

人間中心ソフトウェア開発

東京工業大学 小西史一

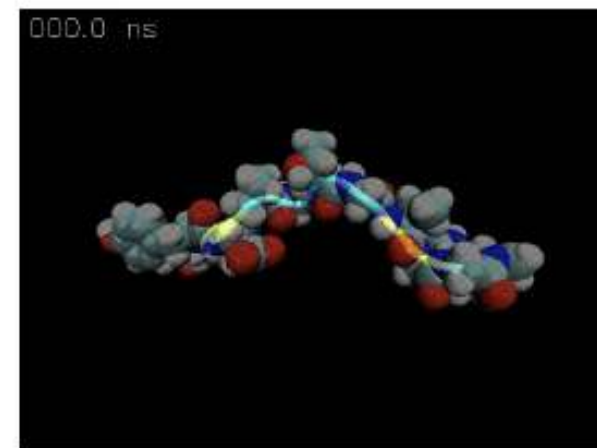
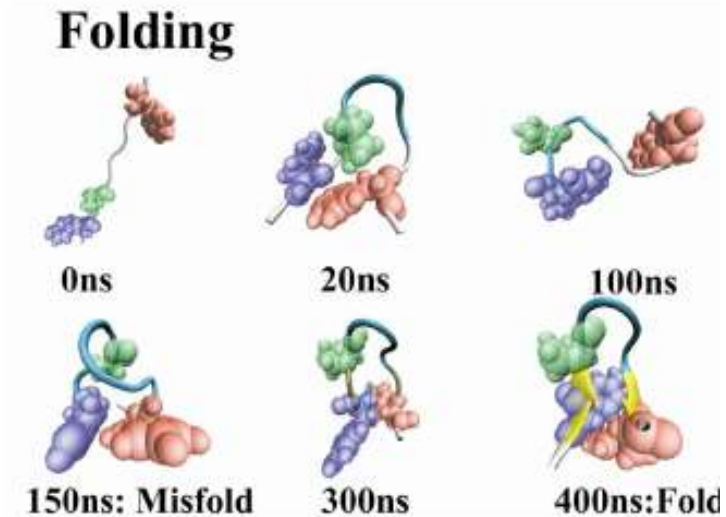
私の問題意識

開発サイクルが早い
ハードウェアにソフトウェア
開発が振り回される事
はありますか？

MDには高速な計算機が必要

例: プロテインフォールディング

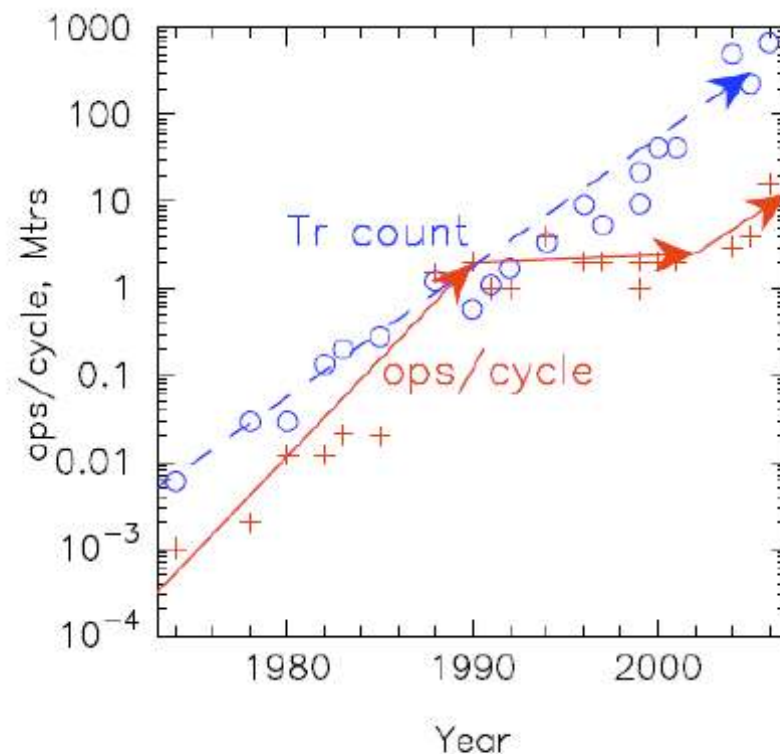
- 10残基のペプチド
- NMRによる実験から得られた3次元構造が320 nsecのシミュレーションで再現
- 7,500原子の系
- 360 GflopsのMDGRAPE-3を使って3か月の計算時間



