RISS
Research and Development of
Innovative Simulation Software

オープンソースソフト FrontISTER (ﾌﾛﾝﾄｱｲｽﾀｰ)の 大規模並列解析戦略

東京大学人工物工学研究センター　奥田 洋司

戦略的革新シミュレーションソフトウェアの研究開発 (2005年度～2007年度)
http://www.rss21.iis.u-tokyo.ac.jp

『 ハイエンド計算ミドルウエア(HEC-MW)援用構造解析システムによる汎用連成シミュレーション・システム 』

大規模並列性能を保証しつつ構造解析機能を充実化

文部科学省ITプログラム戦略的基盤ソフトウェア (2002年度～2004年度)
http://www.fsis.iis.u-tokyo.ac.jp

『 科学技術並列ソフトウェア開発支援 HPC-MW 』

GeoFEMプロジェクト (1998年度～2002年度)

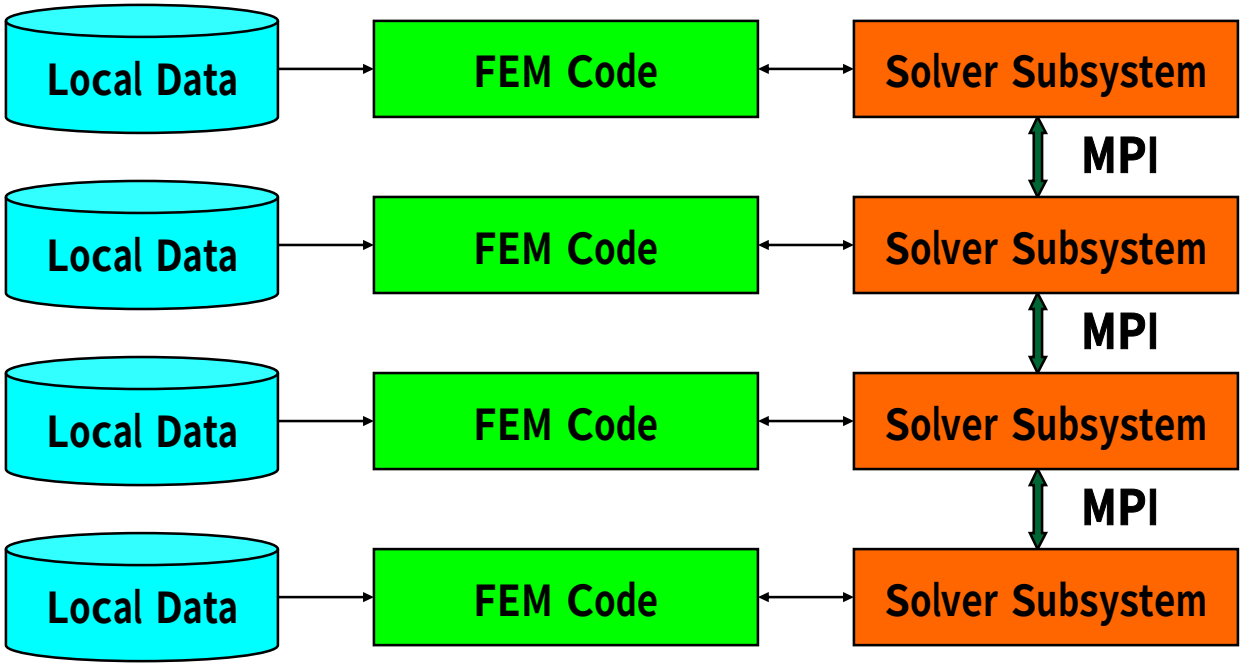
・地球シミュレータ上でのFEMコード
・並列FEMの基盤確立

Hybrid Parallel / Vector & マルチコア対応

- Fortran90 (可視化部はC)
- Inter-node : MPI
  - 領域分割に基づくSPMD (Single-Program Multiple-Data) 並列
- Intra-node : OpenMP (あるいはPthread)
  - オーダリング (演算の依存性をなくす)
  - 外側ループに対してOpenMP
- Each PE: Vectorization
  - オーダリング (演算の依存性をなくす)
  - 最内側のループを最も長くしてベクトル化

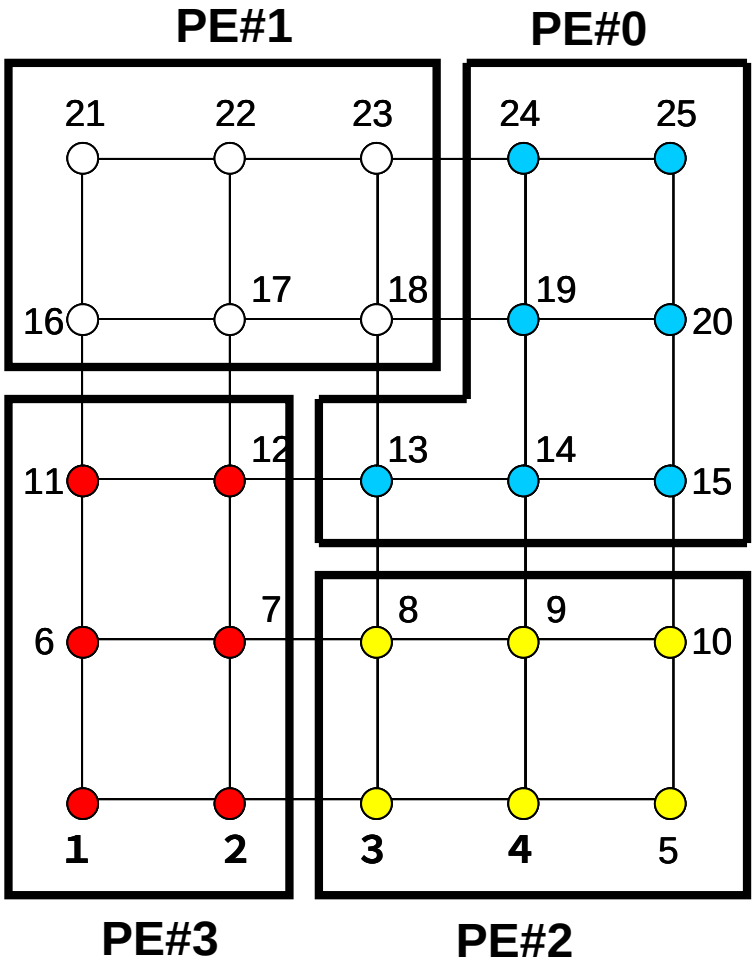
SPMD Programming Style

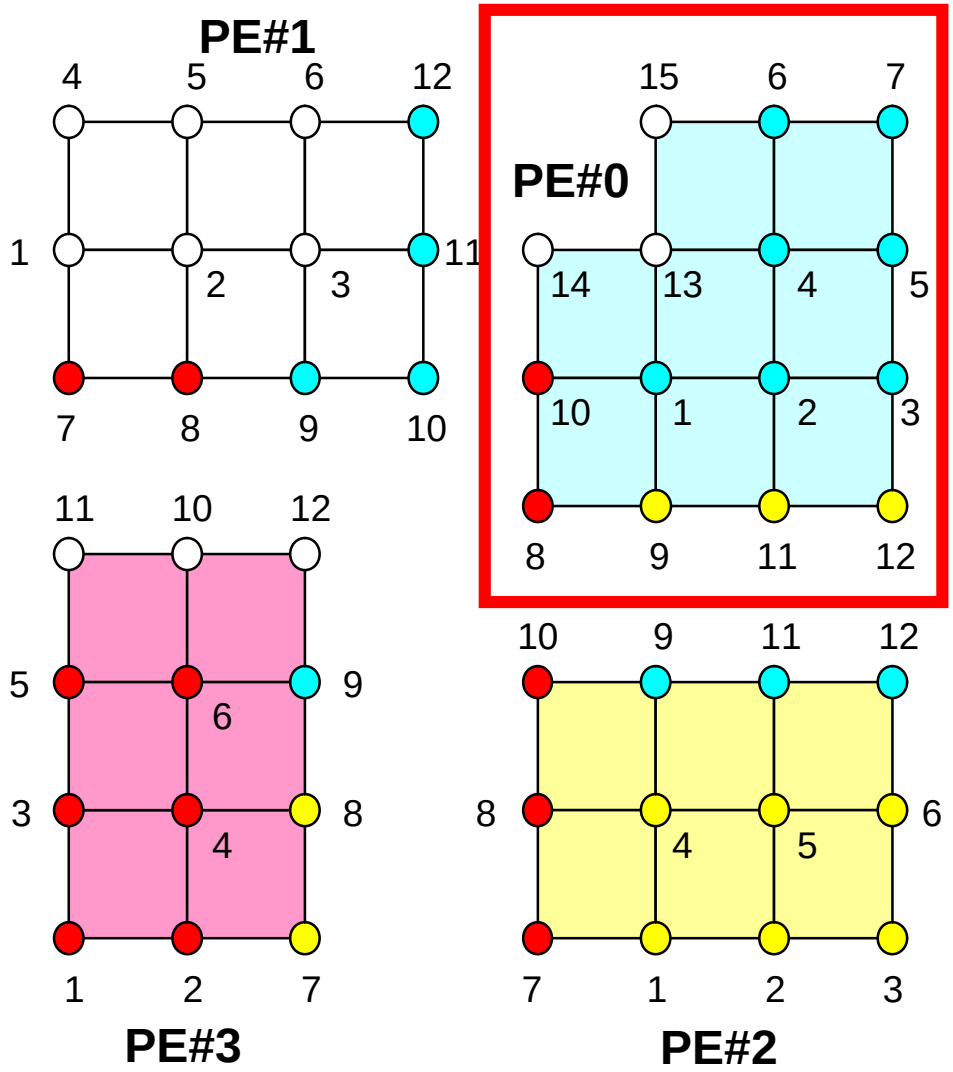
- Large file handling → Local distributed data
- Structural analysis modules just consider local operation (element matrix assemble)
- Global operation occurs only in linear solver.



Local Data Structure

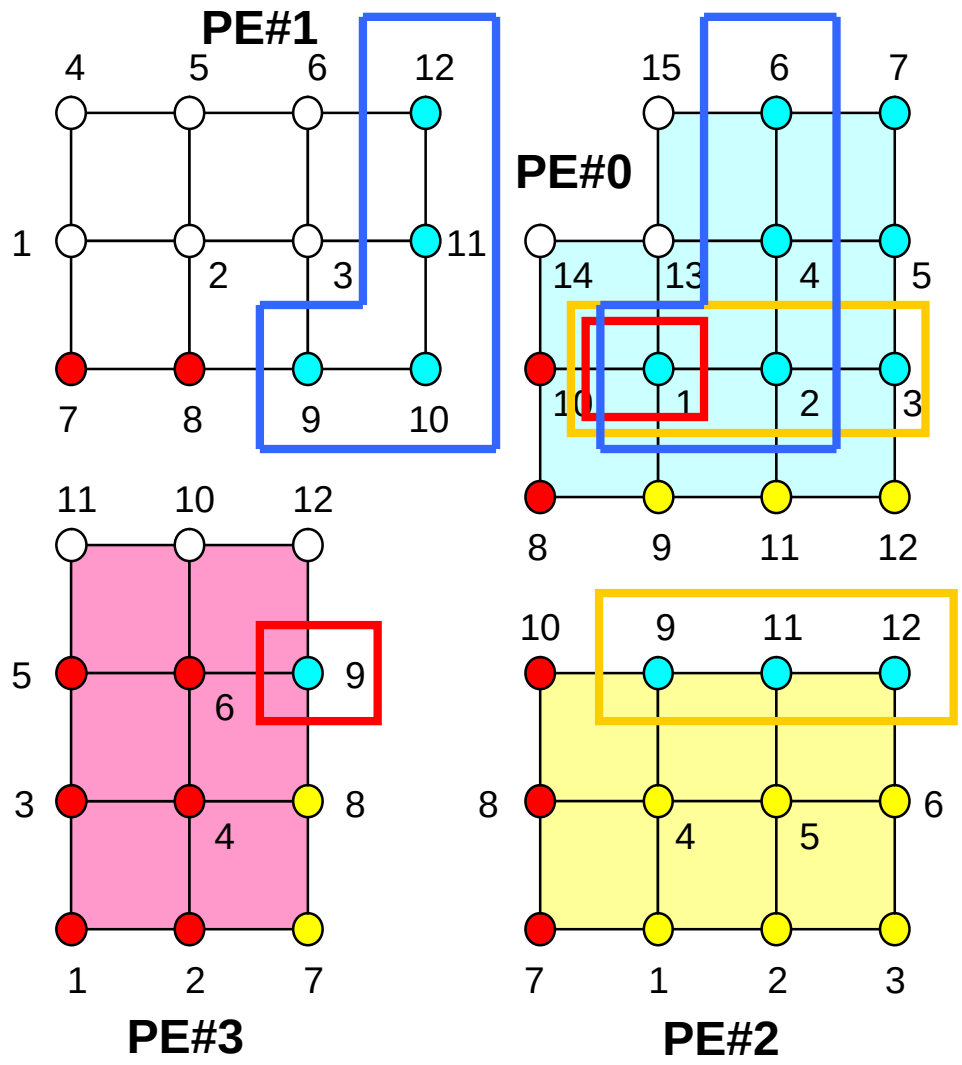
Node-based Partitioning
internal nodes - elements - external nodes





Local Data Structure : PE#0

internal nodes - elements - external nodes



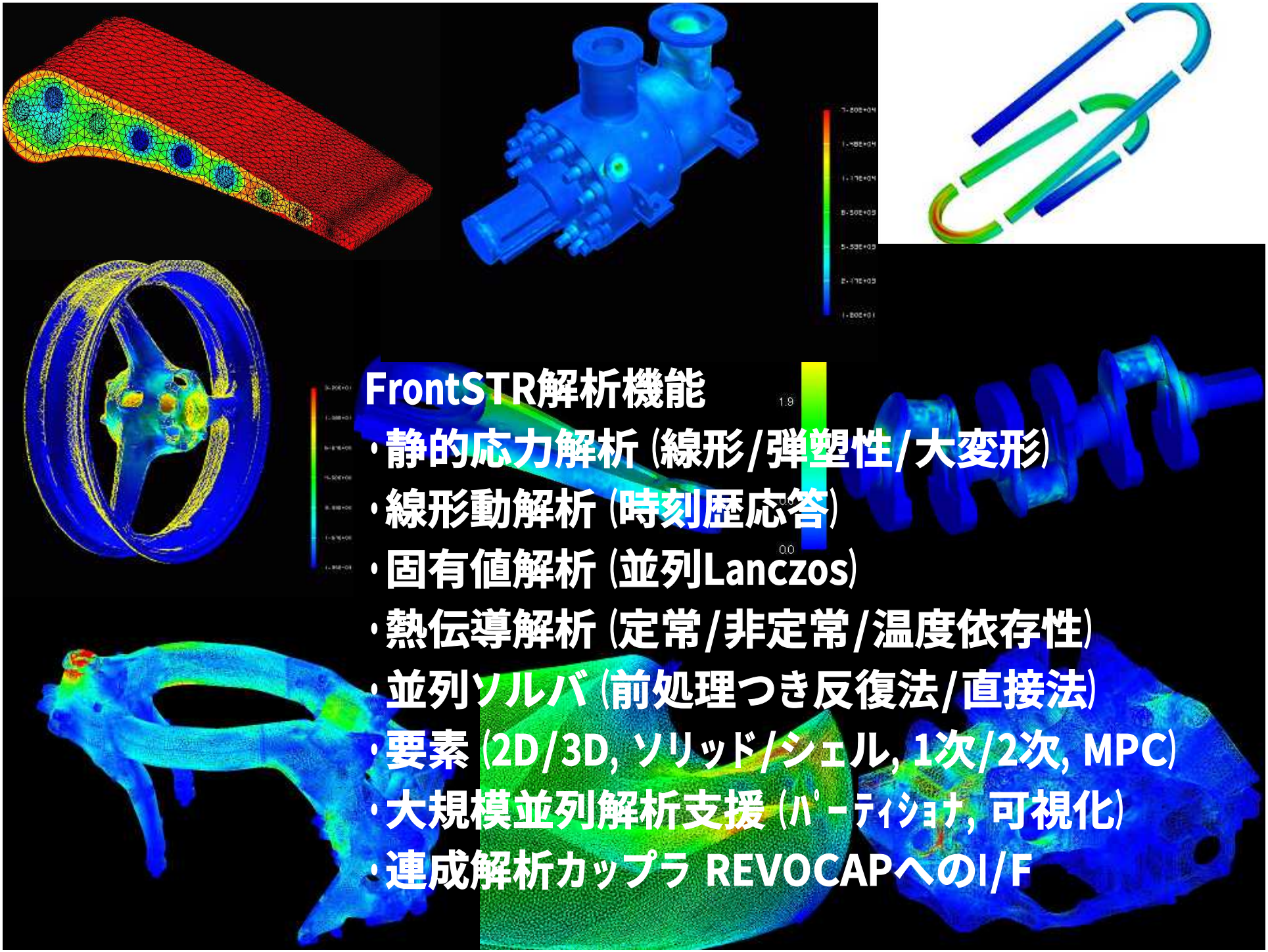
Partitioned nodes themselves
internal nodes

