

流体解析ソフトウェア Advance/FrontFlow/redのクラウド利用とGPU高速化

小川 哲司* 大西 陽一*

Cloud Computing and GPU Acceleration of Advance/FrontFlow/red

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.001169-vol32>

Keywords: 流体解析、Advance/FrontFlow/red、クラウドコンピューティング、GPU、ベクトルエンジン

1. はじめに

近年、流体解析に用いられる計算環境は急速に多様化している。従来のオンプレミス型に加え、クラウドコンピューティング、GPU アクセラレーション、ベクトル型スーパーコンピュータなど、計算資源の選択肢は大きく広がっている。こうした中で、流体解析ソフトウェアには、高性能かつ柔軟な実行環境への対応と、継続的な保守・高速化への適応力が求められるようになってきている。

一方、広く普及している一部の海外製解析ソフトは、高度な機能と引き換えに高額なライセンス体系が必要であり、計算規模や並列数に応じて費用が増大するケースも多い。また、自由に利用可能なソフトウェアは、導入から運用、保守に至るまで高度な技術力が求められ、対応する人材が社内には存在しない場合には実運用上の負担となる。

このような背景に対し、国産の汎用流体解析ソフトウェアである Advance/FrontFlow/red (以下 AFFr) は、開発・保守を一貫して国内で行っており、各種計算機環境への柔軟な対応と継続的な性能向上を強みとしている。本稿では、AFFr が新しい計算環境に対応しながら、いかにして高い生産性と実用性を維持しているかを示すため、クラウド・GPU・ベクトル計算機における実測結果とともにその開発事例を報告する。

2. 流体解析の計算時間分析

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。

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%

圧力を更新する際に現れる Poisson 方程式を離散化した連立一次方程式を解くための計算時間が全体の約 9 割を占めている。この結果は、流体解析全体の高速化において、この圧力に関する連立一次方程式を高速に解くことが極めて重要であることを示している。

次に、AFFr の圧力を解く際に現れる連立一次方程式の係数行列と右辺ベクトルを取り出し、係数行列の様々な格納形式を用いた連立一次方程式ソルバーの単一コアでの計算時間を、AFFr お

*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

よびオープンソースの流体解析ソフトウェア OpenFOAM (v2412) の行列ソルバーと比較した (図 1)。

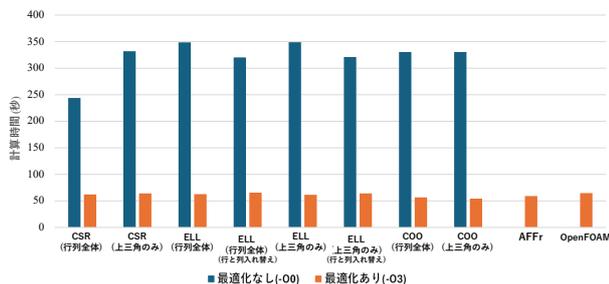


図 1 行列データの保持形式の違いと AFR, OpenFOAM のソルバー計算時間比較

図 1 より、最適化を行わないプログラムにおいては、対称行列の上三角部分のみを格納する場合と比較して、行列全体をデータとして与えた方が計算時間は短くなる傾向が見られるなど、格納形式による差がみられた。これは、データアクセスパターンやキャッシュ効率の違いによるものと考えられる。しかし、コンパイラの最適化を有効にすると格納形式による計算時間の差はあまりないことが確認された。AFR の単一コアにおける計算時間もこれら同程度であり、線形ソルバーが適切に実装されていることが確認できる。

3. クラウドコンピューティング

計算高速化の重要な手段の一つとして、領域分割に基づくメモリ分散型の MPI 並列計算が挙げられる。大規模な計算を実施するためには多数の計算機資源が必要となるが、これを迅速かつ柔軟に確保できるのがクラウドコンピューティング環境である。

クラウドコンピューティング環境として Amazon Web Services (AWS) を選択し、大規模並列計算のための仮想計算機クラスターを構築した。クラスターの構築と管理には、AWS が提供する HPC クラスター構築・管理ツールである AWS ParallelCluster を利用した。AWS ParallelCluster は、Python ベースの CLI または Web インターフェースを通じて、クラスターの構成定義から起動、管理までを容易に行うことができる。

構築したクラスターは、ジョブ投入と管理を行うログインノード (HeadNode)、実際の数値計算を実行する計算ノード (Compute)、それらを接続するネットワーク、そして全てのノードで共有されるストレージで構成される。ジョブ管理には、Slurm または AWS Batch といったジョブスケジューラを利用し、計算ノードはジョブ投入時に必要な数のインスタンスが動的に起動し、ジョブ完了後一定時間 (デフォルト 10 分) で自動的に終了する。これにより、計算リソースの効率的な利用が可能となる。共有ストレージには、高速並列ファイルシステムである「FSx for Lustre」を選択することで、ログインノードと複数の計算ノード間での高速なデータアクセスを実現した。

