KYUSHU UNIVERSITY 2011
100th Anniversary

大規模科学計算向け
汎用数値ソフトウェア基盤の開発

九州大学情報基盤研究開発センター

西田　晃

KYUSHU
UNIVERSITY

ライブラリ開発の背景

大規模科学技術計算を取り巻く環境の変化

- インターネット登場以前 ～
  - 計算機センター等で開発，商用ライブラリ
  - 分野ごとに個別に開発
- ネットワーク技術の発達
  - コンピュータの処理能力は18ヶ月で2倍に（Moore の法則）
  - 通信網の帯域幅は6ヶ月で2倍に（Gilder の法則）
  - ネットワーク性能が向上
  - オープンな環境で開発が可能に
- パーツとして利用できるオープンなソフトウェア基盤の整備が重要に

研究実施の概要（1）

平成14年度発足JST CREST「シミュレーション技術の革新と実用化基盤の構築」領域で初年度に採択，5カ年プロジェクトとして研究を開始

- 反復解法，高速関数変換（特にFFT），数値ライブラリを呼び出すためのミドルウェア，及びこれらの効果的な計算機上への実装手法を対象
- モジュール化されたプログラミングインタフェースを採用
- 並列化に適したアルゴリズムで構成，高並列な環境での使用に耐えうるライブラリにする
- ソースコードを含むソフトウェアは無償公開とし，ユーザの要望を反映しつつ更新

研究実施の概要（2）

- 平成14年度～ 東京大学を拠点として研究開発
- 平成15年度～ IBM ワトソン研究所と Blue Gene/L の利用に関する共同研究契約
- 平成18年度～ 地球シミュレータセンター共同プロジェクト
  → ベクトル計算機を含む高並列環境に対応
- 平成20年度～ 九州大学情報基盤研究開発センターを拠点として研究開発
  - 主に分子科学，構造解析への応用を念頭に固有値解法を実装

CREST事業 参加メンバー（H14～H19）

研究代表者

- 西田 晃 (東京大学／中央大学／九州大学)

実装手法研究グループ

- 西田 晃 (東京大学／中央大学／九州大学)
- 長谷川 秀彦 (筑波大学)
- 須田 礼仁 (東京大学)
- 中島 研吾 (高度情報科学技術研究機構／東京大学)
- 高橋 大介 (筑波大学)
- 小武守 恒 (科学技術振興機構／東京大学／TCAD International)
- 梶山 民人 (科学技術振興機構／東京大学／Universidade Nova de Lisboa)
- 額田 彰 (科学技術振興機構／東京大学／東京工業大学)
- 藤井 昭宏 (東京大学／工学院大学)
- 蓬来 祐一郎（東京大学／産業技術総合研究所）

反復解法研究グループ

- 西田 晃 (東京大学／中央大学／九州大学)
- 長谷川 秀彦 (筑波大学)
- 張 紹良 (東京大学／名古屋大学)
- 中島 研吾 (高度情報科学技術研究機構／東京大学)
- 阿部 邦美 (理化学研究所／岐阜聖徳学園大学)
- 伊藤 祥司 (筑波大学／理化学研究所)
- 藤井 昭宏 (東京大学／工学院大学)
- 小武守 恒 (科学技術振興機構／東京大学／TCAD International)
- 曽我部 知広 (東京大学／名古屋大学)

高速関数変換グループ

- 須田 礼仁 (東京大学)
- 高橋 大介 (筑波大学)
- 額田 彰 (科学技術振興機構／東京大学／東京工業大学)

研究実施の概要（3）

線型方程式

- 特に構造解析，流体計算などで大規模計算の需要
- 反復解法とその前処理手法について研究
  - 計算機環境は年々高並列に
    →スケーラブルなアルゴリズムが必要
  - マルチレベルな解法として，代数的マルチグリッド (AMG) 法を前処理として提案（2002，藤井昭宏，西田晃，小柳義夫）
- これらを実装し，疎行列格納形式に対応した並列反復解法ライブラリ Lis (A Library of Iterative Solvers for Linear Systems，仏語でユリの意) を開発（小武守恒，藤井，長谷川秀彦，西田）．ソフトウェアを公開（プロジェクトホームページ http://www.ssisc.org/ にて配布）

