

《小特集》

GeoFEM における線形ソルバースubsystemと 固体地球シミュレーション

中 島 研 吾*

ABSTRACT In GeoFEM, iterative methods are adopted for solving large-scale sparse matrices in scientific computing using massively parallel computers. In this paper, distributed data structure and parallel processing in GeoFEM will be described. Moreover, recent progress in the preconditioning methods on ill-conditioned matrices in contact problems for solid earth simulations is described.

1. はじめに

有限要素法 (Finite Element Methods, FEM) を始めとする科学技術計算のプロセスの大半は、線形化された微分方程式の離散化によって得られる大規模連立一次方程式の求解に費やされる。連立一次方程式の解法としてはガウスの消去法などの直接法 (Direct Method)¹⁾が広く使用されてきたが、大域的 (Global) 処理が生ずるため、並列計算には適していない。並列計算に適した手法として共役勾配法 (Conjugate Gradient)¹⁾などの反復法 (Iterative Method) が注目されている。

反復法の収束特性は係数行列の固有値分布に依存するため、実用的な問題に適用するためには前処理 (Preconditioning) を施し、固有値分布を変えた行列を解く手法が一般的である。反復法の前処理手法としては不完全 LU 分解 (Incomplete LU Factorization, ILU) あるいは不完全コレスキー分解 (Incomplete Cholesky Factorization, IC) などがよく使用される¹⁾。ILU/IC (以下 ILU) は一種の不完全な直接法であり、大域的な処理が生じるために、並列化に適した局所的な前処理手法が必要となる。

本稿においては、(1)反復法を使用した有限要素法の並列化、(2)並列計算用局所前処理手法について GeoFEM における実装例を述べた後、断層部接触問題などに現れる悪条件マトリクスを対象とした前処理手法の動向についても説明する。

2. 反復法を使用した有限要素法の並列化^{2,3)}

並列計算で扱うデータのサイズ (メッシュ数) は非常に大きいため、全体領域を一括して取り扱うことは困難で、全体データを部分領域 (局所データ) に分割する必要がある。有限要素法は差分法などと比較して並列化が困難であると考えられてきた。間接データ参照があるため、1 プロセッサ (Processing Element, PE) あたりの計算効率も差分法と比較して低いが、有限要素法の処理は基本的に要素単位の局所的な処理であり、領域間の通信は図 1 に示すように線形ソルバースubsystemの部分だけで生じる。この特性を最大限利用し、適切なデータ構造を設定、並列計算に適した反復法を採用することによって後述するように 95% を越えるような並列化効率を達成することも可能である。

GeoFEM では領域間の通信の記述には MPI を使用している。差分法などに使用されている構造格子 (Structured Grids) に関しては MPI 固有の領域間通

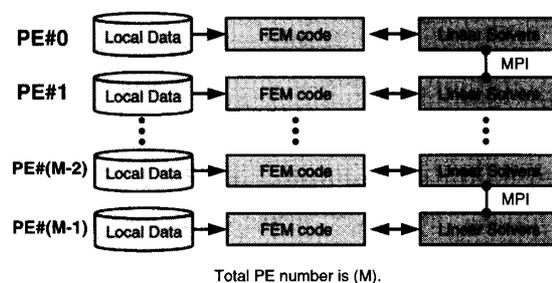
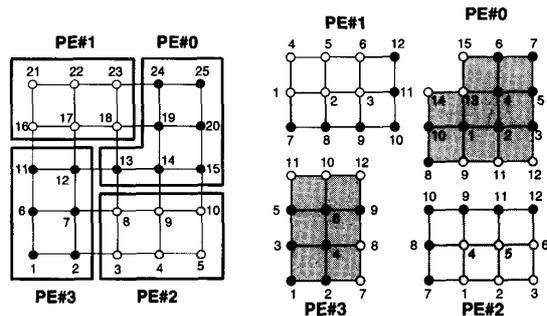


図 1 並列有限要素法の処理
有限要素法の処理は要素単位の局所的な処理であるため並列化が容易である。通信は線形ソルバースubsystemのみ生じる。

Solid Earth Simulation by Linear Solver Subsystem in GeoFEM. By Kengo Nakajima (Research Organization for Information Science and Technology (RIST)).

