

科学研究費助成事業（基盤研究（S））公表用資料
〔平成29年度研究進捗評価用〕

平成26年度採択分
平成29年3月13日現在

ものづくり HPC アプリケーションのエクサスケールへの進化

Advancement of HPC Applications for Manufacturing
Technology to Exascale

課題番号：26220002

青木 尊之 (AOKI TAKAYUKI)

東京工業大学・学術国際情報センター・教授



研究の概要 ものづくり HPC アプリケーションがエクサスケールのスパコンで十分な性能を出すために、新しい数値計算手法、演算密度の向上とデータ移動を削減するアルゴリズム、動的負荷分散の導入等を行う。特に非圧縮性流体解析では、これまで行われてきた連立一次方程式の疎行列反復計算を行わない弱圧縮性流体計算による完全陽解法を開発しエクサスケール・スパコンで画期的成果を創出できるアプリケーションへの道筋を示す。

研究分野：情報学

キーワード：HPC、ものづくり、数値流体シミュレーション、陽解法

1. 研究開始当初の背景

日本が「ものづくり」で再び世界をリードするには、CAEを中心としたコンピュータ・シミュレーションによる革新的な発展が必要である。そのためには最先端のスパコンで超高精細な計算格子を用いた大規模計算が不可欠であるが、現在のスパコンは演算性能に対してメモリバンド幅や、ノード間のインターコネクション性能が低いため、演算と通信のバランスが非常に悪い。「ものづくり」のための HPC アプリケーションを次世代のエクサスケール・スパコンで十分に性能を発揮させる必要がある。

2. 研究の目的

本研究では近い将来に登場するエクサスケールのスパコンを念頭に置き、ものづくり HPC アプリケーションを大きく進化させ、真に「ものづくり」に貢献できるアプリケーションを開発し実証を行う。単に FLOPS 値や実行効率の割合が高いことを目指すのではなく、必要の無いほど高精度計算手法を用いるような冗長な計算を避け、要求される計算結果に対する実時間 Time-to-Solution を短縮することを最重要視し、実際に「ものづくり」に革新的な発展をもたらすエクサスケールの HPC アプリケーションを実現することを目的とする。

3. 研究の方法

エクサスケールで Time-to-Solution の性能を追求するために、プロセッサ性能とノード内の総演算性能に対する階層的構造のメモ

リ帯域やノード間通信性能などの影響を考慮したパフォーマンスモデルを構築し、それに対応する数値計算手法の探査と新しい手法の開発を行う。演算密度を増加させ、データ移動の少ないアルゴリズムを適用し、通信隠ぺい手法を導入する。

ものづくりアプリケーションは、均一格子では極めて非効率的な計算となり、適合格子細分化法 (AMR 法) を導入する。不均質な計算負荷に対する動的負荷分散手法を開発する。GPU などの高い演算性能を持つメモリーコア型プロセッサを意識し、計算カーネルの詳細な検証、ベンチマークテストでの計算精度・実行性能の確認等、様々なレベルのチューニングを行う。

4. これまでの成果

① 格子系の非圧縮性単相流体 (乱流 LES) シミュレーション

完全陽解法である格子ボルツマン法の D3Q27 型モデルに AMR 法を適用し、リーフでの実行性能を向上させるための C++テンプレートによる GPU カーネル関数生成を行い、Naïve な実装に対して 10 倍以上の高速化を達成した。時間積分に MRT (Multiple Relaxation Time) 法を導入した。さらにヒルベルト空間充填曲線を用いた領域分割を行い、複数 GPU での大規模計算を実行可能とした。

② 気液二相流シミュレーション

大規模計算が困難な気液二相流計算に対し、弱圧縮性流体計算に音速制御などを組み

合わせるにより、完全陽解法の数値計算手法の開発に成功した。特性線法および方向分離法はデータ通信量の削減と演算密度の向上の両方に寄与し、Time-to-Solutionを大幅に短縮する数値計算手法の変更でもある。



