

令和 4 年 6 月 19 日現在

機関番号：13401

研究種目：若手研究

研究期間：2018～2021

課題番号：18K18061

研究課題名（和文）疎行列固有値問題に対する直接法ソルバの確立

研究課題名（英文）Development of a direct eigensolver for a sparse matrix.

研究代表者

廣田 悠輔（Hirota, Yusuke）

福井大学・学術研究院工学系部門・助教

研究者番号：60709765

交付決定額（研究期間全体）：（直接経費） 3,200,000円

研究成果の概要（和文）：本研究では、置換前処理テクニック、拡張された帯行列帯幅削減アルゴリズムなどを組み合わせることで、非構造実対称疎行列に対して効率的に働く疎行列三重対角化アルゴリズムを開発した。また、開発したアルゴリズムの実装と既存の三重対角行列に対する固有値ソルバを組み合わせにより実対称疎行列の全固有値を求める疎行列固有値ソルバを作成した。作成された固有値ソルバは様々な疎行列に対して効率的に全固有値を求められることが実験的に確認された。

研究成果の学術的意義や社会的意義

本研究の成果により、これまで実現されていなかった直交変換により実対称疎行列の効率的な三重対角化が、一定の状況のもとで可能になった。結果、実対称疎行列の多数の固有値（および少数の固有ベクトル）のみが必要であるという状況において、新たなアルゴリズムに基づく高性能固有値ソルバが使用可能となった。このような状況で従来使用されていた密行列固有値ソルバや疎行列反復法ソルバに比べて、本研究で開発されたソルバは少ない計算量で固有値を求められる。このため、本研究の成果は多数の固有値を求めるシミュレーションやデータ解析を高速化し、それらの分野における研究・開発を加速させる可能性がある。

研究成果の概要（英文）：In this research, we have developed an efficient tridiagonalization algorithm for real symmetric unstructured sparse matrices by combining matrix reordering techniques and an extended band-to-band matrix reduction algorithm. We have made an eigensolver that exploits the new tridiagonalization algorithm and a conventional tridiagonal eigensolver for finding all eigenvalues of a real symmetric unstructured sparse matrix. Numerical experiments show that the sparse eigensolver works efficiently for finding eigenvalues for many real symmetric sparse matrices.

研究分野：高性能計算

キーワード：高性能計算 疎行列 固有値問題 直接法

### 1. 研究開始当初の背景

行列の標準固有値問題（以下、単に固有値問題）の求解は、様々な科学技術計算において中核をなす重要な行列計算のひとつである。これらの科学技術計算では、しばしば要素の大部分がゼロである行列（疎行列）の固有値問題を解く必要がある。固有値問題の求解法は、直接法と反復法に大別される。反復法では、適当ないくつかの初期近似固有対（固有値と対応する固有ベクトル）を定め、反復ごとに何らかの方法によって近似固有対を改良することにより、近似的に解を求める。これに対して直接法では、

- (1) 与えられた行列を、相似変換により固有対の計算がより容易な行列（中間形）に変換し、
- (2) 変換後の行列の固有対を反復法により求め、
- (3) 変換後の行列の固有ベクトルを、元の行列の固有ベクトルに変換する

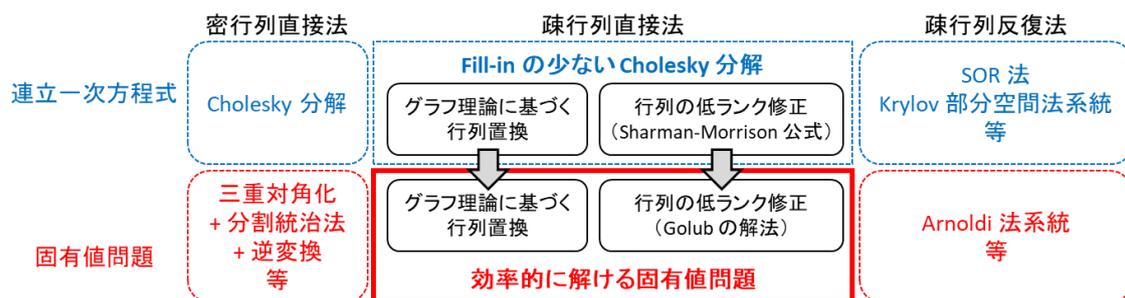
という3つのステップにより固有対を求める。例えば、三重対角化、QR法および逆変換の組み合わせなどが代表的である。次数  $n \geq 5$  の行列の固有値問題は有限回の計算ステップによって求めることができないため、直接法であっても部分的に反復法を使用することになるが、反復法部分 2) の計算回数が少なくなるような中間形を用いることで、有限回のステップにより計算が可能な直接法部分 1), 3) が計算量の主要な部分を占めるようになる。

