

オープンCAEシンポジウム

OpenFOAMへの疎行列計算ライブラリXabclibの適用と評価

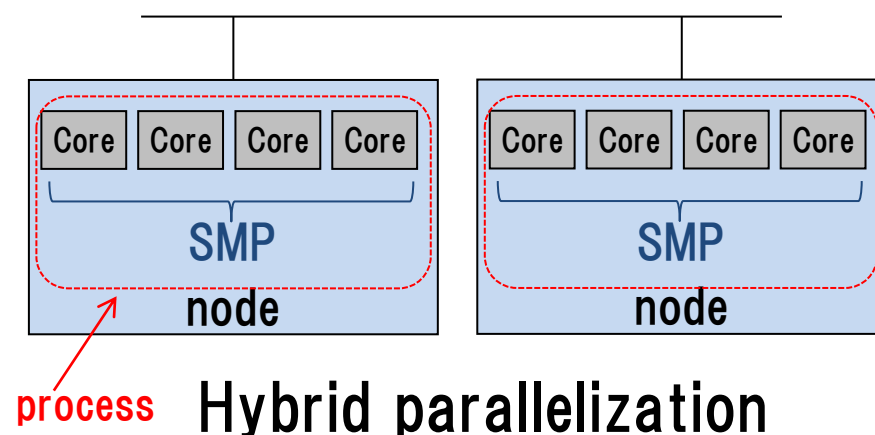
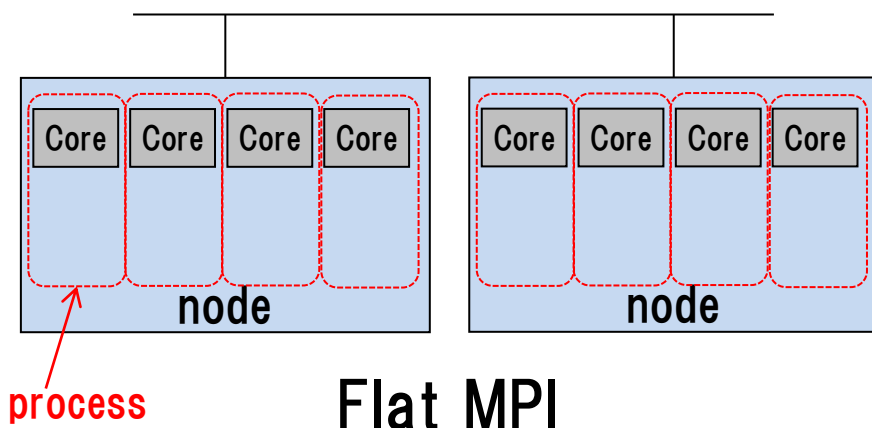
櫻井隆雄（日立製作所）
片桐孝洋（東京大学）
大島聡史（東京大学）
猪貝光祥（日立超LSIシステムズ）
黒田久泰（愛媛大学）

1. 背景と目的
2. Xabclib
3. OpenFOAMへのXabclibの適用
4. 初期評価

本研究は科学研究費 基盤研究B 24300004「実行時自動チューニング機能付き疎行列反復解法ライブラリのエクサスケール化」の助成を受け行われました。

1-1. 背景

- ・ 近年、高性能な計算機は多数のノードによって構成されている
- ・ 各ノードは複数の計算コアを保有(数個～数十個)
- ・ これらの計算機を効率的に使用するには Flat MPI のみではなく、ハイブリッド並列 (SMP + MPI) も必要.
 - ・ Flat MPI
 - ・ MPIの各プロセスを1つの計算コアで実行
 - ・ ハイブリッド並列
 - ・ MPIの各プロセスを2つ以上の計算コアで実行.
 - ・ 例えば、ソケットやノード単位でプロセスを割り当てる

