

科学研究費助成事業（科学研究費補助金）研究成果報告書

平成24年5月25日現在

機関番号：12102

研究種目：基盤研究（A）

研究期間：2009～2011

課題番号：21246018

研究課題名（和文）次世代シミュレーション環境のための一般化固有値解法の開発と応用

研究課題名（英文）Development and Application of a Method for Generalized Eigenvalue Problems in Next Generation Computing Environment

研究代表者

櫻井 鉄也 (SAKURAI TETSUYA)

筑波大学・システム情報系・教授

研究者番号：60187086

研究成果の概要（和文）：

本研究では、次世代計算機環境における大規模シミュレーションを実現するために、特に並列化が困難な内部固有値問題の解法を対象として、複素周回積分を用いた固有値解法の実用技術を開発した。ここで開発した解法を、マルチコアによる大規模並列環境向けのソフトウェアとして実装した。開発したソフトウェアを複数の応用分野の問題を対象として適用し、実用性を想定して性能改善を行った。

研究成果の概要（英文）：

In this research, we have developed a parallel method for solving interior generalized eigenvalue problems that appear in large-scale simulations in next generation computing environment. The software package is implemented based on the developed method, and the performance of the software is improved with application for several problems.

交付決定額

（金額単位：円）

	直接経費	間接経費	合計
2009年度	9,900,000	2,970,000	12,870,000
2010年度	5,500,000	1,650,000	7,150,000
2011年度	5,500,000	1,650,000	7,150,000
総計	20,900,000	6,270,000	27,170,000

研究分野：工学

科研費の分科・細目：応用物理学、工学基礎

キーワード：シミュレーション工学、固有値解析、基盤ソフトウェア

1. 研究開始当初の背景

コンピュータシミュレーションによる解析・設計手法は幅広い分野において活用され、科学技術や産業の発展においてその役割が大きくなってきた。新規材料やデバイスの開発、流体・振動解析、創薬、マクロ経済予測などの多くのアプリケーション分野で大規模な固有値問題が現れ、その実用的な解法の開発は工学・理学分野において重要な課題の一つである。

一方、次世代のシミュレーション環境としてマルチコアノードによる大規模並列計算

機が想定されるが、従来の計算アルゴリズムでは性能を引き出すことは容易ではない。特に漸化的な計算が用いられる内部固有値問題では大規模な並列化が困難である。そのため、このような大規模並列環境で高い性能を得るための新たなアルゴリズムデザインによる並列解法の開発が必要となっていた。

2. 研究の目的

本研究では、次世代計算機環境における大規模シミュレーションを実現するために、特に並列化が困難な内部固有値問題の解法を

対象として、複素周回積分を用いた固有値解法の実用技術を開発することを目的とする。ここで開発した技術を用いて、幅広い分野の問題に対応した基盤的ソフトウェアとして実装する。

周回積分を用いて目的の部分空間を直接生成することにより、従来法に見られる漸化的な計算を必要としない並列性の高い解法を提案した。この成果をもとに、より汎用性の高い方法を構築するとともに、解法のさらなる高性能化や安定化を進め、大規模分散環境を前提とした実用性の高いソフトウェアとして実装する。固有値解法は大規模なシミュレーションで広く必要とされ、高性能な解法の開発は工学・理学分野への波及効果は大きいものと期待される。

3. 研究の方法

大規模な並列環境で高い性能を得る解法の開発のため、周回積分を用いた固有値解法に対して、以下の項目を実施する。

(1) 並列固有値解法アルゴリズムの改良

周回積分を用いた固有値解法を対象として、方法の実用性を高めるためのフィルター理論を用いたアルゴリズムの改善やブロック Krylov 部分空間反復法による高速化と安定化などにより、解法の高性能化を行う。

