高性能コンピューティング特論
講義メモ（10）

「並列数値計算アルゴリズム」

高橋大介
daisuke@cs.tsukuba.ac.jp
筑波大学大学院システム情報工学研究科
計算科学研究センター

講義内容

- 高速フーリエ変換（Fast Fourier Transform, FFT）
- Cooley-Tukey FFTおよび並列化
- Six-Step FFTおよび並列化
- Nine-Step FFTおよびブロック化，並列化

高速フーリエ変換（FFT）

- 高速フーリエ変換（FFT）は，離散フーリエ変換（DFT）を高速に計算するアルゴリズム．
- 理学分野での応用例
  - 偏微分方程式の解法
  - 畳み込み，相関の計算
  - 第一原理計算における密度汎関数法
- 工学分野での応用例
  - スペクトラムアナライザ
  - CTスキャナ・MRIなどの画像処理
  - 地上波デジタルテレビ放送や無線LANで用いられているOFDM（直交周波数多重変調）では，変復調処理にFFTを用いている．

離散フーリエ変換（DFT）

- 離散フーリエ変換（DFT）の定義

$$y(k) = \sum_{j=0}^{n-1} x(j)\omega_n^{jk}$$

$$0 \le k \le n-1, \quad \omega_n = e^{-2\pi i/n}$$

行列によるDFTの定式化（1/4）

- $n=4$ のとき，DFTは以下のように計算できる．

$$y(0)=x(0)\omega^0+x(1)\omega^0+x(2)\omega^0+x(3)\omega^0$$
$$y(1)=x(0)\omega^0+x(1)\omega^1+x(2)\omega^2+x(3)\omega^3$$
$$y(2)=x(0)\omega^0+x(1)\omega^2+x(2)\omega^4+x(3)\omega^6$$
$$y(3)=x(0)\omega^0+x(1)\omega^3+x(2)\omega^6+x(3)\omega^9$$

行列によるDFTの定式化（2/4）

- 行列を用いると，より簡単に表すことができる．

$$\begin{bmatrix} y(0) \\ y(1) \\ y(2) \\ y(3) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \omega^0 & \omega^0 & \omega^0 & \omega^0 \\ \omega^0 & \omega^1 & \omega^2 & \omega^3 \\ \omega^0 & \omega^2 & \omega^4 & \omega^6 \\ \omega^0 & \omega^3 & \omega^6 & \omega^9 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x(0) \\ x(1) \\ x(2) \\ x(3) \end{bmatrix}$$

- n^2 回の複素数の乗算と，$n(n-1)$ 回の複素数の加算が必要．

行列によるDFTの定式化（3/4）

- $\omega_n^{jk}=\omega_n^{jk \bmod n}$ の関係を用いると，以下のように書き直すことができる．

$$\begin{bmatrix} y(0) \\ y(1) \\ y(2) \\ y(3) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 1 & 1 & 1 \\ 1 & \omega^1 & \omega^2 & \omega^3 \\ 1 & \omega^2 & \omega^0 & \omega^2 \\ 1 & \omega^3 & \omega^2 & \omega^1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x(0) \\ x(1) \\ x(2) \\ x(3) \end{bmatrix}$$

行列によるDFTの定式化（4/4）

- 行列の分解により，乗算回数を減らすことができる．

$$\begin{bmatrix} y(0) \\ y(2) \\ y(1) \\ y(3) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & \omega^0 & 0 & 0 \\ 1 & \omega^2 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & \omega^1 \\ 0 & 0 & 1 & \omega^3 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 & 0 & \omega^0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & \omega^0 \\ 1 & 0 & \omega^2 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & \omega^2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x(0) \\ x(1) \\ x(2) \\ x(3) \end{bmatrix}$$

