次世代超並列計算機開発
——多粒子系向け超並列計算機の開発

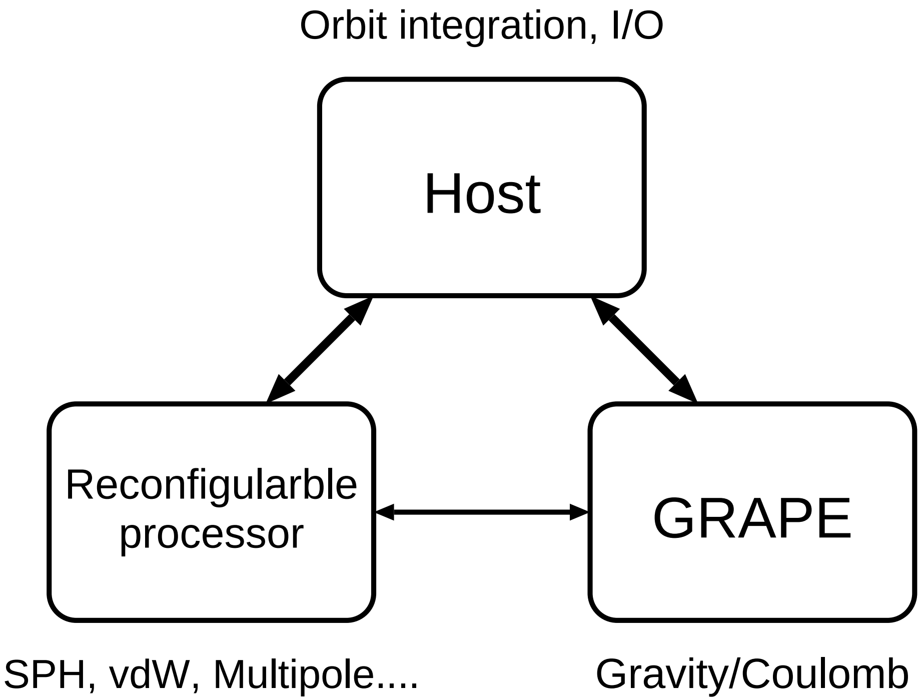
牧野淳一郎

東京大学大学院理学系研究科

講演概要

1. プロジェクト概要
2. 今年度の成果
    - 開発進行状況
    - ゴードン・ベル賞
    - 新しい高速計算アルゴリズム等
3. まとめ

プロジェクトの概要



1. 重力計算用の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 $>$ 100Tflops
- 通信速度の向上 ($>$ 2GB/s)
- 周期境界のサポート

重力専用計算機の応用分野

- 天体物理
- 古典分子動力学計算におけるクーロン相互作用
- 第一原理計算におけるクーロン積分 ？ (FMM, tree が使われている)

意外に広い応用がある。

粒子系向け多用途計算機の役割

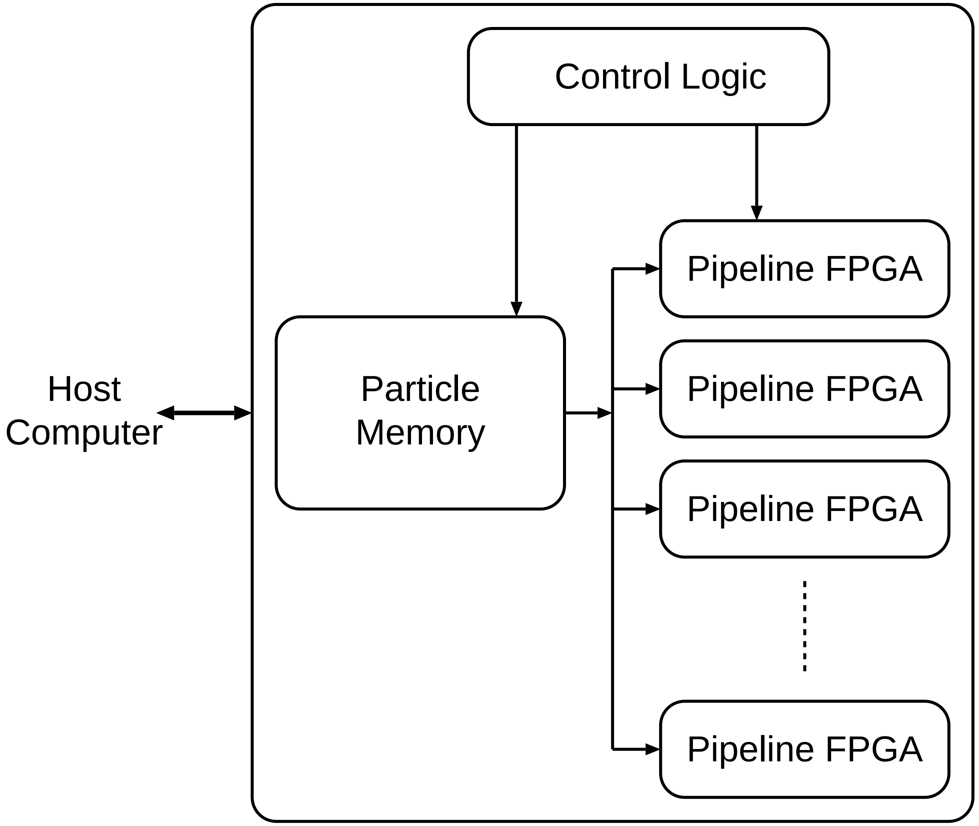
遠距離相互作用に比べて計算量が小さいが、そのかわり多種多様な近距離相互作用を扱う。

