

「京」コンピュータによる大規模シミュレーションのための地震動計算コード Seism3D の高度化及び性能チューニング Performance tuning of the Seism3D, the seismic wave propagation code, for large-scale parallel simulation using K comput

前田 拓人^{1*}, 古村 孝志¹, 井上 俊介², 南 一生²

MAEDA, Takuto^{1*}, FURUMURA, Takashi¹, Shunsuke Inoue², Kazuo Minami²

¹ 東大情報学環総合防災情報研究センター, ² 理化学研究所計算科学研究機構

¹ CIDIR, III, the University of Tokyo, ² RIKEN AICS

はじめに

「京」コンピュータは理論最大性能 10PFlops の、現時点で世界最高性能をもつスーパーコンピュータである (Yonezawa et al., 2011)。地震学においても、「京」を利用することで地震波や津波伝播・プレート運動シミュレーション等の高度化が期待されている。しかし、「京」の性能を引き出すためには、80,000 以上もの大ノード数での超並列性能が必要であり、また、各 CPU の 8 個のコアを用いたノード内並列の設計も重要である。そこで、本研究では地震動シミュレーションコード Seism3D について、「京」のハードウェア特性から見た理論的な最大性能を評価し、大規模シミュレーションに向けて性能チューニングを行った。

地震動シミュレーションコード Seism3D とその改良

Seism3D は弾性体運動方程式を Staggered grid 差分法を用いて陽的に解く MPI 並列地震動シミュレーションコードである (Furumura and Chen, 2005)。本研究では、Seism3D の高精度化に向けて、応力歪みの構成方程式を一般化 Zenner 粘弾性体に拡張し、広帯域の内部減衰の導入を可能にした。また、モデル境界には Split-PML を導入し、地震波のモデル境界からの人工反射を効果的に押さえることに成功した。このことにより、長時間ステップ計算後に残留する地殻変動成分を安定して推定することも可能になった。本シミュレーションコードは、震源等価体積力とともに重力項を外力として加え、地震動から津波まで統一的に取り扱う「地震-津波同時シミュレーション」(Maeda and Furumura, 2011) へと拡張することができる。

理論性能の定量評価

Seism3D の地震動計算では、CPU が地球内部構造・地震波動場・応力場といった多量の変数データを参照しながら計算が行われる。そのため、地震動計算は CPU 速度だけではなく、CPU が単位命令を発行する間にどれだけのデータ量をメモリから供給できるか、という相対的なメモリへのアクセス速度 (Byte/Flop 値) に律速される。そこで、コード内の特に計算負荷の高い部分について、演算量および必要とされるメモリ量と「京」のメモリアクセス速度と CPU 速度から、本計算コードの計算速度の上限を推定した。その結果、Seism3D は「京」の理論ピーク性能の約 15-16% が上限であることが確認され、この数値を性能チューニングの目標とすることにした。

並列性能チューニングと並列計算レイアウトの検討

最大 80,000 ノード (CPU) 以上を用いた大規模並列計算を行うには、隣接するノードとの効率的な通信とノード間での並列バランスの調整が必要である。我々は、隣接間通信を伴う領域分割法のうち、計算領域を一般的な 3 次元分割ではなく、水平方向に分割する 2 次元分割を採用した。ノードに割り当てられる領域は Z 方向に極端に大きい棒状の形状を持つ。この形状の特性を生かし、Z 方向の計算を 3 次元ループ演算の再内ループになるよう配列の添え字の順番を変更することで、連続的なメモリアクセスを持つ長いループ長を確保し、さらにソフトウェアパイプラインによる高速化も実現した。

単体性能チューニング

CPU がメモリから読み込んだデータは、L1 もしくは L2 キャッシュに置かれる。キャッシュへのアクセス速度はメモリよりはるかに速いため、高速化にはキャッシュ上のデータを有効活用することが必須である。本研究では、3 次元の微分演算についてキャッシュチューニングを行った (南・他, 2012)。微分演算では、3 次元配列の 3 方向への連続したメモリアクセスが必要となる。配列の第 1 添字については元々メモリ上に連続的にデータが載っており、まとめてキャッシュに読み込まれたデータを有効に再利用することができる。しかし、配列の第 3 添字方向については、データがメモリ上に離散的に配置されており、キャッシュの有効利用が困難であった。そこで、CPU 内のスレッド並列計算を第 3 添字について連続的に割り当てるサイクリック分割を適用した。このことにより、ある添字に関わるデータが、キャッシュを共有する隣のコアによって利用でき、キャッシュに納められた離散的なデータを効率よく利用することが可能になった。

SSS27-P03

会場:コンベンションホール

時間:5月23日 17:15-18:30

まとめ

地震動計算コード Seism3D について、キャッシュ利用の効率化を軸にした単体性能チューニングと、並列性能チューニングを組み合わせることにより、「京」上でほぼ理論的上限值とみられる実効性能 16% を達成することが出来た。講演ではチューニング手法の詳細と、実用レベルの計算の実例とを合わせて紹介する。

謝辞

本研究は文部科学省 HPCI 戦略プログラム (分野 3) 「防災・減災に資する地球変動予測」の一環として、理化学研究所が実施している京コンピュータ「京」の試験利用により実施した。

キーワード: 地震波伝播, 数値計算, シミュレーション, 並列計算, チューニング

Keywords: Seismic wave propagation, numerical computation, numerical simulation, parallel computation, tuning