様　式　Ｃ－１９、Ｆ－１９－１、Ｚ－１９　（共通）

科研費
KAKENHI

科学研究費助成事業　　研究成果報告書

令和　５ 年　６ 月 ２７ 日現在

機関番号：１２１０２
研究種目：基盤研究(C)（一般）
研究期間：2017～2022
課題番号：１７Ｋ００１６４

研究課題名（和文）高精度演算と共役勾配法を用いた非対称線形方程式の解法ソフトウェアの開発と高速化

研究課題名（英文）Development of Iterative solvers for unsymmetric linear equations using Conjugate Gradient method and High Precision Arithmetic

研究代表者

長谷川　秀彦（HASEGAWA, Hidehiko）

筑波大学・図書館情報メディア系・教授

研究者番号：２０１６４８２４

交付決定額（研究期間全体）：（直接経費）　　3,500,000円

研究成果の概要（和文）：　数値シミュレーションの核は「大規模な非対称疎行列を係数とする連立一次方程式の解法」であり、クリロフ部分空間法と総称される反復法が広く用いられている。係数行列が対称の場合は共役勾配法 Conjugate Gradient Method が多くの問題に対して優れた収束性を示すが、非対称の場合はそのような万能な方法が存在していない。
本研究では、方程式への修正によって係数行列を対称化し、高精度演算を用いて共役勾配法を良好な収束にできないかを検討する。対称化には、非対称行列Aから２倍の次元数を持つ行列を構成する方法と、Aと転置行列A'から対称行列 A'A または AA'を構成する方法を扱う。

研究成果の学術的意義や社会的意義
非対称行列 A から、次元を拡大したり、A'A を作るといった素朴な方法で対称行列を係数とする方程式を構成して共役勾配法で解く。短い漸化式からなる共役勾配法は次元数での収束が理論的に保証されるという利点がある。
多くの場合、共役勾配法は安定に収束するが、丸め誤差の影響を受けやすいため、対称化によって条件数が２乗になること、反復あたりの演算量増大は好ましくない。コンピュータの高速・大容量化は、演算コストを下げるとともに、高精度演算のコストも下げている。コストと精度の問題でこれまでは論外とされていた手法から、隠れた優位性を発見できないかというのが本研究の意義である。

研究成果の概要（英文）：　The core of numerical simulation is "the solution of simultaneous linear equations with large-scale asymmetric sparse matrices as coefficients", and the iterative method collectively called the Krylov subspace method is widely used. When the coefficient matrix is symmetric, the Conjugate Gradient Method shows excellent convergence for many problems, but when it is asymmetric, such a versatile method does not exist.
In this research, we examine whether the conjugate gradient method can be made to converge well by symmetrizing the coefficient matrix, modifying the equations, and applying high-precision arithmetic. Symmetrizing includes constructing a matrix with twice the number of dimension from an asymmetric matrix A, and constructing a symmetric matrix A'A or AA' from A and the transposed matrix A'.

研究分野：コンピューティングサイエンス

キーワード：連立一次方程式の反復解法　非対称行列　対称化　共役勾配法　高精度演算　疎行列

様　式　C－１９、F－１９－１、Z－１９（共通）

１．　研究開始当初の背景

コンピュータを活用した数値シミュレーションの核は「離散化された連立一次方程式の解法」であり、そこでは大規模な疎行列を係数とする連立一次方程式に対して、クリロフ部分空間法と呼ばれる反復法が用いられている。

係数行列が対称の場合には、共役勾配法 Conjugate Gradient Method が多くの問題に対して優れた収束性を示す。いっぽう、係数行列が非対称の場合には、数々の手法が提案されているが、対称問題に対する共役勾配法のような優れた解法はみつかっていない。実際、すべての非対称問題に対してひとつのクリロフ部分空間法アルゴリズムで満足な収束性を得られることはないことが保証され、収束性は問題とアルゴリズムの組み合わせによって大きく異なる。

本研究では、方程式の係数行列が対称行列となるように修正し、対称行列に対する優れた解法である共役勾配法の適用を試みる。このような修正では、行列の次元数の増大、係数行列の条件数の増大などの副作用が現れるが、高精度演算を適用することで精度的な問題を回避する。演算量の増大によって計算時間も増大するが、技術革新によるコンピュータの高速化で吸収できる程度であれば許容し、非対称系のアルゴリズムに含まれる不安定さの除去を重視し、安定に解けることを目指す。

