

二流体モデルによる量子流体のための大規模 GPU 計算フレームワークの構築 - part I



都築 侂理 (東京大学)

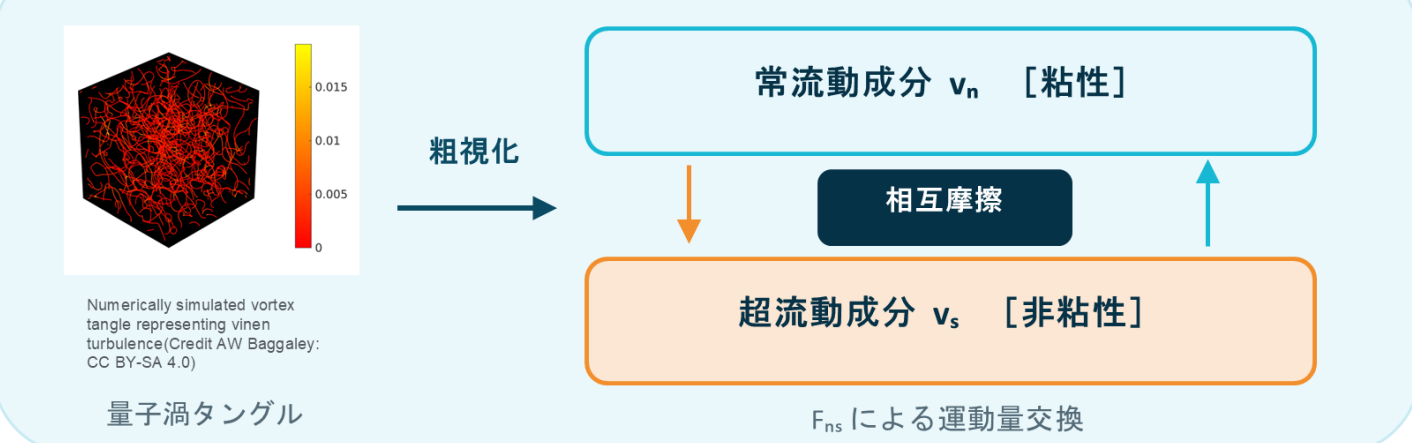
共同研究者: 青木尊之 (東京科学大学・名誉教授) | 竹内宏光 (大阪公立大学・准教授) | 小野寺直幸 (プロメテック株式会社・テクニカルマネージャー)

1. 研究のねらい: HVBKで量子乱流を粗視化

狙い: He-IIの量子乱流をHVBK(二流体)モデルで粗視化し、常流動 v_n と超流動 v_s の連成場から、乱流統計・渦度構造・エネルギー輸送を評価する。

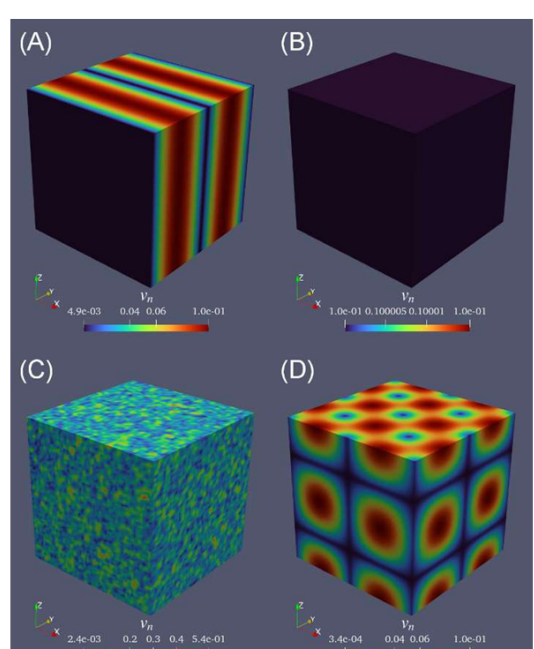
量子渦を「一本ずつ追う」微視的記述ではなく、実験・大規模並列計算で扱いやすい連続場として捉える。

HVBK (Hall-Vinen-Bekarevich-Khalatnikov)モデルによる粗視化



- 同一領域内に2成分が独立に存在し、相互摩擦でのみ力を伝達
- 対向流条件の Vinen 乱流と、初期条件駆動の等性乱流を扱う
- 量子渦の微視的効果も、連続場の統計・渦度・輸送として観測

