

固体地球シミュレーション プラットフォームの開発

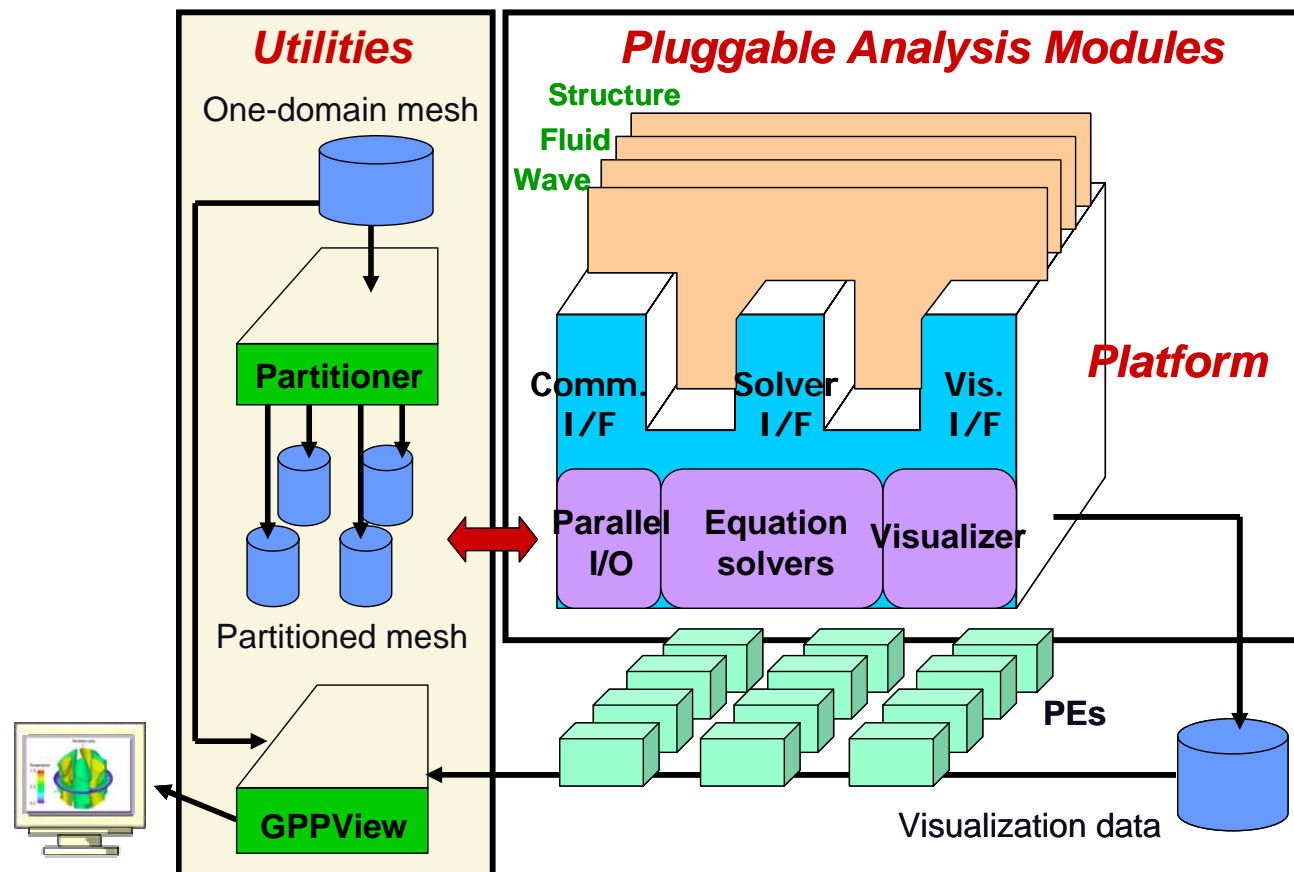
中島研吾（東大理・地球惑星）

2006年1月6日
2005年度地球シミュレータ利用報告会

背景: GeoFEMプロジェクト

<http://geofem.tokyo.rist.or.jp>

- 科学技術振興調整費総合研究(1998~2002年度)「高精度の地球変動予測のための並列ソフトウェア開発」
 - 固体地球シミュレーション用プラットフォーム(有限要素法)



目的

- 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。
 - 並列反復法によるSMPクラスタ向け高速ソルバーの最適化，性能評価
 - 並列メッシュ生成，並列固体地球シミュレーション，連成解析カップラー，並列可視化からなる統合化プラットフォーム開発
 - 固体地球分野へのプラットフォームの適用
 - 地下水流動・物質拡散解析，津波シミュレーション，実機工学問題解析
 - 構造格子系，離散粒子系へのプラットフォーム拡張
- 構成員
 - GeoFEMプロジェクトのメンバーが中心（機械，航空，情報系）
 - 東大地惑，東大人工物，東大生研，東北大，上智大，工学院大
 - NERSC/LBNL，Purdue大，Queensland大

実施項目

- 線形ソルバー，並列アルゴリズム
 - 並列反復法によるSMPクラスタ向け高速ソルバーの最適化，性能評価
- プラットフォーム整備
 - 並列メッシュ生成，並列固体地球シミュレーション，連成解析カップラー，並列可視化からなる統合化プラットフォーム開発
- プラットフォーム適用（固体地球グループ）
- プラットフォーム適用（工学分野）
 - 地下水流動・物質拡散解析，津波シミュレーション，実機工学問題解析の実施
- プラットフォーム拡張
 - 構造格子系，離散粒子系へのプラットフォーム拡張

2005年度計画

- 固体地球シミュレーションの統合化に向けたプラットフォームの機能拡張
 - 悪条件問題向け(有限要素法, 境界要素法)並列ソルバーの開発, 実装, 検証
 - 代数的多重格子法(Algebraic Multigrid)による多重格子ソルバーの開発, 検証
 - 並列適応格子機能, 動的負荷分散機能の開発, 実装, 検証
 - 粒子系へのプラットフォーム拡張, 実装, 検証
- 固体地球シミュレーションプラットフォームのシミュレーションへの適用
 - 固体地球(松浦, 平原, 古村各グループ)
 - 工学的実問題

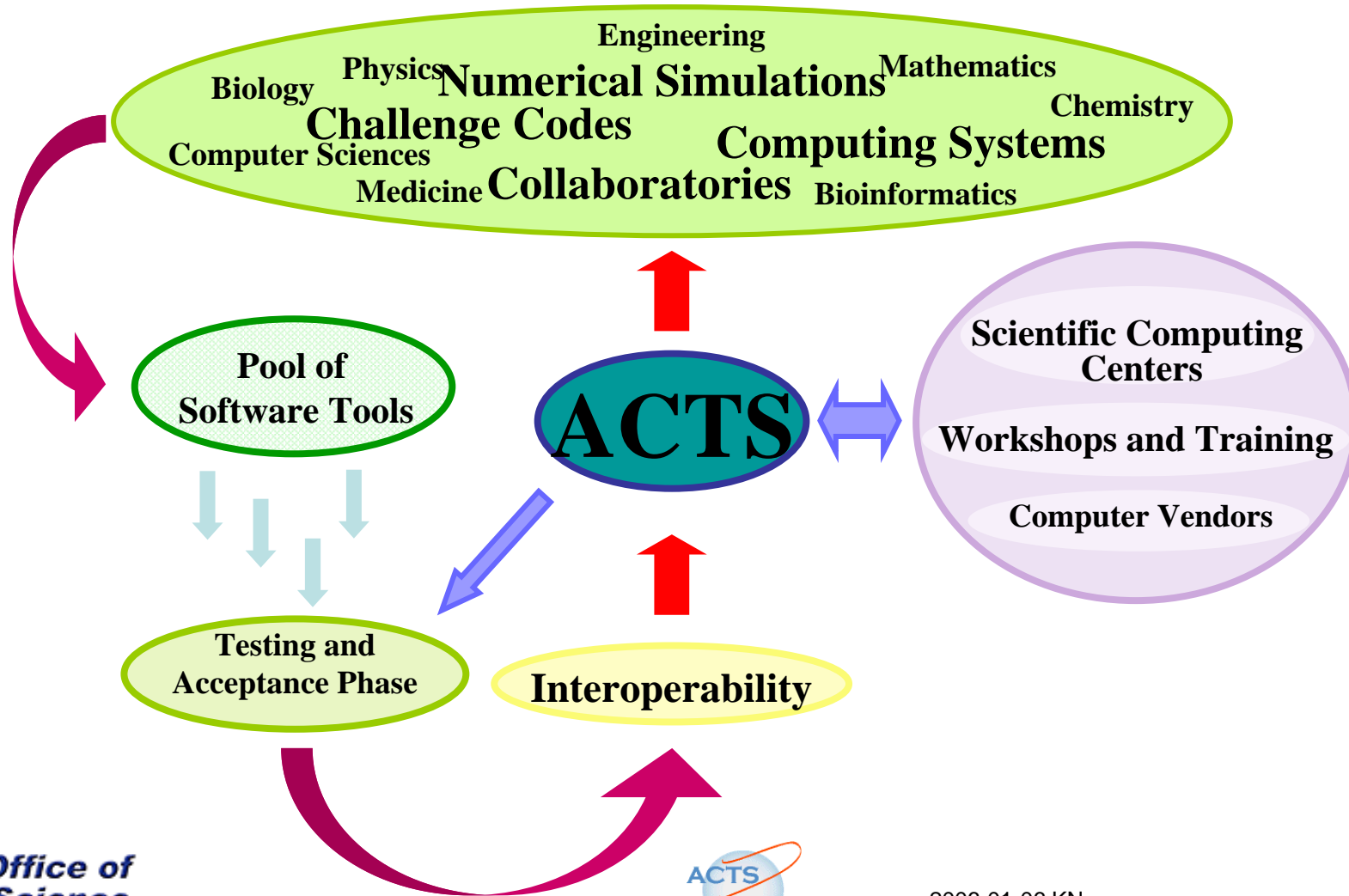
2005年度成果

- 固体地球シミュレーションの統合化に向けたプラットフォームの機能拡張
 - 悪条件問題向け並列ソルバーの開発, 実装, 検証
 - 前処理付き反復法, Gauss-Jordan法の並列化
 - FMM(高速多重極展開法)機能の整備
 - 並列可視化機能の整備
- 固体地球シミュレーションプラットフォームのシミュレーションへの適用
 - 松浦, 平原, 古村各グループ
- 他プロジェクトとの連携
 - 先進・創出分野「地下水挙動」(奥田グループ)
 - 文科省「戦略的革新シミュレーションソフトウェアの研究開発」
 - CREST/JST「生体骨医療シミュレータ」
 - US-DOE ACTS

