ABC-LIB：自動ブロック化・通信最適化ライブラリの開発

片　桐　孝　洋†

我々は，PC クラスタを主なターゲットにした自動チューニング機能付き並列数値計算ライブラリ ABC-LIB を開発している．本発表ではその設計方針と，典型的なライブラリの機能と性能について報告する．

Developing ABC-LIB: Automatically Blocking and Communication Adjustment Library

Takahiro KATAGIRI†

We are developing the ABC-LIB, which is a parallel numerical library with auto-tuning facilities for PC cluster systems. In this presentation, we will report the concept, functions, and performance of the ABC-LIB.

1. はじめに

近年，PHiPAC[1]，ATLAS[2]，および ILIB[3] に代表される，いわゆる「自動チューニング機能付き」の数値計算ライブラリが多数開発されるようになってきた．これらのライブラリは，階層メモリ型の逐次計算機やベクトル並列計算機を主なターゲットとして開発されたライブラリである．

ところが現状では PC クラスタ構築に関する技術やコストが著しく改善されてきており，PC クラスタが数値計算を行う上での事実上の共通アーキテクチャになっている．この現状を踏まえ我々は，数値計算ライブラリにおいても PC クラスタを指向した機能・アルゴリズムを採用したライブラリを構築すべきと考え，新たに ABC-LIB の開発を行っている．

以下の章で，この ABC-LIB に関する説明や性能の報告を行う．

2. 設計方針

ABC-LIB とは，Automatically Blocking and Communication adjustment LIBrary の省略形である．このことから ABC-LIB は，ブロック化と通信の調整機能を持つように設計されたライブラリである．特に PC クラスタ上での性能を高める目的で，以下の特徴・機能を有する：

- ブロック化アルゴリズムの採用：階層型メモリを有する計算機上で高性能な数値計算を実現するため，ブロック化アルゴリズムを採用
- 通信隠蔽アルゴリズムの採用：低速なネットワーク環境でも高性能を達成するため，通信隠蔽アルゴリズムを採用
- 自動チューニング機能：要素計算機 (PE) が異なる多彩な PC クラスタに対応するため，自動チューニング機能を搭載
- フォールト・トレラント機能：自動チューニング時，および計算時のシステムダウンを考慮し，処理の途中再開の機能を搭載

ABC-LIB では処理を科学技術計算，特に線形代数計算 (連立一次方程式，固有値問題の解法など) に限定する．また将来的には，ABC-LIB を効率的に開発できるプリプロセッサや言語を独自開発し，ライブラリ自体をその開発した言語で記述することを検討中である．

3. ライブラリ・インタフェース

ABC-LIB では自動チューニング機能を採用していることから，性能に関するライブラリ・パラメタを極力削減することができる．このことにより，従来よりも利用が簡便なライブラリ・インタフェースが実現可能となる．

具体的に固有値計算ライブラリでのインタフェースを例にあげる．従来型のライブラリでは

```
call PEigCal( A, x, lambda, n,  ...(i)
     nprocs, myid, iDistInd,   ...(ii)
iMVlp, jMVlp, iulp, julp, icomm, ...(iii)
              MAXITER, deps,...) ...(iv)
```

のようなインタフェースをとらざるを得なかった．ここで各パラメタに関し，(i) は行列情報などの基本情報パラメタ，(ii) は並列制御パラメタ，(iii) はアンローリング段数などの性能に影響する性能情報パラメタ，

† 科学技術振興事業団 さきがけ研究２１(情報基盤と利用環境)領域 “Information Infrastructure and Applications”, PRESTO, Japan Science and Technology Corporation(JST)

(iv) はアルゴリズムに影響する解法情報パラメタ，と呼ぶことにする．一般的に，(ii) 並列制御パラメタはライブラリ設計の工夫で，(iv) 解法情報パラメタは解法の数値解析をおこなうことで除去可能である．しかし自動チューニング機能のない従来型のライブラリでは，(iii) 性能情報パラメタの除去が本質的にできない．

そこで ABC-LIB では，自動チューニング機能の搭載により (iii) の性能情報パラメタの除去を行い

```
call PEigCal(A, x, lambda, n)
```

のようなライブラリ・インタフェースの実現を目指す．

4. 性 能 例

この章では，PC クラスタを用いて典型的な ABC-LIB のライブラリ性能を評価した結果を記す．本評価で使用した PC クラスタのノードとして，Intel PentiumIII 800MHz Dual CPU を 4 ノード用いた．ノード当たりの搭載メモリは 512MB (SDRAM, ECCPC100 CL=2)，MB は Intel L440GX+ Server Board (FSB 100MHz)，ネットワークカードは PCI 10/100Mbps Intel EtherExpressPro100+ である．使用 OS は Linux 2.2.13-33smp である．またコンパイラとして，PGI 社の Fortran90 コンパイラ 3.2-3，オプションとしては -fast を指定した．通信ライブラリとしては MPICH 1.2.0 を利用し，ノード間通信は TCP/IP 通信である．

