様式 C-19

科学研究費補助金研究成果報告書

平成２１年　４月１１日現在

研究種目：若手研究（Ｂ）
研究期間：2006～2008
課題番号：18710141
研究課題名（和文）　超大規模な半正定値計画問題に対する効率的な並列計算の実装

研究課題名（英文）　Efficient Parallel Implementation for Extremely Large-Scale SemiDefinite Programming

研究代表者
山下　真（YAMASHITA　MAKOTO）
東京工業大学・大学院情報理工学研究科・助教
２０３８６８２４

研究成果の概要：

半正定値計画問題は、量子化学や制御理論など幅広い応用を持つ重要な数理計画問題である。しかしながら、量子化学などから発生する半正定値計画問題は大規模になる傾向が強く、一台の計算機では求解が難しい。本研究では、Schur 補完行列にかかる計算に並列計算を適用することで、既存ソフトウェアでは不可能であった大規模な半正定値計画問題の求解を実現した。さらに行列の特徴を活用し、高い並列効果を得ることに成功した。

交付額

（金額単位：円）

	直接経費	間接経費	合　計
2006 年度	100,000	0	100,000
2007 年度	200,000	0	200,000
2008 年度	100,000	30,000	130,000
年度			
年度			
総　計	400,000	30,000	430,000

研究分野：複合新領域
科研費の分科・細目：社会・安全システム科学　社会システム工学・安全システム
キーワード：数理計画法、並列計算、半正定値計画問題

１．研究開始当初の背景

一般に、数理計画問題とは、実行可能集合 $S \subset R^n$ 上で実数関数 $f(x): R^n \rightarrow R$ を最大化、または最小化する $x \in S$ を求める問題である。本研究の対象となる半正定値計画問題(SemiDefinite Programming, 以下 SDP)は、実行可能集合 S を記述する際に行列不等式を用いることができるという特徴を持つ。この特徴によって、制御理論の問題や量子化学の電子構造計算が SDP に帰着できるだけでなく、組み合わせ最適化や多項式最適化など他の数理計画問題からも強力な緩和手法として利用されている。

SDP は、線形計画問題と同様に、以下のように主双対の形式で標準形を定義することができる。

$$\min : C \bullet X \qquad s.t.: A_k \bullet X = b_k, X \succeq O$$
$$(k = 1, \ldots, m)$$

$$\max : \sum_{k=1}^{m} b_k y_k \quad s.t.: Z = C - \sum_{k=1}^{m} A_k y_k \succeq O$$

ここで、$X \bullet Y$ は n 次元対称行列 X, Y の内積を表し、$X \succeq O$ は X が半正定値（すべての固有値が非負）であることを示している。

線形計画問題に対する効率的な手法である主双対内点法を対称行列空間に拡張すると、 主双対内点法を SDP に適用することが可能となり、これまでに SDPA や CSDP, SeDuMi,SDPT3 を含め、様々なソフトウェアが実装されてきた。

しかしながら、量子化学や多項式最適化などから発生する SDP は超大規模になる傾向が強い。一般に SDP の大きさは主問題の制約本数 m と変数行列 X, Y の次元 n でおおよそ見積もることができる。既存ソフトウェアが想定していた問題のサイズが $m = 1{,}000, n = 1{,}000$ 程度であったのに対して、量子化学では $m \geq 15{,}000, n \geq 3{,}000$ という規模の SDP を解く必要があった。この規模の SDP を 1 台の計算機で求解することは、計算時間、消費メモリ量の両面から極めて困難であった。

研究開始の時点で、このような大規模 SDP を求解するための並列計算ソフトウェア SDPARA を単体ＣＰＵ用ソフトウェア SDPA をベースに開発してきた。

主双対内点法は、反復解法の一種であるが、Schur 補完行列と呼ばれる正定値行列(次元 m)が係数行列となる連立方程式を各反復で解く必要がある。Schur 補完行列の各要素は、

$$B_{ij} = \left(X A_i Z^{-1} \right) \bullet A_j$$

で求めることができるが、主双対内点法の計算時間としての主なボトルネックは、この行列の要素の計算と連立方程式を解くための Cholesky 分解であり、大量にメモリを消費するのも一般に Schur 補完行列である。

SDPARA では、この Schur 補完行列を複数 PC のメモリに分散して保持し、要素計算と Cholesky 分解に並列計算を適用することで、大規模な SDP の求解を可能としてきた。

しかしながら、PC クラスタ上で数値実験を行うと、制御理論や量子化学などでは一定の成果が挙げられるものの、この時点の SDPARA は発展途上にあり、大幅な性能向上の余地があることがわかってきた。

