

令和 5 年 6 月 12 日現在

機関番号：82401

研究種目：基盤研究(B) (一般)

研究期間：2019～2021

課題番号：19H04127

研究課題名(和文) エクサ時代の非同期タスクを応用した高性能高次元数値線形代数の研究

研究課題名(英文) Research on high-performance and high-dimensional numerical linear algebra applying an asynchronous task mechanism on the exascale computing era

研究代表者

今村 俊幸 (Imamura, Toshiyuki)

国立研究開発法人理化学研究所・計算科学研究センター・チームリーダー

研究者番号：60361838

交付決定額(研究期間全体)：(直接経費) 14,350,000円

研究成果の概要(和文)：本研究課題の主眼は、エクサ時代のメニコア環境下においてシステム実行効率を向上するための非同期的な数値計算アルゴリズムならびにタスク技術周辺を研究し、将来にわたって持続可能な高性能な数値計算ソフトウェアのための開発フレームワークを実現することである。当該課題設定に対して、既存コンパイラランタイム技術の調査、ならびに数値計算アルゴリズム実現に必要な条件付きタスク起動や依存関係の動的処理の課題をとりあげ、実際の数値計算ライブラリ内部に組み込み実行速度のみならず利用効率向上の点に貢献する成果を達成するとともに、次世代につながる混合精度演算技術との連携課題も同時に確認した。

研究成果の学術的意義や社会的意義

計算機システムのメニコア化が進み、適切な並列タスク数が数千以上の環境が通常となり逐次数値計算アルゴリズムはより高並列なアルゴリズムに変更する必要がある。その基盤には数値計算アルゴリズムの研究と実際に動作をサポートするコンパイラランタイム系技術の融合が欠かせない。本研究はタスク制御に関する一側面を数値計算研究者の立場から提案し解決に導いた。数値計算ソフトウェアはシミュレーションやデータ分析において極めて重要な役割を果たすものであり、本手法はコデザイン的な側面を強化し実用化を進める必要があると考える。

研究成果の概要(英文)：The main objective of this research project is to study asynchronous numerical algorithms and task technologies to improve system execution efficiency in the exascale era and to realize a development framework for high-performance numerical software that is sustainable in the future. To address this issue, we will investigate existing compiler runtime technologies, identify problems related to conditional task invocation and dynamic processing of dependencies that are necessary to realize numerical algorithms and incorporate them into actual numerical libraries to achieve results that contribute not only to execution speed but also to utilization efficiency. As a result, we identified issues related to the next generation of mixed-precision computation technology.

研究分野：高性能計算

キーワード：高性能数値線形代数 タスクスケジュール 高並列処理 非同期・条件付・競争的タスク タスク並列 DAG

科研費による研究は、研究者の自覚と責任において実施するものです。そのため、研究の実施や研究成果の公表等については、国の要請等に基づくものではなく、その研究成果に関する見解や責任は、研究者個人に帰属します。

1. 研究開始当初の背景

2021年ごろの運用を目指し「ポスト「京」コンピュータ」として1エクサフロップス(1秒間に10の18乗回の浮動小数点計算能力)程度の性能をもつ計算機開発プロジェクトが進行している。米国、中国においてはSummit、神威・太湖之光など、100ペタフロップス以上のシステムが実用化されており、エクサスケール時代到達目前である。Summitや神威・太湖之光は数百～数千コア/ノード構成の超メニコアシステムである。このようなハードウェア構成は電力消費量や共有メモリプログラミング上でのメリットはあるものの、高並列アルゴリズム表現上の問題を有している。

共有メモリ環境のプログラミング言語としては、OpenMPを中心にOpenCLやOpenACCなどのディレクティブ言語、またGPUに対してはNvidia社のCUDA SDKが業界標準である。いずれの言語も「ハードウェアの非均一性排除」と「高並列度の向上に対応した処理概念」の取り込みにより、ハードウェアの劇的な変化に対応している。例えば、初期のOpenMPはデータ並列性向きの言語であったが、現4.x版ではメニコア環境向けに「タスク並列モデル」機能を強化している。

