

密結合 FPGA クラスタによる格子ボルツマン法専用計算機の実装

鈴木 隼人 高野 芳彰 千葉 諒太郎 佐野 健太郎 山本 悟

東北大学大学院 情報科学研究科

1. 緒論

近年、数値流体力学(CFD)計算は様々な分野において実用的な問題への適用が可能となっており、コストや労力の点から必須の技術となってきている。しかし、CFD計算は大規模化・高精度化に伴い計算時間が膨大となるため、高い計算性能が求められている。

CFD の計算手法の一つに格子ボルツマン法(Lattice Boltzmann Method, LBM)⁽¹⁾がある。LBM は、混相流や多孔質物質を扱うことができる他、高い並列性を持つという利点がある。一方で演算当たりのデータ量が多い、つまり演算密度が低いという欠点を持つ。このような特徴を持つ問題を汎用マイクロプロセッサを用いて計算する場合、実効性能がメモリ帯域により制限されてしまい、そのピーク演算性能発揮することは困難となる。

一方、高効率の計算を達成する有望なアプローチとして、専用計算回路によるカスタムコンピューティングが挙げられる⁽²⁾。ネットワーク帯域とメモリ帯域に釣り合うように多段のパイプラインデータパスを構成することなどにより、個々のアプリケーションに特化した回路を設計し、システム中の計算資源を有効活用することが可能である。カスタムコンピューティングに用いられるFPGA(Field-Programmable Gate Array)は、近年大規模化が進み、大量の DSP ブロックやロジックエレメントを使用した高い浮動小数点演算性能が期待されることに加え、広帯域のメモリアンターフェースやチップ間通信が実現可能となってきている。

本研究では、高効率なカスタムコンピューティングを目的として、FPGA を用いた LBM 専用計算機の開発を行っている。専用計算機の計算要素(PE)は、計算格子を走査することによって得られるデータストリームに対しストリーム計算を行う。更に、この PE を 2 次元アレイ構造に配置することにより、時間的及び空間的に並列に LBM 計算を行うことが可能となる。本稿では、LBM 専用計算機の詳細について述べる。

2. 格子ボルツマン法

2.1 2次元9速度モデル 格子ボルツマン法

格子ボルツマン法(Lattice Boltzmann Method, LBM)⁽³⁾⁽⁴⁾は、流体問題を計算する手法の一つであり、混相流や多孔質物質を扱うことが可能であり、高い並列性といった特徴を持つ。LBM では、流体の流れを離散化された格子状における仮想粒子の並進と衝突によって表現する。各格子点は、図 1 に示すように 9 方向の粒子速度 $c_i = (c_{xi}, c_{yi})$ に対する、粒子密度分布関数 f_i を持つ。

Designing and Implementing the Custom Accelerator for Lattice Boltzmann method on tightly-coupled FPGA cluster
Hayato SUZUKI, Yoshiaki KONO, Ryotaro CHIBA, Kentaro SANO, Satoru YAMAMOTO
Tohoku University

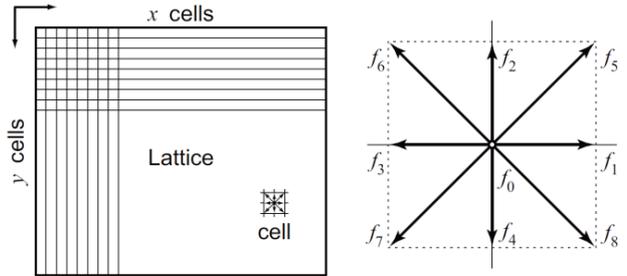


図 1 2次元格子と 2D9V モデルにおける粒子密度分布関数

$$c_{xi} = \cos \frac{2\pi(i-1)}{8}, c_{yi} = \sin \frac{2\pi(i-1)}{8} \quad (0 \leq i \leq 8) \quad (1)$$

本稿では $\Delta t = \Delta x = \Delta y = 1$ とする。仮想粒子に対する衝突及び並進計算は次式により与えられる。

$$f_i^{new}(\mathbf{x} + \mathbf{c}_i, t + 1) = f_i(\mathbf{x}, t) - \frac{f_i(\mathbf{x}, t) - f_i^{eq}(\mathbf{x}, t)}{\tau} \quad (2)$$

