

QR分解に関する高性能計算技術の研究

深谷 猛(代表・北大), 鈴木 智博(副代表・山梨大), 大島 聡史(九州大),
伊田 明弘(JAMSTEC), 岩下 武史(北大), 門倉 陣之介(北大・学生)

概要

主要な行列分解の一つであるQR分解に対して、その性能向上に資する高性能計算技術の研究開発を行う。現在、QR分解に対して異なる特徴を有する様々な数値計算アルゴリズムが存在する。一方、計算が行われる環境も、マルチコアCPU、GPU、分散並列システムなどと多様化している。更に、計算対象となる行列も、縦長行列から正方行列まで多様な形状があり、加えて、Block Low Rank行列のQR分解のような新しい問題設定も登場している。この状況に対して、本課題では、QR分解に関連した研究実績を持つ研究者を集めて、各々が持つ知見や技術を土台とした上で、それらを柔軟に組み合わせることで、様々な状況におけるQR分解の高性能化の可能性を追求することを目指す。

◆ 実施項目1: Cholesky QRに基づく列ピボット付きQR分解アルゴリズムの開発

- Cholesky QR型のアルゴリズムはHPCに適した特徴を持ち、縦長行列のQR分解において高性能であることが知られている。
- 列ピボット付きQR分解は行列のランクに関する情報を扱うこと(Rank Revealing QR分解)が可能で、行列のランク近似などの応用を持つ。
- 本課題では、Cholesky QR型の列ピボット付きQR分解アルゴリズムの開発を行う。
- 開発したアルゴリズムの性能を既存アルゴリズム(LAPACKのルーチンなど)と比較し、その有効性を検証する。

CholQR: Cholesky QR

Input: $A \in \mathbb{R}^{m \times n}$ 1: $W \leftarrow A^T A$ 2: $R^T R \leftarrow W$ // Cholesky factorization3: $Q \leftarrow AR^{-1}$ Output: $Q \in \mathbb{R}^{m \times n}, R \in \mathbb{R}^{n \times n}$

Cholesky QRアルゴリズムの概要

◆ 実施項目2: 非縦長行列のQR分解に対するCholesky QRアルゴリズムの活用

- Cholesky QR型のアルゴリズムは縦長行列に対して高性能である一方で、正方行列に近い(非縦長の)行列に対しては性能に限界があることを確認済み。
- 本課題では、Block Gram-Schmidt(BGS)アルゴリズムとCholesky QR型アルゴリズムを併用し、非縦長行列のQR分解に対する高性能計算を目指す。
- マルチコアCPU環境における提案手法の有効性を検証。
- 分散並列システムに対して、データ分散の方法を含めて、提案手法の拡張を検討予定。

CGS (Classical Gram-Schmidt)

行列×ベクトル → 計算効率が悪い

1. $(I - QQ^T) \times \begin{matrix} x \\ | \\ | \end{matrix} \rightarrow \begin{matrix} x \\ | \\ | \end{matrix}$ 2. $x \rightarrow qr$ ※ $r := \|x\|_2$

BCGS (Block CGS)