数値線形計算アルゴリズムにおいては、長年データ並列処理に依存してきた。これは現在も続いているが、高スレッド並列処理においては「ブロックアルゴリズム」と「タイリング技法」の2手法が有用な手段であると認識されている。実際、両手法を活用した数値計算アルゴリズムへの再構築が進み、スレッド並列環境へと急激に移行している。その過程で、多くの並列数値計算ライブラリ開発はアルゴリズム開発以上に高性能なランタイム利用に重点が置かれている。これは、高並列プログラミングの実現以上に、アルゴリズム開発者の意図通りに並列タスクを実行することが極めて困難であることというアルゴリズム表現上の問題に起因する。一般的なランタイムやタスクスケジューラは数値計算アルゴリズムとは切り離されたシステムソフトウェアである。数値線形計算アルゴリズム研究の本質に立ち返るならば、研究者の着想に起因する並列タスク実行方式を整理し、数値線形計算ソフトウェアの効率性向上を考えるべきである。言い換えれば、数値線形計算に有効なタスクモデル研究が現在の重要課題といえる。

2. 研究の目的

数値計算ソルバは既存タスクモデルでは非効率な部分と実現困難なものが存在する。近年メニコア環境での効用が主張されている非同期型アルゴリズムをタスクモデルの枠の中で表現し実現することは極めて難しい。エクサスケール計算機上では「並列性のミスマッチ」と「表現能力不足」が拡大することは明らかである。また、高利用率維持が現在以上に要求されるため、タスク間の実行順依存関係以外の事項を考慮すべきである。既存の数値線形計算は負荷不均衡をランタイム実行系に委ねているが、決して最良のスケジューリングとはならない。少なくとも、アルゴリズム開発者が知りうる(意図した並列性や実行順序など)コスト情報をスケジューリング反映すべきであるが、その様なスケジューリング機能を用いた数値計算ソフトウェアの実装はほとんどない。

このような状況のもと、数値線形計算ソフトウェアの開発のみならず利便性の向上と多様なメニコア計算環境での高性能化のため、研究グループがこれまでに培ってきた応用数学技術とHPC技術を連動させ、数値線形代数研究者の視点からエクサ時代に必須となるタスクスケジューリングの技術要件を提案する。図1に示す技術展開構想の下、個々の研究者が実施する既存数値線形代数ソルバにこれら技術要件を適用することを本研究提案での達成目標とする。最終的にはその成果を元に、将来の高性能高次元数値線形代数計算ソフトウェア実現に向けた新しい技術創出を目的とする。

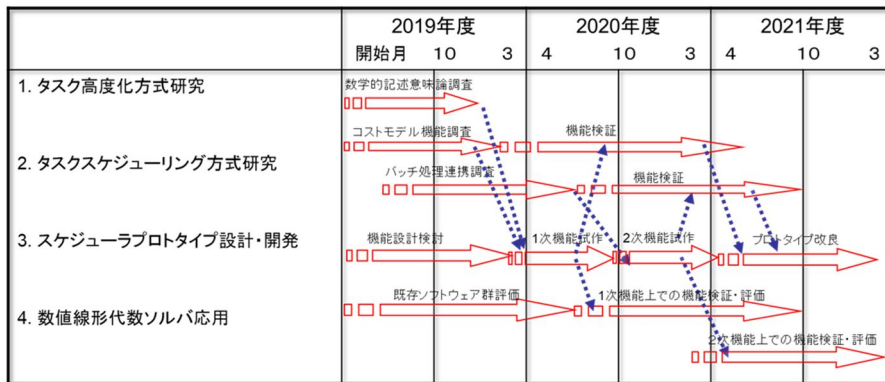


図1. 本研究における研究展開

3. 研究の方法

研究項目を組み合わせ、4グループに分けて実施する。提案段階では個別技術としてのアイデアであり、初年度は調査研究と概念実証を主に進める。以降2年間にわたり、段階的にプロトタイプ実装と実問題応用での実証を行う。4グループの具体的な研究計画とマイルストーン、更にグループ間の相関と工程表(表1)を示す。

表 1 : グループ間の相関と工程表



(1) タスク高度化方式研究グループ [TAG] :

