

科学研究費助成事業（科学研究費補助金）研究成果報告書

平成 25 年 5 月 27 日現在

機関番号： 14501
 研究種目： 基盤研究(C)
 研究期間： 2009～2012
 課題番号： 21560065
 研究課題名（和文） メニーコア時代に向けた高速・高精度固有値計算アルゴリズムの開発
 研究課題名（英文） Fast and accurate eigenvalue solver for many-core processors
 研究代表者
 山本 有作（YAMAMOTO YUSAKU）
 神戸大学・大学院システム情報学研究所・教授
 研究者番号： 20362288

研究成果の概要（和文）：

本課題では、メニーコアプロセッサの性能を引き出す固有値計算アルゴリズムの開発を目的として研究を行った。本研究の主な成果は次の通りである。

- (1) マルチコア/メニーコア向け固有値計算アルゴリズムの実装と性能評価
- (2) AllReduce 型ハウスホルダーQR 分解法の誤差解析
- (3) 高い並列性を持つベクトル逐次添加型直交化アルゴリズムの開発
- (4) Totally Nonnegative 帯ヘッセンベルグ行列向けの高精度固有値計算アルゴリズムの開発

研究成果の概要（英文）：

The objective of this research is to develop efficient algorithms for computing eigenvalues on many-core processors. The achievements of this research can be summarized as follows:

- (1) Implementation and performance evaluation of an eigenvalue computation algorithm designed for multi-core/many-core processors
- (2) Error analysis of the AllReduce algorithm for Householder QR decomposition
- (3) A new highly parallel algorithm for incremental orthogonalization
- (4) A new algorithm for computing the eigenvalues of a totally nonnegative band Hessenberg matrix with high relative accuracy

交付決定額

(金額単位：円)

	直接経費	間接経費	合計
2009 年度	1,800,000	540,000	2,340,000
2010 年度	1,000,000	300,000	1,300,000
2011 年度	800,000	240,000	1,040,000
年度			
年度			
総計	3,600,000	1,080,000	4,680,000

研究分野： 工学

科研費の分科・細目： 応用物理学・工学基礎、工学基礎

キーワード： 固有値計算、線形計算、メニーコア、並列処理

1. 研究開始当初の背景

マイクロプロセッサの動作周波数向上は

飽和しつつあり、更なる性能向上にはチップレベルでの並列処理が必須となっていた。当時は1チップに4個程度の計算コアを集積す

る方式が主流であったが、高性能が要求される科学技術計算においては、百コア以上を集積するメニーコアプロセッサが有力視されていた。

一方、第一原理分子動力学法、量子化学計算、構造解析などの分野では、計算の大規模化・複雑化に伴い、ますます大規模な固有値問題を解くことが求められていた。

2. 研究の目的

メニーコアプロセッサの性能を最大限に引き出す新しい固有値計算アルゴリズムの開発を目的とする。

3. 研究の方法

メニーコアプロセッサの性能を引き出すには、計算の並列性を高めることと、データ参照の局所性の向上によってメモリアクセスのネックを削減することの両方が重要となる。本研究では、並列性とデータ参照の局所性に優れた行列乗算を中心的な演算として用いてアルゴリズムを再構成することで、この課題を解決する。また、構築したアルゴリズムに対して収束性や計算精度を数学的に保証することで、より信頼性の高いアルゴリズムを実現する。

4. 研究成果

本研究の主な成果は次の通りである。

(1) マルチコア／メニーコア向け固有値計算アルゴリズムの実装と性能評価

マルチコア／メニーコアプロセッサ向けに対称密行列固有値計算のアルゴリズムを実装し、性能評価を行った。本アルゴリズムは演算のほとんどを行列乗算で行うことができるため、マルチコアプロセッサにおけるメモリアクセス競合の影響を受けにくく、従来のアルゴリズムに比べて性能向上を達成しやすいという特徴を持つ。4～24個のコアを持つ計算機上で評価を行った結果、本アルゴリズムは従来の LAPACK に比べて最大 3.6 倍の性能を達成できることが示された。本アルゴリズムを富士通 HX600 (T2K スーパーコンピュータ相当) の 1 ノード (16 コア) で実行したときの計算時間を図 1 に示す。行列サイズは 9,000 である。メモリアクセス競合の影響が低減されたため、16 コアまで順調に計算が加速していることがわかる。

(2) AllReduce 型ハウスホルダー QR 分解法の誤差解析

行列乗算に基づく対称密行列固有値計算では、QR 分解が計算の部品として重要な役割を果たす。この QR 分解は、精度の観点から、ハウスホルダー法を用いて行う必要があるが、従来のハウスホルダー法は並列粒度が小さく、コア数を増やした場合の性能ネックになることが予想されている。これに対し、2007 年に AllReduce 型と呼ばれる新しい大粒度のハウスホルダー QR 分解の手法が提案されている。そこで、この手法に対して理論誤差解析を行った。その結果、この手法は従来のハウスホルダー QR 分解と同等以上の精度を持つことを明らかにした。

