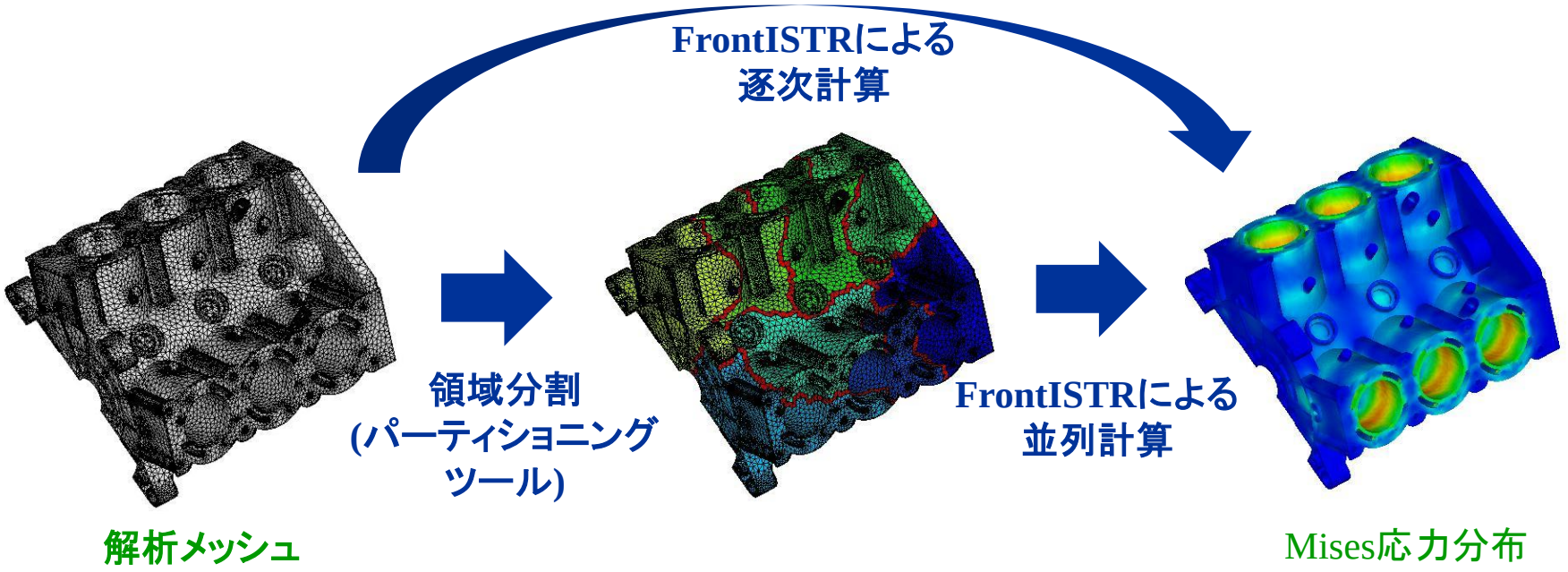
