

流体解析ソフトウェア Advance/FrontFlow/redのGPU活用

小川 哲司* 大西 陽一*

Accelerating Advance/FrontFlow/red, Computational Fluid Dynamics Software,
with GPU Computing

Tetsuji Ogawa* and Yoichi Ohnishi*

流体解析ソフトウェア Advance/ FrontFlow/red (AFFr) の新しい計算技術に対応する取り組みとして、柔軟に計算リソースを用意可能なクラウド環境での大規模解析と GPU などの高い並列処理能力を持ったプロセッサを利用した高速化の例を紹介する。

<https://doi.org/10.69290/j.001228-vol133>

Keywords: 流体解析、Advance/FrontFlow/red、GPU、スーパーコンピューター、クラウド、並列

1. はじめに

近年、計算科学においても GPU の高い並列処理能力を生かし、負荷の高い科学技術計算の効率的な実行環境が生まれている。国産の汎用流体解析ソフトウェアである Advance/FrontFlow/red (以下、AFFr) を対象とし、これらの新しい GPU 計算環境への適応に向けた取り組みについて報告する。具体的には、流体解析において最も計算時間を要する線型方程式の求解部分における計算高速化を目指し、複数種類の GPU に対して高速化の程度を確かめた。これらの取り組みとその成果について報告する。

の決定には大域的な情報の伝達が不可欠であり、結果として大規模な疎行列に対する反復解法が必要となる。流体解析の計算時間が圧力求解に集中し、かつ GPU による並列化が困難となる根本的な原因はここにある。

流体解析における計算時間のボトルネックを特定するため、プロファイラを用いてサブルーチンごとの処理時間を計測した。表 1 に、AFFr を用いて四面体要素を中心とした約 528 万セルの計算格子によるビル周りの風計算を 2 タイムステップ実行した際の計算時間例を示す。

2. 高速化手法

非圧縮性流体の解析では、連続の式を満たすように圧力場を決定する圧力ポアソン方程式を各タイムステップで解く必要がある。これは楕円型偏微分方程式であり、計算領域内の任意の一点における圧力擾乱が瞬時に領域全体へ伝播するという、非局所的な性質を持つ。対流項や粘性項が局所的な情報のみで評価できるのに対し、圧力場

表 1 AFFr による流体解析のサブルーチンごとの計算時間例

サブルーチン内容	計算時間 (秒)	割合
圧力の連立一次方程式を解くサブルーチン	409.9	86.5%
速度の連立一次方程式を解くサブルーチン	25.79	5.4%
その他のサブルーチン	37.99	8.0%

楕円型偏微分方程式である圧力ポアソン方程式を離散化した線型方程式を解くための計算時

*アドバンスソフト株式会社 第3事業部

3rd Computational Science and Engineering Group,
AdvanceSoft Corporation

間が全体の約 9 割を占めている。流体解析全体の高速化において、この圧力に関する線型方程式の求解の高速化が極めて重要である。

AFFr では、非圧縮性流体の圧力に関する線形方程式のソルバーとして、不完全コレスキー分解前処理付き共役勾配法 (ICCG 法) を採用している。線形ソルバーにおける前処理とは、簡易的に求められる「近似的な逆行列」を利用することで、前処理を利用しない共役勾配法 (CG 法) と比較して大幅に反復回数を低減させることが可能となる。しかし、前処理部分には逐次的な、前のセルの計算結果を次のセルの計算に用いる前進・後退代入があり、その計算部分が並列処理の障害となる。この問題を解決する一つの方法がマルチカラーオーダーリング法である。

マルチカラーオーダーリングは、隣接するセルが同じ「色」にならないようにすべてのセルに「色」を割り当てて、同じ「色」のセルがメモリ上で連続になるように「色」の順番にセル番号を付けなおし、同じ色に分類されたセルの計算をまとめて実行する手法である。同じ色の間では計算順序の依存関係がないため、GPU による並列実行が可能である。AFFr では、色付けアルゴリズムとして、Cyclic-Multicoloring + Reverse Cuthill-McKee (CMRCM) オーダーリングを実装している。

