

東京工業大学 学術国際情報センター Global Scientific Information and Computing Center

TSUBAME ESJ.

Vól.

マルチフェーズフィールド法を用いた 金属多結晶組織形成シミュレーションの 大規模 GPU計算

Multi-GPU Computation of Multi-phase Field Simulation of the Evolution of Metallic Polycrystalline Microstructure

量子モンテカルロ法に基づく 振動状態解析の大規模並列計算

A Large-scale Parallel Computation for Vibrational State Analysis Based on Quantum Monte Carlo method

個別要素法による粉体の大規模シミュレーション

Large-scale DEM Simulations for Granular Dynamics

http://www.gsic.titech.ac.jp/TSUBAME_ESJ

マルチフェーズフィールド法を用いた 金属多結晶組織形成シミュレーションの 大規模GPU計算

山中 晃徳* 岡本 成史** 下川辺 隆史*** 青木 尊之***

*東京農工大学大学院工学研究院先端機械システム部門 **東京農工大学大学院工学府機械システム工学専攻 ***東京工業大学学術国際情報センター

金属材料の内部で生じるミクロな多結晶組織形成のシミュレーション法として注目されているマルチフェーズフィールド (MPF)法を複数のGPUで高速かつ大規模に並列計算する方法を開発した。本稿では、数値計算と並列処理のためのデー タ通信を非同期実行するためのオーバーラッピング法を導入したMPF法の計算手法を紹介する。さらに、開発したGPU計 算手法による多結晶粒成長の大規模3次元シミュレーションをGPUスーパーコンピューター TSUBAME2.5 に実装し、良好 な実行性能が得られたことを示す。

はじめに

地球環境に与える負荷の低減のために、ハイブリッド自動車など の燃費の良い自動車の開発が活発である。自動車の燃費をさらに 向上させるためには、エンジンやモーターの効率向上の他に、車体 の軽量化も重要な技術課題とされている。自動車車体の軽量化は、 使用する金属板材を薄肉化することにより可能であるが、衝突安 全性を確保するために強度も高めることが必要とされる。しかし 一般には、金属材料は強度を高めると加工性は低下する。すなわち、 薄くプレス加工する際に割れ易くなる。そのため従来の材料研究 開発では、絨毯爆撃的な実験を行い、材料の特性を支配する材料 内部のミクロな構造の空間分布や形態を制御するための適切な合 金組成や製造プロセスを見つけ出す努力を重ねてきた。しかし近 年では、材料研究開発の国際競争が激化しており、如何にして効 率良く、無限の組み合せが存在する合金元素や製造プロセスの中 から、所望の特性を具備する材料を作るための条件を見つけ出す かが極めて重要となっている。

これに対して現在では、材料開発のコストや期間を飛躍的に短 縮するために、計算材料学に基づく数値シミュレーションにより 材料のミクロ組織や特性を予測する計算技術の開発が世界的に活 発となっている。その中でも、材料中のミクロ組織を予測するた めの強力な数値シミュレーション方法としてフェーズフィールド 法が注目されている。特に、実用金属材料のほとんどで観察され る多結晶構造を有するミクロ組織の形成過程を計算するための方 法として、マルチフェーズフィールド(MPF)法^[1]が世界標準とな りつつある。しかしながら、2011年にゴードンベル賞を受賞した 通常のフェーズフィールド法を用いた合金凝固の計算^[2]とは異な り、MPF法では複雑な非線形項を含んだ複数の偏微分方程式を解 く必要があるため、数値演算とメモリの両面で計算コストが大き いことが問題である。

そこで我々の研究では、GPUを用いてMPF法を高速かつ大規模 に並列計算する技術を開発している。本稿では、MPF法を多数の GPUを用いて計算するために必要なオーバーラッピング法⁽³⁾(数値 演算とデータ通信を非同期に行うアルゴリズム)と、それを東京 工業大学学術国際情報センターのGPUスーパーコンピューター TSUBAME2.5に実装して実施した、金属多結晶組織形成の大規模 3次元シミュレーションを紹介し、我々が開発したGPU計算法の 実行性能評価を示す^[4]。

マルチフェーズフィールド法

本研究で使用したMPF法は、1999年にSteinbachらによって提案 された^[1]。MPF法は、次式で表される材料の全自由エネルギーが 単調に減少するようにミクロ組織形成が進行するとの仮定に基づ いている。

$$G = \int_{V} \left[\sum_{i=1}^{N} \sum_{j=i+1}^{N} \left\{ W_{ij} \phi_{i}\left(\mathbf{r},t\right) \phi_{j}\left(\mathbf{r},t\right) \right\} + \sum_{i=1}^{N} \sum_{j=i+1}^{N} \left\{ -\frac{a_{ij}^{2}}{2} \left| \nabla \phi_{i}\left(\mathbf{r},t\right) \right|^{2} \right\} \right] dV \quad (1)$$

ここで、右辺第1項はポテンシャルエネルギー、第2項は勾配エネ ルギーと呼ばれる。 W_{ij} や a_{ij} は界面エネルギーや界面幅に関係づけ られるパラメータである。 $\phi_i(\mathbf{r}, t)$ は、フェーズフィールド変数と 呼ばれ、異なるN個の結晶粒からなる系を考えたとき、空間座標r と時間tにおいて、あるi番目($i=1 \sim N$)の結晶粒が存在する確率 を表す。したがって、たとえば番号1の結晶粒(結晶粒1と呼ぶ) が存在する座標では $\phi_1(\mathbf{r}, t) = 1$ 、結晶粒1が存在しない座標では $\phi_1(\mathbf{r}, t) = 0$ と定義する。また、結晶粒1と他の結晶粒との界面を 有限厚さの領域と定義し、そこで0から1へと滑らかに変化するも のと定義する。以下では各変数について、(\mathbf{r}, t)は省略して記する。

式(1)に示した全自由エネルギーの時間に対する単調減少を仮 定すると、**ゆ**iの時間発展方程式は、Allen-Cahn方程式より次式で 与えられる。

$$\frac{\partial \phi_i}{\partial t} = -\frac{2}{n} \sum_{j=1,j\neq i}^n M_{ij}^{\phi} \sum_{k=1}^n \left\{ \left(W_{ik} - W_{jk} \right) \phi_k + \frac{1}{2} \left(a_{ik}^2 - a_{jk}^2 \right) \nabla^2 \phi_k \right\}$$
(2)

ここで、nは任意座標において非零となるフェーズフィールド変数の個数、 M_{ij}^{ϕ} はフェーズフィールド変数の変化を規定するモビリティーである。

なお数値シミュレーションにおいては、式(2)に示す ∲iの偏微 分方程式を時間と空間について離散化し、3次元直交格子上でス テンシル計算を行う。本研究では、空間微分は2次精度の有限差 分法、時間積分は1次精度のオイラー法を用いて計算した。

