

科学研究費助成事業（科学研究費補助金）研究成果報告書

平成24年 4月11日現在

機関番号：12608

研究種目：若手研究（B）

研究期間：2009～2011

課題番号：21710148

研究課題名（和文）

疎行列に帰着される超大規模半正定値行列への並列計算による高速求解の実装

研究課題名（英文） A parallel implementation for solving large-scale Semidefinite Programs having sparse Schur complement matrix

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

研究者番号：20386824

研究成果の概要（和文）：

半正定値計画問題の計算時間短縮は、センサネットワーク問題や多項式計画問題など様々な問題にとって重要である。本研究では並列計算で計算時間短縮を行うが、その計算時間の多くを占める Schur 補完行列が疎行列となる特徴を注目し、行列要素ごとの計算時間を見積もることで計算負荷分散を行い、効率的な並列計算手法の提案を行った。数値実験を通して、提案手法により大幅な計算時間短縮が達成されることを確認した。

研究成果の概要（英文）：

The reduction in computation time for solving Semidefinite Programs is essential to many applications like sensor network localization problems and polynomial optimizations. We focus on the sparsity of the Schur complement matrix, which occupies most computation time. We estimate the computation cost of each element of the matrix and propose efficient parallel schemes. From numerical results, we verified that the parallel schemes successfully reduce the computation time.

交付決定額

(金額単位：円)

	直接経費	間接経費	合計
2009年度	1,000,000	300,000	1,300,000
2010年度	600,000	180,000	780,000
2011年度	600,000	180,000	780,000
年度			
年度			
総計	2,200,000	660,000	2,860,000

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：応用数学，ハイパフォーマンスコンピューティング，数理最適化，並列計算，半正定値計画問題

1. 研究開始当初の背景

数理最適化は、実数関数 $f(x): R^n \rightarrow R$ を最大化あるいは最小化する $x \in S$ を実行可能領域 $S \subset R^n$ から効率的に求解する分野であり、問題解決学の一翼を担っている。本研究では、半正定値計画問題（Semidefinite Programs, 以下 SDP）を対象とした。SDP

は数理最適化の基礎とされる線形計画問題の Hilbert 空間への拡張であり、SDP は以下のような主双対ペアの標準形で表すことができる。

$$\min : C \bullet X \quad \text{s.t.} : \begin{aligned} A_k \bullet X &= b_k \quad (k=1, \dots, m), \\ X &\succeq O \end{aligned}$$

$$\max : \sum_{k=1}^m b_k y_k \quad \text{s.t.} : \begin{aligned} \sum_{k=1}^m A_k y_k + Z &= C \\ Z &\succeq O \end{aligned}$$

ここで、 S^n を n 次対称行列のなす空間としたとき、入力 $A_1, \dots, A_m, C \in S^n$ と $b \in R^m$ であり、求める変数は

$(X, y, Z) \in (S^n, R^m, S^n)$ である。SDP の特徴は、変数行列 X, Z に半正定値条件 $X \succeq O, Z \succeq O$ を課しているところである。

この半正定値条件により、SDP の応用範囲は従来の組合せ最適化問題や制御理論に加えて、近年では量子化学の電子構造計算、センサネットワーク問題、多項式最適化まで幅広くカバーしている。

従来の主双対内点法をこれらの応用に適用した場合、その計算量が莫大となり実用的な計算時間で計算できない状況が発生する。これまでに主双対内点法を並列計算で実行するソフトウェア SDPARA を実装してきた。SDPARA は、量子化学などの大規模な SDP の求解を可能としてきた。

しかしながら、センサネットワーク問題、多項式計画問題の SDP に対しては、SDPARA の並列計算の効率が低いことが分かってきていた。従来の SDPARA では、主双対内点法の計算時間の大部分を占める Schur 補完行列の要素計算とコレスキー分解に注目をし、並列計算を適用した。ところが量子化学の場合とセンサネットワーク問題では Schur 補完行列の様子が著しく異なる。図 1 は量子化学とセンサネットワーク問題で Schur 補完行列の非ゼロパターンを図示したものである。(Schur 補完行列は対称行列であるため、上三角のみを示している。)

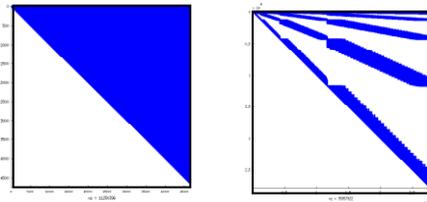


図 1 : Schur 補完行列の非ゼロパターン (左 : 量子化学, 右 : センサネットワーク)