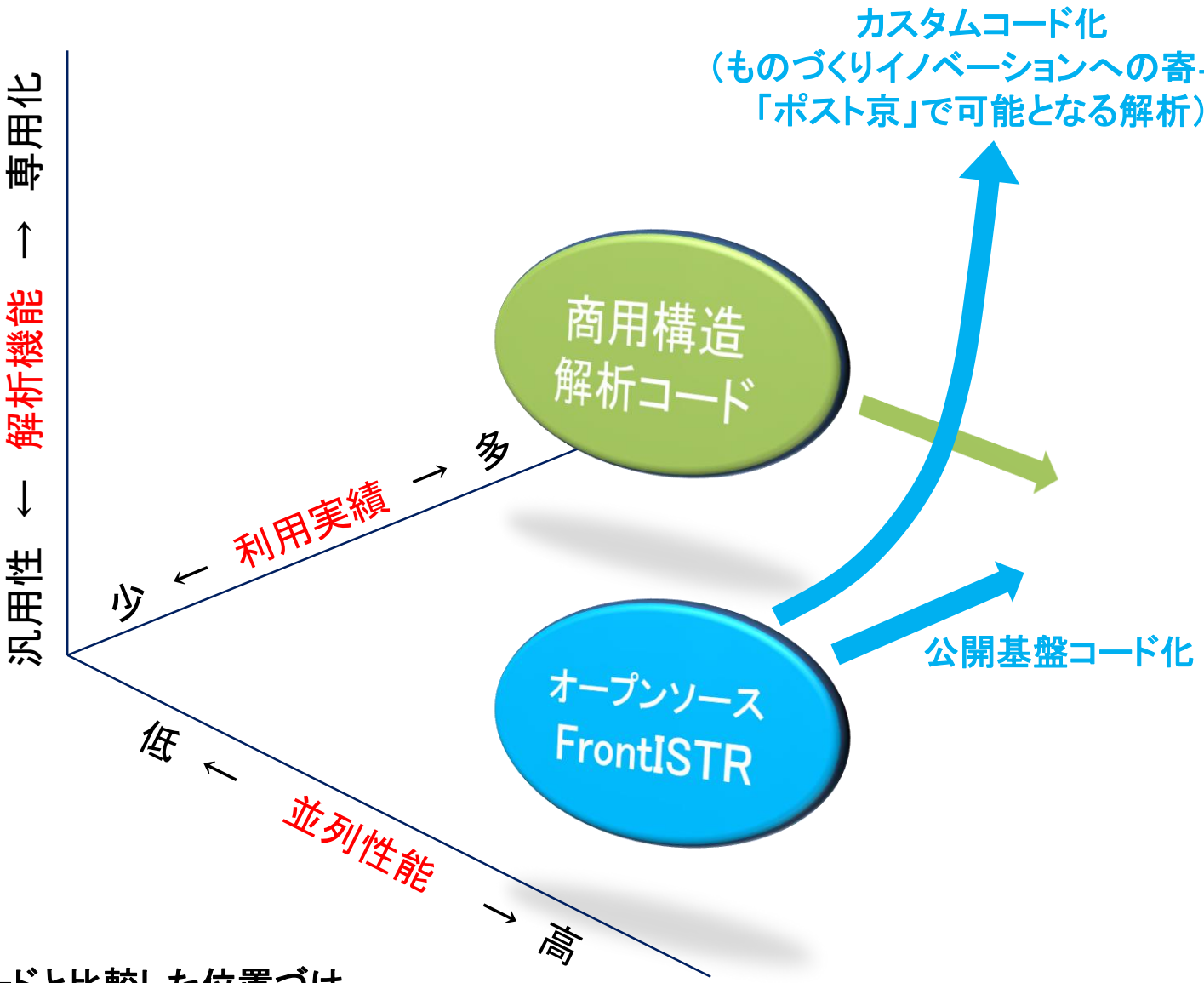
並列有限要素法プログラム「FrontISTR (フロントアイスター)」

