

並列計算環境における鞍点型連立一次方程式に対する反復改良付き階層並列型解法の性能評価

多田野 寛人¹

¹ 筑波大学計算科学研究センター

e-mail : tadano@cs.tsukuba.ac.jp

1 はじめに

鞍点型と呼ばれる連立一次方程式：

$$\begin{bmatrix} A & B \\ C^T & O \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \mathbf{x} \\ \mathbf{y} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \mathbf{f} \\ \mathbf{g} \end{bmatrix} \quad (1)$$

は様々な分野において出現し、その高速・高精度求解が必要とされている。ここで、 $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$ は正則行列、 $B, C \in \mathbb{R}^{n \times m}$ は列フルランク行列、 $O \in \mathbb{R}^{m \times m}$ は零行列、 $\mathbf{f} \in \mathbb{R}^n$ と $\mathbf{g} \in \mathbb{R}^m$ は既知ベクトル、 $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n$ と $\mathbf{y} \in \mathbb{R}^m$ は未知ベクトルである。(1) をクリロフ部分空間反復法で解く場合、行列 B, C の列数 m が大きくなると同法の収束性が著しく悪化することが知られている。我々はこの困難を打破するために、(1) のブロック構造を用いた手法 [1] を提案した。同法では (1) を直接解くのではなく、複数次右辺ベクトルをもつ連立一次方程式の求解を経て、解ベクトル \mathbf{x}, \mathbf{y} を求める。この複数次右辺連立一次方程式の求解は計算の主要部であるが、右辺項を構成する列ベクトルは互いに依存関係がないため、少数の右辺ベクトルをもつ複数次の連立一次方程式に分割できる。これらの方程式は同時求解が可能で、各方程式も並列求解が可能であることから、本手法は階層型の並列性をもつ [2]。

複数次右辺連立一次方程式の求解後、 m 次行列を係数行列にもつ小規模連立一次方程式を解き、解ベクトル \mathbf{y} を求める。解ベクトル \mathbf{x} は \mathbf{y} を用いて計算され、 \mathbf{y} の精度は \mathbf{x} の精度にも影響を及ぼすため、 \mathbf{y} を高精度に求めることが必要である。文献 [3] において、精度混合型反復改良法 [4] の適用により解ベクトル \mathbf{x}, \mathbf{y} の精度が改善できることが述べられている。しかしながら、分散メモリ型並列計算環境における精度混合型反復改良付き階層並列型解法の性能については報告されていないため、本発表ではその実装、及び性能評価を目的とする。

2 鞍点型連立一次方程式に対する階層並列型解法

鞍点型連立一次方程式 (1) の解ベクトル \mathbf{x}, \mathbf{y} は、以下のように書き表される。

$$\mathbf{x} = A^{-1}\mathbf{f} - A^{-1}B\mathbf{y}, \quad \mathbf{y} = (C^T A^{-1}B)^{-1}(C^T A^{-1}\mathbf{f} - \mathbf{g}). \quad (2)$$

故に、行列 $U \equiv A^{-1}B \in \mathbb{R}^{n \times m}$ とベクトル $\mathbf{v} \equiv A^{-1}\mathbf{f} \in \mathbb{R}^n$ が得られれば、解ベクトル \mathbf{x}, \mathbf{y} が計算できる。行列 U とベクトル \mathbf{v} は、以下の複数次の右辺ベクトルをもつ連立一次方程式：

$$A\hat{X} \equiv A[U \ \mathbf{v}] = [B \ \mathbf{f}] \equiv \hat{B}, \quad \hat{X}, \hat{B} \in \mathbb{R}^{n \times (m+1)} \quad (3)$$

を解くことで求められる。連立一次方程式 (3) の求解部分が本解法の計算主要部となる。

右辺項 \hat{B} を構成する列ベクトルは互いに依存関係がないため、分割が可能である。 \hat{B} を列方向に分割することにより、(3) は少数の右辺ベクトルをもつ複数次の連立一次方程式に分割できる。

$$A\hat{X}^{(j)} = \hat{B}^{(j)}, \quad \hat{X}^{(j)}, \hat{B}^{(j)} \in \mathbb{R}^{n \times s} \quad (j = 0, 1, \dots, P-1). \quad (4)$$

