2版

様　式　Ｃ－１９、Ｆ－１９、Ｚ－１９　（共通）

科研費 KAKENHI

科学研究費助成事業　　研究成果報告書

平成　２８　年　　６　月　　２　日現在

機関番号：１４３０１
研究種目：基盤研究(B)（一般）
研究期間：2012～2015
課題番号：２４３６００３８

研究課題名（和文）大規模スパース行列の高速特異値分解法の開発とその実装コード公開

研究課題名（英文）Development of high speed singular value decomposition algorithm for sparse matrices of large scale and upload of its source code

研究代表者
中村　佳正（Nakamura, Yoshimasa）

京都大学・情報学研究科・教授

研究者番号：５０１７２４５８

交付決定額（研究期間全体）：（直接経費）　　14,500,000円

研究成果の概要（和文）：大規模スパース行列の特異値分解はビッグデータ解析の基礎になる重要な行列演算である。本研究では、再直交化つきGolub-Kahan-Lanczos法を大規模スパース行列に適用してその近似3重対角行列を並列計算で高効率に生成し、これに2分法と逆反復法を適用して部分固有対を計算するデータ再利用性の高い並列計算法を開発し、そのソースコードを順次公開している。特に正定値スパース行列に適用すれば部分特異対が得られる。

研究成果の概要（英文）：Singular value decomposition of sparse matrices of large scale is an important matrix operation which is fundamental for analyzing big data. In this research we apply the Golub-Kahan-Lanczos algorithm with reorthogonalization to sparse matrices of large scale to generate approximated tridiagonal matrices by high performance computation in parallel processing. Secondly the bisection and the inverse iteration methods are applied to them to giving a subset of eigenpairs of the originals with high reusability of data. The corresponding source codes have been uploaded one by one. When the sparse matrices are positive definite, then the resulting eigenpairs lead to a sebset of singular triplets.

研究分野：計算数学

キーワード：特異値分解　大規模スパース行列　Golub-Kahan-Lanczos法　部分特異対　再直交化

１．研究開始当初の背景

行列の特異値分解(SVD)は多方面に応用をもつ極めて重要な行列演算である。密行列の特異値分解の場合、通常、計算量の低減のため、与えられた密行列 A を Householder 変換で上 2 重対角行列 B に変形する前処理を行う。今日、M 行列の特異値分解で主流となっているのが原点シフトつき QR 法に基づく Demmel-Kahan 法(1990)である。Demmel-Kahan 法は数値安定性と収束性の保証された信頼性の高い標準解法の地位を獲得し、1991 年 SIAM SIAG/LA 賞を受賞している。Demmel-Kahan 法は LAPACK において DBDSQR コードとして公開され、MATLAB 等の汎用ソフトウェアで広く使われている。

一方、情報検索、量子化学、流体力学などでは、大規模かつスパースな行列の特異値分解が頻繁に現れる。Householder 変換は密ベクトルと行列との積であるから、計算の初期で行列のスパース性が壊れてしまい、密行列の特異値分解と同じだけの計算量とメモリ量を必要とする。これでは大規模行列には歯が立たない。ここにスパース性を活かした高速な前処理という新たな課題が明らかとなる。

２．研究の目的

広範な科学技術計算における重要性にも関わらず、スパース行列のためのライブラリ ARPACK には特異値分解専用のコードは存在しないなど、これまで決定的な解法がなかった大規模スパース行列の特異値分解、固有対計算において、複数の研究者と大学院学生の協力を得て、マルチコアプロセッサ、スパコン、GPGPU 等の最新の計算機環境上で部分特異対及び部分固有対の高速計算を実行する並列性の優れた新アルゴリズムを開発し、有用な実装コードを公開する。

３．研究の方法

本研究では、Householder 変換ではなく Lanczos 法による上 2 重対角化を採用する。Lanczos 法ではスパース行列 A またはその転置行列 A^T を左乗するためスパースを壊すことはない。むろんこれだけでは既存の技術である。そこで、本研究ではブロック Lanczos 法によるブロック上 2 重対角化を行う。大規模かつスパースな行列の特異値分解のための前処理は必ずしも上 2 重対角化にこだわる必要はないからである。ブロック Lanczos 法ではスパース行列 A または A^T を縦長の長方形行列に左乗するため行列データの再利用が可能になる。むろん、前処理で得られたブロック上 2 重対角行列をいかに特異値分解するかという新たな課題が発生する。ここで新しい解法が必要になる。また、Lanczos 法は数値不安定で、数値誤差による Lanczos ベクトルの直交性の悪化が課題となるが、コンパクト WY 変換を利用したブロック Householder 変換による高速な再直交化、あるいは、準直交ブロック Lanczos 法と呼ぶべき手法によってこの問題を回避する。ブロック Householder 変換による再直交化において、高速な行列積の利用が可能である。以上の前処理で得られたブロック上 2 重対角行列からは、ブロック上 2 重対角行列をブロック 3 重対角対称拡大行列に埋め込み、帯行列に対する Sturm 逆反復法（帯行列の 2 分法・帯行列の逆反復法）で特異値分解する。

