

流体数値シミュレーションに用いられる Super Computer の性能比較 (その 1)

— 特に実用プログラムを用いたベンチマークテスト —

Performance of Various Types of Super Computer in Numerical Simulation for Fluid Flow

村 上 周 三*・日 比 一 喜**・持 田 灯*

Shuzo MURAKAMI, Kazuki HIBI and Akashi MOCHIDA

序

Large Eddy Simulation 等の手法を用いた乱流の数値解析は最近の超高速計算機の発達を背景として、その研究が一段と活発になりつつある。国内では東大大型計算機センターに設置された HITAC S 810-20 を最初としてパイプライン方式の Super Computer の利用が広く行われるようになってきた。

これらの Super Computer のベクトルコンパイラはわれわれユーザの負担を大きく軽減しているが、パイプライン方式の Super Computer の性能を十分に引き出すにはプログラム、アルゴリズム、計算規模など種々の要因を検討する必要がある。従来の計算機以上に内部アーキテクチャの知識をユーザ側に要求しているように思われる。またメーカーごとに機械の性格が異なり、プログラムによっては結果的に計算時間に大きな差が出ることもある。乱流数値シミュレーションを発展させるためにはユーザ側としてもこれらの道具の性質をよく理解し、われわれの問題に適した計算機の利用法、アーキテクチャ等を検討することは意義のあることと考え、筆者らが一般的に用いている流体計算プログラムを使って各メーカーの Super Computer のベンチマークテストを実施することとした。

1. ベンチマークプログラムの内容

著名なベンチマークプログラムとしてはリバモアループ、LINPACK 等があり、いくつかのデータが公表されている。これらは浮動小数点演算量の多いプログラムであり Super Computer 等の科学技術計算に対する平均性能を推定することがある程度可能である。しかしこれらは実用プログラムではなく、流体数値シミュレーションの場合の計算時間がこれに対応しているかどうかは不明である。そこで本報告では流体計算を行う実用コード

* 東京大学生産技術研究所 付属計測技術開発センター

** 民間等共同研究員 清水建設(株)技術研究所

表-1 Navier-Stokes の方程式

$$\frac{\partial u_i}{\partial x_i} = 0 \quad (1)$$

$$\frac{\partial u_i}{\partial t} + \frac{\partial u_i u_j}{\partial x_j} = -\frac{\partial P}{\partial x_i} + \nu \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) \quad (2)$$

$$(i = 1, 2, 3)$$

を使って比較を行った。

1-1 計算コード

ここでは表-1 に示されるように最も基本的な層流の 3 次元 Navier Stokes 方程式を差分近似し、MAC 法を用いて計算している。時間差分は時間 3 点を用いた陽的解法である Adams Bashforth スキーム、空間差分は 2 次精度の中心差分を用いている。ここでレイノルズ数は 100 と想定している。本ベンチマークプログラムは層流計算であるが、Large Eddy Simulation のプログラムと比べ、乱流粘性の計算部分が加わる点を除けば、基本的に同様の構造を持っている。また $k-\epsilon$ 型乱流モデルを用いて計算する場合にも、計算時間の大半を占める圧力緩和の部分と同じ構造を持っているから、今回の結果とそれほど大きな差は生じないものとは考えてよい。連続式を満たすには通常圧力に関するポアソン方程式を SOR, ADI 法などのアルゴリズムを用いて解くことが多いが、本報告ではこれと等価な圧力速度同時緩和法を用いている。解法のフローを図 1 に示す。

本プログラムは教育上の配慮から見やすさ、理解しやすさを重視して差分定義式をそのまま書き下した 3 重の DO LOOP が大半を占めるプログラムである。したがって今回のように 3 次元 (20×20×20) の場合、トータルのメッシュ数が多いにもかかわらず、最内側の LOOP 長は 20 程度と短い。

また SOR 法、圧力速度同時緩和法は反復法であり、定義どおりコーディングすると 1 回前の演算で修正された値をすぐ次の演算で使うことになる。このようなアルゴリズムの場合は基本的にベクトル化が容易でない。

実際のプログラムでは図 1 の①の部分で計算時間の

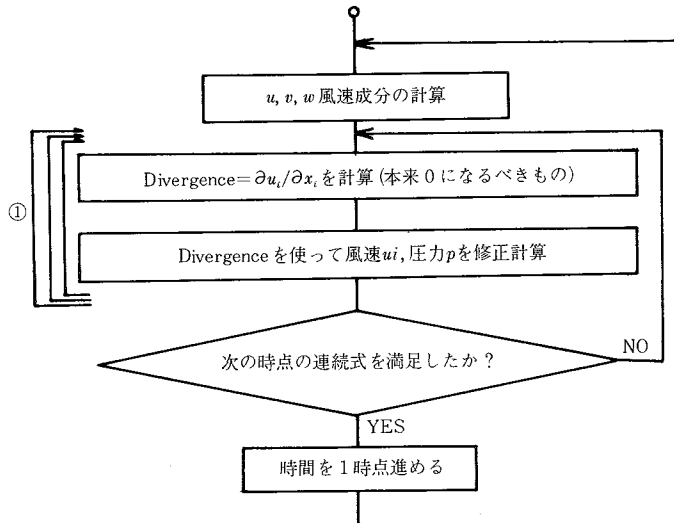


図 1 本ベンチマークプログラムのフロー

70 %程度を占めており、ベクトル化した場合の期待される効果は大きい。ベンチマークテストでは以下のようにこの部分をベクトル化した場合、しない場合等複数のケースについて比較を行った。

