

## 科学研究費助成事業 研究成果報告書

平成 30 年 6 月 5 日現在

機関番号：12612

研究種目：基盤研究(B) (一般)

研究期間：2014～2017

課題番号：26286087

研究課題名(和文)電子状態計算への応用を指向した行列計算ライブラリの機能拡張とメニーコア向け最適化

研究課題名(英文)An extended linear algebra library for electronic structure calculation and its optimization for many-core processors

研究代表者

山本 有作 (Yamamoto, Yusaku)

電気通信大学・大学院情報理工学研究科・教授

研究者番号：20362288

交付決定額(研究期間全体)：(直接経費) 8,800,000円

研究成果の概要(和文)：電子状態計算で使われる線形計算について、並列性能、精度、数値的安定性に優れたソルバの開発を目的として研究を行った。主な研究成果は次の通りである。(1) 通信回避型のQR分解手法として有望なCholeskyQR2法について誤差解析を行い、数値的安定性を証明した。(2) 量子電子波ダイナミクス計算向けに、one-way dissectionオーダリングに基づく連立1次方程式の並列ソルバを開発した。(3) 一般化固有値問題計算コードとして、3種の密行列ソルバを複合させた数値ソルバEigenKernelを開発した。これらの成果はメニーコアプロセッサ上での電子状態計算を加速するのに役立つと期待される。

研究成果の概要(英文)：In this project, we aimed at developing solvers for numerical linear algebra functions used in electronic structure calculations. The main achievements of this project are as follows. (1) We performed an error analysis of the CholeskyQR2 method, which is a promising communication-avoiding algorithm for the QR decomposition, and proved its numerical stability. (2) We developed a parallel linear equation solver based on the one-way dissection for quantum wave dynamics. (3) We developed a generalized eigenvalue solver EigenKernel, which is a hybrid solver that combines three eigenvalue solvers for dense matrices. These results will be useful for accelerating electronic structure calculations on many-core processors.

研究分野：数値解析, 高性能計算

キーワード：固有値計算 連立1次方程式 直交化 並列計算 メニーコア 電子状態計算 計算科学

### 1. 研究開始当初の背景

科学技術計算では、連立1次方程式の求解や行列の固有値計算をはじめとする行列計算が中心的な役割を果たす。近年では、計算機アーキテクチャの高度化・複雑化に伴い、計算機の性能を引き出すには高度な最適化技法が必要となっており、個々のユーザが性能の良い行列計算プログラムを作るのは困難になりつつある。そのため、高性能な行列計算ライブラリの重要性が増している。しかし、ライブラリのメニューは行列計算ライブラリが登場した1970年代からほとんど変わっておらず、連立1次方程式解法、固有値計算、最小2乗法という従来からの機能に留まっていた。一方、科学技術計算のアルゴリズムは大きく進歩しており、これらの標準的なメニューではカバーできない行列計算も増えていた。

### 2. 研究の目的

本研究では、電子状態計算を中心とする科学技術計算からの新しいニーズに応えるための行列計算ライブラリの機能拡張を目的とする。そのため、次の3つの機能について、今後主流となるメニーコアプロセッサ及び超並列計算機上で高性能を発揮できるアルゴリズムを開発することを目的とする。

- (1) 電子状態計算における行列の性質を活用した高効率な固有値解法
- (2) ベクトル逐次添加型の直交化法
- (3) 行列関数の計算法

### 3. 研究の方法

研究目的のうち(1)は、(1a) 1万円程度の中規模行列に対する強スケールな固有値計算法、(1b) 時間依存固有値問題の数値解法、(1c) 固有値ヒストグラムの計算法、の3つのサブテーマからなる。我々は、業界標準ライブラリ ScaLAPACK 等で採用されている3重対角化法に比べて通信回数を大幅に削減できるブロックヤコビ法を用いた並列固有値ソルバを開発しており、これを基に、上記の機能を実現できるソルバを開発する。

