

令和 5 年 6 月 4 日現在

機関番号：14501

研究種目：基盤研究(C) (一般)

研究期間：2018～2022

課題番号：18K11325

研究課題名(和文) マルチコアシステムによる建物・地盤連成地震動解析シミュレーションの最適化

研究課題名(英文) Optimization of building-ground coupled seismic motion analysis code on parallel system with multi-core processors

研究代表者

横川 三津夫 (Yokokawa, Mitsuo)

神戸大学・システム情報学研究科・教授

研究者番号：70358307

交付決定額(研究期間全体)：(直接経費) 1,800,000円

研究成果の概要(和文)：本研究では、地盤と建物の地震動応答を解析するシミュレーションコードに対し、x86アーキテクチャプロセッサを搭載したベクトルホスト部(VH)に、ベクトル型マルチコアプロセッサ(ベクトルエンジン部, VE)を付加した並列計算機SX-Aurora TSUBASA上で、ベクトル化とMPIライブラリによる並列化を行った。このコードを、VH部に1つのMPIプロセス(8スレッド)、VE部に2プロセス(4スレッド×2)のハイブリッド並列計算を行った結果、1時間ステップの計算時間は約3.5倍の高速化が得られた。

研究成果の学術的意義や社会的意義

建築物の耐震性評価のためには、地盤と建物の地震動応答を求める数値シミュレーションが行われている。地震動に対する正確なデータを得るためには、広い地盤領域と詳細に表現された建物データを用いる必要があるが、解析対象をより詳細にすると計算時間が大きくなる。このシミュレーションコードの主要な計算部分は、大規模かつ疎な対称行列を係数とする連立一次方程式の解法であり、この部分の高速が必要とされている。本課題では、コードの改良とベクトル型並列計算機システムを用いた計算により、シミュレーション時間が短縮できることを示した。これにより規模が大きく詳細な解析を行えることが明らかとなった。

研究成果の概要(英文)：A simulation code for analyzing seismic response of the ground and buildings has been vectorized and parallelized on SX-Aurora TSUBASA which consists of an x86 host server (VH) and one or more vector engines (VEs). Approximately 3.5 times speedup was obtained for the calculation time of one time step by hybrid parallel calculation of the code with an MPI process with 8 threads on the VH and two processes (4 threads for each) on the VEs.

研究分野：大規模並列数値シミュレーション

キーワード：地震動応答シミュレーション 部分前処理付き共役勾配法 並列ベクトル計算 ハイブリッド並列計算 SX-Aurora TSUBASA

科研費による研究は、研究者の自覚と責任において実施するものです。そのため、研究の実施や研究成果の公表等については、国の要請等に基づくものではなく、その研究成果に関する見解や責任は、研究者個人に帰属します。

## 1. 研究開始当初の背景

建物-地盤地震動解析シミュレーションは、建築物の設計現場で良く用いられている。シミュレーションで用いられる計算コード(プログラム)では、大規模な連立一次方程式を解いており、その一部にLU分解法などの数値計算ライブラリを用いる場合がある。一般に数値計算ライブラリのソース・プログラムは提供されないため、プログラム改良によるコードの最適化や並列化が困難であり、計算時間の短縮が望めない。数値計算ライブラリを利用していない計算部分については、ループ・ブロッキングやベクトル化のような高速化技術により、プロセッサ単体での計算性能の向上が得られる場合があるが、数値計算ライブラリ部分も考慮した並列化による高速化は実施例が少なく、またマルチコアプロセッサを搭載した大規模並列計算機システム上での高速化が課題となっていた。

本研究で対象とした建物-地盤地震動シミュレーションコードは、地震の加速度の時間変化を入力とし、Newmark-法により建物および地盤の地震動の時間変化を解析するプログラムである。数値積分の各時間ステップでは、大規模かつ疎な行列を係数行列に持つ連立一次方程式を、商用の線型計算ライブラリなどを用いて逐次的に解いているため、最新の並列計算機システムを用いた実行が行われていなかった。また、詳細な解析のために解析すべき領域の拡大が求められており、スーパーコンピュータによる計算時間の短縮が求められている。

