

科学研究費助成事業 研究成果報告書

平成 27 年 6 月 9 日現在

機関番号：12608

研究種目：若手研究(B)

研究期間：2013～2014

課題番号：25870226

研究課題名(和文) 次世代スパコンの高密度実装に向けた超大規模乱流熱伝達計算

研究課題名(英文) Peta-scale large-eddy simulation using lattice Boltzmann method on the TSUBAME supercomputer

研究代表者

小野寺 直幸 (Onodera, Naoyuki)

東京工業大学・学術国際情報センター・助教

研究者番号：50614484

交付決定額(研究期間全体)：(直接経費) 3,000,000円

研究成果の概要(和文)：本研究はGPUを利用した高性能な大規模流体解析手法の開発を目的とする。格子ボルツマン法にコヒーレント構造スマゴリンスキーマを導入することで、乱流の高精度な解析を可能とした。構築した手法は、東工大のスパコンTSUBAME 2.0において、4032台のGPU計算で東京都心部の10km四方の大規模気流解析に成功している。さらに、2013年秋に更新したTSUBAME 2.5では、3968台のGPUで1.14PFLOPSと極めて高い演算性能を達成し、ベタスケールの流体解析手法として有効であることを示した。スパコンの熱設計手法の確率には至らなかったが、構築した手法を推進して達成できることが期待される。

研究成果の概要(英文)：Turbulent phenomena are one of the important topics in CFD. In order to understand the detail of airflows, it is necessary to carry out large-scale CFD simulations. We have developed a CFD code based on LBM (Lattice Boltzmann Method) for GPU supercomputers. We calculated a large-scale wind simulation for a 10km × 10km area in Tokyo. We used 4,032 GPUs for the computation with 10,080 × 10,240 × 512 mesh. By executing a large-scale wind simulation, we confirm large-scale structure of wind and detailed winds behind buildings. The code is written in CUDA and the GPU kernel function is well tuned to achieve high performance on TSUBAME supercomputer. By introducing the overlapping technique between the GPU-to-GPU communication and the GPU kernel computation, we achieved 1.14 PFLOPS using 3968 GPUs in single precision on TSUBAME 2.5.

研究分野：高性能数値流体計算

キーワード：ハイパフォーマンス・コンピューティング GPU 格子ボルツマン法 ラージエディ・シミュレーション
流体構造連成

1. 研究開始当初の背景

スパコンの熱設計において、冷却能力の向上は高密度実装を可能とし、演算性能の向上や消費電力の削減に結びつく。計算機のノード内には、演算器・ヒートシンク・電源などのさまざまなパーツが配置されているため、高精度な乱流解析を実施するためには、ノード内全体の流れ場と演算器周辺の局所的な流れ場を捉えた大規模計算が必須となる。

GPU(Graphics Processing Unit)は画像処理用の演算器であったが、近年これを汎用計算に適用する GPGPU(General-purpose computing on GPU)研究が盛んに行われている。GPU は従来の演算器である CPU と比べて計算の処理能力が非常に高く、消費電力あたりの演算性能が高いため、ペタスケールのスパコンにおいても GPU を搭載したシステムが構築されている。本研究で利用する東京工業大学のスーパーコンピュータ TSUBAME 2.0 も、GPU を主とした計算機であり、理論ピーク性能 2.4PFlops の非常に高性能なシステムが構成されている。

高速に大規模計算を実施する上で GPU に適した流体解析手法が必須となる。格子ボルツマン法(Lattice Boltzmann Method)は、単純なアルゴリズムで規則的なメモリアクセスを行うため、GPU を用いた大規模流体計算に適している。しかしながら、通常の LBM では、高いレイノルズ数の乱流解析は不可能であるため、乱流モデルの適用が必須である。

本研究では GPU を用いた大規模計算に適している、コヒーレント構造スモグリンスキモデルを導入することで、高精度な乱流解析を可能とした。東京工業大学のグランドチャレンジ制度を利用した大規模計算では、東京都心部の 10km 四方の領域に対し、4032 台の GPU を用いることで、1m 格子解像度の大量計算に初めて成功した。本課題では、この計算手法を高度化する事で、次世代のスーパーコンピュータ上での複雑物体を含む乱流解析手法の構築を目指す。

