

DEQSOLとスーパーコンピュータ向け応用ソフトウェア

DEQSOL and Application Softwares for Supercomputers

スーパーコンピュータの登場によって、大規模な数値シミュレーションが可能になり、さまざまな物理現象の解明ができるようになってきた。ところが、このシミュレーション処理を行うには膨大なプログラムの作成が必要である。

この問題を解決する一つの方法は、物理モデルを簡単に記述できる高水準プログラムの開発であり、もう一つは分野別の応用ソフトウェアの開発である。更に、結果をグラフ化するソフトウェアやシミュレーションの核となる行列演算パッケージの整備である。

ここでは、偏微分方程式向きシミュレーション言語DEQSOLを中心に、これら応用ソフトについて述べる。DEQSOLでは、FORTRANの約 $\frac{1}{10}$ の記述量でプログラムが作成できる。

後 保 範* *Yasunori Ushiro*
 金野千里** *Chisato Konno*
 長堀文子* *Fumiko Nagahori*
 石黒由樹夫* *Yukio Ishiguro*
 小泊重能*** *Shigeyoshi Kodomari*

1 緒 言

スーパーコンピュータで実行される数値シミュレーションプログラムを分類すると、ユーザーが個別に作成するプログラムと、分野及び利用方法に対応して提供される応用シミュレーションプログラムの2種類がある。

前者は、ユーザーの必要に応じて自由に、またきめ細かくプログラミングすることができるが、大規模で複雑な計算を高速に処理するためには、高度なプログラミング技術が必要とされる。高速計算を必要とする数値シミュレーションの多くは、偏微分方程式の数値解を得る¹⁾ことである。そのため、日立製作所は偏微分方程式向き数値シミュレーション言語DEQSOL²⁾(Differential Equation Solver Language)を提供している。また、数値シミュレーションでの問題の多くは、大規模な連立一次方程式や固有値問題の計算に帰着する。このため、行列計算副プログラムライブラリMATRIX/HAP(MATRIX Calculation Subprogram Library/HAP)を提供している。更に、多量のシミュレーション結果を容易にグラフ出力するため、数値シミュレーショングラフ作成プログラムSGRAF(Simulation Graphic Facilities)を提供している。

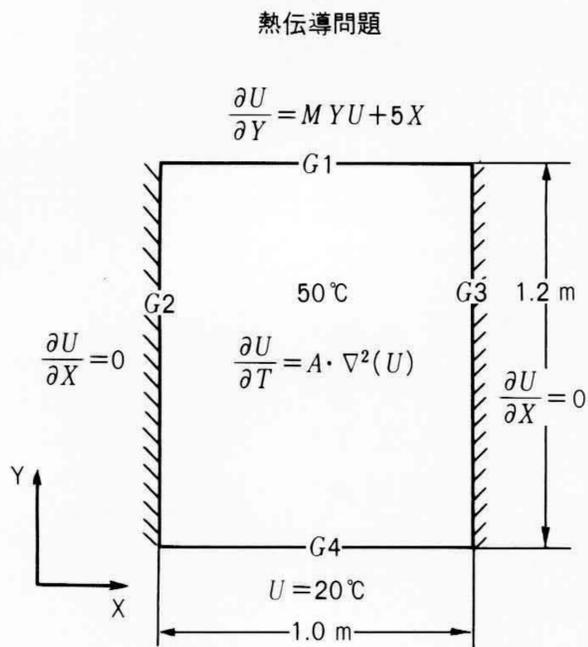
一方、後者のプログラムとして総合構造解析システムISAS II/HAP(Integrated Structure Analysis System II/HAP)を提供している。また、スーパーコンピュータ用応用ソフトウェアに関しては、流通ソフトウェアが利用できるよう、REFER(流通ソフトウェア紹介制度)への登録、紹介を推進している。

2 DEQSOLの概要

DEQSOLによる簡単な記述例を用いて、言語の概要とプログラムの構成法を説明する。この例は差分法であるが、それ以外に有限要素法とバウンダリ フィット法が使用できる。

初期温度50°Cのボックスを、左右の壁は断熱、下面は20°Cに冷却し、上面は発熱体に接した簡単なモデルと、その内部の温度変化を求めるDEQSOLのプログラムを図1に示す。本プログラムをFORTRANで記述すると約250ステップになる。同図中の①はプログラムの始まりと名称を、②は離散化手法(本例では差分法)の選択を指定している。③から⑪までが数理モデルの構造を記述している部分である。問題の定義される空間領域③、非定常問題に対する時間範囲④、差分法による格子分割⑤、時間刻み幅⑥、境界条件や物性値を与えるときに引用する副領域名⑦、物理定数(本例ではないが、場所ごとに異なった値を与えることができる。)⑧、未知の物理変数(ここでは温度)⑨、境界条件⑩、初期条件⑪などを指定する。ここでDX, DY及び⑭で現れるLAPLは、それぞれ一次微分とラプラス演算子を表している。次いでSCHEME文⑫からEND SCHEME文⑰の間で、計算スキームを記述している。本例では時間微分は前進オイラー法の陽解法スキームを使用している。ITER文⑬からEND ITER文⑱の間の実行文はUNTIL以下の条件文が成立するまで実行される。代入文⑭で各時間ステップの全節点の温度が順次求められる。仮に物性値が大きく異なる場合は陰解法、例えばバックワードオイラー法を構成するには、代入文⑭をSOLVE文⑳で置き換えればよい。SOLVE文はDEQSOLの基本機能の一つで、線形偏微分方程式中の指定した変数の数値解を、BY以降に指定した行列

* 日立製作所ソフトウェア工場 ** 日立製作所中央研究所 *** 日立ソフトウェアエンジニアリング株式会社 理学博士



陽解法 ; $\frac{UN-U}{DLT} = A * \nabla^2(U)$

陰解法 ; $\frac{UN-U}{DLT} = A * \nabla^2(UN)$

```

①  PROG   HEAT ;
②  METHOD  FDM ;
③  DOMAIN X=[0 : 1], Y=[0 : 1.2] ;
④  TIME   T=[0 : 1] ;
⑤  MESH   X=[0 : 1 : 20], Y=[0 : 1.2 : 12] ;
⑥  TSTEP  DLT=[0(0.01)1] ;
⑦  REGION WHOLE=[*, *],
      G1=[*, 1.2], G2=[0, *],
      G3=[1, *], G4=[*, 0] ;
⑧  CONST  A=0.6, MYU=50 ;
⑨  VAR    U, UN ;
⑩  BCOND  U=20 AT G4,
      DX(U)=0 AT G2+G3,
      DY(U)=MYU+5*X AT G1 ;
⑪  ICOND  U=50 AT WHOLE ;
⑫  SCHEME ;
⑬  ITER   NT UNTIL NT GE 100 ;
⑭  UN=U+DLT*A*LAPL(U) ;
⑮  U=UN ;
⑯  SAVE  U EVERY 10 TIMES ;
⑰  END   ITER ;
⑱  END   SCHEME ;
⑲  END ;
    
```

