

構造解析ソフトウェア Advance/FrontSTR の大規模並列計算性能の評価

尾川 慎介*

Evaluation for Large-scale Parallel Computing Performance of Advance/FrontSTR

Shinsuke Ogawa*

Advance/FrontSTR は文部科学省の国家プロジェクトで開発された FrontSTR およびその後継である FrontISTR をベースとして当社が開発している、大規模解析を主眼に置いた構造解析ソフトウェアである。当社では、本ソフトウェアを含む当社のソフトウェアを国内の複数のスーパーコンピュータ環境で活用するための共同研究を実施した。本稿ではその実施内容である、前述の環境における本ソフトウェアの動作確認と、その大規模並列計算性能に関する評価について報告する。なお、この共同研究の成果はアドバンス/スーパーコンピューティング・サービスとしてすでに提供中である。

Key word: スーパーコンピュータ、大規模解析、構造解析、シミュレーションソフトウェア

1. はじめに

近年の計算機の飛躍的な性能向上を背景として、産業界での製品に対する品質向上への要求から、製品全体に対する大規模構造解析シミュレーションへのニーズが高まっている。

並列計算機を利用した大規模解析の計算方法はほぼ確立されており、多くの研究により成果が残されてきた。今後は、これらの研究成果を実用技術として産業界へ技術移転させなければならない。そのために、現在では低コストで実施可能な大規模構造解析が、さらに手軽に実施できるようなソフトウェアを普及させる時期であると考えられる。

このような時代背景のもと、シミュレーションソフトウェアを実用化するためには、数億自由度の大規模構造解析を可能にすることと、流体解析や音響解析、熱解析などと連成させて解析できることが望まれている。

当社が開発・販売している構造解析ソフトウェア Advance/FrontSTR^[1]は、前者の課題に対する取り組みの一環である。Advance/FrontSTR は文

部科学省における国家プロジェクト「革新的シミュレーションソフトウェアの研究開発プロジェクト」で開発された FrontSTR, およびその後継の「イノベーション基盤シミュレーションソフトウェアの研究開発」で開発された FrontISTR^[2]をベースに、当社で開発を行っている有限要素法による構造解析ソフトウェアである。本ソフトウェアは、もともと大規模並列計算向けに設計・開発されてきた経緯があり、また、大規模構造解析の実施を支援するためのリファイナーや領域分割ツールなどを備えている^{[3][4][5]}。

後者の課題を掘り下げると、複雑な解析対象に対するメッシュ作成や、原理の異なるいくつかの現象の取り扱いといった幅広い課題がある。この問題を解決するためのアプローチはいくつかある。当社では、当社が開発している次のソフトウェアと Advance/FrontSTR を組み合わせた連成解析についても取り組んでいる^{[1][2]}。なお、熱解析は Advance/FrontSTR で実施できる。

- Advance/FrontFlow/red (流体)
- Advance/FrontFlow/FOCUS (高速流)
- Advance/FrontNoise (音響)^[6]

しかし、いくらソフトウェアを開発しても、大

*アドバンスソフト株式会社 第1事業部

1st Computational Science and Engineering Group,

AdvanceSoft Corporation

規模解析や連成解析はどこでも簡単に実施できるものではなく、相応のハードウェアを必要とする。この問題に関しては、従来は研究用途でしか利用できないスーパーコンピュータシステムがほとんどであったが、近年は個人や企業に開放されたシステムが国内外で増えてきたことや、それによって認知度が高まり活用事例も増えてきたため、時間とともに状況はさらに改善されると考えている。

このようにハードウェアとソフトウェアの双方で環境が整ってきたことから、当社は「アドバンス/スーパーコンピューティング・サービス」として、国内のスーパーコンピュータの産業利用を促進させるために、保有するソフトウェアを必要に応じて利用できるサービスの提供を開始した。本サービスで対象としているシステムは次の通りである。

- 大規模共有メモリシステム UV2000
(所有：海洋研究開発機構)
- スーパーコンピュータ「京」
(所有：理化学研究所 計算科学研究機構)

