

自動並列化した大気力学用流体モデルでの eServer の性能 – VPP5000 との比較–

中島 健介 (九州大学 大学院理学研究院 地球惑星科学部門)

中野 満寿男 (九州大学 大学院理学府 地球惑星科学専攻)

概 要

高性能演算サーバ IBM eServer p5 と VPP5000 の性能を、自家製の流体計算 fortran プログラムにおいて比較した。結果は、fortran77 プログラムの場合に IBM eServer p5 が比較的高性能であることを示した。また、fortran90 の構造体文法を多用したプログラムでは、特に VPP5000 での実行性能の悪化が目だった。

1 はじめに

我々はナビエ・ストークス方程式を基礎とする流体力学数値モデルを日常の道具として、地球・惑星の気象学に関する研究を行っている。筆者の一人が研究を始めた時期は日本におけるベクトル型スーパーコンピュータの全盛期であったが、今日、時代の主役は PC と並列機であり、プログラムも世代交代の時期である。それでも、MPI などを使用した並列プログラム開発は億劫なのが本音であり、コンパイラの自動並列化機能への期待は大きい。このたび、九州大学情報基盤センターの「春の無料キャンペーン」により、同センターの VPP5500 および eServer を使わせて頂き、我々が自前で開発してきた新旧二種のプログラムの実行性能を、自動並列化機能も含めて比較することができたので、その結果を報告する。

2 「古典的」FORTRAN77 プログラムの自動並列化

評価に用いた第一のプログラムは、1980 年代中盤にベクトル機での実行を意識して開発された FORTRAN77 版の 2 次元流体の時間発展を差分法により計算するモデルである。計算の全ステップで、全計算領域についての楕円型境界値問題を解く（内部で FFT を使用）ため、並列機には向かない。そのかわり、ベクトル機上での実行性能は比較的高く、主要な国産スーパーコンピュータの全てで 99% を越えるベクトル演算稼働率を示し、FLOPS 値でも「公称」値の 25% 以上で実行されていた。

このプログラムの実行性能を表 1 にまとめた。これから感じられることは、まず eServer の健闘（あるいは VPP の落日）である。並列化をせずとも計算時間は VPP5000 の 3 倍に過ぎず、さらに VPP5000 では CPU が占有できず CPU 時間の 4 倍程度の実行時間がかかることを考えれば、ユーザから見た場合、eServer の方が速く結果が得られることになる。

さらに、eServer の自動並列実行もまた、なかなか健闘している。使用 CPU 数が増えるに従って全 CPU 時間は増加しているが、実行時間としては、8CPU までは短縮している。8CPU 使用時の実行時間は VPP5000 の CPU 時間に匹敵するものである。

```

!浅水波方程式をleap-frog法で積分
h_a(1:imax) = h_b(1:imax) &
  -depth*(( u(1:imax) - u(0:imax-1) ) / dx) * 2.0D0 * dt
u_a(0:imax)=u_b(0:imax) &
  -grav * (( h(1:imax+1) - h(0:imax) ) / dx) * 2.0D0 * dt

!with GMS
h_a = h_b - depth * d_x(u) * 2.0D0 * dt
u_a = u_b - grav * d_x(h) * 2.0D0 * dt

```

図 1: 偏微分方程式の staggered 格子状での差分法のコードの一部。上は通常の fortran90 の場合。下は gms を用いた場合。格子点位置の相違も含めて一切の添字が不要となっている。(実際の評価で用いた計算コードではない。)

ちなみに「標準的な PC」は、VPP より一桁遅く、また eServer より 1CPU では約 3 倍、並列化計算と比較すれば一桁遅い。この点の評価は、負担金との関係を含めて改めて議論したい。

3 fortran90 構造体を使用したプログラム

次に評価したプログラムは fortran90 で導入された「構造体」を積極的に利用して可読性を高める、という方針で書かれている。特に、格子点情報や記憶領域のマネージメントを隠蔽しつつ差分演算を定義する関数ライブラリ “gms” を使用することにより、ユーザープログラムから一切の添字を追放することに成功している (図 1)。

このプログラムの、各計算機での実行時間 (概略) を表 2 に示す。PC の計算速度との比較では、eServer は先の例と同等であるが、VPP5000 の実行性能は悪い。ただし、コンパイルが正常に行えるようになったのが、キャンペーン期間の終わり近くであり、格子点数が小さいケースしか評価できなかったことに注意が必要である。なお、モデル中で LAPACK のサブルーチン (多数の一次方程式の解法) を毎

計算機	全 CPU 時間	実行時間
eServer 1 CPU	3,354 秒	3,400 秒
eServer 4 CPU 自動並列	3,642 秒	1,608 秒
eServer 8 CPU 自動並列	3,846 秒	1,272 秒
eServer 16 CPU 自動並列	5,712 秒	1,368 秒
VPP5000 1 CPU	1,091 秒	4,000 秒
Pentium 4 2.8GHz	12,500 秒	12,500 秒

