

主双対内点法に対する高速化・並列化の技術

山下 真

ここでは、2010年現在のSDPソルバーによって、どの程度の規模のSDPをどの程度の時間で解くことができるかを紹介する。主双対内点法の発展に伴うSDPソルバーの開発の歴史は、すでに15年に達しており、SDPの性質によっては100倍以上の高速化が達成されている。また、並列計算の導入で、これまで求解できなかった制約が数万に達する超大規模SDPを実際に解くことが可能になってきている。特に、並列計算ソルバーSDPARAは、超大規模SDPを解く際に、主双対内点法の性質にあわせて複数の並列計算手法を組み合わせており、数値計画分野とHigh Performance Computingの融合として捉えても興味深い。

キーワード：半正定値計画問題、主双対内点法、ソフトウェア、High Performance Computing、並列計算

1. ソルバー開発によるSDP高速求解への挑戦

SDPソルバーは、福田光浩氏の記事にあるように主双対内点法を実装した代表的なものだけでも、CSDP, SDPA, SDPT3, SeDuMiなどがある。これらは、1995年のSDPAの開発以降、お互いに刺激を受けながら開発が進んでおり、15年以上におよぶ開発を経て、各SDPソルバーは大きな高速化を達成している。表1では、SDPAがバージョンアップに伴ってどれだけの計算時間短縮を実現してきたかをまとめた。数値実験環境としては、Xeon E5520 (2.27 GHz) を2個と24GBの搭載メモリのLinux (RHEL5) である。なお、表1ではSDPAのみを扱っているが、これは著者らのグループがSDPAを開発してきたため、2000年以前の旧バージョンも数値実験に利用できたことによる。各SDPソルバーの最新バージョンが計算時間については、Mittelmannのベンチマークのページ¹で詳細な結果を確認することもできる。

なお、control10, gpp500-1は、SDPの標準的なベンチマーク問題集であるSDPLIB[1]からの引用であるが、SDPLIBが整備されたのは1999年のことであり、近年のSDPソルバーではほとんどの問題が100

秒程度で解けてしまう。ここ数年は、Mittelmannのページ¹にあるより大規模なベンチマークが標準的なベンチマークとなりつつあり、NH⁺, nonc_500, yalsdpは、ここからの引用である。

1.1 高速化達成の原動力

SDPソルバーの高速化を理解するには、アルゴリズム的な視点とハードウェアからの視点の両輪が同時に必要であるが、ここではアルゴリズムからの視点に重きを置く。ハードウェアからの視点は藤澤克樹氏の記事が詳しいので、そちらを参照してほしい。

SDPソルバーが表1にある大きな高速化を達成したのは、アルゴリズム面では以下の4つの要素によるところが大きい。

1. 入力行列 F_1, \dots, F_m の疎性を活用し、Schur 補完行列の要素計算の高速化[Ver 2⇒3]
2. BLAS/LAPACKの導入による密行列演算の高速化[Ver 5⇒6]
3. Schur 補完行列が疎行列となった場合に、疎コレスキー分解の採用[Ver 6⇒7]

表1 SDPAのバージョンと計算時間(秒)

Version	開発年	control10	gpp500-1	NH ⁺	nonc_500	yalsdp
2	1996	683.11	1199.03	3039.70	66891.09	3304.66
3	1997	328.21	1830.92	397.07	14369.86	1534.70
4	1998	118.77	72.54	310.42	30650.07	1233.32
5	1999	132.31	30.96	189.47	35328.96	1154.81
6	2002	48.26	2.77	92.24	789.92	315.45
7	2009	19.22	2.07	18.87	5.35	86.99
Ver 2から7での高速化		35倍	579倍	161倍	12503倍	37倍

