

氏名	高柳 雅俊
博士の専攻分野の名称	博士（工学）
学位記番号	医工農博甲第51号
学位授与年月日	令和3年3月23日
学位授与の要件	学位規則第4条第1項該当
専攻名	情報機能システム工学専攻
学位論文題目	CPU/GPU ヘテロジニアスクラスタのためのタイル行列分解の研究

論文審査委員	主査	准教授	鈴木 智博
		教授	大淵 竜太郎
		教授	美濃 英俊
		准教授	安藤 英俊
		教授	高橋 正和
		教授	渡辺 喜道

## 学位論文内容の要旨

シミュレーションや設計分野で行われる科学技術計算では、ベクトルや行列の形式でデータを扱う。行列の上・下三角化、対角化などの基本的な操作や固有値分解、特異値分解、線形方程式の求解などは数値線形代数と呼ばれ、科学技術計算分野の基礎領域の広い部分を占める。数値線形代数計算の一つに QR 分解があり、固有値問題の行列の前処理や後処理、最小二乗法の解法など、幅広く使用される計算である。本研究で用いるハウスホルダー変換を用いた逐次的な QR 分解は計算精度が高いが、行列ベクトル積演算が主要計算であり、近年主流であるマルチコア CPU の演算性能を十分に発揮することができない。近年の高並列なマルチコアアーキテクチャ向けの新しいアプローチとしてタイルアルゴリズムに基づくタイル QR がある。タイルアルゴリズムは、行列を縦横方向に分割し、一つ一つの小行列（タイル）毎に分解、更新操作を行う。これらの操作をタスクとみなし、タスク並列プログラミングモデルに基づく並列処理を行う。適切なブロックサイズを選択することで、並列計算資源の量に対して十分な数のタスクを生成し、これらを非同期に実行することですべての計算資源を常に稼働状態にすることを目的としている。タイルアルゴリズム

ムによる大量の細粒度タスクの非同期実行は近年の主流であるマルチコアアーキテクチャ向きのアルゴリズムであるとの認識が、多くの研究者の間に広がりつつある。

近年の計算機環境は大きく変化しつつある。世界のスーパーコンピュータの性能ランキングである Top500 では、2008 年 11 月に NVIDIA 社製 GPU を搭載した東京工業大学の TSUBAME1.2 が GPU を搭載したスーパーコンピュータとしては初めて上位 (30 位) にランクインした。その後、Top500 上位には演算加速装置として GPU を搭載したスーパーコンピュータが増加し、2018 年 11 月のランキングで 1 位となった Summit は演算性能の約 90% が GPU によるものであるとされており、GPU を汎用的な計算に用いる GPU コンピューティングは大規模科学技術計算の分野に定着している。計算機システムの総計算コア数も増加し続け、最大のシステムでは 1000 万コアに達する。近年の科学技術計算に用いられる計算機の並列性は非常に高く、システムの構成も複雑化している。このような計算機システムに適した数値線形代数ライブラリの整備が求められている。

本研究では、2つの課題に取り組んだ。1つはマルチコアクラスタシステムにおけるタイルアルゴリズムの適切なブロックサイズ (タイルサイズ) を選択するためのアルゴリズムの性能モデルの作成であり、2つ目は CPU/GPU ヘテロジニアスクラスタシステム向けの QR 分解の高性能実装である。

タイルアルゴリズムでは、使用する計算環境の並列度に対して十分な数のタスクを生成することにより計算資源の負荷の不均衡を極力少なくすることで、すべての資源を有効に活用することが可能となる。一方で、アルゴリズムの主要タスクは行列行列積演算を多用しており、これは surface-volume 効果により、大きなデータサイズ、つまりタイルサイズでより効率的となる。このようなトレードオフがあるため、タイルアルゴリズムにおけるタイルサイズチューニングは非常に重要である。タイルサイズチューニングのために、タイルサイズやノード間通信などをパラメータとした性能モデルを作成する。実際のプログラムでなく、性能モデルを使ってパラメータサーチを行うことで、短時間に最適なパラメータを探索することが可能となる。タイル QR 分解はタスクが動的にスケジューリングされるため、性能モデルの構築は難しい。本研究では、タイル QR のタスクの中で 90% 以上の割合を占める更新タスクの実行回数に着目したモデルの作成を行った。理化学研究所計算科学研究センターの京コンピュータを使用した評価実験を行い、実行時間の予測を行っ

たところ、性能モデルから導出された最適パラメータは、パラメータ空間の全探索によるチューニングで得られた最適値と一致することを確認した。また、予想実行時間と実際の実行時間の一致度は約 90%であった。

