



筑波大学計算科学研究センター CCS HPCサマーセミナー 「並列数値アルゴリズムⅡ」

高橋大介

daisuke@cs.tsukuba.ac.jp

筑波大学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

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

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



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

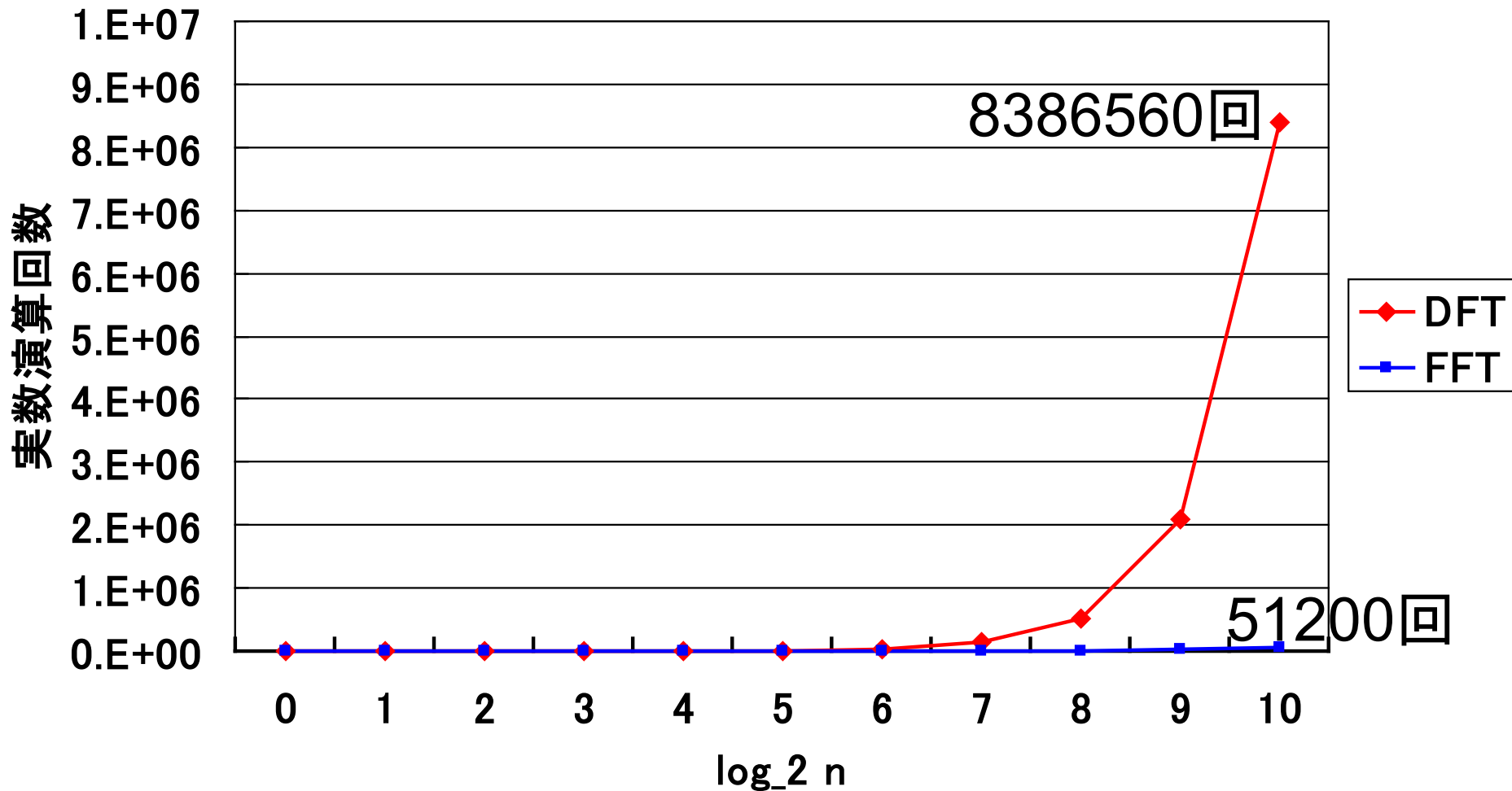
$$T_{DFT} = 8n^2 - 2n$$

- ・ FFTの実数演算回数
(n が2のべきの場合)

