

科学研究費助成事業 研究成果報告書

平成 28 年 6 月 8 日現在

機関番号：12102

研究種目：若手研究(B)

研究期間：2013～2015

課題番号：25870099

研究課題名(和文)大規模連立一次方程式に対する反復法を用いた前処理技術の開発と科学技術計算への応用

研究課題名(英文) Developments of iterative-type preconditioning techniques for large linear systems and their application

研究代表者

今倉 暁 (Imakura, Akira)

筑波大学・システム情報系・助教

研究者番号：60610045

交付決定額(研究期間全体)：(直接経費) 3,100,000円

研究成果の概要(和文)：本研究課題では、大規模連立一次方程式の高速求解アルゴリズムを開発し科学技術計算で活用することを目指し、反復法を用いた高速・高安定・高並列性を併せ持つ前処理技術の開発、科学技術計算への実用化を目指した利用性向上のための技術開発および科学技術計算への適用と性能評価を行った。

本研究課題で開発した重み付き定常反復型前処理は、超新星爆発計算において従来の前処理技術では求解困難であった問題の効率的な求解を可能とし、実コードで採用され成果を上げ始めている。

研究成果の概要(英文)：In this project, we aim to develop efficient algorithms for solving large linear systems and apply to some real applications. In order to achieve these purposes, we developed iterative-type preconditioning techniques which have high speed, high stability and high parallel efficiency. We also provided parameters optimization techniques for improving convenience of the proposed preconditioning techniques.

The proposed preconditioning techniques and their parameter optimization techniques were applied to supernova simulation. The proposed techniques made it possible to solve efficiently difficult problems for traditional techniques. Then, the proposed techniques adopted to a supernova simulation code and are beginning to make achievements.

研究分野：数値解析

キーワード：高性能計算 数値解析 大規模連立一次方程式 反復法 前処理技術

1. 研究開始当初の背景

近年のコンピュータ技術の目覚ましい発展に伴って、超高速計算機の高度利用に基づく“計算科学”は理論・実験に次ぐ第3の科学として広く認知され、様々な科学分野の進歩に必要なものになっている。例えば、超新星爆発・ブラックホールの誕生過程の解明や格子 QCD による物理点でのバリオン間相互作用の決定といった物理学の最先端分野においては計算科学がその中心的な役割を果たしている。これらの複雑な科学技術計算を実施するためには、単に高速計算機を開発するだけでは不十分であり、その計算資源を効率的に使いこなすアルゴリズムの開発が重要である。

実際に行われる科学技術計算ではその計算時間の大部分が大規模連立一次方程式の求解に費やされるという事実から、大規模連立一次方程式の高速求解アルゴリズムの開発は計算科学における最も基盤的な研究でありながら、現在においても最も重要な研究の1つである。

近年では、問題の大規模化に伴い計算量と記憶容量の観点から反復法の一つであるクリロフ部分空間法が標準的に用いられている。また、クリロフ部分空間法はその収束性を高める前処理技術とともに用いることが標準的である。前処理技術によってクリロフ部分空間法の収束性を劇的に改善出来ることもあり、大規模連立一次方程式の高速求解アルゴリズムの実用化には、高速・高安定なクリロフ部分空間法の開発とともに高性能前処理技術の開発が必要不可欠である。

2. 研究の目的

本研究課題では、反復法を用いた高性能前処理技術の実用化のための各種の技術を開発する。また、超新星爆発計算や格子 QCD 計算などの科学技術計算に適用し、性能評価を行う。具体的には、以下の3点に重点的に取り組む。

- (1) 定常反復法の高性能化及び収束性の理論解析
- (2) 実用化を目指した利用性向上のための技術開発
- (3) 科学技術計算への適用と性能評価

3. 研究の方法

本研究課題では、反復法を用いた高性能前処理技術を開発し、科学技術計算への適用及び性能評価を行うことが目的である。従来、反復型の前処理では古典的な定常反復法のみが用いられてきた。これに対し、本研究では前処理での使用を想定した定常反復法の高性能化に焦点を当てる。

