行列計算における高速アルゴリズム - ポストペタ時代に向けた線形計算アルゴリズムの 課題と研究動向 —

2019年6月27日

計算科学技術特論A

電気通信大学 情報理工学研究科 情報・ネットワークエ学専攻 山本 有作



- 第1回(6月20日)
 - 「大規模連立1次方程式の反復解法」
 - 代表的な行列計算である連立1次方程式の解法について,現在最も 広く利用されているクリロフ部分空間法の基礎を紹介する
- 第2回(6月27日)

「ポストペタ時代に向けた線形計算アルゴリズムの課題と研究動向」

- 様々な行列計算について、ポストペタ計算機上での実装における課 題と、その解決のための取り組みを紹介する

はじめに: スーパーコンピュータの性能動向



本講義の目的

• 本講義の目的

- エクサフロップス時代に向けた数値計算アルゴリズムの課題を、
 線形計算に焦点を当てて考える
- 最近の研究動向について、簡単なサーベイを行う
- 目次
 - エクサフロップスマシンのハードウェア特性
 - 線形計算アルゴリズムの技術課題
 - 最近の研究動向

2018年のスーパーコンピュータ: 4つのタイプ

- 汎用型 「京」の後継
 - メモリ容量・帯域・演算性能をバランス良く向上
 - 「京」のように汎用的に様々な問題に適用可能
- 容量・帯域重視型 ベクトル計算機タイプ
 - 汎用型から演算性能を落として、メモリ性能により多くの資源を割く
- 演算重視型
 メニーコアタイプ
 - メモリ性能を落とし、演算性能により多くの資源を割く
- メモリ容量削減型
 - メモリ容量を極限まで削減し、オンチップメモリですべての計算を完結

出典: HPCI技術ロードマップ白書, 2012年3月

各タイプの性能諸元(予測値)

条件

- 「京」と同程度の消費電力(20MW)
- 「京」と同程度の設置面積(2000~3000m²)

	総演算性能	総メモリ帯域	総メモリ容量
汎用 (従来型)	200~400 PFLOPS	20~40 PB/s	20~40 PB
容量・帯域重視	50~100 PFLOPS	50~100 PB/s	50~100 PB
演算重視	1000~2000 PFLOPS	5~10 PB/s	5~10 PB
メモリ容量削減	500~1000 PFLOPS	250~500 PB/s	0.1~0.2 PB
京 (参考)	10 PFLOPS	5 PB/s	1.2 PB

最もエクサフロップスに近いのは演算重視型

出典: HPCI技術ロードマップ白書, 2012年3月

エクサフロップスマシンの特徴(1)

- 多階層の並列性
 - 10⁹個程度の演算コア(動作周波数はGHzオーダー)
 - コアレベル, チップレベル, ノードレベル, システムレベルの並列性



エクサフロップスマシンの特徴(2)

- データ移動コストの増大:スループット
 - 主メモリのByte/Flop(データ転送性能と演算性能の比)による比較

	総演算性能	総メモリ帯域	比
演算重視型	1000~2000PFLOPS	5~10PB/s	0.005Byte/Flop
京	10PFLOPS	5PB/s	0.5Byte/Flop

主メモリアクセスの相対的コストは, 京の場合の100倍



エクサフロップスマシンの特徴(3)

- データ移動コストの増大:レイテンシ(遅延時間)
 - コア間同期・通信レイテンシ: 100サイクル
 - ノード間通信レイテンシ: 80~200サイクル

AllReduce のような全ノード同期型通信で特に影響大



80~200サイクル

エクサフロップスマシンの特徴(4)

電力消費の問題

- 発熱抑制と節電の両面から、電力消費の抑制が重要
- オフチップのデータアクセスが大きな電力を消費
 - 倍精度演算: 1.1pJ/FLOP

 - オンチップデータアクセス: 2.1pJ/Word 100倍
 オフチップデータアクセス: 205pJ/Word 100倍
- 部品数増加に伴う故障確率上昇
 - ハードエラー(熱などによる部品の故障)
 - ソフトエラー(α線などによるビット反転)

