様式Ｃ－１９

科学研究費助成事業（科学研究費補助金）研究成果報告書

平成 25 年 5 月 24 日現在

機関番号：12102
研究種目：若手研究（Ｂ）
研究期間：2010 ～ 2012
課題番号：22700003
研究課題名（和文）複数右辺項をもつ連立一次方程式の高速・高精度求解法の開発と科学技術計算への応用
研究課題名（英文）Development of fast and accurate methods for solving linear systems with multiple right-hand sides and their application to scientific computations
研究代表者
多田野　寛人（TADANO HIROTO）
筑波大学・システム情報系・助教
研究者番号：50507845

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をもつ連立一次方程式を解くための Block Krylov 部分空間反復法の高速・高精度アルゴリズムの研究を行った．本研究課題を通して Block Krylov 部分空間の安定化手法を開発し，同法の計算量削減による高速化を行った．開発手法を素粒子物理学分野の格子 QCD 計算に適用し，有効性を確認した．

研究成果の概要（英文）：In this project, we studied fast and accurate Block Krylov algorithms for solving linear systems with multiple right-hand sides. Through this project, we developed stabilized Block Krylov subspace methods, and reduced the amount of the computational complexity of the developed methods. Moreover, we applied the developed methods to lattice QCD computation, and verified the efficiency of the methods.

交付決定額

（金額単位：円）

	直接経費	間接経費	合　計
2010 年度	1,000,000	300,000	1,300,000
2011 年度	800,000	240,000	1,040,000
2012 年度	600,000	180,000	780,000
総　計	2,400,000	720,000	3,120,000

研究分野：数値解析学
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，複数右辺ベクトル

１．研究開始当初の背景

連立一次方程式は，様々な分野における数値計算で現れ，その求解法の重要性が高まっている．行列の固有対を求めるための固有値解法や，素粒子物理学分野における数値シミュレーションなどでは，複数の右辺ベクトルをもつ連立一次方程式が現れ，この求解部分が計算時間の大半を占める．

複数右辺ベクトルをもつ連立一次方程式の数値解法として，Block Krylov 部分空間反復法がある．同法は，右辺ベクトルが１本の方程式に対する Krylov 部分空間反復法よりも効率的に近似解を求めることができる一方で，右辺ベクトル数が多い場合は数値的不安定性の影響で，近似解が得られない場合も存在する．また，近似解の精度は適用アプリケーションの計算結果に大きく影響するため，Block Krylov 部分空間反復法には高精度近似解を生成することも求められている．そのため，高精度近似解を生成し，数値的に安定な解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，多くの数値シミュレーショ

ンでは，複数本の右辺ベクトルをもつ連立一次方程式を高速・高精度に解き，かつ数値的に頑健な信頼性の高いアルゴリズムが必要とされている．本研究課題では，同方程式の数値解法の 1 つである Block Krylov 部分空間反復法に着目し，高速・高精度・高信頼な数値解法の開発を目的とする．

３．研究の方法

高速・高精度・高信頼な Block Krylov 部分空間反復法を開発するために，以下の方法で研究を行う．

(1) 高精度近似解を生成する Block Krylov 部分空間反復法の収束性向上

代表者らはこれまでの研究を通して，高精度近似解を生成できる Block Krylov 部分空間反復法である Block BiCGGR 法を開発した．同法は高精度近似解が生成できる一方で，右辺ベクトル数が多い場合は，数値的不安定性の影響で近似解が得られない場合が存在する．

同法は，収束の加速を促す「加速多項式」を用いてアルゴリズムが構築されているが，同多項式のパラメータは 1 つだけであるため，収束性が悪い．本研究課題では，2 つのパラメータをもつ加速多項式を用いてアルゴリズムを再構築し，かつ高精度近似解が得られる手法を開発する．

