

# 並列数値計算ライブラリ上での データベースにおける知識発見の利用 — 対称疎行列用の連立一次方程式ソルバを例にして —

黒田 久泰<sup>¶</sup>    片桐 孝洋<sup>¶</sup>    佃 良生<sup>¶</sup>    金田 康正<sup>||</sup>

<sup>¶</sup> 東京大学大学院理学系研究科情報科学専攻

<sup>||</sup> 東京大学大型計算機センター

## 概要

本稿では、並列数値計算ライブラリにおけるパラメータの自動決定の問題について述べる。さらに、データベースにおける知識発見技術を利用した、並列数値計算ライブラリの構築構想について論じる。

## 1 はじめに

近年分散メモリ型並列計算機用の数値計算ライブラリが数多く構築され、かつ自由に入手できるようになってきた。例えば、ScaLAPACK[1] がその一例である。ところが、これらのライブラリを利用するという観点から考えると、必ずしも利用者にとって使い易いインタフェースになっているとは言い難い。なぜならば、これらのライブラリを利用するためには、非常に多くのパラメータを付加しなくてはならないことが多いからである。インタフェースに多くのパラメータを必要とするライブラリは、多機能の電家製品のように、その使い方に手間取ることは明白である。

利便性を高めるために、これら性能に関するパラメータに人手で値を入力するのではなく、自動的に値を最適化して設定することが望ましい。しかもこのことは、高性能を達成することにもなる。この自動最適化の操作は、機種依存の要因を自動的に解決していることと同値で、いわば機種ごとにコードを自動生成することになるからである。

数値計算ソフトウェアにおいて、機種ごとにコードを自動生成する研究は、既になされている。例えば、階層メモリ構造やパイプライン処理を考慮した数学ソフトウェアのコード自動生成と最適化を目指すプロジェクトとして、ATLAS プロジェクト [2] が挙げられる。しかしながら、並列計算を考慮し、ライブラリ単位で数値計算ソフトウェアを最適化する試みはきわめて少ない。そこで本研究では、連立一次方程式のソルバを例として、ライブラリ構築を試みる。

連立一次方程式  $Ax = b$ ,  $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$ ,  $x, b \in \mathbb{R}^n$  の解  $x$  を求める並列数値計算ライブラリの場合、少なくとも以下のようなパラメータをもつ。(i) 使用する計算アルゴリズムの指定 (例えば、SOR 法、共役勾配法 (CG 法) など), (ii) 演算性能に関するパラメータ (例えば、ブロック化アルゴリズムにおけるブロック幅やループ展開の段数など), (iii) 並列処理方式の指定 (例えば、1 対 1 通信を使うか放送機能を使うか)。

ここで (i) のパラメータの自動決定は、一般に解きたい行列の性質を判定することは難しく、非常に困難であることに注意しておく。

## 2 データベースにおける知識発見の利用 ~ 構想 ~

既に述べたように、並列数値計算ライブラリに必要なパラメータの自動決定は非常に多彩な要因を含み、決定が困難であるといえる。この問題を解決するため、近年注目されはじめたデータベースにおける知識発見 (KDD: Knowledge Discovery in Databases) [3] の技術がどれだけ利用できるか検討する。