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

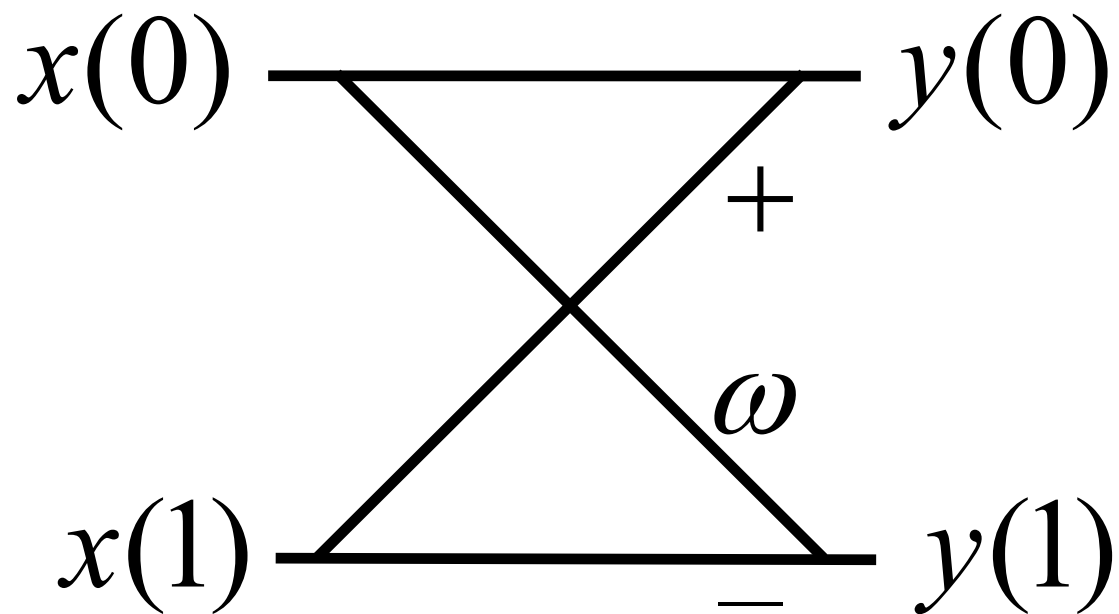


DFTとFFTの演算量の比較





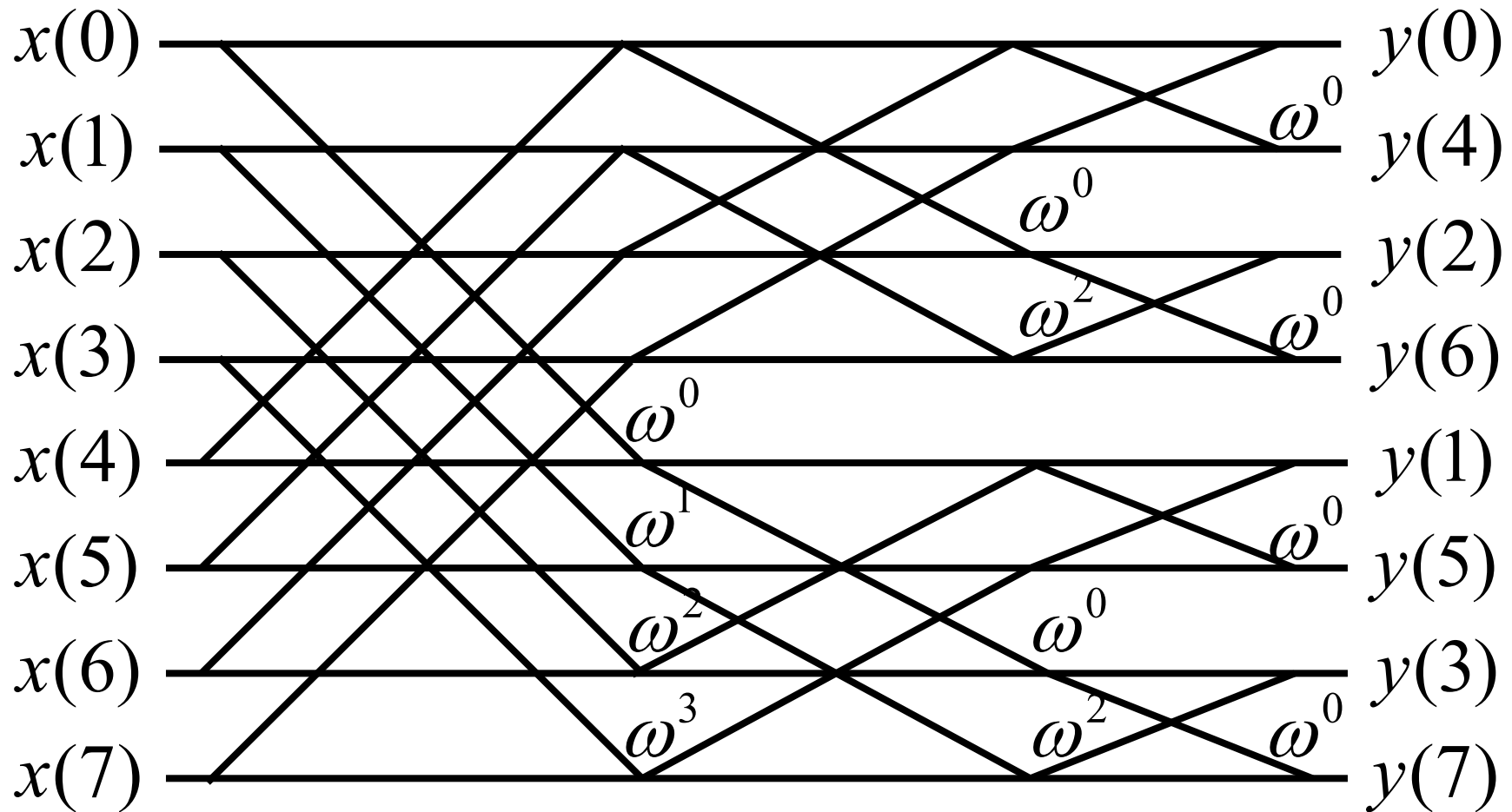
バタフライ演算



$$y(0) = x(0) + x(1)$$

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

Cooley-Tukey FFTの信号流れ図





FFTのカーネル部分の例

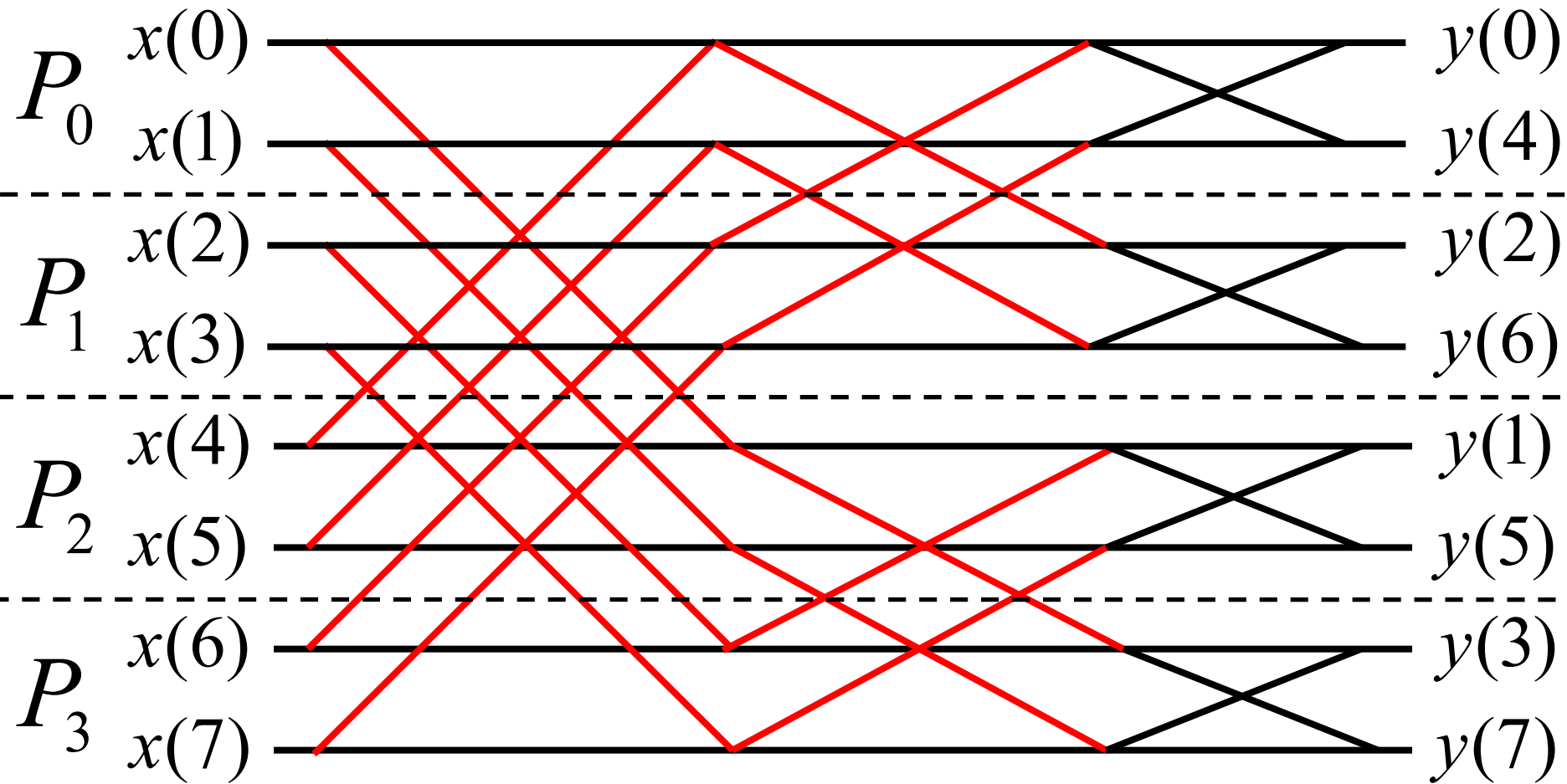
```
SUBROUTINE FFT2(A,B,W,M,L)
  IMPLICIT REAL*8 (A-H,O-Z)
  DIMENSION A(2,M,L,*),B(2,M,2,*),W(2,*)
```

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,

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



$n = n_1 n_2$ 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.

$$j = j_1 + j_2 n_1 \quad j_1 = 0, 1, \dots, n_1 - 1 \quad j_2 = 0, 1, \dots, n_2 - 1$$

$$k = k_2 + k_1 n_2 \quad k_1 = 0, 1, \dots, n_1 - 1 \quad k_2 = 0, 1, \dots, n_2 - 1$$

- ・ 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.

