

H P C を 目 指 し て

--- N A からの飛躍 ---

福井義成

東芝 総合情報システム部

13年活動を続けた数値解析研究会が時流の要請を受け、総合技術としてのハイパフォーマンスコンピューティング研究会に変貌した経緯を述べる。ハイパフォーマンスコンピューティングという言葉は非常に広い意味に取ることが可能である。科学や工学の問題を計算機を利用して解く過程の各段階において、“ハイパフォーマンス”を追求することが重要と考える。

Aiming for High Performance Computing

Yoshinari Fukui

TOSHIBA CORPORATION

Total Information and Systems Division

580-1, Horikawa-cho, Saiwai-ku, Kawasaki 210 JAPAN

“High Performance Computing” could have variety of meanings, and it reflects greatly of what this group is becoming. The name “Numerical Analysis” was used for 13 years, but the computing technology trends of today shows that there should be more than “Numerical Analysis” to be studied. “High Performance Computing” suggests that all stages of resolving science and technological problems using computers should be the subjects for this study. The great transition of “Numerical Analysis” to “High Performance Computing” is discussed.

1. はじめに

数値解析は計算機の利用分野の中でも、最も長い歴史をもつ分野である。しかし、ここ2、3年、数値解析研究会（NA）の活動は活発とは言えない状況であった。しかし、「数値解析」という重要な分野の必要性が小さくなっているのではなく、スーパーコンピュータ、超並列計算機、高性能ワークステーション等の出現によって、数値計算・シミュレーションの科学・工学における重要性は以前にも増して大きくなっている。そこで、この分野をどのように扱っていくかを研究会の幹事、連絡委員の方々と半年近くにもわたる協議を行った。その結果、以下の様な合意を得た。

- ・数値解析は情報処理研究の今後においても重要であり、廃止すべきでない。
- ・情報処理学会における研究会としての特徴を出すべきである。
- ・情報処理技術の新しい流れが取り込めるような研究会とすべきである。
- ・対象範囲を広げて多分野との交流が積極的に行えるようにすべきである。
- ・誰でも参加討論できる雰囲気の研究會とすべきである

そのため、研究会の名称を「ハイパフォーマンスコンピューティング研究会」と改め、再出発することにした。ハイパフォーマンスコンピューティングは直訳すれば高性能計算であるが、この「高性能」は単に高速度であるという意味に留まらず、精度、利用技術、表現技術等といったコンピューティングシステムの高度な要素技術をすべて含むものとする。本研究会の特色は、扱う対象がシステム化を目指したものであり、純粹に要素技術を対象とするのではないという点である。キーワードとしては高性能計算のためのシステム化技術を対象とした研究会である。取り扱う研究分野としては下記の様な分野を考えており、今後、時代の流れを反映する予定である。

1. 数値計算と数値シミュレーションの基礎理論と実際
(モデル化、離散化手法、アルゴリズム、標準ライブラリ、数値表現、高精度計算、品質保証)
2. 高速・高性能計算用アーキテクチャシステムの利用技術、性能評価、と提言
((超)並列・分散処理、ベクトル処理、ワークステーション、実験システム、スーパースカラ、キャッシュ、メモリアクセス)
3. 計算と計算機を結ぶ技術の利用方法と提言
(プログラミング言語、最適化、データ配置、マッピング、可視化、デバッグツール、性能評価モデルと実測、その他)

2. ハイパフォーマンスコンピューティング

ハイパフォーマンスコンピューティングという表現が現れる以前は、類似の言葉では、スーパーコンピューティングがあつた。スーパーコンピューティングという言葉は人によって、理解が異なるが「スーパーコンピュータをうまく使った計算」というイメージが強い。これに対して、ハイパフォーマンスコンピューティングという言葉は非常に広い意味に取ることが可能である。科学や工学の問題

