2007年1月24日

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」 ワークショップ(第7回)

構造解析シミュレーション FrontSTR

~ Win ノートクラスタから地球シミュレータまで~

奥田洋司

東京大学 人工物工学研究センター

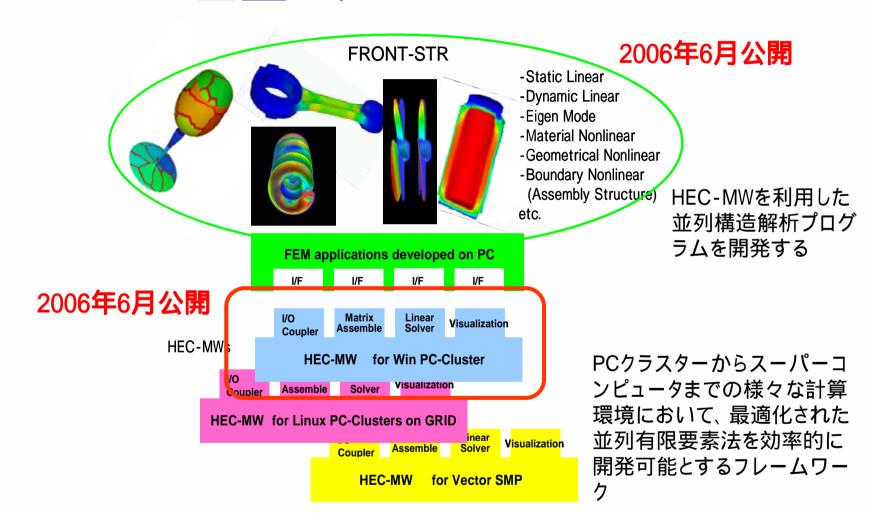
開発メンバー:

小笠原朋隆,陳莉,深堀安二,今井登,伊東聰(東京大学),長嶋利夫(上智 大学),荒川貴道(アドバンスソフト(株))

Revolutionary Simulation Software



HEC-MWを基盤とするFrontSTR



2006年8月 Ver.1.1 アップ(バグFix版)



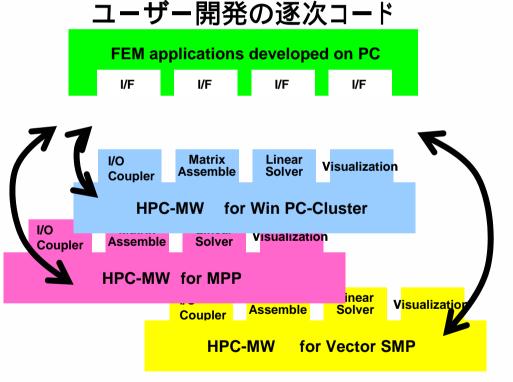
FrontSTRの革新性・差別化ポイント

- 大規模並列分散環境への対応
 - 従来の汎用コードの限界
 - NLS(ナショナル・リーダーシップ・スパコン) における構造解析ソフトウェア
 - さまざまな環境(OS,プロセッサタイプ)における効率的な大規模並列構造解析(とくにWin環境)
- RSS21革新的連成シミュレーション・システムへのI/F
- HEC-MW上での構築
 - 有限要素解析アプリケーションの効率的な改良,新規開発



HEC-MWの提供する機能

- データ入出力(単一・分散領域)
- 線形ソルバ
 - 反復法・直接法
 - ブロック処理
- 有限要素処理
 - 行列演算
 - コネクティビティ生成 等
- ■可視化
- ユーティリティ
 - 領域分割等

