

令和 4 年 6 月 14 日現在

機関番号：12102

研究種目：若手研究

研究期間：2019～2021

課題番号：19K20280

研究課題名（和文）連続緩和型アルゴリズムによる超並列高速グラフ分割の研究

研究課題名（英文）A study of massively parallel high-performance graph partitioning using continuous relaxation-based algorithms

研究代表者

二村 保徳 (Futamura, Yasunori)

筑波大学・システム情報系・助教

研究者番号：30736210

交付決定額（研究期間全体）：（直接経費） 3,300,000円

研究成果の概要（和文）：本課題では、大規模グラフのグラフ分割問題を解くための高速な並列アルゴリズムの開発を実施してきた。本研究では離散最適化問題であるグラフ分割問題を連続緩和した問題の大域的最適化に基づく連続緩和型アルゴリズムを対象とした。特筆すべき成果として測地線距離型の射影法による高速な固有空間近似手法を開発し、標準的に用いられている並列グラフ分割ソフトウェアであるmt-Metisと同等の精度・並列性能をもつこと、同時にmt-Metisにはない再現可能な並列性をもつことを示した。成果をまとめた論文がIEEE HPEC 2021に採択され、さらにOutstanding Paper Awardを受賞した。

研究成果の学術的意義や社会的意義

グラフ分割問題は、科学技術計算における偏微分方程式求解や、ソーシャルネットワーク解析、バイオインフォマティクスなど、多様な分野で応用されている。特に高性能計算分野では、タスク割当における負荷バランスと通信コストの最適化に用いられている。新たに提案したアルゴリズムは、高性能計算分野で重点的に研究されている計算カーネルが主要部となっており、それらの高性能実装を活用することで、さらなる高速化が期待できる。近年、解析結果の再現性が重要視されているが、提案法は再現可能な並列性をもつための各種応用分野での再現性保証に資する。本研究成果が波及することにより、科学技術計算や人工知能技術の高度化に寄与する。

研究成果の概要（英文）：In this study, we have developed a fast parallel algorithm for solving graph partitioning problems for large graphs. This study targets algorithms based on global optimization of the graph partitioning problem with continuous relaxation. As a notable achievement, we developed a fast eigenspace approximation method using a geodesic distance-based projection, and showed that it has the comparable accuracy and parallel performance as mt-Metis, a standard parallel graph partitioning software, and at the same time has reproducible parallelism, which mt-Metis does not have. Our paper was accepted to IEEE HPEC 2021 and received the Outstanding Paper Award.

研究分野：高性能計算，数値線形代数，機械学習

キーワード：グラフ解析 固有値解析

1. 研究開始当初の背景

(1) グラフ分割問題

グラフ分割問題は、科学技術計算における偏微分方程式求解や、ソーシャルネットワーク解析、バイオインフォマティクスなど、多様な分野で応用されている。特に高性能計算分野では、タスク割当における負荷バランスと通信コストの最適化に用いられている。グラフ分割問題には様々な定式化があるが、本研究ではグラフ分割後の各部分グラフに含まれる頂点数を均等にしつつ、部分グラフをまたがる辺の数を最小化するグラフカット問題を対象とする。グラフカット問題は最も標準的なグラフ分割問題の一つとして知られている。

このグラフカット問題は通常、ヒューリスティックな組合せ論的アルゴリズムを用いて解かれ、そのようなアルゴリズムを実装する METIS や SCOTCH といったソフトウェアが広く用いられている。一方、近年の超並列計算環境はメニーコア CPU や GPU を搭載した大規模クラスシステムとなっており、グラフ分割が負荷バランス最適化のための前処理として用いられる場合、並列度が大きくなった際に、本来オーバーヘッドが小さいと考えられていたグラフ分割処理が、全体の計算のボトルネックとなってしまう問題が発生している。そのため、強スケールな並列グラフ分割アルゴリズムが求められている。