研究実施の概要（4）

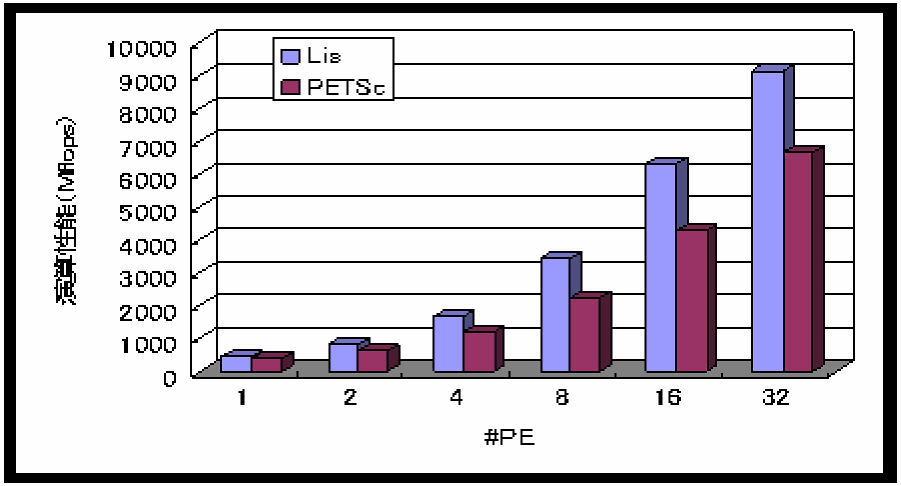
固有値解法
- 量子化学, 構造計算等で大規模行列の固有値を数値的に求める必要
- 従来の解法
  - Lanczos 法，Davidson 法，部分空間反復法など
- Jacobi-Davidson 法の並列実装（2002）
  - Davidson 法の改良版
  - 密行列版アルゴリズムを Level 2 BLAS（zgemv）の並列化により実装
  - スケーラビリティに若干問題
- 共役勾配法の利用（2003）
  - よりスケーラブルな解法を
  - 一般化固有値問題を Rayleigh 商の極値問題として解く
    - Rayleigh-Ritz 法と前処理（近似逆行列による逆反復）とを組み合わせることにより，Lanczos 法系の解法と比較してより高速に固有値・固有ベクトルを計算
    - 並列反復解法ライブラリ（連立一次方程式用）により実装が可能
    - アルゴリズムがシンプルでスケールしやすい

反復解法（1）

- まずは連立一次方程式解法を
  - 多くのアプリケーション
  - 反復解法とその前処理手法に関する研究成果を実問題に適用したい
  - 多数の解法，前処理，疎行列格納形式に対応，解法，アーキテクチャ間の比較を容易に
  - 固有値解法でも利用（shift and invert）

反復解法(2)

- 反復解法ライブラリ Lis (a Library of Iterative Solvers for Linear Systems)をOpenMP 版から開発, MPI版, MPI+OpenMPハイブリッド版に拡張.
- IBM T. J. Watson 研究所との共同研究による Blue Gene システム16,384ノードでの動作検証では, 共役勾配法について16,384ノードまで線形な性能向上を実現.
- 地球シミュレータ上では, 行列格納形式間の変換(CRS→JDS)をサポートすることにより, ベクトル化率99.1パーセント, 並列化率99.9パーセントを実現.

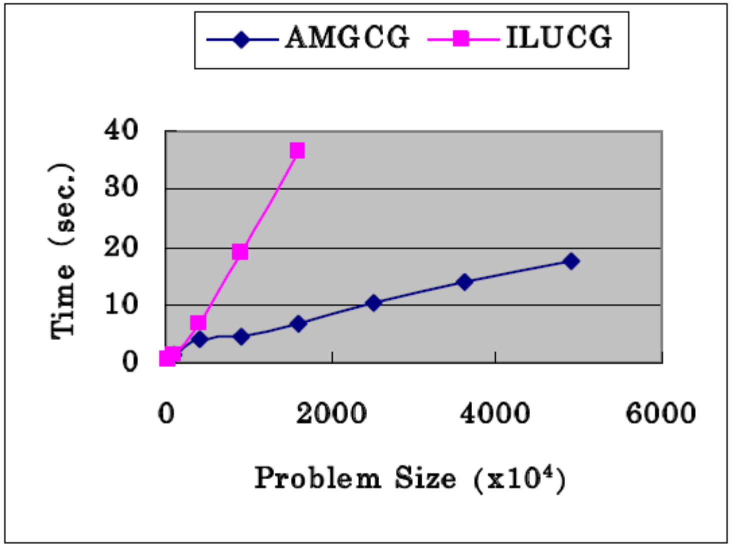


3次元 Poisson 方程式(次数100万元, 非零要素数26,207,180)を用いた MPI 版 Lis と他ライブラリ(PETSc)との共役勾配法の性能比較例(SGI Altix 32ノード上で評価)

