

プラズマ粒子シミュレーションのメニーコアプロセッサ向け 最適化手法の探求

木倉 佳祐^{1*}、三宅 洋平¹、臼井 英之¹、中島 浩²

1. 神戸大学大学院システム情報学研究科、2. 京都大学学術情報メディアセンター

*E-mail: kikkun28@stu.kobe-u.ac.jp

近年、1チップ上に数10個のCPUコアを搭載したIntel Xeon Phiなどのメニーコアプロセッサが登場し、注目されている。Xeon Phiではx86ベースのCPUアーキテクチャに準拠した命令セットが使用できるため、ソフトウェア移植にかかるコストが比較的低いという利点がある。一方で、不規則な演算フローとデータアクセスパターンを有する一部のアプリケーションでは、メニーコアプロセッサ本来の性能を引き出すのは容易ではない。本研究では、そのようなアプリケーションの題材として、Particle-In-Cell (PIC) 法に基づくプラズマ粒子シミュレーションを取り上げ、メニーコアプロセッサ向けの高効率実装法を探求する。

プラズマ粒子シミュレーションでは、領域内の任意の位置に分布する多数の荷電粒子に関しては運動方程式、空間格子点上に定義された電磁場に関してはマクスウェル方程式をそれぞれ相互に解き進める。本研究の第一の目標は、それら二つの方程式をつなぐ、プラズマ粒子による電流の計算ルーチンについて、 10^2 並列度までスケール可能なマルチスレッド実装法を見出すことである。プラズマ電流ルーチンでは、各粒子がつくる電流要素を、それらの位置座標に隣接する格子点上の電流配列に分配する。粒子位置は実行時まで未知数であるため、単純に粒子ループをOpenMPで並列化すると電流配列上でアクセス競合が生じ、正しい電流値が得られない。これを解決する手法として、各スレッドで複製されたprivateな配列上で電流計算を行い、最後にそれらの総和をとることで全体の電流を求める粒子分割法が良く用いられてきた。しかしprivate配列のためのメモリ量や、電流の総和計算にかかるコストを考慮すると、 10^2 並列度のマルチスレッド電流計算では、粒子分割法は有効な方法とは言えない。

そこで本研究では、あらかじめ位置座標に基づく粒子ソーティングを実施した上で、粒子が所属する領域に応じて処理を分散する領域分割法を採用した。この方式では、分割された小領域の境界付近を除いては、電流配列上アドレスはスレッド間で重複しないため、アクセス競合を回避できる。さらに、分割された領域の境界付近におけるアクセス衝突を避けるための実装として、①境界付近のみにバッファ領域を用意する方法（糊しろ法）と、②隣接する小領域が互いに異なる色を持つように色付けを行ったうえで、同色で塗られた小領域同士を並列的に処理する方法（色付け法）、の2通りを実装した。これらの手法の評価を行った結果、従来の粒子分割法より優れたスケーラビリティが得られることや、②の色付け法がより高効率であるとの結果を得た。一方で、領域分割法において必須となる粒子ソーティングによるオーバーヘッドを無視できないことも判明した。これについては今後更なる検討が必要である。

上記と並行して、メニーコアプロセッサ向け最適化のもう一本の軸となるSIMD演算活用に関する検討も開始した。電流計算ルーチンでは、粒子位置に依存する複雑なデータアクセスパターンが、コンパイラによるSIMD命令発行の阻害要因となっている。SIMD命令発行を促進するために必要な、電流計算最内ループ構造とデータ構造の変更について検討を進めており、その進捗状況について議論を行う。