

令和 3 年 5 月 27 日現在

機関番号：12601

研究種目：挑戦的研究(萌芽)

研究期間：2017～2020

課題番号：17K19962

研究課題名(和文) 超大規模疎行列の全固有値計算に向けた研究

研究課題名(英文) A study toward the computation of all eigenvalues of large-scale sparse matrices

研究代表者

伊田 明弘 (Ida, Akihiro)

東京大学・情報基盤センター・特任准教授

研究者番号：80742121

交付決定額(研究期間全体)：(直接経費) 4,800,000円

研究成果の概要(和文)：大規模疎行列の全固有値計算に向けた研究を行った。従来手法では大規模疎行列を密行列として扱うが、本研究では低ランク構造行列として扱った。代表的な低ランク構造行列であるH行列をハウスホルダー変換により帯行列化し、全固有値計算を行う手法を開発した。密行列として扱う場合に比べて、計算オーダーを低減させられることを、理論および数値実験で示した。また、BLR行列(単純な低ランク構造行列の一種)のQR分解法およびその並列化手法を開発した。

研究成果の学術的意義や社会的意義

行列の全固有値計算は、大量の計算機メモリと計算量を必要とする。本研究の成果は、京コンピュータの全系を用いてやっとなることが可能な数百万円規模の行列の全固有値を、研究室のパソコンを用いて現実的な時間内に計算することができるようになる可能性を示したことにある。さらに、開発した並列計算手法は、スパコンを用いることにより、実応用アプリケーションへの適用で革新的な成果が期待できる超大規模行列(数億～数十億元)の全固有値計算が可能であることを示唆する。

研究成果の概要(英文)：A study towards the calculation of all eigenvalues of large sparse matrices was conducted. In conventional methods, large sparse matrices are treated as dense matrices, but in this study, we treated them as low-rank structured matrices. We developed a method to calculate all eigenvalues of an H-matrix (a typical low-rank structured matrix) by transforming it into a band matrix using the Householder transformation. Theoretical and numerical experiments show that the computational order can be reduced compared to the case where the matrix is treated as a dense matrix. We also developed a QR decomposition method for BLR matrices (a simple low-rank structured matrix) and its parallelization method.

研究分野：高性能計算

キーワード：固有値 近似計算 低ランク アルゴリズム 並列計算 H行列 BLR行列 高性能計算

科研費による研究は、研究者の自覚と責任において実施するものです。そのため、研究の実施や研究成果の公表等については、国の要請等に基づくものではなく、その研究成果に関する見解や責任は、研究者個人に帰属します。

1. 研究開始当初の背景

行列の全固有値計算は、高分子のエネルギー計算など科学技術計算で必要とされる。計算対象となる行列は、疎行列(行列成分のほとんどが零である行列)であることが多いが、疎な構造を活かす効率的な全固有値計算法は見つかっていない。従来手法では、疎行列を密行列(全行列成分が零でない行列)として扱う。この時、行列の次元を N として、 $O(N^2)$ の計算機メモリと $O(N^3)$ の演算量が必要であり、世界有数のスーパーコンピュータを利用したとしても、数百万円程度の全固有値計算しか行えない。従来手法の延長では、計算規模の拡大はハードウェアの性能向上のみに依存しており、飛躍的な計算規模の拡大は望めなかった。

一方、伊田(代表)らは、H行列法に代表される低ランク構造行列法の研究を行ってきた。低ランク構造行列法は、積分方程式を離散化して得られる密行列に対する近似計算手法の一種であり、H行列法を用いれば必要な計算機メモリ量を密行列の場合の $O(N^2)$ から $O(N \log N)$ に低減させることができる。H行列法の適用に加えて、スーパーコンピュータを使用することにより、超大規模シミュレーションが可能となる。伊田(代表)らは、研究成果を広く社会に還元するために、分散メモリ並列計算向けH行列法ライブラリ「HACApK」を開発・公開している。当初、HACApKは電磁場解析に適用されたが、適用範囲を広げる研究の成果により、現在では地震サイクル解析、超電導解析など、幅広い分野の実用アプリケーションで使用されている。

