

周回積分法に対する Block Krylov 部分空間反復法の適用と分子軌道計算への応用

多田野 寛人^{†1} 櫻井 鉄也^{†1}

理学や工学などの分野では大規模な一般化固有値問題が現れ、その高速求解技術が必要とされている。周回積分に基づく固有値解法 (CIRR 法) は一般化固有値問題の解法の 1 つである。その計算の主要部は複数の連立一次方程式の求解であり、これらは独立に解くことが可能であることから master-worker 並列環境に適している。この方法で現れる連立一次方程式の右辺項は複数本のベクトルで構成され、これらの方程式の求解時間が固有値解法の大部分を占める。本論文では、周回積分法で現れる複数の右辺ベクトルを持つ連立一次方程式に対して、Block Krylov 部分空間反復法を適用することで効率良く解くことを提案する。また、数値実験において分子軌道計算で現れる一般化固有値問題に対して適用し、その有効性についても示す。

A Block Krylov Subspace Method for the Contour Integral Method and Its Application to Molecular Orbital Computations

HIROTO TADANO^{†1} and TETSUYA SAKURAI^{†1}

Large-scale generalized eigenvalue problems appear in many scientific applications. An eigensolver using contour integral (the CIRR method) is suitable for the master-worker parallel environment since the main operation of this method is to solve independent systems of linear equations. Systems of linear equations which appear in CIRR have multiple right hand sides. Most of the computation time of CIRR is spent on solving these systems of linear equations. In this paper, we propose to solve systems of linear equations with multiple right hand sides by using the Block Krylov subspace method. Moreover, we apply this method to the generalized eigenvalue problem which appears in molecular orbital computations.

1. はじめに

n 次実対称行列 $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$, および n 次正定値実対称行列 $B \in \mathbb{R}^{n \times n}$ を持つ大規模一般化固有値問題

$$Ax = \lambda Bx \quad (1)$$

は、建造物の振動解析, 材料設計などの応用分野で現れる。これらの分野では、すべての固有対が必要なのではなく、ある一部の固有対のみが必要とされることが多い。

大規模固有値問題の一部の固有対を求める代表的な手法として、Shift-and-Invert Lanczos (SIL) 法¹⁾がある。同法を用いることでシフト量 σ の近傍にある複数の固有対を求めることができるが、行列 $(A - \sigma B)$ を係数行列に持つ連立一次方程式を逐次的に解かなければならず、並列環境において高い並列性を引き出すことは非常に困難である。我々は、一般化固有値問題 (1) の一部の固有対を求める別のアプローチとして、周回積分と Rayleigh-Ritz procedure を組み合わせた固有値解法¹³⁾ (CIRR 法: Contour Integral Rayleigh-Ritz method) を提案した。同法は複素平面上の指定した円領域内に存在する固有値と、対応する固有ベクトルを求める方法である。CIRR 法における演算の主要部は、複数の大規模連立一次方程式の求解であるが、これらの方程式は互いに依存関係がないことから、それぞれ独立に解くことが可能である。

SIL 法で現れる連立一次方程式は実対称行列を持つが、CIRR 法では複素対称行列を持つ連立一次方程式が現れる。近年の計算機では、メモリバンド幅が計算時間に大きな影響を与える。そのため、両方で現れる連立一次方程式が反復解法によって同じ反復回数で解けたとすると、CIRR 法では 1 方程式あたりの求解に SIL 法の 2 倍の計算時間を要する。しかしながら、SIL 法は反復によって固有対の精度を改善するため、十分な精度の固有対を得るには一般に数十回の反復が必要となる¹⁾。SIL 法の各反復において連立一次方程式の求解が必要となる一方、CIRR 法は反復処理を必要としないため、演算量の面で有利である。また精度面では、SIL 法は反復を繰り返すことで固有対の精度を向上させることができるが、CIRR 法における固有対の精度は複素平面上に配置した円領域に大きく依存する。そのため、CIRR 法で固有対の精度が足りない場合は、円領域の半径を小さくすることで精度の良い固有対を得ることができる (付録参照)。

^{†1} 筑波大学大学院システム情報工学研究科

Department of Computer Science, Graduate School of Systems and Information Engineering, University of Tsukuba

CIRR 法では複素平面上に円領域を設定し、その内部に存在する固有値と、対応する固有ベクトルを求めることができるが、前述のように円領域の配置の仕方によっては十分な精度の固有対が得られないことがある。文献 7) で提案されているブロック化手法と CIRR 法を組み合わせ、Block CIRR 法¹⁴⁾により固有対の精度が改善できるようになった。しかしながら、Block CIRR 法では、複数の右辺ベクトルを持つ大規模連立一次方程式が複数現れ、この求解が必要になった。

複数の右辺ベクトルを持つ連立一次方程式の求解法として、係数行列の完全分解を用いた方法がある。係数行列を 1 回だけ完全分解し、右辺ベクトルの数だけ前進・後退代入を行うことで解を求めることが可能である。しかしながら、係数行列が大規模である場合は、完全分解に膨大な演算量とメモリ量を必要とするため、同手法の適用は困難である。本研究では、同方程式に対して Block Krylov 部分空間反復法を適用することにより、効率良く解を求めることを提案する。さらに、応用例として分子軌道計算で現れる一般化固有値問題に Block CIRR 法を適用し、同法において現れる連立一次方程式を効率良く解くことができることを示す。

本論文の構成は以下のとおりである。次章では、周回積分に基づく固有値解法である Block CIRR 法について述べる。3 章では、Block CIRR 法で現れる複数の連立一次方程式を効率良く解くための Block Krylov 部分空間反復法について説明する。4 章において、分子軌道計算で現れる一般化固有値問題に対して Block CIRR 法を適用し、その際に現れる連立一次方程式が Block Krylov 部分空間反復法で効率良く解けることを、数値実験により示す。最後に 5 章において、本論文のまとめと今後の課題を述べる。

