

TSUBAME の GPU による大規模ステンシル・アプリケーション

青木 尊之[†]

GPU は高い演算性能だけでなくメモリバンド幅も広いために、様々なアプリケーションを高速に実行することが可能であり、スパコンにも大量導入されてきている。ステンシル計算ではメモリアクセスが頻繁に発生し、計算速度がメモリバンド幅に律速することが多い。GPU を用いた大規模ステンシル・アプリケーションとして、メソスケール気象計算、フェーズ・フィールド法による樹枝状凝固計算、界面捕獲法による気液二相流計算を紹介し、その TSUBAME 上での実行性能と複数 GPU に対するスケーリングを示す。

Large-scale Stencil Applications on TSUBAME GPUs

TAKAYUKI AOKI[†]

GPU (Graphics Processing Unit) has high performance on both floating point computation and memory bandwidth unlike previous accelerators. Several world top-level supercomputers are GPU-centric and various kinds of applications have already run on them. Stencil-based applications are often memory bound and suitable for GPU architectures. As large-scale GPU applications, the performances and the scalabilities on TSUBAME supercomputer for meso-scale weather simulation, dendrite solidification based on Phase-Field model and gas-liquid two-phase flows based on an interface capture method.

1. はじめに

GPU(Graphics Processing Unit)は画像表示専用が開発され発展してきたプロセッサであるが、Programmable Unified Shader となり、統合開発環境である CUDA のリリースにより、GPU を画像表示以外の目的に利用する GPGPU が一気に広まってきた。特に NVIDIA の Fermi コアの GPU は、倍精度演算性能の大幅な向上と ECC メモリへ対応したため、HPC での利用が一段と加速された。2010 年 11 月のスパコン Top500 ランキングでは、1 位、3 位、4 位が GPU を大量に搭載した構成になっていて、消費電力当たりの演算性能も高い。

GPU は CPU のマザーボードに装着するアクセラレータという点では同じであるが、これまでの ClearSpeed や GRAPE などと異なり、オンボード・メモリのバンド幅が非常に広く、メモリアクセスが律速なアプリケーションでの利用を促進している。また、パソコンなどのゲームやコンピュータ・グラフィックスの市場を背景としているため、価格面でも大きなアドバンテージを持っている。

東京工業大学・学術国際情報センターでは、2008 年に世界に先駆けセンター運用のスパコンに

NVIDIA の GT200 世代の GPU を 680 枚導入し、2010 年 11 月からは Fermi コアの GPU を 1408 枚導入したピーク性能 2.4PFlops の TSUBAME2.0 を稼働している。

2. ステンシル・アプリケーションのメモリ参照

物理現象をシミュレーションするためのモデルは時間・空間の偏微分方程式で記述されることが多く、計算機上で解くためには時間・空間を離散化しなければならない。最も簡単には格子状に離散

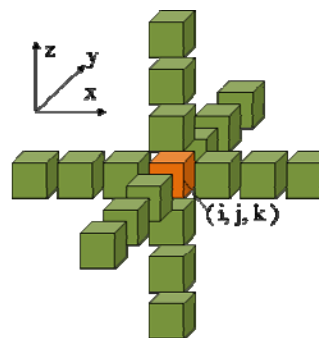


図 1 5次精度の WENO 法のステンシル。

化された空間に対する従属変数を配列として GPU のメモリ (ビデオメモリ) 上に確保する。時間方向には逐次的に積分するのが一般的なので、その配列を 2 Step 分用意しておき、1 Step の計算が終了すると内容を入れ替える。

直交格子で離散化した空間の格子点上で高次精度の有限差分法による流体計算の典型的なステンシル・パターンを図1に示す。Fermi コアより前の世代のGPUでは、Shared memory を用いて Software Managed Cache によりビデオメモリへのアクセスを低減していたが、Fermi コアのGPUでは、L1 キャッシュが有効に働き、プログラミングを容易にしている。

