

開放系粒子シミュレーションコード のHPF化

大谷寛明, 石澤明宏, 石黒静児, 堀内利得

核融合研

林康晴, 堀内紳年

NEC

アウトライン

- 3次元電磁粒子シミュレーション
- 粒子に対する開放系境界条件
- 配列のとり方
- F77, F90, HPFへ
- 配列の多次元化
- 並列化に対応したアルゴリズム
- PUSHER, GATHER, FIELD SOLVER
- 性能評価
- 課題

3次元電磁粒子シミュレーション

Motion equation for particles

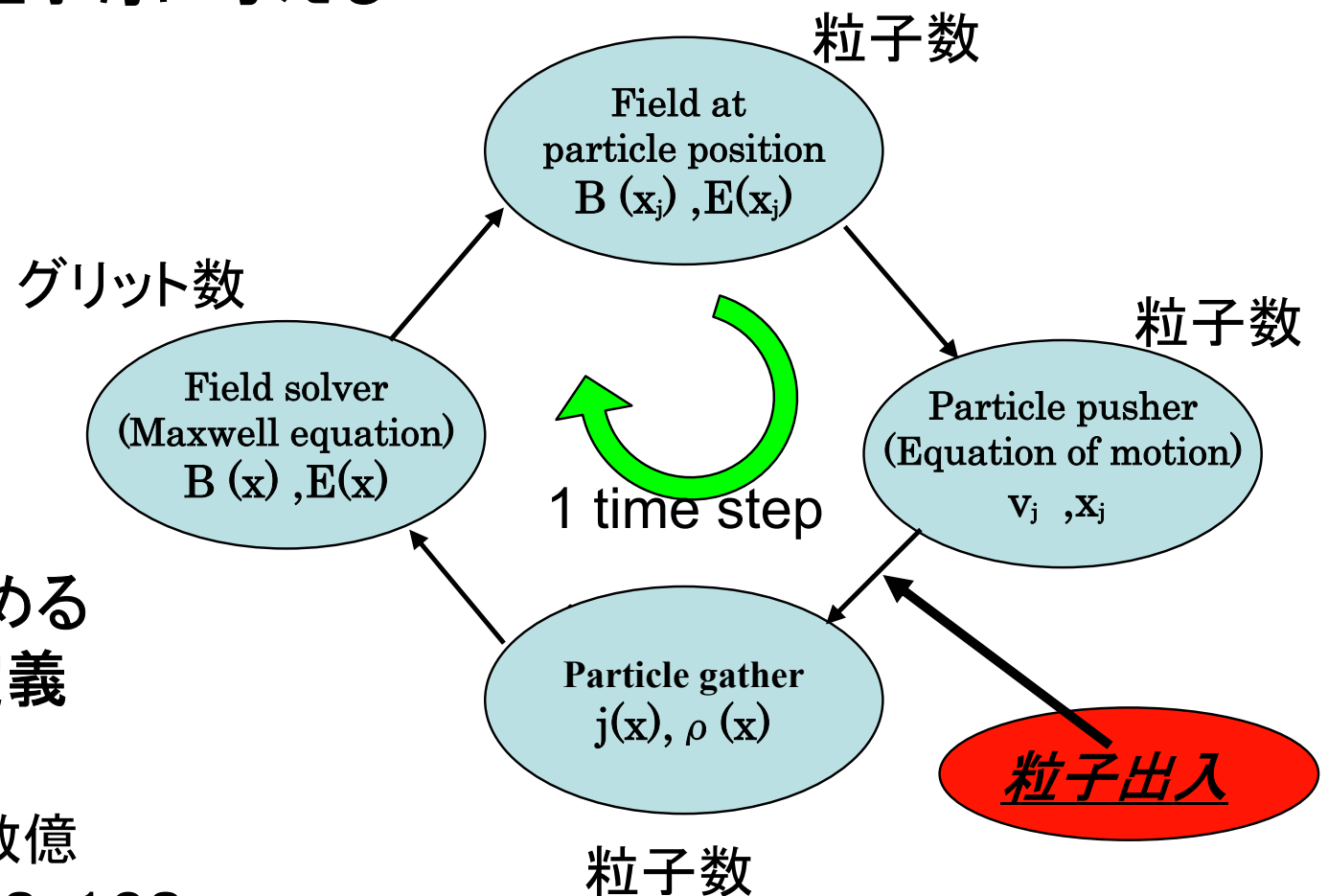
→与えられた場の中での粒子の位置・速度を更新する