CMRCM オーダーリングによる色分けの例を図 1 に示す。図 1(a) は並行平板の計算格子の一部で、六面体セルが並んだ構造格子の断面図である。同じ色が規則正しく対角線方向に並んでいることが分かる。同じ色がメモリ上で連続になるような番号付けをしているため、メモリキャッシュ効率も高いと期待できる。図 1(b) は外部流れ計算用の非構造格子の断面図である。構造格子と比較して色分布がランダムに見えるが、色順の並び替えによって隣接セルがメモリ上の近い位置にまとまる傾向があるため、色順に並び変える前の非構造格子計算よりもメモリアクセスの局所性が高まりキャッシュ効率が高くなると期待できる。

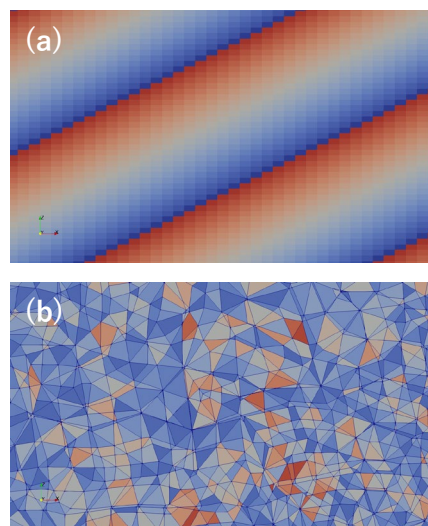


図 1 マルチカラー法の色分けの例
(a) 構造格子, (b) 非構造格子

線型ソルバー内の前処理計算の前進・後退代入の計算におけるセルのループを、外側ループを色のループ、内側ループをその色に属するセルのループの 2 重ループとして、内側ループに OpenACC のディレクティブを付加して GPU 上で並列実行させる形の実装を行った。

このマルチカラーオーダーリングは、ICCG 法だけではなく、代数的マルチグリッド法 (Algebraic Multigrid, AMG) の Smoother (平滑化演算子) として用いている逐次的なガウス・ザイデル法にも応用可能であり、AMG 法の線形ソルバーも GPU による高速化が期待できる。

3. GPU を用いた計算例

AFFr の GPU 計算機能の性能評価を目的として、表 2 の 3 つの GPU 計算機環境でベンチマーク計算を行った。

計算対象は、図 2 に示した非圧縮性流体の壁乱流計算をモデルとし、構造格子タイプ (セル数約 4700 万) の計算メッシュで計算を実行した。

表 2 ベンチマークに用いた計算機環境

計算機	CPU	GPU
A100 (40 GB) 搭載計算機	Xeon Platinum 8368 ×2	NVIDIA A100 (40 GB) ×8
A100 (80 GB) 搭載計算機	Xeon Silver 4310 ×2	NVIDIA A100 (80 GB) ×1
H200 搭載計算機	Xeon Platinum 8480+ ×2	NVIDIA H200 ×8

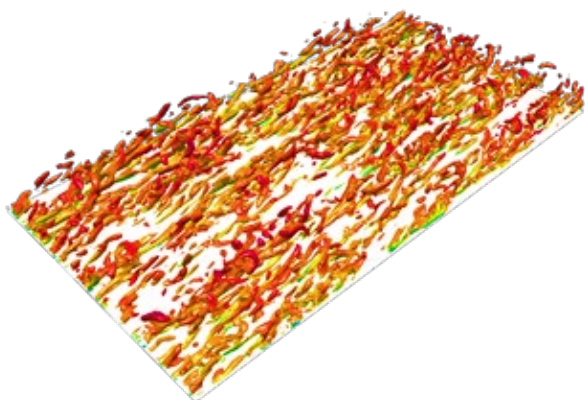


図 2 AFFr による計算結果例 (速度勾配テンソルの第 2 不変量の等値面)

