

## 京コンピュータに向けた密行列固有値ソルバーの開発について

今 村 俊 幸<sup>†1,†2</sup>

固有値計算の需要は高性能計算機の出現により高くなり、対角化可能な行列サイズも大きくなってきている。現在では数千次元実対称行列の対角化は秒オーダーで可能であり、百万次元実対称行列の全固有値計算も可能となりつつある。計算の質を見た場合も、京コンピュータなどのベタスケールスパコン利用により大きな変容が強く期待されている。本発表では地球シミュレータから始まり京コンピュータに至る固有値ソルバ開発プロジェクトの概要と、最新成果について報告する。

### Development of an Eigensolver for dense matrices on the K-computer

TOSHIYUKI IMAMURA<sup>†1,†2</sup>

The demand of eigenvalue calculation becomes stronger with the advent of a high performance computer. The matrix size to be diagonalized is also becoming large. At the present, fully diagonalization for a thousand-dimensional real symmetric matrix is being attained to a second order. Furthermore, it is possible to diagonalize fully a one-million-dimensional real symmetric matrix within a realistic CPU time. A big change for quality of calculation is strongly expected by use of a peta-scale supercomputer like the K-computer. In this talk, the outline of the eigenvalue solver project, which begins from the Earth Simulator and results in the K-computer, and the latest result are presented.

#### 1. はじめに

デスクトップ計算機が 10GFLOPS オーダーの時代に、スパコンが 10PFLOPS を超えたことは様々な意味を持つといえる。デスクトップやクラスターで利用する形態と「京」クラスのスパコンとでは、トータルの計算能力において 1000~10000 倍以上、計算コア数でも同様以上の違いがある。科学技術計算で重要な役割を果たす数学ライブラリにおいて、この大規模な量的辺かは数学ライブラリの構成方法や利用方法について大きな変革をもたらすと予想される。

タイトルにあるように密行列の固有値計算法に限定して話を進めよう。分散メモリ並列計算機向けの密行列数学ライブラリといえば ScaLAPACK であろう。ScaLAPACK は 1995 年に開発され、その当時のスパコンは数千プロセッサを搭載するものであった。当然、マルチコアも GPGPU という考えもなかった時代である。現在のスパコンのトレンドは「京」に代表されるマルチコア・マルチノードとともにマルチ GPU・マルチノードの構成も存在する。ScaLAPACK が想

定する計算コア数と並列性は大きなギャップが生じ始めている。本講演では、スパコンの発展と並行して説明を進めていく。

#### 2. ES: 並列マルチベクトルプロセッサ

SC98 での Gordon Bell finalist の一つに ScaLAPACK を用いた固有値計算がある<sup>1)</sup>。ASCI-Red を使って約 4 万次元行列の対角化を行い 684GFLOPS を記録している。当時としては非常に高性能な計算結果であった。

著者と共同研究者の町田、山田は、2002 年に地球シミュレータ (ES) が登場した際に、ES が ScaLAPACK が想定する並列モデルとは異なるということに気付き、将来の並列計算機の多様性への対応や量子多体計算コードの開発をスムーズに行うために独自の固有値ソルバ Eigen シリーズ開発を開始した<sup>2)</sup>。その時点では、ベクトルプロセッサをマルチコアとして捉えてはいなかったが、MPI+スレッド並列+ベクトル並列の並列階層を意識した開発を進めていた。

#### 3. T2K: 中規模マルチコア・マルチノード

ベクトルプロセッサからコモディティマルチコアプロセッサの時代に移行した際に、固有値ソルバーの最

†1 電気通信大学大学院情報理工学研究所

Graduate School of Informatics and Engineering, the University of Electro-Communications

†2 CREST JST

表 1 T2K スパコン 64 ノードを利用した固有値計算の性能

|             | 10240 | 20480 | 40960 | 81920 |
|-------------|-------|-------|-------|-------|
| 計算時間 (秒)    | 8.880 | 36.85 | 195.7 | 1146  |
| 性能 (TFLOPS) | .403  | .776  | 1.17  | 1.59  |

適化の戦略はベクトル化からキャッシュ重視に大きくシフトした。1ソケット上のコア数増加により相対的なメモリバンド幅は狭くなり、ES時代からノード数はそれほど多くはなっていないが、階層化が大きく進んだ。このような背景下で最も有効な最適化技法は、キャッシュブロッキングであり、任意のデバイス間でのメモリ移動を最小化することにある。