2. 研究の目的

これまでの研究では、東京都心部に対して気流計算を行い、巨大建造物の影響範囲が 1km 以上に及ぶことや、幹線道路に風が集中する「風の道」、乱立するビル間で突発的に強風が吹くビル風の発生等の物理現象を再現した。これにより、GPU を用いた格子ボルツマン法による大量計算が流体解析に非常に有効であることを示した。しかしながら、LBM による複雑物体に対する LES の解析精度や適用範囲に関する知見は少なく、より詳細な検証を進める必要がある。本課題では、これまで構築した手法に対して、検証を進めるとともに、より高度な境界条件手法と複雑物体の表現手法を導入することで、解析精度の向上を目指す。また、2013 年秋にアップデ

ートした TSUBAME 2.5 のシステムに対して実効性能を測定することで、次世代のペタスケール・スーパーコンピュータを効率よく利用するための計算手法の設計方針の知見等を得ることを目的とする。

3. 研究の方法

本研究では、東京工業大学のスーパーコンピュータ TSUBAME2.0 および 2.5 の GPU を利用した複雑物体を含む乱流の計算コードを開発する。格子ボルツマン法の物体を含む流れの高精度化として、計算格子内を斜めに横切るような境界条件の解析に対しても適用可能な Interpolated bounce-back 法を適用する。また、複雑物体は、CAD データ等に利用されている STL データより、符号付き距離関数を作成することで表現する。

大規模計算を実施するためには、計算の高速化、通信とデータ入出力の最適化が必須である。CUDA による計算の最適化として、ループアンローリングやレジスタ数の調整などのチューニングを行う。通信の最適化として、GPU によるカーネル計算と MPI 通信のオーバーラップ技術を導入し、弱スケールリング及び強スケールリングに対する計算効率の向上を図る。また、大量計算ではデータ量が膨大となり、並列数に応じた性能が得られなくなる。前述した東京都心気流計算では、出力したリスタートファイルのファイルサイズが 4.6TByte 程度となり、1 回の出力に 10 分以上の時間を要した。その問題に対して、TSUBAME の各計算ノードに搭載されたローカル SSD を利用することで、高速化を図った。

4. 研究成果

本課題の代表的な研究成果として、STL データを利用した車体周りの LES、物体周りの流れに対する検証計算、TSUBAME の GPU を用いた実効性能測定の結果を示す。

最初に複雑形状周りの LES として、車体周りの流体解析を示す。計算で用いる物体表面は、図 1 に示す STL データから、格子点上の符号付き距離関数を構築することで作成した。計算条件として、格子解像度 4.2mm、計算領域 13m × 6.5m × 3.25m に対して、288 台の GPU にて格子点数(N_1, N_2, N_3) = (3072, 1536, 768) を設定した。境界条件は、主流方向に流入・流出境界条件を、スパン方向および高さ方向には、主流方向速度を流入速度とした Dirichlet 境界条件を設定した。流入速度は 60km/h とした。図 2 に車体周りの粒子の軌跡を示す。計算結果より、車体下部および車体後方だけでなく、ミラー後方など領域においても粒子が激しく乱されている様子が再現された。以上より、STL データを用いることで複雑物体が表現可能であり、詳細な LES が実施可能であることが分かる。

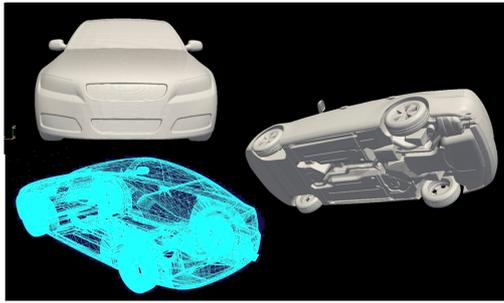


図1 車体のSTLデータの可視化

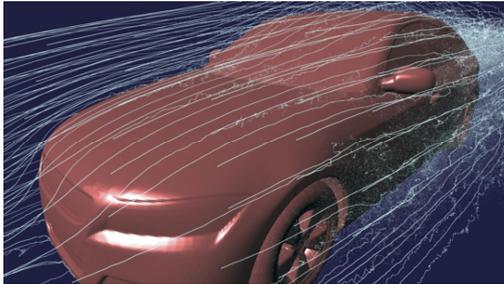


図2 STLを用いた車体周りのLESによる流線の可視化(速度:60km/h)

