INFORMATION TECHNOLOGY CENTER
THE UNIVERSITY OF TOKYO

低ランク構造行列法と $\mathcal{H}$ACApKライブラリ

伊田　明弘（東京大学・情報基盤センター）

THE UNIVERSITY OF TOKYO

行列計算でも「密」は嫌われる！

- 値が0の行列要素は、四則演算の結果が自明なためメモリ上に記憶不要
- **疎行列**：ベクトル数本分以外の要素値が0⇒必要メモリ$\boldsymbol{O}(\boldsymbol{N})$, 行列演算<$\boldsymbol{O}\left(\boldsymbol{N}^2\right)$
- 密行列：行列要素のほぼ全てが0以外　⇒必要メモリ$\boldsymbol{O}\left(\boldsymbol{N}^2\right)$, 行列演算>$\boldsymbol{O}\left(\boldsymbol{N}^2\right)$

密行列

$$N\left\{\begin{bmatrix} 8 & 7 & 6 & 5 & 4 & 3 & 2 & 1 \\ 7 & 14 & 12 & 10 & 8 & 6 & 4 & 2 \\ 6 & 12 & 18 & 15 & 12 & 9 & 6 & 3 \\ 5 & 10 & 15 & 20 & 16 & 12 & 8 & 4 \\ 4 & 8 & 12 & 16 & 20 & 15 & 10 & 5 \\ 3 & 6 & 9 & 12 & 15 & 18 & 12 & 6 \\ 2 & 4 & 6 & 8 & 10 & 12 & 14 & 7 \\ 1 & 2 & 3 & 4 & 5 & 6 & 7 & 8 \end{bmatrix}\right.$$

疎行列

$$N\left\{\begin{bmatrix} 2 & -1 & & & & & & \\ -1 & 2 & -1 & & & & & \\ & -1 & 2 & -1 & & & & \\ & & -1 & 2 & -1 & & & \\ & & & -1 & 2 & -1 & & \\ & & & & -1 & 2 & -1 & \\ & & & & & -1 & 2 & -1 \\ & & & & & & -1 & 2 \end{bmatrix}\right.$$

空白部分の
値は0

密行列に潜む低ランク行列

■科学技術計算やデータ科学計算の密行列は、部分行列が低ランクに成り得る

・例：二階微分方程式

$$-\frac{\mathrm{d}^2 y}{\mathrm{d}x^2} = f \ \text{ in } [0,1], u(0) = u(1) = 0$$

⇩ 2次精度中心差分で離散化

$$A = \begin{bmatrix} 2 & -1 & & & & & & \\ -1 & 2 & -1 & & & & & \\ & -1 & 2 & -1 & & & & \\ & & -1 & 2 & -1 & & & \\ & & & -1 & 2 & -1 & & \\ & & & & -1 & 2 & -1 & \\ & & & & & -1 & 2 & -1 \\ & & & & & & -1 & 2 \end{bmatrix}$$

⇨ 逆行列

$$A^{-1} = \frac{1}{9}\begin{bmatrix} 8 & 7 & 6 & 5 & 4 & 3 & 2 & 1 \\ 7 & 14 & 12 & 10 & 8 & 6 & 4 & 2 \\ 6 & 12 & 18 & 15 & 12 & 9 & 6 & 3 \\ 5 & 10 & 15 & 20 & 16 & 12 & 8 & 4 \\ 4 & 8 & 12 & 16 & 20 & 15 & 10 & 5 \\ 3 & 6 & 9 & 12 & 15 & 18 & 12 & 6 \\ 2 & 4 & 6 & 8 & 10 & 12 & 14 & 7 \\ 1 & 2 & 3 & 4 & 5 & 6 & 7 & 8 \end{bmatrix}$$

$$\begin{pmatrix} 1 \\ 2 \\ 3 \\ 4 \\ 5 \end{pmatrix} \otimes \begin{pmatrix} 4 & 3 & 2 & 1 \end{pmatrix}$$