本グループ(TAG)では、1) 非同期的タスク、2) 条件付きタスク、3) 競争的タスクについて研究を行う。3種タスクともに既存の DAG ベースのタスクモデルの枠組みを外れるものであり、本グループにおいて、数学的な表現方法と各種タスク間連携の意味を調査する。更に、拡張した3タスクを含む抽象的なモデルの実現可能範囲とその原理を明らかにし、実システムにおける最良実装方法とスケジューリング方法に到達することを目指す。これらは、スケジューラグループ (SPG) と連携をしながら検討を進め、スケジューラ機能設計に反映させる。

(2) タスクスケジューリング方式研究グループ [TSG] :

本グループ(TSG)では、コストを利用したスケジューリング方、バッチ処理と通常タスクモデルとの連携方式)

について研究を行う。1) は先に述べたように、数値線形代数アルゴリズム研究の立場から詳細なコストモデルを実行前に得ることができる。これは対象ハードウェアの構成によって変動するため、動的計画法などの手法を駆使して実行前に詳細化可能であるが、実行前・実行時両者のコスト評価を行う方式について研究を進める。2) においてもコストモデルとの連携は重要であり1) の枠組みで実施するが、従来タスクモデルとの連携については、OpenMP の文脈で可能な等価なタスクモデル(例えばタスクループ構文や階層的なタスクグループ)を調査し効果検証を進める。

提案グループでは従来研究の中でコストモデル研究を進めており、性能評価の経験を多く有している。そこで培われた評価手法の拡張とともに、タスク並列環境下における評価手法の一般化により、個別の問題だけではなくシステムレベルのタスクスケジューリング機能としての技術提案を目指す。特に1) については、鈴木智や鈴木厚らの先行研究が進んでおり、メニコア環境だけではなく複数 GPU+メニコアのような非均一環境でのコストを考慮したスケジューリングの実践まで進める。

(3) スケジューラプロトタイプ設計・開発グループ [SPG] :

本グループ(SPG)では、TAG と TSG 両グループによって研究提案された従来タスクモデルの拡張とスケジューリング方式を統合する。スケジューラの機能設計と既存開発のスケジューラに機能拡張を施し、スケジューラプロトタイプを試作するとともに、ソルバ応用グループ(SAG)での利用につなげていく。

分担者鈴木厚らは自らが開発する疎行列直接法ソルバ「Dissection」の中で、タスクグループ間での条件付き実行順序を制御する独自のタスクスケジューラを開発している。タスクの大半は事前コスト評価により静的に割り当てられるが、ミューテックスを用いたスレッド割り当てによる動的割り当てを組み合わせることで効率化を図っている。また、工藤は OpenMP の枠組みであるが、タスクモデルを用いずにセマフォベースのスレッド割り当て技術を実現している。本研究では、まず Dissection に実装されたタスクスケジューラを元にして、TAG と TSG の提案と拡張実現項目の実現を目指し、コストモデルを考慮した1次機能を実装し、バッチ処理融合を施した2次機能版の順にスケジューリング機能追加を進める。

(4) 数値線形代数ソルバ応用グループ [SAG] :

本グループ(SAG)では、エクサ環境で想定される非均一計算機構成のもと実験検証を進める。対象は、これまでに参加研究者らが開発した

- 疎行列直接解法(鈴木厚の Dissection)
- 分割統治法(廣田の LOGSTEP)
- TSQR アルゴリズム(鈴木智)
- テンソル分解ソルバ(今村)

とする。これらソフトウェアはタスク並列もしくはバッチ処理による並列化がなされており、本研究提案の原点ともなったソフトウェア群である。

4. 研究成果

本研究はコロナ流行により大きくその研究計画の進行が乱された。いくつか関連する研究が実施が困難となり、期間延長等も進めたが、各研究グループ間での成果の相互利用が難しい面もあり研究計画とは一部異なる実装を行っている。以下時系列的に年度毎に成果を示す。

(1) 初年度・令和元年度：

本年度は、研究計画の初年度として本基盤研究が目指す数値計算アルゴリズム由来の難スケジューリングについて調査とプロトタイプ実装による効果と問題点の絞りだしを行った。問題点は今後整理し、スケジューラプロトタイプの主要機能として実装を進める。

