

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

理研での所属研究室名 : 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群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 OpenCL を組み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

現在、ナノ粒子群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。それらのコードの開発は基本的に手元の PC クラスタで行われているが、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。

ナノ粒子群生成プロセスのシミュレーションには大容量メモリが必要であり、高解像度なシミュレーションを行うためには、大規模分散メモリ型並列システムによる並列処理が必要不可欠である。また、シミュレーションの実行時間も長いいため、その飛躍的な高速化の要求も強い。しかしながら、その疎粒度並列性は限られているため、MPI プロセス数の上限は制約されている。このため、各 MPI プロセスを GPU によって高速化するアプローチが有望である。

本課題では、MPI と OpenCL を用いたハイブリッドプログラミング化によって同シミュレーションコードを高速化した。手元の GPU クラスタで性能評価した結果を図 1 に示す。Intel Core i7 930 1 プロセッサで 6 時間かかるシミュレーションを、4 ノードの小規模クラスタでも 15 分程度で実行可能であることから、多目的クラスタを使うことによってさらなる大規模化と高速化が多いに期待される。

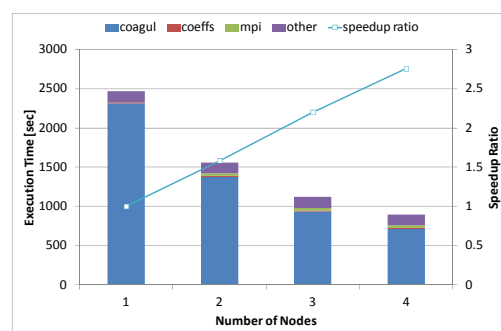


図 1 計算ノード数と実行時間の関係

4. 利用研究成果が無かった場合の理由

現在はシミュレーションコードの開発途中であり、多目的クラスタによる大規模シミュレーションの評価をようやく始めた段階であることから、来年度、さらなる評価と解析を行った後に研究成果として発表する予定である。

また、本課題の目的の一つである GPU クラスタ利用技術の研究成果として、現在、先行して開発

平成 23 年度 RICC 利用報告書

されてきた数値流体シミュレーションの性能評価に関する論文を投稿中である。