⑳ SOLVE UN OF (UN-U)/DLT=A*LAPL(UN) BY 'GAUSS'

$\nabla^2(u) = \text{lap1}(u)$; ラプラスアン, 偏微分方程式で書くと $\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial z^2}$ と表される。ただし2次元のときは $\frac{\partial^2 u}{\partial z^2}$ はなし

図1 DEQSOLの記述例 左の熱伝導問題を解くためのDEQSOL(Differential Equation Solver Language)の記述例を右に示す。⑭の部分をも⑳で置き換えると陰解法になり、物性値が大幅に異なる場合に効率が良い。

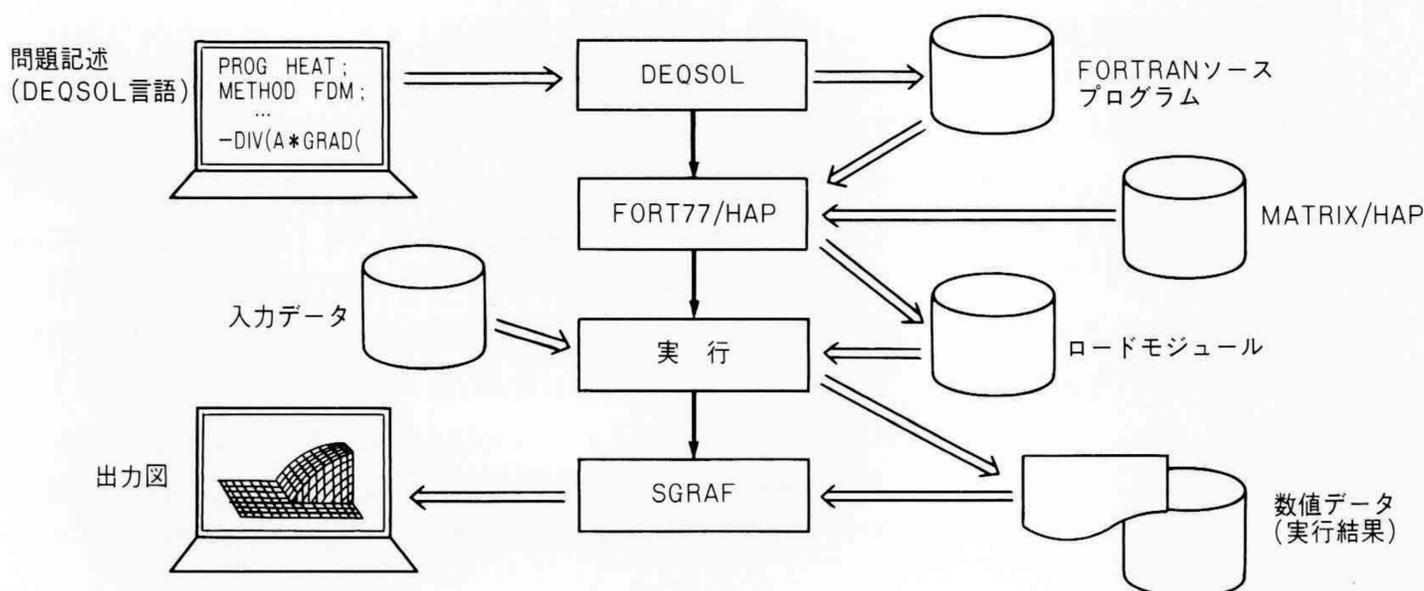
解法によって求めることを指定する。SAVE文⑯は、DEQSOLで求めた数値解をSGRAFに渡し、SGRAFでグラフを出力させる。⑲のEND文でDEQSOLのプログラムは終わる。

3 DEQSOLの機能

3.1 システム構成

DEQSOLはスーパーコンピュータを意識して作成しているが、はん用コンピュータMシリーズでも使用できる。ここでは、スーパーコンピュータ用の構成を図2に示す。DEQSOLはDEQSOL言語で記述したプログラムを、FORTRANのソー

プログラムに展開する。そのソースプログラムを最適化FORTRAN77(FORT77/HAP)で翻訳し、MATRIX/HAPの行列解法ライブラリを結合して数値シミュレーションプログラムを生成する。実行の結果、得られた多量の数値データからSGRAFを使用して、必要なグラフを出力する。また有限要素法などでは、複雑な形状データ及び要素分割データをHICAD/FEM3(Hitachi Computer Aided Design system/Finite Element Method for 3 dimensional geometry)からDEQSOLの提供するコンバータを通して入力することもできる。



注：略語説明
 SGRAF (Simulation Graphic Facilities)
 MATRIX/HAP (MATRIX Calculation Subprogram Library/HAP)

図2 DEQSOLのシステム構成 DEQSOL言語で記述したプログラムが、FORTRANソースプログラムに変換され翻訳実行され、結果はSGRAF (Simulation Graphic Facilities)でグラフとして出力する。

3.2 機能

DEQSOLは、数値シミュレーション用に設計した高水準の問題向きプログラミング言語である。その特長は、アルゴリズムと計算スキーム並びに領域形状の簡潔な記述と各種解法への柔軟な適応及びスーパーコンピュータ用プログラムの自動作成である。

(1) アルゴリズムと計算スキームの簡潔な記述

偏微分方程式で表される物理現象は、ほとんどそのまま偏微分方程式の形で記述できる。例えば、偏微分方程式の一般的な記法である

$$-\text{div}(A \cdot \text{grad}(U)) + v \cdot \text{grad}(U) = f \dots\dots(1)$$

はDEQSOLでは次のように簡潔度でほとんど差がなく記述できる。

$$-\text{DIV}(A..GRAD(U)) + V..GRAD(U) = F\dots(2)$$

記述された方程式は、自動的に差分法や有限要素法及びバウンダリ フィット法で離散化され計算される。図3にバウンダリ フィット法の計算過程を示す。数値シミュレーション対象の領域形状、メッシュ分割、境界条件及び初期条件も簡潔に記述できる。結果として、DEQSOLでの記述行数は同じ問題に対するFORTRANソースプログラムの記述行数と比べると約 $\frac{1}{10}$ となる。また記述が簡単で、複雑な離散化や数値解法はDEQSOLが自動的に処理するため、数値解析の専門家であっても容易に数値シミュレーションプログラムが作成でき、プログラミング上のミスも少なくなる。