検証の起点: 4種類の初期条件



異なる条件下で物理量を比較し、HVBK解法の精度と性能評価を初期に定める。

- 1 物理対象** He-II量子乱流: 古典乱流とは異なる構造・輸送機構
- 2 粗視化** 常流動 v_n と超流動 v_s を二流体連成場として扱う
- 3 測定量** $E(k)$, $\Pi(k)$, 渦度構造, 異方性・間欠性を統計評価
- 4 先の展開** 周期境界から壁境界・実験条件へ拡張可能な基盤へ

Take-home: HVBKは「量子渦の粗視化」と「二流体連成」を同時に扱うための入口であり、以降の統計解析・GPU実装計画の前提となる。

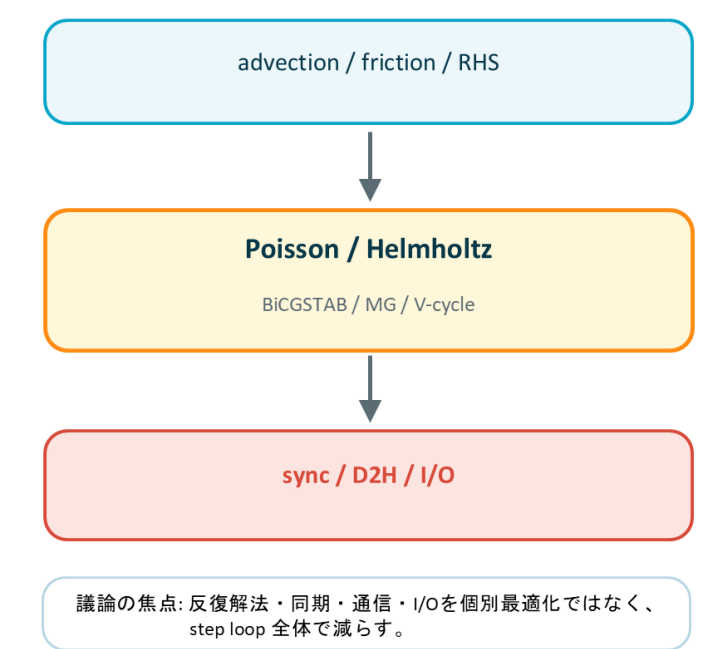
4. 実装戦略: GPUネイティブ化からMPI+GPUへ

設計原則 Poisson/Helmholtz 支配の二流体 HVBK をデータ配置・同期・線形解法・通信まで改めて再設計する。 単なるCUDA移植ではなく、GPUメモリ常駐・device-side reduction・マルチグリッド(MG)最適化・非同期halo通信を一体で評価する。 **出口:** 512³探索 → 2048³本計算 (64-128 GPUs)

