

國家理論中心數學組『高性能計算』短期課程 Parallel Finite Element Method Using Supercomputer

中島研吾

東京大学情報基盤センター

本稿は、「國家理論中心數學組『高性能計算』短期課程」の一環として、2023年7月10日(月)～14日(金)に国立台湾大学で開催された、集中講義「Parallel Finite Element Method Using Supercomputer¹⁾」(共催:國家理論科學研究中心(National Center for Theoretical Sciences, NCTS)²⁾、東京大学情報基盤センター他)について紹介したものである。

國家理論科學研究中心(NCTS)は1997年に台湾のNational Science Council(NSC, 行政院國家科學委員會)によって設立された横断的研究組織で、物理・数学の2部門がある。数学部門(數學組)の本部は2015年から國立臺灣大學(台北)に置かれている。8つの重点分野があり、国際交流も盛んに行っているほか、会議、チュートリアル等様々なイベントを主催、サポートしている。中核となっている研究者は、国立台湾大学、国立清華大学、国立中央大学、中央研究院(Academia Sinica)等の台湾におけるトップクラスの大学・研究機関を本務としており、参加している学生もこれらの大学の学部生、大学院生である。当センターとNCTSは2018年1月に研究交流協定覚書(Memorandum of Understanding, MOU)を締結している。本集中講義は例年2月に5日間で國立臺灣大學(National Taiwan University, NTU)³⁾で開催してきた。2020年2月に開催ののち、2022年2月は新型コロナウイルス感染症対策のため、オンラインで実施した⁴⁾。

今回は、本年2月に開催した集中講義⁵⁾に続いて、オンサイトで集中講義を実施した。受講者は、募集開始がやや遅くなったこともあり、合計13名であった。実施した講義内容と資料は東大側で準備したホームページ⁶⁾で見ることができる。本講義の内容は、2022年冬学期に情報理工学系研究科、工学系研究科の講義として実施した「科学技術計算II, コンピュータ科学特別講義II, ハイブリッド並列コンピューティング」⁷⁾の教材を使用している。偏微分方程式の数値

NCTS
National Center for Theoretical Sciences

Parallel Finite Element Method using Supercomputer

Time 09:10-17:00, July 10 - 14, 2023
Venue Room 505, Cosmology Building, NTU

Speaker
Kengo Nakajima
The University of Tokyo

Organizers
Weichung Wang
National Taiwan University
Tsung-Ming Huang
National Taiwan Normal University
Feng-Nan Hwang
National Central University
Puchung Chen
National Tsing Hua University
Ying-Jer Kao
National Taiwan University
Yu-Heng Tseng
Institute of Oceanography,
National Taiwan University

Registration and more information about prerequisites and preparation:

Contact: Murphy Yu, murphyyu@ncts.tw

Course Background & Purposes
Several sample programs will be provided and participants can review the economics of lectures through hands-on-exercises/practices using the Windows/BSD/C/C++/OpenCL System (<http://ncts.ntu.edu.tw/2022/Programs/BSDECC/C++/with/Fallout/Army/AM45X/> (same architecture as that of "Toga" supercomputer) at the University of Tokyo, which is ranked 23rd in the Top500 list published in November 2022 (<https://www.top500.org/>)).
Finite Element Method is widely used for solving various types of real-world scientific and engineering problems, such as structural analysis, fluid dynamics, electromagnetics, and etc. This lecture course provides brief introduction to procedures of FEM for 1D/2D steady-state heat conduction problems with various linear solvers (not to parallel FEM). Lectures for parallel FEM will be focused on design of data structure for distributed local mesh files, which is the key issue for efficient parallel FEM. Introduction to MPI (Message Passing Interface), which is widely used method as "de facto standard" of parallel programming is also provided.
Solving large scale linear equations with sparse coefficient matrices is the most expensive and important part of FEM and other methods for scientific computing, such as Finite-Difference Method (FDM) and Finite-Volume Method (FVM). Recently families of Krylov iterative solvers are widely used for this process. In this class, details of implementations of parallel Krylov iterative methods are provided, along with parallel FEM.
Homework lectures on programming for multicore architectures will be also given along with brief introductions to OpenMP and OpenMP/PSH Hybrid Parallel Programming.

Course Outline & Descriptions
This 5-day intensive "intension" class provides introduction to large-scale scientific computing using the most advanced massively parallel supercomputer's Toga supercomputer.
- Finite Element Method (FEM)
- Message Passing Interface (MPI)
- Parallel FEM using MPI and OpenMP
- Parallel Numerical Algorithms for Iterative Linear Solvers

¹⁾ <https://t.ly/G6Xv>

²⁾ <https://ncts.ntu.edu.tw/>

³⁾ <http://www.ntu.edu.tw/>

⁴⁾ <http://nkl.cc.u-tokyo.ac.jp/NTU2022online/>

⁵⁾ <http://nkl.cc.u-tokyo.ac.jp/NTU2023W/>

⁶⁾ <http://nkl.cc.u-tokyo.ac.jp/NCTS2023S/>

⁷⁾ <http://nkl.cc.u-tokyo.ac.jp/22w/>

解法として広く知られている有限要素法 (Finite Element Method) とその並列化について下記項目について講義を実施した：

- 有限要素法の概要とそのプログラミング (一次元・三次元熱伝導)
- MPIによる並列プログラミング
- MPI/OpenMP ハイブリッドによる並列有限要素法
- 並列前処理付き反復法による大規模連立一次方程式求解

受講者全員に Wisteria/BDEC-01 (Odyssey) のアカウントを発行し、実習を行った。スケジュールは表 1 を参照されたい。

本集中講義実施に当たって、多大なご協力を頂いた、王偉仲教授 (國立臺灣大學) と NCTS のスタッフに対してこの場を借りて深甚なる謝意を表したい。

表 1 講義スケジュール

Date	Hour	Content	Date	Hour	Content
July 10 (M)	09:10-10:00	Introduction (1/2)	July 13 (Th)	09:10-10:00	Exercise (Optional)
	10:10-11:00	Introduction (2/2)		10:10-11:00	Exercise (Optional)
	11:10-12:00	FEM (1/7)		11:10-12:00	MPI Practice (2/4)
	13:10-14:00	FEM (2/7)		13:10-14:00	MPI Practice (3/4)
	14:10-15:00	FEM (3/7)		14:10-15:00	MPI Practice (4/4)
	15:10-16:00	FEM (4/7)		15:10-16:00	Parallel FEM (1/4)
	16:10-17:00	Exercise (Optional)		16:10-17:00	Parallel FEM (2/4)
July 11 (T)	09:10-10:00	FEM (5/7)		July 14 (F)	09:10-10:00
	10:10-11:00	FEM (6/7)	10:10-11:00		Parallel FEM (4/4)
	11:10-12:00	FEM (7/7)	11:10-12:00		Exercise
	13:10-14:00	Parallel FEM	13:10-14:00		OpenMP/MPI Hybrid (1/3)
	14:10-15:00	Login to Odyssey	14:10-15:00		OpenMP/MPI Hybrid (2/3)
	15:10-16:00	MPI (1/6)	15:10-16:00		OpenMP/MPI Hybrid (3/3)
	16:10-17:00	Exercise (Optional)	16:10-17:00		Exercise (Optional)
July 12 (W)	09:10-10:00	MPI (2/6)			
	10:10-11:00	MPI (3/6)			
	11:10-12:00	Exercise			
	13:10-14:00	MPI Practice (1/4)			
	14:10-15:00	MPI (4/6)			
	15:10-16:00	MPI (5/6)			
	16:10-17:00	MPI (6/6)			