

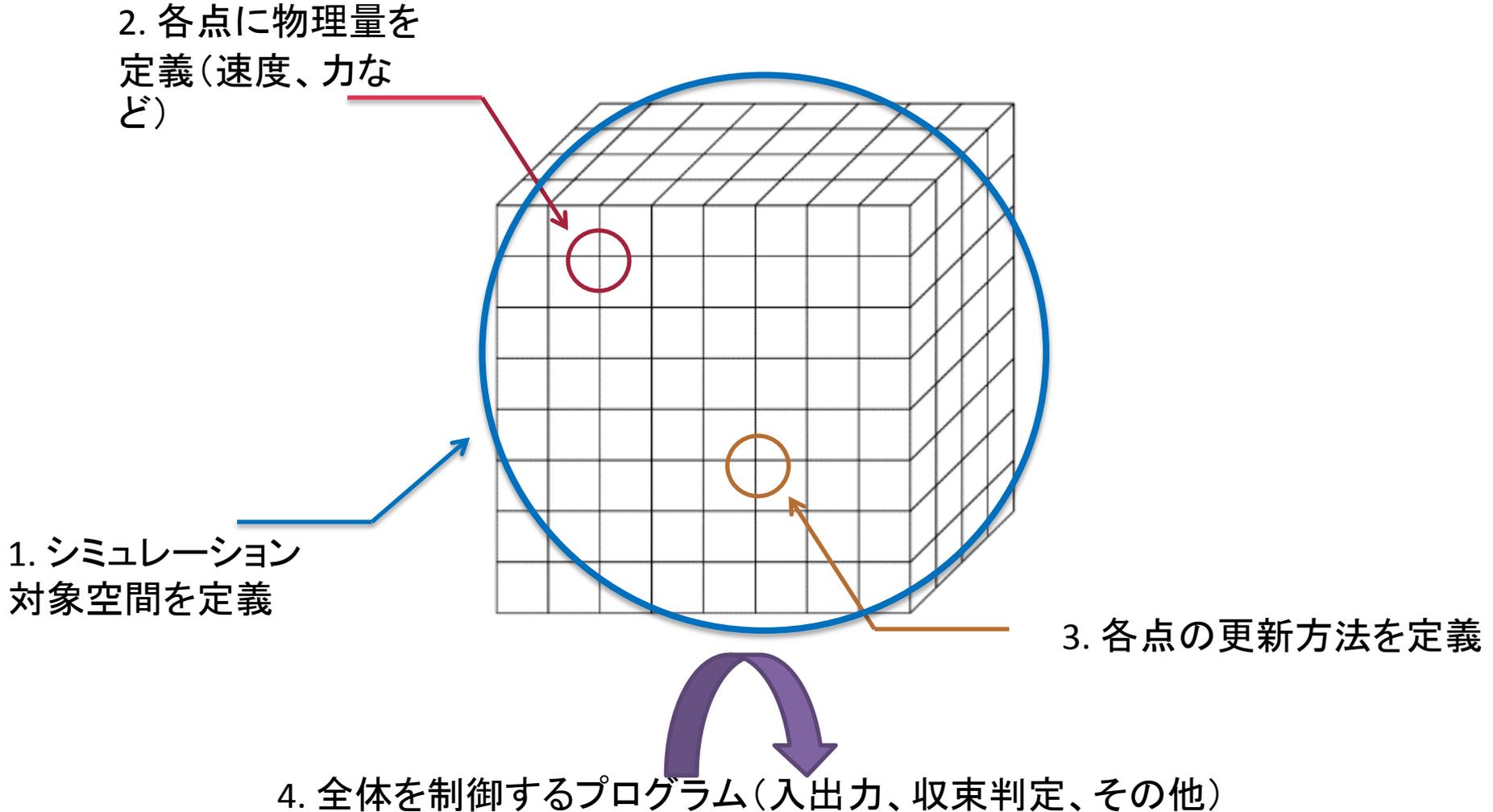
ステンシルフレームワークによる 性能と生産性の両立

丸山直也（理研AICS/東工大/JST CREST）
ワークショップ ー地球流体計算の今後ー
神戸大学惑星科学研究センター
2014年3月11日

流体現象のシミュレーションに至るまで

1. 対象現象の方程式による記述
2. 方程式の離散化
3. プログラム記述

ステンシル計算に基づいた流体シミュレーションの構成



流体現象のシミュレーションに至るまで

1. 対象現象の方程式による記述

2. 方程式の離散化

3. プログラム記述

1. 対象空間の定義

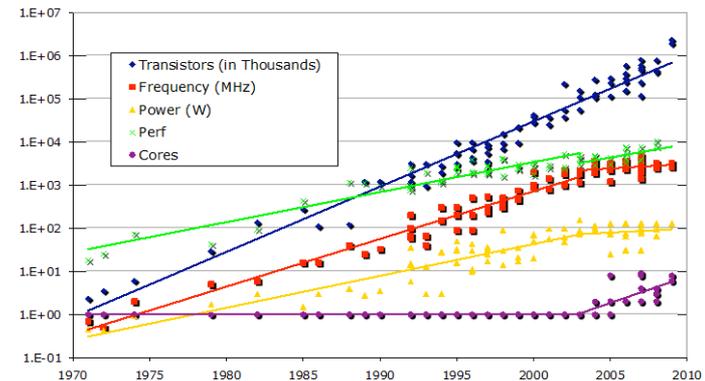
2. 格子点物理量の定義

3. 格子点更新方法の定義

4. 全体制御プログラムの記述

流体シミュレーションプログラムの記述

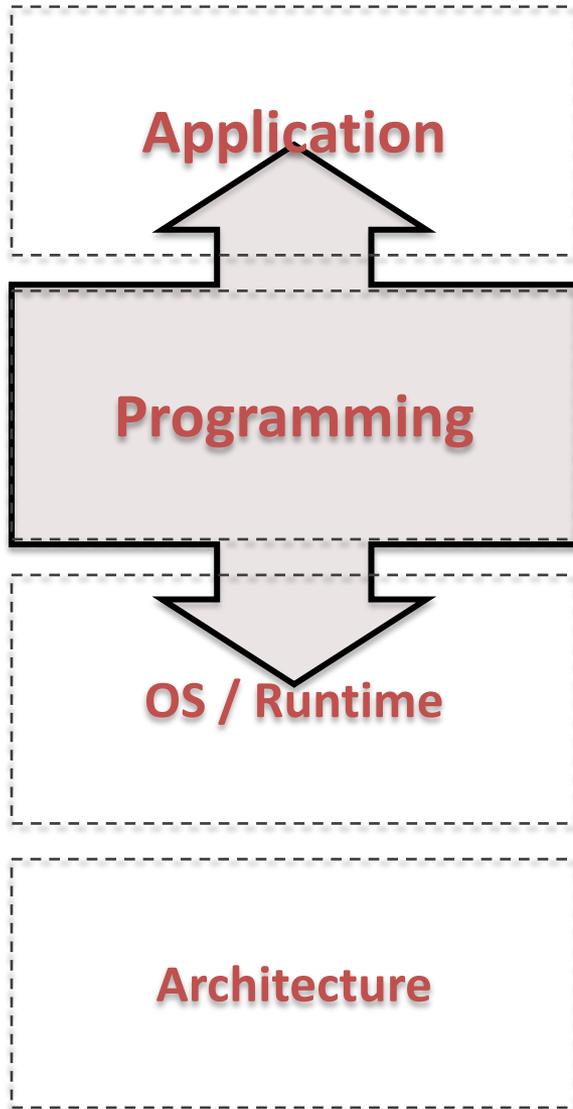
- ステンシル計算自体は単純
 - 各格子点の隣接要素を使った算術演算
 - データ並列性による並列化への適正
 - MPI、OpenMP 並列容易
- データ移動コストの増大
 - 計算の並列化 != 性能向上
 - データ移動最小化が重要
- 並列アーキテクチャの多様化
 - GPU等のアクセラレータ
 - アーキテクチャ毎に最適化方針が異なる



現状

- 現在のメインストリーム(?)
 - 各アーキテクチャ毎に人手によるプログラミング
→ 以下のトレードオフ
 - 手間
 - アーキテクチャの将来性
 - 移植による性能向上
 - 指示文ベースのプログラミングモデルにより生産性の改善→性能最適化にはアーキテクチャ固有最適化が必要([CCGrid'13])
- 研究レベル
 - コンパイラによる自動GPUコード生成 & 最適化

ドメイン特化型プログラミング



- 特定ドメインに特化することで、アプリケーションドメインのボキャブラリでプログラムを記述可能に
- 汎用性と生産性のトレードオフ
- 例
 - 計算科学: Matlab、R、BLAS、FFTW、OpenFOAM
 - 一般: SQL, Ruby on Rails, LaTeX, Make
 - その他研究レベルでは多くが出現
- 実現方法
 - 言語、フレームワーク、ライブラリ
 - ドメインによって異なる

