様式 C-19

科学研究費補助金研究成果報告書

平成 22 年 5 月 24 日現在

研究種目：若手研究（スタートアップ）
研究期間：2008 ～ 2009
課題番号：20800009
研究課題名（和文）大規模連立一次方程式の高速求解技術の構築と並列固有値解法への応用
研究課題名（英文）A development of fast solvers for large-scale linear systems and its application to the parallel eigensolver.

研究代表者
多田野　寛人（TADANO HIROTO）
筑波大学・大学院システム情報工学研究科・助教
研究者番号：50507845

研究成果の概要（和文）：多くの分野の数値シミュレーションでは，最終的に連立一次方程式が現れ，その求解が必要となる．連立一次方程式の求解には，非常に多くの計算時間を要するため，高速化が不可欠である．本研究課題では，複数本の右辺ベクトルをもつ連立一次方程式を効率よく解くための Block Krylov 部分空間反復法の研究を行った．また，数値計算手法の一つである並列固有値解法に対して同法を適用し，速度向上を図った．

研究成果の概要（英文）：Large-scale linear systems appear in many application areas and need to be solved. Since this is a very time-consuming step, we need to solve it fast. In this research project, we study Block Krylov algorithms for solving linear systems with multiple right-hand sides. Moreover, we apply Block Krylov algorithms to the parallel eigensolver for speeding-up of the method.

交付決定額

（金額単位：円）

	直接経費	間接経費	合　計
2008 年度	1, 320, 000	396, 000	1, 716, 000
2009 年度	1, 140, 000	342, 000	1, 482, 000
年度			
年度			
年度			
総　計	2, 460, 000	738, 000	3, 198, 000

研究分野：数値解析
科研費の分科・細目：情報学・情報学基礎
キーワード：連立一次方程式，Block Krylov 部分空間反復法，並列固有値解法

1．研究開始当初の背景

計算機の発展に伴い，多くの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．分子軌道計算などのナノテクノロジー分野においても，数値シミュレーションが行われている．分子軌道計算では，シュレーディンガー方程式を解くことで分子軌道が得られるが，解析的に解くことは不可能である．シュレーディンガー方程式を Hartree-Fock を用いて近似することで，大規模一般化固有値問題に帰着させ，同問題を解くことで分子軌道が得られる．分子軌道計算では全ての固有対を必要とせず，ある一部分の固有対のみが必要となる．

ある一部分の固有対を求める方法として，我々は周回積分を用いた並列固有値解法を

研究している．この並列固有値解法では，解くべき複数の連立一次方程式はそれぞれ独立に求解できるため，並列計算環境において高速に計算を行うことができる．しかしながら，これらの連立一次方程式は複数本の右辺ベクトルをもつため，固有値解法の高速化を達成するには連立一次方程式の解法を高速化が必須となる．

2．研究の目的

上述のように，周回積分を用いた並列固有値解法の計算時間は，同法で現れる連立一次方程式の求解時間に大きく依存する．特に，同法で現れる方程式は複数本の右辺ベクトルを保持しており，このような方程式を高速に解くことができる手法が求められる．

係数行列が同じで，複数の右辺ベクトルをもつ連立一次方程式の求解法として，行列の LU 分解に基づく直接法がある．一度だけ行列を LU 分解し，前進・後退代入を行うことで効率的に求解が可能となる．しかしながら，大規模行列に対する LU 分解は多くの演算量とメモリ量を必要とするため，直接法の適用は現実的ではない．

本研究課題では，複数の右辺ベクトルをもつ連立一次方程式のための反復法について研究を行い，連立一次方程式の求解，及び並列固有値解法の高速化を目的とする．

3．研究の方法

本研究では，複数本の右辺ベクトルをもつ連立一次方程式を高速に解くことが最重要課題となる．この目的を達成するために，以下の方法で研究を行う．

(1) Block Krylov 部分空間反復法の性能検証

複数本の右辺ベクトルをもつ連立一次方程式に対する反復法として，Block Krylov 部分空間反復法が提案されている．先行研究において，複数本の右辺ベクトルをまとめて扱うことにより，反復回数が減少することが示されている．本研究課題で扱う問題に対して Block Krylov 部分空間反復法が有効がどうか，性能を検証する．

