

流体解析ソフトウェア Advance/FrontFlow/red の SX-Aurora・富岳・GPGPU における高速化

李 佳智* 小川 哲司*

Speeding up of Advance/FrontFlow/red in SX-Aurora, Fugaku and GPGPU

Jiazhi LI*, Tetsuji OGAWA*

本稿では、SIMD 演算機能があるベクトルエンジン「NEC SX-Aurora」やスーパーコンピュータ「富岳」と SIMT 演算機能がある「Nvidia GPGPU」における Advance/FrontFlow/red の高速化手法や計算性能について紹介する。

Keywords: 高速化、ベクトル化、富岳、GPGPU、流体解析

1. はじめに

MPI 並列機能が実装された Advance/FrontFlow/red (以下、AFFr) ではマルチコアのスカラ機における高い実行速度と並列効率が得られるが、SIMD・SIMT アーキテクチャを持つ計算機に最適化を行わない場合に律速されることがある。

SIMD とは、一つの命令を同時に複数のデータに適用する方式である。ベクトルエンジン「NEC SX-Aurora」やスーパーコンピュータ「富岳」は SIMD によるベクトル演算を行う。倍精度浮動小数点の場合に、同時に処理できる最大ベクトルの長さは「富岳」では 8、「NEC SX-Aurora」では 256 である。

SIMT とは、一つの命令で複数のスレッドを制御する方式である。「Nvidia GPGPU」が一つの命令列を 32 の演算で共用し、各スレッドが 1 個のデータを処理する。

SIMD・SIMT 方式を活かすように、その複数のデータ演算は独立する必要がある。AFFr では、反復法による求解における収束性向上のため、不完全 Cholesky 分解による前処理が行われている。このとき、反復プロセスの内部には SIMD・SIMT 演算が困難な前進・後退代入が生じる。

本稿に紹介する開発において、不完全 Cholesky 分解の枠組みの中でベクトル演算を可能とするマルチカラー法が導入され、SIMD・SIMT アーキテクチャを持つ計算機上における高い実行速度を得た。他方、上記の前進・後退代入を避ける方策の一つとして、対角スケーリング法による前処理も導入された。

2. SIMD・SIMT へ適用する線形ソルバーの前処理

Cholesky 分解を前処理法とする連立一次方程式 $Ax = b$ の求解は変換行列 $U := D^{1/2}L^T$ を用い以下の形で表される。

$$(UAU^{-1})Ux = Ub \quad (1)$$

ここで、 D および L は、Cholesky 分解 $A = LDL^T$ における対角行列および上三角行列を表し、 $D^{1/2} := \sqrt{d_{ii}}$ である。行列解法として共役勾配法を用いる場合、(完全)Cholesky 分解による D および L が最も良い収束性を有する。しかし、 A が巨大な疎行列の場合に Cholesky 分解における L が必ずしも疎行列とはならない。メモリ負荷を軽減するため、AFFr において用いられている不完全 Cholesky 分解 (以下 IC 分解) では、 L の非零要素を A が非零になる位置に限定した疎行列とする手法を採用している。

この IC 分解を前処理法とする共役勾配法は、反復プロセス内部における残差 r の評価において下

*アドバンスソフト株式会社 第 3 事業部

3rd Computational Science and Engineering Group,
AdvanceSoft Corporation

の形で LDL^T の逆変換を必要とする。

$$\mathbf{z} = (\mathbf{LDL}^T)^{-1}\mathbf{r} \quad (2)$$

ここで、 $\mathbf{L}$ が上三角行列であるため、以下の式の形による直接法で依存関係のある前進・後退代入が行われる。配列の値 ($\mathbf{y}$ と $\mathbf{z}$) を逐次更新するとき、依存関係があるため SIMD・SIMT 演算ができない。

$$\mathbf{L}\mathbf{y} = \mathbf{r} \quad (3)$$

$$\mathbf{DL}^T\mathbf{z} = \mathbf{y} \quad (4)$$

この点が、かつて AFFr の SIMD・SIMT の計算機における計算速度のボトルネックとなっていた。

2.1. 対角スケーリング法

上記のボトルネックを避ける方法として、Cholesky 分解の形式において $\mathbf{L}$ に単位行列を用いる対角スケーリング法[1] (以下 OS 法) が挙げられる。

