

## 科学研究費助成事業 研究成果報告書

平成 30 年 6 月 23 日現在

機関番号：33704

研究種目：基盤研究(C) (一般)

研究期間：2014～2017

課題番号：26390136

研究課題名(和文) 最新線形方程式ソルバーの丸め誤差に起因する脆弱性の数理的追究と新たな展開

研究課題名(英文) Mathematical analysis of rounding errors which arise from new solvers for solving linear equations and its future developments

研究代表者

阿部 邦美 (Abe, Kuniyoshi)

岐阜聖徳学園大学・経済情報学部・教授

研究者番号：10311086

交付決定額(研究期間全体)：(直接経費) 3,800,000円

研究成果の概要(和文)：線形方程式を解くための最新ソルバー，帰納的次元縮小原理に基づく解法(IDR法)群の収束スピードの悪化や近似解の精度の劣化を防ぐための手法について研究を進めた。また，前処理が丸め誤差の影響を制御する一技法であることから，IDR原理に基づく解法の前処理アルゴリズムを提案し，いくつか同種アルゴリズムの性能評価を行った。さらに，(本申請で得た)結果を利用して先行研究の改良を行った。次に，最新の計算機を用い，前処理の性能を十分に引き出すための並列化計算手法を提案し，その性能評価を行った。また，電磁界解析の実用問題に提案した前処理手法や並列化計算手法を適用し，従来よりも効果があることを示した。

研究成果の概要(英文)：We have proposed strategies for improving the convergence speed and the accuracy of approximate solutions for the Induced Dimension Reduction(IDR)(s) method. We have derived the preconditioned IDR(s) algorithms and then examined the convergence speed and the accuracy of approximate solutions among some implementations of IDR(s). Moreover we have redesigned the conventional Krylov subspace methods for improving the convergence speed and the accuracy of approximate solutions by using the results obtained in this research. We have given strategies to parallelize preconditioning on parallel computers and then evaluated the parallel performance. We have applied our proposed strategies to parallelize preconditioning to the application problem which arises from electromagnetics field, and then shown the effectiveness.

研究分野：数値計算

キーワード：線形方程式 Krylov空間法 帰納的次元縮小法 前処理手法 丸め誤差解析 並列計算

### 1. 研究開始当初の背景

大規模疎(成分の多くは 0)行列を係数にもつ線形方程式の求解問題のための標準的なソルバーは Krylov 空間法であるが、丸め誤差の影響を受け易く、また近年では現象が複雑かつ大規模となったため、計算時間の大幅な増加や丸め誤差の影響による収束スピードの劣化、近似解精度の悪化という問題が起きる。そのため、効率良くかつ精度良く解くことができる計算手法の研究が重要である。

Krylov 空間法は、現在多くの応用分野で用いられ、その有効性が実証されているが、丸め誤差の影響を受け易く、理論通りに収束しないことがある。そのため、1990 年代半ばからアルゴリズムにおける各演算、すなわち行列ベクトル積、内積、ベクトル更新(ベクトル和とベクトルのスカラー倍)の演算から発生する丸め誤差が収束性に与える影響が解析されてきた。現在、Krylov 空間法の世界的な水準の研究では、こういった丸め誤差の分析が必須であり、それらの解析結果は収束性を盤石なものに改善するために役立ってきた。

2008 年に帰納的次元縮小 (IDR と略す)法と呼ばれる最新ソルバーが提案され、従来の Krylov 空間法より収束性が優れていることで注目された。IDR(s)法は、IDR 原理によって構築される空間(新しい空間は前の空間に包含されるように構築される)において近似解を作る方法である。その後すぐに、研究協力者の Sleijpen らによって IDR(s)法と一部の Krylov 空間法との関連性が明らかになり、ひきつづき  $L$  次の安定化多項式を IDR(s)法に組み入れた解法が提案された。また、研究代表者と研究協力者は 2 次の安定化多項式を IDR(s)法に組み入れた解法を提案している。連携研究者の張らは疑似残差の概念を組み込んだ IDR(s)法を開発している。しかしながら、それらの最新ソルバーは、Krylov 空間法と同様、丸め誤差の影響を受け易く、収束しないことがある。また、IDR 原理に基づく解法が開発が(2008~2012 年頃までに)ひと通り終わった現在、これまでの Krylov 空間法の研究の流れ・歴史と同様、次に丸め誤差の影響の解析が期待される。

