

「ポストペタスケール高性能計算に資する

システムソフトウェア技術の創出」

平成22年度採択研究代表者

| |
|----------------|
| H23 年度 実績報告 |
|----------------|

櫻井 鉄也

筑波大学大学院システム情報工学研究科・教授

ポストペタスケールに対応した階層モデルによる超並列固有値解析エンジンの開発

§ 1. 研究実施体制

(1) 櫻井グループ

① 研究代表者: 櫻井 鉄也 (筑波大学大学院システム情報工学研究科、教授)

② 研究項目

- ・階層的固有値計算アルゴリズムの理論構築と高性能化技術の開発
- ・ペタフロップス環境向け実装と実アプリケーションを用いた評価

(2) 張グループ

① 主たる共同研究者: 張 紹良 (名古屋大学大学院工学研究科、教授)

② 研究項目

- ・ロバストな高性能線形計算手法

(3) 今村グループ

① 主たる共同研究者: 今村 俊幸 (電気通信大学大学院情報理工学研究科、准教授)

② 研究項目

- ・再帰的アルゴリズムに基づく行列変換法の研究
- ・GPU・メニーコア向け実装技術研究
- ・ペタフロップス環境での試験実装と実アプリを用いた評価

(4) 山本グループ

① 主たる共同研究者: 山本 有作 (神戸大学大学院システム情報学研究科、教授)

② 研究項目

- ・密行列向け固有値計算アルゴリズムの開発

・性能モデリング・自動最適化技術の開発

(5) 蔵増グループ

① 主たる共同研究者: 蔵増 嘉伸 (筑波大学大学院数理物質科学研究科、准教授)

② 研究項目

- ・実アプリケーションを用いた検証と開発者へのフィードバック
- ・実アプリケーションにおいて高性能利用するための技術開発

(6) 星グループ

① 主たる共同研究者: 星 健夫 (鳥取大学大学院工学研究科、准教授)

② 研究項目

- ・物質科学分野実アプリケーションからの利用を想定した SMP 密行列ソルバの評価
- ・実アプリケーション利用からみた疎行列計算方法の提案

§ 2. 研究実施内容

(文中に番号がある場合は(3-1)に対応する)

(1) 櫻井グループ

(a) 階層的固有値計算アルゴリズムの理論整備と高性能化技術の開発

開発している階層型の固有値解法の適用範囲を広げるために、縮重がある場合にも適用できる理論の整備を進めた。また、標準固有値問題で現れるシフト方程式を高速に解くためのブロック型の解法の安定化と高速化技術を開発した。さらに一般化固有値問題に対しては、分子軌道計算で現れる問題を対象として準疎行列に対する前処理法を実装した。適切なパラメータ選択のための固有値密度の確率的推定法を開発した¹⁻³⁾。

(b) ペタフロップス環境向け実装と実アプリケーションを用いた評価

(a)で開発したブロック型解法を実空間密度汎関数法(RSDFT)を用いたバンド構造計算に適用し、京コンピュータ6,144コアを用いてシリコンナノワイヤ1万原子のバンド構造が実用的な時間で得られることを確認した⁴⁾。

(2) 張グループ

計算科学に現れる様々な超大規模固有値問題をポストペタスケールの超並列環境で高効率的に解くには、階層的な構造を持つアルゴリズムが必要不可欠である。本グループは、非対称や非標準、非線形の困難な問題における領域分割・周回積分・線形方程式求解の各階層に対して、数理的手法重視の高速アルゴリズムの開発に取り組んでいる。具体的には、非対称線形方程式の解法として近年注目を集めている IDR 法に対して、疑似残差最小化技法およびブロック化技法を導入し、よりロバストで並列環境に適した高速アルゴリズムを開発した。また、非対称な固有値問題に対しては、並列環境に適したマルチシフト QR 法をベースとして、アルゴリズムに含まれるパラメータの最適化を行い、より高効率なアルゴリズムを開発した。今後は、非標準や非線形の問題に対しても、よりロバストな高性能線形計算手法の開発に取り組む。

(3) 今村グループ

(a) 再帰的アルゴリズムに基づく行列変換法の研究

ポストペタスケール環境において密行列固有値計算の重要な前処理となるハウスホルダーの三重対角化をブロック三重対角化として構成する。階層内と階層間の通信のオーバーヘッドを削減するためのブロックリフレクター構成方法とその実装、および通信回数やデータ依存関係を緩和するアルゴリズムの研究を実施した。