MPF 法の複数 GPU 計算

3

3.1 Active Parameter Tracking法

本研究で用いたMPF法では、N個すべての結晶粒ではなく、任意座標に存在するn個の結晶粒に対応する ϕ_i についてのみ時間変化を計算すればよい。したがって、N個すべての ϕ_i の値や結晶粒番号iの値をメモリ上に保存しておく必要はない。そこで本研究では、メモリ効率化手法としてActive Parameter Tracking (APT)法を用いた^[5]。APT法の詳細は文献^[5]を参照されたいが、MPF法で多結晶組織形成の3次元シミュレーションを高速に行うためには、メモリアクセス数やデータ通信量を低減するためにも、APTの利用は必須である。本稿では、APT法の処理のうち隣接差分格子点のデータを必要としない処理をAPT1、隣接差分格子点のデータを必要とする処理をAPT2と記する。

3.2 領域分割

MPF法を複数のGPUで計算するために、全計算領域を複数のサブ 領域に分割し、各サブ領域の計算にCPUとGPUを1基ずつ割り当 てる、領域分割法を採用した。例えば、図1に示すように、NX× NY×NZ個の差分格子からなる全計算領域を3次元分割によりx、 y、z方向にそれぞれX、Y、Z分割する場合には、サブ領域に含まれ る差分格子点はNX/X × NY/Y × NZ/Z 個となる。本研究では、ス テンシル計算を行う為、隣接するサブ領域間のデータ通信が必要 となる。そのため、各サブ領域のx、y、z方向の端面に境界領域を 作成する。すなわち、サブ領域のx、y、z方向の端に、それぞれ1× NY × NZ、NX×1×NZ、NX×NY×1の境界領域を作成する。境 界領域のデータ通信には、MPIを用いる。なお、本研究で実施した 実行性能の評価では、全計算領域サイズを変えるごとに、1次元分 割、2次元分割および3次元分割でテスト計算を実施し、実行性能 が最も高い領域分割方法を採用した。

3.3 スレッドブロックの設定

GPUの性能を十分に発揮させてシミュレーションを行うためには スレッドおよびブロックの割当て方法が非常に重要となる。本研 究では、図2のように、サブ領域の格子点数が nx × ny × nz の場合、 x、y方向にそれぞれ X'、Y'に分割した。つまり、サブ領域を nx/X' × ny/Y' × nz の小領域に分割し、nx/X' × ny/Y' × 1 のスレッドブ ロックが z 方向に nz 回移動するように計算した。スレッドとブロッ クの割り当て数については、計算領域サイズや領域分割数に応じ て、試行錯誤により最適値を決定した。



図1 3次元分割による計算領域の分割

マルチフェーズフィールド法を用いた 金属多結晶組織形成シミュレーションの大規模 GPU計算





図3 オーバーラッピング法の計算ダイアグラム

図2 スレッドブロックの設定

3.4 オーバーラッピング法

複数のGPUとCPUを用いて並列計算する場合、並列数を増やすほ ど境界領域のデータ通信のオーバーヘッドが発生し、実行性能が 低下する。そこで本研究では、CUDAの複数カーネルの非同期実 行機能とGPU-CPU間の非同期通信機能およびこれらの同時実行 機能を利用して、数値演算とデータ通信をCPUとGPUの両方で同 時に実行し、オーバーヘッドを隠蔽するためのアルゴリズム(オー バーラッピング法)を開発した^[4]。

図3に、オーバーラッピング法を適用したMPF法の計算ダイア グラムを示す。本方法では、GPUで行う計算を4つのストリーム (Stream 1~Stream 4)として用意する。まず、Stream 1では、各 GPUに割り当てられたサブ領域内部に対して式(3)の時間発展方 程式の計算とAPT1の処理を行う。これと並行して、Stream 2~ Stream 4では、境界領域に対して式(3)の時間発展方程式の計算 を行う。Stream 2~Stream 4での計算が終わり次第、GPUのグロー バルメモリにある計算結果をCPU側のホストメモリへ転送する。 ここでは、CUDAの非同期通信関数(cudaMemCpyAsync)を用いる。

一方、CPUは1計算ステップ前に計算されGPUのグローバル メモリ上にある境界領域の計算結果をcudaMemCpyAsyncによ りホストメモリへ転送した後、Stream 2 ~ Stream 4の処が完了 するのを待機する。Stream 2 ~ Stream 4の処理が完了すれば、 境界領域についてAPT 1とAPT 2の処理とそれに必要なデータ 通信を行う。以上の処理により更新された境界領域のデータを cudaMemCpyAsyncによりGPUのグローバルメモリへ転送する。

CPUでの計算とデータ通信、および全てのStreamの実行完了を 確認してから、GPUが境界領域に対してAPT 2の計算とデータ更 新を行い、1計算ステップが完了する。なお、ホストメモリ上のデー タ更新は、Stream 1 ~ Stream 4を実行している間に行うことがで きる。 GPU スーパーコンピューター TSUBAME2.5 における実行性能評価

4.1 多結晶粒成長シミュレーション

本研究で開発したMPF法の複数GPU計算法のベンチマークとして、 東京工業大学学術国際情報センターのGPUスーパーコンピュー ター TSUBAME2.5 において、多結晶粒成長の大規模3次元シミュ レーションを実施し、実行性能の評価を行った。実行性能の評価は、 すべて単精度計算にて行った。

図4に、TSUBAME2.5で計算した多結晶粒成長シミュレーション の結果の一例を示す。この例では、0.512³mm³の計算領域を 1024³の規則差分格子で分割し、256台のGPUを用いて計算した。 初期結晶粒数は32768個であり、図4では各結晶粒に異なる色を 付けて多結晶粒組織を可視化した。多結晶粒成長は、金属材料の 強度を調節するために行われる熱処理(焼鈍)などで生じる現象で あり、その際に観察される結晶粒の粗大化と収縮して消滅する挙 動を良好に再現できている。このシミュレーションのような大規 模な計算領域で、かつ非常に多数の結晶粒で構成されるミクロ組 織の変化を考慮したシミュレーションを行うことで初めて、正しい 多結晶組織の統計学的評価(例えば、結晶粒サイズの平均値の変 化やその分布の評価)が可能となる。

図4で示したような、多結晶粒成長シミュレーションの実行性 能を評価するために、1GPUで計算する差分格子点数を256³、結 晶粒数を512で一定とし、使用するGPU数を変えることで計算領 域サイズを大きくした際の浮動小数点演算性能(FLOPS)の変化 を評価した。この評価により、弱スケーリング性能を評価するこ とができる。図5に、弱スケーリング性能の評価結果を示す。オー バーラッピング法を導入せずとも、FLOPS値はGPU数に比例して 増加しており、良好なスケーリング性能が得られているが、オー バーラッピング法を導入すれば、実行性能は全体的に3~4倍は向 上する。この結果、GPU数を729、差分格子点数を2304³、結晶粒 数を373248とした計算では、実行性能は1.9 TFLOPSとなった。





図4 TSUBAME2.5で計算した多結晶粒成長シミュレー ションの結果。差分格子点数は1024³であり、 256GPUを使用した。結晶粒ごとに異なる色を付 けて多結粒組織を可視化した。