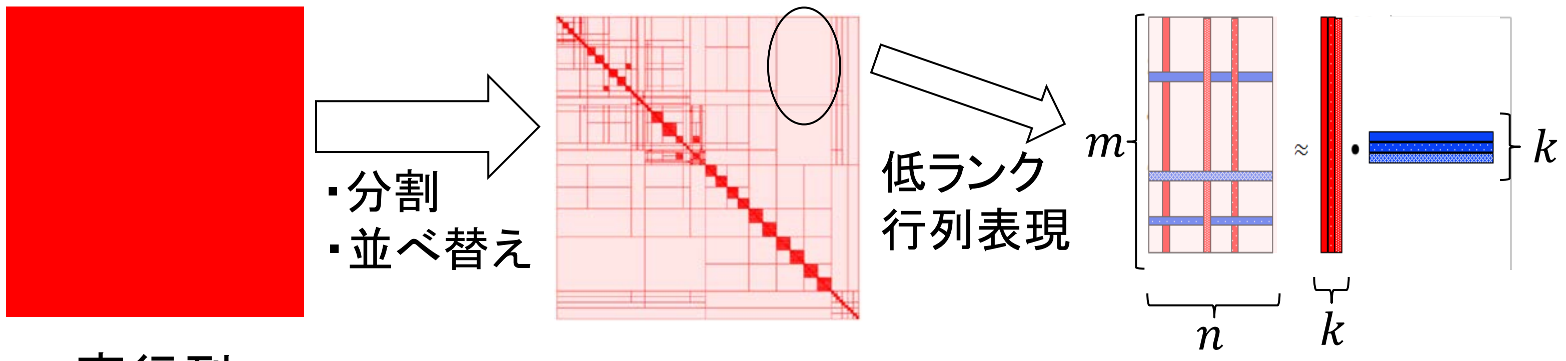
ランク1行列積

記憶容量激減

低ランク行列構造行列法

■密行列を圧縮し、メモリ削減と計算速度向上

- 部分行列に対して、低ランク近似を適用



密行列

密行列
近似対象

$O(mn) \Rightarrow O(k(m+n))$

・行列要素数
・行列ベクトル積演算数

- 数値的に低ランクな部分行列の発見法が重要

⇒分割法の違いで様々な手法が存在
$\mathcal{H}$, $\mathcal{H}^2$, 格子$\mathcal{H}$, BLR, HSS, ⋯

■適用対象

密行列が必要な手法
⇒ 大規模化困難で敬遠

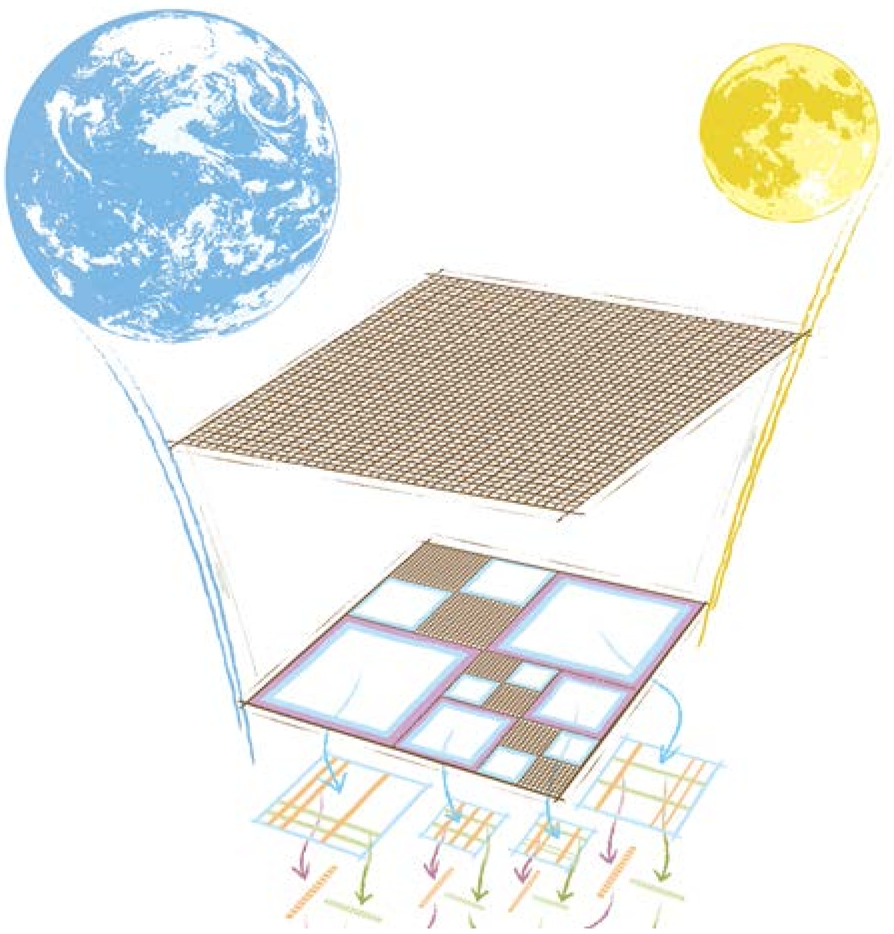
- 科学技術計算
  - ・積分方程式法（境界要素法）
  - ・疎行列の逆行列やシューア補行列
- データ科学計算
  - ・カーネル法