Elements which include “internal nodes”
Provide data locality in order to carry out element-by-element operation in each partition

Nodes included in the elements
external nodes
Numbering : internal -> external

Internal nodes which are “external nodes” for other partitions
boundary nodes

Communication table provides boundary~external node relationship



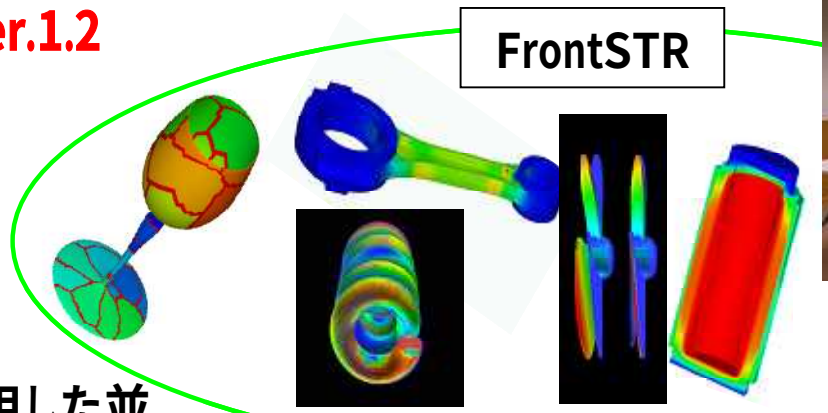
FrontSTR解析機能

- 静的応力解析（線形/弾塑性/大変形）
- 線形動解析（時刻歴応答）
- 固有値解析（並列Lanczos）
- 熱伝導解析（定常/非定常/温度依存性）
- 並列ソルバ（前処理つき反復法/直接法）
- 要素（2D/3D, ソリッド/シェル, 1次/2次, MPC）
- 大規模並列解析支援（ﾊﾟｰﾃｨｼｮﾅ, 可視化）
- 連成解析カップラ REVOCAPへのI/F

HEC-MWを基盤とするFrontSTR

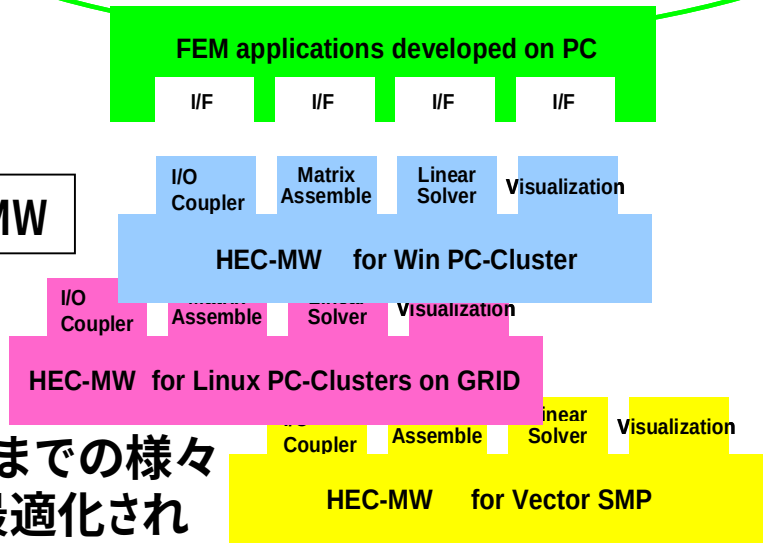
2008年3月 Ver.1.2

FrontSTR



WinノートPC群による
FrontSTR並列計算

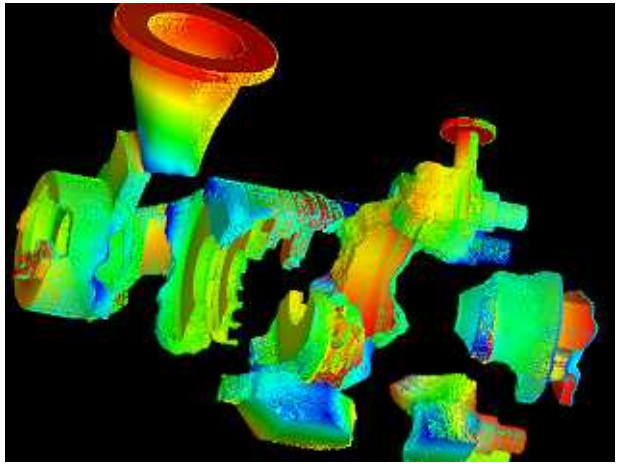
HEC-MWを利用した並列構造解析プログラム



PCクラスタからスパコンまでの様々な計算環境において、最適化された並列有限要素法を効率的に開発可能とするフレームワーク

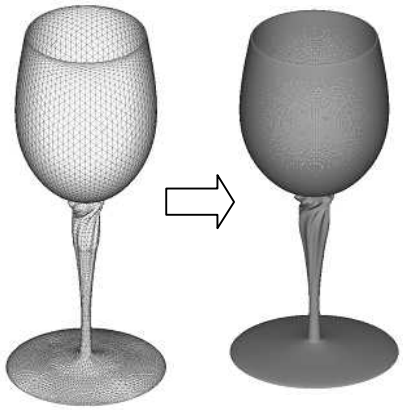
‘並列有限要素解析[II] FrontSTRを使いこなす’, 培風館, 2008.

ソフトウェアの特長



- 局所化されたデータ構造による効率的な大規模並列計算
  - ＥＳで 7.9億自由度の計算（反復法ソルバ）

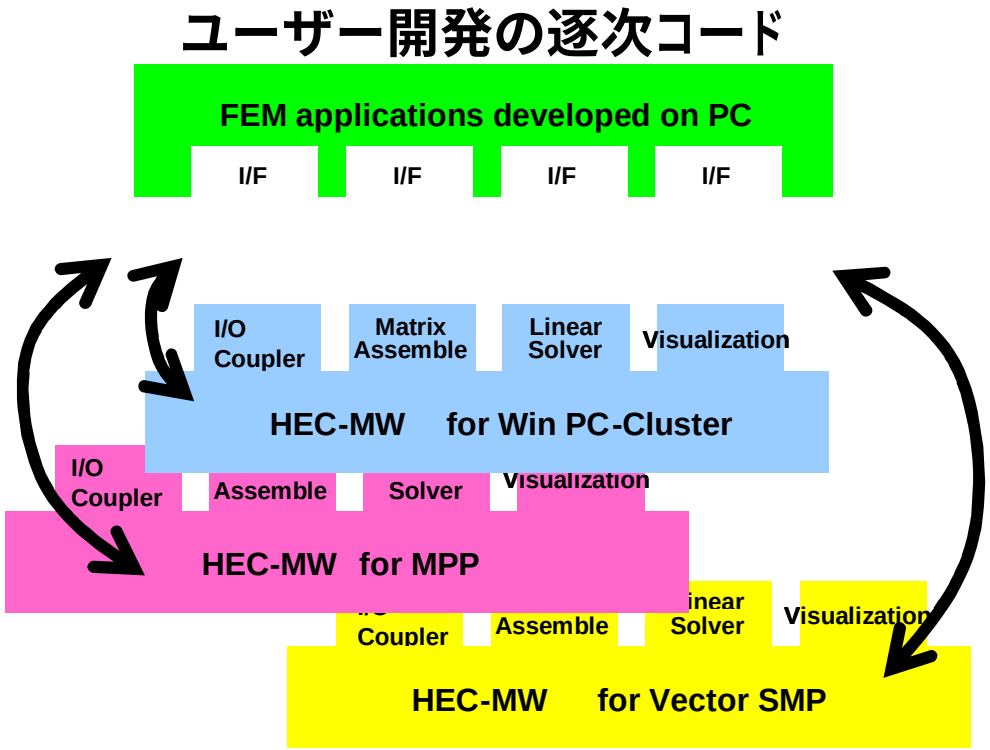
    並列化率 99.9885%, 4GFlops/PE（対ピーク比50%）,
    PCｸﾗｽﾀで 24h → 地球シミュレータで 1h
- 並列直接法ソルバ
  - 悪条件の行列（シェルや扁平な要素など）や固有値解析で威力を発揮
  - 1PE(2GB)では10万節点程度が限界
    →並列化で解決



50万点ソリッド静解析、26万点シェル固有値解析など

HEC-MWの提供する機能

- 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 等
- 可視化
- ユーティリティ
  - 領域分割 等



