

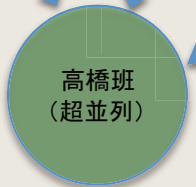
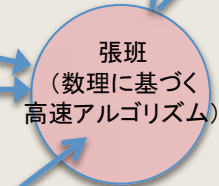
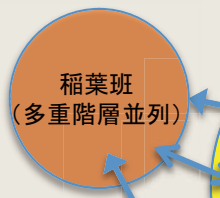
計算物質科学の基盤となる超大規模系のための高速解法

張紹良

名古屋大学大学院工学研究科

計算理工学専攻
新学術領域研究

9/18/2010



計算科学の驚異的な進歩

- 高速コンピュータの開発
- 数理解法の開発

成功の鍵

- 高速コンピュータの高度利用
- 数理解法の深化

基盤となる数理問題

- 大規模線形方程式
- 大規模固有値問題
- 最適化

計算機科学分野との連携 (共通言語は数理)

- 超並列アーキテクチャ
- 多重階層アーキテクチャ

物質科学分野との連携 (共通言語は数理解法)

- 線形方程式
- 固有値問題

基盤となる数理解法

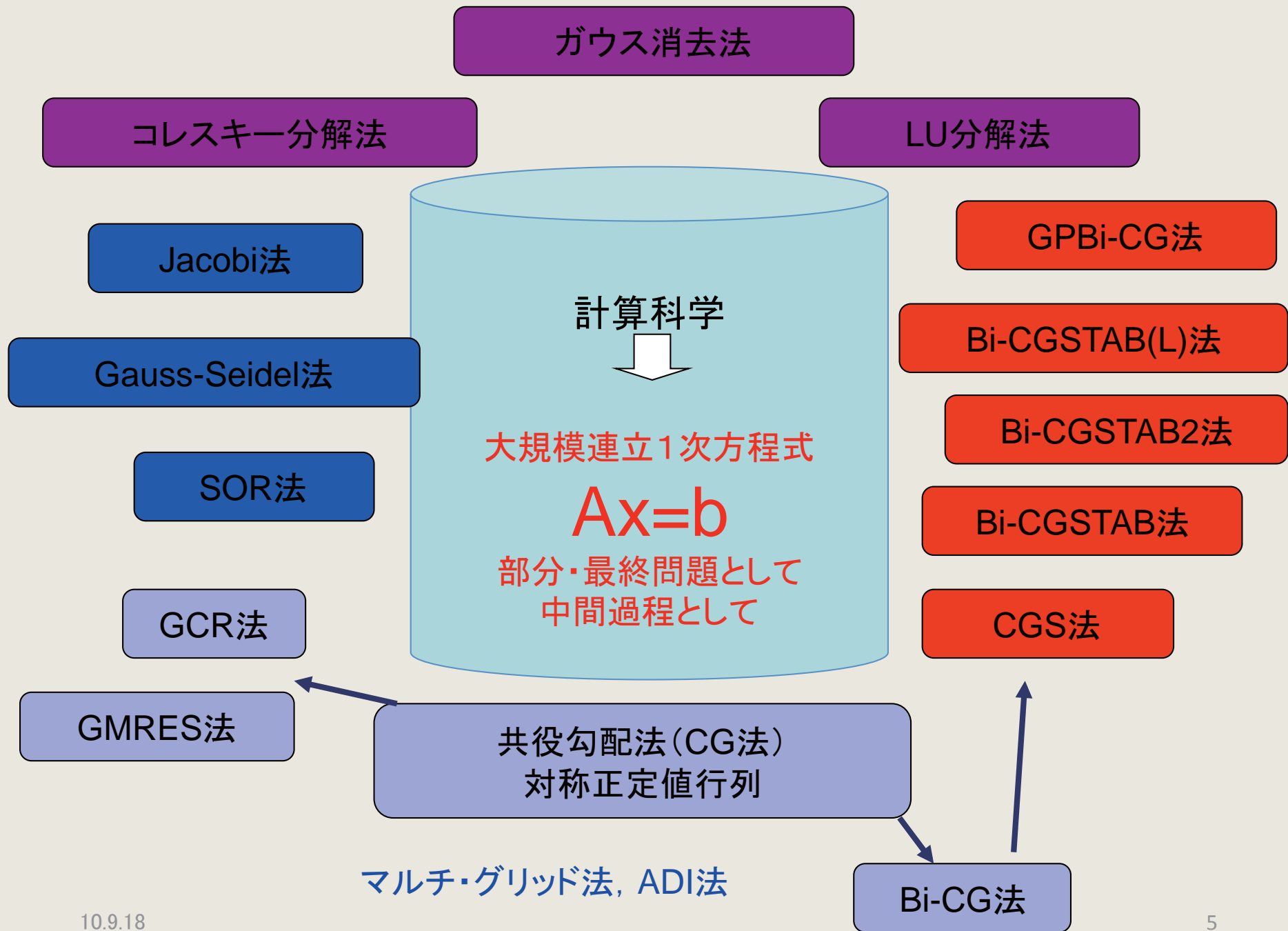
- クリロフ部分空間法 実用的前処理
- 物質科学共通の数理特徴の活用
- 物質デザインのためのコンピューティクスにロバストな解法