流体現象のシミュレーションに至るまで

1. 対象現象の方程式による記述

2. 方程式の離散化

3. プログラム記述

1. 対象空間の定義

2. 格子点物理量の定義

3. 格子点更新方法の定義

4. 全体制御プログラムの記述



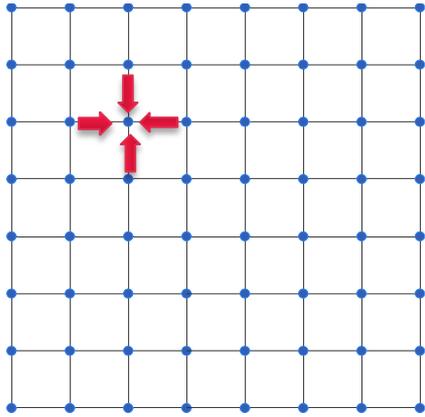
対象ドメイン



フレームワーク化

Physis ステンシルフレームワーク

Paper @ SC'11 Code @ <http://github.com/naoyam/physis>



Stencil DSL

- Declarative
- Portable
- Global-view
- C-based

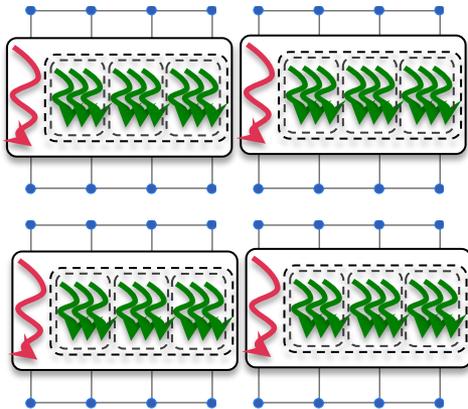
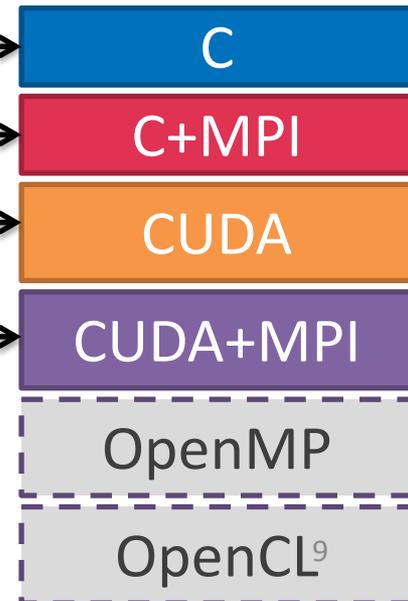
```
void diffusion(int x, int y, int z,
              PSGrid3DFloat g1, PSGrid3DFloat g2) {
    float v = PSGridGet(g1,x,y,z)
    +PSGridGet(g1,x-1,y,z)+PSGridGet(g1,x+1,y,z)
    +PSGridGet(g1,x,y-1,z)+PSGridGet(g1,x,y+1,z)
    +PSGridGet(g1,x,y,z-1)+PSGridGet(g1,x,y,z+1);
    PSGridEmit(g2,v/7.0);
}
```



DSL Compiler

- Target-specific code generation and optimizations
- Automatic parallelization

Physis



フレームワーク設計指針

- 種々のステンシルに対応
- 計算科学における親和性
- **並列性**のプログラマによる明示的な記述
 - Cf. OpenMP vs. コンパイラ自動並列化
- 並列化**方法**は記述させない
- アーキテクチャ独立

ステンシルをプログラミング可能である必要あり
ライブラリでは不十分

C/Fortranのような記述

宣言的な記述

自動コード生成

Physis DSL

- C言語を限定的に拡張したドメイン特化型言語
- 以下の機能を提供
 1. 対象空間の定義
 2. 格子点物理量の定義
 3. 格子点更新方法の定義

1. 対象空間の定義

- 要件
 - 多次元密直交空間の定義
- Physis
 - 型 `PSDomainND` により定義
 - 例: N^3 の3次元空間

```
PSDomain3D d = PSDomain3DNew(0,N,0,N,0,N);
```

- 例: N^3 空間内の2次元平面

```
PSDomain3D p = PSDomain3DNew(0,N,0,N,0,0);
```

2. 格子点物理量の定義

- 要件
 - シミュレーション問題によって定義する物理変数は異なる→ユーザ定義の必要性
 - 実際の値の持ち方はプログラマから隠蔽
 - Cf. SoA vs. AoS
- Physis
 - C言語構造体として変数を定義
 - 構造体を点に持つ格子の型を宣言
 - DeclareGridND(構造体の型, 格子の型)
 - 定義した格子型のオブジェクトを生成、破棄
 - PSGrid3DTypeNew, PSGridFree
 - 例： 速度 v_x , v_y , v_z を持つ3次元格子

```
struct point {double vx, vy, vz};  
DeclareGrid3D(struct point, Point);  
// Grid3DPoint型が以降利用可能
```

2. 格子点物理量の定義

- 例：速度 v_x , v_y , v_z を持つ3次元格子

```
struct point {
    double vx, vy, vz
};
DeclareGrid3D(struct point, Point);
// PSGrid3DPoint型が以降利用可能

void foo() {
    PSGrid3DPoint g=PSGrid3dPointNew(N,N,N);
    ...
    PSGridFree(g);
}
```

データ構造の性能可搬性

```
PSGrid3DFloat u;  
PSGrid3DFloat v;  
PSGrid3DFloat w;  
PSGrid3DFloat x0, x1, x2, ..., x18;  
...  
PSGridGet(u, i, j, k);
```

w/o user-defined point type

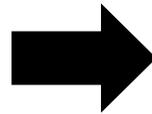
```
struct Point {  
    float u;  
    float v;  
    float w;  
    float x[19];  
};  
DeclareGrid3D(Point, struct Point);  
PSGrid3DPoint g;  
PSGridGet(g.u, i, j, k);  
PSGridGet(g.x[l], i, j+1, k);
```

w/ user-defined point type

データ構造の性能可搬性

- SoA vs. AoS
 - GPU → SoA
 - CPU → AoS (?)

```
struct Point {  
    float u;  
    float v;  
    float w;  
    float x[19];  
};  
DeclareGrid3D(Point, struct Point);  
  
PSGrid3DPoint g;  
...  
PSGridGet(g.u, i, j, k);  
PSGridGet(g.x[l], i, j+1, k);
```



Automatic
translation
to SoA
layout

```
struct PointGrid {  
    float *u;  
    float *v;  
    float *w;  
    float *x;  
};  
...  
// PSGridGet(g.u, i, j, k);  
g->u[i+j*nx+k*nx*ny]  
// PSGridGet(g.x[2], i, j+1, k);  
g->x[i+j*nx+k*nx*ny+l*nx*ny*nz];
```

3. 格子点更新方法の定義

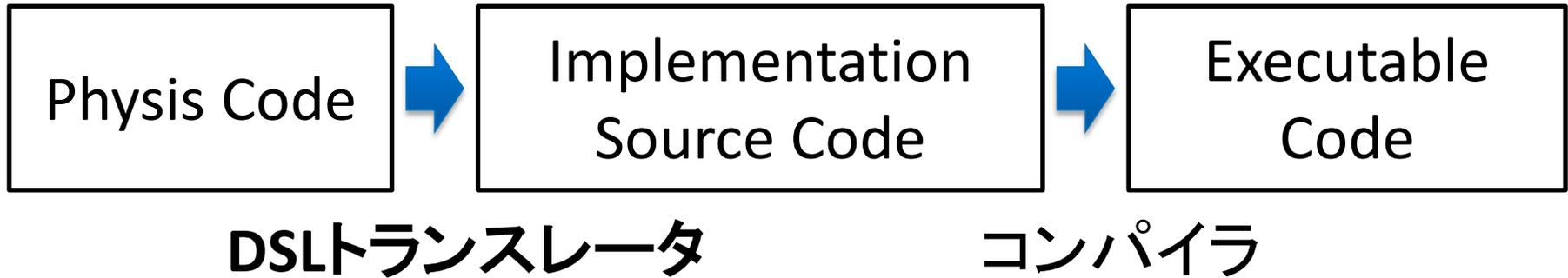
- 要件
 - ステンシル操作をC言語で記述
 - 明示的なアクセスパターン
 - 最適化に利用
- Physis
 - 各点におけるスカラー計算をC言語の関数として定義
 - N次元ドメインの点に対する操作 → N個のダミーインデックス引数
 - Cf. elemental subroutines in Fortran 95
 - PSGridGet: 格子点の読み込み
 - PSGridEmit: 格子点の書き込み
 - PSStencilMap: ドメイン上でステンシル関数を実行
 - 派生として PSStencilMapRedBlack など

例

```
void kernel(const int x, const int y, const int z,  
           PSGrid3DPoint g1, PSGrid3DDouble g2) {  
    double v = PSGridGet(g1,x,y,z).vx  
              +PSGridGet(g1,x-1,y,z).vx + PSGridGet(g1,x+1,y,z).vx  
              +PSGridGet(g1,x,y-1,z).vy + PSGridGet(g1,x,y+1,z).vy  
              +PSGridGet(g1,x,y,z-1).vz + PSGridGet(g1,x,y,z+1).vz;  
    PSGridEmit(g2,v/7.0);  
}
```

```
PSGrid3DPoint g1 = PSGrid3DPointNew(NX, NY, NZ);  
PSGrid3DDouble g2 = PSGrid3DDoubleNew(NX, NY, NZ);  
PSDomain3D d = PSDomain3DNew(0, NX, 0, NY, 0, NZ);  
PSStencilMap(kernel,d,g1,g2);
```

実装



- 使い方

- `physisc-ref user-program.c`

- リファレンスタarget (逐次C) コードを生成

- `physisc-cuda user-program.c`

- CUDAコードを生成

DSLトランスレータ

- ROSEコンパイラフレームワーク

- <http://rosecompiler.org>

- LLNLにて開発

- C/C++のソースレベル変換

- ソースコード上のハイレベルな情報を保持

- LLVM/Clangも検討したが(一部実装もした)、バイトコードレベルに落とす段階で情報が欠落

- Steep learning curveだが、まあまあ安定して動作

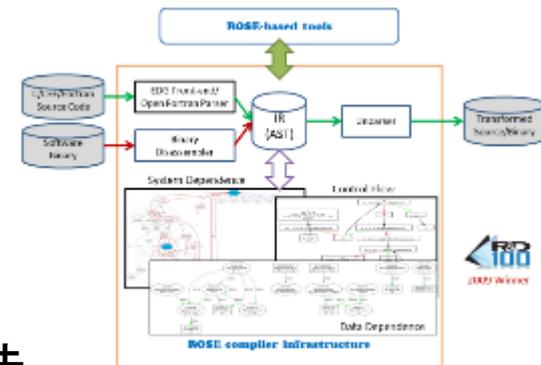
- C/C++フロントエンドは商用コンパイラでも使われているEdg

- Fortranフロントエンドもあるが、あまりサポートされていない(?)

