

独立並列計算による行列固有値分布の確率的推定法

二村 保徳^{†1} 多田野 寛人^{†1}
櫻井 鉄也^{†1} 岩田 潤一^{†1}

大規模疎行列向け固有値解法において、固有値分布の推定値が得られている場合、効率良いパラメータ設定が可能となる。本稿では、行列 trace の確率的推定法と周回積分を組み合わせた固有値分布の推定法を提案する。提案法は LDLT 分解などの行列分解を行うことが困難な行列に対して適用可能であり、さらに並列性にも優れている。また、提案法は少ない計算量で十分な精度の推定が可能であることを数値実験で示す。

YASUNORI FUTAMURA,^{†1} HIROTO TADANO,^{†1}
TETSUYA SAKURAI^{†1} and JUN-ICHI IWATA^{†1}

Some kinds of eigensolvers for large sparse matrices require specification of parameters based on rough estimation of desired eigenvalues. In this paper, we propose a stochastic estimation method for eigenvalue distribution by the combination of a stochastic estimator of a matrix trace and the contour integration. Our proposal method can be applied to a matrix that unfeasible to be factorized, and it is easy to parallelized. Some numerical experiments is executed to show that our method can estimate in enough accuracy by a small computational cost.

1. はじめに

行列の固有値問題は科学技術計算におけるさまざまな分野で現れ、この求解が計算時間の大きな割合を占めることが多い。特に疎行列の一部の固有値と、それに対応する固有ベク

トルのみが必要な場合が多くあり、このような場合に用いられる固有値解法ではパラメータ設定が性能に大きく影響する。このとき、たとえ粗い精度であっても固有値分布が事前にわかっている場合には効率の良いパラメータ設定が可能となる。この場合、固有値分布を求める計算は固有値解法の計算に比べ少ない計算量で行える必要があり、さらにその並列性も重要である。従来、このような固有値分布推定法としてシルベスター慣性則を用いた手法や、行列の部分構造化による方法¹²⁾などが用いられてきた。これらの手法は行列の線形方程式の直接解法を用いるため、演算量やメモリ容量の都合上、大規模疎行列や行列ベクトル積としてのみ与えられる行列に対する適用は困難となる。本稿では行列の trace の確率的推定法と、周回積分を組み合わせた固有値分布推定法を提案し、前述の行列に対しても適用可能であることを示す。

以下本稿の構成について述べる。まず次節では指定した領域内の固有値数の確率的推定法に関する理論と、提案法における数値積分の積分誤差について述べる。また、固有値数推定法を用いて固有値分布の推定法を定義し、その並列性について述べる。第3節では標準固有値問題を対象とする場合における Krylov 部分空間の shift 不変性を用いた提案法の高速度について論じる。第4節では Matrix Market⁹⁾の行列および実空間密度汎関数計算^{4),7)}で現れる行列に対して提案法を適用する数値実験を行い、その有効性を確認する。そして最後に第5節でまとめと今後の課題を述べる。

2. 固有値分布の確率的推定法

行列 $A, B \in \mathbb{C}^{n \times n}$ とし、 B は正則とする。留数定理より、周回積分

$$\begin{aligned} \mu_{\Gamma} &= \frac{1}{2\pi i} \oint_{\Gamma} \text{tr}((zB - A)^{-1}B) dz \\ &= \frac{1}{2\pi i} \oint_{\Gamma} \sum_{j=1}^n \frac{1}{z - \lambda_j} dz \end{aligned} \quad (1)$$

を行うと正方向の単純閉曲線 Γ 内の固有値数 μ_{Γ} が得られる。ここで $z \in \mathbb{C}$ であり、 i は虚数単位、 λ_j ($j = 1, 2, \dots, n$) は行列束 (A, B) の固有値とする。ただし、 $zB - A$ は Γ 上で正則とする。

