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

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

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

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

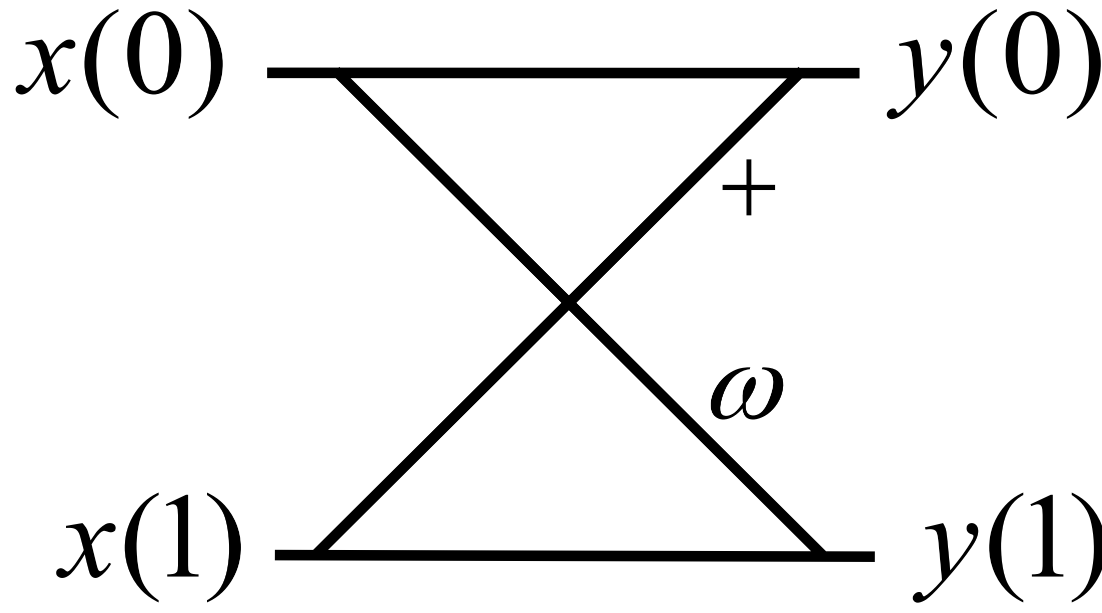
$$T_{DFT} = 8n^2 - 2n$$

- 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

$x(0)$ $x(1)$ $x(2)$ $x(3)$ $x(4)$ $x(5)$ $x(6)$ $x(7)$

ω^0 ω^1 ω^2 ω^3

ω^0 ω^2 ω^0 ω^2

ω^0 ω^0 ω^0 ω^0

$y(0)$ $y(4)$ $y(2)$ $y(6)$ $y(1)$ $y(5)$ $y(3)$ $y(7)$

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

	Input	Output
P_0	$x(0)$	$y(0)$
	$x(1)$	$y(4)$
P_1	$x(2)$	$y(2)$
	$x(3)$	$y(6)$
P_2	$x(4)$	$y(1)$
	$x(5)$	$y(5)$
P_3	$x(6)$	$y(3)$
	$x(7)$	$y(7)$

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，

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

$n = n_1 n_2$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.

