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

東京大学大学院総合文化研究科

講演概要

1. 「計算科学」のなかでの計算機ハードウェア開発の位置づけ
2. 「粒子モデル」の特性、利点 / 欠点
3. 「粒子モデル」向け計算機の意義
4. 全体計画
5. 進行状況
6. 今年度の成果
7. 今後の予定

「計算科学」のなかでの計算機ハードウェア開発の位置づけ

「計算科学」は計算機ハードウェアを与えられたものとして進めていけるわけではなく、積極的に新しい計算機の構成を提案していく必要がある

例：

- QCD 計算用並列計算機
- Linux PC クラスター

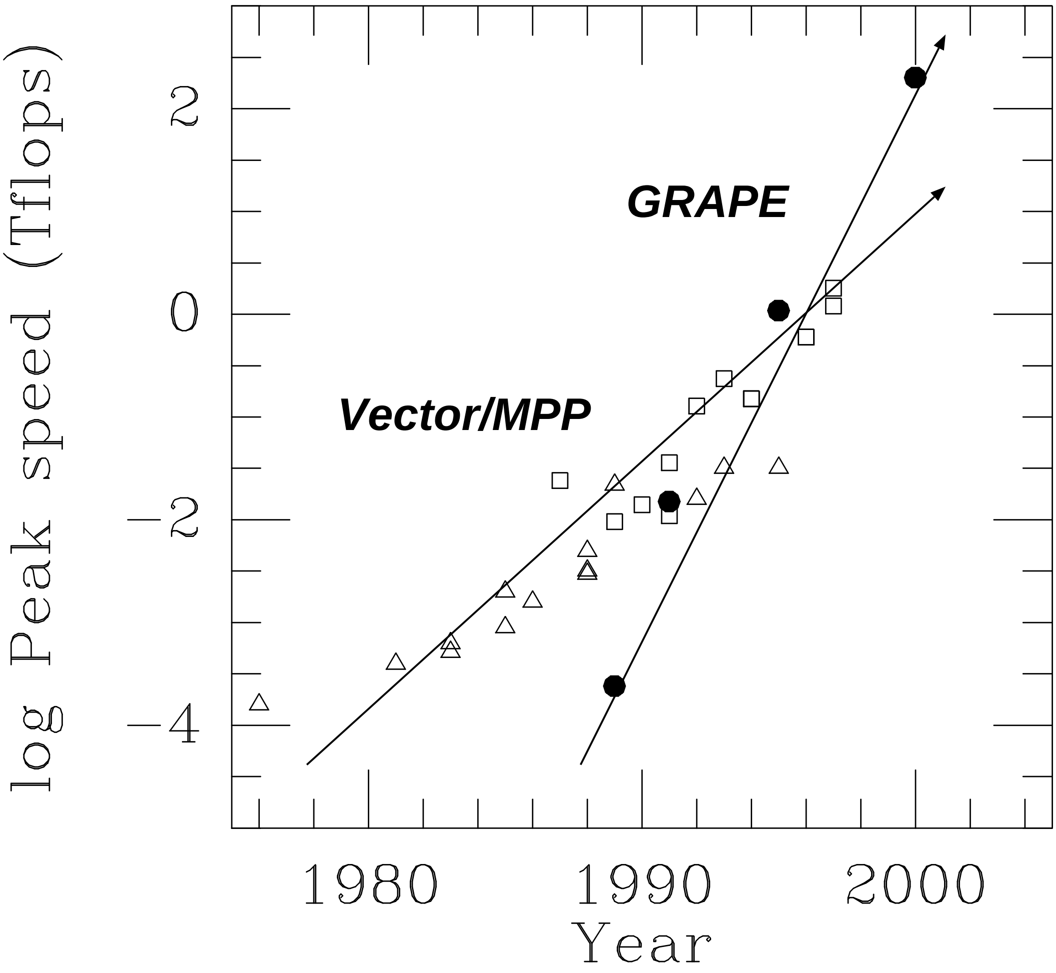
どちらも、計算機メーカーや計算機アーキテクチャ研究者ではなく、現場の研究者が作ってきたもの

