



## 本課題の実施概要

- 地球シミュレータ(大規模共有メモリシステム SGI UV 2000)上で、その大規模共有メモリを十分に活かしたシミュレーションソフトウェアのチューニングや環境の整備を目的とする。
- 通常のクラスター計算機では、4~8GB/プロセス単位で分散メモリを構成する。この場合、並列数を上げることによりメモリ規模も増加するが、プロセスあたりの使用メモリは4~8GBに制限される。大規模共有メモリシステムでは、プロセスあたりの使用メモリも大規模とすることが可能である。
- 各ソフトウェアにおいて、スーパーコンピュータが必要となる大規模・高精度なシミュレーション課題に対応できるように、大規模例題を想定し、可能な限り並列化効率を高め、高速化することを本作業(チューニング)の目標とする。

## 本課題における移植ソフトウェア

• 第一原理計算ソフトウェア	Advance/PHASE
• 流体解析ソフトウェア	Advance/FrontFlow/red
• 構造解析ソフトウェア	Advance/FrontSTR
• 音響解析ソフトウェア	Advance/FrontNoise
• 3次元デバイスシミュレータ	Advance/DESSERT

- Advance/PHASE、Advance/FrontFlow/red、Advance/FrontSTRは、東京大学生産技術研究所計算科学技術連携研究センターが実施した文部科学省ITプログラム「戦略的基盤ソフトウェアの開発」プロジェクト、および、文部科学省次世代IT基盤構築のための研究開発「革新的シミュレーションソフトウェアの研究開発」プロジェクトの成果(ソフトウェア)をアドバンスソフト株式会社が商品化したものです。アドバンスソフトはこれらのプロジェクトに参加し、ソフトウェアの開発を担当しましたが、その成果を独自に改良して商用パッケージソフトウェアとし、販売保守を行っております。

## ターゲット:大規模共有メモリシステム SGI UV2000

- ご協力: 国立研究開発法人海洋研究開発機構 様
- 地球シミュレータに付属する大規模共有メモリシステム
- スーパーコンピューティング・サービスの対象



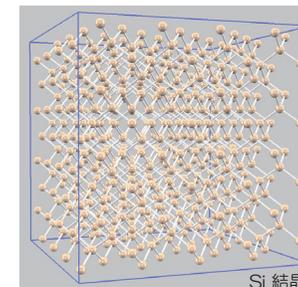
ハードウェア	SGI UV2000
CPU	Intel Xeon E5-4650 v2 2.40GHz
ノード数	1
CPU数	256 (2560 cores)
総メモリ容量	32 TB (12.5GB/core)
インターコネクト	SGI NUMalink6
演算性能	49.152 TFLOPS
OS	SUSE Linux Enterprise Server



## 第一原理計算 Advance/PHASE

- 第一原理計算とは  
実験結果などの経験的なパラメータを用いない第一原理(first principles)による計算法。  
電子間、原子核間、および電子・原子核間のクーロン相互作用から、量子力学の基本法則である電子状態理論を使って電子分布を計算する。

計算モデル	Si結晶
計算内容	SCF + FORCE
原子数	512
k点サンプリング	k点並列時: 2×2×2 バンド並列時: Γ点のみ
バンド数	1600
平面波数	k点並列時: 146116 バンド並列時: 72919
射影演算子数	2048



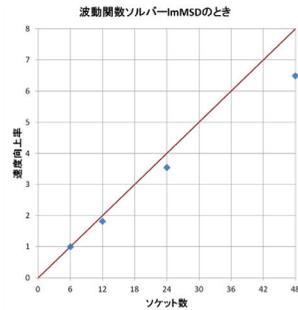
# Advance/PHASE k点並列の速度向上率



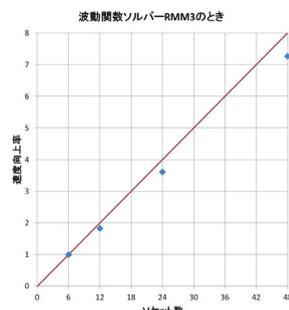
## 並列条件

k点並列数	バンド並列数	使用コア数	使用ソケット数
1	60	60	6
2	60	120	12
4	60	240	24
8	60	480	48

## 速度向上率



(a)波動関数ソルバーがImMSDのとき



(b)波動関数ソルバーがRMM3のとき

Copyright ©2016 AdvanceSoft Corporation. All rights reserved.

