HITACHI
Inspire the Next

第5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

2013/12/25

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)
直野健(日立製作所)
猪貝光祥(日立超LSIシステムズ)

© Hitachi, Ltd. 2013. All rights reserved.

発表の概要

HITACHI
Inspire the Next

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の疎行列ソルバをXabclibに差し替え
   - チュートリアルのsimpleFoamで性能の初期評価
4. まとめ

© Hitachi, Ltd. 2013. All rights reserved.

発表の概要

HITACHI
Inspire the Next

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の疎行列ソルバをXabclibに差し替え
   - チュートリアルのsimpleFoamで性能の初期評価
4. まとめ

© Hitachi, Ltd. 2013. All rights reserved.

1. Xabclib と OpenATLib

HITACHI
Inspire the Next

- 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

© Hitachi, Ltd. 2013. All rights reserved.

2-1. Xabclibの提供機能

HITACHI
Inspire the Next

- 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、
    対称用は無し
- 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

© Hitachi, Ltd. 2013. All rights reserved.

2-1. Xabclib

HITACHI
Inspire the Next

- 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）

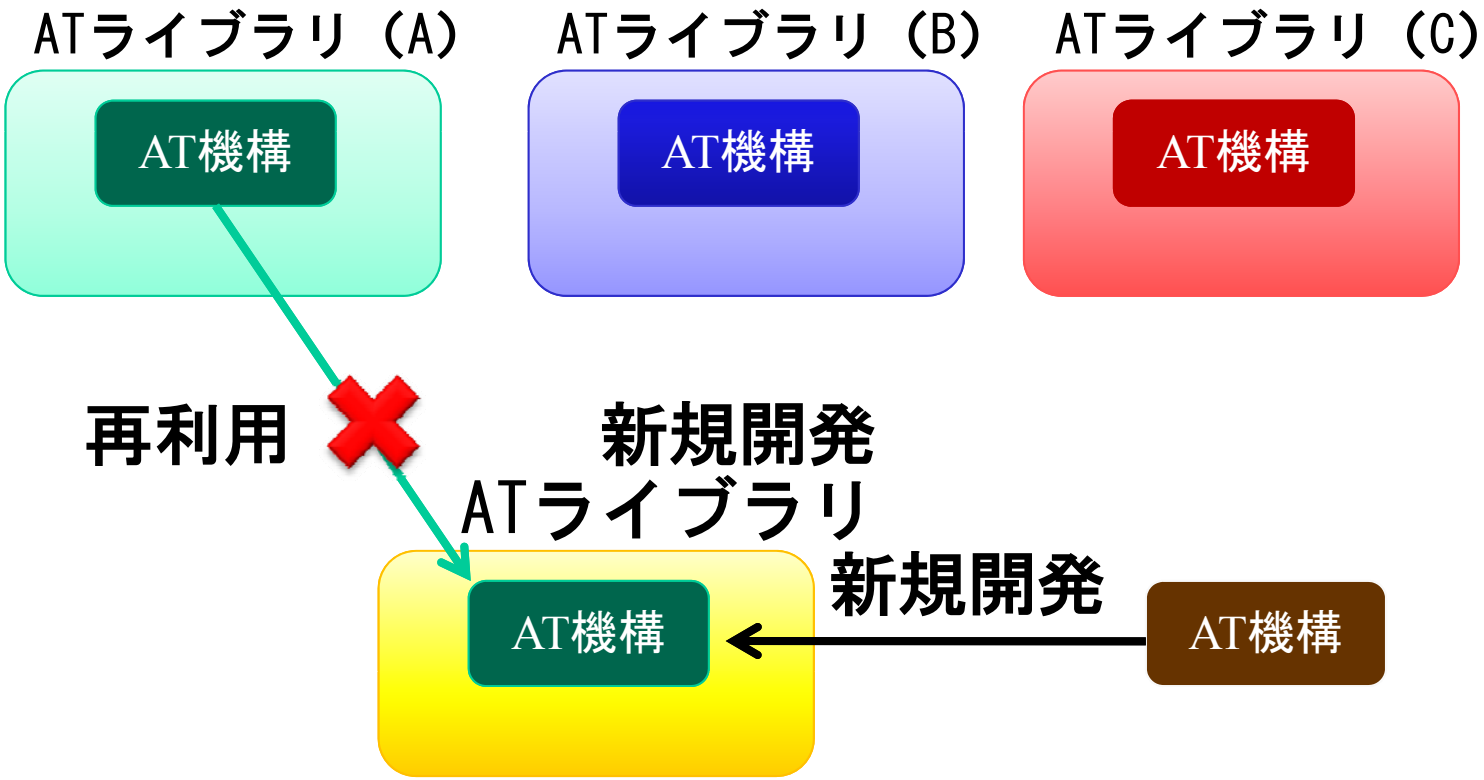
●標準固有値問題（Ax=λx）

- Xabclib_LANCZOS（Lanczos法）：対称行列用
- Xabclib_ARNOLDI（Arnoldi法）：非対称行列用

© Hitachi, Ltd. 2013. All rights reserved.

