

4D-8

陽的差分による三次元数値シミュレーションのスーパーコンピューティング

鶴飼正行 津田孝男
愛媛大学 京都大学

現在、複雑な科学技術計算や数値シミュレーションに対してスーパーコンピューティングの重要性、有用性がますます認識されてきており、定量科学の多くの分野で確固たる地位を築きつつある。スーパーコンピュータの加速性能を最大限利用するためにはそのシステムアーキテクチャに適合するアルゴリズム設計、プログラミング開発が基本的に重要になってくる。ここでは一般的によく用いられる陽的差分法に基づかれた三次元数値シミュレーションのベクトル計算機適合アルゴリズムを設計し、実際に数値実験によってその有効性を確かめる。

一般に、陽的差分法に基づく数値計算は $V_i = f_i(U)$ の形で与えられる。ここに、 U は従属変数ベクトルを定義し s 個の元から成っているとす。 V_i は単位時間ステップ後の変数値であり、また f_i は変換関数を定義しており基礎方程式や数値スキームによって決定される ($i=1, \dots, s$)。三次元空間はメッシュ状に分割され、単位時間ステップごとに各格子点上の V_i ($i=1, \dots, s$) を求める計算が全格子点にわたって繰り返し実行され、変数値が更新される。従って、Do Loop中の計算 $V_i = f_i(U)$ は基本的に s 個の文(式)からなり、引用するデータ(右辺)は旧値 U だけであるから各々の式は独立に処理されうる。この意味で陽的差分法はベクトル計算機向きであり、ほぼ100%のベクトル化率をもつプログラムを作製することが原理的に可能になる。

ベクトル計算機の加速性能を高めるためには、ベクトルデータの効率的アクセス(ロード/ストア)が基本的であろう。即ち、演算形 f_i が与えられるとコンパイラに応じて最適化された演算パイプラインが組み立てられると考えられるが、演算パイプラインに入力される全ベクトルデータの長さ(ベクトル長)、一回の計算に引用する独立データ数に応じたベクトルレジスタ(VR)の分割(ロード方法)、ベクトルデータの参照方法、等によって加速性能が大きく左右される。これらはシステムアーキテクチャに依存するのはもちろんであろうが、アルゴリズムの設計法、特にプログラム中のデータ配列の与えかた等によって大きく影響される事が予想される。

本論文ではこのような問題を検討するため、具体的問題として三次元電磁流体方程式を取りあげる。この場合、変数ベクトルは8個の元からなり($s=8$)、2段階Lax-Wendroff法によって偏微分方程式の数値解が得られる。まず基本的アルゴリズムを提案し、データ配列の取り方によるベクトル加速率の変化を数値実験によって実測する。特に参照データ間距離、三次元配列の一次元配列化、等によって実効性能がどのように依存するかを実例をもって示し、効率良いベクトルデータ参照法について議論する

Supercomputing of Numerical Simulations by an Explicit Scheme

Masayuki Ugai¹ and Takao Tsuda²

¹Ehime University ²Kyoto University