# 重力多体問題専用計算機 GRAPE
# ー その動作原理と使用方法

福重 俊幸
(株)K&F Computing Research

イントロダクション

動作原理

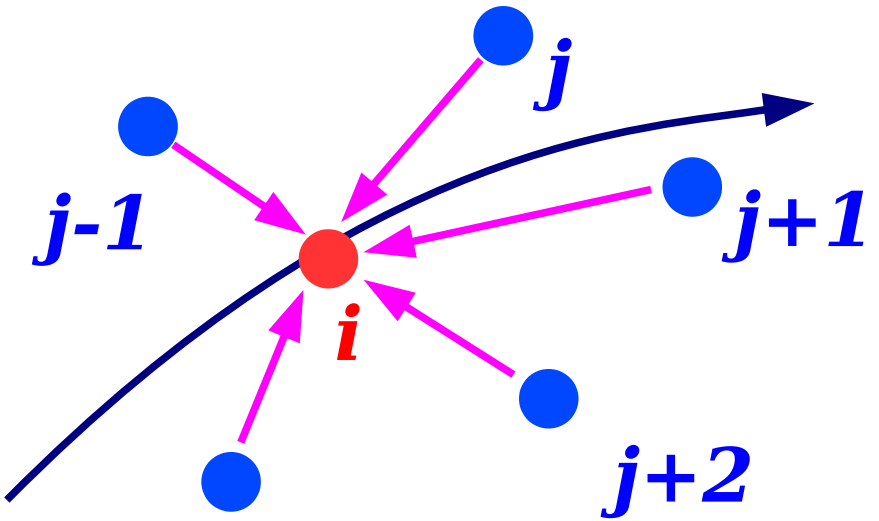
専用計算機と最近のトレンド

基礎的な使用法(実際)

まとめ

# 多体シミュレーションの計算コスト

$$\begin{cases} \dfrac{d^2\vec{r}_i}{dt^2} = \vec{f}_i & O(N) \\ \text{(運動方程式)} & \\ \vec{f}_i = \displaystyle\sum_{j \neq i}^{N} G \frac{m_j(\vec{r}_j - \vec{r}_i)}{|r_j - r_i|^3} & O(N^2) \\ \text{(重力計算)} & \end{cases}$$




重力計算が全計算量の大半を占める。

# 高速化の手法

計算量を減らす

ツリー法、エバルト法、$P^3M$ 法、独立時間刻み法、、、

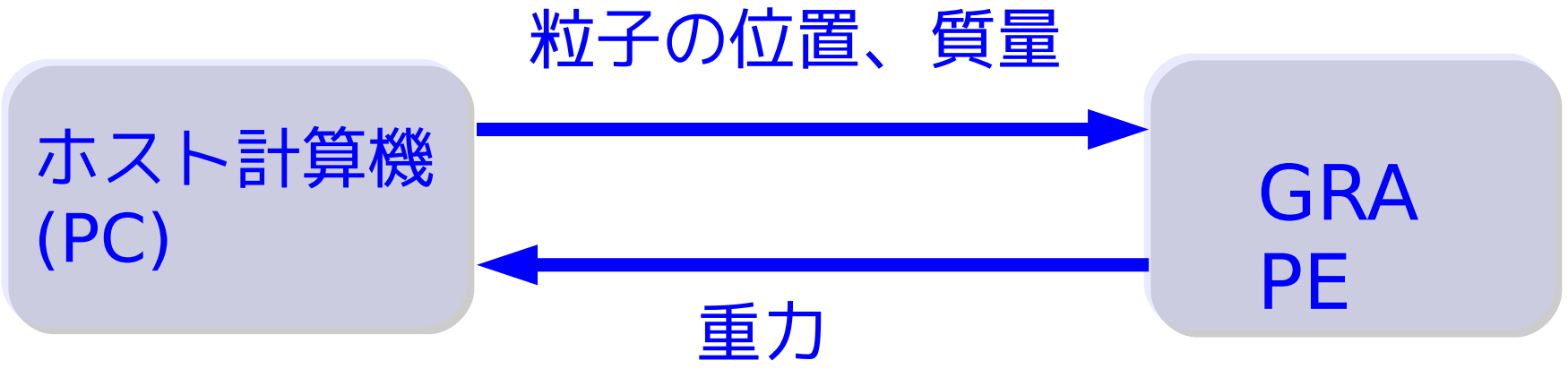
並列化

CPUコア並列、ノード並列、、、

計算機自体の高速化

クロックアップ、ベクトル化、専用化、
アクセラレータ、、、

# 多体問題専用計算機 GRAPE




重力計算に特化したハードウェア。

イントロダクション

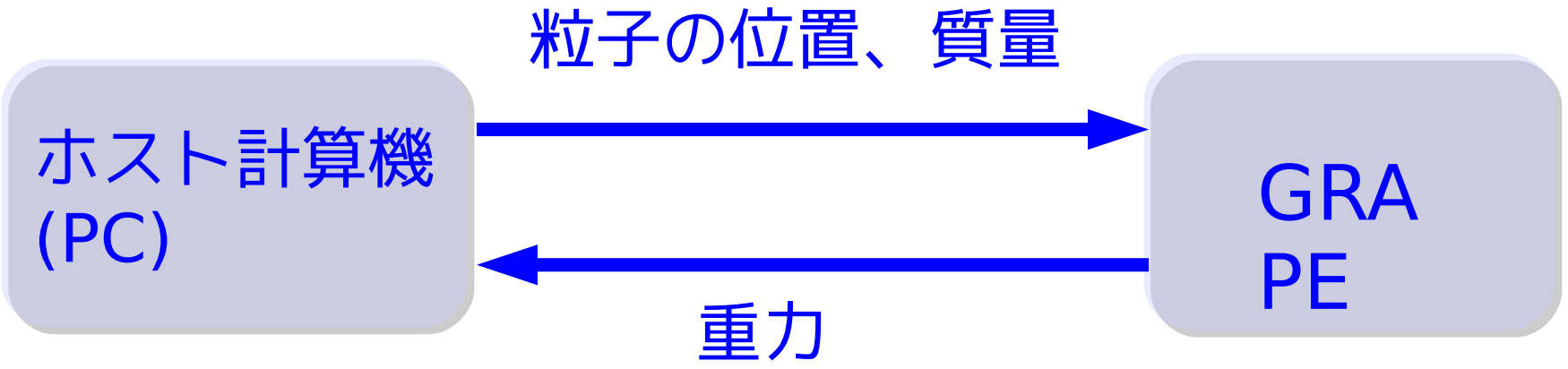
動作原理

専用計算機と最近のトレンド

基礎的な使用法(実際)