この AWS ParallelCluster を用いて構築したクラスター上で、AFR による流体解析を実行した。自動車車体周りの空気流れ (図 2) の計算では、四面体要素を中心とした計算格子で、約 1,180 万コントロールボリュームのモデルを用い、AWS の c7i.48xlarge インスタンス (96 コア) を複数用いたフラット MPI 並列により、50 タイムステップの非定常計算を実施した。

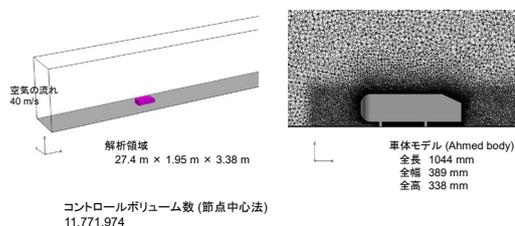


図 2 流体計算を行ったモデル(1)

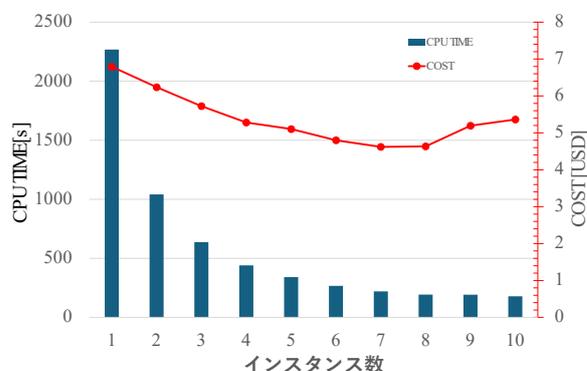


図 3 モデル(1)の計算時間とインスタンスコスト (オンデマンドインスタンス価格から算出)

図 3 に、インスタンス数 (1 インスタンスあたり 96MPI 並列) と計算時間の関係を示す。グラフから明らかなように、並列効率は高く、インスタンス数の増加にほぼ反比例して計算時間が短縮されている。これは、「計算時間 × インスタンス数」で評価されるコストが並列数にあまり依存しないことを示しており、より多くの計算ノードを用いることで、解析時間を大幅に短縮できるというクラウドコンピューティングの大きなメリットを示す結果となった。

次に、平行平板間の流れ計算を実施した (図 4)。このモデルは六面体要素で構成され、コントロールボリューム数は約 3,330 万である。この計算においても、同様に AWS ParallelCluster 上に構築したクラスターを用いて並列計算を実行した。

図 5 に、インスタンス数と計算時間の関係を示す。数千万規模の格子を用いた AFFr による流体解析を高い並列効率で実行可能であることが確認できた。

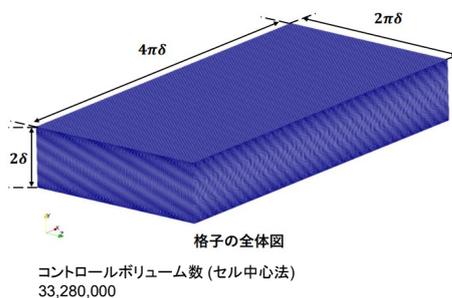


図 4 流体計算を行ったモデル(2)

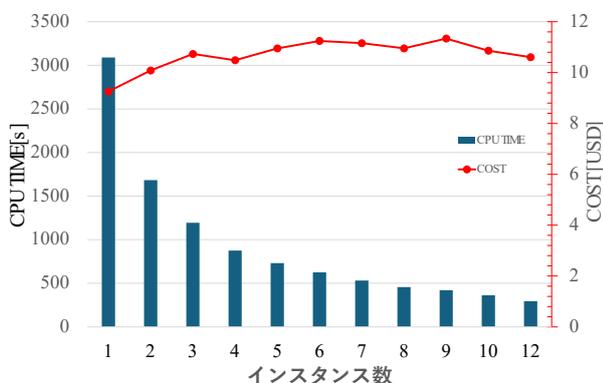


図 5 モデル(2)の計算時間とインスタンスコスト (オンデマンドインスタンス価格から算出)

以上の結果より、クラウド環境は、必要な時に必要なだけ計算リソースを迅速かつ柔軟に確保

し、様々な規模の流体解析を実施可能な強力な計算基盤として AFFr の流体解析においても有効に活用できることが示された。

4. メモリ共有型並列化による高速化

4.1. OpenMP

GPU などの高い並列処理能力を最大限に活用するためには、メモリ分散型の MPI 並列だけでなく、メモリ共有型の並列処理の導入が不可欠となる。その第一歩として、メモリ共有型の並列処理である OpenMP による並列化を試みた。

