

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

プロジェクト責任者

松澤 邦裕 アドバンスソフト株式会社

著者

松澤 邦裕^{*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

利用施設：国立研究開発法人海洋研究開発機構 地球シミュレータ

利用期間：平成 27 年 8 月 12 日～平成 28 年 3 月 31 日

アブストラクト

わが国の産業競争力強化のために、地球シミュレータ等のスーパーコンピュータを活用することは重要であるが、現実にはスーパーコンピュータ活用のためのソフトウェアが準備されていないことにより、スーパーコンピュータの産業利用が進んでいない。

アドバンスソフト株式会社は、国プロあるいは自社で開発した多くの大規模・高精度なシミュレーションソフトウェアを保有している。それらをスーパーコンピュータ上で性能を発揮できるようにチューニングし、環境整備することは、今後のスーパーコンピュータの産業利用に大きく貢献できると考えている。また、利用者が使いたいときに直ちにスーパーコンピュータを利用できる「アドバンス/スーパーコンピューティング・サービス²⁾」事業を 2015 年 8 月から開始した。

本プロジェクトでは、昨年度大規模共有メモリシステム SGI UV 2000 上に移植したアドバンスソフト株式会社が所有するソフトウェアに対し、更なるチューニングを実施した。

キーワード：大規模シミュレーション、高速化、アルゴリズムの改良、並列処理性能、オンデマンド・スーパーコンピューティング

1. 本プロジェクトの目的と概要

産業界が要求するより大規模・高精度なシミュレーションに対応するため、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。本プロジェクトで整備の対象となるシミュレーションソフトウェアを表に一覧にまとめた。

表1 対象となるソフトウェア一覧¹⁾

| No. | 種類 | ソフトウェア名 |
|-----|---------------|-----------------------|
| 1 | 第一原理ソフトウェア | Advance/PHASE |
| 2 | 流体解析ソフトウェア | Advance/FrontFlow/red |
| 3 | 構造解析ソフトウェア | Advance/FrontSTR |
| 4 | 音響解析ソフトウェア | Advance/FrontNoise |
| 5 | 3次元デバイスシミュレータ | Advance/DESSERT |

2. 本プロジェクトの内容と得られた成果の概要

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。また、各ソフトウェアの性能評価を行い、スペックを導出する。これら大規模例題の実施、並びに並列化効率等のスペックの導出は、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（大規模共有メモリシステム SGI UV 2000）を利用した。従来プロセスあたりのメモリ制限や計算速度の点から実行不可であった大規模シミュレーションが実現可能となった。

2.1. Advance/PHASE

第一原理計算ソフトウェア Advance/PHASE¹⁾ に対する実施内容と成果を報告する。

2.1.1. 解析モデル

表2 に性能分析に用いた計算モデルの概要を示す。また、図1 に Si₅₁₂ の計算モデルを示す。

表2 性能分析に用いた計算モデル概要

| | |
|-----------|----------------------------------|
| 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 |

2.1.2. k 点並列の速度向上率

k 点並列時はバンド並列数は 64 で固定し、表3 に示す並列条件で計算を実行した。その時の速度向上率の測定結果を図2 に示す。図2 より波動関数ソルバーが RMM3 のときは、理想的な速度向上率に近いことが分かった。また、波動関数ソルバーが lmMSD のときはノード数が増加すると効率は若干悪くなるが、lmMSD は SCF の最初の数サイクルのみの実施であるため全体の計算時間に大きな影響はない。

