

課題名 (タイトル) :

自動チューニング機能付き数値ライブラリの研究

利用者氏名 : 片桐孝洋

所属 : 本所 情報基盤センター

1. 本課題の研究の背景、目的、関係するプロジェクトとの関係

科研姫野プロジェクトとの関係

文部科学省の「次世代スーパーコンピュータ (スパコン) 開発プロジェクト」に対し、計算科学のアプリケーション (応用問題) 分野の研究者や技術者から大きな期待が寄せられている。完成後には国内外で未踏の規模の数値シミュレーションが展開される。

ところが一方で、このプロジェクトで開発されるのはスパコン本体と一部分の基本的ソフトウェアのみ (従来から用意されている線形ライブラリの改良までしか含まれていない) であり、両者のバランスが悪いことが指摘されている。スパコンの性能を余すことなく十分に発揮させるために、応用問題の特性に応じ超並列計算時に最適な求解アルゴリズムを用いることと、スパコン利用を円滑にすることを支援する基盤ソフトウェアの開発が重要となる。本プロジェクトではこのような要請を受け、アプリケーション領域、求解アルゴリズム、基盤システム開発のコンピュータ科学分野の研究者が集う学際フレームワークを形成し、実際の大規模数値シミュレーションに対する有用な求解アルゴリズムの検討と、最適な計算性能を得るための基盤ミドルウェア開発を目的とする。

本課題は上記プロジェクトにおいて、応用問題の特性に応じ超並列計算時に最適な求解アルゴリズムを利用する方式開発を目的にし、新しい超並列数値計算法の開発と、数値計算ライブラリのための自動チューニング機能の開発に寄与するものである。

背景

人類はペタフロップスコンピュータを持った。その並列数 (コア数) は 10 万コアにも達する超並列計算機である。このことは、ペタフロップスの演算性能を達成する計算機環境 (ペタフロップス計算機環境) では、10 万プロセッサもの超並列性を 1 つのアプリケーション内で達成しなくてはならないことを意味している。一方、従来開発されてきた並列計算機用の密行列数値

計算ライブラリは、高効率並列実行のために超大規模行列での実行を前提とし、それに特化したアルゴリズムと実装方式が実現されている。ところが計算量が $O(n^3)$ で増加するため、大規模行列実行には並列化されているとはいえ時間的制約がある。また、スーパーコンピュータの運営上の制約で、1 ユーザが全系占有できる時間は数時間に限定されるであろう。

目的

そこで本課題では、小規模行列に対してコア数を増加しても台数効果が見込める超並列固有値ソルバの方式開発を目的にする。その超並列化の方式に自動チューニング機能を付加する場合の問題点について、通信時間削減、単体性能向上、および、メモリ量削減の観点から性能評価を行うものである。

2. 具体的な利用内容、計算方法

計算方法

対称密行列 $A \in R^{n \times n}$, 実数 $\lambda \in R$, 実数ベクトル $x \in R^n$ とすると、以下の標準固有値問題

$$A x = \lambda x \quad \dots (1)$$

の解 λ を固有値、ベクトル x を固有ベクトルとよぶ。いま、式 (1) の固有値 n 個を対角要素に並べた行列 A を $A = \text{diag}(\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_n)$ 、固有値 λ_i に対応する固有ベクトル x_i を並べて構成された行列 X を、 $X = (x_1, x_2, \dots, x_n)$ とすると、式(1)は

$$A X = X A, \quad \dots (2)$$

となる。式(2)の固有値行列 A 、固有ベクトル行列 X を求めるが、その手順は以下である：

(Step1) 三重対角化: 行列 A を相似変換で

三重対角行列 T に変換 ($Q^T A Q = T$)

(Step2) 三重対角行列 T の固有値行列 A を求解

(Step3) T の固有ベクトル行列 Y を求解

(Step4) 逆変換: Y を行列 A の固有ベクトル行列 X に変換 ($X = Q Y$)