この5年ほどの間に、H行列法を含む低ランク行列近似手法を、従来の適用範囲である積分方程式から大きく拡大させ、疎行列の近似LU分解や近似逆行列計算などの数値線形代数計算に適用する研究論文が欧米から数多く出版されている。これらの論文には、低ランク行列近似手法により、微分方程式に基づく科学技術計算に対する大規模化・高速化の達成事例が示されている。

これらの事例から、疎行列の近似逆行列計算に低ランク近似手法の適用が可能であるならば、疎行列の固有値計算に対しても低ランク行列近似を利用した手法を開発できるのではないかという着想を得た。更に、並列化アルゴリズムの開発と実装を行い、スーパーコンピュータを用いた超並列計算を行うことで、他に類を見ない超大規模行列の全固有値計算を行う本研究構想に至った。

2. 研究の目的

科学技術計算に必要な大規模疎行列の全固有値を、スーパーコンピュータを用いて、近似的に計算する手法を開発することが、本研究の目的である。固有値の計算対象である疎行列を、従来手法のように密行列として終始扱うのではなく、密行列演算に近似手法を導入する。必要な精度内で近似計算を行うことにより、計算機メモリと演算量を低減させる手法の開発を行う。近似手法としては、応用数学分野で近年注目を浴びる低ランク行列近似手法(H行列法など)を応用して用いる。本研究が成果を挙げれば、スーパーコンピュータの全系が必要な数百万円の行列の全固有値計算を、研究室のパソコンで計算できるようになる。更に、本研究では、数学アルゴリズムの開発に留まらず、スーパーコンピュータの性能を引き出す高性能な実装も目的に含む。スーパーコンピュータを用いた計算では、実応用アプリケーションへの適用で革新的な成果が期待できる超大規模計算がターゲットである。

3. 研究の方法

研究目的を達成すべく、下記の項目について研究を行った。

・研究課題(1) 低ランク行列近似を用いた固有値計算法の開発

計算対象行列の構造、求めたい固有値の個数および範囲に応じて、固有値計算法には数多くの種類がある。どの手法のどの部分のどの計算に低ランク行列近似を用いれば効率的な計算手法となるかについて調べる。まずは、図1に示した手法に取り組む。この手法では、計算対象行列をH行列に変換する。この変換は伊田(代表)のこれまでの研究成果を利用する。本研究では、計算対象行列を対称行列に限定し、ハウスホルダー変換によるH行列の帯行列化を検討する。帯行列化した後は、既存の数値計算ライブラリを用いて全固有値の計算を行う。従来のハウスホルダー変換では、変換途中に密行列が現れるが、その密行列を行列分割と低ランク行列近似により近似する方法を検討する。

・研究課題(2) 開発手法の実応用アプリケーションへの適用

上記研究課題(1)の固有値計算手法の開発には、実応用アプリケーションから得られた行列を用いる。開発手法を実応用アプリケーションへ還元して課題を抽出し、手法の改良を行う作業を繰り返す。開発手法が実応用アプリケーションのどの範囲で使用可能かを調べる。具体的には、図1の手法を念頭に、表面電荷法による電磁場解析に現れる行列を用いてアルゴリズム開発を始める。実験コードを作成した後は、他のアプリケーションで現れる行列などでも数値実験を行う。

その後、ターゲットと定めたアプリケーションを用いて、開発手法の計算効率を高めるための

数値実験を行う。これまでのH行列に関する研究の経験から、物理モデル形状や物理量が、低ランク近似手法の選択やパラメタと相関関係があることが分かっている。また、アプリケーションで許容される誤差と低ランク近似手法の計算効率との関係について調べる。開発手法の改良を重ねつつ、アプリケーションのパフォーマンス向上を目指す。

