

Hierarchical low-rank approximation methods on distributed memory and GPUs

JHPCN

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 $O(N \log N)$ 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

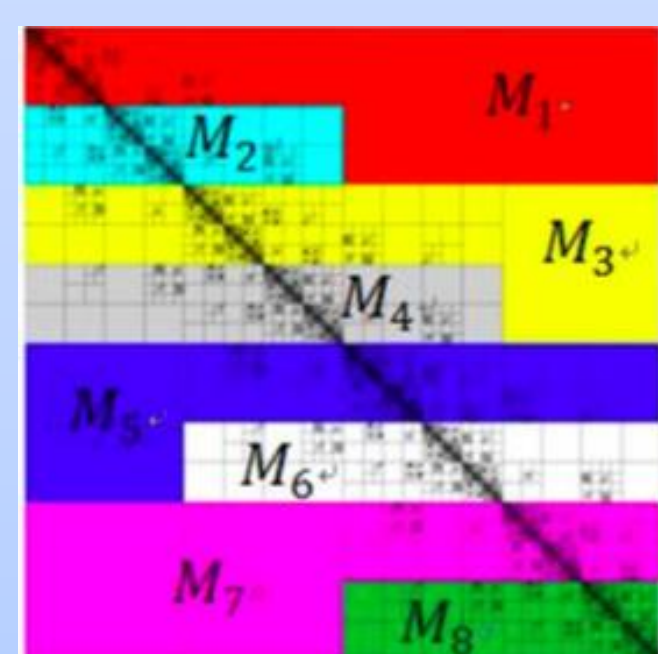
本研究では、エクサスケールを視野に入れた階層的低ランク近似法の分散メモリ・GPU上での高性能な実装を行うことを目的とする。このとき重要になるのが比較的小さな密行列の高速な処理である。Tennessee大学のDongarraグループではまさにこのような小さな密行列のバッチ処理をGPU上で高速に行うライブラリを開発しており、JHPCNの国際共同研究として行うことでこの技術をいち早く導入できる。

昨年度はGPU化とLU分解への拡張を行ったが、今年度はマルチ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る。また、FMMを低ランク近似に用いることにより[1]、従来のACAでは扱えなかった行列も高速に圧縮できる手法を開発する。

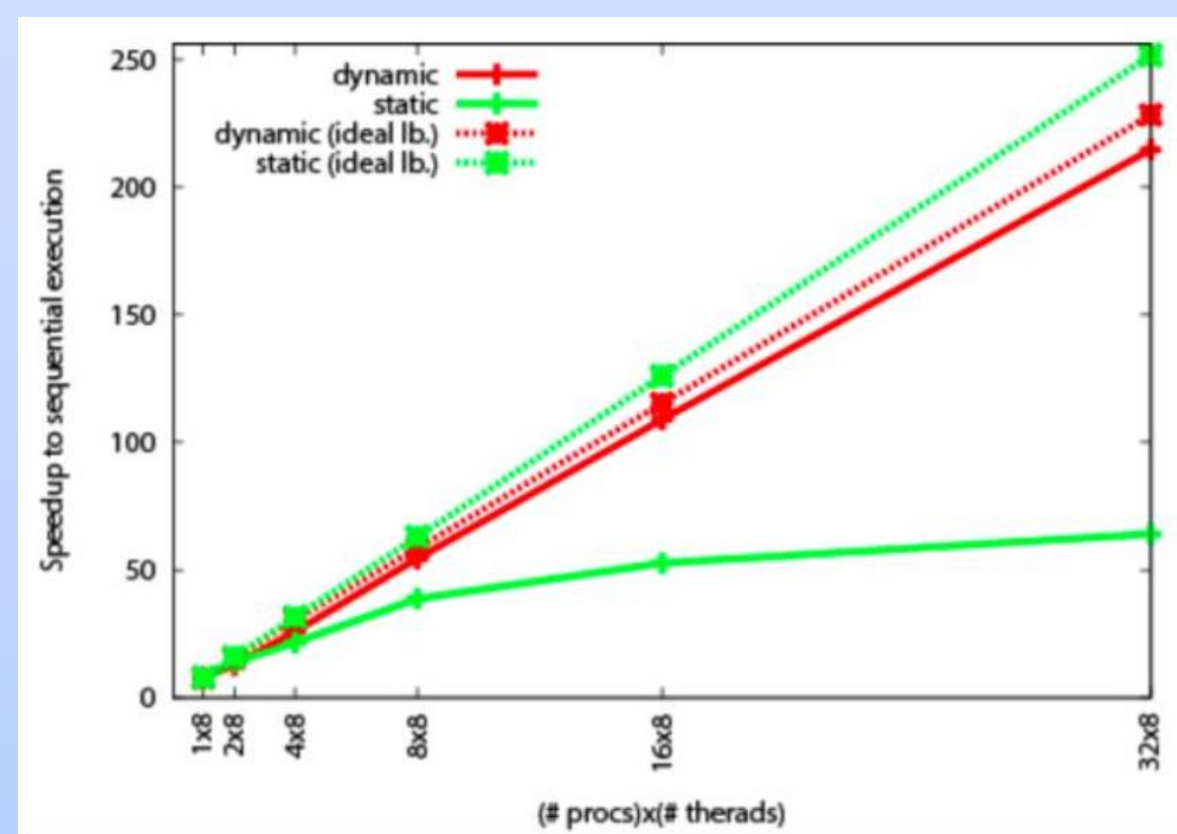
H行列のOpenMP+MPIハイブリッド実装 -- HACApK



HACApKはH行列による階層化とAdaptive Cross Approximation (ACA)による低ランク近似を用いるOpenMPとMPIのハイブリッド実装である。