本サービスを開始するにあたって、関連機関との共同研究として Advance/FrontSTR を含む当社のソフトウェアの移植や動作確認と、大規模並列性能の評価を実施した。具体的には、「UV2000」については海洋研究開発機構と、「京」については互換環境である「FX10」を対象として高度情報科学技術研究機構とそれぞれ共同で実施した。本稿ではその共同研究で得られた成果を報告する。

2. Advance/FrontSTR の概要

2.1. 開発の経緯

本ソフトウェアの開発に至る経緯は前述の通りである。当社では、ベースである FrontSTR、FrontISTR をより使いやすくするために、プリポストとともに独自に改良を進め、商用パッケージとして販売保守を行っている^[1]。公開されているソフトウェアと、当社の Advance/FrontSTR との違いは次の通りである。

非線形問題および線型ソルバーの収束性の強化（主に接触機能）
 各種要素の開発、追加および強化
 材料モデルの追加および強化
 混在自由度への対応
 局所座標系などの拡張機能
 専用プリポスト Advance/REVOCAP との統合

Advance/REVOCAP は当社の流体・構造・音響解析ソフトウェアの共通のプリポストとして利用可能なシステムで、特に連成解析で活用できる^{[7][8][9]}。また、アセンブリ機能、リファイナー機能の実用化を中心に強化されている。

2.2. 特長

本ソフトウェアの大きな特長は次の通りである。詳細は文献^[1]を参照されたい。

大規模な並列計算が可能で、並列効率が非常に高い。

多くの CPU（コア）を利用しても、追加料金がかからないシンプルな価格体系。

低価格にもかかわらず、必要な機能を提供。開発者によるサポートおよびカスタマイズサービスを提供。

2.3. 機能

本ソフトウェアの解析機能を表 1 に、非線形解析機能を表 2 に、材料と要素タイプを表 3 に、大規模解析を含むユーザー支援機能を表 4 にそれぞれ示す。表 4 のリファイナーは自動的にメッシュを細分化する機能^{[3][4]}で、アセンブリ機能は部分的に作成したメッシュを組み上げる機能^[4]である。さらに、ベースのソルバーを並列計算向けに改良することで、大規模構造解析を効率的に行えるパッケージを提供している。

表 1 解析機能

項目	内容
静解析	熱応力解析を含む応力解析
動解析	陽解法 / 陰解法
・直接積分法	中央差分法 / Newmark-β 法 / HHT 法
・モード解析	過渡応答解析 周波数応答解析
固有値解析	ランチョス法 / その改良法
熱解析	定常 / 非定常解析 (陰解法)

表 2 変形解析における非線形解析機能

項目	内容
幾何学的非線形	Total Lagrange 法、 Updated Lagrange 法
境界非線形 (接触)	Augmented Lagrange 法、 有限すべり、摩擦 接触並列解析にも対応
材料非線形	表 3 を参照

表 3 材料・要素ライブラリ

項目	内容
材料ライブラリ	温度依存性を含む材料
・弾性材料	弾性 (異方性材料も可) 超弾性、粘弾性
・非弾性材料	等方 / 移動 / 複合硬化等の弾 塑性、粘塑性、熱弾塑性
要素ライブラリ	連続体要素、構造要素 連続体要素と構造要素が混 在したモデルの解析にも対応
・ソリッド要素	四面体 / 六面体 / プリズム / ピラミッド、1 次 / 2 次、 非適合モード、B-bar 要素など
・シェル要素	三角形 / 四辺形、1 次 / 2 次、 MITC 要素
・梁要素	1 次 / 2 次 / 3 次、MITC 要素
・トラス要素	1 次 / 2 次 / 3 次
・その他	接触要素、マス要素、 熱解析用ギャップ要素

表 4 ユーザー支援機能

項目	内容
大規模解析支援	リファイナー アセンブリ構造対応
局所座標系	直交座標系、円柱座標系 球座標系

3. スーパーコンピュータシステムへの移植

3.1. ビルド

移植先でのビルドは、依存ライブラリも含めておおむね問題なく実施できた。

3.2. チューニング

メモリの飛びアドレスアクセスが存在するループ演算の性能改善策として、L3 キャッシュの活用が有効であることが経験的に知られていた。そのため、それを有効に活用できるようにプログラムのコードの一部を変更した。図 1 の網掛けの部分が追加された行である。この改良を 3 つのモデルの静解析で検証した結果、UV2000 環境における計算速度が最大 30% 近く向上した (表 5)。したがって、この改良は有効であったと考えられる。

```

do i = 1, hecMAT%N
  j S= hecMAT%i ndexL(i -1) + 1
  j E= hecMAT%i ndexL(i )
  do j = j S, j E
    (sni p)
  enddo
enddo
do i = 1, hecMAT%N
  j S= hecMAT%i ndexU(i -1) + 1
  j E= hecMAT%i ndexU(i )
  do j = j S, j E
    (sni p)
  enddo
enddo
    
```

