

第6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

科学研究費 基盤研究B 研究課題番号:24300004

実行時自動チューニング機能付き疎行列反復解法ライブラリのエクサスケール化

実行時自動チューニング機能付き疎行列反復解法ライブラリ Xabclibの機能とOpenFOAMへの適用

2014/12/25

櫻井隆雄(日立製作所)

共同研究者:

片桐孝洋、大島聡史(東京大学)

黒田久泰(愛媛大学)

猪貝光祥(日立超LSIシステムズ)

1. 背景
2. OpenATLib/Xabclibの機能
 - Xabclib
自動チューニング機能付き疎行列反復解法ライブラリ
 - OpenATLib
疎行列反復解法ライブラリ向け汎用自動チューニングインターフェース
3. OpenFOAMへの適用
 - OpenFOAMの疎行列ソルバにXabclibを追加
4. 評価
 - チュートリアル simpleFoam で性能の初期評価
5. まとめ

• Xabclib

– 数値計算ライブラリ

- 連立一次方程式の疎行列反復解法
- 標準固有値問題の疎行列反復解法
- 自動チューニング(AT)機能は、OpenATLibを利用して実現

• OpenATLib

– AT機能の手続き集

– 疎行列反復解法で必要となる機能を集約

- 疎行列 - ベクトル積(SpMV)
- 直交化アルゴリズム
- 解法に必要なパラメタの調整機能、など
- ATポリシー機能の提供
 - 実行速度、演算精度、メモリ量

- 連立一次方程式 $Ax = b$ の解法
 - 行列Aは、実数行列のみ、疎行列のみ
 - 行列Aは、対称、非対称の双方
 - 解法は、
非対称用: GMRES(m)、BiCGStab、
対称用: CG法(今年度新規開発)
- 標準固有値問題 $Ax = \lambda x$ の解法
 - 行列Aは、実数行列のみ、疎行列のみ
 - 行列Aは、対称、非対称の双方
 - 数個の固有値・固有ベクトル計算用
 - 解法は、
対称用: リスタート付きLanczos、
非対称用: 陽的リスタート付きArnoldi

- ・ OpenATLibを利用した疎行列反復解法ライブラリ
 - ◆ OpenATLibの機能を用いて実行時に重要なパラメータを最適化
 - ◆ 対象は実数の疎行列
 - 連立一次方程式の求解 ($Ax=b$)
 - Xabclib_GMRES (GMRES(m)法)
 - Xabclib_BICGSTAB (BiCGStab法)
 - Xabclib_CG (CG法)
 - 標準固有値問題 ($Ax=\lambda x$)
 - Xabclib_LANCZOS (Lanczos法) : 対称行列用
 - Xabclib_ARNOLDI (Arnoldi法) : 非対称行列用

■ 以下の実行時AT機能を提供

◆ パラメータ選択機能

- ・ リスタート周期自動選択

◆ 実装方式選択機能

- ・ 疎行列ベクトル積自動選択(SpMxV)
 - 行分割方式
 - 非零要素分割方式
 - リダクション並列演算最適化
 - Branchless Segmented Scan (BSS)

◆ アルゴリズム選択機能

- ・ 複数のグラムシュミット再直交化アルゴリズム提供
 - BCGS, MGS, DGKS

◆ 数値計算ポリシーインターフェース

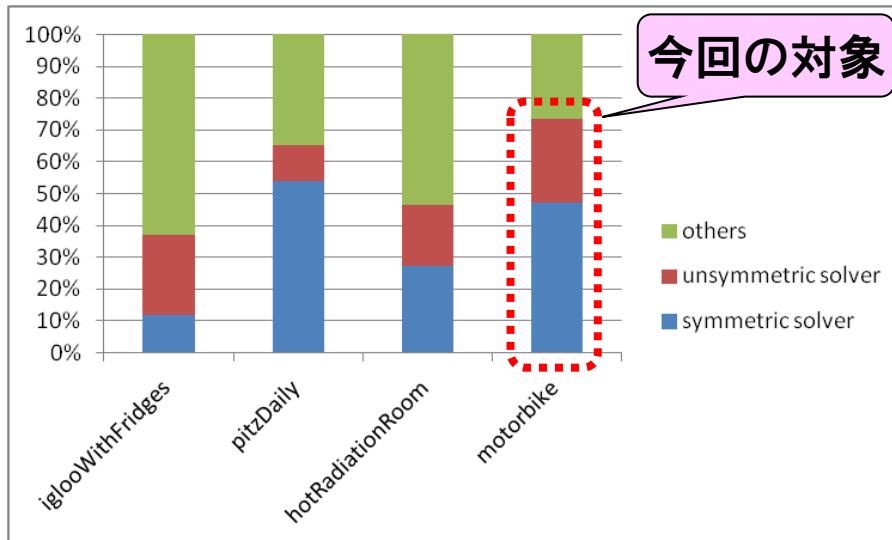
- ・ ユーザが望む条件(ポリシー)を元に演算を実行する仕組みを提供
(演算時間orメモリ使用量の最小化, 解の精度の保証)
- ・ 前処理・解法の自動選択機能

3-1. OpenFOAMへの適用と評価

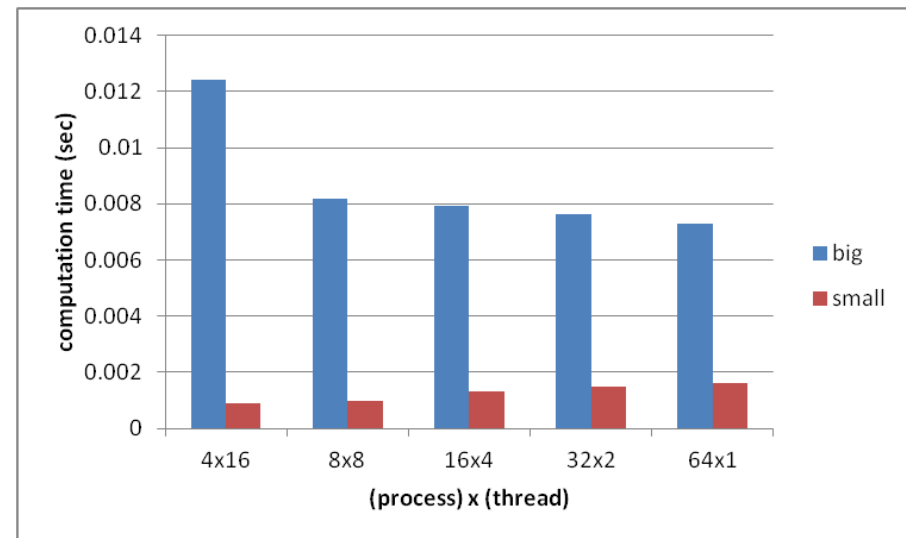
● 対象アプリ: OpenFOAM (オープンソースのCFDライブラリ)