¹ <http://plato.asu.edu/ftp/sdp/00README>

やました まこと

東京工業大学 大学院情報理工学研究科数理・計算科学専攻

〒152-8552 目黒区大岡山2-12-1

4. Schur 補完行列の要素計算のマルチスレッド化による並列計算[Ver 6⇒7]

この4つの要素は、いずれも Schur 補完行列に関係しているが、これは一般に Schur 補完行列の計算時間が主双対内点法の計算時間の80%以上に達するためである。中田和秀氏の記事に主双対内点法の枠組は記されているが、Schur 補完行列は最適解に近づけるために Lagrange 乗数をどれだけ変化させるか、を計算するための連立方程式の係数行列であるため、主双対内点法での核となり、計算時間も集中しやすい。

なお、括弧書きしたのは SDPA のどのバージョンアップに対応しているかであり、これらの要素は他の SDP ソルバーにも取り入れられている。例えば、1の疎性の活用については、SDPA に最初に実装された[2]が、その後 CSDP, SDPT3 にも導入されている。逆に3の疎コレスキー分解は SeDuMi, SDPT3 が Matlab の関数として利用していたが、SDPA では C++ から直接利用できる MUMPS² のライブラリにより導入した形である。また、4のマルチスレッド化は SDPA の最新技術でもあり、他の SDP ソルバーが今後追随する可能性が高い。

以下では、この4つの要素について順次触れていきたい。

1.1.1 入力行列の疎性の活用

Schur 補完行列 B の各要素は、

$$B_{ij} = (YF_i X^{-1}) \cdot F_j \quad (1)$$

で計算されるが、 F_i, F_j の要素に着目すると以下のように書き下すこともできる。

$$B_{ij} = \sum_{\gamma=1}^n \sum_{\epsilon=1}^n \left(\sum_{\alpha=1}^n \sum_{\beta=1}^n [Y]_{\gamma\alpha} [F_i]_{\alpha\beta} [X^{-1}]_{\beta\epsilon} \right) [F_j]_{\epsilon\gamma} \quad (2)$$

ただし、 $[F_i]_{\alpha\beta}$ は F_i の (α, β) 要素である。この式の場合、入力行列 F_i と F_j の要素のほとんどが0であった場合（つまり、疎行列であった場合）、それらの計算を省略し、非ゼロ要素の計算だけを行えば計算時間を短縮できる。実際、組合せ最適化などに代表される SDP 緩和では、入力行列が疎行列になる場合が多く、大幅な計算時間短縮が実現される。

表1の NH⁺ では、Ver 2 から Ver 3 になるときに大幅な計算時間短縮となっている。これは、入力行列 F_1, \dots, F_{948} の平均非ゼロ要素が133個のみと、完全に密な状態（約24万）に対して極めて疎な状態であり、文献[2]による効果が著しく現れるためである。

1.1.2 BLAS/LAPACK の導入

主双対内点法は、密行列の計算も多く含まれる。例えば、前述の $B_{ij} = (YF_i X^{-1}) \cdot F_j$ も F_i, F_j が疎行列でない場合には、 $YF_i X^{-1}$ に密行列同士の積が2回、さらに F_j との密行列同士の内積計算が1回必要である（一般に、主双対内点法では変数行列 X, Y を密行列形式でメモリ上に格納している）。他にも、 X, Y のコレスキー分解などが必要である。

密行列の数値計算ライブラリとしては、行列積など基本的な演算を扱う BLAS (Basic Linear Algebra Sets)³ や BLAS を用いて連立方程式の求解などを行う LAPACK (Linear Algebra PACKage)⁴ がある。これらのライブラリは、CPU キャッシュやメモリ構造などの性質を積極的に利用することで、CPU の理論ピークに近い性能を達成している。

SDPA, CSDP では、ATLAS や Intel MKL といった種類の BLAS を利用できるようになっている。また、Matlab 上のソフトウェアである SDPT3, SeDuMi も、内部的には Matlab が呼出している Intel MKL で密行列演算を処理している。

表1の control 10 で、Ver 5 から Ver 6 で計算時間が2.5分の1に短縮されるのは、BLAS/LAPACK を適切に利用できている効果である。