これまでに研究代表者らは、最も単純な定常反復法である Jacobi 法に着目して、重みパラメータとスケーリング対角行列を用い

た改良法を提案した。また、その収束性に関する理論的解析を通して重みパラメータとスケーリング対角行列の最適化手法を提案した。

今後は、上述の研究の発展として、反復型の前処理技術での使用を想定したより一般的な定常反復法の高性能化手法の開発、各種パラメータの自動設定等による実用化を目指した利用性向上のための技術開発および科学技術計算への適用を行う。

4. 研究成果

本研究課題では、反復法を用いた高性能前処理技術の実用化のための各種技術の開発を目的として、3つの課題：(1) 定常反復法の高性能化及び収束性の理論解析、(2) 実用化を目指した利用性向上のための技術開発、(3) 科学技術計算への適用と性能評価、を重点的に取り組んだ。

各項目に対する主な研究成果は以下の通りである。

(1) 定常反復法の高性能化及び収束性の理論解析

反復型の前処理技術で用いる場合、定常反復法には高速性・高精度・高並列性が要求される。これらの点を考慮し、反復型の前処理技術での使用を想定した定常反復法の高性能化として、重みパラメータを用いた拡張法を開発した。この拡張法は適切なパラメータを設定することにより従来の定常反復法の演算量を増加させることなく収束性を完全にすることが出来る。また、提案法の収束性に関する理論的解析を通し、重みパラメータの理論的最適値について解明した。

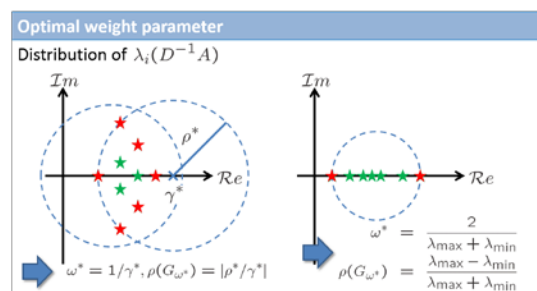


図1. 最適重みパラメータの概要

(2) 実用化を目指した利用性向上のための技術開発

前述した(1)において、重みパラメータの理論最適値について解明した。その最適値を具体的に計算するためには、行列の固有値分布が必要であり、実際に最適値を計算するためには、多くの計算時間が必要であり実用的ではない。本研究課題では、近似的な固有値分布を用い、重みパラメータの近似最適値を実用的な時間で計算する手法を開発した。

図2に示すように、提案した重み付き定常反復法およびその最適化手法を組み合わせることにより、従来の前処理では解くことが出来なかった問題を効率的に解くことが出来るという結果が得られた[1]。

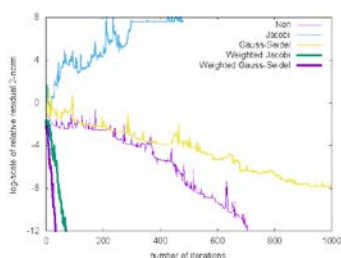


図2. 重み付き定常反復法を前処理とした Krylov 部分空間法の収束履歴

(3) 科学技術計算への適用と性能評価

超新星爆発計算や格子 QCD 計算などの幅広い科学技術計算に対し、開発した前処理技術を適用しその性能評価を行うとともに、フィードバックしてアルゴリズムの改良を行った。本研究課題期間内において、必ずしも多くの分野の科学技術計算に対する貢献が成果として現れてはいないものの、超新星爆発計算の分野において、本研究課題で開発した前処理技術が実コードの高速化を実現した(図3参照)。また、超新星爆発計算の実コードに採用され、日本物理学会[2]や国際会議 Nuclei in the Cosmos[3]に採択されるなど、成果を上げ始めている。