ここで、 $\hat{X} = [X^{(0)} X^{(1)} \dots X^{(P-1)}]$, $\hat{B} = [B^{(0)} B^{(1)} \dots B^{(P-1)}]$, P は MPI プロセス数である。また、簡単のため $m+1$ は P で割り切れると仮定し、 $s \equiv (m+1)/P$ とする。(4) の求解後、行列 $\hat{X} = [U \ v]$ を行方向に分割し、再分散する。これにより、第 j プロセスは行列 $U^{(j)} \in \mathbb{R}^{l \times m}$, 及びベクトル $v^{(j)} \in \mathbb{R}^l$ を保持する。但し、 $l \equiv n/P$ である。行列 C を $C = [C^{(0)\top} C^{(1)\top} \dots C^{(P-1)\top}]^\top$ と分散し、第 j プロセスにおいて $S^{(j)} \equiv C^{(j)\top} U^{(j)} \in \mathbb{R}^{m \times m}$, 及び $w^{(j)} \equiv C^{(j)\top} v^{(j)} \in \mathbb{R}^m$ を計算する。その後、MPI_Reduce による縮約計算で行列 $S \equiv \sum_{j=0}^{P-1} S^{(j)}$, 及びベクトル $w \equiv \sum_{j=0}^{P-1} w^{(j)}$ が第 0 プロセスに格納され、第 0 プロセスで $t \equiv w - g$ を計算し、連立一次方程式 $Sy = t$ を解いて解ベクトル y を求める。 y は全プロセスに送信され、解ベクトル x が並列に計算される。

3 精度混合型反復改良法による解ベクトルの精度改善

式 (2) にあるように、解ベクトル x は y を用いて計算されるため、 y の精度は x にも影響を及ぼす。 y の精度を改善するために、精度混合型反復改良法 [4] を適用する。本手法は文献 [3] においても適用されているが、本発表ではその分散メモリ型並列計算環境での実装・性能評価を行う。

図 1 に、共有メモリ型計算環境における連立一次方程式 $Sy = t$ に対する精度混合型反復改良法のアルゴリズムを示す。同図における添字 H, D はそれぞれ、高精度計算、倍精度計算を表す。また、 \leftarrow はキャストを表す。同図に示すように、高精度で計算された行列 S_H , 及びベクトル w_H が必要となる。しかしながら、多くの MPI ライブラリは高精度の縮約計算に対応していないため、分散メモリ型計算環境では S_H, w_H の計算ができない。

代替案として以下を考える。まず、各 MPI プロセスにおいて行列 $S_H^{(j)}$, ベクトル $w_H^{(j)}$ を高精度で計算し、これらを倍精度にキャストした $S_D^{(j)}, w_D^{(j)}$ を生成する。それらを MPI_Reduce で第 0 プロセスに縮約したものを S_H, w_H として用いる。その後、第 0 プロセスにおいてベクトル t_H を計算し、図 1 の第 3 ステップ以降を実行することで、解ベクトル y の精度改善を行う。数値実験結果については、当日の講演で述べる。

```

1. Compute  $S_H = C^\top U$ 
2. Compute  $w_H = C^\top v$  and  $t_H = w_H - g$ 
3.  $S_D \leftarrow S_H, t_D \leftarrow t_H$ 
4. Solve  $S_D y_D = t_D$  for  $y_D$ 
5.  $y_H \leftarrow y_D$ 
Repeat
6. Compute  $r_H = t_H - S_H y_H$ 
7.  $r_D \leftarrow r_H$ 
8. Solve  $S_D d_D = r_D$  for  $d_D$ 
9.  $y_H \leftarrow y_H + d_D$ 
Until  $y_H$  is accurate enough
10.  $y_D \leftarrow y_H$ 

```

図 1. 共有メモリ型計算環境における連立一次方程式 $Sy = t$ に対する精度混合型反復改良法のアルゴリズム。

参考文献

- [1] H. Tadano and S. Ishikawa, An efficient approach for solving saddle point problems using block structure, J. Adv. Simulat. Sci. Eng., Vol. 8, No. 1 (2021), 114–127.
- [2] H. Tadano, Implementation and performance evaluation of a hierarchical parallel solver for saddle point problems on a GPU cluster, J. Adv. Simulat. Sci. Eng., Vol. 10, No. 1 (2023), 116–131.
- [3] H. Tadano and S. Ishikawa, Accuracy improvement of approximate solutions generated by the method for solving saddle point problems using block structure, in: Proc. of CEFC 2020, 4 pages, 2021.
- [4] A. Buttari, *et al.*, Mixed precision iterative refinement techniques for the solution of dense linear systems, Int. J. High Perf. Comput. Appl., Vol. 21 (2007), 457–466.