1.1.3 疎コレスキー分解の採用

Schur 補完行列 B は、主双対内点法の枠組では必ず正定値行列となるため、下三角行列 L で $B = LL^T$ とコレスキー分解できる。これにより、連立方程式 $Bdx = r$ を解く際に、 $L^T \tilde{d}x = r$ の後進代入、 $Ldx = \tilde{d}x$ の前進代入となり、Gauss の消去法や LU 分解よりも短時間で dx を求められる。

量子化学などから生じる SDP では一般に、 B がすべての要素で0ではない、完全な密行列となるため、LAPACK のルーチンを呼ぶことが可能である（図1）。その一方、センサーネットワーク問題の SDP では、ほとんどの要素が0となり（図2）、これに対応した疎コレスキー分解を適用する必要がある。なお、図1, 2では、 B が対称行列であることから、上三角のみ非零要素の位置を示している。

SDPA では、Ver 7 から MUMPS による疎コレスキー分解が導入されたが、この効果は、nonc_500 で見て取れる。nonc_500 の場合、Schur 補完行列の非

² <http://mumps.enseeiht.fr/>

³ <http://www.netlib.org/blas/>

⁴ <http://www.netlib.org/lapack/>

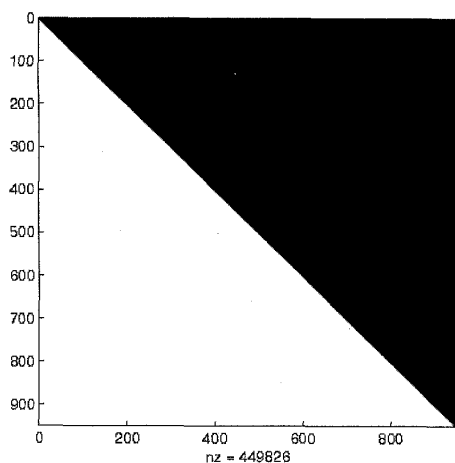


図1 量子化学から発生する Schur 補完行列の非零要素の位置

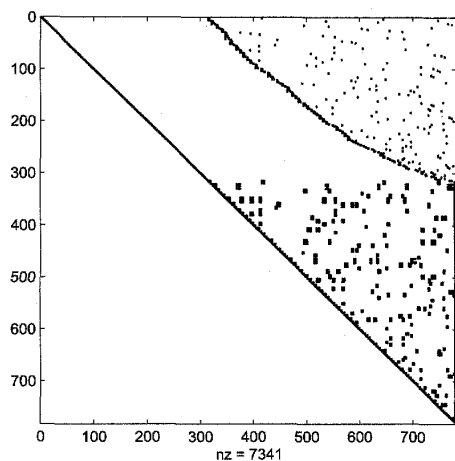


図2 センサーネットワーク問題から発生する Schur 補完行列の非零要素の位置

ゼロ要素数は、89,732個しかなく、これは、 $m^2=約$ 2,500万に対して、0.36%である。

1.1.4 マルチスレッド化

近年のCPUは、ネットブックに搭載されているAtomでも一部マルチコア化が進んでおり、並列計算がより身近になっている。後述のSDPARAでは複数のPCからなるクラスターで並列計算を実行するように実装しているが、SDPAではVer 7より、この実装の一部を取り込み、Schur補完行列の計算時間がマルチスレッドでの並列計算で大幅に短縮されている。

Schur補完行列は、 $B_{ij}=(YF_iX^{-1})\cdot F_j$ で評価されるが、各*i*行では YF_iX^{-1} の積計算のあとに F_j との内積計算となる。つまり、各行の計算は完全に独立しており、行ごとに違うスレッドに計算させることが可能である。SDPARAでは、このような分割をrow-wise distributionと呼んでいる。例えば、図3は**B**