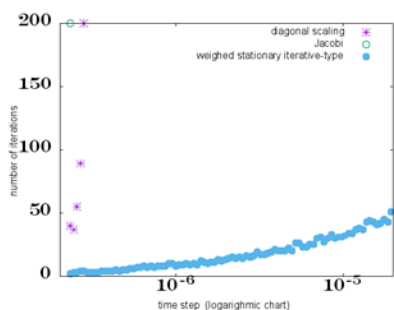


図3. 超新星爆発計算での高速化結果(横軸: 時間ステップ、縦軸: 反復回数)

<引用文献>

[1] 今倉 暁, 櫻井 鉄也, 住吉 光介, 松古 栄夫, 重み付き定常反復型前処理のためのパラメータ最適化手法および超新星爆発計算における有効性, 京都大学数理解析研究所講究録, No. 1848 「次世代計算科学の基盤技術とその展開」, 2013. 8, pp. 15-24.

[2] 長倉洋樹, 岩上わかな, 住吉光介, 古澤峻, 松古栄夫, 今倉暁, 山田章一, 6D ボルツマン・ニュートリノ輻射流体計算による 2 次元超新星シミュレーション, 日本物理学会 第 71 回年次大会 (2016 年), 東北学院大学, 2016/ 3/ 19-22.

[3] Kohsuke Sumiyoshi, Hiroki Nagakura, Wakana Iwakami, Shun Furusawa, Hideo Matsufuru, Akira Imakura, and Shoichi Yamada, Core-collapse supernovae explored by multi-D Boltzmann hydrodynamic simulations, Nuclei in the Cosmos, Toki Messe, Niigata, Japan, 2016/ 6/ 19-24.

5. 主な発表論文等

[雑誌論文] (計 13 件)

[1] Hiroki Nagakura, Wakana Iwakami, Shun Furusawa, Kohsuke Sumiyoshi, Shoichi Yamada, Hideo Matsufuru, Akira Imakura, Three-dimensional Boltzmann-Hydro code for core-collapse in massive stars II. The Implementation of moving-mesh for neutron star kicks, arXiv:1605.00666 [astro-ph.HE], 2016. (査読無し、URL: <https://arxiv.org/abs/1605.00666>)

[2] Akira Imakura, Lei Du, Tetsuya Sakurai, Error bounds of Rayleigh-Ritz type contour integral-based eigensolver for solving generalized eigenvalue problems, Numerical Algorithms, Vol. 71, Issue 1, 2016, pp.103-120. (査読有り、DOI: 10.1007/s11075-015-9987-4)

[3] Akira Imakura, An efficient algorithm to construct an orthonormal basis for the extended Krylov subspace, East Asian Journal on Applied Mathematics, Vol. 4, No. 3, 2014, pp.267-282. (査読有り、DOI: 10.4208/eajam.240413.020614a)

[4] Shusaku Saito, Hiroto Tadano, Akira Imakura, Development of the block BiCGSTAB(1) method for solving linear systems with multiple right hand sides, JSIAM Letters, Vol. 6, 2014, pp.65-68. (査読有り、DOI: 10.14495/jsiaml.6.65)

[5] Hiroto Tadano, Youichi Ishikawa, Akira Imakura, Improvement of the accuracy of the approximate solution of the block BiCR method, JSIAM Letters, Vol.6, 2014, pp.61-64. (査読有り、DOI: 10.14495/jsiaml.6.61)

[6] 今倉 暁, 櫻井 鉄也, 住吉 光介, 松古 栄夫, 重み付き定常反復型前処理のためのパラメータ最適化手法および超新星爆発計算における有効性, 京都大学数理解析研究所講究録, No. 1848 「次世代計算科学の基盤技術とその展開」, 2013. 8, pp. 15-24. (査読無し、URL: <http://www.kurims.kyoto-u.ac.jp/~kyodo/kokyuroku/contents/pdf/1848-02.pdf>)

[7] Akira Imakura, Tomohiro Sogabe and Shao-Liang Zhang, An efficient variant of the restarted shifted GMRES method for solving shifted linear systems, *Journal of Mathematical Research with Applications*, Vol. 33, No. 2, 2013, pp. 127-141. (査読有り、DOI: 10.3770/j.issn:2095-2651.2013.02.001)