つまり、従来の SDPARA は密行列に対しては効率的であるが、疎行列については並列計算を効率的に利用できなかった。

2. 研究の目的

本研究では、疎な Schur 補完行列に対して、

効率的な並列計算手法を提案し、センサネットワーク問題や多項式計画問題から発生する超大規模な SDP を短時間で求解することを目指した。

3. 研究の方法

(1) formula-cost-based distribution の導入
 一般に Schur 補完行列 $B \in S^m$ の各要素は $B_{ij} = (XA_i Y^{-1}) \bullet A_j$ で計算される。従来の SDPARA では複数台のプロセッサが並列計算に参加しているときに各プロセッサを B の各行に割り当てることで負荷分散をしていた。この方法は図 1 左のように完全密行列では効率的であった。しかしながら、図 1 右では計算対象となる要素数が行ごとにバラツキが大きい。そこで、各要素の計算量を見積もることで負荷分散を行うこととし、この負荷分散手法を formula-cost-based distribution と呼ぶこととした。たとえば、図 2 では $B \in S^6$ のときの各要素の計算量見積もりの例が示されている。この計算量は、入力行列 A_i, A_j から算出する。

150		40	30		20
	135			20	
		70		10	
			50		5
				30	
					3

図 2 : 各要素の計算量見積もり

ここで 3 台のプロセッサがあるときには、図 2 で示されるように、赤・緑・青と計算を分散させることで、それぞれの計算負荷は 190, 185, 188 となり均等に近い分散が達成される。

(2) 疎コレスキー分解の導入

コレスキー分解も従来の ScaLAPACK の密行列に対する並列コレスキー分解に加えて、疎行列に対応できるライブラリ MUMPS も利用できるように改良をした。MUMPS は multiple frontal method を用いており、主双対内点法から発生する Schur 補完行列を効率的にコレスキー分解可能である。

また、MUMPS は分解する行列の非ゼロ要素について、行方向で各プロセッサに分散して持っていることが想定されている。図 2 を見ると分かるように、formula-cost-based distribution も行方向に各プロセッサに保持させており、MUMPS の想定と一致するように実装している。仮に要素計算の行列分散配置と MUMPS の想定が異なると、ネットワーク

通信を介して複数プロセッサ間での行列配置を行う必要があるが、formula-cost-based distribution の性質からネットワーク通信を行わずに MUMPS を利用できる。これによって、計算効率が上昇している。

(1)と(2)より、新しいSDPARAでは表1のようにSchur補完行列の密度に応じて異なる並列計算アプローチを行っている。

表1：行列密度と並列計算アプローチの対応

行列密度	要素計算	コレスキー分解
密	行方向分割	ScaLAPACK
疎	formula-cost-based distribution	MUMPS

(3) 2段並列計算の導入

従来のSDPARAは複数台のPCをネットワークで接続しているPCクラスタを想定し、MPI(Message Passing Interface)により並列計算を実行していた。しかし、近年のプロセッサはプロセッサ内部に複数コアを持つことで単一プロセッサでもマルチスレッドによる並列計算が可能となった。そこで、複数PC間は従来のMPIとし、各PC内部ではマルチスレッドという2段並列を新しいSDPARAに導入した。

たとえば、formula-cost-based distributionでは、要素計算コストに基づいて、まずは各PCに計算負荷を分散した後、同じ手法を用いて各スレッドに計算負荷を分散しなおしている。また、密行列の場合には、各PCへと行方向の行列分割となるが、さらに各PCでは計算が終了したスレッドに次の計算対象となる行を割当ての方針を採用している。これらの行列の性質に基づいた実装により、Schur補完行列の計算を従来よりも高速に行うことができるようになった。

なお、コレスキー分解については、内部の線形代数演算ライブラリのマルチスレッド化により、十分な効果が得られることが予備実験により確認できた。

4. 研究成果

(1) 研究の方法に示した3点の改善点を取り入れたのが新しいSDPARA, SDPARA 7.3.1である。

① SDPARA7.3.1による計算時間短縮

図3は、制御理論から発生するSDPに対してSDPARA7.3.1を実行したときの計算時間である。このSDPのSchur補完行列は4.39%であり、疎行列とみなせる。1台と比較すると16台のときに要素計算は13倍の高速化を達成しており、formula-cost-based distributionによって並列計算が効率的に

