

大規模反復型数値計算の高速化支援のための可視化ツールの開発

花房 秀光, 小寺 晋, 木内 俊介, 山崎 勇輔,
福間 慎治, 森 眞一郎

Hideaki Hanafusa, Susumu Kodera, Shunsuke Kiuchi, Yusuke Yamazaki,
Shinji Fukuma, Shin-ichiro Mori

1 はじめに

数値シミュレーションで多用される反復型数値計算の高速化では、いかに少ない反復回数で十分な精度の近似解が得られるかが重要である。そのためには計算手法の高速化が重要になってくる。しかしながら、その計算手法の高速化を図るのは数値解析の専門家以外でさえ試行錯誤が必要である [1]。また、反復型数値計算手法としてよく用いられる共役勾配法の収束過程を評価する残差ノルムのグラフが与えられても何故そのような結果が得られたかは専門家以外わからない。しかし、シミュレーションを行っているユーザーは一般に解こうとしている問題の性質に関する事前知識を持っており、この事前知識を上手く活用できれば、シミュレーションの高速化に関する示唆が得られる可能性がある。そこで我々は今までユーザーに提示されることが少なかった反復計算の収束過程に注目し、残差分布を可視化してユーザーに提示することで、プログラムの高速化を支援する手法の検討を行っている。また、より効果的な可視化手法を検討し、またユーザー支援の為に高速化支援ツールの構築を目的としている。

2 収束過程の可視化による高速支援

2.1 残差分布の可視化とアルゴリズム設計支援

一般によく用いられる正規化残差ノルムの時間変化をグラフ表示したものが図1である。このグラフからは反復回数が進むにつれ残差の値が収束に向っていることが読み取れる。しかし、計算の過程で個々の変数で何が起きてどうすれば高速化出来るかは、このグラフだけからでは解析できない。反復計算の過程で個々の変数に対する残差の収束過程を可視化することを考える。具体的には、残差の絶対値を色(原稿ではグレースケールで代用)で表現することで可視化を行った。

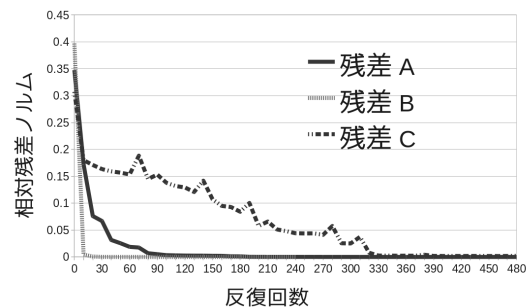


図 1: 一般的な収束過程の表現

予備実験として、次元数 1000 の単純な帯行列(帯幅 6)となる剛性方程式を考え、既知の解に対してある一点のみ誤差を加えた近似解を与えて収束過程を可視化した。その結果を図2に示す。横軸は個々の変数に対応し、縦軸が時間方向である。色の薄い部分ほど残差が小さいことを示している。図2から、初期値として与えた解の大半が真の解であるにもかかわらず、ある一箇所の残差が一旦全体に拡散し、そのあとで収束が始まっていることが分かる。このような不必要な残差の拡散が高速化の妨げとなっている可能性が考えられる。そこで、残差の拡散を強制的に制限するためのアルゴリズムの修正を行い、同様の実験を行った。図3は収束条件 10^{-6} に対し残差が 10^{-4} となるまで要素番号 0 から 500 の変数以外に対して、反復解法における解探索方向に一定の制約を加えた場合の収束過程を示したものである。図2と比較すると、残差の拡散を抑えることで高速化が達成できていることがわかる。

この結果に基づき、同様の最適化を実際の血管(大動脈弓)の構造変形シミュレーションに対して適用した。制限方法としては、強制的な変形が加えられたノード i に対応する剛性マトリクス A の列ベクトル a_{*i} のうち非ゼロ要素に対応したノード群 ($a_{k,i} \neq 0$ となるノード k) のみ残差補正を行う方法を試験的に適用し