(Step1) 及び (Step4) は $O(n^3)$ である。(Step3) は解法

と問題の性質に依存し、 $O(n) \sim O(n^3)$ である。したがって、ソルバ全体の演算量は $O(n^3)$ となる。メモリ量については、入出力行列 A と X が密行列であるため $O(n^2)$ となるのは自明であるが、解法に必要なメモリ量もソルバ全体で $O(n^2)$ となることが知られている。なお、三重対角化に必要な行列 Q は、各反復 k において、 $(n-k+1) \times (n-k+1)$ の行列 A_k から計算される枢軸ベクトル u_k から計算される Q_k を用いて構成される。

$$Q_k = (I - \alpha_k u_k u_k^T), \quad \dots (3)$$

ここで、 α_k は A_k から計算されるスカラー $\in R$ である。

このとき

$$Q = Q_1 Q_2 \cdots Q_{n-2}, \quad \dots (4)$$

となる。

利用内容

本研究では、既に著者により開発したライブラリ ABCLib_DRSSSED ver. 1.04 に、新規開発したアルゴリズムを実装し、理研の計算機で性能評価を行うものである。また、従来の自動チューニング方式の効果を、理研の計算機で実行評価するものである。そのため、以下の 2 種類の利用計画を実施した。

[利用計画 1]

従来法では並列動作のため、プロセス数 np とすると、 $np=p*q$ のとき（この $p*q$ をプロセッサ・グリッドとよぶ）、従来法では $p=q$ の時のアルゴリズムしか提案されていない。そこで、任意の p, q について動作するアルゴリズムの開発に平成 21 年度に成功した。

本課題の三重対角アルゴリズムにおいては、必要なメモリ量が p に応じて削減する。しかし、 p が増えると通信時間が増す。一方、三重対角化(Step1)において、必要なメモリ量が p に応じて削減するが、 $p=q$ のとき最も通信時間が短い。したがってソルバ全体として、利用メモリ量と p, q の値が影響する全体の実行速度について、現在明確な指針が示されていない。自動チューニング機構を導入する場合、チューニング戦略が立てられないという現状があり、本利用による評価により、その解決策を明らかにする。

[利用計画 2]

計算機アーキテクチャの特性（キャッシュのサイズや構造、レジスタ数など）に依存し、数値計算ライブラリ内の性能パラメータの変動が異なる。そこで、計算機アーキテクチャの違いによる効果を数値計算ライブ

ラリ ABCLib_DRSSSED ver. 1.04 の性能パラメータを通して検証し、自動チューニング手法として確立することを目指す。

3. 結果

[利用計画 1 による結果]

平成 21 年度の成果報告に詳細を記載したのでデータは省略する。なお本年度は、論文執筆をして外部発表をおこなったので、それが本年度成果である。

以降に平成 21 年度の成果内容を略記する。

- RICC 計算機環境では三重対角化の時間が逆変換の時間に比べて多く、三重対角化を最適化するチューニング戦略をとるべきである。
- チューニング尺度 SPM を導入した。SPM とは、 $(p=q \text{ の実行時間}) / (\text{対象の実行時間}) / (\text{対象の } p=q \text{ に対するメモリ量の増加})$ で定義される。
- SPM の基準について、0.95 倍の速度低下でメモリ量が 1/2 になる点において、正方に近いグリッド 8x16 での実行は、4x32 での実行に対して効率的ではないことが明らかになった。
- 正方グリッド 16x16 の実行について、0.71 倍の速度低下を許容できるのであれば、1/2 のメモリ量削減が可能となる。
- 正方に近いグリッドを取るかとらないかの判断は、ユーザが実行速度を優先するのか、メモリ量削減を優先するのかに依存するので、一概に判断できない。
- ユーザの自動チューニング指針（ポリシー）を機能として用意する必要がある。

[利用計画 2 による結果]

ABCLib_DRSSSED ver. 1.04 の自動チューニング効果を理研の計算機で検証する。ここでは、コンパイラの最適化のみによる性能（実行時間）を 1 とし、性能パラメータ変動による性能向上（実行時間の向上）を評価する。ここで、「コンパイラの最適化のみの性能」とは、たとえば、アンローリング無し（1 段）に固定した上で、コンパイラによるアンローリング等の最適化（推奨オプション）を施した性能（実行時間）である。したがって、アンローリング段数が 1 段のコードでも、コンパイラによるアンローリングが施されている点に注意する。このことで、実用上の自動チューニングによる最適化を評価するのが目的である。