The Roadmap and Interactions

Advanced Computational Software Collection (ACTS) Project

User Community

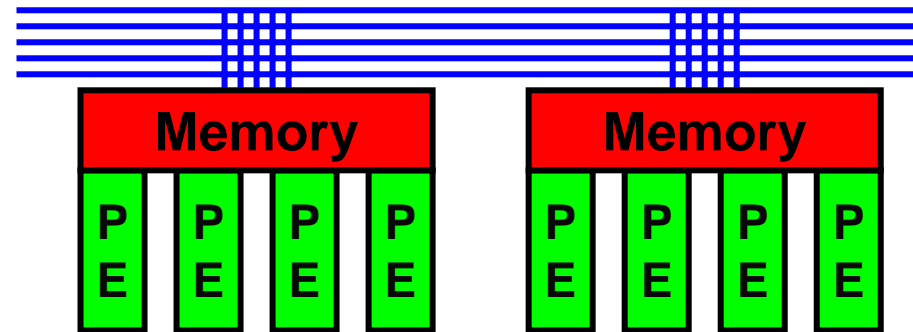


外部発表等

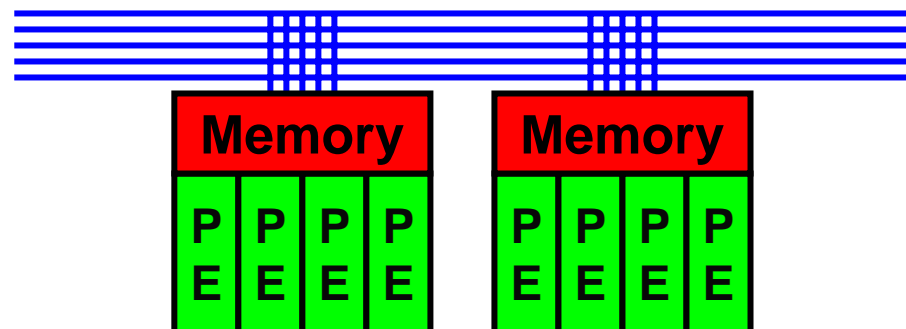
- 査読付き論文（発行待ち含む）
 - K.Nakajima, "Three-Level Hybrid vs. Flat MPI on the Earth Simulator: Parallel Iterative Solvers for Finite-Element Method", Applied Numerical Mathematics 54 (2005) 237-255.
 - K.Nakajima, "Parallel Iterative Solvers for Finite-Element Methods using an OpenMP/MPI Hybrid Programming Model on the Earth Simulator", Parallel Computing 31 (2005) 1048-1065.
 - K.Nakajima, "Parallel programming models for finite-element method using preconditioned iterative solvers with multicolor ordering on various types of SMP cluster", IEEE Proceedings of HPC Asia 2005, Beijing, China, 2005.
 - 中島研吾「不均質場における並列マルチレベル解法」, HPCS2006, 2006年ハイパフォーマンスコンピューティングと計算科学シンポジウム
- 招待講演
 - First International Workshop on OpenMP (Eugene, Oregon)
 - 筑波大学スーパーコンピュータワークショップ
- ES講習会
- Hybrid Programming Modelへの注目度は高い

Flat MPI vs. Hybrid

Flat-MPI: Each PE -> Independent



Hybrid: Hierarchical Structure

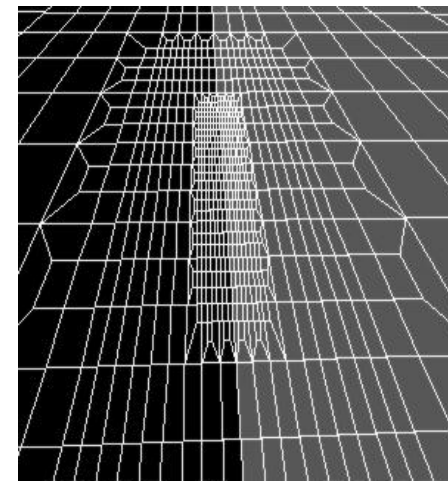
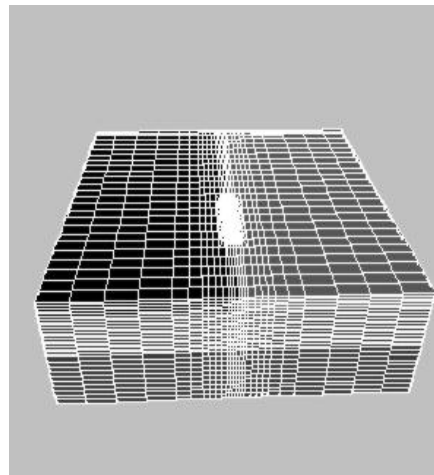
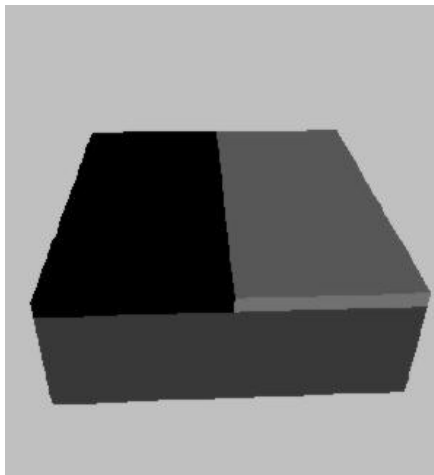


2005年度成果の実例

- 線形ソルバー, 並列アルゴリズム
 - 平原グループ向け
 - 中島研吾(東大理)
- プラットフォーム拡張
 - 粒子型解法向け可視化手法
 - 陳莉(東大生研)
- プラットフォーム適用
 - 高速多重極展開法とレプリカ交換法によるタンパク質構造解析
 - 鈴木正昭, 奥田洋司(東大人工物)
 - 並列有限要素法による海綿骨応力解析
 - 櫛田慶幸(JST・京大)

複雑断層面上のすべり応答関数

- 積分方程式法で使用する応答関数を正確に求めるため、局所細分化領域を含む有限要素法による計算を実施。
- メッシュ幅の分布が大きく、収束が遅い。



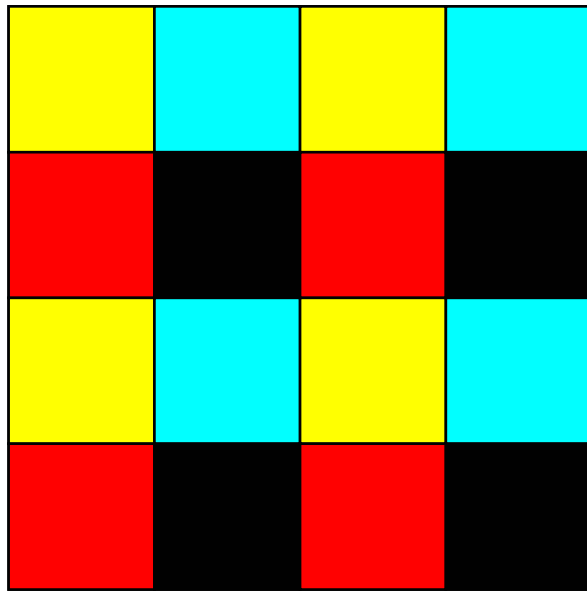
対応

- Fill-inを深くとるILU系前処理
 - 並列時の前処理性能低下を防ぐため、領域間オーバーラップの拡張が効果的(昨年度に既に報告)
- オーダリング法の検討
- マルチレベル手法

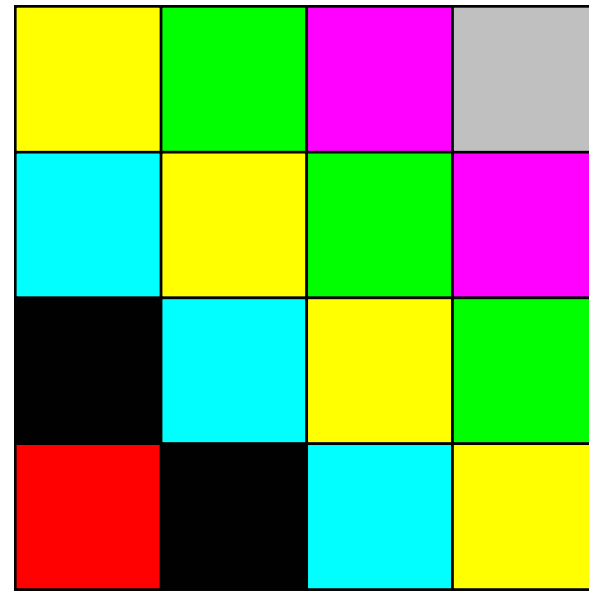
オーダリング手法について

- これまで、主としてマルチカラーオーダリングによって、ベクトルプロセッサ向けのソルバーを開発してきた。
 - 連続メモリアクセス, 高い局所性・並列性, 長いループ
- 悪条件マトリクスを解く場合, マルチカラーオーダリングでは, 色数 = 要素数程度までに増やさなければ, 収束回数が非常に増加する場合が多い。
 - ループ長の減少, 性能低下
- RCMオーダリング (Reverse Cuthill-McKee) は部分的にループ長が短くなるものの, 計算順序をある程度考慮したオーダリングを実現できる。

オーダリング手法について(続き)



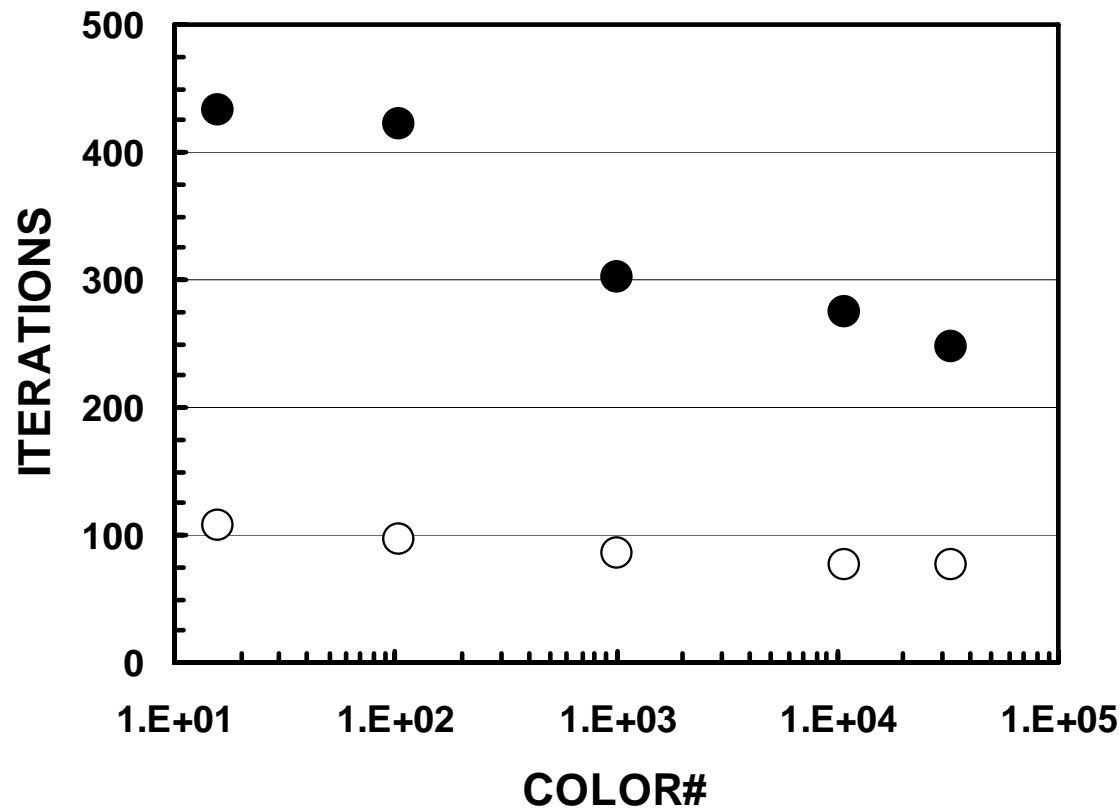
マルチカラー(4色)



