

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」

# FSIS NEWS

Frontier Simulation Software for Industrial Science

<http://www.fsis.iis.u-tokyo.ac.jp/>

NUMBER  
2003.MAR

3

編集発行：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事務局

この3月で「戦略的基盤ソフトウェアの開発」プロジェクトの初年度が終わります。

この1年は、文部科学省はじめ関係機関のご支援ご協力により、ソフトウェア開発の取組みは順調にスタートしました。来年度には出来上がった実証ソフトはご利用者にリリースする予定であり、ピッチを上げた取組みとなりますが、今時点で、本プロジェクトが生まれた背景を再度見つめ直して、より大きな成果に結びつけたいと思います。

## わが国の産業競争力強化をめざす「戦略的基盤ソフトウェアの開発」プロジェクト

産業競争力の強化はわが国が直面する課題であります。産業競争力を強化するためには、研究開発のスピードアップ、高品質な製品の開発が必要不可欠であり、その基盤となる技術開発に国として戦略的に取り組んでいく必要があります。ところで、20世紀後半の科学技術の発展は計算科学技術によって支えられてきました。21世紀に入り、技術革新がさらに加速していますが、それにとれない科学技術、産業技術における計算科学技術の重要性は一層増していくものと考えられます。米国においては計算科学技術が産業競争力の鍵を握るとして、ブッシュ元大統領の時代から、大統領直轄の組織をつくり、国を挙げて計算科学技術の振興に取り組んでいます。米国の情報技術研究開発計画(IT R&Dプログラム)の中核は計算科学=HPC(ハイパフォーマンス・コンピューティング)です。EUにおいても同様の状況にあります。

わが国においても、産業競争力の強化のために、計算科学技術により一層強力に取り組んでいく必要があります。産業競争力の観点からは大学に蓄積された研究成果を民間に移転することが重要です。そのために、政府においては、まづ、国の開発フェーズにある基礎研究の成果を踏まえ、民間の参加を得つつ実証ソフトウェアの開発に取り組むこと

が期待されます。さらに、民間事業におけるシミュレーションの活用に向けて、産学官の連携の下、研究機関とユーザ企業の橋渡しを行うテストベッドを設け、実用問題への適用、利用技術の開発や、研究開発・設計プロセスへの適用等にも取り組み、成果の民間への移転を進めることが必要です。このプロセスにおいては、民間企業が果たすべき役割も重要です。実証ソフトウェアを実際に事業で活用できるものとするためには、その開発やテストベッドにおける各種の活動への積極的な参加が不可欠です。さらに、ユーザとして、開発されたソフトウェアを活用することはもとより、ソフトウェアの販売や、ソリューションサービスの提供等、事業化の推進も重要な役割です。実用ソフトウェアは、常に改良、成長することによりデファクトスタンダードとなり得るものであり、出来るだけ早くビジネスベースに乗せていくことが重要です。

現在、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が実施している、「戦略的基盤ソフトウェアの開発」プロジェクトは、産学連携により実証ソフトウェアを開発するとともに、開発したソフトウェアをベンチャー企業が事業化するプロジェクトです。このプロジェクトは、先に述べた計算科学技術の振興戦略を先導するものであり、わが国の産業競争力の強化に大きな貢献をするものと期待されます。

# ● HPCミドルウェアグループの取組み概要

**奥田 洋司** 東京大学大学院工学系研究科 助教授

HPCミドルウェア(以下,HPC-MW)は、さまざまなハイエンド計算機環境において最適化された、有限要素法による大規模シミュレーションコードの効率的な開発を可能とするミドルウェア群です。PCで開発されたソースプログラム(FORTRAN90またはC言語で記述)をネットワーク上の各ハイエンド計算機にインストールされたHPC-MWにプラグインすることにより、PCクラスタからベクトル並列計算機まで、それぞれのハードウェアに対して最適化されたコードが自動的に生成されます。

有限要素法など科学技術シミュレーション分野では大規模計算 高速計算への需要が高く 常にハイエンドの計算機性能を最大限引き出せるようなプログラミングが必要となる。本プロジェクトでは 科学技術シミュレーションコード開発にあたって 並列処理 計算機依存チューニングなど計算本体と必ずしも直接関係のないプロセスを隠蔽するような仕組みをHPC-MWによって提供するものである。

