

Analisi delle Prestazioni dei Supercomputer

Progetto per il corso di Statistica del Prof. Marco Romito

Rambod Rahmani

Corso di Laurea Magistrale in
Artificial Intelligence and Data Engineering

22 Novembre 2020

Indice

1	Introduzione	1
2	Dati	1
2.1	Contenuto della tabella	2
2.2	Importazione e pulizia	2
2.3	Esplorazione e comprensione dei dati	3
3	Analisi	3
3.1	Modello di Regressione Lineare	3
3.1.1	Analisi dei Residui	3
3.2	Modello di Regressione Logaritmico	5
3.2.1	Analisi dei Residui	6
4	Predizione e autovalutazione	7
5	Conclusioni	9

1 Introduzione

Lo scopo della presente analisi è quello di costruire un modello di regressione lineare multivariata per poter prevedere le prestazioni di un Supercomputer a partire dalle specifiche delle sue caratteristiche hardware. A partire dalla tabella dei dati, tramite l'utilizzo di R, sono stati valutati due modelli di regressione. In particolare, uno di regressione lineare e uno di tipo non lineare.

Per quanto riguarda il contesto applicativo ipotizzato, esistono due benchmarks essenziali che vengono usati per valutare le prestazioni di questo tipo di calcolatori, il LINPACK benchmark (una misura delle prestazioni computazionali per operazioni in virgola mobile) e il HPCG benchmark (a complemento del LINPACK, valuta le prestazioni dei sotto sistemi del calcolatore). I costruttori di tali computer forniscono di solito il parametro teorico (calcolato su carta) chiamato **Rpeak** che indica le prestazioni massime teoriche. Dato che per eseguire un test LINPACK è necessario calibrare ben oltre 18 parametri, sarebbe interessante poter stimare il valore di **Rmax** (prestazioni raggiunte nel LINPACK test) tramite un modello statistico.

2 Dati

La tabella dei dati è stata scaricata dal sito dell'organizzazione **TOP500**. La TOP500 mantiene una graduatoria, ordinata secondo le loro prestazioni, dei Supercomputer attual-

mente installati e in funzione. Tale graduatoria viene aggiornata con cadenza semestrale.

Link di download diretto: https://www.top500.org/lists/top500/2020/11/download/TOP500_202011.xlsx

Credenziali di accesso:

Login: rambodrahmani@yahoo.it

Password: GCgFH6yuZYFMeCr

2.1 Contenuto della tabella

La tabella dei dati contiene 37 colonne per un totale di 500 osservazioni. Per la presente analisi ho utilizzato le seguenti colonne:

- **Total Cores**: numero totale di cores;
- **Accelerator/Co-Processor Cores**: numero totale di cores del co-processore;
- **Rmax [TFlop/s]**: massime prestazioni raggiunte nel benchmark LINPACK;
- **Rpeak [TFlop/s]**: massime prestazioni teoriche;
- **HPCG [TFlop/s]**: massime prestazioni raggiunte nel benchmark HPCG (High Performance Conjugate Gradient);
- **Power [kW]**: potenza consumata;
- **Processor Speed [MHz]**: velocità processore;
- **Cores per Socket**: numero di cores per socket.

2.2 Importazione e pulizia

Sui dati, non è stata effettuata alcuna operazione precedente la loro importazione in R. Il file originale, in formato `.xlsx`, è stato però convertito in `.csv` per facilitare l'importazione. Prima di iniziare l'analisi, ho rimosso le colonne che ritengo che non influenzano le prestazioni di un Supercomputer ("Name", "Manufacturer", "Country", "Year", ecc...), mentre come fattore di uscita per la predizione utilizzerò il valore della colonna "Rmax".

Nelle colonne che ho scelto, ho rilevato 351 valori mancanti in "Accelerator/Co-Processor Cores", 426 in "HPCG [TFlop/s]" e 310 in "Power [kW]". Dato che il numero di valori mancanti è elevato rispetto al totale delle 500 osservazioni, le suddette colonne sono state eliminate.