(2) 階層的並列環境での性能向上

固有値を求める領域を複数に分け、それぞれの領域上に積分点をおく。さらに、積分点ごとに独立に線形方程式を解く。これらは階層的な構造になり、これを利用して階層的な並列環境での性能を向上させる。また、標準固有値問題に対して Krylov 部分空間のシフト不変性を利用した演算量削減や、Level3 BLAS による高効率化手法を開発する。

(3) 実用性の高い基盤ソフトウェアの提供

項目 (1)、(2) で得られた成果に基づいてソフトウェアの実装を行う。図 1. に示すように、解法の備える階層構造に対応させて計算資源を割り当てることで高い効率を得る。確率的な逆行列のトレース計算法を利用した固有値分布推定とその結果を用いた適切なパラメータ設定を行う手法を検討する。

(4) 開発したソフトウェアの実用問題応用

材料物理、分子化学、生命科学などのアプリケーションを対象として本研究で開発した方法を適用し、その性能を検証する。さらにその結果を用いて方法の改良につなげる。

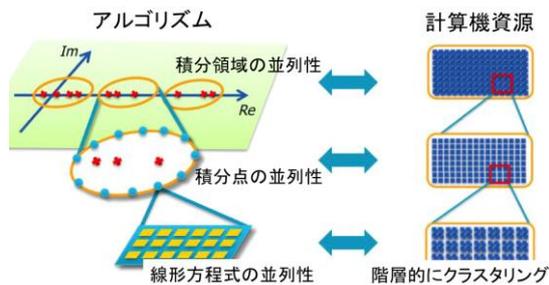


図 1. 解法の階層的な構造と計算資源割当て

4. 研究成果

以下に本研究課題によって得られた研究成果を示す。

(1) 固有空間のフィルターの概念に基づいて自由度の高い解法的设计法や反復による精度改善法の開発が可能となった。図 2. に周回積分による部分フィルターの様子を示す。縦棒グラフは各固有値における固有ベクトル成分の強さを表し、左側が入力、右側が周回積分を適用した出力を表している。破線は積分領域を表し、出力ベクトルは領域内の成分のみが残り、外側の成分は消える。

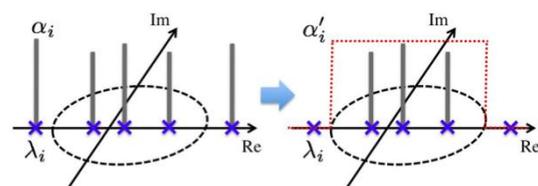


図 2. 周回積分による部分空間フィルター

(2) 複数ベクトルによるブロック演算を利用して効率化と安定性の改善を行った。これは計算量の多くを占め、その高速化は方法全体の高性能化につながる。

図 3. に開発した手法と従来法である Thick Restart Lanczos 法との比較を示す。対象とした行列はリニアコライダー設計で現れる一般化固有値問題で、次元は約 110 万次元である。実験はローレンスバークレイ国立研究所の Cray XT4 を用いた。横軸は用いたコア数、縦軸は計算時間(秒)を表す。

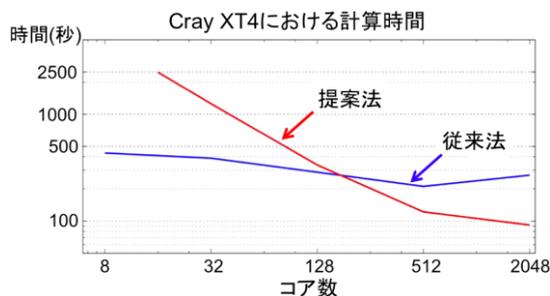


図 3. 演算コア数による計算時間の変化

コア数が少ないときには従来法が高速であるが、256 コア以上では提案法が高速となり、想定する 1000 コア以上の計算環境において高い性能が得られることが確認できた。

(3) マルチコア CPU の分散環境において高性能を発揮するソフトウェアとして実装した。また、非確定的手法による大域的な固有値分布推定法を開発した。これを用いたパラメータ設定によって高い並列効率と負荷分散が可能となる。複素平面上において分布推定を行った結果を図 4. に示す。黒い領域は固有値密度が低いことを表し、求めるべき領域から除外することができる。