AFFr では、圧力の連立一次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。しかし、ICCG 法における前処理の逐次的な前進・後退代入は、並列処理の障害となる。この問題を解決するため、マルチカラーオーダーリング法を導入した。マルチカラーオーダーリングは、隣接しないセル同士を同じ「色」に分類し、セル番号を色順に並べ替えることで、同じ色に分類されたセルに関する計算を独立に実行可能にする手法である。本研究では、色付けアルゴリズムとして、Cyclic-Multicoloring + Reverse Cuthill-McKee (CMRCM) オーダーリングを用いた。

このマルチカラーオーダーリングに基づきセル番号を並べ替え、色ごとに計算を行うように連立一次方程式ソルバーを改修した。さらに、このソルバーにおける同じ色のセル集合に対するループ計算部分に並列実行を指示する OpenMP 指示文を追加した。OpenMP 指示文の追加により、共有メモリ型並列 (マルチスレッド) 計算が可能となる。

性能評価として、立方体格子 ($172 \times 172 \times 172$ 、約 509 万セル) の Poisson 方程式を対象とし、この連立一次方程式を 1 回解くのに要する時間を測定した。比較対象として、オープンソースの流体解析ソフトウェアである OpenFOAM (v2412) の線形方程式ソルバーを用いて、同一の Poisson 方程式を解く時間を測定した。異なるソフトウェア間での収束判定基準を統一し、計算時間の比較を行った。

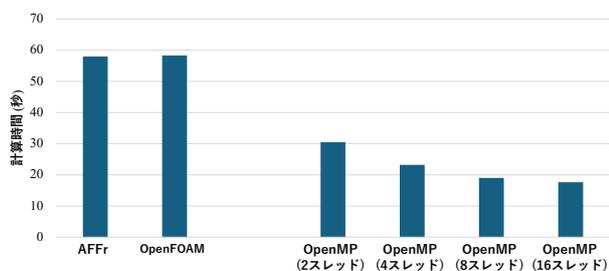


図 6 OpenMP 並列の計算時間

図 6 に示すように、従来の AFFr と OpenFOAM でシングルコア計算を行った時間には大きな差は見られなかった。AFFr をもちいて OpenMP 並列計算の結果を見ると、2 スレッドではほぼ半分の計算時間となったが、それ以上のスレッド数では、スレッド数の増加に対する計算時間の短縮効果は徐々に小さくなっており、並列数を増やしても得られるメリットが小さいことがわかる。一方 OpenFOAM(v2412)では最適化された OpenMP 並列化ルーチンは準備されておらず、単純に OpenMP 並列計算を実行するとシングルコア計算時間よりも大幅に悪化する結果となった。

4.2. GPU

マルチカラーオーダーリング法による OpenMP 並列化をベースとして GPU 対応を行った。係数行列の格納形式は、GPU の SIMD (Single Instruction, Multiple Data) 並列処理との親和性が高い ELL 形式を採用し、OpenMP の指示文と同様の OpenACC の指示文を追加することで GPU を活用するように実装した。

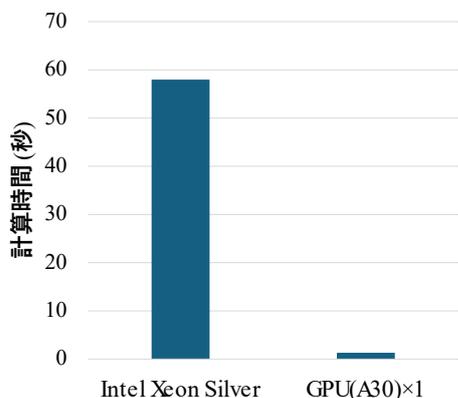


図 7 GPU を利用した計算時間 (立方体格子)

図 7 に、図 6 計算時と同じ立方体格子の Poisson 方程式ソルバーの計算を、GPU (NVIDIA A30) を搭載した計算機で行った計算時間を示す。GPU を用いた結果は、OpenMP による並列化よりも顕著な高速化を示し、Intel Xeon Silver プロセッサのシングルコア計算に対して約 50 倍という大幅な高速化を達成している。これは、GPU の高い並列処理能力が連立一次方程式ソルバーの高速化に非常に有効であることを示している。

