

# エクサスケール時代の数値計算手法に対する性能予測 技術

深谷 猛（北海道大学 情報基盤センター）

## 概要

性能予測技術は、HPC 分野における重要な基盤技術の一つであり、スパコン上での数値計算プログラムの性能（実行時間）を事前に見積もることができれば、スパコン利用に馴染みの無い利用者に対して、有益な情報を提示することが可能となる。本研究では、これからのエクサスケール時代に想定される数値計算の状況を念頭において、その性能を予測する技術の研究開発を行う。具体的には、1) 大規模計算時の性能を外挿するための性能予測技術、2) 混合精度計算等における異なる精度・データ型を想定した性能予測技術、3) データ駆動型アプリケーションに対する性能予測技術、の三項目について研究を実施する。2020 年度の実施内容としては、当初の目標より遅れている部分が多いが、研究の土台となるベンチマークプログラムの整備を進めることができ、特に、2 番目の項目については、興味深い性能データと解析結果を得ることができた。

## 1 共同研究に関する情報

### 1.1 共同研究を実施した拠点名

北海道大学 東京大学

### 1.2 共同研究分野

■超大規模数値計算系応用分野

### 1.3 参加研究者の役割分担

- 深谷猛（北大・代表）：全体統括・HPC
- 星健夫（鳥取大・副代表）：物質科学
- 山本有作（電通大）：応用数学
- 田中和幸（鳥取大）：物質科学
- 塩谷明美（電通大）：応用数学
- 福島孝治（東大）：データ駆動科学
- 中西義典（東大）：データ駆動科学
- 望月出海（高エネ研）：物質科学
- 高山あかり（早大）：物質科学

## 2 研究の目的と意義

エクサスケール時代に向けて、様々なアプリケーション分野で、スパコンの利用促進が進んでいる。特に、データ駆動科学の発展等により、これまでスパコンの利用経験が乏しかった、実応用分野の研究者による利用の拡大が今後期待されている。一方で、スパコン利用経験の乏しい利用者にとって、スパコン利用の際の敷居が必ずしも低いとは限らず、その一因として、スパコン上でプログラムを実行した際の性能（計算時間）の見積もりが難しい、という点がある。例えば、単一ノード上でプログラムを実行する場合でも、スレッド並列化の効果は、計算の種類・問題・システムなどに依存して異なる。また、複数（多数）ノードを用いた（超）並列計算の場合、更に状況が複雑化し、テスト

を実施する機会も限られるため、事前に性能を予測することは容易ではない。そこで、本研究では、スパコンの利用を見据えている物質科学分野やデータ駆動科学分野の研究者のニーズを踏まえた上で、現在・今後のスパコン上での数値計算プログラムの性能（実行時間）予測技術を開発することを大局的な目的として掲げる。

主な研究項目としては、これからの数値計算の状況（方向性）を念頭におき、以下の三項目を設ける。

- 項目1) 超並列計算：並列数と問題サイズの両方向に対して、実行が比較的容易である範囲の性能データから、性能を外挿する技術を研究する。また、一般的に外挿が困難であることを踏まえて、予測結果の信頼性を取り扱う技術を一緒に研究する。
- 項目2) 低精度・混合精度計算：演算精度（倍精度/単精度）・データ型（実数/複素数）が異なる数値計算に関して、相互に性能データ等の情報を活用して、性能予測を行う技術を研究する。
- 項目3) データ駆動型計算：データ駆動型計算（例：サンプリングに基づく計算）に関する性能予測技術を研究する。

なお、各項目について、性能予測技術の研究開発で用いる性能データの収集・解析と、そのために必要となるベンチマークプログラム（性能データ収集プログラム）の開発・整備も実施内容の一部とする。

### 3 当拠点公募型研究として実施した意義

性能予測技術の研究開発において、特徴の異なる複数の計算機システムを利用した実験は有益である。そのため、多種多様な計算機システムが容易に利用できる当制度は最適である。ま

た、実用的な性能予測技術の開発には、高性能計算と応用数学の両面の知見が必須であり、さらにアプリ分野の利用者の視点も重要となる。本研究課題では、これらの異なる分野の研究者が協力して、学際的な課題の解決に取り組む計画であり、その点においても JHPCN の趣旨に合致している。加えて、本課題の過程で収集された基本的な数値計算プログラムの性能データは、多くの利用者にとって有益な情報となり得る。そのため、実際に全国共同利用サービスが行われている計算機システムを利用した研究の実施は意義があると言える。