図 1 L3 キャッシュの有効活用のための改良点

表 5 L3 キャッシュの有効活用による性能改善

モデル	改良前 [s]	改良後 [s]	時間比
#1	373.6	292.6	1.28
#2	246.5	216.5	1.14
#3	757.1	665.7	1.14

なお、FX10 環境では MPI 並列と OpenMP マルチスレッド並列の両方を活用するハイブリッド並列の適用についても検討したが、変数の依存関係の問題で断念した。

4. 大規模並列性能の評価

4.1. UV2000 における大規模並列（反復法）

Cap モデルに Refiner を適用し、大規模解析モデルに対する並列処理性能を計測した。このモデルはすべて四面体 2 次要素からなり、概形を図 2 に示す。Refiner 適用時のメッシュ規模を表 6 に示す。並列処理性能の計測結果を図 3 に示す。図 3 の並列化効率 η の近似曲線は次の式による。ただし、 T_i は i 並列における実行時間、 n は並列数、 α は並列化率である。

$$\eta = \frac{1}{n} \frac{T_1}{T_n} = \frac{1}{1 - \alpha + \frac{\alpha}{n}}$$

さらなる大規模並列解析の調査として、リファイン 3 回の Cap モデルを用いて UV2000 の専有実施日に 192CPU および 256CPU による解析を実施した。この計測結果を図 4 に示す。図 4 の横軸は計算コア数、縦軸は並列化効率である。リファイン 3 回の 260 並列における計算時間は 105,776 秒、リファイン 3 回の 2560 並列における計算時間は 14,583 秒であり、この 2 つのデータから計算される速度向上率は約 7.25 (理論値は約 10) であった。

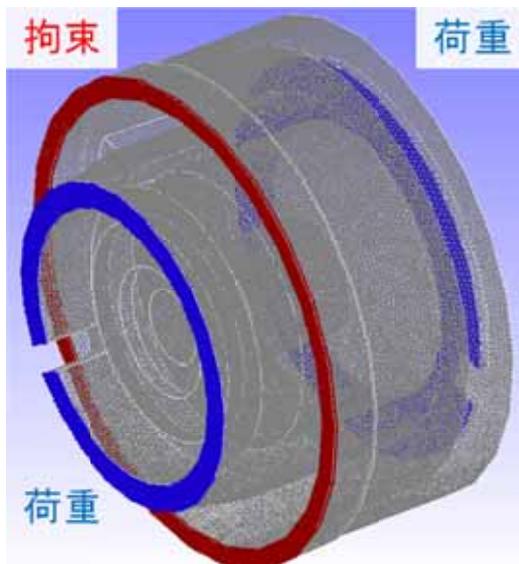


図 2 Cap モデルの概形と解析条件

表 6 Cap モデルのメッシュ規模

Refine	要素数	節点数
なし	684,807	1,008,911
1 回	5,478,456	7,707,758
2 回	43,827,648	60,089,084
3 回	350,621,184	474,183,032

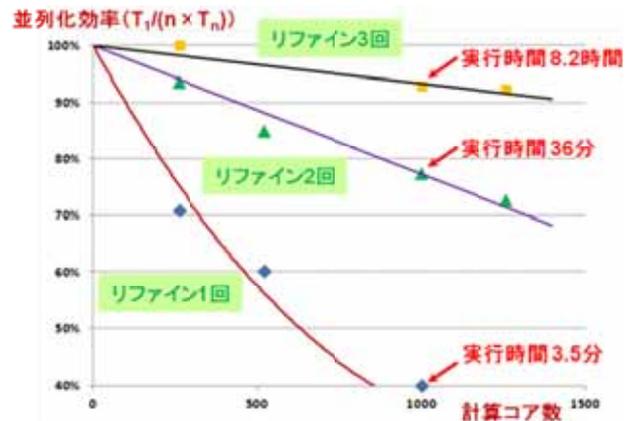


図 3 Cap モデルの大規模並列性能 (UV2000)

