

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

森下 浩二^{1,a)} 横川 三津夫¹ 宇野 篤也² 石原 卓³ 金田 行雄⁴

概要: 現在日本最速のスーパーコンピュータである「京」を用いて、一様等方性乱流の超大規模直接数値シミュレーション (DNS) を実現するために、地球シミュレータ向けに開発された、フーリエ・スペクトル法に基づく一様等方性乱流の DNS コードの「京」への移植、及び最適化を行った。移植の際には、従来の 1 次元分割によるデータ分散手法から、より効率的な All-to-all 通信が可能であると考えられる 2 次元分割による手法へと変更を行った。その結果、「京」の 192 × 128 ノードを用いて最大格子点数 12288³ の超大規模 DNS の実現に成功した。これはプロダクトランとしては世界最大の一様等方性乱流の DNS である。ピーク性能比として、格子点数 6144³, 8192³, 12288³ の DNS でそれぞれ 3.84%, 3.14%, 2.24% の実効性能が得られた。また、コードの更なる高効率化のために、乱流 DNS 特有のアルゴリズムに対する最適化を試み、その性能評価を行った。

1. はじめに

乱流は自然現象や科学技術の様々な問題で現れる物理現象である。乱流は強い非線形性、巨大自由度、多階層性等を持つため、現在までの多くの実験的および理論的研究にもかかわらず、依然として未解決の難問として知られている。

一方、近年のコンピュータ性能の飛躍的な向上にともない、乱流現象の解明のためには、計算科学的手法に基づくデータ解析が有用な手段となってきた。特に、乱流の基礎方程式をモデル化することなく直接解く直接数値シミュレーション (Direct Numerical Simulation; DNS) は、実験とは異なり、よく制御された条件下で測定に伴う仮説や実験誤差なしに、詳細なデータを得ることが可能という利点をもつ。一般に乱流の自由度は、レイノルズ数 (乱流の非線形性の強さを表すパラメータ) の 4 分の 9 乗に比例して増大する。そのため、乱流の普遍性が期待出来るような高いレイノルズ数の乱流場を得るためには、莫大な計算資源が必要となる。かつては DNS で到達可能なレイノル

ズ数は小さく、乱流の普遍性を探るには不十分であった。しかし、この制約は近年大きく緩和しつつある。たとえば、2000 年代に地球シミュレータを用いて、従来と桁違いに大規模な非圧縮一様等方性乱流の DNS (最大格子点数 4096³) が実現されている [1], [2], [3]。このような DNS データは、高レイノルズ数乱流のもつ普遍的な法則性の解明のための有用な手がかりを与えると期待される。

本研究では、現在日本最速のスーパーコンピュータである「京」を用いて、さらに大規模な一様等方性乱流の DNS を実現するために、地球シミュレータ向けに開発された一様等方性乱流の DNS コード [1] の「京」への移植、及び最適化を行った。移植の際には、従来の 1 次元分割のデータ分散手法から、より効率的な All-to-all 通信が可能であると考えられる 2 次元分割へと変更を行った。その結果、最大格子点数 12288³ の超大規模 DNS を実現することに成功した。これはプロダクトランとしては世界最大の一様等方性乱流の DNS である。また、コードの更なる高効率化のために、乱流 DNS 特有のアルゴリズムに対する最適化を試み、その性能評価を行った。

2. 計算手法

2.1 基礎方程式

本 DNS で扱う乱流場は、一辺が 2π の周期ボックス内で、Navier-Stokes 方程式及び非圧縮条件

$$\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + (\mathbf{u} \cdot \nabla) \mathbf{u} = -\nabla p + \nu \nabla^2 \mathbf{u} + \mathbf{f} \quad (1)$$

