

新しい高性能科学技術計算パラダイムに向けて： Large Scale Reconfigurable Data Pathを利用した 科学技術計算

本田，宏明
九州大学情報基盤センター

<http://hdl.handle.net/2324/9137>

出版情報：SLRC プレゼンテーション，2006-07-19
バージョン：
権利関係：



新しい高性能科学技術 計算パラダイムに向けて

～*Large Scale Reconfigurable Data Path*
を利用した科学技術計算～

国立大学法人 九州大学

情報基盤センター

本田宏明

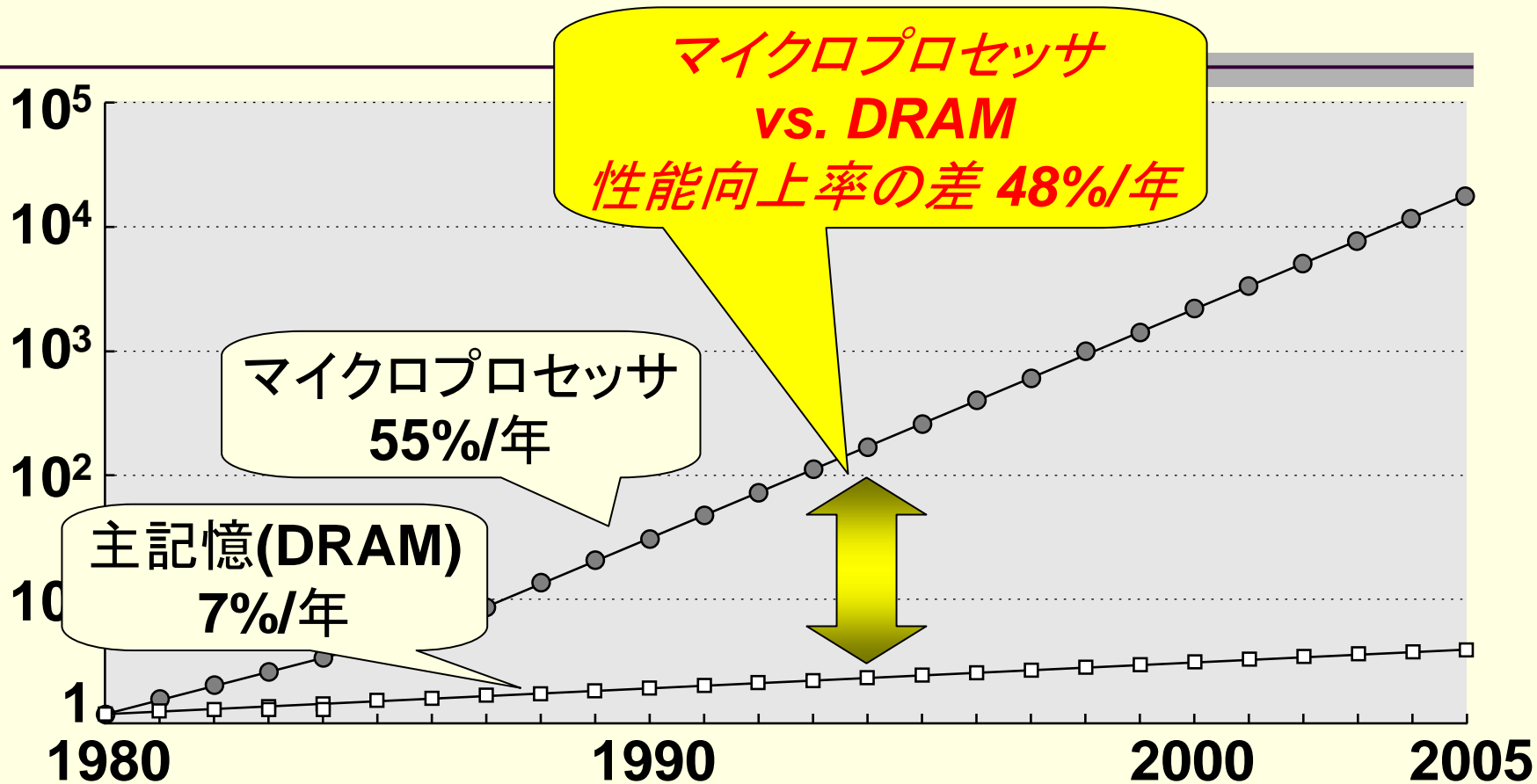
honda@cc.kyushu-u.ac.jp

Agenda

- はじめに
 - Large Scale Reconfigurable Data Path(LSRDP)
- LSRDP に対する種々の計算の適用可能性
 - Cramer の公式
 - 分子軌道法電子反発積分
 - 適用可能性
- LSRDP シミュレータの開発, 計算実験
 - シミュレータ開発
 - 電子反発積分の計算
- 研究の広がり

「Memory Wall」問題

性能向上率



【出典】J.L. Hennessy, D.A. Patterson, *Computer Architecture: A Quantitative Approach 3rd Edition*, Fig. 5.2

