

格子QCDで使いやすい計算機は？

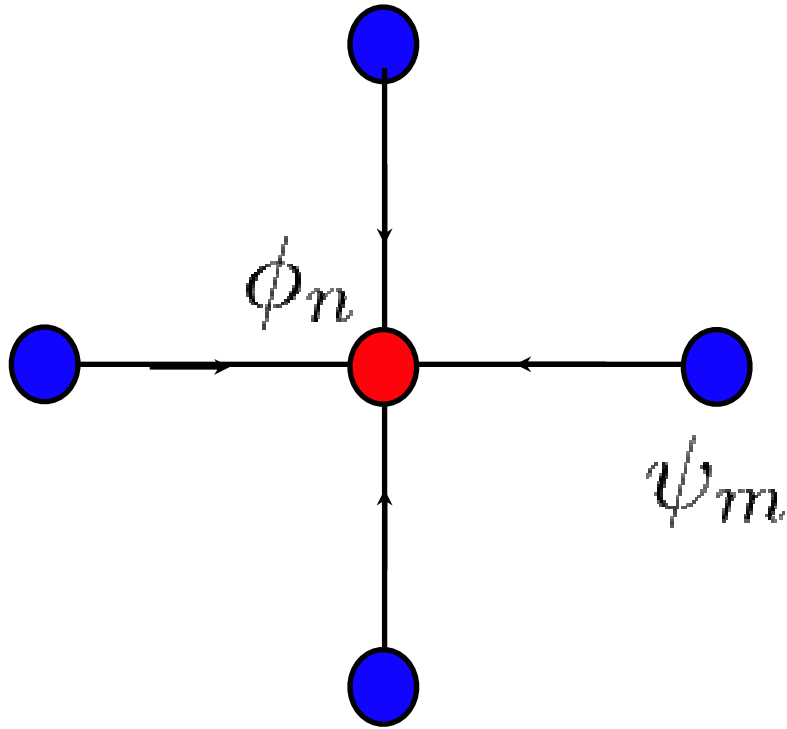
筑波大学 数理物質科学研究科 物理学専攻
理研BNL研究センター
青木 慎也

「計算科学の戦略と次世代スーパーコンピュータ」シンポジウム
2006年4月5日-6日、筑波国際会議場

格子QCD計算の特徴

- 近接相互作用であること
 - 相対理論と因果律から遠隔相互作用はない
 - QCDだけでなく素粒子の理論一般的に成り立つ
 - したがって、比較的、並列計算機に適している
- 演算量が多いが、**データ供給のスピード**も重要
 - キャッシュのみで実行性能を上げるのは難しい
- 4次元の周期的な格子上で理論を定義
 - 並列計算機では境界のデータ転送が必要
 - 隣接転送が主なのでトータスで充分だが、総和計算が速いことが応用上好ましい
 - 通信の速さ(スループット)だけでなく、**起動時間の短さ**も重要

格子QCDの基本演算の構造



ベクトル

$$\phi_n = D_{n,m} \psi_m$$

大規模疎行列

ロード・ストア/演算 = 2~3 [Byte/Flop]