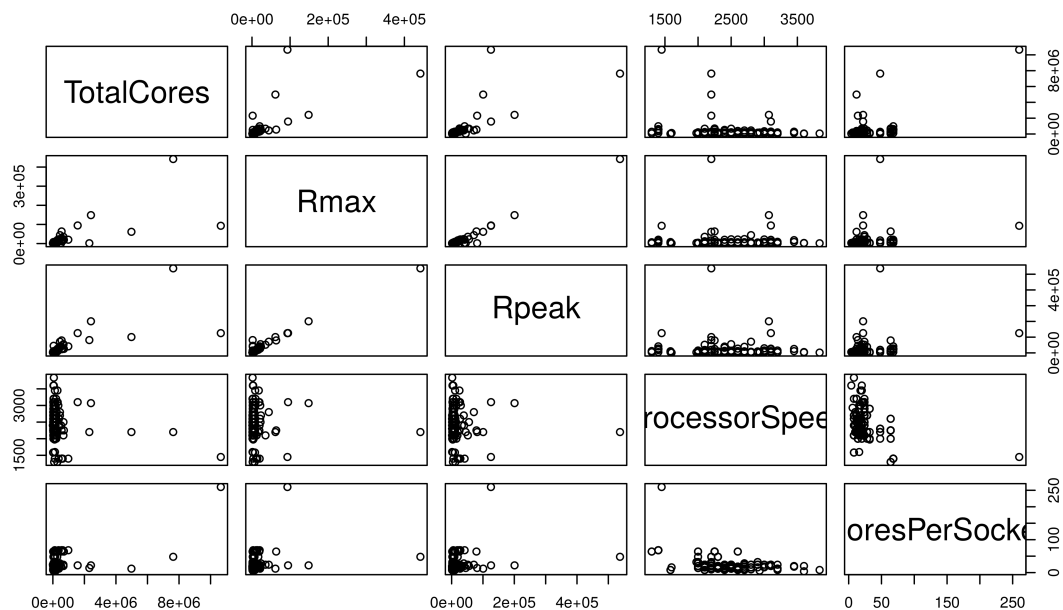


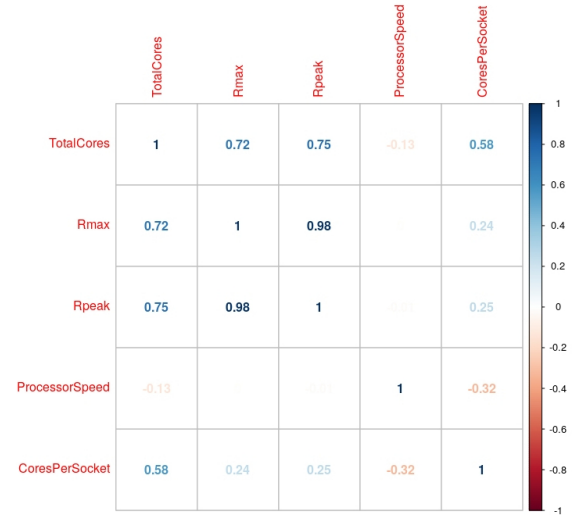
Figure 1: Diagramma di dispersione

2.3 Esplorazione e comprensione dei dati

Il primo approccio esplorativo dei dati è stato di tipo grafico: nonostante si possa palesemente vedere una forte correlazione tra il fattore di uscita **Rmax** e i fattori **TotalCores** e **Rpeak**, ho preferito iniziare con un modello di regressione lineare multipla usando **Rmax** come output e tutte le altre variabili come predittori. Ho poi proceduto con l'eliminazione dei fattori valutando per ogni modello ottenuto i seguenti valori:

- R^2 : Proporzione di Varianza Spiegata dal Modello;
- R^2_{Adj} : Proporzione di Varianza Spiegata dal Modello corretto;
- p-value globale e dei singoli coefficienti.

Figure 2: Matrice di dispersione



3 Analisi

3.1 Modello di Regressione Lineare

