

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）

概要

性能予測技術は、HPC 分野における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実行時間を事前に見積もることができれば、スパコンの有効利用につながる。本研究課題では、エクサスケール時代の状況を念頭において、性能予測技術に関する研究開発を行う。2021 年度は、まず、超並列計算時の性能外挿技術として、ベイズ推定に基づく確率的な性能予測手法の研究を行った。先行研究で提案した手法の改良を進めるとともに、手法の検証を行うための性能データの収集を行った。次に、低精度・混合精度計算を念頭において、異なるデータ型間での類似性を調査し、これを活用した性能予測手法の研究を進めた。LAPACK の主要ルーチンについて、詳細な性能データの収集・解析を行い、手法構築のための知見を得ることができた。加えて、データ駆動型アプリケーションの性能予測を目標として、関連プロジェクトで開発が進められている 2DMAT を用いた検討を行った。

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 名古屋大学

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（同志社大）：データ駆動科学
- 望月出海（高エネ研）：物質科学

- 高山あかり（早稲田大）：物質科学
- 工藤周平（電通大）：応用数学
- 坂本優也（電通大）：応用数学
- 久賀谷匡貴（電通大）：応用数学
- 一ノ瀬颯人（鳥取大）：物質科学
- 農本峻介（鳥取大）：物質科学
- 日高正晴（鳥取大）：物質科学

2 研究の目的と意義

本研究の目的は、エクサスケール時代に実行される数値計算手法の特徴を踏まえた上で、それらの性能（実行時間）を事前予測する技術を開発することである。それにより、スパコン利用経験の乏しい利用者においても、効率的な計算実行計画を立案や適切な計算リソースの選択を可能とするとともに、将来的な自動チューニ

ング技術への展開を目指す。

計画全体としては、以下の3つの項目に主眼を置く。

- 項目1：超並列計算
実行が比較的容易である条件（並列数・問題サイズ）での性能データから、興味のある条件（超並列・サイズ大）における性能を外挿する技術を開発する。ただし、外挿が一般的に困難であることを踏まえて、予測結果の不確実性を含めて取り扱うことが可能な技術の開発を目指す。
- 項目2：低精度・混合精度
近年、低精度演算を用いた混合精度型アルゴリズムの注目が高まっていることを踏まえて、異なる精度や混合精度の場合に対する性能予測技術を開発する。その際、個別に独立して予測するのではなく、異なる精度間の性能の関係性に着目し、全体として効率的に予測可能な技術の開発を目指す。
- 項目3：データ駆動型計算
データ駆動型アプリケーションへのスパコンの展開が進んでいることを念頭におき、サンプリング計算に関する性能予測技術を開発する。これまで HPC 分野での研究事例が少ないため、物性物理分野の実験データ解析アプリを主な対象として、基礎的な部分から研究開発を進める。

また、本年度の主な実施目標は以下の通りである。

- 項目1：ScaLAPACK 等の密行列アルゴリズムに関して、各条件での性能データ測定プログラムの整備及びデータ収集を行う。また、先行研究で提案した確率的性能外挿手法を適用・評価するとともに、手法の拡張・改良を検討する。加えて、疎行列計算

に関するベンチマークプログラムの初期検討を行う。

- 項目2：LAPACK のルーチンについて、ベンチマークプログラムの整備・性能データの収集を行い、精度・データ型間の関係性を分析する。また、混合精度型の疎行列反復法に関する初期検討を行う。加えて、半精度環境でのベンチマークプログラム開発と初期テストを実施する。
- 項目3：MC 法に基づくサンプリング計算の性能予測に関する基礎的な技術要件を整理する。また、実験データ解析ソフトウェアに関する性能データの収集とそのためのベンチマーク等の整備を進める。

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て実験を行うことは有益である。そのため、多種多様な計算機システムを利用することができる本制度は利便性が高い。また、実用的な性能予測技術の研究開発には、高性能計算と応用数学の両面の知見に加えて、アプリケーション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ことを目指しており、JHPCN の趣旨に合致している。また、本研究課題を通して収集される、基本的な数値計算プログラムの性能データは、多くの計算機システムの利用者に対し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実施さ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考えられる。

