GPUによる5ノードサブグラフ数え上げの高速化

菅波 柊也[↑] 天笠 俊之^{↑↑} 北川 博之^{↑↑}

† 筑波大学 情報学群 情報科学類 〒 305-8577 茨城県つくば市天王台1丁目1-1
 †† 筑波大学 計算科学研究センター 〒 305-8577 茨城県つくば市天王台1丁目1-1
 E-mail: †suganami@kde.cs.tsukuba.ac.jp, ††{amagasa,kitagawa}@cs.tsukuba.ac.jp

あらまし サブグラフの数え上げは、ネットワーク分析の基本的な手法の一つであり、バイオインフォマティクスや コンピュータサイエンスなどの様々な分野で利用されている.サブグラフの数え上げを行うアルゴリズムはいくつか 提唱されているが、既存のアルゴリズムは、大規模なグラフに対して、実行に多くの時間を要するという問題がある. これは特にノード数が5以上のサブグラフの数え上げに対して、より顕著に現れる.この問題の解決法の一つとして、 GPUを用いた並列処理が考えられる.GPUは多くのコア搭載し、高い並列度の処理を得意とする.提案手法では GPUを用い、数え上げの探索を並列に行うことで高速化を図る.評価実験により、我々の手法は5ノードサブグラフ の数え上げを行う state-of-the-art な手法に比べ、4 倍から 10 倍程度の高速化が可能であることを示した. **キーワード** GPU、サブグラフカウンティング

1序 論

グラフ構造はデータをノードとエッジで表したデータ構造で ある. グラフは実世界において様々な場面で利用されており, グラフを分析することにより様々な情報を抽出する技術が注目 を集めている. 近年データが大規模化し,ノード数が数億を超 えるグラフも現れてきている. 例えば, Instagram では 2018 の一ヶ月あたりのアクティブユーザー数が 10 億を超えており, ユーザをノード,ユーザ間のフォロー/フォロワー関係をエッ ジで表したグラフを考えると大規模なグラフになることが分か る [25]. 今後もデータの規模が大きくなっていく事を考えると, 大規模なグラフに対する高速な分析手法が必要となる.

グラフ構造の分析手法の一つとしてサブグラフの数え上げが 挙げられる. グラフにはトライアングルやクリークのような 様々な構造のサブグラフが存在する. サブグラフの数え上げは, これらのサブグラフのグラフ中の出現回数を求めることにより グラフを分析する手法である. サブグラフの数え上げの結果は, 複数のグラフで同じ値を取りうる直径などのグローバルな特徴 に比べ,よりグラフ特有のローカルな特徴を表すことができ, コンピュータサイエンス,バイオインフォマティクス,ソーシャ ルサイエンスなどの様々な分野で用いられている [8] [22].

しかし,既存のサブグラフの数え上げアルゴリズムの多くは 実行に多くの時間を要するという問題点が存在する.この問題 は特に5ノード以上のサブグラフの数え上げに対して顕著に現 れる.これは5ノード以上のサブグラフの数え上げにおいて組 合せ爆発が起こることに起因する.エッジ数が数百万程度のグ ラフであっても,5ノードの各サブグラフは数十億から数兆個 存在する.さらにサブグラフ数え上げを行うためには,実際の 出現回数より多くの候補のパターンについて探索する必要があ る.そのため数え上げには多くの探索が必要となる.これらの ことにより,ノード数が5を超える場合,サブグラフの数え上 げを行うためには多くの時間を要する.

5 ノードまでのサブグラフの数え上げを行う手法の中で stateof-the-art なものとして Pinar らによる ESCAPE [16] がある. ESCAPE は組合せを用いることにより、5 ノードまでのサブグ ラフを効率よく求める.しかし ESCAPE はグラフによっては 探索に数時間から数日を要するため、より高速に5 ノードまで サブグラフの数え上げを行う事が必要である.

一方,近年大規模なデータを処理するために GPU (graphics processing unit)を用いた並列コンピューティングが注目され ている.GPUは CPU に比べ,多数のコアを搭載しているため 高い並列処理性能を持つ.この GPU の高い並列処理性を利用 して GPU を汎用計算に用いる事を GPGPU(general-purpose computing on graphics processing units)と呼び,様々なアプ リケーションの高速化に貢献している.

本稿では、GPUを用いてグラフ中の全ての5ノードまでの サブグラフの数え上げの高速化行う.図1に5ノードのグラフ を示す.ESCAPE[16]により示されているように、全ての連結 なサブグラフの数え上げを行えば、包除原理を用いることによ りグラフに対して追加の探索を行うことなく、非連結なサブグ ラフの数え上げは定数時間で行うことができる.そのため本稿 では連結なサブグラフの数え上げについてのみを対象とする.

我々は ESCAPE の数え上げのアルゴリズムを注意深く観察 し、サブグラフの探索がノードやエッジごとに独立に行えるこ とを発見した.提案手法では、数え上げの独立な探索を GPU を用いてノードやエッジ単位で並列に実行することにより数え 上げの高速化を行う.また提案手法の性能を評価するため、実 世界のグラフデータセットを用いて ESCAPE と実行時間の比 較実験を行なった.その結果、我々の手法は ESCAPE に比べ 約4倍から 10 倍の高速化を達成した.

本稿の構成は、以下の通りである.2章で関連研究を紹介し、 3章で GPU コンピューティングについて述べる.4章で前提と なる知識について説明し、5章で提案手法について述べ、6章



(a) 連結な 5 ノードのグラフ



(b) 非連結な5 ノードのグラフ

図 1:5ノードのグラフ

で実験結果を示す.最後に7章で本稿のまとめを述べる.

2 関連研究

グラフ中のサブグラフの数え上げは重要なタスクであり様々 なアルゴリズムが提案されている[18].ここでは本研究と特に 関連の強い4,5ノードのサブグラフの数え上げの関連研究につ いて述べる.数え上げのアルゴリズムは大きく厳密解法と近似 解法に分かれる.