成果としては以下の二項目があげられる。

数値計算アルゴリズム由来のスケジューリング調査について、まず、バッチスケジューラ方式を中心とした、内部での細粒度パイプライン処理方式の開発と実問題でのテストを行い、スケジューリング方式の予備調査として中間結果を国際会議に発表している(高次 FFT と粗密混合精度行列計算)。非同期ならびに優先度付きスケジューリングについては、本研究の中核をなす新規提案であり十分な予備調査と試験実装が行われた。特に、既存言語である OpenMP の task 構文と priority 句などの優先順位付けのアルゴリズムと我々が所望する数値アルゴリズムとの整合性(機能実現性・親和性・表現能力も含めて)研究を実施し国内外の研究会で報告をしている。

行列分解アルゴリズムを CPU/GPU ハイブリッド環境上の実装し、同実装において priority 句によるタスクの優先順位付けにより、並列実行可能なタスクを部分的に増加できることが分かったが、その効果はさほど大きくないなどの結果を得ている。既存スケジューラの機能調査として、INRIA が開発をしている StarPU を調査し、その内部機能や基本性能を確認した。実情は我々が Dissection で構成しているタスクスケジューラよりもオーバーヘッドが大きく定量的に 20~30%の性能低下が見込まれた。さらに既存スケジューラで活用されている DAG の表現能力についても調査し、LDU 分解の限られた範囲であるが数値計算アルゴリズムに DAG の記述能力が問題にならないなど、次年度に展開する良好な調査結果を得ることができた。

(2) 令和二年度：

本年度成果は大きく 2 項目に大別される。

まず「タスクスケジューリングの実装予備実験」である。疎行列直接ソルバ において、タスク依存関係の記述と実行の制御、さらにメモリ依存性についてタスク管理と同等機能の必要性、条件設定の扱いを考慮した分岐タスクの記述可能性を確認した。さらに、タスク並列の観点で重要な vBatched 方式での BLAS を用いて、スケジューラに負荷量情報を与えることに対する影響調査を実施した。利用言語・ランタイム・ハードウェアによるスケジューリング戦略の差異を自動チューニングや機械学習などにより吸収できる可能性があることが確認された。更に、GPU におけるスレッドブロック間のタスク排他制御方式を実装した。本方式を、グローバルループ、条件分岐、さらには DAG と連携させることで上位ソルバ実装につなげられる可能性の検討を開始した。

2 つ目は「数値計算アルゴリズムにおけるタスク並列モデルの調査研究」である。まず、行列分解方式のアルゴリズムにおいて、コストの重回帰分析を進めてスケジューラ連携の一例を示した。連立一次方程式求解における、不定値密対称行列分解・疎行列直接解法における LDL 分解、GMRES の前処理へのタスク並列処理の適用についても昨年度より継続調査を進めている。更に、新しいタスク系列処理の例として、アンサンブルカルマンフィルタ処理中に現れる対称平方根の行列関数計算について、レゾルベント計算やタイル処理のタスク並列の検討を開始した。また、行列固有値計算の分割統治法のスレッド並列のスケジューリングについて、不均等分割化によって生じるツリー構造の非対称性や不均衡の処理系による改善やコストの事前推定方式について検討を開始した

(3) 令和三年度+令和四年度(コロナの影響での繰り越し)

第三カ年目は繰り越し事業も含めて以下の成果となる。

「タスクスケジューリングの各種実験的評価」: 本プロジェクトで検討を進めてきたスケジューラ開発は、コロナ等の影響で実装作業並びに研究者相互の技術展開が困難となったため、内容を限定するとともに想定技術を既存ランタイム系で代用するなどの措置により進めることに変更した。そのような条件下において、a) CUDA におけるスレッドブロックの独自管理手法の実現 b) OpenMP のマルチタスク制御方式の組み合わせによるロードバランス制御方式の研究、c) バッチ処理に特化した設定における OpenMP のタスクスケジューリングとコスト通知方式の性能相

