

FX10 教育利用報告

動機付けプロジェクト「スパコンで何が出来る？～大規模並列計算を体験する～」

橋本 学

東京大学新領域創成科学研究科人間環境学専攻
(工学部システム創成学科兼任)

1. はじめに

システム創成学科の学生は、卒業研究までに四つのプロジェクト型の講義を必修科目として履修する。すなわち、2年 A セメスターに動機付けプロジェクト、3年 S セメスターに基礎プロジェクト、3年 A セメスターに応用プロジェクト、4年 S セメスターに領域プロジェクトを履修する。プロジェクト型の講義を履修した後、卒業研究に取りかかることになる。動機付けプロジェクトは、システム創成学科に配属が決まり、システム創成学という学問の入り口に立った学部 2 年生のための講義である。以下では、システム創成学科システムデザイン&マネジメントコースの動機付けプロジェクトのテーマの一つである「スパコンで何が出来る？～大規模並列計算を体験する～」における FX10 の教育利用について報告する。本講義は、2015 年度と 2016 年度に駒場キャンパス 1 号館の教室で実施された。

2. 講義の概要

本講義は、座学と演習から構成される。全六回の講義であり、学生は

- ・ Fortran 90/95 による基礎的なプログラミング
 - ・ MPI 関数の使用
 - ・ OpenMP ディレクティブの使用
 - ・ 円周率の並列計算
 - ・ 構造解析シミュレーション (グループ A～E に分かれて、解析テーマを決める)
- を体験する。学生は無線 LAN 接続可能な Windows OS のノート PC を持参するように指示している。本講義の受講者数は、2015 年度で 17 名であり、2016 年度で 19 名であった。

3. 講義の目標

本講義の目標は、学生が大規模並列計算を身近に感じ、スパコンで何が出来るのかを理解するようになることである。基本的な使用方法に慣れてしまえば、スパコンでの計算は敷居が高いものではないと感じてほしいと考えて、本テーマを取り上げることにした。

本来ならば、スパコンを利用するには負担金が必要となる。そのため、スパコンは学部 2 年生にとって遠い存在である。しかし、本講義の期間中であれば、駒場キャンパスからでも、自宅からでも、学生は FX10 を自由に使うことができる。実行時間は最大で 15 分であるが、最

大で 12 ノード (192 コア) も使うことができる。

学部 2 年生の多くは、UNIX コマンドを知らないし、プログラムを書いたこともない。六回という限られた回数の講義の中で、残念ながら、これらを深く学ぶことは難しい。そこで、スパコンでの並列計算に必要となる、最低限の UNIX コマンド、基本的な Fortran 90/95 文法を予め選んでおき、学生にそれらを何度も使用してもらうことにした。本講義が終了した後も、数値シミュレーションを行う上で役立つと考えられる UNIX コマンドと Fortran 90/95 文法を選ぶようにした。

4. FX10 の利用方法および並列プログラミングの習得

講義は、各学生が持参しているノート PC の CPU 情報やメモリ情報を確認してもらうことから始めた。そして、ノート PC と「京」や FX10 などのスパコンの違いを説明した。

次に、鍵認証や FX10 のログイン方法を説明した。学生がログインできたことを確認し、プログラムの作成方法、コンパイル方法、実行方法を学生に覚えてもらった。最初に作成したプログラムは、「Hello, world.」である。

さらに、プロセス並列とスレッド並列を説明した。「Hello, world.」のプログラムに MPI 関数や OpenMP ディレクティブを加えて、並列計算を実施してもらった。並列プログラムの書き方を覚えたら、モンテカルロ法による円周率の並列計算、区分求積法による円周率の並列計算を実施してもらった。そのとき、計算時間を計測して、加速率と並列化効率も調べてもらった。

5. 構造解析アプリケーションによる大規模並列計算の体験

5.1 構造解析のハンズオン

FX10 で大規模シミュレーションを体験してもらうため、並列有限要素法による構造解析シミュレーションを扱った。解析メッシュの生成、境界条件 (初期条件) や外力の付与、並列有限要素法プログラムの実行、解析結果の可視化という構造解析の流れを説明した。並列有限要素法プログラムとして、オープンソースソフトウェア FrontISTR を使用した。FrontISTR を用いて、

- (1) 梁の曲げ問題
- (2) 円孔板の引張変形問題
- (3) コネクティングロッドの引張変形問題
- (4) コネクティングロッドの熱伝導問題と熱変形問題
- (5) コネクティングロッドの固有値問題

を解いてもらい、並列有限要素解析を体験してもらった。次に、解析メッシュの生成、境界条件の付与、FX10 での並列有限要素解析、計算結果の可視化という一連の手順を行った。具体的には、ノート PC で STL データから SALOME Platform や REVOCAP_PrePost で解析メッシュを生成し、REVOCAP_PrePost で境界条件を付与し、FX10 で FrontISTR による並列計算を行い、REVOCAP_PrePost で可視化するという一連の手順を行った (図 1 参照)。構造解析シミュレーションで使用した FrontISTR、REVOCAP_PrePost、SALOME Platform は、全てオープンソースプログラムであり、講義の終了後も学生はこれらのソフトウェアを無償で利用することができる。

