

令和 6 年 6 月 10 日現在

機関番号：12102

研究種目：基盤研究(C) (一般)

研究期間：2020～2023

課題番号：20K11840

研究課題名(和文)鞍点型連立一次方程式に対する階層並列型高速数値解法の開発

研究課題名(英文) Development of a hierarchical parallel numerical algorithm for saddle point problems

研究代表者

多田野 寛人 (Tadano, Hiroto)

筑波大学・計算科学研究センター・助教

研究者番号：50507845

交付決定額(研究期間全体)：(直接経費) 3,200,000円

研究成果の概要(和文)：鞍点型と呼ばれる連立一次方程式は様々な応用分野において出現し、その高速求解法が必要とされている。本研究課題では、同方程式に対する階層並列型数値解法を構築し、その並列計算コードを開発した。筑波大学計算科学研究センターのスーパーコンピュータ「Cygnus」において同コードの性能評価を行い、本数値解法の並列計算環境に対する親和性の高さを実証した。さらに、本数値解法の内部で必要となる複数右辺ベクトルをもつ連立一次方程式に対する高精度数値解法の開発も行った。

研究成果の学術的意義や社会的意義

本研究課題を通して、鞍点型連立一次方程式の階層並列型数値解法を開発することにより、同方程式の反復法による求解難度を下げることができたとともに、並列計算環境に適した手法を構築することができた。また、複数右辺ベクトルをもつ連立一次方程式の高精度数値解法を開発することにより、本研究課題の内容にとどまらず他の分野に対しても貢献できる。

研究成果の概要(英文)：Saddle point problems appear in many application areas, and a fast solver for these problems is needed. In this research project, we constructed a hierarchical parallel solver for these problems and developed a parallel computing code. We evaluated the parallel performance of this code on the Cygnus Supercomputer, operated at the Center for Computational Sciences, University of Tsukuba, and demonstrated that this solver is suitable for parallel computing environments. In addition, we also developed a highly accurate numerical solver for linear systems with multiple right-hand sides, which is needed in the hierarchical parallel solver.

研究分野：数値線形代数

キーワード：鞍点型連立一次方程式 階層並列型数値解法 ブロッククリロフ部分空間反復法

科研費による研究は、研究者の自覚と責任において実施するものです。そのため、研究の実施や研究成果の公表等については、国の要請等に基づくものではなく、その研究成果に関する見解や責任は、研究者個人に帰属します。

1. 研究開始当初の背景

2行2列のブロック構造を有する行列を係数行列にもつ連立一次方程式は「鞍点型」と呼ばれ、拘束条件付の数理最適化問題、偏微分方程式のメッシュレス離散化法、構造解析などにおいて現れる。同方程式の係数行列は、左上に正方行列 A 、右上に縦長行列 B 、左下に横長行列 C^T 、右下に零行列をもつ。右上行列 B の列数、左下行列 C^T の行数が多い場合、クリロフ部分空間反復法による同方程式の求解には非常に多くの反復回数を必要とし、解が得られないこともある。この振る舞いは様々な現象を解析する上でボトルネックになっており、この点を解決できれば多くの分野の研究者に対して鞍点型連立一次方程式の求解高速化、及びシミュレーション時間全体の高速化の面で寄与できる。

鞍点型連立一次方程式の求解高速化手法を確立できるかどうかを明らかにすることが、本研究課題を遂行する動機である。

2. 研究の目的

上述の通り、鞍点型連立一次方程式はクリロフ部分空間反復法による求解が困難な問題である。本研究課題では、鞍点型連立一次方程式の求解プロセスを複数段階に分解し、計算の主要部を求解が容易な複数右辺ベクトルを有する連立一次方程式に置き換える手法を構築することで、求解高速化を図る。また、この提案手法が高い並列性をもつようにアルゴリズムを構築するとともに、並列計算環境に対する親和性の高さを実証することも本研究課題の目的とする。