これを再帰的に行うと，演算量を $O(n\log n)$ にできる（データ数 n は合成数である必要がある）

DFTとFFTの演算量の比較

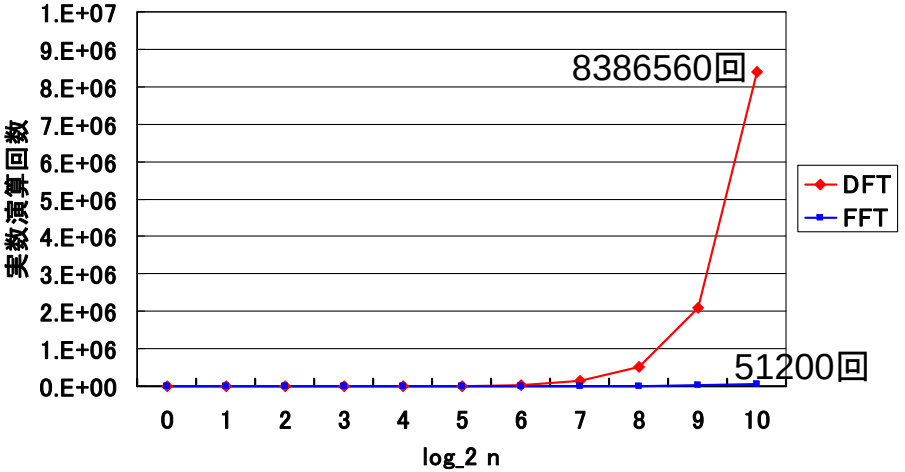
- DFTの実数演算回数

$$T_{DFT} = 8n^2 - 2n$$

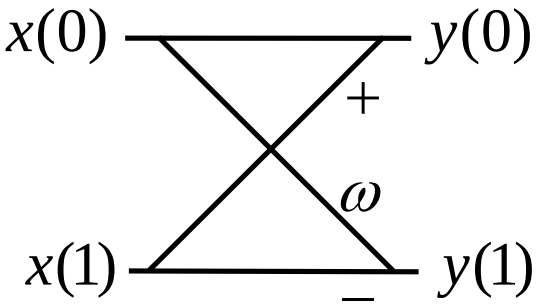
- FFTの実数演算回数
  （n が2のべきの場合）

$$T_{FFT} = 5n\log_2 n$$

DFTとFFTの演算量の比較

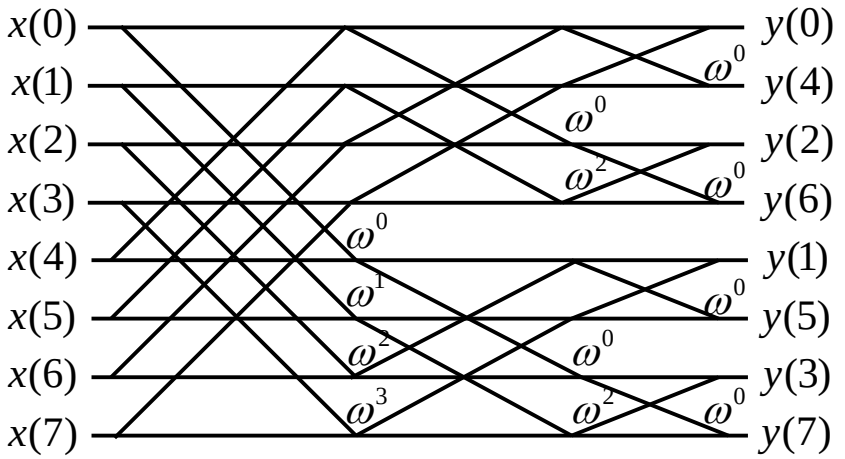


バタフライ演算



$$y(0) = x(0) + x(1)$$
$$y(1) = \omega\{x(0) - x(1)\}$$

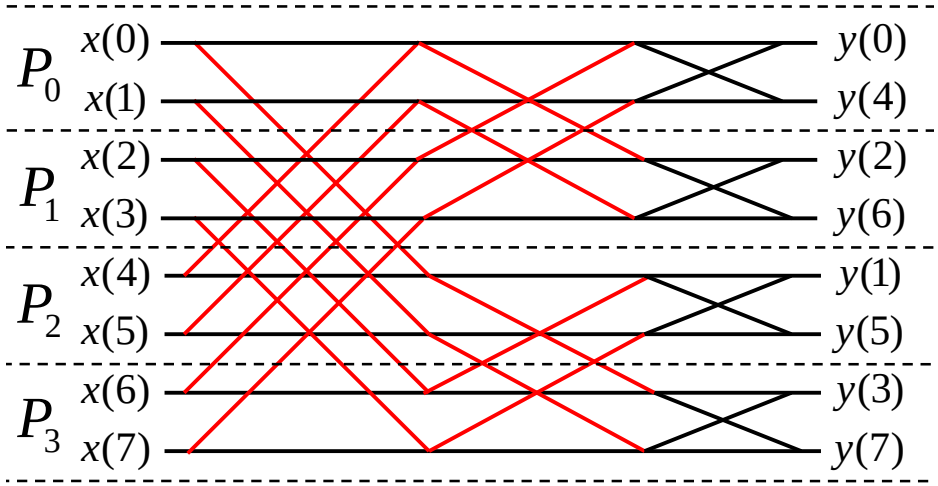
Cooley-Tukey FFTの信号流れ図



FFTのカーネル部分の例

```
      SUBROUTINE FFT2(A,B,W,M,L)
      IMPLICIT REAL*8 (A-H,O-Z)
      DIMENSION A(2,M,L,*),B(2,M,2,*),W(2,*)
C
      DO J=1,L
         WR=W(1,J)
         WI=W(2,J)
         DO I=1,M
            B(1,I,1,J)=A(1,I,J,1)+A(1,I,J,2)
            B(2,I,1,J)=A(2,I,J,1)+A(2,I,J,2)
            B(1,I,2,J)=WR*(A(1,I,J,1)-A(1,I,J,2))-WI*(A(2,I,J,1)-A(2,I,J,2))
            B(2,I,2,J)=WR*(A(2,I,J,1)-A(2,I,J,2))+WI*(A(1,I,J,1)-A(1,I,J,2))
         END DO
      END DO
      RETURN
      END
```


