2版

様　式　Ｃ－１９、Ｆ－１９－１、Ｚ－１９　（共通）

科研費 KAKENHI

科学研究費助成事業　　研究成果報告書

令和　　元 年　　６ 月 １７ 日現在

機関番号：３２６１３
研究種目：若手研究(B)
研究期間：2015～2018
課題番号：１５Ｋ１５９９８
研究課題名（和文）通信を最小化した代数的マルチグリッド法

研究課題名（英文）Algebraic Multigrid method with minimized communication

研究代表者
藤井　昭宏（Fujii, Akihiro）

工学院大学・情報学部（情報工学部）・准教授

研究者番号：１０３８３９８６

交付決定額（研究期間全体）：（直接経費）　　3,000,000円

研究成果の概要（和文）：線形問題の解法の一つである多重格子法は大きいサイズの問題を小さいサイズの問題（粗いレベル）に近似し，それらを交互に反復的に解く手法であるが，スーパーコンピュータなどの超高並列な環境では小さいサイズの問題が全プロセスに分散され，通信が多くの時間を占めてしまう問題があった．この場合，小さいサイズの問題を解くための通信時間がボトルネックとなり，高並列時には全体性能をより悪化させてしまう．本研究ではそれを解決するため，粗いレベルにおいて並列度と通信量をうまくバランスさせる新規の手法を提案し，実装例としてプログラムに公開した．

研究成果の学術的意義や社会的意義
線形問題の解法として多重格子法は流体解析も含めて，広い範囲のアプリケーションで利用されている．本研究では主に，高並列時に課題になるサイズの小さい問題の生成方法についてと，問題に応じて収束性をあげるためのニアカーネルベクトルの設定手法について新規手法を提案し，発表をしてきた．今後，本研究の考察の対象としているような超高並列な計算環境や，問題に応じて収束しにくい成分を設定して代数的多重格子法を適用する場面において，本研究の成果が取り込まれていくことを期待している．

研究成果の概要（英文）：Algebraic multigrid method is a linear solver, which calculates the smaller sized problem from the original large sized problem. It solves those large and small matrix equations alternatively, and makes the solution reach convergent very fast. From the view point of computing environment, supercomputers offer huge parallelism these days. In such an environment, small sized problems of the multigrid method tend to be too much distributed all over the processes, which leads to large communication time. In this case, it becomes the bottle neck of execution time, and higher parallel execution degrades the performance more. This research proposes an original method that balances the paralelism and communication amount of the distributed smaller sized problems in algebraic multigrid method. It was effective in our numerical experimetns, and our solver is published as an example implementation.

