数値流体解析における パーソナルコンピュータの利用と性能評価に関して

On performance evaluation of Personal Computer in CFD

丸岡 晃^{*1} 平野 廣和^{*2}

Akira MARUOKA, Hirokazu HIRANO

1. はじめに

風工学の分野において、数値流体解析(CFD: Computational Fluid Dynamics)を用いて流れの現象および物体の空力性能の評価を実施することは、現在、急速に発展しつつあり、かつ着実に成果を挙げるに至っている¹⁾。最近では、静的な空気力のみならず、大規模な3次元数値流体解析により非定常空気力²⁾までも計算することが試みられている。このようなことから、21世紀初頭には、CFDが従来から主として行われてきている風洞実験に置き換わることはないまでも、風洞実験のある部分を置き換えたり、また風洞実験を相補う形で広く利用されることは確実な状況となっている。

しかしながら、風工学の分野におけるCFDの発展のためには、今後解決しなくてはならない様々な問題も残されている。例えば、風工学の分野で対象とする物体が下流側に複雑な流れを生じること、そのうえ風が自然風として乱れの強い乱流であることなどから、信頼性の高い結果を得るためには、大規模な3次元数値流体解析³⁾が必要不可欠となってくる。さらに、これを短時間で解析するためには、高速な演算性能を有した並列型スーパーコンピュータ等の高価な計算機システムが必要となる。そのため、利用者数や使用時間が制限されたり、多大な計算費用を要することになるので、一般の実務者が手軽にCFDを採用できない状況に

なっている。これらが、CFDを風工学の分野に広めるための大きな障壁の一つとなっている。

一方、近年、PC(Personal Computer)の心臓部であるマイクロプロセッサの技術開発競争により、性能の大幅な向上が計られている。なおかつ周辺機器やメモリ等も含め、汎用品としての大量生産により大幅な低価格化が計られている。最近では、数年前のスーパーコンピュータの性能に匹敵する演算能力や記憶容量を有するプロセッサや周辺装置を搭載したPCが個人ベースでも購入可能となっている。また、安価な高速ネットワークシステムが登場するとともに、通信ライブラリとしてMPI(Message Passing Interface)やPVM(Parallel Virtual Machine)が整備されてきた。このような背景から、これらを組み合わせて複数のPCを高速ネットワークで接続し、あたかも1台のコンピュータとして使うことができるPCクラスタ型並列計算機⁴⁾⁵⁾が注目を集めるに至っている。

このようなことから、本研究ではできる限りコストを掛けないことを最大の目標として、簡単に市中から入手可能な各種のプロセッサや汎用部品を用いてパーソナルコンピュータならびにPCクラスタ型並列計算機を製作した。これらに、同一の風工学のためのCFDソフトを用いて計算を行い、単一のプロセッサならびにクラスタ化により並列化した場合の性能評価を行うものである。さらに、数値計算に欠かせないFortran

*1 八戸工業高等専門学校建設環境工学科 助手 博士(工学)
Research Associate, Hachinohe College of Technology

*2 中央大学総合政策学部 教授 工博
Professor, Faculty of Policy Studies, Chuo University
(原稿受理:平成12年12月18日)

のコンパイラに関しても、無償で入手できるソフトと有償のソフトとの性能比較も併せて行った。

2. プロセッサの性能比較

PC/AT 互換機のプロセッサとしては、従来から Intel 社製 Pentium シリーズの X86 互換プロセッサが独占状態であった。しかし、最近はこの同互換の AMD 社製 K-6 シリーズなどの製品が販売されるようになり、最新型の Athlon シリーズは価格面ならびに浮動小数点演算性能に関して Intel 社製を上回っていると言われるようになってきた。

