

平成15年度 地球シミュレータ利用報告会
(平成15年1月11日 地球シミュレータセンター)



研究課題テーマ

固体地球シミュレーション・ プラットフォーム

利用責任者 **奥田 洋司** (東京大学人工物工学研究センター)

中島研吾(RIST), 江連真一(RIST), 陳莉(RIST), 藤代一成(お茶大), 櫛田慶幸(東大), 鈴木正昭(東大), 今村通孝(東大), GrossLutz(UQ, iSERBO), Xu Changhai(Purdue), Ng Esmond(LBNL)

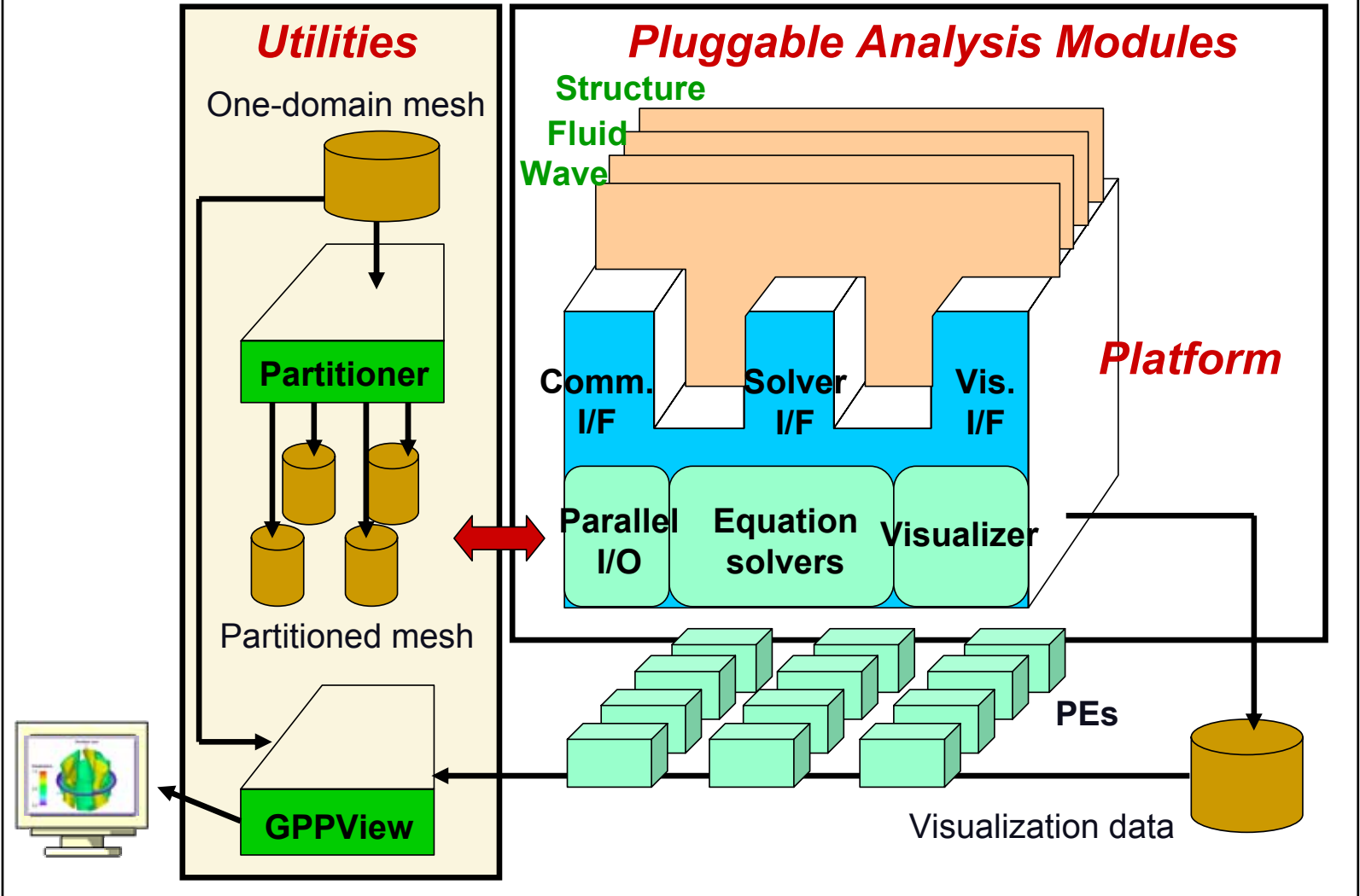
目次

- 研究概要
- H15年度 研究計画
- 今年度の成果
- 今後の研究計画

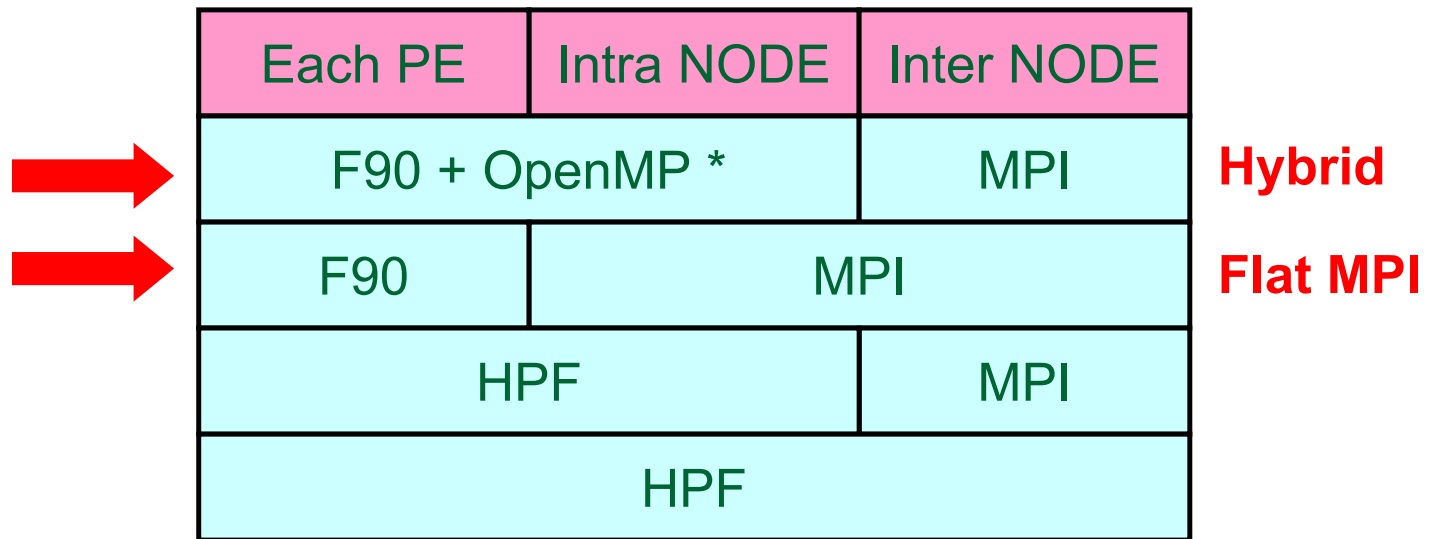
研究概要(全体計画)

- 固体地球シミュレーション・プラットフォーム GeoFEMにおいて、プラグイン形式による解析システム結合、大規模線形システムの高速並列解法、大規模並列可視化、その他の汎用的解析支援機能に関する研究を行う。

System Configuration of GeoFEM



Parallel Programming Model



* Visualization subsystem : C + Pthread

目次

- 研究概要
- H15年度 研究計画
- 今年度の成果
- 今後の研究計画

研究計画(H15年度)

固体地球変動予測のための大規模シミュレーションプラットフォームGeoFEMについて

- ① 並列反復法ソルバ・解析モジュール部の最適化, 性能評価
- ② 統合化プラットフォームの最適化・フィージビリティスタディ
- ③ 固体地球シミュレーションへの適用(連成解析を含む)
- ④ 実機工学問題解析
- ⑤ プラットフォームの格子系拡張のための基礎データ取得

目次

- 研究概要
- H15年度 研究計画
- 今年度の成果
- 今後の研究計画

本年度の成果

① 並列反復法ソルバ・解析モジュール部の最適化，性能評価

- 熱応力解析機能をプラグインしたシステムにおいて弾性解析ベンチマークを行い，512ノード使用時（このときの解析自由度は8億自由度）に並列化効率84%，並列化率0.999955，を達成した。
- Selective Blocking とDJDSオーダリングにより，接触問題（拡張ラグランジアン法）に有効な前処理の開発および最適化を行った。

Re-Ordering Technique for Vector/Parallel Architectures

Cyclic DJDS(RCM+CMC) Re-Ordering

(ノード内並列およびベクトル化
のための最適化)

(ノード間並列は領域分割)