3. 研究の方法

(1) 鞍点型連立一次方程式のブロック構造を利用した数値解法の構築

鞍点型連立一次方程式を直接クリロフ部分空間反復法で求解するのは困難であるため、本研究課題ではこの困難さを打破する手法を構築する。同方程式の係数行列は2行2列のブロック構造を有するため、これを利用することで同方程式を変形する。この変形により、係数行列の左上行列 A を係数行列にもち、かつ複数の右辺ベクトルを有する連立一次方程式に帰着できる。この複数右辺連立一次方程式は一般に鞍点型連立一次方程式よりも反復法による求解が容易であり、複数右辺連立一次方程式の解行列を用いることで鞍点型連立一次方程式の解ベクトルを求めることができる。本手法では、複数右辺連立一次方程式の求解部分が計算主要部となり、かつその精度は鞍点型連立一次方程式にも影響するため、高速かつ高精度に求解する必要がある。本研究課題では、複数右辺連立一次方程式に対する効率的な数値解法として知られているブロッククリロフ部分空間反復法を適用することで、高速求解を図る。

(2) 鞍点型連立一次方程式に対する階層並列型数値解法の実装

上述の鞍点型連立一次方程式のブロック構造を利用した数値解法は、複数右辺ベクトルをもつ連立一次方程式の求解部分が計算主要部であることから、同方程式の高速求解ができれば鞍点型連立一次方程式も高速に求解することが可能となる。複数右辺連立一次方程式の右辺項を構築する各列ベクトル間には依存関係がないため、列方向に分割することが可能である。この分割により、少数本の右辺ベクトルをもつ複数の連立一次方程式に分割することができる。これらの連立一次方程式は同時に求解することができ、さらに分割された各方程式も並列に求解可能であることから、本手法は階層型の並列性を有する。本研究課題では、分割された各方程式に対して1つのMPIプロセスを割り当て、各MPIプロセス内ではOpenMP、及びOpenACC、CUDAライブラリによりGPUを用いることで並列化を行う。さらに、鞍点型連立一次方程式の解ベクトルを求める部分についても並列実装を行う。

(3) 複数右辺連立一次方程式に対する高精度ブロッククリロフ部分空間反復法の開発

鞍点型連立一次方程式に対する階層並列型数値解法では、複数右辺連立一次方程式が内部問題として現れ、その解行列の精度が鞍点型連立一次方程式に影響を及ぼすことから高精度に求解する必要がある。そのため本研究課題では、高精度ブロッククリロフ部分空間反復法の開発を行う。一般にブロッククリロフ部分空間反復法は、右辺ベクトル数の増加に伴い反復回数は減少する傾向にあるが、その反面、得られる解の精度は悪くなる傾向にある。ブロッククリロフ部分空間反復法の解の精度の改善手法として、Group-wise 更新手法がある。同手法では、複数反復分の漸化式更新量をグループ化し、解の精度劣化を引き起こす計算を避けることで高精度化を図っている。しかしながら、このグループ化周期は解法の性能に大きな影響を及ぼす。本研究課題では、解法内の情報を用いることでグループ化周期を可変的に制御する手法を開発する。さらに、この開発手法をブロッククリロフ部分空間反復法の1つであるBlock GPBiCGrQ法に対して適用し、その性能を評価する。

4. 研究成果

(1) 鞍点型連立一次方程式のブロック構造を利用した数値解法の性能評価

鞍点型連立一次方程式の係数行列の左上行列 A として, SuiteSparse Matrix Collection で公開されている行列 epb2 (行列サイズ: 25, 228, 非零要素数: 175, 027) を用いた. 同係数行列の右上行列 B と左下行列 C^T の要素は乱数で与えた. ブロック構造を利用した数値解法で用いるブロッククリロフ部分空間反復法として, Block GWBiCGSTABrQ 法を適用し, 同法の漸化式グループ化パラメータは 20 とした. 実験環境として, 筑波大学計算科学研究センターのスーパーコンピュータ「Cygnus」の 1 ノード (OS: Cent OS ver. 7.7, CPU: Intel Xeon Gold 6126 2.6GHz (12 コア) \times 2, GPU: NVIDIA Tesla V100 \times 4, メモリ: 192GiB) を用いた. なお, 本実験では CPU のみを用い, OpenMP で並列化し 24 スレッド並列で計算を行った.