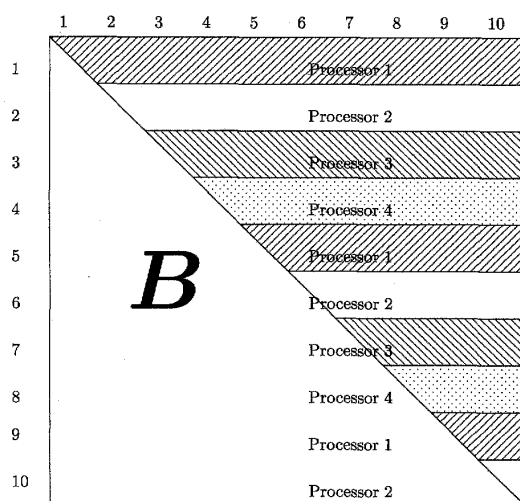


図3 row-wise distribution

表2 各ソルバーによる計算時間

問題名	CSDP	SDPA	SDPT3	SeDuMi
mater-6	10409.33	108.78	146.14	187.73
neulg	385.11	103.29	374.69	211.77
shmup4	2409.69	343.36	1065.30	35774.77
t_texture	2183.78	124.39	280.31	35494.91

が10×10行列だったとして、4コア利用できるときを示している(ただし、**B**は対称行列であるため、上三角だけを評価している)。

マルチスレッド化により、Schur補完行列の評価が94%を占めるNH⁺のような問題をSDPA Ver 7では高速に解くことができる。

1.2 数値実験結果

表2では、現状のソルバー(SDPA, SeDuMi, CSDP, SDPT 3)でどれほどの規模の問題がどの程度の時間で解けるか、についてまとめてみた。表2で扱った問題の規模は、表3の通りである。SDPの問題の規模は、大まかにいうと、*m*(入力行列の個数)、*n*(変数行列の次元)、*nnz*(入力行列の非ゼロ要素の数の総和)、*sd*(Schur補完行列の非ゼロ要素の密度)で表される。また、*n*の列に括弧書きしてある数字は、対角ブロック表現したときの最大ブロックの次元である。

なお、表1で扱った問題の規模は表4にまとめてある。表3と表4は、現状のSDPソルバーが標準的に求解できる規模の目安として見ることもできる。

2. 並列計算による大規模SDPへの挑戦

複数のPCを高速ネットワークで接続することで並列計算環境を構築するPCクラスターの導入が進み、大

表3 SDP問題の規模

問題名	m	n	nnz	sd
mater-6	20463	54628(11)	1325669	0.20%
neu1g	3002	252(252)	63503	100%
shmup4	800	4961(1681)	89520	100%
t_texture	1802	1801(1801)	14402	100%

表4 表1のSDP問題の規模

問題名	m	n	nnz	sd
control10	1326	150(100)	622700	100%
gpp500-1	501	500(500)	250500	100%
NH ⁺	948	1406(306)	126396	100%
nonc_500	4990	2998(6)	17479	0.36%
yalsdp	5051	300(100)	2000200	100%

規模な数値計算問題を実際に解く環境が近年整ってきた。並列SDPソルバーとしては、福田光浩氏の記事にまとめられているようにSDPARA[7]やPCSDP[3]がある。主双対内点法の場合、ほとんどの計算時間はSchur補完行列に費されるため、この2つの並列ソルバーの並列化はSchur補完行列の計算に集約されている。しかし、最新のSDPARAは1.1.3節にある疎なSchur補完行列に対しても並列計算を適用でき、この点でPCSDPよりも優れている。ここでは、SDPARAの並列化について解説した後、複数PCでどの程度の高速化が得られるのか、また、どの程度の規模まで解くことができるのかをまとめることとしたい。

2.1 SDPARAにおける並列計算

Schur補完行列に関する計算は、その要素の評価とコレスキー分解であるが、SDPARAでは、これらのボトルネックをELEMENTSとCHOLESKYと呼んでいる。