- MPIにより並列化
- 連立一次方程式解法 $Ax=b$ のソルバの処理が長い
- 標準で連立一次方程式解法のソルバが実装されている
 - ・ Smooth solver, PBiCG など
 - ・ ソルバのSMP並列化はされていない

➤ 問題サイズが計算ノード数と比べて小さい場合、MPIのみでは性能向上に限界



OpenFOAMの処理時間の内訳
(ソルバの収束条件 $\epsilon = 10^{-8}$)



ハイブリッド並列化されたBiCGStab法ソルバの
反復1回あたりの処理時間
(big: 160万次元、small: 5万次元)

● 目的

- ハイブリッド並列化を目標として SMPで並列化されたソルバを適用

1. 対称ソルバの実装と適用

- CG法を追加

2. 行列格納形式変換の高速化

- OpenFOAMの変形COOからCRSへ変換
- 非零構造が前timestepと変わらなければ変換情報を再利用

3. 行列ソルバの呼び出し方法の適正化

- XabclibをOpenFOAMの設定ファイルから直接指定可能に

3-3. OpenFOAMからXabclibの呼び出し

- OpenFOAMの設定ファイル(system/fvSolution)でXabclibを直接指定可能に
 - ◆ 前回までのPBiCGをXabclibに差し替えていた方式から改良
 - ◆ 呼び出される際に行列格納形式を変形COOからCRSに変換

```
FoamFile
{
  version      2.0;
  format       ascii;
  class        dictionary;
  object       fvSolution;
}
// ***** //

solvers
{
  p
  {
    solver      PCG;
    preconditioner DIC;
    tolerance    1e-8;
    relTol       0.0;
  }

  U
  {
    solver      PBiCG;
    preconditioner DILU;
    tolerance    1e-8;
    relTol       0.0;
  }
}
```

オリジナルのソルバを使用する場合

```
FoamFile
{
  version      2.0;
  format       ascii;
  class        dictionary;
  object       fvSolution;
}
// ***** //

solvers
{
  p
  {
    solver      XabclibCG;
    preconditioner DIC;
    tolerance    1e-8;
    relTol       0.0;
  }

  U
  {
    solver      XabclibGMRES;
    preconditioner DILU;
    tolerance    1e-8;
    relTol       0.0;
  }
}
```

Xabclibを使用する場合

4-1. 初期評価

■ XabclibとOpenFOAMのオリジナルのソルバの性能を比較

- ◆ OpenFOAMの2つのチュートリアルで評価
- ◆ 対称・非対称の行列ソルバを差し替え
- ◆ MPIは不使用

● 計算条件

#		OpenFOAM	Xabclib
version		2.2.2	1.02
Solver	Sym	PCG	PCG
	Unsym	PBiCG	BiCGStab, GMRES(m)
Preconditioner	Sym	DIC	Jacobi, Jacobi Iterative(5), DIC
	Unsym	DILU	Jacobi, SSOR, DILU, ILU0
Sparse matrix format		COO	CRS
Num of threads		1	1, 2, 4, 8, 16
Convergence criterion			1.0E-08

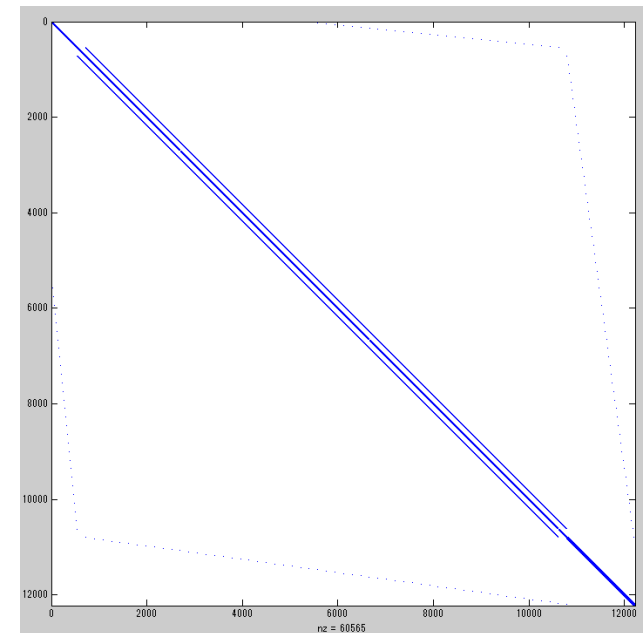
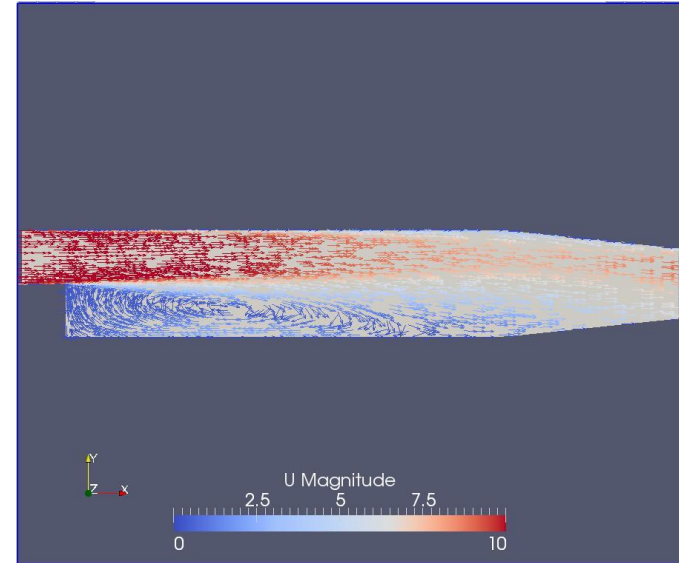
■ 東大FX10を1ノード使用

FX10

CPU	SPARC64™ IXfx 1.848GHz , 1socket, 16 core/node
Main Memory	32GByte
OS	XTCOS
Compiler	Fujitsu Technical Computing Suite V1.0
Compile Option	-Kfast,openmp, -Fixed