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プログラマブルな FPGA チップをおく
- FPGA の大きさは実効 10 万ゲート程度、応用によるがチップあたり 1 ～ 10 Gflops 程度が可能。



今年度の成果

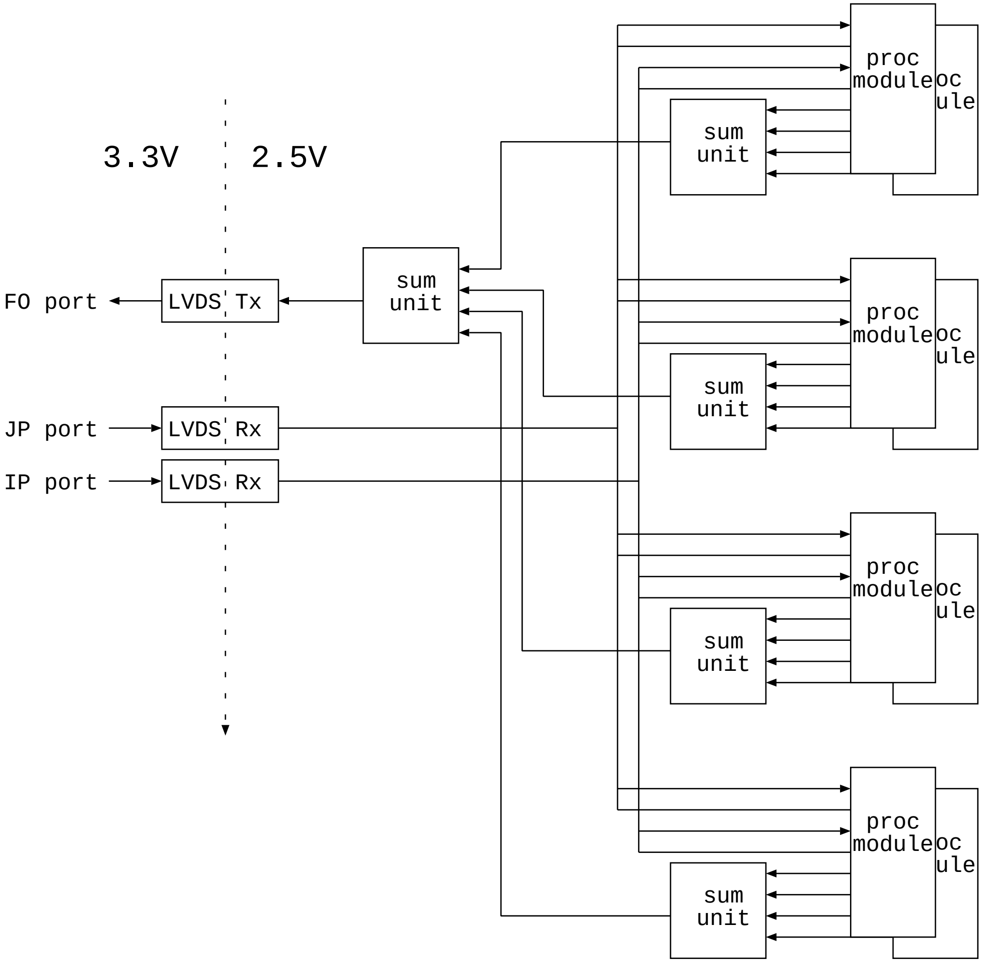
今年度(2001年1月まで)の主な成果

- 重力計算システムの開発進行
  - プロセッサボード、ネットワークボード試作版完成
  - マルチボードシステム動作確認
  - プロセッサボード、ネットワークボード量産版完成
- 試作版マルチボードシステムでの応用計算で2000年ゴードン・ベル賞獲得
- 疑似粒子多重極法の改良

