

ICCG 法向け多色順序付けアルゴリズムの階層的並列化

河合直聡

東京大学情報基盤センター

1. はじめに

本研究は HPCC2017 で採択された、多色順序付けにより並列化されたブロック不完全コレスキー前処理付き CG(BICCG)法を対象とし、多色順序付けアルゴリズム自体を並列化する階層的な並列化手法の提案、評価に関する内容である[1]。本稿では 2017 年 11 月 21~22 日に実施された「大規模 HPC チャレンジ」を利用させていた際の、大規模問題、並列環境での評価結果について述べる。

多色順序付け法で並列化された BICCG は比較的ロバストな並列反復法として知られている。実際に、量子力学問題から導出されるような悪条件な線形方程式でも、BICCG 法を用いて求解可能である[2]。(本研究は日本(CREST)の ppOpen-HPC プロジェクト[3]とドイツ(SPPEXA)の ESSEX-II プロジェクト[4]の共同研究であり、本共同研究で対象としている問題が量子力学の一固有値問題である。)

多色順序付けが適用された BICCG 法では、ブロック IC 分解、前処理、行列ベクトル積などほとんどの部分が並列化可能であるが、多色順序付けを行うアルゴリズム自体の並列化に関する研究成果はほぼ存在しない。これは、多色順序付けの並列化が必要となる規模の問題を対象とした研究が少ない点と、多色順序付けの結果が BICCG 法の収束性に強く影響するために、アプリケーション毎に様々なアルゴリズムが提案されている点にある。

本研究では大規模な問題、並列環境に対応し、かつ既存の多色順序付けアルゴリズムをその収束性や演算性能を変化させずに並列化可能な階層的な手法を提案した。大規模 HPC チャレンジでは Graphene モデルを対象に、Oakleaf-FX 128~4800 ノードで、並列化多色順序付けアルゴリズムの収束性および計算時間を評価したため、本稿ではこの結果について述べる。

2. ブロック IC 前処理の並列化のための多色順序付け法

本節ではブロック IC 前処理の並列化で使用する多色順序付け法について述べる。図 1 左はブロック IC 分解に際して、対象の行列を部分行列に分割、各部分行列の関係性を表したグラフの一例である。多色順序付け法はこのグラフ情報を基に、同じ色の頂点が隣接しないよう全ての頂点を塗り分ける手法である。図 1 右に 5 色で塗り分けた例を示す。

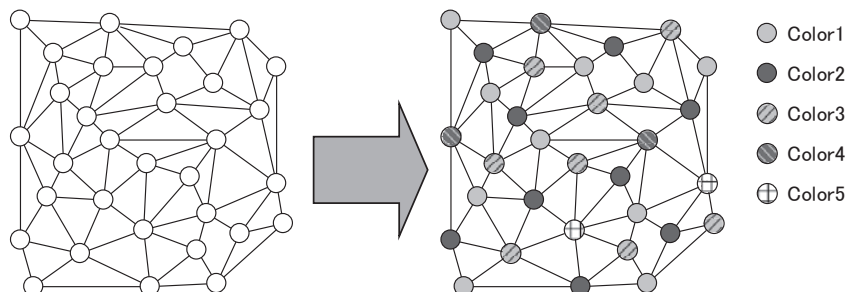


図 1：多色順序付けの一例

次に、並列化に際して各プロセスが担当する領域を図2左に示すように定る。色分け結果および各プロセスへの割り当てを考慮して、対象となる線形方程式の係数行列の行および列の入れ替えを行った結果が図2右である。多色順序付けにより各頂点は同じ色が隣接しないよう色分けされているため、行列上では同じ色となっている対角項に対応する非対角項は全て0である。これにより、同じ色で塗り分けられた要素は並列に計算が可能となっている。ブロック IC 前処理ではこの性質を利用し、前進後退代入の並列化を実現している。