2. 周回積分に基づく固有値解法とそのブロック化

2.1 CIRR 法

本節では、周回積分に基づく固有値解法である CIRR 法¹³⁾について述べる。複素平面上に中心 $\gamma \in \mathbb{R}$ 、半径 ρ の円周 Γ を設置し、その内部に含まれる一般化固有値問題 (1) の m 個の固有値 $\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_m$ と、対応する固有ベクトル x_1, x_2, \dots, x_m を求めることを考える。周回積分によって定義される m 本のベクトル $\{s_k\}_{k=0}^{m-1}$ を

$$s_k \equiv \frac{1}{2\pi i} \int_{\Gamma} z^k (zB - A)^{-1} Bv dz \quad (2)$$

とおく。ここで、 $v \in \mathbb{R}^n$ は任意の非零ベクトル、 i は虚数単位であり、 $z \in \mathbb{C}$ である。行列 $S \in \mathbb{R}^{n \times m}$ を $S \equiv [s_0, s_1, \dots, s_{m-1}]$ と定義し、行列 S に対する QR 分解により正規直交

基底を列ベクトルに持つ行列 $Q \in \mathbb{R}^{n \times m}$ を生成する。得られた行列 Q を用いて生成された行列束 $(Q^T A Q, Q^T B Q)$ の Ritz 値、Ritz ベクトルは、円周 Γ 内に存在する固有値と対応する固有ベクトルに一致する¹³⁾。

実際の計算では、式 (2) の周回積分は近似的に評価する必要がある。ここでは、円周 Γ 上に N 個の節点

$$\omega_j = \gamma + \rho e^{\frac{2\pi i}{N}(j+\frac{1}{2})}, \quad j = 0, 1, \dots, N-1 \quad (3)$$

をとり、周回積分を N 点台形則によって近似する。ベクトル s_k を N 点台形則で近似したベクトルを \tilde{s}_k とすると、

$$\tilde{s}_k = \frac{1}{N} \sum_{j=0}^{N-1} \left(\frac{\omega_j - \gamma}{\rho} \right)^{k+1} (\omega_j B - A)^{-1} Bv$$

と書ける。行列 $\tilde{S} \in \mathbb{R}^{n \times K}$ を $\tilde{S} \equiv [\tilde{s}_0, \tilde{s}_1, \dots, \tilde{s}_{K-1}]$ と定義し、 \tilde{S} を QR 分解することにより正規直交基底を生成する。台形則による近似の影響で積分誤差が発生するため、 \tilde{s}_k には円外に存在する固有値に対応する固有ベクトル成分も含まれる。そのため、正数 K は理論的には $K = m$ であるが、円外の固有ベクトル成分も考慮し $K \geq m$ と設定する。円周 Γ 内に多くの固有値が含まれる場合は、正数 K を大きくとる必要があるが、ベクトル列 $\{\tilde{s}_k\}$ の独立性が低くなるため、得られる固有対の精度も悪化するという欠点がある。

2.2 Block CIRR 法

CIRR 法の精度を向上させるために、文献 14) において Block CIRR 法が提案された。Block CIRR 法では、式 (2) で現れる CIRR 法のベクトル v を、ベクトルを M 本並べた行列 $V \in \mathbb{R}^{n \times M}$ で置き換え、

$$\tilde{S}_k = \frac{1}{N} \sum_{j=0}^{N-1} \left(\frac{\omega_j - \gamma}{\rho} \right)^{k+1} (\omega_j B - A)^{-1} B V \quad (4)$$

とした方法である。Block CIRR 法を用いることにより、CIRR 法と比較して精度の良い固有対を得ることができる。Block CIRR 法では、行列 $\tilde{S} \in \mathbb{R}^{n \times (MK)}$ を $\tilde{S} = [\tilde{S}_0, \tilde{S}_1, \dots, \tilde{S}_{K-1}]$ で構成し、 \tilde{S} を QR 分解して射影に用いる行列 Q を生成する。このとき、正数 K は $K \geq m/M$ を満たすように設定する。

行列 \tilde{S}_k は、 M 本の右辺ベクトルを持つ N 本の連立一次方程式

$$(\omega_j B - A) Y_j = B V, \quad j = 0, 1, \dots, N-1 \quad (5)$$

Input: $\gamma, \rho \in \mathbb{R}$, $N, K \in \mathbb{Z}$, $V \in \mathbb{R}^{n \times M}$.

Output: $\tilde{\lambda}_1, \tilde{\lambda}_2, \dots, \tilde{\lambda}_{m'}$, $\tilde{\mathbf{x}}_1, \tilde{\mathbf{x}}_2, \dots, \tilde{\mathbf{x}}_{m'}$.

0. **Set** $\omega_0, \omega_1, \dots, \omega_{N/2-1}$ by (3).

1. **Solve** $(\omega_j B - A)Y_j = BV$, $j = 0, 1, \dots, N/2-1$.

2. **Compute** $\tilde{S}_0, \tilde{S}_1, \dots, \tilde{S}_{K-1}$ by (6).

3. **Compute** singular values $\sigma_1, \sigma_2, \dots, \sigma_{MK}$ of \tilde{S} and find \tilde{m} such that $\sigma_j/\sigma_1 \geq \theta$ for $1 \leq j \leq \tilde{m}$.

4. **Construct** S' by the first \tilde{m} columns of \tilde{S} .

5. **Compute** an orthonormal matrix Q from S' .

6. **Form** $A' = Q^T A Q$, $B' = Q^T B Q$.

7. **Compute** eigenpairs $(\tilde{\lambda}_j, \mathbf{u}_j)$ of (A', B') .

8. **Compute** approximate eigenvectors $\tilde{\mathbf{x}}_j = Q \mathbf{u}_j$.

9. **Choose** m' eigenpairs $(\tilde{\lambda}_j, \tilde{\mathbf{x}}_j)$ with small residual.

