

これからのHPCにおける ベンチマークテスト

2010年3月24日

理研シンポジウム

パネルセッション

モデレータ: 姫野龍太郎

理化学研究所

情報基盤センター

現在のベンチマークテスト

- 一般に使われているHPCベンチマークテスト
 - LINPACK
 - NAS並列ベンチマーク

この他

- SPEC 2000年ごろまでメジャー
- TPC: database
- 3DMark: graphic
- リバモアループ(カーネル)
- himenoBMT

LINPACK

- 米国アルゴンヌ国立研究所でFORTRANを使って開発されたライブラリ
- 開発者: Jack Dongarra、Jim Bunch、Cleve Moler、Pete Stewart
- 1970年代から1980年代初期のスーパーコンピュータを対象として設計
- その後より洗練されたライブラリLAPACKに取って代わられた。
- **LINPACK ベンチマークは、LINPACK に基づいたベンチマークプログラム**
- 理学・工学で一般的な線型方程式系(大きさは自由)をガウスの消去法で解く速度を測定し、システムの浮動小数点演算性能を評価
- ただし密係数行列。一般に、差分法や有限要素法などで解かれる大規模問題は、参照の局所性の低い疎行列系であり、キャッシュメモリの恩恵をほとんど受けない。つまりメモリバンド幅によって性能が決まる。したがって、必ずしも実アプリケーションの性能を示すものではなく、指標の一つとして考えるのが妥当であろう。

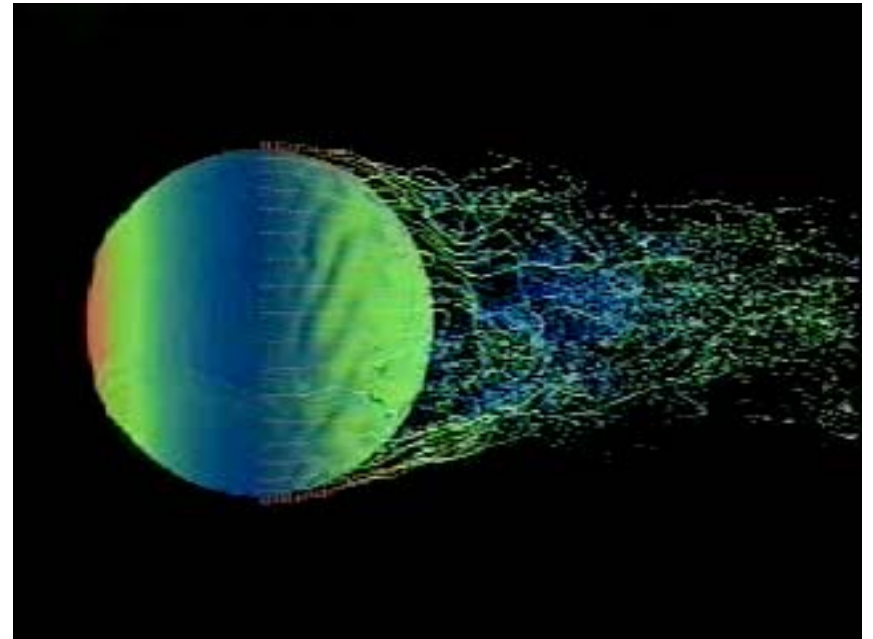
以上、出典: <http://ja.wikipedia.org/wiki/LINPACK>(ただし、一部略)

NAS並列ベンチマーク

- 最初のバージョンNPB1, 1994
 - NPB2
 - NPB-MPI 2.0, 1995
 - NPB-MPI 2.4, 2002
 - NPB-MPI 2.4 I/O, 2003
 - NPB3: multi-zone benchmark: OpenMP, HPF
 - NPB-OpenMP 3.0, 1999
 - NPB-JAVA 3.0, 2002
 - NPB-HPF, 1998
 - NPB-Multi-Zone 3.0, 2003
- GridNPB 3, 2003

himenobMT

- himenobMTは
 - 非圧縮性のNavier-Stokes方程式のソルバーのカーネル(流体シミュレーション)
 - 物体適合格子を使った差分法
 - 圧力のポアソン方程式のソルバー(元はSOR法)
 - 1990年代初期の作
 - その後、MPI版、C版