### 2. 研究の目的

大規模疎行列を係数にもつ線形方程式を解くための標準的なソルバーとして Krylov 空間法が知られている。近年、Krylov 空間法よりも優れた収束性をもつ最新ソルバー IDR(s)法が発表され、注目されている。しかし、Krylov 空間法と同様、丸め誤差の影響を受け易く、理論通りに収束しないことがある。そこで本研究では、Krylov 空間法のこれまでの研究の流れ・歴史と同様、最新ソルバーの丸め誤差に起因する脆弱性を数学的に追究する。すなわち、Krylov 空間法の研究成果を利用、拡張して、IDR(s)法から発生

する丸め誤差が収束性に及ぼす影響を解析する。そして、新しい解析結果に基づいて丸め誤差を制御する手法を提案し、最新ソルバーの収束性を盤石なものにする。丸め誤差に対する解法の性質が定量的に明らかにされると、解法の弱点を克服する手法を開発できるため、それらの結果を利用して先行研究(Krylov 空間法)の収束性も一層、高速で強固なものに改良する。

線形方程式ソルバーの研究は計算工学の応用分野と密接に関連しており、それらの分野では線形方程式の数値解をできるだけ高速かつ安定に解けることが、緻密に大規模な現象を解明するために重要となる。そこで、(本申請で)開発した手法・アルゴリズムを超大規模な実用問題に適用し、従来よりも求解効率が向上することを示す。また、コンピュータの発展が著しい近年、最新高性能コンピュータの性能を十分に引き出すようなアルゴリズムを開発する。

### 3. 研究の方法

連携研究者が出版したある論文は、Krylov 空間法のために明らかにされた解析結果を拡張または融合すれば、IDR 原理に基づく解法群の収束性が解析できることを示唆している。すなわち、IDR 原理に基づく解法群の近似解は、ブロック Krylov 部分空間上で生成され、そのブロック Krylov 空間では Lanczos 原理(短い漸化式)を用いるステップと、Arnoldi 原理(長い漸化式)を用いるステップとが交じり合っているため、Arnoldi 原理と Lanczos 原理を用いる Krylov 空間法の両者の解析結果を結びつける必要があることを意味している。これらの点に注意し、まず丸め誤差が強く発生する箇所の特定や、固有値、固有ベクトルを用いた分析を行なう。次に、Krylov 空間法の収束スピードや近似解の精度はアルゴリズムの各演算から発生する丸め誤差と関連しているため、残差多項式係数の計算で発生する丸め誤差が収束スピードに与える影響の解析や、行列ベクトル積やベクトル更新の演算から発生する丸め誤差が近似解の精度に与える影響の解析を進める。次に、その解析結果に基づき、丸め誤差に起因する脆弱性を克服・制御するための対策手法を開発する。同時に、その解析結果に基づいて先行研究(Krylov 空間法)を改良できないか検討する。ついで、丸め誤差の影響を強く受ける複数次右辺項に対する IDR 原理に基づく解法のための制御手法を提案する。さらに、社会的に役立つ応用問題、特に収束スピードの劣化、近似解の精度の悪化が起こると予想される電磁界解析や流体解析の問題に(本申請で)開発した制御手法を適用し、従来の方法よりも求解効率が向上することを示す。同時に、最新の計算機向きのアルゴリズム、すなわち GPU またはメモリーコア上で効率性の高いアルゴリズムを開発する。

