

GPU スパコンによる大規模粒子法・格子法シミュレーション

Large-scale simulations using particle and mesh methods on a GPU supercomputer

東京工業大学 学術国際情報センター 青木 尊之

Takayuki Aoki

Global Scientific Information and Computing Center,
Tokyo Institute of Technology

1. GPU を搭載するスパコン

GPU(Graphics Processing Unit) は高い浮動小数点演算処理能力と広帯域のメモリを搭載できるため、画像表示の目的に留まらず、汎用計算に広く利用されるようになってきた。さらに消費電力当たりの演算性能が高いため、ハイエンドの GPU を演算加速装置 (アクセラレータ) としてスパコンに搭載されるようになっている。2016 年 11 月 Top500 ランキング[1]では、82 システムが GPU を搭載している。

2. GPU で達成可能な実行性能

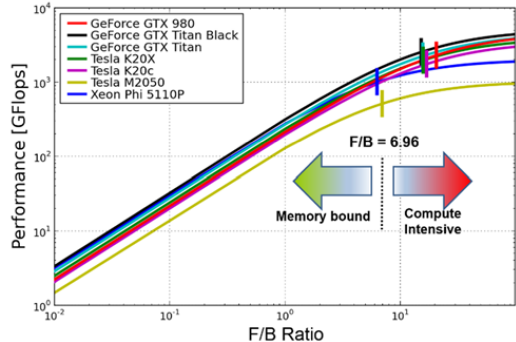
アプリケーションについて、浮動小数点演算が多いのか、メモリアクセスが多いのかの指標となるのが演算密度(Arithmetic Intensity)である。これはアプリケーションの総浮動小数点演算回数 F (単位 GFlops) \div 総メモリアクセス量 B (単位 GByte)であり、格子法や粒子法による流体シミュレーションの場合、1 格子点または 1 粒子当たりの浮動小数点演算回数 \div メモリアクセス量と同じことになる。演算密度(F/B)が大きいかほど演算律速となる。

一方、プロセッサにはピーク演算性能(P_{peak})とピークメモリバンド幅(B_{peak})がある。アプリケーションが演算律速の場合には P_{peak} に近い実行性能が達成されるが、メモリ律速の場合は計算の所要時間は総メモリアクセス量 \div ピークメモリバンド幅となり、ルーフラインモデルと呼ばれる。より詳しくは、計算の所要時間を浮動小数点演算に要する時間(F/P_{peak})とメモリアクセスに要する時間(B/B_{peak})の和とすることにより、右の式により予測精度を少し上げることができる[2]。演算に要する時間とメモリアクセスに要する時間が等しくなる場合は $F/B = P_{peak}/B_{peak}$ となり、スパコンの指標として良く用いられる BF 値 (B_{peak}/P_{peak}) の逆数となる。アクセラレータとして使う場合の GPU(NVIDIA Tesla K20X)と参考のために MIC(Intel Xeon Phi 5110P)のルーフラインモデルを第 1 図に示す。

流体シミュレーションの演算密度が分かれば達成可能な実行性能を予測することができ、プログラム・チューニングの目安となる。重力多体計算に近い渦法などを除いて、多くの流体シミュレーションはメモリ律速であり、GPU 計算による高速化には高いメモリバンド幅の寄与が大きい。

3. 複数 GPU を用いる計算の問題点

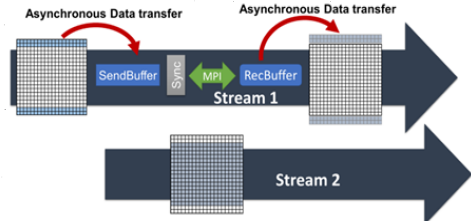
単一のグラフィックス・カードに搭載されるビデオメモリのサイズはせいぜい数 GByte (最新の Tesla K40 では 12GByte) であり、大規模計算を行うには複数の GPU を使った計算が必要となる。格子系の流体シミュレーションでは領域分割法が用いられ、分割された各領域の計算を 1 個の GPU が担当する。分割された領域の境界近傍格子での計算は隣接領域の格子点にアクセスする必