２．　研究の目的

対象とするのは、大規模、非対称、疎行列を係数に持つ連立一次方程式

$$Ax = b$$

であるが、テストには大規模でない行列を使用する。対称化の方法は、(A）２倍の次元数を持つ方程式を構築する方法、(B）転置行列を A'として A'A または AA' のような対称行列を構成する方法である。どちらの場合も、プログラム中で行列として扱うのは疎行列A、A' のみとなる実装とし、プログラム中での基本演算は、疎行列・ベクトル積とベクトル演算とする。

３．　研究の方法

（A）２倍の次元数を持つ方程式を構築する方法では、

$$\begin{bmatrix} O & A \\ A' & O \end{bmatrix}$$

あるいは

$$\begin{bmatrix} O & A' \\ A & O \end{bmatrix}$$

のような係数行列を仮定して、これら２倍の次元数を持つ方程式に対する共役勾配法を構成する。新たに必要となるのは、並行して解くことになる連立一次方程式

$$A'y = c$$

であり、y と c は任意に定められる。元になっている方程式Ax＝bの解xと y はなんらかの関係を持ち、似たような収束を示すことが望ましい。

（B）A'A または AA'によって対称行列を構成する方法では、A'A、AA'とも条件数が元の行列の２乗となるので、丸め誤差の影響を受けやすい共役勾配法にとっては大問題である。丸め誤差の問題は、コンピュータにおける演算精度の問題であり、理論的には誤差のない計算環境であれば解消できる。ここでは４倍精度程度の高速な高精度演算が利用できるので、これによってどの程度の解消できるかに興味がある。

４．　研究成果

（１）（A）の方法と類似しているのが非対称行列向け解法の双共役勾配法 Bi-Conjugate Gradient Method である。SuiteSparse Matrix Collection の非対称行列 875 種に対して倍精度演算の双共役勾配法を適用し、235 種（27%）での収束を確認した。全体的な比率は少なめであるが、相対的によい収束を示すことが確認された。今回の研究においては、行列の種数、収束性能において、この結果を上回ることが必要である。

係数行列に対して画像化を行い、28*28、 56*56、 112*112、 224*224 のグレイスケール画像を作成し、収束非収束を教師データとして CNN を用いた機械学習を行った。5-fold cross-validation によって 80% 超の Accuracy で収束非収束が予測できることを示した。(「行列・固有値の解法とその応用」研究部会，2019; HPC Asia, 2020; JSIAM Letters, 2020）

（２）（A）の方法の収束判定では、A についての方程式を重点的に判定する方法、A と A' についての方程式を同等に判定する方法という２種類の方針が考えられる。いずれの方法でも、解を既知として扱える方程式A'y ＝ cを補強に使うメリットを活用できなかった。

網羅的かつ全体的な結論とは言えないが、並行させて解く方程式に任意性があるとはいえ、

Ａｘ＝ｂとＡ’ｙ ＝ ｃのｘとｙには、なんらかの関係性が必要なようである。
（３）（Ｂ）の方法で、A’A あるいはＡA’とした素朴な対称化では、高精度演算を適用しても良好な収束性を得ることが難しかった。対角優位性が保証されない行列に対しては、丸め誤差の影響を少なくしても共役勾配法にとっては難しい問題といえる。
（４）そこで対角行列Ｄを導入し、 （DA）’DA といった対称化を試みた。網羅的なテストではないが、多くの行列に対して有効なＤの決定方法を見いだすことはできなかった。