$$\nabla \cdot \mathbf{u} = 0 \quad (2)$$

¹ 神戸大学

Kobe University

² 理化学研究所 計算科学研究機構

RIKEN AICS

³ 名古屋大学

Nagoya University

⁴ 愛知工業大学

Aichi Institute of Technology

a) morishita@port.kobe-u.ac.jp

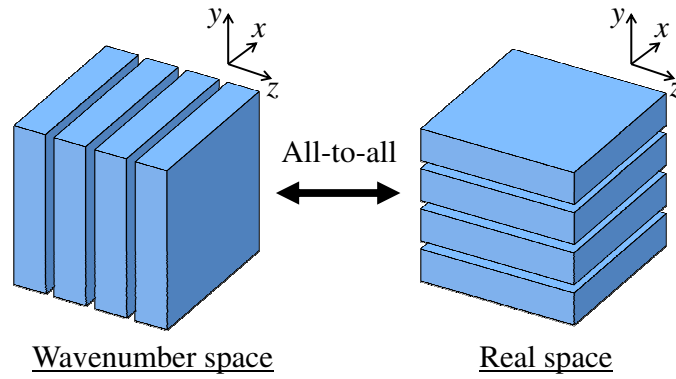


図 1 従来の 1 次元分割によるデータ分散.

に従う非圧縮 3 次元一様等方性乱流である。ここで、 $\mathbf{u} = (u_1, u_2, u_3)$, p , ν , $\mathbf{f} = (f_1, f_2, f_3)$ はそれぞれ速度、圧力、動粘性係数、外力である。また、流体密度は 1 としている。

式 (1), (2) は以下のように書き換えることができる。

$$\frac{\partial u_i}{\partial t} + h_i = -\frac{\partial p}{\partial x_i} + \nu \nabla^2 u_i + f_i \quad (3)$$

ここで、

$$h_i = \frac{\partial(u_i u_j)}{\partial x_j} \quad (4)$$

である。ここで、繰り返す添え字に関して 1 から 3 まで和を取っており、以下も同様の記法を用いる。また、式 (3) の発散をとり、式 (2) を用いると

$$\nabla^2 p = -\frac{\partial h_j}{\partial x_j} \quad (5)$$

が得られる。

2.2 フーリエ・スペクトル法

乱流 DNS では、非圧縮条件 (2) が崩れないように、式 (5) の型のポアソン方程式をどう高精度に解くかが重要となる。

本研究では、高精度・高解像度な数値解法としてフーリエ・スペクトル法を用いる。フーリエ・スペクトル法を用いると、式 (3) 及び式 (5) は、波数空間で

$$\left(\frac{d}{dt} + \nu k^2\right) \hat{u}_i(\mathbf{k}) = P_{ij}(\mathbf{k}) \hat{h}_j(\mathbf{k}) + \hat{f}_i(\mathbf{k}) \quad (6)$$

と表わされる。ここで、

$$P_{ij}(\mathbf{k}) = \delta_{ij} - \frac{k_i k_j}{k^2} \quad (7)$$

である。また、 $\mathbf{k} = (k_1, k_2, k_3)$ は波数ベクトル及び $k = |\mathbf{k}|$ であり、 $\hat{\cdot}$ はフーリエ係数を表す。例えば、 $\hat{u}_i(\mathbf{k})$ は、

$$u_i(\mathbf{x}) = \sum_{\mathbf{k} < K_c} \hat{u}_i(\mathbf{k}) \exp(i\mathbf{k} \cdot \mathbf{x}) \quad (8)$$

で定義される。

フーリエ・スペクトル法による DNS では、計算時間の

ほとんどは非線形項の評価に費やされる。波数空間における非線形項の値は、速度場を一度逆 FFT で実空間に戻し、実空間での非線形項を計算し、それをまた FFT で波数空間に戻すことにより得られる。その際に、いわゆるエイリアジング誤差が生じるが、それは phase-shift method を用いることにより除去する [4]。

また、式 (6) の時間発展には 4 段 4 次精度の Runge-Kutta 法を用いる。

3. DNS コードの「京」への移植

本研究では、まず、横川ら [1] によって地球シミュレータ向けに開発された一様等方性乱流の DNS コードの「京」への移植を行った。

地球シミュレータ向け DNS コードは、ノード間の分散並列を MPI により行い、ノード内のスレッド並列をマイクロタスクにより行っているハイブリッド並列コードとなっており、MPI のデータ分散は 1 次元分割を用いている。波数空間では z 軸を、実空間では y 軸をそれぞれスラブ状に分割している (図 1 を参照)。非線形項の計算の際の、3 次元 FFT は各軸に対して順に 1 次元 FFT を行うことにより実現する。 x 軸及び y 軸に対して 1 次元 FFT を行った後、 z 軸に対する FFT を行う際には、データ分散の軸を全対全 (All-to-all) 通信により y 軸に変更している。