式 (1) を計算機で扱うため、 Γ を中心 γ 、半径 ρ の円として N 点台形則を用いて

$$\mu_{\Gamma} \approx \hat{\mu}_{\Gamma} = \frac{\rho}{N} \sum_{k=0}^{N-1} e^{\frac{2\pi i}{N}(k+1/2)} \text{tr}((\omega_k B - A)^{-1}B) \quad (2)$$

^{†1} 筑波大学
University of Tsukuba

と表す. Γ 上を等間隔にとる点を

$$\omega_k = \gamma + \rho e^{\frac{2\pi i}{N}(k+1/2)} \quad k = 0, 1, \dots, N-1$$

とする. 文献 10), 11) によると, 式 (2) は以下のように表される.

$$\hat{\mu}_\Gamma = \sum_{j=1}^n \frac{\rho}{1 + \left(\frac{\gamma - \lambda_j}{\rho}\right)^N} \quad (3)$$

ここで, $|\frac{\gamma - \lambda_1}{\rho}| \leq |\frac{\gamma - \lambda_2}{\rho}| \leq \dots \leq |\frac{\gamma - \lambda_n}{\rho}|$ とする. また, m' は $\rho / (1 + (\frac{\gamma - \lambda_1}{\rho})^N) = O(\varepsilon)$ となる j があるとき, $m' < j \leq n$ を満たす整数である. ただし $\varepsilon > 0$ とする. したがって式 (3) は

$$\hat{\mu}_\Gamma = \sum_{j=1}^{m'} \frac{\rho}{1 + \left(\frac{\gamma - \lambda_j}{\rho}\right)^N} + O(\varepsilon).$$

と表すことができる. よって Γ の外部かつ Γ 付近に存在する固有値が積分誤差に大きく影響するということがわかる.

文献 1)–3), 6) によると, 式 (2) の trace は

$$\text{tr}((\omega_k B - A)^{-1} B) \approx \frac{1}{s} \sum_{j=1}^s \mathbf{v}_j^T (\omega_k B - A)^{-1} B \mathbf{v}_j. \quad (4)$$

と推定できる. ただし, \mathbf{v}_j はその要素が等確率で 1 または -1 の n 次元ベクトルとし, s は任意の正の整数とする.

式 (4) を用いると $\hat{\mu}$ は

$$\hat{\mu}_\Gamma \approx \tilde{\mu}_\Gamma = \frac{\rho}{N s} \sum_{k=0}^{N-1} e^{\frac{2\pi i}{N}(k+1/2)} \sum_{j=1}^s (\mathbf{v}_j^T (\omega_k B - A)^{-1} B \mathbf{v}_j) \quad (5)$$

と表せる, したがって $(\omega_k B - A)^{-1} B$ の trace 推定では s 個の独立な線形方程式

$$(\omega_k B - A) \mathbf{x}_j^k = B \mathbf{v}_j \quad j = 1, 2, \dots, s. \quad (6)$$

を解く必要がある. \mathbf{x}_j^k の下添え字はサンプルベクトル \mathbf{v}_j に対応していることを示し, 上添え字は積分点 ω_k に対応していることを示す. 線形方程式を直接解法で解くことが困難な場合は, これを反復解法によって解けばよい.

固有値分布の推定法は固有値数の推定法から直接導かれる. 簡単のため, 行列 A, B を Hermite 行列とする. この場合, 行列束 (A, B) のすべての固有値は実軸上に分布する. 区間 $[\alpha, \beta]$ が与えられているとして, それぞれの中心 $\gamma_1, \gamma_2, \dots, \gamma_{n_c}$ が実軸上にある n_c 個の円 $\Gamma_1, \Gamma_2, \dots, \Gamma_{n_c}$ を置く. 全ての円の半径を $\rho = (\beta - \alpha) / 2n_c$ とし, 中心を $\gamma_\ell = \alpha + (2\ell - 1)\rho$. とすると, 区間 $[\alpha, \beta]$ における解像度 n_c の固有値分布推定とみなせる.