図 1 に, 鞍点型連立一次方程式のブロック構造を用いた数値解法 (Proposed) と従来法 (BiCGSTAB, GMRES, GMRES(100), GMRES(200)) の反復回数と計算時間の性能比較結果を示す. ブロック構造を用いた数値解法における反復回数は, 複数右辺連立一次方程式の求解に要した反復回数である. 従来法における反復回数は, 鞍点型連立一次方程式に対して反復法を適用し, 求解に要した反復回数を表す. なお, 図 1 は収束条件を満たした点のみをプロットした. 図 1(a) に示すように, 従来法では行列 B, C の列数が増えると反復回数が増加し, GMRES 法を除いて求解不能となった. 一方, ブロック構造を用いた数値解法では逆に, 反復回数が減少した. これは解法内部で用いているブロッククリロフ部分空間反復法の特徴が活かされているためである. また, 図 1(b) に示すように, ブロック構造を用いた解法は従来法よりも高速に鞍点型連立一次方程式を解くことができた.

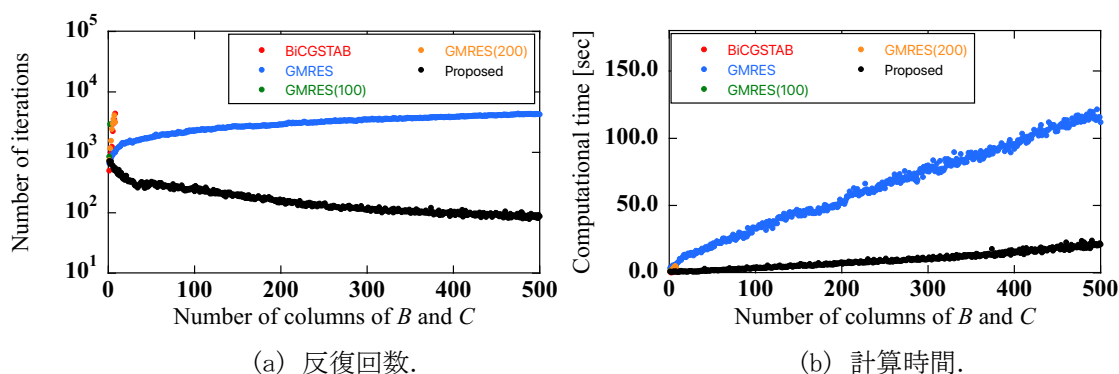
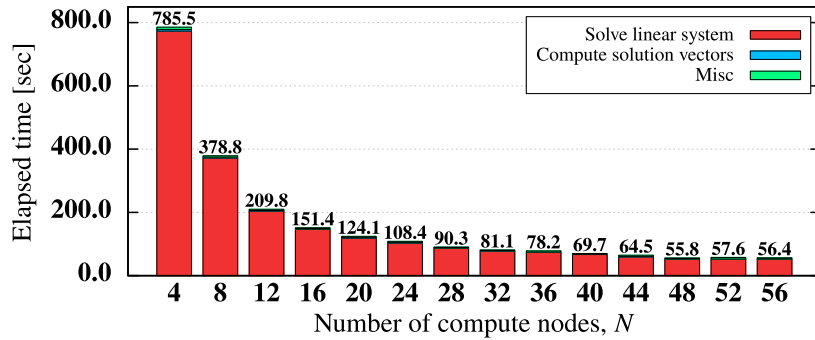


図 1 鞍点型連立一次方程式のブロック構造を用いた数値解法と従来法の性能比較.

