

論文の内容の要旨

論文題目	高性能計算機に適したヤコビSVD手法の実装技術と性能解析
学位申請者	工藤周平

行列の特異値分解 (Singular Value Decomposition; SVD) は、統計計算、情報圧縮、情報検索、逆問題など科学技術計算の様々な分野で用いられる重要な線形計算である。近年では問題の大規模化に伴い、並列計算機に適した特異値分解アルゴリズムが重要となっている。また、振動学などの分野をはじめとして、極めて微小な特異値をも小さい相対誤差で計算できる高精度計算手法への需要が高まっている。特異値分解のためのヤコビ法は、これらの要求に応える潜在能力を持つ優れたアルゴリズムであるが、大規模並列計算機向けの実装最適化手法に関しては十分な検討がなされておらず、また、最適化に伴うアルゴリズム変更が精度に与える影響についても、検証が行われていなかった。

そこで本研究では、ヤコビ法的一种であるブロックヤコビ法について、大規模並列計算機向けの実用化を目的とし、次の3つの側面から研究を行った。第一に、大規模並列計算機に適した実装最適化手法を提案し、数千コア規模の並列計算機で性能評価を行った。これにより、ブロックヤコビ法が従来使われてきた2重対角化に基づく手法に対して性能優位性を持ちうる解法であることを明らかにした。第二に、プロセッサ間通信を削減して高性能化を図った改良版アルゴリズムについて、理論誤差解析と実験による精度評価を行い、同改良が相対誤差の意味での高精度性に影響を与えないことを示した。第三に、今後の高性能計算機の主流になると予想されるメニーコアプロセッサ上でブロックヤコビ法を効率的に実装するための基礎検討を行った。

以下、本論文の内容を章ごとに要約する。

第1章は緒論であり、本研究の目的を明らかにし、研究の成果を要約するとともに、本論文の構成を述べる。

第2章では、本研究の背景として、最近の高性能計算のトレンド、特異値分解とその応用、特異値分解の誤差、特異値分解に対する各種の計算アルゴリズムについて述べる。

第3章では、本研究の基盤となる片側ヤコビ法による特異値分解手法について、既存研究のサーベイを行う。片側ヤコビ法では、行列の列ペアの直交化と呼ばれる操作が計算の中心となり、直交化すべき列ペアの選び方が収束性に大きな影響を与える。本章では、これまでに提案された各種の列ペアの選び方を調査し、収束性・並列性の違いについて議論している。また、ヤコビ法の高性能計算向け改良版であるブロックヤコビ法について述べるとともに、収束加速のために提案された前処理技法についても紹介する。

第4章では、本研究の成果のうち、ブロックヤコビ法の理論誤差解析と実験による精度評価について述べる。前述の通り、ブロックヤコビ法はヤコビ法の高性能計算向け改良版であるが、その改良が計算の安定性と計算精度に及ぼす影響について、これまでは十分な研究が行われてこなかった。本章では、ブロックヤコビ法における直交化の実装方法の一種であるHariのV2手法について理論誤差解析を行い、その数値的安定性を示す。また、数値実験により、同手法を用いたブロックヤコビ法が十分な精度を持つことを確認する。

第5章では、本研究の成果のうち、大規模分散メモリ型並列計算機に適したブロックヤコビ法の実装最適化手法について述べる。特に、2次元データ分割に基づく並列化手法の詳細を提案し、超並列計算機上「京」の1万ノードを用いて性能評価を行い、従来の2重対角化法を用いたライブラリScaLAPACKに比べて速度面での優位性があることを示す。

第6章では、将来のスーパーコンピュータで主流になると予想されるメニーコア型プロセッサ向けに、ブロックヤコビ法の実装の基礎検討を行う。特に、ブロックヤコビ法の核心部分である直交化で用いられる対称行列乗算を取り上げ、それをメニーコア型プロセッサ上で効率的に並列化する手法として、3次元動的分割法を提案する。また、同手法をインテル社のメニーコア型プロセッサであるXeon Phi上で実装し、同社のライブラリに比べ2倍の性能が得られることを示す。