$\omega_{\ell k}$ を ℓ 番目の円の k 番積分点とすると, 固有値分布推定法で最も計算量の多い部分は線形方程式

$$(\omega_{\ell k} B - A) \mathbf{x}_j^{\ell k} = B \mathbf{v}_j \quad \begin{cases} j = 1, 2, \dots, s \\ k = 0, 1, \dots, N-1 \\ \ell = 1, 2, \dots, n_c \end{cases}$$

の求解である. ただし, 積分点の数はすべての円において N 個とした. 式 (5) から簡単に j, k, ℓ に関する全ての方程式はそれぞれ独立に計算できることがわかる. このような独立性は近年の大規模並列計算環境において有効であると考えられる. さらに, 反復解法を用いる場合は各線形方程式の解法の並列化も容易である.

3. shift 不変性を用いた高速化

この節では Krylov 部分空間

$$\mathcal{K}_j(A, \mathbf{v}) = \text{span}\{\mathbf{v}, A\mathbf{v}, A^2\mathbf{v}, \dots, A^{j-1}\mathbf{v}\}.$$

の Shift 不変性を用いた固有値分布推定法の高速化について述べる. ここで \mathbf{v} は任意の非零ベクトルとする. 行列 A に単位行列の複素定数 σ 倍を足し合わせた行列 $A + \sigma I$ は, その固有値が A の固有値から全て σ だけ shift した値となることから, shift 行列と呼ばれ, shift 行列 $A + \sigma I$ に関する Krylov 部分空間は元の行列 A に関する Krylov 部分空間と一致する

$$\mathcal{K}_j(A + \sigma I, \mathbf{v}) = \mathcal{K}_j(A, \mathbf{v}).$$

この Krylov 部分空間の shift 不変性を用いて複数の shift 行列に関する線形方程式

$$(A + \sigma_k I) \mathbf{x} = \mathbf{b} \quad k = 1, 2, \dots$$

に対し, 行列ベクトル積を任意の seed 行列 $A + \sigma_{\text{seed}} I$ に関するものだけ行えばよい反復解法である Shifted Krylov 部分空間反復法系の解法が提案されている^{5), 8)}. 行列ベクトル積の計算時間が主要な場合, Shifted Krylov 部分空間反復法を用いると, BiCG 法などの shift 不変性を考慮しない Krylov 部分空間反復法を用いて N 個の方程式を別々に解く場合と比較して, 式 (7) を解くための 1 反復分の行列ベクトル積を $1/N$ に減らすことができる.

表 1 行列の特徴.
Table 1 Matrices properties.

Matrix pencil	Size	nnz(A)	nnz(B)	Type(A)	Type(B)	Center	Radius	#eig in Γ
LUjND	147	1298	1294	Indefinite	Indefinite	1.0×10^4	1.0×10^4	40
BCSST07	420	4140	3836	Positive definite	Positive semi-definite	0.23	0.17	398
BCSST10	1086	11578	11589	Positive definite	Positive semi-definite	4.0×10^{-5}	1.5×10^{-5}	35
PLAT1919	1919	17159	—	Indefinite	—	2.0×10^7	2.5×10^7	40
BCSST13	2003	42943	11973	Positive definite	Positive semi-definite	3.0×10^3	2.0×10^3	11

標準固有値問題, つまり $B = I$ の場合を考えると式 (6) は各サンプルベクトルごとに N 個の独立な shift 線形方程式

$$(\omega_k I - A)x_j^k = v_j \quad (7)$$

を Shifted Krylov 部分空間反復法を用いて解くことにより, 提案法の高速度が可能となる.