自前のハードウェアを作る必要性

計算機メーカー、計算機アーキテクチャ研究者は、計算科学の必要に本当にマッチしたものをなかなか作ってくれない。

- 要求が多様 ＝ それぞれの市場が小さ過ぎる
- 計算機は「汎用」＝ 応用毎に別のものを作るのは計算機科学の研究ではない？

汎用計算機の技術トレンド



汎用計算機の速度の進歩

汎用計算機の技術トレンド（続き）

現在の(名目)最高速計算機 :分散メモリ、疎結合のクラスタマシン

- **Intel-Sandia ASCI**
- **IBM SP-2**
- **Cray-SGI Origin**

安価な CMOS マイクロプロセッサを多数使うことで高い価格性能比と高い最高性能を両立
= QCD 専用並列計算機そのもの

- 半導体技術の進歩 → 新しいアーキテクチャが必要
- 必然的に超並列 → 「汎用」は困難

粒子系シミュレーション

系を記述する方程式：

$$\frac{d^2 \boldsymbol{x}_i}{dt^2} = \sum_{j \neq i} \boldsymbol{f}_{ij}$$

- 多くの場合、相互作用は中心力
- 積分時間が非常に長いことが多い
  :必要メモリ小さい
- 相互作用の計算が計算時間の大半を占める
  :必要メモリバンド幅小さい

$$\left\{ \begin{array}{l} \text{「近距離」力：粒子が相互作用するのは} 10^2 \sim 10^3 \text{個} \\ \text{遠距離力：系のすべての粒子と相互作用} \end{array} \right.$$

粒子モデル

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

メッシュ法との比較

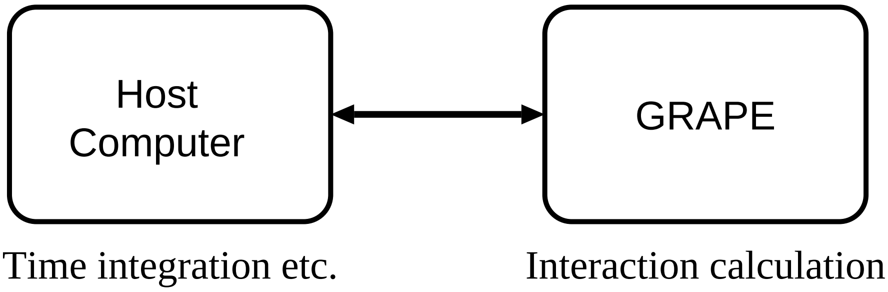
(短距離相互作用の場合)

- 利点
  - ラグランジュスキームの構築が容易
  - 適応的スキームの構築が容易
  - 複雑な境界条件等への対応も容易
- 欠点
  - 同じ自由度で比較すると計算量が増える
  - 不連続性を扱うのは工夫がいる (衝撃波、接触不連続等)

計算量 :専用計算機化が有効

粒子系向け専用計算機の基本的考え

(GRAPE, GRAvity PipE)