#### 4. 研究成果

線形方程式を解くための最新ソルバー、IDR 原理に基づく解法群の収束スピードの悪化や近似解精度の劣化を防ぐためのアルゴリズムについて研究を進めた。とくに、スムージングという技法を用いて IDRstab 法 (IDR(s)法)にL次の安定化多項式を組み入れた方法)の残差の振動を抑制する(疑似残差を最小化した)アルゴリズムを提案した。その際、計算量を抑える工夫をした。また、前処理が丸め誤差の影響を制御する一技法であることから、IDRstab 法の前処理アルゴリズムを提案し、いくつか同種のアルゴリズムとの性能評価を行った。さらに、近似解精度を改善する技法を提案した。つぎに、先行研究(Krylov 空間法)を改良することができないか検討した。とくに、Krylov 空間法のために提案された収束スピードを改善する技法をもとに最新ソルバーの収束性を改善する技法や、実対称行列および複素対称行列をもつ線形方程式を従来よりも効率良く解くためのアルゴリズムを提案した。また、複数右辺項をもつ線形方程式に対する IDR(s)法に Krylov 空間法のために提案された収束スピードを改善する技法を適用し、その効果を調べた。

さらに、最新の計算機において前処理の性能を十分に引き出すための並列化計算手法を提案し、その性能評価を行った。とくに、Eisenstat トリックを用いる symmetric SOR 法前処理付き Krylov 空間法(対称行列用)を提案し、ハイブリッド並列を用いて並列化したときの並列計算機上(256 コア)での収束性、並列性能を調査した。また、この並列化手法を実用的な応力解析問題などに適用し、その収束性、並列性能を評価した。つぎに、電磁界解析の実用問題を取り上げ、提案した前処理手法および並列化計算手法を適用し、従来よりも効率的であることを示した。とくに、アルゴリズム上で現れる内積演算の箇所を減らして通信時間を減らす技法を施したアルゴリズムを提案し、GPU を用いた並列計算でその有効性を明らかにした。

#### 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 12 件)

1. A quasi-minimal residual variant of IDRstab using the residual smoothing technique, Kensuke Aihara, Kuniyoshi Abe, Emiko Ishiwata, Applied Mathematics and Computation (Elsevier), Vol. 236, 2014, 67-77 (査読有)
2. Hybrid BiCR methods with a stabilization strategy for solving linear equations, Kuniyoshi Abe, Kensuke Aihara, AIP Conference Proceedings 1648 (ICNAAM 2014), Vol. 1648, 2015, 690002-1-4 (査

読有)

3. An implementation IDRstab with biorthogonality relations for solving linear systems, Kensuke Aihara, Kuniyoshi Abe, Emiko Ishiwata, AIP Conference Proceedings 1648 (ICNAAM 2014), Vol. 1648, 2015, 690005-1-4 (査読有)
4. Preconditioned IDRStab Algorithms for Solving Nonsymmetric Linear Systems, Kensuke Aihara, Kuniyoshi Abe, Emiko Ishiwata, IAENG International Journal of Applied Mathematics, Vol. 45, 2015, 164-174 (査読有)
5. Variant Implementations of SCBiCG Method for Linear Equations with Complex Symmetric Matrices, Kuniyoshi Abe, Seiji Fujino, Proceedings: 17th International Symposium on Symbolic and Numeric Algorithms for Scientific Computing, 2015, 117-120 (査読有)
6. 線形方程式を解くための MrR(ミスターR)法について, 阿部邦美, 藤野清次, 火の国情報シンポジウム 2016 論文集(情報処理学会報告会 IPSJ SIG Technical Report), 2016, 1-5 (査読無し)
7. Performance of Krylov subspace methods for symmetric matrices in hybrid parallelization, Kuniyoshi Abe, Seiji Fujino, PDP 2017 proceedings, 2017, 224-228 (査読有)
8. Variable Preconditioned Krylov Subspace Method with Communication Avoiding Technique for Electromagnetic Analysis, Soichiro Ikuno, Gong Chen, Taku Itoh, Susumu Nakata, Kuniyoshi Abe, IEEE Transactions on Magnetics (IEEE), Vol. 53, No.6, 2017, 1-4 (査読有)
9. On MrR Method for Solving Linear Equations with Symmetric Matrices, Kuniyoshi Abe, Seiji Fujino, Modeling, Design and Simulation of Systems (Part 2) (Springer), Communications in Computer and Information Science Vol. 752, 2017, 524-533 (査読有)
10. LBAS: Lanczos Bidiagonalization with Subspace Augmentation for Discrete Inverse Problems, Per Christian Hansen, Kuniyoshi Abe, Technical Report 2017-03 - DTU, 2017 (査読無し)
11. Converting BiCR Method for Linear Equations with Complex Symmetric Matrices, Kuniyoshi Abe, Seiji Fujino, Applied Mathematics and Computation (Elsevier), Vol.321, 2018, 564-576 (査読有)
12. Application of Eisenstat-SSOR Preconditioner to Realistic Stress Analysis Problems by Parallel Cache-Cache Computing, Kuniyoshi Abe, Seiji Fujino, Parallel Computing is Everywhere (IOS press), Advances in

