

解説



計算物理学と超並列計算機—CP-PACS 計画—

4. 超並列計算機 CP-PACS の計算物理学分野における実効性能の予測†

青木 慎也†† 金谷 和至††† 吉江 友照†††

1. はじめに

CP-PACS 計画¹⁾の主要課題である“格子量子色力学 (lattice QCD) の数値シミュレーション”の概要と、CP-PACS 上での実効性能予測について述べる。本計画で行うことを予定している物理計算は多岐にわたるが、本稿では、最も典型的な計算である“軽いハドロンの質量計算”に対し、計算の特徴と CP-PACS の特徴を対比しつつ、単体プロセッサ上での実効性能評価結果と、プロセッサ間通信を考慮した実効性能評価結果を示す。ハドロンの質量計算に必要な総実行時間の見積りにについても述べる。本稿で述べる性能予測は、文献 1) の前提条件等の見直しによって改訂した最新の予測に基づくものである²⁾。

2. 格子量子色力学計算の概要

格子量子色力学は、ハドロンの構成要素であるクォークとグルーオンの相互作用を 4 次元格子上で離散化した理論である³⁾。計算機上では、クォーク場は各格子点 n に定義された 3×4 複素行列 q_n^{aa} で、グルーオン場は隣接格子点を結ぶ最小線分 l に定義された 3×3 特殊ユニタリ行列 U_l^{ab} で表される。ここに、 $a, b=1, 2, 3$, $\alpha=1 \sim 4$ である。

クォーク・グルーオンの相互作用は、“作用”

$$S = \frac{\beta}{6} \sum_p \text{tr}(U_{l_1} U_{l_2} U_{l_3} U_{l_4}) + \sum_{n,n'} \bar{q}_n D_{n,n'}(U) q_{n'}$$

で定義される。第 1 項は、格子上の最小正方形 p

のまわりに変数 U を 4 つ乗じたもののトレースの和であり、グルーオンの自己相互作用を表す。第 2 項は、クォーク・グルーオン間の相互作用を表す。 $D_{n,n'}$ は U の関数であり、クォーク場を $12V$ (V : 格子点数) 要素の列ベクトルと見た場合、 $12V \times 12V$ の疎行列と見ることがができる。

ハドロンの質量は、1) グルーオン配位をモンテカルロ法を用いて確率分布 $\exp(-S)$ で生成し、2) 各配位上でのクォークの伝搬関数を計算し、3) ハドロンの伝搬関数を求めることによって得られる。配位生成の主要部は、クォークのグルーオンへの反作用を無視する近似 (クエンチ QCD) では (a) 各最小正方形での 3×3 行列 U の積の計算であり、近似なし理論 (フル QCD) では (b) 大規模線形方程式 $p=Dq$ を解くこと、である。(b) には最小残差法等の繰り返し法が用いられるので (b) はベクトル q に行列 D を掛ける演算に帰着する。また、クォーク伝搬関数計算も (b) に帰着する。ハドロンの伝搬関数はクォークの伝搬関数から比較的少ない演算で得られる。

我々は演算 Dq を行うルーチンを QCDMULT と呼んでいる。1 つのジョブの実行時間で QCDMULT が占める割合は、大略、クエンチ QCD で 50%、フル QCD で 80% である。QCD 計算の他の部分も QCDMULT と同一の特徴 (後述) を備えているので、QCD 計算の実効性能は QCDMULT の実効性能で決まると言っても、過言ではない。

3. 基本ルーチンの実効性能

基本ルーチン QCDMULT は演算・通信の両側面から見ていくつかの著しい特徴を持っている。CP-PACS ではそれらの特徴を生かしたコーディングが可能であり、高い実効性能が実現される。

† Performance of Massively Parallel Computer “CP-PACS” in Computational Physics by Shinya AOKI (Institute of Physics, University of Tsukuba), Kazuyuki KANAYA and Tomoteru YOSHIE (Center for Computational Physics, Institute of Physics, University of Tsukuba).

