2026 年度 学際大規模情報基盤共同利用･共同研究拠点 課題番号：JH260025

Deflation に基づく並列反復法前処理とその GPU 実装

森田直樹、三目直登、松田哲也、馬込望、新舘京平、根本琢巳、山本歩穂（筑波大学）、
柴沼一樹、Tianyu He、奥田洋司、林雅江（東京大学）

研究背景

高度な安全性評価などの要請により、メッシュベース法（有限要素法など）やメッシュフリー法（粒子法など）に基づく高忠実度な大規模数値シミュレーションが不可欠となっている。これら解析手法から得られる離散化方程式は自由度数が数千万規模に達することもあり、**計算コストの大部分は連立一次方程式の求解が支配する。**このような大規模な連立一次方程式に対し、逐次的アルゴリズムで構成される直接法による求解は、計算量およびメモリ使用量の観点から現実的でない。そのため、MPI を用いた分散メモリ並列計算環境と親和性が高く、**大規模計算環境において良好な並列化効率が見込まれる反復法が用いられる。**

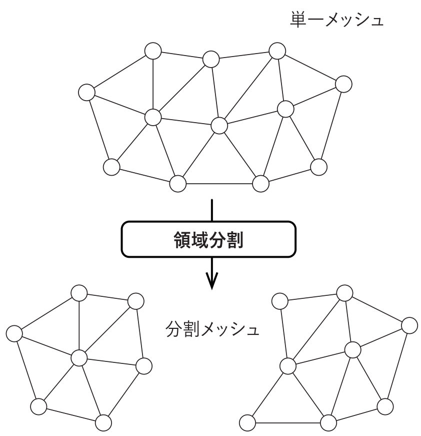
一方その収束性は対象問題に強く依存するため、悪条件数問題では反復回数が大きく増大し、しばしば解に至らないこともある。したがって、反復法を実用的に適用するためには、問題の条件数を低減し**安定した収束性を確保する、反復法前処理の適用が不可欠である。**また前処理の性能は、前処理を事前準備する追加の計算コストと反復回数削減による計算時間短縮効果とのトレードオフ関係となるうえ、並列効率や通信・同期コストなど、大規模並列計算を前提とした手法の設計が重要となる。

研究目的

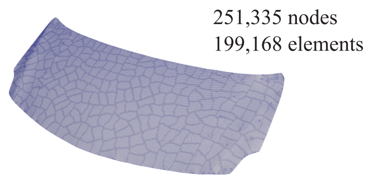
大規模解析に有効な反復法前処理には、マルチグリッド（Multi Grid, MG）前処理や領域分割（Domain Decomposition, DD）に基づく前処理が選択肢となる。はじめに MG 前処理は対角スケーリング前処理などの標準的な前処理では対応しにくい、空間的に大域的な誤差（低周波誤差成分）を効率的に低減できる点で強力である。一方、幾何学的 MG では多段の粗格子を構成するためにメッシュ分割に制約が生じ、複雑形状や非構造格子、連成問題では運用面で課題がある。他方、代数的 MG は幾何情報に依存せず適用範囲が広いものの、有限要素メッシュが持つ空間的近接性や境界条件の構造といった情報を直接活用しにくく、設定パラメータへの依存が課題になることがある。

次に DD 前処理は、分割領域内での局所的な処理と分割領域境界での境界問題から構成され並列化しやすいが、基本的にメッシュ分割（領域分割）を前提とするため、適用可能な範囲がメッシュベース法に限定される。これら背景から本研究では、**既知の基底ベクトルを前処理として利用する deflation 前処理に注目する。**Deflation 前処理は、既知の基底ベクトルの線形結合で表される解を元の方程式から直接除去する手法であり、例えば既知の基底ベクトルとして低次固有モードを入力すると、このモードに対応する低次固有値（低周波誤差成分、収束阻害成分）を元の問題から除去でき、条件数が低減され収束性向上が期待される。また deflation は、2 段 V サイクルの MG と数学的に等価な低周波誤差除去効果を与えることが知られており、既知の基底を適切に選定することで、MG が本質的に狙う効果をメッシュ構造に依存せずに実現できる。以上より、対象問題の物理・離散化・領域構造に応じて基底を選定できる点で、メッシュベース法にとどまらない**離散化手法が異なる場合でも適用可能な、汎用性の高い前処理フレームワークを提案する**ことが、本研究の最終的な目標である。

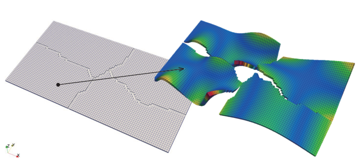
そこで本研究では、階層型領域分割（Hierarchical Domain Decomposition, HDD）に基づく階層的領域構造を活用し、**階層型領域分割と deflation に基づく反復法前処理のフレームワークを確立**するとともに、CPU・GPU 双方への適用を含めた性能評価を行う。特に GPU に関しては、deflation の基本演算となる密行列計算に対して親和性があり、高い演算性能が期待される一方、GPU に適した計算粒度設定が存在すると推定されるので、本提案フレームワークの恩恵が大きい。



標準的な有限要素法における領域分割法の概要図。標準的な有限要素解析では、分割メッシュの節点数が等しく（計算量の均一化）、エッジカットが最小となるよう（通信量の最小化）にデータ分割を行う。



Partitioned mesh of plate model



Schematics of subdomain deflation

階層型領域分割の概略図。並列計算に用いる領域と、前処理に用いる基底を取得する領域を分けて定義する。前処理性能が基底取得領域に依存することが知られており、並列計算性能と前処理性能を両立する手法として研究開発を行う。

Algorithm of deflated preconditioned CG method

Deflated PCG Method $(A, b, x, W, M_{\mathrm{trad}})$

$Q = W(W^tAW)W^t,\ P = I - Q$
$r_0 = b - Ax_0$
$z_0 = M_{\mathrm{trad}}^{-1} r_0$
$p_0 = z_0$
for $i = 0, 1, 2, \dots$ **do**
  $w_i = PAp_{i-1}$
  $\alpha_i = (r_i^t z_i)/(p_i^t A w_i)$
  $x_{i+1} = x_i + \alpha_i p_i$
  $r_{i+1} = r_i - \alpha_i A p_i$
  if $(||r_i||/||r_0|| < \varepsilon)$ exit
  $z_{i+1} = M_{\mathrm{trad}}^{-1} r_{i+1}$
  $\beta_i = (r_{i+1}^t z_{i+1})/(r_i^t z_i)$
  $p_{i+1} = z_{i+1} + \beta_i p_i$
end for
return $Qb + P^t x_{i+1}$