$$(\mathbf{D}^{-1/2}\mathbf{A}\mathbf{D}^{1/2})\mathbf{D}^{-1/2}\mathbf{x} = \mathbf{D}^{-1/2}\mathbf{b} \quad (5)$$

$$\mathbf{z} = (\mathbf{D})^{-1}\mathbf{r} \quad (6)$$

OS 法は、従来の不完全 Cholesky 分解との比較において、反復プロセスあたりの演算量を低減できる反面、収束性が悪化する。一般のスカラー機では後者の影響が前者を上回る場合がほとんどである。他方、「SX-Aurora」と「富岳」では、前者にベクトル演算率およびベクトル長の向上が加わることにより、OS 法の実行速度がスカラー機より向上できる。

2.2. マルチカラー法

マルチカラー法[2]とは前進代入・後退代入において、依存性が無く独立に更新できる配列要素を同時処理する方法である。依存性がある要素は互いに異なる「色」になるような色付けを行う (マルチカラー)。同じ「色」に属する要素は依存性が無く、同時処理が可能になる。また、メモリの連続性のため、配列の順序を色順に並び替える (オーダリング)。

Cyclic-Multicolor Reverse Cuthill-McKee (CM-RCM) 法によって色付けを行った。以下の手順で色番号を付ける。

- 隣接する要素の数 (次数) が最小の要素を

1 つ選んで、色番号 1 をつける。

- 色番号 k の要素に隣接する要素から色番号がついていない要素をリストアップして、その中で互いに依存性を持つ要素があれば一方を除いて、依存性のない要素の集まりを決定し、これに色番号 $k+1$ をつける。
- これを $k = 1, 2, 3, \dots$ と繰り返して全要素の色番号を決定する。
- この色番号を逆順にする。(Reverse Cuthill-McKee)
- このままでは、色数が多いので、全色数 N を決めて (デフォルトで $N=10$ とした) 色番号を N で割った余りを新しい色番号とする (Cyclic Multicoloring)。
- 色番号を決定したのち、色番号順に要素番号を付け変えるが、その際、隣接要素数の少ない順に並び替え、行列要素の配列は、 A_{ij} (要素番号, 隣接番号) (Fortran 型式) のように保存することで、一番内側のループを要素番号のループにしたときに、連続したメモリアクセスになるようにした。

上記の手法で、前進代入、後退代入が以下のような形に書けるようになった。

色番号のループ

隣接番号のループ

要素番号のループ (SIMD・SIMT 処理)

要素ごとの処理

要素番号のループ終わり

隣接番号のループ終わり

色番号のループ終わり

2.3. 他的高速化手法

非構造メッシュを用いる解析で、隣接セルとの間に圧力ポアソン方程式の行列係数が作成される。図 1 に例として非構造メッシュが生成される行列係数の非零要素を示す。縦軸はセル番号になり、横軸は隣接セルの番号となる。この分布で反復ループにある行列ベクトル積を行う時にそのベクトルのキャッシュヒット率が低いことが分かる。そのため、従来の ICCG 法と対角スケーリング法に Reverse Cuthill-McKee 法で各ノードの内部

