

## 自作デスクトップ機による HPC とその性能

総合情報基盤センター 准教授 布村 紀男  
 総合情報基盤センター技術職員 小林 大輔  
 総合情報基盤センター 助教 沖野 浩二

### 1. はじめに

最近では、PC や周辺機器の高性能化、低価格化がめざましく、とくにマルチコア CPU の登場により、HPC(High Performace Computing)を行うための要求性能を備えた PC を個人でも比較的手軽に所有することが可能になってきている。そのような状況下で 2008 年末に登場した Intel 社の Nehalem 世代の CPU である Core i7 と高性能グラフィックカードを用いて、個人で所有できる手頃な価格の自作マシンを組み、その性能を評価したので報告する。

さらに、近頃話題になっているグラフィックカードの GPU(Graphic Processing Unit)を汎用計算に使う GPGPU(General Purpose Computing on GPU)の動向とサンプルプログラムを実行した結果についても併せて紹介する。

### 2. 既存計算サーバとの性能比較

マルチコア CPU を搭載したデスクトップ PC が科学技術計算用コンピュータとしてどこまで通用するのか調べるため、以下に述べる性能評価を行った。

まず、単体 CPU 性能と OpenMP によるスレッド並列性能について、EuroBen Benchmark<sup>[1]</sup>を使用して、演算の基本性能を測定した。このベンチマークテストには多くの項目があり、誌面の都合上、全ての結果を述べる事ができないので、以下の代表的な演算の測定結果について述べる。

- ・ 逐次計算 (9 次の多項式計算)
- ・ ベクトルの定数倍とベクトル和
- ・ 行列演算 (実対称行列の固有値)
- ・ 乱数生成 (一様乱数生成)

次に、姫野ベンチマーク<sup>[2]</sup>の演算性能を述べる。このベンチマークは、ポアソン方程式をヤコビ反復法で解く場合の主要計算を計測したものである。

さらに、代表的なアプリケーションでは汎用量子化学計算の Gaussian03<sup>[3]</sup>は、共有メモリ並列計算として、第一原理分子動力学計算パッケージの Quantum Espresso<sup>[4]</sup>は、MPI 並列計算としてテス

ト計算の計測について述べる。

表 1 使用した組み立て PC の主な仕様

プロセッサ	Intel(R) Core i7 Quad 940 (2.93GHz)
メモリ	CFD 製 DDR3 1,333MHz, 2GB×6,
グラフィックカード	nVIDIA GeForce 9800GTX+ 512MB
電源	オウルテック製 Seasonic 電源 M12 シリーズ SS-700HM 700W

### 2.1 EuroBenV.5.0 単体 CPU での性能比較

#### (1) 逐次性能の測定結果

演算の測定結果を図-1(a)に示す。この測定結果は、mod1a の kernel14 の 9 次の多項式計算について、問題サイズを変化させて逐次実行した際の演算性能を計測したものである。グラフの横軸は、問題サイズ、縦軸は演算性能を表す。センター既存の計算サーバで使用されている CPU(Itanium2, Xeon)と性能を比較すると Core i7 は問題サイズが小さいところでの立ち上がり性能、問題サイズが大きいたころでも他の CPU に比べて高い実行性能を示している。

#### (2) ベクトルの定数倍とベクトル和の測定結果

測定結果を図-1(b)に示す。これは mod1a の kernel8 のベクトルの定数倍とベクトル和を求めるものである。この演算でも問題サイズが小さいところから大きくなっても Core i7 は高い実行性能を示していることがわかる。

