

jh170031-NAH

格子ボルツマン法によるリアルタイム物質拡散シミュレーション手法の開発

小野寺 直幸（日本原子力研究開発機構）

放射性物質の拡散予測は社会的な関心が非常に高く、緊急時における迅速性および正確性が求められている。日本原子力研究開発機構では、数 10km 以上の広域の拡散予測システムとして、緊急時環境線量情報予測システム(SPEEDI)が開発されているが、これに加えて数 km 以下の局地拡散予測システムの開発が進められており、スーパーコンピュータを用いた解析規模の拡大および高速化が望まれている。本研究では GPU に適している格子ボルツマン法 (LBM) に基づく汚染物質の拡散解析手法を構築することで、次世代の汚染物質の拡散予測手法を構築する。高解像度のリアルタイム解析に向けて、適合細分化格子 (AMR) 法を適用する事で、人が生活する数 m からメソスケール解析を実施する数 km までの解像度の変化に対応した、マルチスケール解析の実現を目指す。本最終報告書では、AMR 法を適用した格子ボルツマン法の実効性能および風洞実験等に対する収束性を確認し、リアルタイム汚染物質拡散解析の実現の目処がたてられた。

1. 共同研究に関する情報

(1) 共同研究を実施した拠点名

東京工業大学学術国際情報センター

(2) 共同研究分野

□ 超大規模数値計算系応用分野

(3) 参加研究者の役割分担

- ・ 代表者（日本原子力研究開発機構）：
小野寺 直幸、(役割分担) 解析手法の開発および解析結果の評価
- ・ 副代表者（東京工業大学）：
青木 尊之、(役割分担) TSUBAME での大規模計算に関する助言
- ・ 協力者（日本原子力研究開発機構）：
町田 昌彦、(役割分担) 解析条件の設定及び解析データの取得
井戸村 泰宏、(役割分担) 解析条件の設定及び解析手法の評価
- ・ 協力者（東京大学）：
下川辺 隆史、(役割分担) 解析手法の高速化に関する助言

2. 研究の目的と意義

2.1 研究目的

放射性物質の拡散予測シミュレーションは社会的関心が非常に高く、迅速性および正確性が求められている。日本における予測システムとして、緊急時環境線量情報予測システム(SPEEDI)やその世界版(WSPPEEDI)が用いられている[参考文献 1,2]。これらは観測されたデータを基に放射性物質の広域を対象としたの拡散挙動の予測が可能である。また、日本原子力研究開発機構では、局地的な拡散挙動の予測精度の向上に向けて非圧縮性 Navier-Stokes 方程式に基づく非定常解析手法 (LOHDIM-LES) の開発[参考文献 3]を行なっているが、人が生活する路地や建物等を含んだ高解像度解析を行うためには、計算機性能を最大限に引き出すことの可能な解析手法の開発が必須となる。本課題では、GPU スパコンに適した格子ボルツマン法 (LBM) による乱流解析手法を構築することで、迅速性と精度を兼ね備えたりリアルタイム予測システムを提案する。

本研究は、平成 26 年度の JHPCN の採択課題「首都圏における大気乱流の超高解像度・広域数値計算」(代表者：神田学(東工大))にて開発した

解析手法が基になっており、この手法に適合格子細分化(AMR)法およびデータ同化モデルを導入することで高精度な物質拡散手法を構築する。本手法は、LBM に基づく解析手法であるため、GPU を用いた大規模計算においても良い実効性能が得られ、高速な解析が実施できることが期待される。都市気流計算においては、対象とする建築物と路地とのスケールが大きいため乱流解析が必須となる。本研究では、LBM の高次の物理量に対する緩和計算を行う Cumulant LBM[参考文献 4]を用いて解析を行う。建物等の複雑境界条件を含む乱流解析においては符号付距離関数を用いた Interpolated Bounce-Back 法[参考文献 5]を適用する。

本課題により、実際の建物等を解像した高解像度計算手法が構築されると共に、データ同化を用いたりリアルタイム予測の実現により、解析者と観測者の双方が連携する新たな応用研究に繋がる。このため、本研究が次世代のシミュレーション技術に与える影響は大きい。