実行されていることを示している。

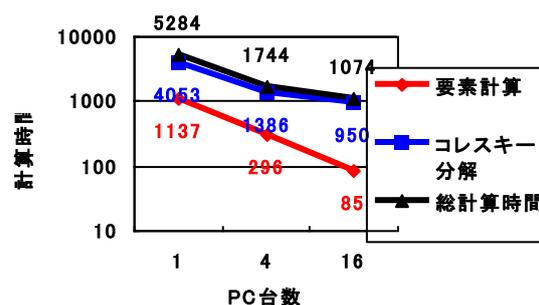


図3：SDPARA7.3.1の計算時間(秒)

またコレスキー分解も4.7倍の高速化を達成している。要素計算に比較すると高速化が劣るような印象があるが、4.39%の疎行列として考えると十分な高速化である。これらの高速化によって、SDPARA7.3.1は総計算時間においても5倍の高速化を達成している。

② 2段並列計算の効果

SDP並列計算ソフトウェアとしては、SDPARAの他にIvanovとde KlerkがCSDPをベースに実装したPCSDPがあるが、量子計算から発生するSDPに適用した計算時間をまとめたのが表2である。

計算台数	1	2	4	8	16
PCSDP	53768	27854	14273	7995	4050
SDPARA	5983	2002	1680	901	565

表2：PCSDPとSDPARAの計算時間(秒)

表2から分かるように、SDPARAはPCSDPと比較して、およそ8倍高速である。これはSDPARAがマルチスレッドを利用できているという2段並列計算による効果が大い。

なお、SDPARAはT2Kクラスタでも実行されており、量子化学から発生する超大規模なSDPを2段並列計算によって高速に求解している。このことは、富士通のプレスリリース(<http://pr.fujitsu.com/jp/news/2010/05/28.html>)にも掲載されている。

③ 疎なSchur補完行列への対応

センサネットワーク問題はSchur補完行列が疎となる傾向が強いが、これをPCSDP, SDPARAで解いた計算時間(秒)をまとめたのが表3である。

表3：センサネットワーク問題の計算時間

センサ数 1,000 (m=16450; 密度=1.23%)					
#Servers	1	2	4	8	16
PCSDP	0. M.	1527	887	591	368
SDPARA	28.2	22.1	16.7	13.8	27.3
センサ数 35,000 (m=527096; 密度=0.00653%)					
#Servers	1	2	4	8	16
PCSDP	Out of Memory				
SDPARA	1080	845	614	540	506

表3から分かるようにPCSDPは問題が大きくなるとメモリ不足となって求解できない。これは、PCSDPが常にSchur補完行列を完全密行列として保持していることに起因している。SDPARAでは、Schur補完行列の密度を予め計算することで自動的に密行列か疎行列かを判断して保持するため、このような大きなセンサネットワーク問題に対しても、10分程度の計算時間での求解を達成できる。

SDPARA7.3.1に関する以上の成果は、主に論①, ④, ⑦でまとめられており、国際学会①②, ④, ⑤などで発表を行っている。また、SDPARAは現状では最も大規模なSDPを解くことができるソフトウェアとして国内外の研究者からも認識されている。

SDPARA7.3.1は、2次割り当て問題や統計学などから発生する大規模なSDPへの適用なども今後期待できる。

(2) SDPARAを中心とした研究に加えて、他のSDPに関連する研究も行った。

① 論文②ではセンサネットワークから生成するSDPについて、ネットワーク自体の持つ構造的な疎性を利用して等価な小さいSDPに変換する手法を研究した。この研究で生成されたSDPを実際にSDPARAで解いたのが表3の結果である。センサ数が35,000という従来にはなかった規模の問題を求解できるのは、この変換とSDPARAを組合せたことによる。

② 論文③では、多項式計画問題をSDPで解いた際に得られる近似解が本来の最適解からどの程度離れているかを評価する手法を楕円による評価基準で提案をした。この手法では楕円をSDPで計算しており、将来的にはSDPARAの高速な計算とも組合せることも可能な枠組みとなっている。

(3) SDPARAは単体ソフトウェアSDPAをベースにしている。このSDPAについては、フリーソフトとして公開している

(<http://sdpa.sourceforge.net/>) だけでなく、Linux上のDebianパッケージの作成も

行った。これにより、Debian, UbuntuでのSDPA利用が容易となり、SDPAの利用者が増え、SDPARAについても利用が増える傾向となっている。

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7件)

