ユーザーサイドから見たこれまでの経験と将来像

CP-PACS プロジェクトについて
~計算科学専用計算機開発における物理屋の役割~

金谷 和至

(元筑波大学計算物理学研究センター 現筑波大学)



講演者紹介

名前: 金谷 和至(かなや かずゆき)

現職: 筑波大学 大学院数理物質科学研究科 物理学専攻 教授

略歴: 1955年 広島県生まれ

1977年 広島大学理学部物理学科 卒業

1982年 名古屋大学大学院理学研究科博士課程物理学専攻 修了、理学博士 ドイツのビーレフェルト大学、アーヘン工科大学、スイスのベルン大学での ポスドクを経て、

1988年 筑波大学物理学系 助手

1992年 同 助教授(計算物理学研究センター)

2000年 同 教授(2004年 組織替えにより現職)

現在に至る。

日本物理学会に所属し、専門は素粒子物理学(理論)。特に大規模シミュレーションによる量子色力学の基本的性質や高温・高密度クォーク物質の物性に関する研究を行っている。また、そのための専用計算機開発として、QCDPAX, CP-PACS, PACS-CSなどのプロジェクトに参加。

CP-PACSプロジェクト について

~ 計算科学専用計算機開発における物理屋の役割 ~

筑波大学 数理物質科学研究科 物理学専攻金谷和至

kanaya@ccs.tsukuba.ac.jp

2011/9/10 三好甫先生記念 計算科学シンポジウム

CP-PACS

Computational Physics by Parallel Array Computer System

筑波大学 計算物理学研究センター (現計算科学研究センター (ラ)





- 1991 開発開始
- 1996 稼働開始
- 1996/10 Top500で第1位に
- 2005 shutdown



- 2048 PU + 128 IOU
- 8x17x16 HXB network, 300 MB/sec/link
- 529 GB RAID-5
- 275 kW



http://www.ccs.tsukuba.ac.jp/cppacs/cppacs-j.html



- - 素粒子と格子QCD
 - PAX/PACSシリーズのこと ~ QCDPAX ~
- - 暗黒のミーティング
 - Sliding Window

=> 河辺峻さん

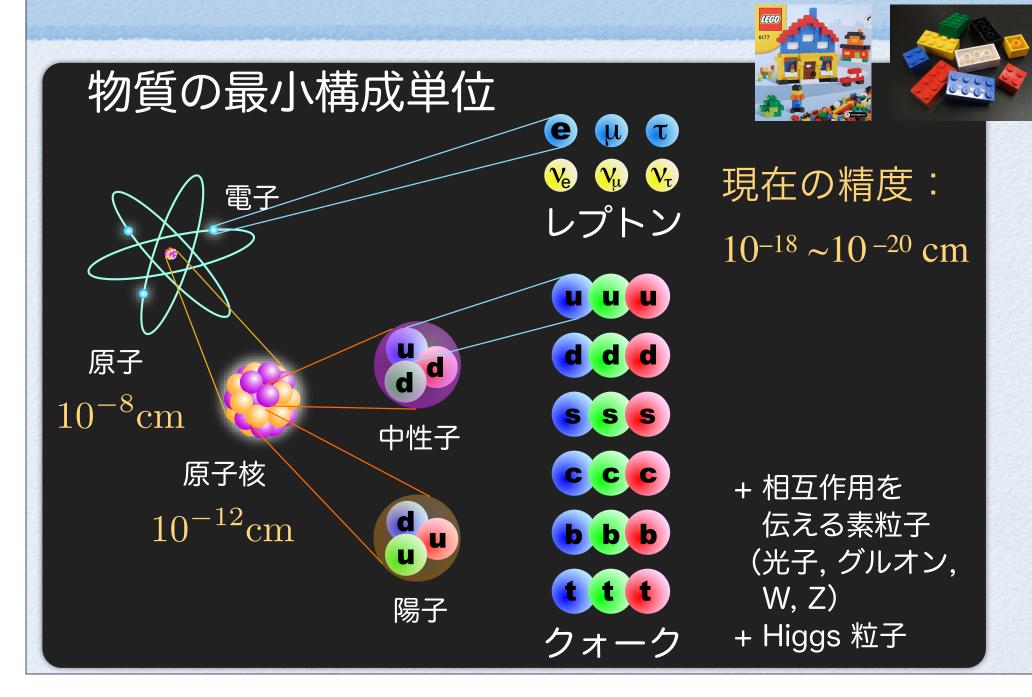
CP-PACSの背景と動機

『場の物理』専用計算機

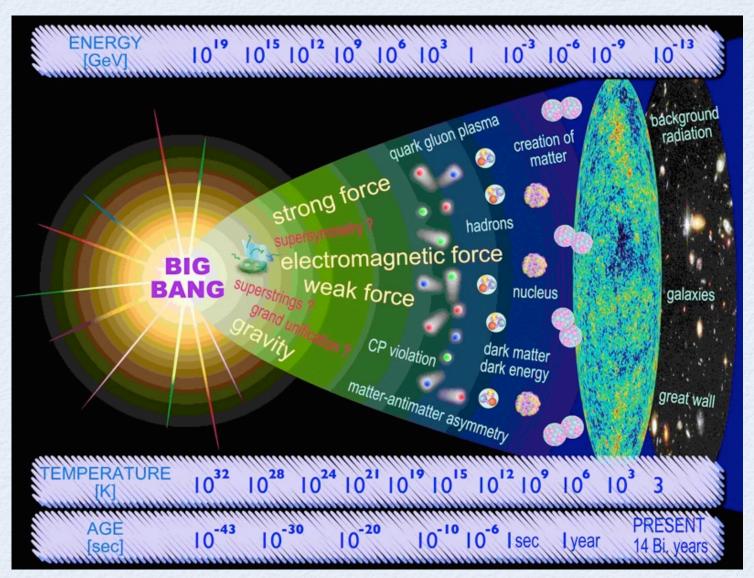
素粒子・宇宙などのシミュレーションが主目的

ターゲットとする計算のタイプを明確にしながら、 物理屋 + 計算機工学屋 + 製造メーカー(日立) の密接な共同作業で開発された。

素粒子 = 物質の最も小さな構成単位



宇宙の謎と物質の起源



謎:

- ·物質>>反物質
- ・元素の組成
- ・暗黒物質,暗黒エネルギー

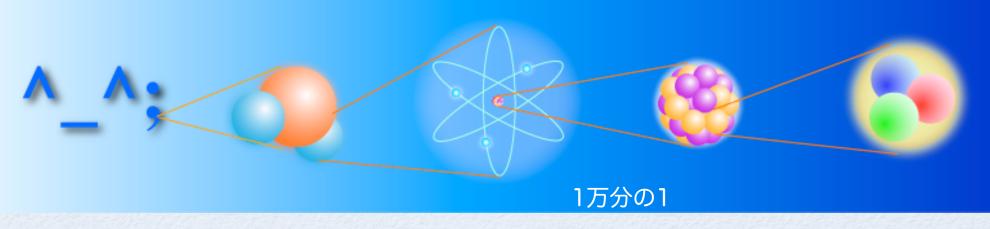
宇宙の構成単位である素粒子の解明が重要。

特に、数µ秒にあった クォーク →核子の相転 移は、現在の宇宙に至 る最後の相転移。

クォーク物質の解明は、

宇宙進化と物質創成の解明に直接繋がっている。

QCD = クォークの基本法則

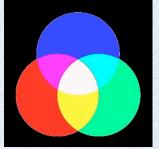


原子核の謎: どうしてあんな小さな所に,反発し合う陽子を固められる? クォークの謎: クォークを核子から取り出せない! 「閉じ込め」

=> 電磁気力よりずっと強い新たな力

=> 「強い力」

「色」



クォーク3個で中性になる => 核子 そこからわずかに漏れ出る強い力で、原子核は固まっている。

「強い力」の基礎理論:Quantum Chromo Dynamics (量子色力学) 強結合の非線形系なので、数値シミュレーションが必要。

Quantum Chromo Dynamics (量子色力学) :場の理論

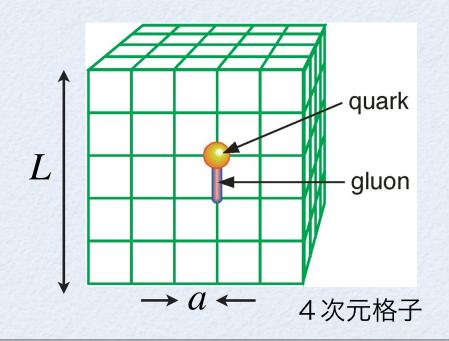
強結合系 + 非線形問題 + 無限個の自由度

連続時空の各点に力学的自由度

計算機にのせるために、まず有限自由度に

K. Wilson (1974)

時空の格子:



L: 格子サイズ

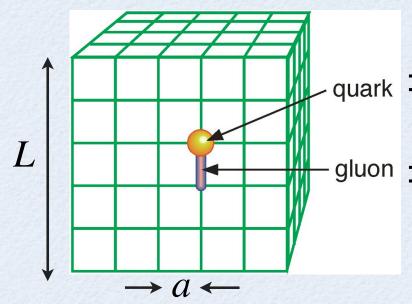
a:格子間隔

格子点の数(格子体積) $V = (L/a)^4$

L,a が有限なら、問題も有限。

最後に、 $L \rightarrow \infty, a \rightarrow 0$

連続極限外挿



quark:3x4成分複素ベクトル

V x quarkの種類

·gluon: 3x3複素行列

 $V \times 4$

$$q_x^{a,s\,(f)}$$

$$U_{x,\mu}^{a,b}$$

<= Monte Carlo 法で評価

$$Z = \int \cdots \int \Pi dq \, \Pi dU \, e^{-S[q,U]}$$

$$\langle \mathcal{O} \rangle = \frac{1}{Z} \int \cdots \int \Pi dq \, \Pi dU \, \mathcal{O}[q, U] \, e^{-S[q, U]}$$

$$\langle \mathcal{O} \rangle = \frac{1}{Z} \int \cdots \int \Pi dq \, \Pi dU \, \mathcal{O}[q, U] \, e^{-S[q, U]}$$

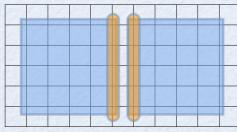
- \triangleright e^{-S} の重みで配位[q,U]を生成(Monte Carlo法)
- ▶ 主要な計算:高次元線形連立方程式の求解 <= qの扱いのトリック</p>

D[U] x = b D[U] : 12Vx12V sparse complex matrix

CG等の再帰的解法 \Rightarrow 行列とベクトルの積 D[U]q の計算

演算:メモリアクセス ~ 1:1

- ▶ 局所的でスケーラブルな問題。ベクトル化、並列化に適している。
- ▶ 主要な通信:PU境界部分に関する隣接通信



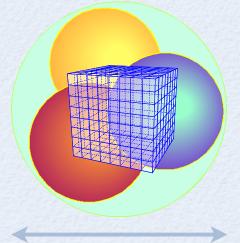
物理格子をPUにマップ

- 膨大な計算が必要(4次元系、3桁以上のスケール差、フェルミオンの数値計算、など)
- ▶ クエンチ近似 (重みの計算でクォークを無視・グルオンのみを取り入れた近似) 大胆な近似だが、閉じ込めなどの重要な性質を保つ。計算量は数百分の 1