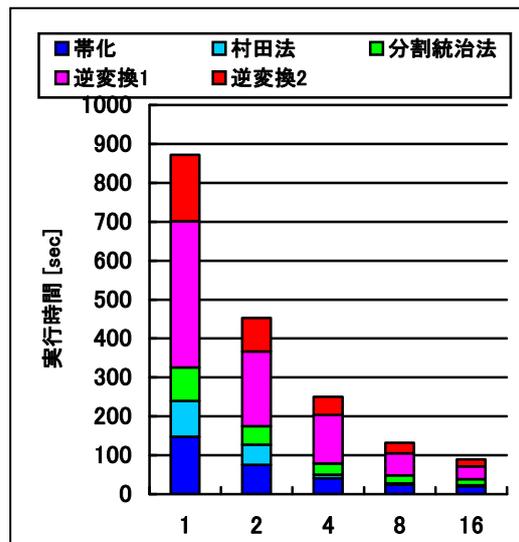


図 1 富士通 HX600 上での計算時間

(3) 高い並列性を持つベクトル逐次添加型直交化アルゴリズムの開発

逆反復法による固有ベクトルの計算では、固有値が密集する場合、固有ベクトルの直交化という処理が必要である。また、最新の MR³ アルゴリズムにおいても、固有値間の相対ギャップが小さい場合には、直交化が必要になることがある。これらの直交化は、従来、修正グラム・シュミット法を用いて行われてきたが、直交精度が十分でなく、また計算が逐次的であるという問題点があった。これに対して本研究では、コンパクト WY 表現という技法を用いることにより、高い直交精度を持ち、かつ並列化可能な直交化手法を開発した。また、本手法を逆反復法による固有ベクトル計算に適用し、有効性を確認した。

(4) Totally Nonnegative 帯ヘッセンベルグ行列向けの高精度固有値計算アルゴリズムの開発

メニーコア向けの固有値計算アルゴリズムでは、入力の実行列をまず帯行列に変換す

るため、帯行列の固有値計算法が重要である。本研究では、帯行列の特殊な場合である帯ヘッセンベルグ行列に対する固有値計算法を開発した。本手法は、行列が totally nonnegative という性質を持つ場合には必ず収束し、かつ、全固有値を小さい相対誤差で計算できるという特徴を持つ。また、本手法の収束を加速するための原点シフトの導入法も提案した。

本手法は、今後、一般の帯行列への拡張が期待される。

5. 主な発表論文等

(研究代表者、研究分担者及び連携研究者には下線)

[雑誌論文] (計 12 件)

①Akiko Fukuda, Yusaku Yamamoto, Masashi Iwasaki, Emiko Ishiwata and Yoshimasa Nakamura: "On a shifted LR transformation derived from the discrete hungry Toda equation", Monatshefte fuer Mathematik, Vol. 170, No. 1, pp. 11-26 (2013). 査読有り

②Daisuke Mori, Yusaku Yamamoto and Shao-Liang Zhang: "Backward error analysis of the AllReduce algorithm for householder QR decomposition", Japan Journal of Industrial and Applied Mathematics, 査読有, Vol. 29, No. 1, pp. 111-130 (2012).

③Yusuke Hama, Akiko Fukuda, Yusaku Yamamoto, Masashi Iwasaki, Emiko Ishiwata and Yoshimasa Nakamura: "On Some Properties of Discrete Integrable System Derived from Hungry Lotka-Volterra System of Multiplicative Type", Journal of Math-for-Industry, 査読有, Vol. 4(A), pp. 5-15 (2012).

④Akiko Fukuda, Yusaku Yamamoto, Masashi Iwasaki, Emiko Ishiwata and Yoshimasa Nakamura: "Error analysis for matrix eigenvalue algorithm based on the discrete hungry Toda equation", Numerical Algorithms, 査読有, Vol. 61, No. 2, pp. 243-260 (2012).

⑤Y. Hirota, Y. Yamamoto and S.-L. Zhang: Cache Optimization of a Non-Orthogonal Joint Diagonalization Method, JSIAM Letters, 査読有, Vol. 3, pp. 9-12 (2011).

⑥T. Miyata, Y. Yamamoto, T. Uneyama, Y.