Cooley-Tukey FFTの並列化



並列Cooley-Tukey FFTの通信量

- ノード数を P とすると，並列Cooley−Tukey FFTでは，$\log_2 P$ ステージの通信が必要になる．
- 各ステージでは n/P 個の倍精度複素数データの通信（MPI_Send，MPI_Recv）が行われるため，合計の通信量は，

$$T_{Cooley-Tukey} = \frac{16n}{P}\log_2 P \quad （バイト）$$

$n = n_1 n_2$ に対するFFTアルゴリズム

- $n = n_1 n_2$ で与えられるとする．

$$j = j_1 + j_2 n_1 \quad j_1 = 0, 1, \cdots, n_1 - 1 \quad j_2 = 0, 1, \cdots, n_2 - 1$$
$$k = k_2 + k_1 n_2 \quad k_1 = 0, 1, \cdots, n_1 - 1 \quad k_2 = 0, 1, \cdots, n_2 - 1$$

- 上記の表現を用いると，DFTの定義式を以下のように書き換えることができる．

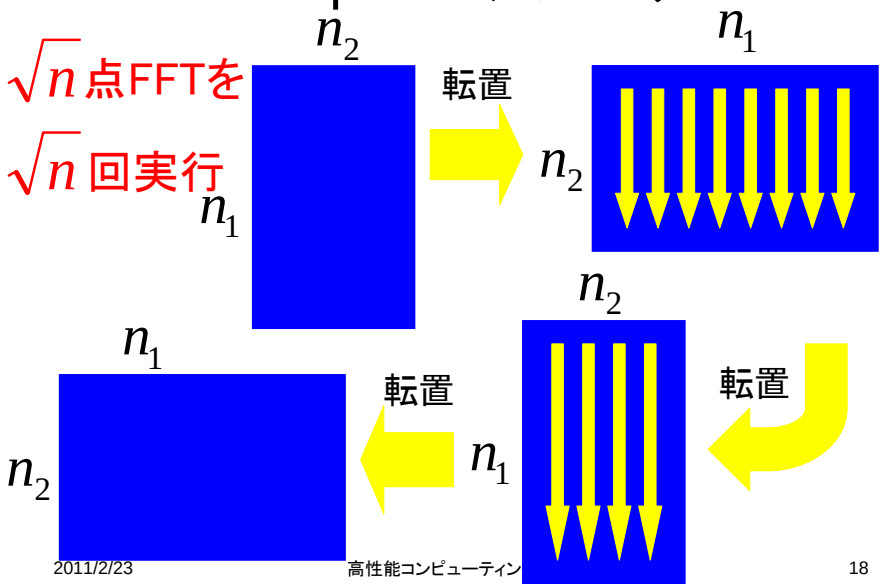
$$y(k_2, k_1) = \sum_{j_1=0}^{n_1-1}\left[\sum_{j_2=0}^{n_2-1} x(j_1, j_2)\omega_{n_2}^{j_2 k_2}\omega_{n_1 n_2}^{j_1 k_2}\right]\omega_{n_1}^{j_1 k_1}$$

- n 点FFTを n_1 点FFTと n_2 点FFTに分解している．

Six-Step FFTアルゴリズム

1. 行列の転置
2. n_1 組の n_2 点 multicolumn FFT
3. ひねり係数（$\omega_{n_1 n_2}^{j_1 k_2}$）の乗算
4. 行列の転置
5. n_2 組の n_1 点 multicolumn FFT
6. 行列の転置

Six-Step FFTアルゴリズム

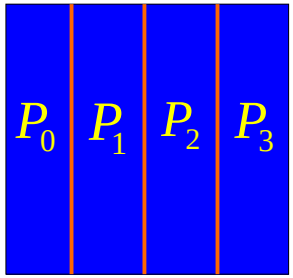


Six-Step FFTのプログラム例

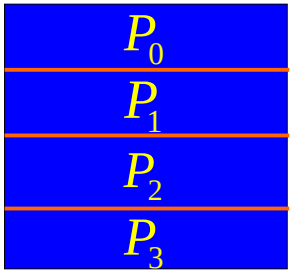
```
      SUBROUTINE FFT(A,B,W,N1,N2)
      COMPLEX*16 A(*),B(*),W(*)
C
      CALL TRANS(A,B,N1,N2)              N1 x N2行列をN2 x N1行列に転置
      DO J=1,N1
         CALL FFT2(B((J-1)*N2+1),N2)     N1組のN2点multicolumn FFT
      END DO
      DO I=1,N1*N2
         B(I)=B(I)*W(I)                  ひねり係数（W）の乗算
      END DO
      CALL TRANS(B,A,N2,N1)              N2 x N1行列をN1 x N2行列に転置
      DO J=1,N2
        CALL FFT2(A((J-1)*N1+1),N1)      N2組のN1点multicolumn FFT
      END DO
      CALL TRANS(A,B,N1,N2)              N1 x N2行列をN2 x N1行列に転置
      RETURN
      END
```


