

科学研究費助成事業（科学研究費補助金）研究成果報告書

平成 24 年 5 月 18 日現在

機関番号：14301

研究種目：基盤研究（A）

研究期間：2008 年度～2011 年度

課題番号：20246027

研究課題名（和文） マルチコアプロセッサに対応した革新的特異値分解ライブラリの開発

研究課題名（英文） Development of Innovative Library for Singular Value Decomposition Suited to Multi-Core Processors.

研究代表者：中村 佳正（NAKAMURA YOSHIMASA）

京都大学・情報学研究科・教授

研究者番号：50172458

研究成果の概要（和文）：

マルチコア計算機環境における並列計算において、1) 上 2 重対角行列の特異値計算のための一般化 Newton シフトに基づく mdLVs アルゴリズムのシフト戦略の完成、2) compact WY 表現を用いた Householder 変換による特異ベクトル再直交化部の高速化、3) 与えられた密行列から上 2 重対角行列への前処理部の高速化、4) I-SVD および D&C 等の特異値分解アルゴリズムの GPGPU 上の倍精度計算に関する性能・精度評価、5) 可積分アルゴリズムの適用範囲を 2 重対角行列から帯行列の固有値・特異値計算に広げる等も進展があった。これらの成果について、精力的に国際会議・学会発表、論文発表するとともに、成果 1)-4) によってさらに高速化された I-SVD 法の実装コード DBDSL V のウェブページ公開を行った。

研究成果の概要（英文）：

This project obtains the following fruits in parallel computations with multi-core CPU environments. 1) A shift strategy based on the generalized Newton shift is completed for computing bidiagonal singular values by the mdLVs. 2) A speed up is established in reorthogonalization of singular vectors by using the Householder transformation with the compact WY representation. 3) A speed up of preconditioning process from given dense matrix to bidiagonal is performed. 4) Evaluation both of performance and accuracy of some singular value decomposition algorithms including I-SVD and D&C in double precision computation in GPGPU are discussed. 5) New integrable algorithms for computing eigenvalues and singular values of some class of band matrices are designed. The resulting code DBDSL V of the fast I-SVD algorithm in terms of 1)-4) can be downloaded in the web page as well as many presentations have been given in international workshops and annual meetings and many research papers have been published.

交付決定額

（金額単位：円）

	直接経費	間接経費	合計
2008 年度	8,600,000	2,580,000	11,180,000
2009 年度	8,700,000	2,610,000	11,310,000
2010 年度	6,900,000	2,070,000	8,970,000
2011 年度	5,700,000	1,710,000	7,410,000
総計	29,900,000	8,970,000	38,870,000

研究分野：工学

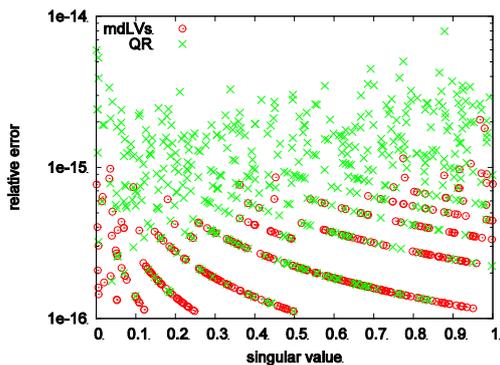
科研費の分科・細目：応用物理学・工学基礎，工学基礎

キーワード：数理工学（数理的解析・計画・設計・最適化），特異値分解

1. 研究開始当初の背景

研究代表者等は、平成13年以降平成19年までに、離散可積分系と直交多項式論という従来にはない数学的基礎をもつ2重対角行列の特異値計算アルゴリズム mdLVs (modified discrete LV algorithm with shift), および、2重対角特異値分解アルゴリズム I-SVD (Integrable SVD)を開発してきた。