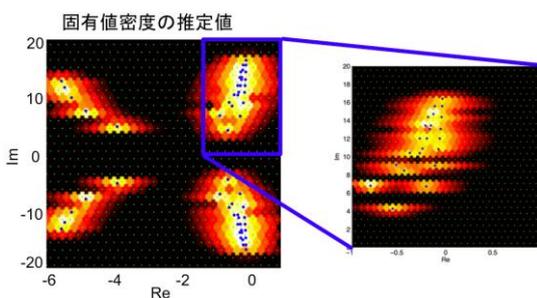


図4. 複素平面上での固有値分布推定

開発したソフトウェアはパッケージ名 BLOSS として産業技術総合研究所のサーバにおいて公開を予定している。また、英文によるマニュアルの整備を行うなど、より実用性を高めるための準備も進めた。

(4) 開発したソフトウェアを、分子シミュレーションである FMO-MO 法、実空間密度汎関数法で現れるバンド計算、量子ドットシミュレーション、格子 QCD、殻モデル、線形加速器設計で現れる問題など、各種の大規模実問題に適用し、性能評価と手法改善を行った。

EGFR (Epidermal Growth Factor Receptor) dimmer 17, 246 原子の分子軌道計算で現れる一般化固有値問題に適用した。ここで基底関数は 6-31G で、行列は 96, 234 次元、非零要素数 456, 807, 6481 である。

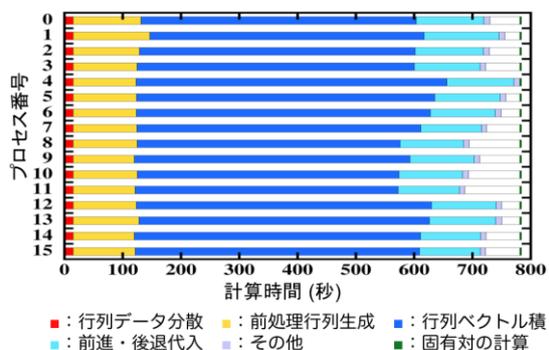


図5. 分子軌道計算への適用結果

実験は筑波大学計算科学研究センター T2K-Tsukuba の 8 ノード (128 コア) を用い、積分点数 32 (線形方程式 16 個)、ブロック数 32 とした。図 5. に結果を示す。図より計算時間のほとんどは線形方程式の求解 (前処理, 前進後退代入, 行列ベクトル積) で占められていることがわかる。また、プロセスごとのロードバランスも比較的良好であることがわかる。

シリコンナノワイヤの実空間密度汎関数法によるバンド計算で現れる問題に適用した結果を図 6. に示す。固有値問題はパラメータ k を含み、バンドギャップ付近の内部固有値問題を k を変えて解く。また、開発したコードを「京」コンピュータ上でも実行し、9, 924 原子のバンド図計算において高い効率が得られることを確認した。

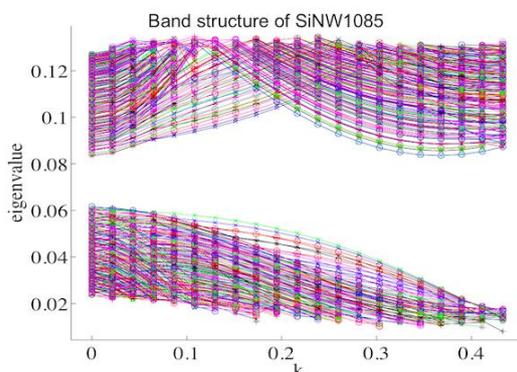


図6. 密度汎関数法におけるバンド計算

計算誤差に対するアルゴリズムのロバスト性の解析を行い、大並列環境下での耐故障性について検証した。図 7. に計算途中でベクトルの一つにデータ欠損が発生したことを想定した計算結果を示す。図に示すように、計算過程でデータの一部が欠損した場合でも、適切な部分空間サイズを選択によってその影響を回避できることが確認できた。この成果は今後さらなる大規模な並列システムの利用において問題となる計算時の障害に対して、アルゴリズムレベルでの耐障害性につながると考えられる。