## 2. 研究の目的

地盤とその上の建築物の地震動解析シミュレーションは、地震災害時の堅牢な建築物の設計に有用であり、防災、減災に役立てることにより、安全かつ安心な社会基盤を確立することができる。このために、多くの研究現場や実際の建築物の設計現場で、計算機シミュレーションによる解析が行われている。このシミュレーションでは、建物と地盤からなる計算対象の領域を小領域(要素)に分割し、節点に関する運動方程式を時間発展させるが、各時間ステップにおいて大規模かつ疎な対称行列を係数行列に持つ連立一次方程式を解いている。

一般に、大規模かつ疎な対称行列を係数行列に持つ連立一次方程式の解法として、前処理付き共役勾配法などの非正常反復法の適用研究が進展している。しかし、実際の建物の設計現場では、連立一次方程式の解法として反復法よりも有限回の計算で必ず解が得られる直接解法が利用される場合がある。これは離散化により得られた行列の条件数が悪いため、反復解法の収束回数が多大になるためである。また、反復法のアルゴリズムに現れる変数の依存関係により並列化も難しいため並列計算による高速化が問題となっている。

本研究では、係数行列のある部分行列の条件数が大きい連立一次方程式に対し、部分的にコレスキー分解による前処理を行い、それ以外の部分行列には対角スケーリングによる前処理と施す部分コレスキー分解前処理付き共役勾配法を、並列計算により高速実行することを目的とした。高速化の方針として、汎用ライブラリのIntel Math Kernel Library (MKL)/PARDISOを用いている部分コレスキー分解のプログラム部分は大きく変更せず高速化することとした。共役勾配法に現れる行列・ベクトル計算部分や内積計算については並列計算を行い、マルチコアプロセッサによるスレッド並列化とプロセス並列化を合わせたハイブリッド並列化により計算時間の短縮を図る。また、ベクトル型並列計算機システム SX-Aurora TSUBASA のスカラプロセッサにベクトルエンジンを付加した特徴的な構成を有効活用した実装による高速化を図ることも目的である。

### 3. 研究の方法

本研究では、建物・地盤連成地震動解析の時間発展シミュレーションにおいて、各時間ステップで解くべき連立一次方程式の係数行列が変化しない場合に対して、マルチコアシステム上で前処理つき反復法、及びその並列計算によりシミュレーションコードの最適化、高速化を行った。

対象とする連立一次方程式は次のように得られる。建物と地盤からなる3次元の計算領域に配置された節点を、図1のように建物を構成する節点(B)、建物と地盤が接している節点(I)、及び地盤の節点(G)の3つに分け、その順に接点の番号付けをする。3次元計算領域のすべての節点に対する運動方程式をまとめると、次の疎な対称行列Aを係数行列とする連立一次方程式が得られる。

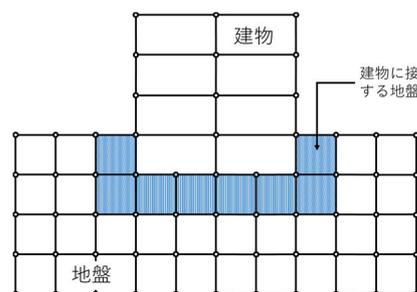


図1 計算領域の分割イメージ

$$A = \begin{bmatrix} A_{BB} & A_{IB}^t & 0 \\ A_{IB} & A_{II} & A_{GI}^t \\ 0 & A_{GI} & A_{GG} \end{bmatrix} \quad \dots\dots\dots (1)$$

この行列の建物部分に対応する部分行列 $A_{BB}$ の条件数が大きいので、反復法では反復回数が増え、計算時間が長くなる。坂らは、部分コレスキー分解前処理付き共役勾配法を適用して安定に計算できることを確認した。

一般に、共役勾配法に現れる行列・ベクトル積やノルム計算は並列計算が可能である。しかし、このコードでは、部分的に行うコレスキー分解に基づく前処理部分を Intel MKL/PARDISO を利用しているため、プログラムレベルの改良が出来ない。プログラムの大きな変更をしない方針の下、MKL/PARDISO の利用は変更しない方法を検討した。