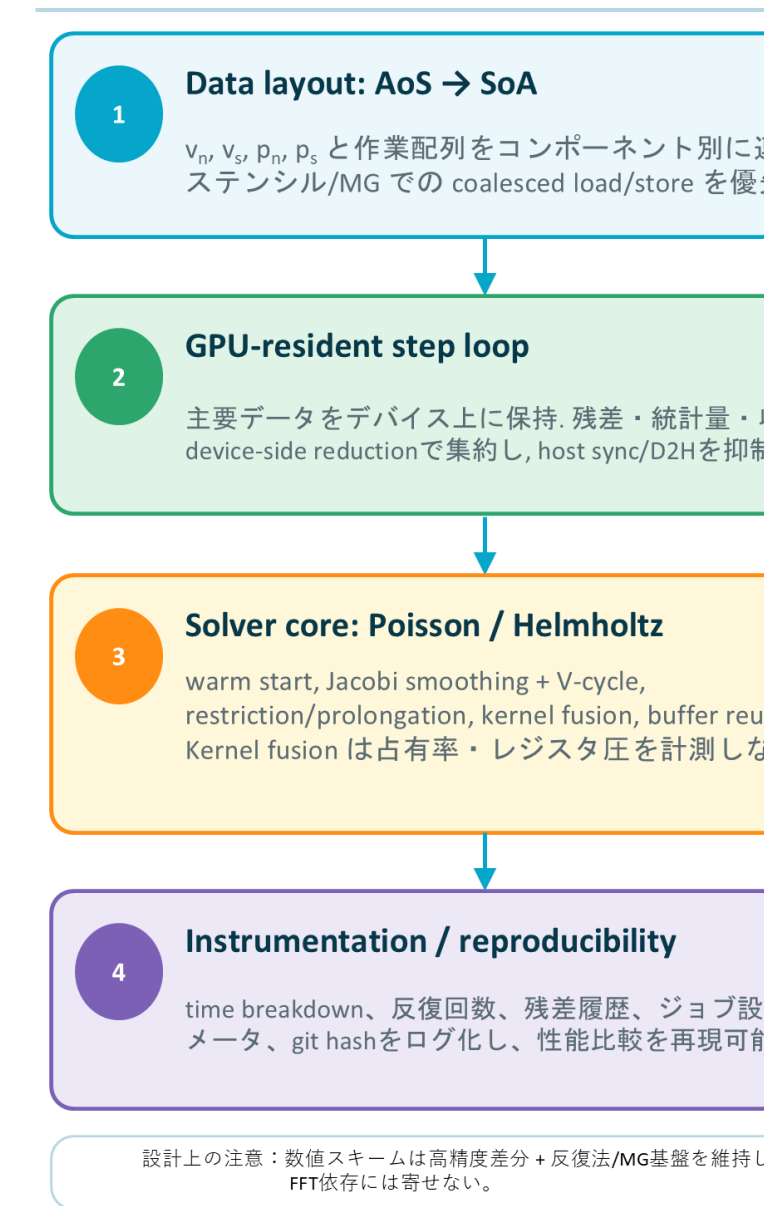
A. 実装のボトルネック

- 現状の主な制約
- 各stepで Poisson / Helmholtz 反復解法が支配
 - stencil + MG は演算強度が低く、実効性能はメモリ帯域に依存
 - stepごとの同期・D2H転送が残ると、GPU利用率も待ち時間が見える