図 1 Block CIRR 法のアルゴリズム

Fig. 1 Algorithm of the Block CIRR method.

を解くことにより計算することができる。ここで、 A, B, V は実行列で、節点に関して $\omega_{N-j-1} = \bar{\omega}_j$ の関係が成り立つことを利用すると、 $Y_{N-j-1} = \bar{Y}_j$ となる。したがって、解くべき連立一次方程式の本数は $N/2$ 本となる。これらの関係を利用して式 (4) を整理すると、

$$\tilde{S}_k = \frac{2}{N} \sum_{j=0}^{N/2-1} \operatorname{Re} \left(e^{\frac{2\pi i}{N}(k+1)(j+\frac{1}{2})} Y_j \right) \quad (6)$$

を得る。Block CIRR 法のアルゴリズムを図 1 に示す。ステップ 5 の QR 分解、およびステップ 6 の射影に要する時間を減少させるために、行列 \tilde{S} に含まれる独立性が低いベクトルを除去する。これは \tilde{S} の特異値分解によって実行される。

Block CIRR 法では、アルゴリズムのステップ 1 において $N/2$ 本の連立一次方程式を解く必要がある。この部分が同法の計算時間の大半を占めるが、これらの連立一次方程式は互いに独立に解くことができ、演算の主要部を分散して処理することが可能である。並列環境において Block CIRR 法の計算時間をさらに短縮するには、複数の右辺ベクトルを持つ連立一次方程式を効率良く解くことが求められる。

3. Block Krylov 部分空間反復法

Block CIRR 法では、周回積分を N 点台形則で近似する際に、式 (5) の連立一次方程式を $N/2$ 本解く必要がある。また、同方程式の右辺項には行列 $V \in \mathbb{R}^{n \times M}$ が存在するため、現れる連立一次方程式は複数の右辺ベクトルを持つ。このような連立一次方程式は、係数行列の完全分解と複数回の前進・後退代入によって解を求めることができるが、行列の完全分解には多くの演算量とメモリ量が必要となり、大規模問題には適していない。大規模連立一次方程式の反復解法として、共役勾配法⁶⁾、双共役勾配法²⁾、BiCGSTAB 法¹⁷⁾などに代表される Krylov 部分空間反復法がある。これらは右辺ベクトルが 1 本の場合の反復解法であるが、複数本の右辺ベクトルを持つ連立一次方程式を同時に解くことができる Block Krylov 部分空間反復法も提案されている。

本章では、Block Krylov 部分空間反復法の性質について述べ、Block CIRR 法で現れる連立一次方程式に対して Block Krylov 部分空間反復法を適用することを考える。

3.1 Block Krylov 部分空間反復法の性質

本節では、 n 次行列 C を係数行列に持つ連立一次方程式

$$CY = W \quad (7)$$

を Block Krylov 部分空間反復法で解くことを考える。ここで、 $Y = [\mathbf{y}^{(1)}, \mathbf{y}^{(2)}, \dots, \mathbf{y}^{(M)}]$ 、 $W = [\mathbf{w}^{(1)}, \mathbf{w}^{(2)}, \dots, \mathbf{w}^{(M)}]$ とする。連立一次方程式 (7) の第 k 番目の近似解を Y_k 、対応する残差を $R_k = W - CY_k$ とおく。Block Krylov 部分空間反復法では、近似解 Y_k 、および残差 R_k は空間条件

$$Y_k \in Y_0 + \mathcal{K}_k(C; R_0),$$

$$R_k \in \mathcal{K}_{k+1}(C; R_0)$$

を満たすように計算される。ここで、 $\mathcal{K}_k(C; R_0)$ は Block Krylov 部分空間

$$\mathcal{K}_k(C; R_0) \equiv \left\{ \sum_{j=0}^{k-1} C^j R_0 \xi_j ; \xi_j \in \mathbb{C}^{M \times M} \right\}$$

を表す。右辺ベクトルが 1 本の場合は Krylov 部分空間反復法に帰着し、1 回反復あたり Krylov 部分空間の次元は 1 広がる。一方、Block Krylov 部分空間反復法では、1 回反復あたり Krylov 部分空間反復法の次元が M 広がるため、1 本ずつ方程式を解いた場合と比較して近似解の探索空間が広がる。

係数行列 C が正定値 Hermite 行列の場合の Krylov 部分空間反復法として共役勾配法⁶⁾ が

あり, 同法を Block 版に拡張した Block 共役勾配法 (Block CG 法) が文献 10) で提案されている. $\mathbf{y}_k^{(j)}$ を Block CG 法で得られた第 j 番目の連立一次方程式の第 k 番目の近似解, $\mathbf{y}_*^{(j)}$ を第 j 番目の連立一次方程式の解析解とし, $\mathbf{y}_k^{(j)}$ に対する誤差ベクトルを $\mathbf{e}_k^{(j)} = \mathbf{y}_*^{(j)} - \mathbf{y}_k^{(j)}$ とする. また, 行列 C の固有値は $\mu_n \geq \mu_{n-1} \geq \dots \geq \mu_M \geq \dots \geq \mu_1$ であるとする. このとき, Block CG 法で生成される近似解の誤差 $\mathbf{e}_k^{(j)}$ について, 以下の定理が成り立つ¹⁰⁾.

定理 1 誤差ベクトル $\mathbf{e}_k^{(j)}$ の C -内積に関して

$$(\mathbf{e}_k^{(j)})^H C \mathbf{e}_k^{(j)} \leq c \cdot \left(\frac{\sqrt{\kappa} - 1}{\sqrt{\kappa} + 1} \right)^{2k}, \quad 1 \leq j \leq M$$

が成り立つ. ここで, c は定数, $\kappa = \mu_n / \mu_M$ である.