ハード/システムソフトレベルでのエラー耐性強化は可能だが, 部品数・速度・消費電力の面で大きなコストが必要

> 出典: HPCI技術ロードマップ白書, 2012年3月 10

アプリケーション並列化における要求の変化

- これまでの並列化研究:弱スケーリングに重点
 - ノード当たりの問題サイズが一定という条件下で並列化
 - ノード数を増やすとともに、問題サイズもどんどん大きくする
 - 比較的,並列性能を出しやすい
- エクサフロップス時代における問題点
 - すべてのアプリで問題サイズ拡大が求められているわけではない
 - 問題サイズは固定し, モデルを精密化したい場合
 - 問題サイズは固定し,時間ステップを増やしたい場合(分子動力学など)
 - 弱スケーリングでは、ノード数増加につれて計算時間も増加
 - 多くの場合, 演算量は問題サイズに対して線形より速く増加
 - エクサフロップスマシンの性能を引き出せる問題サイズでは、計算時間 が長くなり過ぎて実用的でなくなる場合も

線形計算アルゴリズムの課題(1)

- 10⁹個のコアを活用できる並列性
- データ移動の削減(I): データ移動量の削減

- データ移動量(階層間/ノード間)に比例してかかるコストの影響を削減

データ再利用性の向上
 データが上位のメモリにある間に
 できるだけ集中して演算を行う

🔷 消費電力節減の面からも有効



- データ移動の削減(II): データ移動回数の削減
 - データ移動/同期1回ごとにかかるコストの影響を削減
 - → 計算粒度の大きいアルゴリズム 計算粒度 同期やデータ移動をできるだけまとめて行う 通信と通信の間で、できるだけ多くの演算を行う

線形計算アルゴリズムの課題(2)

- アルゴリズムレベルでの耐故障性
 - 結果不正のノード,結果を返さないノードがあっても,計算が破綻せ ずに進行
- 計算量のオーダーの低減
 - ある程度の(確率的)誤差を許容することでオーダーを低減

テンソルの近似に基づくアルゴリズム
 確率的アルゴリズム

- ・ 強スケーリングの意味で効率的なアルゴリズム
 - 問題サイズを固定したとき、ノード数を増やすほど実行時間が短縮

→ 強スケーリングの条件下では,通信・同期時間が支配的 大粒度のアルゴリズムはこの場合にも有効

109個のコアを活用できる並列性: 密行列の場合

- 正方行列に対するアルゴリズム
 - LU分解, QR分解, 3重対角化, Hessenberg化

 - ネックとなりうる部分: ピボット生成, 通信
 - これらを隠蔽するためのスケジューリングが重要
 - DAGスケジューリング
- 帯行列・縦長行列に対するアルゴリズム
 - 帯行列のLU分解,帯行列の3重対角化,
 - 縦長行列のQR分解,ベクトル逐次添加型の直交化
 - 全体の計算量: $O(n^2b)$ or $O(nb^2)$, 並列性: $O(b^2)$, O(nb) or O(n)
 - - ・ 帯行列に対する分割統治型のLU分解
 - Compact WY 表現に基づくベクトル逐次添加型直交化法

n

109個のコアを活用できる並列性: 疎行列の場合

- 部分空間への射影に基づく反復解法
 - 連立1次方程式の解法: Krylov部分空間法全般
 - 固有値問題の解法: Lanczos法, Arnoldi法, Jacobi-Davidson法

部分空間の拡大操作は本質的に逐次的
 並列性:行列ベクトル積の並列度 O(nz)

- 並列性を向上させる手法
 - ブロックKrylov部分空間法
 - 複数の初期ベクトルから出発し、複数の部分空間を同時に生成
 - 部分空間の数だけ並列性が向上
 - 数値積分を用いたフィルタで部分空間を生成する手法
 - 櫻井•杉浦法
 - 積分点ごとの並列性を新たに利用可能

データ移動の削減: 密行列の場合

想定する状況と目標 コア:1個,キャッシュ: M ワード,行列サイズ: n キャッシュと主メモリとの間のデータ移動を最小化 ノード間通信最小化でも同様の手法を適用可能