†† 筑波大学物理学系

††† 筑波大学物理学系計算物理学研究センター

3.1 単体プロセッサの評価

QCDMULT の主要部は、“演算に必要な乗算の数・加算の数・Load/Store の数がよくバランスしている”という特徴を持っている。(以下、乗算・加算・Load/Store 命令を、“三種の命令”と呼ぶ。) 実際、各格子点での演算は、3列の複素ベクトルの和の計算と3行3列の複素行列を3列の複素ベクトルに乗ずる演算:

$$y^a = x^a + x'^a; \quad z^a = \sum_b U^{ab} y^b \quad (a=1, 2, 3)$$

が中心であり、この演算に対しては、ループ変数 a についてのアンローリングにより、三種の命令を完全にバランスさせることが可能である。

“三種の命令のバランス”は QCDMULT に限らず多くの大規模科学技術計算に見られる特徴である。多くのベクトル型計算機は三種の命令がほぼ同じウエイトで実行できるよう設計されており、ベクトル型計算機が大規模科学技術計算で性能を発揮するのはこのためである。CP-PACS も同じ特徴を備えている。CP-PACS のプロセッサは2命令スーパスカラで、加算と乗算は1命令で実行される。1命令で load/store を、1命令で加算・乗算命令を指定することにより、三種の命令を同じウエイトで実行することが可能となる。ただし、QCDMULT 全体では、三種の命令は完全にはバランスしていない。このため、各マシンサイクルを3種の命令で完全に満たすことは不可能である。

特集記事「超並列計算機 CP-PACS のアーキテクチャ」に解説されているように、CP-PACS では Hewlett Packard 社 PA-RISC アーキテクチャにメモリレイテンシの隠蔽のために新たに開発された PVP-SW 機構を付加したプロセッサが用いられる。この機構は、“必要なデータがレジスタに届いていないために生じるプロセッサストール”を著しく低減するが、新たにウィンドウ切替えが必要となる。

実効性能評価のため、我々は、PVP-SW 機構を生かしたアセンブラコードを日立製作所の協力を得て作成した。本稿で述べる実効性能評価結果はこのコードの解析に基づいたものである。

理論ピーク性能からの性能低下の要因には、“三種の命令のアンバランス”に加えて、

- (1) ウィンドウ切替え
- (2) アドレス計算等の整数演算

(3) preload/poststore の prologue/epilogue 部

(4) バンクコンフリクト

がある。このうち、(1)から(3)については書かれたコードで決まる。PVP-SW 機構によるメモリレイテンシの隠蔽の効果は、レジスタ数に依存する。レジスタがより多ければ、より早く preload 命令を発行できるからである。メモリアクセスが連続であればレイテンシを完全に隠蔽することは容易であるが、非連続アクセスの場合はバンクコンフリクト効果によりレイテンシが完全には隠蔽できなくなる。バンクコンフリクト効果による性能低下はメモリの詳細とメモリアクセスパターンに依存するので、日立製作所作成のメモリシミュレータを用いて評価を行った。(シミュレータ作成時に想定したメモリ構成と現時点でのそれは多少異なっているため、結果は1つの目安である。)

図-1 にメモリ系が理想的であるとした場合(レイテンシがゼロの場合)の QCDMULT の実効効率(実効性能/理論ピーク)を示す。実効効率は75%程度である。preload/poststore の pro-

