

科学研究費助成事業 研究成果報告書

平成 27 年 6 月 19 日現在

機関番号：82108

研究種目：若手研究(B)

研究期間：2013～2014

課題番号：25820325

研究課題名(和文) GPGPUによるPhase-field法コードの高速化

研究課題名(英文) Application of GPGPU technique to phase-field model

研究代表者

大出 真知子(Ode, Machiko)

独立行政法人物質・材料研究機構・理論計算科学ユニット・主任研究員

研究者番号：50370309

交付決定額(研究期間全体)：(直接経費) 2,600,000円

研究成果の概要(和文)：本研究の目的はGPGPUをPhase-field法に適用することで、計算速度の高度化をはかりワークステーション一台の計算可能範囲を広げることにある。二年度にわたり、希薄溶液計算だけでなく、実用合金に多くみられる正則溶体近似が必要な系でのGPUコードの開発を行った。希薄溶液で数倍程度しか実行速度の向上が見られなかったものの、正則溶体合金では20倍程度の速度向上を達成することができた。

研究成果の概要(英文)：The purpose of this study is to expand the computational capability of the phase-field model by applying the GPGPU technique to its numerical code. The GPGPU technique is applied to both dilute and regular solution alloy systems. In the case of the dendrite growth in binary dilute alloy system, the calculation speed is increased only several times by using GPU. On the other hands, in the case of ternary regular solution alloy system, the computational speed is increased about twenty times.

研究分野：材料マイクロ組織シミュレーション

キーワード：Phase-field法 GPGPU

1. 研究開始当初の背景

Phase-field 法を用いた初めての数値計算は凝固 dendrite の成長解析であり、1991年に示されている。その後、材料ミクロ組織をその組織パターンの複雑さに拘らず計算できること、Ginzberg-Landau 方程式(ノーベル物理学賞受賞理論)を支配方程式の基礎としていること、CALPHAD 法で評価された自由エネルギーデータベースを直接引用できるため、実用合金の解析が容易であることなどから、1990年代半ばから基礎理論の高度化や解析ツールとしての簡便化などに、多くの研究者が研究に参画し、現在も研究分野として拡大しつつある。

モデルの提案当初から Phase-field 法の活用の障害となっている問題に計算時間がある。特に CALPHAD エネルギーを利用した場合、界面濃度計算がボトルネックとなっており、理論改良のみでは避ける事ができない。

一方、2006年 NVIDIA 社から、CPU ではなく GPU (Graphic Processing Unit) を一般演算用に資するための開発環境 CUDA がリリースされている。GPU 個人向け製品であっても演算ユニットが 1000 個以上実装されているものがあり並列演算に優れた性能を示す。この GPU 用のユニットは単精度計算 2010 年には新たな GPU アーキテクチャ Fermi により倍精度計算速度が単精度計算並みに向上した。

このように新たな計算資源の開発が進みつつある中で、Phase-field 法の計算ボトルネックである界面局所平衡濃度のデータベース処理ルーチンの GPGPU 化を試みた。

2. 研究の目的

本研究では GP-GPU (General-purpose computing on graphics processing units) を Phase-field 法の界面濃度計算に適用し、実用合金のミクロ組織計算時間を 1/10 以下にする事を目的とする。特に、CALPHAD 法によって評価された自由エネルギーを用いる必要がある系を対象とする。既に

Phase-field 法に対して GPGPU を適用した例はいくつか存在する。しかし現在のところ、GPU 適用は希薄溶液近似を用いられており、適用目的は計算領域の大規模化が主なものになっている。一方、今回は希薄溶液近似が適用できない多成分系合金 (CALPHAD により評価された正則溶体近似による自由エネルギーデータを利用) を対象としている。その場合、界面局所平衡濃度探索ルーチンが計算のボトルネックとなっている。本研究では、この部分のデータベース検索作業を GPU により実行性能 10 倍以上を達成することで、実用合金の解析をより身近に行えることを目的とする。

3. 研究の方法

Phase-field 法の計算コードを、CUDA を用いて書き換え、支配方程式計算と界面濃度計算部分に適用する。具体的にはウォープ・ダイバージェントを極力避けるよう、コードと界面濃度のデータベース形式を最適化する。

