次期スーパーコンピュータのソフトウェア

渡部 善隆 *

本稿では、来年 1 月から稼働する新スーパーコンピュータ VPP700 でサービスする予定のアプリケーション・ライブラリの紹介をします。なお、この原稿を執筆している段階では、筆者も VPP700 のアプリケーションを実際に扱っていませんので、カタログ的な紹介になることをご勘弁願います。具体的な使用方法は、今後のセンターニュース・広報で随時お知らせします。

1 言語処理

1.1 Fortran90/VPP

VPP700 の複数 PE 上で動作する Fortran コンパイラ / ライブラリです。並列処理拡張仕様を含む VPP Fortran 言語で記述されたプログラムをベクトル命令や並列実行ライブラリの呼び出しを含むオブジェクトに翻訳し、 VPP700 の複数 PE を使い高速に実行します。

言語仕様は国際規格である ISO/IEC 1539:1991(JIS 規格 JIS X 3001-1994) に準拠しています。また、並列化のための拡張最適化制御行をサポートしています。

サポート機能としては、 Fortran90/VP の機能にプラスして、複数 PE 上に分散している別々のメモリーを一つのメモリーとして扱うグローバルメモリー機能、文の並びと DO ループを分割する並列処理機能、データ転送機能、同期・排他処理機能を提供します。

1.2 Fortran90/VP

単一 PE 上で動作する Fortran コンパイラ / ライブラリです。ベクトル演算機構を使用した高速な浮動小数点演算が実行できます。言語仕様は、国際規格である ISO/IEC 1539:1991(JIS 規格 JIS X 3001-1994) に準拠しています。また、 Fortran90/VP は、 VP2600/10 向けの言語システム FORTRAN77 EX/VP の言語仕様を包含しています。従って、現在使用中の Fortran プログラムはそのまま移行可能です。ただし、バイナリーレベルの互換性はありませんので、実行ファイル、私用ライブラリは再作成する必要があります。

また、浮動小数点形式は VP2600/10 の M 形式から VPP700 は IEEE 形式に変更されます。しかし、双方の形式の変換オプションを利用することで、従来のデータをそのまま利用することが可能です。

サポート機能としては、 FORTRAN77 EX/VP でおなじみのベクトル化機能、ループアンローリング機能、高速組み込み関数などに加えて、ベクトルレジスタ割り当ての最適化機能、 LIW 型 RISC 命令向け最適化機能などを提供します。

1.3 C 言語

スカラー版 C 言語です。言語仕様は、国際規格である ANSI X3. 159-1989 に準拠しています。また、 K&R 仕様もサポートしています。

*九州大学大型計算機センター・研究開発部 E-mail : watanabe@cc.kyushu-u.ac.jp

最適化機能としては、共通式の除去などの汎用最適化、プログラム構成の変更機能、広域命令スケジューリングなど並列 RISC 向けの最適化機能をサポートしています。

1.4　C/VP

単一 PE 上で動作するベクトル版 Fortran コンパイラ / ライブラリです。 C 言語で記述されたプログラムを、ベクトル命令を含むオブジェクトモジュールに翻訳し、実行します。言語仕様は、国際規格である ANSI X3. 159-1989 に準拠しています。また、 K&R 仕様もサポートしています。

サポート機能としては、ベクトル化機能、ループアンローリング機能、高速組み込み関数などに加えて、ベクトルレジスタ割り当ての最適化機能などを提供します。

1.5　C++ 言語

C 言語にクラスタ、インライン関数、演算子の定義などの機能を追加した言語です。言語仕様は、業界標準の USL C++ Release3 に準拠しています。また、 ANSI C 言語標準規格の大部分を取り込んでいるため、 C プログラムの移植が容易です。

2　言語処理支援

2.1　アナライザ

VPP700 におけるプログラミングにおける、チューニング支援ツール、デバッグ支援ツール、および性能測定支援ツールです。

並列化に関する効果・加速度・負荷バランス・非同期転送率の情報を出力し、あわせて手続き間の負荷分布、平均ベクトル長の情報も得ることができ、プログラムのチューニングに役立ちます。また、対話的なデバックや PE 動作に関する事象の測定、 PE 間のデータ転送に関する情報も測定できます。

2.2　VPP WorkBench

VPP700 向けのプログラム開発環境としてプログラムの実行、デバッグ、およびチューニングを Unix ワークステーション上で統合的に行います。

サポート機能としては、すべてワークステーションの GUI を通してコンパイラの起動、 VPP700 へのジョブ投入と実行管理、チューニングツールの起動、 GUI ベースの会話型デバッグ、並列プログラムの各 PE での動作状況のグラフィックス表示を提供します。

