

TSUBAME 共同利用 令和元年度 学術利用 成果報告書

利用課題名 LRnLA アルゴリズムを用いた物理シミュレーション
 英文: Simulation of Physical Processes with LRnLA Algorithms

善甫 康成
 Yasunari Zempo

法政大学 情報科学部
 Computer and Information Sciences
<http://cis.k.hosei.ac.jp/>

地震解析のための DiamondSeism コードは、毎秒最大 14 億セル更新のパフォーマンスで、層状媒体の地震弾性波をシミュレートできる性能を持っている。この性能は LRnLA 並列アルゴリズムを使用することで達成されたものである。昨年報告したシミュレーションを継続し、更に多くの地震情報を取得している。表面波、屈折波、二次波など総てのタイプの弾性波を考慮に入れた 3D の有限差分モデルにより、地震応答の正確な予測ができるようになった。3D クロスステンシルを持つ新しいモデルを用いて LRnLA コードの最適化のテストを実行した。この新しいアルゴリズムは、今後様々な物理シミュレーションコードの開発で使用できると期待できる。

The code DiamondSeism simulates seismic elastic waves in a layered media with a performance up to 1.4 billion cell updates per second. This performance is achieved with the use of parallel LRnLA algorithms. We continue the simulation batch that has been reported in the previous year, and obtain new seismograms in the extended domain. Taking account of all types of elastic waves: surface wave, refracted waves, secondary waves, finite difference modelling in 3D media gives accurate predictions of the seismic response. We have performed tests for optimization of LRnLA codes on a model with a 3D cross stencil. The new algorithm will be used in further physical simulation code development.

Keywords: LRnLA Algorithm, Hooke's law, synthetic seismogram, finite difference, cross stencil

背景と目的

永久凍土(permafrost)がある地域での地震波トモグラフィーを用いる際に注意しなければならないことの一つに不凍土層(Talik)の存在の有無がある。不凍土層があると地震計の記録に干渉によるノイズが発生することが知られている。3次元全波数値シミュレーションを使用すると、推測した位置にある不凍土層を含む地震層モデルから理論的な地震波が得られる。その記録を解析することにより不凍土層に起因した干渉の検出が可能になる。更に地震波トモグラフィーの解析について補正を行い、地震波を正確にとらえることが可能である。

計算コストの観点から、不凍土層は低速度層であるので、解析の解像度は空間ステップによって決まり、それがモデルの全計算量を決める。

4次近似の数値スキームを使用すれば、空間ステップが一番短い波長の8分の1程度で十分であり、必要な精度が得られるモデルリングが可能である。不凍土層のP波の伝播速度は $V_p \sim 2400$ m/s, S波の伝播速度は $V_s \sim 1550$ m/s であるので、長さが ~ 10 km程度のシミュレーションを行うと、データ量は50GB以上になる。また幾つかの震源位置での地震解

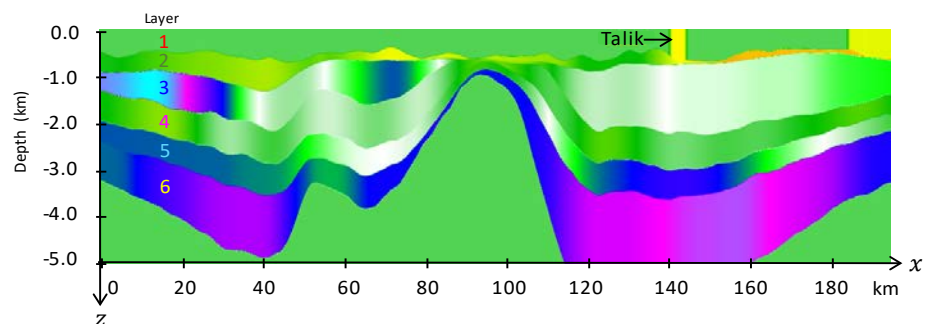


図 1. 地震層モデル。Layer1 の 141200m-144925m が Talík 層である。地震源は 134925m から 151200m の空間にあるとした。

析の結果を得るには、必要な計算を 1000 ケース以上行う必要がある。

このためには効率的なアルゴリズムを持つ並列コードと高性能計算機の利用が不可欠となる。本プロジェクトでは、GPU を使用して地震波の伝播現象をシミュレーションする高性能コード DiamondSeism を many-GPU の環境である TSUBAME3.0 に移植し不凍土層を含む地震層モデル計算を実施した[1]。

加えて並列効率とメモリ効率を更に向上させるため、新しい LRnLA アルゴリズムと実装法を開発し、その試験を実施した。

内容

地震波の伝播の数値モデルはフックの法則とニュートン運動の法則からなる[2]。モデルは、応力テンソルと変位速度ベクトルの時間発展をあらわす。使用されている Finite-Difference 数値スキームは空間で 4 次近似、時間で二次近似である[3]。境界条件として PML を使用し、地震波源のため TF/SF 法を使用している。なお本モデルは以前、DTmaxwell コード[4]を基本に TSUBAME2.5 と TSUBAME3.0 上で開発してきた解析を実施してきた実績のあるものである。