図 1 は、理研 Fujitsu PRIMERGY RX200S5 (1 ノード 8 コア。グリッド構成は 2×4 で以降同一。) における ABCLib_DRSSSED ver. 1.04 の Step1 の行列更新部分の性能 (外部ループ) のアンローリングの効果である。

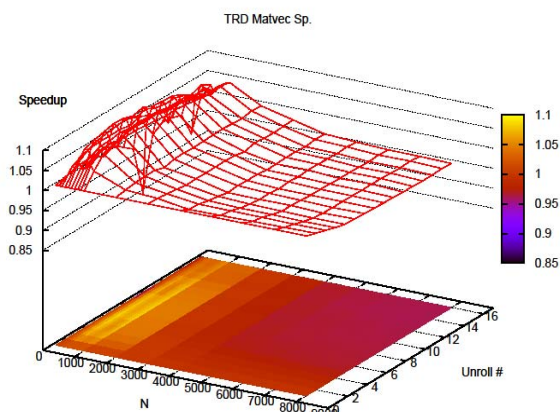


図 1 理研 Fujitsu PRIMERGY RX200S5 (1 ノード 8 コア) における ABCLib_DRSSSED ver. 1.04 の Step1 の行列更新部分の性能。性能パラメタは、外部ループのアンローリング 1 段～16 段。行列サイズは N=100～1000 までは 100 間隔、N=1000～8000 までは 1000 間隔。

図 1 から、2000 次元以下でアンローリングの効果があある。2000 次元以上では、アンローリングの効果がなく、むしろ 1 段のほうが良い。この理由は、キャッシュ上にデータがある場合、ない場合で、コード変換最適化の効果が異なるからと予想される。したがって、2000 次元以下の小規模サイズの自動チューニングは、繊細に行う必要があることがわかる。

図 2 は、QR 分解の性能である。QR 分解は、修正 Gram-Schmidt 法によりなされる方法を採用している。またブロック化を施している。特に、ブロック幅の調整効果を評価するものである。ここで、図 2 のブロック幅は、キャッシュヒットの効率のみならず、通信回数も制御される (ブロック幅の逆数の割合の通信回数削減になる)。したがって、ノード内演算効率と、通信性能の効果が調和され、その結果としてチューニング効果が表れる点に注意する。図 2 から、3000 次元以下の小規模サイズでは、ブロック化の効果があまりない。しかし 3000 次元以上のサイズは速度向上に対し劇的な効果がある。最大で 4 倍程度の速度向上の効果を奏する。特にブロックサイズが 8 と 16 でその効果が認められる。したがって、この特定のサイズを中心に自動チューニングをすると効果的であると予想される。

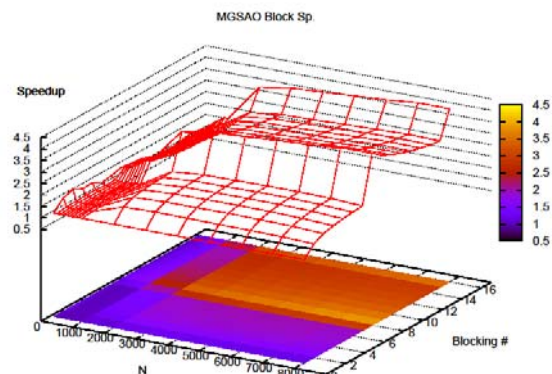


図 2 理研 Fujitsu PRIMERGY RX200S5 (1 ノード 8 コア) における ABCLib_DRSSSED ver.1.04 の QR 分解の性能。性能パラメタはブロック幅で 1～16。行列サイズは N=100～1000 までは 100 間隔、N=1000～8000 までは 1000 間隔。

図 3 は、QR 分解の性能である。違いは、3 重ループで構成される行列更新部分において、最外ループのアンローリングを 1 段～4 段、かつ、第 2 ループのアンローリングを 1 段～16 段を行ったものである。最外ループと第 2 ループは依存性があり、同時にアンローリング段数を定める必要がある。なお、行列サイズは N=1000 の場合である。