2.2 研究の意義

現在、汚染物質の拡散予測シミュレーションとして、SPEEDI や LOHDIM-LES 等[参考文献 1-3]を用いた解析が行われている。それらの解析手法は、長年の経験の蓄積により、限られた計算資源の制約の下においても、地形や気象を考慮した拡散予測が可能である。一方で、複雑な構造物に起因する風環境や吹き溜まりを再現することができず、人が生活するスケールでのホットスポットの予測は難しい。本課題では、GPU に適した LBM を基に解析手法を構築することで、高解像度かつ高速な解析を行うことが可能である。本課題は、データ同化手法を導入した高精度の乱流解析を実施することで、より高度な予測手法の構築が可能となり工学分野に与える影響は大きい。また、本課題は、計算とデータ入出力等のプリ・ポスト処理を含めた強スケーリングでの性能向上を目標としており、スーパーコンピュータの設計を含む計算機科学分野に対しても有意義な結果を残すことが期待される。更に、得られた解析結果を基に、観測点

の最適化等を提案することで、今後の観測と計算をまたいだ研究の発展に対する貢献も期待される。

3. 当拠点公募型共同研究として実施した意義

本課題を達成するためには、建物形状や乱流の非線形性を捉えた高解像度計算と、リアルタイムに観測されるデータを活用するための高速計算が必須となる。基となる解析手法は、TSUBAME2.0/2.5 の GPU を用いた大規模解析で、1.14 PFlops(単精度)の実効性能および超高解像度気流計算に成功しているが、リアルタイム解析の実現には更なる高速化が必須となる。本課題は、東工大の青木教授のグループが開発している適合細分化格子(AMR)法の知見、および大規模データの取り扱いに精通した下川辺准教授のサポートを得ることで、初めて達成できる。更に、平成 29 年度に更新予定の TSUBAME3.0 の利用により、最新のメニーコア・アーキテクチャに対する最適化の知見を得ることができ、ポスト京等のエクサスケール時代のスパコン利用に繋げることが可能となる。

4. 前年度までに得られた研究成果の概要

該当なし（初年度採択課題）

5. 今年度の研究成果の詳細

5.1 格子ボルツマン法による物質拡散解析手法

LBM は連続体である流体を格子上を並進・衝突する仮想的な粒子の集合と仮定し、格子上の粒子の速度分布関数について時間発展方程式を解く手法である。空間は等間隔の格子上で離散化され、有限個の速度を持つ粒子は並進運動により 1 タイムステップ後に格子点上に位置するため補間に伴う離散化誤差を含まない。粒子の衝突過程は、粒子分布が局所平衡状態へと緩和すると仮定する。

都市気流解析では、高レイノルズ数の計算での安定性および精度が重要となる。本研究では粒子の衝突モデルとして、高次の物理量を用いた Cumulant LBM モデルを採用することで安定性を確保した[参考文献 4]。

5.2 適合細分化格子(AMR)法

都市気流解析では、都市街区での数 m 解像度の解析と、メソスケールモデルによる数百 m 解像度の解析を繋いだマルチスケールの解析が必須となる。AMR 法は格子解像度を任意に変化させることが可能な格子生成法であり、これを LBM に適用することで、計算の高速化および計算資源の削減が実現できる。

AMR 法の一つとして、木構造(Tree)内の末端の葉(Leaf)に N^3 等の格子を割り当てるブロック型の AMR 法がある。この手法は、AMR 法においても Leaf 内にて N^3 の連続的なメモリアクセスが可能となるため、GPU 計算に適している。本研究では Leaf に対して 8^3 の格子点を割り当てることで、GPU による高スレッドの計算に対応した。並列計算では、各プロセスの計算を担当している Leaf の周囲に通信用の Leaf を配置した。

AMR 法を適用した LBM[参考文献 6,7]では、計算解像度毎に異なる時間刻み幅が採用される。図 1 に Lv.0 および Lv.1 を用いた AMR 法での計算順序を示す。図の左側が全体の計算順序、右側が計算を時間ステップ毎に並べたものである。計算は物理量を 2 つ確保するダブル・バッファリングを採用した。図内の矢印はデータの流れを表している。通信が必要となるタイミングは①および④の LBM による計算(cal)の後となる。より多階層の AMR 法では、図 1 の処理を再帰的に実行する事で、実現できる。

