

令和 6 年 6 月 25 日現在

機関番号：33704

研究種目：基盤研究(C) (一般)

研究期間：2019～2023

課題番号：19K12008

研究課題名(和文)大規模な計算機環境の性能を活かす線形方程式ソルバーの数理的考究に基づく新たな展開

研究課題名(英文) New solvers and strategies based on mathematical analyses to enhance parallel performance on massive computers

研究代表者

阿部 邦美 (Abe, Kuniyoshi)

岐阜聖徳学園大学・経済情報学部・教授

研究者番号：10311086

交付決定額(研究期間全体)：(直接経費) 3,400,000円

研究成果の概要(和文)：多くのプロセッサを用いて計算可能なハードウェアが開発され、今日、ペタスケールの性能が実現されている。近年では、こういった大規模計算機の性能を十分に活かすことができる Krylov 空間法の研究が活発に進められている。

そこで、通信箇所を減らし、さらに従来と同程度の収束スピードを保つことができるような(丸め誤差が収束性に与える影響を考慮した)アルゴリズム、すなわち新たな communication avoiding 積型解法 (BiCGSTAB法、GPBiCG法、BiCGstab(ell)法)、pipelined 積型解法、s-step 共役勾配法などを開発した。

研究成果の学術的意義や社会的意義

近年、大規模な計算機環境の発展が著しく、そういった大規模な計算機環境を活かす解法群の開発が始まっている。一方で、誤差に対して脆弱であるという欠点があり、大規模計算機向きアルゴリズム設計の研究と誤差の解析や制御といった研究とが、互いの長所を活かし進められていない。本研究は、アルゴリズム設計で問題となる誤差に対する脆弱性の改善と、今日の大規模な計算機環境向きアルゴリズムの設計との両面から研究を遂行するものである。同時に、これらの課題を実現すると大規模な計算機環境向き解法群が盤石なものとなり、社会に役立つ実用問題に対する緻密な解明が一層可能となる。

研究成果の概要(英文)：In present petascale highperformance computing hardware, the main bottleneck of Krylov subspace methods for efficient parallelization is the inner products which require a global reduction. The parallel variants of BiCGSTAB such as communication avoiding and pipelined BiCGSTAB reducing the number of global communication phases and hiding the communication latency have been proposed. However, the numerical stability, specifically, the convergence speed of the parallel variants is slow, i.e., strongly affected by rounding errors.

Therefore, we have designed parallel variants, which are referred to as pipelined BiCGSTAB, GPBiCG and BiCGstab(ell), and s-step CG. We have developed a stabilization strategy as well. We have examined the convergence speed between the standard and the parallel variants, and the effectiveness of the stabilization strategy by numerical experiments on the problems where the convergence has a long stagnation phase.

研究分野：計算科学

キーワード：Krylov空間法 線形方程式 大規模計算機環境 通信箇所の削減 収束スピードの改善 丸め誤差解析

様式 C - 19、F - 19 - 1 (共通)

1. 研究開始当初の背景

計算理工学における現象を解明しようとするとき、数学的な定式化を行うと微分方程式などで表され、それを離散化すると最終的に大規模疎(成分の多くは 0)行列を係数にもつ線形方程式の求解問題に帰着されることが多い。現在、大規模線形方程式の標準的なソルバーは Krylov 空間法である。Krylov 空間法は、少ない計算時間かつ少ない記憶容量で近似解を見付けることができる強力なソルバーであるが、丸め誤差の影響を受け易く、収束スピードの悪化、近似解精度の劣化という問題が起きることがある。そのため、アルゴリズムを構成する行列ベクトル積、内積、ベクトル更新(ベクトル和とスカラー倍)の演算から発生する丸め誤差が収束性に与える影響がこれまでに解析されてきた。そして、それらの解析結果に基づいて収束スピードの悪化や近似解精度の劣化を防ぐ手法が開発され、収束性が盤石なものに改善されてきた。

多くのプロセッサを用いて計算可能なハードウェアが開発され、今日、ペタスケール(1秒間に 10^{15} 回の演算が可能)の性能が実現されている。さらに、将来に向けてエクサスケールのハードウェアが計画されている。近年では、こういった大規模な計算機の性能を十分に活かすことができる線形方程式ソルバーの研究が活発になっており、将来の環境ではその必要性が益々高まる。1 プロセッサの場合の計算時間は、行列ベクトル積の演算が主であるが、大規模な計算機環境における効率性のボトルネックは、内積演算で起こるプロセッサ間の通信に関するオーバーヘッドである。この問題点を克服するため、近年、大きく分類して2つのアイデアを用いる解法群、すなわち同期の回数を減らした(数反復に1回しか内積計算を行わない、または同期が起こる箇所を減らす)解法群、および行列ベクトル積の演算に重ねて内積演算の通信を隠蔽する解法群が開発されている。