4 前年度までに得られた研究成果の概要

超並列計算に関しては、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行った。具体的には、ScaLAPACKの主要ルーチンに対して、行列サイズや並列数などのパラメータを指定して、実行時間を計測するプログラムの開発を進めた。また、先行研究 (K. Tanaka et al., JJIAM 36(2), 719–742, 2019) で提案した手法の拡張・改良に関する検討を進めた。

低精度・混合精度計算に関しては、LAPACKの主要ルーチンに対して、それぞれのデータ型で行列サイズ等の条件を指定して、実行時間を計測するプログラムの整備を進めた。また、実際に、一部の条件で実行時間のデータを測定し、データ型間での計算時間の類似性の調査を行った。その結果、一定の傾向を確認することができたが、一方で、実行時間のばらつきの影響など、より多くのデータを収集し、実態を把握することが必要であることが課題として明らかになった。

データ駆動型計算に関しては、ポピュレーション型モンテカルロ法に関する基礎的な検討を行うとともに、ベンチマークプログラムである Python のテストコードのスパコン上での動作検証を進めた。また、簡単なテスト問題について、収束性などの数値的な挙動の調査を行った。

5 今年度の研究成果の詳細

各項目に対する主な研究成果は以下の通りである。

5.1 項目1：超並列計算

まず、前年度の内容から継続して、前節で挙げた先行研究で提案したベイズ推定を用いた

確率的な性能外挿手法の改良に関する研究開発を進めた。具体的には、手法の内部で用いる性能モデルの基底関数の候補を追加し、モデルを決定する際の教師データを変えて、予測結果の違いを検証した。図1は一例で、電子状態計算に現れる固有値問題の計算を対象とした実験結果の一部である。図1の各グラフが示すように、用いる教師データ（実測データ）や基底関数に応じて、外挿部分の不確かさが異なっており、本研究課題で意図した性能予測がある程度実現できている。この結果をまとめた論文は JSIAM Letter 誌に掲載された。

次に、上記の手法の有効性を検証するために、当初は、昨年度の実施内容を継続して、ScaLAPACKの主要ルーチンに関する性能データを収集し、それをを用いた実験を計画していた。しかし、予備的な計測を行った結果、ScaLAPACKのルーチンの実行時間に影響を与えるパラメータの種類が予想以上に多く、また、MPIの通信時間等を把握することも容易ではなかったため、計画を変更して、以前から研究開発を行っている、縦長行列のQR分解のルーチンを対象とすることにした。具体的には、異なる特徴を持つ4種類のQR分解プログラムについて、内部の通信時間等を含めて、計算時間を測定するプログラムを整備し、4種類のスパコン上で実行時間（強スケーリング）を計測した。図2はその一例であり、各データについて、図3のような実行時間の内訳も得ている。対象とした各プログラムは異なる特徴を持っているため、実行時間の挙動も図2が示すように異なっている。そのため、異なるスパコン上でのデータが得られている点も含めて、上述の性能予測手法の有効性の検証に適したものとなり、今後、具体的に手法を適用して、結果の検証を進める予定である。なお、今回得られた性能データ自体も有益であると判断したた

め、簡単な解析を含めて、2022年5月のHPC研究会で報告を行った。

5.2 項目2：低精度・混合精度

まず、混合精度の疎行列反復法の研究の一部として、疎行列ベクトル積 (SpMV) の実行時間に関する検証を行った。SuiteSparse Matrix Collection から取得した疎行列に関して、倍精度と単精度の SpMV カーネルを実装し、マルチコア CPU 環境における計算時間の違いを調査した。得られた結果より、メモリアクセスコストの比率から、単精度と倍精度の SpMV カーネルの実行時間の比率をある程度予測できることが確認できた。一方で、キャッシュメモリの影響を考慮する必要がある場合が存在することも確認できた。

次に、前年度の実施内容を継続し、LAPACK の主要ルーチンに関して、各データ型 (単精度実数、倍精度実数、単精度複素数、倍精度複素数) での実行時間の挙動やデータ型間での類似性等を検証した。図4や図5はその一例である。これらの図から、データ型間で一定の傾向・類似性が存在することが確認できる。また、それがルーチンの種類によって異なることも読み取れる。一方、単精度実数 (図中の青色の結果) を中心に、実行時間のばらつきが存在し、これの取り扱いなどが課題となることが分かった。