A. Suenaga et al., *Chem. Asian J.* 2, 591-598(2007)

CPUの進化の鈍化

Evolution of Microprocessors

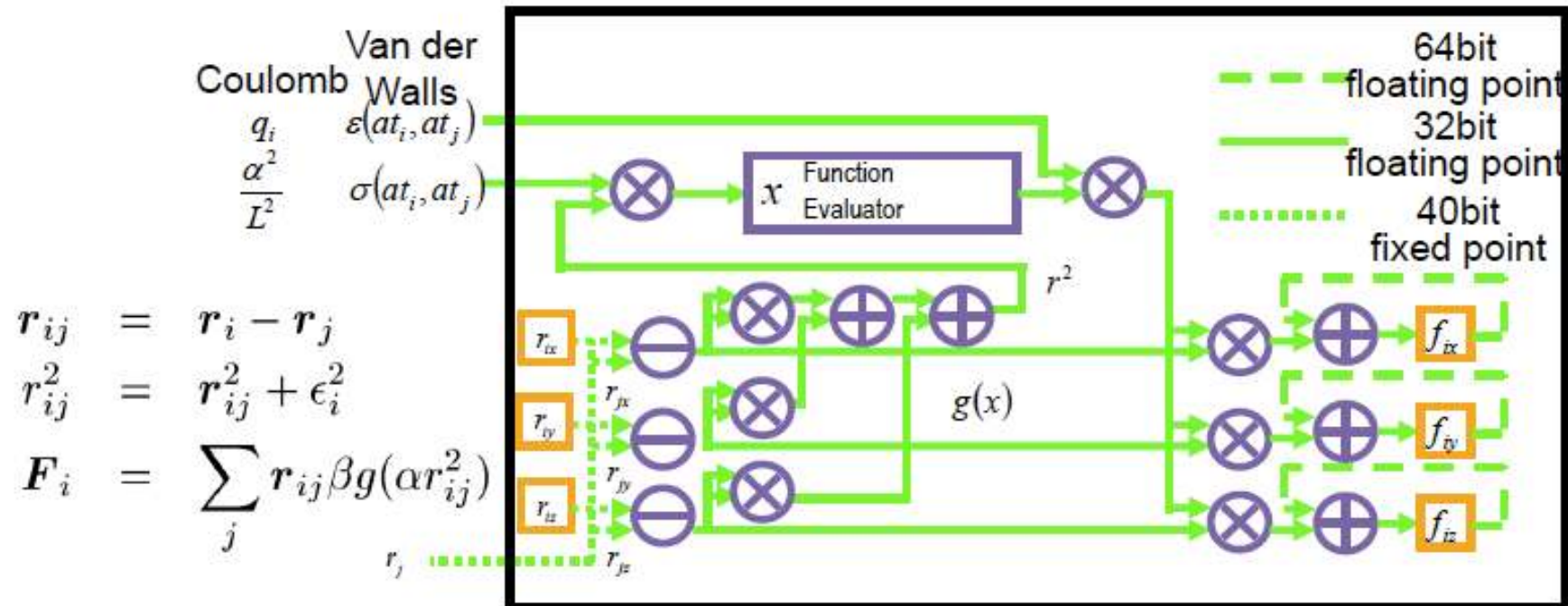


- Transistors: 1000 times in last 15 years
- FPU: 8 times more in the same period
- a factor of 100 “lost”

