

QCDPAXの性能評価

5L-8

白川友紀、星野 力、岩崎洋一、小柳義夫、金谷和至、吉江友照(筑波大学)

一井信吾(高エネルギー物理学研究所)、川合敏雄(慶応大学)

【1】はじめに

量子色力学(QCD:Quantum Chromodynamics)のシミュレーションは、巨大な計算量を必要とするため、世界各国で専用の並列計算機を作製してこれを行う研究が進められている[1]。筑波大学においてもQCD計算用の並列計算機QCDPAXを開発し[2]、本年度4月にPU(Processing Unit)288台のシステムが一応完成した。現在まだハードウェア、ソフトウェアの調整中であるが、このシステムとその性能について報告する。

【2】格子ゲージモデルとQCD計算

格子ゲージモデルは周期境界条件を持つ4次元超立方格子の格子点(site)にクォークを、辺(link)にグルーオンを置いた形になっている。

主な計算は、 $\exp(-\beta \sum_p S_p(U)) \det(D(U))$ に比例した確率でグルーオン場を生じさせること、連立一次方程式、 $Dx=b$ を解くことである。ただし β は定数、 S_p は、 $S_p=1-\text{Re tr}[U_{12}U_{23}U_{34}U_{41}]/3$ によって与えられる。 U_{12} 等は 3×3 の特殊ユニタリ行列である。 D は $(12 \times \text{格子点数}) \times (12 \times \text{格子点数})$ の疎行列で大規模であるが非0ブロックは隣接する格子点の対応関係をあらわす位置にのみある。 b は正規乱数である。 $Dx=b$ の解法には不完全LU分解の前処理付きの最小残差法を用いる。最小残差法の主要

な計算は行列とベクトルの乗算であるが行列の非0要素は隣接格子点との間にあるので、QCDPAXにおける並列処理では隣接PUとのデータ転送で済む。

【3】QCDPAXの概要

(1) ハードウェア

2次元隣接結合MIMD方式の並列計算機で、同期バリア機構を備えている。大規模な複素数行列の計算を行うため各PUに高速浮動小数点演算、ベクトル演算の機能がある。QCDPAXの写真を図1に示す。

(2) ソフトウェア

ノード記述型の並列処理言語でベクトル演算の陽的記述も可能なコンパイラpsc、浮動小数点演算やベクトル演算のアセンブラqfa、複素数をサポートするためのプリプロセッサ、PUアレイ制御用関数、初等関数、QCD計算用関数などが作成されている。

【4】QCDPAXの評価

Red-Black-SOR法によるポアソン方程式の求解、およびQCD計算の主要部分を240台の16MHzのクロックのPUを用いて実行して、本システムの評価を行った。

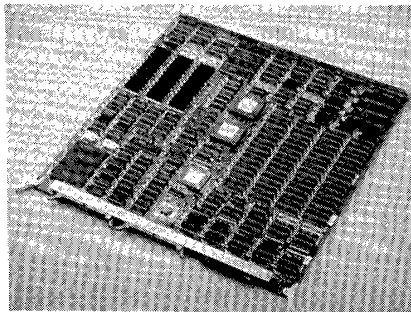
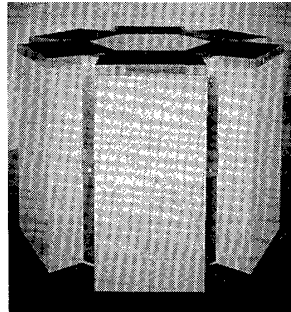
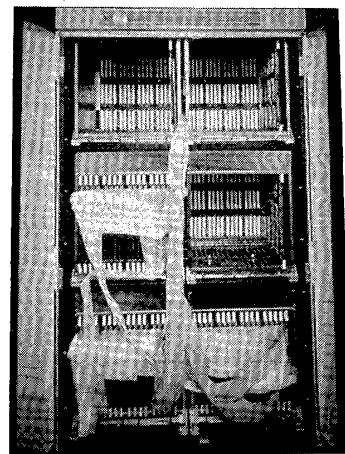


図1 (a)PUボード



(b)筐体



(c)1筐体に48台のPUが入っているところ

Evaluation of the processor array QCDPAX : Tomonori SHIRAKAWA, Tsutomu HOSHINO, Yoichi IWASAKI, Yoshio OYANAGI, Kazuyuki KANAYA, and Tomoteru YOSHIE(Univ. Tsukuba), Shingo ICHII(High Energy Physics Lab.), and Toshio KAWAI(Keio Univ.)

