

基于高性能计算平台的 TensorFlow 应用探索与实践

王一超, 韦建文

(上海交通大学 网络信息中心, 上海 200240)

摘要:近年来,伴随着深度学习方法在人工智能领域中的广泛应用,在校级高性能计算平台上也产生了越来越多人工智能领域应用的计算需求。上海交通大学的超级计算机 π 充分利用 GPU 加速卡的硬件资源,率先在校级高性能计算平台上部署了多款主流深度学习软件框架,如 TensorFlow 等,向校内用户提供面向深度学习应用的计算服务。将阐述在传统高性能计算平台上部署深度学习软件框架的探索与实践,并通过对图像识别领域 Inception 模型的训练实验,验证目前校级高性能计算平台对深度学习应用的支持效果。实验结果显示,交大 π 超算的模型训练性能与目前最新 NVIDIA Minsky GPU 工作站上的性能相当,可以充分支撑校内深度学习相关应用。

关键词:高性能计算;深度学习;TensorFlow;图形处理器

中图分类号:TP 381

文献标志码:A

文章编号:1006-7167(2017)12-0125-04



Study and Practice of Application of Tensor Flow on HPC Platform

WANG Yichao, WEI Jianwen

(Network & Information Center, Shanghai Jiaotong University, Shanghai 200240, China)

Abstract: With the rapid development of deep learning method in artificial intelligence area, the demand of realizing deep learning applications on HPC platform in the university is also increased. In order to provide computing resources for deep learning users, π supercomputer in Shanghai Jiao Tong University is equipped with 130 GPU cards, and several deep learning frameworks such as TensorFlow are deployed on it. This paper studies to deploy deep learning frameworks on traditional HPC platform and compares the performances of training an Inception model by TensorFlow with GPU on π supercomputer and GPU workstation. The experiment results show that the performance of training on π supercomputer is close to that on NVIDIA Minsky Workstation.

Key words: high performance computing; deep learning; TensorFlow; graphics processing unit(GPU)

0 引言

深度学习作为近年来兴起的一种机器学习方法^[1],可大幅提升包括图像识别在内的诸多模式识别问题的准确率。同时,该方法经由 GPU 大规模并行计

算的助推,已经大幅缩短了其模型的训练时间,成为了学术与工业界炙手可热的机器学习方法^[2-3]。当前,利用深度学习提升图像和语音识别精度的软件产品层出不穷,并且已大量应用于安防、人机交互、语音输入法等实际场景。在科研领域,越来越多的科学家也意识到了可以尝试利用深度学习替代传统的机器学习方法^[4],提高模式识别或分类问题的精度^[5]。在这一大背景下,为支撑校内高水平科研用户的需要,在校高性能计算平台上结合高性能计算软件栈的特点,部署了多款支持深度学习的软件框架,包括 CNTK、MXnet、TensorFlow 等。同时,在目前的交大超算平台上,利用 TensorFlow 框架下的图像识别模型训练,与最新的

收稿日期:2017-07-25

基金项目:国家重点研发计划(2016YFB0201400, 2016YFB0201800)

作者简介:王一超(1990-),男,上海人,硕士,助理工程师,主要研究方向为高性能计算。

Tel.: 13661511618; E-mail: wangyichao@sjtu.edu.cn

NVIDIA Minsky 高性能工作站进行了性能对比测试,以验证平台对于深度学习应用的支持效果。

1 高性能计算平台

为应对校内各院系用户对计算需求的大幅增加,上海交通大学于 2012 年初成立校级高性能计算中心,挂靠校网络信息中心,为全校提供高性能计算的公共服务。该校级高性能计算平台于 2013 年建成并上线服务超算集群 π , 2013 年 6 月世界排名 158, 国内高校第一, 上海地区第一^[6]。

1.1 硬件环境

π 集群采用异构计算设计, 计算资源由 Intel 至强多核处理器和 NVIDIA GPU 加速卡组成, 经过 2 轮升级之后, 目前整机的理论计算峰值性能为 343TFlops, 聚合存储能力达 4PB, 为国内高校领先的大规模 GPU 异构计算集群, 具体硬件配置如表 1 所示。

表 1 π 集群硬件配置

节点类型	数量	参数
CPU 节点	332	双路 Intel E5-2670 (内存 64GB, 以下同)
GPU 节点	50	双路 Intel E5-2670 + 2 块 NVIDIA K20
GPU 节点	15	双路 Intel E5-2680 + 2 块 NVIDIA K80
大内存节点	20	双路 Intel E5-2670 (内存 256GB)
Infiniband 网络	1	Mellanox 56Gbps FDR 交换机, 648 端口
存储	1	4PB, Lustre 并行文件系统

