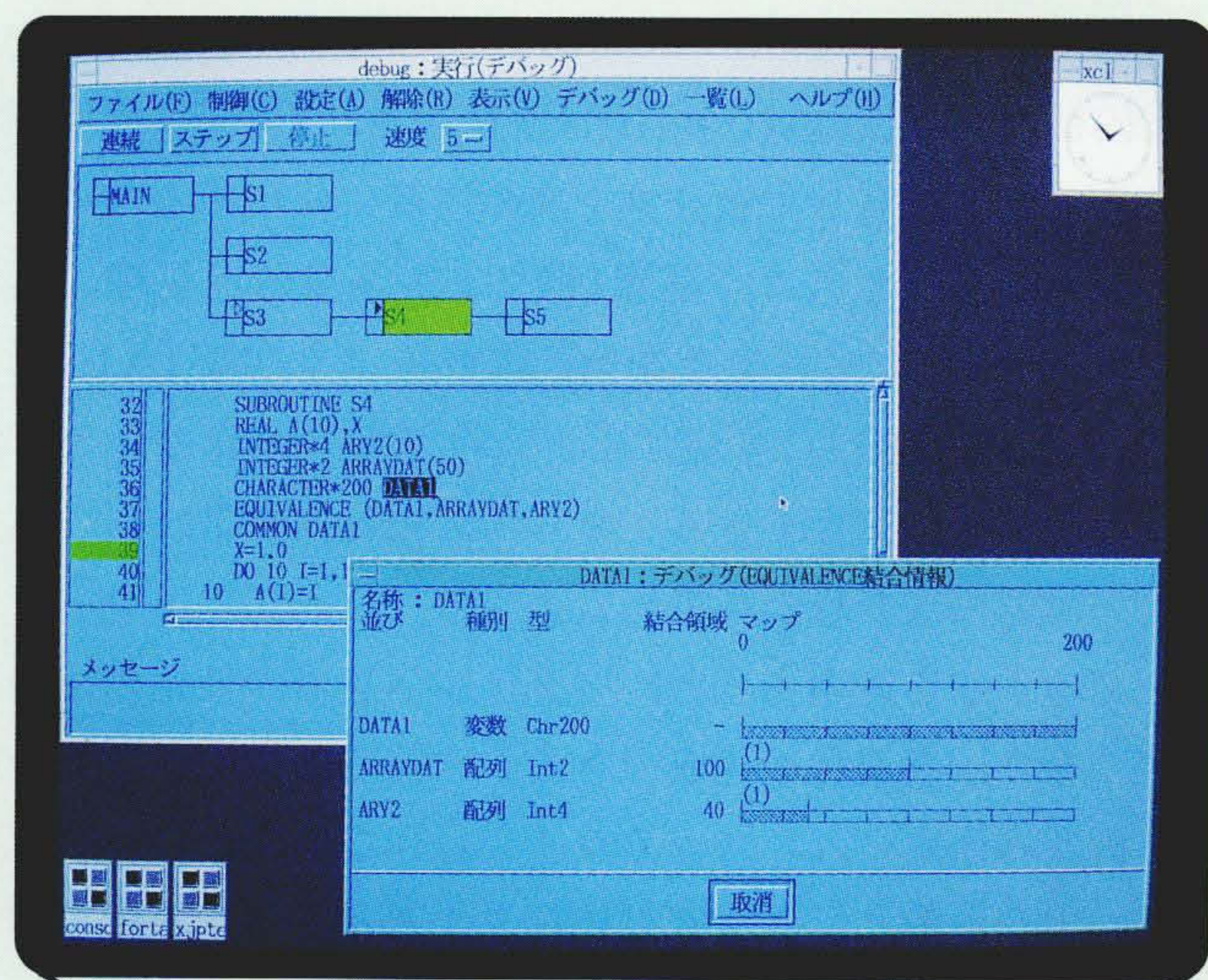


超高速性能を実現する技法とソフトウェア

“Techniques and Software” Realizing High Performance

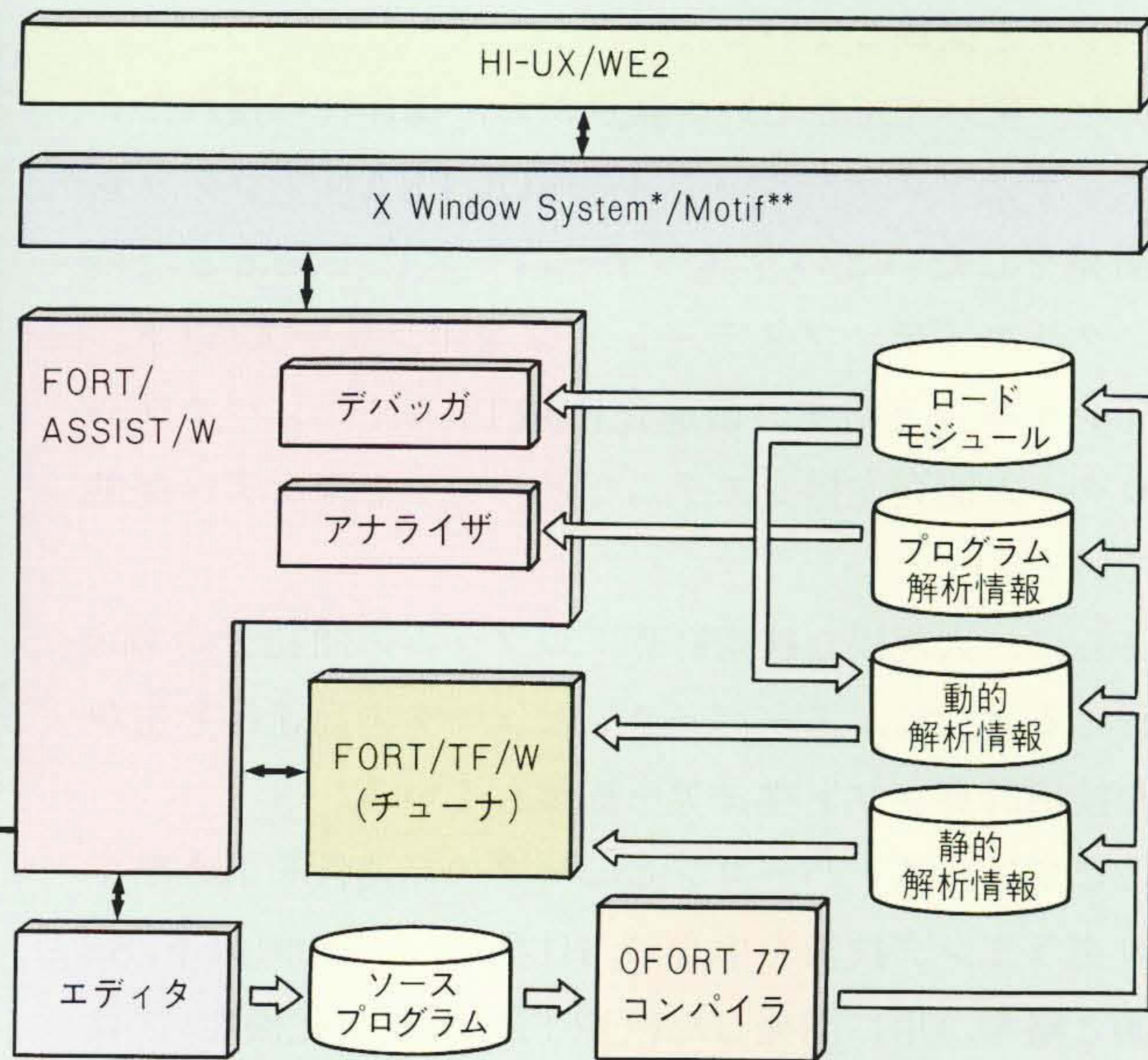
布 広 永 示* Eiji Nunohiro 後 保 範** Yasunori Ushiro
後藤志津雄** Shizuo Gotô 原野紳一郎** Shin'ichirô Harano



(a) デバッグ画面



クリエイティブステーション 3050



注：⇨ データの流れを示す。→ 制御の流れを示す。

* 米国MIT (マサチューセッツ工科大学)の商標である。

** Open Software Foundation, Inc. の商標である。

(b) FORTRAN開発支援システムの構成

FORTRAN開発支援システムの構成とデバッグ画面

画面上部にはコールグラフとソースプログラムが表示されており、下部にはEQUIVALENCE結合関係が表示されている。

スーパーコンピュータの需要の拡大に伴い、高速化や大規模化への要求はますます強くなっている。このようなニーズにこたえるためには、ハードウェアの高速化とともに、高性能コンパイラ技術、プログラム開発支援システム、数値計算ライブラリなどの応用ソフトウェアの充実が必要である。

自動並列化FORTRANコンパイラでは、スーパーコンピュータ HITAC S-3600, S-3800 (以下、S-3600, S-3800と略す。)のベクトル性能およびS-3800のマルチプロセッサの高速性能を引き出す機能を開発した。C言語ユーザーに対しては、S-3600, S-3800の高速ベクトル性能を提供するための自動ベクトル

化Cコンパイラを開発した。

また、スーパーコンピュータの能力をより引き出すためのチューニング作業を促進するために、プログラムの作成、コンパイル、リンク、デバッグおよび実行という一連のプログラム開発を操作性の優れたクリエイティブステーション3050上で行う開発支援システムを実現した。

さらに、スーパーコンピュータの高性能を最大限に発揮することができるベクトル計算・並列計算向きアルゴリズムを採用した応用ソフトウェアを開発した。

* 日立製作所 ソフトウェア開発本部 工学博士

** 日立製作所 ソフトウェア開発本部

1 はじめに

科学技術計算に対する高速化、大規模化への要求に伴い、スーパーコンピュータに対する性能向上、使いやすさへの要求はますます強くなっている。このような要求にこたえるために、より速いハードウェアの開発とともに、自動並列化機能および自動ベクトル化機能を持つコンパイラを提供している。