研究分野：高性能計算

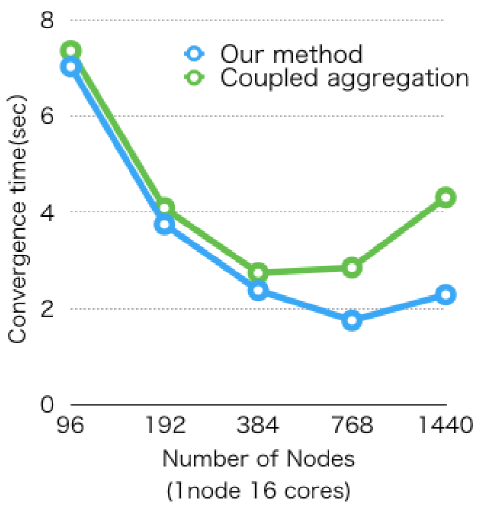
キーワード：代数的多重格子法　粗格子集約　ニアカーネルベクトル　時間積分並列化

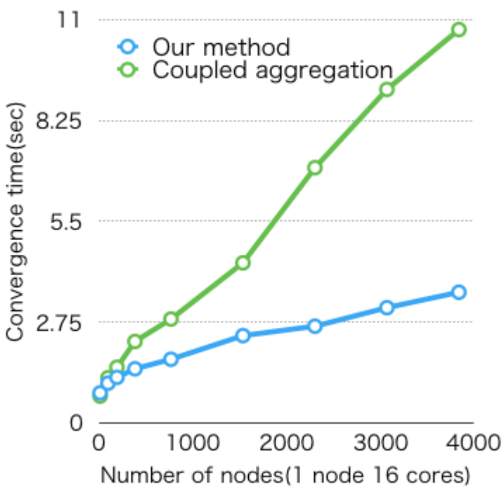
１．研究開始当初の背景
代数的多重格子法は問題サイズを n とすると $O(n)$ の解法として知られており，大規模な問題になればなるほど，他の手法に比べて優位性が発揮できる解法として考えられてきた．しかし，利用可能な計算コア数が飛躍的に向上し，問題サイズを大きくしたときの性能よりも，問題サイズを一定サイズに固定して並列度を大きくしたときの性能（ストロングスケーリング性能）が重要と考えられるようになってきた．
代数的多重格子法は問題行列を再帰的に小さい問題行列で近似をして効率良く解く手法であるが，その小さい問題行列は不規則な構造を持ち，それを複数計算ノードで分割して持つと，不規則な接続関係で通信が発生する．最もサイズの小さい問題行列では，隣接プロセス数が増大し，ほとんどの実行時間を通信が占めてしまう．そして，高並列になるほど，この小さい問題行列での通信が占める割合が増大する．そこで，ストロングスケーリング性能を上げるため，行列の再分散や，幾何的多重格子法と代数的多重格子法を組み合わせた手法など，多くの研究がなされていた．

２．研究の目的
上記のような研究背景をうけ，本研究ではストロングスケーリング性能を高くすることと，多重格子法の安定性向上や適用範囲を広げることを目的とし研究を行った．

３．研究の方法
はじめにストロングスケーリング性能を高くするため，二つの項目を研究した．(1) まずは，不規則な構造を持つ小さい行列を生成する際に，並列度を抑えて通信を最小化した構造を生成することを目指した．多重格子法では大きい問題と小さい問題の間で未知数ベクトルを変換するレベル間演算子があるが，それを作ると疎行列疎行列積の計算により小さいサイズの問題が計算される．本研究では，そのレベル間演算子を小さい問題での未知数の分散状況を考慮して作成することで，通信が抑えられた小さい問題を生成する手法を実現した．(2)次に計算性能を上げるため，対称疎行列ベクトル積の研究を行った．多重格子法のほとんどの部分は疎行列ベクトル積で実現されており，高速な疎行列ベクトル積は解法にとって重要になる．特に対称疎行列に限定することで，メモリアクセスを少なくできる対称行列フォーマットが使えるため，そのフォーマットを利用する Hierarchical Diagonal Blocking と呼ばれる手法を研究のベースにし，高速化を図った．
次に解法の安定性向上や適用範囲を広げるため，二つの項目を研究した．本研究が対象としている強連結な未知数集合を作り小さいサイズの問題を生成する代数的多重格子法(Smoothed aggregation algebraic multigrid method)の場合，定常反復解法が収束させにくい成分であるニアカーネルベクトルを指定することで，その成分を考慮した小さいサイズの問題が生成できる．(3)このニアカーネルベクトルは複数本与えることができるため，問題に応じた適切な設定手法を考えた．また，多重格子法の適用範囲という観点からは，近年線形問題だけでなく，時間発展シミュレーションの時間積分の並列化にも多重格子法をベースにした手法(MGRIT)が提案されている．そこで，(4)本研究では時間刻み幅がシミュレーションの重要な要素になっている振動問題にて，MGRIT に対する特性評価を行った．

４．研究成果
(1)　大きいサイズの問題行列から小さいサイズの行列を生成する手法
レベル間演算子を調整することで，並列度と通信量がバランスした小さいサイズの行列を生成する手法を考案した．レベル間演算子により，小さいサイズに変換された未知数の各プロセスの分布を決めることができる．このため，小さいサイズの問題で，未知数の個数が一定値以下のプロセスがある場合は，レベル間演算子を変更し，隣接するプロセス領域と融合させて，広