図5 多結晶粒成長シミュレーションの複数 GPU計算の 弱スケーリング性能。 次に、計算領域サイズと結晶粒数は一定とし、領域分割数(GPU 数)を変化させてシミュレーションを実施した際のFLOPS値の変 化、すなわち強スケーリング性能を評価した。ここでは、256³差分 格子点の計算領域に含まれる結晶粒数を512で一定とし、計算領 域を256³、512³、1024³差分格子点とした。図6に、強スケーリン グ性能の測定結果を示す。基本的には、どの計算領域サイズを用 いてもGPU数の増加によりFLOPS値は線形に増加し、良好な強ス ケーリング性能が得られているが、256³差分格子点の計算領域を 128GPUで計算した場合のように、設定した計算領域に対してGPU 数が過多となると、実行性能が低下する。これは、GPUで行う計算 時間がCPUで行うデータ通信などの処理に要する時間よりも短く なることで、オーバーラッピング効果が得られなくなったためであ る。しかしながら、計算領域を512³および1024³差分格子とした 計算では、GPU数が100を超えても良好なスケーラビリティが得ら れることがわかる。



 図6 多結晶粒成長シミュレーションのMPF法の複数 GPU計算の強スケーリング性能。

マルチフェーズフィールド法を用いた 金属多結晶組織形成シミュレーションの大規模 GPU計算

おわりに

5

MPF法を用いて、金属材料中の多結晶組織形成の高速かつ大規模 なシミュレーションを行うために、複数のGPUで並列計算する方 法を開発した。本稿では、開発した計算法をGPUスーパーコンピュー ター TSUBAME2.5に実装し、多結晶粒成長の大規模3次元シミュ レーションを行い、優れた実行性能を得られることを示した。現代 の材料制御技術を利用しても、実験的な研究開発を繰り返して、 所望の結晶粒サイズを得るための最適条件を決定することは時間 のかかる作業となる。我々が開発したMPF法の複数 GPU計算法 により、金属多結晶組織の変化を効率的かつ高精度に解析可能と なれば、材料開発期間の短縮、実験コストの削減に大きく貢献で きるものと期待している。

謝 辞

本研究は、平成25年度および平成26年度の学際大規模情報基盤 共同利用研究・共同研究拠点の支援のもと行ったものである。関 係者の皆様に感謝申し上げる。また、本研究の一部は、科学研究 費補助金・挑戦的萌芽研究(課題番号25630322)から支援を頂 いた。記して謝意を表す。

参考文献

- I. Steinbach, F. Pezzola: A Generalized field method for multiphase transformations using interface fields, Physica D, Vol. 45, pp.385-393 (1999)
- [2] T. Shimokawabe, T. Aoki, T. Takaki, A. Yamanaka, A. Nukada, T. Endo, N. Maruyama, S. Matsuoka: Peta-scale phase-field simulation for dendritic solidification on the TSUBAME2.0 supercomputer, Proceedings of the 2011 ACM/IEEE International Conference for High Performance Computing, Networking, Storage and Analysis, SC'11, IEEE Computer Society, Seattle, WA, USA, (2011)
- [3] 岡本成史,山中晃徳,下川辺隆史,青木尊之:マルチフェーズ フィールド法による多結晶粒成長シミュレーションの複数 GPU計算,日本計算工学会論文集,Vol. 2013, p.20130018 (2013)
- [4] A. Yamanaka, M. Okamoto, T. Shimokawabe, T. Aoki: Large scale 3D multi-phase-field simulation of microstructure evolution using TSUBAME2.5 GPU-supercomputer, Proceedings of 2nd. International Congress on 3D Materials Science, The Minerals, Metals & Materials Society, pp.59-64, (2014)
- [5] S. G. Kim, D. I. Kim, W. T. Kim, Y. B. Park: Computer simulation of two-dimensional and three-dimensional ideal grain growth, Phys. Rev. E, Vol. 74, p.061605 (2006)

量子モンテカルロ法に基づく 振動状態解析の大規模並列計算

中山 涼太* 藤岡 蔵** 北 幸海 ** 立川 仁典 ** *横浜市立大学国際総合科学部 **横浜市立大学大学院生命ナノシステム科学研究科

本稿では、我々が開発した振動量子モンテカルロ(vibQMC)法、およびその並列化の実装法について概説する。 vibQMCプログラムの並列化率は99.9981%であり、東京工業大学のTSUBAME2.5スーパーコンピューターシステムを 用いたベンチマーク計算(最大5376 cores)による実行並列化効率は約91%である。また大規模並列計算の応用事例 として、大気中のエアロゾル形成の前駆体となる負イオン核一水和物(H₃O₂⁻)に対する振動状態解析の結果についても 報告を行う。

方法

the second se	=^
IZ.	1200
177	0100

量子モンテカルロ(Quantum Monte Carlo; QMC)法^[1]は乱数を 用いた確率論的な量子化学計算手法であり、原子や分子を問わず 適用可能な超高精度第一原理計算の一つである。その中でも拡 散モンテカルロ(Diffusion Monte Carlo; DMC)法は、高精度な変 分エネルギーを与えることで知られている。しかしながら、(i)配 置数変動による誤差(population control bias)が不可避、(ii)ハ ミルトニアンと非可換な演算子の固有値として与えられる物理量 の計算が困難である、といった問題があり、事実上、DMC法の適用 範囲は変分エネルギーの解析に制限されている。

Reptation Monte Carlo (RMC) 法^[2]は、DMC法と同様に虚時間 発展を利用した高精度な計算手法でありながら、上記の問題を解 決することが出来る方法である。しかしRMC計算は計算コストが 大きいため、その適用範囲は水分子^[3]など極めて小さな系に留まっ ている。

本稿では、大規模系に対するRMC計算の実現に向けて実装したRMCプログラムの並列化の実装案を概説し、東京工業大学のTSUBAME 2.5スーパーコンピューターシステムを用いたベンチマーク計算(最大5376 cores)の結果について報告を行う。また大規模並列計算の応用計算例として、大気中のエアロゾル形成の前駆体となる負イオン核一水和物(H₃O₂⁻)に対する振動状態解析の結果について報告を行う。

本研究では多原子分子の振動状態解析に、変分モンテカルロ (VMC)法とReptation Monte Carlo (RMC)法という2種類の量子 モンテカルロ法を用いた。本節ではこれら二手法について簡単に 説明を行う。

2.1 変分モンテカルロ(VMC)法

VMC法では、変分パラメーターを含む任意の試行反動関数 Ψ_T を 用いて、次式で定義されるハミルトニアン演算子 $\hat{H} = \hat{T} + \hat{V} (\hat{T}$ は 運動エネルギー演算子、 \hat{V} はポテンシャルエネルギー演算子)の 期待値 *E*を考える:

$$E = \frac{\int \Psi_{\rm T}(Q) \hat{H} \Psi_{\rm T}(Q) dQ}{\int \Psi_{\rm T}^2(Q) dQ}$$
(1)
$$= \frac{\int \Psi_{\rm T}^2(Q) \varepsilon_{\rm L}(Q) dQ}{\int \Psi_{\rm T}^2(Q) dQ}$$