・研究課題 (3) 開発手法の並列化アルゴリズムの開発と実装

開発した固有値計算法に対して、スパコンの性能を引き出すために必要な並列化アルゴリズムを開発する。その並列化アルゴリズムに最適なデータ構造を検討し、共有メモリ並列計算環境で動作するコードを作成する。分散メモリ並列計算環境(最新スパコン)への発展に向けて、計算負荷均衡をなるべく保ちつつ、演算パターンの局所性を高める検討を行う。

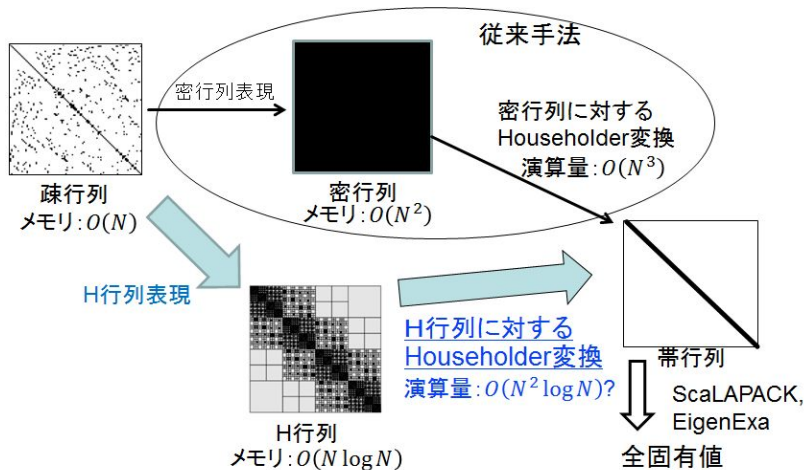


図1：全固有値計算の従来手法とH行列を用いた手法の概念図

4. 研究成果

(1) ハウスホルダー変換によるH行列の帯行列化

H行列に対して、ハウスホルダー変換による三重対角化を効率的に行えるかの検討を行った。ハウスホルダー変換の主要計算部は、行列・ベクトル積および行列とランク2行列の和で構成される。行列サイズをNとすると、N-2回のハウスホルダー変換を行えば、対象行列を三重対角行列に変換することができる。通常の密行列であれば、この三重対角化に必要な演算量は $O(N^3)$ である。

階層型行列の場合には、行列・ベクトル積の演算量は $O(N \log N)$ に落ちるため、高速に計算可能である。問題となるのは、H行列とランク2行列の和をどう計算するかであるが、本研究では以下の手順を採用した。

手順 ランク2行列を切断して、階層型行列の枠に嵌め込む

手順 部分行列ごとに、行列和の演算を行う

-1 密部分行列 + ランク2行列 = 密部分行列

-2 ランクk部分行列 + ランク2行列 = ランク(k+2)部分行列

この手順において考慮すべき点は、ハウスホルダー変換を行うごとに(H行列とランク2行列の和をおこなうごとに)ランクが2ずつ増えてしまうことである。演算量の増加を抑えるには、ランク(k+2)行列をランクk行列で近似する必要がある。しかし、ハウスホルダー変換のたびに近似を行うよりも、何回かのハウスホルダー変換を行った後に近似を行う方が効率的な可能性がある。本研究の成果として、ハウスホルダー変換をk/2回行うごとに近似を行うと演算量が最小になることを予測し、数値実験で確かめた(図2)。

