

機関番号：13901

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

研究成果の概要(和文)：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盛んに行われており、その一部の成果を活用したライブラリーも多数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。本研究班は、超大規模線形方程式の数理的諸問題を研究し、そのための高速解法に対して総合的开发を行った。

研究成果の概要(英文)：There are many researches about Krylov subspace methods for large linear systems and some research results were utilized for solving practical problems. However, these results can be used for some special cases. We studied and developed fast solvers for large linear systems in the field of scientific computations.

交付決定額

(金額単位：円)

	直接経費	間接経費	合計
2007年度	1,400,000	420,000	1,820,000
2008年度	700,000	210,000	910,000
2009年度	700,000	210,000	910,000
2010年度	700,000	210,000	910,000
総計	3,500,000	1,050,000	4,550,000

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. 研究開始当初の背景

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多数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。さらに、ライブ

ラリーの多くがクリロフ部分空間法の高度な知識を必要とするため、多くの利用者にとって敷居の高いものとなっている。

2. 研究の目的

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ースを有するウェブサーバの構築
 - (7) 計算サーバとウェブサーバの連携機能の構築
- などの課題を総合的に研究することである.

3. 研究の方法

研究課題遂行のため,

- (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) 電子構造計算のための高速解法に対して研究・開発,
- (5) 実際の大規模問題を用いた解法の評価
- (6) Linux 環境を用いた計算サーバ及びウェブサーバの構築

に取り組んだ. 特に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, 応用グループと密接に連携することを重視した. これにより, 実際の大規模問題に解法を適用し, 解法の計算効率及び精度に対して, 改善に取り組んだ. また, 様々な実際問題を解くため, 計算サーバの構築は基盤技術として重要である. 特に, クリロフ部分空間の専門的な知識を必要とせず, 誰にでも利用できるような計算サーバを実現するため, 使いやすいインターフェースを有したウェブサーバを構築し, 両サーバの連携を行う.

4. 研究成果

本研究班の具体的な研究成果は下記の通りである.

- (1) 原始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, 原始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)法が特異な計算に

有効であることを明らかにした.

- (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及び並列生の両側面で優れていることを確認した.
- (7) 計算サーバ及びウェブサーバの基礎部分 “LS-Wiki システム” を構築し,

- ① ユーザー認証
- ② アップロード
- ③ 計算
- ④ Wiki

の機能を実装した. これらの機能により,

- ① 登録された利用者が,
- ② サーバに問題を送信し,
- ③ サーバに実装された解法を用いて問題を解く

ことが可能となる. また,

- ④ 解法に関する情報を掲示

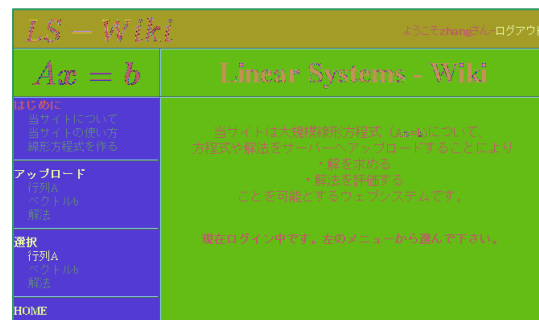
することにより, 利用者が解法を選択する際の指針を示した. このような解法に対するコメントは, 利用者も追加することが可能である.

実装したシステムにおいて, 試験稼働を行った様子を以下に示す.

- ① ユーザー認証 (利用者の管理)



ログイン後, ②③④の機能が利用可能.



- ② アップロード (問題を送信)

A

以下を記入・選択した上でアップロードボタンを押し、行列Aをアップロードしてください。

アップロードするファイル: (参照)

行列Aの名前(10文字):

応用分野:

性質情報(任意: 30文字):

b

以下を記入・選択した上でアップロードボタンを押し、ベクトルbをアップロードしてください。

アップロードするファイル: (参照)

ベクトルbの名前(10文字):

性質情報(任意: 30文字):