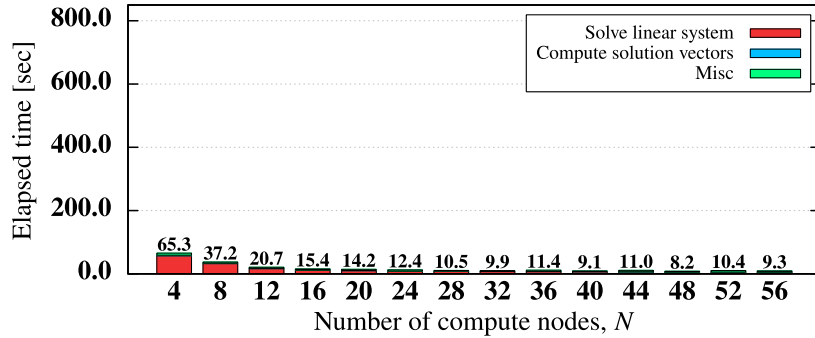
(2) 鞍点型連立一次方程式に対する階層並列型数値解法の並列コード開発と性能評価

鞍点型連立一次方程式に対する階層並列型数値解法の並列計算コードを開発し, 筑波大学計算科学研究センターのスーパーコンピュータ「Cygnus」を用いて性能評価を行う. Cygnus の各計算ノードには CPU が 2 基, GPU が 4 基搭載されている. そのため, 各 CPU に MPI プロセスを 2 つ立ち上げ, 各 MPI プロセスに対して CPU コアを 6 コア, GPU を 1 基割り当てる. 即ち, 各 GPU において分割された複数右辺連立一次方程式の求解を行う. 鞍点型連立一次方程式の係数行列の左上行列 A として, SuiteSparse Matrix Collection の行列 atmosmod1 (行列サイズ: 1, 489, 752, 非零要素数: 10, 319, 760) を用い, 同係数行列の右上行列 B の列数と左下行列 C^T の行数は 3, 000 とし, 行列要素は乱数で与えた. 分割された各複数右辺連立一次方程式は, 前処理付き Block GWBiCGSTABrQ 法を用い, 同法の漸化式グループ化パラメータは 5 とした. 前処理として, 近似逆行列前処理法を用いた.

図 2 に, 鞍点型連立一次方程式の階層並列型数値解法の計算時間の内訳を示す. 同図の横軸は計算に用いた計算ノード数 N を表す. 1 ノードあたり 4MPI プロセスが立ち上がっているため, 全 MPI プロセス数は $4N$ となる. 図 2(a) は CPU 版の計算時間であるが, 同図に示すとおり計算時間の大半が複数右辺連立一次方程式の求解時間となっている. 使用計算ノード数を増やすことにより, 計算時間がほぼ単調に減少していることがわかる. 図 2(b) に GPU を用いた場合の階層並列型数値解法の計算時間を示す. GPU を用いることにより, CPU 版と比較して計算時間が大幅に短縮できていることがわかる. 4 ノードを用いた場合, GPU 版は CPU 版と比較して約 12 倍高速であった. 使用計算ノード数が増加すると計算時間の減少が鈍くなるが, これは通信時間の増加によるものである. この結果より, 本研究課題で構築した鞍点型連立一次方程式の階層並列型数値解法は, 並列計算環境に対して親和性が高いことが示された.



(a) CPU 版.



(b) GPU 版.

図2 鞍点型連立一次方程式に対する階層並列型数値解法の計算時間の内訳.

