

科学研究費助成事業 研究成果報告書

平成 29 年 6 月 21 日現在

機関番号：12102

研究種目：基盤研究(B) (一般)

研究期間：2013～2016

課題番号：25286097

研究課題名(和文)非線形固有値解法の先端アルゴリズム開発と実アプリケーションへの応用

研究課題名(英文)Development of an advanced method for nonlinear eigenvalue problems and its applications

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

交付決定額(研究期間全体)：(直接経費) 13,600,000円

研究成果の概要(和文)：本研究課題では、非線形固有値解法を計算科学分野における各種のアプリケーションで活用することを目指し、大規模問題に適用可能な高性能な計算アルゴリズムの開発とその理論研究、および適用性・利用性向上のための技術開発を行った。周回積分を用いたスペクトル射影法を非線形固有値問題に適用するための理論を構築し、解法の高性能化・汎用化・高信頼化のための各種の技術を開発した。物理分野の研究者と協力して、物理分野の実問題に対して開発した解法を適用し、その性能評価を行った。さらにバレンシア大学で開発されているスーパーコンピュータ向けの固有値計算ライブラリSLEPcの関数CISSに実装し公開した。

研究成果の概要(英文)：In this project, we considered a numerical algorithm for nonlinear eigenvalue problems that can be applied to large-scale problems in various application areas of computational sciences. We studied theoretical aspects and some related techniques of a contour integral-based eivensolver for nonlinear eigenvalue problems to apply for various practical applications in computational sciences. According to the results, we developed a method for a spectral projection method using contour integral. We also developed some methods and related techniques to attain high performance and high reliability on large-scale cluster machines. We evaluated the efficiency of the method with some applications. We implemented our method on a function CISS in the software library for the solution of large scale sparse eigenvalue problems on parallel computers SLEPc that is developing at Universitat Politcnica de Valencia.

研究分野：計算数理

キーワード：アルゴリズム 高性能計算 大規模計算 非線形固有値問題 基盤ソフトウェア

1. 研究開始当初の背景

(1) コンピュータを用いて予測・解析・設計を行う計算科学手法は多くの分野において活用され、科学技術・産業の発展においてその役割はますます大きくなっている。現象のモデル化で現れる非線形固有値問題は、遅延微分方程式、電磁場解析、座屈解析、流体の安定性解析など、多くの分野で重要なテーマになっている。しかし、特に大規模な問題に対しては実用的な数値解法がなかったことを反映し、非線形固有値問題を用いた定式化は理論的な解析手段に留まり、線形近似による計算を行っていた。非線形固有値問題の解法は近年、盛んに研究が行われるようになり、密度汎関数法でも非線形固有値問題が現れるなど、新たな展開が始まっている。

(2) 非線形固有値問題 (Nonlinear Eigenvalue Problems, NEPs) は、標準固有値問題 (Standard Eigenvalue Problems, SEPs) や一般化固有値問題 (Generalized Eigenvalue Problems, GEPs)、多項式固有値問題 (Polynomial Eigenvalue Problems, PEPs) を含み、その解法の適用範囲は広い。

(3) 我々は非線形固有値問題 (NEPs) を線形近似することなく直接扱うことができる非線形版 Sakurai-Sugiura 法 (NL-SS 法) を提案した。この方法は多項式問題 (PEPs) 以外にも適用可能であり、従来、Newton 法などの初期値依存性の高い方法で反復によって求めるしかなかった問題でも、与えられた領域内のすべての固有値を網羅的に求めることが可能となった。

(3) 大規模問題に対して周回積分を導入する方法は、我々の研究グループが世界に先駆けて提案したものであり、独自性・先進性が高い。また、欧米の複数のグループがこの方法を発展させており、国際的な広がりも現れ始めている。本手法の実用化によって、これまでとは異なる新しい固有値解析手法の可能性が広がり、さまざまな分野における数値シミュレーション手法の発展に貢献できると考えられる。

2. 研究の目的

(1) 本研究課題では、非線形固有値解法を計算科学分野における各種のアプリケーションで活用することを目指し、高性能な先端計算アルゴリズムの開発とその理論研究、および実用化を目指した利用性向上のための技術開発を行う。さらに、これらの技術をもとにして非線形固有値計算ソフトウェアを実装し、実アプリケーションへの適用と性能評価を行う。

(2) 非線形固有値問題は、量子ドットデバイス探索、時間遅れのある現象解析、大規模加速器設計などナノスケールから巨大装置規

模まで幅広い分野において現れ、これらの分野におけるシミュレーションのために高性能な解法とソフトウェアが求められている。本研究の成果により、幅広い分野において実用性の高い計算手法の開発が期待される。