2-2. OpenATLibの目的

- 個々に開発されてきて他のライブラリで利用できない
  AT機構に再利用性を付加

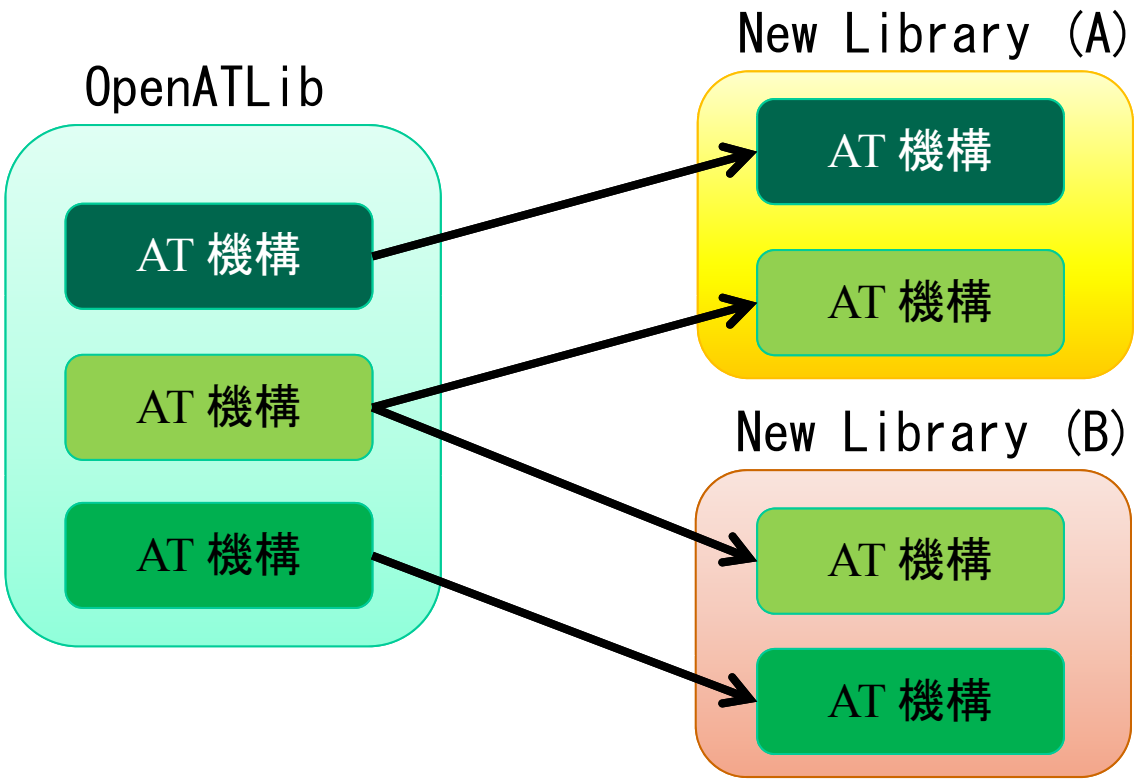


© Hitachi, Ltd. 2013. All rights reserved.

2-2. OpenATLibの開発

HITACHI
Inspire the Next

- 発表者らは自動チューニングインターフェースOpenATLibを開発
- OpenATLibは低コストでAT機能付ライブラリを開発するために様々なAT機能を提供
- 提供するのは実行時のAT機能



© Hitachi, Ltd. 2013. All rights reserved.

