

平成 22 年 5 月 1 日現在

研究種目： 基盤研究(C)
研究期間： 2007 ~ 2010
課題番号： 19560065
研究課題名 (和文) 計算科学の基盤となる超大規模線形方程式の高速解法の総合的研究と
計算サーバの開発
研究課題名 (英文) A study on fast solvers for large linear systems
in the field of scientific computations
研究代表者
張 紹良 (SHAO-LIANG ZHANG)
名古屋大学・大学院工学研究科・教授
研究者番号： 20252273

研究分野：工学

科研費の分科・細目：応用物理学・工学基礎 ・ 工学基礎

キーワード：線形方程式、高速解法、計算サーバ、計算科学、クリロフ部分空間法

1. 研究計画の概要

超大規模線形方程式のためのクリロフ部分空間法の研究は、50年あまりの歴史があり、特に1980年代の後半から盛んに行われてきた。国内外では数多くの研究成果が発表され、その一部の成果を活用したライブラリーもたくさん開発され実際問題に役立っている。しかし、研究成果の多くは特定な解法、限定されている問題に対して得られたもので、多方面からの総合的な研究は決して多いと言えない。また、ライブラリーの殆どは中小規模の問題にその威力を発揮できるが、大・超大規模の問題になると利用困難になる。本研究班が目指しているのは、

- (1) 元となる問題への深い理解に基づく係数行列の分類,
 - (2) クリロフ部分空間法の研究開発及び問題毎の解法選択基準の確立,
 - (3) 前処理手法の開発と適用,
 - (4) 計算機アーキテクチャーへの配慮・実装,
 - (5) 専門家にも普通の利用者にも使いやすい計算サーバの構築,
 - (6) クリロフ部分空間法の知識を必要としないインターフェスを有するウェブサーバの構築
- などの課題を総合的に研究することである。

2. 研究の進捗状況

3年度目までに実施した研究内容は、

- (1) 線形方程式に帰着される計算科学の応用問題の現状についての調査,

- (2) 線形方程式の係数行列を規模と構造と代数性質の観点からの分類,
- (3) 前処理手法の研究,
- (4) Bi-CR 法, GPBi-CG 法の収束特性に対してテスト問題を通じて具体的な評価などが挙げられる。基礎研究を続けると同時に、応用分野に現れる計算問題にも積極的にコミットして、応用グループと密接に連携して、実際の大規模問題に適用し、その計算効率・精度面の改善・向上の研究を行った。具体的な研究成果は下記の通りである。
 - (1) 原子軌道計算の分野において、計算物理の専門家との共同研究として、原子軌道計算の高速アルゴリズムを開発した。行列部分に物理問題に特化した COCR 法を提案し、計算速度と精度の両側面からこの分野に貢献した。
 - (2) 特異値分解の高速解法に対して、計算効率の良い改良を行い、その収束性を理論的に証明した。
 - (3) 中国科学院力学研究所との共同研究として、流体計算の高速化のため、大規模線形方程式の Finger pattern 前処理の開発を行った。
 - (4) 流体計算などの多くの分野に現れる特異な線形方程式に対して、ORTHOMIN (m)

法を変形して適用を試みた。その結果、変形版の ORTHOMIN(m)法が特異な系に有効であることを判明した。

- (5) 線形方程式の解法における反復改良法と GMRES 法のリスタートの関係を数理的に解明し、それに基づき、GMRES 法の新しい有効なリスタート戦略を提案した。
- (6) 大規模連立線形常微分方程式に対して、行列の指数関数に基づく並列解法を提案し、従来法に比べて計算量および並列性の両面で優れていることを確認した。

これらの成果を国内外の同分野の研究者に紹介し、学术交流を通してその位置づけ・意義を明確にするため、学術論文誌に投稿するとともに、国内学術会議（日本応用数学会、情報処理学会）と国外学術会議にて出席し、発表を行った。

3. 現在までの達成度

②おおむね順調に進展している。

研究計画に挙げている本研究の目標に対して、進捗状況に示したようにその大部分は達成した。

4. 今後の研究の推進方策

具体的には

- (1) 専門家にも一般の利用者にも使いやすい計算サーバ、
- (2) 専門知識を必要としないインターフェスを有するウェブサーバを構築する。

5. 代表的な研究成果

(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 T. Sogabe and S.-L. Zhang 「A COCR method for solving complex symmetric linear systems」

J. Computational and Applied Mathematics, 199 巻, p297-303, 2007, 査読あり。

② 今倉暁, 曾我部知広, 張紹良 「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」日本応用数学会論文誌, 17-4 巻, p523-542, 2007, 査読あり。

③ T. Sogabe, T. Hoshi, S.-L. Zhang, T. Fujiwara 「On a weighted quasi-residual minimization strategy for solving complex symmetric shifted linear systems」 Electron. Trans. Numer. Anal, 31

巻, p126-140, 2008, 査読あり。

④ S. Yamamoto, T. Sogabe, T. Hoshi, S.-L. Zhang, T. Fujiwara 「Shifted COCG method and its application to double orbital extended Hubbard model」 J. Phys. Soc. Jpn, 77 巻, p1-8, 2008, 査読あり。

⑤ 前田祥兵, 阿部邦美, 曾我部知広, 張紹良 「AOR 法を用いた可変的前処理付き一般化共役残差法」日本応用数学会論文誌, 18 巻, p155-170, 2008, 査読あり。

⑥ 宮田考史, 岩崎雅史, 山本有作, 張紹良 「対称三重対角行列向けマルチシフト QR 法の漸近的収束性解析」日本応用数学会論文誌, 18 巻, p563-577, 2008, 査読あり。

⑦ 宮田考史, 杜磊, 曾我部知広, 山本有作, 張紹良 「多重連結領域の固有値問題に対する Sakurai-Sugiura 法の拡張」日本応用数学会論文誌, 19 巻, p537-550, 2009, 査読あり。

⑧ 今倉暁, 曾我部知広, 張紹良 「GMRES(m) 法のリスタートについて」日本応用数学会論文誌, 19 巻, p551-564, 2009, 査読あり。

⑨ T. Sogabe, M. Sugihara, S.-L. Zhang 「An extension of the conjugate residual method to nonsymmetric linear systems」 J. Comput. Appl. Math, 226 巻, p103-113, 2009, 査読あり。