(3) Group-wise 更新によるブロッククリロフ部分空間反復法の精度改善と性能評価

ブロッククリロフ部分空間反復法の1つである Block GPBiCGrQ 法の解の精度を, Group-wise 更新を用いて改善する. 上述の Block GWBiCGSTABrQ 法も Group-wise 更新手法を用いた解法であるが, 同法においては漸化式のグループ化周期を計算前に設定していた. このグループ化周期を短くすると解法の収束性は良くなるが, 得られる解の精度が悪くなる傾向がある. 一方, グループ化周期を長くすると, 解の精度は良くなるが収束性が悪くなるという, トレードオフの関係がある. さらに, 解く連立一次方程式の係数行列の違いによっても, より良いグループ化周期の与え方は異なってくる. そのため, グループ化周期を事前に固定するのではなく, 計算過程の情報を利用して動的に決定できることが望ましい. ブロッククリロフ部分空間反復法では, 計算過程において縦長行列の thin QR 分解が行われるが, 収束性が悪くなると thin QR 分解で生成される小行列の条件数が上昇する傾向があることが明らかになった. よって本研究課題では, この条件数が閾値 $\theta \geq 1$ 以上になることをグループ化終了条件として採用した. また, 残差ノルムが大きいタイミングでグループ化を終了すると解の精度が悪化することがこれまでの研究でわかっているため, 前述の条件に加え, グループ化開始時よりも残差ノルムが小さくなっていることもグループ化終了条件として採用する. この手法を可変的グループ化と呼ぶ. Block GPBiCGrQ 法に Group-wise 更新手法を適用した解法を Block GWGPBiCGrQ 法と名付ける. なお, Block GWGPBiCGrQ 法に対して固定グループ化, 可変的グループ化を適用した手法をそれぞれ, Block GWGPBiCGrQ-FG 法, Block GWGPBiCGrQ-VG 法と呼ぶ.

数値実験により提案手法の性能評価を行う. 係数行列として, SuiteSparse Matrix Collection の行列 torso3 (行列サイズ: 259,156, 非零要素数: 4,429,042) と FEM_3D_thermal2 (行列サイズ: 147,900, 非零要素数: 3,489,300) を用いた. 右辺ベクトル数は 50 とし, 右辺項の要素は乱数で与えた. 実験環境として, 筑波大学計算科学研究センターのスーパーコンピュータ「Cygnus」の 1 ノードを用い, OpenMP を用いて 24 スレッド並列で計算した. 図 3 に Block GPBiCGrQ 法と Block GWGPBiCGrQ 型解法の反復回数を示す. Block GWGPBiCGrQ 型解法のパラメータが小さい場合は, Block GPBiCGrQ 法とほぼ同じ反復回数であったが, パラメータが大きくなると反復回数が増加した. また, Block GWGPBiCGrQ-FG 法では求解可能なパラメータの範囲が係数行列によって異なるのに対し, Block GWGPBiCGrQ-VG 法では両行列において θ が 10^6 が小さい場合は反復回数がほぼ一定であった. 図 4 に Block GPBiCGrQ 法と Block GWGPBiCGrQ 型解法の真の相対残差を示す. 真の相対残差は解の精度の指標であり, この値が小さければ高精度の解が得られていることを示す. 同図に示すように, Block GWGPBiCGrQ 型解法は Block GPBiCGrQ 法よりも高精度

の解が得られていることがわかる。Block GWGPBiCGrQ-FG 法ではパラメータ s が 1 に近いと解の精度が悪化する傾向があるが、Block GWGPBiCGrQ-VG 法では収束判定条件が満たされた θ において、真の相対残差の値がほぼ一定であった。図 5 に Block GPBiCGrQ 法と Block GWGPBiCGrQ 型解法の計算時間を示す。Block GWGPBiCGrQ 型解法のパラメータが小さい場合は、Block GPBiCGrQ 法とほぼ同じ計算時間であった。パラメータの値が大きくなると Block GWGPBiCGrQ 型解法の反復回数が増加するため、それに伴い計算時間も増加した。