*勸高度情報科学技術研究機構



(a) 全体メッシュと内点
(b) 各領域に属する内点, 要素, 外点
領域間でオーバーラップする要素が生じる

図2 GeoFEMの局所データ：節点単位の領域分割

信用のサブルーチンが準備されているが、有限要素法に代表される非構造格子 (Unstructured Grids) では、プログラム開発者が独自にデータ構造と領域間通信を設計しなければならない。

GeoFEMでは、領域間の負荷バランスを考慮して全体領域を「節点ベース (Node-Based)」に分割している。すなわち、各部分領域、各プロセッサ (PE) で扱う節点数が均等になるように領域を分割している (図2 (a)参照)。

節点ベースの領域分割では各局所データは以下の情報を含んでいる：

- (1) 本来その領域に割り当てられた節点
- (2) (1)の節点を含む要素
- (3) (2)の要素に含まれる節点のうち(1)に含まれないもの
- (4) 領域間の通信テーブル (Communication Table)
- (5) その他、節点/要素/面グループ等

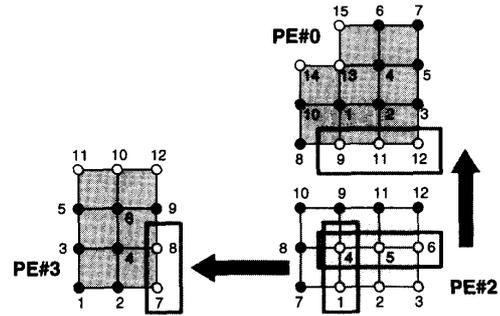
上記のうち(2), (3)の情報は各領域において、要素単位のマトリクス生成を実施するために必要な情報である。そのため図2(b)に示すように各領域境界では各領域によって共有されるオーバーラップ要素が生じる。

部分領域内の節点は領域間通信の見地から以下の3種類に分類される：

- 内点 (Internal Nodes, 上記の(1))
- 外点 (External Nodes, 上記の(3))
- 境界点 (Boundary Nodes, 「内点」のうちで他領域の「外点」となっている点)

例えば図2(b)の「PE # 2」の領域に注目すると、内点：{1, 2, 3, 4, 5, 6}, 外点：{7, 8, 9, 10, 11, 12}, 境界点：{1, 4, 5, 6} となる。

隣接する領域間の通信に関して記述しているデータ



(a) 「境界点」が送信

(b) 「外点」として受信

図3 GeoFEMの局所データ：通信テーブル

が「通信テーブル (Communication Tables)」である。「境界点」のデータが各隣接領域に「送信 (send)」され、送信先の各領域では「外点」データとして「受信 (receive)」される (図3参照)。

GeoFEMでは全体データから局所データを自動的に生成するためのツールとして領域分割ツール (Partitioner) が用意されている。利用者は実際には上記の通信テーブルについては陽に意識することなく並列有限要素法コードの開発、利用が可能である。

領域分割にあたっては、(1)各領域の負荷が均等となっていること、(2)領域間の通信が少ないことが重要である。特に前処理つき反復法を使用する場合には収束を速めるために(2)が重要なポイントである³⁾。この両条件を満たす手法としてはMETIS⁴⁾が良く知られている。GeoFEMの領域分割ツールでは文献5)で紹介されているRCB法 (Recursive Coordinate Bisection) 等のほか、METISに関するインターフェースも提供している。

3. 並列計算用局所前処理手法

図1にも記述されているように、GeoFEMでは領域間の通信は線形ソルバーの部分でのみ生じる。前処

理つき反復法における計算プロセスは以下の4種類に分類される：

- (1) 行列ベクトル積
- (2) ベクトル～ベクトル内積
- (3) ベクトル（およびその実数倍）の加減
- (4) 前処理

このうち(3)を除く各プロセスでは領域間の通信が発生する。(1)は計算前に2.で述べた通信を実施すれば局所的な処理が可能である。(2)はMPI_ALLREDUCEなどのサブルーチンを使用して容易に達成可能である。(4)については前処理手法によって異なる。例えば1.でもふれたILUなどの手法は前進/後退代入により大域的な変数の依存性が生じるため、並列化が困難である。単独プロセッサを使用した計算の場合、Fill-inのないILU(0)法を前処理として使用すると、前処理計算部分が全体の50%程度を占めるため³⁾、前進/後退代入部分の並列化は計算効率の向上のために不可欠である。

