

ITBL ポータルにおける連立 1 次方程式に対する 前処理と反復解法の評価システム

AN EVALUATION SYSTEM OF ITERATIVE SOLVERS AND PRECONDITIONERS FOR THE LINEAR SYSTEM ON THE ITBL PORTAL

長谷川 秀彦¹⁾, 福井 義成²⁾

Hidehiko HASEGAWA and Yoshinari FUKUI

¹⁾博士 (工学) 筑波大学 図書館情報メディア研究科 (〒 305-8550 つくば市春日 1-2, hasegawa@slis.tsukuba.ac.jp)

²⁾航空宇宙研究開発機構 情報・計算工学センター (〒 182-8522 調布市深大寺東町 7-44-1, yoshinari.fukui@ieee.org)

We developed the TiS system which is an evaluation system of iterative solvers and preconditioners for a system of simultaneous linear equations $Ax = b$. Users can find an appropriate iterative solver and preconditioner for a matrix A by using the TiS system without any programming effort. The researchers and manager of the TiS system can utilize the accumulated data for the evaluation of new iterative solvers, new preconditioners and new computing environments.

Key Words : *Grid application, Iterative Solvers, Preconditioners, Large Sparse Linear System*

1. はじめに

大規模疎行列 A を係数とする連立 1 次方程式 $Ax = b$ の解法は, 数値シミュレーションの核となる処理でメモリと CPU 時間の多くを占める. 数値シミュレーションを高速化するには, 適切な反復解法と前処理の選択が重要である. いっぽう, 反復解法と前処理の収束に要する反復回数は問題や初期値に依存し, 事前に回数が見積もれたり, 共通に使用できる最適な解法があるわけではない. 現時点で, 事前にどの反復解法と前処理がベストかを予測する方法論も存在しない.

反復解法と前処理の収束に要する反復回数は, 解法, 前処理, 問題のほか, 演算精度には依存するが, 使用するマシンには依存しない. いっぽう, 実行時間やメモリ使用量は, 計算環境 (パソコン, 共有並列, 分散並列), マシンの性能, データ格納形式, プログラムの実装方法に依存する. そのため, 実行時間やメモリ使用量は共通の指標としては利用しにくい, 反復回数は共通の指標として利用できる.

色々な反復解法と前処理のプログラムを作成し, 自分の問題に最適な反復解法と前処理を探索するのは大きな負担である. プログラムを開発したり, ソフトウェアをインストールしたりすることなく, 適切な反復解法と前処理を知ることができれば多くのユーザにとって有益であろう.

われわれは ITBL ポータル環境上に反復解法を用いた大規模疎行列 A を係数とする連立 1 次方程式 $Ax = b$ の評価システム TiS (Test of Iterative Solvers; <http://amazon.slis.tsukuba.ac.jp/TiS/>) [1][2][3][4] を構築した. 自分の問題のデータを ITBL ポータル [5] 経由でアップロードして TiS システムを利用すれば, そのデータに対する解と評価データが得られる. TiS

システムは送られたデータを蓄積し, 新たな反復解法, 新たな前処理, 計算環境の評価に活用する.

TiS システムによって, ユーザはプログラムを開発することなく, 問題に合った反復解法と前処理がわかる. そのあと Web などプログラムを入手して自分の計算環境向けにチューニングすることで, 問題と計算環境に合った高性能なアプリケーションが容易に構築できる. データの特徴が変わったり, 新しい反復解法や前処理が提案された場合は, 再度, 自分の問題に適切な反復解法と前処理を探せばよい.

2. Test of Iterative Solvers

(1) TiS システムの流れ

TiS システムを用いた連立 1 次方程式 $Ax = b$ に適切な反復解法と前処理の決定は以下のように行う (図 1). なお TiS システムは処理結果を提供するだけで, 結果の判断はすべて利用者に任せている.