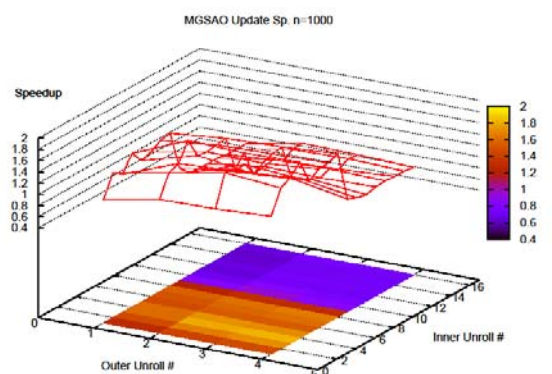


図 3 理研 Fujitsu PRIMERGY RX200S5 (1 ノード 8 コア) における ABCLib_DRSSSED ver.1.04 の QR 分解の性能。性能パラメタは 2 種で、最外ループのアンローリング 1 段～4 段、および第 2 ループのアンローリング 1 段～16 段。行列サイズは N=1000。

図 3 から効果は最大で約 2 倍である。したがって、自動チューニングの効果は大きい。効果のある第 2 ループのアンローリング段数は限定している。それは、1 段～8 段までである。また、2 段、4 段、8 段など、特定の 2 べき数の段数で効果が大きい。探索範囲を限定できる可能性がある。

一般にアンローリング段数は、キャッシュサイズに

影響する行列サイズと、ハードウェアパラメタであるレジスタ数に依存する。レジスタ数などのハードウェア情報から、自動チューニングの探索範囲を限定する手法を開発できると効果的である。

る。

4. まとめ

本課題では、計算機環境に依存しメモリ量と演算速度が変化するアプリケーションとして、対称実数密行列用の固有値ソルバを例に挙げ、性能評価を理研 Fujitsu PRIMERGY RX200S5 を用いて行った。性能評価の結果、速度とメモリ量に影響するチューニングを行う場合、自動チューニング機能にユーザによるポリシーの設定機能を導入する必要があることを示した。また、性能パラメタの自動チューニングの効果と、性能向上の効果の表れ方について、定性的な評価を行った。

5. 今後の計画・展望

以下の点を考慮し、研究を進展させる。

- SPM の尺度を基にした自動チューニング指針(数値計算ポリシー)を確立し、自動チューニング機能付き固有値計算ソルバに機能を組みこむ
- 定性的評価の知見から、経験に基づく自動チューニング方式を作る。この効果を定量的に評価する。

6. RICC の継続利用を希望の場合は、これまで利用した状況(どの程度研究が進んだか、研究においてどこまで計算出来て、何が出来ていないか)や、継続して利用する際に行う具体的な内容

来年度も継続申請を希望する。以下を中心に性能評価と自動チューニング機能の研究開発を行う。

- ユーザがメモリ量と実行時間のポリシーを与えた時における、自動チューニング機能の戦略と、その品質評価。
 - SPM の尺度を基にした性能評価を実施済み。
 - 自動チューニング機能の定性的評価を実施済み。
 - ポリシ機能の実装と評価がされていない。
- 対称密行列ソルバ以外の数値計算ライブラリの評価。たとえば、疎行列反復解法ソルバや陽解法(ステンシルコード)の性能評価と、その自動チューニング機能の品質評価
 - 固有値ソルバ以外のライブラリは未評価であ

平成 22 年度 RICC 利用研究成果リスト

【論文、学会報告・雑誌などの論文発表】

Takahiro Katagiri and Shoji Itoh: A Massively Parallel Dense Symmetric Eigensolver with Communication Splitting Multicasting Algorithm, Selected Papers of 9th International Meeting of High performance Computing for Computational Science (VECPAR' 10), Springer Lecture Notes in Computer Science (LNCS), (2011) (To be published)

【国際会議などの予稿集、proceeding】

Takahiro Katagiri and Shoji Itoh: A Massively Parallel Dense Symmetric Eigensolver with Communication Splitting Multicasting Algorithm, Proceeding of 9th International Meeting of High performance Computing for Computational Science (VECPAR' 10), Berkeley, California, USA, June 22-25 (2010)

【国際会議、学会などでの口頭発表】

特になし

【その他】

特になし