ケーススタディー

ハイパフォーマンス・コンピューティング
教育/科学研究

より効率的な数値シミュレーション

intel Software

ノボシビルスク大学はインテル® Parallel Studio XE、インテル® Advisor、インテル® Trace Analyzer & Collector でシミュレーション・ツールのパフォーマンスを 3 倍に向上

「インテル® Xeon Phi™ プロセッサーのインテル® AVX-512 を利用することで、市場で利用可能なほかのアーキテクチャーよりもコードのパフォーマンスを最大限に引き出すことができました。」

– ノボシビルスク大学
Igor Kulikov 准教授

ノボシビルスク大学 (NSU) は、ロシアで有数の研究/教育機関の 1 つで、シベリアで最も大きな大学の 1 つです。大学の研究者が、天体物理学物体シミュレーション (AstroPhi) プロジェクトの一部である、水素イオン化を利用した磁気流体力学 (MHD) 問題の数値計算シミュレーション用ソフトウェア・ツールの開発と最適化を行っているとき、インテル® Xeon Phi™ プロセッサー・ベースのハードウェアでツールのパフォーマンスを最適化する必要がありました。チームがインテル® Advisor とインテル® Trace Analyzer & Collector を利用して最適化を行ったところ、パフォーマンスが最大 3 倍に向上し、1 つの問題の計算にかかる時間を 1 週間から 2 日に短縮できました。

現代社会の課題との関連性を保つ

NSU は、学士、修士、博士、博士研究員レベルで、技術、経済、人文分野の約 120 の研究プログラムを提供しています。大学のスタッフは、研究と教育の両方に従事しており、現代社会の課題と関連性のある教育プログラムを提供するように努めています。NSU は、研究機関/大学、工業部門、商業部門、国有部門と密接に協力して作業を行っています。

数学的モデリングは、現代の天体物理学で重要な役割を果たしており、宇宙の非線形進化プロセスの研究における普遍的ツールです。高解像度での複雑な天体物理学プロセスのモデリングは、最も強力なスーパーコンピューターで行われます。大学の AstroPhi プロジェクトは、インテル® Xeon Phi™ プロセッサーを搭載した超並列スーパーコンピューター向けの天体物理学コードを開発しています。この有益なプロジェクトは、超並列スーパーコンピューター向けの数値シミュレーション・コードを作成する方法と、将来のエクサスケールのスーパーコンピューターの開発に備えるため、現代の HPC ハードウェア・アーキテクチャーについて学ぶ機会を学生に与えます。

数値計算法

チームは、数値計算法を使用してプロジェクトを設計しました (図 1)。この高次法には次のような利点があります。

- 人工粘性がない
- ガリレイ不変ソリューション
- エントロピー非減少を保証
- 単純な並列化
- 潜在的に “無限の” スケーラビリティー (ウィーク・スケーラビリティー)

最初の 3 つの利点は、天体物理学問題において、すべての膨大な物理的効果のリアルなモデリングで鍵となる要因です。この単純さと MPI の送信/受信操作により、効率的な並列化とウィーク・スケーラビリティーの観点から潜在的に "無限の" スケーラビリティーが得られます。

Novosibirsk State University
THE REAL SCIENCE

超並列アーキテクチャー

チームは、インテル® Xeon Phi™ プロセッサー・ベースの超並列アーキテクチャー向けの新しいソルバーを共同で設計しました。ノードのボトルネックを排除し、コードの現代化を単純化することで、ブート可能なプロセッサーで最も要件の厳しいハイパフォーマンス計算アプリケーションに必要な電力効率を達成しました。

チームは、ソルバーをインテル® アドバンスト・ベクトル・エクステンション 512 (インテル® AVX-512) 命令ベースにして、512 ビットの SIMD をサポートし、プログラムが 512 ビットのベクトルに 8 個の倍精度浮動小数点値、16 個の単精度浮動小数点値、8 個の 64 ビット整数値、または 16 個の 32 ビット整数値をパックできるようにしました。そのため、1 つの命令でインテル® AVX やインテル® AVX2 の 2 倍、あるいはインテル® ストリーミング SIMD 拡張命令 (インテル® SSE) の 4 倍のデータ要素を処理することができます。

