

SPECFEM3D Cartesianの地球シミュレータ向けチューニング

今任嘉幸¹、津田健一²、坪井誠司¹、杉山大祐¹、上原均¹、加藤季広³

1:海洋研究開発機構 地球情報基盤センター 2:清水建設株式会社技術研究所 3:日本電気株式会社

1. 研究の背景

SPECFEM3Dは、スペクトル要素法を用いた数値解法により、理論地震波形を計算する地震波伝播計算プログラムである。

過去、地球シミュレータでは、SPECFEM3D Globeコードを用いた全球地震波伝播シミュレーションにより、多くの地球内部構造研究が行われてきた(Komatitsch et al., 2005¹; Tsuboi et al., 2003²)など。

一方で、例えば、東北地方太平洋沖地震といったプレート境界型巨大地震の発生メカニズムを解明するためには、局地的な地震動計算を行うプログラムSPECFEM3D Cartesianに含まれている動力学モデルに基づいた断層破壊を考慮する必要がある(Tsuda et al., 2017³)

しかしながら、SPECFEM3D Cartesianは、地球シミュレータでの実績がなく、またスカラー計算機向けに開発されていることもあり、ベクトル計算機向けのチューニングを行う必要がある。本研究では、SPECFEM3D Cartesianコードを地球シミュレータへ移植し、チューニングを実施した。また、チューニングによる効果を評価し、さらにスカラー機との性能比較を行った。

2. 地球シミュレータ(ES)の概要

現在の地球シミュレータ(ES)は、2015年にNEC SX-ACEに更新された。以下にESのスペックを示す。

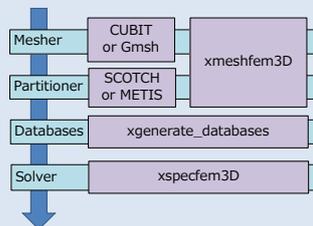
コア	ADB容量	1 MB
	演算性能	64 GFLOPS
CPU	コア数	4
	演算性能	256 GFLOPS
	メモリバンド幅	256 GB/s
ノード	CPU数	1
	メモリ容量	64 GB
システム	総ノード数	5,120
	総CPU数(コア数)	5,120 (20,480)
	総演算性能	1.3 PFLOPS
	ネットワーク性能	4 GB x 2

3. ESへの移植

SPECFEM3D Cartesianの計算処理の流れを右図に示す。

本研究では前処理プログラムのMesher, Partitioner, DatabasesはIntel CPU上で実行することとし、地震波伝播計算を行うSolverのみをESへ移植した。

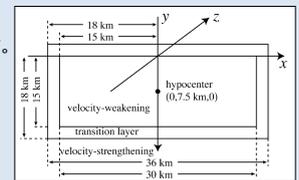
地震動シミュレーションの処理の流れ



4. チューニングで使用したデータ

SPECFEM3D CartesianのES向けチューニングに用いたデータを右図に示す。チューニングには、動力学モデルに基づいた断層破壊を含む例題TPV103⁴)を使用した。

ステップ数: 9,600
スペクトル要素数: 2,587,500



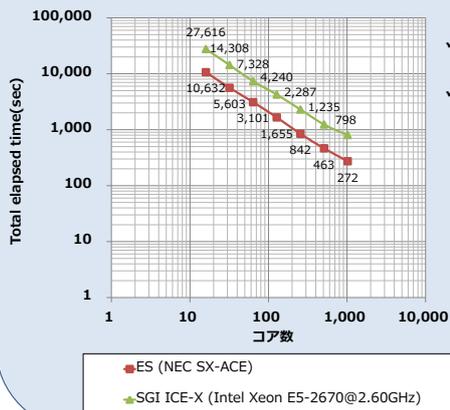
仮定する断層形状 (例題TPV103)

5. ES向けチューニング

SPECFEM3D Cartesianについて、性能分析を実施した結果、地震波伝播計算ルーチン及び動力学断層破壊計算ルーチンが高コストとなっていた。各々のルーチンは、ベクトル化が十分ではなく、ベクトル化が適用されていてもループ長が著しく短い箇所が多く存在していた。そこで、ベクトル化促進、ベクトル長延長といった最適化を適用した(具体的なチューニング適用例は右で示す)。

