

研究報告書

「自動チューニング可能な一般化 N 体問題解法枠組みの開発」

研究期間：平成 29 年 10 月～平成 31 年 3 月

研究者番号：50141

研究者：佐藤 重幸

1. 研究のねらい

N 体問題とは、N 個の粒子の相互作用を計算する問題であり、天体シミュレーションなどで一般に知られている。しかし、その作用演算子(カーネル)をパラメタ化すると、一般性の高い計算パターンとして、様々な科学技術計算や機械学習の計算に応用できることが知られている。同様に、N 体問題の高速解法も一般化することができ、それを実装したソルバは、様々な応用問題を高速に解く基盤になりえる。しかし、既存の N 体問題のソルバは、その一般性を捨てて、特定の応用問題に固定した実装になっており、様々な問題設定には適用しにくい。また、既存のソルバは、移り変わっていく計算機環境に対して熟練者による手作業で適応させているため、開発コストも大きい。この問題を解決するために、N 体問題の一般性を毀損しない抽象性と、複数の計算機環境に対して機械的に適応できるようなチューニングパラメタを備えたソルバを開発する。これによって、利用者の計算機環境上で効率良く動作する、多目的利用可能な N 体問題ソルバを、一般のプログラマにとって手軽に利用できるようにし、多くの領域のアプリケーション開発の生産性を向上させる。

2. 研究成果

(1) 概要

全体としては、多目的利用と自動チューニングが可能な N 体ソルバを設計し、特定の応用問題や計算機環境に適応した実装インスタンスを自動生成する枠組みの開発に取り組んできた。個別的には、主に次の 3 つの研究課題に取り組み、それぞれについて成果を得た。

1. 複数の代表的な高速 N 体アルゴリズムを包摂する一般化 N 体アルゴリズムを、並列計算の抽象パターンとして定式化した。
2. 問題仕様の核となるカーネルコードを自動的に効率化する言語処理系を開発した。
3. 効率的な SIMD 化を、半自動的に適用する手法を開発した。

これらの個別的成果によって、目的とする多目的利用と自動チューニングが可能な N 体ソルバの理論と実装の両面の基盤が整った。

(2) 詳細

1. 並列解法パターンの定式化(PPL 2018)

計算パターンと引数演算子(カーネル)に分解して並列計算を定式化する並列パターンは、高水準並列プログラミングに役立つと事が知られている。多目的利用と自動チューニングを両立させるために、複数の典型的な N 体アルゴリズムを、並列パターンの合成によって定式化した。この定式化には、次の 4 つの利点がある：

- 関数合成によってアルゴリズム全体が簡潔に表現され、ライブラリ実装しやすい。

- パラメタ演算子によってアルゴリズムインスタンスを自然に切り替えられる一般性を持つ。
 - 関数融合と呼ばれる既存のプログラム変換を関数合成に適用することで、破壊的実装をハードコードした場合と同等に空間効率の良い実装が機械的に導出できる。
 - 合成される個々の並列パターンは、分割統治型計算であるため、複数のコードテンプレートを再帰的に合成することで、チューニングのバリエーションを機械的に増やせる。
- これは、多目的利用と自動チューニングが可能な N 体ソルバに適した定式化である。

2. 対称性に基づくカーネル最適化 (JSSST 2018, SPLASH 2018 Poster)

N 体ソルバにおいて、カーネルコードの効率化は重要である。とりわけ、対称性を利用したカーネルコードの効率化は、単純だが大きな効果がある。これは、例えばニュートン力学における作用 f_{12} と反作用 f_{21} の対称性 $f_{12} = -f_{21}$ に基づいて、作用・反作用をまとめて計算するようにカーネルを実装 (相互化) することである。知識のある人にとっては単純に見える効率化だが、コンパイラにとっては難しく、既存のコンパイラ最適化では対処できない。そこで、プログラム検証の技術とコンパイラ最適化の定式化を組み合わせ、カーネル相互化をドメイン特化言語 (DSL) 処理系の形で自動化した。