また、使いやすさという観点から、操作性に優れたクリエイティブステーション上でFORTRANプログラムの開発をしたいというユーザーニーズにこたえるために、クリエイティブステーション3050シリーズ(以下、3050シリーズと略す。)最適化FORTRANコンパイラやプログラム開発支援システムなどのソフトウェアを提供している。

さらに、大規模な技術計算プログラムの開発を効率的に行えるように、スーパーコンピュータの高速性を生かした技術計算ソフトウェアを提供している。

ここでは、スーパーコンピュータの高速性を引き出すプログラミング技術を中心に、HITAC S-3800(以下、S-3800と略す。)用に開発したFORTRAN並列化機能、プログラム開発支援システムおよびベクトル計算・並列計算向きに開発した応用ソフトウェアについて述べる。

2 高速性能を引き出すプログラミング技術

HITAC S-3600(以下、S-3600と略す。), S-3800シリーズは、ベクトル型スーパーコンピュータである。S-3600はシングルプロセッサ構成であり、S-3800はマルチプロセッサ構成が可能である。1台のベクトル型スーパーコンピュータの高性能を引き出すためには、ベクトル演算器の利用率を向上させるプログラミング技術が重要であった。ベクトル型スーパーコンピュータでは、ベクトル演算器を有効に使用すれば、各自のプログラムの計算時間が短縮した。

気象予報のように短時間で結果を出す必要がある分野および分子計算や流体計算のように長時間計算を要する分野で、並列コンピュータは大きなメリットがある。並列スーパーコンピュータを効率よく使用するには次の2点が重要である。

- (1) 各計算機の負荷が等しくなるように計算量を分散させる。
- (2) 各計算機に分散させた計算量は可能なだけ多くする。このとき、各計算機ではまったく異なった演算をさ

せてもよい。

上記以外のことは、従来のベクトル型スーパーコンピュータの高速性能を引き出す技術と同様である。

次に、構造計算で多く使用されるスカイライン法を例に、高速性能を引き出すプログラミング技術について簡単に述べる。通常、スカイライン法は1行・1列単位の内積型($S = S + A(i) * B(i)$)が使用されている。内積型であると、計算した値をすぐ次の演算に使用するため、ベクトル演算とスカラ演算(ベクトル演算の前処理、後処理)が並列に実行できない。これをストア型($A(i) = A(i) + C * B(i)$)に変更すると、ベクトル演算とスカラ演算が並列に実行できる。さらに、密行列や帯行列の連立一次方程式で行われているように、ループアンローリングの手法を適用すると、ベクトル演算器の使用効率が高くなり、高速化が達成できる。一節点3自由度の構造解析から作成されたスカイライン行列ならば、3行・3列のアンローリングを容易に行うことができ、1行1列の内積型に比較して2~4倍ベクトル演算で高速化できる。

さらに、最近では、大規模なスカイライン法で、元の行列に非ゼロ要素が少ないことに着目し、スパース・ソルバと呼ばれる高速解法が発見され、実用化されてきている。より高速な計算機が出現すると、従来あまり有用でなかった解析手法が有用となる場合がある。計算機の高速度性とアルゴリズムの高速度性を共に利用して、大規模計算プログラムの高速性能を十分に発揮してもらいたい。

3 高速性能を実現する言語プロセッサ

3.1 自動並列化コンパイラ

FORTRANコンパイラ FORT77/HAPは、S-3800のマルチプロセッサ向きの並列実行機能を持つコンパイラであり、大きく分けて次の二つの並列化機能をサポートしている。

(a) 自動並列化機能

DOループ内の文に対して並列化が適用できるか否かを自動的に解析し、並列実行オブジェクトを生成する。

(b) 並列化指示機能

手続きなどの文の集まりを、ユーザーの簡単な指示に従って並列実行オブジェクトを生成する。

また、自動ベクトル化機能によってS-3000シリーズのベクトル演算器の高性能を引き出すための命令の並び換えなどの機能強化も行っている。自動ベクトル化機能と自動並列化機能を組み合わせることにより、S-3800のマ

ルチプロセッサの性能を最大限に引き出すことが可能である。

(1) 自動並列化機能

コンパイラがソースプログラムを解析して並列実行可能な部分を自動的に検出し、並列実行用のオブジェクトプログラムを生成する。したがって、利用者は、並列化のための特別なコーディングをする必要はない。また、コンパイラの並列化能力をさらに引き出すために、コンパイラを支援する手段として並列化指示注釈行を用意している。並列化指示注釈行を用いることにより、よりきめ細かく、効率的な並列化を行うことができる。

自動並列化はFORTRANプログラムのDOループを対象としており、多重ループの場合、内側ループをベクトル化し、外側ループを並列化するようにしている。

自動並列化の例を図1に示す。総和計算を含むDOループに対しても自動並列化を行う。

(2) 並列化指示機能

利用者がFORTRANソースプログラムに対して指示をすることにより、並列化を行う機能である。FORT77/HAPは大きく分けて次の三つの並列化指示機能をサポートしている。