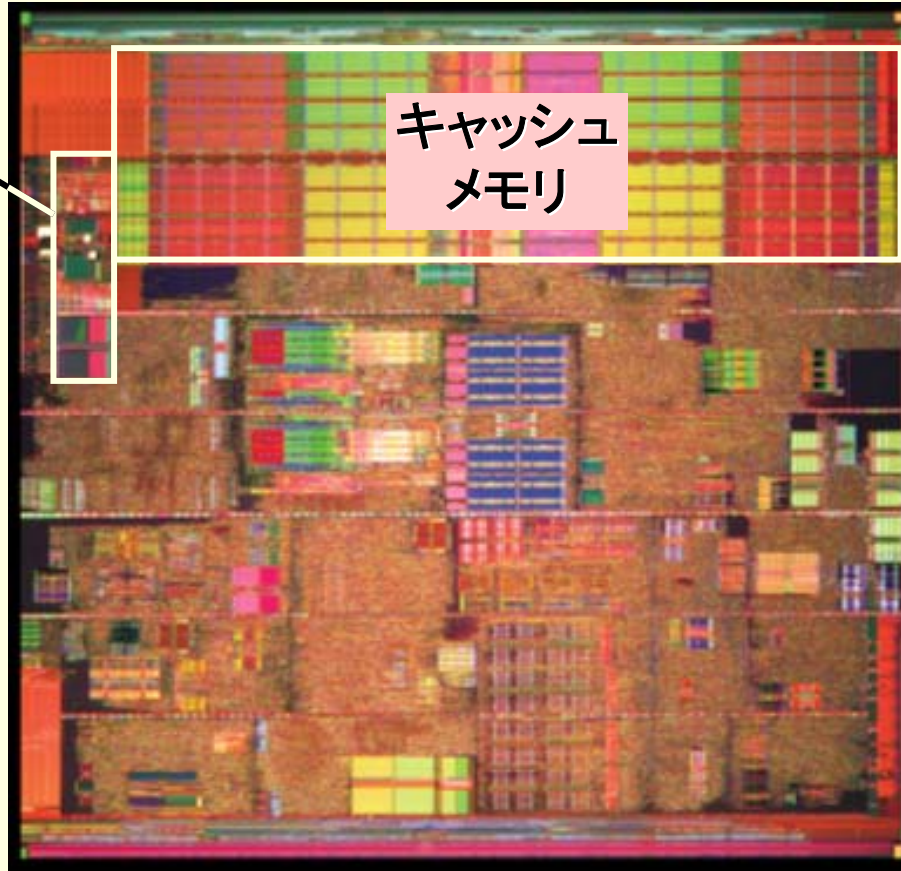
対処法

1. データアクセス遅延を削減, 隠蔽
2. データアクセス回数自身を削減

現代のプロセッサの構成

浮動小数点
演算器

キャッシュ
メモリ



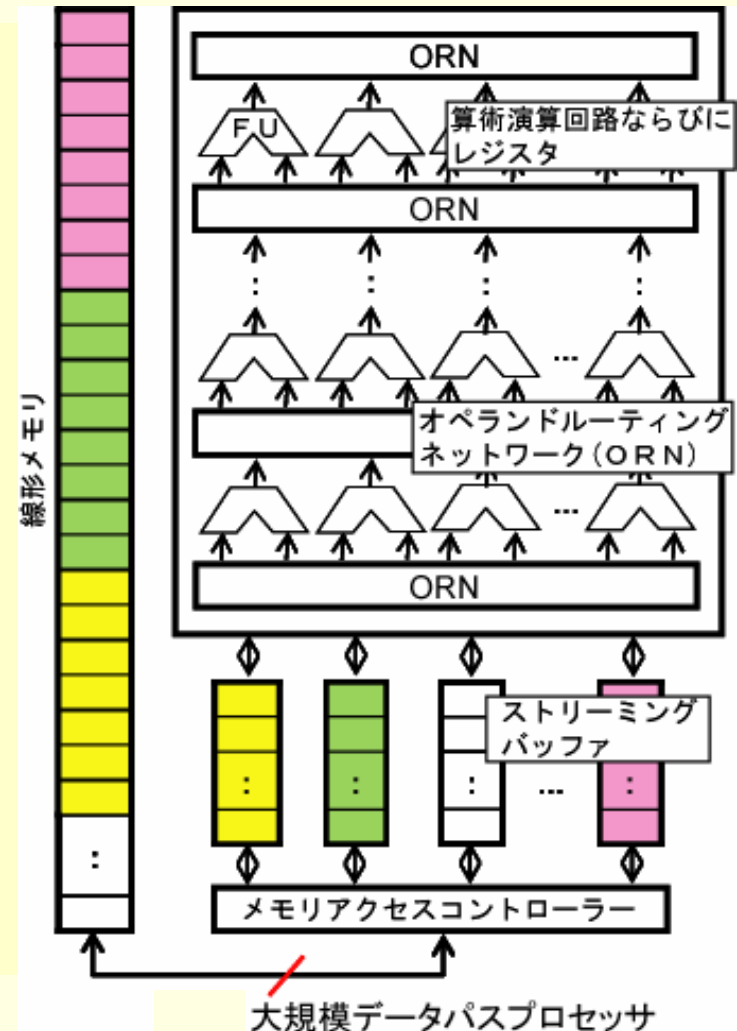
Pentium4(112mm² @90nm)

