jh180012-NAHI

横田　理央 (東京工業大学)

Hierarchical low-rank approximation methods on distributed memory and GPUs

背景

H行列、H^2行列、HSS行列などの階層的低ランク近似法は$O(N^2)$の要素を持つ密行列を$O(N)$の要素を持つ行列に圧縮することができる。圧縮された行列を用いることで、行列積、LU分解、固有値計算を$O(N\log^2 N)$で行うことができるため、従来密行列の解法が用いられてきた分野では階層的低ランク近似法の導入が近年盛んに行なわれている。また、密行列のみならず、疎行列の直接解法におけるSchur補元の圧縮に用いることもできるため、流体、構造、電磁界解析において前処理法として用いる研究も盛んに行なわれている。しかし、これらの階層的低ランク近似法は比較的新しい手法であるため、高性能な並列実装は少なく、GPUなどへの実装も未成熟である。これらの階層的低ランク近似法に内在する並列度は高く、高性能な分散メモリ・GPU実装に大きな期待が寄せられている。

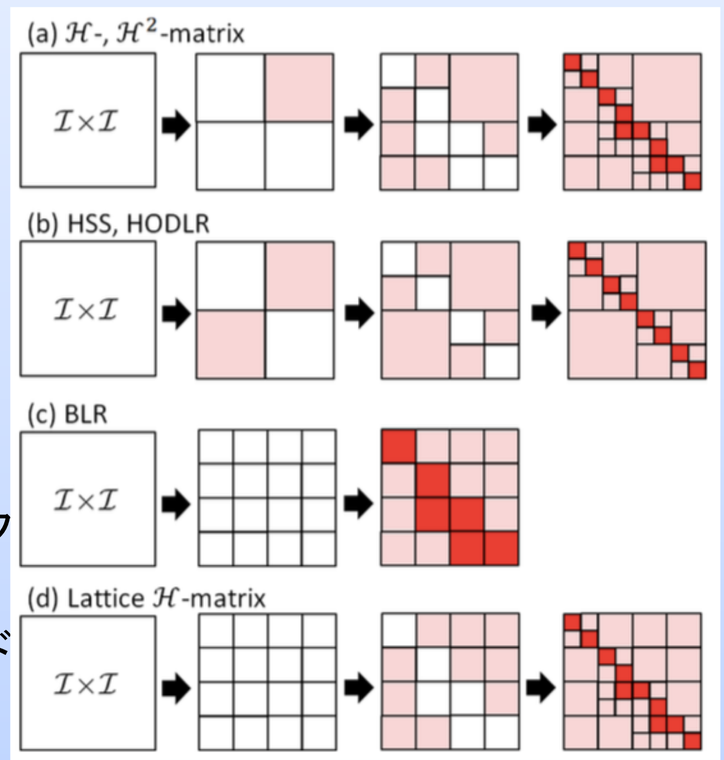
目的

本研究では,エクサスケールを視野に入れた階層的低ランク近似法の分散メモリ・GPU上での高性能な実装を行うことを目的とする。このとき重要になるのが比較的小さな密行列の高速な処理である。Tennessee大学のDongarraグループではまさにこのような小さな密行列のバッチ処理をGPU上で高速に行うライブラリを開発しており、JHPCNの国際共同研究として行うことでこの技術をいち早く導入できる。

昨年度はマルチGPU化とスケーラビリティの向上を目指すとともに、block MAGMAを用いた単体GPU性能の更なる向上を図ったが，今年度はマルチGPU上で行列分解を行う際の負荷分散アルゴリズムやbatch MAGMAを用いる際の階層的データのストリーム化について開発を行う。

H-matrix, HSS, BLRの違い

右図に様々な低ランク近似法の違いを図示する。(a)にあるH-matrixやH^2-matrixなどの手法は(b)のHSSやHODLRとは異なり、非対角ブロックをより細かく分割するのが特徴である。(c)のBLRは階層的でない低ランク近似法であり、(d)はBLRとH-matrixのハイブリッドである。(d)のlattice H-matrixはハイブリッド化により、BLRのもつ並列度とH-matrixのもつ$O(N\log^2 N)$の計算コストの両方を有する。下の表には許容条件と基底のネストの両方の観点から手法を分類したものとそれぞれを実装したオープンソースコードの名称を示す。



Method	Structure	Nested	Implementation
$\mathcal{H}$-matrix	strong-$\mathcal{H}$	no	HLIBpro, AHMED
$\mathcal{H}^2$-matrix	strong-$\mathcal{H}$	yes	LORASP, H2lib
HSS	weak-$\mathcal{H}$	yes	STRUMPACK, GOFMM, ASKIT
BLR	strong-block	no	MUMPS-BLR, HiCMA
Lattice $\mathcal{H}$-matrix	strong-($\mathcal{H}$+block)	no	HACApK