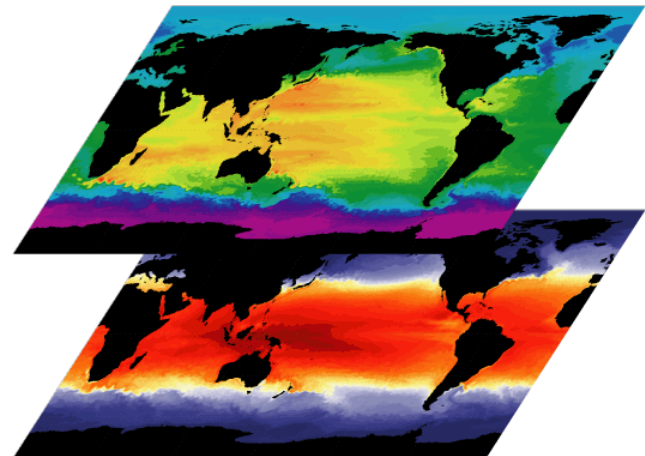
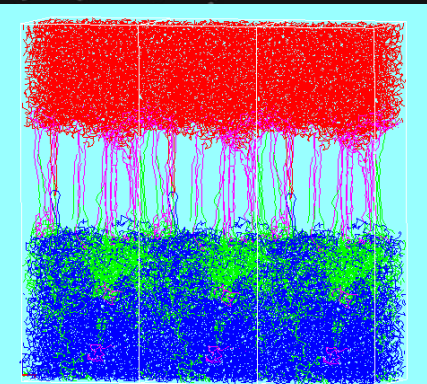
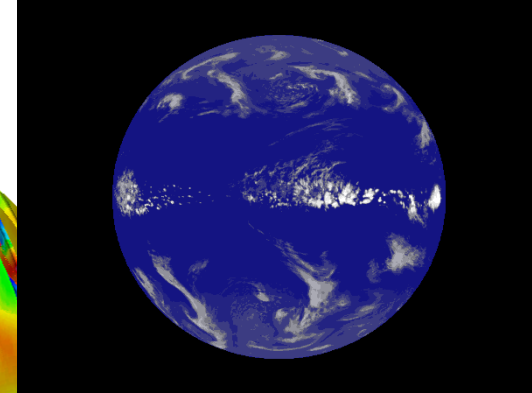
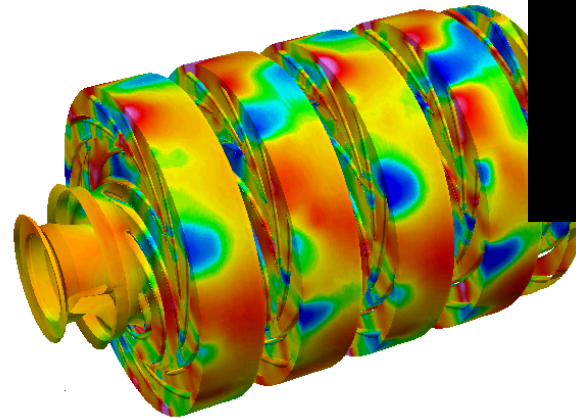
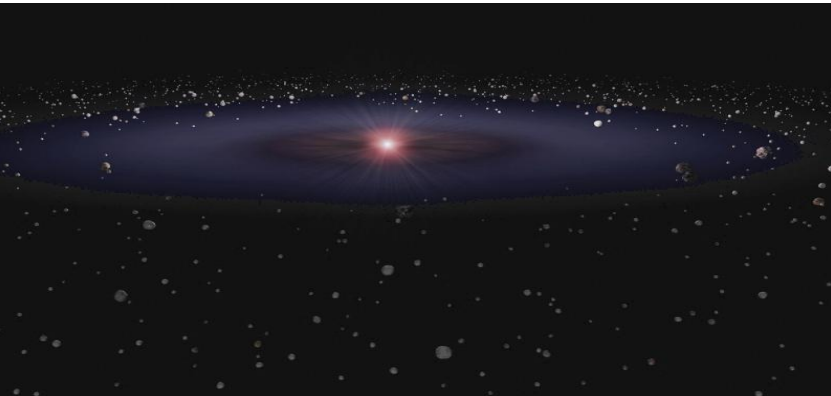
himenobMTの特徴

