7C-2

スーパーコンピュータＳＸシステムに適した巨大スパース行列の固有値問題

増田典雄[*] 野々村仁[**] 花村光泰[***] 津和義昭[***]

* 日本電気技術情報システム開発株式会社 ** 日本電気ソフトウェア株式会社
*** 日本電気株式会社

【１】はじめに

構造力学、分子科学、プラズマ物理学などにおいて巨大スパース行列の固有値問題を解くことが重要である［１］。これらの解析の精度を上げるためには、行列の次元数を大規模にする必要があり、より高速で大規模な固有値問題の解法アルゴリズムの研究が行われている。一方、ベクトル計算機が本格的に稼働し、その大規模な主記憶容量および高速性を背景として、ベクトル計算機の性能を最大限に引き出すアルゴリズムの開発も盛んに進められている。本講演では、スーパーコンピュータＳＸシステムに適した巨大スパース行列の固有値問題の解法アルゴリズムについて報告する。

巨大実対称行列の固有値問題の解法アルゴリズムとしては、中継行列を経るアルゴリズムと直接固有値を求めるアルゴリズムに大別される［２］。前者のアルゴリズムとしては、ハウスホルダ法、ランチョス法が有名である［３］。これらの方法は、問題の行列を中継行列として三重対角行列へ変換するものである。三重対角行列の固有値、固有ベクトルの解法アルゴリズムとしては、並列バイセクション法［４］および逆反復法が知られている一方、中継行列を経ないアルゴリズムとしては、ベキ乗法が知られている。

本研究で扱う行列は、次元数が、数百以上、スパース率が９９％以上の実対称行列とする。解法アルゴリズムを評価する条件として、２次記憶装置を用いず主記憶とのアクセスだけを考えた。２次記憶装置はアクセス時間が遅いので、ベクトル計算機の性能を生かせないからである。また、高速２次記憶装置の利用が考えられるが、本研究では検討を行っていない。

【２】アルゴリズム

２．１ 変換アルゴリズム

ハウスホルダ法とランチョス法は、対象行列を三重対角行列に変換するアルゴリズムである。２つのアルゴリズムを以下に示す。これらのアルゴリズムの演算数、

ハウスホルダ法 （$A=a_{i,j}$：対称行列、N：行列の次元）

$i=1, 2, \cdots, N-2$

$$x=(a_{i+1,i}, a_{i+2,i}, \cdots, a_{N,i})^T$$
$$\alpha = \mathrm{sign}(a_{i+1,i}) \sqrt{\sum_{j=i+1}^{N} a_{j,i}^2}$$
$$v = x + \alpha e_1$$
$$\beta = 1/\{\alpha(a_{i+1,i}+\alpha)\}$$
$$p = \beta B v \quad \text{（BはAの右下の（N－ｉ）次行列）}$$
$$q = p - \beta(v^T p)v/2$$
$$B = B - vq^T - qv^T$$

ランチョス法 （A：対称行列、N：行列の次元）

q_1を$\|q_1\|=1$となる初期ベクトル、$p_1=Aq_1$

$i=1, 2, \cdots$

$$\alpha_i = q_i^T p_i$$
$$r_i = p_i - \alpha_i q_i$$
$$\beta_i = r_i^T r_i$$
$$q_{i+1} = r_i / \beta_i$$
$$p_{i+1} = Aq_{i+1} + \beta_i q_i$$

必要なメモリ数について表2.1 に示す。ランチョス法で完全に三重対角化を行った場合に、除算を除く演算数（

表2.1 ハウスホルダ法とランチョス法の演算数とメモリ数の比較。

アルゴリズム	演算数	メモリ数
ハウスホルダ法	$4N^3/3$	$O(N^2)$
ランチョス法	$2N^2(p+4)$	$O(N^2)$

注）ｐはＡの一行当たりの平均非零要素数。

Large Sparse Symmetric Eigenvalue Computaions Available for SX System

Norio MASUDA[*], Hitoshi NONOMURA[**], Mitsuyasu HANAMURA[***], Yoshiaki TSUWA[***]

* NEC Scientific Information System Development Ltd., **NEC Software,Ltd.
*** NEC Corporation

除算はわずかである）がハウスホルダ法と一致するのは約ｐ＝２Ｎ／３である。従って、スパース率が約６５％以上では常にハウスホルダ法に比べて演算数は少ない。特に、三重対角化を途中で打ち切ることが可能なので、演算数を大幅に減らすことができるという特徴がある。メモリ数は両アルゴリズム共に同程度といえる。また、両アルゴリズムの反復ステップ内の演算は、ほぼ全てベクトル演算が可能なので、両アルゴリズムともにベクトル計算機に適している。