1. <http://www.itbl.jp/> にアクセスして, ITBL ポータルのアカウント ID を取得する.
2. 連立 1 次方程式 $Ax = b$ の行列 A , 右辺ベクトル b と初期値 x_0 をアップロードする. 初期値 x_0 はオプションである. ファイルは TiS システムのデータ形式の ASCII テキストでなければならない. 現時点では合計ファイルサイズを 700MByte 以下としている (CD-ROM 1 枚分).
3. 反復解法と前処理の組合せを選択する. 11 種類の非対称・実数行列用の反復解法を用意している [6]:

BiConjugate Gradient 法
Conjugate Gradient Square 法
BiCGSTAB 法
BiCGSTAB(l) 法

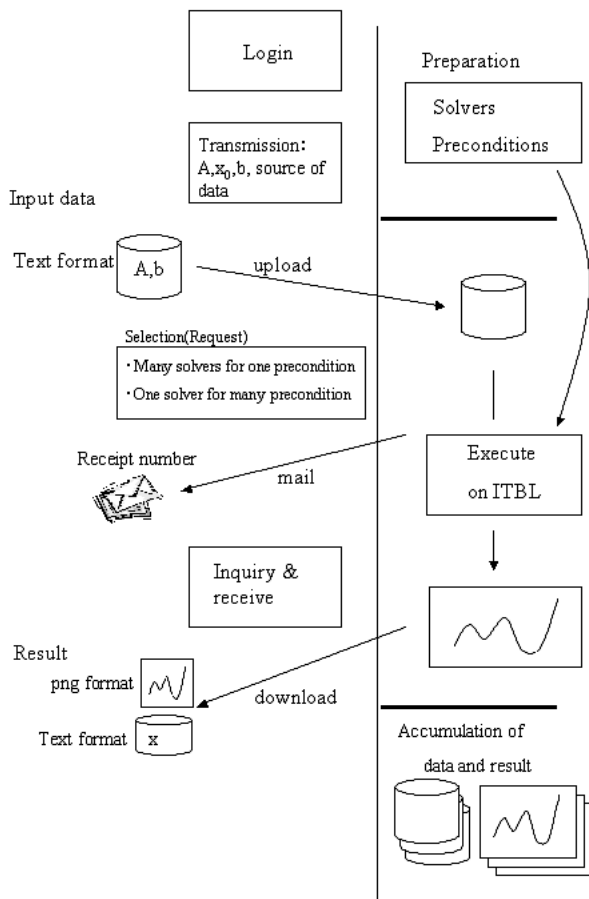


図-1 TiS サービスの概要

- General Product type BiCG 法 [7]
- Orthomin 法
- GMRES 法
- QMR 法
- Jacobi 法
- Gauss-Seidel 法
- SOR 法
- Conjugate Gradient 法 (対称用)

前処理は 6 種類を用意している:

- Jacobi
- Incomplete LU
- SSOR
- Hybrid[8]
- $I + S$ type[9]
- SAINV[10]
- 前処理無し

ユーザは「1つの反復解法と複数の前処理」が「複数の反復解法と1つの前処理」のどちらかの組合せを選択できる。TiS システムの内部では、計算カーネルに Lis (<http://ssi.is.s.u-tokyo.ac.jp/lis/>)[11] を使用している。

4. 行列 A の数学的特徴, 分野等を記述する。この情報はオプションである。
5. 計算を依頼する。ユーザにはジョブの状態問合せや

- 計算結果の入手に使うジョブ識別番号が返される。
6. 収束までの反復過程を示したグラフ (図 2) と反復解法と前処理の組み合わせに対応した数値解 x が計算される。必要な結果をダウンロードする。

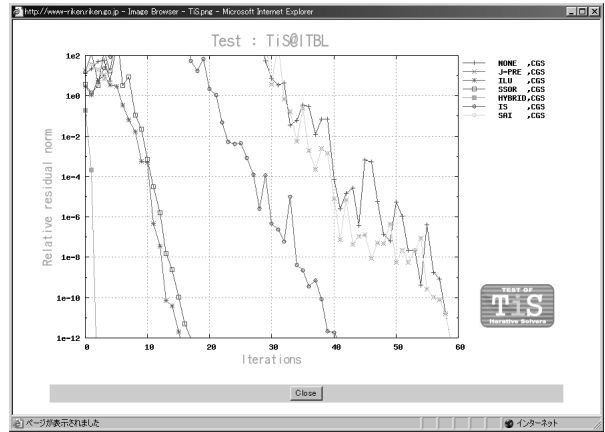


図-2 計算結果の比較の例

(2) 入力データ形式

TiS システムが受け付けるデータは MatrixMarket [12] の形式 (係数行列のみ) に準拠し、右辺ベクトル b を付加したもので、初期値 x_0 は与えなくても良い (与えない場合は初期値を 0.0 とする)。%で始まる行はコメント行で、任意の場所に許す。TiS システムではデータの先頭部分に置かれたコメントはデータについての情報と解釈し、将来の解析の際のデータ属性として役立てる。入力データの形式は図 3 の 4 通りで、 N は次元 (ベクトルデータの数)、 NNZ は非ゼロ要素の数 (行列データの数) である。