4-3. Target tutorials① simpleFoam/pitzDaily

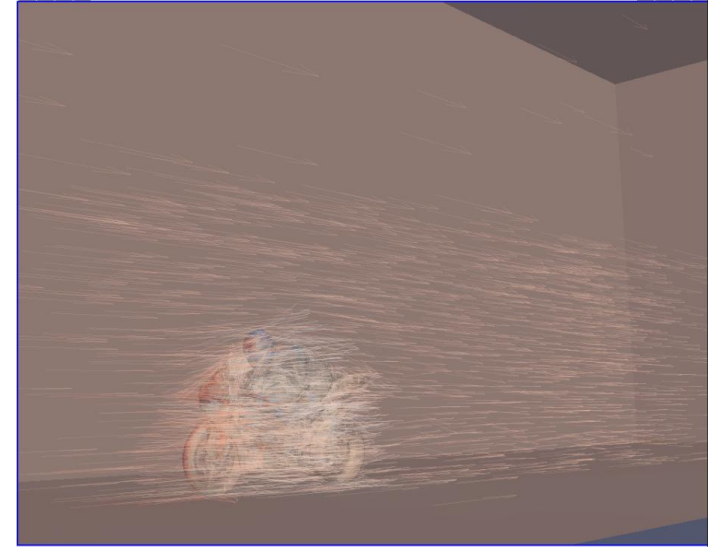
- SIMPLE法を用いた乱流解析ソルバ
- 右図のような形状での乱流解析
- 1反復で以下の求解を実施
 - ・ p: 対称行列
 - ・ U(x方向): 非対称行列
 - ・ U(y方向): 非対称行列
 - ・ k: 非対称行列
 - ・ ε : 非対称行列
- 行列の次元数は12,225、非零要素数は60,565
- チュートリアルでのDefault設定では786反復
 - ・ 対称786回、非対称3,144回の反復解法を実行
 - ・ ソルバは初期設定では対称はPCG+DIC、非対称はPBiCG + DILU



➡ Xabclibに差し替えて評価を実施

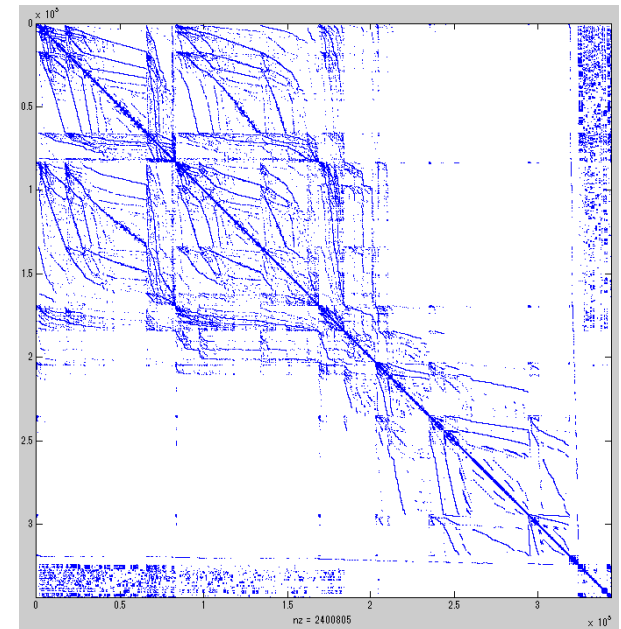
4-4. Target tutorials ② motorBike

- SIMPLE法を用いた乱流解析ソルバ
- 右図のような形状での乱流解析
- 1反復で以下の求解を実施
 - ・ p: 対称行列
 - ・ U(x,y,z方向): 非対称行列
 - ・ k: 非対称行列
 - ・ ω : 非対称行列



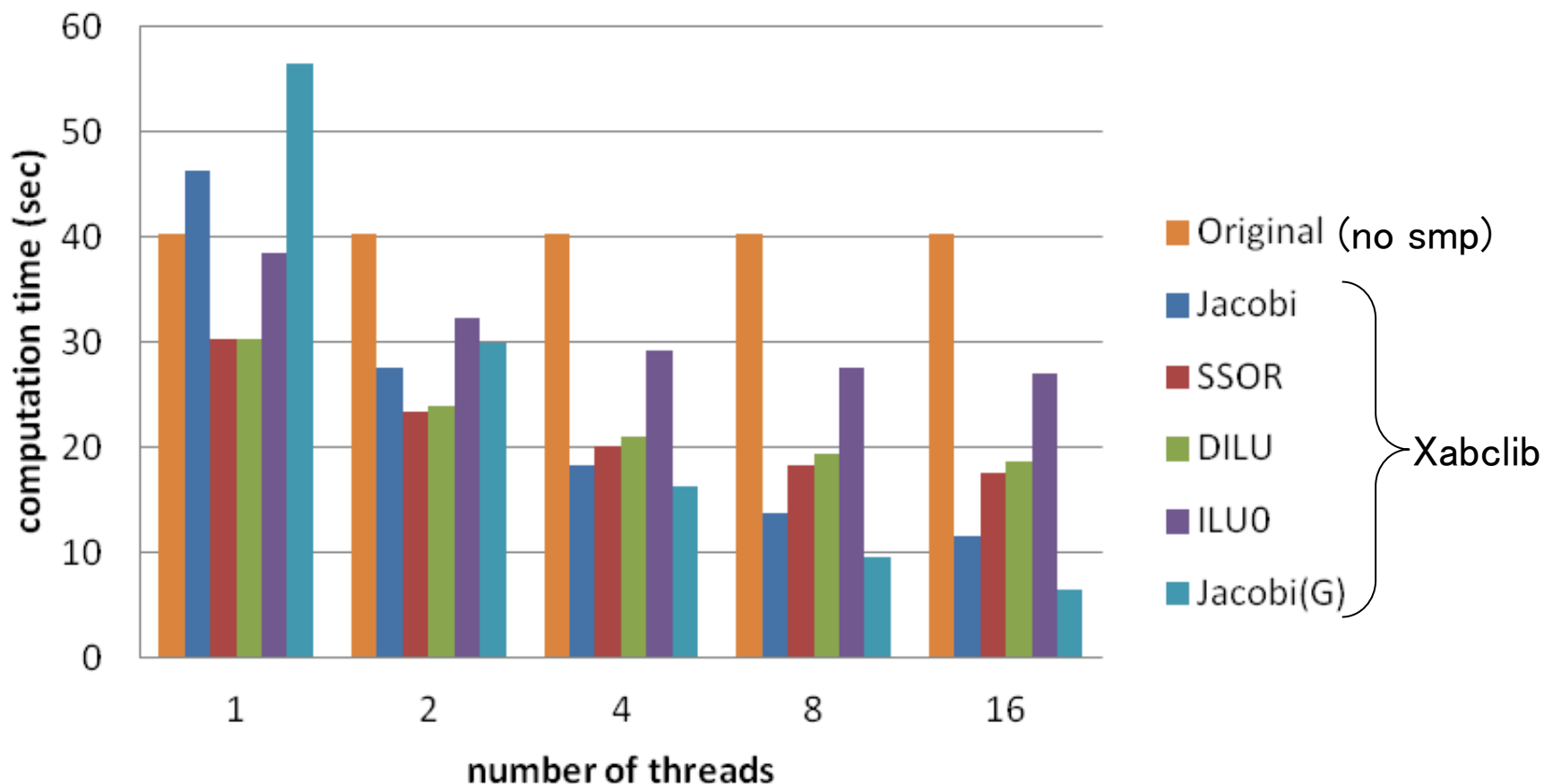
- 行列の次元数は343,673、非零要素数は2,400,805
- チュートリアルでのDefault設定では500反復
 - ・ 対称500回、非対称2,500回の反復解法を実行
 - ・ ソルバは初期設定では対称はAMG法、非対称はGauss-Seidel法