2.1 厳密解法

2.1.1 4ノードのまでサブグラフの数え上げ

CPUを用いた手法: 4ノードまでのサブグラフの数え上げ を行う手法として Marcus らによる RAGE [13] や Ortman ら による手法 [15], Ahmed らによる PGD [3] などさまざな手法 が提案されている. それらの中で PGD は比較的高速にサブグ ラフの数え上げを行うことができる. この手法では CPU を用 いて並列に数え上げを行う. PGD ではエッジ数が 10M 程度の グラフに対して, 1 時間以下でサブグラフの数え上げを行うこ とができる.

GPU を用いた手法: GPU を用いてサブグラフの数え上げ の手法として Rossi らによる手法 [20] がある. この手法では, グラフ全体として各 4 ノードのサブグラフが何回出現するかだ けでなく,各エッジごとに各サブグラフが何回出現するかまで を求めることができる.

2.1.2 5ノードまでのサブグラフの数え上げ

CPU を用いた手法: 5 ノードまでのサブグラフの数え上げを 行う手法として Hočeva らによる ORCA [9] や Pinar らによる ESCAPE [16] がある. ESCAPE は 5 ノードまでのサブグラフ の数え上げる state-of-the-art な手法である. さらに ESCAPE は 4 ノードのサブグラフの数え上げにおいて, PGD よりも高 速に数え上げを行うことができる. また ORCA はグラフ全体 で各サブグラフが何回出現するかだけでなく,各ノードごとに 各サブグラフが何回出現するかまでを求めることができる. し かし ORCA は実行に多くの時間を必要とするため,大規模な グラフに用いることはできない.

GPU を用いた手法: GPU を用いて 5 ノードまでのサブグ ラフの数え上げを行う手法として Milinković らによる ORCA- GPU [14] がある.しかしこの手法は実行に時間を要し大規模 なグラフに対して適用することが出来ない.

2.2 近似解法

近似解法にはランダムウォークを利用した手法やカラーコー ディングを利用した手法など様々な手法が提案されている.し かし GPU を用いたサブグラフの数え上げの近似解法はまだ提 案されていない.

2.2.1 4ノードまでのサブグラフの数え上げ

4 ノードまでのサブグラフの近似解法とし Elenberg らによ る手法 [6] や Madhav らによる手法 [11] などがある. Elenberg らによる手法では後述する GUISE や GRAFT よりも高い精度 で 4 ノードのサブグラフの出現回数を求められ,また実行速度 も数十倍から数百倍高速である.

2.2.2 5ノードまでのサブグラフの数え上げ

5 / -ドまでのサブグラフの近似解法として Bhuiyan らによ る GUISE [4] や Rahman らによる GRAFT [17], Wang らに よる MOSS-5 [24] などがある. MOSS-5 は高速かつ高精度で 数え上げを行える手法であり, GRAFT や GUISE に比べ数百 倍から数千倍高速に 5 / -ドまでのサブグラフの数え上げを行 うことができる.

3 GPU コンピューティング

OpenACCはGPUプログラミングにおいて広く用いられて いる CUDAに比べ学習コストが低く,また既存のコードに指 示文を追加するだけでアクセラレータで実行できるため,可搬 性や保守性,生産性に優れる.GPGPU(general-purpose computing on graphics processing units)は本来グラフィック向け に開発されたデバイスである GPU(graphics processingunit) を,汎用の計算に用いることである.GPUはCPUに比べ多 くのコアが搭載されているため,高速に並列処理を行うことが 可能である.そのため科学技術計算や機械学習など様々なアプ リケーションにおいて,処理の高速化に貢献している.

GPGPU は適切に設計されたプログラムにおいては高い性能 を発揮するが,不適切な実装やアルゴリズムによって CPU よ り悪い性能を示す場合がある.そのため GPU を用いて高速化 を行うためには,適切なプログラム設計を行う必要がある.

本研究では, NVIDIA 社の GPU と OpenACC を用い GPU プログラミングを行った.以下ではGPUの一例としてNVIDIA 社の GPU の構造と特徴,及び OpenACC を用いたプログラム について説明する.

3.1 NVIDIA GPU

GPU は複数の Streaming Multiprocessor(SM) から成り,各 SM は数十から数百の Scalar Processor(SP) を搭載している. SP は単純な処理に適しており、単純な大量の処理を行う場合、 大量の SP による並列実行が有効となり高い性能を発揮する.

また, GPU には大きく分けて, グローバルメモリ, シェアー ドメモリ、レジスタの3種類のメモリが存在する. グローバル メモリは SM 外に存在し、シェアードメモリとレジスタは SM 上に存在する. グローバルメモリは3種類のメモリの中で最も 容量の大きいメモリである. グローバルメモリは GPU 上の全 ての SP からアクセス可能であるが、SM 外に位置することか ら、シェアードメモリやレジスタと比較するとアクセスが低速 である.シェアードメモリはグローバルメモリよりも容量が小 さく,同じ SM 上の SP からのみしかアクセスできないという 制約はあるが、グローバルメモリよりも高速にアクセスできる. レジスタは3種類のメモリの中で最も容量の小さいメモリであ る. レジスタは同じ SM 上の SP からのみアクセス可能であり, シェアードメモリよりもさらに高速なアクセスが可能である.

3.2 OpenACC

OpenACC [2] はメニーコアアクセラレータ向けの並列プロ グラミング規格である. C/C++・Fortran のコードに対して, 指示文を挿入することにより指示領域がアクセラレータにより 実行される. OpenACC の指示文には主に、並列領域指示文, データ指示文,ループ指示文の3つがある.並列領域指示文 では並列に実行する領域を指定する. データ指示文では CPU とアクセラレータ間のデータの転送を指示する. 一般にアクセ ラレータは CPU とは独立したメモリを持つ. そのためアクセ ラレータ上で実行するためには、事前に CPU 側からアクセラ レータ上へデータを転送しておく必要がある. ループ指示文は 並列化の方法や並列の粒度を指示する. OpenACC の並列の粒 度には gang, worker, vector の 3 段階が存在する. 各ギャン グは1つ以上の worker を持ち,各 worker は vector を用いて ベクトル演算を行う.

4 前提知識

本稿では重みなし無向グラフ G = (V,E) に対してグラフ中 の5ノードまでのサブグラフの数え上げを行う.また数え上げ を行う構造をパターンと呼び、パターンを H = (V(H), E(H))と表す. ただし V(H) はパターン H のノード集合, E(H) は パターン H のエッジ集合である.