CPU/GPU ヘテロジニアスクラスタシステムにおけるタイル QR 分解の実装では、逐次性の強いタスクを CPU で、並列性の高いタスクを GPU で実行する方針を取った。GPU 向けの計算カーネルの最適化を行った上で、並列性の高い更新タスクの GPU 向けの実装方法として、Bulk update と Stream update の 2 つを提案し、それぞれ性能評価を行った。東京大学情報基盤センターの Reedbush-H と名古屋大学情報基盤センターの不老 typeII による実験の結果、Stream update がより効率的に GPU を使用できることが分かった。Reedbush-H システムでの並列化効率は、Weak scaling 指標では 16 ノード使用時に約 8 倍の性能向上が得られ、Strong scaling 指標では 16 ノード使用時に約 3 倍の性能向上が得られた。本研究の実装は、既存の CPU/GPU システム向けのライブラリのルーチンに比べると低速であるが、約 2 倍のサイズの行列に適用可能であり、近年の大規模化の要請に答えられるものである。

## 論文審査結果の要旨

本研究には 2 つの成果がある。1 つ目は、マルチコアクラスタシステム向けの行列分解タイルアルゴリズムの性能モデルを作成したことである。

タイルアルゴリズムのタスク並列モデルにおける各タスクは、1 または 2 タイル毎の処理であり、この処理を行う小プログラムは計算カーネルと呼ばれる。本研究で提案された通信削減型のマルチコアクラスタシステム向けのタイルアルゴリズムでは、6 つの計算カーネルが存在する。そのうち、ドメイン内行列分解の主要演算となるカーネルと、ドメイン間のマージ処理を行うカーネルの 2 種類について実測したサンプルから性能モデルを構築し、これにノード間の通信時間を加えて行列分解アルゴリズムの性能モデルとしている。このように性能モデルを細分したことでサンプリング時間を削減し、モデルの生成時間を含む総チューニング時間を大幅に削減している。理化学研究所計算科学研究センターの京コンピュータを使った評価で、行列分解の実行時間は誤差約 10% で推定できることが示されている。本論文第 6 章のこれに関する記述についてはやや分量が少なく、考察が十分でないが、クラスタシステム向け行列分解の実装の性能モデルは実例がほとんど見当たらず、十分な研究成果として評価できる。

2つ目は、CPU/GPU ヘテロジニアスクラスタシステムにおけるタイルアルゴリズムの実装と性能評価である。

第2章に記述されている通り、これまで、大規模並列環境におけるCPU/GPU クラスタシステムのための数値計算ライブラリの整備は行われていない。数値計算ライブラリの中で、行列分解は行列サイズを $n$ として $O(n^3)$ の計算量が必要となる重い処理であり、科学技術アプリケーションプログラムの実行時間の多くを占める。その行列分解の中のQR分解は様々な分野で適用される主要演算であり、これについて高速な実装を作成することは数値計算ライブラリの整備のために不可欠である。

タイルアルゴリズムは高並列な計算資源を有効活用できる手法であるが、分散メモリ環境では小規模な通信を大量に発生させてしまうため通信回数を削減する工夫が必要となる。本研究では、この問題に対しては通信削減アルゴリズムを適用している。更に、計算ノード間の負荷不均衡を低減するためのデータ分散に関する提案も示されている。

CPU/GPU システム向けのアプリケーションでは、計算能力の高いGPUに可能な限り多くの計算を割り当てる方針と、CPU、GPU双方を効果的に利用する方針の2種類がある。本論文で提案されているのは後者の方針である。逐次性が高く、計算量が比較的少ない計算カーネルはCPUが分担し、計算量が多く、呼び出し回数も多い計算カーネルをGPUが分担するやり方が提案されている。また、CPU向け計算カーネルをGPU向けにチューニングすることで全体として20%の性能向上が見られたことも示されている。

実装における最も注目すべきは、GPUにおける行列更新タスクの実行方法の提案である。Stream update と Bulk update の2種類の手法が提案されている。どちらもGPUの特性を活かす発想に基づいているが、実験の範囲ではStream update方式が高速であった。

Reedbush-Hシステムでの並列化効率は、Weak scaling 指標では16ノード使用時に約8倍の性能向上が得られ、Strong scaling 指標では16ノード使用時に約3倍の性能向上が得られた。本研究の実装は、既存のCPU/GPUシステム向けのライブラリのルーチンに比べると低速であるが、約2倍のサイズの行列に適用可能であり、近年の大規模化の要請に答えられるものである。

以上、本論文で示された研究成果とその意義を総合的に判断し、本論文は博士（工学）として評価できると判断した。