反復解法(3)

代数的マルチグリッド前処理の採用

A. Nishida, H. Kotakemori, A. Fujii, and A. Nukada, Development of Scalable Software Infrastructure on Blue Gene Systems, In *Report on the Juelich Blue Gene/L Scaling Workshop 2006 (FZJ-ZAM-IB-2007-02)*, John von Neumann Institute for Computing, Research Centre Juelich, pp.13-14, February, 2007.



固有値解法（1）

応用1 : 量子力学

考える系のハミルトニアンを H, x を状態ベクトルとすると, Schroedinger 方程式は

$Hx=\varepsilon x$

ε : エネルギー固有値またはエネルギー準位.

ψ : 系の波動関数. 固有ベクトル x に相当.

エネルギー固有値が求まる場合, 波動関数はエネルギー固有状態（量子状態）になっている.

- 電子状態計算（電子構造計算, バンド計算）
  - 近似的手法
    - 密度汎関数法、局所密度近似、一電子近似、断熱近似
  - 第一原理計算, 非経験的 (ab initio) 分子軌道法
    - Ab initio タンパク質構造予測 (protein folding)
- 低いエネルギー準位ほど安定

固有値解法（2）

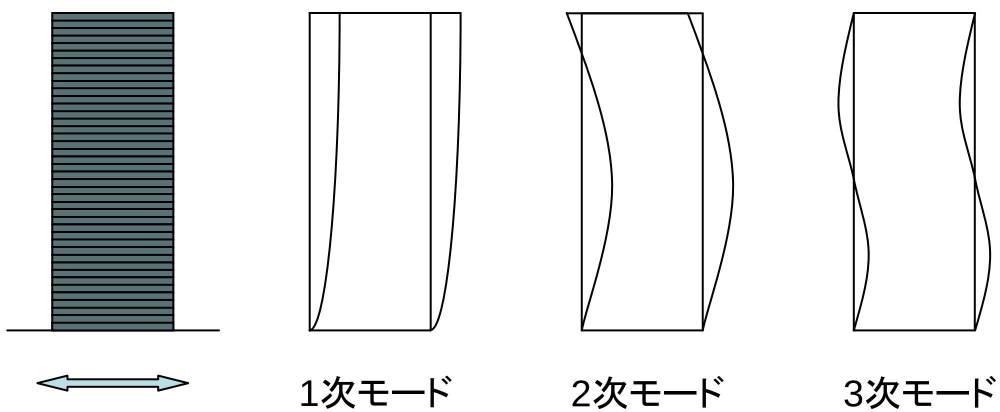
応用2：振動解析

固有方程式

$|A-\lambda I|x=0$

λは固有振動数，xは固有振動モードに対応

<u>低次のモードほど重要</u>



固有値解法(3)

– 全固有値・固有ベクトルの計算が必要な場合 … O(n^3) (QR法)
– 少数の固有値・固有ベクトルを求めればよい場合 … O(n^2)
– 問題が大規模になると計算量に大差
– 後者 → Krylov 部分空間法
  - べき乗法・逆反復法・部分空間反復法
  - Lanczos 法
  - (Jacobi-) Davidson 法
  - 共役勾配法
  - メモリ使用量少(疎行列性を保持)
– 今年度は Lis 上にこれらの解法を実装

Krylov 部分空間法（1）

べき乗法・逆反復法・部分空間反復法 実装済

– サイズn の大規模実行列A, B に関する一般化固有値問題

$Ax = \lambda Bx$

の最大固有値を計算

– クリロフ部分空間を生成するr 個の独立なベクトルを

$U = [u_1, \ldots, u_r], 1 \le r < n$

とすると, 正規直交基底の選び方によって解法は2種に分類

– $S_l = A^l S, l = 1, 2, \ldots$

として,

$r = 1$ の場合はべき乗法（逆反復法ではA^{-1}を適用）

$r > 1$ ならば部分空間反復法

Krylov 部分空間法（2）

Lanczos 法

- $\{u_1, \ldots, u_r\}$ によって生成される Krylov 部分空間を

  $K_l = \mathrm{lin}(S, AS, \ldots, A^{l-1}S)$

  とすれば

  - A が Hermite 行列ならば Lanczos 法（r = 1）, 実装済
  - ブロック Lanczos 法（r > 1） 未実装
  - A が非 Hermite 行列ならば Arnoldi 法（r = 1）,未実装