上記定理は, ブロック数 M が大きいほど κ は 1 に近づき, 誤差ベクトルの C -内積の減少率が大きくなるため, 少ない反復回数で解に近づくことを示している. 文献 8) において, ブロック数を大きくすると近似解を得るまでの反復回数が減少することが数値実験によって示されている.

係数行列 C が正定値 Hermite 行列でない場合は上記定理は成り立たない. しかしながら, Block Krylov 部分空間反復法の 1 つである Block QMR 法³⁾ や Block BiCGSTAB 法⁵⁾ で複数の右辺ベクトルを持つ連立一次方程式を解いた場合, 1 本ずつ解いた場合と比較して反復回数が減少することが, 文献 3), 5) で示されている.

3.2 Block COCG 法

Block CIRR 法で現れる連立一次方程式の係数行列 C は $C = \omega B - A$ で構成され, 行列 A, B が実対称行列, ω が複素数であるため, C は複素対称行列となる. 複素対称行列用の Krylov 部分空間反復法として, COCG 法¹⁸⁾ や CSQMR 法⁴⁾ がある. 非 Hermite 係数行列用の解法である双共役勾配法 (BiCG 法)²⁾ や BiCGSTAB 法¹⁷⁾ は, 1 回反復あたり 2 回の行列・ベクトル積を必要とするが, COCG 法, CSQMR 法では係数行列の複素対称性を利用して, 1 回反復あたり 1 回の行列・ベクトル積で近似解の計算を行うことができる.

複数本の右辺ベクトルを持つ複素対称連立一次方程式に対する QMR 法が, 文献 15) で提案されている. この手法は残差ノルムの疑似最小化アプローチから得られるが, このほかに, 残差に対して共役直交条件を課すことで得られる Block COCG 法がある. 本研究では, 1 回反復あたりの演算量が少ない Block COCG 法を採用する. Block COCG 法では, 連立一次方程式 (7) の第 $(k+1)$ 番目の残差 R_{k+1} が 2 項間漸化式

$$R_0 = P_0 = W - CY_0,$$

$$R_{k+1} = R_k - CP_k \alpha_k,$$

$$P_{k+1} = R_{k+1} + P_k \beta_k$$

によって求められる. ここで, P_{k+1} は補助行列, Y_0 は初期解であり, 近似解 Y_{k+1} は

$$Y_{k+1} = Y_k + P_k \alpha_k$$

で計算できる. 漸化式中に現れる $\alpha_k, \beta_k \in \mathbb{C}^{M \times M}$ は共役直交条件

$$R_{k+1}, CP_{k+1} \perp \mathcal{K}_{k+1}(\bar{C}; \bar{R}_0)$$

を満たすように決められる.

3.3 前処理付き Block COCG 法

一般に, Krylov 部分空間反復法の収束性は, 係数行列によって大きく左右される. 係数行列が悪条件の場合は, 解が得られるまで多くの反復回数を要したり, 解が得られなかったりすることがある. 一方, 係数行列が単位行列に近い場合は, 少ない反復回数で解が得られることが多くの実験によって示されている. 解くべき連立一次方程式を変形し, 係数行列を単位行列に近づける手法を前処理と呼ぶ. Krylov 部分空間反復法で連立一次方程式を解く場合, 前処理を用いることが一般的になっている.

複素対称連立一次方程式に対する前処理は, 係数行列 C を $C \approx LDL^T$ と不完全分解することによって行われる. ここで, L は n 次下三角行列, D は n 次対角行列である. このとき, 行列 L と D によって係数行列を変形すると

$$C \approx LDL^T \Leftrightarrow (LD^{1/2})^{-1} C (LD^{1/2})^{-T} \approx I$$

のように単位行列に近い行列が得られる. この行列を係数行列に持つ連立一次方程式を解くことにより, 少ない反復回数で解を得ることができる. 連立一次方程式 (7) に対する前処理付き Block COCG 法のアルゴリズムを図 2 に示す. 図 2 中の $r_k^{(j)}$ は, 第 j 番目の連立一次方程式の第 k 反復における残差ベクトルを表し, ε は正の微小値である.

3.4 近似係数行列の完全分解前処理

本研究では, 前処理として近似係数行列の完全分解前処理⁹⁾ を用いる. 前処理は, まず係数行列に対してカットオフと呼ばれる非零要素数を減少させる処理を施し, 近似係数行列を生成する. 係数行列を $C = [c_{ij}]$, 近似係数行列を $\tilde{C} = [\tilde{c}_{ij}]$ とすると, 近似係数行列は

$$\tilde{c}_{ij} = \begin{cases} c_{ij}, & (i = j \text{ or } |c_{ij}| \geq \delta) \\ 0, & \text{otherwise} \end{cases}$$

で非零要素が決定される. ここで, δ は正の微小値である. 近似係数行列 \tilde{C} の完全 Cholesky 分解: $\tilde{C} = LDL^T$ により, 前処理行列 L , および D を生成する.

Let Y_0 be an initial guess,
 Compute $R_0 = W - CY_0$,
 Set $P_0 = Z_0 = (LDL^T)^{-1}R_0$,
 For $k = 0, 1, \dots$ until $\max_j \|r_k^{(j)}\|_2 / \|w^{(j)}\|_2 \leq \varepsilon$ do:
 $Q_k = CP_k$,
 Solve $(P_k^T Q_k)\alpha_k = R_k^T Z_k$ for α_k ,
 $Y_{k+1} = Y_k + P_k \alpha_k$,
 $R_{k+1} = R_k - Q_k \alpha_k$,
 $Z_{k+1} = (LDL^T)^{-1}R_{k+1}$,
 Solve $(R_{k+1}^T Z_k)\beta_k = R_{k+1}^T Z_{k+1}$ for β_k ,
 $P_{k+1} = Z_{k+1} + P_k \beta_k$,
 End for

図 2 前処理付き Block COCG 法のアルゴリズム

Fig. 2 Algorithm of the preconditioned Block COCG method.