Come primo passo, ho costruito 4 differenti modelli di regressione lineare valutando di volta in volta il valore di R^2 , R^2_{Adj} , p-value. Si può osservare un netto calo di entrambi i grafici tra i punti di ascissa 3 e 4: dunque la terza versione è la migliore delle quattro regressioni effettuate. Con una proporzione di varianza spiegata dal modello maggiore del 96% e con

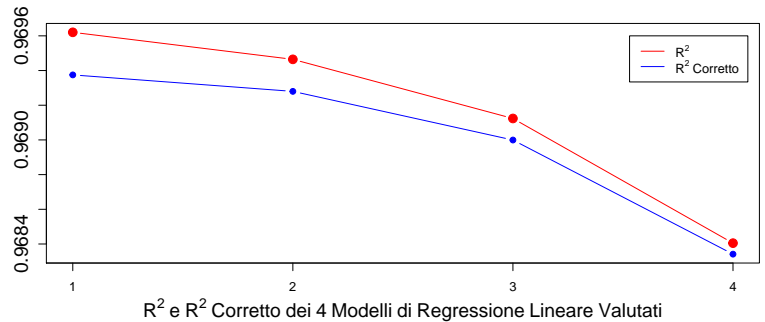
```
> summary(lm)

Call:
lm(formula = Rmax ~ Rpeak + TotalCores, data = data)

Residuals:
    Min       1Q   Median       3Q      Max
-59167    -74     478   1132   23307

Coefficients:
            Estimate Std. Error t value Pr(>|t|)
(Intercept) -1.101e+03  1.804e+02  -6.103  2.09e-09 ***
Rpeak        8.012e-01  9.450e-03  84.782  < 2e-16 ***
TotalCores   -1.392e-03  4.091e-04  -3.401  0.000724 ***
---
Signif. codes:  0 '***' 0.001 '**' 0.01 '*' 0.05 '.' 0.1 ' ' 1

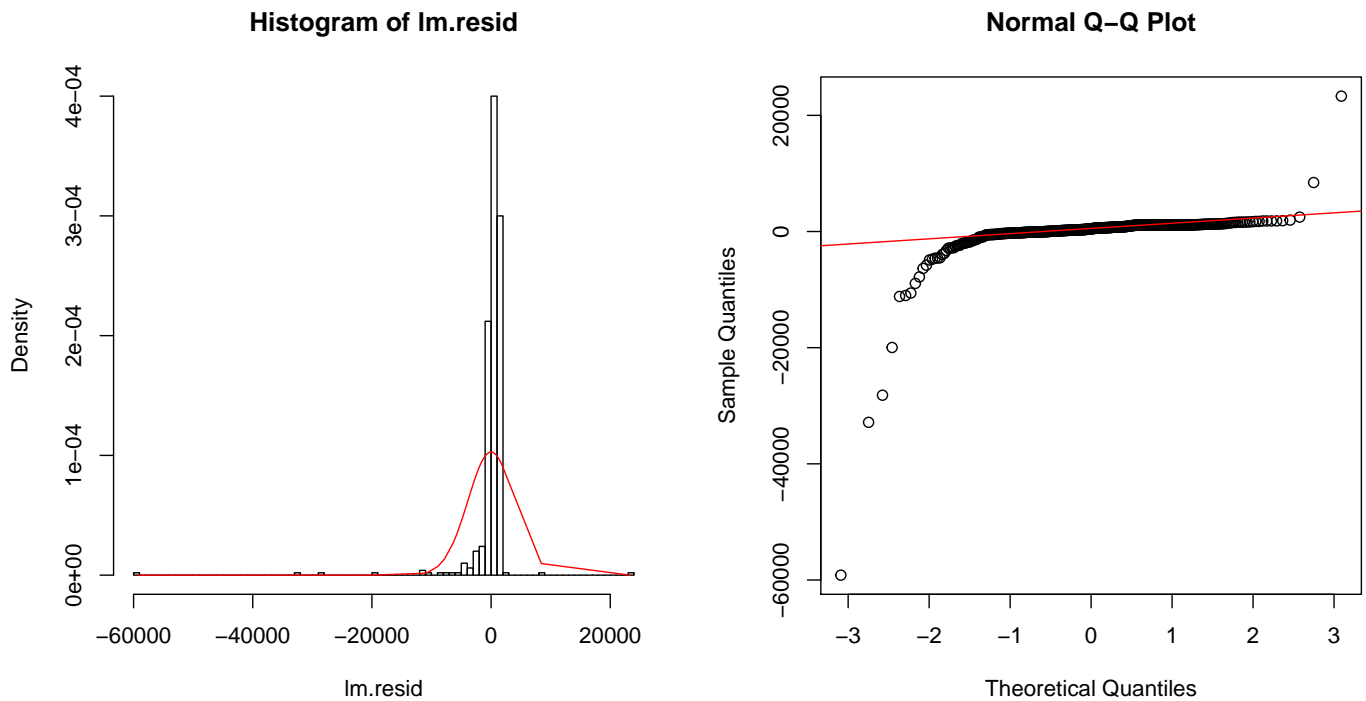
Residual standard error: 3889 on 497 degrees of freedom
Multiple R-squared:  0.9691, Adjusted R-squared:  0.969
F-statistic: 7800 on 2 and 497 DF, p-value: < 2.2e-16
```



