

平成 27 年 5 月 27 日現在

機関番号：13901

研究種目：新学術領域研究（研究領域提案型）

研究期間：2010～2014

課題番号：22104004

研究課題名（和文）計算物質科学の基盤となる超大規模系のための高速解法

研究課題名（英文）Fast solution for ultra-large scale systems as a basis of computational materials science

研究代表者

張 紹良（Zhang, Shao-Liang）

名古屋大学・工学（系）研究科（研究院）・教授

研究者番号：20252273

交付決定額（研究期間全体）：（直接経費） 33,500,000 円

研究成果の概要（和文）：物質デザインコンピュータに現れる様々な超大規模系の数理的諸特徴を研究すると同時に、最新の計算機を高度に駆使することが可能な高速解法の総合的開発を目的し、大規模線形方程式の数値解法（Shifted COCR法、the Look-Back GMRES(m)法など）および大規模固有値問題の数値解法（Arnoldi(M,W,G)法、SS法の拡張）の開発を行った。これらは解法によっては高並列化が可能であることや物理問題に特化した解法であることから当初の目的を達成したといえる。

研究成果の概要（英文）：Finding novel complex correlation phenomena and clarifying the non-equilibrium dynamics are of prime importance in the field of materials design. This research group tackles the challenging problems from the viewpoints of numerical linear algebra, optimization and high-performance computing. The major purpose of the researches is to develop robust and efficient numerical algorithms for solving large linear systems and eigenvalue problems in order to shed light on a breakthrough toward the challenging problems. Some of numerical algorithms for solving linear systems we developed are as follows: the shifted COCR method for solving shifted complex symmetric linear systems; the look back GMRES(m) method for nonsymmetric linear systems; a variant of the IDR(s) method for nonsymmetric linear systems. Some of numerical algorithms for solving eigenvalue problems we developed are as follows: the Arnoldi(M,W,G) method; an extension of the SS method;

研究分野：数値解析学

キーワード：計算物理 数理物理 数理工学 シミュレーション工学 応用数学

1. 研究開始当初の背景

本領域は様々な異なる計算手法により複合相関と非平衡ダイナミクスに焦点を当てた物質デザインに挑戦するものであり、その研究過程において数多くの超大規模線形方程式と固有値問題を直面しなければならない。この領域に現れる線形方程式と固有値問題を総合的に研究し、より高効率、よりロバストな解法の系を開発・整備するため、本研究は電子構造計算のために蓄積してきたノウハウが領域内での各研究グループの有機的な結合に活用することにより、統一的な観点からそれらの数理的特徴を捉えたうえ、数理手法重視の高速解法の誕生を目指す。

2. 研究の目的

既知の基礎法則や支配原理から出発して、極めて大きな自由度をもつ自然系や人工物系などの振る舞いを理解・予測するためには、計算機による超大規模科学技術計算が不可欠であり、近年の計算科学分野のめざましい進歩は高速計算機の性能によるものだけでなく、数値解法の驚異的な進歩にもよるものである。物質デザインコンピュティクスでは、数百万規模以上の系が頻繁に現れて、計算時間の大半がそれを解くことに費やされると予想される。この部分の計算効率の向上は物質デザインコンピュティクスの分野においてきわめて重要である。

本研究では、物質デザインコンピュティクスに現れる様々な超大規模系の数理的諸特徴を研究すると同時に、最新の計算機を高度に駆使するための高速解法に対して総合的開発を行うことを目的とする。本研究の目標としては、解きにくい問題を簡単に、計算時間のかかる問題を高速に、計算精度の不十分な問題を高精度に解けるようにすることである。

3. 研究の方法

線形方程式・固有値問題・最適化問題・並列計算の専門家と連携し、物質デザインに現れる超大規模系の問題に対して、直接法と反復法の両面から高性能数値計算法の開発を行う。また、物質デザインに現れる数理的特徴を活かした高速解法の開発を行う。

4. 研究成果

前述の研究方法に基づき、得られた成果を以下に示す。

- ・線形方程式に対する部分空間法の開発・新型前処理の研究(1)

