

超大規模並列環境における大規模疎行列に対する 固有値解法と線形計算技術の開発

多田野 寛人^{†1}

近年、様々な応用分野において大規模固有値問題が現れ、超大規模並列環境で高速に解くことが望まれている。疎行列をもつ大規模固有値問題の並列解法として、Sakurai-Sugiura (SS) 法が提案されている。本稿では SS 法の高速度化、及び安定化のための線形計算技術について述べる。

Development of eigensolvers and linear calculation methods for large sparse eigenvalue problems on a very large scale computation environment

HIROTO TADANO^{†1}

Recently, large eigenvalue problems appear in many applications. It is desired to solve them fast on a very large scale parallel computation environment. The Sakurai-Sugiura (SS) method has been proposed as a parallel eigensolver for large sparse eigenvalue problems. In this paper, we describe linear calculation techniques for speeding-up and stabilization of the SS method.

1. はじめに

物性物理や分子軌道計算などの応用分野では、計算過程で大規模固有値問題が現れ、大規模並列環境での高速求解法が必要とされている。疎行列に対する shift-invert 型の固有値解法では、部分空間を生成するための内部反復と、固有対の精度を改善するための外部反復が存在する。内部反復においては大規模な連立一次方程式を複数回逐次的に解く必要があり、大規模並列環境で性能を引き出すのは困難である。

疎行列に対する大規模固有値問題の並列解法として、周回積分に基づく固有値解法である Sakurai-Sugiura 法 (SS 法)^{1),2)} が提案されている。同法は複素平面上の指定した領域内に存在する固有値、及び固有ベクトルを求める方法で、従来法で必要であった内部・外部反復を必要としない。また、同法では積分経路上に積分点を配置して積分の近似を行う。SS 法では領域毎、積分点毎に独立して計算を行うことができるため、近年の大規模並列環境に対して親和性が非常に高い。

SS 法で最も計算時間を占めるのは、各積分点毎に現れる複数本の右辺ベクトルをもつ連立一次方程式の求

解である。そのため、複数右辺ベクトルをもつ連立一次方程式を高速に解く線形計算技術の開発が必要とされている。本稿では、SS 法について簡単に述べ、SS 法を高速化・安定化するための線形計算技術について述べる。

2. Sakurai-Sugiura 法

n 次行列関数 $T(z)$ に対する固有値問題

$$T(\lambda)\mathbf{x} = \mathbf{0} \quad (1)$$

に対する SS 法^{1),2)} について簡単に示す。領域 Ω 内に m 個の相異なる固有値 $\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_m$ が存在するとして、行列 $S_k, k = 0, 1, \dots, m-1$ を

$$S_k \equiv \frac{1}{2\pi i} \oint_{\Gamma} z^k T(z)^{-1} V dz \quad (2)$$

と定義する。ここで、 Γ は領域 Ω を囲む単一閉曲線であり、 $V \in \mathbb{C}^{n \times L}$ とする。次に、 M_k を $M_k \equiv V^H S_k$ と定義し、2つの Hankel 行列を

$$H_{m'L} \equiv [M_{i+j-2}]_{i,j=1}^{m'}, \quad H_{m'L}^< \equiv [M_{i+j-1}]_{i,j=1}^{m'}$$

とする。このとき、行列束 $(H_m^<, H_m)$ の固有対から (1) の固有対 $(\lambda_j, \mathbf{x}_j), j = 1, 2, \dots, m$ が得られる。実際の計算では、(2) を

$$S_k \approx \tilde{S}_k \equiv \frac{1}{N} \sum_{j=0}^{N-1} w_j z_j^k T(z_j)^{-1} V \quad (3)$$

^{†1} 筑波大学システム情報系情報工学科

Division of Information Engineering, Faculty of Engineering, Information and Systems, University of Tsukuba

で近似する。ここで、 z_j は Γ 上の積分点で、 w_j は z_j における重みである。 $\tilde{M}_k \equiv V^H \tilde{S}_k$ とし、Hankel 行列

$$\tilde{H}_{m'L} \equiv [\tilde{M}_{i+j-2}]_{i,j=1}^{m'}, \quad \tilde{H}_{m'L}^< \equiv [\tilde{M}_{i+j-1}]_{i,j=1}^{m'}$$

