

平成22年 5月 1日現在

研究種目：若手研究(B)
 研究期間：2006～2008
 課題番号：18760063
 研究課題名（和文） 計算科学に現れる超大規模連立一次方程式の高速・高安定解法に関する研究
 研究課題名（英文） Study on fast and stable iterative methods for solving large and sparse linear systems arising from computational science
 研究代表者
 曾我部 知広 (Sogabe Tomohiro)
 名古屋大学・大学院工学研究科・助教
 研究者番号：30420368

研究成果の概要：

物理・工学に現れる超大規模連立一次方程式の高速・高安定解法を開発することを目的とし、近年提案された Bi-CR 法を基礎として、計画通りその積型解法族が開発された。これらの解法族は、新規購入した計算機を用いて大規模な計算を行い、従来法である Bi-CG 法の積型解法族と比べて、同程度以上の高速性と安定性を有することを確認した。その他、本研究と関連する前処理技術の開発、特殊行列の性質に関する基礎研究、そして複数の連立一次方程式を同時に解く高速解法の開発を行った。

交付額

(金額単位：円)

	直接経費	間接経費	合計
2006年度	2,000,000	0	2,000,000
2007年度	700,000	0	700,000
2008年度	900,000	270,000	1,170,000
総計	3,600,000	270,000	3,870,000

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：連立一次方程式，クリロフ部分空間法，双共役残差法（Bi-CR 法），積型解法，CRS 法

1. 研究開始当初の背景

物理・工学の応用諸分野で頻繁に現れる超大規模連立一次方程式に対する高速・高安定数値解法の開発は極めて重要な課題である。この連立一次方程式の多くは、行列で表現したときに、行列の大部分の要素が 0 であると

いう特徴を有する。この問題の解法として、20 世紀のトップテンアルゴリズムの 1 つとして知られているクリロフ部分空間法があるが、その中で非対称行列用として最も重要な解法の一つに双共役勾配法（以後、Bi-CG 法と略す）がある。1990 年代には、この Bi-CG 法を更に加速・安定化させる積型解法

という理論的枠組みが構築され、その枠組みから様々な解法が導出された。これらは、全て Bi-CG 法を基礎としている。

近年、双共役残差法(以後、Bi-CR 法と略す)が本研究代表者らにより提案され、従来の基幹解法である Bi-CG 法よりも、高速・高安定であることが分かった。以上が、研究開始当初の背景である。

2. 研究の目的

本研究では、Bi-CR 法を基礎として超大規模非対称連立一次方程式を解くための高品質の数値計算アルゴリズムを3点：高速・高安定、広い適用範囲、信頼性の高いアルゴリズムに留意して開発することを主目的とし、更に関連研究として解法の高速化に繋がる前処理技術の開発や応用諸分野に現れる行列の性質に関する基礎研究を行う。

3. 研究の方法

- (1) Bi-CR 法が生成する残差ベクトルに対し図1のように行列多項式を乗じることで、Bi-CR 法の加速・安定化を図る。

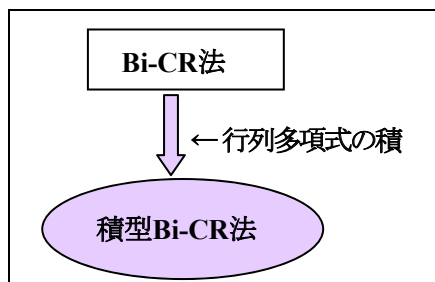


図1：Bi-CR 法の加速・安定化

- (2) 行列多項式の選択により幾通りも解法的设计が可能であるが、成功した Bi-CG 法の積型解法を参考にして乗じる行列多項式を定める。そして、得られた解法の性能評価を行い、有用な解法を選別する。

4. 研究成果

- (1) Bi-CR 法の積型解法の開発

① 理論の整備

Bi-CG 法と同様に Bi-CR 法の積型解法の理論が構築可能であることを示した。この成果は文献⑫⑬としてまとめられた。

② 解法の導出

積型解法の理論から3つの解法を導出し、これらは効率の良い解法であることを示した。(文献⑫)