(a) 並列実行単位の指示

手続き呼出しなどの複数の文の集まりを、並列実行単位(SECTIONと呼ぶ。)とした並列化指示。

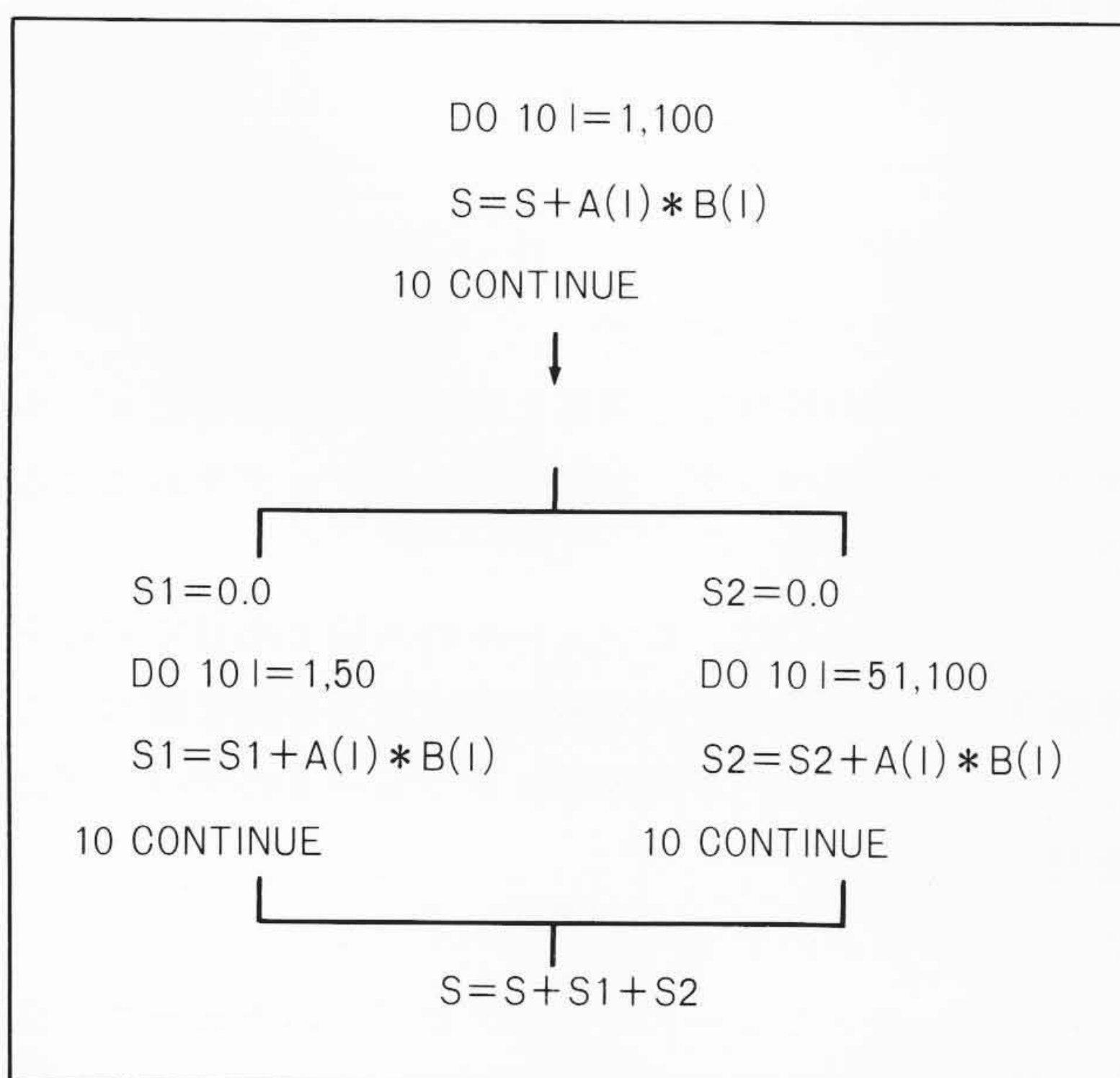


図1 自動並列化の例 おのこのDOループで部分和計算を行い、並列実行終了後に部分和の結果をまとめるオブジェクトを自動生成する。

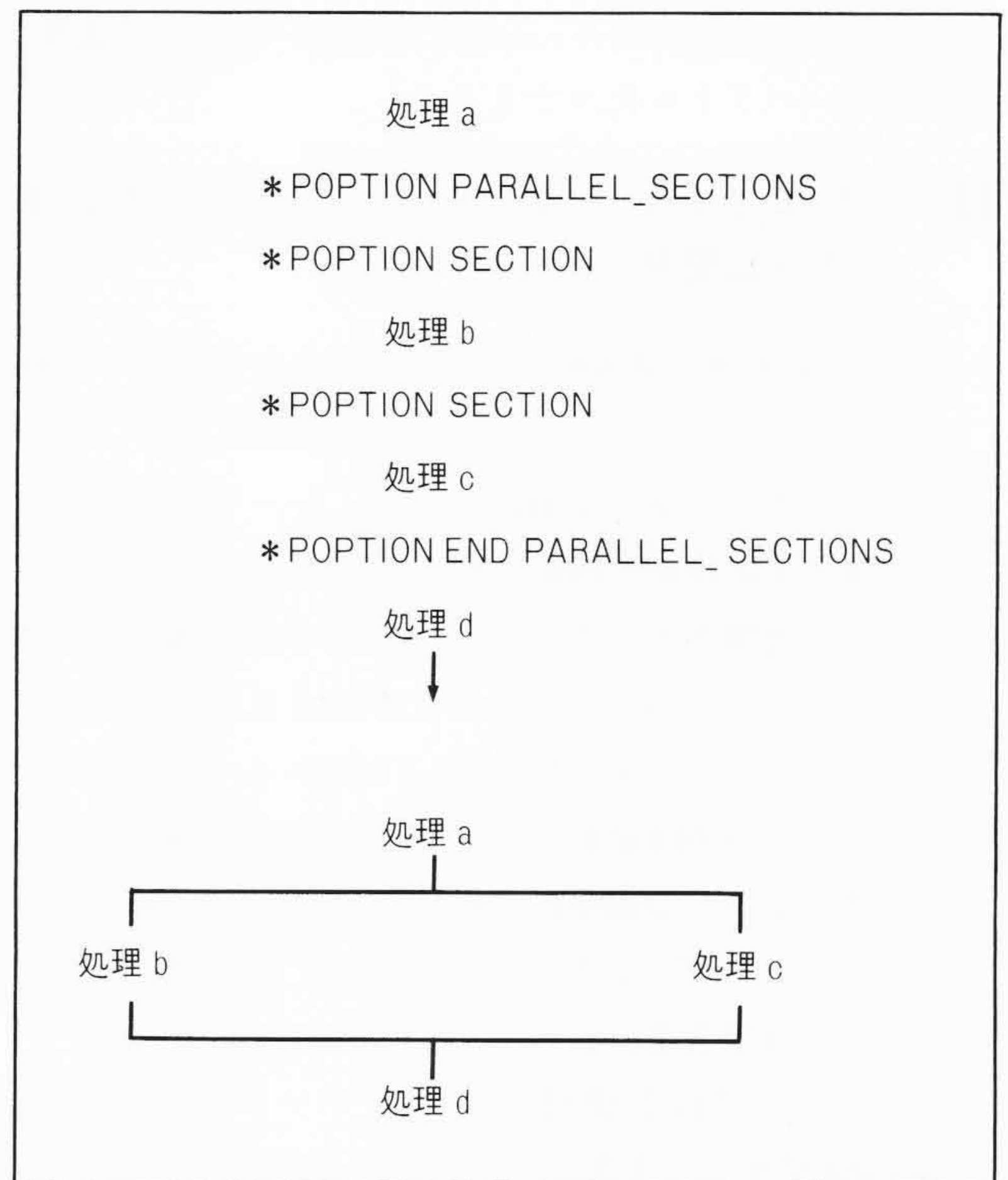


図2 並列実行単位の指示の例 処理bと処理cとが並列に実行される。

(b) 同期制御指示

並列実行単位間でデータに順序性が必要な場合、その順序性を保証するための並列化指示。

(c) 排他制御指示

並列実行単位間で逐次処理を必要とする場合、その結果を保証するための並列化指示。

並列実行単位の指示の例を図2に示す。この機能を用いることにより、複数の文の集まりどうしの並列化が可能となる。

(3) DOループの動的スケジューリング機能

並列化による実行性能向上は、並列に実行される処理の演算量に大きく依存する。FORT77/HAPでは、DOループ内の演算量に依存した並列実行制御を行うことにより、最適な並列スケジューリングを実現している。

3.2 自動ベクトル化Cコンパイラ C/HAP

C/HAPは、国際規格ISO(国際標準化機構)/IEC(国際電気標準会議)9899およびANSI(米国国家規格協会)規格X3.159-1989に準拠した言語仕様を持つ自動ベクトル化Cコンパイラであり、ソースプログラムのループ部分を自動的に解析して、高速なベクトルオブジェクトコードを生成する。また、ユーザー指示による特定ループの

ベクトル化も可能であり、この指示を用いることにより、きめ細かいベクトル化ができる。

4 クリエイティブステーション3050上でのプログラム開発

4.1 クリエイティブステーション3050上でのコンパイラ

3050シリーズマシン上の最適化FORTRANコンパイラは、ネットワーク上のHITAC Sシリーズおよび大型汎(はん)用コンピュータMシリーズマシンと3050シリーズマシン間で連携をとりながら、効率的にFORTRANプログラムを開発し、運用していくことができる環境を提供する。これにより、従来SシリーズおよびMシリーズマシン上で行っていたFORTRANプログラムの開発作業を、3050シリーズマシン上で効率的に展開することができる。

