

Lis : a Library of Iterative Solvers for linear systems

小武守 恒 (JST/東京大学)
長谷川 秀彦 (筑波大学)

藤井 昭宏 (工学院大学)
西田 晃 (東京大学)

1. はじめに

大規模疎行列に対する線型方程式 $Ax = b$ の高速解法は科学、工学における計算で重要である。解くべき問題に依存して、反復解法と前処理の選択によって、収束するまでに多くの反復回数が必要となったり、収束しない場合がある。また、これらのアルゴリズムの計算時間は、計算環境とデータの格納形式にも強く依存する。われわれは、「大規模シミュレーション向け基盤ソフトウェアの開発」プロジェクト¹⁾として複数の反復解法、前処理、格納形式を組み合わせ使用することができるライブラリ Lis (a Library of Iterative Solvers for linear systems) を開発した²⁾。

これらが、複数の問題、多様な環境で組み合わせて利用できるようにすることで、ユーザーは、問題と環境に応じたよりふさわしいライブラリプログラムを容易に使えるようになる。

今回は、MPI による並列化について述べる。

2. Lis の概要

Lis は線型方程式 $Ax = b$ を反復法で解くための C 言語で記述されたライブラリである。AMG 前処理ルーチンを含む Lis-AMG では、Fortran 90 も使用しているが、現バージョンでは C 言語からの呼び出しにのみ対応している。

Lis は以下のような特徴がある。

- 逐次環境から共有メモリまたは分散メモリ環境への移行はプログラムの変更なし(あるいはごくわずかな変更)でよい。
- 反復解法、前処理の選択は、コマンドラインからも選択可能である。

2.1 解法・前処理・格納形式

一般実行列用の定常 (SOR 等)、非定常 (GPBiCG 等) など 10 種類程度の解法を採用している。前処理としては、よく知られているスケーリング、不完全 LU 分解などに加えて、定常反復解法に有効な $I + S$ 型、smoothed aggregation に基づく代数的マルチグリッド SA-AMG、SOR などの反復法を用いる Hybrid 法、A-直交化に基づき逆行列 A^{-1} そのものを近似する近似逆行列 SAINV などを採用している。データの格納形式は CRS (Compressed Row Storage) など 10 種類程度を採用している。

3. MPI による並列化

反復解法における最も重要なカーネルは行列ベクトル積である。その性能が反復解法の性能に重大な影響を与える。ここでは、行列ベクトル積 $y = Ax$ の並列化を考える。MPI での並列化では、以下の処理が必

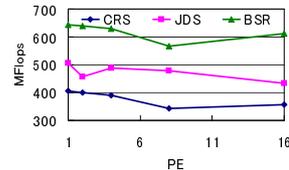


図 1 MPI 並列による行列ベクトル積の性能

要となる。

- ベクトル x のデータを各プロセッサ間で通信する。
- 各プロセッサで行列ベクトル積を行う。

行列データは、行ブロック分散を行い各プロセッサは部分行列を持つようにした。ベクトルデータの通信は、各プロセッサで通信が必要な要素のみを通信するようにした。通信に必要な情報のテーブル (通信テーブル) は GeoFEM を参考にした。

4. 数値例

分散共有メモリ型計算機 SGI Altix3700 (CPU: Intel Itanium2 1.3GHz、主記憶: 32GB、1CPU あたりのピーク性能: 5.2GFlops、OS: SGI Advanced Linux 2.4) を使用した。Intel C/C++ Compiler ver. 8.1 で、最適化オプション-O3 を使用した。係数行列 A は、3次元ポアソン方程式を有限要素法で離散化したものである。

CRS、JDS (Jagged Diagonal Storage)、BSR (Block Sparse Row) の 3 種類の格納形式の行列ベクトル積の性能を図 1 に示す。ただし、行列の次数は各プロセッサの行数が 12,500 となるようにした。また、各プロセッサの非零要素数は 3,241,792 である。各格納形式の行列ベクトル積はループアンローリングを行っている。CRS は最内側ループを、JDS は外側と内側ループを、BSR はブロック内をアンローリングしている。今回の行列では、CRS (4 段)、JDS (3×4)、BSR (3×1) が最適であった。

他の計算環境での結果はポスターで示す。

参考文献

- 1) 西田晃. SSI: 大規模シミュレーション向け基盤ソフトウェアの概要. 情報処理学会研究報告, 2004-HPC-098, pp. 25-30, 2004.
- 2) <http://ssi.is.s.u-tokyo.ac.jp/lis/>
- 3) H. Kotakemori, H. Hasegawa, and A. Nishida. Performance Evaluation of a Parallel Iterative Method Library using OpenMP. HPC Asia 2005, pp.432-436, 2005.
- 4) H. Kotakemori, et. al.. Performance Evaluation of Parallel Sparse Matrix-Vector Products on SGI Altix3700. IWOMP2005, to appear.