(2) 各種解法への柔軟な適応

DEQSOLは単に解法ルーチンの名称を指定して計算するのは異なり、解法ブロックで実行文を任意に組み合わせて解法を記述する方式を採用しているため、各種の問題への柔軟な適応が図れる。データ操作のためには代入文とSOLVE文の2種類を置き、陽解法、陰解法及び準陰解法の種々のスキームに対応できるように配慮している。また、時間依存問題や非線形問題の反復計算のため、繰り返しブロックを置き計算制御が容易にできるようになっている。

(3) スーパーコンピュータ用プログラムの自動作成

偏微分方程式で表される物理現象を、シミュレーションするプログラムは高い並列性を内在している。しかし、この並

列性を有効に利用したプログラムを作成するには、高度な数値計算手法とスーパーコンピュータ アーキテクチャを知る必要がある。DEQSOLでは、自動的にこの並列性を生かしたFORTRANプログラムの生成及び行列解法ルーチンを用意しているため、スーパーコンピュータの性能を十分に発揮することができる。

4 DEQSOLの使用例

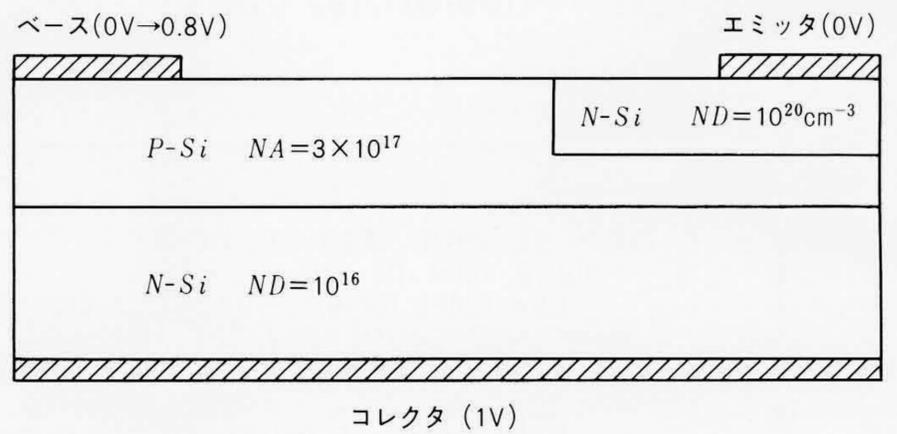
本章では、DEQSOLによる半導体シミュレーションに関する二つの使用例について述べる。

4.1 デバイス シミュレーション

半導体デバイスの2次元シミュレーションモデルを図4に示す。電子密度 n 、正孔密度 p 、電位 ϕ に関し、ポアソン方程式と電流連続の式を連立して解く。本シミュレーションでの課題と特徴的技法は以下のとおりである。

(1) n, p, ϕ の変数間の強い連成(カプリング)

連立系を解くスキームとして、連立している偏微分方程式

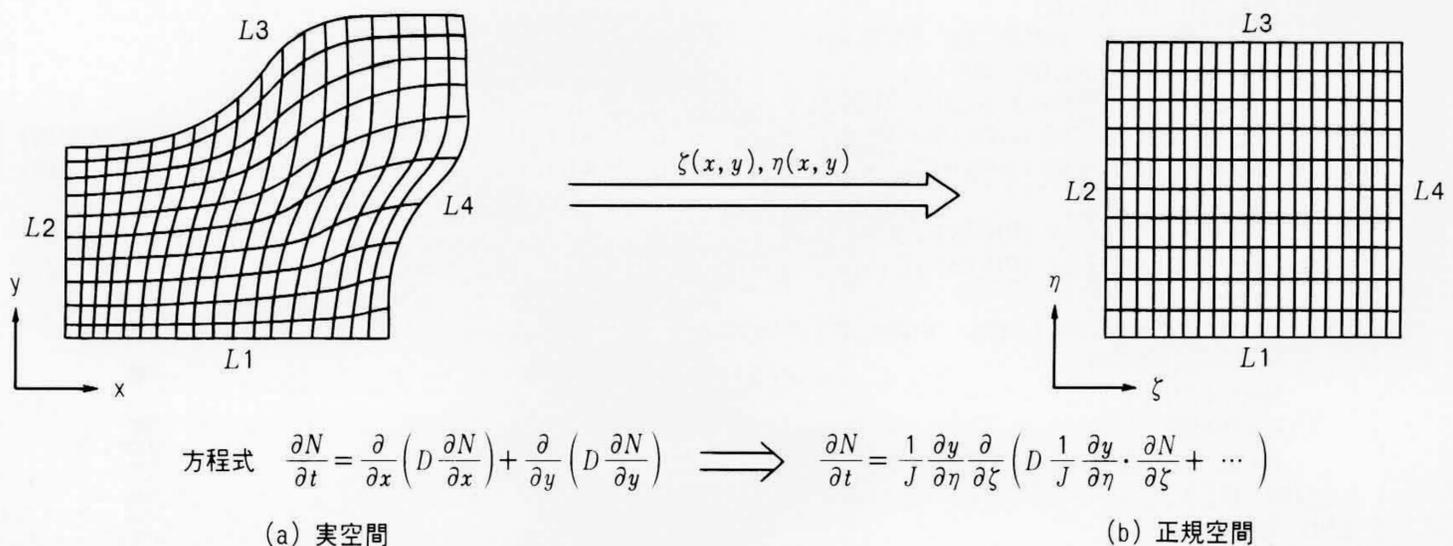


$$\begin{cases} \epsilon_s \Delta \phi = q(n - p - ND + NA) \dots\dots \text{ポアソン方程式} \\ B \nabla \cdot [\mu_n e^{-u} \nabla(e^{-u} n)] = R - G \dots\dots \text{電子電流連続式} \\ B \nabla \cdot [\mu_p e^{-u} \nabla(e^{-u} p)] = R - G \dots\dots \text{正孔電流連続式} \end{cases}$$

ただし $U = \phi/B$
ここに n : 電子密度, p : 正孔密度, ϕ : 電位分布

注: 略語説明 NA (アクセプタ濃度), μ_n (電子移動度)
 ND (ドナー濃度), μ_p (正孔移動度), B (ボルツマン電圧)

