



**The race with MPRACE  
On GRAPE, FPGA,  
Petaflop/s**

**Rainer Spurzem, Astronomisches Rechen-Institut  
Zentrum für Astronomie Univ.Heidelberg, Germany**

[spurzem@ari.uni-heidelberg.de](mailto:spurzem@ari.uni-heidelberg.de)

<http://www.ari.uni-heidelberg.de/mitarbeiter/spurzem/>



# ASTRONOMISCHES RECHEN-INSTITUT HEIDELBERG (ARI)

Foundation Document of ARI

May 10, 1700

Calendar Patent of Duke of Brandenburg



Special Thanks to the ARI gang:

**W**ir **F**riedrich der Dritte/von Gottes Gnaden/Marggraf zu Brandenburg/  
des Heil. Röm. Reichs Erzh. Cammerer und Churfürst in Preussen/ zu Magdeburg/ Cleve/ Jülich/Beyge/ Steyrin/  
Domherrn/ der Grafsch. und Steden/ auch in Schlesien zu Gersdorff/ Burggraf zu Nürnberg/ Fürst zu Dalmatien/ Minden und Camm/ Graf zu  
Sachsen/ Herr zu Ravensberg/ Herr zu Havelstein und der Lande Kauenburg und Pletow. Fügen hiermit erdemännlich zu wissen; Nachdem  
aus Landes-Väterlicher Vorforge Wir allegat dahin bedacht gewesen wie in Unserm Churfürstenthum und Landen/nicht nur die Handlung und Gewerbe/ sondern

auch nützliche gute Künste und Wissenschaften zum besten des gemeinen Bestens und derrer Einwohner mehr und mehr gefohrgen/ und in Aufschwung gebracht werden möchten/ Wir  
auch zu solchem Ende/ so wohl in dem einem als den andern verschiedene nützliche Establishemts zu stifften/ kein Gelegenheit vorbeig gelassen; Und es dann auch durch des Dächsten  
Gnade vor weniger Zeit dahin geblieben/ daß durch einen unter denen Evangelischen Reichs-Ständen gefassten einmütigen Schluß/ das Calendar-Wesen auf einen verbesserten Fuß  
gerichtet/ und dabeneben dahin abgeleitet worden/ wie künfftig die Zeit-Vereinigung nach dem Astronomischen Calculo und Observationen geführt/ und wie billig verbessert werden möchte;  
Daß Wir dabero veranlassen und bewegen worden in Unserm hierigen Dreihingigen Observatorium des Himmeles/ und Societatem Scientiarum in Physicis, Astronomicis, auch sonsten  
in Mathematicis, Mechanicis und andern dergleichen nützlichen Wissenschaften und Künsten angurichten/ und mit geschickten Büderrn/ guten Geschnen/ benötigten Gebäuden/ auch andern  
erforderlichen Bedienungsdiensten und Unterhaltungs Mitteln/ der geßalt zu versehen und zu benehmen/ daß so wohl die abgelebte Aufnahme der Wissenschaften in Unserm Landen errichtet  
als auch die in gebührender Regensburgerischen Schluß an Hand gebracht/ an sich selbst hochwichtige Observaciones zu Verbesserung der Astronomie vorgenommen werden können; Geßalt  
denn dieses sehr nützliche Werk unter Unserm besondern eigenem Schutz und Directi-Direction durch ordentliche Zusammenkünfte und Anstellung der Observaciones mit höchstem Fleiß  
aufgeführt werden wird.

Wieweil Wir nun denen bey diesem Unserm Observatorio und Societät bestellten/ in der Stern-Rechnung so wohl/ als Observacionibus gelübten Astronomis zu Verhütung  
der Unordnung die Anstehung und Verfertigung/ der ganzen Societät/ aber den Verlag derrer verbesserten oder sonst löblichen Calendar in allen Unsern/ Chur- und übrigen Landen aus  
eigener hohen Vergnügen/ um so viel mehr in Gnaden aufzutragen/ und sie damit alleinig und privative privilegiert haben/ damit die bisher so häufig im Schwange gewesene theils unrichti-  
ge/ theils ärgere/ und mit unangenehmen Lügen- Historien/ nützigen Beschreibungen/ auch schandbaren Schreibern mehrertheils angefüllte/ sonst aber von einigen der schwachen  
und müßigen Stern-Rechnung zumahlen unerschlenen Weiten nur ausgeführte Calendar/ von nun an und allegat aus Unserm Landen gehalten/ hingegen aber an andern Part der Societät-  
richtige/ mit nützlichen Astronomischen und andern Materien verfehene Calendar/ welche Unser Societät mit einem gewissen Kupfer oder Zeichen zu bemerken hat/ eingeführt/ dabeneben  
auch das für jetzt ausgegangene Ged künfftig in Lande behalten werden möge; So haben Wir nötig erachtet/ solche Unser gnädigste Willens-Vereinigung/ und wie Wir es deshalb  
weiter gehalten wissen wollen/ durch dieses Unser welschbedacht Edict jedermännlich bekannt zu machen.

Demnach fügen/ ordnen und wollen Wir Straff dieses/ daß außer denen von obgedachten Unsern löbigen und künfftigen Astronomis und Societät anserrechneten und verfertigten Calendar  
den von nun an und zu allen künfftigen Zeiten wenig in Unser Chur-March als allen übrigen Unsern Provinzen/ In geschicktem Unsern Druck- und Verhütung/ auch  
Schätzen und Gebieten/ wo die auch kein künfftig andere Calendar/ die kein von was Formet/ Schriftlich/ Druck oder Art sie immer wollen/ so mögen auch gemacht/ verfertigt oder gedruckt sein  
wo sie wollen/ weder gedruckt noch verlegt/ noch aus Unsern Unterthanen oder Fremden eingeführt/ verkauft oder gedruckt/ sondern hierdurch schädter dings aller Orten/ auch auf  
allen Jahrmärkten verboten und verboten sein sollen; dergestalt/ daß nicht allein die Buchbinder und andere melche den Calendar/ Handel in Unserm Landen sey aus Concession und  
Bergensung/ oder sonsten bisher gehabt oder künfftig haben werden/ keine andere/ als der Societät Calendar einkaufen und verkaufen sollen; Sondern Wir wollen auch/ daß alle  
andere Unser Unterthanen/ welche derrer Calendar zu ihrer Haushaltung benötiget seyn/ gehalten sein sollen/ bloß und allein von der Societät Calendar zu kaufen und zu gebrauchen.  
Es wird dann/ daß ein oder der ander neben der Societät Calendar/ auch den so genannten Kattischen Calendar in. z. zu keiner Curiosität zu haben verlangt/ welchen zu verschreiben und zu  
haben hierdurch zwar gestattet wird/ es soll aber demoh keinm erlauben seyn/ bergleichen zu solen Kauf zu haben noch aufzuführen.

Welcher nun von Unsern Unterthanen oder wohnwärtigen in Unserm Landen/ dem zu wider zu handeln sich unterseyben oder einen fremden und mit der Societät Zeichen nicht bemerck-  
ten Calendar bey sich finden lassen/ wird beschließen er mit Calendarn handel/ sol von jeden fremden Edict ohne Unterseyben Hundert Rthlr. maß er aber den Calendar nur vor sich und zu  
seiner Vorhaltung eingefauft hat/ von jedem Stück sechs Rthlr. unerlässlicher Straff/ auf beschene Anzeig/ ohne alle Nachsehen/ angehöret zu erliegen/ nach Confirmation der Exem-  
plarien angehalten werden; Von welcher Straff/ dem Denuncianten bester/ ohne auch nach Möglichkeit zu halten/ dem Fiscal so befördert/ dem Richter so bekräftigt/ dem  
Zehnten dritten der Drey/ und endlich der Societät ausgereicht/ und darüber nötige Nachrichten/ jeder Orts gehalten/ und alle dalk/ daß der Societät eingeschickt werden sollen; Dem aber  
derglichen Straff erwan ohne Zutun des Fiscal/ oder Denuncianten eingetruet wird/ so soll alddann derrer abgehenden Amtschreiber/ denen löbigen zu gleichem Theil zu schicken.

Dann aber die Buchbinder oder vor sonstigen Calendar verfaßter/ derrer von der Societät verlegten Calendar/ schon so weiten/ als bisher derrer verbotenen von Nürnberg/ Keisig und  
andern Orten/ abgehört werden mögen/ So wird die Societät dahin sehen/ daß bey einem gangbaren Absatz nicht allein in die löbigen Unsern Provinzen/ sondern auch in einigen andern Unsern  
Städtern/ als Magdeburg/ Staragard/ Minden und andern Orten/ um billigen Preis/ und zu rechter Zeit/ bei der Hand seyn/ damit Unser Lande aller Orten verfertigt werden können.

Es wird auch gedachte Unser Societät/ wann an andern Orten Observatoria angelegt/ und gute Calendar publica autoritate verfertigt werden solten/ dabitt Khen/ dabitt deren an-  
stehen/ und mit ihrem Zeichen bemerck/ damit bernach ein oder ander Liebhaber/ jedoch nach Begahlung des gedoppelten Preises/ der andern Calendar/ damit verfahren werden könne.  
Wegen des besorgenden Unterschleiss/ aber/ und damit hierdurch die Einführung fremder Calendar nicht weiter gemein werde/ wollen Wir/ daß deren Verkauf der Societät bey abste-  
hender Straff/ gleichfalls privative und sonst niemanden erlaubt seyn solle;

Wir beschlen auch/ welchen nicht allein dem bey der Societät bestellten/ und allen übrigen Unsern Hof- und andern Fiscalen in allen Unsern Landen überal/ hiermit gnädig und ernst-  
lich/ auf die genaue Beobachtung dieses unsers Edicts ein wichtiges Auge zu haben/ und keinen Unterschleiss zu gestatten/ sondern Wir wollen auch und beschlen hiermit gleichfalls in Gnade  
allen Unsern Regierungen/ Reichsleibern/ Droschen/ Amteuten/ Magistraten/ Richtern und Obrigkeiten/ wie die Maßnahmen haben mögen/ in allen Unsern Landen/ über dieses Unser Edict  
nun und zu allen Zeiten eigentlich und schärf zu halten/ denen Denuncianten und Fiscalen löbliche Hilff und Vordien ohne Verhütung der geringsten Bewillküstiger oder Pro-  
cess/ widerfahren zu lassen/ und die verurtheilte Straff ohne alle Ansehen der Person/ Mühsorge und Zeit-Verlust einschickbarlich zu executionen.

Auf daß aber dieses Unser Edict zu deren Ansehn/ so wohl ansehnlicher als einmütiger Beschloß/ geung/ und hierdurch niemand mit der Unwissenheit sich zu entschuldigen habe/  
sindern sich ein jeder vor Schaden und einseitiger Vertheilung fürten möge; So haben Wir dasseibe nicht nur in öffentlicher Druck bringen lassen/ sondern Wir wollen auch/ daß es aller  
Orten in Unserm Chur-March und allen übrigen Unsern Provinzen und Landen von denen Censuren abgelesen und kund gemacht/ auch an nöthigen Orten/ sonderlich in denen  
Städtern und Märkten öffentlich angeteilt werde.

Weslich zu Urkund haben Wir dieses Edict eigenhändig unterschrieben/ und mit Unserm Churfürst. Insigel bekräftigt; So geschien Edict an der Secreten 10. May Anno 1700.

Friedrich. (L.S.) Graf von Wartemburg.

Pau Amaro-Seoane, Peter Berczik,  
Ingo Berentzen, Andrea Borch,  
Jonathan Downing, Christoph  
Eichhorn, Andreas Ernst, Jose  
Fiestas, Ovidiu Furdul, Andreas  
Just, Gabor Kupi, Alexei Minz,  
Miguel Preto, Chingis Omarov,  
Kristina Wäcken

**Collaboration:**  
Sverre Aarseth (IoA Cambridge UK),  
Christian Boily (Strasbourg), David  
Merritt (RIT, USA), Naohito Nakasato,  
Tsuyoshi Hamada (RIKEN Japan),  
Simon Portegies Zwart, Alessia  
Gualandris (U Amsterdam), Hyung Mok



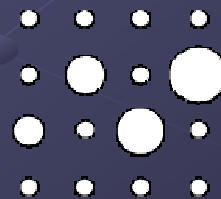
## *The GRACE Project = GRAPE + MPRACE*

Astrophysical Computer Simulations using Programmable Hardware  
*R. Spurzem, R. Manner, A. Burkert with  
P. Berczik, G. Kupa, I. Berentzen, G. Lienhart, M. Wetzstein...*

Interdisciplinary: Computer Science and Astrophysics  
Univ. Heidelberg (ARI-ZAH), Munich (USM)  
Univ. Mannheim (Techn. Informatik)

GRAPE  
project

with Jun Makino, Toshi Fukushima, ...



VolkswagenStiftung





# ARI-ZAH + RIT 32 node GRAPE6a clusters



Performance Analysis (3.2 Tflop/s):  
Harfst et al. 2006, New Astron., in press, astro-ph/0608125

Dez. 06

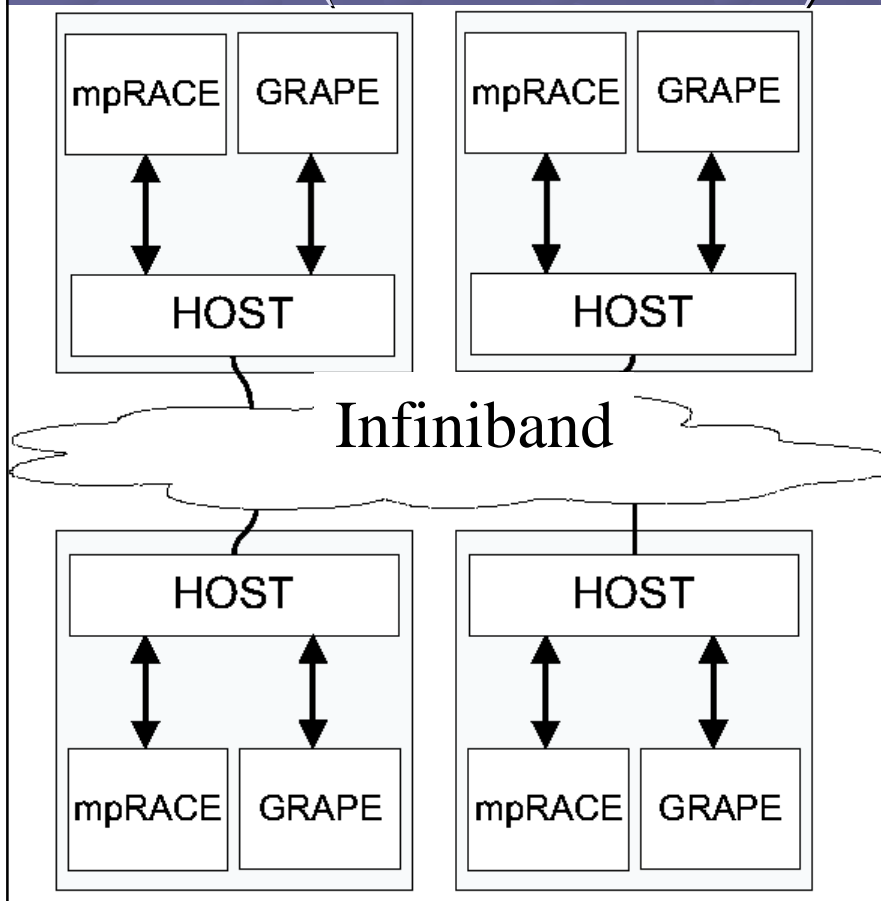


Holi 2006

# Hardware - GRACE

Univ. Heidelberg (ARI) Univ. Mannheim (LIV)  
Univ. Munich (USM) RIKEN Institute Tokyo