研究組織

- ⇒ 張紹良 (名大・教授)
 - 代表者, 研究総括と解法開発
- ⇒ 阿部邦美 (岐阜聖徳学園大・准教授)
 - 分担者, 新型前処理の研究
- ⇒ 曾我部知広 (愛知県立大・准教授)
 - 分担者, 線形方程式に対する部分空間法の開発
- ⇒ 今堀慎治 (名大・講師)
 - 分担者, 離散最適化のメタ解法
- ⇒ 宮田考史 (名大・助教)
 - 分担者, 固有値問題に対する部分空間法の開発
- ⇒ 山本有作 (神戸大・教授)
 - 分担者, 固有値問題に対する直接法の開発, HPC
- ⇒ 杉原正顕 (東大・教授)
 - 協力者, 高精度数値積分法の開発

これまでの応用分野との連携

- 部分空間法の研究開発
 - GPBi-CG法, Bi-CR法, Look-Back GMRES(m)法
(非対称行列用, 応用範囲の広い解法)
 - Arnoldi(M, W)法, 一般化SS法, 並列QR法
- 応用分野との関係(テイク・アンド・ギブ)
 - 大規模電子構造計算(東大・藤原グループ)
テイク(密度汎関数, グリーン関数)
ギブ(シフト方程式, シフトKS法, 並列化, 一般化固有値問題)
 - 最適化問題
テイク(半正定値計画問題・内定法, 原子炉燃料の配置問題)
ギブ(密行列の解法としてKS法の適用・前処理の提案,
メタ戦略)
 - 可変的前処理
テイク(CFDの解法より本質の抽出→新概念に到達)



クリロフ部分空間法 (KS法) の分類

	ランチョス算法	アーノルディ算法	双ランチョス算法
リッツ・ガレルキン アプローチ	CG法 (対称行列用)	FOM法 (非対称行列用)	存在しない
最小残差 アプローチ	MINRES法 CR法 (対称行列用)	GMRES法 Look-Back GMRES(m) (新) GCR法 (非対称行列用)	存在しない
ペトロフ・ガレルキン アプローチ	ナンセンス	ナンセンス	Bi-CG法 GPBi-CG法 Bi-CR法 (新) CO-CR法 (新) (非対称行列用)

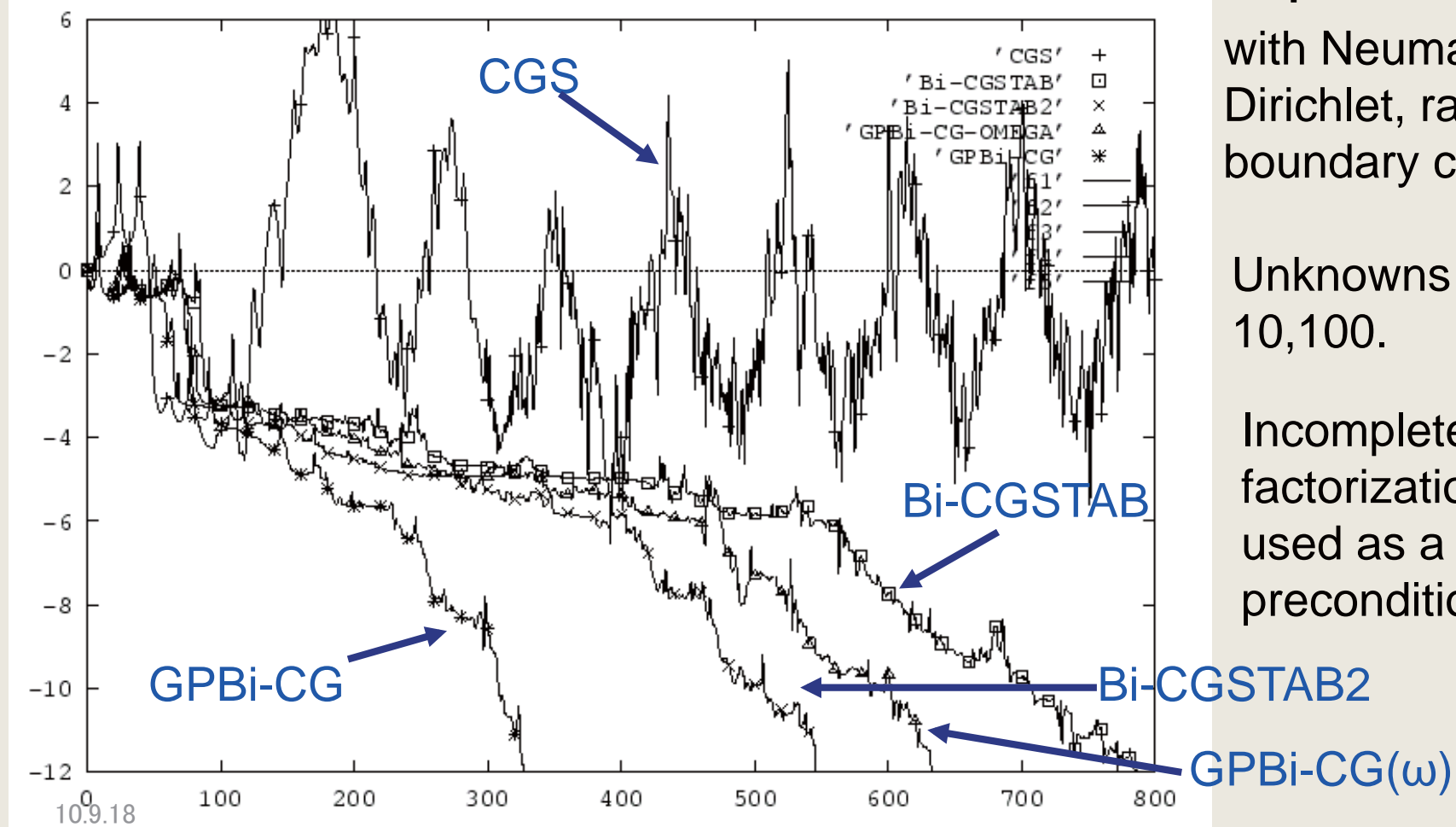
計算例 (w.r.t. iteration steps)

