

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」
HEC-MW/ハイエンド計算ミドルウェア Ver.2.0

Research and Development for Next-generation Information Technology of MEXT.
“Revolutionary Simulation Software”
High End Computing Middleware (HEC-MW)
—Infrastructure for developing optimized and reliable scientific simulation codes

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	革新的シミュレーションソフトウェアの研究開発、HEC-MW/FrontSTR グループ
公開年月	2007年12月
コード名	HEC-MW
使用言語	Fortran90、C

HEC-MW 概要

有限要素法のプログラムにおいては、行列演算、メッシュ操作、可視化など共通の基盤的な処理が多くある。そこで HEC-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、有限要素法アプリケーションから容易かつ有効に利用できることを目指している。

HEC-MW の機能

HEC-MW は有限要素法における共通の基盤的プロセスについて、各種のハイエンド並列計算機用に最適化されたライブラリとして提供される。アプリケーション開発者は HEC-MW で提供される各種機能を利用し、利用する計算機上のライブラリをリンクすることにより、自動的に最適化された並列計算コードを得ることが可能になる。今回のバージョンアップにおける主な改良点を以下にあげる。

(1) メッシュデータ読み込みの高速化

単一・分散メッシュデータ読み込みサブルーチン `hecmw_get_mesh` において、大規模なデータを読み込む際に処理時間が著しく増大するという問題があった。とくに単一領域データを読み込む必要のあるパーティションで支障を生じることがあった。これに対し、`hecmw_get_mesh` 内部におけるデータの一時格納法および整合性チェックのアルゴリズムを改良することにより、データ読み込み時の大幅な高速化を実現した。

(2) 結果ファイルのフォーマット修正

これまで、結果ファイル (**.res) は HEC-MW の提供する可視化機能のためのデータという位置づけであった。このため、各データの測定位置 (節点番号や要素番号) が記録されていなかった。しかし、ユーザの増加とともに、小・中規模データの解析や開発コードのテスト結果の検討などの場面において、出力データの値を res ファイルから直接確認したいという要望が多数寄せられた。そのため、結果出力

サブルーチン hecmw_result_add を改良し、各データの先頭に節点番号および要素番号を追加した。

(3) 並列直接法ソルバー

並列有限要素法では、行列のスパース性や計算量、並列化の容易さの観点から反復法ソルバーを用いることが多い。しかしながら、行列が悪条件となる場面では直接法ソルバーに対する需要は依然として大きい。直接法ソルバーの問題点は、(a)自由度に対するメモリ消費量が非常に大きい、(b)中・大規模問題において計算間が長い、の2点である。新しく追加された並列直接法ソルバーでは、複数のプロセッサを用いることで解析規模の上限を大幅に上げることが可能となった。また、分散処理により、計算時間の短縮も図られている。

API (F90 and C)	Function
hecmw_init	Initialize
hecmw_finalize	Finalize
hecmw_get_mesh	Load mesh data
hecmw_result_write/read	Output/Read result data
hecmw_restart_read_int/real	Read restart data
hecmw_mat_con	Create CRS format table
hecmw_matrix_allocate	Allocate memory for matrix
hecmw_Jacob	Calculate shape functions
hecmw_matrix_assemble	Assemble global matrix
hecmw_vector_innerProduct	Vector dot product
hecmw_solve_11/22/33	Solve linear equation
hecmw_matvec_11/22/33	Mat-Vec product
hecmw_visualize	Execute visualization
hecmw_(MPI functions)	MPI wrappers

図1：HEC-MW の主な機能
(I/O、行列ベクトル積、ヤコビアン計算、ソルバー、並列可視化の各機能に対応するサブルーチンの例)

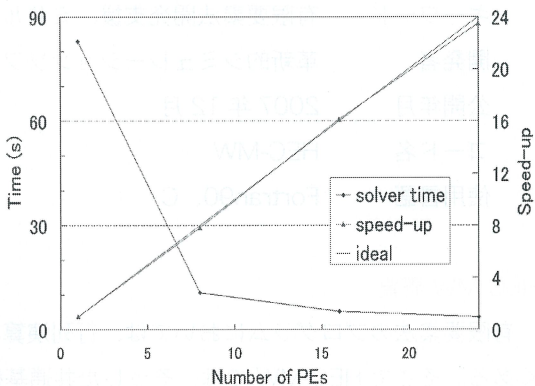


図2：反復法CG法ソルバーのスピードアップ
(SR11000、キャピティー流れモデル、100万自由度)

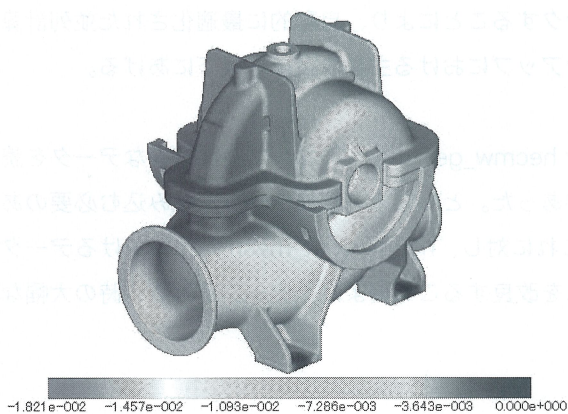


図3：HEC-MW 並列可視化機能を用いた可視化例1
(ポンプ自重の静弾性解析、ミーゼス応力のコンター表示、約1,500万自由度、反復法CGソルバー使用)

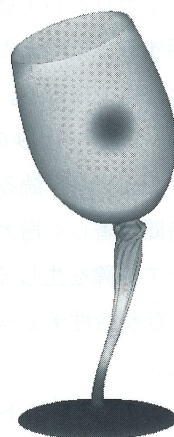


図4：HEC-MW 並列可視化機能を用いた可視化例2
(ワイングラスの固有値解析結果、変形モードと固有値のコンター表示、約30万自由度、直接法ソルバー)