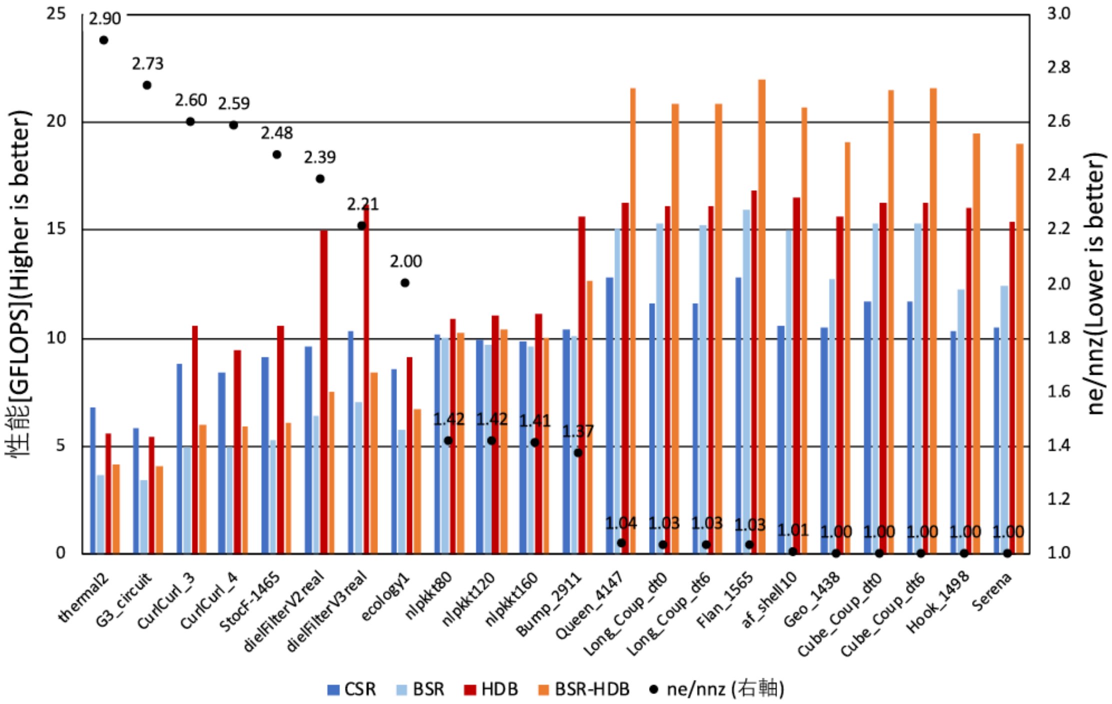




いプロセス領域を確保し，並列度を落とす手法を実装した．隣接プロセスとプロセス領域を融合させるため，未知数集合は領域ごとに個別に独立に作成する(independent aggregation)ようにした．これにより，常に1プロセスの担当領域は一定の未知数の個数を保持しつつ，並列度が過剰になりすぎるとそれを抑えて少ないプロセス数で実行できるようになった．拡散係数が不連続に変化するポアソン問題のダルシー流れを題材にストロングスケーリング性能（左図）とウィークスケーリング性能（右図）を評価した．青線が提案手法で，緑線が提案手法なしで，未知数集合を領域境界から作っていく手法（Coupled aggregation）との比較である．縦軸が実行時間を表している．レベル間演算子を変えただけになるが，それによりストロング，ウィークスケーリング性能ともに大きく改善したことが分かる．