2016 年发布的 NVIDIA Pascal 架构是目前最先进的 GPU 加速卡架构, 相较于 2013 年建设集群时所采用的 Kepler 架构, 不仅提升了浮点数运算能力和内存访问带宽, 更支持了适应目前深度学习应用特点的半精度浮点数计算 (即 FP16)^[7]。NVIDIA P100 加速卡的半精度浮点数运算性能约为 K80 的单精度浮点数运算性能的逾 3 倍, 由于深度学习对于精度要求较低, 半精度即可胜任, 所以现已在集群的 GPU 节点上部署测试 P100 加速卡。

1.2 软件环境

π 集群利用 module 管理面向用户的全局软件环境, 我们在集群上安装了诸多常用的开源软件及完整的编译环境, 面向所有用户开放使用。用户仅需在自己账号下加载相关软件或者工具库, 即 module load 指令, 便可使用所需要的软件。这种配置方案节省了用户对于软件及编译环境的部署学习时间, 同时我们对于全局软件环境的定期升级与维护, 也保障了用户始终能在优化后的软件环境下运行计算作业, 从而提升作业运行效率。

TensorFlow 是由 Google 公司开发的一款支持不同深度学习应用的软件框架, 在这款基于 Python 的软件框架上可以通过调用不同的程序接口, 构建深度学习训练所需的流图, 进行深度学习训练。目前人工智能

领域最著名的案例, 围棋软件 AlphaGo 正是基于该框架开发的^[8]。TensorFlow 今年刚刚推出了其 1.0 版本, 目前更新速度较快, 故本文中采用基于源代码的安装部署方式, 目的是在于能使用最新的软件版本。以下将简述一下在 π 集群上部署 TensorFlow 的实践方法。

首先, 用户需要加载正确的全局软件环境, 包括完整的编译工具和 GPU 所需的 CUDA 并行库环境。

```
$ module purge
$ module load gcc/5.4 python/3.5 bazel cuda/8.0
  cudnn/6.0
```

virtualenv 是一款创建隔绝的 Python 环境的软件工具, 它通过创建一个包含所有必要的可执行文件的文件夹, 来解决依赖、版本以及间接权限问题。用户被允许在其 HOME 目录下创建一个 Python 的虚拟环境, 然后使用 pip 管理所需软件包。

```
$ python3 virtualenv.py ~/python35-gcc
$ source ~/python35-gcc54/bin/activate
$ pip3 install numpy
```

用户通过 git 将 TensorFlow 源代码下载至其 HOME 目录下, 并更新至最新版本, 进行下一步编译和安装

```
$ git clone https://github.com/tensorflow/tensorflow
```

```
$ cd tensorflow; git checkout r1.0
```

利用 bazel 编译工具开启编译环境设置, 在选项中, 用户需要选择使用 GPU, 并指明 CUDA 和 cuDNN 的安装路径。

```
$ bazel build --config = opt --config = cuda //
  tensorflow/tools/pip_package:build_pip_package
```

用户最终将基于以上操作编译而成的基于 pip 的 TensorFlow 安装包安装到用户本地的 python 目录下。打开 Python 后, 即可正常使用 TensorFlow。

2 深度学习应用

深度学习中的卷积神经网络是由一个或多个卷积层和顶端的全连通层组成, 同时也包括关联权重和池化层^[9]。这种网络数学上就是许多卷积运算和矩阵运算的组合, 而卷积运算通过一定的数学手段也可以通过矩阵运算完成。这些操作和 GPU 本来能做的那些图形点的矩阵运算是一样的。因此深度学习就可以非常恰当地用 GPU 进行加速了。

目前, 交大高性能计算平台上的深度学习计算需求主要来自于语音识别和图像处理, 计算机系和医学图像处理的团队对于在集群上利用 GPU 跑深度学习作业。当前他们的应用占了 GPU 应用的 11%, 仅次于传统科学计算领域的软件 Amber, 与 GPU 版本的

Gromacs 和 Lammmps 相当(见图 1)。

目前在 π 集群上使用最多的开源深度学习框架是 Google 公司开发的 TensorFlow。TensorFlow 是一个使用数据流图进行数值计算的开源软件库。数据流图中的节点表示数学运算,数据流图中的边表示节点之间互联的多维数据数组^[11]。而目前在图像识别领域使用最多的训练模型 Inception,即如图 2 示例,是一个 13 层的网络模型。本文基于以上现状,在 π 集群上基于 TensorFlow 框架针对 Inception 模型进行测试实验^[12],用以验证目前高性能计算集群对于深度学习应用的支持情况。