- けっこう綺麗なコードを生成(わりと重要)

- CUDA, OpenCLをASTとしてサポート

- ASTの操作としてプログラミング可能



コード生成例

Physisユーザコード

```
static void kernel_physis(const int x, const int y, const int z,
                          PSGrid3DReal g1, PSGrid3DReal g2,
                          REAL ce, REAL cw, REAL cn, REAL cs,
                          REAL ct, REAL cb, REAL cc) {

    int nx, ny, nz;
    nx = PSGridDim(g1, 0);
    ny = PSGridDim(g1, 1);
    nz = PSGridDim(g1, 2);

    REAL c, w, e, n, s, b, t;
    c = PSGridGet(g1, x, y, z);
    if (x == 0) w = PSGridGet(g1, x, y, z); else w = PSGridGet(g1, x-1, y, z);
    if (x == nx-1) e = PSGridGet(g1, x, y, z); else e = PSGridGet(g1, x+1, y, z);
    if (y == 0) n = PSGridGet(g1, x, y, z); else n = PSGridGet(g1, x, y-1, z);
    if (y == ny-1) s = PSGridGet(g1, x, y, z); else s = PSGridGet(g1, x, y+1, z);
    if (z == 0) b = PSGridGet(g1, x, y, z); else b = PSGridGet(g1, x, y, z-1);
    if (z == nz-1) t = PSGridGet(g1, x, y, z); else t = PSGridGet(g1, x, y, z+1);
    PSGridEmit(g2, cc*c + cw*w + ce*e + cs*s
              + cn*n + cb*b + ct*t);
    return;
}
```

コード生成例

\$ physisc-cuda physis/examples/diffusion-benchmark/diffusion3d_physis.c

```
__device__ static void kernel_physis(const int x,const int y,const int z,__PSGrid3DFloat_dev *g1,__PSGrid3DFloat_dev *g2,float ce,float cw,float cn,float cs,float ct,float cb,float cc)
{
    int nx;
    int ny;
    int nz;
    nx = PSGridDim(g1,0);
    ny = PSGridDim(g1,1);
    nz = PSGridDim(g1,2);
    float c;
    float w;
    float e;
    float n;
    float s;
    float b;
    float t;
    c = ((float *)(g1 -> p0))['__PSGridGetOffset3DDev(g1,x,y,z)];
    if (x == 0) w = ((float *)(g1 -> p0))['__PSGridGetOffset3DDev(g1,x,y,z)]; else w = ((float *)(g1 -> p0))['__PSGridGetOffset3DDev(g1,(x - 1),y,z)];
    if (x == (nx - 1)) e = ((float *)(g1 -> p0))['__PSGridGetOffset3DDev(g1,x,y,z)]; else e = ((float *)(g1 -> p0))['__PSGridGetOffset3DDev(g1,x,(y - 1),z)];
    if (y == 0) n = ((float *)(g1 -> p0))['__PSGridGetOffset3DDev(g1,x,y,z)]; else n = ((float *)(g1 -> p0))['__PSGridGetOffset3DDev(g1,x,y,(y - 1),z)];
    if (y == (ny - 1)) s = ((float *)(g1 -> p0))['__PSGridGetOffset3DDev(g1,x,y,z)]; else s = ((float *)(g1 -> p0))['__PSGridGetOffset3DDev(g1,x,y,(y - 1),z)];
    if (z == 0) b = ((float *)(g1 -> p0))['__PSGridGetOffset3DDev(g1,x,y,z)]; else b = ((float *)(g1 -> p0))['__PSGridGetOffset3DDev(g1,x,y,(z - 1),z)];
    if (z == (nz - 1)) t = ((float *)(g1 -> p0))['__PSGridGetOffset3DDev(g1,x,y,z)]; else t = ((float *)(g1 -> p0))['__PSGridGetOffset3DDev(g1,x,y,(z - 1),z)];
    ((float *)(g2 -> p0))['__PSGridGetOffset3DDev(g2,x,y,z)] = (((((((cc * c) + (cw * w)) + (ce * e)) + (cs * s)) + (cn * n)) + (cb * b)) + (ct * t));
}
```

- コードの大まかな構成、変数名を維持
- 変換後のコードの人手による編集もわりと容易

トランスレータの動作詳細

1. ユーザプログラムの解析

1. 格子型宣言の検出
2. ステンシル関数の検出
3. ステンシル関数内の格子へのアクセス解析

2. コード生成

1. 格子型の実際の定義を生成
2. 格子オブジェクトの生成、破棄の呼び出しを適切な関数呼び出しへ変換
3. ステンシル関数定義をターゲットアーキテクチャ向けに変換
4. ステンシル関数呼び出しコードの生成

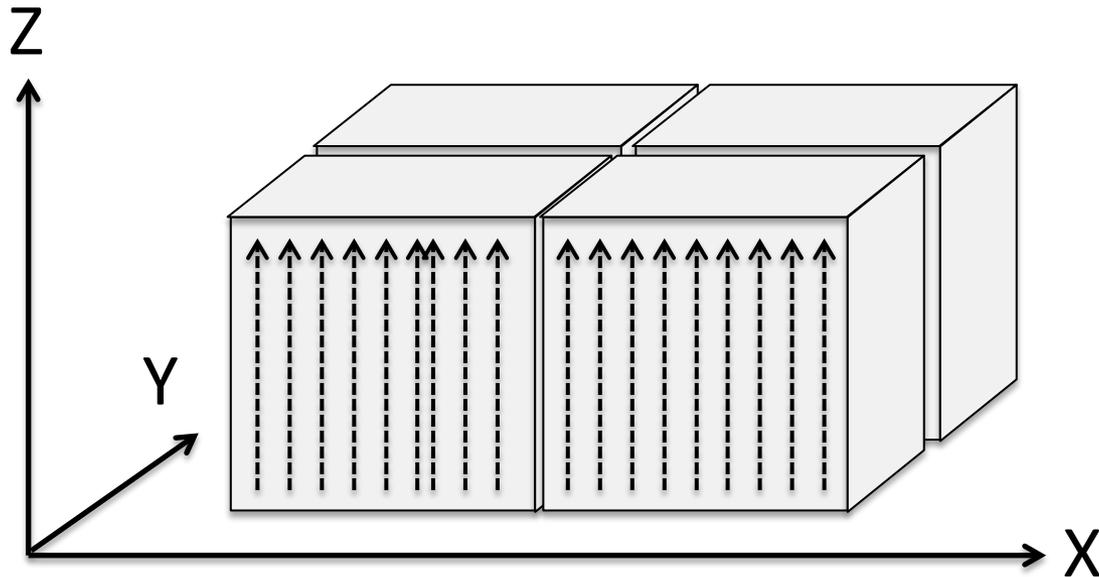
3. 最適化

2. コード生成

- ターゲット毎のコード生成をC++のクラスとして実装
 - ReferenceTranslator
 - コード変換の検証用リファレンスコード生成
 - CUDATranslater
 - ReferenceTranslatorを継承し、CUDA固有部分を実装
 - MPITranslator
 - MPICUDATranslator
- ユーザー定義格子型
 - CPU向け→AoSとして定義
 - GPU向け→SoAとして定義
 - ユーザコードのPSGridGetを適宜変換
- ステンシル関数呼び出し
 - CUDA、MPIターゲットの場合は領域分割により並列化

CUDA Thread Blocking

- Each thread sweeps points in the Z dimension
- X and Y dimensions are blocked with $A \times B$ thread blocks, where A and B are user-configurable parameters (64x4 by default)



Example: 7-point Stencil GPU Code

```
__device__ void kernel(const int x,const int y,const int z,__PSGrid3DFloatDev *g,
                      __PSGrid3DFloatDev *g2)
{
    float v = (((((( *__PSGridGetAddrFloat3D(g,x,y,z) +
                    *__PSGridGetAddrFloat3D(g,(x + 1),y,z)) +
                    *__PSGridGetAddrFloat3D(g,(x - 1),y,z)) +
                    *__PSGridGetAddrFloat3D(g,x,(y + 1),z)) +
                    *__PSGridGetAddrFloat3D(g,x,(y - 1),z)) +
                    *__PSGridGetAddrFloat3D(g,x,y,(z - 1))) +
                    *__PSGridGetAddrFloat3D(g,x,y,(z + 1))));
    *__PSGridEmitAddrFloat3D(g2,x,y,z) = v;
}

__global__ void __PSStencilRun_kernel(int offset0,int offset1,__PSDomain dom,
                                     __PSGrid3DFloatDev g,__PSGrid3DFloatDev g2)
{
    int x = blockIdx.x * blockDim.x + threadIdx.x + offset0;
    int y = blockIdx.y * blockDim.y + threadIdx.y + offset1;
    if (x < dom.local_min[0] || x >= dom.local_max[0] ||
        (y < dom.local_min[1] || y >= dom.local_max[1]))
        return ;
    int z;
    for (z = dom.local_min[2]; z < dom.local_max[2]; ++z) {
        kernel(x,y,z,&g,&g2);
    }
}
```

