

슈퍼컴퓨터 누리온을 활용한 전산구조공학 성능 비교 연구

이재국*, 안도식*, 홍태영*

*한국과학기술정보연구원 슈퍼컴퓨팅인프라센터
jklee@kisti.re.kr, tyhong@kisti.re.kr, dsan@kisti.re.kr

A Study on Performance Comparison of Computational Structural Engineering using the NURION Supercomputer

Jae-Kook Lee*, Taeyoung Hong*, Do-Sik An*

*Dept. of Supercomputing Infrastructure, KISTI

요 약

누리온 시스템은 한국과학기술정보연구원(KISTI) 국가슈퍼컴퓨팅센터에서 2018년 5번째로 구축하여 운영하고 있는 슈퍼컴퓨터이다. 본 논문에서는 전산구조공학 분야에서 많이 활용되고 있는 ABAQUS, NASTRAN 등과 같은 응용소프트웨어를 누리온 시스템에서 활용하기 위한 방법을 소개하고 간단한 전산구조공학 모델을 누리온 시스템과 기존에 운영되었던 슈퍼컴퓨터 4호기 신바람 시스템에서 ABAQUS를 이용하여 분석하고 성능을 비교한다.

1. 서론

전산구조공학 연구를 위해서는 분석하려는 분야의 물리적인 현상에 대한 이해 및 모델에 대한 연구도 중요하지만 컴퓨팅 자원 및 이에 대한 활용능력도 필요하다. 한국과학기술정보연구원(KISTI) 국가슈퍼컴퓨팅센터에서는 전산구조공학 연구에 많이 사용되고 있는 프로그램인 ABAQUS[1], NASTRAN[2], LS-DYNA[3] 등을 이용할 수 있도록 국가 슈퍼컴퓨터 5호기 누리온 시스템과 상용 어플리케이션 라이선스를 제공한다.

본 논문에서는 누리온 시스템의 하드웨어 및 소프트웨어 아키텍처 구성과 특징을 기술하고 전산구조공학 분야에서 많이 활용되고 있는 ABAQUS, NASTRAN 등과 같은 응용소프트웨어의 사용방법을 소개한다. 그리고 ABAQUS를 이용하여 간단한 전산구조공학 모델의 분석을 진행하고 기존에 운영되었던 4호기 신바람 시스템과의 성능을 비교한다.

본 논문의 구성은 다음과 같다. 2장에서는 국가 초고성능컴퓨터(슈퍼컴퓨터)인 누리온 시스템에 대하여 소개한다. 3장에서는 전산구조공학에 많이 활용되고 있는 응용소프트웨어를 누리온에서 사용하기 위한 방법을 설명하고 전산구조공학 분석모델 4개를

ABAQUS를 이용하여 시험하고 4호기 신바람 시스템과 성능을 비교한다. 끝으로 4장에 결론을 맺는다.

2. 슈퍼컴퓨터 누리온

누리온 시스템은 2018년도 KISTI에서 5번째로 구축한 국가 슈퍼컴퓨터로 리눅스 운영체제 기반의 클러스터 시스템이다. 누리온 시스템은 병렬 프로그램이 수행되는 계산노드와 계산노드 및 스토리지 시스템을 초고속으로 연결해 주는 인터커넥트 네트워크, 사용자 데이터 및 계산 결과가 저장되는 스토리지 등으로 구성되어 있다.

Fig. 1은 누리온 시스템의 구성도를 나타낸다. 계산노드는 8,305대의 제온 파이 프로세서(나이즈랜딩) 기반 노드와 132대의 제온 프로세서(스카이레이크) 기반 노드로 구성되어 있다. 누리온 시스템에서 사용자 프로그램 수행을 지원하기 위하여 다양한 컴파일러 및 라이브러리를 모듈 형태로 제공한다.

3. 전산구조공학 성능 비교 연구

전산구조공학 연구에 많이 사용되는 프로그램으로는 ABAQUS, NASTRAN 등이 있다. 누리온 시스템에서는 이들 프로그램에 대한 라이선스를 보유하고 있으므로 연구자들은 이를 이용하여 연구를 수