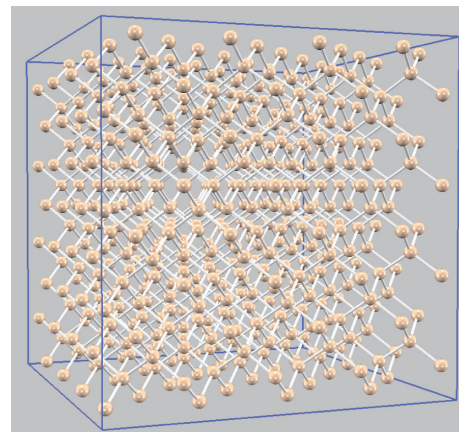


図1 Si₅₁₂ の計算モデル

表 3 k 点並列時における並列条件

| 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 |

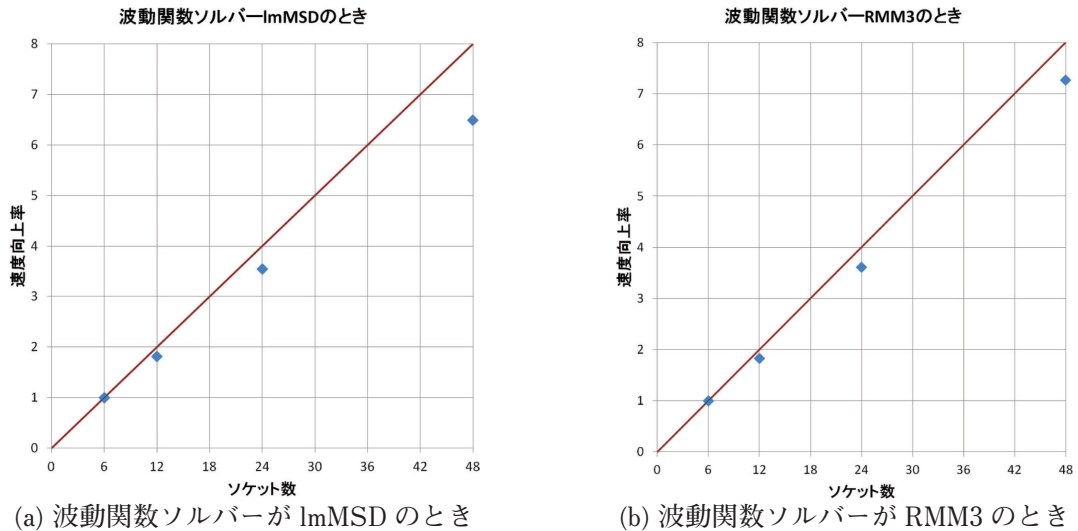


図 2 バンド並列時の速度向上率（赤線は理想的な速度向上率）

2.1.3. 結果と展望

k 点並列は理想に近い速度向上率が達成できた。よってより多くの k 点を用いた計算を必要とする物性値の評価を効率よく行うことが可能であると考えられる。多くの k 点を必要とする物性値の事例として、①状態密度、Fermi 面、バンド分散の高精度計算、②磁性材料における磁気異方性エネルギー、③誘電関数、④有効質量が考えられる。

2.2. Advance/FrontFlow/red

流体解析ソフトウェア Advance/FrontFlow/red¹⁾ に対する実施内容と成果を報告する。

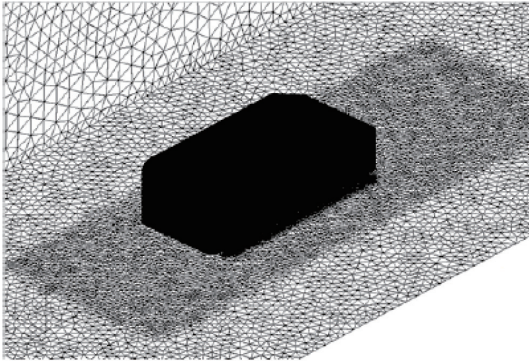
2.2.1. 解析モデル

性能評価および UV2000 での動作確認を実施するため、図 3 に示したモデル Ahmed body を利用した。モデルの左端から 40m/s の空気を流入させて、Ahmed body 周りの空力解析を行った。

2.2.2. 空力解析の実施

次の解析条件で空力解析を行った。

- Ahmed body 周りの流体は、常温 (25°C) ・ 常圧 (101325Pa) の空気。
- 行列ソルバーには、AMG 法を適用。
- 乱流モデルには、LES (標準 Smagorinsky モデル) を適用。
- 時間刻み幅を 10-3[s] とし、500 ステップの計算を実施。



| リファインの回数 | 節点数 | 要素数 |
|----------|------------|-------------|
| 0 | 1,505,423 | 7,638,219 |
| 1 | 11,771,974 | 75,448,548 |
| 2 | 92,978,866 | 488,846,016 |

