2版

様　式　Ｃ－１９、Ｆ－１９－１、Ｚ－１９　（共通）

科学研究費助成事業　　研究成果報告書

平成 ２９ 年　 ６ 月 １９ 日現在

機関番号：１２１０２

研究種目：若手研究(B)

研究期間：2015～2016

課題番号：１５Ｋ１５９９６

研究課題名（和文）複数右辺ベクトルをもつ連立一次方程式に対する高精度・高効率アルゴリズムの開発

研究課題名（英文）Development of high accuracy and high performance algorithms for linear systems with multiple right-hand sides

研究代表者

多田野　寛人（Tadano, Hiroto）

筑波大学・計算科学研究センター・助教

研究者番号：５０５０７８４５

交付決定額（研究期間全体）：（直接経費）　　2,000,000円

研究成果の概要（和文）：本研究課題では，複数本の右辺ベクトル，及び係数行列の対角部分にシフトパラメータをもつ連立一次方程式（以下，シフトブロック連立一次方程式）の近似解を，高精度かつ効率良く求めるための数値解法について研究を行った．複数右辺ベクトル用の反復法であるブロッククリロフ部分空間反復法を，シフトブロック連立一次方程式用に拡張したシフトブロッククリロフ部分空間反復法を構築し，その数値的性能の検証を行った．その結果，単純な拡張では生成される近似解の精度が劣化することが明らかになった．本研究では，近似解の精度劣化を抑える手法を構築し，高精度近似解を生成することが可能となった．

研究成果の概要（英文）：In this project, we studied high accurate and high performance numerical methods for solving linear systems with multiple right-hand sides and multiple shifts. We extended Block Krylov subspace methods to Shifted Block Krylov subspace methods, and evaluated the performance of the developed methods. Through the numerical experiments, we found that the accuracy of the approximate solutions generated by the naive extension of Block Krylov subspace methods may degrade. In this project, we developed Shifted Block subspace methods which can generate high accurate approximate solutions.

研究分野：数値解析

キーワード：連立一次方程式　複数シフト・複数右辺ベクトル　シフトブロッククリロフ部分空間法

１．研究開始当初の背景

近年，様々な応用分野において数値シミュレーションが盛んに行われるようになってきた．数値シミュレーションの過程において大規模な連立一次方程式が現れることが多く，その求解に多くの計算時間が費やされている．

素粒子物理学分野の格子量子色力学（Quantum Chromodynamics: QCD）計算や疎行列向け固有値解法などにおいて，複数本の右辺ベクトルをもつ連立一次方程式が現れる．また，これらの連立一次方程式の係数行列の対角部分にはシフトパラメータが含まれており，複数のシフトパラメータに対して連立一次方程式を解く必要がある．これらの連立一次方程式の求解時間は数値シミュレーションの計算時間の大部分を占めること，及び得られる近似解の精度はシミュレーションの質に大きな影響を及ぼすことから，高速かつ高精度近似解を生成できる手法の開発が必要となっている．

２．研究の目的

上述のように，複数右辺ベクトル，及び複数シフトパラメータをもつ連立一次方程式を高速に，かつ高精度な近似解を生成できる数値解法が必要とされている．本研究課題では，このような連立一次方程式の数値解法であるシフトブロッククリロフ部分空間反復法に着目し，高速かつ高精度近似解を生成できる手法の開発を目的とする．

３．研究の方法

(1) シフトブロッククリロフ部分空間反復法の構築

本研究課題では，まずブロッククリロフ部分空間のシフト不変性に基づくシフトブロッククリロフ部分空間反復法の構築を行う．ブロッククリロフ部分空間のシフト不変性とは，シフトパラメータが異なっても生成されるブロッククリロフ部分空間は同一であるという性質を指す．この性質を利用することで，メインとなる連立一次方程式（以下，シード方程式）をブロッククリロフ部分空間反復法で解く過程で，他のシフトパラメータをもつ連立一次方程式（以下，シフト方程式）の近似解を係数行列・ベクトル積計算を行うことなく更新することができる．研究代表者がこれまでに構築してきたブロッククリロフ部分空間反復法を，シフト不変性を用いることでシフトブロッククリロフ部分空間反復法に拡張する．

