

エクサスケールコンピュータに向けて

牧野淳一郎

理学研究流動機構/計算科学研究機構(理研)

地球生命研究所(4/1から)

の前に

の前に
規定発表の真似事的何か

研究室構成、論文数等

	人数	論文数
教授	1	(1)
特任准教授	1	1
特任助教	1	1
D3	1	0
D2	1	0
B4	2	0
その他		7(+1)

- 括弧付きは計算機科学の査読ありでそこそこの国際学会 (SCxy)
- 本人が好きそうなことを
- 成果がでそうな(人がまだやってない)方向に
- (あんまり研究室の方針とかない)

競争的資金

資金名	研究題目・代表者	研究期間	今年度研究費（千円）
委託研究	「演算加速機構を持つ将来のHPCIシステムに関する調査研究」・佐藤三久(基本プロセッサアーキテクチャ及び地球科学分野の計算科学アプリケーションに関する検討)	2012-13	35948
基盤S	「ルビーによる高生産な超並列・超分散計算ソフトウェア基盤」・平木(東大)	2009-2013	5330
NEDO	「超低消費電力を実現するハイパフォーマンスコンピューティング用プロセッサアーキテクチャの開発」・牧野	2012	2500
HPCI戦略	「HPCI戦略プログラム分野5 物質と宇宙の起源と構造」・青木(筑波)	2011-2015	34650

業績の概要

代表的な研究成果

- まともな研究
 - SPH の新しい定式化: 最初の論文 3/7 アクセプト (<http://arxiv.org/abs/1202.4277>)
 - 「京」を使ったダークマターハロー計算 2012年度ゴードンベル賞
- やくざな仕事 (「京」後継の開発計画)
 - 今後のHPCI計画推進のあり方に関する検討ワーキンググループ委員
 - 「演算加速機構を持つ将来のHPCIシステムに関する調査研究」分担

Baba, J., Saitoh, T. R., and Wada, K., "Dynamics of Non-steady Spiral Arms in Disk Galaxies", ApJ, 763, 46-(2013)

Fujii, M. S. and Baba, J., "Destruction of star clusters due to the radial migration in spiral galaxies", MNRAS, 427, L16-L20(2012)

Komugi, S., et al. , "The Schmidt-Kennicutt Law of Matched-age Star-forming Regions; Pa α Observations of the Early-phase Interacting Galaxy Taffy I", ApJ, 757, 138-2012)

Farr, W. M., Ames, J., Hut, P., Makino, J., McMillan, S., Muranushi, T., Nakamura, K., Nitadori, K., and Portegies Zwart, S., "PSDF: Particle Stream Data Format for N-body simulations", NewA, 17, 520-523(2012)

Fujii, M. S., Saitoh, T. R., and Portegies Zwart, S. F., "The Formation of Young Dense Star Clusters through Mergers", ApJ, 753, 85-2012)

Inoue, S. and Saitoh, T. R., "Natures of a clump-origin bulge: a pseudo-bulge like but old metal-rich bulge", MNRAS, 422, 1902-1913(2012)

Tanikawa, A., Hut, P., and Makino, J., "Unexpected formation modes of the first hard binary in core collapse", NewA, 17, 272-280(2012)

Saitoh, T. R. and Makino, J., "A natural symmetrization for the plummer potential", NewA, 17, 76-81(2012)

Ishiyama, T, K. Nitadori and J. Makino, 4.45 Pflops astrophysical N-body simulation on K computer: the gravitational trillion-body problem (SC12)

J. Makino and H. Daisaka, GRAPE-8 — An Accelerator for Gravitational N-body Simulation with 20.5Gflops/W Performance (SC12)