The GRACE architecture  
(GRAPE+MPRACE)

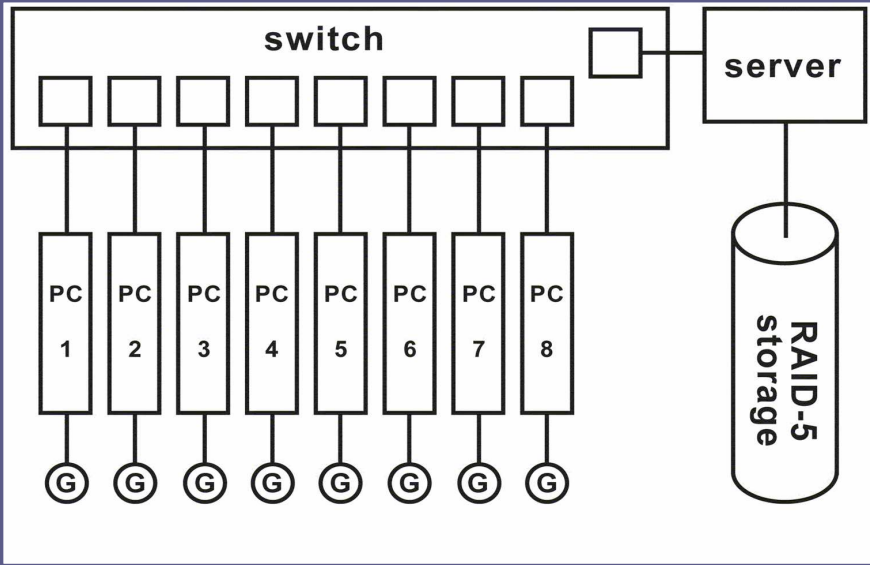


4 Tflops, 128 CPUs, 128 GB Memory  
(64 P4 Xeon, 32 GRAPE, 32 Xilinx FPGA-MPRACE)

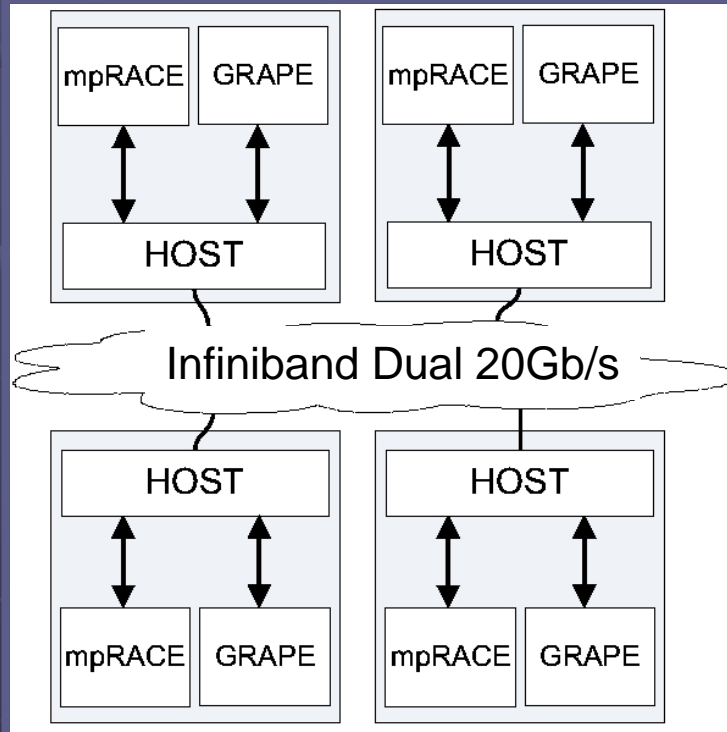


# RIT & ARI 32 node GRAPE6a clusters

- 32 dual-Xeon 3.0 GHz nodes
- 32 GRAPE6a
- 14 TB RAID
- Infiniband link (10 Gb/s)
- Speed: ~4 Tflops
- N up to 4M
- Cost: ~500K USD
- Funding: NSF/NASA/RIT



- 32 dual-Xeon 3.2 GHz nodes
- 32 GRAPE6a
- 32 FPGA
- 7 TB RAID
- Dual port Infiniband link (20 Gb/s)
- Speed: ~4 Tflops
- N up to 4M
- Cost: ~380K EUR
- Funding: Volkswagen/Baden-Württemberg



# Hardware - GRAPE

~128 Gflops for a price ~5K USD; Memory for up to 128K particles



## GRAPE6a **PCI board**

GRAPE6a, -BL - PCI Board for PC-Clusters

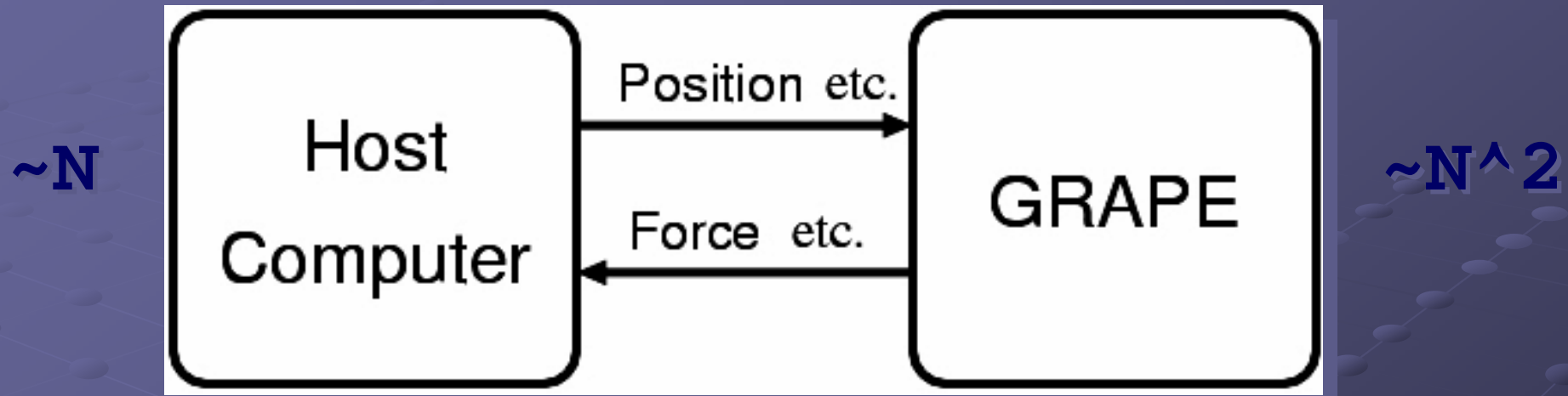
PROGRAPE-4, FPGA based board from RIKEN (Hamada)

GRAPE7 - new FPGA based board from Tokyo Univ. (Fukushige)

GRAPE-DR - new board from Makino et al. NAOJ

MPRACE1,2 - FPGA boards from Univ. Mannheim/GRACE (Kugel et al.)

# Basic idea of any GRAPE N-body code:



$$\vec{a}_i = \sum_{j=1; j \neq i}^N \vec{f}_{ij}$$

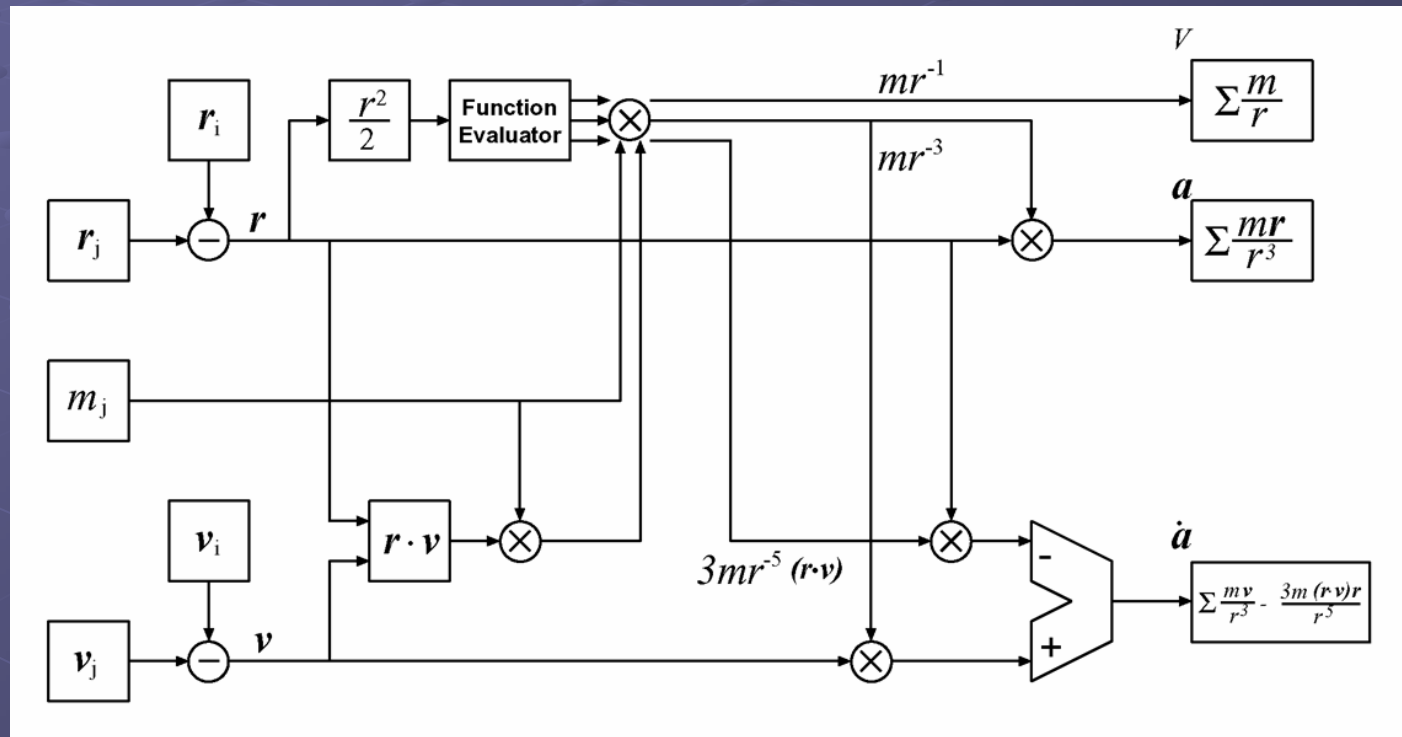
$$\vec{f}_{ij} = - \frac{G \cdot m_j}{(r_{ij}^2 + \epsilon^2)^{3/2}} \vec{r}_{ij}$$



# GRAPE = GRAVity PipE – more detail...

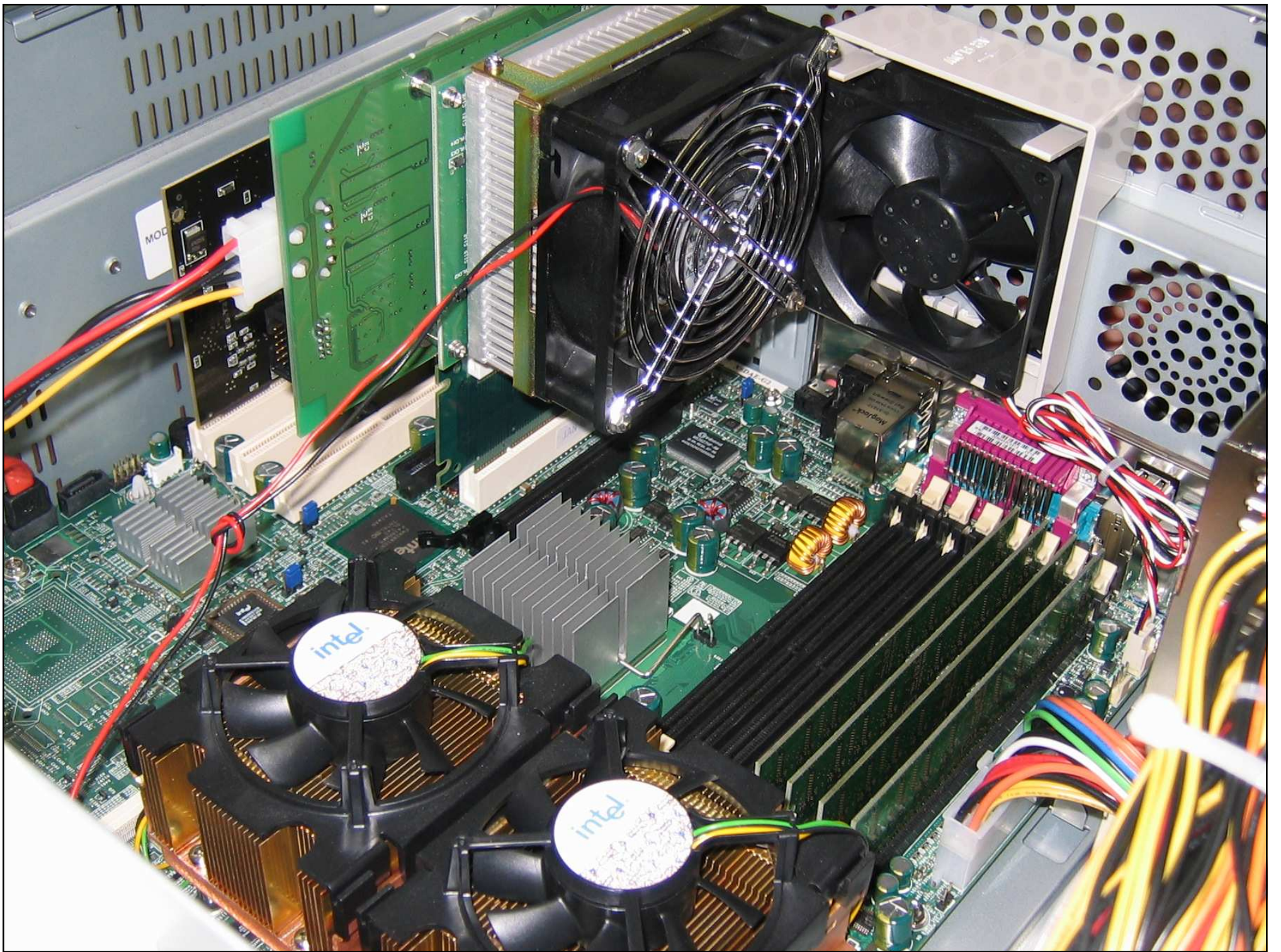
$$m_i; \vec{r}_i; \vec{v}_i; t_i$$

$$m_j; \vec{r}_j; \vec{v}_j; t_j$$



$$\phi_i; \vec{a}_i; \dot{\vec{a}}_i$$







# Parallelization and Software

*S.J.Aarseth, S. Mikkola (ca. 20.000 lines):*

- Hierarchical Block Time Steps
- Ahmad-Cohen Neighbour Scheme
- Kustaanheimo-Stiefel and Chain-Regular.  
for bound subsystems of  $N < 6$  (Quaternions!)
- 4th order Hermite scheme (pred/corr)
- Bulirsch-Stoer (for KS)
  
