

## 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 6 月 5 日現在

機関番号：23901

研究種目：若手研究(B)

研究期間：2009～2012

課題番号：21760058

研究課題名（和文）計算科学に現れる超大規模シフト線形方程式の高速・高精度解法に関する研究

研究課題名（英文）Study on fast and robust iterative methods for solving large and sparse shifted linear systems arising from computational science

研究代表者

曾我部 知広 (Sogabe Tomohiro)

愛知県立大学・大学院情報科学研究科・准教授

研究者番号：30420368

研究成果の概要（和文）：計算科学に現れる超大規模シフト線形方程式の高速・高精度解法の開発を行い、複素対称行列用として Shifted COCR 法④、（複素）非対称行列用として Restarted Shifted GMRES 法の改良版⑧が提案された。特に、ある物性物理学に現れる問題に対して Shifted COCR 法は、従来の COCR 法と比較して約 26 倍高速であることが分かった。さらに関連研究として次の成果が得られた。基礎解法の開発として COCR 法の改良②、IDR 法の改良③⑤、GMRES(m) 法の改良⑥、特殊行列の解法⑨、そして一般化されたシフト線形方程式の複素対称行列用の解法が開発された⑦。

研究成果の概要（英文）：We developed some efficient iterative methods for solving large and sparse shifted linear systems that arise from computational science. As a result, the shifted COCR method was proposed for solving complex symmetric case, and a variant of the shifted GMRES method was proposed for (complex) nonsymmetric case. Remarkably, the shifted COCR method was about 26 times faster than the COCR method for a problem arising from large scale electronic structure calculation. As related work, the following results are obtained: (1) An improvement of the COCR method for solving complex symmetric linear systems; (2) Improvements of the IDR method; (3) An improvement of the GMRES(m) method for solving nonsymmetric linear systems; (4) a fast solver for linear systems with a special matrix; (5) Efficient iterative method for generalized shifted linear systems with complex symmetric matrices.

交付決定額

(金額単位：円)

	直接経費	間接経費	合計
2009 年度	2,000,000	600,000	2,600,000
2010 年度	500,000	150,000	650,000
2011 年度	500,000	150,000	650,000
2012 年度	700,000	210,000	910,000
年度			
総計	3,700,000	1,110,000	4,810,000

研究分野：工学

科研費の分科・細目：応用物理学・工学基礎

キーワード：シフト線形方程式，クリロフ部分空間法，COCR 法，Bi-CR 法

## 1. 研究開始当初の背景

素粒子物理学・物性物理学・最適化問題に共通して現れる複数の特殊な線形方程式(連立一次方程式)系である超大規模複素(非)対称シフト線形方程式を高速かつ高精度に数値解を得ることは、重要な課題である。クリロフ部分空間法は一つの線形方程式に対する高性能な数値解法であるが、シフト線形方程式と対してクリロフ部分空間法の理論をうまく用いると、ほぼ一つの線形方程式を解く手間でも複数の方程式を同時に解くことができるという理論があり、この理論に基づく最も有名な解法の一つは 2003 年にドイツの研究者 A. Frommer により発表されたシフト複素非対称線形方程式に対する Bi-CG 法系統の解法であり、特に素粒子物理学分野(格子量子色力学)に応用されている。近年では、物性物理学(大規模電子構造計算)に現れる複素対称シフト線形方程式を高速に解く需要が高まっており、この解法として複素対称線形方程式の数値解法である COCG 法を基礎とした Shifted COCG 法が我々により提案されている。

## 2. 研究の目的

研究開始当初の背景に書かれているように、シフト線形方程式用の解法は共役勾配(CG)法に基づいている。近年、共役残差(CR)法系統の解法が新たに開発され、複素対称線形方程式用として COCR 法が、複素非対称行列用の解法として Bi-CR 法がある。COCR 法や Bi-CR 法は、COCG 法や Bi-CG 法よりも高速かつ高精度に計算できる場合があるため、CR 法系統の解法を基礎としてシフト線形方程式を開発することを目的とする。

## 3. 研究の方法

具体的には以下の 3 点に関して研究を行う

- (1) 複素対称行列用の解法の開発
- (2) (複素)非対称行列用の解法の開発
- (3) 線形方程式の数値解法の関連研究

(1), (2)の目的を達成するためにクリロフ部分空間のシフト不変性を利用する。具体的には、ある一つの方程式を解くために生成される部分空間と他の方程式を解くために生成される部分空間とは一致するという性質を利用して、部分空間を生成する全計算量を大幅に削減する。これを基礎として、(1)の目的を達成するために、我々が開発した COCR 法を改良し、(2)の目的を達成するために Bi-CR 法を改良する。(3)は随時基本解法の開発を行う。基本解法の開発も本研究課題の推進には重要である。なぜならば、効率の良い基本解法の性能がシフト線形方程式の解法に継承される可能性が高いからである。