なお、研究代表者（中村佳正）、研究分担者（木村欣司）に加えて、研究協力者として、神戸大学・大学院システム情報学研究科・教授　山本有作氏、奈良女子大学・理学部・講師　高田雅美氏、参加大学院生として、京都大学大学院情報学研究科　豊

川博己氏、山下巧氏、石上裕之氏、荒木翔氏、藤井祐貴氏、田中博基氏、石田遊也氏（※所属はいずれも本研究参加時のもの）が参加して共同研究を進めることで、本研究を実施する。

４．研究成果

大規模スパース行列の特異値分解はビッグデータ解析の基礎になる重要な行列演算である。本研究では、大規模スパース行列に再直交化つき Golub-Kahan-Lanczos 法を適用して近似３重対角行列を並列計算で高効率に生成し、これに２分法と逆反復法を適用して部分固有対を計算するデータ再利用性の高い計算法を開発し、そのソースコードを順次公開した。特に正定値スパース行列に適用すれば部分特異対が得られた。

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６件）

[J1] Performance evaluation of Golub-Kahan-Lanczos algorithm with reorthogonalization by classical Gram-Schmidt algorithm and OpenMP

Masami Takata, Hiroyuki Ishigami, <u>Kinji Kimura</u>, Yuki Fujii, Hiroki Tanaka, <u>Yoshimasa Nakamura</u>, 情報処理学会論文誌 数理モデル化と応用, 9(2016), 印刷中

Abstract--The Golub-Kahan-Lanczos algorithm with reorthogonalization (GKLR algorithm) is an algorithm for computing a subset of singular triplets for large-scale sparse matrices. The reorthogonalization tends to become a bottleneck of elapsed time, as the iteration number of the GKLR algorithm increases. In this paper, OpenMP-based parallel implementation of the classical Gram-Schmidt algorithm with reorthogonalization (OMP-CGS2 algorithm) is introduced. The OMP-CGS2 algorithm has the advantage of data reusability and is expected to achieve a higher performance of the reorthogonalization computations on shared-memory multi-core processors with large caches than the conventional reorthogonalization algorithms. Numerical experiments on shared-memory multi-core processors show that the OMP-CGS2 algorithm accelerates the GKLR algorithm more effectively for computing a subset of singular triplets for a sparse matrix than the conventional reorthogonalization algorithms. In addition, we discuss the cache use in the CGS2-OMP algorithm and a condition that the CGS2-OMP algorithm achieves a higher performance than the CGS2 algorithm.

[J2] Acceleration of singular value computation solver with narrow band oqds algorithm

Sho Araki, <u>Kinji Kimura</u>, Yusaku Yamamoto, <u>Yoshimasa Nakamura</u>, JSIAM Letters, 7(2015), 9-12.

Abstract--We introduce an extended oqds algorithm for singular values of lower tridiagonal matrix which is a condensed form if inputted full matrix. Reduction to the lower tridiagonal matrix is performed using cache-efficient block Householder method based on the BLAS 2.5 routines. In this letter, we show the implementation details of the latter algorithm such as the shift strategy and criterion for deflation and splitting. The effectiveness of our approach is demonstrated by numerical experiments.

[J3] 再直交化付きブロック逆反復法による固有ベクトルの並列計算

石上裕之，木村欣司，中村佳正，情報処理学会論文誌 コンピューティングシステム，**7**(2014), 1-12.

概要：本論文では，並列計算機向けの実対称３重対角行列の固有ベクトル計算アルゴリズムとして再直交化付きブロック逆反復法を提案する．逆反復法による固有ベクトル計算における再直交化計算では，従来，ベクトル演算や行列-ベクトル積といった並列化粒度の比較的小さい演算を用いたアルゴリズムが中心であった．また，逆反復法の改良アルゴリズムとして Multiple Relatively Robust Representation（MRRR）法が提案されているが，計算対象の行列の固有値分布によっては，固有ベクトルが直交性を失ってしまうことが知られている．本論文で提案する再直交化付きブロック逆反復法は，行列積中心の実装が可能な同時逆反復法を基にした，大粒度の並列化が可能なアルゴリズムである．提案手法により, MRRR 法で計算が破綻してしまうような固有ベクトルを再計算することも可能になるだけでなく，共有メモリマルチコアプロセッサシステム上での数値実験では，提案手法はその元になった逆反復法や同時逆反復法と同等の計算精度を達成し，より高速な並列計算を実現することを示す．

[J4] On implementation and evaluation of inverse iteration algorithm with compact WY orthogonalization

Hiroyuki Ishigami, Kinji Kimura, Yoshimasa Nakamura, IPSJ Trans. Math. Modeling Appl. ***6****(2013), 25-35.*

Abstract--A new inverse iteration algorithm that can be used to compute all the eigenvectors of a real symmetric tri-diagonal matrix on parallel computers is developed. The modified Gram-Schmidt orthogonalization is used in the classical inverse iteration. This algorithm is sequential and causes a bottleneck in parallel computing. In this paper, the use of the compact WY representation is proposed in the orthogonalization process of the inverse iteration with the Householder transformation. This change results in drastically reduced synchronization cost in parallel computing. The new algorithm is evaluated on both an 8-core and a 32-core parallel computer, and it is shown that the new algorithm is greatly faster than the classical inverse iteration algorithm in computing all the eigenvectors of matrices with several thousand dimensions.

