土木学会第45回年次学術講演会（平成２年９月）

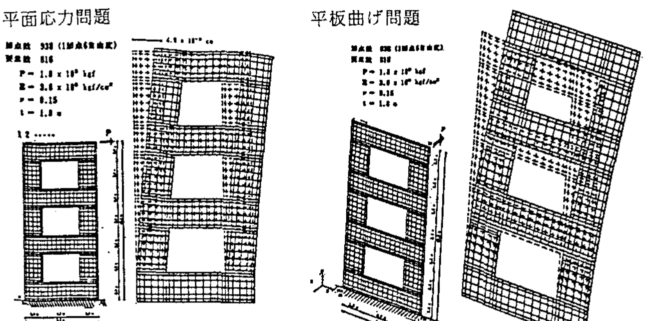
Ⅰ-77　スーパーコンピュータによるＣＧ法の効率化アルゴリズム

東京工業大学　正員　吉田　裕
ＪＲ東日本　正員　中川　昌弥
東京工業大学　学生員　田中　知足

１．はじめに　工学問題の数値解析では、連立一次方程式を解くことが基礎となり、その解法の効率化が重要な課題である。ＣＧ法は、マトリックスとベクトルの乗算だけで解き進めることができるので、ベクトル化に適した解法として最近その有効性が再認識されてきている。本研究は、構造問題の有限要素方程式を対象としてＣＧ法のアルゴリズムについて数値実験を行い、効率化の可能性を検討し、これを踏まえてスーパーコンピュータによるベクトル計算との適合性を考慮したアルゴリズムの提案を行うものである。

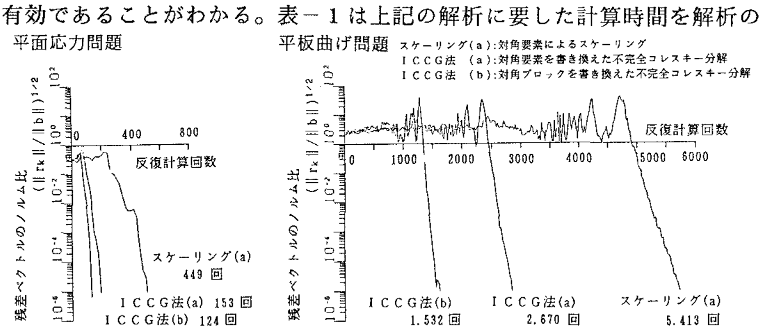
２．ＣＧ法と前処理　ＣＧ法は、各反復計算ごとに残差ベクトルが直交するように解を修正しながら解き進めて行く解法であり、対象とする連立一次方程式をＡｘ＝ｂとすると、そのアルゴリズムは以下のようになる。

1)　$r_0 = b - Ax_0$　, $p_0 = r_0$
　　ただしx_0は任意の初期ベクトル
2)　$\alpha_k = (p_k, r_k)/(p_k, Ap_k)$
3)　$x_{k+1} = x_k + \alpha_k p_k$
4)　$r_{k+1} = r_k - \alpha_k A p_k$
5)　$\beta_k = -(r_{k+1}, Ap_k)/(p_k, Ap_k)$
6)　$p_{k+1} = r_{k+1} + \beta_k p_k$
7)　2)へ



図－１　解析対象

ＣＧ法の収束性は、係数マトリックスの性質および数値誤差に大きく依存する。図－１に示すような同じ自由度を有する平面応力問題と平板曲げ問題を対象として、ＣＧ法およびＩＣＣＧ法における不完全コレスキー分解の仕方の違いが収束性に及ぼす影響について示したものが図－２である。ＣＧ法の収束性が係数マトリックスの性質に大きく依存すること、およびＩＣＣＧ法が収束性の改善に有効であることがわかる。表－１は上記の解析に要した計算時間を解析の過程のそれぞれの段階ごとに比較して示したものである。ＩＣＣＧ法の場合には収束性に大きな改善がみられるが、反復計算ごとに後退代入を必要とするために、要する計算時間に対してはそれ程の改善につながっていないことがわかる。



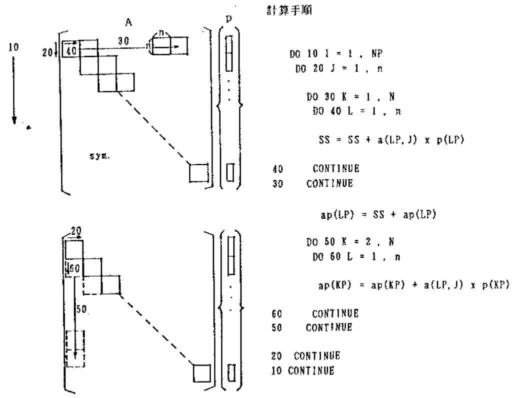
図－２　ＣＧ法とＩＣＣＧ法による収束状況

３．ベクトル計算との適合性を考慮したアルゴリズムについて　ＣＧ法の反復計算過程において最も演算量の多いのはマトリックスとベクトルの積Ａｐの計算であり、この部分の効率化により計算時間が大幅に改善できると考える。ここでは、積Ａｐを求める計算手順においてベクトル計算機との適合性を考慮した、提案するアルゴリズムについてその概要を示す。