まとめ

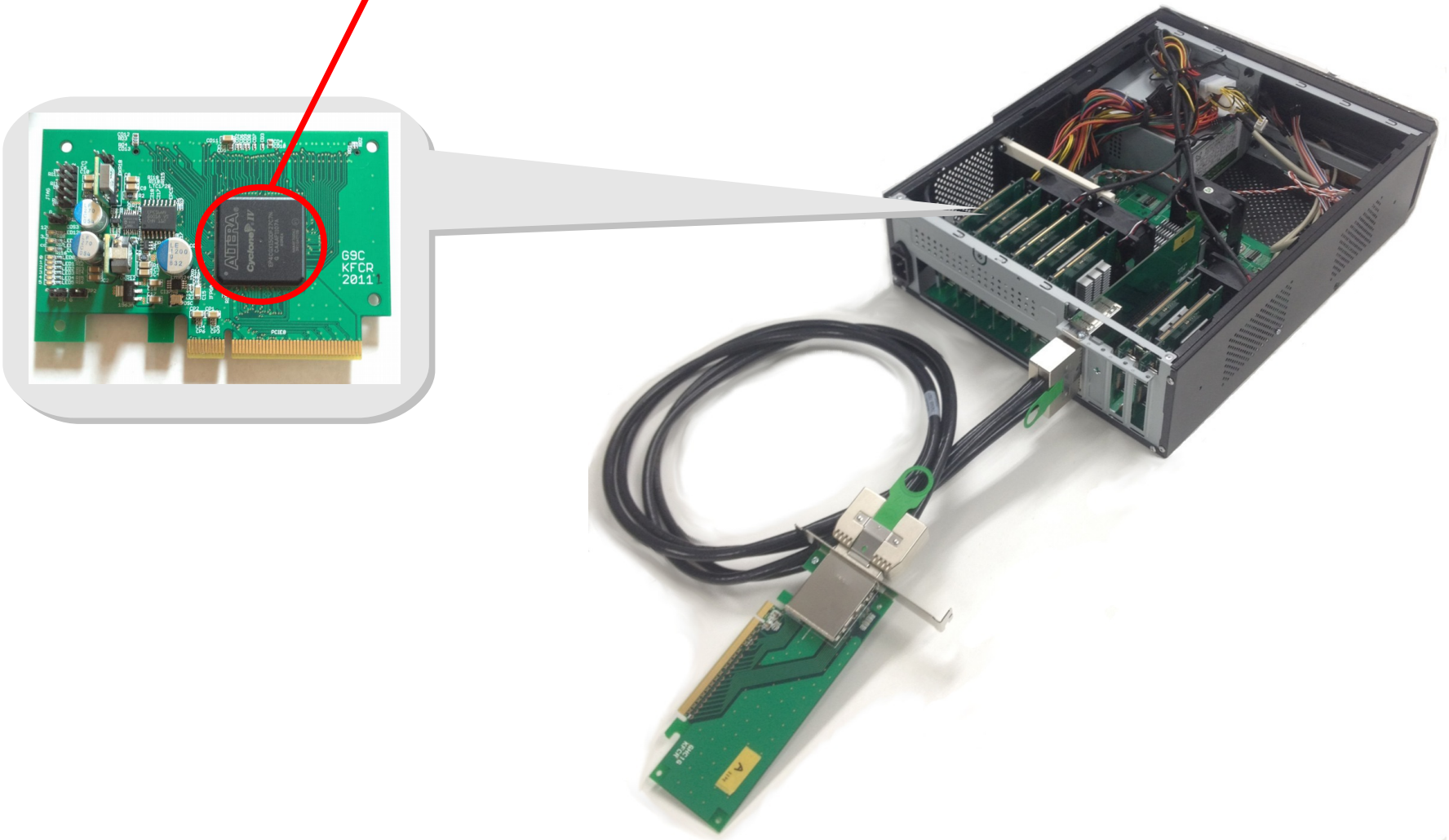
# 多体問題専用計算機 GRAPE



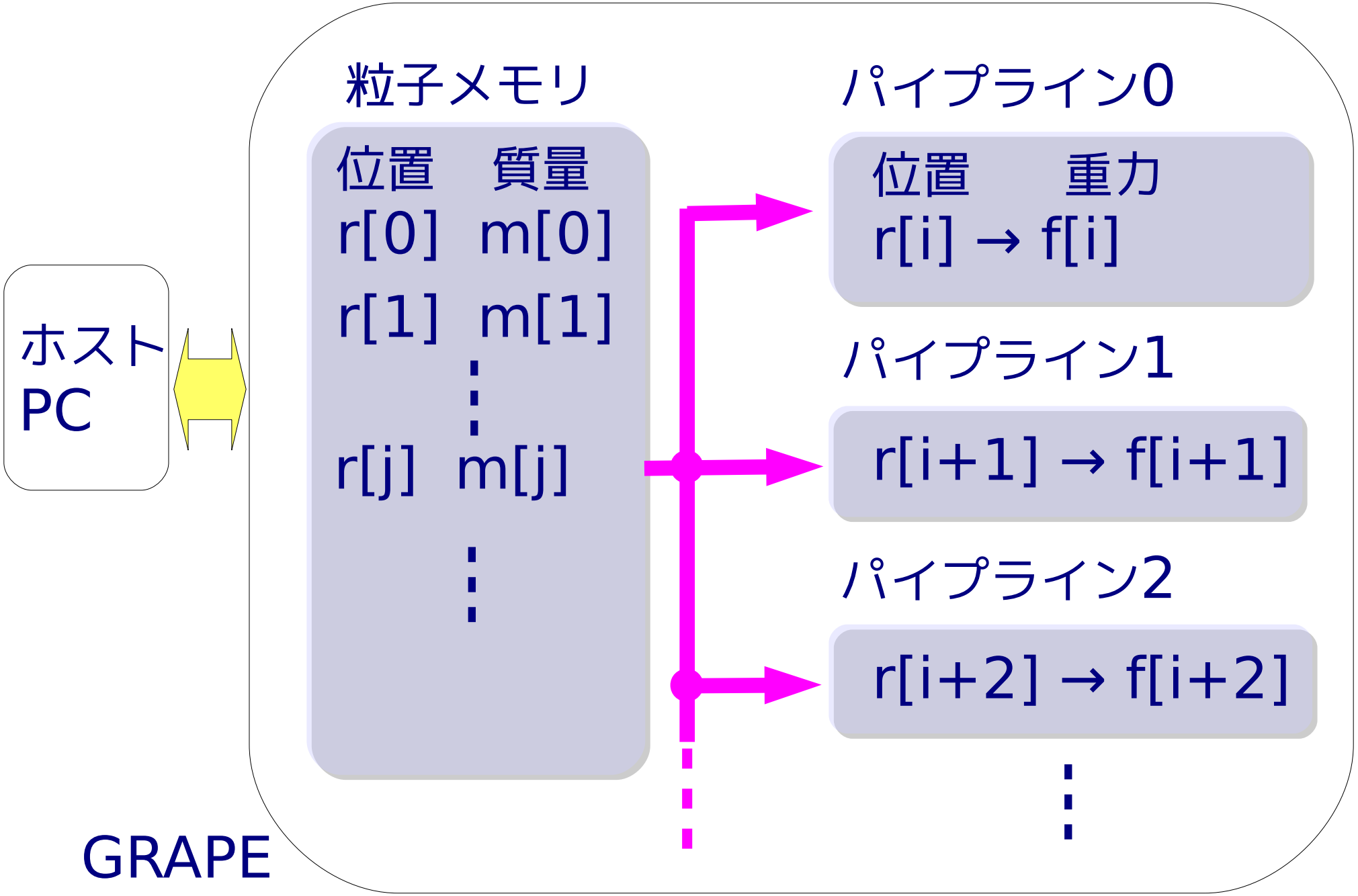

重力計算に特化したハードウェア。

# GRAPE-9 model 800/5000

重力パイプライン (GRAPE-5, GRAPE-6 互換)
を集積したFPGAを8-16個搭載。

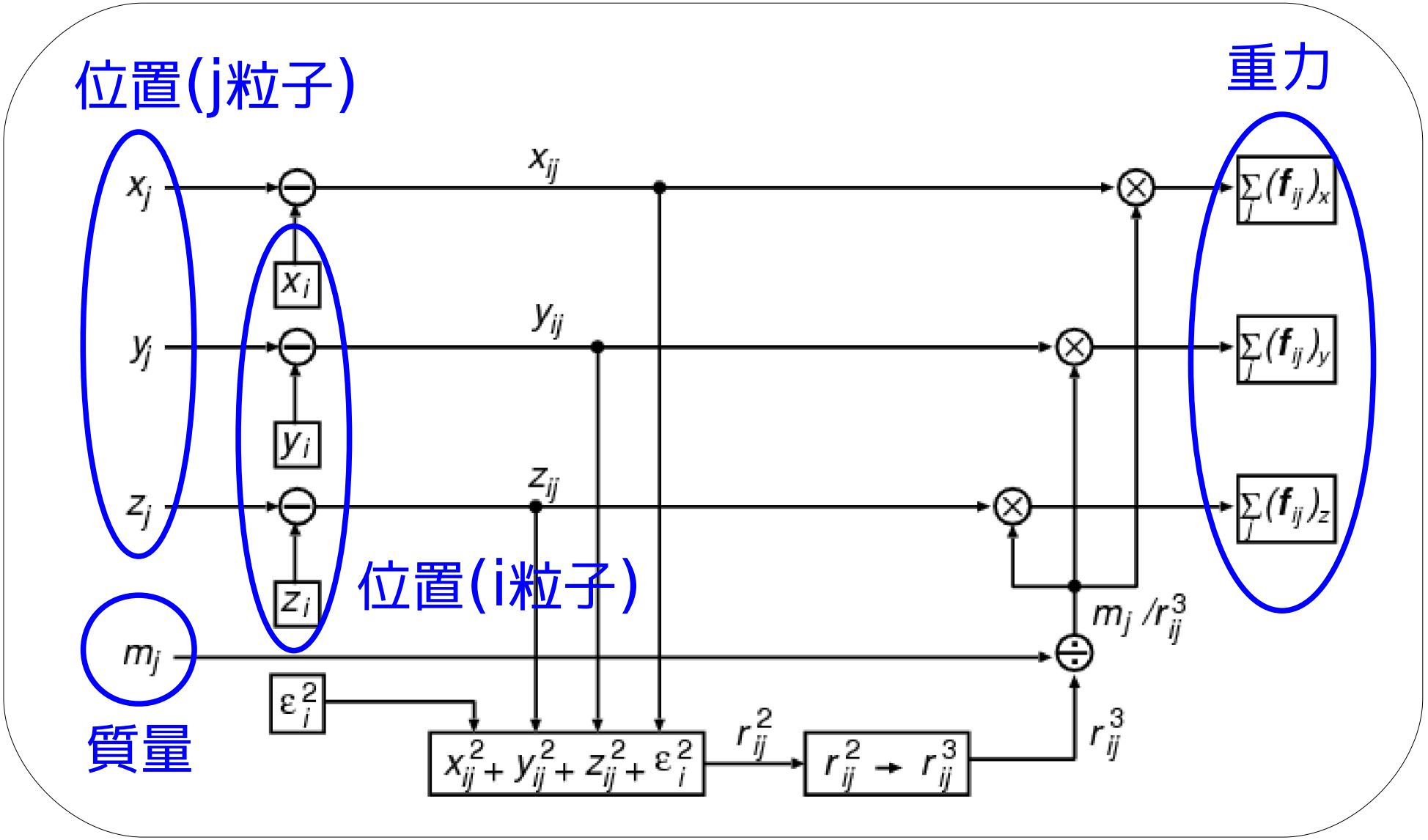


# 基本構成


粒子メモリ
位置　質量
r[0]　m[0]
r[1]　m[1]
r[j]　m[j]
パイプライン0
位置　重力
r[i] → f[i]
パイプライン1
r[i+1] → f[i+1]
パイプライン2
r[i+2] → f[i+2]
ホスト
PC
GRAPE