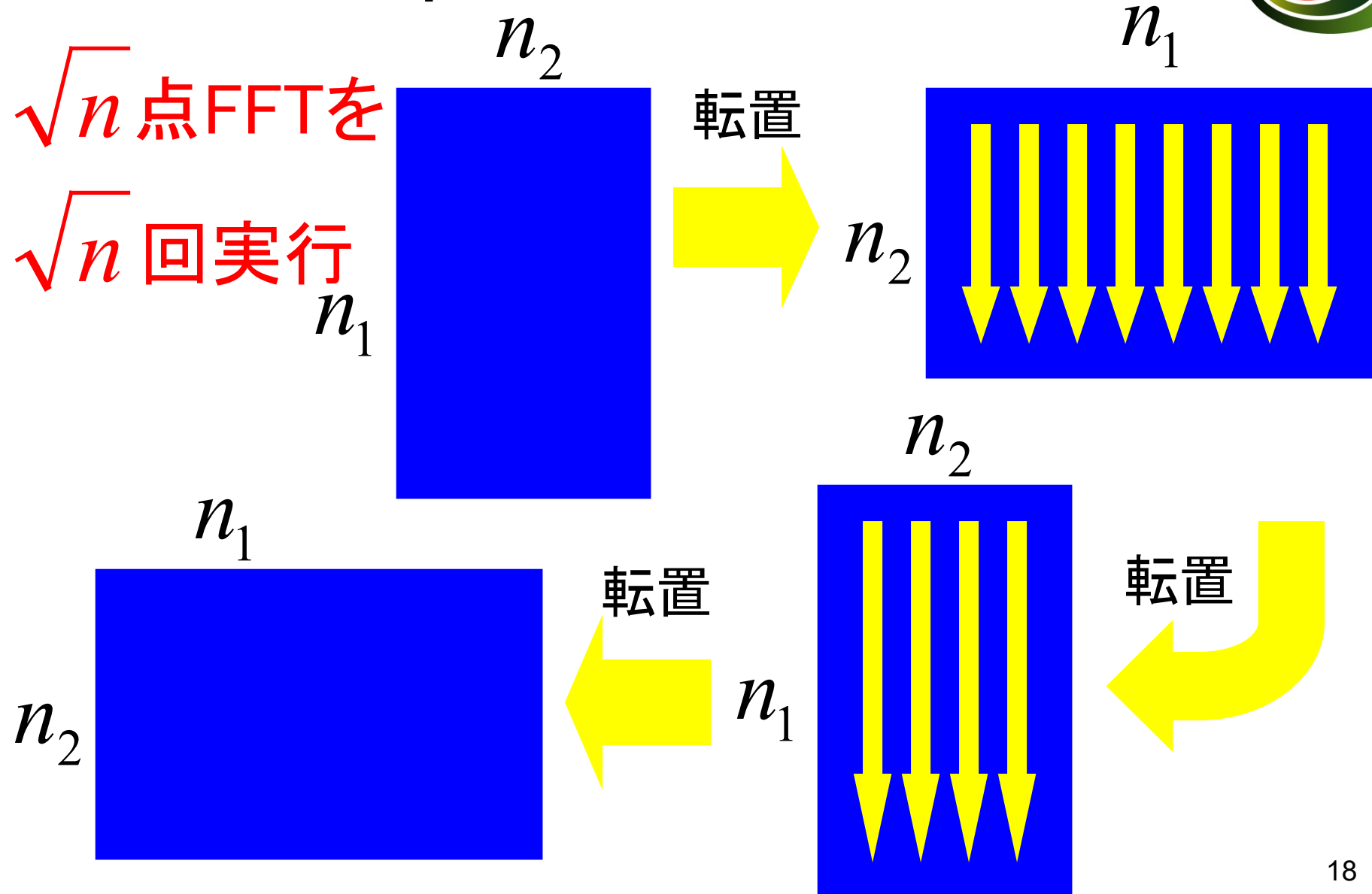


Six-Step FFTアルゴリズム

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)
DO J=1,N1
  CALL FFT2(B((J-1)*N2+1),N2)
END DO
DO I=1,N1*N2
  B(I)=B(I)*W(I)
END DO
CALL TRANS(B,A,N2,N1)
DO J=1,N2
  CALL FFT2(A((J-1)*N1+1),N1)
END DO
CALL TRANS(A,B,N1,N2)
RETURN
END
```

$N1 \times N2$ 行列を $N2 \times N1$ 行列に転置

$N1$ 組の $N2$ 点multicolumn FFT

ひねり係数(W)の乗算

$N2 \times N1$ 行列を $N1 \times N2$ 行列に転置

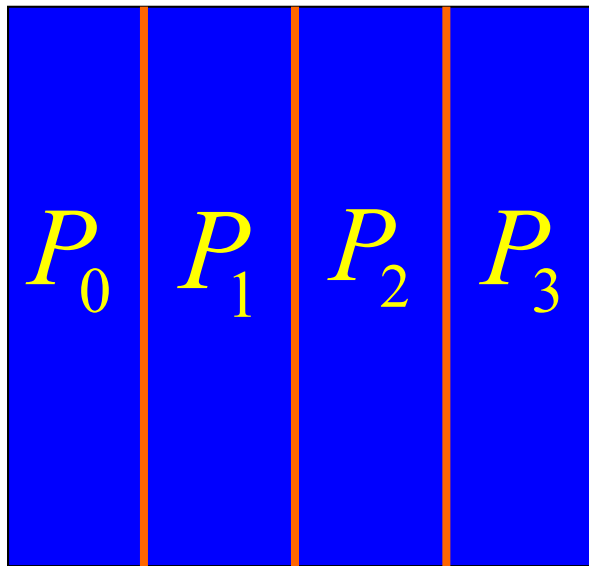
$N2$ 組の $N1$ 点multicolumn FFT

$N1 \times N2$ 行列を $N2 \times N1$ 行列に転置

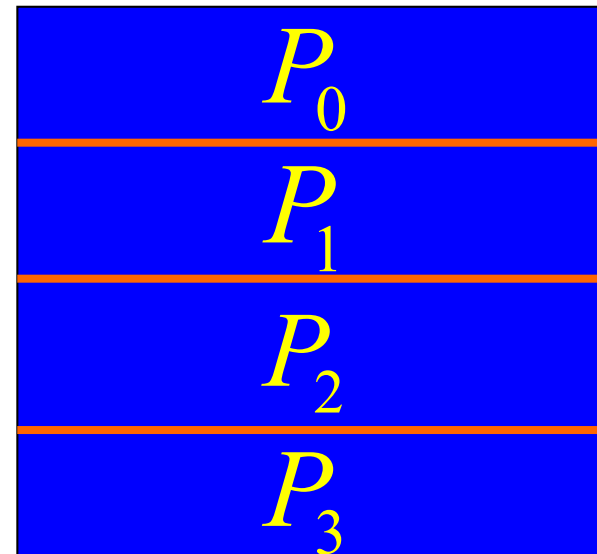


配列の分割方法(1/4)

- ・ 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



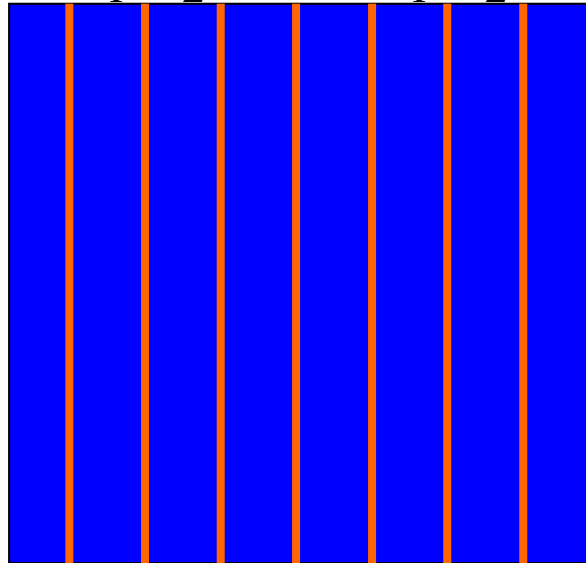
行方向に分割したブロック分割



配列の分割方法 (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

$P_0 P_1 P_2 P_3 P_0 P_1 P_2 P_3$

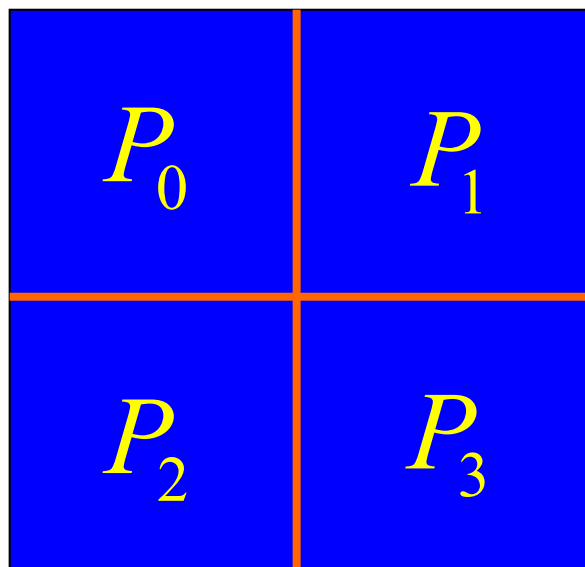