可変的前処理付き Krylov 部分空間解法と変数低減法の並列化効率

佐藤 佑哉¹, 生野 壮一郎¹, 神谷 淳²

¹ 東京工科大学, ² 山形大学

e-mail : ikuno@stf.teu.ac.jp

1 はじめに

可変的前処理付き Krylov 部分空間解法は、単調減少を担保する内部反復解法を前処理に用いることで収束解を得ることができる反復解法であるため、Krylov 部分空間解法を適用することにより、大きな並列化効率を期待できる手法である。一方で、改良型変数低減法 (iVRM) は、鞍点問題などから得られる連立 1 次方程式に対して、収束解を得るための手法である。同手法は、QR 分解を必要とする従来の変数低減法から反復解法だけで求解ができるように改良され、並列分散環境向けの解法であるが、実装とその並列化効率についての議論はなされていない。

本研究の目的は、可変的前処理付き Krylov 部分空間解法と改良型変数低減法を並列分散環境へ実装し、Element-Free Galerkin (EFG) 法より得られる連立 1 次方程式を解くことにより、その並列化効率について数値的に評価する。

2 可変的前処理付き Krylov 部分空間法と変数低減法

EFG 法は、有限要素法とは異なり、幾何学的形状のメッシュで解析領域を分割する必要が無く、領域に散布した節点のみで離散化する手法である [1]。EFG 法を用いて Poisson 方程式の境界値問題を離散化を行うと (1) に示す連立 1 次方程式が得られる。

$$\begin{bmatrix} B & C \\ C^T & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \mathbf{u} \\ \boldsymbol{\lambda} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \mathbf{c} \\ \mathbf{d} \end{bmatrix} \quad (1)$$

但し、係数行列内の各行列と既知ベクトル、未知ベクトルの次元数は $B \in \mathbb{R}^{N \times N}$, $C \in \mathbb{R}^{N \times K}$, $\mathbf{c} \in \mathbb{R}^N$, $\mathbf{d} \in \mathbb{R}^K$, $\mathbf{u} \in \mathbb{R}^N$, $\boldsymbol{\lambda} \in \mathbb{R}^K$ である。本研究では (1) の解を得るために、可変的前処理付き一般化共役残差 (VPGCR) 法と iVRM を適用する。可変的前処理は、従来の前処理行列の代わりに、各反復で係数行列 A を用いた $A\mathbf{z} = \mathbf{v}$ を解くことにより前処理を行う [2]。 $A\mathbf{z} = \mathbf{v}$ を解く際に用いられる解法には、残差の単調減少を担保するものが用いられる。一方で、変数低減法は QR 分解を用いて、(1) より $\boldsymbol{\lambda}$ を消去し、収束に掛かる反復回数を減少させる手法であるが、QR 分解に計算時間を費やしてしまうという難点をもつ。この難点を克服するため、QR 分解を適用せず $\boldsymbol{\lambda}$ を消去し、収束特性の向上を図る手法である [3] が開発された。iVRM では、得られる連立 1 次方程式に対して反復法を適用する場合、各反復において共役勾配法を用いて $C^T C \mathbf{z} = \mathbf{v}$ を解く必要がある。

Abe 等は VPGCR 法の内部解法に SOR 法を適用 [2] しているが、(1) の対角要素には 0 要素が存在するため SOR 法は適用できない。加えて (1) 内の B および C は疎行列であることに注意されたい。これらの条件を鑑み、本研究では VPGCR 法の内部解法に並列化効率が期待できる GCR 法を適用する。また、本研究では行列の疎性を考慮し、Compressed Sparse Row (CSR) 形式で圧縮し、GPU 上で並列実装する。