1st attempts ('81) 44~84

Creutz-Jacobs-Rebbi Creutz, Wilson Hamber-Parisi Weingarten

> $L \sim 0.8 \text{ fm}$ $a \sim 0.1 \text{ fm}$





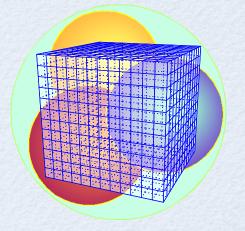
 $\sim 2 \text{ fm}$ (1 fm = 10^{-15} m)

VAX ~ 1 MFlops

1980年代 ベクトル型スパコン

CRAY-XMP, YMP CYBER205 VP-100, 200 S810 SX-1, 2

> $L \sim 1.2 \text{ fm}$ $a \sim 0.1 \text{ fm}$



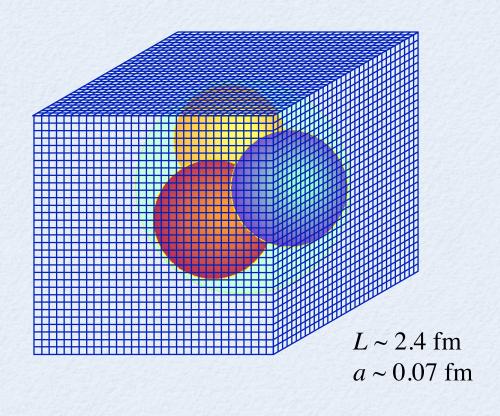


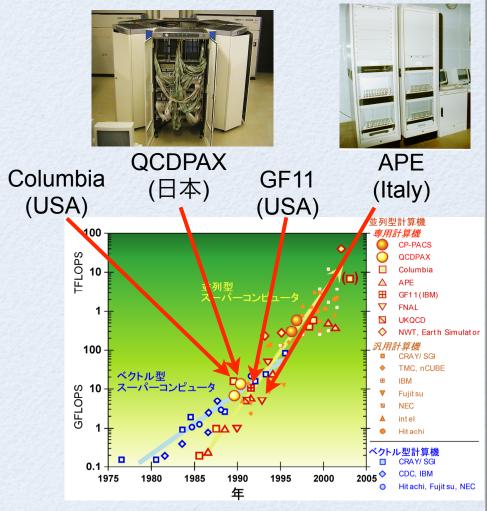


HITAC S-810/20

~ 1-10 GFlops

1990年代: QCD専用計算機の登場





第1世代QCD専用計算機では連続極限外挿に必要な系統的研究に至らず、「クエンチ近似はどれだけ良いのか、悪いのか?」も不明だった。

PACS / PAX

Processor Array for Continuum Simulation / Processor Array eXperiment

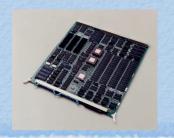
- ♀ 星野力+川合敏雄
- 望 連続体系シミュレーション <= 2次元最隣接結合 筑波大学で一連の並列計算機を開発していた

Year	Machines	# PU	Performance	Memory
1978	PACS-9	9	7 KFLOPS	
1980	PAX-32	32	0.5 MFLOPS	0.5 MB
1983	PAX-128	128	4 MFLOPS	5 MB
1984	PAX-32J	32	3 MFLOPS	4 MB

アプリケーション 原子炉 O(3)スピン, 原子炉 O(3)スピン, U(1)ゲージ SU(3)ゲージ



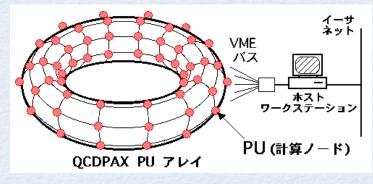
QCDPAX



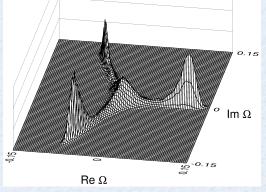
- ❷ 岩崎洋一、吉江友照、金谷和至、星野力、小柳義夫、白川友則、一井信吾
- ♀ 2次元最隣接トーラス結合
- ♀ 1989~1999年稼働 => 格子QCD
- 9 480 PU (24x20), 14 GFlops, 3 GB
- 9 432 PU (24x18), 12.4 GFlops, 2.6 GB

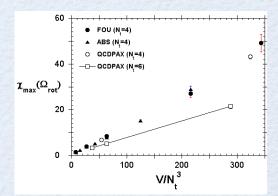


立花隆「電脳進化論」朝日新聞社(1993)より



- · FPUとメモリをgate arrayでコントロール
- ・中間言語qfaで最適化
- ・製造:アンリツ





Y. Iwasaki et al., Phys.Rev. D (1991)

QCDの有限温度相転移、ハドロン質量などを研究。

PACS / PAX COMPUTERS

Year	Machines	# PU	Performance	Memory	アプリケーション
1978	PACS-9	9	7 KFLOPS		原子炉
1980	PAX-32	32	0.5 MFLOPS	0.5 MB	O(3)スピン, 原子炉
1983	PAX-128	128	4 MFLOPS	5 MB	O(3)スピン, U(1)ゲージ
1984	PAX-32J	32	3 MFLOPS	4 MB	SU(3)ゲージ
1989	QCDPAX	480	14 GFLOPS	3 GB	QCD
1996	CP-PACS	2048	614 GFLOPS	128 GB	QCD, 宇宙, 物質
2006	PACS-CS	2560	14 TFLOPS	5 TB	QCD, 宇宙, 物質, 生命, 気象