列方向に分割したブロックサイクリック分割



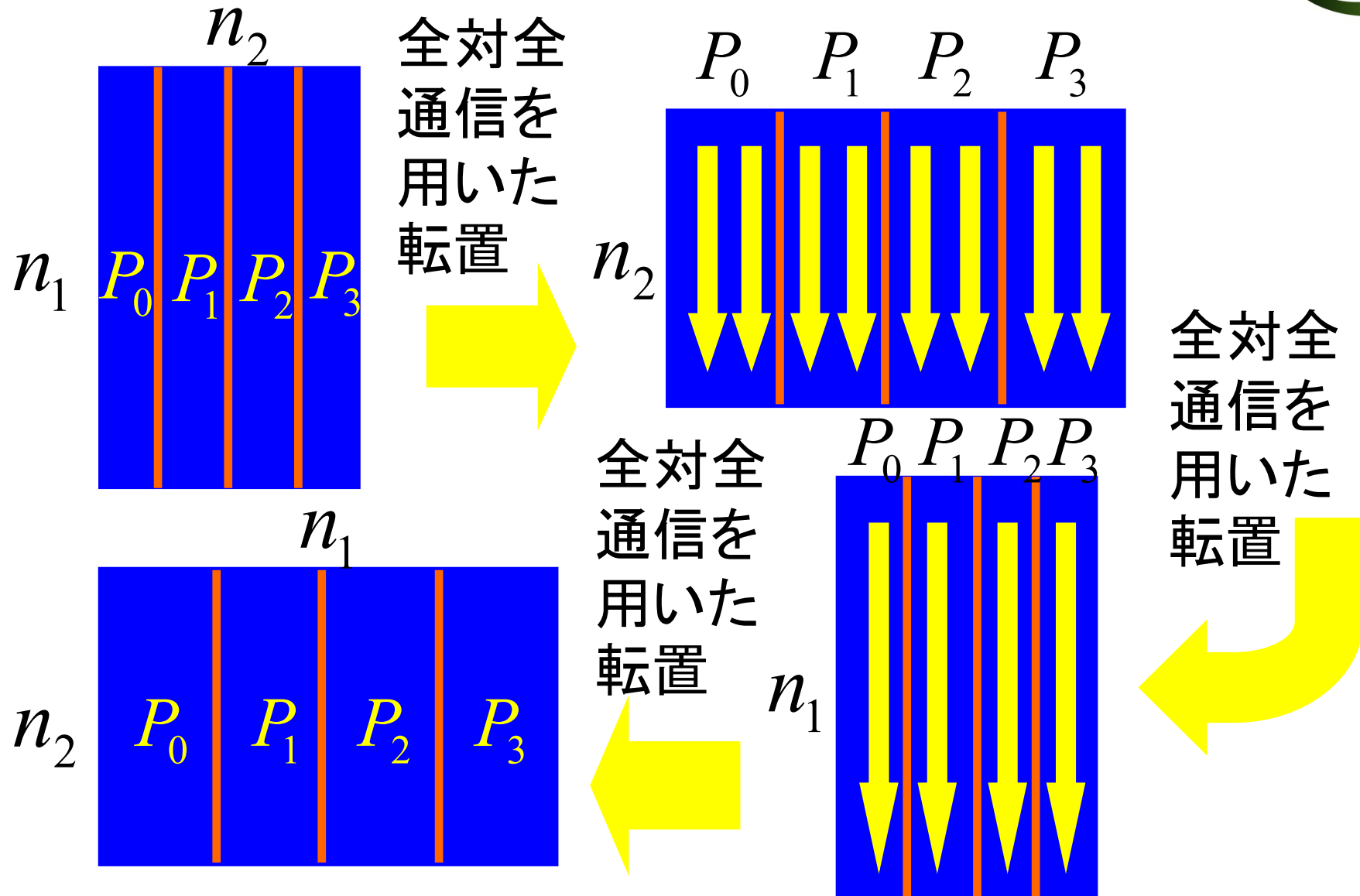
配列の分割方法(4/4)

- ・ 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



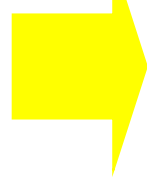
全対全通信 (MPI_Alltoall) を用いた 行列の転置



P0 P1 P2 P3

0	8	16	24
1	9	17	25
2	10	18	26
3	11	19	27
4	12	20	28
5	13	21	29
6	14	22	30
7	15	23	31

全対全
通信

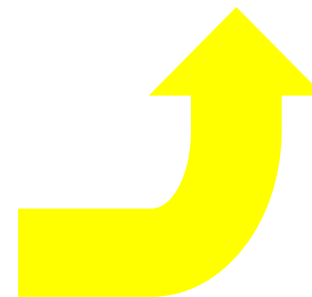


P0 P1 P2 P3

0	2	4	6
1	3	5	7
8	10	12	14
9	11	13	15
16	18	20	22
17	19	21	23
24	26	28	30
25	27	29	31

P0 P1 P2 P3

0 1	2 3	4 5	6 7
8 9	10 11	12 13	14 15
16 17	18 19	20 21	22 23
24 25	26 27	28 29	30 31



ノード内
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)
DO J=1,N1/NPU
  CALL FFT2(B((J-1)*N2+1),N2)
END DO
DO I=1,(N1*N2)/NPU
  B(I)=B(I)*W(I)
END DO
CALL PTRANS(B,A,N2,N1,NPU)
DO J=1,N2/NPU
  CALL FFT2(A((J-1)*N1+1),N1)
END DO
CALL PTRANS(A,B,N1,N2,NPU)
RETURN
END
```

