

# 理論 (計算機シミュレーション)

牧野淳一郎

国立天文台理論研究部/天文シミュレーションプロジェクト

# 概要

1. シミュレーションの長期計画 ( ? )
2. GRAPE-DR
3. 次世代スーパーコンピュータープロジェクト

# シミュレーションの長期計画？

これまで:

- 速い計算機を買ってくる (あるいはどこかにあるのを  
使う)
- なにを対象にするか: 研究者の「自由」
- 原理的にはあらゆる現象が対象
- 現実的には
  - 計算できるもの
  - 新しい観測

「計算機を速くする」という以上の長期計画にはあまり意味がない？

GRAPE は？

# 理論とシミュレーション

基本的にはどちらも

- 基礎方程式で現象を記述
- 基礎方程式の解 = 現象の理解

質的な違いがあるわけではない？

現実的な違い: 基礎方程式の解き方

- 理論: (理想的には) 解析解、パラメータ化された一般解  
求まるとは限らない
- シミュレーション: 個別の解  
原理的には方程式があれば答はあるはず

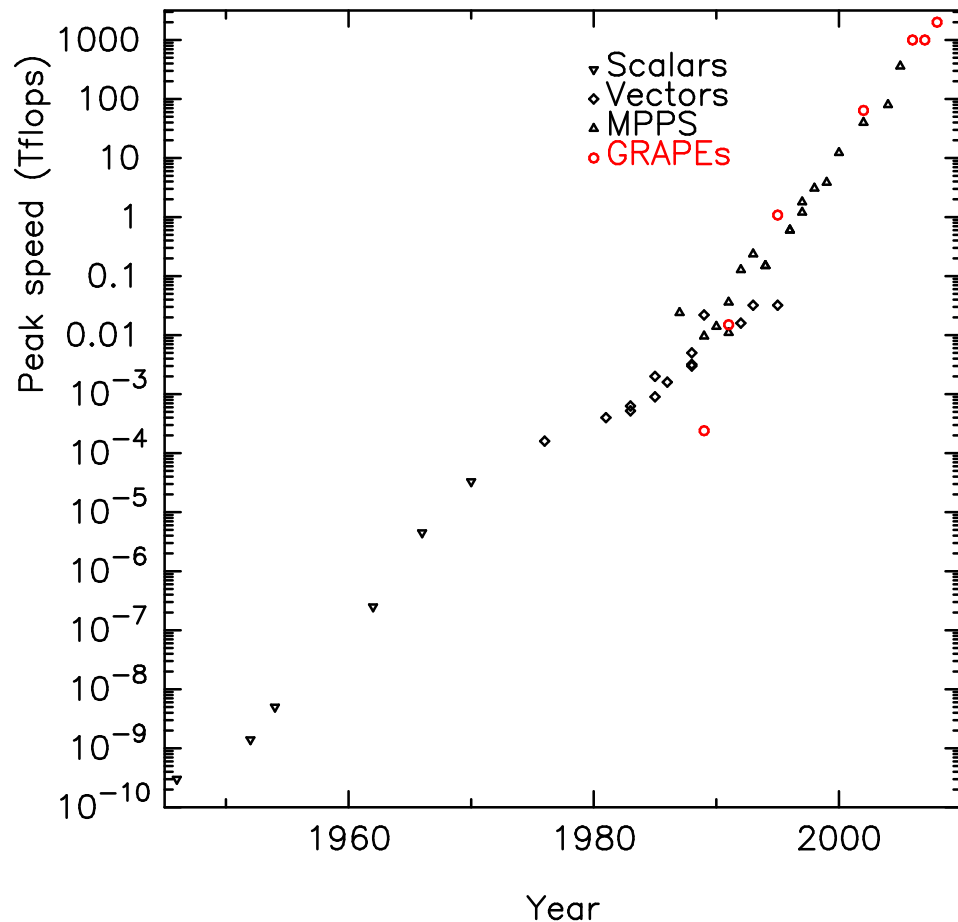
# 理論とシミュレーション(2)

「原理的には」解ける = 現実的には解けるとは限らない  
解けない理由: 計算機の数、速度、記憶容量

速度が速く、容量が大きくなればシミュレーションでできることは広がる。

「なにもしなくても」勝手に望遠鏡が大きくなるようなもの

# 計算機の速度の進歩



- 過去 60 年間、10 年で 100 倍
- 進歩の主な理由: デバイスの速度、集積度の向上
- まだ 15 年くらいは続く?