配列の分割方法（1/4）

- MPIで並列化を行う際には，各ノードで配列を分割して持つようにすると，メモリを節約することができる．
- ブロック分割
  - 連続する領域をノード数で分割



列方向に分割したブロック分割

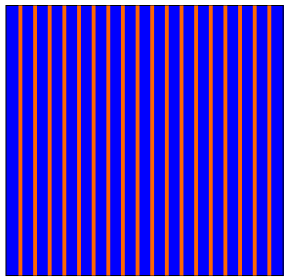


行方向に分割したブロック分割

配列の分割方法(2/4)

- サイクリック分割
  - 1列(または1行)ごとに分割
  - ブロック分割に比べてロードバランスが取りやすい

0123012301230123…

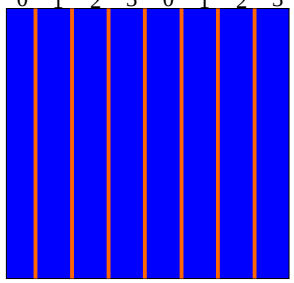


列方向に分割したサイクリック分割

配列の分割方法(3/4)

- ブロックサイクリック分割
  - 複数列(または複数行)ごとに分割
  - ブロック分割とサイクリック分割の中間

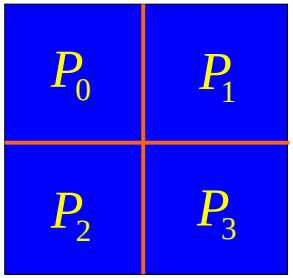
$P_0\ P_1\ P_2\ P_3\ P_0\ P_1\ P_2\ P_3$



列方向に分割したブロックサイクリック分割

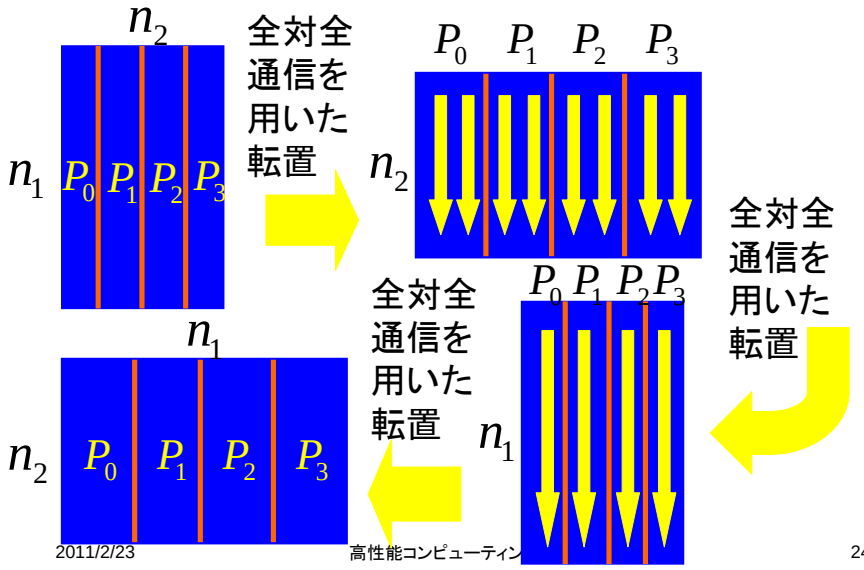
配列の分割方法(4/4)

- 二次元分割
  - 行方向と列方向の両方を分割
  - 一次元分割よりも通信量が減ることがある
  - 二次元のブロック分割，サイクリック分割，ブロックサイクリック分割が考えられる.