GeoFEMでは局所前処理法（局所ILU(0)法、Localized ILU(0)³⁾）を使用している。局所ILU(0)法は一種の「擬似」ILU(0)法である。局所ILU(0)法では前進/後退代入計算時に領域外からの影響（すなわち外点の影響）を0とすることによって、前処理の局所化を行い、並列性の高いアルゴリズムを実現している（図4参照）。

図5は三次元固体力学の例題（一様単純引張⁶⁾）をHitachi SR2201（東京大学情報基盤センター、1024 PE、ピーク性能300GFLOPS）を使用した計算例である。各PEにおける自由度数が一定となるような問題設定となっている。ここではSR2201の擬似ベクトル機能を利用するため、文献7)に基づいて、ベクトル化用のチューニングを実施している。最大 2.72×10^6 自由度の問題を252 PEを使用して、16.2GFLOPSの処理性能を達成している。これはピーク性能の約22%にあたる。図5(b)は並列化効率（（通信およびそれに要する並替計算等を除いた演算時間/全演算時間）に関するデータである。PE数が増加しても並列化効率95%以上を維持しており、1.で述べたデータ構造と局所ILU(0)法によって高い並列化効率を得られていることがわかる。

局所ILU(0)法の問題は、本来の「大域的」な前処理手法と比較して「弱い」前処理となるため、特にPE数が増加した場合に反復回数が増加する可能性があることである。表1は全体問題サイズを固定して1 PEから最大64 PEまで計算した例である。反復回数

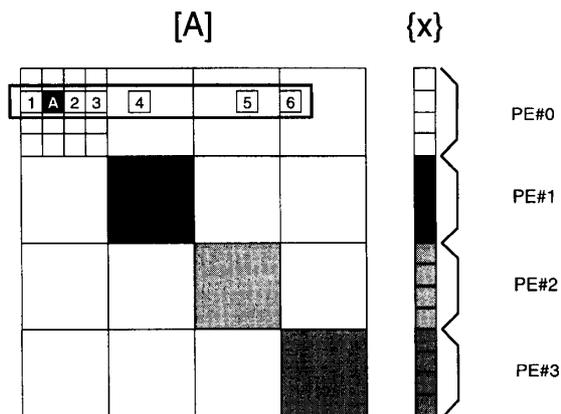
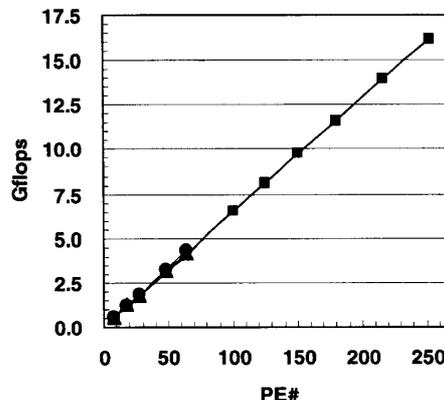
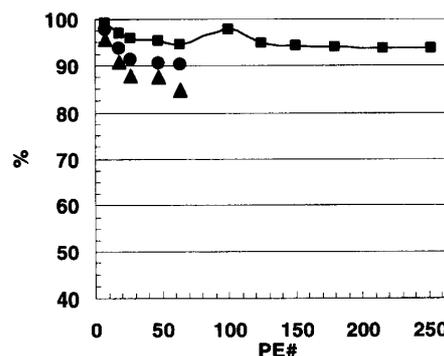


図4 局所ILU(0)法における前進後退代入
たとえばPE # 0の要素「A」に注目すると6個の非対角成分があるが、このうち4, 5, 6, は他領域に属する「外点」であるため、局所ILU(0)法における前進後退代入においては0とみなされる。



(a) PE数とGFLOPS値の関係：ほぼ正比例している



(b) PE数と並列化効率の関係：充分大きい問題規模の場合、並列化効率は95%以上である

図5 Hitachi SR2201を使用したGeoFEMソルバーの計算例
三次元固体力学ベンチマーク問題（単純引張）：
Block局所IC(0)CG法
最大252 PE, 2.72×10^6 自由度, 16.2GFLOPS, ピーク性能の約22%
各PEの自由度数を固定 ■ : 10^3 , ● : 2×10^4 , ▲ : 10^4

表1 加法 Schwartz Domain Decomposition (ASDD) による局所前処理の安定化
三次元固体力学ベンチマーク問題 (単純引張):
Block 局所 IC(0)CG 法
全体自由度数を 255,552 に固定, Hitachi SR2201 使用