$N1 \times N2$ 行列を $N2 \times N1$ 行列に転置
(MPI_ALLTOALLを使用)
($N1/NPU$)組の $N2$ 点multicolumn FFT

ひねり係数(W)の乗算

$N2 \times N1$ 行列を $N1 \times N2$ 行列に転置
(MPI_ALLTOALLを使用)
($N2/NPU$)組の $N1$ 点multicolumn FFT

$N1 \times N2$ 行列を $N2 \times N1$ 行列に転置
(MPI_ALLTOALLを使用)



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

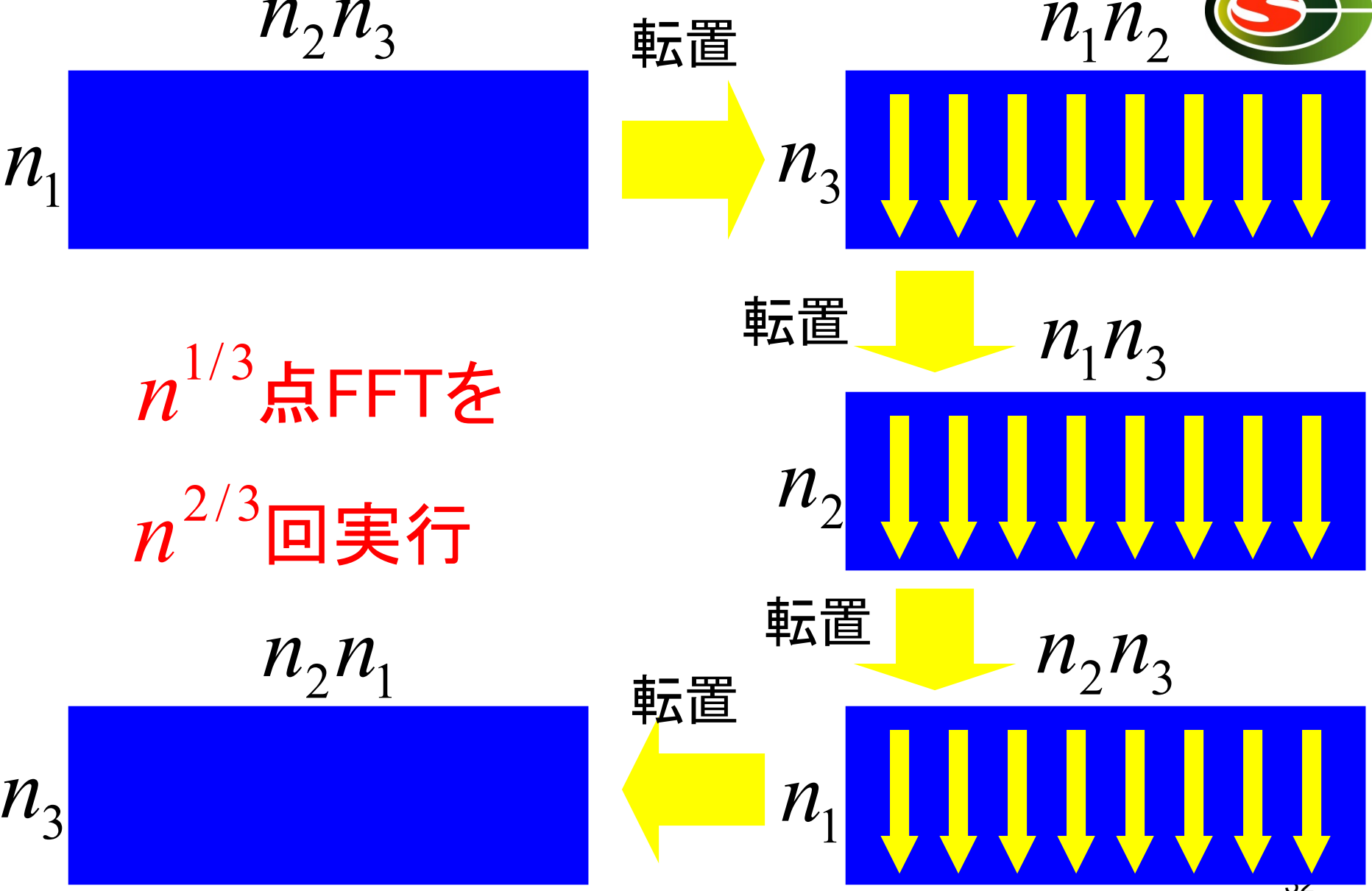


Nine-Step FFTアルゴリズム

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



$n^{1/3}$ 点FFTを
 $n^{2/3}$ 回実行

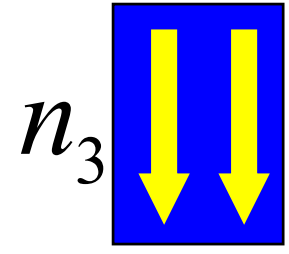
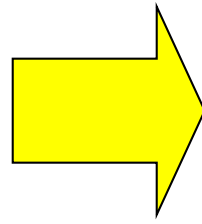


ブロックNine-Step FFTアルゴリズム

$n_2 n_3$

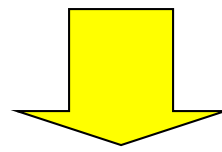
転置

n_B

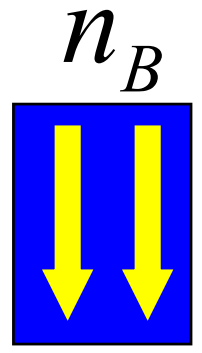
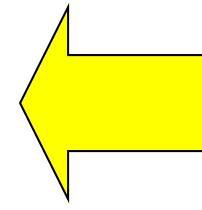


転置

$n_2 n_3$

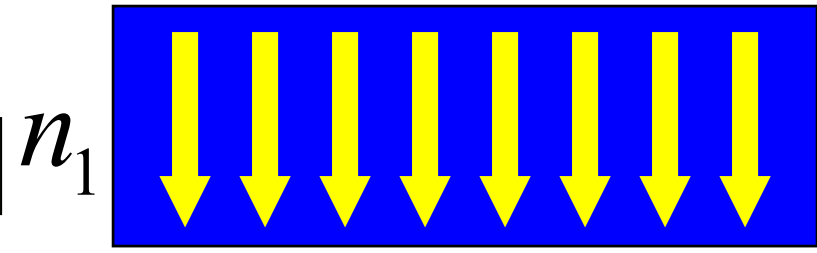
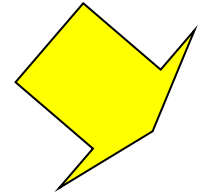


