

令和 4 年 6 月 26 日現在

機関番号：37112

研究種目：基盤研究(C)（一般）

研究期間：2018～2021

課題番号：18K11343

研究課題名（和文）固有値問題の高速高精度解法の研究

研究課題名（英文）Fast and accurate algorithms for solving eigenvalue problems

研究代表者

宮田 考史（Miyata, Takafumi）

福岡工業大学・情報工学部・准教授

研究者番号：90581645

交付決定額（研究期間全体）：（直接経費） 3,300,000円

研究成果の概要（和文）：本研究は、固有値問題を解くためのアルゴリズムの研究を行った。
（1）ネットワーク解析に現れる大規模固有値問題を対象に、高速アルゴリズムの開発を行った。並列計算機上で数値実験を行った結果、提案法は高速に精度の良い解が得られた。（2）既存の有力な固有値計算アルゴリズムに対して、その収束特性を解析した。本解析の結果、アルゴリズムの高速性が発揮される条件を明らかにし、アルゴリズムの適切な使用法を示すことができた。（3）大規模な一般化エルミート固有値問題を解くための反復アルゴリズムの開発に取り組んだ。数値実験の結果、既存のアルゴリズムよりも提案法は速い収束性を示し、高速に解を得ることができた。

研究成果の学術的意義や社会的意義

固有値問題は応用分野に応じて多様な形式を有する複合的な工学問題であり、電子状態計算や構造解析、安定性解析など、様々な応用分野に現れる。特に近年の計算機の発達に伴って、扱う問題規模や複雑さが著しく増加しており、より速く、より正確に問題を解けるような高速高精度アルゴリズムの開発が求められる。本研究は応用分野に現れる固有値問題を解くため、高速高精度アルゴリズムの研究に取り組んだ。本研究で開発を行ったアルゴリズムに関する研究は、応用諸分野に役立てるための基盤であり、今後益々発展に取り組む必要がある。

研究成果の概要（英文）：We study numerical algorithms for solving eigenvalue problems.

(1) Large-scale eigenvalue problems arise in network analysis and are needed to be solved. We develop a fast algorithm for solving the problems. Numerical results on a parallel computer show that our algorithm can compute solutions of the problems faster compared to the existing algorithms.
(2) We analyze the convergence property of the existing fast algorithm for solving eigenvalue problems. Our analysis clarifies the point that the algorithm is specialized for computing particular solutions of the problems. This result suggests that the algorithm and the other existing algorithms should be selectively used depending on target solutions.
(3) We develop an iterative algorithms for solving large-scale generalized Hermitian eigenvalue problems. Our algorithm shows the faster convergence than the existing algorithms and thus requires lesser computational time.

研究分野：計算科学

キーワード：高速高精度アルゴリズム 固有値問題 並列計算

様式 C - 19、F - 19 - 1、Z - 19 (共通)

1. 研究開始当初の背景

複雑な現実問題を解く手段として、計算機を用いたシミュレーションが活発に行われている。計算機を用いてシミュレーションを行い、問題を数値的に解くためには、アルゴリズムが必要不可欠である。特に現実に現れる問題は扱う変数の数が多いため、より速く、より正確な近似解を計算可能な高速高精度アルゴリズムが求められる。

本研究は、計算科学の多様な応用分野に現れる固有値問題に対して、高速高精度アルゴリズムの研究を行った。

2. 研究の目的

本研究は以下の3つの目的に対してアルゴリズムの研究に取り組んだ。

(1) ネットワーク解析等に現れる特殊な固有値問題を解くためのアルゴリズムの開発を行う。本問題は変数の数が億を超える大規模問題のため、高速アルゴリズムの開発を行う。また、本研究のアルゴリズムに対して、並列計算機向けの実装も検討する。

(2) 固有値問題のアルゴリズムは様々な種類が提案されているが、その中でも高速な反復アルゴリズムに着目し、その収束特性に対する理論解析を行った。本アルゴリズムの有用性は、従来、数値実験によって確認されているが、その理論的な背景には不明な点が残る。なお、本アルゴリズムを用いて予備的な数値実験を行った結果、高速に問題を解ける場合もあったが、収束しない場合も確認された。問題によって、アルゴリズムの収束性に大きな違いが生じる理由を明らかにする。