セルの番号を並べ替えることで、図 2 に示すように行列の各行の隣接セル番号は近くなり、キャッシュヒット率が高くなることが期待できる[3]。

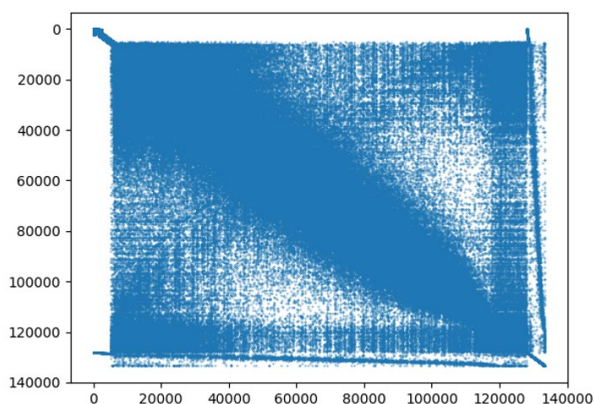


図 1 非構造メッシュに基づいて行列の非零要素の分布

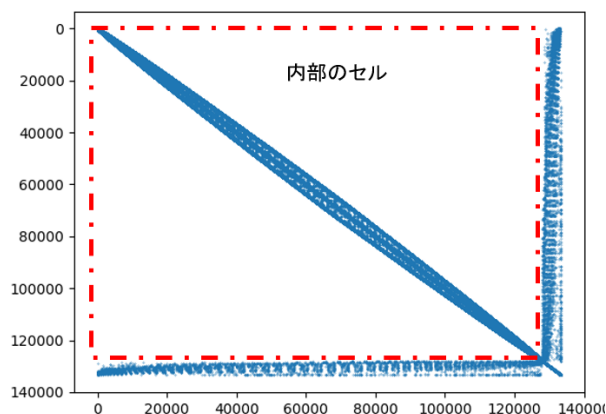


図 2 Reverse Cuthill-McKee 法でセル番号を並び替えた非零要素の分布

また、データ構造とライブラリー使用について下記の高速化手法も実装された。

- ELL・CSR 圧縮行格納方式
- ループ交換・ブロッキング
- 「Nec SX-Aurora」における SBLAS ライブラリーの導入
- 「Nvidia GPGPU」における CUBLAS と CUSPARSE ライブラリーの導入

3. 検証例題

計算対象は、建築物の風荷重評価のベンチマー

クとして用いられる、図 3 に示す単体単純形状建築物モデルである。風洞実験に対応させることができるように、建築物の形状は $7.5 \text{ cm} \times 7.5 \text{ cm} \times 22.5 \text{ cm}$ 、すなわちアスペクト比 3 の直方体とした。計算領域のサイズは $2 \text{ m} \times 3 \text{ m} \times 1.5 \text{ m}$ と定めた。計算メッシュは四面体要素で、その節点数は 1,014,773、要素数は 5,278,479 である。表 1 の解析手法と表 2 の境界条件で、図 4 に 100 ステップのスパン中央断面における流速分布が得られた。

表 1 解析手法

項目	設定
支配方程式	非圧縮性 Navier–Stokes
乱流モデル	Large Eddy Simulation (LES) 標準 Smagorinsky モデル
離散化法	セル中心有限体積法
差分スキーム	2 次精度中心差分
時間積分法	Crank–Nicolson 法

表 2 境界条件

境界	設定
流入境界面	適切な風速の鉛直分布と乱れの強さの流入変動風
流出境界面	自然流出境界
側面・上面	壁境界, 流速 フリースリップ条件
地面	壁境界,
建物	流速 ノースリップ条件

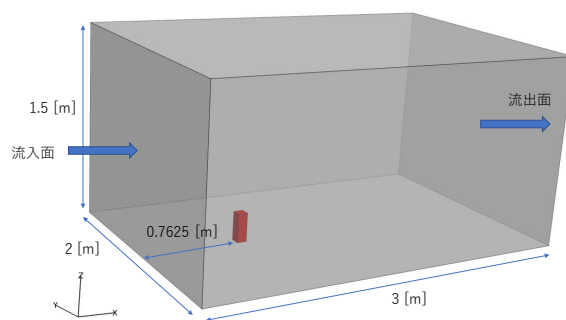


図 3 風荷重評価解析の計算領域

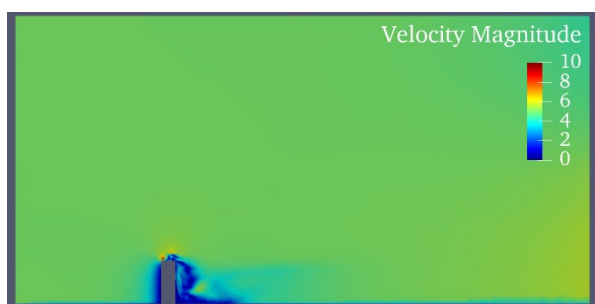


図 4 スパン中央断面における流速分布 [m/s]

