

メニーコア環境における大規模線形問題の並列解法の研究

櫻井鉄也 (筑波大学)

利用カテゴリ XT4I

本研究では、素粒子分野で現れる線形計算を対象として各種の並列解法を適用し、問題の規模や各種のパラメータによって、それぞれの手法の性能を評価することを目的とする。とくに、異なるアーキテクチャにおいて評価し、その比較から手法のもつ特性を明らかにするとともに、より幅広い計算機環境において汎用性の高い手法の開発をめざす。

Cray XT4 と T2K-Tsukuba システムは、どちらもほぼ同等の性能の4コアのCPUを備えており、1CPUあたりのメモリーサイズも等しい。しかし、ノード構成はCray XT4が2CPUで8コア、T2K-Tsukubaシステムが4CPUで16コアとなっており、ネットワーク構成も異なる。そのため、これらの機種による性能の評価は、ノードあたりのCPU数やコア数、ネットワーク構成がソフトウェアにどのような影響を与えるかを解析する上で、さまざまな情報が得られるものと考えられる。

これまでの予備的な実験において、解法によってCray XT4 と T2K-Tsukuba システムにおけるスケーラビリティが異なることが確かめられている。図1に、加速器設計で現れる行列 [3] に対して、疎行列直接解法である SuperLU_DIST[4] を用いてコア数を変えたときの計算時間を示す。行列は複素対称行列である。図中で赤線は T2K-Tsukuba システムでの計算時間を表し、青線は Cray XT4 の時間を示す。破線は実行列での計算時間からの推定値であることを示している。なお、予備実験では Cray XT4 はローレンスバークレイ国立研究所のシステムを利用している。

16 コアの場合には、T2K-Tsukuba システムが高速であるが、32 コア以上では性能の逆転が起こり、とくに T2K-Tsukuba システムでは 128 コアを越えると計算時間が増大に転じ、性能に大きな差が生じる。

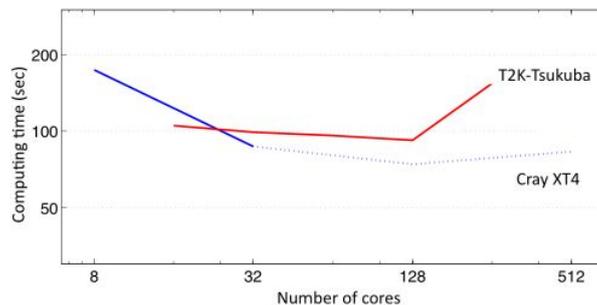


図 1: SuperLU_DIST の計算時間の比較

図2に並列固有値解法であるSS法 [1] の計算時間の比較を示す。行列は図1と同様である。この方法において線形方程式解法が必要とされ、ここでは SuperLU_DIST を用いている。図1と同様の線形方程式解法を用いているにもかかわらず、SS法では Cray XT4 と T2K-Tsukuba システムが 1024 コアまでほぼ同等の性能を示している。

このように、用いる解法によって Cray XT4 と T2K-Tsukuba システム上でのスケーラビリティが大きく異なっている。予備実験において、Cray XT4 での実験は海外の研究機

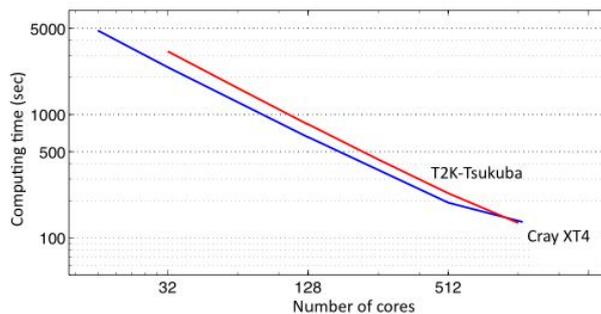


図 2: SS 法の計算時間の比較

関において実施していたため、十分なデータを取ることができず、詳細な解析を行うことができなかった。国立天文台の Cray XT4 を直接利用して、詳細な実験データを収集することで、解析が進むもとの期待される。

我々は、Lattice QCD で現れる固有値問題 [2] を対象として、このような解法による挙動の違いの解析を行うため、ソフトウェアの整備を行った。また、ここで用いる固有値解法では複数右辺ベクトルが現れるため、複数右辺ベクトルに対して高い性能が期待できるブロック型の解法 [5] の実装を行った。これらの開発を、まず、T2K-Tsukuba システム上で実施し、十分な性能評価を行った上で、その結果をもとにして国立天文台の Cray XT4 上での性能評価を行う計画とした。

十分な性能を得るためのソフトウェアの開発に当初の予定よりも時間がかかったため、国立天文台のシステムでの実験を 3 月に集中的に行うこととし、準備を進めた。しかし、3 月に発生した震災の影響により、予定していた実験を行うことができず、期間内に十分な解析を行うことができなかった。

参考文献

- [1] J. Asakura, T. Sakurai, H. Tadano, T. Ikegami and K. Kimura, A numerical method for nonlinear eigenvalue problems using contour integrals, JSIAM Letters 1, 52–55, 2009.
- [2] H. Ohno, Y. Kuramashi, H. Tadano and T. Sakurai, A quadrature-based eigensolver with a Krylov subspace method for shifted linear systems for Hermitian eigenproblems in lattice QCD, JSIAM Letters, 2, 115–118, 2010.
- [3] L Q. Lee, Z. Li, C. K. Ng and K. Ko, Omega3P: A parallel finite element eigenmode analysis code for accelerator cavities. Tech. Report SLAC-PUB-13529, 2009.
- [4] SuperLU DIST solver package. <http://crd.lbl.gov/xiaoye/SuperLU>.
- [5] H. Tadano, T. Sakurai and Y. Kuramashi, Block BiCGGR: A new block Krylov subspace method for computing high accuracy solutions, JSIAM Letters 1, 44–47, 2009.