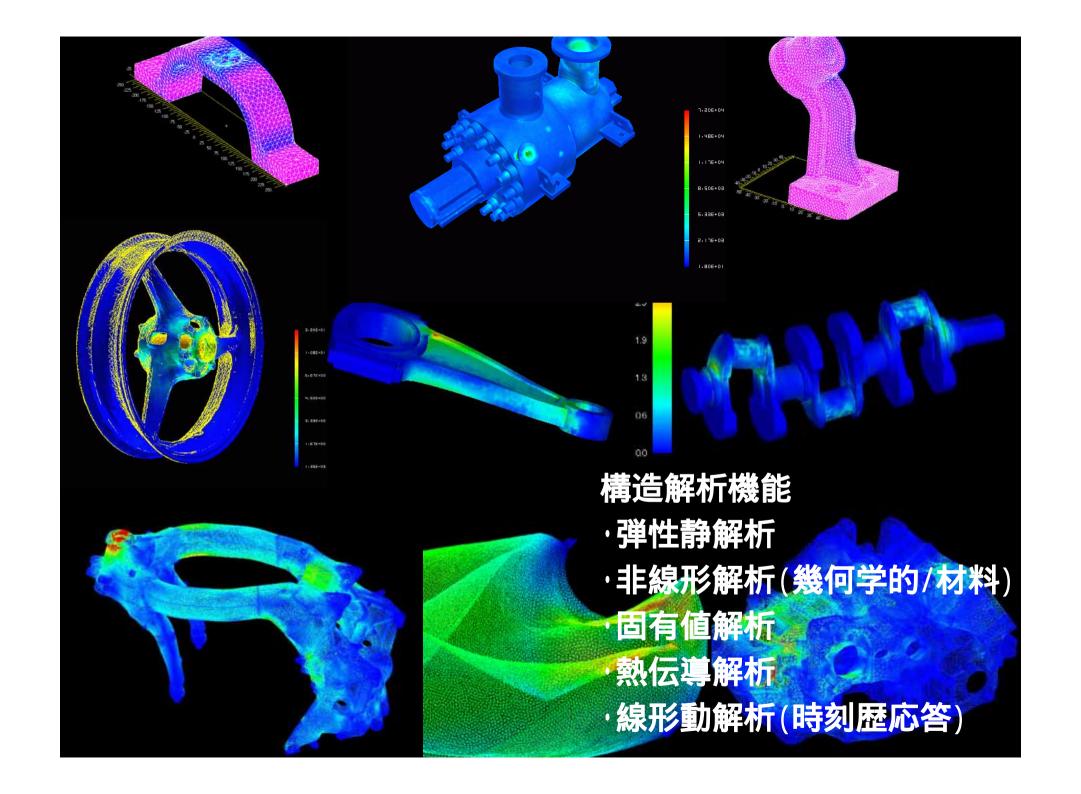


HEC-MWのイメージ



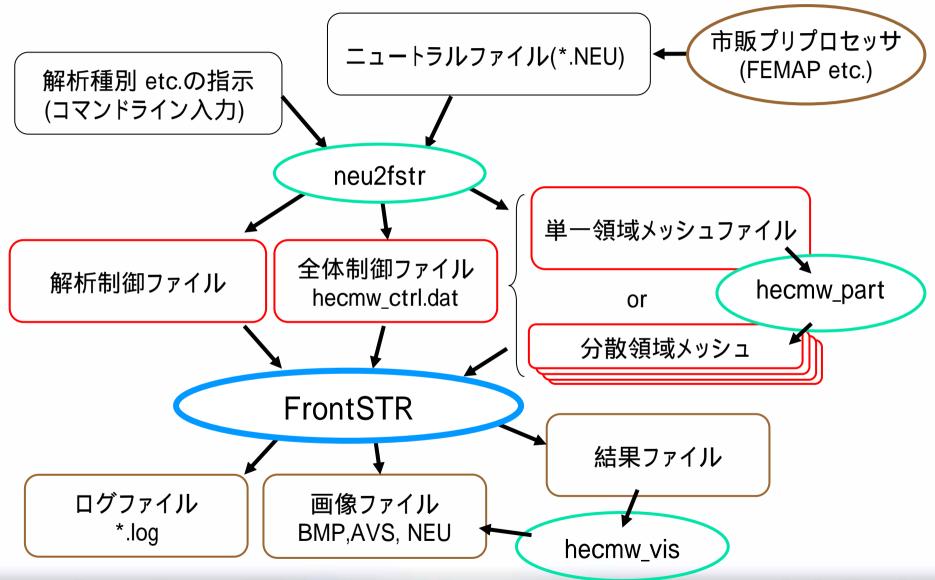
HEC-MWを用いたプログラムイメージ

```
program sample_main
  use hecmw
                        1) hecmwモジュールを"USE"
  implicit none
                                   2) hecmwモジュールで定義
  type (hecmwST_local_mesh) :: hecMESH
                                   された構造体の変数宣言
  type (hecmwST_matrix ) :: hecMAT
  character(len=HECMW_FILENAME_LEN) :: name_ID
                              3) hecmwサブルーチンをコール
  call hecmw init
  call hecmw_get_mesh(name_ID, hecMESH)
                                    ・アプリ開発者が関与する
      ..... FE algorithm
                                     ソース量は大幅に減少
                                    ・並列演算,オーダリング,
  call hecmw_solve_33 (hecMESH, hecMAT)
                                     並列データ入出力が隠蔽
  call hecmw_finalize
                                    ・アプリはSPMD型の並列
                                     プログラム
                                    ・分散領域のデータに対し
end program sample_main
                                     て並列計算を実行
```