Bi-CR 法は、2003年の国際会議(ICNLAO 2003, 中国)で招待講演として公表された。更に2009年に国際誌 Journal of Computational Applied Mathematics 誌に掲載されたため(文献①)、Bi-CR 法は海外においてこれまで以上に認識されると期待される。実際に本論文は著名な雑誌 Journal of Computational Physics 誌に掲載されている論文(2010年)の中で引用されている。従って、今後 Bi-CR 法の加速・安定化である積型解法は、純国産の解法として国内外で広く認識されていくと予想される。

- (2) Bi-CR 法の積型解法の収束性向上に繋がる前処理技術の開発

前処理技術の中で前処理行列の構築を必要としない可変的前処理と呼ばれる枠組みがある。この前処理は所要メモリ量の観点で利点があり、大規模計算向きである。本研究では、この枠組みの中で定常反復法の一つである AOR 法を使用するのが従来法である SOR 法の使用よりも効果的な場合があることが分かり、その結果を文献⑧にまとめた。また、並列計算を考慮に入れた前処理技術として近似逆行列前処理があるが、この枠組みの中でウェーブレット変換を用いた陰的ウェーブレット近似逆行列前処理の効率化を図った。(文献⑩)特に、文献⑩の成果は、筆頭著者の今倉氏によりセルビアで行われた国際会議(2008年4月28日)にて成果発表され、Winner among young researchers の受賞に繋がった。このことから、本研究は国際的に高い評価を受けたといえる。

- (3) Bi-CR 法自体の改良

これまで述べたように、Bi-CR 法は重要な基幹解法として位置付けられ、これを基に効率の良い積型解法が構築されたのであった。この意味で、基幹解法としての影響は大変大きい。そこで、この Bi-CR 法自体に改良の余地はないかということを検討した。この結果、Bi-CR 法の収束性を少しではあるが改良した解法の構築ができた。(文献⑪を参照)

今後の研究の進展により、Bi-CR 法に取って代わる解法になれば、その積型解法を考慮する予定である。

(4) 特殊な行列の性質に関する研究

3重対角行列の行列式の計算に関する高速・高安定な算法が El-Mikkawy により 2004 年に発表された。そこで本研究ではその一般的な枠組みを構築した。(文献⑨を参照) この枠組みは、行列式の高速・高安定算法の基礎となる。

文献⑨の応用として、4階偏微分方程式を取り扱う際に5重対角行列と呼ばれる特殊な行列が現れるため、その行列の行列式を高速に計算する算法を提案した。本算法は、従来法である Evans や Sweet の算法よりも約3~4割程度計算量が少ない。(文献⑦を参照) 本研究結果⑦は、2010年に出版された著書「Antependance models for longitudinal data, CRC press 社」で引用されたため、国際的に一定の評価が得られたと考えられる。

(5) 複数の連立一次方程式の高速解法の開発

計算物理に現れる複数の大規模連立一次方程式を同時に解く解法 (Shifted COCG 法) の開発とその応用を行った。(文献②③参照) 本手法は、大規模電子構造計算の問題に対して従来法である COCG 法で解くよりも、20~30倍程度高速であることが分かり、高い実用性を有する解法であることが分かった。ただし、本手法は、行列が複素対称の性質を持つときにのみ適用が可能であるため、今後は非対称行列用の解法である Bi-CR 法と関連させて高速解法が開発されれば、適用範囲が広くなり、与えるインパクトも更に大きくなると予想される。

まとめ

以上、本科学研究費補助金により円滑な研究の遂行が可能になり、その結果、当初の研究目的であった Bi-CR 法の積型解法、前処理技術、特殊行列の性質に関する基礎研究だけでなく、複数の連立一次方程式の高速解法が得られるなど、当初の研究目的以上の成果を得ることができた。

尚、これらは全て論文として公表したが、専門的な内容のため予備知識なく一般に算法を実装するのは比較的困難であろう。従っ

て、これらの研究成果を具体的に社会に還元できるよう論文の公表に終わるだけでなく、連立一次方程式を高速かつ高安定に解くことを真に必要としている大学・企業研究者に対して口頭発表等を通して算法の実装をどうするか、または作成したプログラムの公開等を視野に入れてこれまでの成果と共に報告できればと考えている。

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13件)

