

平成 29 年 6 月 7 日現在

機関番号：14501

研究種目：基盤研究(C) (一般)

研究期間：2014～2016

課題番号：26390130

研究課題名(和文) ペタスケールコンピューティングによる乱流直接数値シミュレーションの最適化

研究課題名(英文) Simulation Code Optimization for DNS of Turbulence toward Peta-scale Computing

研究代表者

横川 三津夫 (YOKOKAWA, MITSUO)

神戸大学・システム情報学研究科・教授

研究者番号：70358307

交付決定額(研究期間全体)：(直接経費) 2,700,000円

研究成果の概要(和文)：境界壁を持たない乱流の中で周期境界条件を満たす最も規範的な一様等方性非圧縮性乱流(カノニカル乱流)の振る舞いのシミュレーションを目的に、周期境界条件を課した3次元立方体領域においてナビエ・ストークス方程式を解く2軸方向の領域分割による並列化直接数値シミュレーション(DNS)コードを開発した。空間離散化にフーリエ・スペクトル法、時間積分には4次ルンゲ・クッタ法を用い、OpenMPとMPIによるハイブリッド並列化を行った。格子点数12288の3乗のDNSをスーパーコンピュータ「京」上で実行し、レイノルズ数 $R = 2300$ の乱流データを得た。実行効率約2.2%(192x128ノード使用時)を達成した。

研究成果の概要(英文)：A parallel direct numerical simulation (DNS) code was developed on the K computer for solving the Navier-Stokes equations in a box with periodic boundary conditions for three orthogonal axes. The objective of the code is to simulate behaviors of homogeneous, isotropic incompressible turbulent flow, or canonical turbulent flow, which is the most standard flow among turbulent flows without boundary walls. Pseudo-spectral method is used for discretization in 3-dimensional space and fourth-order Runge-Kutta method is used for temporal discretization. Hybrid parallelization with both OpenMP and MPI are adopted in the code. The DNS with grid points of 12288 cubed were carried out on the K computer with sustained performance of 2.2% on the 37,376 compute nodes. Simulation data for about Reynolds number 2300 were obtained.

研究分野：大規模並列シミュレーション

キーワード：Direct Simulation Parallel Computation Tubulence Phase Shift Method K Computer

1. 研究開始当初の背景

研究開始時点，スーパーコンピュータ性能が急速に向上し，その計算能力を最大限に発揮させた計算機シミュレーションによる科学的手法（計算科学）は，第三の科学としてその地位を確立していた．計算機シミュレーションでは，現象のモデル化，離散化手法，計算アルゴリズム，プログラム開発，シミュレーション実行と結果検証などの各段階において多くの研究課題があるが，シミュレーション対象に既に確立された計算手法が存在する場合には，高性能計算が可能なアプリケーションの最適化研究が特に重要となっていた．

本研究で解明すべき対象となる高レイノルズ数乱流（図 1）は，自然現象や工学分野のさまざまな問題に現れる現象であり，極めて重要な問題である．例えば，大気物質の拡散，竜巻の進路予測，効率的な輸送機（航空機や自動車）の設計など防災，安全，環境，ものづくりの広い問題において乱流が深くかかわっており，その解明は社会的にも強く要請されている．

しかし，高レイノルズ数乱流の振る舞いは，強い非線形性と小さなスケールから大きなスケールを持つ巨大自由度の系を取り扱う必要があるため，依然として未解決な問題として知られている．この問題にアプローチするためには大規模な直接数値シミュレーション（DNS）を行う以外に方法はなく，高性能 DNS の実施が可能なアプリケーションソフトウェアが必要な状況であった．

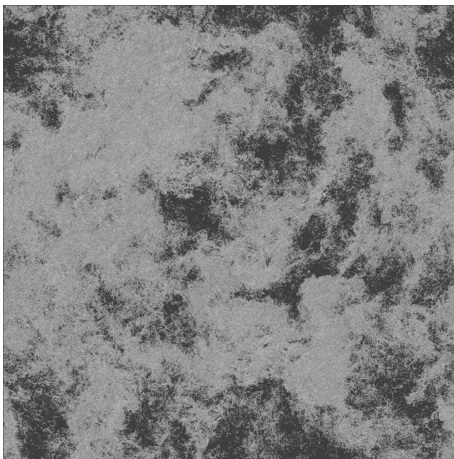


図 1 乱流中の高渦度領域

2. 研究の目的

世界最大規模の DNS を実施するために，日本における研究開始時点で最高性能のスーパーコンピュータ「京」の計算能力を最大限に活かした擬スペクトル法による DNS コードを開発し，その性能及び精度を評価するとともに，格子点数 8192<sup>3</sup> 以上の世界最大規模の乱流 DNS を実施することが目的である．