5.3 テンポラルブロッキング法を用いた通信回数の削減アルゴリズム

AMR 法を適用した並列計算では、細分化レベルの

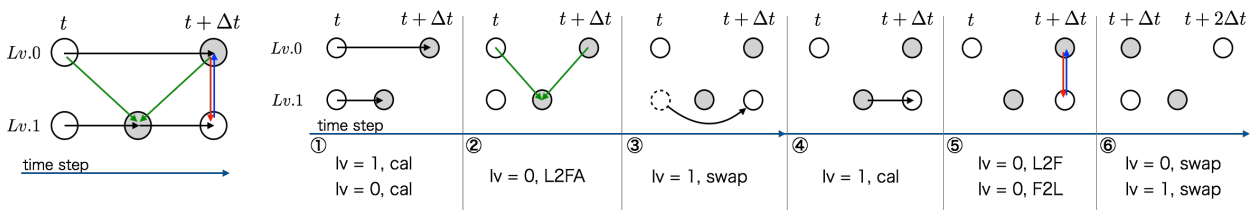


図 1 AMR 法を適用した LBM での計算順序例。①LBM 計算、②Lv.1 への時空間補間、③Lv.1 での swap、④Lv.0 と Lv.1 での空間補間、⑤Lv.0 と Lv.1 での swap、以後①～⑤の繰り返し。②および⑤は解像度が異なる領域と重なる Halo 領域に対しての更新する。

違いに伴う、隣接通信の複雑化が懸念される。特に TSUBAME3.0 の様にノード内のメモリ帯域とノード間の通信帯域が大きく異なる場合、そのボトルネックが顕著となる。

テンポラルブロッキング(TB)法[参考文献 8]は計算のオーバーヘッドとなる領域の処理を別の処理に置き換えることで、オーバーヘッドの処理を数ステップの間は省略することが可能である。GPU を用いた並列計算においては、MPI 通信がオーバーヘッドとなるため、それを GPU 計算に置き換えることで高速化が期待できる。具体的には、通信が必要となる Halo 領域の Leaf に対して余分な計算を行うことで、通信回数を Leaf の要素数分の一回(1/8)に削減可能となる。これにより、同期コストの削減および AMR 法で必要な解像度間の補間に必要な余分な通信が不必要となる。さらに、計算で必要となる時間・空間に関する補間(図 1 ②)が省略できる。

5.4 TSUBAME での実効性能測定

東京工業大学 TSUBAME3.0 の GPU(Nvidia Tesla P100)を用いて、Weak scaling での実効性能測定(単精度)を行なった。ソースコードのコンパイラとして Nvidia の CUDA 8.0 を、MPI ライブラリは OpenMPI 2.1.1 を使用した。MPI 通信関数として、GPU のデバイスメモリに対して直接転送を行う CUDA-Aware MPI にて通信を行なった。MPI 通信は Leaf 毎に行われ、非同期の片方向通信(MPI_Put)を用いて、送信先のデバイスメモリへ直接的に書きこみを行なった。

計算手法として、D3Q27 モデルに Cumulant LBM を組み合わせて計算を行なった。AMR 法の

分割条件として、地面と垂直(Z 軸)方向に解像度を変化させ、地表面近傍に最も細かな格子を、上空に荒い格子を配置した。MPI の分割方法として、XY 軸方向に分割する 2 次元分割を採用し、各 GPU に同じ計算負荷を割り当てる Flat MPI にて並列化を行なった。本計算コードでは、リスタートや可視化に伴う I/O 処理を計算とは別のスレッドを用いて行っており、大きなオーバーヘッドとはならないが、計算性能の計測時には I/O 処理を除いた測定を行った。

図 2 に TB 法を採用した 4GPU での解析例を示す。測定は NVIDIA の API である nvvp コマンドを用いて実行し、図は NVIDIA Visual Profiler を用いて作成した。図の下段の緑および青の部分(Compute)が LBM における各関数のタイムライン、図の中段の MemCpy(HtoD, DtoH)が MPI 転送に伴うデータ移動となる。計算結果より、LBM の計算(緑・青の組)が数回実行された後に、MPI 転送(茶色)が実行されていることが確認される。図中では、Lv.0 が 2 回、Lv.1 が 4 回、Lv.2 が 8 回の計 14 回実行された後、Lv.2 の格子が MPI 通信により Halo 領域の Leaf($N_{\text{Leaf}}=8^3$)が更新される。図中では、MPI での片方向通信関数(MPI_Put)は直接計測されていないが、MemCpy 関数とオーバーラップされて実行されていると予測される。

図 3~5 に弱スケール時の 1 ステップあたりの計算時間を示す。青が LBM の計算時間、橙色が通信時間、緑が LBM からマクロな物理量への変換、赤が AMR に関わる関数となる。TB 法を採用した GPU 計算では、全体の計算時間に対して、