(b) GPU・メニーコア向け実装技術研究

ポストペタスケール環境におけるプロセッサ構成要素に近いと考えられるGPUとメニーコアについて、線形計算の基盤となる BLAS の高性能化と実装における自動チューニング技術の構成方法を実施し¹⁰⁾、実際にそれらを組み込んだ高性能 GPU-BLAS ライブラリの実装を実施した。

(c) ペタフロップス環境での試験実装と実アプリを用いた評価

従来開発を進めてきた **Eigen-T2K** シリーズを **Eigen-K** に拡張するために、**T2K** 東大システムでその性能を測定するとともに、通信オーバーヘッドの解析等を実施した。基本アルゴリズムや初期段階におけるいくつかの性能を解析した¹¹⁾。

(4) 山本グループ

(a) 超並列環境における密行列固有値計算のための基礎技術の開発

ポストペタスケール環境に対応した密行列固有値解法全体を並列性・データ参照の局所性に優れた再帰的アルゴリズムとして定式化し、部品となる様々な行列計算に関して並列性を高めたアルゴリズムの開発を進めた。マルチコアプロセッサに向け、再帰的アルゴリズムに基づく固有値解法の開発と実装を行った。また、固有値計算の部品として使われるベクトル逐次添加型の直交化演算に対し、コンパクト **WY** 表現と呼ばれる技法を用いて、並列性を高めたアルゴリズムを開発した¹²⁾。さらに、**QR** 分解について並列性の高い **TSQR** 法に対する理論誤差解析を行い、従来法と同等以上の精度を持つことを示した¹³⁾。

(b) 密行列固有値計算のための性能モデリング技術の開発

密行列固有値解法について、1 ノード内での性能モデルを構築した。同モデルは、基本行列演算の実測性能をデータとして利用することで、誤差 5~10%の精度の高い性能予測を可能とした。

(5) 蔵増グループ

(a) 実アプリケーションを用いた検証と開発者へのフィードバック

格子 **QCD** における小規模行列に対して櫻井-杉浦法による固有値計算を適用したテスト結果をもとに、今後の大規模疎行列向け固有値解析エンジンの高度化に必要な計算技術要素と利用形態の拡張性を検討した。

(b) 実アプリケーションにおいて高性能利用するための技術開発

超並列・低 **B/F** 値が予想されるポストペタスケール環境において疎行列向け固有値解析エンジンを高性能利用するために、**QR** 分解を取り入れたブロック版 **BiCGSTAB** 法を提案し、格子 **QCD** における実問題に適用してその有効性を確かめた¹⁵⁾。現在「京」において実装を行い、その性能を検証中である。

(6) 星グループ

(a) 物質科学分野実アプリケーションからの利用を想定した **SMP** 密行列ソルバの評価

物質科学分野実アプリケーションを想定したテストコードの作成を行っている。本年度は実アプリケーションから利用されることを想定し、共同研究グループ(4)による **SMP** むけ密行列ソルバの評価を行った。

(b) 実アプリケーション利用からみた疎行列計算方法の提案

共同研究グループ(2)との共同研究で、実アプリケーション(電子状態計算)利用からみた疎行列計算方法の提案を行った。一般化固有値問題から導出されるシフト型一般化線形方程式をとりあ

げた。対象とする一般化固有値問題における右辺行列は単位行列に近い性質があり、この性質を使うことで、高速計算技術の基礎となりうることが示された。

§3. 成果発表等

(3-1) 原著論文発表

●論文詳細情報

(1) 櫻井グループ

1. Y. Maeda, Y. Futamura and T. Sakurai, “Stochastic estimation method of eigenvalue density for nonlinear eigenvalue problem on the complex plane”, *JSIAM Letters*, Vol. 3, pp. 61-64, 2011.
2. 山本和磨, 前田恭行, 二村保徳, 櫻井鉄也, “非線形固有値問題の固有値密度推定法における適応的並列アルゴリズム”, 2012年ハイパフォーマンスコМПユーティングと計算科学シンポジウム予稿集, pp. 127-134, 2012.
3. 山本和磨, 前田恭行, 二村保徳, 櫻井鉄也, “非線形固有値問題の固有値密度推定法における適応的並列アルゴリズム”, 情報処理学会 ACS 論文誌第 38 号. (accepted).
4. Y. Futamura, T. Sakurai, S. Furuya and J. Iwata, “Efficient algorithm for linear systems arising in solutions of eigenproblems and its application to electronic-structure calculations”, *Proc. 10th International Meeting on High-Performance Computing for Computational Science (VECPAR 2012)*. (accepted)