(2) Block Krylov 部分空間反復法の数値的不安定性の緩和

上記 (1) では 2 つのパラメータをもつ加速多項式を用いて収束性の向上を図ったが，アルゴリズムの数値的不安定性は依然として残ったままとなっている．既存の Block Krylov 部分空間反復法である Block BiCGSTAB 法と Block BiCGGR 法における数値的不安定性の原因を調べ，その緩和を試みる．

(3) Block Krylov 部分空間反復法の演算量削減による高速化

上記(2) の数値的不安定性の緩和には，縦長行列の QR 分解が必要となる．右辺ベクトル数が多い場合は，QR 分解に要する時間が増大する．本研究課題では QR 分解の回数削減が可能であるかを調べ，方法の高速化を図る．

４．研究成果

以下では，素粒子物理学分野の格子 QCD 計算で現れる連立一次方程式に対して提案手法を適用し，その有効性を検証した．行列のサイズは 1,572,864 であり，非零要素数は 80,216,064 である．

(1) Block Krylov 部分空間反復法の収束性向上

① 収束性と近似解の精度

2 つのパラメータをもつ加速多項式を用いて，高い収束性をもち高精度近似解を生成する新たな Block Krylov 部分空間反復法（以下，提案法）を構築した．図 1 に 4 つの解法の真の相対残差履歴を示す．真の相対残差とは，高精度近似解が得られているかどうかを示す指標であり，その値が小さいほど精度の高い近似解が得られていることを表す．ここでは，右辺ベクトル数は 8 本とした．

Block BiCGSTAB 法と Block BiCGGR 法では反復過程で残差が発散し，近似解が得られなかった．Block BiCGSafe 法は提案法と同じく 2 パラメータをもつ加速多項式から構成された手法であり，約 750 回の反復回数で反復の停止条件を満たした．しかしながら，真の相対残差は 10^{-6} 付近で停滞し，高精度近似解が得られなかった．一方，提案法は反復の停止条件を満たし，かつ高精度近似解が得られた．

② 近似解の精度悪化の原因解析

Block BiCGSafe 法と提案法において，近似解の精度悪化の原因解析を行い，その原因となる誤差行列を導出した．図 2 に誤差行列ノルムと真の相対残差ノルムの関係を示す．ここでは右辺ベクトル数は 4 本とした．

Block BiCGSafe 法では，反復の序盤は相対残差ノルムと真の相対残差ノルムは同じように減少していくが，誤差行列ノルムの影響で真の相対残差ノルムは途中で停滞した．一方，提案法でも誤差行列ノルムは発生しているが，その値は非常に小さいため真の相対残差ノルムの値も十分に小さくなっている．

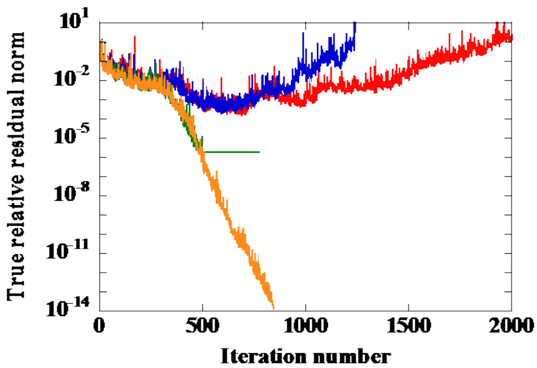
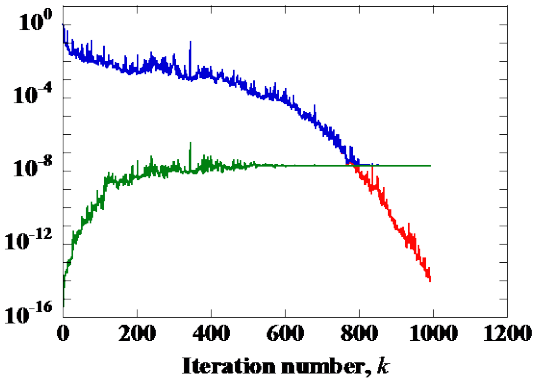
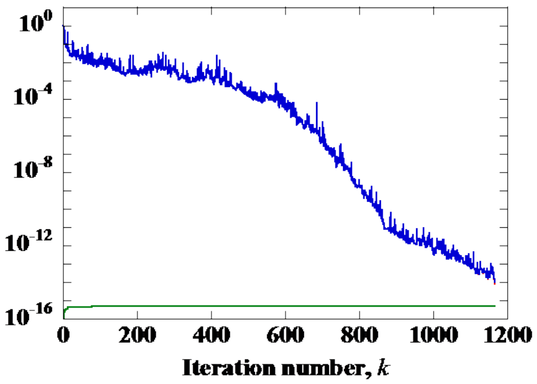