FrontSTR 入出力系図(1/2)





FrontSTR 入出力系図(2/2)





FEMAP内からデータ生成・解析・ 可視化を実施するための拡張機能 (開発協力: 寺坂・陳(東大))





地球シミュレータでの性能

- オーダリング, ベクトル化等の最適化はHEC-MWでサポート (FrontSTR部分のプログラムは同じ)
- 弾性解析ベンチマークにおいて, データサイズを変更して並列性能を 比較(実行時間:sec)
- 対ピーク性能比 40% 以上, Itanium2 (1.4GHz)の30~40倍のスピード

PE数 節点数	1PE	2 PE	4 PE	8 PE	16PE	(並列化率)
2万	1.42	0.784	0.443		1 4P	I PE で 3.2 倍 (91.7%) I
100万		70.1	35.8	17.9	2 81	1 PE で 3.9 倍 (99.2%) I
170万		137	67.8	35.1	17.6	2 16PE で 7.8 倍 (99.5%)



オフィスでのWindows環境におけるHEC

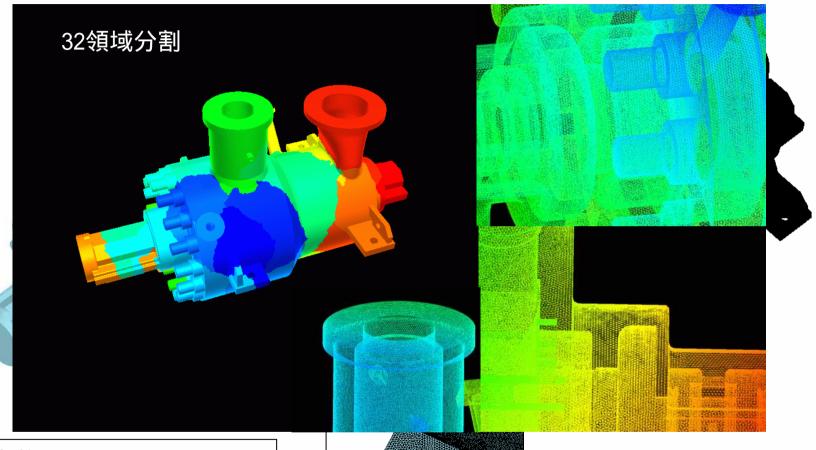
WinノートPC群によるFrontSTR並列計算実験



- 無線LANで日常業務
- ■Win用MPIの安定化、クラスタOSの普及、64ビット化
- コンロッド(9.4万節点) 585sec(1PE) 42sec(16PE, 14倍)
- フレーム(51.7万節点)
 - 2,550sec(16PE) 参考)Xeonクラスタ(16PE) 4,852sec
 - CG反復1,000回の計算 1,080sec(4PE) 190sec(16PE, 5.7倍)

RSS 21

PCクラスタによる1億自由度ポンプの静解析



節点数: 36,728,129

要素数: 26,289,770

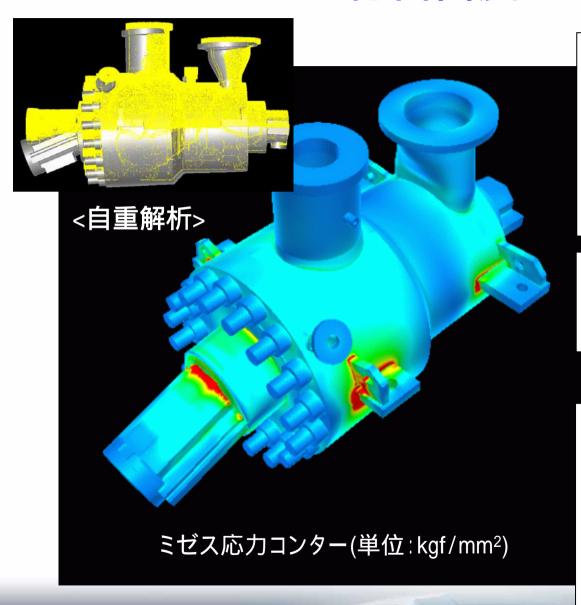
自由度数: 110,184,387

使用要素: 四面体2次要素

静解析(自重、内圧)および 可視化機能について大規模 問題への適用性を実証

PCクラスタによる1億自由度ポンプの静解析





計算機:

Itanium2 Cluster, 1.4GHz,

32PE 使用

使用メモリ: 120 GB

計算時間: 27.3 (h)

CG反復: 10,249 回

9.49E-01

< 内圧解析のとき >

計算時間: 約24 (h)

CG反復: 8,557 回

< HEC-MW可視化処理 > 計算機:

Xeon Cluster, 2.8GHz,

32PE 使用

Rendering処理枚数: 12枚

処理時間: 1時間弱

(ファイル渡しバージョン、うち5~7割

が1/0)



並列直接法ソルバー

- 直接法の安定性を重視
- 並列化により記憶容量と計算時間の増大に対応
- 並列性能は反復法よりは劣る

行列分割による並び替え

$$Ax = b$$

$$A = \begin{pmatrix} A_{11} & & C_1 \\ & A_{22} & C_2 \\ B_1 & B_2 & D \end{pmatrix}$$

$$x = \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_0 \end{pmatrix}$$
, $b = \begin{pmatrix} b_1 \\ b_2 \\ b_0 \end{pmatrix}$ $D'x_0 = b'_0 \to x_0$ 密行列の並列解法
 $A_{11}x_1 = b_1 - c_1x_0 \to x_1$ 逐次直接法ソルバーの分散
 $A_{22}x_2 = b_2 - c_2x_0 \to x_2$ 実行 $(A_{11}^{-1}, A_{22}^{-1})$ 計算)

$$A = \begin{pmatrix} A_{11} & C_1 \\ A_{22} & C_2 \\ B_1 & B_2 & D \end{pmatrix} \qquad D' = D - B_1 A_{11}^{-1} C_1 - B_2 A_{22}^{-1} C_2 \\ b'_0 = b_0 - B_1 A_{11}^{-1} b_1 - B_2 A_{22}^{-1} b_2 \\ \text{EUT}$$

$$D x_0 = b_0 \to x_0$$

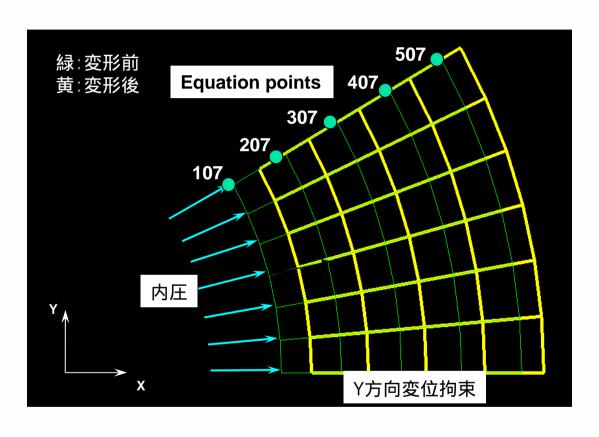
$$A_{11}x_1 = b_1 - c_1x_0 \to x_1$$

$$A_{22}x_2 = b_2 - c_2x_0 \to x_1$$

PE数 加速率 1.0 2 1.8 3.3 4 8 4.5



MPC機能(1/2)!EQUATION



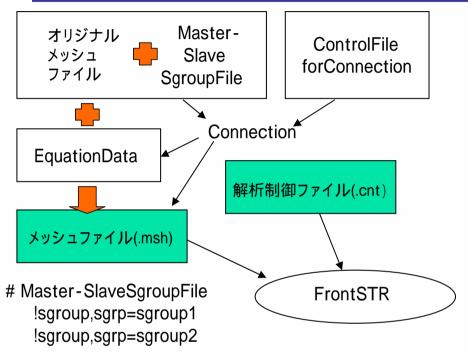
!EQUATION

2 107, 1, 1.0, 107, 2,-1.73205 2 207, 1, 1.0, 207, 2,-1.73205 2 307, 1, 1.0, 307, 2,-1.73205 2 407, 1, 1.0, 407, 2,-1.73205 2 507, 1, 1.0, 507, 2,-1.73205