CPUを効率よく動かすにはデータ供給のスピードが鍵

通信と演算

演算量は体積に比例

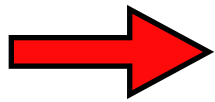
$$\propto N^4$$

通信量は表面積に比例

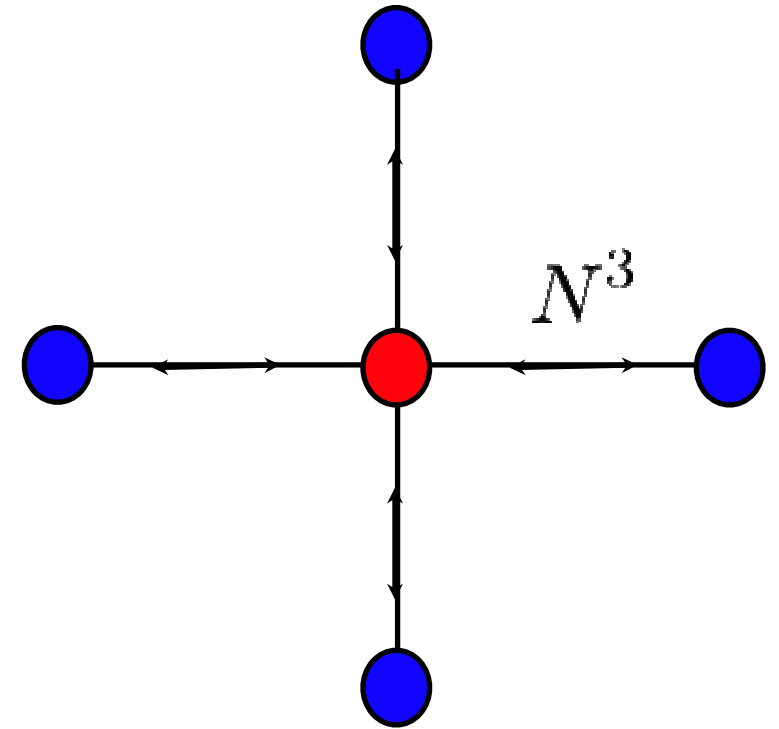
$$\propto N^3$$

N 各PU内の1辺の格子点の数

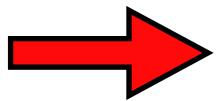
ネットワークの次元に関わらず、リンク当りの通信量は N が同じなら同じ。



ネットワークの次元はさほど問題ではない。



通信 / 演算 $\propto 1/N$



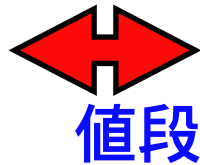
PU数が少ない(N が大きい)方は有利

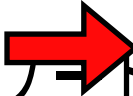
(現在使われている)各システムの特徴

1. ベクター並列機(地球シミュレータ、SX、VPPなど)
 - パイプラインで高いメモリバンド幅を実現
 - その結果、実行効率も高い
 - PU数が少なくていいので通信量は相対的に小
 - データ配列などに工夫が必要(プログラミング上の制約)
 - 値段、電力、場所

- 2. スカラー並列機(SR8000,11000など)
 - 各ノードは共有メモリの複数CPUで高性能
 - 1つのCPUは比較的安価
 - メモリバンド幅が問題(複数のバンクなど)
 - ノード数は小、通信には有利

- 3. 超並列機(CP-PACS,PACS-CS,クラスターなど)
 - 市販の(安価な)CPUで(最)高速のものを使う
 - メモリバンド幅が大問題
 - キャッシュは有効でない
 - 疑似ベクトル化機能(PVP-SW,SSEなど)が不可欠
 - 比較的多数のノード
 - 発熱、サイズ
 - ネットワークの性能



- 4. 超超並列機(QCDOC, BuleGene/L など)
- 市販の安価なCPUでほどほどの速度のものを使う
- 超多数のノード  ノード当りのデータが小
 - キャッシュを有効に使って速度を出す
 - ネットワークにコストをかける必要がある
 - 信頼性が大問題

格子QCDでの計算モデル？

1. ノードの実行性能が出るのが最重要

- CPUのクロック数を上げるだけではだめ。メモリバンド幅の確保が重要。キャッシュ or (疑似)ベクトル？
- データ配列やアクセスパターンなどの制限はない方が良い。

2. 演算と通信のバランスが重要。特にレイテンシ。

3. プログラム体系の構築は必須

- 膨大な既存の資産と新しい資産の蓄積
- どんな計算機にも簡単に移植可能
 - コアの部分の最適化(アセンブラ?)だけで済む
- 管理のための組織が必要では？
- 人材の育成、交流にも重要

パネルディスカッションのテーマ

1. つぎの10年を考えた各分野での発展のキーとなる要素は？

- もちろん計算機の発達も重要であるが、**新しいアルゴリズム**の開発が不可欠

2. 基礎分野と応用分野の関係

- 素粒子論では「応用」は考えにくい。原子核理論、応用数学との連携は重要。

3. 世界情勢と日本の位置

- 単独でリードするのは難しい。アメリカ、ヨーロッパと並び、3大拠点の1つ。競争と協調。
- 人材育成。アジア(中国、韓国、台湾 + オーストラリア)との連携。