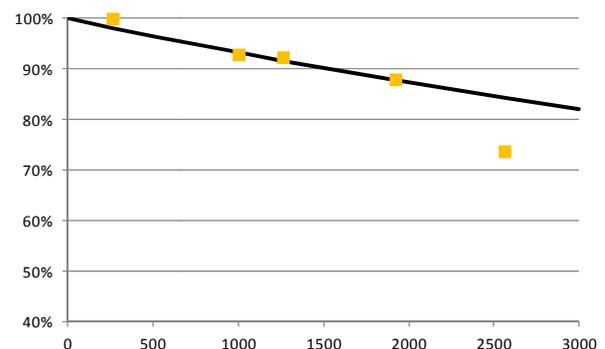


図 4 Cap モデルの大規模並列性能 (UV2000)

4.2. UV2000 における大規模並列（直接法）

直接法ソルバーによる大規模解析への UV2000 の対応能力を表 7 に示す解析ケースについて検証した。V6engine モデルの概形は割愛する。なお、Advance/FrontSTR は直接法ソルバーに MUMPS^{[10][11]}を使用している。

解析ケース A の計測結果を図 5 および図 6 に、解析ケース B の計測結果を図 7 および図 8 に示す。解析ケース C については、MUMPS によって 16.4 TB もの膨大なメモリが必要であると予測されたことから専有実施日に実行した。しかし、実際に使用したメモリは 256 プロセス 1 スレッドの

並列解析で 2.96 TB で、予想よりもかなり少なかった。一方、実行時間は 3.9 時間であった。同じ解析ケースを 256 並列の反復法ソルバーで実行すると約 8 分である。

表 7 直接法による大規模解析の検証ケース

ケース	モデル	Refine	要素数	節点数
A	Cap	なし	684,807	1,008,911
B	V6engine	1 回	2,257,024	3,338,817
C	Cap	1 回	5,478,456	7,707,758

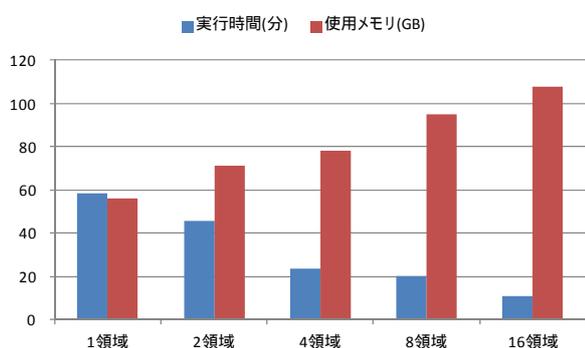


図 5 ケース A のプロセス並列性能(1 スレッド)

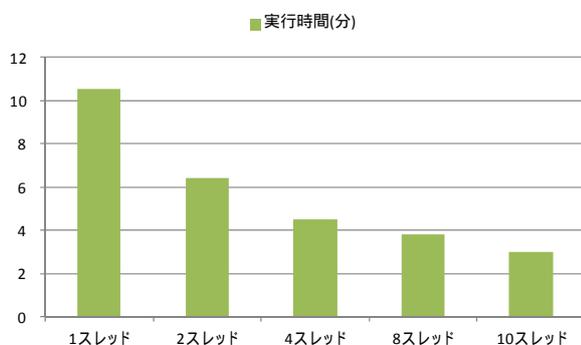


図 6 ケース A のスレッド並列性能(16 プロセス)

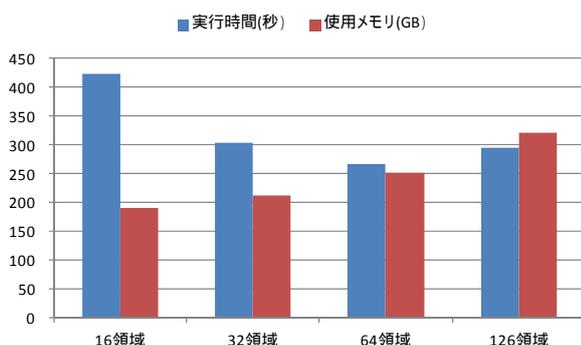


図 7 ケース B のプロセス並列性能(4 スレッド)



