

課題名 (タイトル) :

固体流体連成ソルバーの高並列環境でのテスト

利用者氏名 :

○高木 周*
久田 俊明**
杉山 和靖***
細井 聡****

理研での所属研究室名 :

- * 和光研究所 次世代計算科学研究開発プログラム
次世代生命体統合シミュレーション研究推進グループ 臓器全身スケール研究開発チーム
- ** 東京大学大学院新領域創成科学研究科
- *** 東京大学大学院工学系研究科機械工学専攻
- **** 東京大学大学院新領域創成科学研究科人間環境学

1.研究の背景、目的、関係するプロジェクトとの関係
次世代スパコン向けのグランドチャレンジとして、臓器全身スケールのシミュレーションシステムの開発を実施している。特に、臓器全身スケールでは、循環器系のシミュレーションに着目しており、心臓シミュレータ、赤血球/血小板シミュレータを開発している。これらのシミュレータは、従来法とは異なり、柔らかさを持った固体と流体としての血液の連成解析シミュレータとして開発を行っている。また心臓シミュレータでは、細胞一つ一つの動きを積み上げる事により、臓器全体の振る舞いを予測する事を目指している。さらに、臨床適用が近いと期待されている HIFU (High Intensity Focused Ultrasound: 高密度焦点超音波治療)シミュレータの開発も推進している。これらのシミュレーションシステムは、空間を細密に分割し、かつ大規模な計算を行う必要がある。そのため、次世代スパコンでの大規模並列な環境をターゲットとし、高い並列性能を達成するシミュレーションシステムを構築する必要がある。

これまで、RICC でのテスト運用や簡易利用で 2048 並列や 4096 並列までのテストを実施してきた。本申請では次世代スパコン向けアプリケーションの高い並列化性能を達成する為のチューニングを実施する前段階として、RICC での 8000 並列に近い環境でもシミュレーションプログラムが正常に動作するかの確認とその性能を測るテストを実施する。それにより、実際の計算ケースにおける必要な計算時間の見積り精度を向上するとともに、プログラム高並列化チューニングのポイントを知る事を目的とする。

2.具体的な利用内容、計算方法
各シミュレータの計算手法に関して以下に概要を述べる。

2-1)心臓シミュレータ

有限要素法を利用し非構造格子を用いた、心臓全体を計算要素で構成したシミュレータ。

2-2)赤血球/血小板シミュレータ

従来にない、Euler 表記を用いた固体流体連成シミュレータ。有限差分法を利用しボクセル格子を用い、固体/流体を同時に取り扱う。

2-3)HIFU シミュレータ

流体の支配方程式を有限差分法/ボクセル格子を用いて計算。医療画像診断装置である CT から得られた骨の密度を取り入れ、高精度なシミュレーションを実現。

特別利用での利用内容としては、これらのシミュレータを用いて大規模並列環境でのテストを行い、そのスケーラビリティの評価を行う。それにより、プログラムのウィークポイントが明らかとなり、さらなる大規模並列実行での問題点を明確にする事を目標とする。

また、有限要素法、有限差分法ともに、8000 並列を超える環境での性能評価は未だ無い。従って、今回の性能評価を元として、他の有限要素法、有限差分法を用いたシミュレーションシステムを大規模並列環境で構築する時の問題点/性能予測が事前に行える事を実現する。

3. 結果

各シミュレータの高並列実行の結果を以下に述べる。

3-1) 心臓シミュレータ

RICC で利用可能なコア数は 8000 である。よって今回のテストではマクロモデルは心房を取り除いた両心室のみとし、これに 8000 個のマイクロモデルを定義し、8000 コアを用いた場合と 4000 コアを用いた場合を先ず評価した。なお両心室モデルの要素数は 10146、自由度は 40546、また内部血液の要素数は 6889、自由度は 27467 であり、領域分割による 64 並列計算を行う。今回用いた両心室マクロモデルを図 1 に示す。

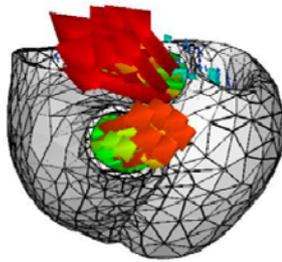


図1 両心室マクロモデル(収縮期シミュレーション結果)

実行時間の測定結果を表 1 に示す。マイクロ部のスピードアップは非常に良好であるが、マクロ部処理時間が 8000 コア時に倍近くとなっているために、全体のスピードアップが劣化している。

	全体の実行時間[s]	マイクロ部[s]	マクロ部[s]
4000 コア	3.31E+03	3.08E+03	4.17E+01
8000 コア	1.82E+03	1.58E+03	1.68E+02
スピードアップ	1.72	1.94	0.55

