

大規模非線形固有値問題の並列解法

産業技術総合研究所 池上 努

Tsutomu Ikegami

Advanced Industrial Science and Technology (AIST)

概要

非線形固有値問題のひとつ、 λ 行列固有値問題 $A(\lambda)q = 0$ について、ブロック櫻井・杉浦法を用いた解法を紹介する。 λ 行列 $A(\lambda)$ は個々の行列要素が固有値 λ の関数として表される行列のことで、各要素が λ の一次式の時、 $A(\lambda)q = 0$ は一般固有値問題に還元される。より高次のケースはコンパニオン行列を用いて線形化し、一般固有値問題に還元して解かれるが、行列次元が膨れ上がるため大規模な問題に対しては適用できなかった。ブロック櫻井・杉浦法は大規模一般固有値問題の並列解法アルゴリズムで、コーシー積分を用いて閉路内の固有対を抜き出す手法である。本手法を λ 行列固有値問題に応用すると、行列次元を拡大することなく内部固有値の求解が可能であることを示す。

1 はじめに

永らく科学技術の発展を支えてきた実験と理論の二柱に、近年新たに計算機シミュレーションが第三の柱として加わった。計算機シミュレーションは一般に、物理現象を微視的なレベルで計算機上に再現し、そこから得られる膨大な数値情報から大局的な特徴量を抜き出す手法である。計算機シミュレーションでは物理モデルの数値表現として行列が極めて普遍的に用いられており、振動数やエネルギーなどの物理的な特徴量はしばしば行列の固有値として現れる。計算機性能の飛躍的な向上と共により大次元の行列の取り扱いが可能になったことを反映し、物理モデルはますます精緻になってきた。このような大規模行列の固有値を求めるにあたり、対角化の手法は行列次元の増大と共に急速に困難になる。しかし幸いなことに全固有値が必要になるケースはまれで、ほとんどの場合物理的に意味のある領域の固有対が計算できれば十分である。特定範囲の固有値を求める問題は内部固有値問題と呼ばれ、その解法には従来より shift-and-invert Arnoldi 法 [1] に代表される反復解法が用いられてきた。残念ながら、反復法は固有副空間を逐次的に改善する手法であるため、個々の反復ステップを同時並行に処理することができない。また各ステップの並列化効率には限界があり、近年の並列計算機を有効に活用することができなかった。ブロック櫻井・杉浦法 [2, 3, 4, 5] は並列計算機を念頭に設計された内部固有値解法で、コーシー積分の評価を通じて固有副空間を一段階で構築する手法である。従来法と比べて演算量は増える傾向にあるが、アルゴリズムの階層的な並列構造を活用することで高い並列化効率を実現できる。

本稿ではまずブロック櫻井・杉浦法の概略を紹介した後、非線形固有値問題の一種 λ 行列固有値問題 $A(\lambda)q = 0$ への応用について述べる。 λ 行列は行列要素が固有値 λ の関数として表される行列で、各要素が λ の高々 d 次の多項式ならば、コンパニオン行列を用いて線形固有値問題に変換できる。しかし $A(\lambda)$ の次元を N とするとコンパニオン行列の次元は dN となるため、大規模な問題に対しては適用し難い。このため自己無撞着法や非線形 Rayleigh-Ritz 法などの反復法が提案されているが、逐次的な性格から並列化効率の向上に限界がある。本稿では、コンパニオン行列に対してブロック櫻井・杉浦法を適用することで、行列次元を増やすことなく λ 行列の内部固有値を求解可能であることを示す。

2 ブロック櫻井・杉浦法

2.1 一般固有値問題

最初にブロック櫻井・杉浦法を用いた一般固有値問題 $(\lambda B - A)q = 0$ の解法を紹介する。 A, B は N 次の複素正方形行列で、複素平面の閉曲線 Γ の内部領域 G に含まれる固有値 $\lambda \in G$ を求める。簡単のため対角化可能なケースについて考える。まず行列束 $A(\lambda) = \lambda B - A$ に対してモーメント演算子 M_k を次のように定義する。

$$M_k = \frac{1}{2\pi i} \oint_{\Gamma} z^k A(z)^{-1} dz \quad (1)$$

M_k を任意のベクトルに作用させると、固有値 λ に対応する固有成分は以下の関数に従って変調される [3, 6]。

$$f_k(\lambda) = \frac{1}{2\pi i} \oint_{\Gamma} \frac{z^k}{z - \lambda} dz = \begin{cases} \lambda^k, & \lambda \in G, \\ 0, & \text{otherwise.} \end{cases} \quad (2)$$