次に高レイノルズ数の流れへの適用範囲および有効性を検証するために球(ピンポン球)周りの乱流解析を行った。図3に球周りのラージエディ・シミュレーションの抗力係数(CD)を示す。本計算結果は 10^4 以上の高いレイノルズ数においても、実験結果を近似した曲線と同様の結果が得られた。また、図4にレイノルズ数 $\log_{10}Re=4.7$ での流線を示す。球の後方で非常に細かな渦が発生し、流線が激しく見出されている様子が確認できる。

最後に東京工業大学のスーパーコンピュータTSUBAME 2.0(Tesla M2050)および2.5(K20X)において、実効性能測定を行う。並列計算手法として、MPIの計算領域にそれぞれ1GPUを割り当てるフラットMPIを採用し、高速化手法としてGPUのカーネル関数とMPI通信を同時に行うオーバーラップ手法を導入した。

図5にTSUBAME 2.5の4台のGPU使用時における1GPUあたりの単精度演算性能と、Improved Roofline Modelによる理論性能曲線を示す。1GPUあたりの格子点数は $(N_1, N_2, N_3)=(192, 256, 256)$ を設定した。Improved Roofline Modelによる理論性能は、1格子点あたりの演算量(F)とデータ参照量(B)、および演算器のPeak Performance(F_{peak})とメモリバンド幅(B_{peak})より表される。

$$P = \frac{F/B}{F/B + F_{peak}/B_{peak}} F_{peak}$$

本計算では以下のパラメータを用いた。

$(F, B)=(476\text{GFLOPS}, 260\text{Byte})$ 、
 $(F_{peak}, B_{peak})=(3950\text{GFLOPS}, 250\text{Gbyte/sec})$ 、
 $(P, F/B) = (410\text{GFLOPS}, 1.83)$ 。

4GPU使用時において、単精度演算性能が306

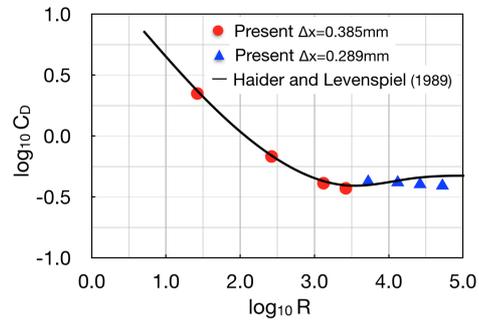


図3 D3Q19速度モデルとコヒーレント構造スマゴリンスキーモデルを用いた球の抗力計算結果

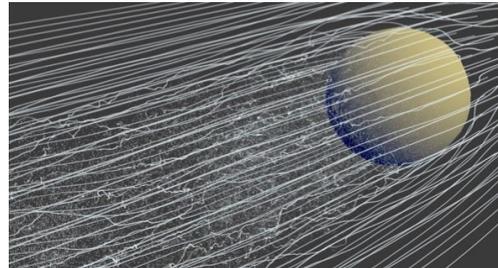


図4 レイノルズ数 $\log_{10}Re=4.7$ における球周りの流線の可視化

GFlops/GPU、Improved Roofline Modelでの理論性能の74%となり、並列計算時の通信のオーバーヘッド等を含めた性能として、良い性能が得られていることが分かる。

図6にTSUBAME 2.0および2.5での弱スケールリングの結果を示す。1GPUあたりの格子点数は $(N_1, N_2, N_3)=(192, 256, 256)$ を設定した。TSUBAME 2.0のTesla M2050は単精度浮動小数点演算性能が1TFLOPS、メモリバンド幅が148GB/s、TSUBAME 2.5のK20Xは単精度浮動小数点演算性能が3.95TFLOPS、メモリバンド幅が250GB/sとなり、メモリバンド幅の性能比の1.69倍以上の高速化が期待される。TSUBAME 2.5において960台のGPUを用いた計算では288TFLOPS(6.20×10^5 MLUPS: Mega-lattice update per second, 1秒で更新できる格子点数)、TSUBAME 2.0で1000台のGPUを用いた計算では149TFLOPS(3.21×10^5 MLUPS)の結果が得られ、TSUBAME 2.5のGPUを用いることで1GPUあたり約1.9倍の高速化が達成された。さらに、TSUBAME 2.5の3968台のGPUを用いた計算においては、1.14PFLOPSの流体解析手法としては、極めて高い性能が達成された。以上の結果より、オーバーラップ手法を導入する事でノード間の通信が隠蔽され、良いスケールリングを得ることが可能となる。