そこで本研究では、Intel 社製の廉価版の Celeron シリーズ 300MHz, 450MHz, 500MHz の 3 種類, Pentium III 800MHz, AMD 社製 Athlon シリーズ 800MHz, 1000MHz の 2 種類, 合計 6 種類のプロセッサを選んだ。なお, Celeron 450MHz は 300MHz をクロックアップした状態で使用している。これらのプロセッサを心臓部とした PC に, OS としては Debian GNU/Linux 2.2 を用いた。さらに, 数値計算用プログラムの Fortran コンパイラとしては, 無償ソフトである GNU の g77, ならびに富士通製のコンパイラ (Linux 対応 Fortran & C Package V2) を用いた。なお, 性能比較の目安として, IBM 社製の大型並列計算機 RS/6000SP (中央大学情報研究教育センター所有, 以下, IBM SP と略す) のシン

グルプロセッサモードでも計算を行った。

比較用に用いた風工学用の CFD ソフトは, 筆者らが大規模 3 次元問題で従来より使用している有限要素法による IBTD/FS 法⁹⁾であり, また乱流モデルには Smagorinsky 型 LES を導入している。計算条件は, 1:1 角柱を用い, レイノルズ数は 1,000 とした。ここでのメッシュ分割は, 節点数は 7808×33 , 要素数は 8024×32 である。連立一次方程式の解法には SCG 法を用いており, 行列の記憶法にイタレーションごとに行列を構築し事前に記憶しない Matrix Free 法を用た。比較ための計算時間は, ある程度計算を行った後の 10 回の時間増分回数とし, ファイルの入出力に要する時間は含まれていない。

Intel 社製の Celeron 300MHz で GNU の g77 コンパイラの速度を規準とした各プロセッサの性能を比較した結果を Fig.1 に示す。

コンパイラを g77 とした場合, Celeron および Pentium III とほぼプロセッサのクロック数に比例して計算速度が向上している。よって, 本解析コードにおいて Pentium III は, 廉価版の Celeron と性能面で大差がなかった。これは, ここで使用したコンパイラが Pentium III 特有の機能である SSE 命令に最適化されていないことに起因するものと思われる。次に Pentium III と Athlon を比較すると同一クロック数では Athlon

Fig. 1 プロセッサの性能比較
Performance evaluation of each processor

の方が約 1.3 倍の計算速度を有している。また, Athlon は、クロック数が上がった分だけ性能が向上している。これらのことから、ここでも取り上げた計算だけで判断するには資料不足ではあるが、浮動小数演算が主な演算である CFD の様な分野には、Celeron や Athlon の方が PentiumⅢより性能面ならびにコスト面にも優れていると考えられる。ただし、Celeron は 2000 年 12 月現在、クロック数が 766MHz まではしか製品化されていないので、これ以上の高クロック数を選ぶことができないので注意する必要がある。

一方、コンパイラを富士通製に変更すると、同一クロック数では富士通製を使用した場合、PentiumⅢが約 1.2 倍、Athlon が約 1.7 倍となっている。また、Athlon と PentiumⅢを比較すると約 2.0 倍となっている。これらより、富士通製のコンパイラは、Athlon に適していることがわかる。Athlon において有償のコンパイラを導入することで約 1.7 倍の性能向上が得られることは、評価に値することと考えられる。

比較の参考用として、IBM SP を単一プロセッサで動作させた場合との比較を示す。富士通製コンパイラを使った Athlon の方が、性能が上回っているのがわかる。最近の PC がスーパーコンピュータに匹敵する性能を有していることを示す一例である。

3. PC クラスタの構成

3.1 ハードウェアの構成

本研究における PC クラスタは、4 台の PC により構成されていて、各 PC ともハードウェアの主要部は同種である。ここで、各 PC は、2 個のプロセッサを持つデュアルプロセッサのシステムを採用している。このため、最大で 8PE(Processing Element)による並列計算が可能となる。デュアル化の利点は、ハードウェア部品を半分にすることが可能で、コストの大幅削減に寄与している。本研究で用いたプロセッサは、2000 年夏の時点でデュアル化が可能であった Intel 社の Celeron¹ 300MHz と PentiumⅢ 800MHz である。これらの仕様を Table. 1 に示す。ところで、Celeron プロセッサの動作周波数は、バスクロックの固定倍となっており、Celeron 300A は、 $66.6\text{MHz} \times 4.5 = 300\text{MHz}$ である。このプロセッサは、バスクロック 100MHz に対応しているマザーボードを使用すれば、クロックアップするこ