➡ Xabclibに差し替えて評価を実施



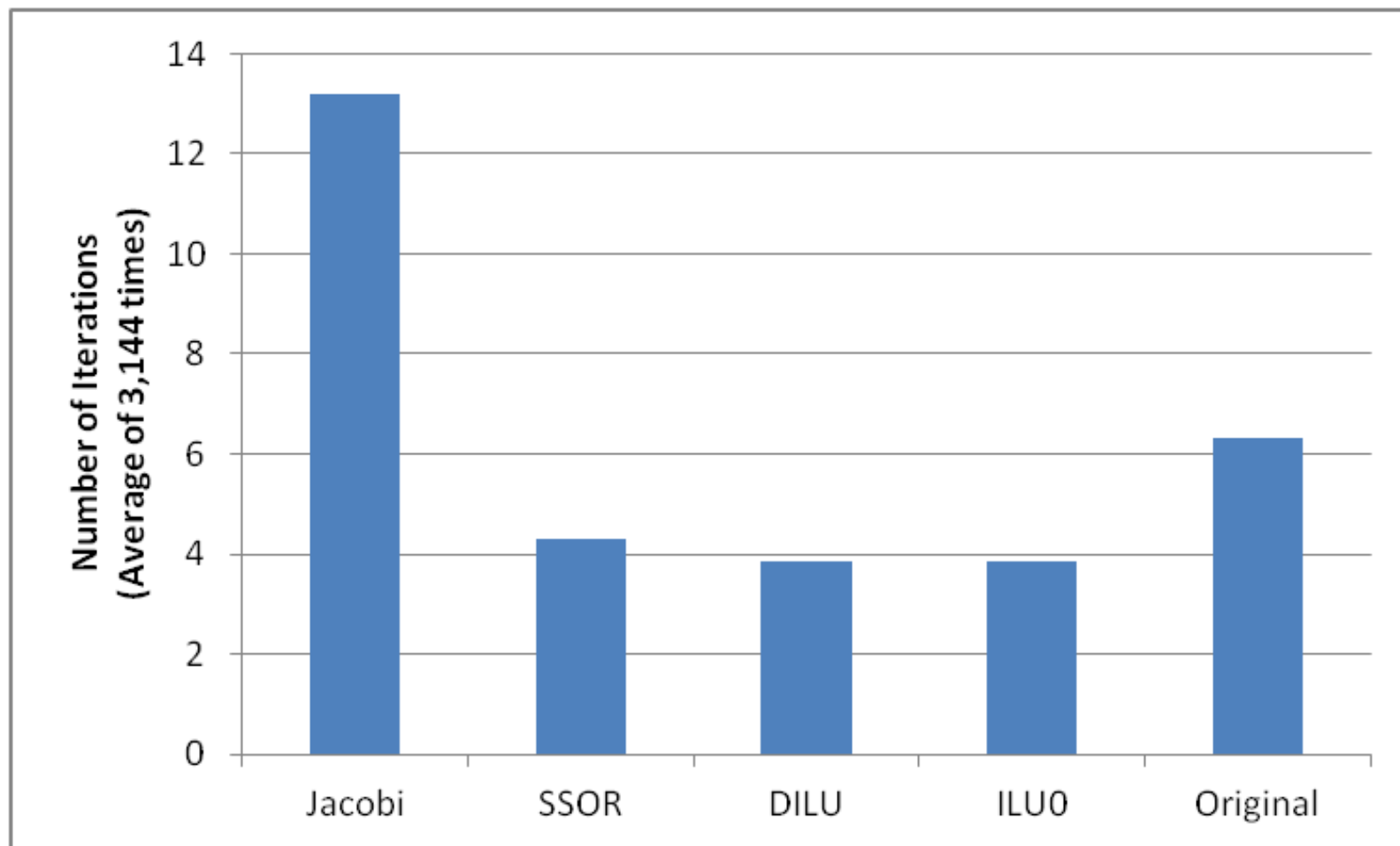
4-5. pitzDailyの非対称問題の演算時間

- 3,144回の呼び出しの合計値
- Xabclibにより、1スレッド時は1.3倍に高速化 (SSOR+BiCGStab)
16スレッド時は6.1倍に高速化(Jacobi+GMRES)