図4 デバイス シミュレーションモデル 高抽出状態であるバイポーラデバイスのシミュレーションモデルを示す。



注: J : 実空間から正規空間への、変換のヤコビアン

図3 バウンダリ フィット法の概要 実空間領域(a)を正規空間の長方形領域(b)に変換する。実空間上の偏微分方程式も、正規空間上の偏微分方程式に変換して計算する。

を1本ずつ1変数に関して繰り返し解く巡回解法と、すべてを連立させて解く一括解法のいずれもDEQSOLで記述することができる。ここで巡回解法では、ポアソン方程式を解く際に n, p を単に既知として ϕ について解いたのでは、振動発散して解が求められないことが知られており、これを回避するため n, p を ϕ の関数とみなしたガンメルのアルゴリズム³⁾により対応する。また、ベース電圧の高いときに特に有効となる一括解法では、連立系の非線形性にニュートンラプソン法により対応する。

(2) 指数関数を含む強い非線形性

特に電流連続の式に含まれる e の評価がスキームの安定性を左右する。この $e^{\pm\phi/B}$ はdivの離散化によって $(e^{\phi/B})_{i+\frac{1}{2}}$ の値を参照する形で現れるが、これを通常用いられる $i + \frac{1}{2}$ を囲む両端点の相加又は相乗平均で近似するのでは安定な計算は望めない。これに対して次のシャーフェッタ・ガンメルの近似式³⁾が良い効果を与えることが知られている。

$$U = \phi/B \text{ とする。}$$

$$(e)_{i+\frac{1}{2}} = (U_{i+1} - U_i) / (e^{-U_i} - e^{-U_{i+1}}) \dots\dots\dots(3)$$

これをDEQSOLで表現するには、

$$((3)の右辺) = - [(\partial u / \partial x) / (\partial e^{-U} / \partial x)] \dots\dots\dots(4)$$

に着目し、 $e^{\phi/B}$ を本式で置換した式を対象式とすることによって対応できる。

以上の技法を反映した、DEQSOLによる巡回解法と一括解法のスキーム構成例を図5に示す。紙面の都合でスキームを若干簡略化したが、このようにデバイスシミュレーションでの基本的技法はDEQSOLですべて表現可能である。本例のDEQSOLによる記述行数は、巡回解法で163行、一括解法で261行であり、生成FORTRANはそれぞれ1,996行と3,511行であり、そのベクトル化率は91.5%であった。図6は解析結果で、ベース電圧を0Vから0.8Vに上昇させた際のデバイス内部の等電圧線を示している。

4.2 プロセス シミュレーション

半導体製造プロセスでの不純物抽入後の拡散過程のシミュレーションモデルを図7に示す。本モデルの場合も前節の例と同様に、不純物数〔As(ヒ素), B(ボロン), P(リン)など〕に関する連成と、濃度依存する拡散係数 D による拡散項及びドリフト項ともに非線形性を持っている。このほかに、酸化層の界面は自由形状を含んでいる。このような自由形状に対して、DEQSOLでは有限要素法機能を用いるか、又は自由形状を長方形領域に写像変換してそこで差分法を適用して解を得

```

SCHEME ;
  PHI=PHI0 ;
  ITER NT UNTIL EPSD LE 1.0D-3 ;
  SOLVE DPHI OF
    ES* (LAPL (DPHI) ) -Q* (N+P) *DPHI/B-Q* (N-P-ND+NA) +ES*LAPL (PHI) =0
    BY 'PCG' WITH EPS (1.0D-5) ;
  PHI=PHI+DPHI ;
  SOLVE N OF
    B*DX (MN*DX (-PHI/B) /DX (EXP (-PHI/B) ) *DX (EXP (-PHI/B) *N) )
    +B*DY (MN*DY (-PHI/B) /DY (EXP (-PHI/B) ) *DY (EXP (-PHI/B) *N) ) =R-G
    BY 'PCG' WITH EPS (1.0D-5) ;
  SOLVE P OF
    B*DX (MP*DX (PHI/B) /DX (EXP (PHI/B) ) *DX (EXP (PHI/B) *P) )
    +B*DY (MP*DY (PHI/B) /DY (EXP (PHI/B) ) *DY (EXP (PHI/B) *P) ) =R-G
    BY 'PCG' WITH EPS (1.0D-5) ;
  CALL NORMM (EPSD,DPHI) ;
  END ITER ;
  END SCHEME ;
    
```

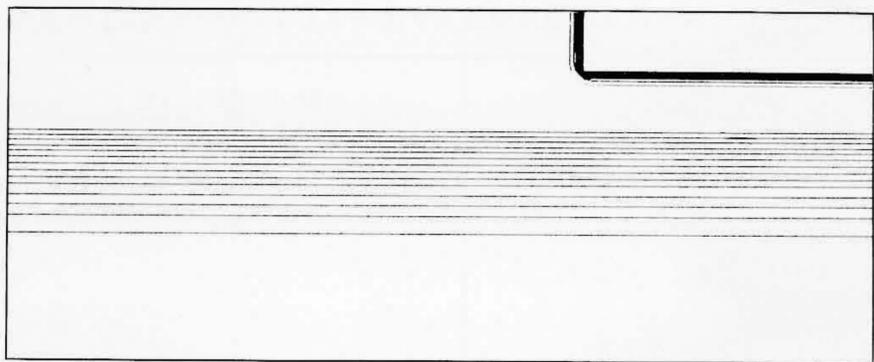
(a) 巡回解法スキーム

```

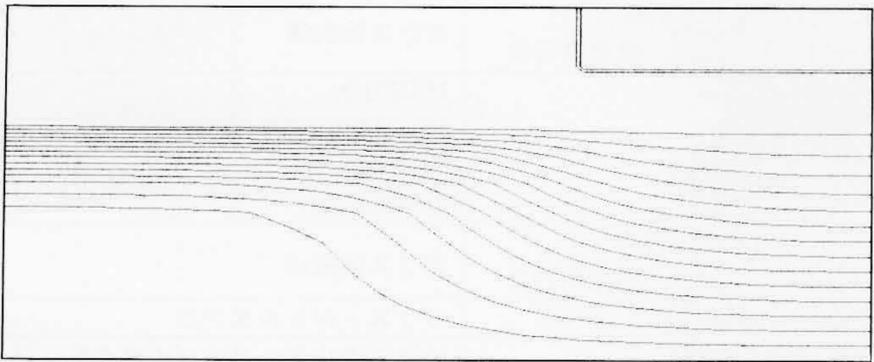
SCHEME ;
  CALL INIT (PHI,P,N) ;
  ITER NT UNTIL EPSD LE 1.0D-3 ;
  SOLVE DPHI, DN, DP OF
    ES* (LAPL (PHI) +LAPL (DPHI) ) -Q* (N-P-ND+NA+DN+DP) =0,
    B*DX (MN*DX (-PHI/B) /DX (EXP (-PHI/B) ) *DX (EXP (-PHI/B) * (N-N*DPHI/B+DN) ) )
    +B*DY (MN*DY (-PHI/B) /DY (EXP (-PHI/B) ) *DY (EXP (-PHI/B) * (N-N*DPHI/B+DN) ) )
    =R-G,
    B*DX (MP*DX (PHI/B) /DX (EXP (PHI/B) ) *DX (EXP (PHI/B) * (P-P*DPHI/B+DP) ) )
    +B*DY (MP*DY (PHI/B) /DY (EXP (PHI/B) ) *DY (EXP (PHI/B) * (P-P*DPHI/B+DP) ) )
    =R-G,
    UNDER BGRP01 BY 'PCG' WITH EPS (1.0D-5) ;
  PHI=PHI+DPHI ;
  N=N+DN ;
  P=P+DP ;
  CALL NORMM (EPSD,DPHI) ;
  END ITER ;
  END SCHEME ;
    
```