RCM (Reverse Cuthill-McKee) re-ordering

CMC (Cyclic Multicolor) re-ordering

Vector
SMP Parallel

DJDS re-ordering : different ordering for
L/U computation

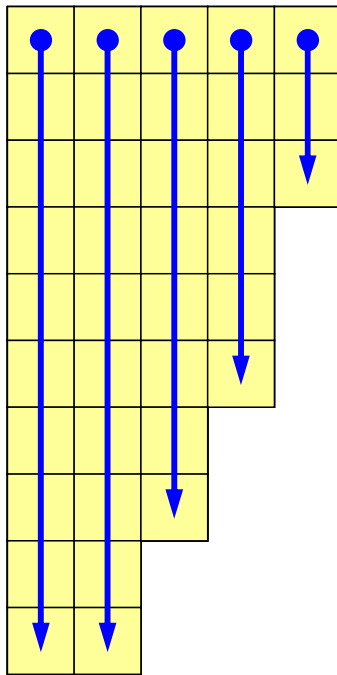
Vector

Cyclic DJDS for SMP unit

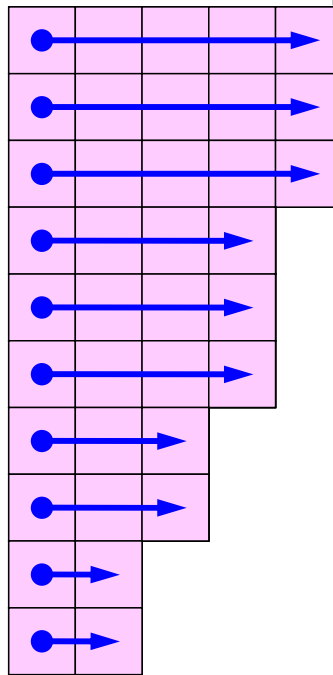
SMP Parallel

SMPクラスタ型ベクトル計算機用 オーダリング

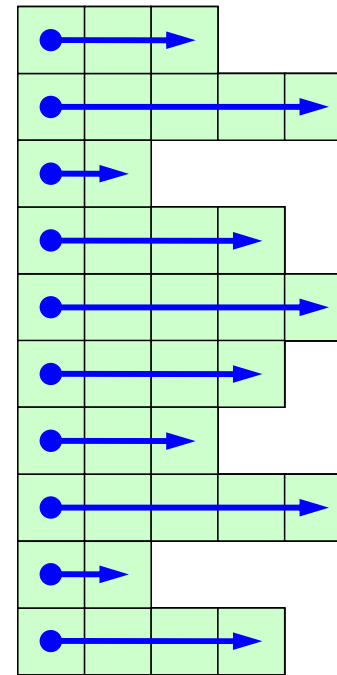
PDJDS/CM-RCM



PDCRS/CM-RCM
short innermost loop



CRS no re-ordering



Elastic Analysis Benchmark

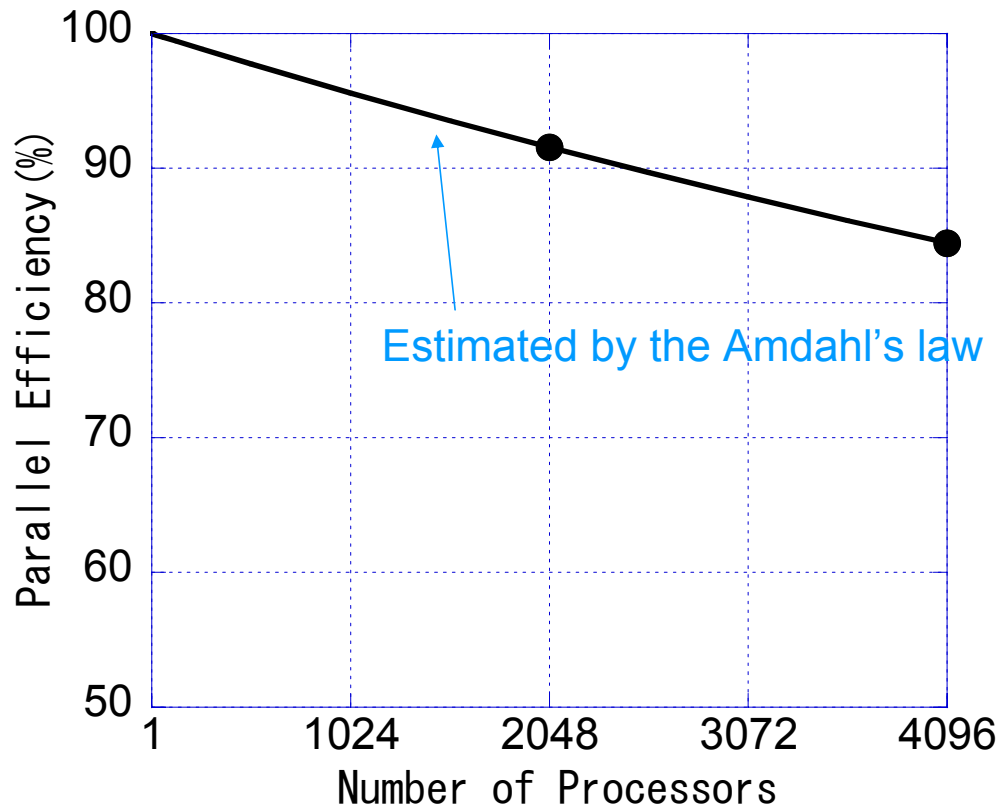
- Computational speed (Fixed problem size per node)

- 9.8 TFLOPS (using 512 nodes, 31 % to peak, 6.4 GDOFs, work ratio > 95%)

max. number of nodes for users

- Parallel efficiency

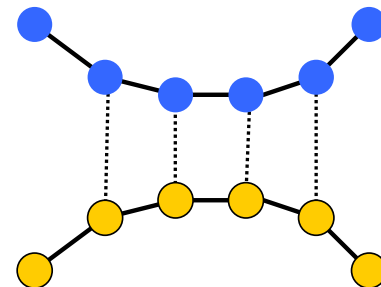
- Compute 0.8 GDOF problem using 256 nodes and 512 nodes, and estimate the parallel efficiency by the Amdahl's law
- Parallel efficiency = 84% when using 512 nodes (parallelization ratio = 0.999955)



Parallel efficiency for 3D linear elastic problem
(estimated with the Amdahl's law)

Preconditioning for Contact Problems (cont.)

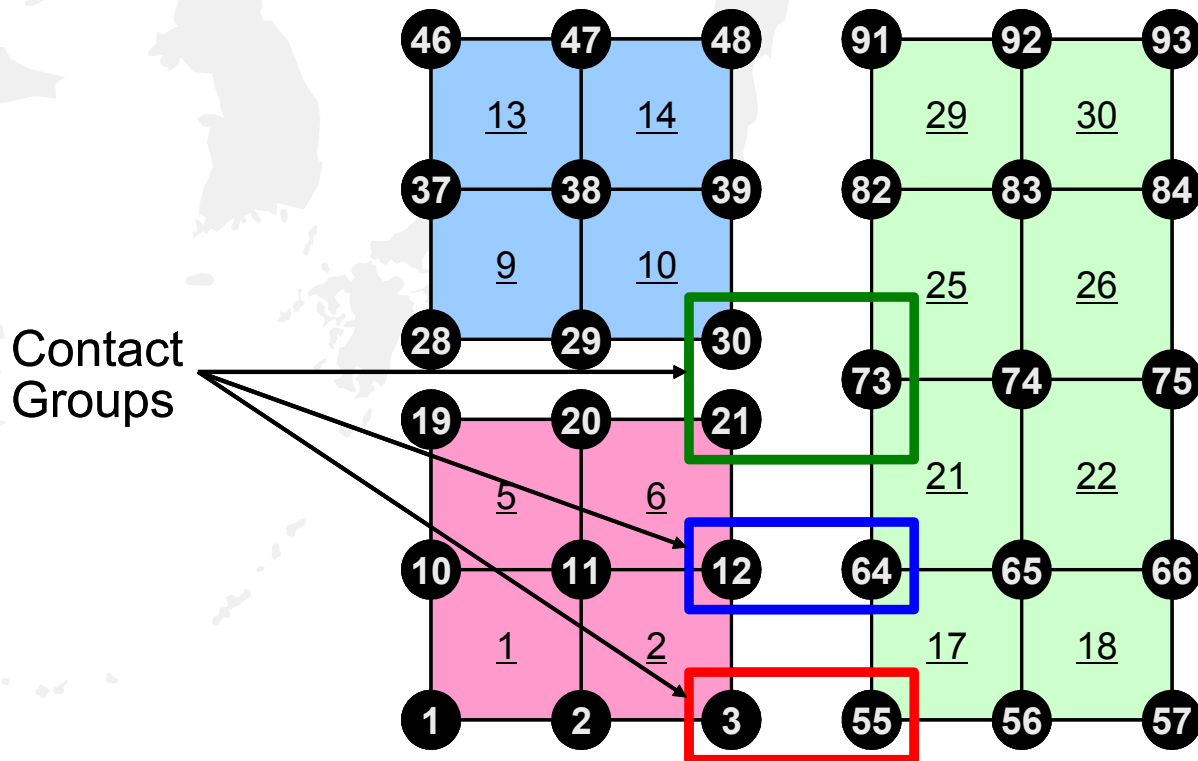
- Assumptions
 - Infinitesimal deformation, static contact relationship.
 - Location of nodes in each "contact pair" is identical.
 - No friction : Symmetric coefficient matrix
- Special preconditioning : ***Selective Blocking.***
 - provides robust and smooth convergence in 3D solid mechanics simulations for geophysics with contact.
- Computations
 - Hitachi SR2201 (Univ. Tokyo)
 - Earth Simulator



Selective Blocking

Special Method for Contact Problem

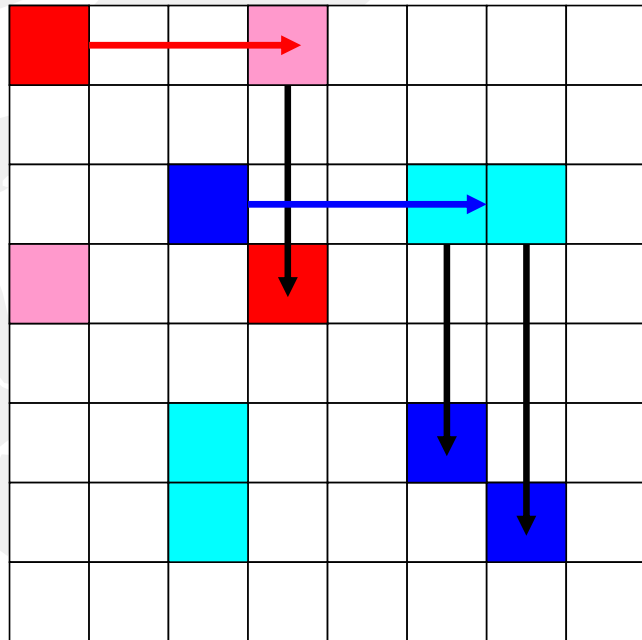
Strongly coupled nodes are put into the same diagonal block.