エクサスケールコンピュータに向けて

エクサスケールコンピュータに向けて

と思ったのですが

エクサスケールコンピュータに向けて

なんか面白い話にならないので

エクサスケールコンピュータに向けて

別の話をします

SPH の話

- 通常の質量でなく、圧力を使う定式化を考えた
- これはこれで色々上手くいくが問題も残る
- さらに拡張した定式化を考えた
- まだあんまりテストはしていない

Saitoh and Makino 2012 2013

従来のSPH1

新しいSPH1

従来のSPH2

新しいSPH2

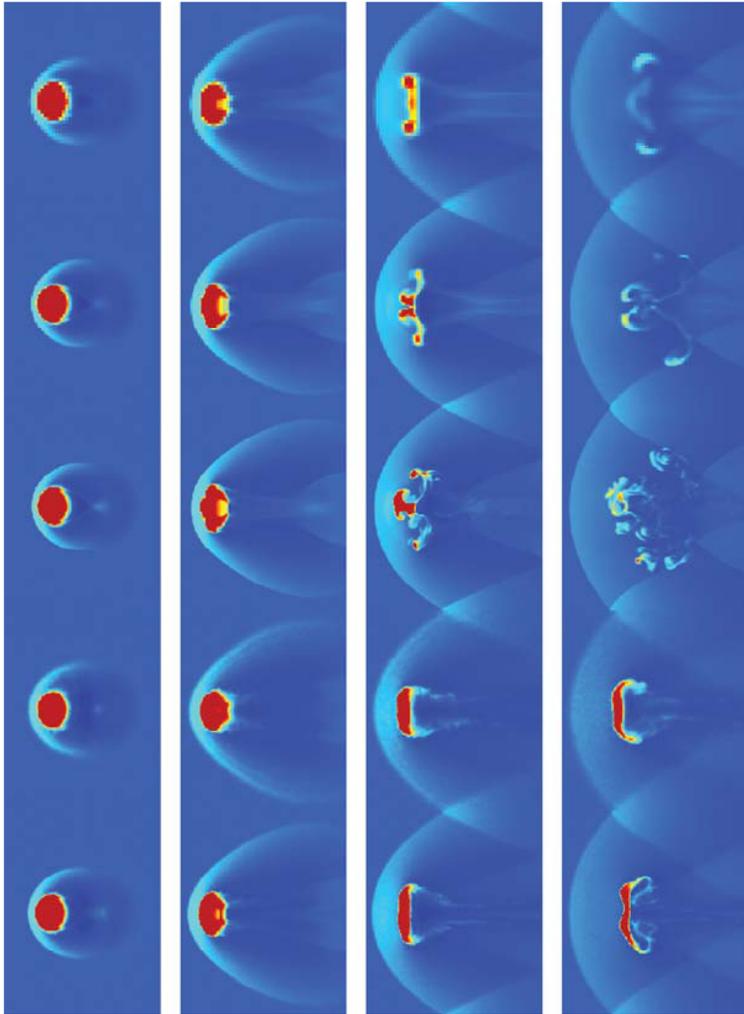
接触不連続を扱える SPH の定式化 (Saitoh and Makino, ~~まだ論文通ってない、、、~~
3/7 アクセプト)

SPH と接触不連続、KH 不安定

Agertz et al (MN 2007, 380, 963)