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
```

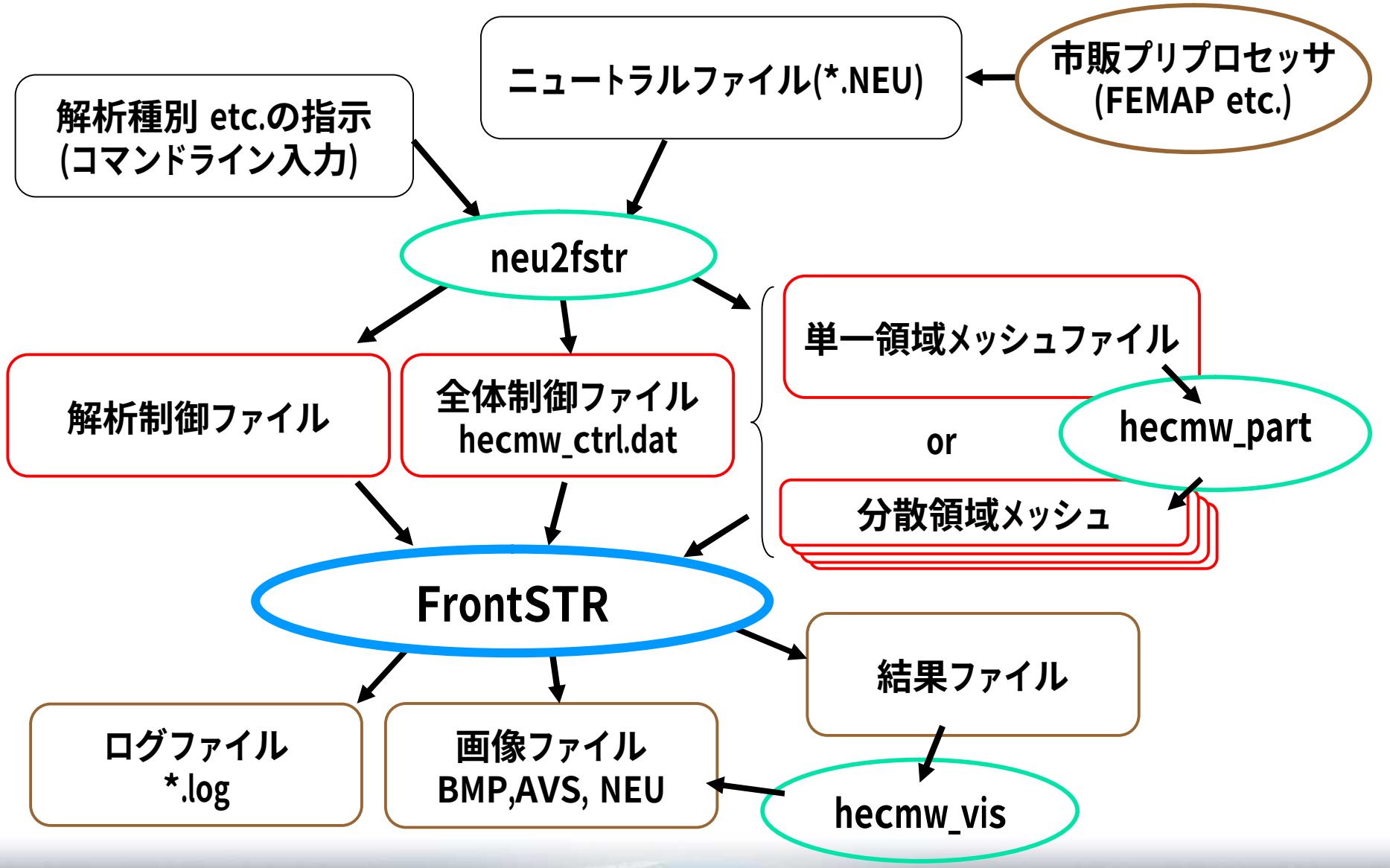
1）hecmwモジュールを“USE”

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

FrontSTR 入出力系 (1/2)

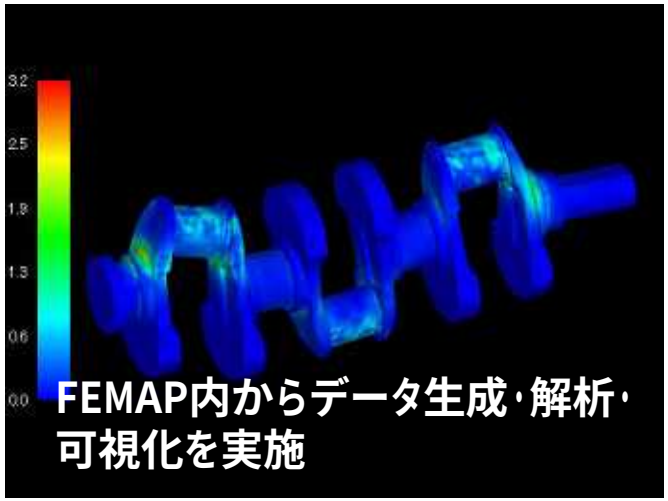


FrontSTR 入出力系 (2/2)

FEMAP + FrontSTRPre

FEMAP内からデータ生成・解析・
可視化を実施するための拡張機能
(開発協力:寺坂・陳(東大))

FEMAPのメニューバー



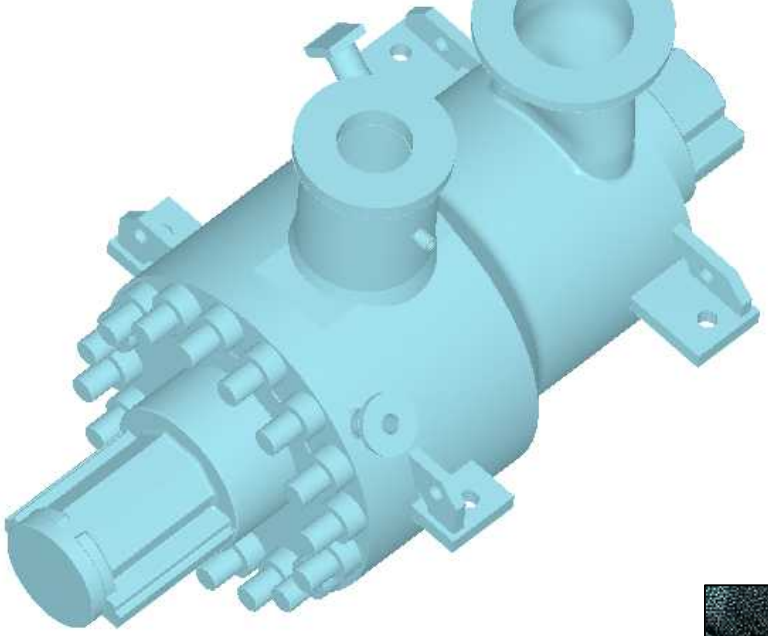
FEMAP内からデータ生成・解析・
可視化を実施

FrontSTR用サブメニュー

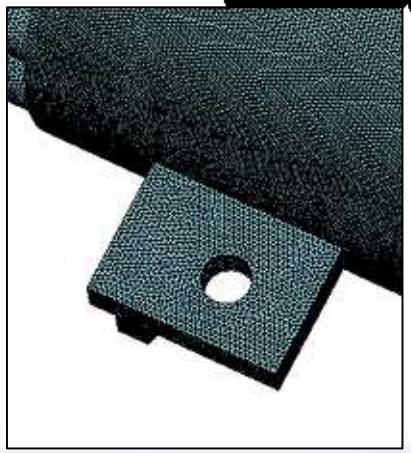
PCクラスタによる1億自由度ポンプの静解析

RSS21
Revolutionary Simulation Software

協力：日立プラントテクノロジー



メッシュライン無し

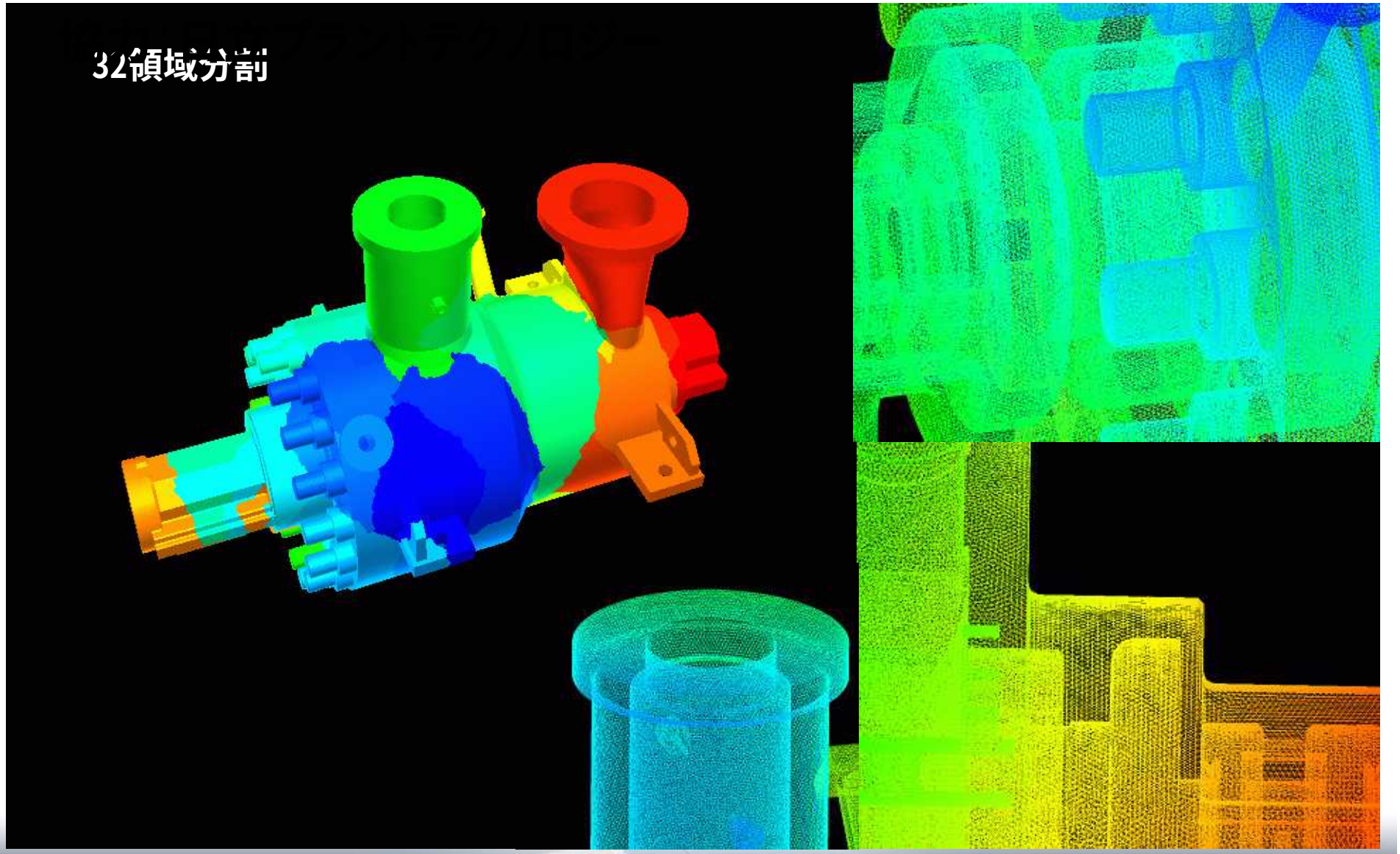


メッシュライン有り

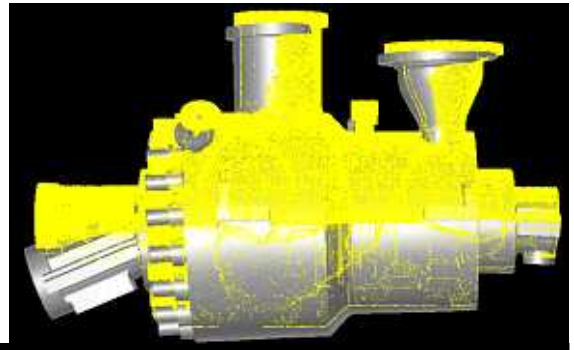
節点数：	36,728,129
要素数：	26,289,770
自由度数：	110,184,387
使用要素：	四面体2次要素

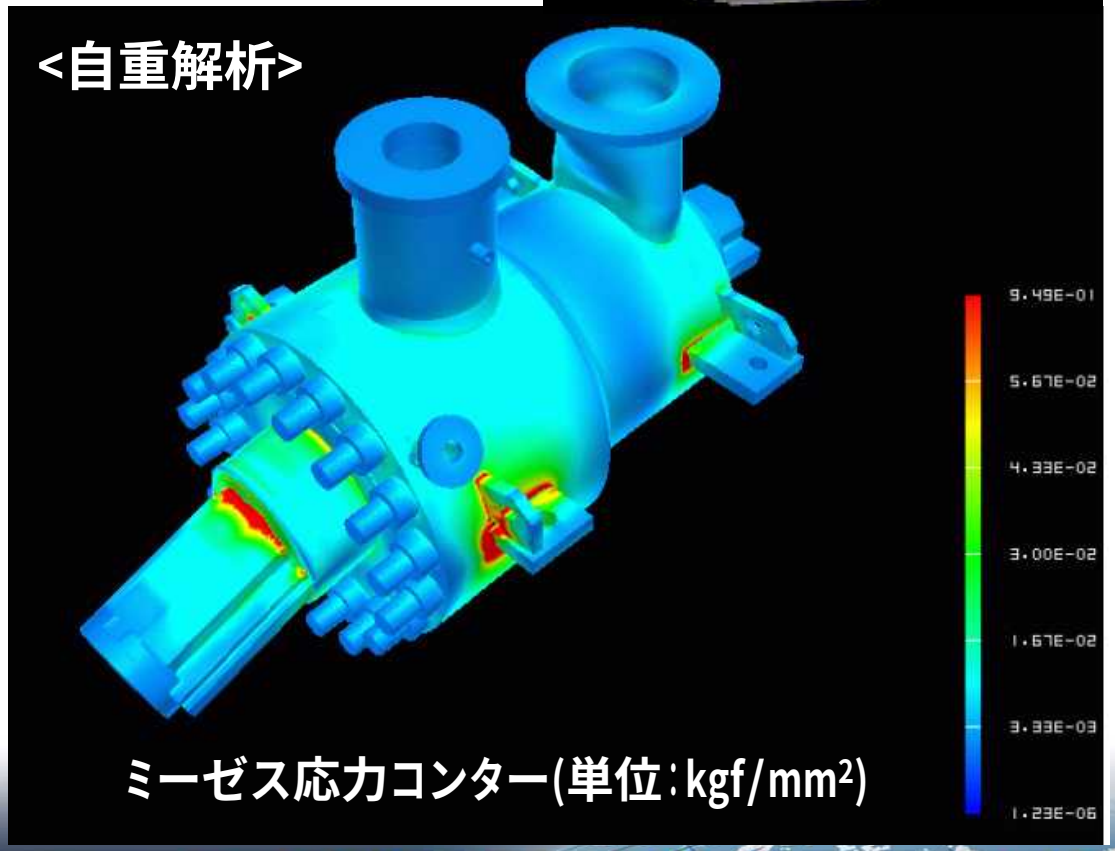
静解析（自重、内圧）および可視化機能について大規模問題への適用性を実証

PCクラスタによる1億自由度ポンプの静解析



PCクラスタによる1億自由度ポンプの静解析



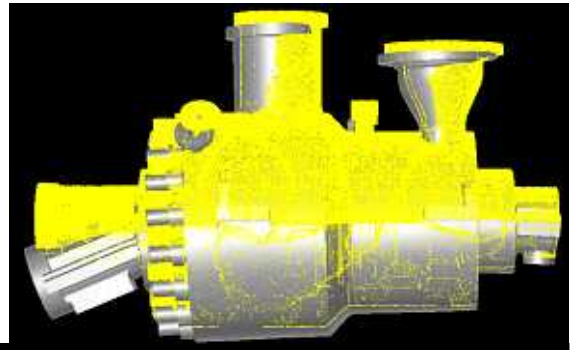


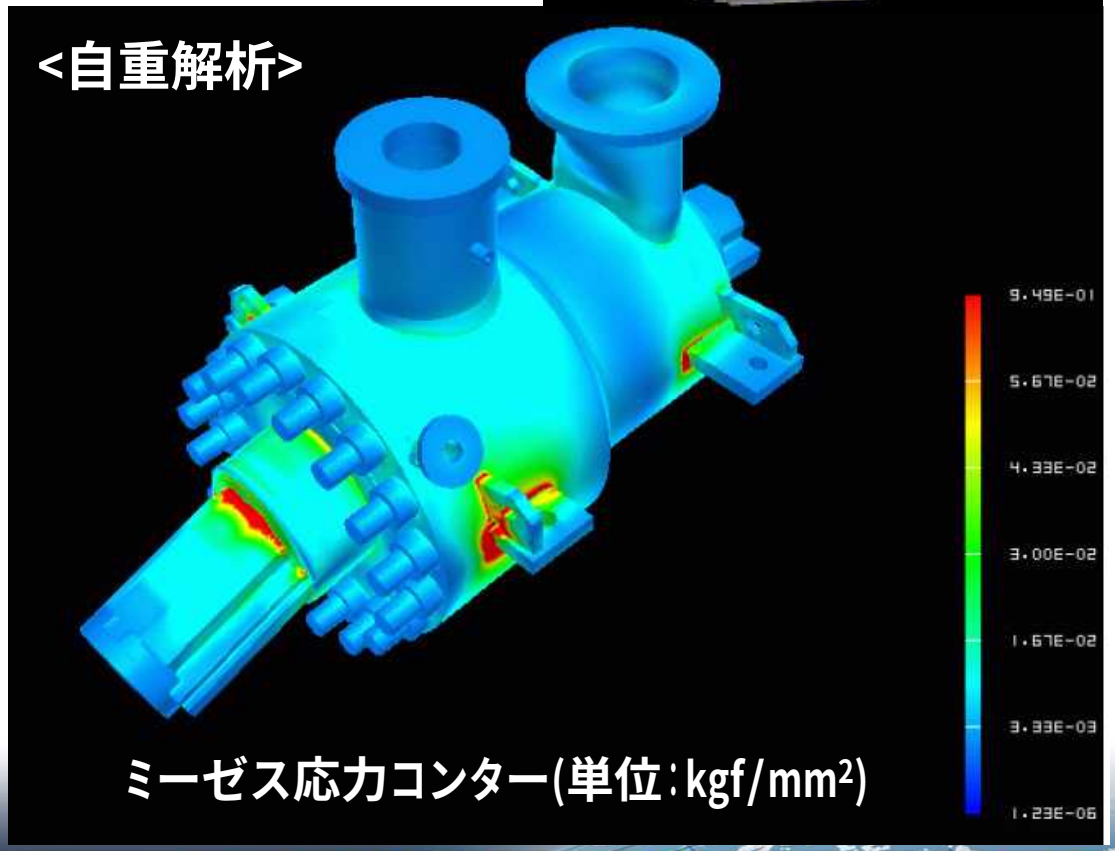
計算機:
Itanium2 Cluster, 1.4GHz,
32PE 使用
使用メモリ: 120 GB
計算時間: 27.3 (h)
CG反復: 10,249 回

＜内圧解析のとき＞
計算時間: 約24 (h)
CG反復: 8,557 回

＜HEC-MW可視化処理＞
計算機:
Xeon Cluster, 2.8GHz,
32PE 使用
Rendering処理枚数: 12枚
処理時間: 1時間弱
(ファイル渡しバージョン、うち5～7割がI/O)

PCクラスタによる1億自由度ポンプの静解析



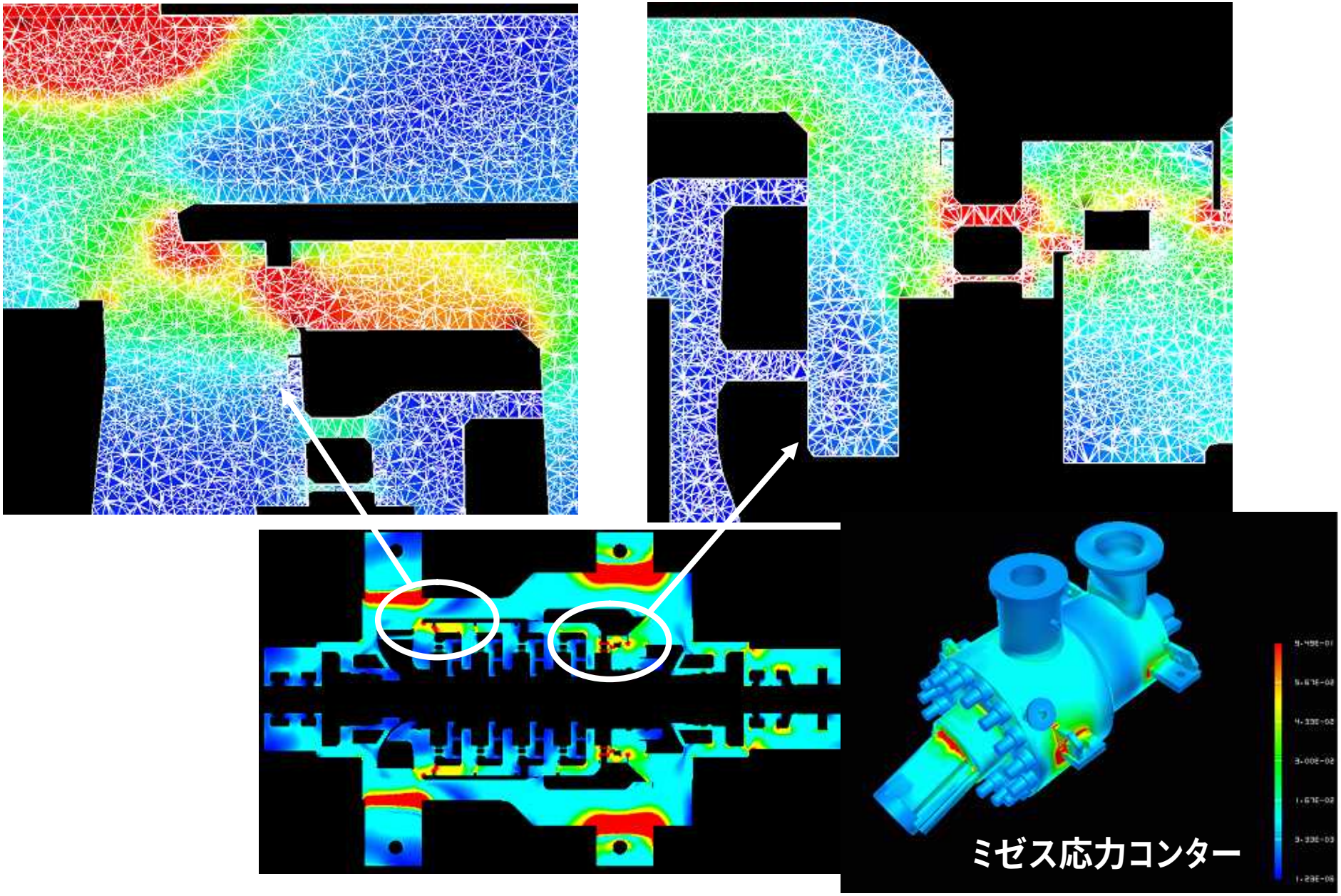


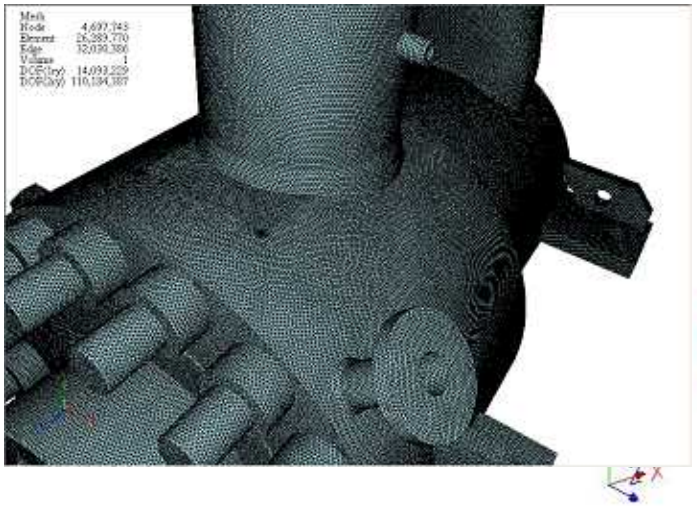
ミーゼス応力コンター(単位：kgf/mm²)

大規模解析のメリット（日立プラントテクノロジー）

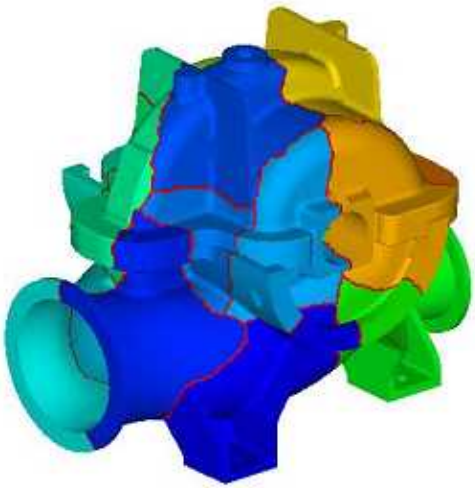
- ■解析対象構造の３ＤＣＡＤモデルそのまま無理な近似をせずにモデル化できる
- ■形状の不連続部や応力集中部の変形、応力解析が高精度に求まる
- ■流体-構造連成解析で、両者のメッシュサイズがほぼ同じサイズにできる（「戦略ソフト」の時点では構造側の要素が約10倍の大きさ）
- ■解析時間の短縮が期待できる

自重解析

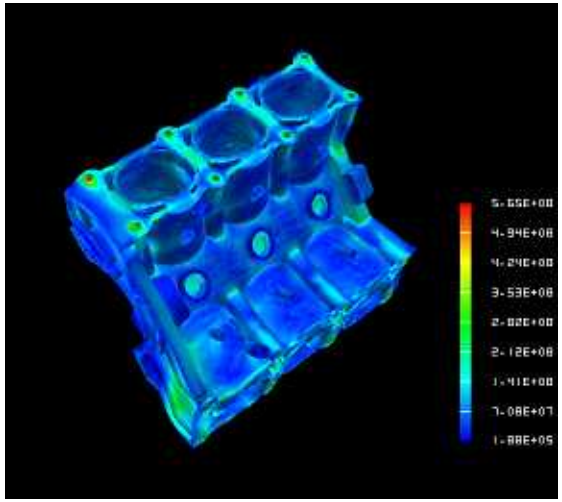




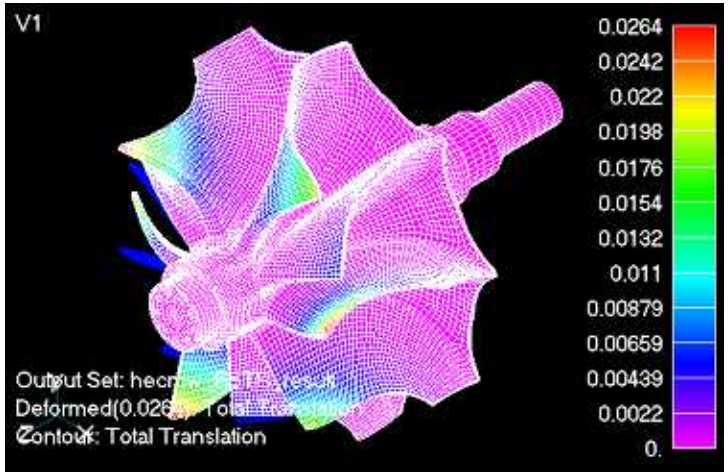
1.1億自由度ポンプモデル



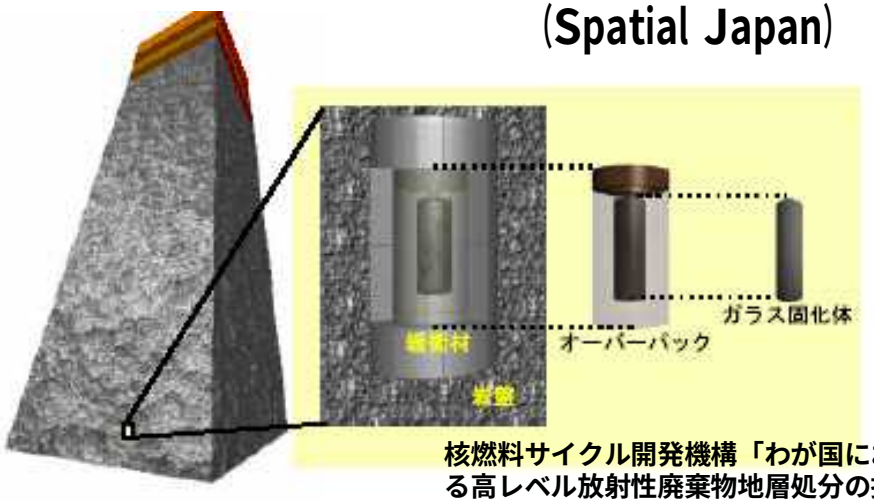
ダブルボリュートポンプのケーシング
（日立プラントテクノロジー）



V6エンジン
（Spatial Japan）

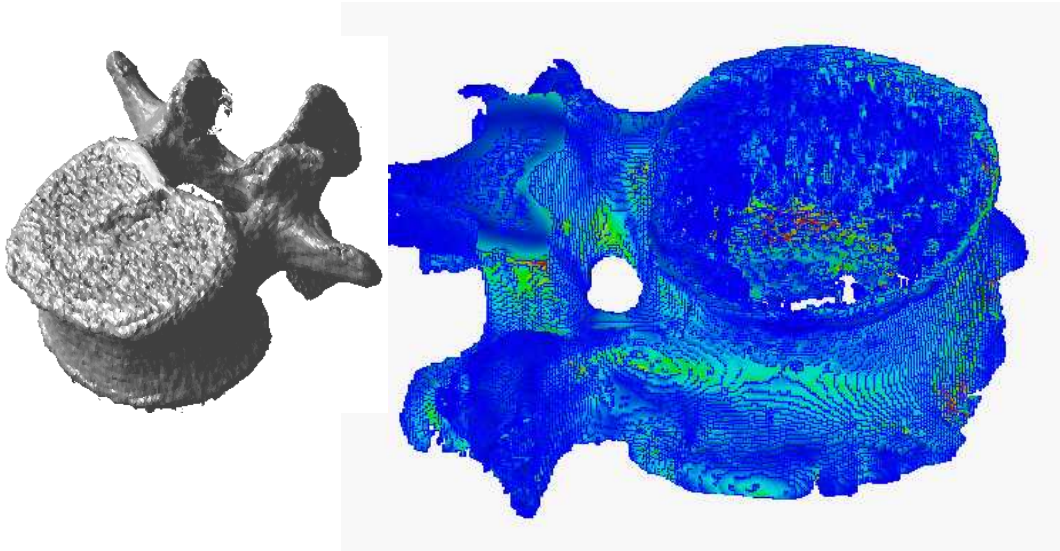


過給機タービンインペラ
（IHI）

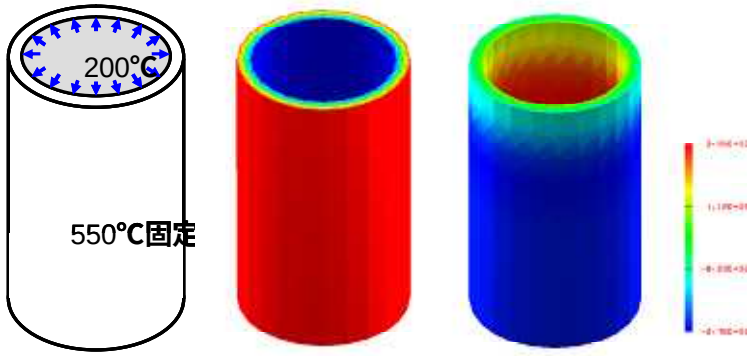


核燃料サイクル開発機構「わが国における高レベル放射性廃棄物地層処分の技術的信頼性」（平成11年）より

HEC-MWによるDtransu-3D･ELの並列化
（三菱マテリアル）



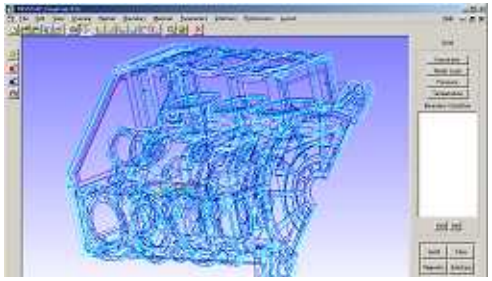
ヒト腰椎骨のマルチスケール解析
(立命大学)



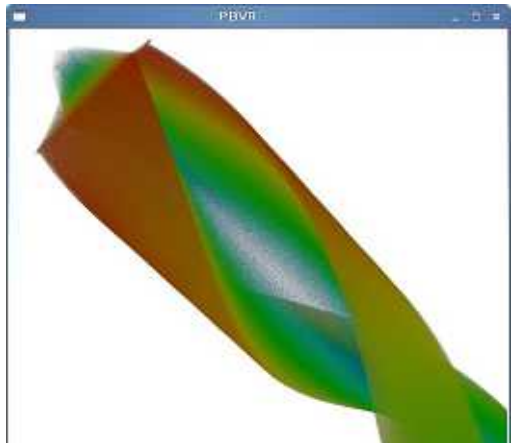
高温発電プラント機器
(電力中央研究所)

その他の利用事例
・平織強化複合材料　(大阪工業大学)
・織物複合材料　(龍谷大学)
・日本機械学会「計算力学技術者認定事業」付帯講習