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

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

- 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

$\sqrt{n}$ 点FFTを

$\sqrt{n}$ 回実行

n_2

n_1

転置

n_1

n_2

n_2

n_1

転置

n_1

n_2

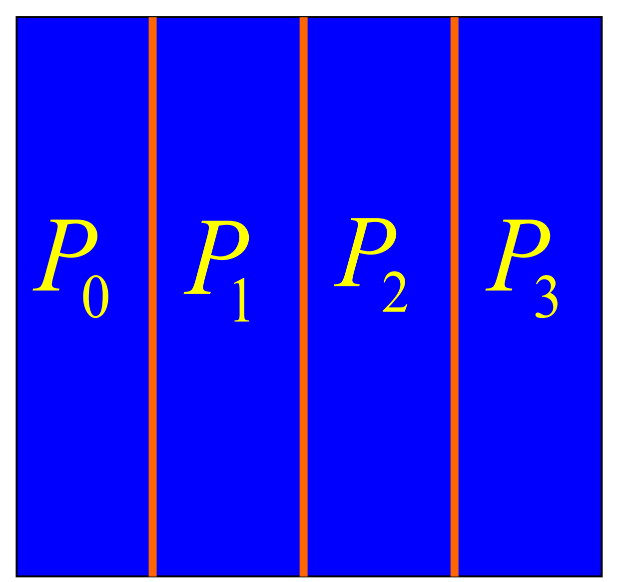
転置

Six-Step FFTのプログラム例

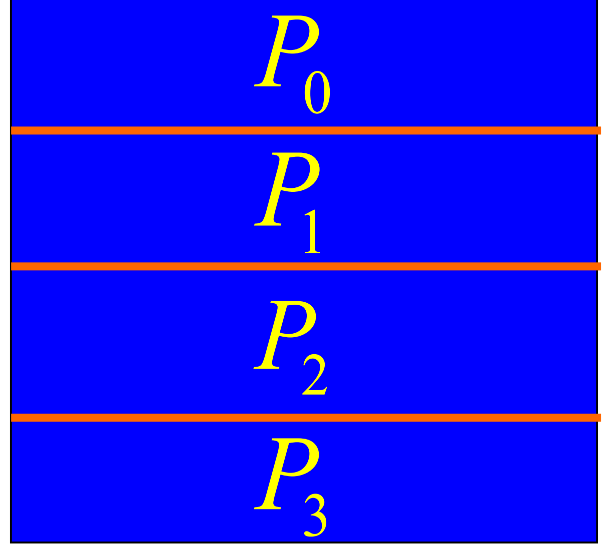
```
      SUBROUTINE FFT(A,B,W,N1,N2)
      COMPLEX*16 A(*),B(*),W(*)
C
      CALL TRANS(A,B,N1,N2)              N1 x N2行列をN2 x N1行列に転置
      DO J=1,N1
        CALL FFT2(B((J-1)*N2+1),N2)      N1組のN2点multicolumn FFT
      END DO