研究開始の時点で、疎行列固有値問題を解くには、行列の疎性を活用した反復法（疎行列反復法）のソルバを用いるか、行列の疎性を無視して密行列に対する直接法（密行列直接法）のソルバを用いる2つの選択肢がある。しかしながら、行列の疎性を活かした直接法（疎行列直接法）のソルバは実現されておらず、それどころか疎行列直接法の研究も現在までに行われていない。

一方で、連立一次方程式の求解では、密行列直接法と疎行列反復法に加えて疎行列直接法が研究されており、METIS/MUMPS, PARDISO および SuperLU などの疎行列直接法ソルバが幅広く応用されている。これら連立一次方程式に対する疎行列直接法では、前処理として係数行列に対する置換行列の適用や低ランク積による修正を行い、その後に疎行列向け Cholesky 分解などによって係数行列の分解を求めている。適切な前処理の適用により Cholesky 分解により生じる fill-in が抑制されることになり、行列の疎性を活かした効率的な疎行列直接法が実現されている。

### 2. 研究の目的

本研究課題の目的は、これまで研究が行われていなかった固有値問題に対する疎行列直接法を研究し、実際に疎行列直接法ソルバを実現することである。固有値問題に対する疎行列直接法は、下図に示される解法マトリクス上の空白であり、本研究課題の遂行により解法の空白を補完することができる。また、実用の観点においても、本課題により効率的な疎行列直接法ソルバが実現されれば、疎行列固有値問題を解くべき様々な科学技術計算に対して劇的な高速化をもたらす可能性がある。



### 3. 研究の方法

固有値問題に対する疎行列直接法を実現するための手段として、連立一次方程式に対する疎行列直接法の考え方を応用する。連立一次方程式に対する疎行列直接法では、特別な非ゼロ構造をもつ行列に効率的に働く直接法と、そのような非ゼロ構造をもつ行列への変換手法（前処理）の組み合わせにより、行列の疎性を活かした直接法を実現していた。我々は、この考えの応用により、特別な非ゼロ構造をもつ行列の固有値問題を効率的に解く直接法アルゴリズムと、そのような形への変換を行う前処理技術をそれぞれ構築することで、固有値問題に対する疎行列直接法ソルバを実現することを考えた。

我々は、特別な非ゼロ構造をもつ実対称疎行列の固有値問題を効率的に解く直接法を構築する上で、Bischofらの帯行列 reduction（三重対角行列を含む帯幅の小さい行列への変換）アルゴリズムに注目した。本アルゴリズムは本来は帯行列からより半帯幅の小さい帯行列へと変換

するものであるが、我々の予備的な分析から、本アルゴリズムに対して修正を加えることで、より広範囲の行列に対して効率的な半帯幅削減が可能である判明している。半帯幅の縮小された行列に対しては、元の reduction アルゴリズムそのものを適用することにより、三重対角化が可能である。したがって、この方法を使うことで、ある種の非ゼロ構造をもつ実対称疎行列に対して少ない計算量で三重対角化が可能であると予想された。得られた三重対角行列に対して QR 法などの既存の反復法を適用すれば計算量で固有値が求められる。したがって、効率的な三重対角化が可能な実対称疎行列に対しては、効率的に固有値が求められるものと考えられた。