4.1 記 法

本稿において用いる記号について説明する.本稿で用いる記号を表 1 に示し,いくつかのパターンの名称を図 2 に示す. G→ は下で定義

表 1: 記号の定義

記号	定義
V	G 中のノードの集合
V(H)	パターン H 中のノードの集合
E	G 中のエッジの集合
E(H)	パターン H 中のエッジの集合
$H _C$	ノード集合 C より誘導される H の部分グラフ
d(i)	ノード i の次数
N(i)	<i>i</i> の隣接ノード集合
$N^+(i)$	i より degree ordering の大きい隣接ノード集合
$N^{-}(i)$	i より degree ordering 小さい隣接ノード集合
W(G)	G 中のウェッジの数
W(i,j)	ノード <i>i</i> , <i>j</i> 間のウェッジの数
$W_{++}(i,j)$	ノード <i>i</i> , <i>j</i> 間のアウトウェッジの数
$W_{+-}(i,j)$	ノード <i>i</i> , <i>j</i> 間のインアウトウェッジの数
t(i)	ノード <i>i</i> を含むトライアングルの数
T(i, j)	エッジ (<i>i</i> , <i>j</i>) とトライアングルとなるノードの集合
$T^{\pm}(i, i)$	エッジ (i, j) とトライアングルとなり
1 (i,j)	i, j より degree ordering の大きいノードの集合
$C_4(G)$	G 中の 4 サイクルの数
$C_4(i)$	ノード <i>i</i> が含まれる 4 サイクルの数
$C_4(i,j)$	エッジ (<i>i</i> , <i>j</i>) が含まれる 4 サイクルの数
$K_4(G)$	G 中の 4 クリーク
$K_4(i)$	ノード <i>i</i> が含まれる 4 クリーク
$K_4(i,j)$	エッジ (i, j) が含まれる 4 クリーク
$k_4(i,j,k)$	トライアングル (<i>i</i> , <i>j</i> , <i>k</i>) と 4 クリークとなるノードの集合
$k_4^+(i,j,k)$	トライアングル (<i>i</i> , <i>j</i> , <i>k</i>) と 4 クリークとなり,
	i, j, k より degree ordering の大きいノードの集合
D(G)	G 中のダイヤモンド
TT(G)	C 由の tailed-triangle の数

 $TT(G) \mid G \oplus \mathcal{O}$ tailed-triangle



図 2: いくつかの基本的なパターンの名称

される degree ordering に基づいて作成される DAG(directed acyclic graph) G^{\rightarrow} を表す.

グラフの degree ordering を ≺ で表す. ノード i, j について d(i) < d(j) または $d(i) \leq d(j)$ かつ i < j の時, i ≺ j と表す. Gの全てのエッジについて ~ に基づいて方向づけを行うことにより G^{\rightarrow} を得る.degree ordering \prec は全順序関係であるため G^{\rightarrow} が閉路 を持たない, つまり DAG であることは保証される. また, 図 1a の連 結なグラフの i 番目のグラフの G 中のサブグラフとしての出現回数を N_i と表す.

4.2 ESCAPE

ESCAPE は5ノードまでのサブグラフの数え上げを行う手法であ る. ESCAPE は多くの数え上げのアルゴリズムで起こる組合せ爆発を 避けることにより、5 ノードまでのサブグラフの数え上げを行う. 組合 せ爆発を回避するために ESCAPE では以下の 2 つのアイデアを利用 する.

アイデア 1: パターンをより小さなパターンに分割する. クリーク を除く全てのパターンにおいて,いくつかのノードを取り除くとその パターンをいくつかの連結なグラフに分割できるようなノード集合が 存在する (これらのノード集合をカットセットと呼ぶ).数え上げを行 うパターンを H とし,そのカットセットを S とする. H から S を取 り除いてできるいくつかの連結なグラフをそれぞれ C₁,C₂,...,S と C_iの和集合により誘導される H の部分グラフを H_iとする. このア イデアは以下のことが分かれば,H 数え上げが行えることに基づいて いる.

- G中の全てのSについて、Sのノードが含まれる H₁, H₂,...の 出現回数.
- パターン H よりノード数の少ない全てのパターン H' の G 中の 出現回数.

分割の詳細については 4.2.1 で述べる.

アイデア 2: エッジに方向付けを行う.入力される無向グラフ G の エッジについて ≺ に基づいて方向付けを行い G[→] を作成する.この G[→] について探索を行うことで方向付けにより同じ部分を重複して探 索することを防ぎ,探索範囲を削減する.エッジに方向付けを行う手 法はトライングルカウンティング [21] やクリークカウンティング [5] に おいても用いられている.

ESCAPE ではこれらのアイデアを組み合わせパターンをより小さ いパターンに分割し,その分割したパターンについて G→ を探索する ことでカウンティングを行う.

4.2.1 分割フレームワーク

パターンをより小さなパターンに分割するフレームワークについて 説明する.H = (V(H), E(H))をカウンティングを行いたいパターン とする. $H|_C$ を H 中のいくつかのノードの集合 C により誘導される Hの部分グラフとする.まずはじめに同型を定義する.

定義 1. G = (V, E), G' = (V', E')において,全単射 $\tau: V \to V'$ が ($\tau(u), \tau(v)$) $\in E'$ であるときに限り $(u, v) \in E$ である場合, G'は Gと同型であるいい, G と同型であるグラフの集合を AUT(G) と表す.

次にマッチを定義する.

定義 2. 全単射 $\pi: S \to V(H)$ において $(\pi(s_1), \pi(s_2))$ が H のエッ ジであるときに限り, $S \subseteq V$ かつ $\forall s_1, s_2 \in S, (s_1, s_2)$ が G のエッジ である場合, $\pi \in H$ のマッチという. G 中の H の異なるマッチの集 合を match(H) と表す.

定義よりパターン H のグラフ中のサブグラフとしての出現回数は |match(H)|/|AUT(H)| である.AUT(H) は事前に求めることができ るため, match(H) を求めることができれば H のグラフ中のサブグラ フとしての出現回数を求めることができる.また π が単射である,つ まり |S| < |V(H)| であるとき, π を部分マッチという.