表 1: ベクトル機向きプログラムの実行時間。格子点数は約 60 万、最内側ループ長は殆どどの do ループで 16,384 である。eServer の自動並列化ではコンパイル時に “-O3 -qarch=pwr5 -qtune=pwr5 -qsmpr=auto” のオプションを指定している。

計算機	概略 CPU 時間	備考
eServer 1 CPU	2 分	センター標準 LAPACK LAPACK のソースを改変
VPP5000 1 CPU	7 分	
VPP5000 1 CPU	4.5 分	
Pentium M 1.7 GHz	9 分	

表 2: fortran90 構造体を多用したプログラムの実行時間。格子点数は 2048、最内側ループ長は 64 である。

時間ステップ呼び出しているが、情報基盤センターの標準のものは非常に性能が悪かった。ソースを多少に改変したところ、この部分の計算時間は激減した。

eServer での自動並列化は試みたものの、実質的に 1CPU でしか実行されなかった。この点はループ長がもっと長い場合も同様であった。このプログラムの場合、構造体引数とし構造体を返す関数の呼び出しが多数あり、関数内部での演算が極めて少ないことを考えると、自動並列化ではの粒度が極めて小さくなる。したがって、並列化性能が悪いのは当然かも知れない。

4 eServer と VPP の負担金について

現在の課金体系では、VPP5000 と eServer の CPU 課金の比率は 20:1 である (VPP5000 については、計算時間 15 分以降の料金とした)。したがって、先の性能比 (約 1:3.5) からすれば「eServer が約 6 倍お買得」である。しかし現在の VPP5000 の料金は、16CPU 並列実行でも 1CPU と同額であることに注意する必要がある。我々が研究において行う数値計算では、初期条件やパラメタを変えつつ複数の計算を行い、結果を比較する場合がある (図 2)。このような計算は、VPP5000 の 16CPU を最大の並列化効率で使用して、1/16 の課金で実行することができる。一方、これと同じ計算を eServer で行えば、CPU 時間の合計について課金がなされるため、VPP 5000 を用いるよりもずっと割高 (約 2.7 倍) になってしまう。

最後に eServer と PC のコストを比較してみよう。PC の 1 年間に相当する計算は eServer 1CPU では 8.5×10^6 秒で実行可能であり、課金は通常で 17 万円、定額利用 (資源共有タイプ) の場合は 3.4 万円である。これは割りと「お買得」と思われるが、大きなメモリが使えるなどの利点があることを考えても、今後とも魅力的であり続けるためには、PC の性能向上 (と価格低下) に応じた見直しが随時、必要と感じられる。

5 おわりに

「ベクトル機の落日」を向かえ、余り大きな期待を持たずに臨んだ eServer および自動並列化の性能評価であったが、結果としては「eServer も自動並列化も結構使えるぞ」というのが感想である。ただし、負担金の面では、使い方によっては VPP5000

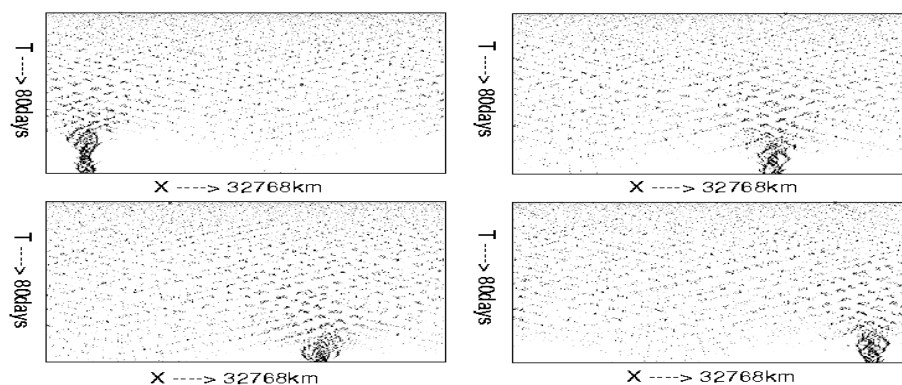


図 2: パラメタは共通で初期値を微妙に変えて行った計算の例。大領域雲モデルにおける降水の時空間構造。

にまだ分がある。VPP5000 の後継機導入にともなう課金体系の決定にあたっては、このような点にも注意を払っていただければ幸いである。逆に、eServer の課金を、並列計算（パラメタ並列計算も含む）に有利（少なくとも不利にならないように）改訂することも検討して頂きたい。

謝辞

関連の計算は「2006 年春の無料キャンペーン」にて、九州大学情報基盤センターの研究用計算機を用いて行った。図 2 の計算は国立環境研究所地球環境研究センターにて行った。