２．研究の目的

(1) 疎な Schur 補完行列への対応

本研究課題の申請時における SDPARA は疎性の活用に大きな余地があった。例えば、入力行列 A_i, A_j に対角ブロック構造などの構造があるときに、Schur 補完行列 B が極めて疎になることがある。量子化学から発生する SDP では、B が完全に密となることがあらかじめ解かっており、密行列に対する Cholesky 分解を適用すれば十分である。しかしながら、B が疎になる場合には行列の非零要素のみを計算した上で、Sparse Cholesky 分解を適用することが望ましい。これにより、問題の構造によっては、大幅なメモリ消費量の削減と計算時間の短縮が達成可能である。

(2) 計算時間の推測モデル

大規模な SDP を求解する場合には、並列計算を実行しても長時間の計算時間を要する。したがって、予め計算時間を推測できることが望ましい。この計算時間推測を可能とする見積もり式の構築を行う必要があった。

(3) 数値的安定性の向上

SDPARA の採用しているアルゴリズムは主双対内点法であるが、数値的に不安定な側面もあり、制御理論や多項式最適化などの SDP では得られる有効桁数が十分でないという難点があった。ここでは、パラメータ調整による精度向上を目指した。

(4) Online Solver による提供

並列計算環境は普及しているとは言い難い状態にあり、SDPARA を自分でインストールして利用するユーザは限定されてしまう。そこで、東京電機大学の藤澤研究室（現時点では中央大学）で開発中の Online Solver に組み込むこととした。Online Solver はユーザからインターネットを介して SDP を受け取り、Online Solver 側で準備したＰＣクラスタで SDPARA を実行し、得られた解をユーザに返信するというシステムである。これに組むことで、多くのユーザに SDPARA の活用を促すことができる。

３．研究の方法

(1) 疎な Schur 補完行列への対応

これについては、まず単体 CPU 用ソフトウェアである SDPA で実装が行われた。入力行列 A_i の対角ブロックごとのメモリ読み込みを変更し、非零ブロックのみを読み込むこととした。これにより、Schur 補完行列がどの程度の非零要素を含んでいるかを把握することが容易となり、Schur 補完行列を密行列として計算するか、疎行列として計算するか、という判断の基準を設けることができるようになった。

また、Schur 補完行列に Sparse Cholesky 分解を適用する際には、適切な行と列のオーダーリングが性能に大きな影響を及ぼすが、

SPOOLES や MUMPS などの他のライブラリを利用することで、この部分での性能向上が得られた。

さらに、ここで得られた実装を元に SDPARA の改良も行った。SDPARA では、Schur 補完行列を行ごとに分解するのが従来の手法であったが、疎行列ではそれぞれの要素ごとに計算量を予め見積もっておき、要素単位で複数プロセスへの割り当てを行うように変更を施した。

(2) 計算時間の推測モデル

全体の計算時間の見積もりでは、主双対内点法の計算コンポーネントの各部分について推測モデルを立て、実際の計算時間と対比することでパラメータを得られる手法を検討した。

この手法では、パラメータを得るために以下のような問題を解く。

$$\min:\sum_i \max\left(\frac{\sum_j a_{ij}x_j}{b_i},\ \frac{b_i}{\sum_j a_{ij}x_j}\right)$$

ただし、a_{ij} は問題 i に関するコンポーネント j に関する量であり、b_i は問題 i に実際にかかる時間である。これらから、それぞれのコンポーネントの比例パラメータ x_j を求める。

この問題は小規模の SDP に変換することができ、SDP の計算時間推定のために SDP を解くという入れ子構造も特徴である。

(3) 数値的安定性の向上

数値的安定性については、当初は主双対内点法の内部パラメータ、あるいは探索方向の制御の変更などを試みたが、改善量はわずかであった。

その一方で、多倍長精度計算のライブラリ(Gnu Multiple Precision)が十分に使用可能なレベルとなり、これを SDPA に組み込んだ SDPA-GMP の開発が進んだ。

(4) Online Solver による提供

中央大学の藤澤研究室で開発が進んでいる Online Solver に組み込んでの運用を、現在行っている。

http://sdpa.indsys.chuo-u.ac.jp/portal/

４．研究成果

(1) 疎な Schur 補完行列への対応

疎な Schur 補完行列に対応した計算やメモリ確保により、単体 CPU 上での多項式計画問題の数値実験では、計算時間が 6204 秒から 3 秒に短縮され、メモリ使用量が 380MB から 19MB に削減された。

