

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

H25 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 ((独)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) 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. 研究実施の概要

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 25 年度は、以下の研究を実施した。

### 1) 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

疎行列向け固有値エンジンとして開発を進めてきた **z-Pares** を公開し、京コンピュータ上で性能評価をした。**z-Pares** のメニーコアへの対応を進め、筑波大学の GPU クラスタである **HA-PACS** 上で性能評価を行った。バレンシア大学で開発している並列固有値計算ライブラリである **SLEPc** に C 版の開発ソフトウェア **CISS** を登録した。

また、密行列向け固有値エンジンの開発として、ポストペタスケール環境において重要な階層型アルゴリズムに基づく行列変換法の研究と、ポストペタスケール環境において有力な計算機アーキテクチャと考えられている GPU やメニーコアにおける基本数値線形演算の実装方法を中心に研究を実施した。開発を進めてきた密行列固有値エンジン **EigenExa** を公開し、京コンピュータ上で性能評価をした。さらに、今村グループ・山本グループの連携により **TSQR** のスケーラビリティに関する研究を実施した。

### 2) 固有値解析エンジンのための共通基盤技術の開発

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、複数のアルゴリズムに基づく **MPI** 並列プログラムを開発するとともに、計算機アーキテクチャや問題サイズに応じて最適なアルゴリズムを選択するための基準を提案した。また、密行列固有値ソルバ **EigenExa**、**EigenK** においてそれぞれ計算時間の主要部分を占める 3 重対角化、5 重対角化処理について性能モデルを開発し、「京」を用いた評価により、実用的な予測精度が得られることを確認した。

また、特に疎行列向け固有値計算アルゴリズムで重要となる複数の右辺ベクトルを持つ複素対称シフト線形方程式の数値解法である **Block Shifted COCG** 法の開発を行った。本成果は、(対称)一般化固有値問題の疎行列向け固有値解析エンジンの高速化に繋がると期待される。

### 3) 実アプリケーションでの性能評価および実アプリケーション向け共通利用技術の開発

星グループは超大規模超並列ナノ物質量子シミュレーター **ELSESES**(<http://www.elses.jp>)を開発している。平成 25 年度は、**ELSESES** に実装されている星グループ・張グループの共同研究による大規模疎行列向けアルゴリズムのチューニングを行った。「京」を用いて、昨年度成果 (1000 万原子系) の 10 倍にあたる 1 億原子系(世界最大)計算が達成された[論文詳細情報(国際)-16]。これはシリコン単結晶での 126 ナノメートル立方領域に相当し、産業上重要な 100 ナノスケール系計

算が達成されたことになる。

また、ポストペタスケール環境における疎行列向け固有値解析エンジンの高性能利用を目指し、筑波大学計算科学研究センターにおいて稼働中の大規模 GPU クラスタ HA-PACS や京コンピュータを利用した格子 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継続した。特に、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、種々の最適化を試みた結果、solver 全体で 30%以上の実効性能を得た。

### § 3. 成果発表等

#### (3-1) 原著論文発表

##### 論文詳細情報(国内)

###### (1) 櫻井グループ

1. 山崎 育朗, 今倉 暁, 多田野 寛人, 櫻井 鉄也, "残差最小性に基づく Krylov 部分空間反復法に対する疎行列用直接解法を用いた前処理のパラメータ推定", 日本応用数理学会論文誌, 23, 3, 281-404, 2013

###### (2) 山本グループ

2. 福田 亜希子, 岩崎 雅史, 山本 有作, 石渡 恵美子, 中村 佳正, "ハングリー型の離散可積分系と非対称行列の固有値計算: 可積分アルゴリズムにおける最近の発展", 日本応用数理学会論文誌, 23, 1, 109-181, 2013

