

分子動力学法のマルチノード環境における GPUの電力効率の評価

宇田川 拓郎[†]

東京工業大学 情報工学科

関嶋 政和^{†‡}

東京工業大学 学術国際情報センター
東京工業大学 情報理工学研究科 計算工学専攻

1 はじめに

スーパーコンピュータや大規模クラウドにおける消費電力は年々増加しており、エネルギー効率の高いスーパーコンピュータやこのようなコンピュータを活用するアプリケーションプログラムの開発が求められている。

中でも近年注目を浴びているのがGPU(Graphics Processing Unit)の利用である。GPUは本来画像処理に用いられてきたデバイスであるが、CPUに比べ低電力で動作する単純なコアを多数搭載することで、高い並列計算能力とエネルギー効率を有しているため、科学技術計算に用いる試みが盛んに行われている。しかし、一般的にはGPUを用いて計算を行うためには大きな電力が必要とされる。例えば、本研究で用いたNVIDIA GeForce GTX 480 GPUでは最大250Wもの電力が必要とされる。これは本研究で用いたIntel Xeon X5550 CPUの95Wに比べて大きな値である。加えて、メモリアクセスやCPU-GPU間のデータ転送など、GPUの計算にはパフォーマンスを低下させる要因が存在する。こういったことからアプリケーションによりGPUを用いることで高速化・低消費電力化は向き不向きがあると考えられる。

そこで、本研究では分子動力学法のプログラムをGPU計算用に開発し、このプログラムを通じてCPUとGPUの性能の比較、また、GPUを複数使った場合の性能の比較を行った。

GPUのエネルギー効率の研究としては、Rofoueiらの研究[1]やHuangらの研究[2]などが存在する。Rofoueiらは、LEAP-Serverを用いてGPUに供給される電力・

電流を計測し、そのエネルギー消費を求めた。Huangらは、GEMの実行にかかるエネルギーの測定を行った。コンセントからサーバーに供給される電力を測定し、GPUのエネルギー効率の優位性を示すとともに、スレッド数によるエネルギー効率の最適化を図った。本研究では、マルチノード環境におけるGPUのエネルギー効率、およびFermiアーキテクチャを採用しているGPUを用いた場合の実験について議論する。

2 実験内容

分子動力学法は多原子系における原子の運動を、原子間の相互作用を計算しながら、個々の原子に対するNewtonの運動方程式を数値積分することにより求める方法である。本研究では、真空中でのアルゴン原子の挙動を追跡する分子動力学シミュレーションプログラムを開発した。本プログラムでは相互作用にvan der Waals力のみを考慮し、力はレナード・ジョーンズポテンシャル(式(1))で計算を行う。

$$(r_{ij}) = 4 \left[\left(\frac{1}{r_{ij}} \right)^{12} - \left(\frac{1}{r_{ij}} \right)^6 \right] \quad (1)$$

その後、得られた相互作用力から、verlet法で原子の座標の更新を行う。境界条件には周期境界条件を用い、相互作用のカットオフは99Åに設定した。計算の時間幅は1femto秒とし、これらの計算を100ステップ繰り返し、その計算に要した時間と消費電力を計測した。

計算の並列化にはatom decompositionを用いた。atom decompositionでは計算対象の原子をプロセスごと、あるいはスレッドごとに分割し、負荷を分散させる。CPUの並列化にはMPICH2を用い、GPUの計算にはNVIDIAのCUDA Cを用いた。

計算の実行は我々の保有するクラスタを用いた。このクラスタは管理・計算ノード1台と計算ノード1台の計2台のノードからなり、各ノードにはIntel Xeon

The evaluation of the energy efficiency of multi GPUs with molecular dynamics

Takuro Udagawa[†] and Masakazu Sekijima^{†‡}

[†] Department of Computer Science, Tokyo Institute of Technology

[‡] Global Scientific Information and Computing Center, Tokyo Institute of Technology