      DO I=1,N1*N2
        B(I)=B(I)*W(I)                   ひねり係数(W)の乗算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

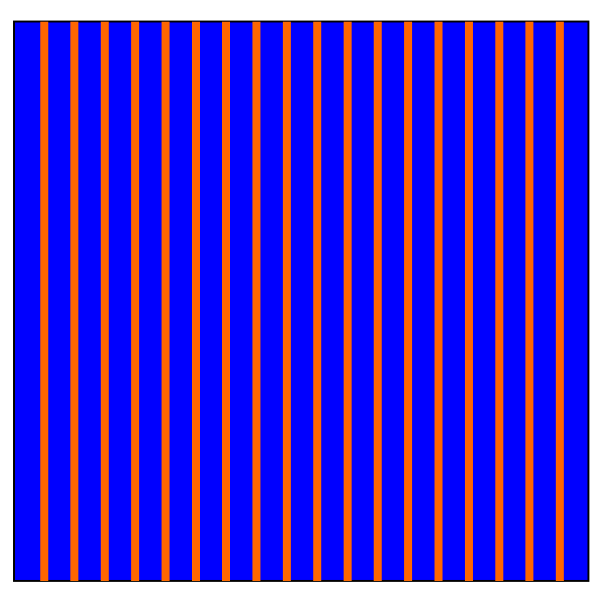


行方向に分割したブロック分割

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…

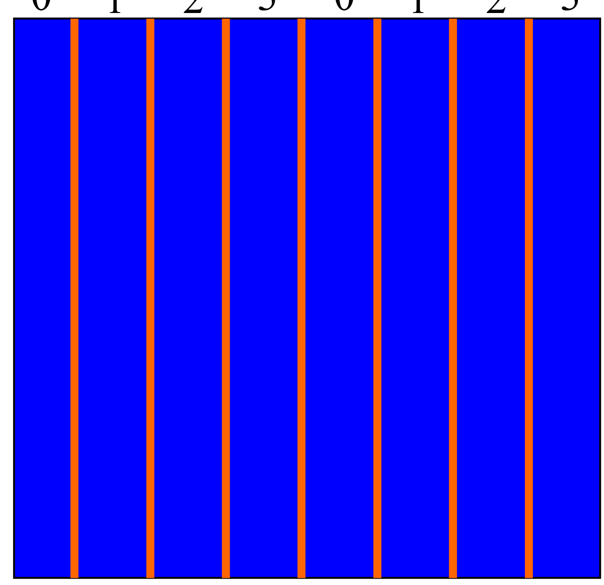


列方向に分割したサイクリック分割

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

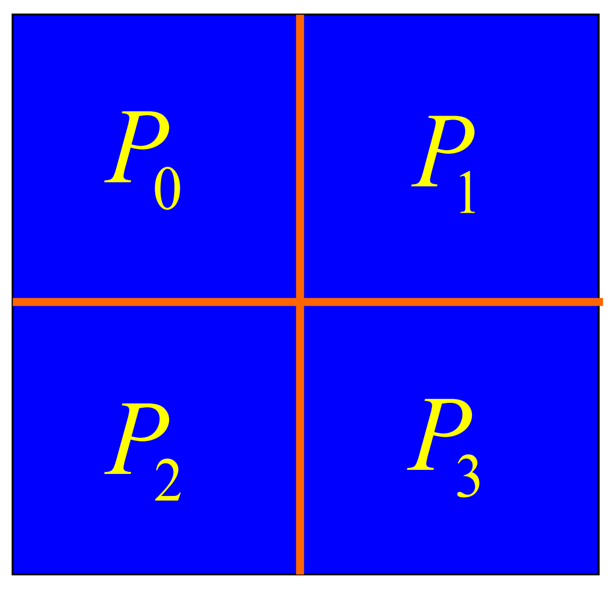
P_0 P_1 P_2 P_3 P_0 P_1 P_2 P_3



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

n_2

n_1 P_0 P_1 P_2 P_3

全対全
通信を
用いた
転置

P_0 P_1 P_2 P_3

n_2

全対全
通信を
用いた
転置

P_0 P_1 P_2 P_3

n_1

n_1

全対全
