

2P08 電力制約下における分子積分プログラムの性能最適化

○ 稲富雄一、深沢圭一郎、井上弘士

九州大学, JST/CREST

【序】 近年の大型計算機システムは、プロセッサ、メモリ、ネットワーク、あるいは、GPGPU を代表とする演算加速器などの様々な部品で構成されており、システム導入時には、これらの構成要素の最大消費電力を積算したもの（ピーク電力）が最大供給電力を超えないように設計される。しかしながら、アプリケーションには、メモリアクセスが多いが演算量は少ない、あるいは、演算量が多いが通信量は少ない、というような様々な特徴があり実行時の利用する計算機資源に偏りがあること、ならびに、プロセッサやメモリなどの各構成要素には利用率によって消費電力を削減するための機能が導入されていることなどから、実実行時の消費電力はピーク電力より非常に低いことが多い。そこで我々は、ピーク電力が供給電力を大きく超えるようなシステムの導入を積極的に許容して、運用時に消費電力が最大供給電力を超えないように制御する、という電力制約適応型システムをこれからの大型計算機システムとして提案している。そのようなシステムでは、限られた電力資源をプログラムの特性に応じて各計算機資源（CPU, DRAM, ネットワークなど）に配分することによって実行性能を最大化（電力最適化）することで、電力制約による性能低下を回避する必要がある。我々は、これまでに、分子積分プログラムを例にして、CPU と DRAM への電力配分を調整することによって実行性能を向上させることが可能であることを示した[1,2]。しかし、従来手法では、最適な電力配分を決めるために、電力配分条件をメッシュ状に変えて多数回の実行を行う必要があり、膨大な手間を要した。そこで、より簡便な電力配分決定手法を決めるための試みを行ったので、今回はその結果を報告する。

【実験と結果】 今回は並列 FMO プログラム OpenFMO で利用している分子積分プログラムを、Xeon プロセッサ(E5-2620, 6-cores, 2GHz)上で実行して、その電力制約下での電力、および、実行時間などのデータを取得した。コンパイルにはインテル C++コンパイラ (version 13.1.3) を使用した。CPU や DRAM の消費電力データ取得、および、電力制約にはインテルプロセッサで提供されている running average power limit (RAPL) インターフェイスを用いた。今回は、①電力制約なし時、②CPU の最低動作周波数時、③CPU 電力制約値 20W、の 3 点で分子積分プログラムを実行して性能データを取得し、その結果から CPU と DRAM への最適な電力配分を決める、という方法を試した。CPU や DRAM のカタログ性能だけを用いて電力を決める手法（naïve 手法）の場合と、他のいくつかの電力配分法を用いた場合との性能比を図 1 に示す。その結果、今回試みた手法（図中の”this study”）を用いた場合には、多数回実行して電力配分を決める他の手法と同程度、あるいは、より高い性能を達成していることが分かった。詳細は当日報告する。

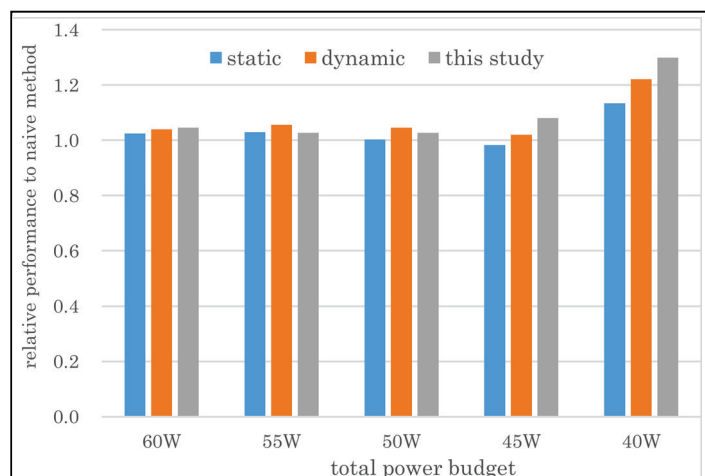


図 1：各電力配分手法の naïve 手法に対する相対性能

参考文献 1. 「電力制約下での性能最適化に向けた SCF 計算の電力特性解析」稲富など, 1P30, コンピュータ化学会 2013 秋季年会 (福岡) 2. 「電力指向型次世代スーパーコンピュータを想定した HPC アプリケーションの性能最適化 ～量子化学計算の場合～」, 稲富など, 口頭発表 30, 第 199 回計算機アーキテクチャ・第 142 回ハイパフォーマンスコンピューティング合同研究発表会 (HOKKE-21)