RCM

三次元弾性問題における 色数と反復回数 の関係

32,768 × 3 DOF



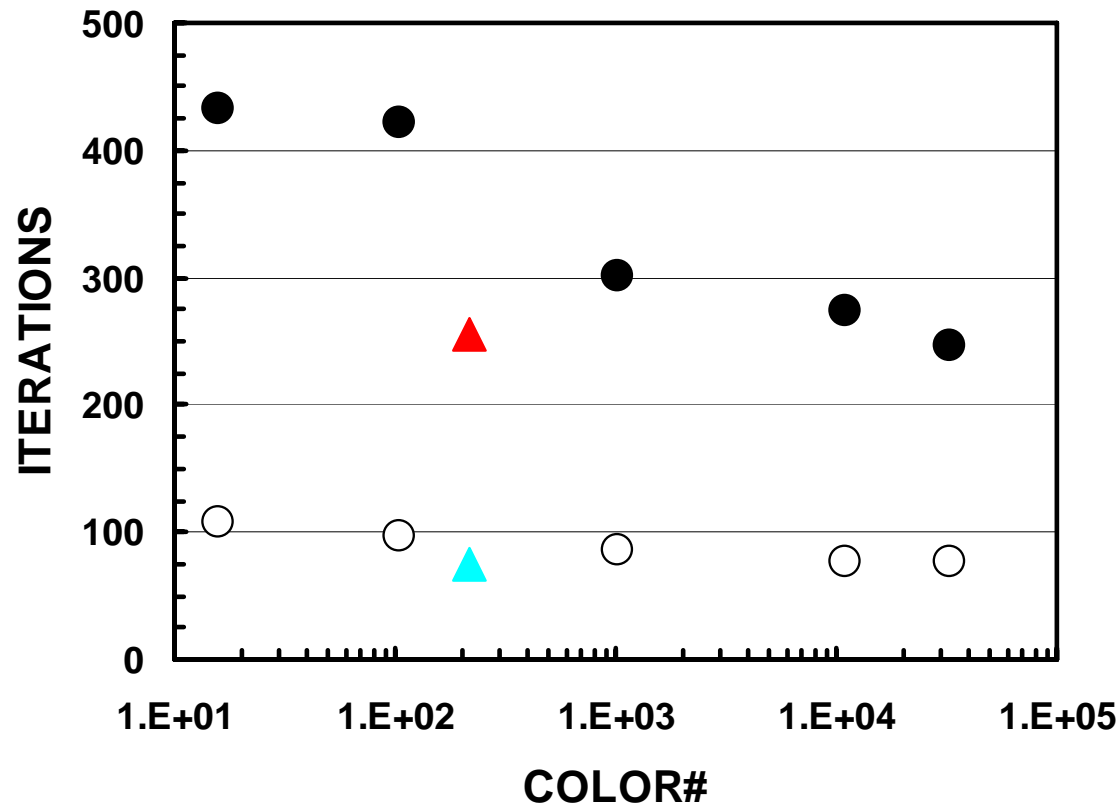
- 均質メッシュ (MC)
- 不均質メッシュ (MC)

隣接メッシュの辺の長さ
の比が33対1

色数が増加すると反復回数は
減少するが、性能が低下。
最悪の場合、ベクトル長=1。

三次元弾性問題における 色数と反復回数 の関係

32,768 × 3 DOF

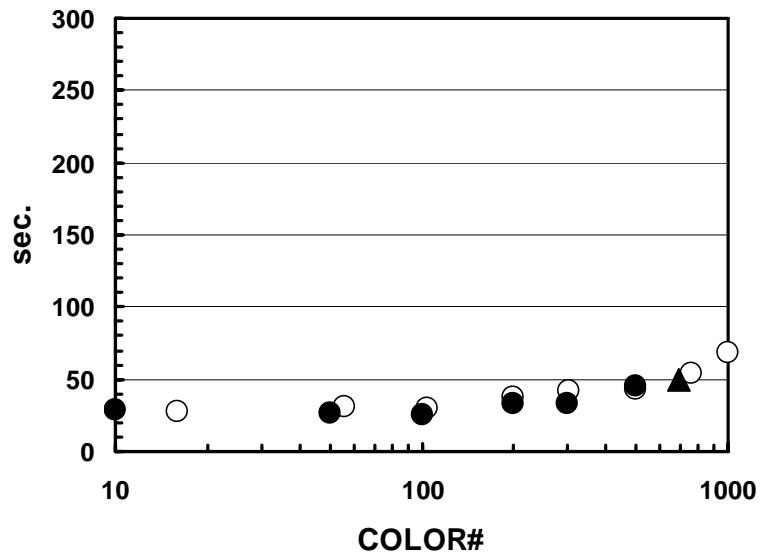
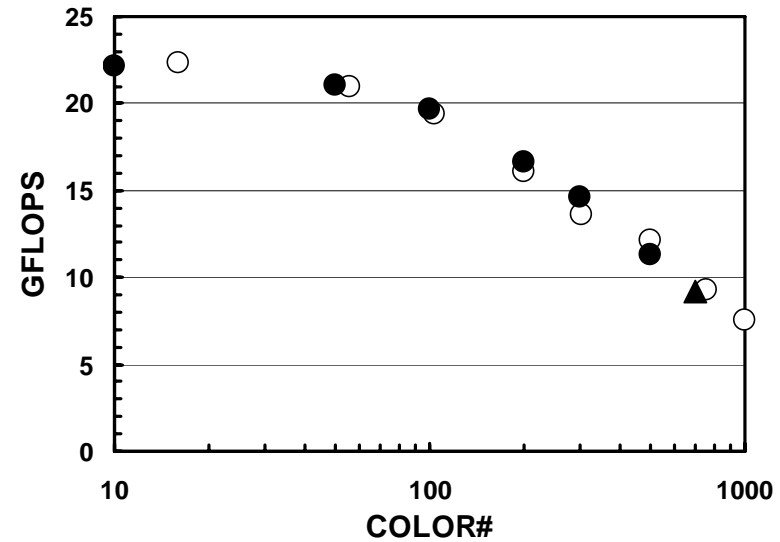
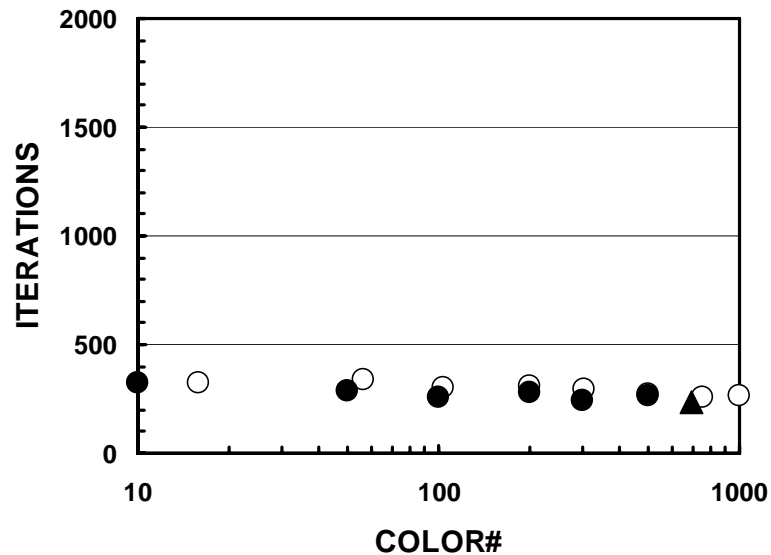


- 均質メッシュ (MC)
- 不均質メッシュ (MC)
- ▲ 均質メッシュ (RCM)
- ▲ 不均質メッシュ (RCM)

RCM法によって、色数が増加せず
に少ない反復回数を実現可能である。

三次元弾性問題における色数の影響

3×10^6 DOF, ES 1ノード (OpenMP), 均質メッシュ

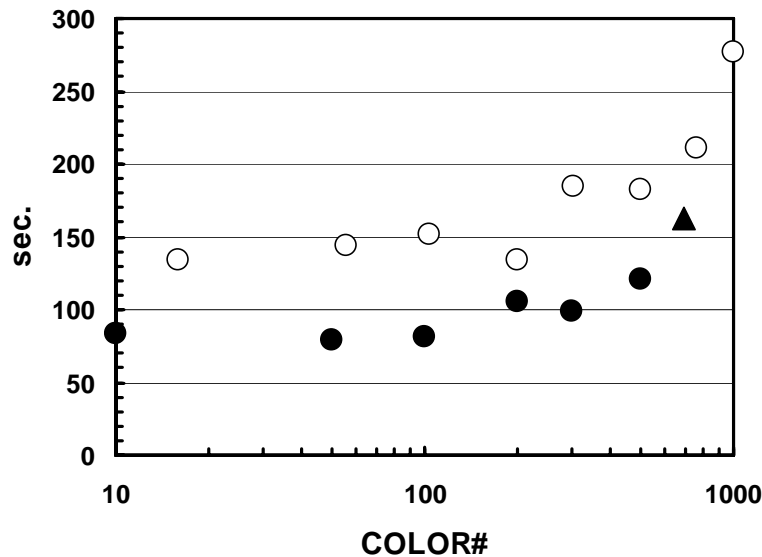
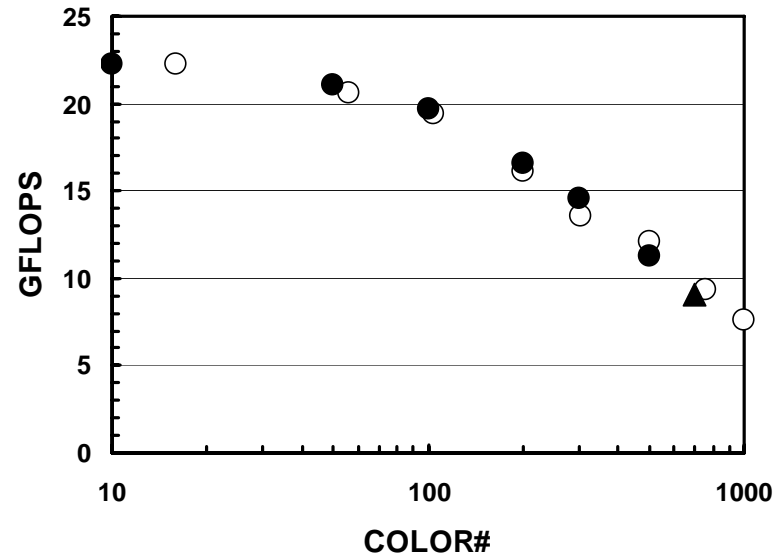
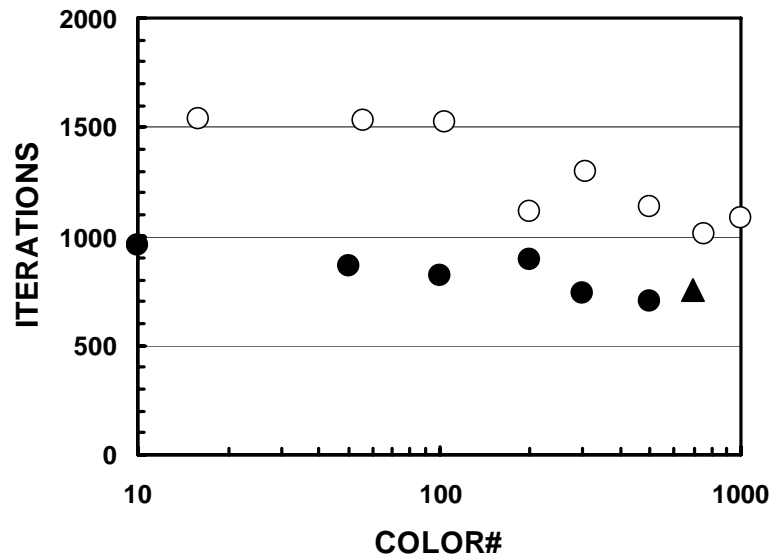