#### (3) 行列演算(固有値)

mod2d は 実対称行列の固有値を求めるものである。測定結果を図-1(c)に示す。Core i7 は問題サイズが大きいたころでも伸びている結果が得られた。

#### (4) 乱数生成

mod2h は、[0,1]の一様乱数生成の回数を測定したものである。測定結果を図-1(d)に示す。

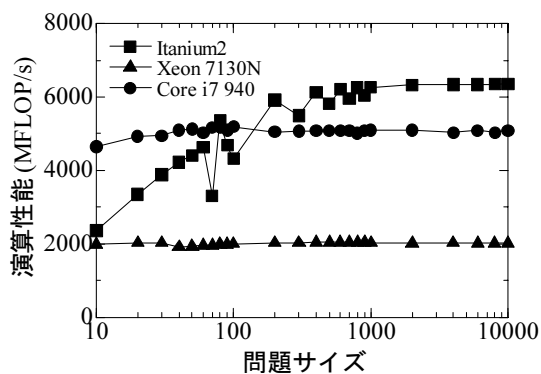


図-1(a) 9 次の多項式計算

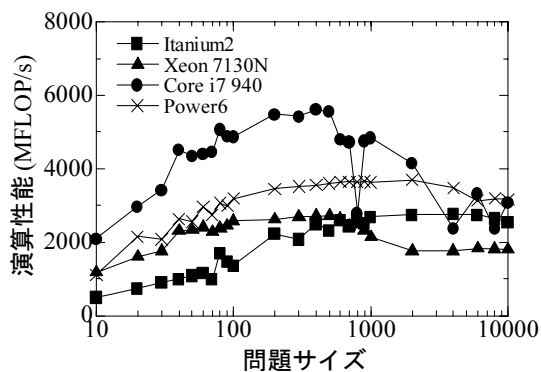


図-1(b) ベクトルの定数倍とベクトル和

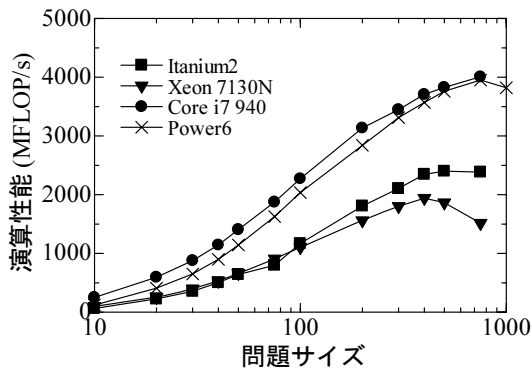


図-1(c) 実対称行列固有値計算

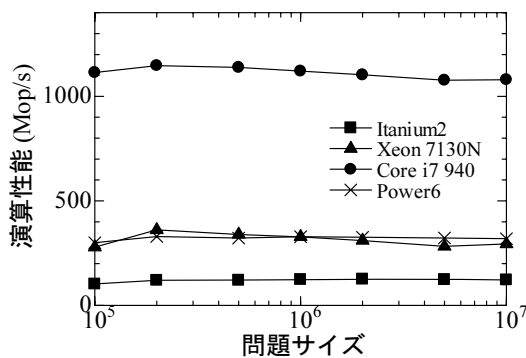


図-1(d) 一様乱数生成

## 2.2 OpenMPによるスレッド並列計算

EuroBen V.2.0 の共有メモリ並列版を用いて、並列計算の性能を計測した。ここでは、線形代数演算のベクトルの定数倍とベクトル和について、プロセッサごとの結果を図-2(a)~(c)示す。なお、スレッド数は各プロセッサで  $n=1, 2, 4, 8$  について調べたものである。Core i7 は他の CPU に比べて並列性能は優れているが、 $n=8$  では演算性能が悪くなるので、並列度 4 が最もパフォーマンスが良いことがわかる。これより、Core i7 では OpenMP による並列計算ではスレッド数 4 で利用することが推奨される。