表－１　解析に要した計算時間（ETA10によるCPU-time）

	解法の種類	前処理過程 (s)	反復計算過程 回数	反復計算過程 1回当り(s)	反復計算過程 全過程(s)	全計算過程 (s)
平面応力	ＣＧ法 (a)	――	449 回	0.086	38.72	49.1
平面応力	ＩＣＣＧ法(b)	0.11	124 回	0.188	23.23	33.7
平板曲げ	ＣＧ法 (a)	――	5,413 回	0.086	464.95	472.7
平板曲げ	ＩＣＣＧ法(b)	0.11	1,532 回	0.188	288.02	295.8

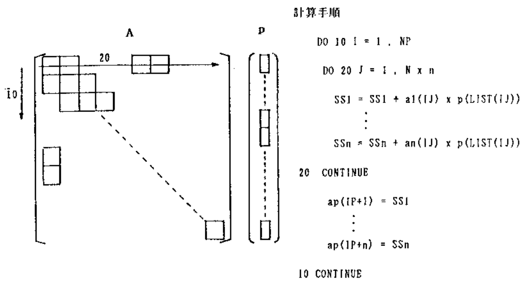
１）基準とするアルゴリズム　　ＣＧ法の最大の利点は、これに要する記憶容量が直接法に比べて少なくてよいという点であり、係数マトリクスは節点の自由度を単位とするブロックの集まりとして、その対称性を考慮して上半分の非零ブロックだけを記憶するのが普通である。係数マトリックスのｉ行に着目すると、ｉ行で上半分にある要素とベクトルｐとの積を図－３中の30のループで計算する。これらの要素は同時にｉ列の下半分の要素に対応しており、列方向の積を50のループで求める。



図－３　基準とするアルゴリズム

２）ベクトル計算との適合性を考慮したアルゴリズム

ベクトル計算との適合性を考慮して最内側のDOループ長をできる限り長くとるために、１）のアルゴリズムを次のように変更する。係数マトリックスは対称性を考慮せずにすべての非零ブロックを記憶し、記憶した要素の列番号をリストベクトルに記憶する。これにより行方向の積を１つのループで処理することが出来る。



図－４　ベクトル化を考慮したアルゴリズム

__４．数値実験による効率化の検証__　前記の平面応力、平板曲げ問題について、対角要素でスケーリングし通常考えられるアルゴリズムでＡｐの積を求める基準的なアルゴリズムと、対角ブロックでスケーリングしベクトル計算を考慮し効率化したアルゴリズム、の２つで計算を行い計算時間等の比較を行った。使用した計算機は東京大学計算機センターのスーパーコンピュータHITAC S820/80 および東京工業大学総合情報処理センターのスーパーコンピュータ　ETA 10-Eである。結果を表－２に示す。効率化を考えたアルゴリズムでは、基準となるアルゴリズムに較べ、要する容量は約２倍になるが、計算時間は大幅に短縮することが出来た。

__５．おわりに__　以上、ＣＧ法による連立一次方程式の解法の効率化について前処理とベクトル計算に着目し、いくつかの数値実験を行い、記憶容量では問題が残るが計算時間においては大幅な効率化を可能とするアルゴリズムを提案した。演算は、計算機のパイプライン構成に大きく依存し、ベクトル化と共に並列化が重要なポイントとなる。並列化に対する検討は今後の課題である。

表－２　解析に要した計算時間

		解法の種類	要する容量	反復計算過程			全計算過程
				回数	１回当り(s)	全過程(s)	(s)
S820	平面応力	ＣＧ法 (a) 基	447 KB	449 回	0.025	11.4	14.3
		ＣＧ法 (b) 効	873 KB	409 回	0.0023	0.9	3.9
	平板曲げ	ＣＧ法 (a) 基	447 KB	5,189 回	0.025	131.1	132.6
		ＣＧ法 (b) 効	873 KB	4,344 回	0.0023	10.0	11.7
ETA10	平面応力	ＣＧ法 (a) 基	447 KB	449 回	0.086	38.7	49.1
		ＣＧ法 (b) 効	873 KB	409 回	0.012	4.9	15.4
	平板曲げ	ＣＧ法 (a) 基	447 KB	5,413 回	0.086	465.0	472.7
		ＣＧ法 (b) 効	873 KB	4,421 回	0.012	52.5	60.4

__参考文献__

1) Kershaw, D. S:"The Incomplete Cholesky Conjugate Gradient method for the iterative solution of system of linear equations", J. Comp. Phys., No26, pp. 43-65, 1978

2) 藤掛，村野:"不完全共役勾配法とスカイライン法との連立一次方程式解法効率の比較", 構造工学における数値解析法シンポジウム論文集, Vol. 10, pp. 28～33, 1986

3) 三好，高野:"構造解析における反復解法について", 構造工学における数値解析法シンポジウム論文集, Vol. 12, pp. 19～22, 1988

4) 吉田、依知川、中川:" 連立一次方程式算法の計算機システム適合性に関する一検討", 構造工学における数値解析法シンポジウム論文集, Vol. 13, pp. 149～154, 1989