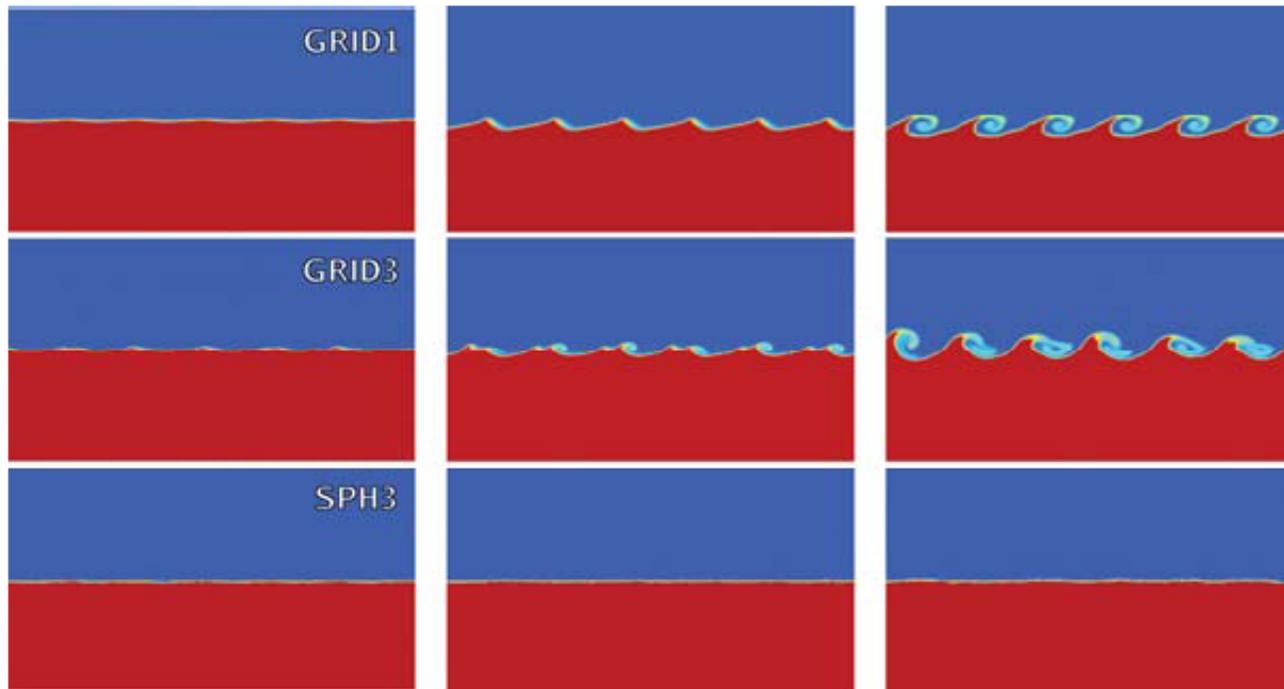
- SPH と Grid コードで、「Brook test」の答が全然違う
- もっと簡単な Kelvin-Helmholtz 不安定 (計算は3次元) でも全然違う
- SPH だめじゃん

どれくらい違うか (1)



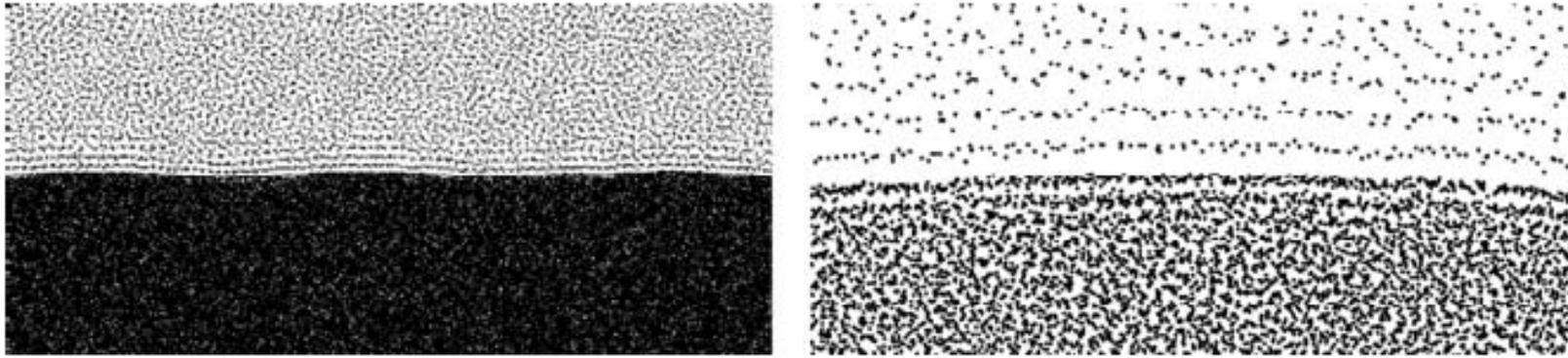
- 周りよりつめたい (温度 1/10、密度 10 倍) ガスの球を超音速で動かす
- 上から 3 個は Grid
- 下の 2 つは Gasoline (下は 10M 粒子)
- SPH では 境界での不安定が起きないで、冷たい流体が固まりのまま。

どれくらい違うか (2)



SPH では KH 不安定が起きない。

どれくらい違うか (3)