(2) Block Krylov 部分空間反復法に対する前処理法の研究

前処理法とは，連立一次方程式の解を得るまでの反復回数を減少させるための方法である．前処理には多くの計算量を要するが，Block Krylov 部分空間反復法の特性を活かすことにより，前処理の計算量を減少させることができると考えられる．Block Krylov 部分空間反復法に適した前処理法の研究を行う．

(3) Block Krylov 部分空間反復法の改良と新たな解法の検討

研究課題(1)を通して，Block Krylov 部分空間反復法の長所・短所を明らかにする．また，その短所を克服するための改良，及び新たな解法設計の可能性について研究，検討を行う．

(4) Block Krylov 部分空間反復法＋並列固有値解法の性能評価

この研究課題と通じて研究・開発を行った Block Krylov 部分空間反復法を周回積分を用いた並列固有値解法に適用し，性能評価する．

4．研究成果

(1) Block Krylov 部分空間反復法による連立一次方程式の高速求解

周回積分を用いた並列固有値解法で現れる，複数の右辺ベクトルをもつ連立一次方程式に対して Block Krylov 部分空間反復法を適用し，性能を評価する．用いた問題は，上皮成長因子受容体 2 量体の分子軌道計算で現れる一般化固有値問題で，行列サイズは 96,234，非零要素数は約 4.5 億である．

① 右辺ベクトル数と収束性の関係

並列固有値解法で現れる複数の右辺ベクトルをもつ連立一次方程式に対して，Block Krylov 部分空間反復法の 1 つである Block COCG 法を適用する．ここでは，右辺ベクトル数を変化させたときの残差の収束性の変化を調べる．

図 1 に Block COCG 法の相対残差履歴を示す．右辺ベクトル数 L が 1 本の場合は，200 回以上の反復で残差が収束条件を満たした．一方，$L = 2$ の場合は，反復回数が 120 回程度の反復で残差が収束した．図 1 に示すように，右辺ベクトル数の増加に伴い，Block COCG 法の反復回数が減少していることが

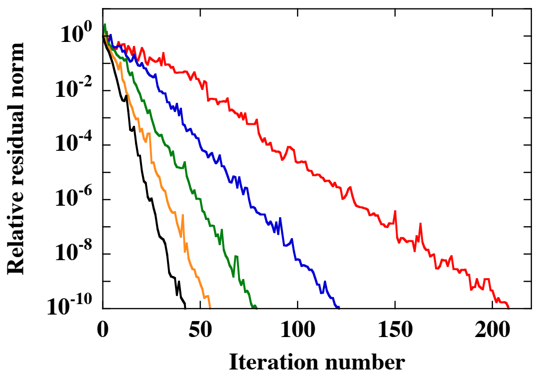


図 1．右辺ベクトル数 L と Block COCG 法の相対残差変化の関係． ：$L = 1$， ：$L = 2$， ：$L = 4$， ：$L = 8$， ：$L = 16$．

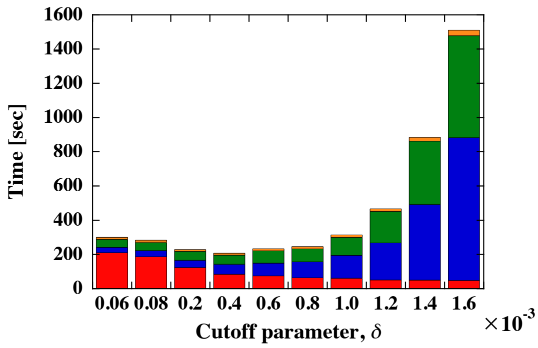
わかる．以上の結果から，Block Krylov 部分空間反復法で L 本の右辺ベクトルをまとめて処理することで，1 本ずつ Krylov 部分空間反復法で解いた場合よりも効率よく連立一次方程式の解を得ることができる．

