

11-MD03

次世代ペタスケール CFD のアルゴリズム研究

中橋和博, 佐々木大輔 (東北大学大学院工学研究科)
小林広明, 江川隆輔 (東北大学サイバーサイエンスセンター)
高橋俊, 新井紀夫 (東京農工大学工学研究院)
東田学 (大阪大学・サイバーメディアセンター)
石井 克哉 (名古屋大学情報基盤センター)

概要

ペタフロップス級計算機開発および将来の更なる計算機性能の向上を念頭に、等方直交格子をベースとする次世代 CFD アルゴリズムを世界に先駆けて構築する研究を進めている。等方直交格子はその単純性から格子生成を極めて高速に行え、高次精度解法の導入も容易である。これら利点は大規模計算で更に強化されることが期待される一方、大規模な非定常計算を分散メモリ型並列計算で行う場合には、数値計算の中で行なう MPI の情報交換によるレイテンシ、データの IO 時間、データの転送時間が大きなボトルネックとなることが分かっている。本研究では、並列計算効率を低下させるこれら 3 つの障壁に対して、数値流体力学の研究グループと計算機科学を専門とする研究グループとの協力により解決を目指す。本報告では、ペタフロップス級流体計算を可能とする直交格子法をベースとする非圧縮性流体ソルバの並列性能の評価結果について述べる。また、直交格子法に基づく計算手法の現在の進捗状況について述べる。

1. 研究の目的と意義

現在国家プロジェクトとして進められている次世代高性能計算機・京を活用したシミュレーション技術に対する産業界の期待は大きく、革新的な製品開発のブレークスルーにつながることを期待される。しかしながら、計算機能力だけに依存したリードは一時的なものに終わる可能性が大きい。飛躍的に計算能力が高まるのを機会に、それを最大限に活かす計算アルゴリズムを構築し、いち早く応用研究を進める事が将来に渡る差別化技術の創成につながる。そこで、ペタフロップス級流体計算を可能とする流体ソルバのアルゴリズム開発と、次世代高性能並列計算機や大規模ベクトル計算基盤におけるソルバの高効率実行を可能にする超並列化技術およびベクトル化技術の研究開発に取り組む必要がある。

世界のスーパーコンピュータは過去 10 年で 1000 倍もの性能を向上させており、その勢いは今後も当分続くと言われている。本研究は、このスーパーコンピュータの将来の更なる性能向上を念頭に、そのペタフロップス級の演算能力を最大限に活かす流体の数値計算アルゴリズムを、数値流

体力学の研究グループと計算機科学を専門とする研究グループとの協力により開発することを目的とする。この研究により、従来は計算機能力の限界により制限されていた様々な流体問題への挑戦を可能にするとともに、シミュレーション技術の高度化を通じて航空機をはじめとする流体機械の高性能化と環境適合化に資することを旨とするものである。

本研究では、直交格子法ベースの計算手法である Building-Cube 法の計算効率（ベクトル化・並列化）の向上を目的とした研究を実施し、実用性の向上を図る。

2. 当拠点公募型共同研究として実施した意義

(1) 共同研究を実施した大学名と研究体制

本共同研究は、東北大学・東京農工大学・大阪大学・名古屋大学と共同して研究を進めた。

(2) 共同研究分野

超大規模数値計算系応用分野・超大規模情報システム関連研究分野

(3) 当公募型共同研究ならではの事項など

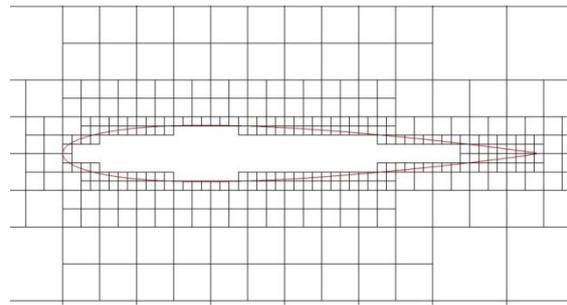
ペタフロップス級流体計算を可能とする流体ソルバのアルゴリズム構築のためには、大規模ベクトル計算機や超並列計算機環境による評価が必須であり、当公募型共同研究による計算機環境が必要不可欠である。また、本研究の最終目標としては、各センターの計算資源のみならず、複数拠点をまたいだ広域ベクトル連携基盤において大規模計算を実施し、大規模数値解析に向けた応用例を示す予定である。