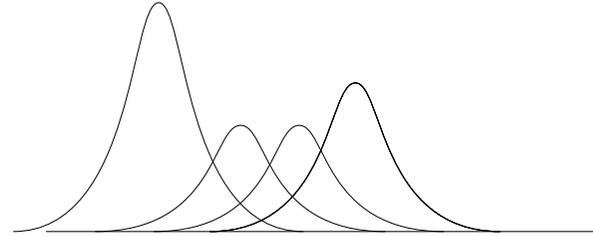


2流体の境界面で妙な隙間ができる。このため力が働かない？

何故そんなことが起きるか？

基本的には、SPH の方程式自体の問題
密度の推定

$$\rho(x) = \sum_j m_j W(x - x_j), \quad (1)$$



物理量の推定

$$\langle f \rangle(x) \sim \int f(x_j) W(x - x_j) dx_j \sim \sum_j \frac{m_j f(x_j)}{\rho(x_j)} W(x - x_j). \quad (2)$$

ここでやっていることは、本質的には体積要素 dx を $m_j/\rho(x_j)$ で置き換えているだけ。

密度に不連続があると 1 式が $O(1)$ の誤差を出すので破綻。

粒子の占める体積の推定さえできれば別に何を使ってもいいはず (但し、色々論文をみてもこれ以外の方法をやっているものはみたことがない)

新しい提案 — 原理

質量密度の代わりに何を使うか？

色々検討して、去年の年末にでてきた式:

$$\sum_j V_j W(x_i - x_j) = 1 \quad (3)$$

密度とか圧力とかいった物理量から粒子に対応する積要素を出すのではなく、幾何学的位置から直接体積要素を出す。

- そもそも V_i は求まるか？ 安定か？ → OK(今日は省略)
- これで SPH の式はでてくるか？ → OK
- それはなんかいいことがあるか？ → 多分ある

これで SPH の式はでてくるか？

特に問題なくそれらしい式がでてくる。
エネルギー方程式は多分

$$\dot{U}_i = \sum_j p_i V_i V_j (v_i - v_j) \nabla W(x_i - x_j). \quad (4)$$

運動方程式は

$$m_i \dot{v}_i = - \sum_j V_i V_j (p_i + p_j) \nabla W(x_i - x_j). \quad (5)$$

というようになる。 V の時間発展も書ける

$$\dot{V}_i = -V_i \sum_j V_j (v_i - v_j) \nabla W(x_i - x_j). \quad (6)$$

SPHのところのまとめ

- 従来のSPHの問題点である、接触不連続での異常な振舞いは、密度の代わりに圧力を基本的変数にすることで解消できる
- 但し、これは、強い衝撃波や、圧力0の表面で問題。また、非理想気体の扱いが不明
- 非理想気体で、圧力の任意の関数を基本的変数に取る形に拡張した
- さらに、「圧力の任意の関数」ではなくて「定数」を使うSPHを導出した。
- 書いてみると「もっとも自然」な形。なぜ今まで知られてなかったのか？
- これからテスト。

エクサスケールコンピュータに向けて

- 経緯
- 状況
- 今後

経緯

- 2011年春、文部科学省研究振興局情報課:「京」はできたので次のを
- 4-7月: なんとかワーキンググループ、レポート:さらに3個ワーキンググループ作って検討しなさい。
- で、アーキテクチャ・コンパイラ、システムソフトウェア、アプリケーションの3作業部会ができた。
- アーキテクチャ・コンパイラ・システムソフトウェアのほうは SDHPC 検討グループが横すべり
- アーキテクチャは戦略分野等から人を集めて急拠立ち上げ。9-11月に集中的にミーティング、検討。

最終レポートではこんな感じ(1)

2. サイエンスロードマップ「アプリケーションからの要求の概要」(9/9)

ネットワークレイテンシ

タンパクMD	1時間ステップがマイクロ秒程度。同期等がこれより十分短い必要あり
格子QCD	大域縮約をマイクロ秒程度
他の多く	もう少し余裕あり

ネットワークバンド幅

格子QCD	隣接ノードとの通信速度が B/F で 0.01 程度
大域FFT	パイセクションバンド幅で性能が決まる。普通の構成では効率 1% 以下 ハードウェアだけでなく、アルゴリズム面からの検討も重要