(2)では、ベクトルを1本追加するごとに以前の全てのベクトルと直交化を行う演算について、高い並列性と高精度性を併せ持つアルゴリズムを確立する。予備実験により、compact WY 表現と呼ばれる直交行列の表現法に基づく新しいアルゴリズムが有望であるとの評価を得ており、これを基に理論誤差解析を行うことで高信頼な直交化アルゴリズムを確立する。

(3)では、行列の指数関数や平方根などの行列関数について、クリロフ部分空間法に基づく高並列な計算アルゴリズムを確立する。研究に当たったの主な課題は、誤差評価に基づき、必要なクリロフ部分空間の次元を見積もることである。そこで、複素関数論に基づくクリロフ部分空間法の収束性解析の手法を取り入れることで、誤差の事前評価を可能

にし、要求精度での計算を可能とする。

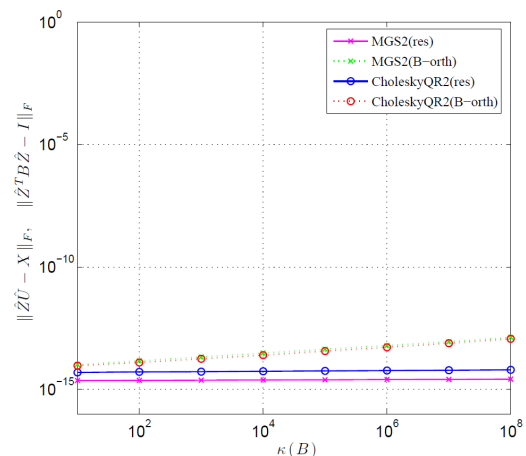
以上で開発したアルゴリズムは、Intel Xeon Phi 等のメニーコアプロセッサ、及び京をはじめとする超並列計算機上で実装し、性能評価を行う。また、研究分担者・連携研究者の協力により電子状態計算や分子軌道法の実アプリで評価し、フィードバックを得て更に解法の改良を行う。

### 4. 研究成果

本研究の成果について、(1) 新規アルゴリズムの開発とその理論的解析、(2) 電子状態計算等への応用、(3) ソフトウェアの開発と公開、の3つに分けて報告する。

#### (1) 新規アルゴリズムの開発と理論的解析

本項目については次の成果が得られた。  
 (1a) 通信回避型のQR分解手法として有望なCholeskyQR2法について誤差解析を行った。その結果、入力行列Aの条件数が $10^8$ 以下であれば、残差 $A-QR$ 、直交性 $Q^T Q-I$ のいずれもがマシンプレシジョン程度に抑えられるという結果を得た。これにより、同アルゴリズムが数値安定となるための条件を理論的に明らかにした。また、同アルゴリズムをマルチコアプロセッサ及びメニーコアプロセッサ Xeon Phi 向けに並列実装し、性能評価を行った。その結果標準的なQR分解アルゴリズムであるHouseholder QR法に比べて2倍以上の性能が得られることを明らかにした。  
 (1b) 上記手法の拡張として、一般内積空間におけるQR分解のための通信回避型アルゴリズムであるB-CholeskyQR2法を開発した。また、誤差解析を行い、本手法が適用可能となる条件と直交化誤差・残差の上界を理論的に導出した。B-CholeskyQR2法は、残差 $A-QR$ 、直交性 $Q^T Q-I$ の両方について、広く使われているMGS法と同等であり(下図)、かつ、通信回数が2回で済むというMGS法にはない長所を持つ。そのため、一般内積での直交化手法として今後広く活用が期待される。



(1c) 高分子系の電子状態計算に現われる連立1次方程式ソルバへの適用に向けて、one-way dissection オーダリングによる並列解法の性能評価を行った。この結果、領域数、