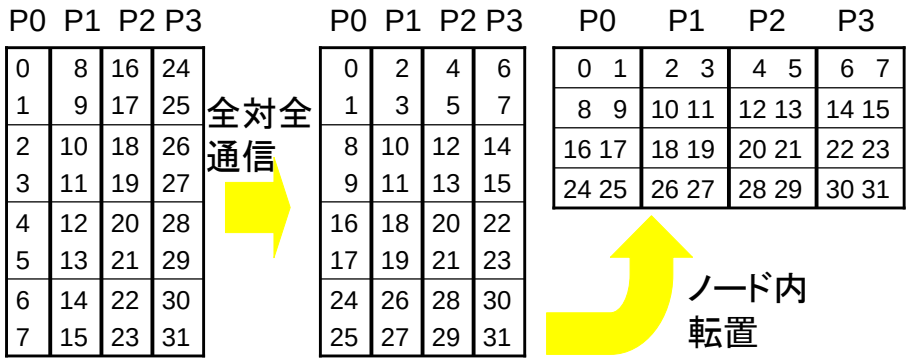


二次元ブロック分割

並列Six-Step FFTアルゴリズム



全対全通信(MPI_Alltoall)を用いた行列の転置



並列Six-Step FFTのプログラム例

```
      SUBROUTINE PARAFFT(A,B,W,N1,N2,NPU)
      COMPLEX*16 A(*),B(*),W(*)
C
      CALL PTRANS(A,B,N1,N2,NPU)          N1 x N2行列をN2 x N1行列に転置
      DO J=1,N1/NPU                       (MPI_ALLTOALLを使用)
        CALL FFT2(B((J-1)*N2+1),N2)       (N1/NPU)組のN2点multicolumn FFT
      END DO
      DO I=1,(N1*N2)/NPU
        B(I)=B(I)*W(I)                    ひねり係数(W)の乗算
      END DO
      CALL PTRANS(B,A,N2,N1,NPU)          N2 x N1行列をN1 x N2行列に転置
      DO J=1,N2/NPU                       (MPI_ALLTOALLを使用)
        CALL FFT2(A((J-1)*N1+1),N1)       (N2/NPU)組のN1点multicolumn FFT
      END DO
      CALL PTRANS(A,B,N1,N2,NPU)          N1 x N2行列をN2 x N1行列に転置
      RETURN                              (MPI_ALLTOALLを使用)
      END
```


並列Six-Step FFTの通信量

- ノード数を P とすると，並列Six-Step FFTでは，3回の全対全通信が必要になる．
- 全対全通信では，各ノードは n/P^2 個の倍精度複素数データを，自分以外の $P-1$ ノードに送ることになるため，合計の通信量は

$$T_{Six-Step} = 3\cdot(P-1)\cdot\frac{16n}{P^2} \quad (\text{バイト})$$

並列Cooley-Tukey FFTと並列Six-Step FFTの通信量の比較

- 並列Cooley-Tukey FFTの通信量

$$T_{Cooley-Tukey} = \frac{16n}{P}\log_2 P$$

- 並列Six-Step FFTの通信量

$$T_{Six-Step} = 3\cdot(P-1)\cdot\frac{16n}{P^2}$$

- 両者を比較すると，$P>8$ の場合には，並列Six-Step FFTの方が通信量が少なくなる．

Six-Step FFTの問題点

- Multicolumn FFTにおいて，$\sqrt{n}$ 点の各column FFTがキャッシュに載らない場合，性能が大きく劣化する．
- 分散メモリ型並列計算機で処理する大規模FFT（例えば，2^24点以上）では，高い性能を発揮できない．

三次元表現

- n が $n = n_1 n_2 n_3$ と分解されるとすると

$$y(k_3,k_2,k_1) = \sum_{j_1=0}^{n_1-1}\sum_{j_2=0}^{n_2-1}\sum_{j_3=0}^{n_3-1} x(j_1,j_2,j_3)\omega_{n_3}^{j_3 k_3}$$

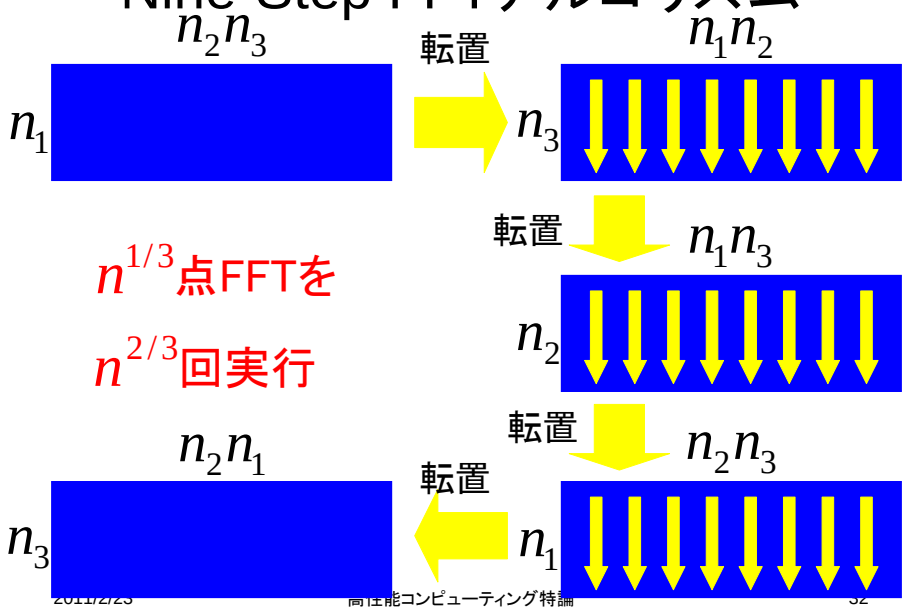
$$\omega_{n_2 n_3}^{j_2 k_3}\,\omega_{n_2}^{j_2 k_2}\,\omega_{n}^{j_1 k_2}\,\omega_{n_1 n_2}^{j_1 k_2}\,\omega_{n_1}^{j_1 k_1}$$