Schur補完行列が完全に密行列となっている場合、ELEMENTSの計算は1.1.4節で取り上げたようにrow-wise distributionによって行う。つまり、 N 台のPCがあるときに p 番目のPCは、 $\mathbf{B} \in \mathbb{S}^m$ のうち、 $R_p = \{i: 1 \leq i \leq m, (i-1)\%N = p-1\}$ の行を評価する。ただし、 $a\%b$ は a を b で割ったときの余りである。このように分割することで、 p 番目のPCがメモリ上に保存すべき \mathbf{B} の領域も明確になる。したがって、仮に m が数万を超えて大きくなり、 \mathbf{B} が1台のPCのメモリ容量を超えたとしても、複数PCに分散保持できるため、さらに大きな \mathbf{B} を保持できるようになっている。

Schur補完行列が疎行列となる場合は、ELE-

MENTSの計算割り当ては複雑になる。図2からも簡単に予想がつくように、row-wise distributionでは各PCの計算負荷にバラツキが大きくなり、より多くの要素を割り当てられたPCの計算時間に全体の計算時間が律速されてしまう。

SDPARAでは、計算時間を計算式から予測することで、計算割り当てを算出する仕組みを導入している。要素 B_{ij} は、入力行列 $(\mathbf{F}_i, \mathbf{F}_j)$ の疎性に依拠して(1)式、あるいは(2)式で評価されるが、これらの計算式は積や和で構成されている。特に、 \mathbf{F}_i と \mathbf{F}_j の非零要素の数をカウントすることで積の回数を見積もることができる。つまり、(1)式と(2)式にかかる計算コストは、 \mathbf{F}_i と \mathbf{F}_j の情報によって、ある程度予測することができる。この計算コスト予測をすべての B_{ij} に適用し、その結果を計算割り当てに用いる。 B_{ij} にかかる計算コストを c_{ij} としたとき、全体のコスト C は $C = \sum_{i=1}^m \sum_{j=i}^m c_{ij}$ であり、 N 台のPCでは平均して各PCが C/N だけの計算を受け持つ。1台目のPCが担当する範囲 ϵ_1 は、 B_{11} 要素から始めて、行方向に計算コストの和が C/N を超えない最大範囲が基本となる。具体的に記せば、

$$\epsilon_1 = \{(i, j): 1 \leq i < \bar{i}, i \leq j \leq m\} \\ \cup \{(\bar{i}, j): \bar{i} \leq j \leq \bar{j}\}$$

となる。ただし、 \bar{i}, \bar{j} は以下の式を満たすものである。

$$\sum_{i=1}^{\bar{i}-1} \sum_{j=i}^m c_{ij} < C/N \leq \sum_{i=1}^{\bar{i}} \sum_{j=i}^m c_{ij} \\ \sum_{i=1}^{\bar{i}-1} \sum_{j=i}^m c_{ij} + \sum_{j=\bar{i}}^{\bar{j}-1} c_{\bar{i}j} < C/N \leq \sum_{i=1}^{\bar{i}-1} \sum_{j=i}^m c_{ij} + \sum_{j=\bar{i}}^{\bar{j}} c_{\bar{i}j}$$

同様にして、 e_2, \dots, e_N を順次決定し、1台目から N 台目までの計算割り当てとする。

次に、CHOLESKYについて見ていくこととする。Schur補完行列が密行列となる場合は、ScaLAPACK⁵が提供している並列コレスキー分解を利用する。これについては、PCSDPも同様である。ただし、ELEMENTSの計算が終了した時点でSDPARAのSchur補完行列はrow-wise distributionで各PCのメモリ上に分散している。SDPARAでは、2次元巡回ブロック分散に分散しなおすことで、ScaLAPACKの性能を引き出すことに成功している。図4は図3を2次元巡回ブロック分散に再分散した状態であり、 B_{12}, B_{59} は1台目のPCが担当し、 B_{43}, B_{78} は4台目のPCが担当する。