Krylov 部分空間法(3)

(Jacobi–) Davidson 法 未実装

- 最大固有値の計算

  正規直交基底 $[v_i]_k$ で張られる部分空間 $K = \mathrm{span}[v_1, ..., v_k]$ 上で,

  行列 A の近似固有対，すなわち Ritz 値 θ_k 及び Ritz ベクトル u_k を計算

- u_k を更新するためには K の次元を拡張する必要

  Davidson 法では残差

  $r = Au_k - \theta_k u_k$

  について，修正方程式と呼ばれる以下のような方程式を解く

  $M_k t = r,\ M_k = D_A - \theta_k I$ (D_A は A の対角成分)

  t を K と直交化して v_{k+1} を得る

  $V_{k+1} = [v_1, ..., v_{k+1}]$ と置けば，新しい Ritz 対 (θ_{k+1}, u_{k+1}) は行列

  $H_{k+1} = V^*_{k+1} A V_{k+1}$

  の固有対として計算される

  ($M_k = I$ の場合は Lanczos/Arnoldi 法と同一)

- Jacobi–Davidson 法では u_k の直交補空間から更新のための成分を取り出してより精度を高める

Krylov 部分空間法(4)

共役勾配法(1) 実装済

- 非線形最適化問題への共役勾配法の適用
- 1951 年 Hestenes ら
- 2次形式 $F(x) = a + b^T x + 1/2 x^T A x$ の局所的な最小点を考える
- 各段階の試行点 x から F の値が減少する方向へ探索を進めると, 各段の方向がすべて共役ならば, F の最小点は任意の出発点 $x^{(1)}$ から有限回の降下ステップの計算によって求められる

共役勾配法（2）

以上の関係から, 実対称行列A, B に関する一般化固有値問題

$$Ax = \lambda Bx$$

の最小固有値, もしくはこれと同値な問題

$$Bx = \mu Ax,\ \mu = 1/\lambda$$

の最大固有値の計算を, Rayleigh 商

$$\mu(x) = x^T Bx \ / \ x^T Ax$$

の極値問題に帰着.

最急勾配方向が

$$\nabla \mu(x) \equiv g(x) = 2(Bx - \mu Ax)/x^T Ax$$

であることから, Rayleigh 商を局所的に最適化する係数α_iを用いて，共役勾配法

$$x_{i+1} = x_i + \alpha_i p_i,$$

$$p_i = - g_i + \beta_{i-1} p_{i-1},\quad \beta_{i-1} = (g^T_i g_i) \ / \ (g^T_{i-1} g_{i-1})$$

により固有値を計算.

共役勾配法（3）

1980 年代以降の Knyazev らの研究

– 適切な前処理と組み合わせることによってより高速に固有値を計算

前処理付固有値解法のアルゴリズムは, 前処理行列T $\approx A^{-1}$, TA, TB に関する m_k 次多項式 P_{m_k} (TA,TB) を用いて以下のように行う