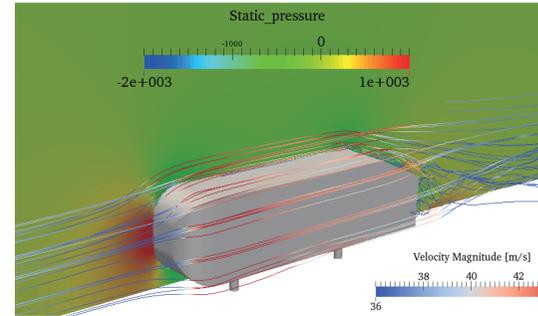
大規模問題に対し、並列性能を十分活用できることが期待できる。

# 流体解析 Advance/FrontFlow/red



## 車体(Ahmed Body)周りの静圧分布&流線

リファイン2回 9297万節点

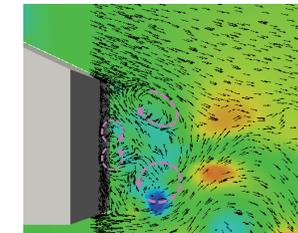


モデル名	要素数	節点数
Ahmed Body	7,638,219	1,505,423
Refine1	75,448,584	11,771,974
Refine2	488,846,016	92,978,866

要素は、テトラとプリズムの混合要素

LES(Large Eddy Simulation)を用いた解析

## 車体後方の静圧分布&速度ベクトル



車体後方に発生する非定常渦を明確にとらえることができる。

Copyright ©2016 AdvanceSoft Corporation. All rights reserved.

# スーパーコンピュータでの性能評価



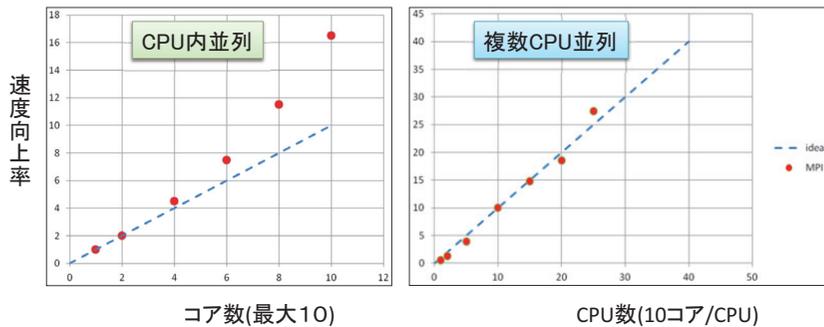
## 国立研究開発法人 海洋研究開発機構 様

地球シミュレータ(大規模共有メモリスistem SGI UV2000)上で実証試験

モデル: Ahmed body

オリジナル 150万節点

リファイン1回 1177万節点



Copyright ©2016 AdvanceSoft Corporation. All rights reserved.