本末転倒？

計算が目的なのに実際にはキャッシュメモリの塊。
本来の計算のための大量の演算器構成と出来ないのかな？

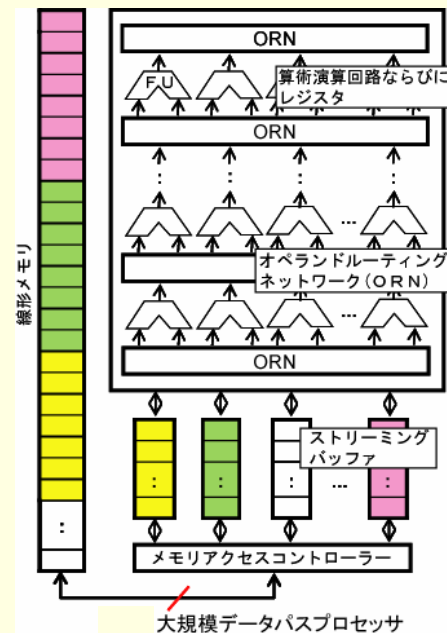
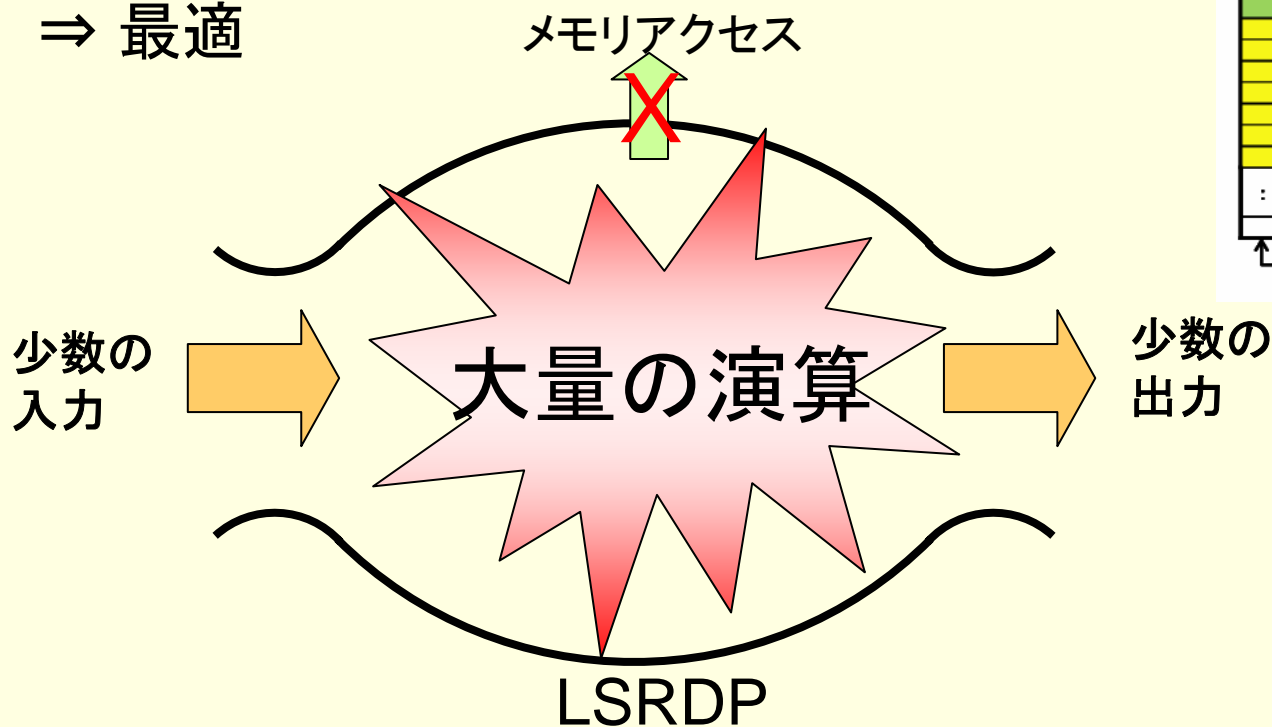
Large Scale Reconfigurable Data Path (LSRDP) による計算

- 数千個の浮動小数点演算器
 - 計算ロジックを持つ大規模データパス
- 汎用プロセッサと連動
 - 計算のアクセラレータとして
- 動的に再構成可能
- 大量の計算を高スループットで計算
 - 入出力時以外にメモリアクセス遅延が無い
 - データパス設計時に計算の並列性を考慮
 - LSRDP 計算の最大遅延は計算のクリティカルパスで決定



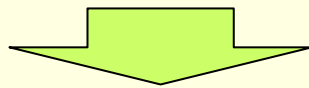
LSRDP に対する計算対象の、 向き不向き

- 大量のメモリアクセスが必要
⇒ 不向き
- 入出力が少なく、
メモリアクセスなしの大量の計算
⇒ 最適



関連研究

- 専用コンピュータ, 専用プロセッサ
 - 数多くの専用プロセッサ研究...
 - EHPC-ERIC: (九大, セイコー・エプソン)
- データフロー型計算機: SIGMA-1, EM-4 等
- タイルアーキテクチャ: Raw, TRIPS 等
- FPGA