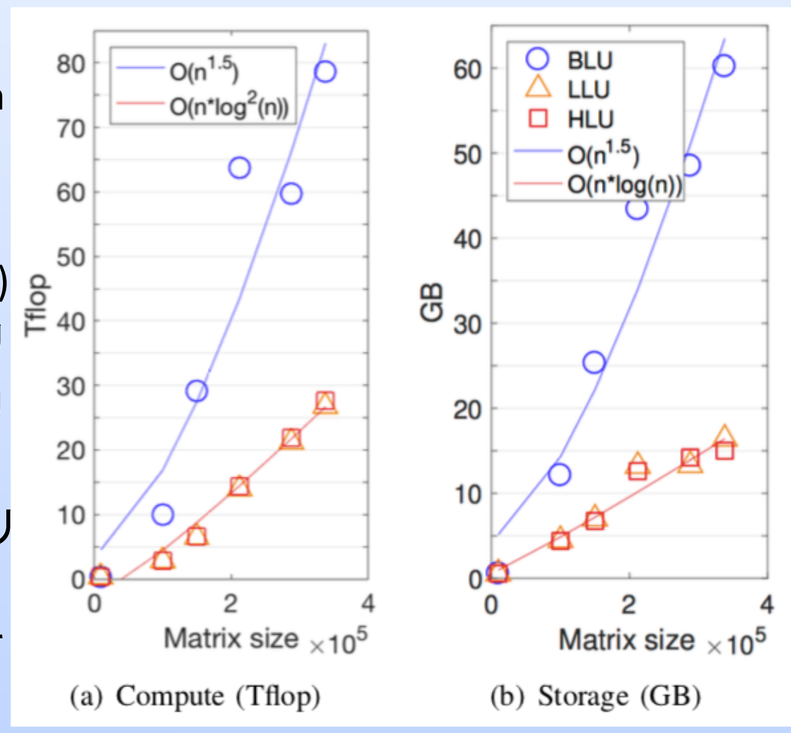
Lattice H行列によるLU分解のパフォーマンスモデル

下の表にLattice H行列の主要な関数の呼ばれる回数と計算コスト、その積から求められる全体の計算コストを示す。ただし、nは行列の大きさ、lはブロックの大きさを表す。Hがついている関数は階層的なブロックに関するものであり、low-rankと記されている関数は低ランクなブロックに関するものを表す。BLRの密行列になっている部分をH行列に置き換えることでこれらは簡単に導くことができる。

Function	# of calls	Complexity	Total complexity
getrf($\mathcal{H}$)	$\mathcal{O}(n/l)$	$\mathcal{O}(l\log^2 l)$	$\mathcal{O}((n/l)*(l\log^2 l))$
trsm(low-rank)	$\mathcal{O}((n/l)^2)$	$\mathcal{O}(l)$	$\mathcal{O}((n/l)^2*l)$
trsm($\mathcal{H}$)	$\mathcal{O}(n/l)$	$\mathcal{O}(l\log l)$	$\mathcal{O}((n/l)*(l\log l))$
gemm(low-rank)	$\mathcal{O}((n/l)^3)$	$\mathcal{O}(l)$	$\mathcal{O}((n/l)^3*l)$
gemm($\mathcal{H}$)	$\mathcal{O}((n/l)^2)$	$\mathcal{O}(l\log^2 l)$	$\mathcal{O}((n/l)^2*(l\log^2 l))$

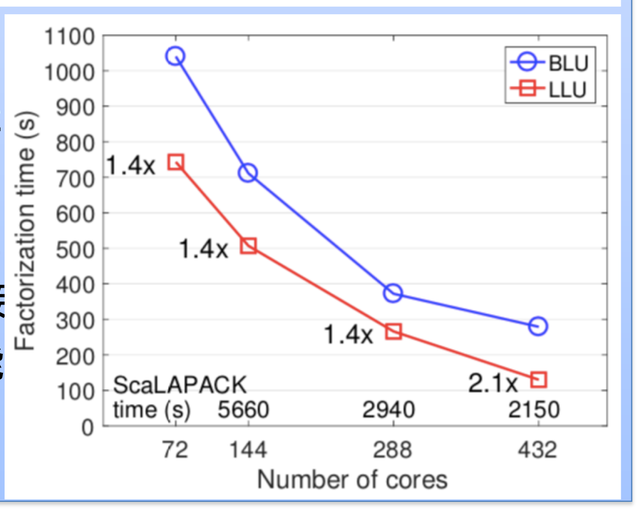
Lattice H行列によるLU分解の演算性能とメモリ消費量

右図にBLRによるLU分解(BLU)、H-matrixによるLU分解(HLU)、lattice H-matrixによるLU分解(LLU)の演算性能とメモリ消費量を示す。BLUに比べてHLUやLLUは演算性能やメモリ消費量の漸近挙動が大きく低減されていることが分かる。



(a) Compute (Tflop)　(b) Storage (GB)

右下図にBLUとLLUを用いた場合の並列化効率を計算時間の観点から図示する。またScaLAPACKの計算時間を直接図示することで相対的な性能を確認できる[1]。



今後の展望

- FMMによる低ランク近似を用いることでACAでは扱えなかった行列を圧縮できるようにする
- 小さい行列をバッチ処理することに特化した「block MAGMA」を用いてGPU実装を高速化
- 境界要素法による電磁界解析にGPU実装された$\mathcal{H}$ACApKを用いることで実アプリケーションにおける性能を検証

参考文献

[1] I. Yamazaki, A. Abdelfattah, A. Ida, S. Ohshima, S. Tomov, R. Yokota, J. Dongarra, ``Analyzing Performance of BiCGStab with Hierarchical Matrix on GPU clusters," 32nd IEEE International Parallel & Distributed Processing Symposium, IPDPS2018, Vancouver, Canada, 21-25 May (2018).