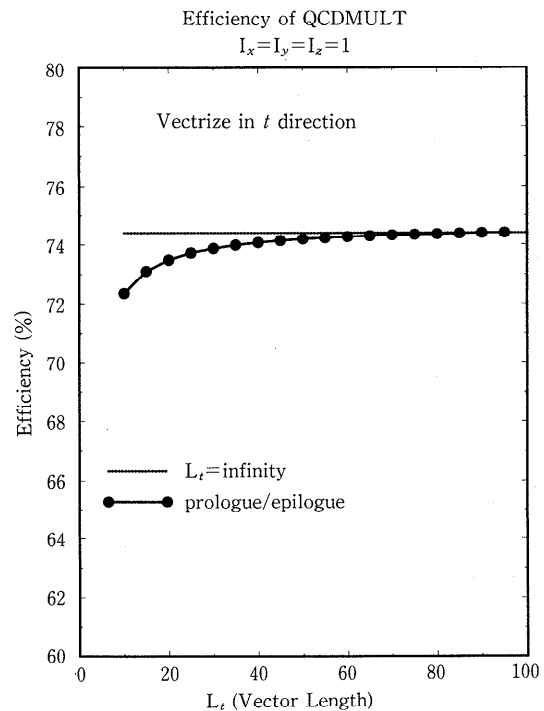


図-1 QCDMULT の実効効率(実効性能/理論ピーク)のベクトル長依存性。メモリ系が理想的である場合。

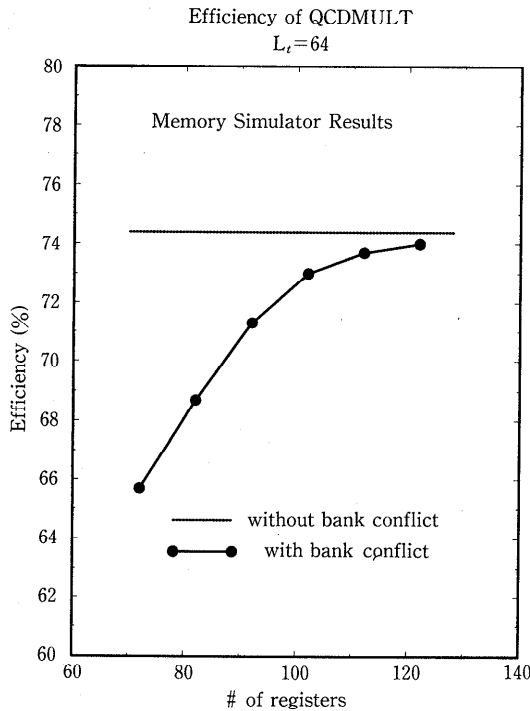


図-2 QCDMULT の実効効率 (実効性能/理論ピーク) のレジスタ数依存性。

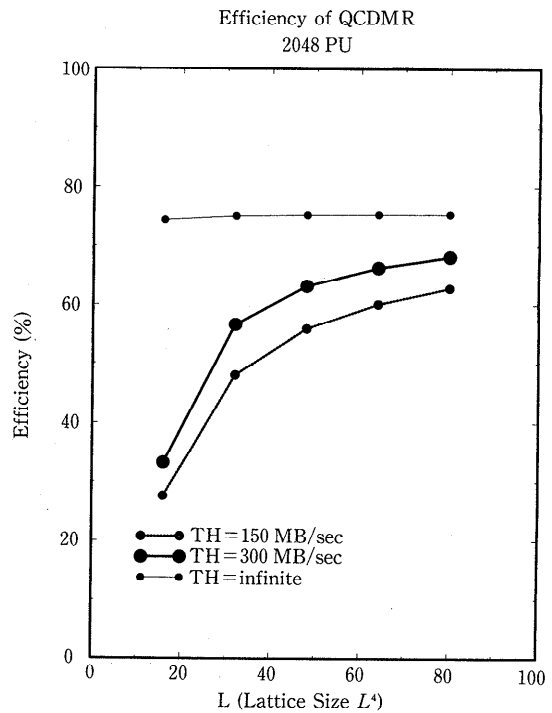


図-3 QCDMR の実効効率 (実効性能/理論ピーク)。ネットワークスループット (TH) が 150 MByte/sec の場合と 300 MByte/sec の場合。比較のため、スループットが無限大の場合も示した。

logue/epilogue 部は性能のベクトル長依存性を生む。図に示したようにベクトルの立ち上がりはきわめて早い。これは多くのベクトル型計算機では見られない性質である。N_{1/2} が小さいことは PVP-SW の大きな特徴の 1 つである。図-2 に、ベクトル長を 64 に固定した場合の、バンクコンフリクト効果を考慮した実効性能予測を示す。レジスタが十分 (100 程度) あればバンクコンフリクトの影響により伸長するメモリレイテンシも十分隠蔽され、実効効率の低下はほとんどないことが分かる。

CP-PACS の単体プロセッサ上では、QCDMULT は効率約 74% で実行可能である。この効率は商用ベクトル型スーパーコンピュータ上でのそれに匹敵する。

3.2 ネットワーク性能の評価

格子 QCD 計算の場合もそうであるが、科学技術計算ではブロックストライド型のデータ転送、つまり“連続する一定長のデータが一定のストライドで多数個つながったデータ群の転送”が現れ

る。これは、高次元の問題を並列計算機に一樣に写像して解く場合、部分格子の境界のデータを隣接ノード間で交換する際に常に必要となる。また、QCD 計算のデータ転送は、“1 回に転送すべきデータ量が大い”という特徴も持っている。このような転送を高速に行うため、CP-PACS はブロックストライド転送機能・リモート DMA 転送機能を有している。QCDMULT の場合、これらの機能がない場合はネットワークバンド幅の 40% ほどしか有効に働かないが、これらの機能のため、CP-PACS では 90% 程度の転送効率が実現される。

図-3 に、ネットワークを含めた全システムでの QCD 計算の実効効率の評価結果を示す。図は、前述の方程式 $p=Dq$ を Red/Black 最小残差法で解く (QCDMR) 場合の効率の評価結果である。(評価では 2048 PU を仮定した)。スループットが 300 MB/sec の場合、64⁴ 格子 (クエンチ QCD における我々のターゲット) に対しては 66%、32⁴ 格子 (フル QCD のターゲット) に対

