

1. 利用の概略

1) 利用目的・内容

自動車の各種製造プロセスにおいて重要な粒子分散流体の解析に対して、流体を計算格子を用いて計算し、粒子を質点として計算する、CFD-DEM(Computational Fluid Dynamics-Discrete Element Method)法をベースとしたシミュレーション技術を開発している。本手法の粒子計算部分では、2体相互作用を計算するため、並列化計算における高性能化が容易ではなく、計算規模の観点から解析できる系に制限が生じている(例えば、粒子濃度が低い条件に制限されるなど)。そこで、大規模計算を目指し、FX100/CX400を用いて本アプリの高速化可能性を検討する。

2) 利用意義(産業利用の観点から)

近年、産業界においても計算機の高性能化は進んでいるものの、世界トップクラスの計算機を利用できる機会は少なく、また、利用できたとしても独力で十分な評価や性能向上を達成するのは容易ではない。そこで、リソース、サポートともに充実している本 HPC システムを利用することで、アプリ高速化へ向けた高効率な検討が期待できる。

3) スーパーコンピュータを利用する必要性

本アプリを用いた場合の「モデル系」のスループット時間は、標準的な SMP 機 10 コアのスレッド並列計算で1ヶ月以上/1ケースであり、「現実系」へさらに粒子数を増やす計算(例:1億粒子程度)は非現実的である。その解決策のひとつとしてスーパーコンピュータの利用が挙げられる。

2. 成果の概要

1) 本利用で得られた成果(成果が得られなかった場合はその理由)

※内容を以下のうちから選択の上、計算機利用の観点から得られた知見を中心に記載してください。

(1. 計算科学、 2. コンピュータ・サイエンス、 3. プログラムチューニング 4. その他)

(1) 約10万粒子の粒子-流体連成計算の FX100 および CX400(CX2)によるベンチマーク。500ステップの計算を各ケース3回実施し、ELAPSE TIMEの平均値を算出。OpenMPによるスレッド並列。

FX100-8コア:平均269秒, FX100-16コア:平均258秒, FX100-32コア:平均297秒

CX400-12コア:平均144秒, CX400-24コア:平均187秒

FX100は16コアが最速。CX400の方がFX100よりも高速。CX400はCPUを跨ぐと性能が低下することから、粒子間相互作用計算時のメモリアクセスがNUMAになることが性能低下の一因と推察。

(2) (1)の結果から、メモリアクセスを改善するため、実行時の numactl --interleave=all 設定を評価。

FX100-8コア uma:平均271秒, FX100-16コア uma:平均259秒, FX100-32コア uma:平均296秒

CX400-24コア uma:平均213秒

となり、FX100においては numactl の効果はほぼなく、CX400では numactl により性能が低下した。

(3) (2)より、numactl ではメモリアクセスの改善が期待できないことがわかった。今後は、メモリアクセスを改善するために、粒子のソーティングなどプログラム内での改良を進める方針である。

2) 社会・経済への波及効果の見通し

今回の検証では、直接的なアプリの性能向上は達成できなかったものの、今後の改良指針を明確にすることができた。このような改良を着実に実施することにより、将来的に、自動車の実製造プロセスを模擬した大規模な計算が可能となり、より高効率で低環境負荷なプロセスの実現が期待できる。

3) その他の成果