(b) 一括解法スキーム

図5 デバイスシミュレーションのスキーム例 (a)は1本1変数の式を各々巡回して解いている。(b)は3変数DPHY, DN, DPを同時に解いている。変数間のカップリングが強いと(b)の方式が必要となる。

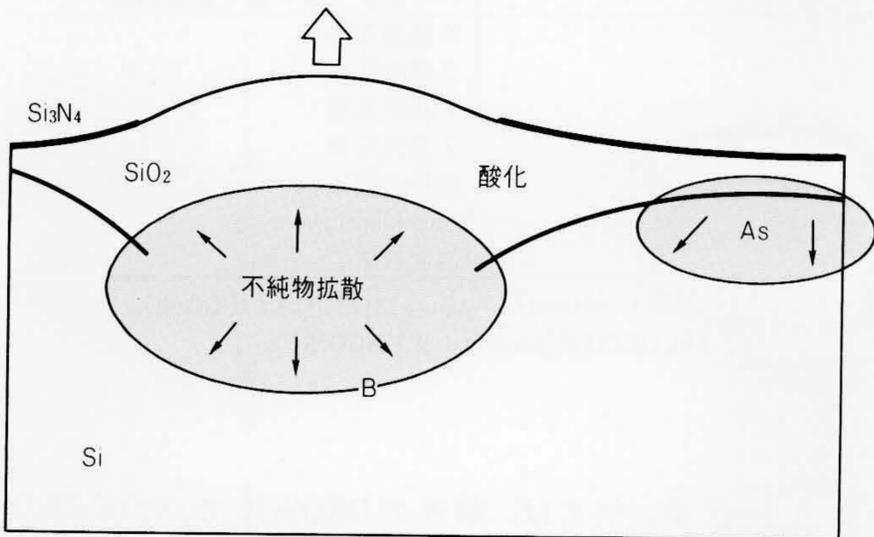


(a) ベース電圧 0V



(b) ベース電圧 0.8V

図6 デバイスシミュレーション結果 デバイス内の等電位線, DEQSOLの結果をSGRAFで作画したものである。



$$\frac{\partial N}{\partial t} = \underbrace{\text{div}(D \cdot \text{grad}(N))}_{\text{拡散項}} \pm \underbrace{\frac{q}{kT} \text{div}\left(\frac{D \cdot N}{\sqrt{U^2 + 4Ni}} \cdot \text{grad}(U)\right)}_{\text{ドリフト項}}$$

ただし N:不純物濃度分布, D:拡散係数

図7 プロセスシミュレーションモデル 配化層の境界面が時間とともに変形していく。

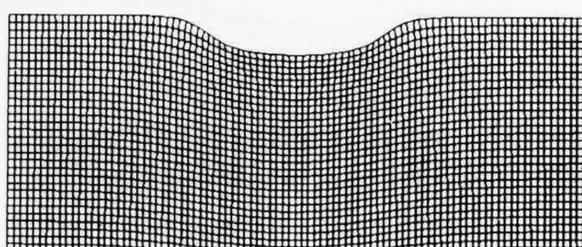
```

    PROG ISO ;
    METHOD BFM ;
    DOMAIN X=[0:10] ,
           Y=[0:10] ;
    POINT P1= (0,0) ,
           P2= (0,10) ,
           P3= (3,10) ,
           :
    REGION BOT=LN (P1,P2) ,
           MID=SPL (P3,P4,P5,P6) ,
           :
           SF1=QUAD (BOT,LF1,RT1,MID) ,
           SF2=QUAD (MID,LF2,RT2,TOP) ;
    FREGION SF1+SF2 ;
    BOUND BOT+LF1+LF2+RT1+RT2+TOP ;
    NCORD (BOT,LF1) ;
    MESH BOT=D (20) ,
         LF1=R (0.9,15) ,
         :
    VAR N,NNEW,D ;
    ICOND NNEW=1.0E+21 AT SF2 ,
          NNEW=0 AT SF1 ,
    BCOND NGRAD (N) =0 AT TOP ,
    :
    SCHEME ;
    ITER NT UNTIL NT GE 100 ;
    CALL DCOEF (DLT,D,NNEW) ;
    N=NNEW+DLT*DIV (D*GRAD (NNEW) ) + ... ;
    END ITER ;
    END SCHEME ;
    END ;
    
```

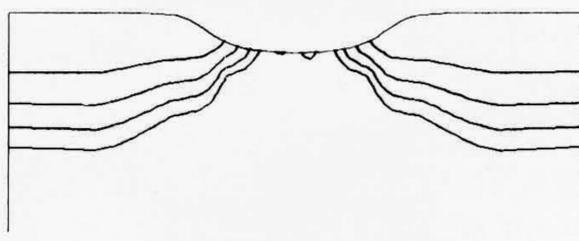
図8 DEQSOLプログラムの記述例 バウンダリ フィット法のプログラムで, POINT文で点の座標値を, REGEION文で線分や四辺形を指定する。