数千からなる演算ロジックが取り扱い可能かつ,
計算中に再構成可能なプロセッサが存在した場合, どうなる?
ソフトウェア面からの研究

LSRDP による計算に向けて

~ソフトウェアからのアプローチ~

(計算手法)

- ・LSRDP 計算の適用可能性
- ・新規アルゴリズムの開拓

(計算実験)

- LSRDP シミュレータでの実験**
- ・シミュレーター開発
 - ・データパスの作成
 - ・複雑な計算

LSRDP に対する種々の
計算対象への適用可能性

種々の計算対象

- 数値計算アルゴリズム
 - Cramer の公式
 - Jacobi の対角化
 - ...
- アプリケーション
 - 分子軌道法計算
 - 2電子積分: 1電子ハミルトニアン行列生成
 - ...

計算対象(1): Cramerの公式

以下の連立一次方程式について,

$$\begin{pmatrix} A_{11} & A_{12} & \Lambda & A_{1n} \\ A_{21} & A_{22} & \Lambda & A_{2n} \\ \text{M} & \text{M} & \text{O} & \text{M} \\ A_{n1} & A_{n2} & \Lambda & A_{nn} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \text{M} \\ x_n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} b_1 \\ b_2 \\ \text{M} \\ b_n \end{pmatrix}$$

行列式 $\det(\mathbf{A})$

$$\det(\mathbf{A}) = \sum_{(p_1, \Lambda, p_n)} \varepsilon_{p_1, p_2, \Lambda, p_n} A_{1p_1} A_{2p_2} \Lambda A_{2p_n}$$

ε : $p_1 \sim p_N$ に対し偶置換: +1
奇置換: -1

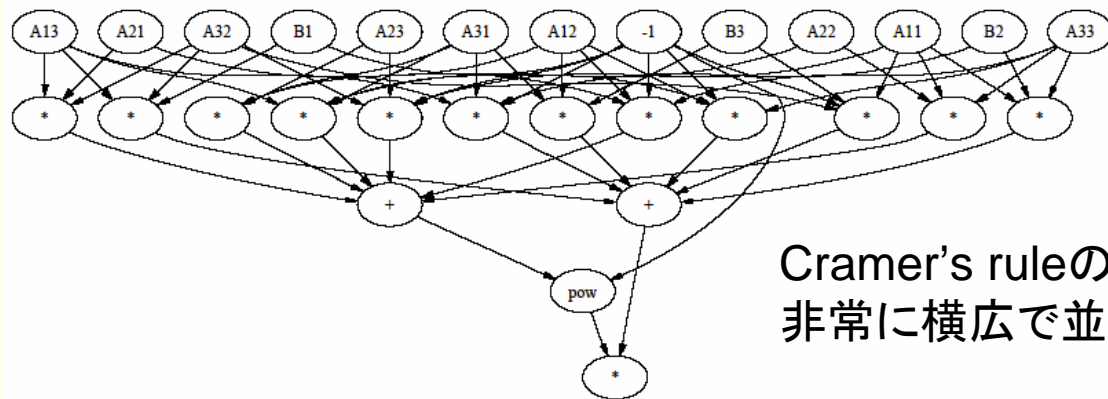
を求めることにより、直接に解を書き下すことが出来る。

$$x_i = \frac{\begin{vmatrix} A_{11} & \Lambda & b_1 & \Lambda & A_{1n} \\ A_{21} & \Lambda & b_2 & \Lambda & A_{2n} \\ \text{M} & \text{O} & \text{M} & \text{O} & \text{M} \\ A_{n1} & \Lambda & b_n & \Lambda & A_{nn} \end{vmatrix}}{\det(\mathbf{A})}$$

(i)

ここで、
行列式の和の数は $p_1 \sim p_N$ までの順列回数 $N!$ だけある。

Cramer の公式の計算量見積り



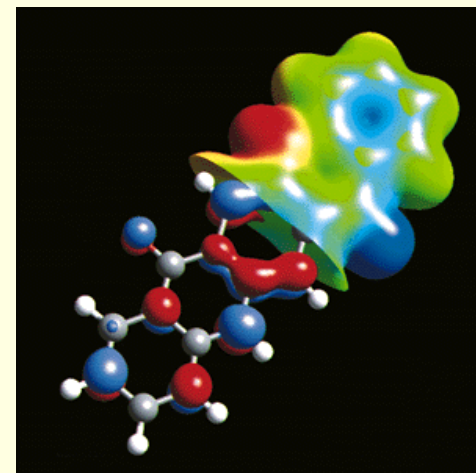
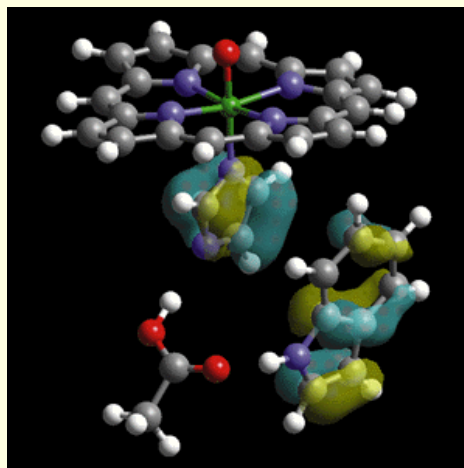
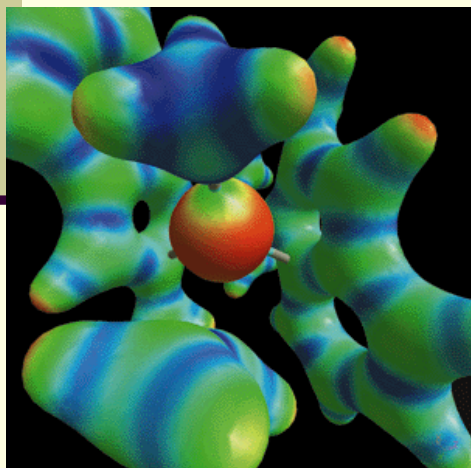
Cramer's ruleの計算データフロー(次元数3)
非常に横広で並列度大