とが可能であり、 $100\text{MHz} \times 4.5 = 450\text{MHz}$ で動作することが多い。よって、本研究で行った計算は、全て動作周波数を 450MHz にクロックアップした状態で使用している。これは動作保証外である。さらに、動作周波数を上げることによって、プロセッサの発熱が大幅に増えるため、特に筐体内部の冷却に十分な注意を払う必要があり、冷却が十分でなければ、システムが誤作動したり、停止してしまうことも発生するので注意を要する。

Table. 2 にネットワーク関連のハードウェアの仕様を示す。各 PC は、ファーストイーサネット(100Mbps)の NIC(Network Interface Card)とスイッチングハブにより接続されている。ハブは、full-duplex モードで動作している。ところで、並列計算機のネットワークには、Myrinet に代表される並列計算専用機で開発されたギガビット (Gbps) クラスの SAN(System Area Network)システムを利用する例⁷も見られる。しかし、現在のところこのシステムは高価であるため、限られた予算内では採用することが出来なかった。そのため、本論では安価なファーストイーサネットの LAN(Local Area Network)システムを採用し、大幅なコストダウンを計った。

3.2 ソフトウェアの構成

PC クラスタのソフトウェアの一覧を Table. 3 に示す。OS には、Debian GNU/Linux 2.2 を用いた。Debian GNU/Linux は、Linux カーネルを中核として、全てフリーソフトウェアにより構成された OS であり、数多くのパッケージ(コンパイル済みのソフトウェア)を有している。本研究で用いたソフトウェアは、全て Debian のパッケージに含まれているもので、一切のコストをかけていない。ところで、Linux カーネルは、

Table. 1 単体 PC のハードウェアの仕様
Hardware specification of each PC.

マザーボード	Tekram P6B40D-A5 (Dual Slot1)
プロセッサ	Intel Celeron 300A (450MHz× 2)
メモリ	256Mbyte

マザーボード	Tyan Tiger 100 (Dual Slot1)
プロセッサ	PentiumⅢ 800MHz × 2
メモリ	256Mbyte

¹ Celeron のデュアル化は、メーカー動作保証外である。実施には十分な注意が必要である。

Table 2 ネットワーク関連のハードウェアの仕様
Hardware specification of Network

NIC	Planex ENW-9501-F
ハブ	Planex FX-16E (16 ポートファーストイーサネットスイッチングハブ)

Table 3 ソフトウェアの一覧
Software specification

OS	Debian GNU/Linux 2.2
カーネル	Linux 2.2.17
コンパイラ	g77, gcc
通信ライブラリ	Mpich 1.1.2

デュアルプロセッサシステムに対して SMP (Symmetrical Multi-Processor)の機能により各プロセッサに均一な処理を行わせる機能を有している。

3.3 並列化評価法

大規模数値流体解析に対する PC クラスタ型並列計算機の有効性に関しては、速度向上比と並列化効率によって検討した。速度向上比と並列化効率はそれぞれ式(1), (2)で定義される。これらの値より、並列化に対する評価を行うこととする。

$$\text{速度向上比} = \frac{\text{プロセッサ数1PEの計算時間}}{\text{プロセッサ数NPEの計算時間}} \quad (1)$$

$$\text{並列化効率} = \frac{\text{速度向上比}}{\text{プロセッサ数NPE}} \times 100(\%) \quad (2)$$