⁰福井大学大学院工学研究科, University of Fukui

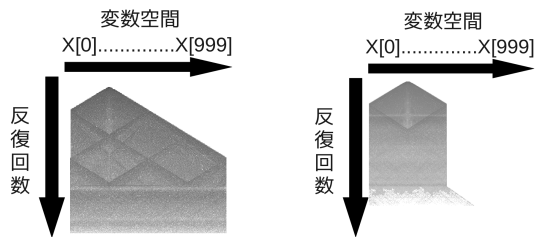


図 2: 残差の収束過程

図 3: 残差拡散の抑制

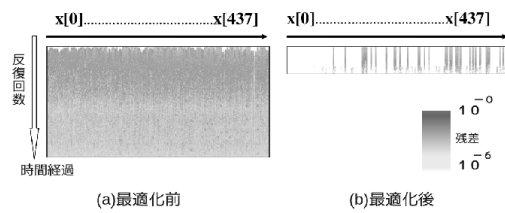


図 4: 残差分布表現による収束過程の可視化

た. 表 1 に最適化前後の反復回数を示す. また, 図 4 に次元数 438 に対する収束過程の可視化結果を示す. 残差拡散制御の結果, どの次元数においても反復回数が大幅に削減され, 期待通りの高速化が達成できた.

表 1: 残差拡散制御の効果

| 次元数 N | 最適化なし 反復回数 | 最適化あり 反復回数 |
|-------|------------|------------|
| 438 | 284 | 88 |
| 1836 | 452 | 49 |
| 3765 | 607 | 71 |

2.2 残差拡散制御の一般問題への適用例

前章では, 残差の拡散が探索方向ベクトルにより行われていることから, この探索方向ベクトルを制御することにより高速化が達成できた. そこで他の一般的な問題に適用し, その有効性を検証した. MATRIX MARKET[5] から共役勾配法で適用可能な問題に対して制限法の適用を次の条件で行った.

- A: 初期ベクトル $x^{(0)} = 0$ とする. 拡散制限なし.
- B: 初期ベクトル $x^{(0)}$ としてあらかじめ求めておいた真値に一点だけ誤差を与えた近似値を用いる. 拡散制限なし.
- C: 初期ベクトル $x^{(0)}$ としてあらかじめ求めておいた真値に一点だけ誤差を与えた近似値を用いる. 拡散制

限あり.
適用結果を表 2 に示す.

表 2: 反復回数

| | A | B | C |
|-----------------|--------|-------|-------|
| 662_BUS(662) | 452 | 40 | 28 |
| S3RMT3M1(5489) | 4584 | 569 | 282 |
| BCSSTK13(2003) | 65354 | 19473 | 487 |
| BCSSTK18(11948) | 43500 | 14512 | 1903 |
| BCSSTK24(3362) | 109720 | 14890 | 16325 |

Note: 括弧内の数字は問題サイズ

BCSSTK24 を除き反復回数が減少しておりこの制限法の有効性が認められた. 一方, BCSSTK24 では制限をかけることによって探索ベクトルが収束の方向へと向かなかつたと考えられる. このような問題依存の現象に対応するために収束過程で発生する現象を視覚的に解析するツールが必要であると考えられる.

3 可視化システムの構築の要件

ここで, 残差の可視化システムに求められる要件を分析する. 一般に, 反復法では収束までの反復回数は問題サイズに比例して増加する. そのため, 可視化対象となるデータのサイズは空間方向, 時間方向それぞれの問題サイズに比例して増加する. しかしながら, 画面上に表示可能なピクセル数には限界があるため, 大規模な問題を表示する際には何らかの情報圧縮が必要となる.

次に残差の値そのものについて考えると, 一般的な傾向としてその絶対値は初期値から始めて指数関数的に減少し, 0 に向かって収束する. そのため, 残差の時間方向の変化を考えるとダイナミックレンジが非常に広いという性質がある. 問題にも依存するが, 同一時刻での変数空間方向で考えても残差は広いダイナミックレンジを有している. 一方, 数値計算に要する時間について考えると, 問題の大規模化に伴い, 1 回の反復に要する時間も増大する. そのためシミュレーションを, 可視化のパラメータを変えて何度もシミュレーションを再実行するという試行実験は困難となる. さらに, 高速化支援のためにはあるステップでの残差が, 次の反復でどのような影響を与えるかを予測するための相互作用に関する視覚的情報提示が必要となる. 物理構造データが既知である場合は物理構造データ上にプロットすればよいが, 未知の場合にも有効な情報提示手段を与える必要がある.