ここで、並列計算機システム SX-Aurora TSUBASA は、x86 アーキテクチャ・プロセッサを持つホストサーバ(ベクトルホスト, VH)に、ベクトルアーキテクチャのベクトルエンジン(VE)を PCI-e 接続したハイブリッド型のスーパーコンピュータである。VE は 8 つのベクトルコアを持つマルチコアシステムであり、ベクトル化されたコードを高速に実行できる。VH 部で Intel MKL/PARDISO を利用することができるので、SX-Aurora TSUBASA をコード実装および性能評価の対象システムとした。このシステムを用い、OpenMP によるスレッド並列、MPI ライブラリを用いたプロセス並列化のコード修正を行い、そのコードを VH, VE 連携による実行ができるように修正することとした。新しく実装したコードは、SX-Aurora TSUBASA 上で性能評価を行う。

### 4. 研究成果

#### (1) PCクラスタ上のハイブリッド並列計算による性能評価

SX-Aurora TSUBASA上の性能評価の前に行ったPCクラスタでの並列化と性能評価について述べる。建物・地盤連成地震動解析の時間発展シミュレーションコードで実装されている部分コレスキー分解前処理付き共役勾配法 (Partially sparse Cholesky conjugate gradient method, PSCCG法) による計算部分を抽出したプログラムを作成し、MPIによるプロセス並列化を行った。スレッド数を1としてMPI版プログラムを実行し、プロセス数を変化させたときの実行時間を計測した結果を図2に示す。プロセス並列では、ランク番号0に建物・IFブロック部分の計算を割り当て、その他のプロセスに地盤部分の計算を割り当てた。

2プロセス実行の場合には、地盤部分の行列ベクトル積計算 (SpMV) に時間を要し、ランク番号1のプロセスの計算時間がかかってしまい、並列化の効果は見られない。MPIプロセスを増加させると、SpMVが並列じっこうされるので、全体のプロセスの実行時間が均一化される。8プロ

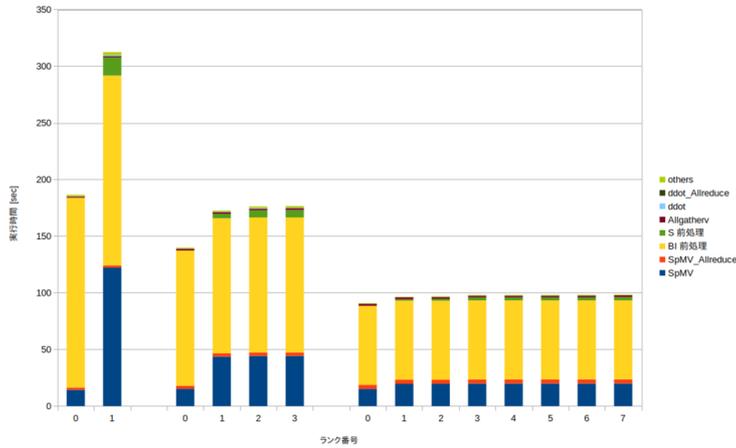


図2 プロセス並列による実行時間

セスの場合には、地盤部分の行列ベクトル積の計算が7つのプロセスに分散されている。

MPI 版プログラムに対し、PCクラスタ上でスレッド並列とプロセス並列のハイブリッド実行を行った結果、最大で3.15 倍の高速化が得られた。しかし、プロセス並列数 8，スレッド数12の時に、建物・IF ブロックを担当するランク番号0のプロセスの計算時間は、地盤ブロックを担当する他のランク番号のプロセスの実行時間と比較して、約 2 倍必要であった。

(2) SX-Aurora TSUBSAでの性能評価

SX-Aurora TSUBASAは、スカラ処理に適合した実行部分をIntel Xeonプロセッサからなるベクトルホストと呼ばれるシステムで実行させることが出来る。コレスキー分解部分による前処理部分で用いられるライブラリ Intel MKL/PARDISO は、VH部のIntel Xeonプロセッサで、地盤部分の対角スケールによる前処理は、コードのベクトル化を行いベクトル部で実行することによってコード全体の最適化、高速化を行った。ベクトル化では、オリジナルコードの行列の格納方式 Upper Compressed Row Storage 形式 (UCRS形式) からCRS形式へ変換を行い、行列へのアクセスを連続化したほか、地盤部分に対応する行列を11重行列として表現することにより、ループ内のベクトル長を大きくした。図3に、ベクトル化前後のベクトル演算率とLast Level Cache (LLC) ヒット率を示す。ベクトル化後にベクトル化演算率、LLCヒット率ともほぼ100%になった。