図 1　各解法の真の相対残差履歴．■ : Block BiCGSTAB 法，■ : Block BiCGGR 法，■ : Block BiCGSafe 法，■ : 提案法．



(a) Block BiCGSafe 法.



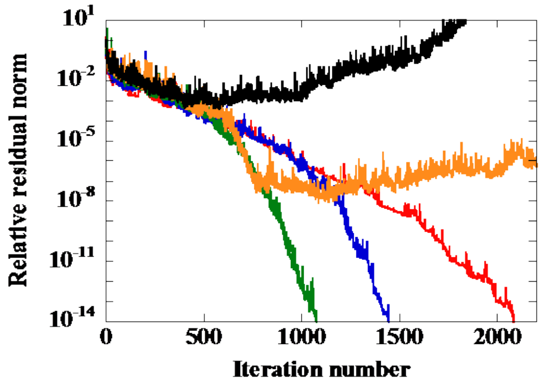
(b) 提案法.

図 2　誤差行列ノルムと真の相対残差ノルムの関係．■：相対残差ノルム，■：真の相対残差ノルム，■：誤差行列ノルム．

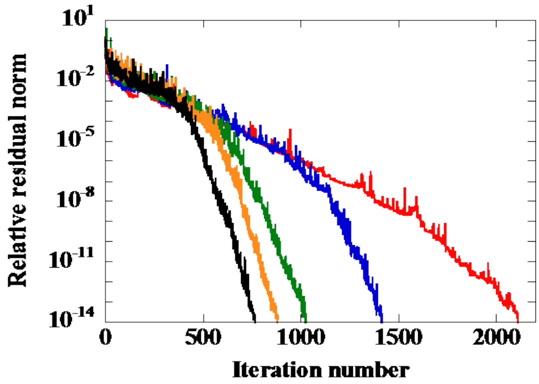
(2) Block Krylov 部分空間反復法の数値的不安定性の緩和

Block BiCGSTAB 法と Block BiCGGR 法では，右辺ベクトル数 L を増加させると数値的不安定性の影響で残差が発散することがある．図 3 (a)，図 4 (a) に示す Block BiCGSTAB 法，Block BiCGGR 法の相対残差ノルム履歴では，$L = 1, 2, 4$ の場合は残差が収束しているが，$L = 6, 8$ の場合は発散している．

この数値的不安定性は，方法の反復過程で現れる縦長行列を構成するベクトルの独立性が失われることで発生することが分かった．本研究課題では，一部の縦長行列に対して QR 分解を行うことで，ベクトルの独立性を回復するアルゴリズム：Modified Block BiCGSTAB 法，及び Block BiCGGRRO 法を構築した．Modified Block BiCGSTAB 法は Block BiCGSTAB 法の補助行列に対して QR 分解を施した方法，Block BiCGGRRO 法は Block BiCGGR 法の残差行列に対して QR 分解を施した方法である．



(a) Block BiCGSTAB 法.



(b) Modified Block BiCGSTAB 法.