応用分野に頻繁に現れる超大規模線形方程式に対して、クリロフ部分空間法の研究が盛んに行われている。本研究では、主要な

解法の一つである GMRES(m)法に対して、その計算時間を大幅に短縮できる新解法：Look-Back GMRES(m)法を提案し、数理の側面から更なる改良を進めた。解法と併用するための重要な前処理技術においては、近年注目を集めている可変的前処理に着目し、その改良に取り組んだ。本研究の GSOR 法付き可変的前処理は、計算時間はもちろんのこと、その適用範囲において、従来よりも優れた性質を示している。また、東京大学の藤原グループが開発している超大規模電子構造計算プログラムパッケージに対して、その問題に特化した高速解法 Shifted-COCG 法を提案し、応用分野への高速解法の適用し有用性を検証した。

- ・線形方程式に対する部分空間法の開発・新型前処理の研究(2)

近年、注目を集めている Induced Dimension Reduction (s) method (帰納的次元縮小(s)法, IDR(s)法)の長所と応用問題分野で従来から利用されてきた積型解法(とくに一般化積型解法, GPBiCG 法)の長所を結びつけ、高速、かつロバストなアルゴリズムを開発した。具体的にはまず、GPBiCG 法の安定化多項式の係数の新たな計算方法を提案し、従来よりも高速、かつ精度の良い近似解を得ることができる GPBiCG 法の改良アルゴリズムを開発した。また、IDR(s)法を導出する際に用いられる BiCG 法の漸化式を用いて、従来よりもロバストな積型解法のアルゴリズムを提案した。さらに、IDRstab 法 (IDR(s)法に高次の安定化多項式を導入した解法)のアルゴリズムでは AXPY 計算(ベクトルのスカラー倍またはベクトルとベクトルとの和の計算)が多いため、APXY を削減して計算時間を短縮する IDRstab 法の改良版を提案した。

IDRstab 法で生成されるベクトルと Krylov 部分空間の基底との関係を考察することによって、IDRstab 法に Quasi-Minimal Residual (疑似最小残差, QMR) スムージングを用いたアルゴリズムを提案した。数値実験では、QMR スムージングを用いた IDRstab 法の残差ノルムは滑らかに収束し、さらに近似解の精度が改善されることを示した。

- ・固有値問題に対する直接法と部分空間法の開発(1)

工学における科学技術計算では、大規模行列の固有値問題が様々な応用分野に頻繁に現れ、計算時間の大半が固有値問題を解くことに費やされるという事実がある。大規模固有値問題を高速かつ高精度に解くことは、計算科学の分野において極めて重要である。

固有値問題は、複素平面上に分布した膨大な数の点（固有値）の中から、工学上重要な固有値だけを選別して求める問題である。必要な固有値は工学問題によって異なるため、様々な固有値のニーズに対応した数値解法が求められている。

近年、フォトニクス結晶の応用が盛んに行われており、電子の代わりに光を利用した集積回路が注目を集めている。このような次世代集積回路の設計においては、従来と異なる固有値のニーズが生じている。そのため、既存解法の効率的な適用は困難であり、新たな高速解法の開発が望まれている。本研究班は、新しい固有値のニーズに対して、数理的な側面から高速解法の研究開発を行っている。

本研究では、必要なすべての固有値を確実かつ高速に計算することを目指し、数値解法を開発を行っている。具体的には、単位円の内部と外部にそれぞれ円を設置し、二つの円で囲まれた多重連結領域を設定する。この領域は単位円を含んでいるため、必要な固有値もすべて領域内部に含まれている。そのため、固有値のニーズは「指定された多重連結領域内部のすべての固有値」として捉えることが可能となる。次に、多重連結領域内部のすべての固有値を求めるため、既存の解法（Sakurai-Sugiura 法）を拡張した。

- ・固有値問題に対する直接法と部分空間法
の開発（2）

電子構造計算に現れる超大規模固有値問題に対しては、反復法の開発に取り組んでいる。反復法は、低次元の部分空間で解を近似し、その近似精度を反復的に改善する方法である。従来、反復法の一つである Arnoldi 法（対称行列に対しては、Lanczos 法）が用いられてきた。しかし、これらの解法は行列の分解を要するため、超大規模問題に対する適用は、実際上困難である。