これまでに開発された大規模計算機向き解法群は、従来の解法よりむしろ丸め誤差の影響を受け易いという欠点がある。実際、研究代表者からも収束スピード悪化、近似解精度劣化を確認しており、このままでは実用性・信頼性が不十分と思われる。また大規模計算機向き解法群の開発は、一部のみでまだ発展途上にある。そこで、未開発な解法群の設計や、実用性を高めるために誤差に対する解析と制御手法の設計が必要不可欠であると考える。

2. 研究の目的

本研究の目的は、今日または将来の大規模な計算機の性能を活かす線形方程式ソルバーを開発し、さらに数理的考究に基づき実用性・信頼性を高める(盤石にする)ことである。そこで、次の研究目的(1)-(3)を遂行する。

大規模な計算機環境向き解法群は誤差に対して脆弱であるという欠点があるが、誤差の解析や制御といった研究と、大規模計算機向きアルゴリズム設計の研究とが、互いの長所を活かし進められていない現状のため、考究の余地がある。

(1) 大規模な計算機の性能を活かすソルバーを設計する。これまでに開発された大規模計算機向き解法は従来のうちの一部である。そこで、大規模な計算機環境向きになっていない積型解法や派生した解法を大規模計算機向きに設計する。

(2) 大規模な計算機環境向き解法群の実用性・信頼性を高める(盤石にする)。大規模計算機向き解法群は、従来より丸め誤差の影響を受け易い。そこで、丸め誤差が収束性に及ぼす影響を解析し、従来と同程度の収束スピードをもつアルゴリズムや、誤差を制御・対策する手法を開発する。

(3) 大規模な計算機環境における並列性能の検証し、実用問題への適用する。(本申請で)開発した手法を最新かつ主要な大規模計算機によって性能評価する。その際、大規模で社会的に役立つ実用問題を取り扱う。

3. 研究の方法

本研究の目的は、今日または将来の大規模な計算機の性能を活かす線形方程式ソルバーを開発し、さらに数理的考究に基づき実用性・信頼性を高める(盤石にする)ことである。そこで、下記(1)-(3)の方法で進める。

(1) 積型解法族や、その高速化版である帰納的次元縮小原理(IDR)に基づく解法は、一般化最小残差(GMRES)法と並び大規模問題にしばしば利用される。大規模計算機環境向き GMRES 法の研究は進んでいるが、積型解法族や IDR 法、派生した解法に対する大規模計算機環境向きアルゴリズムの設計は未だである。そこで、次の手順で設計する。

安定化双共役勾配(BiCGSTAB)法よりも収束性が強力な一般化積型解法を、下記参考文献[5]に沿ってまず同期が起こる箇所を減らし、次に行列ベクトル積の演算で内積演算の通信を隠蔽するアルゴリズムを設計する。

IDR 法は、BiCGSTAB 法に GMRES 法を組み込んだアルゴリズムとなっているため、下記参考文献[3, 5]を参考にして同期が起こる箇所を減らし、大規模計算機環境向きアルゴリズムを設計する。

(2) 大規模計算機環境向き解法群と従来との違いは、同期が起こる箇所を集約させるために従

来より多くのベクトル更新が用いられる点である(マルチステップと呼ぶ)。さらに、マルチステップから生成されるベクトルを用いて内積計算を行う。そこで、次の手順で誤差の影響を解析し、その結果に基づき誤差を制御する手法を開発する。

マルチステップを数学的に表現し、これと従来結果(下記参考文献[4, 6]など)を組み合わせることにより、発生する誤差が近似解精度に与える影響を解析する。

マルチステップから発生する誤差を表す解析結果(上記(2)-)と、従来から知られている内積演算から発生する誤差を表す解析結果[1, 2, 7]とを組み合わせることによって、収束スピードに与える影響を解析する。

上記(2)- , の結果、および従来の制御手法を開発した際に用いたアイデア(下記参考文献[1, 2, 6]など)によって 収束スピードの悪化や近似解精度の劣化を防ぐ手法を開発する。

(3) 最新の計算機において(本申請で)開発した手法の並列性能を評価する。さらに、効率性の高いアルゴリズムを目指す。次に、社会的に役立つ応用問題に開発した手法を適用し、求解効率が向上することを示す。

