

# アプリケーション作業部会 スペック検討 サブWG報告

牧野淳一郎

東京工業大学理工学研究科

理学研究流動機構

合同作業部会 2011/11/26

# 11/5 のアーキテクチャグループ資料によるアーキテクチャまとめ

以下の4タイプになった

---

新名称	10/15 アプリケーション部会資料での 対応するもの
レファレンス	ベースライン
メモリバランス重視	バンド幅重視
演算重視	アクセラレータ
メモリ削減	SoC

---

# 牧野によるタイプわけ

タイプ	B/F	メモリ量 (1TF)	消費電力 (1EF)	演算性能) (20MW)	バンド幅 (20MW)
ベースライン	0.1	10-100GB	20MW	1EF	0.1EB/s
SoC	4	5-10MB	2-5MW	4-10EF	16-40EB/s
アクセラレータ	0.001	1-10GB	4-10MW	2-5EF	2-5PB/s
バンド幅重視	1	1TB	120MW	0.15EF	0.15EB/s

# アーキテクチャグループによるもの

タイプ	B/F	メモリ量 (1TF)	消費電力 (MW/EF)	演算性能) (EF/20MW)	バンド幅 (EB/s)/(20MW)
レファレンス	0.1	100GB	50-100	0.2-0.4	0.1
メモリ削減	0.5	200MB	20-40	0.5-1	0.25-0.5
演算重視	0.005	10GB	10-20	1-2	0.005-0.01
バランス重視	1	1TB	200-400	0.05-0.1	0.05-0.1

# 違いのまとめ (牧野の私見)

1. 全体に電力当り性能が下がっている (1/5-1/10)
  - 現在のコモデティ製品の延長で書いている
  - トレンド予測であって技術的可能性の検討にはまだなっていない
2. 新「メモリ削減」でバンド幅あまりない
  - これはオンチップメモリ
  - オンチップでリッチなネットワークをもつ (物理共有メモリに近い) としているため
  - アプリケーション側から見ると、チップ内部で分散メモリ、メッシュネットワークでよい話が殆ど。

# このアーキテクチャまとめの位置付け

- アプリケーションの側のアーキテクチャ要求の幅を示す、というのがそもそもの目的
- ここでの数字は「予測」であって目標とかではない
- FS でこれらだけをするべし、というわけではなく、候補の例をあげたもの

# アプリケーションのまとめ

- まず分野5のうち宇宙の状況を少し詳しくみる (牧野が割合中身をわかるから)
- それから他の分野を概観

# 分野5(宇宙)でのサイエンスと計算法

N体、粒子法流体(+輻射)

銀河と巨大ブラックホール形成のシミュレーション

宇宙暗黒時代の進化の解明

中性水素の宇宙論的分布の解明

惑星系形成のシミュレーション

地球・惑星形成のシミュレーション

PIC 粒子シミュレーション

超高エネルギー現象と粒子加速

無衝突衝撃波：太陽圏から宇宙まで

# 分野5(宇宙)でのサイエンスと計算法 (続き)

## メッシュ流体 (MHD、数値相対論)

天体降着流・噴出流の輻射磁気流体計算

ブラックホールの形成と強重力現象の解明

超新星爆発のシミュレーション

太陽恒星ダイナモ

太陽系環境科学の推進

惑星表層環境の形成と進化シミュレーション

## 6次元ボルツマン方程式

自己重力系、宇宙プラズマの数値シミュレーション

プラズマ非熱的分布形成の解明

## 量子化学計算

宇宙アミノ酸の量子計算

# 分野5(宇宙)の計算機スペックへの要求

- 前回と同じくまずメモリバンド幅とメモリ量だけ
- 計算手法毎に大体まとめてみた。計算サイズに幅があるので、要求が厳しくなるほうをとっている
- 牧野の判断で若干数字を調整した
- ノード性能は 100TF で規格化した

# 分野5(宇宙)の計算機スペックへの要求

計算手法	B/F	メモリ量	タイプ	コメント
N体、粒子法流体(+輻射)	0.001	200GB	演算重視	
N体、粒子法流体(小粒子数)	0.1	1GB	メモリ削減	
PIC 粒子シミュレーション	1	60TB	バランス重視	
メッシュ流体(MHD、数値相対論)	0.001	100GB	演算重視	
6次元ボルツマン方程式	0.3	32TB	バランス重視	
量子化学計算	0.1	100GB	レファレンス	