3050シリーズマシン上の最適化FORTRANの特長は、以下のとおりである。

- (1) SシリーズおよびMシリーズマシン上の最適化FORTRANコンパイラとソースレベルで互換性がある。
- (2) 強力な最適化機能を持ち、高速なFORTRANオブジェクトを生成できる。
- (3) 自動ベクトル化機能を含むSシリーズおよびMシリーズマシン向けのクロスオブジェクト出力機能を持つ。

3050シリーズマシンとSシリーズおよびMシリーズマシンを利用したプログラム作成から実行までの作業の流れを図3に示す。

4.2 クリエイティブステーション3050上でのプログラム開発支援システム

FORTRANのプログラム開発を、操作性の優れたクリエイティブステーション上で行いたいというユーザーニーズに対応して、3050シリーズ上で動作するFORTRAN開発支援システム“FORT/ASSIST/W”を開発した。FORTRAN開発支援システムは、プログラムの作成、コンパイル、リンク、デバッグ、実行などの開発作業を一貫して行えるものであり、これによりユーザーはプログラム開発を効率よく進めることができる。

さらに、対話型チューニング支援“FORT/TF/W”と連携することによって、ワークステーション上でスーパーコンピュータ向けのプログラムチューニングができる。

FORTRANプログラム開発支援システムの特長は、次のとおりである。

(1) プログラムのコンパイル

原始プログラムのファイル名を登録することで、修正されたファイルを自動検出し、そのファイルだけをコン

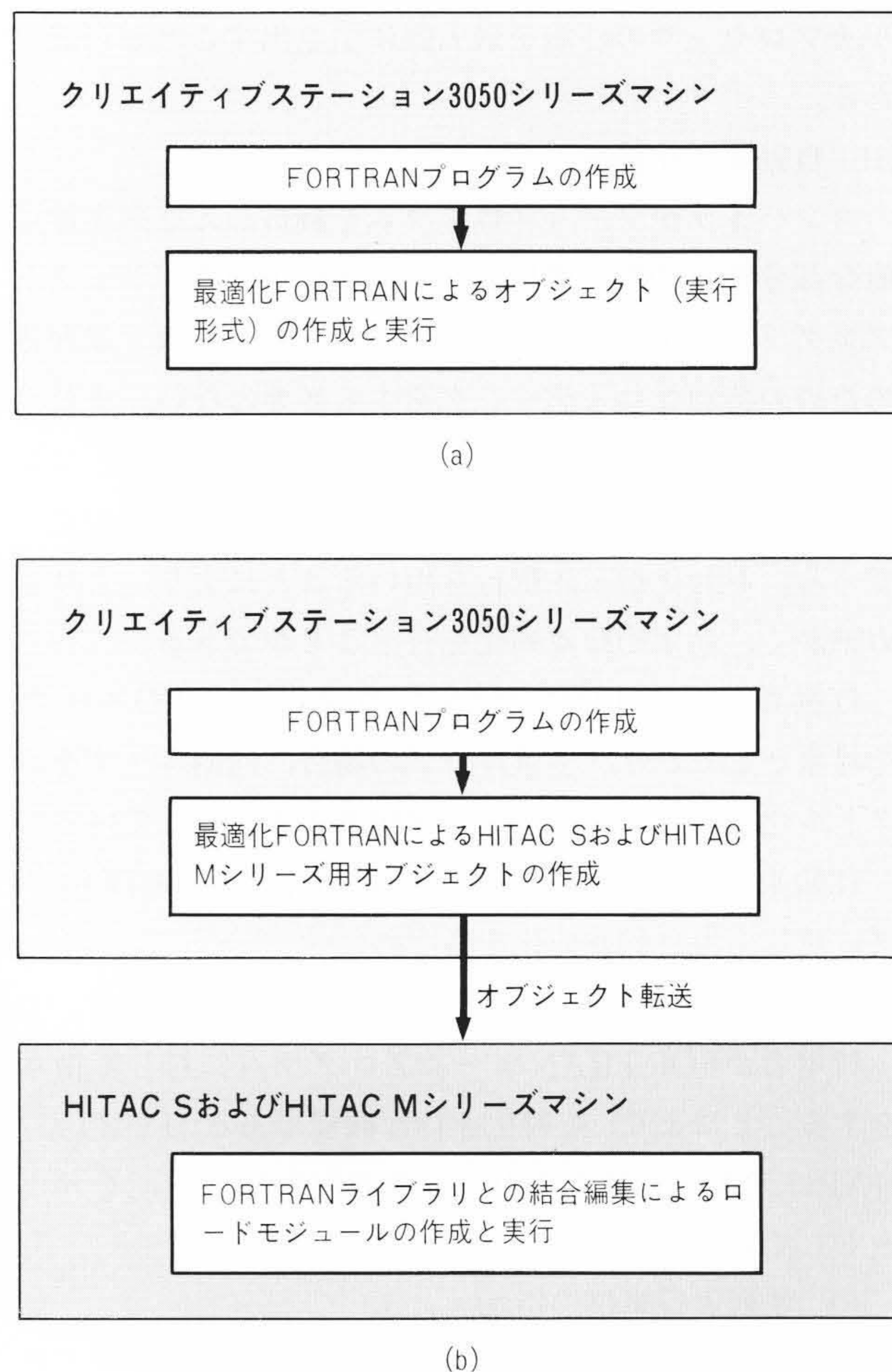


図3 プログラム作成から実行までの流れ クリエイティブステーション3050シリーズマシン上でプログラムの作成と実行を行う場合を(a)に示す。プログラムの作成を3050シリーズマシン上で行い、実行をHITAC SシリーズおよびMシリーズマシン上で行う場合を(b)に示す。