3. 研究成果の詳細と当初計画の達成状況

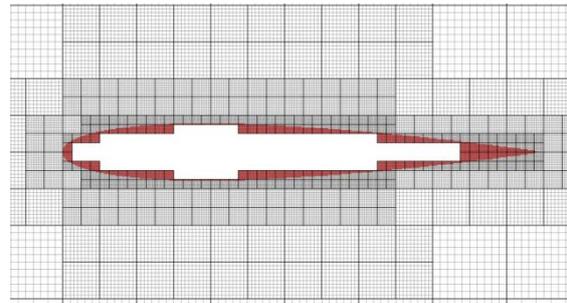
3.1 Building-Cube 法の概要

Building-Cube 法 (BCM) は格子生成、流体解析アルゴリズム、後処理の単純性を保つために等間隔直交格子を採用している高解像度の計算手法である。BCM では流れ場を多くの様々なサイズの”Cube”と呼ばれる立方体の領域に分割する。各 Cube サイズは物体の形状に合わせて決定され、各 Cube の内部には等間隔直交格子”Cell”を生成して計算が行われるが、全ての Cube が同数の Cell を持つことで高い並列化効率が得られる。物体壁を単純な階段状に表現しているため、物体境界の幾何学精度を保ち且つ境界層内の粘性領域を解くには物体近傍で非常に細かい格子が必要である。しかし、格子生成のような人的作業が不要になることの利点は、実問題で必要となる複雑形状では非常に大きい。また、圧倒的に細かな格子を用いることで計算結果の格子依存性や物理モデルへの依存性も除去できる。

図 1 に、翼周りに生成した BCM 格子を示す。物体近傍では小さい Cube サイズを使用するため、十分に細かい格子を生成することになり、物体を詳細に表現することが可能となる。一方、翼から離れた領域では Cube サイズを大きくすることで、格子点数の削減を図っている。本アプローチにより、各 Cube における計算負荷は均一となり、大規模並列計算環境時でも十分な並列性能を上げることが期待できる。



(a) Cube 配置



(b) Cell 配置

図 1 翼周りの BCM 格子

3.2 非圧縮性流体解析ソルバの並列性能

支配方程式は三次元非圧縮性 Navier-Stokes 方程式とし、それを Fractional-step 法によって段階化したのちに、スタガード格子においてそれぞれの項を有限差分法で近似する。Fractional-step 法の予測段階で仮の速度を求める際には、対流項と粘性項のどちらにも 2 次精度の Adams-Bashforth 陽解法を用い、対流項の差分近似には 3 次精度風上差分、粘性項と圧力の Poisson 式には 2 次精度中心差分近似をそれぞれ用いる。なお、図 2 に示すように各 Cube は 2 セル分のオーバーラップ領域を有しており、そのオーバーラップ領域を利用して隣接 Cube との情報交換を行う。

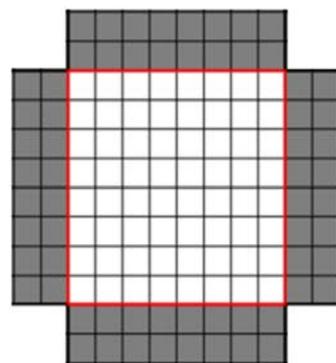


図 2 Cube におけるオーバーラップ領域

表 1 計算機性能

System	Peak Tflops/s	Nodes	Sockets /node	Cores /PE	Memory BW GB/s	On-chip Memory	Network	B/F
NEX SX-9	26.2	16	16	1	256	256 KB ADB	2x 128GB/s IXS	2.5
Nehalem EP	0.75	8	2	4	25.6	256 KB L2/core, 8MB shared L3	40 Gb/s IB	0.55
Nehalem EX	1.74	6	4	8	34.1	256 KB L2/core, 24MB shared L3	20 Gb/s IB	0.47
Fujitsu FX-1	5.16	128	1	4	40.0	6MB shared L2	20 Gb/s IB	1.0
Tesla S1070	1.24	16	1	1	102	16 KB/ SM	10 Gb/s IB	1.3