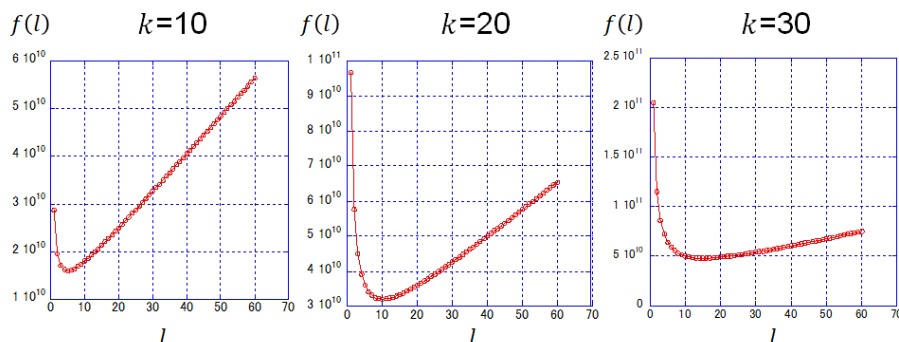


図2：ハウスホルダー変換の頻度と計算量の関係
(横軸：ハウスホルダー変換を行うタイミング、縦軸：演算量)

(2) H 行列の帯行列化を用いた全固有値計算

上記(1)のハウスホルダー変換による H 行列の三重対角化を用いて、全固有値計算手法を提案した。計算手順は以下の通りである。

HHT により対称階層型行列の三重対角化

三重対角行列の全固有値を適当な数値計算ライブラリを用いて計算

提案手法の実験コードを作成し、電磁場解析で得られる H 行列に適応した。密行列の場合の $O(N^2)$ から演算量が低減していることを確かめた (図 3)。

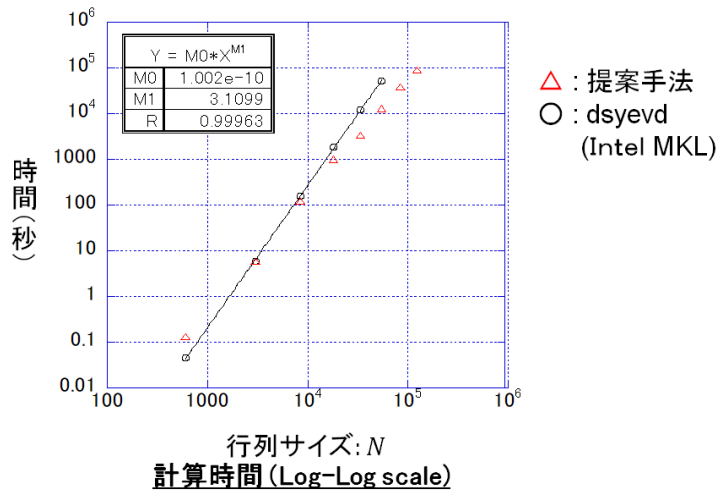


図 3 : 提案手法と数値計算ライブラリ (Intel MKL:dsyevd) との計算時間比較

提案手法で計算した固有値の精度について調べた。ライブラリ関数 dsyevd を用いて密行列として近似なしで計算した固有値 e_*^{QR} と、提案手法を用いた近似計算により得られた固有値 e_*^{LRA} の相対誤差を、最大固有値および固有値総和について調べた (表 1)。提案手法を用いた近似計算でも、最大固有値および固有値総和は高い精度で得られた。

表 1 : 提案近似手法と従来手法 (近似なし) で計算した固有値の相対誤差

行列サイズ N	最大固有値 相対誤差: $\frac{\ e_1^{QR} - e_1^{LRA}\ }{\ e_1^{QR}\ }$	固有値総和 相対誤差: $\frac{\ \sum e_i^{QR} - \sum e_i^{LRA}\ }{\ \sum e_i^{QR}\ }$
3,000	8.31E-16	1.00E-16
8,400	3.96E-16	1.50E-16
18,000	4.86E-16	1.40E-15
33,000	6.52E-16	7.61E-16
54,600	9.34E-16	1.29E-15

e_*^{QR} : dsyevd で計算した固有値

e_*^{LRA} : 提案手法で計算した固有値

$e_1^* \geq \dots \geq e_N^*$

(3) BLR 行列の QR 分解と QR 法による固有値計算

BLR (Block low-rank) 行列の全固有値を、QR 法により計算する手法を検討し、検討結果手法の実装を作成し数値実験を行った。検討手法では、固有値の計算対象行列は弱許容条件の BLR (Block low-rank) 行列で近似した。すなわち、対角ブロックのみが密行列で、残りの副対角ブロックは全て低ランク近似という条件である。