- Multicolor (MC)
- RCM/Cyclic-Multicolor
- ▲ RCM

OpenMPではRCMは負荷分散が悪いため、Cyclic-MCと併用する。

三次元弾性問題における色数の影響

3×10^6 DOF, ES 1ノード (OpenMP), 不均質メッシュ

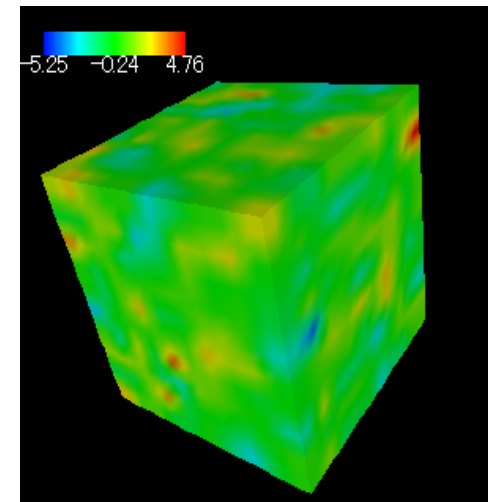


- Multicolor (MC)
- RCM/Cyclic-Multicolor
- ▲ RCM

OpenMPではRCMは負荷分散が悪いため、Cyclic-MCと併用する。

マルチレベル解法：予備的計算

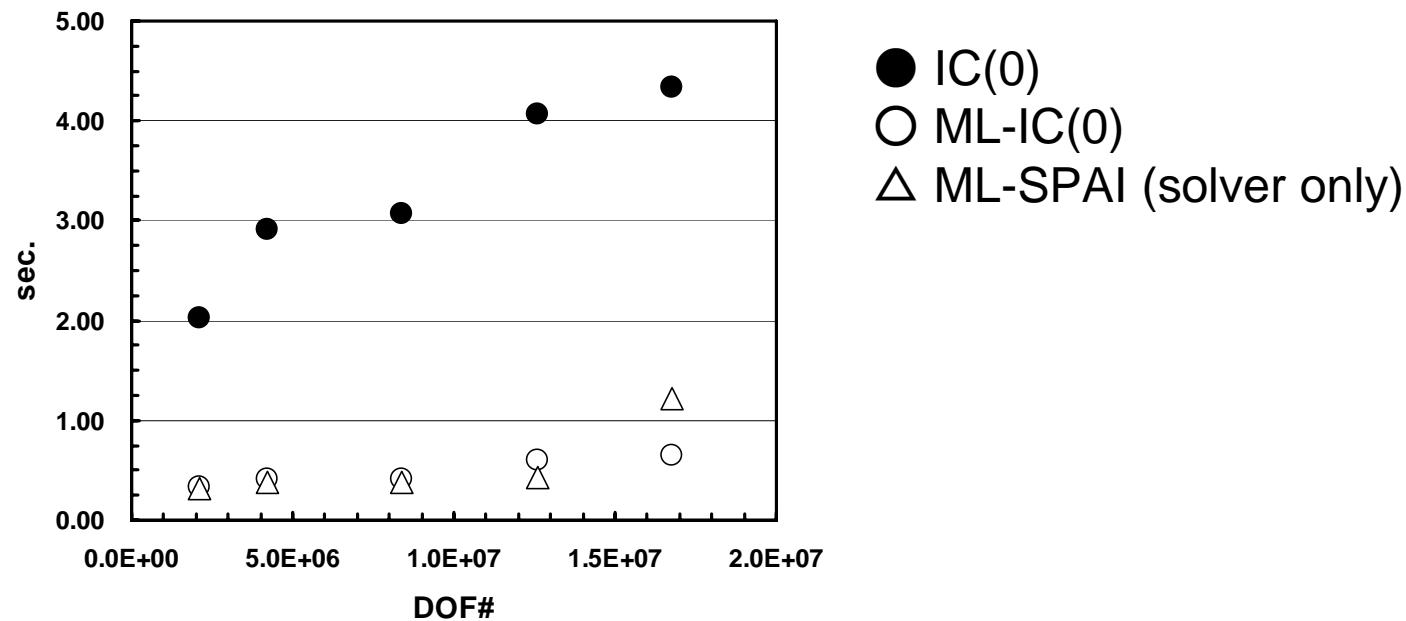
- 局所細分化格子を含む不均質系における地下水流れ問題のための並列解析コードを開発した。
- マルチレベル(幾何学的多重格子)法を前処理手法とするCG法を使用した。
 - フィルイン無し不完全コレスキー分解(IC(0))
 - Gauss-Seidelに基づく多重格子法(ML-GS)
 - IC(0)に基づく多重格子法(ML-IC(0))
 - SPAI法(SPAI)
 - Explicit SAI
 - SPAI法に基づく多重格子法(ML-SPAI)



ESにおける予備的計算結果

(均質, ~64PE's)

1PEでの性能	IC(0)	ML- GS	ML- IC(0)	SPAI	ML- SPAI
GFLOPS rate	1.80	1.32	1.50	1.83	1.56
Vector Operation Ratio (%)	99.2	98.6	99.0	99.5	99.6
Average Vector Length	245.8	212.1	236.8	256.0	255.6



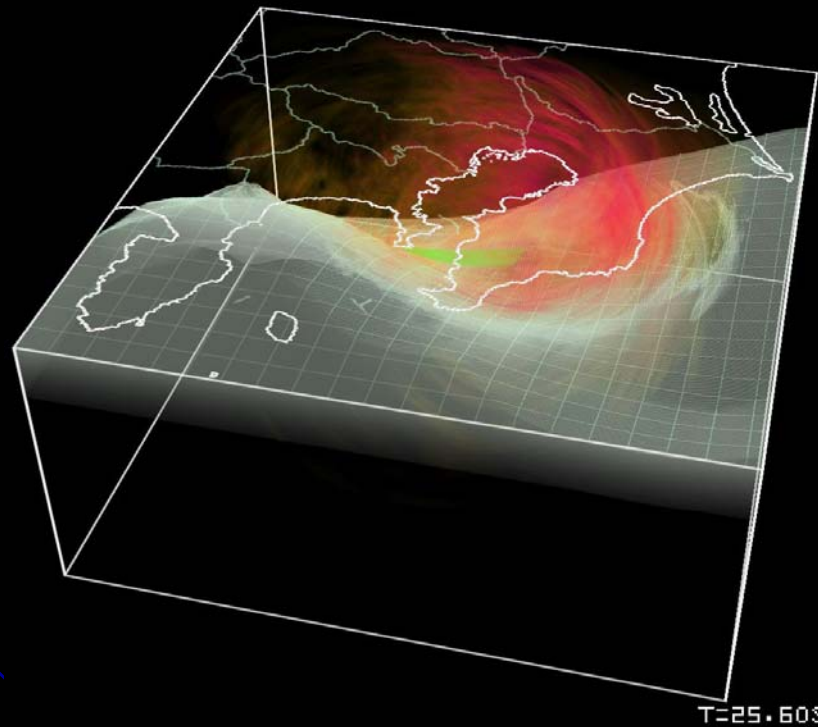
現状と対策

- SPAI系解法 (Explicit Sparse Approx. Inverse) は set-up に時間がかかる。特に ES ではベクトル長が短い計算 (QR 分解) を自由度数分だけ解くため、効率上得策ではない。
- Fill-in を深めに、領域間オーバーラップを深くとる方法が本問題には適しているようだ。
 - ベクトル化: マルチカラーではなく RCM によるオーダリングが効果的と考えられる。
- マルチレベル
 - 緩和演算子に高級なものを使う必要あり。

2005年度成果の実例

- 線形ソルバー, 並列アルゴリズム
 - 平原グループ向け
 - 中島研吾(東大理)
- プラットフォーム拡張
 - 粒子型解法向け可視化手法
 - 陳莉(東大生研)
- プラットフォーム適用
 - 高速多重極展開法とレプリカ交換法によるタンパク質構造解析
 - 鈴木正昭, 奥田洋司(東大人工物)
 - 並列有限要素法による海綿骨応力解析
 - 櫛田慶幸(JST・京大)

Structured Grids for FDM



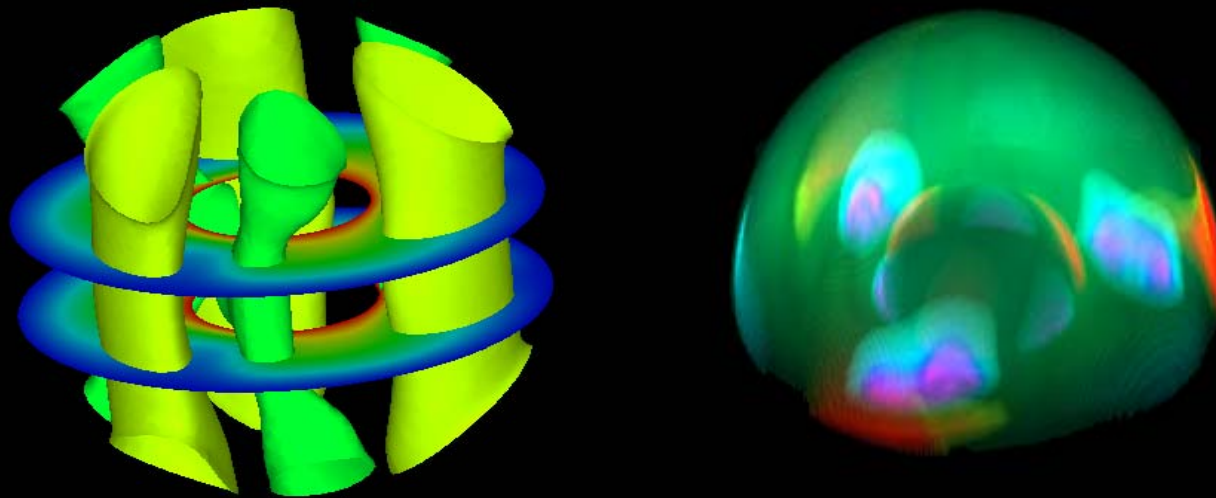
Parallel volume rendering for a regular dataset (Tokyo scenario earthquake simulation, Data courtesy of Prof. Takashi Furumura, ERI/University of Tokyo)

Unstructured Grids for FEM

Hybrid of tetrahedra, hexahedra, prisms, etc.

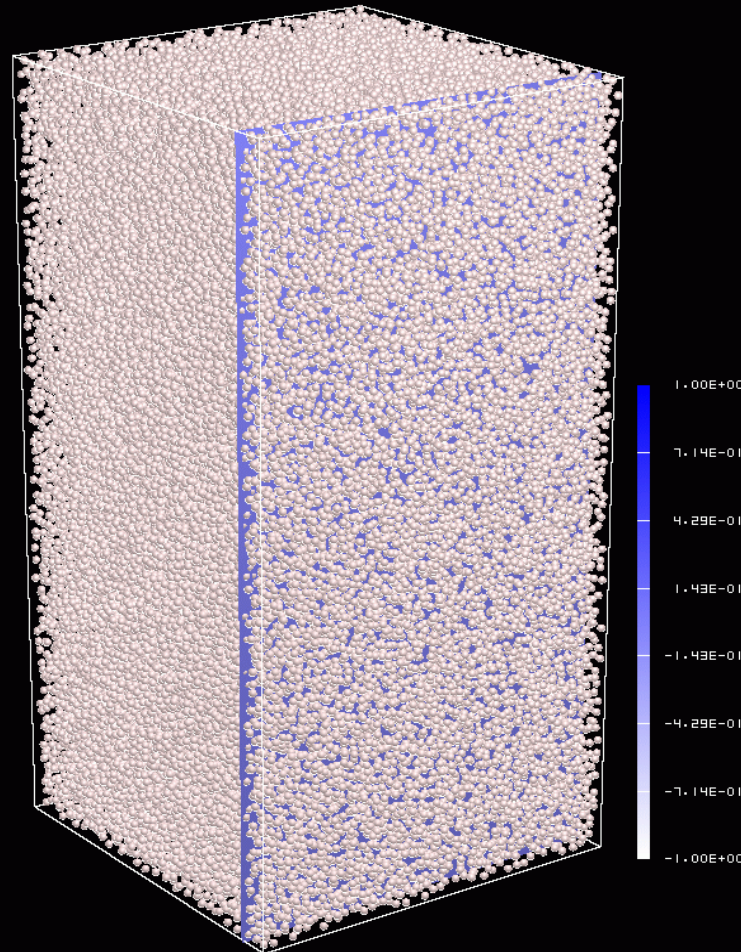
Hierarchical

Higher order elements



Parallel visualization images for the unstructured magnetohydrodynamic simulation datasets: Parallel surface rendering image (left); Parallel volume rendering image (right) (Data courtesy of Dr. H. Matsui, University of Chicago)