time stepの支配構造



B. GPUネイティブ化のレイヤー



C. MPI+GPUへの拡張



Objective: 8-128 GPUs の強・弱スケーリングで MPI+GPU 構成を確定し、2048³本計算に必要な実効スループットを検証する。

2. 物理解析で狙う統計量

高解像度HVBK計算から $E(k)$ ・ $\Pi(k)$ ・異方性・高次統計量を同時に取得し、二流体の結合/デカップリングと量子系特有の散逸を定量化する。

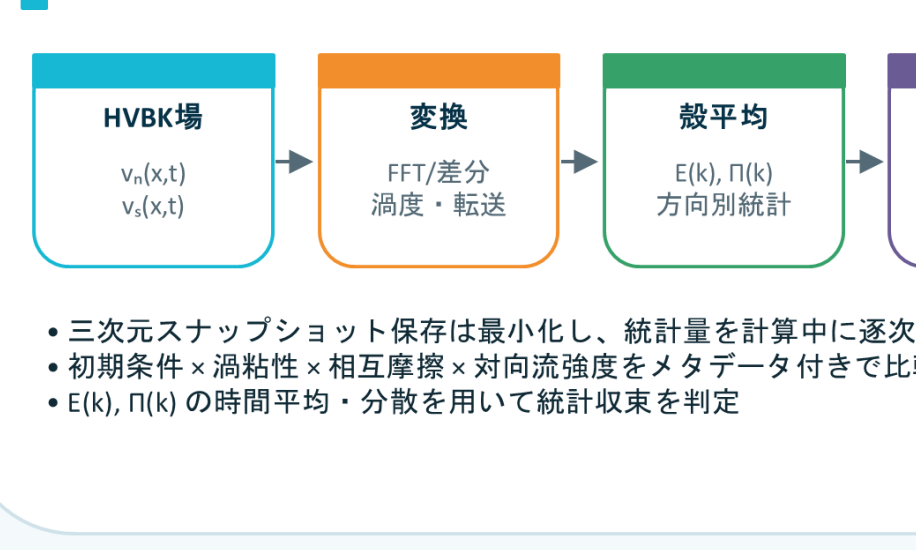
スケールkごとに「どこでエネルギーが移動し、どこで二流体がずれるか」を測る。

計算から抽出する主統計量

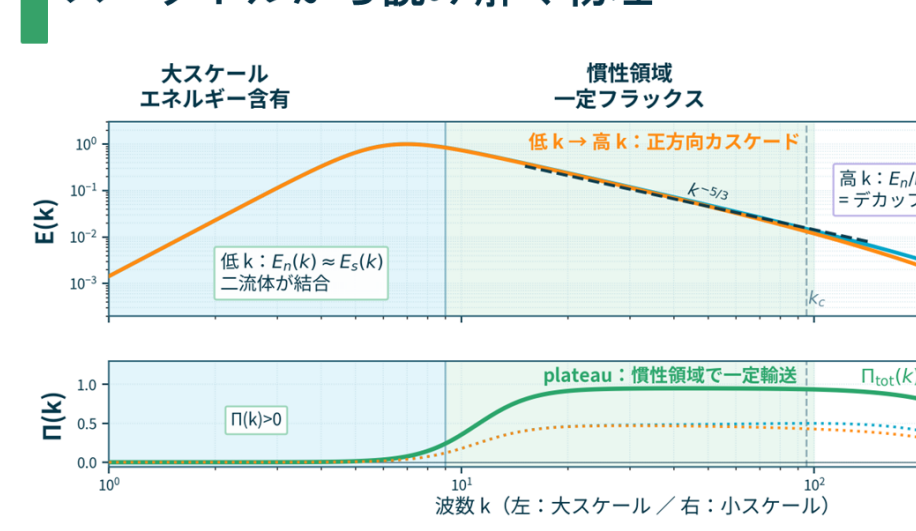
$E(k)$, $\Pi(k)$, 異方性指標, 高次統計量をケース間で標準化して比較する。

- A エネルギースペクトル** $E(k) \approx \frac{1}{2} \rho_0 \langle |u(q)|^2 \rangle$
各スケールに含まれる運動エネルギー, 慣性領域の形成, 初期条件依存, E_n/E_0 の差を調む。
- B エネルギーフラックス** $\Pi(k) \approx -2 \tau(q)$
カスケードの向き・強さ, $\Pi(k)$ の符号・ピーク位置・定常化時刻を重点的に見る。
- C 二流体結合指標** $C_m(k)$, E_n/E_0
 v_n と v_s が同じスケールで同期しているか, 相互摩擦で結合/デカップリングするかを評価する。
- D 異方性・間欠性** $A(k)$, $S_n(r)$, $F(r)$
対向流方向の偏り, 構造関数・フラットネスによる高次統計を用いて局所的な強い変動を捉える。

解析フロー: 速度場データから統計量へ



スペクトルから読み解く物理



議論の問い: ① 慣性領域はどこまで伸びるか ② $\Pi(k)$ の符号・ピーク位置はどこか ③ 対向流で異方性/二流体デカップリングはどう現れるか

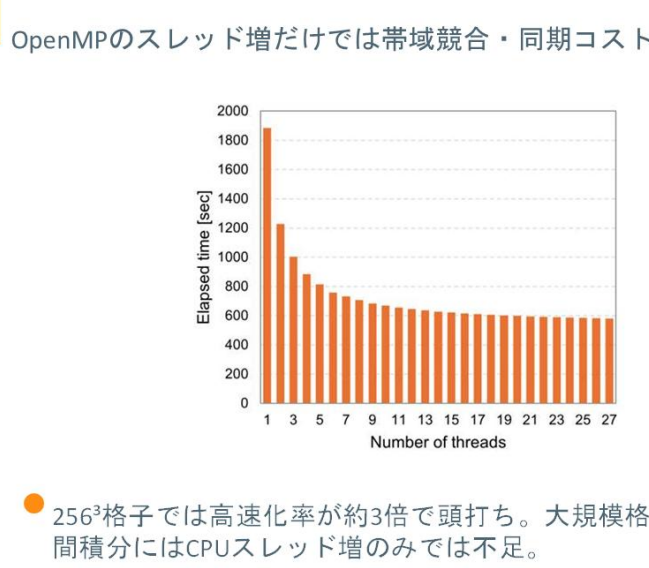
Take-home: 物理解析の主役は「スケール別のエネルギー・フラックス・二流体結合」。512³で探索し、2048³で信頼できる統計量を得る。