dei p-value quasi nulli (sia per quanto riguarda i singoli coefficienti che quello globale), possiamo concludere che il modello di regressione che abbiamo ottenuto cattura buona parte del problema ed è statisticamente significativo.

3.1.1 Analisi dei Residui

Soddisfatto del modello ho proceduto con l'analisi dei residui. Dal diagramma di dispersione, dall'istogramma, dal QQ-plot, dal valore della skewness e della kurtosi e dai risultati ottenuti dal Test di Shapiro-Wilk, è evidente che la distribuzione dei residui è ben lontana dall'essere la Gaussiana che cerchiamo:



```
> skewness = mean(((lm.resid - mean(lm.resid)) / sd(lm.resid))^3); skewness
[1] -9.094902
> kurtosi = mean(((lm.resid - mean(lm.resid)) / sd(lm.resid))^4) - 3; kurtosi
[1] 125.4671

> shapiro.test(lm.resid)

Shapiro-Wilk normality test

data:  lm.resid
W = 0.28981, p-value < 2.2e-16
```

Per approfondire, ho analizzato la correlazione tra i predittori utilizzati, se eventualmente i residui del modello fossero correlati con uno dei predittori, un modello di regressione con tutti i predittori disponibili e un modello di regressione lineare semplice. I risultati però non sono stati comunque soddisfacenti:

```
> cor(data$Rpeak, data$TotalCores)
[1] 0.7525282
> cor(data$Rpeak, lm.resid)
[1] 1.965037e-15
> cor(data$TotalCores, lm.resid)
[1] 8.458876e-16

> # approfondimento analisi dei residui: valutazione modello di regressione lineare con tutti i fattori
> lm.1.resid = residuals(lm.1)
> shapiro.test(lm.1.resid)

Shapiro-Wilk normality test

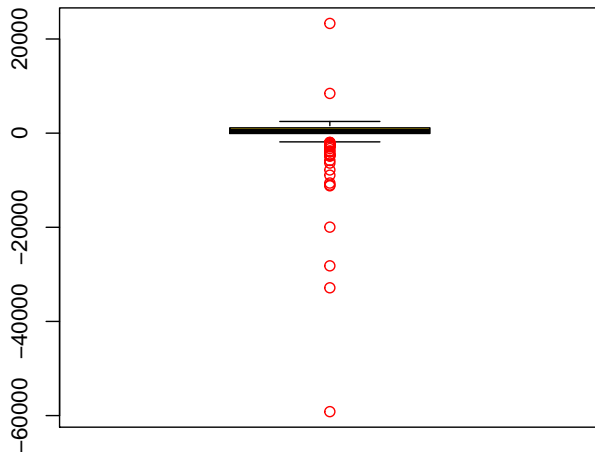
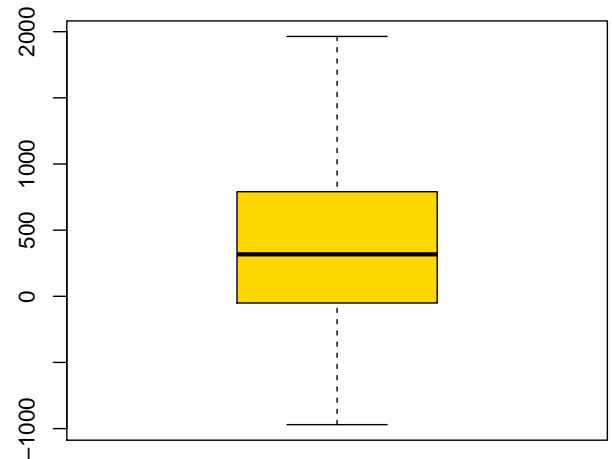
data:  lm.1.resid
W = 0.31715, p-value < 2.2e-16

> # approfondimento analisi dei residui: valutazione modello di regressione lineare semplice
> lm.4.resid = residuals(lm.4)
> shapiro.test(lm.4.resid)

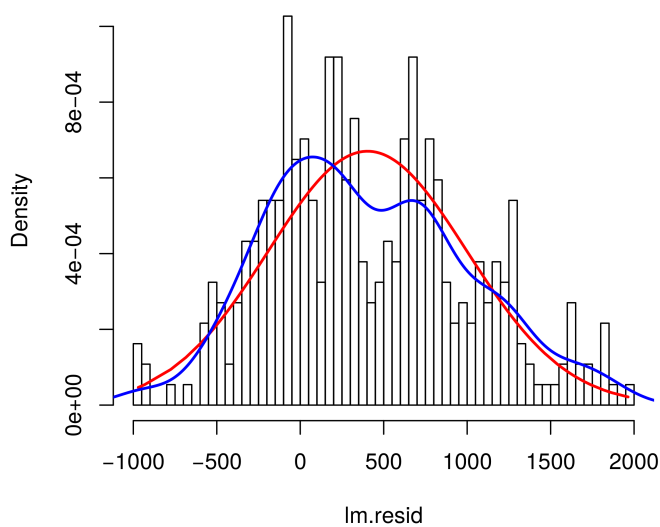
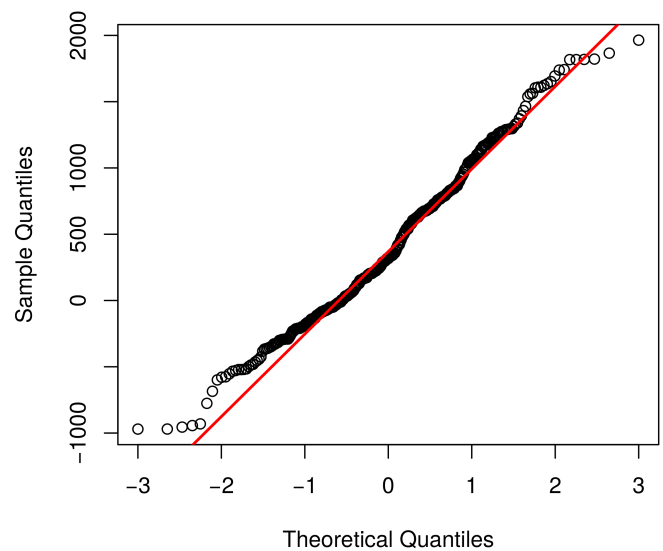
Shapiro-Wilk normality test

data:  lm.4.resid
W = 0.27671, p-value < 2.2e-16
```

La mia ipotesi allora, dato che la distribuzione è comunque centrata in zero e ricorda l'andamento di una Gaussiana, e dato il valore di kurtosi pari a 125.4671 è stata che fosse a causa della presenza di alcuni valori numerici eccessivamente elevati rispetto alla media. Dopo aver rimosso questo primo sottoinsieme di residui, ho notato che probabilmente fosse necessario rimuovere una parte dei residui che causavano una forte deviazione da una distribuzione Gaussiana. Così facendo ho ottenuto un modello certamente migliore ma comunque non perfetto:

Boxplot residui iniziali**Boxplot residui dopo la rimozione degli outliers**

Per la precisione, sono stati rimossi 40 campioni per ottenere il seguente risultato:

Histogram of lm.resid**Normal Q-Q Plot**

```
> skewness = mean(((lm.resid - mean(lm.resid)) / sd(lm.resid))^3); skewness
[1] 0.2961855

> kurtosi = mean(((lm.resid - mean(lm.resid)) / sd(lm.resid))^4) - 3; kurtosi
[1] -0.3962842

> shapiro.test(lm.resid)

Shapiro-Wilk normality test

data:  lm.resid
W = 0.98522, p-value = 0.0007833
```

Da notare comunque la diminuzione del valore del p-value di ben oltre 10 ordini di grandezza nel Test di Shapiro-Wilk, e il netto miglioramento dei valori di skewness e kurtosi. Dobbiamo certamente sottolineare che, con una proporzione di varianza spiegata dal modello pari al 96%, l'errore introdotto dalla non normalità della distribuzione dei residui, rappresenta una piccolissima parte di struttura che non riusciamo a catturare.