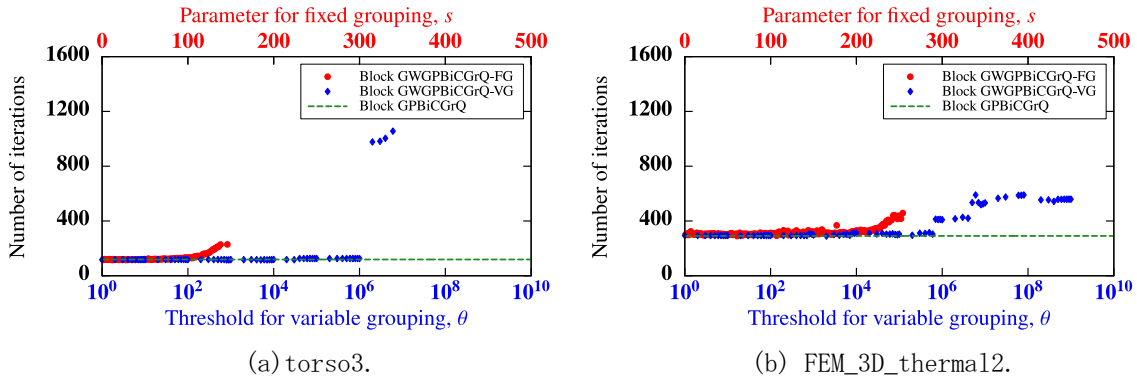


図 3 Block GPBiCGrQ 法と Block GWGPBiCGrQ 型解法の反復回数。

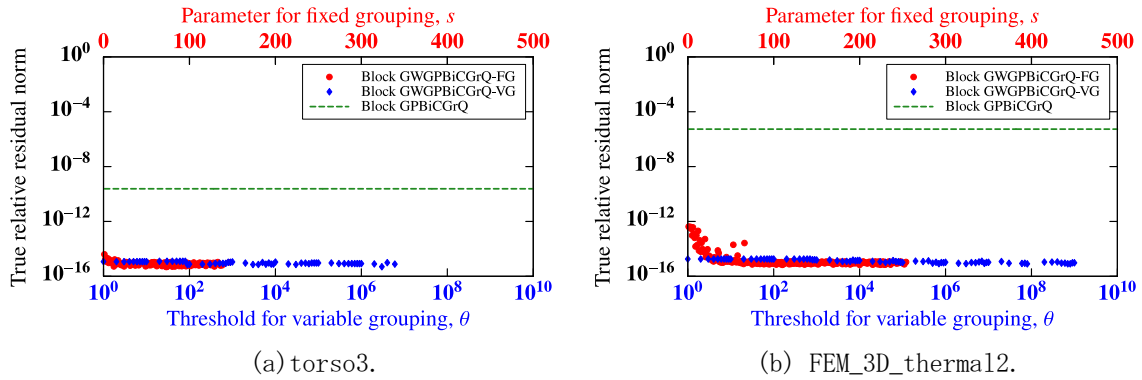


図 4 Block GPBiCGrQ 法と Block GWGPBiCGrQ 型解法の真の相対残差。

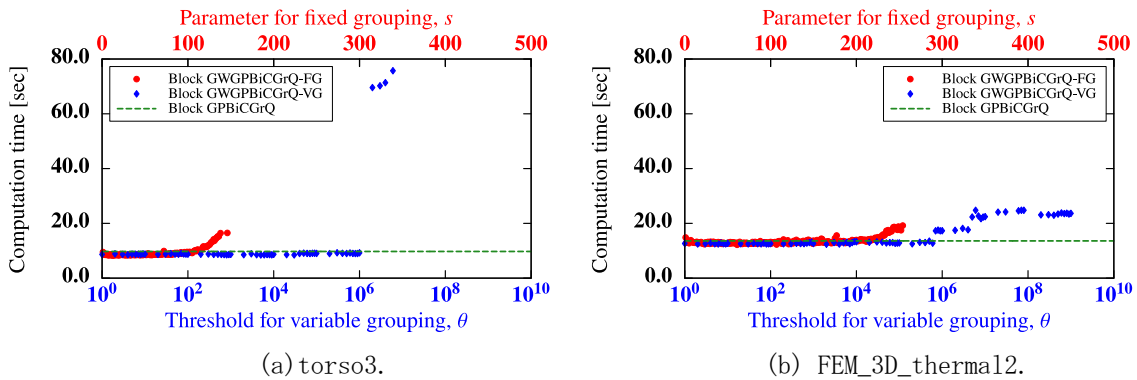


図 5 Block GPBiCGrQ 法と Block GWGPBiCGrQ 型解法の計算時間。

5. 主な発表論文等

〔雑誌論文〕 計5件（うち査読付論文 5件/うち国際共著 0件/うちオープンアクセス 4件）

| | |
|---|-------------------------|
| 1. 著者名 Tadano Hiroto | 4. 巻 11 |
| 2. 論文標題 Development and performance evaluation of the Block-product type iterative methods with the variable grouping strategy | 5. 発行年 2024年 |
| 3. 雑誌名 Journal of Advanced Simulation in Science and Engineering | 6. 最初と最後の頁 32 ~ 53 |
| 掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.15748/jasse.11.32 | 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 Tadano Hiroto | 4. 巻 10 |
| 2. 論文標題 Implementation and performance evaluation of a hierarchical parallel solver for saddle point problems on a GPU cluster | 5. 発行年 2023年 |
| 3. 雑誌名 Journal of Advanced Simulation in Science and Engineering | 6. 最初と最後の頁 116 ~ 131 |
| 掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.15748/jasse.10.116 | 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 Ishikawa Shota, Tadano Hiroto, Saitoh Ayumu | 4. 巻 14 |
| 2. 論文標題 Application and performance evaluation of a method using block structures for saddle point problems appearing in image reconstruction problems | 5. 発行年 2022年 |
| 3. 雑誌名 JSIAM Letters | 6. 最初と最後の頁 115 ~ 118 |
| 掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.14495/jsiaml.14.115 | 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 Hiroto Tadano, Shota Ishikawa | 4. 巻 8 |