Selective Blocking

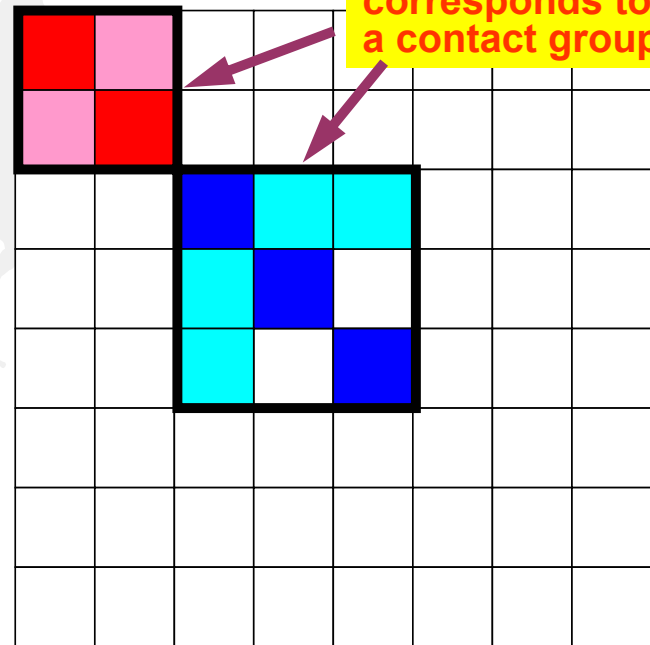
Special Method for Contact Problem

Strongly coupled nodes are put into the same diagonal block.



Initial Coef. Matrix

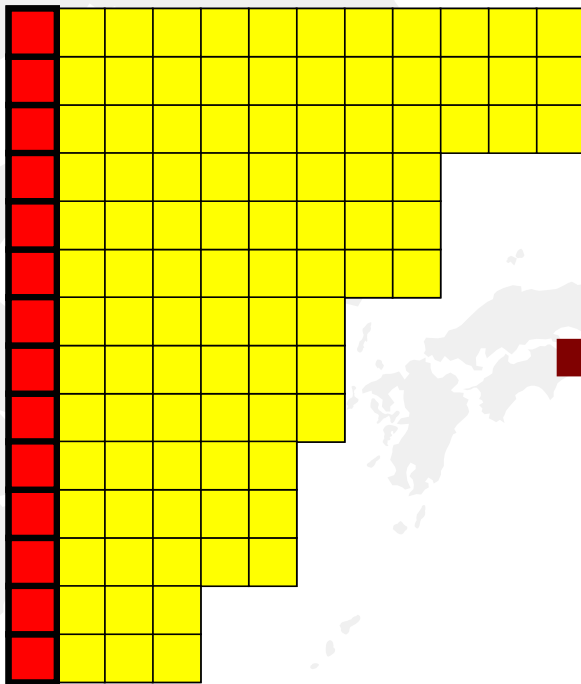
find strongly coupled contact groups (each small square:3x3)



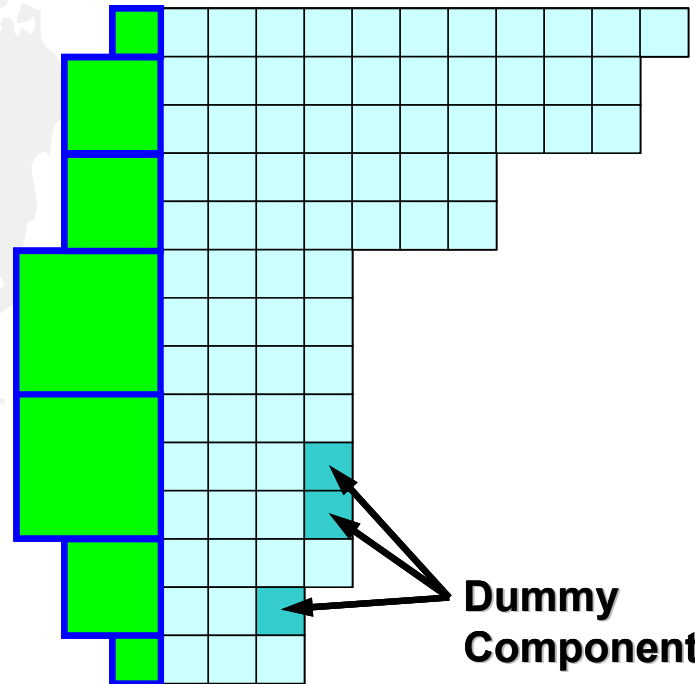
Reordered/Blocked Matrix
nodes/block

DJDS for Selective Blocking

Dummy elements to maintain a smooth decrease in the number of off-diagonal components in descending order



3x3 blocks

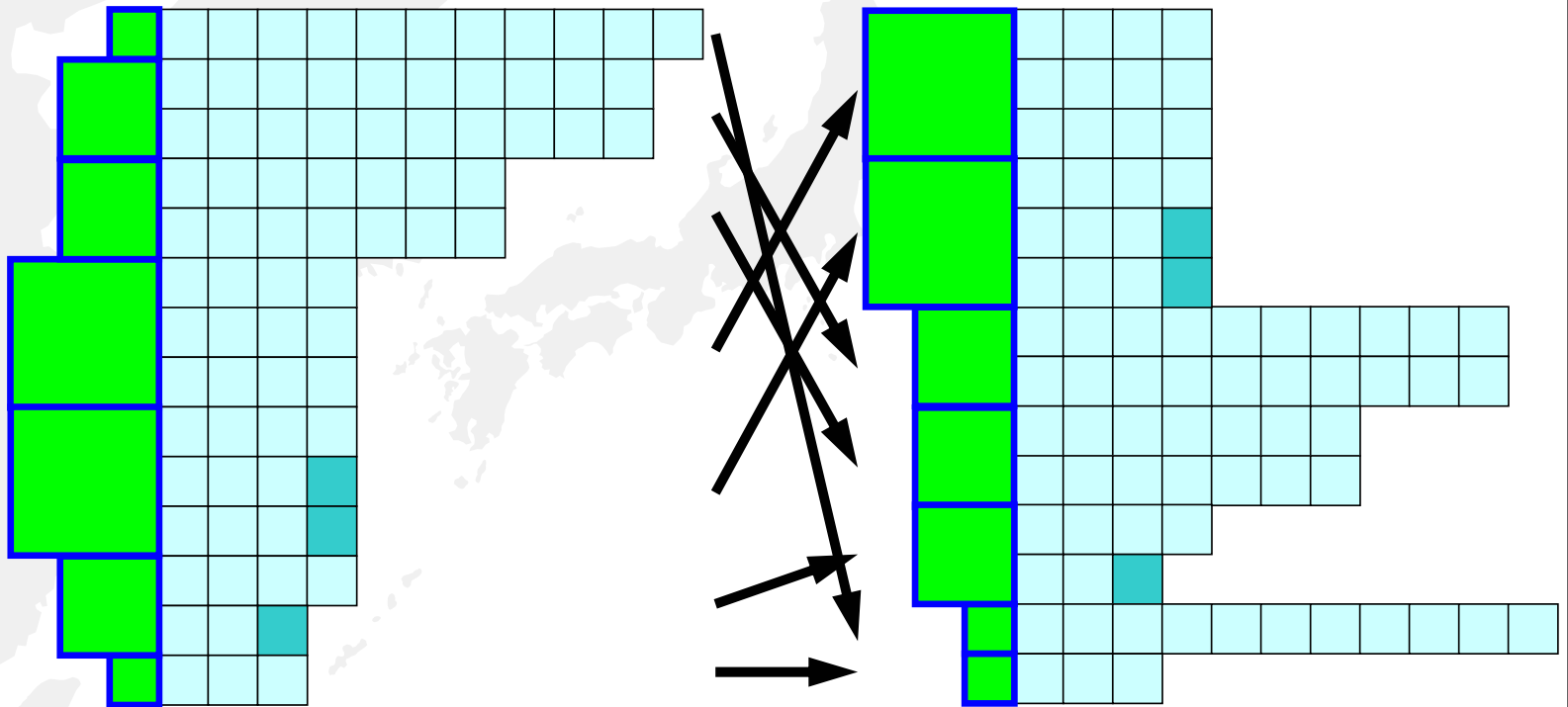


**Dummy
Components**

**Supernode/Selective
Blocking**

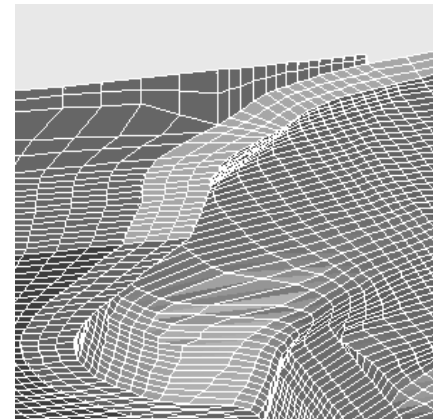
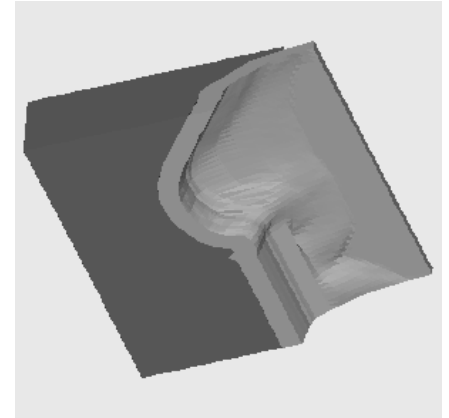
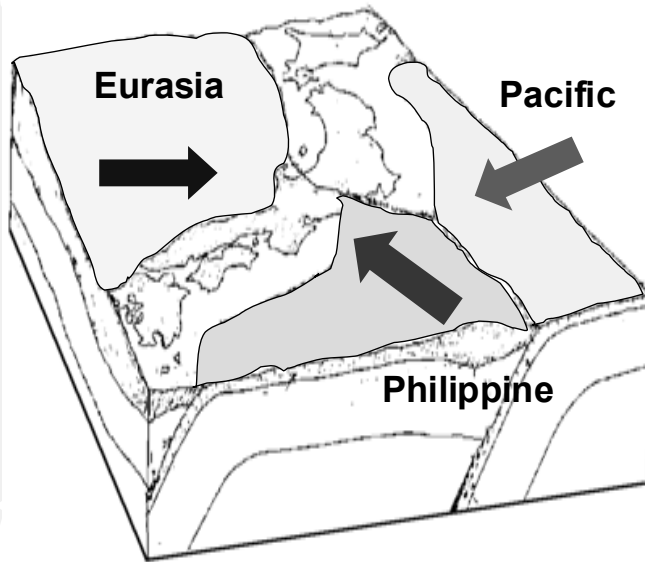
DJDS for Selective Blocking

