

固体地球シミュレータ GeoFEM の開発（大規模並列計算技術）

Development of Solid Earth Simulator GeoFEM (Procedures for Large-Scale Parallel Computation)

中島 研吾 [1], 奥田 洋司 [2], 中村 壽 [3]

Kengo Nakajima [1], Hiroshi Okuda [2], Hisashi Nakamura [1]

[1] RIST, [2] 横国大・工・生産, [3] 高度情報

[1] RIST, [2] Dept. of Mech. Eng., Yokohama National Univ.

<http://geofem.tokyo.rist.or.jp>

本研究では、複雑形状を有限要素法によって離散化した場合に、大規模問題をメモリ分散型並列計算機上で効率的に解くために必要な計算技術を開発した。有限要素法の特性を生かすために処理を局所化し、通信を効率的に実施するための局所データ構造について検討した。グローバルなデータ依存性を持たない局所前処理を使用して、並列性の高い大規模疎行列用反復ソルバーを開発し、試計算を実施した。

並列計算であつかうデータの規模は非常に大きくなるため、効率的な並列計算を実施するためにはできるだけ処理を局所化することが望ましい有限要素領域を分割して並列計算を実施する場合に、基本的には単一プロセッサを使用していた場合と全く同じデータ構造を使用して、同じアルゴリズムによって計算が可能である。要素、節点番号等も局所的なものが使用される。ただ、系全体としての保存則や整合性を保つための通信が必要となるため、そのためのデータが必要となる。

節点単位で領域分割された場合のローカル情報は：

- ・その領域に割り当てられた節点自身
- ・割り当てられた節点を含む要素およびそれに含まれる節点すべて

を含む。要素を構成する節点が複数の領域にわたっている場合には、この要素および要素を構成する節点はそれぞれの（複数の）領域に属する。節点は以下の3種類に分類される：

（内点）本来その領域に割り当てられた節点

（外点）本来当該領域には属していないが内点を含む要素を構成する節点、ここでは袖領域深さ1の場合をデフォルトとしている深さを変えることは可能である。

（境界点）内点のうち他の領域の外点となっている節点

節点の番号付けはまず内点を先に、そのあと外点という順番で格納する。境界点は「境界点ではない」内点と区別する必要はない。同じ隣接領域に属する外点は、隣接領域番号の順番に連続した番号付けになっている必要がある。

通信の際にはまず境界点の情報が隣接領域に「送信」され、これらの情報は外点の情報として「受信」される。

連立一次方程式を反復法で解く場合、収束性は係数行列Aの固有値分布に強く依存することから、適当な前処理行列によって変換された方程式を解けば少ない反復回数で収束する。前処理行列がもとの係数行列に近いほど収束が早くなる。反復法では行列の固有値が1のまわりに集中しているほど速く収束するが、前処理はもとの係数行列にこのような性質を与えるために実施されるものである。

前処理以外の反復法の計算プロセスの大部分は内積、行列/ベクトル積、ベクトルの加減であるため容易に並列化可能であるが、前処理行列の逆行列を乗ずるプロセスは全体に占める計算量としても多く、ソルバーの並列化において最も重要な部分である。

ブロック対角行列による前処理の場合は逆行列を容易に求めることが可能であり、並列化も容易である。しかし、非対称マトリクス計算の前処理法として広く使用されているILU(0) (fill-inのないILU (incomplete LU decomposition) 法) は一般にブロック対角行列による前処理と比較して速く収束するものの、並列化はより困難

である。並列計算機ではデータの局所性を保つことが効率的な計算に不可欠であるが、一般にILU(0)ではデータのグローバルな依存性があるため局所性を保つのが困難である。

並列計算向けの疑似的なILU(0)前処理手法はプロセッサ単位の「ローカルな」ILU(0)であり、前処理行列でそのプロセッサに含まれていない成分に相当する係数は0とするものである。すなわち各プロセッサで境界条件がゼロ固定のディリクレ境界値問題を解くのと同値である。この手法を「局所」ILU(0)分解("Localized" Incomplete LU decomposition)と呼ぶ。

この手法によって並列度は高くなり、ロードバランスも保たれるが、前処理手法としては本来の「グローバルな」ILU(0)ほど強力なものではなくなり、プロセッサ数(領域数)の増加により収束が悪くなる。

様々な反復解法では、計算の50%前後が前処理行列の処理に費やされており、並列度の高い本手法は効果的である。