2-3. OpenATLibのAT機能

HITACHI
Inspire the Next

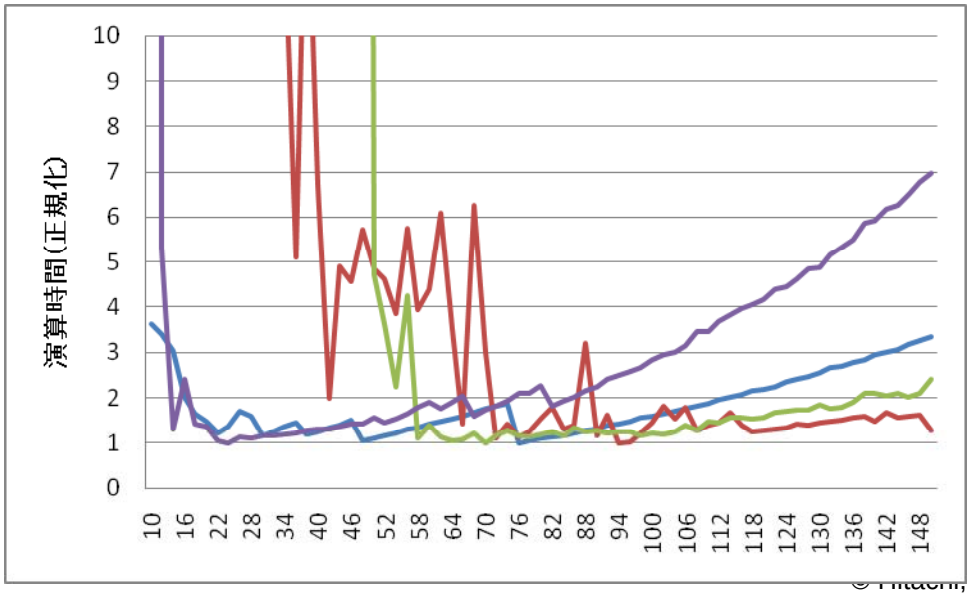
- 以下の実行時AT機能を提供
  - ◆パラメータ選択機能
    - ・リスタート周期自動選択
  - ◆実装方式選択機能
    - ・疎行列ベクトル積自動選択(SpMxV)
      - 行分割方式
      - 非零要素分割方式
      - リダクション並列演算最適化
      - Branchless Segmented Scan (BSS)
  - ◆アルゴリズム選択機能
    - ・複数のグラムシュミット再直交化アルゴリズム提供
      - BCGS, MGS, DGKS
  - ◆数値計算ポリシーインターフェース
    - ・ユーザが望む条件(ポリシー)を元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

© Hitachi, Ltd. 2013. All rights reserved.

2-4. リスタート周期選択機能 OpenAT_DAFRT（1/2）

HITACHI
Inspire the Next

- Krylov部分空間法のリスタート周期Mは事前選択が困難
  - Mの値は大きすぎても小さすぎても性能が劣化
    - Mが大きすぎる場合：部分空間の1回あたりの作成時間が増加
    - Mが小さすぎる場合：部分空間が入力行列Aの要素を強く射影しないため
      収束までに必要な部分空間の作成回数（反復回数）が増加
  - Mの選択を間違えると演算時間が10倍以上増加
  - 最大の性能が得られるM_bが存在
  - M_bは入力行列によって異なる
- OpenAT_DAFRTは演算実行中にM_bを探索



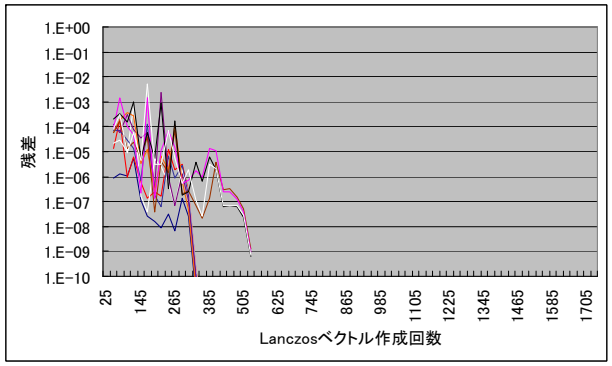
© Hitachi, Ltd. 2013. All rights reserved.

2-4. リスタート周期選択機能OpenAT_DAFRT(2/2)

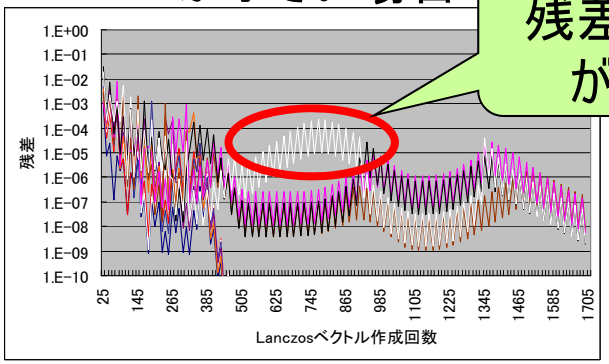
HITACHI Inspire the Next

■mが小さい場合、残差の停滞が発生

mが大きい場合



mが小さい場合



残差の動きが停滞

■残差の停滞を表すパラメータとして下のMM比を定義

$$MM\text{比}：R(s,t)=\frac{\max_z\{r(z);z=s-t+1,\cdots,s\}}{\min_z\{r(z);z=s-t+1,\cdots,s\}}$$

($r(z)$:z番目のサンプリング値)