4. 数値実験

この節ではいくつかの数値実験を示す. 数値例 1 および数値例 2 は Matlab 7.4 で行い, 数値例 3 では PGI の Fortran 90 コンパイラを用いた. 演算はすべて倍精度で行った. すべての数値例において行列 A, B は実対称行列を対象とした. 積分点 ω_k が行列束 (A, B) の固有値付近に置かれた場合, 行列 $\omega_k B - A$ が悪条件になり, 十分な精度の解が得られなくなる可能性がある. A, B が実対称行列の場合は固有値が全て実軸上に存在するため, 固有値と一定以上の距離をおいて積分点を設置することができる. 簡単のため, 本稿の数値実験では実対称行列を対象とする.

4.1 数値例 1

数値例 1 では Matrix Market の行列を用いた. 行列の特徴を表 1 に示す. 全ての行列は実対称疎行列で, 固有値問題に関する行列である. 表中の行列 A, B は一般化固有値問題 $Ax = \lambda Bx$ の行列を表す. 標準固有値問題である PLAT1919 を除いたすべての行列束は一般化固有値問題のものである. $nnz(A)$ と $nnz(B)$ の列は行列 A および B の非零要素の数を表し, $Type(A)$ と $Type(B)$ の列は A および B の正定性を表す. すべての行列束において積分領域として異なる円 Γ を設定した. $Center$ と $Radius$ の列はそれらの中心と半径を表す. $\#eig$ in Γ の列は円 Γ 内の固有値の数を表す. 固有値の数は Matlab 関数 `eig` の結果を用いた.

積分点数 N を変えて固有値の近似値の変化を確認する. 逆行列 $(\omega_j B - A)^{-1} B$ の trace

表 2 数値例 1 の結果.
Table 2 Results of Example 1.

N	eigenvalue count				
	LUND	BCSST07	BCSST10	PLAT1919	BCSST13
4	38.024	318.03	29.957	55.559	10.917
8	38.268	364.80	32.236	42.350	10.926
16	38.880	392.98	34.152	40.606	10.988
32	39.373	397.89	34.997	39.945	11.000
64	39.749	398.00	35.113	39.540	11.000

の計算には Matlab 関数 `eig` の結果を用いた. N は 4, 8, 16, 32, 64 と変化させた. 固有値の近似値を表 2 に示す. 表 2 から, 少ない N によって十分な精度で固有値が近似できていることが確認できる.

4.2 数値例 2

数値例 2 ではサンプルベクトルの数 s の変化によって固有値の推定値の変化を確かめた. 実験は数値例 1 と同じ行列束を対象とし, s は 10 から 1000 まで変化させた. 線形方程式は Matlab 関数の `mldivide` を用いた. すべての行列束において積分点数は $N = 16$ とした. 実験結果を表 4.2 に示す. サンプルベクトルの要素を決める際の疑似乱数は Matlab 関数 `rand` を用い, その生成アルゴリズムと種の設定は `rand('twister', 5489)` で行った. 表 4.2 から s が増加するに従いある程度の精度向上が見られるが, s が大きい場合はその計算コストに対し十分な精度が得られていないことがわかる.

4.3 数値例 3

数値例 3 では, 差分法による実空間密度汎関数計算で現れる行列の固有値問題を対象とする. 本固有値問題は A が実対称行列の標準固有値問題 $Ax = \lambda x$ であり, A は次の 3 つの項 $A = L + V_{loc} + V_{nl} V_{nl}^T$ から成る. L と V_{loc} はそれぞれ $n \times n$ の疎行列と対角行列, V_{nl} は $n \times n_e$ の疎行列である. ここで $n_e < n$ は対象とする系の全電子数とする. $V_{nl} V_{nl}^T$

表 3 数値例 2 の結果.
Table 3 Results of Example 2.