CAD/可視化ツールとの連携



AGMPrePost (Spatial Japan)



大規模非構造格子分散可視化　(京大, 小山田教授)

実証計算：ガス配管の応力集中

- **背景**

  半導体製造装置に使用されるガス配管の応力集中の現象をFrontSTRを用いて確認したい。

  （対象物の変形は微小なものであるためできるだけ大規模な計算を行いたい。←既存ソフトでは不可。）

- **計算規模（四面体2次要素）**

  要素数： 5,462,272　　節点数： 7,459,586

  プロセッサ数（＝分割数）： 16分割

- **使用計算機**

  PCクラスタ（skyraiders） CPU: Xeon 2.8GHz

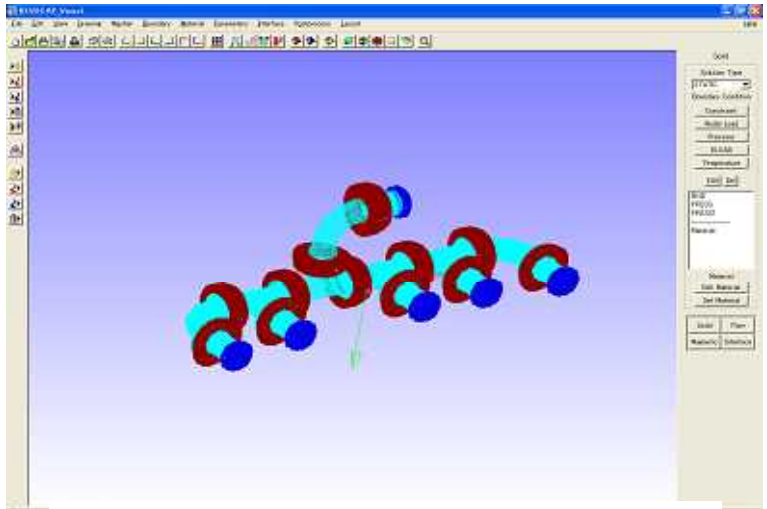
  RAM: 2Gbyte, Net: 10/100base-T, OS: RedHat 7.3

- **計算時間**

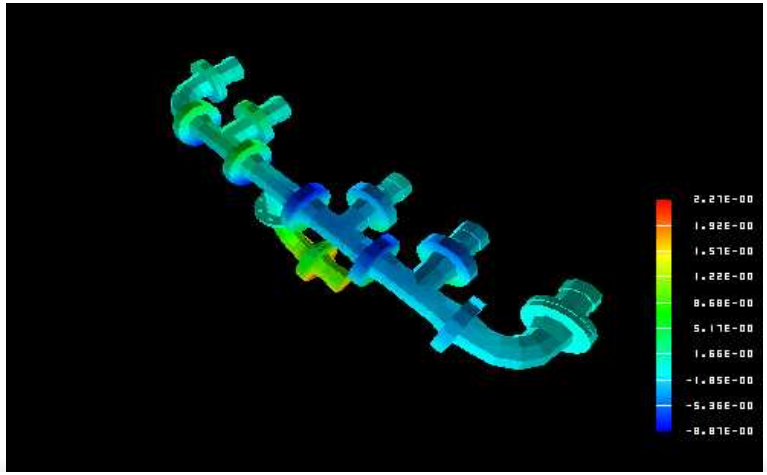
  結果出力含めて約8h

- **出展**

  ワッティ-株式会社殿 http://www.watty.co.jp/



REVOCAP_Visualを用いたプリ処理



応力コンター図と変形図（FrontSTRより出力）

オフィスでのWindows環境におけるHEC

RSS21
Revolutionary Simulation Software

WinノートPC群によるFrontSTR並列計算実験

オフィスでのWindows環境におけるHEC

RSS21 Revolutionary Simulation Software

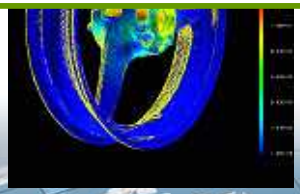
WinノートPC群によるFrontSTR並列計算実験

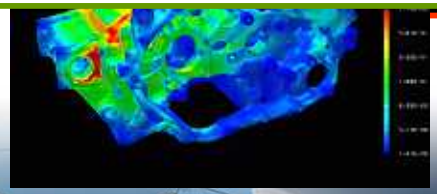
- Linuxクラスタから Winオフィス環境でのHECへ　→普及に大きなインパクト
  - Dual Core、省スペース、多目的
  - 閉じた有線（ギガビットEther）LANでFrontSTR
  - 無線LANで日常業務
  - Win用MPIの安定化、クラスタＯＳの普及、64ビット化

- コンロッド（9.4万節点）
  - 585sec(1PE) → 42sec(16PE, 14倍)

- フレーム（51.7万節点）
  - 2,550sec(16PE)　　参考）Xeonクラスタ(16PE) 4,852sec
  - CG反復1,000回の計算　1,080sec(4PE) → 190sec(16PE, 5.7倍)

- ホイール（9.4万節点）
  - 439sec(4台x2コア,有線)，3,140sec(4台x2コア,無線)

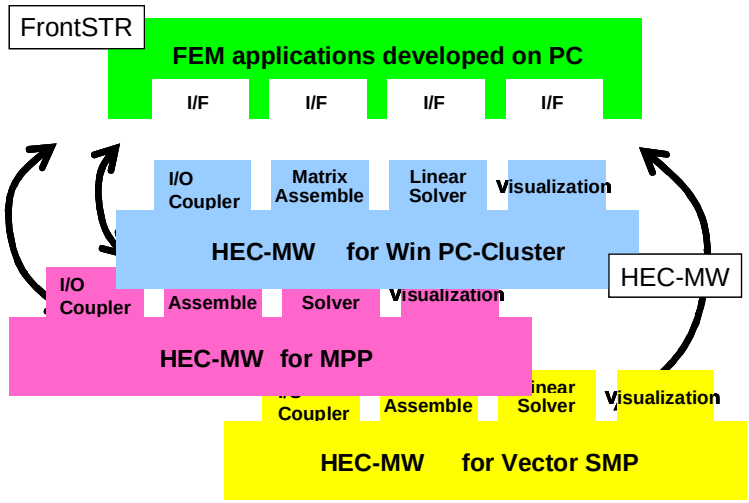




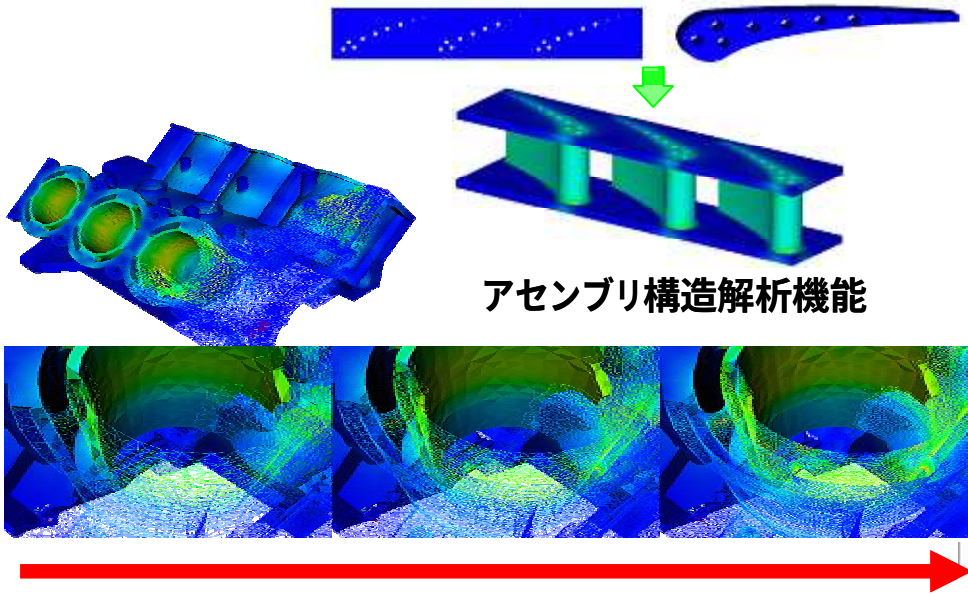
FrontISTRの全体概念図

大規模アセンブリ構造対応非線形構造解析ソフトウェア FrontISTR（フロントアイスター）

○未来のニーズに挑戦できる「先進性」と 商用コードに匹敵する目の前のニーズに対応できる「実用性」
○次世代スパコンなどの超並列計算機環境からオフィス環境まで対応可能な高精度非線形構造解析システム
○メッシュ階層細分化による解析の大規模化、高精度化
○実機まるごと解析（アセンブリ構造体）に必要な10億～100億メッシュ規模までの解析を実現

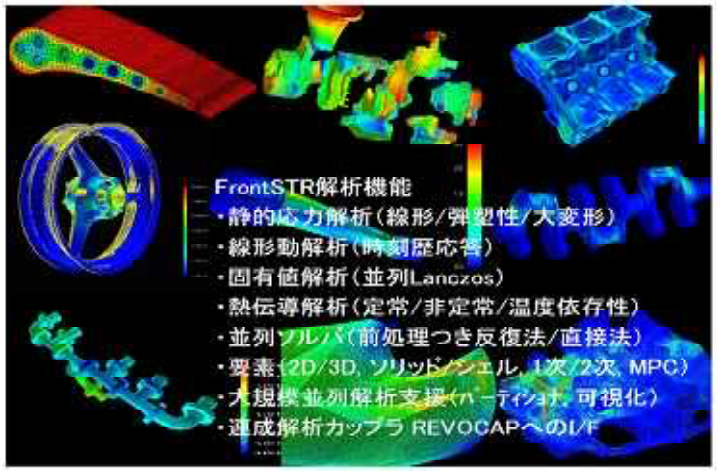


HEC-MWを基盤とするソフトウェア設計



アセンブリ構造解析機能

階層的メッシュ細分化機能



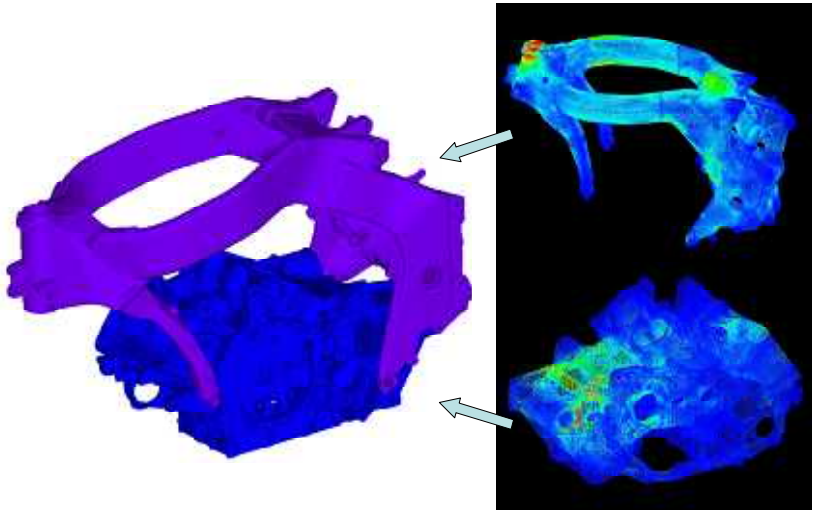
FrontSTRの各種構造解析機能を拡充

研究開発概要 (1/2)

- 未来のニーズに挑戦できる「先進性」と 商用コードに匹敵する目の前のニーズに対応できる「実用性」

- 次世代スパコンなどの超並列計算機環境からWindowsオフィス環境まで対応可能な高精度非線形構造解析システム

- 実機まるごと解析 (アセンブリ構造体) に必要な10億～100億メッシュ規模までの解析を実現



研究開発概要 (2/2)

- 「革新プロジェクト」で開発されたFrontSTRに、以下の機能拡充を実施する
  - ①階層型データに対応した高精度解析
    - 大規模ノード数、多数コア対応アルゴリズム
    - 共通基盤 (旧HEC-MW)：データ構造見直しによる高度化
    - 階層型データを利用した反復法ソルバの収束加速
    - 反復法ソルバ対応MPC機能
  - ②大規模アセンブリ構造における接触解析
  - ③大規模アセンブリ構造における非線形解析

