

課題名(タイトル):

Performance Evaluation of GPUs for Scientific Applications

利用者氏名:

○近藤正章 (1)、和遠 (1)、小林 千草 (2)、中村 宜文 (2)、安藤 和人 (2)

理研における所属研究室名:

(1) 計算科学研究センター 次世代高性能アーキテクチャ研究チーム

(2) 計算科学研究センター 運用技術部門 ソフトウェア開発技術ユニット

1. 本課題の研究の背景、目的、関係する課題との関係
近年、高性能計算や人工知能分野において、計算処理の高速化を目的としてGPUを演算加速装置として利用することが一般的になっている。特に、GPU は複雑な数値計算を伴う科学技術計算において顕著な性能向上をもたらすことが期待されている。本研究の目的は、アプリケーションの種類やプログラミングの方法、GPU のアーキテクチャに依存した性能特性を調査し、今後のアプリケーション最適化のための指針を得ることである。

2. 具体的な利用内容、計算方法

本研究では、本課題で集めた各研究分野のソフトウェアに対し、HBW2 システムの H100 GPU ノードを用いて演算時間、もしくは、FLOPS を測定した。具体的に利用したアプリケーション・ソフトウェアは以下である。

具体的には以下のアプリケーションを対象とした。

- STREAM: メモリ帯域幅の測定
- HPL (High Performance Linpack): 浮動小数点演算性能の測定
- HPCC (HPC Challenge): 多様な計算負荷の評価
- NPB (NAS Parallel Benchmarks): 並列計算性能の測定
- GENESIS: 分子動力学法ソフトウェア GENESIS
- GROMACS: 生体分子シミュレーション
- CP2K: 分子動力学シミュレーション
- LAMMPS: 大規模分子動力学計算
- GROMACS: 生体分子シミュレーション
- NAMD: 分子動力学シミュレーション
-
- FrontFlow/blue: 流体力学ソフトウェア
- LCD-DWF-HMC: 格子 QCD ソフトウェア

各アプリケーションに対して、シンプルなベンチマークは異なる入力データサイズや並列度を調整しながら、また、実アプリケーションでは、開発者などから提供された入力を使用した。コンパイラは、それぞれ GENESIS では Intel

Fortran+CUDA、FrontFlow/blue では NVfortran、LCD-DWS-HMC では nvhpc を利用した。

3. 結果

本研究のベンチマークおよび評価の結果を以下にまとめる。H100 の HBM は非常に高いメモリ帯域幅を維持でき、科学技術計算に適した性能を発揮し、多くのベンチマークとアプリケーションにおいて x86 CPU を上回る性能を示した。また、HBM の容量の限界が、入力データが大きいワークロードにおいて問題となる可能性があることも確認できた。

GENESIS のシステムは、約 92,000 原子のタンパク質システムに対して MD メインループの経過時間を測定した。1 ノード内(112 コア)で MPI プロセス数や OpenMP スレッド数を変化させて計測を行った。その結果、4GPU カード、8MPI、14OpenMP スレッドで 18.6 秒の結果を得た。

FrontFlow/blue については、200 万有限要素を使用した Cavity 流れの問題について 4MPI プロセスから 1GPU を使用する設定で性能測定を行った。結果、時間積分ループ全体の実行時間は 90.3 秒となり、比較対象となる富岳(実行時間 28.5 秒)に対し 1/3 ほどの性能しか出ていない結果となる。これは複数プロセスからの単一 GPU 利用の際の競合が原因であり、この問題を回避するための MPS 機能を使用した結果、GPU での実行時間は 11.3 秒に削減され、妥当な値となった。

LCD-DWF-HMC では、2つの格子サイズで計測を行い、32x8x8x12 システムでは、915 GFLOPS、64x32x16x12 システムでは、3303 GFLOPS の性能を得た。これは十分な性能であった。

4. まとめ

本課題で集めた複数のベンチマークや実アプリケーション(GENESIS, FrontFlow/blue, LCD-DWF-HMC)で GPU ノードを利用して速度性能を測定した。GPU ノードが多様なアプリケーションで高い性能を発揮することが確認された。一方で、GPU メモリのサイズが制約となる可能性もあった。

当初性能が十分でない場合も、プロセス数の工夫や MPS の利用で性能が向上することもわかった。

5. 今後の計画・展望

現時点でのこれらのソフトウェアでの GPU マシンでの性能を計測することができた。今後は、他のソフトウェアにも範囲を広げること、そして、今年度計測したソフトウェアについても高度化・高速化による変化をトレースしていく予定である。