(2)　対称疎行列ベクトル積

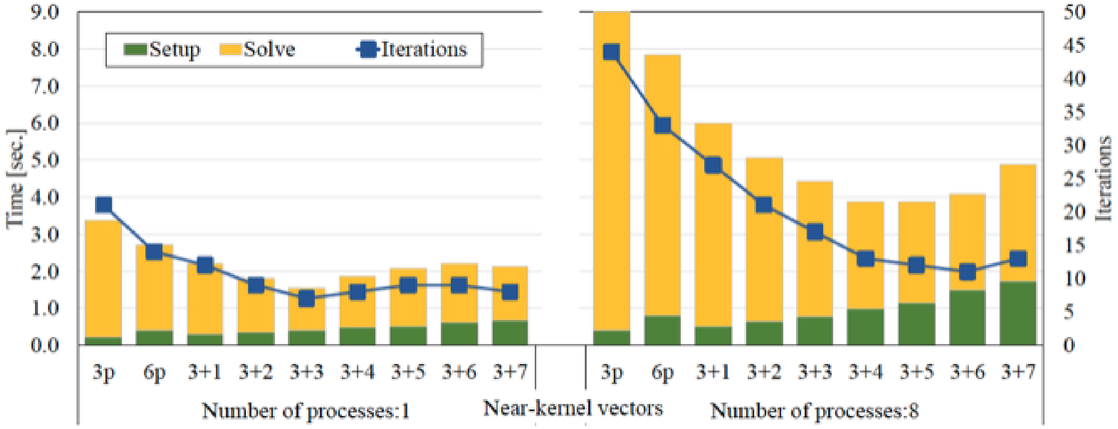
疎行列ベクトル積だが，対称行列に限定することで，対称性を活用したメモリアクセスの低減をはかることができる．Hierarchical Diagonal Blocking は行列を部分行列に分解し，木構造の依存関係を持たせて計算させる手法である．この手法にワークベクトルを用いることで，木構造の根に近い並列性が落ちるところの依存関係を切る改良手法を提案した．さらに BSR 形式と組み合わせることで，より高速な実装となることが分かった．下図は，INTEL の MKL にある CSR や BSR での疎行列ベクトル積ルーチンと本改良手法による HDB と BSR-HDB の性能を比較したグラフである．性能は疎行列に依存ため，Suite Sparse Matrix Collection の行列で正方で対称なものを選択して評価した．これによりリオーダリングは必要だが，最大で CSR での疎行列ベクトル積の 2 倍近く速度向上を達成できることが分かる．黒の点は BSR 化したときに非ゼロ要素数が何倍になってしまったかを示す．BSR で計算するとそれだけ無駄な要素の計算をしていることになるが，1.0 倍のときには，ぴったり BSR 化ができ，非ゼロ要素は増加しなかったことを意味する．



(3)　ニアカーネルベクトル

ニアカーネルベクトルは定常反復法では収束させにくい成分となっている．そのため，その成分に関する情報を小さいサイズの問題で反映できると，大きい問題行列で解けない部分を小さい行列でうまく補正できるようになるため，収束性が向上する．本研究では問題に応じて適切なニアカーネルベクトルを探し設定する手法を考案し，評価した．

3次元弾性体への問題での適用例を示す．左図が1プロセスでの場合，右図が8プロセスでの場合である．3p が平行移動成分，6p はそれと回転成分を加えたニアカーネル成分を意味する．3+1 は平行移動成分と 1 本，収束性の悪い成分を本研究の手法により自動抽出し追加したもので，3+7 は 7 本追加したものとなる．この図からも収束しにくい成分を追加していくと収束性が向上するため，反復解法部（Solve）の時間が減少するが，小さい問題を生成していく時間（Setup）は増大していくことが分かる．8 プロセスの場合，最も高速になったのは 3+4 の設定のときであった．今後さらにニアカーネルベクトルを設定する手法を高度化することで，代数的多重格子法の適用範囲が大きく広がる可能性があると考えている．