「京」のような超大規模並列環境においては、上記のような 1 次元分割は非現実的である。そこで、本研究では、MPI のデータ分散の 2 次元分割への変更を行った。図 2 に示すように、波数空間では (y, z) 軸に対してペンシル状に 2 次元分割をする。非線形項の計算の際の 3 次元 FFT では、 x 軸に対して FFT を行った後、 x - y 平面内で All-to-all 通信を行い (z, x) 軸に対する 2 次元分割に変換する。その後、同様に y 軸に対して FFT を行った後、 y - z 平面内で All-to-all 通信を行い (x, y) 軸に対する 2 次元分割に変換する。さらに z 軸に対して FFT を行うと、最終的に実空間で (x, y) 軸に対して 2 次元分割したデータが得られる。また、この逆の操作を辿ることで波数空間への変換を行うことができる。この手法では、All-to-all 通信が各 2 次元平面

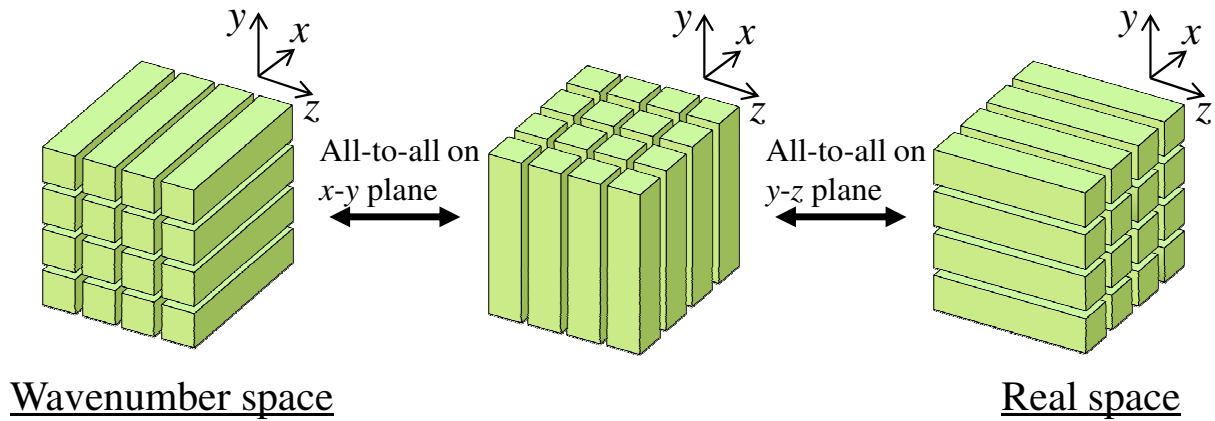


図 2 本研究における 2 次元分割によるデータ分散。

表 1 DNS パラメータ及び計算性能. R_λ : テイラー・マイクロスケール・レイノルズ数, Δt : 時間刻み幅, ν : 動粘性係数.

N^3	ノード数	R_λ	$10^4 \Delta t$	$10^5 \nu$	実効性能 (ピーク比:%)
6144^3	96×64	1477	1.66	1.02	3.84
8192^3	128×64	1793	1.25	0.70	3.14
12288^3	192×128	2315	0.833	0.41	2.24

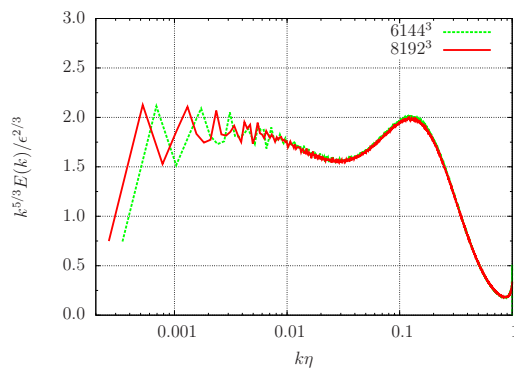


図 3 格子点数 6144^3 , 8192^3 の DNS により得られたエネルギースペクトル.

