

ブロックヤコビ法に基づく超並列固有値解法の「京」上での性能評価  
Performance of a Massively Parallel Eigensolver based on the Block Jacobi Method  
on the K computer

工藤周平, 高橋祐輔, 深谷猛, 山本有作

Shuhei Kudo, Yusuke Takahashi, Takeshi Fukaya and Yusaku Yamamoto

神戸大学大学院システム情報学研究科計算科学専攻

Department of Computational Science, Kobe University, Kobe, Hyogo 657-8501

実対称密行列の固有値問題は様々な科学技術計算で重要な役割を果たす線形計算であり, **ScaLAPACK** をはじめとして様々な超並列向けライブラリが開発されている。しかし, そのほとんどは超大規模問題をターゲットとしており, 計算機のメモリを一杯に使うサイズの行列でないと計算機の性能を引き出せない。一方, 第一分子動力学計算などでは, 行列は1万元程度と比較的小規模だが, 時間発展などの繰り返し計算を数万回にわたって行うタイプの問題も存在する。このような問題を高速化するには, 多数のコアを活用して小規模問題を超高速に解けるソルバが必要である。しかし, 3重対角化に基づく標準的な解法では, 細粒度の通信が多数発生し, 小規模問題ではスケーラビリティが大きく悪化する。

そこで本研究では, ブロックヤコビ法に基づく超並列固有値ソルバを開発した。ブロックヤコビ法は, 3重対角化に基づく方法に比べ, 計算量は数倍多いものの, 通信が大粒度であり, 演算パターンが単純であるという特徴を持つ。ブロックヤコビ法の並列化に当たり, 本研究では, 従来の1次元分割に代えて, 2次元分割を新たに採用した。これにより, 負荷の均等性は低下するものの, 通信量については大幅に削減できる。

本手法を **MPI** を用いて実装し, 「京」上で性能評価を行った結果, 1万元の問題に対して1万コアまで順調な加速が見られた。1万コア使用時の全固有値・固有ベクトル計算の時間は16.5秒であった。一方, **ScaLAPACK** では, 1000コアを越えると加速率の頭打ち, さらには低下が見られた。これにより, ブロックヤコビ法の良いスケーラビリティを確認した。ただし, 絶対時間で見ると, 最適なコア数を用いた **ScaLAPACK** のほうがまだ高速である。この原因は, ブロックヤコビ法における部分対角化処理が十分最適化されていないことであり, 今後, この部分のチューニングを行う予定である

[1] Y. Takahashi, Y. Hirota and Y. Yamamoto: “Performance of the block Jacobi method for the symmetric eigenvalue problem on a modern massively parallel computer”, Proceedings of ALGORITHM 2012, pp. 151-160 (2012).