

150031-NA19

成見 哲 (電気通信大学)

Fast Multipole Method を用いた多種アーキテクチャ向けスーパーコンピュータ用ライブラリの開発と分子・流体シミュレーションでの評価



背景

N 体問題の高速化手法である Fast Multipole Method (FMM) は並列性, 演算密度, データの局在性, 非同期性などの観点からエクサスケールコンピュータにおいて高い性能を発揮できる手法として期待されている. 汎用性の観点からも, FMM はN 体問題だけでなく音響・電磁場解析における密行列問題の行列・ベクトル積, 流体・構造解析における疎行列問題の前処理, 量子化学計算における固有値解析, 信号処理やスペクトル解析における FFT などの代わりに用いることができることから, 超大規模計算における代替手法として注目されている.

目的

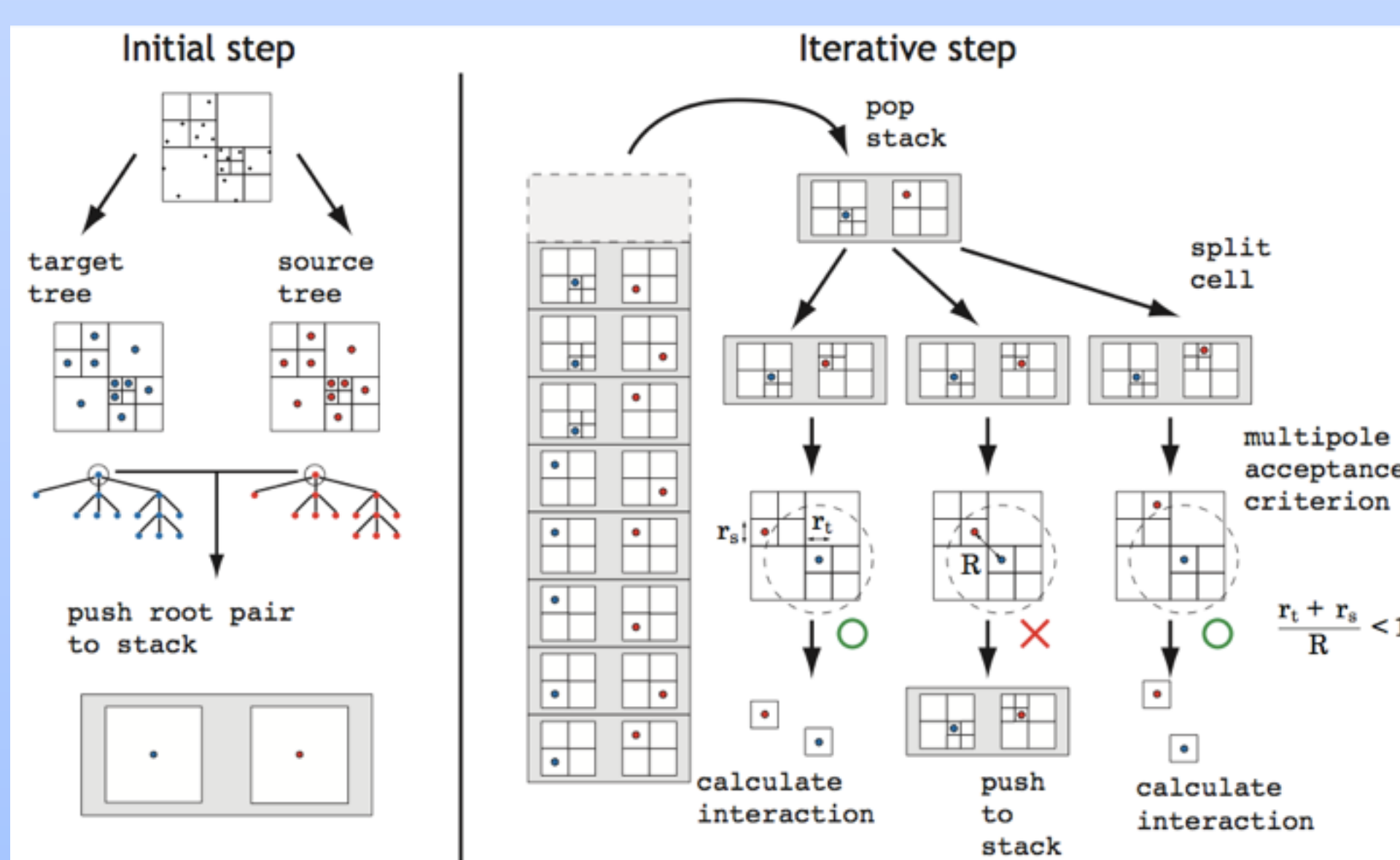
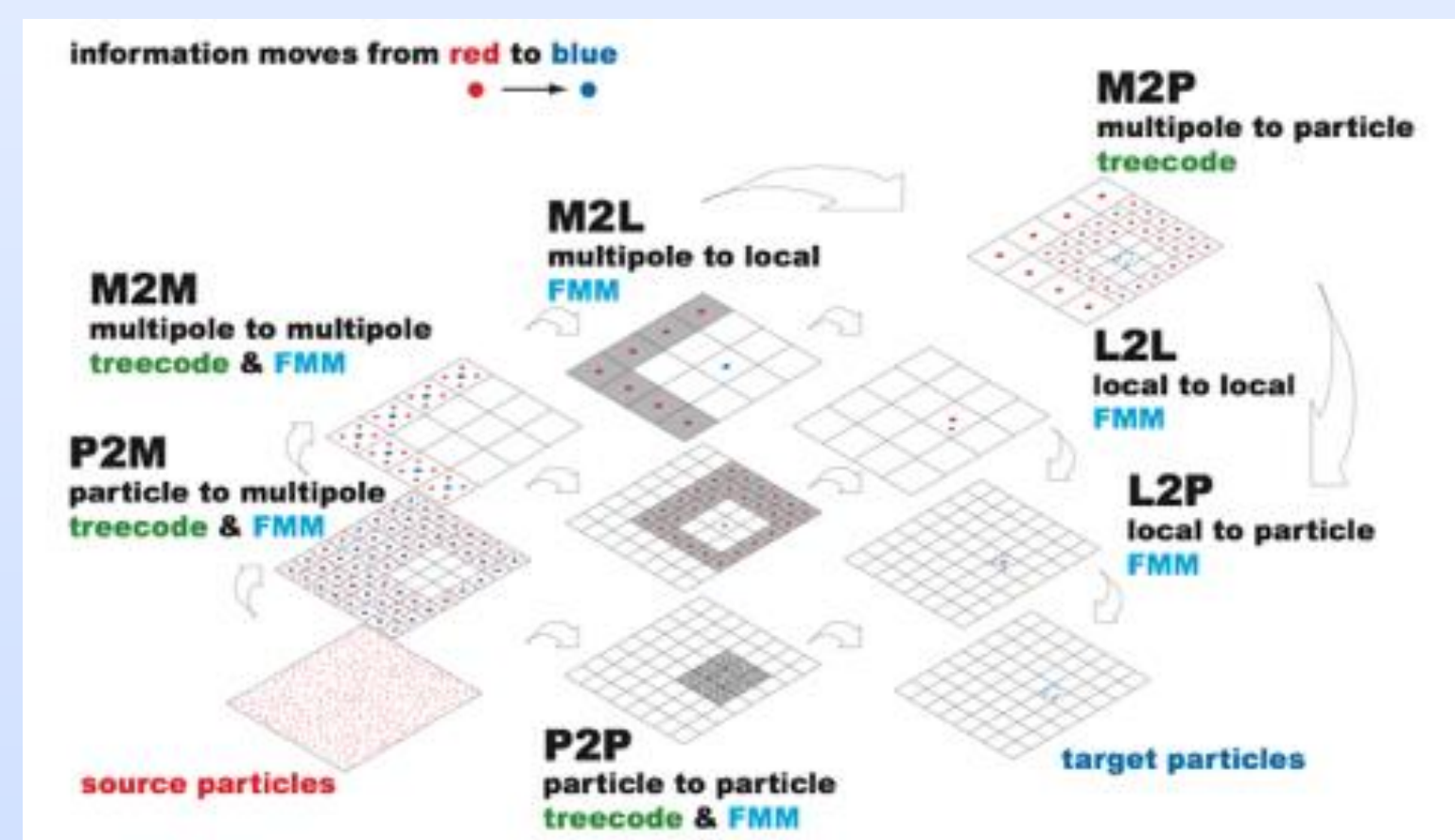
本研究では, エクサスケールを視野に入れた FMM のオープンソースライブラリ ExaFMM を様々なアーキテクチャ向けに最適化し, 流体解析における疎行列の前処理と古典分子動力学における長距離力の計算に用いることで, その性能や精度を検証する.