PE#	ASDD なし		ASDD あり	
	反復回数	演算時間に基づく	反復回数	演算時間に基づく
		Speed-up		Speed-up
1	204	1.00	144	1.00
2	253	1.63	144	1.99
4	259	3.15	145	3.95
8	264	6.36	146	8.21
16	262	13.52	144	17.33
32	268	24.24	147	31.80
64	274	35.68	150	50.07

は 35%程度増加しており, 計算時間ベースのスピードアップ効率も 32 PE で 24 倍程度にとどまっている. 局所前処理を安定化させるため文献 8) に基づいて加法 Schwartz Domain Decomposition (ASDD) を適用したところ表 1 に見られるように領域数の増加による反復回数の増加はわずかに抑えられ, 32 PE ではほぼ 100%に近いスピードアップ効率が得られている.

4. 接触問題への適用

3. で紹介した例は, 一樣な物性, 境界条件に基づく系を対象としていた. 係数マトリクスは固有値分布の一樣ないいわゆる「条件の良い」問題であった. GeoFEM の対象としている固体地球シミュレーションの代表的なものとして, 地震発生サイクル予測のための断層接触シミュレーションがある⁹⁾. このようなシミュレーションでは接触面の拘束のためにペナルティ法, 拡大ラグランジュ法などを使用し, Newton-Raphson 法によって非線形問題を解くという解法が一般的である⁹⁾. 詳しい定式化はここでは省略するが, これらの手法の特徴は接触条件を適用する部分に大きな定数 (ペナルティ数) がかかることであり, それによって条件数 (Condition Number)¹⁾が増加し, 反復法の反復回数が増加する. 一例として文献 9) であげられている断層接触問題に関するベンチマーク例題 (7220 節点, 21660 自由度, 1 PE, Compaq Alpha 21164-600 MHz) の計算例をあげると:

$\lambda = 10^{10}$

対角スケーリング	174 回	8.9 sec.
IC(0)CG	89 回	11.2 sec.
Block スケーリング	165 回	11.9 sec.

$\lambda = 10^{16}$

対角スケーリング, IC(0)CG	収束せず
-------------------	------

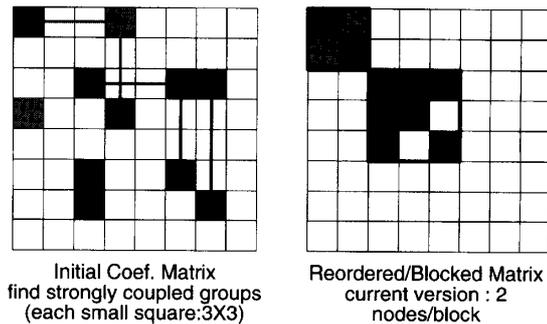


図6 Selective Blocking 前処理の概念図

カップリングの強い成分 (接触点ペア) を同じブロック (Super Node) に入れて完全 LU 分解を適用する

Block スケーリング 3727 回 268.9 sec.
となり, ペナルティ数が増加すると反復回数が爆発的に増加する. このような場合の措置として, (1)ブロック化, (2) Fill-in レベルの増加などの対処法が考えられる. 今回は三次元固体力学を対象としているため 1 節点あたり 3 つの自由度がある. この 3×3 ブロック内に完全 LU 分解を適用し, さらに Fill-in レベルを増加させる ILU/IC 法 (BILU(0), BILU(1), BILU(2)) を使用するほか, 新たに図 6 に示すように接触点ペアを同じブロック (Super Node) に入れてそのブロック内に完全 LU 分解を適用する, Selective Blocking BILU(0) 法 (SB-BILU(0)) を開発した¹⁰⁾ (図 6 参照). $\lambda = 10^{16}$ の場合の計算結果は以下の通りである:

Block スケーリング (前掲)	3727 回	268.9 sec.
BIC(0)CG	1102 回	144.3 sec.
BIC(1)CG	94 回	21.1 sec.
BIC(2)CG	33 回	15.4 sec.
SB-BIC(0)CG	82 回	11.1 sec.

ブロック化, Fill-in レベルの増加によってソルバーの性能が大幅に改善されたことがわかる. Fill-in レベルの増加によって必要メモリは 1 レベル増加ごとに倍になるが, SB-BILU(0) の場合は BILU(0) とほぼ同じ記憶容量で済むため, 計算, 記憶容量両方の面から効率的な手法と考えられる.