内のプロセスで閉じられるため、1次元分割における全プロセス間の All-to-all 通信と比べると、より効率的な通信が可能であると考えられる。

なお、1次元 FFT の計算には「京」向けに SIMD 化された FFTW ライブラリを用いた。

MPI のプロセスは 1 ノードに 1 つ割り当て、ノード内の 8 個のコアに対しては OpenMP によるスレッド並列化を行った。

4. 計算性能と DNS 結果

今回、「京」へ移植した DNS コードを用いて、格子点数 $N^3 = 6144^3$, $N^3 = 8192^3$, $N^3 = 12288^3$ の 3 つの DNS を行った。表 1 に DNS パラメータ及び得られた実効性能を示す。

図 3 に DNS によって得られたエネルギースペクトルを示す。なお、格子点数 12288^3 についてはまだ積分時間が

不十分であると考えられるため、格子点数 6144^3 , 8192^3 についての結果のみを示す。Kolmogorov の理論 [5] によると、十分に高いレイノルズ数では、巨視的なスケールより十分小さくかつ粘性の影響を受けないくらいには十分大きいスケール領域 (慣性小領域) が存在し、その慣性小領域では、エネルギースペクトルは以下の式で記述される。

$$E(k) = C_K \epsilon^{2/3} k^{-5/3} \quad (9)$$

ここで、 C_K は普遍定数、 ϵ は単位質量あたりの平均エネルギー散逸率である。図 3 では、 $k\eta < 0.005$ でグラフが平らなところ、すなわち式 (9) が満たされる慣性小領域が確認できる。ここで、 $\eta = (\nu^3/\epsilon)^{1/4}$ は Kolmogorov の長さスケールである。

図 4 は格子点数 6144^3 の DNS によって得られた渦度の絶対値の等値面を可視化したものである。微細な渦管構造と、それらが集まってできたクラスターが大小様々な構造を形成している様子が観察できる。

5. DNS コードの更なる高効率化の試み

ここでは、「京」へ移植した乱流 DNS コードの更なる高効率化のために行った試みとその性能評価について述べる。乱流 DNS における計算時間の大部分を占める phase shift method による非線形項の計算では、実空間において、

- 元の格子上で非線形項を評価
- (1, 1, 1) 方向に半格子だけシフトした格子上で非線形項を評価

をそれぞれ行い、その二つからエイリアス・フリーな波数空間における非線形項の値が得られる。ここで、a) と b) は独立に計算することができることに着目し、a) と b) の