転置



転置

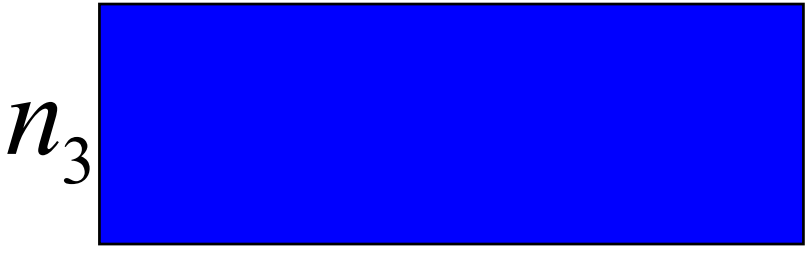
$n_2 n_3$



転置

n_1

$n_2 n_1$





In-Cache FFTアルゴリズム

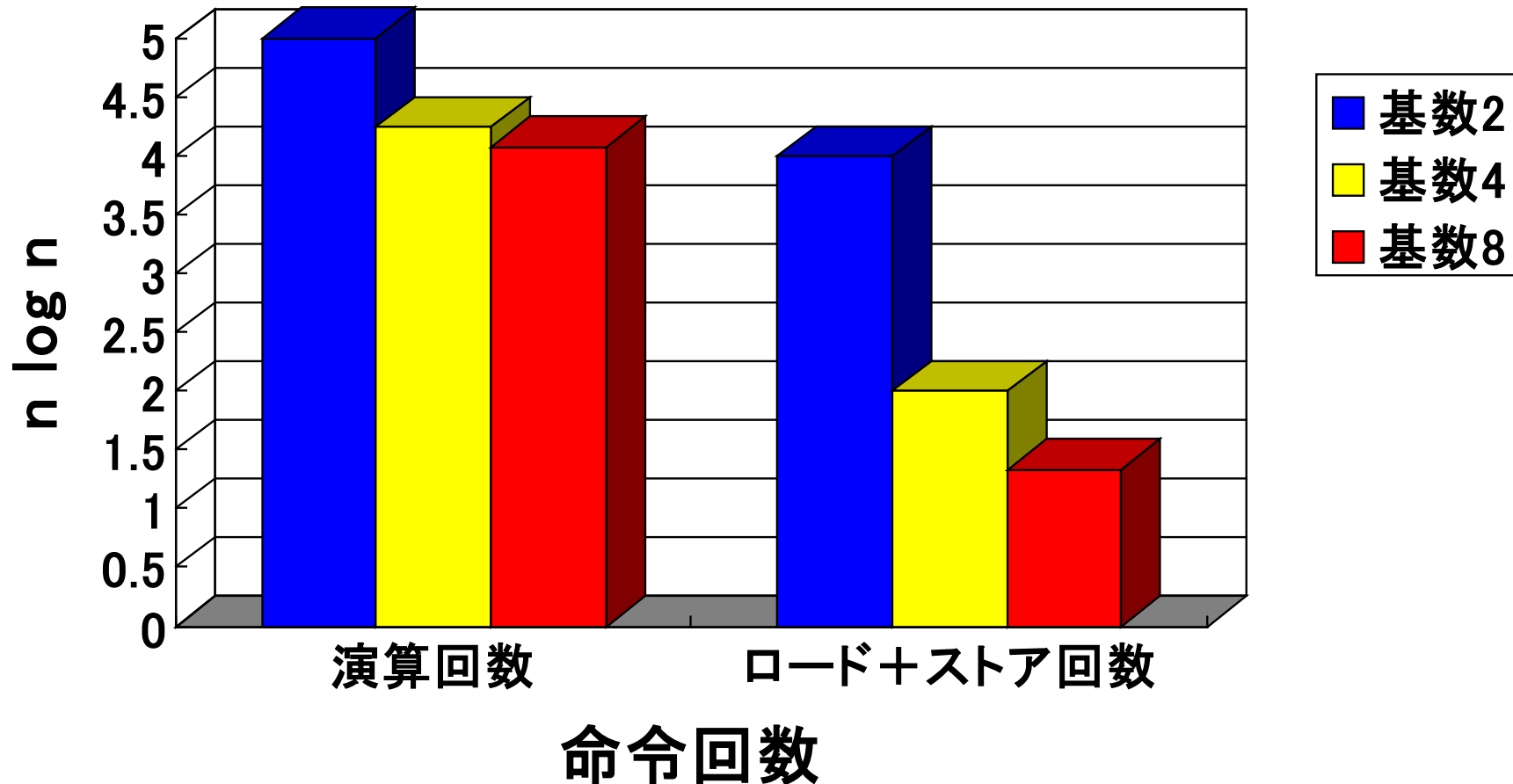
- Multicolumn FFTにおいて、各column FFTがキャッシュに載る場合のin-cache FFTとして、
 - Cooley-Tukeyアルゴリズム(ビットリバーズ処理が必要)
 - Stockhamアルゴリズム(ビットリバーズ処理は不要)が考えられる.
- 高い基数のFFTを積極的に用いることにより、メモリアクセス回数を減らす。
 - 基数4, 8のFFTを組み合わせて使用.
 - 基数8よりもメモリアクセス回数の多い, 基数4のFFTを最大2ステップに抑えることにより, さらにメモリアクセスを減らす.