- NBODY6 (Aarseth 1999)
- NBODY6++ (Spurzem 1999) using MPI/shmem
- Parallel Binary Integration in Progress (with C. Boily et al.)
- Parallel GRAPE Use in Progress
- $\phi$ GRAPE – NBODY1-like on GRAPE clusters (Harfst et al. 2006)



# Parallelization and Software

- **Copy Algorithm**: parallelize work over block members  
replicate all data on all processors  
(Example: NBODY6++)
- **Ring Algorithm**: domain decomposition  
partial forces shifted  
blocking or non-blocking, systolic or hyper-systolic  
(Gualandris et al. 2005, Dorband et al. 2003)

## *Our present workhorse:*

- **Mixed Algorithm**:  $\phi$ GRAPE – domain decomposition on GRAPE  
memories, copy algorithm for active particles  
(Harfst et al. 2006, astro-ph/0608125)

Note: Special hypersystolic quadratic algorithm (Makino 2002):

$$O(N/\sqrt{p}) + O(N^2/p)$$

# Parallelization and Software

$$t_{\text{calc}} = p \cdot \frac{N}{p} \cdot \frac{s}{p} \cdot \tau_f = \frac{N}{p} s \tau_f$$

$$t_{\text{comm}} = p \tau_l + p \cdot \max_i (s_i \tau_c) = p \tau_l + s \tau_c$$

$$t_{\text{tot}} = \max(t_{\text{calc}}, t_{\text{comm}}) = \max\left(\frac{N}{p} s \frac{\beta}{X}, \frac{s \xi}{Y}\right)$$

$$T = t_{\text{tot}} N_s = \left(\frac{N}{p} \cdot s \frac{\beta}{X}\right) N_s$$

N: part. Number

s: Block size

p: processor number

$\tau_f$ : force calc. time

$\tau_l$ : latency time

$\tau_c$ : communic. time

$\xi$ : Number of bytes (192)

$\beta$ : Number of flop/force (20)

X: speed (flop/s)

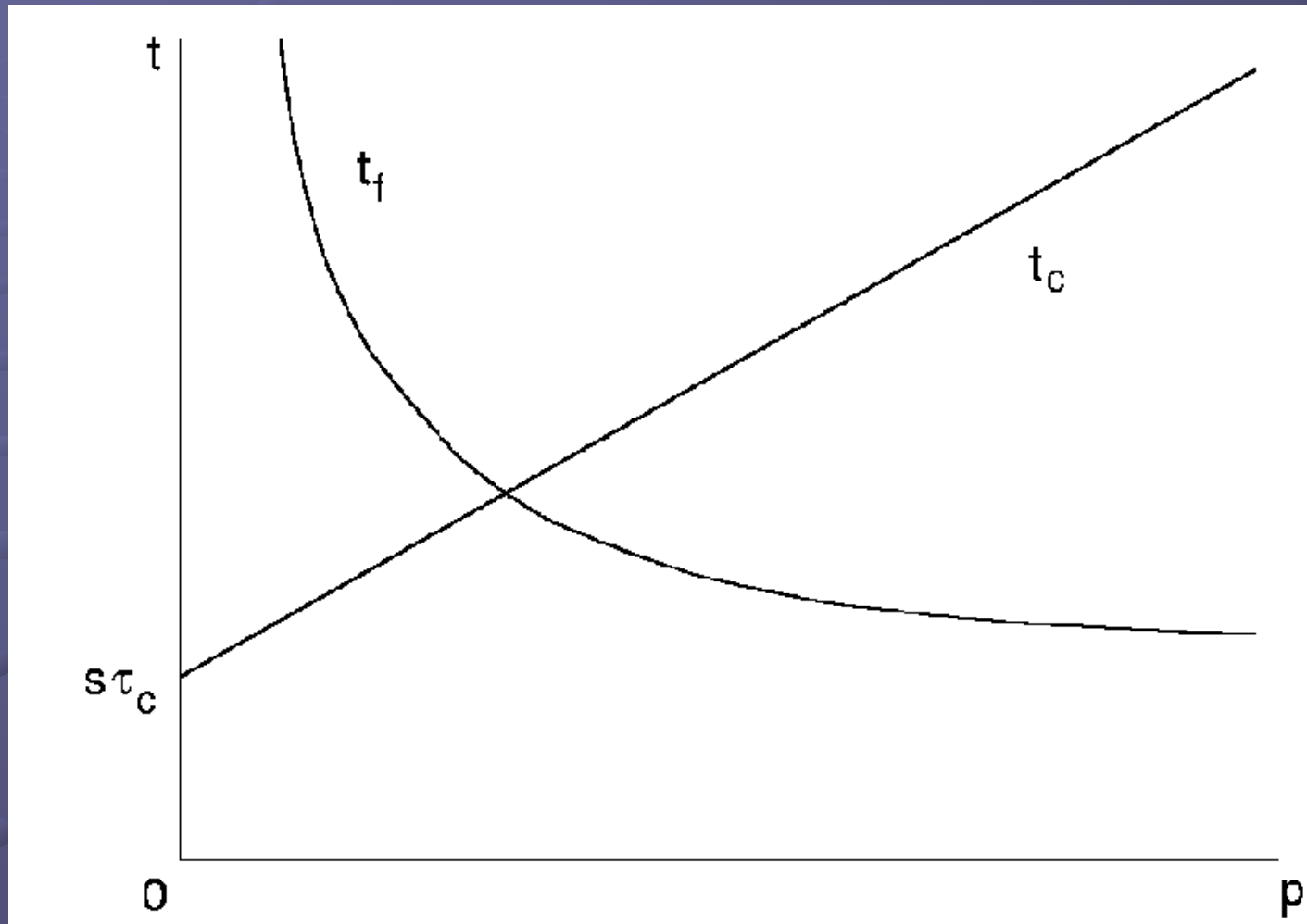
Y: bandwidth (Byte/s)

GIZMO/NBODY6++ nearly same!

But: Memory!

GIZMO: Dorband et al. 2003

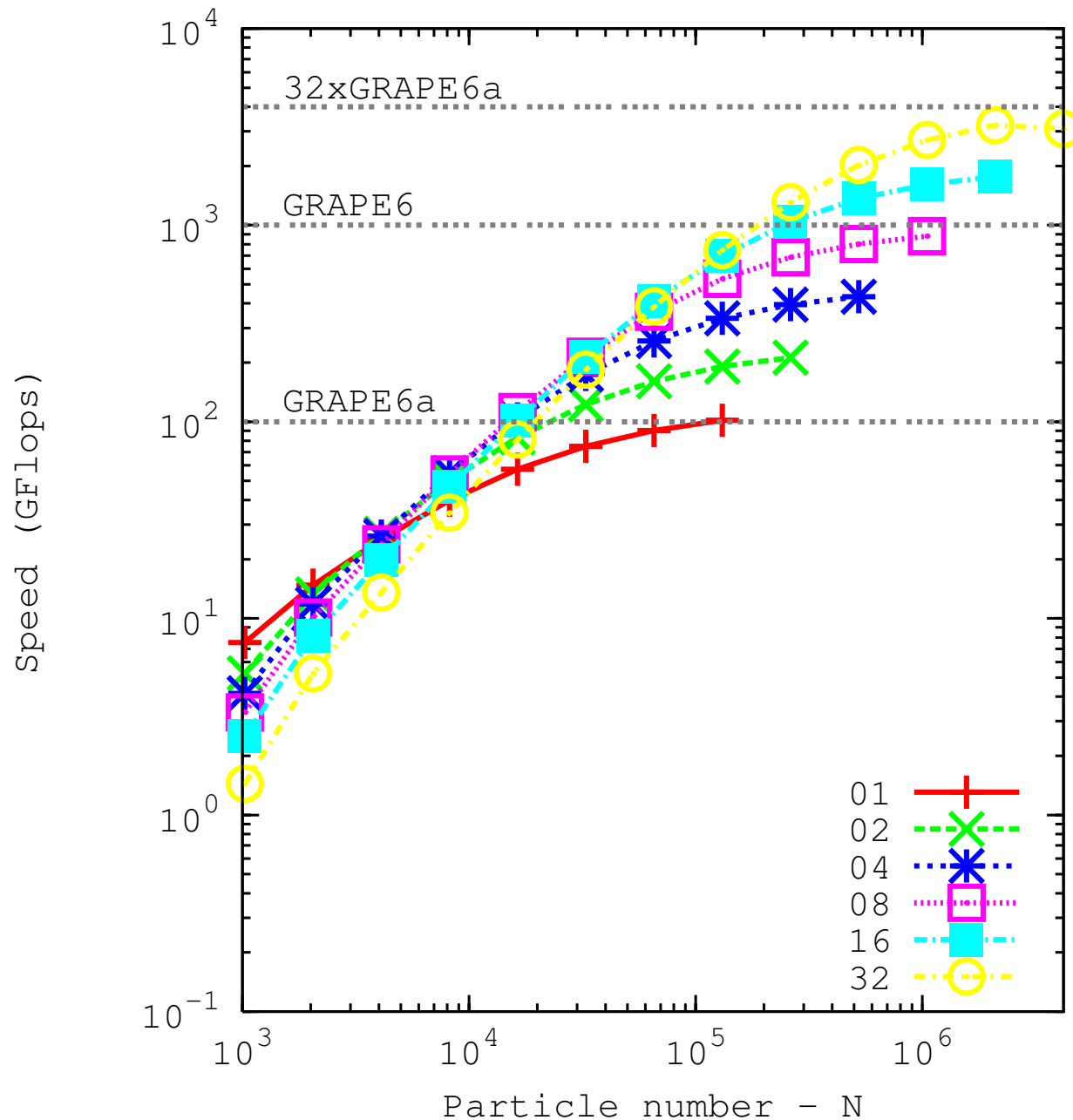
# Parallelization and Software



Dorband, Hemsendorf, Merritt 2003, J. Comp. Phys.



# Parallel PP on GRAPE6a cluster



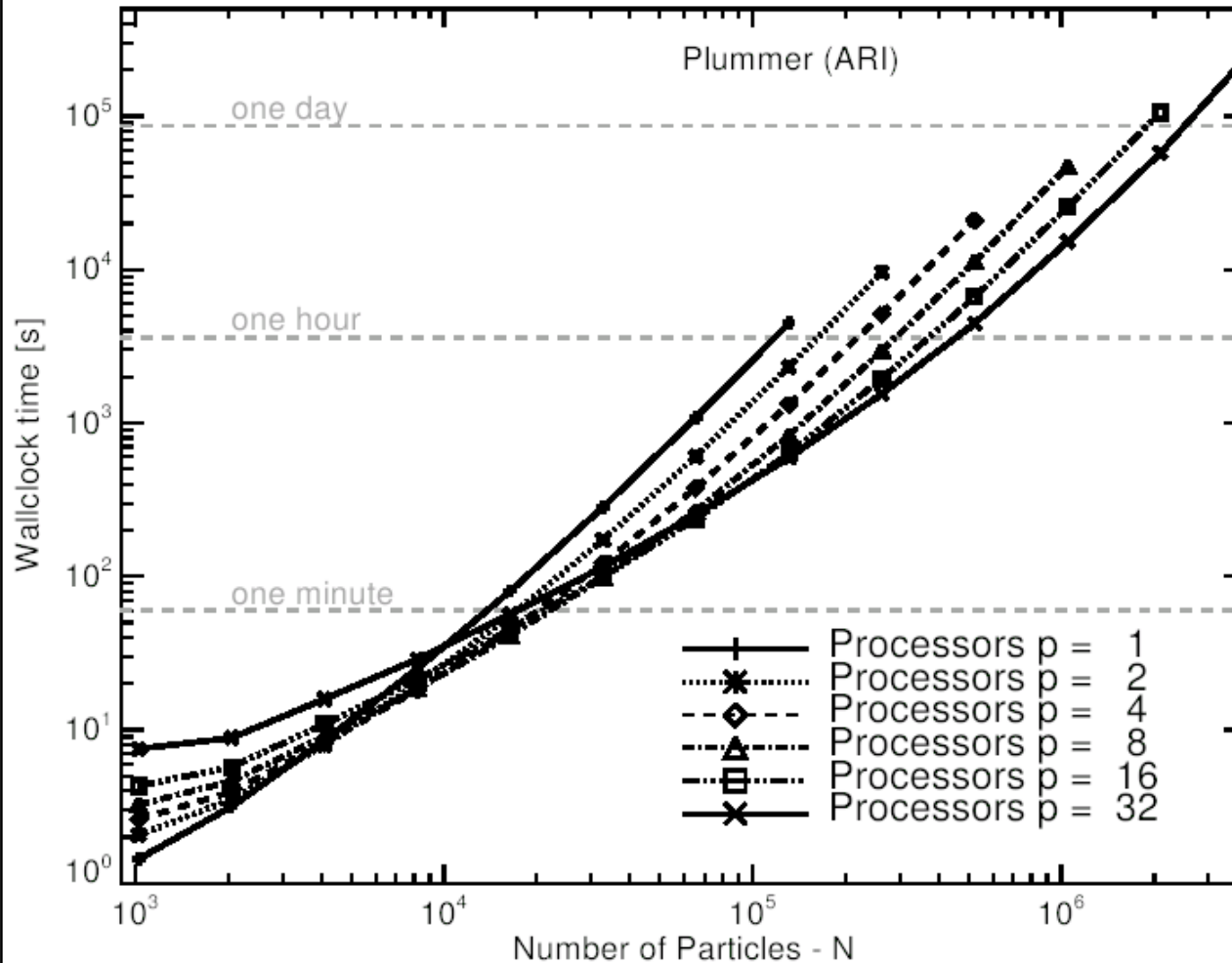
ARI

Cluster:

~3.2 Tlop/s  
sustained

Harfst, Gualandris,  
Merritt, Spurzem,  
Portegies Zwart, Berczik  
2006, New Astron. in press  
astro-ph/0608125