| 2. 論文標題 An efficient approach for solving saddle point problems using block structure | 5. 発行年 2021年 |
| 3. 雑誌名 Journal of Advanced Simulation in Science and Engineering | 6. 最初と最後の頁 114 ~ 127 |
| 掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.15748/jasse.8.114 | 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 Tadano Hiroto, Ishikawa Shota | 4. 巻 - |
| 2. 論文標題 Accuracy Improvement of Approximate Solutions Generated by the Method for Solving Saddle Point Problems Using Block Structure | 5. 発行年 2021年 |
| 3. 雑誌名 Proc. of 19th biennial IEEE Conference on Electromagnetic Field Computation (CEFC 2020) | 6. 最初と最後の頁 - |
| 掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1109/CEFC46938.2020.9451308 | 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 - |

〔学会発表〕 計14件 (うち招待講演 0件 / うち国際学会 4件)

| |
|--|
| 1. 発表者名 多田野 寛人 |
| 2. 発表標題 鞍点型連立一次方程式の階層並列型解法に対する漸化式動的グループ化反復法の適用と性能評価 |
| 3. 学会等名 日本応用数理学会第20回研究部会連合発表会 |
| 4. 発表年 2024年 |

| |
|---|
| 1. 発表者名 Hiroto Tadano |
| 2. 発表標題 Development and performance evaluation of the Block GPBiGrQ method with variable grouping strategy |
| 3. 学会等名 The 42nd JSST Annual International Conference on Simulation Technology (JSST2023) (国際学会) |
| 4. 発表年 2023年 |

| |
|--|
| 1. 発表者名 Hiroto Tadano |
| 2. 発表標題 Implementation of a hierarchical parallel solver for saddle point problems on a GPU cluster |
| 3. 学会等名 The 41st JSST Annual International Conference on Simulation Technology (JSST2022) (国際学会) |
| 4. 発表年 2022年 |