第 1 図 GPU のルーフラインモデルによる予測実行性能

$$P_{reachable} = \frac{F}{F/P_{peak} + B/B_{peak}} = \frac{I}{I + P_{peak}/B_{peak}} P_{peak}$$

要があり、袖領域のデータ通信が発生する。グラフィクス・ボード上のデバイスメモリ上にあるデータの GPU 間通信は帯域の狭い PCI Express バスを介して CPU 側のメモリに転送する必要があり、メモリアクセスと比較するとかなり時間がかかる。さらに CPU 側のメモリから隣接の GPU に転送する必要があるため、大規模計算において GPU 間のデータ通信は大きなオーバーヘッドになる。実行性能を上げるためには、分割された各領域において境界格子を先に計算し、その終了とともに GPU 間データ通信を開始する。それと同時に内側の格子の計算を並行して実行する「計算と通信のオーバーラップ（第2図）」により、GPU 間データ通信の時間を可能な限り隠蔽する必要がある。

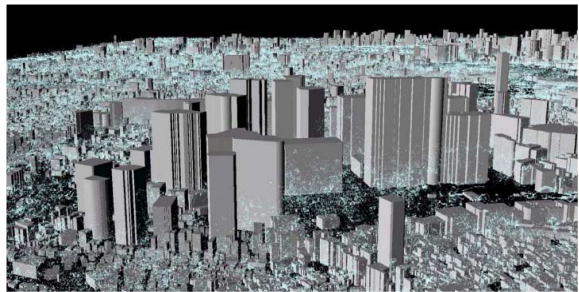


第2図 計算と通信のオーバーラップ

4. 1m 格子による東京都心部の 10km 四方の気流計算

都市は高層ビルが立ち並び複雑な構造をしており、詳細な気流を解析するためには高解像度格子による大規模気流シミュレーションが必要となる。数値計算手法は単純なアルゴリズムで大規模計算に適した D3Q19 モデルの格子ボルツマン法[3]を用いた。都市の気流はレイノルズ数が 100 万を超えるような乱流状態になるため、ラージエディ・シミュレーション (LES) [4]のモデルを導入する必要がある。現在良く使われている動的スモグリンスキー・モデルでは、モデル定数を決定するために各格子点で広領域の平均操作が必要になり、大規模計算には極めて不向きである。本研究では、モデル定数を局所的に決定できるコヒーレント構造スモグリンスキー・モデル[5]を格子ボルツマン法に導入することに成功し、大規模な気流の LES 計算を初めて可能にした。実際の建物データに基づき計算対象のエリアを領域分割し、TSUBAME2.0/2.5 の GPU を用いて計算を行った。CUDA を用いてコードを実装し、ここでも 3.1 節の計算と通信のオーバーラップを導入し、実行性能をオーバーラップしない場合と比較して 30%以上向上させることができた[6]。

格子ボルツマン法はメモリ律速の計算手法であるが、TSUBAME2.0 の全ノードを用いた計算ではピーク性能の 15%となる 600TFlops、TSUBAME2.5 では 1.14PFlops の実行性能が得られた。10,080×10,240×512 格子に対して 4,032 個の GPU を使い、新宿や皇居を含む 10km 四方のエリアを 1m 格子間隔で計算した。第3図は多数の粒子を風速に乗って移流させたときのスナップショットであり、動画にすると風速分布を把握することができる。高層ビル背後の発達した渦によるビル風や幹線道路に沿って流れる「風の道」、台風の際の被害などが飛躍的な精度で予測できるようになる。さらに、排ガス、事故やテロによる有毒ガスなどの汚染物質の拡散も詳細に予測可能となる。



第3図 1m 格子による 10km 四方の都市部の気流計算

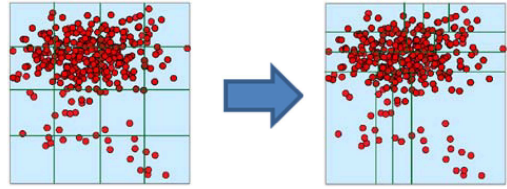
5. 粒子法による大規模流体シミュレーション

5.1 動的負荷分散を導入した粉体シミュレーション

重力やクーロン力のような長距離力による粒子間相互作用と違い、砂や粉などの粉体現象は粒子間の接触による反発や摩擦力のモデル (離散要素法: Discrete Element Method (DEM)) [7]でシミュレーションされる。実現象と同じ程度の粒子サイズで計算することにより、疎視化モデルでは表現できない現象を計算することが可能になるが、計算規模が膨大になり単一 GPU ではメモリが足りず複数 GPU による計算が必要になる。