(2) 連続緩和型アルゴリズム

離散最適化問題であるグラフカット問題の整数制約を外し、連続(実数)緩和した手法としてグラフラプラシアン行列の固有値問題に帰着する Spectral Graph Partitioning (SGP) という手法がある。通常、頂点間の結合が疎なグラフを扱うため、グラフラプラシアン行列は零要素の多い疎行列となり、SGP の主要な計算カーネルは疎行列ベクトル積となる。疎行列ベクトル積は高性能計算分野では科学技術計算における需要から重要な計算カーネルの一つとなっており、GPU 等の最新アーキテクチャに対しても専門の研究者らや計算機ベンダーによってチューニングされている。本課題では SGP に疎行列固有値解法を用いるアルゴリズムを「連続緩和型アルゴリズム」とよぶ。課題代表者はこれまで科学技術計算で現れる超大規模な疎行列固有値問題の並列アルゴリズムに関して研究を行ってきた。

課題代表者はこれまで超大規模疎行列の線形方程式や固有値問題の並列解法の高速度・高性能化に取り組んできた。扱った行列のサイズは最大で 10 億次元に及ぶ。研究を進めていた固有値分布範囲内部の固有値を計算するアルゴリズムでは、疎行列の LU 分解が必要であり、LU 分解の過程で増大する使用メモリ量を抑えるため、前処理として行列の行と列を入れ替えるオーダリングをグラフ分割アルゴリズムに基づいて行っていた。標準的な分散並列グラフ分割ソフトウェアである ParMETIS や PT-SCOTCH を用いていたが、高並列実行においてこのグラフ分割処理がボトルネックとなり、グラフ分割アルゴリズムのいちユーザーとして、このボトルネックに困難を感じていた。そこで高速なグラフ分割を達成するため、連続緩和型アルゴリズムであるグラフラプラシアンの固有値計算に基づく Spectral Graph Partitioning の活用に着目した。

Spectral Graph Partitioning では固有値分布範囲の端付近の固有値を計算するため、計算機ベンダー等によりチューニングされる疎行列ベクトル積を主体とする解法を利用することができ、ポータビリティの高い実装が達成できると考えた。

2. 研究の目的

本研究では、グラフカット問題に対する高性能な連続緩和型の並列アルゴリズムを開発し、通常利用されている組合せ論的アルゴリズムと比較し、その性能を確かめる。普遍的な離散最適化問題であるグラフ分割問題に対し、先進的な固有値解法理論を応用することで、高速な連続緩和型アルゴリズムを開発する。最新の線形計算技術によって開発する連続緩和型アルゴリズムが、最新の並列計算機アーキテクチャの性能をどの程度引き出すことができるか、また通常利用されている組合せ論的アルゴリズムと比較し、どの程度優位な並列アルゴリズムとなり得るかが本研究課題における学術的問いである。

一方、通常用いられている組合せ論的な局所的な計算に基づくアルゴリズムは、計算順序やデータ構造が複雑であることから、並列化が容易では無い。それと比較し、連続緩和型アルゴリズムでは、疎行列ベクトル積という、単純かつチューニングされている計算カーネルが主要部となるため、専門の研究者らやベンダーによる実装を活用することで共有メモリ並列レベルでの高い実効性能の達成が期待できる。グラフ分割問題のアルゴリズムを扱う文献において連続緩和型アルゴリズムが取り上げられるとき、帰着される固有値計算が「expensive」であると述べられ敬遠される傾向があり、近年のグラフ分割高速化の研究ではあまり扱われていない。

しかし、課題代表者はこれまで大規模固有値計算手法のソフトウェアを開発し、10 億次元を超える大規模固有値問題の高速化に取り組んできた経験から、連続緩和型アルゴリズムが組合せ論的アルゴリズムより高速となる可能性が十分にあると考えた。本研究課題においては連続緩和型アルゴリズムにおいて疎行列ベクトル積が主要な計算になることに着目した点、また、さ

らに分散並列を想定し、集団通信や近接間通信削減を考慮した手法を開発するという点に独自性がある。

3. 研究の方法

SGPの高速化において重要な質の高い(Fiedlerベクトルをよく近似できる)低次元部分空間の効率的な生成手法について研究を進めた。特に実応用から現れるグラフ特有の性質の活用を重視して進めた。この低次元部分空間に対する射影法を用いることで、Fiedlerベクトル計算全体の高速化に取り組んだ。また、代数的マルチグリッド法を応用した固有値計算の収束性向上手法についての研究を進めた。