(3) 電子状態計算等に現れる大規模な一般化エルミート固有値問題を解くためのアルゴリズムの研究を行う。本問題の特徴であるエルミート行列の性質を利用することで、高速高精度なアルゴリズムの開発に取り組む。

3. 研究の方法

上記の3つの目的を達成するため、それぞれ以下の方法を用いた。

(1) 本問題で計算が必要な解は少数のため、不要な解の計算を避け、必要な解のみを選択的に計算可能なアルゴリズムが有用である。そのため、射影法に基づく反復アルゴリズムの開発に取り組んだ。

反復アルゴリズムは、一定の計算を行う度に近似解を計算し、反復を繰り返すことで、より精度の良い近似解へと近づける。この際、近似解を計算するための部分空間が必要である。

本研究では、近似解の収束を速めるために部分空間の構築を工夫した。具体的には、反復毎に近似解を改良するための情報を既存のアルゴリズムよりも多く利用したうえで部分空間を構築し、その中で近似解を計算した。本手法により、既存のアルゴリズムよりも正確な近似解の計算が可能となり、その結果、少ない反復回数で精度の良い近似解へ収束可能な高速アルゴリズムを導出した。

本問題は大規模なため、メモリ使用量の制限が実用上必要となる。従来、部分空間の大きさに上限を設定する手法が用いられる。これは、上限に達した段階で部分空間を縮小し、新たに部分空間を構築し、反復毎に拡大しながら、新しい近似解を計算する。ただし、本手法は部分空間の情報を一部削減するため、収束が遅くなる場合が多い。本研究では、部分空間の情報を削減した後、メモリ使用量を増加させずに収束を速めるため、独自の計算を行った。

以上の手順で本研究の高速アルゴリズムを開発した後、さらに高速なアルゴリズムへ発展させるため、並列計算機向けの実装を行った。具体的には、本問題の特徴であるネットワークのリンク構造を活用し、一反復あたりの計算量が各演算コアで均等に近くなるようにアルゴリズムを修正した。本手法により、各演算コアの待ち時間を減らすことで、並列計算機の性能を一層引き出すことが可能となった。

(2) 既存の有力なアルゴリズムを数学上同値な別のアルゴリズムへと変形した。変形後のアルゴリズムは、収束を速めるための近似固有値計算を含む。この近似値に着目することで、アルゴリズムの収束特性を明らかにした。

アルゴリズムの変形を行うための準備として、部分空間の性質に対する考察を行った。その結果、射影された部分空間がある種の不変性の性質を有することを示した。本性質を用いることで、既存のアルゴリズムを上記のように別の形へと変形した。これは、従来のアルゴリズムが陰的に行っていた計算を、収束を速めるための近似固有値計算、という形で陽的に示したことに対応する。また、設定された値は、特定の固有値に対する近似値であることを示した。本解析の結果、既存のアルゴリズムは特定の固有値計算に特化したアルゴリズムであることを明らかにした。

(3)一般化エルミート固有値問題を高速高精度に解くため、射影法に基づく反復アルゴリズムの開発を行った。具体的には、修正量と呼ばれる計算手法に基づく反復アルゴリズムの研究を行った。本アルゴリズムは、近似解を反復毎に計算し、精度の良い解へ収束させる。この際、近似解を厳密解へ修正するための成分である修正量を計算するが、この修正量の計算法がアルゴリズムの速さに影響を及ぼす。

本研究では、修正量を高速に求めるため、重み付きノルムの下で修正量を計算することを考え、そのような修正量を解にもつ方程式を導出した。また、本修正方程式に対する近似計算手法を考案することで、独自の高速アルゴリズムを開発した。

以上の手順で本研究の高速アルゴリズムを開発したうえで、特に入力行列が特定の条件を満たす場合は、さらにアルゴリズムの計算量を減らすことが可能であることを示した。

4. 研究成果

上記の3つの方法を用いた結果、それぞれ以下の成果を得られた。

(1)本研究の提案法を主要な既存のアルゴリズムと比較した。数値実験の結果、既存のアルゴリズムに比べ、提案法は少ない反復回数で精度の良い近似解へと収束し、高速に問題を解くことができた。