行列次元数	4	5	6	100
入出力データ数	36	55	78	20100
演算数	4.0×10^2	3.0×10^3	2.6×10^4	9.3×10^{161}
演算数 データ数	~10	~100	~1000	~ 10^{156}

入力に対する演算数の割合が大きく、有利。
しかし入出力数と演算数が多すぎ、**大次元行列では不可能**

計算対象(2): 分子軌道法計算

- 電子が原子・分子内でどのような運動をしており、エネルギーを持っているかを計算により求める。
 - 分子物性の解析
 - 創薬、新素材の開発
 - ex) プリンタのカラーインク、液晶ディスプレイ



分子軌道法計算のボトルネック： 電子反発積分

量子力学的
電子反発エネルギー計算 G_{ij}



電子反発積分
(二電子積分)

1000 原子未満の分子で
(IJ,KL)計算量 ~ **600 TB**

- ・ $O(N^4)$ の計算量
- ・ 上記ループが計算時間の約 98 % 以上 (巨大分子)

電子反発積分計算表式

$(\mathbf{IJ}, \mathbf{KL})^{(m)}$ 漸化計算による求値:

入力: 17 個 倍精度浮動小数点数 16 個, 整数 1 個
出力: 1~1296 個 (計算依存) 1 個

初期項
(初期積分)

$$(s_a s_b, s_c s_d)^{(m)} = \frac{2\pi^{5/2} \exp\left(-\frac{ab}{a+b}(\mathbf{A}-\mathbf{B})^2\right) \exp\left(-\frac{cd}{c+d}(\mathbf{C}-\mathbf{D})^2\right)}{(a+b)(c+d)\sqrt{a+b+c+d}} F_m(T)$$

$$T = \frac{(a+b)(c+d)}{a+b+c+d} \left[\frac{b(\mathbf{B}-\mathbf{A})}{a+b} + \frac{d(\mathbf{C}-\mathbf{D})}{c+d} + (\mathbf{A}-\mathbf{C}) \right]^2$$

+ 複雑な漸化計算

電子反発積分の計算量見積もり

積分タイプ	(ss,ss)	(pp,pp)	(dd,dd)
入力数	17	17	17
出力数	1	81	1296
全演算数	122	$\sim 7 \times 10^4$	$\sim 4 \times 10^6$
1出力当たり演算数	122	~ 850	~ 3000
演算数 / データ数	7.2	$\sim 10^3$	$\sim 10^5$

- 複雑な計算 \Rightarrow 演算数 / データ数 比が大
- 入力数いつでも 17 個

LSRDP に有利

(dd,dd) では1出力のみ搭載可能, 全演算は無理

再構成の
必要性

LSRDP を利用した場合の 電子反発積分ループ計算アルゴリズム変更

通常

```
loop: IJKL  
begin
```

(IJ,KL)の 全成分を同時に
計算

```
(IJ,KL)全成分を利用し計算  
end
```

(IJ,KL) は, 配列量



LSRDP 使用時

```
loop: IJKLの各成分  
begin
```

各成分に対応した
LSRDP構成情報の入替え

```
loop: 現成分を持つ IJKL  
begin
```

(IJ,KL)の 1成分のみ
計算

```
(IJ,KL) 1成分のみ利用し計算  
end  
end
```

(d_0d_0, d_0d_0)
(d_0d_0, d_0d_1)
...

LSRDP

電子反発積分計算ループにおける、 各計算アルゴリズムの計算量とデータアクセス比較

(dd,dd) ,120 ループ繰り返しでの見積もり:

	通常プロセッサ	LSRDP 使用時
計算遅延 [*] (CC)	$\sim 5 \times 10^9$	$\sim 5 \times 10^9 / \text{並列度}$
ロードストア回数	$> 5 \times 10^9$ ^{**}	$\ll 5 \times 10^9$