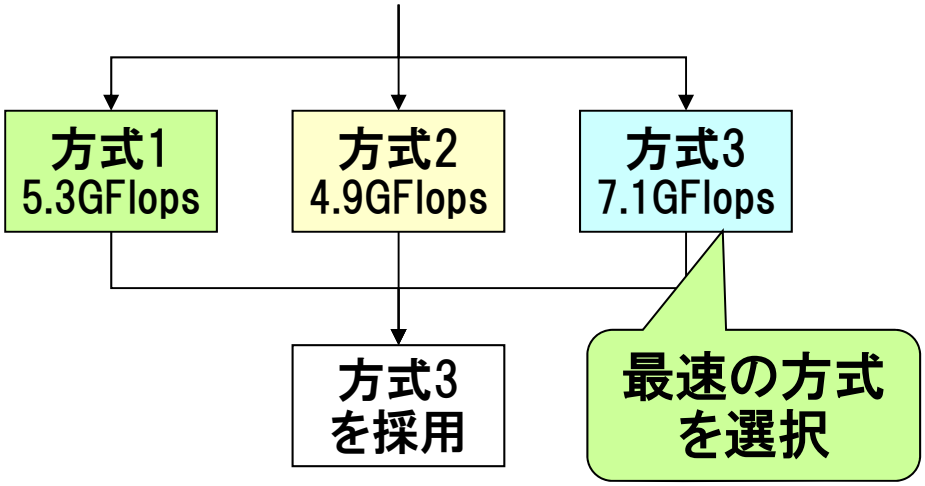
■演算開始時はmを小さい値に設定し、MM比が一定値を下回った際に少しずつmを大きくするとm_{th}に近い値で演算が可能

© Hitachi, Ltd. 2013. All rights reserved.

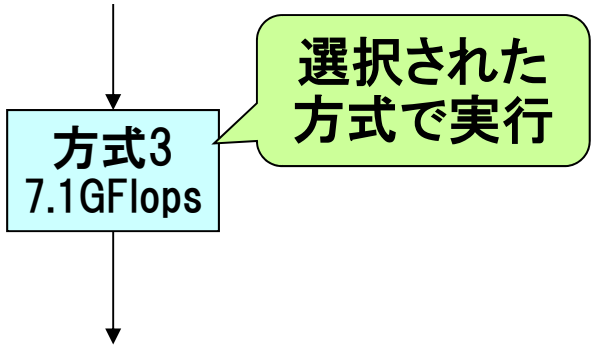
2-5. 行列-ベクトル積実装方式選択機能OpenAT_D{S|U}RMV

HITACHI
Inspire the Next

- 疎行列-ベクトル積の性能は行列の特性、計算機環境などにより大きく変化
- 最適な実装方式もそれらにより異なる
- OpenAT_D{S|U}RMVは演算開始時に複数の実装方式を試し、 最も高い性能を示した実装方式を以後の演算で用いる



初回の行列-ベクトル積



以後の行列-ベクトル積

© Hitachi, Ltd. 2013. All rights reserved.

2-5. 行列-ベクトル積実装方式選択機能OpenAT_D{S|U}RMV

HITACHI
Inspire the Next

■OpenATI_DSRMV（対称疎行列用）

- S1) 行分割方式（RDM）
- S2) 非零要素均等化方式（NNZ)(負荷バランス化RDM)
- S3) 並列リダクション時に零演算を除去したRDM

■OpenATI_DURMV（非対称疎行列用）

- U1)行分割方式（RDM）
- U2)非零要素均等化方式（NNZ)(負荷バランス化RDM)
- U3) Branchless Segmented Scan(BSS)法
  （スカラマシン用）
- U4) オリジナルSegmented Scan法
  （ベクトルマシン用）

© Hitachi, Ltd. 2013. All rights reserved.

2-6. 前処理・解法自動選択機能の必要性

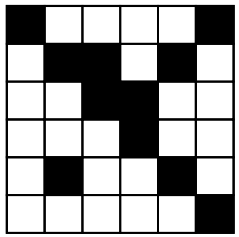
HITACHI
Inspire the Next

■連立一次方程式$Ax = b$を解くための疎行列向けの反復解法やその収束性を向上させるための前処理法は多くの種類が提案されている

- ユーザはその中から自分の行列に合わせ任意の組合せを選択し実行

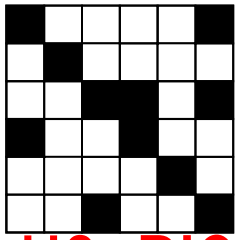
■選択を誤った場合、演算時間の増大や解が得られない等の問題が発生

Matrix A



○ ILU0+BiCGStab
× ILUT+GMRES(m)

Matrix B



× ILU0+BiCGStab
○ ILUT+GMRES(m)