- メモリーアクセスの特徴
 - 14個の3次元配列
 - 1つだけ再利用
 - 13個の配列は一度だけしか参照しない
 - キャッシュが効かない
- 性能のボトルネックはメモリーバンド幅
 - 14ストリームのデータ供給: 高バンド幅

次世代スパコンの設計検討時

ターゲットアプリケーションとベンチマーク

アプリ検討部会(大学・研究機関や企業の委員27名で構成)で5分野から21本のアプリを選定(2006年1月~3月)



NextBMTとPeta-scale BMT(1/2)

分野	プログラム名	概要
生命科学	SimFold	タンパク質立体構造の予測
	GNISC	遺伝子発現実験データからの遺伝子ネットワークの推定
	MLTest	オーダーメイド医療実現のための統計的有意差の検証
	MC-Bflow	血流解析シミュレーション
	sievgene/myPresto	タンパク質・薬物ドッキングシミュレーション
	ProteinDF	巨大タンパク質系の第一原理分子動力学計算
ナノ	GAMESS/FMO	FMO分子軌道法計算
	Modylas	高並列汎用分子動力学計算ソフトウェア
	RSDFT	実空間第一原理分子動力学計算
	RISM/3D-RISM	溶液内タンパク質の電子状態の3D-RISM/FMO法による解析
	PHASE	平面波展開第一原理分子動力学解析
	Octa	粗視化分子動力学計算

NextBMT and Peta-scale BMT(2/2)

Peta-scale BMT

物理・天文	LatticeQCD	格子 QCD により、素粒子の強い相互作用の第一原理計算
	NINJA/ASURA	惑星が形成される過程を粒子や粒子・ガスの複合シミュレーション
地球物理	NICAM	全球雲解像大気大循環モデル
	Seism3D	地震波動の伝播を、運動方程式、応力-歪みの構成方程式の2つの差分法で計算
	COCO	全海洋を超高解像度で表現し、全球規模の海洋大循環と局所的な海況変動を同時に詳細に再現
工学	Cavitation	キャビテーションモデルおよび乱流モデルによって両方の現象が絡んだ流れを計算
	LANS	航空・宇宙機全機周りで発生する乱流遷移の予測と遷移に至る流れメカニズムの解明を行う
	FrontSTR	有限要素法による構造解析プログラム(静解析、非線形解析、動解析、熱伝導解析)
	FrontFlow/Blue	乱流現象の高精度予測が可能である Large Eddy Simulation に基づく流体解析コード

ベンチマークの本来の目的

- システムの性能を評価、比較する
 - 総合的な性能の評価
 - 単純に数値一つとして比較するのが簡単
 - 代表的な評価方法で代表
 - 部分的な性能評価を重み付けして総合化
 - 部分的な性能
 - 数値演算性能
 - メモリーバンド幅
 - I/O性能
 - ファイル転送
 - ジョブ制御

一般的指標

- もともと評価者が自分の利用に合わせた評価をするもの
- 自分だけで測定ツールや種々のシステムの評価をこなすのは現実的でない
- そこで、一般的な性能評価ツールとしてのベンチマークテストとテスト結果を一覧にしたサイト(PCの場合は雑誌?)の価値がある

派生的に

- クラスタが正しく動作しているかのテスト
- 計算機科学的な高性能化方法の有効性のチェック

問題は？

- アーキテクチャーの変化や規模の拡大に今のベンチマークテストがあっているか？
 - GPGPUなどの新しいハードを活用できるベンチマークの必要性は？
 - 新しいハードが機能する改良版があればいいのか、本質的にアルゴリズムから変えなければならないか
 - これまで評価されていないが重要な性能は？
 - Top500でのLINPACK測定の意味合
 - あの規模の密行列を解くのか？その意味は？

新しいベンチマークテストが必要か

- 誰がなににつかう？
- 何をどう測る？
- 単体性能／スイート？
- アプリは？
- どうやってつくる？

各パネラーの問いかけへの回答要旨

石川先生

- 誰がなにに
 - 調達者
 - システム研究・開発者
 - 何をどう測る
 - File I/O、空間分割化による性能、バッチジョブシステム性能、再現性、耐故障性
 - 単体計算性能に力をおきすぎ
 - 大規模計算 ペタ&エクサを必要とするアプリ
 - 大規模データ解析
 - 全体が分割されて実行している
 - ファイルシステムが一つのボトルネック
 - ファイルステージングしても巨大化すると問題がおこる
 - ペタスケール超時代のベンチマーク
 - ハードウェアの耐故障性からソフトウェアによる耐故障性
- ベンチマークテストに関して重要なこと
- 耐故障性
 - 実行時間再現性