- 階層型データ対応大規模マルチ力学解析の実現
- 競合ソフト: NASTRAN, Abaqus, ADVC, FINAS/STAR, ASU/P-formシリーズ など

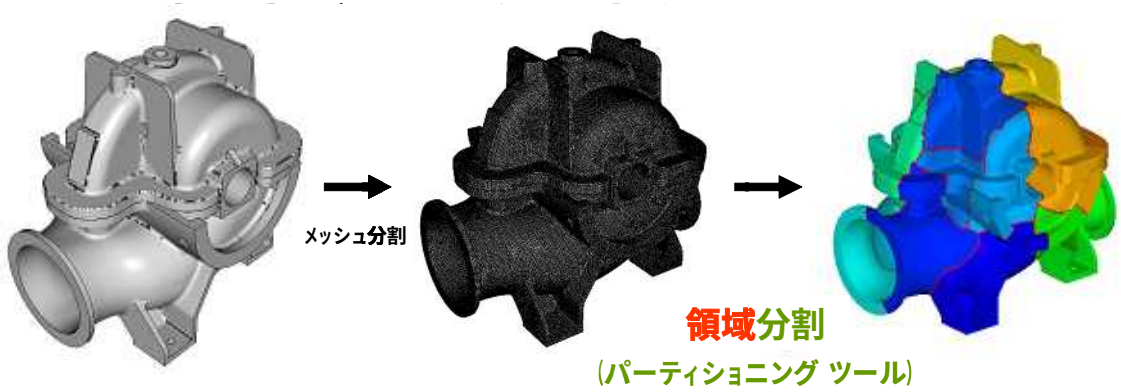
並列ソルバー

- 反復法並列ソルバ
  - 部分領域ごとに並列実行
  - 袖領域の情報を通信して全体化

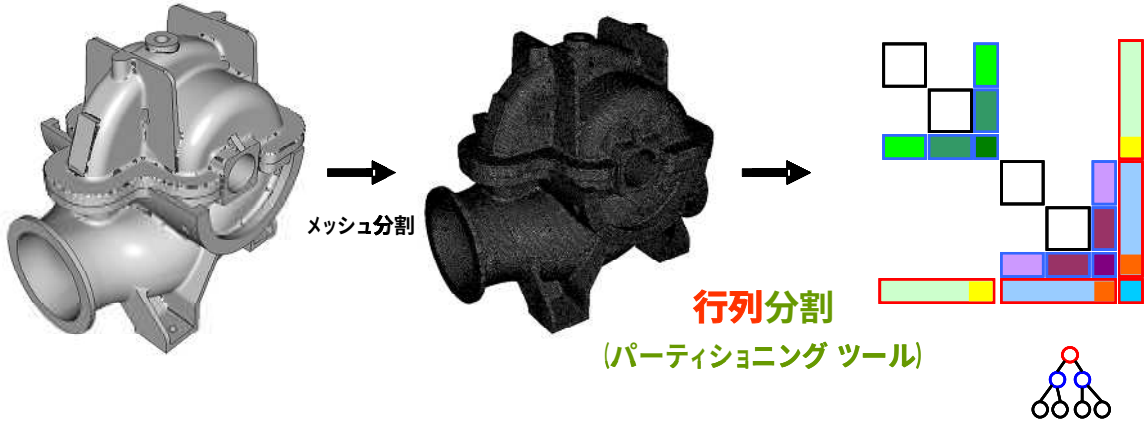
- 直接法並列ソルバ
  - マルチフロンタル法による行列の並べ替え
  - 非依存部分（疎行列）は子PEで並列に分解、求解
  - 依存部分（疎行列が密に並ぶ）は親PEで分解、求解

並列ソルバー

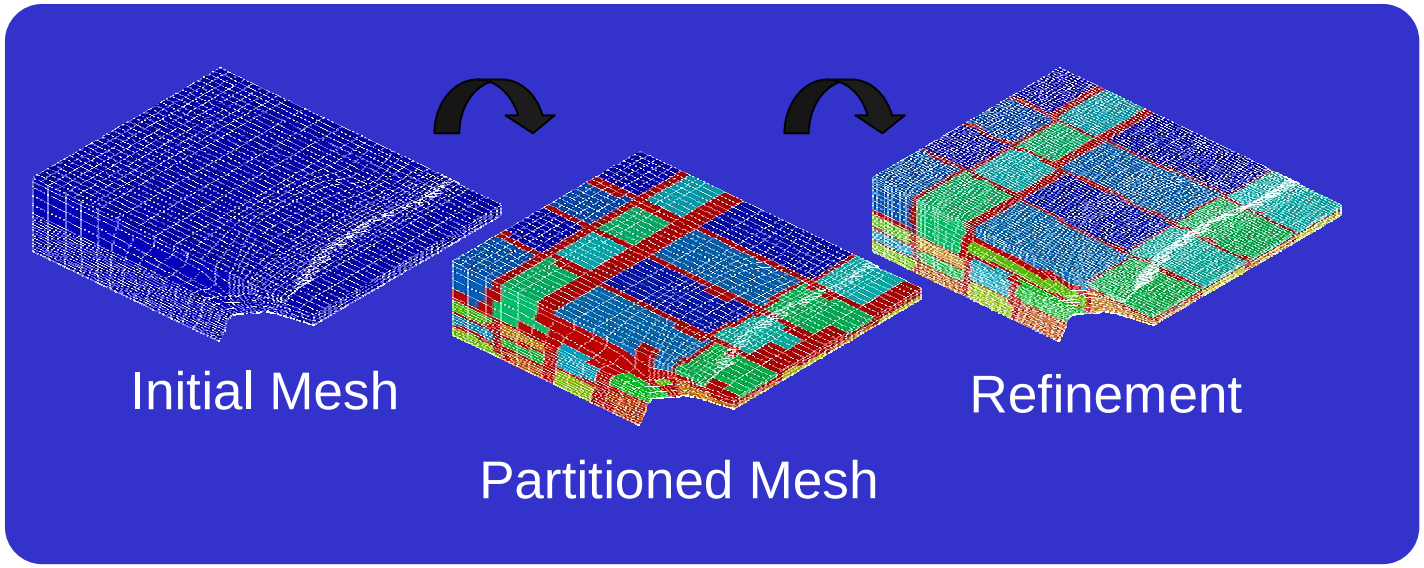
- 反復法並列ソルバ

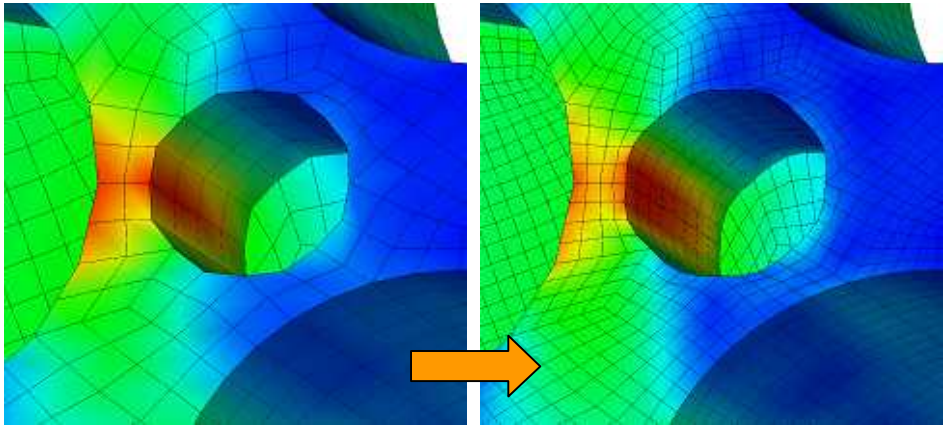


- 直接法並列ソルバ



階層型データの利用





リファインメントのイメージ

- プログラム内部での処理
- 形状ベクトルデータを維持した細分化
- リファインメントによる高精度化
- メッシュ階層構造を利用した収束加速 (GMG)　反復法ソルバを前提

共通基盤 (MW) のデータ構造見直しによる高度化

- MW変数のカプセル化
  - 実装の詳細を隠蔽．アプリ側の修正なしにMW独自の変更が容易

例） MW_Matrix_Add(StiffMat, node_i, dof_i, node_j, dof_j, val)

節点 node_i の自由度 dof_i と、節点 node_j の 自由度 dof_jに関する成分に値 val を加える

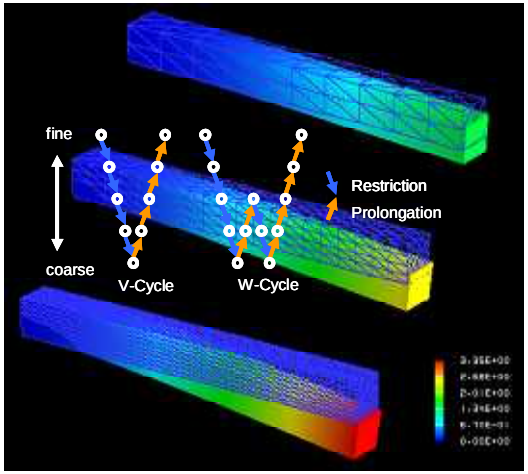
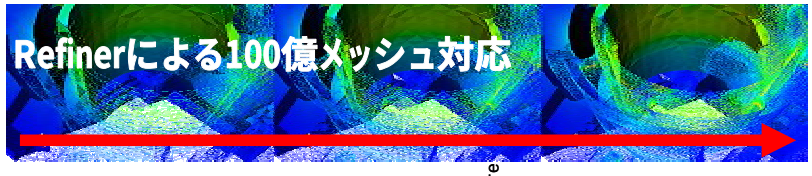
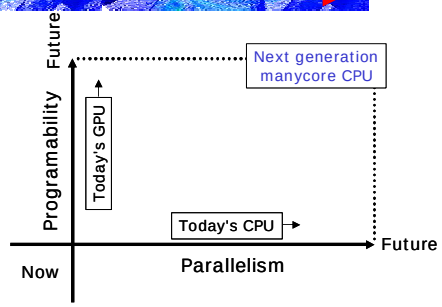
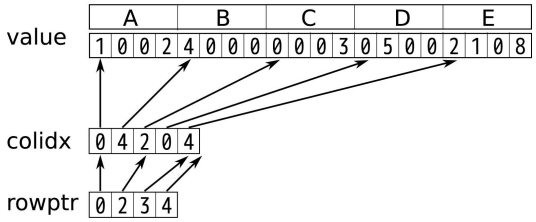
- 有限要素法APIの詳細化
  - MW_Elem_dNdx1_on_pt　形状関数の微係数
  - MW_Matrix_Add_Elem　行列の全体化
  - MW_Compress_Matrix　行列の非ゼロプロファイル
  - MW_Value_Extrapolation　積分点から節点値への外挿　　など
- 階層型データ構造、節点自由度混在　への対応

大規模アセンブリ構造における接触解析、非線形解析

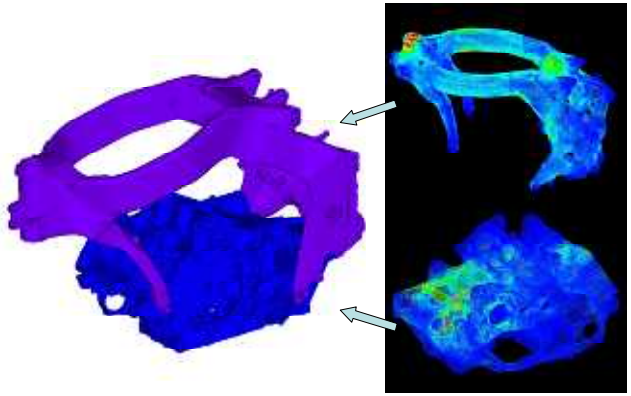
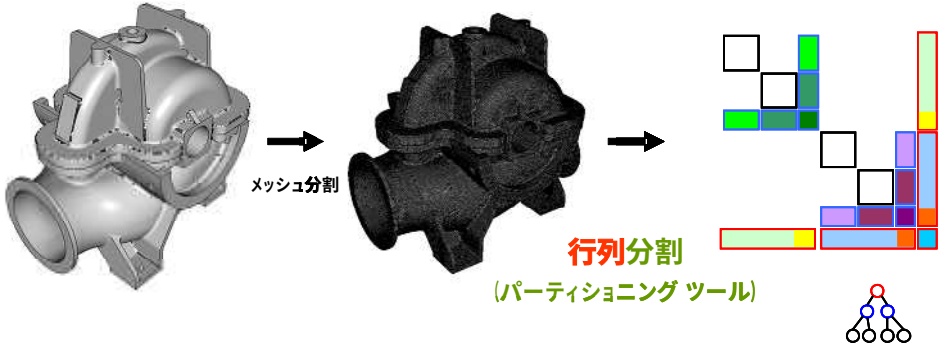
- 接触
  - 接触関係判定
  - 微小すべり、有限すべり
- 非線形解析
  - ユーザーサブルーチン
  - ステップ解析機能
  - Updated Lagrangian
  - 超弾性、弾塑性、熱弾塑性
- 実証例題（ターゲット問題）
  - タイヤゴムの大変形・大ひずみ解析
  - ガラス製造プロセス解析
  - 船体全体構造モデルの溶接残留応力解析

（予定を含む）

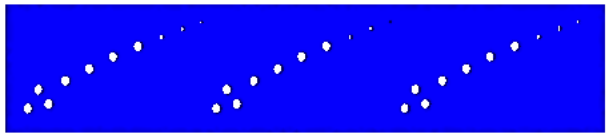
ソフトウェア先端性説明表

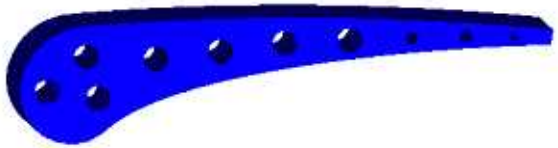
	内　　容	補助説明図
イノベーション創出に資する独創的機能	階層型メッシュ細分化機能（Refiner）を組み込んだ、マルチグリッド型構造解析およびマルチ力学連成解析機能 大規模アセンブリ構造のための反復法ソルバーMPC機能	 階層型メッシュ細分化と解の精度向上 $\mathbf{r}_0 = \mathbf{T}^T\mathbf{f} - \mathbf{T}^T\mathbf{K}\mathbf{T}\mathbf{u}'_0$ $\mathbf{p}_0 = \mathbf{r}_0$ For $k = 0, 1, \cdots$ $\alpha_k = \frac{(\mathbf{r}_k, \mathbf{r}_k)}{(\mathbf{p}_k, \mathbf{T}^T\mathbf{K}\mathbf{T}\mathbf{p}_k)}$ $\mathbf{u}'_{k+1} = \mathbf{u}'_k + \alpha_k \mathbf{p}_k$ $\mathbf{r}_{k+1} = \mathbf{r}_k - \alpha_k \mathbf{T}^T\mathbf{K}\mathbf{T}\mathbf{p}_k$ 収束判定 $\beta_k = \frac{(\mathbf{r}_{k+1}, \mathbf{r}_{k+1})}{(\mathbf{r}_k, \mathbf{r}_k)}$ $\mathbf{p}_{k+1} = \mathbf{r}_{k+1} + \beta_k \mathbf{p}_k$ end $\mathbf{u} = \mathbf{T}\mathbf{u}'$ 並列MPC-CG法