■未知の行列の対し、適切な組合せを事前に予測するのは困難

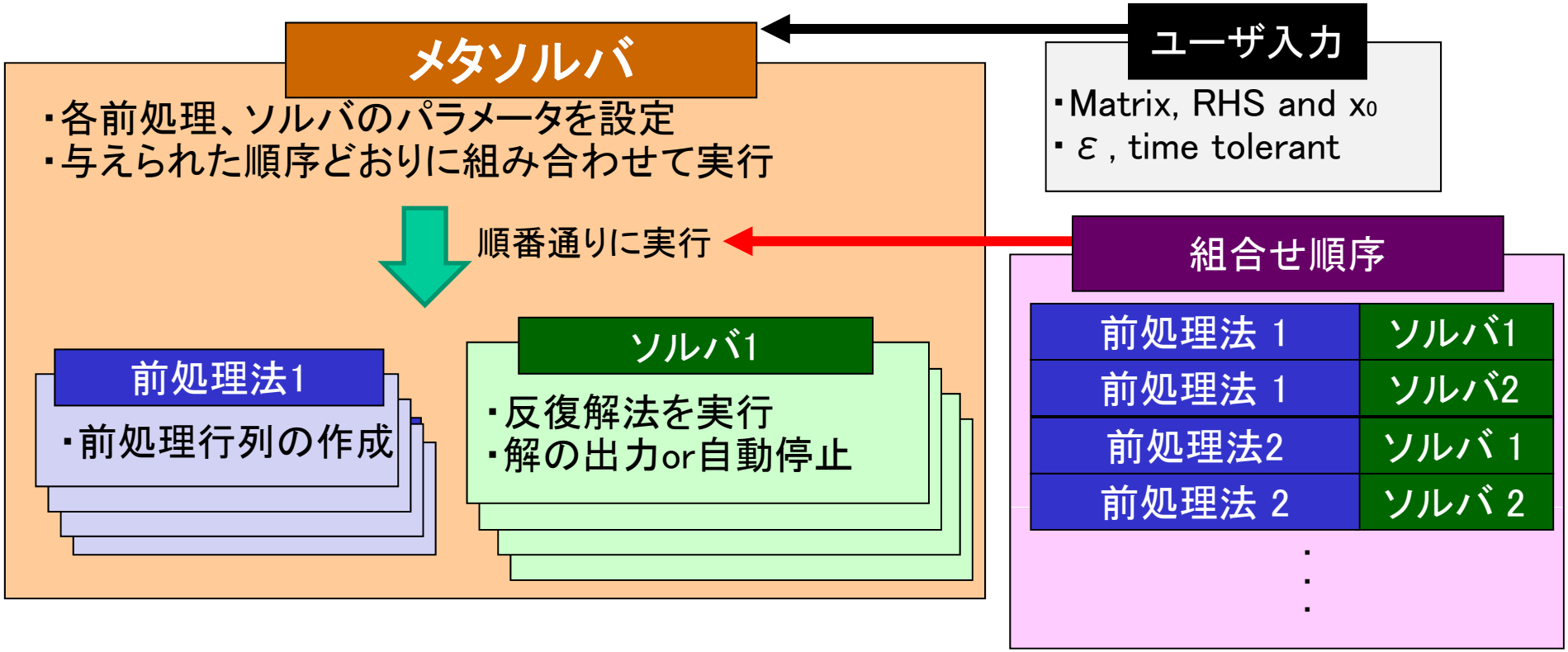
■これらの組合せを実行時に自動的に選択する仕組みが必要

© Hitachi, Ltd. 2013. All rights reserved.

2-6. 前処理・ソルバ自動選択方式(1/3)

HITACHI
Inspire the Next

- 自動選択方式は2つの機能から構成
  - ①メタソルバ:ユーザの要求(時間、精度)を満たすように手持ちのソルバの中で用意された前処理・解法の組合せを順に実行
  - ②自動停止機能付ソルバ:時間内に収束するか停滞するか予測し、停滞と予測される時は自動的に演算を停止



3-1. OpenFOAMへの適用と評価

HITACHI
Inspire the Next

- OpenFOAM
  (Open source Field Operation And Manipulation)
  - オープンソースのCFDソフトウェアパッケージ
  - 疎行列ソルバを標準搭載
    - PCG法（対称行列向け）、PBiCG法（非対称行列向け）
  - 標準の非対称行列向けソルバをXabclibに差し替えてチュートリアルで評価
    - 評価したチュートリアルはsimpleFome/pitzDaily
    ($OPENFOAM)/tutorials/incompressible/simpleFoam/pitzDaily
    - 言及の無いパラメータは全てDefault値を使用

© Hitachi, Ltd. 2013. All rights reserved.