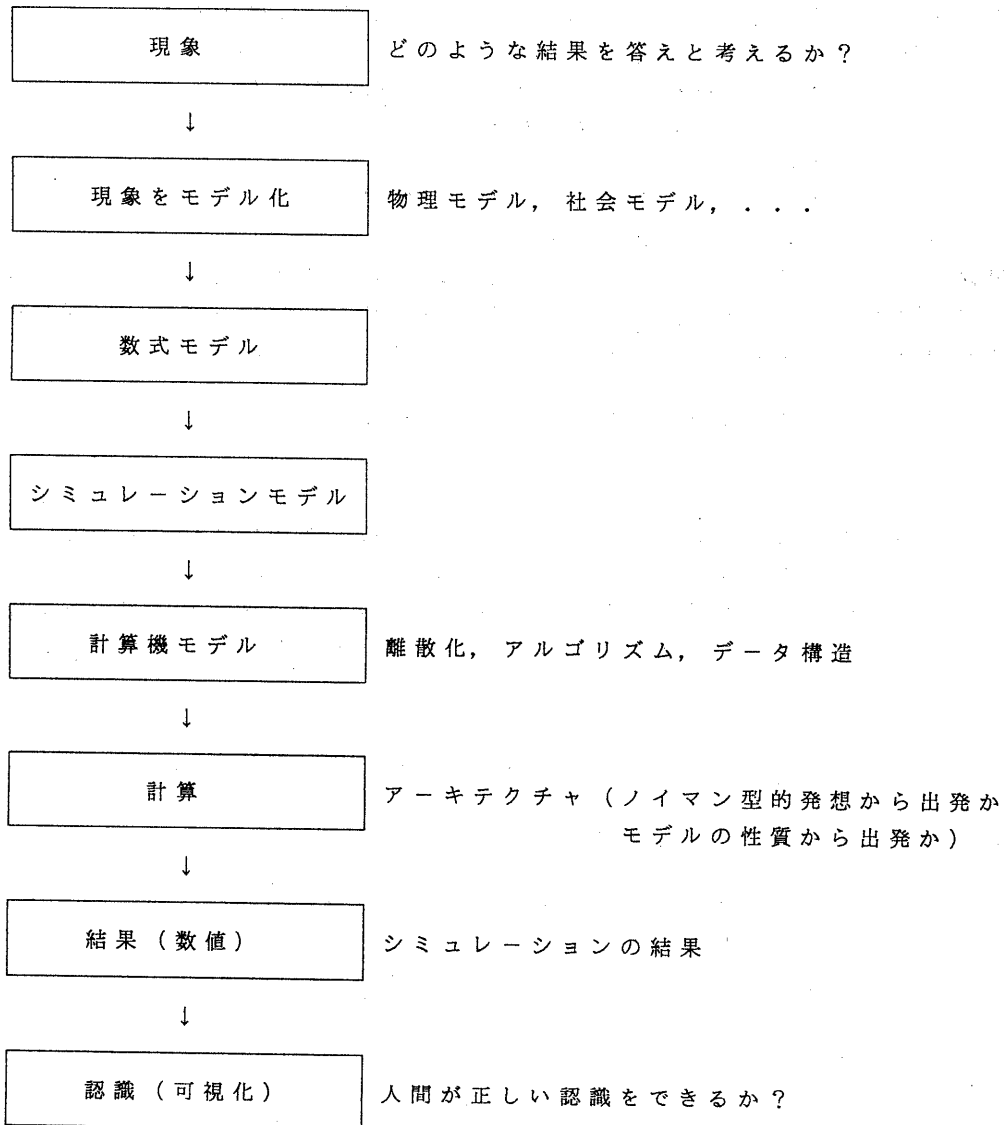


図 1. 科学工学問題を計算機を利用して解く（理解する）過程

を計算機を利用して解く（理解する）過程を模式的に書くと図1のようになる。図1の各段階において，“ハイパフォーマンス”を追求することが重要と考える。

(1) 計算機モデルないし計算の段階

ベクトル型のスーパーコンピュータで良く行なわれる高速化（チューニング）の作業は，計算機モデルないし計算の段階で“ハイパフォーマンス”を追求していると考えられる。ベクトル型のスーパーコンピュータ，汎用大型計算機，ワークステーション等で行なわれる手法としては以下のようなものがある。

- ・D O ループのベクトル化
- ・ループを構成する機械語を命令バッファ内に納める
- ・メモリーのバンクコンフリクトを無くす
- ・短いループのインライン展開
- ・小さいサブルーチン，関数のインライン展開
- ・キャッシュメモリーのヒット率の向上

この段階での“ハイパフォーマンス”を追求は，問題を熟知していなくても可能であるが，使用する計算機が仮定している条件（ベクトル計算機であれば同じ種類の演算が多い等）に依存し，大幅な“パフォーマンス”の向上は望めない。

(2) シミュレーションモデルから計算モデルの段階

この段階での“ハイパフォーマンス”の追求は離散化の方法，アルゴリズム，データ構造の変更である。アルゴリズムとデータ構造は密接に関係しており，この2つは同時に考える必要がある。ここでの手法と(1)の手法を組み合わせることにより，大きな効果が得られることが多い。問題の性質を熟知している必要がある。さらに使用する計算機も熟知しているとより効果が大きい。例としては以下の様なものがある。

- ・FFTの使用
- ・スパース行列に適したデータ構造と解法の適用

(3) 現象から計算機モデルの段階

この段階では，どの程度の答えを必要とするかから出発するため，“ハイパフォーマンス”の追求の効果は最も大きい。答えの概念を変えたとき，“パフォーマンス”の大きく向上させるブレイクスルーとなる。