定義 3. 部分マッチ $\sigma: T \to V(H)$ とマッチ $\pi: S \to V(H)$ に ついて, $S \supset T$ かつ $\forall t \in T, \pi(t) = \sigma(t)$ である場合,部分マッチ $\sigma: T \to V(H)$ はマッチ $\pi: S \to V(H)$ に拡張されるという.

定義 4. $\sigma \in G$ 中の H の部分マッチとする. $\sigma \in$ 拡張し H のマッチ となる数を σ の H-degree といい, $\deg_H(\sigma)$ と表す.

次に *H* を小さなパターンに分割することにより得られるフラグメントについて定義する.

定義 5. Cをカットセットとする. カットセットの定義より, H から C



図 3: データの格納方式の例

を取り除くと H はいくつかの連結な要素 $S_1, S_2, ...$ に分割される. こ の分割されたそれぞれの要素と C の和集合, つまり $C \cup S_1, C \cup S_2, ...$ によって誘導される H の部分グラフを H の C-フラグメントといい, この集合を $Frag_C(H)$ と表す.

ここで $H|_{C}$ のマッチ σ を考える. σ を H に拡張するためには, σ を Frag_C(H) の全ての要素に対して拡張できれば十分である. σ を拡張し た Frag_C(H) の要素 $F_i, F_j(i \neq j)$ において $H|_{C}$ を除いた $F_i \geq F_j$ の ノード集合が互いに素である場合, σ を拡張した $F_1, F_2, \ldots, F_{|Frag_{C}|}$ を合併すると H のマッチとなる. 一方で, $F_i \geq F_j$ が互いに素でない 場合, $F_1, F_2, \ldots, F_{|Frag_{C}|}$ の合併させた物は H とは異なるパターン H' となる. この H' を shrinkage と呼ぶ.

定義 6. Cをカットセット, $Frag_C(H)$ の要素を $F_1, F_2, ...$ とする. パターン Hを異なるパターン H'にする C-shrinkage を以下を満た す集合 $\{\sigma, \pi_1, \pi_2, ..., \pi_{|Frag_C(H)|}\}$ とする.

- $\sigma: H|_C \to H'$ が H'の部分マッチである.
- 各 $\pi_i: F_i \to H'$ がH'の部分マッチである.
- 各 π_i は σ を拡張したものである.
- H' の全てのエッジ (u, v) について, $\pi_i(a) = u$ かつ $\pi_i(b) = v$ であるような $F_i \in Frag_C(H)$ のエッジ (a, b) が存在する.

定義 7. H からの C-shrinkage が少なくとも一つ存在するパターン H'の集合を $Shrink_{C(H)}$ とする. $H' \in Shrink_{C}(H)$ について, 互 いに素な C-shrinkage の数を numSh_C(H, H') と表す.

次に match(H) を求めるための補題を示す. この補題より全ての $H|_C$ の σ の deg_H(σ), 全てのC-フラグメントF, 起こりうる全ての shrinkage の出現回数が分かれば match(H) を求めることができる.

補題 1. Cをカットセットとする.

$$match(H) = \sum_{\sigma \in match(H|_C)} \prod_{F \in Frag_C(H)} deg_{F(\sigma)} - \sum_{H' \in Shrink_C(H)} numSh_C(H, H')match(H')$$

5 提案手法

本章では GPU を用いた 5 ノードまでのサブグラフの数え上げにつ いて述べる.提案手法では前節で説明した ESCAPE の分割フレーム ワークに基づいた数え上げアルゴリズムを GPU 用いて並列に実行す ることにより、5 ノードまでのサブグラフの数え上げを高速化する.パ ターン H の探索において、カットセットを C とすると探索はグラフ中 の全ての $H|_C$ のマッチに対して行う.例えば、 $H|_C$ のマッチがエッジ の場合、グラフ中の全てのエッジが $H|_C$ のマッチとなるため、全エッ ジについて探索を行う.この探索は各 $H|_C$ 毎に独立であるため、 $H|_C$ 単位でのスレッド並列化を行うことにより並列に探索を行うことがで きる.提案手法ではこれに基づきノード単位またはエッジ単位でスレッ ド並列化し探索を行う.



(a) DAG である 4 サイクル
 (b) フラグメント
 図 4: DAG である 4 サイクルとそのフラグメント

5.1 データ構造

数え上げを行うために、 グラフやトライアングルの基本的な情報の 他に、各ノードごとにウェッジを形成するノードと各ウェッジごとにダ イヤモンドを形成するノードをそれぞれ記録しておく必要がある.こ こで、あるノードとウェッジを形成するノードとは図2のウェッジにお いて, ノード i に対してノード j の位置となるノードのことである. た だし i, j 間のエッジの接続関係は問わない.またウェッジとダイヤモン ドを形成するノードとは図 2 のダイヤモンドにおいてウェッジ (*i*, *j*, *k*) に対してノード l となる位置のノードである.ただし i,k 間の接続関 係は問わない.我々の検証により、実世界のグラフにおいてウェッジと ダイヤモンドの配列は比較的疎となるが分かった. そのため本稿では ウェッジとダイヤモンドの配列を CSR (compressed sparse row) 形式 に基づいた表現法により表す. CSR はグラフを表現するために一般的 に使用されているデータレイアウトであり、重みなしグラフの場合 ptr 配列と to 配列からなる. to 配列は各頂点の隣接ノードを格納してお り、ptr 配列はある頂点の隣接ノードが to 配列中のどこに格納されて いるかを表している. 例えば図 3a のグラフを CSR 方式で表すと図 3b のようになる. ノード 2 の隣接ノードの情報は to 配列の ptr[2] = 4 から ptr[3] = 7 の範囲で表される.また本稿においてグラフは CSR 方式で表されるとする.

次にウェッジを CSR に基づいた方式で表現する方法を説明する. 実際には数え上げにおいてウェッジを利用するためには,あるノードとどのノードがウェッジを形成するかだけでなく,あるノードがどのノード と何個ウェッジを形成するかまでを知っている必要がある. ptr 配列と to 配列を用いることで,あるノードがどのノードとウェッジを形成す るかの情報は得られるが,何個のウェッジを形成するかの情報を得るこ とができない. そこで本稿ではあるノードがどのノードと何個のウェッ ジを形成するかを表す value 配列を導入する.