[J5] 特異値分解アルゴリズムの性能評価のための大きな条件数を持つ行列作成

高田雅美，木村欣司，中村佳正，情報処理学会論文誌 数理モデル化と応用, **6**(2013), 75-86.

概要：本論文では，特異値分解を評価するために，条件数の大きなテスト行列の作成法を提案する．我々が対象とする条件数は，以下の 2 種類の定義によるものである．1 つ目は，連立 1 次方程式を解く際の困難さの指標として知られる最大特異値と最小特異値の比による定義である．2 つ目は，特異値分解の数値計算の困難さを表す特異値の近接度による条件数の定義である．1 つ目の条件数の大きなテスト行列の作成法では，行列のべき乗を利用するもので，密行列を作成することが可能である．一方，2

つ目の作成法では，近接固有値をもつglued Wilkinson 行列の特異値版ともいえるもので，2 重対角行列のみが作成可能である．提案する 2 種類の作成法の目的は異なるため，それぞれに意義がある．これらの作成法によって作成されるテスト行列を用いて，LAPACK 3.4.2 に含まれているいくつかの特異値分解アルゴリズムを評価する．

[J6] **特異値計算アルゴリズム dqds 法および m2dLVs 法のための新しいシフト戦略**
高田雅美，豊川博己，石上裕之，木村欣司，山下巧，岩﨑雅史，中村佳正，情報処理学会論文誌 コンピューティングシステム，6(2013), 94-107.
概要：本論文では，特異値計算アルゴリズム dqds 法および m2dLVs 法の計算速度と相対精度を改善するために，新しいシフト戦略として algebraic シフトを提案する．従来，LAPACK に実装された dqds 法では経験則に基づく aggressive シフトを，mdLVs 法では Johnson シフトを採用している．aggressive シフトは高速に計算されるが，無誤差計算でも過大なシフトとなる可能性がある．Johnson シフトは，平方根計算を多用するため，速度面で適切とは言えない．よって，dqds 法および m2dLVs 法の両方に対して，数学的理論に基づく algebraic シフトを導入する．このシフト戦略の有効性を確認するために，従来のシフト戦略との比較を行う．

〔学会発表〕（計　２４件）
うち、国際会議録論文（査読つき）５件
[P1] **A parallel solver based on bisection and inverse iteration for computing a subset of eigenpair of symmetric band matrices**
Hiroyuki Ishigami, Hidehiko Hasegawa, Kinji Kimura, Yoshimasa Nakamura, in: Proceedings of International Workshop on Eigenvalue Problems: Algorithms; Software and Applications, in Petascale Computing (EPASA2015), 2016.

[P2] **Implementation of computing singular pairs for large scale matrices using ARPACK**
Masami Takata, Sho Araki, Kinji Kimura, Yuki Fujii, Yoshimasa Nakamura, in: Proceedings of The 2016 International Conference on Parallel and Distributed Processing Techniques and Applications (PDPTA2016), 2016.

[P3] **A new parallel symmetric tridiagonal eigensolver based on bisection and inverse iteration algorithms for shared-memory multi-core processors**
Hiroyuki Ishigami, Kinji Kimura, Yoshimasa Nakamura, in: Proceedings of the 10th International Conference on P2P, Parallel, Grid, Cloud and Internet Computing (3PGCIC-2015), 2015, pp. 216-223.

[P4] **GPU Implementation of Inverse Iteration Algorithm for Computing Eigenvectors**
Hiroyuki Ishigami, Kinji Kimura, Yoshimasa Nakamura, in: Proceedings of 2014 22nd Euromicro International Conference on Parallel, Distributed and network-based Processing (PDP 2014), pp. 664-671.

[P5] Implementation of the orthogonal qd algorithm for lower tridiagonal matrices
Sho Araki, Hiroki Tanaka, Kinji Kimura, Yoshimasa Nakamura, in: Proceedings of The 2013 International Conference on Parallel and Distributed Processing Techniques and Applications (PDPTA2013), Vol. II, 2013, pp.161-167.

〔図書〕（計　０件）

〔産業財産権〕
○出願状況（計　０件）
○取得状況（計　０件）

〔その他〕
ホームページにおけるソフトウェア公開
http://www-is.amp.i.kyoto-u.ac.jp/lab/en/isvd/

６．研究組織
(1)研究代表者
中村佳正（NAKAMURA, Yoshimasa）
京都大学大学院情報学研究科・教授
研究者番号：50172458

(2)研究分担者
木村欣司（KIMURA Kinji）
京都大学大学院情報学研究科・特定准教授
研究者番号： 10447899