本研究は、Arnoldi 法や Lanczos 法を含み、より一般化した枠組み：Arnoldi(M, W, G)法を提案した。本枠組みにおいて、3つの行列パラメータ M, W, G の設定により、様々な反復法の導出が可能である。本枠組みから実際に導出した解法の一例は、従来法よりも少ない計算時間で固有値を得ることができた。

- ・固有値問題に対する直接法と部分空間法
の開発（3）

対称密行列固有値問題は様々な科学技術計算で重要な役割を果たす線形計算であり、ScaLAPACK をはじめとして様々な超並列向けライブラリが開発されている。しかし、そのほとんどは超大規模問題をターゲット

としており、計算機のメモリを一杯に使うサイズの行列でないと計算機の性能を引き出せない。一方、第一分子動力学計算などでは、行列は1万元程度と比較的小規模だが、時間発展などの繰り返し計算を数万回にわたって行うタイプの問題も存在する。このような問題を高速化するには、多数のコアを活用して小規模問題を超高速に解けるソルバが必要である。しかし、3重対角化に基づく標準的な解法では、細粒度の通信が多数発生し、小規模問題ではスケールビリティが大きく悪化する。

そこで本研究では、ブロックヤコビ法に基づく超並列固有値ソルバを開発した。ブロックヤコビ法は、3重対角化に基づく方法に比べ、計算量は数倍多いものの、通信が大粒度であり、演算パターンが単純であるという特徴を持つ。ブロックヤコビ法の並列化に当たり、本研究では、従来の1次元分割に代えて、2次元分割を新たに採用した。これにより、負荷の均等性は低下するものの、通信量については大幅に削減できる。

本手法を MPI を用いて実装し、「京」上で性能評価を行った結果、1万元の問題に対して1万コアまで順調な加速が見られた。1万コア使用時の全固有値・固有ベクトル計算の時間は16.5秒であった。一方、ScaLAPACK では、1000 コアを越えると加速率の頭打ち、さらには低下が見られた。これにより、ブロックヤコビ法の良好なスケールビリティを確認した。

5. 主な発表論文等

（研究代表者、研究分担者及び連携研究者には下線）

〔雑誌論文〕(計 38 件)

S. Araki, K. Kimura, Y. Yamamoto and Y. Nakamura, Implementation details of an extended oqds algorithm for singular values, JSIAM Letters, 査読有, Vol.7, 2015, pp.9-12

L. Du, T. Sogabe and S.-L. Zhang, IDR(s) for solving shifted nonsymmetric linear systems, Journal of Computational and Applied Mathematics, 査読有, Vol.274, 2015, pp.35-43,

DOI:10.1016/j.cam.2014.07.004

Y. Yamamoto, L. Zhang and S. Kudo, Convergence analysis of the parallel

classical block Jacobi method for the symmetric eigenvalue problem , JSIAM Letters , 査読有 , Vol.6 , 2014 , pp.57-60

L. Du, T. Sogabe and S.-L. Zhang , An algorithm for solving nonsymmetric penta-diagonal Toeplitz linear systems , Applied Mathematics and Computation , 査読有 , Vol.244 , 2014 , pp.10-15 , DOI: 10.1016/j.amc.2014.06.104

S. Imahori, Y. Chien, Y. Tanaka and M. Yagiura , Enumerating Bottom-Left Stable Positions for Rectangle Placements with Overlap , Journal of the Operations Research Society of Japan , 査読有 , Vol.57 , 2014 , T. Miyata, S. Honda, R. Naito and S.-L. Zhang , A numerical approach to surface Green's functions via generalized eigenvalue problems , Japan Journal of Industrial and Applied Mathematics , 査読有 , Vol.30 , 2013 , pp.653-660 ,

DOI:10.1007/s13160-013-0116-2
D. Lee, T. Miyata, T. Sogabe, T. Hoshi and S.-L. Zhang , An interior eigenvalue problem from electronic structure calculations , Japan Journal of Industrial and Applied Mathematics , 査読有 , Vol.30 , 2013 , pp.625-633 ,