QR 法を使用するには、まず計算対象行列を QR 分解する必要があるため、まずは、BLR 行列の近似 QR 分解のアルゴリズムを開発した。BLR 行列の各部分行列のブロックサイズを $O(N^{1/2})$ とした時に、計算機メモリ量および演算量が最も小さくなることを理論的に示し、数値実験で確かめた。密行列の場合、QR 分解の計算コストは $O(N^3)$ であるが、開発した BLR 行列の近似 QR 分解は $O(N^2)$ の計算コストに低減されている。

開発したアルゴリズムについて、分散メモリ CPU クラスタ上で実装し、数値実験を行った。図 4 (a) に BLR 行列を近似 QR 分解した際の計算時間を示す。BLR 行列の密行列に対する近似精度に応じて、精度が高いほど計算時間が多くかかるが、いずれの精度でも行列サイズを大きくして行った際に計算時間の増加は $O(N^2)$ に収まっている。また、近似分解の精度は、近似元低ランク構造行列の密行列に対する近似精度程度であることが分かった。図 4 (b) に BLR 行列の近似

QR 分解結果行列の直交性を調べた結果を示す。

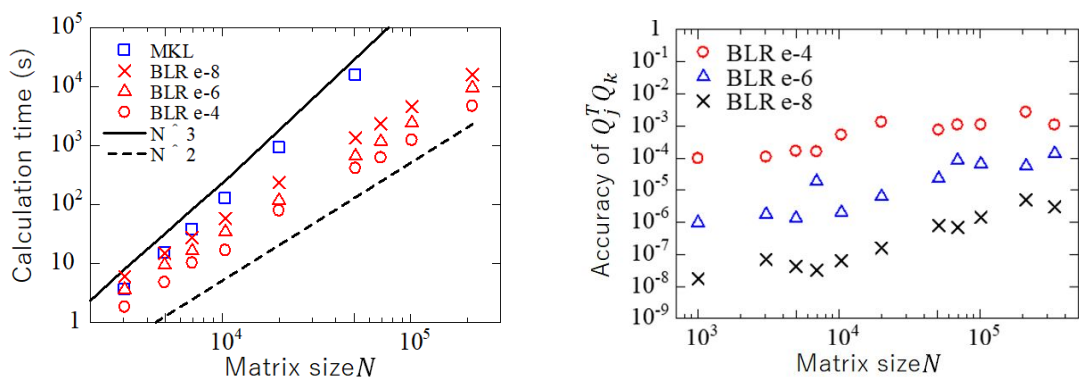


図 4: (a) BLR 行列の近似 QR 分解の計算時間

(b) BLR 行列の近似 QR 分解結果行列の直交性

BLR 行列の近似 QR 分解 (近似精度 e-6) で得た BLR 形式 Q と BLR 形式 R を用いて、Shift 付 QR 法 ($A_{n+1} := R_n Q_n$, 但し添え字 n は QR 法の反復回数) を実行した。図 5 は、反復 n ごとに固有値の最大相対残差 $\max((e_n(i) - e_{\text{exact}}(i)) / e_{\text{exact}}(i))$ を計測しプロットしたものである。図 4 で観測された通り、近似 QR 分解の精度は 1e-6 程度あるが、QR 法で得られる固有値の精度は 1e-1 程度であった。精度低下の原因は、QR 法の反復のたびに行われる部分行列の近似誤差が蓄積しているものと考えられる。