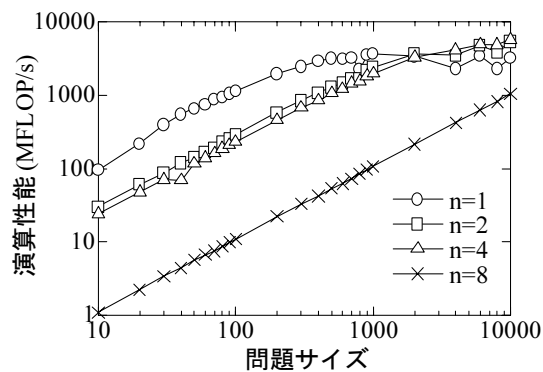


図-2(a) OpenMP 並列 Core i7

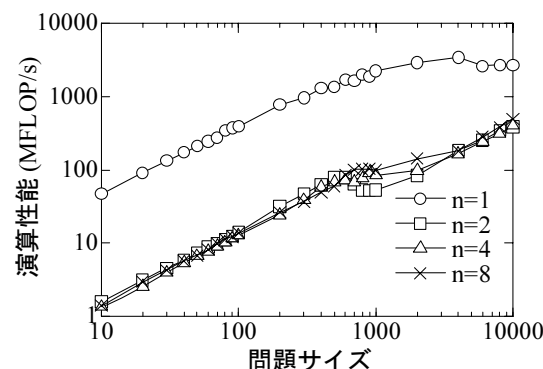


図-2(b) OpenMP 並列 Itanium2

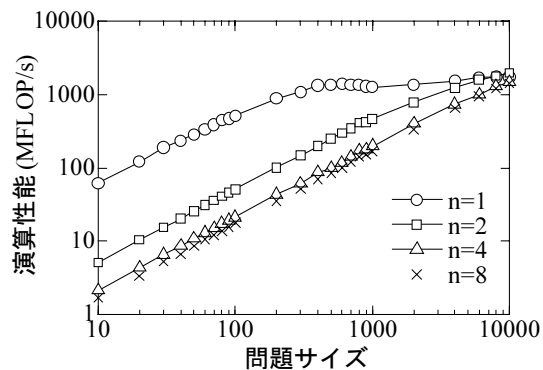


図-2(c) OpenMP 並列 Xeon 7130N

### 2.3 姫野ベンチマークでの結果

Core i7 と既存計算サーバの Itanium2 における OpenMP 用のベンチマークテストの結果を表 2(a), (b)に示す. コンパイルオプションはいずれも -O3 を指定している. 問題サイズは 3 種類, S サイズ (64x64x128), M サイズ(128x128x256), L サイズ (256x256x512)について計測している. 単位はすべて Mflop/s である. S サイズでは, Itanium2 が良好な性能を示すが M, L サイズでは, 圧倒的に Core i7 が優れていることがわかる.

表 2(a) プロセッサ Core i7 940 4core (OpenMP)

サイズ スレッド数	S (64x64x128)	M (128x128x256)	L (256x256x512)
1	3903.26	3663.13	3323.56
2	5643.21	5470.38	5074.71
4	4567.58	4328.47	4071.34
8	6108.28	5646.38	5669.38

表 2(b) プロセッサ Itanium2 8cpu (OpenMP)

サイズ スレッド数	S (64x64x128)	M (128x128x256)	L (256x256x512)
1	1769.12	697.00	692.99
2	2156.41	773.99	749.33
4	6810.30	671.31	636.96
8	11755.46	1031.22	735.04

次に MPI 並列版を用いて, ベンチマークを計測した結果を表 3(a), (b)に示す. (b)は既存計算サーバで運用されている MPI 並列用機である. 問題サイズ M, L で 8 並列までは 3 倍以上の性能を示している.

表 3 (a) プロセッサ Core i7 940 4core (f77\_xp\_mpi)

サイズ 並列度	S (64x64x128)	M (128x128x256)	L (256x256x512)
2	2326.71	2461.64	2646.87
4	3068.08	4207.99	4375.73
8	2439.37	4988.52	5747.37

表 3 (b) プロセッサ Xeon 7130N 32core (f77\_xp\_mpi)

サイズ 並列度	S (64x64x128)	M (128x128x256)	L (256x256x512)
2	871.11	823.14	800.30
4	1580.96	1360.12	1225.07
8	5006.92	1994.50	1641.25
16	8342.19	4823.62	3260.61
32	3616.77	6845.13	6268.63

### 2.4 汎用量子化学計算 Gaussian03

性能評価テストとしてベンチマークテストでよく用いられる test397 にて, 実行時間を計測した. その結果を図-4に示す. 並列度に関わらず, Core i7 は十分に既存計算サーバに比べて高速であることがわかる. 既存計算サーバの Xeon 7130N の並列度は 32 まで可能であり, 実行時間は最も短くなることを補足しておく.