以上の事より、格子ボルツマン法にラージエディ・シミュレーションの乱流モデルを適用することで、高レイノルズ数の流れの解析が可能となり、さらに高精度な物体形状の表現モデルの導入と、高性能計算機への最適化

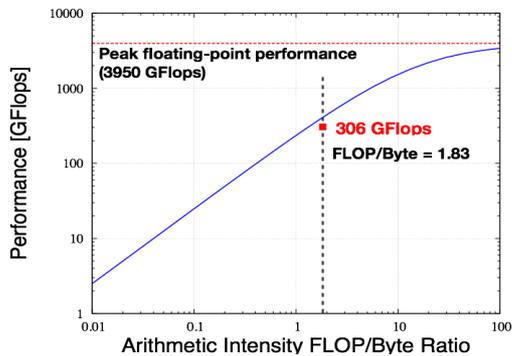


図5 TSUBAME 2.5での Improved roofline model と、格子ボルツマン法による単精度実効性能の比較

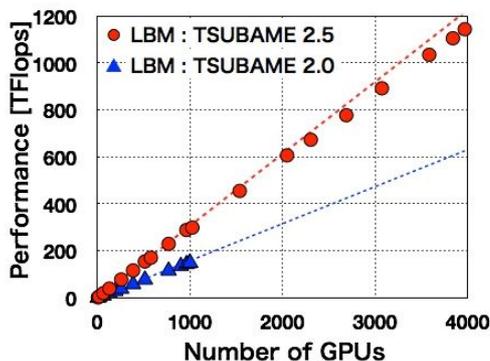


図6 格子ボルツマン法の弱スケールリング (単精度: $(N_1, N_2, N_3) = (192, 256, 256)$ /GPU)

を行うことで、非定常な乱流解析が可能であることを示した。しかしながら、研究開始当初の目的であるスパコンの熱設計に適用可能な詳細解析手法の構築には至らなかった。原因の一つとして、高レイノルズ数の流れにおいて、物体表面の乱流境界層を捉えるだけの高解像度格子が、現在の均一格子を用いた解析手法では実現できなかった事があげられる。それに対して、今後は時間・空間的に格子解像度を変化させることのできる細分化格子(Adaptive Mesh Refinement)法を導入することで解決を図る。

5. 主な発表論文等

(研究代表者、研究分担者及び連携研究者には下線)

〔雑誌論文〕(計4件)

- (1) Takashi Shimokawabe, Takayuki Aoki, and Naoyuki Onodera, High-productivity Framework on GPU-rich Supercomputers for Operational Weather Prediction Code ASUCA, Proceeding of the 2014 ACM/IEEE conference on Supercomputing (SC '14), 2014 Article, 査読有, 2014, 251-261
- (2) Xian Wang, Yanqun Shanguan, Naoyuki Onodera, Hironichi Kobayashi, and Takayuki Aoki, Direct Numerical

Simulation and Large Eddy Simulation on a Turbulent Wall-Bounded Flow Using Lattice Boltzmann Method and Multiple GPUs, Mathematical Problems in Engineering, 査読有, 2014 Article, 2014, 1-10

- (3) 下川辺隆史、青木尊之、小野寺直幸、複数GPUによる格子に基づいたシミュレーションのためのマルチGPUコンピューティング・フレームワーク、HPCS2014(2014) 査読有、2014 Article、2014、78-86
- (4) 小野寺直幸、青木尊之、GPUを用いた固体粒子を含む固気液三相流の大規模シミュレーション、日本混相流学会 混相流、査読有、27巻5号、2014、607-613

〔学会発表〕(計27件)