図3 性能評価に利用した解析モデル (左:モデルの格子図、右:節点数および要素数)

図4は、Ahmed body 周りの静圧分布の断面図である。ここでは、リファインなしのモデルを用いて計算している。車体前方に高い圧力が発生している。また、車体後方では、非定常渦が発生しているのが分かる。

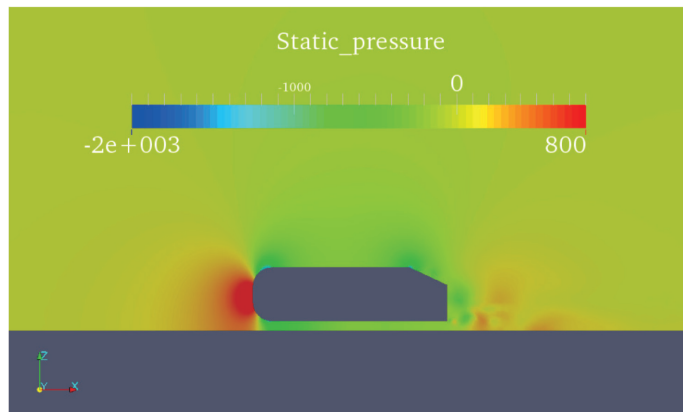


図4 Ahmed body 周りの静圧分布

2.2.3. 並列処理性能

モデル Ahmed body (リファインなし) を用いて測定した速度向上率を図5に示す。

最初に1ソケット(1ソケットに10コア)を用いたソケット内での並列処理を行った。図5を見ると、並列度以上に並列化の効果が現われる super-linear が起きていることが確認できる。これは、低並列時にキャッシュが有効に使用されておらず、並列度が上がり処理が分割されることで、状況が解消されていく場合に起こる事が多く、特に低並列時においてキャッシュミスヒットが相当量起きていることが原因と思われる。

次に図6はモデル Ahmed body (リファイン1回) を用いて測定した速度向上率である。図6より、並列数 25 ソケット (250 コア) 迄は並列度に応じて速度向上率が上がることを確認した。

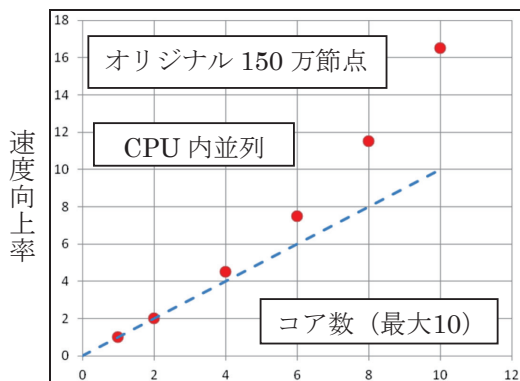


図5 Ahmed body (リファインなし) における速度向上率

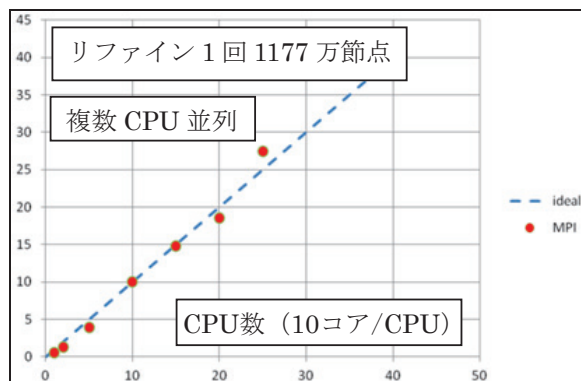


図6 Ahmed body (リファイン1回) における速度向上率

2.2.4. まとめと展望

本プロジェクトにより、解析が正常に実行できること、及び並列処理における速度向上率がほぼ理想に近い形で上昇していくことを確認した。更に、格子数が1億程度のモデルでも動作するようになったが、モデル規模が大きくなるにつれて、プリで出力されたファイルをソルバーが読み込むのに時間がかかることが分かった。今後、引き続き、高速化に向けたチューニングが期待される。