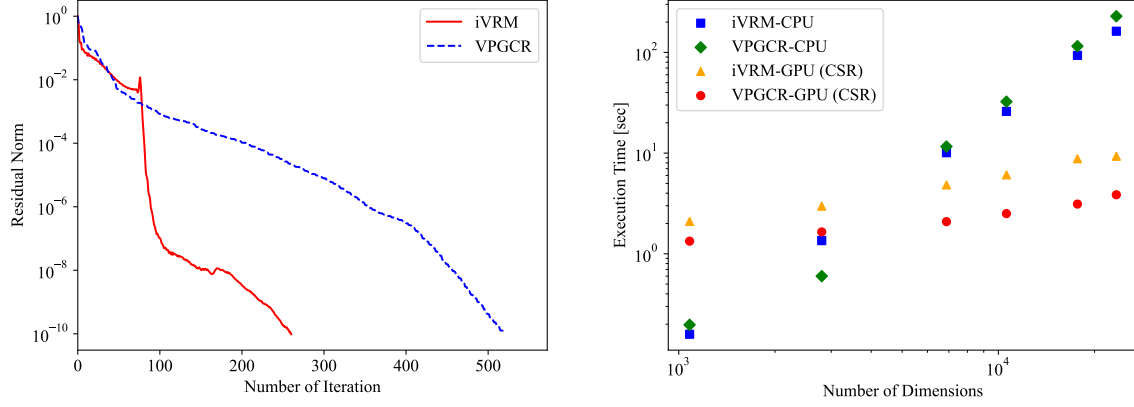


図 1. VPGCR 法, iVRM の残差履歴 ($(N+K) = 23401$). 図 2. 次元数 ($N+K$) の変化に対する VPGCR 法, iVRM の CPU および GPU 実装での実行時間.

3 結果と考察

本研究では, Poisson 方程式の境界値問題を EFG 法で離散化して得られる (1) に対して, VPGCR 法および iVRM を適用し, その収束特性と並列化効率について数値的に評価する. 図 1 に次元数 ($N+K$) = 23401 の場合の VPGCR 法と iVRM の残差履歴を示す. 但し, 本稿を通して束判定子は 10^{-10} とし, VPGCR 法の内部反復の収束判定子は 10^{-1} とした. 同図よりわかるように, いずれの解法においても次元数に対して少ない反復回数で収束していることがわかる. 即ち, iVRM による変数低減と可変的前処理が効果的であることを示している.

次に, 両手法を GPU を用いた並列化と CRS による疎行列の圧縮を行い, その効果を数値的に評価する. 図 2 に係数行列の疎性を考慮しない場合の CPU での計算時間と CRS 形式を用いて疎性を考慮し, さらに, GPU 実装を行った場合の VPGCR と iVRM の計算時間を示す. 同図よりわかるように, 係数行列の疎性を考慮する場合, 演算量が劇的に減少していることがわかる. また, GPU 実装を行った場合, iVRM と比較して VPGCR の方が反復回数は多いが計算時間を減少することが可能であることがわかる. この事実は, iVRM の CG 法の内部で $C^T C z = v$ を解くタスクに対して GPU と CPU 間でのデータ通信時間が多くなることが原因の一つであると考えられる.

その他の詳細な結果は学会で発表する.

参考文献

- [1] T. Belytschko, Y.Y. Lu, L. Gu, and M. Tabbara: Element-free galerkin methods for static and dynamic fracture, *Int. J. Numer. Meth. Eng.*, vol. 37, 229 (1994).
- [2] K. Abe and S. L. Zhang: A variable preconditioning using the SOR method for GCR-like methods, *Int. J. Numer. Anal. Model.*, vol. 2, no. 2, pp. 147–161, 2005.
- [3] A. Kamitani, T. Takayama, A. Saitoh, and H. Nakamura: Linear-System Solver for EFG-Type Saddle-Point Problem without Using QR Decomposition, *Plasma Fusion Res.*, vol. 17, (2022)2403014.

非対称 EFG 型鞍点問題に対する高性能ソルバーの一般化

神谷 淳¹, 高山 彰優¹

¹ 山形大学大学院理工学研究科

e-mail : kamitani@yz.yamagata-u.ac.jp

1 はじめに

楕円型偏微分方程式の境界値問題を解くためのメッシュレス法として, EFG 法 [1] と X-EFG 法 [2] は開発された. 同問題を X-EFG 法で離散化すると, 次の連立 1 次方程式が得られる.

$$\begin{bmatrix} B & C \\ D^T & O \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \mathbf{u} \\ \boldsymbol{\lambda} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \mathbf{c} \\ \mathbf{d} \end{bmatrix}. \quad (1)$$

但し, $\mathbf{u} \in \mathbb{R}^N$ と $\boldsymbol{\lambda} \in \mathbb{R}^K$ は未知ベクトルであり, $\mathbf{c} \in \mathbb{R}^N$ と $\mathbf{d} \in \mathbb{R}^K$ は既知ベクトルである. また, $B \in \mathbb{R}^{N \times N}$ と $C, D \in \mathbb{R}^{N \times K}$ は既知行列である. さらに, 自然数 N と K は $K < N$ を満たす. 部分行列 B, C, D が [3] に記された 6 条件を満たすとき, (1) を非対称 EFG 型鞍点問題と呼ぶ.

