

1000 億格子規模における OpenFOAM の超大規模数値流体解析

PHAM VAN PHUC* (清水建設株式会社) 内山 学 (清水建設株式会社)

Ultra-Large-scale Simulation of CFD using OpenFOAM with 100 Billion Mesh Cells

Pham Van PHUC* (Shimizu Corporation) Uchiyama Manabu (Shimizu Corporation)

Keywords: CFD, OpenFOAM, Large-scale Simulation, K Computer

1. 研究の目的

OpenFOAM は膨大なクラス群に構成される。解くべき物理方程式は、C++ オブジェクト指向により僅かな数十行のコードで記述されている。生産性の高い数値流体解析コードとして知られている。しかしながら、チューニングの観点では C や Fortran と比較して複雑となっている。超並列処理や超大規模計算において、負荷の大きい箇所を性能ツールで分析しても、対象となるオブジェクトの関係が多岐に渡りホットスポットの特定が困難となっている。既存の HPC 分野の経験も十分に活かされない現状である。

本研究では、OpenFOAM の特徴とその課題および改良策について述べる。また、実際の流体解析アプリケーションに実装して「京」コンピュータでの超大規模並列計算により 1,000 億格子規模の計算の可能性を議論する。

2. 研究の内容

3.1 技術課題と解決ヒント 1,000 億格子規模の計算を実現するためには、以下の解決すべき技術課題がある。

- (1) 超大規模計算モデルの作成
- (2) 正しい数値的な表現
- (3) 超並列処理の実施

課題(1)については、現状の市販しているプリ・ポストマシンにおいて搭載されている最大メモリ容量は 1B 程度である。これより作成された計算モデルの格子数は約 10 億である。より大規模計算モデルを作成するためには複数マシンを利用できる分散並列処理が必要である。

OpenFOAM において snappyHexMesh 等は既に分散並列処理に適用できるため、適切な改良より数百億格子や数千億格子を作成できると考えられる。

課題(2)は、通常の計算コードでは整数 32bit としてコーディングされたものが多いが、整数 32bit では二十億までの数値を表現できないため、整数 64bit の対応やコードの適切な修正が必要となる。

課題(3)は、構築された並列処理プラットフォームの性能に直接に依存するものである。現状のコードは汎用性を重視されているため、構築されたプラットフォームは十分に最適化されていない。図-2 に示すように、3,000MPI 以上になる使用しているメモリ量は爆発的に増加している。「京」コンピュータでは 1 万 MPI まで計算できない現状である。1,000 億格子の計算を実施すると 1000 万格子/MPI を実施する必要があるが、実用の観点で適用できないことになる。

3.2 解析モデルと計算環境 1,000 億格子規模の計

算を実施するためには、実用の 10 万~100 万/MPI から 10 万並列以上の処理が必要となる。これを行うためには代替の並列処理プラットフォームの開発が必要となる(図-1)。詳細は文献-1 を参考されたい。

これより、図-3 に示すように、「京」コンピュータにおいて 98,304MPI 処理で 1,000 億格子の計算モデルを実現できることを確認できた。

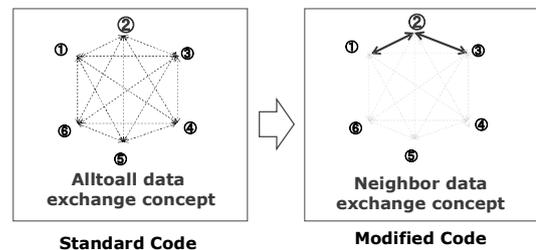


Fig.1 Data exchange optimization

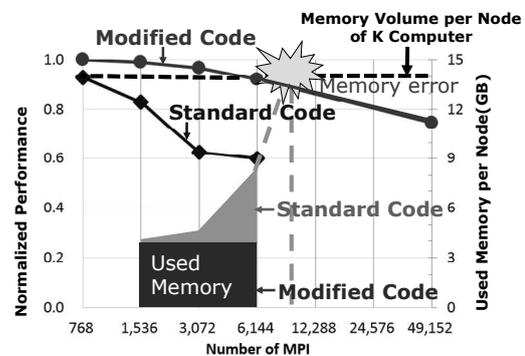


Fig. 2 Performance of Standard and Modified Codes in weak-scaling

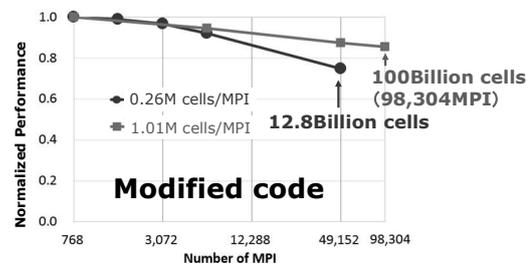


Fig. 3 Performance by model scales in weak-scaling

参考文献

- (1) ファム バン フック, 井上義昭, 浅見暁, 内山学, 千葉修一: 「京」コンピュータでの C++型流体コードにおける MPI の評価, 第 151 回ハイパフォーマンスコンピューティング研究発表会 (2015)