

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 (理化学研究所計算科学研究機構、チームリーダー)
- 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
 - ・階層型並列環境に対応した高性能ソフトウェア群の開発

(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
- ・実アプリを用いた評価

(5) 藏増グループ

① 主たる共同研究者: 藏増 嘉伸 (筑波大学大学院数理物質系、准教授)

② 研究項目

- ・疎行列向け固有値解析エンジンの性能を実アプリケーションを用いて検証し、開発者へフィードバック
- ・実アプリケーションにおいて固有値解析エンジンを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

- ・本プロジェクトで開発される固有値解析エンジン(特に密行列向けエンジン)が多くの実アプリケーションから利用されることを目的とした、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と性能実証・下方展開可能性の検証・実アプリケーション開発者の立場からのフィードバック

§ 2. 研究実施内容

本プロジェクトでは、大規模計算の実行において多くの時間を占め高速化のニーズが高い固有値計算を対象として、ポストペタスケール規模のハードウェア性能を十分に引き出すことのできる「超並列固有値解析エンジン」を開発する。そのために、アーキテクチャの持つ細粒度・大粒度の超並列性を活用する階層型並列アルゴリズムの構築、高性能実装と性能最適化の技術開発、性能評価モデルの設計を行う。

平成 24 年度は、以下の研究を実施した。

i) 階層的な並列構造を持つ固有値計算アルゴリズムとその高性能ソフトウェアの開発

密行列向けの再帰的アルゴリズムに基づく行列変換法の開発のために、ポストペタスケール環境において密行列の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として構成する方法について研究を実施した。また、自動チューニングを採用し通信オーバーヘッドを削減するため非同期集団通信の実装法研究を実施した。超並列環境下での固有値ソルバの柔軟な利用形態の要望などをまとめ、高並列環境に共通する多倍長高性能ソフトウェア群の構成要素の調査を実施・検討した。

疎行列向けとして、統計的な固有値密度推定法を利用して高性能利用のために必要な各種のパラメータを推定する方法を提案した¹⁾。この方法をソフトウェアに組み込むことで、従来、最適化のために方法に対する知識が求められた複数のパラメータの設定を自動化することが可能となり、利用性が向上した。この方法の幅広い問題での有効性検証のために、その設計図の役割を果たす MATLAB 版を Web で公開するとともに、海外の研究機関を含む外部の研究グループに配布してフィードバックを得た。固有値エンジンを多様なアプリケーションに組み込むことを想定し、Reverse Communication Interface (RCI) を備えた FORTRAN90 版のソフトウェアを「京」上で実装した。開発したソフトウェアの公開に向けて整備を進め、複数のアプリケーション開発者に配布するための準備を行っている。また、標準固有値問題での高性能化のために、ii)で開発したブロックシフト法を利用し、「京」上で実空間密度汎関数法によるバンド図計算を対象として高性能実装法の開発を行った。

密行列・疎行列両方の固有値計算アルゴリズムで重要な役割を果たす縦長行列の QR 分解について、並列向きとされる TSQR アルゴリズムをベースとして、MPI 並列・スレッド並列のハイブリッド並列プログラムを開発した。東大 T2K および「京」上での性能評価を行ったところ、アルゴリズム中の逐次部分である、特殊な構造を持つ小行列の QR 分解の FLOPS 値が低く、性能ボトルネックとなることが判明した。今後、この部分についてチューニングを行い、性能向上を図るとともに、密行列・疎行列固有値計算アルゴリズムへの組み込みを行う。

ii) シフト線形方程式のための数値解法を利用した高速化

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、非対称線形シフト方程式の解法である GMRES 法に対して Look Back 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の指定された絶対値のニーズに対しては、疎行列向けの解法をベースとして収束評価を行い、より高効率なアルゴリズムの開発を行った。

iii) GPU・メニーコア向け実装技術の開発

GPU・メニーコア向け実装技術の開発のため、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 の特に対称行列とベクトルとの積 (SYMV 計算) の高性能実装手法を開発した¹⁷⁾。また、HA-PACS や「京」を利用した格子 QCD 計算のカーネル部分のチューニングおよび通信の高度化を行った。QR 分解を取り入れたブロック版 BiCGSTAB 法を「京」において実装してその効果を確認した後、更なる実効性能の向上を図っている。

iv) マルチコアプロセッサを対象とした性能予測モデルの構築

密行列固有値ソルバのうち、演算時間の主要部分を占める 3 重対角化の部分について、性能モデルを構築した。本モデルは、1 ノードでの演算性能の実測値と、複数ノードでの通信性能の実測値に基づき、複数ノードでの 3 重対角化の実行時間を予測する。「京」上で本モデルの精度を評価したところ、行列サイズが十分大きい場合、3 重対角化処理中の大部分の演算については、10% 程度の誤差で実行時間を予測できるという結果が得られた。ただし、行列ベクトル積など一部の演算については予測誤差が大きいため、今後、その原因を調査する。

v) 実アプリケーションによる高性能利用技術の開発

「京」向けに開発した Eigen-K の性能評価を実施した。基本アルゴリズムや強スケーリング特性結果が得られている。また、「京」に移植した際に確認された通信オーバーヘッドとなる部分の改良を進めた。実空間密度汎関数法コード RSDFT や PHASE などの実アプリケーションへの応用で、開発した固有値コードが利用され高性能を達成している。開発した TSQR アルゴリズムのプログラムを実アプリケーションである RSDFT に組み込んで評価を行うため、組み込みに向けコードの整備を行った。開発した疎行列向けコードと実空間密度汎関数法を組み合わせ、これまで従来コードでは計算量の大きさから実施できなかったシリコンナノワイヤー 1 万原子のバンド図計算を「京」上で行い、実用的に計算が可能であることを検証した。開発したシフト方程式解法の応用として、超大規模超並列ナノ物質量子シミュレーター ELSESES に実装し、「京」でのベンチマークを行った。1000 万原子系 (シリコン単結晶で 70nm 立方領域に相当) の計算を、産業利用が期待されるナノ物質 (sp²-sp³ ナノ複合カーボン固体など) を対象に行った¹³⁾。98,304 コア計算までの計算を行った。