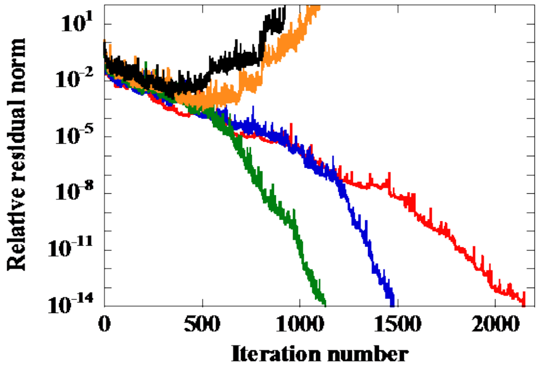
図 3　Block BiCGSTAB 法と Modified Block BiCGSTAB 法の相対残差履歴．■：$L = 1$，■：$L = 2$，■：$L = 4$，■：$L = 6$，■：$L = 8$．

図 3 (b)，図 4 (b) に示すように，Modified Block BiCGSTAB 法と Block BiCGGRRO 法では，右辺ベクトル数が 6, 8 本の場合でも残差が収束した．このことから，反復過程でベクトルの独立性を回復させることで，反復法の数値的不安定性を緩和することができた．

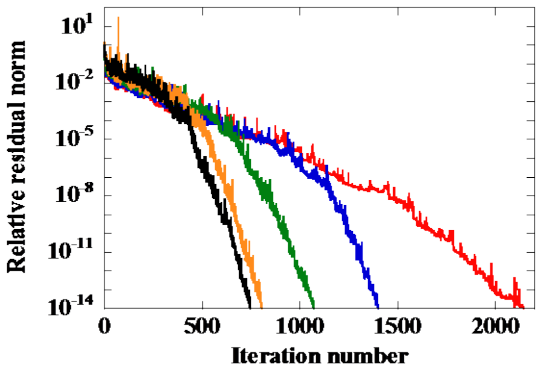
(3) Block Krylov 部分空間反復法の演算量削減による高速化

Block Krylov 部分空間反復法では数値的不安定性を緩和するために，反復毎に QR 分解を行う必要がある．しかしながら，QR 分解はベクトル本数が多い場合は多くの演算量を必要とする．そのため，数値的に不安定な状況に陥った場合のみ QR 分解を実行することができれば，収束性を悪化させずに演算量を削減できると考えられる．

本研究では，アルゴリズム中に現れる小規模行列の条件数を用いて，数値的に不安定な状況かどうかを判定する手法を開発した．図 4 に，Block BiCGGRRO 法と Modified Block BiCGSTAB 法に対して本手法を適用した結



(a) Block BiCGGR 法.

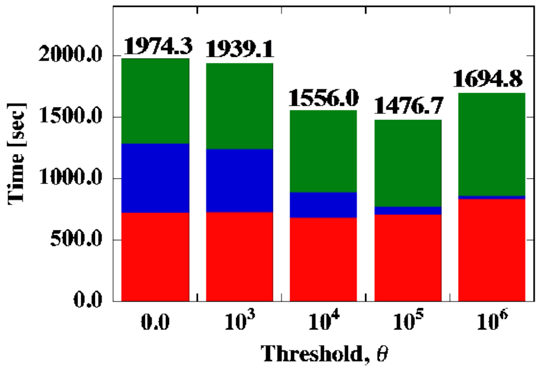


(b) Block BiCGGRRO 法.

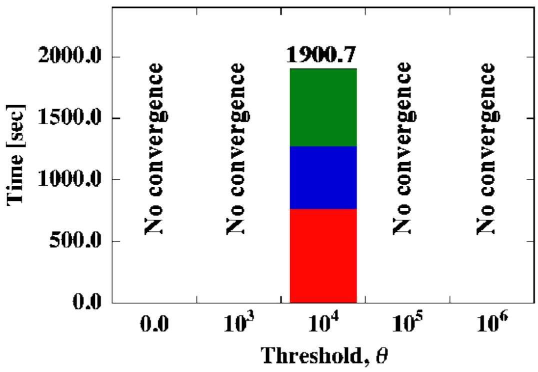
図 4 Block BiCGGR 法と Block BiCGGRRO 法の相対残差履歴. ■ : $L = 1$, ■ : $L = 2$, ■ : $L = 4$, ■ : $L = 6$, ■ : $L = 8$.

