

# 分散メモリ型スーパーコンピュータにおける直接法と反復法の並列化行列解法の研究



## 概要

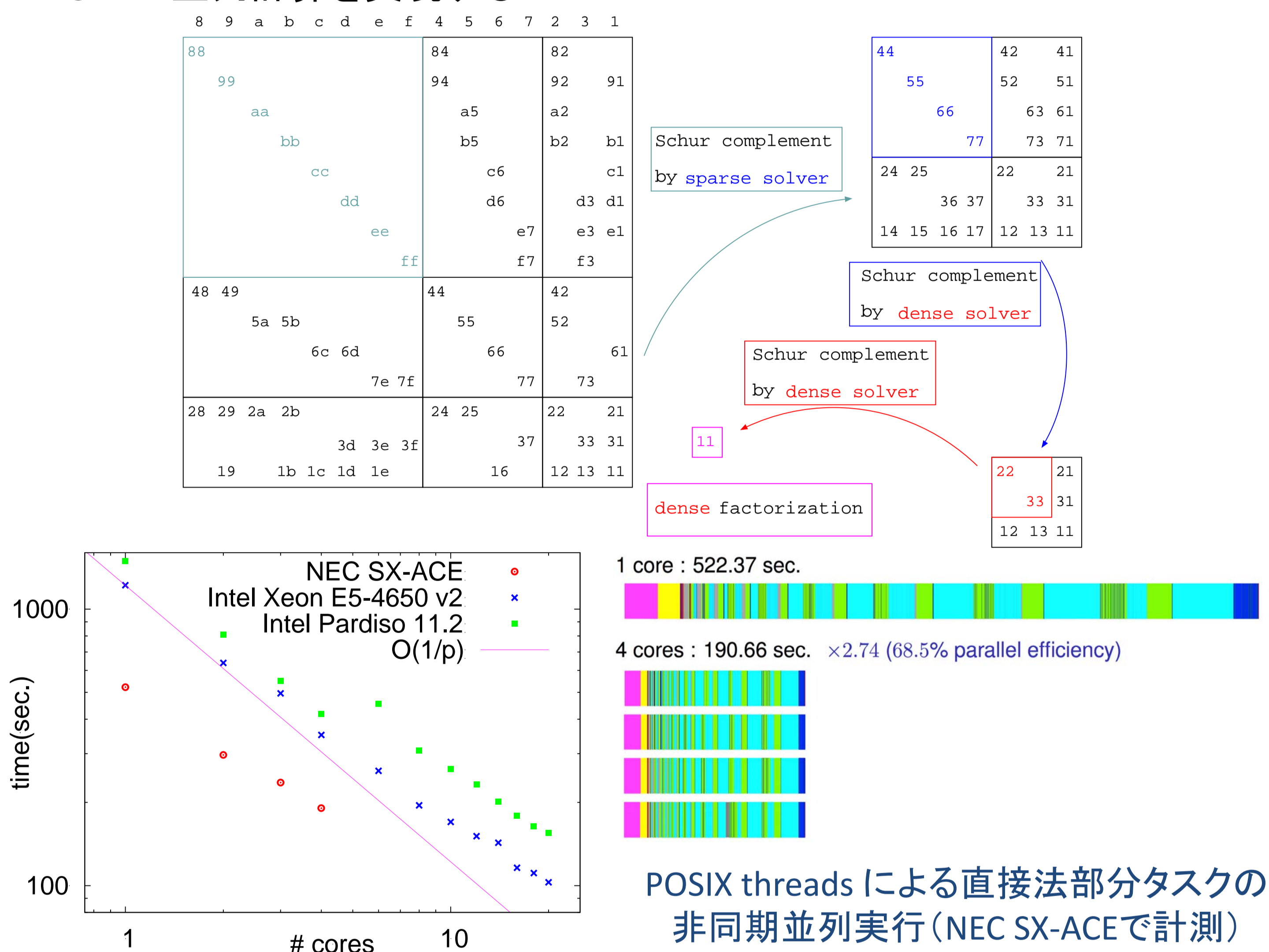
現代のスーパーコンピュータは共有メモリ構造を持つマルチコアシステムのクラスタで構成されている。ここにはキャッシュメモリ、主記憶、ネットワークを介した分散記憶の3種類のアクセス速度の異なるメモリ階層がある。1つのプロセッサの内部は4から16程度のマルチコアを持ち、1ノードの論理演算速度は256GFlop/s程度になっている。クラスタ全体は1,000ノードを超えるが、実アプリケーションでは、30ノード程度での高い並列効率が必要である。ノード内メモリバンド幅とノード間通信バンド幅の差は大きい、この環境でも演算速度を保てるように最適なタスク配置と新規アルゴリズムの導入により通信コストの低減を図る。またノード内での演算器の効率的な利用を実現する必要がある。偏微分方程式の離散化で得られる対称行列及び非対称行列の問題に対する反復法及び直接法の並列化手法を研究し、各種スーパーコンピュータ上で評価することによって、メニーコア時代に対応した並列化行列解法を提供するとともに、対称行列及び非対称行列を用いた大規模半導体シミュレーションで有用性を検証することを目的とする。

