

「ポストペタスケール高性能計算に資するシステムソフトウェア技術の創出」  
平成23年度採択研究代表者

H24 年度 実績報告
----------------

塩谷 隆二

東洋大学総合情報学部・教授

ポストペタスケールシミュレーションのための階層分割型数値解法ライブラリ開発

## §1. 研究実施体制

### (1)「東洋大学」グループ

① 研究代表者: 塩谷 隆二 (東洋大学総合情報学部、教授)

② 研究項目

- ・ 階層分割型数値計算ライブラリの基礎研究並びに設計とその応用

### (2)「名古屋大学」グループ

① 主たる共同研究者: 荻野 正雄 (名古屋大学情報基盤センター、准教授)

② 研究項目

- ・ 階層型ソルバーライブラリの基礎研究とその応用

### (3)「東京大学」グループ

① 主たる共同研究者: 越塚 誠一 (東京大学大学院工学系研究科、教授)

② 研究項目

- ・ 階層分割型入出力ライブラリ並びに連続体力学向け問題領域専用言語の基礎研究とその応用

## § 2. 研究実施内容

### (A) DDM 入出力ライブラリ

平成 23 年度に開発した多階層領域分割アルゴリズムについて、非構造格子向け並びにメッシュフリー向けの機能強化を行った。特に平成 24 年度は、京コンピュータや PRIMEHPC FX10 が持つ Tofu を例に、ネットワークポロジを意識したデータ配分の自動調整アルゴリズムの検討と開発などを行った。本ライブラリを用いることで、東京大学 FX10 の 600 計算ノードを用いてポリゴンモデルから 20 億粒子生成を 20 秒、京コンピュータの 8,196 計算ノードを用いて 258 億要素の非構造四面体メッシュ生成を約 94 分<sup>8,12)</sup>で成功するなど、ポストペタコンで想定される超大規模シミュレーションのプレ処理に有効なライブラリであることが示された。

また平成 24 年度から、超大規模シミュレーション結果を高効率に可視化するために、マルチプラットフォーム大規模領域分割型並列可視化ライブラリ VSCG (Versatile Scientific Computing Graphics library) の開発を開始した。VSCG は依存ライブラリが数学関数のみであることから、将来を含めた多様な計算機環境で動作することが可能である。平成 24 年度は、メッシュ・粒子の描画に対応した基礎的な可視化機能の開発を行った。ソフトウェア描画を行うライブラリであり、超大規模データに対する高精細画像生成を容易に可能とした(図 1)。この高精細画像は最低でも  $10^4 \times 10^4$  ピクセル画像を生成し結果の評価に用いる。また、プロセスごとの描画と画像出力、並びに深さ情報に基づく画像重畳機能を備えており、それらを利用することで並列可視化を可能とした。VSCG を用いて多階層領域分割されたメッシュまたは粒子の並列可視化システムを構築し、京コンピュータ上で 112 億自由度有限要素モデルのポスト処理に成功した。

さらに平成 24 年度から、非構造格子向け DDM 圧縮技術の開発を開始した。多階層領域分割による領域間境界上情報への圧縮率調査を行っている。一般的な CG 法の演算量 ( $O(n^3+n^2)$ ) を基準に試算を行った。全体剛性行列を解く計算量と領域ごとの小さな剛性行列を解く計算量の比が極めて大きくなることが分かった。100 億自由度有限要素法モデルの計算量の比は、 $10^{10}$  以上の計算量比が生じる。このことから、袖領域の変位量をもとに内部の変位、ひずみ、応力を再度計算することは現実的であることが分かった。現在、計算速度の計測と全体の計算量がどの程度のオーダーになるのかを詳細に調べ、次世代計算機のパフォーマンス推定の基礎データとする予定である。

平成 25 年度は、平成 24 年度までの成果を元に、「DDM 入出力ライブラリ」B 版を完成させ、公開を目指す。B 版ライブラリは、ユーザーによる性能評価を行う予定である。

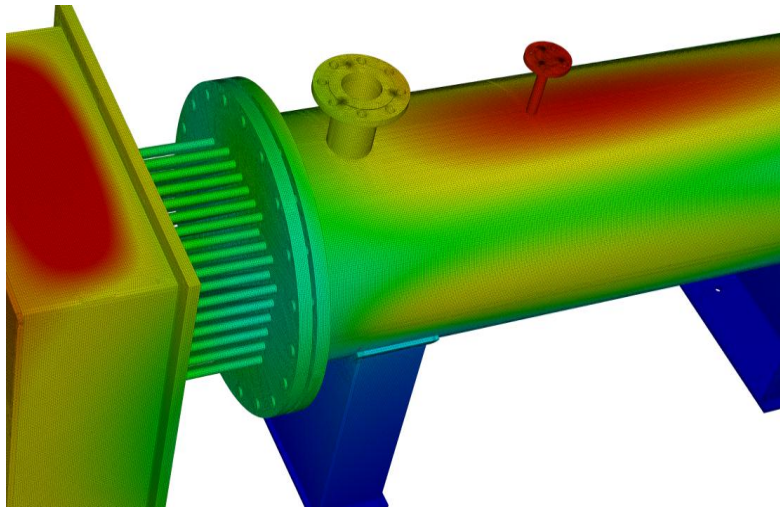


図1 1,200×9,000 ピクセル画像の部分拡大図(重力による変位分布コンタ)