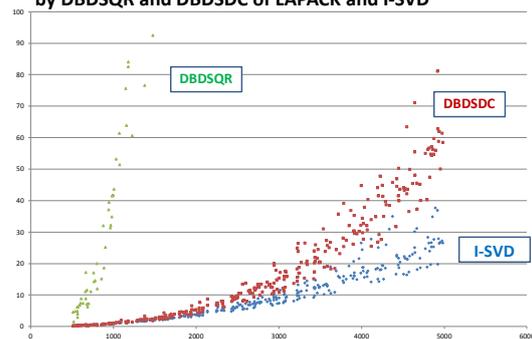
dLVs アルゴリズムの漸化式において見かけは減算があるが、原点シフト項を最小特異値よりも小さく取れば全ての変数の正值性が保たれ、mdLVs アルゴリズムは非常に高い相対精度で必ず2重対角行列の特異値に安定に収束する。この結果、国際標準の線形数値計算ライブラリである LAPACK 3.0 の DBDSQR コード (Demmel-Kahan QR 法, 1992年 SIAM SIAG/LA 賞) と比較して、1000次ランダム行列の特異値計算では、実行速度は DBDSQR の0.15倍程度であり、相対誤差の総和は DBDSQR の0.3倍程度と高精度で、全ての特異値が真値からマシンプレシジョンの数倍程度に収まる。



I-SVD アルゴリズムでは、まず、mdLVs によって特異値計算を実行し、続いて3重対角対称行列の2度の Cholesky 分解と dLV 型ツイスト分解を行うことで特異ベクトルを個別に計算する。特異値が真値に近い程、直交性のよい特異ベクトル計算が可能となり

mdLVs の高精度性が効いてくる。I-SVD は LAPACK 3.0 の特異値分解コードである DBDSQR, DBDSDC (分割統治法, 1997年 SIAM SIAG/LA 賞) を特異ベクトルの精度で上回っている。並列化や特異ベクトルの選択的計算も容易である。N次2重対角行列の特異値分解法として、I-SVD の全計算量は常に $O(N^2)$ である。これは DBDSQR の $O(N^3)$, DBDSDC の $O(N^2) \sim O(N^3)$ と比べ際立って高速である。与えられた長方形の Householder 法による2重対角化の前処理や逆変換の計算量を加えても、I-SVD のトータルでの十分な高速性と良好なスケラビリティが確認されている。

Execution time (sec.) for Toeplitz bidiagonal SVD by DBDSQR and DBDSDC of LAPACK and I-SVD



2. 研究の目的

本研究では、今後主流になるといわれるマルチコアプロセッサやGPGPUの計算機環境において、以下の3点を主な研究目的とする。

特異値計算のシフト戦略：特異値計算アルゴリズムmdLVs研究の残された課題として以下の性質を証明する。すなわち、近接特異値や重複特異値があっても任意パラメータを単調増加な正数に選ぶことで漸近安定性が成り立ち、mdLVsは必ず収束する。また、従来型mdLVsコードでは最小特異値のJohnson下界を用いて原点シフト量を計算しているが、一度の計算に2回の平方根計算を必要とするためシフト量計算が全計算の約40%を占めていた。木村が発見した局所性の優れた平方根

を必要としないシフト計算法の完成が mdLVsに残された重要な課題である。

前処理部と再直交化部の高速化： I-SVD は $O(N^2)$ の計算量の2重対角行列の高速特異値分解法である。I-SVDが開発された結果、Householder法による2重対角化前処理の計算量 $8N^3/3$ が支配的となってしまった。前処理部の高速化は大きな課題である。ブロック Householder法による帯行列化と村田法による2重対角化を導入することで、計算量は減らないものの、レベル3 BLASによる行列演算の高速化の結果、実計算時間の短縮が可能となる。同様に $O(K^3)$ の計算量が必要な特異ベクトルの再直交化のレベル3 BLASによる高速化もまた重要な課題である。ここに、 K は近接する特異値の個数である。

3. 研究の方法

BLAS が使える計算機環境向けの高速な前処理部と逆変換部をもつ特異値分解コードを開発する。これはブロック Householder 法による帯行列化部分、村田法による 2 重対角化部分、2 重対角行列の特異ベクトルからもとの密行列の特異ベクトルへの逆変換部分に登場する行列乗算の BLAS とレベル3のキャッシュ利用による高速化である。