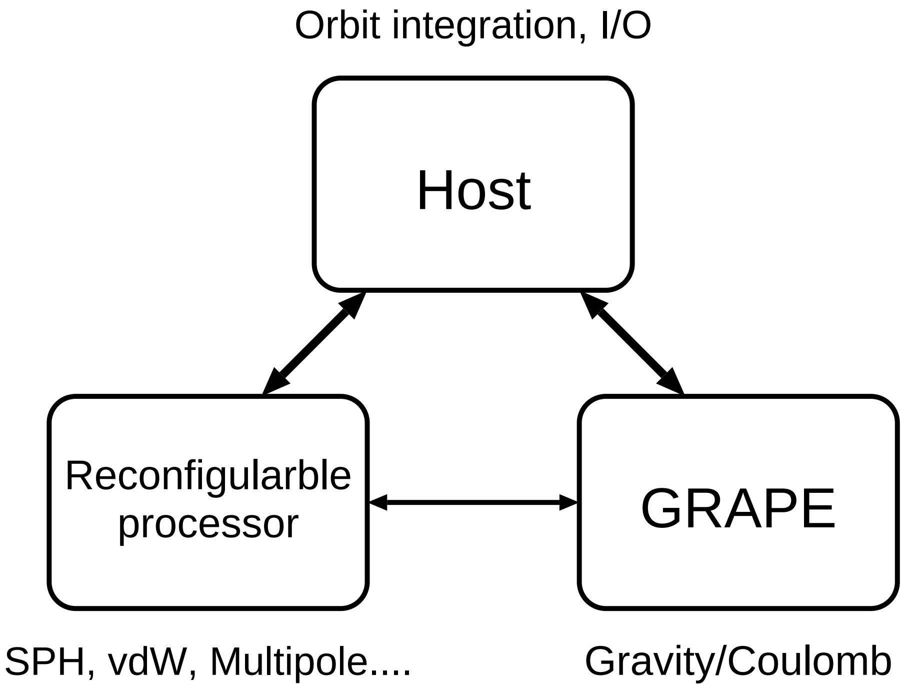


- 専用ハードウェア
  - ・ハードウェア化した論理 → ソフトウェア不要
  - ・相互作用計算専用のパイプライン → 高い性能
- 汎用ホスト計算機
  - ・高レベル言語が使える (**Fortran, C, C++...**)
  - ・既存のプログラムが多少の手直しで使える
  - ・ツリーコード、独立時間刻みなども使える

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

本プロジェクトの概要



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)
- 周期境界のサポート

プロセッサLSI

- 0.25 μm custom design (IBM SA-12, 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

粒子系向け多用途計算機の役割

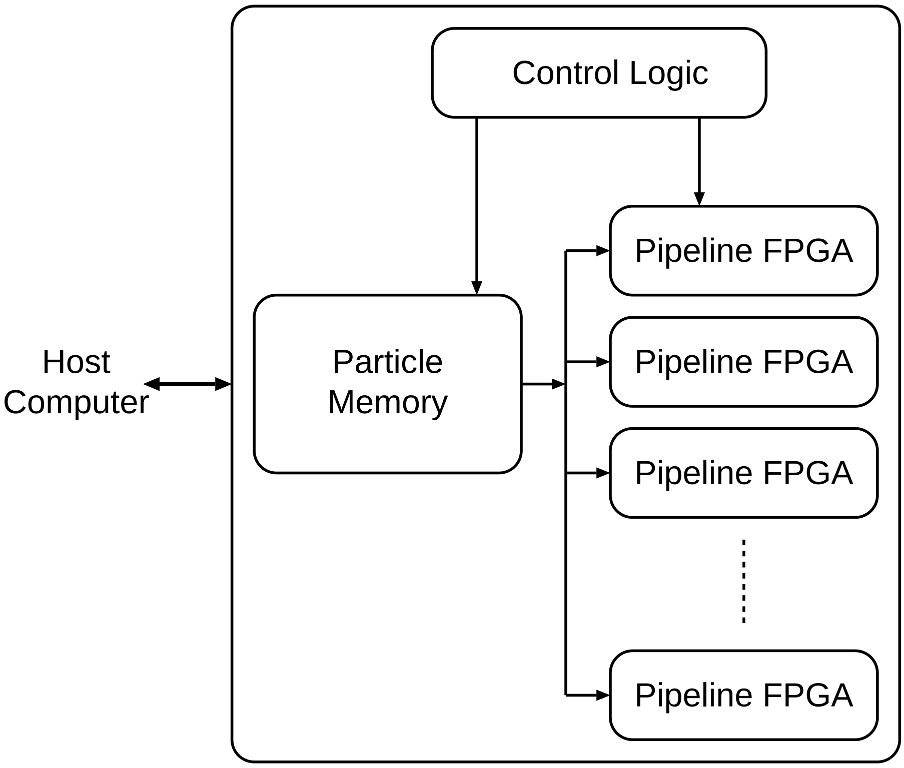
遠距離相互作用に比べて計算量が小さいが、そのかわり多種多様な近距離相互作用を扱う。