【参考文献】

- [1] K. Abe, G. Sleijpen, Appl. Numer. Math., Vol. 67, 2013
- [2] K. Abe, G. Sleijpen, J. Comput. Appl. Math., Vol. 234, 2010
- [3] E. Carson, N. Knight, J. Demmel, SIAM J. Sci. Comput., 2013
- [4] E. Carson, M. Rozložnik, Z. Strakos, P. Tichy, M. Tuma, SIAM J. Sci. Comput., 2018
- [5] S. Cools, W. Vanroose, Parallel Comput., 2017
- [6] M. H. Gutknecht, Z. Strakos, SIAM J. Matrix Anal. & Appl., 2006
- [7] G. Sleijpen, H. A. van der Vorst, Numer. Algorithms, 1995

4. 研究成果

大規模な計算機環境向き解法群は、誤差に対してしばしば脆弱であるという欠点をもつ。そこで、大規模計算機の性能を十分に活かすことができる Krylov 空間法の研究と、丸め誤差の解析や収束スピードの制御に関する研究を両立させるアルゴリズムを開発した。すなわち、通信箇所を減らし、さらに従来と同程度の収束スピードを保つことができるような(丸め誤差が収束性に与える影響を考慮した)アルゴリズム、言い換えれば 新たな communication avoiding 積型解法(BiCGSTAB 法, GPBiCG 法, BiCGstab(ell)法), pipelined 積型解法, s-step 共役勾配法などを開発した。下記(1)-(5)に研究成果の概略をまとめる。

(1) 大規模な計算機環境における効率性のボトルネックは、内積演算で起こるプロセッサ間の通信に関するオーバーヘッドである。そのため、同期の回数を減らす手法群や、行列ベクトル積の演算に重ねて内積演算の通信を隠蔽する手法群が開発されている。われわれは行列ベクトル積の演算に重ねて内積演算の通信を隠蔽する概念(上記参考文献[5]のアイデア)を非対称行列用ソルバーBiCGSTAB 法に適用し、大規模な計算機環境向けのアルゴリズムを新たに開発した。さらに、内積演算から発生する丸め誤差が収束性に与える影響を解析し、その解析結果に基づいて誤差を制御する技法を提案した。そして、数値実験を通して、開発したアルゴリズムと制御手法の有効性を示した。

(2) 上記(1)と同様、われわれは行列ベクトル積の演算に重ねて内積演算の通信を隠蔽する概念(上記参考文献[5]のアイデア)を非対称行列用ソルバーGPBiCG 法に適用し、大規模な計算機の性能を活かすことができ、同時に従来と同程度の収束スピードをもつアルゴリズムを開発した。なお、われわれは以前にGPBiCG 法について4つの改良アルゴリズムを開発しており、これら4つに関する大規模な計算機環境向けのアルゴリズムを開発した。さらに、内積演算から発生する丸め誤差が収束性に与える影響を解析し、その解析結果に基づいて誤差を制御する技法を提案した。そして、数値実験を通して、開発したアルゴリズムと制御手法の有効性を示した。また、丸め誤差が発生する主たる多項式係数(収束スピードに影響を与える誤差がどの内積演算から発生するか)を特定することができた。なお、本研究成果は国際共同研究(オランダ)にあたる。

(3) 大規模な計算機環境を活かすためには同期の回数を減らすことが有効な手段である。われわれは同期の回数を減らす(数反復に1回しか内積計算を行わない)概念をもつCG法を開発した。さらに、近似解精度を改善するために2つの技法、すなわち一つは数回の反復毎に真の残差を利用する技法、もう一つは反復のなかで計算された残差と真の残差との重み付き平均を用いる技法を提案した。そして、エレメントフリーガラーキン法から得られる線形方程式に適用し、開発したアルゴリズムと近似解精度を改善する技法の有効性を示した。

(4) 上記(3)と同様、大規模な計算機環境を活かすために、われわれは同期の回数を減らす(数反復に1回しか内積計算を行わない)概念を持つ可変的前処理付き Krylov 空間法のアルゴリズムを開発した。ただし、可変的前処理付き Krylov 空間法では、内部反復回数は外部反復回数に数百倍となる(内部反復回数が圧倒的に多い)ことから、内部反復で使用する解法にこの概念を適用して同期の回数を減らした。そして、電磁界解析から得られる線形方程式を用いてその有効性を示した。