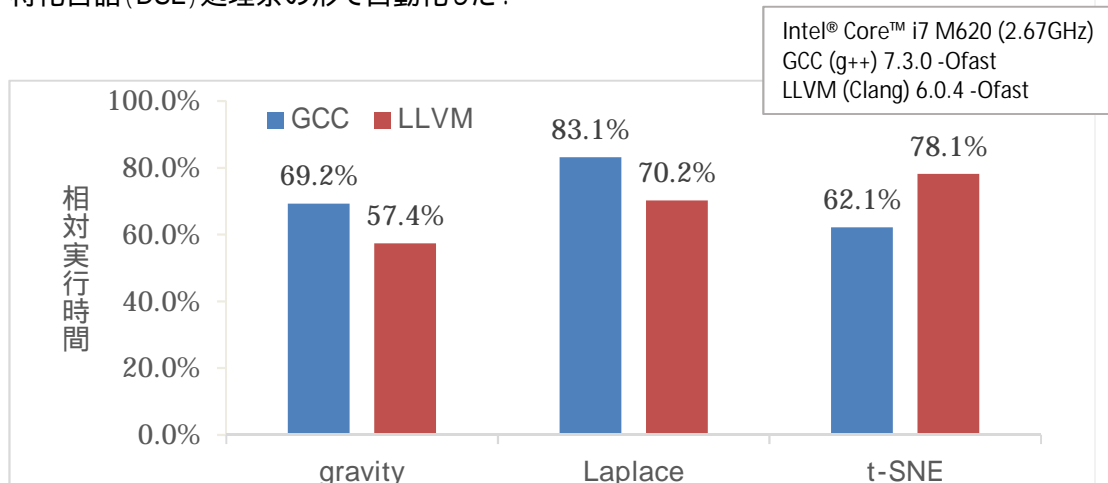


図 1: 相互化による実行時間削減 (相対実行時間が小さいほど効果大きい)

図 1 に示されるように、通常のカーネルを 2 回呼び出す場合と比べて、相互化したカーネルを 1 回呼び出す方が、明確に効率が良い。これは同時に、最新の最適化コンパイラ (GCC・LLVM) でも、相互化と同等の最適化が実現できていないことも示している。開発した DSL 処理系は、モデル式が素直に書き下されたカーネルから、正しく相互化されたカーネルを自動構成する。つまり、生産性の高い簡単な仕様記述と、人の知識による手作業が必要だった効率的な実装を、両立させる。

3. 並列パターンのモジュラーな SIMD 化 (PPL2019 Poster)

SIMD 命令 (単一命令で複数データを処理する命令) を使うようにプログラムを変換する SIMD 化は、プログラム高速化において大変重要である。理想的には SIMD 命令のベクトル

幅 (AVX2 なら 4) 倍に性能向上する一方, N 体ソルバを含めた実際のプログラムに置いて, コンパイラが自動的に SIMD 化できる範囲は極めて限定的である。故に事実上, 熟練者の手作業を要する高速化となっており, 生産性が低い。そこで, 並列パターンをモジュラー且つ半自動的に SIMD 化する手法を開発した。これを並列パターンで表現された N 体ソルバに適用すれば, 一般性を保ちつつ SIMD 化した N 体ソルバを, ライブラリレベルでモジュラーに実装できるようになる。

図 2 に, 重力カーネルを用いた N 体ソルバに対する, 開発したモジュラーな SIMD 化手法と, ナイーブな手法, 熟練者による標準的手法の性能利得を比べた結果を示す。

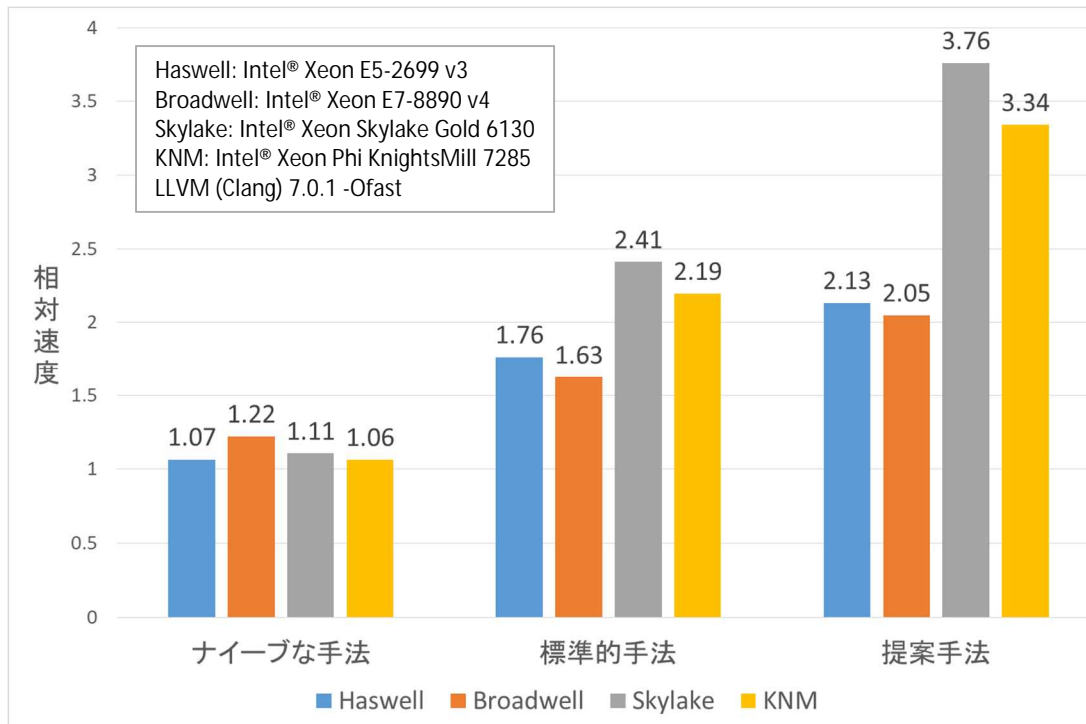


図 2: 各種 SIMD 化の性能利得 (相対速度が大きいほど利得が大きい)