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



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

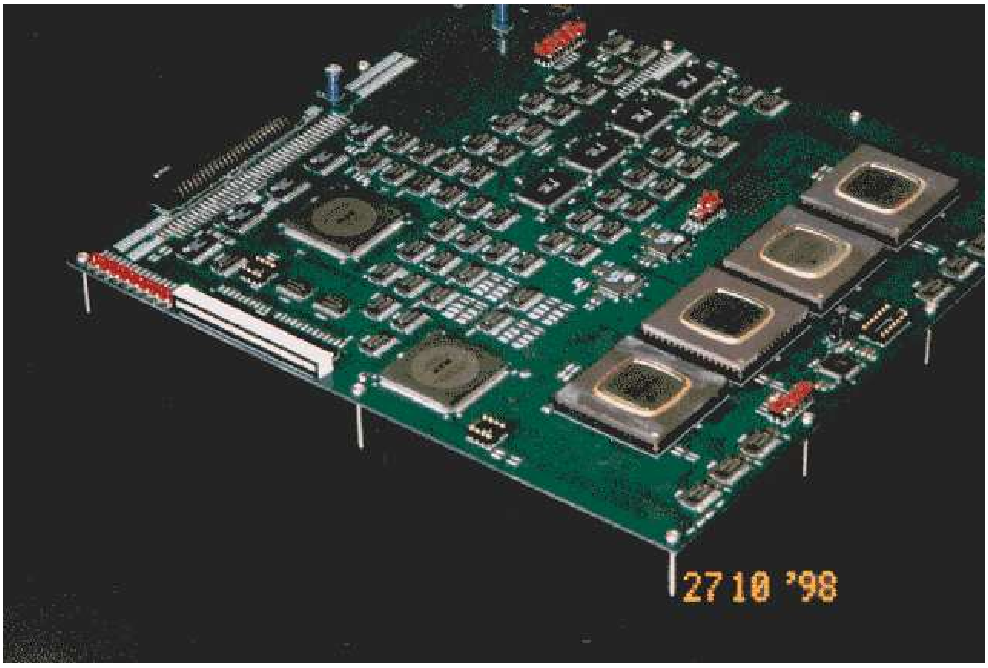
筑波システムとの連係の実現

進行状況・今年度の成果

進行状況はほぼ予定通り。
今年度(1999年1月まで)の主な成果

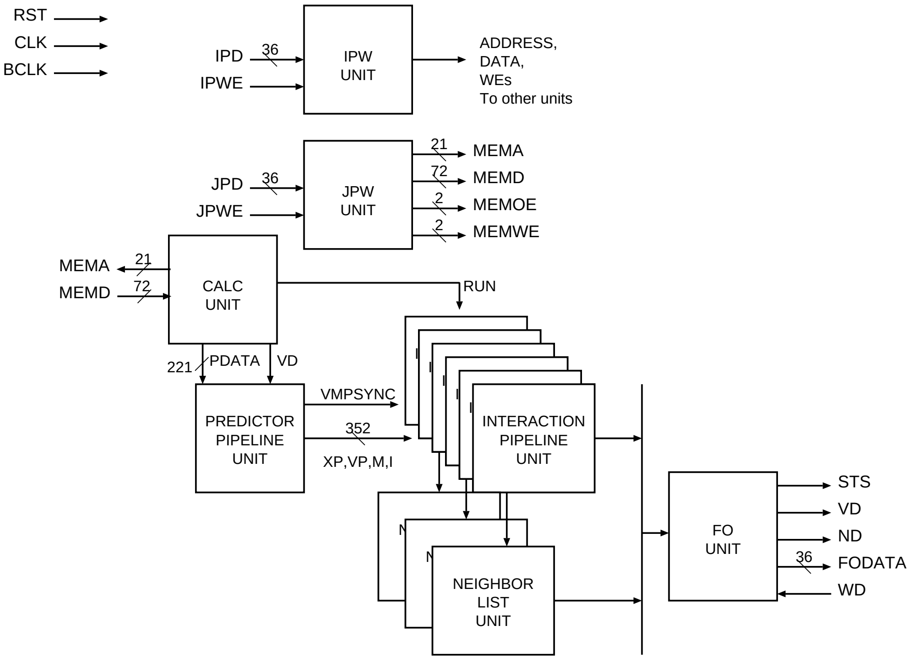
- GRAPE-5 システムの完成
- 重力計算チップ物理設計終了
- 重力計算システムプロトタイプ設計終了
- PROGRAPE-1 システムを使った FPGA による多用途計算機上でのアプリケーション開発
- 疑似粒子多重極法の開発

