



ソフトウェア工学による自動チューニング技術の新展開

● 研究の意義

- **I) ソフトウェア工学** : 数値計算ソフトウェアにおけるソースコードの更新、コンパイル、静的解析、ビルド、自動テストの実行といった一連の更新手順を自動化し、効率化する継続的インテグレーションにおいて、自動テストの実行順序を工夫することにより、デバッグを含む開発効率の研究をする。本課題では、数値計算ライブラリLAPACKを対象にし、数値テストケースにおいて本課題の解決を狙う。またAT技術の研究は、高性能化のためのパラメータチューニングやコード自動生成により、開発工数削減に寄与する。片桐らが開発したAT言語のppOpen-ATフレームワークやIDEAS-ECPプロジェクト開発のATツールを活用してAT研究を行う。
- **II) アプリケーション評価** : 計算化学計算/その量子アルゴリズムへの適用を想定し、GPU最適化と疑似量子アニーラ/量子回路シミュレータ (GPUで稼働するNVIDIA cuQuantum) の高速化に寄与する性能パラメータチューニングを対象にする。一方、AT適用分野の拡大に資する非線形ソルバのアルゴリズム上に現れる性能パラメータチューニングを取り扱う。
- **III) チューニングノウハウの共有** : スーパーコンピュータ「富岳」のCPUであるARM A64FX、GPUのV100とA100の高性能実装技法や、パラメータチューニングのノウハウを集約する。

● 主な構成員

- 片桐 孝洋・星野 哲也(名大)・大島 聡史 (九大) : 研究統括、AT開発、GPU最適化、AT開発
- 森崎 修司 (名大) : ソフトウェア工学
- Weichung Wang (国立台湾大、台湾)・Feng-Nan Hwang (国立中央大、台湾)・Osni Marques (LBNL、米国) : 固有値計算、非線形アルゴリズム、国際連携
- 中島 研吾 (東大) : 連立一次方程式の反復解法
- 望月 祐志 (立教大)・杉崎 研司 (慶応大) : 計算化学、量子計算アルゴリズム

● 自動チューニングのAI活用と説明可能AI

- AT機構に最新AIを適用することは喫緊の課題
- しかしAIモデルが妥当な選択をするかの解釈 (説明可能AI (XAI)) は大問題
- 特に数値計算に対するXAIの研究は限定
- 事例 : 河合開発の閾値付不完全コレスキー前処理付きCG法ライブラリ中の性能チューニングのATに深層学習を適用

⇒XAIツールSHAPを用い、妥当なATができることを世界で初めて示した (図1)

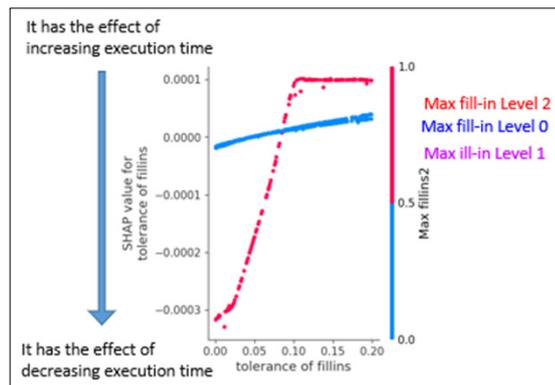


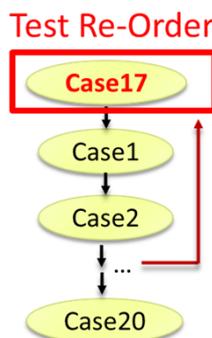
図1 : 閾値付不完全コレスキー前処理(IC)付CG法のATのSHAPによる解釈。x軸は、ICにおけるゼロとみなす値。

● LAPACKテストシーケンスの効率化

- BLASルーチン(dgemm)に意図した「バグ」を挿入
←頻繁に呼ばれるルーチン
- dgemm関数中のスカラー値 "alpha" を、強制的に 1.0 から 0.01に変更
- LAPACKテストルーチンSTCollectionにおいて、バグは第17番テストのみに出現 (残差と直交性)
⇒テスト順番の入替で高速化の可能性

alpha	実行時間[秒]	残差	直交性
1.0 (通常)	9.12×10^1	3.34×10^{-3}	1.80×10^{-2}
0.01	1.27	2.42×10^{11}	4.84×10^{11}

図2 : 17番テストの結果



テスト時間の速度向上:
9.17x