具体的には，ナビエ・ストークス方程式のスペクトル法による離散化手法，エイリアス誤差除去のための phase shift 法の計算手順

をベースに，スーパーコンピュータ「京」のアーキテクチャに合致した DNS コードを開発する．高性能を得るためには，「京」の特徴である SIMD 機構を持つプロセッサ，及び直接結合ネットワークである 6 次元メッシュ/トラス型インターコネクト Tofu の機能を最大限に発揮させることが重要である．

本研究では，3 次元高速フーリエ変換(FFT)における大域通信の局所化，エイリアス誤差除去のための phase shift 法のパイプライン処理化などの技法を用い，アプリケーションソフトウェアを開発，高性能化を行う．

3. 研究の方法

境界壁を持たない乱流の中で周期境界条件を満たす最も規範的な非圧縮性乱流（カノニカル乱流）のふるまいを計算機シミュレーションするために，周期境界条件を課した 3 次元立方領域においてナビエ・ストークス方程式を解く 2 軸方向の領域分割による並列化 DNS コードを開発する．

コードは，空間方向に対し擬スペクトル法，時間積分に 4 段 4 次ルンゲ・クッタ法を用いた 3 次元 DNS の離散化を行う．非線形項の計算に必要な FFT では，フーリエ空間の 2 軸方向の並列化を行い，擬スペクトル法に特有のエイリアス誤差を位相シフト法と球状領域外の高モード打ち切りによって除去するが，計算と通信のオーバーラップ化，及び計算ノード間の 3 次元トラス型ネットワーク構造を活かした通信の局所化を行い，計算時間の短縮を図る．

また，開発したコードをスーパーコンピュータ「京」で実行させ，計算格子点数 8192<sup>3</sup>，12288<sup>3</sup> などの世界最大規模 DNS を実施し，乱流シミュレーションによる統計データ取得の見通しを立てる．

4. 研究成果

周期境界条件を課した 3 次元立方体領域においてナビエ・ストークス方程式を解く 2 軸方向の領域分割による並列化直接数値シミュレーション(DNS)コードを開発した(図 2)．DNS コードでは，空間離散化にフーリエ・スペクトル法，時間積分には 4 段 4 次ルンゲ・クッタ法を用いた．スペクトル法特有の空間のエイリアス誤差に対しては，位相シフト法（phase shift 法）と球状領域外の高モード打ち切りによるエイリアス誤差除去方法を用いた．並列化は，OpenMP によるスレッド並列と MPI によるプロセス並列の両方を用いた

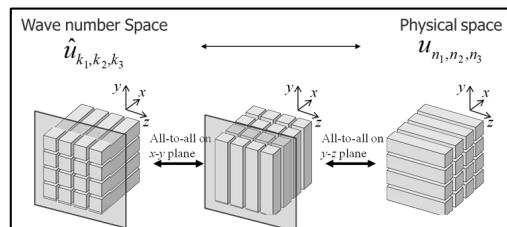


図 2 2 軸並列化コードの FFT 転置

ハイブリッド並列化を行った。3次元FFTのMPI並列化では、FFTを適用するx-y面、y-z面の各部分領域に対し、MPIのコミュニケータを複数用意し、スーパーコンピュータ「京」のTOFUネットワークを有効に利用し、隣の部分領域への通信の影響を無くすことに成功した。

また、エイリアス誤差除去のためのphase shift法について、通常の系列と半幅だけ位相をシフトした系列の2つのFFT系列に対し、別々のMPIコミュニケータを割り当てる2パスの計算方法(2系列エイリアス誤差除去アルゴリズム)により、並列度を上げ、実行時間短縮化を図った(図3)。この手法をスーパーコンピュータ「京」、及び海洋研究開発機構が所有する地球シミュレータ上において、格子点数768<sup>3</sup>のDNSに対し、3つのケースについて計算時間を比較し評価した。ケース1はオリジナルコードを96ノードで実行したもの、ケース2は提案アルゴリズムをケース1の2倍の192ノードで実行したもの、ケース3はオリジナルコードの並列数を倍にして192計算ノードで実行したものである。この結果、ケース2の2系列エイリアス除去アルゴリズムは、約半分の実行時間となった(図4)。しかし、2系列間のデータ交換のためのsend-recv(送信・受信)のMPI通信がオーバーヘッドとなり、単純に計算領域を2倍にしたケース3が、計算時間が最も短い結果となった。しかし、計算領域の並列度に限界があり十分な計算ノードがある場合には、提案した2系列エイリアス誤差除去アルゴリズムは有効である。