このほかの前処理行列生成法として、係数行列の非零構造と同じ構造を持つように前処理行列を生成する IC(0) 分解¹²⁾がある。IC(0) 分解前処理は、有限差分法で生成される連立一次方程式に対して効果的であることが多くの実験によって確かめられている。しかしながら、非零要素数が多く複雑な構造を持つ行列に対しては、IC(0) 分解前処理では解が得られない場合があることが、文献 9) で示されている。文献 9) では、このような行列を持つ連立一次方程式に対して近似係数行列の完全分解前処理を適用することにより、IC(0) 分解前処理では解けなかった問題でも解が得られている。

4. 数値実験

本章では、数値実験により Block Krylov 部分空間反復法の性能を評価する。数値実験は、CPU: AMD Opteron Quad Core 8356 2.3GHz, メモリ: 32 GBytes, コンパイラ: Intel Fortran ver. 10.1, Intel C++ ver. 10.1 上で、倍精度計算で行った。また、計算には OpenMP を用い、近似係数行列の完全分解前処理は、疎行列直接法パッケージである PARDISO¹¹⁾で行った。

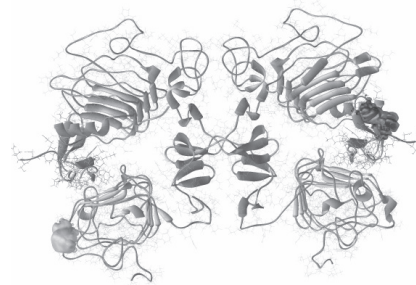
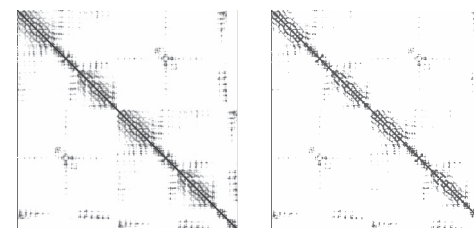


図 3 上皮成長因子受容体 2 量体のフロンティア電子軌道

Fig. 3 Frontier orbital of dimerization of epidermal growth factor receptor.



(a) 行列 A の非零構造 (b) 行列 B の非零構造

図 4 数値実験で用いる行列の非零構造

Fig. 4 Nonzero structures of matrices used in numerical experiments.

本実験では、上皮成長因子受容体 2 量体の分子軌道計算¹⁶⁾で現れる一般化固有値問題を扱う。図 3 は上皮成長因子受容体 2 量体のフロンティア電子軌道である。行列サイズ n は 96,234, 行列 A の非零要素数は 456,807,648 であり、行列 B は 53,146,470 個の非零要素を持つ。図 4 に行列 A と行列 B の非零構造を示す。

Block CIRR 法で現れる連立一次方程式は、前処理付き COCG 法、および Block COCG 法で解き、前処理は近似係数行列の完全分解前処理⁹⁾を用いた。また、Block CIRR 法が必要となる行列 V は乱数で与え、反復法の停止条件は M 本の連立一次方程式の相対残差ノルムの最大値が、 1.0×10^{-10} を下回った場合とした。

4.1 右辺ベクトルの本数が前処理付き Block COCG 法の反復回数に与える影響

本節では、 M 本の右辺ベクトルを持つ連立一次方程式を前処理付き Block COCG 法で

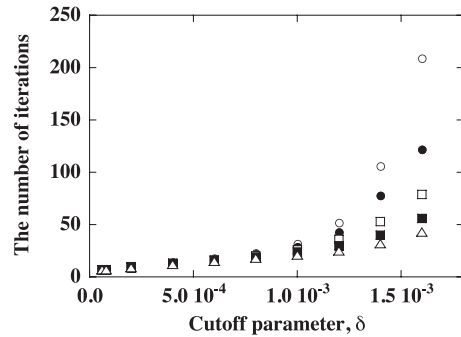


図 5 近似係数行列生成パラメータ δ が Block COCG 法の反復回数に及ぼす影響 (○ : $M=1$, ● : $M=2$, □ : $M=4$, ■ : $M=8$, △ : $M=16$)
 Fig. 5 Relation between the parameter δ for the approximate coefficient matrix and the number of iterations of the Block COCG method (○ : $M=1$, ● : $M=2$, □ : $M=4$, ■ : $M=8$, △ : $M=16$).

解いた場合の反復回数を調べる。ここでは、中心 $\gamma = -0.15$, 半径 $\rho = 0.05$ の円周上に節点 N を 32 点配置し, 第 0 番目の節点 ω_0 を用いて構成した行列 $C = \omega_0 B - A$ を係数行列に持つ連立一次方程式を解いた。また, 連立一次方程式の右辺ベクトルの本数 M は, 1, 2, 4, 8, および 16 の 5 通りの場合について実験を行った。

図 5 に, 近似係数行列生成パラメータ δ を変化させたときの前処理付き Block COCG 法の反復回数を示す。図 5 の横軸は, 近似係数行列の完全分解前処理で用いるカットオフパラメータ δ を表し, 縦軸は前処理付き Block COCG 法の反復回数を表す。パラメータ δ を小さくすると, 前処理行列の精度が向上するため, 少ない反復回数で計算が終了している。このとき, 連立一次方程式の右辺ベクトルの本数 M によらず, 反復回数はほぼ同程度であった。一方, δ が大きくなると前処理行列の精度が低下するため, 反復回数が増加する。右辺ベクトルの本数 M が 1 の場合は前処理付き COCG 法で連立一次方程式を解くことと等しくなるが, この場合は前処理行列の精度低下にともなって, 反復回数が急激に増加している。右辺ベクトルの本数 M を増やしていくと, 前処理行列の精度が低下しても反復回数の増加は緩やかになった。この結果は, 文献 3), 5) で示されている, 複数本の右辺ベクトルを持つ連立一次方程式をまとめて解くと反復回数が減少するという性質が, 前処理付き Block COCG 法でも得られることを示している。