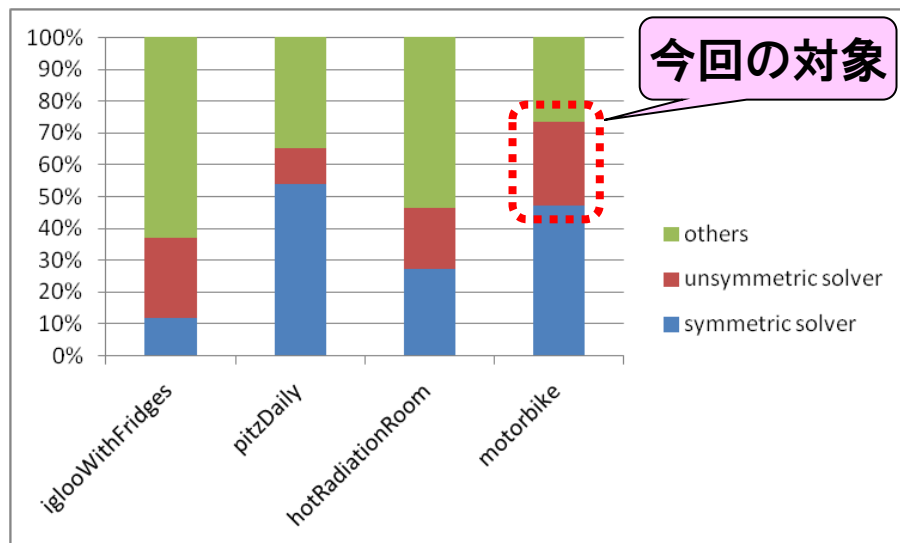


1-2. 本発表の目的

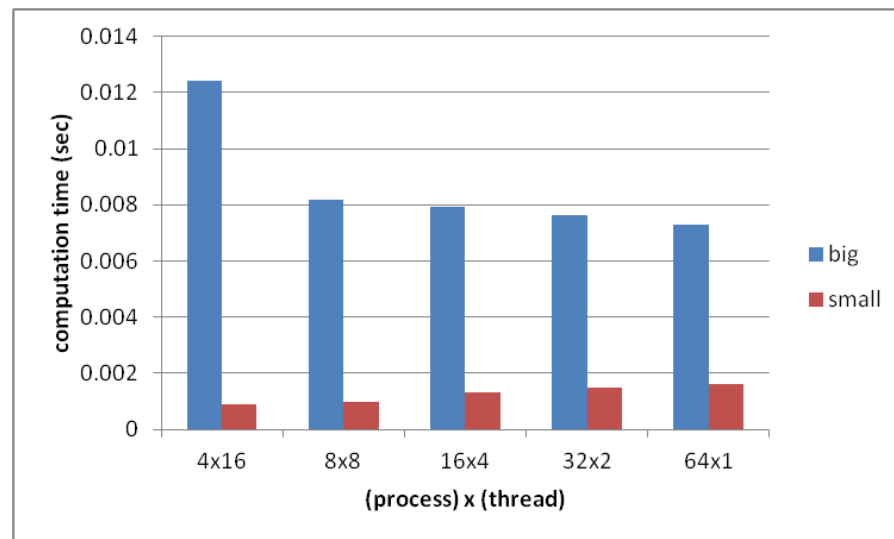
● 対象アプリ: OpenFOAM

- MPIにより並列化
- 連立一次方程式解法 $Ax=b$ のソルバの処理が長い
- 標準で連立一次方程式解法のソルバが実装されている
 - ・ Smooth solver, PBiCG など
 - ・ ソルバのSMP並列化はされていない

➤ 問題サイズが計算ノード数と比べて小さい場合、MPIのみでは性能向上に限界



OpenFOAMの処理時間の内訳
(ソルバの収束条件 $\varepsilon = 10^{-8}$)



ハイブリッド並列化されたBiCGStab法ソルバの
反復1回あたりの処理時間
(big: 160万次元、small: 5万次元)

● 目的

- ハイブリッド並列化を目標としてSMPで並列化されたソルバを適用

- Xabclib

- 数値計算ライブラリ
 - 連立一次方程式の疎行列反復解法
 - 解法: BiCGStab法、GMRES(m)法
 - 前処理: 対角スケーリング、SSOR、DILU、ILU、ILUT(p, τ)
 - 悪条件の問題に効果的
 - 標準固有値問題の疎行列反復解法
- OpenMPによりSMP並列化
- 対応行列格納形式はCRS(Compressed Row Storage)
- OpenATLibを利用した自動チューニング(AT)機能を実装