しては 57% の効率でシステムが稼働することが分かる。

4. 実行時間予測と期待される成果

4.1 クエンチ QCD

ハドロン質量計算には、クォークの伝搬関数計算に加え、配位生成およびハドロン伝搬関数計算が必要となる。すべてのクォーク伝搬関数をメモリに保持することができないため、分散ディスクとの I/O が必要となる。我々は、重いクォークから比較的軽いクォークまで 6 種のクォークの伝搬関数から 30 組のハドロン伝搬関数を計算することを想定している。この場合のディスク I/O のコストは、現在の設計値に基づく評価では、 64^4 格子で、QCDMR 全実行時間の約 30% 程度である。(128 IOU を仮定した) また、配位生成の時間は、配位生成とクォーク伝搬関数計算の時間比の経験値をもとに予測できる。

クエンチ QCD の 1 つの格子間隔に対する総実行時間は約 48 日である。最低でも格子間隔を 3 種とって計算し、その結果の連続極限 (格子間隔ゼロの極限) への外挿を行う必要がある。この場合、ハドロン質量の総計算時間の見積りは 150 日となり、十分実行可能な範囲である。CP-PACS では、現在行われている典型的な格子の、サイズで約 $(1.5)^4$ 倍、格子間隔で約 1.5 分の 1 のシミュレーションを行うことが可能となる。これにより有限体積効果・有限格子間隔から生じる不定性を取り除き、クエンチ QCD のハドロン質量に対する最終結果が得られると考えている。

4.2 フル QCD

フル QCD に対しては、現在クエンチ QCD で行われている計算と同規模の計算 ($32^3 \times 64$ 格子でストレンジクォーク程度の質量から比較的軽いクォーク質量までの 4 種のクォークに対する計算) を行うことを想定している。これによって、近似なしのフル QCD でハドロン質量・崩壊定数等を数パーセントの精度で求めることが可能になる。

QCDMR の実行時間をもとに見積もった 1 格子間隔あたりの配位生成の総実行時間は 310 日である。複数の格子間隔での計算を行うには、この数値は少々大き過ぎる。小さな格子を選択する可能性もある。しかし、計算時間の大半は線形方程

式 $p=Dq$ の求解に費やされるので、実行時間を短縮し上記の格子での計算を行えるよう、現在、並列計算機に適した高速なアルゴリズムの研究・開発を行っている。

謝辞 最後に、シュミレータの製作等の協力に対し日立製作所に感謝致します。

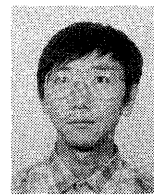
参考文献

- 1) CP-PACS 計画の詳細については、「専用並列計算機による「場の物理」の研究」: 新プログラムによる研究 研究進捗状況報告書, 計算物理学研究センター (Aug. 1994).
- 2) 性能予測のより詳細な解説として, Yoshié, T.: In Proceedings of the Japan-German Seminar: QCD on Massively Parallel Computers, Yamagata, Japan (1995).
(WWW <http://xxx.lanl.gov/ps/hep-lat/9510004>).
- 3) 格子 QCD の平易な解説として, 岩崎洋一: 格子ゲージ理論, 物理学最前線 11 巻, 共立出版.
(平成 7 年 7 月 6 日受付)



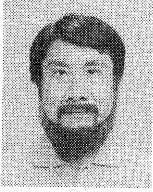
青木 慎也

1959 年生。1982 年東京大学理学部物理学科卒業。1987 年同大学院理学系研究科物理学専門課程修了。理学博士。同年日本学術振興会奨励研究員。同年 Post-doctoral fellow (Physics Department, Brookhaven National Laboratory, USA)。1989 年 Post-doctoral fellow (Institute for Theoretical Physics, SUNY at Stony Brook, USA)。1991 年筑波大学物理学系助手。1993 年同講師。1994 年同助教授。現在に至る。格子上の場の理論の研究、とくに格子フォルミオンの問題の研究に従事。日本物理学会会員。



金谷 和至

1955 年生。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。同年日本学術振興会奨励研究員。1983 年西ドイツ アレキサンダー・フォン・フンボルト財団奨学研究員 (ビーレフェルト大学物理学科)。1985 年西ドイツ アーヘン工科大学理論物理学科研究員。1987 年スイス ベルン大学理論物理学科研究員。1988 年筑波大学物理学系助手。1992 年同計算物理学研究センター助教授。現在に至る。格子場の理論を用いた素粒子物理学の研究に従事。また、筑波大学における並列計算機 QCDPAX (1990 年完成) の開発に参加。日本物理学会会員。



吉江 友照

1958年生。1980年筑波大学第一学群自然科学類卒業。1985年同大学院物理学研究科修了。理学博士。1987年同大物理学系助手。

1992年同講師。現在に至る。数値シミュレーションによる格子QCDの研究に従事。日本物理学会会員。