### 4 前年度までに得られた研究成果の概要

新規課題のため、該当せず。

### 5 今年度の研究成果の詳細

各項目について、今年度の主な実施内容と得られた成果の概要を以下に記載する。

#### 項目1) 超並列計算

性能予測技術の研究で用いる性能データを収集するためのベンチマークプログラムの整備を進めた。具体的には、代表的な分散環境向け数値計算ライブラリである ScaLAPACK の主要な行列計算ルーチンの性能（実行時間）を、問題サイズや並列数をパラメータとして測定するプログラムを開発し、基本的な動作確認まで済ませた。一方で、プログラムの整備が遅れたため、当初計画していた多数のノードを用いた性能データの収集が、スパコンの年度末の混雑等のために実施できず、次年度に持ち越しとなってしまった。

また、外挿結果の信頼性を取り扱うための手法として、我々の先行研究 (K. Tanaka et al., JJIAM, 36(2), 719–742, 2019) の手法の拡張に関する理論的な検討を進めた。具体的には、

並列数（ノード数）と問題サイズの両方を変数としたモデル式の検討と、ベイズ推定の適用方法に関する基礎的検討を行った。一方で、ScaLAPACKでは、問題サイズだけでなく、内部のデータの持ち方に関するパラメータ（ブロックサイズ）があり、同じ問題サイズでもブロックサイズによって性能が異なることが確認された。そのため、当初予定していたノード数と問題サイズを変数とした性能モデルでは、取り扱いが難しい場合があることが予想され、この点に対する対応方法の検討が、次年度以降の課題として生じた。

#### 項目2) 低精度・混合精度計算

LAPACKの主要ルーチンについて、異なる精度（倍精度・単精度）とデータ型（実数・複素数）で、スレッド数・問題サイズを指定して計算時間を収集するベンチマークプログラムを整備し、北大のGrand Chariot等の上で性能データを収集した。更に、得られた性能データについて、精度やデータ型が異なる場合の計算時間の関係性を分析した。

図1は、収集した性能データを解析した結果の一例である。この結果より、当初の想定通り、ある程度の規則性が確認でき、ある精度・データ型の実行時間データから、異なる精度・データ型の実行時間を予測できる可能性が十分あることが分かる。一方で、図から分かるように、問題サイズやスレッド数の影響が無視できないようなので、その影響を考慮する必要があることが課題として明らかとなった。

次の段階としては、各計算機システム上での結果を比較して、類似性などを検証することが必要となる。また、演算精度やデータ型が異なる場合について、データサイズ（バイト）や演算回数（複素数の加算は実数の2演算、乗算は実数の6演算）の違いと、計算の特徴（メモリ律速/演算律速）から、理論的に予想される結

果と比較することも必要である。

#### 項目3) データ駆動型計算

本研究で対象とするデータ駆動型アプリの基盤技術である、ポピュレーション型モンテカルロ法について、手法の要点や課題の整理を進めた。具体的には、手法の内部で一定間隔が必要となる、リサンプリングのためのコスト（一般的な実装の場合、gatherに相当する全ノードでの通信）が、性能を予測する際のポイントとなることが分かった。また、収束までの反復的な処理であるため、反復回数（収束性）に関するモデル化・予測手法が主要な課題の一つとなる。

性能データを収集するためのベンチマークプログラムの整備に関しては、Pythonのテストコードをスパコン上で分散並列実行が可能なプログラムに移植・拡張する作業を実施し、簡単な動作確認を済ませた。また、簡単なテスト問題について、ポピュレーション型モンテカルロ法を適用し、数値的な振る舞い（収束性など）を確認した。

## 6 今年度の進捗状況と今後の展望

今年度から新規に開始した課題であったため、新型コロナウイルス感染症の影響を大きく受けてしまった。スパコンアカウントの発行作業の遅れや、オフラインでの細かい打合せ・議論が制限された影響が大きかった。その結果として、プログラム開発が当初の予定よりも遅れて、更に、年度の後半には、計算機システムの混雑により一定数以上のジョブが実行しにくくなり、全体として悪循環となってしまった。

項目1については、いくつかのルーチンについて、並列数と問題サイズを変えた性能データを収集し、既存の予測手法を拡張した手法を試してみる段階まで進める予定であったが、ベンチマークプログラムの整備までに留まってお