現在 SB-BILU(0) 法の並列化, 最適化に向けた検討を進めており, 10^7 自由度クラスの大規模実用問題での計算を開始したところである. この結果についてはいずれ稿を改めて紹介したい. SB-BILU(0) 法の並列版である局所 SB-BILU(0) 法は, 従来の局所 ILU(0) などと比較して直接法に近い前処理手法と考えることができる. 局所 SB-BILU(0) 法では完全

LU 分解は各領域で独立に実施されるので並列性能には問題はない。

5. おわりに (悪条件問題と前処理付き反復法)

接触問題に代表されるような悪条件問題を反復法によって解く場合、より直接法に近い前処理手法を適用することが最近の一つの傾向である。Fill-in レベルを深くしていくというよりは、むしろ「不完全な」直接法を前処理として使用するという考え方で、そのような場合の収束特性、並列性能などに関する研究も進められている。筆者は今年の4月末にカリフォルニア州タホ市で開催された「Preconditioning 2001 (2001 International Conference on Preconditioning Techniques for Large Sparse Matrix Problems in Industrial Applications)」¹¹⁾という会議に参加して来たが、同様の傾向の発表がいくつかあった。「直接法に限りなく近い前処理手法を使用した反復法は、直接法/反復法のハイブリッド解法と呼んでもよいのでは」というようなコメントも出ていた。一方で伝統的な ILU(0) が非常に広範囲の工学的問題に適用可能であるような例も示されていた。

反復法においてどのような前処理手法を選択するかは、今のところ解くべき問題に依存しており、万能の前処理手法というものはまだない。本稿ではあえて触れなかったが、最近いわゆる多重格子法 (Multigrid) とくに代数的な手法 (Algebraic Multigrid, AMG)¹²⁾ が特に大規模問題向けの前処理手法として注目されている。様々な手法の長所を組み合わせた新手法の研究が今後の課題である。

謝 辞

本稿は科学技術振興調整費「高精度の地球変動予測

のための並列ソフトウェア開発に関する研究」の一環として実施中の「GeoFEM」プロジェクトの成果の一部である。本稿の執筆にあたって有益な助言を与えてくれた、矢川元基教授 (東京大学大学院) をはじめとする「GeoFEM」プロジェクトのメンバーにこの場を借りて謝意を表したい。

参 考 文 献

- 1) J. J. Dongarra, I. S. Duff, D. C. Sorensen and H. A. van der Vorst: Numerical Linear Algebra for High-Performance Computers, SIAM (1998)
- 2) <http://geofem.tokyo.rist.or.jp/>
- 3) K. Nakajima and H. Okuda: IJCFD, **12**, 315/322 (1999)
- 4) <http://www-users.cs.umn.edu/~karypis/metis/>
- 5) H. D. Simon: Computing Systems in Engineering, **2**, 135/148 (1991)
- 6) K. Garatani et al.: Lecture Notes in Computer Science, No. 1593, 132/140 (1999)
- 7) T. Washio, K. Maruyama, T. Osoda, F. Shimizu, and S. Doi: Blocking and reordering to achieve highly parallel robust ILU preconditioners, *RIKEN Symposium on Linear Algebra and its Applications*, The Institute of Physical and Chemical Research, 42/49 (1999)
- 8) B. Smith et al.: Domain Decomposition: Parallel Multilevel Methods for Elliptic Partial Differential Equations, Cambridge University Press (1996)
- 9) M. Iizuka et al.: Nonlinear Structural Subsystem of GeoFEM for Fault Zone Analysis *Pure and Applied Geophysics*, 157, 2105/2124 (2000)
- 10) K. Nakajima et al.: Parallel Iterative Solvers for Simulations of Fault Zone Contact using Selective Blocking Reordering, 2001 International Conference on Preconditioning Techniques for Large Sparse Matrix Problems in Industrial Applications (Preconditioning 2001) Proceedings, April 29–May 1, 2001, Tahoe City, CA, USA.
- 11) <http://www.nersc.gov/conferences/pc2001/>
- 12) K. Stüben: Algebraic Multigrid (AMG): An Introduction with Applications, GMD Report 53, GMD-Forschungszentrum Informationstechnik GmbH (1999)