4. 解析による並列化評価

一 矩形断面まわりの3次元流れ

非圧縮粘性流れの Navier-Stokes 方程式に対して矩形断面($B/D=20$)まわりの大規模3次元流れの解析を行った。

(1) 解析条件

解析手法は、2章のプロセッサの性能比較で用いた CFD ソフトと同一のものをを用いた。取り上げた例題は、矩形断面($B/D=20$)まわりの大規模3次元流れの解析であり、レイノルズ数は $Re=10,000$ である。なお、ここでも乱流モデルとして Smagorinsky 型 LES を用いている。流れの3次元性の考慮および大規模数値流体解析に対する並列計算の有効性を検討するために、流れ場は3次元とした。3次元要素分割は、2次元要素分割を軸方向に32層重ねることによって得た。ここで軸方向長さは、 $6.4D$ であり、総節点数は $35,856 \times 33=1,183,248$ 、総要素数は $35,200 \times 32=1,126,400$ である。2次元平面の解析領域と境界条件を Fig. 2 に示す。領域分割には、

Fig. 3 に示すように有限要素に分割された解析領域をプロセッサ数に従い軸方向に等分割し、個々の小領域での計算を各プロセッサごとに割り当てる方法で行った。これにより各プロセッサの負荷および通信量を均一にすることができる。計算結果の一例として、矩形断面 ($B/D=20$) まわりの等渦度と等圧力分布の鳥瞰図の一例を Fig. 4 に示す。

(2) 並列化評価

比較解析結果を Fig. 5 示す。Fig. 5 (a) は1PEあたりの記憶容量負荷の変化を示したものである。PE 数の増加に伴い記憶容量が減少し、8PE では1PEのときの約1/5になった。Fig. 5 (b) に1時間ステップあたりの計算時間の比較を示す。Celeron 450MHz を用いた PC クラスタは、PentiumIII 800MHz の1PEのとき1.78倍、8PEのとき1.53倍の計算時間を要した。1PEの場合、前章と同様にクロック数に比例した計算速度の向上が得られたが、8PEの場合には、十分な計算速度の向上が得られなかった。このことは、Fig. 5 (c) の速度向上比の比較からも PentiumIII 800MHz を用いた PC クラスタの方が効率が劣っていることから読み取ることができる。8PEのときの並列化効率は、Celeron 450MHz の場合、85%、PentiumIII 800MHz の場合、73%であった。ここで高速なプロセッサの方が並列化効率が劣ることは、プロセッサ間の通信に要する時間に起因していると思われる。両者のプロセッサは、同一のネットワーク環境であることから、高速のプロセッサの方がクラスタ間の通信に待ち時間が生じ、ここで発生する

Fig. 2 解析領域と境界条件 (2次元平面)
Domain and boundary condition (2-D plane)

Fig. 3 領域分割の例 (4分割の場合)
Example of Domain decomposition (4 layers)

(a) 等渦度分布図
Vorticity contours

(b) 等圧力分布図
Pressure contours

Fig. 4 $B/D=20$ の矩形断面まわりの流れ
Flow around a rectangular cylinder ($B/D = 20$)

時間をどうしても縮めることが出来なかったと考えられる。よって、高速プロセッサの性能を十分に発揮させるためには、より高速なクラスタ間の通信ネットワークシステムの採用が必要である。

5. おわりに

本研究では、著者らが従来から風工学の大規模問題に利用している CFD ソフトを用いて矩形柱回りの 3 次元解析をベンチマーク問題として取り上げ、最近のプロセッサ性能ならびに PC クラスタ型並列計算機システムの構築、有効性の検討を行った。ここで取り上げた比較計算だけでは資料不足ではあるが、以下の結論を得ることができた。まず、プロセッサ単体の性能比較では次の通りである。

(a) 記憶容量負荷
Memory storage

(b) 計算時間の比較
CPU time

(c) 速度向上比の比較
Speed up ratio

Fig. 5 矩形断面まわりの 3 次元流れ解析の結果
Result of flow around a rectangular cylinder

- (1) 浮動小数演算が主な演算である CFD の様な分野には、Athlon の方が PentiumIII より性能面ならびにコスト面にも優れていることが考えられる。
- (2) Athlon において有償のコンパイラを導入することで約 1.7 倍の性能向上が得られることは、評価に値