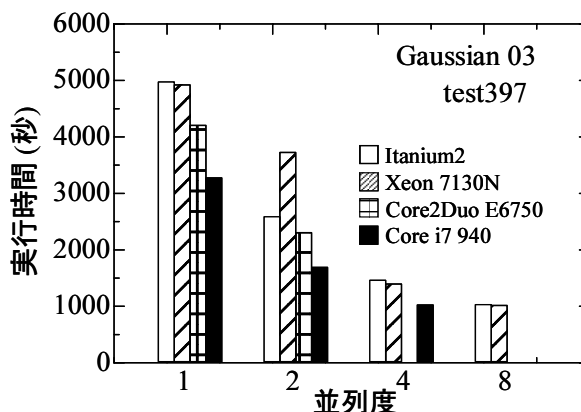


図-4 test397 の結果

### 2.5 第一原理分子動力学計算 Quantum Espresso

性能計測に用いたジョブは, テストサンプルとして付属している水分子の計算 example21 である.

問題サイズを 32 分子として, MPI 並列で実行した結果を図-5に示す. Core i7 は並列度が少ない場合でも実行時間は短く, MacPro 2CPU(Score)で実装されている Harpertown Xeon E5462 2.8GHz のデータに比較しても, 劣らない性能を示している. 並列度 4 までは, 既存計算サーバの Itanium2, Xeon 7130N プロセッサの半分以下の実行時間である. このアプリケーションでも, Core i7 が有効であることがわかる.

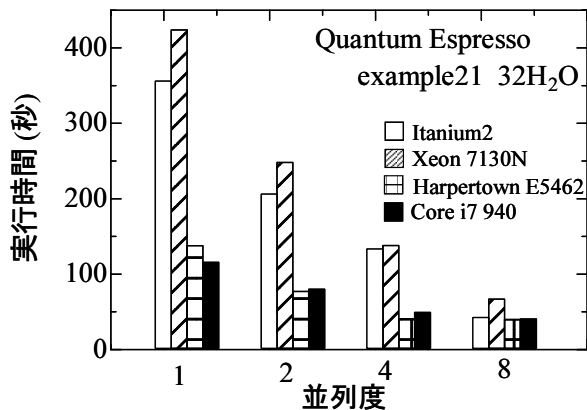


図-5 example21 の結果

### 3. GPGPU の状況とその実力

「CUDA」<sup>[5]</sup>は GPU メーカーである nVIDIA 社が GPGPU 用開発環境として提供しているものである。また、競合の AMD 社も ATI Stream SDK として、「Brook+」<sup>[7]</sup>という GPGPU 開発環境を提供している。いずれも C 言語を独自に拡張したもので専用のコンパイラでコンパイルし、GPU に演算を実行させるものである。それぞれ、GPU メーカーが独自に開発環境を提供しているので、全く互換性はない。

一方、「OpenCL」は Apple 社により提案されて、昨年末に OpenCL1.0 が仕様策定されている<sup>[8]</sup>。

「OpenCL」では、GPUにとどまらず、DSP、Cell などにも対応できるような拡張したソフトウェア環境を提供することを目指している。CPU の世界では OpenMP は共有メモリ型並列として一般化されているが、この OpenMP 準拠で書かれたコードが GPU でも問題なく動くようになれば、科学技術計算用のソフトウェア開発の負担は軽減するだろう。