= 30 ° 境界線上の全ての節点について x = 3 v y をEQUATIONデータで指定



MPC機能(2/2) マスター·スレーブ結合



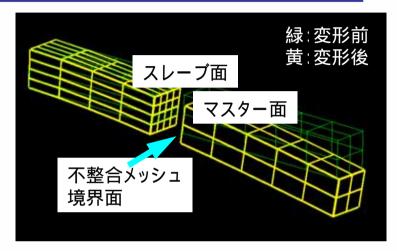
ControlFile for Connection

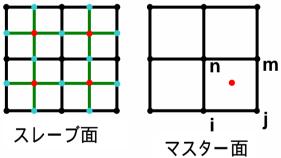
!connection,master=sgroup1,slave=sgroup2,x=0.0,y=0.0,z=1.0 !connection,master=sgroup3,slave=sgroup4,x=0.0,y=0.0,z=1.0

master: マスター面を定義したsgroup名 slave: スレーブ面を定義したsgroup名

x: スレーブ面からマスター面への法線ベクトルのx成分 y: スレーブ面からマスター面への法線ベクトルのy成分

z: スレーブ面からマスター面への法線ベクトルのz成分

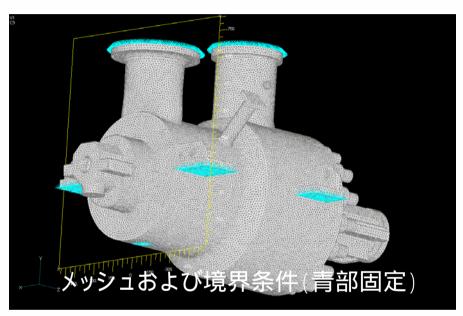




<重みの決定>
スレーブ面の全ての節点について、マスター面と接する点の座標と要素面i,j,m,n を法線ベクトルから求め、その点の重みを決定し、独立変数の係数として!EQUATIONデータを自動生成

RSS 21 Revolutionary Simulation Software

動解析機能の検証 中規模ポンプ(戦略Pの実証例題)の打撃試験



計算機: Xeon Cluster, 2.80GHz, 32PE

使用メモリ: 704 MB

t: 5.0E-8 (s)

総ステップ数: 5,000,000 ステップ

<陽解法>

計算時間: Total 約58 (h)

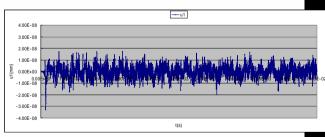
Solver部 約0.04 s / 1STEP

節点数 : 311,580

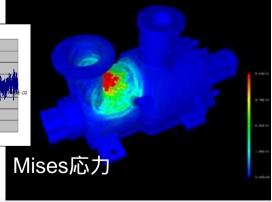
要素数: 1,368,583

使用要素:四面体1次要素

最大要素辺長 : 34.0 mm 最小要素辺長 : 0.9 mm

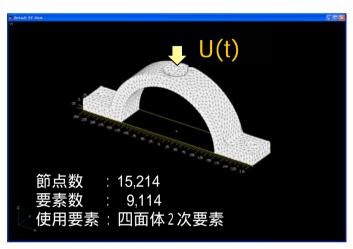


観測点における変位u₁ (粘性減衰係数=0.2)