※全演算器の遅延を一律 1CC とした

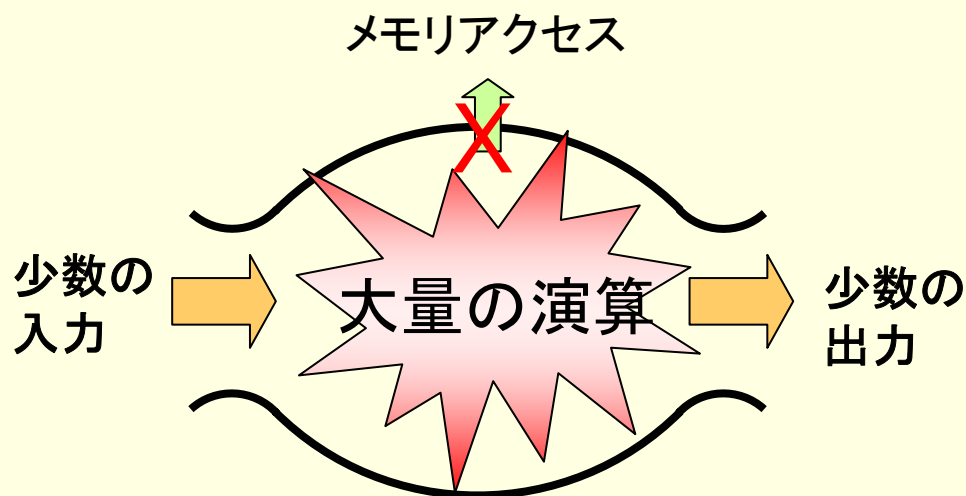
※ ※1演算に対し1ロードストア以上と見積り

動的再構成
演算器入れ替え分

1. $(IJ, KL) = (JI, KL) = (IJ, LK) = (JI, LK)$
 $= (KL, IJ) = (LK, IJ) = (KL, JI) = (LK, JI)$
なる対称性を利用すると更に Id 数は削減
2. 大多数の再構成の際に部分再構成で済む

LSRDP に対する計算対象の、 向き不向き

- 通常の行列計算では不利？
- 複雑な行列の要素の計算には適している？
- 特殊関数計算等には適している？



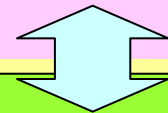
LSRDP シミュレータによる実験

LSRDP シミュレーター開発

- クロックサイクル毎の動作シミュレーション
- 遅延, 並列計算度, ピーク性能の見積もり
- LSRDP 外との計算の接続
- 計算の途中で動的にデータパスを
再構成可能
- 数千個の演算器の適切な配線技術

計算全体の
シミュレーション

通常プロセッサで
実行分の計算と
接続可能



LSRDP
機能レベル
シミュレーター

実験：LSRDP シミュレータによる 電子反発初期積分，初期積分ループの計算

実験(1):
初期積分1回計算

(ss,ss):LSRDP

$$= \frac{2\pi^{5/2} \exp\left(-\frac{ab}{a+b}(A-B)^2\right) \exp\left(-\frac{cd}{c+d}(C-D)^2\right)}{(a+b)(c+d)\sqrt{a+b+c+d}} F_m(T)$$