今回の比較で用いた計算機は、表 1 に示すとおりであり、解析ソルバはそれぞれの計算機に合わせて最適化を施してある。

(1) ベクトル並列計算機

使用したベクトル並列計算機 SX-9 は、プロセッサ当たり 102.4GFlops の演算性能を持ち、各ノードは 16 個の CPU を搭載している。SX-9 の特徴の一つは、ADB (Assignable Data Buffer) と呼ばれるオンチップキャッシュを有していることである。この ADB (256KB) を利用することによって、実効性能を向上させることが可能である。BCM をベクトル計算機で実行するに当たり、マスタテーブルを利用したレッドブラック SOR 法を採用する。

(2) スカラー並列計算機

使用した並列計算機 Nehalem-EP クラスタ、Nehalem-EX クラスタ、FX-1 はそれぞれ、Nehalem-EP, Nehalem-EX, SPARC64VII プロセッサを搭載したスカラー並列スーパーコンピュータである。表 1 に記載されているように、オンチップキャッシュを搭載している。ベクトル計算機に導入したレッドブラック SOR 法はデータ依存性を解消できる一方、ストライドデータアクセスが必要となり性能低下を起こす。そこで、スカラー並列計算機で BCM を計算する際には、通常の SOR 法を用いることとした。

(3) GPU 計算機

GPU は多数のストリームプロセッサから構成されており、プログラミング環境 CUDA ではそれ

らをグループ化してストリームマルチプロセッサとして扱う。BCM を GPU クラスタで計算するに当たり、それぞれのノードに Cube が割り当てられ、GPU のストリームマルチプロセッサに渡される。Cube 内の Cell の計算はスレッド化されてストリームプロセッサで計算される。BCM の特徴である、Cube 内の Cell 数が同数であることから、ストリームプロセッサでは効率的に並列計算が実施される。

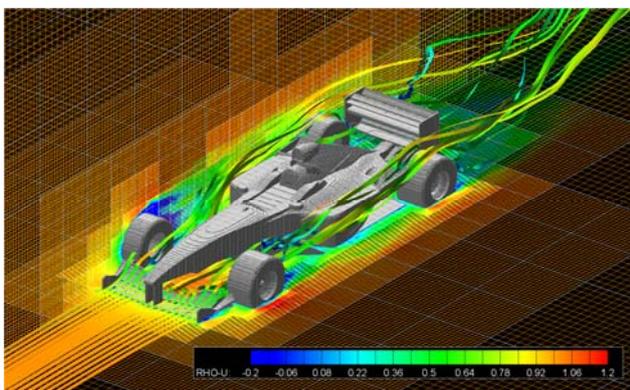
並列性能の評価に利用した 3 次元モデルは、図 3 に示す大規模モデル (F1, 2 億点) 及び小規模モデル (球, 500 万点) の 2 種類である。図 4 は、大規模モデルである F1 における並列性能を示している。図より SX-9 の実効性能が高いことが分かる。これは、BCM がメモリ高負荷型の計算手法であることから、メモリバンド幅による影響が大きい。また、ADB のキャッシュをうまく使うことで性能の向上が図られている。

スカラー計算機に着目すると、FX-1 の有する性能に対して、BCM の並列性能が Nehalem EP や EX に比べて低いことが分かる。これは、SPARC64VII のメモリバンド幅よりも Nehalem の方が大きいためと考えられる。実際、STREAM ベンチマークの結果では、FX1 は 10.0GB/s であるのに対し、Nehalem EP と EX はそれぞれ 17.0, 17.6GB/s である。

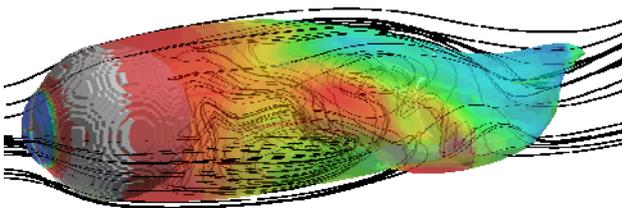
メモリの関係上、GPU は小規模モデルしか計算できていないため、図 5 における実効性能を比較