→ (x_j, v_j) 添字j: 粒子毎に与える

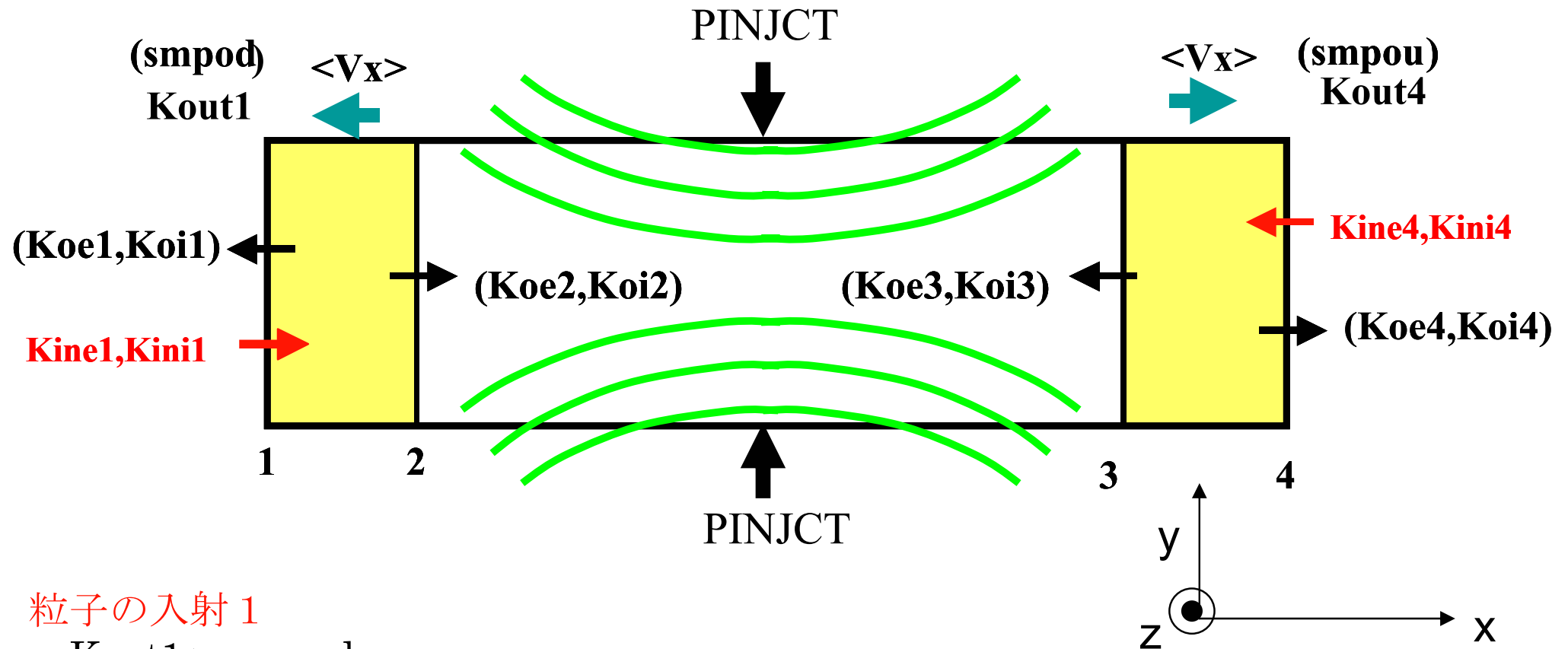
Maxwell equations

→与えられたソースより
新しい時刻での場を求める
場の量はグリット上で定義

粒子数: 1千万から数億
グリット数: 128x128x128



粒子に対する開放系境界条件



粒子の入射 1

$K_{out1} \leftarrow \text{smpod}$

$K_{ine1} = K_{oe1} - K_{out1}$: (number of incoming electrons through boundary 1)

