

令和 3 年 6 月 19 日現在

機関番号：13401

研究種目：基盤研究(C) (一般)

研究期間：2017～2020

課題番号：17K00167

研究課題名(和文)大規模並列計算環境に適した新しい部分特異対計算法の開発

研究課題名(英文)Development of a new method for computing singular pairs suitable for massively parallel computing environments

研究代表者

木村 欣司(Kimura, Kinji)

福井大学・学術研究院工学系部門・准教授

研究者番号：10447899

交付決定額(研究期間全体)：(直接経費) 2,400,000円

研究成果の概要(和文)：新しい部分特異対計算法の構築をめざして分割統治法の研究を行う中で、一変数非線形方程式の解法を詳しく調査し、割線法と挟み撃ち法がギブンス回転に使われるサイン、コサインの値を修正できることを見出した。その工夫を、大規模並列計算環境に適した部分特異対計算を実現する、広義の分割統治である櫻井・杉浦法、TRL法、AIRLB法の実装技術である陽的シフト付き直交QD法、両側ヤコビ法、片側ヤコビ法、QR法において採用できた。さらに、櫻井・杉浦法において重要な役割を果たすQR分解の高速化も行った。また、LSMR法と部分特異値計算のための修正DQDS法を組み合わせることで逆問題を解く方法を提案した。

研究成果の学術的意義や社会的意義

櫻井・杉浦法、TRL法、AIRLB法を改良することで、大規模並列計算環境に適した新しい部分特異対計算法を提案した。具体的には、高精度ギブンス回転を採用することで、3つの方法の実装技術であるDQDS法+OQDS法、両側・片側ヤコビ法、QR法を改良した。逆問題を扱うLSMR法については、過学習の抑制のため部分特異値計算を必要とする。微小な特異値も高精度に計算可能な修正DQDS法により、その問題を解決した。以上の成果により、主成分分析を代表とするビッグデータ解析において、これまでよりも高速かつ高精度な計算が可能となった。研究成果は、すべてソースコードの形式で公開した。

研究成果の概要(英文)：In the course of researching divide-and-conquer methods with the aim of constructing a new method for computing partial singular pairs, we have surveyed the solution methods for nonlinear equations and found that the secant method and the false position method can modify the values of cos and sin used in the Givens rotation. We were able to employ this technique in the DQDS+OQDS method, the two-sided and one-sided Jacobi method, and the QR method, which are implementation techniques in the Sakurai-Sugiura method, which can be regarded as divide-and-conquer method in the broad sense, the TRL method, and the AIRLB method. These methods can achieve partial singular pair computation suitable for massively parallel computing environments. In addition, we accelerated the QR decomposition, which plays an important role in the Sakurai-Sugiura method. We also proposed to solve the inverse problem by combining the LSMR method and the modified DQDS method for computing partial singular values.

研究分野：高性能計算

キーワード：櫻井・杉浦法 TRL法 AIRLB法 割線法 挟み撃ち法 QDS法 ヤコビ法 QR分解

## 様式 C - 19、F - 19 - 1、Z - 19 (共通)

### 1. 研究開始当初の背景

(1)現代計算機の特徴として、CPUの高い性能により演算は高速であるが、相対的に、CPUとメモリの間のデータ転送は高速ではない。その特徴を考慮して、ベクトル-ベクトル演算や行列-ベクトル演算のような計算ではなく、行列-行列演算を多用した計算法を確立する必要がある。その方法として、次のステップに沿った部分特異対計算の方法が考えられる。(1)密行列 $A$ を $QR$ 分解する、(2)ブロックハウスホルダー変換により、特異値を不変にしたまま、行列 $R$ を上 $L$ 重の帯行列に変換する、(3)上 $L$ 重の帯行列の部分特異対を計算する、(4)逆変換を施して、元の行列 $A$ の部分特異対を得る、という方針を採用する。求めたい特異対の数は数個から数十個程度であるという条件を考慮して、応募者は、上 $L$ 重の帯行列の特異値分解の問題が対称 $L$ 重対角帯行列の固有値分解の問題に変換できることに注目し、対称 $L$ 重対角帯行列の固有値問題を、並列2分法と並列逆反復法を用いて解く方法を提案した。しかし、大規模並列計算環境においては、求めたい特異対の数が並列数(総プロセッシングエレメント(PE)数)よりも小さい場合が多く、その場合には、2分法は多分法へ変更すればよいが、並列逆反復法は、すべてのPEを有効に活用できない。その困難を克服することが課題となっていた。