⁵ <http://www.netlib.org/scalapack/>

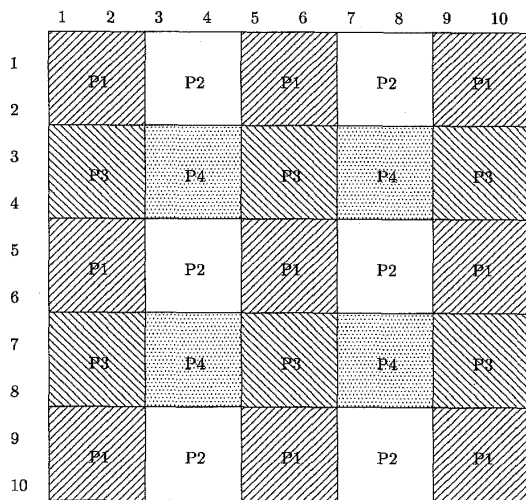


図4 2次元巡回ブロック分散

一方, Schur 補完行列が疎行列となる場合は, MUMPS の並列疎コレスキー分解を適用する. MUMPS では, 上記の $\epsilon_1, \epsilon_2, \dots, \epsilon_N$ のメモリ分散をそのまま利用できるため, メモリ上で再分散を行う必要はない.

ここまで見てきたように, SDPARA では Schur 補完行列の計算方法をさまざまに変更することで, Schur 補完行列が密行列であっても疎行列であっても, 効率的な並列計算を実現している.

2.2 SDPARA による数値実験

ここでは, まず PC の台数が増えたときに SDPARA がどれだけ高速に SDP を求解できるかを示した後, どれだけの規模の SDP まで現段階で解けているかを示す.

SDPARA の数値実験に用いた計算環境は以下である.

- 合計 16 ノードで Myrinet-10 G (10 Gbps) で接続
- 各ノードは Xeon X5460 (4 Core) を 2 個と 48 GB メモリ, Cent OS 5.4 で構成されている.

今回, SDPARA の計算実験で用いた SDP は, 表 5 にある 2 つである. この表には, 問題の出展も掲載している. 表 5 の問題を PC の台数やスレッド数を変更しながら解いた時間をまとめたのが, 表 6 である.

NH_3 の問題は, 合計時間で見ると 1 台/1 スレッドの 4,086 秒から 16 台/8 スレッドの 80 秒へ高速化されている. 特に, ELEMENTS の部分は, 3,941 秒から 41 秒に短縮されており, 合計 128 スレッドで 96 倍の高速化を達成している.

また, BroydenBand500 の問題では, ELE-

表 5 大規模 SDP の規模

問題名	m	n	nnz	sd	出典
量子化学 NH_3	2964	3178(744)	566720	100%	[5]
多項式計画問題 BroydenBand500	392171	59280(120)	7113106	0.67%	[6]

表 6 SDPARA による計算時間 (単位: 秒)

問題名 / スレッド数	PC 台数	1	2	4	8	16
NH_3 /1	ELEMENTS	3941.65	1974.94	993.71	500.80	252.37
	CHOLESKY	47.26	27.88	16.45	12.98	8.31
	合計計算時間	4086.48	2098.32	1101.09	602.43	347.22
NH_3 /8	ELEMENTS	568.23	288.10	147.16	76.61	41.04
	CHOLESKY	21.48	11.42	9.20	8.83	6.79
	合計計算時間	632.51	341.28	193.03	119.57	80.07
BroydenBand500 /1	ELEMENTS	12978.29	6763.48	3441.37	1850.83	995.64
	CHOLESKY	21953.57	12807.86	7479.62	4648.30	3013.93
	合計計算時間	35988.86	20394.17	11571.03	7100.83	4666.87
BroydenBand500 /8	ELEMENTS	2941.40	1302.34	585.40	321.99	173.43
	CHOLESKY	13134.59	7983.12	4997.47	3388.00	2456.02
	合計計算時間	17054.42	10055.84	6190.81	4275.33	3263.54

表 7 超大規模 SDP の規模

問題名	m	n	nnz	sd	出典	計算時間 (秒)
量子化学 H_2O	27888	15194(4032)	9438380	100%	[5]	51046.45
センサー Sensor40000	602484	918468(60)	3903224	$5\text{e}92 \times 10^{-3}\%$	[4]	209.67