5.3 項目3：データ駆動型計算

本課題と関連するプロジェクトにおいて、実験データ解析用ソフトウェア (2DMAT) がリリース・更新されている。それに応じて、本課題では、2DMAT の実行時間の予測を念頭において検討を進めた。具体的には、スパコン上での 2DMAT の動作検証やベンチマーク用の問題等の検討・整備を行った。

6 今年度の進捗状況と今後の展望

全体として、当初の計画通りに進まなかった部分が多く、配分された計算機資源の利用も遅くなってしまった点が反省点である。項目1に関しては、先行研究の手法を改良し、論文として発表できた点と、配分された計算機資源を用いて、有益な性能データを収集することができた点から、一定の進捗が得られたと考えている。項目2に関しては、大量の性能データを収集し、実行時間の挙動を詳しく把握できた点はよかったが、具体的な予測手法の構築までは至っていない点は課題である。項目3に関しては、対象とする手法・プログラム自体が開発途中で定まっていない部分があり、本課題として具体的な結果が得られる段階までに至らなかった。

今後の展望としては、当初は3年の計画を考えていたが、この2年間の実施状況を踏まえて、JHPCN 課題としての実施は区切りとすることとした。これは、この2年間で十分な性能データを収集することができたため、計算機資源を用いて更なるデータを収集するよりも、これまでに得られたデータを用いて性能予測手法の研究開発を行うことを優先すべきと判断したからである。

各項目に関する今後の展望は以下の通りである。まず、項目1については、収集した QR 分解の性能データは興味深いものであり、早々にベイズ推定に基づく性能予測手法の検証を行いたいと考えている。項目2については、性能予測手法を利用する状況も念頭において、具体的な方法の検討を進める予定である。項目3については、2021年度途中から、関連課題 (「富岳」一般機動的課題: 超並列解析ソフト 2DMAT による全反射高速陽電子回折実験解析) が開始され、2DMAT の高度化が進められているので、