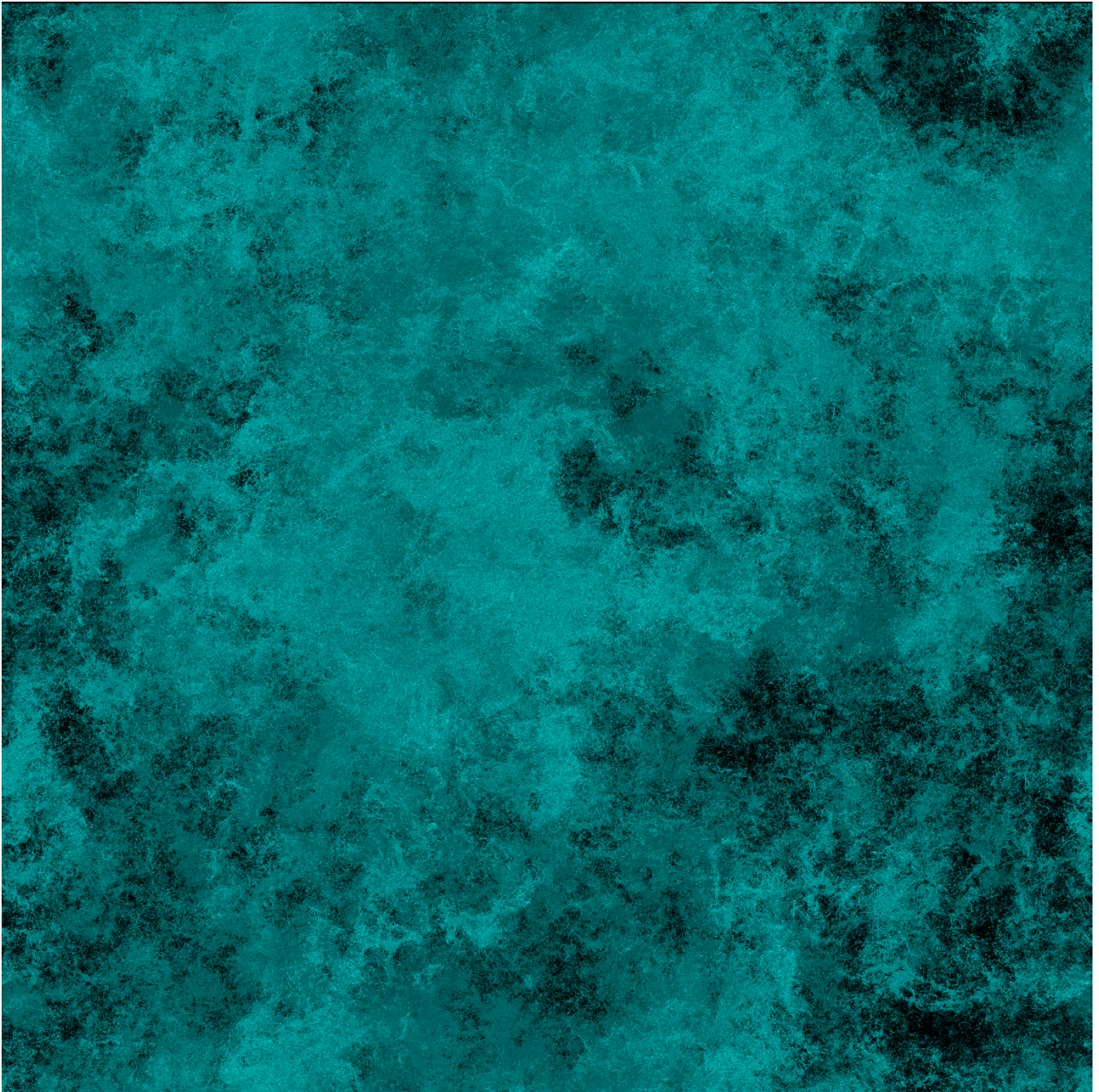


図 4 格子点数 6144^3 の DNS により得られた渦度場の可視化.

計算に別々の MPI プロセスを割り当てることを考える。データ分割数は変えないまま MPI プロセスを 2 倍にし、同じデータ分割領域に 2 つずつプロセスを割り当てる。非線形項の計算以外では、2 つのプロセスは同じデータに対してまったく同じ計算を行う。一方、非線形項の計算部分に入ると、2 つ系統のプロセスがそれぞれ a), b) の計算を並列に行い、その結果を 2 つ系統のプロセス間で交換することによって、最終的にエイリアス・フリーな非線形項の値がそれぞれのプロセスで計算できる。

一般に、オリジナルの計算手法でプロセス数を増やすと、1 回あたりの All-to-all の通信量は減るが、通信相手が増え

るために、より不効率な通信となると考えられる。一方、提案手法では、プロセスあたりの All-to-all による通信回数は半分になるため、最終結果の交換 (Sendrecv) による通信時間が小さければ、プロセスを 2 倍にすることで全体として計算時間を約半分にすることが出来ると期待される。

性能評価をするために、格子点数 $N^3 = 768^3$ の DNS を、

- i) オリジナルの手法でノード数 12×8
- ii) オリジナルの手法でノード数 12×16
- iii) 提案手法でノード数 $12 \times 8 \times 2$

の 3 つについて、100 ステップ実行し、計算時間の比較を行った。

表 2 非線形項の計算時間の内訳.

	ノード数	Other (sec.)	FFT (sec.)	All-to-all (sec.)	Sendrecv (sec.)	Total (sec.)
i) Original Method	12 × 8	31.6510	179.5432	114.3401	–	325.5343
ii) Original Method	12 × 16	16.2213	94.7417	71.0488	–	182.0118
iii) New Method	12 × 8 × 2	21.3575	89.7730	67.6182	19.1888	197.9375

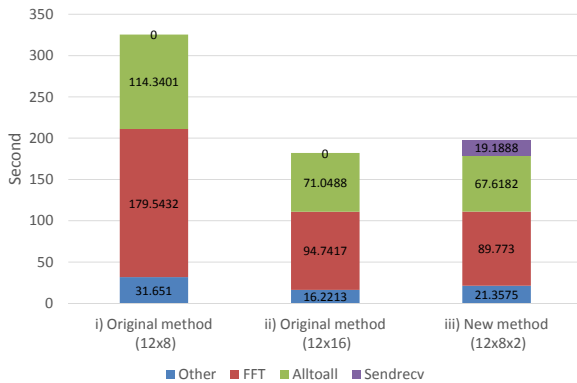


図 5 非線形項の計算時間の内訳.

