各種計算機基本性能調査

平成26度第2四半期

目次

1.はじめに

最近はシュミレーションの規模が大きくなり、
倍精度演算では、表現できる数値範囲と
仮数部のビット数が問題となってきています。
4倍精度変数は倍精度浮動小数点数を2つ
つなげた方式とieee754-2008のデータ形式が
ありそれぞれ一長一短があります。

また演算に1-xの様な計算があると精度低下を
防ぐためには倍精度浮動小数点数を2つつなげた
方式をとる必要があります。このため,倍精度変数
で表現できる数値範囲の問題と仮数部のビット数
の問題があると、演算に1-xの計算が多いか否
かで適用する方式を考える必要があります。

さらにこの問題はアクセラレータなどの適用方法
と絡むため問題がさらに複雑になります。
今四半期はこの問題を中心に扱っていきます。

SR16000/M1 システムでは、性能評価の基準となる演算量の算出と倍精度では,3次元対称問題での反復法の計算,倍精度超の精度での3次元非対称問題の反復計算を中心にしています。
サーバーでは整数演算方式による超多倍長計算、GPUでは各種演算精度での性能比較とDD形式と整数演算方式の性能比較を行っています。

GPUでは,Phi5110Pは他とは少し異なるアーキテクチャーのため、詳細に解析し,また
HD7970,W8000,CYP7 (AMD HD7980)
などの結果も示しました。

尚,SR16000での一般ジョブに関しては,主に各種計算機アプリケーション性能比較に
記載しています。

2.性能評価問題の演算量

2.1　3次元反復法計算

倍精度演算用に以下の問題を設定しました。

対称行列用

(1)サイズ$257 \times 257 \times 257$の対角優位な問題

を解くcg法(conjugate　gradient)

(2)ポアソン方程式

$$\Delta u = -3\sin(x) \times \sin(y) \times \sin(z)$$

解析解$u(x, y, z) = \sin(x) \times \sin(y) \times \sin(z)$

sor(successive　over－relaxation)

陰解法　sor1

陽解法　sor2

odd－even法　sor3

adi(alternating　direction　implicit　method)法

$R = 100, nx = ny = nz = 113$

収束判定値は共役残差10^{-12}

初期値$u(x, y, z) = 0$

倍精度超の演算精度が必要な場合用に以下の問題を設定しました。

非対称行列用

3次元ポアソン方程式

$$\Delta u + R\frac{\partial u}{\partial x} = -f$$

領域$[0,1]\times[0,1]\times[0,1]$

解析解$u(x,y,z) = e^{xyz}\times\sin(\pi x)\times\sin(\pi y)\times\sin(\pi z)$

bcg(biconjugate gradient)法

$R = 100, nx = ny = nz = 129$

cgs(conjugate gradient square)法

$R = 100, nx = ny = nz = 113$

収束判定値は共役残差10^{-12}

初期値$u(x,y,z) = 0$

2.1.1 対称行列計算

解法により反復回数が大きく異なるため演算量は以下の様にばらつきがおおきくなっています。

演算量一覧(GFLOP)	
解法	演算量
SOR(陰解法)	1148
SOR(陽解法)	15267
SOR(odd-even)	443
ADI	4554
CG法	506

2.1.2 非対称行列計算

非対称行列の場合は倍精度超演算が必要になるので性能モニターでの値が基本的な性能データとなります。

倍精度での演算量(FLOP)/1反復

bcg法 $18\times(nx-2)\times(ny-2)\times(nz-2)$

$+2[14+18\times(nx-1)+22\times(ny-1)+13\times nx\times ny\times(nz-2)]$

cgs法 $21\times(nx-2)\times(ny-2)\times(nz-2)$

$+2[14+18\times(nx-1)+22\times(ny-1)+13\times nx\times ny\times(nz-2)]$

性能モニターによる演算量 (GFLOP)