CP-PACSの開発

専用並列計算機による「場の物理」の研究

(研究課題番号 08NP0101)

平成4年度~8年度 科学研究費補助金(創成的基礎研究費) 研究成果報告書

平成9年8日

研究代表者 岩崎洋一 (筑波大学物理学系教授)



http://www.ccs.tsukuba.ac.jp/cppacs/file/report97.pdf

http://www.ccs.tsukuba.ac.jp/cppacs/kinenshi/

物理サイドからの要求

目的

● 素粒子物理学:ハドロンスペクトラムのクエンチ計算を完成 $L \approx 3 \text{ fm}, a \approx 0.1 – 0.05 \text{ fm}$ で高統計simulation

=> 連続極限とカイラル外挿を行う、系統的研究

♀ 宇宙物理学: 6次元輻射輸送シミュレーション

❷ 物性物理学: 第一原理法による並列シミュレーション

望 理論ピーク ≥ 400 GFlops [614 GFlops]



全記憶 ≥ 80 GB [128 GB]

● 一時記憶 ≥ 1000 GB [529 GB]

外部記憶 ≥ 50 TB [21 TB]

プロジェクトチーム

星野 力 (筑波大学 構造工学系) 育男(筑波大学 電子・情報工学系) 【研究課題】 白川 友紀(筑波大学 構造工学系) 専用並列計算機による 「場の物理」の研究 和田 耕一(筑波大学 電子・情報工学系) 計34名 安永 守利(筑波大学 電子・情報工学系) 【小研究課題】 朴 泰祐 (筑波大学 電子・情報工学系) 「場の物理」専用並列計算機 システムの研究 渡瀬 芳行(高エネルギー物理学研究所) 〈研究班代表者〉 (東京大学 先端科学技術センター) 中澤 喜三郎 義行 (筑波大学 電子・情報工学系) (電気通信大学 情報工学科) 一井 信吾(東京大学 大型計算機センター) 他14名 義夫(東京大学 理学系研究科) 【研究リーダー】 森 正武 (東京大学 工学部) 岩崎 洋一 -(筑波大学 川合 敏雄(慶応大学 理工学部) 物理学系) 修一(筑波大学 電子・情報工学系) (筑波大学 物理学系) 福来 正孝(東京大学 宇宙線研究所) 大川 正典(高エネルギー物理学研究所) 青木 慎也(筑波大学 物理学系) 金谷 和至(筑波大学 物理学系) 【小研究課題】 「場の物理」に於ける 吉江 友照(筑波大学 物理学系) 諸問題の研究 石塚 成人(筑波大学 物理学系) 〈研究班代表者〉 岩崎 洋一 卓史(京都大学 基礎物理学研究所) (筑波大学 観山 正見(国立天文台) 物理学系) 他18名 雅之(筑波大学 物理学系) 中本 泰史(筑波大学 物理学系) 今田 正俊(東京大学 物性研究所) 精二(大阪大学 理学部宇宙地球科学科) (高エネルギー物理学研究所) 幸児(北海道大学 大学院理学研究科) (筑波大学 物理学系) 郡司 茂樹(筑波大学 物理学系) 中村 文隆(新潟大学 教育学部)

計算機工学: 15名 (ハード+ソフト+システム)

物理:19名

(素粒子+宇宙+物性)

+ 日立の皆さん

(ハード+ソフト+SE+営業+ ...)