$n^{1/3}$ 点column FFTにして，キャッシュミスを低減

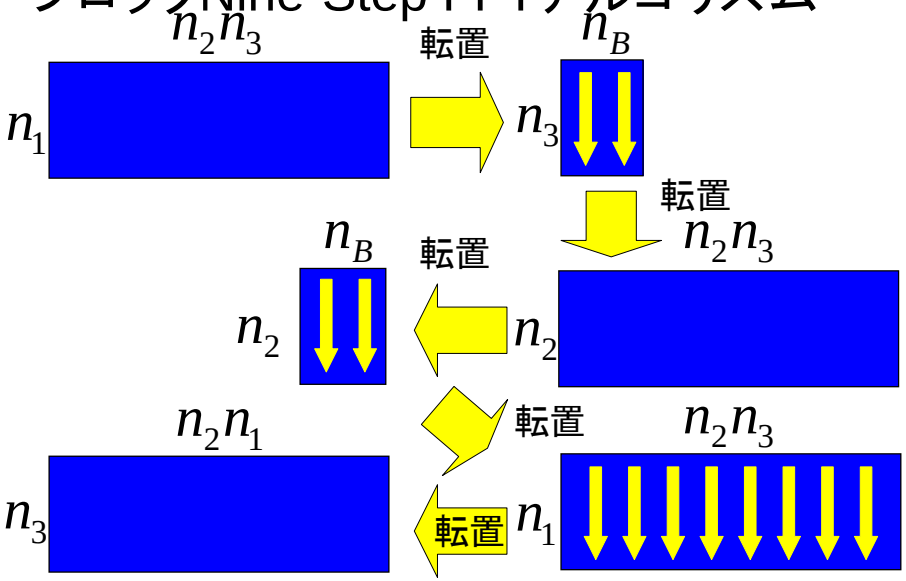
Nine-Step FFTアルゴリズム

1. 行列の転置
2. $n_1 n_2$ 組の n_3 点 multicolumn FFT
3. ひねり係数（$\omega_{n_2 n_3}^{j_2 k_3}$）の乗算
4. 行列の転置
5. $n_1 n_3$ 組の n_2 点 multicolumn FFT
6. ひねり係数（$\omega_{n}^{j_1 k_3}\,\omega_{n_1 n_2}^{j_1 k_2}$）の乗算
7. 行列の転置
8. $n_2 n_3$ 組の n_1 点 multicolumn FFT
9. 転置

Nine-Step FFTアルゴリズム



ブロックNine-Step FFTアルゴリズム



In-Cache FFTアルゴリズム

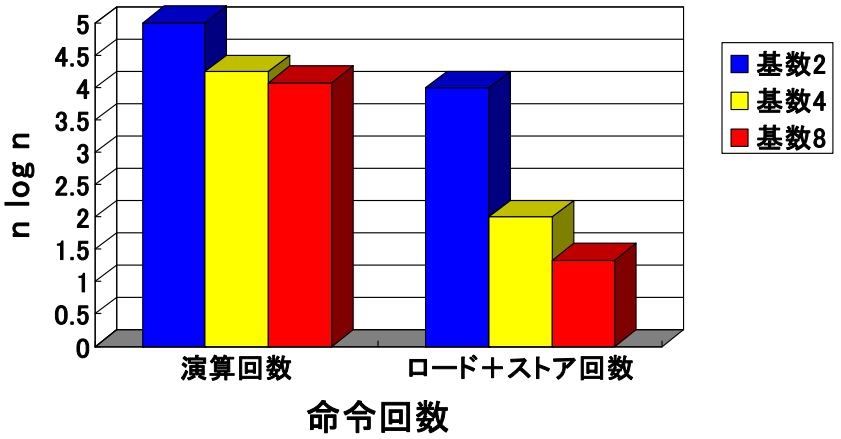
- Multicolumn FFTにおいて，各column FFTがキャッシュに載る場合のin-cache FFTとして，
  - Cooley-Tukeyアルゴリズム（ビットリバース処理が必要）
  - Stockhamアルゴリズム（ビットリバース処理は不要）

  が考えられる．
- 高い基数のFFTを積極的に用いることにより，メモリアクセス回数を減らす．
  - 基数4，8のFFTを組み合わせて使用．
  - 基数8よりもメモリアクセス回数の多い，基数4のFFTを最大2ステップに抑えることにより，さらにメモリアクセスを減らす．