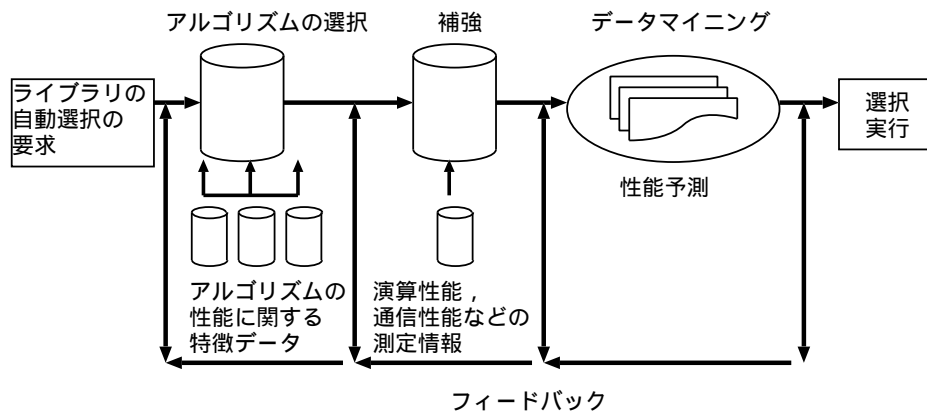


図 1: 並列数値処理ライブラリの自動選択における KDD プロセスの流れ

図 1 に並列数値処理ライブラリの自動選択における KDD プロセスの流れの一例を示す。図 1 では、次に示す 3 つの手順でライブラリの自動選択を決定する。

- (1) アルゴリズムの選択
- (2) 補強
- (3) データマイニング

(1) アルゴリズムの選択では、利用者にいどんな問題を扱っているか問い合わせをすることで、どのアルゴリズムが有効かを決定する。この手順は、いわゆるエキスパートシステムと同様の処理をしているといえる。(2) 補強では、(1) で得られた知識を補強するためのデータを付加する部分である。最後の (3) データマイニング部分は、(1)、(2) で得られた知識をもとに性能予測を行い、その結果に基づき、実際にライブラリの選択を行う。

以降、疎行列を係数に持つ連立一次方程式のライブラリ選択に限定して、各手順の内容を説明する。

## 2.1 アルゴリズムの選択

この手順では、先述の通りエキスパートシステムと同様の処理を行うことを目的とする。疎行列を係数行列にもつ、連立一次方程式の解法アルゴリズムの場合、図 2 に示される手順で決定するのが良いとされる [4]。

図 2 の手順どおり、利用者に問い合わせを行い、その結果をファイルとして保存する。

## 2.2 補強

この手順では、アルゴリズムの選択から得られた複数のアルゴリズムについて、さらに有用となる情報を付加する。考えられる情報例としては、実測に基づくプロセッサの演算性能、実測に基づく通信性能、およびキャッシュメモリサイズなどのハードウェア情報などが挙げられる。

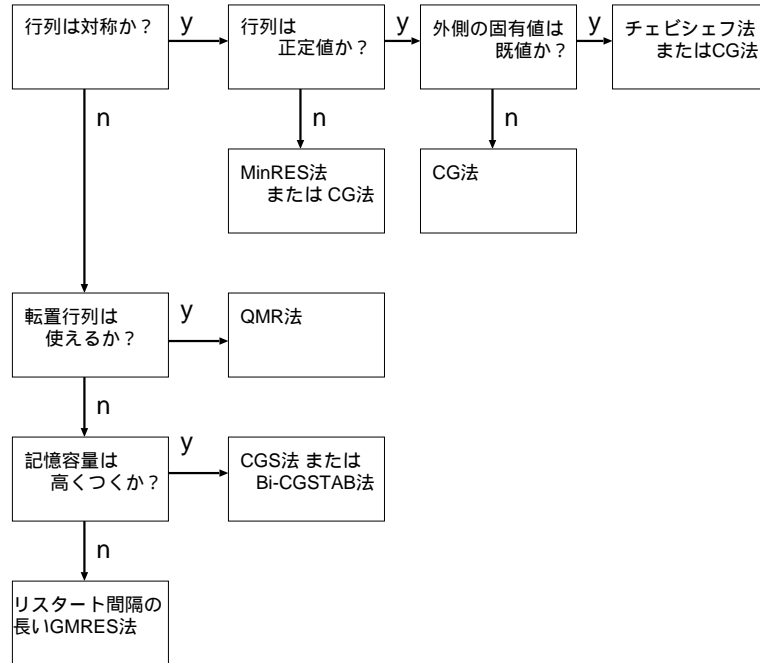


図 2: 反復法選択のおすすめを示す流れ図 [4]

### 2.3 データマイニング

手順 (1), (2) から得られた知識に基づき, 最良のライブラリを発見する手順である. 知識を利用して用意されている複数のライブラリの実行時間を予測する. このとき, なんらかの統計処理を行い, 実際の実行時間を推定することが必要と考えられる.

## 3 現状

現状では, KDD の全ての手順を含むライブラリは実現できていない. 前提として, 利用者は解くべき問題は正値実対称疎行列であり, そして解法として CG 法が有効であることを知っていると仮定する.