次に、VHとVEによるハイブリッド並列化を試みた。MKL/PARDISOを使用しているコレスキー分解による前処理をVH部で動作させるようにMPIプロセスを割り当てた。VH部で 1プロセス、8スレッド割当てを固定し、VE部のプロセスを1, 2, 4, 8と変化させたとき実行時間を図4に示す。VE部で4プロセスまでは実行時間が減少し、4VEのとき1.68倍を達成したが、8プロセスで実行時

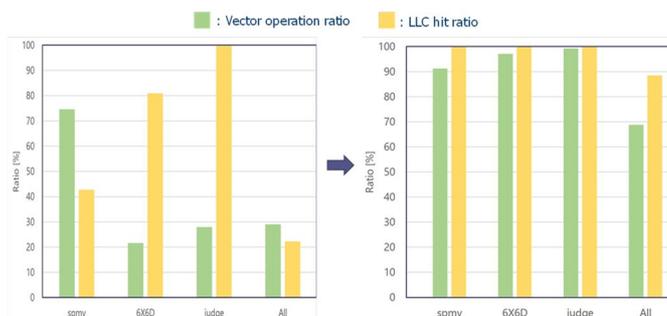


図3 ベクトル化によるベクトル演算率とキャッシュヒット率

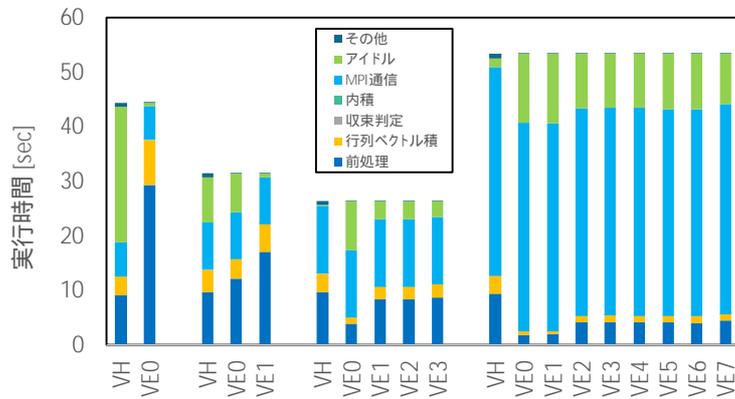


図4 ハイブリッド並列計算による実行時間

間が増えた。これは、共役勾配法の並列化によりプロセス間通信が必要となり、VH-VE間のMPI通信が大きく増えたことが原因である。VH、VEの両方を用いたMPI実行は可能であるが、それらを接続している、PCI-e スイッチでのバンド幅を8プロセスが共有するためと考えられる。一方、VE 1プロセスの時にVHで見られたアイドル時間は、VEの数が増えるにしたがって、VE側の待ち状態に変わっている。これらから、VE上のプロセス数を適切に設定することが高速実行のためのポイントである。

マルチスレッド化の効果を見るために、VH 1プロセス、8スレッド、2VE 2プロセス（1プロセス/VE）とし、VEの1プロセス当たりのスレッド数を1スレッドと4スレッドで比較した。この時の実行時間を図5に示す。依然として、プロセス間のMPI通信の占める割合は大きいですが、VE上のマルチスレッド化により、実行時間が短縮されている。オリジナルコードと比較して、約3.5倍の高速化が達成された。