表 1 両心室マクロモデルでの性能測定結果

今回のテストでは小自由度の細胞モデルを用いたためマイクロ部のソルバーには直接法を用いた。しかしながら次世代スーパーコンピュータでは本格的な細胞モデルを導入するため反復法を用いざるを得ない。そこで今回のテストでも反復法(GMRES 法)を用いて数十ステップについての計算時間を計測した。なおこの場合必要メモリ量が減少し、1000コア(コア当たり8細胞担当), 2000コア(コア当たり4細胞担当), 4000コア(コア当たり2細胞担当), 8000コア(コア当たり1細胞)での計算を行い、図2のようにスケーラビリティを評価した。

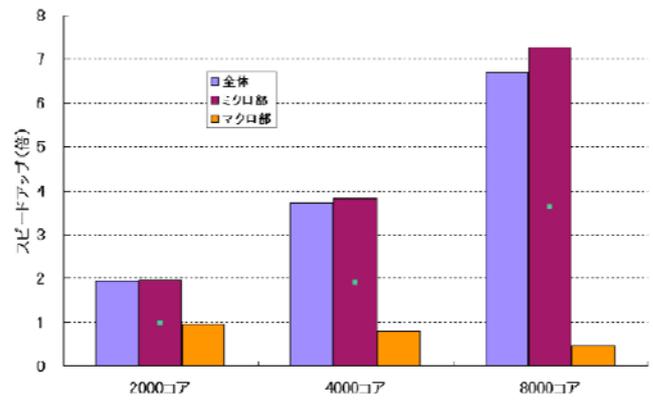


図2 1000コアを基準とした場合のスピードアップ

上図に示されるとおり、反復法の場合においても直接法と同様の傾向を示し、マイクロ部は8000 コアにおいて 90%以上の良好なスケーラビリティが得られているが、マクロ部の計算においては劣化が見られる。このため全体としては 80%を上回る程度のスケーラビリティを示すに留まっている。しかしマクロ部の計算は使用コア数にかかわらず 64 並列による同一の計算を行っており、基本的には総コア数の影響を受けない筈である。速度劣化の原因は現在調査中である。

3-2) 赤血球/血小板シミュレータ

RICC で利用可能な、以下に示すコンパイラと MPI ライブラリの組み合わせで計測を行った。

- 1) Intel Compiler + OpenMPI
- 2) Intel Compiler + Fujitsu MPI
- 3) Fujitsu Compiler + Fujitsu MPI

また、シミュレーションプログラムは並列通信のモードとして、計算と通信を個別に実施する通常版と計算と通信を同時に行い、見かけ上通信のコストを隠蔽する通信隠蔽版(HIDE)の二種類を持っている。そのため、上記コンパイラと MPI ライブラリの組み合わせそれぞれに置いて二つの並列通信のモードをテストし、合計 6 パターンの計測を行った。

計測対象のデータは、具体的な計算対象ではなく、プログラム性能測定に的を絞ったデータであり、あらかじめプログラムに組み込み、ファイル入出力が必要としないようプログラムを改変してある。並列実行のスケーラビリティを評価するため、データ規模を二種類用意した。また、Strong Scaling と Weak Scaling についても計測した。計測に利用したデータサイズの一覧をいかに示す。

■ Strong Scaling テスト

1) 大規模データ

- 960x960x960=約 9 億要素
- 512~8000 並列でのスケーラビリティを評価

2) 特大規模データ

- 1524x1524x1524=約 35 億要素
- 2048~8000 並列でのスケーラビリティを評価

■ Weak Scaling テスト

- コアあたり 100x100x100 のサイズ固定で計測
- 1~8000 並列での実行速度を計測

図 3-1 に Strong Scaling 大規模データを図 3-2 に Strong Scaling 長大規模データを図 3-3 に Weak Scaling のテスト結果を示す。