② Block 版と非 Block 版の性能比較

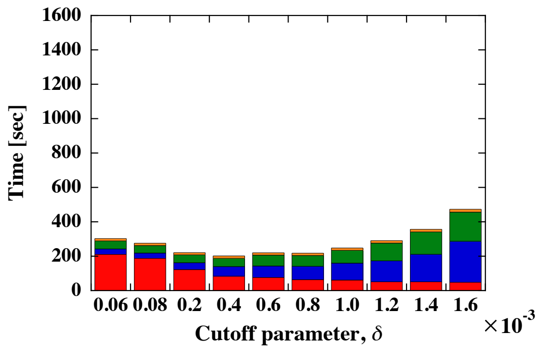
COCG 法と Block COCG 法における，前処理行列を変化させたときの計算時間の変化を調べる．解いた問題は前小節と同じ問題で，右辺ベクトル数 L を 8 とした．

図 2 に，前処理行列を変化させたときの COCG 法，及び Block COCG 法の計算時間を示す．横軸は前処理行列生成に関連するパラメータを表しており，δ が小さいほど前処理行列の性能が高いことを表す．δ が小さい場合は，COCG 法，Block COCG 法ともにほぼ同じ計算時間となった．しかしながら，δ を大きくすると両者の計算時間に差が現れ，δ が 1.6×10^{-3} の場合は Block COCG 法の計算時間が約 1000 秒高速であった．

以上の結果は，Block Krylov 部分空間反復法を用いることで，前処理行列生成をより不完全に行えることを示している．そのため，前処理行列生成時間，及び反復に要する時間の両方を短縮することが可能となる．また，



(a) COCG 法．



(b) Block COCG 法．

図 2．前処理が COCG 法と Block COCG 法の計算時間に及ぼす影響（L = 8 の場合）．■：前処理行列生成，■：行列・ベクトル積，■：前処理行列の前進後退代入，■：その他．

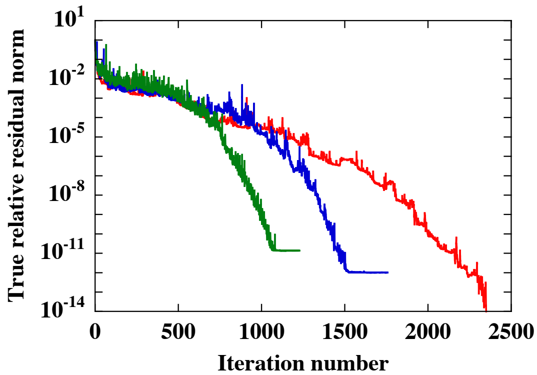
非 Block 版と異なり，パラメータ δ を変化させても計算時間が大きく変わることはないため，より柔軟にパラメータ選択を行うことができる．

(2) 高精度近似解を生成する Block Krylov 部分空間反復法の開発

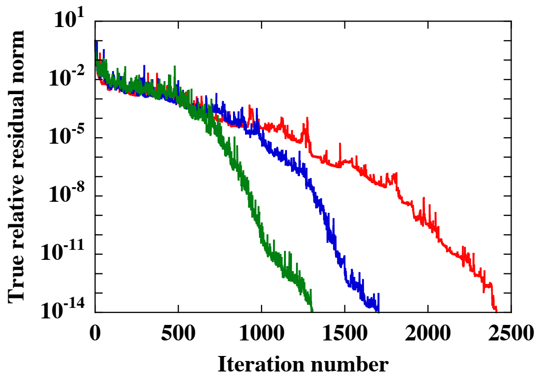
Block Krylov 部分空間反復法を用いることで，複数本の右辺ベクトルをもつ連立一次方程式を効率よく求解できるようになった．しかしながら，右辺ベクトル数を増やしていくと，近似解の精度が悪化する可能性があることがわかった．

図 3(a)に右辺ベクトル数 L を変化させたときの Block BiCGSTAB 法の真の相対残差履歴を示す．真の相対残差は，近似解の精度を調べるための指標であり，この値が十分に小さくなっていれば，高精度の近似解が得られたことになる．なお実験には，格子量子色力学（QCD）計算で現れる 1,572,864 次の行列を用いた．

右辺ベクトル数 L が 1 の場合は，真の相対残差が 10^{-14} に到達しており，高精度近似解が得られている．一方，$L = 2$，$L = 4$ とした場