# 重力計算パイプライン

プログラムではなく、論理回路で演算を記述する。



# シミュレーションの手順

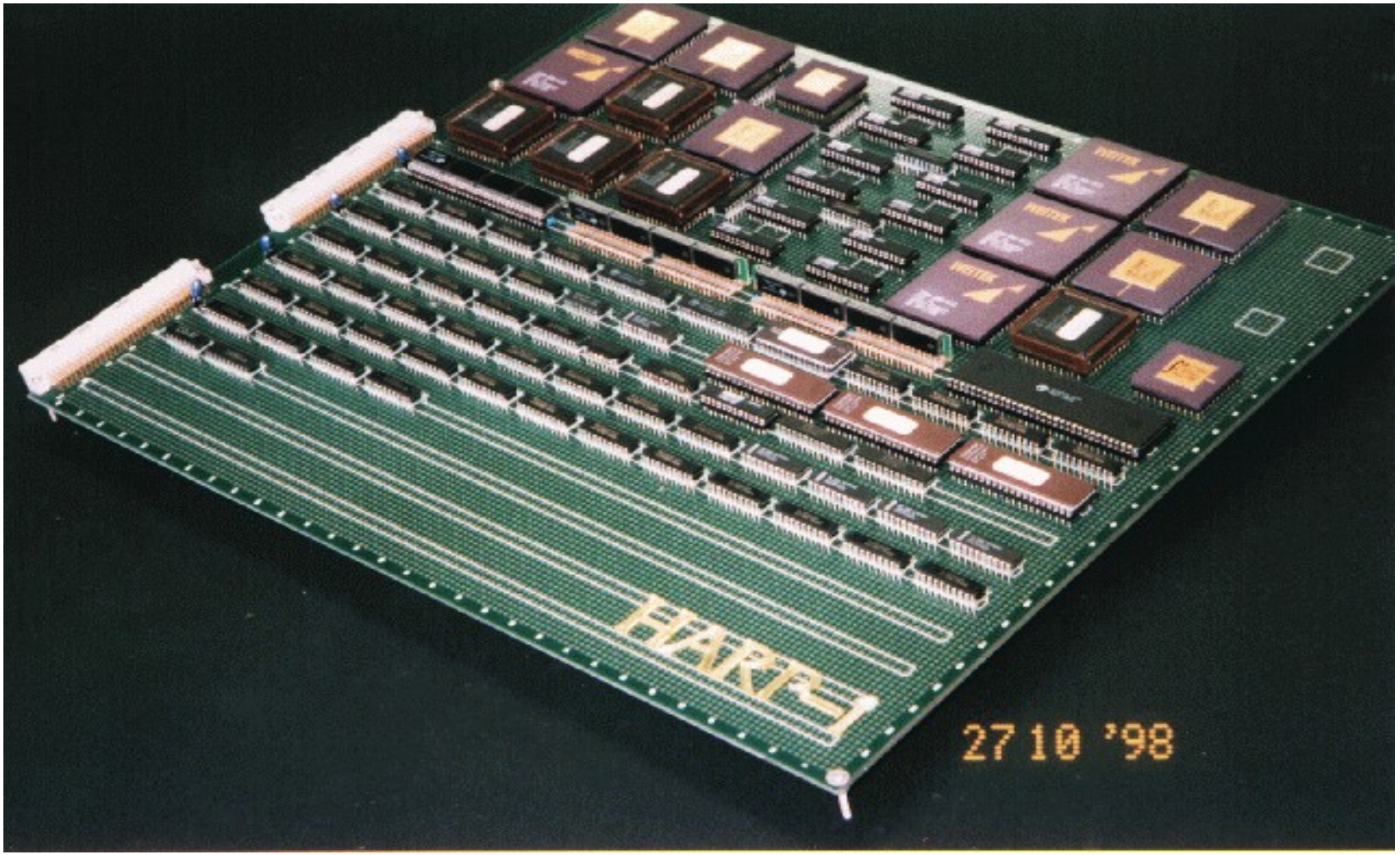
1. 重力を及ぼす側の全粒子(j粒子)の位置と質量を粒子メモリに送る。

2. 全粒子への重力が求まるまで以下を行う。
   1) 重力を受ける側の粒子(i粒子)の位置を各パイプライン内のメモリ(レジスタ)に送る。
   2) すべての j粒子との重力を各パイプラインで計算し積算する。
   3) 求まったi粒子への重力を各パイプライン内のメモリ(レジスタ)から送り返す。

3. 求まった重力を用いて運動方程式を積分し、次の位置を求める。1. に戻る。

# 初期のGRAPEボード

HARP-1(1993)

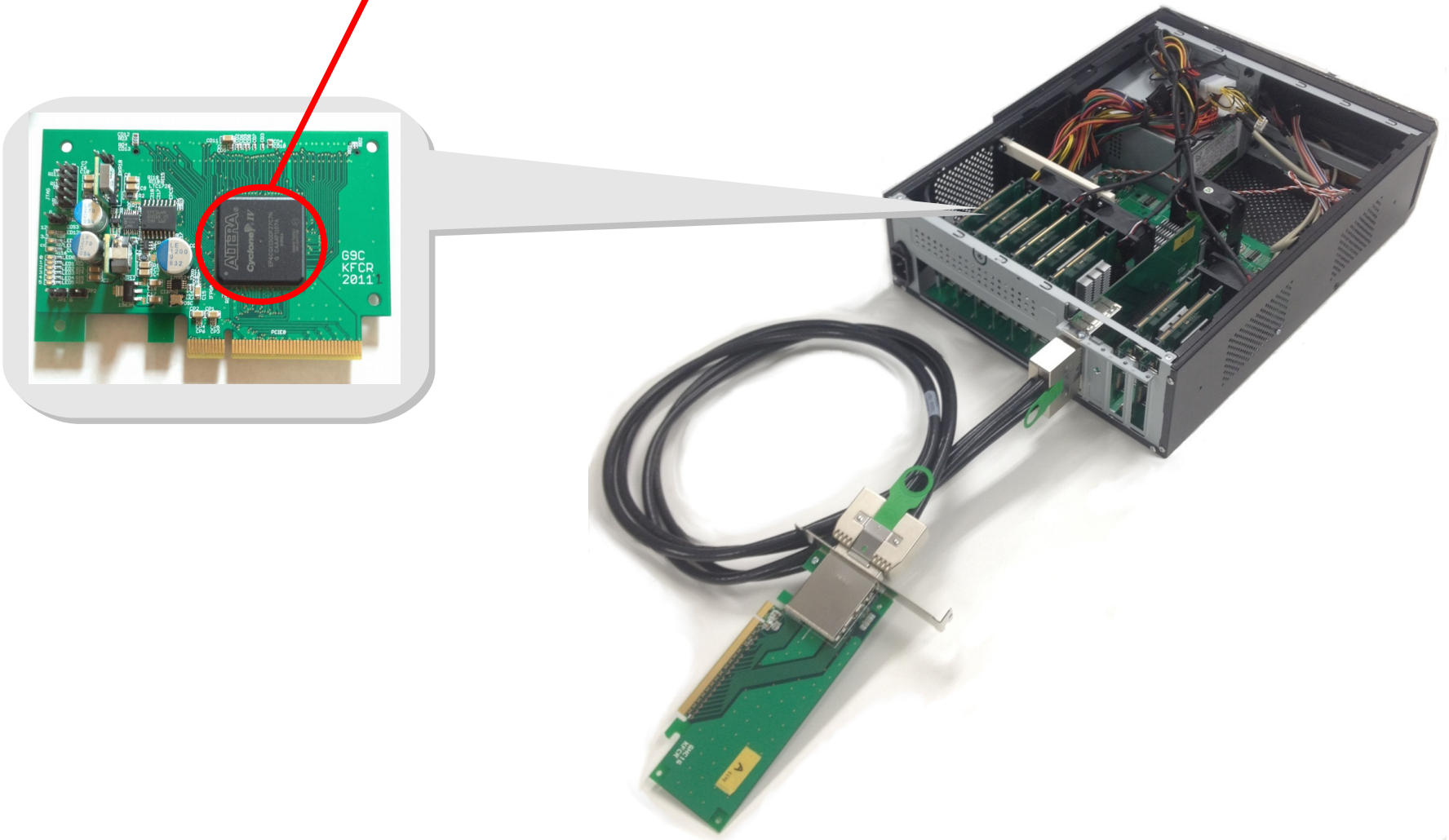


# 初期のGRAPEボード

GRAPE-5, GRAPE-6 (2005頃? at MUV)

# GRAPE-9 model 800/5000

重力パイプライン (GRAPE-5, GRAPE-6 互換)
を集積したFPGAを8-16個搭載。



イントロダクション

動作原理

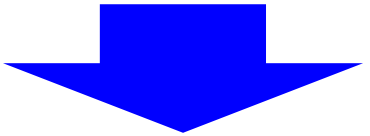
専用計算機と最近のトレンド

基礎的な使用法(実際)