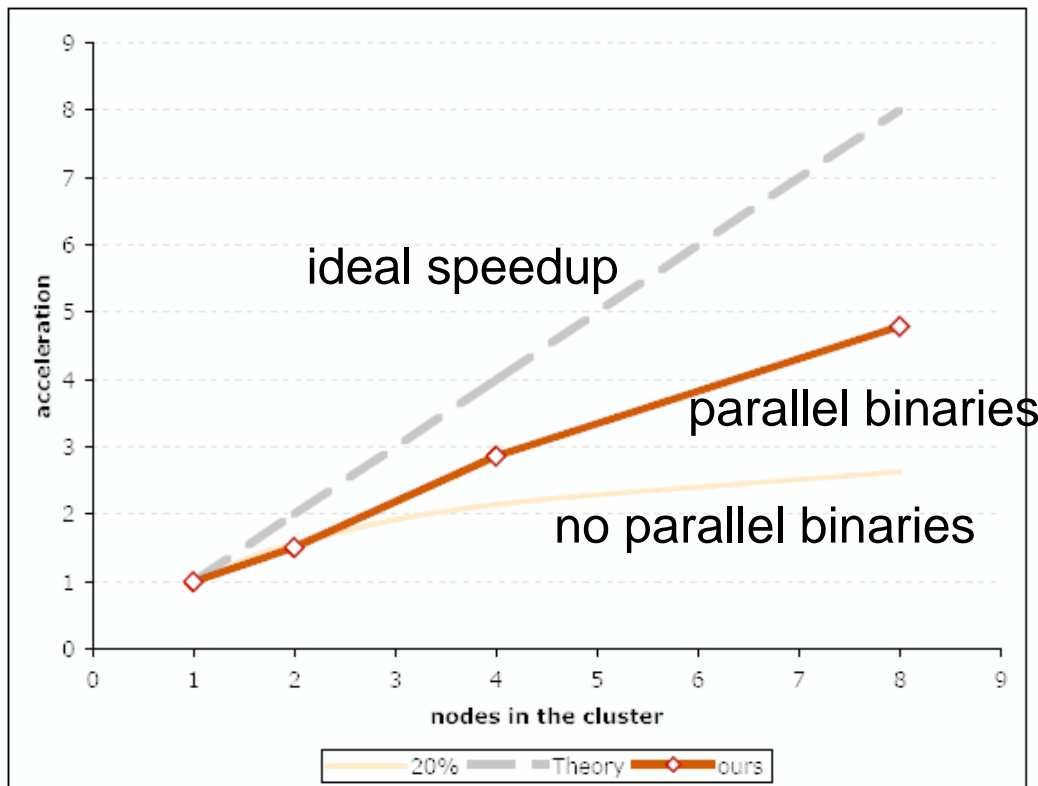
# Parallelization and Software



## Performance Modelling

Harfst, Gualandris,  
Merritt, Spurzem,  
Portegies Zwart, Berczik  
2006, New Astron. in press,  
astro-ph/0608125

# Parallelization and Software



*Comparison of the acceleration of the computation after our modifications (for a data set with about 17% of binaries) compared to the acceleration seen before for 20% of binaries.*

*We see a clear improvement in performance, much closer of the ideal case than before.*

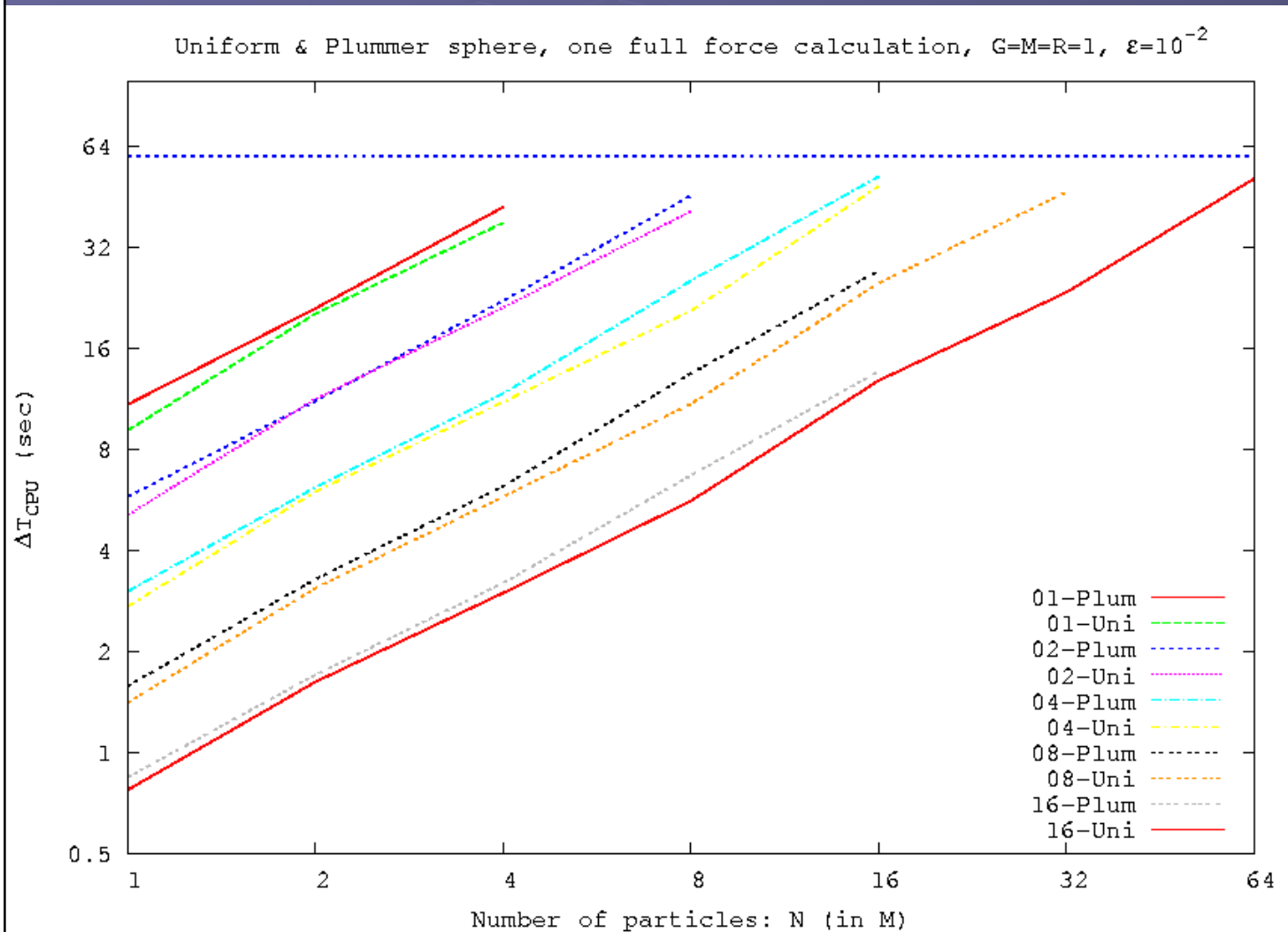
*Tests run on the HPC cluster at the University Louis Pasteur, Strasbourg.*

Binary Parallelisation

Maalej, Boily, Spurzem, 2005  
with Sverre Aarseth



# Science Case: Galaxy Modelling

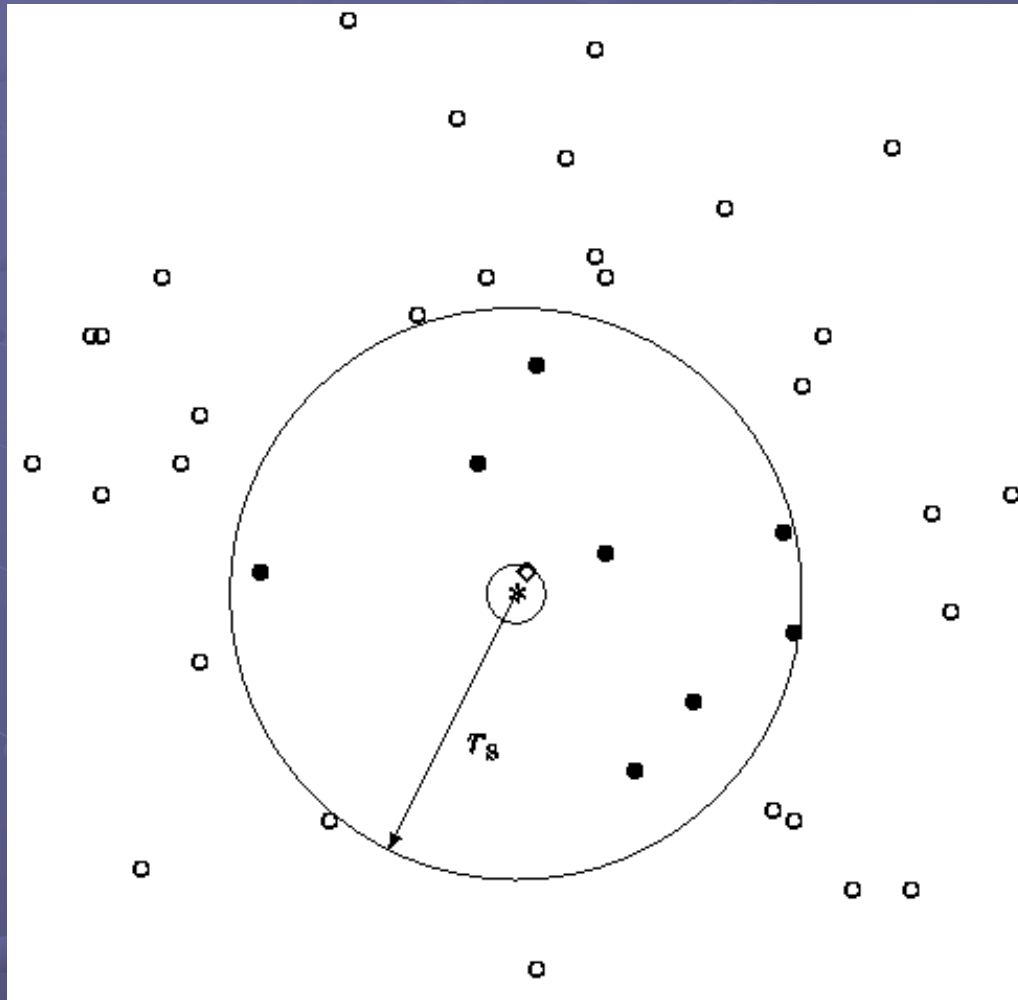


Further  
Application

TREE-Code  
simulations with  
PP-core  
64 Million particles!

Berczik,  
Nakasato,  
in progress

# Parallelization and Software



Ahmad-Cohen  
Neighbour Scheme

(Double Volume for  
Incoming Particles)

Special Care for fast  
Particles

Not yet with GRAPE!  
Work in Progress!

# GRACE

GRACE = GRAPE + RACE

## Smoothed Particle Hydrodynamics (SPH)

$$\rho_i = \sum_{j=1}^N m_j W(|\vec{r}_{ij}|, h_{ij}), \quad p_i = P(\rho_i)$$

Hydrodynamic equation  
of motion, gravity

$$\frac{d\vec{v}_i}{dt} = -\frac{1}{\rho_i} \nabla P_i + \vec{a}_i^{visc}$$

$$\frac{d\vec{v}_i}{dt} = -\sum_j m_j \left( \frac{p_i}{\rho_i^2} + \frac{p_j}{\rho_j^2} + \Pi_{ij} \right) \nabla_i W(|\vec{r}_{ij}|, h_{ij})$$

$$\Pi_{ij} = \begin{cases} \frac{(-\alpha c_{ij} \mu_{ij} + \beta \mu_{ij}^2)}{\rho_{ij}} & \text{for } \vec{v}_{ij} \cdot \vec{r}_{ij} \leq 0 \\ 0 & \text{for } \vec{v}_{ij} \cdot \vec{r}_{ij} > 0 \end{cases}$$

$$\rho_{ij} = \frac{\rho_i + \rho_j}{2}, \quad f_{ij} = \frac{f_i + f_j}{2}, \quad \vec{r}_{ij} = \vec{r}_i - \vec{r}_j$$

$$c_{ij} = \frac{c_i + c_j}{2}, \quad h_{ij} = \frac{h_i + h_j}{2}, \quad \vec{v}_{ij} = \vec{v}_i - \vec{v}_j$$

$$\mu_{ij} = \frac{h_{ij} \vec{v}_{ij} \cdot \vec{r}_{ij}}{\vec{r}_{ij}^2 + \eta^2 h_{ij}^2} f_{ij}$$

SPH formulation





# Parallelization and Software

## Scaling of best algorithm:

$$O(N p) + O(N^2 / p) [ + O(N N_n / p) + O(N^2_{bin} / p) ]$$

1	2	3	4
Communication	Total Force Regular Force	Irregular Force	KS Binaries

## Codes Discussed Here:

<u>φGRAPE</u>	1 + 2 (parallel GRAPE)
<u>NBODY6++</u>	1 + 2 (parallel) + 3 (parallel), no GRAPE
<u>NBODY6xx</u>	as NBODY6++ + 4 (parallel)
<u>NBODY6yy</u>	as NBODY6++ + φGRAPE

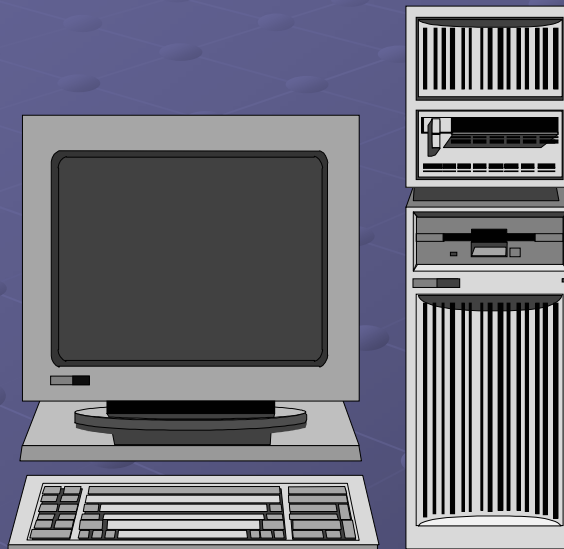
# GRACE

GRACE = GRAPE + RACE

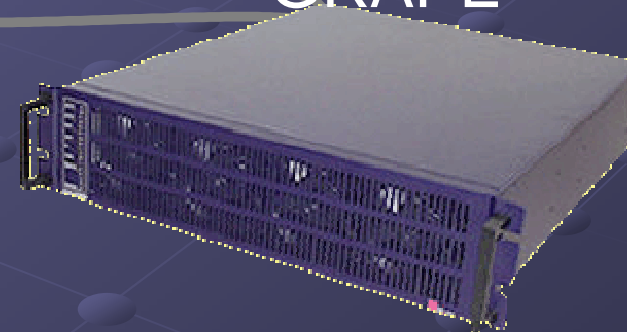
## Hardware



MPRACE Board



GRAPE



- GRAPE moves the bottleneck to neighbour calculation
- Use FPGA-platform for accelerating neighbour algorithm (SPH, NBODY6++)