例として図 3a のグラフはウェッジは図 3c のように表される. 図 3a において, ノード 0 はノード 2 と (0,1,2) と (0,4,2) の 2 つのウェッ ジを形成するため value は 2 となる. ダイヤモンドについてもウェッ ジと同様に CSR 方式で表す. ただしダイヤモンドについては value 配 列の情報のみが必要となるため, value 配列のみを保持する.

5.2 サブグラフ数え上げのアルゴリズム

5.2.1 4ノードのサブグラフの数え上げ

4 ノードのサブグラフの数え上げについて説明する.

*N*₃, *N*₄, *N*₅, *N*₇ の数え上げ: *N*₃, *N*₄, *N*₅, *N*₇ の数え上げは以下の 式により行う. これらは容易に並列に実行できる.

$$N_{3} = \sum_{(i,j)\in E} (d(i)-)(d(j)-1) - 3N_{1}$$

$$N_{4} = \sum_{i\in V} {\binom{d(i)}{3}}$$

$$N_{5} = \sum_{i\in V} t(i)(d(i)-2)$$

$$N_{7} = \sum_{(i,p)\in E} {\binom{|T(i,j)|}{2}}$$

N₆ (4 サイクル) の数え上げ: 4 サイクルの数え上げには分割と エッジの方向付けを用いる. DAG である 4 サイクルは対称となる場





(a) DAG である 4 クリーク (b) DAG である 5 クリーク

図 5: DAG であるクリーク

Algorithm 1 4 クリーク数え上げ

1: $N_8 \leftarrow 0$

- 2: for each $(i, j) \in E$ do in parallel $// i \prec j$
- 3: $sort(T(i, j), [] (a, b) \{ return \ a \prec b \}) // T^+(i, j)$ を degree ordering の昇順にソート
- 4: for each $k_u \in T^+(i,j)$ do $//i \prec j \prec k_u$
- 5: for each $k_v \in \{k_{u+1}, \dots, k_{|T|}\}$ do // $i \prec j \prec k_u \prec k_v$
- 6: **if** $k_v \in N(k_u)$ **then** // k_u, k_v 間にエッジが張る時
- 7: $N_8 \leftarrow N_8 + 1$
- 8: end if
- 9: end for
- 10: end for
- 11: end for

合を除くと図 4a に示すように 3 種類存在する. これらの 4 サイクル に対して degree ordering が最も大きいノードを *i*, その対角のノード を *j* とし *i*, *j* (図において色付けされているノード)をカットセット とする. したがってフラグメントはウェッジとなる. このウェッジには エッジの方向を考慮すると図 4b のようにアウトウェッジとインアウト ウェッジの 2 種類存在する. そのため以下の式より N₆ の数え上げを行 うことができる.

$$N_{6} = \sum_{i \in V} \sum_{j \prec i} {W_{++}(i,j) + W_{+-}(i,j) \choose 2}$$

 N_8 (4 クリーク) の数え上げ: クリークにはカットセットが存在し ない. そのためエッジの方向付けのみを用いて数え上げを行う. DAG である 4 クリークは対称となる場合を除くと図 5a の 1 種類のみであ る. そのため G^{\rightarrow} に対して,図 5a となる 4 クリークを探索することで 数え上げを行う. 4 クリークの数え上げのアルゴリズムを Algorithm1 に示す. Algorithm1 では 3 行目で $T^+(i,j)$ を degree ordering の昇 順になるようにソートする. 4,5 行目で $T^+(i,j)$ から $k_u \prec k_v$ となる ように $k_u \ge k_v$ を選び 6 行目で $k_u \ge k_v$ の間にエッジを張るかを確 認する. $k_u \ge k_v$ がエッジを張る場合 $\{i, j, k_u, k_v\}$ は 4 クリークと なる.

5.2.2 5ノードのサブグラフの数え上げ

次に5ノードのサブグラフの数え上げについて説明する. ここでは4ノードま でのサブグラフの数え上げは完了しているとする. 図6はノード数 1.69M, エッ ジ数 28.8Mの tech-as-skitter に対して, ESCAPEを実行した時の5ノード の各パターンの探索にかかる時間である. これより, 実行時間のほとんどがいく つかのパターンの数え上げによって占めていることが分かる. これはほとんどの パターンの数え上げは単純なノードやエッジのループで実行できるのに対し, い くつかのパターンの探索は深いループが必要となるためである. そのためここで は. 特に時間を要するパターンの数え上げについて詳細に説明する.

 N_{16} (5 サイクル)の数え上げ: DAG である 5 サイクルは対称となる場合 を除くと図 7a のように 2 種類存在する. 図 7a の i,l (色のついたノード)を カットセットとするとフラグメントは directed 3-path とウェッジである. こ のウェッジには 2 種類のエッジの方向が存在する. そのため G^{\rightarrow} に対して図 7a となる 5 サイクルを探索することで探索を行う. 5 サイクルの数え上げのアルゴ リズムを Algorithm2 に示す. Algorithm2 では 2 行目から 4 行目で図のよ うな directed 3-path となるノード i, j, k, lを選ぶ. 5 行目でノード i がノー ド lとウェッジを形成するかを判定する. ノード i がノード lとウェッジを形成



図 6: ノード数 1.69M, エッジ数 28.8M の tech-as-skitter に対 し ESCAPE を実行した時の 5 ノードの各サブグラフの数え上 げに要する時間



(a) DAG である5サイクル
 (b) shrinkage
 図 7: DAG である5サイクルと shrinkage

する場合,5 サイクルとなるためその分カウントを増やす.8 行目で*i*と*l*間に エッジが張るかを判定する.*i*と*k*の間にエッジが張る時(*i*, *k*, *l*) でウェッジを 形成する.その場合6行目において図7b(*i*)のような時も5サイクルとしてカ ウントしてしまう.そのため9行目において shrinkage となる分のカウントを 減らす.11行目についても同様である.