### 3.1 自動チューニング機能 [5]

正値実対称疎行列を係数行列  $A$  にもつ連立一次方程式を, 分散メモリ型並列計算機を用いて (すなわち, メッセージ交換機能を用いて) CG 法で解く場合, 以下の項目を指定する必要がある.

- (a) 非零要素の位置に特化した計算方式の選択
- (b) 疎行列 - ベクトル積 ( $Ap, p \in \mathbb{R}^n$ ) におけるループ展開段数の選択
- (c) 通信方式の選択

[(a) に関して]: CG 法は正値実対称疎行列を係数行列にもつ連立一次方程式の効率的な解法の一つとして広く知られている [4] が, 疎行列の非零要素の性質によって, より効果的な CG 法の計算方式を構築できることがある. そこで本ライブラリでは, 特定の非零要素の型を検索することで, 以下のように計算方式を自動選択する. (1)

三重対角：三重対角用 LU 分解法（逐次ルーチン），(2) 5 点差分：5 点差分に特化した不完全コレスキー分解前処理付き CG 法（並列ルーチン），(3) その他：前処理付き CG 法（並列ルーチン）．ここで，(3) の前処理には 2-step Jacobi 前処理を用いている．具体的には， $A$  がスケーリング済みの行列とすると， $M^{-1} = (I - L - U)$ ，（ここで  $L$  は  $A$  の対角要素を除く下三角行列，同様に  $U$  は上三角部分）を前処理行列とする．

[(b) に関して]：疎行列とベクトルの積を行う場合において，一般的に  $A[i] * p[ind[i]]$  のような間接参照がなされる．この場合， $i$ -ループ に関して  $n$  段展開すると

$$A[i+1] * p[ind[i+1]] + A[i+2] * p[ind[i+2]] \\ + \dots + A[i+n] * p[ind[i+n]]$$

のようになる．このループ展開により，演算が高速化される場合がある．しかし，この段数はレジスタ数などの機種依存の要因で決まることから，同一段数の展開コードは全ての計算機で最適ではない．本ライブラリでは，1 行当たりの非零要素数がある数以下の場合，列方向に 1, 2, 3, 4, 8 段の展開済のコード（プリフェッチ向きコードを含む二種）を用意する．そして CG 法反復に入る前に数回，あるループ長で展開コードを用いた行列-ベクトル積時間を測定することで，最速のループ展開コードを選択する．

[(c) に関して]：疎行列-ベクトル積を並列に行う場合，メッセージ交換による通信が必要になる．この通信処理は疎行列の非零要素の位置に依存する．ところが，対象の疎行列と使用する PE 数を固定した場合でも，その通信の実装方法により通信時間が増加することがある．例えば通信ライブラリの標準規格の 1 つである MPI(Message Passing Interface) を用いて実装するとする．このときベクトルの要素を集める操作をする場合，(I) MPI が提供する高機能なルーチンを用いるか，(II) 低機能な 1 対 1 通信を用いて自分で実装するか，選択の余地がある．もしベンダが十分高性能な MPI ルーチンを提供している場合は (I) の実装法が有効となるが，そうでないなら (II) の実装法が有効になるだろう．本ライブラリでは，あらかじめ (I)(II) の実装法の実行時間をチェックして有効な実装法を自動的に選択する．このとき，(I) の実行時間と比較して，(II) の実行時間が一度に何回 1 対 1 通信が発生する場合まで有効か調べ，その値を保存する．この値により，疎行列の非零要素の位置が変化しても，反復に入る前に通信回数を数えることで，高速な実装方式の選択が可能となる．

## 3.2 実験結果

ディリクレ境界条件を持つ 2 次元単位領域におけるポアソン方程式  $-\nabla(k\nabla u) = f$  in  $\Omega = (0, 1) \times (0, 1)$  with  $u = 0$  on  $\partial\Omega$  において，領域を  $512 \times 512$  のメッシュで離散化を行う．この問題に対して，日立 SR2201 (16PE 使用) を用いて実験を行った．なお，この実験での本ライブラリのコンパイルには，以下に示す二種のコンパイラオプションを用いる．

[オプション -W0, 'opt(o(0))' : 非最適化版]