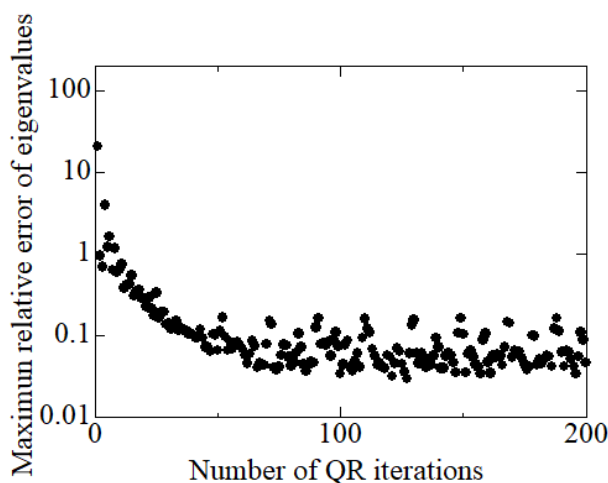


図 5: BLR 行列に QR 法を適用した際の反復ごとの固有値の最大相対誤差

5. 主な発表論文等

〔雑誌論文〕 計6件（うち査読付論文 6件/うち国際共著 4件/うちオープンアクセス 0件）

1. 著者名 Yu Pei, George Bosilca, Ichitaro Yamazaki, Akihiro Ida, Jack Dongarra	4. 巻 なし
2. 論文標題 Evaluation of Programming Models to Address Load Imbalance on Distributed Multi-Core CPUs: A Case Study with Block Low-Rank Factorization	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 In: 2019 IEEE/ACM Parallel Applications Workshop, Alternatives To MPI (PAW-ATM)	6. 最初と最後の頁 25-36
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1109/PAW-ATM49560.2019.00008	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 該当する
1. 著者名 Akihiro Ida, Hiroshi Nakashima, Tasuku Hiraishi, Ichitaro Yamazaki, Rio Yokota, Takeshi Iwashita	4. 巻 27
2. 論文標題 QR Factorization of Block Low-Rank Matrices with Weak Admissibility Condition	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 Journal of Information Processing	6. 最初と最後の頁 831-839
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.2197/ipsjjip.27.831	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -
1. 著者名 Ichitaro Yamazaki, Akihiro Ida, Rio Yokota and Jack Dongarra	4. 巻 33(5)
2. 論文標題 Distributed Memory Lattice H-matrix Factorization	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 The International Journal of High Performance Computing Applications	6. 最初と最後の頁 1046-1063
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1177/1094342019861139	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 該当する
1. 著者名 Akihiro Ida	4. 巻 -
2. 論文標題 Lattice H-Matrices on Distributed-Memory Systems	5. 発行年 2018年
3. 雑誌名 32nd IEEE International Parallel & Distributed Processing Symposium (IPDPS 2018)	6. 最初と最後の頁 389-898
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1109/IPDPS.2018.00049	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Akihiro Ida	4. 巻 印刷中
2. 論文標題 Lattice H-Matrices on Distributed-Memory Systems	5. 発行年 2018年
3. 雑誌名 32nd IEEE International Parallel & Distributed Processing Symposium (IPDPS 2018)	6. 最初と最後の頁 印刷中
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) なし	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 該当する

1. 著者名 Akihiro Ida, Hiroshi Nakashima, Masatoshi Kawai	4. 巻 なし
2. 論文標題 Parallel Hierarchical Matrices with Block Low-rank Representation on Distributed Memory Computer Systems	5. 発行年 2018年
3. 雑誌名 International Conference on High Performance Computing in Asia-Pacific Region	6. 最初と最後の頁 232-240
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1145/3149457.3149477	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 該当する

〔学会発表〕 計14件 (うち招待講演 3件 / うち国際学会 7件)