通信を
用いた
転置

n_2 P_0 P_1 P_2 P_3

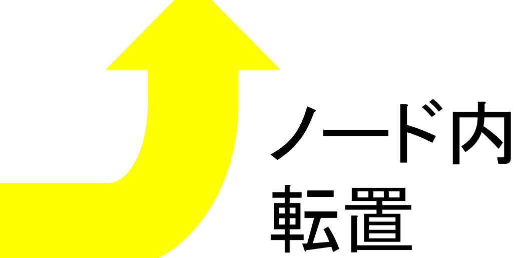
全対全通信(MPI_Alltoall)を用いた行列の転置

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)          N1 x N2行列をN2 x N1行列に転置
                                          （MPI_ALLTOALLを使用）
      DO J=1,N1/NPU
        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
                                          （MPI_ALLTOALLを使用）
      DO J=1,N2/NPU
        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

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

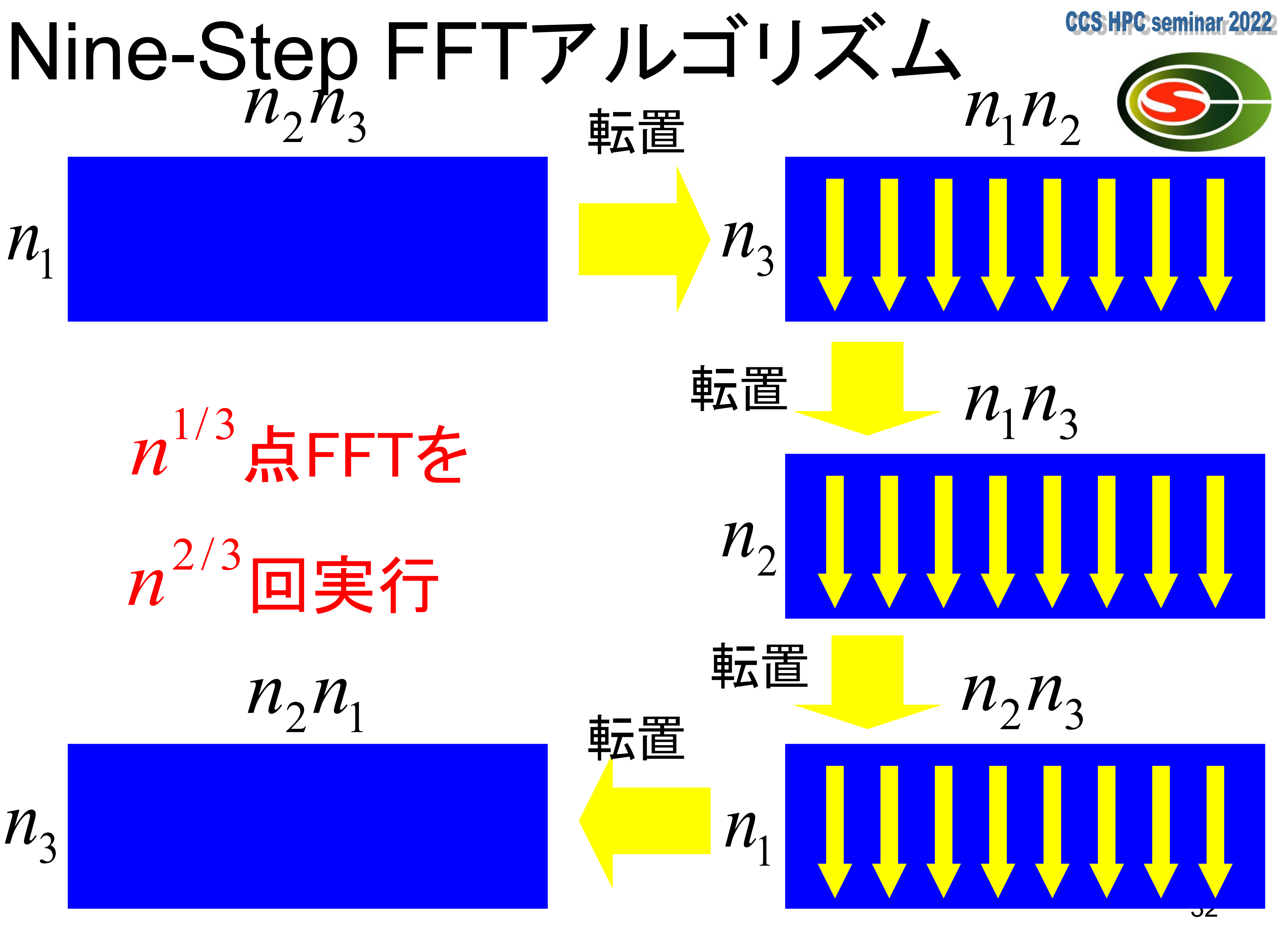