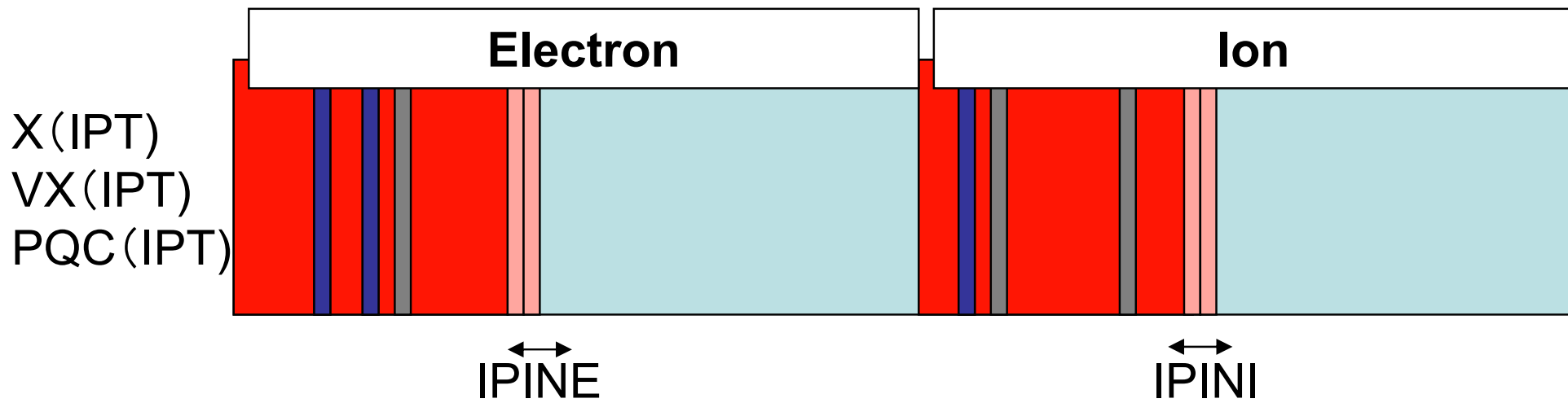
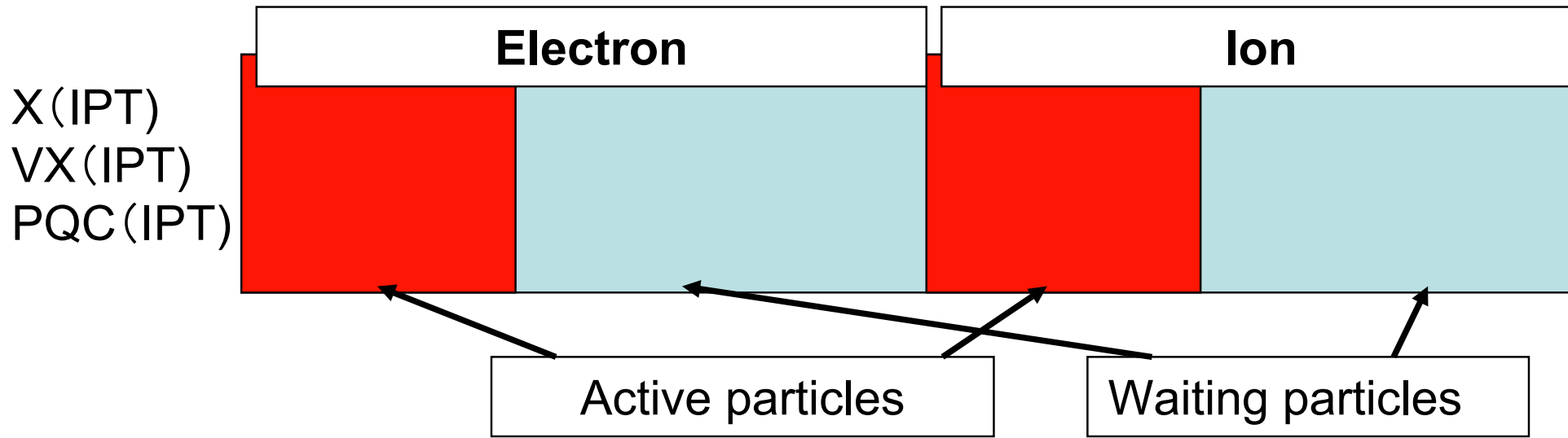
$K_{ini1} = K_{oi1} - K_{out1}$: (number of incoming ions through boundary 1)

$K_{ine1}, K_{ini1}, K_{ine4}, K_{ini4}$ の位置速度情報は $K_{oe2}, K_{oi2}, K_{oe3}, K_{oi3}$ をコピー