2.3　エンジニアリング開発環境

VPP700 でのプログラム開発の支援として、ベクトル化や並列化の前段階としてスカラープログラムの作成、基本アルゴリズムの検証、プログラム構造の把握などの作業を UNIX ワークステーションを用いて効率的に行う環境をサポートします。

サポート環境としては、 Unix ワークステーション単独で Fortran90, C, C++ コンパイラが利用できる他に、 SSL II や会話型のデバッガ、実行コスト分布やプロセスの実行・監視、および、 GUI ベースのアナライザを提供します。

3　メッセージパッシングライブラリ

3.1　PVM

PVM は、アメリカオークリッジ国立研究所で開発されたメッセージパッシングライブラリです。通常はネットワークを介した分散環境上で各ノード間の通信のために利用されますが、 VPP700 上で PE をノードとしたデータ変換を行います。

サポート機能としては、プロセス生成、各種問い合わせなどのプロセス管理、同期 / 非同期送受信、広報送信などのメッセージ通信、複数メッセージの一括送受信、複数プロセス間にまたがる演算機能を提供します。

3.2　PARMACS

プロセス管理、メッセージ送信、同期処理、各種問い合わせ、論理ネットワーク定義を C 言語関数または Fortran サブルーチンとして制御するメッセージパッシングライブラリです。

VPP700 シリーズは分散メモリー並列コンピュータですが、高速クロスバー通信により共有メモリー型並列コンピュータ並の性能を実現する、とカタログに書いてあります。

3.3　MPI

MPI Forum において業界標準を目指して仕様検討されているメッセージパッシングライブラリです。分散されたプロセス間の集配信機能、集積演算およびグルーピングなどの強力な機能をサポートしています。

4　数値計算ライブラリ

4.1　SSL II/VPP

複数 PE 向き並列高速アルゴリズムをサブルーチン形式で提供します。仕様頻度が高く、計算コストのかかる重要な機能をサポートしています。

- 行列積
- 実・複素行列の連立 1 次方程式
- 正定値対称行列の連立 1 次方程式
- 実バンド・スパース行列の連立 1 次方程式
- 固有値問題 (3 重対角，実対称，一般化固有値問題)
- 逆行列
- 実・複素 Fourier 変換 (2, 3, 5 の混合基底)
- 線形最小二乗解
- 一様乱数生成

4.2　SSL II/VP

科学用サブルーチンライブラリ SSL II/VP は、連立 1 次方程式や微分方程式などの数値計算を行う約 230 種類のサブルーチンからなる VPP700 の単一 PE 向け汎用数値計算ライブラリです。各サブルーチンは Fortran プログラムから使用できます。使用方法は従来の VP2600/10 とまったく変わりません。

4.3 NUMPAC/VP

VPP700 の単一 PE 向け汎用数値計算ライブラリです。各サブルーチンは Fortran プログラムから使用できます。機能・使用方法は従来の VP2600/10 と変わりませんが、一部制限があります。

5 アプリケーションライブラリ

5.1 α-FLOW

最新の解析技術を導入した汎用 3 次元流体解析システムです。格子生成、 AI 支援機能など充実したプレ / ポスト機能を有し、ベクトル計算機向けの最適化技術を採用しています。

5.2 MASPHYC

材料の物性・構造を原子・分子レベルのミクロな情報から分子動力学の手法を用いて予測するシステムです。材料の性質を決定する原子・分子間相互作用ポテンシャルをライブラリ化することにより、有機化合物から無機化合物まで幅広い材料に適用可能です。

5.3 LS-DYNA3D

非線形動的構造解析ソフトウェア LS-DYNA3D は、ソウトツ衝突安全解析やプレス成形解析の分野でトップレベルの機能を持つ解析プログラムです。時間積分に陽解法を使用し、大変形・弾塑性・動的接触を含む数万要素を短時間で計算できます。さらに構造解析だけでなく、熱や流体との連成解析も標準で装備しており、通常の非線形ソフトウェアでは不可能な数万素以上のモデルや収束性の悪い問題にも適用可能です。

5.4 AVS

AVS(Application Visualization System) は、豊富なツールを用いて多角的なデータ解析ができるように設計されたデータおよびアプリケーション可視化システムです。 AVS により、利用者は計算機のハードウェア能力を問題解決のためにフルに使えるようになります。 VPP700 および可視化用サーバで動作します。

また、スーパーコンピュータ VPP700 とワークステーションをネットワークで接続したシステム上で AVS と連携しながらリアルタイムで可視化を実現するツール VisLink もサポートする予定です。

その他にも VPP700 では MARC K6, Gaussian94 などをサポートする予定です。