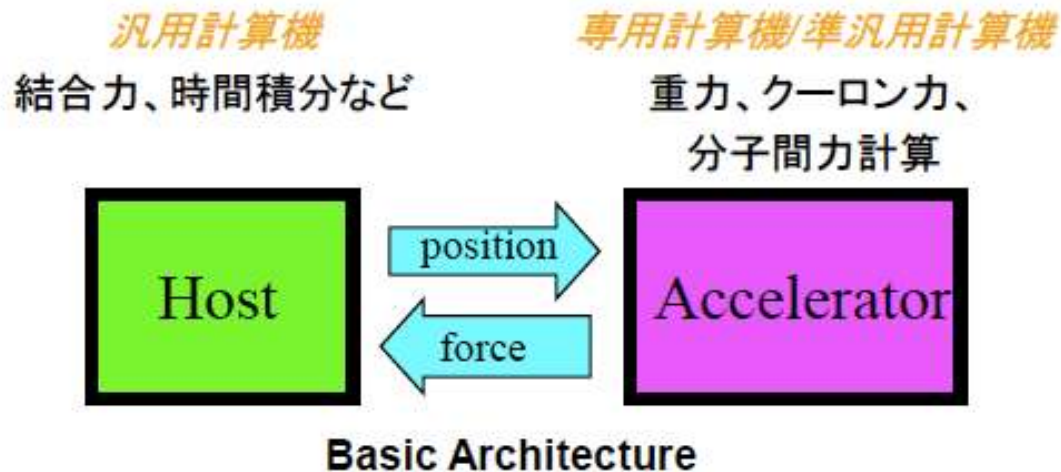
Presentation slide by J. Makino at SC07

専用計算機では精度をカスタマイズ出来る

- 例: MDGRAPE-2のパイプライン
- 座標は40-bit、ペアの力は単精度、力の足し合わせは倍精度



アクセラレータの構成



- 粒子に働く力の計算をアクセラレータ側で行う
- アクセラレータは比較的容易に高速化出来る
- 力の計算量が $O(N^2)$ なら通信はそれ程性能に影響ない
- 共通のライブラリにすると異なるアクセラレータを同じソースプログラムから使える
- 全てのMD計算をアクセラレータ側で走らす(フルGPU)例もある