Reordering of selective blocks according to block size



South-West Japan (SWJ)

fixed at $z=z_{\min}$ + body force

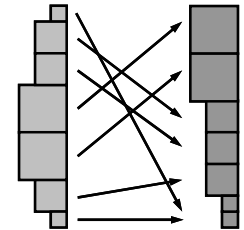


DJDS for Selective Blocking

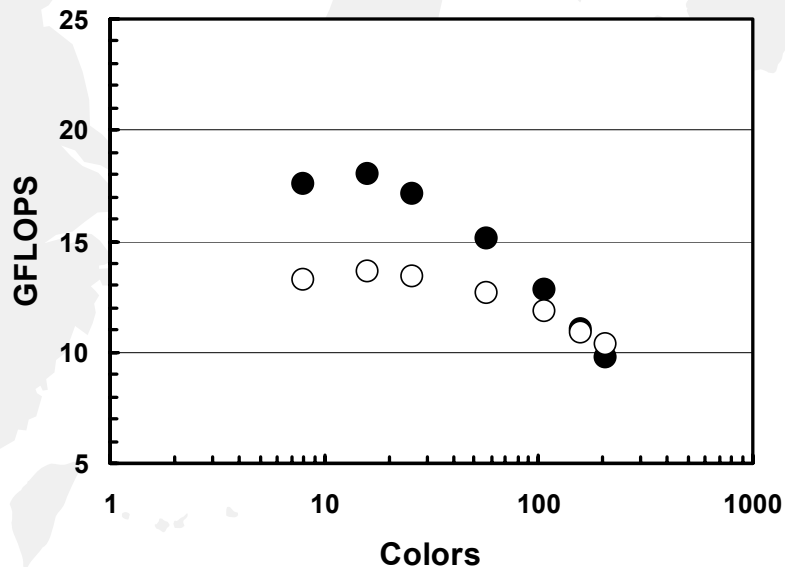
1 SMP Node of ES, 64 GFLOPS Peak Performance

● with Reordering, ○ without Reordering

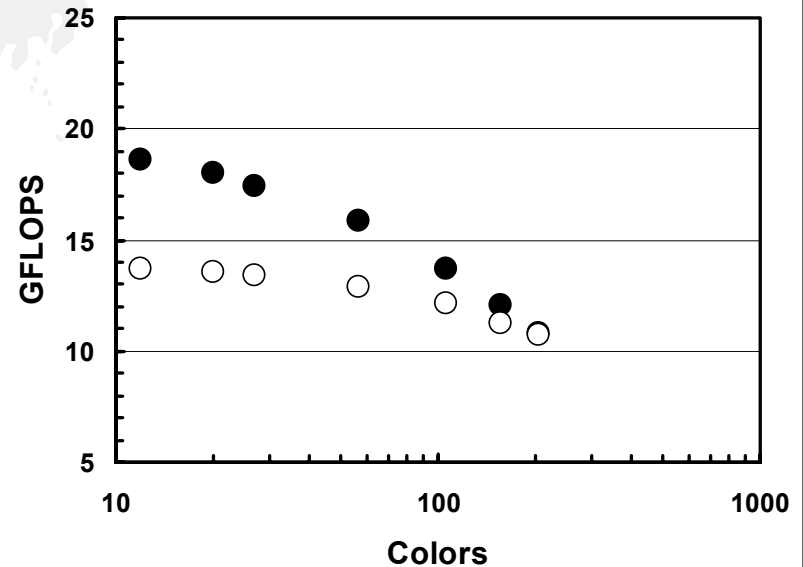
HYBRID Parallel Programming Model



Simple Block



SWJ



South-West Japan Model

7,767,002 nodes, 23,301,006 DOF

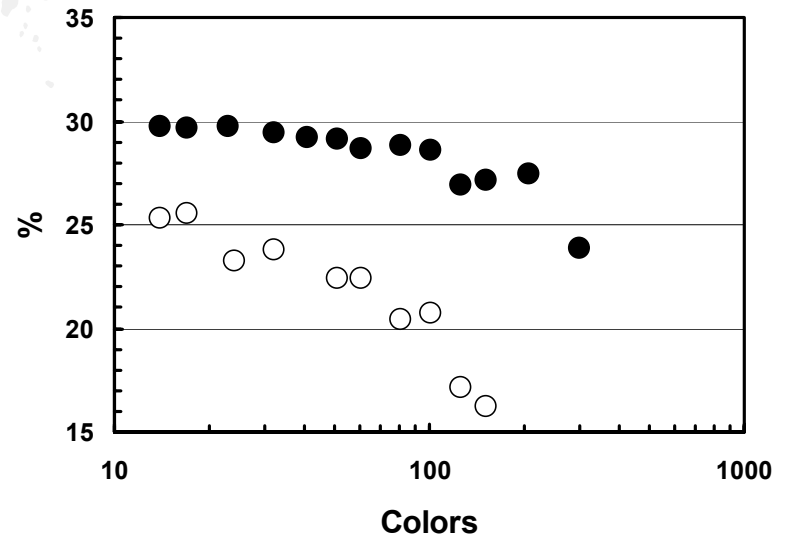
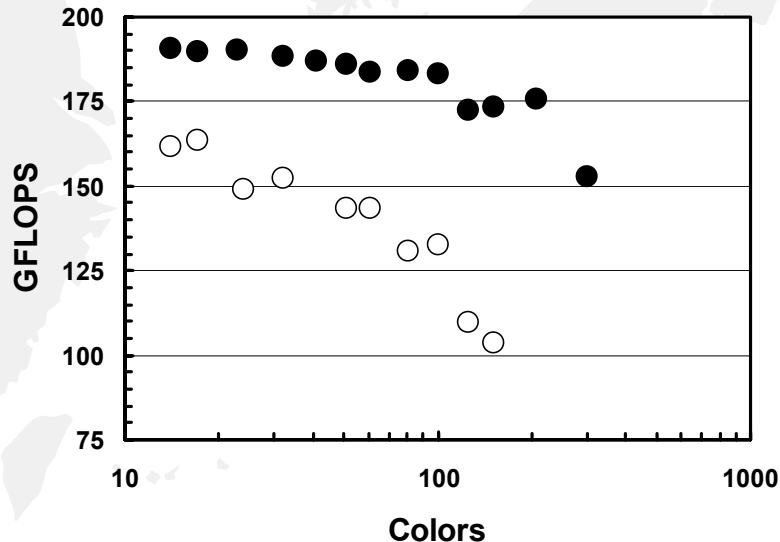
ES, 10 SMP nodes (Peak= 640 GFLOPS)

As number of colors increases,

- smaller number of solver iterations until convergence
- shorter vector length ... FLOPS rate decreases.

'Hybrid' is sensitive to number of colors and synchronization overhead of OpenMP.

● Flat MPI
○ Hybrid



本年度の成果

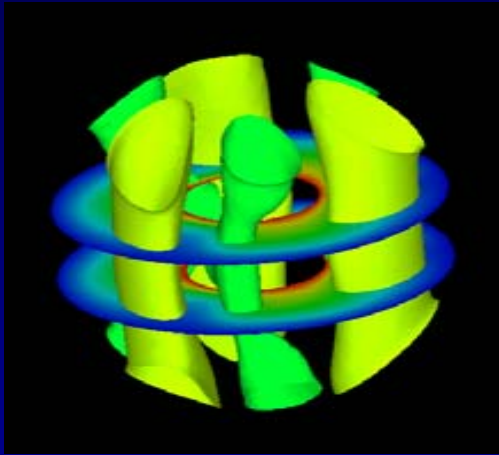
②統合化プラットフォームの最適化・
フィージビリティスタディ

③固体地球シミュレーションへの適用

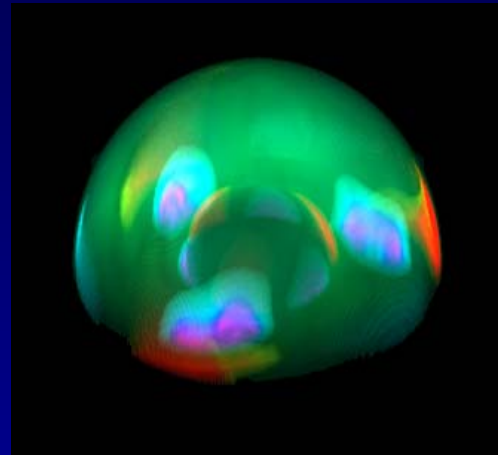
④実機工学問題解析

- 可視化 (Volume Rendering, Surface Mapping) のMPI/ Pthreadハイブリッド並列化, ベクトル化率の向上
- 解析部と可視化部のシステム結合 (ダイナモ解析, 東北日本断層解析, 熱応力解析で実施)
- 並列メッシュ生成ツールPMRのベクトル化率の向上, 非定常熱応力解析での利用