GRACE

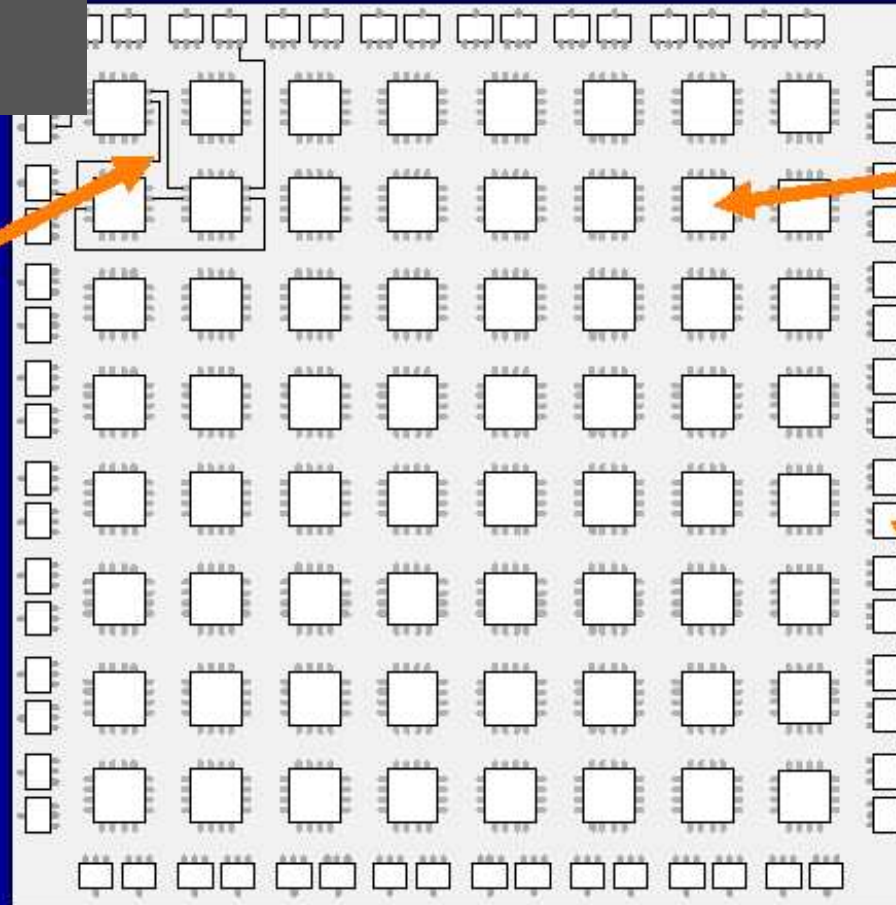
GRACE = GRAPE + RACE

# Hardware

Programmable Interconnect

Configurable Logic Blocks

Programmable I/O

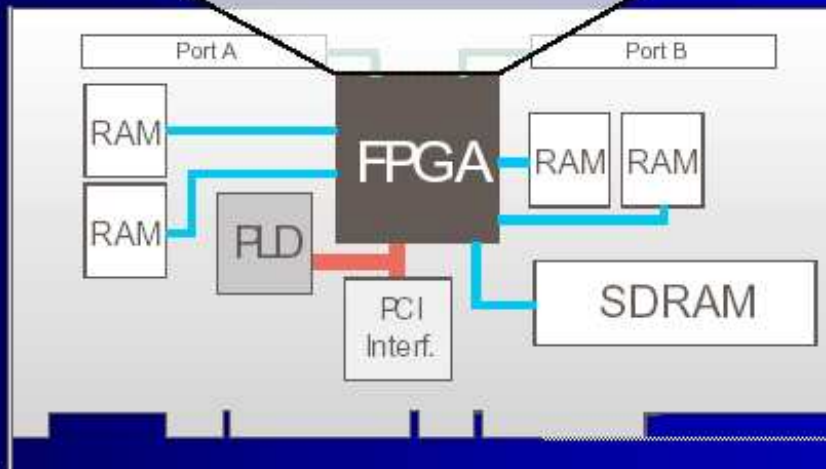
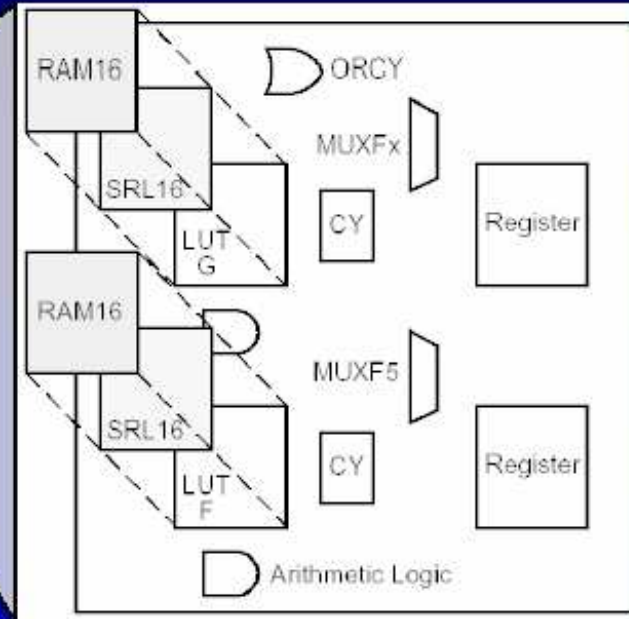
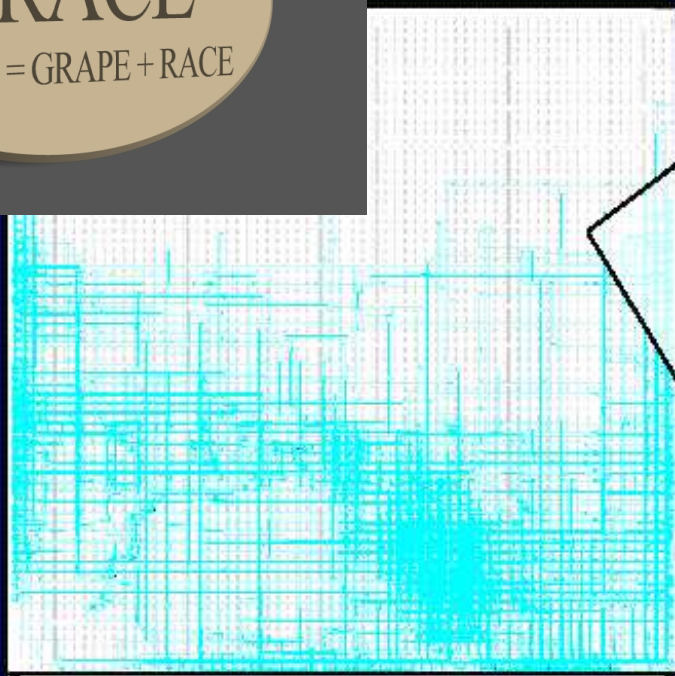




# FPGA-Plattform MPRACE

## GRACE

GRACE = GRAPE + RACE



[lienhart@ti.uni-mannheim.de](mailto:lienhart@ti.uni-mannheim.de)

GRACE

GRACE = GRAPE + RACE

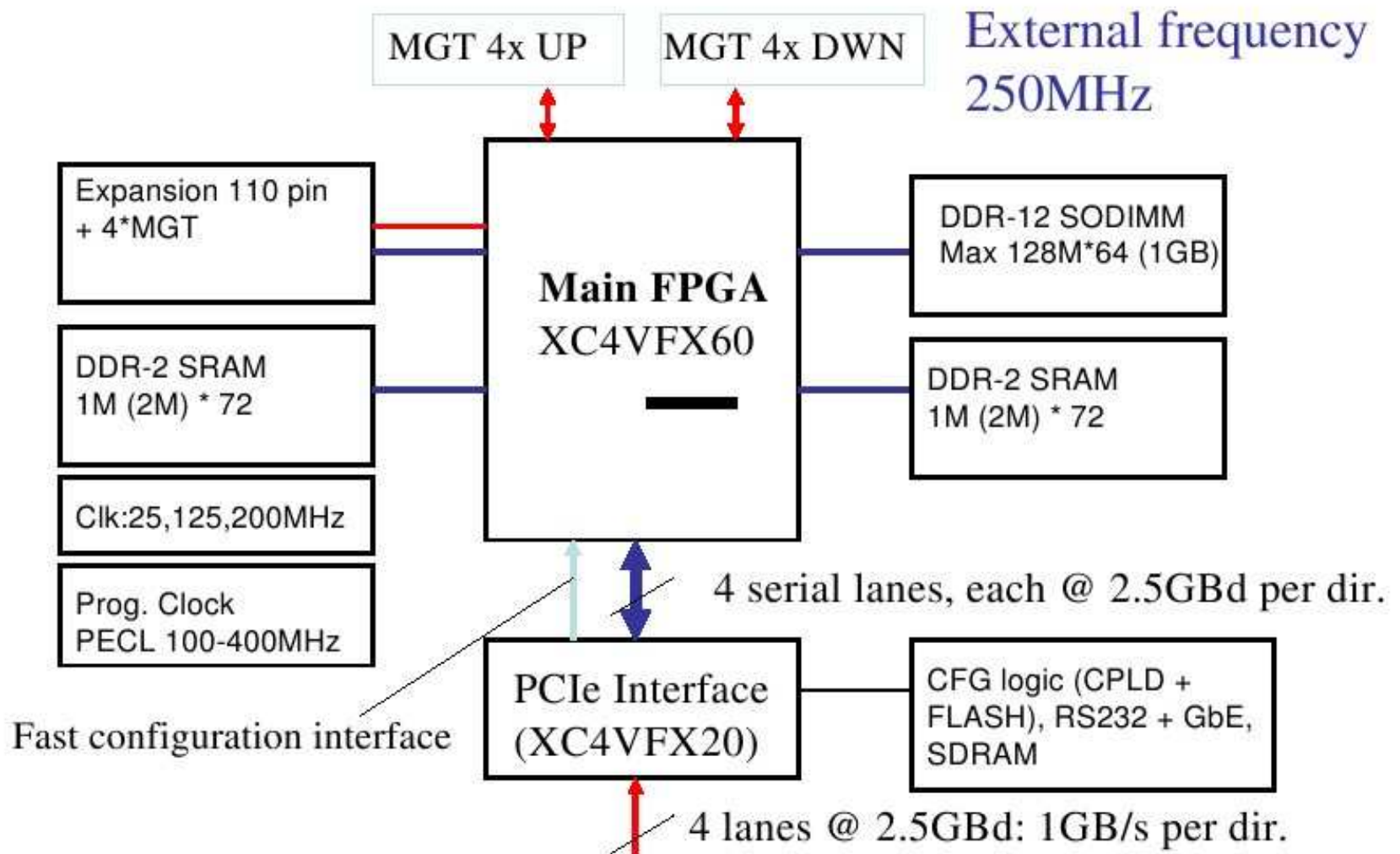
Reconfigurable

MPRACE-2

Accelerator



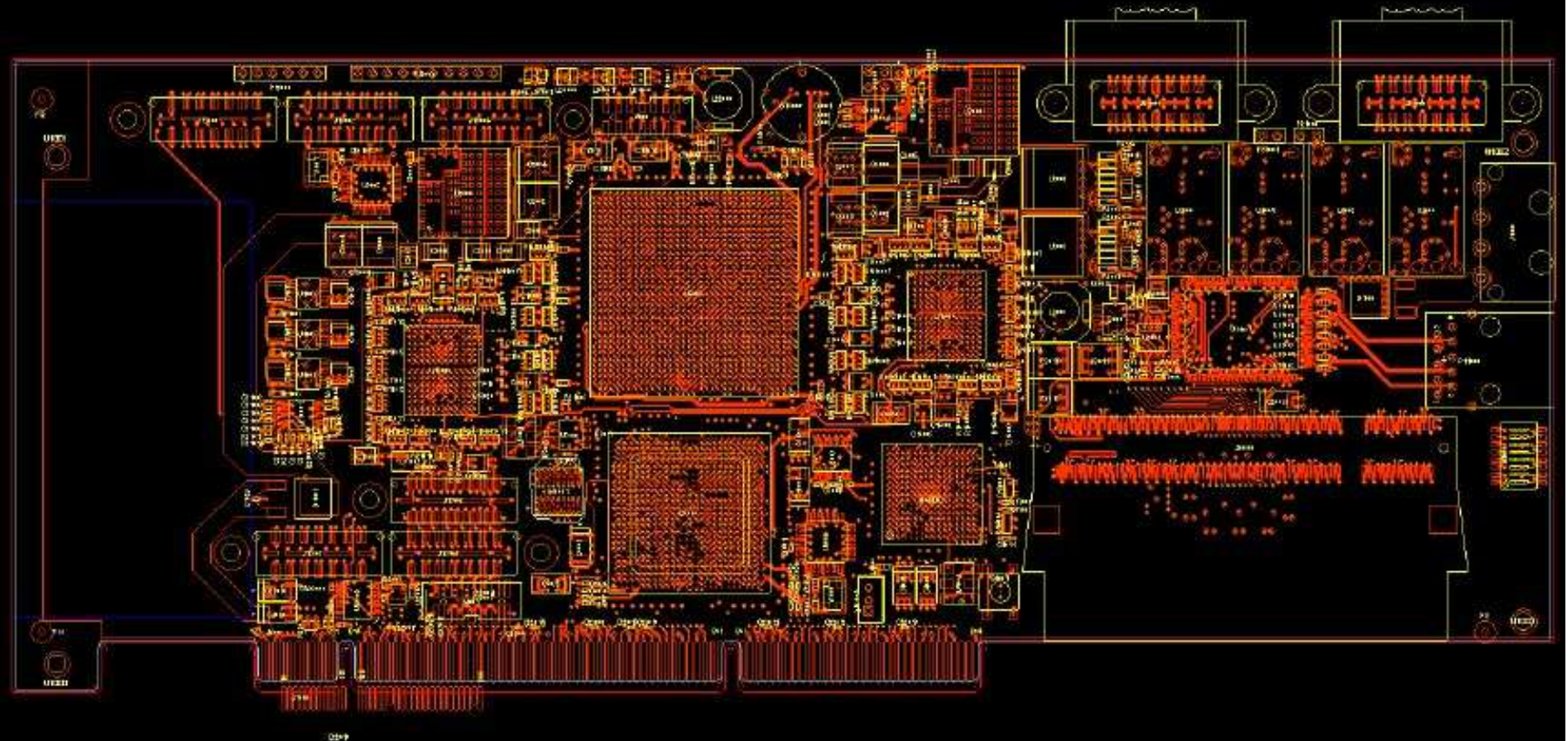
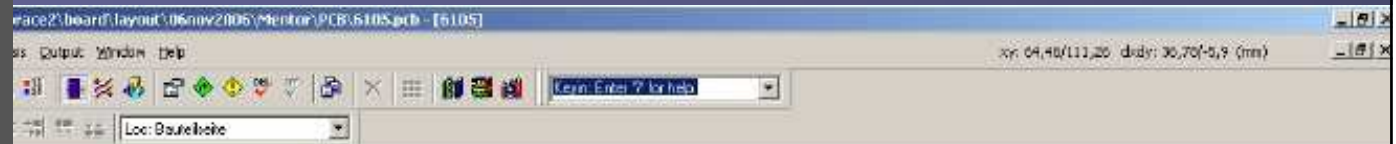
# MPRACE-2 Block diagram





