

<アプリケーションソフトウェア>

ベクトル・並列計算のための有限要素法 プログラムジェネレータの開発

Development of FEM Code Generator for Vector/Parallel Computation

藤尾秀洋*

要旨

スーパーコンピュータのベクトル処理や並列処理は、大規模な3次元問題や非線型問題の数値計算を可能にしています。一方で、計算機の性能を十分に引き出すためには、高度な並列アルゴリズムや複雑なデータ構造を使うプログラミングが必要になります。これらのソフトウェア技術の成果は日々蓄積されていますが、新たに蓄積されるソフトウェア資産を、素早く容易に利用することができる環境が求められています。

本稿では、並列処理などの複雑なアルゴリズムやデータ構造を格納し、抽象的な問題記述を入力から簡単に再利用できるツール、有限要素法向けプログラムジェネレータfeelfemについて、その概要を述べます。

Vector and parallel processor machines enable numerical computation of large-scale 3-dimensional problems and nonlinear analysis. This advanced computation requires a lot of hard work in programming. It is necessary to adopt sophisticated algorithms and complicated data structures to use supercomputers efficiently. Developments of software technologies in this field are very active, and new softwares are announced almost every week. It is desirable to use these newly developed software technologies easily and quickly.

This paper describes an FEM code generator tool 'feelfem'. This tool is an FEM software repository where algorithms and data structures are stored in template style, and feelfem generates a complete program from users' inputs in a high-level PDE (Partial Differential Equation) language.

1. まえがき

最新のスーパーコンピュータで高速な数値計算プログラムを開発する場合、ベクトル処理だけでなく並列処理も考慮する必要があります。並列計算を実行するプログラムでは、MPIライブラリによるプロセス間通信の処理や、並列計算のための複雑なデータ構造、またベクトル処理を行うためにDOループの順序の変更など、スカラー処理とは異なる手順やデータ構造が必要になり、そのコーディング作業は簡単ではありません。

並列化やベクトル化が考慮された計算アルゴリズム、またはそのプログラム・データ構造は再利用が可能です。たとえば、線形の熱応力解析向けの並列プログラムの構造は、非線形の熱応力解析の並列計算にも使うことができるでしょう。そこでは、数学的な離散化の定式化は違いますが、ベクトル・並列計算機を使いこなすためのプログラム上の手法にはほとんど違いはありません。つまり、スーパーコンピュータのための数値計算プログラムは、「数学的な離散化にかかる部分」×「ベクトル処理・並列計算にかかる部分」と考えることができます。

しかし、この両者が結合し完成されたプログラムとしていったん実現されると、両者を切り離して並列計算のプログラムのパターン部分を他の問題に転用したり、インプリメンテーションされている離散化処理の部分を書き換えたりするのは大変です。そこで、開発された並列アルゴリズムのプログラム・データ構造を離散化計算と独立させてテンプレートとして格納し、それを色々な問題に簡便に再利用することができるツールがあれば、スーパーコンピュータのソフトウェア開発に有用です。

2. 有限要素法ソフトウェア格納庫としてのfeelfem

feelfemは、ユーザが記述した抽象的な有限要素解析の問題記述と、生成するプログラムのプログラム様式を指定

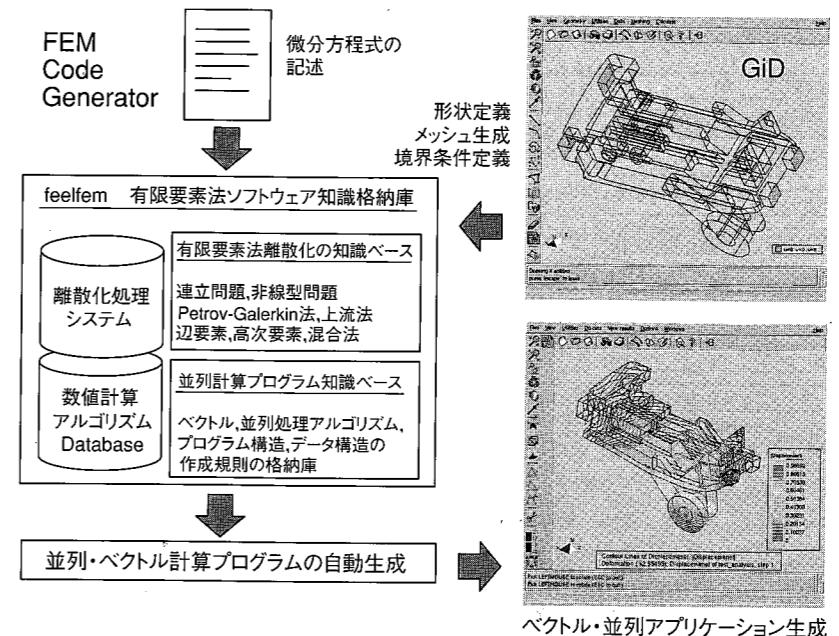


図1 feelfemとGiDによる並列アプリケーション作成環境

Fig.1 Parallel/Vector FEM application generator with GiD pre/post processor.

プログラム生成を行う
という機構によって実現しています。

図2は、この方式のソルバーライブラリの拡張性に関して模式的に説明した図です。一般に数値計算の数学的なアルゴリズムは特定の計算機アーキテクチャやデータ構造には依存しません。feelfemでの数値計算アルゴリズムは、インプリメンテーションの諸要素の依存関係を考慮した小単位に分解され、各単位を疑似コードとして表現したものを格納しています。生成されるプログラムは、各疑似コードのステップごとに、プログラム言語やプログラムモデル、ライブラリに用いられるデータ構造などの個別要素ごとに用意されているテンプレートを用いて生成されます。

ソルバーライブラリに関していえば、重要なデータ構造の要素は行列成分の格納形式になります。SXシリーズ向けの行列格納方法としては、たとえばIDS-MJAD形式¹⁾など、様々な形式が提案されています。feelfemでは、疑似コードのうち行列格納方法に関するプログラム生成情報は、形式別にテンプレートとして独立に格納されています。そのため、対応する行列格納方法を増やすためには、新たなテンプレートを付け加えるだけです。しかし、これらのテンプレートは互いに独立に増やせるため、行列データ構造に関するプログラム生成機能の拡張は大変容易です。

このような生成プログラムの要素のレベルとしてほかに、Fortran90やC++などのプログラミング言語のレベル、要素や節点データの表現のレベル、入力ファイルのデータ表現レベル、プログラム構造のレベル、ライブラリの呼び出し形式のレベルが用意されています。

* インターネットシステム研究所
Internet Systems Research Laboratories