3. 最適化

- ステンシル適用ループに対するピープホール最適化
- トランスレータコマンドのオプションとして最適化有効・無効設定ファイルを指示可

```
OPT_OFFSET_COMP = true | false  
OPT_LOOP_PEELING = true | false  
OPT_REGISTER_BLOCKING = true | false  
OPT_LOOP_OPT = true | false  
OPT_UNCONDITIONAL_GET = true | false
```

最適化：レジスタブロッキング

- スレッドローカルな局所性の活用
 - ローカル変数の使い回しによるグローバルメモリアクセス削減

適用前

```
for (int k = 1; k < n-1; ++k) {  
    g[i][j][k] = a*(f[i][j][k]+f[i][j][k-  
1]+f[i][j][k+1]);  
}
```

適用後

```
double kc = f[i][j][0];  
double kn = f[i][j][1];  
for (int k = 1; k < n-1; ++k) {  
    double kp = kc;  
    kc = kn;  
    kn = f[i][j][k+1];  
    g[i][j][k] = a*(kc+kp+kn);  
}
```

最適化： インデックス計算最適化

- インデックス計算の共通部分式括りだし
 - イテレーション内の共通項
 - イテレーション間の共通項

適用前

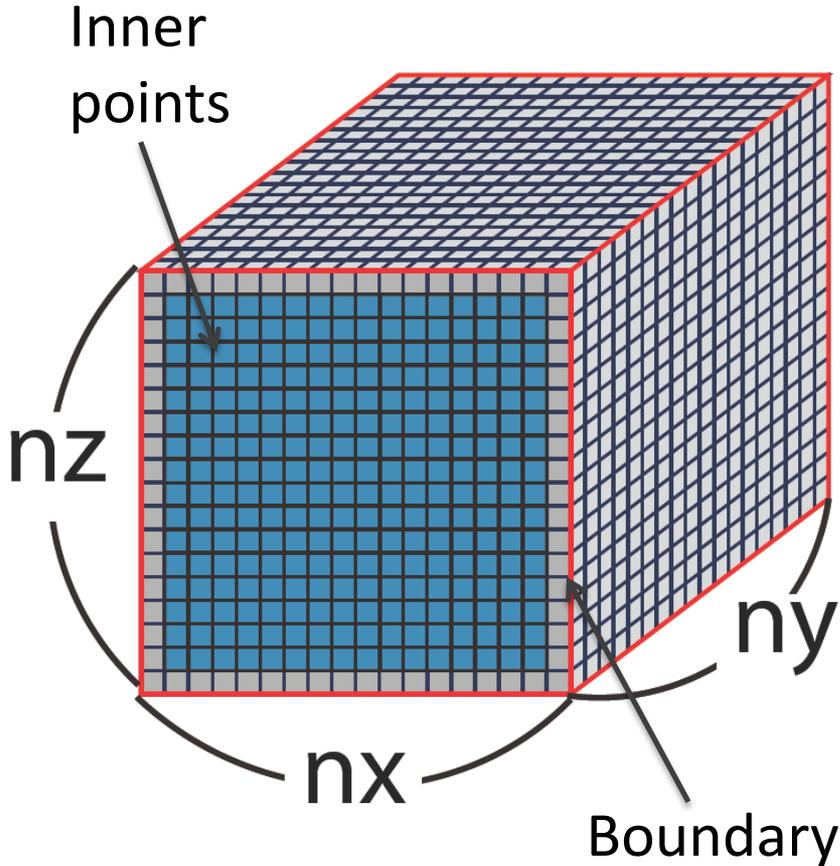
```
for (int k = 1; k < n-1; ++k) {  
    g[i][j][k] = a*(f[i+j*n+k*n*n]+  
        f[i+j*n+(k-1)*n*n]+f[i+j*n+(k+1)*n*n]);  
}
```

適用後

```
int idx = i+j*n+n*n;  
for (int k = 1; k < n-1; ++k) {  
    g[i][j][k] = a*(f[idx]+f[idx-n*n]+f[idx+n*n]);  
    idx += n*n;  
}
```

その他ループピーリング等のループ最適化器

Optimization: Overlapped Computation and Communication



1. Copy boundaries from GPU to CPU for non-unit stride cases



2. Computes interior points

3. Boundary exchanges with neighbors



4. Computes boundaries



Optimization Example: 7-Point Stencil CPU Code

Computing

Interior Points

```
for (i = 0; i < Interior Points)
__PSStencilRun_kernel_interior<<<s0_grid_dim,block_dim,0, stream_interior>>>
  (__PSGetLocalOffset(0),__PSGetLocalOffset(1),__PSDomainShrink(&s0 -> dom,1),
  *((__PSGrid3DFloatDev *) (__PSGridGetDev(s0 -> g))), *((__PSGrid3DFloatDev *) (__PSGrid
int fw_width[3] = {1L, 1L, 1L};
int bw_width[3] = {1L, 1L, 1L};
__PSLoadNeighbor(s0 -> g, fw_width, bw_width, 0, i > 0, 1);
__PSStencilRun_kernel_boundary_1_bw<<<1,(dim3(1,128,4)),0,
  stream_boundary_kernel[0]>>>(__PSDomainGetBoundary(&s0 -> dom,0,0,1,5,0),
  *((__PSGrid3DFloatDev *) (__PSGridGetDev(s0 -> g))), *((__PSGrid3DFloatDev *) (__PS
__PSStencilRun_kernel_boundary_1_fw<<<1,(dim3(1,128,4)),0,
  stream_boundary_kernel[1]>>>(__PSDomainGetBoundary(&s0 -> dom,0,0,1,5,1),
  *((__PSGrid3DFloatDev *) (__PSGridGetDev(s0 -> g))), *((__PSGrid3DFloatDev *) (__PS
...
__PSStencilRun_kernel_boundary_2_fw<<<1,(dim3(128,1,4)),0,
  stream_boundary_kernel[11]>>>(__PSDomainGetBoundary(&s0 -> dom,1,1,1,1,0),
  *((__PSGrid3DFloatDev *) (__PSGridGetDev(s0 -> g))), *((__PSGrid3DFloatDev *) (__PS
  cudaThreadSynchronize();
}
cudaThreadSynchronize();
}
```

Boundary Exchange

Computing Boundary Planes Concurrently

評価

- 小規模ベンチマークステンスルによる基礎評価
- 実アプリケーションによる応用評価

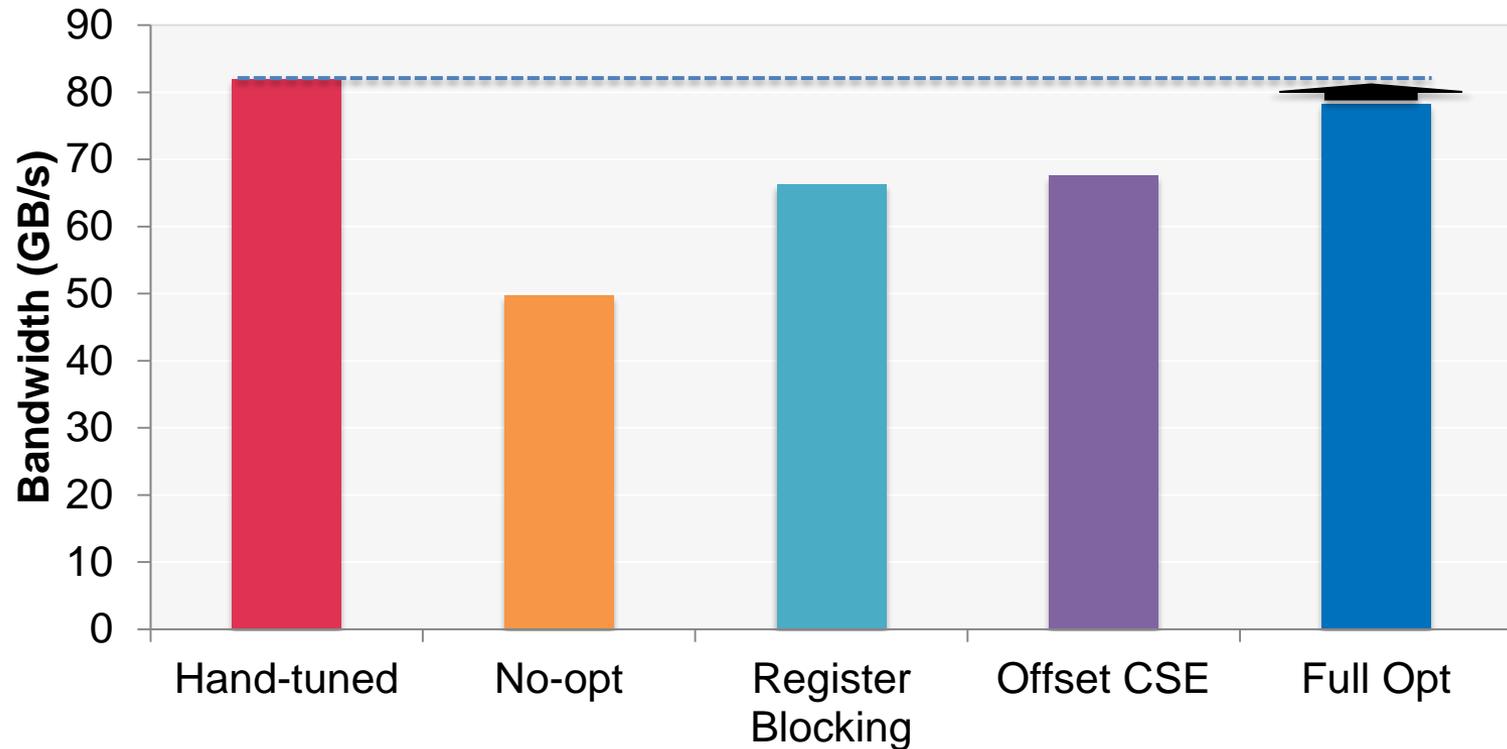
基礎評価

- Performance and productivity
- Sample code
 - 7点diffusion
 - 姫野ベンチマーク
- Platform
 - Tsubame 2.0
 - Node: Westmere-EP 2.9GHz x 2 + M2050 x 3
 - Dual Infiniband QDR with full bisection BW fat tree