与えられた疎行列が対称性、対角優位性を持つのと、非対称行列 A から恣意的に対角優位となるよう構成した対称行列 A’DDA（疎度も変わる）には、共役勾配法の収束に強い影響を与える相違点があると考えられる。今後、固有値分布を定性的に比較する必要があるかもしれない。
（５）多くの問題において高精度化は収束改善にはつながらなかった。倍精度で収束しなかった問題が、４倍精度相当の演算によって収束することはある。倍精度で収束に 100 反復必要だった問題が、４倍精度相当の演算では 80 反復でよかったというような例はほとんどない。この結果から、丸め誤差を少なくできる高精度演算が有効なのは明らかであるが、実用面では有効性を発揮させることが非常に難しいことがわかった。
（６）実験には４倍精度相当の演算である Double-double 演算、８倍精度相当の演算である Quad-double 演算、標準的な Double 演算を混在させて使用できる環境が必要である。C などのプログラミング言語用ライブラリでは、コンパイルによって高速性が得られるが、データの型に強く依存したプログラムを書かなければならないことと、データ型の混在が難しいため、実行速度の面では不利だがインタプリタ型の計算環境として、MATLAB 上に高精度演算環境 MuPAT (Multiple Precision Arithmetic Toolbox) を実装し、FMA、SIMD、OpenMP などを用いた高速化を実施した。ここでの高速化方法に関する知見をまとめて発表した。(SIAM Conference on Parallel Processing for Scientific Computing, 2018; 日本応用数理学会年会, 2018; 査読付き、第 17 回情報科学技術フォーラム, 2018; 査読付き、ParCo 2019; 査読付き、Advances in Parallel Computing, 2020; HPC Asia 2020)
（７）非対称行列 ASIC_100ks, epb3, memplus, TSOPF_RS_b39_c7 などについて、双共役勾配法を用いて Double 演算と Double-double 演算の組み合わせを評価した。すべての演算を倍精度演算で実行する All Double、使用する変数の部分的な Double-double 化、反復の途中で Double から Double-double への切替え(DQ-SWITCH)、Full Double-double を適用した。部分的な Double-double の改善効果はわずかで、問題によっては効果のない場合も観察された。Full Double-double はきわめて安定な収束だった。異なる演算精度による restart 法である DQ-SWITCH は、Full Double-double より１割ほど反復回数が増加するが、Full Double-double と同様の収束を示した。係数行列を Double 精度とし、Double-double を上位の変数配列と下位の変数配列に保持し、AVX2 を用いて高速化した環境であれば、Full Double-double の約半分の計算時間、Double 演算よりも速く安定に解が得られた。DQ-SWITCH はきわめて有効かつシンプルなアルゴリズムであるが、自動的に切り替える方法は見つけられていない。(Preconditioning 2017; SIAM Conference on Parallel Processing for Scientific Computing, 2020)

記述の精緻化に伴う問題の大規模化、あるいは問題の複雑化により、倍精度演算では収束させることが難しかったり、得られた解の誤差が大きかったりという問題に遭遇することが増えてきた。これまでは、前処理を工夫し、問題の条件を改善することで収束性の向上と誤差の軽減に対応してきたが、効果的な前処理は演算順序に依存性が強く、大規模な分散並列計算には向かない。いっぽうコンピュータの進歩は、演算については各段の性能向上が達成されているが、メモリアクセスに対してはさほど大きな性能向上はない。

高精度化が有効であれば、最良のケースでは前処理が不要となり、前処理なしのクリロフ部分空間法で済む。前処理なしのクリロフ部分空間法では、内積演算と疎行列ベクトル積のみが並列化阻害要因となるが、アルゴリズムは汎用的で、良い前処理を探索して実装するのに比べれば微々たるコストである。

詳細な評価をするまでもなく、高精度演算が高コストであることは明らかである。そこで、反復回数は少なくなるが１反復あたりの計算時間がかかる高精度演算と、反復回数は多いが１反復あたりの計算時間が少ない倍精度演算のトレードオフを考えことになる。特定の変数を高精度化し１反復内に倍精度演算と高精度演算を混在させるのがよいのか、あるいは倍精度の反復と高精度演算の反復を組み合わせるのがよいのかも検討する必要がある。反復計算の質を保ちながら、いかに演算コストを低減させるかも実用的な観点では重要である。

倍精度演算の組合せで４倍精度演算を実現するには、数十倍から数百倍の倍精度演算が必要になるが、メモリアクセスは２倍である。コンピュータの演算性能とメモリアクセス性能の向上度を考えれば、メモリアクセスに対して演算が多いことはむしろメリットとも言えるだろう。

複数の演算精度を同時に使い分けて利用できるようになり、アルゴリズム開発に演算精度選択という自由度が付与された。計算パワーを計算の質の向上にも活用すべきだと考えている。

５．主な発表論文等

〔雑誌論文〕　計2件（うち査読付論文　2件／うち国際共著　0件／うちオープンアクセス　1件）

１．著者名 Ota Ryo、Hasegawa Hidehiko	４．巻 12
２．論文標題 Predicting the convergence of BiCG method from grayscale matrix images	５．発行年 2020年
３．雑誌名 JSIAM Letters	６．最初と最後の頁 45～48
掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） 10.14495/jsiaml.12.45	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている（また、その予定である）	国際共著 －