2.3. Advance/FrontSTR

構造解析ソフトウェア Advance/FrontSTR¹⁾ に対する実施内容と結果を報告する。

2.3.1. 解析モデル

図7のような 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。

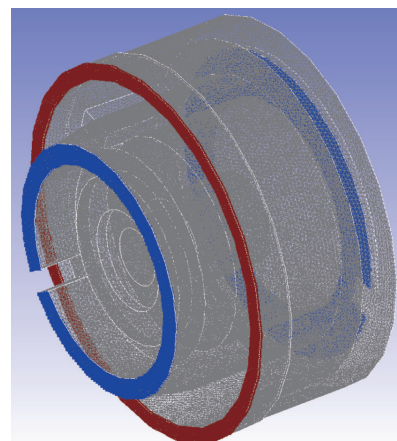


図7 Cap モデル(すべて四面体二次要素)

2.3.2. リファイン 3 回の構造解析の実施

Cap モデルに対し、メッシュ細分化機能 (REVOCAP_Refiner) を利用して、複数回のリファインを行った。Refiner 適用時のメッシュ規模を表4に示す。

表4 Refiner 適用時の Cap モデルのメッシュ規模

| リファイン | 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 |

2.3.3. 結果と展望

リファイン 3 回の Cap モデルを用いて並列化効率を調査した。192CPU (1920 コア) および 256CPU (2560 コア) はマシンを専有して調査した。この計測結果を図8に示す。

Advance/FrontSTR の大規模並列性能は良好であり、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。

