

確率的手法を用いた状態密度の並列計算法

Parallel Stochastic Estimation Method for Computing Density of States

櫻井鉄也 (筑波大学)

Joint work with

二村保徳, 前田恭行 (筑波大学)

内容

- はじめに
- 固有値数の確率的推定
 - 周回積分を用いた固有値数計算, アルゴリズム
- 線形方程式の解法
 - ブロック線形方程式, シフト線形方程式
- 固有ベクトル成分のフィルター
 - 多項式フィルターと有理型フィルター
- 並列固有値解法
 - 周回積分を用いたスケーラブルな解法
- 数値例
- おわりに

超並列固有値解析エンジンの開発

- 科学技術振興機構 CREST領域 「ポストペタスケール高性能計算に資するシステム・ソフトウェア技術の創出」

ポストペタスケールに対応した階層モデルによる超並列固有値解析エンジンの開発 (H23 – H27)

- 階層的超並列固有値解析エンジン
大規模並列ハードウェアの性能を十分に引き出す
 - 疎行列型： **z-Pares**
 - 密行列型： **EigenExa**
- 共通基盤技術
 - 性能予測モデル・共通線形計算ライブラリ
- 高性能利用技術
 - 各種アプリケーションへ適用

超並列固有値解析エンジンの開発

- 応用数理, 高性能計算, アプリケーション分野の協力

櫻井鉄也 (筑波大学)

疎行列固有値問題に対する
階層化超並列技術

張紹良 (名古屋大学)

ロバストな線形計算手法

藏増嘉伸 (筑波大学)

基礎科学分野実問題での
高性能利用技術

今村俊幸 (理化学研究所)

密行列固有値問題に対する
階層化超並列技術

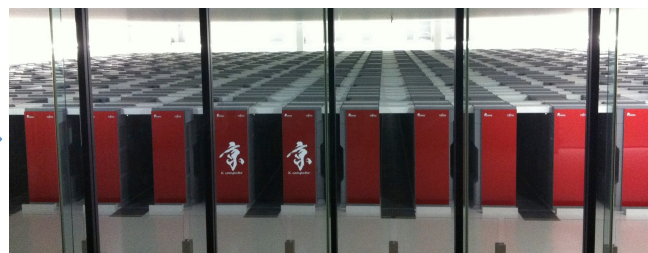
山本有作 (電気通信大学)

性能モデリングの構築,
GPU・メニーコア向け実装技術

星健夫 (鳥取大学)

物質科学分野実問題での
高性能利用技術

固有値解析
エンジン



はじめに

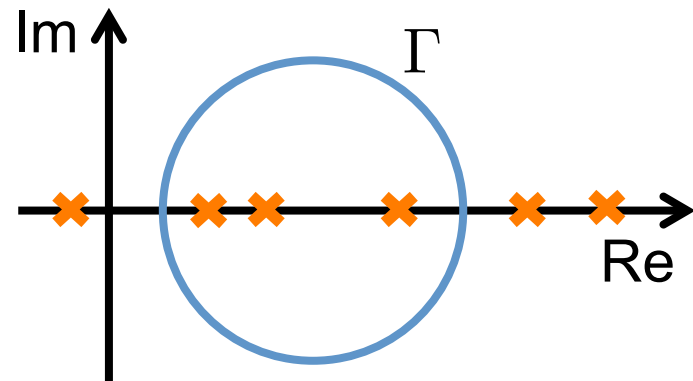
■ 一般化固有値問題

$$Ax = \lambda Bx$$

ここで A, B は n 次元行列.

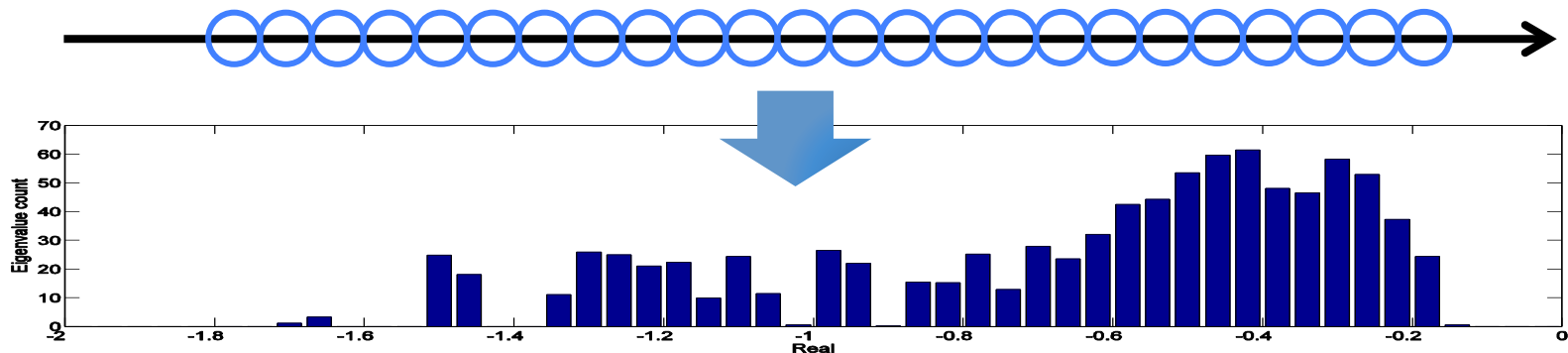
■ 固有値数の計算

実軸上の区間内にある固有値数を
周回積分を用いて求める.



■ 固有値分布・密度の計算

複数の区間で固有値数を求め、分布や密度を推定する

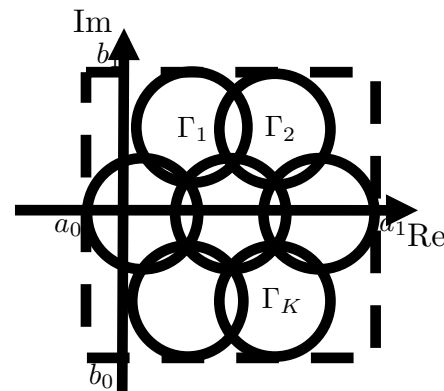


はじめに

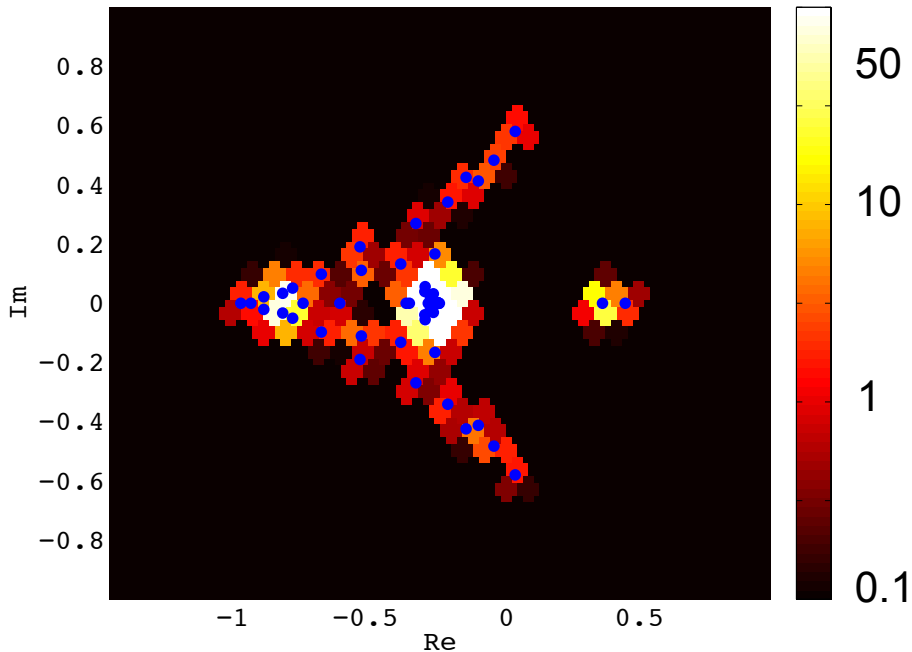
■ 複素平面上での固有値分布

➤ 領域を複素平面上に並べて固有値数を計算

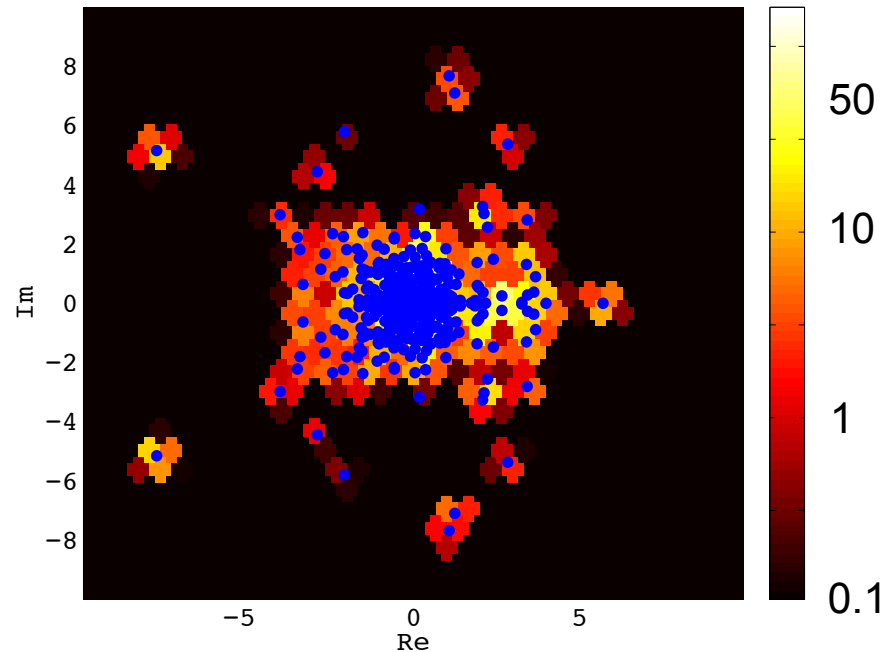
➤ 非対称行列への適用例



Matrix Market: GRE06



Matrix Market: RBS480



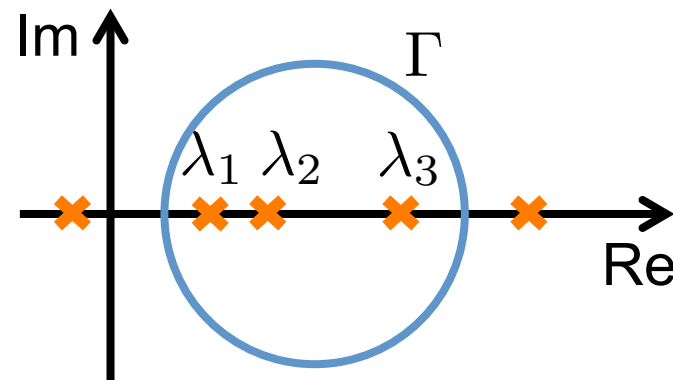
固有値数の確率的推定

領域内の固有値数

■ 領域内の固有値数

Γ : 複素平面上の Jordan 曲線

$\lambda_1, \dots, \lambda_n$: 固有値



- Γ で囲まれた領域内の固有値数 m は
周回積分を用いて以下のように表される.

$$m = \frac{1}{2\pi i} \oint_{\Gamma} \text{tr}((zB - A)^{-1} B) dz$$

ここで記号 tr は行列のトレースを表す.