1つの例として，有限要素法の素人が外野から有限要素法を見ていると，有限要素法の成功の最大の要素は“答え”の概念を変えたことにあると考えられる（有限要素法として応力のイメージで考えている）。有限差分法は基本的に微分を基礎においており，有限要素法は積分を基礎している。言い替えると収束の概念として有限差分法は強収束を用いており，有限要素法は弱収束を用いている。

有限要素法は“答え”の概念をこれまで強収束から弱収束でよいと概念を変更したと考えられる。

現在、シミュレーション（計算）が非常に大変な分野でも，“答え”の概念を変更することにより、ブレークスルーが可能であると、筆者は予想している。

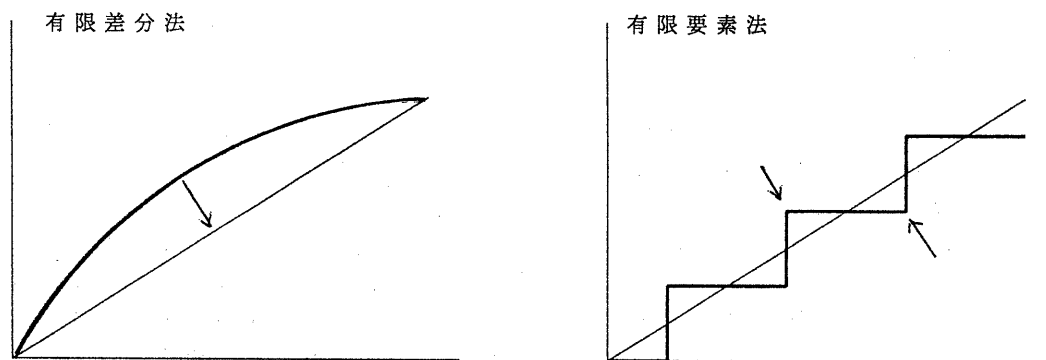


図 2. 有限差分法と有限要素法

(4) 計算から認識の段階

膨大なシミュレーション結果を人間が理解できるようにすることも重要である。シミュレーションで如何に良い答えを出しても、人間がその答えを正しく認識することができなければ、何の意味も無くなってしまふ。そのため、シミュレーション結果の可視化等も非常に重要である。

3. 計算機アーキテクチャ、数値表現及びネットワーク

(1) 計算機アーキテクチャ

“コンピューティング”を効果的に行える計算機アーキテクチャは上記の様なことを考慮しなければならない。リソースが無限であれば問題ないが、現実にはリソースは有限であり、その制約の中で効果的な計算ができなければならない。

現在のトピックスとしては、並列計算機と高性能マイクロプロセッサであろう。並列計算機はプロセッサの接続方式などで色々なアーキテクチャが出現しており、どのような問題にどのようなアーキテクチャが適しているかが重要なテーマである。並列化のためには、モデル化から計算までの段階を考慮することが重要である。また、スーパースカラー方式では、高速化のための手法がこれまでのマイクロプロセッサと異なるため、新たな手法の研究が重要である。

汎用的なアーキテクチャだけではなく、性能を追求するには目的に合ったアーキテクチャも必要であろう。ソフトでも、汎用的な解法には限界があり、性能を追求するには、目的に合った解法でなければだめなときがある。例えば、バンド行列、スパース行列向きの解法がそれである。（汎用は半用につうじる）。

理想的な計算機に少しでも近づけるために、本研究会と計算機アーキテクチャの研究者、開発者との連携が重要である。

(2) 数値表現

“コンピューティング”を行なうためには、データの内部表現も重要である。有効桁数と指数部の範囲が十分なければならない。半導体のデバイスシミュレーションではこのことが特に重要になる。デバイスシミュレーションでは変数を電子やホールにとり、その変化が指数関数的であるため、 10^{+150} 程度のダイナミックレンジが無いとプログラム作成に苦勞する。また、現在の多くのデバイスシミュレーションは流体モデルであり、移流項と拡散項の大きさがほぼ等しくなる状況では64ビット浮動小数点でも精度不足になることがある。精度不足で反復法が収束しないと、ベクトル化が可能な64ビット浮動小数点演算よりも、ベクトル化ができない128ビット浮動小数点演算のほうが速いこともある。

(3) ネットワーク

今後の“ハイパフォーマンスコンピューティング”においてはネットワーク環境も重要な要素であり、各計算機をうまく接続しなければならない。したがって、HPCにコミュニケーションのCを追加し、

H P C C または H P C ²

とする必要がある。

4. おわりに

このような点をHPCの軸と考え、各軸について総合的に“ハイパフォーマンス”を追求したいと考えています。ハイパフォーマンスコンピューティング研究会に変身した目的を果たすため、努力してきます。関連する研究会、学会等のご協力をお願いします。

最後に、NAからHPCへの変身に多大な協力をいただいた研究会幹事、連絡委員の方々に感謝いたします。