マルチコアプロセッサ上での特異ベクトルの再直交化の高速化研究を開始する。これまでI-SVD法では、クラスタを成す近接特異値について特異ベクトルの直交性が悪化しがちであった。この場合は逆反復法による再直交化を行っていたが大きなクラスタがある場合は全体の計算時間の増加を招いていた。従来の再直交化を伴う逆反復法が並列化粒度の低いアルゴリズムとなっていたのは、再直交化アルゴリズムに修正Gram-Schmidt法を採用していたことに原因がある。ベクトル演算よりも行列-ベクトル演算の方が並列化粒度が高いことから、ベクトル演算中心である修正

Gram-Schmidt法の代わりに、行列-ベクトル演算を中心とするアルゴリズムを実装することが考えられる。本研究では、世界に先駆けてマルチコア上での高速固有値・特異値分解を実現する。

4. 研究成果

平成 20 年度：

従来の 2 重対角化アルゴリズムでは、与えられた行列に対して両側から Householder 変換を繰り返し作用させることで 2 重対角化を行う。計算量のほとんどを行列とベクトルの積、および行列の rank-1 更新と呼ばれる演算が占める。しかし、これらの演算ではデータの再利用性がなく、キャッシュメモリが有効に利用できない。このため、メモリからのデータ転送速度がボトルネックとなり、プロセッサの演算性能が十分発揮できない。これを改善する手法として、本研究では、Bischof により提案された 2 段階型の 2 重対角化アルゴリズムに着目した。この算法では、与えられた行列をまず帯幅 L の下三角帯行列に変換し、次にこれを 2 重対角行列に変換する。同様に逆変換も 2 段階で行う。逆変換の演算量が 2 倍になる代わりに、前処理、後処理の演算のほとんどがキャッシュ利用効率の高い行列乗算で実行できる。この算法は、演算量が大幅に増加することから、従来はあまり使われてこなかったが、本研究では、マルチコアプロセッサにおいてはメモリボトルネック解消の効果のほうが演算量増加のデメリットよりも大きいと考え、本算法をマルチコア向けに実装した。実装に当たっては、2 重対角行列から下三角帯行列への変換も OpenMP を用いて並列化するなど、全体に渡って最適化を行い、アルゴリズムの性能が最大限に引き出せるよう注意を払う。この結果、従来法では前処理がネックとなり、8 プロセッサでもほとんど加速が得られないが、この

プログラムでは約4倍の加速が得られることがわかった。この結果、マルチコアプロセッサの性能を引き出すことができた。

平成21年度：

バイナリーコードでの DBDSL_V のウェブ公開を行った。さらに、BLAS(Basic Linear Algebra Subprograms)によるCPU上での高速行列乗算を利用した上2重対角行列への前処理部と元の密行列の特異ベクトルへの逆変換部の高速化を行った。前処理部ではブロック Householder 法の下で BLAS を活用するが、この適切なブロックサイズを見いだすための自動チューニング機構を導入した。

平成22年度：

マルチコアプロセッサを用いた密正方形行列の高速な特異値分解のために、マルチコアプロセッサ環境に有利な Bischof のアルゴリズムと村田法による前処理及び後処理と並列 I-SVD 法を組み合わせる方法を開発した。この手法では、村田法の逆変換の処理の一部を並列 I-SVD 法において待機状態のコアで実行させる。これによってコアの稼働率が向上し、密正方形行列の特異値分解の計算時間が短縮され、並列 I-SVD 法と行列作成に必要な合計計算時間を短縮できることが数値実験によって確認された。

特異値分解アルゴリズムの性能を調べるには条件数の極端に大きなテスト行列が必要である。そこで、このようなテスト行列の作成法を提案するとともに、そのテスト行列を用いた LAPACK ルーチンの性能評価を行った。