Parallel Visualization Techniques on ES



Parallel surface rendering



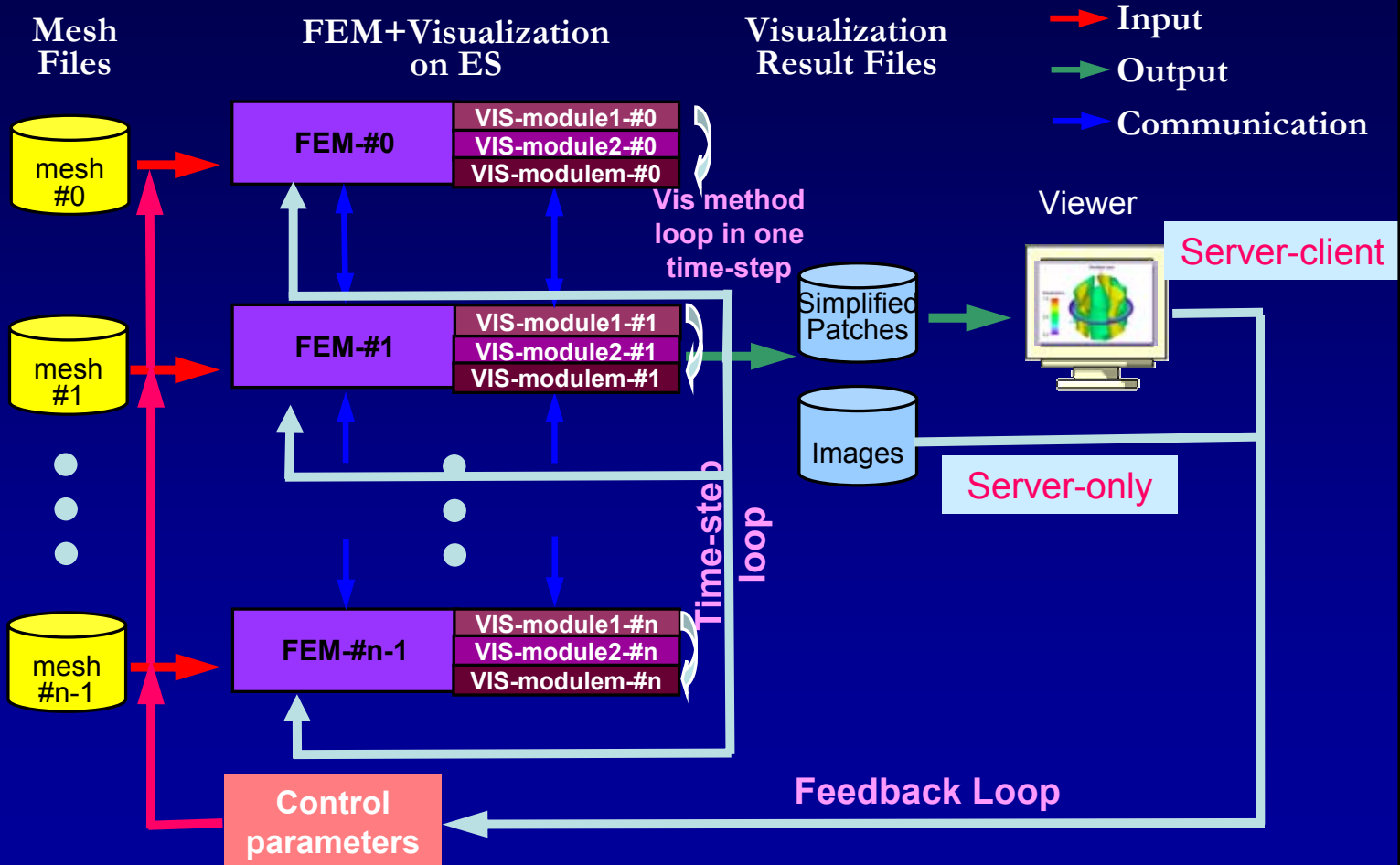
Parallel volume rendering

Visualization examples of MHD (magnetohydrodynamic) simulations

Features

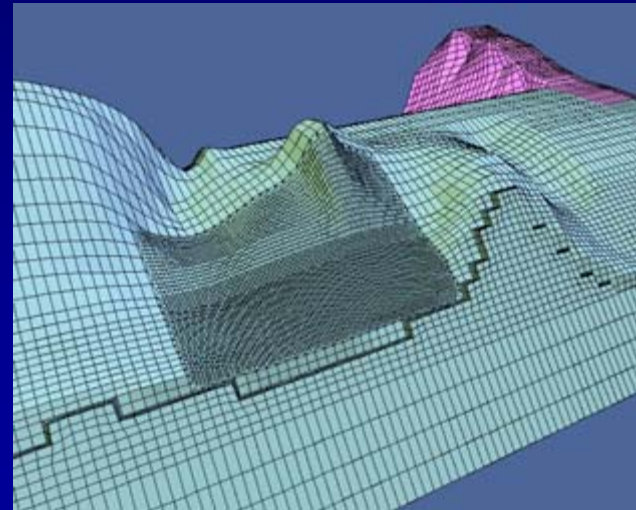
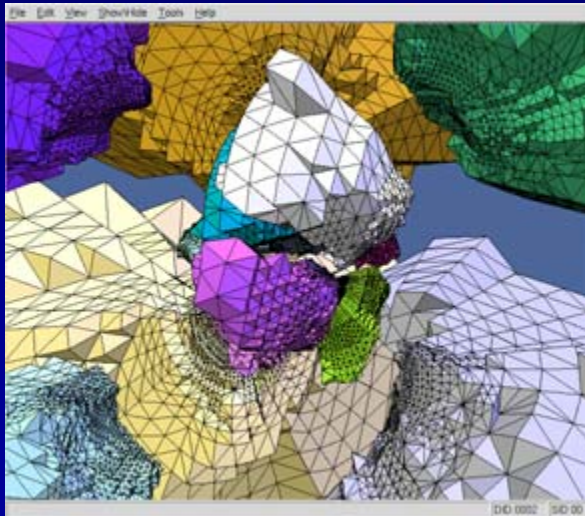
- **Concurrent with computation**
- **Applicable to complicated unstructured grids**
- **High parallel performance**
- **High visualization quality**

Concurrent with Computation



Applicable for Complicated Grids

- Unstructured
- Hybrid (tetrahedra, hexahedra, and prism)
- Hierarchical



Grids generated by Dr. Yoshitaka Wada in GeoFEM

High Parallel Performance

Optimization Strategies

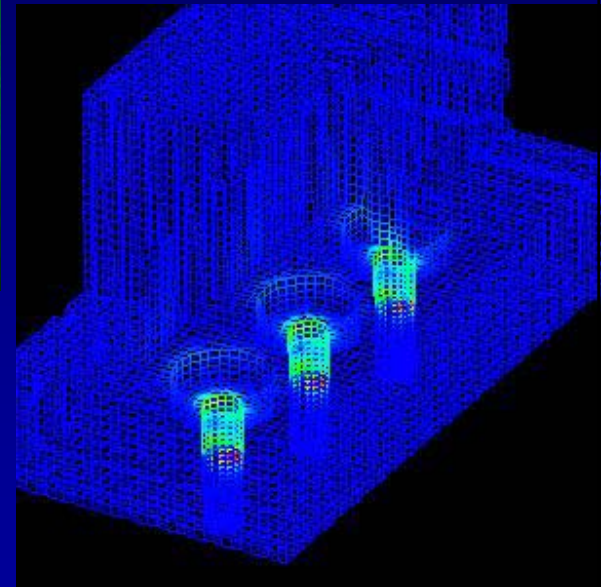
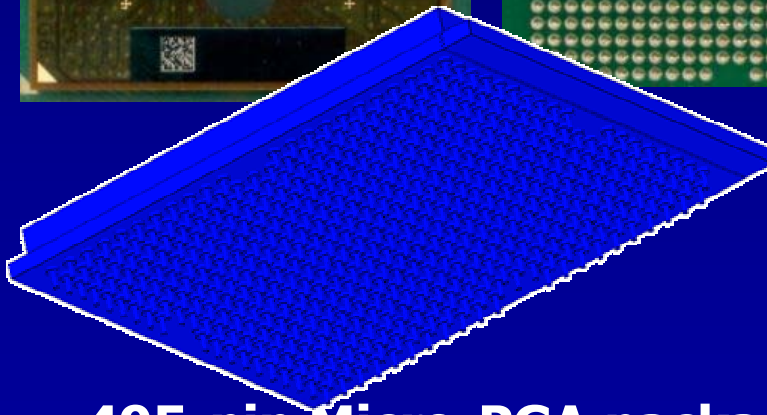
- **Suitable design of visualization methods**
 - Suitable for parallelization
 - Coupling well with computation data structure
- **Three-level hybrid parallelization**
 - Inter-SMP node MPI
 - Intra-SMP node OpenMP for parallelization
 - Individual PE Compiler directives for vectorization
- **Dynamic load balancing**

Test Application 1

Dataset : 495-Pin Grid Array (PGA) dataset

6,263,201 Nodes, 5,886,640 Elements

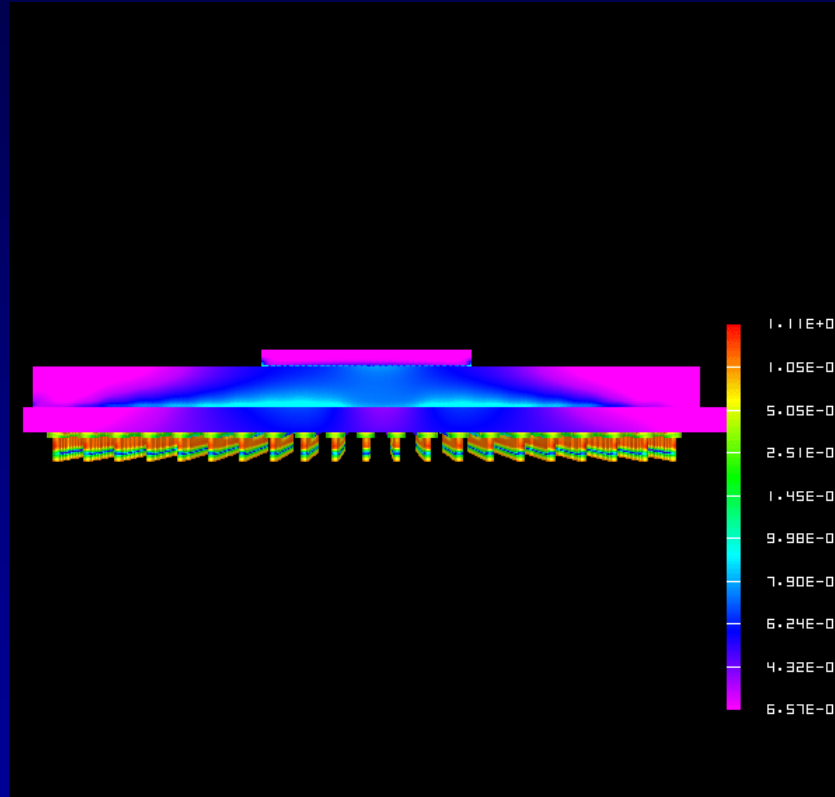
(Data courtesy of H. Okuda, S. Ezure, N. Kushida)



495-pin Micro-PGA package Intel® Mobile Pentium® iii Processor

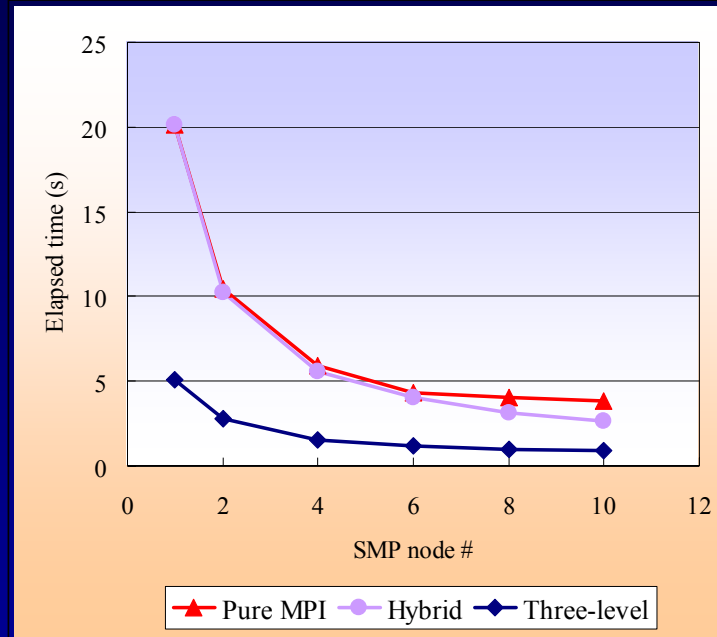
Photo : <http://www6.tomshardware.com/cpu/00q4/001107/mobilecpu-19.html>

Animation for 495-pin PGA Dataset



Volume rendered animation to show the misis stress by the linear elastostatic analysis for a 495-pin PGA dataset. It took about 64.312 seconds to generate 32 frames animation with resolution 400*400 using 4 SMP nodes on the ES.

