



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」
 ハイエンド科学技術計算 HPC ミドルウェアスカラ版
 IT program of MEXT, "Frontier Simulation Software for Industrial Science"
 High-Performance Computing Middleware (HPC-MW)
 Infrastructure for developing optimized and reliable scientific simulation codes
 - Scalar version -

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

分類	大規模有限要素解析
キーワード	有限要素法開発支援、ミドルウェア、最適化、並列計算
開発者	戦略的基盤ソフトウェアの開発、第7グループ (HPC-MW 開発チーム)
公開年月日	2005年6月
コード名	ライブラリ型 HPC-MW
使用言語	Fortran90、C

HPC-MW 概要

有限要素法などのシミュレーションプログラムにおいては、行列計算、メッシュ操作、可視化など共通基盤となる処理が多くある。そこで HPC ミドルウェア（以下、HPC-MW）では、そうした共通基盤処理部分をさまざまなハイエンド計算機環境において最適化し、シミュレーションプログラムから容易かつ有効に利用できることを目指している。以下では、2005年6月公開のライブラリ型 HPC-MW について紹介する。

ライブラリ型 HPC-MW

ライブラリ型 HPC-MW とは、有限要素法の共通基盤となるプロセスについて、各種のハイエンド並列計算環境に合わせて最適化されたライブラリ群である。シミュレーションプログラムの開発者が並列計算を意識しなくても、このライブラリとリンクすることにより並列計算環境における最適化コードを生成できるようにデザインされている。公開のプログラムでは以下の機能を有している。

(1) データ入出力・メッシュ関連ユーティリティ

自由書式による独自のデータフォーマットおよび GeoFEM メッシュデータ形式に対する入出力処理をサポートするほか、単一領域データから分散データへの領域分割ツールとそれを視覚的に確認するためのメッシュビューアを提供する。

(2) 並列可視化

スカラー量、ベクトル量、テンソル量について各種レンダリング機能をサポートしている。更に、並列解析プログラムの結果を、ファイルを介さずに直接画像データに変換する機能も有しており、極めて大規模な解析に際しても、大容量のポストデータを保存する必要はない。

(3) 並列線形ソルバー

大規模並列計算を実施するための前処理付反復法を並列化して提供する。ユーザは特に並列処理を意

識しなくても(1)の領域分割ツールと組み合わせて使うことにより、効率よい並列プログラムを作成できる。解法の種類はCG、BiCG-STAB、GPBiCG、GMRESをサポートしている。また、構造解析計算にて扱われる悪条件の行列を解くために直接法行列ソルバーについても、既存のライブラリへのインターフェースを構築する。

(4) 行列計算ユーティリティ

作成した大規模行列に伴う種々の演算（アセンブリ、行列積、転置、境界条件設定、行列分割）を行うユーティリティを作成する。これによりユーザーが、大規模疎行列のデータ構造を意識せず、数学演算のためのプログラムを作成できる。

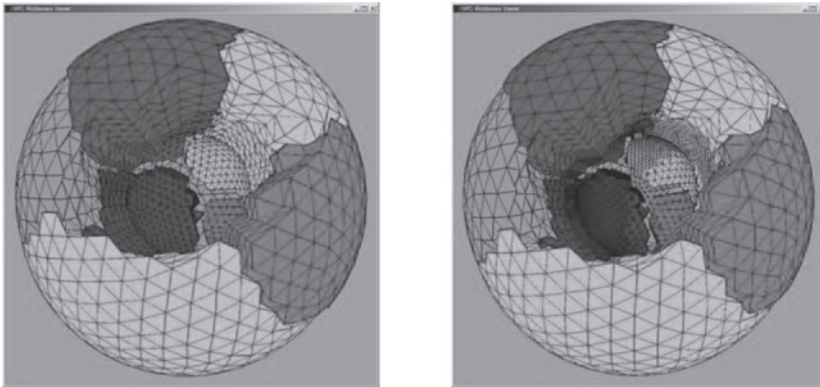


図1 HPC-MW Mesh Viewer による階層構造データの表示例
 (左図：通常の分散メッシュデータの表示例、
 右図：適応格子機能により局所細分割された階層構造を持つ分散メッシュデータの表示例)

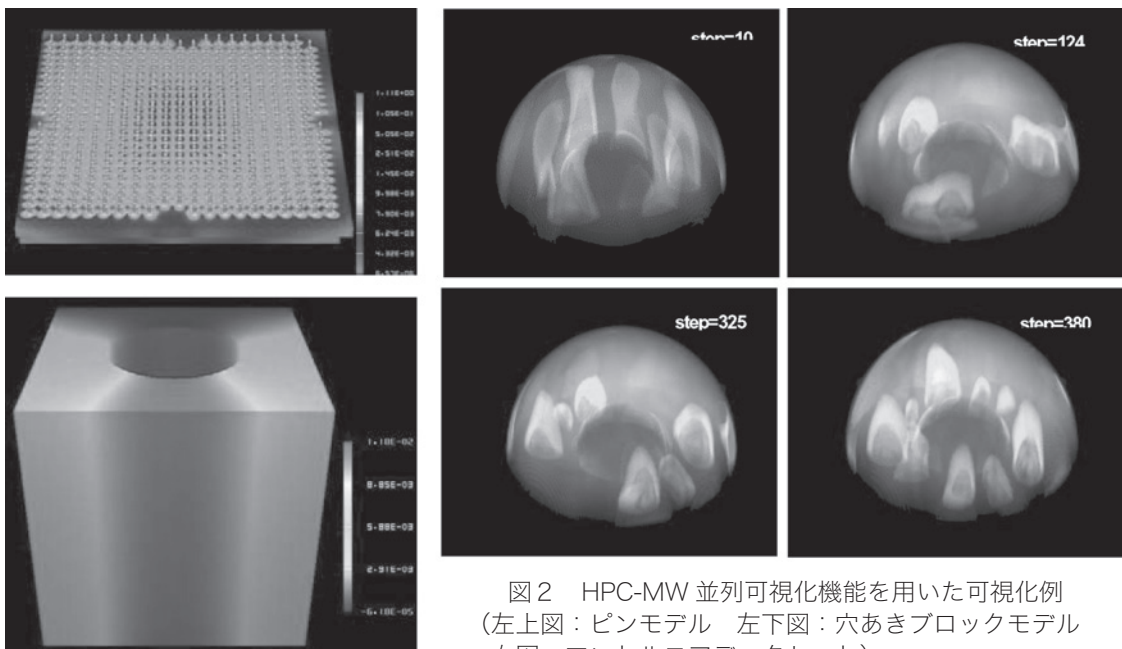


図2 HPC-MW 並列可視化機能を用いた可視化例
 (左上図：ピンモデル 左下図：穴あきブロックモデル
 右図：マンツルコアデータセット)