

実対称行列のブロック鏡映変換によるブロック三重対角化の OpenMP 並列化の実験

村上 弘 (首都大学東京)

概要 ブロック鏡映変換を用いた実対称行列のブロック三重対角形への変換処理を OpenMP により並列化実装して計算機実験を行った。計算の大部分はブロック小行列 (タイル) 間の行列積 (xGEMM) であるため、メモリバンド幅を抑えた密度の高い計算ができる。現時点での簡単なブロック三重対角化の実装では、例えば Intel 社製の一般普及品のマルチコア CPU を用いた PC 上で、CPU のクロックから決まる理論上限の 70% から 80% 程度の演算性能が得られている。

はじめに 大規模 (数万次元～) な実対称密行列の固有値問題を解く場合に、通常の Householder 三重対角化は level-2 BLAS であり記憶走査が多く、メモリバンド幅が性能の隘路になる。通常の行列算法の行列要素を、数から小さい行列に変えるブロック化拡張により計算粒度を大きくし、さらに行列積を level-3 BLAS で計算することで、メモリバンド幅による性能の隘路 (特に CPU のマルチコア化が進むと厳しくなる) が緩和できる。鏡映変換をブロック拡張したブロック鏡映変換に置き換えると、Householder 三重対角化はブロック三重対角化になる。実対称行列の次数を N とすれば、小行列のサイズ b のブロック化により、ブロック三重対角化の記憶走査の回数は b に反比例して減少するが、演算回数の主要項は $(4/3)N^3$ で変わらないので演算密度は b に比例して向上する。ブロック三重対角形を経由して対称密行列の固有値問題を解く方法は、通常の三重対角形を経由する方法と同様で以下のようなになる。

1. ブロック鏡映変換を繰り返し適用して、対称密行列 A をブロック三重対角形 T に変換する。 T の固有値は A の固有値と一致する。
2. T の固有対すべてあるいは必要なものを求める。通常は必要な固有値の固有対だけを解く。
3. A の固有ベクトルの組は、 T の固有ベクトルの組に、ブロック三重対角化の際に用いたブロック鏡映変換を逆順に作用させて作る。

行列はサイズ b の小行列 (タイル) に区分けして扱うが、行列の次数 N が b の倍数でなければ、末尾に半端なサイズのタイルもできる。各タイルの内部は記憶を連続領域にとる。

ブロック鏡映変換の構成法 縦長の $m \times b$ 行列 U が $U^T U = I_b$ を満たせば、 $H = I_m - 2UU^T$ は $H^T = H$, $HH = I_m$ を満たすので、 H は (U を軸とする) ブロック版の鏡映変換になる。与えられた縦長の $m \times b$ 行列 C に対して HC の先頭の b 行以外がすべて消去されるように軸 U を決めれば、それを利用してブロック三重対角化ができる。つまり $HC = E_b \beta$ 。ここで E_b は $m \times b$ の拡張単位行列で、 β は b 次行列である。

与えられた C から上記の性質を満たすブロック変換の軸 U を構成するには以下のようにする。

1. C の QR 分解を $C \Rightarrow XR$ とし、 X の先頭の b 列だけを集めた b 次行列を χ とする。
2. χ の特異値分解を $\chi \Rightarrow WDV$ とする。この特異値はすべて 1 以下になる。
3. b 次行列 WV を X の先頭の b 列に加算した行列を Y とする。すなわち $Y \leftarrow X + E_b(WV)$ 。
4. $G = V^T \{2(I_b + D)\}^{(-1/2)}$ とし、 Y に G を右から乗じて $U = YG$ を作る。

実際 $U^T U = I_b$ であり、 $H = I_m - 2UU^T$ を C に作用させると最初の b 列以外は消去されて、 $HC = E_b \beta$ となる。ここで b 次行列 $\beta = -(WV)R$ であることもわかる。この構成では C の記憶場所に順番に X, Y, U を重ね書きできる。また C の QR 分解には、Tall-Skinny 型行列専用の階層的な方法により C の記憶走査量を減らすことも (b を大きくするほど) 重要になる。

H による A の両側変換 A の最初の列の対角ブロックよりも下のブロック列ベクトルを C としてそれから U を同じ場所に作って保存する。 A の 1 ブロック分だけサイズを短くした行列の部分 \hat{A} とするとき、変換 $A \leftarrow HAH$ による m 次行列 \hat{A} の部分の更新は、補助のブロックベクトル P と対称な b 次の小行列 γ を用いて、以下のように (タイル分割された小行列同士の加減乗算により) 通常の Householder 三重対角化と同様に A の下半分の記憶場所だけを参照して行なえる：

$$P \leftarrow \hat{A}U, \gamma \leftarrow P^T U, P \leftarrow 2(U\gamma - P), \hat{A} \leftarrow \hat{A} + UP^T + PU^T.$$

計算法の詳細と性能の実測結果は、当日のポスターで発表する。

参考文献 Hiroshi Murakami, "An Implementation of the Block Householder Method", 情報処理学会論文誌コンピューティングシステム, Vol.47, SIG 7(ACS 14), pp.61-80, May (2006).