１．著者名 Yagi Hotaka、Ishiwata Emiko、Hasegawa Hidehiko	４．巻 36
２．論文標題 Acceleration of Interactive Multiple Precision Arithmetic Toolbox MuPAT Using FMA, SIMD, and OpenMP	５．発行年 2020年
３．雑誌名 Advances in Parallel Computing	６．最初と最後の頁 431-440
掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） 10.3233/APC200069	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11件（うち招待講演　0件／うち国際学会　7件）

１．発表者名 Hidehiko Hasegawa, Hotaka Yagi, and Emiko Ishiwata
２．発表標題 Parallelization of DD and QD high-precision arithmetic operations
３．学会等名 SIAM Conference on Parallel Processing for Scientific Computing (PP20)（国際学会）
４．発表年 2020年

１．発表者名 Ryo Ota and Hidehiko Hasegawa
２．発表標題 Predicting the Convergence of an Iterative Method from Matrix Images using CNN
３．学会等名 International Conference on High performance Computing in Asia-Pacific Region (HPC Asia 2020)（国際学会）
４．発表年 2020年

1．発表者名 Hotaka Yagi, Emiko Ishiwata, and Hidehiko Hasegawa
2．発表標題 More Accurate Computation for Double-double Arithmetic without Additional Execution Time by Parallel Processing
3．学会等名 International Conference on High performance Computing in Asia-Pacific Region (HPC Asia 2020)（国際学会）
4．発表年 2020年

1．発表者名 Hotaka Yagi, Emiko Ishiwata, and Hidehiko Hasegawa
2．発表標題 Acceleration of Interactive Multiple Precision Arithmetic Toolbox MuPAT by FMA, SIMD, and OpenMP
3．学会等名 International Conference of Parallel Computing (ParCo 2019)（国際学会）
4．発表年 2019年

1．発表者名 太田 凌、長谷川秀彦
2．発表標題 行列のグレースケール画像を用いたBiCG法収束予測の試み
3．学会等名 日本応用数理学会 第15回研究部会連合発表会年会，「行列・固有値の解法とその応用」研究部会
4．発表年 2019年

1．発表者名 八木 武尊， 長谷川 秀彦， 石渡 恵美子
2．発表標題 並列処理を用いた対話的多倍長演算環境 MuPAT の高速化
3．学会等名 第17回情報科学技術フォーラム
4．発表年 2018年

１．発表者名
八木武尊， 菱沼利彰，石渡恵美子，長谷川秀彦

２．発表標題
多倍長精度浮動小数点演算の並列化

３．学会等名
日本応用数理学会 2018年度年会，「正会員主催OS：多倍長精度浮動小数点演算の高速化手法と応用」

４．発表年
2018年

１．発表者名
Hotaka Yagi, Emiko Ishiwata, and Hidehiko Hasegawa

２．発表標題
Accelaration of MuPAT on MATLAB/scilab Using Parallel Processing

３．学会等名
the eighteenth SIAM Conference on Parallel Processing for Scientific Computing (PP18)（国際学会）

４．発表年
2018年

１．発表者名
Hidehiko Hasegawa, Toshiaki Hishinuma, and Teruo Tanaka

２．発表標題
DD-AVX Library

３．学会等名
ITBL booth's poster presentation at SC17

４．発表年
2017年

１．発表者名
H. Hasegawa and T. Hishinuma

２．発表標題
Robust and Fast BiCG Method using SIMD-Accelerated DD Arithmetic

３．学会等名
The International Conference on Preconditioning Techniques for Scientific and Industrial Applications (Preconditioning 2017)（国際学会）

４．発表年
2017年

〔図書〕　計1件

1．著者名	4．発行年
長谷川秀彦，今村俊幸，山田進，櫻井鉄也，荻田武史，相島健助，木村欣司，中村佳正	2019年
2．出版社	5．総ページ数
丸善出版	214
3．書名	
固有値計算と特異値計算	

〔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
研究分担者	田中　輝雄 (TANAKA TERUO) (90622837)	工学院大学・情報学部・教授 (32613)	
研究分担者	石渡　恵美子 (ISHIWATA EMIKO) (30287958)	東京理科大学・理学部・教授 (32660)	

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