Particle Data for DEM



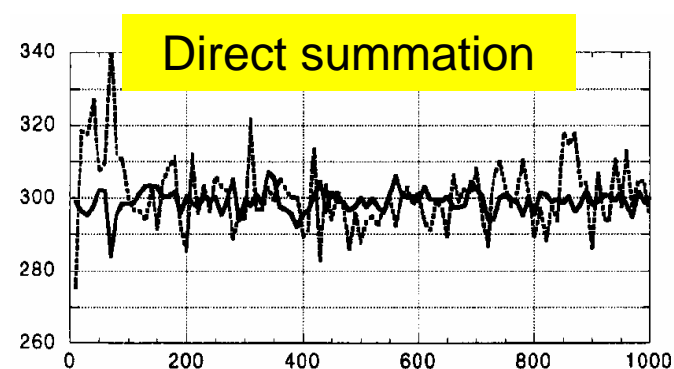
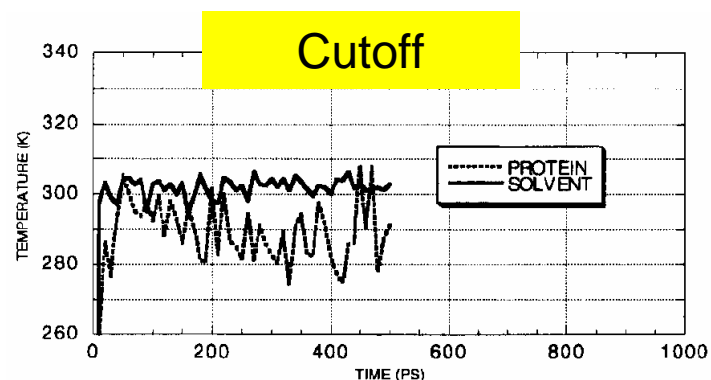
Parallel surface rendering image for displaying large number of particles (Data courtesy of Dr. Daisuke Nishiura, Doshisha University)

2005年度成果の実例

- 線形ソルバー, 並列アルゴリズム
 - 平原グループ向け
 - 中島研吾(東大理)
- プラットフォーム拡張
 - 粒子型解法向け可視化手法
 - 陳莉(東大生研)
- プラットフォーム適用
 - 高速多重極展開法とレプリカ交換法によるタンパク質構造解析
 - 鈴木正昭, 奥田洋司(東大人工物)
 - 並列有限要素法による海綿骨応力解析
 - 櫛田慶幸(JST・京大)

高速多重極展開法

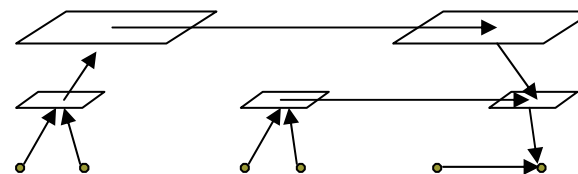
- クーロン項のカットオフによる温度の乖離



Y. Komeiji et al., *J. Comp. Chem.*, Vol.18, 1546-1563 (1997)

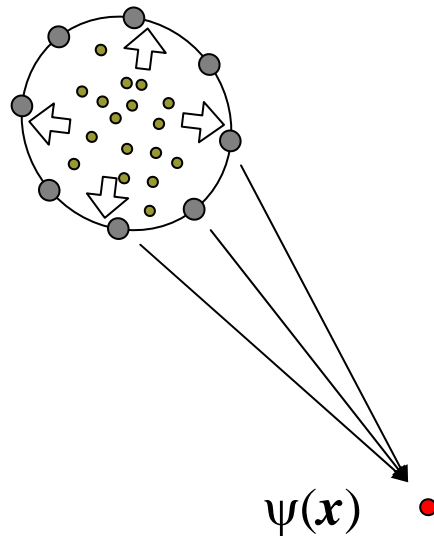
- クーロン力の高速・高精度計算のために

- 高速多重極展開法: $O(N)$
 - “遠方の粒子はまとまりで扱う”
- 含まれる数式が複雑で
コード開発・高速化が困難



Andersonの方法

- 高速多重極展開法の効率的実装
 - Andersonの方法: $O(N)$
 - オリジナルの高速多重極展開法と比較してコード開発・高速化が容易
 - Outer/Inner sphere approximation
 - 半径 a の球に含まれる粒子が球面の外側の点 x に及ぼすポテンシャル $\psi(x)$ は、球面上でのポテンシャルの値が分かればポアソンの公式を用いて以下のように書ける



$$\Psi(\rho) \approx \sum_{i=1}^K \left[\sum_{n=0}^M (2n+1) \left(\frac{a}{r} \right)^{n+1} P_n(\hat{s}_i \cdot \hat{x}_p) \right] g(a\hat{s}_i) w_i$$

a : 球面の半径

r : x の大きさ

P_n : n 次ルジャンドル関数

\hat{x}_p : x 方向の単位ベクトル

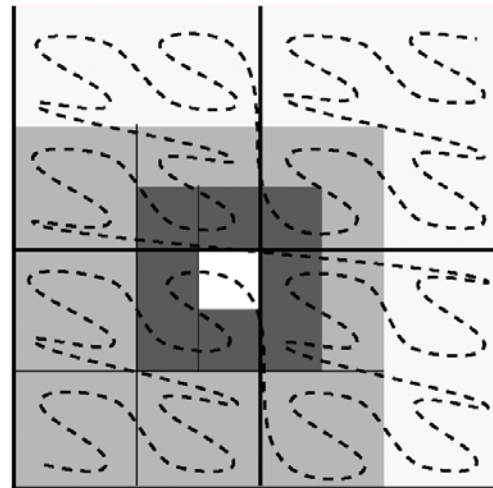
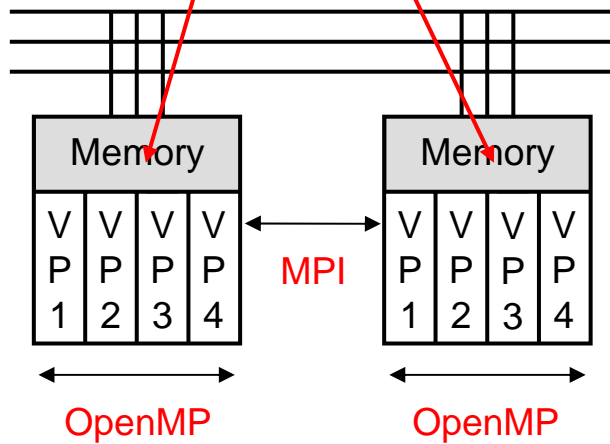
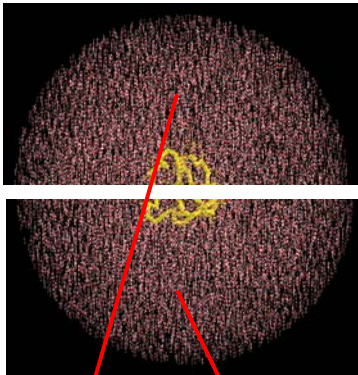
\hat{s}_i : 単位球面上の積分点 i の
位置ベクトル

g : 球面上のポテンシャル値
 w_i : 積分点の重み

Andersonの方法の並列化

- MPI/OpenMPハイブリッド
- Mortonオーダリング
- 近傍粒子リストの作成

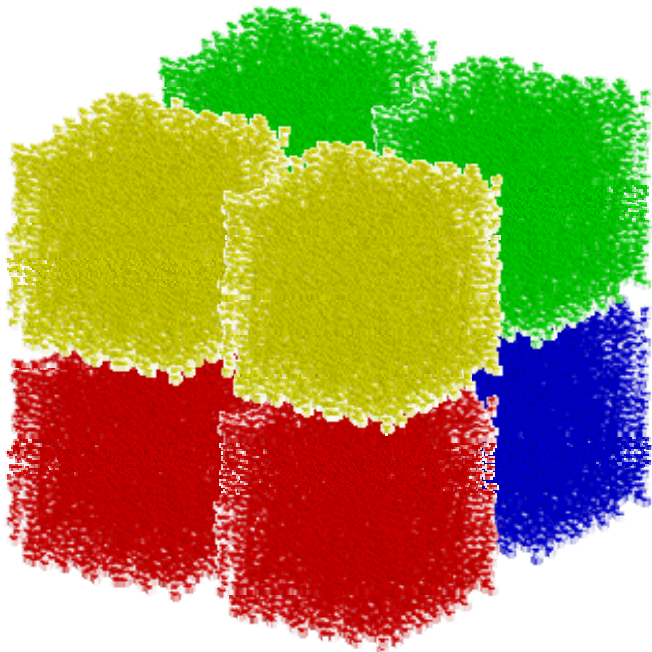
領域分割



```

近傍セルリスト作成
!$OMP DO
do (中心セル)
  do (中心セル内粒子)
    do (近傍粒子)
      VDW, Coulomb項計算
    end do
  end do
end do
    
```

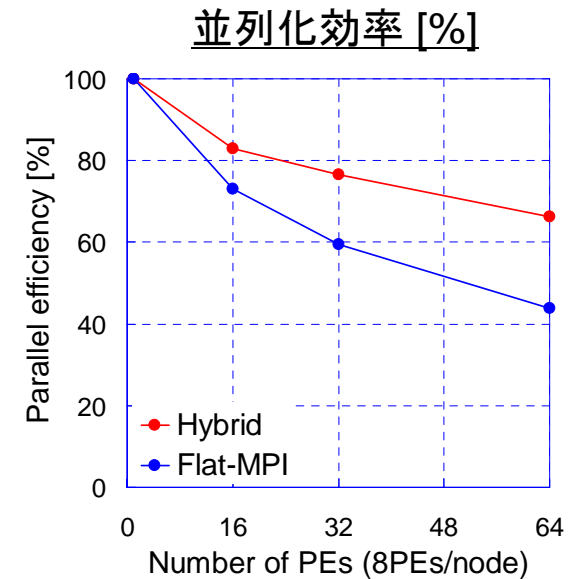
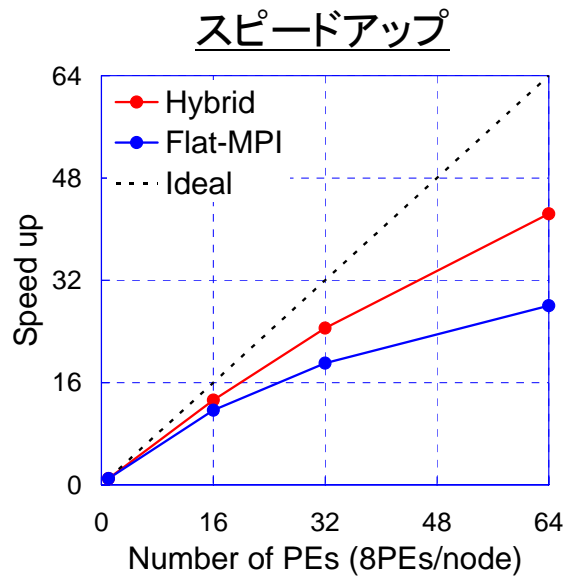
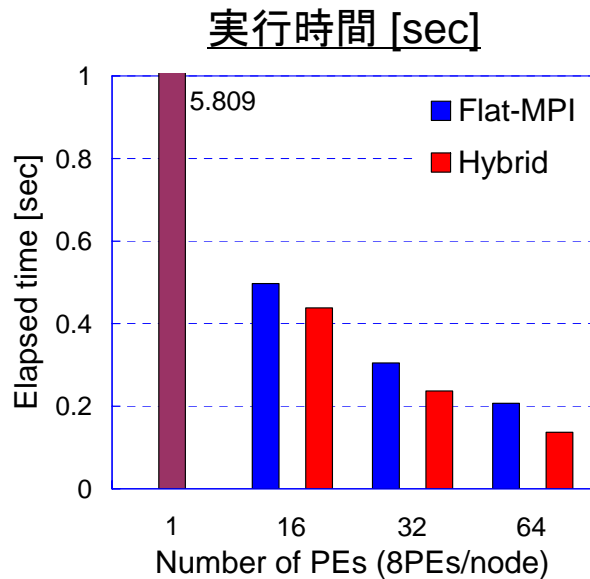
地球シミュレータ上での並列性能評価