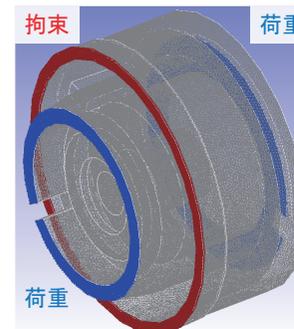
大規模問題に対し、並列性能を十分活用できることが期待できる。

# 構造解析 Advance/FrontSTR



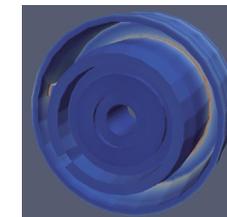
## Capモデルの解析

### 静解析

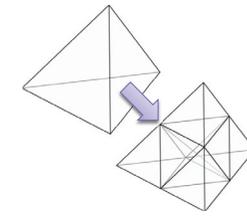


モデル(すべて四面体二次要素)

	要素数	節点数
オリジナル	684,807	1,008,911
メッシュ細分化機能 (REVOCAP/Refiner)		
リファイン2回	43,827,648	60,089,084
リファイン3回	350,621,184	474,183,032



ミーゼス応力



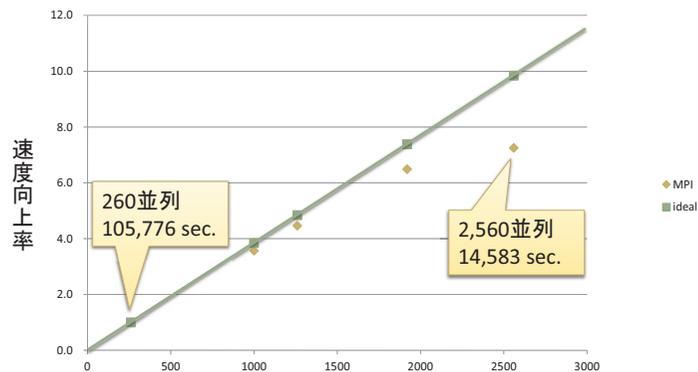
メッシュの細分化

Copyright ©2016 AdvanceSoft Corporation. All rights reserved.

## スーパーコンピュータでの性能評価

国立研究開発法人 海洋研究開発機構 様

地球シミュレータ(大規模共有メモリスistem SGI UV2000)上で実証試験  
3.5億要素(リファイン3回)



Copyright © 2016 AdvanceSoft Corporation. All rights reserved.

並列数

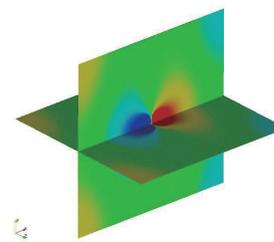
大規模問題に対し、並列性能を十分活用できることが期待できる。

13

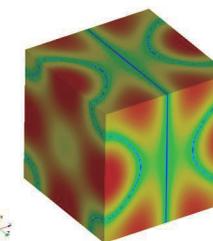
## 音響解析 Advance/FrontNoise

箱に閉じ込められた双極子音源の音場解析

- 箱に閉じ込められた双極子音源の音場解析 (チュートリアル中のB1モデルを1回リファインしたもの)
- 節点数: 約812万、要素数: 4800万 (すべて四面体)



中央断面の音圧レベル



表面の速度ポテンシャル分布

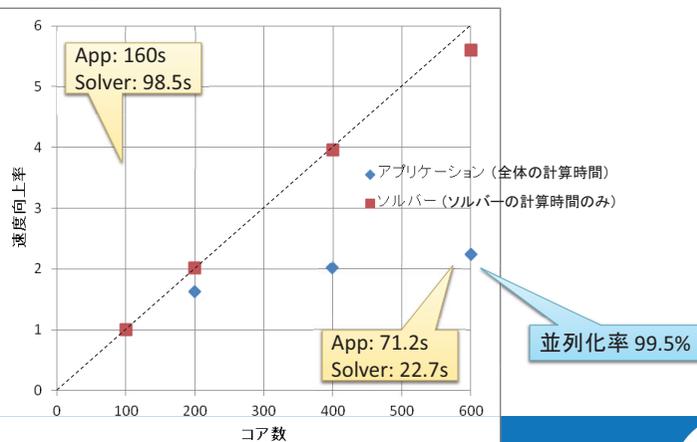
Copyright © 2016 AdvanceSoft Corporation. All rights reserved.