多様なアクセラレータ



- 専用計算機GRAPE、MDGRAPE
- FPGA
- GRAPE-DR
- ClearSpeed
- PLAYSTATION 3
- GPU

準汎用計算機



MDGRAPE-3



ClearSpeed X620



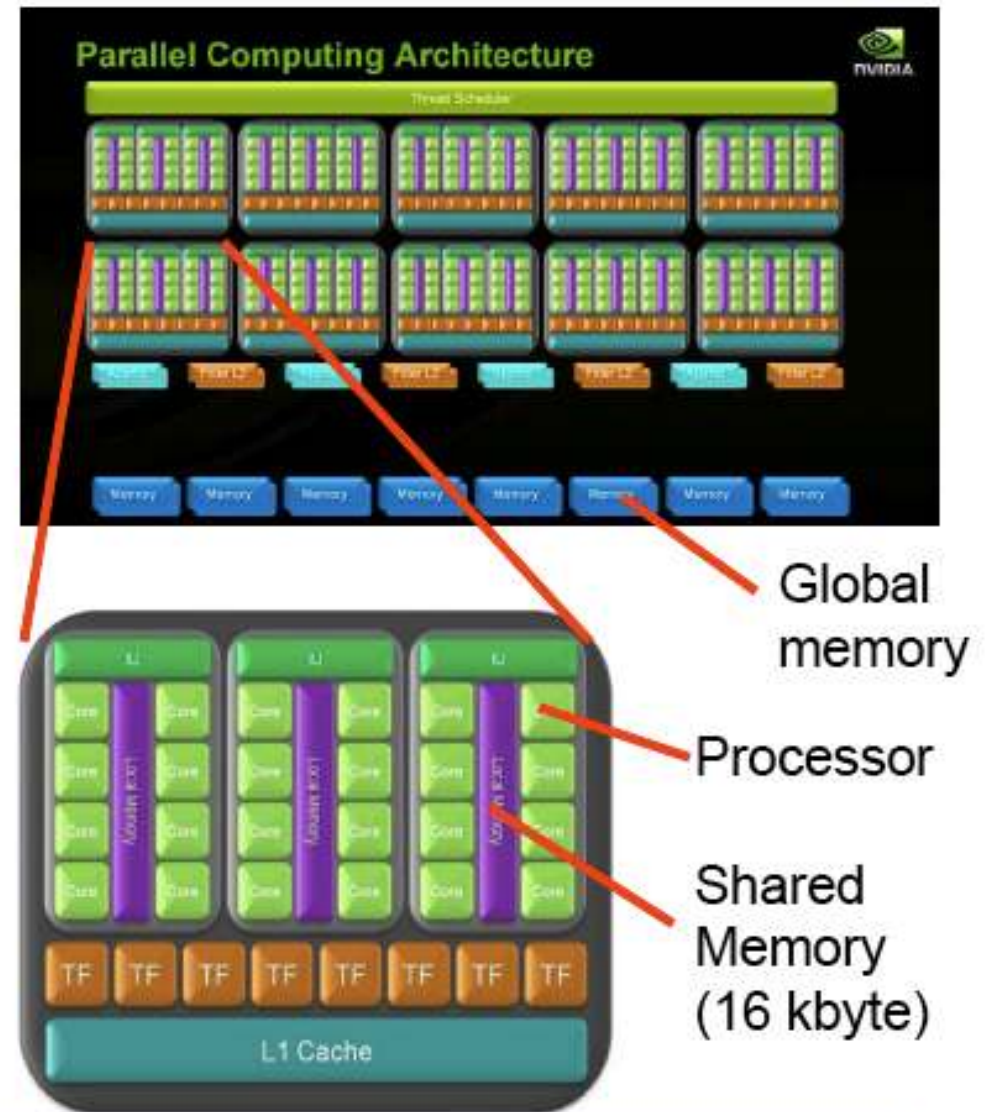
PLAYSTATION 3



GPU

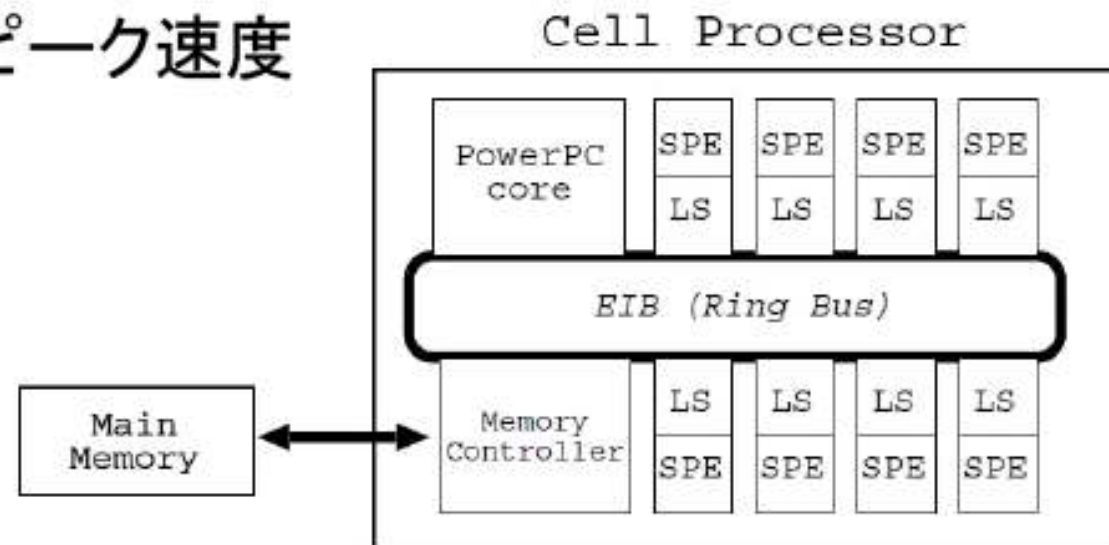
GeForce GTX 280 Graphics Card

- Made by NVIDIA
- 240 stream processors (1.3 GHz clock)
- 933 Gflops : 単精度 (10x of Intel CPU)
- 78 Gflops : 倍精度 (1.6x of Intel CPU)
- 後継285が4万円程度