3. 研究の方法

(1) 本研究課題では、非線形固有値問題の解法を対象として、その理論的な基盤の構築、高精度な計算手法の研究、および実用化を目指す利用性向上のための技術開発を行うため、1) 非線形固有値解法の理論基盤構築と高性能化手法の研究、2) 実用化を目指した利用性向上のための技術開発、3) 非線形固有値計算ソフトウェアの実装、4) 実アプリケーションへの適用と性能評価、を実施する。

(2) 非線形固有値問題の理論基盤構築、部分空間反復による高性能化の実現、確率的なトレース近似を用いたパラメータの自動設定などによる解法の利便性と信頼性の向上達成、固有値解法ソフトウェアの実装、実問題におけるアルゴリズム・ソフトウェアの性能評価および問題点の改善と更なる性能向上を行う。

(3) 大規模問題を対象とした研究およびソフトウェアの開発においては、筑波大計算科学研究センターが保有する T2K-Tsukuba や HA-PACS、理化学研究所の京コンピュータなどのスーパーコンピュータを活用し、計算手法の開発、ソフトウェアの実装と高性能化、ならびに評価を行う。

(4) アルゴリズムとそのソフトウェアの開発においては、応用分野の研究者との積極的な研究交流を進め、実用性を見すえ、分野横断型の研究開発を実施する。本研究で開発する周回積分法に基づく非線形固有値解法を大規模実問題に適用しその有効性を実証する。ソフトウェアの開発を進める過程で、より幅広いアプリケーション分野の研究者と交流を進め、それを通じてさらなる方法の改良と実用化で必要とされる機能の改善を行う。

4. 研究成果

(1) 非線形固有値問題への展開として、基盤解法である Sakurai-Sugiura 法をベースとして非線形固有値解法の開発・高性能化を進めた。周回積分を利用した高並列な非線形固有値解法として、SS-H 法および Beyn 法が知られているが、SS-H 法は精度面で、Beyn 法は計算コストの面でそれぞれ問題がある。これに対して本研究プロジェクトでは、両解法の理論的関係性の解析に基づき、communication-avoiding Arnoldi 法を利用した新しい Sakurai-Sugiura 法を開発した。開発した、SS-CAA 法は SS-H 法と同程度の計算コストかつ Beyn 法と同程度の計算精度を持

ち高い並列性を発揮する結果が得られている。本成果は国際会議で発表し、現在論投稿中である。

(2) 本研究課題でこれまでに得られた成果の実問題に適用するため、物理分野の研究者と協力して、電子デバイスのシミュレーションで現れる大規模な非線形固有値問題への適用方法の開発と大並列計算環境での性能評価を行った。その成果として、筑波大学と東大が共同で運用するスーパーコンピュータである Oakforest-PACS の 2048 ノードを用いて、従来では得られていなかった規模の計算が実現できることが確認された。得られた成果を論文としてまとめ、高性能計算に関する国際会議のプロシーディングスに投稿中である。

(3) EXA スケールを想定した大規模な非線形固有値問題の解法の開発について、ドイツにおいて開発されている大規模並列フレームワークである GHOST/PHIST 上での実装を進め、基本となるブロック Krylov 部分空間法や周回積分の計算部分までの動作を確認した。今後は、実問題を想定して大規模な疎行列を対象とした性能評価を行う。この研究協力は今後も引き続き行い、日独の国際協力での高性能な計算手法とソフトウェアの開発を進める予定である。

(4) SLEPc (Scalable Library for Eigenvalue Problem Computations) はバレンシア大学で開発されている並列固有値計算ライブラリで、PETSc (Portable, Extensible Toolkit for Scientific Computation) を用いて実装されており、Cray や京コンピュータなど多くのスーパーコンピュータで利用できる。この SLEPc 上で Sakurai-Sugiura 法を実装したライブラリとして CISS が登録されている。この CISS を拡張して非線形固有値問題に適用可能とした。これによって世界的に広く用いられているライブラリにおいて我々の開発したアルゴリズムが利用できるようになった。

(5) 多項式固有値問題の解法としてこれまでコンパニオン行列を用いて全固有値を求める線形固有値問題に帰着する方法が多く用いられてきた。このとき、数値的安定性が大きな問題となっていた。周回積分型の固有値解法では一部の目的とする領域の固有値のみを抽出する。Rayleigh-Ritz 手法によって小規模な多項式固有値問題に帰着した後、さらにコンパニオン行列に帰着させるが、バランス化手法とスケールリング手法を適用することで数値的安定性を改善する方法を提案した。いくつかの多項式固有値問題に適用してその有効性を示した。