(4)　時間方向の並列化

時間発展問題における時間積分は通常逐次に行われてきた．しかし，近年，多重格子法を時間方向に適用し，時間積分の並列化を実現する手法 MGRIT が提案された．MGRIT は既存の時間進展アプリケーションコードに大きな修正なく組み込めるという性質があり，様々なアプリケーションで適用され，性能が報告されてきた．一方で，MGRIT の収束性は時間方向の刻み幅に大きく依存するため，本研究では，時間刻み幅が重要な要素となる振動問題に対し，振動の周期と MGRIT の収束性の観点から性能の分析を行った．具体的には，安定に収束するためには周期内に少なくとも何個の時間刻み幅を残さなければならないかを分析した．振動問題は安定な離散化法として知られる Newmark-Beta 法で離散化した．結果，1 質点の単純な問題では安定した収束性を保持するためには 1 周期内に少なくとも 4 つの時間刻み幅を残す必要があることが分かった．これは時間方向に粗くしていく際に，一定の刻み幅以上に粗くできないことを意味しており，時間方向に O(n)に近づけるためにはこの粗い時間積分問題をどのように解くかが課題となっていることを示している．下の表は 1 質点の振動の問題で縦軸が周期長，横軸がシミュレーション時間長で，表の中に入っている値が MGRIT の収束に要した反復回数である．右端には，MGRIT の中で時間方向に最も粗くしたときに，1 周期内に何個の時間刻み幅が入っているかを示す数字が記載されている．この表からおよそ 1 周期に 4 つ以上の刻み幅が入るときには 40 回程度で収束をしているが，4 つ入らないところでは，反復回数が 100 回以上となり大幅に増大する場合や収束しないケースも観測された．

		シミュレーション時間長																
		16	32	48	64	80	96	112	128	144	160	176	192	208	224	240	256	点数
問題の周期長	6.28	14	19	22	22	23	23	23	23	23	23	24	24	25	26	27	28	6.3
	5.88	14	19	21	22	22	22	22	23	24	25	26	27	29	30	31	32	5.9
	5.44	14	19	20	20	21	23	24	26	27	29	30	32	33	35	36	38	5.4
	4.97	14	18	20	23	25	27	29	31	33	35	37	39	41	43	45	46	5.0
	4.44	14	22	26	29	32	35	38	41	43	46	48	51	53	55	58	60	4.4
	3.85	16	24	33	42	51	60	69	77	86	95	104	113	121	130	139	148	3.8
	3.14	20	33	46	58	70	128	N/A	N/A	N/A	N/A	N/A	N/A	N/A	N/A	N/A	N/A	3.1
	2.22	25	39	52	64	76	89	133	238	N/A	N/A	N/A	N/A	N/A	N/A	N/A	N/A	2.2

５．主な発表論文等

〔雑誌論文〕（計　３　件）

① Ryo Muro, Akihiro Fujii, Teruo Tanaka, Acceleration of Symmetric Sparse Matrix-Vector Product using Improved Hierarchical Diagonal Blocking Format, Proceeding of HPC Asia 2019 Proceedings of the International Conference on High Performance Computing in Asia-Pacific Region, pp.63-70, 2019, 10.1145/3293320.3293332

② Naoya Nomura, Akihiro Fujii, Teruo Tanaka, Osni Marques, Kengo Nakajima, Algebraic Multigrid Solver Using Coarse Grid Aggregation with Independent Aggregation, Proceeding of 2018 IEEE International Parallel and Distributed Processing Symposium Workshops (IPDPSW). pp. 1104-1112, 2018, 10.1109/IPDPSW.2018.00170

③ Naoya Nomura, Akihiro Fujii, Teruo Tanaka, Kengo Nakajima and Osni Marques, Performance Analysis of SA-AMG Method by Setting Extracted Near-kernel Vectors, 12th International Meeting on High Performance Computing for Computational Science(VECPAR2016), 10.1007/978-3-319-61982-8_7

〔学会発表〕(計 3 件)

① Ryo Yoda, Akihiro Fujii, Teruo Tanaka, MGRIT preconditioned Krylov subspace method, Super Computing 2018(SC18), Poster

② 依田 凌, 藤井昭宏, 田中 輝雄, 中島 研吾, 空間並列度および時間並列度の割り当て方に対する考察, 情報処理学会ハイパフォーマンスコンピューティング研究会 Vol.2018-HPC-163, No.27, pp.1-8, 2018 年

③ 藤戸 宙希, 金子 重郎, 藤井昭宏, 田中 輝雄, 鷲尾 巧, 岩下 武史, 複数ばねによる質点の一次元運動シミュレーションに対する Multigrid Reduction in Time の有効性の評価, 情報処理学会ハイパフォーマンスコンピューティング研究会 Vol.2018-HPC-162, No.16, pp.1-8

〔その他〕

ホームページ等

http://hpcl.info.kogakuin.ac.jp/lab/

※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，研究者個人に帰属されます．