➡ 逆行列のトレース, 周回積分の計算

周回積分の近似

- 周回積分を N 点数値積分で近似

$$m = \frac{1}{2\pi i} \oint_{\Gamma} \text{tr}((zB - A)^{-1} B) dz$$

$$\approx \sum_{j=1}^N w_j \text{tr}((z_j B - A)^{-1} B)$$

ここで, z_1, \dots, z_N は積分点, w_1, \dots, w_N は積分の重み.

- 積分路が中心 γ , 半径 ρ の円するとき, N 点台形則

積分点 : $z_j = \gamma + \rho(\cos \theta_j + i \sin \theta_j)$, $j = 1, \dots, N$

重み : $w_j = (\cos \theta_j + i \sin \theta_j)/N$, $j = 1, \dots, N$

ここで $\theta_j = \frac{2\pi}{N}(j - 1/2)$, $j = 1, \dots, N$

トレースのStochasticな近似

■ 行列のトレースを近似

➤ $\mathbf{v}_1, \dots, \mathbf{v}_L$: L 本のサンプルベクトル

成分は平均が0の乱数で $\|\mathbf{v}_\ell\|_2 = \sqrt{n}$ に
正規化された n 次元ベクトル

➤ 行列 A のトレースは以下のように近似される¹⁾

$$\text{tr}(A) \approx \frac{1}{L} \sum_{\ell=1}^L \mathbf{v}_\ell^T A \mathbf{v}_\ell$$

 逆行列のトレースの近似

$$\text{tr}((zB - A)^{-1}B) \approx \frac{1}{L} \sum_{\ell=1}^L \mathbf{v}_\ell^T (zB - A)^{-1} B \mathbf{v}_\ell$$

1) M. F. Hutchinson, J. Commun. Statist. Simula. 19(2), 433–450 (1990).

領域内の固有値数のStochasticな計算

- 領域内の固有値数を以下で近似する^{1), 2)}

$$m \approx \sum_{j=1}^N w_j \left(\frac{1}{L} \sum_{\ell=1}^L \mathbf{v}_\ell^T (z_j B - A)^{-1} B \mathbf{v}_\ell \right)$$

➡ 連立一次方程式：

$$(z_j B - A) \mathbf{y}_{j\ell} = B \mathbf{v}_\ell, \quad \ell = 1, \dots, L, \quad j = 1, \dots, N$$

- 少ないサンプルベクトルと積分点数で近似できればよい
 - 行列の性質に依存

1) Y. Futamura, H. Tadano, and T. Sakurai, JSIAM Letters 2, 127-130 (2010).

2) Y. Maeda, Y. Futamura, and T. Sakurai, JSIAM Letters 3, 61-64 (2011).

線形方程式の解法

ブロック線形方程式

- 各積分点ごとに L 本の右辺ベクトルに対して線形方程式を解く

$$(z_j B - A)\mathbf{y}_{j\ell} = B\mathbf{v}_\ell, \ell = 1, \dots, L$$

- サンプルベクトルを列ベクトルにもつ行列 $V = [\mathbf{v}_1, \dots, \mathbf{v}_L]$.
線形方程式は

$$(z_j B - A)Y_j = BV$$

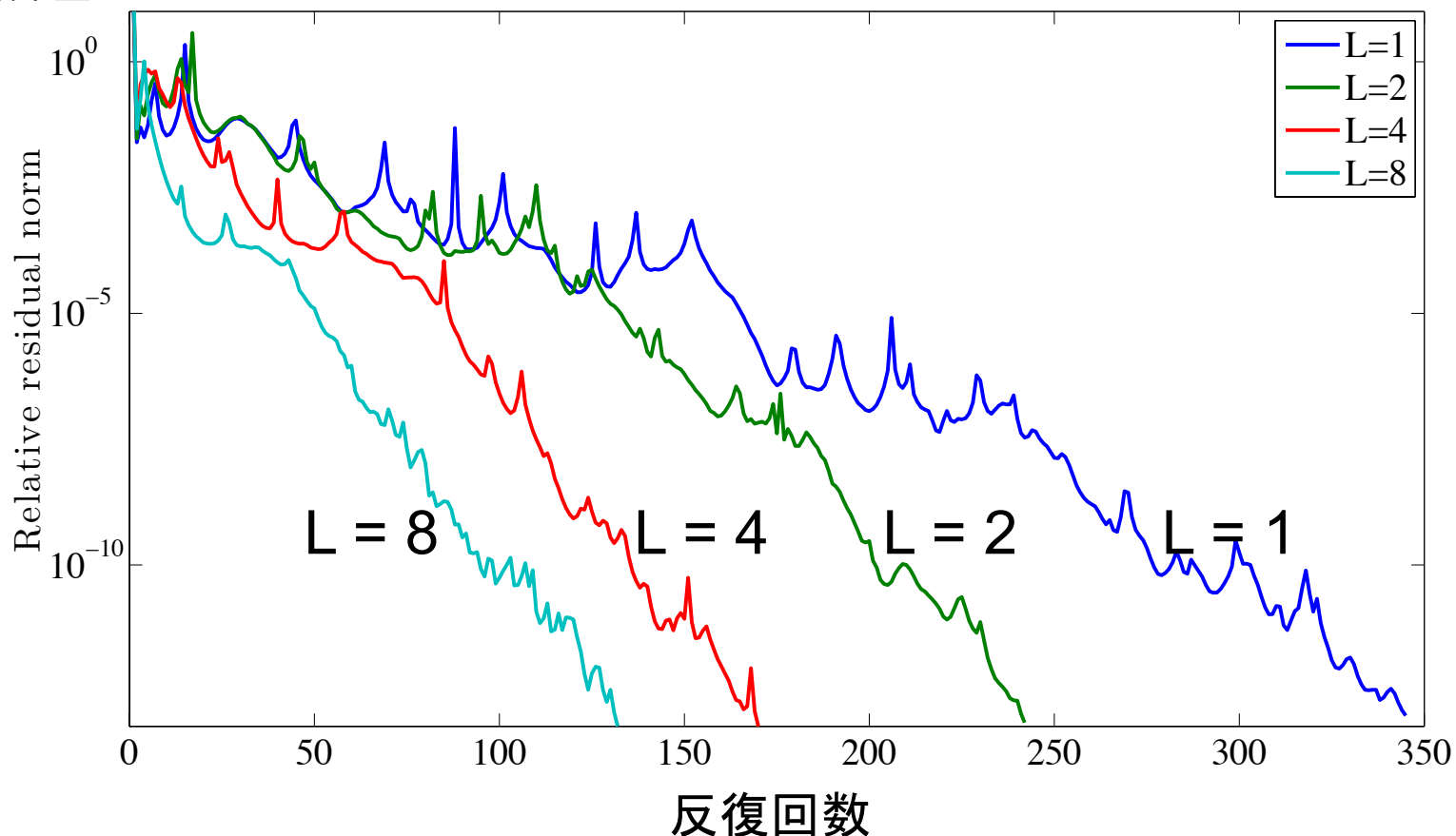
と表される. ここで $Y_j = [\mathbf{y}_{j,1}, \dots, \mathbf{y}_{j,L}]$.

- ➡ 複数右辺ベクトルに対するBlock Krylov部分空間法を用いて線形方程式を解く.

Block Krylov部分空間法

- より広い空間から解を探索することにより反復回数を削減できる場合がある

残差



Block Bi-linear Form

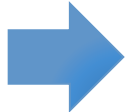
- 固有値数の計算で

$$F_j = V^T Y_j = V^T (z_j B - A)^{-1} B V$$

を利用.

- 線形方程式の解 Y_j ではなく, F_j を求める.

Block Bi-linear Formに対するKrylov部分空間法¹⁾


$$\frac{1}{L} \sum_{\ell=1}^L \mathbf{v}_\ell^T (z_j B - A)^{-1} B \mathbf{v}_\ell = \frac{1}{L} \text{tr}(F_j)$$

1) L. Du, Y. Futamura, T. Sakurai, Comput. Math. Appl. 66, 2446-2455 (2014)

シフト線形方程式

- 標準固有値問題のとき, シフト線形方程式

$$(z_j I - A)Y_j = BV$$

となる.

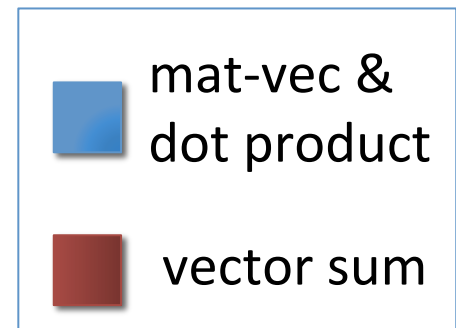
➡ Krylov部分空間のシフト不変性を利用

1つの係数行列分の行列ベクトル積から, 全てのシフト線形方程式の近似解を更新できる.

Krylov method



Shifted Krylov method



固有ベクトル成分のフィルター

固有空間でのフィルター

- 式を簡単にするため、以下では標準固有値問題

$$Ax = \lambda x$$

を考える。ここで A は実対称とする。

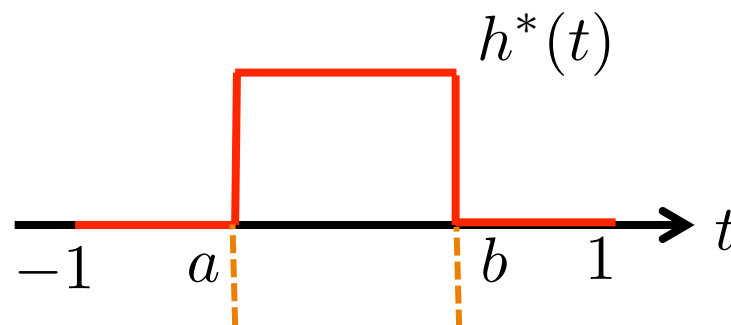
- 矩形関数を

$$h^*(t) = \begin{cases} 1, & a < t < b \\ 0, & t < a \text{ or } t > b \end{cases}$$

とする。ここで $a < b$ は区間 $[-1, 1]$ 内の実数。

- 区間 $[a, b]$ 内の固有値数は

$$m = \sum_{i=1}^n h^*(\lambda_i)$$

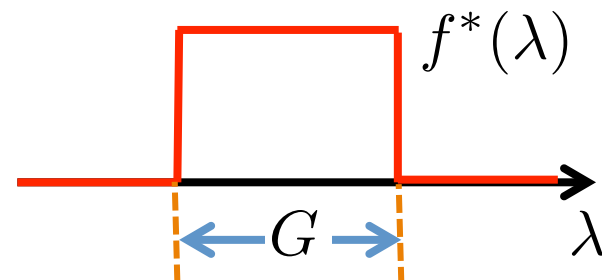


有理型フィルター

- 関数 f^* を以下のようにおく.

$$f^*(\lambda) = \frac{1}{2\pi i} \oint_{\Gamma} \frac{1}{z - \lambda} dz$$

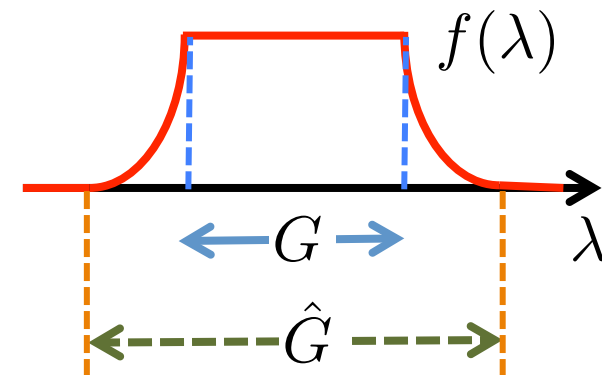
周回積分によるフィルター



- 数値積分の場合には、フィルター関数は以下で与えられる.