最近、注目されている GPGPU の性能を確かめるために、CUDA を使用したデモ用のサンプルプログラムの CUDA N-body<sup>[6]</sup>を用いて、自作機上で動作させて見たので、その結果について以下に述べる。

今回使用した nVIDIA 9800GTX+ の GPU でのコア数は 128 である。N-body は、N 体が対ポテンシャルの重力ポテンシャルにより、お互いに相互作用が働き、運動する天体のシミュレーションである。このプログラムを実行すると、グラフィックス出力がなされ、N 体に働く相互作用を計算する時間が随時、Gflop/s 単位で表示される。実行中の様子を図-6 に示す。ここでは、N=16,384 を使って計算しており、357.4Gflop/s 算出されている。瞬間でのスピードであるが、350Gflop/s 以上を記録している。この値は一昔前のスーパーコンピュータに相当する。

比較のため、低価格(8 千円)の nVIDIA 社製 GeForce 9400GT(16core)についてもベンチマーク計測を行った。その結果を表 4 に示す。128 コアの 9800GTX+ は問題サイズ N=1024 の場合、84.593Gflop/s と演算性能が劣るが、問題サイズが 4096, 16384 になると 350Gflop/s 以上の値が得られている。一方、16 コアの 9400GT は問題サイズに左右されず、31~32Gflop/s の値で推移している。

この N 体モデルは天体シミュレーション以外にも、静電ポテンシャルや van der Waals ポテンシャルを

同様のアルゴリズムで取り扱うことができ、タンパク質の Folding シミュレーションにも有効である。

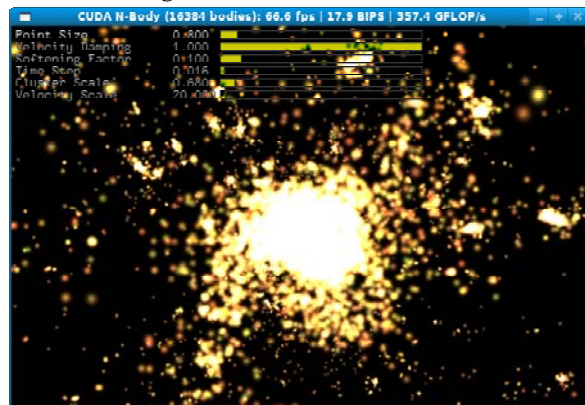


図-6(a) N-body の実行結果

N \ GPU	9800GTX+(128core)	9400GT(16core)
1024	84.593 Gflop/s	31.083 Gflop/s
4096	356.992 Gflop/s	32.612 Gflop/s
16384	364.917 Gflop/s	32.760 Gflop/s

表 4 CUDA N-body ベンチマーク

### 4. おわりに

かつて HPC は 1 台何億円もする高価なマシンを使い、計算に特化した専用計算機にジョブを投入する形態でごく限られた人だけが利用できる環境であった。しかし、現在ではどこにでもある汎用 PC マシンを用い、さらにグラフィックス表示のための GPU を汎用演算として用いることが可能である。その気になれば、個人がデスクトップパソコンを所有し、専用で使うことが夢ではなくなってきている。

現在、当センターでは計算サーバサービスをユーザに提供しているが、これも時代の流れに合わなくなってきていることを最後に強調しておきたい。

### 参考文献

- [1] EuroBen <http://www.euroben.nl/>
- [2] 姫野ベンチマーク <http://w3cic.riken.go.jp/HPC/HimenoBMT/>
- [3] Gaussian 03 <http://www.gaussian.com/>
- [4] Quantum Espresso <http://www.quantum-espresso.org/>
- [5] CUDA zone [http://www.nvidia.co.jp/object/cuda\\_home\\_jp.html](http://www.nvidia.co.jp/object/cuda_home_jp.html)
- [6] <http://developer.nvidia.com/object/gpu-gems-3.html>
- [7] AMD ATI stream <http://ati.amd.com/technology/streamcomputing/>
- [8] 日経エレクトロニクス 2008.12.15 p107-117