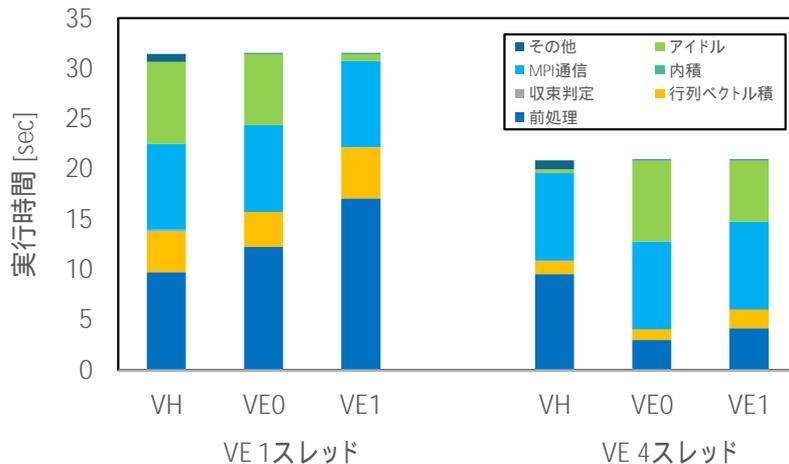


図5 マルチスレッド実行による実行時間

VE 2プロセス、1プロセス当たり4スレッドの場合は、VE側の処理が速く終了し、VH側の処理を待つこととなったため、アイドル時間が現れた。VHの処理が8プロセスでは十分に短縮されず、バランスが取れていない。VE側の処理は地盤部分の計算であるため、より広域の地盤を解析することにより、VE部の処理が多くなるため、ロードバランスをとることが可能と考えられる。計算領域とハイブリッド計算による計算負荷のバランスの関係については、今後の課題と考えている。

## 5. 主な発表論文等

〔雑誌論文〕 計4件（うち査読付論文 0件/うち国際共著 0件/うちオープンアクセス 3件）

1. 著者名 Y. Takenaka, M. Yokokawa, T. Ishihara, K. Komatsu, and H. Kobayashi	4. 巻 2019 and 2020
2. 論文標題 Optimizations of DNS Codes for Turbulence on SX-Aurora TSUBASA,	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 Sustained Simulation Performance 2019 and 2020	6. 最初と最後の頁 51, 59
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1007/978-3-030-68049-7_4	査読の有無 無
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 -
1. 著者名 後藤啓, 横川三津夫, 坂敏秀, 小松一彦, 小林広明	4. 巻 2020-HPC-173
2. 論文標題 建物・地盤地震応答シミュレーションのベクトル計算機向け最適化	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 情報処理学会研究報告ハイパフォーマンスコンピューティング (HPC)	6. 最初と最後の頁 -
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) なし	査読の有無 無
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 -
1. 著者名 T. Nakano, M. Yokokawa, Y. Yamamoto, and T. Fukaya	4. 巻 2018 and 2019
2. 論文標題 Affecting the relaxation parameter in the multifrontal method	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 Sustained Simulation Performance 2018 and 2019	6. 最初と最後の頁 215, 224
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1007/978-3-030-39181-2	査読の有無 無
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -
1. 著者名 後藤啓, 横川三津夫, 坂敏秀	4. 巻 2018-HPC-167 (28)
2. 論文標題 建物の地震動応答シミュレーションに現れる前処理付き共役勾配法の並列化	5. 発行年 2018年
3. 雑誌名 情報処理学会研究報告ハイパフォーマンスコンピューティング (HPC)	6. 最初と最後の頁 1, 5
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) なし	査読の有無 無
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 -

〔学会発表〕 計3件（うち招待講演 0件 / うち国際学会 3件）

1. 発表者名 Yokokawa, Mitsuo
2. 発表標題 Direct Numerical Simulation of Turbulence Using File I/O Functions
3. 学会等名 The 32nd Workshop on Sustained Simulation Performance (国際学会)
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 M. Yokokawa
2. 発表標題 Hybrid Computation on Building Responses against Earthquakes on a VH and VEs of SX-Aurora TSUBASA
3. 学会等名 Workshop on Sustained Simulation Performance 2021 (国際学会)
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 M. Yokokawa
2. 発表標題 Performance of Accelerated and Asynchronous I/O on SX-Aurora TSUBASA
3. 学会等名 Workbench on Sustained Simulation Performance (国際学会)
4. 発表年 2019年

〔図書〕 計0件

〔産業財産権〕

〔その他〕

-

6. 研究組織	氏名 (ローマ字氏名) (研究者番号)	所属研究機関・部局・職 (機関番号)	備考
---------	---------------------------	-----------------------	----

7. 科研費を使用して開催した国際研究集会

〔国際研究集会〕 計0件

8 . 本研究に関連して実施した国際共同研究の実施状況

共同研究相手国	相手方研究機関
---------	---------