3-5. 評価内容

HITACHI
Inspire the Next

- OpenFOAMの反復解法ソルバとXabclibの演算時間を比較
  - 非対称行列（U_x,U_y, k, ε）の求解のみ、対称行列（p）は対象外
  - Xabclibの方では、行列の格納形式変換の時間は含まない
- それぞれの条件は以下の通り

項目	OpenFOAM	Xabclib
バージョン	2.1.0	1.02
反復解法	PBiCG	BiCGStab
前処理	DILU	ILU0
行列格納形式	COO	CRS
スレッド数	1	1, 16
AT	-	DURMV（SpMV）
収束条件（共通）	1.0E-08, 1.0E-12 ※	

※pitzDailyのDefault値では収束条件は初期残差の0.01倍

© Hitachi, Ltd. 2013. All rights reserved.

3-6. 評価環境

HITACHI
Inspire the Next

- 以下のサーバを使用

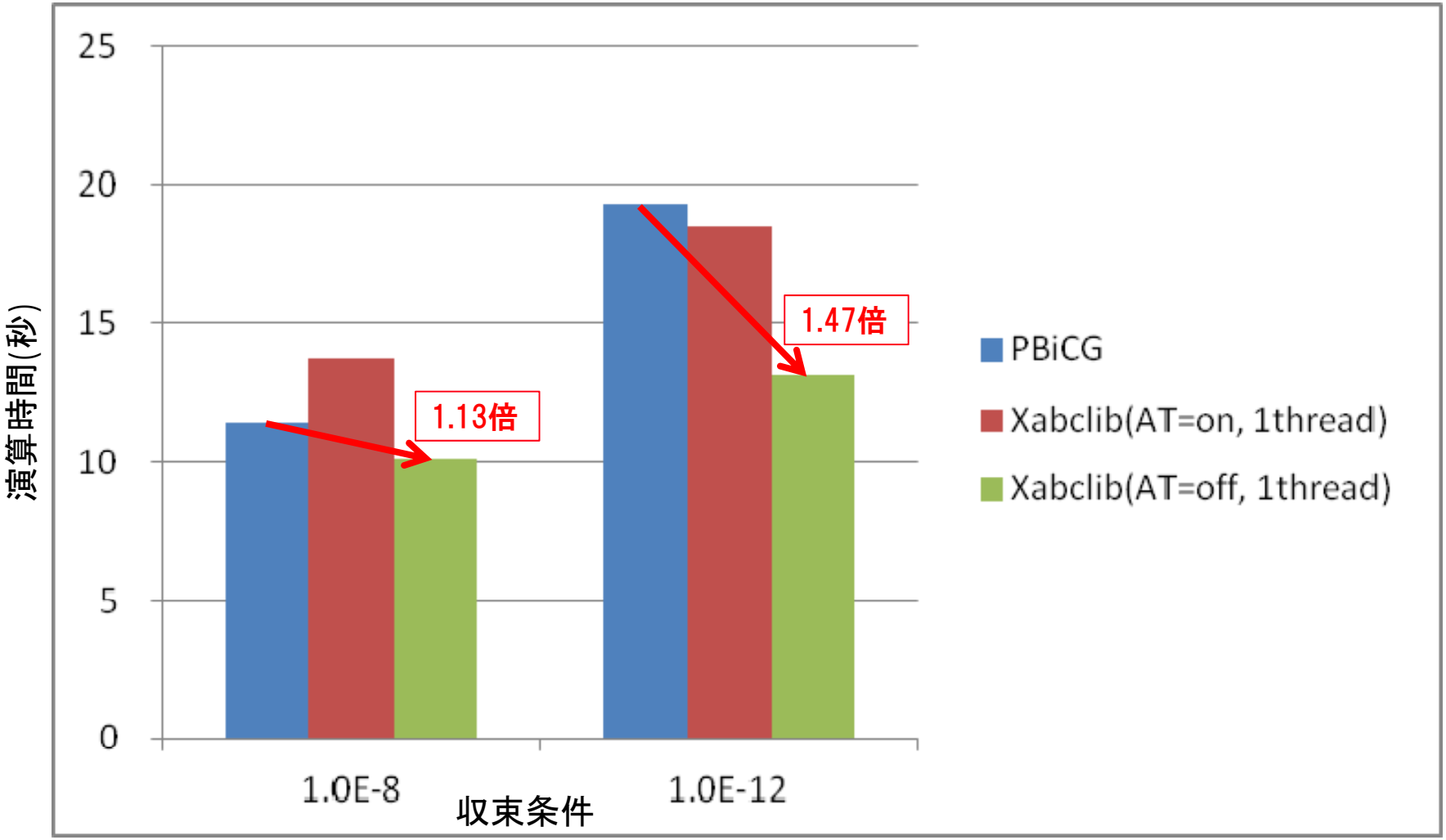
CPU	Intel(R) Xeon(R) E5-2680 (SandyBridge) 2.7GHz , 2socket, 16 core/node
L1 Cache Size	32 Kbyte/core
L2 Cache Size	256 Kbyte/core
L3 Cache Size	20 MByte/8core
Main Memory	32GByte
OS	CentOS 6.4
Compiler	Gcc/Gfortran 4.4.7 （-O3）

© Hitachi, Ltd. 2013. All rights reserved.