## 4. 研究成果

- (1) 複素対称線形方程式用の数値解法の開発  
(Shifted COCR 法) Si(001)-1024 原子系の表面再構成シミュレーションの問題に現れるシフト複素対称線形方程式の問題に対する計算結果を表 1 に示す。

表 1 : COCR 法と Shifted COCR 法の計算時間の比較 (論文④の表 3 を一部抜粋)。

数値解法	計算時間[秒]
COCR 法	251.42
Shifted COCR 法	9.38

表 1 から本研究成果である Shifted COCR 法は COCR 法に比べて約 26 倍高速であった。ここで、解くべき線形方程式の数は物理的要求である 1001 である。この結果から、応用として例えば、大規模電子構造計算に現れるグリーン関数の高速計算に役立つと期待される。

## (2) (複素)非対称行列用の解法の開発

Bi-CR法を基礎とした解法の理論は完成したが、論文にはまとめられなかった。一方、(複素)非対称行列用の解法としてRestarted Shifted GMRES(m)法の改良版を提案した。問題によっては、提案法は従来法よりも約6倍程度高速であった。本成果は、格子量子色力学の問題に現れるシフト線形方程式に対する高速解法に繋がると期待される。

## (3) 線形方程式の数値解法の関連研究

ここでは、関連研究成果を段落毎に述べる。非対称線形方程式の解法として、近年IDR(s)法が注目されている。この理由の一つは行列サイズを $N \times N$ とすると従来の解法では高々 $2N$ の行列・ベクトル積の回数以内で解に収束するのに対し、IDR(s)法では高々 $N+N/2$ 回の反復回数以内で収束するという理論による。ただし、収束の振る舞いは比較的不規則であるため、滑らかな収束の振る舞いを示すように改良した⑤。また、IDR(s)法は1本の右辺ベクトルを有する非対称線形方程式用の解法であるため、複数本の右辺ベクトルを同時に解くことができるBlock IDR(s)法を提案した③。

非対称線形方程式のIDR(s)法とは異なる著名な解法としてGMRES(m)法がある。GMRES(m)法は、 $m$ 反復毎にこれまでに得られた近似解を新たに初期値として反復を開始(リスタート)するが、このリスタート時に適切な近似解の修正量を施すことによって、収束の改良を図った⑥。

5重対角行列に近い係数行列を持つ線形方程式の解法を開発した⑨。(常)微分方程式の境界値問題に対する数値解法としての応用が期待される。

一般化されたシフト線形方程式の複素対称行列用の解法が開発された⑦。この成果

は、大規模電子構造計算に現れるグリーン関数の効率的計算に繋がると期待される。

本研究課題の推進中に当初予想されなかった成果が得られた。具体的にはシフト線形方程式の数値解法の理論が最適化問題(球面制約上の二次計画問題)に役立つ可能性が見いだされ、高速解法が提案された(国際会議での講演③⑥)。研究課題終了後も、継続して研究を進め、成果を論文として発表する予定である。

## 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9件)

- ① 曾我部知広, 張紹良: 大規模シフト線形方程式の数値解法—クリロフ部分空間の性質に着目して—, 応用数理, 19 (2009), pp. 27-42. (解説論文)  
URL: <http://ci.nii.ac.jp/naid/110007361021>
- ② Y. -F. Jing, T. -Z. Huang, Y. Zhang, L. Li, G. -H. Cheng, Z. -G. Ren, Y. Duan, T. Sogabe, and B. Carpentieri: Lanczos-type variants of the COCR method for complex nonsymmetric linear systems, J. Comput. Phys., 228 (2009), pp. 6376-6394. (査読あり)  
DOI: 10.1016/j.jcp.2009.05.022
- ③ L. Du, T. Sogabe, B. Yu, Y. Yamamoto, and S. -L. Zhang: A block IDR(s) method for nonsymmetric linear systems with multiple right-hand sides, J. Comput. Appl. Math., 235 (2011), pp. 4095-4106. (査読あり)  
DOI: 10.1016/j.cam.2011.02.035
- ④ T. Sogabe, S. -L. Zhang: An extension of the COCR method to solving shifted linear systems with complex symmetric matrices, East Asia J. on Appl. Math., 1 (2011), pp. 97-107. (査読あり)  
DOI: 10.4208/eajam.260410.240510a
- ⑤ L. Du, T. Sogabe, and S. -L. Zhang: A variant of the IDR(s) method with quasi-minimal residual strategy, J. Comput. Appl. Math. 236 (2011), pp. 621