弱圧縮性流体計算による完全陽解法の気液二相流計算

③ 流体-構造連成問題

トポロジーの変わる空間を流れる流体解析の実現するために、非構造格子による解析手法から構造格子を用いた高次精度解析手法を構築した。高次関数による曲面の再現性能の向上により、複雑形状を少ない格子点で実現することができるようになり、3次元の実問題の解析例としては、路面と接触する凹凸を有するタイヤの周囲流れ解析、人工弁や心臓弁周囲の流れ、流体潤滑から接触が生じる軸受の解析などの複雑な形状や問題に適用することができた。

④ フェーズフィールド法による凝固などの相変化や相分離を伴う流れ

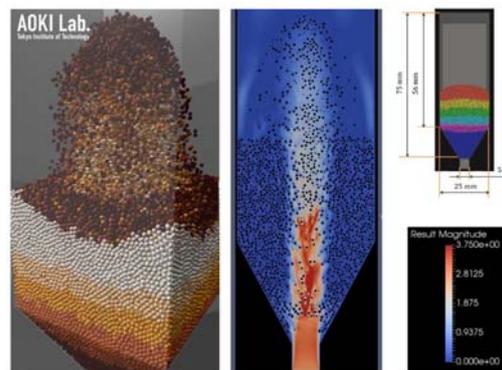
二元合金凝固の定量的フェーズフィールドモデルを一方向凝固問題に適用し、その並列 GPU コードを開発し、統計的評価に十分なデンドライト本数を表現可能な、超大規模なシミュレーションに成功した。また、フェーズフィールド法と格子ボルツマン法を連成させた並列 GPU 計算を行い、強制対流下で複数デンドライトが液相流動内で成長する超大規模の計算 (1536×1536×3072 格子) を 512 個の GPU を用いて実行した。

⑤ 粒子法による粉体・流体シミュレーションのアプリケーション

個別要素法による大規模粉体シミュレーションとして、1,670 万個の粒子を用いたバンカーショット・シミュレーションを 64 個の GPU を用いて実行した。空間充填曲線に基づいた動的領域分割を粉体シミュレーションに初めて導入し、スケーリングを大幅に改善した。

流体と粒子の相互作用を直接計算する流動層の大規模シミュレーションを行った。8 万粒子と流体計算には格子ボルツマン法を用い、512×512×1,680 格子を使った固気混相流の流動層シミュレーションを 128GPU で

実行した。



固気噴流層シミュレーション

5. 今後の計画

弱圧縮性流体計算による完全陽解法の計算手法を①～⑤のアプリケーションに AMR 法とともに実装を展開し、領域間通信と計算負荷を両立させる動的領域分割法を開発する。

エクサスケール・スパコンの開発計画が遅れているが、そこにスケールするアプリケーションの道筋を示し、具体的なものづくり分野での画期的成果を目指す。

6. これまでの発表論文等 (受賞等も含む)

- [1] Mohamed Wahib, Naoya Maruyama, Takayuki Aoki, Daino: A High-level Framework for Parallel and Efficient AMR on GPUs, SC16, Salt Lake City, USA, November 18, 2016
- [2] T. Takaki, S. Sakane, M. Ohno, Y. Shibuta, T. Shimokawabe, T. Aoki: Primary arm array during directional solidification of a single-crystal binary alloy: Large-scale phase-field study, Acta Materialia, Vol. 118, P230-243, 2016
- [3] 長谷川雄太, 青木尊之: Octree 型 AMR を導入した格子ボルツマン法の C++テンプレートをを用いたカーネル生成による GPU 計算の高速化, 情報処理学会論文誌 コンピューティングシステム(ACS), Vol. 9, No. 2, P34-45, 2016
- [4] 都築怜理, 青木尊之: 動的領域分割を用いた流体構造連成によるサスペンション・フローの大規模 GPU 計算, 2015 年ハイパフォーマンスコンピューティングと計算科学シンポジウム, P.111-119, 2015 年 5 月 20 日

受賞

- Best Paper Award, SC'16 Technical Paper, Nov 17, 2016
- 2015 年ハイパフォーマンスコンピューティングと計算科学シンポジウム・最優秀論文賞
- 2014 年ハイパフォーマンスコンピューティングと計算科学シンポジウム・最優秀論文賞

ホームページ等

<http://www.sim.gsfc.titech.ac.jp/>