Level-3 BLAS に基づく固有値解法のマルチコアプロセッサ上での性能

Performance of a BLAS3-Based Eigensolver on Multicore Processors

山本有作，廣田悠輔

Yusaku Yamamoto and Yusuke Hirota

神戸大学 大学院システム情報学研究科 計算科学専攻

Department of Computational Science, Kobe University, Kobe, 657-8501

実対称，あるいは複素エルミートの密行列の固有値計算は，計算物質科学で多用される重要な線形計算である。最近ではマルチコアプロセッサが普及してきており，マルチコアプロセッサ上での固有値計算の高速化は重要な課題である。しかし，LAPACK などで使われている標準的な固有値計算アルゴリズムは，マルチコアプロセッサの性能を十分に引き出せないことが知られている。その理由は，前処理である 3 重対角化部分において，演算の半分が行列ベクトル積であり，この部分のキャッシュ利用効率が低いために，メモリバンド幅ネックによって演算器が十分に稼動できないからである。

これに対して，Bischof らにより提案された Level-3 BLAS に基づく 3 重対角化アルゴリズムがある[1]。このアルゴリズムでは，入力の密行列をまず適当な帯幅の帯行列に変換し，次にその帯行列を 3 重対角行列に変換するという 2 段階の手順を踏む。このうち，第 1 のステップが 3 重対角化の演算量のほとんどを占めるが，この部分はすべて Level-3 BLAS，すなわち行列乗算を用いて実行できる。一方，第 2 のステップは行列ベクトル積が必要であるが，その演算量は第 1 のステップに比べてずっと小さい。Level-3 BLAS はキャッシュ利用効率が高いため，このアルゴリズムはメモリバンド幅ネックの影響を受けにくく，3 重対角化を高速に計算できる。ただし，3 重対角化が 2 段階になることに対応して，固有ベクトルの逆変換の部分も 2 段階となり，この部分の演算量が倍増する。そのため，この手法は，必要な固有ベクトルの本数が少ない場合のみしか有効でなく，全対角化には不向きであると考えられてきた。

しかし，コア数が増えるにつれ，メモリバンド幅ネックの影響はより大きくなるため，コア数がある程度多ければ，Level-3 BLAS を使えるという利点が演算量増加という欠点を上回り，全対角化においても Bischof のアルゴリズムが有効になるのではないかと考えられる。我々は Bischof のアルゴリズムをマルチコアプロセッサ向けに実装し，改良を加えることにより，8 コア以上ではこれが LAPACK に比べて性能面で優位に立つことを確認した。また，固有値計算と深い関係を持つ特異値分解に対して Level-3 BLAS 型のアルゴリズムを GPU 上で実装し，高い性能を達成できることを示した[2][3]。

[1] C. Bischof , B. Lang and X. Sun, “A Framework for Symmetric Band Reduction”, ACM Transactions on Mathematical Software, Vol. 26, No. 4, pp. 581–601 (2000).

[2] H. Toyokawa, K. Kimura, Y. Yamamoto, M. Takata, A. Ajisaka and Y. Nakamura, “On Auto-tuned Pre/postprocessing for the Singular Value Decomposition of Dense Square Matrices”, IPSJ Transactions on Advanced Computer Systems (ACS), Vol. 4, No. 3, pp. 9-21 (2011).

[3] 深谷猛，山本有作，畝山多加志，中村佳正: “正方行列向け特異値分解の CUDA による高速化”，情報処理学会論文誌 ACS, Vol. 2, No. 2, pp. 98-109 (2009).