初年度は、まずは研究事例が既に報告されている希薄溶液近似の凝固問題に対して GPU の性能評価を行なった。その際、CPU / GPU (+ CPU) のコードは、それぞれの計算ユニットの特徴を最大限生かすよう記述する。Phase-field 方程式は界面領域以外で解く必要がないため CPU による計算では条件分岐により計算時間を大幅に短縮できる。また、計算の必要のない領域にはそもそも配列を割り当てない：動的割り付けなども柔軟に使用できる。

一方、GPU はウォープ・ダイバージェントが発生するため、全領域で方程式を解いてしまう方が速い。一般に GPU 使用により高い性能向上が見込まれるのは、CPU 分岐により計算量を減らすことができない系であるため、GPU の真の性能価値を評価するためには、CPU 分岐による最適化は不可欠である。

次年度以降は、実際の正則溶液近似の計算研究対象として Mg 合金の凝固過程の再現などを検討した。その際には、演算専用 GPU の Tesla の使用を検討し、現実的に入手可能な計算環境範囲内で多成分系合金の材料ミクロ組織を計算対象とした場合に対して、10 倍程度まで計算速度が向上可能かどうかを検討する。

4. 研究成果

図 1 に Phase-field 法の計算での計算処理の流れを示す。初期化の段階で計算領域は一樣な正方メッシュで微小領域に分割される。その後、タイムステップループ内の 4 つのプロセス内の最初の 3 プロセスに対して、領域位置を示すインデックス全て Do ループ (for ループ) を回し、各微小領域で順次支配方程式を解く。希薄溶液近似の場合、支配方程式の計算部分が、正則溶体近似の場合、濃度場計算が計算全体のボトルネック部となる。これは正則溶体近似の場合、領域ループに加えて溶質濃度の最適解を検索するための収束計算ループが加わる 2 重構造をとっているためである。本研究ではこの濃度計算に対して GPGPU を適用した。用いた CPU は Intel 社製の Xeon2.4Ghz、GPU は Nvidia 社製の Tesla2070C である。

一般に、計算領域は実空間に対応するため、2 次元、3 次元配列の形で分割される。一方、GPU では長大な 1 次元配列の計算で最も高速化が期待できる。そこで、CPU のみの場合は領域位置に対応する配列は多次元配列、GPU を併用する場合は、GPU 演算に関する配列は 1 次元配列とした。

図 2 に希薄溶液近似の凝固計算時の CPU / CPU+GPU 計算速度比を示す。希薄溶液近似の場合、組織 1 番では殆ど実行性能の差が認められず、組織 6 番まで計算して GPU 併用の計算処理速度は CPU の計算速度の通算 3 倍程度しか達成できない。