4 高速化支援システムの構築

4.1 残差分布の時系列解析

残差空間を横軸、反復回数を縦軸にとり残差を表示する。前章で検討した要件を考慮して、高速化支援のための視覚的解析ツールを構築した。図5は開発したツールを使って解析を行っている様子である。この際、大規模問題に対応するために残差分布図の縮小や、縮小による情報の見落としを防ぐため拡大図の作成、そして残差拡散傾向をとらえるためのソート図を作成した。図5の左上は残差分布の時間変化を示した図であり、その右側ならびに下側にはこれを補足する情報が提示されている。図5右下では、シミュレーション対象の物体の形状データに残差をマッピングした物である。図5右上には解析支援ならびにシミュレーションステアリングのための制御メニューが表示されている。以下それぞれについて説明する。

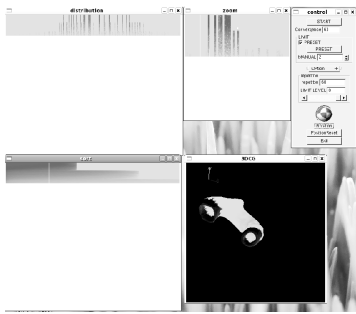


図 5: 実行の様子

4.2 変数空間を考慮した残差の3D表示

タイムステップでの残差分布の情報を解くべき問題の性質を反映して視覚的に提示することで、解析支援を行う。シミュレーション対象の物理構造データが既知の場合、残差の拡散をその物理空間にマッピングして可視化する。具体的にはシミュレーション対象の3DCGモデルを構築し、そこへ残差分布を対応付けることで物理空間における残差の拡散の視認を図る。対応付けの方法として、CGモデルの表面にこれまでと同様に残差の大きさに応じた色付けを行うことで対応つける。面の色の決定は、面を構成する3点の残差で行う。その様子を図6に示す。

一方、物理構造データが未知の時、本研究ではシティマップ [5][6] に基づく可視化手法を実装することとした。シティマップとは反復計算の対象となる方程式における係数行列のうち、非ゼロとなる要素を "点" で表



図 6: 物理モデルへの対応付けの例

現することで係数行列の概形を一目で把握可能にしたもので、行列のおおまかな性質の推定や変数内の関係を参照する際に用いられるデータ構造である(図7)。シティマップに残差をマッピングする際に、問題の大規模化につれ空間的なダイナミックレンジが広くなりマッピングされた点が見にくくなる。そこで2次元のシティマップに高さ方向の次元を追加して、立体的な情報提示を行うことによる強調を行った。いま、各要素毎の高さを $Z_{i,j}$ 、係数行列の各要素を $a_{i,j}$ 、残差の各要素を r_i 、右辺ベクトルの各要素を b_i と定義する。この時高さ方向の情報として提示するデータとしては、現在以下の物を用意している。

- a) 残差そのもの $Z_{i,j} = r_i$, (図8)
- b) 係数を考慮した残差分布 $Z_{i,j} = a_{i,j}r_i$, (図9)
- c) 右辺ベクトルを考慮した表示 $Z_{i,j} = a_{i,j}r_i/b_i$, (図10)

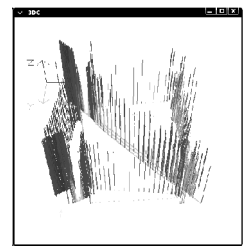
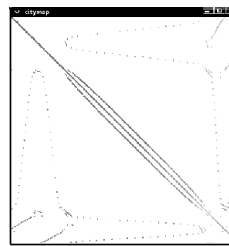


図 7: 2次元残差分布表示 図 8: 3次元残差分布表示

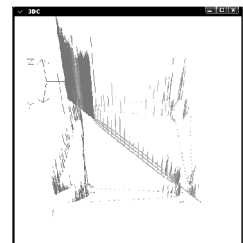
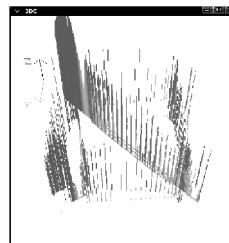