MENTS の部分の高速化は, 12,978 秒から 173 秒と 74 倍の短縮に留まっている. しかしながら, SDPARA では 2.1 節で述べた計算コストに基づく計算分散を行っており, 疎行列に対する並列化として考えた場合には十分な並列効果を得ているともいえることができる. 密行列の Schur 補完行列のみを扱う PCSDP では, 計算時間以前に Schur 補完行列を分散メモリに保持することさえできないため, SDPARA の大きなアドバンテージのひとつともいえる.

最後に現状の SDPARA でどれだけの規模の問題を解くことができるかを示したのが, 表 7 である. ここでは, 量子化学とセンサーネットワーク問題の SDP について, 合計 16 台をフルに用いての SDPARA の最大性能を示している. センサーネットワーク問題は, 2 次元平面にセンサーがばら撒かれている状態でセンサー間の距離だけが与えられたときに各センサーの座標を求める問題である. 各センサーの座標からセンサー間の距離を求めることはピタゴラスの定理から容易であるが, この逆は極めて難しく, ここでは高精度な近似解を生成することに SDP を利用している. Sensor40000 はセンサーネットワーク問題として 40,000 頂点を保持しており, 72 GB のメモリを使用して文献 [4] で生成できる最大規模の問題でもある. H_2O , Sensor40000 はともに超大規模 SDP であり, これだけの規模の SDP を解くことができるのは, SDPARA のみである.

3. まとめ

表7で示したのが、どれだけの規模のSDPをどれだけの時間で解くことができるか、に対する現状のSDPソルバーの目安であるともいえる。最初の表1で示したとおり、SDPソルバーの性能はこの15年間で飛躍的に上昇しているが、藤澤克樹氏の記事にも一部あるように、アルゴリズム中のパラメータの設定、並列計算やCPUキャッシュの効率化によって、一層の性能向上の余地は十分にある。これらの改良によって、さらに大規模なSDPをより短時間で求解することを今後も目指していきたい。

参考文献

- [1] Borchers, B.: "SDPLIB 1.2, a library of semidefinite programming test problems," *Optimization Methods and Software*, Vol. 11 & 12, pp. 683-690 (1999).
- [2] Fujisawa, K., Kojima, M. and Nakata, K.: "Exploiting Sparsity in Primal-Dual Interior-Point Methods for Semidefinite Programming," *Mathematical Programming*, Vol. 79, pp. 235-253 (1997).
- [3] Ivanov, I. D. and de Klerk, E.: "Parallel Implementation of a Semidefinite Programming Solver based on CSDP in a distributed memory cluster," *CentER Discussion Paper*, Vol. 2007-20, pp. 1-22 (2007).
- [4] Kim, S., Kojima, M., Waki, H. and Yamashita, M.: "SFSDP: a Sparse version of Full SemiDefinite Programming relaxation for sensor network localization problems," *Research Report B-457*, Dept. of Math. and Comp. Sciences, Tokyo Institute of Technology, 152-8552, July (2009).
- [5] Nakata, M., Braams, B. J., Fujisawa, K., Fukuda, M., Percus, J. K., Yamashita, M. and Zhao, Z.: "Variational calculation of second-order reduced density matrices by strong N -representability conditions and an accurate semidefinite programming solver," *Journal on Chemical Physics*, Vol. 128, 164113 (2008).
- [6] Waki, H., Kim, S., Kojima, M., Muramatsu, M. and Sugimoto, H.: "SparsePOP: a Sparse Semidefinite Programming Relaxation of Polynomial Optimization Problems," *ACM Transactions on Mathematical Software*, Vol. 35 (2), 883 (2008).
- [7] Yamashita, M., Fujisawa, K. and Kojima, M.: "SDPARA: SemiDefinite Programming Algorithm parallel version," *Parallel Computing*, Vol. 29, pp. 1053-1067 (2003).