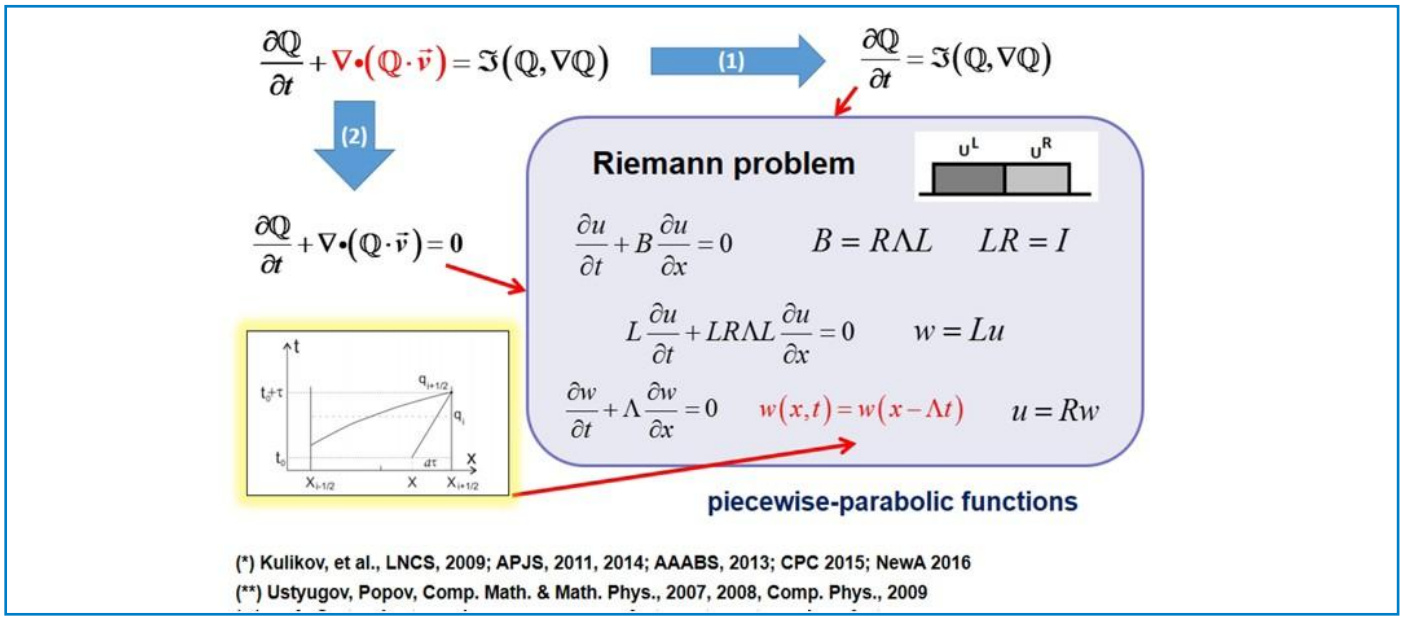

図 1. 数値計算法

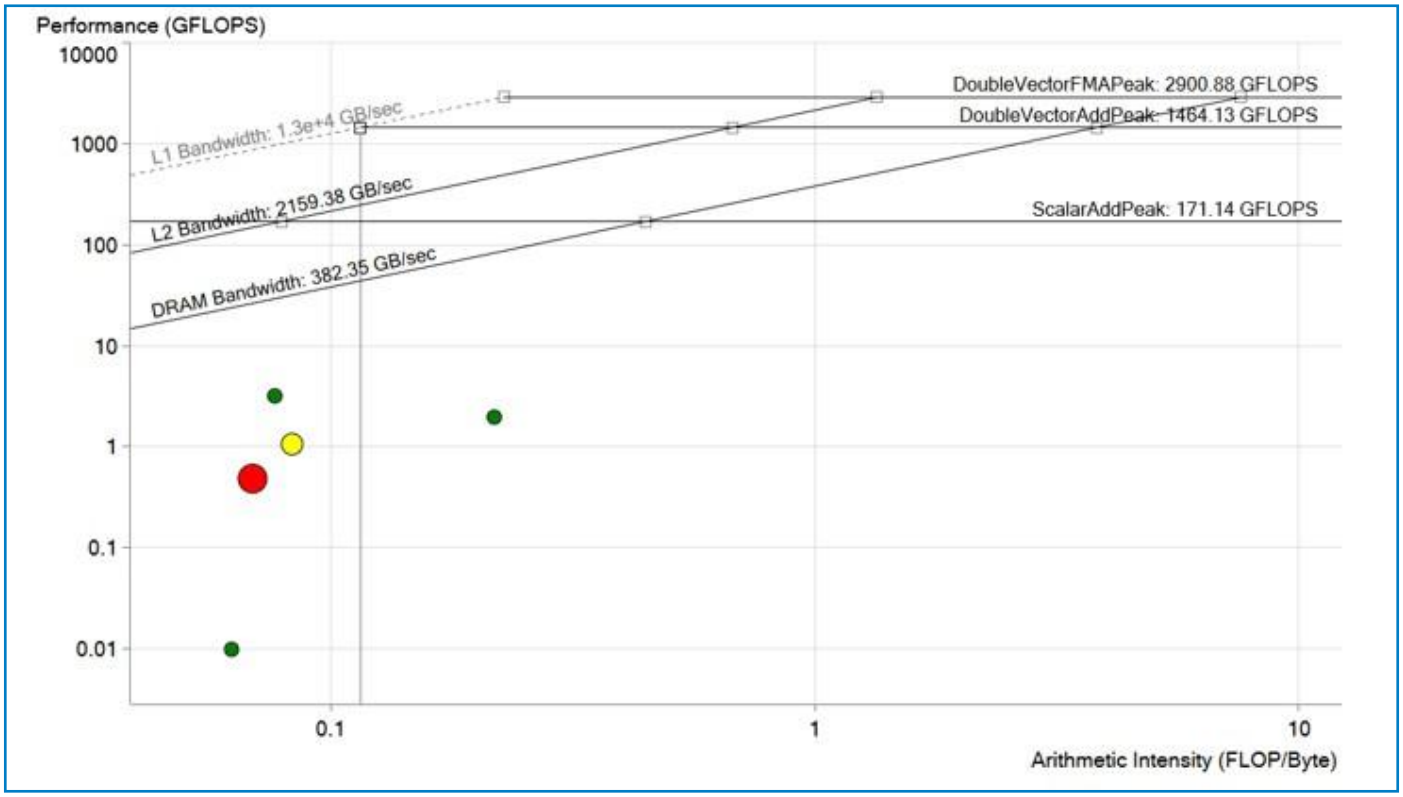

図 2. 最適化前。各ドットはループを表します。大きいループと赤色のループは、実行に多くの時間がかかっているため、最適化することで大きな効果が得られます。上の図で赤色のループは、DRAM のピーク帯域幅を大きく下回っており、1 GFLOP 未満で実行されています。改良の余地が多いため、最適化により大幅なパフォーマンスの向上が期待できます。

「インテル® Xeon Phi™ プロセッサーのインテル® アドバンスト・ベクトル・エクステンション 512 を利用することで、市場で利用可能なほかのアーキテクチャーよりもコードのパフォーマンスを最大限に引き出すことができました。」(NSU、Igor Kulikov 准教授)

コードの最適化

AstroPhi プロジェクトの重要なポイントは、インテル® Xeon Phi™ プロセッサーのパフォーマンスを最大限に引き出すようにコードを最適化することでした。最適化の前に、チームはベクトル依存性とベクトルサイズの問題を抱えていました (図 2)。コード最適化の目標は、ベクトル依存性を排除し、メモリーロード操作を最適化して、ベクトルおよび配列サイズをインテル® Xeon Phi™ プロセッサー・ベースのアーキテクチャーに効率良く適応させることでした。チームは、インテル® Parallel Studio XE に含まれる 2 つのツール、インテル® Advisor およびインテル® Trace Analyzer & Collector を使用して最適化を行いました。

インテル® Parallel Studio XE は、増加するプロセッサー・コア数とベクトルレジスターの幅を活用して、現在および将来のプロセッサーでアプリケーションのパフォーマンスが最大限になるように開発者を支援する、包括的なソフトウェア開発スイートです。