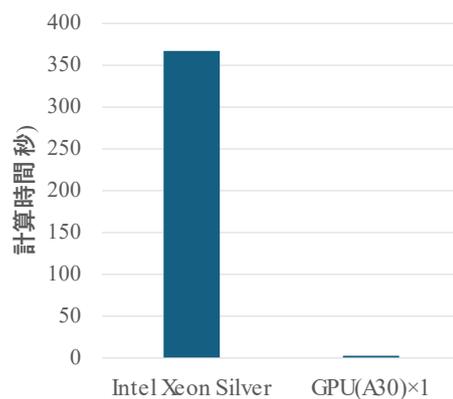


図 8 GPU を利用した計算時間 (非構造体格子)

次に、ビル周りの風計算の、四面体要素を中心とした約 528 万セルの計算格子を用いての圧力の方程式を 1 回解くためにかかった計算時間を測定した結果を図 8 に示す。

従来の AFFr の CPU シングルコアの計算時間と比較して、GPU 利用により約 130 倍の高速化を達成する結果となった。この結果は、実用的な規模の流体解析においても GPU が極めて有効であることを示している。

4.3. ベクトル計算機

NEC の SX-Aurora TSUBASA は、ベクトルエンジンを搭載したベクトル型スーパーコンピュータシリーズである。1 つのベクトル命令で 256 個の 64 ビットデータを同時に処理できるこのベクトル機の特長を生かすために、GPU 用のコードをベースに、より多くのデータを同時に処理できるようにループ順序の入れ替えなどの最適化を行った。

このように SX-Aurora TSUBASA 用に改修した AFFr で、図 8 と同じビル周りの風計算における圧力の方程式をベクトルエンジンの 1 コアを用いて 1 回解くためにかかった計算時間の結果を図 9 に示す。

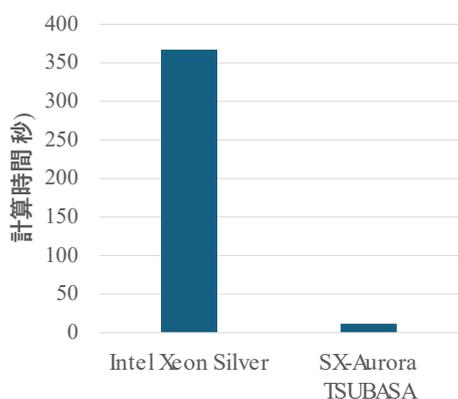


図 9 SX-Aurora TSUBASA を利用した計算時間 (非構造体格子)

従来の AFFr の CPU シングルコアの計算時間と比較して、ベクトルエンジン利用により約 30 倍の高速化を達成する結果となった。ベクトル計算機も流体解析の高速化に有効であることが示された。

5. さらなる高速化

AFFr は、開発元であるアドバンスソフトが保守・最適化を主体的に行っており、計算環境の変化に対して迅速かつ柔軟に対応可能である点が特長である。特に、GPU やベクトル計算機といった最新アーキテクチャへの対応においても、必要な修正を自社で実装可能であるため、長期的な運用においても安心して利用できる基盤が整っている。

本研究では、マルチカラーオーダーリング法の導入により、従来逐次処理に限定されていた計算の並列化を実現し、GPU およびベクトルエンジンの両者で大幅な高速化を達成した。今後は、cuBLAS 等の高性能ライブラリの活用や、MPI+GPU 並列のさらなる拡張、ベクトル命令への最適化といった改良により、さらなる計算時間の短縮が期待される。

これらの取り組みは、単なる速度向上にとどまらず、複雑で大規模な解析を現実的な時間で実施可能とするものであり、製品開発や設計現場の解析サイクル全体の効率化に大きく貢献するものと考えられる。

6. まとめ

本稿では、国産汎用流体解析ソフトウェア Advance/FrontFlow/red の最新計算機環境への適応に向けた取り組みとして、クラウドコンピューティング環境における数千万セル規模の流体解析事例と、GPU やベクトルエンジンを用いた連立一次方程式ソルバーの高速化事例を紹介した。クラウド環境においては、AWS ParallelCluster を用いることで、大規模並列計算を効率的に実行できることを示した。また、GPU やベクトルエンジンを活用した連立一次方程式ソルバーの開発により、従来の CPU シングルコア計算と比較して大幅な計算時間短縮を達成した。これらの成果は、最新の計算機環境を有効活用し、より大規模かつ高精度な流体解析を効率的に行うための重要な基盤となる。今後も、進化し続ける計算機環境に対応するため、ソフトウェアの開発を継続していく方針である。

謝辞

本取り組みにおいて、東京大学情報基盤センタースーパーコンピューティング研究部門中島研吾教授の線形ソルバープログラム (CPU 版、GPU 版) を活用させていただくとともに、中島教授から GPU 化について多くのご助言をいただきました。

※ 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。