

特集

大規模流動解析 on HPC

流体運動に関する方程式を数値的に解くことによって流れ状態を詳細に定量評価する数値流体解析は、各種の流体機械や構造物の設計ツールとして現在では必須の存在となっている。単相流などの単純系では計算手法がほぼ確立し、近年は相変化や化学反応を伴う流れや動的境界面との連成解析など、様々な物理現象を数値モデルで表現して解くことが可能となり、また海洋／気象現象などの大規模な流動現象を高精細かつフルスケールで解くような数値モデル開発が進んでいる。このような大規模複雑計算を支える基盤技術である計算機（スーパーコンピュータ）の能力も飛躍的に向上しており、直近で日本一のOakforest-PACS (2016年, 25 PFLOPS, 東大-筑波大)では黎明期のCray-1 (1976年, 160 MFLOPS, Cray Research) に対して約1.6億倍に達している。本特集では国内の主要HPC拠点における大規模で複雑な流体解析事例を紹介することで、化学工学分野におけるHPCの利用促進を期待する。 (編集担当：坂本明洋)†

HPCIと大規模流動解析

中島 浩

1. はじめに

HPCI (High-Performance Computing Infrastructure) は、京コンピュータを中核として、SINET5 (Science Information Network 5) で全国12拠点のスーパーコンピュータを結合した、世界でも有数の大規模計算基盤である¹⁾。HPCIを構成する各機関は、文部科学省の「革新的ハイパフォーマンス・コンピューティング・インフラ (HPCI) 構築事業」の運用事務局であり、また特定先端大型研究施設としての京コンピュータの利用促進のための登録施設利用促進機関(登録機関)でもある高度情報科学技術研究機構 (RIST) との密接な連携のもとで、平成24年度よりHPCIを利用する公募型研究のための計算資源提供と研究支援をおこなっている。

この公募型研究は、4月から実施されている平成29年度分を含めて総計646件(「京」利用361件、「京以外」利用285件)にも及び、我が国の高性能計算技術の進歩はもちろん、科学技術全体に対して大きな貢献を成してきている。中でも化学工学誌がカバーする「物質・材料・化学」の分野に属する

課題は全体の約1/4を占めており、この分野での高性能計算の重要性を示すとともに、今回の特集テーマである流動解析をはじめとする高度な大規模解析に関する研究開発が活発におこなわれていることを示している。

以下本稿では、HPCIおよびそれと密接に関係する学際大規模情報基盤共同利用・共同研究拠点 (JHPCN) の枠組や利用可能な計算資源を紹介するとともに、HPCIを支えるプレーヤーの一つであるHPCIコンソーシアムの役割と、今後の大規模流動解析に対する期待を述べる。

2. HPCIと計算資源

HPCIは、図1に示す12拠点(9大学, 3研究機関)が有する多様なスーパーコンピュータを、高速ネットワークSINET5で結合した広域分散型の高性能計算基盤であり、統一アカウント(HPCIアカウント)を用いたシングルサインオンをはじめとするさまざまな連携利用機能の構築・運用が、各拠点と運用事務局であるRIST、およびSINET5の構築・運用を担っている国立情報学研究所(NII)によっておこなわれている。これらの拠点の計算資源を利用する研究課題の公募とピアレビューによる選定はRISTが実施し、毎年「京」の利用課題が70件程度、またそれ以外の資源を利用する課題も70件程度、それぞれ採択・実施されている。また12拠点中の8拠点は、JHPCNの構成拠点でもあり、HPCIと連携した公募型の共同研究を毎年40件程度実施している。これらの拠点がHPCIに提供している計算資源のうち、



High-Performance Computing Infrastructure (HPCI) and Large-Scale Multiphase Flow Analyses