グラフ分割の連続緩和問題であるグラフラプラシアン行列の固有値問題には、最小固有値を求めるといった性質から通常、LOBPCG法[Knyazev, SIAM J. Sci Comput., 2001]が利用される。LOBPCG法ではベクトルの内積計算が毎反復において発生するため、集団通信が頻繁に必要となるという性質がある。そこで、チェビシェフ多項式といった定常型の反復計算に基づくアルゴリズムの実装を進めた。定常型反復法は、LOBPCG法のような入力に応じた非定常型の反復計算と異なり、多項式の係数が固定で与えられるため、集団通信を要するベクトルの内積計算が反復毎に発生しないというメリットがある。グラフカット問題では連続緩和問題の解が低精度であっても、元の離散最適化問題に解の精度への影響が限定的であることが経験的に知られているため、特に集団通信を要しないという点で定常型反復法はグラフカット問題に対して優れているといえる。チェビシェフ多項式を用いた定常型反復法は反復が進むと、あるところで近似解の精度向上が停滞してしまうという問題が発生する。大規模な悪条件問題では、近似解の精度が全く改善しないという状況が発生することが懸念される。そのため、LOBPCG法やランチョス法等の高精度解が得られる解法と定常型反復法を組み合わせることで、悪条件問題にも対応できるようなアルゴリズムの拡張を試みた。

深層学習等の需要により、プロセッサベンダーが単精度/半精度浮動小数点演算の性能を向上させてきている。連続緩和型アルゴリズムで解くグラフラプラシアン行列の固有値問題の解として固有ベクトルの要素の符号のみ分かればよいと、固有ベクトルの計算精度は低精度で許容できる可能性がある。このような低精度演算を活用したアルゴリズム実装を進めた。

従来のLanczos法やLOBPCG法などの疎行列向けの固有値解法は、一定の精度の固有対を求めるには高速な解法であるが、マルチレベル型のグラフ分割法のような高速なヒューリスティックと比較した場合速度が劣ることが想定される。そのような場合には、実グラフの性質を活用した、よりドラスティックに計算量を削減したアルゴリズムが必要となる。この観点で高速な部分空間生成法の開発を進めた。

開発アルゴリズムの計算の主要部である幅優先探索や疎行列ベクトル積は、高性能計算分野で特に集中的に研究が進んでいる主要計算カーネルである。これらの既存研究を活用し、その高性能実装を取り入れることで開発手法の高性能化を図った。また、幅優先探索が特に計算時間の大きな割合を占めるが、開発手法の性質上、必ずしも完全な幅優先探索を行う必要はない。そのため、解の質を維持した上で、さらに高性能となる代替手法を検討した。開発手法はエッジカット最小化を目的関数としているが、これを拡張し高性能なNested Dissectionの実装へと展開した。またSGPベースのアルゴリズムは並列実行の場合でも得られる解に再現性があり、これがマルチレベル型手法に対する優位性となっているため、この性質に基づいて精微化された再現可能実装を開発した。開発した技術に基づき、アルゴリズムの実装を完成させ、標準的に用いられているMETISやmt-Metisといったグラフ分割ソフトウェアと大規模グラフにおいて性能比較を行った。性能指標として、計算時間、カットのクオリティ、および並列性能を用いた。

4. 研究成果

従来から広く用いられているグラフ分割ソフトウェアMETISに採用されているグラフの粗視化に基づくマルチレベル型アプローチをSGPに取り入れ、実装と性能評価を進めた。マルチレベル型アプローチで重要な役割を果たす頂点マッチングによるグラフ粗視化と、Cut関数の局所的改善手法であるFiduccia and Mattheyses (FM) refinementについて調査・実装を行った。マルチレベル型アプローチではグラフ粗視化のために頂点の重みが均一でなくなるため、SPで従来採用されている通常のRatio Cut関数でなく頂点重み付きのRatio Cut関数を用いることが望ましいことに着目した。この頂点重み付きのRatio Cut関数を連続緩和することでグラフ分割問題を新たな一般化固有値問題に帰着し、粗視化グラフ階層の最下層で本一般化固有値問題を解く形式の手法を実装した。これにより、通常のRatio Cutを利用する場合に比べ、元のグラフのCut関数の値が改善するケースが複数のテスト問題で見られた。

