

X20c AMD 製 GPU ・ NVIDIA 製 GPU 両対応 direct N -body code の実装と性能評価

三木洋平, 埴敏博, 河合直聡, 星野哲也 (東京大学)

国内・海外を問わず今まで導入・運用されてきた GPU スパコンはそのほとんどが NVIDIA 製 GPU を搭載してきた。しかし, AMD 製 GPU を搭載した Frontier が 2022 年 6 月版の TOP500 リストにおいて 1 位を獲得し, また Intel 製 GPU を搭載するスパコンの導入予定が発表されるなど状況は変わりつつある。コード開発においても, これまでは NVIDIA 製 GPU が主な対象であったが, 今後は NVIDIA 製 GPU, AMD 製 GPU, Intel 製 GPU の全てを念頭に置いたコード開発・最適化が重要になるだろう。AMD 社が提供する開発環境 HIP では, NVIDIA 製 GPU と AMD 製 GPU 両方で動作可能なコードを実装でき, なおかつ NVIDIA 製 GPU 専用の CUDA と同レベルの性能最適化も施せる。そこで本研究では, NVIDIA 製 GPU 向けに CUDA で実装された既存の N 体計算コードを, AMD 製 GPU 上でも動作可能となるように HIP に移植・最適化した上で性能評価を行った。

AMD 製 GPU である MI100 向けの性能最適化としては逆数平方根の計算に `_frsqrt_rn()` 命令を用いることが重要であり, 最大 14.6 TFlop/s という高い演算性能を発揮した (相互作用あたりの浮動小数点演算数として単精度 22 Flops を仮定)。NVIDIA 製 GPU である A100 上では最大 14.5 TFlop/s であり, 両 GPU の発揮した性能はほぼ同じであった。さらに A100 上で CUDA 版コードと HIP 版コードの性能差を測定したところ, 性能差は存在しない, つまり HIP 実装によるオーバーヘッドは存在しないか十分に小さいということが分かった。また, より簡易な GPU コードの実装手法である OpenMP による GPU オフローディング版では, MI100 上では HIP コードの 72%程度, A100 上では CUDA コードの 55%程度の性能が得られた。