上記の結果に基づき、提案法を並列計算機向けのアルゴリズムへと改良を行った。本アルゴリズムを並列計算機上に実装したうえで数値実験を行った結果、より少ない計算時間で大規模固有値問題を解くことができた。

本研究の成果は、研究業績の「雑誌論文1」に掲載された。

(2)理論解析の結果、反復毎にアルゴリズムの内部で陰的に近似固有値が計算されることを示した。この陰的な計算値は、特定の固有値に対する精度の良い近似値となり、アルゴリズムの収束を速める効果がある。すなわち、アルゴリズムの高速性が発揮される条件を明らかにした。

本解析の結果、従来は実験的に確認されていたアルゴリズムの高速性に対して、理論的な裏付けを示した。さらに、アルゴリズムが特定の固有値計算に特化していることを明らかにした。すなわち、必要な固有値に応じて、他のアルゴリズムと使い分ける必要があることを示しており、アルゴリズムの適切な使用法を理論的に与えた。

上記の理論解析の結果が成り立つことを数値実験によっても確認した。数値実験の結果、特定の固有値に対して速く収束したが、他の固有値に対しては収束が停滞したため、解析結果の妥当性を確認することができた。

本研究の成果は、研究業績の「雑誌論文2」に掲載された。

(3)修正量の計算がアルゴリズムの収束速度に及ぼす影響を数値的に調べた。修正量を精度良く求める場合、反復毎の計算量が増加するが、(近似)解へ収束するまでに要する反復回数は少なくなることが期待される。しかし、既存のアルゴリズムは、修正量を正確に求めた場合、収束に要する反復回数は必ずしも減少せず、むしろ増加することもあった。一方、本研究の提案するアルゴリズムは、修正量の計算を正確に行うほど、収束に要する反復回数が減少した。

数値実験の結果、既存のアルゴリズムに比べ、提案法は少ない反復回数で精度の良い近似解へ収束し、高速に固有値と対応する固有ベクトルを求めることができた。特に、既存のアルゴリズムの収束が停滞するような場合に対して、提案法は高速に精度の良い近似解を計算することができた。

本研究の成果は、研究業績の「雑誌論文3」に掲載された。

本研究に関連して、固有値問題のアルゴリズムに関する解説を、研究業績の「図書1」に分担執筆した。

5. 主な発表論文等

〔雑誌論文〕 計3件（うち査読付論文 3件/うち国際共著 0件/うちオープンアクセス 0件）

1. 著者名 Takafumi Miyata	4. 巻 74
2. 論文標題 A heuristic search algorithm based on subspaces for PageRank computation	5. 発行年 2018年
3. 雑誌名 The Journal of Supercomputing	6. 最初と最後の頁 3278 ~ 3294
掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） 10.1007/s11227-018-2383-9	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Takafumi Miyata	4. 巻 E101.A
2. 論文標題 On correction-based iterative methods for eigenvalue problems	5. 発行年 2018年
3. 雑誌名 IEICE Transactions on Fundamentals of Electronics, Communications and Computer Sciences	6. 最初と最後の頁 1668 ~ 1675
掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） 10.1587/transfun.E101.A.1668	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Takafumi Miyata	4. 巻 77
2. 論文標題 A Riccati-type algorithm for solving generalized Hermitian eigenvalue problems	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 The Journal of Supercomputing	6. 最初と最後の頁 2091 ~ 2102
掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） 10.1007/s11227-020-03331-w	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

〔学会発表〕 計0件

〔図書〕 計1件

1. 著者名 宮田考史（分担執筆、pp.74-87）	4. 発行年 2018年
2. 出版社 共立出版	5. 総ページ数 336
3. 書名 数値線形代数の数理とHPC	

〔産業財産権〕

〔その他〕

-

6. 研究組織

	氏名 (ローマ字氏名) (研究者番号)	所属研究機関・部局・職 (機関番号)	備考
--	---------------------------	-----------------------	----

7. 科研費を使用して開催した国際研究集会

〔国際研究集会〕 計0件

8. 本研究に関連して実施した国際共同研究の実施状況

共同研究相手国	相手方研究機関
---------	---------