粒子の入射 2

$PINJCT$

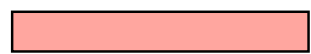
場の情報に従って粒子を入射



Koe1で出て行く粒子



Kine1で入射される粒子



PINJCTで入射される粒子

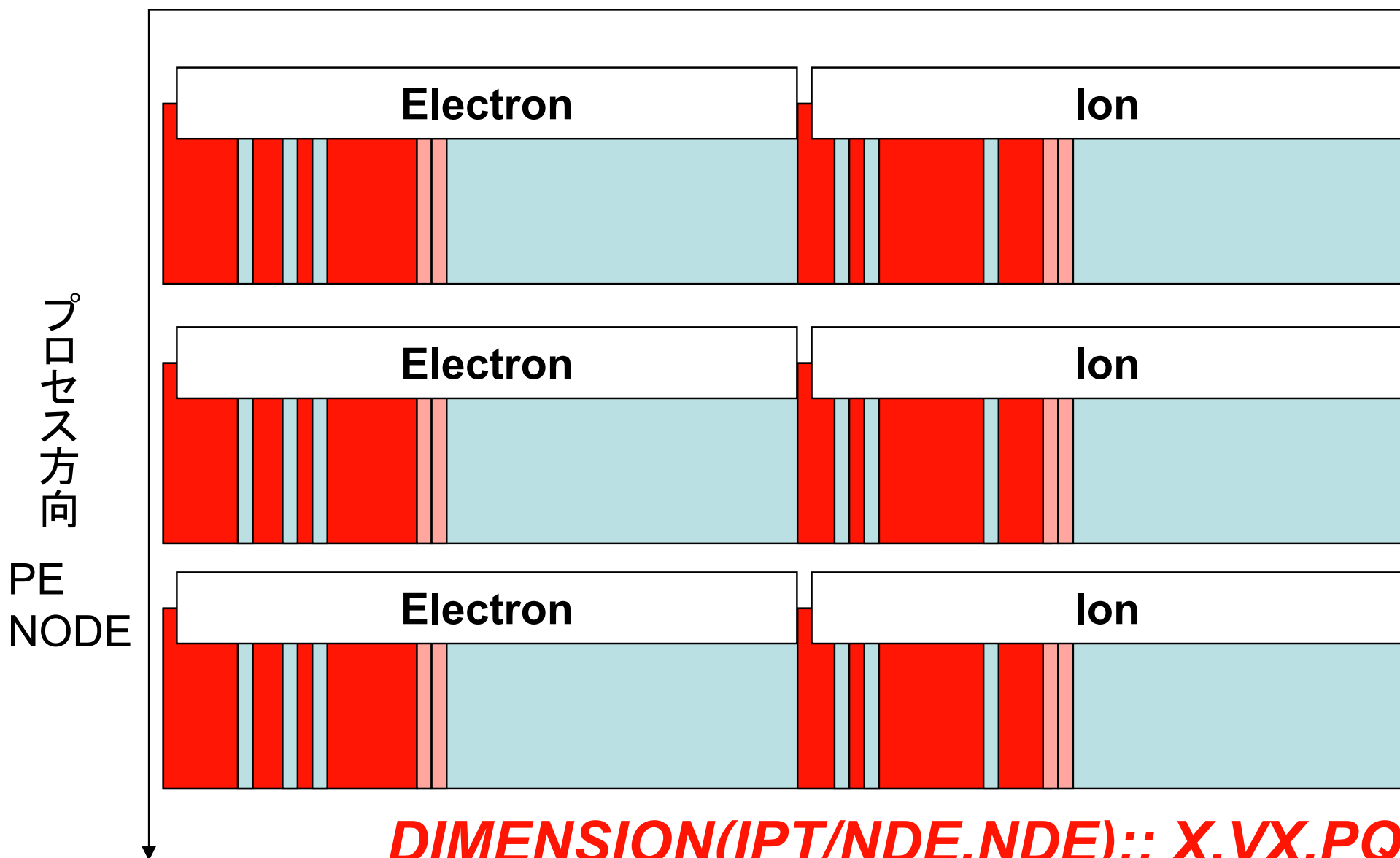
ある時間ステップおきにパッキング
WAITING粒子の再生成.