- 並列計算では，メッシュ領域分割によって分散メモリ環境に対応し，通信ライブラリにはMPIを使用(MPI並列)
- さらに，CPU内はOpenMP並列(スレッド並列)
- WindowsやLinuxのPCクラスタはもとより京や地球シミュレータなどの超並列スパコンにも対応

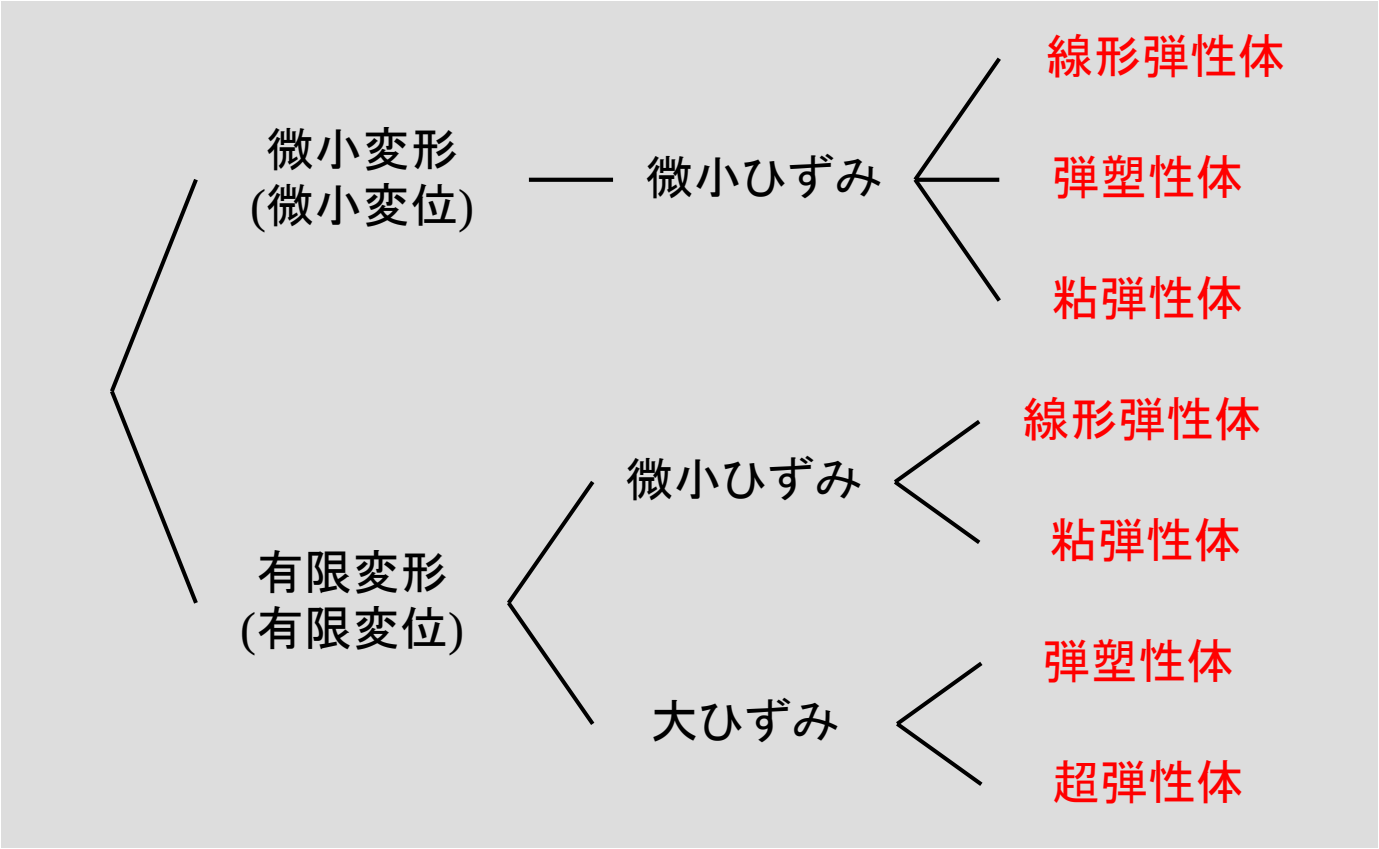




商用コードと比較した位置づけ

やがては両者の解析性能は同様のものに収斂．現段階では商用コードとは相補的な関係．定式化とプログラムが理解できれば、個別のニーズに応じたカスタマイズ化が可能となり、利用者（コード開発者）の競争力強化につながる．信頼性を保証する方法としてソース公開に勝るものはない．

FrontISTRで使用できる材料



有限変形

$$ {}^{t}_{0}\boldsymbol{E} = \frac{1}{2}\left\{ ({}^{0}\nabla \otimes {}^{t}\boldsymbol{u}) + ({}^{0}\nabla \otimes {}^{t}\boldsymbol{u})^{\mathrm{T}} + ({}^{0}\nabla \otimes {}^{t}\boldsymbol{u}) \cdot ({}^{0}\nabla \otimes {}^{t}\boldsymbol{u})^{\mathrm{T}} \right\} $$