This problem came from a 100×100 of central difference discretization of Helmholtz equation

with Neumann Dirichlet, radiation boundary conditions


Unknowns are 10,100.

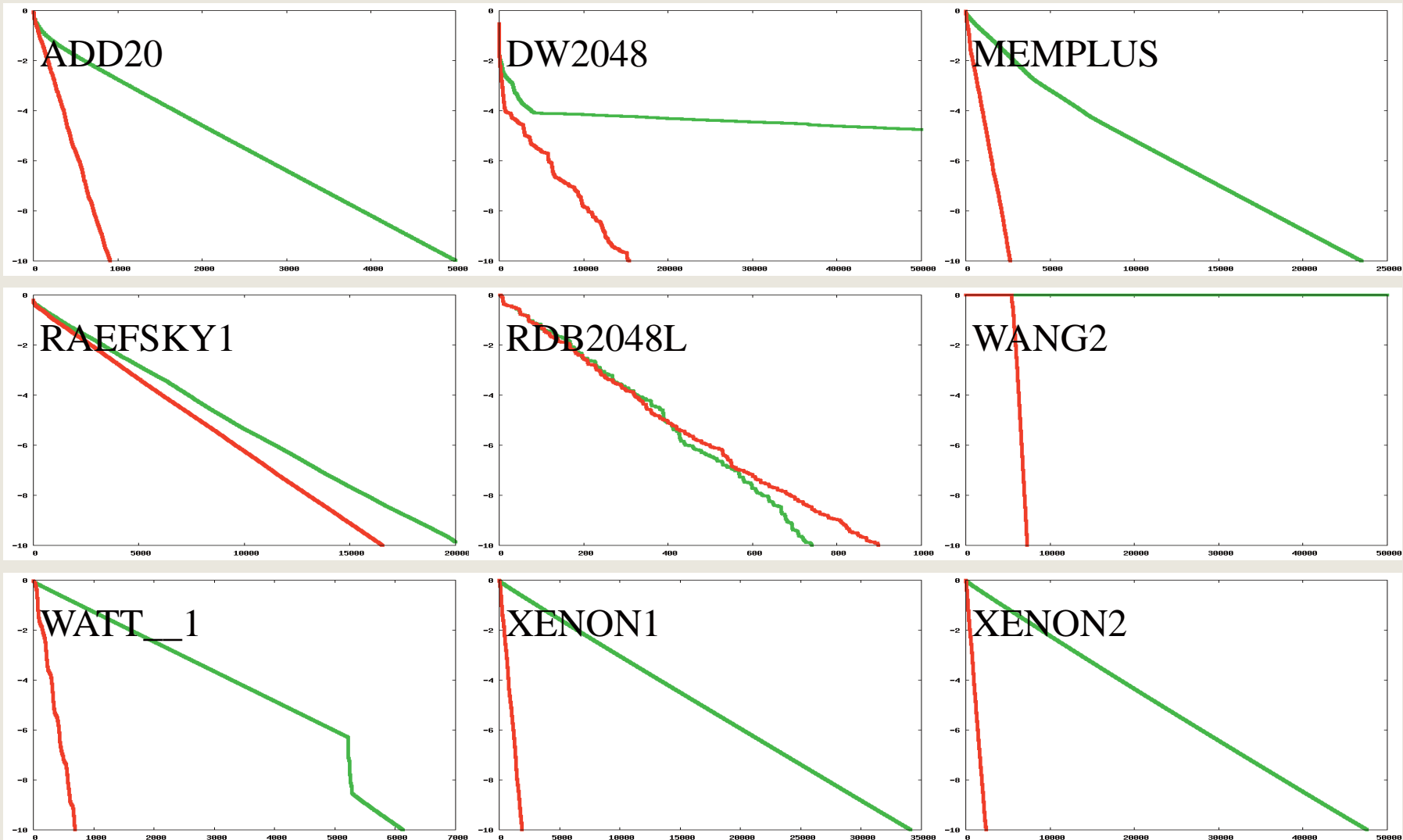
Incomplete LU factorization was used as a preconditioner.