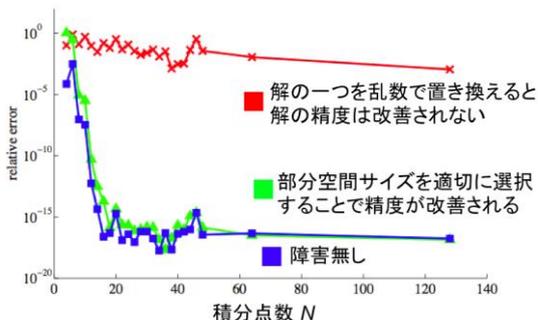


図7. データ欠損が発生した状況

5. 主な発表論文等

[雑誌論文] (計 20 件)

1. 山本和磨, 前田恭行, 二村保徳, 櫻井鉄也, 非線形固有値問題の固有値密度推定法における適応的並列アルゴリズム, 情報処理学会 ACS 論文誌, 査読有, 採録決定
2. Y. Futamura, T. Sakurai, S. Furuya, J.-I. Iwata, Efficient algorithm for linear systems arising in solutions of eigenproblems and its application to electronic-structure calculations, Proc. 10th International Meeting on High-Performance Computing for Computational Science, 査読有, 採録決定
3. I. Yamazaki, T. Ikegami, H. Tadano, T. Sakurai, Performance comparison of parallel eigensolvers based on a contour integral method and a Lanczos method, Parallel Computing, 査読有, 採録決定
4. K. Koyanagi, Y. Kita, M. Tachikawa, Systematic theoretical investigation of positron-binding to amino acid molecules with ab initio multi-component molecular orbital approach, Eur. Phys. J. D, 査読有, 採録決定
5. Y. Maeda, Y. Futamura, T. Sakurai, Stochastic estimation method of eigenvalue density for nonlinear eigenvalue problem on the complex plane, JSIAM Letters, 査読有, Vol. 3, 2011, pp. 61-64
6. T. Ikegami, T. Sakurai, Contour integral eigensolver for non-Hermitian systems: a Rayleigh-Ritz-type approach, Taiwanese J. Math., 査読有, Vol. 14, 2010, pp. 825-837
7. K. Senzaki, H. Tadano, T. Sakurai, Z. Bai, A method for profiling the distribution of eigenvalues using the AS method, Taiwanese J. Math., 査読有, Vol. 14, 2010, pp. 839-853
8. T. Sakurai, H. Tadano, T. Ikegami, U. Nagashima, A parallel eigensolver using contour integration for generalized eigenvalue problems in molecular simulation, Taiwanese J. Math., 査読有, Vol. 14, 2010, pp. 855-867
9. Y. Futamura, H. Tadano, T. Sakurai, Parallel stochastic estimation method of eigenvalue distribution, JSIAM Letters, 査読有, Vol. 2, 2010, pp. 127-130
10. T. Mizusaki, K. Kaneko, M. Honma, T. Sakurai, Filter diagonalization of shell-model calculations, Phys. Rev. C, 査読有, Vol. 82, 2010, 10 pages
11. H. Ohno, Y. Kuramashi, H. Tadano, T. Sakurai, A quadrature-based eigensolver with a Krylov subspace method for shifted linear systems for Hermitian eigenproblems in lattice QCD, JSIAM Letters, 査読有, Vol. 2, 2010, pp. 115-118
12. I. Yamazaki, M. Okada, H. Tadano, T. Sakurai, K. Teranishi, A block sparse approximate inverse with cutoff preconditioner for semi-sparse linear systems derived from Molecular Orbital calculations, JSIAM Letters, 査読有, Vol. 2, 2010, pp. 41-44
13. T. Sakurai, H. Tadano, Y. Kuramashi, Application of block Krylov subspace algorithms to the Wilson-Dirac equation with multiple right-hand sides in lattice QCD, Comput. Phys. Commun., 査読有, Vol. 181, 2010, pp. 113-117
14. H. Umeda, Y. Inadomi, T. Watanabe, T. Uagi, T. Ishimoto, T. Ikegami, H. Tadano, T. Sakurai, U. Nagashima, Parallel Fock matrix construction with distributed shared memory model for the FMO-MO method, J. Comput. Chem., 査読有, Vol. 31, 2010, pp. 2381-2388
15. J. Asakura, T. Sakurai, H. Tadano, T. Ikegami, K. Kimura, A numerical method for polynomial eigenvalue problems using contour integral, Japan J. Indust. Appl. Math., 査読有, Vol. 27, 2010, pp. 73-90
16. H. Tadano, Y. Kuramashi, T. Sakurai, Application of preconditioned block BiCGGR to the Wilson-Dirac equation with multiple right-hand sides in lattice QCD, Comput. Phys. Commun., 査読有, Vol. 181, 2010, pp. 883-886
17. T. Ikegami, T. Sakurai, U. Nagashima, A filter diagonalization for generalized eigenvalue problems based on the Sakurai-Sugiura projection method, J. Comput. Appl. Math., 査読有, Vol. 233, 2010, pp. 1927-1936
18. T. Sakurai, J. Asakura, H. Tadano, T. Ikegami, Error analysis for a matrix pencil of Hankel matrices with perturbed complex moments, JSIAM Letters, 査読有, Vol. 1, 2009, pp. 76-79
19. J. Asakura, T. Sakurai, H. Tadano, T. Ikegami, K. Kimura, A numerical method for nonlinear eigenvalue problems using contour integrals, JSIAM Letters, 査読有, Vol. 1, 2009, pp. 52-55
20. 多田野寛人, 櫻井鉄也, 周回積分法に対する Block Krylov 部分空間反復法の適用と分子軌道計算への応用, 情報処理学会論文誌 コンピューティングシステム, 査読有, Vol. 2, 2009, pp. 10-18
[学会発表] (計 37 件)
1. T. Sakurai, z-Pares: A complex moment based parallel sparse eigenvalue solver package, International Workshop on Computational Science and Numerical Analysis, March 25, 2012, Building W-9, 3F AV Hall, The University of Electro-Communications, Tokyo, Japan
2. M. Tachikawa, Bound states of positron with nitrile species with several