変調の様子を図 1 に模式的に示した。式 (2) より、 M_k は G 上への射影演算子として働くと共に G 内の固有振幅に k 次の変調を加えることがわかる。すなわち線形独立な l 本の初期ベクトルのセット $V \in \mathbb{C}^{N \times l}$ を用意し、基底ベクトルのセット $S_R = \{M_0 V, M_1 V, \dots, M_{m-1} V\}$ を構築すると、 S_R には G 上の固有成分のみが残る。 $l \times m$ が G に含まれる固有値の数より大きければ、 S_R を用いて G 上の固有空間を張ることができる。同様に、初期ベクトルのセット $U \in \mathbb{C}^{N \times l}$ より基底ベクトル $S_L = \{M_0^H U, M_1^H U, \dots, M_{m-1}^H U\}$ を構築すると、 S_L は対応する左固有空間を張る。なお上付き文字 H は複素共役転置を意味する。 $l \times m$ 次元の行列 $B = S_L^H B S_R$, $A = S_L^H A S_R$ を用意すると、Petrov-Galerkin 法により G 上の内部固有値は低次元の固有値問題 $(\lambda B - A)q = 0$ の解と一致し、対応する固有ベクトルは $q = S_R q$ で与えられる。モーメント演算子が加法定理 [6] $M_i B M_j = M_{i+j}$ および $M_i A M_j = M_{i+j+1}$ を満たすことに留意すると、この低次元の行列束 $\lambda B - A$ を次

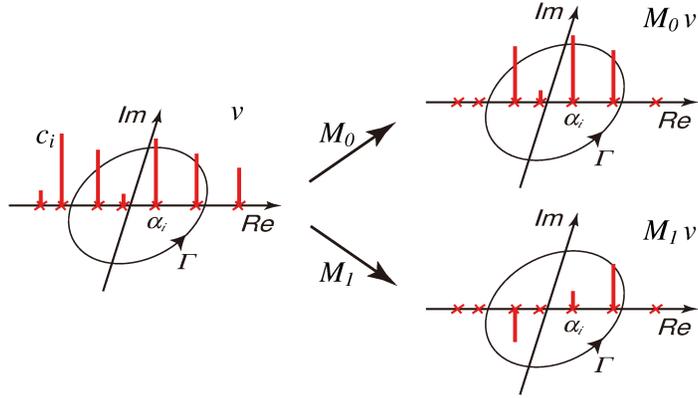


図 1: モーメント演算子による固有振幅の変化。実固有値系について、ベクトル v , $M_0 v$, $M_1 v$ の固有振幅をそれぞれヒストグラムで表示した。

のように書き下せる。

$$\lambda B - A = \lambda \begin{pmatrix} \mu_0 & \mu_1 & \cdots & \mu_{m-1} \\ \mu_1 & \mu_2 & \cdots & \mu_m \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \mu_{m-1} & \mu_m & \cdots & \mu_{2m-2} \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} \mu_1 & \mu_2 & \cdots & \mu_m \\ \mu_2 & \mu_3 & \cdots & \mu_{m+1} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \mu_m & \mu_{m+1} & \cdots & \mu_{2m-1} \end{pmatrix}, \quad (3)$$

$$\mu_k = U^H M_k V \quad (4)$$

すなわち一連の $\{\mu_k\}$ さえ計算すれば、後は無視できるほどの演算量で内部固有値問題を解くことができる。

2.2 λ 行列固有値問題

λ 行列 $A(\lambda)$ の各要素が λ について高々 d 次の多項式である場合、 $A(\lambda)$ は $A_k \in \mathbb{C}^{N \times N}$ を用いて次のように表される。

$$A(\lambda) = \sum_{k=0}^d \lambda^k A_k \quad (5)$$

λ 行列固有値問題では $A(\lambda_i)q_i = 0$ を満たす固有対 (λ_i, q_i) を求める。以下、式 (1) の $A(z)$ を形式的に λ 行列で置き換えることで、 λ 行列の内部固有値をブロック櫻井・杉浦法で求解可能なことを示す。非縮重系については既にスミスの標準形に基いた証明が与えられているが [7]、本稿ではコンパニオン行列に基いた導出について紹介する。

λ 行列が式 (5) で与えられる時、その固有値問題はコンパニオン行列を用いて線形化できる。コンパニオン行列束 $\tilde{A}(\lambda)$ を以下のように定義する。

$$\tilde{A}(\lambda) = \lambda \begin{pmatrix} I & & & \\ & \ddots & & \\ & & I & \\ & & & A_d \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} 0 & I & & \\ \vdots & & \ddots & \\ 0 & & & I \\ -A_0 & -A_1 & \cdots & -A_{d-1} \end{pmatrix} \quad (6)$$