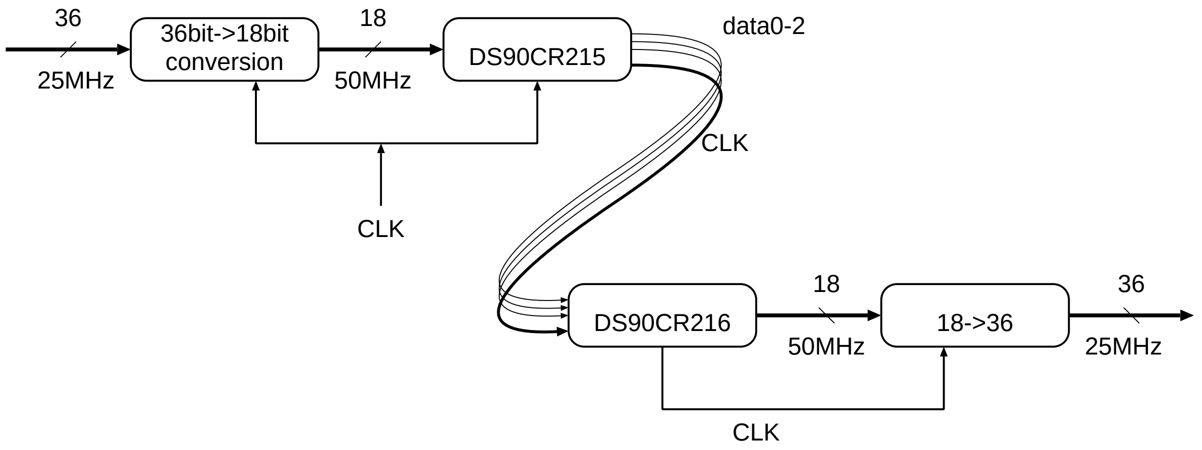
重力計算システムの開発進行状況

重力計算システムプロセッサボード（試作版）

- プロセッサモジュール8個搭載（チップ16個）
- ピーク性能 **576 Gflops**
- ホストまたは通信・制御ボードへの接続: **LVDS** による高速セミシリアル方式 (100MB/s ×3)
- ボード上で計算結果をリダクション