特に、反復法においてはSplitting-Up作用素を用いた前処理付き共役勾配法の実装を主な対象とし、直接法においてはDissection法による疎行列のグラフ分割と密行列部分のブロック化によって得られたLDU分解のタスクの非同期実行とデータ配置の最適化を主な対象として取り組む。

## 直接法の並列化行列解法

### 現状とその問題点

行列解法の直接法はnested-dissection法などによる疎行列のオーダリングにより並列計算が可能な部分を抜き出すこと(マルチフロント法)で、複数の部分的な疎行列と再帰的に構成されるSchur補行列からなる部分密行列のLDU分解の組み合わせになる。二分木構造の密行列は更にブロック化によって並列計算を実現する。



上図は非対称疎行列  $N=645,928$ ,  $nnz=60,863,284$  のLDU分解

密行列のLDU分解の主要演算である,  $dgemm$ ,  $dtrsm$  (BLAS 3)は演算集約的であるが、主記憶へのアクセス効率にも左右される。バンク構成のメモリの場合、繰り返し同一のメモリバンクにアクセスするバンクコンフリクトが起きると性能が低下するため、データの記憶方法を最適化が必要である。また、タスクの非同期並列実行では、タスクの状態の確認の必要のない静的割当と依存関係にあるタスクの終了の確認を絶えずおこなう動的割当を併用しているが、その比率の最適化が必要である。