通信時間が半分近く占めていることが確認された。また、GPU 数が 64 台(ノード数 16 台)以上の時に、通信時間の増加が確認される。図 6 に TB 法無しの GPU 計算での計測時間を示す。TB 法無しの条件では、MPI による転送に対して、Leaf 全体を転送する Naïve な実装をしており、必要とされる格子のみを転送する最適な実装は行っていない。図 5 と図 6 の通信時間を比較すると、4GPU を用いた計算では、TB 法有りで 264msec、TB 法無しでは 2134msec の 8 倍の実行時間となっている。以上より、TB 法を採用することで、MPI によるプロセス間およびホストとデバイス間の転送回数の削減が可能であることが示された。図 7 に TB 法有りでの CPU での計算結果を示す。東工大の TSUBAME3.0 では、ノード内の GPU と CPU のメモリバンド幅の比が 20 倍程度となっているため、計算速度の遅い CPU では通信時間が支配的とならず、良いスケールリングが得られている。

本計算の実行時には、MVAPICH による MPI ライブラリが Omni-Path を用いた GPU Direct RDMA に対応しておらず、ノード内において NVLink を用いた高速な通信が行われていない。しかしながら、日本原子力研究開発機構が所有している GPU クラスタにおいては、MVAPICH ライブラリによる NVLink を使用した高速な通信を実現しており、リアルタイム解析の実現への目処が立てられた。今後は TSUBAME3.0 の MVAPICH ライブラリ等による Omni-Path への対応に期待したい。

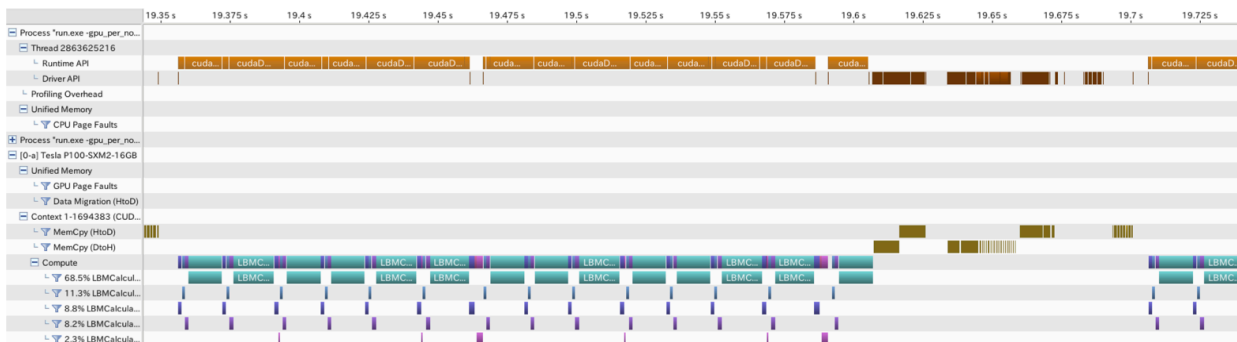


図 2 テンポラルブロッキング法を採用した LBM での Nvprof を用いたタイムラインの可視化 (4MPI プロセス、AMR:Lv.0 ~ Lv.2、Leaf size=8)

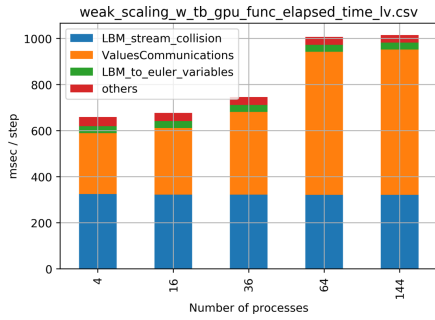


図 3 テンポラルブロッキング法を採用した GPU 計算での弱スケーリング結果

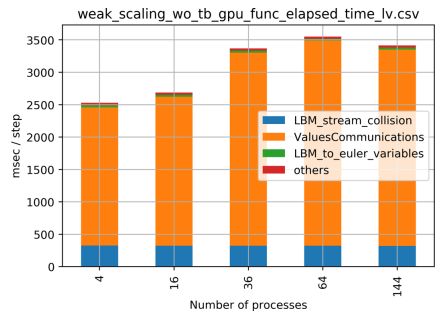


図 4 テンポラルブロッキング法無しの GPU 計算での弱スケーリング結果

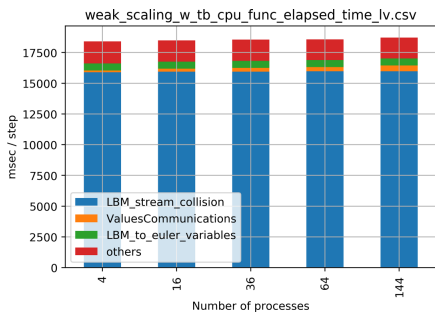


図 5 テンポラルブロッキング法を採用した CPU 計算での弱スケーリング結果(4MPI Procs/node)