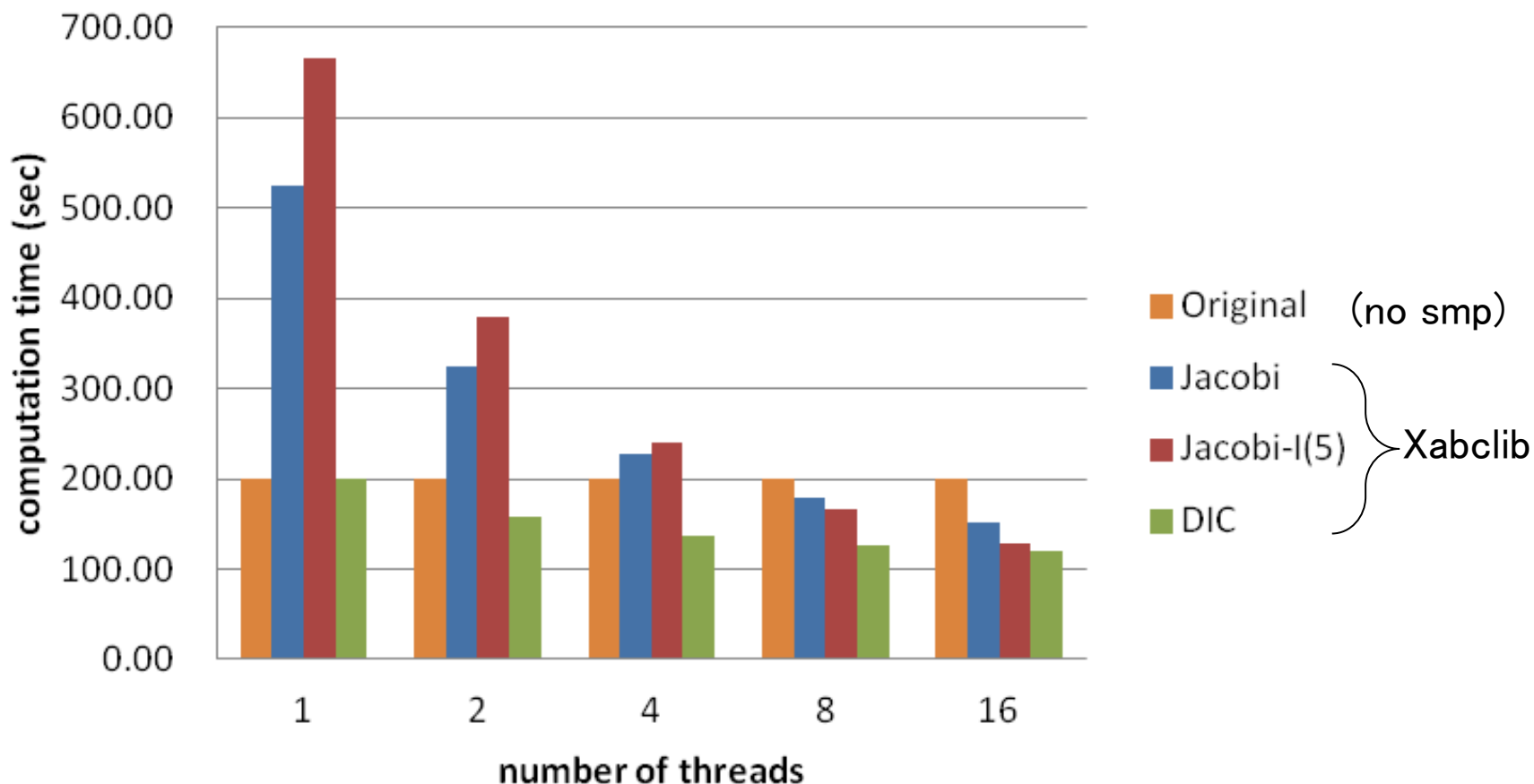
4-6. pitzDailyの非対称問題の反復回数

- 1回あたりの反復回数は非常に少ない
 - ◆ 全ての前処理で反復回数は14回以下
- pitzDailyの非対称行列は非常に解きやすい



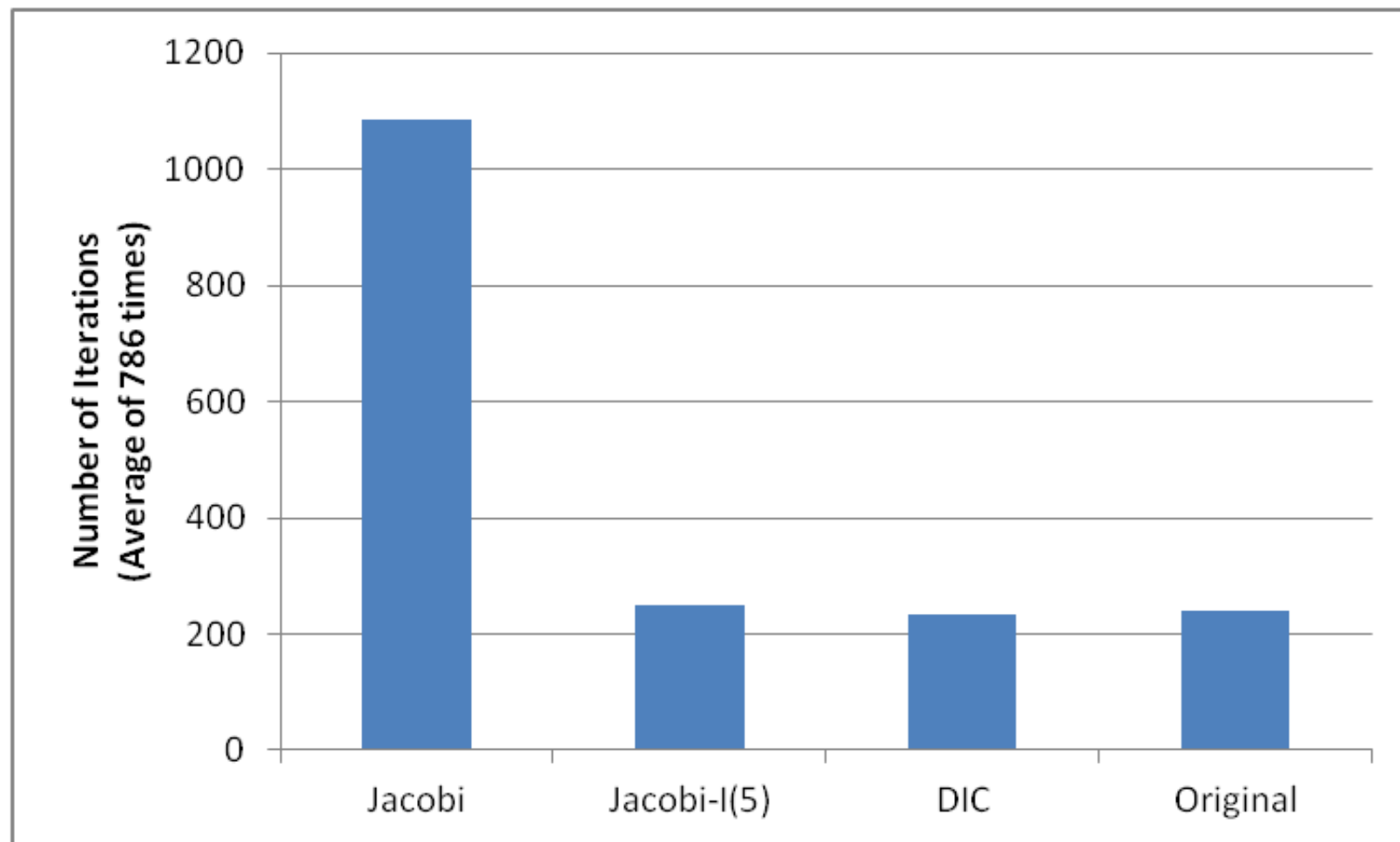
4-7. pitzDailyの対称問題の演算時間

- 786回の呼び出しの合計値
- Xabclibにより、1スレッド時は0.99倍 (DIC+PCG)
16スレッド時は1.6倍に高速化(DIC+PCG)