$$y(k_3,k_2,k_1)=\sum_{j_1=0}^{n_1-1}\sum_{j_2=0}^{n_2-1}\sum_{j_3=0}^{n_3-1}x(j_1,j_2,j_3)\omega_{n_3}^{j_3k_3}$$

$$\omega_{n_2n_3}^{j_2k_3}\omega_{n_2}^{j_2k_2}\omega_{n}^{j_1k_2}\omega_{n_1n_2}^{j_1k_2}\omega_{n_1}^{j_1k_1}$$

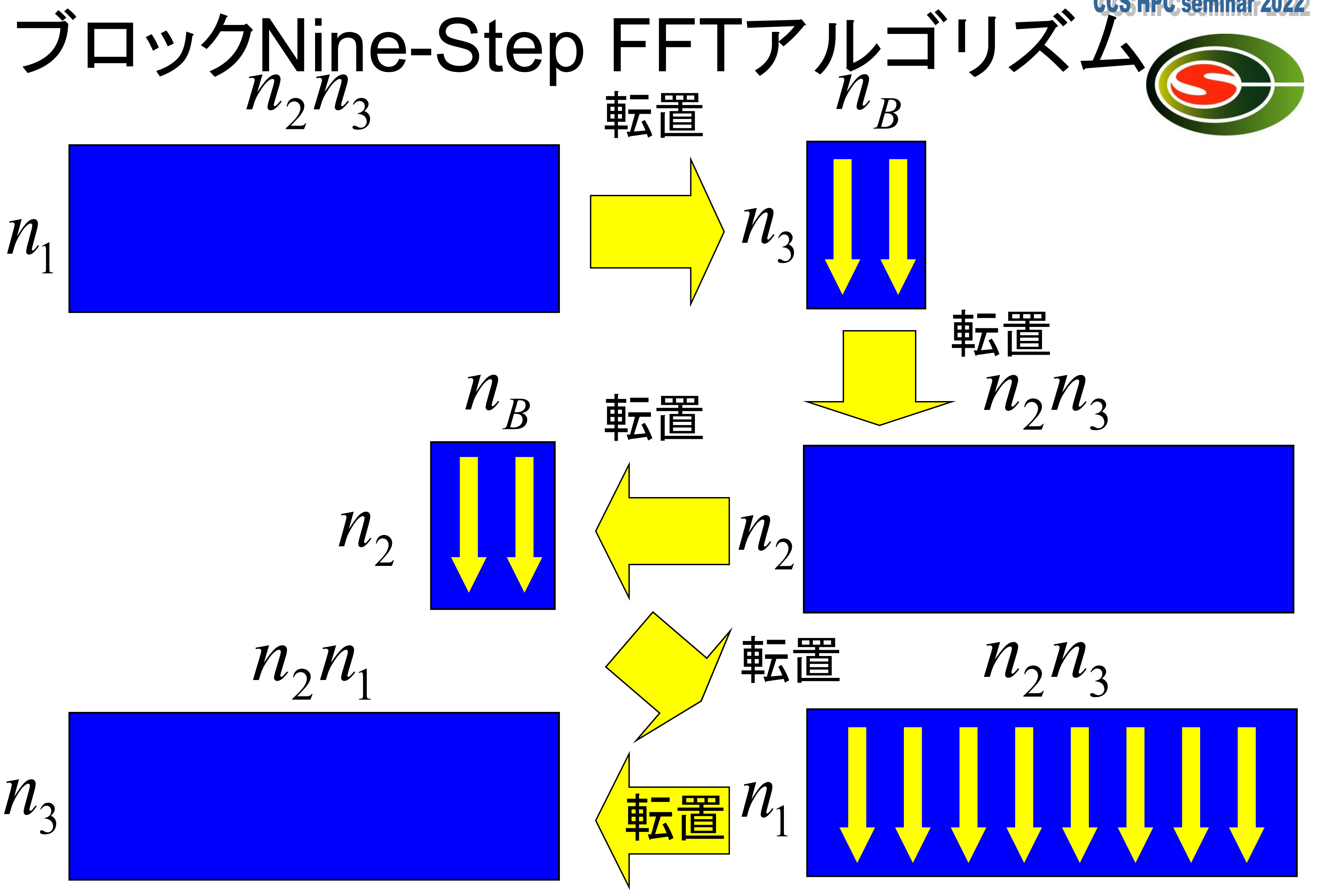
$n^{1/3}$ 点column FFTにして，キャッシュミスを低減

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
CCS HPC seminar 2022
$n_2 n_3$
n_1
転置
$n_1 n_2$
n_3
転置
$n_1 n_3$
n_2
$n^{1/3}$点FFTを
$n^{2/3}$回実行
転置
$n_2 n_3$
n_1
転置
$n_2 n_1$
n_3

ブロックNine-Step FFTアルゴリズム



In-Cache FFTアルゴリズム

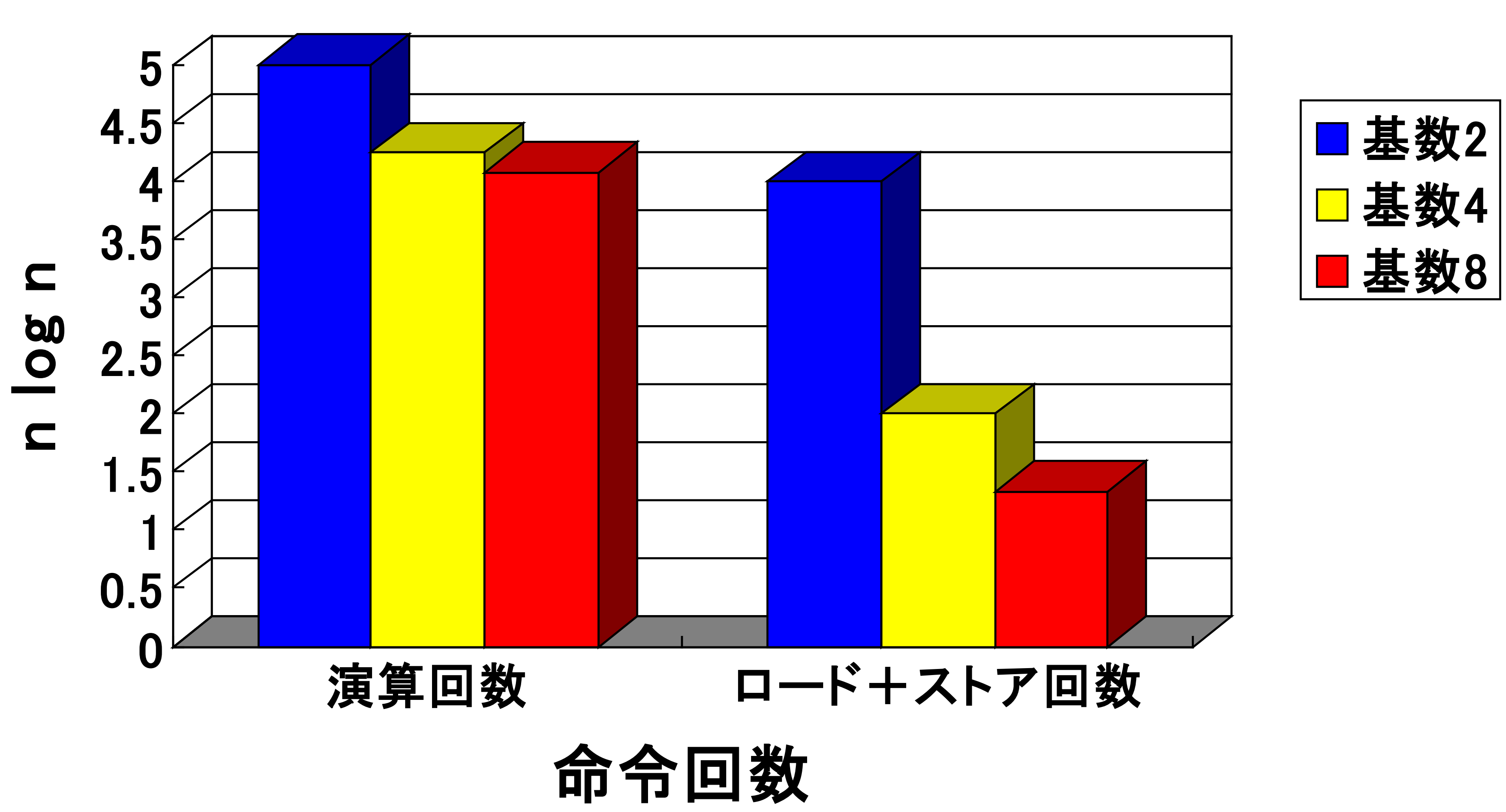