（１）初期ベクトル$x^{(0)}$ を選択する

（２）m_k 回の反復により$x^{(k)} = P_{m_k}(TA,TB)x^{(0)}$ を計算する

（３）$\mu^{(k)} = (x^{(k)},Bx^{(k)}) \,/\, (x^{(k)},Ax^{(k)})$ を計算する

共役勾配法（4）

前処理付共役勾配法の反復は，適当な初期ベクトル$x^{(0)}$と

対応する修正ベクトル $p^{(0)} = 0$ を用いて，

$$\mu^{(i)} = (x^{(i)}, Bx^{(i)}) \ / \ (x^{(i)}, Ax^{(i)})$$

$$r = Bx^{(i)} - \mu^{(i)} Ax^{(i)}$$

$$w^{(i)} = Tr$$ （＝近似的な逆反復）

$$x^{(i+1)} = w^{(i)} + \tau^{(i)} x^{(i)} + \gamma^{(i)} p^{(i)}$$

$$p^{(i+1)} = w^{(i)} + \gamma^{(i)} p^{(i)}$$

とする

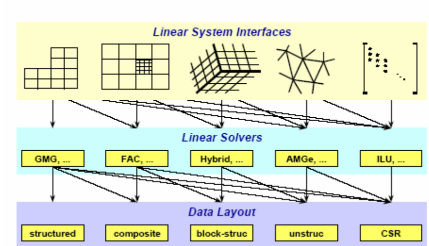
行列束$Bx^{(i)} - \mu^{(i)} Ax^{(i)}$ に関する span [$w, x^{(i)}, p^{(i)}$] 上の Ritz 値, Ritz ベクトルを Rayleigh−Ritz 法により計算

- 最大 Ritz 値に対応する Ritz ベクトルを$x^{(i+1)}$ とする
- 係数 $\tau^{(i)}$, $\gamma^{(i)}$ の値は，span [$w, x^{(i)}, p^{(i)}$] 上での局所的な最適解をもとに計算

共役勾配法(5)

他の実装（公開ライブラリ）

- LOBPCG （locally optimized block preconditioned conjugate gradient method)
  - BLOPEX (Block Locally Optimal Preconditioned Eigenvalue Xolvers)
    - Hypre 版
      - » Lawrence Berkeley 米国立研究所
      - » 疎行列向け並列前処理付線形解法のためのアルゴリズムライブラリ
    - Matlab 版



- SLEPc(Scalable Library for Eigenvalue Problem Computations)
  - Valencia 工科大学
  - PETSc をベースとして実装

Krylov 部分空間法（5）

非対称問題への拡張（1）

- べき乗法，逆反復法系の解法は特にアルゴリズムの変更なく適用可能
  実装済
- 共役勾配法系

  1989 年に末富，関本らにより提案

  末富英一，関本博，多群中性子拡散方程式に現れる非対称行列系の一般固有値問題に対するORTHOMIN（1）法の適用，情報処理学会論文誌，30(1989)，pp. 661−667. 未実装

  対称問題で用いた Rayleigh 商

  $$\mu(x) = x^T Bx \;/\; x^T Ax$$

  の代わりに，残差

  $$r = \lambda Bx - Ax,\quad \lambda = (Ax,Bx)/(Bx,Bx)$$

  を用いて汎関数

  $$F(r) = (r, r)$$

  の極値問題に帰着し，共役残差法（Orthomin(1)）を適用

- 非対称問題への拡張（2）
- 共役勾配法

まず初期値$x^{(0)}$から

$$\lambda^{(0)} = (Ax^{(0)}, Bx^{(0)}) / (Bx^{(0)}, Bx^{(0)}),$$

$$r^{(0)} = \lambda^{(0)} Bx^{(0)} - Ax^{(0)},$$

$$p^{(0)} = r^{(0)}$$

を求め,

非対称問題への拡張（3）

以下の反復

$\alpha^{(i)} = [(r^{(i)},Ap^{(i)}) - \lambda^{(i)}(r^{(i)},Bp^{(i)})] / [(Ap^{(i)},Ap^{(i)}) - 2\lambda^{(i)}(Ap^{(i)},Bp^{(i)})$

$+(\lambda^{(i)})2(Bp^{(i)},Bp^{(i)})],$

$x^{(i+1)} = x^{(i)} + \alpha^{(i)}p^{(i)},$

$\lambda^{(i+1)} = (Ax^{(i+1)},Bx^{(i+1)})/(Bx^{(i+1)},Bx^{(i+1)}),$

$r^{(i+1)} = \lambda^{(i+1)}Bx^{(i+1)}-Ax^{(i+1)},$

$\beta^{(i)} = -[(Ar^{(i+1)},Ap^{(i)}- \lambda^{(i+1)}[(Ar^{(i+1)},Bp^{(i)})+(Ap^{(i)},Br^{(i+1)})]$

$+(\lambda^{(i+1)})2(Br^{(i+1)},Bp^{(i)})] / [(Ap^{(i)},Ap^{(i)}) - 2\lambda^{(i+1)}(Ap^{(i)},Bp^{(i)})$

$+(\lambda^{(i+1)})2(Bp^{(i)},Bp^{(i)})],$

$p^{(i+1)} = r^{(i+1)} + \beta^{(i)}p^{(i)}$

を相対残差

$\varepsilon^{(i)} = \|\lambda^{(i)}Bx^{(i)} - Ax^{(i)}\|_2 / \|\lambda^{(i)}Bx^{(i)}\|_2$

が十分小さくなるまで繰り返す.