また、SDPARA にこの効果を適用した場合の結果が図 1 である。

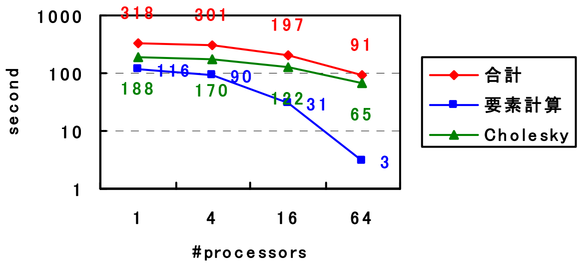

図 1：多項式計画問題の SDPARA 実行結果

ただし、図 1 において、横軸は使用したプロセッサ数であり、縦軸はそれぞれの部分ごと、および合計の計算時間である。ここで、16 台までは Sparse Cholesky 分解による高速化が達成されており、64 台では密行列として計算したほうが高速となっている。これは、密行列の Cholesky 分解は一般に Sparse Cholesky よりも並列効果が高くなりやすいことを反映している。SDPARA では、その両方を組み込んでいるため、台数が増えたときに効果が著しく表面化するケースがある。

次に、量子化学の SDP に適用した結果が図 2 である。

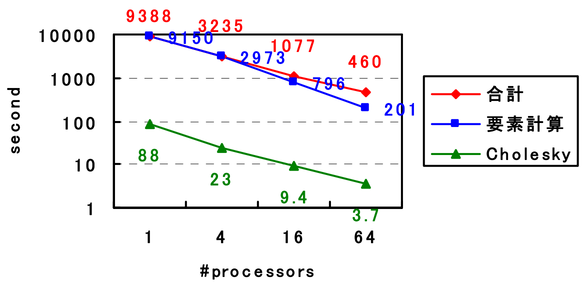

図 2 ：量子化学の SDP の SDPARA 実行結果

量子化学については、すでに並列効果が確かめられていたが、既存のソフトウェアでは解くことのできなかったサイズが解けることを実証した。これまでに SDPARA では、$m \geq 35{,}000, n \geq 4{,}000$ という問題を解いており、主双対内点法の数値精度をこれだけの時間で達成できるソフトウェアは他には存在しない。

これらの研究成果は、論文の (2), (4), (5), (6), (7), (8), 学会発表の (1), (4), (5), 図書の (1), (2) などにまとめられている。

なお、疎な Schur 補完行列の要素計算は、負荷分散に改良の余地が十分に有り、より一層の並列効果が期待できる。

(2) 計算時間の推測モデル

実際の計算時間と、推定時間との比率をまとめたのが図３である。

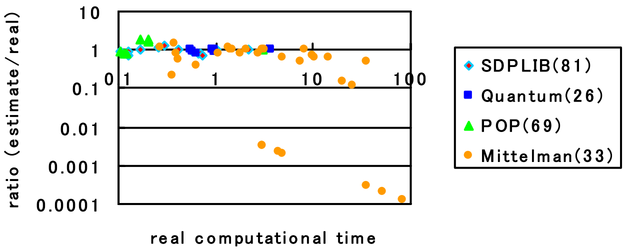

図３：計算時間と推定との比率

ただし、図３で横軸は実際の計算時間であり、縦軸が実際の時間に対する推定時間の比率である。

いくつかのはずれ値を除いては、かなりの精度で推定を実現できた。また、そのはずれ値についても、SDP として特徴的な構造を持っているため、その特徴を推定モデルに取り込むことで、はずれ値を解消できると考えている。

この研究成果は、学会発表(2)で発表している。

(3)数値的安定性の向上

多倍長精度計算を取り入れた SDPA-GMP によって、大幅な精度向上が得られた。例えば、グラフ分割問題から生成される SDP では、双対 gap が SDPA では 10^{-7} 程度であるのに対して、200bit の SDPA-GMP を用いると、10^{-26} と４倍程度の有効桁数を得ることができる。これは、既存ソフトウェアでは得ることのできなかった数値精度である。

また、量子化学から発生する SDP の中には数値誤差などで不十分な求解しか行えないものがあったが、SDPA-GMP により、精度の高い求解を行えるようになった。

この研究成果は、論文(1),(9),学会発表(1)などにまとめられている。

(4) Online Solver による提供

既に Online Solver に提供されて、様々なユーザに活用され始めている。また、それにあわせて、SDP に関する質問なども海外の研究者から寄せられるようになり、SDP の研究全体の発展に寄与できていると考えられる。

この研究結果は、論文(3),(4),学会発表(1),(4)などにまとめられている。

５．主な発表論文等

（研究代表者、研究分担者及び連携研究者には下線）

〔雑誌論文〕（計　９件）

(1)Maho Nakata, Bastiaan Braams, Katsuki Fujisawa, Mituhiro Fukuda, Jerome Percus, Makoto Yamashita and Zhengji Zhao, “Variational calculation of second-order reduced density matrices by strong N-representability conditions and an accurate semidefinite programming solver,” *Journal of Chemical Physics*, Vol. 128, pp. 164113 (2008), 査読有.