本プロジェクトの全期間を通じて開発するものは以下の通りである(1)。

## (1)ライブラリ型HPC-MW

並列有限要素法の代表的な計算プロセスについて 各種のハイエンド並列計算環境に関して最適化されたライブラリである。これにユーザーがPC上で開発した単独CPU用のFEMコードをリンクすることによって 様々な並列計算環境において最適化されたコードが生成される。

## (2)コンパイラ型HPC-MW

形状データやキャッシュ容量 新規のアーキテクチャに応じたプログラム生成を支援する。メモリ階層の深さ プロセッサ速度 メモリバンド幅 キャッシュ容量 をパラメータとして 各アーキテクチャ メッシュデータに最適な「HPC-MW」を自動的に生成する。

## (3)ネットワーク型HPC-MW

GRID等 ネットワーク上で共有されているヘテロジニアスな並列計算機群を同時に利用して大規模有限要素シミュレーションを実施する場合に 利用する計算機リソースそれぞれに最適化された「HPC-MW」を各計算機リソースの性能に基づくパラメータをもとに自動生成する。

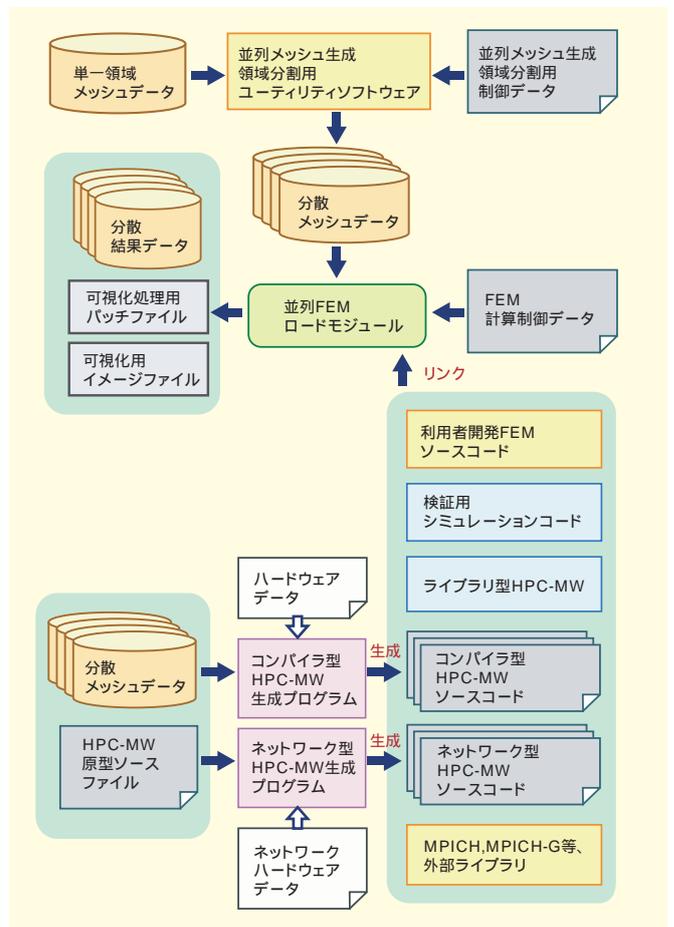
## (4)検証用シミュレーションコード

(1)~(3)で開発された各種「HPC-MW」の性能 有用性を検証するために HPC-MWを使用して開発された並列有限要素法による応用プログラム群である。HPC-MWのユーザーは これら検証用シミュレーションコードとHPC-MWとの結合のさせ方を参考にすることで 各自のプラグイン作業の効率化を図ることができる。もちろん これらはそのまま高性能な有限要素法解析アプリケーションであるため ブラックボックス的に使うこともできる。

## (5)並列メッシュ生成 領域分割用ユーティリティソフトウェア

大規模非構造メッシュの生成 および領域分割を効率的に実施するためのユーティリティである。「NASTRAN」「ABAQUS」「FEMAP Neutral」など 商用汎用コードのメッシュデータに関するインタフェースも備えており「HPC-MW」を使用して開発したFEMコードではこれらのコードで使用したメッシュファイルをそのまま利用することが可能である。

上記の(1)~(3)はそれぞれ ベクトルプロセッサ スカラープロセッサを使用したSMPクラスタ型および分散メモリ型の両アーキテクチャに対応したバージョンを開発する。