ここで、 $f_i^{eq}(\mathbf{x}, t)$ は局所平衡分布関数であり、 τ は緩和係数である。

LBM においては、式(2)を巨視的変数計算、局所平衡分布計算、衝突計算、粒子の並進、境界条件計算、終了判定の 6 ステップにより解く。巨視的変数計算においては、流体の密度 ρ 及び流速 $\mathbf{V} = (u, v)$ を、粒子密度分布関数 $f_i(\mathbf{x}, t)$ を用いて次式によって計算する。

$$\rho = \sum_i f_i(\mathbf{x}, t), \rho \mathbf{V} = \sum_i \mathbf{c}_i \cdot f_i(\mathbf{x}, t) \quad (3)$$

局所平衡分布計算においては、局所平衡分布関数 $f_i^{eq}(\mathbf{x}, t)$ を次式によって計算する。

$$f_i^{eq} = \rho \{ A_i + B_i (\mathbf{c}_i \cdot \mathbf{V}) + C_i (\mathbf{c}_i \cdot \mathbf{V})^2 - D_i V^2 \} \quad (4)$$

ここで、 A_i, B_i, C_i, D_i は $i = 0, 1, \dots, 8$ における定数値である。衝突計算においては、式(2)の右辺を計算する。粒子の並進においては式(2)において、位置 \mathbf{x} での $f_i(\mathbf{x}, t)$ を隣接点の粒子密度分布関数 $f_i(\mathbf{x} + \mathbf{c}_i \Delta t, t + \Delta t)$ へ代入する。境界条件計算においては、後述するように、定圧力境界条件及びバウンスバック境界条件を用いて境界に位置する格子点の計算を行う。終了判定においては、既定のタイムステップ数などの条件により計算の継続か終了かを定める。

2.2 境界条件

本研究の専用計算機は境界条件計算において、定圧力境界条件及びバウンスバック境界条件に基づいて境界計算を行う。

定圧力境界条件は、計算領域の境界に位置する格子点に対して適用する。計算領域外からは粒子密度分布関数の並進がないため、境界に位置する格子点に対して与えられた密度と計算領域内から並進してきた粒子密度分布関数をもとに計算して求める。

バウンスバック境界条件は、個体格子点と隣接する格

子点に対して適用する。個体格子点の方向へと進む粒子が反射することを仮定した境界条件であり、滑りなし壁面境界を表現する。

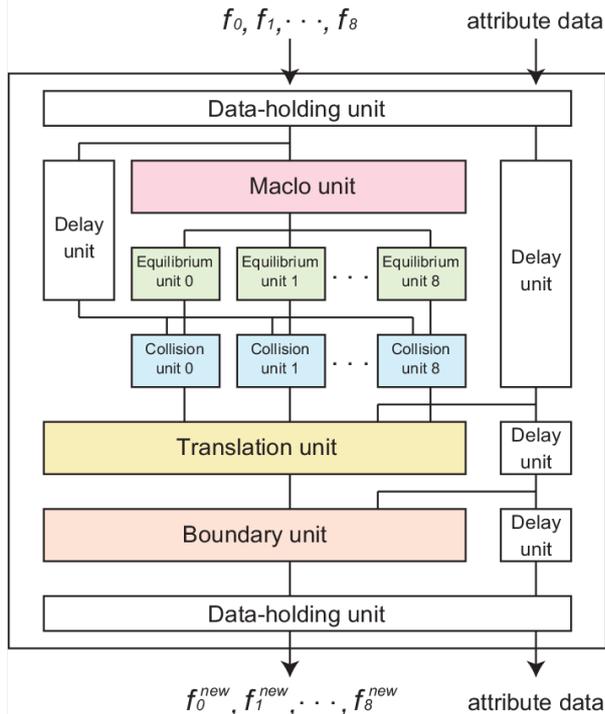


図2 PEの概要

3. LBM 専用計算機

3.1 計算要素の構成

LBM 専用計算機の計算要素(PE)の概要を図 2 に示す。PE は主に、巨視的変数計算パイプライン(Macro Calculation Pipeline, MCP), 9本の局所平衡分布及び衝突計算パイプライン(Equilibrium Calculation and Collision Pipeline, ECP), 並進ユニット(Translation Unit, TLU), 及び境界条件計算ユニット(Boundary Unit, BDU)から構成される。