する。GPU クラスタは、SX-9 よりは低い、並列計算機よりも同等かそれ以上の性能を示している。GPU では、ストリームプロセッサ数と高いバンドメモリ幅を有していることから、BCM の並列計算を効率的に行えることを示している。その一方、GPU と CPU 間のデータ通信や他のノードにある GPU との通信を行う場合、計算速度の大幅な低下が避けられない。そのため、GPU による大規模計算を実施する場合、通信データ数の削減やデータ交換の隠蔽が不可欠である。

スケーラビリティに着目すると、大規模格子である F1 モデルにおいては、どの計算機においても良好な性能向上が確認できる。これは、各プロセッサに割り当てられる計算量が多いことと十分なネットワークバンド幅を有していることに起因している。一方、小規模モデルの球においては、スケーラビリティは F1 モデルよりも低い。GPU クラスタに関しては、データ通信がオーバーヘッドになっており、スカラー並列機に関しては、領域毎の計算量が少ないことが原因である。



(a) 大規模モデル (F1)



(b)小規模モデル (球)

図 3 計算モデル

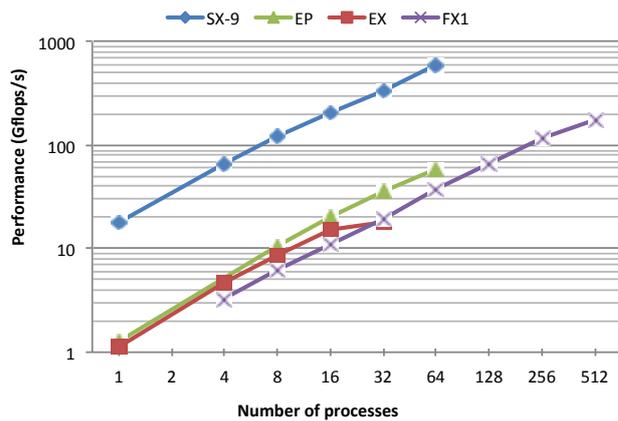


図 4 BCM の並列性能 (大規模モデル, F1)

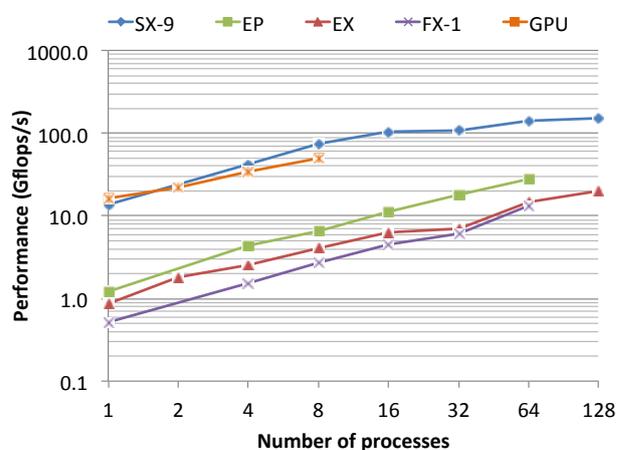


図 5 BCM の並列性能 (小規模モデル, 球)

3.3 当初計画の達成状況について

今年度の計画は、ブロック型直交格子法に基づく流体解析ソルバに対して分散メモリ型並列化を施し、超並列計算機上でその性能を評価することであった。今年度、ベクトル並列計算機 (SX-9)、スカラー並列計算機 (Nehalem-EP クラスタ, Nehalem-EX クラスタ, FX-1)、GPU 計算機にて並列計算を行い、その性能の評価を行った。GPU 計算機は高い実効性能を示したが、メモリの制約により小規模モデルのみの評価にとどまっている。一方、スカラー並列計算機では、2 億点の大規模格子モデルにおいては良好な並列スケーラビリティを示したが、超並列計算規模での評価には至っていない。今後、超並列計算機に向けた大規模並列の性能評価を行うと共に、更なる改善のためデータ通信の隠蔽等を行うことが必要である。