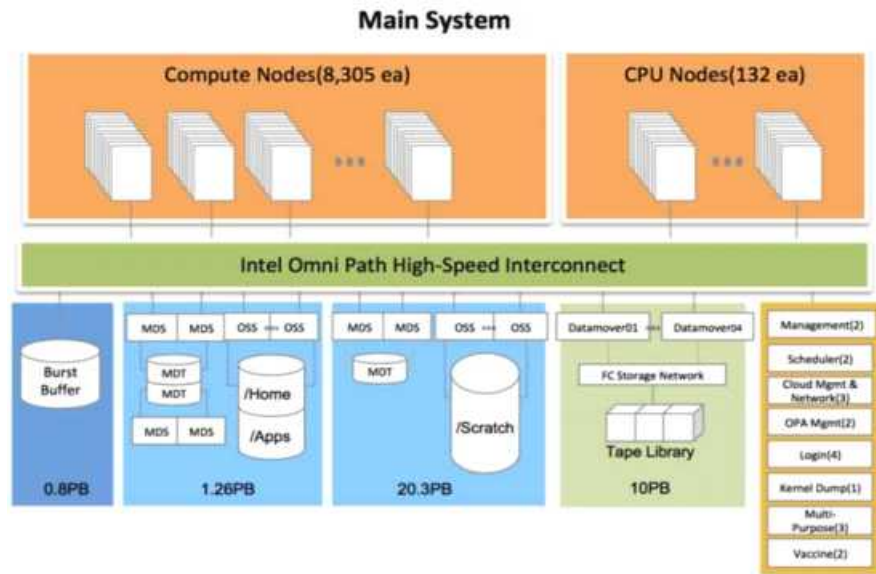


Fig. 1 Hardware Architecture of the NURION

행할 수 있다. ABAQUS는 유한요소해석(Finite Element Analysis) 연구 분야에 사용되는 대표적인 프로그램이다. ABAQUS는 새로운 신소재에 대한 계산 모델(Computational model)을 개발하거나 우주 환경이나 나노스케일 등과 같은 시험으로 접근이 되지 않는 영역에 대한 분석이 필요할 때, 특히 실험적으로 구현하기 어려운 상황을 구현하여 구조물의 움직임을 예측하는데 광범위하게 학교나 연구소에서 이용되고 있다[1,4-7]. NASTRAN은 정적해석 및 동적해석, 비선형 해석, 열 해석, 최적화 해석 등에 사용되는 범용의 유한요소 프로그램으로 특히 항공기 구조해석 분야에서 보편적으로 사용되고 있다. NASTRAN의 유한요소들의 번호는 고유(Unique)해야 한다. 만약 요소의 종류가 다르더라도 동일한 번호를 사용할 수 없다. 또한 모든 요소는 각각의 결점연결(Connectivity)에 의해 정의되는 요소좌표계(Element Coordinate System)를 가지게 되며 요소의 응력이나 힘은 이 좌표계에서 출력되는 특징이 있다[2,7-11].

누리온 시스템에서 ABAQUS를 이용하기 위해서는 PBS라는 스케줄러를 이용하여 작업을 제출해야 한다. 다음은 누리온 시스템의 계산노드 1개에서 ABAQUS를 실행하기 위한 스크립트 예제이다. 사용자는 작업의 이름을 임의로 지정(abaqus_test)하고 작업이 수행될 큐(commercial)와 연산에 필요한 자원(select=1:ncpus=32:mpiprocs=32:ompthreads=1) 및 작업소요 시간(04:00:00)을 지정한다.

```
#!/bin/sh
#PBS -V
#PBS -N abaqus_test          # JOB의 이름을 지정
#PBS -q commercial          # PBS의 큐(Queue) 지정
#PBS -l select=1:ncpus=32:mpiprocs=32:ompthreads=1
                             # 연산에 사용할 자원 지정
#PBS -l walltime=04:00:00
                             # 예상 작업 소요시간 지정 (시:분:초)

cd $PBS_O_WORKDIR           # 작업 디렉토리 이동

##### Do not edit #####
TOTAL_CPUS=$(wc -l $PBS_NODEFILE | awk '{print $1}')
#####

cp
/apps/commercial/abaqus/6146/6.14-6/SMA/site/abaqus_v6.
env .
/apps/commercial/abaqus/Commands/abq6146          job=c2
cpus=${TOTAL_CPUS} int # 단일노드 작업 수행 명령
```

만약 단일노드에서 스레드(Threads)를 이용하여 작업을 수행할 때에는 mp_mode=threads를 추가해주면 되고, 여러 개의 계산노드를 이용하기 위해서는 단일노드 작업 수행 명령 부분에 mp_mode=mpi를 추가하면 된다.

다음은 NASTRAN을 이용하기 위한 작업 스크립트 예제이다. PBS 스케줄러를 이용하므로 ABAQUS와 유사한 형태를 갖는다.