### 取組み

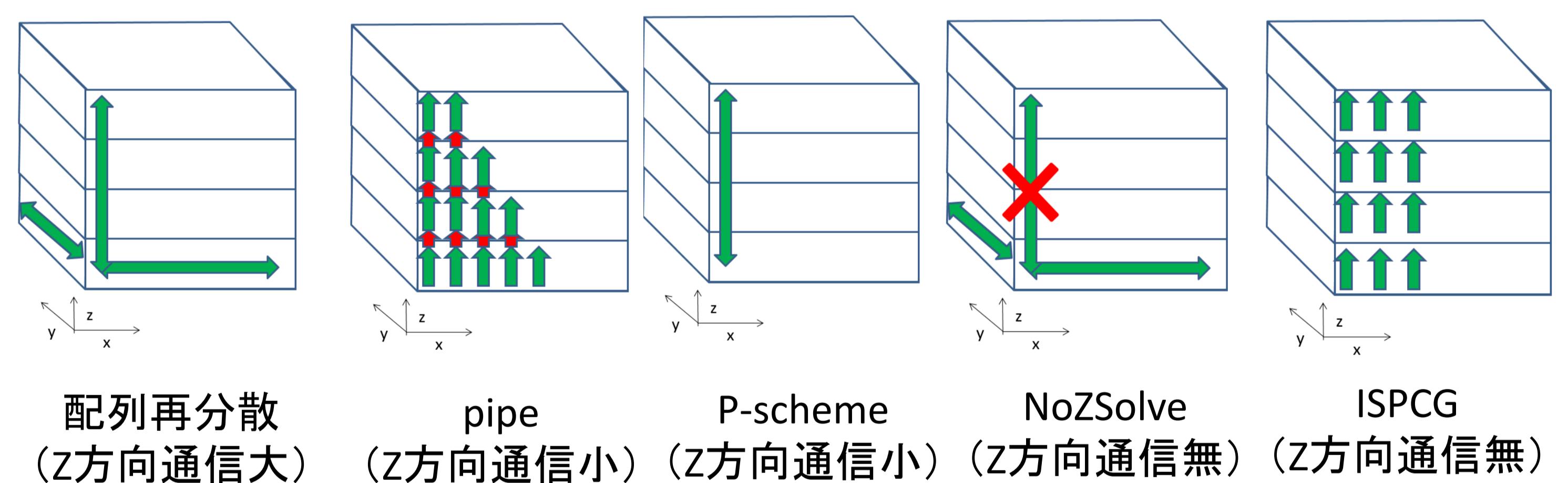
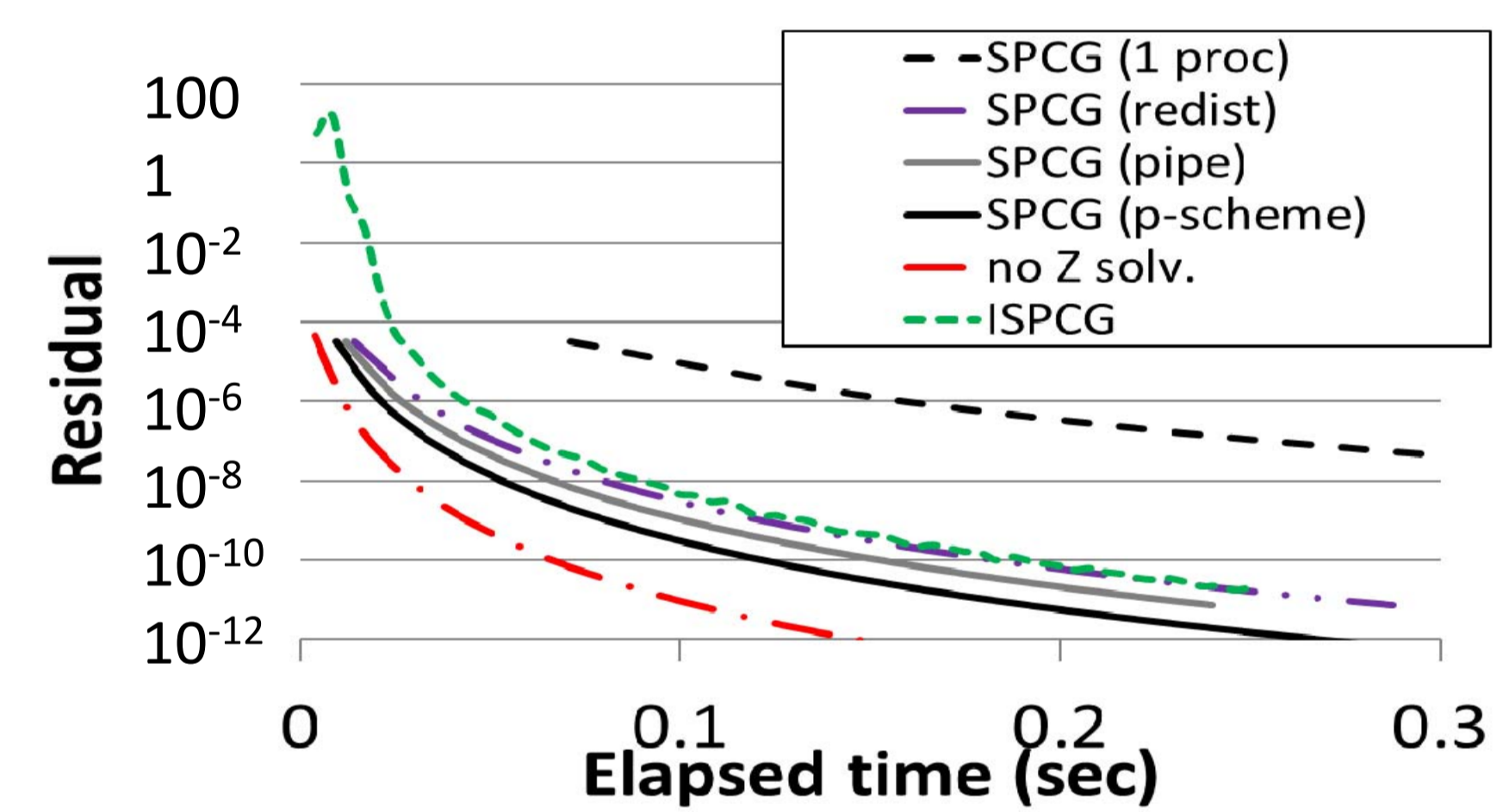
以下の研究項目を大阪大学,京都大学および東京大学のスーパーコンピュータ(NEC SX-ACE, Cray XC-30およびFujitsu FX-10)で実施する。