- (1) 下川辺隆史、青木尊之、小野寺直幸、GPUスパコンによる格子に基づいたシミュレーションのためのGPUコンピューティング・フレームワーク、AXIES 大学 ICT 推進協議会 2014 年度年次大会、2014 年 12 月 12 日、仙台市(宮城)
- (2) 長谷川雄太、青木尊之、小野寺直幸、格子細分化法を導入した D3Q27 格子ボルツマン法の GPU 実装、第 28 回数値流体力学シンポジウム、2014 年 12 月 10 日、東京船堀タワーホール(東京)
- (3) 泉田康太、青木尊之、小野寺直幸、杉原健太、中島聖、本郷均、横畑英明、流入・流出を伴う気液二相が存在する容器内における気泡挙動の解析、第 28 回数値流体力学シンポジウム、2014 年 12 月 10 日、東京船堀タワーホール(東京)
- (4) 小野寺直幸、青木尊之、泉田康太、ピンポン球の乱流中での浮遊の大規模流体構造連成解析、日本機械学会第 27 回計算力学講演会、2014 年 11 月 24 日、岩手大学(盛岡)
- (5) Takashi Shimokawabe, Takayuki Aoki, Naoyuki Onodera, High-productivity Framework on GPU-rich Supercomputers for Operational Weather Prediction Code ASUCA, Proceedings of the 2014 ACM/IEEE conference on Supercomputing (SC '14), 2014 年 11 月 18 日、New Orleans(USA)
- (6) 小野寺直幸、青木尊之、泉田康太、ピンポン球のスパコンによる大規模流体構造連成解析、第 92 期日本機械学会流体工学部門、2014 年 10 月 26 日、富山大学(富山)
- (7) 小野寺直幸、青木尊之、泉田康太、格子ボルツマン法を用いたピンポン球の運動の大規模ラージエディ・シミュレーション、日本流体力学学会年会 2014、2014 年 9 月 16 日、東北大学(仙台)
- (8) 小野寺直幸、青木尊之、下川辺隆史、杉原健太、宮下達治、泉田康太、GPUを用