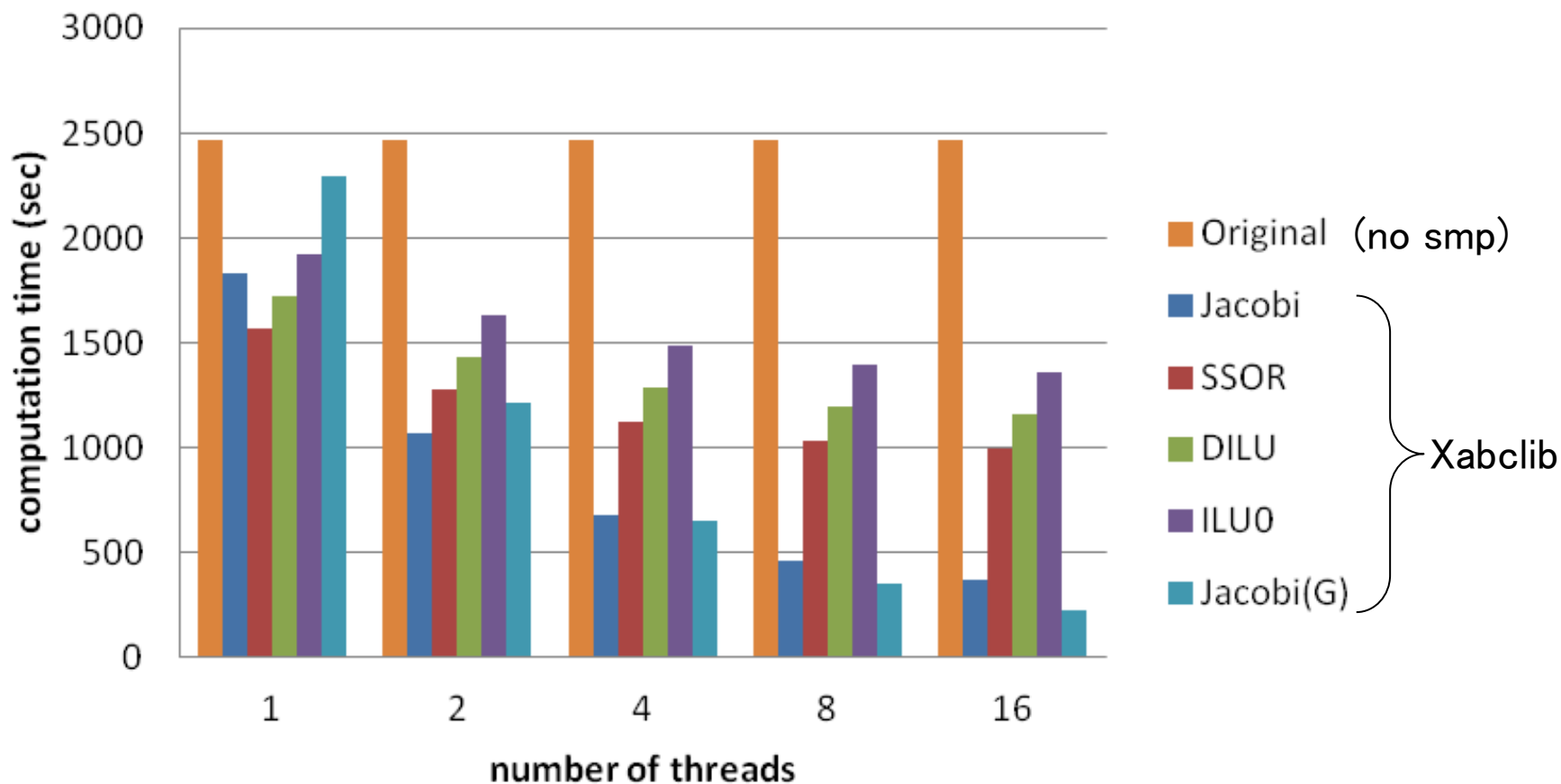
4-8. pitzDailyの対称問題の反復回数

- 反復回数はDICで240回以上、Jacobiだと1,000回以上
 - ◆ DICの場合、オリジナルとXabclibでほぼ同数
- 対称行列は非対称行列と比べ解きづらい



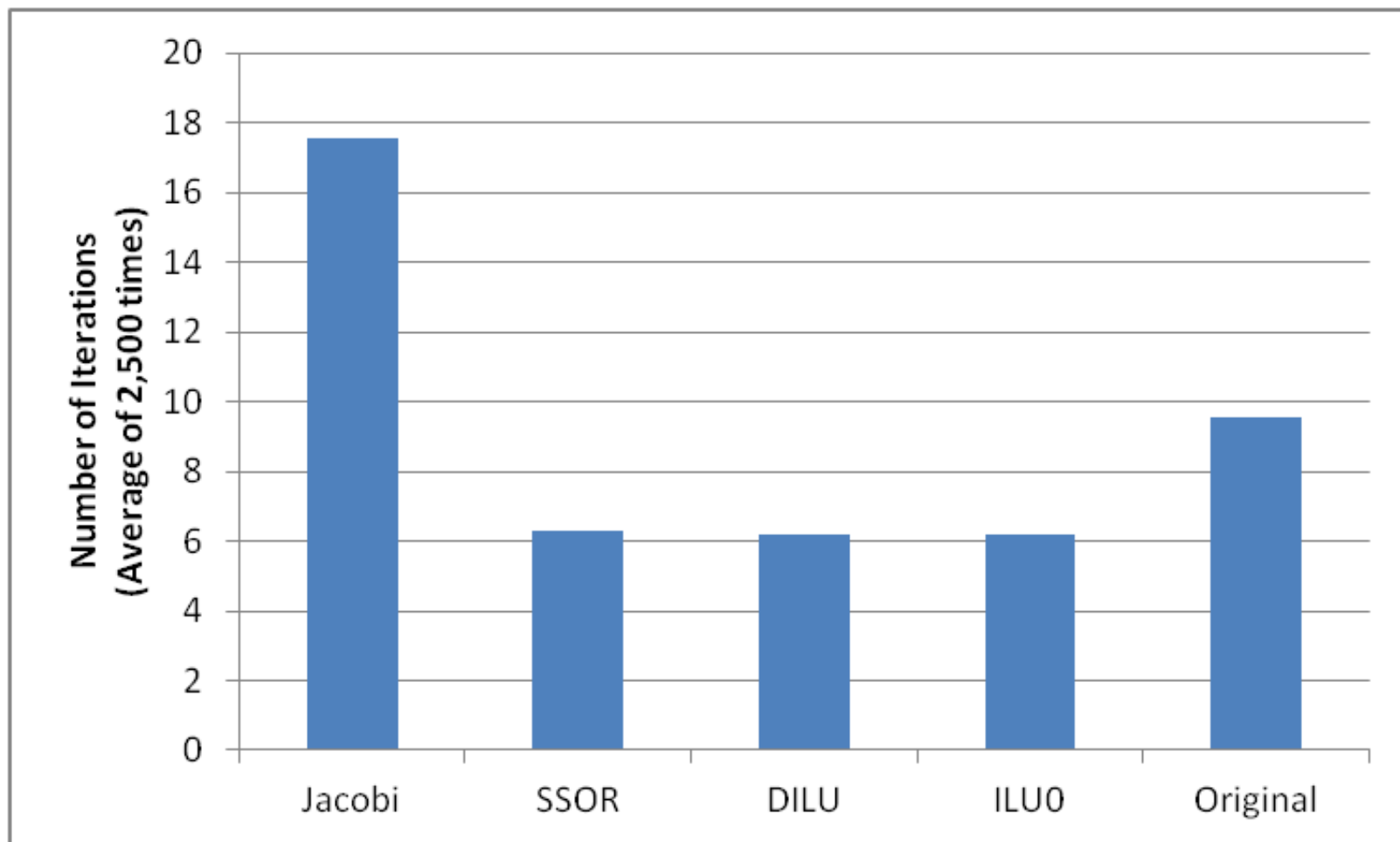
4-9. motorBikeの非対称問題の計算時間

- 2,500回の呼び出しの合計値
- Xabclibにより、1スレッド時は1.6倍に高速化 (SSOR+BiCGStab)
16スレッド時は11.1倍に高速化(Jacobi+GMRES)



