

P1-1 対称帯行列に対する 大規模固有値解析をパソコンで

筑波大学 長谷川秀彦

古典的な解法・パソコンでも結構いける
m1=300, N=180,900, 300 組, 2.5GB
村田法 37 時間、スツルム 44 時間

並列化・新アルゴリズムのターゲットは
「 10^6 次元以上の問題で1日以内」か？

Q: ユーザはどんな問題を解きたいのか？
サイズ / 疎構造 / 数学的性質 etc.

P1-1 対称帯行列に対する 大規模固有値解析をパソコンで

筑波大学 長谷川秀彦

コメントの書き込みを歓迎します

目的

- ・古典的な固有値解析アルゴリズム
&
パソコン (非並列計算環境)
でどこまでできるかを明らかにする
- ・並列化の目標 (スタートポイント)
サイズ / 計算時間 / どんな問題
- ・昔の手法の改善

前提

- ・実対称
- ・帯: 非ゼロは $-m1$ $j-i$ $m1$ のみ
- ・標準固有値問題
- ・帯半幅の2倍組の固有値・固有ベクトル

アルゴリズム

1. 村田法 mura2
 - ・帯行列のままハウスホルダー変換
 - ・3重対角行列の固有値を2分法で
 - ・帯行列に対する逆反復法で固有ベクトルを
2. スツルム逆反復法 eigv2
 - ・帯行列に対して Martin-Wilkinson の特殊ガウスを用いた2分法
 - ・帯行列に対する逆反復法で固有ベクトルを

アルゴリズム・バリエーション

1. 村田法

- ・固有値だけの場合は2分法まで
(時間&メモリの節約)

2. スツルム逆反復法

- ・逆反復法のかわりに同時逆反復法
(時間短縮; 精度が少しおちる)
- ・一般固有値問題へ拡張可能

村田法

Power Macintosh G5 Dual 2GHz, 2.5GB

m1/N	3重対角化	2分法	逆反復	合計	倍率
100/ 20300	392s (85%)	1.40s	65.8s (14%)	460s 8分	
150/ 45450	2690s (88%)	5.01s	352s (11%)	3050s 51分	6.6
200/ 80600	13000s (90%)	11.6s	1310s (9%)	14300s 4時間	31.0
250/ 125750	48200s (91%)	23.0s	4580s (8%)	52810s 15時間	114.

村田法

Xeon Dual 3.2GHz, 2GB

m1/N	3重対角化	2分法	逆反復	合計	倍率
100/ 20300	364s (86%)	1.05s	54.9s (13%)	420s 7分	
150/ 45450	2950s (89%)	3.77s	342s (10%)	3300s 55分	7.8
200/ 80600	14100s (91%)	10.2s	1240s (8%)	15400s 4時間	36.7
250/ 125750	s (%)	s	s (%)	s	

スツルム逆反復法

Power Macintosh G5 Dual 2GHz, 2.5GB

m1/N	2分法	逆反復	合計	倍率
100/ 20300	324s (69%)	138s (29%)	463s 7分	
150/ 45450	2410s (70%)	990s (29%)	3400s 56分	7.3
200/ 80600	15200s (67%)	7630s (33%)	22800s 6時間	49.2
250/ 125750	52800s (71%)	20700s (28%)	73500s 20時間	158.

スツルム逆反復法

Xeon Dual 3.2GHz, 2GB

m1/N	2分法	逆反復	合計	倍率
100/ 20300	305s (66%)	156s (33%)	462s 7分	
150/ 45450	2040s (68%)	930s (31%)	2970s 50分	6.4
200/ 80600	10700s (66%)	5230s (32%)	16000s 4時間半	34.6
250/ 125750	s (%)	s (%)	s 時間	

村田法

m1=100, N=20300

	3重対角化	2分法	逆反復	合計	倍率
Pentium 3 550MHz	3610s	6.88s	644s	4268s	9.2
Power3-II 400MHz	962s	4.23s	163s	1130s	2.4
Xeon 3.2GHz	364s	1.05s	54.9s	420s	0.9
PowerPC 2GHz	392s	1.40s	65.8s	460s	1
Itanium2 1.3GHz					

スツルム逆反復法

m1=100, N=20300

	2分法	逆反復	合計	倍率
Pentium 3 550MHz	3750s	1490s	5250s	11.3
Power3-II 400MHz	918s	373s	1297s	2.8
Xeon 3.2GHz	305s	156s	462s	1
PowerPC 2GHz	324s	138s	463s	1
Itanium2 1.3GHz				

同時逆反復法

m1=100, N=20300

	2分法	逆反復	合計	倍率
Pentium 3 550MHz	198s	1170s	1375s	10.3
Power3-II 400MHz	52.6s	261s	313s	2.3
Xeon 3.2GHz	14.6s	92.8s	107s	0.8
PowerPC 2GHz	17.3s	116s	133s	1
Itanium2 1.3GHz				

並列化のポイント

- 帯ハウスホルダー 3重対角化(村田法) 難
- 3重対角行列に対する2分法(村田法) 易
- 帯に対する2分法(スツルム) 小:易、大:難
- 帯に対する逆反復(村田法・スツルム) 大:難

係数行列が 1PE に収まらない問題では多難！

並列化の効果見積もり

- メモリ: 2GB をこえるメモリが使える
- ? スピード: そこそこ高速化できる
どんな並列化アルゴリズムが使えるか
- × 並列性: 帯アルゴリズムは逐次的
- ? OpenMP : 多分法が実装できるか?

計算時間の多くは並列化の難しい部分に！

まとめ

- 古典的な方法でも結構いける
m1=300, N=180,900, 300 組, 2GB
村田法 37 時間、スツルム 44 時間
- ネックはメモリサイズ
- 並列化のコスト・パフォーマンスは悪そう
- 多少のチューニングは可能
(使ったのは 15 年前のベクトルコード)

??? 疑問 ???

- ユーザはどんな問題を解きたいのか?
サイズ
疎構造
数学的性質 etc.
- Arnoldi, Jacobi-Davidson の可能性は?
安定性
一般性
頑健さ etc.