既に GPU, BG/Q, Xeon Phi などの主要なプラットフォームに実装されている ExaFMM コードを東北大学の SX-ACE や名古屋大学の FX100 を利用することで日本固有のアーキテクチャにも拡張し, Top500 のリストにあるほぼ全ての情報基盤で使えるライブラリとして提供する. また, 単に実装するだけでなく, 各プラットフォームに固有の最適化を行うことで, 性能の移植性も確保する.

Fast Multipole Method (FMM)とは？

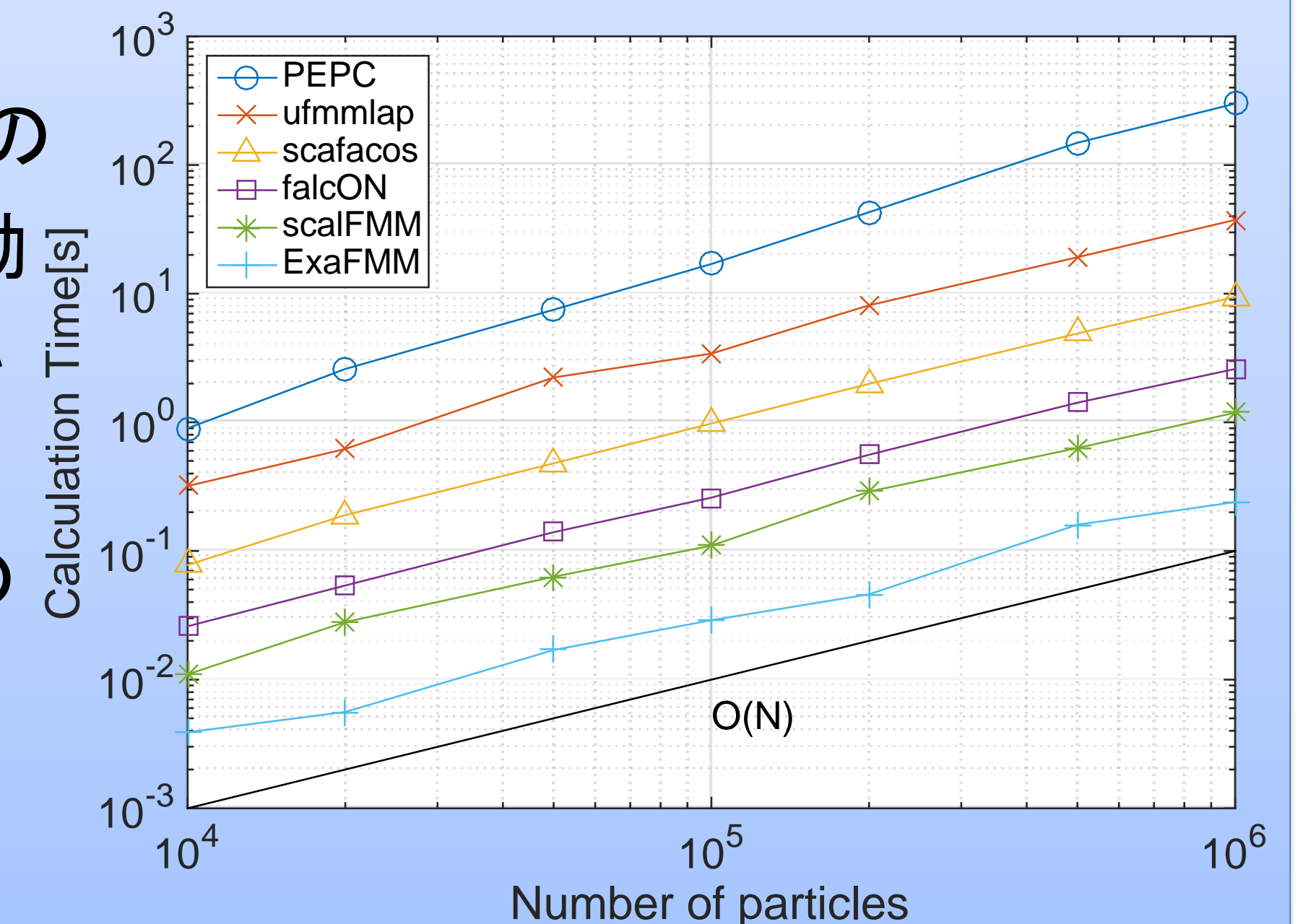
FMMは遠方場を多重極展開, 近傍場を局所展開を用いて近似することで本来 $O(N^2)$ のN体問題の計算を $O(N)$ で行うことができる. このためには, 領域を階層的にセルに