3.2 Modello di Regressione Logaritmico

Non contento, nella speranza di riuscire ad ottenere un modello di regressione con un valore di R^2 leggermente minore, ma con una distribuzione dei residui migliore, ho provato una analisi tramite modello di regressione non lineare. Quindi ho usato la trasformazione logaritmica per effettuare un *fit* esponenziale. Seguendo lo stesso filone di ragionamento e con le dovute accortezze, riassumo di seguito i risultati ottenuti:

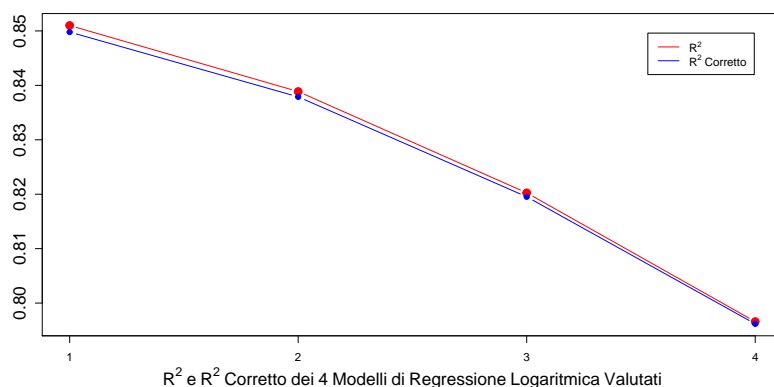
```
> summary(lm)

Call:
lm(formula = log(Rmax) ~ log(Rpeak) + log(TotalCores), data = ...)

Residuals:
    Min       1Q   Median       3Q      Max
-3.12824 -0.08284  0.07566  0.12253  0.88843

Coefficients:
            Estimate Std. Error t value Pr(>|t|)
(Intercept)  -0.24672    0.19428   -1.270   0.205
log(Rpeak)    0.65997    0.02967  22.246 < 2e-16 ***
log(TotalCores) 0.23030    0.02847   8.088 4.66e-15 ***
---
Signif. codes:  0 '***' 0.001 '**' 0.01 '*' 0.05 '.' 0.1 ' ' 1

Residual standard error: 0.3061 on 497 degrees of freedom
Multiple R-squared:  0.8203, Adjusted R-squared:  0.8195
F-statistic: 1134 on 2 and 497 DF, p-value: < 2.2e-16
```

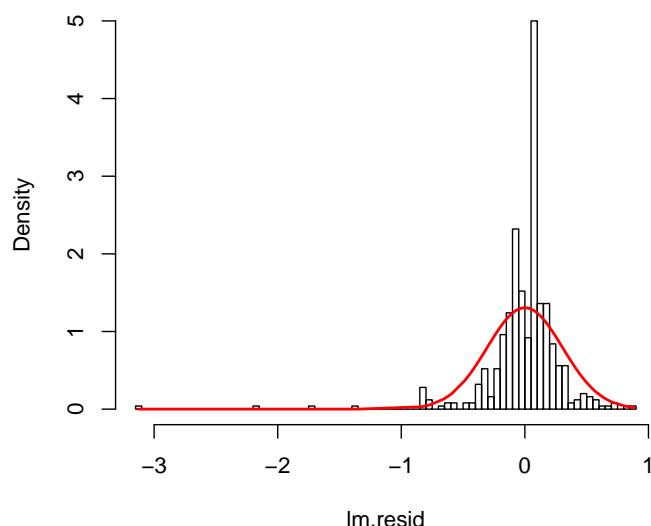


Notiamo quindi un passaggio da una Varianza spiegata del 96% con un modello di regressione lineare, all'82% del modello logaritmico.

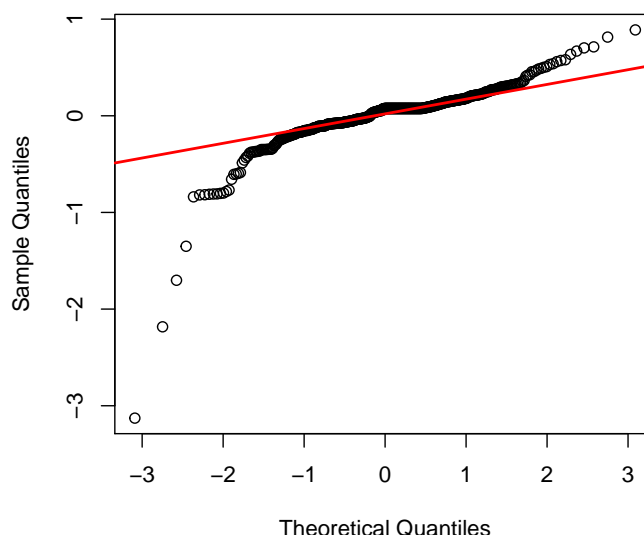
3.2.1 Analisi dei Residui

I valori di partenza dell'analisi dei residui riguardanti il modello logaritmico non sono certamente perfetti ma comunque migliori di quelli del modello lineare.