$$f(\lambda) = \sum_{j=1}^N \frac{w_j}{z_j - \lambda}$$

数値積分によるフィルター



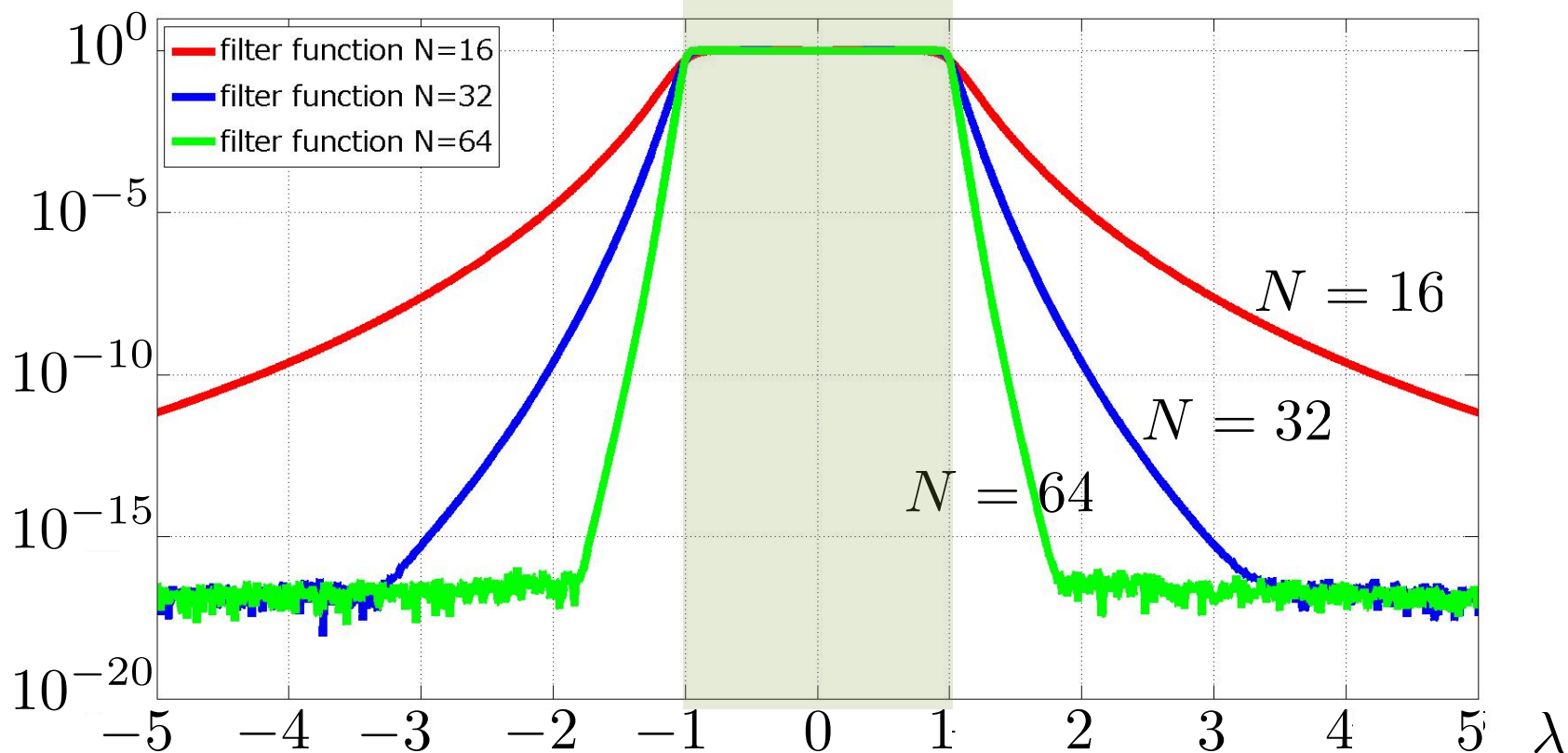
➡ $m \approx \sum_{i=1}^n c_i f(\lambda_i), \quad c_i = \frac{1}{L} \sum_{\ell=1}^L (\mathbf{v}_{\ell}^T \mathbf{x}_i)^2$

固有ベクトル成分のフィルター

有理型フィルター

$$f(\lambda) = \sum_{j=1}^N \frac{w_j}{z_j - \lambda}$$

$\log_{10} |f(\lambda)|$ Γ が単位円のとときのフィルター関数の値

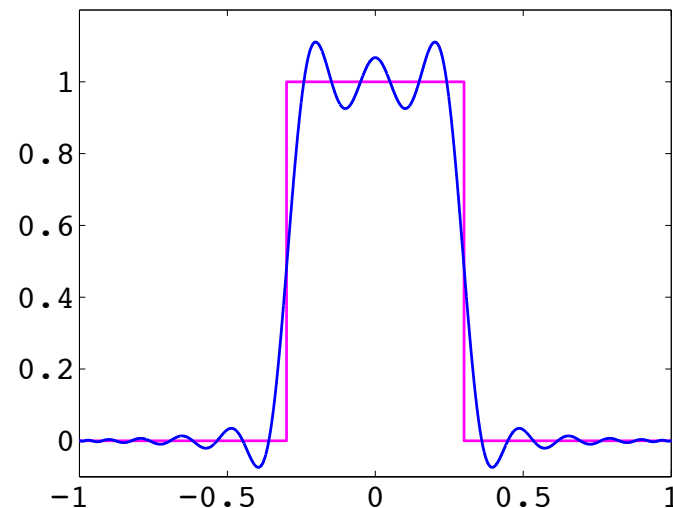


Chebyshev多項式によるフィルター

- すべての固有値が区間 $[-1, 1]$ に分布しているとする.
 - 区間 $[-1, 1]$ 内の小区間 $[a, b]$ が与えられたとき

フィルターを以下で計算する

$$f(\lambda) = \left(\sum_{j=0}^p \gamma_j T_j(\lambda) \right)$$



区間 $[-0.3, 0.3]$ の例

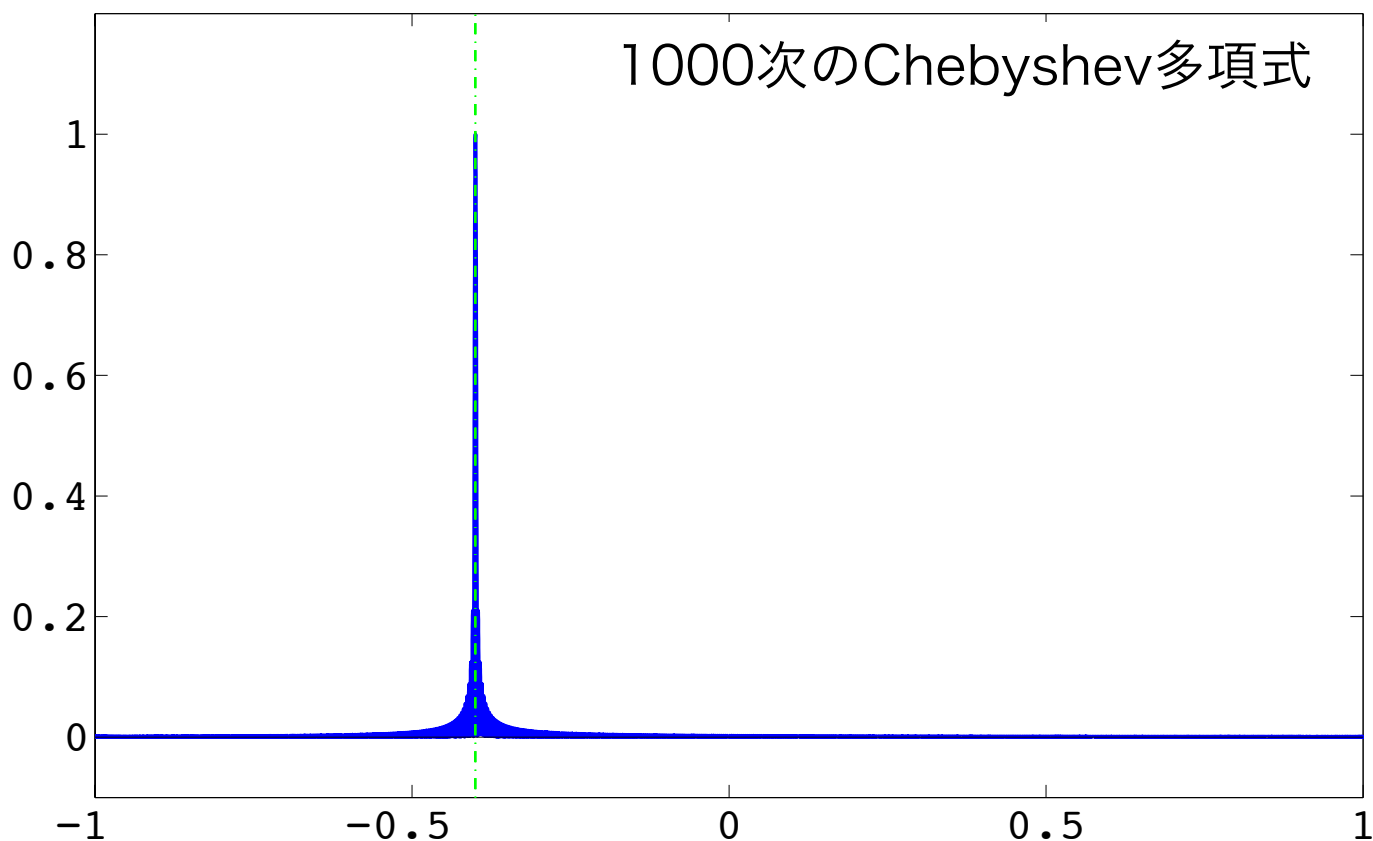
$T_j(\lambda)$: j 次の第一種Chebyshev多項式

$$\gamma_j = \begin{cases} \frac{1}{\pi} (\cos^{-1}(a) - \cos^{-1}(b)) & (j = 0) \\ \frac{1}{j\pi} (2 \sin(j \cos^{-1}(a)) - 2 \sin(j \cos^{-1}(b))) & (j > 0) \end{cases}$$