図 6 に, 図 5 の $\delta = 1.6 \times 10^{-3}$ の場合における前処理付き Block COCG 法の相対残差履歴を示す。同図の縦軸には, M 本の連立一次方程式の相対残差ノルムの最大値をプロッ

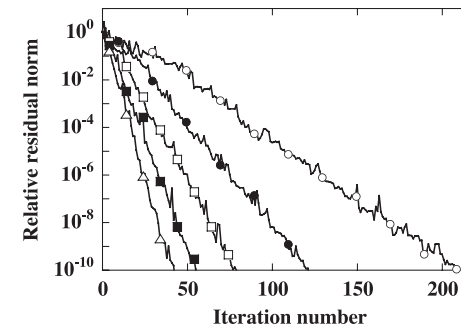


図 6 近似係数行列パラメータが $\delta = 1.6 \times 10^{-3}$ の場合の Block COCG 法の相対残差履歴 (○ : $M=1$, ● : $M=2$, □ : $M=4$, ■ : $M=8$, △ : $M=16$)
 Fig. 6 Relative residual histories of the Block COCG method when the parameter δ for the approximate coefficient matrix was 1.6×10^{-3} (○ : $M=1$, ● : $M=2$, □ : $M=4$, ■ : $M=8$, △ : $M=16$).

トした。右辺ベクトルの本数 M が 1 本の場合は 209 回の反復を要したが, $M = 4$ の場合は 79 回, $M = 16$ の場合は 43 回の反復で近似解が得られた。

4.2 前処理付き COCG 法と前処理付き Block COCG 法の計算時間比較

本節では, M 本の右辺ベクトルを持つ連立一次方程式を前処理付き COCG 法で 1 本ずつ解いた場合と, 前処理付き Block COCG 法でまとめて解いた場合の計算時間を比較する。図 7 に, 前処理付き COCG 法で連立一次方程式を 1 本ずつ解いた場合と, 前処理付き Block COCG 法で複数本の方程式をまとめて解いた場合の計算時間を示す。ここで, ブロック数 M は 8 とした。図 7 の横軸は近似係数行列の完全分解前処理のパラメータ δ を表し, 縦軸は計算時間を表している。パラメータ δ が小さい場合は, 前処理行列が精度良く計算できるため, 前処理付き COCG 法で 1 本ずつ解いた場合と前処理付き Block COCG 法でまとめて解いた場合で計算時間に大きな差は見られなかった。パラメータ δ を小さくすると行列の完全分解には多くの演算量が必要となるため, 反復回数は減少するが計算時間は増加する傾向にある。逆にパラメータ δ を大きくすると前処理行列生成時間は短くなるが, 反復回数が増加する。このとき, 前処理付き COCG 法で 1 本ずつ解いた場合と, 前処理付き Block COCG 法でまとめて解いた場合で, 計算時間に大きな差が見られた。パラメータ δ が 1.6×10^{-3} のとき, 前処理付き COCG 法では 1,509 秒で連立一次方程式を解くことができたが, 前処理付き Block COCG 法では 472 秒で計算が終了した。図 7 より, 前処理付き Block COCG 法で複数本の連立一次方程式を解く場合は, 1 本ずつ解く場合と

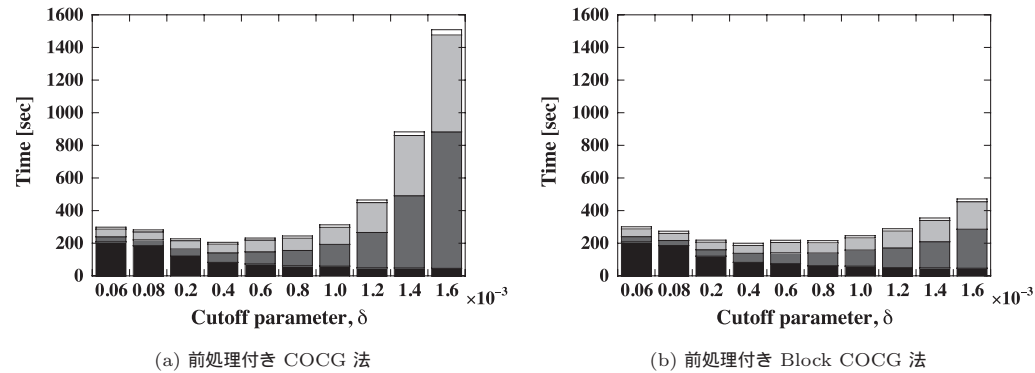


図 7 ブロック数 $M = 8$ の場合の前処理付き COCG 法と前処理付き Block COCG 法の計算時間 (■: 前処理行列生成, ■: 行列ベクトル積, ■: 前処理行列の前進後退代入, □: その他)
 Fig. 7 Computational time for the preconditioned COCG method and the preconditioned Block COCG method when the block size $M = 8$ (■: generation of the preconditioning matrix, ■: matrix-vector multiplications, ■: forward/backward substitutions of the preconditioning matrix, □: misc.).