##### 論文詳細情報(国際)

###### (1) 櫻井グループ

1. Shinnosuke Yokota, Tetsuya Sakurai, "A projection method for nonlinear eigenvalue problems using contour integrals", JSIAM Letters, 5, 41-44, 2013
2. Tetsuya Sakurai, Yasunori Futamura and Hiroto Tadano, "Efficient parameter estimation and implementation of a contour integral-based eigensolver", J. Alg. Comput. Tech., 7, 3, 249-269, 2013
3. Yuki Nagai, Yasushi Shinohara, Yasunori Futamura, Yukihiro Ota and Tetsuya Sakurai, "Numerical construction of a low-energy effective Hamiltonian in a self-consistent Bogoliubov-de Gennes approach of superconductivity", J. Phys. Soc. Jpn. 82, 094701, 2013
4. Akira IMAKURA, Lei DU, Hiroto TADANO, "A Weighted Block GMRES method for solving linear systems with multiple right-hand sides", JSIAM Letters, 5, 65-68, 2013
5. Akira IMAKURA, Lei DU, Tetsuya SAKURAI, "A block Arnoldi-type contour integral spectral projection method for solving generalized eigenvalue problems", Applied

Mathematics Letters, 32, 22-27, 2014

6. Y. Nakatsukasa and N. J. Higham, "Stable and efficient spectral divide and conquer algorithms for the symmetric eigenvalue decomposition and the SVD", SIAM J. Sci. Comp. 35, 3, A1325-1349, 2013
7. Y. Nakatsukasa, N. Saito and E. Woei, "Mysteries around the graph Laplacian eigenvalue 4", Linear Algebra Appl. 438, 8, 3231-3246, 2013
8. J. Lankeit, P. Neff and Y. Nakatsukasa, "The minimization of matrix logarithms - on a fundamental property of the unitary polar factor", Linear Algebra Appl. (accepted)
9. F. De Teran, R. Lippert, Y. Nakatsukasa and V. Noferini, "Flanders' theorem for many matrices under commutativity assumptions", Linear Algebra Appl. 443, 120-138, 2014

(2) 張グループ

10. A. Imakura, T. Sogabe and S.-L. Zhang, "An Efficient Variant of the Restarted Shifted GMRES Method for Solving Shifted Linear Systems", Journal of Mathematical Research with Applications, 33, 2, 127-141, 2013
11. T. Miyata, S. Honda, R. Naito, S.-L. Zhang, "A numerical approach to surface Green's functions via generalized eigenvalue problems", Japan Journal of Industrial and Applied Mathematics, 30, 3, 653-660, 2013
12. D. Lee, T. Miyata, T. Sogabe, T. Hoshi, S.-L. Zhang, "An interior eigenvalue problem from electronic structure calculations", Japan Journal of Industrial and Applied Mathematics, 30, 3, 625-633, 2013

(3) 山本グループ

13. Akiko Fukuda, Emiko Ishiwata, Yusaku Yamamoto, Masashi Iwasaki and Yoshimasa Nakamura, "Integrable discrete hungry systems and their related matrix eigenvalues", Ann. Mat. Pura Appl., 192, 423-445, 2013, (DOI: 10.1007/s10231-011-0231-0)
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, 170, 11-26, 2013

(4) 星グループ

15. 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, 4, 2013, (DOI:10.1016/j.cpc.2011.08.010)
16. Takeo Hoshi, Keita Yamazaki, Yohei Akiyama, "Novel linear algebraic theory and one-hundred-million-atom electronic structure calculation on the K computer", JPS

Conf., 1, 016004, 4, 2014, (DOI: 10.7566/JPSCP.1.016004

[proceedings]

(1) 櫻井グループ

17. T. Yano, Y. Futamura, T. Sakurai, "Multi-GPU scalable implementation of a contour-integral-based eigensolver for real symmetric dense generalized eigenvalue problems", Proceedings of 8th International Conference on P2P, Parallel, Grid, Cloud and Internet Computing (3PGCIC-2013), 121-127, 2013

(2) 今村グループ

18. T. Imamura, S. Yamada, M. Machida, "Eigen-G: GPU-based eigenvalue solver for real-symmetric dense matrices", Proceedings of PPAM 2013, LNCS8384/8385, 2014, (to appear)
19. S. Yamada, T. Imamura, M. Machida, "Parallel Computing Design for Exact Diagonalization Scheme on Multi-band Hubbard Cluster Models", Advances in Parallel Computing, 25, (to appear)