(2)求めたい固有値・固有ベクトルが少ない場合の対称3重対角行列向け分割統治法と全固有値・固有ベクトルを計算する場合の対称5重対角行列向けの分割統治法がすでに提案されている状況にあった。それらを参考とし、求めたい特異対の数が数個から数十個程度の場合の部分特異対計算を行う分割統治法を開発する。

(3)分割統治法の特長により、特異値・特異ベクトルの計算が困難となる行列が存在することも知られていた。

### 2. 研究の目的

(1)本研究の目的は、大規模並列計算環境に適した密行列の高速・高精度な部分特異対計算を実現することにある。ここで、特異対とは、一組の特異値と特異ベクトルを意味し、 $m \times n$  ( $m \geq n$ )の長方形行列においては、 $n$ 組存在する。「部分」と付けた理由は、その $n$ 組のうちの一部を計算することを意味する。本研究では、主成分分析などへの応用を想定して、求めたい特異対の数が数個から数十個程度の場合を考える。現代計算機は、演算は高速であるが、相対的にデータの転送速度は遅い。そこで、密行列の部分特異対計算の問題を、直接、上 $L$ 重の帯行列の部分特異対計算の問題に変換するのではなく、上 $L$ 重の帯行列の問題に変換して解く方法が提案された。過去に、応募者は、対称 $L$ 重対角帯行列の固有値問題に対する並列2分法と並列逆反復法を利用して、上 $L$ 重の帯行列の部分特異対問題を解く方法を提案した。しかし、求めたい特異値と特異ベクトルの数が並列数よりも小さい場合には、高い並列性能を発揮する並列2分法・逆反復法の開発は、容易ではない。本研究では、そのような状況においても高い並列性能を実現可能な分割統治法に注目し、それを利用することで、高速・高精度な部分特異対計算を達成する。

(2)計算中に分割統治法の計算が破綻する行列に対しても分割統治法が有効に機能するように、分割統治法を改良することも本研究の目的である。

(3)分割統治法の計算が破綻する行列への対応は難問であるため、本研究では、分割統治法の定義として、ニュートン法を基礎とする Cuppen の分割統治法以外にも、櫻井・杉浦法も含めることとする。すなわち、櫻井・杉浦法の改良も、本研究の目的である。

(4)主成分分析などへの応用を想定して、求めたい特異対の数が数個から数十個程度の場合における密行列の高速・高精度な部分特異対計算法を構築するという研究目的より明らかなように、主成分分析を代表とするビッグデータ解析への応用を主目的として研究する。

### 3. 研究の方法

(1)求めたい固有値・固有ベクトルが少ない場合の対称3重対角行列向け分割統治法と全固有値・固有ベクトルを計算する場合の対称5重対角行列向けの分割統治法がすでに提案されている。それらを参考とし、求めたい特異対の数が数個から数十個程度の場合の部分特異対計算を行う分割統治法を開発する。

(2)特異値の分布として複数個のクラスタを持つ行列について、分割統治法は有効に機能しない。計算に失敗した場合、閾値を変更するなどの修正を行う。

(3)分割統治法の計算が破綻する行列への対応と、原点付近に微小な特異値をもつ行列の高精度な特異値計算の実現は非常に難しい問題であるため、本研究では、Cuppen の分割統治法以外にも、櫻井・杉浦法も広義の分割統治法と見なし、櫻井・杉浦法の改良についても検討する。

### 4. 研究成果

(1)シフト付きコレスキー $QR$ 分解に対する研究成果は次の通りである。櫻井・杉浦法においては、

細長い長方形行列の列空間の計算を必要とする。その前処理として、シフト付きコレスキーQR分解を採用する。シフト付きコレスキーQR分解を実用化するため、適切なシフト量を導入した。櫻井・杉浦法以外の応用先として、通常の特異値分解の計算の前処理にも活用できるため、その実装も行った。