- multi-component molecular theories, International Workshop on Positrons in Astrophysics, March 20, 2012, Murren, Switzerland
3. Y. Maeda, Stochastic Estimation Method of Eigenvalue Density for Nonlinear Eigenvalue Problems on the Complex Plane, SIAM Conference on Parallel Processing for Scientific Computing, February 15, 2012, Hyatt Regency Savannah, Georgia, USA
 4. K. Yamamoto, Scalable Parallel Software for Large-Scale Nonlinear Eigenvalue Problems on Petsc/Trilinos, SIAM Conference on Parallel Processing for Scientific Computing, February 15, 2012, Hyatt Regency Savannah, Georgia, USA
 5. M. Naito, A Modified Block IDR(s) Method for Computing High Accuracy Solutions, SIAM Conference on Parallel Processing for Scientific Computing, February 15, 2012, Hyatt Regency Savannah, Georgia, USA
 6. Y. Futamura, Efficient Algorithm for Linear Systems Arising in Solutions of Eigenproblems and Its Application to Electronic-Structure Calculations, SIAM Conference on Parallel Processing for Scientific Computing, February 15, 2012, Hyatt Regency Savannah, Georgia, USA
 7. 山本和磨, 非線形固有値問題の固有値密度推定法における適応的並列アルゴリズム, 2012年ハイパフォーマンส์コンピューティングと計算科学シンポジウム, 2012年1月26日, 愛知県 名古屋大学豊田講堂シンポジオンホール
 8. 多田野寛人, 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, 2012年ハイパフォーマンส์コンピューティングと計算科学シンポジウム, 2012年1月25日, 愛知県 名古屋大学豊田講堂シンポジオンホール
 9. 櫻井鉄也, 大規模並列環境向けの固有値解析ソフトウェア開発, 第3回自動チューニング技術の現状と応用に関するシンポジウム, 2011年12月5日, 東京都 東京大学小柴ホール
 10. 櫻井鉄也, 耐障害性を考慮した大規模並列環境向けの固有値解法, RIMS 研究集会「科学技術計算における理論と応用の新展開」, 2011年10月26日, 京都府 京都大学数理解析研究所
 11. 櫻井鉄也, 次世代スーパーコンピュータの性能を引き出す計算アルゴリズムデザイン, コンピュータサイエンス特別シンポジウム「数値解析ソフトウェアの発祥と発展ー研究と教育への応用」, 2011年10月20日, 茨城県 筑波大学筑波キャンパス
 12. 前田恭行, 非線形固有値問題における複素平面上での大域的固有値分布推定, 日本応用数理学会 2011年度年会, 2011年9月15日, 京都府同志社大学今出川キャンパス
 13. 古庄茉紀, 非線形固有値問題に対する TDS Arnoldi-SS ハイブリッド解法, 日本応用数理学会 2011年度年会, 2011年9月14日, 京都府同志社大学今出川キャンパス
 14. 内藤理大, IDR(s)法における残差停滞の回避方法について, 2011年並列/分散/協調処理に関する『鹿児島』サマー・ワークショップ, 2011年7月27日, 鹿児島県 かがしま県民交流センター
 15. 櫻井鉄也, 大規模固有値問題の並列解法とその応用, HPCI 戦略プログラム 分野2 × 分野5 異分野交流研究会, 2011年7月26日, 茨城県 筑波大学筑波キャンパス
 16. Y. Futamura, A Memory Saving Technique for a Resolvent Based Sparse Eigensolver, Scalable Eigensolver for Electronic Structure Calculations on Hierarchical Parallel Computers, The 7th International Congress on Industrial and Applied Mathematics, July 19, 2011, Vancouver, BC, Canada
 17. T. Sakurai, Scilab for mathematical education and high performance computing, European pole of competence in high performance simulation TERATEC2011, June 29, 2011, Ecole Polytechnique, Palaiseau, France
 18. T. Sakurai, An interpolatory parallel method for large-scale nonlinear eigenvalue problems, 2011 SIAM Conference on Computational Science and Engineering, March 4, 2011, Reno, Nevada, USA
 19. 櫻井鉄也, 大規模疎行列に対する補間型固有値解法, 科学技術計算アルゴリズムの数理的基盤と展開, 2010年10月20日, 京都府 京都大学数理解析研究所
 20. 多田野寛人, 近似解の精度劣化を回避する Block 積型 Krylov 部分空間反復法について, 日本応用数理学会 2010年度年会, 2010年9月6日, 東京都 明治大学駿河台キャンパス
 21. 二村保徳, 独立並列計算による行列固有値分布の確率的推定法, 並列/分散/協調処理に関するサマー・ワークショップ, 2010年8月5日, 石川県 金沢市文化ホール
 22. T. Sakurai, A hierarchical parallel eigenvalue solver: parallelism on top of multicore linear solvers, 6th International Workshop on Parallel Matrix Algorithms and Applications, July 1, 2010, Basel, Switzerland
 23. Y. Futamura, Parallel stochastic estimation method for matrix eigenvalue distribution, 6th International Workshop on Parallel Matrix Algorithms and Applications, July 1, 2010, Basel, Switzerland
 24. I. Yamazaki, Performance evaluation of the BSAIC preconditioner, Parallel Matrix Algorithms and Applications 2010,