写真 1 2 CP-PACS 稼働終了式 2 0 0 5 年 9 月

前列左から:渡瀬芳行、川合敏夫、星野力、宇川彰、岩崎洋一、中澤喜三郎、小林二三幸、佐久間嘉一郎、小平光彦、能沢健

中前列左から:富田雅、澤本英雄、河辺峻、小柳義夫、吉江友照、和田耕一、安永守利、中村宏、朴泰祐、金谷和至

中後列左から:浅野朋広、瀧田忠郎、高橋大介、荻山得哉、安崎篤朗、谷口裕介、三好一義、石川健一、白石賢二、橋本耕平、宮脇孝

後列左から:工藤紀之、谷嶋則幸、藤田不二男、佐藤三久、平下博之、原川竹氏、田中博、篠原敏一、伊藤洋志、板倉憲一

物理+計算機工学+メーカー

頻繁にミーティング 報告と濃密な議論

それに向けて連日夜中 までテスト・検討

研究員会議									
平成 4 年度	4/10	4/18	5/9	5/23	6/8	6/20	7/13	7/22	9/5
	10/1	10/24	11/7	12/5	1/9	1/21	2/6	2/18	3/6
	3/22								
平成5年度	4/3	4/22	5/8	5/20	6/5	6/17	7/3	7/15	8/5
	8/26	9/16	10/1	10/22	11/6	11/18	12/4	12/16	1/17
	2/5	2/17	3/5	3/17					
平成6年度	4/14	5/7	5/24	6/4	6/16	7/2	7/14	9/3	9/16
	10/15	11/5	11/17	12/3	12/15	1/19	2/4	2/16	3/3
	3/20								
平成7年度	4/20	5/18	6/3	6/15	7/1	9/2	9/21	10/7	10/19
	11/9	11/22	12/9	12/26	1/18	2/3	2/16	3/9	3/21
平成8年度	4/19	5/11	5/24	6/15	7/6	7/22	8/23	9/7	9/20
	10/12	11/2	12/7	12/26	1/11	2/1	3/1		
ハードウェア WG									
平成 4 年度	7/9	7/23	8/6	9/5	9/19	10/5	10/27	11/30	12/22
	1/14	1/28	3/1						
平成 5 年度	4/2	5/7	6/17	8/4	9/24	10/28	12/6	1/28	2/28
平成 6 年度	4/11	5/12	6/6	6/17					
ソフトウェア WG									
平成 4 年度	11/6	12/3	1/21	2/23					
平成 5 年度	4/28	5/31	7/5	8/4	8/31	9/16	10/22	12/16	2/7
	3/10								
平成7年度	4/14	5/26	7/1						
ハードウェア									
ソフトウエア合同 WG									
平成 6 年度	7/26	8/30	10/14	11/24	12/27	1/31			
平成7年度	4/20	5/22	6/20	7/27	8/30	9/28	10/26	11/21	12/27
	1/26								
平成8年度	5/29	6/28	7/19	8/23	10/18	11/22	12/20	1/24	2/20
コンパイラーサブ WG									
平成6年度	11/4	12/2	$^{2/3}$						
平成7年度	4/7	5/26	7/21	9/19	11/8	12/25	1/19		
平成8年度	4/5	8/7	10/4	12/13	1/17	3/11			
ベンチマークサブ WG									
平成7年度	1/11								
平成 8 年度	6/7	8/7	11/11						
	表 7: 研究員会議, WG 開催日程								

20

暗黒のミーティング

1991/8/10

「CPUは速くても、メモリアクセスがボトルネック。 キャッシュprefetchではキャッシュミスを排除しきれず QCDの主要計算でも、実効性能が出ない。」

コア部分の計算でも、ピークの12%しか出ない。

=> これでは物理の目標は達成できない! 「暗黒の暑気払い」

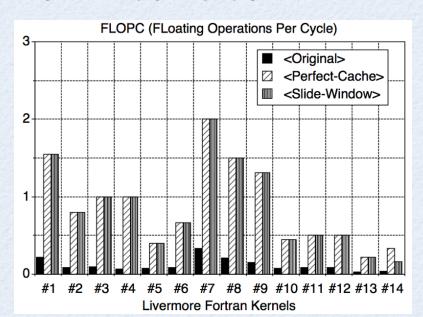
- ベクトル計算機と汎用スカラーCPUとの違い
- キャッシュとレジスターの違い

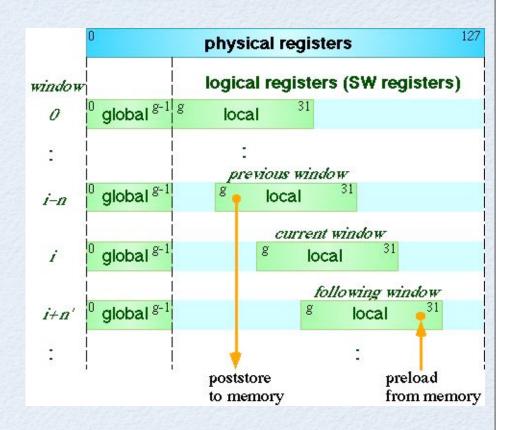


PVP-SW (Pseudo Vector Processor based on Slide Windowed registers)

SLIDING WINDOW

- ♀ 物理レジスターはもっと増やせる。
- ♀ 3命令の追加
 - preload
 - poststore
 - window slide





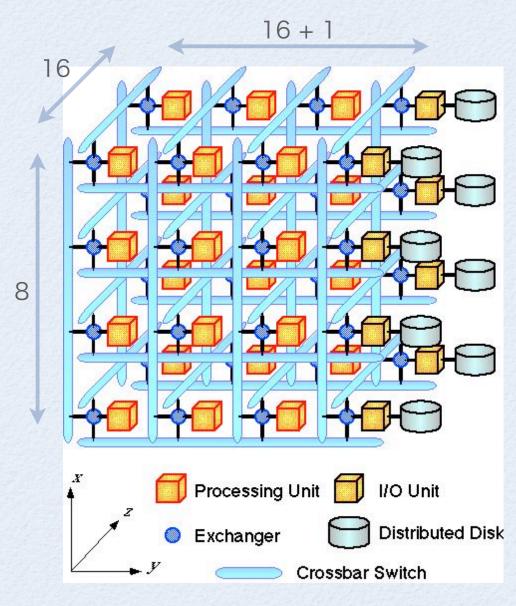
大学側から提案。

実効性能へのbreakthrough!

ユーザには新しいパズル。

=> コンパイラでどこまでやれる?

3D-HYPER CROSSBAR



- 9 2048 PU + 128 IOU
- 8x17x16 HXB network,300 MB/sec/link
- **9** 529 GB RAID-5
- 275 kW
- 参 物理の要求:3D以上の隣接
- 星野+川合のPACS/PAXを拡張
- ❷ 日立から提案
- PACS-CSに継承
- block-stride転送をハードで

QCDプログラムによる実測性能



614.6 GFlops (peak)

2048 PU + 128 IOU

QCD HB update: 246 GFlops (40%)

qQCD OR update: 280 GFlops (46%)