- バンクメモリアクセスに対する最適化と非同期タスクの割当時のメモリ配置の最適化を行う。また、NUMA型のメモリアクセスの効率化のために、二分木構造を利用したメモリ配置を考慮する。
- 4ノードでの分散環境で実行出来るよう共有メモリ型計算機向けに開発を行ってきたコードを拡張する。Schur補行列はブロック密行列の対角軸選択付きLDU分解アルゴリズムで計算するが、最終2段は複数ノードにまたがる。演算速度とノード間メモリ転送速度の比は256以上であるためブロック化サイズを大きくとりマルチコア演算器を有効活用する。

## 反復法の並列化行列解法

### 現状とその問題点

行列解法の反復法には、ICCG法がしばしば用いられるが、収束性能を保ったままで、単純に並列化することが難しいものとされている。一方、Splitting-Up作用素を前処理として用いた共役勾配法(SPCG法)は、ICCG法と同等程度の収束性能を持ち、また、並列実行に適したアルゴリズムである。しかし、前処理の際の配列再分散が並列化効果を低下させるので、前処理の不完全化(NoZSolve及びISPCG)をした実装方法を提案した。下図に示すように、SX-ACEのような分散メモリスーパーコンピュータにおいて、ポアソン方程式に対するMPIだけを用いたフラット実装の効果が確認できているが、ノード内でのマルチスレーディングの効果の検証には至っていない。



### 取組み

以下の研究項目を大阪大学,京都大学および東京大学のスーパーコンピュータ(NEC SX-ACE, Cray XC-30およびFujitsu FX-10)で実施する。

- SPCG法に対し、パイプラインおよびP-scheme法による通信削減手法及び前処理の不完全化(NoZSolve及びISPCG)による通信フリー手法の2レベル実装を行う。
  - 2レベル実装とフラット実装での性能評価および性能比較を行なう。
- なお、ノード間通信性能の異なる複数のスーパーコンピュータで評価することにより、通信がアルゴリズムに与える影響を評価することができる。

若谷彰良	甲南大学	研究統括・並列化反復法計算手法
小田中 紳二	大阪大学	半導体シミュレーション
鈴木 厚	大阪大学	並列化直接法計算手法
鍾 菁廣	大阪大学	数値シミュレーション