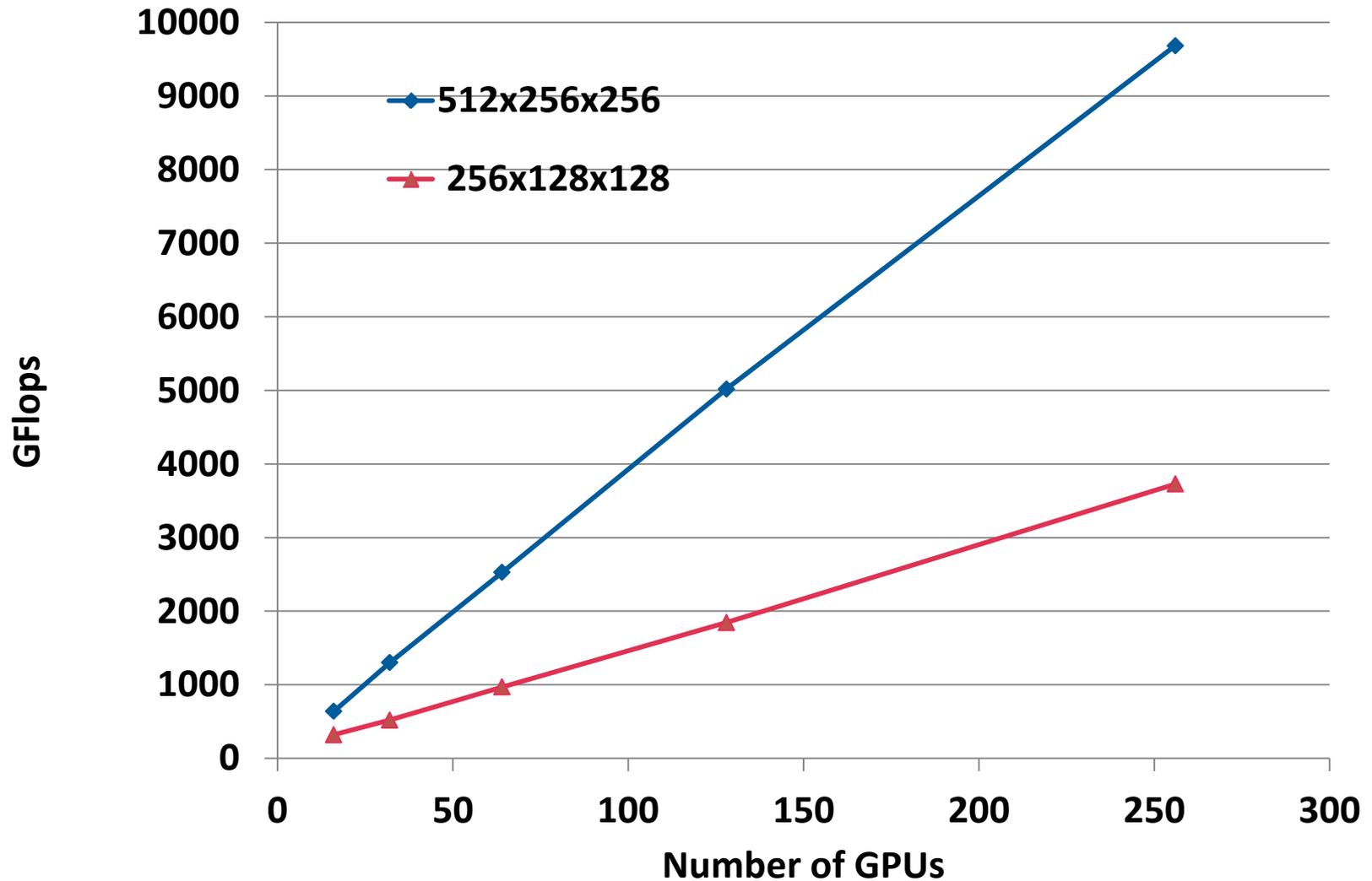
7点diffusion

1 GPU (Tesla M2050), CUDA 4.1



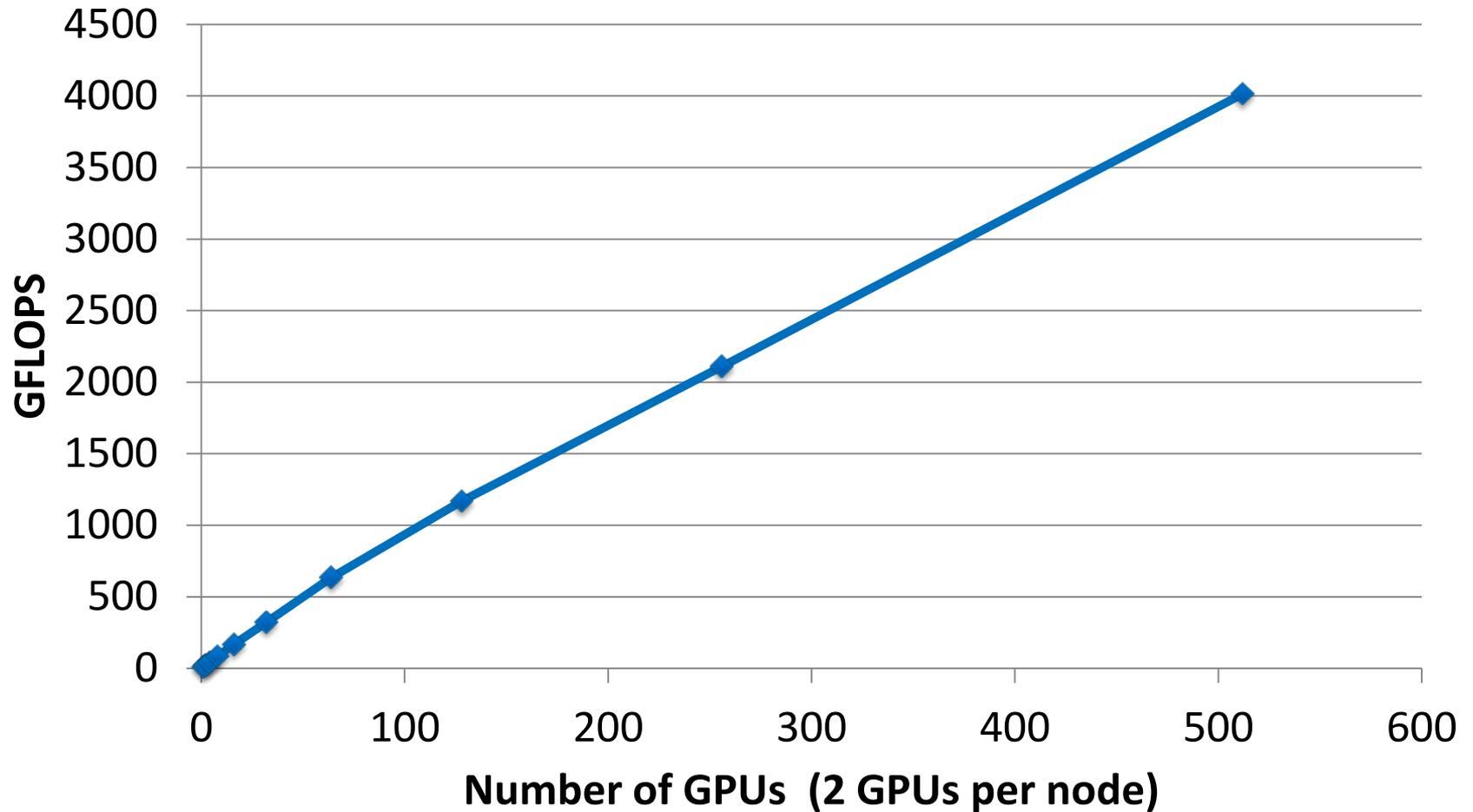
コード自動生成により、人手による最適化コードの95%の性能を達成

Diffusion Weak Scaling



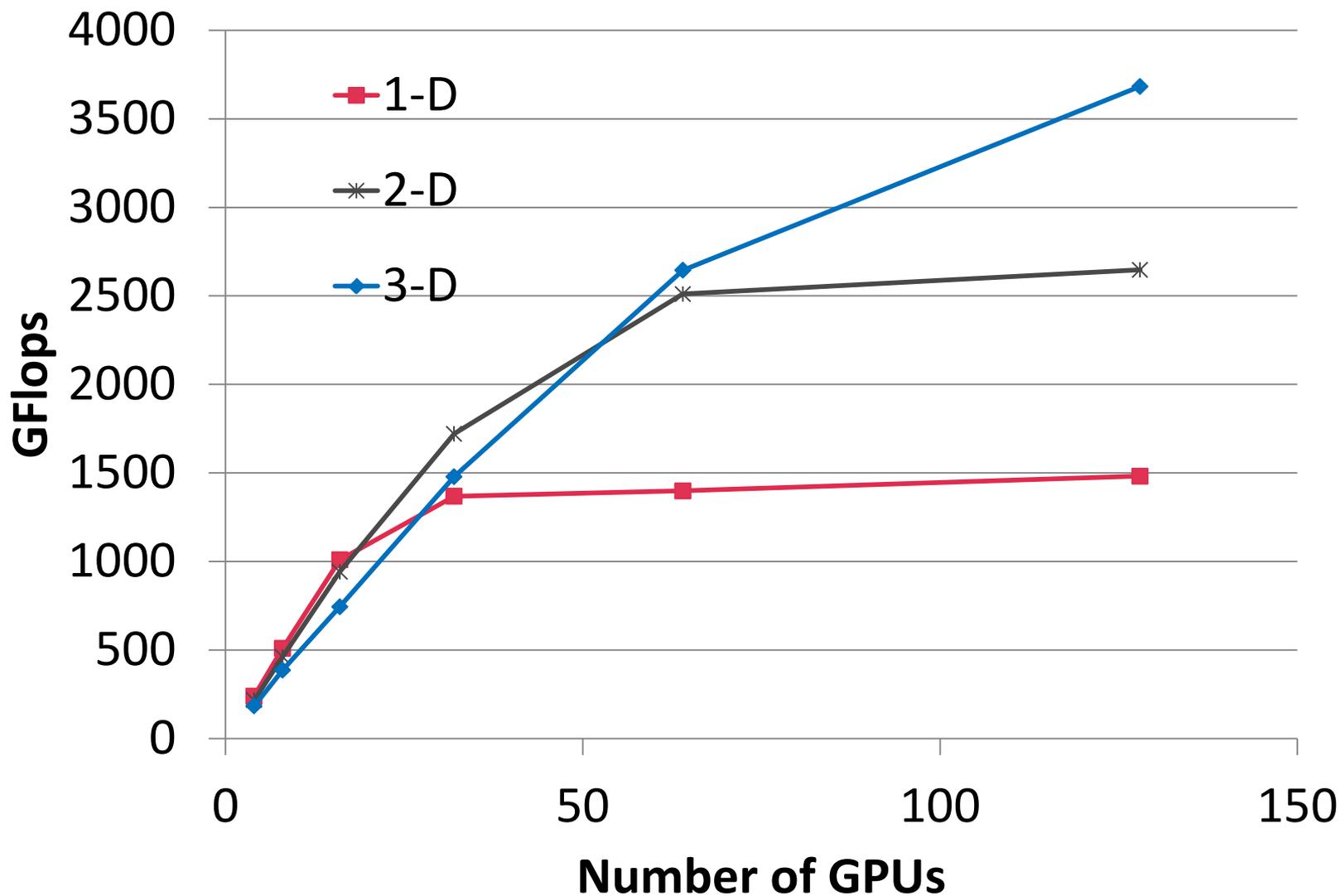
Seismic Weak Scaling

Problem size: 256x256x256 per GPU