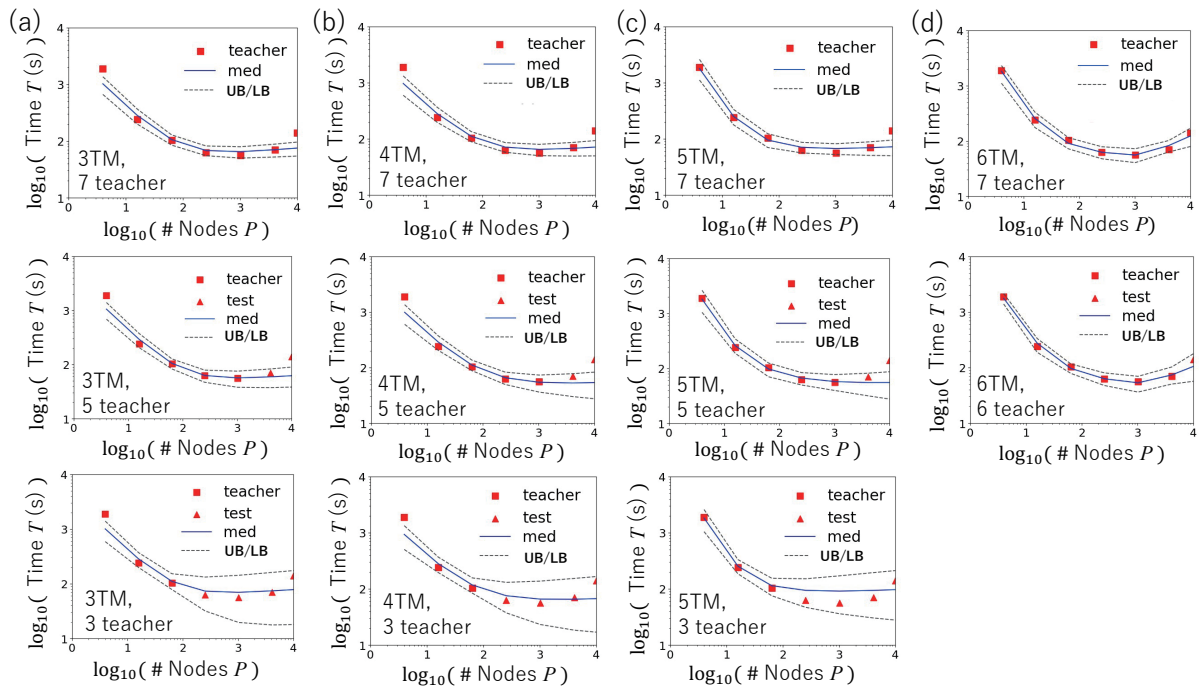


図1 電子状態計算で現れる固有値問題の計算を対象とした確率的な性能外挿手法に関する実験結果の例 (JSIAM Letters Vol. 14 に掲載された論文から引用).

今後は、そのプロジェクトの一部として、性能予測手法の研究開発を行う予定である。

まずは、この2年間で配分された計算機資源により得られたデータを活用した研究開発を行うことを最優先としたい。その上で、計算機システムの更新も含めて、新しい性能データが必要となった際に、改めて、JHPCNの制度の利用を検討したいと思う。

7 研究業績一覧 (発表予定も含む)

学術論文 (査読あり)

- H. Kohashi, H. Iwamoto, T. Fukaya, Y. Yamamoto, T. Hoshi, 'Performance prediction of massively parallel computation by Bayesian inference', JSIAM Letters, 14, pp. 13–16, 2 February, 2022.

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)

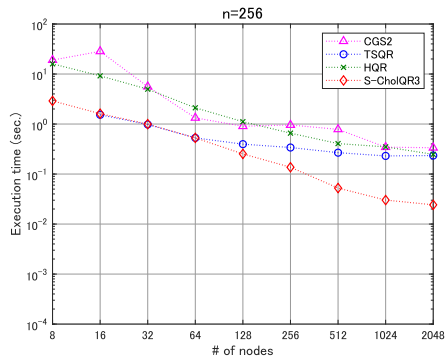
- 星健夫, 小橋恒士, 山本有作, 深谷猛, 'ベイズ推定による超並列計算の性能予測', 2021年度 JSIAM 年会, 2021/9/9, オンライン.
- 深谷猛, '分散並列環境上での縦長行列のQR分解に対する各種アルゴリズムの性能評価', 情報処理学会 研究報告ハイパフォーマンスコンピューティング (HPC), 2022-HPC-184, 2, pp. 1–9, 2022/5/4.

公開したライブラリ等

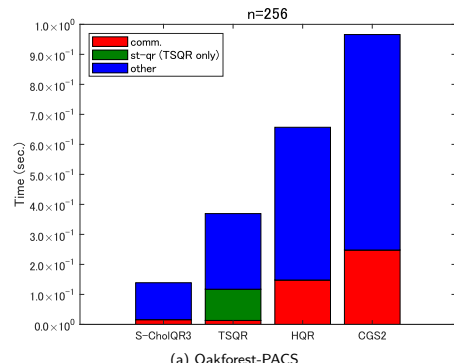
なし

その他 (特許, プレス発表, 著書等)