- June 30, 2010, Basel, Switzerland
25. T. Sakurai, A hierarchical parallel eigenvalue solver for nonlinear eigenvalue problems, 2nd International Workshops on Advances in Computational Mechanics, March 30, 2010, Pacifico Yokohama (Conference Center), Kanagawa
 26. Y. Futamura, Scalable eigensolver for electronic structure calculations on hierarchical parallel computers, Parallel Processing for Scientific Computing, February 25, 2010, Seattle, Washington, USA
 27. T. Sakurai, A comparative study of parallel generalized eigenvalue solvers with an application to accelerator cavity design, SIAM Conference on Parallel Processing for Scientific Computing, February 25, 2010, Seattle, Washington, USA
 28. H. Ohno, An application of an eigensolver with shifted linear systems to eigenproblems in lattice QCD, International Symposium of Electronic Structure Calculations, December 7, 2009, Yayoi Auditorium, Ichijo Hall, University of Tokyo, Tokyo
 29. T. Sakurai, A hierarchical parallel eigensolver for large-scale scientific computing, International Symposium of Electronic Structure Calculations, December 7, 2009, Yayoi Auditorium, Ichijo Hall, University of Tokyo, Tokyo
 30. Y. Futamura, Scalable parallel algorithm for electronic structure calculations by band localization, International Symposium of Electronic Structure Calculations, December 7, 2009, Yayoi Auditorium, Ichijo Hall, University of Tokyo, Tokyo
 31. T. Sakurai, A contour integral bases method for nonlinear eigenvalue problems, International Symposium of Electronic Structure Calculations, December 8, 2009, Yayoi Auditorium, Ichijo Hall, University of Tokyo, Tokyo
 32. T. Sakurai, A hierarchical parallel method for solving nonlinear eigenvalue problems, SIAM Conference on Applied Linear Algebra 2009, October 28, 2009, Monterey, California, USA
 33. 二村保徳, バンド局所化による電子状態計算の高性能並列アルゴリズム, 日本応用数学会 2009年度年会, 2009年9月28日, 大阪府 大阪大学豊中キャンパス
 34. 櫻井鉄也, Spectral Projectorに基づく非線形固有値問題の解法, 日本応用数学会 2009年度年会, 2009年9月28日, 大阪府 大阪大学豊中キャンパス
 35. I. Yamazaki, A Block Approximate Inverse With Cutoff Preconditioner for Semi-Sparse Linear Systems,