Numerical Results

— GMRES(m)
— Look-Back GMRES(m)

 The relative residual 2-norm history ($m = 10$)



大規模電子構造計算

(東大・藤原研との共同研究)

$$\langle \hat{X} \rangle = \sum_i \langle \phi_i | \hat{X} | \phi_i \rangle = \text{Tr}[\hat{\rho} \hat{X}]$$



$$\rho_{ij} = -\frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \text{Im} G_{ij}(z) f(\varepsilon) d\varepsilon$$

$f(\varepsilon)$: Fermi-Dirac distribution

$$z \equiv \varepsilon + i\gamma$$

$G_{ij}(z)$: $(z - H)^{-1}$ の ij -要素

KS法によるアプローチ

基本アイデア:

$$G_{ij} = e_i^T G e_j$$

$$e_i = (0, \dots, 1, \dots, 0)^T$$

$$= e_i^T (z - H)^{-1} e_j$$

定式化(シフト方程式)

$$(A + \alpha_i I) x_i = b, \quad i = 1, 2, 3, \dots$$

- ⇒ 本来は非効率
- ⇒ $z_k = \epsilon + i\gamma_k, \quad k = 1, 2, 3, \dots$
 - **KS法**はこの特徴を生かせる
 - 並列処理は容易

- ⇒ A は対称正定値
- ⇒ α_i は複素数
- ⇒ $A + \alpha_i I$ は非エルミート, 対称

KS法の適用

- ⇒ **KS法**においては、直交基底の構築に必要な行列・ベクトル積の計算がコストのメイン部分

$$\text{Span}\{\mathbf{b}, (A + \alpha_i I)\mathbf{b}, \dots, (A + \alpha_i I)^{k-1}\mathbf{b}\}$$

|||

$$\text{Span}\{\mathbf{b}, A\mathbf{b}, \dots, A^{k-1}\mathbf{b}\}$$

- ⇒ シードとなる α_i に対して**KS法**を適用すれば
- 残りの α に対して、行列・ベクトル積の計算は不要
 - 多くの α に対して並列処理は容易

数值例

- 大規模電子構造計算

Si 512 atoms, surface reconstruction simulation

$$(\mathbf{A} + \sigma \mathbf{I}) \mathbf{x}^\sigma = \mathbf{b}, \quad (\mathbf{A} + \sigma \mathbf{I}) \in \mathbb{C}^{2048 \times 2048}$$

$$\sigma_0 = 0.400 + 0.001i$$

$$\sigma_1 = 0.401 + 0.001i$$

\vdots

$$\sigma_{1000} = 1.400 + 0.001i$$

1001 systems

[Cf. R. Takayama, et al., Phys. Rev. B 73 (2006)]

Solver

Shifted COCG $\mathbf{x}_0^{\sigma_i} = \mathbf{0}$

CPU time

Shifted COCG

Initial seed

$\text{Re}(\sigma)$

Time

Switch

1.111

5.5 [s]

0

0.900

5.7 [s]

1

0.700

6.9 [s]

2

COCG (1001 linear systems)

150.4[s]

$(A + \sigma B)x^\sigma = b$ に拡張することにも成功した

一般化固有値問題

(東大・藤原研との共同研究)

担当: 宮田・曾我部・張

● 対象とする問題

- 大規模・疎・非エルミート行列の一般化固有値問題

$$Ax = \lambda Bx, \quad x \neq 0$$

- Input : $A, B \in \mathbb{C}^{n \times n}$
- Output : $\lambda \in \mathbb{C}, x \in \mathbb{C}^n$

