

**科学研究費助成事業 研究成果報告書**

平成 28 年 6 月 15 日現在

機関番号：37112

研究種目：若手研究(B)

研究期間：2012～2015

課題番号：24760061

研究課題名(和文) 超大規模固有値問題の高速数値解法に関する研究

研究課題名(英文) Research on fast numerical methods for large-scale 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) 3,600,000円

研究成果の概要(和文)：本研究は、固有値問題を高速高精度に解くための数値解法の開発に取り組み、次の結果が得られた：(1) 反復型の数値解法を機械的に導出可能なフレームワークの構築 (2) フレームワークを用いて、既存のJacobi-Davidson法やその変種の再導出 (3) 再導出の知見を元にした新解法の導出 (4) 実問題に特化した高速高精度アルゴリズムの開発。

研究成果の概要(英文)：This research aims to develop fast and accurate numerical methods to solve eigenvalue problems. The results obtained in this research are as follows: (1) A framework to derive iterative methods (2) Rederivations of the existing Jacobi-Davidson method and its variants using the framework (3) New methods to improve the issues clarified in the rederivations (4) Fast and accurate algorithms for practical needs in eigenvalue computations.

研究分野：計算科学

キーワード：固有値問題 高速高精度アルゴリズム Jacobi-Davidson法

## 1. 研究開始当初の背景

行列の固有値問題は主要な工学問題の1つであり、構造解析や流体解析、電子状態計算やネットワーク解析など、多様な応用分野に現れる。固有値解法の研究は歴史が古く、1950年代から国内外で数多くの研究成果が発表されているが、数値解法に対する需要も時代とともに複雑化・多様化している。特に、計算機の発達に伴い、扱う行列の規模が著しく増大したことの影響を受け、多大な計算時間を要する大規模問題を高速かつ高精度に解くための数値解法が求められている。

## 2. 研究の目的

固有値問題の高速高精度な数値解法の開発を目的とし、次の研究を行うことを目標とした。

### (1) 反復法のフレームワーク

反復法は、計算に必要なメモリ使用量が少なく、大規模問題に適した性質を備えている。また、一定の手順を反復することで徐々に精度の良い固有対を構築する点が特徴であり、解法の速さは、近似固有対を構築するための部分空間に依存する。この部分空間の生成次第で様々な解法が提案されているが、比較的近年提案された Jacobi-Davidson 法は、電磁流体力学の難解な固有値問題を高速に解いた実績から注目を集め、数値解法の研究分野はもちろんのこと、応用分野からも有力な数値解法として注目されている。

Jacobi-Davidson 法の特徴は、修正方程式と呼ばれる線形方程式を近似的に解くことにより部分空間を生成することである。本手法は、近似固有ベクトルと真の固有ベクトルの(近似的な)差分を探索することに対応し、解法の速さを決定する要である。

本研究は、修正方程式の導出過程を踏まえ、方程式に内在するパラメータおよび方程式の近似解計算について複数の手法を用意し、これらの組合せによって、反復法を機械的に導出可能なフレームワークを整備する。

### (2) 既存解法の再導出

(1) のフレームワークを利用することで、Jacobi-Davidson 法やその変種を再導出する。これにより、修正方程式の計算手法の側面から、既存解法の特徴を明らかにし、改良点を見いだす。

### (3) 新解法の導出と計算機への実装

(2) の結果を踏まえ、既存解法の性質を改良するために必要な修正方程式の計算手法を構築し、新たな反復法を導出する。また、新解法を計算機上で実装し、その収束性を数値的に確認するとともに、既存解法との比較を行う。

## 3. 研究の方法

本研究は、数値解法の導出に加え、数値実験を行って収束の振る舞いを調べながら、改良に取り組んだ。また、既存解法と新解法の性能比較を数値的に行った。

## 4. 研究成果

本研究の主要な成果は次の通りである：(1)~(3)は、それぞれ研究の目的に対応した結果であり、これらに加え、(4)当初の研究目的にはない結果、が得られた。

### (1) 反復法のフレームワーク

修正方程式におけるパラメータ選択について、主に2つの計算手法を提案した。これらは、固有値のニーズによって、適宜選択することを想定した。また、パラメータ計算部分の結果を再利用することで、修正方程式の近似解を効率良く計算する手法を提案した。以上の組合せにより、反復法を機械的に導出可能なフレームワークを構築した。これらは、次の(2)で得られた知見を元に独自の改良を実装した結果であり、最終的に(3)新解法の導出へと至った。

### (2) 既存解法の再導出

(1)のフレームワーク上で既存解法の特徴を整理し、改良点を見出した。具体的には、パラメータ計算と修正方程式の近似解計算における共通部分を見出し、既存解法と同程度の計算量で、収束を加速するパラメータの設定および修正方程式の近似解計算を同時に達成する手法を提案した。これらは、(1)で述べたように、フレームワーク上で実装し、次の(3)新解法の導出へと至った。