Histogram of lm.resid



Normal Q-Q Plot



```
> skewness = mean(((lm.resid - mean(lm.resid)) / sd(lm.resid))^3); skewness
[1] -3.561324

> kurtosi = mean(((lm.resid - mean(lm.resid)) / sd(lm.resid))^4) - 3; kurtosi
[1] 28.8915

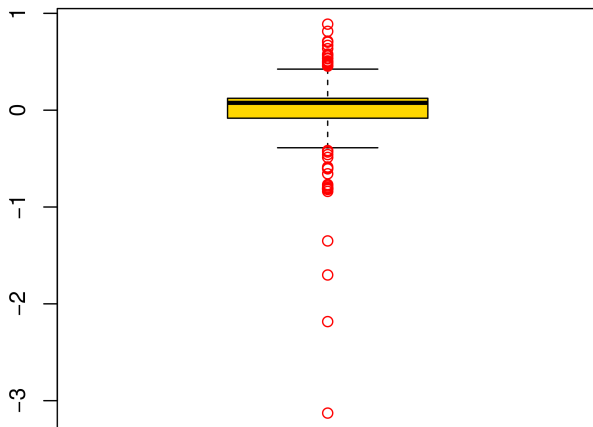
> shapiro.test(lm.resid)

Shapiro-Wilk normality test

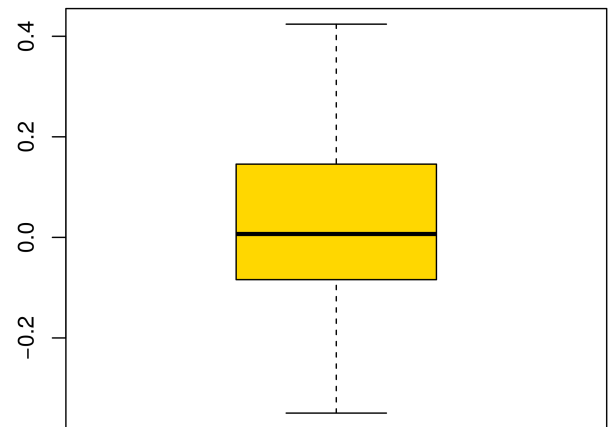
data:  lm.resid
W = 0.74598, p-value < 2.2e-16
```

Uguualmente a quanto fatto nell'analisi dei residui del modello di regressione lineare, ho rimosso una parte dei residui che causavano una forte deviazione da una distribuzione Gaussiana. La presenza di questi residui "anomali", in entrambi i modelli valutati, è dovuta alla presenza di osservazioni "anomale" che dipendono dal fatto che la tabella di dati raccoglie informazioni riguardanti Supercomputer dal 2010 al 2020. Sappiamo bene quanto aumentino bruscamente le prestazioni dei computer in un arco di tempo pari a 10 anni. In questo contesto quindi, per "anomalo" non intendiamo certo errato ma bensì diverso. L'analisi di regressione sicuramente soffre per la presenza di questi fattori.

Boxplot residui iniziali

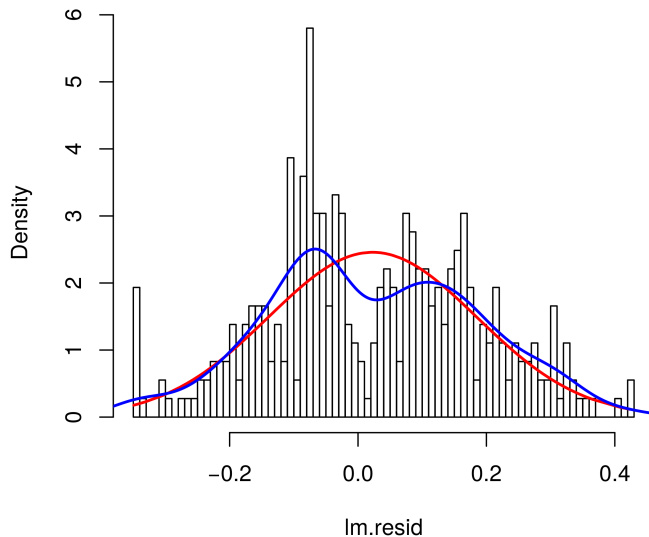


Boxplot residui dopo la rimozione degli outliers

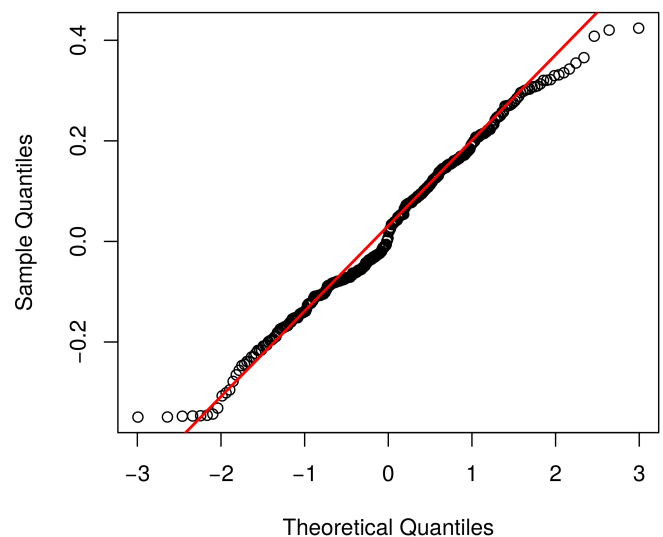


Per la precisione, sono stati rimossi 40 campioni per ottenere il seguente risultato:

Histogram of lm.resid



Normal Q-Q Plot



```
> skewness = mean(((lm.resid - mean(lm.resid)) / sd(lm.resid))^3); skewness
[1] 0.04635719
> kurtosi = mean(((lm.resid - mean(lm.resid)) / sd(lm.resid))^4) - 3; kurtosi
[1] -0.5150052
> shapiro.test(lm.resid)

Shapiro-Wilk normality test

data:  lm.resid
W = 0.98905, p-value = 0.008154
```