マルチレベル型SGPをVertex Separator最小化向けのFM refinementと組み合わせ、再帰適用することで疎行列対称線形方程式に対するNested Dissectionを実装し、METISで行った場合と同等のフィルイン削減効果が得られることを実応用から現れる複数のテスト問題で確認した。しかしながら、実装した手法は計算速度がMETISに劣り、課題が残った。

また、本研究で開発を進めている固有値計算技術の応用として、グラフ上で密に結合している小規模な部分グラフを検出する手法の拡張を行った。代表者がこれまで高度化に取り組んでき

た周回積分型固有値解法を利用することで内部固有値に対応する固有ベクトルにおいても部分グラフを検出することができることを示した。

前述の課題を受け、従来のマルチレベル型手法では頂点マッチングと粗視グラフ生成の処理が並列化のボトルネックとなっていることに着目し、マルチレベルスキームに基づかない手法の開発を進めた。開発を進めた手法はグラフ描画分野で提案されているフィドラーベクトルの近似法に基づいており、高速に近似フィドラーベクトルを得ることが可能である。開発手法の計算の主要部は、幅優先探索と疎行列ベクトル積となっており、多くの実応用グラフでは特に幅優先探索の割合が大きくなる。そこで我々は幅優先探索の高性能アルゴリズムおよびその共有メモリ並列化について調査し、それらの実装および性能比較を進めた。さらに、これをもとに開発手法の共有メモリ並列プロトタイプ実装を完成させ、既存手法である METIS や mt-METIS との比較を行った。その結果、解の質および実行性能双方の観点において小～中規模の実グラフで METIS/mt-METIS と同程度の性能が得られることを確認した。また本手法は、並列実行された場合でもグラフ分割の結果に再現性があるという利点があり、この点が既存マルチレベル型手法に対する優位性である。提案手法を用いたフィドラーベクトル近似法はグラフ上の測地線距離を用いた射影法であるため、測地線距離型射影法と呼称することとした。

また、本研究における相乗的成果として周回積分型固有値解法の高度化と周回積分型手法による部分空間を用いた次元削減法の並列化に関する査読付き論文が 2 報採択された。

さらにその後、測地線距離型射影法の高度実装に取り組み大規模な実グラフにおいて METIS/mt-METIS と比較し、同等の性能が得られること、また再現性のある並列化となっていることを実験的に示した。この成果をまとめた論文が MIT リンカーン研究所が主催する IEEE High Performance Extreme Computing (HPEC)2021 に採択され、さらに Outstanding Paper Award を受賞した。さらに派生的な成果として、グラフラプシアン概念に基づく新たな次元削減を開発したマテリアルズインフォマティクス研究の Physical Review B 採択論文への貢献、周回積分型大規模固有値解法の反復修正技法の高度化を実施した Numerical Linear Algebra with Applications 採択論文への貢献が挙げられる。今後は本課題代表者が同じく代表を務める基盤研究(C)「スペクトラルアルゴリズムによる再現性を指向した高性能並列グラフ解析手法の開発」において本課題で得られた成果をさらに発展させていく。

5. 主な発表論文等

〔雑誌論文〕 計6件（うち査読付論文 6件/うち国際共著 1件/うちオープンアクセス 2件）

1. 著者名 Futamura Yasunori, Wakaki Ryota, Sakurai Tetsuya	4. 巻 proceedings
2. 論文標題 Spectral Graph Partitioning Using Geodesic Distance-based Projection	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 2021 IEEE High Performance Extreme Computing Conference (HPEC)	6. 最初と最後の頁 1-7
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1109/hpec49654.2021.9622831	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -
1. 著者名 Huber Sarah, Futamura Yasunori, Galgon Martin, Imakura Akira, Lang Bruno, Sakurai Tetsuya	4. 巻 online first
2. 論文標題 Flexible subspace iteration with moments for an effective contour integration based eigensolver	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 Numerical Linear Algebra with Applications	6. 最初と最後の頁 1-14
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1002/nla.2447	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 該当する
1. 著者名 Tamura Ryo, Matsuda Momo, Lin Jianbo, Futamura Yasunori, Sakurai Tetsuya, Miyazaki Tsuyoshi	4. 巻 105
2. 論文標題 Structural analysis based on unsupervised learning: Search for a characteristic low-dimensional space by local structures in atomistic simulations	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 Physical Review B	6. 最初と最後の頁 1-18
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1103/PhysRevB.105.075107	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -
1. 著者名 Futamura Yasunori, Sakurai Tetsuya	4. 巻 該当なし
2. 論文標題 Efficient Contour Integral-based Eigenvalue Computation Using an Iterative Linear Solver with Shift-Invert Preconditioning	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 HPC Asia 2021: The International Conference on High Performance Computing in Asia-Pacific Region	6. 最初と最後の頁 90-99
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1145/3432261.3432269	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている（また、その予定である）	国際共著 -