入力数:17, 出力数:1
演算器数:122

実験(2):
初期積分ループ計算

loop a,b,c,d
begin

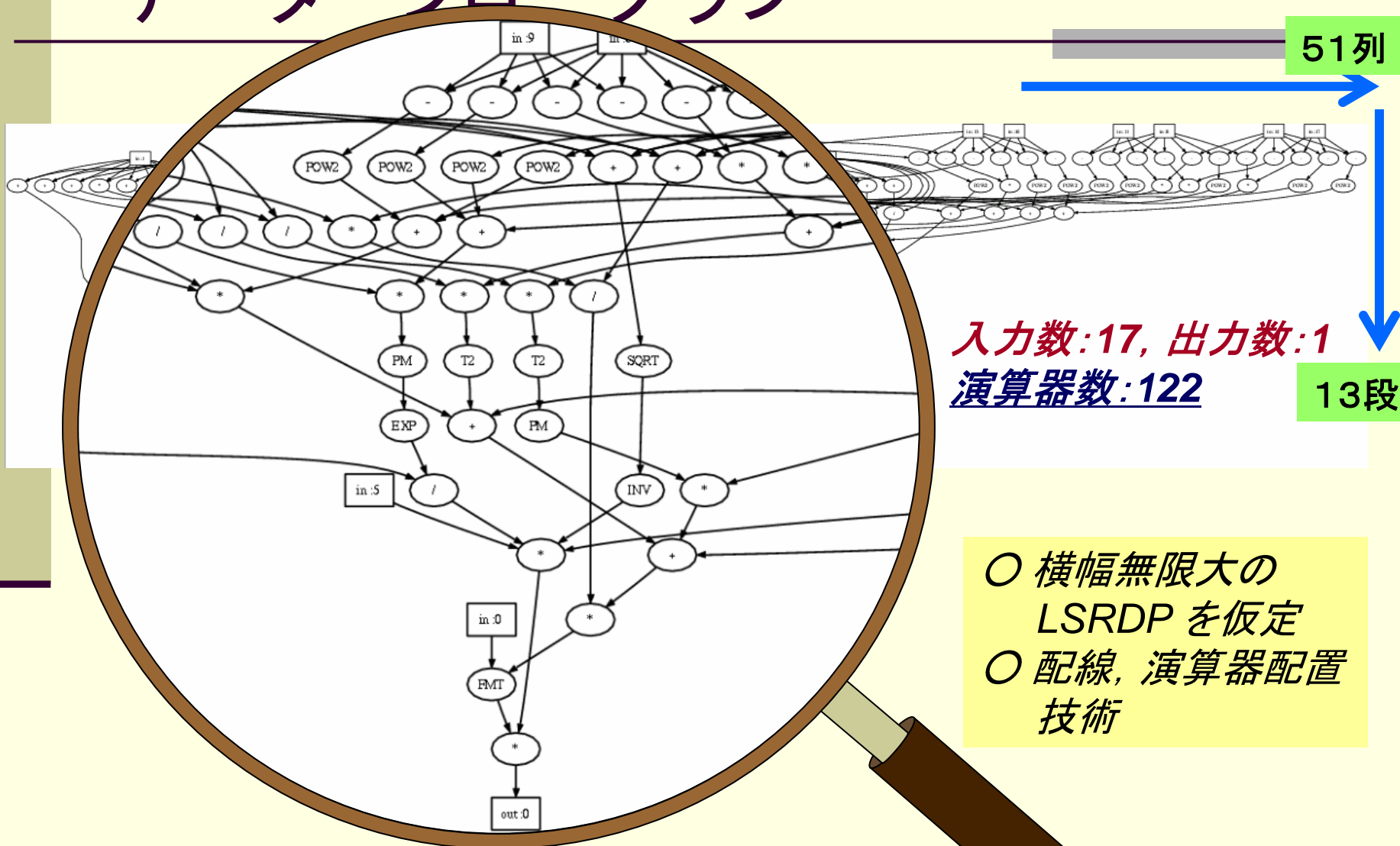
(ss,ss):LSRDP

end

計120回分の繰り返し

1. 計算並列度
2. 計算遅延
3. メモリアクセス回数
4. 通常プロセッサとの比較

初期積分計算 データフローグラフ



51列

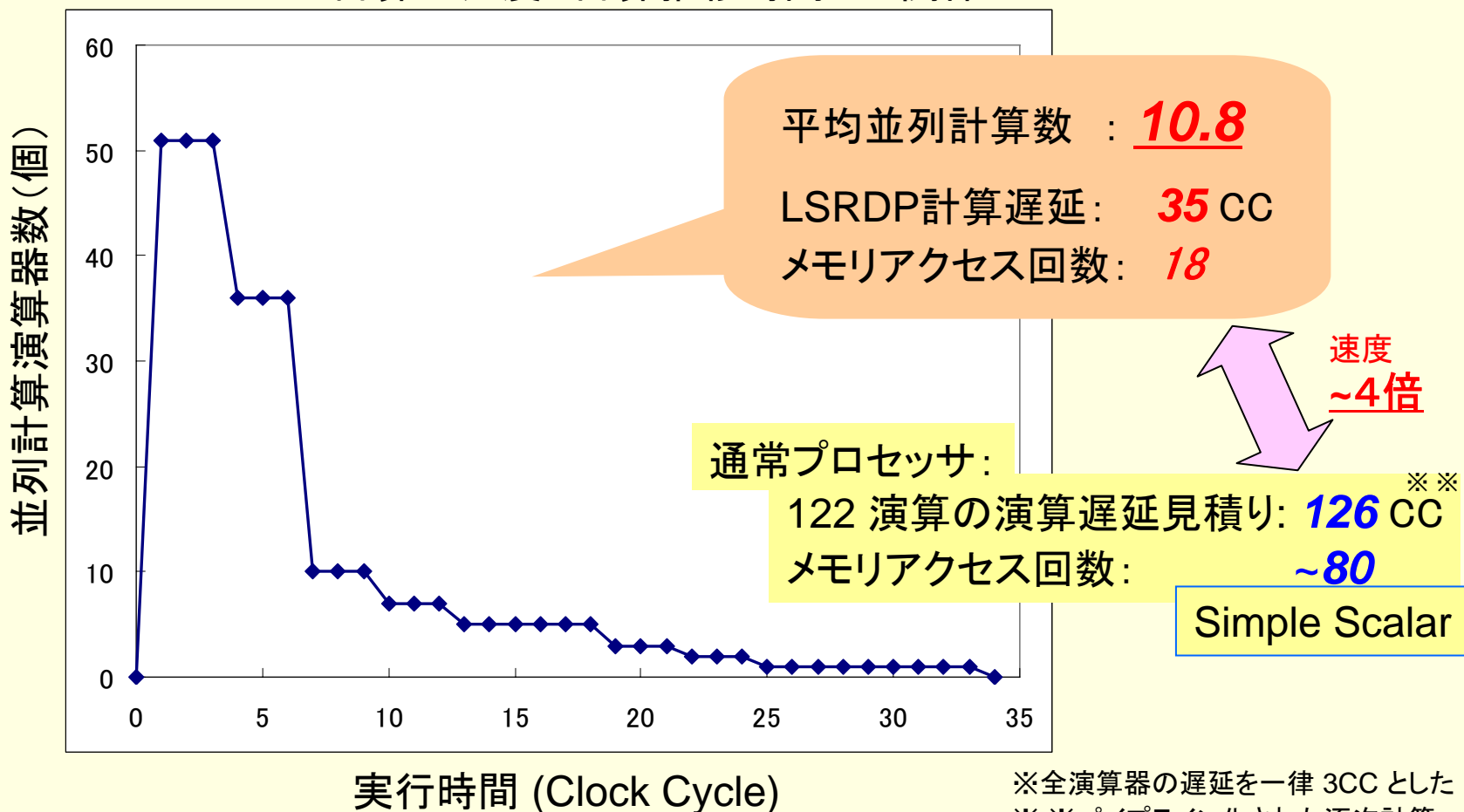
入力数:17, 出力数:1
演算器数:122

13段

- 横幅無限大のLSRDPを仮定
- 配線, 演算器配置技術

計算の遅延ならびに並列度 (LSRDP 1回計算の場合)