(2) 張グループ

5. 今倉暁, 曾我部知広, 張紹良, “非対称線形方程式のための Look-Back GMRES(m)法”, *日本応用数理学会論文誌*, Vol. 22, No. 1, 2012. (掲載予定)
6. A. Imakura, T. Sogabe and S.-L. Zhang, “An efficient variant of the GMRES(m) method based on the error equations”, *East Asian Journal on Applied Mathematics*, Vol. 2, Issue 1, pp. 19-32, 2012. (DOI: 10.4208/eajam.280611.030911a)
7. L. Du, T. Sogabe, and S.-L. Zhang, “A variant of the IDR(s) method with quasi-minimal residual strategy”, *J. Comput. Appl. Math.*, Vol. 236, No. 5, pp. 621-630, 2011. (DOI:10.1016/j.cam.2011.07.027)
8. L. Du, T. Sogabe, B. Yu, Y. Yamamoto and S.-L. Zhang, “A block IDR(s) method for nonsymmetric linear systems with multiple right-hand sides”, *J. Comput. Appl. Math.*, Vol. 235, No. 14, pp. 4095-4106, 2011. (DOI:10.1016/j.cam.2011.02.035)
9. T. Miyata, Y. Yamamoto, T. Uneyama, Y. Nakamura and S.-L. Zhang, “Optimization of the Multishift QR Algorithm with Coprocessors for Non-Hermitian Eigenvalue

Problems”, East Asian Journal on Applied Mathematics, Vol. 1, No. 2, pp. 187-196, 2011.
(DOI: 10.4208/eajam.300510.250311a)

(3) 今村グループ

10. 今村俊幸, CUDA 環境下での DGEMV 関数の性能安定化・自動チューニングに関する考察, 情報処理学会論文誌コンピューティングシステム, Vol. 4, No. 4, pp. 158-168, 2011.

11. T. Imamura, S. Yamada and M. Machida, “Development of a High Performance Eigensolver on the Peta-Scale Next Generation Supercomputer System”, Progress in Nuclear Science and Technology, the Atomic Energy Society of Japan, Vol. 2, pp. 643-650, 2011.

(4) 山本グループ

12. Y. Yamamoto and Y. Hirota, “A parallel algorithm for incremental orthogonalization based on the compact WY representation”, JSIAM Letters, Vol. 3, pp. 89-92, 2011.

13. D. Mori, Y. Yamamoto and S.-L. Zhang, “Backward error analysis of the AllReduce algorithm for householder QR decomposition”, Japan Journal of Industrial and Applied Mathematics, to appear. (DOI: 10.1007/s13160-011-0053-x)

14. A. Fukuda, Y. Yamamoto, M. Iwasaki, E. Ishiwata and Y. Nakamura, “On a shifted LR transformation derived from the discrete hungry Toda equation”, Monatshefte für Mathematik, to appear.

(5) 藏増グループ

15. Y. Nakamura, K.-I. Ishikawa, Y. Kuramashi, T. Sakurai and H. Tadano, “Modified block BiCGSTAB for lattice QCD”, Computer Physics Communications, Vol. 183, Issue 1, pp.34-37, 2012. (DOI:10.1016/j.cpc.2011.08.010)

(6) 星グループ

16. H. Teng, T. Fujiwara, T. Hoshi, T. Sogabe, S.-L. Zhang and S. Yamamoto, “Efficient and accurate linear algebraic methods for large-scale electronic structure calculations with nonorthogonal atomic orbitals”, Phys. Rev. B 83, 165103, 12pp, 2011.
(DOI:10.1103/PhysRevB.83.165103)

17. 山下達也, 宮田考史, 曾我部知広, 星健夫, 藤原毅夫, 張紹良, “一般化固有値問題に対する Arnoldi(M, W, G) 法”, 日本応用数学会論文, Vol. 21, No. 3, pp. 241-254, 2011.

18. T. Hoshi, S. Yamamoto, T. Fujiwara, T. Sogabe and S.-L. Zhang, “An order-N electronic structure theory with generalized eigenvalue equations and its application to

a ten-million-atom system”, J. Phys.: Condensed Matter. (in press)

(3-2) 知財出願

① 平成 23 年度特許出願件数(国内 0 件)

② CREST 研究期間累積件数(国内 0 件)