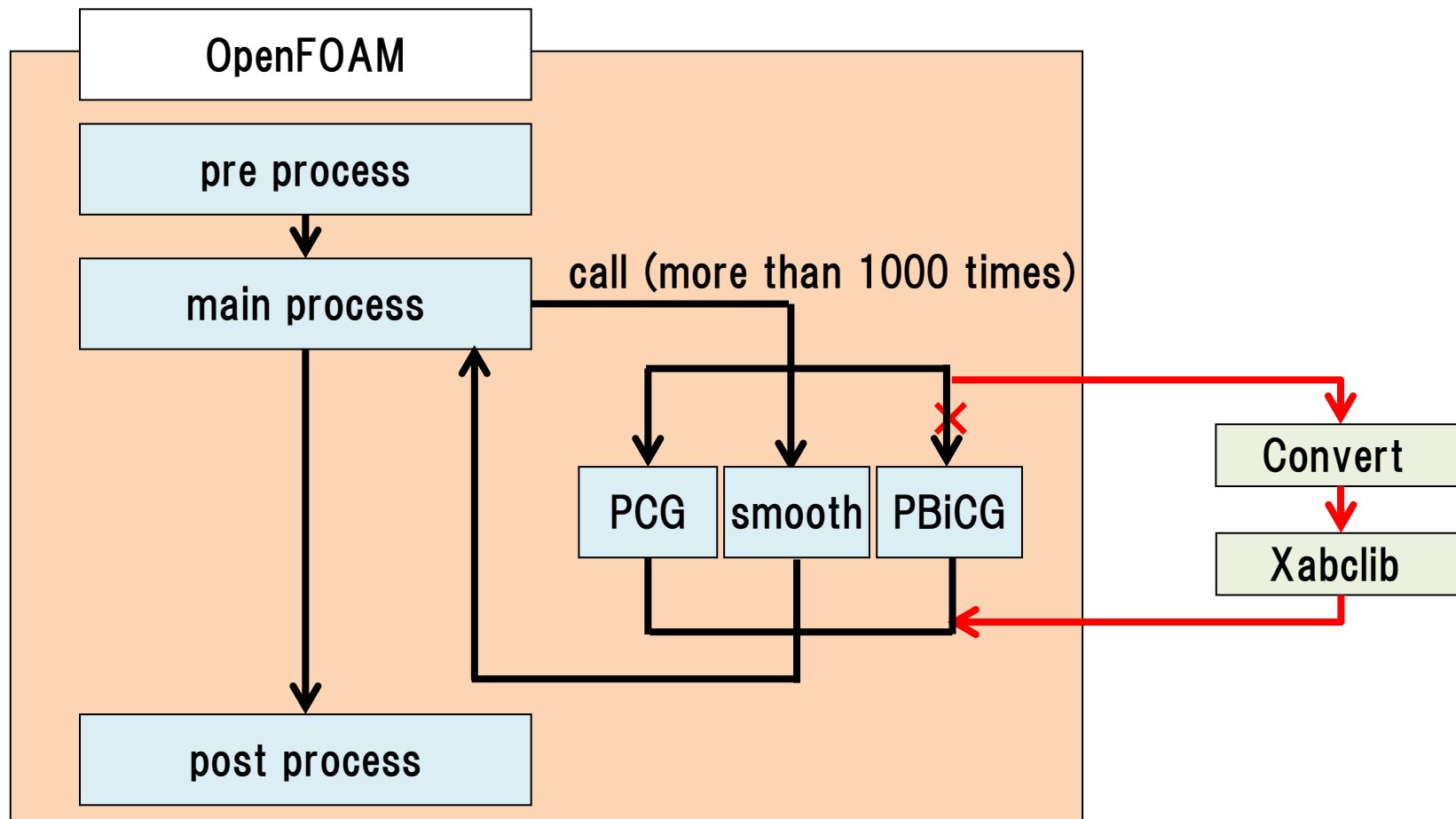
- OpenATLib

- 疎行列反復解法で必要となる機能を集約
 - 疎行列 - ベクトル積(SpMV)の実装方式を問題に合わせて選択
 - 直交化アルゴリズム
 - 解法に必要なパラメタの自動調整機能、など
- ATポリシー機能の提供
 - 実行速度、演算精度、メモリ量
 - 反復解法や前処理法の自動選択

3-1. OpenFOAMへのXabclibの適用

■ 初期実装としてオリジナルのソルバをXabclibに入れ替え

- ◆ OpenFOAM本体からPBiCGが呼ばれる際に、代わりにXabclibを呼び出し
- ◆ 呼び出される際に行列格納形式をCOOをCRSに変換



- XabclibとOpenFOAMのオリジナルのソルバの性能を比較
 - ◆ OpenFOAMの2つのチュートリアルで評価
 - ◆ 非対称問題のみを差し替え
 - ◆ MPIは不使用

●計算条件

#	OpenFOAM	Xabclib
version	2.2.2	1.02
Iterative solver	PBiCG	BiCGStab, GMRES(m)
Preconditioner	DILU	Jacobi, SSOR, DILU, ILU0
Sparse matrix format	COO	CRS
Num of threads	1	1, 2, 4, 8, 16
Convergence criterion	1.0E-08	