Parallel Performance



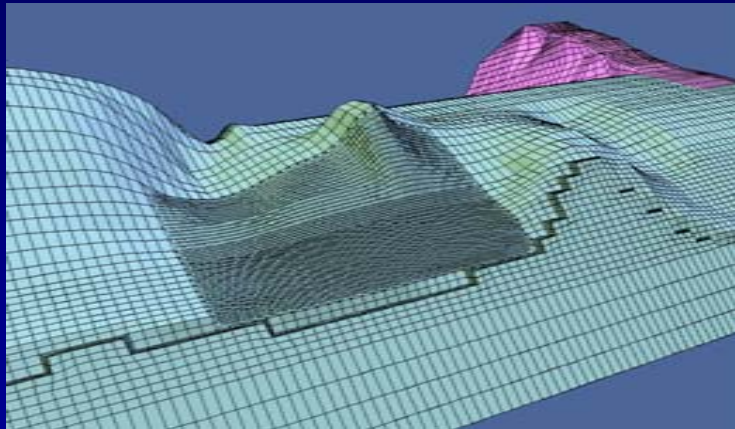
Comparison in elapsed time of three parallelization models for parallel volume rendering the thermal stress analysis dataset of a mobile Pentium III on the ES.

Test Application 2

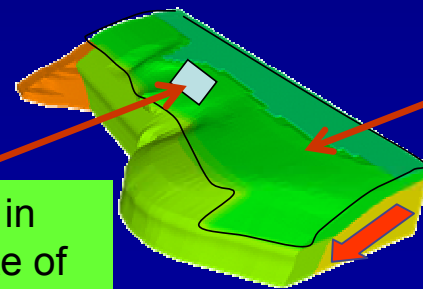
Dataset: Earthquake Simulation of Southwest Japan in 1944

(Data courtesy of Mikio Iizuka in GeoFEM)

Data size: 2,027,520 nodes



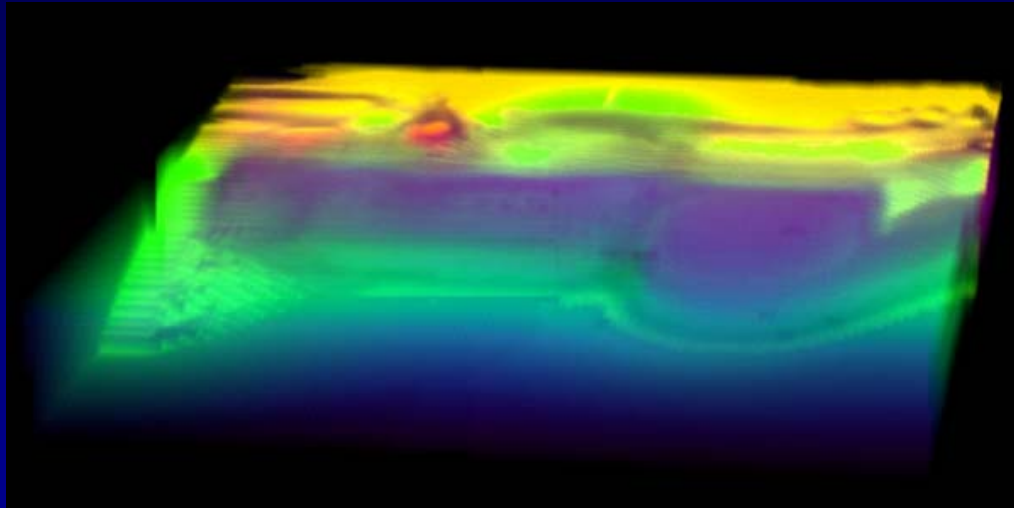
Fault position in
the earthquake of
1944



Plate

Movement direction
of the plate

Test Application 2



Parallel volume rendering image for a large Earthquake simulation dataset of Southwest Japan in 1944, with 2,027,520 unstructured grid elements. The displacement data attribute is mapped to color. On the ES, with 8 SMP nodes, it took about 1.092 seconds to generate a single image (Image resolution: 400*190 pixels), and about 4.975 seconds to generate 16 animation images with a rotation of the viewpoint along y axis.

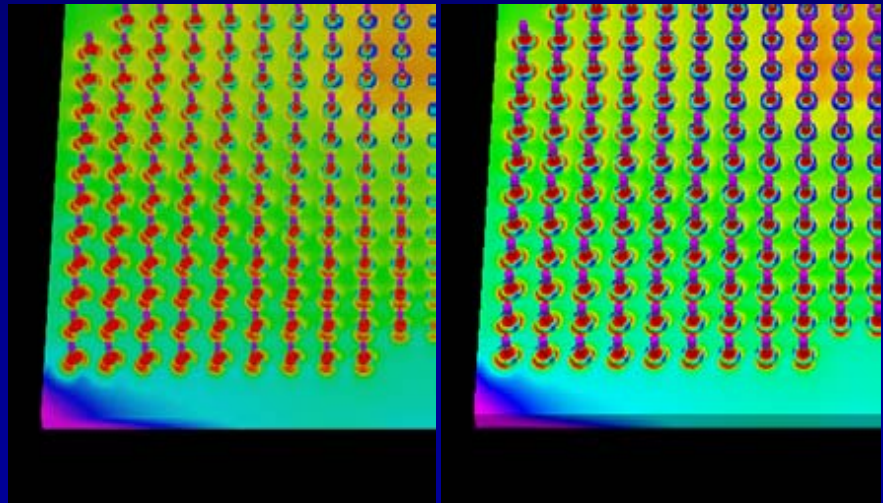
High Visualization Quality (1)

Detail-preserving voxel resampling PVR

Attach some original mesh element information in some **IMPORTANT** voxels to keep all the **DETAILS** in voxel resampling

Four important details

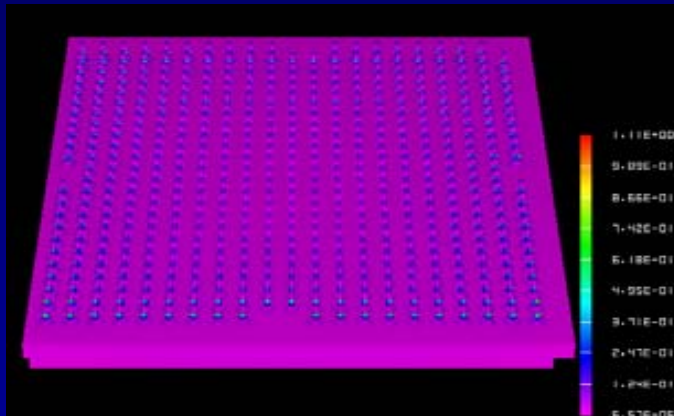
- **Volume**
- **Interval**
- **Boundary**
- **Isosurface**



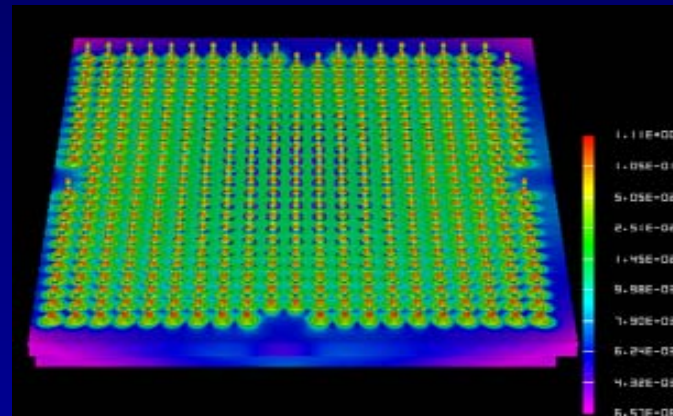
(a) Original voxel resampling (b) Detail-preserving

High Visualization Quality (2)

Better automatic color mapping by inverse histogram transform of data distribution



(a) Linear color mapping

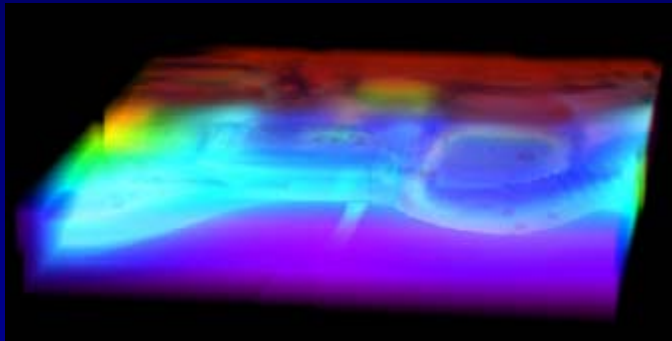


(b) Inverse histogram transform

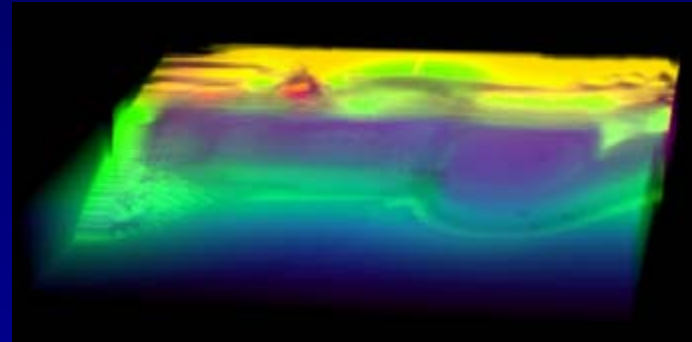
High Visualization Quality (3)

Good transfer functions

Many convenient transfer functions are provided to get better visualization quality



(a) constant opacity +
linear color mapping



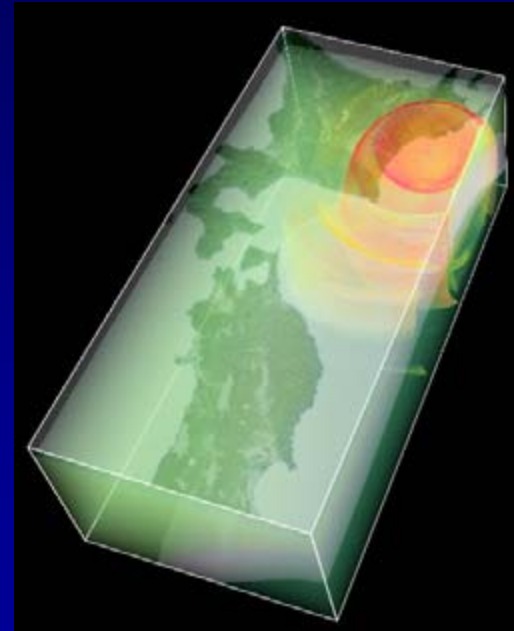
(b) Highlight important intervals +
non-linear color mapping

Extension to Regular Datasets

Our method is mainly designed for unstructured datasets, but also available for regular datasets.