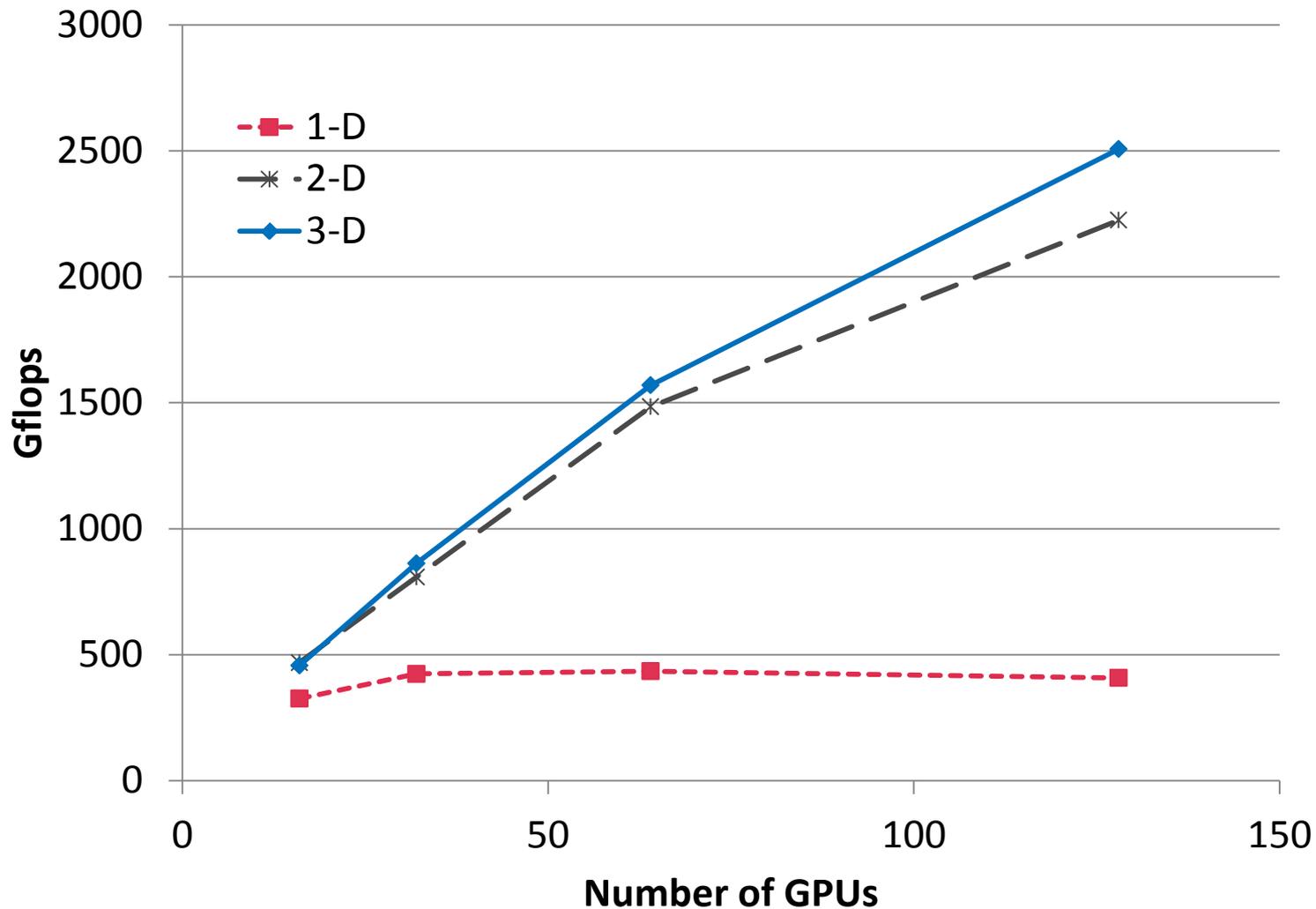
Diffusion Strong Scaling

Problem size: 512x512x4096



Himeno Strong Scaling

Problem size XL (1024x1024x512)



応用評価

- 格子ボルツマン法
- 気象シミュレーション
- 熱流体ソルバー

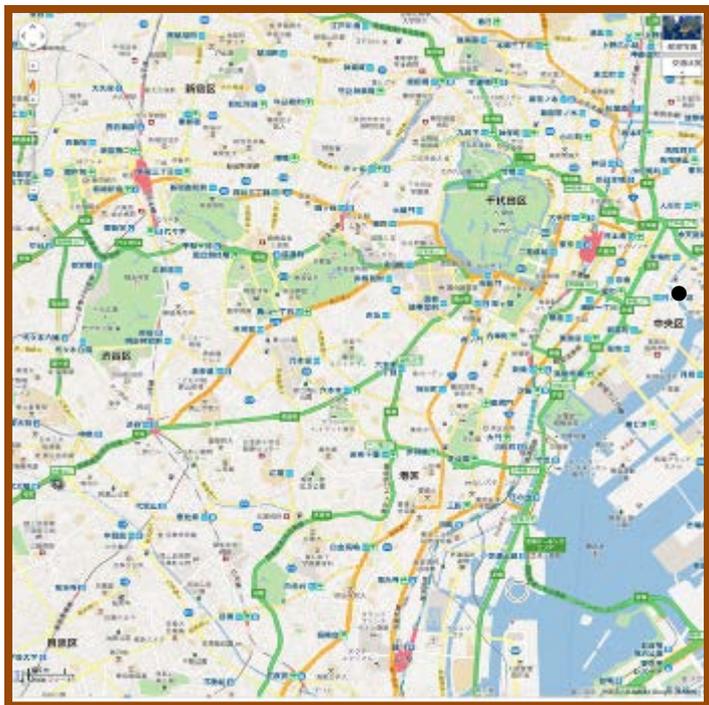
格子ボルツマン法による大規模都市気流計算

小野寺、青木(東工大)ら [HPCS'13]