まとめ

# 汎用機よりも速い理由

- 計算対象があらかじめ決まっている。
- 計算対象に高い並列性がある。



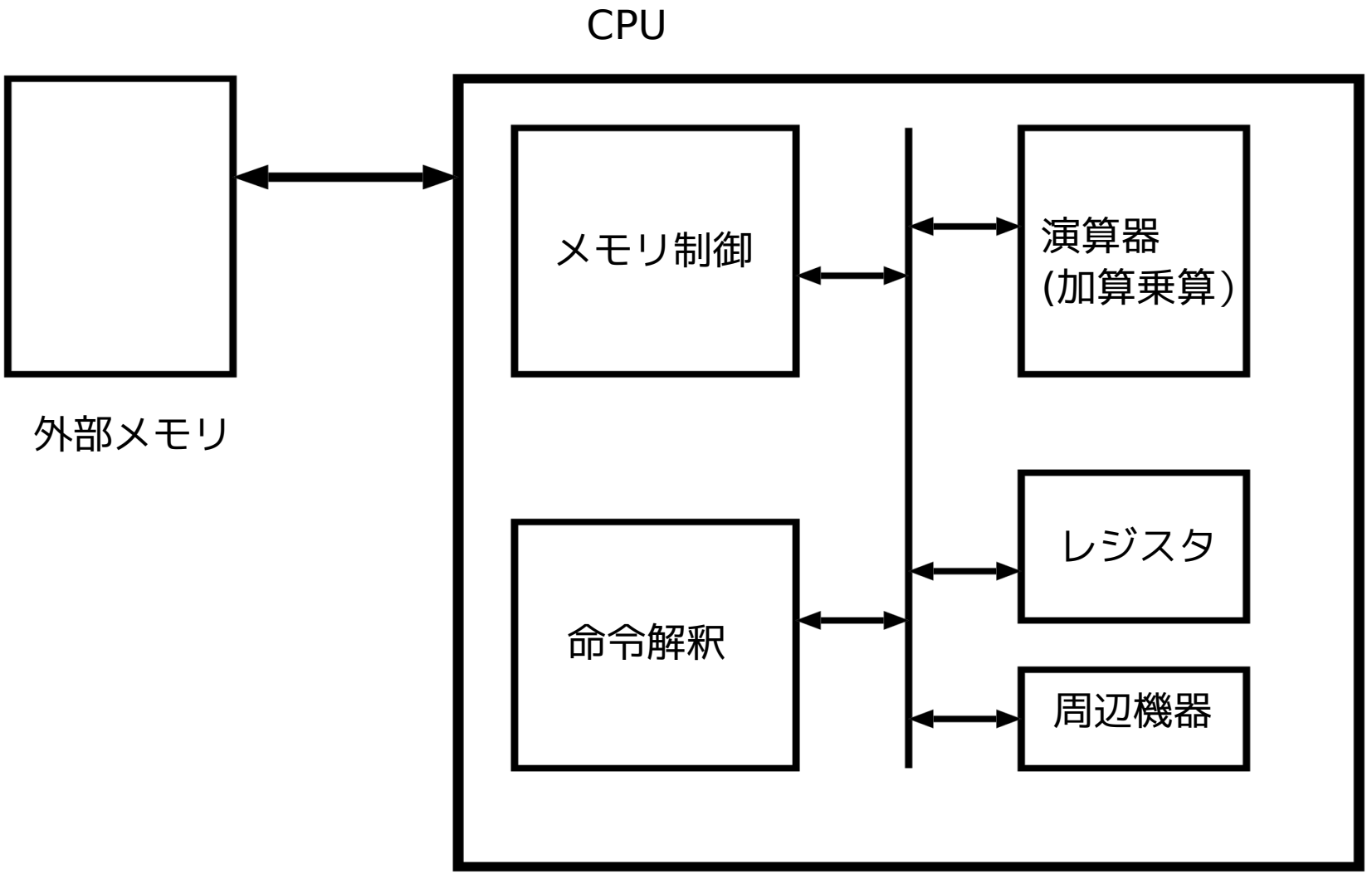
命令解釈部・メモリ制御部が必要ない

その分を演算回路(専用パイプライン)に割くことができる。

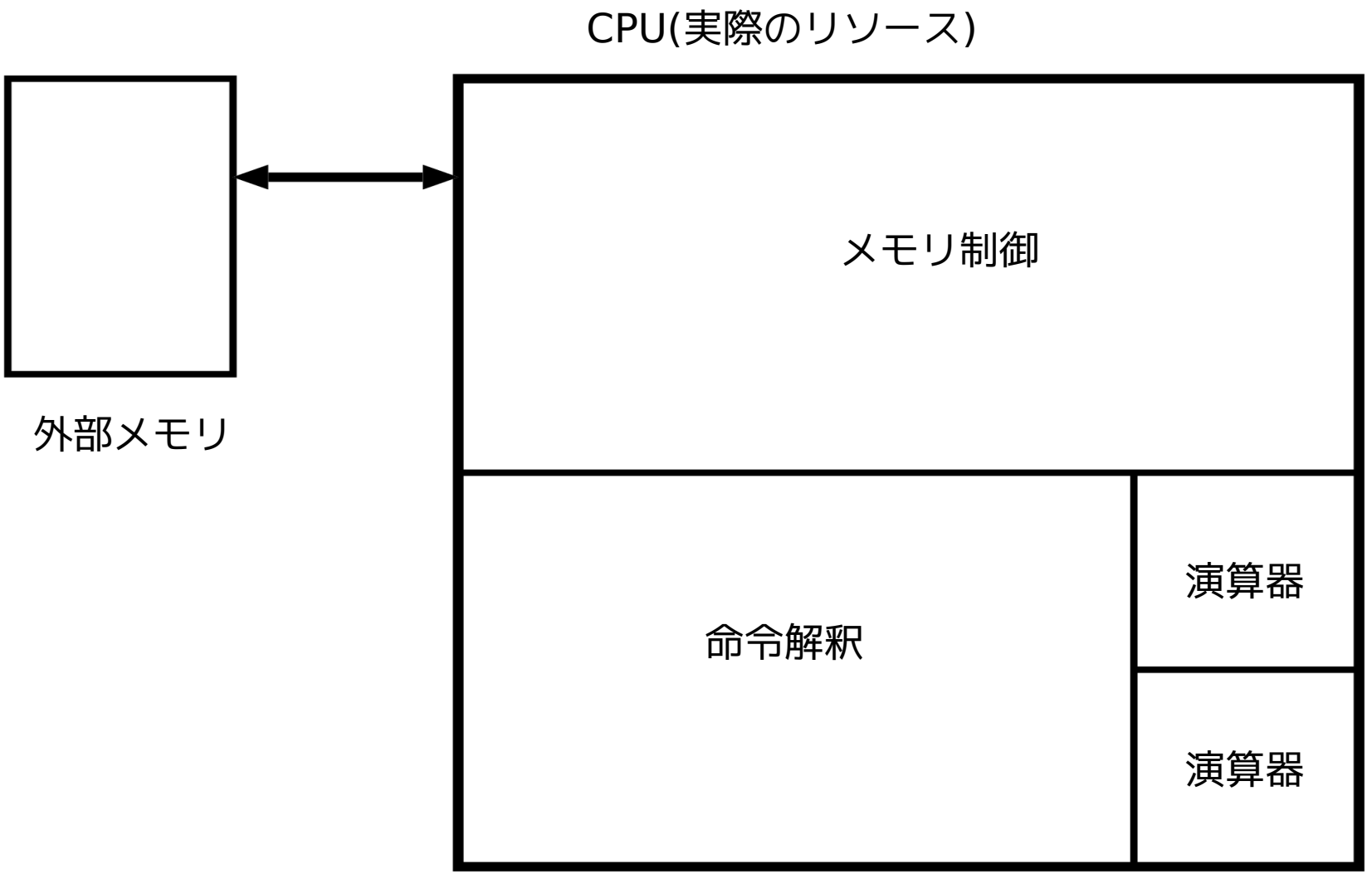
数値フォーマットの最適化

例) 17-bit 対数フォーマット

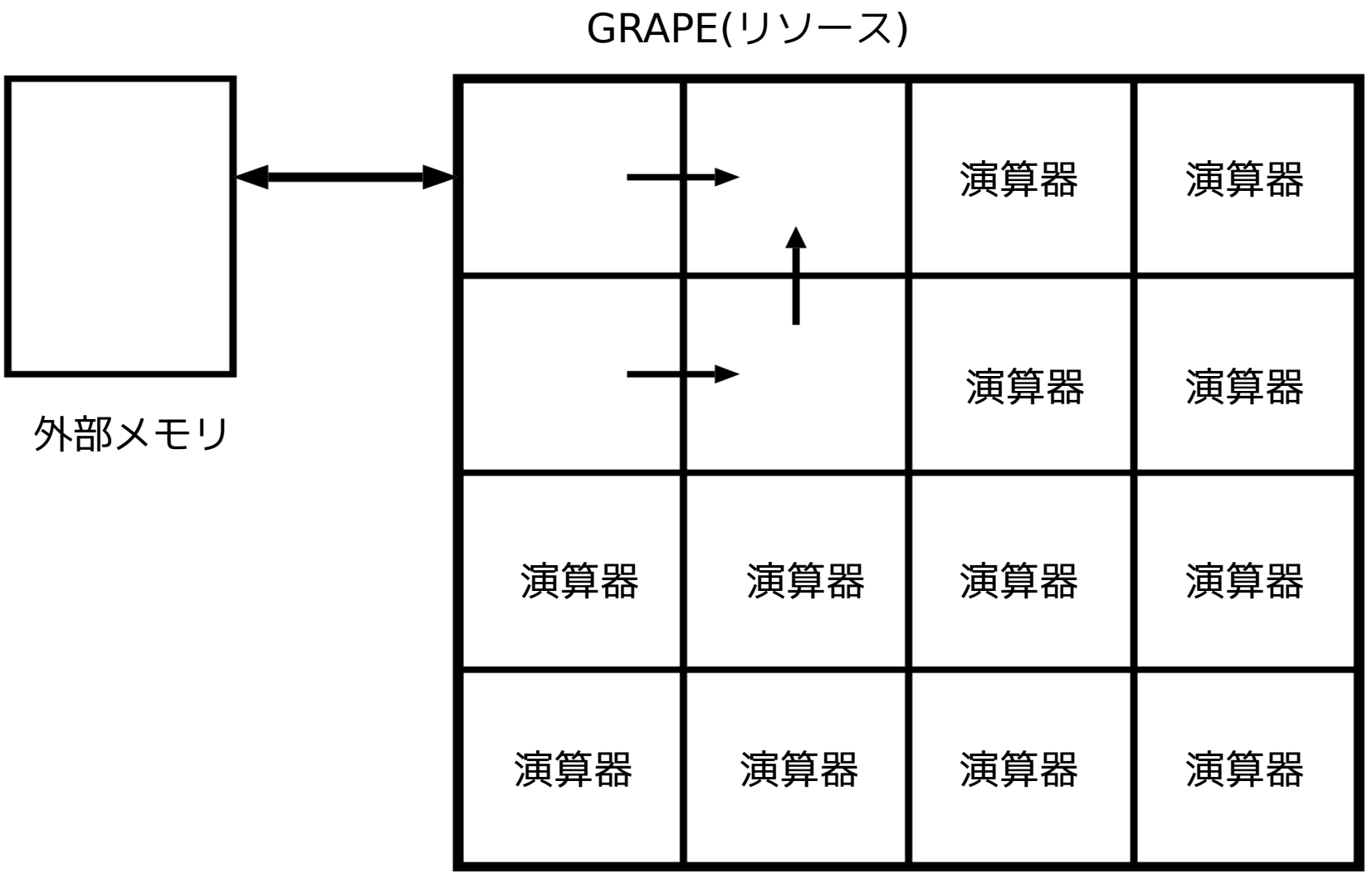
# 汎用機(CPU)の構造



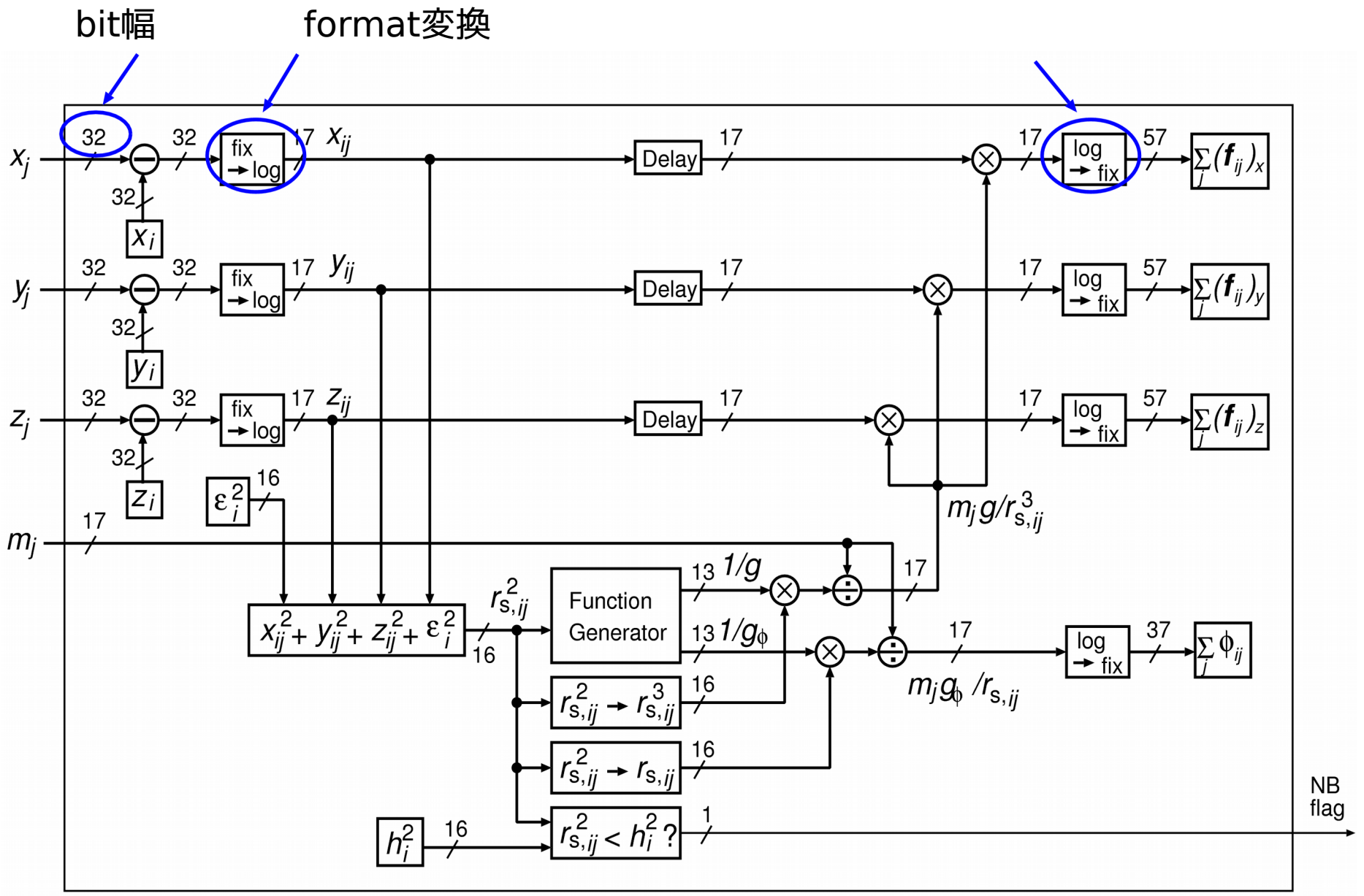
# 汎用機(CPU)の構造（つづき)