### (3) 新解法の導出と計算機への実装

(1)、(2)の結果を用いて、外部固有値および内部固有値の計算について、それぞれ新解法を導出した。数値実験の結果、両解法は Jacobi-Davidson 法や既存の変種に比べて、少ない反復回数で精度の良い近似解へ到達し、少ない計算時間を示した。

以下は、当初の研究目的にはないが、固有値計算の研究進展に伴い、関連して得られた結果である。

### (4) 実問題に特化したアルゴリズム

実問題の特徴を活用し、その問題に特化したアルゴリズムの開発を行った。特に、ナノデバイスの設計に現れる難解な固有値問題に対して、高精度な固有値計算アルゴリズムを開発した。実問題に対する数値実験の結果、提案法は物理的な要請を満たす解を計算可能であることを数値的に示した。

## 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7件)

T. Miyata, R. Naito, S. Honda, Computing surface Green's functions for semi-infinite systems on multilayered periodic structures, Journal of Engineering Mathematics, 97 (2016), 25-32, 査読有.

DOI: 10.1007/s10665-015-9794-x

T. Miyata-Takata, K. Takata, T. Toji, N. Goto, S. Kasahara, T. Takahashi, A. Tari, M. Noujima-Harada, T. Miyata, Y. Sato, T. Yoshino, Elevation of serum interleukins 8, 4, and 1 levels in patients with gastrointestinal low-grade B-cell lymphoma, Scientific Reports, 5 (2015), 18434: 1-7, 査読有.

DOI: 10.1038/srep18434

K. Takata, M. Noujima-Harada, T. Miyata-Takata, K. Ichimura, Y. Sato, T. Miyata, K. Naruse, T. Iwamoto, A. Tari, T. Masunari, H. Sonobe, H. Okada, M. Iwamuro, K. Mizobuchi, Y. Gion, T. Yoshino, Clinicopathologic analysis of 6 lymphomatoid gastropathy cases: expanding the disease spectrum to CD4-CD8+ cases, The American Journal of Surgical Pathology, 39 (2015), 1259-1266, 査読有.

DOI: 10.1097/PAS.0000000000000443

T. Uneyama, T. Miyata, K. Nitta, Self-consistent field model simulations for statistics of amorphous polymer chains in crystalline lamellar structures, The Journal of Chemical Physics, 141 (2014), 164906: 1-13, 査読有.

DOI: 10.1063/1.4899047

T. Miyata, S. Honda, R. Naito, S.-L. Zhang, A numerical approach to surface Green's functions via generalized eigenvalue problems, Japan Journal of Industrial and Applied Mathematics, 30 (2013), 653-660, 査読有.

DOI: 10.1007/s13160-013-0116-2

D. Lee, T. Miyata, T. Sogabe, T. Hoshi, S.-L. Zhang, An interior eigenvalue problem from electronic structure calculations, Japan Journal of Industrial and Applied Mathematics, 30 (2013), 625-633, 査読有.

DOI: 10.1007/s13160-013-0118-0

T. Miyata, S.-L. Zhang, A numerical approach to complex eigenvalues with moduli close to a specified value, RIMS 講義録, 1848 (2013), 33-44, 査読無.  
<http://hdl.handle.net/2433/195090>

〔学会発表〕(計26件)

宮田考史, Riccati 法に基づくページランク計算, RIMS 研究集会「現象解明に向けた数値解析学の新展開」, 京都大学数理解析研究所, 2015年11月18-20日.

西澤慶亮, 宮田考史, GPU を用いたマルチシフト QR 法とその性能最適化, 日本応用数学会「行列・固有値問題の解法とその応用」研究部会第18回研究会, 東京大学, 2014年12月25日.

川出静, 西澤慶亮, 宮田考史, 今堀慎治, 重み付きプロクラスティクス距離を用いたエッシャー風タイリング生成, NICOGRAPH 2014, 愛知工業大学, 2014年11月3-4日.

宮田考史, 西澤慶亮, マルチシフト QR 法の GPU による高速化, 第3回岐阜数理解析研究会, 飛騨高山まちの博物館, 岐阜, 2014年9月7-9日.

西澤慶亮, 宮田考史, 張紹良, GPU を用いたマルチシフト QR 法の高速化について, 2014年並列/分散/協調処理に関する『新潟』サマー・ワークショップ, 朱鷺メッセ新潟コンベンションセンター, 新潟, 2014年7月28-30日.

成瀬由基, 宮田考史, 張紹良, 単位円周上の固有値計算 - Sakurai-Sugiura 法と射影法の利用 -, 第43回数値解析シンポジウム, ホテル日航八重山, 沖縄, 2014年6月11-13日.