FORTRAN77からFortran90, HPFへ

- ✓ 第1段階 F90へ
 - ✓ Common文をModule化
 - ✓ Subroutineの引数(部分配列→配列全体)
 - ✓ バンクコンフリクトの回避
- ✓ 第2段階 分散メモリを念頭においたコーディング
 - ✓ 系外へ出た粒子の番号の記録(パッキングの回避)
 - ✓ 分布(粒子, 速度)生成(粒子番号交換)
 - ✓ Waiting粒子を廃止→
 - 入射粒子の速度情報を別の配列で用意する
- ✓ 第3段階 HPF化を念頭においた配列の多次元化
 - ✓ 粒子の配列を分散→
 - 各HPFプロセスでそれぞれPusher, Gather, 境界条件
 - ✓ 場の量は分散しない→
 - 各HPFプロセスで同じ計算(Maxwell eq.)
- ✓ 第4段階 HPF指示文の挿入

配列の分散化(多次元化)

粒子番号方向 IPT

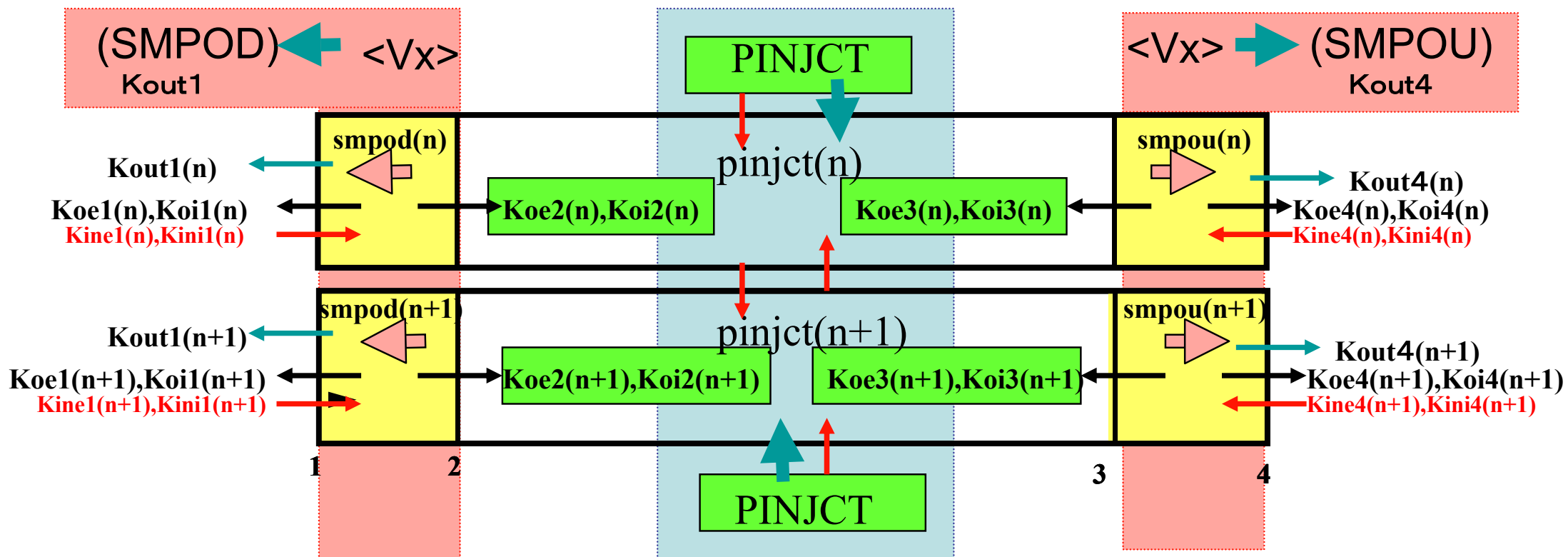


DIMENSION(IPT/NDE,NDE):: X,VX,PQC, ...
!HPF\$ DISTRIBUTION (*,BLOCK):: X,VX,PQC, ...