ここで $Q = \{q_1, q_2, ..., q_N\}$ は多次元の一般化座標であり、配置ある いは walker と呼ばれる。また $\mathcal{E}_L = \Psi_T^{-1} \hat{H} \Psi_T$ は局所エネルギーで あり、試行波動関数には実関数を仮定した。(1) 式はエネルギー 期待値 E が局所エネルギー \mathcal{E}_L の Ψ_T^2 重み付き平均によって算出 されることを意味している。VMC法では、 Ψ_T^2 に従う配置のセット $\{Q_i\}(i=1\sim M)$ をメトロポリス法^[4]によって生成することでエネル ギー期待値の算定を行う。

VMC法では全エネルギーだけでなく、任意の演算子の期待値を 与えることが可能であるが、その計算精度は試行波動関数 Ψ_T の 質に強く依存する。多電子系のQMC計算では、分子軌道計算で 得られる単一(Hartree-Fock法)あるいは複数(配置間相互作用 法)のSlater行列式にJastrow因子と呼ばれる相関因子を付与した、 Slater-Jastrow型試行波動関数を用いることが一般的である。多 原子分子の振動状態解析を主目的とした本研究では、試行波動 関数には次式で表されるVibrational Self-Consistent Field (VSCF) 型関数^[5]を用いた:

$$\Psi_{\text{VSCF}} = \varphi_1(q_1) \times \varphi_2(q_2) \times \dots \times \varphi_N(q_N)$$
(2)

ここで φ_i は i 番目の振動モードのmodal functionである。本研 究では調和振動子の固有関数の線形結合によって φ_i を展開し、 Umrigarらによって開発された線形法^[6]を用いて展開係数の最適 化を行った。また最適化したVSCF関数は次節で説明するRMC法 における試行波動関数として用いる。

2.2 Reptation Monte Carlo(RMC)法

以下、表記の簡単化のため問題を1次元とする。時間依存 Schrödinger方程式の虚時間発展を利用したQMC法では、任意の 試行波動関数 $\Psi_{\rm T}$ に虚時間プロパゲータを作用させることで正 確な波動関数 $\Psi_{\rm 0}$ を得る:

$$\left|\Psi_{0}\right\rangle = \lim_{\tau \to \infty} \mathrm{e}^{-\frac{\tau}{2}\hat{H}} \left|\Psi_{\mathrm{T}}\right\rangle \quad \cdots \times \varphi_{N}(q_{N}) \tag{3}$$

ここで τ は虚時間である。RMC法では以下に示す仮想的な分配関数 Z_0 を導入する:

$$Z_{0} \equiv \left\langle \Psi_{0} \middle| \Psi_{0} \right\rangle = \lim_{\tau \to \infty} \left\langle \Psi_{T} \middle| e^{-\tau \hat{H}} \middle| \Psi_{T} \right\rangle$$
(4)

虚時間ステップを $\Delta \tau = \tau / N$ として虚時間プロパゲータ $e^{-\tau \hat{H}} \delta N$ 個に短時間分解し、二次の短時間近似 (Suzuki-Trotter分解^[7])を 用いることで、分配関数に対する以下の式を得る:

$$Z_{0} = \int \cdots \int dq^{(0)} \cdots dq^{(N)}$$

$$P(q^{(0)}, \cdots, q^{(N)}) \times W(q^{(0)}, \cdots, q^{(N)})$$
(5)

ここで、

$$P = \Psi_{\mathrm{T}}(q^{(0)}) \left[\prod_{i=0}^{N-1} g(q^{(i)}, q^{(i+1)}; \Delta \tau) \right] \Psi_{\mathrm{T}}(q^{(N)})$$
(6)

$$W \equiv \prod_{j=0}^{N-1} e^{-\frac{\Delta \tau}{2} \left\{ \varepsilon(q^{(j)}) + \varepsilon(q^{(j+1)}) \right\}}$$
(7)

である。 $q^{(i)}$ は虚時間 $\Delta \tau \times i$ における配置であり、各虚時間における配置のセット $\{q^{(i)}\}$ (i=0~N)を虚時間 Pathあるいは *reptile*と呼ぶ。 また二次近似として次式を用いている:

$$\left\langle q \right| \mathrm{e}^{-\tau \hat{H}} \left| q' \right\rangle \cong \mathrm{e}^{-\frac{\Delta \tau}{2} \varepsilon_{\mathrm{L}}(q)} \left\langle q \right| \mathrm{e}^{-\Delta \tau \mathcal{H}} \left| q' \right\rangle \mathrm{e}^{-\frac{\Delta \tau}{2} \varepsilon_{\mathrm{L}}(q')} \tag{8}$$

$$\begin{split} & \hbar t \hat{\tau} \cup \hat{H} = \mathcal{H} + \varepsilon_{\mathrm{L}}(q) \, \land \, \mathcal{H} \equiv \hat{T} - \Psi_{\mathrm{T}}^{-1}(q) \hat{T} \Psi_{\mathrm{T}}(q) \, \land \, \delta \downarrow \mathcal{O} \\ & g(q_i, q_{i+1}; \Delta \tau) \equiv \langle q_i | \mathrm{e}^{-\Delta \tau \mathcal{H}} | q_{i+1} \rangle \, \tilde{\tau} \, \delta \eth \, \diamond \, \diamond \, \end{split}$$

(5) 式において、 $P(q^{(0)}, \dots, q^{(N)})$ は Ψ^2_{T} に従うreptileを生成する プロパゲータ、 $W(q^{(0)}, \dots, q^{(N)})$ はそのreptileの重みと解釈するこ とができる。本研究では、このreptileの生成にLangevin方程式

$$q^{(i+1)} = q^{(i)} + 2D\nu(q^{(i)})\Delta\tau + \chi(2D\Delta\tau)$$
⁽⁹⁾

を用いた。ここで、 $D=1/2\mu$ 、 μ は振動モードの換算質量、 $\chi(2D\Delta t)$ は分散 $2D\Delta t$ を持つ正規分布乱数、 $\nu \equiv \Psi_{T}^{-1}\nabla \Psi_{T}$ はdrift velocity である。また重みWによるreptileの採択・棄却にはメトロポリス 法を用いた。