果を示す．なお，右辺ベクトル数は 12 とした．図 5 の横軸は数値的不安定性の判定に用いる閾値を表し，閾値が大きくなると QR 分解を実行する回数が減少する．

図 5 (a) に示すように Block BiCGGRRO 法では，閾値を大きくするにしたがって QR 分解に要する時間が減少した．閾値を 10^5 まで大きくすると計算時間は減少したが，10^6 とすると数値的不安定性の影響で反復回数が増加し，逆に計算時間が増加した．一方，Modified Block BiCGSTAB 法では，QR 分解を毎反復実行した場合でも残差は収束条件を満たさなかった．



(a) Block BiCGGRRO 法.



(b) Modified Block BiCGSTAB 法.

図 5 QR 分解の実行回数削減による Block Krylov 部分空間反復法の計算時間変化. ■ : 行列ベクトル積, ■ : QR 分解, ■ : その他.

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 2 件）

① Y. Nakamura, K.-I. Ishikawa, Y. Kuramashi, T. Sakurai, and H. Tadano, Modified Block BiCGSTAB for Lattice QCD, Comput. Phys. Comm., Vol. 183, pp. 34-37, 2012.（査読有）
http://dx.doi.org/10.1016/j.cpc.2011.08.010

② M. Naito, H. Tadano, and T. Sakurai, A Modified Block IDR(s) Method for Computing High Accuracy Solutions, JSIAM Letters, Vol. 4, pp.25-28, 2012.（査読有）
https://www.jstage.jst.go.jp/browse/jsiaml/4/0/_contents

〔学会発表〕（計 7 件）

① 多田野寛人, 複数右辺ベクトルをもつ連立一次方程式の数値解法と並列固有値 計算への応用，第 5 回日本数式処理学会理論分科会＆システム分科会合同研究会，2012 年 12 月 28 日, 京都大学（京都府）．（招待講演）

② 多田野寛人，櫻井鉄也，偽収束を回避する Block Krylov 部分空間反復法の安定化と計算量削減について，日本応用数理学会 2012 年度年会，2012 年 8 月 31 日，稚内全日空ホテル（北海道）．

③ 多田野寛人, 超大規模並列環境における大規模疎行列に対する固有値解法と線形計算技術の開発，2012 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（HPCS2012）, 2012 年 1 月 25 日，名古屋大学　豊田講堂　シンポジオンホール（愛知県）．（招待講演）

④ 多田野寛人，高精度近似解を生成する Block Krylov 部分空間反復法とその安定化，第 1 回計算力学シンポジウム，2011 年 11 月 11 日，日本学術会議（東京都）．

⑤ 多田野寛人，櫻井鉄也，Block BiCGSTAB 法の安定化について，平成 23 年日本応用数理学会　研究部会連合発表会，2011 年 3 月 7 日，電気通信大学西キャンパス（東京都）．

⑥ 多田野寛人，櫻井鉄也，高精度近似解を生成する Block 積型 Krylov 部分空間法，京都大学数理解析研究所 RIMS 研究集会「科学技術計算アルゴリズムの数理的基盤と展開」，2010 年 10 月 19 日，京都大学数理解析研究所（京都府）．

⑦ 多田野寛人，櫻井鉄也，近似解の精度劣化を回避する Block 積型 Krylov 部分空間反復法について，日本応用数理学会 2010 年度年会，2010 年 9 月 6 日，明治大学駿河台キャンパス（東京都）．

６．研究組織

(1)研究代表者

多田野　寛人（TADANO HIROTO）
筑波大学・システム情報系・助教
研究者番号：50507845