

強スケーリングを実現する超並列固有値ソルバの開発に向けて

Toward Developing a Massively Parallel Eigensolver with a Strong Scaling Property

工藤周平^{*1}, 張瀾^{*1}, 山本有作^{*2}

Shuhei Kudo, Lan Zhang and Yusaku Yamamoto

*1 神戸大学大学院 システム情報学研究科 計算科学専攻

*2 電気通信大学 情報理工学研究科 情報・通信工学専攻

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

*2 Department of Communication Engineering and Informatics,
The University of Electro-Communications, Chofu, Tokyo, 182-8585

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, 弱スケーリングでの性能, つまり, ノード数に比例して問題サイズを大きくしていった場合の並列性能に重点を置いて開発されている. 一方, 第一分子動力学などでは, 行列は 1 万元程度と中規模だが, 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, 行列サイズを固定してノード数を増やしていった場合の並列性能, すなわち強スケーリングの性能が重要となる.

そこで本研究では, 強スケーリングの実現に向けて, ブロックヤコビ法に基づく超並列固有値ソルバの開発を行っている. ブロックヤコビ法は, ScaLAPACK などで行われている 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. そのため, 通信オーバーヘッドが実行時間の多くを占める強スケーリングの環境では, 3 重対角化法に比べて有利となる可能性がある.

そこで, ブロックヤコビ法を MPI を用いて実装し, 通信の最適化とループの最適化を行った上で, 「京」上での性能評価を行った. その結果, 1 万元の問題に対して 1 万ノードまで順調な加速が見られた. 一方, ScaLAPACK では, 100 ノードを越えるとほとんど高速化の効果がなく, 600 ノード以上ではかえって遅くなる傾向が見られた. その結果, 最短の実行時間は, ScaLAPACK の 8.3 秒に対し, ブロックヤコビ法は 5.5 秒となり, 強スケーリングの環境下では後者が有望であることが示された.

本研究課題では, このほかに, 超並列環境向けのベクトル直交化法, 行列指数関数をはじめとする行列関数の計算法などについても研究を進めており, 時間があれば, これらの結果についても紹介したい.

[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 ALGORITHMY 2012, pp. 151-160 (2012).

[2] 工藤周平, 高橋 佑輔, 深谷 猛, 山本 有作: “ブロックヤコビ法に基づく固有値解法の超並列計算機上での実装”, 日本応用数理学会 2013 年度年会, アクロス福岡, 2013 年 9 月 11 日 ~ 13 日.