4-2. 計算機環境

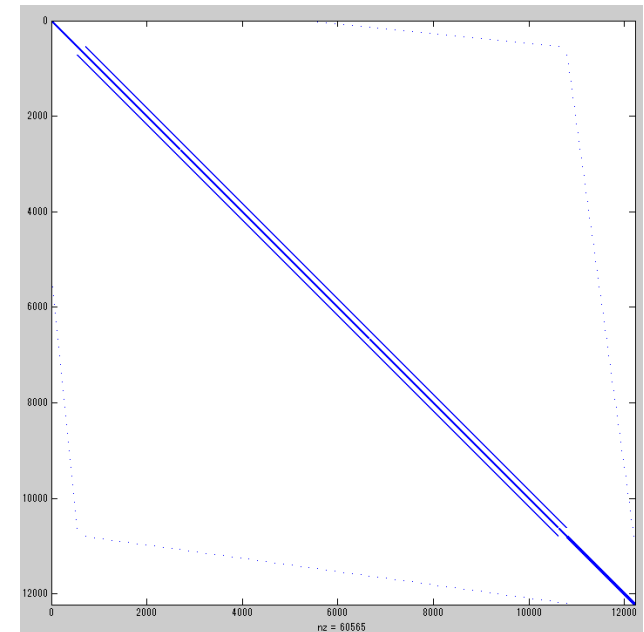
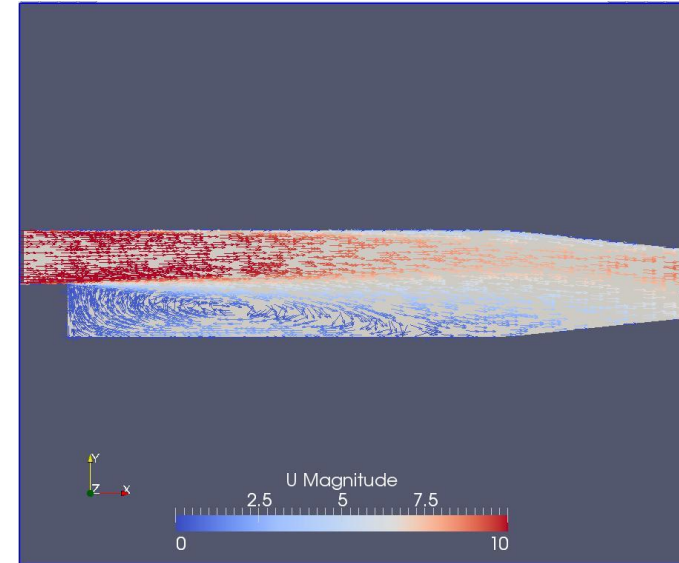
■ 東大FX10を1ノード使用

FX10

CPU	SPARC64™ IXfx 1.848GHz , 1socket, 16 core/node
Main Memory	32GByte
OS	XTCOS
Compiler	Fujitsu Technical Computing Suite V1.0
Compile Option	-Kfast,openmp, -Fixed

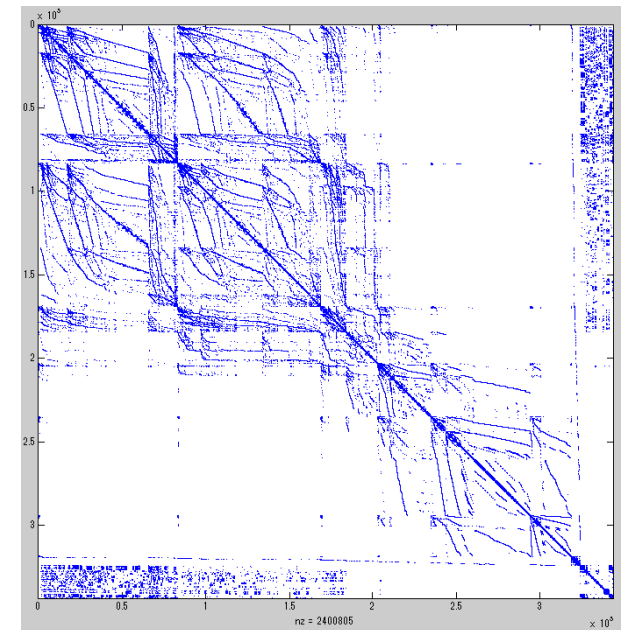
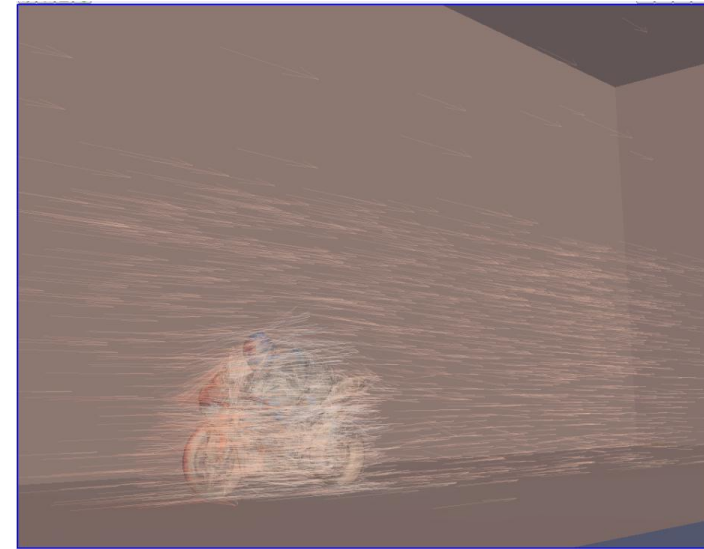
4-3. Target tutorials① simpleFoam/pitzDaily