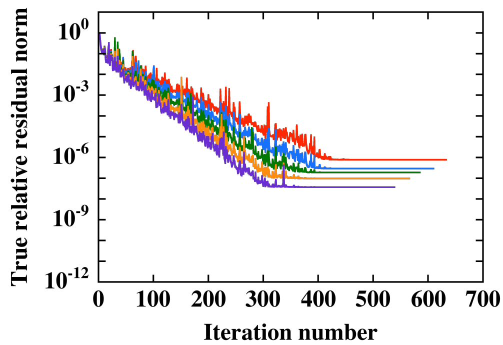
(2) シフト方程式の近似解精度向上手法の開発

シフトブロッククリロフ部分空間反復法により，シフト方程式の近似解は少ない計算量で更新することが可能となるが，得られる近似解の精度は要求精度に達していないことがある．シフト方程式の近似解は，係数行列・ベクトル積の計算を行うことなく更新できるが，縦長行列と小行列の積計算を多用するため，その計算過程で誤差が混入する可能性がある．本研究課題では，縦長行列と小行列の積計算を可能な限り回避するアルゴリズムを構築することで，シフト方程式の近似解への誤差混入の抑制を図る．

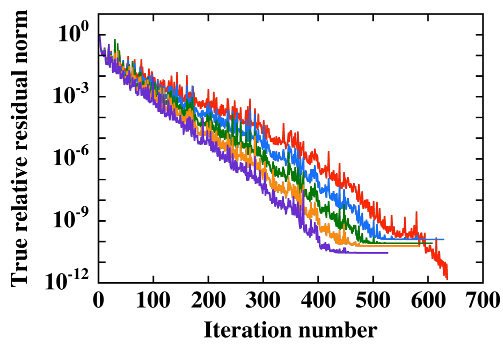
４．研究成果

(1) シフトブロッククリロフ部分空間反復法におけるシフト方程式の近似解精度

複数右辺ベクトル用の解法である Block BiCGGR 法を拡張して構築した Shifted Block BiCGGR 法の性能を示す．テスト問題として，素粒子物理学分野の格子量子色力学計算で現れる連立一次方程式（行列サイズ：1,572,864，非零要素数：80,216,064）を用いた．右辺ベクトル数は 12 とし，係数行列のシフトパラメータ σ は 0.000，0.002，0.004，0.006，及び 0.008 の 5 つを用いた．図 1 にシフト方程式に対する Shifted Block BiCGGR 法の真の相対残差を示す．真の相対残差は近似解の精度の指標であり，この値が小さければ高精度の近似解が得られていることを示している．Block BiCGGR 法を単純に拡張した手法（以下，従来版）の場合は，真の相対残差が 10^{-7} 付近で停滞しており，高精度

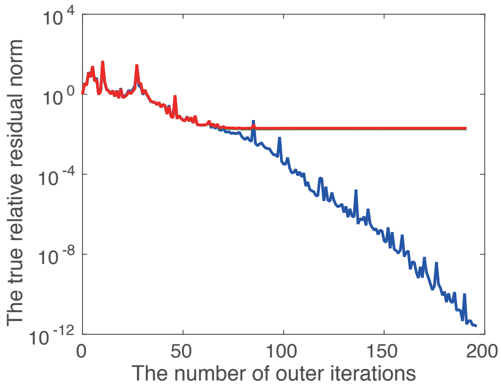


(a)　従来版

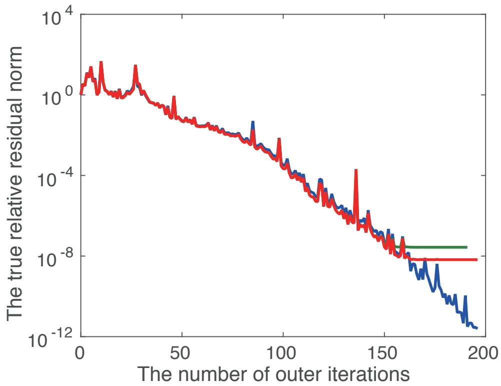


(b) 改良版

図 1　シフト方程式に対する Shifted Block BiCGGR 法の真の相対残差．■：σ = 0.000，■：σ = 0.002，■：σ = 0.004，■：σ =0.006，■：σ = 0.008.



