

線形方程式求解アルゴリズムに対する性能情報検索システムの開発

伊藤 祥司[†] 長谷川 秀彦[‡]

1. はじめに

自然現象や工学現象の解明では, 数値シミュレーションを用いた解析が盛んである. それらのシミュレーションでは, 多くの場合, 大規模で疎な $n \times n$ の係数行列を持つ線形方程式

$$Ax = b$$

を解くことに帰着される.

ところが, 線形方程式の求解アルゴリズム(ここでは, 前処理と解法とを組合せたものを指す)には様々なものが存在し, 対象とする問題の性質によっては, その性能が十分に発揮されないようなものや数値解が得られない場合もある[1]. 従って, 実際のシミュレーションにあたっては, どの求解アルゴリズムを適用したら良いか指針が欲しい.

求解アルゴリズムの性能比較を行うためには, 実際のシミュレーションコードでアルゴリズムを入れ替え, 計算した上で評価するしかないが, このようなことは数値シミュレーションを行う研究者にとっては, 時間のロスであり極力避けたいことである. 一方で, 求解アルゴリズムを提案する側からは, そのような情報提供が十分にされていない.

本研究ではこのような状況を改善するために, 数値計算全般を対象として, 実際の計算結果から得られるデータに注目する. それらの中から, 求解アルゴリズムの性能や特性を評価する方法を検討し, 体系的に評価する方式を提案することが本研究の目的である[3,4]. 現段階では, 線形方程式向きの反復解法とそれらと併用する前処理に対する性能評価のデータを採取している最中である. その中で得られた諸データからデータベースを構築し, 反復解法と前処理の性能比較やグラフ表示を容易にするための検索システムを開発したので紹介する.

2. 線形方程式求解用アルゴリズムについて

線形方程式を高速かつ高精度で解くために, 様々な解法や前処理技法がこれまで提案されている.

それらを集めて提供しているライブラリは多数あるが, 本研究では, Lis(Library of Iterative Solvers for Linear Systems) [5]の逐次版を使用した.

Lis は, 逐次版, 並列版(OpenMP, MPI)を一つにまとめたフリーのライブラリであり, 12 種類の反復解法と 8 種類の前処理(前処理無しも数えた)を集めたものである.

また, 線形方程式求解用アルゴリズムの開発などでは, 典型的なテスト問題として Matrix Market[6]や UF Sparse Matrix Collection[7]などが用いられている. これまでに, Matrix Marketの中から, 線形方程式向きのテスト行列 50 種類程度の問題に対して, Lis を用いて解いた. これは, 結果的に Lis の開発におけるデバッグとベンチマークテストも兼ねている.

3. 性能情報データベースと検索システム

データベースには, 反復法のアルゴリズムの中で用いられている残差ベクトルのノルムの履歴情報と, 数値解(\hat{x})が得られるまでに要した反復回数, CPU 時間および数値解を用いて評価した真の残差($b - A\hat{x}$)のノルムの情報が, 各行列とアルゴリズムの全組み合わせについて格納されている.

これらの中から必要な情報を検索するための画面イメージが図 1 である. ここでは, 検索したい問題の組み合わせをメニューから選択する. 図 1 では, 線形方程式の係数行列で add32 という行列を選択し, BiCGStab 法に対して none(前処理無し)と ILU, GMRES 法に対して SAINV と SAAMG と, 各々 2 種類の前処理を選択しているところである.

このように設定して検索実行したときの表示が図 2 である.

Web サーバでは, 該当するデータにアクセスし, グラフ化の処理とブラウザ表示のためのタグ付けなどの処理を行っており, それらに要する処理時間は数秒程度である. Web 経由で線形方程式の求解アルゴリズムの性能を提示するシステムとしては他に, ITBL ポータルの TIS がある[2]. こちらは, 利用者が解かせたい問題をサーバに転送し, 選択されたアルゴリズムで求解するものである. これは,

[†] 筑波大学 大学院システム情報工学研究科

[‡] 筑波大学 大学院図書館情報メディア研究科

利用者の問題に対するユニークな情報を返す大きな利点を持つ反面で、結果が得られるまでに時間がかかり、アルゴリズムの性能自体を比較するには何回かの実行依頼を繰返すことになる。