- ブロック化(タイル)アルゴリズム
 - 行列を、サイズ $(M/3)^{1/2} \times (M/3)^{1/2}$ のブロックに分割
 - ・ ブロック3個がキャッシュに入る
 - 各ブロックを要素と見て行列計算を行う
 - 行列乗算
 - LU分解, コレスキー分解, QR分解
 - ブロック3重対角化, ブロック Hessenberg 化
 - 演算の主要部分はブロックどうしの乗算であり、これはキャッシュ上 で実行可能



レジスタ



ブロック化アルゴリズムの例

• ブロック化コレスキー分解

- ブロックサイズを $L=(M/3)^{1/2}$, 第 (I, J) ブロックを A_{IJ} とする

do K=1, n/L $A_{KK} := Cholesky(A_{KK})$ do I=K+1, n/L $A_{IK} := A_{IK}A_{KK}^{-T}$	対角ブロックのコレスキー分解 ブロックピボット列の作成
end do do J=K+1, n/L do I=J, n/L $A_{IJ} := A_{IK} A_{JK}^{T}$ end do end do end do	ブロックどうしの行列乗算 (演算の主要部)

- LAPACKで採用されているアルゴリズム

ブロック化アルゴリズムの最適性

- 定理(Ballard, Demmel, Holtz and Schwartz, 2009)
 - ブロックサイズを (M/3)^{1/2} としたブロック化コレスキー分解は,前記の 仮定の下で,キャッシュと主メモリの間のデータ移動量をオーダーの 意味で最小化する

証明

- 行列乗算についてはデータ移動量の下界がわかっていることに着目
- コレスキー分解を用いて行列乗算を計算するアルゴリズムを構築
- これより、定数倍の差を除いて、



が言える

- ブロック化コレスキー分解が右辺の下界を達成することを示す

Communication optimal なアルゴリズム

- ・ データ移動回数の最小化
 - 1回のデータ移動では, 主メモリの連続した 領域しか持ってこられないと仮定
 - このとき,通常の行列格納形式では,ブロック化コレスキーは移動回数最小にならない
 - ブロック単位の格納順を使うことで、データ 移動回数も最小化

連続でないため, 1回で / 持ってこられない



Communication optimal なアルゴリズム

- データ移動量・回数の下界が知られているアルゴリズムの例
 - 行列乗算($O(n^3)$ /Strassen)
 - LU分解, コレスキー分解
 - QR分解, 最小2乗法
 - 固有值分解, 特異值分解

両方について下界を達成する (Communication optimal な) アルゴリズムの開発が,活発 な研究テーマ

データ移動の削減: 疎行列の場合

- Krylov部分空間法
 - $K_k(A; b) = \text{span}\{b, Ab, A^2b, ..., A^{k-1}b\}$ の中で近似解を求めていく解法
 - 演算の主要部分は疎行列ベクトル積y = Ax
 - 1ステップ中に複数回の内積(またはノルム計算)が存在
- データ移動の観点からの問題点
 - 行列ベクトル積は行列データの再利用性が低い
 - *y* = *Ax* において, *A* の各要素は1回しか計算に利用しない
 - 内積は全ノードでの AllReduce を必要とし、レイテンシの影響大
- 課題
 - 行列ベクトル積におけるデータ再利用性の向上
 - 複数の内積をまとめて同期回数を削減
 - ↓ 以下ではGMRES法を例として手法を紹介

GMRES法

原理

- A をかける操作と直交化を繰り返し,部分空間を広げながら正規直 交基底 {q₁, q₂, q₃, ...}を生成
- 各ステップにおいて、 $\|\mathbf{r}^{(n)}\|_2 = \|A\mathbf{x}^{(n)} \mathbf{b}\|_2$ が最小になるよう解を更新
- アルゴリズム(正規直交基底の生成部分)



手法(I): ブロック GMRES 法

アイディア

- 複数(b本)の初期ベクトル $R^{(0)} = [r_1^{(0)}, ..., r_b^{(0)}]$ から出発し, ブロック Krylov 部分空間 $K_b^{(m)}(A; R^{(0)})$ 内で解を求める
- 普通の GMRES 法との比較(1ステップあたり)