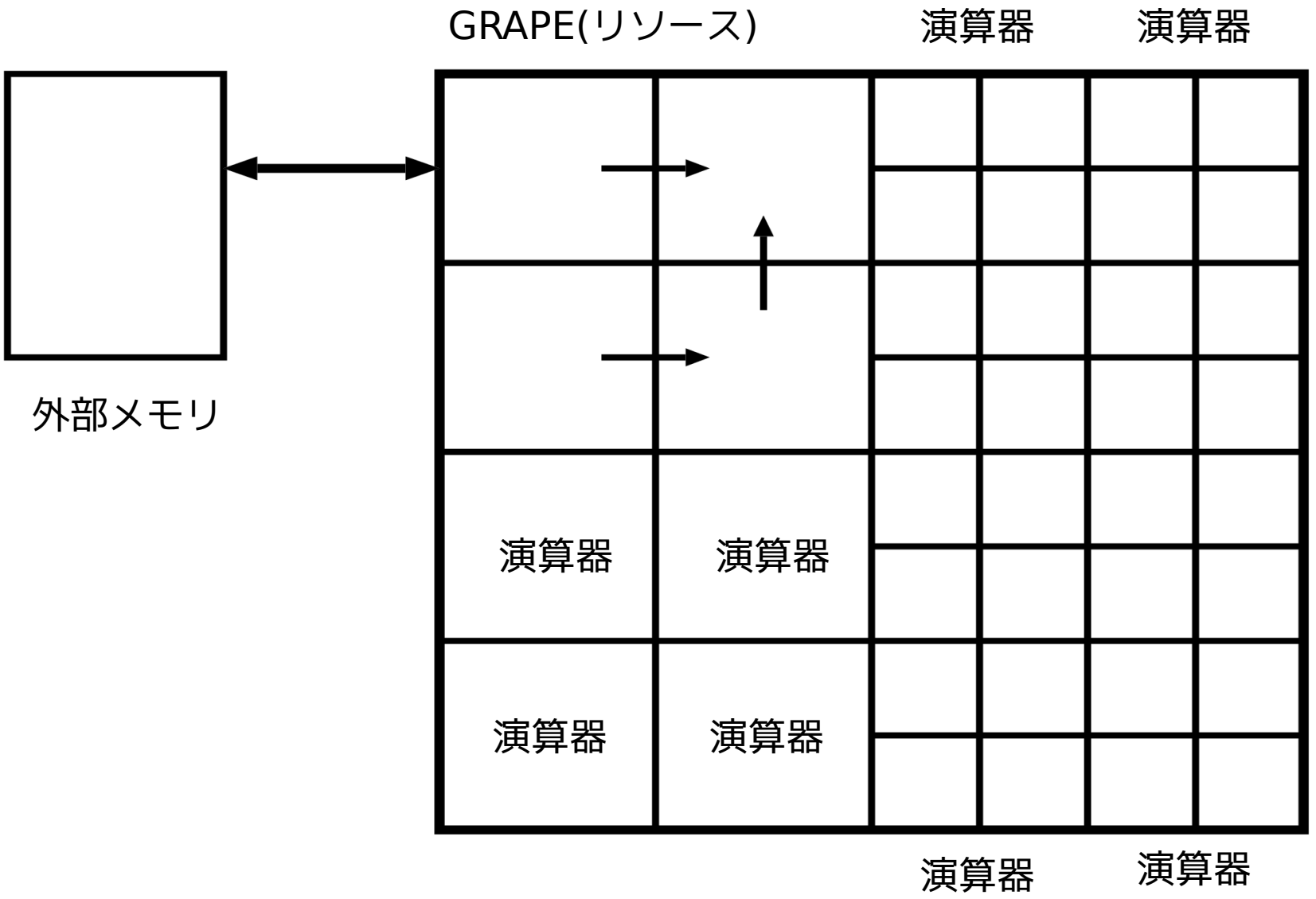
# 専用計算機


GRAPE(リソース)
外部メモリ
演算器
演算器
演算器
演算器
演算器
演算器
演算器
演算器
演算器
演算器
演算器
演算器

# GRAPE-7のパイプライン



# 専用計算機(つづき)

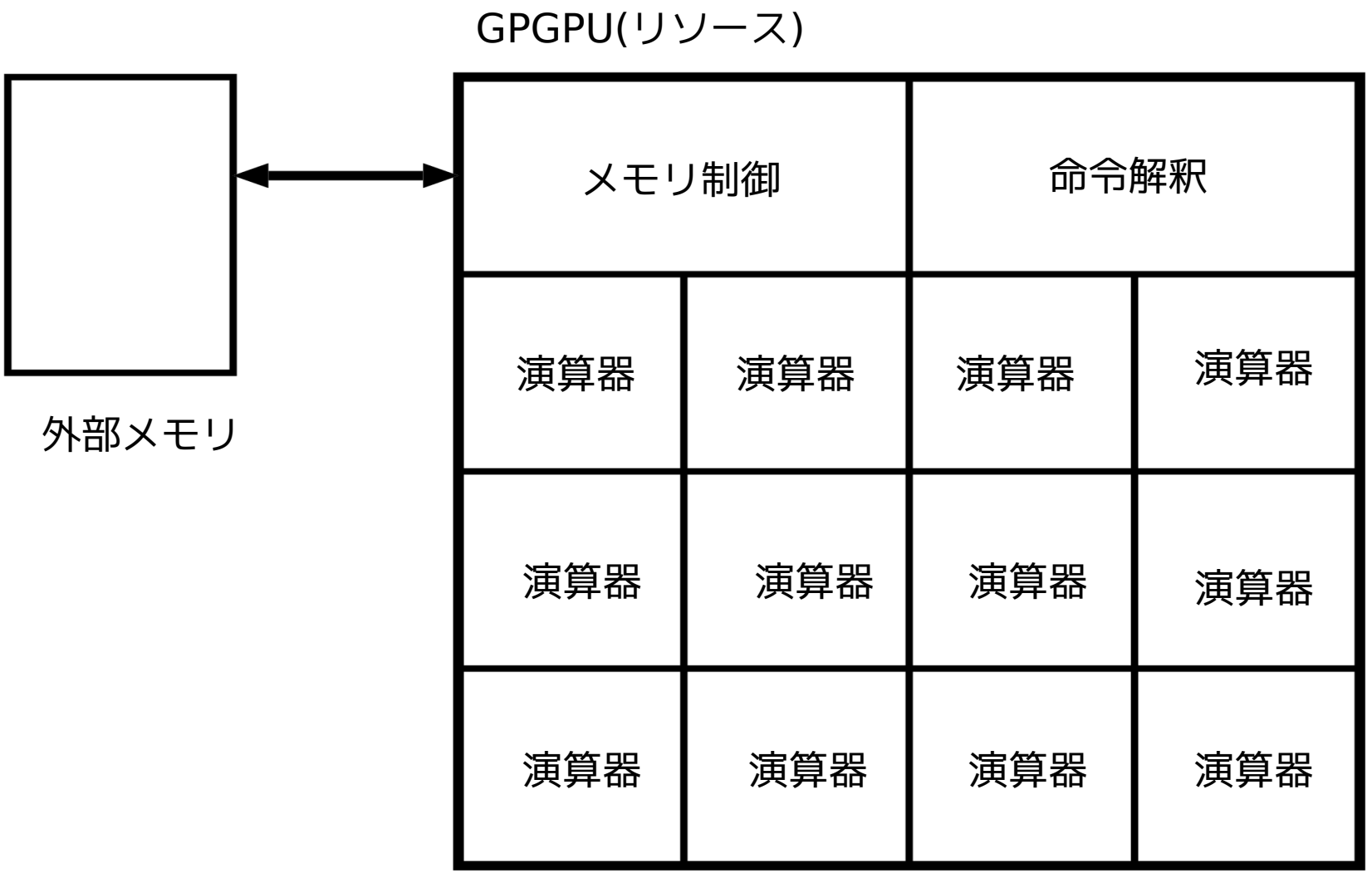


# 最近の計算機のトレンド

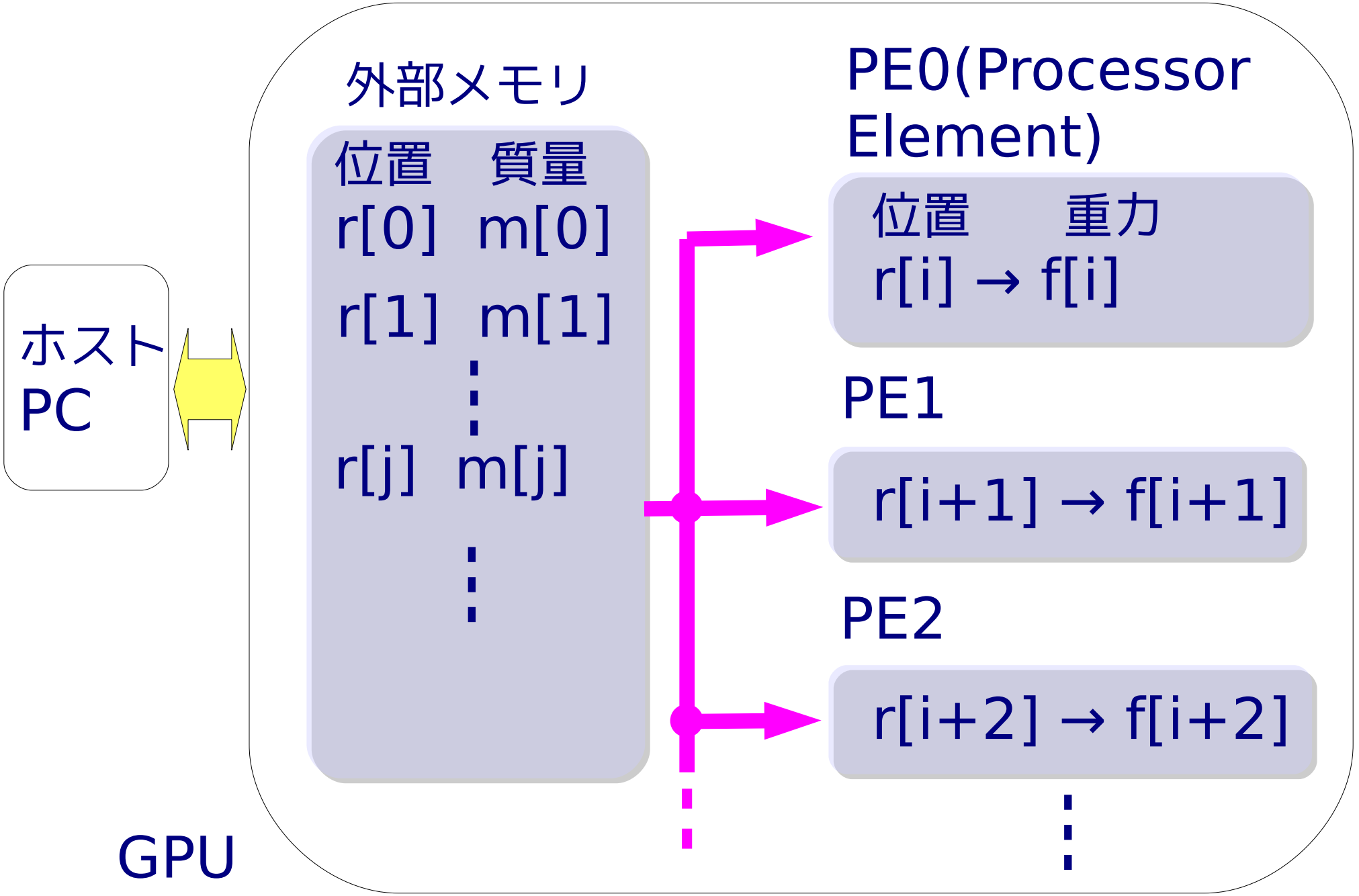
クロックを上げられないので並列度を上げる。

- マルチコア、メニーコア
  - Xeon (4-28コア)、Xeon Phi (60コア)
- ベクトル演算器
  - SSE (128bit)、AVX (256/512bit)
- SIMD 型アクセラレータ
  - GPGPU

# 汎用アクセラレータ(GPGPU)



# 基本構成(GPU)


外部メモリ
位置　質量
r[0]　m[0]
r[1]　m[1]
r[j]　m[j]
PE0(Processor Element)
位置　重力
r[i] → f[i]
PE1