るバウンダリ フィット法を用いることができる。

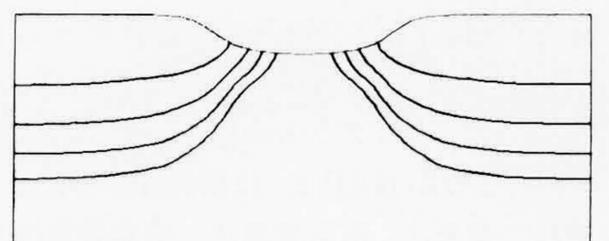
本例ではバウンダリ フィット法を適用した。そのDEQSOLプログラムの構成例を図8に示す。LN(線分), SPL(スプライン曲線)などを用いて自由形状を表現しており, またスキームは陽解法を用いている。DEQSOLによる記述行数は68行, 生成FORTRANの行数は1,003行で97.3%のベクトル化率を



(a) 生成メッシュ



(b) T=10分後



(c) T=30分後

図9 プロセスシミュレーション結果 不純物の等濃度線, DEQSOLの結果をSGRAFで作画したものである。

表1 MATRIX/HAPの機能一覧 大規模疎行列用反復解法と入出力機能付き連立一次方程式の直接解法をサポートしているのが特徴である。

分類	機能	対象	計算法
基本配列演算	配列変換	実対称行列	—
	加減算	実対称行列, 実行列	—
	乗算	実対称行列×実対称行列, 実行列×実行列 実対称行列×実行列, 実行列×実対称行列 実対称行列×実ベクトル 実対称帯行列×実ベクトル, 実帯行列×実ベクトル	—
入出力機能付き基本配列演算	乗算	実行列×実行列, (実行列) ^T ×実行列 実対称行列×実ベクトル, 実行列×実ベクトル 実対称帯行列×実ベクトル, 実帯行列×実ベクトル	—
連立一次方程式	直接解法	実対称行列, エルミート行列, 実行列, 複素行列, 実対称帯行列, エルミート帯行列, 実帯行列, 複素帯行列	ガウス消去法
	大規模疎行列用反復解法	規則的対称疎行列 規則的非対称疎行列 不規則的対称疎行列 不規則的非対称疎行列	MICCG法 MILUBCG法 ICCG法 ILUBCG法
入出力機能付き連立一次方程式	直接解法	実対称行列, エルミート行列, 実行列, 複素行列 実対称帯行列, エルミート帯行列, 実帯行列, 複素帯行列	ガウス消去法
逆行列	逆行列計算	実行列, 複素行列	ガウス・ジョルダン法
固有値	固有値・固有ベクトル	実対称行列	ハウスホルダー法+バイセクション法+逆反復法
		エルミート行列	ハウスホルダー法+バイセクション法+逆反復法
		実行列	初等相似変換+ダブルQR法+逆反復法
		複素行列	初等相似変換+LR法+逆反復法
		実対称三重対角行列	バイセクション法+逆反復法
高速フーリエ変換	実FFT	実データ	2基底変換
	複素FFT	複素データ	2基底変換
	正弦FFT	実奇関数データ	2基底変換
	余弦FFT	実偶関数データ	2基底変換
擬似乱数	一様乱数	実数形	乗算合同法
	正規乱数	実数形	Box-Muller法
	指数乱数	実数形	逆関数法

注：略語説明 FFT(Fast Fourier Transform), ICCG法(Incomplete Cholesky Conjugate Gradient method), MICCG法(Modified ICCG法), ILUBCG法(Incomplete LU decomposition Bi Conjugate Gradient method), MILUBCG法(Modified ILUBCG法)

持っている。図9に本プログラムから自動生成したSi(シリコン)内部のメッシュ(曲線座標格子)と、計算結果である10分後及び30分後のAs(ヒ素)の不純物分布の等濃度線を示す。

5 MATRIX/HAPの機能

行列計算副プログラムライブラリMATRIX/HAPは、連立一次方程式や固有値計算、高速フーリエ変換、擬似乱数生成といった技術計算分野でよく使われる計算を、スーパーコンピュータHITAC S-820の高速性を十分に引き出す工夫をして、サブルーチンライブラリ形式のプログラムプロダクトとして提供する数値計算ライブラリである。したがって、利用者はFORTRAN77言語で記述したプログラム中で、CALL文によりMATRIX/HAPの副プログラムを呼び出すことで、HITAC S-820の高速性を利用できるプログラムが容易に作成できる。副プログラムの機能を、表1にまとめて示す。

MATRIX/HAPは、技術計算分野に広く適用可能である。特に、差分法、有限要素法、境界要素法などの手法により各種の物理現象を数値解析するプログラムを作成するときに、連立一次方程式の解法や固有値計算のライブラリとして有効

に利用できる。例えば、前述のDEQSOLで生成されるFORTRANソースプログラムでは、離散化によって得られる連立一次方程式の解法にMATRIX/HAPを使用し、高いベクトル性能を実現する。

MATRIX/HAPでは、図10に示すように、大規模な連立一次方程式の解法ルーチンを充実させている。特に、入出力機能付きの連立一次方程式の解法ルーチンは、HITAC S-820システムのもとで、高速入出力処理を可能とする拡張記憶装置を効果的に使用するため、主記憶装置上に格納しきれない大規模な係数行列を持つ連立一次方程式も、高速に処理できる。入出力機能付きの連立一次方程式の解法ルーチンでは、係数行列データを複数のブロックに分割し、各々のブロックごとにアクセスできる形式で外部記憶装置上のファイルにデータを記録しておく。主記憶装置上に2ブロック分のデータを格納する配列を確保し、外部ファイルからデータを主記憶装置上の配列にブロック単位に読み込み、2ブロック分ずつのデータを使って、図11に示すように、ガウスの消去法に基づくLU分解を進める⁴⁾。