3. 大規模メソスケール気象計算

これからの気象予報を担う非静力平衡気象モデルは大気の流れ力学的振る舞いを表す力学過程と水蒸気の凝縮や太陽輻射などを表す物理過程に分けられる。気象庁が次世代気象予報の現業コードASUCAをGPUに完全移植し、TSUBAME2.0での実行性能を測った。ほぼ同じ機能を持つ世界標準の気象コードWRF(Weather Research and Forecasting)では、物理過程の一部しかGPU化できないためにCPU-GPU間の頻繁なデータ通信

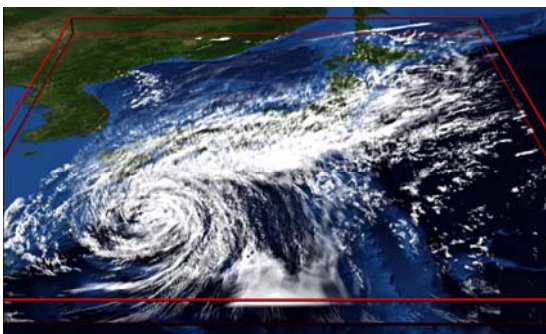


図2 GPU版ASUCAで計算した台風時の雲分布。

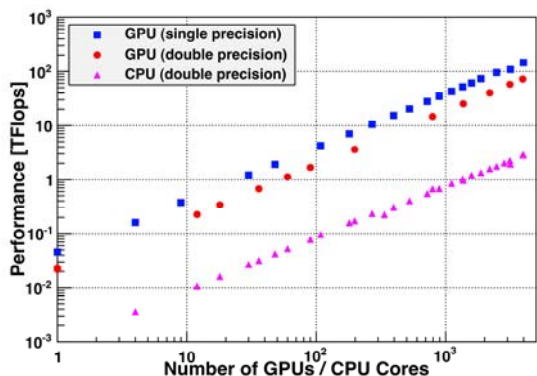


図3 ASUCAのTSUBAME2.0での実行性能。

し、CPU計算に対して20~30%しか性能向上しな

いのに対し、NVIDIA Tesla M2050を用いた計算では、GPU版のASUCAはXeon X5670のソケット比較で約12倍の速度向上を示している。図2は実際の気象データに基づいた台風時の雲の分布のスナップショットである。また、TSUBAME2.0での弱スケールリングも理想的であり、3990個のGPUを使って、単精度計算で145TFlops、倍精度計算で76TFlopsの実行性能が得られている。

4. おわりに

気象計算のようなステンシル計算に対して、GPU計算は非常に有効であることが分かる。紙面の都合で他のステンシル計算を割愛するが、講演では界面捕獲法による気液二相流計算、フェーズ・フィールド法による金属の樹枝状凝固成長過程の計算例などを示す。



図4 界面捕獲法による気液二相流計算、フェーズ・フィールド法による金属の樹枝状凝固成長過程

参考文献

- [1] "CUDA Programming Guide 3.2," http://developer.download.nvidia.com/compute/cuda/3_2/toolkit/docs/CUDA_C_Programming_Guide.pdf, NVIDIA, (2010)
- [2] 杉原 健太, 青木 尊之: 大規模高次精度移流計算の複数GPUによる高速化と強スケラビリティ, 日本計算工学会誌, Transactions of JSCES, Paper No.20100018, 2010年12月3日
- [3] T. Shimokawabe, T. Aoki, C. Muroi, J. Ishida, K. Kawano, T. Endo, A. Nukada, N. Maruyama, and S. Matsuoka, "An 80-Fold Speedup, 15.0 TFlops Full GPU Acceleration of Non-Hydrostatic Weather Model ASUCA Production Code", in SC '10: Proceedings of the Conference on High Performance Computing Networking, Storage and Analysis. New York, NY, USA: ACM (2010)
- [4] 小川慧, 青木尊之, 山中晃徳: マルチGPUによるフェーズ・フィールド相転移計算のスケラビリティ - 40GPUで5TFLOPSの実効性能, 情報処理学会論文誌コンピューティングシステム Vol. 3 No. 2 67-75 (2010).