4. 「SX-Aurora」と「富岳」における計算性能

スカラー計算機(Intel Xeon Gold 5218)で 1 ノードの 32 MPI 並列での計算時間を基準にし、「Nec SX-Aurora」の 1 ベクトルエンジンの 8 MPI 並列と「富岳」の 1 ノードの 48 MPI 並列での計算性能を評価する。

図 5 に示すように、「Nec SX-Aurora」の計算速度はスカラー計算機の 2.25 倍になり、「富岳」はスカラー計算機の 2.34 倍で高速化された。

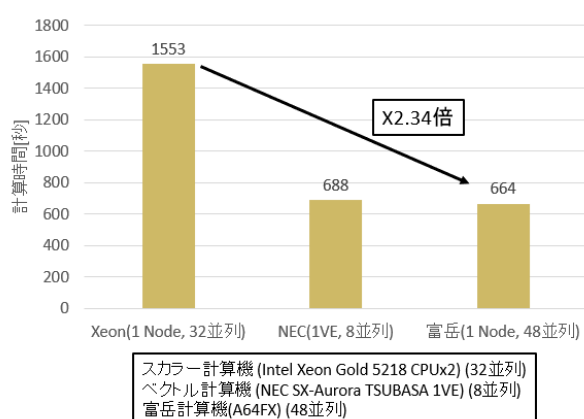


図 5 スカラー機・「SX-Aurora」・「富岳」における計算性能

5. 「Nvidia GPGPU」における計算性能

表 3 に示すように、スカラー計算機(Intel Xeon Silver 4310)で 1 ノードの 48 MPI 並列での反復ループの計算時間を基準にし、「Nvidia GPU」での 1 GPU の計算速度がスカラー機の 2.52 倍を得た。

CM_RCM 法を用いる場合に、従来の ICCG 法より収束性が悪くなることがあり、今回の計算ではソルバーの反復回数が約 1.6 倍に増加したものの、GPGPU は高い計算性能を示した。

表 3 GPGPU 上に反復ループの計算性能の評価

	Xeon(R) Silver 4310 48 MPI	Nvidia A30 1 GPU
ソルバー	ICCG	ICCG+CM_RCM
反復回数	756	1250
計算時間	1649[s]	655[s]
速度の比	1	2.52

6. まとめ

SIMD・SIMT 演算機能が付いているそれぞれのベクトルエンジン「NEC SX-Aurora」やスーパーコンピュータ「富岳」や「Nvidia GPU」上に Advance/FrontFlow/red の計算性能向上を目的として高速化を実施した。

従来の ICCG 法に前進後退代入が含まれることによる SIMD・SIMT 演算ができないボトルネックを対角スケーリング法とマルチカラー法で解消した。また、SBLAS ライブラリーと CUDA・CUSPARSE ライブラリーを導入し、1 ノードのスカラー機より 2 倍以上の計算性能が得られた。

参考文献

- [1] 速水謙, 原田紀夫, 対角項スケーリングを施した共役勾配法のベクトル計算機における有効性について, 情報処理学会論文誌, Vol.30, 1989.11
- [2] 中島研吾, 片桐孝洋, マルチコアプロセッサにおけるリオーダーリング付き非構造格子向け前処理付反復法の性能, 情報処理学会研究報告, Vol.2009-HPC-120 No.6
- [3] 藤野清次, 小玉捷平, 岩里洗介, 縁どり行列用の zigzag-CCS 格納形式の性能評価, 日本シミュレーション学会論文誌, Vol.7, No.4, 2015
- [4] SBLAS ライブラリー
(https://sxaoratsubasa.sakura.ne.jp/documents/sdk/SDK_NLC/UsersGuide/sblas/f/ja/index.html)
- [5] CUBLAS ライブラリー
(<https://docs.nvidia.com/cuda/cublas/index.html>)

[6] CUSPARSE ライブラリー

(<https://docs.nvidia.com/cuda/cusparse/index.html>)

※ 技術情報誌アドバンスシミュレーションは、アドバンスソフト株式会社 ホームページのシミュレーション図書館から、PDF ファイル（カラー版）がダウンロードできます。（ダウンロードしていただくには、アドバンス/シミュレーションフォーラム会員登録が必要です。）