パイルする。

(2) プログラムのデバッグ

モジュールの呼び出し関係を視覚的に表現したコールグラフによるデバッグ、およびソースプログラムによるデバッグができる。

コールグラフでは、モジュールの入口と出口で実行を中断させ、その時点での引き数やコモンの値を調べることができ、モジュール間のインタフェースのデバッグに便利である。

(3) プログラムのチューニング

スーパーコンピュータ向けのプログラムチューニングを、操作性の優れたワークステーションで行える。

プログラムの実行比率やベクトル化比率などの数値表示だけでなく、グラフなどを用いた視覚的な表示ができ

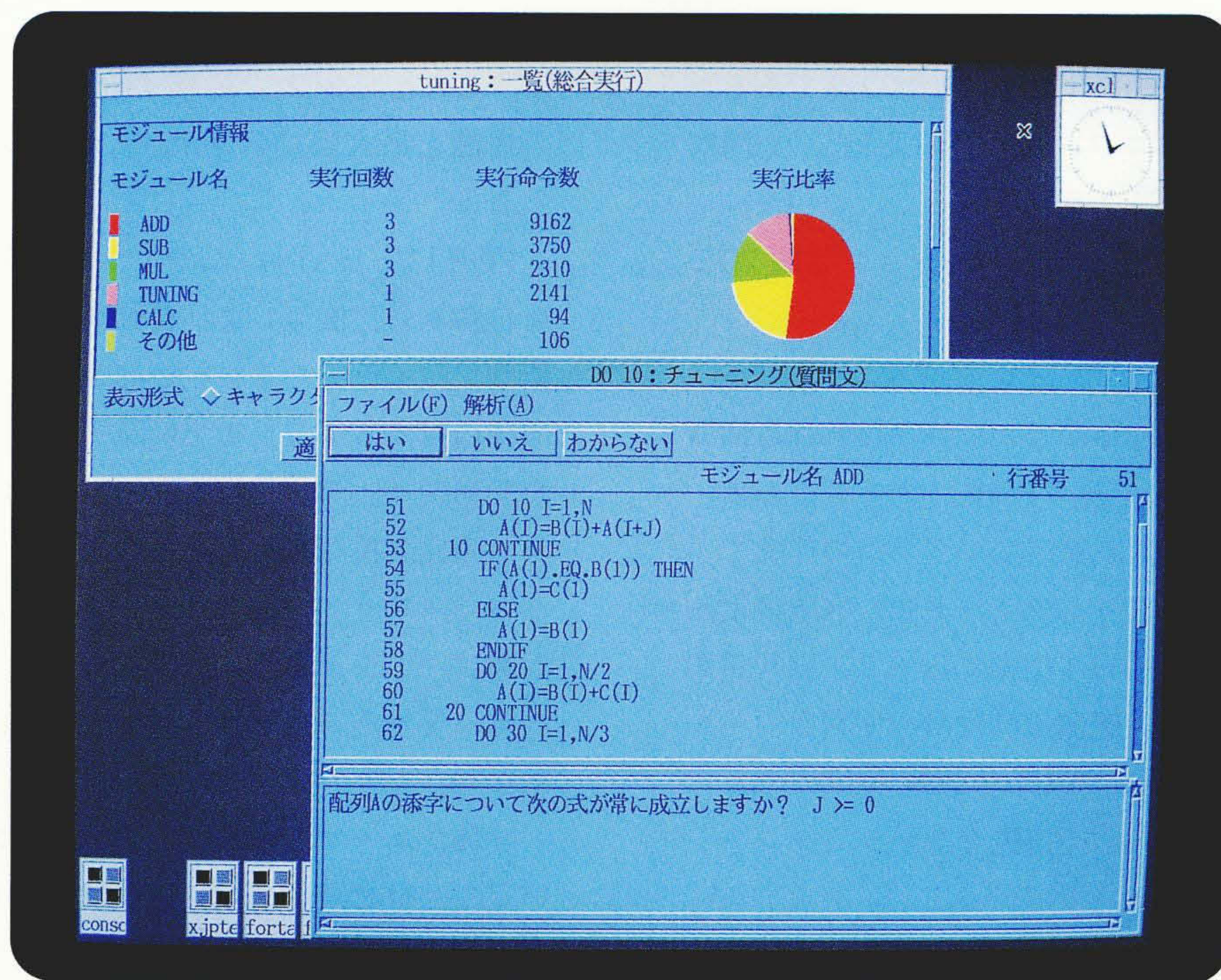


図4 対話型チューニング支援(FORT/TF/W)の表示例 モジュール実行比率のグラフ表示例と、質問文によるチューニングの表示例を示す。

る(図4参照)。

(4) プログラム解析情報の表示

変数やモジュールの相互参照情報、共通ブロックの使用状況、EQUIVALENCE結合情報などの診断情報をデバッグ時、チューニング時で任意の時点で表示することができる。