格子ボルツマン法の利点

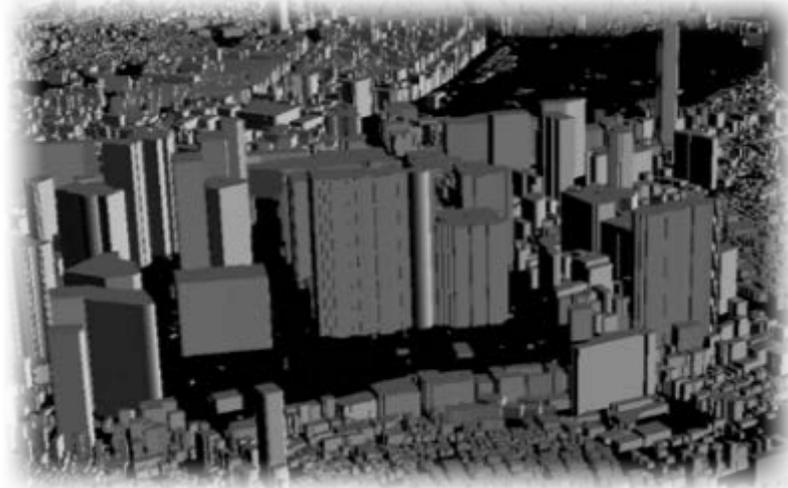
- ・単純なアルゴリズム
- ・圧力Poisson方程式のような行列の反復計算が不要なため、**大規模計算でも高効率**に計算が可能
- ・**複雑物体も容易**に取り扱う事ができる

コヒーレント構造Smagorinskyモデルの導入

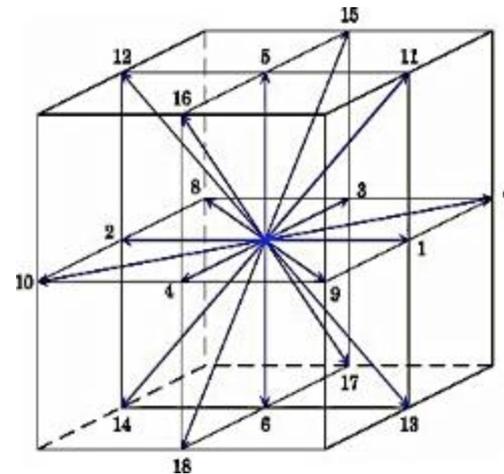


● 新宿区・渋谷区・目黒区・千代田区・中央区・港区・江東区を含む10km×10km四方のエリア

都市の建物データ



D3Q19 discrete velocity



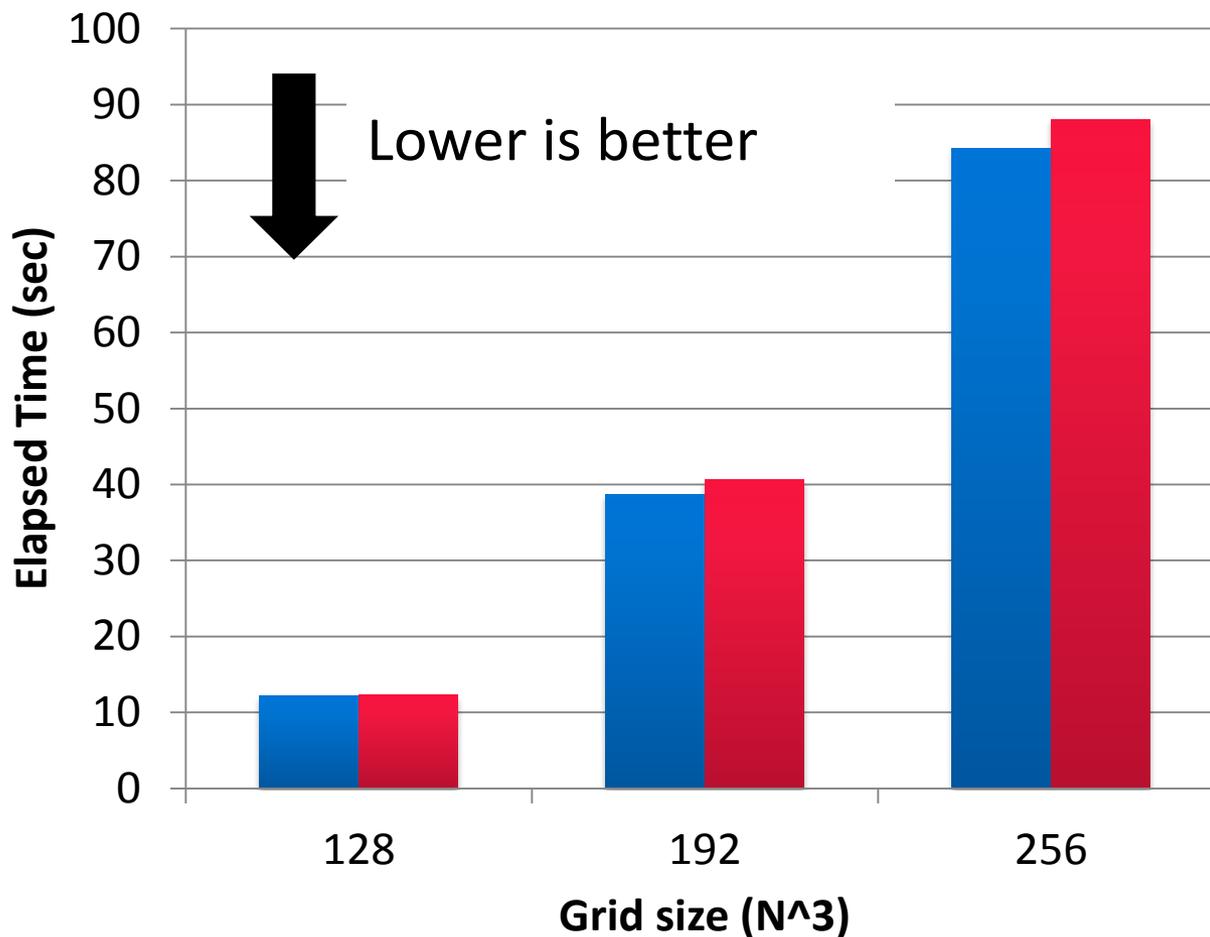
Physisによる記述

- 格子点に定義する物理量の定義
- オリジナルデータ構造を踏襲
- 各点に対する操作をテンソル関数として記述
 - オリジナルのCUDAカーネルコードから移植

```
struct VariablesP {  
    FLOAT f_n[NUM_DIRECTION]; // NUM_DIRECTION=19  
};  
DeclareGrid3D(Variables, struct VariablesP);  
struct BasisVariablesP {  
    FLOAT r_n; FLOAT u_n; FLOAT v_n; FLOAT w_n;  
};  
DeclareGrid3D(BasisVariables, struct BasisVariablesP);  
struct FluidPropertyP {  
    FLOAT vis;  
};  
DeclareGrid3D(FluidProperty, struct FluidPropertyP);  
struct StressP {  
    FLOAT vis_sgs; FLOAT Fcs_sgs; FLOAT Div;  
    FLOAT SS; FLOAT WW;  
};  
DeclareGrid3D(Stress, struct StressP);  
  
PSGrid3DVariables cq_p;  
PSGrid3DVariables cqn_p;  
PSGrid3DBasisVariables cbq_p;  
PSGrid3DFluidProperty cfp_p;  
PSGrid3DStress str_p;
```

性能比較

1 GPU (Tesla M2075), CUDA 4.2



■ Manual
■ Physis

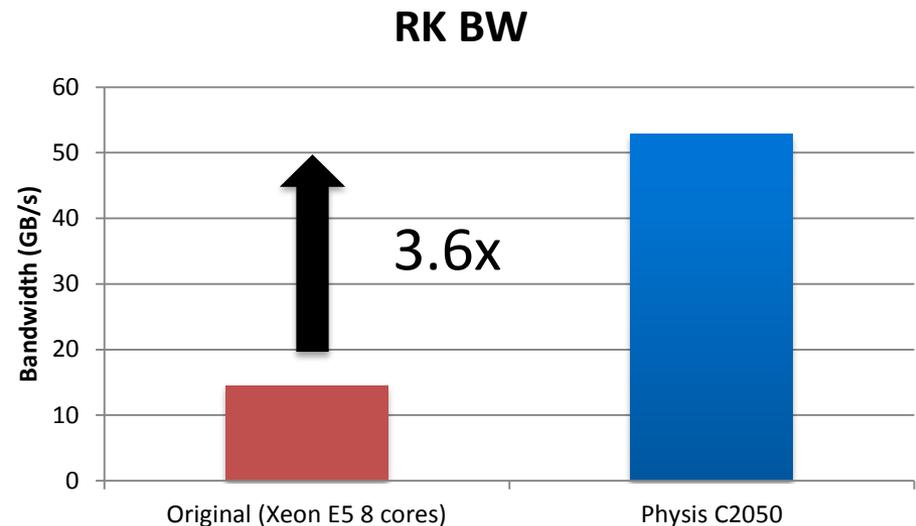
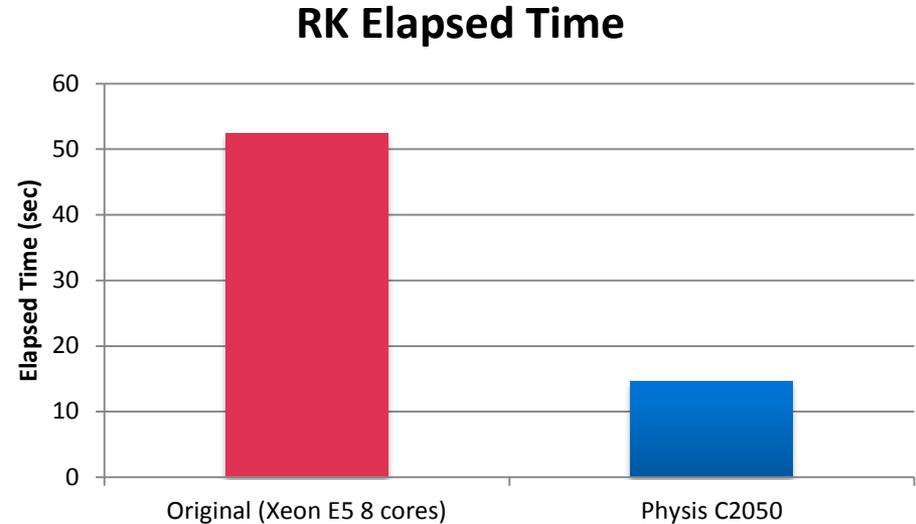
- ほぼ人手によるコードと同様の性能
- Physis版はGPU向けコードだけでなくCPU向けコードも生成可能 → 可搬性