異なり, 前処理行列の精度を粗くしても計算時間は急激に増加しないことが分かった。以上より, 前処理付き Block COCG 法を用いることにより, 近似係数行列の完全分解前処理のカットオフパラメータ δ が, より柔軟に選択できるようになった。

5. まとめと今後の課題

本論文では, 一般化固有値問題の並列解法である Block CIRR 法で現れる, 複数本の右辺ベクトルを持つ連立一次方程式を Block Krylov 部分空間反復法で効率良く解くことを提案した。Block CIRR 法で現れる連立一次方程式は複素対称行列を係数行列に持つため, 同行列用の Block Krylov 部分空間反復法である前処理付き Block COCG 法を適用した。Block CIRR 法を分子軌道計算で現れる一般化固有値問題に適用し, その際に現れる連立一次方程式に対して前処理付き Block COCG 法を適用し, 効果を調べた。前処理行列の精度が良い場合は前処理付き COCG 法, および前処理付き Block COCG 法の反復回数, 計算時間はほぼ同じであった。しかしながら, 前処理行列の精度が低い場合はこれらの 2 つに大きな性能差が生じた。前処理付き Block COCG 法で複数本の連立一次方程式をまとめて解くことにより反復回数が減少し, 前処理付き COCG 法で 1 本ずつ解いた場合と比較して高速に解が得られた。以上の結果から, より大規模な問題で粗い精度の前処理行列しか生成できない

場合でも, Block 版アルゴリズムを用いることにより安定して連立一次方程式が解けると期待できる。

前処理付き Block Krylov 部分空間反復法では, 大規模疎行列と複数本のベクトルの積, および前処理行列の前進・後退代入が計算時間の多くを占める。今後の課題として, これらの計算部分をマルチコアプロセッサ上で高速に計算できるように実装し, 固有値解法のさらなる高速化を図ることがあげられる。

謝辞 本研究の一部は, 日本学術振興会科学研究費補助金若手研究(スタートアップ)(課題番号: 20800009)の助成による。

参考文献

- 1) Bai, Z., Demmel, J., Dongarra, J., Ruhe, A. and van der Vorst, H.A.: *Templates for the Solution of Algebraic Eigenvalue Problems: A Practical Guide*, SIAM, Philadelphia, PA (2000).
- 2) Fletcher, R.: *Conjugate Gradient Methods for Indefinite Systems*, *Lecture Notes in Math.*, Vol.506, pp.73–89 (1976).
- 3) Freund, R.W.: *A Block QMR Algorithm for Non-Hermitian Linear Systems with Multiple Right-Hand Sides*, *Lin. Alg. Appl.*, Vol.254, pp.119–157 (1997).

- 4) Freund, R.W.: Conjugate Gradient-Type Methods for Linear Systems with Complex Symmetric Coefficient Matrices, *SIAM J. Sci. and Stat. Comput.*, Vol.13, No.1, pp.425–448 (1992).
- 5) Guennouni, A.E., Jbilou, K. and Sadok, H.: A Block Version of BiCGSTAB for Linear Systems with Multiple Right-Hand Sides, *Elec. Trans. Numer. Anal.*, Vol.16, pp.129–142 (2003).
- 6) Hestenes, M.R. and Stiefel, E.: Methods of Conjugate Gradients for Solving Linear Systems, *J. Res. Nat. Bur. Standards*, Vol.49, No.6, pp.409–436 (1952).
- 7) Ikegami, T., Sakurai, T. and Nagashima, U.: A Filter Diagonalization for Generalized Eigenvalue Problems Based on the Sakurai-Sugiura Method, Technical Report CS-TR-08-13, University of Tsukuba (2008).
- 8) Nikishin, A.A. and Yeremin, A.Y.: Variable Block CG Algorithms for Solving Large Sparse Symmetric Positive Definite Linear Systems on Parallel Computers, I: General Iterative Scheme, *SIAM J. Matrix Anal. Appl.*, Vol.16, No.4, pp.1135–1153 (1995).
- 9) 岡田真幸, 櫻井鉄也, 寺西慶太: 近似係数行列に対する疎行列用直接解法を用いた前処理, *日本応用数学会論文誌*, Vol.17, No.3, pp.319–329 (2007).
- 10) O’Leary, D.P.: The Block Conjugate Gradient Algorithm and Related Methods, *Lin. Alg. Appl.*, Vol.29, pp.293–322 (1980).
- 11) PARDISO Solver Project. <http://www.pardiso-project.org/>
- 12) Saad, Y.: *Iterative Methods for Sparse Linear Systems, 2nd Edition*, SIAM, Philadelphia, PA (2003).
- 13) Sakurai, T. and Tadano, H.: CIRR: A Rayleigh-Ritz Type Method with Contour Integral for Generalized Eigenvalue Problems, *Proc. 1st China-Japan-Korea Joint Conference on Numerical Mathematics, Hokkaido Mathematical Journal*, Vol.36, No.4 (Special Issue), pp.745–757 (2007).
- 14) Sakurai, T., Tadano, H., Ikegami, T. and Nagashima, U.: A Parallel Eigensolver Using Contour Integration for Generalized Eigenvalue Problems in Molecular Simulation, Technical Report CS-TR-08-14, University of Tsukuba (2008).
- 15) Simoncini, V. and Gallopoulos, E.: Iterative Methods for Complex Symmetric Systems with Multiple Right-Hand Sides, Technical Report 1322, Center for Supercomputing Research and Development, University of Illinois at Urbana-Champaign (1993).
- 16) Umeda, H., Inadomi, Y., Watanabe, Y., Ishimoto, T. and Nagashima, U.: Grid-Enabled Parallel Fock Matrix Construction, *Abstract of MATH/CHEM/COMP 2007 (MCC’07)*, Dubrovnik (2007).
- 17) van der Vorst, H.A.: Bi-CGSTAB: A Fast and Smoothly Converging Variant of Bi-CG for the Solution of Nonsymmetric Linear Systems, *SIAM J. Sci. Stat. Comput.*,

Vol.13, No.2, pp.631–644 (1992).

- 18) van der Vorst, H.A. and Melissen, J.B.M.: A Petrov-Galerkin Type Method for Solving $Ax = b$ where A is Symmetric Complex, *IEEE Trans. Magnetics*, Vol.26, pp.706–708 (1990).