3-7. 評価結果① PBiCGとXabclib（1smp）の比較

HITACHI
Inspire the Next

3012回の反復解法の演算時間の合計値

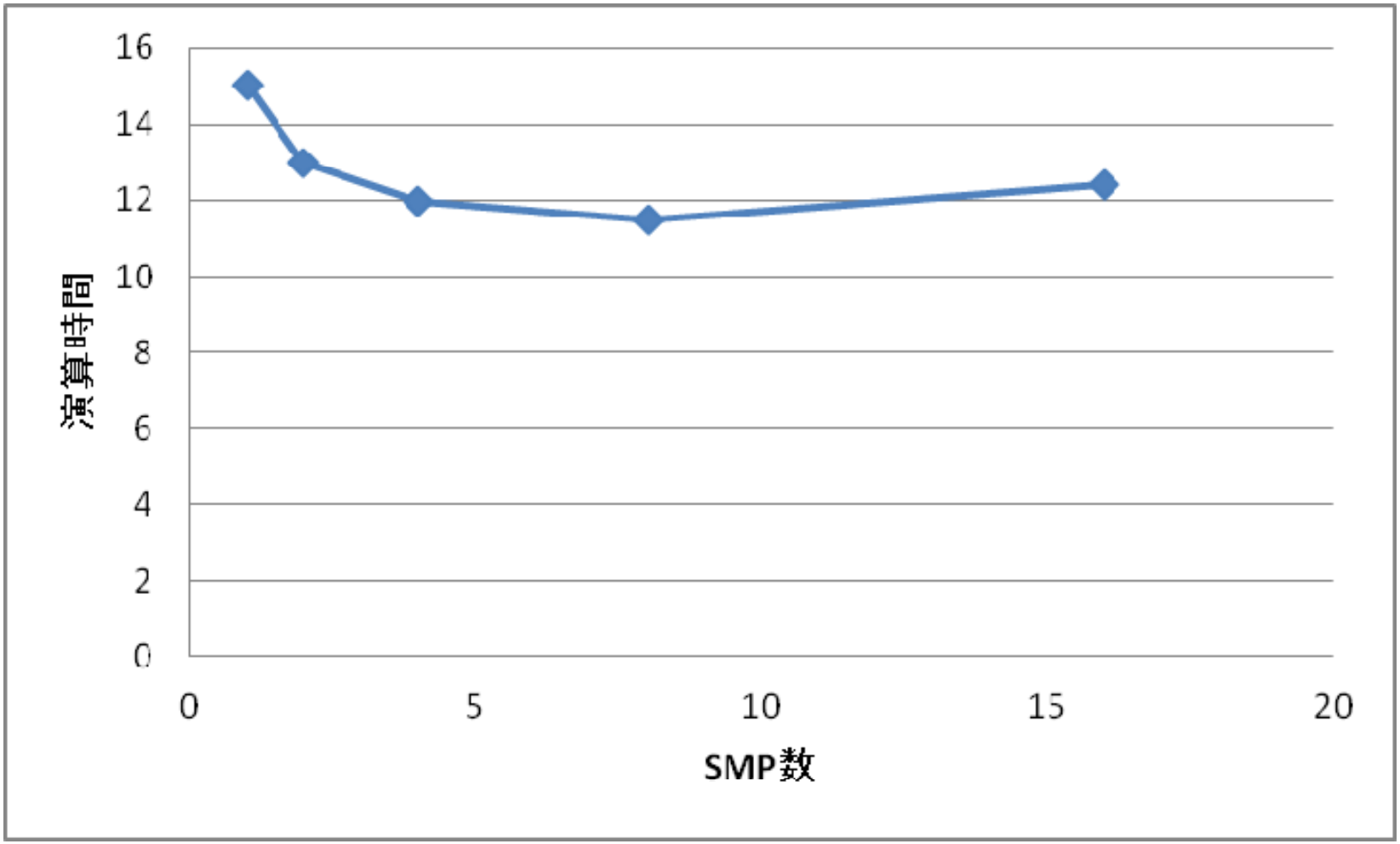


© Hitachi, Ltd. 2013. All rights reserved.