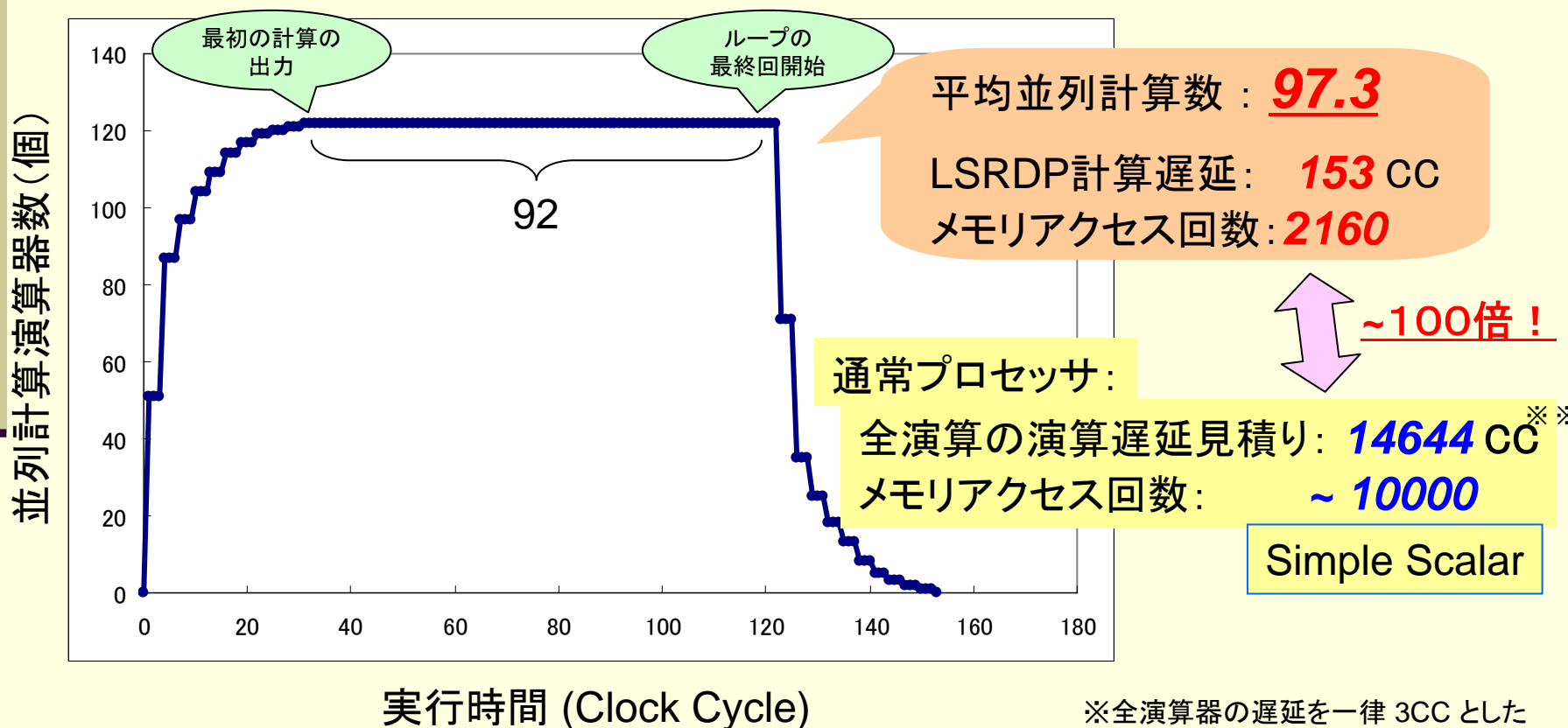
1つの初期積分計算時における
LSRDP 内の計算並列度と計算推移時間との関係*



※全演算器の遅延を一律 3CC とした
※ ※パイプライン化された逐次計算

計算の遅延ならびに並列度 (LSRDP 連続計算の場合)

初期積分連続計算における
LSRDP 内の計算並列度と計算推移時間との関係 ※



※全演算器の遅延を一律 3CC とした

※ ※パイプライン化された逐次計算

研究の広がり

メモリアクセス回数を大幅に削減した
新しい高性能科学技術の創造

- LSRDP に適したソフトウェア
- LSRDP での計算部分と
通常プロセッサの計算切り分け
- 動的再構成の適切な利用
- 新規計算アルゴリズム開拓

- 機能レベルシミュレータ
- RTL レベルシミュレータ
- 計算アルゴリズム配線,
演算器マッピング
- コンパイラ

LSRDP

ハードウェア実装技術