- SIMPLE法を用いた乱流解析ソルバ
 - 右図のような形状での乱流解析
 - 1反復で以下の求解を実施
 - ・ p : 対称行列
 - ・ U (x方向): 非対称行列
 - ・ U (y方向): 非対称行列
 - ・ k : 非対称行列
 - ・ ε : 非対称行列
 - 行列の次元数は12,225、非零要素数は60,565
 - チュートリアルDefalut設定では786反復
 - ・ 3,144回の非対称行列の反復解法を実行
 - ・ ソルバは初期設定ではPBiCG+DILU
- ➡ Xabclibに差し替えて評価を実施



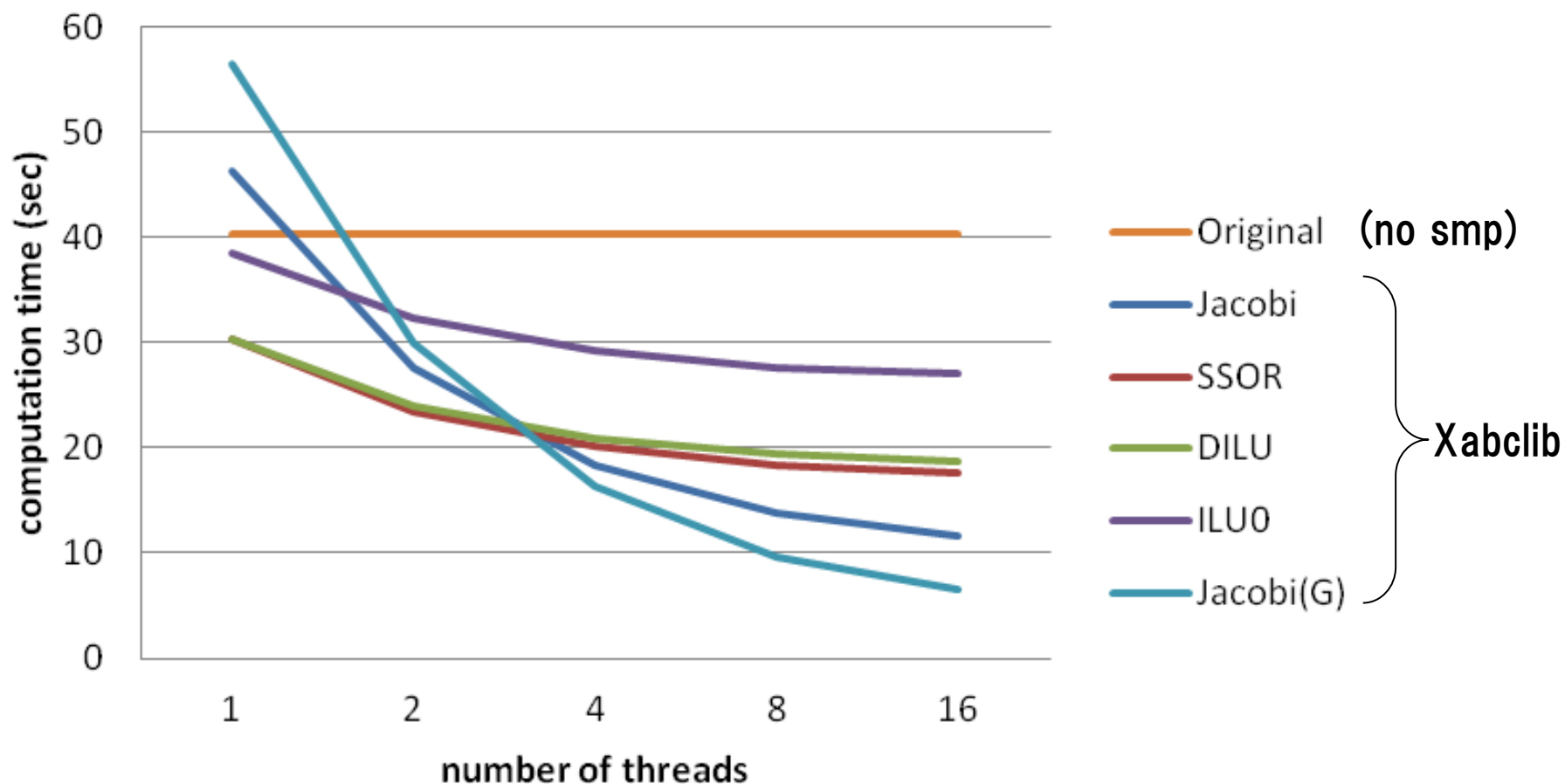
4-4. Target tutorials ② motorBike

- SIMPLE法を用いた乱流解析ソルバ
 - 右図のような形状での乱流解析
