

科学研究費助成事業 研究成果報告書

平成 27 年 6 月 26 日現在

機関番号：12401

研究種目：若手研究(B)

研究期間：2011～2014

課題番号：23760072

研究課題名(和文) 多分割の分割統治法を用いた高速な固有値・特異値計算

研究課題名(英文) High Speed Computation for Eigenproblems and Singular Value Decomposition Using Multiple Division Divide-and-Conquer Method

研究代表者

桑島 豊 (KUWAJIMA, Yutaka)

埼玉大学・理工学研究科・助教

研究者番号：40451736

交付決定額(研究期間全体)：(直接経費) 1,300,000円

研究成果の概要(和文)：特異値分解に対する多分割の分割統治法の並列計算機向けの実装を行った。これは、固有値問題に対する多分割の分割統治法の並列化を応用することで達成でき、良好な高速化が達成された。また、逐次処理において、精度の面で主要となる計算である実対角行列と低階数の摂動の和の固有値問題に対して、新たなアルゴリズムを提案した。これにより、最悪なケースにおける計算時間の短縮が期待できる。

研究成果の概要(英文)：We implemented divide-and-conquer method with multiple division for singular value decomposition on parallel computers. It is achieved by applying the divide-and-conquer method with multiple division for symmetric eigenvalue problems. We improved algorithm for eigenproblem of real diagonal with low-rank perturbation which is main part in terms of accuracy. As a result, it can be expected to reduce the calculation time in the worst case.

研究分野：数値計算

キーワード：固有値問題 特異値分解 分割統治法

1. 研究開始当初の背景

応用分野において固有値問題や特異値分解は、極めて重要性の高い演算の一つである。申請者らは、行列の固有値問題や特異値分解を高速に行う新たなアルゴリズムを開発した。

固有値問題に対する多分割の分割統治法は、Cuppen によって提案された 2 分割の分割統治法 [1] を含む、2 分割の分割統治法の自然な拡張となっている。2 分割の分割統治法は、標準的な数値線形代数ライブラリ LAPACK に実装されている最新の解法の一つで、広く利用されている解法である。これを分割数について拡張した解法が多分割の分割統治法であり、分割数 k が行列サイズに比べて十分小さいとき、2 分割時と比較して演算量（計算時間）が約 $1.5/k$ 倍程度に削減される。

固有値問題・特異値分解に対する多分割の分割統治法については、すでに研究が進行中で主に以下の (1), (2) の成果をあげた。

(1) 実対称行列と低階数摂動の和の固有値問題解法

多分割の分割統治法は、内部で「実対称行列と低階数摂動の和の固有値問題」に帰着される。この固有値問題は多分割の分割統治法の核であり、この問題に対する精度が全体の精度に直結する非常に重要な部分である。「実対称行列と低階数摂動の和の固有値問題」は、数学的には効率的な解法は従来から知られていたが、数值的に精度よく求められる方法が提案され、多分割の分割統治法は実用的となった。

(2) デフレーション操作

2 分割の分割統治法において、デフレーション操作は他の解法と比肩しうる速度を達成するために重要な役割を果たす。デフレーション操作とは、「実対称行列と低階数摂動の和の固有値問題」に対して行う操作で、自明な固有値・固有ベクトルを取り除くことで実質的な問題サイズを減少させる。これにより、分割統治法において演算量の面で支配的な部分の演算量を削減することが可能で、分割統治法全体の速度が向上する。この操作の拡張は多分割の分割統治法においても、性能向上の鍵となる操作であり、高速化に貢献している。

また、固有値問題に対する多分割の分割統治法のみに対して、主に以下の (3)-(5) を達成している。

(3) 最適な分割数の自動決定

前項で述べたようにデフレーションは分割統治法に不可欠な操作であるが、これによる高速化の割合は入力した行列と分割数によって大幅に異なる。そのため、適切な分割数は入力した行列によって大きく変化し、実用

的なアルゴリズムとするには自動的に分割数を決定しなければならない。これに関しては、計算機性能の事前評価と主計算前の簡単なベンチマークによって、適切な分割数を自動決定するアルゴリズムが提案されており、実験した範囲では 8 割以上の行列に対して適切な分割数を選択できている。

(4) 共有メモリ型並列計算機への実装

一般的に分割統治法は、並列性の高いメタアルゴリズムとして知られている。分割統治法は、元問題をそれと規模が異なるだけのいくつかの小問題へと分割し、それを再帰的に解くことで元の問題を効率的に解く算法である。分割された小問題はそれぞれ独立であるため、ここに高い並列性が存在する。ただし、小問題の結果から元の問題の答えを得る箇所では並列性が乏しければ、全体の並列性は高くはならない。

固有値問題に対する多分割の分割統治法は、与えられた行列を分割数個の小行列と余りに分割し、その小行列の固有値問題を再帰的に解く方法であるので、高い並列性が存在する。また解の統合についても並列性が高いため、主にそれを利用して並列効率の良い共有メモリ型並列計算機への実装が提案されている。この実装においては、2 分割の分割統治法を含む他の解法と比較して、同程度の精度と上回る速度を実現した。

(5) 分散メモリ型並列計算機への実装

前項で述べたように、固有値問題に対する分割統治法は高い並列性を有している。大規模な問題に対応するためには、分散メモリ型並列計算機への実装が不可欠である。分散メモリ型並列計算機への実装は現在進行中であるが、実験の範囲では計算機に既に実装されている 2 分割の分割統治法と比較して、数倍を超える速度向上を達成している。

[1] J. J. M. Cuppen: A Divide and Conquer Method for the Symmetric Tridiagonal Eigenproblem, Numerische Mathematik, pp. 177-195, (1981).