-630. (査読あり)  
DOI: 10.1016/j.cam.2011.07.027

- ⑥ A. Imakura, T. Sogabe, and S.-L. Zhang: An efficient variant of the GMRES(m) method based on error equations, East Asia J. on Appl. Math., 2(2012), pp.19-32. (査読あり)  
DOI: 10.4208/eajam.280611.030911a
- ⑦ T. Sogabe, T. Hoshi, S.-L. Zhang, and T. Fujiwara: Solution of generalized shifted linear systems with complex symmetric matrices, J. Comput. Phys., 231(2012), pp. 5669-5684. (査読あり)  
DOI: 10.1016/j.jcp.2012.04.046
- ⑧ A. Imakura, T. Sogabe, and S.-L. Zhang: An efficient variant of the restarted shifted GMRES for solving shifted linear systems, J. Math. Res. Appl., 33(2013), pp. 127-141. (査読あり)  
DOI:10.3770/j.issn:2095-2651.2013.02.001
- ⑨ J. Jia and T. Sogabe: A novel algorithm and its parallelization for solving nearly penta-diagonal linear systems, Int. J. Comput. Math., 90(2013), pp. 435-444.  
DOI: 10.1080/00207160.2012.725845

[学会発表] (計 8 件)

- ①T. Sogabe and S.-L. Zhang: An approach to fast solution of generalized shifted linear systems with complex symmetric matrices, Numerical Analysis and Scientific Computing with Applications (NASCA 2009), Agadir, Morocco, May 18-22, 2009.
- ②T. Sogabe and S.-L. Zhang: A fast solver for generalized shifted linear systems with complex symmetric matrices, The 7th International Conference on Numerical Optimization and Numerical Linear Algebra, Lijiang, Yunnan, China, Aug. 16-19, 2009.
- ③S. Suzuki, T. Sogabe, and S.-L. Zhang: An efficient method for minimizing a quadratic function with a sphere constraint, International Symposium of Electronic Structure Calculations -Theory, Correlated and Large Scale Systems and Numerical Methods-, Tokyo, Japan, Dec. 7-9,

2009. (Poster)

- ④L. Du, T. Sogabe, and S.-L. Zhang: A block IDR(s) method for nonsymmetric linear systems with multiple right-hand sides, International Symposium of Electronic Structure Calculations Theory, Correlated and Large Scale Systems and Numerical Methods-, Tokyo, Japan, Dec. 7-9, 2009. (Poster)
- ⑤A. Imakura, T. Sogabe, and S.-L. Zhang: A study on the restart of the GMRES(m) method for solving nonsymmetric linear systems, International Symposium of Electronic Structure Calculations Theory, Correlated and Large Scale Systems and Numerical Methods-, Tokyo, Japan, Dec. 7-9, 2009. (Poster)
- ⑥T. Sogabe, A. Suzuki, and S.-L. Zhang: On a cost-efficient iteration of Ye's hybrid method for minimizing a quadratic function over a sphere constraint, 2nd IMA Conference on Numerical Linear Algebra and Optimisation, University of Birmingham, UK, Sep. 13-15, 2010.
- ⑦T. Sogabe, T. Hoshi, S.-L. Zhang, and T. Fujiwara: Krylov subspace methods for solving generalized shifted linear systems, International Workshop on Computational Science and Numerical Analysis, The University of Electro-Communications, Tokyo, Japan, March 24-26, 2012.
- ⑧T. Sogabe, T. Hoshi, S.-L. Zhang, and T. Fujiwara: Numerical methods for generalized shifted linear systems with complex symmetric matrices, 4th China-Japan-Korea Conference on Numerical Mathematics, Otsu City, Shiga Prefecture, Japan, August 25-28, 2012.

[その他]

ホームページ等  
[http://www.ist.aichi-pu.ac.jp/person/sogabe/paper\\_s.html](http://www.ist.aichi-pu.ac.jp/person/sogabe/paper_s.html)

## 6. 研究組織

### (1) 研究代表者

曾我部 知広 (Sogabe Tomohiro)  
愛知県立大学・大学院情報科学研究科・  
准教授  
研究者番号: 30420368