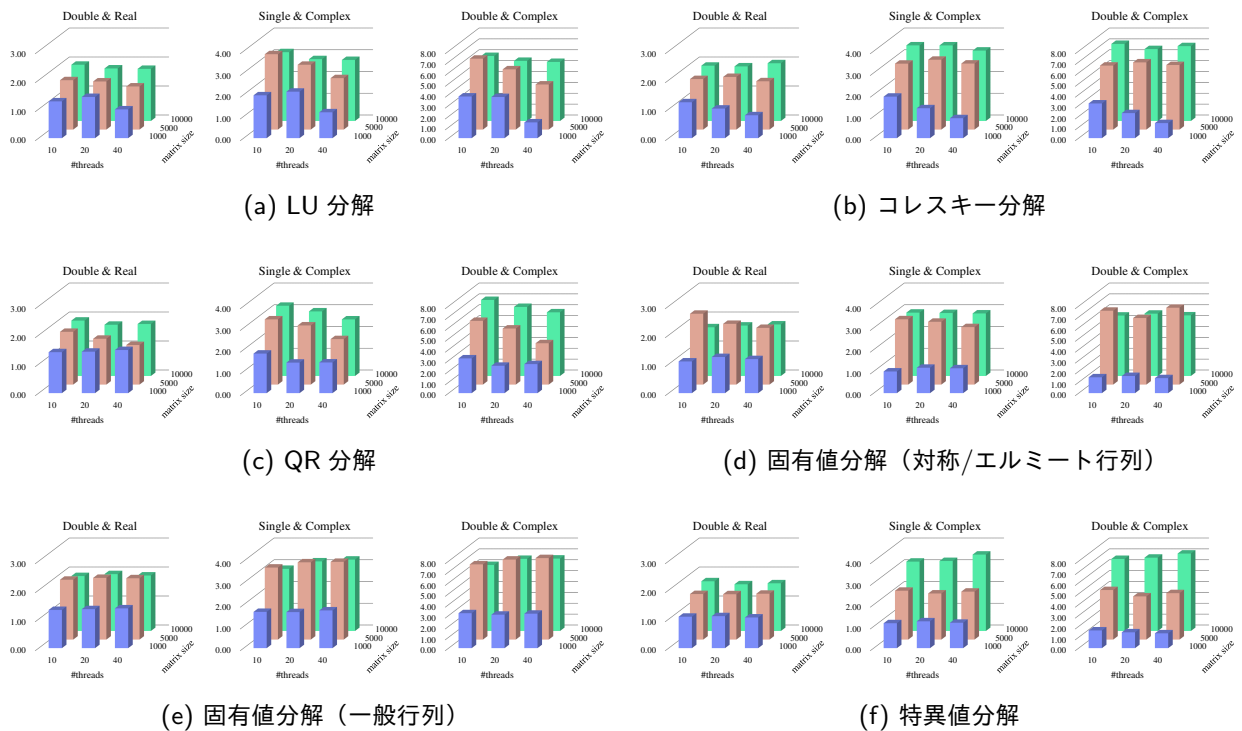


図1 LAPACKの主要ルーチンにおける、異なる精度・データ型の間の実行時間の関係：単精度実数の場合に対する各精度・型の計算時間の相対値（計算機システム：北大 Grand Chariot）

り、進捗は非常に遅れていると言わざるを得ない。項目2については、想定していた性能データがある程度収集することができ、そこから有益な解析結果を得ることができた。実際に予測技術を立案するまでは至らなかったが、新型コロナウイルス感染症の影響があったことを考慮すれば、概ね妥当な進捗であったと思われる。項目3については、細かい打合せを実施できなかった影響が大きく、出遅れる形となってしまった。ただし、年度の後半は、オンラインで打合せを行ったり、関連する別プロジェクトにおいて、より実アプリケーションに近いソフトウェアの開発が進むなど、一定の進展は得られた。全体としては、プログラム開発が遅れたために、配分された計算資源の大部分を有効利用することができなかった点が大きな反省点と

なってしまった。

今後の展望としては、2021年度も継続課題として実施することが認められたので、まずは、2020年度に整備した各種ベンチマークプログラムの整備の残りの部分を早急に済ませて、性能データを収集することに注力したい。その後、性能予測技術に関する理論面の検討を進めるとともに、得られた性能データを用いた検証等を実施する。また、2020年度は外部発表に至らなかったため、2021年度中には成果発表を行えるように努めたい。

## 7 研究業績一覧（発表予定も含む）

学術論文（査読あり）

なし

国際会議プロシーディングス (査読あり)

なし

国際会議発表 (査読なし)

なし

国内会議発表 (査読なし)

なし

公開したライブラリ等

なし

その他 (特許, プレス発表, 著書等)

なし