平成23年度：

マルチコアプロセッサに向けた前処理の高速化として、研究分担者山本有作のグループでは、正方形行列特異値分解は、行列の2重対角化に Bischof のアルゴリズムを用いることにより、計算の大部分を Level-3 BLAS によって行うことができることに基づき、このアルゴリズムの GPGPU 向けの倍精度実

装の性能および精度の評価結果を行った。この結果、マルチコア CPU とのハイブリッド環境において、分割統治法 DBDSL_V コード (LAPACK) を上回る高速性が確認された。

特異値計算における新たな原点シフト戦略の実装を行った。一般化 Newton 下界計算法に基づく Laguerre シフト等と新しいアーキテクチャのもとで高速な平方根計算に基づく Gershgorin シフトのハイブリッド型原点シフト戦略が既存の戦略よりも優れていることを確認するため、まずは、アグレッシブシフトが dqds 法に実装されている DLASQ コード(LAPACK)と新シフト戦略を実装した dqds 法の両者を比較し、大規模ランダム行列を含む多くの行列について新シフト戦略の高速優位性を確認した。この研究が完成したのが平成24年3月であったため、新シフト戦略の mdLVs 法への実装と改良された I-SVD 法の実装コード公開は今後の課題である。

特異ベクトルの高速再直交化の実装では、計画に沿って compact WY 表現を用いた Householder 法と BLAS と並列計算による高速再直交化を特異値分解コード DBDSL_V の特異ベクトル計算部に実装し、特異ベクトル計算の高速化を実現して論文投稿を行った。再録決定後にライブラリ公開する予定せる。

Wu による密行列の帯行列化手法の実装と帯行列の特異値分解の基礎的研究を行った。帯行列の特異値分解の研究では、二分法を帯行列に拡張し BLAS を用いた高速化に成功した。また、3重対角行列において compact-WY 表現を用いた逆反復法の高速化に成功し、同じアイデアを帯行列にも適用すれば逆反復法が高速化されることを確認した。

全研究期間を通じて毎年秋に計算数学研究会を開催して本科研費による共同研究を

推進した。

5. 主な発表論文等

(研究代表者, 研究分担者及び連携研究者には下線)

◆査読付き学術雑誌論文

- [1] Takumi Yamashita, Kinji Kimura, and Yoshimasa Nakamura, Subtraction-free recurrence relations for lower bounds of the minimal singular value of an upper bidiagonal matrix J. Math-for-Industry, Vol.4(2012), 55-71.
- [2] Masashi Iwasaki and Yoshimasa Nakamura, Positivity of dLV and mdLVs algorithms for computing singular values, Elect. Trans. Numer. Anal. Vol.38(2011), 184-201.
- [3] Kinji Kimura, Takumi Yamashita and Yoshimasa Nakamura, Conserved quantities of the discrete finite Toda equation and lower bounds of the minimal singular value of upper bidiagonal matrices, J. Phys. A: Math. Theor. Vol. 44(2011), 285207(12pp).
- [4] Hiroki Toyokawa, Kinji Kimura, Yusaku Yamamoto, Masami Takata, Akira Ajisaka, Yoshimasa Nakamura, On auto-tuned pre/postprocessing for the singular value decomposition of dense square matrices, 情報処理学会論文誌コンピューティングシステム(ACS), Vol.4, No.3(2011), 9-21.
- [5] Takafumi Miyata, Yusaku Yamamoto, Takashi Uneyama, Yoshimasa Nakamura and Shao-Liang Zhang, Optimization of the multishift QR algorithm with coprocessors for non-Hermitian eigenvalue problems, East Asian J. Appl. Math., Vol.1, No. 2 (2011), 187-196.
- [6] Tan Wang, Masashi Iwasaki

and Yoshimasa Nakamura, On condition numbers in the cyclic reduction processes of a tridiagonal matrix, Intern. J. of Computer Math. Vol.87(2010), 3079-3093.

[7] 豊川博己, 山本有作, 木村欣司, 高田雅美, 中村佳正, 密正方形行列特異値分解における並列I-SVD法の特性を用いた後処理の高速化, 情報処理学会論文誌コンピューティングシステム(ACS), Vol.3, No.2, (2010), 30-38.