チューニングの結果、64MPI並列で実行効率は**0.21%から8.1%まで向上**し、123,828秒から3,125秒と**39.6倍の高速化**を実現した。

更に、SX-ACE(ES向けチューニングコード)とIntel Xeon E5-2670 (オリジナルコード) でストロングスケーリングを測定した。測定結果を下に示す。



- ✓ 同コア数では、SX-ACEが**約2.5倍程度高速**。
- ✓ SX-ACE、Intel CPUともに1,000並列程度まで良くスケール。

今回実施したチューニング適用例(動力学断層破壊計算ルーチン)を以下で紹介する。

(オリジナルコードにおける動力学断層破壊計算の抜粋)

```
[...]
do i=1,bc%nglob ベクトル化不可
  Vf_new(i)=rtsafe(0.0_CUSTOM_REAL,Vf_old(i)+5.0_CUSTOM_REAL, ... &
    bc%rsf%V0(i),bc%rsf%a(i),bc%rsf%b(i), ...)
+----- enddo
! second pass
V== A bc%rsf%theta = theta_old
V== A tmp_Vf(:,) = 0.5_CUSTOM_REAL*(Vf_old(:,) + Vf_new(:,))
call rsf_update_state(tmp_Vf,bc%dt,bc%rsf)
+----- do i=1,bc%nglob ベクトル化不可
  Vf_new(i)=rtsafe(0.0_CUSTOM_REAL,Vf_old(i)+5.0_CUSTOM_REAL, ... &
    bc%rsf%V0(i),bc%rsf%a(i),bc%rsf%b(i), ...)
+----- enddo
[...]
```

上記のオリジナルコードでは、要素毎にサブルーチンrtsafeが呼び出され、この中で反復回数最大200回の処理が行われている。最内ループ内でreturn文が呼び出されているため、ベクトル化が阻害されている。そこで、要素のループ(上図ループ)をサブルーチンrtsafe内に移動させ、更に反復回数不定のループと入れ替えて最内とすることでベクトル化を促進した。反復回数が要素毎にどの程度ばらつくかにもよるが、適当なサイズ(ベクトル長程度)でブロッキングし、可能な限り無駄にループが回らないように修正した。

また、その他ルーチンについて下記の最適化を実施した。

- ✓ 要素のループを最内とするような書き換え。
- ✓ 配列構文をループに書き換え、実行効率が低い最内側ループに対して、ループ展開を行い、よりループ長の長い外側のループに対してベクトル化。
- ✓ リストアアクセスが行われているために、コンパイラが依存関係の有無を判断できずベクトル化できていないループに対して、nodep指示行を付加し、ベクトル化。

参考

- 1) Komatitsch, D., Tsuboi, S., and Tromp, J., The spectral-element in seismology, in Seismic Earth: Array analysis of broadband seismograms, Geophys. Monograph 157, AGU, 205-227, 2005.
- 2) S. Tsuboi, D. Komatitsch, C. Ji, J. Tromp, Broadband modeling of the 2002 Denali Fault earthquake on the Earth Simulator, Phys. Earth Planet. Inter., Vol.139, p.305-312, 2003.
- 3) K. Tsuda, S. Iwase, H. Uratani, S. Ogawa, T. Watanabe, J. Miyakoshi and J. P. Ampuero, Dynamic rupture simulations based on the characterized source model of the 2011 Tohoku earthquake PAGEOPH, Topical Volume on "Best Practices in Physics-based Fault Rupture Models for Seismic Hazard Assessment of Nuclear Installations" doi:10.1007/s00024-016-1446-1, 2017.
- 4) https://github.com/geodynamics/specfem3d/blob/master/EXAMPLES/fault_xa/mples/tpv103/description.pdf

6. まとめと今後の課題

- ✓ 地震波伝播計算プログラムSPECFEM3D CartesianをESに移植し、地震波伝播計算ルーチン及び動力学断層破壊計算ルーチンに対して、ES向けチューニングを実施した。その結果、64MPI並列で実行効率は8.1%まで向上し、39.6倍の高速化を実現した。
- ✓ Intel Xeon E5-2670 (オリジナルコード)と比較して、SX-ACE (ES向けチューニングコード)では同コア数で約2.5倍高速であることがわかった。今後、ES向けチューニングコードを使用することで、より効率良く複数パラメータでの断層破壊シミュレーションを実施することが可能となった。
- ✓ SPECFEM3D Cartesianを使用し、動力学断層破壊だけでなく、アジョイントトモグラフィ等の計算をESで効率的に行えるように更にチューニングを進めたい。