用ソフトウェア開発
福重俊幸	重力 / クーロン力専用計算機開発、 FPGA システム開発
高橋広治	応用ソフトウェア開発

現在までの進捗状況

進行状況はほぼ予定通り。

重力 / クーロン力専用計算機の状況

開発が終了したもの

- プロセッサチップ
- プロセッサモジュール
- ホストインターフェースカード

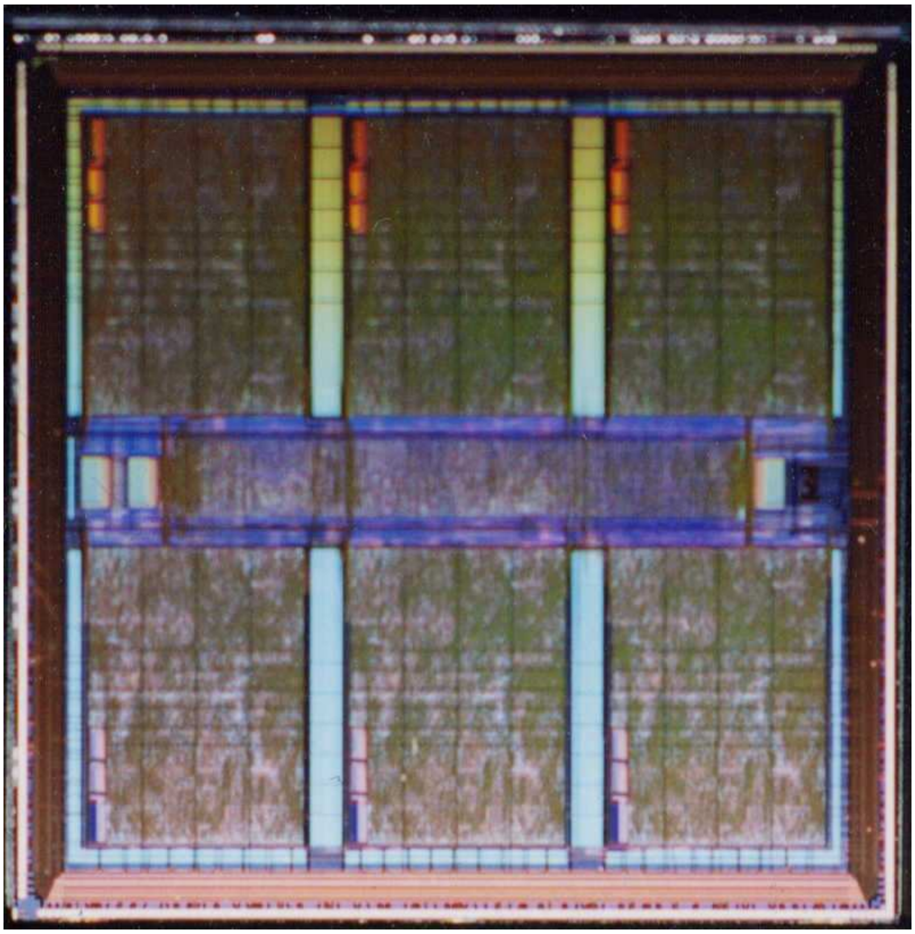
現在開発中のもの

- プロセッサボード
- ネットワークボード

多用途計算機の状況

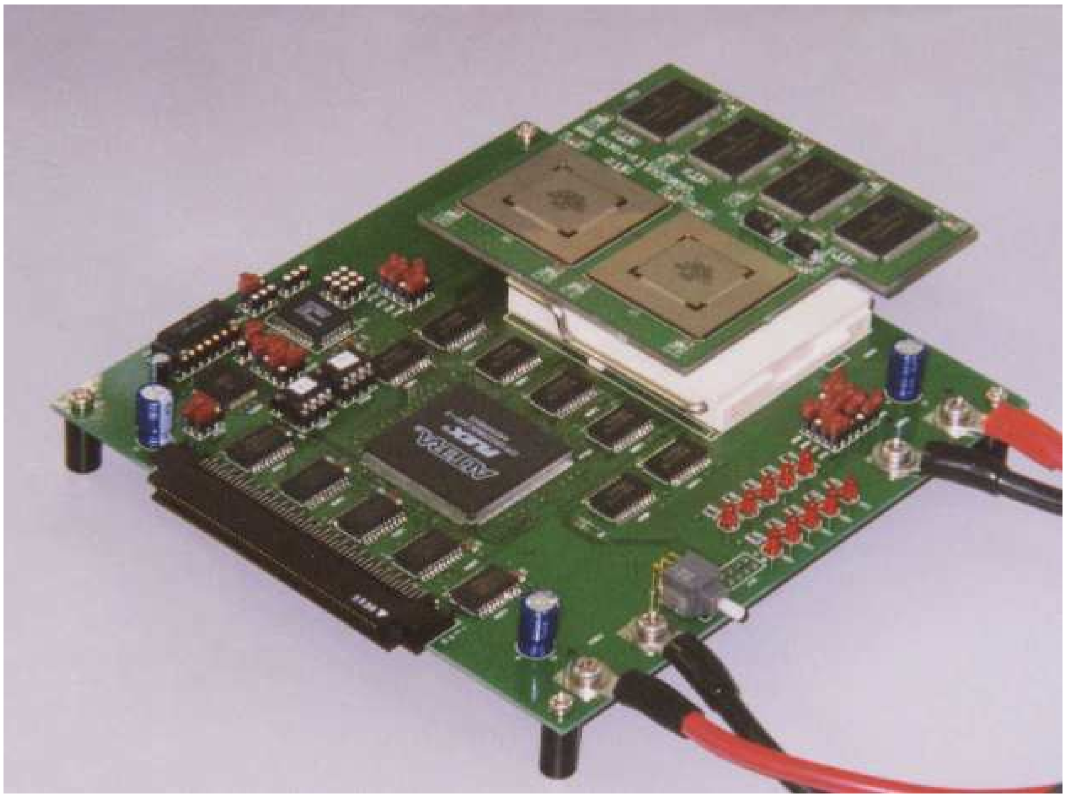
- 評価用システムを開発
- 重力計算等を実装し、性能評価と開発環境の整備を進めた

重力計算機プロセッサチップ



- 高精度パイプライン
- 100 MHz, 36 Gflops
- 1998 年 8 月 RTL 設計終了
