

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 (電気通信大学大学院情報理工学研究科、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、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 26 年度は、以下の研究を実施した。

疎行列向け固有値解析エンジンに関して、2014 年 7 月にオープンソース版の **z-Pares** を公開した。公開ソフトウェアをベースに実アプリケーションとして、自動車部品の設計最適化や電子状態計算で現れる固有値問題において京や COMA 上で性能評価を行った。さらにアルゴリズムの耐故障性を理論的に示すことに成功した。平成 26 年度はとくに公開した固有値解析エンジンのナノシミュレーション分野などでの活用事例を広げること注力し、産業応用のために企業と協力して製品設計で現れる問題を対象とした実用化にも取り組んだ。

密行列向け固有値解析エンジンに関して、公開中の **EigenExa** の細かなバージョンアップを行うとともに、更なる高性能化を目指して **CA (Communication Avoiding)** や **CH (Communication Hiding)** 技術を採用したアルゴリズムのプロトタイプを開発・実装し、その有効性を検証した。

GPU 環境向けの **Lv.2 BLAS** ルーチンの研究・開発を継続して行い、自動チューニング機能付きルーチン **ASPEN.K2** を公開した。また、Intel MIC 上で分割統治法の実装方法を研究し、メニーコア向けの実装技術を検証した。電子状態計算への **EigenExa** の応用を目指して、必要となる各種カーネルの性能調査を行い、ボトルネックを明らかにするとともに効率的なルーチンの組合せや今後の開発方針を検討した。

共通基盤技術として、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、**CholeskyQR2** と呼ばれる新しい大粒度並列アルゴリズムの理論誤差解析を行い、条件数が 10 の 8 乗以下の行列に対しては安定に適用できることを示した。同アルゴリズムは「京」上の並列実装が行われ、1 万ノード規模での高い並列性能が確認されている。また、これまでの密行列固有値解法が不得意としていた、1 万元程度の中規模行列に対する強スケーリング環境下での固有値計算に向けた解法として、ブロックヤコビ法に基づくソルバを開発し、「京」上で性能評価を行った。

固有値解析エンジンの公開によって、基盤技術や実アプリケーションにおいてパデュー大、国立台湾大、Swiss National Supercomputing Centre、パリ大、テネシー大、バレンシア工科大、サンディア国立研究所といった海外の研究機関との連携が進んだ。今後もこの国際連携をさらに広げていく計画である。

【代表的な原著論文】

- [1] T. Fukaya, Y. Nakatsukasa, Y. Yanagisawa and Y. Yamamoto, "CholeskyQR2: A Simple and Communication-Avoiding Algorithm for Computing a Tall-Skinny QR

Factorization on a Large-Scale Parallel System", Proceedings of Workshop on Latest Advances in Scalable Algorithms for Large-Scale Systems (ScalA), 31-38, 2014, DOI: 10.1109/ScalA.2014.11

- [2] 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)