(1)	(2)	(3)	(4)
%comment	%comment	%comment	%comment
N, NNZ	N, NNZ	N, NNZ	N, NNZ
$i, j, a_{i,j}$	b	b	$i, j, a_{i,j}$
b	$\{x_0\}$	$i, j, a_{i,j}$	b
$\{x_0\}$	$i, j, a_{i,j}$	$\{x_0\}$	$\{x_0\}$

図-3 TiS システムのデータ形式

(3) データサイズと計算時間

直方体場における移流拡散方程式を有限差分法で離散化して解くことを考える。各辺を 100 分割すると、方程式の次元 N は 10^6 、1 行あたりの非ゼロ要素は 7 になる。 $i, j, a_{i,j}$ 形式のデータが 1 行あたり 50 Byte だとすると、全データサイズは $50 * 7 * 10^6$ で約 350 MByte となり、現状の制約でも扱える。

係数行列 A , 右辺ベクトル b , 初期解 x_0 が約 500 MByte としたとき、このデータの転送に必要な時間は、自宅を想定した 1.5 Mbit/sec で約 1 時間、オフィスを想定した 100 Mbit/sec で約 1 分となる。

この問題を解くのに必要な時間は、問題や解法の条件、計算環境にもよるが数分である。実際は、マシン

の混雑具合、スケジューリングによるので、いつ終了するかわからないし、問題と解法によっては収束しないこともある（上限回数での打ち切りがセットしてある）。総実行時間は（1 反復あたりの実行時間）*（反復回数）であり、前者は計算環境によって異なる。

結果は反復解法と前処理の組み合わせに対応した複数の数値解 x と評価データである。100 万次元の問題の数値解 x は ASCII テキスト形式でおおよそ 30 MByte、評価データ（収束履歴のグラフ）は PNG 形式で約 1 MByte である。これらのダウンロードに必要な時間は、1.5 Mbit/sec で約 3 分、100 Mbit/sec で約 3 秒である。

同様なシステムである Test for Large Systems of Equations (Grid TLSE) [13] では、大規模疎行列 A を係数とする連立 1 次方程式に対して、疎行列直接解法の計算時間（演算量）を最小化するオーダリングについての情報を提供する。TiS システムが問題を実際に解くのに対し、Grid TLSE では入力データの非ゼロパターンから演算量とメモリ使用量が見積もれるため、大きな計算コストを払う必要がない。

3. Grid 上の新しいサービス

これまでにインターネット上で提供されている不特定多数向けのサービスには、

1. データやプログラムなどを自由に取得できるようにしたもの
 - (a) <http://www.netlib.org/>
 - (b) <http://math.nist.gov/MatrixMarket/>
2. キーワードに対して検索結果を返すもの
 - (a) <http://www.google.co.jp/>
 - (b) <http://www.yahoo.co.jp/>

などがある。

(1) は蓄積された情報を検索・取得するだけで、本質的には「入力なし」である。(2) はキーワードを入力し、システムが加工した結果を受け取るサービスである。この場合、リンクやインデックスは生成されても、本質的に「新しいデータ」は生成されない。

TiS システムは、

1. ユーザが入力したデータをシステムで蓄積する
2. 計算・加工して新しいデータを生成する

という二つの処理からなる。想定データサイズは、入力が数 100MB、生成が数 10MB である。

これまでは計算資源の制約から、不特定ユーザに対する計算サービスは困難であった。ところが、Grid 環境によって計算資源に対する制約がゆるくなってきたため、大規模な数値データに計算・加工をして結果を生成するようなサービスも可能になっている。ユーザとはデータのやりとりだけ、計算・加工はサーバ内とすることで、ソフトウェアの試用も可能だし、有償ソフトウェアに対する従量課金も不可能ではない。いずれの場合も、ユーザ環境にはソフトウェアをインストールしないため、プログラムの詳細を明かす必要はないし、ユーザ側プログラムに対するメンテナンスの問題も発生しない。