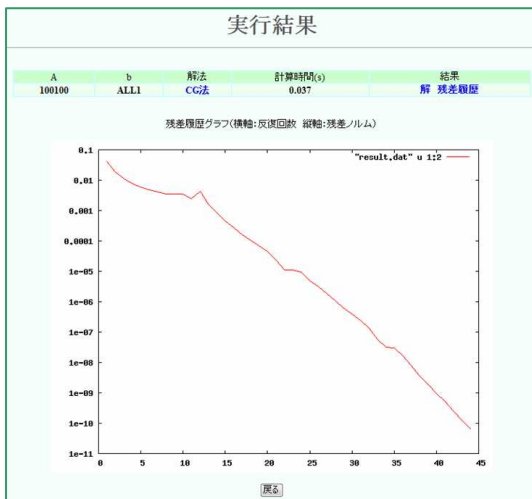
これまでに利用者がアップロードした問題(行列 A とベクトル b) の一覧表示。利用者の解きたい問題を選択後、サーバ内部に実装された解法 (*Solver*) を選択。

行列・ベクトル・解法選択

A					b				
test5人のアップロード一覧					test5人のアップロード一覧				
問題名	応用分野	日時	Web	削除	問題名	応用分野	日時	Web	削除
* 100100	その他	2011/01/13 15:28:46	Web	削除					
100*100 密行列 正定値対称					その他アップロード一覧				
A	ユーザー	応用分野	日時	Web	b	ユーザー	応用分野	日時	Web
rsos4	test1	構造解析	2010/12/24 13:23:02	Web					
ガウ消去	test0	その他	2011/01/13 17:42:11	Web					
strang4	test2	その他	2011/01/17 14:40:03	Web					
正定値対称	test3	電学	2011/01/14 16:35:08	Web					
rsos4	test1	電子状態	2011/02/15 16:07:28	Web					
		S90449							

Solver		
内部一覧		
解法名	適用範囲	Web
* CG法	対称正定値行列	Web
aaa	aaa	Web

③ 計算 (計算結果を受信)



計算結果 (解, 残差収束履歴, 計算時間) を表示。

④ Wiki (解法に関する情報)

LS - Wiki

CG法-M.R.Hestenes,E.Stiefel.1952

有効な行列A:対称正定値行列

共役勾配法は対称正定値行列を係数とする連立一次方程式を解くためのアルゴリズムである。

反復法として利用され、コレスキー分解のような直接法では大きすぎて取り扱えない、大規模な疎行列を解くために利用される。

そのような問題には偏微分方程式などを数値的に解く際に常に現れる。共役勾配法は、エネルギー最小化などの最適化問題を解くために用いられることもある。

CG法に関するコメント

- 共役勾配法(test2)-2011/01/13 15:28:46
- test(test0)-2011/01/13 15:29:43
- 100*100,ALL1,time0.026s(test3)-2011/01/14 16:35:08

コメント:

利用者は解法を選択する際、参考情報(解法の適用範囲やその特性)を知ることができる。なお、利用者がコメントを追加することも可能である。そのため、実際問題に対する解法の評価が多数追加されることで、より有用なシステムに発展することが期待される。

以上の研究成果を国内外の同分野の研究者に紹介し、学術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(日本応用数理学会、情報処理学会)と国外学術会議にて出席し、発表を行った。

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. Fujiwara, T. Hoshi, S. Yamamoto, T. Sogabe, S.-L. Zhang 「A novel algorithm of large-scale simultaneous linear equations」 J. Phys.: Condens. Matter, 査読有, Vol. 22, pp.1-6, 2010.
- ② 宮田考史, 曾我部知広, 張紹良 「Jacobi-Davidson 法における修正方程式の解法—射影空間における Krylov 部分空間のシフト不変性に基づいて—」日本応用数理学会論文誌, 査読有, Vol. 20, pp. 115-129, 2010.
- ③ 則竹渚宇, 今倉暁, 山本有作, 張紹良 「行列の指数関数に基づく連立線形常微分方程式の大粒度並列化解法とその評