(2)中田和秀、藤澤克樹、福田光浩、山下真、中田真秀、小林和博、「最適化ソフトウェア SDPA」, *応用数理*, Vol. 18, No. 1, pp. 2-14 (2008), 査読有.

(3)Makoto Yamashita, Katsuki Fujisawa and Kazuhide Nakata, “Parallel Solver for SemiDefinite Programming,” *International Journal of Logistics and SCM systems*, Vol. 2, No. 1, pp. 22-29 (2007),査読有.

(4)Katsuki Fujisawa, Kazuhide Nakata, Makoto Yamashita and Mituhiro Fukuda, “SDPA Project: Solving Large-Scale Semidefinite Programs,” *Journal of the Operations Research Society of Japan*, Vol. 50, No. 4, pp. 278-298 (2007), 査読有.

(5)Mituhiro Fukuda, Bastiaan Braams, Maho Nakata, Michael Overton, Jerome Percus, Makoto Yamashita and Zhengji Zhao, “Large-scale semidefinite programs in electronic structure calculation,” *Mathematical Programming B*, Vol. 109, No. 2, pp. 553-580 (2007), 査読有.

(6)山下真,「量子化学における 超大規模半正定値計画問題と並列計算による高速求解」, *第 18 回 RAMP シンポジウム論文集*, pp. 191-207 (2006), 査読無（招待講演）.

(7)Katsuki Fujisawa, Masakazu Kojima, Akiko Takeda and Makoto Yamashita, “Solving Large Scale Optimization Problems via Grid and Cluster Computing,” *Journal of the Operation Research Society of Japan*, Vol. 47, No. 4, pp. 265-274 (2006), 査読有.

(8)Maho Nakata, Bastiaan Braams, Mituhiro Fukuda, Jerome Percus, Makoto Yamashita and Zhengji Zhao, “Simple Hamiltonians which exhibit drastic failures by variational determination,” *Journal of Chemical Physics*, Vol. 125, pp. 244109 (2006), 査読有.

(9)Kazuhide Nakata, Makoto Yamashita, Katsuki Fujisawa and Masakazu Kojima, "A Parallel Primal-Dual Interior-Point Method for Semidefinite Programs," *Parallel Computing*, Vol. 32, No. 1, pp. 24-43 (2006), 査読有.

〔学会発表〕(計　５件)

(1) Makoto Yamashita, "SDPA: Leading-edge Software for SDP", INFORMS Annual Meeting 2008, 2008 年 10 月 14 日, Washington DC.

(2)Makoto Yamashita, "Computational Time Estimation for SDP solvers", INFORMS Annual Meeting 2007, 2007 年 11 月 14 日, Seattle.

(3)Makoto Yamashita, "Parallel Solver for SemiDefinite Programming", The Third International Conference of Logistics and SCM, 2007 年 8 月 30 日, 横浜.

(4) 山下真、「量子化学における 超大規模半正定値計画問題と並列計算による高速求解 」, 第 18 回 RAMP シンポジウム, 2006 年 10 月 13 日, 京都.

(5) Makoto Yamashita, "Large-scale semidefinite programming from quantum chemistry", International Symposium on Mathematical Programming 2006, 2006 年 7 月 31 日, Rio de Janeiro.

〔図書〕(計　２件)

(1) Mituhiro Fukuda, Maho Nakata and Makoto Yamashita, *John Wiley & Sons, Inc.*, "Reduced-Density-Matrix Mechanics with Applications to Many-Electron Atoms and Moecules", 2007, pp. 103-118 (総ページ 574), 査読有.

(2) Makoto Yamashita, Katsuki Fujisawa, Mituhiro Fukuda, Masakazu Kojima and Kazuhide Nakata, *Wiley-Interscience*, "Parallel Combinatorial Optimization", 2006, pp. 211-238 (総ページ 330), 査読有.

〔その他〕
　半正定値計画問題ソフトウェア SDPA およびその並列版 SDPARA のホームページ
http://sdpa.indsys.chuo-u.ac.jp/sdpa/
　論文の研究成果は東京工業大学のレポジトリ　T2R2(http://t2r2.star.titech.ac.jp/) でも公開している。

６．研究組織
(1)研究代表者

山下　真
東京工業大学・大学院情報理工学研究科・助教
２０３８６８２４

(2)研究分担者
　なし
(3)連携研究者
　なし