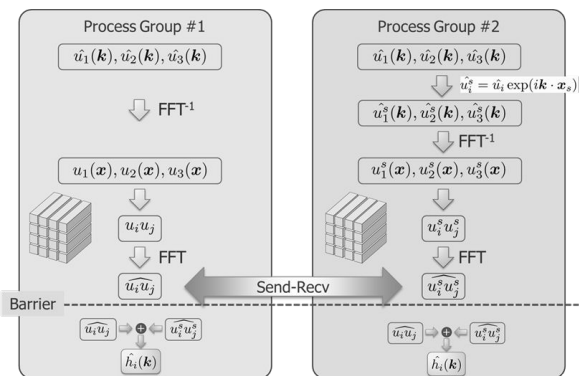


図3 2パスによるエイリアス誤差除去手法

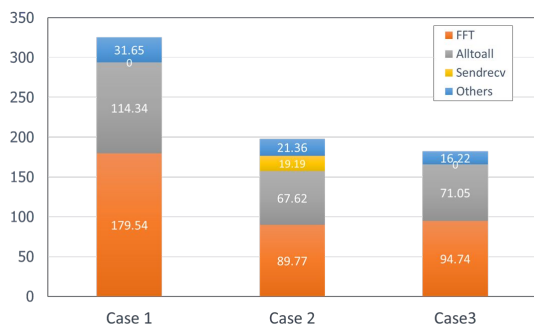


図4 「京」における各計算部分の実行時間

また、開発したコードを用いて、格子点数6144<sup>3</sup>, 8192<sup>3</sup>, 12288<sup>3</sup>のDNSに対し、それぞれ「京」コンピュータの96×64, 128×64, 192×128の計算ノードを用いて実行した。このときの実効性能は、それぞれ30.2TFlop/s(対ピーク性能比3.84%), 32.93TFlop/s(対ピーク性能比3.14%), 70.46TFlop/s(対ピーク性能比2.24%)となった。対ピーク性能比が小さいのは、3次元FFTのデータ転置を行う際のメッセージ転送時間が大きいためである。「京」コンピュータのインタコネクネットワークは、隣接ネットワークであるため、大域通信が必要なFFTでは性能が出ないことが分かっている。しかし、これらの規模のDNSは、一般のシステムではメモリ容量が小さいため実行できない。京コンピュータを用いて初めて可能となったサイズのDNSである。

このコードを用いて、kmax = 1に対し、格子点数6144<sup>3</sup>, 及び8192<sup>3</sup>の2つのケースの大規模乱流DNSを、各々19500ステップ, 17000ステップまで実行し、R = 1500, 及びR = 1800の乱流データベースの統計的な準定常性を高めた。また、格子点数12288<sup>3</sup>, kmax = 1の世界最大規模の乱流DNSを11520ステップまで実行し、世界最大レイノルズ数R = 2300の乱流データを得た。

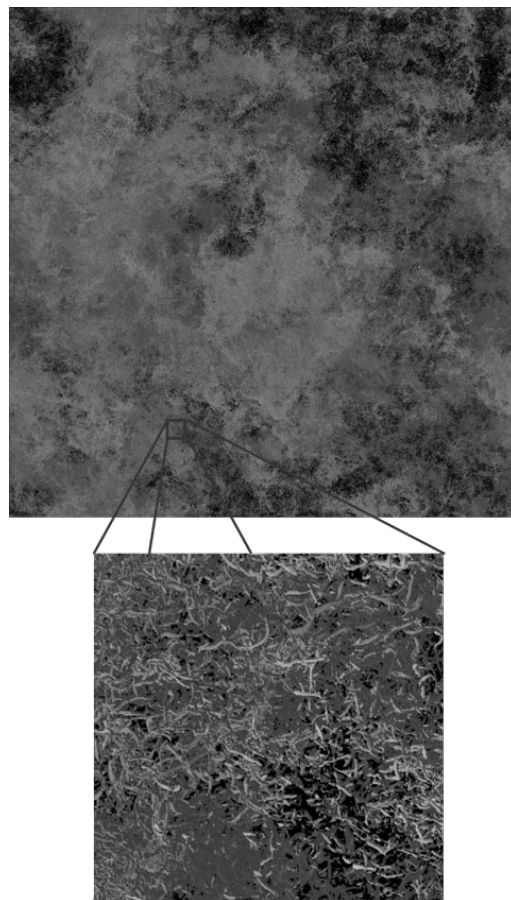


図5 格子点数6144<sup>3</sup>の等温領域(下図は拡大したもの。渦構造が見える)