- International Conference on Preconditioning Techniques for Scientific and Industrial Applications, August 25, 2009, Hong Kong, China
36. T. Sakurai, A method for finding zeros of polynomial equations using a contour integral based eigensolver, Symbolic Numeric Computation 2009, August 4, 2009, CO-OP Inn Kyoto, Kyoto
 37. 櫻井鉄也, 大規模計算における数値アルゴリズムの貢献, 第58回理論応用力学講演会, 2009年6月9日, 東京都 日本学術会議

6. 研究組織

(1) 研究代表者

櫻井 鉄也 (SAKURAI TETSUYA)
筑波大学・システム情報系・教授
研究者番号: 60187086

(2) 研究分担者

北川 高嗣 (KITAGAWA TAKASHI)
筑波大学・システム情報系・教授
研究者番号: 60153095

多田野 寛人 (TADANO HIROTO)
筑波大学・システム情報系・助教
研究者番号: 50507845

佐々木 建昭 (SASAKI TATEAKI)
筑波大学・名誉教授
研究者番号: 80087436

長嶋 雲兵 (NAGASHIMA UNPEI)
独立法人産業技術総合研究所・ナノシステム研究部門・主幹研究員
研究者番号: 90164417

池上 努 (IKEGAMI TSUTOMU)
独立法人産業技術総合研究所・情報技術研究部門・主任研究員
研究者番号: 80245612

立川 仁典 (TACHIKAWA MASANORI)
横浜市立大学・生命ナノシステム科学研究科・教授
研究者番号: 00267410