(a) Block BiCGSTAB 法．



(b) Block BiCGGR 法．

図 3．右辺ベクトル数の変化が真の相対残差に与える影響．━━ ：$L = 1$，━━ ：$L = 2$，━━ ：$L = 4$．

合は，真の相対残差の停滞が発生した．したがって，Block BiCGSTAB 法では，反復回数が減少しても高精度近似解を得ることができない．

Block BiCGSTAB 法の近似解の精度悪化の原因を解析することで，研究代表者は新たな Block Krylov 部分空間法「Block BiCGGR 法」を開発した．図 3(b)に，Block BiCGGR 法の真の相対残差履歴を示す．同図に示すように，Block BiCGGR 法では右辺ベクトル数を増やしても近似解の精度悪化は発生していない．さらに同法は，Block Krylov 部分空間反復法の特長である反復回数の減少も達成している．Block BiCGGR 法により，高速かつ高精度に近似解を生成することが可能となった．

(3) Block BiCGGR 法の並列固有値解法への応用

周回積分を用いた並列固有値解法に対して Block BiCGGR 法を適用し，性能を評価する．図 4 に，並列固有値解法で現れる 16 本の方程式を Block COCG 法，Block BiCGSTAB 法，及び Block BiCGGR 法で解いて得られた解に対する真の相対残差を示す．なお，残差の収束判定定数は 10^{-14} とした．用いた問題は DNA8 塩基対の分子軌道計算で現れる 1,980 次の行列で，右辺ベクトル数は 8 とした．

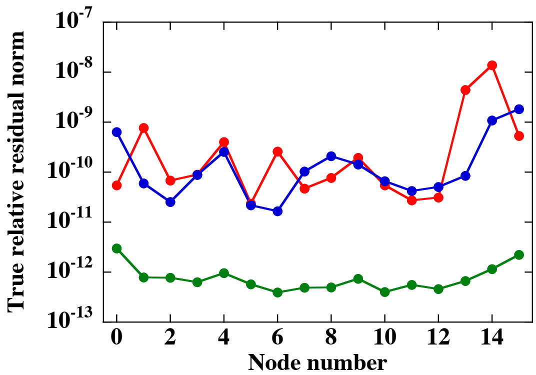


図 4．並列固有値解法で現れる連立一次方程式に対する Block Krylov 部分空間反復法の真の相対残差．●：Block COCG 法，●：Block BiCGSTAB 法，●：Block BiCGGR 法．

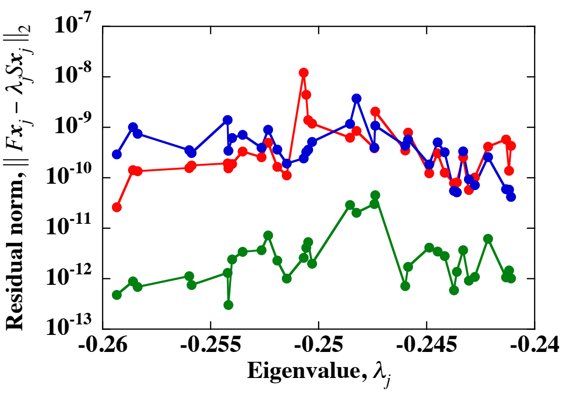


図 5．並列固有値解法で得られた固有値の残差ノルム．●：Block COCG 法，●：Block BiCGSTAB 法，●：Block BiCGGR 法．

Block COCG 法，Block BiCGSTAB 法で連立一次方程式を解いた場合，収束判定定数が 10^{-14} であるにも関わらず，真の相対残差は 10^{-8}～10^{-10} に分布し，非常に大きくなっている．一方，Block BiCGGR 法を用いた場合は真の相対残差が 10^{-12} 程度まで減少しており，他の方法と比較して高精度に近似解が求められていることがわかる．

図 5 に周回積分を用いた並列固有値解法で得られた固有対の残差を示す．Block COCG 法，及び Block BiCGSTAB 法を用いた場合は，固有対の残差は 10^{-10} 付近に分布している．一方，Block BiCGGR 法を用いた場合は，固有対の残差は 10^{-12} 付近に分布しており，他の 2 つの方法と比較して高精度の固有対が得られていることがわかる．

固有対の精度は，連立一次方程式の解の精度に大きく依存するため，連立一次方程式を高精度で求解することは非常に重要となる．

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 4 件）

① H. Tadano, Y. Kuramashi, T. Sakurai, Application of Preconditioned Block BiCGGR to the Wilson-Dirac Equation with Multiple Right-Hand Sides in Lattice QCD, Comput. Phys. Comm., 査読有，Vol. 181, 2010, pp. 883–886.