5.5 風洞実験との比較・検証

解析手法の検証として、大気環境アセスメント手法ガイドライン内[参考文献 9]にある産総研の風洞実験との比較を行なった。表 1 に風洞実験での計算領域および格子点を、図 6 に計算条件を示す。計算領域の中央部に $H=0.1m$ の立方体を配置し、主流方向に $192H$ 、スパン方向および高さ方向に $24H$ の計算領域を確保した。計算格子は、立方体近傍で細かい格子($1/16H$)、外周部で粗い格子を配置した。汚染物質の発生源は立方体

前面 $1.5H$ および高さ $0.5H$ に設定し、空気と同じ密度の物質を格子点と同じ速度で発生させた。

図 7 に AMR 法を適用した計算格子例を示す。本解析で用いた格子点数として合計 3781 万を使用した。これは全体を細かい格子で計算するのと比較して、4.2%程度の格子点に相当する。流入速度として、スパン方向に一様分布、高さ方向に実験を模擬した対数速度分布を設定し、乱流スパイクによる擾乱を与えた。また、流入部分の速度の境界条件に不明確な部分があるため、流入速度と計算結果の主流方向速度分布を比較することで、最適な流入条件を設定した。

表 1 風洞実験での計算領域および格子点

Lv.	Δx ($H = 0.1m$)	Domain size ($X_{min,max} / Y_{min,max} / Z_{min,max}$)	# of grid points ($\times 10^6$)
0	$H/4$	-1.5,1.5 / -0.5,0.5 / -0.2,0.75	12.31
1	$H/8$	-4.0,4.0 / -1.0,1.0 / -0.2,1.5	13.21
2	$H/16$	-19.2,19.2 / -1.2,1.2 / -0.2,2.2	12.29
Total	-	-	37.81

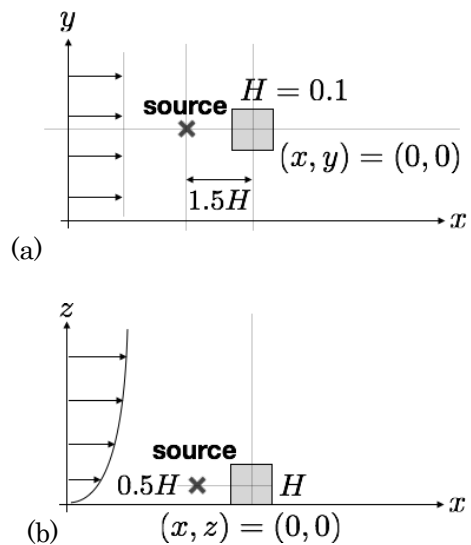


図 6 産総研の風洞実験に対する計算条件

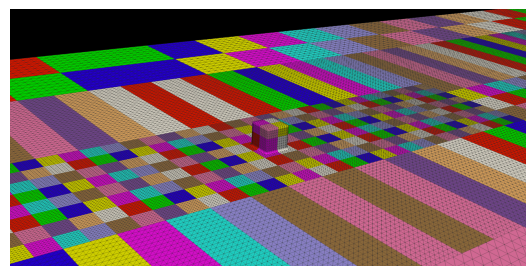


図 7 AMR 法を適用した計算格子

図 8 および図 9 に、水平断面内および垂直断面内の各方向の平均速度分布を示す。灰色の四角内が立方体を表している。いずれの断面においても、LBM による解析結果と実験による測定結果が良く一致することが確認された。

図 10 に立方体後方での垂線上の汚染物質の濃度分布を示す。この計算では、濃度分布の収束性を確認するため、上記の風速分布に対して更に細かい格子($H/32, H/64$)を用いた解析を行った。計算結果より、実験結果への収束性が確認され、汚染物質拡散解析の評価基準の一つの FAC2 値(汚染物質濃度の計算値が実験値のファクター 2 以内に収まる格子点の割合)として 0.89 以上が満たされた。