次世代スパコン等のハイエンド計算機環境対応革新的機能	 大規模ノード数（ノード間並列）、多数コア対応（ノード内並列）アルゴリズム 	$\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 4 & 0 \\ 0 & 2 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 3 & 0 & 0 \\ 0 & 5 & 0 & 0 & 2 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 8 \end{pmatrix} \Rightarrow \begin{pmatrix} A & 0 & B \\ 0 & C & 0 \\ D & 0 & E \end{pmatrix}$  非構造の疎行列演算はメモリ帯域がネック →ブロッキングによりレジスタやキャッシュを有効利用

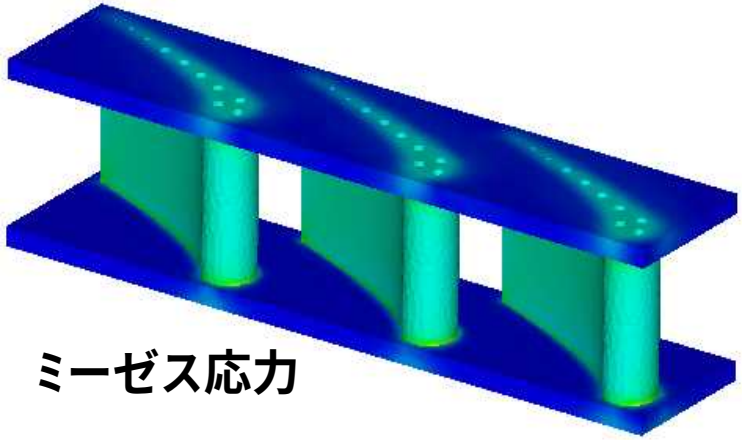
ソフトウェア実用性説明表

	内　　容	補助説明図
実製品を対象とした解析に必要な機能	大規模アセンブリ構造を前提とした非線形解析、とくに接触解析およびマルチ力学解析	 複数のコンポーネントを個別に作成して一体化
産業界技術者が利用可能なソフトウェアの機能	並列直接法ソルバー 多様な並列計算機環境での可搬性 WinノートPC群による FrontSTR並列計算	

大規模アセンブリ構造のための反復法ソルバーMPC（1）







ミーゼス応力

$$\mathbf{r}_0 = \mathbf{T}^T\mathbf{f} - \mathbf{T}^T\mathbf{K}\mathbf{T}\mathbf{u}'_0$$

$$\mathbf{p}_0 = \mathbf{r}_0$$

For $k = 0,\ 1, \cdots$

$$\alpha_k = \frac{(\mathbf{r}_k, \mathbf{r}_k)}{(\mathbf{p}_k, \mathbf{T}^T\mathbf{K}\mathbf{T}\mathbf{p}_k)}$$

$$\mathbf{u}'_{k+1} = \mathbf{u}'_k + \alpha_k \mathbf{p}_k$$

$$\mathbf{r}_{k+1} = \mathbf{r}_k - \alpha_k \mathbf{T}^T\mathbf{K}\mathbf{T}\mathbf{p}_k$$

収束判定

$$\beta_k = \frac{(\mathbf{r}_{k+1}, \mathbf{r}_{k+1})}{(\mathbf{r}_k, \mathbf{r}_k)}$$

$$\mathbf{p}_{k+1} = \mathbf{r}_{k+1} + \beta_k \mathbf{p}_k$$

end

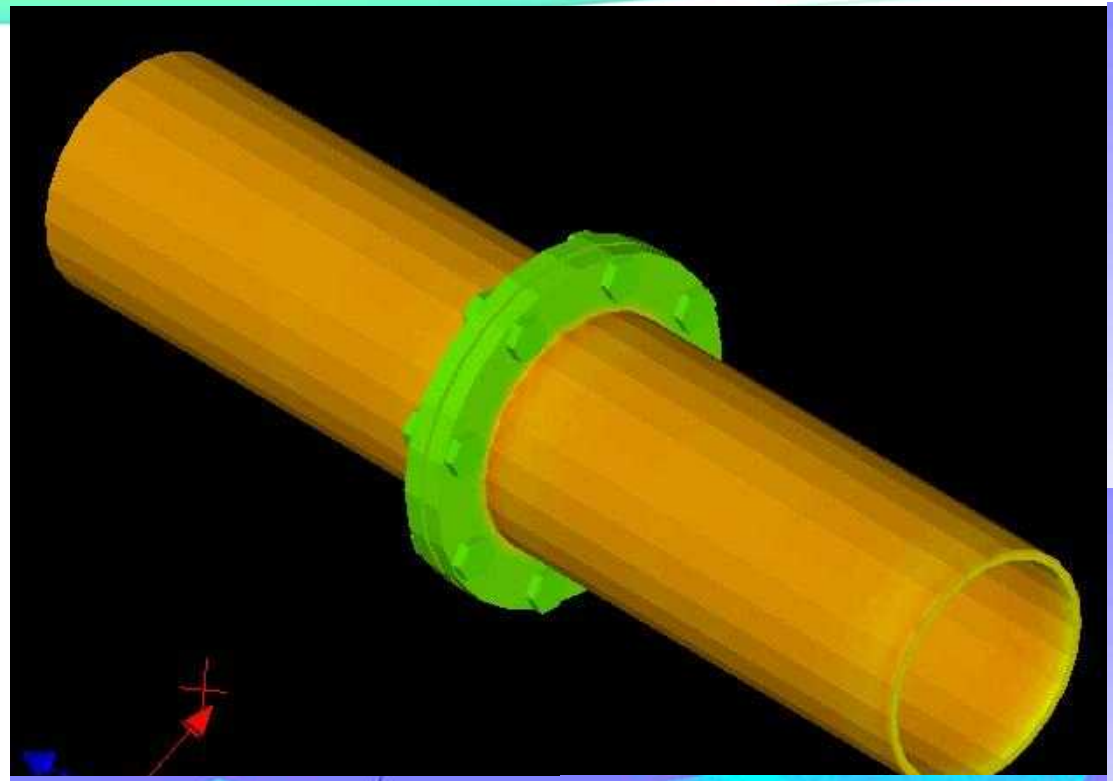
$$\mathbf{u} = \mathbf{T}\mathbf{u}'$$

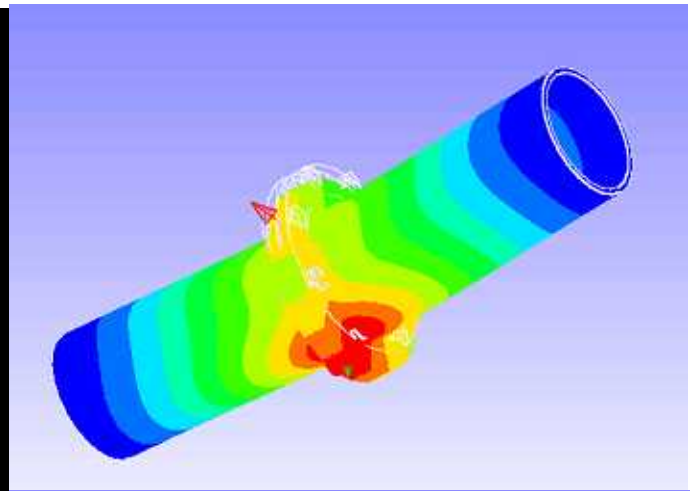
MPC前処理付き共役勾配法アルゴリズム

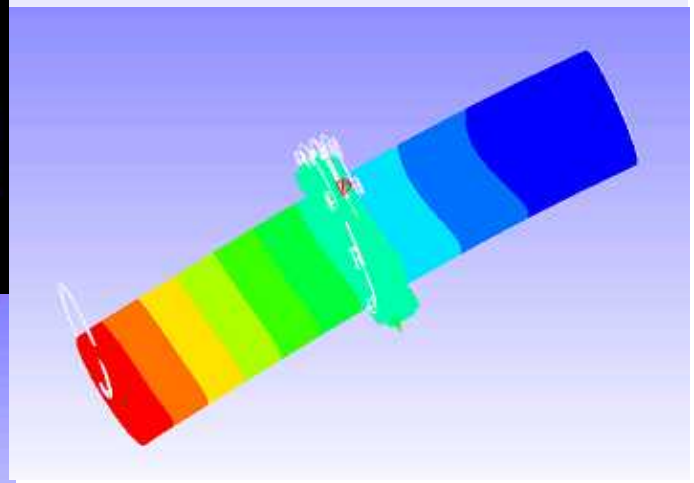
反復法ソルバでのアセンブリ構造解析を大幅に効率化

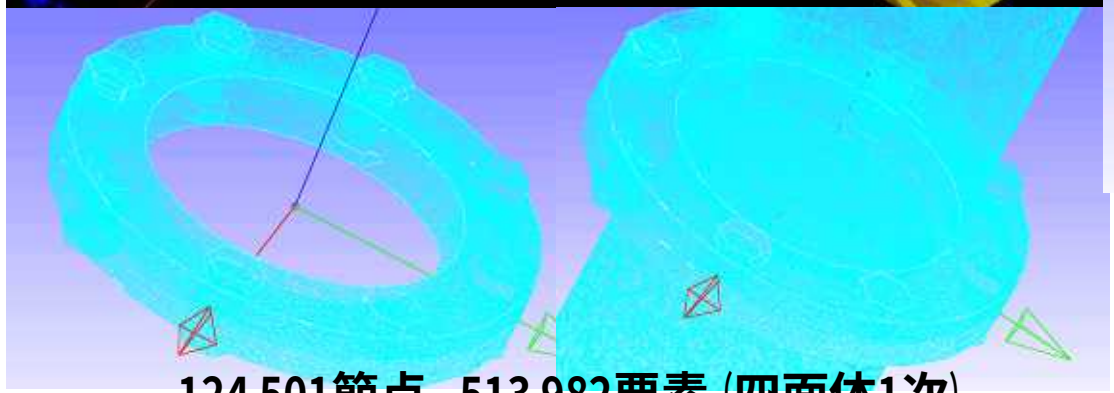
	CG反復回数	計算時間 (sec)	1CG反復あたりの計算時間 (sec)
MPCCG	14,203	3,456	2.43×10^{-1}
Penalty法+CG	171,354	40,841	2.38×10^{-1}

大規模アセンブリ構造のための反復法ソルバーMPC（2）





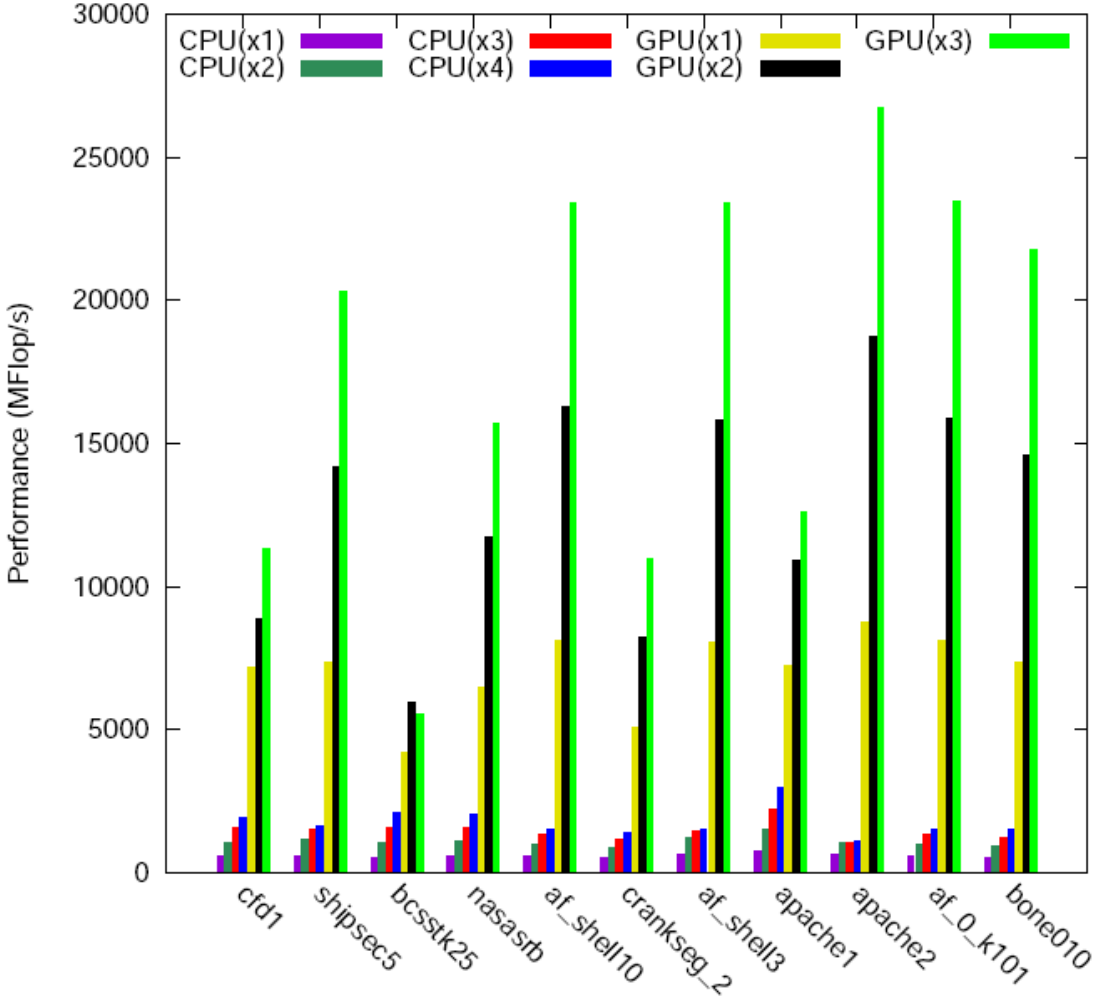




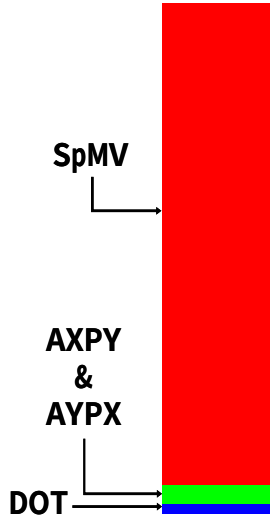
124,501節点、513,982要素（四面体1次）

MPCCG法：8,631 CG反復
ペナルティ法：42,898 CG反復

大規模高速化のための 多数コア環境の予備的検討

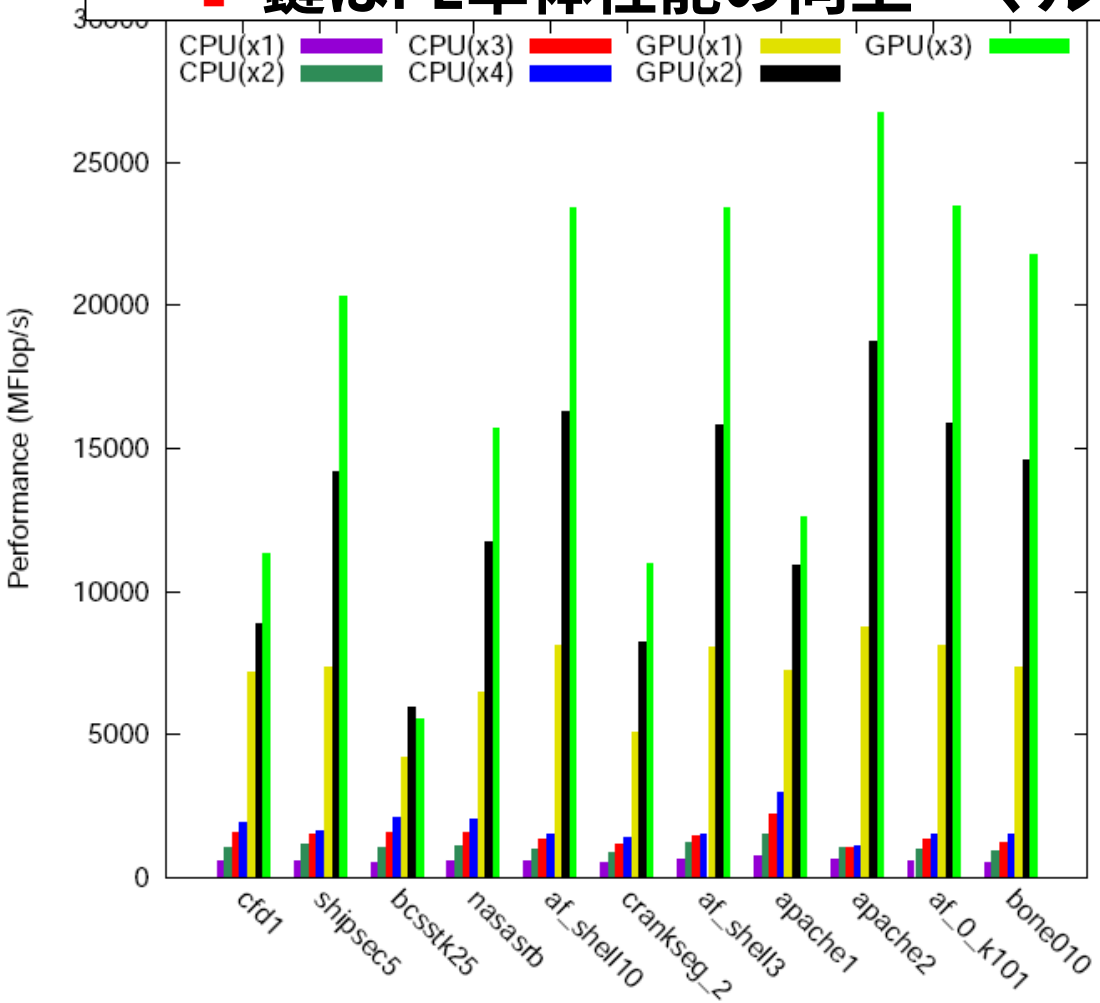


SpMV scaling to up to 3 GPUs and 4 cores

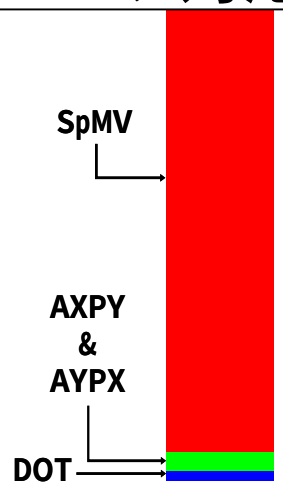


CG法におけるノード内実行時間

- 未来のニーズに挑戦できる「先進性」