§3. 成果発表等

(3-1) 原著論文発表

●論文詳細情報

1. Tetsuya Sakurai, Yasunori Futamura and Hiroto Tadano, "Efficient parameter estimation and implementation of a contour integral-based eigensolver", J. Alg. Comput. Tech., (accepted).
2. Shinnosuke Yokota, Tetsuya Sakurai, A projection method for nonlinear eigenvalue problems using contour integrals, JSIAM Letters, Vol.5, pp.41-44, 2013.
3. Akira Imakura, Tetsuya Sakurai, Kohsuke Sumiyoshi and Hideo Matsufuru, "A Parameter Optimization Technique for a Weighted Jacobi-Type Preconditioner", JSIAM Letters, Vol.4, pp.41-44, 2012.
4. Michihiro Naito, Hiroto Tadano and Tetsuya Sakurai, "A modified Block IDR(s) method for computing high accuracy solutions", JSIAM Letters, Vol.4, pp. 25-28, 2012.
5. Akira Imakura, Tomohiro Sogabe and Shao-Liang Zhang, "An Efficient Variant of the Restarted Shifted GMRES Method for Solving Shifted Linear Systems", Journal of Mathematical Research with Applications, (accepted).
6. 今倉暁, 楊濟榮, 曾我部知広, 張紹良, "デフレーション型とLook-Back型のリスタートを併用したGMRES(m)法の収束特性", 日本応用数学会論文誌, Vol.22, No.3, pp.117-141, 2012.
7. Tomohiro Sogabe, Takeo Hoshi, Shao-Liang Zhang and Takeo Fujiwara, "Solution of generalized shifted linear systems with complex symmetric matrices", J. Comp. Phys. 231, pp. 5669-5684, 2012. (DOI :10.1016/j.jcp.2012.04.046)
8. Akiko Fukuda, Emiko Ishiwata, Yusaku Yamamoto, Masashi Iwasaki and Yoshimasa Nakamura, "Integrable discrete hungry systems and their related matrix eigenvalues", Ann. Mat. Pura Appl. (to appear). (DOI: 10.1007/s10231-011-0231-0)
9. Akiko Fukuda, Yusaku Yamamoto, Masashi Iwasaki, Emiko Ishiwata and Yoshimasa Nakamura, "Error analysis for matrix eigenvalue algorithm based on the discrete hungry Toda equation", Numerical Algorithms, Vol. 61, No. 2, pp. 243-260, 2012. (DOI: 10.1007/s11075-012-9606-6)
10. Yusuke Hama, Akiko Fukuda, Yusaku Yamamoto, Masashi Iwasaki, Emiko Ishiwata and Yoshimasa Nakamura, "On Some Properties of Discrete Integrable System Derived from Hungry Lotka-Volterra System of Multiplicative Type", Journal of Math-for-Industry, Vol. 4(A), pp. 5-15, 2012.

11. 廣田悠輔, 橋本拓也, 山本有作, “倍精度正方行列特異値分解アルゴリズムの GPGPU 上での性能・精度評価”, 情報処理学会論文誌コンピューティングシステム(ACS), Vol. 5, No. 5, pp. 163-176, 2012.
12. 廣田悠輔, 山本有作, 張紹良, “非直交同時対角化アルゴリズムのハイブリッド解法”, 日本応用数理学会論文誌, Vol. 22, No. 2, pp. 63-79, 2012.
13. T. Hoshi, Y. Akiyama, T. Tanaka and T. Ohno, "Ten-million-atom electronic structure calculations on the K computer with a massively parallel order-N theory", J. Phys. Soc. Jpn. 82, 023710, 4pp, 2013. (DOI :10.7566/JPSJ.82.023710)
14. S. Nishino, T. Fujiwara, H. Yamasaki, S. Yamamoto and T. Hoshi, "Electronic structure calculations and quantum molecular dynamics simulations of the ionic liquid PP13-TFSI", Solid State Ionics 225, 22–25, 2012. (DOI :10.1016/j.ssi.2012.01.045)
15. Yasunori Futamura, Tetsuya Sakurai, Shinnosuke Furuya and Jun-Ichi Iwata, "Efficient Algorithm for Linear Systems Arising in Solutions of Eigenproblems and its Application to Electronic-Structure Calculations", Proceedings of 10th International Meeting on High-Performance Computing for Computational Science (VECPAR 2012), LNCS 7851, pp.226-235, 2012. (accepted).
16. Akira Imakura, Tetsuya Sakurai, Kohsuke Sumiyoshi and Hideo Matsufuru, "An Auto-Tuning Technique of the Weighed Jacobi-Type Iteration used for Preconditioners of Krylov Subspace Methods", in: IEEE 6th International Symposium on Embedded Multicore SoCs (MCSoc-12), pp.183-190, 2012.
17. Toshiyuki Imamura, Susumu Yamada and Masahiko Machida, "A High Performance SYMV Kernel on a Fermi-core GPU", Proceedings of 10th International Meeting on High-Performance Computing for Computational Science (VECPAR 2012), LNCS 7851, pp.59-71, 2012, (in press).
18. Yusuke Takahashi, Yusuke Hirota and Yusaku Yamamoto, "Performance of the Block Jacobi Method for the Symmetric Eigenvalue Problem on a Modern Massively Parallel Computer", Proceedings of ALGORITHMMY 2012, pp. 151-160, 2012.