重力多体問題などと異なり DEM 計算はメモリ律速であり、粒子の位置や速度などの従属変数は GPU のビデオメモリ上に乗せておく必要がある。また、接触による相互作用であるため、粒子

分布を空間領域で分割し、分割された領域内の粒子数を一定にすることで GPU 間の計算負荷を均一にして並列計算の効率を上げることができる。しかし、粒子の空間分布は時間とともに大きく変化する。初期に均一な負荷であったとしても時間とともに負荷バランスは大きく崩れる。そこで、第 4 図のように領域境界を移動させるスライスグリッド法を導入することにより、常に領域内の粒子数をほぼ一定に保つ動的負荷分散を行うことができる[8]。



第 4 図 スライスグリッド法による動的領域

ゴルフのバンカーショットはサンドウェッジのスイングによる砂のかき上げと、かき上げられた砂によるゴルフボールへの運動伝達を含む複雑な問題である。実際の砂と同程度のサイズの粒子を用いることにより、実現象のスケールでの 3 次元バンカーショット・シミュレーションを実行した。バンカー砂に含まれる粗砂を想定し、粒子半径を 0.4mm として 1,670 万粒子による大規模バンカーショット計算を 64 台の GPU を用いて行った。回転及び二重振り子モデルからサンドウェッジの軌道を決め、バンカーショットに特徴的な「目玉」の初期状態を 64,000 ステップかけて生成した後、サンドウェッジの先端の最大速度を 5.0m/s としてスイングを開始した。計算結果のスナップショットを第 5 図に示す。



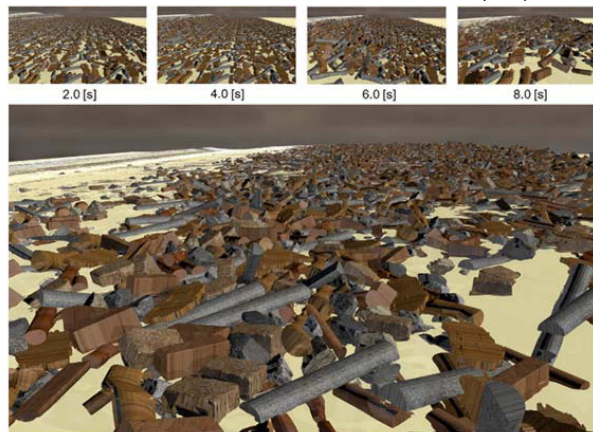
第 5 図 離散要素法による 1,670 万粒子を用いたバンカーショットのシミュレーション

5.2 浮遊物を多数含んだ流れのシミュレーション

SPH(Smooth Particle Hydrodynamics) 法は、粒子を用いて流体を計算することのできる数値計算手法である。その計算アルゴリズムは DEM と非常に類似していて、接触相互作用の代わりに粒子カーネル半径内で粒子間が相互作用する。複雑形状の物体を DEM でモデル化することにより、流体と構造物の連成計算を行うことができる。

スパコン TSUBAME2.5 の複数 GPU を用いた粒子法による多数の浮遊物を含んだ津波シミュレーションの大規模計算を行った。計算領域の縦×横×高さを 180m×160m×20m とし、深さ 2.0m の静止した水を張り、そこに合計 10,368 個の浮遊物として瓦礫を配置する。全部で 117,561,285 個(流体粒子が 93,887,932 個、壁粒子が 21,535,585 個、瓦礫を構成する粒子の総数が 2,137,768 個)の粒子を用いた。各浮遊物は CAD データから距離関数に基づいて作成した 19 個～472 個の球形粒子で構成されている。高さ 10m の津波が左から押し寄せてくる状況を設定している[9]。