計算格子の各格子点は、単精度浮動小数点数による 9 方向の粒子密度分布関数の 9 ワードに加え、1 ワードの属性データを持つ。属性データは、格子点が境界に位置しているかどうかや周囲の各格子点が個体かどうか等の情報を持つものである。各格子点における 10 ワードのデータはデータストリームとして PE に入力され、次のタイムステップのデータが出力される。

3.2 密結合 FPGA クラスタ

PE を 2 次元アレイ構造に配置することで LBM 計算を時間的及び空間的に並列に行うことが可能である。本研究では、大規模並列計算の実現のために、密結合 FPGA クラスタを用いた専用計算機の実装を考えている。クラスタは複数のホスト計算機をネットワークにより接続して構成する。各ホストには専用計算機として使用される複数の FPGA を、それぞれ PCI-Express インターフェースによって接続する。また、FPGA 同士は専用ネットワーク(ADN)により直接接続する。現在試作クラスタを持つ ADN のトポロジーは 1D トーラスである。

4. 性能評価

本専用計算機は、ALTERA Stratix IV EP4SGX230 FPGA を搭載した Terasic 社 DE4 ボードを用いて試作実装を行っている。配置配線の結果、1 台の FPGA 上に最大 3 つの PE が実装可能であるとの見積もりを得たが、現試作においては 2 つとしている。

125MHz で動作する 1×2 の PE アレイからなる試作ハードウェアによる計算結果と、ソフトウェア実装との比較によって、PE の正常動作を確認した。1 つの PE に含まれる単精度浮動小数点演算器が 137 個であり、PE は 125MHz で動作するため、現試作における専用計算機のピーク性能は FPGA1 台当たり $137 \times 0.125 \times 2 = 34.25 \text{GFlop/s}$ となる。1 台の FPGA からなる LBM 専用計算機に対して、 400×240 格子点、12 タイムステップ分の LBM 計算をベンチマークとして、ソフトウェア実装との性能比較を行った。尚、ソフトウェア実装では並列化は行っておらず、3.3GHz で動作する Core i7 プロセッサ中の単一コアを用いて実行される。その結果、専用計算機が 3.8 倍高速であった。

現試作には最適化の余地がある。例えば、PE のハードウェアの大部分を占める MCP 及び ECP は 250MHz で動作可能であり、3 つの PE を 1 台の FPGA に実装した専用計算機のピーク性能は 102.8GFlop/s となると考えられる。更に、本専用計算機はリニアなスケーラビリティを持ち、本試作実装に用いた Stratix IV FPGA の場合、238 台用いることで 24.45TFlop/s の性能まで達成できるという見積もりを得ている⁽⁵⁾。

5. 結言

本研究では、高効率なカスタムコンピューティングを目的として、FPGA を用いた LBM 専用計算機の開発を行っている。本稿では、LBM とその専用計算機の詳細について述べた。また、現時点における試作の専用計算機の性能評価を行った。

今後の課題として、複数の FPGA からなるクラスタと、その上で動作する LBM 専用計算機システムの完成、及び性能評価が挙げられる。

参考文献

- [1] P. Skordos: "Initial and boundary conditions for the lattice boltzmann method", Physical Review E, 48, 6, pp. 4823-4842 (1993).
- [2] J. Makino: "The GRAPE project", Computing in Science and Engineering, 8, 1, pp. 30-40 (2006).
- [3] T. Inamuro, M. Yoshino and F. Ogino: "A nonslip boundary condition for lattice boltzmann simulations", Physics of Fluids, 7, 12, pp. 2928-2930 (1995).
- [4] N. David R, S. Chen, J. G. Georgiadis and R. O. Buckius: "A consistent hydrodynamic boundary condition for the lattice boltzmann method", Physics of Fluids, 7, 1, pp. 203-209 (1995).
- [5] Y. Kono, K. Sano and S. Yamamoto: "Scalability analysis of tightly-coupled fpga-cluster for lattice boltzmann computation", Proceedings of the 22nd International Conference on Field-Programmable Logic and Applications(FPL2012), p. accepted (2012).