簡単な算法で、一般固有値問題 $\tilde{A}(\lambda_i)\tilde{q}_i = 0$ の固有値は λ 行列の固有値に一致し、その固有ベクトルは $\tilde{q}_i = (q_i, \lambda_i q_i, \dots, \lambda_i^{d-1} q_i)^T$ で与えられることがわかる。 $\tilde{A}(\lambda)$ の行列次元は dN に拡大するため、特に高次の問題では固有値問題 $\tilde{A}(\lambda_i)\tilde{q}_i = 0$ をそのまま解くのは難しい。このコンパニオン行列固有値問題に対してブロック櫻井・杉浦法を適用する。ある $\lambda = z$ における線形方程式 $A(z)X = V$ の解を X とすると、 $\tilde{A}(z)$ は次の式を満たす点に注目する。

$$\tilde{A}(z) \begin{pmatrix} X \\ zX \\ \vdots \\ z^{d-1}X \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ \vdots \\ 0 \\ V \end{pmatrix} \quad (7)$$

ここから左右初期ベクトルをそれぞれ $\tilde{U}^H = (U^H, 0, \dots, 0)$, $\tilde{V} = (0, \dots, 0, V)^T$ のように用意すると、 $\tilde{U}^H \tilde{A}(z)^{-1} \tilde{V} = U^H A(z)^{-1} V$ となる。式 (1), (4) より λ 行列について計算したモーメント μ_k がコンパニオン行列束のものと一致することから、式 (3) を用いて λ 行列の内部固有値問題を解くことができる。固有ベクトルについても前節と同じ手順で求められる。このブロック櫻井・杉浦法を用いた手法ではコンパニオン行列を直接扱わないため、 $d \gg 1$ の場合も一般固有値問題と同等の演算量で計算でき、一般には $A(\lambda)$ の各要素が G 近傍で正則であれば適用可能である。

2.3 数値解法

実際の計算では式 (1) のコーシー積分の評価に n 点の求積公式を用いる。モーメント μ_k は z_j を求積点、 w_j を対応する重みとして以下のように近似される。

$$\bar{\mu}_k = \sum_{j=1}^n w_j z_j^k U^H A(z_j)^{-1} V \quad (8)$$

式 (8) を評価する際、 n 本の線形方程式 $A(z_j)X_j = V$ を解く必要がある。この線形解法はブロック櫻井・杉浦法で最も演算量の多い箇所であるが、各線形方程式は互いに独立なため同時並行に解くことができる。さらに下位の並列性として各線形方程式には並列解

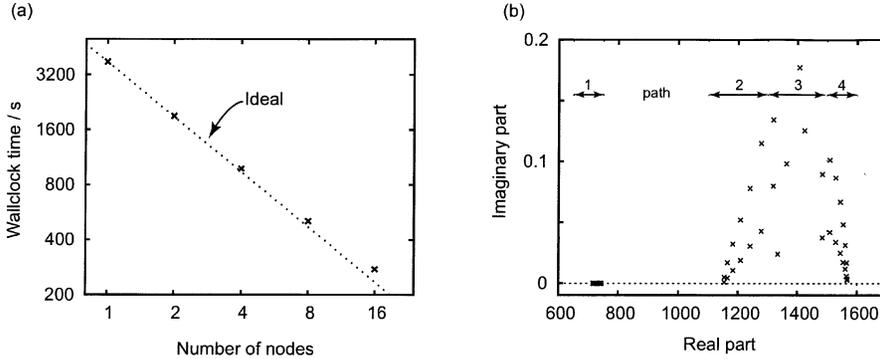


図 2: (a) 非線形ブロック櫻井・杉浦法の並列性能。(b) 非線形固有値の計算結果。4 つの積分領域を併せて示した。

法を適用可能で、また上位の並列性として複数のコーシー積分を同時に評価し、広範囲の固有値を一気に求めることもできる。一般に線形解法の並列性能には限界があるため、ブロック櫻井・杉浦法における階層的な並列性は昨今の並列計算機を活用する上で大きな優位点となる。

3 計算例

線形加速器の設計に現れる非線形固有値問題 [8] を計算例として示す。

$$A(\lambda)q = 0, \quad A(\lambda) = K - \lambda M + i \sum_{j=1}^t \sqrt{\lambda - \sigma_j^2} W_j \quad (9)$$

K, M, W_j は $N = 1,100,242$ 次元の実対称疎行列で、パラメータは $t = 1, \sigma_1 = 0.0$ にとった。 $\Re(\lambda) \gtrsim 630$ でかつ実軸近傍に分布する固有値を求める。