- Multicolumn FFTにおいて，各column FFTがキャッシュに載る場合のin-cache FFTとして，
  - Cooley-Tukeyアルゴリズム（ビットリバース処理が必要）
  - Stockhamアルゴリズム（ビットリバース処理は不要）

  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

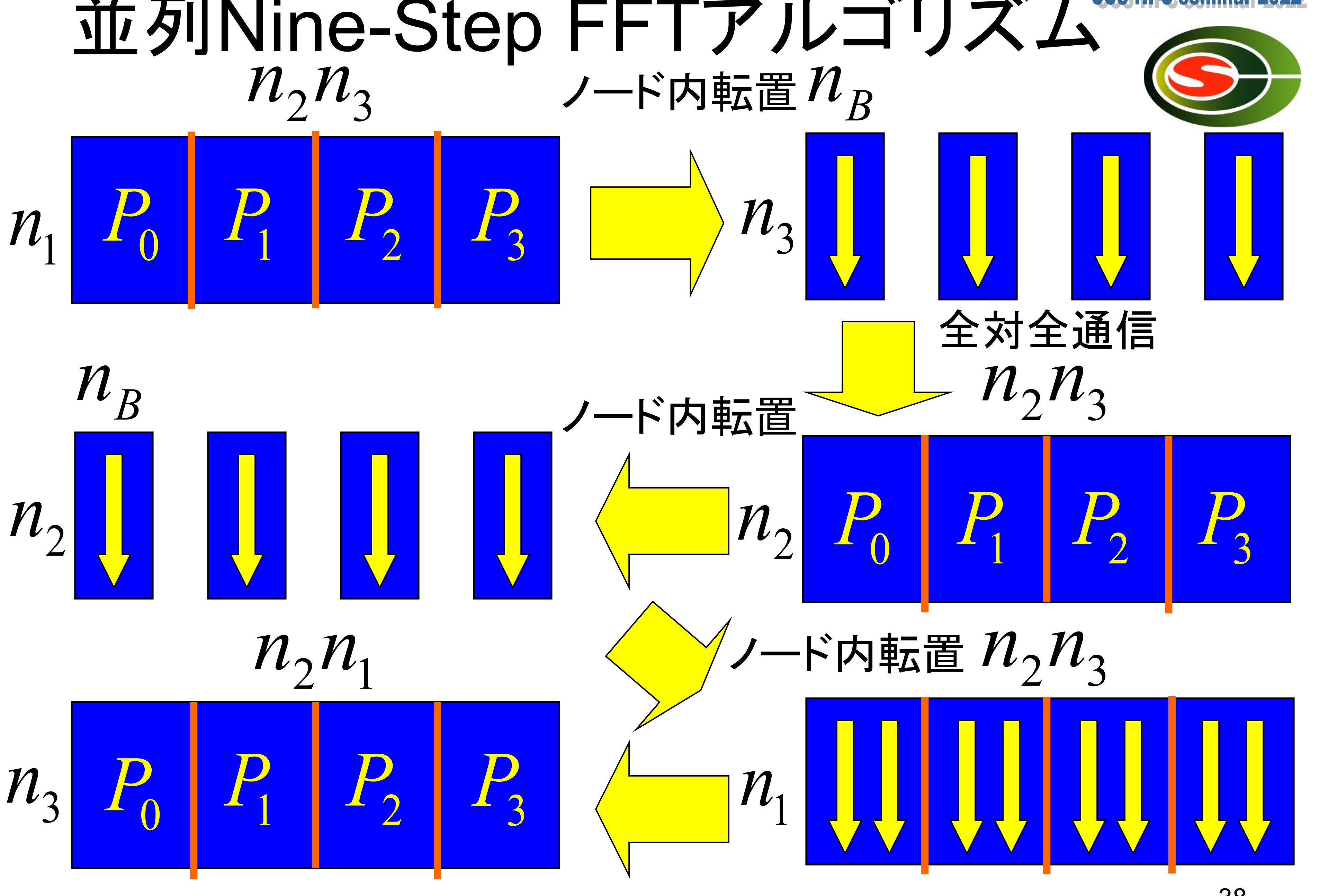
	基数2	基数4	基数8
ロード＋ストア回数	8	16	32
乗算回数	4	12	32
加算回数	6	22	66
総浮動小数点演算回数 $(n\log_2 n)$	5	4.25	4.083
浮動小数点演算命令数	10	34	98
浮動小数点演算命令数とロード＋ストア回数の比	1.25	2.125	3.063

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
CCS HPC seminar 2022
$n_2 n_3$
n_1
P_0
P_1
P_2
P_3
ノード内転置 n_B
n_3
全対全通信
$n_2 n_3$
n_B
ノード内転置
n_2
n_2
P_0
P_1
P_2
P_3
$n_2 n_1$
ノード内転置 $n_2 n_3$
n_3
P_0
P_1
P_2
P_3
n_1