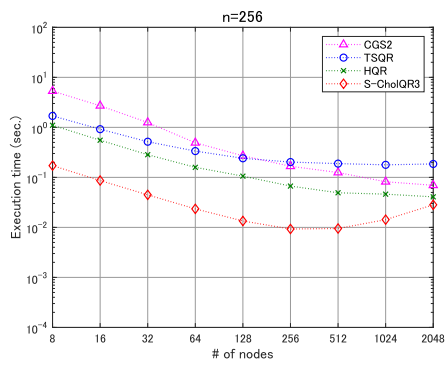
なし



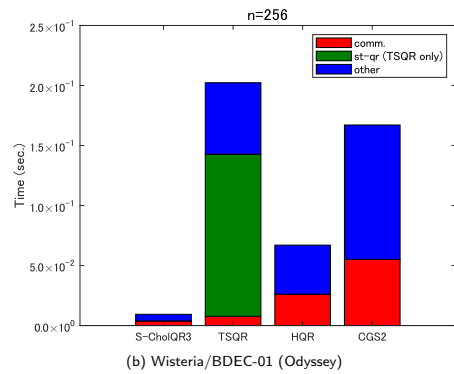
(a) Oakforest-PACS



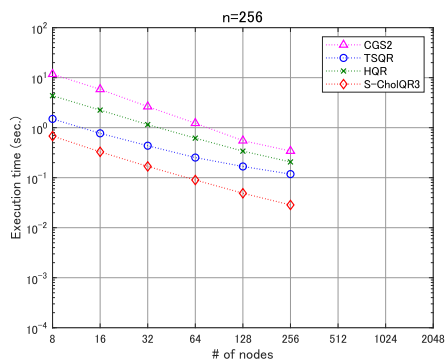
(a) Oakforest-PACS



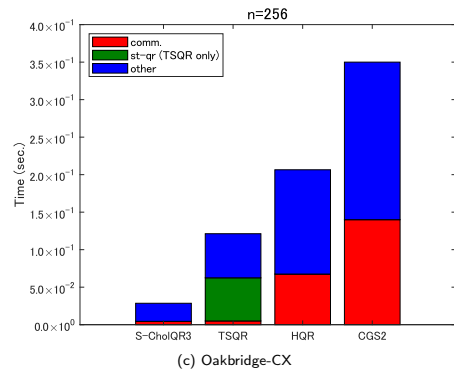
(b) Wisteria/BDEC-01 (Odyssey)



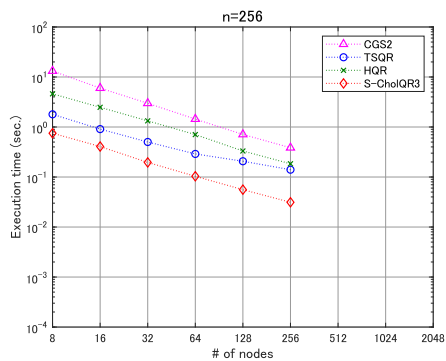
(b) Wisteria/BDEC-01 (Odyssey)



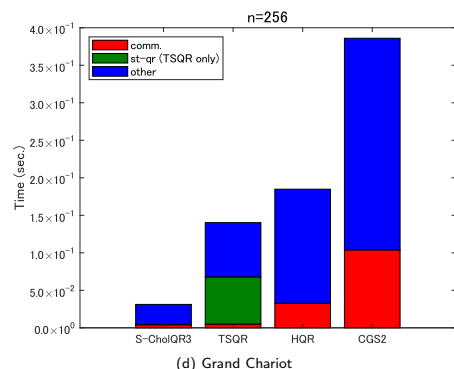
(c) Oakbridge-CX



(c) Oakbridge-CX



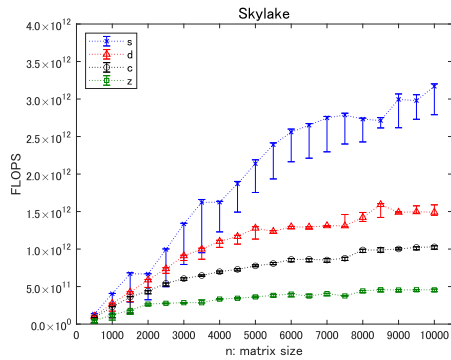
(d) Grand Chariot



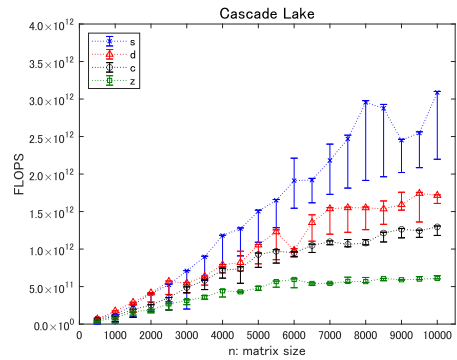
(d) Grand Chariot

図2 4種類のスパコン上で様々なQR分解プログラムの実行時間(強スケール)を測定した結果(情報処理学会研究報告2022-HPC-184に掲載の結果の一部を引用).