1 HPC-MWの全体構成

# ● 統合プラットフォームグループの取組み概要

松原 聖

(株)富士総合研究所 計算科学技術研究センター  
室長

本テーマではネットワークと並列コンピュータを活用した大規模で複雑なアプリケーションソフトウェアを開発する環境と複雑な解析を実行する環境の確立することを目的として統合プラットフォーム(戦略的基盤ソフトウェア用PSE; Problem Solving Environment)を開発しています。平成14年度にシステム全体の基本設計とプロトタイプの開発を実施しました。平成15年度以降は、本システムの実証試験および改良を実施する計画です。本開発により大規模・複雑な高度コンピューティング用ソフトウェアの開発の画期的な進歩が期待できます。

これらの機能を実現するために、我々は「タスクフロー」を提案しています(1)。大規模な実用計算では、一連の処理(タスク)をある手順に従って実施することにより問題を解決します。このタスクの定義と、一連のタスクの作業手順(タスクのつながり)を定義したものがタスクフローです。タスクの定義においては、そのタスクで使用するシミュレーションソフトウェアやデータベースなどを定義することが可能です。タスクフローの変更は自由に可能であり、タスクフローを保存することや、過去のタスクフローをテンプレートとして用いることも可能です。また、タスクには解析のノウハウを記述することも可能であり、実用的な知識ベースとしてタスクフローを利用することも可能です。

統合プラットフォームで利用されるタスクフローは、既存のプログラムやデータベースを部品としてより複雑で高度なシステムを構築するハイレベル言語です。本システムでは、タスクフローはXMLで表現しています。タスクフローは階層化可能な複数のタスクから構成され、それぞれのタスクは解析ソフトウェアやデータベース等の機能をひとつのタスクとして定義することができます。ここで記述したタスクフローのファイルをXML形式で保存および再利用可能です。平成14年度には、タスクフローを中心とした機能(2)を持つ全体システムの基本設計を実施し、統合プラットフォームのプロトタイプとしてタスクフローを中心とした機能を実現しました(3)。

(1) N. Nishikawa, C. Nagano and H. Koike: Integration of Virtual Experiment Technology for Materials Design, Computerization and Networking of Materials Databases, ATSM STP 1311, 1997