分割し, 近似が有効なセルのペアを探索する必要がある. ExaFMMではこのセルの探索に Dual Tree Traversal を用いる. Dual Tree Traversal では二つの木を同時に走査することで $O(N)$ のコストで近似が有効なセルのペアを探索することができる. 従来のFMMでは隣接する $3 \times 3 \times 3$ の立方体のセルを用いて近傍領域を定義していたが, Dual Tree Traversalを用いれば柔軟に近傍領域を定義できる. また, 二つの木構造を走査する際にタスク並列化することで, データの局在性を向上することができる.



類似研究との比較

FMMのコードを開発している研究グループは他にもあるが, コード同士の性能比較を行っている研究は少ない. そこで, 本研究では同じ計算機環境, 同等の計算条件の元で他の主要なFMMコードとの比較を行った. これによりExaFMMの性能の優位性が明らかになった. ただし, いずれのコードも $O(N)$ の漸近挙動を示していることは確かであり, チューニングによって差がつくのはその絶対的な速度である.

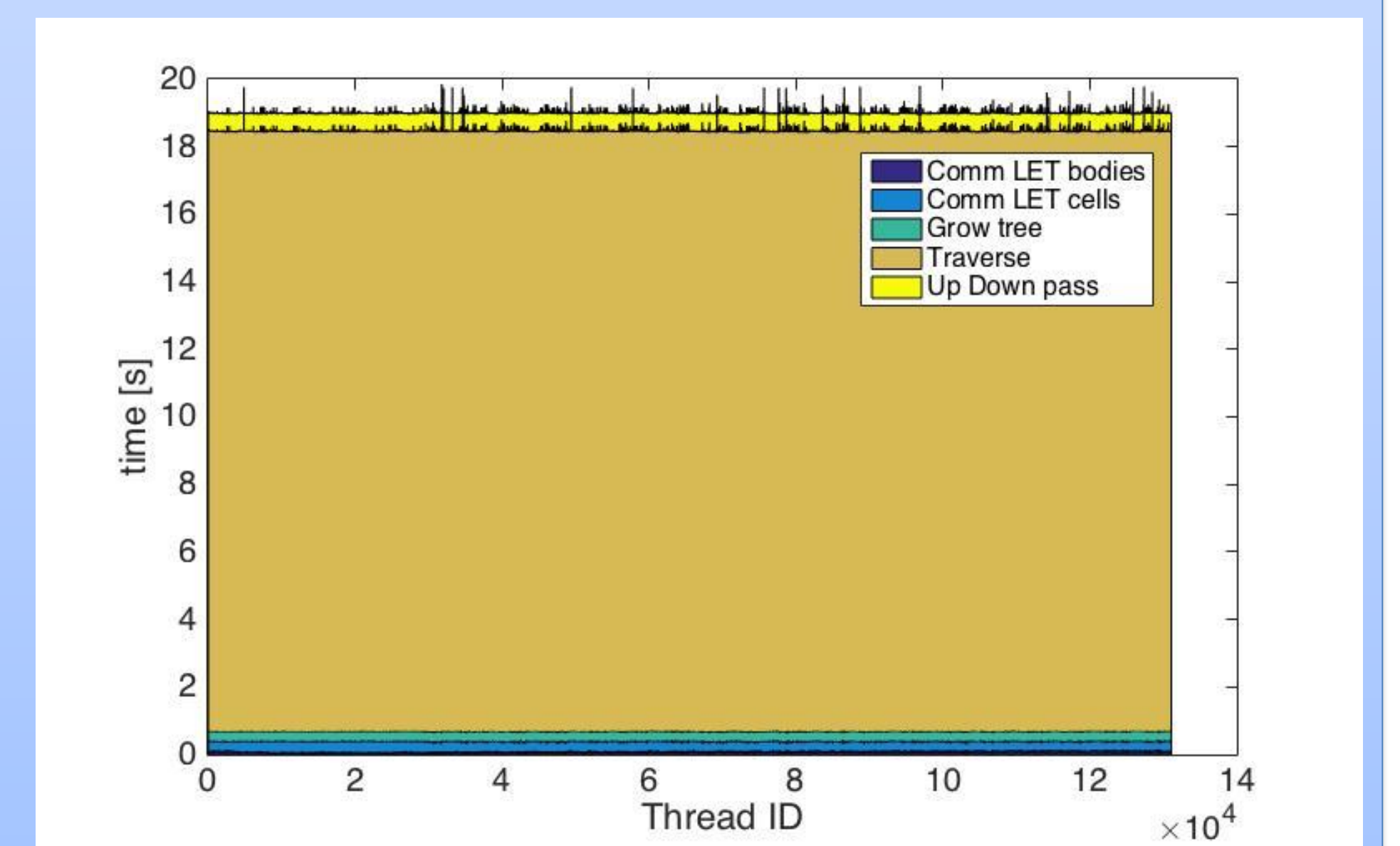


大規模計算における負荷分散

FMMの大規模計算において重要になるのは, 非一様な木構造の計算負荷と通信負荷をいかに均等に分散させるかである. ExaFMMではMPIプロセスから形成される大域的な木構造とローカルな粒子で作られる局所的な木構造を切り離すことで, 通信複雑性を $O(\log P + (N/P)^{2/3})$ に低減できることを理論と実験の両方で示すことができた.

大域的な木構造上では一つのセルを複数のMPIプロセスが重複してもつことになり, この情報の冗長性を利用することで通信量を低減することができる. また, 各階層における近接通信のみによって必要な多重局の情報を集めることができ, AllToAllのような通信は一切行わないのも特徴である.

右図にCray XC40の131072コアを用いて行った計算の際の各スレッドの計算時間を示す. 負荷分散ができており, 計算時間が全てのスレッドで均一になっていることが見てとれる.



今後の展望

1. 対故障性を備えた FMM を用いた分子シミュレーションで1兆ステップ時間積分を行い, PME との比較を通して精度を検証する.
2. FMM を前処理に用いた大規模な流体解析を行い, マルチグリッド法と絶対速度とスケーラビリティを比較する.
3. GPU, Xeon Phi, SX-ACE, FX100の4つのアーキテクチャを共通のアプリケーションで総合比較する.