再評価

低ランク構造行列法
⇒ 省メモリ化・高速化

低ランク行列構造行列法の直観的理解

例：地球と月の全物質間の重力相互作用



① 地球と月の全物質は相互作用している
⇒ 密行列で表現

② 月は遠いし、地球の物質が受ける月からの力は、一様だと考えてもそんなに悪くないかも
⇒ 地球と月の相互作用を低ランク行列近似

③ 地球でも、東アジアと南アメリカは遠いな
⇒東アジアの物質と南アメリカの物質の相互作用を低ランク行列近似

④ 東アジアでも、カムチャッカと海南島は遠いな

以下略

$\mathcal{H}$ACApK：$\mathcal{H}$行列法ライブラリ

■積分方程式法を用いたシミュレーション向け高速計算ライブラリ

➢ 適用対象

積分作用素

$$g[u](x) = \int_{\Omega} g(x,y)\,u(y)\mathrm{d}y$$

積分核の特性： $g(x,y) \cong \sum_{\nu=1}^{r} g_1^{\nu}(x) g_2^{\nu}(y)$

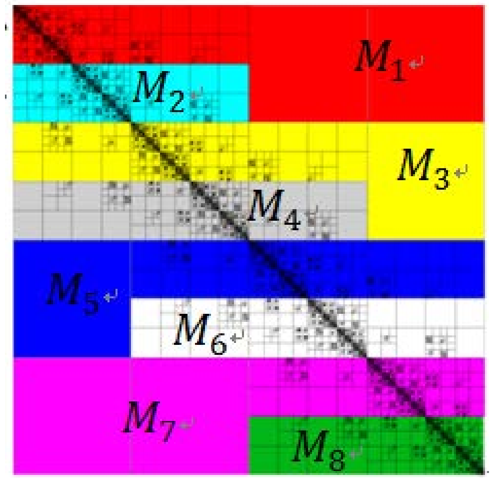
近似条件： x, y間距離が十分遠い

例: $g(x,y) \propto |x-y|^{-1}$

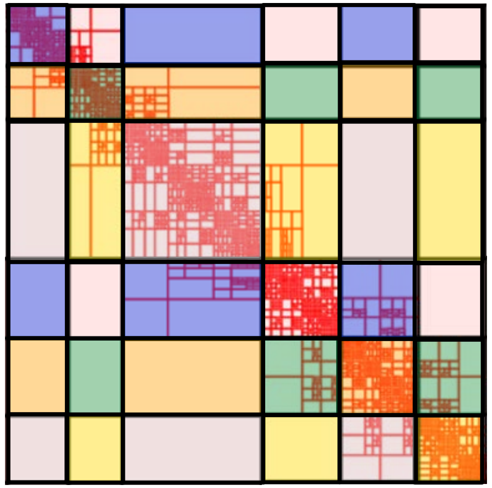
➢ （格子）$\mathcal{H}$行列 ： $O(N^2) \Rightarrow O(N\log N)$