インテル® Advisor は、現代のプロセッサーに対応したソフトウェア・ツールであり、ソフトウェアをベクトル化 (インテル® AVX 命令または SIMD 命令を使用) およびスレッド化してプロセッサーのパフォーマンスを最大限に引き出すために不可欠のツールです。このツールを使用して、チームは、パフォーマンスが低いループと各ループのパフォーマンス向上の余地を示すルーフライン解析を行い、改良できるループと改良する価値のあるループを識別しました。

「インテル® Advisor は、ボトルネックの原因の特定と次の最適化ステップの決定をスムーズに行えるようにします。実装に膨大な労力をかける前に、パフォーマンス・ゲインの予測に役立つデータを提供してくれるのです。」(NSU、Igor Chernykh 准教授)

インテル® Advisor は、パフォーマンス向上の可能性でループをソートし、ソースにメッセージとして表示することでコンパイラー・レポートを読みやすくし、プロジェクト・チームに効率的なベクトル化のヒントを提供しました。また、トリップカウント、データ依存性、ベクトル化を安全かつ効率的に行うメモリー・アクセス・パターンのような、重要なデータももたらしました。

インテル® Trace Analyzer & Collector もコードの最適化に貢献したツールです。このグラフィカル・ツールは、チームが MPI アプリケーションの動作を理解し、ボトルネックを迅速に特定し、正当性を向上して、最終的にインテル® アーキテクチャーでツールのパフォーマンスを最大限に引き出すのに役立ちました。ツールには、ウィーク・スケーリングとストロング・スケーリングの向上に役立つ、MPI 通信のプロファイルおよび解析機能も含まれています。