 - 1反復で以下の求解を実施
 - ・ p : 対称行列
 - ・ $U(x,y,z \text{ 方向})$: 非対称行列
 - ・ k : 非対称行列
 - ・ ω : 非対称行列
 - 行列の次元数は343,673、非零要素数は2,400,805
 - チュートリアルDefalut設定では500反復
 - ・ 2,500回の非対称行列の反復解法を実行
 - ・ ソルバは初期設定ではGauss-Seidel法
- ➡ Xabclibに差し替えて評価を実施



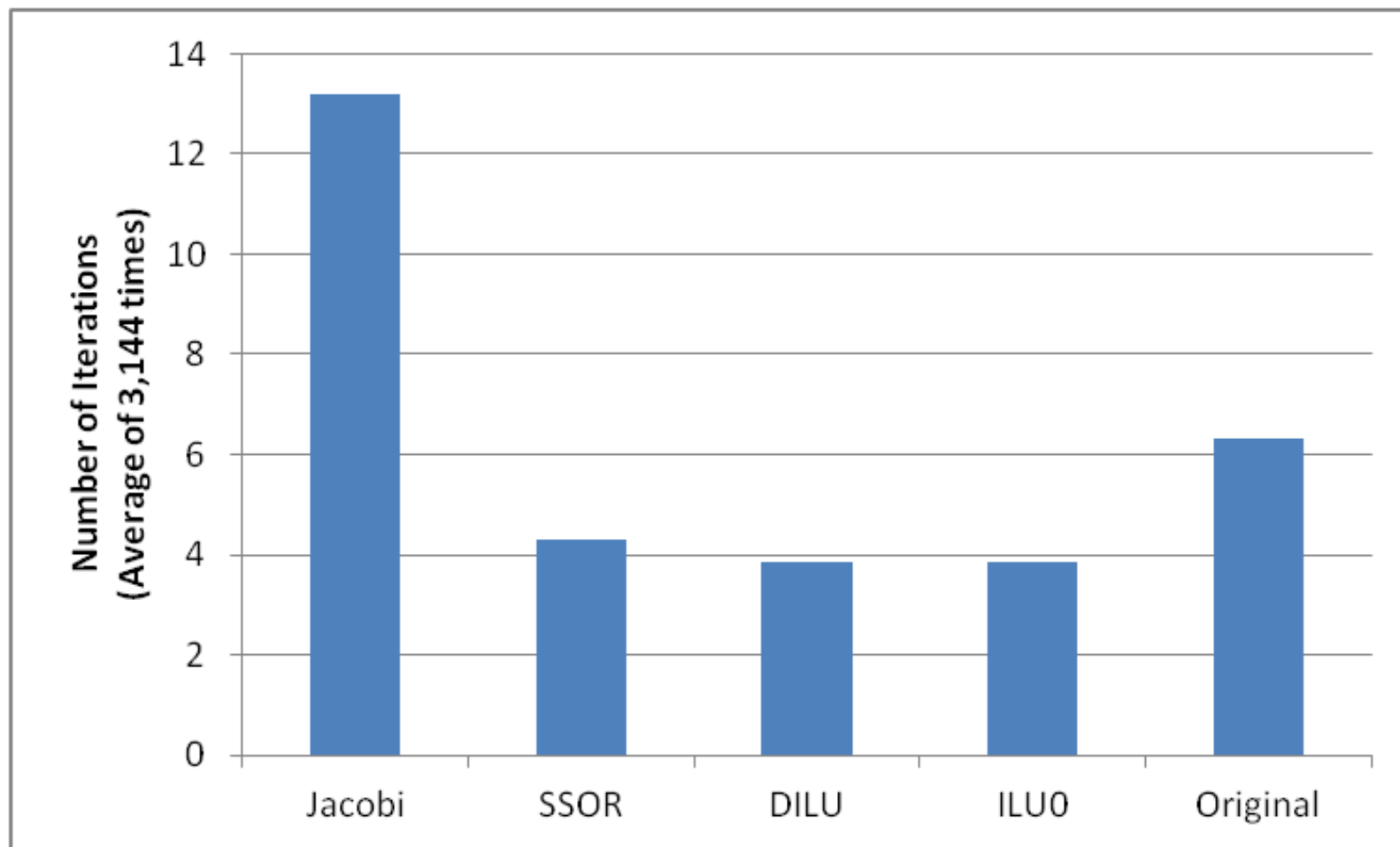
4-5. pitzDailyの計算時間

- 3,144回の呼び出しの合計値
- Xabclibにより、1スレッド時は1.3倍に高速化 (SSOR+BiCGStab)
16スレッド時は6.1倍に高速化 (Jacobi+GMRES)