ひずみ　変位こう配の2次項がある

大ひずみ

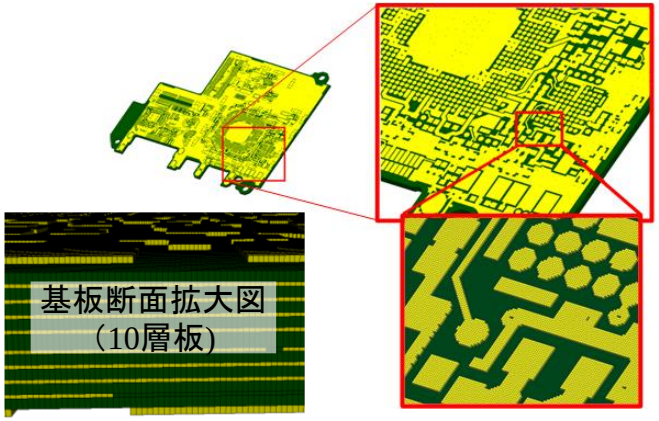
$$ {}^{t}_{0}\boldsymbol{S} = f({}^{t}_{0}\boldsymbol{E},\ {}^{t}_{0}\boldsymbol{E} \cdot {}^{t}_{0}\boldsymbol{E},\ \ldots) $$

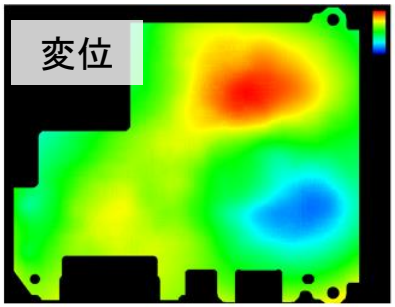
応力　ひずみの2次以上の項がある

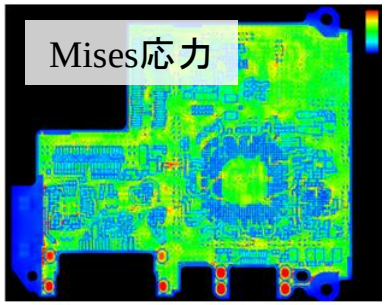
「京」における計算例

産業界と密に連携しながら、FrontISTRによって、
微細な内部構造を有する実モデルの応力解析を実現

電子基板の熱応力 (約75億自由度)



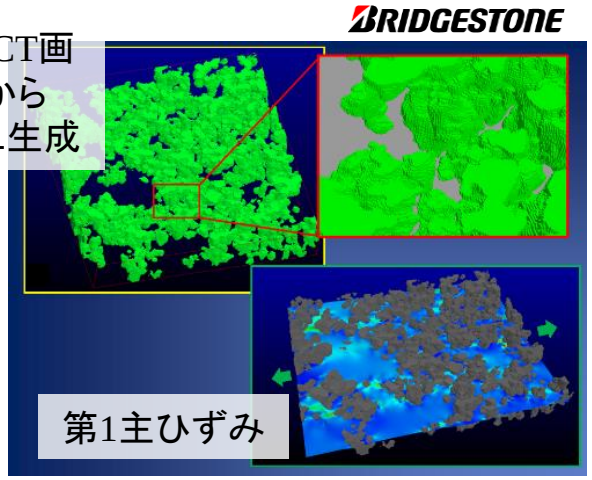


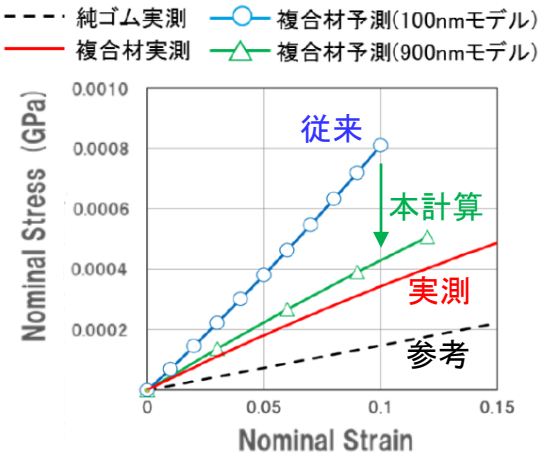


- L2キャッシュを利用した並列計算の最適化
- 対ピーク性能 4.2%

配線構造を簡略化しない実機モデルの計算を実施
反りの小さい配線構造を有する電子基板の製造へ

フィラー充填ゴムの大変形 (約2億要素)