(6) 大規模な非線形固有値問題向けの

Rayleigh-Ritz 手法を用いた積分型固有値解法において、正則な行列値関数の Keldysh 定理に基づいて有理補間を利用した解法を提案した。

(7) 非線形固有値問題に対する積分型の固有値解法である Sakurai-Sugiura 法は 2009 年に提案され、ハンケル行列を用いて線形固有値問題に帰着する。このとき現れるハンケル行列は高次のモーメントを利用すると悪条件になりやすい。これに対して、Rayleigh-Ritz 手法を利用して小規模な非線形固有値問題に変換した後、さらに線形固有値問題に帰着させる方法を提案した。この方法は大規模問題から直交変換によって射影することからハンケル行列を用いた方法に対して数値的な安定性が改善される。この提案法は直交化が必要となることから、ハンケル行列を用いた方法と比較すると計算時間は増加する。そのため、計算時間を優先する場合と計算精度を優先する場合で、それぞれの方法を選択して利用することができる。

(8) 積分型の固有値解法では、積分領域の設定やパラメータ選択によって得られる固有対の精度が変わる。事前におおよその固有値分布の情報などがあると積分領域やパラメータを適切に設定することが可能となる。

(9) 線形加速器 (リニアコライダ) の設計において、平方根を含む大規模な非線形固有値問題が現れる。この問題に対して、ハンケル行列を用いる非線形版の Sakurai-Sugiura 法を適用し、並列環境においてその性能の評価を行った。ローレンスバークレイ国立研究所のスーパーコンピュータを用いて約 270 万次元の行列による非線形固有値問題に適用し、高い並列性能を発揮することを確認した。

5. 主な発表論文等

(研究代表者、研究分担者及び連携研究者には下線)

[雑誌論文] (計 9 件)

[1] H. Chen, Y. Maeda, A. Imakura, T. Sakurai, F. Tisseur, Improving the numerical stability of the Sakurai-Sugiura method for quadratic eigenvalue problems, JSIAM Letters, 9, 17-20 (2017). 査読あり
DOI: 10.14495/jsiaml.9.17

[2] J. Xiao, C. Zhang, T.M. Huang and T. Sakurai, Solving large-scale nonlinear eigenvalue problems by rational interpolation and resolvent sampling based Rayleigh-Ritz method, Int. J. Numer. Methods Eng., 110 (2), 776-800 (2017). 査読あり

DOI: 10.1002/nme.5441

[3] T. Hasegawa, A. Imakura and T. Sakurai, Recovering from accuracy deterioration in the contour integral-based eigensolver, *JSIAM Letters*, 8, 1-4 (2016). 査読あり
DOI: 10.14495/jsiaml.8.1

[4] Y. Maeda, Y. Futamura, A. Imakura and T. Sakurai, Filter analysis for the stochastic estimation of eigenvalue counts, *JSIAM Letters*, 7, 53-56 (2015). 査読あり
DOI: 10.14495/jsiaml.7.53

[5] 前田恭行, 櫻井鉄也, 周回積分を用いた固有値解法の円弧領域に対する拡張, 情報処理学会論文誌コンピューティングシステム, 8, 88-97 (2015). 査読あり
https://ipsj.ixsq.nii.ac.jp/ej/?action=repository_uri&item_id=146085&file_id=1&file_no=1

[6] I. Yamazaki, T. Ikegami, H. Tadano and T. Sakurai, Performance comparison of parallel eigensolvers based on a contour integral method and a Lanczos method, *Parallel Computing*, 39, 280-290 (2013). 査読あり
DOI: 10.1016/j.parco.2012.04.001

[7] Y. Futamura, T. Sakurai, S. Furuya and 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 (VECPAR 2012), 226-235 (2013). 査読あり
DOI: 10.1007/978-3-642-38718-0_23

[8] T. Sakurai, Y. Futamura and H. Tadano, Efficient parameter estimation and implementation of a contour integral-based eigensolver, *J. Algo. Comput. Tech.*, 7, 249-269 (2013). 査読あり
DOI: 10.1260/1748-3018.7.3.249

[9] S. Yokota and T. Sakurai, A projection method for nonlinear eigenvalue problems using contour integrals, *JSIAM Letters*, 5, 41-44 (2013). 査読あり
DOI: 10.14495/jsiaml.5.41

[学会発表] (計 14 件)

[1] H. Chen, A. Imakura, T. Sakurai, “Balancing technique for Rayleigh-Ritz type of Sakurai-Sugiura method in

quadratic eigenvalue problems”, the 5th IMA Conference on Numerical Linear Algebra and Optimization, Birmingham, UK, September 7, 2016.