# 速くなった御利益は？

$10^{15}$  倍計算機が速くなったからといって  $10^{15}$  倍論文が書けるわけではない。

- 今まで扱えなかった問題を扱う
- 怪しい近似を第一原理からの計算に置き換える

# 星団の力学進化の例

- 1950年代以前: 星団の構造の進化については殆ど理論的な理解はなかった。
- 1960年代: 球対称モンテカルロ、流体近似熱力学的進化でコア・コラプスが起こる
- 1970年代: コア・コラプスの「理論的」理解。重力熱力学。
- 1980年代: 「コア・コラプス後」のシミュレーション(流体近似等)、重力熱力学的振動。
- 1990年代: 直接多体計算での「コア・コラプス後」シミュレーション、恒星進化との統合モデル、暴走的合体
- 2000年代: 星団形成からのシミュレーション？



# 星団シミュレーションの方法

- 流体近似: 球対称、速度分布等方、等質量粒子
- 軌道平均フォッカープランク: 球対称、90年代以降は  $f(E, J)$  も。
- モンテカルロ: フォッカープランク方程式をランジュバン方程式で近似しなおす。
- 直接多体計算: 理想化された系なら「近似なし」
- 星団形成から: 流体、輻射計算、、、

計算量は下にいくほど多い。

# 他の分野

- 数値相対論
- 銀河形成
- 恒星進化、超新星爆発 (GRB)
- 惑星形成、星形成

殆どの分野で、

- 非常に粗い近似
- 未解決の問題

がある。(輻射、磁場、その他)

球対称の恒星進化計算は例外的に「良く理解されている」

# 銀河形成

構造の形成、進化と恒星進化のカップルしたモデル: 1990年代初め、 $N$ 体+SPH

- 当初  $10^4$  粒子くらい: ガス粒子 1 つが  $10^7$  太陽質量
- 現在  $10^6$  粒子くらい: ガス粒子 1 つが  $10^5$  太陽質量

現状の問題点:

- 色々ヒューリスティックなモデルをいれて微調整すると銀河のようなものが作れなくもない。
- 分解能 (計算精度) の問題とモデルの問題を分離できない  
= 何が正しいのかよくわからない

粒子数 (分解能) を上げることができれば解決する問題もある

# 計算機の進歩の方向

歴史的には:

- スカラー → ベクトル → 分散メモリ並列  
→ 分散並列+チップ内並列
- 大体 10 年毎にアーキテクチャが大きく変わる
- 新しいアーキテクチャを有効に使うには  
アルゴリズムから見直す必要あり
- 国内の天文研究者の多くはまだ分散メモリ並列に対応始めた段階
- アメリカでは大規模プロジェクト化  
(FLASH, CACTUS)

# シミュレーションの長期計画？

これまで:

- 速い計算機を買ってくる (あるいはどこかにあるのを  
使う)
- なにを対象にするか: 研究者の「自由」

「計算機を速くする」という以上の長期計画にはあまり意味がない？

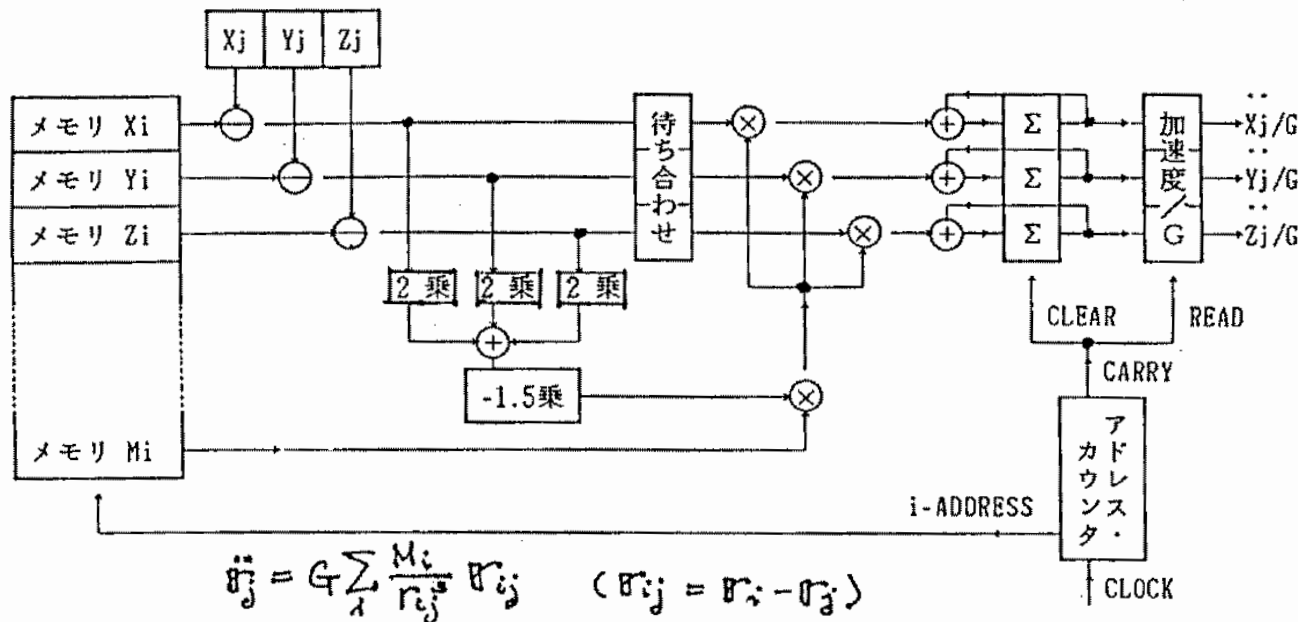
- GRAPE は？
- 今後も計算機は速くなるか？ (次世代スーパーコンピュータ)