Parallel Computing Vol. 32, March 2018,  
Pages 17-26 (査読有)

〔学会発表〕(計 12 件)

1. Hybrid BiCR method with a stabilization strategy for solving linear equations, Kuniyoshi Abe, Kensuke Aihara, 12th International Conference of Numerical Analysis and Applied Math., Greece, 2014
2. バニラ戦略付きハイブリッドBiCR法, 阿部邦美, 日本応用数理学会 環瀬戸内応用数理研究部会第 18 回シンポジウム, 加計学園国際学術交流センター, 2014
3. Variants of SCBiCG method for solving linear equations with symmetric complex matrices, Kuniyoshi Abe, Seiji Fujino, International Workshop on Information Technology, Applied Mathematics and Science 2015, Japan, 2015
4. Variant Implementations of SCBiCG Method for Linear Equations with Complex Symmetric Matrices, Kuniyoshi Abe, Seiji Fujino, Workshop on Information Technology, Applied Mathematics and Education (招待講演), Japan, 2015
5. Variant Implementations of SCBiCG Method for Linear Equations with Complex Symmetric Matrices, Kuniyoshi Abe, Seiji Fujino, 17th International Symposium on Symbolic and Numeric Algorithms for Scientific Computing, Romania, 2015
6. Variant Implementations of SCBiCG Method for Linear Equations with Complex Symmetric Matrices, Kuniyoshi Abe, Seiji Fujino, The 8th International Conference on Science and Mathematics Education in Developing Countries (招待講演), Myanmar, 2015
7. 線形方程式を解くための Mr (ミスター) R 法について, 阿部邦美, 藤野清次, 2015 年度火の国情報シンポジウム (情報処理学会), 宮崎大学, 2016
8. On Mister R Method for Solving Linear Equations with Symmetric Matrices, Kuniyoshi Abe, Seiji Fujino, Computational Methods in Applied Mathematics, Finland, 2016
9. Performance of Krylov subspace methods for symmetric matrices in hybrid parallelization, Kuniyoshi Abe, Seiji Fujino, Parallel, Distribute, and Network-Based Processing, Russia, 2017
10. On MrR Method for Solving Linear Equations with Symmetric Matrices, Kuniyoshi Abe, Seiji Fujino, 17th Asia Simulation Conference, Malaysia, 2017
11. A Numerical Study for Complex Symmetric Linear Equations Arisen from a Mixed Electromagnetic Problem, Kuniyoshi Abe, Seiji Fujino, 18th International

Symposium on Applied Electromagnetics and Mechanics, France, 2017

12. Application of Eisenstat-SSOR Preconditioner to Realistic Stress Analysis Problems by Parallel Cache-Cache Computing, Kuniyoshi Abe, Seiji Fujino, Parallel Computing Conference, Italy, 2017

〔図書〕(計 0 件)

〔産業財産権〕

出願状況 (計 0 件)

取得状況 (計 0 件)

〔その他〕

ホームページ等

## 6. 研究組織

### (1) 研究代表者

阿部邦美 (ABE Kuniyoshi)

岐阜聖徳学園大学・経済情報学部・教授

研究者番号: 10311086

### (2) 研究分担者

石渡恵美子 (ISHIWATA Emiko)

東京理科大学・理学部・教授

研究者番号: 30287958

2015年3月まで

### (3) 連携研究者

張紹良 (ZHANG Shao-Liang)

名古屋大学大学院・工学研究科・教授

研究者番号: 20252273

生野壮一郎 (IKUNO Soichiro)

東京工科大学・コンピュータサイエンス

学部・教授

研究者番号: 70318864

### (4) 研究協力者

Gerard Sleijpen

Utrecht University・Department of

Mathematics・Professor Emeritus