[2] Tetsuya Sakurai, Yasunori Futamura, Akira Imakura, “A quadrature-based parallel eigensolver for large-scale simulations”, The 9th International Workshop on Parallel Matrix Algorithms and Applications (PMAA16), Place de la Victoire, Bordeaux, France, July 6-8, 2016.

[3] Tetsuya Sakurai, Akira Imakura, Yasunori Futamura, “Algorithm-Based Fault Tolerance of the Sakurai-Sugiura Method”, SIAM Conference on Parallel Processing for Scientific Computing (SIAM PP16), Universite Pierre et Marie Curie, Cordeliers Campus, Paris, France, April 12-15, 2016.

[4] T. Sakurai, “A Scalable Parallel Eigensolver for Large-scale Simulations on Post Peta-scale Computing Environments”, International Workshop on Software for Peta-Scale Numerical Simulation SPNS2015, Tokyo, Japan, December 4, 2015.

[5] 前田恭行, 櫻井鉄也, “周回積分型固有値解法における円弧領域への拡張”, 2015年並列/分散/協調処理に関する『別府』サマー・ワークショップ (SWoPP2015), ビーコンプラザ 別府国際コンベンションセンター, 大分県別府市, 2015年8月4-6日.

[6] Yasuyuki Maeda, Tetsuya Sakurai, James Charies, Michael Povolotskyi, Gerhard Klimeck, Jose E. Roman, “A parallel eigensolver using numerical quadrature for annular regions”, International Workshop on Eigenvalue Problems: Algorithms; Software and Applications, in Petascale Computing (EPASA2015), EPOCHAL TSUKUBA, Tsukuba-city, Japan, September 14-16, 2015.

[7] Chen Hongjia, Yasuyuki Maeda, Tetsuya Sakurai, “Scaling technique for Sakurai-Sugiura method in quadratic eigenvalue problems”, 日本応用数学会 2015年度年会, 金沢大学, 石川県金沢市, 2015年9月9-11日

[8] Y. Futamura and T. Sakurai, “z-Pares: A Complex Moment Based Hierarchical Parallel Eigensolver Package”, 2014 SIAM Annual Meeting, The Palmer House Chicago,

Illinois, USA, July. 10. 2014

[9] Y. Futamura and T. Sakurai, "z-Pares: A complex moment based hierarchical parallel eigenvalue solver package", 8th International Workshop on Parallel Matrix Algorithms and Applications, Università della Svizzera italiana, Lugano, Switzerland, July 4. 2014

[10] Y. Maeda, T. Sakurai, "Contour Integral Spectral Slicing Solver CISS in SLEPc", 8th International Workshop on Parallel Matrix Algorithms and Applications, Università della Svizzera italiana Lugano, Switzerland, July 3. 2014.

[11] Akira IMAKURA, Tetsuya SAKURAI, "A Novel Contour Integral Based Eigensolver for Solving Linear and Nonlinear Eigenvalue Problems", East Asia Section of SIAM (EASIAM) 2014, Ambassador City Jomtien, Pattaya, Chonburi, Thailand, June 23-25, 2014.

[12] Y. Maeda, T. Sakurai, "Contour Integral Spectral Slicing Solver CISS in SLEPc", International Workshop on Eigenvalue Problems: Algorithms: Software and Applications, in Petascale Computing (EPASA2014), Tsukuba, Japan, Mar. 9, 2014.

[13] Tetsuya SAKURAI, Yasunori Futamura, Akira IMAKURA, "On error resilience of a complex moment-based eigensolver", 10th International Workshop on Accurate Solution of Eigenvalue Problems (IWASEP10) Dubrovnik, Croatia, June 2-5, 2014

[14] T. Sakurai, "A Scalable Parallel Eigensolver using Contour Integral-based Spectral Projection", 2013 NCTS Workshop on Numerical Linear Algebra and High Performance Computing (2013 NLA-HPC), National Tsinghua University, Hsinchu, Taiwan, Dec. 9-12, 2013.

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

多田野 寛人 (TADANO, Hiroto)
筑波大学・計算科学研究センター・助教

研究者番号 : 50507845

今倉 暁 (IMAKURA, Akira)
筑波大学・システム情報系・助教
研究者番号 : 60610045

池上 努 (IKEGAMI, Tsutomu)
産業技術総合研究所・情報技術研究部門・研究員
研究者番号 : 80245612

(3) 連携研究者

なし

(4) 研究協力者

二村 保徳 (FUTAMURA, Yasunori)
前田 泰行 (MAEDA, Yasuyuki)
CHEN Hongjia