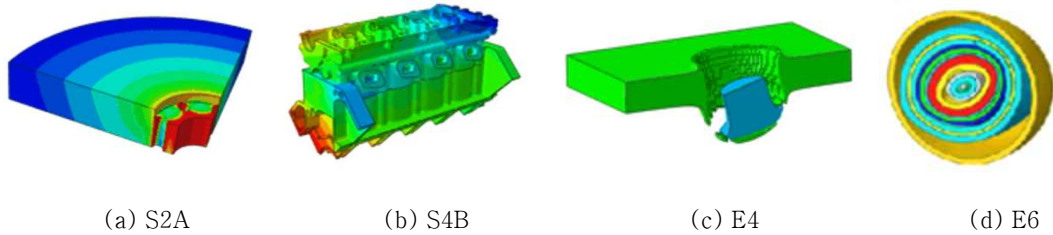


Fig. 2 Abaqus Benchmark Problems

```
#!/bin/sh
#PBS -V
#PBS -N Nastran_job # JOB의 이름을 지정
#PBS -q commercial # PBS의 큐(Queue) 지정
#PBS -l select=1:ncpus=32:mpiprocs=1:ompthreads=32
#PBS -l # 연산에 사용할 자원 지정
#PBS -l walltime=04:00:00
#PBS -l # 예상 작업 소요시간 지정 (시:분:초)

cd $PBS_O_WORKDIR # 작업 디렉토리 이동

/apps/commercial/MSC/Nastran/bin/nast20182
car_mod_freq.bdf smp=$NCPUS batch=no sdir=""
# NASTRAN 명령어
```

누리온 시스템에서 ABAQUS를 이용하여 간단한 모델을 시험하고 기존에 운영되었던 4호기 신바람 시스템과 비교하였다. Fig. 2는 ABAQUS 시험을 위해 사용한 4개의 분석 모델을 나타낸다[12].

- (a) S2A : 원심력 부하가 있는 플라이휠에 대한 비선형 정적 분석
- (b) S4B : 실린더 헤드를 엔진 블록에 고정하는 것에 대한 비선형 정적 분석
- (c) E4 : 3 차원 일반 접촉 알고리즘의 성능 측정
- (d) E6 : 구체 간의 복잡한 접촉 상호 작용 측정

성능 비교를 위한 신바람 시스템의 CPU는 Intel Xeon X5570 2.93GHz(Nehalem) × 2Socket, 메모리 DDR3/1333MHz 24GB이며 인터커넥트 네트워크는 인피니밴드(InfiniBand) 40Gpbs(QDR)로 구성되어 있다. 누리온 시스템의 CPU는 Intel Xeon Gold 6148 2.4GHz(Skylake) × 2Socket, 메모리 DDR4/2666MHz 192GB이며 인터커넥트는 Omni-Path 100Gbps로 구성되어 있다. ABAQUS는 Abaqus 6-14.6 버전으로 S2A, S4B 모델을 단일 노드에서 코어수별 수행 시간(wall clock time)을 측정하였다.

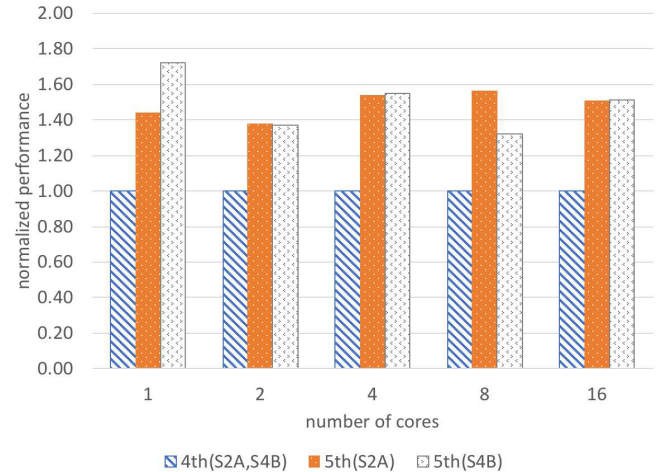


Fig. 3 Standard increased performance using ABAQUS

Fig. 3은 두 모델의 시험 결과를 나타낸 그래프이다. 4호기 시스템에 비해 5호기 누리온 시스템이 평균 1.5배 성능 향상을 보였다. 특히 S4B 모델은 4호기 시스템에 비해 약 1.72배 수행 시간이 단축되었다.