(2)陽的シフト付き Differential QD (DQDS) 法と陽的シフト付き Orthogonal QD (OQDS) 法を併用した高速な列空間の構成法についての研究成果は次の通りである。櫻井・杉浦法においては、シフト付きコレスキーQR分解により、直交行列 $Q$ と上三角行列 $R$ を手に入れる。 $R$ 行列から生成される上2重対角行列 $B$ あるいはその転置行列 $L$ に対する高速な列空間の計算法として、DQDS法とOQDS法を併用した方法を考案した。具体的には、DQDS法によって特異値の分布を調査すると、列空間の次元と零空間の次元が確定する。次に、OQDS法によって零空間を計算すると、その補空間として列空間を得られる。この手法を実装し、その性能を検証した。

(3)単独非線形方程式の求解の方法によるギブンス回転の高精度化についての研究成果は次の通りである。分割統治法の基本原理は、単独非線形方程式の求解の方法の一つであるニュートン法にその基盤をおく。しかし、単独非線形方程式の求解の方法には、ニュートン法以外にも、たくさんの方が存在する。特に、割線法と挟み撃ち法は、双対の関係にあり、両者を併用することで、信頼性の高い単独非線形方程式の求解を実現できる。その方法を固有ベクトル計算・特異ベクトル計算に応用する。ギブンス回転やヤコビ回転を $\sin$ 、 $\cos$ の数値を用いて決定するとき、 $\cos$ 側の数値の精度が低い場合がある。そのとき、 $\sin$ の数値を活用して、 $\cos$ の数値を割線法と挟み撃ち法を用いて修正する。逆に、 $\sin$ 側の数値の精度が低い場合、 $\cos$ の数値を活用して、 $\sin$ の数値を割線法と挟み撃ち法を用いて修正する。正確には、単に修正するのではなく、恒等写像からのずれとしてベクトルの更新を定式化する。以上の工夫を採用することにより、OQDS法の左特異ベクトルの直交性・固有値分解のためのヤコビ法における固有ベクトルの直交性・特異値分解のための片側あるいは両側ヤコビ法における特異ベクトルの直交性・QR法における固有ベクトルあるいは特異ベクトルの直交性を改善できる。

(4)両側ヤコビ法に対する研究成果は次の通りである。櫻井・杉浦法には、今倉らによる改良があり、そちらでは、左右の特異ベクトルが必要となる。左右の特異ベクトルを高精度に計算できる両側ヤコビ法に着目し、逆正接関数を用いた実装方法、Rutishauserによる実装方法、およびGivens回転を用いた実装方法の3つを提案した。数値実験の結果、我々の両側ヤコビ法の実装は、既存のLAPACKの片側ヤコビ法よりも計算時間が短く、左右の特異ベクトルの直交性ならびに特異値分解の精度の両方の基準において優れていることを確認できた。両側ヤコビ法の応用先として、ビッグデータ解析においては、特異スペクトル変換法も存在する。

(5)片側ヤコビ法に対する研究成果は次の通りである。櫻井・杉浦法が必要とする左特異ベクトルの計算において、2重対角化における誤差の混入を考慮すると、ヤコビ法も有力な実装技術の選択肢となる。左特異ベクトルの直交性について、既存のLAPACKの片側ヤコビ法の実装ではなく我々の片側ヤコビ法の実装を採用するならば、両側ヤコビ法よりも片側ヤコビ法のほうが優れている。そのため、片側ヤコビ法の効率的な実装技術を確認した。

(6)特異対計算のためのThick Restarted Lanczos (TRL) 法とImplicitly Restarted Arnoldi (IRA) 法に対する研究成果は次の通りである。ビッグデータは、大規模行列で記述されることが多い。この大規模行列に対して、所望の固有値および固有ベクトルを求める部分固有対計算は、拡大行列の方法を通じて、所望の特異値と特異ベクトルを計算する部分特異対計算に対応する。TRL法とIRA法は、その目的を達成する解法である。しかし、部分特異対計算を行うテクニックとして、拡大行列の方法以外に、転置行列と与えられた行列の積をベクトルに乗算するという方法も存在する。密行列と疎行列の両方について、転置行列と与えられた行列の積をベクトルに乗算するための高速な計算法を提案した。

(7)Thick Restarted Lanczos (TRL) 法における固有ベクトルの直交性の改善についての研究成果は次の通りである。単精度浮動小数点数環境のような丸め誤差を多く含む環境では、TRL法の収束が極端に遅くなる入力行列が存在する。この丸め誤差の影響を回避するために、本研究では、ギブンス回転を基礎とするQR分解を利用して、内部ルーチンにおける解の精度を向上させる方法を提案した。その結果、提案法はTRL法の収束性を向上させることを確認できた。