5 高速アルゴリズムを採用した応用ソフトウェア

S-3600, S-3800では、科学技術計算用プログラムを開発するのに必要なライブラリや応用ソフトウェアを利用することができる。

5.1 行列計算ライブラリ“MATRIX/HAP”

S-3000シリーズでは、科学技術計算プログラムの開発に適した行列計算ライブラリMATRIX/HAPをサポートしている。MATRIX/HAPでは、連立一次方程式解法、固有値計算、FFT(Fast Fourier Transformation)、および乱数計算を扱うことができる。

連立一次方程式解法では、差分法やバウンダリーフィット法でよく利用されるICCG法(Incomplete Cholesky Conjugate Gradient Method)などの反復解法や、材料分野などで扱う積分方程式の離散化で現れる密行列を解く直接解法などがある。

S-3800のような超高速のベクトル計算能力を持つマルチプロセッサタイプのスーパーコンピュータを効果的に利用するには、ベクトル計算機能を最大限に利用し、それらを集めて大きな単位で並列演算をさせることが重要である。

並列処理には、並列化準備のためのオーバーヘッドがかかるため、むやみに並列化するのは好ましくない。並列化オーバーヘッド時間に見合うだけの計算量を持つ大きな処理単位を各プロセッサのベクトル化機能に任せ、それらを並列に組み合わせることがポイントとなる。

科学技術計算プログラムを作成する際、行列計算ライブラリなどの下位レベルでは、ベクトル化機能を使って、ユーザープログラムの上位レベルで、FORTRANの並列化指示機能を利用し、並列向きにするのが望ましい。

5.2 総合構造解析システム“ISAS II/HAP”

総合構造解析システムISAS II/HAPは、構造物の強度計算、振動解析、熱伝導解析などを行うスーパーコンピュータ向けのプログラムプロダクトである。

固有値や固有モードなどの感度解析機能なども利用できる。

5.3 非線形最適化プログラム“HINLPS/HAP”

非線形最適化プログラム“HINLPS/HAP”は、二次

計画問題や大領域的最適化などを扱うことができるスーパーコンピュータ向けの最適化用のライブラリである。

世界的に有名なシュトコフスキーの問題³⁾を、全問解いた実績を持つ強力なライブラリである。

5.4 偏微分方程式向き数値シミュレーション言語“DEQSOL E2”

偏微分方程式向き数値シミュレーション言語DEQSOL E2は、熱や電磁場、流体などの分野で扱われる偏微分方程式で記述した問題を簡単に解くツールである。DEQSOL E2は、科学技術計算用プログラムの作成で手間のかかる差分、バウンダリーフィット法、有限要素法などの離散化手続きを自動的に生成するので、試行錯誤を要するモデルの検証や、概念設計段階の便利なツールとして役立つ。DEQSOL E2は、ソルバの一部にMATRIX/HAPを使うことで、高速な数値シミュレーションを実現している。

6 おわりに

スーパーコンピュータの目的は、その高い演算能力に

よって大規模で複雑な計算を高速に処理することである。これを極限まで追求するためには、ハードウェアの性能を最大限に引き出すためのソフトウェアが必要である。

FORT77/HAPは、このような要求の下で開発し、高度な自動並列化機能および自動ベクトル化機能を持つ高性能コンパイラである。また同時に、ユーザーのプログラム開発に対する作業負担を軽減するために、操作性に優れた3050シリーズ最適化FORTRANコンパイラやプログラム開発支援システムなどのソフトウェアを開発した。さらに、スーパーコンピュータの高速性を生かした技術計算ソフトウェアを提供することにより、大規模な技術計算に要するプログラム開発を効率的に行うことが可能となる。

今後、ユーザーの高性能化への要求はさらに拡大していくことは必至であり、それに対応したソフトウェアを提供していくことはメーカーの責務である。このような方向に対応して、今回開発したソフトウェアを基に、いっそうの機能強化、拡充を図っていく考えである。

参考文献

- 1) 後, 外: スーパーコンピュータ“DEQSOLとスーパーコンピュータ向け応用ソフトウェア”, 日立評論, 69, 12, 1131~1138(昭62-12)
- 2) 長堀, 外: スーパーコンピュータ“FORTRANベクトルコンパイラとチューニングソフトウェア”, 日立評論, 69, 12, 1123~1130(昭62-12)
- 3) W. Hock and K. Schittkowski: Test Examples for Nonlinear Programming Codes, Springer Verlag (1981)