Unroll=( $\alpha$ ,  $\beta$ ) は列方向  $\alpha$  段，行方向  $\beta$  段のループ展開段数を示す．：の後の数字は時間で単位は秒である．なお計算方式の自動判定では，(3) その他の計算方式を自動選択した．

```
----- How To Unroll - Auto Tuning
Unroll=(1,1): 0.028979  Unroll=(1,5): 0.011536
Unroll=(2,5): 0.011182  Unroll=(3,5): 0.011747
Unroll=(4,5): 0.012301  Unroll=(8,5): 0.012612
Prefetch Unroll=(1,5): 0.015810
Prefetch Unroll=(2,5): 0.012946
Prefetch Unroll=(3,5): 0.013595
Prefetch Unroll=(4,5): 0.013683
```

```

Use Unroll = (2,5)
----- How To Communicate - Auto Tuning
MPI_Allgather :0.025872 One -> All :0.068234
Isend -> Irecv:0.001735 Irecv -> Isend:0.001160
Use Irecv -> Isend
iteration=886, |b - Ax|_inf = 9.25385e-06
Elapsed time: 66.984 sec

```

[オプション -W0,'pvec(diag(1)),opt(o(s))': 最適化版]

```

----- How To Unroll - Auto Tuning
Unroll=(1,1): 0.009183 Unroll=(1,5): 0.002914
Unroll=(2,5): 0.003558 Unroll=(3,5): 0.004161
Unroll=(4,5): 0.004656 Unroll=(8,5): 0.005819
Prefetch Unroll=(1,5): 0.002748
Prefetch Unroll=(2,5): 0.009551
Prefetch Unroll=(3,5): 0.008503
Prefetch Unroll=(4,5): 0.011034
Use Prefetch Unroll = (1,5)
----- How To Communicate - Auto Tuning
MPI_Allgather :0.025955 One -> All :0.068980
Isend -> Irecv:0.001770 Irecv -> Isend:0.000981
Use Irecv -> Isend
iteration=886, |b - Ax|_inf = 9.25851e-06
Elapsed time: 43.116 sec

```

以上の実験結果から、我々のアプローチによるループ展開段数や通信実装方式などの自動選択は効果があることがわかる。このことは、コンパイラや通信の実装方式の違いから生じる機種依存の要因を、柔軟に解決していることを意味している。

## 4 おわりに

今後の課題として、CG 法以外の計算アルゴリズムの自動選択が KDD を用いてどこまで可能なのか詳細に検討することなどが挙げられる。また固有値問題の解法に必須な Householder 法を用いた密行列の相似変換についても、通信性能や演算性能などの要因により、最適な計算方法が異なることが定量的にわかってきている [6]。これらのライブラリも自動選択の対象とすることも今後の課題である。さらにライブラリに関するデータベース情報がライブラリが充実するにつれ大きくなることが予想される。よって今後、データ構造もふくめて詳細な検討が必要であろう。

## 参考文献

- [1] : ScaLAPACK Project; <http://www.netlib.org/scalapack/index.html>.
- [2] : ATLAS project; <http://www.netlib.org/atlas/index.html>.
- [3] Adriaans, P. and Zantinge, D.: *Data Mining*, Addison Wesley Longman Limited (1996). 日本語版：山本英子，梅村恭司 訳，データマイニング，共立出版.
- [4] Barrett, R., Berry, M., Chan, T. F., Demmel, J., Donato, J., Dongarra, J., Eijkhout, V., Pozo, R., Romine, C. and van der Vorst, H.: *Templates for the Solution of Linear Systems : Building Blocks for Iterative Methods*, SIAM (1994). 日本語版：長谷川里美，長谷川秀彦，藤野清次 訳，反復法 Templates，朝倉書店.

## 参考文献

- [5] 黒田久泰, 片桐孝洋, 佃良生, 金田康正: 自動チューニング機能付き並列数値計算ライブラリ構築の試み — 対称行列用の連立一次方程式ソルバを例にして —, 情報処理学会第 57 回全国大会予稿集 (1998). to appear.
- [6] 片桐孝洋, 金田康正: 分散メモリ型並列計算機に向く Hessenberg 形への変換アルゴリズムとその有効性, 情報処理学会論文紙 (1998). to be published.