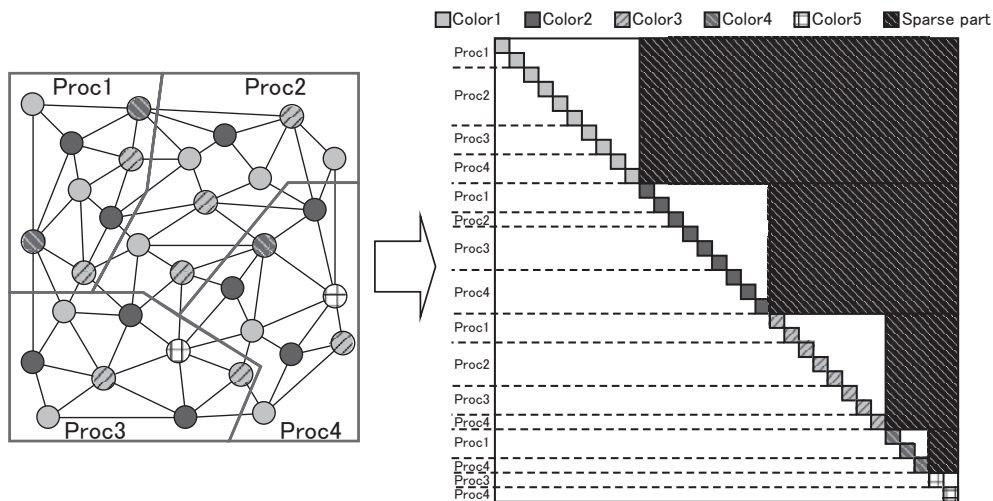


図2：多色順序付けの結果を反映した行列の一例（上三角部分のみ表示）

ただし、この多色順序付けの結果はBICCG法の収束性に強く依存する。図3は元の行列が同じであっても、行および列の入れ替えによって、完全分解後の行列が変化する例である。図3左上の行列と左下の行列は1行1列要素と6行6列要素を入れ替えただけとする。それぞれの行列に完全コレスキー分解を適用した結果、図に示すように分解前と非零要素の分布が全く同じになる場合と、密行列になってしまう場合が存在する。

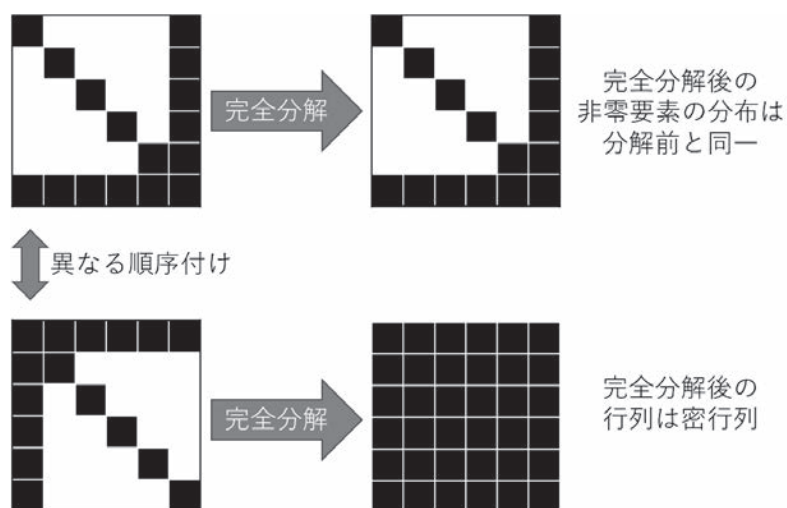


図3：行列の順序付けの差による完全分解後の差異

BICCG 法では元の行列と完全分解後の行列の非零要素の分布に近いほど高い収束性を示す。したがって、同図に近い結果を得られる多色順序付けアルゴリズムが収束性の観点からは望ましい。ただし、多色順序付けの結果は並列度や同期の回数、キャッシュヒット率に影響するため、1 反復あたりの性能も大きく変化する。結果、様々なアルゴリズムが提案されており、適したアルゴリズムはアプリケーション毎に異なる。代表的なアルゴリズムとしては Greedy や代数多色順序付けが存在しており、また、Cuthill-McKee (CM) や Reverse Cuthill-McKee [5] を併用する手法などが知られている。

3. 多色順序付けアルゴリズムの階層的な並列化

多色順序付けの並列化に際しては、既存のアルゴリズムの性質を損なわずに大規模並列環境に対応可能な手法が適している。本研究では階層的な手法に基づく並列化手法を提案している。多色順序付け法では関係性のないノードは同色に塗られており、並列に計算が可能であった。同様に、複数のノードを含む領域に対して多色順序付けをおこなう。これにより、同色の領域に含まれるノードに対して多色順序付けを並列に行う事ができる。具体的な手順を図 4 に示す。

1. 各プロセスは担当領域をさらに分割する。(図 4. b)
2. 分割された領域の関係性から新たなグラフを作成し、マスタープロセスに集約する。(図 4. c)
3. マスタープロセスが集約されたグラフに対して色付けを行う。(図 4. d)
4. 色付け結果を他のプロセスに放送する。(図 4. e)
5. 領域の色分け結果を元に並列にノードの多色順序付けを行う。(図 4. f, g, h)