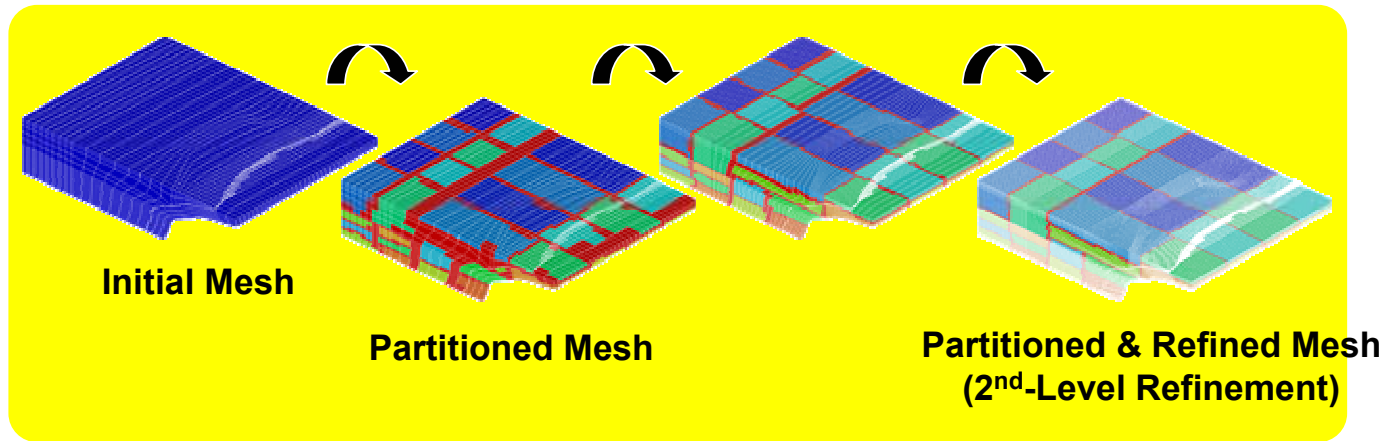
Wave Propagation Visualization module on ES

Co-work with Prof. Takashi Furumura
ERI at the University of Tokyo



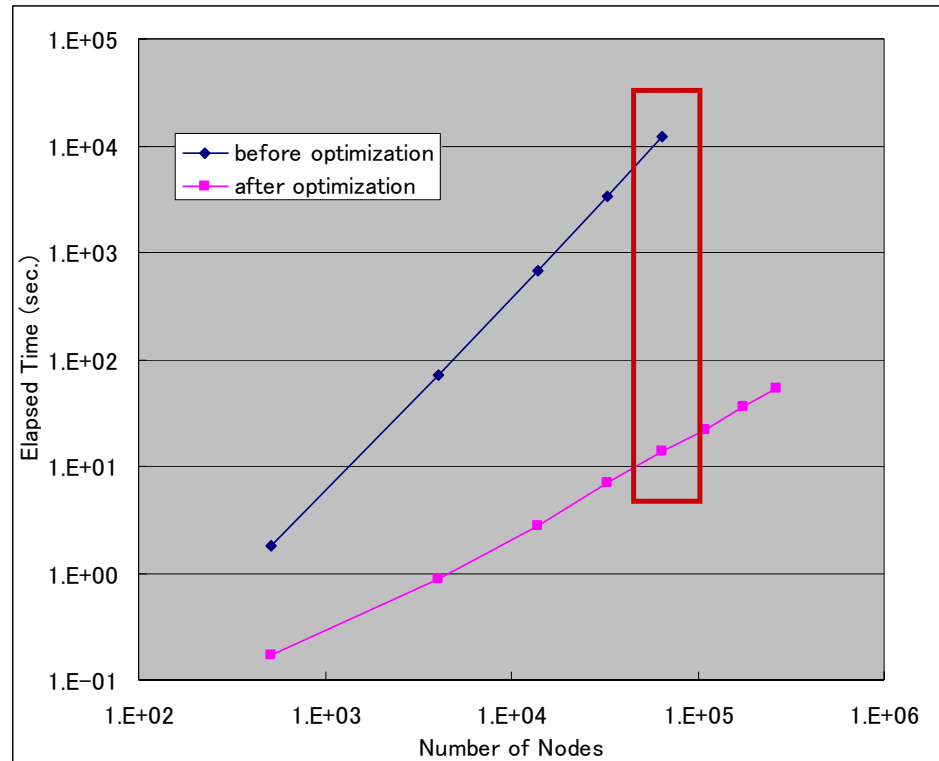
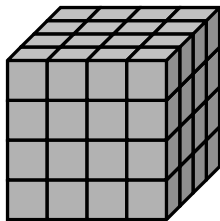
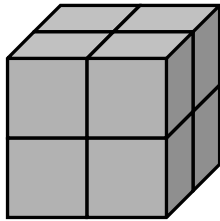
Earthquake simulation at Kushiro, Japan in 1993

**Partitioned & Refined Mesh
(1st-Level Refinement)**



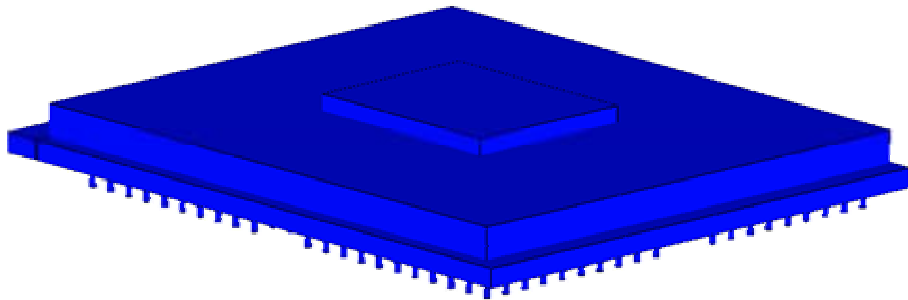
**Mesh Generation of "South West Japan" Model
By PMR (Parallel Mesh Relocator)**

地球シミュレータにおける大規模メッシュ生成 地球シミュレータ向け最適化 (ベンチマーク: 1/2)

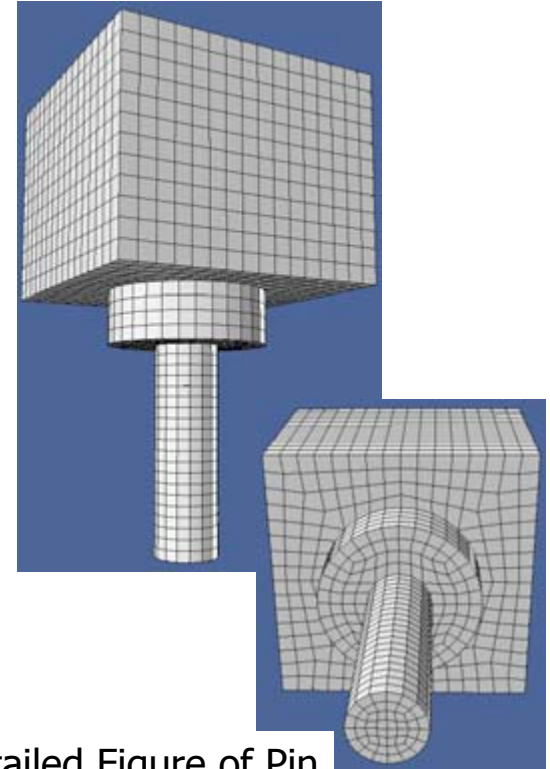
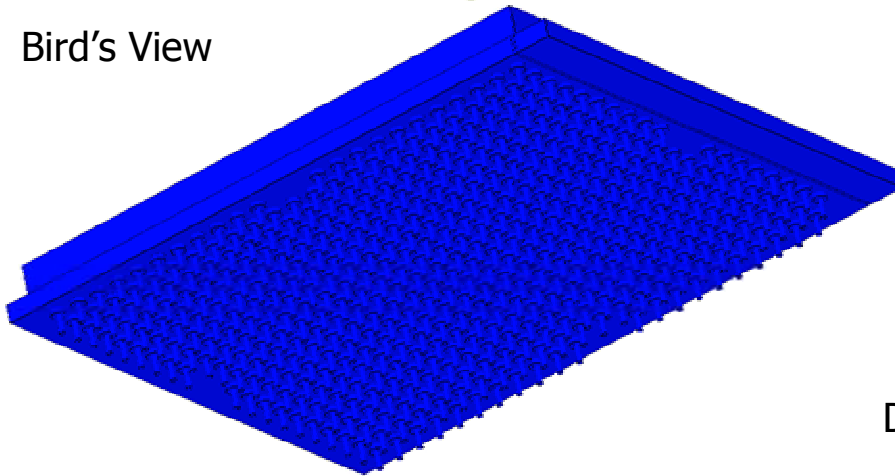


