

メニーコア型クラスタ向け高効率プラズマ粒子計算手法の研究

三宅 洋平^{1*}、寸村 良樹²、木倉 佳祐²、中島 浩³

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

*E-mail: y-miyake@eagle.kobe-u.ac.jp

我々は宇宙、核融合、プロセスの各プラズマ関連分野で幅広く用いられている代表的なプラズマシミュレーション手法である、Particle-In-Cell (PIC) 法の、メニーコア型クラスタ向け高効率実装法を探求している。エクサスケール時代の計算機アーキテクチャとして、数10以上の演算コアを有するメニーコア CPU を各計算ノードに配置し、それをノード間ネットワークにより大規模に結合した、メニーコア型スーパーコンピュータが有力視されている。これを受けて、現在 Intel が展開するメニーコアプロセッサである Xeon Phi に着目が集まっている。Xeon Phi に搭載される CPU コアは基本的には x86 アーキテクチャに基づくため、従来のマルチコアプロセッサ向けのプログラムを比較的容易に移植できるという特徴がある。一方で、PIC 計算のような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その本来の性能を引き出すのは容易ではない。

PIC 法に基づく粒子シミュレーションは、プラズマを多数のマクロ荷電粒子、電磁界を計算メッシュ上に離散的に定義された値としてモデル化し、プラズマ粒子と電磁場の相互作用を自己無動着に解き進める。メニーコア型クラスタ上で効率的なプラズマ粒子計算を行うためには、ノード間 (プロセス並列)、ノード内 (スレッド並列)、コア内 (ベクトル化) の各並列レベルにおいて以下のような最適化が必要である。①ベクトル化については、荷電粒子電流計算における電流配列へのアクセスパターンが、個々の粒子位置に依存して間接的かつランダムとなることから、コンパイラによる SIMD 演算命令の生成を阻害していることがわかった。そこでデータ構造やループ構造の変更により粒子情報をセルごとにまとめ、電流配列への書き込み先を複数の粒子間で揃えることでベクトル化を促進する。次に②ノード内並列に関して、2次元方向に領域を分割し、さらに4色に塗り分けたセルブロックごとに粒子をまとめて並列に処理を行うことで、並列書き込み時のアクセス衝突を回避する。また③ノード間並列に際しては、計算領域の均等分割を基本としつつ、各プロセスが本来の割当領域以外に、粒子数が多い他の小領域の計算を手助けする OhHelp 法を用いることで動的負荷分散を実現する。

本発表では、上記の最適化階層ごとにその要点を述べるとともに、メニーコア型クラスタ向け最適化において必須であり、かつ注意深い実装が必要とされる、所属セルに基づく粒子ソーティングについての検討状況を紹介する。