② T. Sakurai, H. Tadano, Y. Kuramashi, Application of Block Krylov Subspace Algorithms to the Wilson-Dirac Equation with Multiple Right-Hand Sides in Lattice QCD, Comput. Phys. Comm.，査読有，Vol. 181, 2010, pp. 113–117.

③ H. Tadano, T. Sakurai, Y. Kuramashi, Block BiCGGR: A New Block Krylov Subspace Method for Computing High Accuracy Solutions, JSIAM Letters, 査読有，Vol. 1, 2009, pp. 44–47.

④ 多田野寛人，櫻井鉄也，周回積分法に対する Block Krylov 部分空間反復法の適用と分子軌道計算への応用，情報処理学会論文誌　コンピューティングシステム，査読有，Vol. 2, No. 2, 2009, pp. 10

−18.

〔学会発表〕（計 10 件）

① 多田野寛人，櫻井鉄也，近似解の精度劣化を回避する Block BiCGGR 法とその応用，京都大学数理解析研究所 RIMS 研究集会，2009 年 12 月 14 日，京大会館（京都府）.
② 多田野寛人，Block BiCGGR 法の適用による周回積分固有値解法の精度向上，特異値・固有値合同ワークショップ，2009 年 11 月 21 日，つくば国際会議場（茨城県）.
③ 多田野寛人，櫻井鉄也，Block BiCGGR 法の適用による周回積分固有値解法の精度向上，日本応用数理学会 2009 年度年会，2009 年 9 月 29 日，大阪大学豊中キャンパス（大阪府）.
④ 多田野寛人，櫻井鉄也，周回積分法で現れる連立一次方程式に対する Block Krylov 部分空間反復法の適用と性能評価，第 14 回計算工学講演会，2009 年 5 月 13 日，東京大学生産技術研究所（東京都）.
⑤ 多田野寛人，Block Krylov 部分空間反復法の高精度近似解生成法，分野横断型研究科「アルゴリズムによる計算科学の融合と発展」，2009 年 4 月 23 日，筑波大学計算科学計算センター（茨城県）.
⑥ H. Tadano, T. Sakurai, Acceleration of Convergence by Block Krylov Subspace Methods on Multi-Core Processors, 15th International Conference on Finite Elements in Flow Problems (FEF09), 2009 年 4 月 1日, 中央大学駿河台記念館（東京都）.
⑦ 多田野寛人，Block BiCGSTAB 法における解の精度劣化の解析とその改善法の提案，第 6 回計算数学研究会，2009 年 3 月 18 日，ウェルハートピア熱海（静岡県）.
⑧ 多田野寛人，櫻井鉄也，周回積分法に対する Block Krylov 部分空間反復法の適用と分子軌道計算への応用，2009 年ハイパフォーマンスコンピューティングと計算科学シンポジウム(HPCS2009), 2009 年 1 月 23 日，東京大学武田先端知ビル（東京都）.
⑨ H. Tadano, T. Sakurai, A Performance Evaluation of Block Krylov Subspace Methods for the Contour Integral Method, International Symposium on Frontiers of Computational Science 2008, 2008 年 11 月 29 日，名古屋大学シンポジオンホール（愛知県）.
⑩ 多田野寛人，櫻井鉄也，Block CIRR 法に対する Block Krylov 部分空間反復法の適用と性能評価，日本応用数理学会 2008 年度年会，2008 年 9 月 19 日，東京大学柏キャンパス（千葉県）.

6．研究組織

(1)研究代表者

多田野　寛人（TADANO HIROTO）
筑波大学・大学院システム情報工学研究科・助教
研究者番号：50507845