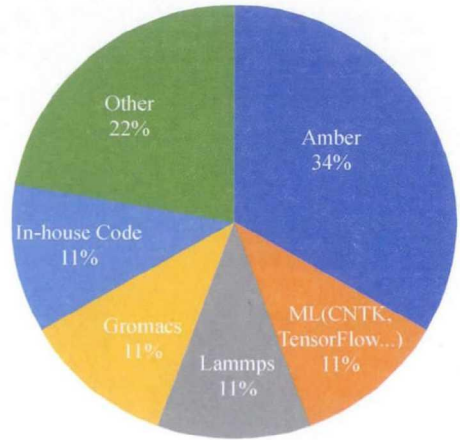


图 1 π 集群 GPU 应用利用率占比^[10]

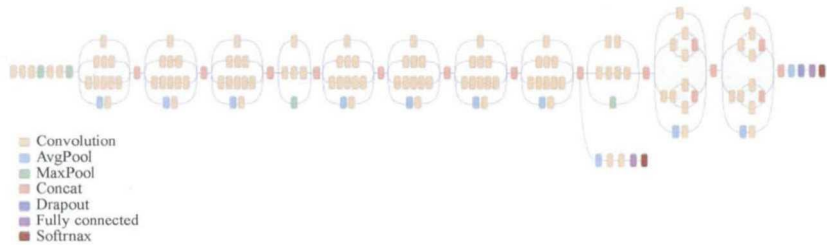


图 2 TensorFlow 框架下 Inception 模型的数据流图

3 性能分析

为分析深度学习应用在 π 集群上的实际性能,本文针对基于 TensorFlow 架构的 Inception-V3 模型进行训练性能的测试,图像测试集采用大规模数据集 ImageNet,该数据集大小约 1.5 TB,由逾 22 000 个种类和超过 1 500 万张图片组成。目前,国际上公认最具权威性的 ImageNet 国际计算机视觉挑战赛 (ILSVRC)正是基于该数据集进行图像识别准确率的比拼的^[13]。由于数据集体量较大,我们将 ImageNet 数据集下载并保存至 π 集群的并行文件系统上,以方便跨界点及多用户的共同访问。

3.1 测试环境

为了能和目前主流的深度学习专用工作站进行性能对比,本次实验不仅只在 π 集群的 GPU 测试节点(搭载了 NVIDIA P100 加速卡^[14])上进行,我们还在同样搭载了 NVIDIA P100 加速卡且支持 NVLink 高速互联技术的 IBM Minsky 测试机上做了同样的训练测试。

如图 3 所示,NVLink 高速互联技术相较于异构计算中常用的 PCIe 互联,访存带宽可以取得 5 倍的提升,从而缓解由主存与 GPU 显存之间传输效率低造成的性能瓶颈。具体的测试平台软硬件环境配置如表 2 所示。

3.2 性能结果对比

本文使用了 ImageNet 数据集训练 Inception-V3 图像识别模型,依次进行了 1~4 块 GPU 卡的训练测试,

为保证负载的平均,batch 值也相应做了调整,实验输入如表 3 所示。

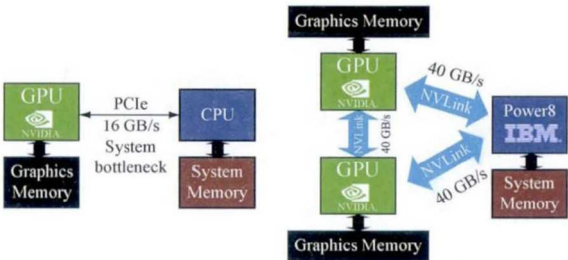


图 3 NVLink 与 PCIe 之间的访存带宽性能对比

表 2 测试平台配置

配置项目	π supercomputer 测试节点	Minsky 测试机
CPU	双路 Intel E5-2680	POWER8
GPU	2 块 P100-PCIe	4 块 P100-SMX
NVLink	不支持	支持
内存	64 GB	32 GB
操作系统	CentOS 7.0	CentOS 7.0
CUDA 版本	8.0	8.0
cuDNN 版本	6.0	6.0

表 3 深度学习应用测试输入

训练模型	GPU 卡数量	Batch size
TensorFlow	1	64
Inception-V3	2	128
	4	256

实验结果如图 4 所示,Minsky 测试机相对于目前

π 集群的 GPU 单节点的 1 和 2 卡的性能非常接近,性能差在 12% 以内。而由于目前集群环境下的 TensorFlow 尚不支持分布式 GPU 节点并行,故无法在此情况下做相应对比测试,图 4 中展示了 Minsky 在 4 卡运行时的性能,相对之前的结果而言,呈线性增长。

