

Speed-up efficiencies of an SPH code with FDPS on GPUs or PEZY-SCs

細野 七月^{1,2}

岩澤 全規²

行方 大輔²

谷川 衝^{3,2}

似鳥 啓吾²

村主 崇行²

牧野 淳一郎^{4,2}

¹海洋研究開発機構 ²理研 計算科学研究センター ³東京大学 ⁴神戸大学

About SPH

- ◆SPH法 (Gingold & Monaghan, 1977; Lucy, 1977)は、天文学の分野で広く使われている、粒子的流体数値計算手法である。

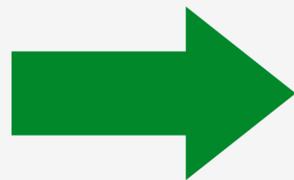
個々の粒子が物理量を持つ

基礎方程式は個々の粒子どうしの相互作用に変換

$$\frac{d\rho}{dt} = -\rho \nabla \cdot \vec{v}$$

$$\frac{d\vec{v}}{dt} = -\frac{1}{\rho} \nabla p$$

$$\frac{du}{dt} = -\frac{p}{\rho} \nabla \cdot \vec{v}$$



$$\rho_i = \sum_j m_j W_{ij}$$

$$\frac{d\vec{v}_i}{dt} = -\sum_j m_j \left(\frac{p_i}{\rho_i^2} + \frac{p_j}{\rho_j^2} + \Pi_{ij} \right) \nabla W_{ij}$$

$$\frac{du_i}{dt} = \sum_j m_j \left(\frac{p_i}{\rho_i^2} + \frac{1}{2} \Pi_{ij} \right) \vec{v}_{ij} \cdot \nabla W_{ij}$$

To accelerate simulations

- ◆SPHは粒子法なので、粒子数を上げると解像度があがる。
大規模な計算を行うためには粒子数を上げる必要がある。
- ◆一方で、SPHは普通に計算すると、 $O(N^2)$ の計算コストがかかるため、
少し粒子数を増やすと計算時間が大きく伸びる。
- ◆そこで、大規模/高解像度な計算を行うには、加速器と呼ばれるメニーコア計算装置を用いたり、
Tree法(Barnes & Hut, 1986)と呼ばれる手法で計算量を $O(N \log_8 N)$ にする、
などの工夫が必要となる。

加速器

- ◆加速器とは、CPUよりも性能は劣るが、多数のプロセッサを備えた、外部演算装置である。NVIDIA GPU、Intel Xeon PhiおよびPEZY-SCなどが最近是有名。

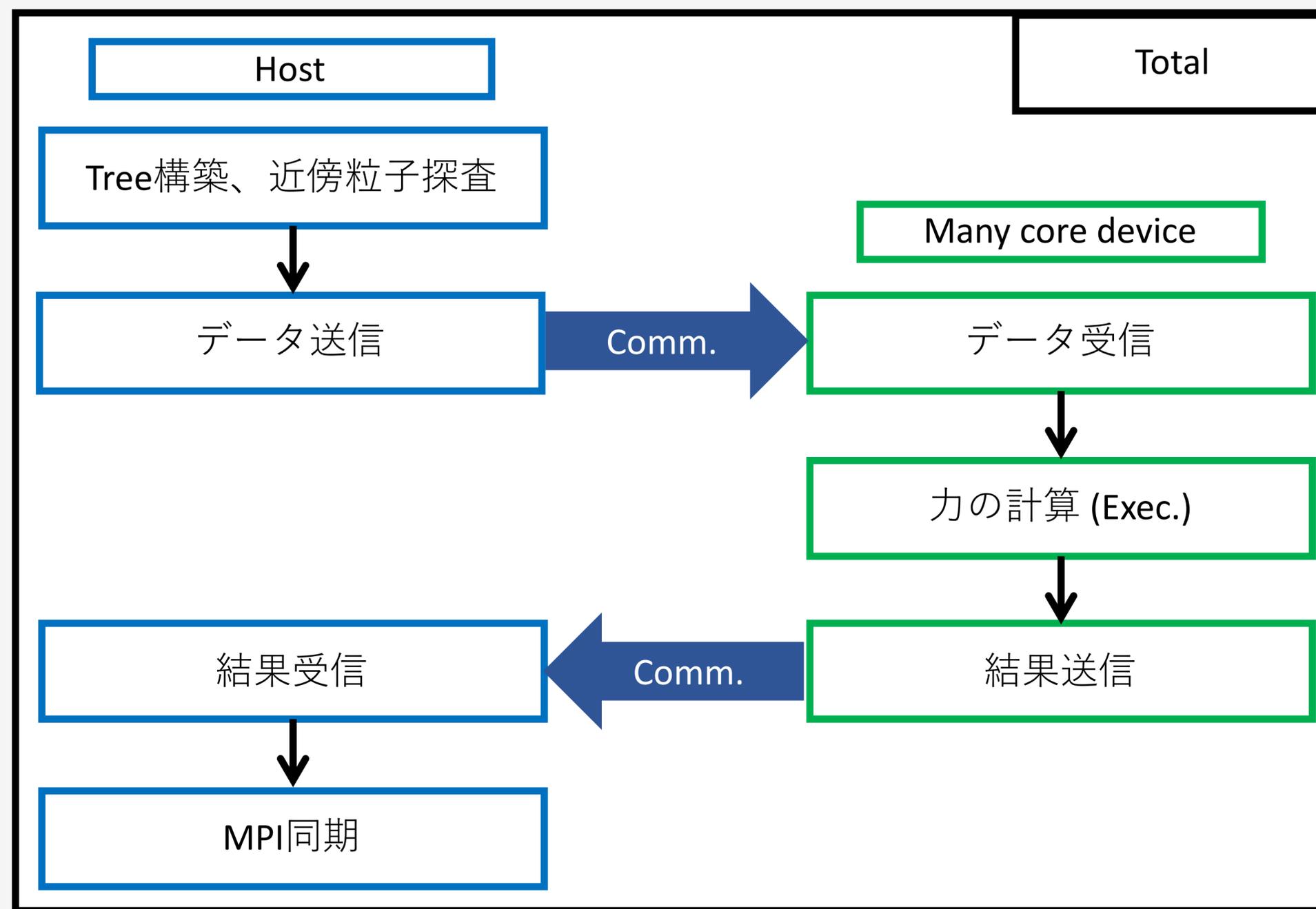
TOP500		Nov. 2017				
Rank	Rank	System	Cores	Rmax (TFlop/s)	Power (kW)	Power Efficiency (GFlops/watts)
1	259	Shoubu system B - ZettaScaler-2.2, Xeon D-1571 16C 1.3GHz, Infiniband EDR, PEZY-SC2 , PEZY Computing / Exascaler Inc. Advanced Center for Computing and Communication, RIKEN Japan	794,400	842.0	50	17.009
2	307	Suiren2 - ZettaScaler-2.2, Xeon D-1571 16C 1.3GHz, Infiniband EDR, PEZY-SC2 , PEZY Computing / Exascaler Inc. High Energy Accelerator Research Organization /KEK Japan	762,624	788.2	47	16.759
3	276	Sakura - ZettaScaler-2.2, Xeon E5-2618Lv3 8C 2.3GHz, Infiniband EDR, PEZY-SC2 , PEZY Computing / Exascaler Inc. PEZY Computing K.K. Japan	794,400	824.7	50	16.657
4	149	DGX SaturnV Volta - NVIDIA DGX-1 Volta36, Xeon E5-2698v4 20C 2.2GHz, Infiniband EDR, NVIDIA Tesla V100 , Nvidia NVIDIA Corporation United States	22,440	1,070.0	97	15.113
5	4	Gyokou - ZettaScaler-2.2 HPC system, Xeon D-1571 16C 1.3GHz, Infiniband EDR, PEZY-SC2 700Mhz , ExaScaler Japan Agency for Marine-Earth Science and Technology Japan	19,860,000	19,135.8	1,350	14.173
6	13	TSUBAME3.0 - SGI ICE XA, IP139-SXM2, Xeon E5-2680v4 14C 2.4GHz, Intel Omni-Path, NVIDIA Tesla P100 SXM2 ,	135,828	8,125.0	792	13.704