- いた大規模アプリケーションの最適化および可視化、日本原子力学会 2014 秋の大会、計算科学技術部門企画セッション「解析結果可視化の最前線」、2014 年 9 月 8 日、京都大学(京都)
- (9) Naoyuki Onodera and Takayuki Aoki, Large-eddy simulation of turbulent flow around a car body using lattice Boltzmann method on the TSUBAME supercomputer, 11th World Congress on Computational Mechanics (WCCM XI)、2014 年 7 月 20 日、Barcelona(Spain)
- (10) 小野寺直幸、青木尊之、下川辺隆史、小林宏充、複数 GPU を用いた格子ボルツマン法による大規模流体・構造連成解析-卓球競技におけるピンポン球の軌道の解析-、学術大規模情報基盤共同利用・共同研究拠点 第 6 回シンポジウム、2014 年 7 月 10 日、品川(東京)
- (11) 小野寺直幸、TSUBAME の GPU を用いた格子ボルツマン法による大規模ラージエディ・シミュレーション、日本機械学会流体工学部門 格子ボルツマン法の基礎と応用に関する研究会(招待講演)、2014 年 6 月 27 日、京都大学(京都)
- (12) 小野寺直幸、青木尊之、下川辺隆史、複数 GPU を用いた格子ボルツマン法による卓球競技のピンポン球のシミュレーション、計算工学講演会、2014 年 6 月 12 日、広島大学(広島)
- (13) Naoyuki Onodera and Takayuki Aoki, Peta-scale large-eddy simulation using lattice Boltzmann method on the TSUBAME supercomputer, KSME-JSME Joint Symposium on Computational Mechanics & CAE 2014 at JEJU、2014 年 5 月 1 日、JEJU(Korea)
- (14) 下川辺隆史、青木尊之、小野寺直幸、複数 GPU による格子の基づいたシミュレーションのためのマルチ GPU コンピューティング・フレームワーク、HPCS2014、2014 年 1 月 7 日、一橋大学一橋講堂(東京)
- (15) 小野寺直幸、青木尊之、下川辺隆史、宮下達治、TSUBAME の GPU を用いた格子ボルツマン法による東京都心部の大規模気流シミュレーション、第 27 回数値流体力学シンポジウム、2013 年 12 月 19 日、名古屋大学(名古屋)
- (16) Naoyuki Onodera, Takayuki Aoki, Takashi Shimokawabe, Tatsuji Miyashita, and Hiromichi Kobayashi, Large-Eddy Simulation of Fluid-Structure Interaction using Lattice Boltzmann Method on Multi-GPU clusters, 5TH ASIA PACIFIC CONGRESS ON COMPUTATIONAL MECHANICS & 4TH INTERNATIONAL SYMPOSIUM ON COMPUTATIONAL MECHANICS、2013 年 12 月 11 日、Continental Hotel(SINGAPORE)
- (17) Takashi Shimokawabe, Takayuki Aoki, and Naoyuki Onodera, A High-productivity Framework for Weather Prediction Code on Multi-GPU Computing, 5TH ASIA PACIFIC CONGRESS ON COMPUTATIONAL MECHANICS & 4TH INTERNATIONAL SYMPOSIUM ON COMPUTATIONAL MECHANICS, 2013 年 12 月 11 日、Inter Continental Hotel(SINGAPORE)
- (18) 小野寺直幸、TSUBAME の GPU を用いた格子ボルツマン法による流体構造連成のラージエディ・シミュレーション、日本学術会議第 3 回計算力学シンポジウム(招待講演)、2013 年 12 月 3 日、日本学術会議講堂(東京)
- (19) 小野寺直幸、青木尊之、下川辺隆史、GPU を用いた格子ボルツマン法による流体構造連成のラージエディ・シミュレーション、日本機械学会第 26 回計算力学講演会、2013 年 11 月 2 日、佐賀大学(佐賀)
- (20) 下川辺隆史、青木尊之、小野寺直幸、気象計算コードのための GPU コンピューティング・フレームワーク、日本機械学会第 26 回計算力学講演会、2013 年 11 月 2 日、佐賀大学(佐賀)
- (21) 小野寺直幸、TSUBAME2.0 の 4032 台の GPU を用いた格子ボルツマン法による大規模 LES 気流シミュレーション、京都大学学術情報メディアセンター「GPU コンピューティングにおける計算事例」(招待講演)、2013 年 10 月 22 日、京都大学(京都)
- (22) 小野寺直幸、TSUBAME2.0 の全ノードを用いた格子ボルツマン法による東京都心部 10km 四方の大規模 LES 気流シミュレーション、第 5 回アクセラレーション技術発表討論会(主催：電子情報通信学会集積回路研究専門委員会)(招待講演)、2013 年 9 月 5 日、会津大学(福島)
- (23) 小野寺直幸、青木尊之、下川辺隆史、GPU を用いた格子ボルツマン法による大規模流体・構造連成解析、日本流体力学会年会 2013、2013 年 9 月 12 日、東京農工大学(東京)
- (24) 小野寺直幸、青木尊之、GPU を用いた固体粒子群を含む固気液三相流の大規模シミュレーション、日本混相流学会混相流シンポジウム、2013 年 8 月 9 日、信州大学(長野)
- (25) 小野寺直幸、TSUBAME2.0 の全ノードを用いた東京都心部 10km×10km の 1m 解像度による気流シミュレーション、GTC(GPU Technology Conference) Japan 2013(招待講演)、2013 年 7 月 30 日、六本木ミッドタウン(東京)
- (26) 小野寺直幸、青木尊之、複数 GPU を用いた複雑移動物体周りの気液二相流解析、日本計算工学会、2013 年 6 月 20 日、東京大学生産技術研究所(東京)
- (27) 小野寺直幸、青木尊之、下川辺隆史、小

林宏充、宮下達治、TSUBAME2.0 の 4032
台の GPU を用いた格子ボルツマン法によ
る都市部 10km 四方の大規模 LES 気流シ
ミュレーション、日本計算工学会、2013
年 6 月 20 日、東京大学生産技術研究所
(東京)

〔図書〕(計 0 件)

〔産業財産権〕

出願状況 (計 0 件)

取得状況 (計 0 件)

〔その他〕

ホームページ等

6. 研究組織

(1) 研究代表者

小野寺 直幸 (Naoyuki Onodera)

東京工業大学学術国際情報センター・特任

助教

研究者番号：50614484