Chebyshev多項式によるフィルター

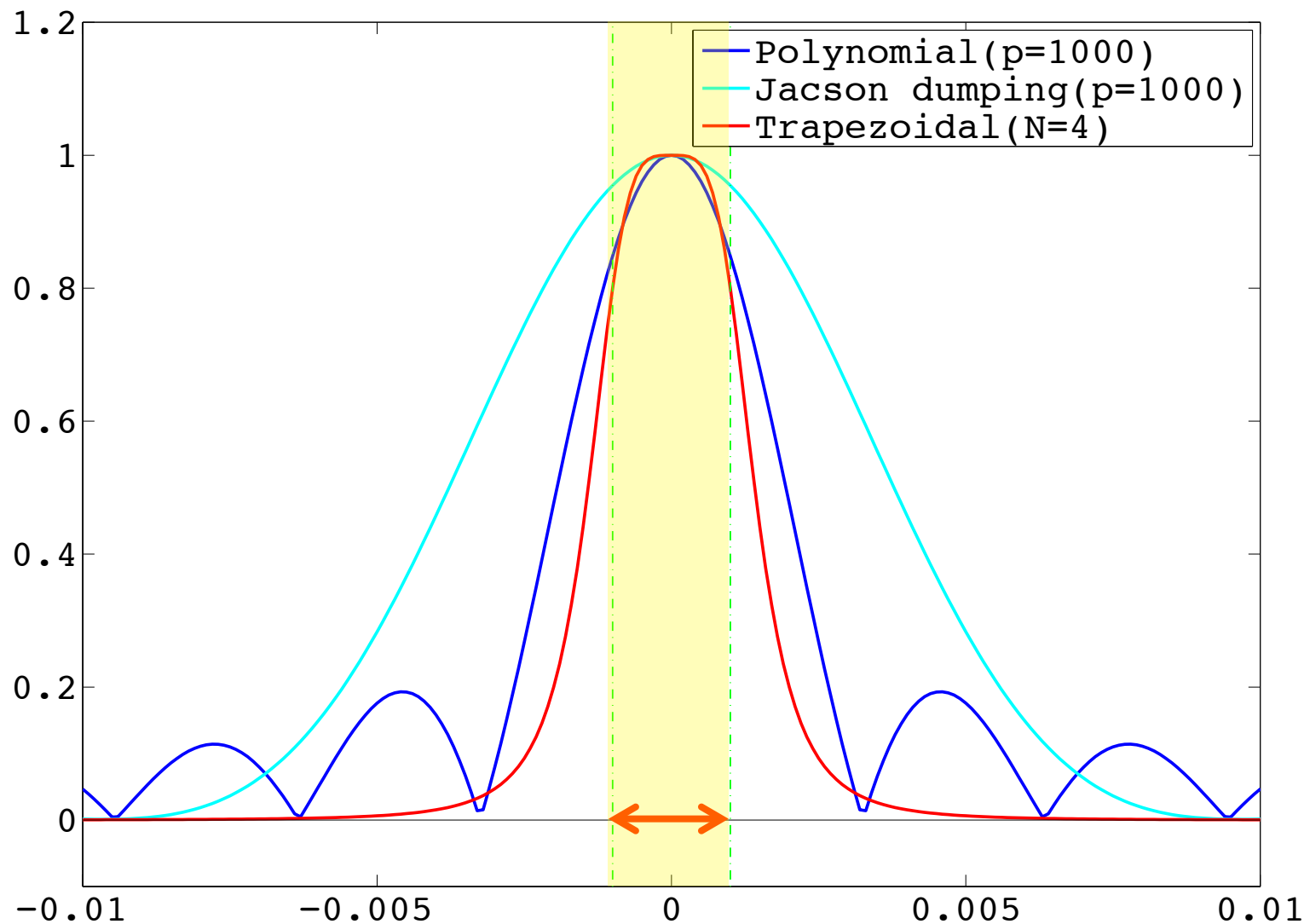
- 全固有値を含む区間に対して、狭い区間内の固有値数を求めたいとき
 - 高い次数が必要

区間 $[-0.41, -0.39]$ のとき



固有ベクトル成分のフィルター

■ Chebyshev多項式フィルターと有理型フィルター



有理型フィルタの多項式近似

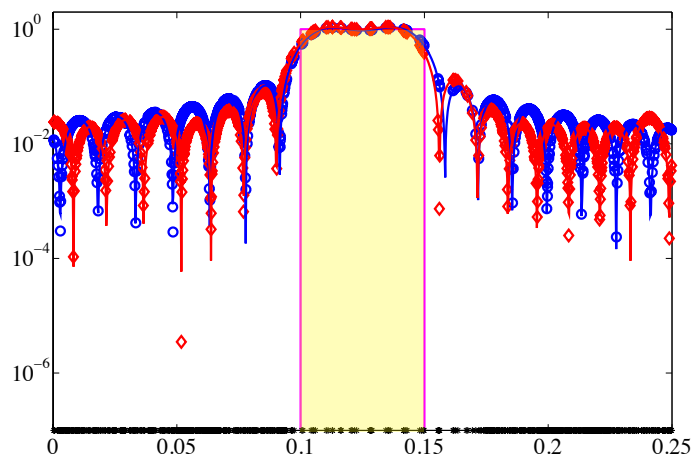
- 線形方程式の求解にKrylov部分空間反復法を利用する

$$m \approx \sum_{j=1}^N w_j \left(\frac{1}{L} \sum_{\ell=1}^L \mathbf{v}_\ell^T (z_j B - A)^{-1} B \mathbf{v}_\ell \right)$$

線形方程式 $Ax = b$ に対する p 反復めの解 $\mathbf{x}_p = S_p(A)\mathbf{b}$

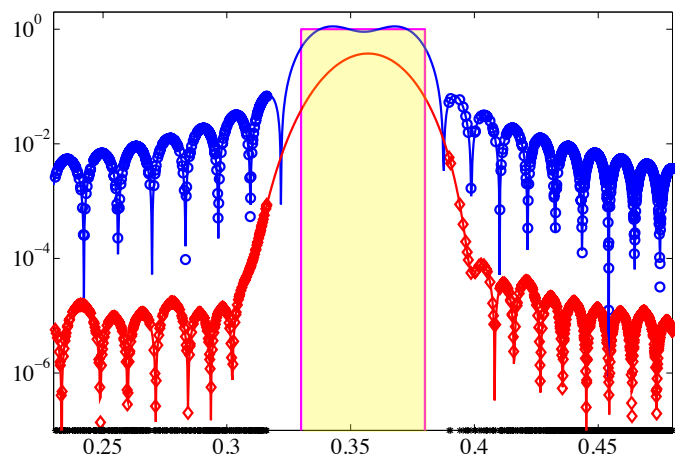
フィルタは多項式で表される $f(\lambda) = \sum_{j=1}^N \sum_{\ell=1}^L w_j S_p^{(j,\ell)}(\lambda)$

区間内に固有値があるとき



多項式
有理型
(反復法)

区間内に固有値がないとき



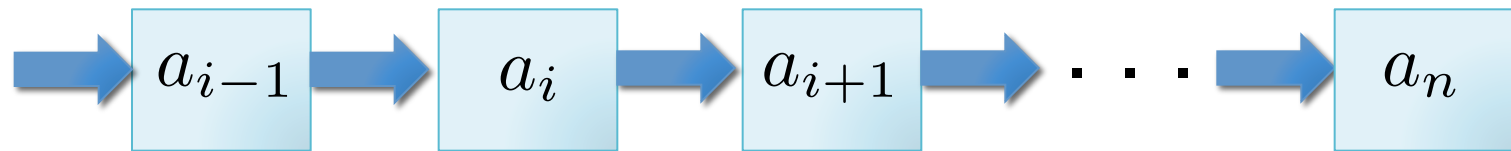
周回積分型固有値解法

スケーラブルな並列固有値解法

■ 漸化式による計算を避ける

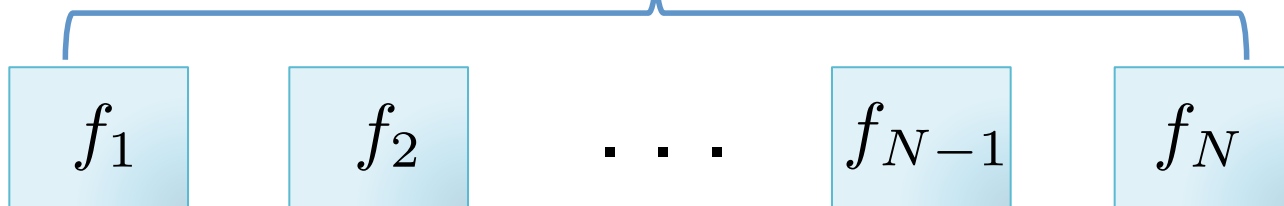
- 漸化式を用いたアルゴリズム：
逐次的な計算があるため並列化部分が限定される

$$a_{i+1} = b_i a_i + c_i a_{i-1}$$



- 数値積分は関数値の重み付き和で表される

$$I_N = \sum_{j=1}^N w_j f_j$$



周回積分による部分空間射影

■ 有理関数の周回積分

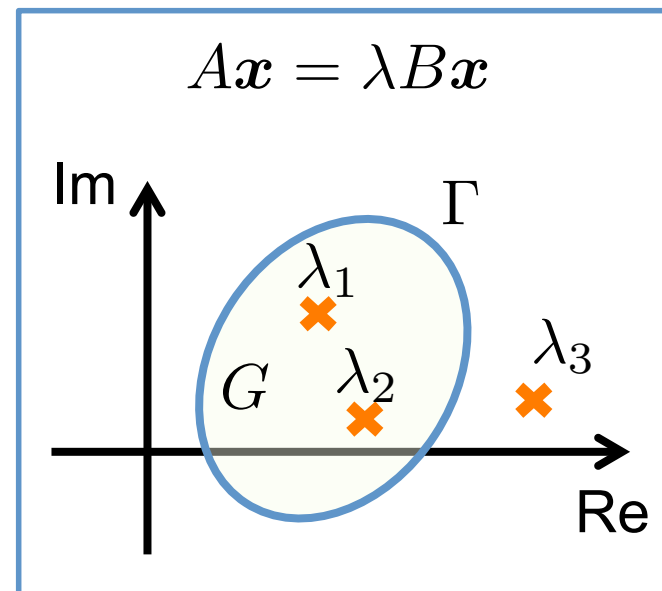
$$\frac{1}{2\pi i} \oint_{\Gamma} \sum_{i=1}^n \frac{\nu_i}{z - \lambda_i} dz = \sum_{\lambda_i \in G} \nu_i$$

■ 行列 $(zB - A)^{-1}B$ のスペクトル分解

$$(zB - A)^{-1}B = \sum_{i=1}^n \frac{P_i}{z - \lambda_i}$$

λ_i : 固有値, P_i : λ_i に対応した射影

(ここでは式を簡単にするため縮重はないとする)



周回積分による部分空間射影の局所化

$$P_{\Gamma} = \frac{1}{2\pi i} \oint_{\Gamma} (zB - A)^{-1}B dz = \sum_{\lambda_i \in G} P_i$$

周回積分による部分空間射影

- z^k をかけて、任意の行列 $V \in \mathbb{R}^{n \times L}$ に作用

$$S_k = \frac{1}{2\pi i} \oint_{\Gamma} z^k (zB - A)^{-1} B dz V$$

$$\approx \hat{S}_k = \sum_{j=1}^N w_j z_j^k (z_j B - A)^{-1} B V$$

z_j : 積分点
 w_j : 積分の重み



積分点 z_1, \dots, z_N での線形方程式

$$(z_j B - A) Y_j = B V, \quad j = 1, \dots, N$$

- $S = [S_0, S_1, \dots, S_{M-1}]$ から固有対を抽出

Rayleigh-Ritz Procedureを用いたSS法 (SS-RR)