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.

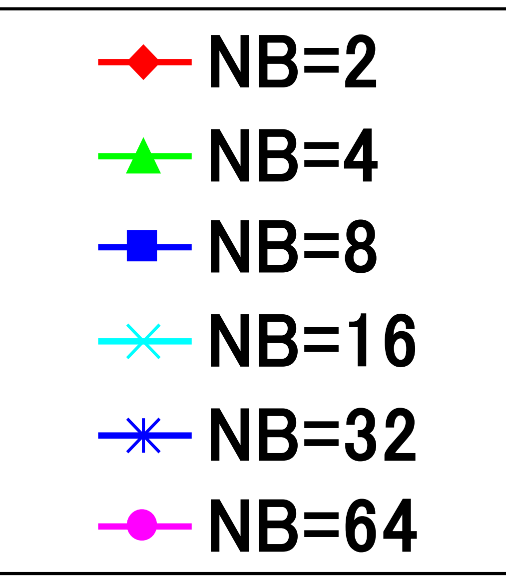
並列Nine-Step FFTにおけるブロックサイズ依存性
（dual-core Xeon 2.4GHz PCクラスタ, 32 cores）

GFLOPS

4
3
2
1
0

18 20 22 24 26 28

log_2 N



GFLOPS
4
3
2
1
0

1 2 4 8 16 32

Number of cores

FFTE 4.0
FFTE 4.0 with AT
FFTW 3.2alpha3

並列一次元FFTの実行時間の内訳
(dual-core Xeon 2.4GHz PCクラスタ, N=2^23xP)

Time (sec)

14
12
10
8
6
4
2
0

1 2 4 8 16 32

Number of cores

演算時間
通信時間

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．

課題

- 離散フーリエ変換（DFT）のO(N^2)のアルゴリズムと，高速フーリエ変換（FFT）のO(NlogN)のアルゴリズムを任意のプログラミング言語で実装し，n=65536の場合の実行時間を比較せよ．