計測領域 (幅900nm) を計算、
従来より実測に近い複合材物性を評価
タイヤの転がり抵抗・耐摩耗性メカニズム解明へ

HEC-MWを基盤とするFrontISTR

HEC-MWを利用することにより、様々な計算環境において最適化された並列FEMアプリ（非線形構造解析機能）を効率的に開発可能

Front ISTR

アプリ開発者が担当する部分

逐次・非線形FEM構造解析アプリケーション

{材料, 幾何学的, 境界}非線形応力解析、ニュートンラプソン法、陽解法・陰解法、ランチョス法、周波数応答、熱伝導、有限要素、解析支援

I/F　I/F　I/F　I/F

データ入出力（単一・分散領域）	線形ソルバ（反復法・直接法、ブロック処理）	有限要素処理、行列演算、コネクティビティ生成	可視化

HEC-MW

京コンピュータ　Winノートクラスタ　PCクラスタ

HEC-MWを用いたプログラムイメージ

```
program sample_main
    use hecmw
    implicit none
    type (hecmwST_local_mesh) :: hecMESH
    type (hecmwST_matrix    ) :: hecMAT
    character(len=HECMW_FILENAME_LEN) :: name_ID

    call hecmw_init
    call hecmw_get_mesh(name_ID, hecMESH)
          ......
          ......  FE algorithm
          ......
    call hecmw_solve_33 (hecMESH, hecMAT)
    call hecmw_finalize

end program sample_main
```

１）hecmwモジュールを“USE”

２）hecmwモジュールで定義された構造体の変数宣言

３）hecmwサブルーチンをコール

- アプリ開発者が関与するソース量は大幅に減少
- 並列演算, オーダリング, 並列データ入出力が隠蔽
- アプリはSPMD型の並列プログラム
- 分散領域のデータに対して並列計算を実行

科学技術シミュレーションをとりまく状況

- 商用スパコンのピーク性能は5年ごとに10倍
- ハードウェア性能の向上→アルゴリズムにも変革
- アプリ開発支援をとりまく動向
  - 並列アーキテクチャ発展の趨勢は当面変わらない
    MPI + スレッド並列 + アクセレレータ(GPU)
  - フロンティア領域ではアプリのニーズがハード開発を牽引
  - 専用機の適用分野拡大
  - ソフトウェア側からのハードウェアの多様性の吸収

RSS21
Revolutionary Simulation Software

シミュレーションソフトウェアの多チャンネル化

- 産業界におけるシミュレーション
  - コスト、時間に制約
  - 設計現場よりは研究所での利用がほとんど
  - ハードウェアの機能向上、低廉化に負うところが大きい
  - ソフトウェア開発はアウトソーシング（欧米）
  - HECは、特定ニーズに応じたカスタマイズソフトウェアによる（衝突解析など）

→ハイエンドのコンピュータを様々なニーズに特化した使い方ができ、同時にそれを可能とする応用ソフトウェア、すなわち多チャンネル化したシミュレーションソフトおよびその開発環境が重要