入出力機能付き副プログラムは、拡張記憶装置上の外部フ

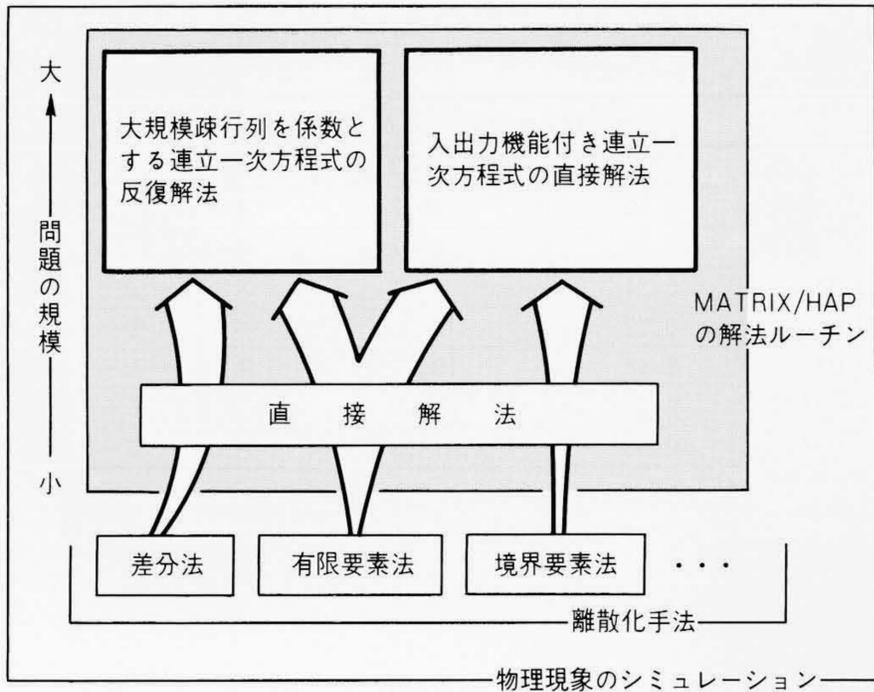


図10 MATRIX/HAPでの大規模連立一次方程式解法機能の充実
問題の規模が大きくなると、反復解法又は入出力機能付きの解法が必要となる。

ファイルを使用するとき、極めて高速になるように工夫してあるが、従来の磁気ディスク装置上のファイルでも使用できる。また、入出力機能付き副プログラムを利用することによって、行列の分解結果や乗算結果を外部ファイル上に保存することも容易であり、計算時間のかかる大規模計算を、分割して実行するときにも有効である。

6 ISAS II /HAPの機能

6.1 ISAS II /HAPの機能概要

ISAS II /HAPは有限要素法に基づいた構造解析プログラムで、次の解析ができる。

- (1) 構造解析
 - (a) 静的解析

- (b) 慣性を受ける自由体解析
- (c) 固有モード解析
- (d) 幾何学的非線形解析
- (e) 座屈解析
- (f) 材料非線形解析
- (g) 複素固有値解析※)
- (h) 周波数応答解析※)
- (i) 過渡応答解析※)
- (2) 熱伝導解析
 - (a) 定常線形熱伝導解析
 - (b) 非定常線形熱伝導解析
 - (c) 非定常熱伝導解析

ISAS II /HAPは図12に示すようにGRADASのアプリケーションと接続され、データ作成と結果整理が簡単にできる。

6.2 ISAS II /HAPの計算処理概要

有限要素法は、偏微分方程式で表される物理現象を、連立一次方程式の形に変換して解く方法である。構造解析プログラムは、連立一次方程式の組み立て、連立一次方程式を解くこと、データの入出力部分を含むその他の部分から成り立っている。問題の規模が大きくなると、連立一次方程式を解く部分が全体の処理時間の50%以上を占めるようになる。この部分の処理速度の向上により、構造解析全体の処理時間の大幅な短縮が図れる。一般に構造物を多くの要素に分割することが多く、構造解析の方程式の未知数は数万元となる。

スーパーコンピュータを使うと、このような大規模な連立一次方程式を効率的に解くことができる。ISAS II /HAPではスーパーコンピュータが得意なベクトルの内積演算を主体とした処理方式を採用し、連立一次方程式を効率よく解くようにしてある。