4. 今後の展望

Building-Cube 法 (BCM) に基づく非圧縮性流体解析ソルバを用いて、ベクトル計算機・スカラー並列計算機・GPU クラスタにおける並列性能に関して評価を進めてきた。使用している CPU 数は最大で 512 であるが、どの計算機においても比較的良好的なスケーラビリティが得られている。その一方、並列数の増加に伴いブロック間のデータ交換の比重が大きくなることから、十分なメモリバンド幅がないと並列性能の向上を図ることが難しいことが分かる。今後、データ通信の隠蔽を図るなど、データ交換に起因する並列性能劣化を抑える方策を導入し、その評価を行う予定である。

また、これまでの研究においては、直交格子の課題である物体表面の解像度を補うアルゴリズム開発にも注力していたため、より高度な流体力学問題に対する応用研究などが不十分であった。航空機設計の実用性を向上させるために BCM のフレームワークを利用して圧縮性流体解析手法や音響伝播解析手法の開発も進めている。図 6 は OpenMP 並列による圧縮性流体解析結果であるが、今後更なる高速化を図るために、MPI 並列化を実施している。その作業が完了し、チューニングを行った後、大規模スカラー並列計算機を有する名古屋大学のスーパーコンピュータを用いて超並列計算に取り組み、性能評価及び改善を進める予定である。

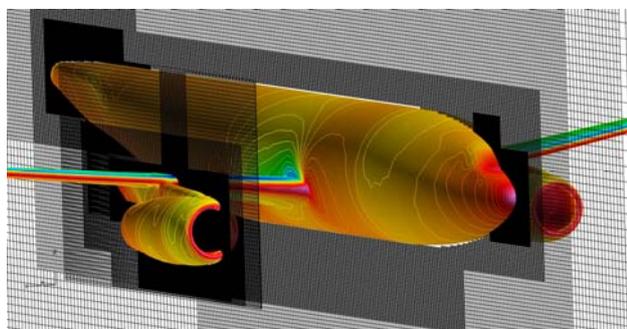


図 6 BCM による航空機周りの圧縮性非粘性流れ計算

5. 研究成果リスト

(1) 学術論文

佐藤義永, 永岡龍一, 撫佐昭裕, 江川隆輔, 滝沢寛之, 岡部弘毅, 小林広明, “ルーブラインモデルに基づくベクトルプロセッサ向けプログラム最適化戦略,” *情報処理学会論文誌 コンピューティングシステム*, Vol. 4, No. 3, pp.77–87, 2011.

Kazuhiko Komatsu, Takashi Soga, Ryusuke Egawa, Hiroyuki Takizawa, Hiroaki Kobayashi, Shun Takahashi, Daisuke Sasaki, and Kazuhiko Nkahashi, “Parallel Processing of the Building-Cube Method on the GPU Plathome,” *Computers & Fluid Special Issue “22nd International Conference on Parallel Computational Fluid Dynamics,”* vol.45, No.1, pp.122-128, May 2011.

Takashi Soga, Akihiro Musa, Koki Okabe, Kazuhiko Komatsu, Ryusuke Egawa, Hiroyuki Takizawa, Hiroaki Kobayashi, Shun Takahashi, Daisuke Sasaki, and Kazuhiro Nakahashi, “Performance of SOR Methods on Modern Vector and Scalar Processors,” *Computers & Fluid Special Issue “22nd International Conference on Parallel Computational Fluid Dynamics,”* vol.45, No.1, pp.215-221, May 2011.

(2) 国際会議プロシーディングス

Shun Takahashi, Norio Arai, “Multidisciplinary Investigation by Fluid-Structure-Motion Integrated Simulation,” *CD-ROM Proceedings of IV International Conference on Computational Methods for Coupled Problems in Science and Engineering*, Greece, June 20-22, 2011.

(3) 国際会議発表

Daisuke Sasaki, Akihito Deguchi, Hiroshi Onda, Kazuhiro Nakahashi, “Airframe Noise Prediction using Block-Structured Cartesian-based CFD Solver,” *ASME-JSME-KSME Fluids Engineering Conference 2011*, Hamamatsu, July 24-27, 2011.