3-8. 評価結果② XabclibのSMP並列化の効果

HITACHI
Inspire the Next

3012回の反復解法の演算時間の合計値

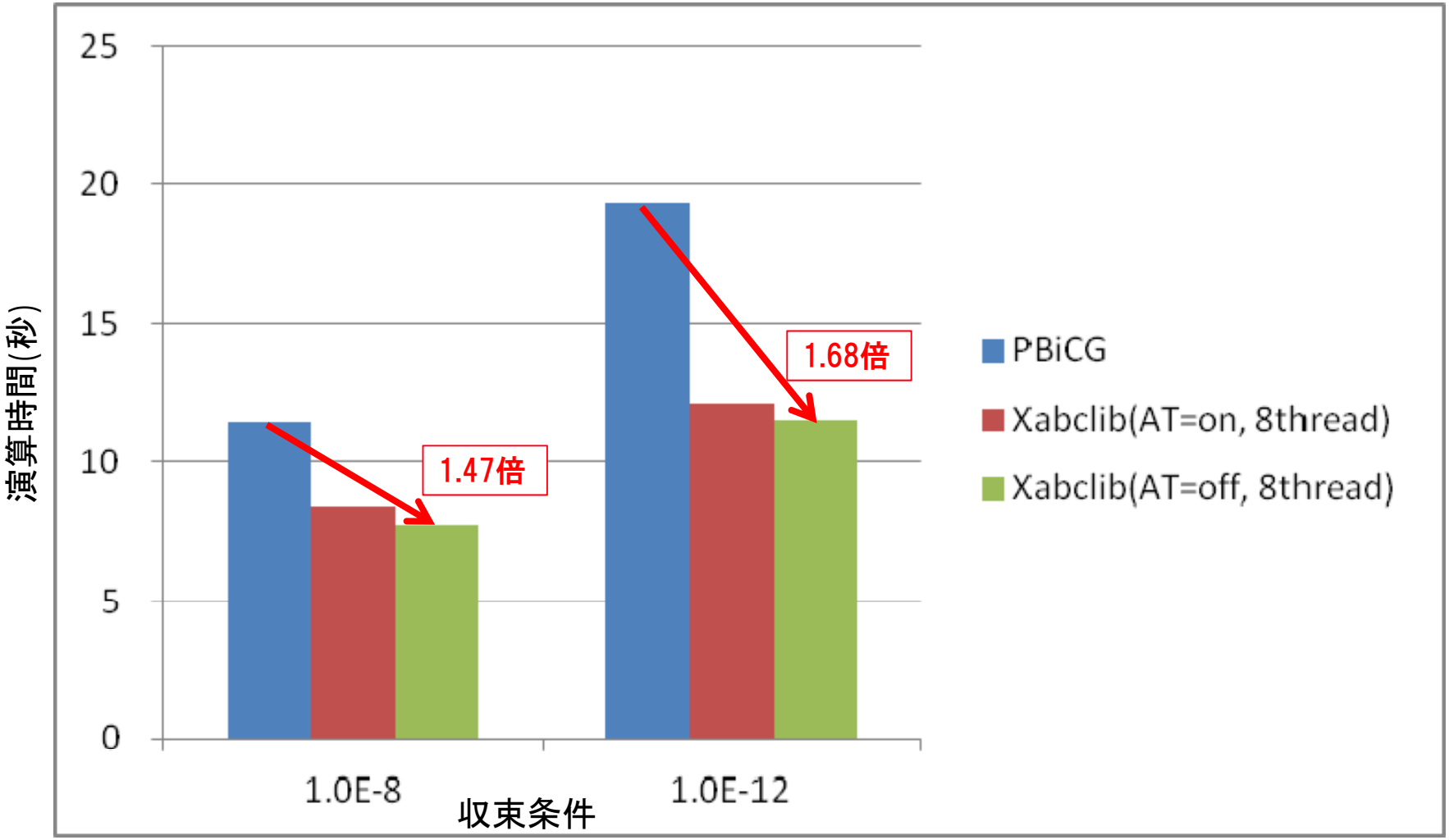


© Hitachi, Ltd. 2013. All rights reserved.

3-9. 評価結果① PBiCGとXabclib(8smp)の比較

HITACHI
Inspire the Next

3012回の反復解法の演算時間の合計値



© Hitachi, Ltd. 2013. All rights reserved.

まとめ

HITACHI
Inspire the Next

- 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の疎行列反復解法ソルバをXabclibに差し替えて性能評価
  - simpleFoam/pitzDailyの行列で1.68倍の高速化を確認（ソルバ部分）
- 今後はより大きな行列、解くことが難しい行列で評価
- ソースコードはXabclibのHPから、無料で入手できます。
  http://www.abc-lib.org/Xabclib/

© Hitachi, Ltd. 2013. All rights reserved.