+分長い虚時間長 τ の下、reptileに対して採択・棄却を繰り返 すことで、reptileの両端の配置 $q^{(0)}$ 、 $q^{(N)}$ の集合は分布 $\Psi_{T} \times \Psi_{0}$ へ、 reptileの中央の配置 $q^{(N/2)}$ は分布 Ψ_{0}^{2} へと収束する。本研究では、 エネルギー期待値などハミルトニアンと可換な演算子の期待値は、 分布 $\Psi_{T} \times \Psi_{0}$ を用いて次式で定義されるmixed estimatorによっ て算出した:

$$\left\langle \hat{H} \right\rangle_{\text{mix}} = \lim_{\tau \to \infty} \frac{\left\langle \Psi_{\text{T}} \middle| \hat{H} e^{-\tau \hat{H}} \middle| \Psi_{\text{T}} \right\rangle}{\left\langle \Psi_{\text{T}} \middle| e^{-\tau \hat{H}} \middle| \Psi_{\text{T}} \right\rangle}$$

$$= \frac{\int \Psi_{\text{T}} \Psi_{0} \varepsilon_{\text{L}}(q) dq}{\int \Psi_{\text{T}} \Psi_{0} dq}$$

$$(10)$$

またポテンシャルエネルギーや分子の幾何構造など、ハミルトニ アンと非可換な演算子に対しては、分布 Ψ² を直接解析すること で期待値の算定を行った。

並列化

前節で概説したように、QMC法による物理量の算定では、VMC法 ではwalkerに対して、RMC法ではreptileに対してメトロポリス法 による多重マルコフ連鎖を発生させる。その際、サンプリング回 数が十分多く、計算するサンプルの総量が変わらなければ、その生 成方法に寄らず統計学的に等価な結果を得ることができる。した がって、QMCアルゴリズムの並列化に向けた最も単純かつ有効な 戦略は、統計的に独立した複数のwalker/reptileを用いた配置空 間の同時サンプリングである。具体的には、単一のwalker/reptile を用いてサンプリング数を増やす代わりに、サンプリングに用いる walker/reptile数を増大させる(図1参照)。



図1 マルコフ連鎖の分割の模式図





図2 並列化QMCプログラムの概略図

本研究では、複数になったマルコフ連鎖を複数のプロセスを用い て並列処理する。並列化されたQMCプログラム概略を図2に示 す。ここでデータ処理用に用意される1つのプロセスをマスター プロセス(Master Process)、マルコフ連鎖の計算を並列的に処理 するために用意される1つもしくは複数のプロセスがスレーブプ ロセス(Slave Process)である。並列化の実装にはMPI(Message Passing Interface)を用い、ライブラリーにはOpenMPI 1.4.2を用 いた。



4.1 並列化効率

本研究では、東京工業大学のTSUBAME2.5スーパーコンピューター システム上で、最大5376プロセス(1 process/core × 12 cores/ node × 448 nodes)を用いて、並列化効率に関するベンチマーク 計算を実行した。ベンチマーク計算に使用した分子系は、正イオン H₃O⁺の一水和物H₅O₂⁺の振動基底状態であり、ポテンシャルエネ ルギーにはBowmanらによってCCSD(T)/aug-cc-pVTZレベルの 第一原理計算を再現するように作成された解析的なポテンシャル 関数^[8]を用いた。

12並列(1node)計算を基準にした際のVMC計算とRMC計算の ベンチマーク結果を図3に示す。5376 coresを用いた並列計算にお けるspeed up (=Time[12 process]/Time [*N* process])は、VMC計算 で4868 (=405.70×12)倍、RMC計算では2307(=192.25×12)倍 である。各計算における問題サイズは不変(アムダールの法則^[9]) と仮定し、これらの結果とから両手法の基準計算(12並列)におけ る逐次実行部分の割合を見積もると、VMC計算では r⁽¹¹²⁾ =0.023%、 RMC計算では $r_{RMC}^{(12)}$ =0.3%となった。これは非並列計算(1core)時における処理の内、VMC計算では 99.9981% が、RMC計算では 99.975%が並列化されたことに相当する。



4.2 負イオンー水和物H₃O₂⁻の解析

本手法を用いて、大気中のエアロゾル形成の前駆体となる負イ オン核一水和物(H₃O₂⁻)の振動状態解析を行った。H₃O₂⁻は大気 中に存在する負イオン核OH-に水分子が1つ配位した系である。 原子核の量子効果を含めない通常の第一原理計算では、図4(a)に 示すように中央のプロトンが片側の酸素原子に寄った構造が最安 定となる。しかし、このプロトン移動の遷移状態におけるエネル ギー障壁は極めて小さいことから(0.88 kJ/mol)、振動基底状態に おいては中央のプロトンが酸素原子間の中央に位置した遷移状態 構造が最安定構造となることが示唆されている(図4(b))^[10]。

本研究では、H₃O₂⁻及びその重水素化(D)体、三重水素化(T)体 に対して、振動基底状態と中央のプロトン移動に関する振動モー ド(以下、架橋振動)の基音準位の解析を行った。試行波動関数は VSCF波動関数、PESにはHuangらによってCCSD(T)/aug-cc-pVTZ の第一原理計算を再現するように作成された解析ポテンシャルを 用いた^[8]。

VMC法とRMC法によって得られた各系の零点振動エネルギー (ZPE)と架橋振動の基本振動数を表1に示す。変分エネルギーで あるZPEに注目すると、全ての系においてRMC法による値がVMC 法よりも低いことから、RMC法によって計算精度が改善されてい ることがわかる。また架橋振動の基本振動数の実験値(H体)は 697cm⁻¹と報告されているが、RMC法は誤差12 cm⁻¹の精度で実 験値を再現している。 各振動状態における水素結合プロトン(H*)の振る舞い解析す るため構造パラメーター $\delta_{OH^*} = R_{01H^*} - R_{02H^*}$ に注目した。ここで $R_{01H^*,02H^*}$ は図4(b)で定義されている2つのOH*間距離であり、 $\delta_{OH^*} = 0$ のときH*は酸素原子間の中央に位置することを意味する。 RMC法から得られた振動基底状態と架橋振動の基音準位におけ る δ_{OH^*} の一次元分布を図5に示す。振動基底状態ではH*は酸素 原子間の中央に分布しており、同様の振る舞いが先行研究におい ても報告されている^[10,12]。またD体、T体でもD*、T*は酸素原子間 の中央に位置しているが、その分布はH体と比較して局在化して いる。経路積分分子動力学法を用いたSuzukiらの解析^[12]では、報 告されている中で最も低温である50Kにおいて、D体とT体に有意 な差は得られていないが、本解析により振動基底状態(0 Kelvin) においてT体の分布は、D体と比較してわずかに局在化することが わかった。

架橋振動の基音準位においては、波動関数の節構造を反映した 結果、 δ_{OH*} はダブルピーク構造を持つ。2つの分布の内、片側一 方に注目すると、その分布は原子核の質量が軽いほど非局在化し ており、かつピーク位置は $|\delta_{OH*}|$ が大きい領域へシフトしている (片側の酸素原子へ寄る)。 $\delta_{OH*} = 0$ はプロトン移動の遷移状態に 対応しているが、基底状態・基音準位ともに原子核の質量が重い ほど遷移状態付近の存在確率が増大するという興味深い結果が 得られた。



図4 H₃O₂⁻の平衡構造(a)と振動平均構造(b)

図5(c)は、振動基底状態と架橋振動の基音準位の二状態のみ を考慮した場合の600Kにおける δ_{OH*} の一次元分布である。H体 における δ_{OH*} は基底状態よりさらに非局在化したシングルピーク 構造を、D体・T体はわずかに分裂したダブルピーク構造を有して いる。同様の分裂がSuzukiらによる600Kにおける経路積分法の 解析で報告されているが、本研究によりD体・T体におけるピークの分裂は、主に架橋振動の基音準位の寄与であることが明らかになった。