5.6 参考文献

1. M. Chino, et al. RADIATION PROTECTION AND DOSIMETRY (C5500), Vol. 16, Issue 9, pp.84, (1984)
2. H. Terada, et al. J. Nuclear Science and Technology, Vol. 41, No. 5, pp.632-640, (2004)
3. Nakayama, H., T. Takemi, and H. Nagai, Adv. Sc. and Research, 12, pp.127-133
4. Martin Geier, Martin Schönherr, et al., Comp. & Math. Applications, Vol. 70, Issue 4, pp.507-547
5. PH Kao, RJ Yang, J. Comp. Phys., 227 (11), pp.5671-5690
6. Stephen M. Guzik, et al., J. Comp. Phys, Vol.259, 15, pp. 461-487
7. O. Malaspinas, P. Sagaut, Phys. Fluids, 23 (2011), p. 105103
8. T. Shimokawabe, T. Endo, N. Onodera, T. Aoki, 2017 IEEE Int. Conf. Cluster Computing, DOI 10.1109 / CLUSTER. 2017.97
9. CFD モデル環境アセスメント適用性研究会 編著、CFD モデル(DiMCFD)による大気環境アセスメント手法ガイドライン

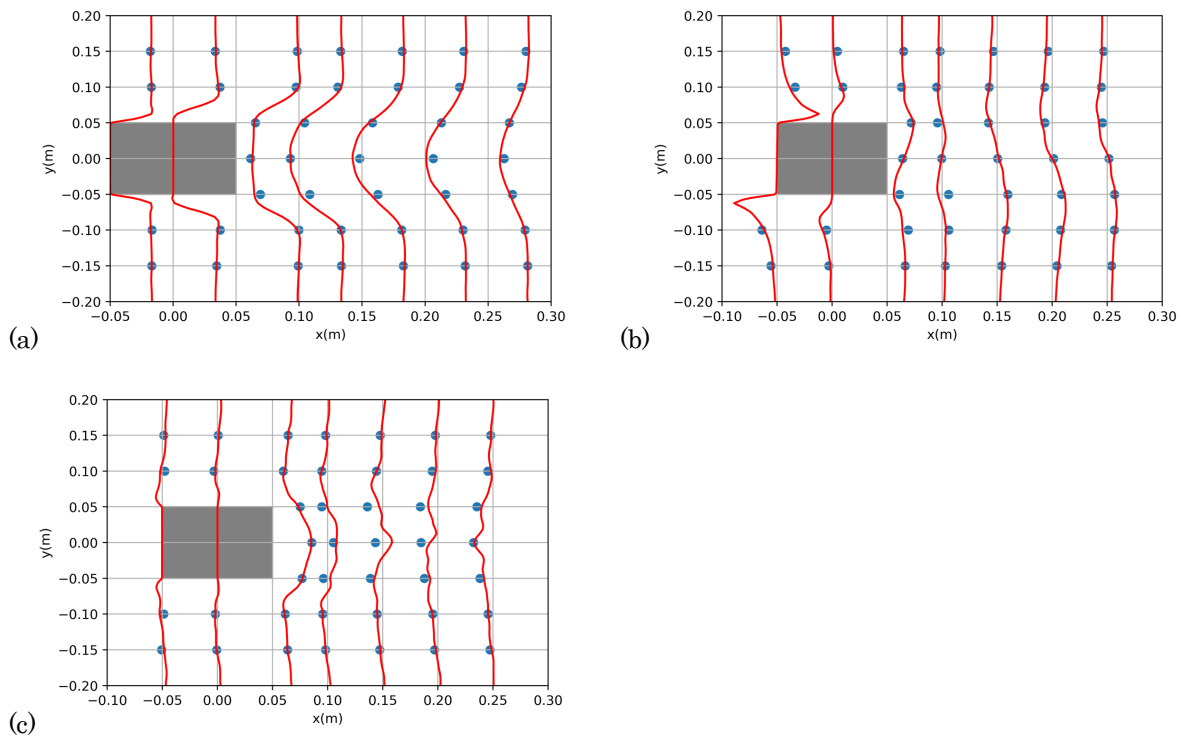


図 8 立方体中央部($Z=1/2H$)の水平断面内の平均速度分布。赤線：計算結果、青丸：実験結果。

$$(a)u_{plot} = 0.02u_{mean} + x_{line}, (b)v_{plot} = 0.04v_{mean} + x_{line}, (c)w_{plot} = 0.08w_{mean} + x_{line}.$$