を生成し、(1) の近似固有対を計算する。但し、 m' は $m'L \geq m$ を満たすように設定される。

式 (3) を計算するためには、複数本の右辺ベクトルをもつ連立一次方程式

$$T(z_j)Y_j = V, \quad j = 0, 1, \dots, N-1$$

の求解が必要となる。

3. SS 法で必要となる線形計算技術

SS 法には、**1. 領域毎の並列性 (Top Level)**、**2. 各節点毎の並列性 (Middle Level)**、**3. 連立一次方程式の解法の並列性 (Bottom Level)** の階層的な並列性が存在する。SS 法では Bottom Level で現れる複数の連立一次方程式の求解も独立に行うことができるため、アルゴリズムレベルで高い並列性をもつ。

SS 法において最も計算時間を要するのが、Bottom Level で現れる複数本の右辺ベクトルをもつ連立一次方程式の求解である。問題サイズが小さい場合は、直接法による連立一次方程式の求解が効率的であるが、行列サイズが大規模である場合は計算量、及びメモリ使用量の制約から直接法の適用は困難である。

もう 1 つの連立一次方程式の求解法である反復法は、演算の主要部が係数行列とベクトルの積であるため、直接法と比較して演算量、メモリ使用量ともに低く抑えることができる。複数右辺ベクトルに対する Krylov 部分空間反復法である Block Krylov 部分空間反復法は、複数本の右辺ベクトルをもつ連立一次方程式をまとめて解く方法で、Krylov 部分空間反復法で 1 本ずつ連立一次方程式を解いた場合よりも反復回数が減少する可能性がある点が、大きな特長として挙げられる。さらに、演算の主要部である行列ベクトル積の効率化により計算時間の短縮を図ることができる。以上より、Block Krylov 部分空間反復法は

1. アルゴリズム：反復回数の減少

2. チューニング：行列ベクトル積の効率化

の 2 つの要因の相乗効果によって、大幅な高速化を実現できる可能性がある。

Block Krylov 部分空間反復法では右辺ベクトル数が増加すると得られる近似解の精度が悪化する場合があるが、Block BiCGGR 法⁴⁾では近似解の精度劣化をアルゴリズムレベルで改善している。文献³⁾では、格子量子色力学 (QCD) 計算で現れる連立一次方程式に対して同法を適用し、高精度近似解が得られるこ

とを示している。また、右辺ベクトル数が増加すると反復回数が減少する可能性がある一方で、数値的に不安定な状況に陥り近似解が得られない場合がある。これは反復過程で現れる $n \times L$ 行列の線形独立性が失われることが原因である。そのため、SS 法の安定化・高速化のためには、大規模並列環境における高速な直交化手法が不可欠である。

大規模並列環境で全ての積分点に対して計算機資源が割り当てられる場合、指定した領域の固有対がほぼ 1 つの方程式を解く時間で求められる。積分点毎に反復法の反復回数が異なる場合は計算時間にばらつきが生じるが、Block Krylov 部分空間反復法を用いることで、積分点毎の反復回数のばらつきを抑えることができる。また、Block Krylov 部分空間反復法は Krylov 部分空間反復法よりも高い収束性を示すことが多いため、連立一次方程式に対する前処理をより不完全に行うことができる。そのため、前処理に必要な演算量、及びメモリ量を抑えることが可能である。

4. おわりに

本稿では SS 法について簡単に説明し、SS 法で必要となる線形計算技術について述べた。SS 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で、アルゴリズム面とチューニング面の相乗効果による高速化が可能である。講演時は SS 法、及び同法で用いられている線形計算技術の性能について紹介する予定である。

参考文献

- 1) Ikegami, T., Sakurai, T. and Nagashima, U.: A filter diagonalization for generalized eigenvalue problems based on the Sakurai-Sugiura projection method, *J. Comput. Appl. Math.*, Vol. 233, pp. 1927–1936 (2010).
- 2) Sakurai, T. and Sugiura, H.: A projection method for generalized eigenvalue problems, *J. Comput. Appl. Math.*, Vol. 159, pp. 119–128 (2003).
- 3) Tadano, H., Kuramashi, Y. and Sakurai, T.: Application of preconditioned block BiCGGR to the Wilson-Dirac equation with multiple right-hand sides in Lattice QCD, *Comput. Phys. Comm.*, Vol. 181, pp. 883–886 (2010).
- 4) Tadano, H., Sakurai, T. and Kuramashi, Y.: Block BiCGGR: A new block Krylov subspace method for computing high accuracy solutions, *JSIAM Letters*, Vol. 1, pp. 44–47 (2009).