- 価」日本応用数学会論文誌，査読有，Vol.19, pp.293-312, 2009.
- ④ T. Sogabe, M. Sugihara, S.-L. Zhang 「An extension of the conjugate residual method to nonsymmetric linear systems」J. Comput. Appl. Math, 査読有, Vol.226, pp.103-113, 2009.
- ⑤ 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，査読有，Vol.19, pp.551-564, 2009.
- ⑥ 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，査読有，Vol.19, pp.537-550, 2009.
- ⑦ 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，査読有，Vol.18, pp.563-577, 2008.
- ⑧ 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，査読有，Vol.18, pp.155-170, 2008.
- ⑨ 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, 査読有，Vol.77, pp.1-8, 2008.
- ⑩ 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, 査読有，Vol.31, pp.126-140, 2008.
- ⑪ 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，査読有，Vol.17, pp.523-542, 2007.
- ⑫ 南さつき, 曾我部知広, 杉原正顯, 張紹良 「Bi-CR法への準最小残差アプローチの適用について」日本応用数学会論文誌，査読有，Vol.17, pp.301-317, 2007.
- ⑬ T. Sogabe, S.-L. Zhang 「A COCR method for solving complex symmetric linear systems」J. Computational and Applied Mathematics, 査読有，Vol.199, pp.297-303, 2007.
- [学会発表] (計 28 件)
- (1) S.-L. Zhang, T. Miyata, L. Du, T. Sogabe, Y. Yamamoto 「A Projection Approach Based on the Residue Theorem for Eigenvalues within a Multiply Connected Domain」The Third China-Japan-Korea Joint Conference on Numerical Mathematics, Aug. 19-23, 2010, Gangneung, Korea.
- (2) A. Imakura, T. Sogabe, S.-L. Zhang 「A Look-Back Technique of Restart for the GMRES(m) Method」Applied Linear Algebra - in honor of Hans Schneider, University of Novi Sad, Jun. 24-28, 2010, Novi Sad, Serbia.
- (3) S.-L. Zhang, A. Imakura, T. Sogabe 「GMRES(m) Method with Look-Back-type Restart for Solving Nonsymmetric Linear Systems」The 7th International Conference on Scientific Computing and Application, Jun. 13-16, 2010, Dalian P.R., China.
- (4) L. Du, T. Sogabe, Y. Yamamoto, B. Yu, S.-L. Zhang 「A Block IDR(s) method for linear systems with multiple right-hand sides」11th Copper Mountain Conference on Iterative methods, Copper Mountain, Apr. 4-9, 2010, Colorado, USA.
- (5) T. Fukaya, Y. Yamamoto, S.-L. Zhang 「An Approach to Automatic Tuning for the Parallel Householder QR decomposition」SIAM Conference on Parallel Processing for Scientific Computing (PP10), Feb. 24-26, 2010, Seattle USA.
- (6) T. Sogabe, T. Hoshi, S.-L. Zhang, T. Fujiwara 「A fast iterative method for solving generalized shifted linear systems with complex symmetric matrices」International Symposium of Electronic Structure Calculations -Theory, Correlated and Large Scale Systems and Numerical Methods-, Dec. 7-9, 2009, Tokyo.
- (7) T. Hoshi, S. Yamamoto, T. Sogabe, S.-L. Zhang, S. Nishino, H. Teng, T. Fujiwara 「Large-scale electronic structure calculations and nanomaterial process」International Symposium of Electronic Structure Calculations -Theory, Correlated and Large Scale Systems and Numerical Methods-, Dec. 7-9, 2009, Tokyo.
- (8) T. Fukaya, T. Sogabe, S.-L. Zhang 「A Dynamic Programming Approach to Performance Optimization for the QR Decomposition」International Symposium of Electronic Structure Calculations -Theory, Correlated and Large Scale Systems and Numerical Methods-, Dec. 7-9, 2009, Tokyo.
- (9) T. Miyata, L. Du, T. Sogabe, Y.