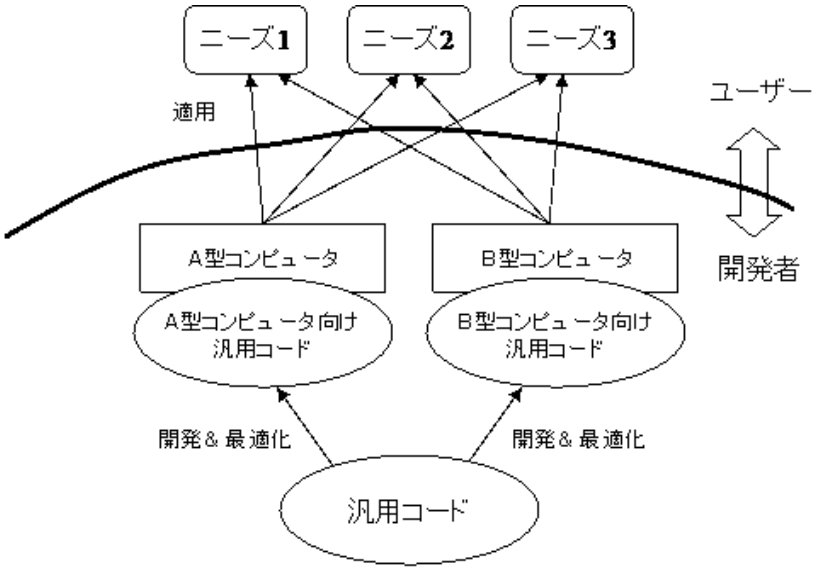


図1(a) 汎用コードの開発と利用（従来型）

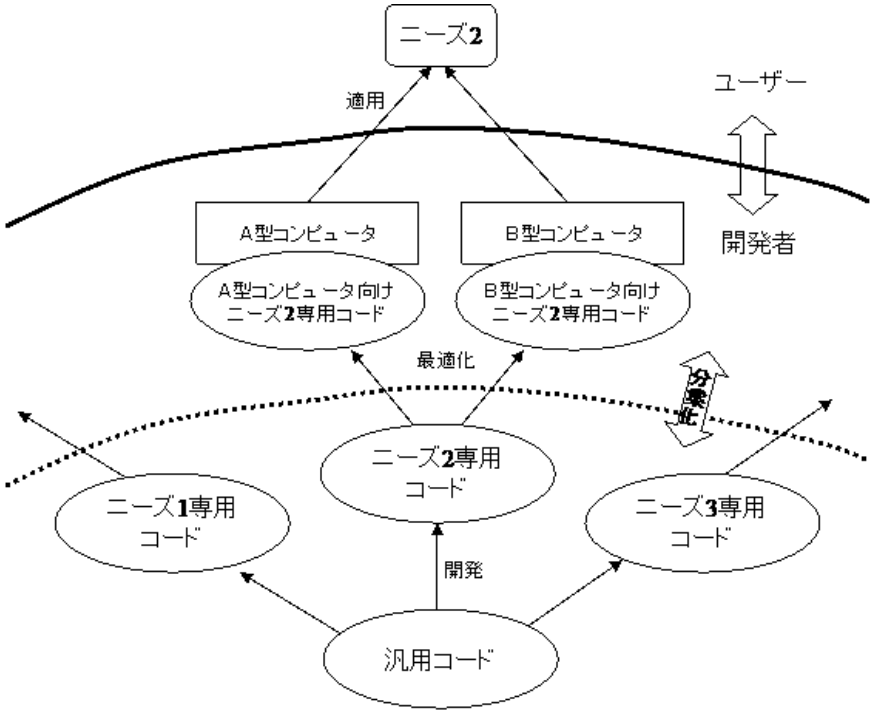


図1(b) ニーズに対応した専用コード開発

奥田洋司，矢川元基, 未来型計算力学, シミュレーション, 2000.