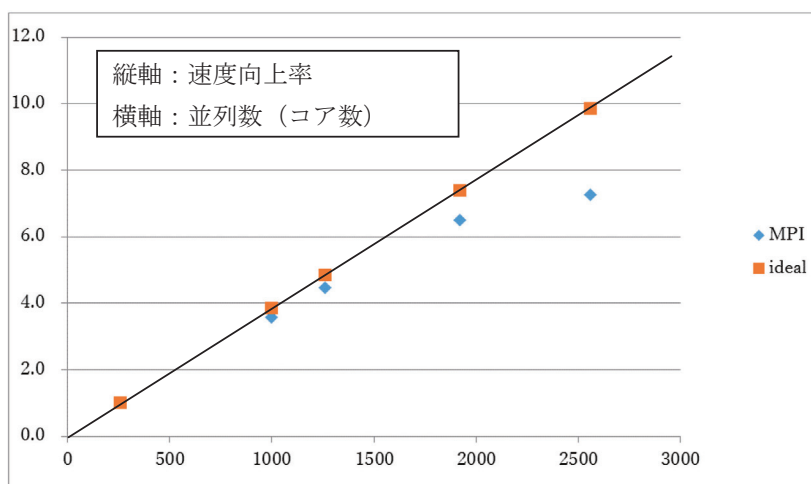


図8 リファイン 3 回の Cap モデルの並列化効率

2.4. Advance/FrontNoise

音響解析ソフトウェア Advance/FrontNoise¹⁾ に対する実施内容と結果を報告する。

2.4.1. 解析モデル

解析モデルは、図9に示す箱に閉じ込められた双極子音源の音場解析（モデル B1）と図10に示す屋外環境騒音解析（モデル C2）である。

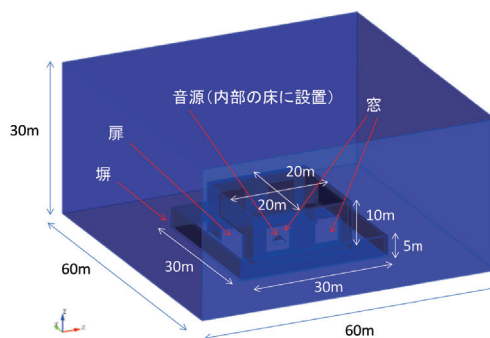


図10 屋外環境騒音（モデル C2）

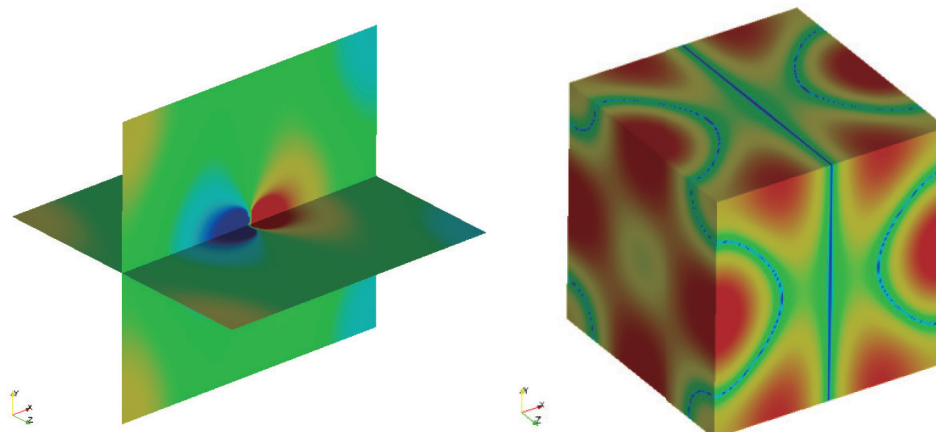


図9 箱に閉じ込められた双極子音源（モデル B1）
（左：中央断面の音圧レベル、右：表面の速度ポテンシャル分布）

2.4.2. 音響解析の実施

モデル B1 およびモデル C2 それぞれに対し、メッシュ細分化機能（REVOCAP_Refiner）を利用して、メッシュ規模を大きくした解析モデル（B1R および C2R）を作成し、計4モデルについて並列処理性能を計測した。解析モデルのメッシュ規模一覧を表5に示す。

表5 解析モデルのメッシュ規模

| 解析モデル | 要素タイプ | 要素数 | 節点数 |
|-------|-------|------------|-----------|
| B1 | 四面体1次 | 6,000,000 | 1,030,301 |
| B1R | 四面体1次 | 48,000,000 | 8,120,601 |
| C2 | 四面体1次 | 2,184,299 | 389,312 |
| C2R | 四面体1次 | 17,474,392 | 3,016,928 |

2.4.3. 結果と展望

B1R および C2R について、並列処理性能を計測した。各解析モデルに対する並列処理性能の計測結果を図11に示す。

Advance/FrontNoise の大規模並列性能は良好であり、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。

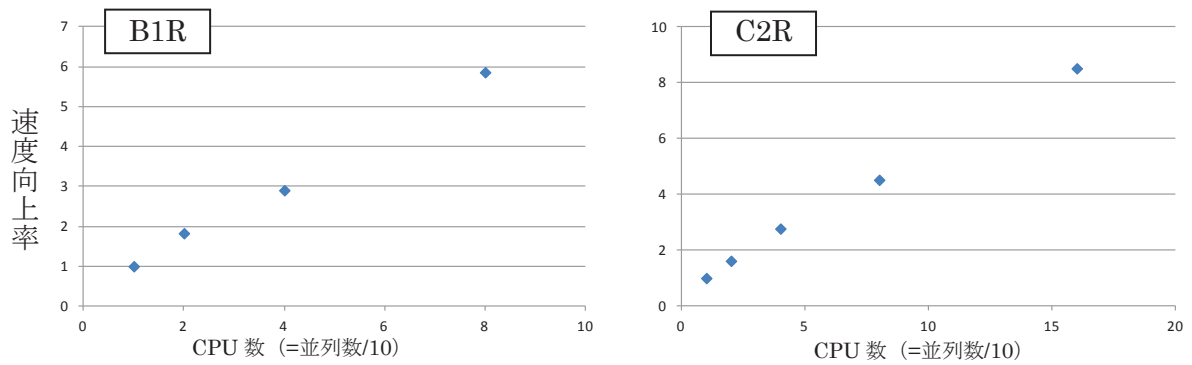


図 11 B1R と C2R モデルに対する速度向上率

2.5. Advance/DESSERT

デバイスシミュレータ Advance/DESSERT1) に対する実施内容と結果を報告する。なお、Advance/DESSERT は Advance/TCAD²⁾ の一部 (デバイスシミュレーション) として取り扱われている。