1. 著者名 Yano Takahiro, Futamura Yasunori, Imakura Akira, Sakurai Tetsuya	4. 巻 該当なし
2. 論文標題 Efficient Implementation of a Dimensionality Reduction Method Using a Complex Moment-Based Subspace	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 HPC Asia 2021: The International Conference on High Performance Computing in Asia-Pacific Region	6. 最初と最後の頁 83-89
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1145/3432261.3432267	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 -

1. 著者名 Yasunori Futamura, Xiucai Ye, Akira Imakura, Tetsuya Sakurai	4. 巻 6
2. 論文標題 Spectral anomaly detection in large graphs using a complex moment-based eigenvalue solver	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 ASCE-ASME Journal of Risk and Uncertainty in Engineering Systems, Part A: Civil Engineering	6. 最初と最後の頁 4020010
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1061/AJRUA6.0001054	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

〔学会発表〕 計6件 (うち招待講演 0件 / うち国際学会 5件)

1. 発表者名 Futamura Yasunori, Wakaki Ryota, Sakurai Tetsuya
2. 発表標題 Spectral Graph Partitioning Using Geodesic Distance-based Projection
3. 学会等名 2021 IEEE High Performance Extreme Computing Conference (HPEC) (国際学会)
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 Futamura Yasunori, Sakurai Tetsuya
2. 発表標題 Efficient Contour Integral-based Eigenvalue Computation Using an Iterative Linear Solver with Shift-Invert Preconditioning
3. 学会等名 HPC Asia 2021: The International Conference on High Performance Computing in Asia-Pacific Region (国際学会)
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 Yano Takahiro、Futamura Yasunori、Imakura Akira、Sakurai Tetsuya
2. 発表標題 Efficient Implementation of a Dimensionality Reduction Method Using a Complex Moment-Based Subspace
3. 学会等名 HPC Asia 2021: The International Conference on High Performance Computing in Asia-Pacific Region (国際学会)
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 Futamura Yasunori、Sakurai Tetsuya
2. 発表標題 Parallel Contour Integral-Based Eigenvalue Computation using a Block Krylov Linear Solver with Shift-Invert Preconditioning
3. 学会等名 SIAM Conference on Computational Science and Engineering (CSE21) (国際学会)
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 二村保徳, 櫻井鉄也, 畠澤作二郎
2. 発表標題 構造解析向け超並列固有値ソルバの大規模実応用モデルにおける性能評価
3. 学会等名 日本応用数理学会2019年度年会
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 Yasunori Futamura, Tetsuya Sakurai
2. 発表標題 Spectral nested dissection for large-scale sparse matrix factorization
3. 学会等名 2019 Mini-Workshop on Computational Science (国際学会)
4. 発表年 2019年

〔図書〕 計0件

〔産業財産権〕

〔その他〕

-

6. 研究組織

	氏名 (ローマ字氏名) (研究者番号)	所属研究機関・部局・職 (機関番号)	備考
研究協力者	櫻井 鉄也 (Sakurai Tetsuya)	筑波大学・システム情報系・教授 (12102)	
研究協力者	今倉 暁 (Imakura Akira)	筑波大学・システム情報系・准教授 (12102)	
研究協力者	叶 秀彩 (Ye Xiucan)	筑波大学・システム情報系・助教 (12102)	

7. 科研費を使用して開催した国際研究集会

〔国際研究集会〕 計0件

8. 本研究に関連して実施した国際共同研究の実施状況

共同研究相手国	相手方研究機関
---------	---------