図5 H₃O₂-のδ_{OH*}の一次元分布。(a)振動基底状態、 (b)架橋振動の基音準位、(c)600K。 単位はBohr。



手法		ZPE	基本振動数
VMC	Η体	6881.6(1)	763.9(1)
	D 体	5046.4(0)	488.4(1)
	T 体	4261.7(0)	383.7(1)
RMC	Η 体	6702.2(2)	685.3(3)
	D 体	4923.8(1)	420.7(2)
	T 体	4160.1(1)	324.7(2)
Expl.[11]			697

表1 H₃O₂⁻の零点振動点エネルギー(ZPE)と 架橋振動の基本振動数(単位はcm⁻¹)

結論

本稿では、変分モンテカルロ(VMC)法とReptation Monte Carlo (RMC)法という2種類の量子モンテカルロ法、およびその並列化 の実装方法に関する概略を示した。東京工業大学のTSUBAME2.5 スーパーコンピューターシステムを用いたベンチマーク計算(最大 5376 cores)を実行した結果、Speed upはVMC法では4868倍(並 列化効率91%)を、RMC法では2307倍(並列化効率43%)となった。 プログラム全体の並列化率はVMC法では99.9981%、RMC法では 全体の99.975%である。また大規模並列計算の応用例として、大 気中のエアロゾル形成の前駆体となる負イオン核一水和物(H₃O₂⁻) に対する振動状態解析を行い、振動状態解析に対するQMC法の有 効性を示した。

本研究では多次元のポテンシャルエネルギー曲面の算定に、計 算コストが安価な解析的ポテンシャル関数を使用したが、第一原 理計算を併用したon-the-fly法の利用により、今後さらなる並列化 効率の向上が期待される。

謝 辞

本研究における計算は「平成26年度秋期TSUBAMEグランドチャレンジ大規模計算制度(カテゴリーB)」の採択により、東京工業 大学学術国際情報センターの大型計算機(TSUBAME2.5)を利用 したものである。本制度を利用させて頂いた東京工業大学学術国 際情報センターの関係各位に深く感謝致します。また本研究の一 部は科学研究費補助金から支援を頂きました。

参考文献

- B.L. Hammond, W.A. Lester Jr. and P.J. Reynolds, "Monte Carlo Methods in Ab Initio Quantum Chemistry" (World Scientific, 1994).
- [2] S. Baroni and S. Moroni, Phys. Rev. Lett., 82, 4745 (1999).
- [3] D.G. Oblinsky, W.K. Yuen, S.M. Rothstein, J. Mol. Struct. (THEOCHEM) 961, 219 (2010).
- [4] N. Metropolis, A.W. Rosenbluth, M.N. Rosenbluth, A.H. Teller and E. Teller, J. Chem. Phys., 21, 1087 (1953).
- [5] J. M. Bowman, J. Chem. Phys. 68, 608 (1978).
- [6] J.Toulouse, C.J. Umrigar, J. Chem. Phys. 126, 084102 (2007).
- [7] M. Suzuki, Proc. Japan Acad., 69, 161 (1993).
- [8] Huang et al. J. Am. Chem. Soc. 126, 5042 (2004).
- [9] Gene M. Amdahl. Validity of the single processor approach to achieving large scale computing capabilities. In AFIPS Conference Proceedings, pp. 483-485 (1967).
- [10] A. B. McCoy, X. Huang, S. Carter, and J. M. Bowman, J. Chem. Phys. 123, 064317 (2005)
- [11] E.G. Diken, J.M. Headrick, J.R. Roscioli, J.C. Bopp, and M.A. Johnson, A.B. McCoy J. Phys. Chem. A, 109, 8 (2005).
- [12] K.Suzuki, M. Shiga, and M. Tachikawa, J. Chem. Phys. 129, 144310 (2008).

個別要素法による 粉体の大規模シミュレーション

<mark>都築 怜理 渡辺 勢也 青木 尊之</mark> _{東京エ業大学・学術国際情報センター}

砂や粉の振る舞いは液体などと似ている場合もあれば大きく違うときもある。このような粉体をシミュレーションするために、粒子間の接触相互作用をバネと摩擦のモデルで表現した個別要素法が良く使われる。スプーン1杯に砂糖が何粒あるかを想像すれば分かる通り、実際の粒子サイズで粉体をシミュレーションしようとすると100万個を超える粒子数が必要になる。粗視化モデルのアプローチもあるが限界があり、スパコンによる大規模計算で実際に近い粒子サイズで粉体シミュレーションを行う意義は大きい。粉体は空間的な広がりが時間的に変化するため、大規模計算で良く使われる領域分割がそのままでは使えない。粒子分布に合わせて時々刻々と領域分割を変更しながら、動的に計算負荷のバランスを取ることが重要である。本稿では動的負荷分散をやり難いと言われているGPUスパコンにおいて、大規模粉体シミュレーションを行い、いくつかの実用計算とゴルフのバンカーショットのような砂粒子からゴルフボールへの運動伝達を含む複雑な粉体計算を行った例を示す。

はじめに

粉体(粉粒体)はさまざまな場面で現れ、その振る舞いが明らかに されていない現象も多い。工学的にもプリンターのトナーや製薬 プロセス、化学工学プラントなどにおいて、粉体シミュレーション の需要は高い。粉体計算は粒子計算の1つであり、天体の重力多 体計算と類似した印象を受ける場合がある。しかし、粉体の相互 作用は後で述べるように接触による相互作用であるため、1つの粒 子が相互作用する粒子は高々数個程度であり、メモリ律速の計算 である。一方、重力多体計算や分子動力学計算などは相互作用す る粒子数が非常に多く、浮動小数点演算のコストが支配的である。

粉体シミュレーションも粒子数を増やして行くと (メモリアク セスを含めた)計算負荷が非常に高くなり、これまで大規模粉体 シミュレーションは余り行われてこなかった。近年、スパコンの性 能は飛躍的に向上し、実サイズの粒子を用いた大規模粉体シミュ レーションが可能な性能を有している。しかし、プロセッサはマル チコア化し、数千~数万計算ノードから構成されているため並列 計算が必須の条件である。粉体シミュレーションにおける粒子間 相互作用は接触による反発と摩擦であるため、粒子番号による並 列化は現実的でなく、領域分割による並列化を行うことが必要で ある。時間・空間的に粒子分布が変化する粉体シミュレーション に対し、計算負荷の分散とメモリ分散の目的で動的領域分割を導 入する必要がある。GPU (Graphics Processing Unit) は演算性能、 メモリバンド幅や電力効率の点で有利な反面、メモリ階層が深く データ移動のオーバーヘッドが大きい。本稿では、そのGPUを用 いて大規模粉体シミュレーションを実行するためのアルゴリズム の開発と実装を行い、実用問題への適用例を示す。

GPU による DEM 計算

2

GPUは階層的なメモリ構造と2,000を超える演算コア(CUDAコア) を持っている。GPUのアーキテクチャを考慮した超細粒度・超多 スレッドの計算アルゴリズムと実装を行うことにより、高い性能 を引き出すことができる。GPUのプログラミングは NVIDIA社が 提供する統合開発環境のCUDAを用いる。