Alg	gorithm 2 5サイクルの数え上げ
1:	$N_{16} \leftarrow 0$
2:	for each $(i, j) \in E$ do in parallel // $i \prec j$
3:	for each $k \in N^-(j)$ do // $k \prec j$
4:	for each $l \in N^+(k)$ do // $k \prec l$
5:	if ノード i がノード l とアウトウェッジまたはインアウ
	ウェッジを形成する then
6:	$N_{16} \leftarrow N_{16} + W^{++}(i,l) + W^{+-}(i,l)$
7:	end if
8:	if $i \in N(k)$ then // i と k の間にエッジが張る時
9:	$N_{16} \leftarrow N_{16} - 1$
10:	end if
11:	if $j \in N(l)$ then // $j \ge l$ の間にエッジが張る時
12:	$N_{16} \leftarrow N_{16} - 1$
13:	end if
14:	end for
15:	end for
16:	end for

 N_{25} (diamond-wedge) の数え上げ: diamond-wedge のフラグメント はダイヤモンドとウェッジである. そのためダイヤモンドとウェッジについて探 索する. diamond-wedge の数え上げのアルゴリズムを Algorithm3 に示す. 2 行目から 4 行目でダイヤモンドとなる i, j, k, lを選ぶ. 5 行目で i が lとウェッ ジを形成するかを判定し, ウェッジを形成する場合 diamond-wedge となるた めカウントを W(i, l) だけ増やす. また $i \ge l$ がウェッジを形成するかの判定は to 配列の ptr[i] から ptr[i+1] の範囲に l が存在するかを二分探索を用いて確 認する.

 N_{26} (wheel) の数え上げ: wheel のフラグメントはダイヤモンドである. Algorithm4 に wheel の数え上げのアルゴリズムを示す. 前述したようにダイ ヤモンドの value 配列の値はあるウェッジが何個のダイヤモンドを形成するかを 表している. そのため value 配列の値の組みわせにより wheel の出現回数を求 めることができる. 我々の手法ではダイヤモンドを CSR 方式を用いて表してい るため, 単純なループにより wheel の数え上げを行うことができる.

Algorithm 3 diamond-wedge の数え上げ

1: $N_{25} \leftarrow 0$

2: for each $(i, j) \in E$ do in parallel

- 3: for each $k \in T(i, j)$ do // i, j, k はトライアングル
- 4: for each $l \in T(j,k)$ do //(i,j,k,l) はダイヤモンド
- 5: **if** ノード*i* がノード*l*とウェッジを形成する **then**
- 6: $N_{25} \leftarrow N_{25} + W(i,l)$
- 7: end if
- 8: end for
- 9: end for
- 10: end for

Algorithm 4 wheel の数え上げ

1: $N_{26} \leftarrow 0$

- 2: for each u < |value| do in parallel
- 3: $N_{26} \leftarrow N_{26} \begin{pmatrix} diamond_value[u] \\ 2 \end{pmatrix}$

4: end for

Algorithm 5 almost-5clique の数え上げ				
1: $N_{28} \leftarrow 0$				
2: for each $(i, j) \in E$ do in parallel // $i \prec j$				
3: for each $k \in T(i,j)$ do $//i,j,k$ はトライアングル				
4: $N_{28} \leftarrow N_{28} + \binom{k_4(i,j,k)}{2}$				
5: end for				
6: end for				

 N_{28} (almost-5clique) の数え上げ: almost-5clique のフラグメントは 4 クリークである. Algorithm5 に almost-5clique 数え上げのアルゴリズムを 示す. 2 行目から 3 行目でトライアングルとなる i, j, k を選ぶ. その i, j, k に ついて 4 クリークとなるものから 2 つ選ぶとその 5 ノードは almost-5clique となる.

 N_{29} (5 クリーク)の探索: DAG である 5 クリークは対称となる場合を除 くと図の 1 種類のみである.そのため G^{\rightarrow} に対して図となる 5 クリークを 探索することで数え上げを行う.5 クリークの数え上げを行うアルゴリズムを Algorithm6 に示す.2 行目から 4 行目で $i \prec j \prec k$ となるトライアングル (i, j, k)を選ぶ.5 行目で $k_4^+(i, j, k)$ を degree ordering の昇順にソートす る.6,7 行目で $k_4^+(i, j, k)$ から $l_u \prec l_v$ となるように2 ノードを選ぶ.8 行目 において $l_u \prec l_v$ がエッジを張る場合 $\{i, j, k, l_u, l_v\}$ は5 クリークとなる.

Algorithm 6 5 クリークの数え上げ

1: $N_{29} \leftarrow 0$

 \mathbb{P}

- 2: for each $(i, j) \in E$ do in parallel $// i \prec j$
- 3: for each $k \in T^+(i,j)$ do // $i \prec j \prec k$ のトライアングル
- 4: $sort(k_4^+(i, j, k), [](a, b) \{ return \ a \prec b \}) // k_4^+(i, j, k) を$ degree ordering の昇順にソート
- 5: for each $l_u \in k_4^+(i, j, k)$ do // i, j, k, l_u は 4 クリーク
- 6: for each $l_v \in \{l_{u+1}, \dots l_{|k_4^+(i,j,k)|}\}$ do // i, j, k, l_u は 4 クリーク

7: **if** $l_v \in N(l_u)$ **then** // $l_u \ge l_v$ がエッジを張る

- 8: $N_{29} \leftarrow N_{29} + 1$
- 9: end if
- 10: end for
- 11: end for
- 12: end for
- 13: end for

Algorithm 7 node-centric	Algorithm 8 edge-centric				
1: $G = (V, E)$ 2: for each $u \in V$ do in parallel	1: $G = (V, E)$ 2: for each $(u, v) \in E$ do in par-				
3: for each $v \in N(u)$ do	allel				
4: // do counting 5: end for	3: // do counting 4: end for				
6: end for					

その他のサブグラフの数え上げ: その他のサブグラフについては単純なルー プにより並列に数え上げを行うことができる. 各サブグラフの数え上げの式を以下に示す

5.3 ウェッジとダイヤモンドの転送の分割

5.1 節で述べたようにウェッジとダイヤモンドを CSR 方式で表す. CSR 方 式は疎な配列を効率良く表現することができる.しかしグラフによってはウェッ ジやダイヤモンドの配列のサイズが大きくなり、全てを GPU のメモリに乗せる ことができないことがある.そこで提案手法では配列の要素を b ごとに分割して GPU に送り、要素数 b の配列を用いて数え上げを行う.これを配列の全ての要 素を GPU に送るまで繰り返す.これによりウェッジやダイヤモンドが GPU の メモリに乗らない場合に対処する.