● 応用例

- ▶ 大規模電子構造計算, 電気工学, 構造解析, フォトニクス結晶

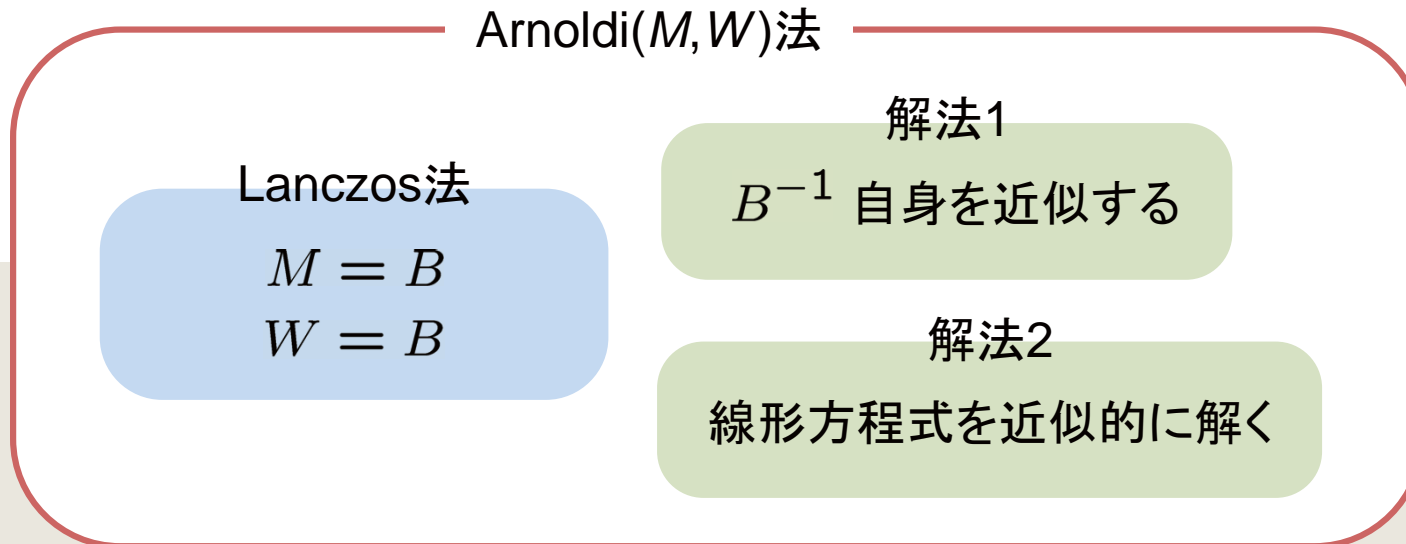
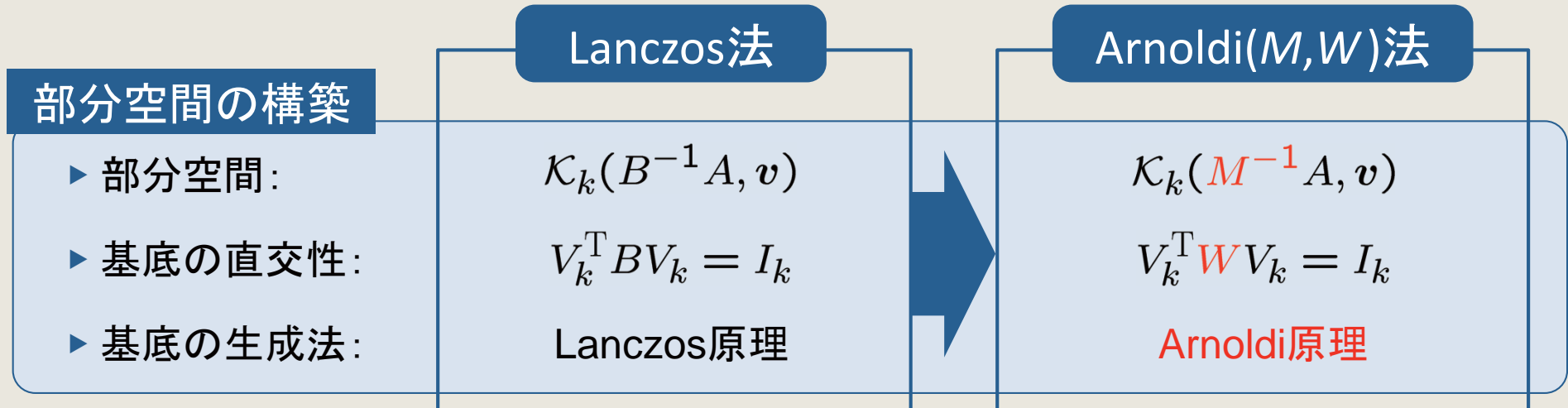
● 従来解法

- ▶ Arnoldi法 [Arnoldi, 1951]
- ▶ Lanczos法 [Lanczos, 1950] (エルミート行列向け)

● 研究目的

- ▶ 大規模一般化固有値問題に対する高速解法の開発

Arnoldi(M, W)法 : Lanczos法の拡張



解法1

B^{-1} 自身を近似する

Arnoldi(M, W)法

- ▶ $\text{span}V_k = \mathcal{K}_k(M^{-1}A, v)$
- ▶ 基底の直交性: $V_k^T W V_k = I_k$
- ▶ 基底の生成法: Arnoldi原理

Neumann級数展開

B が $\|I - B\|_2 < 1$ を満たす

$$\Rightarrow B^{-1} = \sum_{i=0}^{\infty} (I - B)^i$$

$$\begin{cases} B : \text{正定値} \\ \|B\|_2 < 2 \end{cases} \Rightarrow \|I - B\|_2 < 1$$

$$Ax = (\lambda\alpha^{-1})(\alpha B)x \quad (0 < \alpha \in \mathbb{R})$$

- ▶ $\|\alpha B\|_2 < 2$ を満たすように α を定め,
 $M^{-1} = \sum_{i=0}^m (I - \alpha B)^i$ とする
- ▶ 正定値対称行列 B の最大固有値の推定が必要 (Gerschgorinの定理)

解法2

線形方程式 $Bq = p$
を近似的に解く

Arnoldi(M, W)法

- ▶ $\text{span}V_k = \mathcal{K}_k(M^{-1}A, v)$
- ▶ 基底の直交性: $V_k^T W V_k = I_k$
- ▶ 基底の生成法: Arnoldi原理

