

演 題	「Block Householder - 法の実験」	
発 表 者 (所 属)	村上 弘 (東京都立短期大学)	
連 絡 先	〒196-8540 東京都昭島市東町 3-6-33 東京都立短期大学経営情報学科 TEL: 042-543-3001 FAX:042-543-3002 e-mail <murakami@tmca.ac.jp>	
キ ー ワ ー ド	固有値問題、行列、対角化、ブロック化アルゴリズム、ハウスホルダー変換	
開 発 意 図 適 用 分 野 期 待 効 果 特 徴 な ど	通常のハウスホルダー法をブロック化することで演算の局所化を高め、 高速な CPU の性能を十分に引き出し、メモリへのアクセス転送量の 低減を意図する。	
環 境	適 応 機 種 名	
	O S 名	
	ソ ー ス 言 語	Fortran, C
	周 辺 機 器	
流 通 形 態 (右 の い ず れ か に を つ け て く だ さ い)	・日本コンピュータ化学会の無償利用 ソフトとする ・独自に頒布する ・ソフトハウス、出版社等から市販 ・ソフトの頒布は行なわない ・その他 ・ 未定	具 体 的 方 法

要旨:

大規模な行列の問題を取扱う際には、記憶階層間のデータ転送が性能の隘路になり易いので、記憶参照の局所性は極めて重要である。記憶参照の局所性の高い実装は通常、ブロック化アルゴリズムにより得られる。本実験では、WY 表現による方法[1,8]のものとは異なる[7]のものに似た「Block Reflector=ブロック鏡映変換」に基づくブロックハウスホルダー変換を用いる。

ブロックハウスホルダー変換(ブロック鏡映変換)に依れば、通常のハウスホルダー変換を用いる行列のアルゴリズムは、それを真似て容易にブロック化アルゴリズムへと導くことができる。例えば、密な対称行列のブロック 3 重対角化、ブロック帯行列のブロック 3 重対角化などである。ブロック 3 重対角化を行えば参照せねばならないデータ量が減少できるので、それ以降の取り扱いが楽になる。ブロック化された三重対角行列をより小さなブロックからなるブロック帯行列とみなせば、それを帯ハウスホルダー法によってより小さなブロックの三重対角行列として帯幅を縮小することも可能である。計算の主要部はブロック小行列同士の行列積で、それに高速乗算法を適用すれば理論上は計算量の指数が少し減らせることも言える。

結論:

ブロック鏡映変換に基づくブロックハウスホルダー変換を実装し、固有値問題の対称密行列のブロック三重対角化を実験した。ブロック化しないアルゴリズムと比べると、ブロック化による小行列のサイズを b とする時、 b 倍だけ記憶参照の局所性が増すので大規模問題に効果がある。局所性が増す為、記憶の転送の手間が高度に減少し、ローカル記憶の容量が少ない場合にも計算の経過時間を短縮することが出来る。ネットワークによる並列分散記憶型の計算機や共有記憶型の並列計算機にとっても、計算要素の持つローカルな記憶への参照の割合を高めて、記憶のネットワークによる転送あるいは内部バスの競合を減らせるので、並列化の効果が高いと期待できる。

文献:

1. C. Bischof and C. Van Loan, "The WY representation for products of Householder matrices", *SIAM J. Sci. Stat. Comput.*, **8**, No.1, s2-s13(1987).
2. G.H. Golub and C.F. Van Loan, *Matrix Computations*, Chap.8: "The Symmetric Eigenvalue Problem", The Johns Hopkins Univ. Press, Baltimore, Maryland, 1983.
3. J.J. Dongarra and D.C. Sorensen, "Block reduction of matrices to condensed forms for eigenvalue computations", *J. Comput. Appl. Math.* **27**, pp.215-227,1989.
4. 村上 弘, 「対称密行列に対するアウトコア・ハウスホルダー法--大型対称密行列の固有値問題--」, 日本シミュレーション学会第9回計算電気・電子工学シンポジウム, 論文集, 255-258 頁, 1998年3月31日.
5. Murakami Hiroshi, "An Implementation of the Block Reflector Method for the Dense Eigenproblem", 東京都立短期大学経営情報学科研究論叢 (ISSN1343-3202), No.5, 41-67 頁, 2001年3月.
6. 村田健郎, 小国力, 唐木幸比古, 「スーパーコンピュータ --科学技術計算への適用--」, 丸善, 1986.
7. R. Schreiber and B. Perlett, "Block Reflectors: Theory and Computation", *SIAM J. Numer. Anal.* **25**, No.1. pp.189-205,1988.
8. R. Schreiber and C. Van Loan, "A storage efficient YW representation for products of Householder transformations", *SIAM J. Sci. Stat. Comput.* ,**10**, No.1, pp.53-57,1989.
9. J.H.Wilkinson and C.Reinsch, eds., "Handbook for Automatic Computation, Vol.2, Linear Algebra", Springer-Verlag, New York, 1971.