

X44c CUDA/HIP/SYCL を用いた direct N -body code の実装と NVIDIA/AMD/Intel 製 GPU 上での性能評価

三木洋平, 埴敏博 (東京大学)

GPU が演算加速器としてスパコンに搭載されるようになってから 10 年以上に渡って, 国内外を問わず GPU スパコンといえば NVIDIA 製 GPU を搭載したものがほとんどであった. しかし, 2024 年 6 月版の TOP500 リストで 1 位を獲得した Frontier は AMD 製 GPU を, 2 位の Aurora は Intel 製 GPU を, 3 位の Eagle は NVIDIA 製 GPU を搭載するなど, GPU ベンダー間の競争が活性化している. コード開発環境においても, NVIDIA 製 GPU のみを対象とする CUDA だけではなく, NVIDIA 製 GPU と AMD 製 GPU 両方に対応できる HIP や, より多様なデバイスに対応できる SYCL といった様々なプログラミングモデルが提供されている. 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, HIP や SYCL を用いて移植・最適化した上で NVIDIA/AMD/Intel 製のデータセンター GPU 上での性能評価を行った.

NVIDIA H100 SXM 上では SYCL で実装したコードを Intel oneAPI でコンパイルしたコードが最も高い性能を示し, 1 秒あたりの相互作用演算ペア数が 2.16×10^{12} に達した. この性能は CUDA 版よりも 2 割程度高い性能である. AMD MI210 上では HIP 実装が最高性能であり, 相互作用演算ペア数は毎秒 9.10×10^{11} となったものの, SYCL で実装したコードを AdaptiveCpp でコンパイルした際の相互作用演算ペア数は毎秒 9.09×10^{11} であり, HIP 版の性能とほぼ一致した. Intel Data Center GPU Max 1100 上では SYCL で実装したコードを Intel oneAPI でコンパイルしたコードが動作し, 1 秒あたりの相互作用演算ペア数は 8.87×10^{11} であった. したがって, NVIDIA/AMD/Intel 製 GPU 全てに対応したコード開発という観点で SYCL が有用であることが分かった.