	GMRES	ブロックGMRES		
演算量(行列ベクトル積)	1(y=Ax)	b ($Y=AX$)	▶ 再利用性	
行列データのアクセス回数	1(y=Ax)	1 (<i>Y</i> = <i>AX</i>)	<i>b</i> 倍向上	
同期回数*	1	1	同期回数	
$\pm \pm $				

* 直交化に compact WY 表現またはCGS法を用いた場合

- 効果
 - 行列アクセス回数・同期回数は同じため,実行時間増加は b 倍以下
 - ブロック Krylov 部分空間を使うことによる収束性向上の効果も存在
 - 🚽 右辺が複数本の場合は有利.1本でも高速化できる場合もある

手法(II): k-step GMRES 法

- アイディア
 - 行列ベクトル積 Ar^(m), A²r^(m)..., A^kr^(m)を一度に行って Krylov 部分空間
 を一度に k 次元拡大し、その後に正規直交基底を生成する
- 普通の GMRES 法との比較(1ステップあたり)

	GMRES	k-step GMRES		
演算量(行列ベクトル積)	1	$1+\alpha$	▶ 再利用性	
行列データのアクセス回数	1	1 / k	<i>k</i> 倍向上	
同期回数*	1	1 / k	同期回数	
$\frac{1}{k}$				

* 直交化に compact WY 表現またはCGS法を用いた場合

- 効果
 - 再利用性向上と同期の削減により、大きな性能向上が期待できる
 - ただし、(直交化前の)基底が線形従属に近い場合は、収束性が悪化
 - 線形独立性を高めるため、Aの単項式の代わりに直交多項式を 使い、3項間漸化式で計算するなどの工夫が検討されている

アルゴリズムレベルでの耐故障性

- 想定する状況と目標
 - 複数のノードが通信を行いつつ協調して計算
 - そのうち1個のが不正な結果を返すか、あるいは 結果を返さなくても、計算は破綻せずに進行
 - その場合,精度劣化,収束性劣化は許容
 - 計算の一部を,高信頼モード/高信頼ハード ウェア(ただし計算コスト大)で行ってもよい



考察

- 複数のノードの結果を集めて部分空間を改良するタイプのアルゴリズムは、耐故障性と親和性が高い
- 大粒度並列性は、耐故障性にとっても有利
 - 高信頼モードの使用頻度を削減できる

MERAM (Multiple Explicitly Restarted Arnoldi Method)

• アルゴリズム(Emad, Petiton & Edjlali, 2005)

(1) *P* 個のノードで,異なる初期ベクトルを用いて独立にArnoldi法を実行
(2) 各ノードで作ったKrylov部分空間を合わせ,大きな部分空間を生成
(3) その中で *P* 本の初期ベクトルを新たに生成し,Arnoldi法をリスタート

• 耐故障性

- 上記(1)を低信頼モード, (2), (3)を高信頼モードで実行
 - 計算量の大部分は(1)のステップ
- (1) において, 結果不正のノード/結果を返さないノードがあっても, 収束性が落ちるだけで, 計算は破綻しない



耐故障性を持つその他のアルゴリズム

- Fault-Tolerant GMRES法(Hoemmen & Heroux, 2011)
 - Flexible GMRES法の枠組みを利用
 - 結果不正を,不適切な前処理と解釈して計算を続行
 - そのステップでは無駄に部分空間が大きくなるが、精度には悪影響なし
- 櫻井・杉浦法

 ある積分点を担当するノードが結果を返さない場合, その点を使わない積分公式を新たに構築して使用
 ・
- 密行列向けの解法
 - 直接解法では、1箇所の計算間違いで結果に壊滅的な影響
 - アルゴリズムレベルでの耐故障性の実現は、原理的に難しそう