- 立方体領域に一様分布した荷電粒子
 - 117,649粒子
 - 1 MDステップに要する時間を計測
- 単一レプリカについて
 - MPI/OpenMPハイブリッド vs. フラットMPI
 - 8 SMPノード(64プロセッサ)

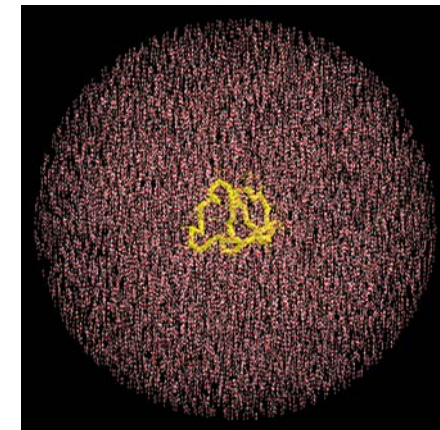
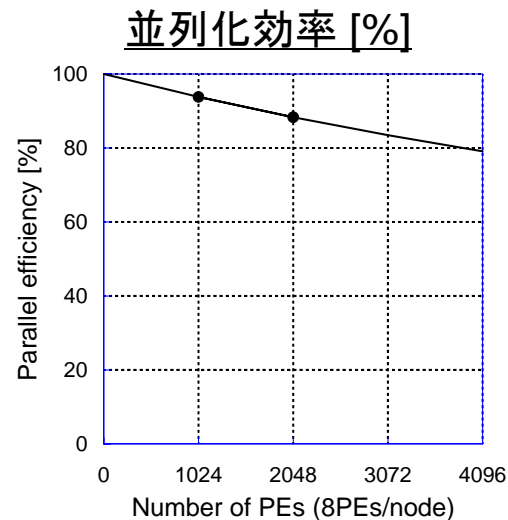
ハイブリッド vs. フラットMPI

- ハイブリッドモデルによる並列性能向上
 - 使用ノード数増加とともに性能差拡大
 - 8ノード使用時に1.5倍の加速



実問題解析

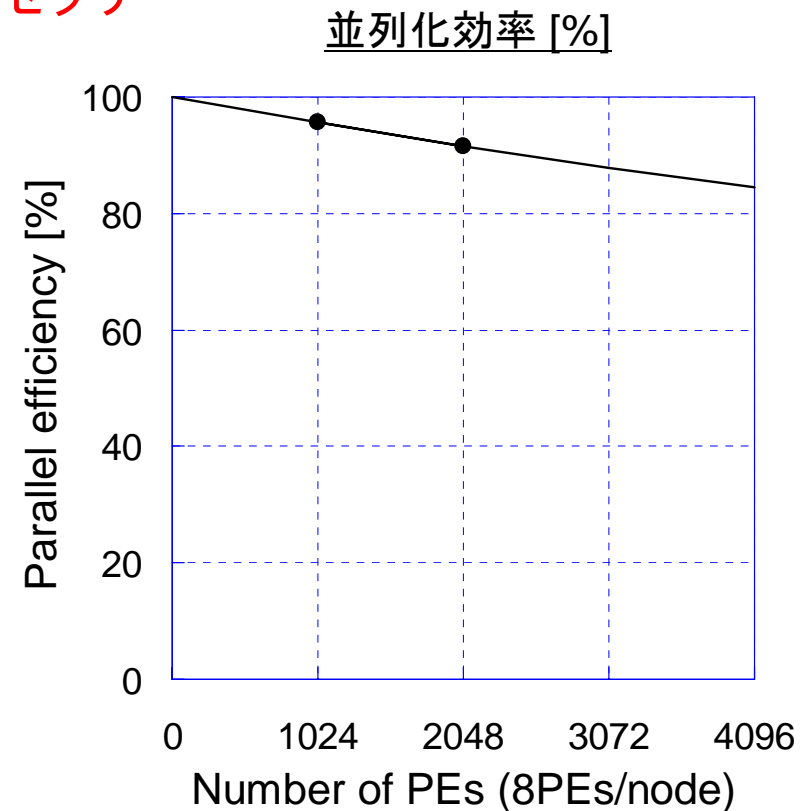
- 水中のタンパク質の折り畳みシミュレーション
 - 半径50 Åの水球中の小タンパク質(アミノ酸数42)
 - 全原子数52,143(水分子17,187、溶質原子数582)
 - 256レプリカ
 - 1024、2048プロセッサで測定
- 並列化効率 88.26% @ 2048プロセッサ
 - 並列化率 99.9935%
- ベクトル化率 98.22%



初期構造

大規模問題による並列性能測定

- 117,649粒子 x 512レプリカ
- MPI/OpenMPハイブリッド
- 並列化効率 91.56% @ 2048プロセッサ
 - 84.44% @ 4096プロセッサ
- ベクトル化率 99.07%
- 対ピーク性能比 24%
 - 3.9 TFLOPS



まとめ

- タンパク質構造予測のためのレプリカ交換MDコードをSMPクラスタ型ベクトル並列計算機である地球シミュレータ向けに最適化した
 - 水中のタンパク質の折り畳みシミュレーション(アミノ酸数:42、全原子数:52,143、レプリカ数:256)において、2048プロセッサ使用時に88.26%の並列化効率を達成し、高い並列性能を持つ並列化を行うことが出来た
- 非知識的な折り畳み計算としては最大規模のシミュレーションのプロダクションランを開始した
- 本研究で開発したFMM計算部分のカーネルを「地球シミュレータ」向け一般ライブラリとして公開すれば、有用性は高いものと考えられる

2005年度成果の実例

- 線形ソルバー, 並列アルゴリズム
 - 平原グループ向け
 - 中島研吾(東大理)
- プラットフォーム拡張
 - 粒子型解法向け可視化手法
 - 陳莉(東大生研)
- プラットフォーム適用
 - 高速多重極展開法とレプリカ交換法によるタンパク質構造解析
 - 鈴木正昭, 奥田洋司(東大人工物)
 - 並列有限要素法による海綿骨応力解析
 - 櫛田慶幸(JST・京大)

背景：海綿骨応力解析の必要性

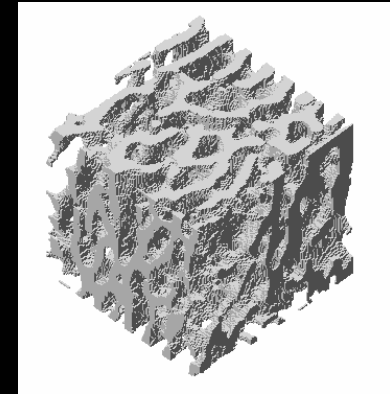
- 医療分野

- 骨粗しょう症患者への
インフォームド
コンセント

局所的に
高い応力



骨梁形態と
の対応(骨
粗しょう症)