図 2 と図 4. h の比較から分かるように、多色順序付けの階層的な並列化により、色付け結果は逐次的な結果と異なっている。しかしながら、階層的な並列化を適用した多色順序付けでは分割された各領域の多色順序付けには既存のアルゴリズムを適用するため、それらの収束性、1 反復辺りの演算性能は大きく変化しないと期待できる。実際に評価を行った結果、さまざまな手法の並列化により BICCG 法の収束性、演算性能は大きく変化しなかった [1]。

4. 評価結果

ここでは提案手法を適用した BICCG 法の収束性、演算性能を評価する。評価に用いた環境は大規模 HPC チャレンジにて利用させて頂いた Oakleaf-FX の 128~4800 ノードである。

対象の問題は SPPEXA より提供頂いた Graphene モデルである [6]。本問題の自由度は 32,768 × 16,384 ≒ 5 千万である。BICCG の適用に際して、ブロックサイズは 4 とし、ブロック IC 分解前の行列の対角項に対して 100.0 の係数を足しこむ対角シフトを適用している。評価に用いたプログラムは OpenMP と MPI を併用したハイブリッド並列化が行われており、ノード毎に 1 プロセス 16 スレッドとしている。提案手法を適用した多色順序付けアルゴリズムは 10 色の代数多色順序付け法である。図 5 に評価結果を示す。本図の横軸はノード数、破線は反復回数の変化を、実線は反復部の 128 ノードでの演算時間を基準とした、性能向上率を示す。図に示すように、ノード数を変化させた場合でも反復回数はほとんど変化していない。また、4,800 ノードでの性能は 3,748 倍と良好な結果が得られた。