1. 発表者名 伊田 明弘
2. 発表標題 修正グラムシュミット法によるBLR 行列の近似QR 分解
3. 学会等名 日本応用数理学会2019年度年会
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 伊田 明弘
2. 発表標題 ブロック低ランク行列による近似QR分解
3. 学会等名 第24回計算工学会
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 Akihiro Ida, Ichitaro Yamazaki, Rio Yokota, Satoshi Ohshima, Tasuku Hiraishi, Takeshi Iwashita, Tetsuya Hoshino, Toshihiro Hanawa
2. 発表標題 Numerical Linear Algebra Based on Lattice H-Matrices
3. 学会等名 International Conference on High Performance Computing in Asia-Pacific Region (HPC Asia 2020) (国際学会)
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 Akihiro Ida
2. 発表標題 Improvement of HACApK Library Using Lattice H-matrices
3. 学会等名 France-Japan-Germany trilateral workshop : Convergence of HPC and Data Science for Future Extreme Scale Intelligent Applications (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 伊田明弘
2. 発表標題 格子階層型行列法：分散メモリ並列計算機向け階層型低ランク近似手法
3. 学会等名 第23回計算工学会
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 伊田明弘
2. 発表標題 格子H行列を用いた並列行列計算
3. 学会等名 2018年並列 / 分散 / 協調処理に関する『熊本』サマー・ワークショップ (SWoPP熊本2018)
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 Akihiro Ida, Ichitaro Yamazaki, Rio Yokota, Satoshi Ohshima, Tetsuya Hoshino, Tasuku Hi-raishi and Takeshi Iwashita
2. 発表標題 More Efficient Structures of H-matrices
3. 学会等名 The HPC symposium Computational Science at Scale (CoSaS18) (国際学会)
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 Akihiro Ida
2. 発表標題 Matrix Arithmetic Using Lattice H-matrix Representations
3. 学会等名 2019 Conference on Advanced Topics and Auto Tuning in High-Performance Scientific Computing (ATAT in HPC 2019) (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 Akihiro Ida, Tadashi Ataka and Atsushi Furuya
2. 発表標題 Lattice H-matrices for Massively Parallel Micromagnetic Simulations of Current-induced Domain Wall Motion
3. 学会等名 22nd International Conference on the Computation of Electromagnetic Fields (Compumag 2019) (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 Akihiro Ida
2. 発表標題 Lattice H-matrices : A new efficient variant on distributed memory systems
3. 学会等名 ATAT in HPC 2018 (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 伊田明弘
2. 発表標題 大規模数値解析向け低ランク行列近似手法
3. 学会等名 RIMS共同研究『数値解析学の最前線-理論・方法・応用-』（招待講演）
4. 発表年 2017年

1. 発表者名 Akihiro Ida
2. 発表標題 Efficient Low-rank Solver for Integral Equations on Distributed Memory Systems
3. 学会等名 SIAM Conference on Parallel Processing for Scientific Computing 2018(SIAM PP 18) (国際学会)
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 伊田明弘, 河合直聡
2. 発表標題 階層型行列における行列分割法
3. 学会等名 2017年並列 / 分散 / 協調処理に関する『秋田』サマー・ワークショップ (SWoPP秋田2017)
4. 発表年 2017年

1. 発表者名 伊田明弘, 片桐孝洋
2. 発表標題 階層型行列法向け低ランク行列近似手法の検討
3. 学会等名 第22回計算工学会
4. 発表年 2017年

〔図書〕 計0件

〔産業財産権〕

〔その他〕

Post-Peta-Crest/ppOpenHPC/MATH/HACApK
<https://github.com/Post-Peta-Crest/ppOpenHPC/tree/MATH/HACApK>

6. 研究組織

	氏名 (ローマ字氏名) (研究者番号)	所属研究機関・部局・職 (機関番号)	備考
--	---------------------------	-----------------------	----

7. 科研費を使用して開催した国際研究集会

〔国際研究集会〕 計0件

8. 本研究に関連して実施した国際共同研究の実施状況

共同研究相手国	相手方研究機関
---------	---------