積分経路 Γ には、 $\gamma = 700$ を中心とする半径 $\rho = 50$ の円を虚軸に沿って $1/10$ に潰した楕円を用いた。求積公式には $n = 32$ 点の台形公式を用い、数値精度の関係から式 (1) のモーメント重率 z^k を $(\frac{z-\gamma}{\rho})^k$ で置き換えた。初期ベクトルは $l = 8$ 本用意し、 $m = 8$ として $2m - 1 = 15$ 次までのモーメントを計算した。数値近似の結果 G 辺縁の固有値が計算結果に混入するため、 l, m は $l \times m = 64$ が G 内の固有値数よりも十分大きくなるよう設定した。計算は筑波大の T2K-Tsukuba システム上で実施した。各計算ノードは 4 ソケット \times 4 コアの Opteron (Barcelona 2.3 GHz) CPU と 32 GB のメモリを搭載し、互いに 4 本の DDR InfiniBand (計 8 GB/s) で接続されている。線形解法には直接法を用い、方程式あたり 8 コアを使用して PARDISO パッケージ [9] で処理した。積分一本あたり $n = 32$ 本の方程式を解くので、最大 16 ノードまで使用可能である。

使用ノード数を 1 ~ 16 の範囲で変化させ、計算の所要時間を図 2(a) にプロットした。ほぼ理想的な並列性能が出ていることがわかる。計算時間のほとんどは線形解法に費さ

れ、16 ノードの計算でも 90 % 近くを占めた。この割合は系の規模の増大と共にさらに大きくなると予想される。

広範囲の固有値を求めるため、4 本の積分経路を用意し、個別に 16 ノードずつ割当てて処理した。得られた固有値の分布を図 2(b) に示す。積分経路 1~4 について、それぞれ 9, 12, 11, 14 個の内部固有値を得た。固有対の相対残差ノルムは全て 4×10^{-13} 以下であることを確認している。計算は積分経路毎に完全に独立なため、計算機資源を同時に確保する必要はないが、今回は計 46 個の固有値の計算に 64 ノード (1024 CPU コア) を使い、4.7 min で処理した。

4 まとめ

一般固有値問題の並列解法としてブロック櫻井・杉浦法を紹介し、この手法が非線形固有値問題のひとつ、入行列固有値問題に拡張可能であることを示した。大規模な非線形固有値問題にはこれまで効率的な解法がなかったため、物理現象は一般に線形行列を用いてモデル化され、必要に応じて非線形反復法などを補ってきた。ブロック櫻井・杉浦法を用いると入行列の固有値を線形固有値問題と同等の演算量で求解可能なので、今後入行列を用いた定式化の探索が望まれる。ブロック櫻井・杉浦法はまたアルゴリズムの階層的構造を反映して高い並列化効率を達成できるので、大規模な並列計算機を活用したより精緻な計算が可能になる。ブロック櫻井・杉浦法のライブラリとして [4], [5] などを用意しているので、活用していただければ幸いです。

謝辞

本研究は JSPS 科研費 21246018, 25286097 の助成を受けたものです。

参考文献

- [1] Lehoucq, R. B., Maschhoff, K., Sorensen, D. and Yang, C.: *ARPACK Software Package* (1996). <http://www.caam.rice.edu/software/ARPACK>.
- [2] Sakurai, T. and Sugiura, H.: A projection method for generalized eigenvalue problems using numerical integration, *J. Comp. Appl. Math.*, Vol. 159, pp. 119–128 (2003).
- [3] Ikegami, T., Sakurai, T. and Nagashima, U.: A filter diagonalization for generalized eigenvalue problems based on the Sakurai-Sugiura projection method, *J. Comp. Appl. Math.*, Vol. 233, pp. 1927–1936 (2010).
- [4] Sakurai, T. et al.: *Development of an Eigen-Supercomputing Engine using a Post-Petascale Hierarchical Model* (2011). <http://h4es.cs.tsukuba.ac.jp>.

- [5] Ikegami, T.: *Bloss Eigensolver* (2012). <http://staff.aist.go.jp/t-ikegami/Bloss>.
- [6] Ikegami, T. and Sakurai, T.: Contour integral eigensolver for non-Hermitian systems: a Rayleigh-Ritz-type approach, *Taiwanese J. Math.*, Vol. 14, pp. 825–837 (2010).
- [7] Asakura, J., Sakurai, T., Tadano, H., Ikegami, T. and Kimura, K.: A numerical method for polynomial eigenvalue problems using contour integrals, *Japan J. Indust. Appl. Math.*, Vol. 27, pp. 73–90 (2010).
- [8] Lee, L.-Q., Li, Z., Ng, C.-K. and Ko, K.: Omega3P: a parallel finite-element eigenmode analysis code for accelerator cavities, Technical Report SLAC-PUB-13529, Stanford Linear Accelerator Center (2009).
- [9] Schenk, O. and Gärtner, K.: Solving unsymmetric sparse systems of linear equations with PARDISO, *Fut. Gen. Comp. Sys.*, Vol. 20, pp. 475–487 (2004).