

並列固有値解法の ILC 加速器設計への応用

プロジェクト名：大規模並列固有値解法の開発と応用

櫻井鉄也 (筑波大学)

Joint work with

多田野寛人 (筑波大学),

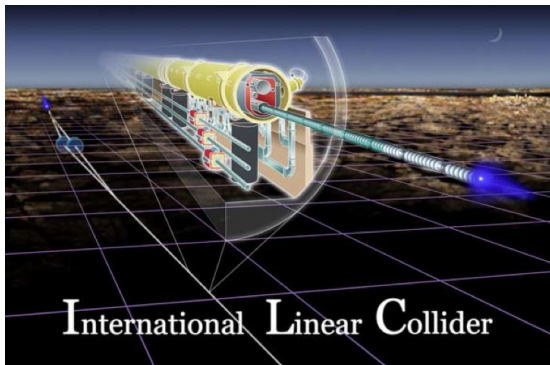
池上努 (産総研),

Ichitaro Yamazaki (LBL, USA)

May 7, 2010

国際リニアコライダ (ILC)

ILC : International Linear Collider

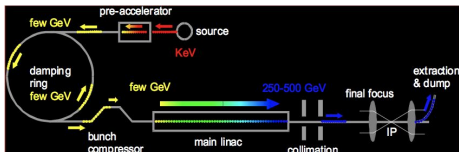


<http://www.linearcollider.org/>

国際協力によって設計開発が進められている次世代の高エネルギー加速器計画

非線形固有値問題

Omega3P：有限要素法を用いた空洞共鳴の周波数領域解析のための並列固有モード計算コード (SLAC National Accelerator Laboratory).



非線形固有値問題が現れる*：

$$T(\lambda)x = 0,$$

ここで

$$T(\lambda) = K - \lambda M + i \sum_{j=1}^m \sqrt{\lambda - \sigma_j^2} W_j.$$

ターゲットサイズは数億～数十億次元.

特定の値から右側の数十個程度の固有値が必要 (内部固有値問題).

* ここでは $T(\lambda)$ に固有ベクトル成分を含まない狭義の固有値問題を意味する

内部固有値問題解法の並列化

内部固有値問題においてスペクトルを変換するために、適当なシフト σ における係数行列の逆

$$T(\sigma)^{-1}$$

の計算が現れる。

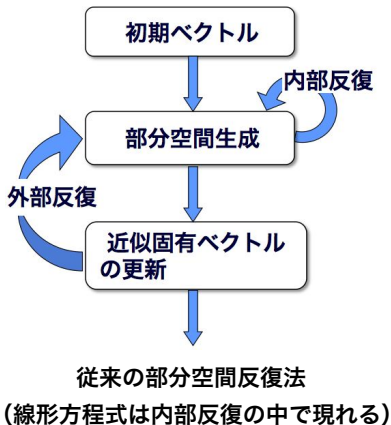


疎な係数行列に対する大規模線形方程式を解く

多くの固有値解法では、この線形方程式の解法の並列性能が固有値解法の並列性能に大きく影響する。

内部固有値問題解法の並列化

部分空間法の多くは、部分空間の生成 (内部反復), および近似固有ベクトルの更新 (外部反復) の 2 つの繰り返し計算で構成され, これらの反復は逐次的に行われる。

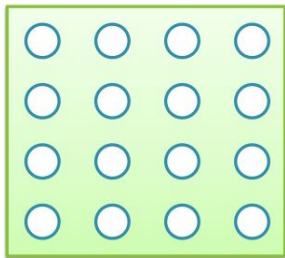


* Sakrai, et. al., J. Comput. Appl. Math. (2003)

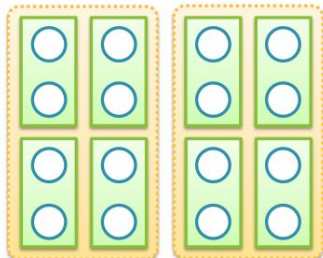
内部固有値問題解法の並列化

従来型の固有値解法では、1つの線形方程式を全計算リソースで繰り返し解く。
提案法では複数の領域を設定し、さらに、その領域ごとに複数の線形方程式を同時に解く、階層構造をもつ。

従来型の固有値解法



提案法 (SS 法)



○ MPI Process

□ Linear Solver

▭ Target Domain

SS 法は関数近似を理論の基礎としており、非線形問題への拡張が可能 *

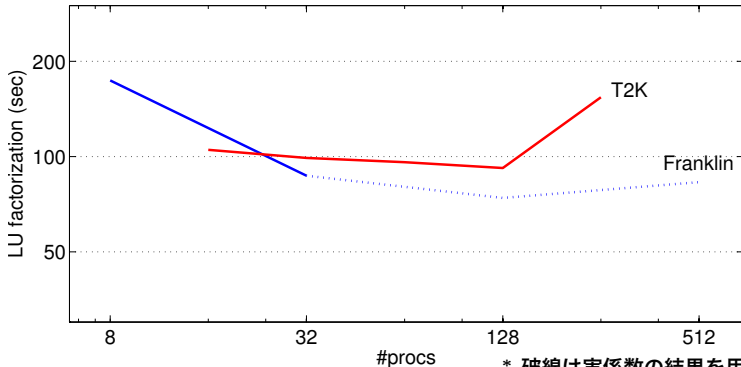
* Asakura, et. al., JSIAM Letters (2009)

T2K-Tsukuba システム, および Franklin(Cray XT4) 上で数値実験を行った.