(a)　従来版



(b)　改良版

図 2　Shifted Block BiCGSTAB(ℓ)法の真の相対残差．■：シード方程式，■：シフト方程式（倍精度計算），■：シフト方程式（一部擬似 4 倍精度利用）．

の近似解は得られていない．一方，縦長行列と小行列の積計算を可能な限り回避した改良版では，全体的に真の相対残差が小さくなっており，高精度近似解が得られている．

次に，Block BiCGSTAB(ℓ)法を拡張して構築した Shifted Block BiCGSTAB(ℓ)法の性能を示す．テスト問題として，The University of Florida Sparse Matrix Collection の行列 Coupled（行列サイズ：11,341，非零要素数：97,193）を用いる．右辺ベクトル数は 16，係数行列のシフトパラメータ σ は 0.001 とし，解法のパラメータ ℓ は 2 とした．従来版，及び改良版の両方において，シード方程式の真の相対残差は十分に小さくなっている．従来版におけるシフト方程式の真の相対残差は，倍精度計算，一部 4 倍精度利用計算の両方とも 10^{-2} 付近で停滞しており，低精度の近似解しか得られていないことがわかる．一方，改良版を用いることでシフト方程式の真の相対残差は 10^{-7} 付近まで減少し，一部擬似 4 倍精度計算を用いることで 10^{-8} 付近まで減少した．

(2)　シフト方程式の近似解精度劣化の数値的な原因解析

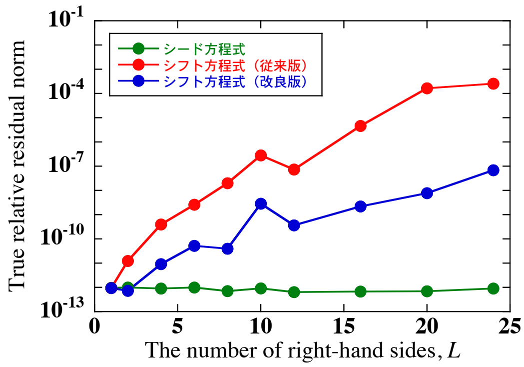
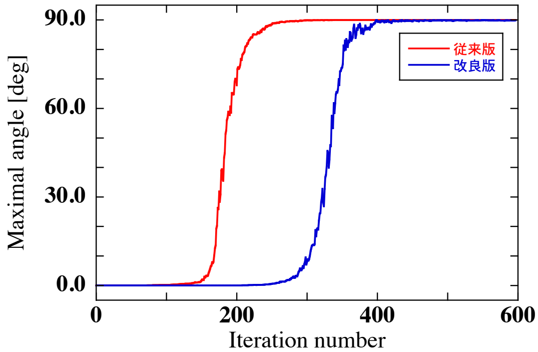


図 3　右辺ベクトル数の変化に対する真の相対残差の変化．

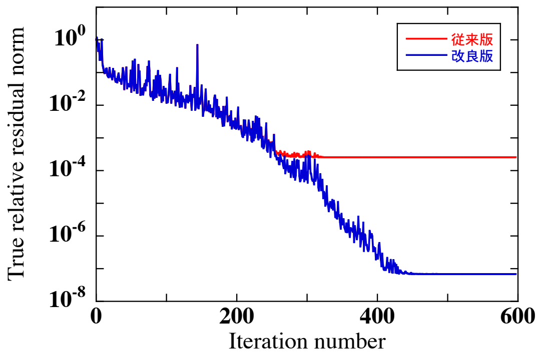
Shifted Block BiCGGR 法によって生成されるシフト方程式の精度劣化の原因を数値的に解析する．シフトブロッククリロフ部分空間反復法では，シード方程式の残差行列とシフト方程式の残差行列が同一のブロッククリロフ部分空間に属することを前提条件として，解法が構築されている．ここでは，シード方程式の残差が属する部分空間と，シフト方程式の残差が属する部分空間を，最大正準角と呼ばれる指標を用いて比較を行い，近似解の精度劣化との関連性を調べた．最大正準角は 2 つの空間を比較する際に用いられる手法であり，最大正準角が 0° であれば 2 つの空間は等しいことを示す．