Rank	System	Cores	Rmax (TFlop/s)	Rpeak (TFlop/s)	Power (kW)
1	Sunway TaihuLight - Sunway MPP, Sunway SW26010 260C 1.45GHz, Sunway , NRCPC National Supercomputing Center in Wuxi China	10,649,600	93,014.6	125,435.9	15,371
2	Tianhe-2 (MilkyWay-2) - TH-IVB-FEP Cluster, Intel Xeon E5-2692 12C 2.200GHz, TH Express-2, Intel Xeon Phi 31S1P , NUDT National Super Computer Center in Guangzhou China	3,120,000	33,862.7	54,902.4	17,808
3	Piz Daint - Cray XC50, Xeon E5-2690v3 12C 2.6GHz, Aries interconnect , NVIDIA Tesla P100 , Cray Inc. Swiss National Supercomputing Centre (CSCS) Switzerland	361,760	19,590.0	25,326.3	2,272
4	Gyokou - ZettaScaler-2.2 HPC system, Xeon D-1571 16C 1.3GHz, Infiniband EDR, PEZY-SC2 700Mhz , ExaScaler Japan Agency for Marine-Earth Science and Technology Japan	19,860,000	19,135.8	28,192.0	1,350
5	Titan - Cray XK7, Opteron 6274 16C 2.200GHz, Cray Gemini interconnect, NVIDIA K20x , Cray Inc. DOE/SC/Oak Ridge National Laboratory United States	560,640	17,590.0	27,112.5	8,209
6	Sequoia - BlueGene/Q, Power BQC 16C 1.60 GHz, Custom , IBM DOE/NNSA/LLNL United States	1,572,864	17,173.2	20,132.7	7,890

Accelerators

- ◆大規模なSPH計算を行うには、Tree法と加速器を組み合わせたコードを作れば良い。
ただし、構築難易度は極めて高い。
- ◆そこで、我々は近年
Framework for **D**eveloping **P**article **S**imulator (FDPS; Iwasawa, Tanikawa, NH, et al., 2015; 2016).
と言う、粒子法向けの自動Tree化 + 大規模並列化ライブラリを開発した。
FDPSはver. 2.0以降、加速器の使用をサポートしている。
- ◆これを用いて、加速器上で動くSPHコードを作成し、
NVIDIA P100およびPEZY-SC2の上で動作させて、その速度をCPUでの実装と比較した。

加速器を用いた実装方法の概要



- ◆ホスト上でのTree構築及び近傍粒子探査は、FDPS(Iwasawa+, 2016)というソフトウェアを用いた。PEZY-SC2上での、kernelコードは、openCLを用いて、独自に実装した。