成瀬さん

- HPCセンターにおけるベンチマークについて
- そろそろLINPACKはやめましょう
- 多数のユーザー
- 多様なプログラム
 - 分野: 生命、ナノ、物理
 - ボトルネック: 演算、メモリー、通信、IO
- 様々な並列度
- ジョブ実行の流れ: これらを全て評価
- ジョブアロケーションによって性能が異なる
 - Fat treeでも倍違う
- ジョブスイートは新規は不要

黒川

- システムの調達
 - 計算性能だけでなくシステム全体の評価が必要
 - システムの足回りであるネットワーク・ストレージの性能評価が重要
- ベンチマークコンテストの企画
 - himenoBMTのみ工夫部門
 - マンネリ感
 - ベンチマークコンテストではアルゴリズムは変更しない
 - コードの可読性と短さがとても大事
- Top500でのLINPACK測定の意味合い
 - システムの粗性能は暴ける
 - 継続は重要
- 新しいアーキテクチャへの対応:ユーザーは保守的
- アプリ分野は並列度と通信性能で考えると4つに大別できる(理研のユーザー)

西村さん

- ベンチマークは今計算機の変化にあわなくなりつつある。LINPACKで30時間
- GPGPUなどの新しいハードを活用できるベンチマークの必要性は、あるが、コード資産をそのまま活用できるシステムが理想
- 改良版はOK
- これまで評価されていない重要な性能は？
 - OSのジッター、通信プロセッサとCPU演算のオーバーラップ
 - メモリー性能 逆順方向の連続／ストライドアクセス
 - スレッド同期オーバーヘッド
- LINPACK:過去の資産の蓄積
- 標準的ベンチマークとしてシステム調達で広範に使われるものがあるといい
- Strong scaling VS weak scaling
- Suite

青木先生

- 新しいハードを活用できるベンチマークの必要性は高い:新しいトレンドのセット
- 新しいハードが機能する改良版か、アルゴリズムもかえるか:変えてハードを生かすことも必要
- Roofline Modelから限界性能が予測(アプリの演算とメモリー要求の性質を考慮)
- メモリーアクセスマップ(パターン)
- ベンチマークテストとして気にすること
 - FLOP/Byte
 - Memory access pattern
- ベンチマーク候補
 - 低精度のFDM, FVM
 - Linpack
 - Sparse Matrix Solver
 - FFT

稲富さん

- 量子化学プログラム開発者として
- GAMESS-ERI: 2電子積分のベンチマーク
- LINPACK
 - 実アプリではありえないケース
 - 通信性能を測っていない
 - 計算機性能の順番を知る
 - 対故障性？
- アクセラレータへの対応
 - 今後必須
 - デバイス非依存のプログラミングモデルが必要
 - アルゴリズムの変更は必要
 - 重要な性能: 特殊なハードを利用したミドルウェアの性能 (MPI, etc)
 - 並列化効率を測定するBMT (どれだけ短時間で計算できるか)

ディスカッションメモ

パネラー共通のコメント

- 計算機システム全体の性能を評価する
 - 現状は演算性能だけが注目
 - LINPACKがその代表
- アプリや粗性能の測定は既存ので
- ジョブミックス、再現性
- I/O

見解が分かれたこと

- 新しいハードへの対応
 - 過去との連続性や比較性
 - ベンチマークが新しい潮流を加速

その他

- コードの見やすさ

パネリスト間会場からの質問

- ジョブスケジューリングの評価は？
- LINPACKで演算性能は評価できているか
- 総合評価はどうするか
- 性能予測をどこまで信じるか
- 入れてから一番がっかりすること

続き

- LINPACKに変わるものの提案
 - 疎行列の反復解法
 - 疎行列の生成部も込みでつくる
 - どのくらいのユーザーがこのテストで評価できるか
- IO性能の評価
 - アメリカではIOR
 - 自分のセンターでIOのアクセスパターンを測定
 - ユーザーのコードはナイーブすぎ、書き直してもらわないといけない
 - 新しいベンチマークが必要(成瀬)