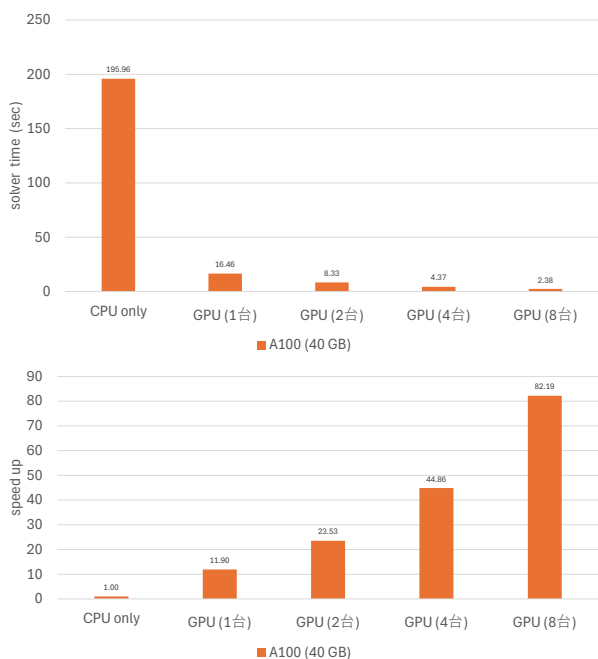


図 3 A100 (40 GB) 搭載計算機 1 回の線型ソルバーにかかった時間(上)と CPU 計算に対するスピードアップ(下)

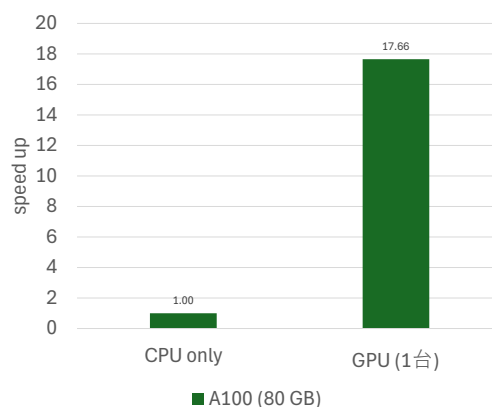
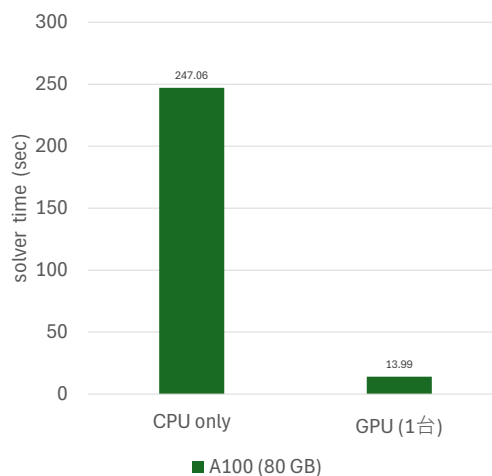


図 4 A100 (80 GB) 搭載計算機 1 回の線型ソルバーにかかった時間(上)と CPU 計算に対するスピードアップ(下)



図 5 H200 搭載計算機 1 回の線型ソルバーにかかった時間(上)と CPU 計算に対するスピードアップ(下)

図 3-5 は GPU 搭載計算機で、立方体格子モデルを用い AFFr のフラット MPI 8 並列で計算を実行したときの、圧力計算における線型方程式を 1 回解くのに要する計算時間および CPU のみの計算に対するスピードアップ率のグラフである。MPI 並列の 8 プロセスに対して GPU が 8 台未満の場合、Multi-Process Service (MPS)を利用することで複数プロセスが 1 台の GPU を効率的に共有した計算が実行される。同じ並列数の CPU 計算と比較して、GPU 計算は 1 台であっても CPU の 10 倍から 20 倍のスピードアップが達成されており、さらに利用可能な GPU 台数が増えるとそれに応じて計算時間が短縮され、スピードアップ率が大きくなることが確かめられた。