➢ 並列計算

CPUクラスタ向け：MPI+OpenMP（一部GPU化）



$\mathcal{H}$行列の割当て方式



格子$\mathcal{H}$行列の割当て方式

➢ ダウンロード・サイト:

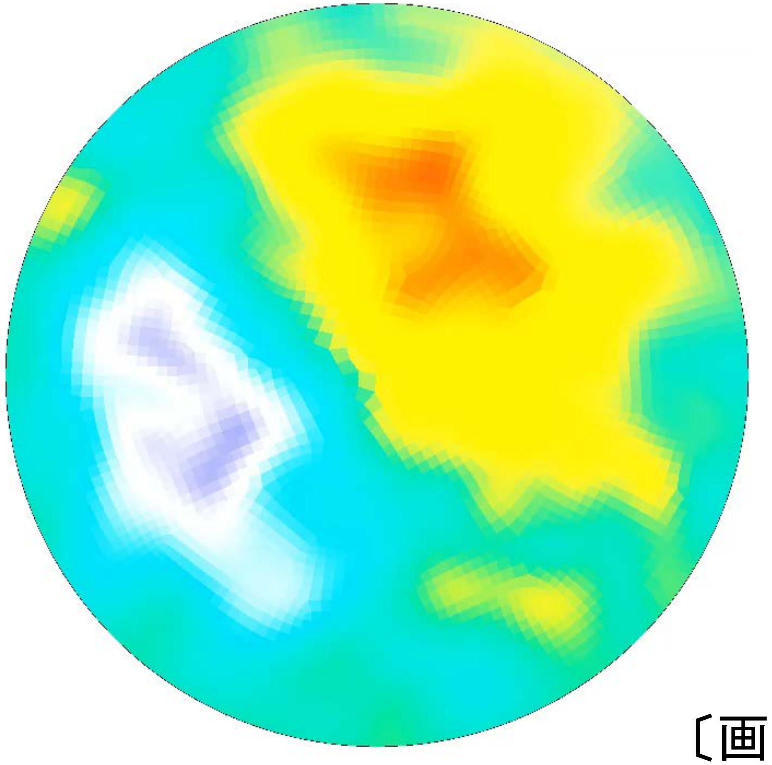
- http://ppopenhpc.cc.u-tokyo.ac.jp
- https://github.com/Post-Peta-Crest/ppOpenHPC/tree/MATH/HACApK