r[i+1] → f[i+1]
PE2
r[i+2] → f[i+2]
ホスト PC
GPU

# シミュレーションの手順(GPU)

1. 重力を及ぼす側の全粒子(j粒子)の位置と質量を外部メモリに送る。

2. 全粒子への重力が求まるまで以下を行う。
   1) 重力を受ける側の粒子(i粒子)の位置を各PE内のメモリ(レジスタ)に送る。
   2) すべての j粒子との重力を各PEでプログラムに基づいて計算し積算する。
   3) 求まったi粒子への重力を各PE内のメモリ(レジスタ)から送り返す。

3. 求まった重力を用いて運動方程式を積分し、次の位置を求める。1. に戻る。

イントロダクション

動作原理

専用計算機と最近のトレンド

**基礎的な使用法(実際)**

まとめ

# 基礎的な計算の手順

1. 重力を及ぼす側の全粒子(j粒子)の位置と質量を粒子メモリに書き込む。

2. 全粒子への重力が求まるまで以下を行う。

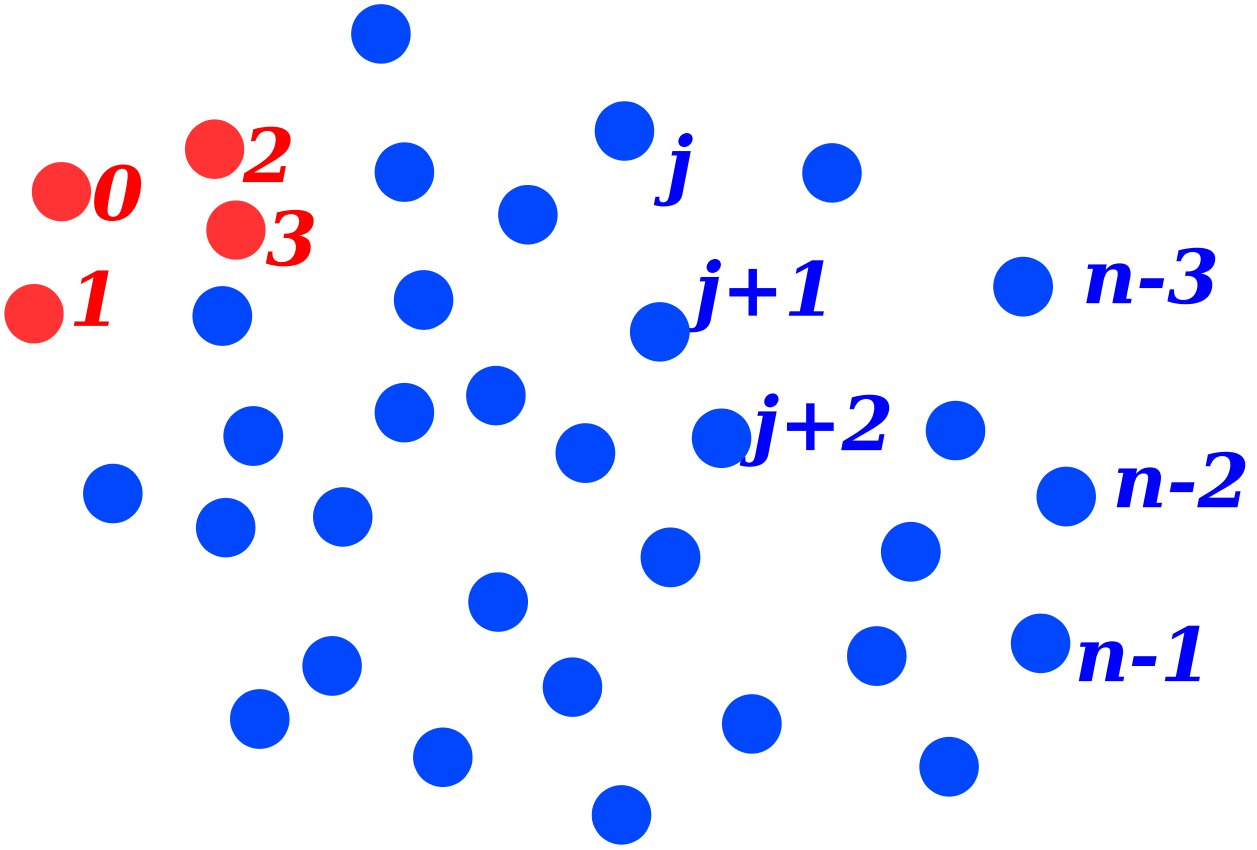
    1) 重力を受ける側の粒子(i粒子)の位置を各パイプライン内のレジスタに書き込む。