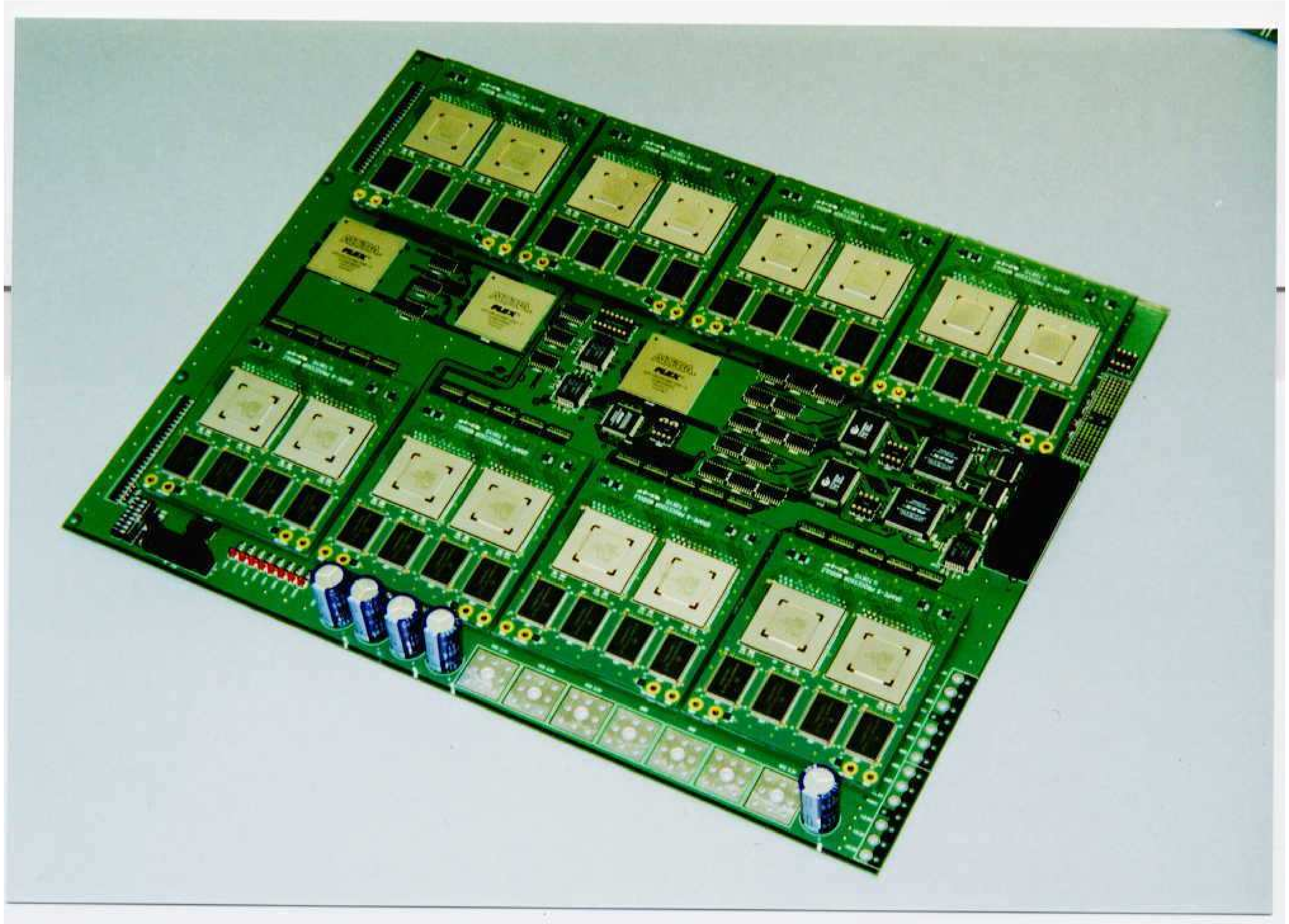


LVDS によるボード間通信



- 信号レベルは**LVDS** (Low Voltage Differencial Signal, EIA-644) 。
- 液晶パネル等に使われる LVDS-link LSI を採用。
- 信号 3 ペア+クロックを通常のカテゴリー5ツイストペアケーブルで伝送。コネクタも通常のモジュラジャック。
- 伝送実験で高い信頼性を確認 (エラーレート 10^{-12}以下)

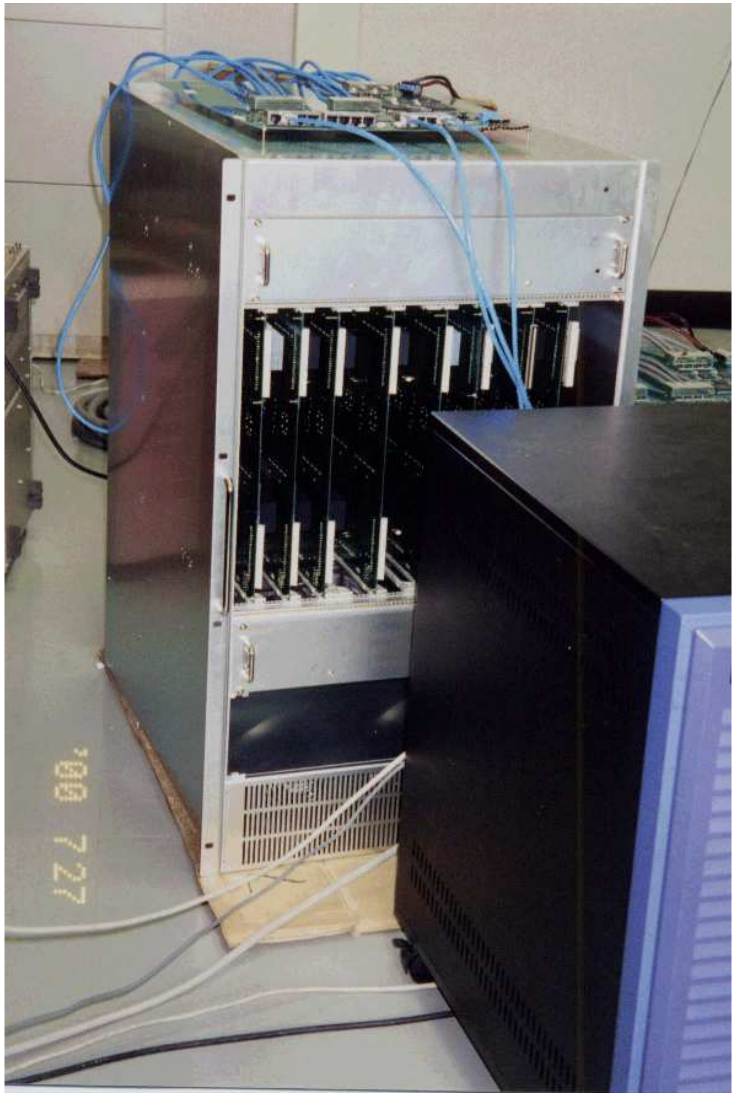
プロセッサボード試作版



ネットワークボード

- ホストからのデータを複数のプロセッサボードに放送（複数ホストからのデータをマルチキャストすることも可能）
- プロセッサボードからのデータを集計・ホストに転送
- ホストへの接続は LVDS ツイストペア
- プロセッサボードへの接続は LVDS ツイストペア とバックプレーンの両方をサポート

