

大規模共有メモリシステムにおける大規模シミュレーションの可能性の検討

松澤邦裕⁽¹⁾、小池秀輝⁽¹⁾、岡崎一行⁽¹⁾、尾川慎介⁽¹⁾、富塚孝之⁽¹⁾、田中洋一⁽¹⁾、小川哲司⁽¹⁾、桑原匠史⁽¹⁾
浅野俊幸⁽²⁾、岩沢美佐子⁽²⁾、廣川雄一⁽²⁾、西川憲明⁽²⁾

⁽¹⁾ アドバンスソフト株式会社 ⁽²⁾ 国立研究開発法人 海洋研究開発機構

本課題の狙い

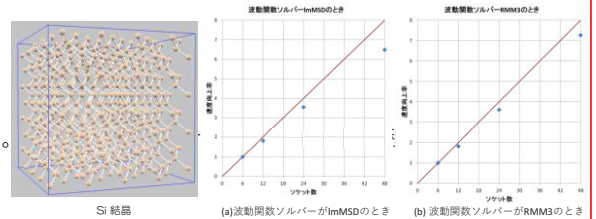
- スパコンの産業利用による更なる**産業競争力の強化**
- スパコン上で稼働する**大規模・高精度シミュレーションソフト**ウェアの拡充が必要
- アドバンスソフトが所有するソフトウェアの移植とチューニングの実施
- 移植されたシミュレーションシステムをユーザーへ提供
- オンデマンド型「**アドバンス/スーパーコンピューティング・サービス**」事業を開始

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



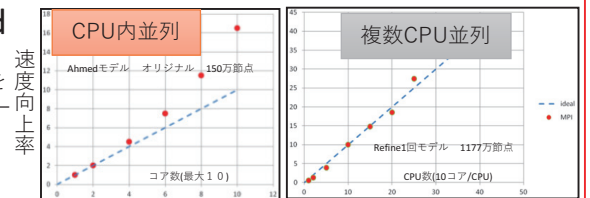
① 第一原理ソフトウェア Advance/PHASE

大規模例題としてSi₅₁₂結晶のSCF+FORCE法による第一原理バンド計算を実施した。k点並列計算では、大規模系に対してはほぼ理論値に近い高速化を達成した。状態密度、Fermi面、バンド分散の高精度計算、磁性材料の電子状態、誘電関数、有効質量など、多くのk点数を必要とする物性値の計算に有効であることを示した。計算は実行可能であるが、高速化については更なる改善を目指す。



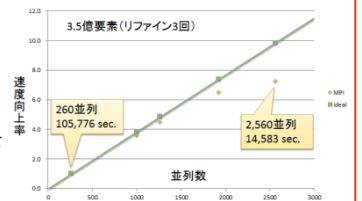
② 流体解析ソフトウェア Advance/FrontFlow/red

非定常乱流を精度よく解析するLarge Eddy Simulation (LES) をベースとし、計算ロバスト性を図った高度な手法や、大規模モデルを高速に解く高い並列性能を持つ。例題として、Ahmed body周りの流体は常温・常圧の空気とし、行列ソルバーのAMG法、LES (標準Smagorinskyモデル) を用いて、時間刻み幅を10-3[s]として500ステップの計算を行った。並列処理の速度向上率は、ほぼ理想に近い値が得られた。



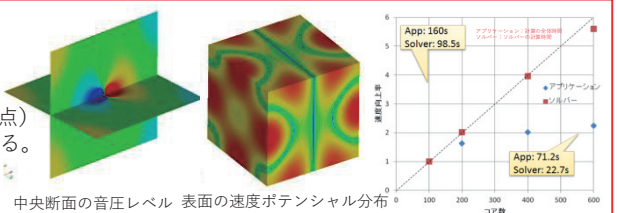
③ 構造解析ソフトウェア Advance/FrontSTR

例題として、アルミニウムのキャップ形状のモデルの弾性静解析を実施した。Refinerを用いて、格子分割の詳細化を図り、3.5億要素、4.7億節点を超える大規模計算を行った。大規模共有メモリシステム (SGI UV 2000) に搭載されているCPUは大規模容量を誇るL3キャッシュであり、有効活用を図るコーディングを試行した。性能解析ツールPerfsuiteによりサブルーティンごとの計算負荷を計測し、最も負荷が高かった反復法ソルバー内の行列・ベクトル積を計算する部分を重点的に試行した。ソルバー時間の並列処理の速度向上率は、ほぼ理想に近い値が得られた。



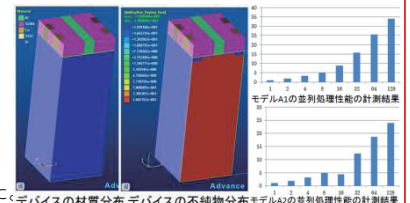
④ 音響解析ソフトウェア Advance/FrontNoise

形状適合性の高い四面体要素を使用し、数値解法には有限要素法を利用して、音源の位置と大きさ等を入力として、解析領域内の音圧レベルを求める。例題として、箱に閉じ込められた双極子音源の音場解析 (4.8億要素、8000万節点) を実施した。反復法ソルバーはオープンソフトウェアであるPETScを利用している。並列処理の速度向上率は、良好な値が得られた。



⑤ 3次元デバイスシミュレータ Advance/DESSERT

ボルツマン輸送方程式に基づく定式化をベースに、豊富な物理モデルのみならず3次元形状を容易に生成する構造構築機能と自動メッシング機能、並びに最適メッシュに基づく高速計算・安定収束を実現した、実用的3次元デバイスシミュレータである。例題として、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MOSの2種類の解析を実施した。反復法ソルバーはオープンソフトウェアであるPETScを利用している。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、大規模問題に対して16コアで8倍、32コアで16倍と良好な並列処理性能が得られた。



今後の課題

この成果をもとに、スーパーコンピュータの産業利用促進のために、アドバンスソフト株式会社は、一か月単位の契約ライセンスとスーパーコンピュータ特有の利用方法に関するコンサルティング・サービスを軸とした「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2015年8月より開始した。今後、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を期待している。

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ある。



アドバンスソフト株式会社

〒101-0022 東京都千代田区神田駿河台四丁目3番地 新お茶の水ビルディング17階西
TEL: 03-6826-3971 FAX: 03-5283-6580 URL: <http://www.advancesoft.jp/>