$\mathcal{H}$ACApKの適用事例

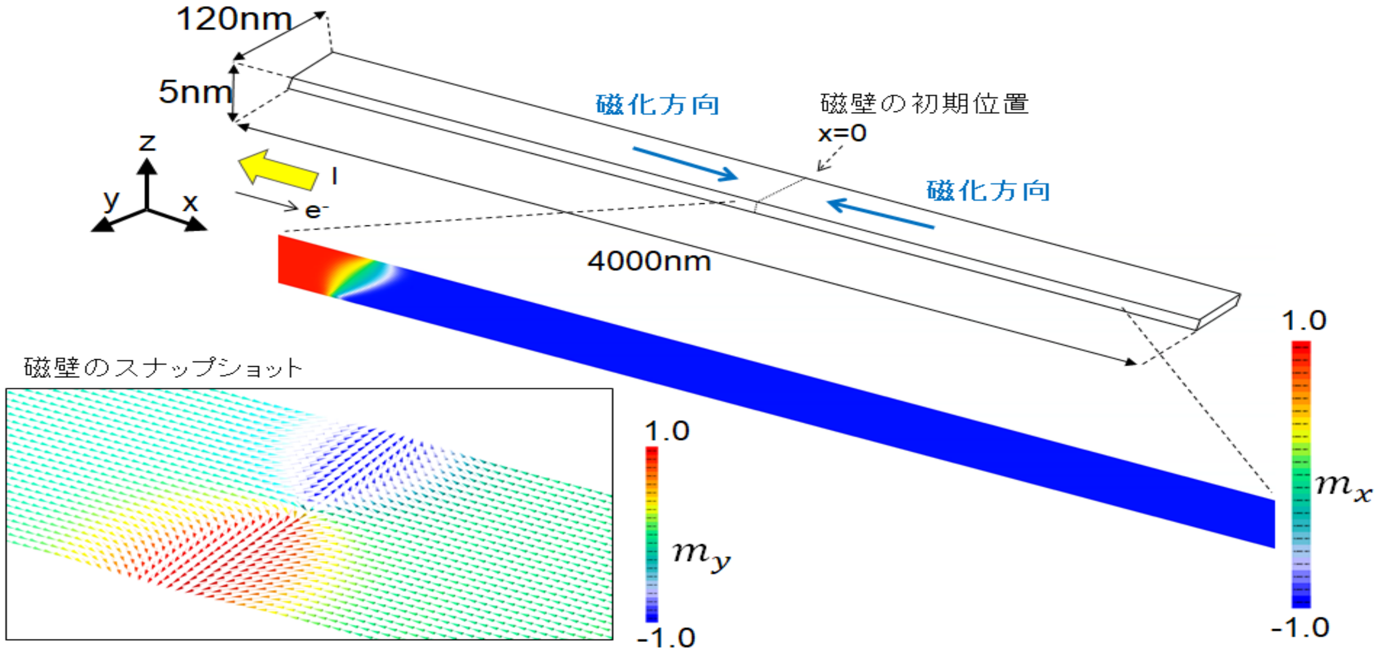
■マイクロマグネティクス計算

$$g(x,y) = \frac{1}{4\pi}\int_{\partial V}\varphi_1(\boldsymbol{y})\nabla|\boldsymbol{x}-\boldsymbol{y}|^{-1}\cdot \mathrm{d}\boldsymbol{S}$$

➢ スピントルク･オシレータ



➢ 磁気壁電流駆動



〔画像提供:安宅正(富士通)〕

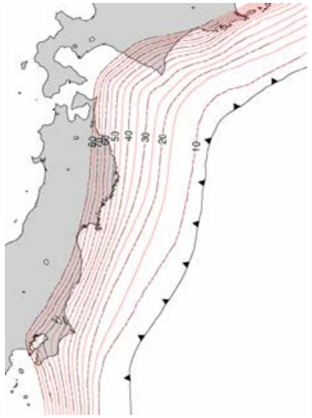
$\mathcal{H}$ACApKの適用事例

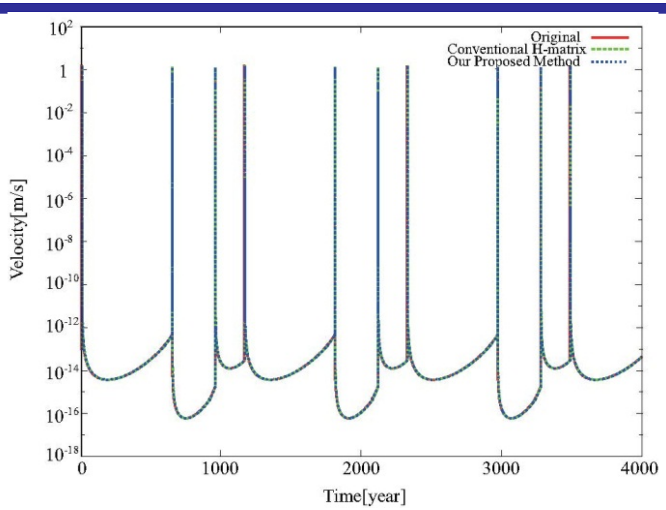
■地震周期解析

- ➢運動方程式:

  $g(x,y) \propto |x-y|^{-3}$

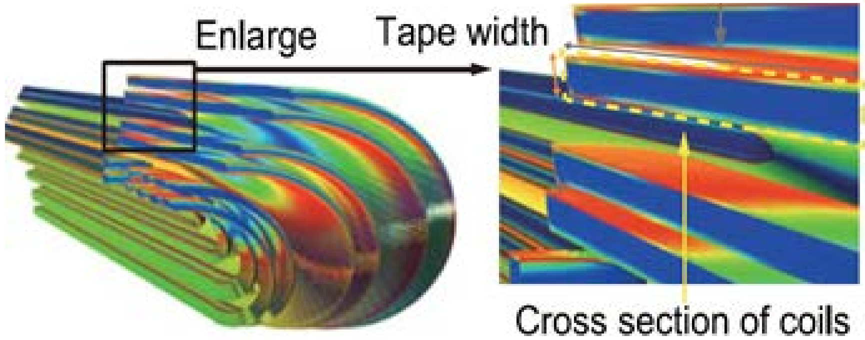
- ➢摩擦法則





■超電導解析

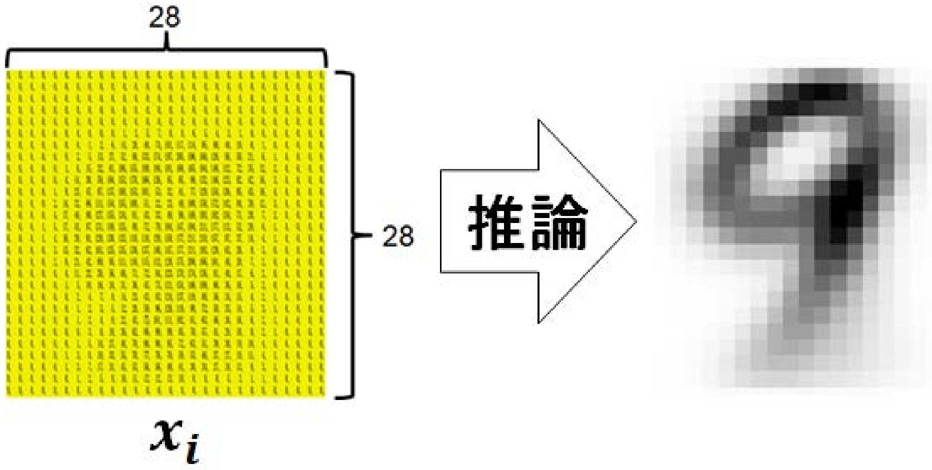
$$g(\mathrm{r}) = \frac{\mu_0 t_s}{4\pi}\int_{S'} \frac{(\nabla \times \boldsymbol{n}'T') \times \boldsymbol{r} \cdot \boldsymbol{n}}{r^3} \mathrm{d}S'$$