表 2 及び図 5 に非線形項の計算時間の内訳を示す. ii) と iii) についての結果を比べると, オリジナルの手法である ii) の方がトータルとして計算時間が短いことがわかる. この理由について考察すると, まず提案手法である iii) では, All-to-all の通信時間がきちんと i) の場合の通信時間の半分になっていないことがわかる. これは, iii) での All-to-all の通信経路が i) の場合と異なっているためではないかと考えられる. 実際にどんな通信経路になっているかについては更なる調査が必要である.

また, iii) では Sendrecv による通信時間が全体の約 10% かなり大きくなってしまっている. これは, Sendrecv を行うノードの組が互いに離れた場所に存在し, 非効率的な通信となっているためではないかと考えられる. そのため, ノードの割り当て方についても更なる考慮が必要であると思われる.

6. まとめ

本研究では, 現在日本最速のスーパーコンピュータである「京」を用いて, さらに大規模な一様等方性乱流の DNS を実現するために, 地球シミュレータ向けに開発された一様等方性乱流の DNS コードの「京」への移植, 及び最適化を行った.

「京」のような超大規模並列環境においては, 1次元分割によるデータ分散は非現実的であるため, コードの移植の際には, より効率的な All-to-all 通信が可能であると考えられる 2次元分割へと変更を行った.

「京」へ移植した DNS コードを用いて, 最大格子点数 12288^3 の超大規模 DNS の実現に成功した. これはプロダクトランとしては世界最大の一様等方性乱流の DNS である. ピーク性能比として, 格子点数 6144^3 , 8192^3 , 12288^3 の DNS でそれぞれ 3.84%, 3.14%, 2.24% の実効性能が得

られた.

また, 乱流 DNS における計算時間の大部分を占める phase shift method による非線形項の計算における独立な 2 系統の計算についてそれぞれプロセスを割り当てることによって, コードの更なる高効率化を試みた. 性能評価を行った結果, 期待したような性能は得られなかったが, 今後, 「京」における All-to-all の性能調査や MPI の通信経路の解析及びノードの最適な割り当て方法についての調査等を行うことにより, 提案手法の効率化を図る予定である.

謝辞 本研究成果の一部は, 理化学研究所のスーパーコンピュータ「京」を利用 (課題番号:hp140135) して得られたもの, 及び JSPS 科研費 26390130 の助成を受けたものです.

参考文献

- [1] Yokokawa, M., Itakura, K., Uno, A., Ishihara, T. and Kaneda, Y.: 16.4-Tflops direct numerical simulation of turbulence by a Fourier spectral method on the Earth Simulator, *Proceeding of the IEEE/ACM SC2002 Conference* (CD-ROM), Baltimore. (2002).
- [2] Kaneda, Y., Ishihara, T., Yokokawa, M., Itakura, K. and Uno, A.: Energy dissipation rate and energy spectrum in high resolution direct numerical simulations of turbulence in a periodic box, *Physics of Fluids*, Vol. 15, No. 2, pp. L21–L24 (2003).
- [3] Ishihara, T., Kaneda, Y., Yokokawa, M., Itakura, K. and Uno, A.: Small-scale statistics in high-resolution direct numerical simulation of turbulence: Reynolds number dependence of one-point velocity gradient statistics, *Journal of Fluid Mechanics*, Vol. 592, pp. 335–366 (2007).
- [4] Canuto, C., Hussaini, M. Y., Quarteroni, A. and Zang, T. A.: *Spectral Methods in Fluid Dynamics*, Springer-Verlag (1988).
- [5] Kolmogorov, A. N.: The local structure of turbulence in incompressible viscous fluid for very large Reynolds number, *C. R. Acad. Sci. URSS*, Vol. 30, pp. 299–303 (1941).