#### (B) DDM ソルバーライブラリ

平成24年度は、非構造格子向け DDM 反復法ライブラリとして、多階層領域分割情報を利用した DDM 反復アルゴリズムの機能強化を行った。特に、ポストペタコンに対する社会ニーズを想定し、現在のペタコンを用いた 1,000 億自由度規模有限要素解析の実現性について検討した。DDM-CG 法の部分領域問題ソルバーとして Eisenstat 技法に基づく CG 法+SSOR 前処理を適用するなど、実装に関する最適化を行うことで、京コンピュータの 8,196 計算ノードを用いて 1,040 億自由度規模有限要素解析(古代建築物パルテノンモデルの自重解析)に 81.8 時間で成功した。本手法はストロングスケーリング性能として約 90%の並列効率を示しており、京コンピュータの全計算資源を利用することで実用時間内に計算できる見込みであり、ポストペタコンにおいては実用化できる可能性が示された。また、非圧縮性粘性流れ問題や電磁界問題解析を想定し、CR 法や MINRES 法など、様々な反復法に基づく DDM 反復法の開発を継続的に行っている。

非構造格子向け多階層前処理技術として、有限要素法向け BDD 前処理アルゴリズムの機能強化を行った。特に、BDD 前処理の超並列計算環境向け実装技術の強化を行い、112 億自由度有限要素解析において 53 反復(収束判定値は相対残差が 3 桁小さくなった時点)で収束解を得ることに成功した。また、異種材料混在モデルにおける収束性を改善するために、DDM 反復法に対する対角スケーリング処理法の新解釈を提案した。特に BDD 前処理において効果的であり、物性値が 100 倍以上でなる複数部材で構成された構造物のシミュレーションにおいて、20 倍以上の収束性改善に成功した。

また、多階層領域分割情報を用いた非構造格子向け数値解析手法のヘテロジニアスコンピューティング向け負荷分散アルゴリズムの開発を行った。特に平成 24 年度は、CPU と GPU のヘテロジニアス環境において、計算ノードに割り当てられた部分領域群を OpenMP の動的スケジューリング機能を用いて CPU コアや GPU に動的負荷分散を行う機能を開発した。6 コア CPU 単体に比べて、6 コア CPU-GPU ハイブリッドにおいて約 2 倍の高速化に成功した。

さらに平成 24 年度から、非構造格子向け DDM ソルバーライブラリお試しツールの開発を開始した。これは、既存の反復法ライブラリユーザーに対して DDM 反復法の試験環境を提供するものであり、ユーザーニーズのフィードバックを可能とする仕組みでもある。平成 24 年度は 2 件の逐次処理版有限要素解析ソフトウェアを例とし、システムの基礎を構築した。

平成 24 年度の MPS 陽解法(粒子法)向けの数値解析手法開発<sup>4)</sup>では、東京大学 FX10 の 4,800 計算ノード上において 200 億粒子のベンチマーク計算に成功した。並列性能では、25 億粒子の 60 計算ノードから 4,800 計算ノードのストロングスケーリングで 0.9933 を達成した。実証例題として、石巻市街地に津波が侵入して、直径 9 m の 2 つのタンクが地上構造物に衝突しながら漂流する解析に成功した(図 2)。本解析は、東京大学 FX10 の 600 計算ノードや九州大学 CX400 の 32 計算ノードを用いた最大 3.8 億粒子の解析である。

平成 25 年度は、「非構造格子向け多階層領域分割情報を利用した DDM 反復法アルゴリズム」、「ポアソン・構造解析向け BDD・BDDC による多階層コースグリッド修正法」と「多階層領域分割情報を用いた非構造格子・メッシュフリー数値解析手法の開発」の開発を継続して実施する。平成 25 年度中に「DDM ソルバーライブラリ」8 版を完成させ、公開を目指す。8 版ライブラリは、ユーザーによる性能評価を行う予定である。