(5) 行列ベクトル積の演算に重ねて内積演算の通信を隠蔽する概念(上記参考文献[5]のアイデア)を非対称行列用ソルバーBiCGstab(ell)法に適用し、大規模な計算機の性能を活かすことができ、同時に従来と同程度の収束スピードをもつアルゴリズムを開発した。なお、本研究

成果は国際共同研究（オランダ）にあたる．また，われわれが開発した行列ベクトル積の演算に重ねて内積演算の通信を隠蔽する pipelined BiCGSTAB 法の大規模計算機環境への実装について検討した．

5. 主な発表論文等

〔雑誌論文〕 計5件（うち査読付論文 4件/うち国際共著 2件/うちオープンアクセス 3件）

1. 著者名 Per Christian Hansen, Yiqiu Dong, Kuniyoshi Abe	4. 巻 26
2. 論文標題 Hybrid enriched bidiagonalization for discrete ill-posed problems	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 Numer Linear Algebra Appl. e2230	6. 最初と最後の頁 1-9
掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） 10.1002/nla.2230	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 該当する
1. 著者名 Kuniyoshi Abe, Seiji Fujino, Soichiro Ikuno	4. 巻 6
2. 論文標題 A numerical study for MrR algorithm for linear equations with symmetric matrices	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 J. ADV. SIMULAT. SCI. ENG.	6. 最初と最後の頁 128-140
掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） 10.15748/jasse.6.128	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている（また、その予定である）	国際共著 -
1. 著者名 Akira Matsumoto, Yoshihisa Fujita, Taku Itoh, Kuniyoshi Abe, Soichiro Ikuno	4. 巻 6
2. 論文標題 Improvement of convergence property of communication avoiding conjugate gradient method for linear system obtained from meshless approaches	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 J. ADV. SIMULAT. SCI. ENG.	6. 最初と最後の頁 43-55
掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） 10.15748/jasse.6.43	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている（また、その予定である）	国際共著 -
1. 著者名 Kuniyoshi Abe, Soichiro Ikuno	4. 巻 1391
2. 論文標題 On Convergence Speed of Parallel Variants of GPBiCG Method for Solving Linear Equations	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 Journal of Physics: Conference Series	6. 最初と最後の頁 1-5
掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） 10.1088/1742-6596/1391/1/012093	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている（また、その予定である）	国際共著 -

1. 著者名 Kuniyoshi Abe, Soichiro Ikuno, Gerard Slejpen	4. 巻 -
2. 論文標題 A Numerical Study of Parallel Variants of GPBiCG Method with Stabilization Strategy for Solving Linear Equations	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 The 40th JSST Annual International Conference on Simulation Technology Conference Proceedings	6. 最初と最後の頁 6-7
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) なし	査読の有無 無
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 該当する

[学会発表] 計4件(うち招待講演 1件/うち国際学会 4件)

1. 発表者名 Kuniyoshi ABE
2. 発表標題 A Numerical Study of Parallel Variants of GPBiCG Method with Stabilization Strategy for Solving Linear Equations
3. 学会等名 The 40th JSST Annual International Conference on Simulation Technology (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 Soichiro Ikuno
2. 発表標題 Numerical Evaluations of Adaptive k-skip Mister R for Linear System obtained from Electromagnetic Analysis
3. 学会等名 19th Biennial IEEE Conference on Electromagnetic Field Computation (国際学会)
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 Kuniyoshi Abe
2. 発表標題 On Convergence Speed of Parallel Variants of Hybrid Bi-CG Methods for Solving Linear Equations
3. 学会等名 The 38th JSST Annual International Conference on Simulation Technology (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 Soichiro Ikuno
2. 発表標題 Numerical Evaluations of Variable k-skip MrR Method
3. 学会等名 The 38th JSST Annual International Conference on Simulation Technology (国際学会)
4. 発表年 2019年

〔図書〕 計0件

〔産業財産権〕

〔その他〕

-

6. 研究組織

	氏名 (ローマ字氏名) (研究者番号)	所属研究機関・部局・職 (機関番号)	備考
研究分担者	生野 壮一郎 (Ikuno Soichiro) (70318864)	東京工科大学・コンピュータサイエンス学部・教授 (32692)	

	氏名 (ローマ字氏名) (研究者番号)	所属研究機関・部局・職 (機関番号)	備考
研究協力者	スレイペン ヘルルド (Sleijpen Gerard)		

7. 科研費を使用して開催した国際研究集会

〔国際研究集会〕 計0件

8. 本研究に関連して実施した国際共同研究の実施状況

共同研究相手国	相手方研究機関		
オランダ	Utrecht University		