- ① T. Sogabe, M. Sugihara, and S.-L. Zhang: "An extension of the conjugate residual method to nonsymmetric linear systems" *Journal of Computational and Applied Mathematics* 226. 103-113 (2009) (査読あり)
- ② T. Sogabe, T. Hoshi, S.-L. Zhang, and T. Fujiwara: "On a weighted quasi-residual minimization strategy for solving complex symmetric shifted linear systems" *Electronic Transactions on Numerical Analysis* 31. 126-140 (2008) (査読あり)
- ③ S. Yamamoto, T. Sogabe, T. Hoshi, S.-L. Zhang, and T. Fujiwara: "Shifted COCG method and its application to double orbital extended Hubbard model", *Journal of Physical Society of Japan* 77, 114713, 1-8 (2008) (査読あり)
- ④ T. Sogabe, "New algorithms for solving periodic tridiagonal and periodic pentadiagonal linear systems" *Applied Mathematics and Computation* 202. 850-856 (2008) (査読あり)
- ⑤ T. Sogabe: "A note on "A fast numerical algorithm for the determinant of a pentadiagonal matrix" *Applied Mathematics and Computation* 201. 561-564 (2008) (査読あり)
- ⑥ T. Sogabe: "Numerical algorithms for solving comrade linear systems based on tridiagonal solvers", *Applied Mathematics and Computation* 198. 117-122 (2008) (査読あり)
- ⑦ T. Sogabe: "A fast numerical algorithm for the determinant of a pentadiagonal matrix" *Applied Mathematics and Computation* 196. 835-841 (2008) (査読あり)
- ⑧ 前田祥兵, 曽我部知広, 他: "AOR 法を用いた可変の前処理付き一般化共役残差法", *日本応用数学会論文誌* 18. 155-170 (2008)

(査読あり)

- ⑨ T. Sogabe: “On a two-term recurrence for the determinant of a general matrix” Applied Mathematics and Computation 187. 785-788 (2007) (査読あり)
- ⑩ 今倉暁, 曾我部知広, 他: “Finger pattern のブロック化による陰的 wavelet 近似逆行列前処理の高速化” 日本応用数理学会論文誌 17. 523-542 (2007) (査読あり)
- ⑪ 南さつき, 曾我部知広, 他: “Bi-CR 法への準最小残差アプローチの適用について” 日本応用数理学会論文誌 17. 301-317 (2007) (査読あり)
- ⑫ 阿部邦美, 曾我部知広, 他: “非対称行列用共役残差法に基づく積型反復解法” 情報処理学会論文誌「コンピューティングシステム」 48. 11-21 (2007) (査読あり)
- ⑬ T. Sogabe, S.-L. Zhang: “CRS : a fast algorithm based on Bi-CR for solving nonsymmetric linear systems” Hokkaido University Technical Report Series in Mathematics Vol.112. 15-18 (2006) (査読なし)

[学会発表] (計6件)

- ① 今倉暁, 曾我部知広, 張紹良: “陰的 wavelet 近似逆行列前処理の Finger Pattern に対するブロック化技法について” 第 36 回数値解析シンポジウム. (20070621). ウェルンティ湯河原
- ② T. Sogabe, S.-L. Zhang: “On a weighted quasi-residual minimization strategy of QMR for solving complex symmetric shifted linear systems” Harrachov 2007-Computational Methods with Applications-. (20070824). ハラホフ, チェコ
- ③ A. Imakura, T. Sogabe, S.-L. Zhang:

“Implicit wavelet sparse approximate inverse preconditioner using blocked finger pattern for nonsymmetric linear systems” ALA 2008 Applied Linear Algebra-in honor of Ivo Marek. (20080428) ノビサド, セルビア

- ④ S. Yamamoto, T. Sogabe, T. Hoshi, S.-L. Zhang, and T. Fujiwara: “Extra large size linear problem solver and its application to the excitation spectra in the many-electron problem”, International Conference on Quantum Simulators and Design (20080531), 日本科学未来館, 東京
- ⑤ S.-L. Zhang and T. Sogabe, “Numerical Algorithms for Solving Shifted Complex Symmetric Linear Systems”, The NIMS 2008 Conference & The 4th East Asia SIAM Conference. (20081010) デジョン, 韓国
- ⑥ T. 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, (20090816), 麗江, 雲南省, 中国

[その他]

ホームページ等

<http://www.aichi-pu.ac.jp/ist/person/sogabe/sogabe.html>

6. 研究組織

(1) 研究代表者

曾我部 知広 (Sogabe Tomohiro)
名古屋大学・大学院工学研究科・助教