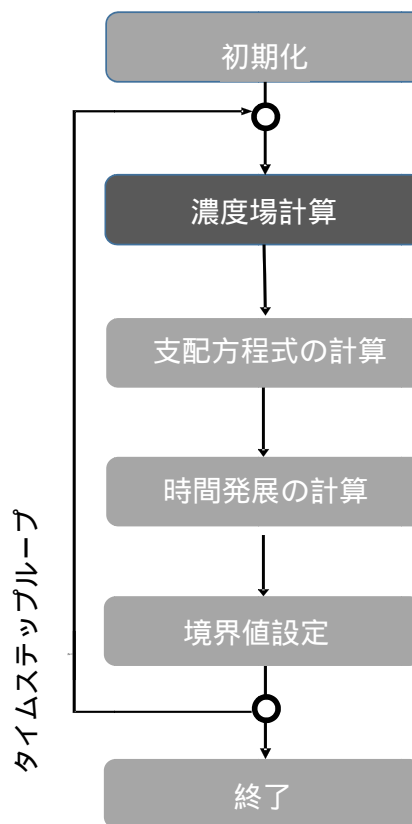


図 1 全体処理の流れ

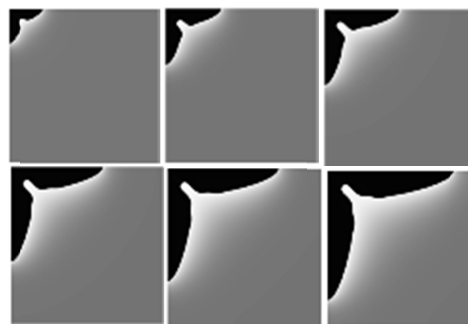
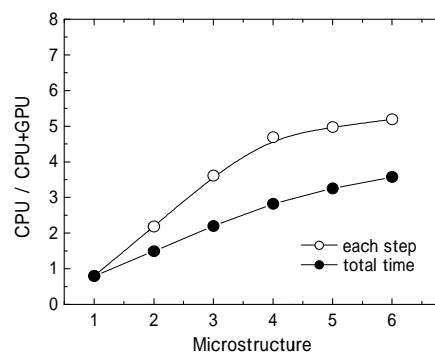


図 2 希薄溶液近似適用時の速度変化
上図横軸 1 ~ 6 は下図の ~ に対応する。
Al-Si 合金 512x512 計算メッシュ

これは、CPU では 1) 界面領域付近のみ条件分岐により計算する、2) 初期核付近しか 1) の条件分岐そのものを判断しなくても良いため特に初期において計算時間の大幅短縮が可能であるためである。

一方、GPU は配列の動的割付の難さや分岐によるウォープ・ダイバージェントを避けるために常時全領域に計算を実行する必要がある。このように Phase-field 法ではポピュラーな計算対象系の 1 つである、希薄溶液凝固による凝固 dendrite 成長を計算する場合、適用者が想定するよりも低い効率化しか達成できないことが予想される。反対に、CPU コードに置いて、分岐による支配方程式計算の高速化効果が殆どない場合：新相の形成プロセスではなく、既存相の粗大化過程や第二の形成過程など、既に界面領域を多く含んだ系の場合、CPU / GPU + CPU 性能比が数十倍以上望める可能性がある。

実際、CPU で分岐による計算時間短縮を試みない場合、組織 6 まで計算すると実行性能は約 7 倍となる。つまり、仮に支配方程式効率化を行わない場合 / 効果がない場合においてであれば、CPU / GPU 計算効率は希薄溶液近似であっても 20 倍を超えることになる。

図 3 に正則溶体近似の場合の計算の一例を示す。対象系は Mg-Y-Zn 三元系合金である。この系では複数の初期核があるため、CPU コードで計算必要配列の動的割付は行っていない。この場合、界面領域かどうかの分岐のみを、支配方程式、界面濃度計算に行った CPU コードと、GPU 適用の計算コードの実行性能は 20 倍程であった。具体的には支配方程式部分が 40 倍、界面濃度計算部分が 1.5 倍程度であり、合わせて約 20 倍の実行速度を達成することができた。

正則溶体近似の場合、支配方程式計算部分の計算負荷は界面濃度計算に比べて小さい。

そのため、希薄溶液近似では主たる計算負荷であった支配方程式計算が約 40 倍の効率を達成できたとしても、全体への寄与は少なかったためである。このように Phase-field 法へと GPGPU への適用する場合、対象系の組織配置、希薄溶液近似で解析可能なのか正則溶液近の適用が必要なのかによって、実行性能の向上差に大きな違いが出る。

しかし実用合金系に多くみられる、晶出 / 析出相が複数ある多成分系合金の場合、図 3 のような比較的小規模な系に置いても、CPU で最大限高効率化をはかったコードに比べて、20 倍以上の速度を達成できるため、GPU 利用の価値は高いと考えられる。



図 3 Mg-Y-Zn 連続冷却凝固時計算
512 x 512 計算メッシュ

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)

[学会発表](計 1 件)

大出真知子, 下野昌人, “フェーズフィールド法に対する GPGPU 適用の試み”
日本金属学会 第 154 回講演大会
2014/3/21-23 於 東京工業大学大岡山キャンパス(東京)

6. 研究組織

(1) 研究代表者

大出 真知子 (ODE, Machiko)
物質・材料研究機構・理論計算ユニット・
主任研究員
研究者番号: 50370309