jh220027 非同期入出力機構を用いた大規模乱流直接数値シミュレーションコードの開発

代表：横川 三津夫（神戸大学）

撫佐昭裕，小松一彦（東北大学），石原卓（岡山大学），曽我隆，山口健太，山根悠輝（日本電気）
松本泰生，畑中裕翔（神戸大学）

本課題では，非圧縮性及び圧縮性乱流直接数値シミュレーション（Direct Numerical Simulation，DNS）コードに対し，変数の一時退避場所としてのテンポラリ・ファイルを作成し，使用メモリ容量を削減するコード実装を行い，その計算性能及びファイル入出力性能の評価を行う．特に，ファイル入出力に対しては，SX-Aurora TSUBASA が提供する高速入出力機構や非同期入出力機構を利用し，大規模DNS実行の可能性について評価する．

1. はじめに ― 背景とコード実装の考え方

スーパーコンピュータの高速化，大規模化により，大規模乱流DNSが進展．大規模な乱流DNSデータベースが構築されている．

計算資源が足らず，さらに規模の大きいDNSが不可能

【ファイル利用による実装】

計算すべき物理量（変数）をファイルに保持し，随時，部分的に変数を読み書きしながら時間積分を行う．

（利点）
- 使用メモリ容量が減少

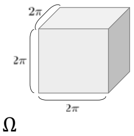
（欠点）
- 従来の計算時間に加え，ファイル入出力時間が増加
- ファイルシステムへの負荷が高い

計算とファイル入出力を非同期に実行出来れば，ファイル入出力時間を計算時間に隠蔽されることが期待される．

2. 直接数値シミュレーション（DNS）コードの概要

1) 非圧縮性一様等方乱流DNSコード（Box乱流）

領域 $\Omega = [-\pi,\pi]\times[-\pi,\pi]\times[-\pi,\pi]$ において



$$\frac{\partial u_i}{\partial x_i}=0,\qquad \frac{\partial u_i}{\partial t}+u_j\frac{\partial u_i}{\partial x_j}=-\frac{\partial p}{\partial x_i}+\frac{1}{\mathrm{Re}}\frac{\partial^2 u_i}{\partial^2 x_j}+f_i \qquad \text{in }\Omega$$

u_i:流速，p:圧力，Re:レイノルズ数，f_i :外力，周期条件 on $\partial\Omega$

- 空間離散化： フーリエ・スペクトル法（3次元高速フーリエ変換）
  aliasing errorは，$\sqrt{2}$N/3以上のモードカットとphase shift法で除去
- 時間積分： 4段4次ルンゲ・クッタ法

2) 等温を仮定した圧縮性乱流DNSコード

立方領域 Ωにおいて

$$\frac{\partial\rho}{\partial t}+\frac{\partial\rho u_i}{\partial x_i}=0,\qquad \frac{\partial\rho u_i}{\partial t}+\frac{\partial(\rho u_i u_j+p\delta_{ij})}{\partial x_j}=\frac{\partial\tau_{ij}}{\partial x_j}+f_i,$$

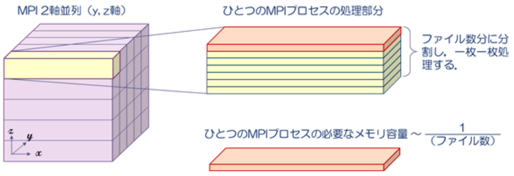
$$p=\rho c^2,\qquad \tau_{ij}=\mu\left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j}+\frac{\partial u_j}{\partial x_i}-\frac{2}{3}\frac{\partial u_k}{\partial x_k}\delta_{ij}\right)\qquad \text{in }\Omega$$

u_i:流速，ρ:密度，p:圧力，c:音速，μ:粘性係数，f_i :外力，周期条件 on $\partial\Omega$

- 空間離散化
  移流項： 8次精度コンパクト差分
  粘性項： 8次精度中心差分
- 時間積分： 3段3次TVDルンゲ・クッタ法
- 高波数領域における数値振動の除去：8次精度ローパスフィルタ

3. 実装イメージ

並列化コードで使用されている変数に対し，1つのプロセス中の変数をさらに分割し，個々のファイルに保持．メモリ量を削減．




```
real(kind=8) :: a(n,m,NN)
real(kind=8) :: b(n,m,NN)

do k = 1, NN
  do j = 1, m
    do i = 1, n
      a(i,j,k) = ... b(i,j,k)
    end do
  end d0
end do
```

Possible overlapped region

```
real(kind=8) :: a(n,m,NN/nf)
real(kind=8) :: b(n,m,NN/nf)

do fno = 1, nf

 read ::  a, b

 do k = 1, NN/nf
   do j = 1, m
     do i = 1, n
       a(i,j,k) = ... b(i,j,k)
     end do
   end do
 end do

 write ::  a, b

end do
```

The third dimension of variables, that size is NN, is divided into the number of files nf.

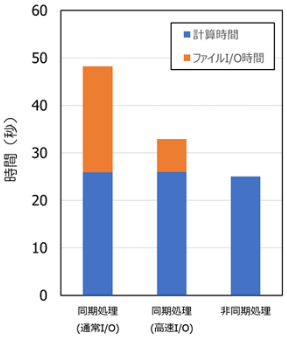
Load a portion of variables

Calculation for the portion loaded

Store the portion calculated

4. 予備実験 ― チェックポイントファイルへの非同期出力

時間発展熱伝導方程式を離散化したテストコードを作成し，途中経過を一定時間間隔でチェックポイントを取る場合について，SX-Aurora TSUBASAの非同期入出力機能による計算時間を計測した．



（計算時間）＞（I/O時間）の時，計算時間にファイルI/O時間が隠蔽されている．非同期入出力機構の正常動作を確認．

5. 今後の課題

- 非同期入出力機能の性能評価
  - ノード直結のSSDファイルシステム vs. 並列ファイルシステム
- 非圧縮性，圧縮性乱流DNSコードへの実装と評価

6. 参考文献

i. Y. Takenaka et al., Optimizations of DNS Codes for Turbulence on SX-Aurora TSUBASA, Sustained Simulation Performance 2019 and 2020, pp. 51-59, Springer, (2021)
ii. Y. Sakurai et al., Effects of the Compressibility of Turbulence on the Dust Coagulation Process in Protoplanetary Disks, AstoroPhys. J., 911 (2), p. 140 (2021)
iii. T. Ishihara et al., Second-order velocity structure functions in direct numerical simulations of turbulence with Rλ up to 2250, Physical Review Fluids, Vol. 5, 104608, pp. 1-15 (2020)
iv. M. Yokokawa et al., I/O Performance of the SX-Aurora TSUBASA, Proc. of 2020 IEEE International Parallel and Distributed Processing Symposium Workshop (IPDPSW), pp. 27-35 (2020)