## 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)

T. Ishihara, K. Morishita, M. Yokokawa, A. Uno, and Y. Kaneda, Energy spectrum in high-resolution direct numerical simulations of turbulence. *Physical Review Fluids*, 1(8), 082403, 2016 [査読有]

S. Imamura, K. Ono, and M. Yokokawa, Iterative-method performance evaluation for multiple vectors associated with a large-scale sparse matrix, *International Journal of Computational Fluid Dynamics*, 30(6), 395-401, 2016 [査読有]

石原卓, 宇野篤也, 森下浩二, 横川三津夫, 金田行雄, 高レイノルズ数乱流中の渦の組織構造とその時間発展 (第 29 回数値流体力学シンポジウム特集)--(特集 注目研究 in CFD29). *ながれ: 日本流体力学会誌 = Nagare: journal of Japan Society of Fluid Mechanics*, 35(2), 109-113, 2016 [査読有]

T. Ishihara, K. Enohata, K. Morishita, M. Yokokawa, and K. Ishii, Accurate Parallel Algorithm for Tracking Inertial Particles in Large-Scale Direct Numerical Simulations of Turbulence, *Parallel Computing Technologies*, LNCS 9251, pp. 522-527, 2015 [査読有]

[学会発表](計 17 件)

M. Yokokawa, K. Morishita, A. Uno, T. Ishihara, and Y. Kaneda, Performance Study on Two-Path Aliasing-Free Calculation of a Spectral DNS Code, The 23rd Workshop on Sustained Simulation Performance, March 16-17, Sendai, Japan (2016) [査読無]

T. Ishihara, A. Uno, K. Morishita, M. Yokokawa, and Y. Kaneda, Vortex Clusters and Their Time Evolution in High-Reynolds-Number Turbulence. In *APS Division of Fluid Dynamics Meeting Abstracts*, 2016 [査読無]

今村成吾, 飯塚幹夫, 小野謙二, 横川三津夫, Parareal 法と領域分割法による拡散問題での時空間並列性能評価. *研究報告ハイパフォーマンスコンピューティング (HPC)*, 2016-HPC-157, 19, 1-7, 2016 [査読無]

K. Morishita, M. Yokokawa, A. Uno, T. Ishihara, and Y. Kaneda, High-Efficient Direct Numerical Simulation of Turbulence by a Fourier Spectral Method on the K Computer, *Proceedings of the Parallel CFD2015*, Toronto, Canada, 2015 [査読無]

K. Morishita, T. Ishihara, Y. Kaneda, M. Yokokawa, and A. Uno, Energy Spectrum in High Reynolds Number Turbulence - High Resolution DNS Results, 68th Annual Meeting of the APS Division of Fluid Dynamics, 60 (21), November 22-24, Boston, 2015 [査読無]

石原卓, 宇野篤也, 森下浩二, 横川三津夫, 金田行雄, 高レイノルズ数乱流中の渦の組織構造とその時間発展, 第 29 回数値流体力学シンポジウム, 2015 年 12 月 15 日 - 17 日, 九州大学 [査読無]

T. Ishihara, Y. Kaneda, K. Morishita, M. Yokokawa, and A. Uno, Energy Spectra of Higher Reynolds Number Turbulence by the DNS with up to  $12288^3$  Grid Points, 67th Annual Meeting of the APS Division of Fluid Dynamics, 59 (20), November, 23-25, San Francisco, 2014 [査読無]

森下浩二, 横川三津夫, 宇野篤也, 石原卓, 金田行雄, 一様等方性乱流の直接数値シミュレーションコードの京コンピュータ向け最適化, 情報処理学会第 205 回計算機アーキテクチャ・第 147 回ハイパフォーマンスコンピューティング合同研究会 (HOKKE-22), HPC-2014-147, 17, 2014 [査読無]

## 6. 研究組織

### (1) 研究代表者

横川 三津夫 (YOKOKAWA, Mitsuo)  
神戸大学・大学院システム情報学研究科・教授  
研究者番号: 70358307

### (2) 研究分担者

森下 浩二 (MORISHITA, Koji)  
神戸大学・計算科学教育センター・特命助教  
研究者番号: 50634648

### (3) 連携研究者

石原 卓 (ISHIHARA, Takashi)  
名古屋大学大学院工学研究科・准教授  
研究者番号: 10262495