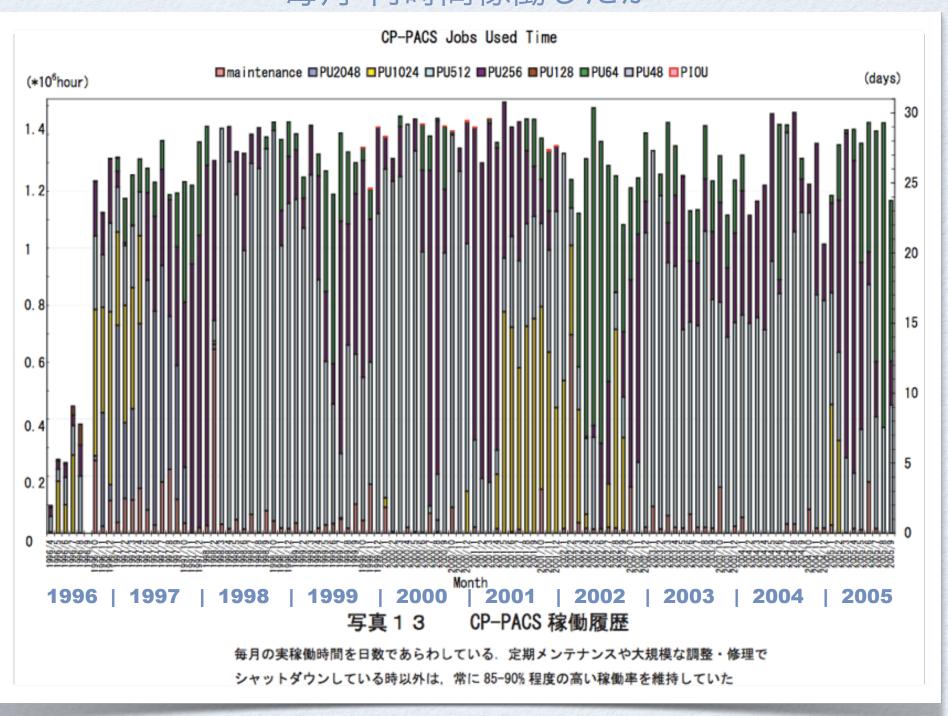
Wilson quark MR solver: 325 GFlops (53%)

カーネルのクォーク行列積はアセンブラで最適化。60%以上を達成。

格子	$32^3 \times 56$	$40^{3} \times 70$	$48^{3} \times 84$	$64^{3} \times 112$
演算 (MFLOPS,%)	191 (79%)	191 (81%)	191 (80%)	192 (82%)
隣接 PU 間通信 (MB/s,%)	205~(18%)	214~(16%)	$221\ (17\%)$	227~(15%)
global sum (%)	(3%)	(3%)	(3%)	(3%)
total (MFLOPS)	152	154	152	157

Wilson クォーク solver プログラム各部の PU あたりの性能と, 実行時間に占める割合.

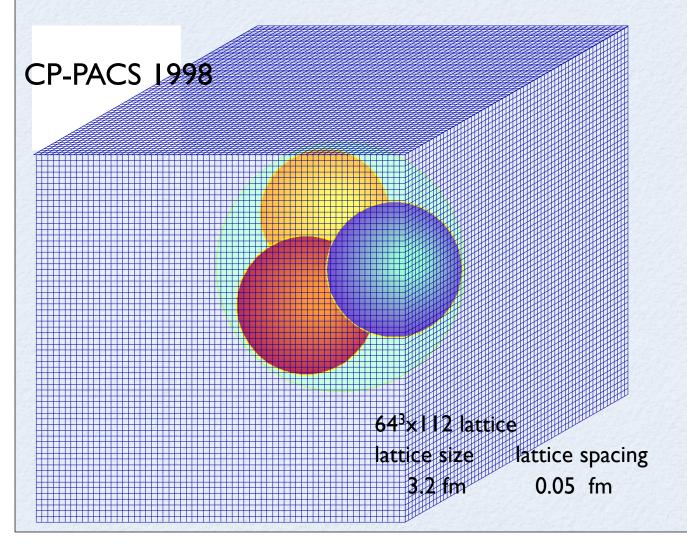
毎月 何時間稼働したか





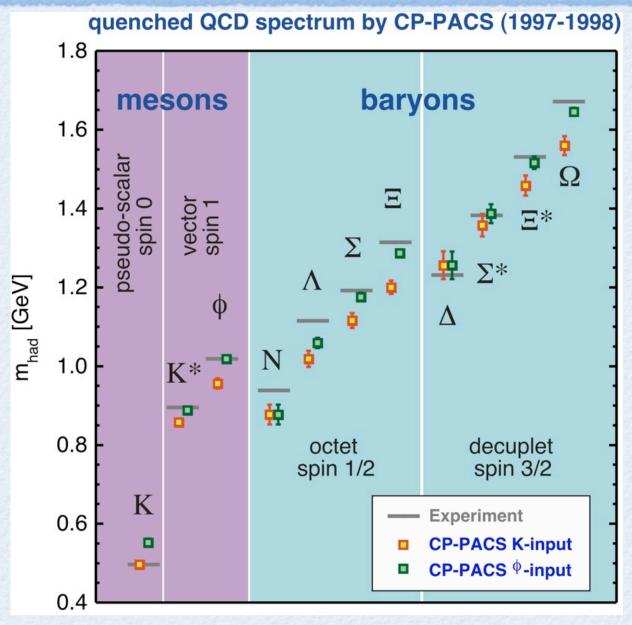
物理の成果

 Θ ハドロン スペクトラムのクエンチ計算を完成 $L \approx 3 \text{ fm}, \ a \approx 0.1, 0.07, 0.05 \text{ fm}$ で高統計simulation => 連続極限