最内側ループにおける ロード＋ストア，乗算および加算回数

	基数2	基数4	基数8
ロード＋ストア回数	8	16	32
乗算回数	4	12	32
加算回数	6	22	66
総浮動小数点演算回数 $(n\log_2 n)$	5	4.25	4.083
浮動小数点演算命令数	10	34	98
浮動小数点演算命令数とロード＋ストア回数の比	1.25	2.125	3.063

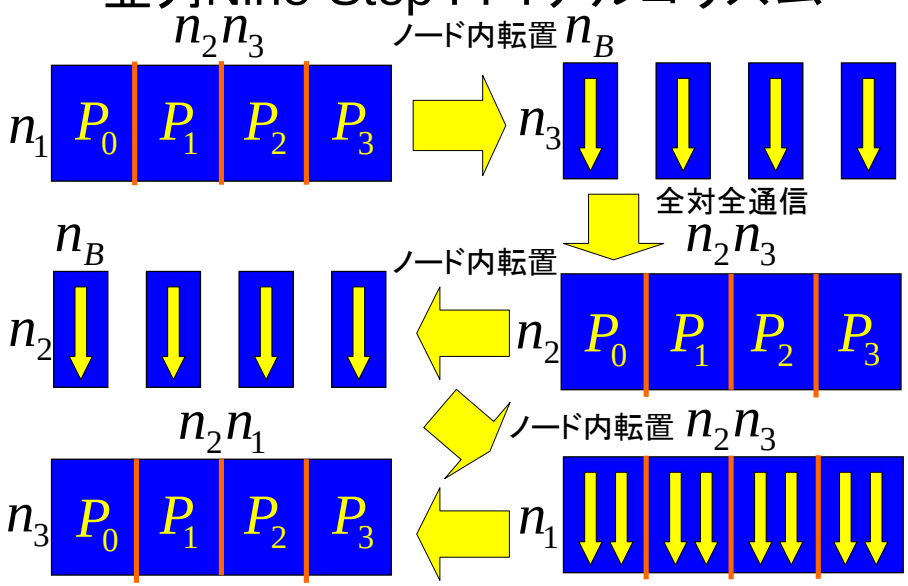
FFTカーネルを用いた場合の n点FFTの必要演算回数



Nine-Step FFTのブロック化

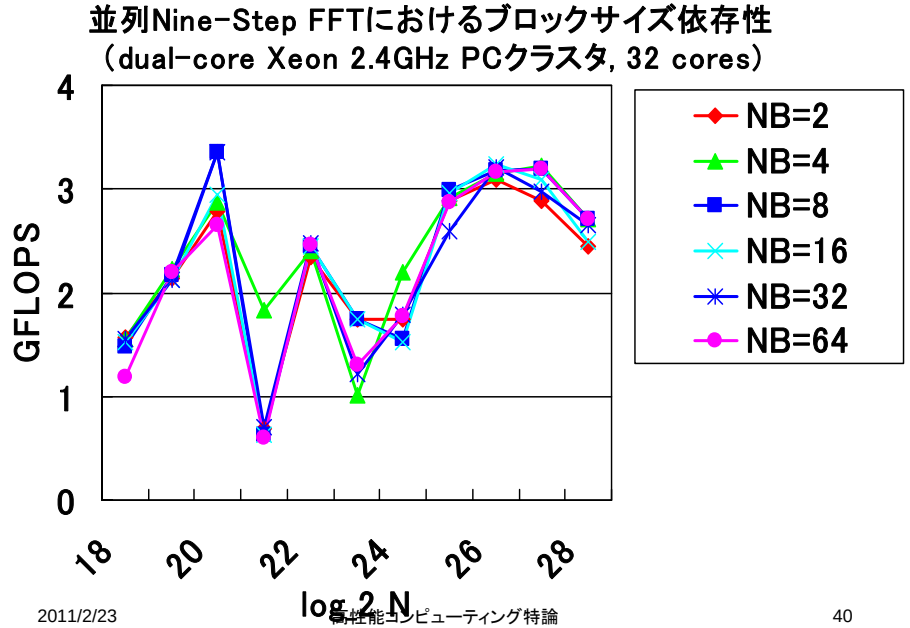
- 行列の転置で用いられているキャッシュ内のデータをmulticolumn FFTでも活用し，キャッシュ内のデータの再利用性を高くする．
- 主記憶からキャッシュにいったんロードしたデータは，できるだけキャッシュに載っているようにする．
- キャッシュ内のデータは再利用できるだけ再利用し，本当にいらなくなった時点で主記憶に書き戻す．