#vectors	eigenvalue count				
	LUND	BCSST07	BCSST10	PLAT1919	BCSST13
10	44.344	391.08	35.725	40.759	12.866
20	43.394	392.58	34.718	40.371	11.747
30	43.195	391.92	33.631	40.926	10.765
40	39.547	393.83	32.862	39.874	10.590
50	40.039	393.09	32.958	41.018	10.313
100	37.716	392.27	32.854	40.632	11.293
200	39.805	393.45	33.569	40.341	11.460
500	41.147	392.76	33.619	40.542	11.104
1000	39.874	392.53	33.995	40.731	11.229
exact	38.880	392.98	34.152	40.606	10.988

がほぼ密な行列となるため同様に A も密行列といえ、演算量やメモリの都合上、行列 A は行列ベクトル積の形でのみ与えられる。したがってこの行列に対する固有値分布推定法として第 1 節で示した従来手法を用いるのは現実的ではない。この固有値問題では小さいものから M_B 個の固有値とそれに対応する固有ベクトルを求める必要がある。ここで M_B は対象とする系の占有状態数である。さらに、行列 A は小さいものから M_B 個の固有値に対応する固有ベクトルに陰的に非線形であり、Self Consistent Field 計算を行って自己無撞着な固有対を求める必要がある。これは行列が少しずつ変化する中で固有値問題を繰り返し解く必要があるという事を意味する。初期行列における固有値分布推定の計算量は、後に続く固有値解法の計算量に比べ比較的小さくすることができ、固有値分布推定が有用となると考えられる。

本数値例の行列は 512 個のシリコン原子からなる結晶から 2 原子分の欠陥を与えた系から現れる行列である。 $n = 175616$, $M_B = 1020$ である。線形方程式の解法として Shifted Krylov 部分空間反復法の一つである Shifted COCG 法^{13),14)}を用い、収束判定条件は全ての方程式の相対残差が 10^{-4} を下回った場合とした。100 個の円を区間 $[-0.230, 0.243]$ に重なりなく等間隔に設置した。すべての円において積分点数は $N = 8$ とし、サンプルベクトル数は $s = 20$ とした。数値実験の結果を図 1 に示す。横軸が円の番号を表し、縦軸がその番号までの円での数値積分による固有値数の推定値の累積を表す。黒い線が推定値で赤い線が真値を表し、真値として固有値問題向けの共役勾配法の結果を用いた。図 1 から、少ない積分点数、サンプルベクトル数、そして粗い線形方程式解の近似によって、固有値解法のパラメータ設定に用いる固有値分布としては十分な精度の固有値分布が求められているとい

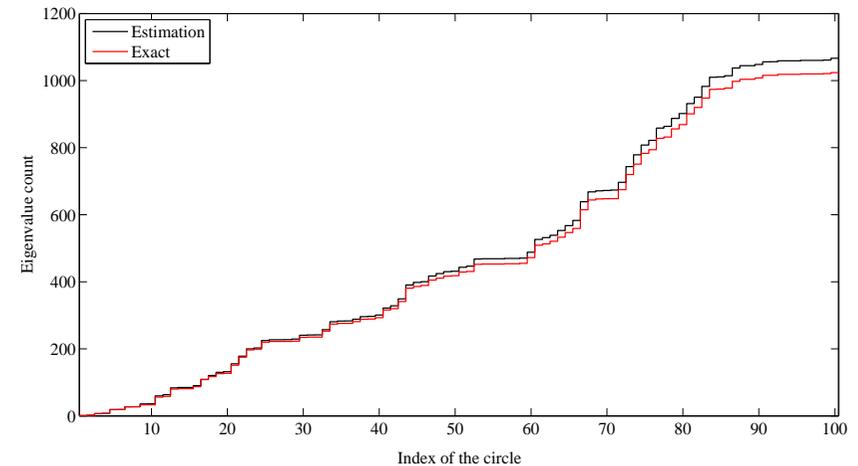


図 1 シリコン 510 原子系の行列の固有値分布.
Fig.1 Distribution of eigenvalue of 510 atoms system of silicon.