5.4 ロードバランスの改善

Algorithm7 と Algorithm8 はどちらも全てのエッジについてのループで ある. 2 つのアルゴリズムの違いは各ノードごとに並列化を行うか各エッジご とに並列化を行うかである. 一般に実世界のグラフの次数分布はべき乗則に従 うことが知られている [7]. そのため node-centric により並列化を行なった場 合, 各ノードの隣接ノード集合の大きさの偏りから, スレッド間のタスクの割り 当てに偏りが生じ, 並列の効率が低下する可能性がある.[10] そのため本稿では edge-centric により並列化を行うことを目指す. しかし前述したようにグラフは CSR 方式で表される. CSR は空間効率やキャッシュ効率に優れているが, to 配



図 8: ノード数 1.69M, エッジ数 28.8M の tech-as-skitter に対 し提案手法を用いて 5 ノードのサブグラフ数え上げを行った時 の実行時間の割合

列から元のノードを参照できないため edge-centric に並列化を行えないという 問題点がある.そこで図 3d に示すように to 配列の要素と対応した from 配列 を導入する [23]. from 配列の i 番目の値は to 配列の i 番目の要素がどのノー ドと隣接しているのかを表す. from 配列を用いることにより, CSR 方式の利点 を得ながら edge-centric による並列化を行うことが可能となる.

6 実 験

本節では提案手法の性能を評価するため、4 ノードと5 ノードのサブグラフの 数え上げの state-of-the-art な手法である ESCAPE と実行速度の比較評価を 行う. ESCAPE はソースコードが公開されており本実験では ESCAPE の実行 にそのコードを利用した [1]. また本実験には CPU として Intel(R) Xeon(R) CPU E5-2660 v4 @ 2.00GHz, 64GB, GPU として NVIDIA Tesla V100, 32GB を搭載しているマシンを使用した. 提案手法のコンパイルには pgc++ 18.5-0, ESCAPE のコンパイルには g++ (GCC) 4.8.5 を用いた. データ セットとして Citation Network Dataset [19] と SNAP [12] のグラフを用い のグラフを用いた. グラフはエッジの方向を無視し, 重複したエッジと自己ルー プを取り除いて使用する. データセットの詳細を表 2 に示す.

実行時間の比較: ESCAPE と提案手法の実行時間の比較を表 2 に示す. ESCAPE-k は ESCAPE による k ノードのサブグラフの数え上げの結果であ り, proposal-k は提案手法による k ノードのサブグラフの数え上げの結果であ る. ただし実行時間が 6 時間を超えた場合タイムアウトとした. 結果から 4 ノー ド, 5 ノードどちらの場合においても,提案手法が全てのデータセットにおいて 高速化していることが示された.

4 ノードのサブグラフの数え上げにおいて、ノード数 2.25M, エッジ数 21.6M の tech-ip に対して最も大きく高速化し,提案手法は既存手法に比べ 5 倍の高 速化を達成している.また,提案手法において soc-pokec, tech-ip のどちらも 約 11 秒で終了しているが既存手法においては soc-pokec は約 36 秒, tech-ip は約 60 秒で終了している.これは提案手法の実行時間のほとんどが CPU で ウェッジなどを作成する前処理の時間で占められていることに起因すると考えら れる.soc-pokec, tech-ip の 2 つのデータセットにおいて,前処理に必要な時 間はほぼ同程度である.しかし既存手法では tech-ip は soc-pokec に比べ前処 理後の数え上げにより多くの時間を必要とする.そのため 2 つのデータセットの 実行時間に差が生じた.一方で提案手法において前処理後の数え上げに必要な時 間はどちらのデータセットでも 1 秒に満たないため実行時間が同程度になった.

5 ノードの数え上げでは、ノード数 1.63M, エッジ数 22.3M の soc-pokec において最も高速化しており、10 倍の高速化を達成している. ノード数 1.69M, エッジ数 28.8M の tech-as-skitter において最も高速化率が低く約 4 倍の高速 である. 高速化率のばらつきの要員としてグラフ中のウェッジやダイヤモンドの 出現回数が考えられる. ウェッジやダイヤモンドを多く含む場合,前処理に多く の時間を必要とするため実行時間が増加する.

ボトルネックの分析: tech-as-skitter の提案手法による5 ノードサブグラフ の実行時間を, CPU によりウェッジやダイヤモンドなどを作成する前処理の時 間, GPU により数え上げを行う時間, CPU と GPU 間のデータ転送の時間の 3 つに分けた時の実行時間の割合を図 8 に示す. CPU による前処理が最も多く の時間を要していることがわかる.

7まとめ

本稿では数え上げの独立性に着目し,GPUを用いて探索を並列に行うことで 5 ノードまでのサブグラフの数え上げの手法を提案した.提案手法は 5 ノードの

データセット	V	E	T	ESCAPE-4	proposal-4	\mathbf{ESCPE} -5	proposal-5				
soc-brightkite	56.7K	426K	494K	0.13	0.03	7.16	1.79				
soc-pokec	1.63M	22.3M	$32.6 \mathrm{M}$	36.05	11.2	1.79 K	174.1				
tech-as-skitter	1.69M	$28.8 \mathrm{M}$	$28.8 \mathrm{M}$	11.3	2.68	$1.27 \mathrm{K}$	321.5				
web-wiki-ch-internal	1.93M	$8.5 \mathrm{M}$	$18.2 \mathrm{M}$	12.8	3.87	1.73K	210.4				
web-hudong	1.98M	14.43M	21.6M	22.2	5.37	$2.55 \mathrm{K}$	396.7				
web-baidu-baike	2.14M	$17.01 \mathrm{M}$	$25.2 \mathrm{M}$	27.1	9.41	$3.61 \mathrm{K}$	596.7				
tech-ip	2.25M	21.6M	2.3M	60.8	11.67	-	18.1K				

表 2: サブグラフの数え上げの実行時間(単位は全て秒)

サブグラフの数え上げを行う手法 state-of-the-art な手法に比べ,約4倍から 10 倍の高速化を達成した. また 4 ノードまでのサブグラフの数え上げに対して も、約3倍から5倍の高速化を達成した。今後の課題としては、手法のボトル ネックとなっているウェッジとダイヤモンドの構築時間の高速が挙げられる.現 在の手法ではウェッジとダイヤモンドを CPU による逐次処理により作成してい るため、これらを並列に行うことで数え上げの高速化が可能だと考えられる.

