

メニーコア型クラスタ向け 高効率プラズマ粒子シミュレーターの開発

寸村 良樹^{1*}、三宅 洋平²、木倉 佳祐¹、中島 浩³

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

*E-mail: 161x211x@stu.kobe-u.ac.jp

本研究では、Particle-in-cell (PIC) 法に基づくプラズマ粒子シミュレーションの、メニーコア型クラスタ向け高効率実装手法を探求する。次世代の高性能計算機システムとして、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、メニーコア型クラスタが有望視されている。系内に配置した多数の荷電粒子と、格子点上に定義された電磁場の相互作用を解き進めるプラズマ粒子シミュレーションにおいて、メニーコア型計算機システムの性能を引き出すためには、ノード内において高スレッド並列・SIMD最適化を行いつつ、スケーラブルな分散メモリ並列化を同時に実現する必要がある。

メニーコアプロセッサの性能の源泉である SIMD については、粒子データ構造の AOS から SOA への変更やカーネルループ構造の変更により粒子が作る電流計算の処理を所属 Cell ごとにまとめ、電流格子点配列へのアクセスパターンを規則化することで SIMD ベクトル化を可能とする。スレッド並列については、2次元方向に領域を分割し、さらに4色に塗り分けた Cell-Block ごとに粒子をまとめ並列に処理を行う手法を用いることで効率的な処理が可能である。分散メモリ並列に際しては均等領域分割による分散処理を採用しつつ、不均一な粒子分布に起因する負荷不均衡を回避するために動的負荷分散手法 OhHelp を適用する。この OhHelp 法では各計算ノードが本来の担当領域以外に、他の小領域を高々一つ担当し、その小領域の粒子・電磁場相互作用計算を手助けすることにより、粒子数と格子点数の双方の観点から負荷均衡を実現する。従来のマルチコアプロセッサ上で利用していた OhHelp 実装である OhHelp Library では、粒子のデータ構造に関して AOS を仮定しているため、SOA への変更に伴って粒子移送通信の再実装が必要である。計算ノード間の粒子移送通信は大きく分けて二種類あり、一つは小領域境界をまたいで移動する粒子の移送、二つ目はある小領域を担当する複数の計算ノードの間で負荷均衡のためにおこなう粒子の融通に伴う移送である。特に二つ目の負荷分散のための通信では、領域内のどの粒子を移送対象にするかについては任意性がある。そこで実際の移送対象粒子の決定に際しては、小領域内を担当する複数のスレッド間での負荷不均衡をなるべく低減するように工夫する、などの検討が新たに必要となる。

本発表では現在実装中となる、ノード間の粒子移送通信を中心として、各階層の並列化に関して紹介する。