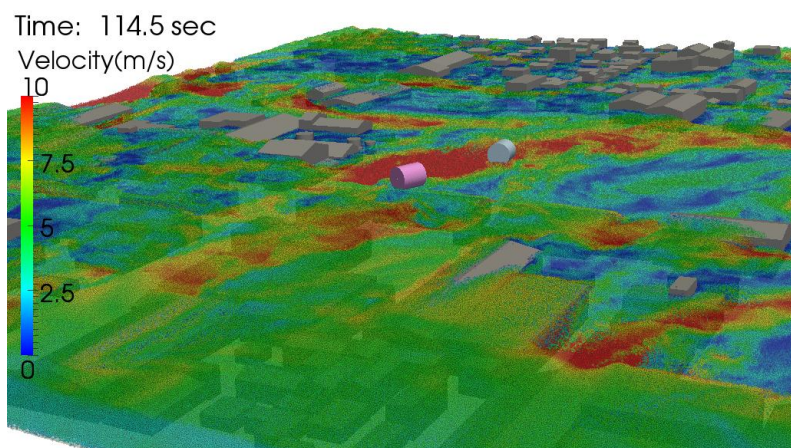


図 2 直径 9m の 2 つのタンクが津波によって流される様子を 3.8 億粒子で可視化した結果

### (C) 連続体力学向け DSL

平成 24 年度は、マルチコア及び SIMD 命令セット向け最適化ライブラリを開発を進めた。開発中の①構造解析・要素剛性、②非線形材料構成則、③熱伝導解析・要素剛性のそれぞれの行列テンソルライブラリでは、Intel (Sandy Bridge) でピーク性能比①60%、②27%、③50%を達成し、東京大学 FX10 ではピーク性能比①27%、②14%、③35%を達成することに成功した。粒子系シミュレーションのための DSL の 8 版を開発した結果、東京大学 FX10 ではピーク性能比 7%を達成した。トランスレータについては、グループ内外のユーザーからのフィードバック情報を元に、文法レベルの検討を行っている。

また、豊田中央研究所や東京理科大学に外部ユーザーとして、本 DSL を利用してもらうことで、性能評価と並行してユーザビリティの改善を行っている。加えて、本 DSL を、理化学研究所、JAMSTEC, JAXA, JAEA, 東京大学生産技術研究所, 東京大学地震研究所や国内スパコンセンターなどへの普及活動を積極的に行い、理化学研究所 京コンピュータ, 東京大学 FX10, T2K 及び GPU クラスタ, 九州大学 FX10, JAMSTEC ES2, 筑波大学 T2K, 名古屋大学 FX1, 京都大学 XE6, 九州大学 CX400 などの利用実績を築きつつある。更に、HPC 技術の産業界向け応用に関する国際ワークショップに参加し、韓国 KiSTi における HPC クラウド開発への協力を行うことで、海外スパコンセンターへの普及活動も行っている。

平成 25 年度は、需要の高いマルチコア及び SIMD 命令セット向けの最適化ライブラリの開発を延長して実施する。また、平成 24 年度未実施であった GPU 向けの開発を重点的に行う。GPU 向け開発には、CUDA 及び OpenACC の利用を検討する。また、メニーコア CPU を視野に、インテルの MIC を対象にした拡張も検討する。トランスレータは、平成 25 年度中にプロトタイプを作成する予定である。

#### (D) 連続体力学系シミュレータ

本研究項目は、研究項目 (A) ~ (C) で開発されたマルチレベル領域分割法による基盤技術の性能評価を行うために、マルチレベル領域分割法による連続体力学系シミュレータの開発を行うものである。

平成 24 年度は、新たに機能追加された「DDM 入出力ライブラリ」、「DDM ソルバーライブラリ」と「連続体力学向け DSL」を用いて、大規模構造物の耐震解析や実地形津波解析などを実証例題とし、理化学研究所 京コンピュータ, 東京大学 FX10, T2K 及び GPU クラスタ, 名古屋大学 FX1, 筑波大学 T2K, 九州大学 CX400 などアーキテクチャの異なる複数のスパコン上においてそれぞれ性能評価を行った。

平成 25 年度は、評価環境として東京工業大学 TSUBAME2.0, 京都大学 CRAY XE6, 名古屋大学の新システムなどを追加し、多様な計算機上において性能評価を行うことで、ポストペタスケールにおける連続体力学系シミュレータの課題を明らかにする。また、大規模な実証問題解析を行い、それらの実用化に必要な計算資源量を推定評価する。

### § 3. 成果発表等

#### (3-1) 原著論文発表

##### ●論文詳細情報

1. Idris Ismail, Hisayoshi Tsukikawa and Hiroshi Kanayama, "Modeling Consideration in the Simulation of Hydrogen Dispersion within Tunnel Structures", Journal of Applied Mathematics, pp. ID-846517, 2012. (DOI:

10.1155/2012/846517)