2.5.1. 解析モデル

解析モデルは、図 12 に示す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 の解析である。また、表 6 にように、計算格子の規模の異なる 2 つの解析モデルを用意した。

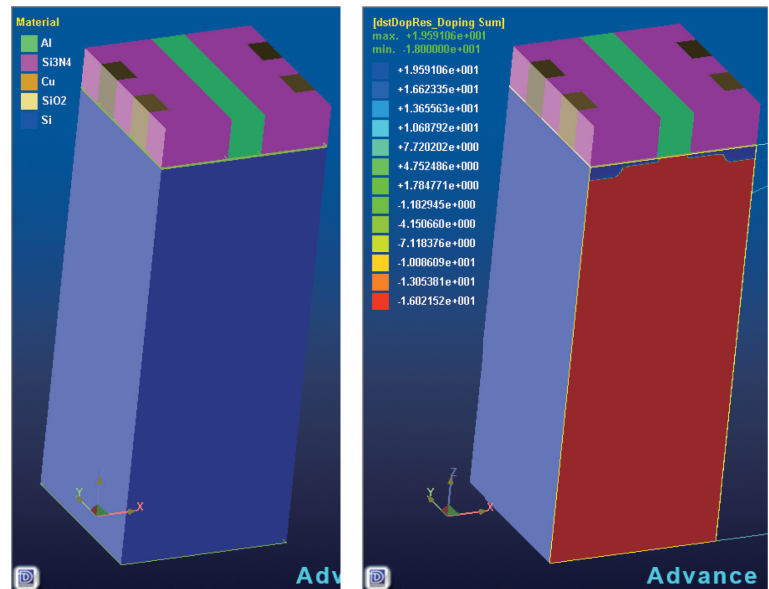


図 12 デバイスの材質分布 (左) と不純物分布 (右)

2.5.2. 並列処理性能

図 13 と図 14 は、各解析モデルに対する並列処理性能を計測した結果である。モデルによる違いはあるが、32CPU コアでは 12 ~ 16 倍、64CPU コアでは 18 ~ 25 倍であった。

また、並列計算時のデータ転送量による効率の違いを比較した。並列計算時に最もデータ転送量が少なくなるように格子を分割

した 250 万節点程度のモデル (z increase model) と、最もデータ転送量が多くなるように格子を分割した 250 万節点程度のモデル (x-y increase model) を作成し、アドバンスソフト社内で所有している一般的な PC クラスタ (1 ノードあたり Xeon (6 コア) CPU × 2、メモリ 96GB) 上で、2 つのモデルについて並列化効率を取得した。非並列計算時 (1CPU コア) での計算時間と並列計算時の計

表 6 解析モデル

| 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 |

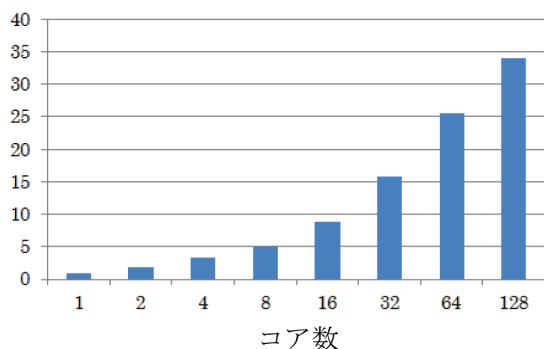


図 13 モデル A1 の並列処理性能の計測結果

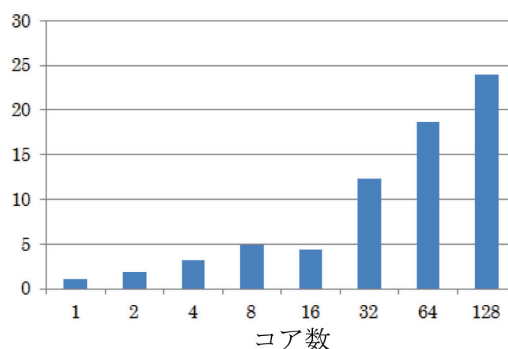


図 14 モデル A2 の並列処理性能の計測結果

算時間に対する割合の CPU コア数依存性を図 15 に示した。ここで、縦軸の値の逆数が並列化効率を示している。結果は、4CPU コアを超えたあたりから並列化効率に違いが現れ、z increase model の方が x-y increase model よりも高い並列化効率が出ており、36CPU コア使用時に、z increase model で約 10 倍、x-y increase model で約 7 倍の並列化効率となっていた。データ転送量の違いが並列化効率の差となっていることが確認できたが、データ通信速度に対しても違いが予想できる。