- 1998 年 12 月テープアウト、 1999 年 3 月サンプル

プロセッサモジュール



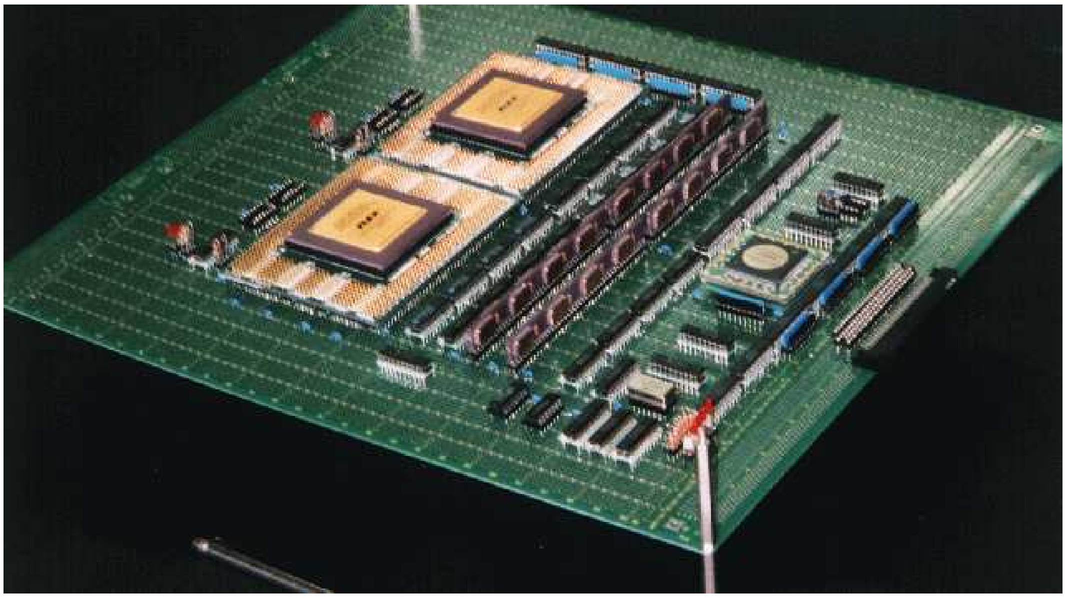
モジュール ＋ 評価用ボード

- GRAPE-4 と同じインターフェースで PCI バスに接続
- 動作確認ほぼ終了

ホストインターフェースカード

- PCI バスマスタ / バースト対応スレーブ
- 出力 2 系統、入力 1 系統
- 完成、性能評価中

多用途計算機プロトタイプ



- Altera Flex 10K50 × 2
- 20 MHz 動作

まとめ

- 本プロジェクトでは、これまでの **GRAPE** の成果を拡張し、ピーク速度で **100 Tflops** を超え、多様な粒子系に適用可能な超高速並列計算機を開発する
- 開発は現在までほぼ予定通りに進んで来ている。