Kazuhiko Komatsu, Takashi Soga, Ryusuke Egawa, Hiroyuki Takizawa, Hiroaki Kobayashi, Shun Takahashi, Daisuke Sasaki, Kazuhiro Nakahashi, "Performance of Building-Cube Method on Various Platforms," 8th International Conference on Flow Dynamics, Sendai, Japan, November 9-11, 2011.

Shun Takahashi, Norio Arai, "Overset Grid Approach for Moving Boundary Problem based on Cartesian Grid Method," 8th International Conference on Flow Dynamics, Sendai, Japan, November 9-11, 2011.

Yasutaka Nishimura, Daisuke Sasaki, Kazuhiro Nakahashi, "Aeroelastic Analysis using BCM Euler Compressible Solver," 8th International Conference on Flow Dynamics, Sendai, Japan, November 9-11, 2011.

Ryotaro Sakai, Akihito Deguchi, Daisuke Sasaki, Kazuhiro Nakahashi, "Large-Scale Unsteady Flow Data Compression for Building-Cube Method," 8th International Conference on Flow Dynamics, Sendai, Japan, November 9-11, 2011.

Yuma Fukushima, Daisuke Sasaki, Kazuhiro Nakahashi, "Linearized Euler Equation on Block-Structured Cartesian Mesh for Noise Propagation from 2D Nacelle Configuration," 8th International Conference on Flow Dynamics, Sendai, Japan, November 9-11, 2011.

Xinrong Su, Daisuke Sasaki, Kazuhiro Nakahashi, "Developments of a Directional Ghost Cell Method and the Multigrid Acceleration for the Building Cube Method," 8th International Conference on Flow Dynamics, Sendai, Japan, November 9-11, 2011.

Xinrong Su, Daisuke Sasaki, Kazuhiro Nakahashi, "A Hybrid Scheme for the Near Wall Treatment of Building Cube Method," 8th International Conference on Flow Dynamics, Sendai, Japan, November 9-11, 2011.

(4) 国内会議発表

高橋俊, 新井紀夫, "直交格子積み上げ法を用いた重合格子法による流体構造連成解析", 第 16 回計算工学講演会, 柏, 2011 年 5 月.

坂井玲太郎, 佐々木大輔, 中橋和博, "ウェーブレット変換を用いた大規模時系列流体計算データの圧縮," 第 43 回流体力学講演会/航空宇宙数値シミュレーション技術シンポジウム 2011, 東京, 2011 年 7 月.

福島裕馬, 佐々木大輔, 中橋和博, "ブロック構造型直交格子と IB 法を用いた LEE コード構築," 第 43 回流体力学講演会/航空宇宙数値シミュレーション技術シンポジウム 2011, 東京, 2011 年 7 月.

西村康孝, 佐々木大輔, 中橋和博, "圧縮性 Building Cube Method を用いた翼周りの Euler 解析," 第 43 回流体力学講演会/航空宇宙数値シミュレーション技術シンポジウム 2011, 東京, 2011 年 7 月.

西村康孝, 佐々木大輔, 中橋和博, "圧縮性 Building Cube Method を用いた翼周りの非定常非粘性流れ解析," 第 25 回数値流体力学シンポジウム, 大阪, 2011 年 12 月.

大西慶治, 中橋和博, "BCM(Building Cube Method)埋め込み境界型仮想セル法を用いた任意形状取り扱い手法の提案と検証," 第 25 回数値流体力学シンポジウム, 大阪, 2011 年 12 月.

(5) その他 (特許, プレス発表, 著書等)

紀要

佐藤義永, 撫佐昭裕, 江川隆輔, 滝沢寛之, 岡部公起, 小林広明, "チップマルチベクトルプロセッサのためのプログラム最適化技術," SENAC Vol.44, No.2, pp.29-36, 2011 年 7 月.

中橋和博, 佐々木大輔, "革新的な航空機開発のための次世代 CFD の研究", SENAC, Vol. 45, No.1, pp. 3-10, 2012 年 1 月.