図 6 に 3 つの計算機環境の GPU 計算の CPU 計算に対する計算時間とスピードアップ率をまとめた。A100 (40 GB)と A100 (80 GB)の違いはメモリ容量だけでなく、A100 (80 GB)のメモリの帯域幅は A100 (40 GB)の約 1.25 倍と GPU のメインメモリと演算コアの間のデータ転送速度も向上している。そのため GPU 1 台の計算時間において A100 (80 GB)は A100 (40 GB)より 15%程度計算時間が短縮される。

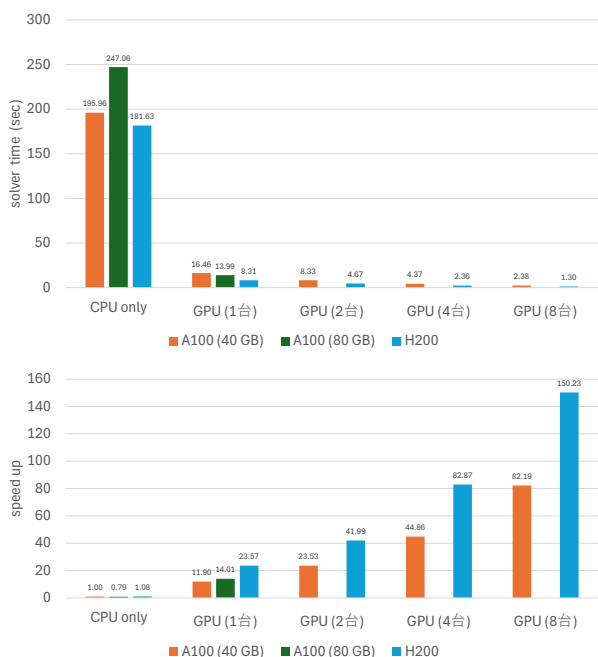


図 6 計算時間とスピードアップのまとめ

H200 は A100 の後継 GPU でメモリ容量もメモ

リ帯域幅も大幅に強化されており、A100 の約半分の計算時間となっている。AFFr は新しい GPU も十分効率的に利用できていることが分かる。

さらに、図 7 に示した車体モデル周りの空気の流れ計算についてベンチマーク計算を行った。

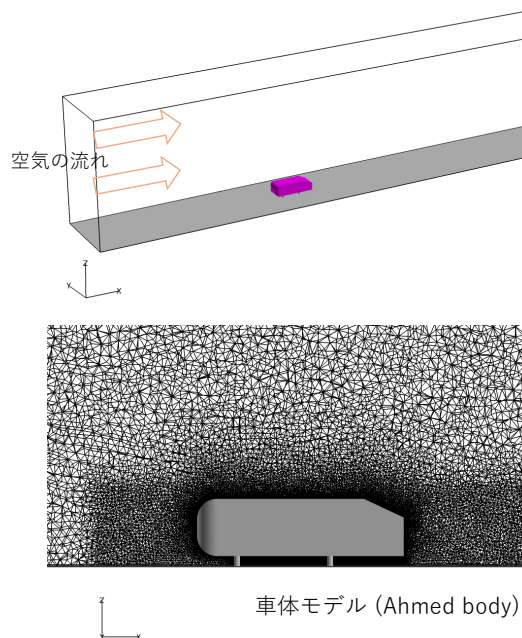


図 7 簡易な車体形状周りの空気流れの解析のモデル

計算格子は四面体セルを中心とした約 6100 万セルの非構造格子である。

図 8 に、A100(40GB)搭載計算機で利用可能な CPU の全コアを使うフラット MPI 76 並列(CPU のみ)と、8 台の A100 を利用したフラット MPI 48 並列計算(1 台の GPU を 6 プロセスが共有)の計算時間を示した。時間ステップ 100 ステップの計算にかかった実時間で、オレンジが圧力の計算、緑が圧力以外の計算にかかった時間である。緑の圧力以外については今回 GPU を利用しておらず、CPU 単独計算よりも MPI 並列数が少ないこともあり時間がかかっているが、オレンジの圧力部分については GPU によって十分高速化されており、全体の計算時間で 10 倍程度の高速化が達成できていることが確かめられた。非構造格子に対しても GPU は非常に効率的に計算が可能である。