与えられる行列が一般の実対称疎行列である場合、前述の方法は必ずしも効率的に機能するとは限らない。このため望ましい非ゼロ構造を持つ疎行列への変換（前処理）が必要となる。前処理の手段としては、Reverse Cuthill-McKee 法などの行列の置換前処理（リオーダーリング）を用いることが可能であり、前処理後の疎行列に対して前述の方法を適用することで、元の行列の固有値が求められるはずである。

このような考えに基づいて疎行列直接法を構築するために、我々は以下の二段階に分けて研究を実施した。

#### (1) 帯行列 reduction アルゴリズムを元にした効率的な疎行列三重対角化アルゴリズムの研究

特別な非ゼロ構造をもつ実対称疎行列の三重対角化アルゴリズムの構築、理論的解析による計算量の導出や、試作プログラムを用いた性能特性の調査などを実施した。

#### (2) 置換行列を用いた相似変換による前処理の研究

一般の実対称疎行列を、段階(1)で開発したアルゴリズムに適した非ゼロ構造をもつ疎行列に変換するためのアルゴリズムを研究した。具体的には Reverse Cuthill-McKee 法などの行列の半帯幅を削減する置換前処理（リオーダーリング）を試作プログラムに組み込み、その実験的評価を中心とする研究を実施した。また、置換前処理自体のコスト（計算量、実行時間）と前処理による効果のトレードオフについても分析した。

### 4. 研究成果

本研究により、まず特別な非ゼロ構造をもつ実対称疎行列の三重対角化アルゴリズムが構築された。また、構築されたアルゴリズムと既存の三重対角行列向け固有値解法を組み合わせた固有値ソルバを開発し、そのような行列の全固有値が効率的に求められることが確認された。また、置換前処理との組合せにより、前述のアルゴリズム単独では高性能を実現できない多くの実対称疎行列についても効率的な全固有値の求解が可能となった。

本研究の成果により、実対称疎行列の多数の固有値（および少数の固有ベクトル）のみが必要であるという状況において、新たなアルゴリズムに基づく高性能固有値ソルバが使用可能となった。このような状況で従来使用されていた密行列固有値ソルバや疎行列反復法ソルバに比べて、本研究で開発されたソルバは少ない計算量で固有値を求められる。このため、本研究の成果は多数の固有値を求めるシミュレーションやデータ解析を高速化し、それらの分野における研究・開発を加速させる可能性がある。

5. 主な発表論文等

〔雑誌論文〕 計0件

〔学会発表〕 計7件（うち招待講演 0件 / うち国際学会 0件）

1. 発表者名 廣田悠輔
2. 発表標題 実対称疎行列に対する効率的三重対角化アルゴリズム
3. 学会等名 日本応用数理学会 2018年度年会
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 廣田悠輔
2. 発表標題 実対称疎行列固有値問題に対する直接解法の検討
3. 学会等名 自動チューニング研究会 $\mu$ ワークショッププログラム
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 廣田悠輔
2. 発表標題 実対称疎行列に対する効率的な全固有値計算アルゴリズム
3. 学会等名 大規模並列数値計算技術に関する研究集会 (LSPANC 2019 March)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 Yusuke Hirota
2. 発表標題 Efficient Algorithm for Tridiagonalization of a Real Symmetric Sparse Matrix
3. 学会等名 Sapporo Summer HPC Seminar 2019
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 廣田悠輔
2. 発表標題 実対称疎行列固有値問題に対する直接法ソルバの性能
3. 学会等名 2019年度 ATμワークショッププログラム
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 廣田悠輔
2. 発表標題 実対称疎行列に対する高速な全固有値計算アルゴリズム
3. 学会等名 RIMS共同研究（公開型）「諸科学分野を結ぶ基礎学問としての数値解析学」
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 廣田悠輔
2. 発表標題 日本応用数理学会 2022年研究部会連合発表会
3. 学会等名 実対称疎行列の三重対角化におけるオーダリングの適用
4. 発表年 2022年

〔図書〕 計0件

〔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
---------	---------------------------	-----------------------	----

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