● 連続極限外挿と クォーク質量の 外挿を、系統誤 差を制御した形 で初めて実行

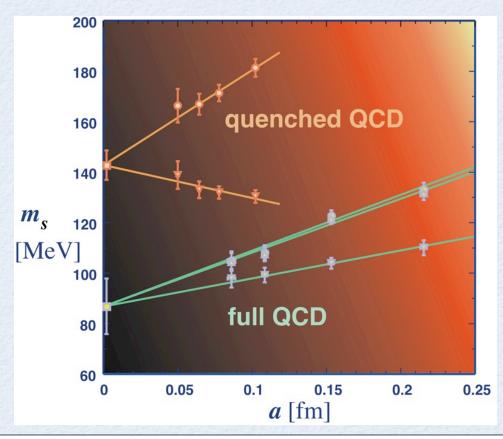
物理の成果



- クエンチ近似は、10% の精度で正しい。
- 回時に、10%のずれの 存在も確立
 - => クエンチ近似の限界
- 格子QCD誕生以来の懸 案を解決。

物理の成果+

- ▶ クエンチ近似 (重みの計算でクォークを無視・グルオンのみを取り入れた近似)
- ▶ Nf=2 フルQCD (u, d クォークの効果を正しく取り入れた計算)
 数百倍の計算量のため、当初はプロジェクトの目標に含まれていなかったが、理論的
 進展を取り入れて、連続極限とカイラル外挿を行う世界初の系統的研究を実現。



- 様々な物理量で、動的な クォークが重要であるこ とを実証。

物理の成果 (その後)

▶ Nf=2+1 フルQCD (u, d, s クォークの効果を正しく取り入れた計算)
連続極限とカイラル外挿を行う最初の系統的研究



CP-PACSプロジェクトから学んだこと

CP-PACSの開発では、多くの要素が最適の形で組み合わさった

・タイミング

並列計算機の台頭 => 計算機側にも動機・メリット 科学研究大型予算 (新プロ)の出現

・計算機の規模

1 大学でやれる最大+の予算規模 <= 文部省と筑波大の強いサポート <= 岩崎さんの熱意と粘り強い交渉

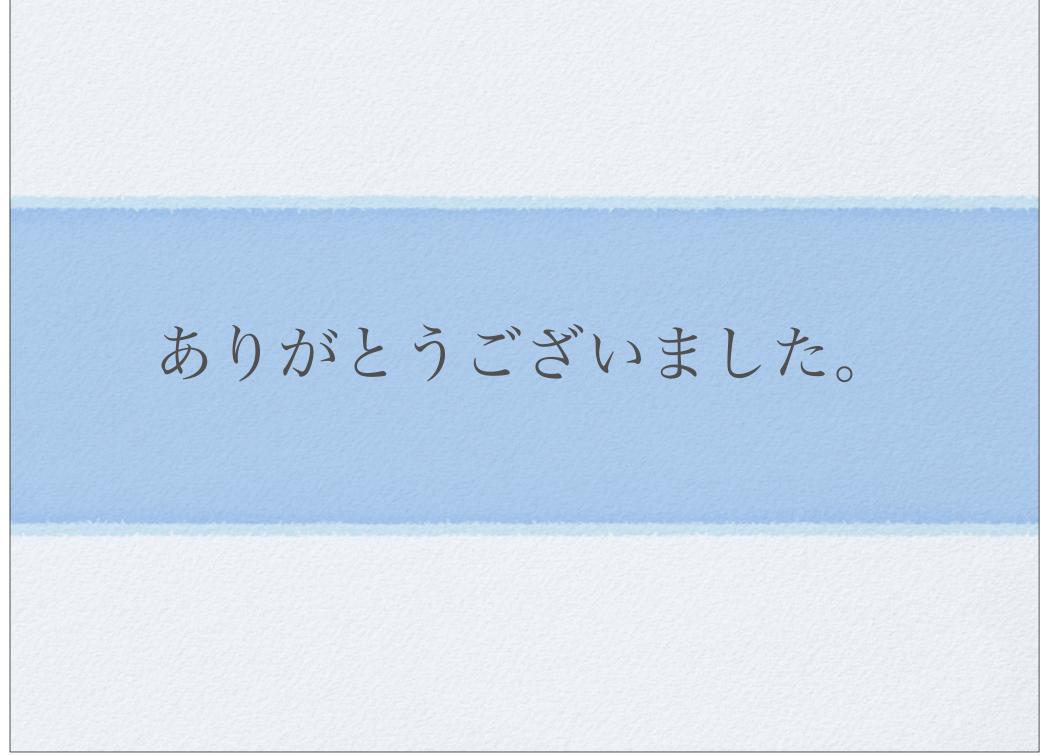
・チーム

物理+計算機工学+メーカーの密接な連携

<= 筑波大・研究学園都市の学際連携環境

<= 明確な目標

❷ 成果と直結した具体的問題における 実効性能の追求

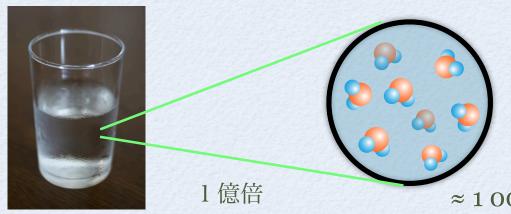


素粒子 = 物質の最も小さな構成単位

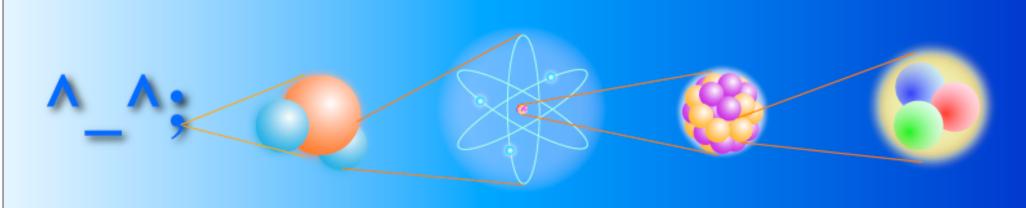
物質は何処まで分解できる?