GRAPE-5



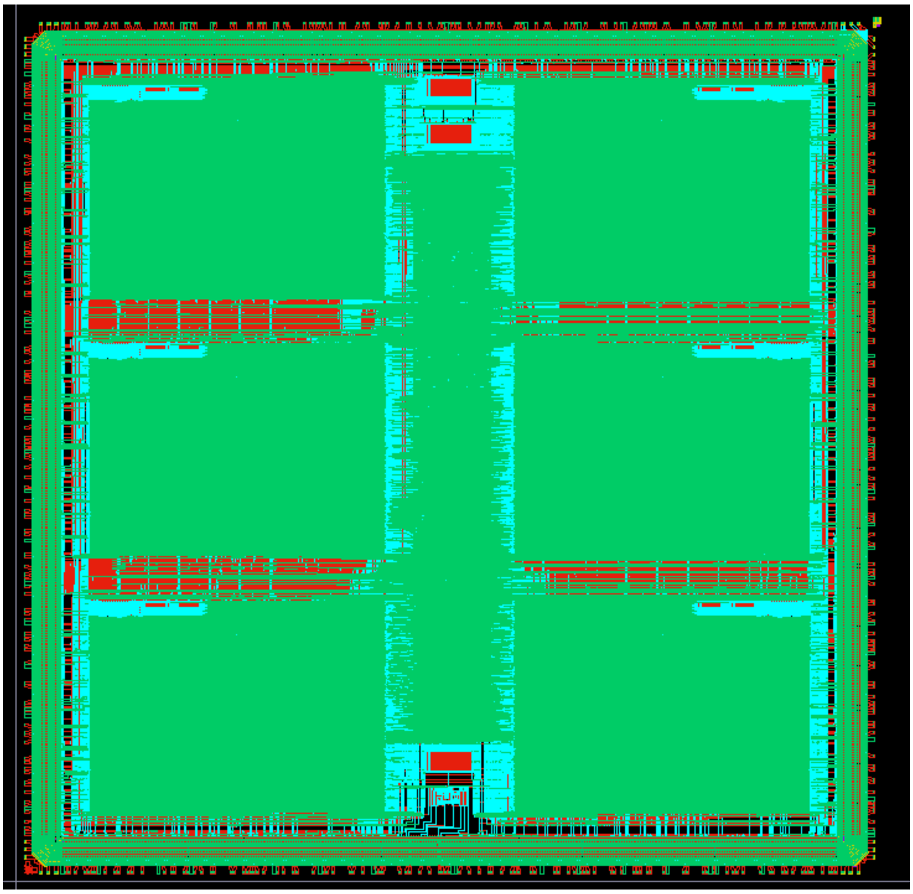
- GRAPE-6 開発のための準備・実験
- 「低精度」パイプライン, 90 MHz, 5.4 Gflops
- VHDL による設計