DOI:10.1007/s13160-013-0118-0
A. Imakura, T. Sogabe and S.-L. Zhang , An Efficient Variant of the Restarted Shifted GMRES Method for Solving Shifted Linear Systems , Journal of Mathematical Research with Applications , 査読有 , Vol.33 , 2013 , PP.127-141

A. Fukuda, Y. Yamamoto, M. Iwasaki, E. Ishiwata and Y. Nakamura , On a shifted LR transformation derived from the discrete hungry Toda equation , Monatshefte für Mathematik , 査読有 , Vol.170 , 2013 , pp.11-26 ,

DOI:10.1007/s00605-012-0404-y

A. Fukuda, E. Ishiwata, Y. Yamamoto, M. Iwasaki and Y. Nakamura , Integrable Discrete Hungry Systems and Their Related Matrix Eigenvalues , Annali di Matematica Pura ed Applicata , 査読有 , Vol.192 , 2013 , PP.423-445 ,

DOI:10.1007/s10231-011-0231-0

福田 亜希子, 岩崎 雅史, 山本 有作, 石渡 恵美子, 中村 佳正, ハングリー型の離散可積分系と非対称行列の固有値計算: 可積分アルゴリズムにおける最近の発展 , 日本応用数理学会論文誌 , 査読有 , Vol.23 , 2013 , pp.109-181

Y. Hu, H. Hashimoto, S. Imahori and M. Yagiura , Efficient Construction Heuristic Algorithms for the Rectilinear Block Packing Problem , Proceedings of the International Symposium on Scheduling 2013 , 査読有 , 2013 , pp.80-85

J. Jia, T. Sogabe, and M.E.A. El-Mikkawy , Inversion of k-tridiagonal matrices with Toeplitz structure , Comput. Math. Appl. , 査読有 , Vol.65 , 2013 , pp.116-125 ,

DOI:10.1016/j.camwa.2012.11.001

K. Abe and G. Sleijpen , Solving linear equations with a stabilized GPBiCG method , Applied Numerical Mathematics , 査読有 , Vol.67 , 2013 ,

- pp.4-16 ,
DOI:10.1016/j.apnum.2011.06.010
A. Imakura, T. Sogabe and S.-L. Zhang ,
An Efficient Variant of the GMRES(m)
Method Based on the Error Equations ,
East Asian Journal on Applied
Mathematics , 査読有 , Vol.2 , 2012 ,
pp.19-32 ,
DOI:10.4208/eajam.280611.030911a
D. Mori, Y. Yamamoto and S.-L. Zhang ,
Backward error analysis of the
AllReduce algorithm for householder
QR decomposition , Japan Journal of
Industrial and Applied Mathematics ,
査読有 , Vol.29 , 2012 , pp.119-130 ,
DOI:10.1007/s13160-011-0053-x
今倉 暁, 曾我部 知広, 張紹良 , 非対称
線形方程式のためのLook-Back
GMRES(m)法 , 日本応用数理学会論文誌 ,
査読有 , Vol.22-1 , 2012 , pp.1-22
T. Hoshi, S. Yamamoto, T. Fujiwara,
T. Sogabe and S.-L. Zhang , An order-n
electronic structure theory with
generalized eigenvalue equations
and its application to a
ten-million-atom system , J. Phys.:
Condens. Matter , Vol.24 , 2012 ,
pp.165502 ,
DOI:10.1088/0953-8984/24/16/165502
K. Abe and G. Sleijpen , Hybrid Bi-CG
methods with a Bi-CG formulation
closer to the IDR approach , Applied
Mathematics and Computation , 査読有 ,
Vol.208-22 , 2012 , pp. 10889-10899 ,
DOI: 10.1016/j.amc.2012.04.049
A. Fukuda, Y. Yamamoto, M. Iwasaki,
E. Ishiwata and Y. Nakamura , Error
analysis for matrix eigenvalue
algorithm based on the discrete
hungry Toda equation , Numerical
Algorithms , 査読有 , Vol.61 , 2012 ,
pp.243-260 ,
DOI:10.1007/s11075-012-9606-6
- 21 Y. Hama, A. Fukuda, Y. Yamamoto, M.
Iwasaki, E. Ishiwata and Y. Nakamura ,
On Some Properties of Discrete
Integrable System Derived from
Hungry Lotka-Volterra System of
Multiplicative Type , Journal of
Math-for-Industry , 査読有 , Vol.4 ,
2012 , pp.5-15
- 22 廣田悠輔, 橋本拓也, 山本有作 , 倍精
度正方形行列特異値分解アルゴリズムの
GPGPU上での性能・精度評価, 情報処理
学会論文誌コンピューティングシステ
ム(ACS) , 査読有 , Vol.5 , 2012 , 163-176
- 23 廣田悠輔, 山本有作 , 張紹良 , 非直交
同時対角化アルゴリズムのハイブリッ
ド解法 , 非直交同時対角化アルゴリズ
ムのハイブリッド解法 , 査読有 , Vol.22 ,
2012 , pp.63-79
- 24 S. Imahori and S. Sakai , A
Local-Search Based Algorithm for the
Escherization Problem , The IEEE
International Conference on
Industrial Engineering and
Engineering Management , 査読有 ,
Vol.1 , 2012 , pp.151-155
- 25 T. Sogabe, T. Hoshi, S.-L. Zhang and
T. Fujiwara , Solution of generalized
shifted linear systems with complex
symmetric matrices , Journal of
Computational Physics , 査読有 ,
Vol.231 , 2012 , pp. 5669-5684 , DOI:
10.1016/j.jcp.2012.04.046
- 26 D. Mori, Y. Yamamoto and S.-L. Zhang ,
Backward error analysis of the
AllReduce algorithm for householder
QR decomposition , Japan Journal of