Red-Black-SOR法によるポアソン方程式の求解では、直方体内の対角線上に一方の端から1/4と3/4の所に+1のソースをおき、X方向とY方向は周期境界条件、Z方向は固定境界条件で、最適加速を行い絶対誤差が $1.0e-5$ 以下になるまで計算した。結果を表1に示す。この計算では隣接通信のためにアセンブリ言語で作成された関数gatherとscatterを用いたが、その他の部分はコンパイラ言語のみでコーディングし、アセンブラレベルでのチューニングは行っていない。ベクトル長を大きくすることによって高性能を得ている。

full QCDの計算で最も負荷の大きいmult(主として複素数行列ベクトルの乗算からなる)は、 $10 \times 48 \times 48 \times 24$ の格子では、 $0.75 \mu\text{s}/\text{site}$ であった。これは隣接通信を含んだ時間で、約4GFLOPSの実効速度にあたる。必要なベクトル演算ルーチンがほとんど全部ベクトル演算制御メモリにロードしておけるのでベクトル演算の立ち上がり時間が少なくて済んだ。

4次元ピュアSU(3)の計算および不完全LU分解の前処理のための関数luinvの実行時間等を表2に示す。SU(3)の計算ではポアソン方程式の求解に比べて高い並列処理効率が得られた。これは、

- (1) SU(3)の計算の計算量/通信量の比がポアソン方程式のそれより大きいこと、
- (2) SU(3)のデータ単位が複素数行列で隣接通信が連続したアドレスへのアクセスで高速に行えるのに対し、ポアソン方程式の場合はアクセスが

跳び跳びになるため隣接通信が遅いこと、による。SU(3)の隣接通信に用いられているコピー関数cpy24xでは転送速度は1PU当り4.23MB/sである。ベクトル処理を用いたgather、scatter関数を作成しコピー関数と組み合わせることによりポアソン方程式求解の効率は多少改善できるであろう。

【5】おわりに

本年度当初には、典型的なQCD計算ではデータ転送、ベクトル演算の立ち上がり、正味の演算の時間がほぼ同じくらいになると予想していた。しかし実際にQCD計算の一部を実行してみて、ベクトル演算の立ち上がりにはそれほど時間がかからず、正味の演算が他の処理と同じくらいの時間になると考えられるようになった。

PUが288台のとき、ピーク速度は8.2GFLOPSであるが、1PUの実質的最高速度は、14.3MFLOPSであるので、実効的に $288 \times 14.3 \times 1/2 = 2.0\text{GFLOPS}$ の速度が期待できる。QCDPAXは本年度中に480台に増設される予定で、それによりピーク速度13.7GFLOPS、実効3.4GFLOPSになるものと期待できる。これはQCDシミュレーションのニーズを満たすものである。

本研究は、科研費特別推進研究 62060001による。

参考文献

- [1] J. Beetem et. al, IEEE Proc. ISCA(1985)255. : N.H.Christ, Nucl.Phys., B(Proc.Suppl.)9 (1989)549.
- [2] 第38回本大会3T4~9(1989).

表1. Red-Black-SOR法による3次元ポアソン方程式の求解 (PU数:240、クロック:16MHz)

問題サイズ X Y Z	収束回数	更新時間・速度		通信時間・速度		効率* %	実効速度 MFLOPS	全収束時間 s
		μs	GFLOPS	μs	MB/s			
72×30×30	81	260.5	1.78	1912.5	90.48	11.99	213	0.3520
120×120×120	162	4485.5	2.43	16901	115.68	20.97	510	6.929
216×210×210	285	21413	2.46	50385	120.24	29.82	734	40.92
360×370×360	488	99647	2.47	132607	135.6	42.90	1060	226.7

表2. QCDの計算 (PU数:240、クロック:16MHz)

問題サイズ	4次元ピュアSU(3)					luinv	
	更新時間(含通信)		通信時間		効率* %	s	$\mu\text{s}/\text{site}$
	s/sweep	$\mu\text{s}/\text{link}$	s/sweep	$\mu\text{s}/\text{link}$			
10×8×8×24	0.356	5.79	-	-	-	-	-
10×12×12×24	0.592	4.28	-	-	-	-	-
10×24×24×24	1.787	3.23	0.353	0.639	80.2	1.41	10.17
10×48×48×24	6.37	2.88	1.34	0.606	80.0	4.63	8.38

* 効率 = (通信を含まない更新時間) / (通信を含む更新時間) で計算。