※) 直接法とモード解析手法が使用できる。

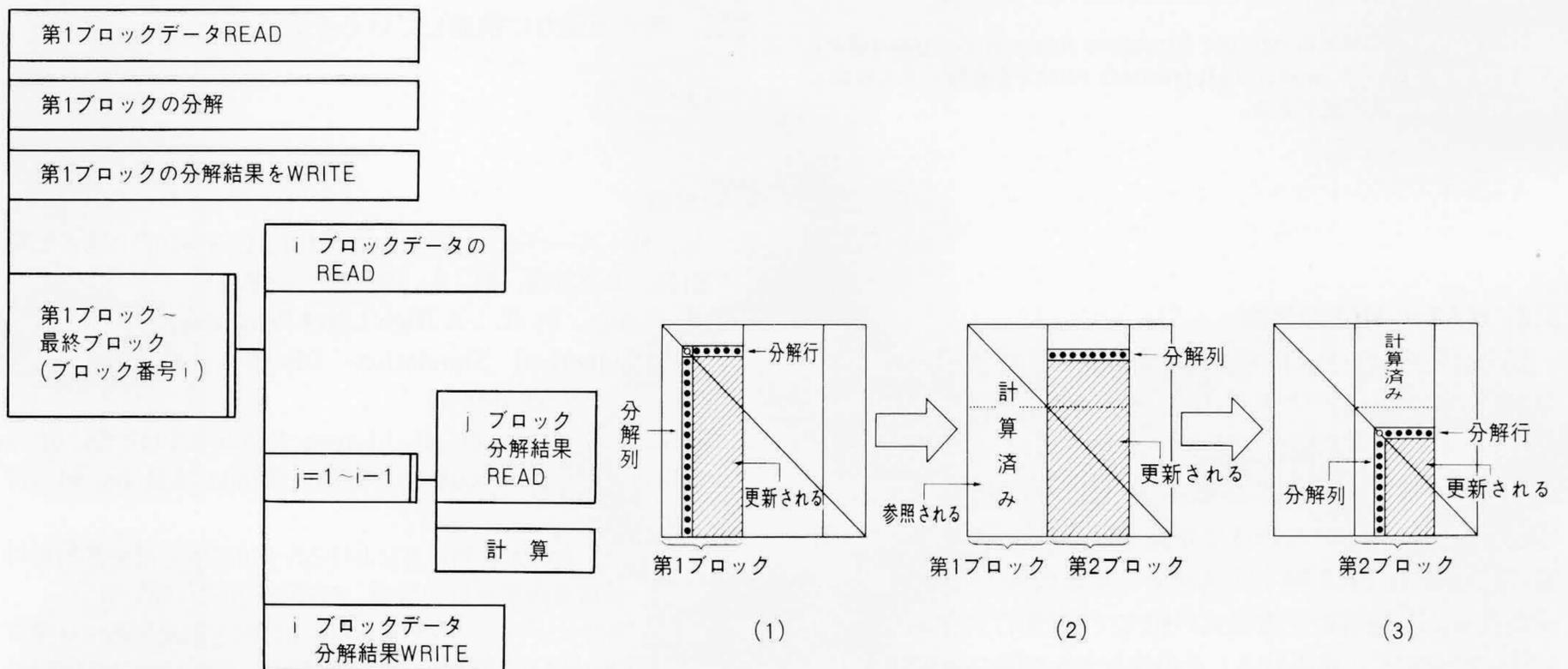


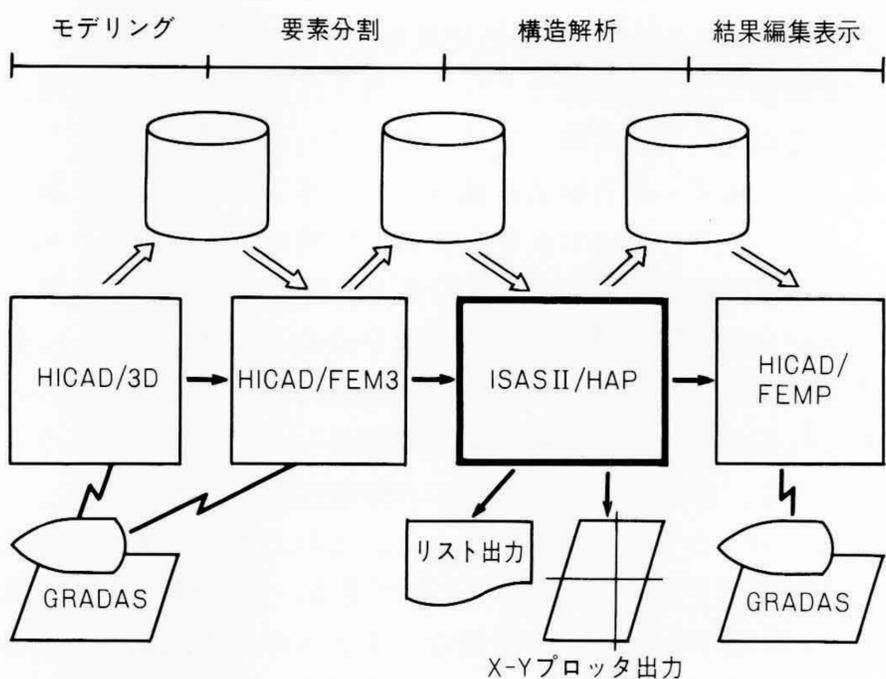
図11 入出力機能付き連立一次方程式解法ルーチンのLU分解処理
参照及び更新するブロック数が少なくなるように工夫してある。

表2 ISAS/HAP CPU性能(S-810/20) 各データはそれぞれスカラーCPU時間を1としてそれに対する比で示した。自由度数が多くなると、ベクトル計算の効果が発揮できることが分かる。

項番	自由度数	全 体	剛性行列	三角分解	前進・後退	そ の 他	実測値 (s)	計算モード
1	2,127	0.81	0.20	0.11	0.01	0.49	37.3	ベクトルモード
		1.0	0.25	0.24	0.01	0.50	46.2	スカラーモード
2	4,472	0.76	0.19	0.22	0.01	0.34	62.7	ベクトルモード
		1.0	0.23	0.41	0.02	0.34	82.1	スカラーモード
3	7,752	0.64	0.15	0.24	0.01	0.22	123.7	ベクトルモード
		1.0	0.18	0.56	0.02	0.24	194.0	スカラーモード
4	18,096	0.29	0.08	0.10	0.007	0.103	408.9	ベクトルモード
		1.0	0.09	0.81	0.013	0.087	1,414.3	スカラーモード

注：ベクトルモード(スーパーコンピュータのベクトル演算器を使用して計算する方法)

スカラーモード(スーパーコンピュータのベクトル演算器を使用しないで、従来のコンピュータと同じスカラー演算機だけで計算する方法)



注：略語説明

- HICAD/3D(Hitachi Computer Aided Design system for 3D Geometry)
- GRADAS(Graphics system for Design and Manufacturing Assistance)
- HICAD/FEM3(HICAD/Finite Element Method for 3 dimensional geometry)
- HICAD/FEMP(HICAD/Finite Element Method Post processor)

図12 ISASII/HAP(Integrated Structure Analysis System/HAP) 関連プログラム HICAD/3D及びHICAD/FEM3を使用して大規模なデータでも簡単に作成できる。

6.3 ISAS II/HAPの性能

表2にISASII/HAPの性能を、問題の規模ごとに各種モードで実測したデータ⁵⁾で示す。ISASII/HAPでは処理の大半を占める連立一次方程式を解く部分だけをスーパーコンピュータ向きに作成してある。この部分は更に、連立一次方程式の係数行列にガウスの消去法に相当する処理を加える三角分解と、実際に方程式を解く前進消去・後退代入の二つの部分に分かれる。構造解析を方程式の組立て(剛性行列作成)、三角分解、前進消去・後退代入、その他と大きく四つに分けてCPU時間を測定した結果を示す。解析の種類は静的解析である。

ここに挙げた数値は各データの全体の処理時間を1とした相対的な値である。総合性能は従来のコンピュータに対して2倍ないし3倍高速である。方程式を解くところだけみると、8,000自由度までの問題を解く場合は、従来の2倍の性能であるが、1万8,000自由度の場合は8倍ないし9倍となる。これはスーパーコンピュータの内積演算の特徴であり、規模が大きい問題ほどスーパーコンピュータが威力を発揮することが分かる。

7 結 言

今後ともスーパーコンピュータで実行する数値シミュレーションプログラムは、ユーザー個別作成のものと応用の2種類が必要である。DEQSOLではユーザー個別作成プログラムの大幅な生産性向上が可能である。このため、DEQSOLの適用分野の拡大に今後とも努力する考えである。また、MATRIX/HAPのようにスーパーコンピュータの性能を完全に発揮させるルーチンの作成はメーカーの責任であり、今後とも続けていく。顧客に提供する応用プログラムに対してはメーカーで広く用意するのは困難なため、流通ソフトウェアが利用できるよう、REFER(流通ソフトウェア紹介制度)への登録、紹介を強力に推進していく考えである。

参考文献

- 1) 後, 外: スーパーコンピュータ“HITAC S-810”による行列計算, 日立評論, 65, 8, 558~562(昭58-8)
- 2) C. Konno, et al.: A High Level Programming Language for Numerical Simulation: DEQSOL, Densi Tokyo, No.25, 50~53(1986-2)
- 3) D.L. Sharfetter, et al.: Large Signal Analysis of a Silicon Diode Oscillator, IEEE Trans. ED-16, 64~77(1969)
- 4) 長堀, 外: 大次元行列計算におけるS-810拡張記憶装置利用の効果, 情報処理学会研究報告, 87-NA-20-2(1987-3)
- 5) 原野, 外: スーパーコンピュータS-810向き構造解析プログラムISASII/HAP, 情報処理学会研究報告, 85-NA-15-2(1985-12)