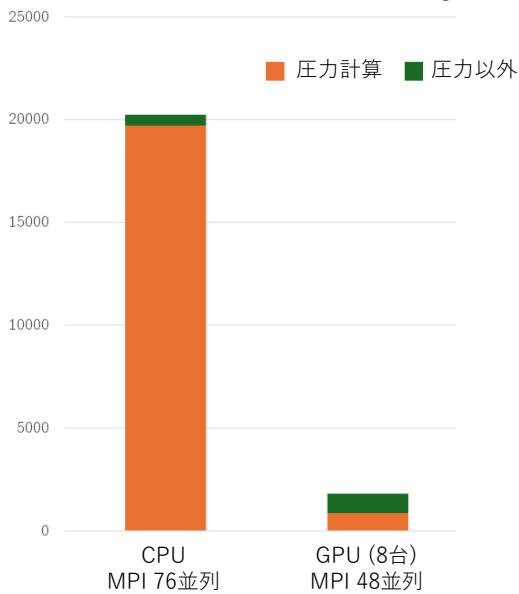


図 8 CPU のみと A100 (8 台)利用
計算時間比較

4. クラウド利用に向けて

近年、Amazon Web Services (AWS)のようなクラウド環境においても GPU を利用可能になっている。大規模並列計算のためのツール (例えば AWS ParallelCluster) も整備されており、仮想計算機クラスターを比較的容易の構築できる。AFFr はこのような環境においても図 9 のように数千万規模の格子を用いた流体解析を高い並列効率で実行可能であることが確認されている。

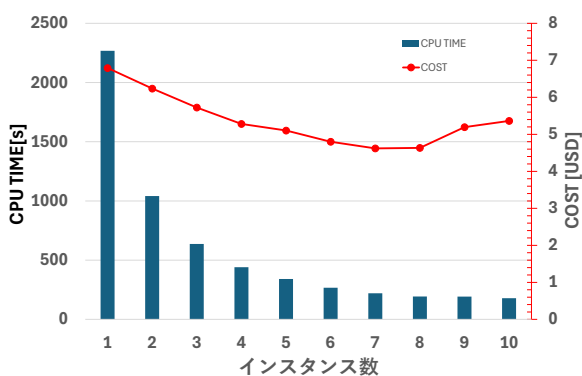


図 9 クラウド環境の
仮想計算機クラスターでの AFFr の性能

並列化効率が高いことから、計算台数を増やすことによって並列数に応じて計算時間が短縮される。そのためインスタンス数をある程度増やしても計算時間×インスタンス数に対してかかる

全体のコストは大きく変わらない。

このことから、たとえ高価な GPU 搭載ノードを利用したとしても、計算時間の短縮によるコストパフォーマンスは高いと期待され、大規模計算の実行に効果的な環境になると考えられる。

5. CFD 計算における GPU 要件 — 生成 AI 用途との差異

近年の GPU 市場は生成 AI の学習・推論需要によって急速に拡大しており、新しい世代の GPU ほど FP16/BF16/FP8 といった低精度演算の性能と、密行列積を高速化する Tensor コアの能力に最適化が進んでいる。一方、CFD で支配的な計算は、非構造格子を扱う疎行列ベクトル積と、それを核とする反復解法である。これらは間接参照を伴う不規則なメモリアクセスが中心となり、演算密度が低く、性能はもっぱらメモリ帯域によって律速される。すなわち、CFD のソルバー性能を支配するのは演算ピーク性能ではなく、HBM の帯域幅と容量、そして倍精度演算ユニットの能力である。

