

ポストペタスケール計算機上での密行列向け固有値ソルバーの性能の展望

深谷 猛^{1,2,4}, 山本 有作^{3,4}, 今村 俊幸^{1,4}

¹ 理化学研究所 計算科学研究機構, ² 北海道大学, ³ 電気通信大学, ⁴ JST CREST

e-mail : fukaya@iic.hokudai.ac.jp

1 はじめに:新しい固有値ソルバーの開発

実対称行列の固有値計算は, 様々な科学技術計算において必要となる, 基本的な行列計算の一種である. 幅広く利用されている ScaLAPACK の固有値計算ルーチンは, よく知られた, 行列の三重対角化に基づく手法 (図 1 の緑色) である. しかし, 三重対角化のステップは, メモリバンド幅に律速される上に通信も頻繁に必要となり, 高性能化が難しい. そこで, アルゴリズム自体を見直し, ペタ・ポストペタスケールシステムにより適した新たなソルバー開発が試みられている.

その代表例として, ELPA[1] や DPLASMA[2, 3] が挙げられる. この二つのプロジェクトでは, 新たに二段階の三重対角化 (図 1 の青色) を採用することで, 前述のボトルネックの解消を図っている. しかし, 求める固有ベクトルの数が多い場合, 逆変換が二段階となる部分が無視できず, 問題となることが指摘されている.

一方, 本ポスターの第三著者を中心に開発されている EigenExa[4] と呼ばれる固有値ソルバーでは, 帯行列 (現状では五重対角行列) の固有値と固有ベクトルを直接計算する手法 (図 1 の赤色) を新たに採用している. この手法では, 前述の逆変換のコストの問題を回避することができる. ただし, 帯行列の固有値計算のコストが増加するというトレードオフがある.

2 現状とポストペタスケールへの展望

我々はこれまでに京コンピュータや FX10 を用いて, 開発中の EigenExa の性能を詳しく評価してきた [5, 6]. その一例として, 東京大学の Oakleaf-FX の 4800 ノードを使用して, 23 万次元の行列の固有値計算を行った場合の実行時間の内訳を図 2 に示す. 図が示すように, 主要コストは五重対角化と分割統治法による五重対角行列の固有値計算で, 前者は通信時間が, 後者は行列積が対部分を占めている.

本ポスターでは, 図 2 のような, これまでに我々が得ている詳細な測定結果や基本的な通信・演算カーネルのベンチマーク結果と, 既に公表

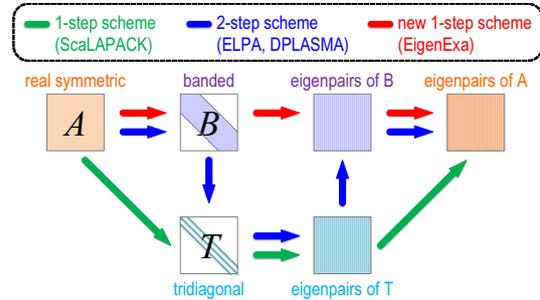


図 1. 様々な固有値計算の手法.

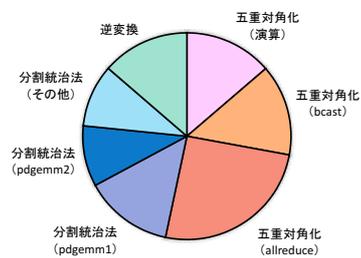


図 2. Oakleaf-FX (4800 ノード) を用いた EigenExa による 23 万次元の行列の固有値計算時間の内訳.

されている FX100 等のスペックに基づいて, 次のシステムにおける EigenExa の性能の見積もりを行う. 具体的には, 京コンピュータや FX10 に対する, 演算, メモリバンド幅, ネットワークのレイテンシ, ネットワークのバンド幅の性能向上率から, 固有値計算の各部分の実行時間を予測する. これにより, 開発中の EigenExa (やそこで新たに採用した手法) がポストペタスケールのシステムにおいて, どの程度有望であるかを議論する.

参考文献

- [1] ELPA, <http://elpa.rzg.mpg.de/>
- [2] DPLASMA, <http://icl.cs.utk.edu/dplasma/index.html>
- [3] PaRSEC, <http://icl.utk.edu/projectsdev/parsec/index.html>
- [4] EigenExa, <http://www.aics.riken.jp/labs/lpnctr/EigenExa.html>
- [5] 深谷 猛, 今村 俊幸, FX10 4800 ノードを用いた密行列向け固有値ソルバ EigenExa の性能評価, 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. 16, No. 3 (2014), pp. 20-27.
- [6] T. Fukaya and T. Imamura, Performance evaluation of the EigenExa eigensolver on the Oakleaf-FX supercomputing system, ACSI2015 (2015).