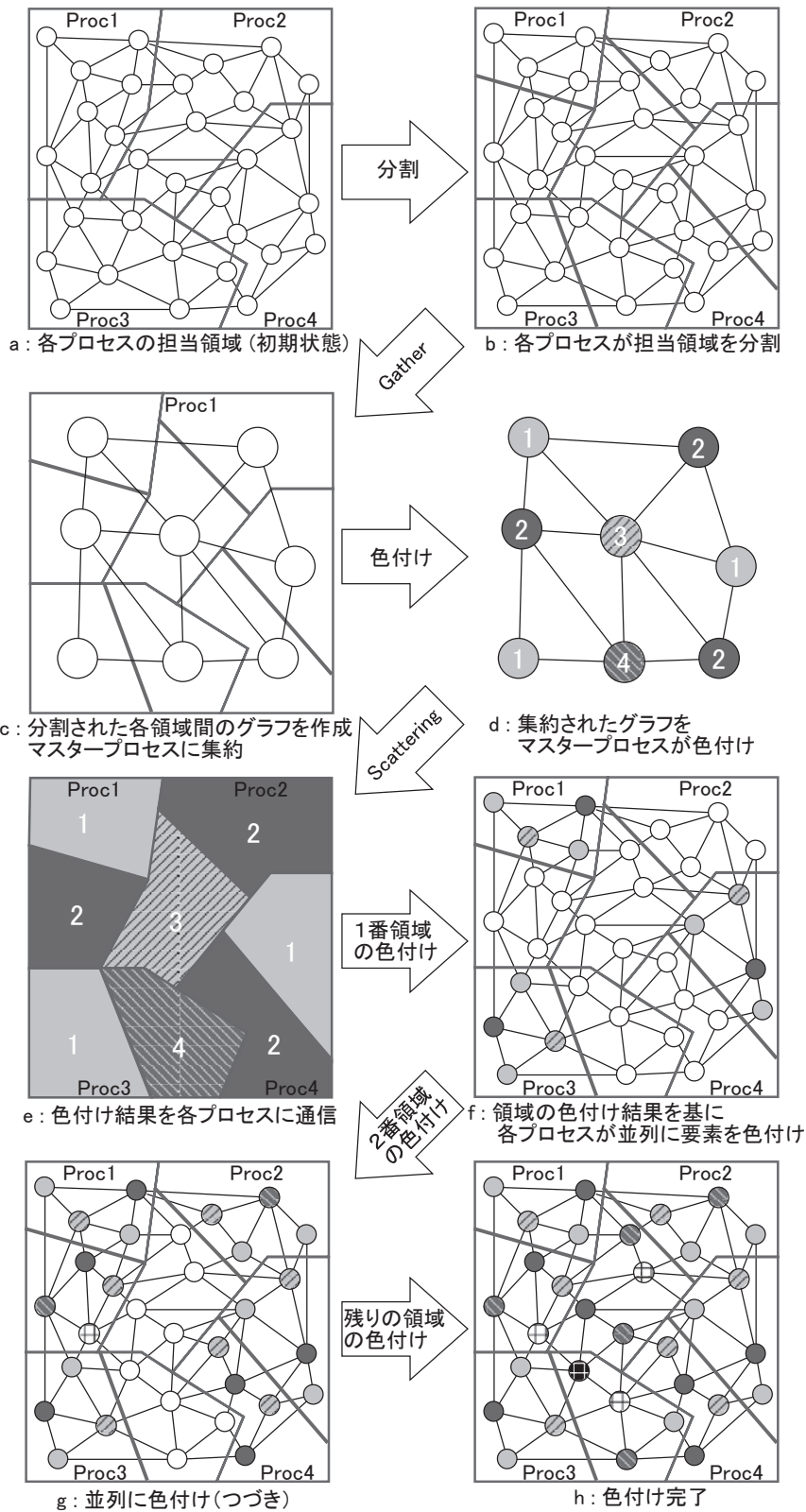


図4：階層的な並列化による多色順序付けの一例

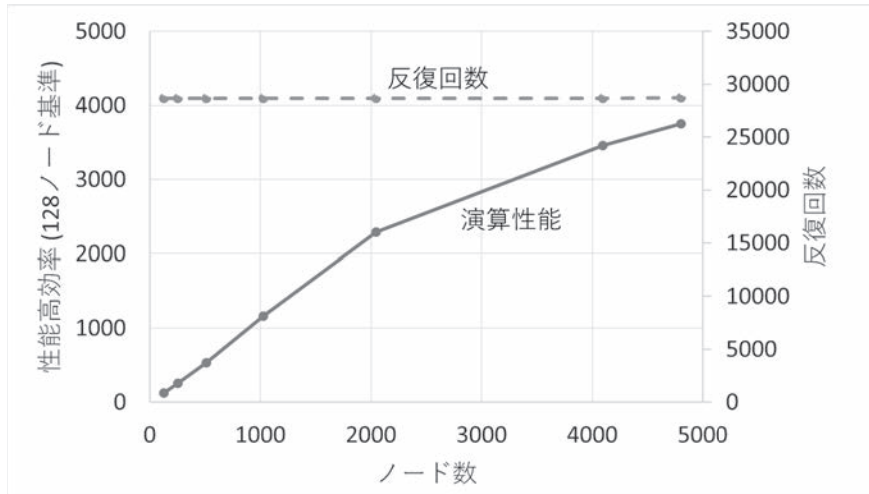


図 5 : 性能評価結果

5. まとめ

本大規模 HPC チャレンジでは HPCC2017 にて採録された、多色順序付けアルゴリズムの階層的な並列化のより大規模な問題、並列度での評価を行った。結果、BICCG 法の収束性は並列度に依存せずほぼ一定であり、また、良好な性能向上率が確認できた。

本稿で評価を行ったプログラムは通信の隠蔽や行列ベクトル積における格納形式の最適化など十分な最適化が行われていない。今後、これらの最適化を行った上で、再評価を行う予定である。

参 考 文 献

- [1] M. Kawai, A. Ida, K. Nakajima, "Hierarchical Parallelization of Multicoloring Algorithms for Block IC Preconditioners", 2017 IEEE Proceedings of the 19th International Conference on High Performance Computing and Communications (HPCC 2017), 138-145, Bangkok, Thailand, 2017
- [2] 河合直聡, 伊田明弘, 中島研吾, 悪条件問題に対する CG 法向け IC 前処理手法の改善, 情報処理学会研究報告(HPC-158-9), 日本情報処理学会第 158 回 HPC 研究会(熱海, 2017年 3 月 8 日~10 日)
- [3] ppOpen-HPC <http://ppopenhpc.cc.u-tokyo.ac.jp/ppopenhpc/>
- [4] ESSEX-II <https://blogs.fau.de/essex/>
- [5] Y. Saad, "Iterative methods for sparse linear systems.", Society for Industrial and Applied Mathematics, 2003.
- [6] Neto, AH Castro, et al, "The electronic properties of graphene.", Reviews of modern physics, 81.1, 109, 2009