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

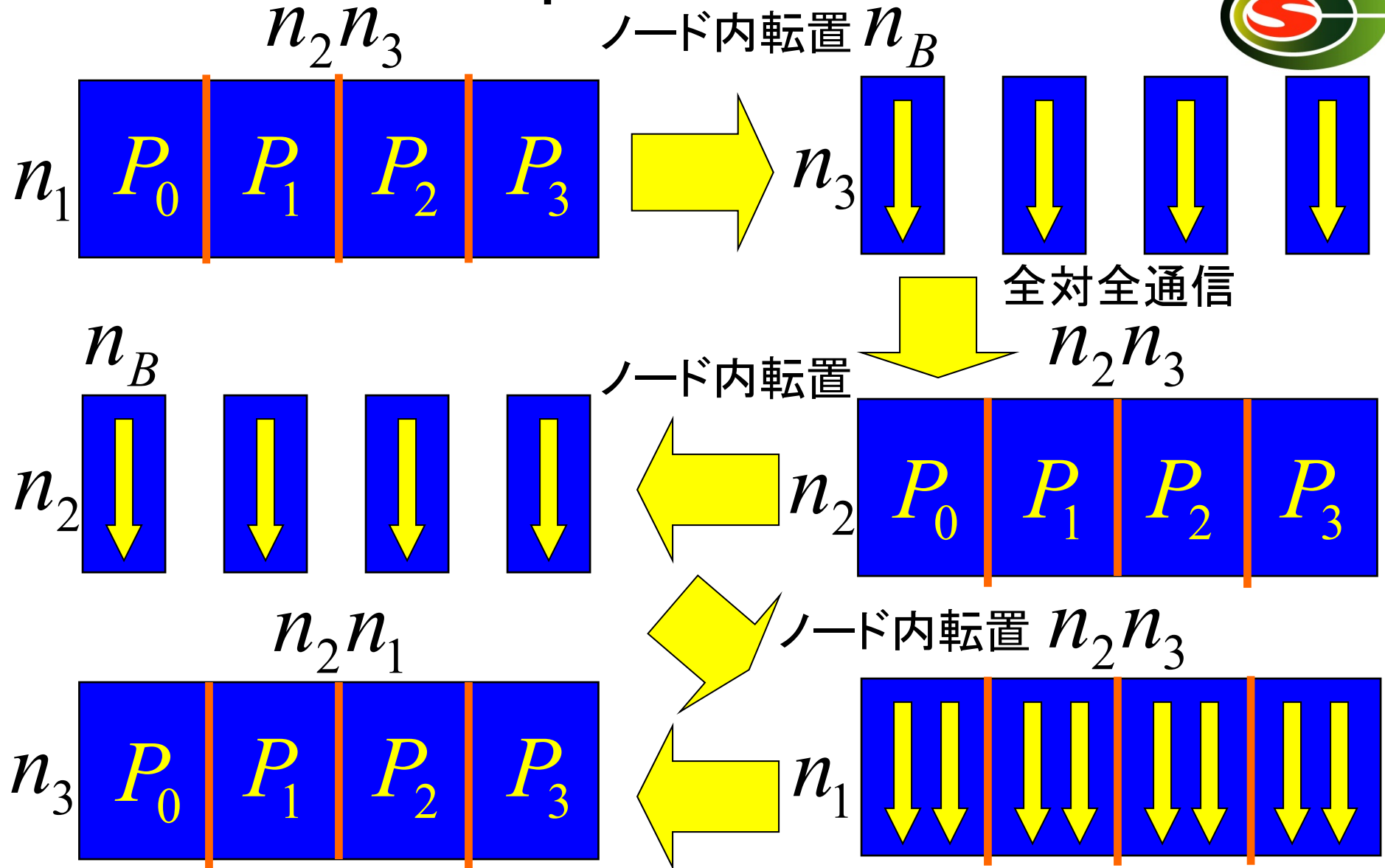




Nine-Step FFTのブロック化

- 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.