X5550 CPU、NVIDIA GeForce GTX480 GPU が1つずつ備えられている。ノード間は Infiniband で接続されている。このクラスタを用いて、単一ノード CPU serial 実行、単一ノード CPU プロセス並列実行、単一ノード CPU 8 プロセス並列実行、2 ノード CPU 16 プロセス並列実行、単一ノード 1GPU 実行、2 ノード 2GPU 実行の 6 通りの場合について計算時間と消費電力の測定を行い、計算に要する消費エネルギーを求めた。

電力の測定には SYSTEM ARTWARE 社の WATT-HOUR METER SHW3A を用いて、コンセントから供給される電力を測定し、1 秒あたりの平均の消費電力を求めた。計算における消費エネルギーは、計算に要した時間とこの平均の消費電力の積によって求めた。

3 結果と考察

前述の実験を原子数が $2^5 \sim 2^{17}$ の場合について行った。その結果の一部を表 1 に示す。16 プロセスで並列化した場合と、2GPU の場合は、2 ノードを用いて計算を行っているため、それぞれのノードにおける消費電力を表示している。ただし、消費エネルギーを求める際は 2 つのノードの合計値を用いて計算を行った。アイドル時の各ノードの消費電力は管理・計算ノード 143W、計算ノード 133W であった。

CPU と GPU を比較すると、原子数が 500 程度と少ない場合は、CPU による並列化がエネルギー効率の面で優位であることがみてとれる。この様な場合では GPU の並列化性能が十分に発揮できず、却って計算時間も消費電力も CPU よりかかってしまったと考えられる。一方で、原子数が増すと、GPU を用いた方が有利な結

果が得られた。計算速度をみても、GPU1 枚でも CPU2 ノードより速く計算できることがわかる。

GPU 単一ノードと 2 ノードを比較すると、6 万原子程度より少ない原子数の計算では 2 ノードの実行の方がエネルギー効率が劣っていた。これは、ノード間の通信の影響であると考えられる。

しかし、原子数が増すと、計算の比重が相互作用計算に移り、2 ノードの並列化が有利に働くようになり、計算速度が 1 ノードに比べほぼ 2 倍程度となった。加えて本実験環境では計算ノードの消費電力が管理ノードに比べ小さいため、13 万原子では 2 ノードを用いた場合の方がエネルギー効率が増す結果となった。

参考文献

- [1] Mahsan Rofouei, Thanos Stathopoulos, Sebi Ryffel, William Kaise, and Majid Sarrafzadeh, "Energy-Aware High Performance Computing with Graphic Processing Units", In Proceedings of the Workshop on Power Aware Computing and Systems 2008 (HotPower'08), 2008.
- [2] Huang S, Xiao S, Feng W, "On the energy efficiency of graphics processing units for scientific computing." In: IPDPS '09: proceedings of the 2009 IEEE international symposium on parallel and distributed processing. IEEE Computer Society, Washington, pp1-8, 2009.

表 1: CPU と GPU における原子数ごとの測定値

原子数	測定値	serial	4 プロセス	8 プロセス	16 プロセス	1GPU	2GPU
512	計算時間 (秒)	6.81	1.68	0.84	0.44	1.17	1.17
	消費電力 (W)	155	179	180	178, 170	265	268, 251
	消費エネルギー (KJ)	1.06	0.301	0.15	0.15	0.310	0.607
8192	計算時間	1727.53	372.67	123.89	85.32	26.59	22.03
	消費電力	155	181	181	181, 173	290	287, 269
	消費エネルギー	268	67.5	22.4	30.2	7.71	12.2
65536	計算時間	88946.5	9443.98	3249.57	1562.39	1046.27	554.79
	消費電力	155	187	187	188, 180	361	351, 331
	消費エネルギー	13800	1770	608	575	378	378
131072	計算時間	312387.31	29337.05	10498.36	6135.72	4147.48	2086.68
	消費電力	161	189	189	189, 180	362	363, 346
	消費エネルギー	50300	5540	1990	2260	1500	1480