- バイオエンジニアリング

- 骨細胞の応力検知
- 骨リモデリングの過程解明

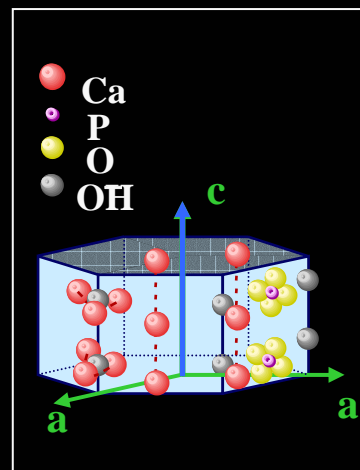
背景: 考慮すべきスケール

骨の応力解析はナノからマクロまでの広いスケール

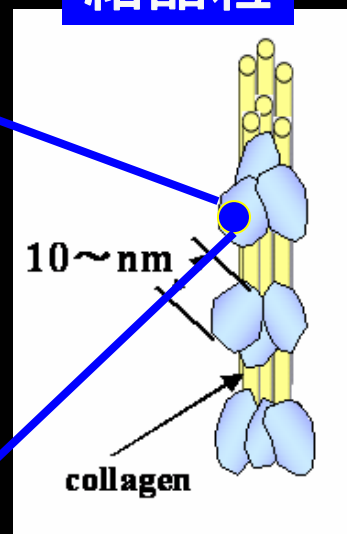
- 海綿骨の複雑な構造
- 結晶配向による骨材料の異方性

1nm 10nm ... 1 μ m ... 100 μ m 1mm 1cm

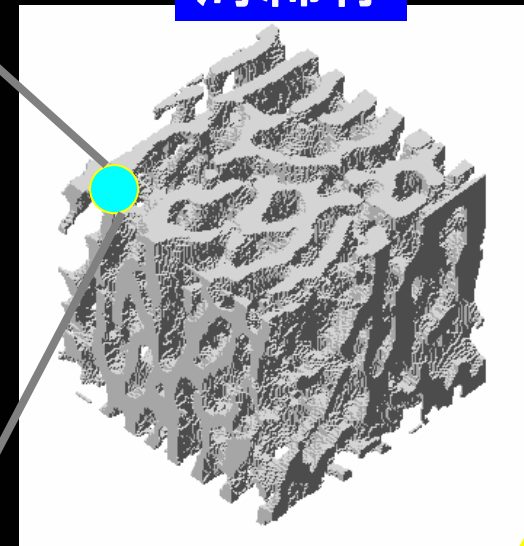
アパタイト結晶



結晶粒



海綿骨

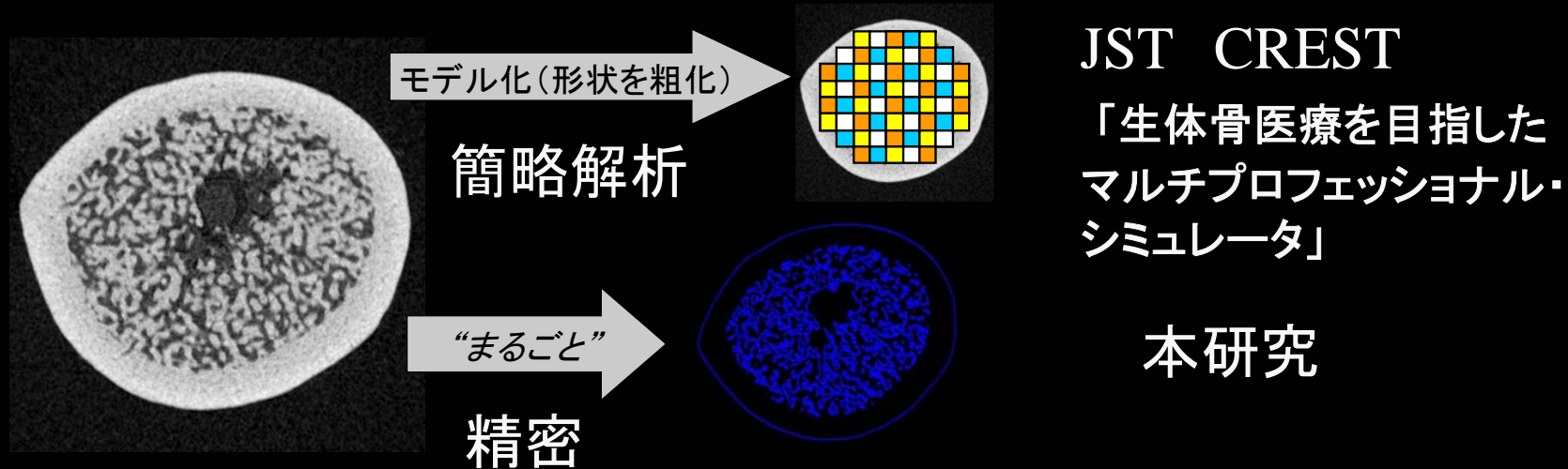


Nano-scale

Micro-scale

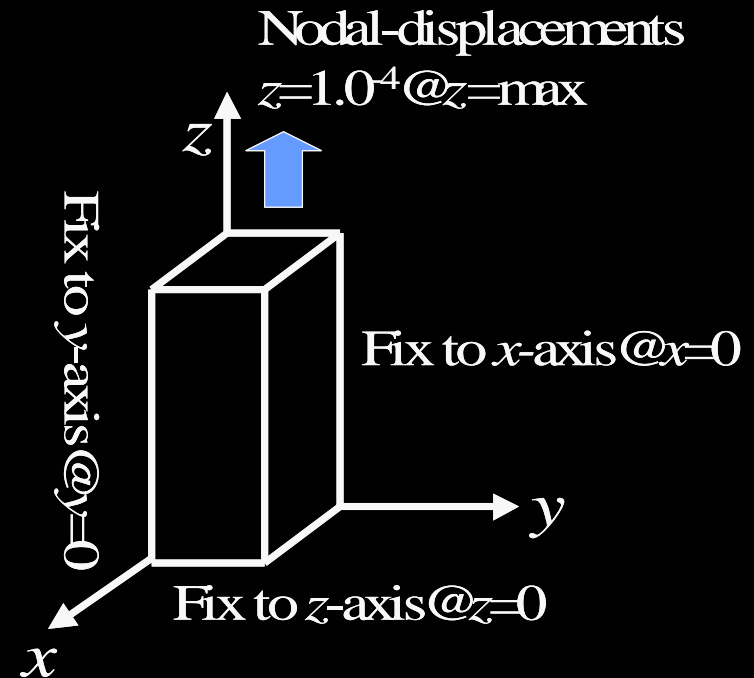
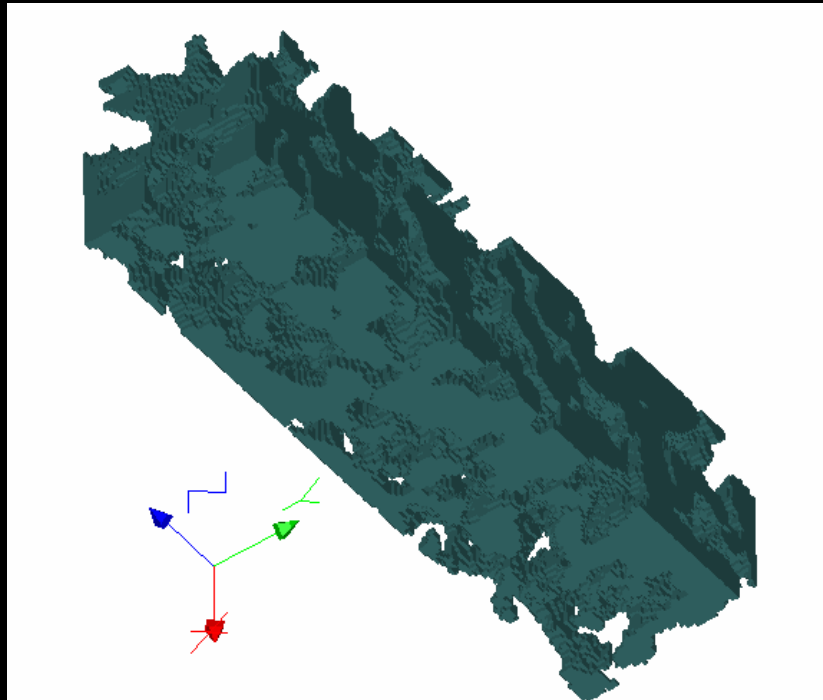
Macro-scale

ミクロ～マクロ応力解析のための戦略



- 臨床医などの非専門家が利用するソフトウェアの開発
 - 海綿骨応力解析に適したPCによる簡略解析をプロジェクト内で開発
 - 高性能計算機を用いた“まるごと”解析
- X線断層写真を三次元化した有限要素をそのまま解析
 - “まるごと”解析による精度の保証
 - 簡略化の精度改善

問題設定

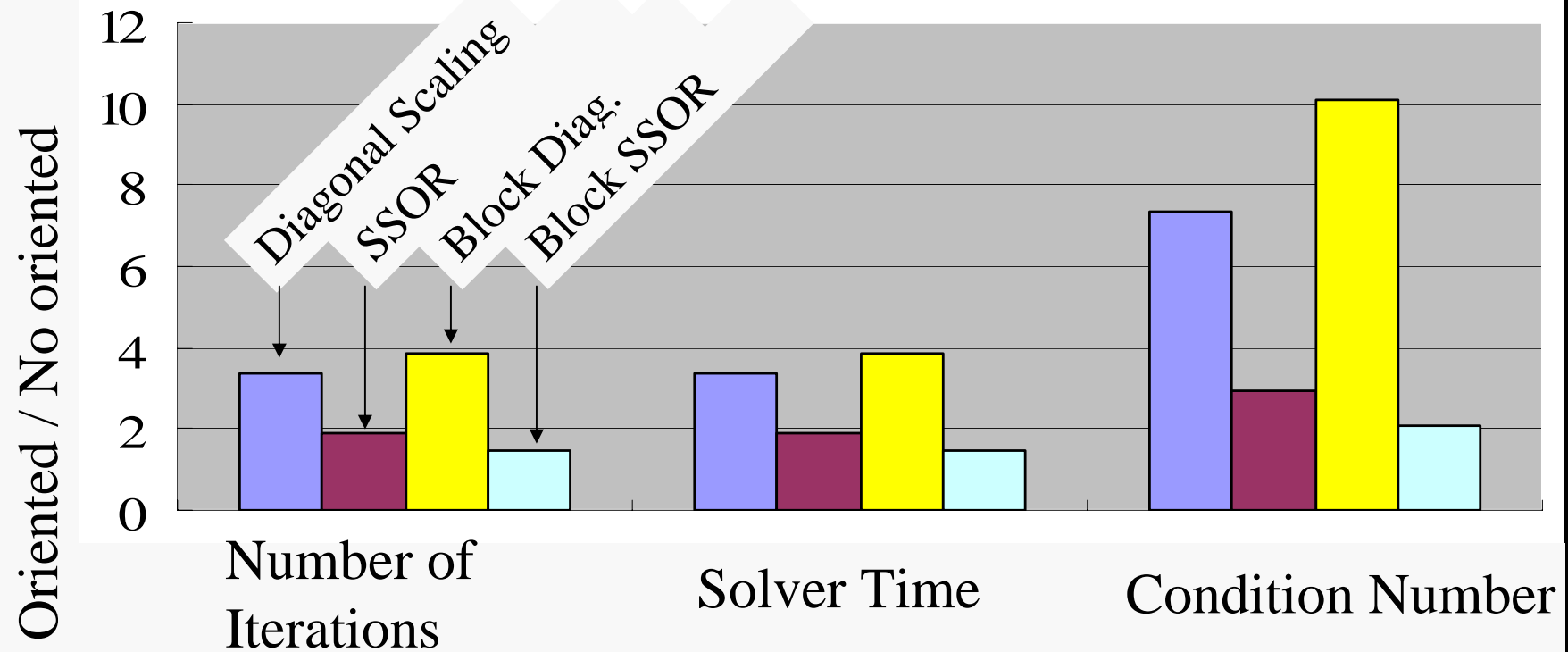


有限要素モデル: 海綿骨の一部
要素数 約20万

境界条件

- 上記解析モデルを, 結晶配向を考慮しない(等方弾性体)場合と結晶配向した場合について解析し, 収束性を検討

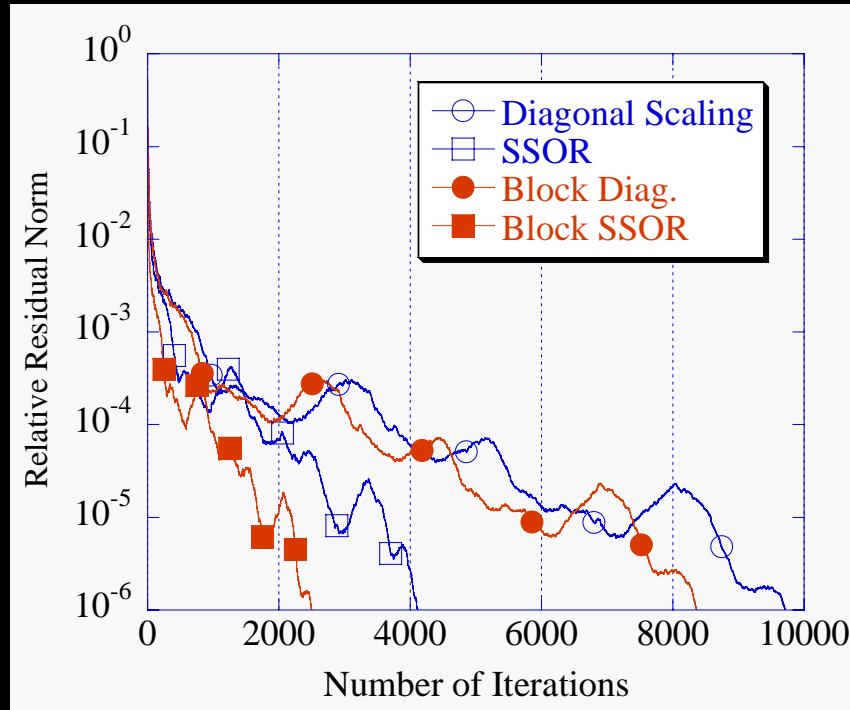
結晶配向考慮による収束性の悪化



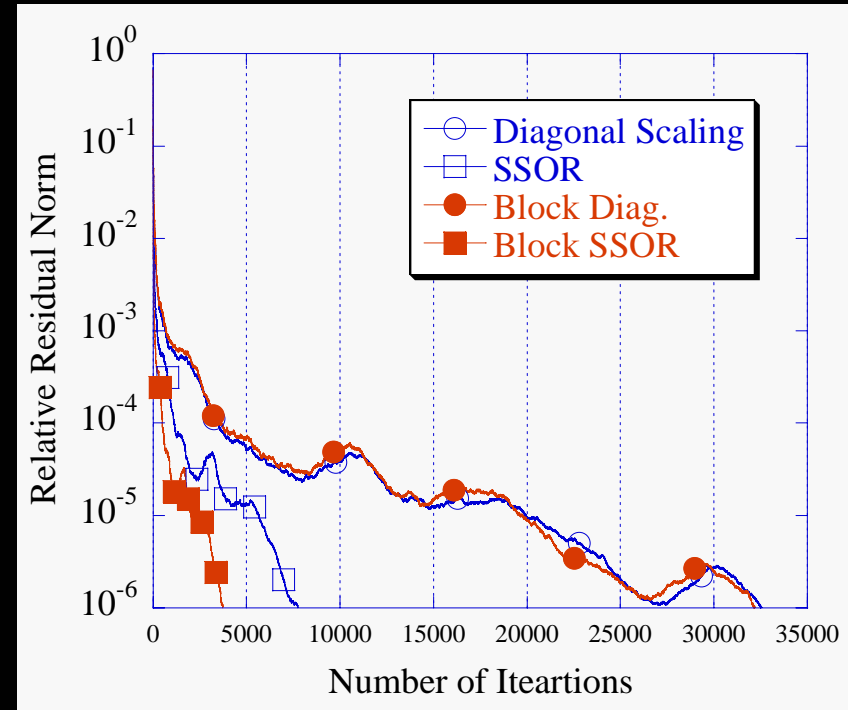
- Block SSORが最も結晶配向による悪化が少ない
- 結晶配向による悪化は周辺の情報 considering することで低減