- 1) ケース 1：差分式の表現どおりのコーディングをした場合 (スカラ演算の比率が高い)
- 2) ケース 2：図 2 の①の部分で最内側 DO LOOP を分けてループ内の参照関係をなくしたもの (ベクトル演算の比率が高い)
- 3) ケース 3：リストベクトルを用いて 3 重のループを 1 次元化し、かつアルゴリズムの変更により参照関係をなくしたもの (ベクトル長の増加)

なおプログラムの最適化については、図 1 の①の部分のみとし、 U, V, W 風速成分を計算する部分については、原則的に手を加えないものとし、コンパイラが通る程度の改造に留めた。

また計算時間の比較は 500 計算ステップまでの CPU 時間で行った。

1-2 比較した Super Computer

- 1) HITAC S 810-20
- 2) HITAC S 810-10
- 3) FACOM VP-200
- 4) FACOM VP-50
- 5) CRAY X-MP/1
- 6) FPS 264

1-3 テスト環境

表-2 に示す。

2. テスト結果

結果は表-3 に示すとおりである。HITAC, VP, FPS 三者はベクトル化率の高いケース 2 のほうが高速化されているが全体的にケース 2 (ベクトル化されたもの) はケース 1 に比較してあまり大きな加速率は得られていない。これは単純に最内側 DO LOOP を分割しただけではかえって緩和計算の収束が悪くなり反復回数が増加してしまうことが 1 つの原因である。

したがってスカラプロセッサのみで計算を実行するとケース 2 のほうが計算時間がかかっている。CRAY ではスカラ演算器とベクトル演算器が同一ブロック周期で演算を行うため、スカラ演算が非常に高速であり演算量の多くなるケース 2 よりもケース 1 のほうが計算時間が短くなっている。このため CRAY はケース 1, 2 の CPU 時間が他の 3 者と逆転している。

HITAC, VP については同一メーカー内の上位機種、下位機種の比較を行った。結果を見る限り両者に大きな差は見られない。これは両者とも並列演算器の数が上位機種ほど多くなっていることに起因するものと思われる。すなわち本ベンチマークプログラムは個々の並列演算器の稼働率を向上させるような最適化は行ってはいないこと、DO LOOP 長が短い小型プログラムであることなどによるものと考えられる。

表-4 に HITAC, VP のスカラ演算時間とベクトル演算時間を示した。ここでスカラ演算時間はベクトル演算時間を含んだものである。両機種ともベクトル演算の実行時間はほとんど変わらない。しかしスカラプロセッサ

表-2 比較した Super Computer の機種とテスト環境

機 種	OS, COMPILER	日 時	場 所
1) HITAC S810-20	VOS 3	1985.10	日立神奈川工場
2) HITAC S810-10	VOS 3	1985.10	日立神奈川工場
3) FACOM VP200	OS4/F4 MSP EDITION20, VSP	1985.10	蒲田システムラボ
4) FACOM VP50	OS4/F4 MSP EDITION20, VSP	1985.10	蒲田システムラボ
5) CRAY X-MP/1	COS 1.15, CFT 1.15	1985.10	MENDOTA HEIGHTS, USA
6) FPS264	SJE	1985.10	FPS 日本支社

表-3 テスト結果 (500 step までに要した cpu 時間)

機 種	case-1	case-2	case-3	備 考
1) HITAC S810-20	43.62 (秒)	30.34 (秒)	16.49 (秒)	
2) HITAC S810-10	46.52	35.15	20.17	
3) FACOM VP-200	35.35 (123.83)	21.70 (196.32)		
4) FACOM VP-50	42.81	36.28		
5) CRAY X-MP/1	28.05 (49.30)	29.22 (93.53)		本来MULTI PROCESSORであるが1 CPUのみで実行
6) FPS264	178.9	154.0		FPS 164で実行、メーカー側がFPS264との倍率を用いてこれを乗算して推定したもの

注) カッコ内の数字はスカラプロセッサのみによる実行時間

の速度差が全体の計算時間の差として表れている。CRAY, FPS については若干アーキテクチャが異なるため、このような比較は行わなかった。

表-3 のケース 3 は、アルゴリズムとコーディングを改良した結果である。ここではリストベクトルを用いた上でループ内の変数の参照関係を変更したものである。この改良により、3 重の DO LOOP を 1 次元アレーにすることが可能となり、かなりの高速化が可能となる。また参照関係の変更による緩和計算の収束性の改善も高速化に寄与している。今回は HITAC だけでこのテストを実施したが、この改良は他の機種においても同様に計算時間の短縮を予想させるものである。