図 1 に地震層モデルを示す。地表から地球内部に向かって主要な構造が 6 層ある。これらの層を用い図 2 に示す層のパラメータ依存性を考慮しシミュレーションを行った。密度の空間依存性、P 波および S 波の伝播速度との空間依存性を、それぞれ図 2、図 3 に示す。本プロジェクトで用いたモデルは 3 次元データを用いた 3 次元解析であるが、1 断面をとり 2 次元の表示としている。伝播速度が低い Talik 層は Layer1(赤線)の中の 141200 m – 144925 m に示してある。

本コードの特徴は、LRnLA アルゴリズムの使用していることである。この数値計算スキームでは局所依存性を考慮し、メモリバンド幅への負担をできるだけ最小化・緩和する。また LRnLA アルゴリズムは、全メモリ階層と全並列法を考慮し temporal blocking[5] の考え方を更に進めた形になっている。GPU の場合、計算のデータを比較的に大きいレジスタファイル内に閉込め CUDA-スレッドの並列性を使う[4]。

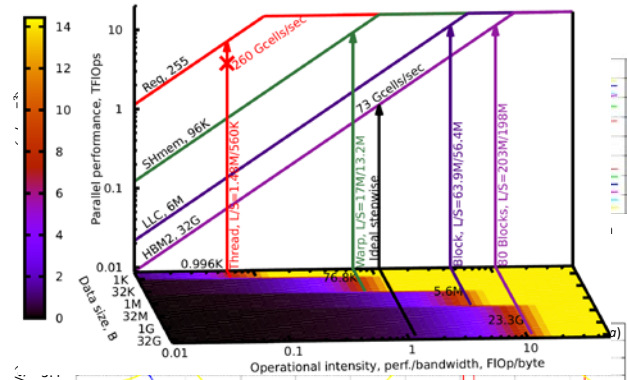


図 4. Roofline 解析による性能評価

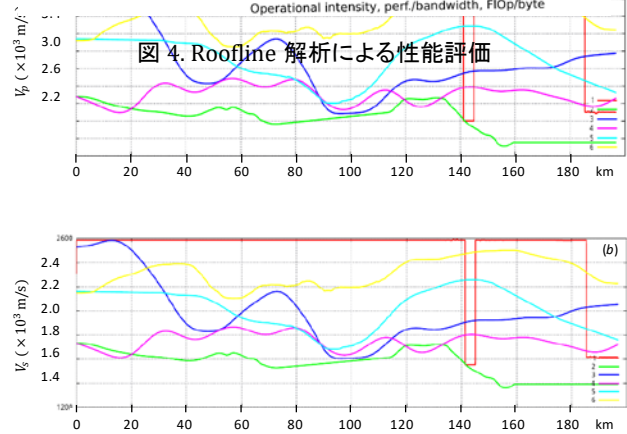


図 3 P 波(a)および S 波(a)の伝播速度との空間依存性

本プロジェクトでは、スレッドの並列に加え、新しい試みとして CUDA-warp 並列と shared メモリアクセス数を減じて実装効率増加させるという実装法を導入した。

図 5 に RoofLine[6] 解析による性能評価の結果を示す。3 次元クロスステンスルを用いたコードのパフォーマンスの見積と NVidia P100GPU での実施結果である。黒い矢印は LRnLA アルゴリズムを用いない従来型コードの最大パフォーマンスの見積である。これは全データ(23.3GB)をデバイスメモリ(HBM2)に保存し、1 回全データのアップデートのため、数値毎にロードして、再度 1 回セーブすることが必要であるということから算出した理想的な場合の見積結果である。

LRnLA アルゴリズムを用いた場合の上限を赤い矢印で示す。従来型のコードとは様子が大きく異なる。その理由は、デバイスメモリからのロードが一番時間が掛かるが、一旦ロードすると、既にロードされているデータを用い多数の計算が行われるため、operational intensity が非常に高く保たれるからである。単純に LRnLA アルゴリズムを用いた結果を図 4 中に桃色の矢印で示す(一番右)。3 次元のデータを DiamondTorre アルゴリズムにて計算した時のデータ量から算出した推測値である。また DiamondTorre 間のデータ交換のため、LLC cache を使用可能と仮定した結果を、二番目の 'Block' という紫色の矢印で示している。また CUDA-block 中の計算では CUDA-スレッドの並列化を使用するので、更に DiamondTorre 間のデータ交換のた