これまでの Grid サービスは大規模な分散コンピュータ、分散ファイルシステムとしてのサービスが主で、「いつでも」、「誰にでも」というサービスは少なかった。われわれは、コンピュータシステムの一部または空き時間を活用すれば可能なサービスは、「いつでも」、「誰にでも」というパブリック・サービスとして Grid 向けであると考えられる。このような観点にたてば、TiS システムには新しい研究コミュニティの創成の可能性がある。そして、これはネットワーク上で広域に分散している研究資源の共有化を図った仮想研究所（室）を目指す ITBL (Information Technology Based Laboratory)[5] の目的にも合致している。

(1) 利用者・研究者・管理者からみた TiS システム

これまで、公開されたプログラムやデータはあっても、それらを組み合わせてテストする環境はなかった。そのため、自分で計算環境を用意して、反復解法と前処理を組み合わせて最適な組合せを見つける作業が必要だった。TiS システムではこのような労力を軽減すると同時に、多くの評価が手軽にできる。

複数のユーザからのデータが時間を追って蓄積されることにより、ユーザがかかえている実問題に対するデータのコレクションが形成される。ある時点で集められたベンチマークデータ・コレクションはあるが [12][14]、そこから実問題に対する「生の」データを探し出すのは難しい。

研究者や管理者は、新たな解法、新たな前処理、計算環境の評価に蓄積されたデータを活用できる。新しい反復解法・新しい前処理が提案されたときは、蓄積されたデータを使ってそれらのおおまかな評価ができる。たとえば、新解法の有効性を調べるには TiS システムにストックされたデータすべてに新解法と既存の解法を適用して結果を比較すればよい。

このデータを新しい計算環境の評価のために使うこともできる。同じデータ、同じプログラムを異なる計算環境で実行すれば、より現実に近いデータによる計算環境の評価ができる。そして、時間経過を追うことにより、新しい計算環境がどのように高速化されたかが評価できる。アルゴリズムの数学的性質は計算環境に依存しないので、データとアルゴリズムの組を異なる計算環境で用いれば、計算環境が比較できる。計算を依頼された時点だけでなく、蓄積されたデータを新しい計算環境で用いることにより新しい計算環境の基本的な特性データも得られるだろう。

(2) TiS システムと ITBL ポータル

TiS システムは、ITBL ポータルの計算サービスとして実現されている。利用者管理、ファイル管理、ジョブ管理、GUI を用いた入出力などは、すべて ITBL ポータルの機能を用いている。反復解法と前処理のコードを提供するアルゴリズムの研究者は、若干の制御フローを考える必要があるが、標準的な数値計算プログラムとしてアルゴリズムを実現することに集中できる。ア

ルゴリズム研究者が TiS システムと同様のサービスを個人で提供することは、本業とは関係のない部分の作業が多く実現は不可能に近い。

また、ITBL ポータルでは Web サーバから計算サーバへのジョブ投入に Globus を使用しているため、計算サーバの追加や他の計算環境への移植は容易である。

ユーザによる TiS システムの利用(データ収集)と、新たな反復解法や新たな前処理の開発者、計算環境の評価者に対する評価用データの提供が完成すれば、実データの収集と反復解法・前処理・計算環境の評価へ実データ提供のループが完成する。

4. おわりに

大規模疎行列 A を係数とする連立 1 次方程式 $Ax = b$ に対する反復解法と前処理の評価システム TiS は、ITBL ポータル上でユーザの問題(データ)を受け取り、実際に $Ax = b$ を解くことで反復解法と前処理についての情報を提供する。問題は TiS システムに蓄積され、新たな反復解法や前処理の開発に利用される。このように、連立 1 次方程式のデータの所有者、反復解法と前処理の提供者、計算資源の提供者が一同に集えば、新しい研究コミュニティが生まれる可能性がある。本システムは、オープン・コミュニティに対する出会いの場、仮想研究所の機能を持つとともに、インターネット上の計算サービスの先駆者とも言える。