以上より、ハウスホルダ法とランチョス法ともベクトル計算機に適しているが、巨大スパース実対称行列を扱うにはランチョス法が有利と考えられる。

２．２　非変換アルゴリズム

ここでは、変換を用いない（直接固有値を求める）アルゴリズムについて検討する。以下に一般的なベキ乗法アルゴリズムを示す。ベキ乗法のアルゴリズムの演算数、必要なメモリ数を表2.2 に示す。ベキ乗法は、行列のスパースの性質を利用できるので反復ステップ当たりの演算数が少なくてすむ。また、演算はほぼ全てベクトル演算可能である。従って、ベクトル計算機で巨大スパース実対称行列を扱う方法として、ベキ乗法のアルゴリズムは有望と考えられる。

ベキ乗法　　（Ａ：対称行列）

$k=0,1,\cdots$

$$l^{(k)} = \max_i (x_{k,i})$$
$$y_k = x_k / l^{(k)}$$
$$x_{k+1} = A x_k$$
$$r^{(k+1)} = (y_k, x_{k+1}) / (y_k, y_k)$$

表2.2　ベキ乗法の演算数とメモリ数。

アルゴリズム	演算数	メモリ数
ベキ乗法	Ｎ（ｐ＋３）	$O(N^2)$

注）ｐはＡの一行当たりの平均非零要素数。

【３】実測例

ここでは、スーパーコンピュータＳＸシステムを用いてハウスホルダ法及びランチョス法を評価する。固有値問題は次のものを使用する［５］。

Ｐｏｉｓｓｏｎ方程式

$$\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} = \lambda u$$

領域　$R = \{ (x, y) \mid 0 \leqq x \leqq X,\ 0 \leqq y \leqq Y \}$

境界条件　$u(x,0) = u(x,Y) = 0 \ (0 \leqq x \leqq X)$
$u(0,y) = u(X,y) = 0 \ (0 \leqq y \leqq Y)$

この方程式を有限差分法で離散化する。領域のメッシュ分割は（３３×１６）であり、従って、行列の次元数は５２８、スパース率は９９．１％である。表3.1 にハウスホルダ法及びランチョス法による計算時間を示す。

表3.1　３つのアルゴリズムの比較（ＳＸ－２）

ｱﾙｺﾞﾘｽﾞﾑ	ＣＰＵｔｉｍｅ(sec)		
	vector	scalar	ratio
ﾊｳｽﾎﾙﾀﾞ法	０．８３	１８．９	２２．７
ﾗﾝﾁｮｽ 法	０．１１	０．７０	６．５

表3.1 から、ランチョス法の有効性が理解できる。なお、ベキ乗法の結果については、講演時に報告する。

【４】　まとめ

ベクトル計算機に適した巨大スパース実対称行列の固有値問題の解法として、ハウスホルダ法、ランチョス法及びベキ乗法を評価した。その結果、ランチョス法が行列のスパース性を生かし、かつベクトル計算機との適合性も良い、有力なアルゴリズムと考えられる。今後は、多くの問題にランチョス法を適用しその有効性を調べ、また、精度についての検討も行う考えである。

最後に、ベキ乗法の資料を提供して頂いた京都大学大学院工学研究科遠藤　潤氏に感謝します。

【５】　参考文献

[1] Parlett,B.N.,"The Software Scene in the Extraction of Eigenvalues from Sparse Matrices",SIAM J.Sci.Stat. Comput.,5,590(1984).Parlett,B.N.,"The Symmetric Eigenvalue Problem",Prentice-Hall Inc.(1980).

[2] Wilkinson,J.H.,"The Algebraic Eigenvalue Problem",Clarendon Press Oxford(1965).

[3] 森正武、名取亮、鳥居達生、『数値計算』、岩波書店(1981). 名取亮、野寺隆、『ランチョス法その後』並列数値計算ｱﾙｺﾞﾘｽﾞﾑとその周辺、予稿集、28,(1985).

[4] 島崎眞昭、『対称三項行列の固有値の並列探索』数理科学講究録、514,219(1982).

[5] Cullum,J.K.and Willoughby,R.A.,"Lanczos Algorithms for Large Symmetric Eigenvalue Computations,I,II",Birkhauser(1985).