# GRACE

GRACE = GRAPE + RACE

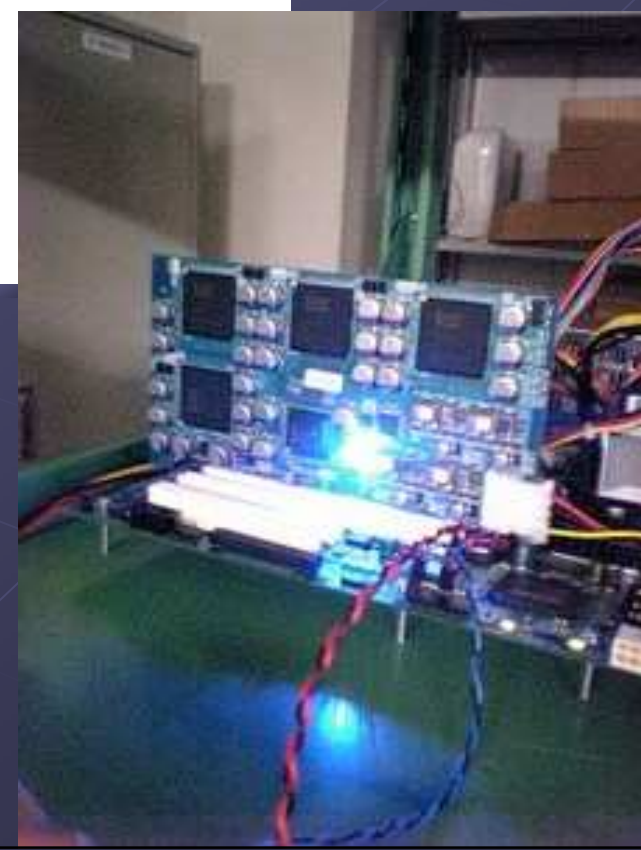


Dez. 0

- PCIe core
  - resource hungry => suitability of XC4VFX20 initially unclear
  - PCI-X version added as „plan-B“
  - Current core version incompatible to previous one
  - Late modification of reference clock (125 MHz => 250 MHz)
  - Status: 4 lane PCIe + 4 lane AURORA + simple DMA fit into XC4VFX20-11 (faster speed grade)
- PCB
  - High density
    - Many differential and/or impedance controlled tracks
    - Large number of decoupling caps and filters
    - Many supply voltages
  - 16 layers, plugged vias, 80µm min track widths

Expected Performance MPRACE-2 250 MHz clock:  
50 Gflop/s with 3 pipelines, support for Ahmad-Cohen neighbour scheme and SPH.

Note: PROGRAPE-4 by RIKEN (Hamada et al. 06)  
250Gflop/s for 2000 US-\$ ! (low precision)  
e.g. molecular dynamics





- HDL Framework plus Perl-based code generator provide powerful tool for automated FPGA design
- Very complex calculation units can be designed with a software-like coding style
- High flexibility due to embedded control signal handling
- Resulting code has quality of hand-coded sources
- Framework is easily extendable

**=> Building floating-point pipelines for simulation gets as easy as writing software**

```
SoftCore = racegrav_create_core(RACEGRAV_FPGACORE, 0);  
...  
racegrav_set_epsilon(SoftCore, eps);  
racegrav_set_particles(SoftCore, n_j, x_j, v_j, m_j)  
...  
racegrav_calc_direct_sum(SoftCore, n_i, ip, 0, n_j,  
                          p_i, a_i, adot_i);  
...  
racegrav_destroy_core(SoftCore);
```



# GRACE

GRACE = GRAPE + RACE

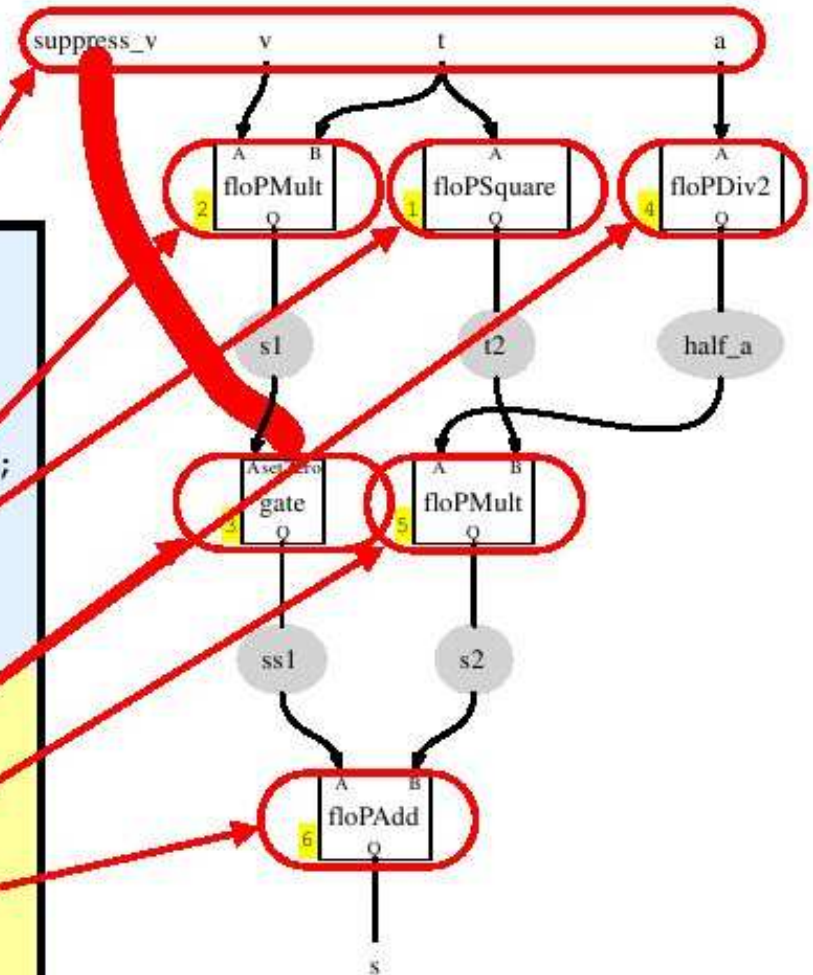
$$s = \begin{cases} \frac{1}{2} a t^2 + v t & : \text{ suppress\_v} = 0 \\ \frac{1}{2} a t^2 & : \text{ suppress\_v} = 1 \end{cases}$$

```
entity distance;
clock clk;

# parameters
floPValDef fpDef(signifLength=>24,
  expLength=>8, useSign=>1, useIsZero=>0);

# inputs
signal (suppress_v);
floPVal (v,a,t) (fpDef);

# calculate
t2 = <floPSquare> t;
s1 = v <floPMult> t;
ss1 = gated(s1, suppress_v);
half_a = <floPDiv2> a;
s2 = half_a <floPMult> t2;
s = ss1 <floPAdd> s2;
```



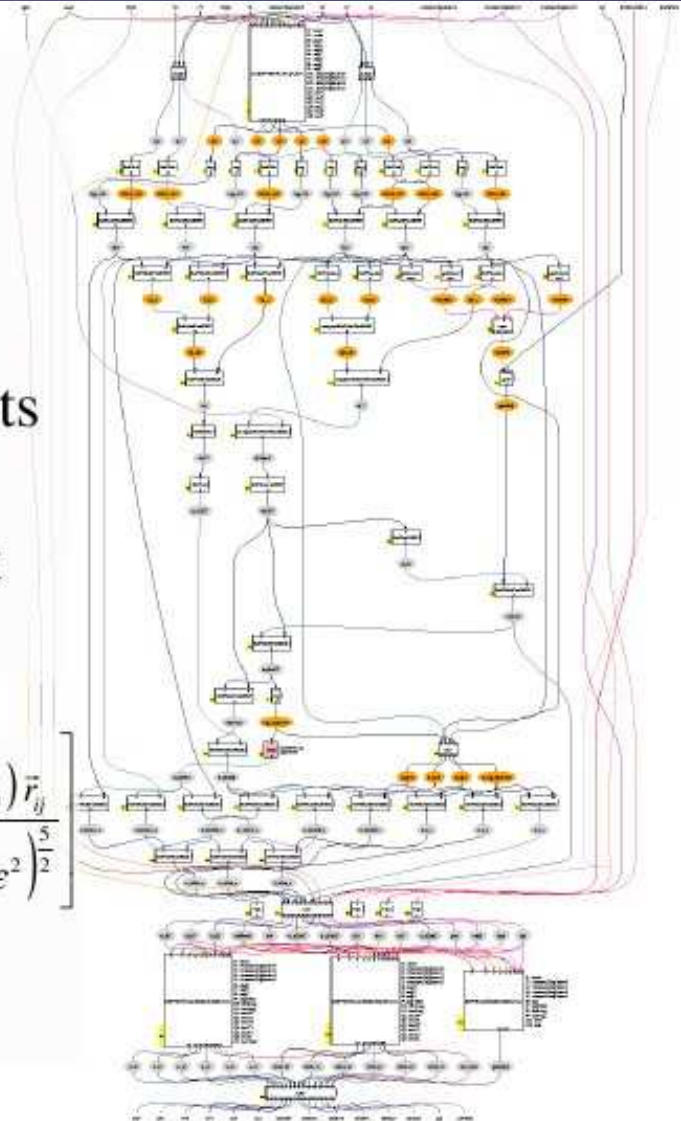
# GRACE

GRACE = GRAPE + RACE

- Designs for Ahmad-Cohen neighbor scheme
- Neighborlist processing of gravity interaction similar to SPH design
- Processing of shared neighbor lists  
 $\#i\text{Particles} \geq 2 * \text{nrPhysicalPipes}$
- Pipeline provides  $a$ ,  $a\text{Dot}$  and  $\text{pot}$
- software integration not finished

$$\bar{a}_i = \sum_j Gm_j \frac{\vec{r}_{ij}}{\left(|\vec{r}_{ij}|^2 + \epsilon^2\right)^{\frac{3}{2}}}, \quad \dot{\bar{a}}_i = \sum_j Gm_j \left[ \frac{\vec{v}_{ij}}{\left(|\vec{r}_{ij}|^2 + \epsilon^2\right)^{\frac{3}{2}}} - \frac{3(\vec{v}_{ij} \cdot \vec{r}_{ij}) \vec{r}_{ij}}{\left(|\vec{r}_{ij}|^2 + \epsilon^2\right)^{\frac{5}{2}}} \right]$$

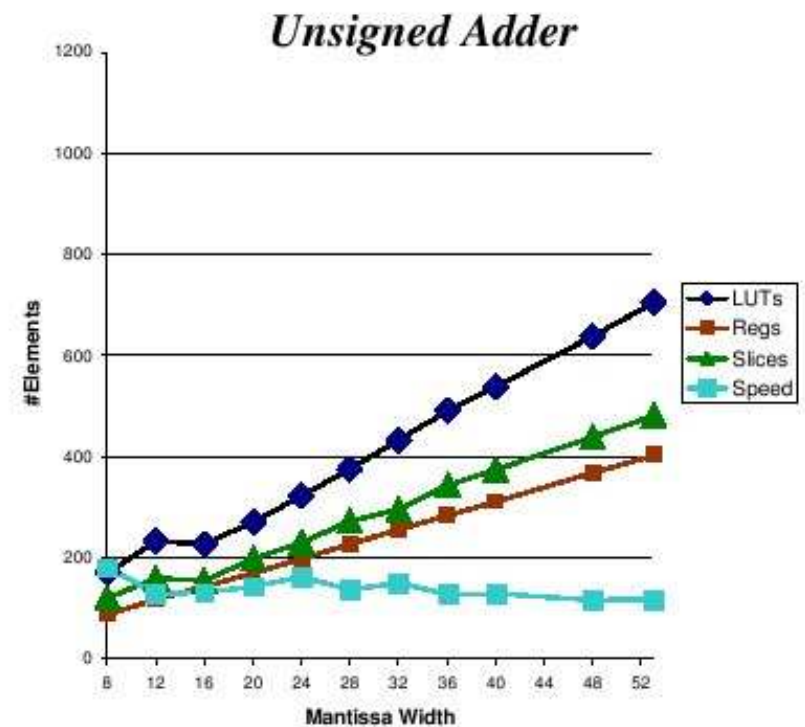
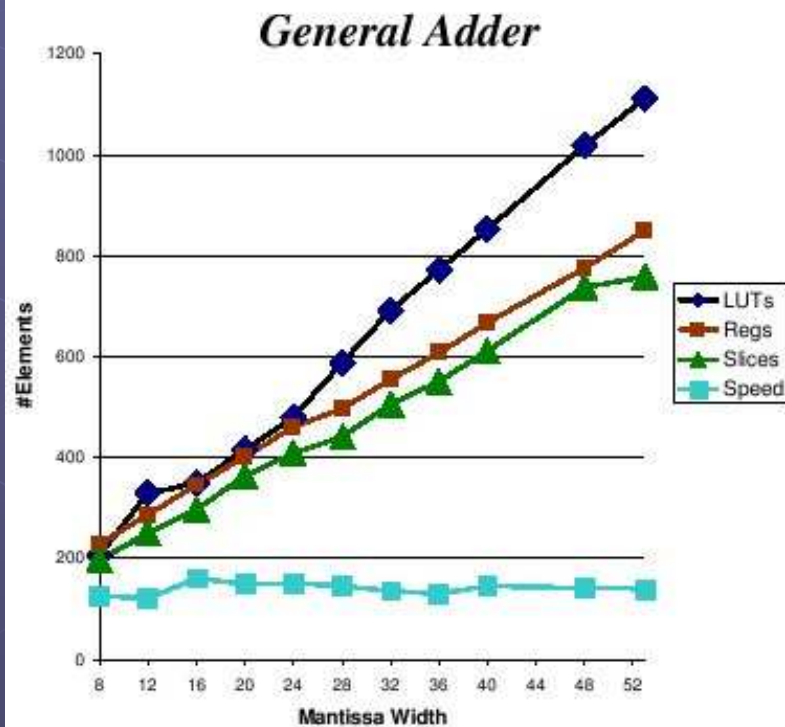
$$\phi_i = \sum_j Gm_j \frac{1}{\left(|\vec{r}_{ij}|^2 + \epsilon^2\right)^{\frac{1}{2}}}$$



# GRACE

GRACE = GRAPE + RACE

- Some extensions for new features of pipeline generator (e.g. for multi-precision arithmetic)
- Now support up to double-precision (but extensive logic consumption)