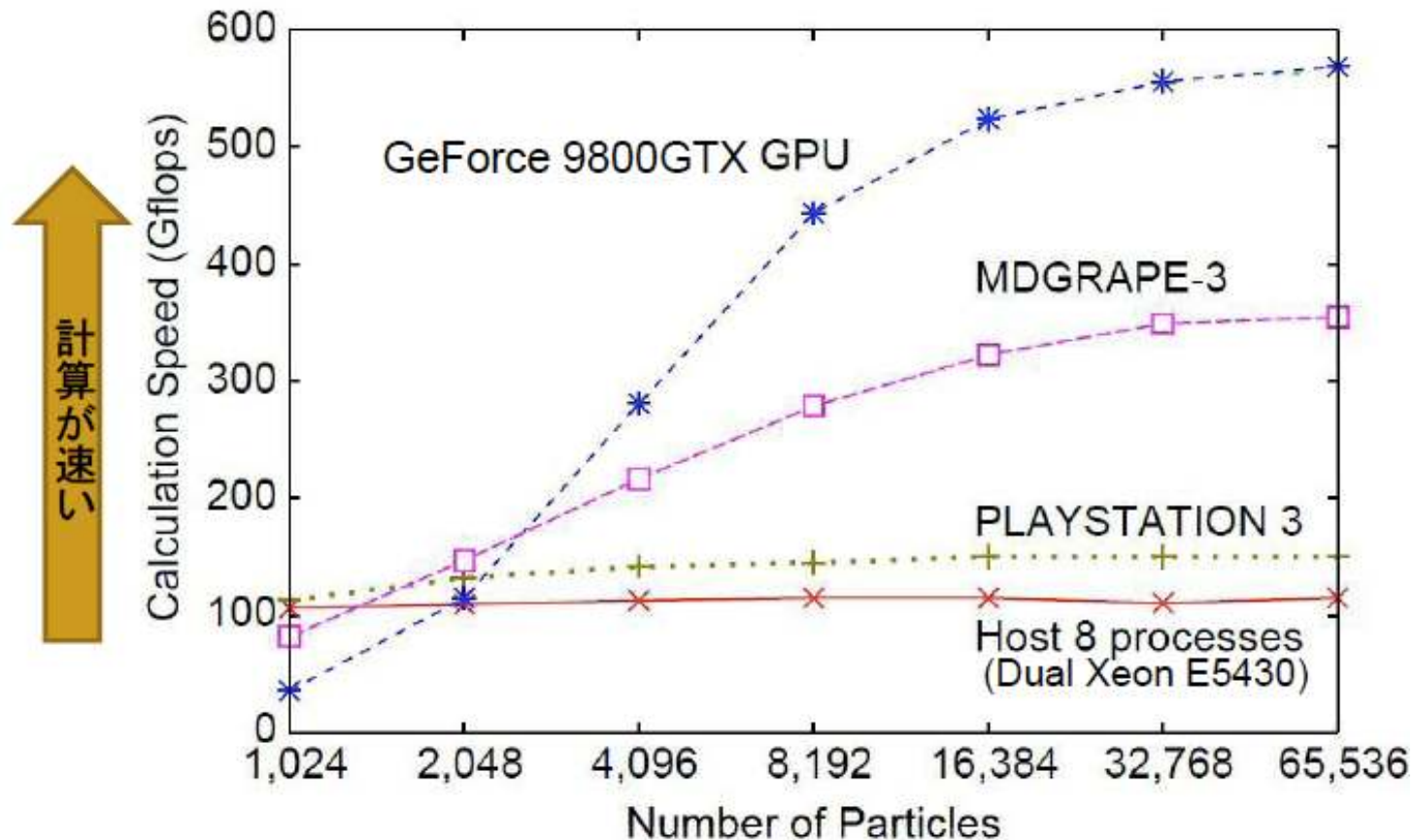
Playstation 3

- SONYが作ったゲーム機
- Cell Broadband Engine (CBE)
 - One PowerPC core
 - 8 Synergetic Processing Elements (SPEs)
- 単精度で179 Gflopsのピーク速度 (1 PPE and 6 SPEs)
- 倍精度は17Gflops
- 39,800円



重力多体問題での計算速度

- GPUとMDGRAPE-3は粒子数が少ない時に性能が落ちる



T. Narumi, et al., Proc. of PDCAT'08, pp. 143-150, New Zealand, (2008)
38 floating point interaction is assumed for pairwise gravity calculation

電通大(成見先生より)





アクセラレータの問題点

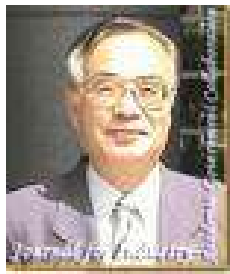
- 高い実行速度を得るためのプログラミングがかなり大変
 - 100～1000程度の並列に対応する必要がある。
 - GPUの場合には、数千の並列が必要。
- 計算ユニットが不均一となる (Cell B.E)
 - PowerPC
 - SPE
- いろいろな種類のメモリを使いこなす (GPU)
 - Global Memory, shared memory, texture memory, constant memory, local memory, register

一度開発したプログラムが今後も使える可能性が低い

- PS3は次期マシンは2年後？ Cellプロセッサかどうかも分からない
- GPUは1年半毎に新しい世代に代わる
 - Multi processorの数、単精度：倍精度の比率が変わる
 - メモリアクセスの自由度が変わる
 - Shared memoryの大きさも変わるかもしれない
- メニーコアプログラミングの標準化：OpenCL

実は・・・

- バイオだの、HPCの話しをしましたが、
- 私が大学時代に所属してた研究室(福田収一)教授(スタンフォード大学コンサルティングプロフェッサー)は、Concurrent Engineering 同時進行技術活動に関して研究していました。



日本機械学会編, 福田収一責任編集, 『HCD
ハンドブック-人間中心設計』, 出版社名:丸善
株式会社, 発行日:2006年7月20日,



次回は是非、福田先生を呼んでください。

ディスカッションテーマ

- ハードウェアに引きずられて、ソフトウェアの開発が、非人間的になることはありませんか？