● Krylov部分空間法を利用する

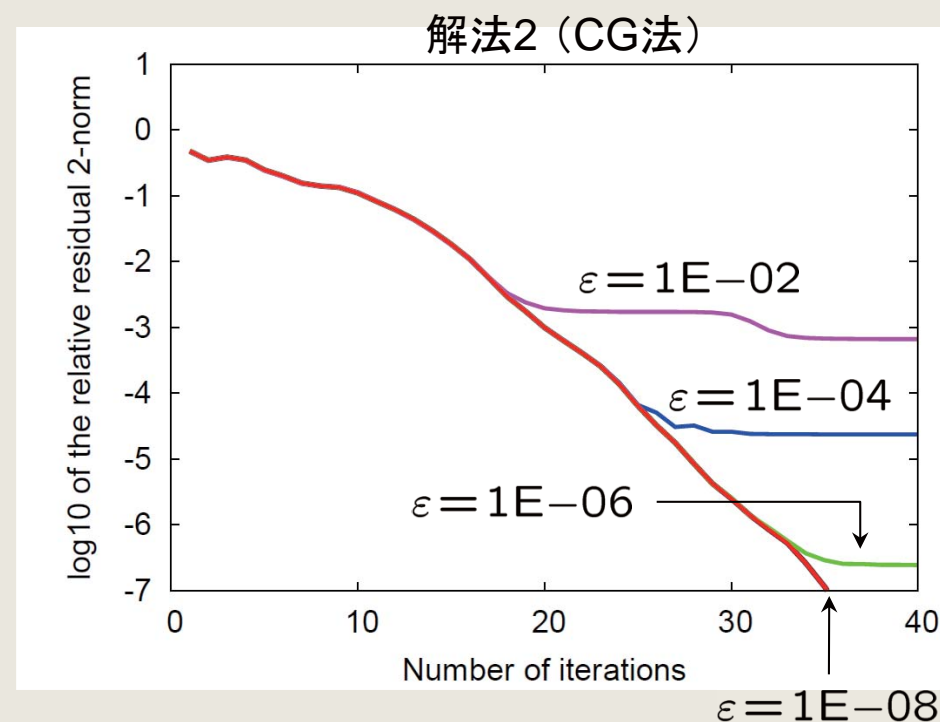
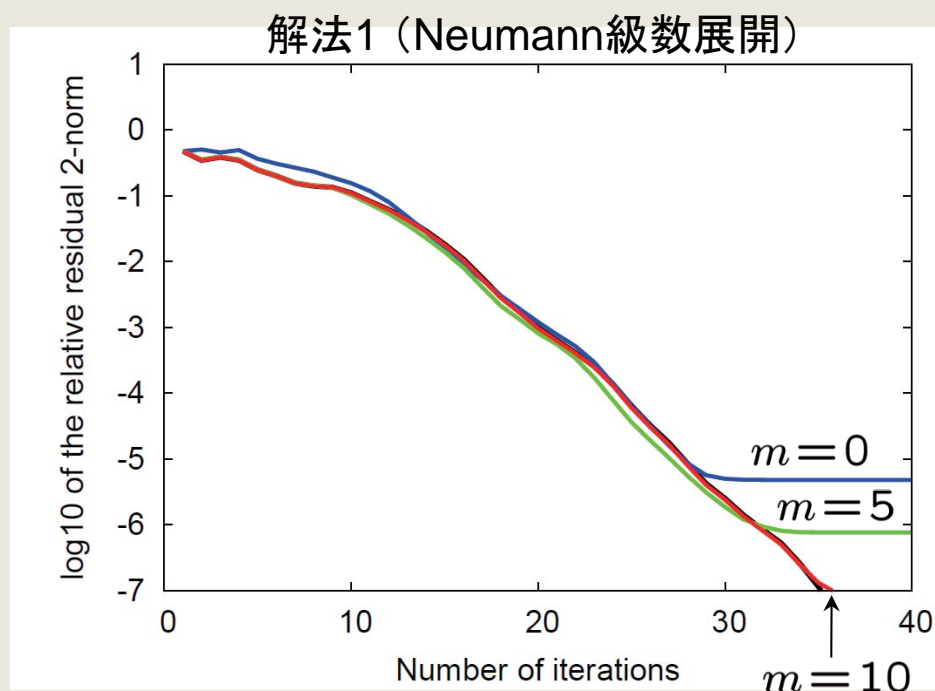
- ▶ B は正定値対称行列 → CG法など
- ▶ 停止条件: (相対残差) $\leq \epsilon$

Lanczos法では

- ▶ Cholesky分解: $B = LL^T$

実験結果

● 残差の収束性



● 反復回数・計算時間

数値解法	反復回数(回)	計算時間(秒)
Lanczos法	36	278
解法1 ($m=10$)	36	12
解法2 ($\epsilon=1E-08$)	36	15