3. 計算ボトルネック: 反復型線形解法が支配

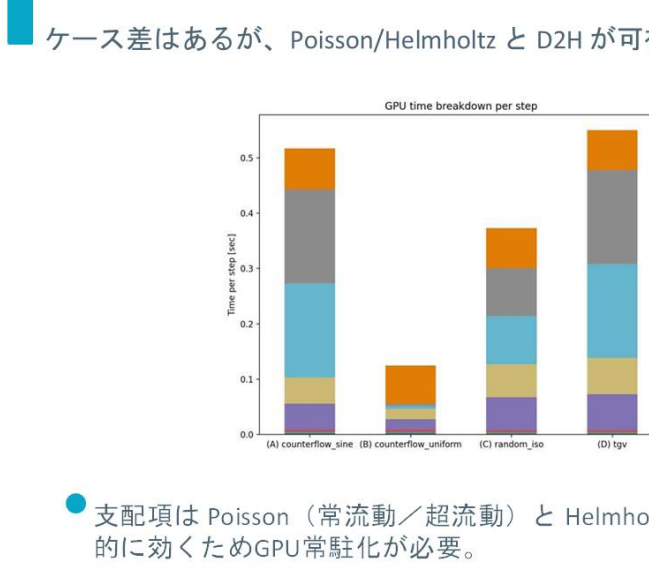
HVBKの各ステップで Poisson (非圧縮縮影) と Helmholtz (粘性半陰) を反復的に解くため、実効性能は「FLOP/s」よりも実効帯域・反復回数・同期/転送に強く支配される。

実装案: CPUはBiCGSTAB+MG前処理, 単一GPUはJacobi smoothing+V-cycle MG, 線形解法・データ配置・MPI通信を一体で設計する。

Evidence 1 | CPU強スケーリング



Evidence 2 | 単一GPUの時間内訳



HPC議論の焦点

- 性能改善の評価軸を明確化
- 測るべき量
- 反復回数・残差履歴
 - FLOP/byte・実効帯域
 - 同期/D2H/I/O頻度
 - halo通信・通信構成
- 性能目標
- 1stepあたりの時間短縮だけでなく、許容誤差・統計収束・再現可能なログ管理を含めて評価する。

原因

- 低い演算強度** 3Dステンシル+反復ソルバでメモリアクセスが支配
- 局所最適化** GPU常駐化: AoS->SoA, 残差評価・統計量をGPU内で完結
- ソルバ最適化** MG / warm start: スムーズ・V-cycle・カーネル融合・テンポラリ削減
- 大規模化** MPI+GPU: 領域分割・halo非同期通信・計算通信オーバーラップ

Evidence 3 | Roofline: 実サイズではL3/DRAM帯域が支配



読み方: Roofline上の計測値が低FLOP/Byte側に集まるほど、ピーク性能ではなくメモリ帯域・データ移動が律速。実装評価では「bytes moved / lattice update」(通信量)「残差評価の同期」を主対象にする。

Take-home: HVBKの性能改善は「線形解法をいかにGPU/MPIネイティブにするか」。支配項・帯域・同期を定量化し、512³→2048³へ外挿できる設計にする。

7. 将来展開

本年度の研究で、周期境界で性能ボトルネックを顕在化・解消し、壁境界条件を含む実験条件との直接比較へつながる「量子流体ものづくりアプリケーション」基盤を整備する。

5. 研究計画: Q1-Q4

検証 → 最適化 → スケーリング → 本計算

狙い: 512³の探索計算で物理量・パラメータを絞り込み、2048³重点ケースを64-128 GPUsで統計収束まで評価する。

Q1 | 複数GPU計算基盤の構築と検証 (256³-512³ / 8 GPUs)

- adaptive Δt と Poisson/Helmholtz 許容誤差を整理
- 4初期条件で $E(k)$, $\Pi(k)$ の時間平均・分散を自動判定
- 時間内訳・反復回数・残差履歴・ジョブ/ログを管理

出口判定: 1024³で注力すべき物理量と数値条件を決定

Q2 | 単一GPU最適化と512³パラメトリック解析 (512³ / 8 GPUs)

- AoS->SoA, GPU常駐化, host sync / D2H を削減
- 統計量を実行中に逐次集約し, 3D出力を抑制
- warm start + MG + kernel fusion + データ再配列を導入