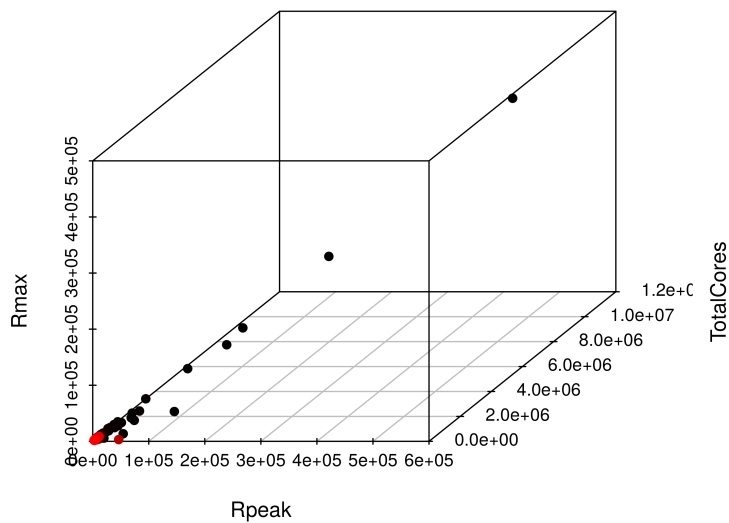
I valori di skewness e kurtosi sono certamente accettabili anche se il **p-value** del Test di Shapiro-Wilk, che comunque è **migliorato aumentando di un ordine di grandezza** rispetto ai residui del modello di regressione lineare, rimane comunque ancora basso. Dobbiamo infatti tenere a mente che questo miglioramento dei risultati del Test di Shapiro-Wilk lo stiamo pagando in termini del valore di R^2 che è passato, lo ricordiamo, da 96% a 82%. A questo punto, per esprimere un giudizio finale definitivo, comparerò i due modelli in fase di predizione.

4 Predizione e autovalutazione

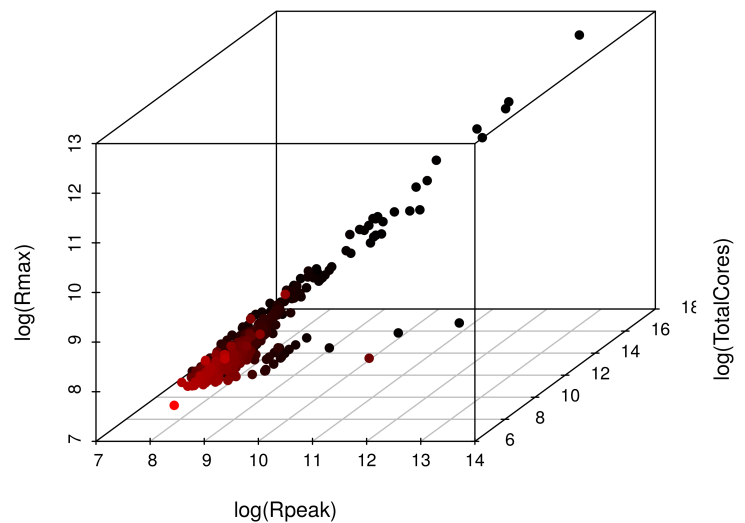
Dato che, al termine del processo di eliminazione dei fattori, ho ottenuto un modello, sia nel caso lineare che nel caso logaritmico, con due predittori e un fattore di uscita, ho pensato di

rappresentare entrambi i modelli tramite una grafico di dispersione 3D:

Regressione Lineare



Regressione Logaritmico



Ritengo che sia utile dato che ci mostra in maniera visiva quanto abbiamo concluso nelle fasi precedenti della nostra analisi: il modello logaritmico, tramite il cambio di scala, riesce ad attenuare l'effetto dispersivo dovuto alla presenza degli outliers nella tabella di dati originale.

In fase di predizione e autovalutazione, i due modelli sono stati messi a confronto. Le osservazioni della tabella originale sono state suddivise in un sottoinsieme di 50 osservazioni, utilizzato come insieme di predizione, e un sottoinsieme di 450 osservazioni, utilizzato come insieme di allenamento del modello. Ho osservato che questa diminuzione del numero di osservazioni utilizzato per la costruzione dei due modelli non ha inciso drasticamente sulla proporzione di varianza spiegata dal modello. Oscilla intorno al 96% per quanto riguarda il modello lineare e intorno al 82% per quanto riguarda il modello logaritmico.

```
> summary(data_train.lm)$r.squared
[1] 0.9692249

> summary(ldata_train.lm)$r.squared
[1] 0.8195792

> data_train.lm.p = predict(data_train.lm, data_test)
> ldata_train.lm.p = predict(ldata_train.lm, ldata_test)

> sqrt(mean((data_train.lm.p - data_train$Rmax)^2))
[1] 23126.91

> sqrt(mean((exp(ldata_train.lm.p) - data_train$Rmax)^2))
[1] 23190.9
```