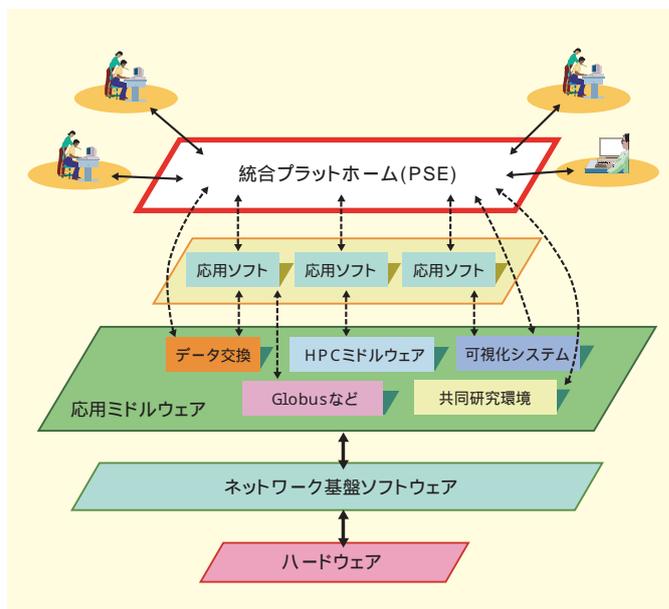


Fig. 1 統合プラットフォームの概念図

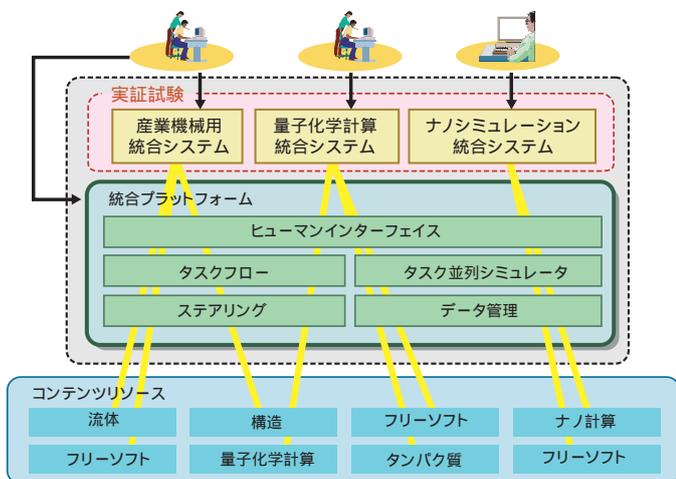


Fig. 2 統合プラットフォームの機能

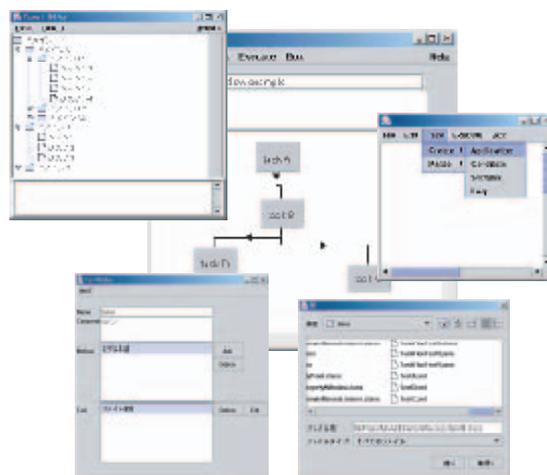


Fig. 3 統合プラットフォームプロトタイプ画面例

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」

# FSIS NEWS

Frontier Simulation Software for Industrial Science

<http://www.fsis.iis.u-tokyo.ac.jp/>

Digital Innovation

NUMBER  
2003.MAR

3

編集発行：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事務局

この3月で「戦略的基盤ソフトウェアの開発」プロジェクトの初年度が終わります。

この1年は、文部科学省はじめ関係機関のご支援ご協力により、ソフトウェア開発の取組みは順調にスタートしました。来年度には出来上がった実証ソフトはご利用者にリリースする予定であり、ピッチを上げた取組みとなりますが、今時点で、本プロジェクトが生まれた背景を再度見つめ直して、より大きな成果に結びつけたいと思います。

## わが国の産業競争力強化をめざす「戦略的基盤ソフトウェアの開発」プロジェクト

産業競争力の強化はわが国が直面する課題であります。産業競争力を強化するためには、研究開発のスピードアップ、高品質な製品の開発が必要不可欠であり、その基盤となる技術開発に国として戦略的に取り組んでいく必要があります。ところで、20世紀後半の科学技術の発展は計算科学技術によって支えられてきました。21世紀に入り、技術革新がさらに加速していますが、それにとれない科学技術、産業技術における計算科学技術の重要性は一層増していくものと考えられます。米国においては計算科学技術が産業競争力の鍵を握るとして、ブッシュ元大統領の時代から、大統領直轄の組織をつくり、国を挙げて計算科学技術の振興に取り組んでいます。米国の情報技術研究開発計画(IT R&Dプログラム)の中核は計算科学=HPC(ハイパフォーマンス・コンピューティング)です。EUにおいても同様の状況にあります。

わが国においても、産業競争力の強化のために、計算科学技術により一層強力に取り組んでいく必要があります。産業競争力の観点からは大学に蓄積された研究成果を民間に移転することが重要です。そのために、政府においては、まづ、国の開発フェーズにある基礎研究の成果を踏まえ、民間の参加を得つつ実証ソフトウェアの開発に取り組むこと

が期待されます。さらに、民間事業におけるシミュレーションの活用に向けて、産学官の連携の下、研究機関とユーザ企業の橋渡しを行うテストベッドを設け、実用問題への適用、利用技術の開発や、研究開発・設計プロセスへの適用等にも取り組み、成果の民間への移転を進めることが必要です。このプロセスにおいては、民間企業が果たすべき役割も重要です。実証ソフトウェアを実際に事業で活用できるものとするためには、その開発やテストベッドにおける各種の活動への積極的な参加が不可欠です。さらに、ユーザとして、開発されたソフトウェアを活用することはもとより、ソフトウェアの販売や、ソリューションサービスの提供等、事業化の推進も重要な役割です。実用ソフトウェアは、常に改良、成長することによりデファクトスタンダードとなり得るものであり、出来るだけ早くビジネスベースに乗せていくことが重要です。

現在、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が実施している、「戦略的基盤ソフトウェアの開発」プロジェクトは、産学連携により実証ソフトウェアを開発するとともに、開発したソフトウェアをベンチャー企業が事業化するプロジェクトです。このプロジェクトは、先に述べた計算科学技術の振興戦略を先導するものであり、わが国の産業競争力の強化に大きな貢献をするものと期待されます。