図 2 を見ればわかるように, 単にライブラリとしてモジュラーに実装できるというだけでなく, 熟練者による標準的な手実装と比べても, 高い性能を達成した。その上, 4 つの異なる CPU アーキテクチャ全てで相対的に高い性能を達成したので, 性能可搬性も高い。この提案手法は, SIMD 化をチューニングパラメタに取り入れた N 体ソルバの実装に即座に役立つ。

3. 今後の展開

研究提案当初は, N 体問題という応用範囲に限定された研究成果になることを想定していたが, 試行錯誤して研究を進めていく中で, 特に研究課題 2 と 3 という形で, N 体問題に限定されない, プログラミング言語の設計と実装に関する個別的な研究成果を得た。また, 全体的な問題へのアプローチとして今回採用した, 並列パターンで定式化した上で, DSL 処理系とライブラリレベルでの自動化を実現するというアプローチは, プログラミング言語の観点で筋が良く, 様々な応用問題に適用できる見込みがある。今後は, 本研究のアプローチに基づいて, 言語処理系の要素

技術を開発することで、扱える問題領域やアルゴリズムクラスの拡大を考えている。

プログラミング言語分野の研究成果は一般に、その言語の利用者が一定程度増えてくるまで、産業や社会への影響は見えて来ないものである。そして、既存のプログラマは、様々な事情から、新しい言語を使わない・使えないこともある。しかし、良い言語設計は、本質的な問題の理解と解決を助けるため、高い教育効果と広い波及効果を生む。新しい世代に向けて、より良い言語基盤を提供すれば、彼らがこれまでの世代よりも高い生産性を以て、社会的に重要な応用問題に取り組めるようになる。N 体問題は、社会的に重要な応用問題を包摂するカテゴリであるため、本研究成果は、未来の生産性を高める 1 つの礎になる。

4. 自己評価

研究目的の達成状況

研究上の技術的な課題については一通り解決し、当初の想定よりも一般性の高い手法によって、期待以上に効率的な N 体ソルバを得られたという意味で、研究目的は想定以上に達成された。しかし、開発した手法がプログラミング言語としての一般性を持ったが故に、当初の想定よりもソフトウェア開発にコストが掛かるようになり、結果としてソフトウェア整備の面には課題が残った。

研究の進め方（研究実施体制及び研究費執行状況）

立場の都合もあり、学生を巻き込む形での研究チームが作れず、秘書もなく、全て独りで実施した。もし学生を RA などで雇用しつつ、ソフトウェア開発を任せることができたら、最終成果物に対するソフトウェア整備がもっと進んだ可能性がある。

研究期間中に別の所属に移り、研究環境（特に計算機環境）が大きく変わった。特に物品購入などは、新しい環境に適応する形で有効活用できたと考えている。また、未参加だったトップ国際会議に参加できたことは、様々な知見、教訓、繋がりを得ることができたので、費用対効果が高かった。ただし、所属を移るタイミングでの費用執行において、想定外のことが重なり、不本意な国庫戻入が生じたことは反省点である。

研究成果の科学技術及び学術・産業・社会・文化への波及効果

学術的には価値があることができたことと自負がある。最近では、並列 DSL の研究開発が、学術と IT 産業の両方で盛んなので、それに従事するグループにこの成果を売り込むことで、彼らの成果物に、その要素技術が取り込まれる可能性は大いにある。

研究課題の独創性・挑戦性

研究提案当初は、どこまで出来るかわからない目標であったので、少なくとも私にとって、挑戦性が高かったことは間違いない。そして、本研究のように N 体問題に深い知見に基づいて、言語処理系の研究に取り組むのは、他の研究グループが容易に追従できない程度に、独創的であると考えている。

5. 主な研究成果リスト

(1) 論文(原著論文)発表

なし

(2) 特許出願

研究期間累積件数:0 件

(3) その他の成果(主要な学会発表、受賞、著作物、プレスリリース等)

- 佐藤重幸. 木上の非構造的再帰関数の融合 高速 N 体問題解法の場合 . 第 20 回プログラミングおよびプログラミング言語ワークショップ(PPL2018) , 2018 .
- 佐藤重幸. 対称な関数呼び出しの融合 . 日本ソフトウェア科学会第 35 回大会(JSSST2018) , 2018 . 優秀発表賞受賞 .
- Sato, S. Symmetry-based Optimization of Interaction Kernels. In the 2018 ACM SIGPLAN conference on Systems, Programming, Languages and Applications: Software for Humanity (SPLASH 2018), Poster, 2018.
- 佐藤重幸. カーネル非依存 SIMD 化テンプレート . 第 21 プログラミングおよびプログラミング言語ワークショップ(PPL2019) , ポスター , 2019 .