- Yamamoto, S.-L. Zhang 「A Numerical Method Based on the Residue Theorem for Computing Eigenvalues in Multiply Connected Region」 SIAM Conference on Applied Linear Algebra, Oct. 28, 2009, Monterey USA.
- (10) A. Imakura, T. Sogabe, S.-L. Zhang 「A look-back strategy for the GMRES(m) method」 The 7th International Conference on Numerical Optimization and Numerical Linear Algebra, Aug. 16-19, 2009, Lijiang, Yunnan, China.
- (11) T. Miyata, L. Du, T. Sogabe, Y. Yamamoto, S.-L. Zhang 「Computation of eigenvalues in multiply connected region」 The 7th International Conference on Numerical Optimization and Numerical Linear Algebra, Aug. 16-19, 2009, Lijiang, Yunnan, China.
- (12) T. Sogabe, 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, Aug. 16-19, 2009, Lijiang Yunnan, China.
- (13) T. Fukaya, Y. Yamamoto, S.-L. Zhang 「A Dynamic Programming Approach to Optimizing the Blocking Strategy for the Householder QR Decomposition」 The 2nd International Conference on Mathematical Modelling and Computation and The 5th East Asia SIAM Conference, Jun. 8-11, 2009, Universiti Brunei Darussalam, Brunei.
- (14) S.-L. Zhang, A. Imakura, T. Sogabe 「A New Variant of the GMRES(m) Method for Solving Nonsymmetric Linear Systems」 The 2nd International Conference in Mathematical Modelling and Computation and The 5th East Asia SIAM Conference, Jun. 8-11, 2009, Universiti Brunei Darussalam Brunei.
- (15) T. Sogabe, S.-L. Zhang 「An approach to fast solution of generalized shifted linear systems with complex symmetric matrices」 Numerical Analysis and Scientific Computing with Applications (NASCA2009), May 18-22, 2009, Agadir Morocco.
- (16) A. Imakura, T. Sogabe, S.-L. Zhang 「An efficient variant of the GMRES(m) method based on error equations」 Numerical Analysis and Scientific Computing with Applications (NASCA2009), May 18-22, 2009, Agadir Morocco.
- (17) S.-L. Zhang, T. Sogabe 「Numerical Algorithms for Solving Shifted Complex Symmetric Linear Systems」 The NIMS 2008 Conference & The 4th East Asia SIAM Conference, Oct. 10-12, 2008, Daejeon, Korea.
- (18) T. Miyata, Y. Yamamoto, S.-L. Zhang 「An Efficient Parallelization of the QR Algorithm for Symmetric Tridiagonal Eigenproblems」 The NIMS 2008 Conference & The 4th East Asia SIAM Conference, Oct. 10-12, 2008, Daejeon Korea.
- (19) T. Fukaya, Y. Yamamoto, S.-L. Zhang 「A Dynamic Programming Approach to Optimizing the Blocking Strategy for the Householder QR Decomposition」 iWAPT 2008, Oct. 1 2008, Tsukuba.
- (20) T. Amako, Y. Yamamoto, S.-L. Zhang 「A Large-Grained Parallel Algorithm for Nonlinear Eigenvalue Problems and Its Implementation Using OmniRPC」 Cluster 2008, Sep. 29-Oct. 1, 2008, Tsukuba.
- (21) T. Amako, Y. Yamamoto, S.-L. Zhang 「A Large-Grained Parallel Algorithm for Nonlinear Eigenvalue Problems Using Complex Contour Integration」 PARA 2008, May 13-16, 2008, Trondheim Norway.
- (22) A. Imakura, T. Sogabe, S.-L. Zhang 「Implicit wavelet sparse approximate inverse preconditioner using blocked finger pattern for nonsymmetric linear systems (Winner among young researchers)」 ALA 2008 Applied Linear Algebra-in honor of Ivo Marek, Apr. 28-30, 2008, Novi Sad Serbia.
- (23) A. Imakura, T. Sogabe, S.-L. Zhang 「Block Algorithms of Implicit Wavelet Sparse Approximate Inverse Preconditioner for Nonsymmetric Linear Systems」 Nagoya-COE and Beijing-LHD Joint Workshopen "Frontier of Computational Science", Mar. 24, 2008, Nagoya University.
- (24) T. Miyata, Y. Yamamoto, S.-L. Zhang, Y. Nakamura 「Performance of the Complex Hessenberg QR Algorithm on the CSX600 Processor」 SIAM Conference on Parallel Processing for Scientific Computing 2008, Mar. 12-14, 2008, Atlanta GA, USA.
- (25) T. Miyata, Y. Yamamoto, S.-L. Zhang 「QR Algorithm for the Parallel Solution of Symmetric Tridiagonal Eigenproblem」 Beijing-LHD and Nagoya-COE Joint Workshop on "Frontier of Computational Science,

Sep. 18, 2007, Beijing China.

- (26) T. Sogabe, S.-L. Zhang 「On a weighted quasi-residual minimization strategy of QMR for solving complex symmetric shifted linear systems」 Harrachov2007-Computational Methods with Applications, Aug. 19-25, 2007, Harrachov, Czech Republic.
- (27) T. Sogabe, T. Hoshi, S.-L. Zhang, and T. Fujiwara 「Krylov subspace methods for solving complex symmetric shifted linear systems」 The 6th International Congress on Industrial and Applied Mathematics, Jul. 16-20, 2007, Zurich, Switzerland.
- (28) T. Sogabe, S.-L. Zhang 「 Sparse approximate inverse preconditioners for complex symmetric systems of linear equations」 2007 International Conference on Preconditioning Techniques for Large Sparse Matrix Problems in Scientific and Industrial Applications (Precond 2007), Jul. 16-20, 2007, Toulouse, France.

6. 研究組織

(1) 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

(2) 研究分担者 なし

(3) 連携研究者 なし