付 録

A.1 Block CIRR 法で得られる固有対の精度とブロック数の関係

ここでは、Block CIRR 法のブロック数が固有対の精度に与える影響について調べる。本節では、数値実験で用いた分子軌道計算で現れる一般化固有値問題を解いた。Block CIRR 法のパラメータ K は 32、円周上の節点数 N は 32 (解くべき連立一次方程式数は 16) とした。また、ブロック数 M は 1, 2, 4, 8, 16 の 5 通りについて実験を行った。円領域の中心 γ は -0.17 で固定し、半径 ρ を 0.02, 0.03, および 0.04 としたときの固有対の精度を調べた。

図 8, 図 9, および図 10 に、円領域の半径 ρ が 0.02, 0.03, および 0.04 の場合の固有対の残差ノルムをそれぞれ示す。図の横軸は固有値を表し、縦軸は対応する固有対の残差ノルムを表す。図 8 に示すように、ブロック数 $M = 1$ の場合は固有対の残差が大きくなっているが、 $M = 2$ にすると固有対の残差ノルムは 10^{-7} 以下になった。 $M = 4$ とするとほぼすべての固有対の残差ノルムが 10^{-10} を下回っており、十分な精度が得られていることが分か

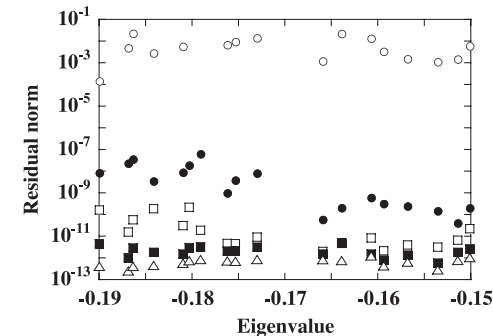


図 8 $\gamma = -0.17, \rho = 0.02$ の場合における Block CIRR 法で求められた固有対の残差ノルム (\circ : $M=1$, \bullet : $M=2$, \square : $M=4$, \blacksquare : $M=8$, \triangle : $M=16$)

Fig. 8 Residual norms of eigenpairs computed by Block CIRR when $\gamma = -0.17$ and $\rho = 0.02$ (\circ : $M=1$, \bullet : $M=2$, \square : $M=4$, \blacksquare : $M=8$, \triangle : $M=16$).

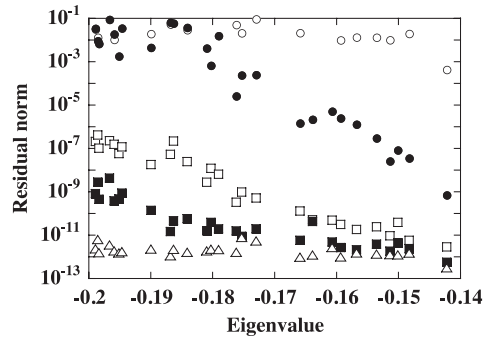


図 9 $\gamma = -0.17, \rho = 0.03$ の場合における Block CIRR 法で求められた固有対の残差ノルム (\circ : $M=1$, \bullet : $M=2$, \square : $M=4$, \blacksquare : $M=8$, \triangle : $M=16$)

Fig. 9 Residual norms of eigenpairs computed by Block CIRR when $\gamma = -0.17$ and $\rho = 0.03$ (\circ : $M=1$, \bullet : $M=2$, \square : $M=4$, \blacksquare : $M=8$, \triangle : $M=16$).

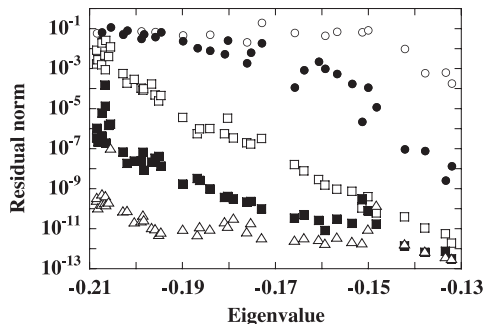


図 10 $\gamma = -0.17, \rho = 0.04$ の場合における Block CIRR 法で求められた固有対の残差ノルム (\circ : $M=1$, \bullet : $M=2$, \square : $M=4$, \blacksquare : $M=8$, \triangle : $M=16$)

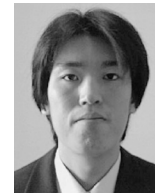
Fig. 10 Residual norms of eigenpairs computed by Block CIRR when $\gamma = -0.17$ and $\rho = 0.04$ (\circ : $M=1$, \bullet : $M=2$, \square : $M=4$, \blacksquare : $M=8$, \triangle : $M=16$).

る。ブロック数をさらに増加させ $M = 8, 16$ とすると、残差ノルムはさらに小さくなった。

円領域の半径 ρ を 0.03 にした場合、 $\rho = 0.02$ の場合と比較して固有対の精度が全体的に悪くなっている。これは積分誤差により、円外部の固有値の影響が出始めたためである。 $\rho = 0.04$ とした場合も同様の傾向が見られている。しかしながら、Block CIRR 法ではブロック数 M を増やすことにより、円外部の固有値の影響を緩和することができるため、ブロック数の増加にともない固有対の残差ノルムは小さくなっている。

(平成 20 年 10 月 3 日受付)

(平成 21 年 1 月 13 日採録)



多田野 寛人

2006 年筑波大学大学院博士課程システム情報工学研究科修了。博士(工学)。同年独立行政法人科学技術振興機構研究員。2007 年京都大学大学院情報学研究科 JSPS 助教。現在、筑波大学大学院システム情報工学研究科助教。大規模線形計算、主に連立一次方程式の反復解法と固有値問題の並列解法の研究に従事。2008 年情報処理学会 HPCS 最優秀論文賞受賞。

日本応用数理学会会員。



櫻井 鉄也 (正会員)

1986 年名古屋大学大学院工学研究科博士課程前期課程修了。博士(工学)。現在、筑波大学大学院システム情報工学研究科教授。大規模固有値問題の並列解法、方程式の反復解法、数理ソフトウェアの利用支援の研究に従事。2008 年情報処理学会 HPCS 最優秀論文賞受賞。1996 年、2007 年日本応用数理学会論文賞受賞。日本応用数理学会、日本数学会、SIAM 各

会員。