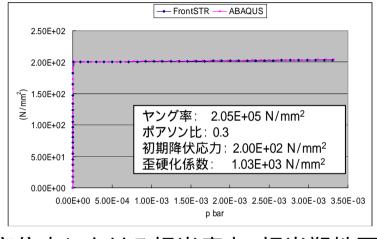


幾何学的非線形および材料非線形を 考慮したかみ合いモデルの解析

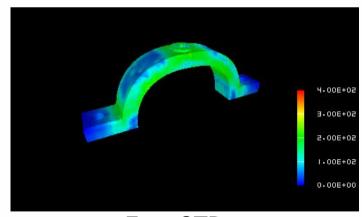




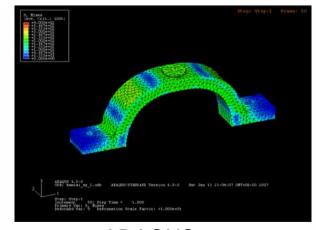
メッシュおよび境界条件



強制変位点における相当応力-相当塑性歪関係

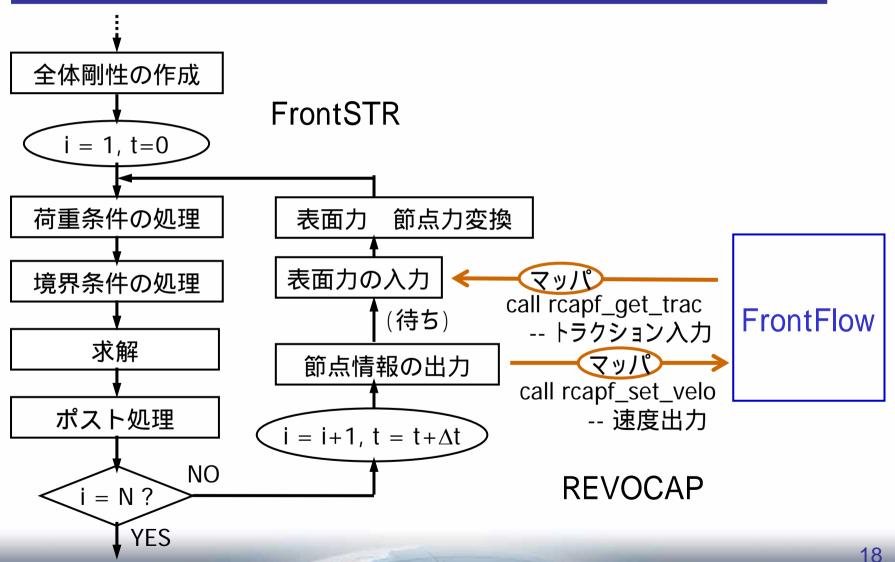


FrontSTR ABAQUS 最終ステップにおけるvon Mises相当応力分布図



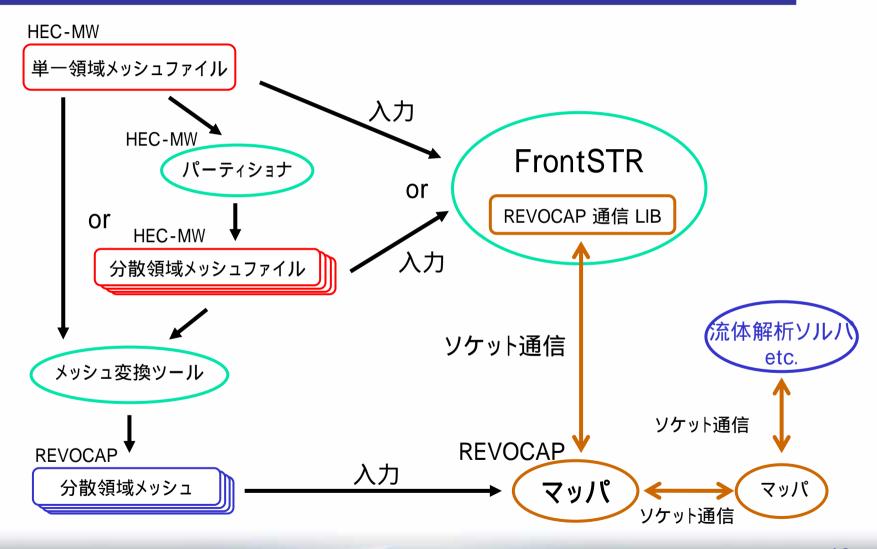


弱連成 FrontSTR/REVOCAP/FrontFlow





FrontSTR と REVOCAP の入出力関係





今後の予定

■ 普及に向けてのロバスト化と公開

- HEC-MW
 - 行列演算機能の高度化と整備
 - 開発者向けドキュメント, テンプレート整備
- FrontSTR
 - 産業応用事例の拡充(固有値・動解析・非線形解析・アセンブリ解析)
 - 並列直接法の高度化
 - オフィス環境等、各種OS環境への適用、産業界での利用促進

■ 機能拡充

- REVOCAPとの連成機能実装と実証連成問題
- 地球シミュレータにおける性能評価·大規模解析(続き)
- 自由度混合のためのデータ構造修正