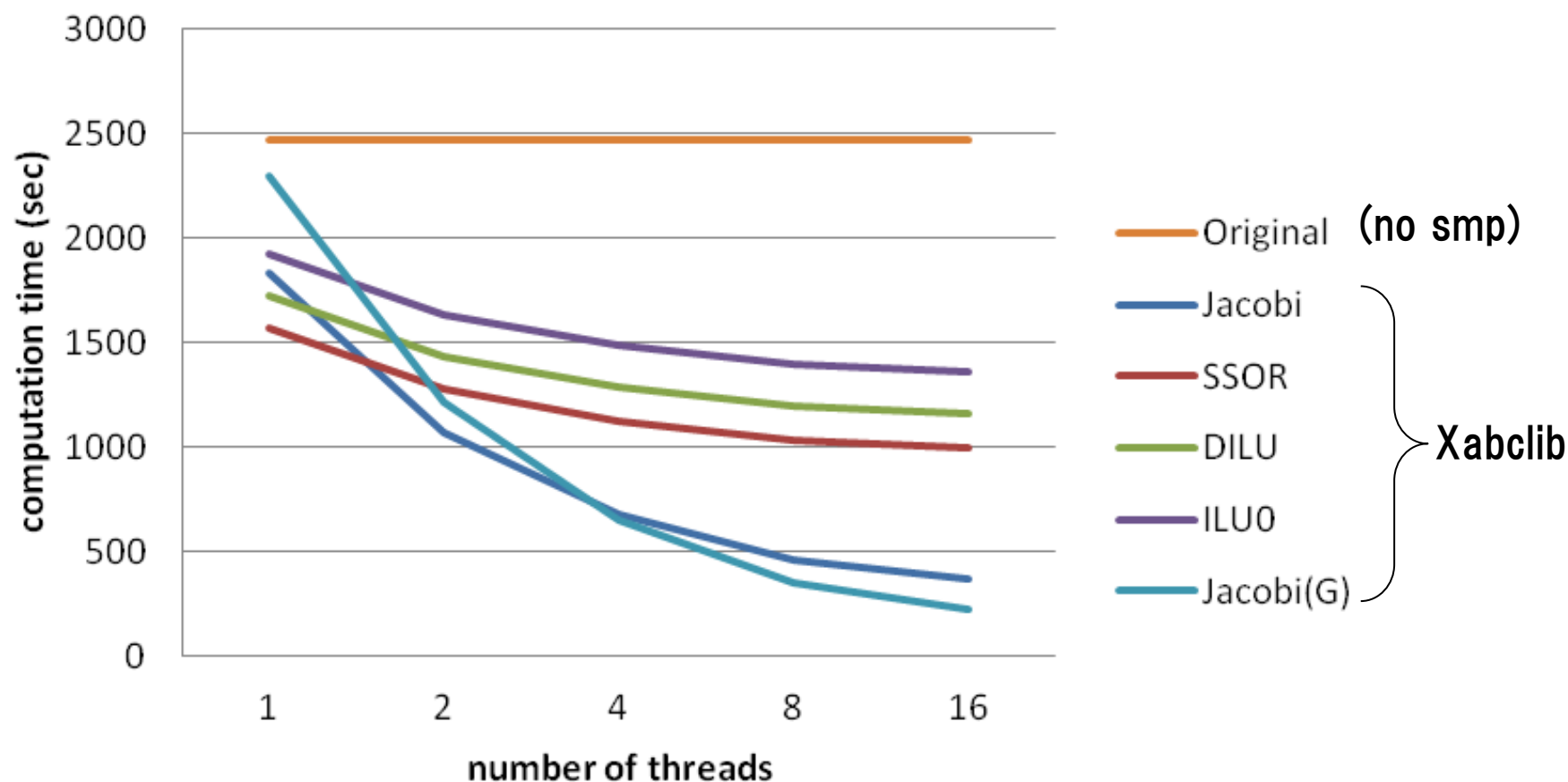
4-6. pitzDailyの反復回数

- 1回あたりの反復回数は非常に少ない
 - ◆ 全ての前処理で反復回数は14回以下
- pitzDailyの行列は非常に解きやすい



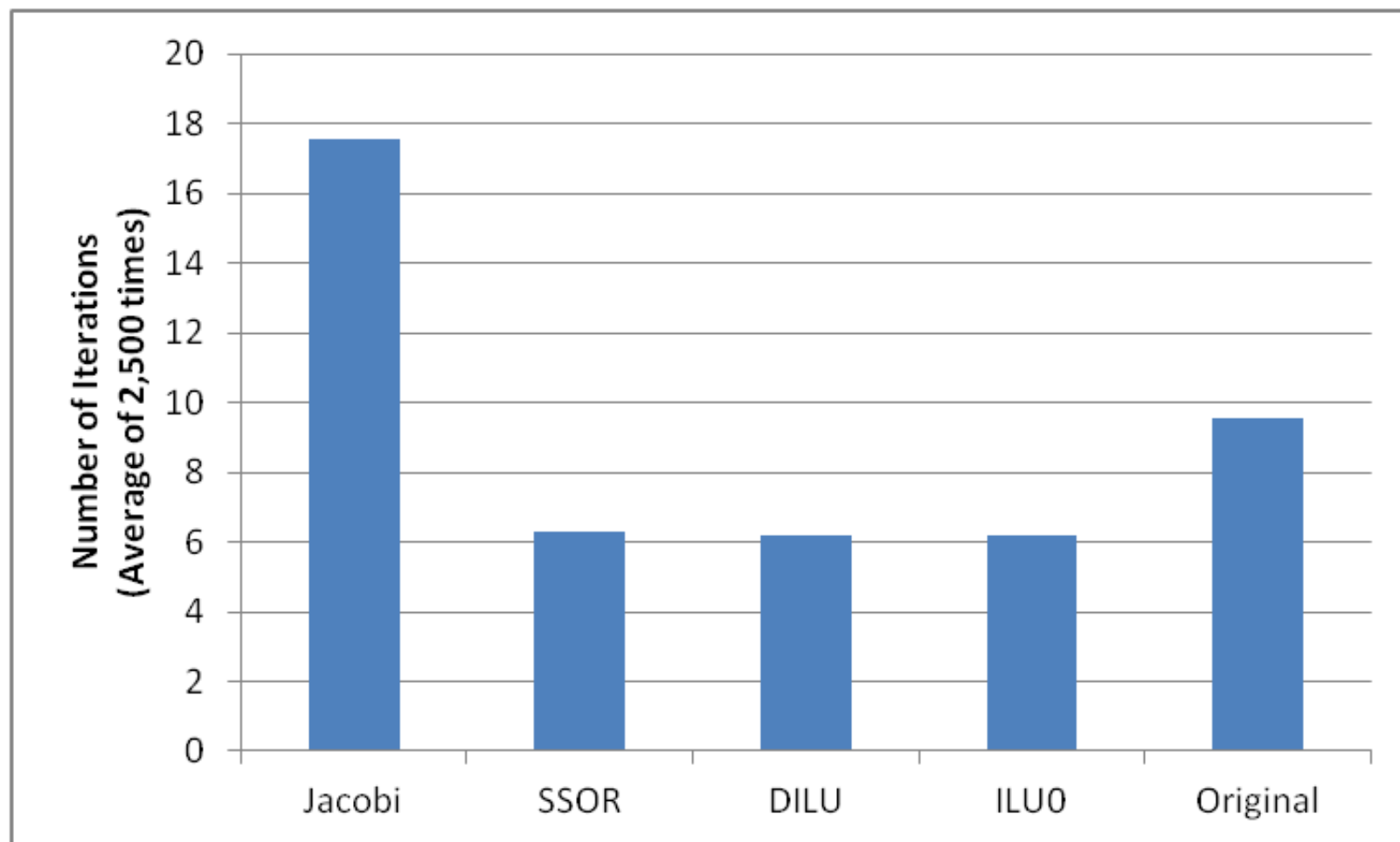
4-7. motorBikeの計算時間

- 2,500回の呼び出しの合計値
- Xabclibにより、1スレッド時は1.6倍に高速化 (SSOR+BiCGStab)
16スレッド時は11.1倍に高速化(Jacobi+GMRES)



4-8. motorBikeの反復回数

- 1回あたりの反復回数は非常に少ない
 - ◆ 全ての前処理で反復回数は18回以下
- motorBikeの行列は非常に解きやすい



- OpenFOAMのソルバをXabclibに差し替える機能を開発
- 2つのチュートリアルで評価した結果、16SMPで非対称ソルバ部分が最大11.1倍に高速化
- 今後の課題
 - MPI並列との比較
 - 対称ソルバの差し替え
 - Xabclibの自動チューニング機能の効果の評価
 - Xabclibによるハイブリッド並列化の実現
 - 強力な前処理による悪条件問題の収束性向上効果の評価
- 連立一次方程式解法部分でお悩み（遅い、解けない）方がいらっしゃいましたらご連絡ください
- Xabclibは以下で公開中

<http://www.abc-lib.org/Xabclib/index-j.html>

連絡先: xabclib-dev@kata-lab.itc.u-tokyo.ac.jp