$$x_{line} = (-50, 0, 65, 100, 150, 200, 250 \text{ mm}) .$$

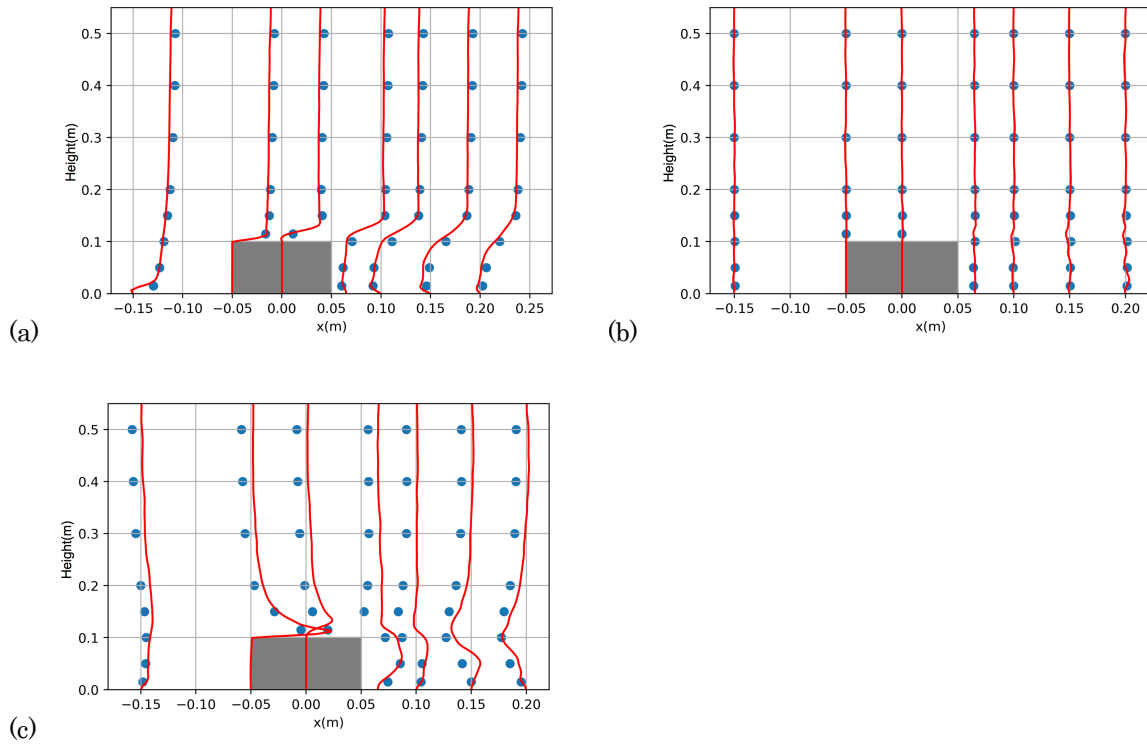


図9 立方体中央部($y=0$)の垂直断面内の平均速度分布。赤線：計算結果、青丸：実験結果。

(a) $u_{plot} = 0.02u_{mean} + x_{line}$, (b) $v_{plot} = 0.04v_{mean} + x_{line}$, (c) $w_{plot} = 0.08w_{mean} + x_{line}$.

$x_{line} = (-50, 0, 65, 100, 150, 200, 250 \text{ mm})$).