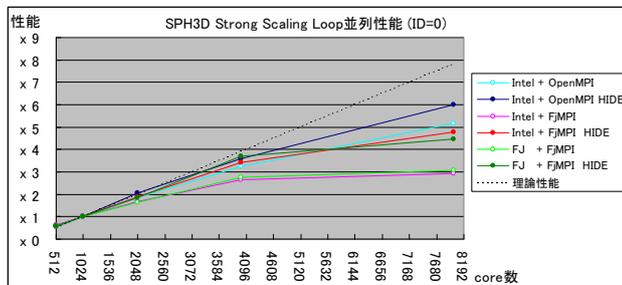


図 3-1 Strong Scaling 大規模データ計測結果

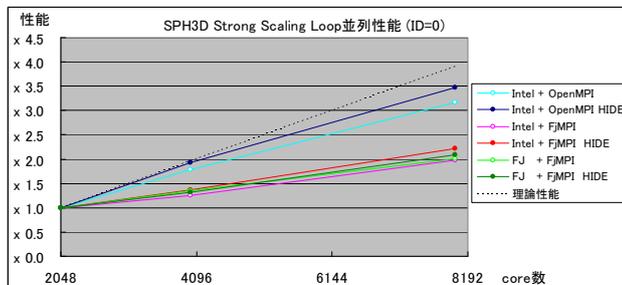


図 3-2 Strong Scaling 超大規模データ計測結果

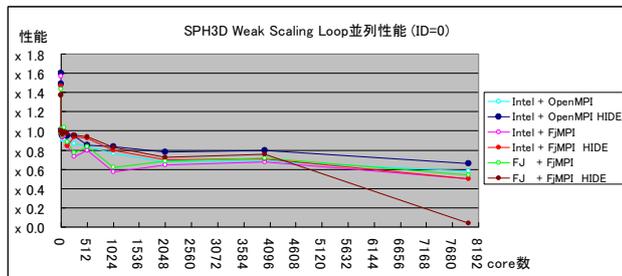


図 3-3 Weak Scaling 計測結果

Strong Scaling の結果から、本プログラムに実装している通信隠蔽が効果を発揮している事が確認できる。また、1524^3 の計算では 8000 並列で十分な並列性能を示している事が確認できる。また、全般的に Fujitsu

コンパイラよりも Intel コンパイラの方が高い並列性能を示す。

Weak Scaling の結果で 8000 並列での Fujitsu コンパイラ + FJMPI (通信隠蔽) の性能劣化に関しては原因が掴めていない。

3-3) HIFU シミュレータ

赤血球/血小板シミュレータと同様なテストを行った。異なる点は Strong Scaling テストと Weak Scaling テストでのデータサイズの違いである。その違いのみ、以下に示す。

■ Strong Scaling テスト

1) 大規模データ

- 1200x1600x1200=約 23 億要素
- 512~8000 並列でのスケーラビリティを評価

2) 特大規模データ

- 1905x2540x1905=約 92 億要素
- 2048~8000 並列でのスケーラビリティを評価

■ Weak Scaling テスト

- コアあたり 75x100x75 のサイズ固定で計測
- 1~8000 並列での実行速度を計測

図 4-1 に Strong Scaling 大規模データを図 4-2 に Strong Scaling 長大規模データを図 4-3 に Weak Scaling のテスト結果を示す。

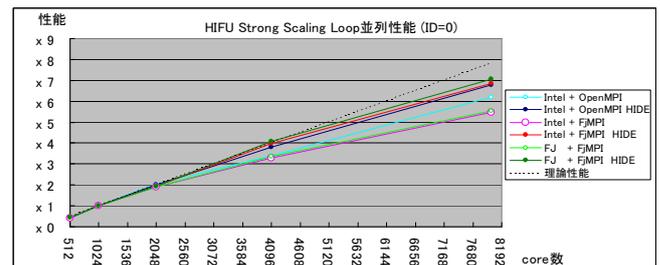


図 4-1 Strong Scaling 大規模データ計測結果

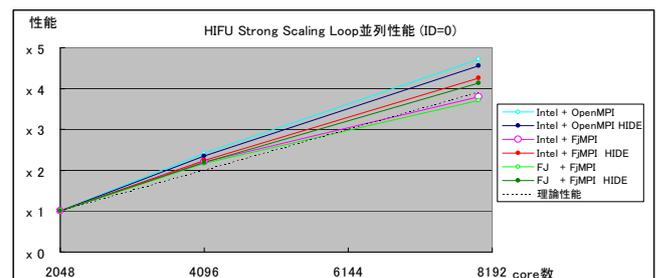


図 4-2 Strong Scaling 超大規模データ計測結果

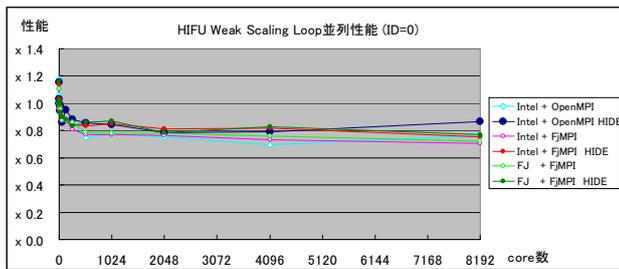


図 4-3 Weak Scaling 計測結果

Strong Scaling の結果から 8000 並列まで良好な並列性能を示している。その他詳細は現在検討中。

4.まとめ

これまでにない高並列環境下でのテストを行い、おおむね良好な並列性能が実現できる事が確認できた。しかしながら、コンパイラや MPI ライブラリでの傾向の違いや不明な点が未だ残っており、原因の解明を行っていききたい。我々のプロジェクトでは同様な計算手法を用いた計算プログラムを多数開発しており、今回のテストで得た知見を元に高並列実行が可能なプログラム開発が効率的に進められる。また、同様な計算プログラムを開発している他の研究者にも有益な情報が提供できるよう、今回の結果を外部に発信できるよう準備を進めていきたい。

5.今後の計画・展望

今回の計測結果をふまえ、不明点/問題点を改善していく計画である。プログラムの準備がととのい次第、来年度も同様に高並列環境下でのテストを実施する計画である。

平成 21 年度 RICC 利用研究成果リスト

【その他】

RICC 特別利用報告書として、心臓シミュレータ、赤血球／血小板シミュレータ、HIFU シミュレータの三式を添付する。