論文の内容の要旨

論文題目： Preconditioned Nonlinear Conjugate Gradient Method for Parallel Finite Element Analysis
(並列有限要素解析のための前処理付き非線形共役勾配法)

氏名： 櫛田　慶幸

近年の高速なコンピュータは、地球環境や天候の予測、もしくは物理・化学現象の解明に多大な影響を与えつつある。現在そのような研究をおこなっているプロジェクトとして、地球シミュレータプロジェクト、ASCI プロジェクト、または SciDAC プロジェクトなどが挙げられる。高速なコンピュータを用いることで複雑な現象を解析することが可能になったが、複雑な現象の解析には非線型方程式を解く必要がある。非線型方程式の解法として近年注目をあつめている方法として、非線形多重格子法やメモリフリーNewton-Krylov 法がある。非線形多重格子法は、大規模線形問題解法として大いに期待がもたれている多重格子法の非線形問題への拡張であるが、プログラムの開発が困難であることや、分散メモリ型並列計算機への適用性が低いと言われる。対して、メモリフリーNewton-Krylov 法は最も有名な非線形解法である Newton 法を改良したものである。メモリフリーNewton-Krylov 法は Newton 法にくらベメモリ使用量が極めて少なく、並列計算機への適用性も高い。しかし、Newton 法に分類される手法は高速であるが不安定であることが指摘されている。このため、メモリフリーNewton-Krylov 法の多くは、初期値問題への適用がほとんどである。初期値問題の場合、時間刻み幅が十分に細かい場合容易に収束解を得ることができる。

ところで、工学分野において材料特性の解析に使われる計算手法としてもっとも高精度な手法は第一原理計算である。第一原理計算は、電子レベルから材料の性質を解析する手法であり、経験的なパラメータを一切用いずに解析をおこなうが、その計算量は膨大なものとなる。その膨大な計算量のため、スーパーコンピュータの利用は必須であるといえる。現在のスーパーコンピュータの主流は分散メモリ型、もしくは分散·共有メモリ型である。このような計算機アーキテクチャにおいては、従来の手法は効率的でないといわれている。そのような問題を克服する手法として、実空間第一原理計算法が脚光をあびている。実空間法は、その名の通り、３次元空間における離散化手法をもちいて第一原理計算をおこなうものである。第一原理計算の支配方程式もまた、非線形方程式であり、加えて境界値問題である。このような非線形な境界値問題を解く手法で、かつ、分散メモリ型並列計算機に適する手法として非線形共役勾配法が考えられる。共役勾配法は、線形連立一次方程式の解法として良く知られている。近年、その並列計算機への適用性の高さから注目をあつめている。共役勾配法は、前処理と呼ばれる収束性を向上させる手法を伴って用いられる

ことが多い。線形共役勾配法の前処理は、多くの研究者の努力により、目覚しい発展が見られる一方、非線形共役勾配法を前提とした手法は研究されていないのが現状である。このような背景のもと、本研究では以下に挙げられる特徴をもつ。

1. 非線形共役勾配法のための新しい前処理を提案し、実空間第一原理計算への適用を行いその有効性を検討した。
2. 線形共役勾配法を用い超大規模計算を行った。この際、用いた計算機は地球シミュレータという複雑な並列構造をもつ計算機であり、その性能を発揮するための最適化をおこなった。

上記項目につき、詳しく述べる。

1．非線形共役勾配法の前処理

非線型方程式解法の一種である Newton 法と、非線形共役勾配法のアルゴリズムを比較することにより、Newton 法は非線形共役勾配法の特殊な場合であるとみなすことができる。両者は近似解を反復法であり、現在の近似解に修正を施すことで厳密解へ近づいてゆく。両者の解の更新部分のみを抜粋する。:

解くべき非線形関数を$\mathbf{f}(\mathbf{x})=0$とすれば、共役勾配法においては、

$$\mathbf{x}_{i+1}=\mathbf{x}_i+\alpha_i\left(-\mathbf{M}^{-1}\mathbf{f}(x_i)\right) \tag{1}$$

となる。ここで$\mathbf{M}$は前処理行列でありαは修正係数である。他方、Newton 法は

$$\mathbf{x}_{i+1}=\mathbf{x}_i-\left(\left.\frac{\partial\mathbf{f}(\mathbf{x})}{\partial x}\right|_i\right)^{-1}\mathbf{f}(\mathbf{x}_i) \tag{2}$$

と表される。式(1)と(2)を較べたときに、共役勾配法の修正係数αを$\alpha=1$に固定し、前処理行列$\mathbf{M}$を$\mathbf{M}=\left.\frac{\partial\mathbf{f}(\mathbf{x})}{\partial x}\right|_i$とすれば、共役勾配法と Newton 法は一致することがわかる。このような関係を利用し、非線形共役勾配法の新たな前処理を提案した。また、提案した前処理付きの効果を検証するために、第一原理計算への適用を行い、計算時間において最大５倍の加速が得られた。

2．超大規模線形共役勾配法

現在のスーパーコンピュータの主流は分散・共有メモリ型の並列計算機である。分散・共有メモリ型の計算機の高い性能を発揮するためには、そのような階層構造を意識したプログラミングが求められる。加えて、数値計算に適した演算装置であるといわれるベクトルプロセッサーをもつ分散・共有メモリ型の計算機も存在する。そのような計算機として地球シミュレータがある。ベクトルプロセシングは広義の並列計算と考えられるため、地球

シミュレータは、並列に際して

1．分散メモリ並列

2．共有メモリ並列

3．ベクトルプロセシング

の三段階がある。このような、階層構造を意識することにより、高い並列性能をもった線形共役勾配法の開発が可能となる。結果、約 8 億自由度の線形連立一次方程式を解く際、4096 プロセッサーを用いて 80%の並列化効率が得られた。