関の実証実験をすすめた。いずれも実用コード上での実装につながり、論文として成果発表まで達成している。

「数値計算アルゴリズムにおけるタスク並列モデルの調査研究」: 逆行列計算過程での陽なタイルレイアウトの並び替えやパック処理によるデータ移動の削減などの結果性能改善につながる例を示すことができた。さらに、LDL 行列分解の中で低ランク近似と適切な OpenMP タスク並列指示を行うことでも既存実装よりも優れた成果を示している。さらに、当該手法の延長上に量子アニーラを活用したチューニングなど新技术への展開も見出すことができている。最後に、疎行列直説法ソルバにおける、先送りされたブロック処理を担当するタスクに対してダミータスクの概念を導入し、DAG 構成時には確定しないタスク表現を可能とした。また、数値安定性の観点から先送りした計算ブロックには高精度計算を考慮した混合精度演算によるケアが必要であり今後の展開に必要な技術課題の洗い出しにもつながっている。

(4) まとめ

当初予定では、独自のタスクスケジューラを実装することを目指していたが、コロナならび参画研究員の異動に伴うスタートアップを考慮して、既存言語系に付随するランタイムでのエミュレーションにて当初予定のスケジューリングと同等機能を実現したが、いくつかは制限付きのものにとどまるため、今後も継続した研究級を進める必要がある。また、研究の過程で混合精度演算との連携を考慮した部分で、スケジューリングのポテンシャルを確認できている。混合精度演算は今後の熱いトピックでもあり、今回の研究成果を発展するよい展開技術の場と考えている。

5. 主な発表論文等

〔雑誌論文〕 計7件（うち査読付論文 4件/うち国際共著 1件/うちオープンアクセス 2件）

1. 著者名 Shen Zhongyu, Zhang Jilin, Suzuki Tomohiro	4. 巻 111
2. 論文標題 Task-parallel tiled direct solver for dense symmetric indefinite systems	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 Parallel Computing	6. 最初と最後の頁 102900 ~ 102900
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1016/j.parco.2022.102900	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 該当する
1. 著者名 Suzuki A.	4. 巻 2022
2. 論文標題 A Factorization Algorithm for Sparse Matrix with Mixed Precision Arithmetic	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 ECCOMAS Congress 2022 - 8th European Congress on Computational Methods in Applied Sciences and Engineering	6. 最初と最後の頁 1 ~ 12
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.23967/eccomas.2022.006	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 -
1. 著者名 今村 俊幸, 伊奈 拓也, 廣田 悠輔, 井戸村 泰宏	4. 巻 Vol. 2022-HPC-187, No. 21
2. 論文標題 CPU+GPU混成システム上の固有値計算ソルバーの現状調査と性能評価	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 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	6. 最初と最後の頁 1 ~ 10
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) なし	査読の有無 無
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -
1. 著者名 工藤 周平, 今村 俊幸	4. 巻 Vol. 2022-HPC-185, No. 10
2. 論文標題 タイル単位でバック化を行う行列計算	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 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	6. 最初と最後の頁 1 ~ 10
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) なし	査読の有無 無
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Toshiyuki Imamura, Masaaki Aoki, Mitsuo Yokokawa	4. 巻 36
2. 論文標題 Batched 3D-distributed FFT kernels towards practical DNS codes	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 Advances in Parallel Computing	6. 最初と最後の頁 169-178
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.3233/APC200038	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 -

1. 著者名 Suzuki Tomohiro	4. 巻 --
2. 論文標題 Performance Tuning of Tile Matrix Decomposition	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 Proceedings of IEEE 13th International Symposium on Embedded Multicore/Many-core SoCs (MCSoc-19)	6. 最初と最後の頁 24 - 31
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1109/MCSoc.2019.00011	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 工藤 周平, 今村 俊幸	4. 巻 2019-HPC-170, 35
2. 論文標題 ヤコビ回転カーネルを用いたヤコビ固有値計算手法の性能評価	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 研究報告ハイパフォーマンスコンピューティング (HPC)	6. 最初と最後の頁 1-8
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) なし	査読の有無 無
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