- Industrial and Applied Mathematics ,
査読有 , Vol.29 , 2012 , pp.111-130
- 27 S. Imahori, Y. Miyamoto, H.
Hashimoto, Y. Kobayashi, M. Sasaki
and M. Yagiura , The Complexity of the
Node Capacitated In-Tree Packing
Problem , Networks , 査読有 , Vol.59 ,
2012 , pp.13-21
- 28 Y. Tanaka, S. Imahori , M. Sasaki and
M. Yagiura , An LP-Based Heuristic
Algorithm for the Node Capacitated
In-Tree Packing Problem , Computers &
Operations Research , 査読有 , Vol.39 ,
2012 , pp. 637-646
- 29 K. Aihara, K. Abe, E. Ishiwata , An
alternative implementation of the
IDRstab method saving vector updates ,
JSIAM Letters , 査読有 , Vol.3 , 2011 ,
pp. 69-72
- 30 山下達也 , 宮田考史 , 曾我部知広 , 星
健夫 , 藤原毅夫 , 張紹良 , 一般化固有
値問題に対するArnoldi(M, W, G)法 ,
日本応用数理学会論文誌 , 査読有 ,
Vol.21 , 2011 , pp. 241-254

その他 : 8 編

招待講演 : 1 8 件

6 . 研究組織

(1)研究代表者

張紹良 (ZHANG , Shao-Liang)
名古屋大学・大学院工学研究科・教授
研究者番号 : 2 0 2 5 2 2 7 3

(2)研究分担者

阿部 邦美 (ABE , Kuniyoshi)
岐阜聖徳学園大学・経済情報学部・教授
研究者番号 : 1 0 3 1 1 0 8 6

(3)研究分担者

山本 有作 (YAMAMOTO , Yusaku)
電気通信大学・情報理工学研究科・教授
研究者番号 : 2 0 3 6 2 2 8 8

(4)研究分担者

曾我部 知広 (SOGABE , Tomohiro)
愛知県立大学・情報科学部・准教授
研究者番号 : 3 0 4 2 0 3 6 8

(5)研究分担者

今堀 慎治 (IMAHORI , Shinji)
名古屋大学・大学院工学研究科・准教授
研究者番号 : 9 0 3 9 6 7 8 9

(6)研究分担者

宮田 考史 (MIYATA , Takahumi)
名古屋大学・大学院工学研究科・助教
研究者番号 : 9 0 5 8 1 6 4 5

(7)連携研究者

杉原 正顯 (SUGIHARA , Masaaki)
青山学院大学・理工学部・教授
研究者番号 : 8 0 1 5 4 4 8 3