  - ペタコンまでは、MPI, 大規模PCクラスタ (Beowulf) の流れ
  - 鍵はPE単体性能の向上＝マルチコア･メニーコア対応



SpMV scaling to up to
3 GPUs and 4 cores



CG法におけるノード内実行時間

パフォーマンスモデル

- キャッシュのレイテンシのみに基づくパフォーマンスモデル[1]を複数コアに拡張

実行時間 ＝ Σ (キャッシュアクセス数) ×レイテンシ

$$T = \frac{\alpha_1}{n}(L+S) + \sum_{i=1}^{\kappa}\left(\frac{\alpha_{i+1}}{m_{i+1}} - \frac{\alpha_i}{m_i}\right)M_i$$

T ：実行時間 [cycle]
α_i ：i段目のキャッシュのレイテンシ[cycle]
M_i ：i段目のキャッシュミス総数
n ：コア数
m_i ：i段目のキャッシュの総数
L, S ：ロード・ストアの回数
κ ：キャッシュの段数

ただし、
- メモリを κ＋1段目のキャッシュとみなす。
- L1キャッシュは各コアに1つずつと仮定。 ($m_1 = n$)

各種パラメータの求め方：
- α はベンチマークによる実測値を用いる。
- M, m, n, κ はCPU固有の値。
- L, S, Miは演算の種類と行列の特徴から決まる。

[1]R.Vuduc. *Automatic Performance Tuning of Sparse Matrix Kernels. PhD thesis, GRADUATE DIVISION of the UNIVERSITY OF CALIFORNIA,*BERKELEY, 2003

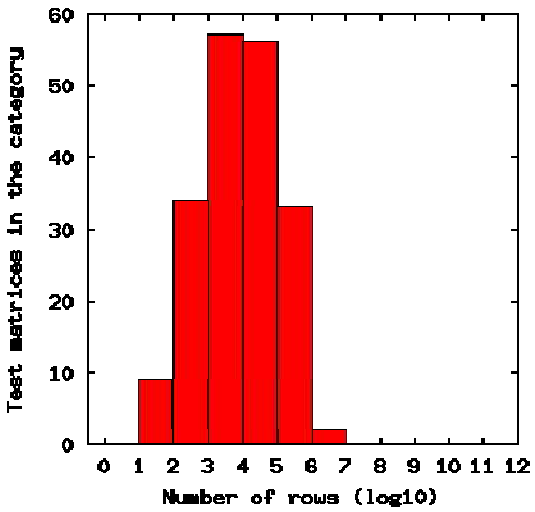
Hardware test-bed

CPU :
- Nehalem
- Core2 Quad
- Core2 Duo

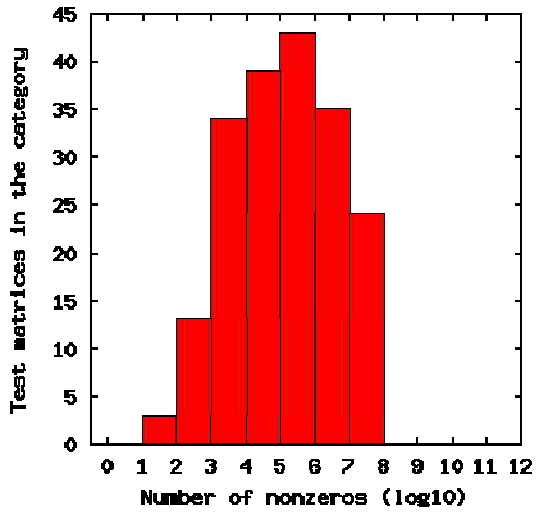
GPU :
- GeForce 280GTX
- GeForce 295GTX
- GeForce 8800GTX
- GeForce 9800GTX+

Test matrices

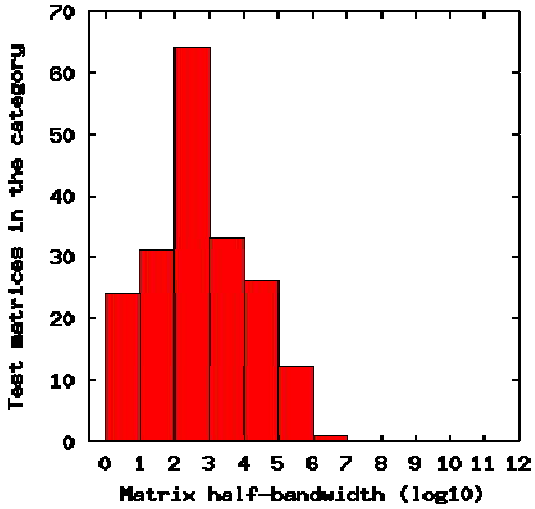
- Matrices from U. of Florida Sparse Matrix Collection [1]
- Divided into groups
  - Small: less than 10^5 non-zeros
  - Medium: 10^5 - 10^7 non-zeros
  - Large: more than 10^7 non-zeros



Rows



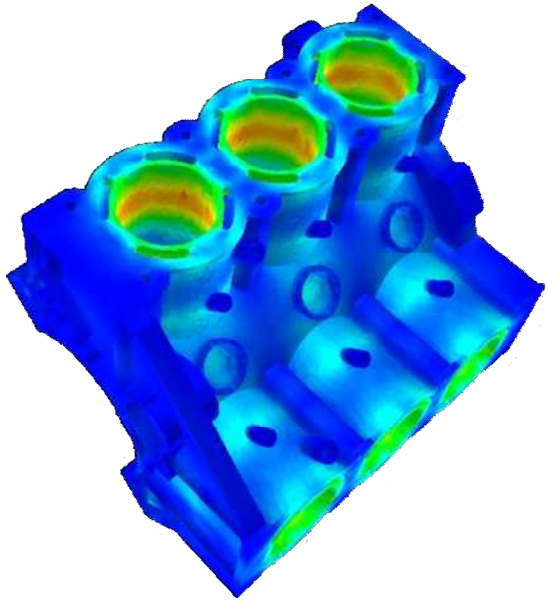
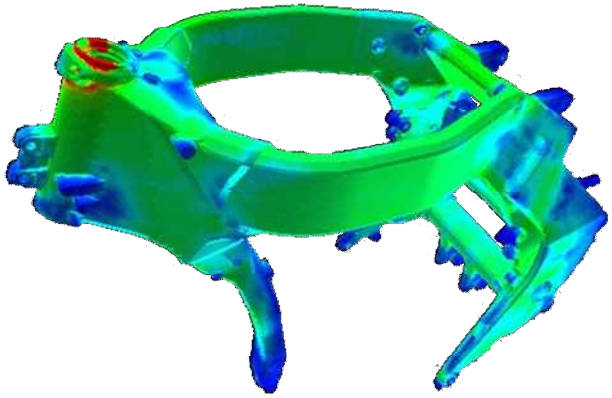
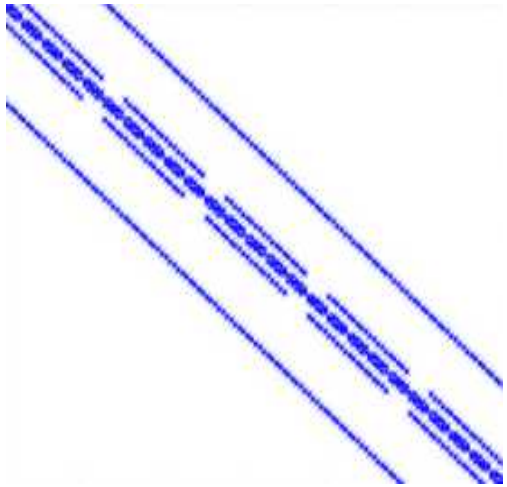
Non-zeros



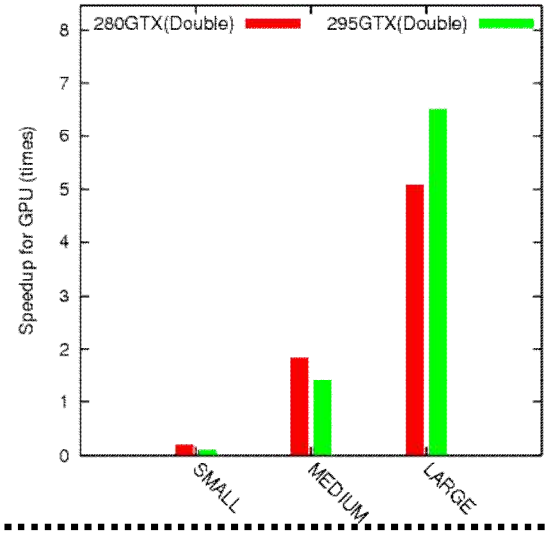
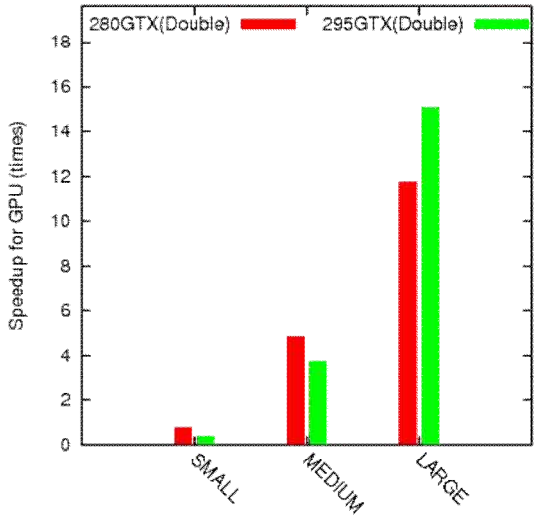
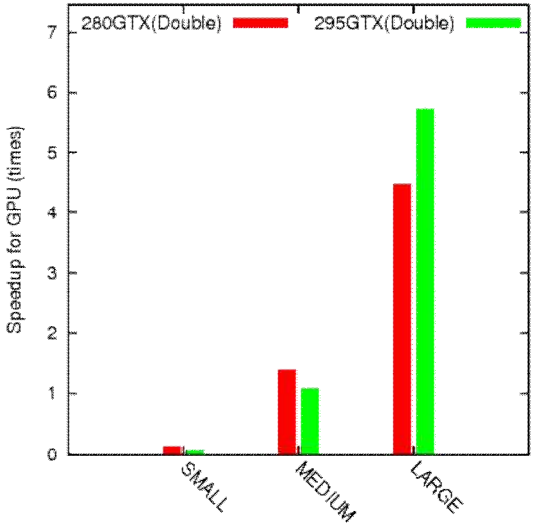
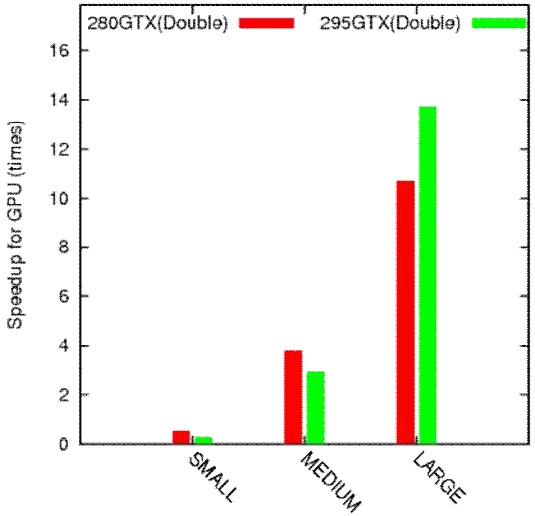
Half-bandwidth

[1] Tim Davis, www.cise.ufl.edu/research/sparse/matrices/

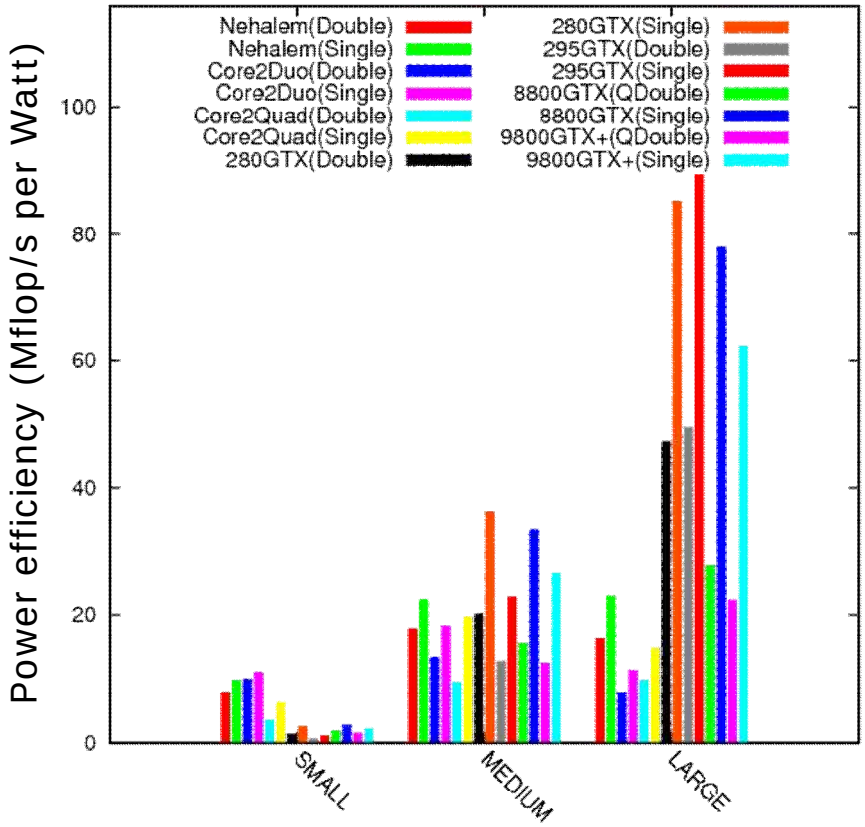
Actual problems

FEM 1	FEM 2	CFD
		
V6 engine	Motorcycle frame	3D Poisson

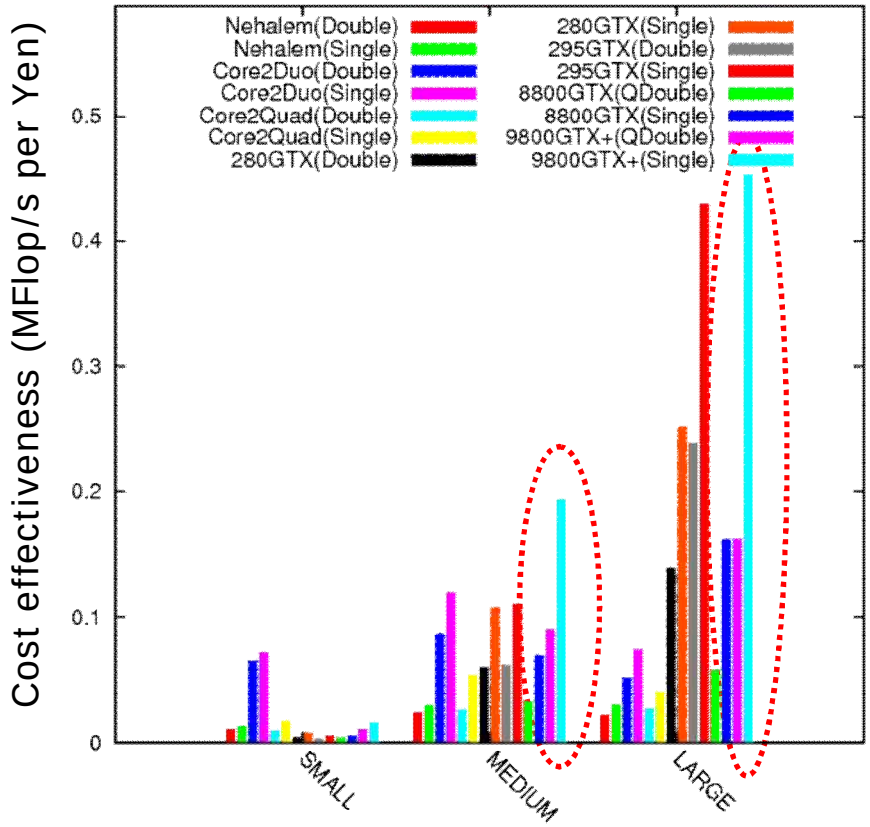
Test matrices, solvers

	GPU vs Nehalem	GPU vs Core2Quad
CG		
GMRES		

Cost and power consumption



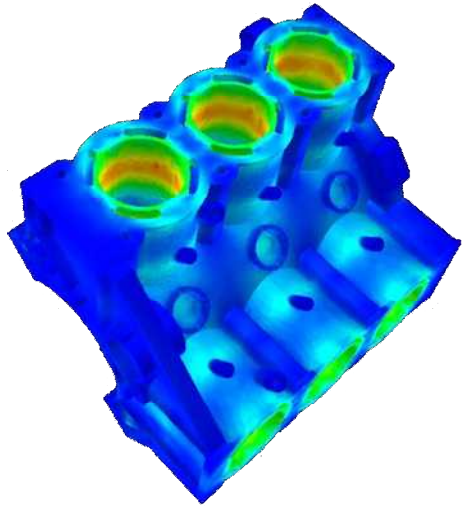
Power efficiency
(MFlop/s per used Watt)



Cost effectiveness
(MFlop/s per spent USD)

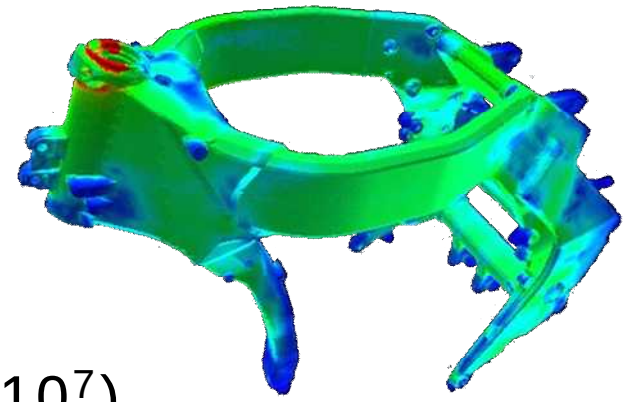
FEM case 1

- V6 engine
- Order: 204,000x204,000
- Non-zeros: 15,621,894