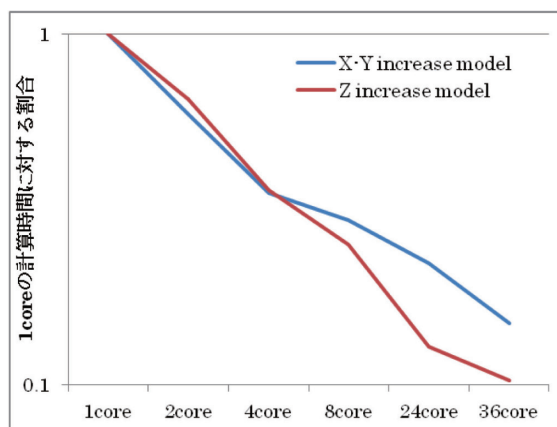


図 15 CPU コア数あたりの計算時間の割合：一般の PC クラスタ

図 16 は、アドバンスソフト社内で所有している一般的な PC クラスタと比較して、よりデータ通信速度が高い大規模共有メモリシステム SGI UV 2000 で取得した並列化効率である。図 15 と比較して高い並列化効率を少ない CPU コア数で実現していることが判る。16CPU コアでは約 9 倍、32CPU コアでは約 16 倍の並列化効率を達成した。大規模共有メモリシステム SGI UV 2000 の優位性が出た結果となった。

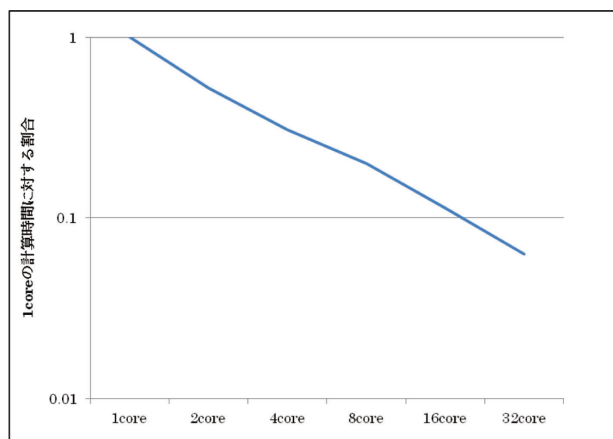


図 16 CPU コア数あたりの計算時間の割合：SGI UV2000

2.5.3. 結果と展望

デバイスシミュレータ Advance/DESSERT は、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。

3. 社会的・経済への波及効果の見通し

2015 年 8 月より、アドバンスソフト株式会社はスーパーコンピュータの産業利用の促進を目的と

して、本プロジェクトの成果を活用した「アドバンス／スーパーコンピューティング・サービス」事業を開始した。本サービスでは、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。

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、地球シミュレータの大規模共有メモリシステム SGI UV 2000 でも対象に含まれている。現在までの実績として、大規模共有メモリシステム SGI UV 2000 に対し、Advance/PHASE（第一原理ソフトウェア）を利用した案件（1件）がある。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。

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³⁾」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⁴⁾」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、販売保守を継続している。

参考文献

- 1 小池 秀耀ら, "特集「アドバンスソフト株式会社が製造販売するソフトウェアパッケージ」", アドバンスシミュレーション Vol.20, 2014.12.
- 2) 小池 秀耀ら, "特集「Made in Japan の LSI デバイス設計 CAD システム Advance/TCAD」", アドバンスシミュレーション Vol.21, 2015.09.
- 3) 小池 秀耀ら, 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」平成 15 年度年報, 2004.
- 4) 小池 秀耀ら, 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」平成 19 年度年報, 2008.