Condition number: $M^{-1}A$ の
最大固有値と最小固有値の比

収束履歴



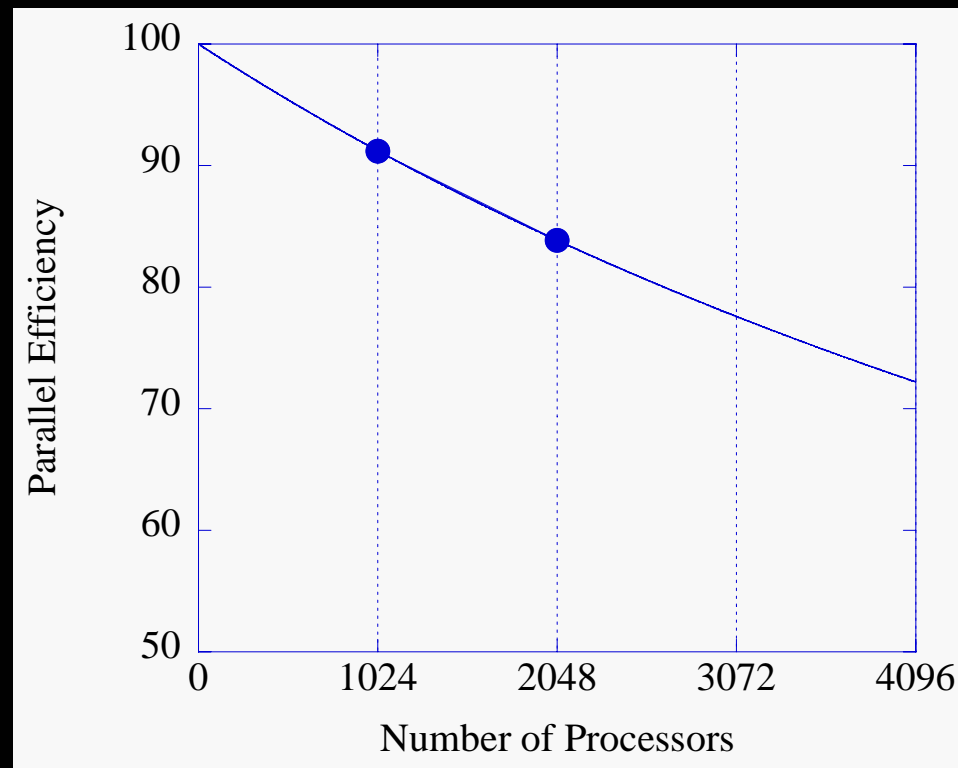
結晶配向無し



結晶配向有り

- 結晶配向がある場合，局所的な前処理はBlock化の効果がない
- 広域的な前処理は，Block化の効果 that 顕著になる
- Block SSORが最も効果的

プログラム性能評価



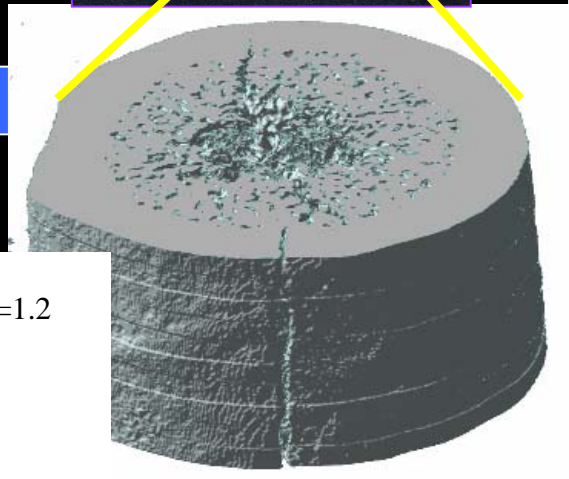
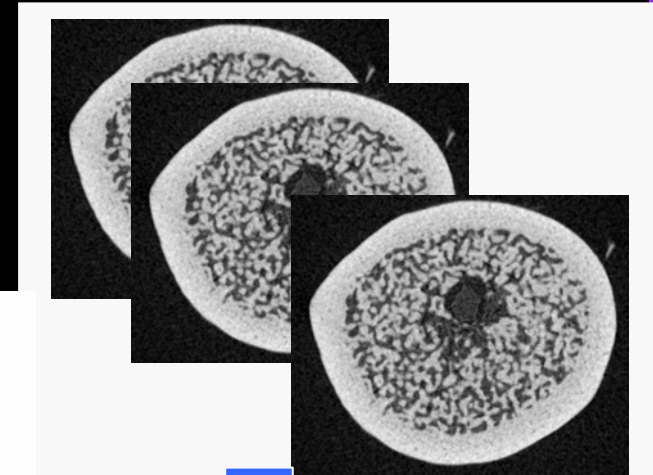
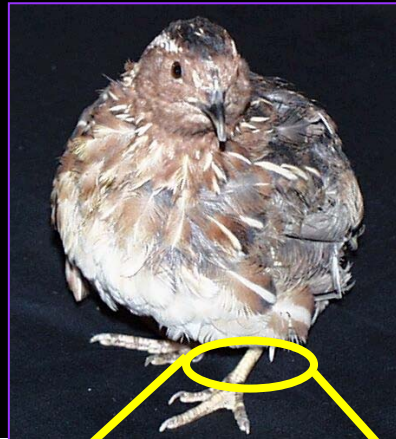
並列化効率 (● : 測定点)

- 地球シミュレータ
- 単純引っ張り問題
- $1024^2 \times 512$ ボクセル

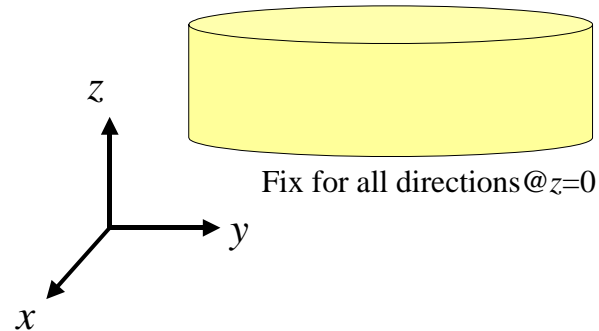
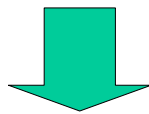
- ベクトル化率 :
98.4%
- 並列化率 :
99.9906%
- 4096 プロセッサ
使用時にも50%以上
の並列化効率を
達成すると予測

例題：うずら大腿骨モデル

- 地球シミュレータ
10ノード使用
- 計算時間：約12時間



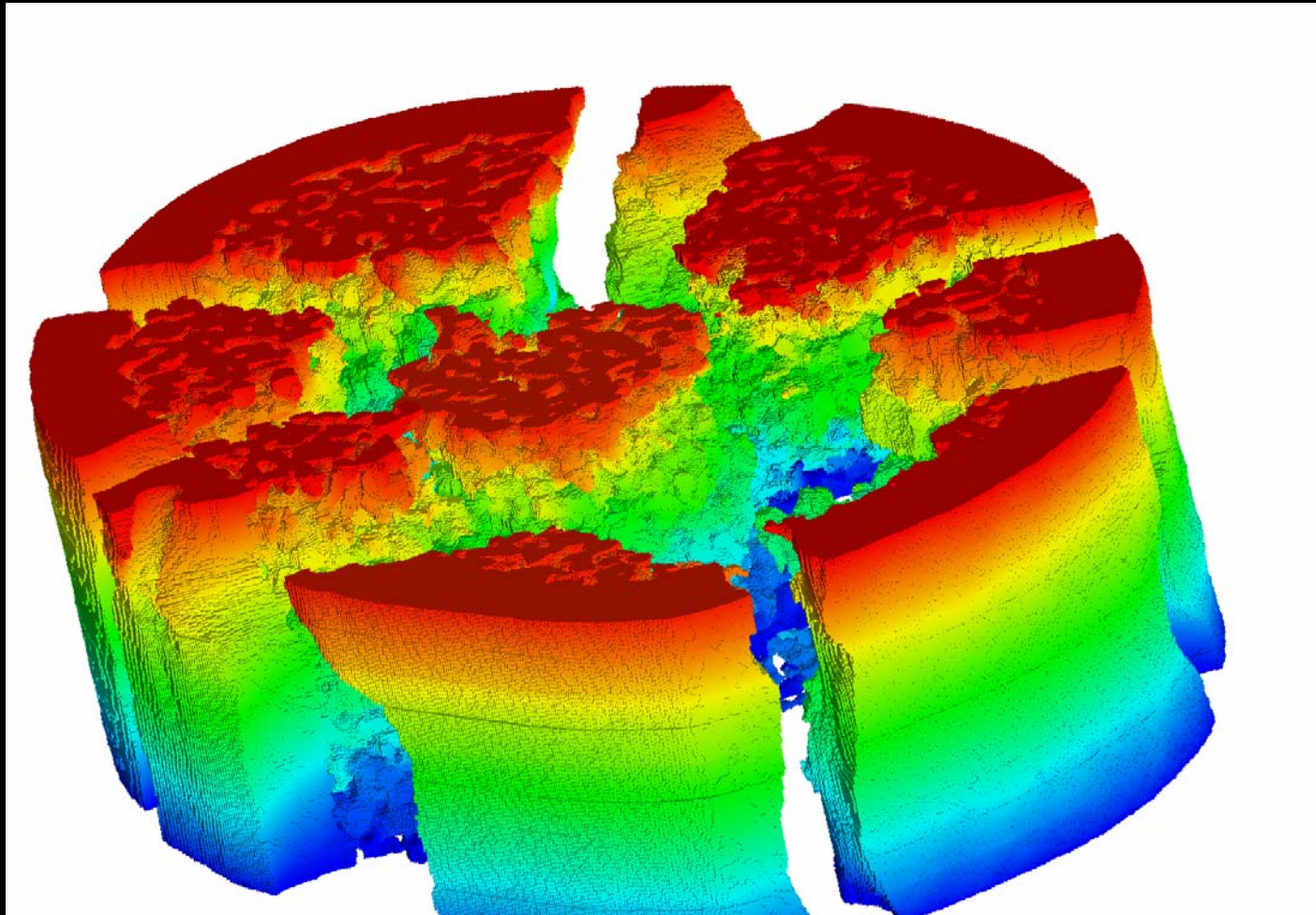
Nodal-displacements ($z=-0.012$)@ $z=1.2$



画像解像度 : 512×512

画像枚数 : 200

結果：Z軸方向変位図



並列計算時のために施した
領域毎に表示

2005年度達成度

- 固体地球シミュレーションの統合化に向けたプラットフォームの機能拡張 **70%**
- 固体地球シミュレーションプラットフォームのシミュレーションへの適用
 - 固体地球分野 **75%**
 - 工学分野 **90%**

今後の展開・課題

- プラットフォーム機能拡張
 - 悪条件問題に関する高速演算ライブラリ整備
 - 局所細分化, 動的負荷分散
- プラットフォームのシミュレーションへの適用
 - 固体地球分野, 工学分野
- 他プロジェクトとの協力
 - CREST/JST「観測・計算を融合した階層連結地震・津波災害予測システム」
 - 先進・創出分野「地下水挙動」(奥田グループ)
 - マルチレベル解法の亀裂ネットワークモデルへの適用(マルチレベルソルバー, 動的負荷分散機能)
 - 文科省「戦略的革新シミュレーションソフトウェアの研究開発」
 - US-DOE ACTS