献

- ¥ [1] Escape. https://bitbucket.org/seshadhri/escape.
- [2]Openacc-standard.org. https://www.openacc.org/sites/ default/files/inline-files/OpenACC.2.7.pdf.
- Nesreen K Ahmed, Jennifer Neville, Ryan A Rossi, and Nick [3] Duffield. Efficient graphlet counting for large networks. In 2015 IEEE International Conference on Data Mining, pages 1–10. IEEE, 2015.
- [4] Mansurul A Bhuiyan, Mahmudur Rahman, Mahmuda Rahman, and Mohammad Al Hasan. Guise: Uniform sampling of graphlets for large graph analysis. In 2012 IEEE 12th International Conference on Data Mining, pages 91–100. IEEE. 2012.
- Maximilien Danisch, Oana Balalau, and Mauro Sozio. List-[5]ing k-cliques in sparse real-world graphs. In Proceedings of the 2018 World Wide Web Conference, pages 589-598. International World Wide Web Conferences Steering Committee. 2018.
- [6] Ethan R Elenberg, Karthikeyan Shanmugam, Michael Borokhovich, and Alexandros G Dimakis. Distributed estimation of graph 4-profiles. In Proceedings of the 25th International Conference on World Wide Web, pages 483-493, 2016.
- [7] Michalis Faloutsos, Petros Faloutsos, and Christos Faloutsos. On power-law relationships of the internet topology. In ACM SIGCOMM computer communication review, volume 29, pages 251–262. ACM, 1999.
- Wayne Hayes, Kai Sun, and Nataša Pržulj. Graphlet-based [8] measures are suitable for biological network comparison. Bioinformatics, 29(4):483-491, 2013.
- [9] Tomaž Hočevar and Janez Demšar. A combinatorial approach to graphlet counting. Bioinformatics, 30(4):559-565,2014.
- Yang Hu, Hang Liu, and H Howie Huang. Tricore: Parallel [10]triangle counting on gpus. In SC18: International Conference for High Performance Computing, Networking, Storage and Analysis, pages 171–182. IEEE, 2018.
- [11] Madhav Jha, C Seshadhri, and Ali Pinar. Path sampling: A fast and provable method for estimating 4-vertex subgraph counts. In Proceedings of the 24th International Conference on World Wide Web, pages 495-505, 2015.
- [12] Jure Leskovec and Andrej Krevl. SNAP Datasets: Stanford large network dataset collection. http://snap.stanford. edu/data, June 2014.
- [13] Dror Marcus and Yuval Shavitt. Rage-a rapid graphlet enumerator for large networks. Computer Networks, 56(2):810-819, 2012.

- [14] Aleksandar Milinkovi ć, Stevan Milinkovi ć, and Ljubomir Lazi ć. A contribution to acceleration of graphlet counting. In Infoteh Jahorina Symposium, volume 14, pages 741-745.
- [15]Mark Ortmann and Ulrik Brandes. Quad census computation: Simple, efficient, and orbit-aware. In International Conference and School on Network Science, pages 1-13. Springer, 2016.
- [16] Ali Pinar, C Seshadhri, and Vaidyanathan Vishal. Escape: Efficiently counting all 5-vertex subgraphs. In Proceedings of the 26th International Conference on World Wide Web, pages 1431-1440. International World Wide Web Conferences Steering Committee, 2017.
- [17] Mahmudur Rahman, Mansurul Alam Bhuiyan, and Mohammad Al Hasan. Graft: An efficient graphlet counting method for large graph analysis. IEEE Transactions on Knowledge and Data Engineering, 26(10):2466-2478, 2014.
- [18] Pedro Ribeiro, Pedro Paredes, Miguel EP Silva, David Aparicio, and Fernando Silva. A survey on subgraph counting: Concepts, algorithms and applications to network motifs and graphlets. arXiv preprint arXiv:1910.13011, 2019.
- [19] Ryan A. Rossi and Nesreen K. Ahmed. The network data repository with interactive graph analytics and visualization. In AAAI, 2015.
- [20]Ryan A Rossi and Rong Zhou. Leveraging multiple gpus and cpus for graphlet counting in large networks. In Proceedings of the 25th ACM International on Conference on Information and Knowledge Management, pages 1783-1792. ACM, 2016.
- [21] Thomas Schank and Dorothea Wagner. Finding, counting and listing all triangles in large graphs, an experimental study. In International workshop on experimental and efficient algorithms, pages 606-609. Springer, 2005.
- [22] Daizaburo Shizuka and David B McDonald. A social network perspective on measurements of dominance hierarchies. Animal Behaviour, 83(4):925-934, 2012.
- [23]Tomokatsu Takahashi, Hiroaki Shiokawa, and Hiroyuki Kitagawa. Scan-xp: Parallel structural graph clustering algorithm on intel xeon phi coprocessors. In Proceedings of the 2nd International Workshop on Network Data Analytics, page 6. ACM, 2017.
- Pinghui Wang, Junzhou Zhao, Xiangliang Zhang, Zhenguo [24]Li, Jiefeng Cheng, John CS Lui, Don Towsley, Jing Tao, and Xiaohong Guan. Moss-5: A fast method of approximating counts of 5-node graphlets in large graphs. IEEE Transactions on Knowledge and Data Engineering, 30(1):73-86, 2017.
- [25]Xin L Wong, Rose C Liu, and Deshan F Sebaratnam. Evolving role of instagram in# medicine. Internal medicine journal, 49(10):1329-1332, 2019.