える。

5. まとめと今後の課題

本稿では行列の trace 値の確率的推定法と複素平面上の周回数値積分を組み合わせた固有値分布の推定法を提案した。提案した推定法は従来用いられている方法と異なり、大規模疎行列や行列が行列ベクトル積としてのみ与えられている場合などの直接解法を適用することが困難な行列に対しても適用可能である。また、提案法の計算の主要部である線形方程式はサンプルベクトルごと、積分点ごとに独立に解くことができることから、提案法は近年の大規模並列計算環境において高い並列性を発揮する。さらに標準固有値問題の場合では Shifted Krylov 部分空間反復法を用いることによって N 本の方程式に対する計算を、一般の Krylov 部分空間反復法で 1 つの方程式を解くコストに近い計算量で解くことができることを示した。いくつかの数値実験によって少ない積分点数、少ないサンプルベクトル数、粗い精度の線形方程式の解で十分な精度の推定値を得られることを確認した。

非対称行列の場合では行列束の固有値が実軸上だけに留まらないため、積分点と固有値との距離を一定以上保つことが難しく、行列の悪条件化によって trace の近似が困難となるこ

とがある。この問題を解決する手法を確立することが今後の課題として挙げられる。

参 考 文 献

- 1) Z. Bai, M. Fahey and G. Golub : Some Large Scale Matrix Computation Problems, J. Comput. Appl. Math vol.74, 71-89, 1996.
- 2) C. Bekas, E. Kokiopoulou, and Y. Saad : An estimator for the diagonal of a matrix, Applied Numerical Mathematics, 57(11-12):1214-1229, November 2007.
- 3) C. Bekas, A. Curioni, I. Fedulova : Low Cost High Performance Uncertainty Quantification, WHPCF '09: Proceedings of the 2nd Workshop on High Performance Computational Finance, 1-8, 2009.
- 4) J. R. Chelikowsky, N. Troullier, K. Wu, Y. Saad : Higher order finite difference pseudopotential method: An applications to diatomic molecules, Phys. Rev. B 50 11355-11364, 1994.
- 5) R. Freund : Solution of shifted linear systems by quasi-minimal residual iterations, In: Numerical Linear Algebra, (Reichel L., Ruttan, A., Varga, R.S., de Gruyter, W., eds.) Berlin pp. 101-121, 1993.
- 6) M. F. Hutchinson : A stochastic estimator of the trace of the influence matrix for laplacian smoothing splines, J. Commun. Statist. Simula., 19(2):433-450, 1990.
- 7) J.-I. Iwata, D. Takahashi, A. Oshiyama, T. Boku, K. Shiraishi, S. Okada, and K. Yamada : A massively-parallel electronic-structure calculations based on real-space density functional theory, J. Comput. Phys. 229, 2339-2363, 2010.
- 8) B. Jegerlehner : Krylov space solvers for shifted linear systems, Hep-lat/9612014, 1996.
- 9) Matrix Market, <http://math.nist.gov/MatrixMarket>.
- 10) T. Sakurai and H. Sugiura : A projection method for generalized eigenvalue problems using numerical integration, J. Comput. Appl. Math., 159, 119-128, 2003.
- 11) T. Sakurai, J. Asakura, H. Tadano and T. Ikegami : Error analysis for a matrix pencil of Hankel matrices with perturbed complex moments, JSIAM Letters Vol.1 pp.76-79, 2009.
- 12) K. Senzaki, H. Tadano, T. Sakurai and Z. Bai : A method for estimating the distribution of eigenvalues using the AS method, Proc. Recent Advances in Numerical Methods for Eigenvalue Problems (RANMEP2008), Tsing Hua (in print).
- 13) R. Takayama, T. Hoshi, T. Sogabe, S.-L. Zhang, and T. Fujiwara : Linear algebraic calculation of the Green's function for large-scale electronic structure theory, Phys. Rev. B 73 165108, 2006.
- 14) S. Yamamoto, T. Sogabe, T. Hoshi, S.-L. Zhang, and T. Fujiwara : Shifted Conjugate-Orthogonal-Conjugate-Gradient Method and Its Application to Double Orbital Extended Hubbard Model, J. Phys. Soc. Japan 77 114713, 2008.