重力計算チップ

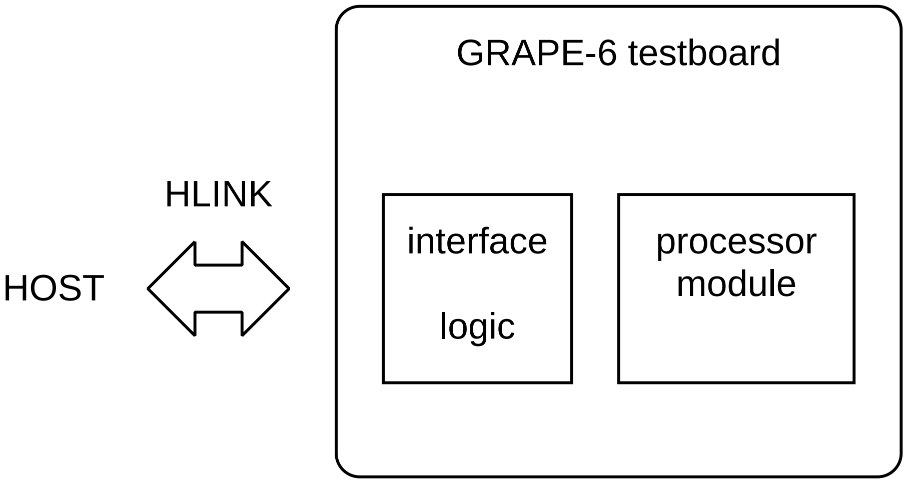


- 高精度パイプライン
- **100 MHz, 36 Gflops**
- **12**月テープアウト、 **2**月サンプル

重力計算チップ（続き）



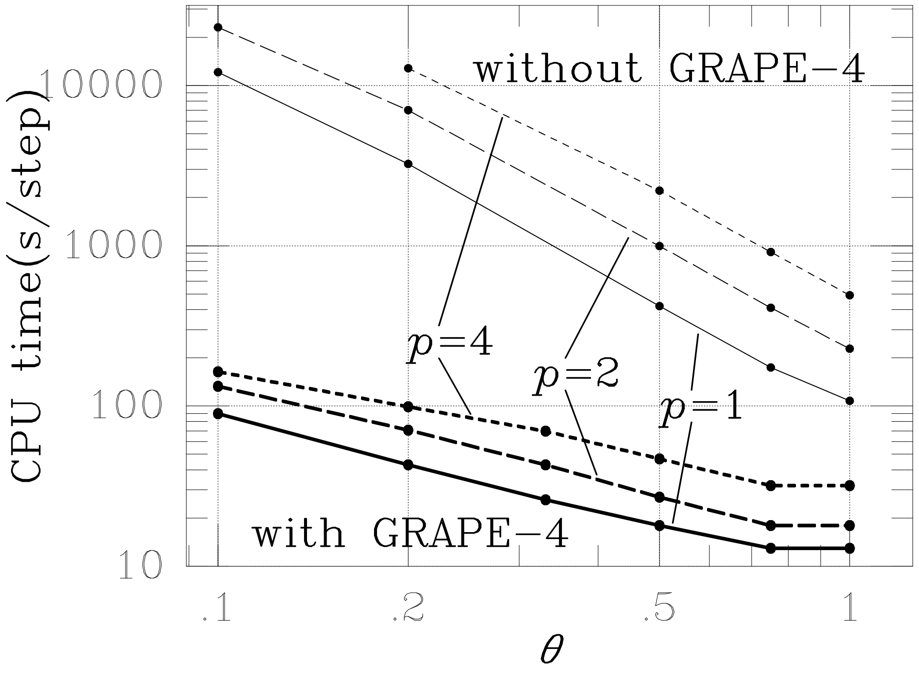
重力計算システムプロトタイプ



- 2チップによるチップ評価システム
- PCI インターフェース
- 2月中には完成の予定

疑似粒子多重極法

- 高速多重極法、**Barnes-Hut** ツリー法の新しい、簡単な定式化
- 少数の疑似粒子を使って多重極展開を表現
- 粒子間重力専用計算機で **FMM**, ツリー法を加速



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
- 今年度はほぼ計画通りの成果を達成した
- 専用計算機に特に適した FMM、ツリー法の実現法である疑似粒子多重極法を開発した。