〔画像提供:雨宮研究室(京大・工学部)〕

■機械学習

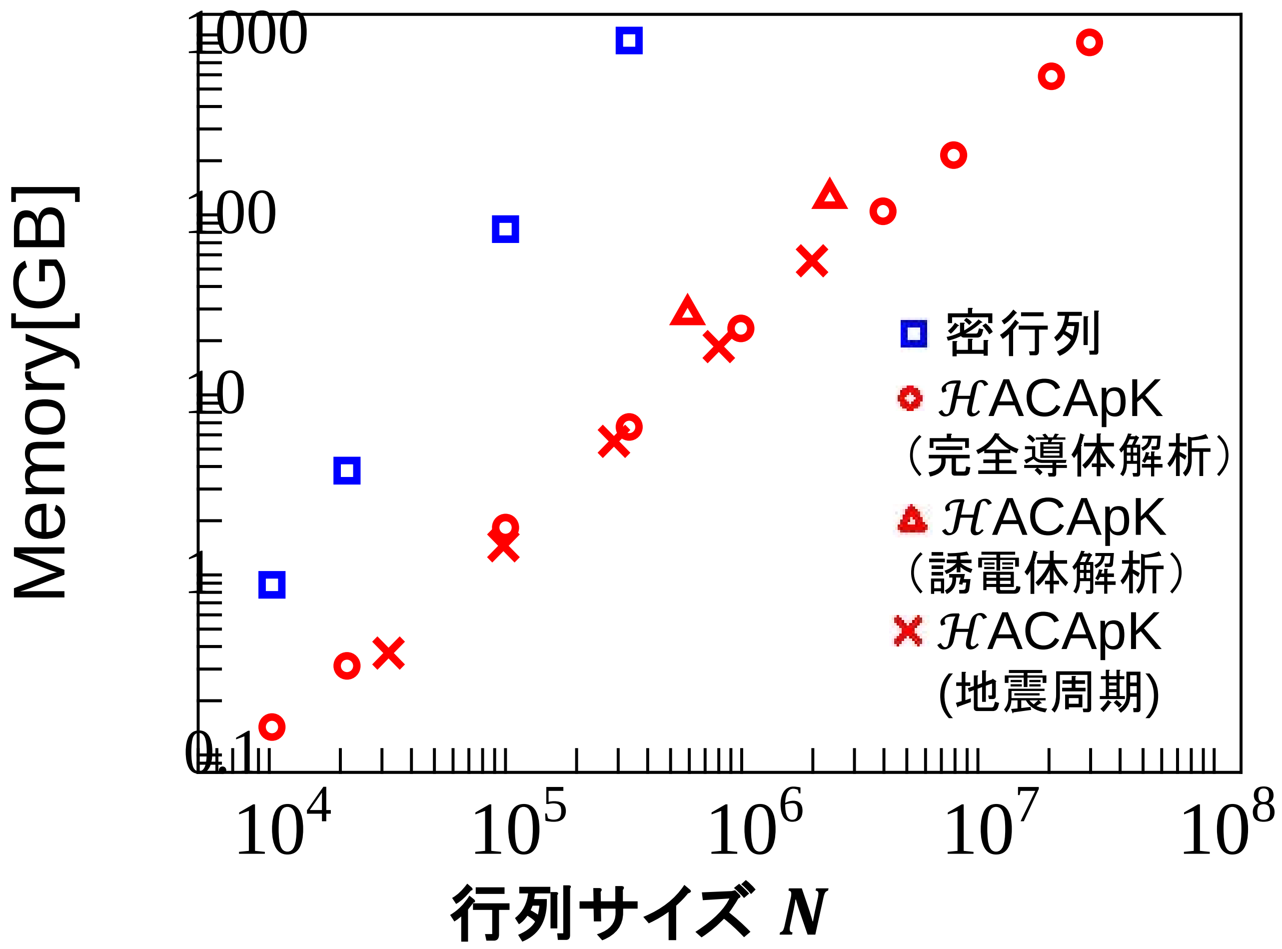
$$A_{ij} := \exp\left(-\|\boldsymbol{x}_i - \boldsymbol{x}_j\|_2^2 / 2\sigma^2\right)$$