[8] 山崎 育朗, 今倉 暁, 多田野 寛人, 櫻井 鉄也, 残差最小性に基づく Krylov 部分空間反復法に対する疎行列用直接解法を用いた前処理のパラメータ推定, *日本応用数理学会論文誌*, Vol. 23, No. 3, 2013, pp. 381-404. (査読有り、URL: <http://ci.nii.ac.jp/naid/110009636317>)

[9] Akira Imakura, Lei Du, Hiroto Tadano, A Weighted Block GMRES method for solving linear systems with multiple right-hand sides, *JSIAM Letters*, Vol. 5, 2013, pp. 65-68. (査読有り、DOI: <http://doi.org/10.14495/jsiaml.5.65>)

[学会発表] (計 34 件)

[1] 長倉洋樹, 岩上わかな, 住吉光介, 古澤峻, 松古栄夫, 今倉暁, 山田章一, 6D ボルツマン・ニュートリノ輻射流体計算による 2 次元超新星シミュレーション, *日本物理学会 第 71 回年次大会 (2016 年)*, 東北学院大学, 2016/ 3/ 19-22. (宮城県仙台市)

[2] Kohsuke Sumiyoshi, Hiroki Nagakura, Wakana Iwakami, Shun Furusawa, Hideo Matsufuru, Akira Imakura, and Shoichi Yamada, Core-collapse supernovae explored by multi-D Boltzmann hydrodynamic simulations, *Nuclei in the Cosmos*, Toki Messe, Niigata, Japan, 2016/ 6/ 19-24. (新潟県新潟市)

[3] Hiroto Tadano, Shusaku Saito, Akira Imakura, Accuracy improvement of the Shifted Block BiCGGR method for linear systems with multiple shifts and multiple right-hand sides, *International Workshop on Eigenvalue Problems: Algorithms; Software and Applications*, in *Petascale Computing (EPASA2015)*, EPOCHAL TSUKUBA, Tsukuba, Ibaraki, Japan, September 14-16, 2015. (poster presentation) (茨城県つくば市)

[4] 多田野 寛人, 齋藤 周作, 今倉 暁, 複数右辺ベクトル・複数シフトをもつ線形方程式に対する Shifted Block Krylov 部分空間法の近似解の精度改善, 【プラズマ壁相互作用における非線形現象の理論モデル構築

と画像・動画解析手法開発に関する研究会】第 1 回非線形・可視化部門研究会, 核融合科学研究所, 2015/ 9/ 28-29. (岐阜県土岐市)

[5] Hiroto Tadano, Akira Imakura, A high accuracy Block Krylov subspace method based on the bi-conjugate residual approach, *International Workshop on Eigenvalue Problems: Algorithms; Software and Applications*, in *Petascale Computing (EPASA2014)*, EPOCHAL TSUKUBA, Tsukuba, Ibaraki, Japan, March 7-9, 2014. (poster presentation) (茨城県つくば市)

[6] 今倉 暁, 櫻井 鉄也, 疎行列向け直接法に基づく重み付き定常反復法, 新学術領域研究「コンピュータによる物質デザイン: 複合相関と非平衡ダイナミクス」平成 25 年度 第 2 回研究会, 東京大学, 2014/ 3/ 10-11. (ポスター発表) (東京都文京区)

[7] 今倉 暁, 疎行列向け直接解法に基づく定常反復法および前処理としての有効性, 環瀬戸内応用数理研究部会 第 17 回シンポジウム, 愛媛大学, 2014/ 1/ 11-12. (愛媛県松山市)

[8] 今倉 暁, 線形方程式の数値解法と科学技術計算への応用, 2013 年度 数値線形代数研究集会, 東京理科大学 大子研修センター, 2013/ 8/ 28-30. (茨城県大子市)

[その他]
ホームページ等
<http://www.cs.tsukuba.ac.jp/~imakura/>

6. 研究組織

(1) 研究代表者

今倉 暁 (IMAKURA, Akira)
筑波大学・システム情報系・助教
研究者番号: 60610045