■ SS-RR のアルゴリズム

0) Set matrix data and parameters

1) Solve linear systems

Solve $(z_j B - A)Y_j = BV$ for Y_j , $j = 1, 2, \dots, N$

2) Construct the subspace

Compute $\hat{S}_k = \sum_{j=1}^N w_j z_j^k Y_j$, $k = 0, 1, \dots, M - 1$

Set $\hat{S} = [\hat{S}_0, \hat{S}_1, \dots, \hat{S}_{M-1}]$

3) Extract eigenpairs

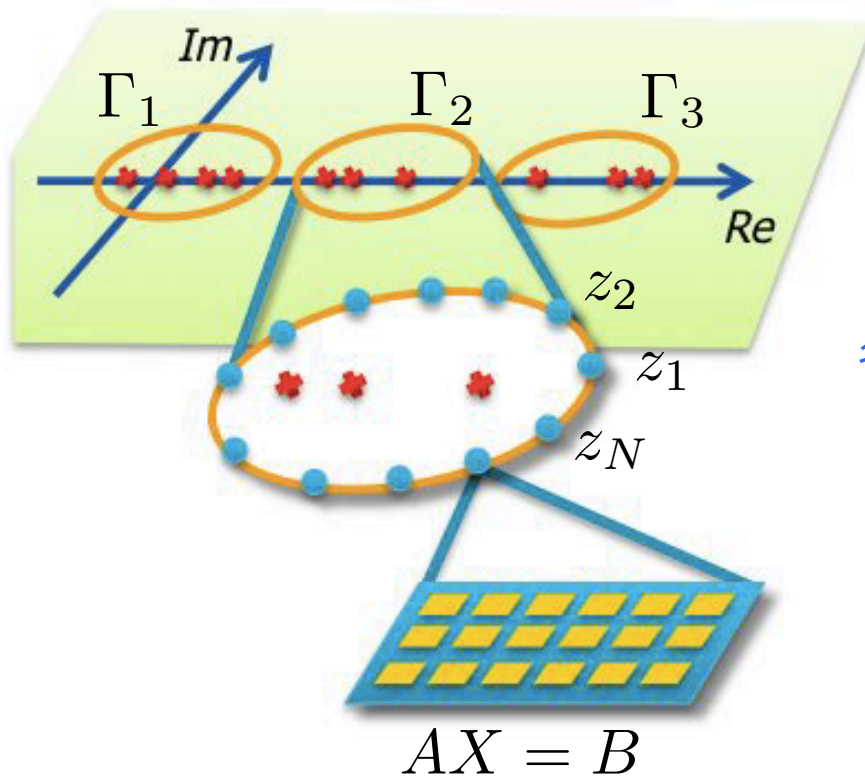
Compute SVD s.t. $\hat{S} = U\Sigma W^H$

Compute Ritz pairs with $\hat{A} = U^H A U$ and $\hat{B} = U^H B U$

並列実装

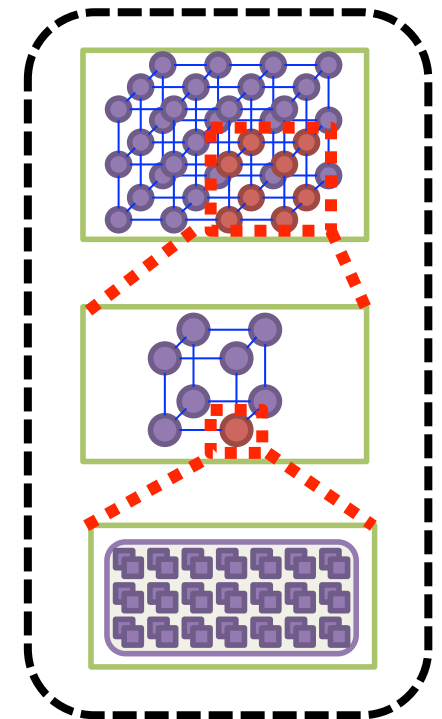
■ アルゴリズムの階層性を利用した実装

アルゴリズムの階層性



ハードウェアの階層性

部分領域
↔
各領域上での積分点
↔
並列線形ソルバ
↔



開発ソフトウェア

■ 公開ソフトウェア

➤ z-Pares

- Fortran95, MPI



- 大規模並列でのアプリケーションへの組み込み

➤ CISS

- C, SLEPc

- PETSc, SLEPcライブラリを利用した並列実装

➤ SSEIG

- MATLAB

- 小規模問題でのアルゴリズムの有効性の評価

■ ダウンロード:

- <http://z pares.cs.tsukuba.ac.jp/>

SLEPc上での実装

- SLEPc¹⁾ : The Scalable Library for Eigenvalue Problem Computations on PETSc (バレンシア工科大で開発)
- PETSc²⁾ : Portable, Extensible Toolkit for Scientific Computation (Argonne National Lab.で開発)

SLEPcに含まれる数値手法

Linear Eigensolver	Nonlinear Eigensolver	SVD Solver
<ul style="list-style-type: none">•Krylov-Schur•Arnoldi•Lanczos•GD•JD•RQCG•CISS•External package•...	<ul style="list-style-type: none">•N-Arnoldi•SLP•RII•...	<ul style="list-style-type: none">•Cross Product•Cyclic Matrix•Lanczos•Thick R.Lanczos•...
	Polynomial Eigensolver	
	<ul style="list-style-type: none">•Linearization•Q-Arnoldi•...	

1) <http://www.grycap.upv.es/slep/>

2) <http://www.mcs.anl.gov/petsc/>

数值例

数値例

■ 積分誤差の影響

- 積分点数を変えて計算. traceは逆行列を利用.
- テスト行列は Matrix Market¹⁾ から選択.

N	<i>eigenvalue count</i>			
	LUND	BCSST07	PLAT1919	BCSST13
4	38.024	318.03	55.559	10.917
8	38.268	364.80	42.350	10.926
16	38.880	392.98	40.606	10.988
32	39.373	397.89	39.945	11.000
64	39.749	398.00	39.540	11.000
exact	40.000	398.00	40.000	11.000

1) <http://math.nist.gov/MatrixMarket/>

数値例

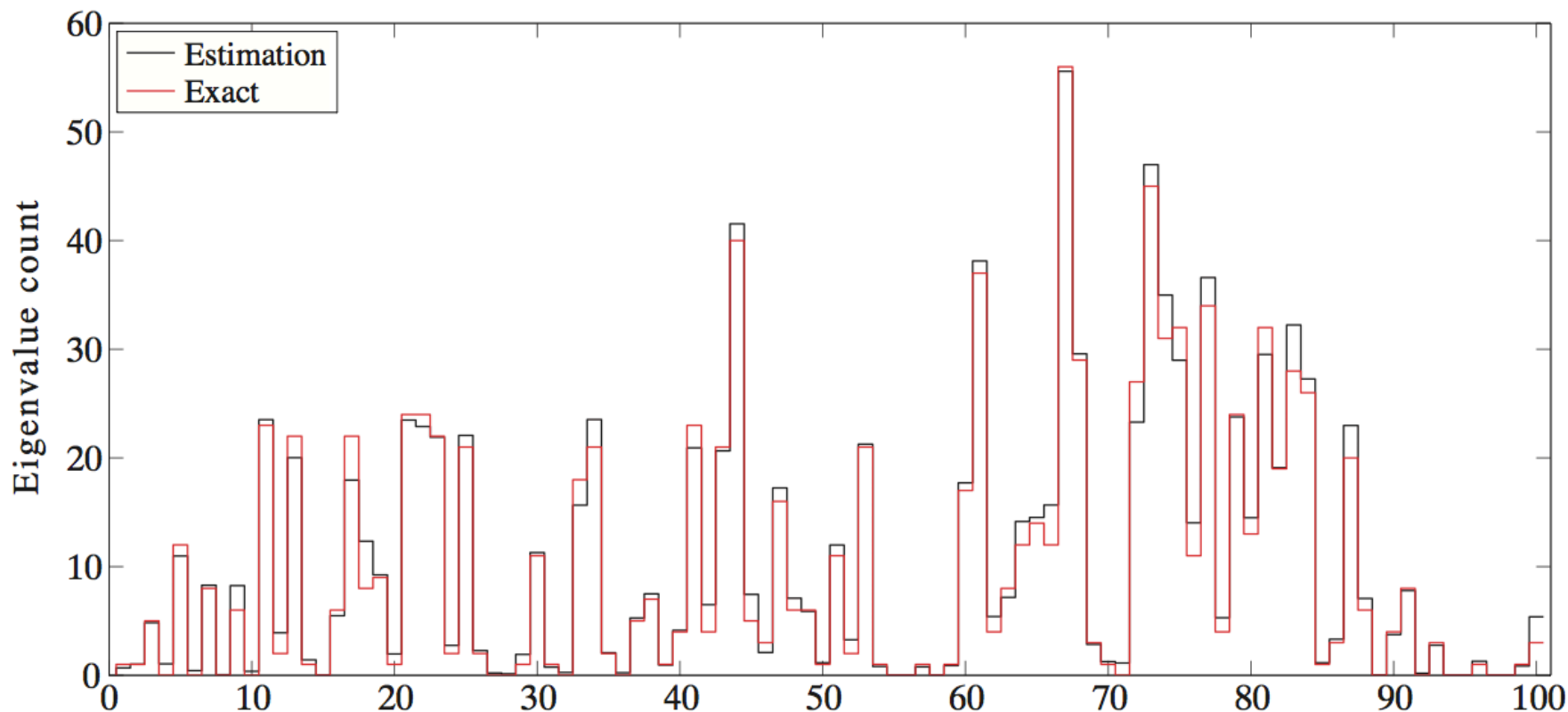
■ サンプルベクトル数の影響

- 積分点数を $N = 16$ として, サンプルベクトルの本数 L を変えて計算

#vectors	<i>eigenvalue count</i>			
	LUND	BCSST07	PLAT1919	BCSST13
10	44.344	391.08	40.759	12.866
20	43.394	392.58	40.371	11.747
30	43.195	391.92	40.926	10.765
40	39.547	393.83	39.874	10.590
50	40.039	393.09	41.018	10.313
100	37.716	392.27	40.632	11.293
200	39.805	393.45	40.341	11.460
500	41.147	392.76	40.542	11.104
1000	39.874	392.53	40.731	11.229
exact	38.880	392.98	40.606	10.988

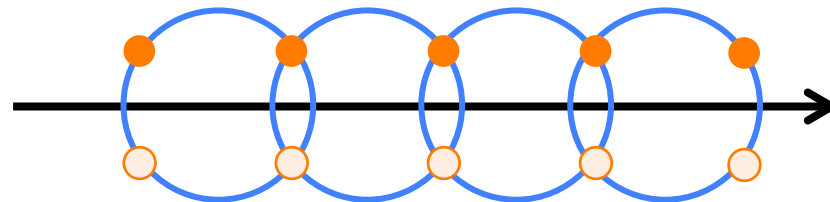
数値例

- 実空間密度汎関数法RSDFT (Iwata, et al.)
 - Silicon 510原子, 行列の次元 $n = 175,616$
 - 区間 $[-0.230, 0.243]$ に100個の領域を配置.
 - 積分点数 $N = 8$, サンプルベクトル数 $L = 20$