評価を行った ABC-LIB ルーチンは，修正 Gram-Schmidt 法を用いた QR 分解ルーチン `ABCLib_QRD` である．評価条件の概略は以下の通りである：

- テスト行列 $A \in \Re^{n \times n}$: $(0, 1]$ の疑似乱数で生成
- アルゴリズム：ブロック化 MGS 法
- データ分散方式：行列 A をブロック幅 m ごとに列ブロック-サイクリック分散 $(*, \mathrm{Block}(m))$
- 計算カーネル：主カーネル (3 重ループ) の外側 2 つをアンローリングした複数のカーネルを用意．用意したカーネルの数は 64 種類．
- 通信方式：ブロック幅 m 毎に通信が発生．現在のバージョンでは，同期放送のみ．

表 **1** に PC クラスタ 4 ノードでの性能を示す．表中の「最適」とは自動チューニングにより最も高速となった実行時間であり「最悪」とは自動チューニングの履歴のうち最も遅い実行時間である．また自動チューニング機能の効果 (AT 効果 (B/W)) を (最適の実行時間) / (最悪の実行時間) で評価した．表 1 から自動チューニングの効果は 2.7–38.8 倍と大きく，この機能は高性能を達成するため必要であることを示している．一方，表 **2** は最適と最悪時間に関する台数効果を示している．最悪時間に関しては，問題サイズが大きくなると最適時間のよりも台数効果がある．これは最適時間では計算カーネルがより高速化されており通信時間の占める割合が，最悪時間の通信時間の占める割合に比べて大きくなるためと考えられる．

表 **1** ABCLib_QRD における PC クラスタ上での自動チューニングの効果

(a) 2 ノードでの性能 (2 プロセス, 1 プロセス / ノード)

問題サイズ n	最適	最悪	AT 効果 (B/W)
100	0.009 [sec]	0.222 [sec]	24.6
200	0.048 [sec]	1.881 [sec]	38.8
500	0.822 [sec]	29.04 [sec]	35.3
1000	6.12 [sec]	235 [sec]	38.4

(b) 4 ノードでの性能 (4 プロセス, 1 プロセス / ノード)

問題サイズ n	最適	最悪	AT 効果 (B/W)
100	0.017 [sec]	0.309 [sec]	18.1
200	0.061 [sec]	1.112 [sec]	18.1
500	2.93 [sec]	17.16 [sec]	5.8
1000	4.36 [sec]	138 [sec]	31.6

(c) 4 ノードでの性能 (8 プロセス, 2 プロセス / ノード)

問題サイズ n	最適	最悪	AT 効果 (B/W)
100	0.024 [sec]	0.236 [sec]	9.6
200	0.116 [sec]	0.766 [sec]	6.5
500	3.53 [sec]	9.67 [sec]	2.7
1000	4.48 [sec]	75.6 [sec]	16.8

表 **2** ABCLib_QRD における台数効果

(a) 細粒度 ($n = 100$)　　(b) 粗粒度 ($n = 1000$)

#Proc.	最適	最悪	#Proc.	最適	最悪
2	1.0	1.0	2	1.0	1.0
4	0.5	0.6	4	1.4	1.7
8	0.3	0.9	8	1.3	3.1

5. おわりに

本報告では，PC クラスタを対象にした計算処理と通信処理の最適化機能を搭載したライブラリ ABC-LIB の設計方針と，開発中のルーチンの性能の一例を紹介した．さらに詳細な性能，機能，および開発中ライブラリの説明は当日発表する予定である．

なお ABC-LIB は，科学技術振興事業団さきがけ研究 21「情報基盤と利用環境」領域の研究成果の一部として開発されたものであり，事業団の助成によるサーバ上でソースコード，およびマニュアル等を含めて公開される予定である．

参 考 文 献

1) Bilmes, J., Asanović, K., Chin, C.-W. and Demmel, J.: Optimizing Matrix Multiply using PHiPAC: a Portable, High-Performance, ANSI C Coding Methodology, *Proceedings of International Conference on Supercomputing 97*, pp. 340–347 (1997).

2) ATLAS project; http://www.netlib.org/atlas/index.html.

3) 片桐孝洋, 黒田久泰, 大澤清, 工藤誠, 金田康正: 自動チューニング機構が並列数値計算ライブラリに及ぼす効果, 情報処理学会論文誌 : ハイパフォーマンスコンピューティングシステム, Vol.42, No.SIG 12 (HPS 4), pp. 60–76 (2001).