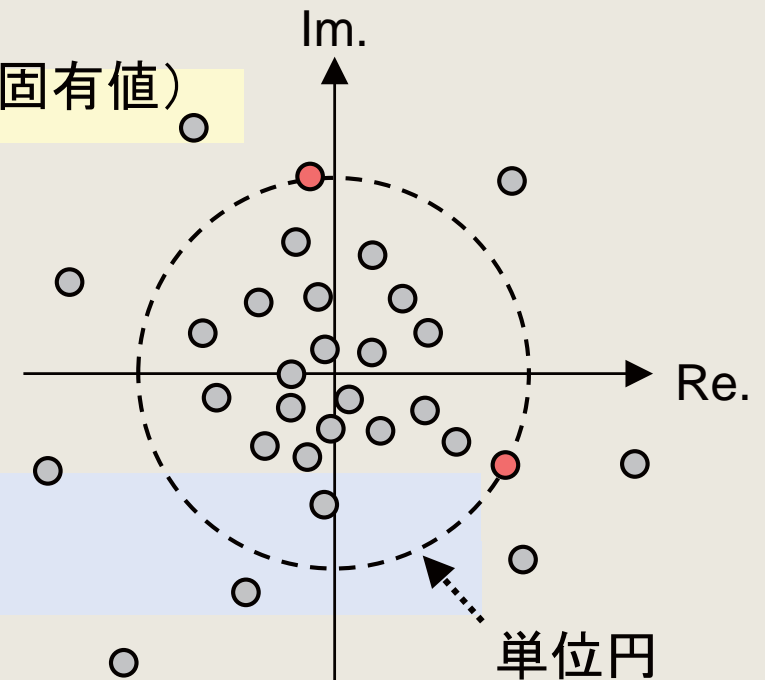
フォトニクス結晶の固有値問題

- 固有値計算のニーズ

- 単位円周上のすべての固有値
(指定された値に近い絶対値を有する複素固有値)

- 従来法

- 多数の不要な固有値を計算
 - QZ 法 (すべての固有値)
 - Jacobi-Davidson style QZ 法 (指定された点近傍の固有値)
 - Sakurai-Sugiura 法 (指定された領域内部のすべての固有値)



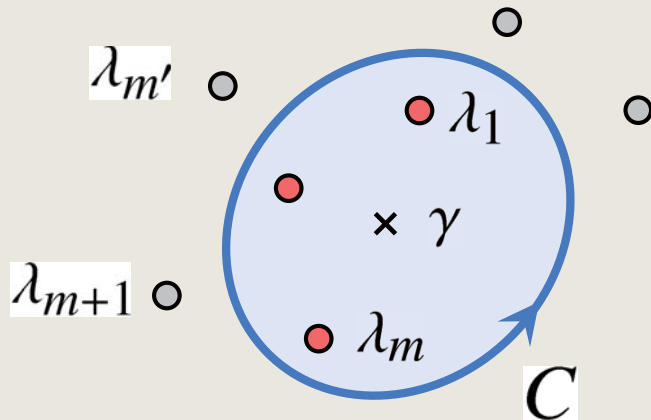
- 本研究

- フォトニクス結晶の固有値問題に対して,
Sakurai-Sugiura 法を拡張 (必要な固有値のみを計算)

- 必要な固有値
- 不要な固有値

Sakurai-Sugiura 法

モーメントは領域内部の固有値の情報を含む



$\lambda_1, \dots, \lambda_{m'}$: 相異なる固有値

C : Jordan 閉曲線

γ : C 内部の点

m : C 内部の固有値数

$$\begin{aligned} \mu_p &= \frac{1}{2\pi i} \int_C (z - \gamma)^p f(z) dz \\ &= \sum_{k=1}^m (\lambda_k - \gamma)^p v_k \end{aligned}$$

u, v : 乱数ベクトル

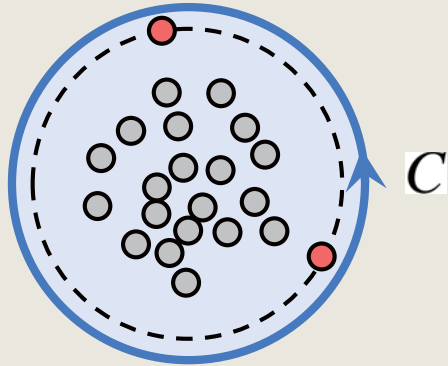
$$f(z) = u^* (zB - A)^{-1} v$$

$$= \sum_{k=1}^{m'} \frac{v_k}{z - \lambda_k} + g(z)$$

(仮定: $v_k \neq 0$ ($k = 1, \dots, m$))

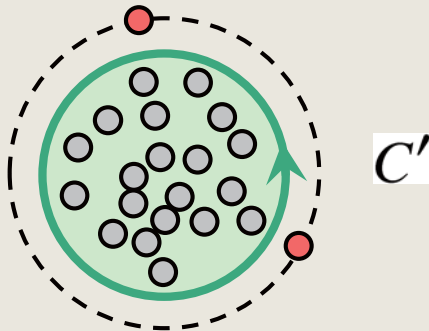
モーメントによる小規模行列の固有値から、領域内部の固有値が得られる

本研究のアプローチ

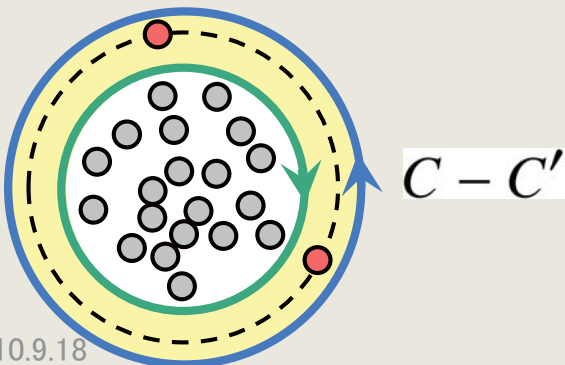


$$\begin{aligned} \mu_p &= \frac{1}{2\pi i} \int_C z^p f(z) dz \\ &= \lambda_1^p v_1 + \cdots + \lambda_s^p v_s + \lambda_{s+1}^p v_{s+1} + \cdots + \lambda_m^p v_m \end{aligned}$$