≈ 1 000 000 000 000 000 000 000 000個



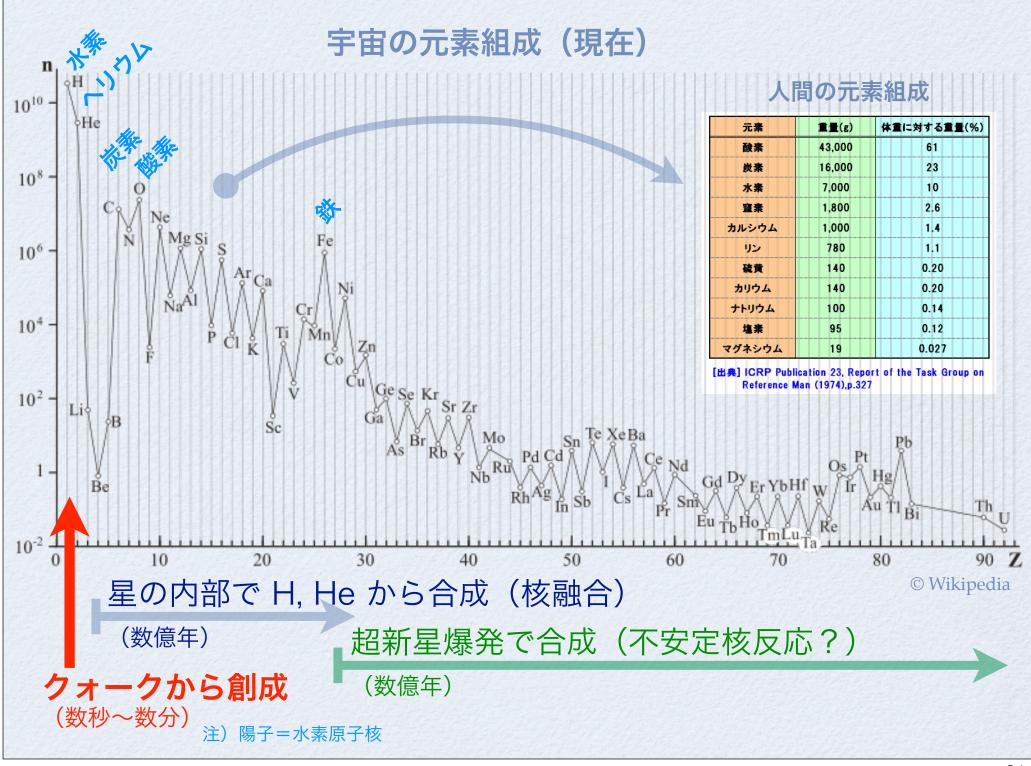
分子

=酸素+水素

原子

=原子核+電子 =陽子+中性子 =クォーク

原子核



素粒子の大規模シミュレーションと専用計算機開発

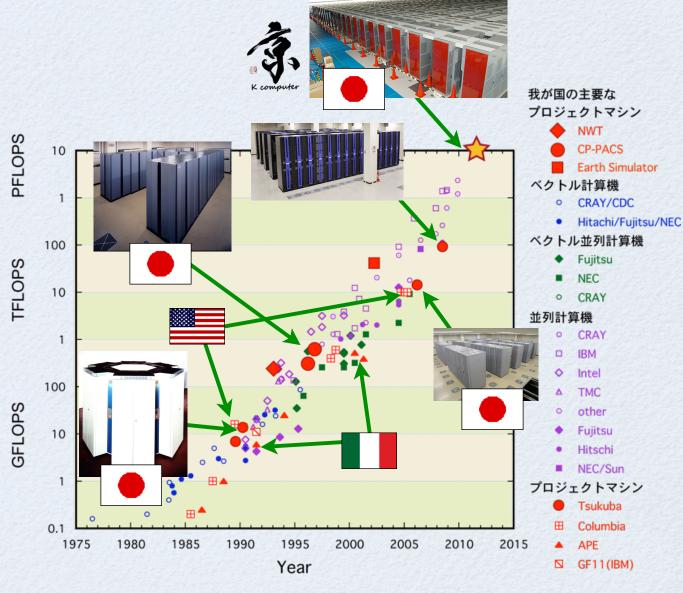
CP-PACS (1996)

筑波大学

1996年:世界最高速

QCDPAX (1990)

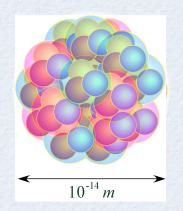
筑波大学 日本で最初の 素粒子理論専用コンピュータ





筑波大学計算科学研究センター http://www.ccs.tsukuba.ac.jp

クォークの理論から原子核や核力を導出



原子核 ← 陽子、中性子が、核力により強く結合

核力:遠方では、湯川理論

近距離で、ハードコア

経験則のみ。 精密な形は不明。

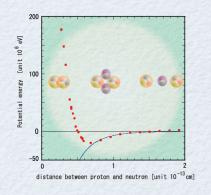
原子核も核力も、クォークから導かれるべき。

下の階層から上の階層の基本法則を導くのは、非常に難しい問題。

☞ 青木(筑波大)ら (2007):

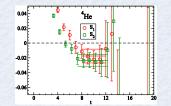
クォークとグルオンから核力を直接導くことに、初めて成功。 湯川力とハードコアを再現。

Nature 2007 research highlights に、iPS細胞と並んで、世界的にインパクトを与えた代表的研究として選出された。



宇川(筑波大)ら (2010):

He原子核が安定であることを、クォークと グルオンから初めて示す。



これらの発展や、クォーク・グルオン・プラズマの大規模 シミュレーションを「京」で計画中。