# 結果の検討

- 格子での流体計算が「演算重視型」となった。
  - 一見不思議
  - 基本的には、格子点当りの計算量が非常に多くなっているため。  
輻射、化学反応等が計算量増加の要因
- 6次元ボルツマンはエクサでもまだ計算速度自体不足
- PIC は粒子当りの計算量が極めて少なく、粒子数も多いのでこうなる。

# 分野5宇宙以外

名称	B/F	メモリ量	タイプ	コメント
格子 QCD 計算 5次元有効型	0.6	2GB	メモリ削減	
格子 QCD 計算 クローバー型クォーク	1.8	2GB	メモリ削減	
シェルモンテカルロ	0.01	数 10GB	演算重視	
核分裂現象シミュレーション	$10^{-4}$ ?	100GB	演算重視	

# 分野4

名称	B/F	メモリ量	タイプ	コメント
熱流体	0.5	1TB	バランス重視	(陰解法流体)
構造解析	1-2?	不明	バランス重視?	(陽解法なら B/F 小さい)
プラズマ GT5D	> 0.5	20GB	バランス重視	
可視化等	0.002	100GB	演算重視	
ナノ科学	0.001	500GB	演算重視	
タンパク電子状態	0.001	1TB	演算重視	(QM/MM, FMO)

# 分野3

名称	B/F	メモリ量	タイプ	コメン
3D 地球モデルに対する理論地震波形計算	0.2?	50TB	バランス重視	
日本列島周辺地震動	1-2	250GB	(バランス重視)	キャッシュ効
気候 MIROC-ESM	3	3GB	(バランス重視)	
気候 NICAM	0.5	1.5GB	メモリ削減	

# 分野2

名称	B/F	メモリ量	タイプ	コメン
実空間基底第一原理 MD			(まだ)	
平面波基底第一原理 MD	0.1?	50GB -		
超高精度電子状態計算	0.001	1TB	演算重視	
短距離古典分子動力学シミュレーション	0.25	10TB	レファレンス	
長距離古典分子動力学シミュレーション	-	1TB	-	分野5ではメ
ナノ構造体電子・電磁場ダイナミクス法	0.5	30TB	バランス	
クラスターアルゴリズム量子モンテカルロ法	-	-	レファレンス	
厳密対角化	1.5	100TB	バランス	ネットワーク
各種アレイジョブ				メモリ量

# 分野 1

名称	B/F	メモリ量	タイプ	コ
人全脳規模詳細	0.1	25TB	レファレンス	
人全脳規模単純	1	6TB	バランス重視	
カイコガ詳細	0.05	200MB	メモリ削減	
データ解析	-	512GB	レファレンス?	
分子動力学計算	0.1	1TB?	レファレンス	バン
1分子粒度生化学反応拡散系シミュレーション	小	3.2TB	レファレンス	整
細胞、細胞間生化学反応・拡散系シミュレーション	0.1	1TB?	レファレンス	バラ
循環器系連続体力学・生化学反応計算	0.1	1TB?	レファレンス	バラ
次世代シーケンサ解析プログラム	?	1TB	レファレンス	

# 注意

- 見積りの精度はまだ低い
- メモリバンド幅要求は原理的なものと現在の実装からの外挿が混在

# ネットワークへの要求

- 低レイテンシ ( $\ll 1\mu\text{s}$ ) 要求はあまりない。小粒子 MD で1ステップをマイクロ秒程度にしたいという要請はあるはずだが数字はでていない。
- バイセクションで効率決まるアプリケーションはいくつかある (分野2他)
- 隣接通信のバンド幅要求は QCD が大きい。10TF に対して128GB/s 双方向
- 通信のメモリアクセスパターン、縮約等には配慮必要

# その他

- I/O、ストレージについては要求はでているのでまとめる。
- FS での検討では以下のようなものも重要
  - コアの機能、特に整数演算性能、分岐等の性能
  - プログラミングモデル
  - その他

# まとめ

- 今回はタイプ毎のアプリケーションの数は書かない
- バランス重視型となるものの多くが陰解法で大規模行列を解くもの
- PIC、ボルツマン方程式等、自由度が大きく自由度あたりの演算量が少ないものもバランス重視型
- 量子化学計算の多くが演算重視型
- 小自由度長時間計算ではメモリ削減型も有効