2. 研究の目的

固有値問題に対する多分割の分割統治法を特異値分解へ応用し、特異値分解に対する多分割の分割統治法を開発・実装した。これにより、新たな特異値分解アルゴリズムが実現された。ただし、これは基本的な実装に留まっており、より実践的な実装を行う。この実装法の開発および実装・評価を行う。

3. 研究の方法

逐次計算は PC 上でを行い、並列計算については 8 コアマルチコアプロセッサを搭載した計算機の上で実験する。Matrix Market に載せ

られている行列や乱数を用いて作成した種々の行列を用いて実験を行い、その性能を評価する。性能評価の尺度には計算時間の他、計算結果が固有値問題や特異値分解の定義式をどの程度近似しているかを示す相対残差と、固有ベクトルや特異ベクトルがどの程度互いに直交しているかを示す直交誤差を用いる。

4. 研究成果

(1) 特異値分解に対する多分割の分割統治法の高速度・高精度な実装

特異値分解は、数学的には実対称の固有値問題へ帰着することができる。一般に数値計算上は固有値問題を經由せずに直接特異値・特異ベクトルを計算する。多分割の分割統治法においても、帰着させた固有値問題に対する分割統治法と同様な結果が得られるようにアルゴリズムを構築する。しかし、微小な特異値を持つ行列に対しては、その特異値や対応する特異ベクトルの精度は低くなる。そのため専用の手法を開発し、精度向上を達成した。また、固有値問題に対する多分割の分割統治法には固有ベクトルの精度を確保するための再直交化という処理があるが、この処理にも修正を加え特異値分解へ適用できるように拡張を行った。これらの手法の開発により、特異値分解に対する多分割の分割統治法は2分割と同程度の精度を維持しつつ、十分な高速化が達成された。

(2) 特異値分解に対する多分割の分割統治法の並列計算機への実装

特異値分解に対する多分割の分割統治法は、与えられた行列を分割数個の小行列と余りに分割し、その小行列の固有値問題を再帰的に解く方法であるので、高い並列性が存在する。また解の統合についても並列性が高いため、主にそれを利用して並列効率の良い共有メモリ型並列計算機への実装が提案した。この実装においては、固有値分解と同様に2分割の分割統治法を含む他の解法と比較して、同程度の精度と上回る速度を実現した。

(3) 低階数摂動を伴う実対角行列の固有ベクトルの高精度計算

固有値問題や特異値分解に対する多分割の分割統治法において、内部で低階数摂動を伴う実対角行列の固有値問題を解く。この問題の解の精度が、全体の分割統治法の精度に密接に影響を与えるため、非常に重要な演算部分である。この演算は分割統治法のパラメータである分割数が大きくなるにつれ精度よく解くことが困難となり、また計算時間が増大する。この固有値問題に対する従来の解法では再直交化と呼ばれる手法により固有ベクトルの精度を確保していたが、この方法には最悪のケースに対しては行列サイズの3乗に比例する時間を要するという問題がある。

そのため、新たな固有ベクトル計算手法を開発した。この手法では精度の悪いわずかな数の成分のみを再計算することにより再直交化をする必要のある固有ベクトルの削減に成功した。

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1件)

1. Takuya Matsumoto, Kenji Kudo, Yutaka Kuwajima, Takaomi Shigehara, Algorithm for solving Jordan problem of block Schur form, JSIAM Letters, 査読あり, Vol. 4, 2012, 9-12, https://www.jstage.jst.go.jp/article/jSIAM/4/0/4_0_9/_article

[学会発表](計6件)

1. 後藤 光伸, 桑島 豊, 重原 孝臣, 低階数摂動を伴う実対角行列の固有ベクトル計算の改良, 日本応用数理学会 2014年度年会, 2014.9.3-5, 政策研究大学院大学(東京都港区)
2. 久保田 将司, 桑島 豊, 重原 孝臣, GUPTRI 型行列束への前処理を伴うクロネッカ基底計算アルゴリズムの評価, 「行列・固有値の解法とその応用」研究部会 第16回研究会, 2013.12.26, 東京大学(東京都文京区)
3. 久保田 将司, 桑島 豊, 重原 孝臣, 一般上三角行列束に対するクロネッカ基底計算アルゴリズムの構築 (2), 数値解析シンポジウム 2013, 2013.6.12-14, 道後館(愛媛県松山市)
4. 林 銀河, 桑島 豊, 重原 孝臣, 実対称低階数摂動を伴う対角行列の固有ベクトル計算の改良, 数値解析シンポジウム 2012, 2012.6.6-8, しん喜(群馬県渋川市)
5. 久保田 将司, 桑島 豊, 重原 孝臣, 一般上三角行列束に対するクロネッカ基底計算アルゴリズムの構築 (1), 数値解析シンポジウム 2012, 2012.6.6-8, しん喜(群馬県渋川市)
6. 小林 雅統, 松本 拓也, 桑島 豊, 重原 孝臣, ジョルダン基底計算アルゴリズム JBA-BSF の悪条件問題への適用, 数値解析シンポジウム 2012, 2012.6.6-8, しん喜(群馬県渋川市)

[図書](計0件)

[産業財産権]
出願状況(計0件)

名称:
発明者:

権利者：
種類：
番号：
出願年月日：
国内外の別：

取得状況（計 0 件）

名称：
発明者：
権利者：
種類：
番号：
出願年月日：
取得年月日：
国内外の別：

〔その他〕

ホームページ等

<http://www.nc.ics.saitama-u.ac.jp/>

6. 研究組織

(1) 研究代表者

桑島 豊 (KUWAJIMA, Yutaka)
埼玉大学・理工学研究科・助教
研究者番号：4 0 4 5 1 7 3 6

(2) 研究分担者

()

研究者番号：

(3) 連携研究者

()

研究者番号：