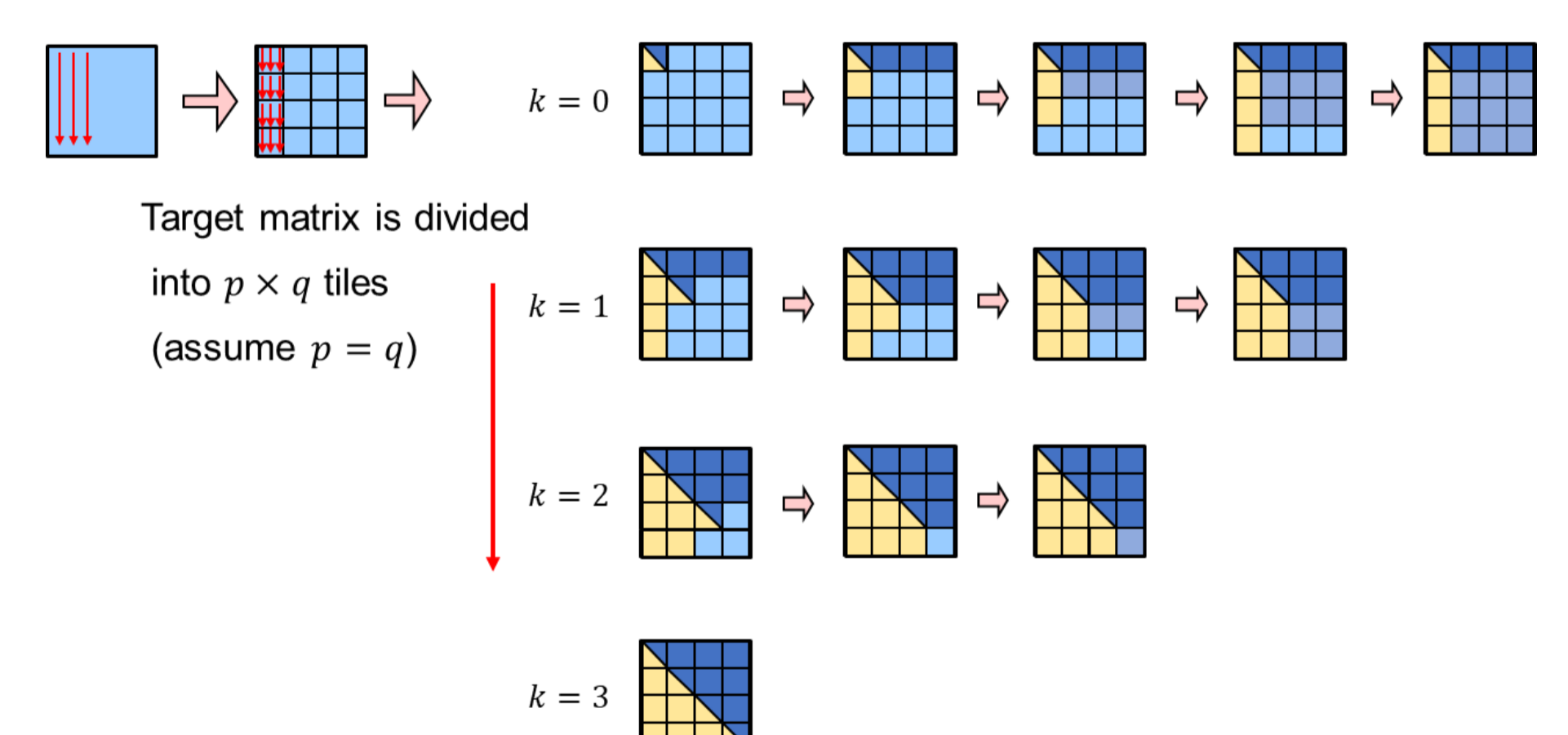
行列×行列 → 計算効率が良い

1. $(I - QQ^T) \times \begin{matrix} X \\ | \\ | \end{matrix} \rightarrow \begin{matrix} X \\ | \\ | \end{matrix}$ 2. $X \rightarrow QR$ QR分解が出てくる
→ 高速なQR分解アルゴリズムが必要

Block Gram-Schmidt(BCGS)アルゴリズムの概要

◆ 実施項目3: 最新のマルチコアCPU環境におけるタイルQRアルゴリズムの性能評価

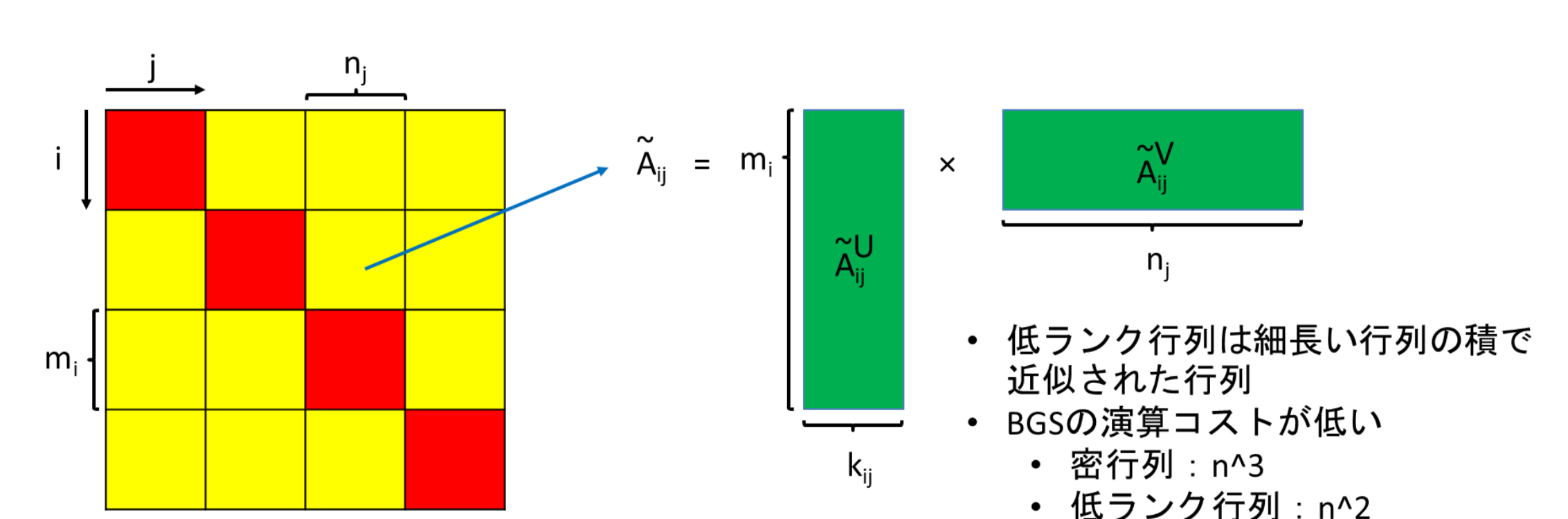
- タイル型の行列分解アルゴリズムは、超並列環境に適した並列アルゴリズムであり、QR分解をはじめとする行列分解における有効性が知られている。
- 本課題では、まず、JHPCNで利用可能である様々な最新のマルチコアCPU環境において、タイル型QR分解アルゴリズムの性能を詳しく調査・分析する。
- タイルサイズ等のパラメータと性能の関係を詳しく分析し、タイル型QR分解アルゴリズムの有効性の検証と性能向上に向けた課題の調査を行う。



タイルQRアルゴリズムの概要

◆ 実施項目4: GPU環境におけるBlock Low Rank行列のQR分解の性能評価

- Block Low Rank (BLR)行列をはじめとする、行列の低ランク近似を活用した行列近似とそれに対する行列分解の研究が活発に行われている。
- BLR行列: ブロック化された行列の一部ブロックが低ランク表現されたもの。
- 本課題では、まず、別プロジェクトで開発が進んでいる、Block Low Rank行列に対するQR分解のGPU向け実装に関して、性能評価・分析を行う。
- 既存ライブラリをベースとしている実装に対して、その性能のボトルネック箇所を明らかにし、アルゴリズムや実装方法の改良について検討する。(密行列向け手法が適用可能だが、低ランク行列を考慮した改良の余地あり。)



Block Low Rank行列の概要

赤: 密行列(主に対角)、黄: 低ランク行列(主に非対角の大部分)