

課題名(タイトル):

FX100 を用いたチェックスイート性能評価

利用者氏名:

○南 一生(1,2), 黒田 明義(1,2), 熊畑 清(2,1), 安藤 和人(1,3), 似鳥啓吾(1,2)

理研における所属研究室名:

- (1) 計算科学研究センター 運用技術部門 チューニング技術ユニット
- (2) 計算科学研究センター フラッグシップ 2020 プロジェクト アプリケーション開発チーム
- (3) 計算科学研究センター 複雑現象統一的解法研究チーム

1. 本課題の研究の背景、目的、関係するプロジェクトとの関係

本課題では、スーパーコンピュータ「京」(以下「京」と記す)並びに富岳スーパーコンピュータ(以下「富岳」と記す)での利活用を促進するために、「京」開発時に作成したチェックスイートや「富岳」の開発におけるコデザインの取り組みにて性能評価に用いられたサンプルアプリケーションコードを用いて、FX100 や GPU を初めとする様々な CPU での性能解析を行い、システム性能の評価、チューニング効果の評価、チェックスイートの問題点の洗い出し、新たなチェックスイートの試作などを行うことを目的に利用を行った。

ここで用いたチェックスイートとは、HPC で利用される計算科学アプリケーションから、主要な計算箇所をループ単位の粒度で切り出したものである。切り出しに用いたアプリケーションは、各分野から、アルゴリズム特性に応じて幅広く選択されている。また用途に応じて、単体チェックスイート、並列チェックスイートに分類出来る。

チェックスイートは、「京」開発当初、システム評価並びにアプリケーションのチューニング指針を得ることを目的に構築された。「京」の運用では、システム(OS、ミドルウェア等)のエンハンス/メンテナンスに伴うアプリケーションの性能劣化を「未然に防止する」「検知する」ことを目的としており、以下の機能整備を行った。

- (1) 複数システム(マシン、コンパイラ)動作
- (2) 計算結果のバリデーションチェック機能
- (3) 性能検証の比較結果レポート機能
- (4) 一括実行機能
- (5) ジョブ多重度管理機能

(6) 評価カーネル選択機能

現在、運用開始に向け準備が進められている「富岳」では、最新の比較的アーキテクチャが類似しているシステムで測定された性能をもとに性能評価を行う。このため、現段階で最新のシステムである FX100 並びに GPU を代表とする様々なアーキテクチャを使用した性能評価が重要である。本課題では、現状のチェックスイートを用いた性能評価を実施し、そこから問題点を洗い出し、チェックスイートの再整備を行った。更に実運用で発生した問題の解決に向けたテスト計算を実施した。

2. 具体的な利用内容、計算方法

本年度は、「富岳」にて共用前評価環境が行われており、本システムを用いた評価は、AI フレームワーク利用に関する性能評価実証として 1 件のみ実施した。

(1) 3次元 CFD 流れ場のモード分割のための分散学習

先行研究(Murata et al., 2019)で提示された、2次元流れ場に対するニューラルネットワークを使用した流れ場モード分割手法を拡張し、3次元流れ場に対するモード分割を実施した。また、得られたモードを使用した縮約モデルの実行を行った。

3. 結果

(1) 3次元 CFD 流れ場のモード分割のための分散学習

BigWaterfall 上でディープラーニングフレームワーク PyTorch 及び分散学習フレームワーク Horovod を使用した

32 ノード(1280 プロセス)までの並列分散学習を実施した。その結果、3次元流れ場について、流れ場を代表する2つのモードを抽出することができた。また、抽出したモードを使用し、計算コストを大幅に削減した縮約モデルを構成し、その実行結果について高精度シミュレーションとの比較を行なった。

4. まとめ

本年度は、「京」で構築されたチェックスイートやテストコード、テストサンプルとしてPyTorchによるDeep Learningの時間実証評価、HOKUSAI BigWaterfallでの評価を行った。これらの解析を詳細に進めることで、モデル並列の導入によるハイブリッド並列などのカーネルの更なるチューニングの知見が得られた。これらのDeep Learningの利活用を目指した調査により、先行しているGPUなどに対して、「京」や「富岳」でも十分対抗できる性能を達成でき、実用的な計算の可能性を見込むことができることが分かった。

5. 今後の計画・展望

今回の課題実施によって得られた知見をもとに、更なる詳細の解析を行うとともに、より汎用かつ有用なチェックスイートの整備に力を入れ、「富岳」の利活用促進に邁進し、その先のスーパーコンピュータに求められるアーキテクチャのデザインへとつなげていく予定である。

6. 利用がなかった場合の理由

該当なし

2020年度 利用研究成果リスト

【雑誌に受理された論文】

なし

【会議の予稿集】

安藤 和人, 大西 慶治, Bale Rahul, 坪倉 誠, 黒田 明義, 南 一生, 「富岳における 3 次元流れ場のモード分割のための分散学習」, 第 34 回数値流体力学シンポジウム, Web, 2020 年 12 月 21 日-23 日, Paper F09-1.

【口頭発表】

なし

【ポスター発表】

なし

【その他(著書、プレスリリースなど)】

なし