H行列の領域分割

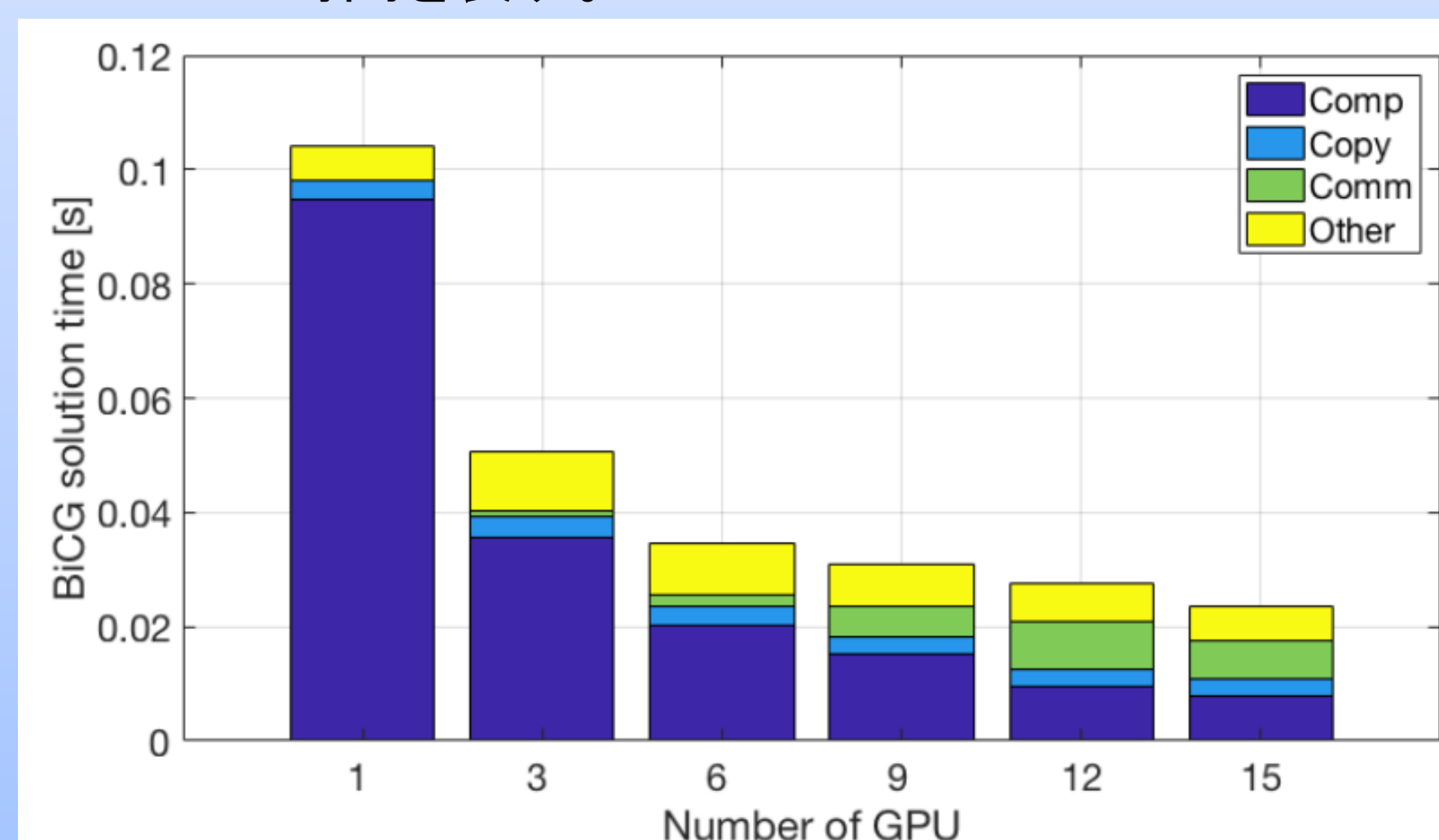


HACApKは各ブロックのランクを予想し動的負荷分散を行う機構を導入することによってMPIスケーラビリティの向上を図ることができた[2]。また、ノード内並列に関してもOpenMPの動的タスクスケジューリングにより負荷分散を実現している。