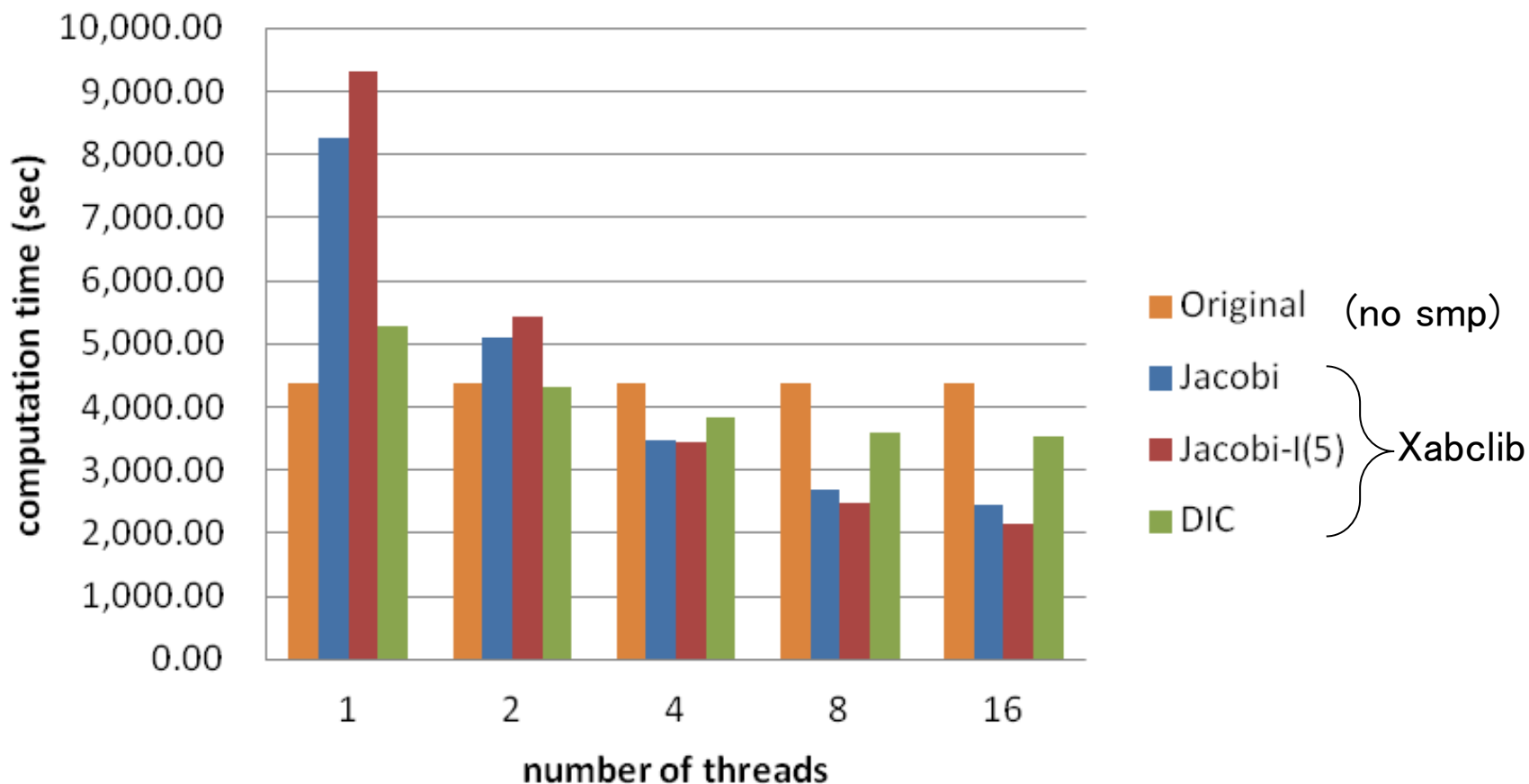
4-10. motorBikeの非対称問題の反復回数

- 1回あたりの反復回数は非常に少ない
 - ◆ 全ての前処理で反復回数は18回以下
- motorBikeの非対称行列は非常に解きやすい



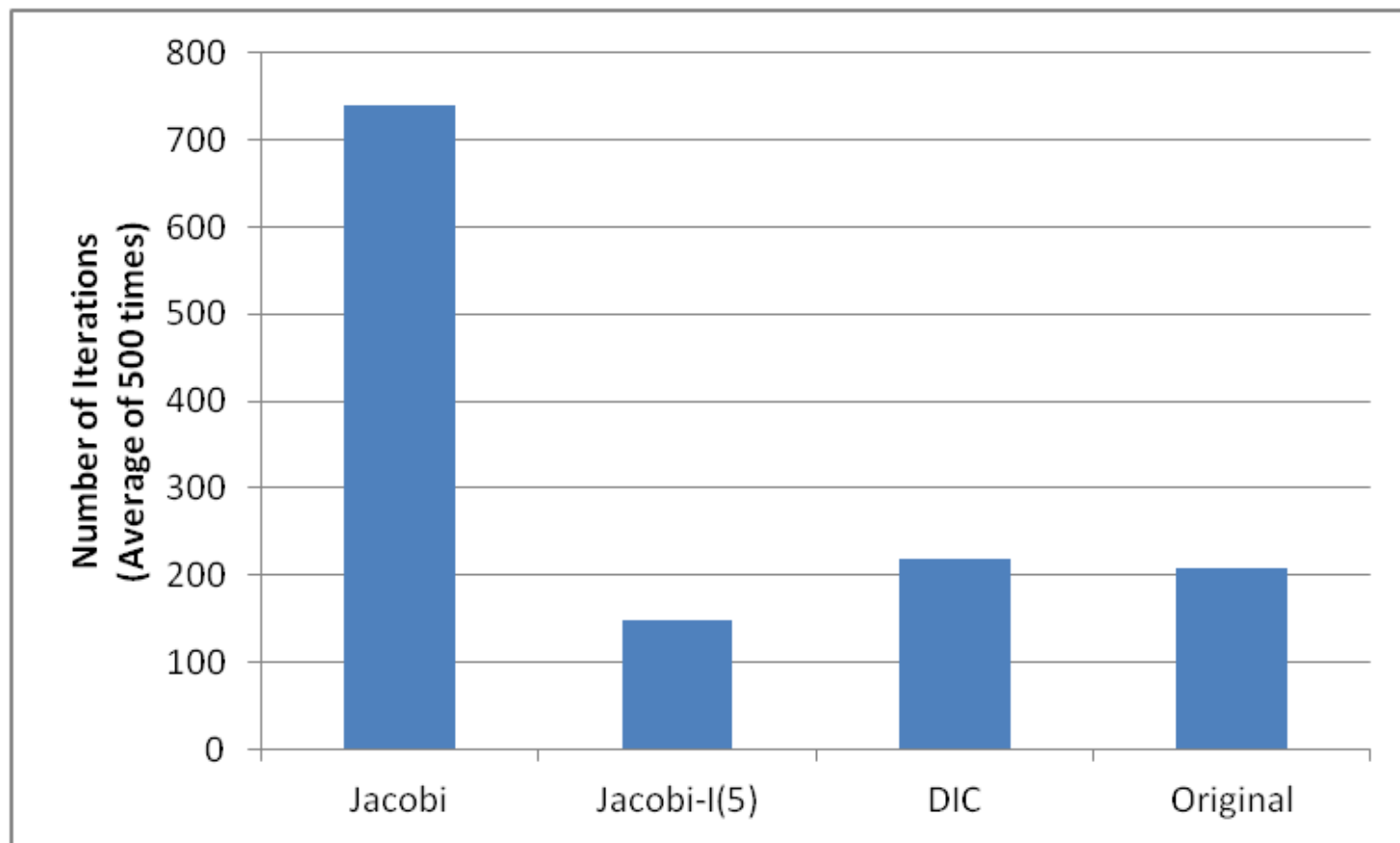
4-11. motorBikeの対称問題の演算時間

- 500回の呼び出しの合計値
- Xabclibにより、1スレッド時は0.83倍 (DIC+PCG)
16スレッド時は2.04倍に高速化(Jacobi_I+PCG)



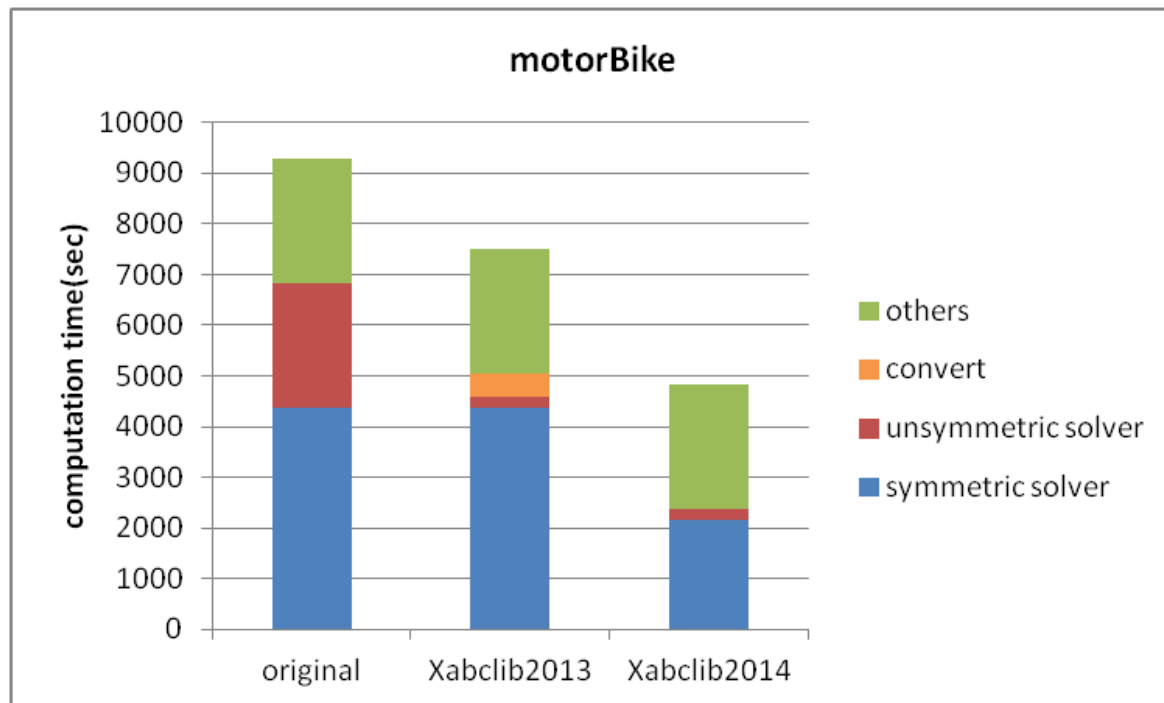
4-12. motorBikeの対称問題の反復回数

- 反復回数はDICで200回以上、Jacobiだと700回以上
 - ◆ DICの場合、オリジナルとXabclibでほぼ同数
 - ◆ Jacobi反復型解法はCG法の反復は少ないが5倍Jacobi法で反復
- 対称行列は非対称行列と比べ解きづらい



4-13. motorBike全体での効果

- 演算時間の70%を占める行列計算部分が16スレッドの並列化により加速
 - ◆ 非対称は16スレッドで11.1倍と大幅に高速化
 - ◆ 対称は16スレッドで2.04倍にとどまる
 - ◆ 前バージョンと比べ行列変換時間が大幅に短縮
- チュートリアル全体としては1.92倍の高速化



- 自動チューニング(AT)インターフェースOpenATLibの機能とそれを利用したAT機能付疎行列ライブラリXabclibを紹介
- OpenFOAMのソルバをXabclibに差し替える機能を開発
- 2つのチュートリアルで評価した結果、16SMPで非対称ソルバ部分が最大11.1倍に高速化、対称ソルバ部分は最大2.04倍に高速化
- チュートリアル全体では最大で1.92倍
- 今後の課題
 - MPI並列との比較
 - Xabclibの自動チューニング機能の効果の評価
 - Xabclibによるハイブリッド並列化の実現
 - 強力な前処理による悪条件問題の収束性向上効果の評価
- 連立一次方程式解法部分でお悩み(遅い、解けない)方がいらっしゃいましたらご連絡ください
- Xabclibは以下で公開中

<http://www.abc-lib.org/Xabclib/index-j.html>

ご静聴ありがとうございました

実行時自動チューニング機能付き疎行列反復解法ライブラリXabclib