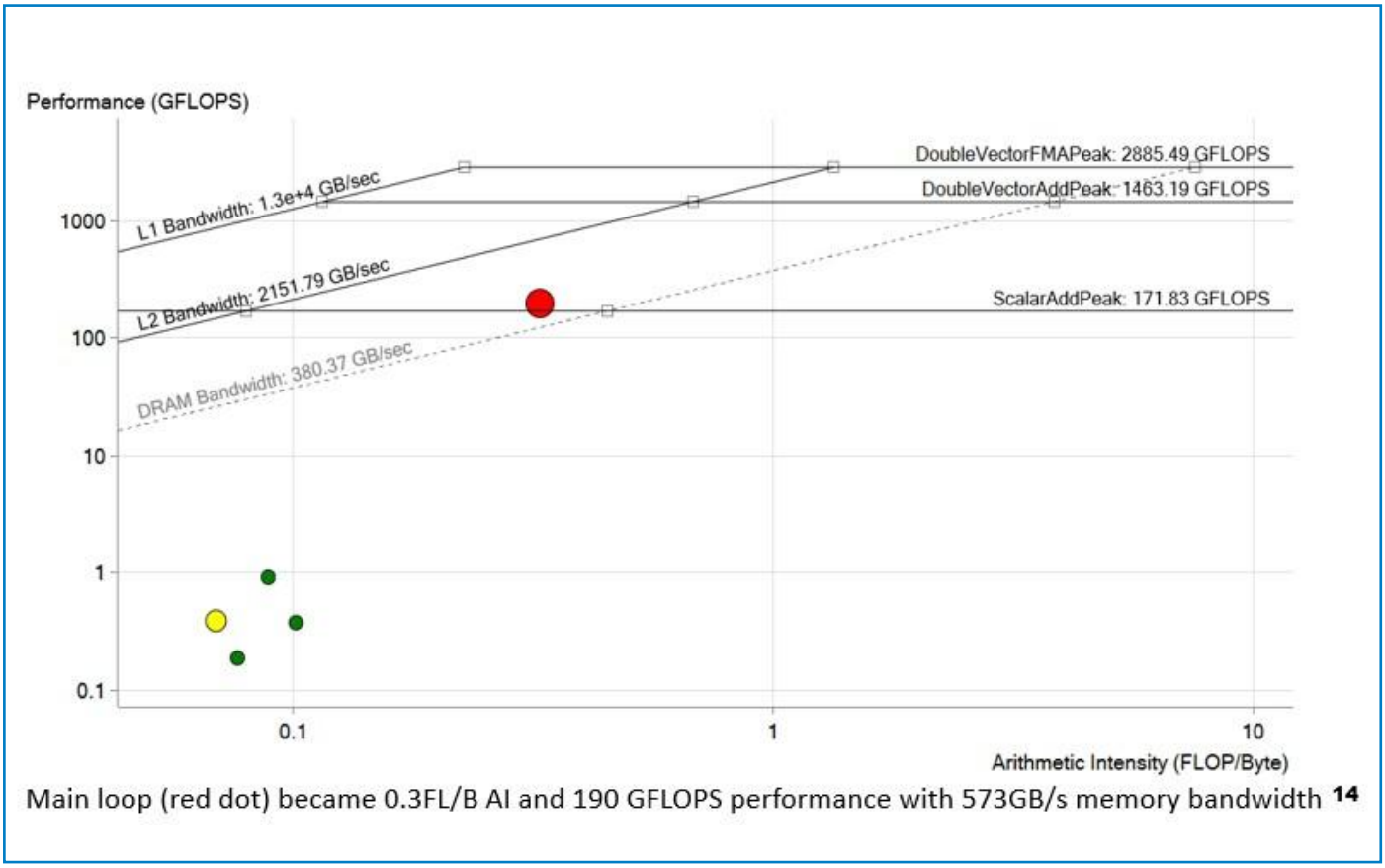

図 3. 最適化後。赤色のループの最適化中に、ベクトル依存性の排除、メモリーロード操作の最適化、インテル® Xeon Phi™ プロセッサーおよびインテル® AVX-512 命令に適したベクトルと配列サイズの適用が行われました。パフォーマンスが 190 GFLOPS (約 200 倍) に向上し、DRAM 制限およびスカラー加算制限を上回った結果、ループの次のルーフ、L2 キャッシュの使用による制限を受けるようになりました。

結果

図 4 は、最適化後のコードのサンプルです。

すべての改良と最適化を適用した結果、チームは 190 GFLOPS のパフォーマンスと 0.3 FLOP/バイトの演算密度を達成し、マスク使用率は 100 パーセント、メモリー帯域幅は 573GB/秒になりました。

「インテル® Advisor とインテル® Trace Analyzer & Collector を使用することで、ベクトル依存性を排除し、メモリーロード操作を最適化して、インテル® Xeon Phi™ プロセッサー・ベースのアーキテクチャーに適したベクトルと配列サイズを適用することができました。

この最適化により、さまざまな天体物理学のテストを 3 倍以上の速度で実行できるようになりました。」(NSU、Igor Kulikov 准教授)

関連資料

- インテル® Parallel Studio XE - 高速なコードを素早く開発
- インテル® Advisor - ベクトル化の最適化とスレッドのプロトタイプ生成
- インテル® Trace Analyzer & Collector – MPI チューニングと解析

```
FYP = _mm512_mul_pd(vecincs,
                _mm512_add_pd(_mm512_sub_pd(_mm512_mul_pd(vecsr,vecfm),_mm512_mul_pd(vecsl,vecfp)),

_mm512_mul_pd(_mm512_sub_pd(vecup,vecum),_mm512_mul_pd(vecsl,vecsr))));
// down interface
vecsl = _mm512_set1_pd(Sound[index(i,k-1,l,3)]);
vecsr = _mm512_set1_pd(Sound[index(i,k,l,2)]);
vecincs = _mm512_set1_pd(1.0/(Sound[index(i,k,l,2)]-Sound[index(i,k-1,l,3)]));
vecfp = _mm512_load_pd(FY+index(i,k,l,0));
vecfm = _mm512_load_pd(FY+index(i,k-1,l,0));
vecup = _mm512_load_pd(U+index(i,k,l,0));
vecum = _mm512_load_pd(U+index(i,k-1,l,0));
FYM = _mm512_mul_pd(vecincs,
                _mm512_add_pd(_mm512_sub_pd(_mm512_mul_pd(vecsr,vecfm),_mm512_mul_pd(vecsl,vecfp)),

_mm512_mul_pd(_mm512_sub_pd(vecup,vecum),_mm512_mul_pd(vecsl,vecsr))));
```

図 4. 最適化後のコード

Software

JPN/1707/PDF/XL/SSG/TT