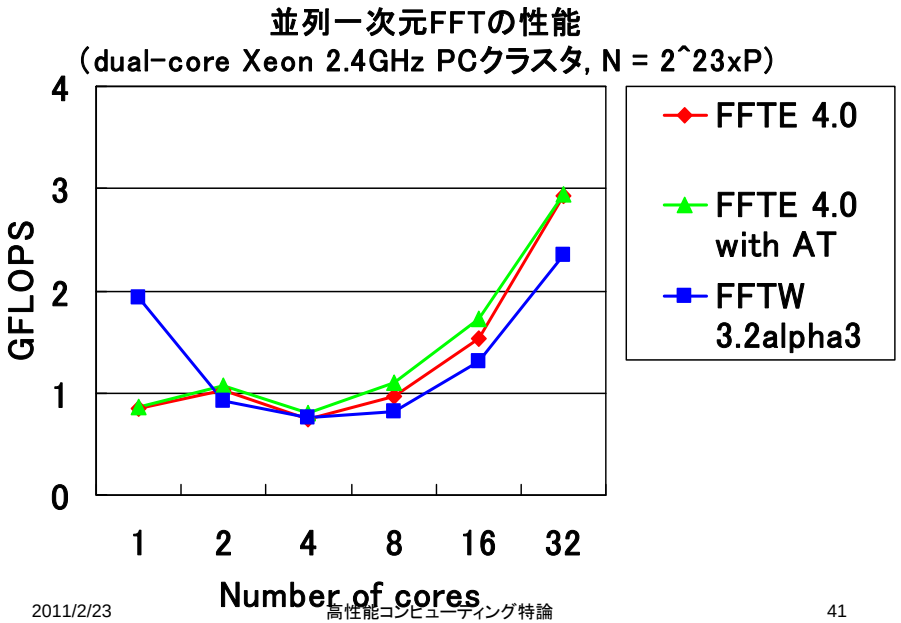
並列Nine-Step FFTアルゴリズム

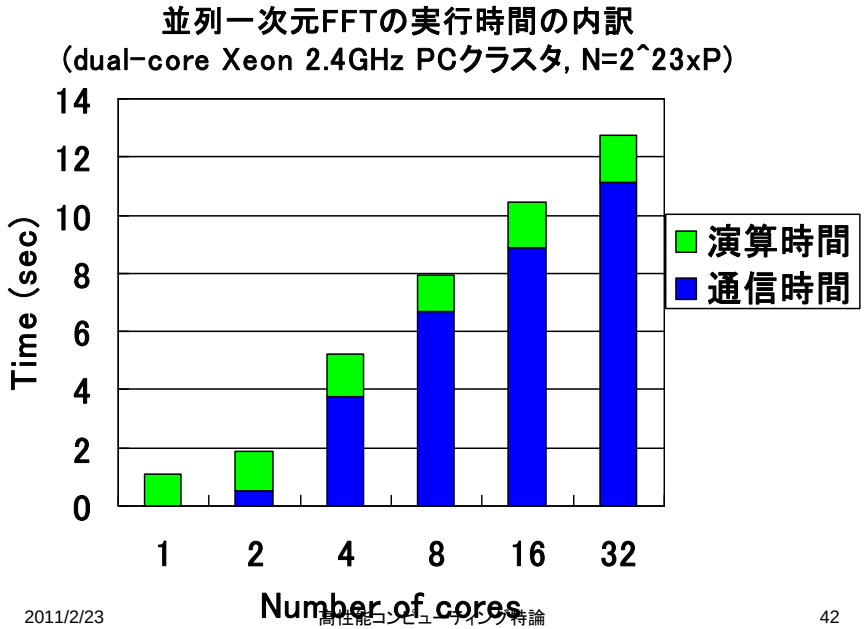


ブロックNine-Step FFTの利点

- Stockham FFT等の通常のFFTアルゴリズムでは，
  - 演算回数：$5n\log_2 n$
  - 主記憶アクセス回数：$4n\log_2 n$
- ブロックNine-Step FFTでは，
  - 演算回数：$5n\log_2 n$
  - 主記憶アクセス回数：理想的には $12n$
- Nine-Step FFTの部分で $n^{1/3}$ 点FFTにブロック化を行っていることから，提案するブロックNine-Step FFTは，「二重ブロック化」アルゴリズムといえる．







並列FFTライブラリの例

- 商用の並列数値計算ライブラリ
  - Intel Cluster MKL（Math Kernel Library）
    - OpenMP版とMPI版が利用可能
  - AMD ACML（AMD Core Math Library）
    - OpenMP版が利用可能
- オープンソースの並列FFTライブラリ
  - FFTW（http://www.fftw.org）
    - OpenMP版とMPI版が利用可能
  - FFTE（http://www.ffte.jp）
    - OpenMP版，MPI版とOpenMP+MPI版が利用可能

まとめ

- 並列数値計算アルゴリズムとして，FFT（高速フーリエ変換）を取り上げた．
- 問題の領域をどのように分割するかが鍵となる．
  - ブロック分割，サイクリック分割，ブロックサイクリック分割
- 並列FFTでは通信部分はAll-to-All通信が中心となるので，並列化は比較的容易．
- 通信量を削減するだけではなく，ブロック化等を用いたメモリアクセスの局所化も重要となる．