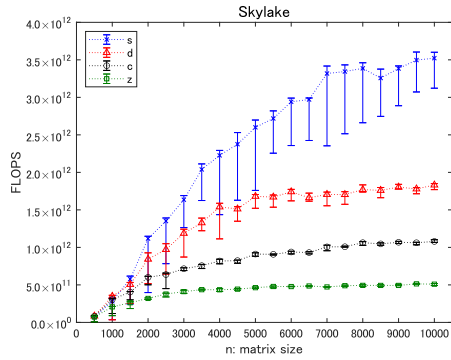
図3 4種類のスパコン上で様々なQR分解プログラムの実行時間の内訳(256ノード時)を測定した結果(情報処理学会研究報告2022-HPC-184に掲載の結果の一部を引用).



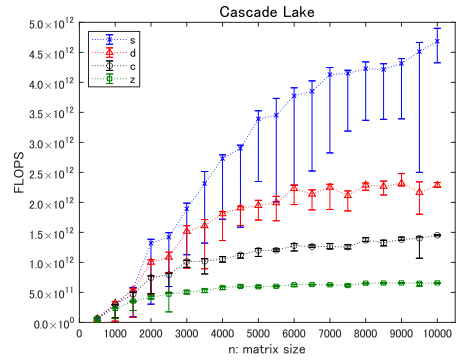
(a) LU 分解



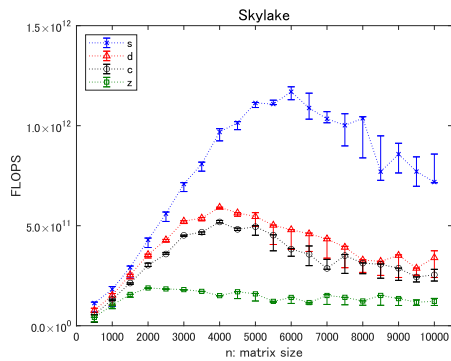
(a) LU 分解



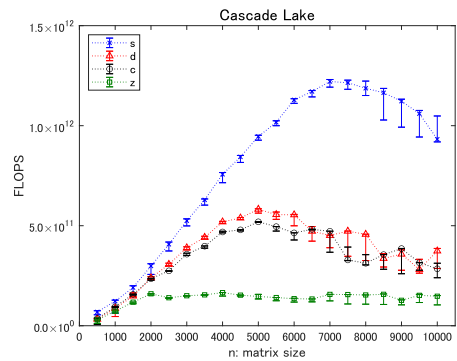
(b) Cholesky 分解



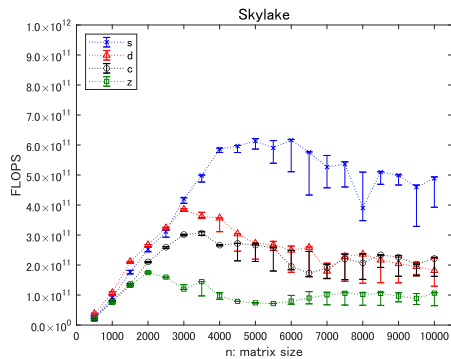
(b) Cholesky 分解



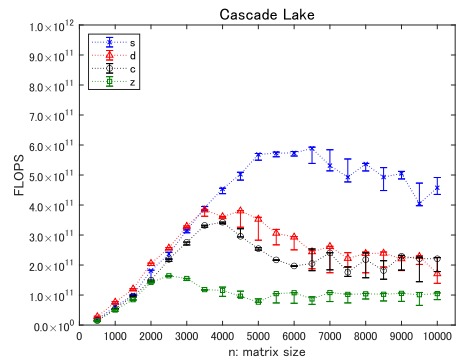
(c) 三重対角化



(c) 三重対角化



(d) 二重対角化



(d) 二重対角化

図 4 Grand Chariot における各データ型 (単精度実数, 倍精度実数, 単精度複素数, 倍精度複素数) の LAPACK ルーチンの実行性能の測定結果.

図 5 Oakbridge-CX における各データ型 (単精度実数, 倍精度実数, 単精度複素数, 倍精度複素数) の LAPACK ルーチンの実行性能の測定結果.