- ① Makoto Yamashita, Katsuki Fujisawa, Mituhiro Fukuda, Kazuhide Nakata, Maho Nakata, "Parallel solver for semidefinite programming problem having sparse Schur complement matrix," ACM Transactions on Mathematical Software, 査読有, 2012
- ② Sunyoung Kim, Masakazu Kojima, Hayato Waki, Makoto Yamashita, "SFSDP: a Sparse Version of Full SemiDefinite Programming Relaxation for Sensor Network Localization Problems," ACM Transactions on Mathematical Software, 査読有, 2012.
- ③ Masakazu Kojima, Makoto Yamashita, "Enclosing Ellipsoids and Elliptic Cylinders of Semialgebraic Sets and Their Application to Error Bounds in Polynomial Optimization," Mathematical Programming, 査読有, 2012.
- ④ Makoto Yamashita, Katsuki Fujisawa, Kazuhiro Kobayashi, Mituhiro Fukuda, Kazuhide Nakata, Maho Nakata, "High Performance Solvers for Semidefinite Programs," Proceedings of the Korean Society for Industrial and Applied Mathematics, 査読無, Vol. 6, No. 2, 2011, pp. 55-58.
- ⑤ Sunyoung Kim, Masakazu Kojima, Martin Mevissen, Makoto Yamashita, "Exploiting Sparsity in Linear and Nonlinear Matrix Inequalities via Positive Semidefinite Matrix Completion," Mathematical Programming, 査読有, Vol. 129, No. 1, 2011, pp. 33-68.
- ⑥ Tomohiko Mizutani, Makoto Yamashita, "Constructing Polyhedral Homotopies on Grid-of-Clusters," Pacific Journal on Optimization, Vol. 7, No. 2, 2011, pp 369-386.
- ⑦ Makoto Yamashita, Katsuki Fujisawa, "Efficient Parallel Software for Large-Scale Semidefinite Programs," Proceedings of 2010 IEEE International Symposium on

Computer-Aided Control System Design,
0178, 査読有, 2010

[学会発表] (計7件)

- ① Makoto Yamashita, Katsuki Fujisawa, Mitsuhiro Fukuda, Kazuhiro Kobayashi, Kazuhide Nakata, Maho Nakata, “High Performance Solvers for Semidefinite Programs”, KSIAM Annual Meeting 2011, 2011年11月25日, Seogwipo, South Korea.
- ② Makoto Yamashita, Katsuki Fujisawa, Mitsuhiro Fukuda, Kazuhide Nakata, Maho Nakata, “Parallel Computation for SDPs Focusing on the Sparsity of Schur Complements Matrices”, INFORMS Annual Meeting 2011, 2011年11月15日, Charlotte, USA.
- ③ Makoto Yamashita and Masakazu Kojima, “Ellipsoid-type Confidential Bounds on Semi-algebraic Sets via SDP Relaxation”, SIAM Conference on Optimization 2011, 2011年5月18日, Darmstadt, Germany.
- ④ Makoto Yamashita, “SDPARA: a parallel software for large-scale SDP based on primal-dual interior-point methods”, Parallel Computing and SDP Workshop, 2010年12月1日, Berlin, Germany.
- ⑤ Makoto Yamashita, Katsuki Fujisawa, “Efficient Parallel Software for Large-Scale Semidefinite Programs”, 2010 IEEE Multi-Conference on Systems and Control, 2010年9月8日, 横浜, 日本.
- ⑥ Makoto Yamashita, Masakazu Kojima, “Enclosing Ellipsoids of Semi-algebraic Sets and Error Bounds in Polynomial Optimization”, Nonlinear Optimization, Variational Inequalities and Equilibrium Problems, 2010年7月5日, Erice, Italy.
- ⑦ Makoto Yamashita, Katsuki Fujisawa, Mitsuhiro Fukuda, Yoshiaki Futakata, Kazuhiro Kobayashi, Kazuhide Nakata, Maho Nakata, “Parallel Software for SemiDefinite Programming with Sparse Schur Complement Matrix”, The International Symposium on Mathematical Programming 2009, 2009年8月26日, Chicago, USA.

[図書] (計1件)

- ① Makoto Yamashita, Katsuki Fujisawa, Mitsuhiro Fukuda, Kazuhiro Kobayashi, Kazuhide Nakata, Maho

Nakata, “Latest developments in the SDPA Family for solving large-scale SDPs,” in “Handbook on Semidefinite, Cone and Polynomial Optimization: Theory, Algorithms, Software and Applications” edited by Miguel F. Anjos and Jean B. Lasserre, Springer, NY, USA, Chapter 24, pp. 687—714. (2011), 査読有

[その他]

半正定値計画問題ソフトウェア SDPA およ
び SDPARA のホームページ
<http://sdpa.sourceforge.net/>

6. 研究組織

(1) 研究代表者

山下 真 (MAKOTO YAMASHITA)

東京工業大学・大学院情報理工学研究科・
助教

研究者番号：20386824