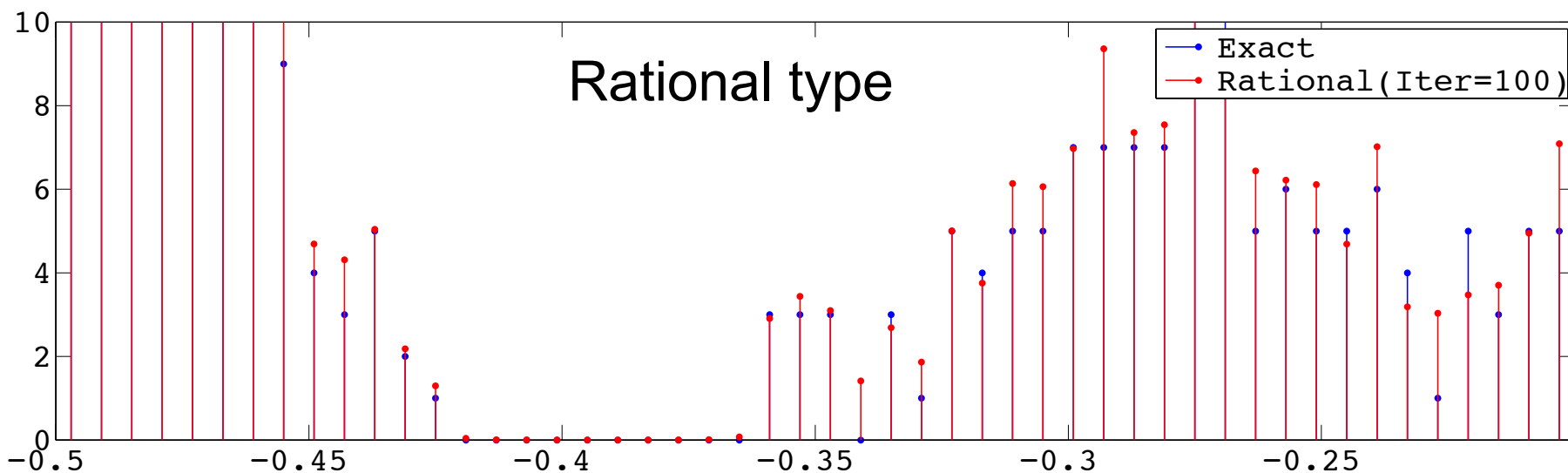
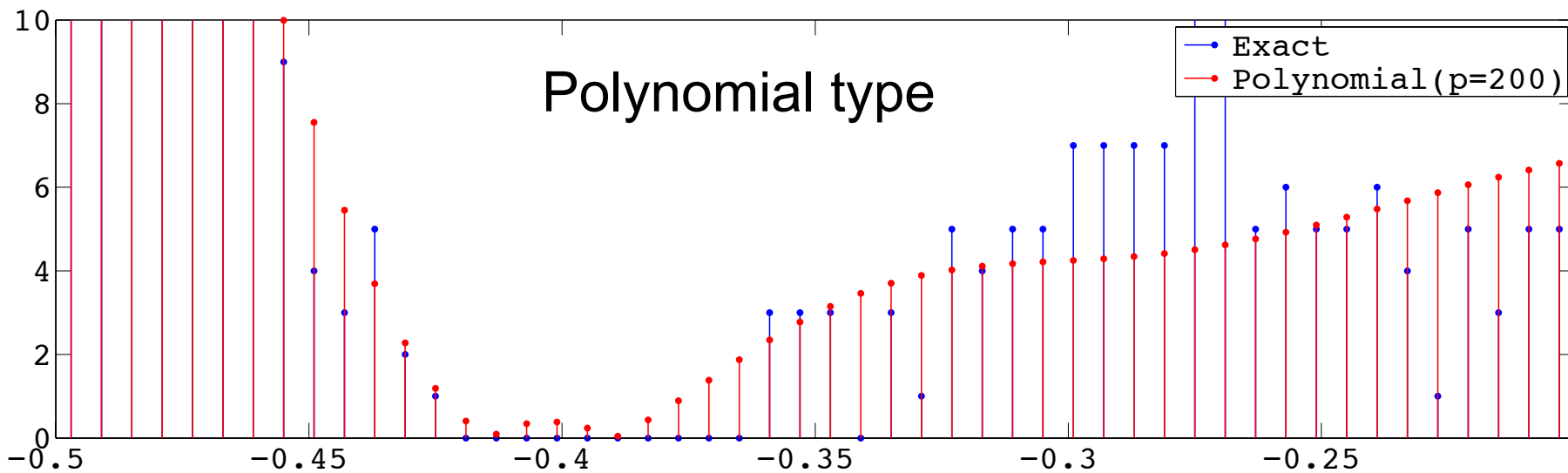


数値例

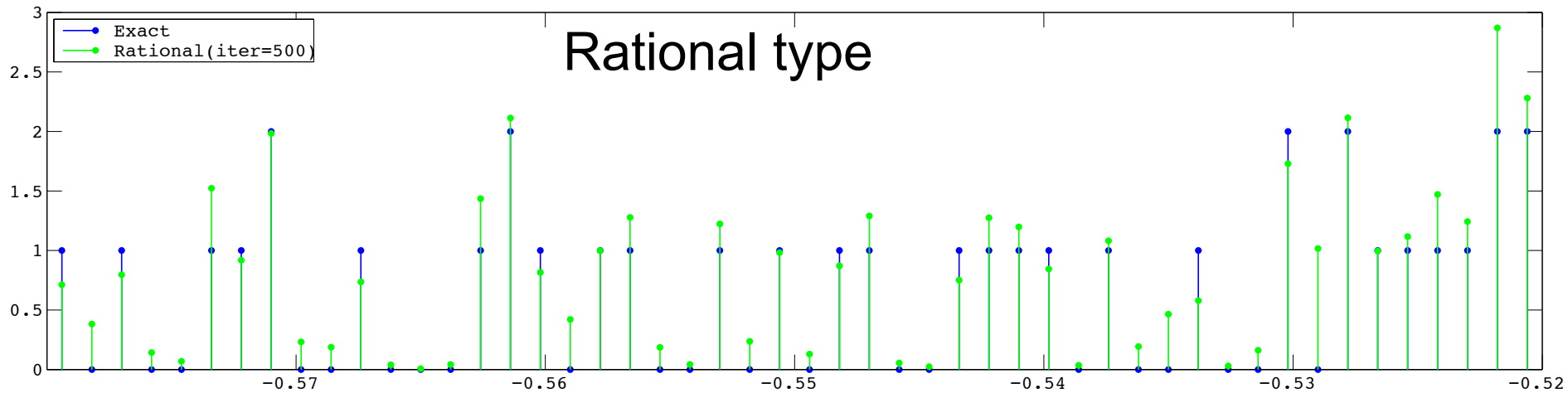
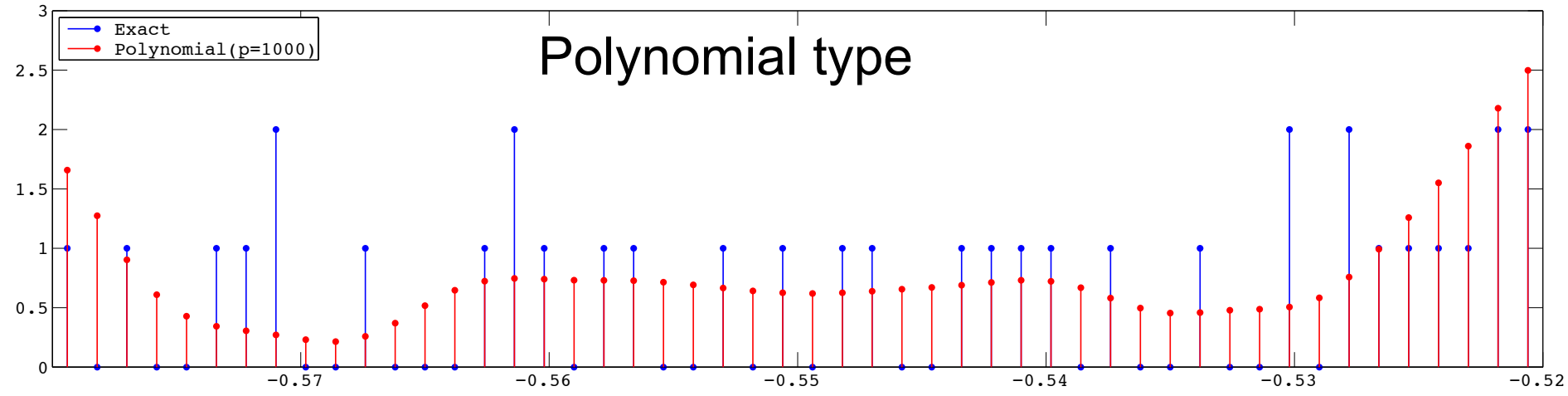
- テスト行列:
ELSES matrix library (Hoshi, et al.)
 - APF4686 (Amourphous-like conjugated polymer)
 - VCNT4500 (Vibrating carbon nanotube)
- 固有値推定のサンプルベクトル数 : $L = 30$
 - 多項式型 (Chebyshev多項式)¹⁾
 - 有理型
 - 線形方程式解法 : Block BiCGrQ
 - 積分点数 : $N = 4$



数值例：APF4686 (200 MatVec)