HEC-MWを援用したアプリ開発

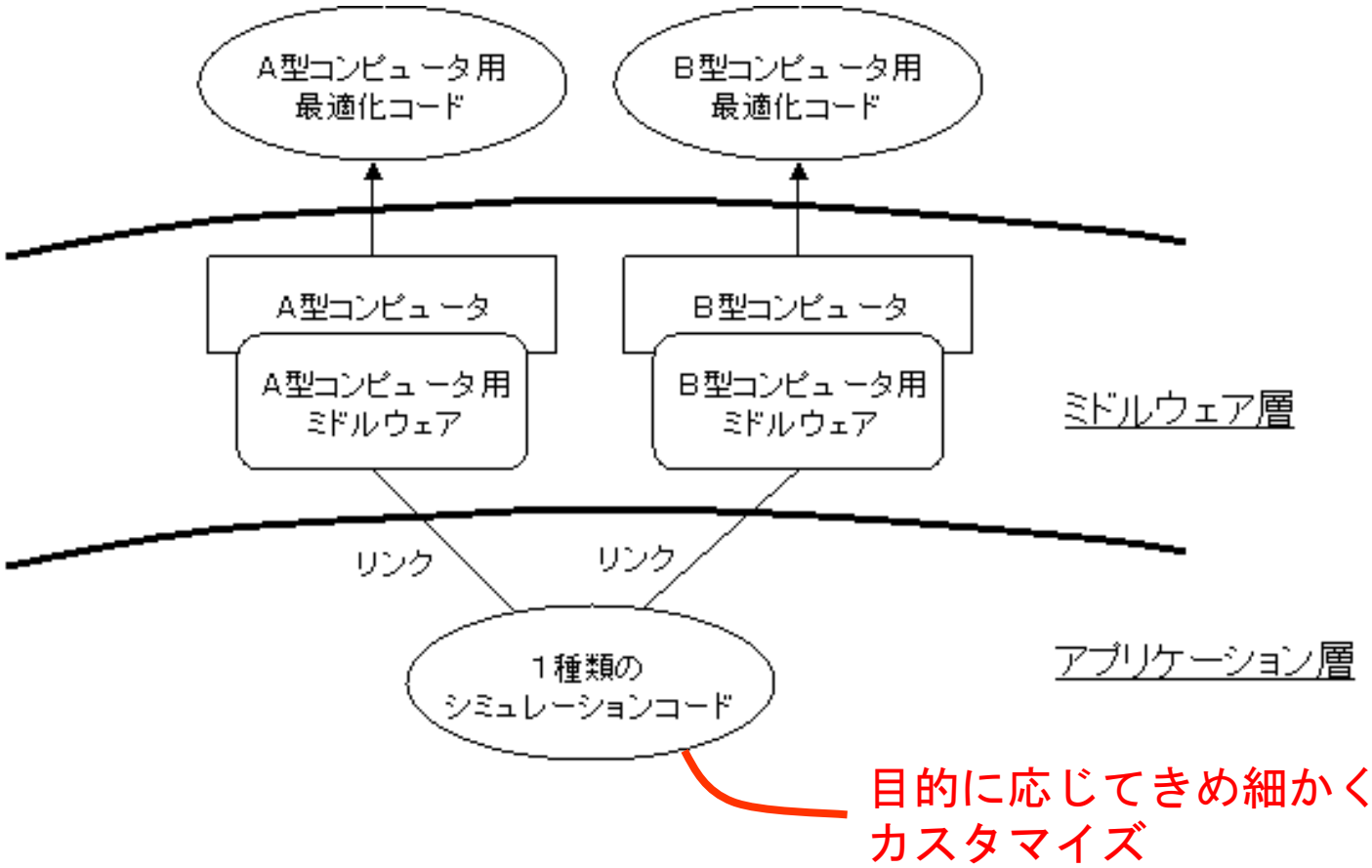


図2 科学技術計算アプリ開発用ミドルウェアの概念

奥田洋司, 矢川元基, 未来型計算力学, シミュレーション, 2000.

HEC-MW開発の背景

- 様々なHPC環境
  - PC Cluster / MPP with Distributed Memory / SMP / SMP Cluster / Grid
  - Scalar PE / Multicore PE / Vector PE / GPU
- ピーク性能 >> 実効性能
  - ハードウェアにおける並列性を最大限引き出す必要
    - データシェアリング、ワークシェアリングの指定
    - 依存性を排除するためのオーダリング
    - データ構造の再構築
  - 並列化などハードウェア依存のチューニング作業
    - アプリ開発者にとって大きな負担

→ミドルウェアによってアプリ開発者の負担を低減化する必要

HEC-MWの特徴と効果

- HEC-MWの特徴
  - FEMの汎用性に注目し、共通的な一連の演算を抽出
    →ミドルウェアによってアプリ開発者から隠蔽
  - アプリケーション寄りの階層に位置づけ
    →より高いソフトウェア開発効率の追究

- ミドルウェア導入の効果
  - 新規開発、レガシーコード改良の効率化
  - アプリの信頼性・移植性・メインテナンス性の向上
  - アプリ開発者は解析アルゴリズムに集中できる