〔学会発表〕 計13件 (うち招待講演 0件 / うち国際学会 4件)

1. 発表者名 鈴木智博, Zhongyu Shen
2. 発表標題 RBT前処理付き不定値密対称行列線形ソルバ
3. 学会等名 情報処理学会第178回ハイパフォーマンスコンピューティング研究会
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 霜鳥竜輝, 鈴木智博
2. 発表標題 統計モデルを用いたタイルQR分解のパラメータチューニング
3. 学会等名 情報処理学会第83回全国大会
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 小見山朋子, 鈴木智博
2. 発表標題 量子アニーリングによる疎行列の直接解法向けフィルイン削減オーダリング
3. 学会等名 情報処理学会第83回全国大会
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 今村俊幸
2. 発表標題 エクサ時代の非同期タスクを応用した高性能高次元数値線形代数の研究
3. 学会等名 第12回 自動チューニング技術の現状と応用に関するシンポジウム(ATTA2020)
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 Atsushi Suzuki
2. 発表標題 Dissection direct solver with quasi quadruple accuracy for sparse matrices with high condition number
3. 学会等名 WCCM-ECCOMAS, Paris (web conference) (国際学会)
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 Atsushi Suzuki
2. 発表標題 Dissection sparse direct solver and parallel task management
3. 学会等名 HPC Asia 2020 (国際学会)
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 工藤 周平, 今村 俊幸
2. 発表標題 ヤコビ回転カーネルを用いたヤコビ固有値計算手法の性能評価
3. 学会等名 第170回ハイパフォーマンスコンピューティング研究発表会
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 KUDO Shuhei, IMAMURA Toshiyuki
2. 発表標題 A level 3 BLAS like kernel of the Jacobi rotations for the Jacobi's eigenvalue algorithm
3. 学会等名 ParNum (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 今村 俊幸
2. 発表標題 エクサ時代の非同期タスクを応用した高性能高次元数値線形代数の研究
3. 学会等名 第11回 自動チューニング技術の現状と応用に関するシンポジウム (ATTA2019)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 鈴木大地
2. 発表標題 尾崎スキームに基づく高精度かつ再現性のあるBLASルーチンの実装と自動チューニングの適用
3. 学会等名 学会等名: 第22回AT研究会オープンアカデミックセッション (ATOS22)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 Tomohiro Suzuki
2. 発表標題 Task-parallel algorithms for matrix factorizations
3. 学会等名 HPC Asia 2020 (Poster session) (国際学会)
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 板垣翼, 鈴木智博
2. 発表標題 BLR行列のMBGSアルゴリズムによるQR分解のPython実装とその性能評価
3. 学会等名 情報処理学会第82回全国大会 (オンライン開催)
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 霜鳥竜輝, 鈴木智博
2. 発表標題 CPU-GPU環境におけるブロックQR分解のタスク並列化
3. 学会等名 情報処理学会第82回全国大会 (オンライン開催)
4. 発表年 2020年

〔図書〕 計0件

〔産業財産権〕

〔その他〕

-

6. 研究組織

	氏名 (ローマ字氏名) (研究者番号)	所属研究機関・部局・職 (機関番号)	備考
研究分担者	工藤 周平 (Kudo Shuhei) (50824421)	電気通信大学・大学院情報理工学研究科・助教 (12612)	
研究分担者	廣田 悠輔 (Hirota Yusuke) (60709765)	福井大学・学術研究院工学系部門・助教 (13401)	
研究分担者	鈴木 智博 (Suzuki Tomohiro) (70235977)	山梨大学・大学院総合研究部・准教授 (13501)	
研究分担者	椋木 大地 (Mukunoki Daichi) (90742289)	国立研究開発法人理化学研究所・計算科学研究センター・研究員 (82401)	
研究分担者	鈴木 厚 (Suzuki Atsushi) (60284155)	国立研究開発法人理化学研究所・計算科学研究センター・上級研究員 (82401)	

7. 科研費を使用して開催した国際研究集会

〔国際研究集会〕 計0件

8. 本研究に関連して実施した国際共同研究の実施状況

共同研究相手国	相手方研究機関
---------	---------