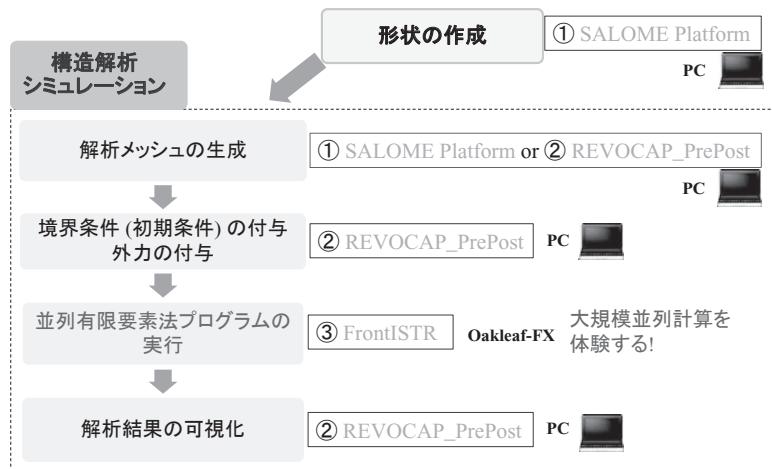


図1 構造解析で使用するソフトウェア

5.2 グループで設定したテーマの計算

学生を複数のグループに分け、以下のように各グループで問題設定を行ってもらった。

1. 解析の種類を選ぶ

FrontISTR の解析機能である「線形静解析」、「固有値解析」、「熱伝導解析と熱変形解析」の中より選ぶ。

2. 解きたい問題の分野を決める

産業分野、建築分野、生体分野などから分野を決める。

3. 形状データを準備する

SALOME Platform を使い、形状データを作成する。または、GrabCAD コミュニティ (<https://grabcad.com/>) などのホームページから無償でダウンロードできるものを利用する。

2015年度

学生はA～Eのグループに分かれて、以下の構造解析シミュレーションを実施した。

- グループ A では「素材の違いによる物質の変形の比較」をテーマとした。鋼、金、銀、アルミニウム、プラチナ、ナイロン、ポリエチレン、氷、ダイヤモンドの9種の材料に対して静応力解析 (圧縮変形解析) を行い、くぎの変形の様子を確認した。また、アルミニウム材料の場合、並列計算の性能を調べた。
- グループ B では、「トラス橋の静応力解析」をテーマとした。トラスアーチ型橋にどのような応力が分布するのかを調べる。さらに、並列計算の性能を調べた。
- グループ C では、「瓦割りでの応力分布の検討」をテーマとした。空手の瓦割りにおいて、瓦にどのような内力が作用しているかを調べた (ただし、静応力解析である)。さらに、並列計算の性能を調べた。
- グループ D では、「カップ容器に力を加えた際の静応力解析」をテーマとした。様々な境界条件の下で、カップ容器がどのような変形をするかを調べた。さらに、並列計算の性能を調べた。
- グループ E では、「トンネルの天井板に作用する応力分布の検討」をテーマとした。トン

ネルの天井板三枚の角度を変更して、板の固定端に作用する応力を調べた。さらに、並列計算の性能を調べた。

2016年度

学生はA～Dのグループに分かれて、以下の構造解析シミュレーションを実施した。

- ・ グループ A では「コップの熱伝導解析」をテーマとした。ドリンクウォーマの上にガラス、銅、チタンのコップを置いて、保温状態を検討した。また、ガラスのコップの場合、並列計算の性能を調べた。
- ・ グループ B では、「音叉の線形弾性解析」をテーマとした。鋼の物性値を与えた音叉モデルの変形状態を検討し、その並列計算の性能を調べた。
- ・ グループ C では、「テーブルの天板の応力分布」をテーマとした。四本脚のテーブルの解析モデルを準備して、天板と脚の接合位置を変更した場合の応力分布を調べ、その並列計算の性能を調べた。
- ・ グループ D では、「ドアの固有値解析」をテーマとした。固有値解析の必要性を考え、建造物のドアを想定した解析モデルの固有振動数を調べた。また、その並列計算の性能を調べた。

2015年度の講義では、数万要素でも規模が大きいと感じている学生が多かったため、FX10のリソースを十分に利用することができなかったことが反省点であった。しかし、2016年度の講義では、解析メッシュをリファインして、数百万要素程度の解析メッシュを用いた構造解析シミュレーションを体験してもらうことができた。

6. おわりに

講義の最終日に行われた各グループの成果発表を聴いて、本講義の目標である「大規模並列計算を身近に感じてもらうこと」および「スパコンで何ができるのかを理解すること」はある程度達成できたと感じた。講義の終了後に学生から提出されたレポートを読み、学生がスパコンの必要性について自分の意見を持つようになったと感じることができたことは大きな成果である。