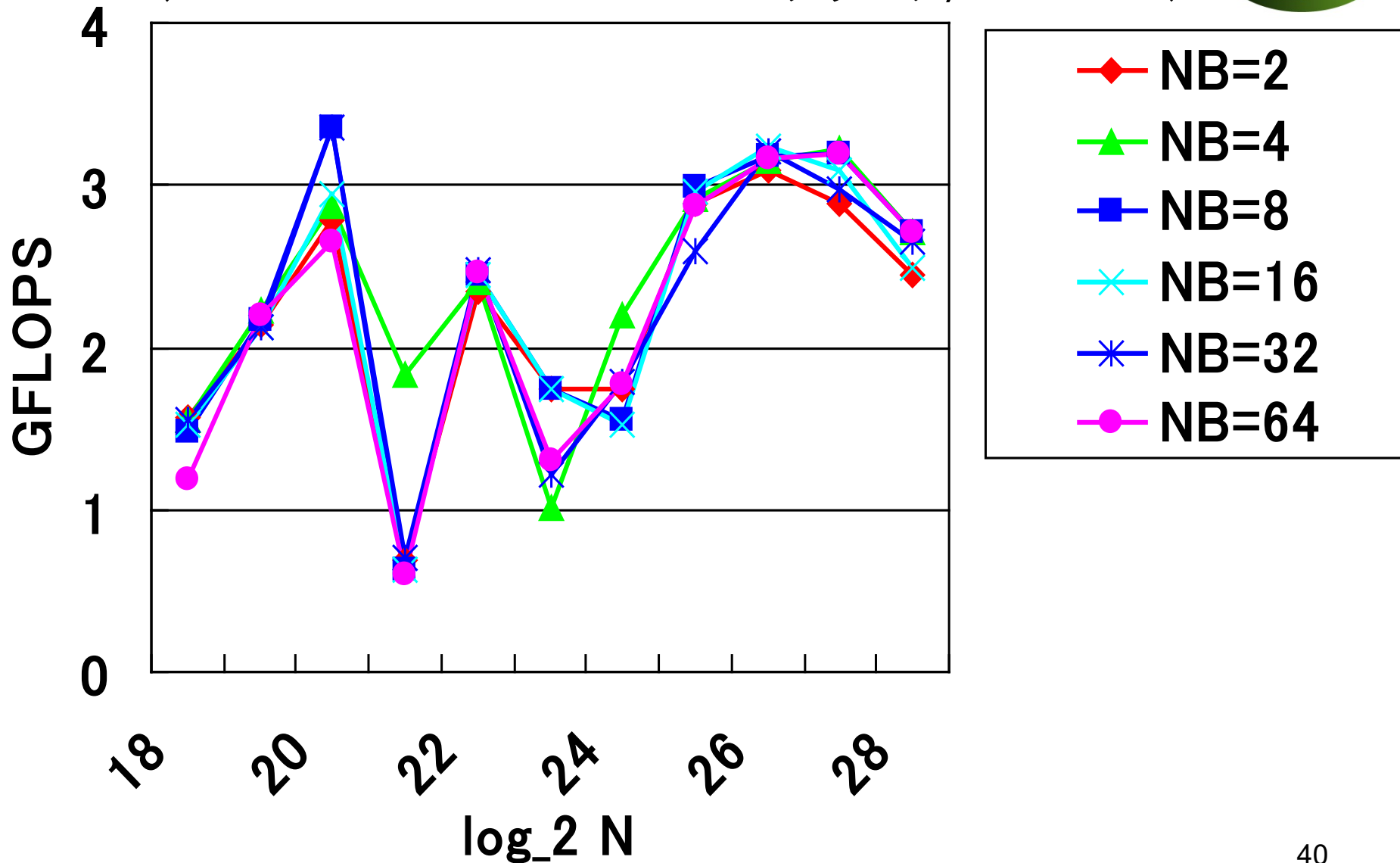
並列Nine-Step FFTアルゴリズム



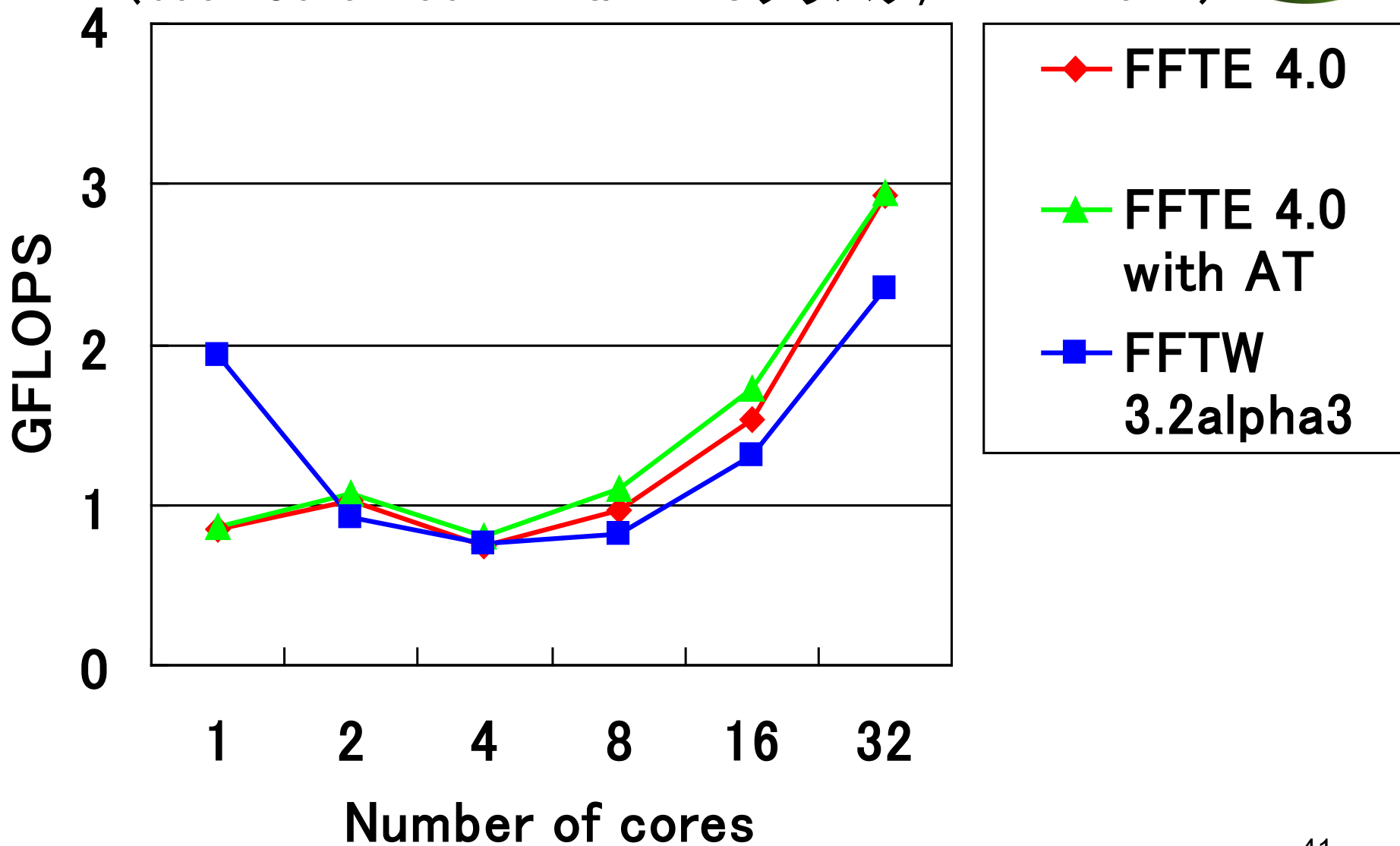
ブロックNine-Step FFTの利点

- 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Nine-Step FFTにおけるブロックサイズ依存性 (dual-core Xeon 2.4GHz PCクラスタ, 32 cores)



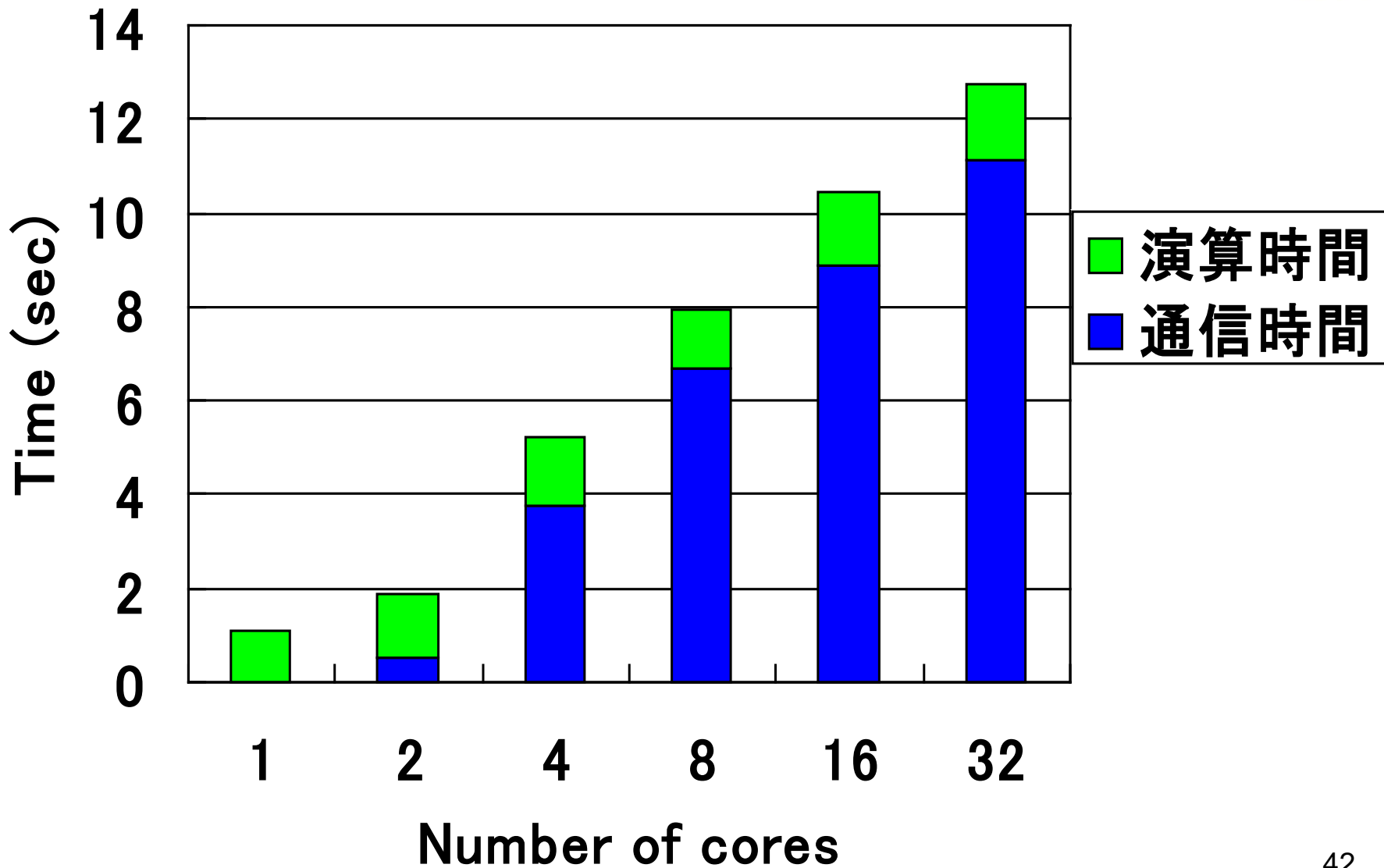
並列一次元FFTの性能

(dual-core Xeon 2.4GHz PCクラスタ, $N = 2^{23} \times P$)



並列一次元FFTの実行時間の内訳

(dual-core Xeon 2.4GHz PCクラスター, $N=2^{23} \times P$)





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.