動的計画法に基づく密行列計算アルゴリズムの再帰的ブロック化

深谷　猛[1)]　　山本　有作[2)]　　張　紹良[1)]
1) 名古屋大学　　2) 神戸大学

1　はじめに

LU 分解や QR 分解といった密行列計算で幅広く使われているブロック化手法の一つとして，再帰的ブロック化 [1][2] がある．本稿では，動的計画法により再帰的ブロック化の構造を決定し，その性能を評価する．

2　再帰的ブロック化

2.1　ブロック化

ブロック化とは，計算対象の行列を部分行列（ブロック）に分割して，ブロック単位で計算を進める手法である（図 1）．まず，ブロック内のみで計算を行い，その後，残りのブロックを行列乗算により一度に更新することで，データの再利用性が増し，性能向上が期待できる．

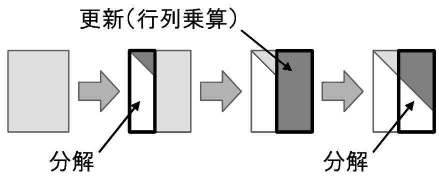

図 1　ブロック化された計算の流れ

2.2　再帰的ブロック化

再帰的ブロック化とは，その名の通り，再帰的に行列をブロックに分割して計算を進める手法である．本来，再帰的ブロック化は非常に大きな自由度を持っているが，現在用いられているのは，図 2 にあるように計算対象の行列（サイズを n とする）を再帰的に二等分するものがほとんどである．

我々は，もう少し自由度を増やして，図 3 にあるように再帰的に任意の幅で二分割をするブロック化を考える．ただし，最小のブロック幅を u とする．このようなブロック化の具体例としては図 4 のようなものがある．

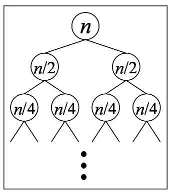

図 2　従来の再帰的ブロック化

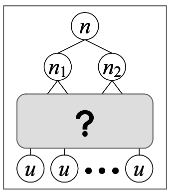

図 3　本研究で考える再帰的ブロック化

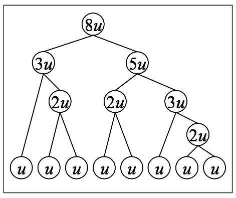

図 4　本研究で考える再帰的ブロック化の具体例

3　動的計画法の適用

ブロック化の方法により，計算の中で生じる行列乗算の行列サイズやブロック内の計算結果をまとめる際の計算量が変化する．したがって，使用する計算機環境や行列サイズによって，適切なブロック化の方法を選択することが重要となる．

計算対象の行列サイズを $m \times n$，図 3 にある二分木を b_n として，b_n に従った再帰的ブロック化で計算した際の計算時間を $T(m, n, b_n)$ とする．

$$T^*(m, n) = \min_{b_n} T(m, n, b_n),$$

とすると，

$$\begin{aligned} &T^*(m, n) \\ &= \min_{n_1} \left\{ T^*(m, n_1) + T^*(m - n_1, n - n_1) + T_{\mathrm{up}}(m, n, n_1) \right\}, \end{aligned}$$

という形の再帰方程式を得る．これはベルマン方程式と呼ばれ，動的計画法を用いて解くことができる [3]．ここで，T_{up} は行列の更新部分の計算時間で m, n, n_1 によって，一意的に決まる値である．

4　おわりに

QR 分解に対して，動的計画法で決定した再帰的ブロック化を適用した結果の一つを紹介する（表 1）．計算機環境は Xeon X5670 (2.93GHz, 1 コアのみ使用) で，BLAS は ATLAS（ver. 3.8.0）を使用した．

u	16	32	64	128	256	従来法
time	0.507	0.525	0.539	0.545	0.566	0.604

表 1　2048 × 1024 の行列の QR 分解の計算時間 (sec.)

動的計画法を使ったブロック化の決定方法や数値実験の詳細については，発表当日に報告する予定である．

謝辞

本研究は日本学術振興会特別研究員奨励費の補助を受けている．

参考文献

[1] S. Toledo.:Locality of Reference in LU Decomposition with Partial Pivoting, SIAM J. Matrix Anal. Appl., Vol. 18, pp. 1065-1081, 1997.

[2] E. Elmrotha and F. Gustavson.: Applying Recursion to Serial and Parallel QR Factrization Leads to Better Performance, IBM Journal of Research and Development, Vol. 44, pp. 605-624, 2000.

[3] R. Bellman.: Dynamic Programming, Dover Publications, 2003.