数值例：VCNT4500



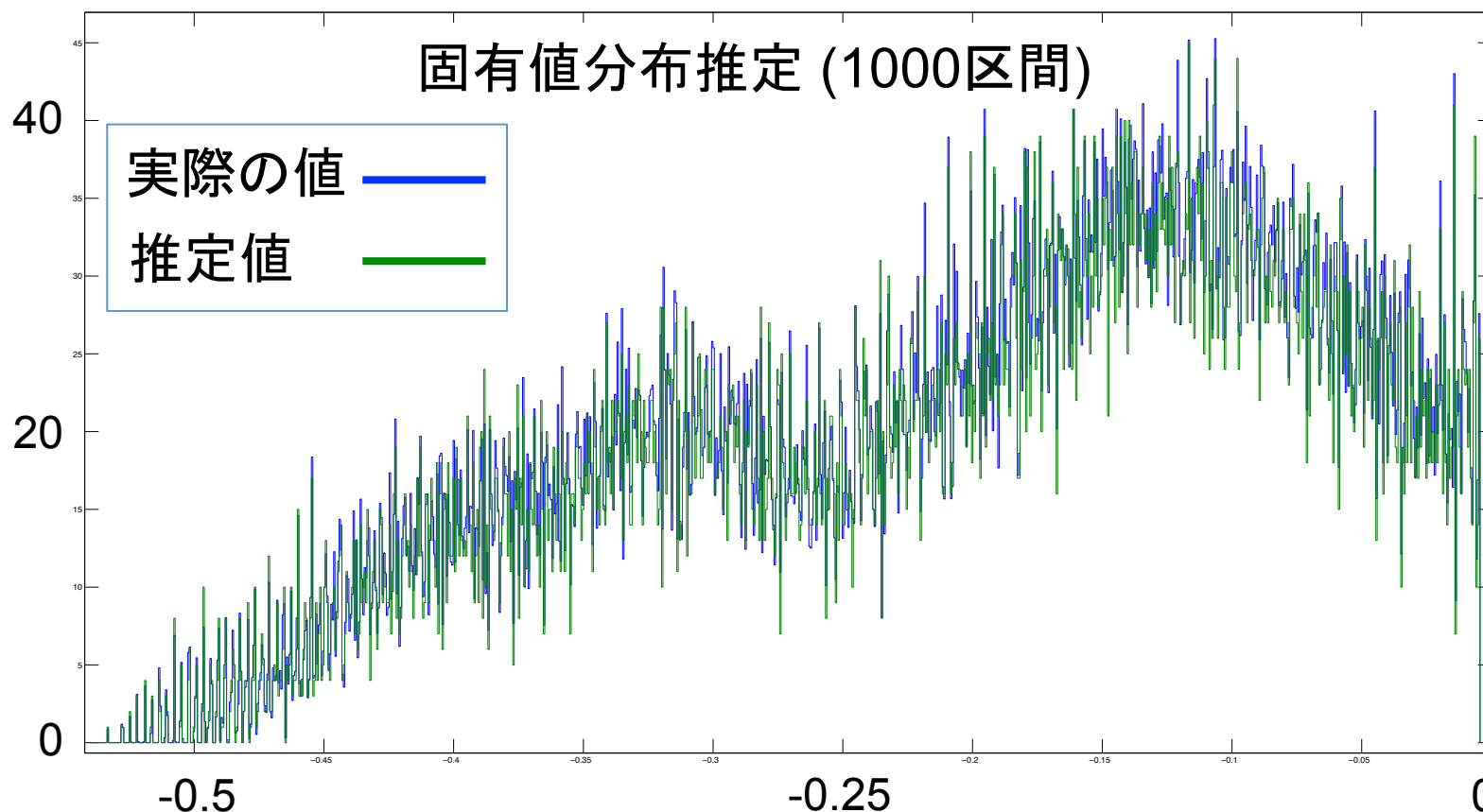
数値例

■ RSDFT SiNW9924原子系

初期電子状態のときの固有値分布

➤ 積分点数： $N = 8$

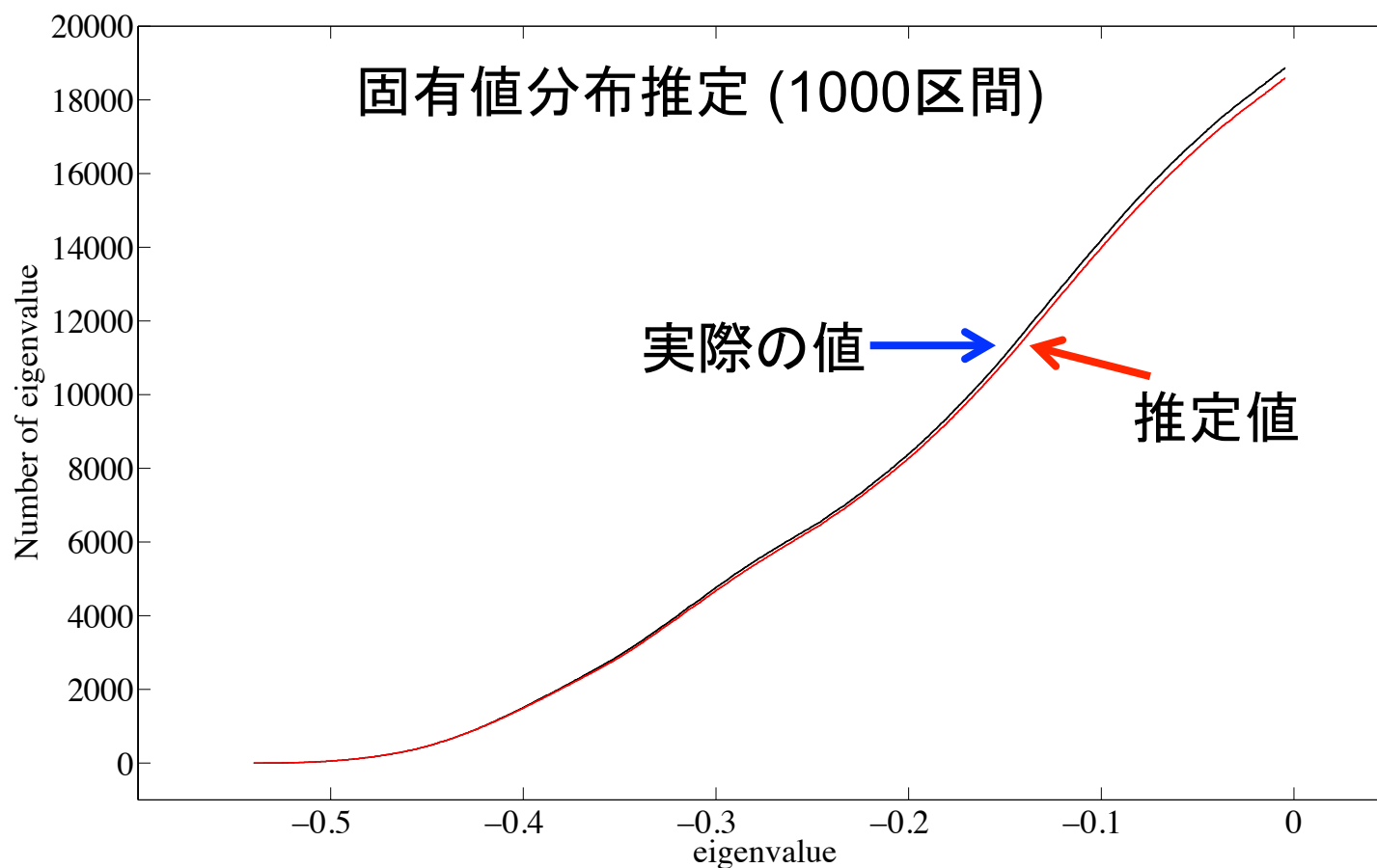
➤ 線形方程式解法：Bi-linear form Shifted Block CGrQ



数値例

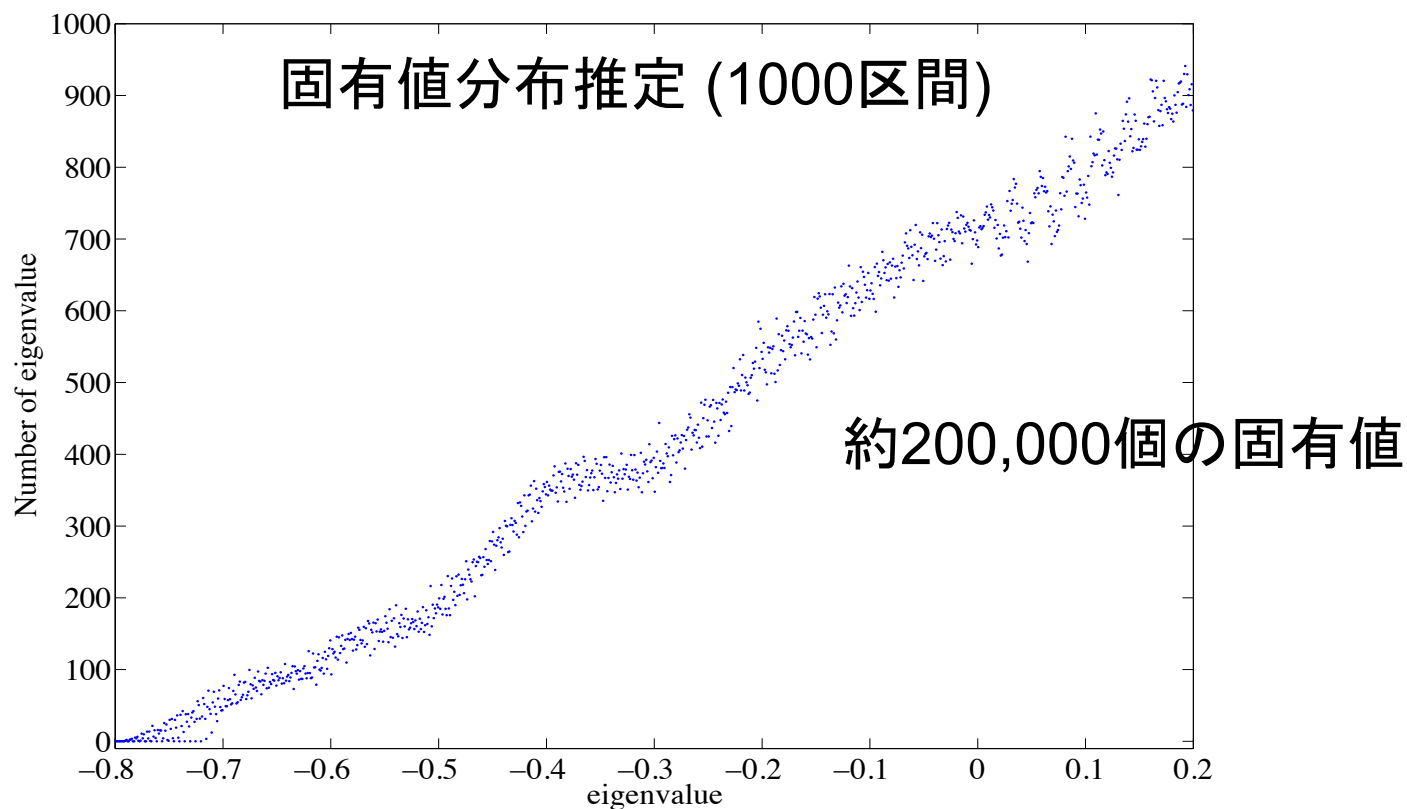
■ RSDFT SiNW9924原子系

初期電子状態のときの固有値分布 左からの累計



数値例

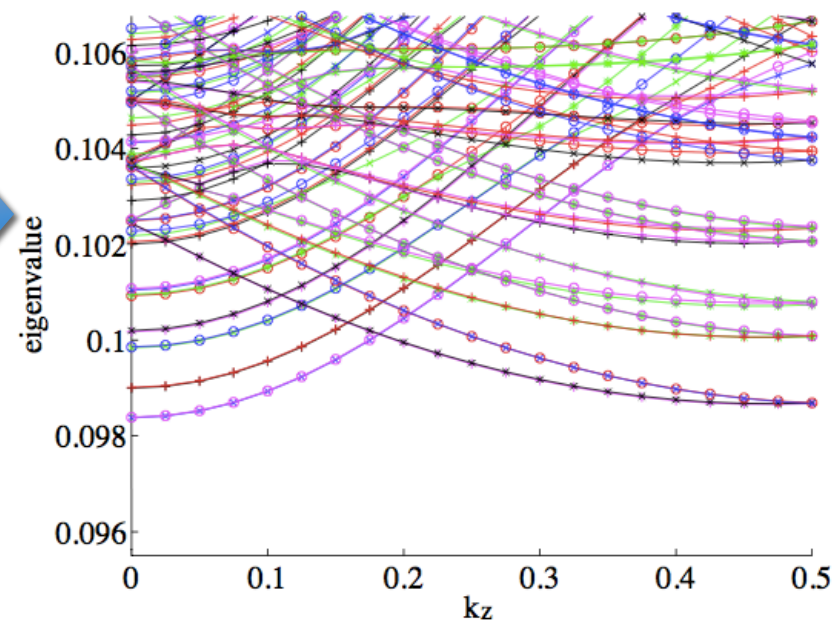
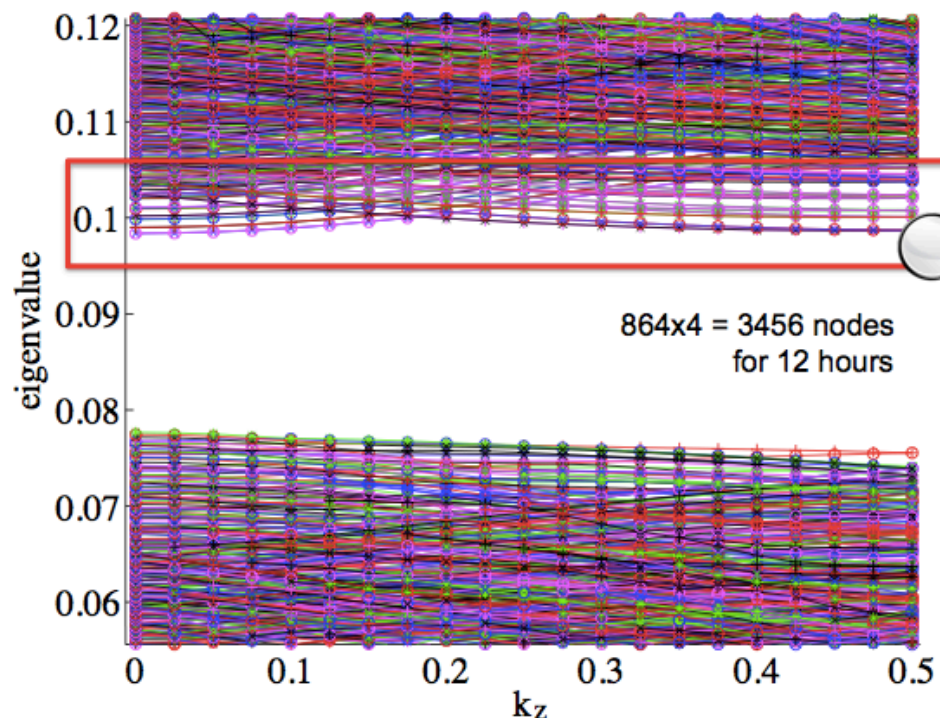
- RSDFT SiNW107,292原子系
初期電子状態のときの固有値分布
 - 行列の次元：64,700,000
 - 京コンピュータ10,800ノードを用いて11,890秒