Nakamura and S.-L. Zhang: "Optimization of the Multishift QR Algorithm with Coprocessors for Non-Hermitian Eigenvalue Problems", East Asian Journal on Applied Mathematics, 査読有, Vol. 1, No. 2, pp. 187-196 (2011)

⑦L. Du, T. Sogabe, B. Yu, Y. Yamamoto and S.-L. Zhang: "A Block IDR(s) Method for Nonsymmetric Linear Systems with Multiple Right-Hand Sides", Journal of Computational and Applied Mathematics, 査読有, Vol. 235, pp. 4095-4106 (2011).

⑧Yusaku Yamamoto and Yusuke Hirota: "A parallel algorithm for incremental orthogonalization based on the compact WY representation", JSIAM Letters, 査読有, Vol. 3, pp. 89-92 (2011).

⑨Jun-ichi Muramatsu, Shao-Liang Zhang and Yusaku Yamamoto: "Acceleration of Hessenberg Reduction for Nonsymmetric Eigenvalue Problems in a Hybrid CPU-GPU Computing Environment", International Journal of Networking and Computing, 査読有, Vol. 1, No. 2, pp. 132-143 (2011).

⑩Akiko Fukuda, Yusaku Yamamoto, Masashi Iwasaki, Emiko Ishiwata, Yoshimasa Nakamura: "A Backlund Transformation Between Two Integrable Discrete Hungry Systems", Physics Letters A, 査読有, Vol. 375, pp. 303-308 (2011).

⑪Yoshinori Mizuno, Kouhei Ohi, Tomohiro Sogabe, Yusaku Yamamoto, Yukio Kaneda: "Four-point Correlation Function of a Passive Scalar Field in Rapidly Fluctuating Turbulence: Numerical Analysis of an Exact Closure Equation", Phys. Rev. E, 査読有, Vol. 82, pp. 036316-036324 (2010).

⑫Yusaku Yamamoto, Takeshi Fukaya: "Differential qd Algorithm for Totally Nonnegative Hessenberg Matrices: Introduction of Origin Shifts and Relationship with the Discrete Hungry Lotka-Volterra System", JSIAM Letters, 査読有, Vol. 2, pp. 69-72 (2010).

[学会発表] (計 6 件)

①Takeshi Fukaya, Toshiyuki Imamura and Yusaku Yamamoto: "Performance Modeling of the Eigen-K Dense Eigensolver on Massively

Parallel Machines”, SIAM Conference on Computational Science and Engineering (CSE13), The Westin Boston Waterfront, Boston, USA, February 25-March 1, 2013.

② Yuusuke Takahashi, Yuusuke Hirota and Yusaku Yamamoto: “Performance of the Block Jacobi Method for the Symmetric Eigenvalue Problem on a Modern Massively Parallel Computer”, ALGORITHM 2012, Podbanske, Slovakia, September 9-14, 2012.

③ Yusuke Hirota and Yusaku Yamamoto: “An Acceleration of Backward Transformation of Singular Vectors on a CPU and GPU Heterogeneous Environment”, Parallel Matrix Algorithms and Applications 2012, Birkbeck University of London, London, UK, June 28-30, 2012.

④ Yusuke Hirota, Yusaku Yamamoto and Shao-Liang Zhang: “Cache optimization of a non-orthogonal joint diagonalization method”, SIAM Conference on Parallel Processing 2012, Hyatt Regency Savannah, Savannah, USA, Feb 17--19, 2012.

⑤ Takeshi Fukaya, Yusaku Yamamoto and S.-L. Zhang: “Auto-tuning for BLAS-based Matrix Computations”, SIAM Conference on Computational Science and Engineering (CSE11), Grand Sierra Resort and Casino, Reno, Nevada, February 28- March 4, 2011.

⑥ Takeshi Fukaya, Yusaku Yamamoto and S.-L. Zhang: “An Approach to Automatic Tuning for the Parallel Householder QR Decomposition”, SIAM Conference on Parallel Processing for Scientific Computing (PP10), Grand Hyatt Seattle, Seattle, Washington, (America) February 24-26, 2010.

[図書] (計 2 件)

① 山本有作: “高速フーリエ変換” (金田康正編著: “並列数値処理”, 第 5 章), コロナ社, (2010).

② Yusaku Yamamoto and Takeshi Fukaya: “Dynamic Programming Approach to Optimizing the Blocking Strategy for Basic Matrix Decompositions”, (Ken Naono et al. (eds): “Software Automatic Tuning - From Concepts to State-of-the-Art Results”, Chapter 5), Springer, 2010.

[その他]

ホームページ等

<http://www.na.scitec.kobe-u.ac.jp/~yamamoto/>

6. 研究組織

(1) 研究代表者

山本 有作 (YAMAMOTO YUSAKU)
神戸大学・大学院システム情報学研究所・
教授
研究者番号: 20362288

(2) 研究分担者

なし