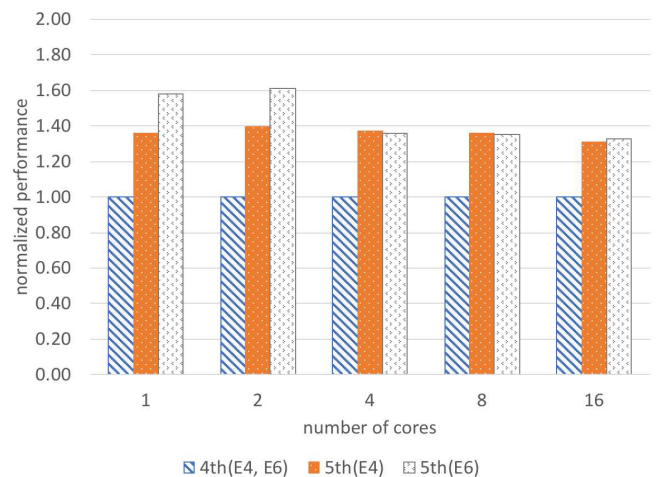


Fig. 4 Explicit increased performance using ABAQUS

Fig. 4는 Explicit 모델인 E4, E6 테스트 결과를 나타낸다. 4호기 대비 5호기의 성능이 약 1.4배 향상되었다. E6 모델은 최대 약 1.6배 성능 향상이 있었으며, E4 모델은 1.4배 수행 시간이 단축되었다.

4. 결론

누리온 시스템은 대규모 계산 능력을 요구하는 국가 연구개발(R&D)의 경쟁력 향상에 목적을 두고 있다. 이에 기후 예측이나 신소재 개발 등 복잡한 문제나 신약개발, 항공실험, 폭발실험 등 실험적으로 해결하기에 위험이 있고 비용이 많이 소요되는 문제를 해결하는데 기여하고 있다. 본 논문에서는 대표적으로 전산구조공학 연구에 사용되는 ABAQUS 및 NASTRAN을 국가 슈퍼컴퓨터 5호기 누리온에서 활용하는 방법에 대하여 소개하였으며 전산구조공학 연구에 이용되는 분석 모델을 4호기 신바람 시스템과 누리온 시스템에서 ABAQUS를 이용하여 성능을 측정하고 비교하였다.

Acknowledgement

본 연구는 2020년도 한국과학기술정보연구원(KISTI) 주요사업 과제로 수행한 것입니다.

참고문헌

- [1] Khennane, Amar. Introduction to finite element analysis using MATLAB® and abaqus. CRC Press, 2013.
- [2] 권진회, 구교남, 문창오, 우경식, 정성남, NASTRAN으로 배우는 전산구조해석, 경문사, 2018
- [3] Ryan Lee, 엔지니어를 위한 LS-DYNA 실습예제를 포함한 실용지침서, e퍼플, 2018
- [4] Chaudhari, S. V., and M. A. Chakrabarti Modeling of concrete for nonlinear analysis using finite element code ABAQUS, International Journal of Computer Applications 44.7, 2012, pp.14-18.
- [5] Ryan Lee 엔지니어를 위한 ABAQUS 실습예제를 포함한 실용지침서, e퍼플, 2018
- [6] M. Nz M. Nazem, I. Rahimani, and M. rezaee-Pajand, "Nonlinear FE Analysis of Reinforced Concrete Structures Using a Tresca-Type yield Surface," Scientica Iranica No. 6, Vol. 16, 2009, pp. 512-519.
- [7] Sun, Eric Qiuli, "Shear locking and hourglassing in MSC Nastran, ABAQUS, and ANSYS," Msc software users meeting, 2006.
- [8] Fang, J., et al. "Weld modeling with MSC/Nastran," Second MSC Worldwide Automotive User Conference, Dearborn, MI, USA, 2000

- [9] Freed, Brian D., and Vit Babuska, "Finite element modeling of composite piezoelectric structures with MSC/NASTRAN," Smart structures and materials 1997: smart structures and integrated systems, Vol. 3041, 1997
- [10] Butler, Thomas G., and Douglas Michel. NASTRAN: A summary of the functions and capabilities of the NASA structural analysis computer system. Vol. 260. Scientific and Technical Information Office, National Aeronautics and Space Administration, 1971.
- [11] Brown, Jeff. "Characterization of MSC/NASTRAN & MSC/ABAQUS elements for turbine engine blade frequency analysis." Proc. MSC Aerospace Users' Conference. 1997.
- [12] Abaqus Performance Data, Online(<https://www.3ds.com/support/hardware-and-software/simulia-system-information/abaqus-614/performance-data/>)