$$\lambda_1^p v_1 + \cdots + \lambda_s^p v_s = \mu_p - \lambda_{s+1}^p v_{s+1} - \cdots - \lambda_m^p v_m$$



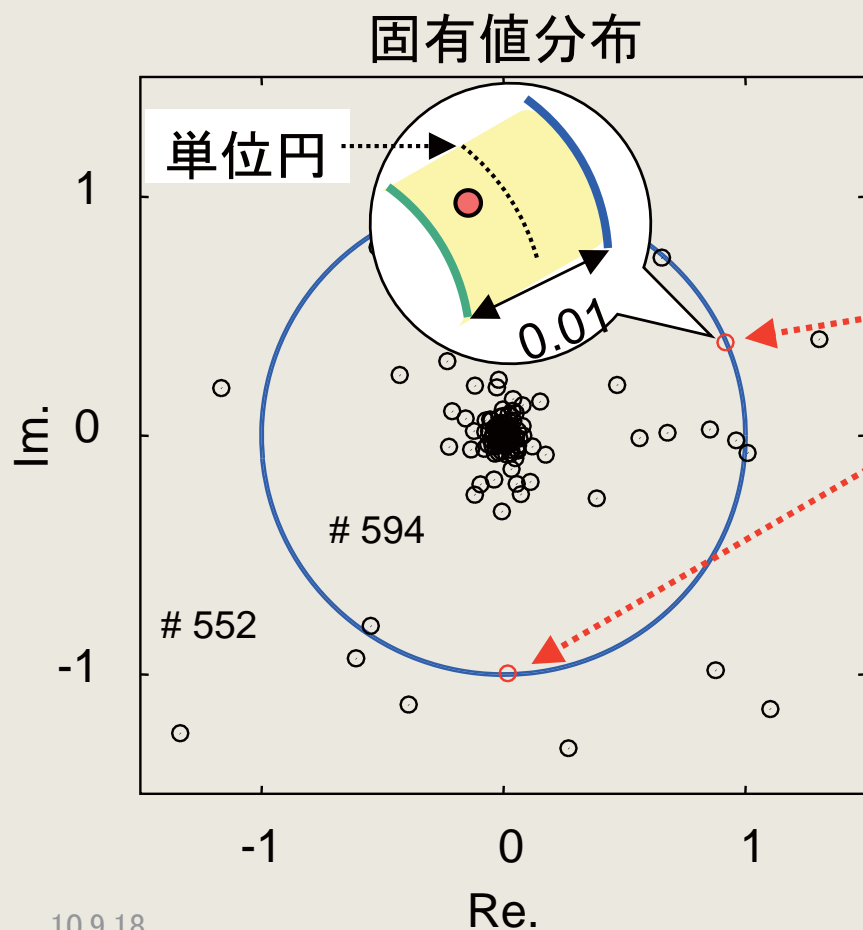
$$\mu'_p = \frac{1}{2\pi i} \int_{C'} z^p f(z) dz = \lambda_{s+1}^p v_{s+1} + \cdots + \lambda_m^p v_m$$



$$\lambda_1^p v_1 + \cdots + \lambda_s^p v_s = \mu_p - \mu'_p = \frac{1}{2\pi i} \int_{C-C'} z^p f(z) dz$$

数値実験 (アルゴリズムの有効性を検証)

- フォトニクス結晶の固有値問題 (Y. Y. Lu, Hongkong)
 - 複素非対称行列 ($n = 1148, n_z = 659526$)



- 計算された固有値

$$\hat{\lambda}_1 = 0.9174281920 + 0.3901032941 i,$$

$$\hat{\lambda}_2 = 0.0174359387 - 0.9954284799 i.$$

- 固有値の誤差

$$|\hat{\lambda}_1 - \lambda_1| = 1.8 \times 10^{-10},$$

$$|\hat{\lambda}_2 - \lambda_2| = 7.2 \times 10^{-11}.$$

λ_1, λ_2 : evaluated by Matlab ('eig').

今後の課題

- 物質デザインコンピューティクス(数百万規模以上の系が頻繁に出現)
 - 計算時間の大半がそれを解くことに費やされると予想
 - 数理手法を用いて(計算効率の向上で)コンピューティクスに貢献
- 領域内の研究諸班との連携
 - 計算機アーキテクチャ班及び並列計算アルゴリズム班
 - コンピューティクスの様々な超大規模系の数理的諸特徴
- 目標 = より速く, より高精度
 - 計算時間のかかる問題を高速に
 - 計算精度の不十分な問題を高精度に
 - 解きにくい問題を比較的簡単に