

課題名 (タイトル) :

## ナノ粒子生成シミュレーションの高速化

利用者氏名 : 滝沢 寛之

所属 : 本所 情報基盤センター

## 1. 本課題の研究の背景、目的、関係するプロジェクトとの関係

近年急速にそのニーズが高まっているナノテクノロジーの一端を担う流動プラズマ支援型ナノ粒子量産プロセスを計算対象として取り上げ、そのマクロスケールからナノスケールに及ぶマルチスケール物理の包括的なシミュレーションを実現する。これによりプロセスを構成する数多の素過程とそれらの干渉現象が初めて解明され、物理学・化学・材料科学分野への学際的な貢献を果たすのみならず、産業界に対しても実機の最適制御のための指針提供が叶うことになる。しかし、そのためには現在膨大な時間を要するナノ粒子生成プロセスシミュレーションの高速化が必要不可欠であり、特に GPU による高速化が有望である。

他にも、MPI と CUDA/OpenCL を組合わせた並列シミュレーションコードを開発し、複数の GPU を用いたシミュレーション高速化技術を研究する。このためには GPU を搭載する大規模クラスタが必要不可欠であるため、国内有数の大規模 GPU クラスタシステムである多目的クラスタを利用する。

## 2. 具体的な利用内容、計算方法

多目的クラスタを利用して GPU による高性能計算を行い、様々なパラメータ設定でのナノ粒子生成プロセスをシミュレートするとともに、MPI アプリケーション中で GPU を効果的に利用する技術の性能評価を行う。

## 3. RICC の継続利用を希望の場合は、これまで利用した状況 (どの程度研究が進んだか、研究においてどこまで計算出来て、何が出来ていないか) や、継続して利用する際に行う具体的な内容

多目的クラスタでいくつかの予備実験を行った結果、GPU を利用する場合には通信時間と計算時間をオーバーラップすることによって通信の

オーバーヘッドを隠ぺいすることが特に重要であり、計算負荷や通信の不均衡等の理由によって隠ぺいできない場合には高いスケーラビリティを得ることができないことがわかった。

我々が開発中の数値流体シミュレーションの MPI プログラムを、多目的クラスタ上で試験的に実行した結果を図 1 に示す。図 1 から、数値流体シミュレーションの圧力計算の実行時間が、ノード数の増加に伴って減少していることが分かる。しかし、本アプリケーションでは計算負荷の均衡はとれているものの、通信時間が各計算ノードで大きく異なる。また、計算時間と通信時間のオーバーラップもできていない。このため、計算台数を増やしても相応の速度向上は得られていない。

現在、ナノ粒子生成プロセスを中心として複数の GPU コードを開発中である。それらのコードは基本的に手元の PC で開発しているが、大規模システム上での性能評価の際には多目的クラスタを積極的に利用することを計画している。

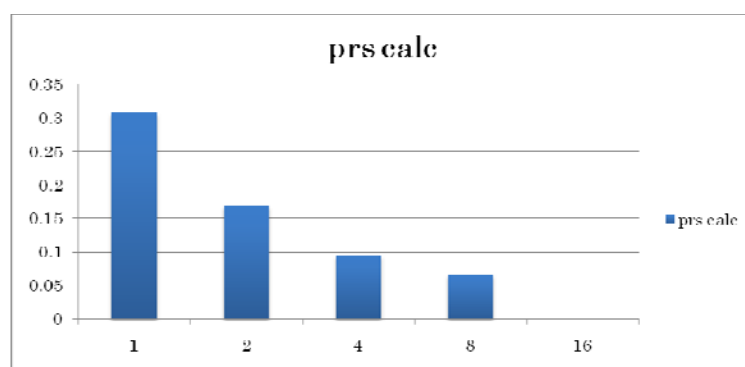


図 1 計算ノード数と圧力計算時間の関係

## 4. 利用研究成果が無かった場合の理由

利用を開始したばかりであり、現在、シミュレーションコードを開発中であるため