256 個の GPU を使い、物理時間 10 秒に対して 20,000 ステップを計算した結果のスナップショットを第 6 図に示す。瓦礫同士が衝突し複雑に運動していることが分かる。計算結果から、浮遊する瓦礫が津波を減衰させているが、瓦礫は固体であるために構造物へ衝突した場合の衝撃圧は流体の衝突よりかなり大きいことが分かる。



第 6 図 10,368 個の瓦礫を含む 1 億 1750 万粒子による大規模津波シミュレーション

6. 粒子と格子による舞い落ちるイチヨウの葉の大規模シミュレーション

小さな球形粒子を連結して複雑形状の物体を表現することにより、比較的容易に非球形粒子と流体の相互作用を計算することができる。例として、舞い落ちるイチヨウの葉のシミュレーションを示す。実際のイチヨウの葉から3次元のポリゴンデータを作成し、ポリゴンデータを符号付きのレベルセット関数に変換する。イチヨウの葉の運動に合わせてレベルセット関数の座標変換を行い、格子ボルツマン法の移動境界条件における、各計算セルでの固休積占有率の計算に用いる。レベルセット関数のゼロ等値面に球形粒子を配置することで、物体形状を表す粒子群データを作成し、他のイチヨウの葉との衝突を計算する。TSUBAME2.5の128台のGPUで $1024 \times 1024 \times 2048$ 格子を用い、512枚のイチヨウの葉が舞い落ちる過程を計算した[10]。図7に示すように、回転しながら落下するイチヨウの葉もあり、特徴的な現象を再現できた。イチヨウの葉同士の接触を考慮することで床に堆積する様子を計算することができた。



図7 512枚のイチヨウの葉の舞い落ちる計算

謝辞

本稿で紹介した計算はTSUBAME2.0/2.5で実施したもので、東京工業大学・学術国際情報センターに深く感謝の意を表す。本研究の一部は科学研究費補助金・基盤研究（S）課題番号26220002「ものづくり HPC アプリケーションのエクサスケールへの進化」、科学技術振興機構CREST「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」、学際大規模情報基盤共同利用・共同研究拠点、および革新的ハイパフォーマンス・コンピューティング・インフラから支援を頂いた。記して謝意を表す。

参考文献

- [1] <http://www.top500.org/>
- [2] T. Shimokawabe et al, An80-foldspeedup,15.0 TFlops full GPU acceleration of non-hydrostatic weather model ASUCA production code; in Proceedings of the 2011 ACM/IEEE International Conference for High Performance Computing, Networking, Storage and Analysis, SC'11, IEEE Computer Society, New Orleans, USA (2010)
- [3] X. Wang and T. Aoki: Multi-GPU performance of incompressible flow computation by lattice Boltzmann method on GPU cluster; *Parallel Computing*, **37**, p.521 (2011)
- [4] M. Lesieur, O. Métais, P. Comte, "Large-eddy simulations of turbulence", Cambridge University Press, New York (2005)
- [5] H. Kobayashi: The subgrid-scale models based on coherent structures for rotating homogeneous turbulence and turbulent channel flow; *Phys. Fluids* **17**, 045104 (2005)
- [6] 小野寺直幸, 青木尊之, 下川辺隆史, 小林宏充: 格子ボルツマン法による 1m 格子を用いた都市部 10km 四方の大規模 LES 気流シミュレーション; 情報処理学会ハイパフォーマンスコンピューティング研究会主催 HPCS シンポジウム (2013)
- [7] P. A. Cundall, O. D. L. Strack; A discrete numerical model for granular assemblies, *Geotechnique* **29** (1979) 47-65.
- [8] 都築怜理, 青木尊之, 下川辺隆史: GPU スパコンにおける 1 億個のスカラー粒子計算の強スケーリングと動的負荷分散; 情報処理学会論文誌コンピューティングシステム, Vol.9, No.3, P.82-93 (2013)
- [9] 都築怜理, 青木尊之: 動的領域分割を用いた流体構造連成によるサスペンション・フローの大規模 GPU 計算; 情報処理学会 HPCS シンポジウム (2015)
- [10] Watanabe, S., Aoki, T., Hasegawa, Y., Large-scale Simulations for Fluidization using Coupled Lattice Boltzmann Method and Discrete Element Method on a GPU Supercomputer. ECCOMAS Congress, Crete Island, Greece (2016).