[8] 高田雅美, 木村欣司, 中村佳正, 特異値分解アルゴリズムの性能評価のための2重対角テスト行列生成アルゴリズム, 情報処理学会研究報告MPS, 数理モデル化と問題解決研究報告, 2010-MPS-79(1), 1-6.

[9] Hiroki Toyokawa, Kinji Kimura, Masami Takata and Yoshimasa Nakamura, On parallelism of the I-SVD algorithm with multi-core processor, JSIAM Lett. Vol.1, (2009), 48-51.

[10] Taro Konda and Yoshimasa Nakamura, A new algorithm for singular value decomposition and its parallelization, Parallel Computing, Vol.35, (2009), 331-344.

◆査読付き国際会議会議録論文

[11] Masami Takata, Takumi Yamashita, Akira Ajisaka, Kinji Kimura and Yoshimasa Nakamura, An improved shift strategy for the modified discrete Lotka-Volterra with shift algorithm, in: Proceedings of The 2011 International Conference on Parallel and Distributed Processing Techniques and Applications (PDPTA2011), H. R. Arabnia ed., Vol. II, 2011, pp.720-726.

[12] Hiroyuki Ishigami, Kinji Kimura and Yoshimasa Nakamura, Implementation and performance evaluation of new inverse iteration

algorithm with Householder transformation in terms of the compact WY representation, in: Proceedings of The 2011 International Conference on Parallel and Distributed Processing Techniques and Applications (PDPTA2011), H. R. Arabnia ed., Vol. II, 2011, pp.775-780.

[13] Masami Takata, Kinji Kimura and Yoshimasa Nakamura, Generating algorithms for matrices with large condition number to evaluate singular value decomposition, in: Proceedings of The 2010 International Conference on Parallel and Distributed Processing Techniques and Applications (PDPTA2010), Vol. II, 2010, pp. 619-625.

[14] Hiroki Toyokawa, Kinji Kimura, Masami Takata and Yoshimasa Nakamura, On parallelization of the I-SVD algorithm and its evaluation for clustered singular values, in: Proceedings of The 2009 International Conference on Parallel and Distributed Processing Techniques and Applications (PDPTA2009), Vol. II, 2009, pp.711-717.

[15] Masami Takata, Kinji Kimura and Yoshimasa Nakamura, Speed-up in mdLVs by limitation in computational number of shift, in: Proceedings of The 2009 International Conference on Parallel and Distributed Processing Techniques and Applications (PDPTA2009), Vol. II, 2009, pp. 704-710.

[雑誌論文・国際会議論文] 計 29 件)

[学会発表] (計 73 件)

[図書] (計 0 件)

[産業財産権]

○出願状況 (計 0 件)

○取得状況 (計 0 件)

[その他]

◆ソフトウェアの公開

[1] 倍精度2重対角行列特異値分解ルーチン DBDSL2010の公開

<http://www-is.amp.i.kyoto-u.ac.jp/svd/index.html>

[2] 倍精度2重対角行列シフト付き用特異値計算ルーチンDLVS2010の公開

<http://www-is.amp.i.kyoto-u.ac.jp/svd/index.html>

6. 研究組織

(1)研究代表者

中村佳正 (NAKAMURA YOSHIMASA)
京都大学・大学院情報学研究科・教授
研究者番号：50172458

(2)研究分担者

辻本 諭 (TSUJIMOTO SATOSHI)

京都大学・大学院情報学研究科・准教授
研究者番号：60287977

木村 欣司 (KIMURA KINJI)

京都大学・大学院情報学研究科・特定准教授
研究者番号：10447899

山本 有作 (YAMAMOTO YUSAKU)

神戸大学・大学院システム情報学研究科・教授
研究者番号：20362288

岩崎 雅史 (IWASAKI MASASHI)

京都府立大学・大学院生命環境科学研究科・准教授
研究者番号：30397575

高田 雅美 (TAKATA MASAMI)

奈良女子大学・大学院人間文化研究科・助教
研究者番号：20397574