図 9: 係数を考慮した残差分布 $Z_{i,j} = a_{i,j}r_i$ 図 10: 右辺ベクトルを考慮した表示 $Z_{i,j} = a_{i,j}r_i/b_i$

4.3 対話的な解析支援とシミュレーションステアリング機能

同一の残差分布に対しても、前述の通り可視化パラメータ次第では異なる視覚的情報が提示される。そこで、シミュレーション中にも可視化のパラメータを対話的に変更可能とし様々な観点から解析を支援するフレームワークを用意した。前述の高さ方向の次元として提示する情報の変更や3DCGにおける残差分布の任意視点からの解析支援や等がある。特にシティマップ表示では視点を変えることで2次元表示や、単なる残差分布のグラフとして見ることも出来る。さらに、残差の表示方法として一つ前のステップの残差からの増減に応じた相対値表示の機能も用意した。図12は相対値表示の例である。赤は増加、青は減少、白は増減なし(原稿ではグレースケールで代用)で表現している。この図は残差拡散制御を行っている状態の様子であり、拡散制御解除のタイミングを検討する際の支援となる。

シミュレーションステアリング機能としては、現時点では残差拡散の制限域、解除のタイミングを対話的に設定可能とした。制限域の設定法としては、行列データの要素間の隣接関係を表すグラフデータとみなして、第一隣接、第二隣接と順次制限域を解除するツール、ならびに、3DCG表示に対してマウス操作により直感的に領域指定を行い(図11参照)、そこに含まれないノードに対しては残差拡散を行わないツール等を用意した。

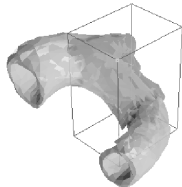


図 11: 制限範囲



図 12: 隣接ステップでの残差の差分表示

残差の表示方法をこれまで用いてきた絶対値と図12に示すような一つ前のステップの残差からの増減に応じた相対値の二つ提供する。図12において、赤は増加、青は減少、白は増減なし(原稿ではグレースケールで代用)で表現している。この図ではある範囲だけで、つまり制限をかけた範囲のみで増減を繰り返してるのがわかる。

5 まとめ

インタラクティブシミュレーションの高速化支援を目的として、反復計算における収束過程の残差分布の可視化を行い視覚的な解析を行った。その結果、不必要な残差拡散が高速化の妨げになっていることを発見し、残差拡散を制限したところ高速化が達成できた。また残差拡散の制限を一般的な問題に適用し有効性を検証した。その結果一般的な問題に対しても概ね有効であることが確認できた。そこで、このような視覚的な解析を支援する可視化ツールの開発を行った。これにより、残差分布の時系列解析ならびに変数間の相互関係を反映した3次元表現による解析支援が可能となった。また、実行中のシミュレーションに対する対話的な残差拡散制御のステアリングも可能となった。また大規模な行列への対応も行い、現時点で150万の行列でもシミュレーション実行中の対話的な可視化解析ならびにシミュレーションのステアリングが可能となった。

6 謝辞

本研究の一部は、日本学術振興会科学研究費補助金(基盤研究(C):22500044)の補助を受けて実施した。

参考文献

- [1] 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講演予稿集, pp.63-66, 2005
- [2] 小寺 晋, 共役勾配法における収束過程の可視化による高速化支援システムの検討. 福井大学情報・メディア工学専攻修士論文. 2008
- [3] 木内 俊介, 反復型数値計算における収束過程の可視化による高速化支援システムの改善. 福井大学情報・メディア工学専攻修士論文. 2009
- [4] 山崎勇輔, 森真一郎: 収束過程の可視化によるアルゴリズム設計支援—インタラクティブシミュレーションの高速化—, 第35回可視化情報シンポジウム 講演論文集, pp.65-66, July 2007.
- [5] MATRIXMARKET <http://math.nist.gov/MatrixMarket/>
- [6] FloridaMatrix <http://www.cise.ufl.edu/research/sparse/matrices/>