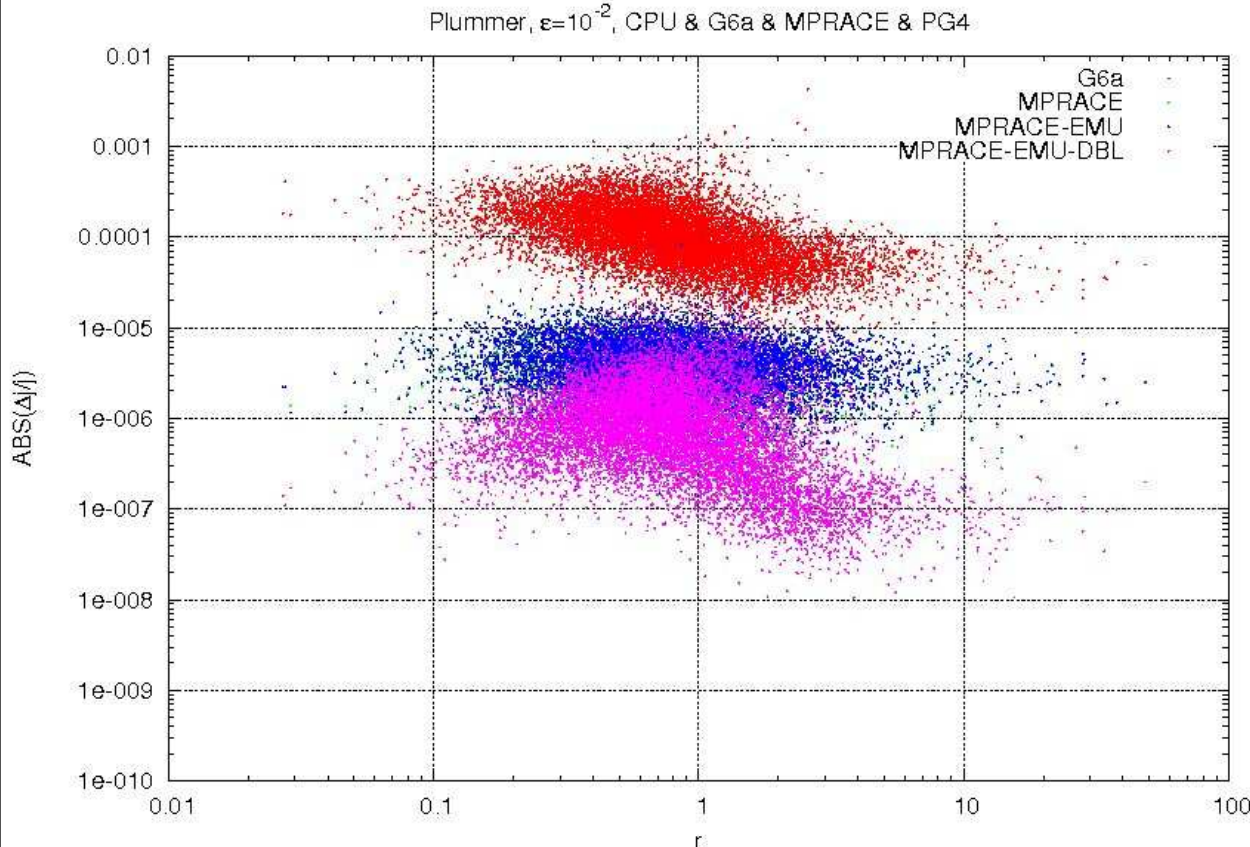
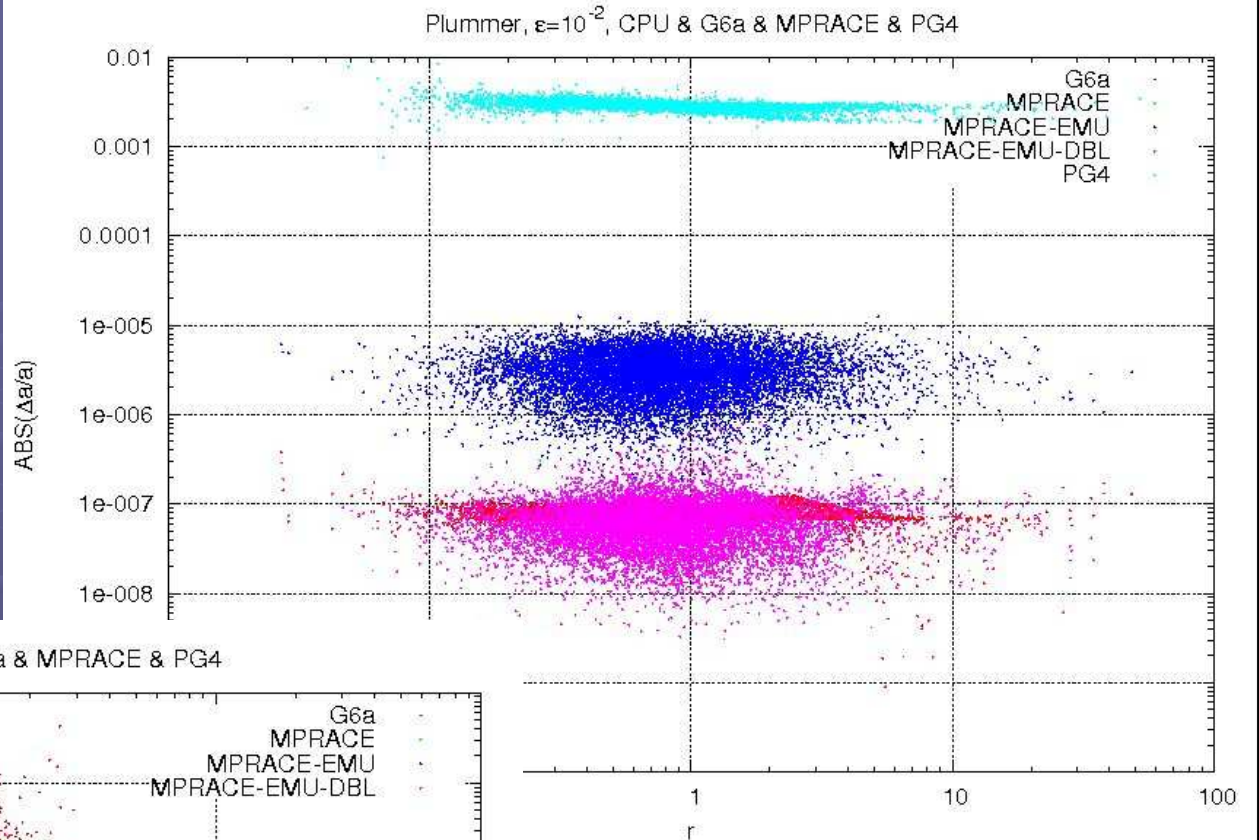




# Accuracy force

**Turquoise: Progrape-4**  
**Red: GRAPE-6**  
**Blue: MPRACE single prec.**  
**Pink: MPRACE double prec.**

# Accuracy jerk



**MPRACE accuracy can be adapted and improved compared to GRAPE!**



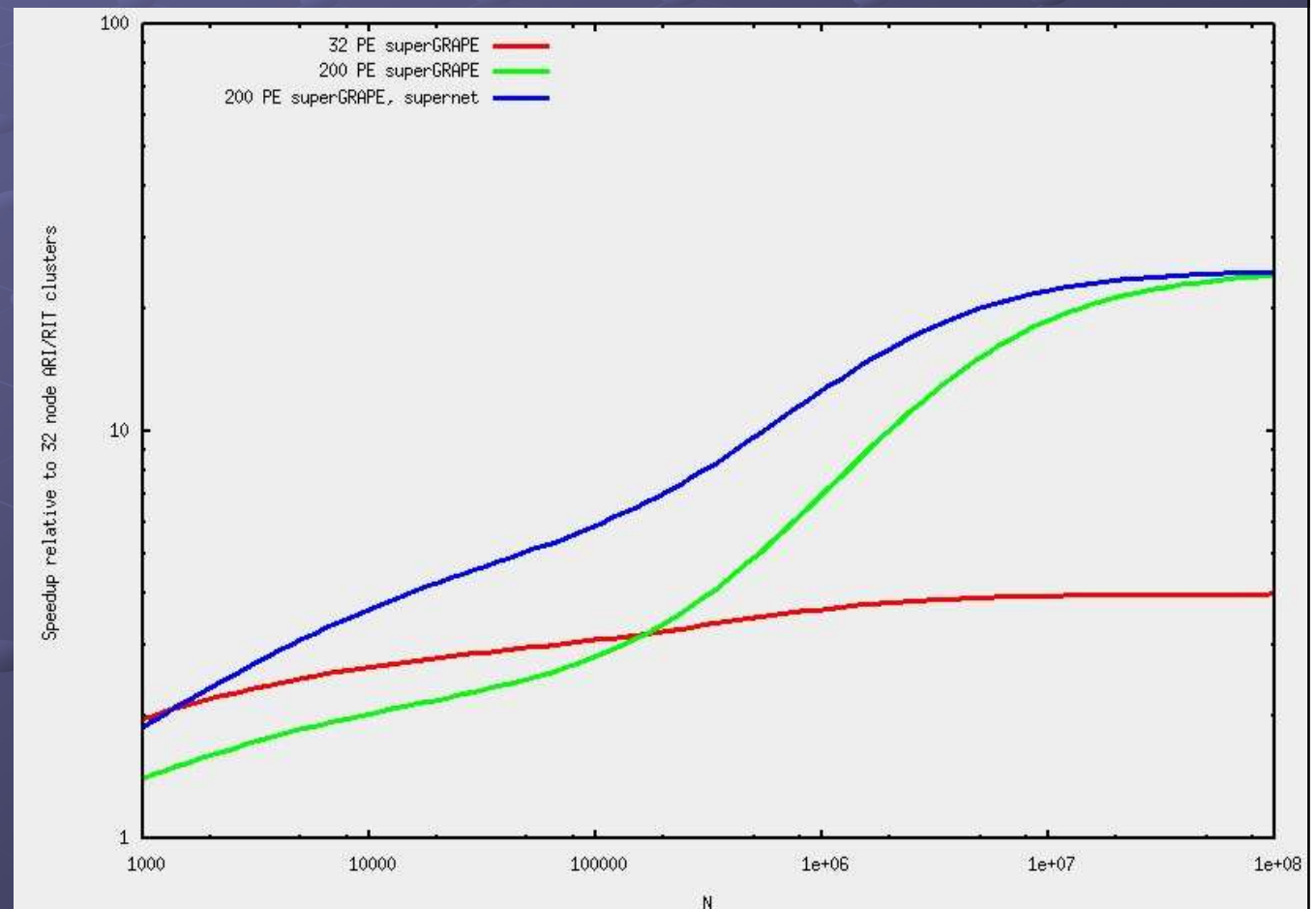


# How to build a 50 Tflop/s machine for < 2 Million US-\$ ?

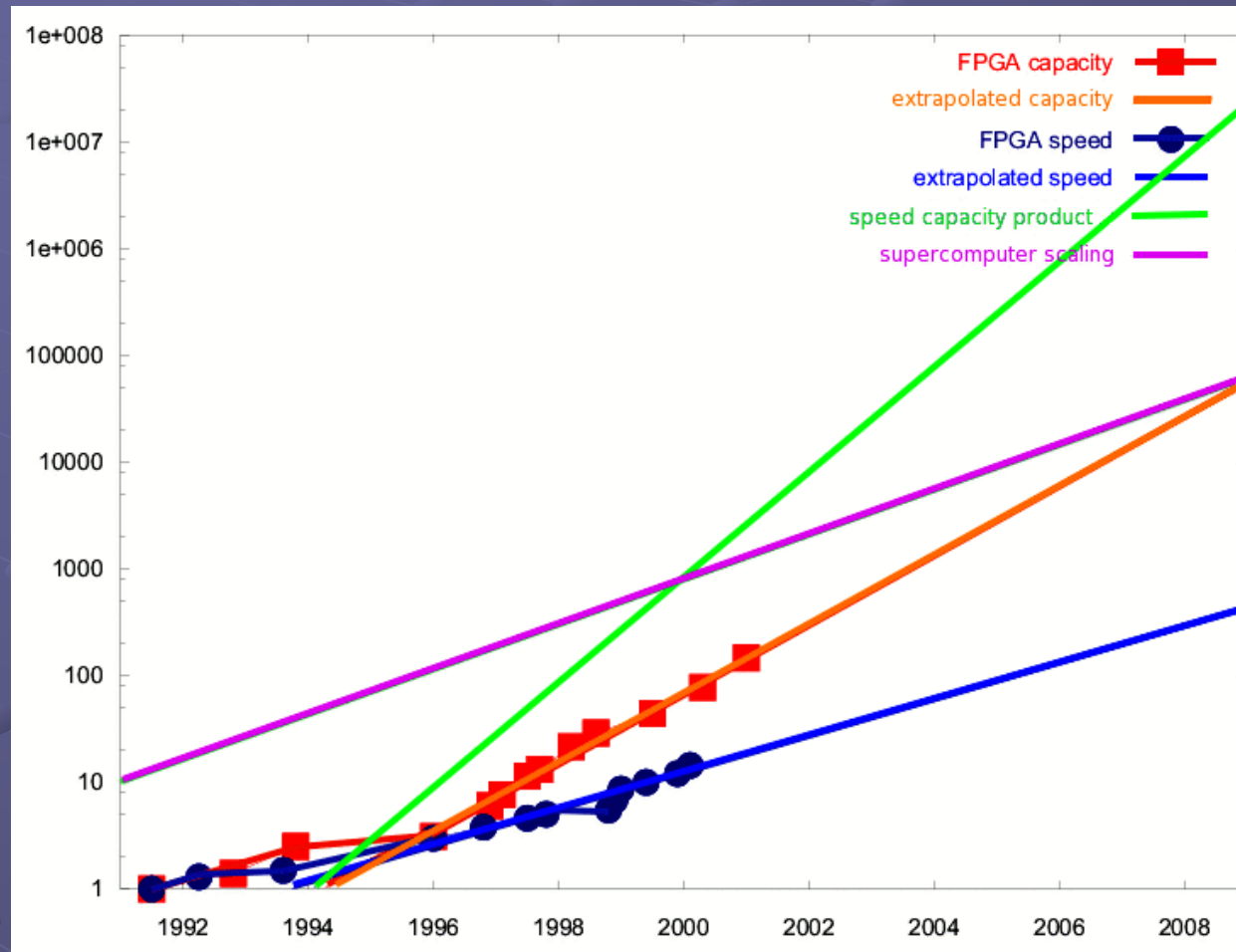
- 200 standard nodes, AMD Opteron or Pentium Xeon
- 200 super-GRAPes (250 Gflop/s) *MPRACE*, *GRAPE-DR*, *PROGRAPE*
- Super-Network (e.g. AMD Hypertransport, links with *MPRACE 2*)  
(AMD excellence centre with Univ. of Mannheim, U. Brüning)

*Such computer competes with general purpose supercomputers on the Petaflop/s scale.*

