計算科学技術部会セッション

福島第一原子力発電所事故の解明・復興に資する計算科学技術

Computational Science and Engineering Contributing to Investigation of and Reconstruction from the Fukushima Dai-ichi Nuclear Power Plant Accident

(3) 「京」が可能にしたこと、「富岳」が可能にすること

(3) What did "K" enable us? What does "Fugaku" enable us?

* 奥田 洋司

¹ 東京大学**1. はじめに**

近年のノイマン型計算機ハードウェアの高性能化は、並列化、クラウド化、あわせて、メモリ構造の階層化により実現されている。これらハードウェアが有するピーク性能をどの程度実効的に発揮できるかは、プログラムの要求する B/F 値 (プログラムやデータ構造で決まる、1 フロップあたりに必要なデータ量) に大きく依存する。CAE (Computer Aided Engineering) の分野、とくに、非構造格子 (unstructured grid) に立脚した離散化解法、例えば、差分法や有限要素法は、一般的に B/F 値が大きく、メモリ律速となることに注意しなければならない。

2. 詳細化と高速化による CAE の高度化**2-1. ノード間並列**

ネットワーク結合された多数ノードを同時に使うことにより大規模な詳細解析が可能となる。計算機の有効利用を図るという意味では、ノードに負担させるタスク量が通信量に対して相対的に大きくかつ負荷バランスのとれた分割を行えば、Weak Scale という意味で加速率を上げることが比較的容易に行える。この場合のプログラミングモデルは領域分割に基づく SPMD タイプとなるのが一般的である。しかしながら、空間解像度が詳細化されると、あわせて非線形や時間進行のための増分も細かくする必要がある。計算機が N 倍になっても解ける問題の詳細化を通じて享受できるメリットが N 倍には届かない、と言われるゆえんである。

2-2. ノード内並列

ノード内 (CPU 内) の複数コア同時利用による演算加速は、OpenMP などの並列指示文の挿入によるループ分割で実装されることが多い。コア数にも依るが、こちらも負荷バランスやブロッキングなどに注意を払えば、加速は比較的容易である。注意しなければならないのは、1 ノードのピーク性能にどれだけ近い実行性能 (対ピーク性能) を発揮できているかであり、多くの CAE アプリケーションではこの値に課題が残されている。具体的には、対ピーク性能で数%程度のものである。CAE の多くの局面において、解析モデルの詳細度を上げる必要性和、モデル規模は一定のまま並列計算により高速化を図る必要性の、両面があり、後者はノード内並列性能 (Strong Scale) に加えて対ピーク性能について向上させることが重要となる。

3. CAE 高度化における課題**3-2. 詳細化から不確実性へ**

造信頼性評価の分野に限って言えば、今後さらに CAE に要求されるものは単に計算モデルの詳細化に留まらず、ジョイント部などを含むアセンブリ構造としての構造物評価、物性値や形状の不確実性の考慮、が挙げられる。後者に必要な計算基盤としては、Embarrassingly Parallel を戦略としたモンテカルロ法の並列実施などがある。

3-2. オープンソース化による検証精度の向上

アプリケーションの V&V を実施するうえで、オープンソース化は自然な流れであり、オープンソース化に勝る計算の透明度はない。各企業や大学が所有するデータにこそコアコンピタンスが見いだされるべきである。

4. おわりに

講演では、著者がその開発の携わってきた並列非線形 FEM 構造解析プログラム FrontISTR (FrontISTR) での経験を通じて、CAE の現状と課題についてディスカッションする。

*Hiroshi Okuda

¹The Univ. of Tokyo