Re z

確率的アルゴリズムによる計算量のオーダー低減

- 特異値分解: 行列の最良の低ランク近似を与える分解
 - 画像処理, 信号処理, 情報検索など広い応用
 - $m \times n$ 行列($m \ge n$)の場合の演算量は $O(mn^2)$ と大きい
- CX分解: 特異値分解の代替手法
 - C: A の列ベクトルをk本 $(1 \leq k \leq n)$ 選んでできる $m \times k$ 行列
 - X: 適当な k×n 行列
 - このとき、 $||A CX||_F$ をできるだけ小さくする $C \ge X$ を求める

Leverage score に基づく確率的アルゴリズム

- Leverage score (Drineas et al., 2008)
 - Aの打ち切り型特異値分解を $A_k = U_k \Sigma_k V_k^T$ とする
 - このとき、次の量を、 V_k^T の第 *j* 列の Leverage score と呼ぶ

$$p_j = \frac{\left\| \left(V_k^T \right)^{(j)} \right\|_2^2}{k}$$

・ サンプリングと誤差評価

- 確率 *p_i*に従い, *A* の列をサンプリングする
- このとき, 確率 0.9 以上で次の誤差評価が成り立つ

$$\left\| A - CC^{\dagger}A \right\|_{F} \leq (1 + \underline{\epsilon}) \left\| A - A_{k} \right\|_{F}$$

サンプリング 相対評価
回数に依存

問題点

- Leverage score の計算には、 V_k^T が必要(このままでは非実用的)

Leverage score の近似

- 近似アルゴリズム(Clarkson et al., 2012)
 - O(mn log m) の計算量で, Leverage score を近似的に計算するアルゴ リズムが存在する
- アイディア
 - A に左から適当な直交行列をかけることで、一様な Leverage score を 持つ行列 A' に変換

・ Johnson & Lindenstrauss の補題と高速 Walsh-Hadamard 変換を使う

- A'に対して一様なサンプリングを行い, CX 分解を求める
- A' のCX 分解から, A のCX 分解を求める

相対誤差の意味での(確率的)誤差評価を持つCX分解の計算が, O(mn log m)で可能に

強スケーリングの意味で効率的なアルゴリズム

- 実対称行列の全固有値・固有ベクトル計算
 - 分子軌道法をはじめ、様々な問題で重要
 - *n*=10,000 程度の中規模問題に対する需要も多い

• 想定する状況と目標

- 行列サイズは <u>n=10,000</u>に固定
- ノードは何個使ってもよいから、できるだけ高速に解きたい
 - 分子軌道法では,多電子積分の計算量が O(n⁴) 以上で並列性も高い
 - この部分を並列化するため、1万ノード以上を確保している例もある
- 標準的な行列計算ライブラリ(ScaLAPACK)での結果
 - 「京」上では、ノード数を400以上にしても、計算が加速しない
 - ・実行時間の70%以上を占める通信オーバーヘッドのため
 - 確保した1万ノードの大部分は、固有値計算部分では遊んでしまう

強スケーリングの意味で効率的なアルゴリズム

- ブロックヤコビ法による全固有値・固有ベクトル計算
 - 一行列をブロックに分割し、直交変換により複数の非対角ブロックを並列に消去
 - これを繰り返すことで、行列を対角行列に近づける



- アルゴリズムの特性
 - 演算量は3重対角化に基づく解法の10倍以上
 - PJードで2次元分割を行った場合,通信回数は $O(P^{1/2}\log P * Iter)$

*n=P=10,000*ならば3重対角化の通信回数 O(N log P) に比べて小さい 通信OHの大きい状況では、3重対角化法より高速となる可能性

強スケーリングの意味で効率的なアルゴリズム

- ScaLAPACK とブロックヤコビ法の性能比較(Kudo, 2013)
 - 「京」上で1万ノードまでを使用して実行時間を測定
 - 行列サイズは n=10,000 に固定



35

- 強スケーリングの条件下でのアルゴリズム設計
 - 通信・同期オーバーヘッドの削減が重要
 - そのためならば、演算量をある程度増やしてもよい
 - 中務氏の新しい固有値・特異値計算アルゴリズム