(8)Augmented Implicitly Restarted Lanczos Bidiagonalization (AIRLB) 法の新しい実装の方法についての研究成果は次の通りである。部分特異対計算法として有名なAIRLB法の改良を行った。具体的には、その下位部品としてOQDS法を採用することで、AIRLB法による高精度な特異対計算を達成した。さらに、修正グラムシュミット法を活用して特異ベクトルのさらなる直交性の改善を実現した。

(9)最小2乗法・逆問題の新しい解法についての研究成果は次の通りである。DQDS法は、大規模

並列計算環境においても、下位部品としてならば有効に機能する。櫻井・杉浦法以外にも、ビッグデータ解析のための最小2乗法・逆問題における過学習の抑制のための condition L-curve の計算がある。具体的には、最小2乗法・逆問題の解法として有名な LSMR 法が生成する2重対角行列の一部の特異値を計算するという目的に応用できる。実験の結果、DQDS 法は、その目的に適した解法であることを確認した。

## 5. 主な発表論文等

〔雑誌論文〕 計4件（うち査読付論文 4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 Yuya Ishida, Masami Takata, Kinji Kimura, Yoshimasa Nakamura	4. 巻 11
2. 論文標題 Improvement of the Augmented Implicitly Restarted Lanczos Bidiagonalization Method in Single Precision Floating Point Arithmetic	5. 発行年 2018年
3. 雑誌名 IPSJ Transactions on Mathematical Modeling and Its Applications	6. 最初と最後の頁 19 - 25
掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） なし	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 -
1. 著者名 Hiroyuki Ishigami, Hidehiko Hasegawa, Kinji Kimura, Yoshimasa Nakamura	4. 巻 117
2. 論文標題 A Parallel Bisection and Inverse Iteration Solver for a Subset of Eigenpairs of Symmetric Band Matrices	5. 発行年 2017年
3. 雑誌名 Lecture Notes in Computational Science and Engineering, Springer	6. 最初と最後の頁 31-50
掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） 10.1007/978-3-319-62426-6_3	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 Masami Takata, Sho Araki, Kinji Kimura, Yuki Fujii, Yoshimasa Nakamura	4. 巻 11
2. 論文標題 Implementation of Computing Partial Singular Value Decomposition for Principal Component Analysis using ARPACK	5. 発行年 2018年
3. 雑誌名 IPSJ Transactions on Mathematical Modeling and Its Applications	6. 最初と最後の頁 37-44
掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） なし	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 -
1. 著者名 Sho Araki, Masana Aoki, Masami Takata, Kinji Kimura, Yoshimasa Nakamura	4. 巻 14
2. 論文標題 On an Implementation of the Two-Sided Jacobi Method	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 IPSJ Transactions on Mathematical Modeling and Its Applications	6. 最初と最後の頁 12-20
掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） なし	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15件（うち招待講演 0件 / うち国際学会 10件）

1. 発表者名 Sho Araki, Masami Takata, Kinji Kimura, Yoshimasa Nakamura
2. 発表標題 On an Implementation of Two-Sided Jacobi Method
3. 学会等名 2019 International Conference on Parallel and Distributed Processing Techniques and Applications (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 Masana Aoki, Masami Takata, Kinji Kimura, Yoshimasa Nakamura
2. 発表標題 Improvement of the Thick-Restart Lanczos Method in Single Precision Floating Point Arithmetic using Givens Rotations
3. 学会等名 2019 International Conference on Parallel and Distributed Processing Techniques and Applications (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 荒木翔, 高田雅美, 木村欣司, 中村佳正
2. 発表標題 融合積和演算を利用した特異値分解のための両側ヤコビ法の実装について
3. 学会等名 日本応用数理学会2019年度年会
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 Sho Araki, Hiroki Tanaka, Masami Takata, Kinji Kimura, Yoshimasa Nakamura
2. 発表標題 Fast Computation Method of Column Space by using the DQDS Method and the OQDS Method
3. 学会等名 International Conference on Parallel and Distributed Processing Techniques and Applications 2018 (国際学会)
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 Masana Aoki, Masami Takata, Kinji Kimura, Yoshimasa Nakamura
2. 発表標題 Improvement of Computing Partial Singular Value Decomposition for Dense Matrix using Thick-restart-Lanczos Method
3. 学会等名 International Conference on Parallel and Distributed Processing Techniques and Applications 2018 (国際学会)
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 Sho Araki, Hiroyuki Ishigami, Masayuki Osawa, Kinji Kimura, Yoshimasa Nakamura
2. 発表標題 Performance Evaluation of a Combination of the Parallel Bisection Method and the Block Inverse Iteration Method with Reorthogonalization for Eigenvalue Problems on MIC processor
3. 学会等名 2017 International Conference on Parallel and Distributed Processing Techniques and Applications (PDPTA' 17) (国際学会)
4. 発表年 2017年