- Test problem (SLAC): 110 万次元
目的とする領域の 40 個の固有値を計算.
- Test environment:
 - T2K-Tsukuba System
Quad-core AMD Opteron 2.3GHz (Barcelona) × 4 sockets, 32GB memory, 10,368 cores (95 TFlops), Infiniband Fat-tree Network
 - Franklin (LBL)
Quad-core AMD Opteron 2.3GHz (Budapest) × 1 socket, 8GB memory, 38,128 cores (352 TFlops), Hypertransport with a 3D torus topology
- Eigenvalue Solver:
 - SS method (提案法)
 - Thick Restart Lanczos method (TRLan)
- Linear Solver: SuperLU_DIST (Sparse direct solver)
対象とする問題で現れる線形方程式は反復解法では収束性が悪いため疎行列直接解法を用いた.

数値例 (Linear Solver)

シフト値 z を複素数とし, shift-invert 計算で現れる複素係数行列 $T(z)$ に対して, 疎行列直接解法 (SuperLU_DIST) によって LU 分解を行った時間を測定.

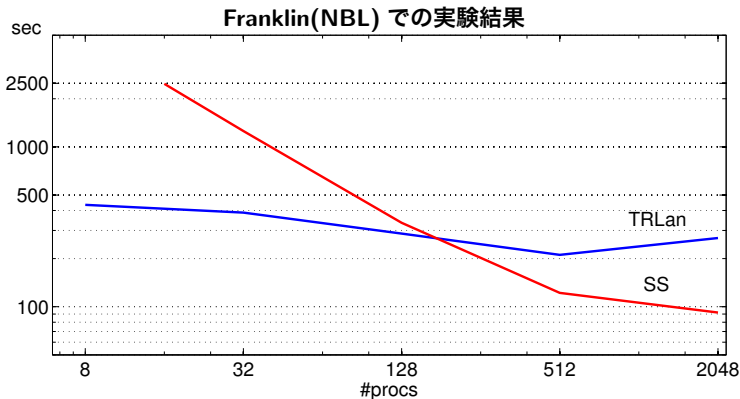


* 破線は実係数の結果を用いた推定値

T2K は 1 ノード (16 コア) では Franklin と同程度の速度だが, 2 ノード以上でほとんど性能が向上しない. 128 コアを越えると急速に性能低下を示す.

数値例 (GEP)

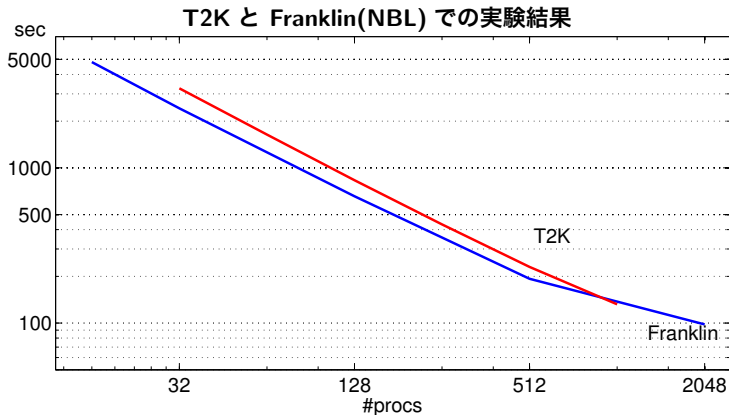
一般化固有値問題 (GEP) 部分のみで、40 個の固有値を求める時間を SS 法と Lanczos 法 (TRLan) で比較。SS 法は非線形固有値問題向けのコードを使用。



128 コア以下では従来法 (TRLan) が提案法 (SS method) よりかなり計算時間が少ない。128 コアを越えると計算時間が逆転し、提案法は 1000 コアを越えても計算時間が減少している。

数値例 (NEP)

非線形固有値問題 (NEP) に SS 法を適用し、40 個の固有値を求めた。



* Franklin は 1 ソケットあたり 2 コアを使用

SS 法は線形方程式の解法に 16 ~ 32 コアを割り当てており、T2K と Franklin でほぼ同等の性能を示す。

Conclusions:

- 階層的並列構造をもつ非線形固有値問題向けの解法を提案
- ILC 加速器設計で現れる大規模非線形固有値問題に適用
- T2K と Franklin(LBL) において並列性能を確認
- 各線形方程式には 1 ノードを割り当て、トータルで 1000 コア超を使用可能

Future work:

- 異なるアーキテクチャでのアルゴリズムの特徴の解析
- 階層的並列構造をもつ固有値解法の理論整備と汎用コード開発
- 応用分野の開拓
 - 量子ドットシミュレーションで現れる問題
 - . . .