14

## スーパーコンピュータでの性能評価

国立研究開発法人 海洋研究開発機構 様

地球シミュレータ(大規模共有メモリスistem SGI UV2000)上で実証試験



Copyright © 2016 AdvanceSoft Corporation. All rights reserved.

大規模問題に対し、並列性能を十分活用できることが期待できる。

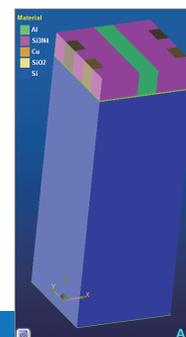
15

## 3次元デバイスシミュレータ Advance/DESSERT

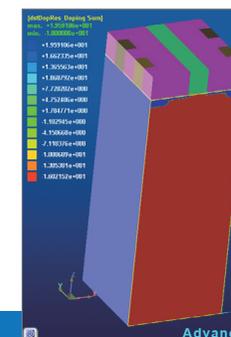
MOSの解析:

- キャリアとしての役割を電子が主に担うnタイプの3次元構造をもつ。
- 計算格子の規模の異なる2つの解析モデルを用意した。

解析モデル	要素タイプ	要素数	節点数
A1	六面体	2287350	2391200
A2	六面体	5464800	5584464



デバイスの材質分布



デバイスの不純物分布

Copyright © 2016 AdvanceSoft Corporation. All rights reserved.

16

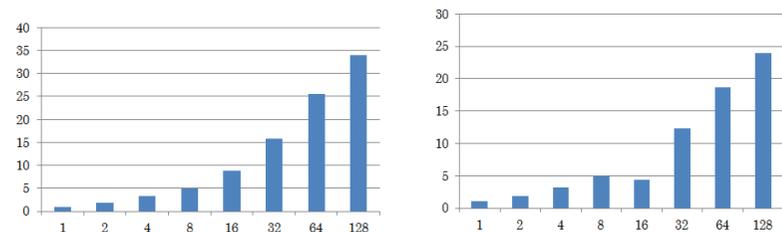
# スーパーコンピュータでの性能評価



http://www.advancesoft.jp/

国立研究開発法人 海洋研究開発機構 様

地球シミュレータ(大規模共有メモリスistem SGI UV2000)上で実証試験



モデルA1の並列処理性能の計測結果      モデルA2の並列処理性能の計測結果

チューニングにより、16コアで8倍、32コアで16倍の高速化。  
並列性能を出すことが難しいとされるデバイスシミュレーションにおいて、  
(大規模)並列性能は概ね良好と考える。

大規模問題に対し、並列性能を十分活用できることが期待できる。

Copyright © 2016 AdvanceSoft Corporation. All rights reserved.

# 結果と展望



- 移植したソフトウェアについて、大規模計算を実施し、十分活用できる並列性能を得ることができた。
- アドバンスソフト株式会社は、本プロジェクトの成果等により、2015年8月より、利用者が必要時に一カ月単位で契約できるライセンスの発行、及び必要に応じてスーパーコンピュータ特有の利用法に関するコンサルティング・サービスを行う、「アドバンス/スーパーコンピューティング・サービス」事業を開始した。このサービスでは国立研究開発法人海洋研究開発機構が所有する、地球シミュレータ大規模共有メモリスistem SGI UV 2000でも提供される。
- 今後、この事業の発展により、産業界でより多くのスーパーコンピュータの利用機会が増えていくことが期待される。

## 謝辞

- 国立研究開発法人海洋研究開発機構が実施した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のもと、平成26年度並びに平成27年度地球シミュレータ産業戦略利用プログラムへの利用課題「大規模共有メモリスistemにおける大規模シミュレーションの可能性の検討」が申請受理され、地球シミュレータ(大規模共有メモリスistem UV2000)を利用させて頂き、多くの知見が得られたこと、また多くの有用なアドバイスを頂いたことを心より感謝致します。