Hiroshi NAKASHIMA

1981年 京都大学工学研究科情報工学専攻修士課程修了

現在 京都大学学術情報メディアセンター教授、(一社)HPCIコンソーシアム理事長

連絡先：〒606-8501 京都市左京区吉田本町

E-mail h.nakashima@media.kyoto-u.ac.jp

2017年2月7日受理

† Sakamoto, A. 平成28, 29年度化工誌編集委員(特集5号主査) 新日鐵住金(株)技術開発本部プロセス研究所



図1 HPCI構成拠点

表1 HPCIの計算資源

機関(略称)	システム名称	ピーク演算性能		負担金(千円)	注
		システム(PFlops)	ノード(TFlops)		
北大	日立SR16000	0.17	0.98	344.5	(1)
東北大	NEC SX-ACE	0.71	0.28	35.2	(1)
JCAHPC	Oakforest-PACS	25.00	3.05	50.0	(3)
筑波大	COMA	1.00	2.55	205.0	
東大	富士通 FX10	1.14	0.24	30.0	
東工大	Tsubame-2.5	5.76	4.08	230.4	(1)
名大	富士通 FX100	3.24	1.13	20.7	(1)
京大	Cray XC40	5.48	3.05	57.5	
阪大	NEC SX-ACE	0.14	0.28	78.0	(1)
九大	富士通 CX400	0.97	1.52	4.0	
JAMSTEC	NEC SX-ACE	1.41	0.28	1134.7	(2)
理研AICS	京	10.62	0.13	83.8	(2)
統数研	SGI UV2000	0.10	0.38	---	

(1) 従量制課金

(2) 産業利用を対象とした従量制課金

(3) 筑波大・東大による共同運用施設

主要なものを表1に示す。また、各資源を原則として学術目的で有償利用する場合の1ノード・年あたりの利用負担金(概算額)も併せて示す。なお、負担金の額は利用資源量など利用形態によって異なることもあるが、1ノード・年あたりの金額が最小となる形態に基づいて算出している。また従量課金を採用している資源については、実際の年間利用時間を24時間×240日として算出している。したがって提示している額はあくまで参考値であり、有償利用を検討する場合には、HPCIシステム構成機関の一覧²⁾に掲載の各拠点web siteへのリンクを通じて、各資源の利用負担金規程などを参照されたい。

表に示すように、各拠点ではそれぞれ特徴あるさまざまな資源を提供しており、用途に応じて適切なアーキテクチャや規模の資源を選択することができる。またピーク演算性能は、システムレベルで1 PFlopsを、またノード単体レベルでは1 TFlopsを、それぞれ超えるものが既に多数あ

り、今後はOakforest-PACSのように「京」を上回るものも少なからず登場するものと予想される。

3. HPCIコンソーシアム

平成24年4月に設立されたHPCIコンソーシアムは、HPCIを我が国の計算科学技術関連コミュニティ全体に開かれたものとするために、その構築・運用・課題選定・利用支援のあり方についてのコミュニティの意見を集約し、それに基づく提言を文部科学省などの関係各方面に対しておこなうことを、主要な任務としている³⁾。コンソーシアムには、計算科学のさまざまな分野のユーザコミュニティを代表する組織(ユーザコミュニティ代表機関、16組織)と、HPCIあるいは個別のコミュニティに計算資源を提供する組織(HPCIシステム構成機関、20組織)から、それぞれの代表者が正会員として参加しているほか、計算科学に関連する15の組織の代表者がアソシエイト会員として参加している。

コンソーシアムが最近力を入れているテーマは、「京」以外の計算資源、いわゆる「第二階層資源」の性能が表1に示したように大幅に向上していることを踏まえて、これらの資源の整備・運用主体である各機関の独自性・独立性と、HPCI全体に対するコミュニティのニーズとを、いかに調和させてHPCIを改善・発展させるかの方策である。これらに関する提言は近々公表する予定であるので、是非ご一読いただきたい。

4. 今後の大規模流動解析

今回の特集テーマである大規模な流動解析は、HPCI利用研究課題やJHPCN共同研究課題として数多く実施されており、本号に寄稿された論文も全てこれらの研究に基づくものとなっている。一口に流動解析と言っても、その方法論やアルゴリズムはさまざまであるが、共通する課題として局所的にも大域的にも計算が複雑化することが挙げられる。

局所的な計算、たとえば格子点あたりの計算の複雑化は、計算対象となる物理量の増加やその表現形式の多様化を伴うことが多いが、これらに起因する参照・更新対象配列の増加や間接参照の存在が、最近のスカラプロセッサの高性能化の源泉であるSIMD機構の活用を阻害することがしばしばある。また、大域的な計算複雑化の代表的な要因である並列計算負荷の均衡化は、一般にプログラムの複雑化・肥大化を招き、開発コストも大きい。これらの問題に対して共通解を見出すことは容易ではないが、たとえばJHPCNの枠組を活用するなどして、アプリケーションのニーズと計算技術のシーズをマッチさせた研究開発が進むことを期待したい。

参考文献

- 1) HPCI: High-Performance Computing Infrastructure <http://www.hpci-office.jp/>
- 2) HPCIシステム構成機関リンク http://www.hpci-office.jp/pages/hpci_link
- 3) 一般社団法人HPCIコンソーシアム <http://hpci-c.jp/>