Comparison of Elapsed Time on Cubic Model

地球シミュレータにおける大規模メッシュ生成 適用例 (対象モデル)



Bird's View

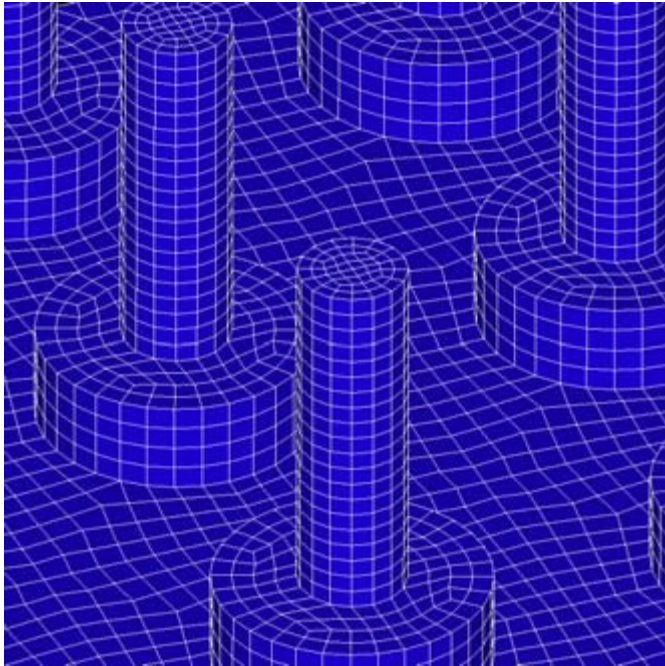


Detailed Figure of Pin

Pin Grid Array Model (Large Model [495-pin] : 6,263,201 Nodes, 5,886,640 Elements)
[495-pin Micro-PGA Package : Intel® Mobile Pentium® iii Processor]

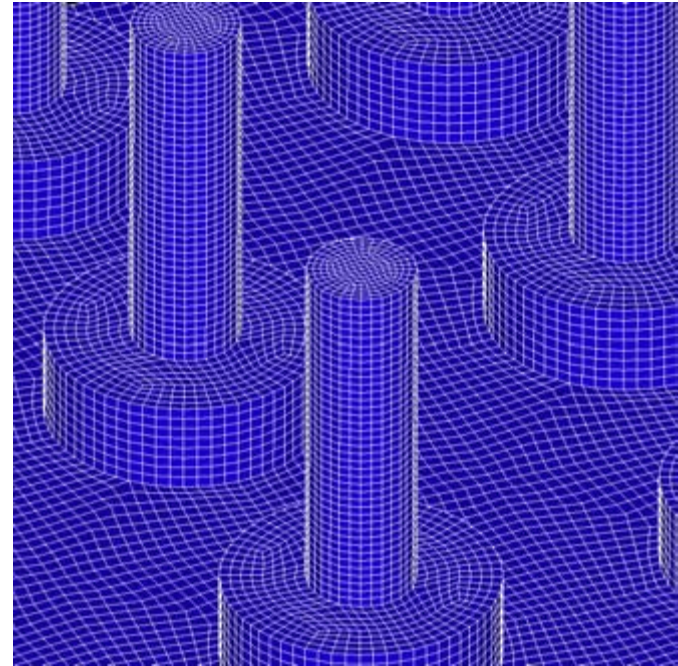
参考文献 : 495-PIN AND 615-PIN MICRO-PGA ZIF SOCKET DESIGN SPECIFICATION, Intel®

地球シミュレータにおける大規模メッシュ生成 適用例 (計算結果)



Partitioned Mesh

Total # of Nodes : 6,215,681
Total # of Elements : 5,886,640



Refined Mesh

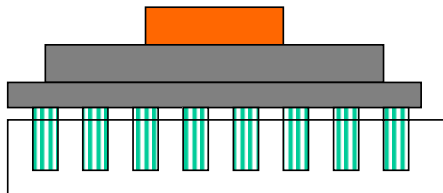
Total # of Nodes : 48,379,905
Total # of Elements : 47,093,120

10ノード(80PEs)を使用し約24分で作成

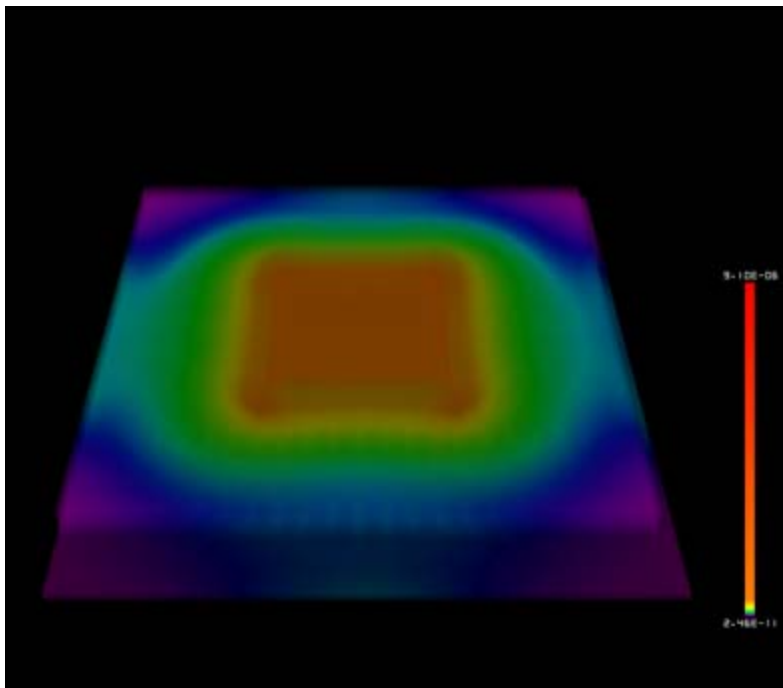
解析条件

- ・ 非定常熱応力解析
非定常熱伝導解析＋静的熱応力解析
- ・ 節点数 : 約5千万
- ・ 自由度数 : 約1億5千万(熱応力解析部)
- ・ 部分領域数: 64(使用PE数: 512)
- ・ 室温(300K)から解析開始(残留応力なし)
- ・ チップ部に100W発熱を付加

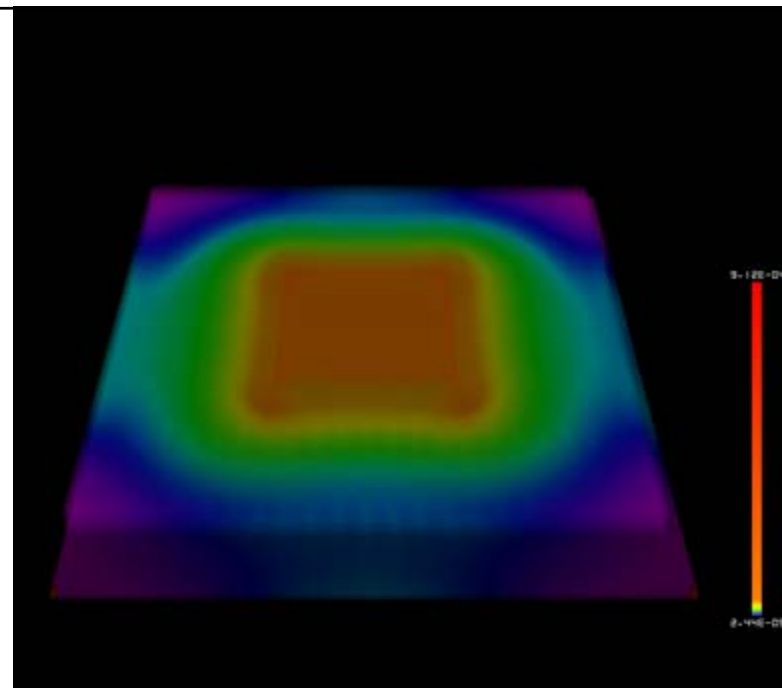
	材質	ヤング率	ポアソン比	線膨張係数	比熱	密度	熱伝導率
■ チップ	シリコン	165.0 GPa	0.278	24.0×10^{-6}	0.71 kJ/(kg·K)	2329 kg/m ³	148.0 W/(m·K)
■ 基板	エポキシ	4.94 GPa	0.33	6.0×10^{-6}	1.0 kJ/(kg·K)	1200 kg/m ³	0.2 W/(m·K)
▨ ピン	アルミ	70.3 GPa	0.345	2.6×10^{-6}	0.92 kJ/(kg·K)	2700 kg/m ³	238.0 W/(m·K)



ピンの下2/3を固定



0.1秒経過後



1.0秒経過後

- ・ ベクトル化率: 平均 97.6% (可視化部込み)
- ・ Work Ratio: 約80% (ソルバー一部のみで計算)
- ・ チップと基板の接合部, 特に角部に応力集中が見られる

研究(H15年度)の進捗

- ① 並列反復法ソルバ・解析モジュール部の最適化, 性能評価
→ 解析モジュール部を含めほぼ終了(手法は確立)。今後はアプリケーションごとの対応が求められる。
 - ② 統合化プラットフォームの最適化・フィージビリティスタディ
→ 解析部とのシステム結合を確立。PMRも利用されはじめた。ただし, さらなる効率向上が求められる。他グループ, ESセンターへ何らかの貢献ができる?
 - ③ 固体地球シミュレーションへの適用(連成解析を含む)
→ GeoFEMプロジェクトの終了にともない, 今後他グループとの連携をより推進する。
 - ④ 実機工学問題解析
 - ⑤ プラットフォームの格子系拡張のための基礎データ取得
→ HPC-MWプロジェクト(文科省ITプログラム 戦略ソフトウェアプロジェクトの一部, GeoFEMの技術を継承)との新たな連携を考えたい。
- … これらを踏まえてH16年度の計画(統合化プラットフォームの拡張, 固体地球シミュレーションへの統合化プラットフォームの適用)

目次

- GeoFEMの簡単な説明
- 研究目的
- 今年度の成果
- 今後の研究計画

今後の研究計画

(1) 短期計画

- 可視化部, PMRの対ピーク性能向上
- 地下水流動・物質拡散, 津波, 熱応力の各種解析へのプラットフォーム適用と性能評価

(2) 長期計画

- 統合化固体地球シミュレーションモデルのためのプラットフォームの機能拡張(格子系, ソルバ)
- 連成系固体地球シミュレーションへの統合化プラットフォームの適用