

## 大域的通信回数を削減した共役勾配法

### Conjugate gradient method with reduced number of global communication

須田礼仁, 李聡

Reiji Suda, Cong Li

東京大学情報理工学系研究科コンピュータ科学専攻

Department of Computer Science, The University of Tokyo, Hongo, Tokyo 113-8656

スーパーコンピュータのコア数は増加の一途をたどり、すでに百万コアを超えるシステムが複数存在する。このような極超大規模並列システムに向けて強スケーリング方式（仕事を分割することで所要時間を短縮させる）で並列処理を行うと、プロセッサあたりの仕事量が非常に小さくなり、通信コストが相対的に大きくなる。このため、今後は通信コストをいかに削減するかが従来にも増して重大な問題となると見込まれ、通信の回数や通信量を最小化するアルゴリズムの研究が盛んになってきている。

我々は共役勾配法の通信回数削減について研究している。古典的な共役勾配法は 1 反復に 2 回の内積計算を必要とする。内積以外にも行列・ベクトル積において通信が必要となるが、スーパーコンピュータで解かれる多くの問題では行列・ベクトル積が局所的通信だけで実現できるのに対し、内積は計算に参加する全プロセッサが通信に関与しなければならない。このため、強スケーリング方式で共役勾配法の大規模並列化をすると、内積の所要時間が全体の半分を超える事例が報告されている。

共役勾配法はクリロフ部分空間を用いて解を構成する。古典的な共役勾配法ではクリロフ部分空間を 1 次元ずつ拡大して解を構成するが、一度に  $k$  次元クリロフ部分空間を拡大することにより、内積の回数を「 $k$  反復あたり 2 回」に減らすことができる。これは数学的には容易だが、計算機上では丸め誤差の影響を慎重に排除しなければ実用にならない。現在のところ、クリロフ部分空間を拡大するのにチェビシェフ多項式を用いることで、ある程度丸め誤差に強いアルゴリズム（チェビシェフ基底共役勾配法）が構成できることがわかっている[1]。また、チェビシェフ基底を用いた実装には複数種類あるが、我々が試した中では、ブロック共役勾配法風のアルゴリズムが丸め誤差に強い。

内積の回数を減らすもう一つの工夫がブロック共役勾配法[2]である。ブロック共役勾配法は係数行列を同じくする  $m$  本の方程式を一度に解くことができるアルゴリズムであるが、反復回数が最良の場合もとの  $1/m$  になる。実際には  $1/m$  まで削減されないことが多いが、反復回数が減れば内積の回数も削減できたことになる。ブロック共役勾配法はチェビシェフ基底共役勾配法よりもやや計算量が少ないが、通信回数の削減量を事前に見積もることが容易でないという問題がある。

チェビシェフ基底とブロック共役勾配法は組み合わせることも可能である。両者を組み合わせることにより、最大で内積の回数をもとの  $1/mk$  に削減することができる。所望の内積回数削減率があるときに、 $m$  と  $k$  の最適な選び方は今後の課題である。

[1] M. Hoemmen, "Communication-Avoiding Krylov Subspace Methods", PhD dissertation, University of California, Berkeley (2010).

[2] D. P. O'Leary, "The Block Conjugate Gradient Algorithm and Related Methods", Linear Algebra and Its Applications, Vol. 29, pp. 293-322 (1980).