メモリ容量・バンド幅

地震波動解析 圧縮性流体計算 有限要素解析の 防災・工学応用	100ペタバイト前後のメモリ、高いメモリバンド幅(B/F 0.5 以上)が必要
タンパクMD 格子QCD	メモリ必要量は極めて小さい。大きなバンド幅(B/F 1以上) が必要
大規模粒子系計算 量子化学計算	バンド幅、メモリ量とも比較的要求小さい

ストレージ容量 速度

DNA	シーケンサデータ処理 50EB, 500TB/s 程度が必要
他の多く	1桁程度下の要求

多様な要求

- ・複数アーキテクチャも視野にいれる必要あり?
- ・メモリ・ネットワークバンド幅については新しいアルゴリズムの研究開発も重要

最終レポートではこんな感じ(2)

4. ロードマップ達成に向けて(アプリ要求性能)

▶サイエンスロードマップに基づいて2018年ごろのアプリケーションに必要な性能を調査

▶演算性能要求・総メモリ容量・演算性能あたりメモリ帯域・ネットワーク要求を調査

要求性能の解析結果

▶演算性能・メモリ容量・メモリ帯域に関する要求

▶演算性能は800PFLOPS~2500PFLOPS

▶メモリ容量は10TB~500PBの幅があり、帯域も1000倍程度の差がある

▶特徴的なもの

▶メモリ容量が少なくても良い: MD・気候・宇宙物理・素粒子物理

▶メモリ帯域が少なくても良い: 量子化学・原子核物理

▶メモリ容量・帯域が両方必要: 構造解析・非圧縮流体解析など

▶ネットワークに対する要求 ※トポロジに依存する部分もあり継続検討が必要

▶レイテンシ・帯域とも強い要求はないが、性能必要なアプリもあった

▶タンパク質の構造解析などでは1us以下での通信が必要な見込み

▶物質化学分野ではBisection帯域が必要なアプリもある

▶1us以下での高速な同期・放送・縮約などが要求されるアプリケーションもあり、専用のハードウェアによるサポートが必要になる可能性もある

▶ストレージに対する要求

▶要求容量に対して他の課題に比べて大きな課題はない

▶性能要求に対しては今後のストレージデバイス技術に応じて構成方法を検討

▶要求性能をトレンドから予想される性能にマッピングした(図1)

▶サイエンスロードマップの達成には、前スライドの4分類とも、技術トレンドから予想される性能よりも高い数値が要求されている

▶ロードマップ達成のためにアプリケーションの特性をさらに詳細化・定量化し、将来のスーパーコンピュータの設計目標を提示していくことが必要である

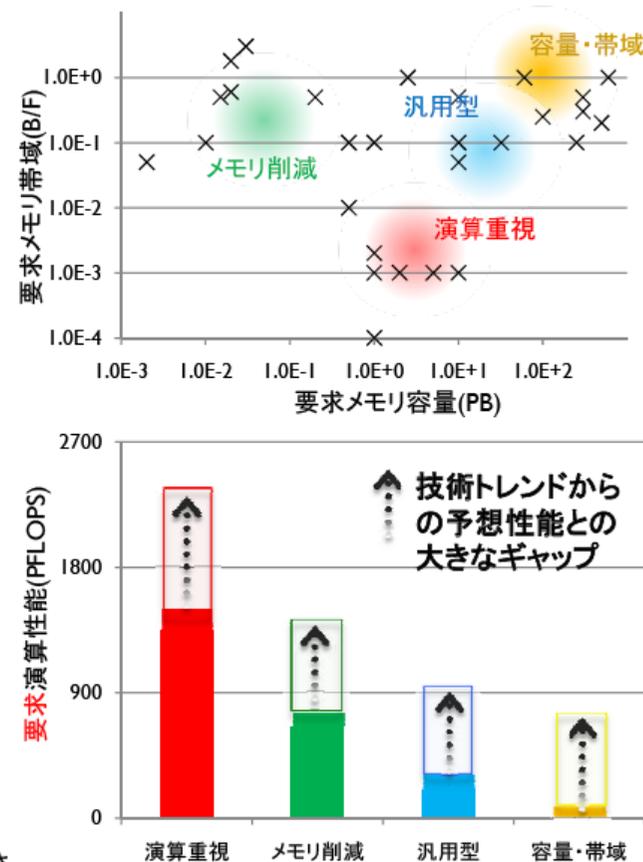


図1. 要求性能と予測性能の相関

上: 各アプリの要求するB/F値とメモリ容量
下: 各分類に対する要求性能値と予想性能

意味するところと今年度の方向

意味:

- 地球シミュレータみたいなベクトルプロセッサを欲しい人はいるが作るのは無理
- 「京」みたいなスカラー機でも性能足りない
- もうちょっと性能あげられるアーキテクチャ2ついれてみた

今年度:

- 4方式の feasibility study (FY12-13)
- ベクタ:東北+NEC、スカラ:東大+富士通、残り:筑波+東工大+日立

注意

- 「汎用」は汎用ではない(「京」でうまく効率がでないアプリケーションはいくらでもある)
- 「容量・帯域」が本当にそのどちらかでも実現できる設計解があるかどうかは自明ではない
- 演算重視は要するに B/F 要求が低いものを対象にする
- 「メモリ削減」はオンチップメモリないし3次元実装でバンド幅を増やすのが本質。小容量になるのは結果

我々のところでは「演算重視」と「メモリ削減」を考える
(=検討するプロセッサアーキテクチャは共通)

演算重視 / アクセラレータ

- メモリ帯域が少なくても良いとなったアプリケーションの大半が量子系 (密行列の直交化や対角化が計算量のほとんどを占める)
- 後は大規模な粒子系
- GPGPU 的なものでいいが、アクセラレータ側に外部メモリはあまりなくてもいい (そちらにメモリあるならホストはなんのため? という問題も)
- GRAPE-DR ベース?

メモリ削減/SoC

- 想定アプリケーション: 小サイズMD、流体、QCD等
- 大サイズ差分法を out-of-core でできるかどうかは要検討
- 外付けメモリがないか、極端に低バンド幅
- 軽量コアを非常に多数集積して、電力当り性能を上げる
- オンチップメモリに対しては 高B/F
- メモリはチップ当り 1GB以下程度?
- ネットワークは 100GB/s 程度?

もうちょっと具体的なイメージ

- 大雑把には: 70-80年代の大規模SIMDマシンを1チップ化。Goodyear MPP, CM, MasPar 等
 - 例: CM-2。 2048 FPU, トータル 512MB メモリ
 - 14nm だと 16384 FPU, 256-512MB メモリくらいが入るかも
 - 考えるべきことは
 - コア内部アーキテクチャ
 - コア間接続
 - チップ間接続
- (今日はこの辺省略)

他の検討点

- 演算器の方式 (単精度重視か倍精度重視か)、数
- 加算・乗算以外の機能。逆数平方根？もうちょっと汎用の関数評価？
- 制御方式 (牧野の好みは少なくともチップ内は完全 SIMD)

Feasibility Study の中身

1. アーキテクチャおよびシステムの設計・検討
2. プログラミング・モデルおよび評価環境の構築
3. 実装検討および電力の推定・評価
4. 計算科学アプリからの検討・評価

牧野が関わっていること: アーキテクチャ設計 (プラン B 的何か)、電力評価のための試作チップ開発

試作する理由

- 類似アーキテクチャでのチップ: 2006年以降やってない。
10年間ギャップがあると予測できない
- (私より) 若い人に回したい、、、

実際の作業

- GRAPE-DR の命令セットを拡張
- GRAPE-DR のソフトウェアシミュレータをいじって上の命令セットが動くようにする
- GRAPE-DR の VHDL コードいじる

スケジュール

- 1月頭: VHDL ソースファーストリリース
- 3月末: VHDL ソースファイナルリリース
- 6月くらい: テープアウト
- 12月くらい: サンプルチップ、基板完成
- 年度末: 電力評価

現在の状況

1月の予定は一応スケジュールミート。3月、、、デバッグが、、、
的状況

現在の状況

1月の予定は一応スケジュールミート。3月、、、デバッグが、、、
的状況

何かスケジュール管理に失敗した気がする。ELSI が、、、

おしまい