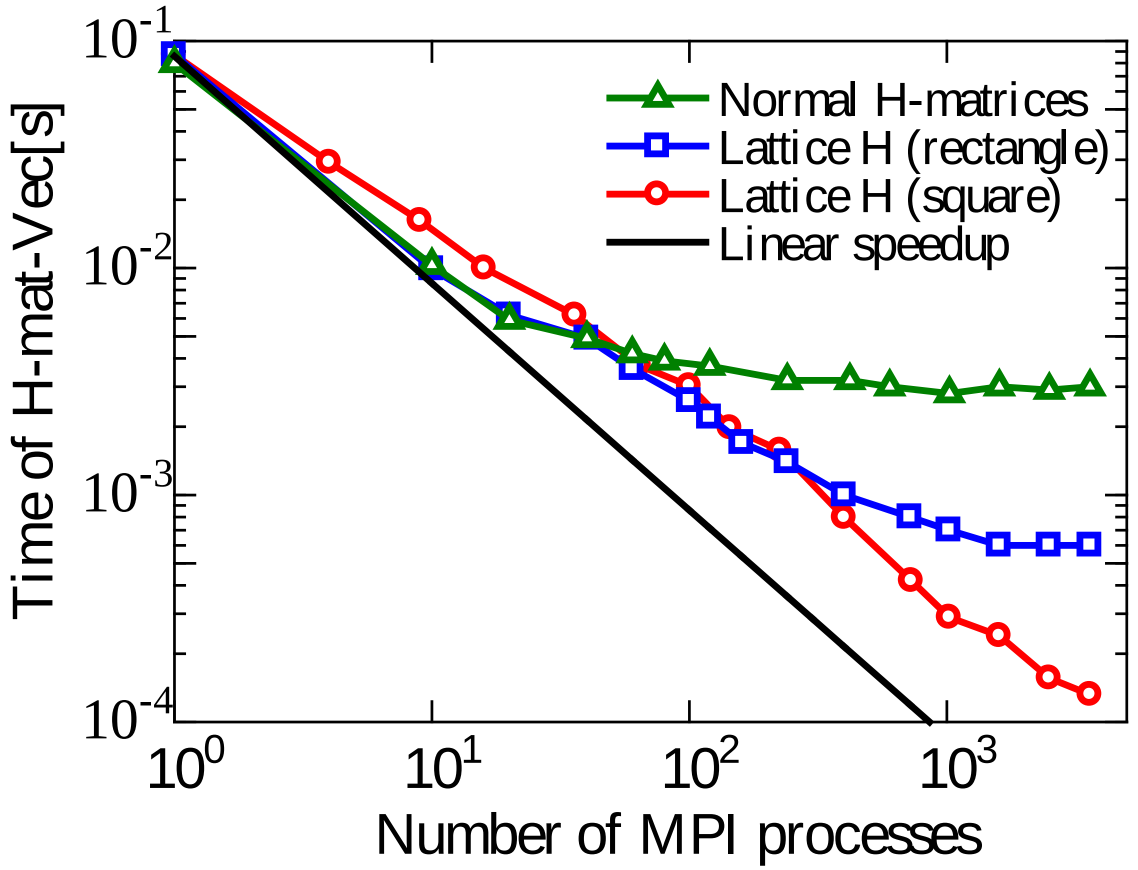
$\mathcal{H}$ACApKの適用効果

■メモリ使用量

- 密行列: $O(N^2)$
- $\mathcal{H}$ACApK: $O(N\log N)$



■並列計算性能



- 計算条件
  - ･マイクロマグネティクス計算: $N = 20{,}910$
  - ･使用計算機: Fujitsu PRIMERGY CX2550

まとめ

■科学技術計算やデータ科学計算では行列計算が多く用いられる

■行列計算でも「密」は嫌われる⇒密行列計算が必要な手法は敬遠される

- 疎行列：必要メモリ$O(N)$，行列演算 $< O(N^2)$
- 密行列：必要メモリ$O(N^2)$，行列演算 $> O(N^2)$

■低ランク構造行列法は密行列を近似し省メモリ・演算量低減を実現する

- $\mathcal{H}$行列：必要メモリ$O(N\log N)$，行列演算 $< O(N\log^2 N)$

⇒境界要素法など密行列計算が必要な手法を避ける理由がなくなる

■ $\mathcal{H}$ACApKライブラリ

- 低ランク構造行列法をスーパーコンピュータ上で使うためのライブラリ
- 現実のシミュレーションに使用され、大規模化・高速化を実現
  - ・マイクロマグネティクス計算，地震周期解析，超電導解析，機械学習（カーネル法）…

Thank you for watching