反復解法や前処理の研究者と TiS システムの管理者にとって、TiS システムは現実的なデータ収集システムでもある。収集・蓄積されたデータは、新しい反復解法や前処理を開発する際に使われるだけでなく、アルゴリズムとデータの分類とアルゴリズムデータの特徴の発見にも使えるであろう。したがって、TiS システムはアルゴリズムとデータの分類や特徴の発見の際の新しい研究ツールにもなっているし、色々な計算環境の評価にも利用できる。

ユーザにとっての TiS システムは、連立 1 次方程式 $Ax = b$ の係数行列 A 、右辺 b と初期値 x_0 を入力とし、 $Ax = b$ を「1つの前処理と複数の反復解法の組合せ」か、「複数の前処理と1つの反復解法の組合せ」で解いて、解 x と収束の履歴グラフを提供してくれるインターネット上の大規模連立 1 次方程式用電卓である。TiS システムはユーザのデータに対して結果だけを与えるので、解法コードの機密保持が可能でコピーの心配もない。

演算精度が変えられるシステムでは、ユーザは演算精度の影響を知ることができるはずである。反復回数のような固定要因は、数学的性質にのみに依存し、計算環境には依存せず結果には汎用性がある。計算時間のような変動要因は計算環境に依存するため、精度のよい予測は困難である。高品質と高性能を両立させるには、固定要因と変動要因の間のバランスが本質的である。TiS システムは、実問題を用いることで、これらのテストを容易にする公開サービスを提供する。課題は、システムの使い易さの改善とアルゴリズム(反

復法、前処理)の数、データタイプ(実、複素、エルミート等)を増やすことである。

謝辞: システム開発にご協力いただいた富士通の坂口吉生氏、鈴木孝一郎氏に感謝いたします。

参考文献

- 1) Y. Fukui and H. Hasegawa. Test of Iterative Solvers on ITBL, Proc. of Eighth International Conference on High-Performance Computing in Asia-Pacific Region, pp. 422-425, 2005.
- 2) 福井義成, 長谷川秀彦. ITBL におけるアルゴリズムとコンピュータの評価について, 第 33 回数値解析シンポジウム予稿集, pp. 106-109, 2004.
- 3) 長谷川秀彦, 福井義成. インターネットを利用した反復解法のテスト, 日本応用数理学会 2004 年年会講演予稿集, pp. 408-409, 2004.
- 4) 福井義成, 長谷川秀彦. ITBL における反復解法を用いた連立 1 次方程式の評価システム, 第 34 回数値解析シンポジウム予稿集, pp. 63-66, 2005.
- 5) ITBL (Information Technology Based Laboratory) <http://www.itbl.jp/>
- 6) R. Barrett, *et al.* Templates for the Solution of Linear Systems: Building Blocks for Iterative Methods. SIAM, 1994.
- 7) S. -L. Zhang. A class of product-type Krylov-subspace methods for solving nonsymmetric linear systems. J. Comput. Appl. Math., 149-1: 297-305, 2002.
- 8) 阿部 邦美ほか. SOR 法を用いた可変的前処理付き一般化共役残差法. 日本応用数理学会論文誌, 11(4): 157-170, 2001.
- 9) T. Kohno, *et al.* Improving the Modified Gauss-Seidel Method for Z-matrices. Linear Algebra Appl., 267: 113-123, 1997.
- 10) R. Bridson and W.-P. Tang. Refining an approximate inverse. J. Comput. Appl. Math., 123: 293-306, 2000.
- 11) H. Kotakemori, *et al.* Performance Evaluation of Parallel Sparse Matrix-Vector Products on SGI Altix3700. Proceedings of the First International Workshop on OpenMP(IWOMP2005), to appear.
- 12) MatrixMarket. Matrix Market Exchange Formats. <http://math.nist.gov/MatrixMarket/formats.html>
- 13) Michel Dayd, *et al.* An Overview of the Grid-TLSE Project. VECPAR04. (<http://www.enseeiht.fr/lima/tlse/vecpar2004.pdf>)
- 14) Tim Davis's sparse matrix collection. <http://www.cise.ufl.edu/research/sparse/matrices/>