気象シミュレーション

- SCALE-LES: 3次元直交格子有限体積法による気候シミュレーションコード
- 手始めに力学過程の主要サブルーチンのPhysis版を実装
 - ルンゲクッタ法
 - 多数(25)の小規模な3重ループから構成
- コードサイズ比較
 - オリジナル行数(F90) 520行
 - Physis行数 244行

性能比較

- CPU: Xeon E5 8 cores
 - BW: ~30 GB/s
- GPU: Tesla C2050
 - BW: ~100 GB/s
- バンド幅比率(およそ3倍)に近い性能差
 - アプリB/F: 2.1



SCALE-LES今後の計画

- Physisへの完全移植
 - 力学過程はルーチン残り2つ
 - 物理過程
 - スカラー計算のためメモリアクセスは単純
 - 分岐が多いためSIMD・ベクトル化が難しい
- SCALE-LESの最適化
 - 小規模ステンシルカーネル25本
 - カーネル融合、分割
 - 単純な総当り自動チューニングではケース数の爆発的な増加
 - 性能モデルによる絞り込み＋自動チューニング
- 複数ノード・複数GPUでの評価
 1. ノード並列: オリジナルMPI + ノード内並列: Physis
 2. ノード間・ノード内並列: Physis
- PhysisのCPUバックエンドを使った他アーキテクチャとの性能可搬性の実証
 - 京、Intelマシンなど

最適化

- 格子点アクセスの局所性
 - ステンシルカーネル間で共通に読み込む格子
 - カーネル間でread-after-writeな依存関係を持つ格子
- ステンシルカーネル(ループ)の融合によりDRAMアクセス回数削減可能
- 通常のCUDAプログラミングでは人手によりカーネル関数の融合が必要
- Physis DSLトランスレータによる自動化

熱流体ソルバー

- FFVCミニアプリ
 - 東大生産技術研究所で開発中の三次元非定常非圧縮熱流体ソルバーFFVCの簡易版
 - 直交等間隔格子、有限体積法、Fractional Step法
- ひとまず・・・主要カーネルのポアソンソルバーステンシルをPhysisで記述
 - 全体の一部に過ぎないためデータコピーオーバーヘッド有り
 - 効率上はアプリケーション全体のデータモデルをフレームワーク上に移植するべき

オリジナルFortranループ

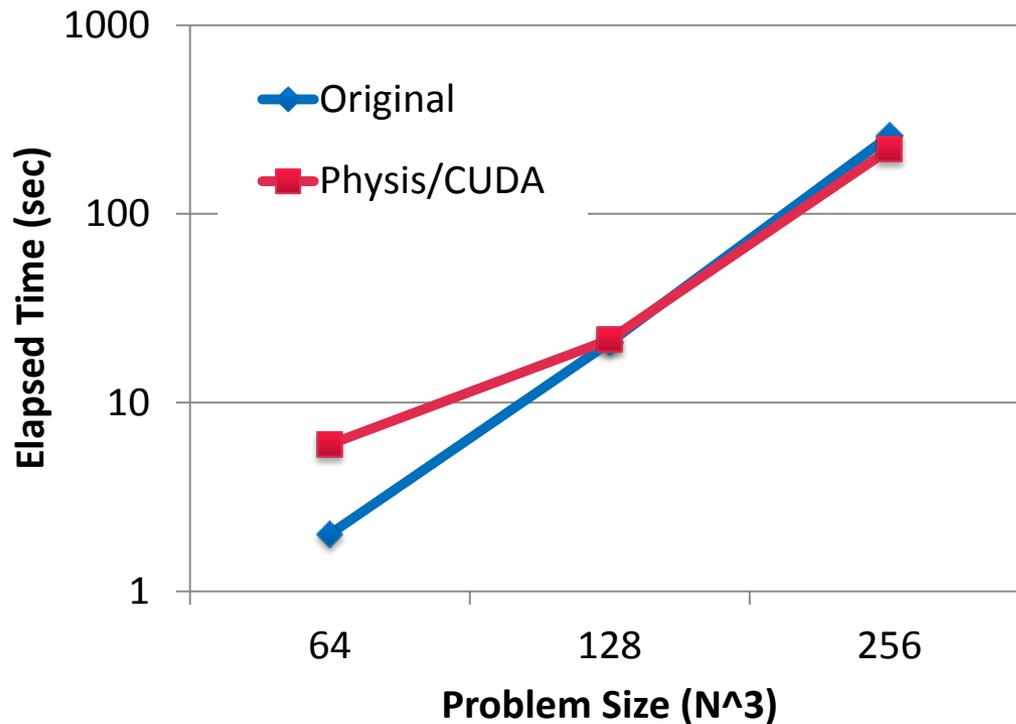
```
do k=1,kx
  do j=1,jx
    do i=1+mod(k+j+color+ip,2), ix, 2
      idx = bp(i,j,k)
      ndag_e = real(ibits(idx, bc_ndag_E, 1)) ! e, non-diagonal
      ndag_w = real(ibits(idx, bc_ndag_W, 1)) ! w
      ndag_n = real(ibits(idx, bc_ndag_N, 1)) ! n
      ndag_s = real(ibits(idx, bc_ndag_S, 1)) ! s
      ndag_t = real(ibits(idx, bc_ndag_T, 1)) ! t
      ndag_b = real(ibits(idx, bc_ndag_B, 1)) ! b
      dd = 1.0 / real(ibits(idx, bc_diag, 3)) ! diagonal
      pp = p(i,j,k)
      ss = ndag_e * p(i+1,j ,k ) + ndag_w * p(i-1,j ,k ) &
        + ndag_n * p(i ,j+1,k ) + ndag_s * p(i ,j-1,k ) &
        + ndag_t * p(i ,j ,k+1) + ndag_b * p(i ,j ,k-1)
      dp = ( dd*ss + b(i,j,k) - pp ) * omg
      p(i,j,k) = pp + dp
      res = res + dble(dp*dp) * dble(ibits(idx, Active, 1))
    end do
  end do
end do
```

Physisステンシル関数

```
static void sor2sma_kernel(const int i, const int j, const int k,  
                          PSGrid3DReal p, REAL_TYPE omg, PSGrid3DDouble res,  
                          PSGrid3DReal b, PSGrid3DInt bp) {  
    int idx = PSGridGet(bp, i, j, k);  
    REAL_TYPE ndag_e = real(ibits(idx, BC_NDAG_E, 1)); // ! e, non-diagonal  
    REAL_TYPE ndag_w = real(ibits(idx, BC_NDAG_W, 1)); // ! w  
    REAL_TYPE ndag_n = real(ibits(idx, BC_NDAG_N, 1)); // ! n  
    REAL_TYPE ndag_s = real(ibits(idx, BC_NDAG_S, 1)); // ! s  
    REAL_TYPE ndag_t = real(ibits(idx, BC_NDAG_T, 1)); // ! t  
    REAL_TYPE ndag_b = real(ibits(idx, BC_NDAG_B, 1)); // ! b  
    REAL_TYPE dd = 1.0 / real(ibits(idx, BC_DIAG, 3)); // ! diagonal  
    REAL_TYPE pp = PSGridGet(p, i, j, k);  
    REAL_TYPE ss = ndag_e * PSGridGet(p, i+1, j, k) + ndag_w * PSGridGet(p, i-1, j, k)  
        + ndag_n * PSGridGet(p, i, j+1, k) + ndag_s * PSGridGet(p, i, j-1, k)  
        + ndag_t * PSGridGet(p, i, j, k+1) + ndag_b * PSGridGet(p, i, j, k-1);  
    REAL_TYPE dp = ( dd*ss + PSGridGet(b, i, j, k) - pp ) * omg;  
    PSGridEmit(p, pp + dp);  
    PSGridEmit(res, dble(dp*dp) * dble(ibits(idx, ACTIVE_BIT, 1)));  
}
```

性能結果

- Tesla M2075 vs. Intel SNB Xeon E5-2670
 - M2075 BW: 90 GB/s > Xeon: 35 GB/s
- ホアソンソルバーカーネルのみ



今後の計画

- 密な計算 + 疎な集合 への拡張
 - Structured Adaptive Mesh Refinement
 - Fast Multipole Method
 - など
- 課題
 - 生産性
 - 分散メモリ環境におけるAMR等の操作
 - 性能
 - 負荷分散、通信コスト
- 方針: 高性能密計算コード + 動的負荷分散ランタイム
 - 密な計算: DSLによりコード生成
 - ノード内並列 → アーキテクチャ・アプリケーション依存
 - 疎な集合: スケーラブルなランタイム/ライブラリによる並列化
 - ノード間並列 → ある程度の種類のパターン & 標準API (MPI)

おわりに

- アプリケーションフレームワーク
 - アプリケーションドメインのボキャブラリによってプログラムを記述 → 生産性の向上
 - ドメインの知識を用いた最適化 → 高性能の実現
- 例： Physis: ステンシル計算向けフレームワーク
 - <http://github.com/naoyam/physis>
- 謝辞
 - JST CREST「ポストペタスケール高性能計算に資するシステムソフトウェア技術の創出」