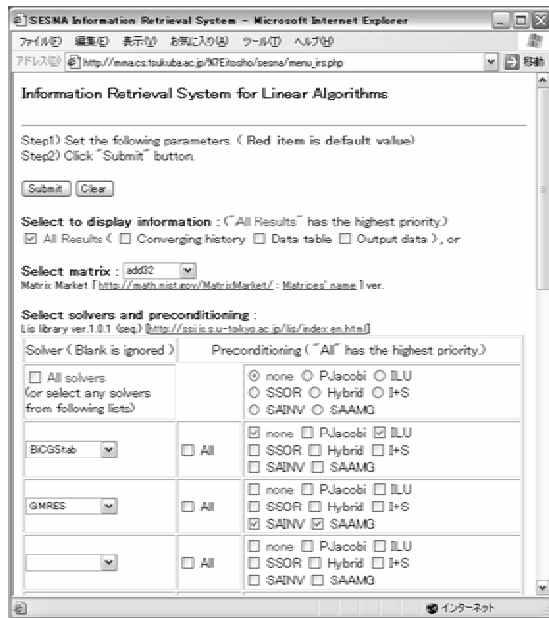


図 1 検索情報の設定画面

4. まとめと今後の課題

本システムが表示するデータの内、反復回数と収束グラフはアルゴリズムの性能と特性とを示し、CPU 時間は Lis の性能も示している。

本データベースは、アルゴリズムの性能評価の中から得られたデータを蓄積したものであるが、国内外での従来の成果としてもこのような情報が提供されていないことと、その情報の有用性から公開している。このシステムを通して確認された Lis の問題点も、その開発にも反映され、それに応じて、データも更新され続けている。現在は、得られたデータの中で、アルゴリズムの性能評価を行うのに十分と思われるデータから公開しているところである。

今後は、本研究のメインテーマとして、得られたデータを用いてアルゴリズムと線形方程式の間の特徴を分析する。また、他のライブラリを用いた比較も行う予定である。

謝辞：本研究を行うにあたり、Lis に関する技術的なサポートをいただいた JST / 東京大学の小武守恒氏に感謝いたします。

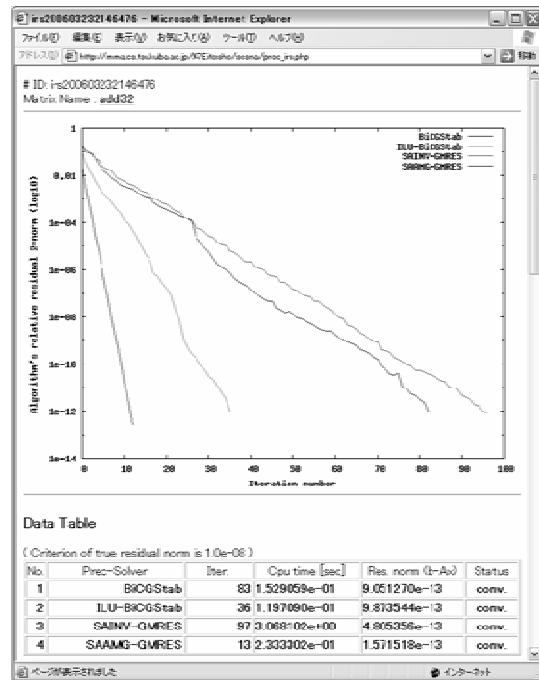


図 2 検索結果の表示画面

参考文献

- [1] Barrett, R., et. al., Templates for the solution of linear systems: Building Blocks for Iterative Methods, SIAM, 1994. (邦訳)長谷川里美, 長谷川秀彦, 藤野清次, 反復法 Templates, 朝倉書店, 1996.
- [2] Fukui, Y. and Hasegawa, H., Test of Iterative Solvers on ITBL, In proceedings of the 8th International Conference on High Performance Computing in Asia Pacific Region (HPC Asia 2005), pp. 422-425, 2005.
- [3] Itoh, S. and Hasegawa, H., A Plan to Develop an Evaluating System for Numerical Algorithms, The 2nd International Conference on Scientific Computing and Partial Differential Equations, Hong-Kong, Dec., 2005.
- [4] 伊藤祥司, 数値シミュレーションユーザ向けの数値計算アルゴリズム評価システムの開発について, 2006 年ハイパフォーマンスコンピューティングと計算科学シンポジウム(HPCS2006), 東京, 1月, 2006.
- [5] Kotakemori, H., Hasegawa, H. and Nishida, A., Performance Evaluation of a Parallel Iterative Method Library using OpenMP, In proceedings of the 8th International Conference on High Performance Computing in Asia Pacific Region (HPC Asia 2005), pp.432-436, 2005.
- [6] Matrix Market, <http://math.nist.gov/MatrixMarket/>
- [7] University of Florida Sparse Matrix Collection, <http://www.cise.ufl.edu/research/sparse/matrices/>