# GRAPE プロジェクト

- 重力多体問題専用計算機
- 星団の力学進化のシミュレーションが当初の目標
- 他にも色々できた
  - 惑星形成
  - 星形成 (SPH)
  - 銀河形成
  - 宇宙論
- 速度が必要なところをハードウェアが面倒見るのでプログラム開発が楽
- 同じ価格なら汎用機の 100-1000 倍の速度

# 近田提案

1988年、天文・天体物理夏の学校



+, -, ×, 2乗は1 operation, -1.5乗は多項式近似でやるとして10operation 位に相当する。総計24operation。

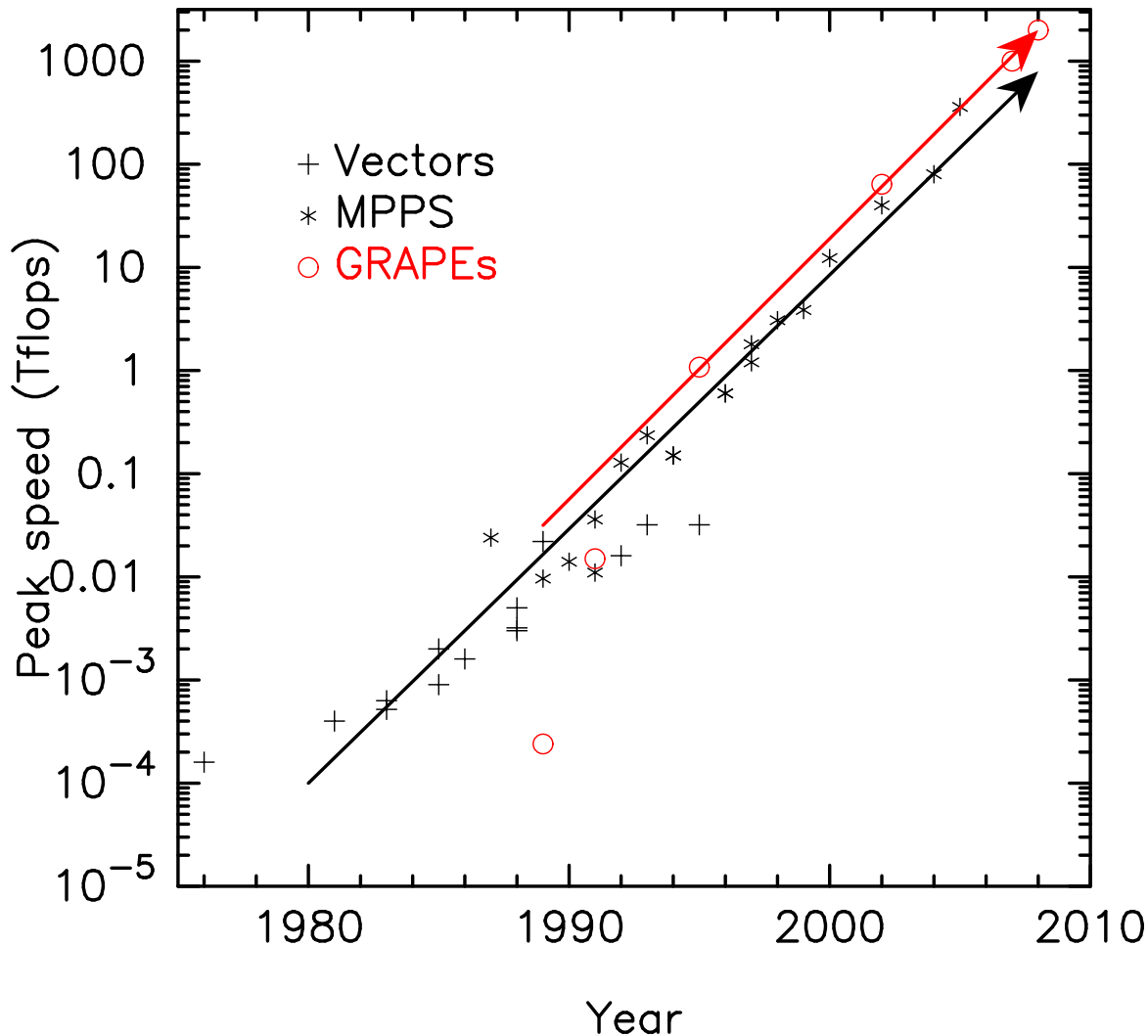
各operationの後にはレジスタがあって、全体がpipelineになっているものとする。