匡体

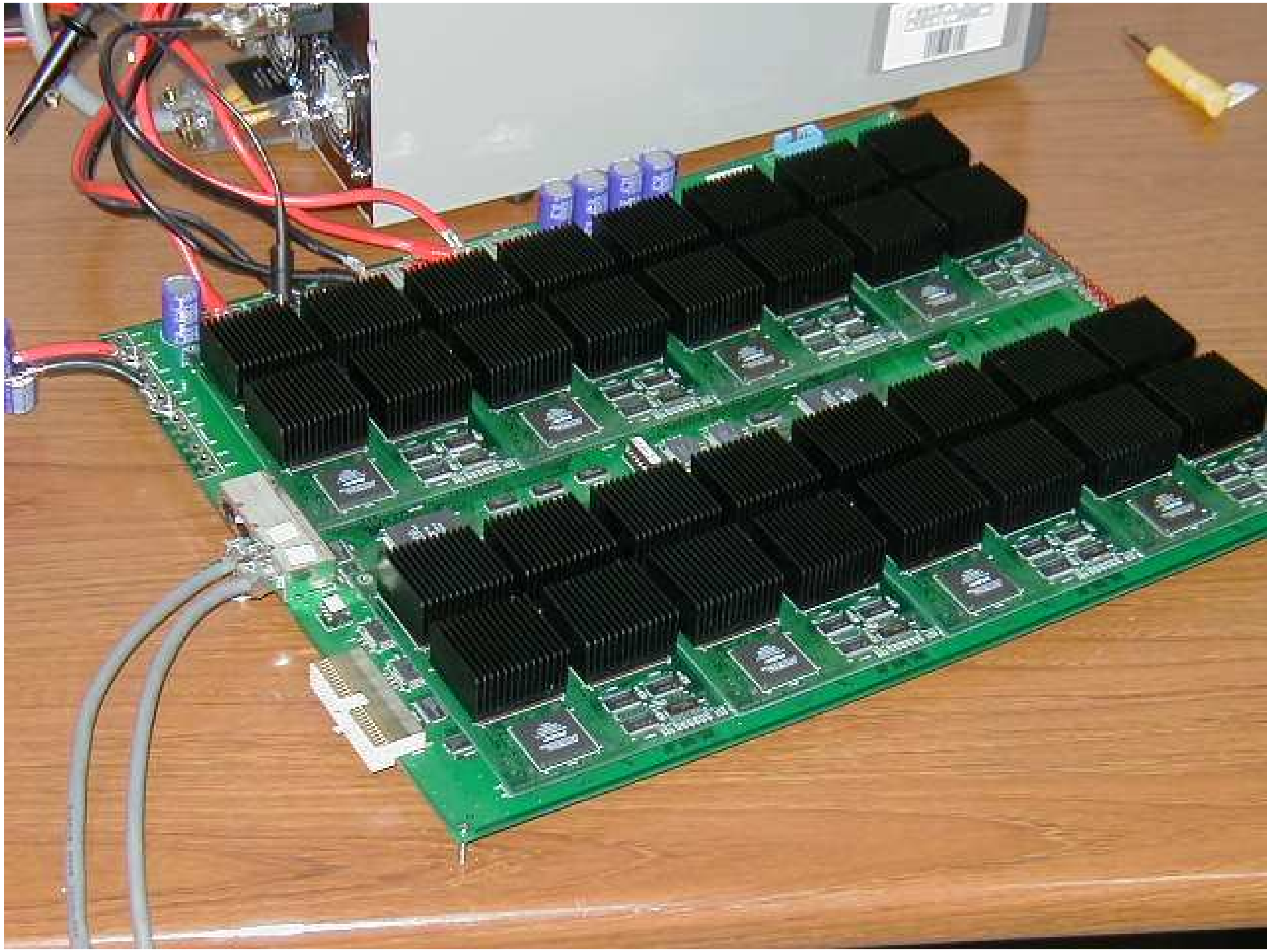


プロセッサボード量産版

量産コストを下げるために実装密度をあげるのが主な目標。具体的には ：

- 4 チップを搭載する新しいモジュールを開発
- ボードはこの新モジュールを 8 個搭載 (合計 32 チップ)
- ピーク性能 **1.1Tflops**
- それ以外は試作版と同じ