第7章はまとめであり、本研究の成果の要約と今後の課題を述べる。

論文審査の結果の要旨

学位申請者氏名	工藤 周平
審査委員主査	山本 有作
委員	山本 野人
委員	緒方 秀教
委員	成見 哲
委員	山崎 匡
委員	横川 三津夫
委員	

行列の特異値分解 (Singular Value Decomposition; SVD) は、統計計算、情報圧縮、情報検索、逆問題など科学技術計算の様々な分野で用いられる重要な線形計算である。近年では問題の大規模化に伴い、並列計算機に適した特異値分解アルゴリズムが重要となっている。また、振動学などの分野をはじめとして、極めて微小な特異値をも小さい相対誤差で計算できる高精度計算手法への需要が高まっている。特異値分解のためのヤコビ法は、これらの要求に応える潜在能力を持つ優れたアルゴリズムであるが、大規模並列計算機向けの実装最適化手法に関しては十分な検討がなされておらず、また、最適化に伴うアルゴリズム変更が精度に与える影響についても、検証が行われていなかった。

そこで本論文では、ヤコビ法的一种であるブロックヤコビ法について、大規模並列計算機向けの実用化を目的とし、次の3つの側面から研究を行っている。第一に、大規模並列計算機に適した実装最適化手法を提案し、数千コア規模の並列計算機で性能評価を行っている。これにより、ブロックヤコビ法が従来使われてきた2重対角化に基づく手法に対して性能優位性を持ちうる解法であることを明らかにしている。第二に、プロセッサ間通信を削減して高性能化を図った改良版アルゴリズムについて、理論誤差解析と実験による精度評価を行い、同改良が相対誤差の意味での高精度性に影響を与えないことを示している。第三に、今後の高性能計算機の主流になると予想されるメニーコアプロセッサ上でブロックヤコビ法を効率的に実装するための基礎検討を行っている。以上により高性能計算機上でのブロックヤコビ法の実用化に向けた基盤を確立することを目的としている。

以下、本論文の内容について要約する。

第1章は緒論であり、本研究の目的を明らかにし、研究の成果を要約するとともに、本論文の構成を述べている。

第2章では、本研究の背景として、最近の高性能計算のトレンド、特異値分解とその応用、特異値分解の誤差、特異値分解に対する各種の計算アルゴリズムについて述べている。

第3章では、本研究の基盤となる片側ヤコビ法による特異値分解手法について、既存研究のサーベイを行っている。片側ヤコビ法では、行列の列ペアの直交化と呼ばれる操作が計算の中心となり、直交化すべき列ペアの選び方が収束性に大きな影響を与える。本章では、これまでに提案された各種の列ペアの選び方を調査し、収束性・並列性の違いについて議論している。また、ヤコビ法の高性能計算向け改良版であるブロックヤコビ法について述べるとともに、収束加速のために提案された前処理技法についても紹介している。

第4章では、本研究の成果のうち、ブロックヤコビ法の理論誤差解析と実験による精度評価について述べている。前述の通り、ブロックヤコビ法はヤコビ法の高性能計算向け改良版であるが、その改良が計算の安定性と計算精度に及ぼす影響について、これまでは十分な研究が行われてこなかった。本章では、ブロックヤコビ法における直交化の実装方法の一種であるHariのV2手法について理論誤差解析を行い、その数値的安定性を示している。また、数値実験により、同手法を用いたブロックヤコビ法が十分な精度を持つことを確認している。

第5章では、本研究の成果のうち、大規模分散メモリ型並列計算機に適したブロックヤコビ法の実装最適化手法について述べている。特に、2次元データ分割に基づく並列化手法の詳細を提案し、超並列計算機上「京」の1万ノードを用いて性能評価を行い、従来の2重対角化法を用いたライブラリScaLAPACKに比べて速度面での優位性があることを示している。

第6章では、将来のスーパーコンピュータで主流になると予想されるメニーコア型プロセッサ向けに、ブロックヤコビ法の実装の基礎検討を行っている。特に、ブロックヤコビ法の核心部分である直交化で用いられる対称行列乗算を取り上げ、それをメニーコア型プロセッサ上で効率的に並列化する手法として、3次元動的分割法を提案している。また、同手法をインテル社のメニーコア型プロセッサであるXeon Phi上で実装し、同社のライブラリに比べて2倍の性能が得られることを示している。

第7章はまとめであり、本研究の成果の要約と今後の課題を述べている。

以上より、本論文は高性能計算機上でのブロックヤコビ法の実用化に向けた基盤を確立するという目的を十分達成しており、博士(工学)の学位論文として十分な価値を有するものと認める。