- Requires approx. 200MB to solve
- Condition number (after Jacobi): $O(10^6)$



CPU=Nehalem GPU=280GTX	+ ILU	+ Jacobi
FrontSTR on CPU	29.1s (732 it)	34.9s (1839 it)
FrontSTR + CUKr on GPU (double precision)	-	4.3s (1830 it)
FrontSTR + CUKr on GPU (iterative refinement)	-	3.5s (8:2884 it)

FEM case 2

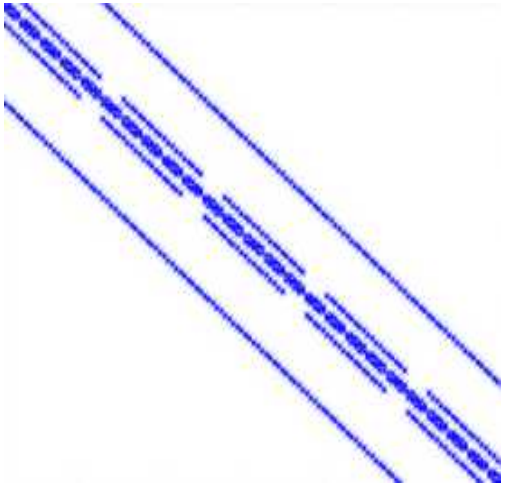


- Motorcycle frame
- Order: 1,552,170x1,552,170
- Non-zeros: 109,522,566
- Requires approx. 1.3GB to solve
- Condition number (after Jacobi): $O(10^7)$

- 10x speedup on an iteration by iteration basis, but could not converge because of lack of good preconditioner

CFD test case

- 3D Poisson with N=250 / dim
- Order: 15,625,000 x 15,625,000
- Non-zeros: 109,249,498
- Requires approx. 2.2GB
- Condition number: $O(10^5)$
  - Depends on level of refinement



CPU=Nehalem GPU=3x280GTX	Time (s)	Performance (GFlop/s)
CUKr on CPU	494	0.9 (1139 it)
CUKr on GPU (double precision)	14.3	29.7 (1139 it)
CUKr on GPU (iterative refinement)	12.9	58.1 (10:2021 it)

接触解析、非線形解析の機能概要

- 接触解析
  - 接触関係判定
  - 微小すべり、有限すべり

- 非線形解析 (幾何学的非線形、材料非線形)
  - ユーザーサブルーチン
  - ステップ解析機能
  - Updated Lagrangian
  - 超弾性、弾塑性、熱弾塑性

代表ソフトウェアの主要機能比較表

	主 要 機 能	競合ソフトとの比較	
		NASTRAN, Abaqus, ASU/P-form（汎用性や非線形解析に定評のあるソフト）	ADVC, FINAS/STAR（並列性能に定評のあるソフト）
A. 大規模アセンブリ構造のための有限要素解析基盤	1．階層型メッシュ細分化機能組み込み 2．マルチ力学連成解析機能組み込み 3．大規模ノード数、多数コア対応アルゴリズム 4．階層型メッシュを利用したマルチグリッド反復法ソルバー 5．大規模アセンブリ構造のための反復法ソルバーMPC機能 6．並列直接法ソルバー 7．有限要素解析基盤ライブラリ（HEC-MW）上での実装 8．多様な並列計算機環境での可搬性	- 8．以外のすべての点においてFrontISTRが独自性、優位性を有する。 - 8．については、「NLSクラスのスパコンでも性能を発揮できる」という意味でFrontISTRが優位性を有する。	
B. 変形･応力解析機能	＜共通的機能＞ 1．非線形荷重、材料特性を扱うユーザーサブルーチン 2．非線形解析に統一的に対応できるステップ解析機能 3．時間依存性のある各種境界条件の設定機能 ＜基本解析機能＞ 4．ソリッド要素／平面要素／ビーム要素、1次／2次 5．熱伝導解析／熱応力解析、静解析／動解析 6．固有振動解析 ＜幾何学的非線形＞ 7．大変形解析（Total Lagrange法, Updated Lagrange法） ＜材料非線形＞ 8．材料ライブラリ（超弾性･弾塑性･粘性･粘弾性･クリープ） 9．硬化則（等方硬化則･移動硬化則･複合硬化則） ＜接触非線形＞ 10．微小すべり／有限すべり、摩擦なし／摩擦あり 11．静的陽解法／静的陰解法	- 大規模アセンブリ構造およびマルチ力学解析との組み合わせでこれら非線形解析機能を実施することでFrontISTRの優位性が発揮できる。	

FrontISTRの開発ロードマップ

現行

- 静応力解析
- 線形動解析
- 固有振動解析
- 熱伝導･熱応力解析

2010年6月公開予定

- 幾何学的非線形
- 材料非線形
- 接触解析
- 階層型データ構造
- ソルバー高速化

2011年6月公開予定

- 大規模アセンブリ構造対応
- 大規模並列計算