1. 発表者名 Yuya Ishida, Masami Takata, Kinji Kimura, Yoshimasa Nakamura
2. 発表標題 An Improvement of Augmented Implicitly Restarted Lanczos Bidiagonalization Method
3. 学会等名 2017 International Conference on Parallel and Distributed Processing Techniques and Applications (PDPTA' 17) (国際学会)
4. 発表年 2017年

1. 発表者名 大澤真之, 木村欣司, 中村佳正
2. 発表標題 シフト付きコレスキーQR分解を利用した逆反復法の高速化
3. 学会等名 日本応用数理学会2017年度年会
4. 発表年 2017年

1. 発表者名 Masayuki Osawa, Sho Araki, Hiroyuki Ishigami, Kinji Kimura, Yoshimasa Nakamura
2. 発表標題 Acceleration of Inverse Iteration Method Using Cholesky QR Decomposition with Shifts
3. 学会等名 International Workshop on Eigenvalue Problems: Algorithms; Software and Applications, in Petascale Computingr Network Algorithms in Materials Science (国際学会)
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 Kinji Kimura, Masayuki Osawa, Sho Araki, Hiroyuki Ishigami, Yoshimasa Nakamura
2. 発表標題 Parallel Symmetric Tridiagonal Eigensolver Based on Bisection and Inverse Iteration Algorithms with the Blocked Classical Gram-Schmidt Reorthogonalization and the Shifted CholeskyQR Decomposition
3. 学会等名 SIAM Conference on Parallel Processing for Scientific Computing (国際学会)
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 石田遊也, 高田雅美, 木村欣司, 中村佳正
2. 発表標題 単精度浮動小数点数環境にも有効な Augmented Implicitly Restarted Lanczos Bidiagonalization 法の改良
3. 学会等名 日本応用数理学会2018年研究部会連合発表会
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 Hiroki Tanaka, Taiki Kimura, Tetsuaki Matsunawa, Shoji Mimotogi, Masami Takata, Kinji Kimura, Yoshimasa Nakamura
2. 発表標題 Application of the Orthogonal QD Algorithm with Shift to Singular Value Decomposition for Large Sparse Matrices
3. 学会等名 2020 International Conference on Parallel and Distributed Processing Techniques and Applications (国際学会)
4. 発表年 2020年



1. 発表者名 Masami Takata, Sho Araki, Kinji Kimura, Yoshimasa Nakamura
2. 発表標題 On an Implementation of the One-Sided Jacobi Method with High Accuracy
3. 学会等名 2020 International Conference on Parallel and Distributed Processing Techniques and Applications (国際学会)
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 久保井五貴, 田中利佳, 小澤伸也, 細田陽介, 高田雅美, 木村欣司
2. 発表標題 デコンボリューション問題におけるcondition L-curveの検討
3. 学会等名 日本応用数理学会 2021年 研究部会連合発表会
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 木村欣司, 久保井五貴, 田中利佳, 小澤伸也, 細田陽介, 高田雅美
2. 発表標題 離散戸田分子方程式と逆問題
3. 学会等名 Risa/Asir Conference 2021
4. 発表年 2021年

〔図書〕 計1件

1. 著者名 一般社団法人 日本計算工学会 (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)	4. 発行年 2019年
2. 出版社 丸善出版	5. 総ページ数 214
3. 書名 固有値計算と特異値計算	

〔産業財産権〕

〔その他〕

Linear Algebra PROgrams in Numerical Computation  
<http://syskiso.fuee.u-fukui.ac.jp/~kkimur/LAPROGNC/LAPROGNC.html>  
Linear Algebra PROgrams in Numerical Computation(Japanese)  
<http://syskiso.fuee.u-fukui.ac.jp/~kkimur/LAPROGNC/LAPROGNC-j.html>

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
--	---------------------------	-----------------------	----

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
---------	---------