西澤慶亮, 宮田考史, 張紹良, GPU を用いたマルチシフト QR 法の高速化について, 第43回数値解析シンポジウム, ホテル日航八重山, 沖縄, 2014年6月11-13日.

T. Miyata, R. Naito, S. Honda, Computing surface Green's functions, International Workshop on Eigenvalue Problems: Algorithms; Software and Applications, in Petascale Computing, International Congress Center EPOCHAL TSUKUBA, Tsukuba, March 7-9, 2014.

D. Lee, T. Miyata, T. Sogabe, T. Hoshi, S.-L. Zhang, A numerical approach to interior eigenvalue problems in electronic structure calculations, International Workshop on Eigenvalue Problems: Algorithms; Software and Applications, in Petascale Computing, International Congress Center EPOCHAL TSUKUBA, Tsukuba, March 7-9, 2014.

T. Miyata, Riccati method for PageRank, 2013 NCTS Workshop on Numerical Linear Algebra and High Performance Computing, Hsinchu, Taiwan, December 9-12, 2013.

宮田考史, PageRank 計算に現れる固有値問題とその数値解法, 第11回計算数学会, プランナールみささ, 鳥取, 2013年11月2-4日.

宮田考史, 大規模固有値問題に対する Jacobi-Davidson 法について, RIMS 研究集会「応用数理と計算科学における理論と応用の融合」, 京都大学数理解析研究所, 2013年10月15-17日.

西澤慶亮, 宮田考史, 固有値計算のためのマルチシフトQR法 - GPU向けの改良 -, 第5回協定講座シンポジウム「計算科学次代を担う若手の集い2013」, 神戸大学, 2013年9月30日.

D. Lee, T. Miyata, T. Hoshi, S.-L. Zhang, An interior eigenvalue problem and its numerical solution, The 9th East Asia SIAM Conference & The 2nd Conference on Industrial and Applied Mathematics, Bandung, Indonesia, June 18-20, 2013.

李東珍, 宮田考史, 星健夫, 張紹良, 中間固有値問題とその数値解法, 第42回数値解析シンポジウム, 四国道後館, 愛媛, 2013年6月12-14日.

西澤慶亮, 宮田考史, 張紹良, GPUを用いたマルチシフトQR法の高速化, 第42回数値解析シンポジウム, 四国道後館, 愛媛, 2013年6月12-14日.

宮田考史, 三森浩平, PageRank 計算に現れる固有値問題の解法について, 日本応用数学会 2013年研究部会連合発表会, 東洋大学, 2013年3月14-15日.

宮田考史, 張紹良, 指定された絶対値を有する複素固有値の計算について, RIMS 研究集会「次世代計算科学の基盤技術とその展開」, 京都大学数理解析研究所, 2012年10月23-25日.

T. Miyata, S.-L. Zhang, A numerical method for eigenvalue problems in the application of photonic crystals, International Symposium on Computics: Quantum Simulation and Design, Osaka University, October 11-13, 2012.

D. Lee, T. Miyata, T. Sogabe, T. Hoshi, S.-L. Zhang, A numerical approach to obtaining intermediate eigenvalues in electronic structure calculations, International Symposium on Computics: Quantum Simulation and Design, Osaka University, October 11-13, 2012.

- ⑳ T. Miyata, T. Sogabe, S.-L. Zhang, Jacobi-Davidson type methods using an invariance of Krylov subspaces for eigenvalue problems, 4th China-Japan-Korea Conference on Numerical Mathematics, Piazza Omi, Otsu, August 25-28, 2012.

- ㉑ D. Lee, T. Miyata, T. Sogabe, T. Hoshi, S.-L. Zhang, On intermediate eigenvalue problems in computational materials science, 4th China-Japan-Korea Conference on Numerical Mathematics, Piazza Omi, Otsu, August

25-28, 2012.

- ㉒ 内藤良平, 宮田考史, 電子状態計算に現れる固有値問題への QZ 法の応用, 第2回協定講座シンポジウム, 神戸大学, 2012年8月23日.

- ㉓ 長谷直哉, 宮田考史, 多項式固有値問題に対する数値解法, 第2回協定講座シンポジウム, 神戸大学, 2012年8月23日.

- ㉔ D. Lee, T. Miyata, T. Sogabe, T. Hoshi, S.-L. Zhang, Eigenvalue computation for a specific need arising from electronic structure calculation, The 8th East Asia SIAM Conference, Taipei, Taiwan, June 25-27, 2012.

- ㉕ T. Miyata, T. Sogabe, S.-L. Zhang, Jacobi-Davidson type methods using a shift invariance property of Krylov subspaces for eigenvalue problems, 2012 SIAM Conference on Applied Linear Algebra, Valencia, Spain, June 18-22, 2012.

〔その他〕

ホームページ

<http://www.fit.ac.jp/research/search/profile/id/223>

6. 研究組織

(1) 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

(2) 研究分担者

なし

(3) 連携研究者

なし