本稿のベンチマーク結果はこの構図をよく反映している。A100 (40 GB) と A100 (80 GB) の差は演算コアではなくメモリ帯域幅であり、約 1.25 倍の帯域比に対して計算時間は約 15%短縮された。さらに A100 から H200 への世代交代では、演算ピーク性能の向上もさることながら、HBM3e による大幅な帯域強化とメモリ容量の増加が、計算時間をおよそ半分にまで短縮する直接的な要因となっている。GPU 1 台で多くのセルをオンチップに保持できれば、ノード間・GPU 間の MPI 通信が削減され、領域分割のオーバーヘッドも軽減される。CFD における GPU の価値は、行列積の演算スループットではなく、メモリサブシステム全体の能力で測られるべきである。

このことを踏まえると、CFD コミュニティが GPU ベンダーに求めるべき技術要件は、生成 AI 向けの最適化方針とは明確に異なる。第一に、HBM 帯域幅と容量の継続的な強化である。FP4 や FP8 といった低精度演算ピークの拡大よりも、倍精度のメモリ帯域こそが工学計算の生産性を直接決定する。第二に、倍精度演算ユニットの維持

と拡充である。生成 AI 用途を主眼に置いた GPU では倍精度の比率が抑制される傾向にあるが、流体解析を含む工学・科学技術計算では倍精度演算が必須であり、この設計方針が崩れることは産業界のシミュレーション基盤に直接影響する。第三に、間接参照を伴う gather/scatter や疎行列演算に対するハードウェア支援の継続である。第四に、NVLink や NVSwitch のような高帯域インターコネクットのトポロジ強化である。領域分割計算では境界データの交換が頻繁に発生するため、GPU 間通信の帯域が並列効率を直接左右する。第五に、MPS や MIG による柔軟な GPU 共有機構と、OpenACC や標準並列構文 (do concurrent 等) に代表される指示文ベース・標準言語ベースの長期サポートである。多様な CFD コードを長期にわたり保守する産業界にとって、移植性と寿命の長いプログラミングモデルの維持は、ハードウェア性能と同等に重要な要件である。

生成 AI の学習基盤として進化する GPU を、CFD が副次的に活用するという従来の構図に対し、CFD 側からも独自の技術要件を明確に発信していくことが、産業シミュレーション基盤の持続的な発展のために重要であると考えられる。

6. まとめ

本稿では、AFFr における GPU 対応の取り組みとして、計算時間の大半を占める圧力ポアソン方程式の求解に対し、CMRCM オーダリングに基づくマルチカラーリングと OpenACC による GPU 並列化を実装した結果を報告した。A100 および H200 を搭載した計算機環境でのベンチマークでは、構造格子・非構造格子のいずれにおいても CPU 計算に対して 10 倍を超えるスピードアップが達成され、AFFr が現行および次世代の GPU を効率的に活用できることが確認された。さらにクラウド環境での大規模並列計算にも対応しており、GPU インスタンスを活用した高コストパフォーマンスな解析が可能となっている。

今後の課題としては、現状 GPU 化されていない圧力以外の計算部分 (速度の連立一次方程式の求解、対流項・粘性項の評価など) への展開、AMG

法の Smoother への GPU 実装の最適化、そしてマルチノード・マルチ GPU 環境におけるさらなるスケーラビリティの追求が挙げられる。また、生成 AI 時代において物理に忠実なシミュレーションの価値は、設計最適化のみならず、AI モデル学習のための高品質な合成データ生成基盤としても増大していくと考えられる。AFFr は国産の汎用 CFD ソルバーとして、こうした新たな計算需要に応えるべく、引き続き計算性能と適用範囲の拡張に取り組んでいく。

A100 (80GB), H200 搭載計算機は株式会社ハイレゾ様にご協力いただき、GPU クラウドサービス「GPUSOROBAN (<https://soroban.highreso.jp/>)」を利用しました。

※ 技術情報誌アドバンスシミュレーションは、それぞれの文献タイトルの下に記載した DOI から、PDF ファイル (カラー版) がダウンロードできます。また、本雑誌に記載された文献は、発行後に、JDREAMIII (日本最大級の科学技術文献情報データベース) に登録されます。