大粒度並列性を持つQR分解手法

• $A \in \mathbf{R}^{m \times n}$ ($m \ge n$)のQR分解

- full QR分解 A = QR

— thin QR分解 $A = \tilde{Q}\tilde{R}$

$$A = Q R$$
$$A = \tilde{Q} \tilde{R}$$

OR分解に対する2つの見方

- \tilde{Q} に着目 → Aの列ベクトルの正規直交化 - Rに着目 → 直交行列によるAの上三角化

- QR分解のアルゴリズム
 - ハウスホルダー法
 - 古典/修正グラム・シュミット法

高性能計算の観点からは課題が多い

様々な応用

CholeskyQR2法による大粒度並列QR分解

• Cholesky QR 法による行列 $X \in \mathbb{R}^{m \times n}$ ($m \ge n$)のQR分解 – アルゴリズム

$$A = X^{\top}X,$$

 $R = Chol(A).$ (コレスキー分解: $A = R^{T}R$)
 $Y = XR^{-1}.$

- 長所: 大粒度並列, すべての計算がブロック化可能
- 短所: X の条件数が大きいとき, 直交行列 Y の直交性が悪化
- CholeskyQR2 法^{*1}
 - Cholesky QR 法で得られた Y を再直交化
 - YをXと見て,上記のアルゴリズムをもう一度繰り返す
 - Xの条件数が10⁸以下ならば,極めて精度の良い結果が得られる
 - ・ 直交性 ||Q^TQ I|| も残差 ||X YR|| も丸め誤差レベル

*1 Y. Yamamoto et al.: "Roundoff Error Analysis of the CholeskyQR2 Algorithm", *Electronic Transactions on Numerical Analysis*, Vol. 44, pp. 306-326 (2015).

「京」上でのCholeskyQR2法の性能



TSQRとCholeskyQR2はScaLAPACK(ハウスホルダーQR)より高速

(n=256でPが大きい場合を除く)

- CholeskyQR2はTSQRよりも高速
- (Pが大きい場合だけでなく, Pが小さい場合でも)

コレスキーQR分解を2回繰り返してもまだTSQRより高速!

• 第一原理分子動力学法における波動関数の時間発展

$$m\ddot{\psi}_i(\vec{r},t) = -\frac{\delta E_{tot}}{\delta \psi^*_{\ i}(\vec{r},t)} + \sum_j \Lambda_{i,j} \psi_j(\vec{r},t) = -H\psi_i(\vec{r},t) + \sum_j \Lambda_{i,j} \psi_j(\vec{r},t)$$

- 時間離散化を行った場合 $- X_{t} = [\Psi_{1}(\mathbf{r}, t), ..., \Psi_{N}(\mathbf{r}, t)] とおくと,$ $\widetilde{X}_{t+\Delta t} = X_{t} + C\Delta t$ $K_{t+\Delta t} = \widetilde{X}_{t+\Delta t} R$ $\overline{X}_{t+\Delta t} = \widetilde{X}_{t+\Delta t} R$ $\overline{X}_{t+\Delta t} = \widetilde{X}_{t+\Delta t} R$
 - X_t は直交化されているから、 Δt が小さければ、 $\widetilde{X}_{t+\Delta t}$ も直交に近い
 - すなわち,条件数は小さい(列が直交する場合,条件数は1)
 - ➡ CholeskyQR2法が適用可能のはず

おわりに

- 本発表のまとめ
 - エクサフロップスマシンでは、多階層の超並列性、データ移動コストの増大、故障確率の上昇などが課題となる、また、強スケーリングでの並列化効率がより重視される。
 - そのため、線形計算アルゴリズムの研究では次の点が重要になる.
 - 10⁹レベルの並列性
 - ・ データ移動量・移動回数の削減
 - アルゴリズムレベルでの耐故障性
 - (確率的)近似による計算量のオーダーの削減
 - ・ 強スケーリング性
 - これらの方向に沿った最近の研究をいくつか紹介した.

SIAM Conference on Applied Linear Algebra

• 会議概要

- 線形代数全般に関する(たぶん)世界最大の国際会議
- Communication-avoiding など, HPCに関連する発表も多い
- 本発表でも、この会議で聞いた様々な講演を参考にした

• 出張報告

http://www.na.scitec.kobe-u.ac.jp/~yamamoto/conference.html