解法	精度	反復回数	演算量
bcg	4倍精度	316	487
cgs	6倍精度	288	1239
cgs	8倍精度	217	2107

2.2 N体問題計算

粒子数N=1000,4000,10000でそれぞれ
タイムステップを10000,625,100として
総演算量が同じになる様に設定しました。

総演算量はSR16000の性能モニターでは
270GFLOPですが,GPUボードでは平方根を
サポートしていないケースがあり,GPUボードで
平方根計算を反復法で計算したプログラムを
SR16000の性能モニターで
実行すると580GFLOPとなっています。

平方根計算,除算計算の演算数は
よく変わり得るのでここでは,
演算量 $= 50 \times$ タイムステップ数 $\times$ (粒子数)^2 FLOP
としています。

2.3 4次元積分計算

4次元積分計算としてS^{221}テストを使用していますDOループで見ると,2重DOループを一次元化していますので,プログラム的には2重DOループ計算となります。

問題は$S^{221}(-1,100,100,0,100)$, $N=576$

で性能モニターによる演算量は

倍精度演算 : 4568GFLOP

4倍精度演算 : 42187GFLOP

となっています。

$$\frac{4\text{倍精度演算量}}{\text{倍精度演算量}}=9.2\text{となっています。}$$

3.性能評価問題の実行時間

3.1　3次元反復法計算

3.1.1 対称行列計算

SR16000実行時間(秒)

プログラム	32core	64smp	反復回数	
d3cg	14.4999	16.2941	1104	
d3sor2	233.2875	362.1883	61382	
d3sor3	15.3201	16.7317	1780	
d3adi	106.0389	171.7138	7632	
d3sor	523.7610		4626	1cpu

d3sor	陰解法	並列化不可
d3sor2	陽解法	並列化可
d3sor3	odd－even	並列化可

1.SORでは陽解法の反復回数は大幅に増えるが、並列化効果により,陰解法より高速になっています。
2.odd-even法の効果が大きい。
3.smt=off,(32core)の性能が良い。

3.1.2 非対称行列計算

ベースとなるシングルジョブ実行結果は下記の様になっています。

シングルジョブ実行結果			
SR16000		実行時間:秒	
プログラム	精度	反復回数	実行時間
bcg	4倍精度	317	10.9749
cgs	6倍精度	277	437.1204
cgs	8倍精度	217	715.7060

並列実行反復法　(実行時間：秒)

sr16000	1node	64smp

bcg

精度	実行時間	反復回数
4倍精度	4.1678	316

single　10.9747

cgs

精度	実行時間	反復回数
6倍精度	76.5859	288
8倍精度	118.5751	217

再並列化強化後

cgs

精度	実行時間	反復回数
6倍精度	29.1450	281
8倍精度	33.5245	217

single
437.1204
715.7060

1.bsg法は並列効果は大きくない。
2.csgの並列化効果は内積演算の修正によるものです。

3.2 N体問題計算

N体問題性能測定結果一覧

粒子数はN=1000,4000,10000で演算量は同じになる様に調整しました。

実行時間(秒)一覧表

N	32core	64smp	最適化
1000	4.7332	4.7668	OPT3
4000	4.2597	4.3365	OPT3
10000	4.1637	4.5797	OPT3
1000	2.6379	2.6471	SOPT
4000	2.6304	2.7826	SOPT
10000	2.5880	2.6867	SOPT

1.最適化の効果は約1.8倍
2.Nの値の違いによる実行時間の差はほとんどないので並列化オーバーヘッドが少ない事がわかります。

3.3　4次元積分計算

S^{221} テスト

$S^{221}(-1,100,100,0,0,100)$

$N = 576$

SR16000	実行時間(秒)	
精度	32core	64smp
倍精度	30.395169	24.126208
4倍精度	550.758631	330.429147

性能的には倍精度,4倍精度演算ともに,smt = on(64smp)の方が良い。
また演算性能での

$$\frac{4倍精度演算}{倍精度演算} = 13.8$$

と演算量比9.2を大きく上回っています。
すなわち4倍精度演算の性能が悪くなっている事を示しています。