スレッド数の増加とともにスケラブルな並列性能が得られた。

(1d) 固有値分布推定やグリーン関数の計算で用いられる、逆行列のトレース  $\text{Tr}(A^{-1})$  の確率的推定法について解析を行った。特に、推定に用いるベクトルを正規化する場合としない場合について、分散の解析を行い、正規化による分散減少効果を定量的に確かめた。また、逆行列のトレースの複素周回積分を用いて複素平面上の円内の固有値数を推定する場合に、各積分点における重みを一定とする方法とランダムにする方法の両方を理論的・実験的に比較し、後者がより小さい分散を与える場合があることを確かめた。本結果は確率的固有値分布推定法の効率化に役立つと考えられる。

### (2) 電子状態計算等への応用

本項目については次の成果が得られた。

(2a) 固有問題ソルバを活用した電子波ダイナミクス計算コードを開発し、有機高分子系および有機高分子集合体系でのテスト計算を行った。固有値ソルバを使った手法が有用であるとの知見を得たが、多数回の固有値計算を行う必要があり、さらなる高速化を検討する余地があることがわかった。

(2b) 100 ナノメートルスケール（世界最大）系の現実的（非理想構造）有機高分子集合体の量子計算（電子状態計算）を、京全体までを用いて行った。量子計算にはクリロフ部分空間をもちいた独自ソルバを利用しており、高い並列効率が得られる事が昨年度までに分かっていた。しかし、本年度、プロファイラをもちいた詳細な性能調査により、大規模ジョブ（3万ノード～全ノード）では量子計算以外の部分に非効率的となるルーチンがみつき、これを改善した。ポスト京などの次世代機での実用的計算で有用となる。

(2c) 本研究で開発している連立1次方程式ソルバの電子状態計算以外への応用として、地盤とその上の構造物に対する地震動解析への適用を行った。同問題を有限要素法で離散化して得られる連立1次方程式に対して、対角項スケラリングを前処理とした共役勾配法を適用したところ、条件数の異なる3つの行列に対していずれも解が得られ、32並列計算により約16倍の性能向上が得られた。また、別の前処理法として、計算式の依存関係を無くす改良型 reverseCuthill-McKee法を用いた並列不完全分解型前処理法を提案した。いくつかの疎行列に対して評価を行った結果、有効であることを示した。

### (3) ソフトウェアの開発と公開

(3a) 一般化固有値問題計算コードとして、3種の密行列ソルバ（ScaLAPACK, ELPA, EigenExa）を複合した数値ソルバを構築し、京コンピュータなどのスーパーコンピュータでの性能評価を行った。評価例題としては、研究分担者の星らが公開している行列ライ

ブラリ (ELSEs matrix library, <http://www.elses.jp/>)にある、電子状態計算の実問題データを用いた。その結果、従来意識されてこなかった、一般化固有値問題-標準固有値問題の変換部分にスケラリング上の問題があることがわかり、次世代（エクサスケール時代）に向けての指針となる知見が得られた。

## 5. 主な発表論文等

〔雑誌論文〕(計10件)

[1] G. Oksa, Y. Yamamoto, M. Becka and M. Vajtersic: "Asymptotic quadratic convergence of the parallel block-Jacobi EVD algorithm with dynamic ordering for Hermitian matrices", BIT Numerical Mathematics, to appear. (査読有)

[2] A. Shioya and Y. Yamamoto: "The danger of combining block red-black ordering with modified incomplete factorizations and its remedy by perturbation or relaxation", Japan Journal of Industrial and Applied Mathematics, Vol. 35, pp. 195-216 (2018). DOI: 10.1007/s13160-017-0277-5 (査読有)

[3] K. Ooi, Y. Mizuno, T. Sogabe, Y. Yamamoto and S.-L. Zhang: "Solution of a nonlinear eigenvalue problem using signed singular values", East Asian Journal on Applied Mathematics, Vol. 7, No. 4, pp. 799-809 (2018). DOI: 10.4208/eajam.181016.300517c (査読有)