め、LLC cache を使用可能と仮定した結果が、右から二番目の'Block'という紫色の線で示した結果である。かなり処理能力が向上していることがわかる。

また CUDA-block 中の計算では CUDA-スレッドの並列化を使用する。Warp-間のデータ交換には shared メモリを使用する。これを利用した場合の上限値を見積ったのが緑の矢印で示した値である、もちろん CUDA-warp 中のデータ効果は shuffle ベクトル演算を用いるため、更に性能が向上することが期待できる(赤の矢印)。その結果、パフォーマンスの上限値は 490 cell update per second であると思える。実際のテストでは、オーバーヘッドのためと思われるが、260 cell update per second であった。

結果および考察

TSUBAME3.0 のノード内の 4 つの NVIDIA Tesla P100 を用い計算を行った。

震源の振動数は 30 Hz である。モデルの 134925 m から 151200 m までの空間内で 50 m ごとに 325 個の地震源があるとした。地震波センサーは地表に 25 m 毎に 650 個設置し、シミュレーション領域は地震計を設置した線に沿って長さ 10 km であり、深さは 5 km である。空間のメッシュ数は $1500 \times 600 \times 256$ 個である。地震計の線の垂線の方向で 128 メッシュ内には PML 層も含んでいるが、球形の波面を持つ地震波の伝播距離にからすると減衰には十分であると考えられる。

計算データは 13 GB となるので、TSUBAME のノード内では、4 つの独立なシミュレーションを実行することが可能である。時間ステップは ~ 0.667 秒であるため、5 秒の伝播を図るためには 15000 ステップ必要である。現在のパフォーマンスは 3.1×10^9 cell update per second であり一つの計算は 12 分程度で済む。

計算結果の例として、図 4 では理論的に求めた地震計の記録が表している。これは、 $t-x$ のグラフで変位の速度の V_z である。 z -軸は下に向いている。不凍土層による反射が良く見てとれる。

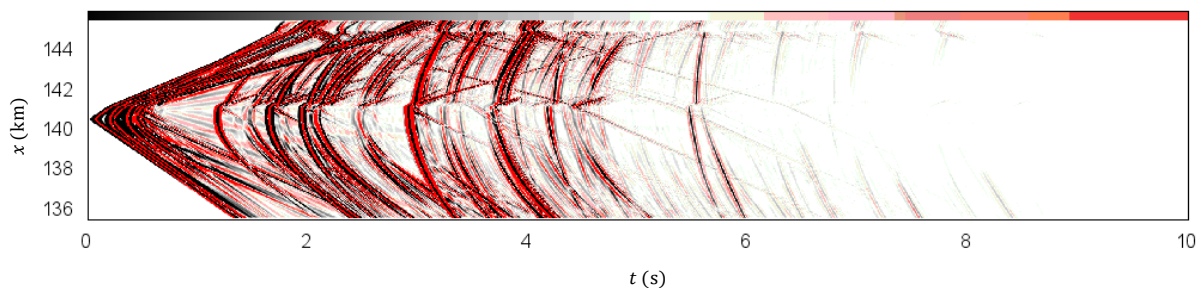


図 6. 理論的に求めた地震波。震源付近での変位の速度の大きさを表している。

まとめと今後の課題

我々が、これまでに開発した LRnLA アルゴリズムを使ったコードを地震波の伝播計算に展開した。また LRnLS に関して GPU のハードに合わせた新しいアルゴリズムの開発も行った。その特徴は、3次元データにおける計算の局所化とレジスター内でのデータ交換である。CUDA を用い実施法の単純化がさらに必要ではありさらに改良を続ける予定である。完成すれば、電磁場、地震波のシミュレーションで使用可能になり、現在使用している地震波解析コード DiamondSeism より高いパフォーマンスが期待できる。

参考文献

- [1] T. Levchenko, V. Rok, V. Levchenko, A. Perepelkina, Y. Zempo, "Computer modelling specifics of the geological structure with contrasting inhomogeneities under the permafrost conditions" GEO Eurasia-2019, Materials of the International geologic and geophysics conference and exhibition (Feb. 4-7, 2019, Moscow), pp. 814-817 <https://www.gece.moscow/> https://drive.google.com/file/d/1Z7o5H8ZQ6EYqgp_atcbBEGlaKiEMFiarh/view?usp=sharing
- [2] Aki, Keiiti, and Paul G. Richards, "Quantitative seismology", 2002.
- [3] Levander Alan R. Fourth-order finite-difference P-W seismograms // Geophysics. 53(11), p1425-1436., 1988
- [4] A. Zakirov, V. Levchenko, A. Perepelkina, Y. Zempo, "High performance FDTD algorithm for GPGPU supercomputers", J. Phys.: Conf. Ser. 759 012100, 2016
- [5] Endo, Toshio. "Applying Recursive Temporal Blocking for Stencil Computations to Deeper Memory Hierarchy." 2018 IEEE 7th Non-Volatile Memory Systems and Applications Symposium (NVMSA). IEEE, 2018.
- [6] Williams, Samuel, Andrew Waterman, and David Patterson. "Roofline: an insightful visual performance model for multicore architectures." Communications of the ACM 52.4 (2009): 65-76.