Considerare lo scarto medio di una sola estrazione di sottoinsiemi, di un solo esperimento quindi, non porta certamente risultati statisticamente significativi. Ho ripetuto l'esperimento quindi 50 volte:

```
> mean(terr_lin)
[1] 24802.19

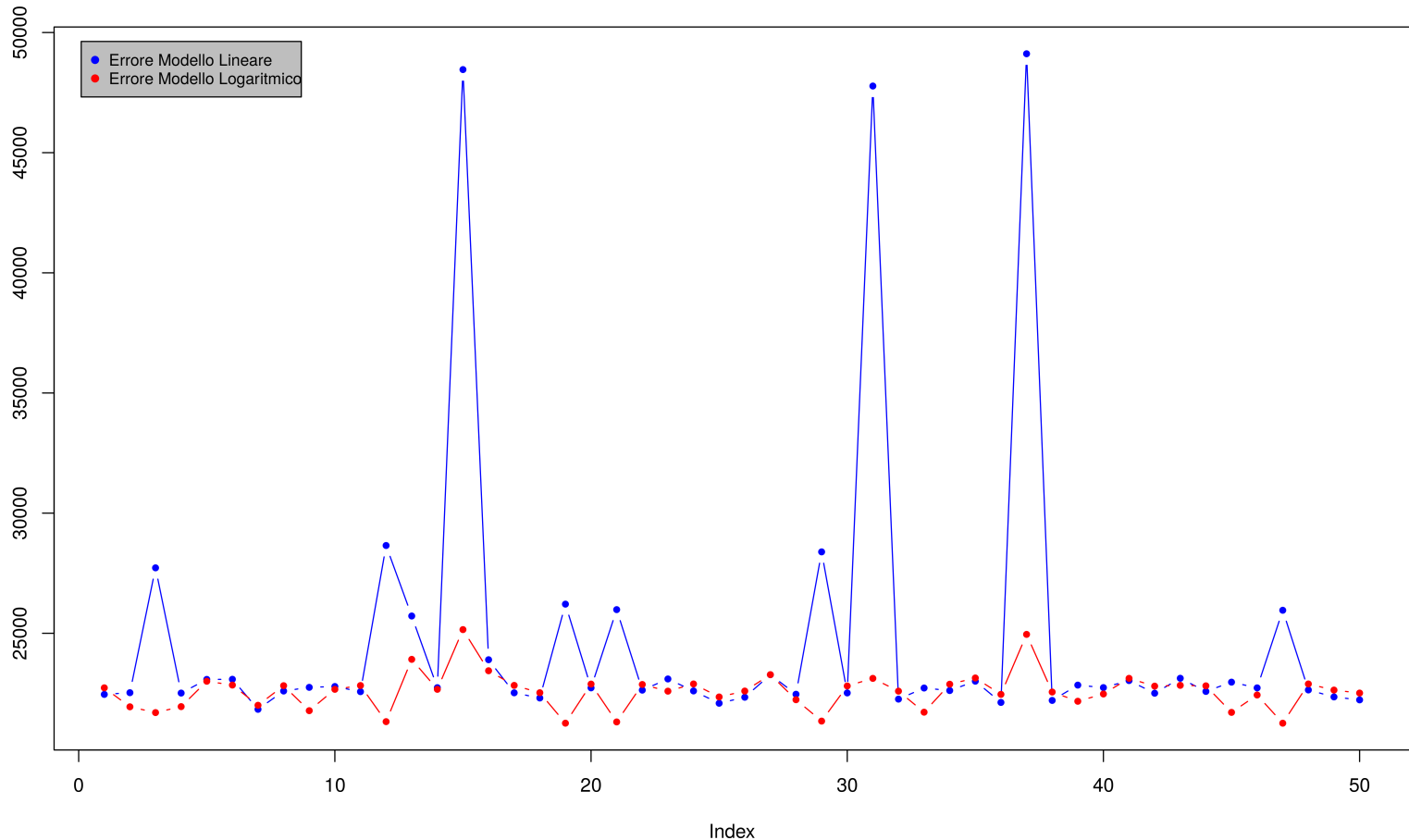
> mean(terr_log)
[1] 22593.09

> sd(terr_lin)
[1] 6244.185

> sd(terr_log)
[1] 782.1269
```

In media quindi, il modello logaritmico, ha una media di errore più bassa. Inoltre, la deviazione standard del modello logaritmico è nettamente inferiore rispetto a quella del modello

lineare, possiamo quindi considerarlo molto più affidabile. La seguente figura riassume la simulazione eseguita:



5 Conclusioni

In ultima analisi, la mia ipotesi, utilizzare un modello non lineare con la trasformazione logaritmica, perdendo qualcosa in Varianza Spiegata dal modello per ottenere un andamento dei residui più "normale", si è rivelata corretta. Quando ho terminato la messa a punto dei due modelli, mi era difficile valutare tramite i vari diagrammi e i valori numerici dei test eseguiti. In fase di predizione e autovalutazione i miei dubbi sono stati risolti dai risultati della simulazione: effettivamente, il modello logaritmico in media sbaglia di meno, e ha un comportamento, in fase di predizione, più affidabile rispetto al modello lineare.

Bisogna tenere in considerazione anche il fatto che la tabella presenta un numero consistente di fattori qualitativi che non abbiamo preso in considerazione, dato che ci siamo basati esclusivamente sui fattori quantitativi. Tali fattori, forse, potrebbero aiutarci a ottenere un R^2 più elevato per il modello logaritmico e residui migliori.

Per quanto riguarda le considerazioni relative al contesto applicativo della presente analisi, sulle quali non mi sono voluto dilungare nella sezione introduttiva per lasciare spazio all'analisi stessa, certamente un modello statistico di questo tipo, che permetta di predire il valore **Rmax** per un Supercomputer, è utile in quanto:

- il "high-performance LINPACK (HPL) benchmark" richiede la calibrazione di ben oltre 18 parametri per essere eseguito;
- un errore nella calibrazione di uno solo di questi parametri può compromettere (eventualmente falsare) i risultati ottenuti;
- mantenere un Supercomputer acceso per l'esecuzione dell'HPL ha un consumo energetico non indifferente.