NDE=並列度:分散並列数×共有並列数

並列化に対応したアルゴリズム(境界条件)

- 各HPFプロセス $Koe1(n), Koe2(n), smpod(n)$
- $smpod(n)$ のReduction $SMPOD \rightarrow Kout1$
- $Kout1/HPF$ プロセス数 $\rightarrow Kine1(n) = Koe1(n) - Kout1/HPF$ プロセス数
- PINJCTで系全体での入射粒子数 $\rightarrow pinjct(n) = PINJCT/HPF$ プロセス数
- 各HPFプロセスで, $Koe2(n)$ の粒子情報とPINJCTの生成粒子(速度分布の再生成)
- 空いている粒子番号に優先して入射粒子の記録
- ある程度のステップ数経過後, 各HPFプロセスでパッキング ロードバランスにより通信



Pusher

!HPF\$ INDEPENDENT

DO n=1,NDE !共有並列&分散並列

DO j=1,IPT/NDE

$$E_{xj}^k = \sum_{lmn} E_{xlmn}^k S[\mathbf{x}^k(j,n) - \mathbf{x}_{lmn}]$$

$$B_{xj}^k = \sum_{lmn} B_{xlmn}^k S[\mathbf{x}^k(j,n) - \mathbf{x}_{lmn}]$$

$$\gamma^{k+\frac{1}{2}}(j,n) \mathbf{v}^{k+\frac{1}{2}}(j,n) = \gamma^{k-\frac{1}{2}}(j,n) \mathbf{v}^{k-\frac{1}{2}}(j,n) + \Delta t \frac{q(j,n)}{m(j,n)} \left(\mathbf{E}_j^k + \frac{\mathbf{v}^{k+\frac{1}{2}}(j,n) + \mathbf{v}^{k-\frac{1}{2}}(j,n)}{2c} \times \mathbf{B}_j^k \right)$$

$$\mathbf{x}^{k+1}(j,n) = \mathbf{x}^{k-1}(j,n) + \Delta t \mathbf{v}^{k+\frac{1}{2}}(j,n)$$

$$\gamma^k(j,n) = 1 / \sqrt{1 - (\mathbf{v}^k(j,n) \cdot \mathbf{v}^k(j,n)) / c^2}$$

ENDDO

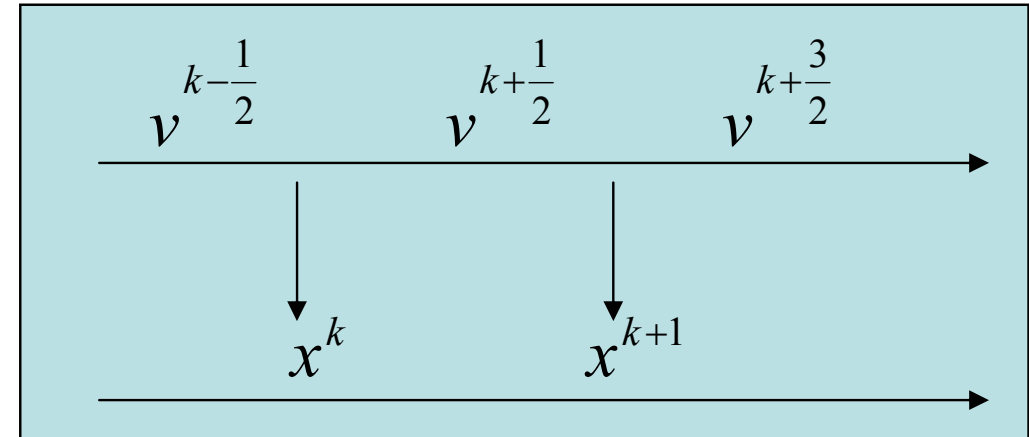
ENDDO

場の量: 各HPFプロセスで同じものをもつ(分散しない)

粒子情報: 各HPFプロセスで粒子の情報をもつ

粒子は完全に独立

(場の量の空間グリッドの次元は省略)



Gather

!HPF\$ INDEPENDENT

DO n=1,NDE ! 共有並列&分散並列

DO j=1,IPT/NDE,IVECT

DO k=1,IVECT

$$w_{j_{xlmn}}(k,n) = w_{j_{xlmn}}(k,n) + q(j) \frac{v_x(j,n)}{c} S[\mathbf{x}_{lmn} - \mathbf{x}(j,n)]$$

$$w_{\rho_{lmn}}(k,n) = w_{\rho_{lmn}}(k,n) + q(j) S[\mathbf{x}_{lmn} - \mathbf{x}(j,n)]$$