粉体シミュレーションの計算モデルを図1に示す。本研究では、 粉体粒子同士が接触すると反発力とダンパー(バネとダッシュ ポット)が作用する個別(離散)要素法 DEM (Discrete Element Method)を用いている。せん断方向にはバネとダッシュポットに 加えて摩擦力も発生する。粒子運動は式(1)に従い、加えられた 力とトルクに対して2次精度のルンゲクッタ法かleap-frogなどに より時間積分される。

$$m\ddot{x}_i = \sum_{j \neq i}^N (-kx_{ij} - \gamma \dot{x}_{ij}) \tag{1}$$

GPU計算では、各粒子の持つ速度や座標、運動量などの従属変数 は粒子構造体の中のメンバ変数としてGPUボード上のDeviceメ モリ(CUDAプログラミング上では、グローバル・メモリ)に保持 され、1スレッドが1粒子を計算する。 DEMのように接触した粒子とのみ相互作用する局所性の高い 計算では、全粒子との接触判定を行うことは非効率的である。計 算領域を仮想的に格子に分割し、自身の属する格子(セル)及び 隣接するセルに属する粒子とのみ相互作用計算を行う「セル分割 法」を用いて計算する。粒子が属するセルに全ての粒子番号を登 録する通常のセル分割法ではメモリ不足を引き起こす可能性があ る。図2のように各セルでは1つの粒子の番号のみを登録し、同 ーセルに属するその他の粒子は粒子番号を数珠つなぎに保持する Linked-listを導入する^{[1][2]}。これにより空間格子のメモリ使用量 は静的な空間格子を用いる場合と比較して8分の1に削減できる。



図2 Linked-list を用いた近傍粒子探索

複数のGPUで粉体計算を行うには、計算領域を小領域に分割し、分割された各小領域にGPUを割り当てて計算する。図3の左側のように均等分割した場合、小領域内の粒子数に偏りが生じる。そこで、 図3右図のように小領域内の粒子数を一定にするために、小領域の 境界を計算途中で移動させるスライスグリッド法を導入する^[3]。

図3 スライスグリッド法による負荷分散

境界線の移動にともない隣接小領域に移動する粒子をGPU上で 探索するための効率的な手法を提案する。粒子は小領域のどこに 分布しているか不明なので、図4のように小領域を微小幅 ΔI で分 割し、各分割幅内の粒子を数え上げる。境界を移動すべき距離が 分かると、境界が移動したために小領域外にはみ出る粒子をGPU 上でパッキングし、隣接小領域のGPUにホスト計算機を介してデー タ転送する。複数ノードに分散するGPU間ではMPIライブラリに よる通信が必要になる。受け取る側の小領域はパッキングされた 粒子を小領域の粒子に加え領域の再分割が完了する。

粒子は運動するため、時間積分後に境界を横切り領域外に出た 粒子の通信や、隣接小領域内の接触する可能性がある粒子のデー タ転送も必要になる。GPUではメモリの確保や解放に非常に時間 がかかるため、粒子データを格納するメモリはある程度静的に保 持する必要がある。一方、このような頻繁な小領域境界を横切る 粒子移動が起こると、使用するメモリの断片化が発生する。そこ で図5のように定期的に粒子の再整列を行い、メモリの断片化を 解消する。

図4 粒子の数え上げと境界線の変更

図5 Deviceメモリ上の粒子データの再整列

TSUBAME2.5 における 強・弱スケーリング

スライスグリッド法による動的負荷分散を導入したDEMのGPU コードを用いて、TSUBAME 2.5 の GPU(K20X)で大規模粉体シミュ レーションの実行性能を強スケーリングで検証した。図6のスク リューが粉体中で回転する撹拌計算を約200万個、約1,600万個、 約1億2,900万個の粒子により計算する場合の実行性能の測定結 果を図7に示す。

縦軸の実行性能は用いた粒子数を計算時間で割ったもので、1秒 当たり何個の粒子を計算できるかを意味している。図7の×印で 表された2つの測定点が、それぞれ1億2,900万粒子を用いた場合 の256GPU、512GPUに対する実行性能の測定結果である。同一 線上の実行性能の変化が強スケーリングを示している。1,600万 個程度までの粒子数であれば、8~16倍まではGPU数の増加に応 じて性能向上が期待できるが、それ以上は性能が飽和してくるこ とが分かる。弱スケーリングは4GPUによる200万粒子の計算、 32GPUによる1,600万粒子の計算、256GPUによる1億2,900万粒 子の計算に対する実行性能を比較することにより検証でき、理想 的な直線と比較して大きく性能低下していることがわかる。スラ イスグリッド法の欠点である分割された小割領域の形状(アスペ クト比)の悪化による領域間通信量の増大が原因となり並列化効 率が低下したためである。DEM計算へのスライスグリッド法の適 用限界が256GPU~512GPU程度であることが確認できる。

図6 64台のGPUを使い412万個の粒子を使った 撹拌計算

図7 粉体シミュレーションの強・弱スケーリング

提案手法の実用問題への適用

工業的、産業的に重要ないくつかの典型的な粉体現象に対して、 動的負荷分散を用いた複数GPUによる大規模シミュレーション を行った。実用的なDEM計算には任意形状の物体との相互作用 を取り扱う必要がある。図8のようにCADデータから物体表面か らの符号付距離関数(Level Set 関数)を事前計算しておくことに より^[4]、そのLevel Set 関数を参照するだけで物体-粒子間の距離 が求まり、粒子-物体間の相互作用を効率的に計算できる。

図8 Level Set 関数による物体形状表現

433万個の粒子による粉体の搬送計算を64 GPUを用いて計算 した結果をそれぞれ図9に、416万個の粒子による螺旋すべり台の 計算を32 GPUを用いて計算した結果を図10に示す。

ゴルフのバンカーショットはサンドウェッジのスイングによる 砂のかき上げと、かき上げられた砂によるゴルフボールへの運動

伝達を含む複雑な問題である。解析手法であるDEMは計算コストが高いため、これまでは10万個程度の粒子による2次元計算にとどまっている^[5]。実際の砂と同程度のサイズの粒子を数千万個~1億個用いることにより、実現象のスケールでの3次元バンカーショット・シミュレーションを実行することができた。

バンカー砂に含まれる粗砂を想定し、粒子半径0.4 mmの粒子 1,670万個を用いた大規模バンカーショット・シミュレーション を64台のGPUを用いて行った。サンドウェッジの軌道は回転及 び二重振り子モデルから決定している。バンカーショットに特徴 的な砂上のゴルフボールの「目玉」の初期状態は、実際と同じよ うにボールを落とし、DEM計算で64,000 ステップかけて生成して いる。サンドウェッジの先端の最大速度を 5.0 m/s としてスイン グを開始した。計算結果を図11に示す。

図9 64台のGPUを使い433万個の粒子を使った 搬送計算

図10 32台のGPUを使い416万個の粒子を使った 螺旋すべり台のシミュレーション算

図11 1,670万粒子のバンカーショット計算

非球形粒子を用いた DEM 計算

複数の粒子を剛体連結させた非球形の粒子モデルを用いることで、 球形粒子よりも粒子間の摩擦を正確に表現でき、より現実の現象 に近い粉体シミュレーションが可能となる^[6]。1つの非球形粒子 を複数の粒子を用いて表現するため球形粒子を用いたDEMに比べ て多くの粒子が必要となり計算コストが増大するため、GPU計算 の必要性が高まる。1台のGPUで数十万~数百万個の非球形粒子 による粉体シミュレーションを実行することができた。