出口判定: 512³探索を自動化し, Q3の実装・運用条件を固定

Q3 | MPI領域分割と2048³スケーリング測定 (8-128 GPUs / 2048³)

- 3D領域分割 + 非同期halo通信で通信帯域を評価
- 強・弱スケーリングから64-128 GPUs構成を測定
- 安定性・メモリ・反復回数・I/O・checkpoint/restartを確認

出口判定: 1024³本計算の構成・運用手順を確定

Q4 | 実アプリ計算・スペクトル解析・成果化 (512³探索 + 2048³本計算)

- 初期条件・有効粘性・相互摩擦パラメータ依存性を整理
- 慣性領域, $\Pi(k)$, 異方性, 二流体結合/デカップリングを評価
- 高次統計量による間欠性を統計収束まで評価

出口判定: 標準化データセット・性能評価・2年目の設計指針

HPC観点での評価軸

単に「動く」だけでなく、数値誤差・性能・運用を同時に可視化する

- 数値妥当性**
 Δt , CFL, 残差履歴, Ψ , v , energy budget
許容誤差が統計量を汚染しない範囲を固定
- GPU実装**
GPU内完結のreduction / residual評価
D2H + 同期回数・kernel launch + temporary配列を監視
- MPI+GPU性能**
halo通信, stream設計, 計算/通信overlap
strong/weak scalingで64-128 GPUsの妥当性を判断
- I/O・再現性**
checkpoint/restart, metadata, parameter sweep
オンライン統計で3D確保容量を抑制

出口: 物理データの信頼性とHPC実装の再現性を同じログ体系で説明できる状態

Q4終了時の成果物

Q1-Q3の「出口判定」を通過した設定だけを2048³本計算へ投入する

- MPI+複数GPU版 HVBKコード
- ベンチマーク 4初期条件・収束判定
- 性能評価レポート 強/弱スケーリング・ボトルネック
- 物理データセット 1024³重点ケース統計量

Take-home: 次年度への接続: 壁境界条件導入・複雑条件・複数GPU間の動的負荷分散へ展開

6. 到達スケール・成果物

狙い: 512³でケースと統計設計を絞り込み、2048³重点ケースを64-128 GPUsで統計収束まで評価する。成果物は「コード・ベンチマーク・性能評価・物理データセット」として残す。

A. 到達スケール: 探索と本計算を分離

探索・選別 512³ (8 GPUs程度 / 10⁷ steps目安) → 重点本計算 2048³ (64-128 GPUs / 10¹⁰ steps目安)

B. 資源計画: GPU時間と保存容量

47,900 GPUh ≒ 48,000 GPUh (Work領域 30 TB)

同時利用 112-146 (GPUノード数)

C. 運用設計: I/Oをボトルネックにしない

GPU常駐, 逐次集約, 3D出力抑制, 再現性

D. Q4終了時の成果物

- MPI+複数GPU版 HVBKコード
- ベンチマーク・収束判定
- 性能評価レポート
- 2048³ 乱流統計データセット

E. HPC議論ポイント

- 並列効率
- 線形解法
- メモリ帯域
- 通信/I/O
- 再現性

Take-home: 到達スケールは物理成果とHPC実装の双方を縛る制約。512³で広く探索し、2048³に計算資源を集中する。

8. 謝辞・参考文献

謝辞: 本研究は、JHPCN (課題番号: jh260021)、JSPS科研費 (JP22K14177)、およびJT さきがけ (JPMJPR2307) に支援頂いている。

参考文献:

- [1] H. E. Hall and W. F. Vinen, Proc. R. Soc. Lond. A 238, 204-214 (1956).
- [2] H. E. Hall and W. F. Vinen, Proc. R. Soc. Lond. A 238, 215-234 (1956).
- [3] I. L. Bekarevich and I. M. Khalatnikov, Sov. Phys. JETP 13, 643-646 (1961).
- [4] R. N. Hills and P. H. Roberts, Arch. Rational Mech. Anal. 66, 43-71 (1977).
- [5] P.-E. Roche, C. F. Barenghi and E. Lévesque, EPL 87, 54006 (2009).
- [6] C. F. Barenghi, L. Skrbek and K. R. Sreenivasan, Proc. Natl. Acad. Sci. USA 111, 4647-4652 (2014).