Used: Performance Model of Harfst et al. 06

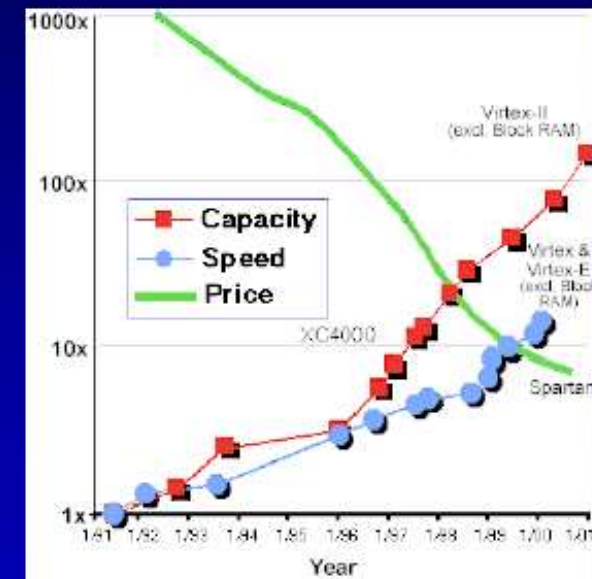
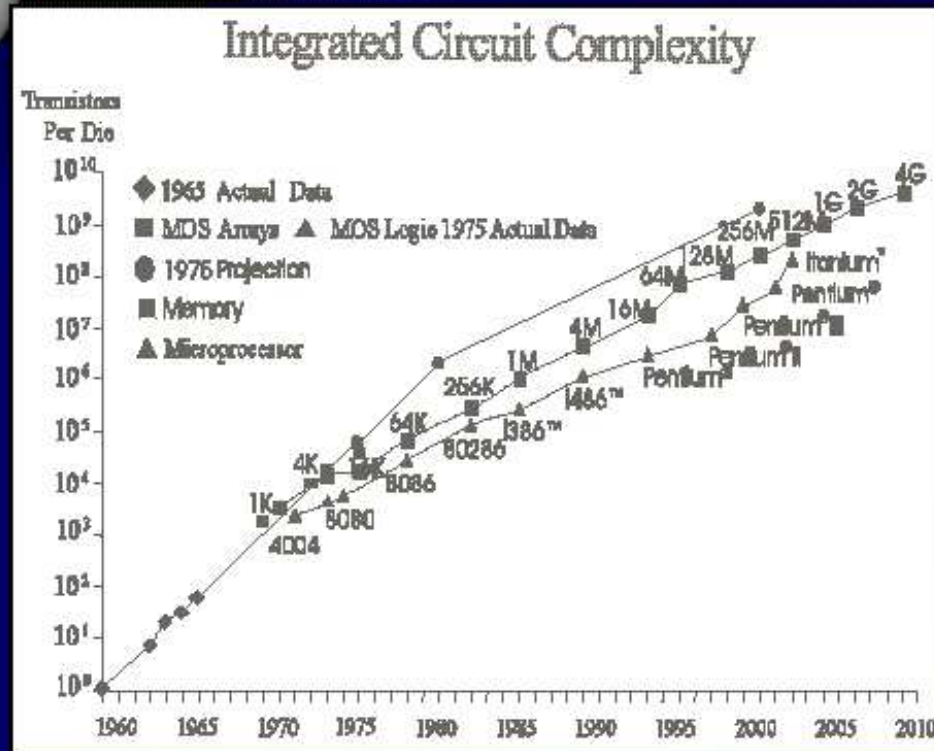


# Future Potential of FPGA

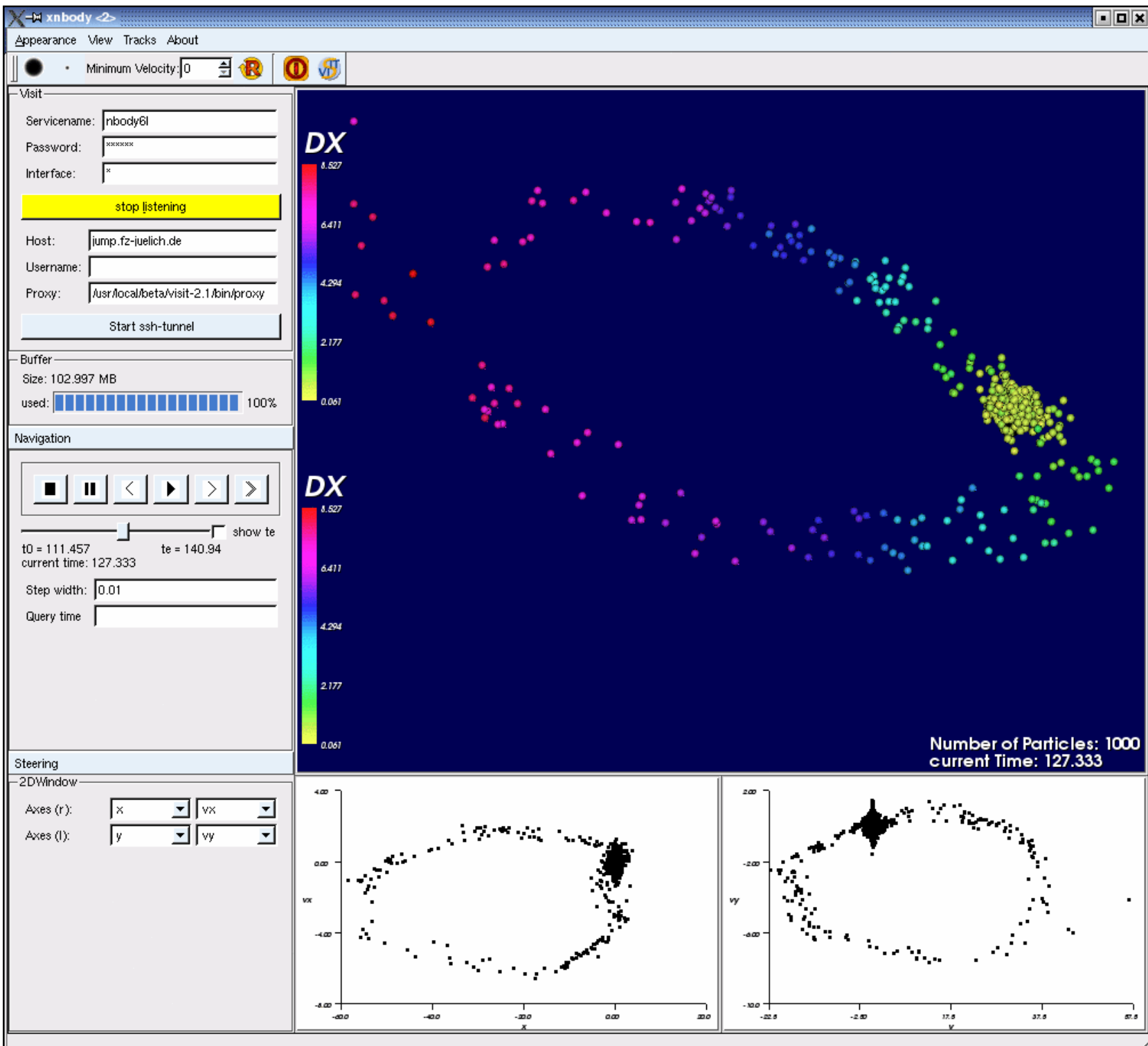


FPGA can easily outperform supercomputers, performance gap grows

# Future Prospects



- Moores Law concerning increase of transistors still valid
- Capacity of FPGA is directly proportional to transistor count
- Performance of FPGA-applications profits both of switching speed and the amount of logic resources



Visualisation

With  
S. Dominiczak  
W. Frings

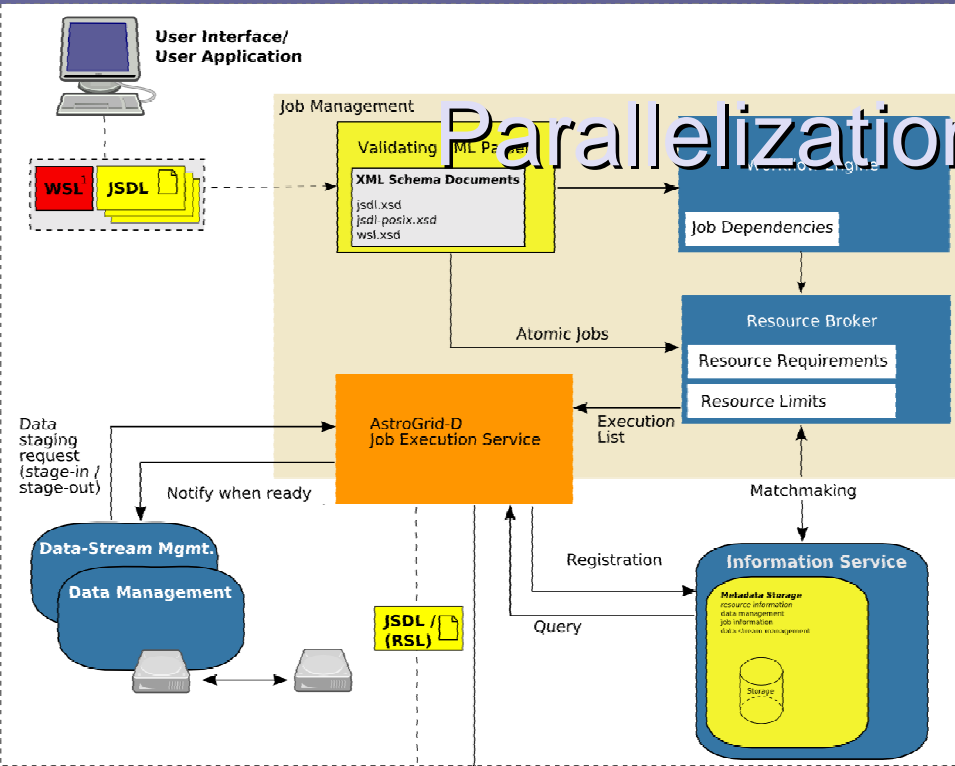
John-von-  
Neumann  
Institute for  
Computing  
(NIC)  
FZ Jülich

google for

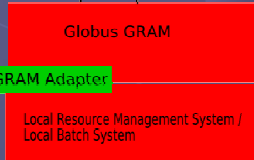
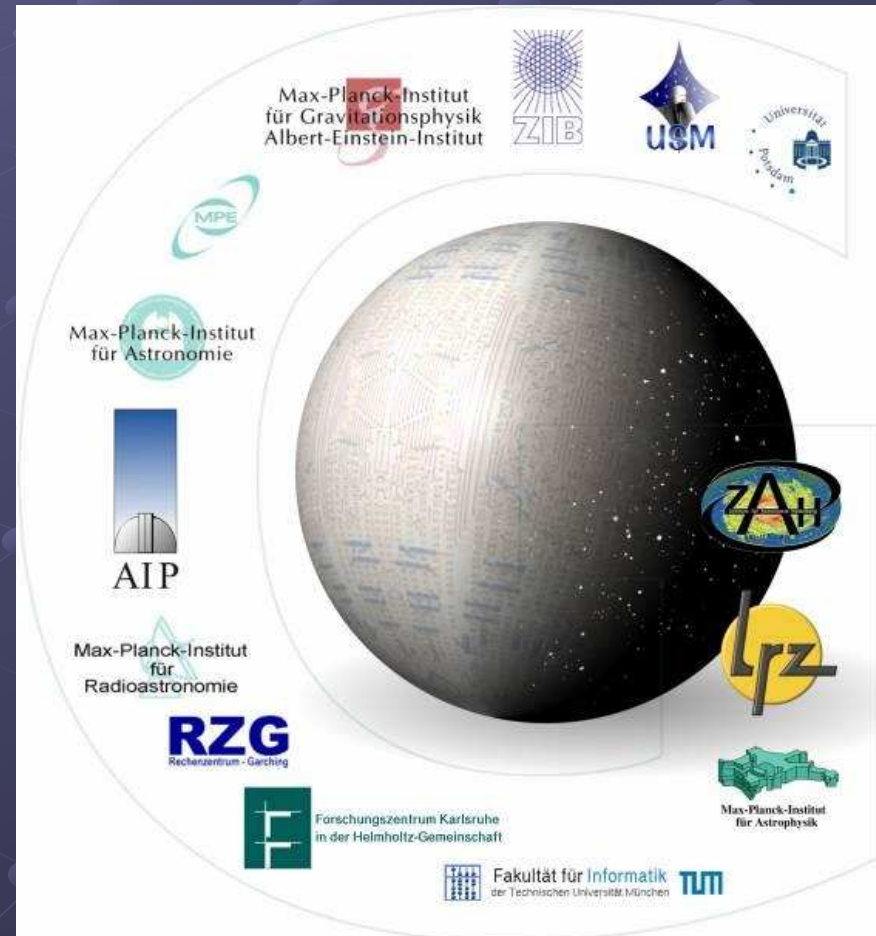
xnbody



# Parallelization and Software



GACG = German Astronomy  
Community Grid, NBODY6++ is one  
of some 15 use cases...



## The Future

- Grid Computing
- GRAPE-DR
- NBODY6++ on GRAPE
- NBODY on the GRID

1. Workflow Specification Language (not specified yet)

```
=====
JSDL Document
=====
```

```
<?xml version="1.0"?>
<jsd1:Job Definition xmlns="http://www.gac-grid.de/namespaces/jobmanagement"
  xmlns:jsdl="http://schemas.ggf.org/jsdl/2005/11/jsdl"
  xmlns:jsdl-posix="http://schemas.ggf.org/jsdl/2005/11/jsdl-posix"
  xmlns:xsi="http://www.w3.org/2001/XMLSchema-instance">
  <jsd1:JobDescription>
    <jsd1:JobIdentification/>
    <jsd1:JobName>Example Nbody6++ run</jsdl:JobName>
    <jsd1:Description>
      This is a simple example for evaluating JSDL with Nbody6++ UC
    </jsdl:Description>
    </jsdl:JobIdentification/>
    <jsd1:Application>
      <jsd1:ApplicationName>nbody6</jsdl:ApplicationName>
      <jsd1-posix:POSIXApplication>
        <!-- PATH to files given by globus gatekeeper plus user specified --!>
        <jsd1-posix:Executable>nbody6</jsdl-posix:Executable>
        <jsd1-posix:Input>in1000,comment</jsdl-posix:Input>
        <jsd1-posix:Output>nbody6,out</jsdl-posix:Output>
      </jsdl-posix:POSIXApplication>
    </jsdl:Application>
    <jsd1:Resources>
      <!-- depends on the job -->
    </jsdl:Resources>
    <!-- Stage in the parameter input file -->
    <jsd1:DataStaging>
      <jsd1:FileName>in1000,comment</jsdl:FileName>
      <jsd1:CreationFlag><jsd1:CreationFlag>
      <jsd1>DeleteOnTerminationFlag>false</jsdl>DeleteOnTerminationFlag>
      <jsd1:Source>
        <jsd1:URI>http://myhost,ari,uni-heidelberg.de/files/in1000,comment</jsdl:URI>
      </jsdl:Source>
    </jsdl:DataStaging>
    <!-- Stage out the stdout (log)file -->
    <jsd1:DataStaging>
      <jsd1:FileName>nbody6,out</jsdl:FileName>
      <jsd1:CreationFlag>overwrite</jsdl:CreationFlag>
      <jsd1>DeleteOnTermination>false</jsdl>DeleteOnTermination>
      <jsd1:Target>
        <jsd1:URI>protocol://gridhost,ari,uni-heidelberg.de</jsdl:URI>
      </jsdl:Target>
    </jsdl:DataStaging>
    <!-- Binary files can be staged out here -->
  </jsdl:JobDescription>
</jsdl:JobDefinition>
```

NBODY6++  
as a  
portable  
JSDL Job

User Interface  
will be based  
on Java or XML