することと考えられる。

また Athlon は、IBM SP よりも単体性能が上回ったことから最新のプロセッサを有する PC は、スーパーコンピュータ単体に匹敵する性能を有していると言っても過言ではない。

次に PC クラスタ型並列計算機では、次の結論を得られた。

- (3) 8PE のときの並列化効率は、Celeron 450MHz の場合 85%、PentiumIII 800MHz の場合 73%であった。
- (4) 高速なプロセッサの方が並列化効率が劣るのは、通信に要する待ち時間が原因の一つと考えられる。高速プロセッサの性能を十分に発揮するには、より高速なネットワークシステムが必要となる。

安価な投資で、並列計算機を自作し、風工学分野の問題の一つである矩形断面まわりの大規模 3 次元数値流体解析を実施したことにより、PC クラスタ型並列計算機の有効性が示された。ところで、本論での評価は、2000 年夏の時点での性能評価である。それから 4 ヶ月余りを経過しているが、その間もプロセッサの性能は向上し、近々 1000MHz をはるかに越えるクロック数のプロセッサや新たな設計の高速プロセッサも市販される予定である。プロセッサの性能面だけでも本システムの 2~3 倍へとアップしてくるのも間近である。また、高速通信システムも安価な機種が登場するに至っている。

よって、プロセッサ性能向上ならびに通信システムの低価格化を考慮すれば、極めて低価格で並列計算専用機とほぼ同等の性能を有する PC クラスタ型並列計算機を近い将来自作できることはほぼ確実である。これにより、CFD を風工学の分野に広めるための大きな障壁の一つが取り去られることと確信する。

謝 辞

本研究を行うに際し、岩手大学工学部（研究当時八戸工業高等専門学校）青木晴信君の協力を得た。また、中央大学理工学部土木工学科檜山和男教授の研究グループならびに三井造船（株）渡邊茂氏から貴重な助言を受けた。各位に感謝の意を表す。なお、本研究の一部は、中央大学情報教育研究センターならびに（財）鹿島学術振興財団から給付を受けたことを付記する。

参考文献

- 1) 土木学会構造工学委員会「風工学における数値計算の応用と評価」研究小委員会活動成果報告書、1999.
- 2) 渡邊茂，丸岡晃，平野廣和：数値流体解析による偏平矩形断面の非定常空気力係数算出に関して，土木学会第 55 回次学術講演会第 I 部門，2000.
- 3) 平野廣和，渡邊茂，丸岡晃，佐野健一：断面辺長比 4 の矩形断面の空力特性に関する 2 次元・3 次元数値流体解析，土木学会論文集，Vol.598/ I -44, pp401-411, 1998.
- 4) URL <http://beowulf.gsfc.nasa.gov/>
- 5) 須江克章，桜庭雅明，山口敏，檜山和男：PC クラスタを用いた自作並列計算機の構築とその有効性の検討，計算工学論文集，Vol.4, 1999.
- 6) 丸岡晃，太田真二，平野廣和，川原睦人：同次補間を用いた陰的有限要素法による非圧縮粘性流れの解析，構造工学論文集，Vol.43A, pp.383-394, 1997.
- 7) 原田浩，手塚宏史，堀敦史，住元真司：Myrinet を用いた分散共有メモリにおけるメモリバリアの実装と評価，並列処理シンポジウム，1999.
- 8) C.Farhat : A simple and efficient automatic FEM domain decomposer, Computer & Structures, Vol.28, No.5, pp.579-602, 1988.
- 9) V.Kalro and T.E.Tezduyar : Finite element solution strategies for large-scale flow simulations, Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering, Vol.112, pp3-24, 1994.