数値例（固有対計算）

■ SiNW9,924原子系のバンド図計算

- 21個の固有値問題を解いて固有値を接続して表示
- 4個の積分領域をバンドギャップ付近に配置
- 京コンピュータ3,456ノード (12時間)
- 線形方程式解法：Shifted Block CGrQ¹⁾

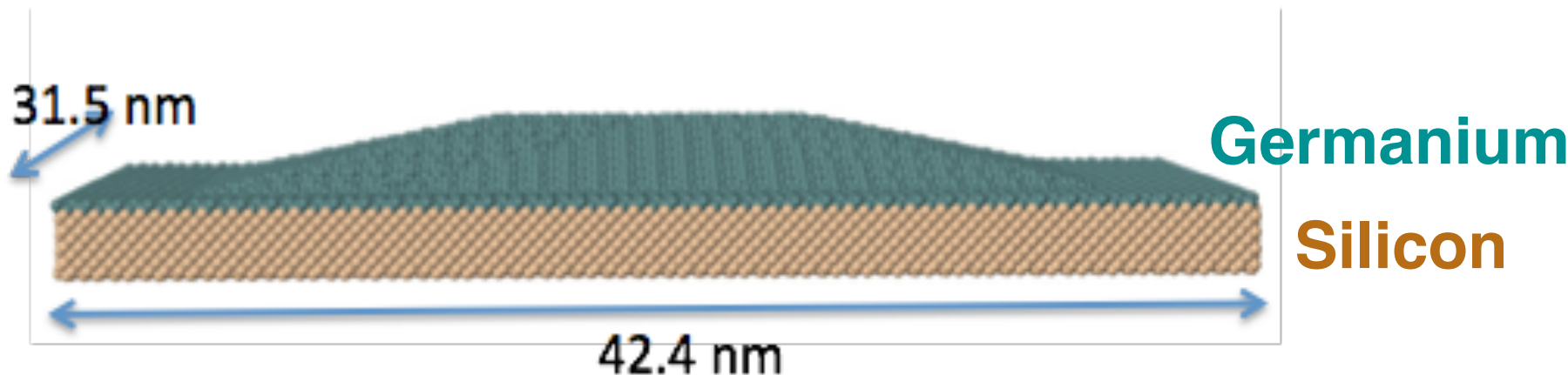
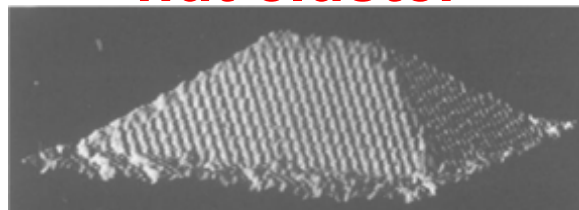


Y. Futamura, T. Sakurai, S. Furuya and J. Iwata, LNCS 7851, 226-235, 2012

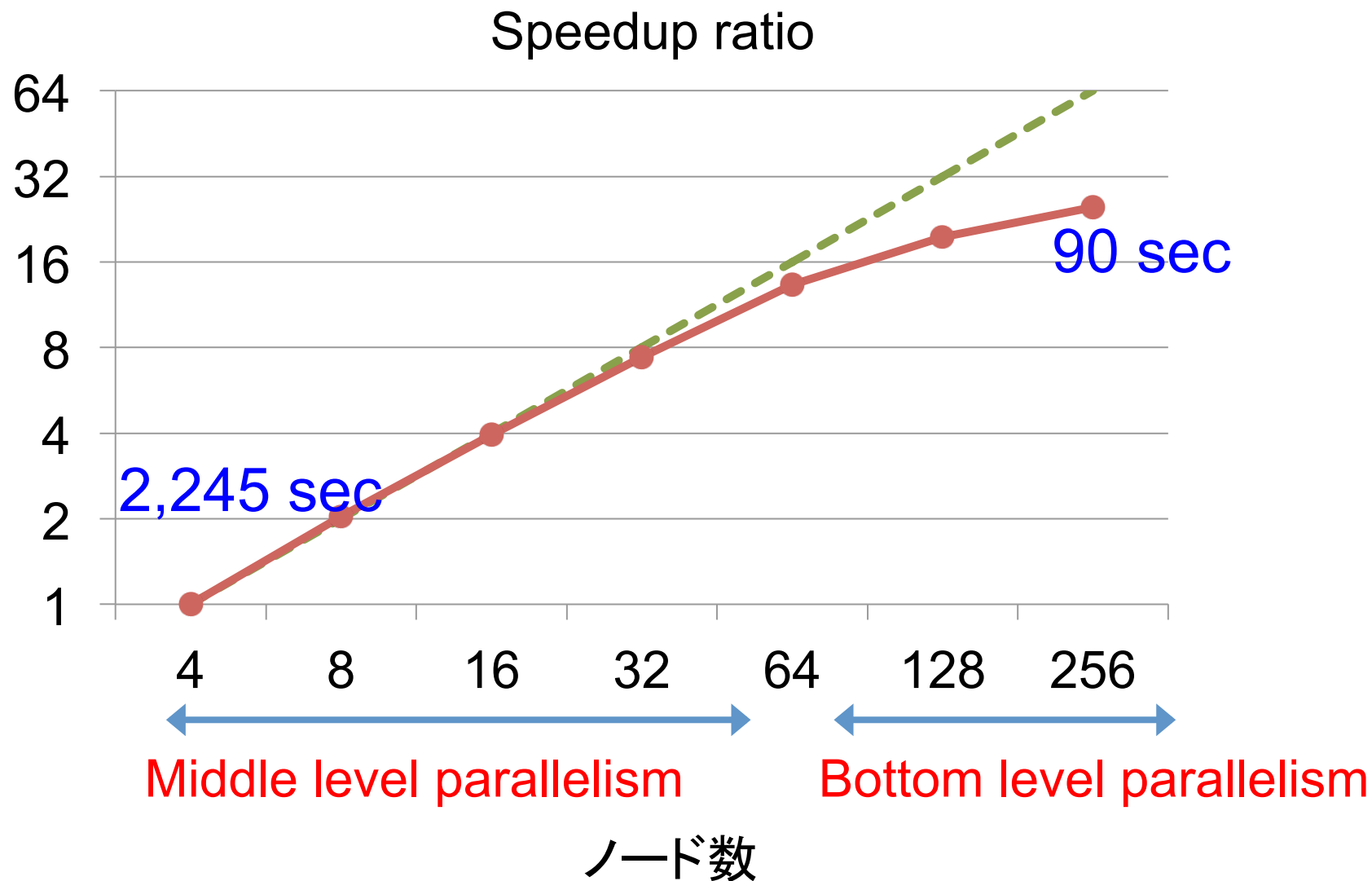
数値例（固有対計算）

- CONQUEST (Miyazaki, et al.)
 - SiGe hut cluster 200,000原子系
 - 行列次元：778,292, Basis set：SZ
 - HOMO-LUMO付近の223個の固有対を計算
 - 計算機：COMA@Univ. of Tsukuba
 - 8 threads / process
 - 2 process / node

hut cluster



数値例 (固有対計算)



おわりに

- 領域内の固有値数推定
 - 数値積分とトレースの確率的推定の組み合わせ
 - 計算の主要部は線形方程式の求解 -- 低精度の解を利用
- ブロック線形方程式に対する反復解法
 - ブロックKrylov部分空間法, シフト線形方程式
- 並列固有値解法
 - 周回積分によって特定領域内の固有ベクトル成分を抽出
 - 高い並列性, 計算局所性
- 今後の課題
 - 実応用への展開, 高性能ソフトウェア開発

References

- [1] T. Sakurai, H. Sugiura, A projection method for generalized eigenvalue problems using numerical integration, *J. Comput. Appl. Math.* 159, 119-128, 2003.
- [2] T. Sakurai, H. Tadano, CIRR: a Rayleigh-Ritz type method with contour integral for generalized eigenvalue problems, *Hokkaido Math. J.* 36, 745-757, 2007.
- [3] T. Ikegami, T. Sakurai, U. Nagashima, A filter diagonalization for generalized eigenvalue problems based on the Sakurai-Sugiura projection method, *J. Comput. Appl. Math.* 33, 1927-1936, 2010.
- [4] Y. Futamura, H. Tadano, T. Sakurai, Parallel stochastic estimation method of eigenvalue distribution, *JSIAM Letters* 2, 127-130, 2010.
- [5] T. Mizusaki, K. Kaneko, M. Honma and T. Sakurai, Filter diagonalization of shell-model calculations, *Phys. Rev. C* 82, 024310, 2010.
- [6] Y. Maeda, Y. Futamura, T. Sakurai, Stochastic estimation method of eigenvalue density for nonlinear eigenvalue problem on the complex plane, *JSIAM Letters* 3, 61-64, 2011.
- [7] Y. Futamura, T. Sakurai, S. Furuya and J. Iwata, Efficient algorithm for linear systems arising in solutions of eigenproblems and its application to electronic-structure calculations, *Proc. VecPar*, 226-235, Kobe, 2012.
- [8] T. Sakurai, Y. Futamura, H. Tadano, Efficient parameter estimation and implementation of a contour integral-based eigensolver, *J. Alg. Comput. Tech.* 7, 249-269, 2013.
- [9] Y. Nagai, Y. Shinohara, Y. Futamura, Y. Ota and T. Sakurai, Numerical construction of a low-energy effective Hamiltonian in a self-consistent Bogoliubov-de Gennes approach of superconductivity, *J. Phys. Soc. Jpn.* 82, 094701, 2013.
- [10] T. Yano, Y. Futamura, T. Sakurai, Multi-GPU scalable implementation of a contour-integral-based eigensolver for real symmetric dense generalized eigenvalue problems, *Proc. 3PGCIC-2013*, 121-127, Compiègne, 2013.
- [11] A. Imakura, L. Du, T. Sakurai, A block Arnoldi-type contour integral spectral projection method for solving generalized eigenvalue problems, *Appl. Math. Lett.* 32, 22-27, 2014.
- [12] L. Du, Y. Futamura, T. Sakurai, Block conjugate gradient type methods for the approximation of bilinear form $CH^{-1}B$, *Comput. Math. Appl.* 66, 2446-2455, 2014.