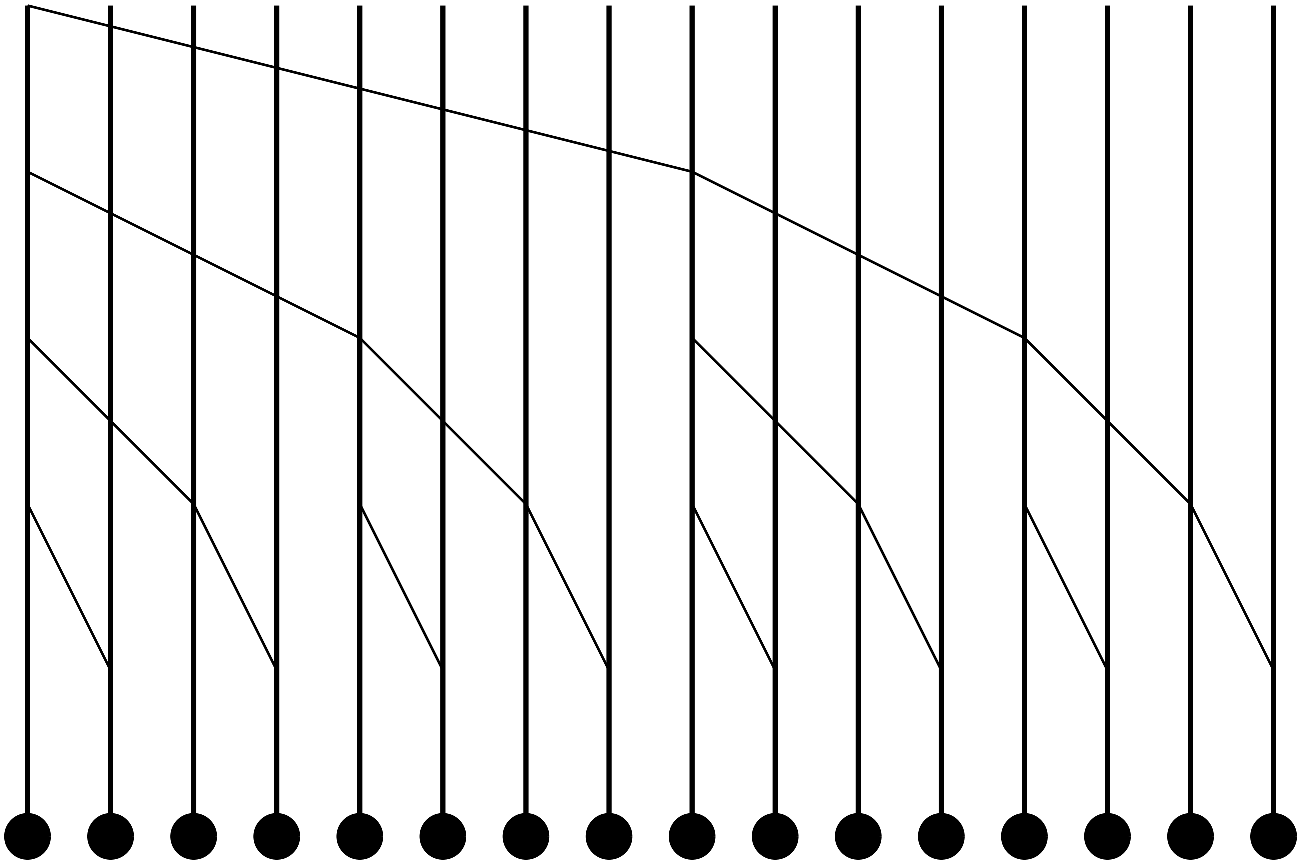
プロセッサボード量産版



ネットワークボードの機能

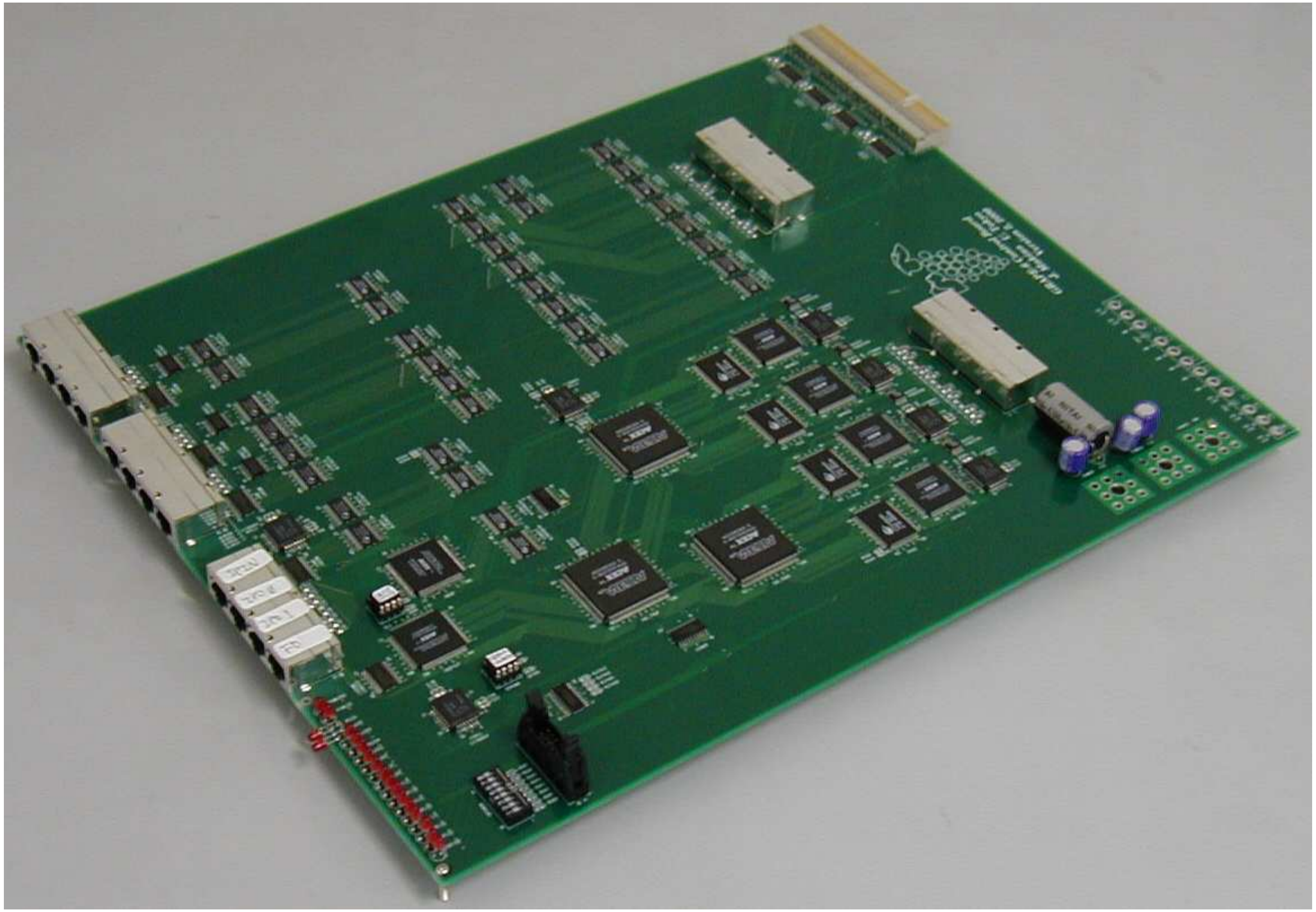
- ホストからのデータを複数のプロセッサボードに放送（複数ホストからのデータをマルチキャストすることも可能）
- プロセッサボードからのデータを集計・ホストに転送

マルチキャストネットワーク



1:16, 2:16, 4:16, 8:16, 16:16 のマルチキャストを再帰的なネットワークにより実現

ネットワークボード量産版



テスト風景

開発状況のまとめ

- プロセッサボード、ネットワークボードの試作版完成。複数ボードの並列動作に成功。
- 量産版ではボードあたりのチップ数を増やした。これはコスト削減のため。
- 量産版もプロセッサボード2枚の並列動作を確認。バックプレーン接続も動作確認。