H行列のマルチGPU実装

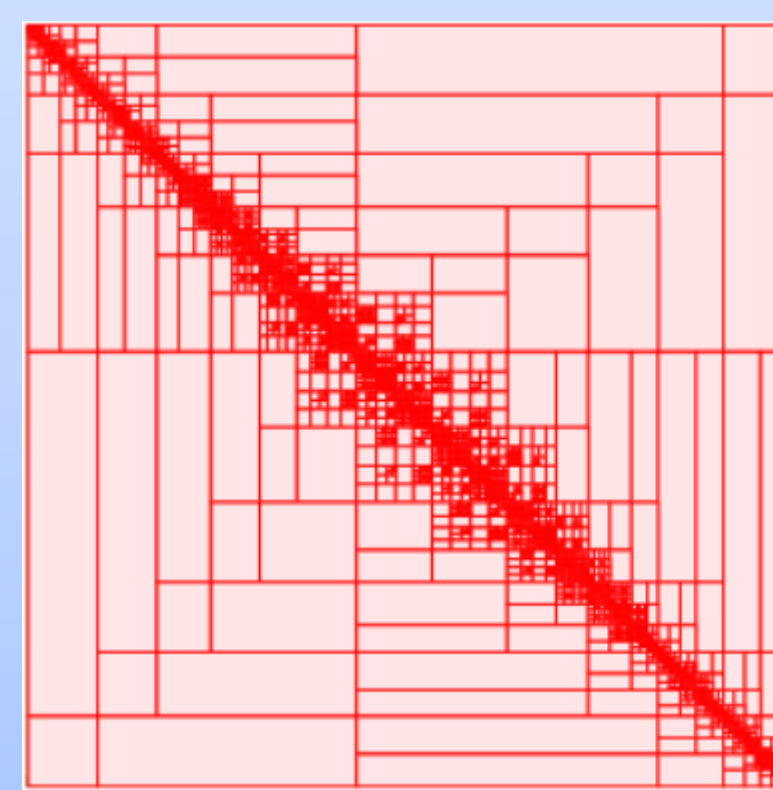
H行列のOpenMP・MPIハイブリッド実装であるHACApKをGPU化するにあたり、共同研究者の山崎らのグループが開発しているMAGMAを用いた。HACApKはもともとMPIに対応していたためマルチGPU化は容易に行うことができた。

下図にTSUBAME2.5で複数GPUを用いて行った境界要素法の反復解法におけるHACApKの計算時間の内訳を示す。Compは演算、CopyはCUDAMemcpy、CommはMPI通信、Otherはその他にかかった時間を表す。

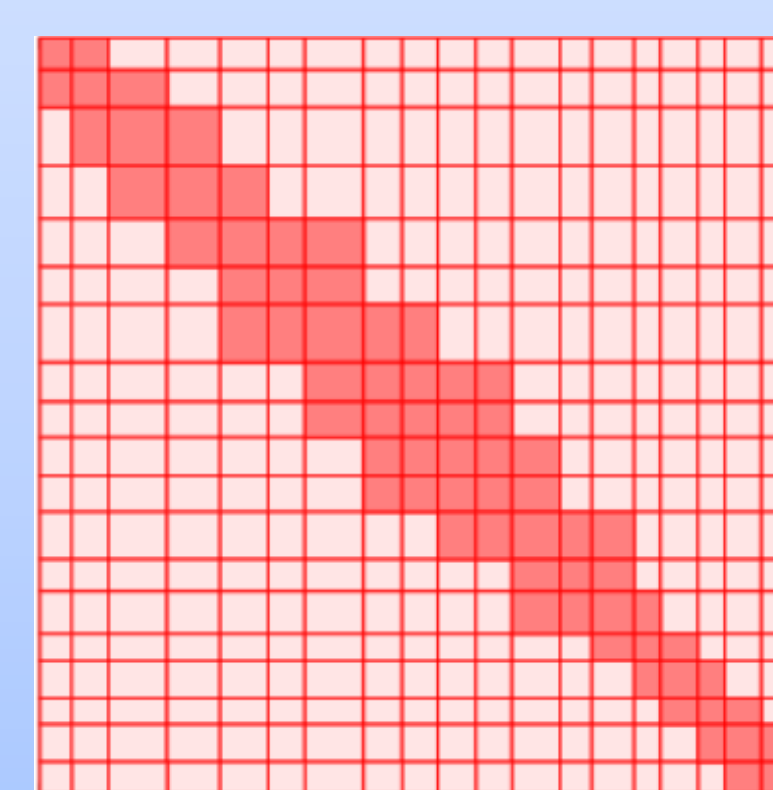


H行列のLU分解

H行列のLU分解を行う際に、階層構造から生じるデータの依存関係がアルゴリズムの並列性に悪影響を与える。そこで、本研究では下図のH行列構造からBLR構造へと行列のブロック構造を変換し、LU分解の際のデータの依存関係をより並列なものへと変えた。



H行列構造



Block Low-Rank(BLR)構造

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HACApK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] Rio Yokota, Journal of the JSCES, Vol. 21, No. 4, pp. 3498–3501, 2016.
- [2] Akihiro Ida, Takeshi Iwashita, 2 others, Journal of the JSCES, Vol. 21, No. 4, pp. 22-25, 2016.