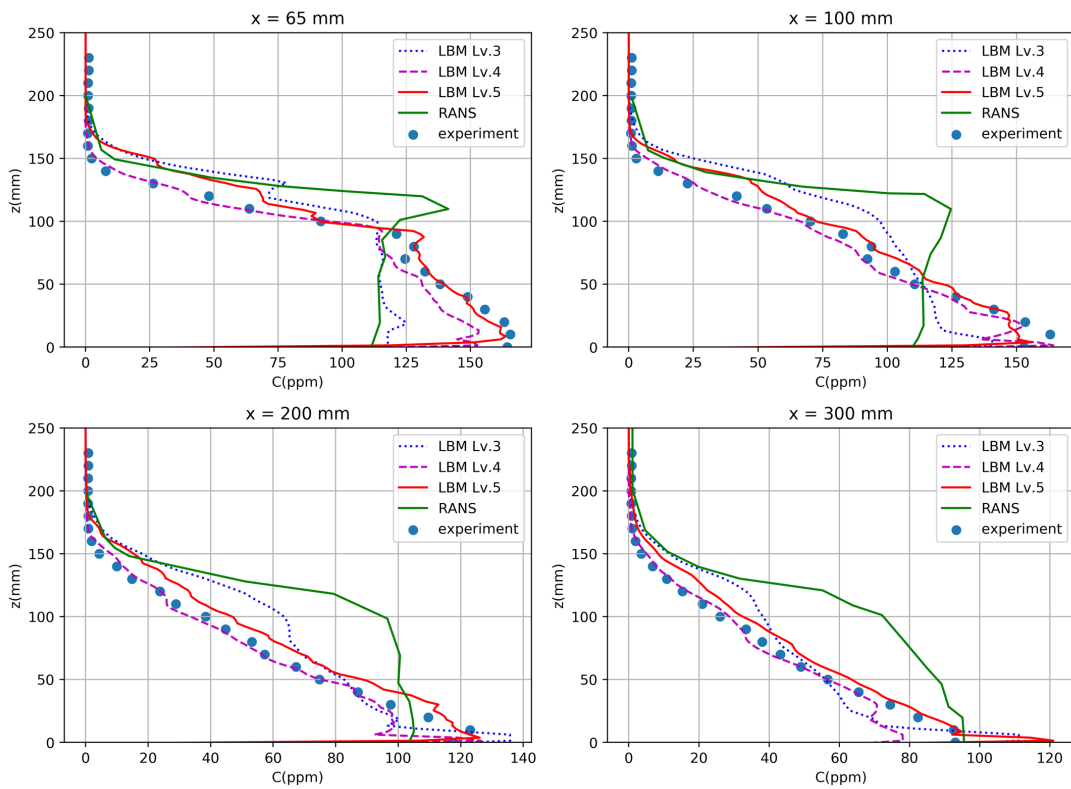


図10 立方体の後方中央部($y = 0$)での垂線上($x_{line} = (65, 100, 200, 300 \text{ mm})$)の平均濃度分布。
 青点線：AMR Lv.3 格子($\Delta x = H/16$)、紫破線：AMR Lv.4 格子($\Delta x = H/32$)、赤実線： $(\Delta x = H/64)$ 、
 緑実線：RANS、青点：実験結果

6. 今年度の進捗状況と今後の展望

格子ボルツマン法のリアルタイム汚染物質拡散解析の実現に向けて、東工大の TSUBAME3.0 向け実装および TB 法を適用した AMR 法を提案した。今年度の進捗状況として、計画していた AMR 法を用いた LBM の性能測定および風洞実験を用いた検証など、順調に計画が実施された。データ同化手法を用いた解析手法の高度化に関しては、風洞実験の流入速度分布の最適化に留まり、メソスケールモデル等の一般的な境界条件との融合までには至らなかった。また、TSUBAME3.0 を用いた性能測定にて問題となっていた、NVLINK を用いた高速な MPI 通信に関しては、報告書作成時においては Omni-Path を用いた GPU Direct RDMA に対応した MPI ライブラリが未整備なため実現されていない。しかしながら、原子力機構の GPU クラスタにおいては、最新の MVAPICH ライブラリを用いることで NVLINK を用いた高速な並列計算が実現されており、リアルタイム解析の実現への目処が立てられた。

今後の展望として、都市部の気流計算で重要となる、熱や植生等の物理モデルの導入および、観測データとの連携に向けたデータ同化手法の導入を計画している。最終的には、計算の高速化および物理モデルの高度化を行なった解析手法にて、実際の建物データを読み込んだ汚染物質拡散解析を行う。

7. 研究成果リスト

(1) 学術論文

1. A.Inagaki, A.N.Huda, M.Kanda, N.Onodera, and T.Aoki, “A numerical study of turbulence statistics and the structure of a spatially developing boundary layer over a realistic urban geometry”, Boundary-Layer Met., Vol.164, Issue 2, pp161-181, (2017), 査読有

(2) 国際会議プロシーディングス

2. N.Onodera and Y.Idomura, “Acceleration of wind simulation using locally mesh-

refined Lattice Boltzmann Method on GPU-Rich supercomputers”, Supercomputing Asia 2018, (2018), 査読有

(3) 国際会議発表

3. N.Onodera and Y.Idomura, “Acceleration of turbulent wind simulation using locally mesh-refined Lattice Boltzmann Method”, 18th SIAM Conf. Parallel Processing for Scientific Computing, (2018), 査読無

(4) 国内会議発表

4. 小野寺直幸, 井戸村泰宏, “格子ボルツマン法を用いた物質拡散計算の高速化”, 日本原子力学会秋の大会, (2017), 査読無
5. 小野寺直幸, 井戸村泰宏, “適合細分化格子を用いた格子ボルツマン法による物質拡散計算”, 第 31 回数値流体力学シンポジウム, (2017), 査読無

(5) その他 (特許, プレス発表, 著書等)