図12 テトラポッド型非球形粒子

実問題への適用例として、長靴の足跡のシミュレーションを実行した。図12のように、4つの粒子をテトラポッド型に連結させた 非球形粒子を約40万個用いた。図13に(a)球形粒子、(b)テト ラポッド型の非球形粒子を用いた場合のシミュレーション結果を 示す。非球形粒子を用いた場合は粒子間のインターロックの影響 が表われ、靴底の溝が確認できるほど明確な足跡が砂に残った。非 球形粒子で計算することで粒子間の摩擦を正確に表現できること を確認した。

(a) 球形粒子による計算

(b) テトラポッド型の非球形粒子による計算

図13 長靴の足跡のシミュレーション

まとめ

DEM計算に動的負荷分散を導入することにより、大規模粉体シ ミュレーションをGPUスパコンで実行することができた。スライ スグリッド法によるGPU間の動的領域分割と近傍粒子探索にお けるLinked-list法の導入により、効率的に粉体計算を実行する手 法を提案した。複雑形状物体を含む問題や非球形粒子のDEM計 算も可能になり、今後は流体と連成させるなどより実用問題への 展開が期待できる。

謝辞

本研究の一部は、科学研究費補助金・基盤研究(S)課題番号 26220002「ものづくりHPCアプリケーションのエクサスケールへ の進化」、科学技術振興機構CREST「ポストペタスケール高性能 計算に資するシステムソフトウェア技術の創出」、学際大規模情報 基盤共同利用・共同研究拠点、および革新的ハイパフォーマンス・ コンピューティング・インフラから支援を頂いた。記して謝意を 表す。

参考文献

- [1] G. S. Grest, B. D " unweg, and K. Kremer, "Vectorized link cell Fortran code for molecular dynamics simulations for a large number of particles," Computer Physics Communications, vol. 55, pp. 269–285, Oct. 1989.
- [2] Gomez-Gesteira, M., Crespo, A., Rogers, B., Dalrymple, R.,Dominguez, J. and Barreiro, A.: fSPHysicsg development of a free-surface fluid solver Part 2: Efficiency and test cases,Computers and Geosciences, Vol. 48, No. 0, pp. 300 – 307 (2012).
- [3] S, Tsuzuki, and T, Aoki: Large-scale granular simulations using Dynamic load balance on a GPU supercomputer, in Poster at the 26th IEEE/ACM International Conference on High Performance Computing, Networking, Storage and Analysis (SC) 2014, New Orleans, US-LA, USA (2014).
- [4] J. A. Bærentzen and H. Aanæs, "Computing discrete signed distance fields from triangle meshes," Informatics and Mathematical Modeling, Technical University of Denmark, DTU, Richard Petersons Plads, Building 321, DK-2800 Kgs. Lyngby, Tech. Rep., 2002.
- [5] 堀井 宏祐,小泉 孝之,辻内 仲好,三木 光範,日高 重助,折戸 啓太,: "並列粒子要素法によるバンカーショット解析",情報 処理学会論文誌,数理モデル化と応用,Vol. 44, No. 14, pp. 91-99 (2003)
- [6] Ikuya Ono, Hiroshi Nakashima, Hiroshi Shimizu, Juro

Miyasaka, Katsuaki Ohdoi, Investigation of elemental shape for 3D DEM modeling of interaction between soil and a narrow cutting tool, Journal of Terramechanics, Volume 50, Issue 4, August 2013, Pages 265-276, ISSN0022-4898.

TSUBAME e-Science Journal vol.13

2015 年 3 月 10 日 東京工業大学 学術国際情報センター発行 © ISSN 2185-6028 デザイン・レイアウト:キックアンドパンチ 編集: TSUBAME e-Science Journal 編集室 青木尊之 渡邊寿雄 佐々木淳 仲川愛理 住所: 〒152-8550 東京都目黒区大岡山 2-12-1-E2-6 電話: 03-5734-2085 FAX:03-5734-3198 E-mail:tsubame_j@sim.gsic.titech.ac.jp URL: http://www.gsic.titech.ac.jp/

TSUBAME

TSUBAME 共同利用サービス

『みんなのスパコン』TSUBAME共同利用サービスは、 ピーク性能 5.7PFlops、18000CPUコア、4300GPU搭載 世界トップクラスの東工大のスパコンTSUBAME2.5を 東工大以外の皆さまにご利用いただくための枠組みです。

課題公募する利用区分とカテゴリ

共同利用サービスには、「学術利用」、「産業利用」、「社会貢献利用」の3つの利用区分があり、 さらに「成果公開」と「成果非公開」のカテゴリがあります。 ご利用をご検討の際には、下記までお問い合わせください。

、 TSUBAME 共同利用とは…

他大学や公的研究機関の研究者の学術利用[有償利用]

民間企業の方の産業利用[有償・無償利用]

その他の組織による社会的貢献のための社会貢献利用[有償利用]

共同利用にて提供する計算資源

共同利用サービスの利用区分・カテゴリ別の利用課金表を下記に示します。TSUBAME における計算機資源の割振りは口数を単位としており、1口は標準1ノード(12 CPUコア, 3GPU, 55.82GBメモリ搭載)の3000時間分(≒約4ヵ月)相当の計算機資源です。 1000 CPUコアを1.5日利用する使い方や、100 GPUを3.75日利用する使い方も可能です。

利用区分	利用者	制度や利用規定等	カテゴリ	利用課金(税抜)※
学術利用	他大学または 研究機関等	共同利用の 利用規定に基づく	成果公開	1口:120,000円
産業利用	民間企業を中心 としたグループ	「先端研究基盤共用・ プラットフォーム形成 事業」に基づく	成果公開	トライアルユース (無償利用)
				1口:120,000円
			成果非公開	1口:480,000円
社会貢献利用	非営利団体、 公共団体等	共同利用の 利用規定に基づく	成果公開	1口:120,000円
			成果非公開	1口:480,000円

※ 平成 27 年度の利用課金です。最新の利用課金については、下記 URL をご参照ください。 http://www.gsic.titech.ac.jp/kyodou/kakin

産業利用トライアルユース制度 (先端研究基盤共用・ブラットフォーム形成事業)

東工大のスパコンTSUBAMEを、より多くの企業の皆さまにご利用いただくため、初めて TSUBAMEをご利用いただく際に、無償にてご試用いただける制度です。

(文部科学省先端研究基盤共用・プラットフォーム形成事業による助成) 詳しくは、下記までお問い合わせください。

お問い合わせ

●東京工業大学 学術国際情報センター 共同利用推進室
 ●e-mail kyoyo@gsic.titech.ac.jp Tel.03-5734-2085 Fax.03-5734-3198
 詳しくは http://www.gsic.titech.ac.jp/tsubame/をご覧ください。

vol. **13**