| |
|--|
| 1. 発表者名 菅沼 夏樹, 多田野 寛人 |
| 2. 発表標題 複数右辺連立一次方程式に対するブロック・グローバル混合型反復法の構築と性能評価 |
| 3. 学会等名 日本応用数理学会2022年度年会 |
| 4. 発表年 2022年 |

| |
|---|
| 1. 発表者名 多田野 寛人 |
| 2. 発表標題 GPUクラスタにおける鞍点型連立一次方程式に対する階層並列型解法の実装と性能評価 |
| 3. 学会等名 日本応用数理学会2022年度年会 |
| 4. 発表年 2022年 |

| |
|---|
| 1. 発表者名 多田野 寛人 |
| 2. 発表標題 鞍点型連立一次方程式に対する階層並列型数値解法のGPUによる高速化 |
| 3. 学会等名 【非線形問題の高性能解法と可視化技術に関する研究会】2022年度第1回研究会 |
| 4. 発表年 2023年 |

| |
|---|
| 1. 発表者名 齋藤 颯人, 多田野 寛人 |
| 2. 発表標題 漸化式の可変的グループ化によるBlock GwBiCGSTAB法の性能改善 |
| 3. 学会等名 【非線形問題の高性能解法と可視化技術に関する研究会】2022年度第1回研究会 |
| 4. 発表年 2023年 |

| |
|--|
| 1. 発表者名 Hiroto Tadano |
| 2. 発表標題 Parallel implementation of the approach for solving saddle point problems using block structure |
| 3. 学会等名 The 40th JSST Annual International Conference on Simulation Technology (JSST 2021) (国際学会) |
| 4. 発表年 2021年 |

| |
|---|
| 1. 発表者名 多田野 寛人, 倉本 亮世 |
| 2. 発表標題 Group-wise更新によるBlock GPBiCG法の近似解精度改善 |
| 3. 学会等名 日本応用数理学会2021年度年会 |
| 4. 発表年 2021年 |

| |
|--|
| 1. 発表者名 石川 翔大, 多田野 寛人, 齋藤 歩 |
| 2. 発表標題 画像再構成問題で現れる鞍点型連立一次方程式に対するブロック構造を利用した前処理の適用と性能評価 |
| 3. 学会等名 日本応用数理学会2021年度年会 |
| 4. 発表年 2021年 |

| |
|--|
| 1. 発表者名 Hiroto Tadano, Shota Ishikawa |
| 2. 発表標題 A Numerical Study on the Acceleration of Solution of Saddle Point Problems by Using Block Krylov Subspace Methods |
| 3. 学会等名 19th Biennial IEEE Conference on Electromagnetic Field Computation (CEFC 2020) (国際学会) |
| 4. 発表年 2020年 |

| |
|---|
| 1. 発表者名 石川 翔大, 多田野 寛人, 齋藤 歩 |
| 2. 発表標題 3次元モデル再構成問題に現れる鞍点型連立一次方程式に対する前処理付き反復法の開発 |
| 3. 学会等名 日本応用数学会「行列・固有値問題の解法とその応用」研究部会 第30回研究会 |
| 4. 発表年 2020年 |

| |
|---|
| 1. 発表者名 石川 翔大, 多田野 寛人, 齋藤 歩 |
| 2. 発表標題 3次元モデル再構成問題に現れる鞍点型連立一次方程式に対する前処理付き反復法の性能評価 |
| 3. 学会等名 日本応用数学会 第17回研究部会連合発表会 |
| 4. 発表年 2021年 |

| |
|--|
| 1. 発表者名 石川 翔大, 多田野 寛人, 齋藤 歩 |
| 2. 発表標題 3次元モデル再構成問題に現れる鞍点型連立一次方程式の求解高速化 |
| 3. 学会等名 【非線形問題の解法と可視化に関する研究会】2020年度第1回研究会 |
| 4. 発表年 2021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 |
|---------------------------|-----------------------|----|
| | | |

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 |
|---------|---------|
|---------|---------|