[4] Y. Yamamoto: "On the optimality and sharpness of Laguerre's lower bound on the smallest eigenvalue of a symmetric positive definite matrix", Applications of Mathematics, Vol. 62, No. 4, pp. 319-331 (2017). DOI: 10.21136/AM.2017.0022-17 (査読有)

[5] G. Oksa, Y. Yamamoto and M. Vajtersic: "Asymptotic quadratic convergence of the serial block-Jacobi EVD algorithm for Hermitian matrices", Numerische Mathematik, Vol. 136, No. 4, pp. 1071-1095 (2017). DOI: 10.1007/s00211-016-0863-5 (査読有)

[6] S. Kudo, Y. Yamamoto, M. Becka and M. Vajtersic: "Performance analysis and optimization of the parallel one-sided block Jacobi SVD algorithm with dynamic ordering and variable blocking",

Concurrency and Computation: Practice and Experience, Vol. 29, No. 9 (2017).  
DOI: 10.1002/cpe.4059 ( 査読有 )

[7] H. Imachi and T. Hoshi: “Hybrid numerical solvers for massively parallel eigenvalue computation and their benchmark with electronic structure calculations”, J. Inf. Process., Vol. 24, pp. 164-172 (2016). ( 査読有 )

[8] T. Yamashita, K. Kimura and Y. Yamamoto: “A new subtraction-free formula for lower bounds of the minimal singular value of an upper bidiagonal matrix”, Numerical Algorithms, Vol. 69, No. 4, pp. 893-912 (2015).  
DOI: 10.1007/s11075-014-9931-z ( 査読有 )

[9] Y. Yamamoto, Y. Nakatsukasa, Y. Yanagisawa, and T. Fukaya: “Roundoff error analysis of the CholeskyQR2 algorithm”, Electronic Transactions on Numerical Analysis, Vol. 44, pp. 306-326 (2015). ( 査読有 )

[10] S. Kakizaki, A. Fukuda, Y. Yamamoto, M. Iwasaki, E. Ishiwata and Y. Nakamura: “Conserved quantities of the integrable discrete hungry systems”, Discrete and Continuous Dynamical Systems - Series S (DCDS-S), Vol. 8, No. 5, pp. 889-899 (2015).  
DOI: 10.3934/dcdss.2015.8.889 ( 査読有 )

[ 学会発表 ] ( 計 14 件 )

[1] 俵谷 健太郎, 横川 三津夫: “色数を抑えた改良 reverse Cuthill-McKee 法による線形ソルバの並列化について”, 情報処理学会第 159 回ハイパフォーマンスコンピューティング研究発表会, 東京大学柏キャンパス, 2017 年 4 月 17 日.

[2] 山本 有作: “ブロックヤコビ法に基づく強スケーリング型固有値・特異値計算アルゴリズム”, 日本応用数学会「行列・固有値問題の解法とその応用」研究部会第 22 回研究会, 東京大学, 2016 年 11 月 25 日.  
( 招待講演 )

[3] T. Hoshi, H. Imachi, K. Kumahata, M. Terai, K. Miyamoto, K. Minami and F. Shoji: “Extremely scalable algorithm for  $10^8$ -atom quantum material simulation on the full system of the K computer”, Proceeding of ScalA16: Workshop on Latest Advances in Scalable Algorithms for Large-Scale Systems, in SC16, Salt Lake City, UT, USA, Nov. 13, 2016.

[4] T. Hoshi and H. Imachi: “One-hundred-nanometer-scale electronic state and transport calculations of organic device material on the K computer”, The 19th Asian Workshop on First-Principles Electronic Structure Calculations, National Chiao Tung University, Hsinchu, Taiwan, 31. Oct. 31-Nov. 2, 2016.  
( 招待講演 )

[5] Y. Yamamoto: “Convergence Analysis of the Parallel Block Jacobi Method for the SVD with Dynamic Ordering”, Parallel Numerical Computing and Its Applications, Smolenice, Slovakia, September 7-9, 2016.  
( 招待講演 )

[6] T. Hoshi: “100M atom electronic structure calculation of organic device materials on full system of K Computer”, ISC2016, Frankfurt, Germany, June 19-23, 2016  
( 招待講演 ) .