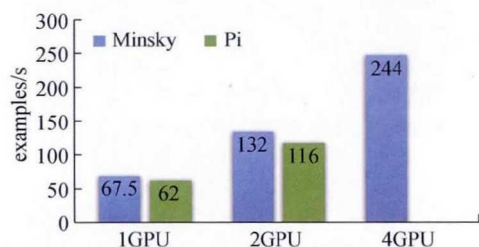


图 4 利用 TensorFlow 在 Minsky 和 π 集群上训练 Inception-V3 模型的性能对比

造成 π 集群节点与 Minsky 测试机上性能差异的原因主要有 2 点:①Minsky 上配备的 NVLink 高速互联技术,提供了 5 倍于 π 测试节点上基于 PCIe 技术的传输带宽。从而使得数据在从主存传输至 GPU 设备内存的时间明显降低了,在 1 和 2 卡的实验中提升了性能;②Minsky 测试机集成了 4 块 P100-SMX GPU 卡,该款加速卡相较于采用同样硬件架构的 P100-PCIE 版本,其核心的主频更高,因此计算能力有约 16% 的提升^[15]。

综上所述,在 2013 年建成的 π 超算上成功部署了 TensorFlow 深度学习框架,在将 GPU 节点上的 GPU 加速卡从原有的 NVIDIA Kepler 架构升级至最新的 Pascal 架构后。在实验中,对比了其于 2016 年发布的 Minsky 测试机上 Inception-V3 模型的训练性能,实验结果显示性能差异在 12% 以内。由此可见,当前的集群硬件条件可以支持深度学习应用在单节点上的运行,但在未来的建设中,仍有待进一步考察高密度 GPU 节点对提升深度学习应用性能的帮助。

4 结 语

在这一轮新的人工智能大潮中,人们利用深度学习方法大踏步提升人工智能应用预期的同时,也越来越认识到计算性能对于未来人工智能能发展的重要性。日本政府近期也提出了发展面向人工智能的超级计算机战略。在高校一级的高性能计算平台上,人工智能的研究需求也理应得到满足,这就需要在已有的集群上更新软硬件环境,帮助用户更快地成功运行相关计算应用。本文分享了交大在高性能计算平台上配

置部署深度学习软件框架,并实践对比了其于目前最先进的 GPU 工作站的性能,证明了校级高性能计算平台可以支撑深度学习用户的计算需求,但在分布式深度学习上的性能还有待评估。因为与传统的科学计算不同,深度学习应用由于极高的运算强度,对于多卡情况下的数据传输性能要求更高,故在工业界普遍采用单机多卡的高密度 GPU 节点方案^[16],以提高其性能。在这一方面,在建设新一阶段的超算集群时,也可以对类似的高密度节点性能进行调研,以评估其实际应用价值。

参考文献 (References):

- [1] 李航. 统计学习方法[M]. 北京:清华大学出版社,2012.
- [2] 余凯,贾磊,陈雨强,等. 深度学习的昨天、今天和明天[J]. 计算机研究与发展, 2013, 50(9): 1799-1804.
- [3] 张建明,詹智财,成科扬,等. 深度学习的研究与发展[J]. 江苏大学学报:自然科学版, 2015, 36(2): 191-200.
- [4] LeCun Y, Bengio Y, Hinton G. Deep learning[J]. Nature, 2015, 521(7553): 436-444.
- [5] 张焕龙,胡士强,杨国胜. 基于外观模型学习的视频目标跟踪方法综述[J]. 计算机研究与发展, 2015, 52(1): 177-190.
- [6] 林新华,顾一众. 上海交通大学高性能计算建设的理念与实践[J]. 华东师范大学学报(自然科学版), 2015(S1): 298-303.
- [7] GP100 Pascal Whitepaper [EB/OL]. <https://images.nvidia.com/content/pdf/tesla/whitepaper/pascal-architecture-whitepaper.pdf>
- [8] Silver D, Huang A, Maddison C J, et al. Mastering the game of Go with deep neural networks and tree search[J]. Nature, 2016, 529(7587): 484-489.
- [9] 周志华. 机器学习[M]. 北京:清华大学出版社,2016.
- [10] 上海交通大学高性能计算中心年度报告 2016 [EB/OL]. http://hpc.sjtu.edu.cn/report2016_170607.pdf.
- [11] 黄文坚,唐源. TensorFlow 实战[M]. 北京:电子工业出版社,2017.
- [12] Installing TensorFlow from Sources [EB/OL]. https://www.tensorflow.org/install/install_sources.
- [13] Krizhevsky A, Sutskever I, Hinton G E. Imagenet classification with deep convolutional neural networks [C]//Advances in neural information processing systems. 2012: 1097-1105.
- [14] Deep Learning Performance with P100 GPUs [EB/OL]. http://en.community.dell.com/techcenter/high-performance-computing/b/general_hpc/archive/2016/11/11/deep-learning-performance-with-p100-gpus.
- [15] Inside Pascal: NVIDIA's Newest Computing Platform [EB/OL]. <https://devblogs.nvidia.com/parallelforall/inside-pascal/>.
- [16] 顾乃杰,赵增,吕亚飞,等. 基于多 GPU 的深度神经网络训练算法[J]. 小型微型计算机系统, 2015(5): 1042-1046.