コスト削減のために設計変更を行なった分、量産スケジュールが遅れているが、来年度には大規模システムが完成する。

試作版 ゴードンベル賞受賞

SC2000

GORDON BELL PRIZE

Junichiro Makino

Winner, Peak Performance Category

• • •

A 1.349 Tflops simulation of black holes in a galactic center on GRAPE-6

SC2000 CONFERENCE • NOVEMBER 04-10, 2000 • DALLAS, TEXAS USA

LOUIS TURCOTTE, SC2000 GENERAL CHAIR

James McGraw

JAMES McGRAW, CONFERENCE VICE CHAIR, TECHNICAL PROGRAM

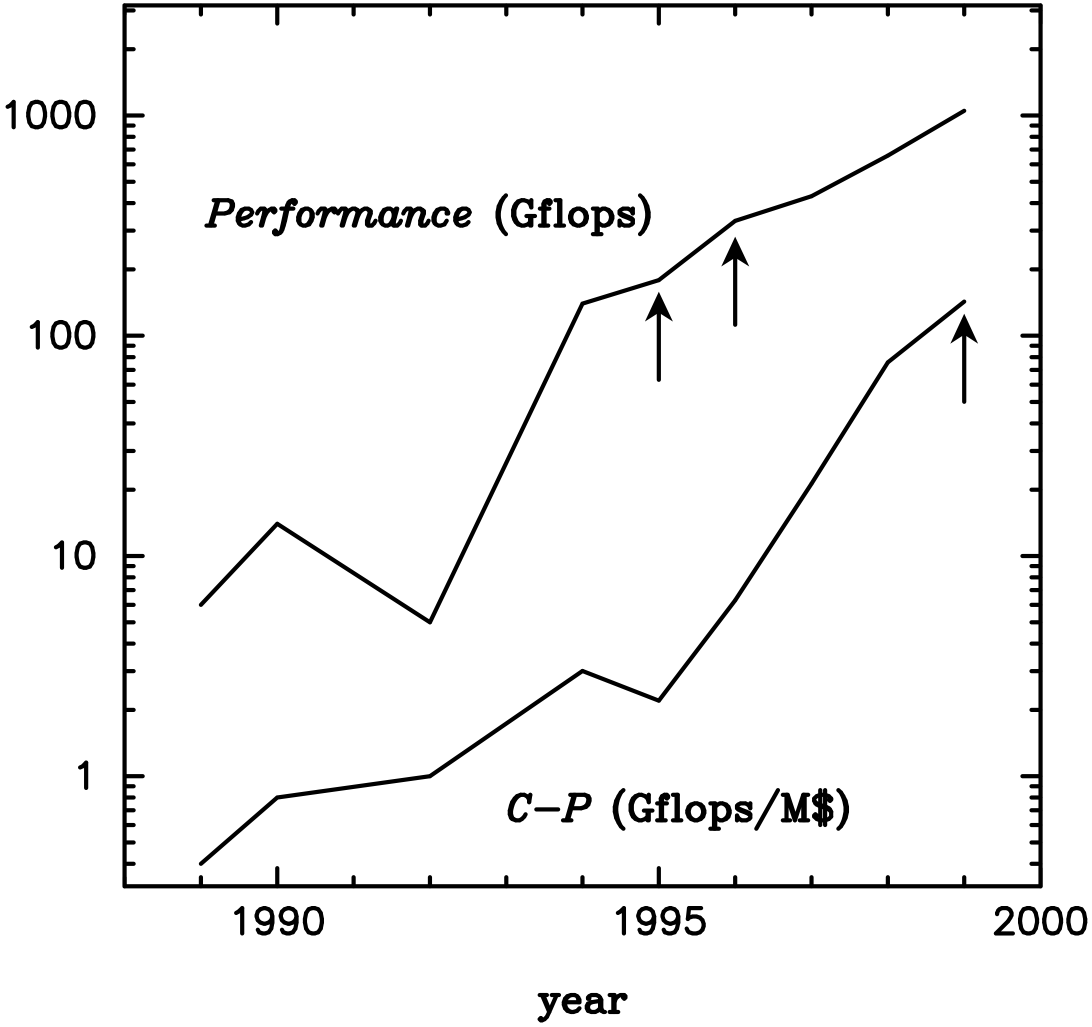
ゴードンベル賞とは？

- 元 DEC のゴードン・ベルが 1987 年に創設。
- 実用的な科学技術計算の並列化に対して与えられる。
- 現在は
  - 実効性能
  - 価格性能比
  - 特別部門（特に並列化困難な応用での達成）

  の 3 部門。
- 毎年、応募のあったもののなかから選ばれる。

過去の受賞者の達成

- 過去の10年の計算機の性能向上を表す良い指標
- 1995, 1996 年は GRAPE-4
- それ以降は T3E や ASCI machines (主にRed)
- 1998年の価格性能比は QCD 専用機, 1999年は GRAPE-5



今回の我々の計算

- 試作版 16チップボード × 6枚 (96チップ、ピーク3Tflops) +Alpha UP2000 box
- 独立時間刻みを使った直接計算、粒子数は 768K
- 実効性能で 1.35 Tflops を達成
- 理研の分子動力学専用計算機 MDM と賞をわけあった (理研は 1.34 Tflops)

まだ全体の1/10 以下しか完成していない試作版ではあるが、すでに世界最高速の計算機になっていることを実証した。

疑似粒子多重極法の改良

疑似粒子多重極法 (Makino 1998): 重力ポテンシャルの多重極展開を粒子で表現し直すことで、専用計算機で高速に FMM や高次の多重極展開を使うツリー法を実現する。

当初の提案 : spherical *p*-design による粒子配置

球面調和関数の数値積分の直交性を満たすのに必要な粒子を球面上に配置。展開を逆変換することで各粒子の質量を決める

利点 :線形計算で粒子分布を決められる
欠点 :必要な粒子数が多い (2 次で 12 個!)

4重極の場合の効率的配置

4重極　:トレースレスの4重極テンソルで書ける。

対角化した後は xy 平面上の楕円　:モーメントを合わせるだけなら等質量の3粒子を平面上におけばいい。

結局 3粒子の2等辺3角形配置で4重極までを表現できる。

12粒子を3粒子に減らせた → 4倍高速化

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、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
- 今年度は、量産版のコストダウンのための作業のために多少予定のスケジュールから遅れたが、来年度始めには大規模システムが立ち上がる。
- **GRAPE-6** 試作版のマルチボードシステムのゴードン・ベル賞絶対性能部門での受賞で、現在の試作版システムがすでに世界最高速の実効性能を実現できることを実証できた。