固有値計算ではハウスホルダー三重対角化が極めて難しい算法であった。理由は、高メモリ帯域を要求する行列ベクトル積を内部に含むためであった。我々は、多重対角化もしくはブロック三重対角化を導入し、行列ベクトル積を行列行列積に置き換えることによって性能向上を図った<sup>3),4)</sup>。

表 1 は T2K スパコンの 64 ノードを用いて行列の対角化に要した時間をまとめたものである。一般的な PC(Intel Core i5 2.67GHz) では、1 万次元の対角化に 218 秒要するのであるが、スパコン利用で 10 秒以下で実現できる。この時点で、数万次元の対角化はもはや小規模問題になったといえよう。

また、我々は、共有メモリ上の分散並列コードのプロセスをスレッドに対応させるプログラミングを行ったが、DPLASMA<sup>5)</sup> の様にマルチコア化の方向から分散並列版の数値ライブラリを開発する方向も存在する。

#### 4. K: 大規模マルチコア・マルチノード

京コンピュータはノード数が 1 万近くに増加し、かつ、ソケット内コア数も増加している。T2K で開発した固有値ソルバにおいて、メモリバンド幅に関する最適化と通信最適化が重要になる。SC2011 でゴードンベル賞を受賞した RSDFT<sup>6)</sup> に我々が開発した固有値ソルバが利用されている。しかし、アプリケーション全体の計算性能の中では高い性能を発揮しているとは言い難かった。2012 年 1 月時点でも、京は試験利用期間にあり、十分な最適化を実施することができていない。また、使用したコア数に対して適切な問題サイズでなかった(問題サイズが小さい)ことが、性能が出なかった一番の理由といえる。

T2K 開発版に対して京のハードウェア仕様を想定して改良を加えた固有値ソルバの性能を表 2 に示す。実行効率が 20%に近いため十分な性能を発揮しているといえる。最下段 38 万次元の対角化の総性能は  $23.6 \times 4608 = 108,748$  [GFLOPS] である。著者が知る

表 2 K スパコンでの固有値計算試験結果

| N       | 使用プロセス数 | 計算時間 (秒) | 性能/CPU (GFLOPS) | 実行効率 (%) |
|---------|---------|----------|-----------------|----------|
| 151,448 | 288     | 1085.6   | 37.0            | 29.0     |
| 240,768 | 1152    | 1287.1   | 31.3            | 24.5     |
| 382,464 | 4608    | 1713.7   | 23.6            | 18.4     |

限り 108TFLOPS は単体固有値計算での最高性能である。全て 10 万次元以上の計算であったが、京コンピュータ利用を想定したものであり本格的な利用を想定すると単なる番地マークではなく十分に実用範囲の問題であることを注意しておきたい。

#### 5. まとめ

ES から T2K、京に至るスパコン上で進めてきた密行列向け固有値ソルバ開発について説明したが、紙面の都合で技術的内容は記すことができなかった。オーガナイズドセッション当日には詳細も含めて紹介をしたい。

謝辞 固有値ソルバ Eigen シリーズは日本原子力研究開発機構の町田、山田両氏との共同開発物である。試験利用における京コンピュータでの Eigen のベンチマーク結果を御提供頂いた理化学研究所の長谷川、南両氏にはこの場を借りてお礼を申し上げます。

#### 参考文献

- 1) Sears, M.P., et al.: Application of a high performance parallel eigensolver to electronic structure calculations, SC98, 1998.
- 2) Yamada, S., et al.: High-Performance Computing for Exact Numerical Approaches to Quantum Many-Body Problems on the Earth Simulator, SC06, 2006.
- 3) 今村俊幸: T2K スパコンにおける固有値ソルバの開発, 東京大学情報基盤センター スーパーコンピューティングニュース, Vol. 11, No. 6, 2009.
- 4) Imamura, T., et al.: 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, 2011 (to appear).
- 5) Bosilca, G., et al.: Distributed Dense Numerical Linear Algebra Algorithms on massively parallel architectures: DPLASMA, Univ. of Tennessee Comput. Sci. Tech. Rep., UT-CS-10-660, 2010.
- 6) Hasegawa, Y., et al.: First-principles calculations of electron states of a silicon nanowire with 100,000 atoms on the K computer, SC11,

2011.

---