よく知られているように, 非対称 EFG 型鞍点問題は数値的に解くのが困難である [3–5]. 同問題の高性能ソルバーとして, 筆者らは AiVRM-NN, AiVRM-NO, AiVRM-ON, AiVRM-OO を提案した [3]. 本研究では, この 4 種類のソルバーを特殊 AiVRM と総称する. 特殊 AiVRM の基本的アイデアは, $\boldsymbol{\lambda}$ 消去行列と境界条件記述行列を用いて (1) からベクトル $\boldsymbol{\lambda}$ を消去することである.

本研究の目的は, $\boldsymbol{\lambda}$ 消去行列と境界条件記述行列の概念を拡張することによって, 非対称 EFG 型鞍点問題に対する高性能ソルバーを開発することである.

2 $\boldsymbol{\lambda}$ 消去法の一般化

[3] では, $\boldsymbol{\lambda}$ 消去法を $\boldsymbol{\lambda}$ 消去行列と境界条件記述行列を用いて定式化した. これに対して, 本研究では $\boldsymbol{\lambda}$ 消去補行列 \mathcal{F}_λ と境界条件記述行列 \mathcal{F}_B によって $\boldsymbol{\lambda}$ 消去法を一般化する. 行列 $\mathcal{F}_\lambda, \mathcal{F}_B$ は次の 3 条件によって定義される.

- (i) \mathcal{F}_λ は $\mathcal{F}_\lambda = CH$ を満たす射影行列であり, H は $K \times N$ 行フルランク行列である.
- (ii) \mathcal{F}_B は $\mathcal{F}_B = GD^T$ を満たす射影行列であり, G は $N \times K$ 列フルランク行列である.
- (iii) $\text{Ker } \mathcal{F}_\lambda \cap \text{Im } \mathcal{F}_B = \{\mathbf{0}\}$.

さらに, $\boldsymbol{\lambda}$ 消去行列 \mathcal{U}_λ と境界条件記述補行列 \mathcal{U}_B を $\mathcal{U}_\lambda \equiv I - \mathcal{F}_\lambda$ と $\mathcal{U}_B \equiv I - \mathcal{F}_B$ で定義する. ここで, I は単位行列を示す.

$\mathcal{F}_\lambda, \mathcal{F}_B, \mathcal{U}_\lambda, \mathcal{U}_B$ を用いて (1) からベクトル $\boldsymbol{\lambda}$ を消去すると, 連立 1 次方程式:

$$B^\dagger \mathbf{u} = \mathbf{c}^\dagger, \quad (2)$$

を得る. ここで, $B^\dagger = \mathcal{U}_\lambda B \mathcal{U}_B + \mathcal{F}_B$, $\mathbf{c}^\dagger = \mathcal{U}_\lambda (\mathbf{c} - B G \mathbf{d}) + G \mathbf{d}$ である. なお, (2) は, 非対称 EFG 型鞍点問題 (1) を満たすベクトル $\boldsymbol{\lambda}$ が存在するという命題と等価である. この等価性は $(\mathcal{F}_\lambda, \mathcal{F}_B)$ の定義中の (iii) によって保証される. (2) から明らかのように, $(\mathcal{F}_\lambda, \mathcal{F}_B)$ の各組合せは連立 1 次方程式だけでなくソルバーも新たに生み出す. 本研究では, 得られた連立 1 次方程式を外部連立 1 次方程式と呼ぶ.