    2) 計算開始信号を送る。

    3) 計算終了を待つ。

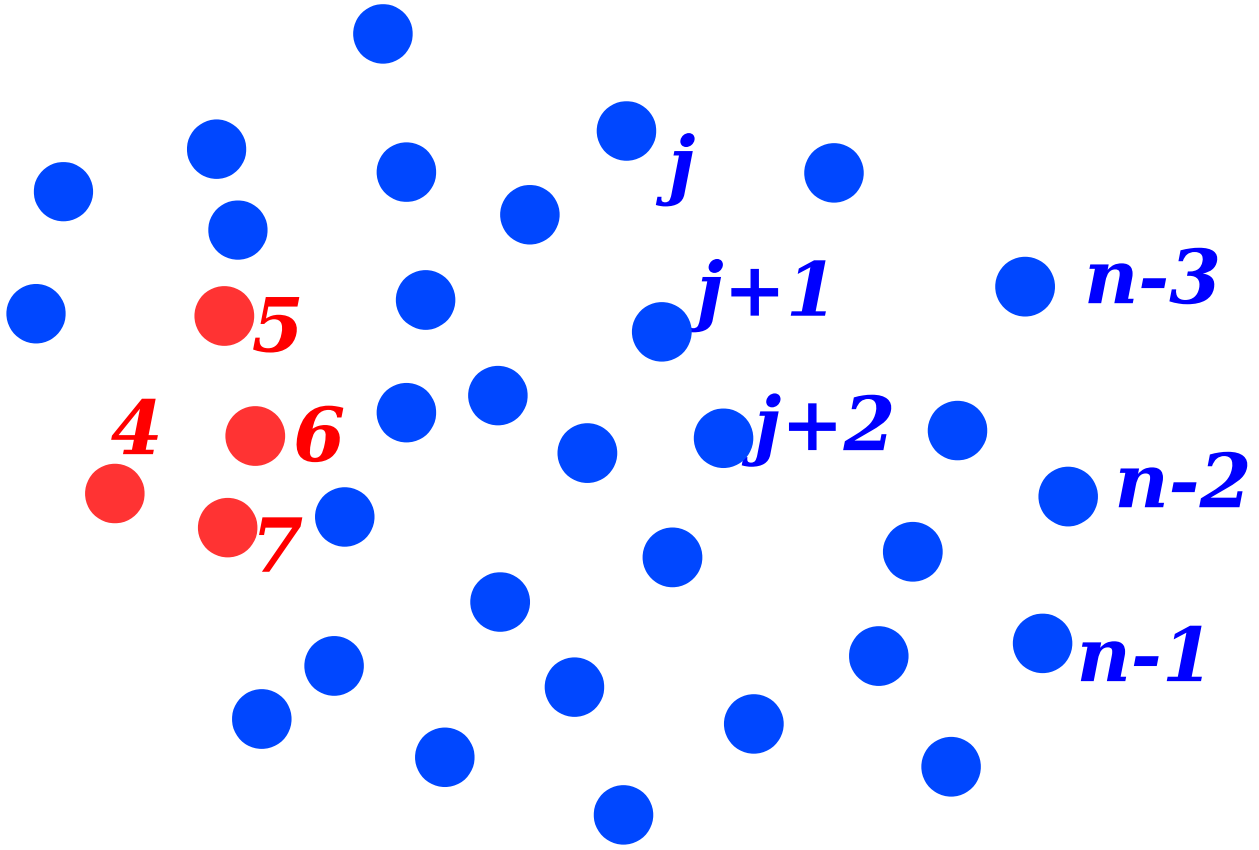
    4) 求まったi粒子への重力を各パイプライン内のレジスタから読み出す。

# 基礎的な計算の手順



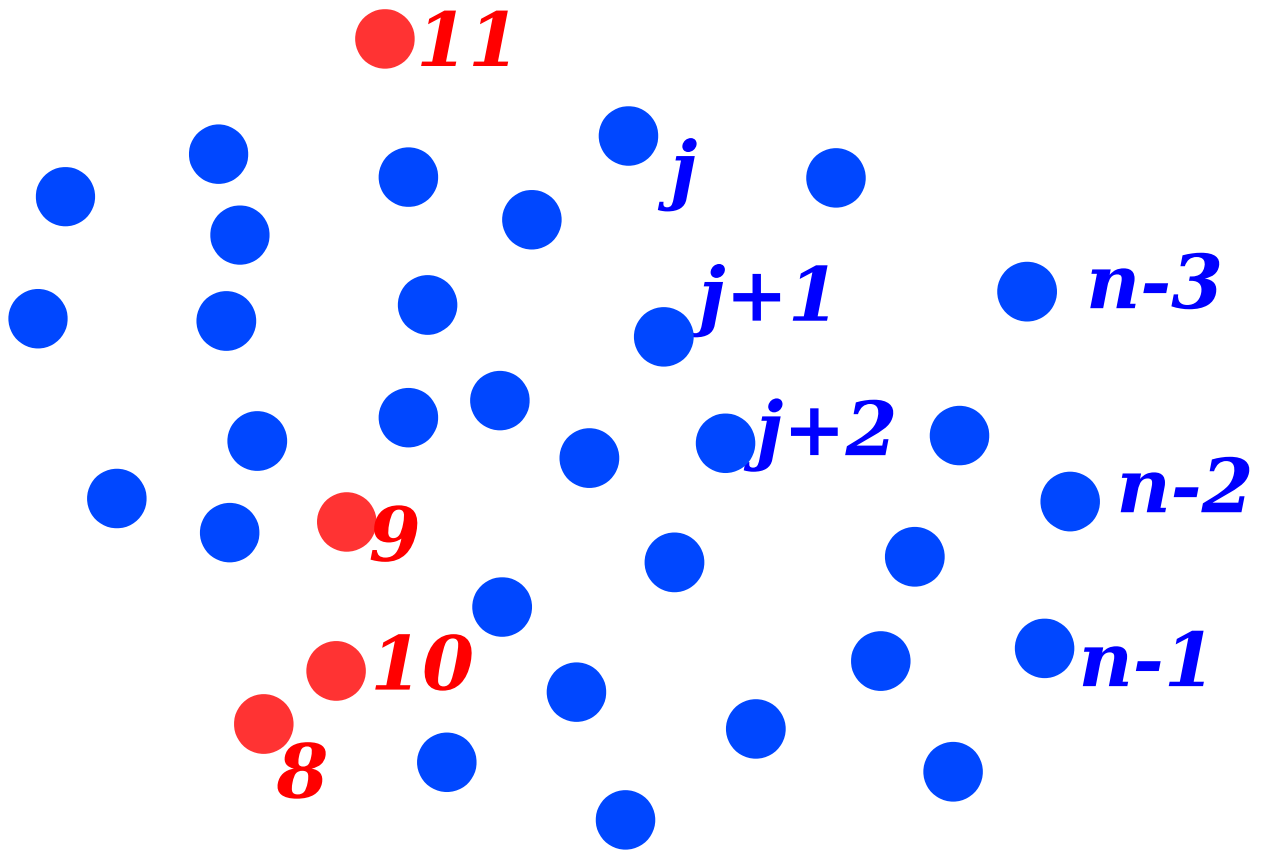

```
for (i=0; i<n; i+=4) {
    calc_force_on(i..i+3);
}
```

# 基礎的な計算の手順



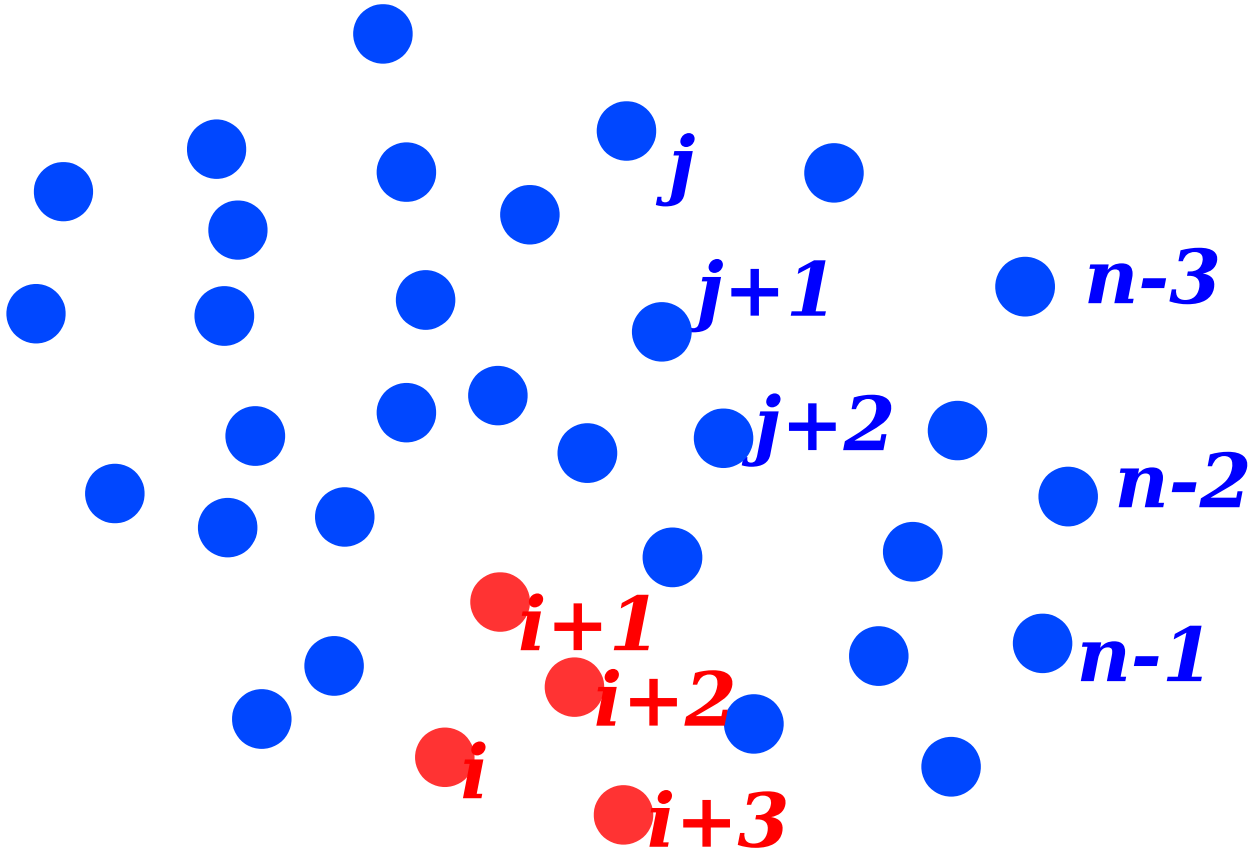

```
for (i=0; i<n; i+=4) {
    calc_force_on(i..i+3);
}
```