[7] T. Hoshi: “Massively parallel electronic structure calculations and transport property of organic materials”, Computational Chemistry Symposium of 12th International Conference of Computational Methods in Sciences and Engineering (ICCMSE 2016), Metropolitan Hotel, Athens, Greece, March 17-20, 2016. ( 招待講演 )

[8] 井町 宏人, 宮武 勇登, 星 健夫: “エネルギー保存数値解法の大規模物質計算への展開”, 日本応用数学会研究部会連合発表会, 神戸学院大学, 2016 年 3 月 4 日-5 日.

[9] 俵谷 健太郎, 横川 三津夫: “大規模連立一次方程式の反復解法の実問題への適用と性能評価”, 情報処理学会第 152 回ハイパフォーマンスコンピューティング研究発表会, 北海道立道民活動センター, 2015 年 12 月 16 日-17 日.

[10] 井町 宏人, 星 健夫, “超並列固有値計算のための最適複合化数値ソルバと電子状態計算におけるベンチマーク”, 日本応用数学会 2015 年 研究部会連合発表会, 明治大学, 2015 年 3 月 6 日-7 日.

[11] 井町 宏人, 星 健夫, “一般化固有値問題むけ最適複合化ソルバの構成と性能評価”, 「行列・固有値問題の解法とその応用」研究部会, 東京大学, 2014 年 12 月 25 日.

[12] 星 健夫, 井町 宏人: “「京」での 100 ナノ電子状態計算とその展望”, 物性研究所計算物質科学研究センター 第 4 回シンポ

ジウム, 東京大学物性研究所, 2014 年 12 月 14 日。(招待講演)

[13] 井町 宏人, 星 健夫: “実応用・アルゴリズム連携研究のための固有値ソルバ性能評価環境の開発”, 日本応用数学会年会, 政策研究大学院大学, 東京, 2014 年 9 月 3 日-5 日.

[14] Y. Yamamoto: “A nonlinear eigenvalue problem arising in theoretical fluid dynamics and its solution using signed singular values”, The Fifth China-Japan-Korea Conference on Numerical Mathematics, Ningxia, China, August 25-28, 2014.  
(招待講演)

[図書](計1件)

[1] Y Yamamoto: “An elementary derivation of the projection method for nonlinear eigenvalue problems based on complex contour integration”, T. Sakurai et al. eds. “Eigenvalue Problems: Algorithms, Software and Applications in Petascale Computing”, pp. 251-265, Springer, 2018. ISBN: 978-3319624242

[その他]

ホームページ等

<http://kjk.office.uec.ac.jp/Profiles/66/0006540/profile.html>

## 6. 研究組織

### (1) 研究代表者

山本 有作 (YAMAMOTO YUSAKU)  
電気通信大学・大学院情報理工学研究科・教授  
研究者番号: 20362288

### (2) 研究分担者

横川 三津夫 (YOKOKAWA MITSUO)  
神戸大学・先端融合研究環・教授  
研究者番号: 70358307  
星 健夫 (HOSHI TAKEO)  
鳥取大学・工学研究科・准教授  
研究者番号: 80272384

### (3) 連携研究者

今村 俊幸 (IMAMURA TOSHIYUKI)  
研究者番号: 60361838  
理化学研究所・計算科学研究センター  
・チームリーダー  
稲富 雄一 (INADOMI YUICHI)  
九州大学・大学院システム情報科学研究  
院・研究員  
研究者番号: 70437747

### (4) 研究協力者

Marian Vajtersic

ザルツブルグ大学・コンピュータサイエンス学科・教授