2. Masao Ogino, Shin-ichiro Sugimoto, Seigo Terada, Yanqing Bao and Hiroshi Kanayama, "A Large-Scale Magnetostatic Analysis Using an Iterative Domain Decomposition Method Based on the Minimal Residual Method", *Journal of Advanced Computational Intelligence and Intelligent Informatics*, vol. 16, No. 4, pp. 496–502, 2012. (DOI: 10.1109/ICEF.2012.6310348)
3. Hiroshi Dan and Hiroshi Kanayama, "Finite Element Analysis of Tsunami by Viscous Shallow-Water Equations", *Journal of Advanced Computational Intelligence and Intelligent Informatics*, vol. 16, No. 4, pp. 508–513, 2012.
4. 室谷浩平, 大地雅俊, 藤澤智光, 越塚誠一, 吉村忍, "ParMETISを用いたMPS陽解法の分散メモリ型並列アルゴリズムの開発", *Transactions of the Japan Society for Computational Engineering and Science*, Paper No. 20120012, 2012. (JOI: DN/JST.JSTAGE/jscses/2012.20120012)
5. 吉村忍, 小林敬, 秋葉博, 鈴木智, 荻野正雄, "3次元有限要素法による沸騰水型原子炉のフルスケール地震応答解析", *日本原子力学会論文誌*, vol. 11, No. 3, pp. 203–221, 2012. (DOI: 10.3327/taesj.J11.045)
6. Reza Miresmaeili, Lijun Liu and Hiroshi Kanayama, "A Possible Explanation for the Contradictory Results of Hydrogen Effects on Macroscopic Deformation", *International Journal of Pressure Vessels and Piping*, vol. 99–100, pp. 34–43, 2012. (DOI: 10.1016/j.ijpvp.2012.08.001)
7. 武居周, 室谷浩平, 吉村忍, 金山寛, "数値人体モデルを用いたマイクロ波帯域の有限要素電磁界解析", *日本シミュレーション学会論文誌*, vol. 4, No. 3, pp. 81–95, 2012. (DOI: 10.11308/tjsst.4.81)
8. K. Murotani, G. Yagawa and J. B. Choi, "Adaptive Finite Element Analysis Using Hierarchical Mesh and Its Application to Crack Propagation Problem", *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, vol. 253, pp. 1–14, 1 January 2013. (DOI: 10.1016/j.cma.2012.07.024)
9. 崎原康平, 松原仁, 江戸孝昭, 原久夫, 矢川元基. "付帯条件付き多次元型移動最小自乗法とエレメントフリー Galerkin 法における境界条件の精度", *日本機械学会論文集 (A 編)*, vol. 79, No. 797, pp. 100–104, 2013.
10. K. Sakihara, H. Matsubara, T. Edo and G. Yagawa. "Multi-Dimensional Moving Least Squares Method Applied to 3D Elasticity Problems", *Engineering Structures*, vol. 47, pp. 45–53, February 2013. (DOI: 10.1016/j.engstruct.2012.05.010)
11. Masao Ogino, Amane Takei, Hirofumi Notsu, Shin-ichiro Sugimoto and Shinobu Yoshimura, "Finite Element Analysis of High Frequency Electromagnetic Fields Using a Domain Decomposition Method Based on the COCR Method", *Theoretical*

- and Applied Mechanics Japan, vol. 61, pp. 173–181, 2013. (in press).
12. K. Murotani, S. Sugimoto, H. Kawai and S. Yoshimura, “The Hierarchical Domain Decomposer with the Parallel Mesh Refinement Function for the More than Billions of DOFs Scales Analyses”, International Journal of Computational Methods. (accepted. January 2013).
  13. Kaworu Yodo, Ryuji Shioya, Akio Miyoshi and Takuru Asaumi, “Parallel CAE System for Large Scale Problems Based on HTML5 and WebGL”, The 2012 International Design Engineering Technical Conferences and Computers and Information in Engineering Conference (IDETC/CIE 2012), DETC2012-70818, pp. 1–6, Chicago (USA), 8月12日 - 15日.
  14. Kaworu Yodo, Hiroshi Kawai, Hiroshi Okada, Masao Ogino and Ryuji Shioya, “Development of the Next-Generation Computational Fracture Mechanics Simulator on the Earth Simulator 2”, The 2012 International Design Engineering Technical Conferences and Computers and Information in Engineering Conference (IDETC/CIE 2012), DETC2012-70909, pp. 1–7, Chicago (USA), 8月12日 - 15日.
  15. Masao Ogino and Ryuji Shioya, "A Scalable and High Performance Implementation of the Domain Decomposition Method", The 4<sup>th</sup> International Conference on Computational Methods (ICCM2012), 160.pdf, pp. 1–8, Gold Coast (Australia), 11月25日 - 28日.
  16. A. M. M. Mukaddes, Masao Ogino and Ryuji Shioya, “Performance of Domain Decomposition Method with Sparse Matrix Storage Schemes”, The 4<sup>th</sup> International Conference on Computational Methods (ICCM2012), 163.pdf, pp. 1–8, Gold Coast (Australia), 11月25日 - 28日.