「待ち合わせ」は2乗してMと掛け算する間の時間ズレを補正するためのFIFO (First-In First-Out memory)。

「Σ」は足し込み用のレジスタ。N回足した後結果を右のレジスタに転送する。

図2. N体問題のj-体に働く重力加速度を計算する回路の概念図。

# ピーク性能の進歩



GRAPE-4 以  
降、完成した時  
点で世界最高速  
を実現



# GRAPE-DR 計画

「基本的には」次期 GRAPE 計画

- 2004年度から5年計画
- 目標ピーク性能: 2 Petaflops
- チップ数 4096
- 単体チップ性能 0.5Tflops

と、これだけなら今までの GRAPE が速くなっただけ。

**実際のアーキテクチャ: 今までの GRAPE とは全然違う**

- なぜ違うか
- それで何ができるか

# 「次期 GRAPE」の実際的な問題

天文だけ (しかも理論だけ (しかも  $N$  体だけ)) でもらうにはチップ開発コストが大き過ぎる

## チップ開発費

1990	1 $\mu$ m	1500万円
1997	0.25 $\mu$ m	1億円
2004	90nm	3億円以上?
2006	65nm	10億円以上

ある程度広い応用を持つものでないと予算獲得が難しい

ALMA でも相関器は FPGA、、、

# 基本的な考え方

- チップに演算器を 2000 個くらい入れる
- それを (GRAPE が得意なタイプの問題に対しては) ある程度のプログラム可能性をもった形で使う。GRAPE のようなハードワイヤードなパイプラインにはしない。

もうちょっとそれらしく言うと:

- 応用に特化し、多数の演算器を1チップに集積、並列動作させて高い性能を得た専用計算機の特徴を生かす
- しかし広い応用範囲を実現する

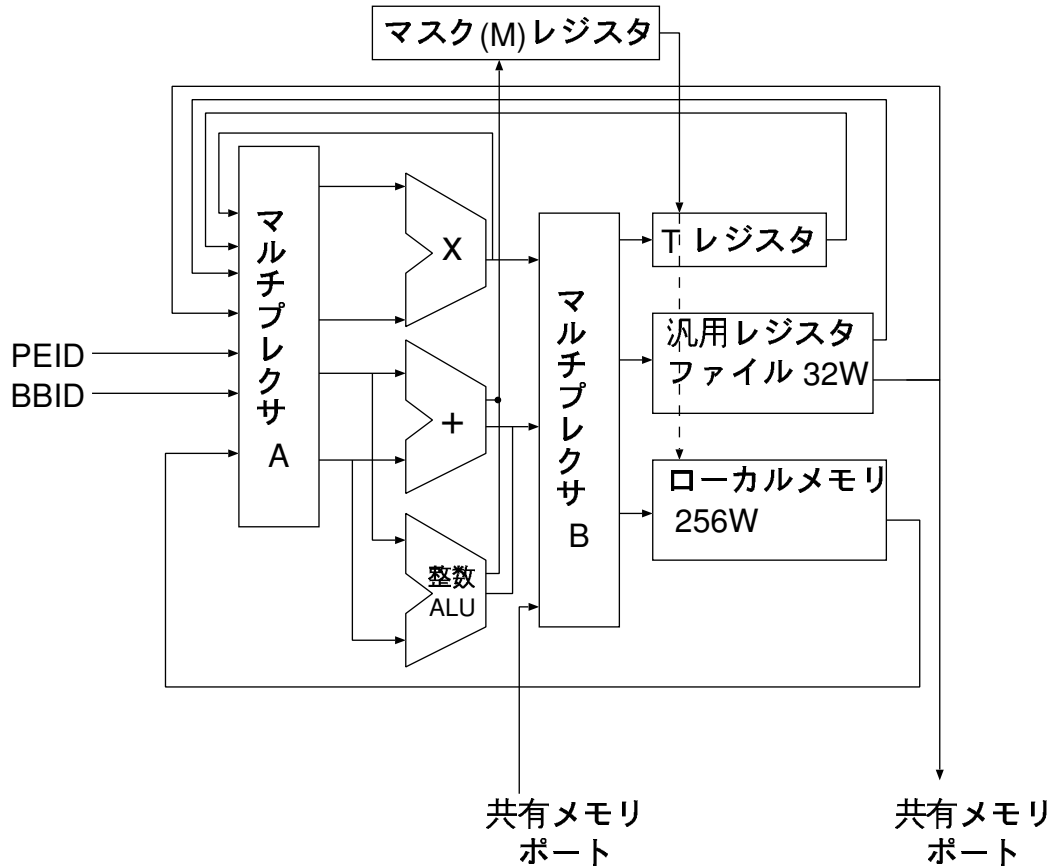
# SIMD 並列処理

パイプラインプロセッサをやめにして、「プログラム可能なプロセッサ」を沢山載せる。

SIMD (Single Instruction Multiple Data): 全プロセッサが同じ命令を実行

基本的には、全プロセッサがソフトウェアで GRAPE をエミュレーションする。

# GRAPE-DR プロセッサエレメント



- 浮動小数点演算器
- 整数演算器
- レジスタ
- メモリ (256語), K とか M ではない。

# GRAPE-DR の開発状況



シミュレーションデータと同じものを供給して同じ答がでる  
いくつかのアプリケーションが動作

# 原始的なコンパイラ

(中里 2006)

```
/VARI  xi, yi, zi, e2;  
/VARJ  xj, yj, zj, mj;  
/VARF  fx, fy, fz;  
dx = xi - xj;  
dy = yi - yj;  
dz = zi - zj;  
r2 = dx*dx + dy*dy + dz*dz + e2;  
r3i= powm32(r2);  
ff = mj*r3i;  
fx += ff*dx;  
fy += ff*dy;  
fz += ff*dz;
```

これから GRAPE  
並のことをするアセ  
ンブラ、インター  
フェースライブラリ  
を生成。

基本的なアイデアは  
PGR (FPGA を  
使った

PROGRAPE 用  
コンパイラ、濱田 D  
論 2006) と同様

# 応用範囲

- 基本的には、データ量の割に計算量が多いものならなんでも
- むかないアルゴリズム: 大規模 FFT

天文では

- 重力多体問題
- 自己重力流体
- 輻射流体



# 次世代スーパーコンピュータープロジェクト

- 2006年度から7ヵ年計画 (2007年度 80億)
- 10 Pflops ?
- 総予算 1100億 ?
- 場所は神戸ポートアイランドに決定 (3/28)

# 位置づけ (公式)

- 数値風洞 (1993, 220Gflops)、地球シミュレータ (2002, 40Tflops) の後継
- 「これらのマシンが実現した世界をリードする地位を回復」

# 位置付け (実態)

- 1993 数値風洞は初めて分散メモリ+ベクトルを実現した革新的マシン
- 2002 地球シミュレータはその延長
- 2012 次世代: 何を作るか決められない(すでに1年半遅れ)

## 要因:

- 航技研・三好氏にあたる人がいない(現在のトップは元 NEC の渡辺氏)
- なんのために作るものかわからない

# 天文コミュニティとの関係

- アプリケーション検討部会、物理・天文分野 (宇川、観山)
  - 数値相対論、MHD、惑星・銀河形成を提案
  - ベンチマークに惑星・銀河形成
  - ある程度のマシンタイムは獲得できる？
- 理研・天文台共同研究 (2006 年度)
  - 「アクセラレータ」に関する検討
  - 今年度以降は？

# 天文台スパコンとの関係

- リプレース: 2008/3
- 演算性能 2T(ベクトル)+20T(スカラー)  
+ 1P(?, GRAPE-DR)
- その次のリプレースがあると: 2013/3, スカラー 0.5P  
程度?
- 次世代スパコンの天文コミュニティの取り分よりかなり  
大きい

現在の計画では、次世代スパコンは高い割に遅い

# 長期計画

- 計算機アーキテクチャの進歩をリードしてきたのは天文・物理
  - QCD (QC DPAX, CP-PACS, QCDOC)
  - GRAPE
- 次世代スパコンの次のための研究開発を目指すべき
  - GRAPE-DR の次の計画
  - スカラー並列