図 8 ケース B のスレッド並列性能(64 プロセス)

4.3. FX10 における大規模並列(反復法)

4.1 節と同様に Cap モデルで調査した結果を図 9 に示す。図 9 の横軸は計算コア数、縦軸は並列化効率である。ただし、リファイン 3 回はメモリ不足で実施できなかった。リファイン 2 回の 192 並列における計算時間は 9,607 秒、リファイン 2 回の 576 並列における計算時間は 3,386 秒であり、この 2 つのデータから計算される速度向上率は約 2.84 (理論値は 3) である。

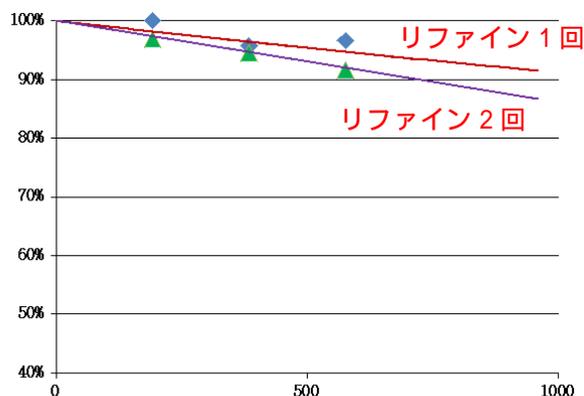


図 9 Cap モデルの大規模並列性能 (FX10)

5. まとめ

Advance/FrontSTR の大規模並列性能は現時点でも良好であり、大規模問題に対して並列性能を十分活用できることが期待できる。

参考文献

- (2006).
- 技術情報誌アドバンスシミュレーションは、アドバンスソフト株式会社 ホームページのシミュレーション図書館から、PDF ファイルがダウンロードできます。(ダウンロードしていただくには、アドバンス/シミュレーションフォーラム会員登録が必要です。)
- [1] 大家史, 松原聖, “構造解析ソフトウェア Advance/FrontSTR”, アドバンスシミュレーション, Vol.20 (2014).
- [2] 末光啓二, “FrontISTR の機能紹介”, 第3回 統合ワークショップ(次世代ものづくり), 文部科学省次世代 IT 基盤構築のための研究開発「イノベーション基盤シミュレーションソフトウェアの研究開発」, (2011.02.25).
- [3] 末光啓二, 徳永健一, “Advance/FrontSTR のメッシュ細分化機能「リファイナー」”, アドバンスシミュレーション, Vol.8 (2011).
- [4] 末光啓二, “Advance/FrontSTR によるリファイナーを利用した大規模解析”, アドバンスシミュレーション, Vol. 13(2012).
- [5] 末光啓二, 徳永健一, “Advance/FrontSTR の部品アセンブリ解析機能”, アドバンスシミュレーション, Vol.8 (2011).
- [6] 松原 聖ほか, “音響解析ソフトウェア Advance/FrontNoise を利用した連成解析, アドバンスシミュレーション, Vol.15 (2013).
- [7] 吉村忍, 徳永健一ほか, “並列連成解析システム REVOCAP を用いた流体構造連成解析”, 第59回理論応用力学講演会, (2010).
- [8] 徳永健一, “REVOCAP_PrePost と REVOCAP_Refiner”, 第3回統合ワークショップ (次世代ものづくり), 文部科学省次世代 IT 基盤構築のための研究開発「イノベーション基盤シミュレーションソフトウェアの研究開発」, (2011.02.25)
- [9] 徳永健一, “Advance/FrontSTR 用 汎用プリポストプロセッサ Advance/REVOCAP の紹介”, Vol.8 (2011).
- [10] P. R. Amestoy *et al.*, A fully asynchronous multifrontal solver using distributed dynamic scheduling, SIAM Journal of Matrix Analysis and Applications, Vol 23 (1), pp 15-41 (2001).
- [11] P. R. Amestoy *et al.*, Hybrid scheduling for the parallel solution of linear systems. Parallel Computing Vol 32 (2), pp 136-156