ENDDO

ENDDO

ENDDO

!HPF\$ INDEPENDENT, REDUCTION(j_{xlmn}, ρ_{lmn})

DO n=1,NDE ! 共有並列&分散並列

DO k=1,IVECT

$$j_{xlmn} = j_{xlmn} + w_{j_{xlmn}}(k,n)$$

$$\rho_{lmn} = \rho_{lmn} + w_{\rho_{lmn}}(k,n)$$

ENDDO

ENDDO

w_j, w_ρ : ベクトル化のための作業配列

作業配列も分散

各HPFプロセスで足しこんでから、

ベクトル方向と並列方向の和をとる

(場の量の空間グリッドの次元は省略)

Field Solver

$$\frac{E_{xlmn}^{k+1} - E_{xlmn}^k}{c\Delta t} = \left(\frac{B_{zlmk+1}^{k+\frac{1}{2}} - B_{zlmk-1}^{k+\frac{1}{2}}}{2\Delta y} - \frac{B_{zlm+1k}^{k+\frac{1}{2}} - B_{zlm-1k}^{k+\frac{1}{2}}}{2\Delta z} \right) - \frac{4\pi}{c} j_{xijk}^{k+\frac{1}{2}}$$

$$\frac{B_{xlmn}^{k+\frac{3}{2}} - B_{xlmn}^{k+\frac{1}{2}}}{c\Delta t} = - \left(\frac{E_{zlmk+1}^{k+1} - E_{zlmk-1}^{k+1}}{2\Delta y} - \frac{E_{zlm+1k}^{k+1} - E_{zlm-1k}^{k+1}}{2\Delta z} \right)$$

場の量は各HPFプロセスで同じ物を持っている(分散しない)
 各HPFプロセスで同じ計算(Maxwell eq.)
 (場の量の空間グリッドの次元は省略)

性能評価

- 粒子数: 6千万, グリット数: 128x64x128
- 並列度: 32, 16 1ノード
 - HPF 1x32, 2x16 (Rev. 2.0.1)
 - F90 32, 16 (Rev.274)
- ベクトル化のためのパラメター: 128
- 700stepから800stepまでの100step間で測定
(すべてのルーティンが動く)
- HPFのオプション
 - C hopt `-P auto -pi|line=500 -R5`
 - Minfo -Mkeepftn `-Moverlap=size:0 -Mnoentry`
 - Wf"-pvctl loopcnt=60000000 fullmsg"-Minfo -Mkeepftn

性能評価

- HPF16共有並列x1分散並列
 - Real Time 11.442sec/step
 - Mflops(concurrent) 3147.3
 - Vector率 98.0130%
 - 平均Vector長 154.762
 - メモリ 81.024Gbytes
- HPF16共有並列x2分散並列
 - Real Time 11.624sec/step
 - Mflops(concurrent) 2050.0
 - Vector率 96.972%
 - 平均Vector長 147.058
 - メモリ 154.688Gbytes
- F90 16並列
 - Real Time 7.054sec/step
 - Mflops(concurrent) 5358.8
 - Vector率 98.5397%
 - 平均Vector長 170.157
 - メモリ 80.320Gbytes
- F90 32並列
 - Real Time 6.870sec/step
 - Mflops(concurrent) 7042.6
 - Vector率 98.2826%
 - 平均Vector長 168.713
 - メモリ 144.576Mbytes

課題(並列化率)

- HPF 2x16

- Max Concurrent Proc. : 16.
- Conc. Time(≥ 1)(sec): 1135.624326
- Conc. Time(≥ 2)(sec): 248.789704
-
- Conc. Time(≥ 15)(sec): 218.986075
- Conc. Time(≥ 16)(sec): 202.518835

- F90 32

- Max Concurrent Proc. : 32.
- Conc. Time(≥ 1)(sec): 640.593584
- Conc. Time(≥ 2)(sec): 241.444438
-
- Conc. Time(≥ 31)(sec): 225.814654
- Conc. Time(≥ 32)(sec): 214.438441

まとめと課題

- 開放系電磁粒子シミュレーションのHPF化をおこなった.
- 逐次実行の部分がまだ多い
 - 並列化率の向上
 - 非並列化部分の呼び出し回数を減らす
 - アルゴリズムそのものの変更(分布の取扱)
- ベクトル化効率の向上
- ftraceを活用