\mathcal{F}_λ と \mathcal{F}_B の候補として, 3 種類の射影行列 $F \equiv C(D^T C)^{-1} D^T$, $F_C \equiv C(C^T C)^{-1} C^T$, $F_D \equiv$

$D(D^T D)^{-1} D^T$ を採用すれば、4 種類の組合せ $(\mathcal{F}_\lambda, \mathcal{F}_B) = (F, F), (F, F_D), (F_C, F), (F_C, F_D)$ が $(\mathcal{F}_\lambda, \mathcal{F}_B)$ に対する 3 条件 (i), (ii), (iii) を満たすことを証明できる．換言すれば、4 種類のソルバーが得られた．このソルバーこそが特殊 AiVRM なのである．

3 一般化 AiVRM

特殊 AiVRM では、 \mathcal{F}_λ と \mathcal{F}_B の候補を行列 C と D をもとにして構成した．本研究では、同候補を次のように一般化する．

$$\mathcal{F}_\lambda \equiv C(\mathcal{D}^T C)^{-1} \mathcal{D}^T, \quad \mathcal{F}_B \equiv \mathcal{C}(D^T \mathcal{C})^{-1} D^T. \quad (3)$$

但し、 \mathcal{D} と \mathcal{C} は共に $N \times K$ 行列である．

簡単な計算によれば、上記の \mathcal{F}_λ と \mathcal{F}_B が (i), (ii), (iii) を満たすための十分条件は 3 つの行列 $\mathcal{D}^T C$, $D^T \mathcal{C}$, $\mathcal{D}^T \mathcal{C}$ の正則性である．それ故、以下の定理が得られる．

定理 1 行列 $\mathcal{D}, \mathcal{C} \in \mathbb{R}^{N \times K}$ が 3 つの正則行列 $\mathcal{D}^T C$, $D^T \mathcal{C}$, $\mathcal{D}^T \mathcal{C}$ を生成するならば、外部連立 1 次方程式 (2) は (1) を満たすベクトル λ が存在するための必要十分条件となる．ここで、 \mathcal{F}_λ と \mathcal{F}_B は (3) で与えられる．

定理 1 に基づけば、無数の外部連立 1 次方程式を得ることができる．その結果として得られる連立 1 次方程式を Krylov 部分空間法で解けば、数値解 u が得られる．本研究では、この数値解法を一般化 AiVRM と総称する．

一般化 AiVRM を用いる際には、 \mathcal{D} と \mathcal{C} の具体形を明示する必要がある．ここでは、2 つの例を紹介しよう．以下では、2 つの行列 $P, Q \in \mathbb{R}^{N \times K}$ のアフィン結合を $\mathcal{A}(P, Q, x) = (1 - x)P + xQ$ で表す．ここで、 $x \in \mathbb{R}$ である．さらに、行列 $Z \in \mathbb{R}^{N \times K}$ は C , D と同じ非零要素パターンをもち、その非零要素はすべて 1 である．このとき、第 1 の例は $\mathcal{D} = \mathcal{A}(D, C, \alpha)$, $\mathcal{C} = \mathcal{A}(C, D, \beta)$ で与えられるのに対して、第 2 の例は $\mathcal{D} = \mathcal{A}(D, (\|D\|_F / \|Z\|_F) Z, \alpha)$, $\mathcal{C} = \mathcal{A}(C, (\|C\|_F / \|Z\|_F) Z, \beta)$ で与えられる．ここで、 $\|\cdot\|$ は Frobenius ノルムであり、 $\alpha, \beta \in \mathbb{R}$ である．定理 1 から明らかなように、ソルバーが意味をなすためには、行列 $\mathcal{D}^T C$, $D^T \mathcal{C}$, $\mathcal{D}^T \mathcal{C}$ はすべて正則でなければならない．

参考文献

- [1] T. Belytschko, Y.Y. Lu, L. Gu, Element-Free Galerkin Methods, Int. J. Numer. Meth. Eng., Vol. 37 (1994), 229–256.
- [2] A. Kamitani, T. Takayama, T. Itoh, H. Nakamura, Extension of Meshless Galerkin/Petrov-Galerkin Approach without Using Lagrange Multipliers, Plasma Fusion Res., Vol. 6 (2011), Art. No. 2401074.
- [3] A. Kamitani, T. Takayama, H. Nakamura, Improved Variable-Reduction Method and Its Variant for Solving Asymmetric EFG-Type Saddle-Point Problem, Plasma Fusion Res., Vol. 18 (2023), Art. No. 2403039.
- [4] T. Itoh, A. Saitoh, S. Ikuno, A. Kamitani, Numerical Investigation of Preconditioning for Iterative Methods in Linear Systems Obtained by Extended Element-Free Galerkin Method, J. Adv. Simulat. Sci. Eng., Vol. 3 (2017), 188–205.
- [5] M. Rozložník, Saddle-Point Problems and Their Iterative Solution, Birkhäuser, 2018.