テスト問題として，格子量子色力学計算で現れる連立一次方程式（行列サイズ：1,572,864，非零要素数：80,216,064）を用い，シフトパラメータ σ は 10^{-4} とした．図 3 に右辺ベクトル数を変化させたときのシード方程式，シフト方程式の真の相対残差を示す．シード方程式の真の相対残差は右辺ベクトル数によらず十分に小さくなっている．一方，シフト方程式の真の相対残差は右辺ベクトル数が増加するに従って大きくなっている．また，改良版を用いることで高精度の近似解が得られていることがわかる．

図 4 に，右辺ベクトル数が 24 本の場合の最大正準角の変化，及び真の相対残差の変化を示す．図 4(a)より，従来版を用いた場合は 150 回目付近の反復から最大正準角が大きくなり，その後 90° に収束した．一方，改良版を用いた場合は 300 回目付近の反復から最大正準角が増大した．図 4(b)に示すように，真の相対残差は最大正準角が 90° に達するまでは減少しており，最大正準角の増加が遅い改良版では，真の相対残差はより小さな値に到達できている．このことから，シード方程式とシフト方程式の残差行列が同じ部分空間に属するという条件が崩れると，近似解精度が悪化することがわかった．2 つの部分空間の最大正準角の増加を抑える手法を構築



(a)　２つの部分空間が成す最大正準角変化



(b)　真の相対残差の変化

図４　右辺ベクトル数が 24 の場合の最大正準角と真の相対残差の変化.

できれば，更なる近似解精度向上が可能であると考えられる.

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３件）

① Lijiong Su, Akira Imakura, Hiroto Tadano, Tetsuya Sakurai, Improving the convergence behavior of BiCGSTAB by applying D-norm minimization, JSIAM Letters, Vol. 7, pp. 37-40, 2015. DOI: 10.14495/jsiaml.7.37

② 齋藤 周作, 多田野 寛人, 今倉 暁, Shifted Block BiCGSTAB(ℓ)法の構築とその高精度化, 日本応用数理学会論文誌, Vol. 26, No. 3, pp. 318-352, 2016. DOI: 10.11540/jsiamt.26.3_318

③ Hiroto Tadano, Shusaku Saito, Akira Imakura, Accuracy improvement of the Shifted Block BiCGGR method for linear systems with multiple shifts and right-hand sides, Proc. International Workshop on Eigenvalue Problems: Algorithms; Software and Applications, in Petascale Computing (EPASA2015). (in print)

〔学会発表〕（計５件）

① 齋藤 周作, 多田野 寛人, 今倉 暁, Shifted Block BiCGSTAB(ℓ)法の構築とその近似解の精度について, 第 44 回数値解析シンポジウム(NAS2015), 2015 年 6 月 8 日, ぶどうの丘（山梨県甲府市).

② Hiroto Tadano, Shusaku Saito, Akira Imakura, Accuracy improvement of the Shifted Block BiCGGR method for linear systems with shifts and multiple right-hand sides, International Workshop on Eigenvalue Problems: Algorithms; Software and Applications, in Petascale Computing (EPASA2015), 2015 年 9 月 15 日, つくば国際会議場（茨城県つくば市）.

③ 多田野 寛人, 齋藤 周作, 今倉 暁, 複数右辺ベクトル・複数シフトをもつ線形方程式に対する Shifted Block Krylov 部分空間反復法の近似解の精度改善, 【プラズマ壁相互作用における非線形現象の理論モデル構築と画像・動画解析手法開発に関する研究会】＆【プラズマ工学・電磁界解析とその数値解析手法およびビジュアライゼーションに関する研究会】合同研究会, 2015 年 9 月 29 日, 自然科学研究機構 核融合科学研究所（岐阜県土岐市）.

④ Hiroto Tadano, Shusaku Saito, Akira Imakura, Development of the Shifted Block BiCGGR method and accuracy improvement of approximate solutions, International Conference on Simulation and Technology (JSST2015), 2015 年 10 月 13 日, 富山国際会議場（富山県富山市）.

⑤ Hiroto Tadano, Numerical investigation of the cause of accuracy degradation of approximate solutions generated by Shifted Block Krylov subspace methods, The 1st Japan-Thailand Workshop on Numerical and Experimental Approaches to Nonlinear Problems, 2016 年 12 月 9 日, King Mongkut's Institute of Technology Ladkrabang, Bangkok, Thailand.

６．研究組織

(1)研究代表者

多田野 寛人（TADANO, Hiroto）

筑波大学・計算科学研究センター・助教

研究者番号：50507845