今回用いたコンピューターの中で FPS 264 のみは信号処理用アタチットプロセッサから発達したものであり、他の 3 機種の Super Computer とはやや性格を異にする機械であり、価格帯が 1 桁低い所に位置している。公表されているピーク性能で比較した場合、前者は後者に対しかなりの性能差があるように見られるが、今回のベンチマークテストの場合、その差は小さくなっている。

なお表-5 に文献 1) より 1 部分引用した LINPACK ベンチマークの結果を示したので参照されたい。

3. 結 論

3 節でも述べたように表-3 の CPU 時間の比較のみでその機械の優劣を単純に判断するのは非常に危険である。今回使用したベンチマークプログラムは前述のように教育上の配慮から、差分定義式をそのまま書き下したものであり、パイプライン方式 Super Computer に対して最適化が行われているわけではなく、また DO LOOP 長も 20 と短い小型のものである。したがって従来のスカラ計算機と比較して大きな加速率を期待できるプログラムとはなっていない。このようなベンチマークテストが一般性を持つか否かの判断は難しいが、筆者らがを行っている流体計算に関してはこの結果が、それぞれの平均性能やそれぞれの機種の特徴をある程度判断する資料にはなりうるものと考えてよい。以上の結果について筆者らの知見を述べると以下のごとくである。

- 1) HITAC は演算器並列度をより有効に使えばかなりの高速化が期待される。
- 2) VP はスカラ演算の高速性からベクトル化率の低いプログラムでも有利である。
- 3) CRAY はスカラ演算が他と比較して高速であ

研 究 速 報

表-4 SPU, VPU 時間の比較

機 種	case 1		case 2		備 考
	SPU TIME	VPU TIME	SPU TIME	VPU TIME	
1) HITAC S810-20	46.00 (秒)	11.00 (秒)	31.00 (秒)	20.00 (秒)	東大計算機センターでの実行結果
2) FACOM VP200	35.35	11.56	21.70	19.42	富士通蒲田システムラボでの実行結果

注 1) SPU : Scalar Processing Unit, VPU : Vector Processing Unit

注 2) スカラー演算時間はベクトル演算時間を含む

注 3) HITAC のデータは課金の関係で 1 秒以下は切り捨て

表-5 LINPACK ベンチマーク (文献 1) より)

Solving a System of Linear Equations with LINPACK^a in Full Precision^b

Computer	OS/Compiler ^c	Ratio ^d	MFLOPS ^e	Time secs	Unit ^f μsecs
CRAY X-MP-1	CFT1.14 (Coded BLAS)	.23	52.7	.013	
CDC Cyber 205	FTN (Coded BLAS)	.48	25	.027	0.079
CRAY-1 S	CFT (Coded BLAS)	.54	23	.030	0.088
CRAY X-MP-1	CFT1.13 (Rolled BLAS)	.50	24	.028	0.082
Fujitsu VP-200	Fortran 77 (Rolled BLAS)	.72	17	.040	0.12
Hitachi S-810/20	Fortran 77/HAP (Rolled BLAS)	.74	17	.042	0.12
CRAY-1 S	CFT (Rolled BLAS)	1	12	.056	0.16
FPS-264	F.01 F77, (Coded BLAS)	1.2	10	.066	0.19
FPS-164	D, opf = 3 (Coded BLAS)	4.2	2.9	.232	0.68

り、またそのアーキテクチャからスカラ演算が多くとも速度は変わらない。また MULTI PROCESSOR を考慮したプログラミングにより大規模問題における能力がより有効に発揮されるであろう。

4) FPS はその価格/性能比から考えて小部門での専用機として使う場合に有利であろう。

いずれの機種においてもパイプライン方式の Super Computer にアルゴリズムを最適化することは効果が大きい。このことからこれらの計算機はまだクセのある道具といえる。プログラム最適化の作業をユーザがどこまで行うかはそれぞれの立場により議論の分かれるところであろう。

謝 辞

本ベンチマークテストを実施するにあたりまして下記の諸氏から多大なる御援助を頂きました。
FACOM-HITAC(株) HITAC 本部 石田正己・村井一郎氏、FACOM-HITAC(株) FACOM 本部 丹下正昭・

大山幸信氏、日本 CRAY(株) 河田紘一・寺内和也・加藤毅彦氏、フローティングポイントシステムズ日本支社 小島三津夫・青木純一・榊原悟氏。

紙面を借りて深く感謝の意を表します。

(1985 年 11 月 12 日受理)

参 考 文 献

- 1) J. J. Dongarra, Performance of Various Computers Using Standard Linear Equations Software in a Fortran Environment, Mathematics and Computer Science Division, Technical Memorandum No. 23, 1985, 10
- 2) 星野力編, PAX コンピュータ, オーム社, 1985, 3
- 3) 川合敏雄, スーパーコンピュータへの挑戦, 岩波書店, 1985, 2
- 4) 村田健朗, 小国力, 唐木幸比古, スーパーコンピュータ, 丸善, 1985, 3
- 5) R. W. Hockney, C. R. Jesshope 著, 奥川, 黒住訳, 並列計算機, 共立出版, 1984, 9