# 基礎的な計算の手順



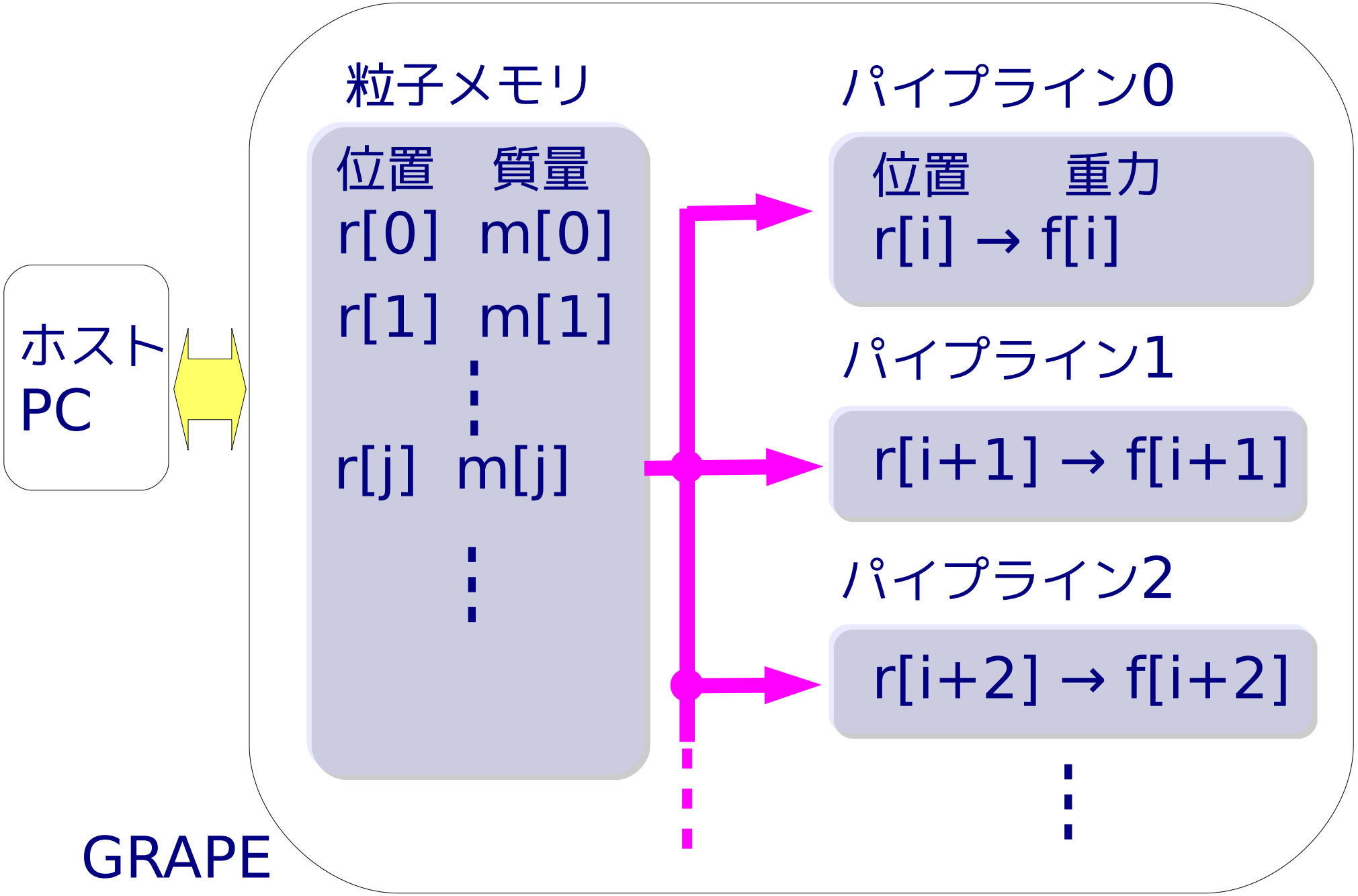

```
for (i=0; i<n; i+=4) {
    calc_force_on(i..i+3);
}
```

# 基礎的な計算の手順




```
for (i=0; i<n; i+=4) {
    calc_force_on(i..i+3);
}
```

# 基本構成


粒子メモリ
位置　質量
r[0]　m[0]
r[1]　m[1]
r[j]　m[j]
パイプライン0
位置　重力
r[i] → f[i]
パイプライン1
r[i+1] → f[i+1]
パイプライン2
r[i+2] → f[i+2]
ホスト
PC
GRAPE

# コーディングの例 (直接計算法)

```
npipes = g5_set_number_of_pipelines();
for (step = 0; step < final_step; step++) {
    g5_open();
    g5_set_range(xmin, xmax, mmin);
    g5_set_xj(0, n, x);
    g5_set_mj(0, n, mj);
    g5_set_eps_to_all(eps);
    g5_set_n(n);
    for (i = 0; i < n; i += npipes) {
        if (i + npipes > n) npipes = n - i;
        g5_calculate_force_on_x(xj + i,
          acc + i, pot + i, npipes);
    }
    g5_close();
    // orbital integration
    ............
}
```

# 位置、質量のスケーリング

```
g5_set_range(xmin, xmax, mmin)
```

位置座標の上限、下限

質量の分解能

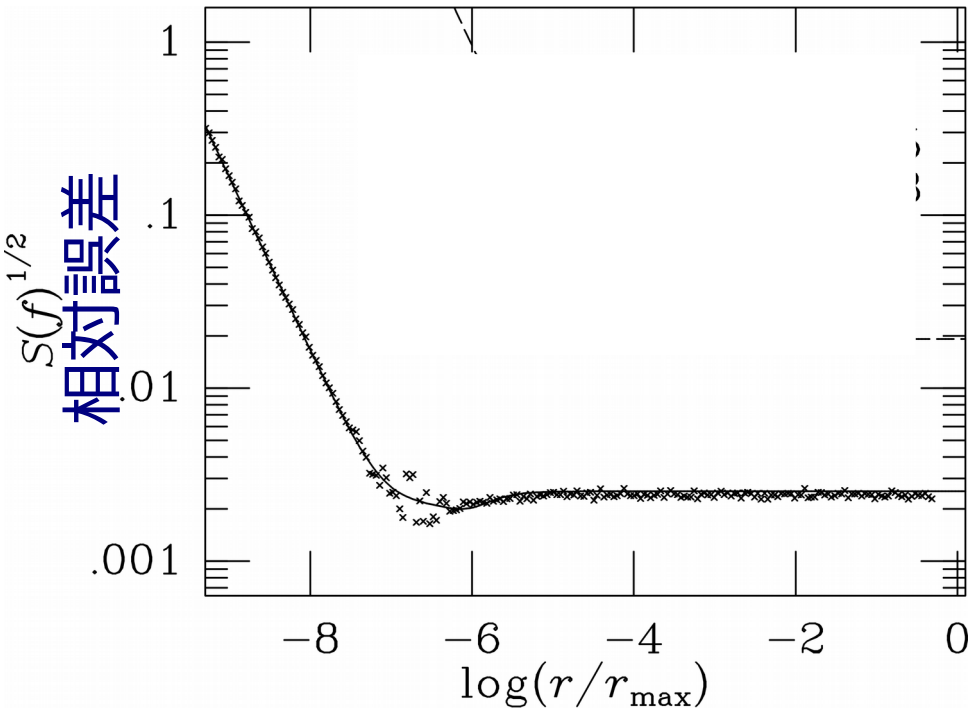
座標の分解能は

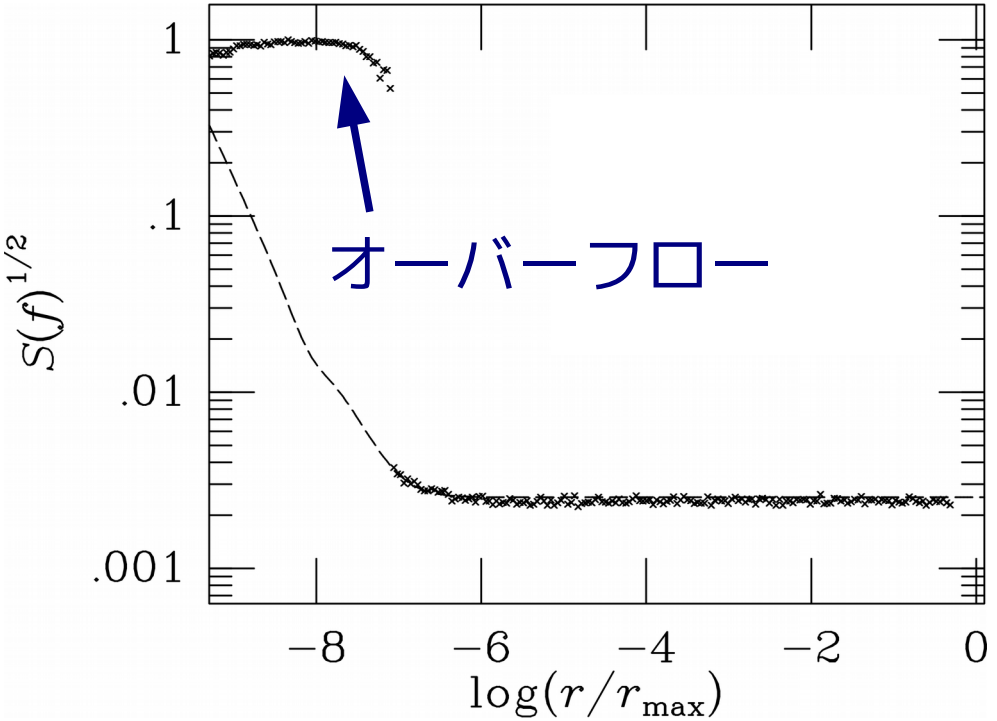
約 $10^{-10}$ x (xmax - xmin)

ソフトニング値の下限は

$$\epsilon \gtrsim 10^{-7} \times \left( \frac{m}{mmin} \right)^{1/2} (xmax - xmin)$$

# 位置、質量のスケーリング (続き)




m/ mmin=1

ϵ / rmax=$10^{-6}$

m/ mmin=1

ϵ / rmax=$10^{-8}$

小さすぎるソフトニング値

イントロダクション

動作原理

専用計算機と最近のトレンド

基礎的な使用法(実際)

まとめ

# まとめ

+ GRAPEの動作原理
  - プログラムではなくハードウェアで演算を記述する。
  - 対象を限定することで高速化。

+ GRAPEの使用法
  ホスト計算機上の API を介して使用する。

+ 最近の計算機
  用途によっては GRAPE 的な手法が採用されつつある。