実装方針

Lis の API を拡張

- 並列要素演算（主要部分は疎行列–ベクトル積）
- 入出力機能（Matrix Market, Harwell–Boeing 形式等に対応）
- 前処理
  - Jacobi, 対角スケーリング前処理
    - 対角スケーリングは前処理としては最も単純な手法
    - スケーラビリティに関しては良好
  - 近似逆行列前処理
  - 不完全LU 分解前処理
  - Smoothed Aggregation MG 前処理

Lis を用いたプログラミング例

```
LIS_MATRIX     A;
LIS_VECTOR     b,x;
LIS_SOLVER     solver;
int            iter;
double         times,itimes,ptimes;

lis_initialize(argc, argv);
lis_matrix_create(LIS_COMM_WORLD,&A);
lis_vector_create(LIS_COMM_WORLD,&b);
lis_vector_create(LIS_COMM_WORLD,&x);
lis_solver_create(&solver);
lis_input(A,b,x,argv[1]);
lis_vector_set_all(1.0,b);
lis_solver_set_optionC(solver);
lis_solve(A,b,x,solver);
lis_solver_get_iters(solver,&iter);
lis_solver_get_times(solver,&times,
printf("iter = %d time = %e (p=%e
lis_finalize();
```

Lis ビルド手順

ファイルのダウンロード

http://www.ssisc.org/lis/

ファイルの展開

>gunzip -c lis-1.2.0.tar.gz | tar xvf –

configure スクリプトの実行

>./configure

make の実行

>make

インストール

>make install

configure オプション	
OpenMP を利用	--enable-omp
MPI を利用	--enable-mpi
FORTRAN API を利用	--enable-fortran
SA-AMG 前処理を利用	--enable-saamg
4倍精度演算を利用	--enable-quad
地球シミュレータを利用（クロス環境）	TARGET=nec_es
NEC SX-9 を利用（クロス環境）	TARGET=nec_sx9_cross

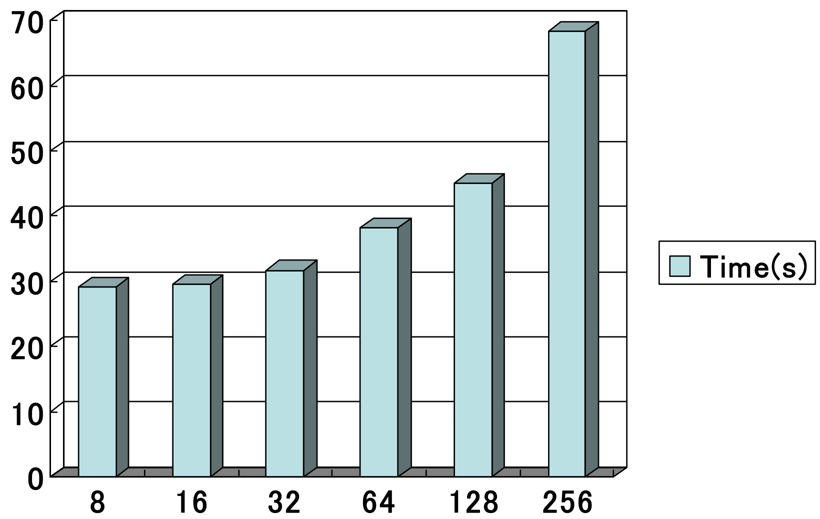
性能評価（1）

- 対角要素2，劣対角要素1の係数行列について最大固有値の計算時間を評価
  - 検証が容易（固有値分布 0〜4）
  - 非零要素数は多次元の場合に比べて少ない（並列化効率は相対的に低下）
- 相対残差ノルムの閾値は10^{-5}
- 前処理は並列局所 ILU(0) を使用
- 富士通 PRIMEQUEST 580 (1.6GHz dual core Intel Itanium 2 processor ×32）4ノード上で Flat MPI 版を weak scaling により評価
- 地球シミュレータ，東北大学 SX-9 上にも移植済み

性能評価（２）

べき乗法（最大固有値）

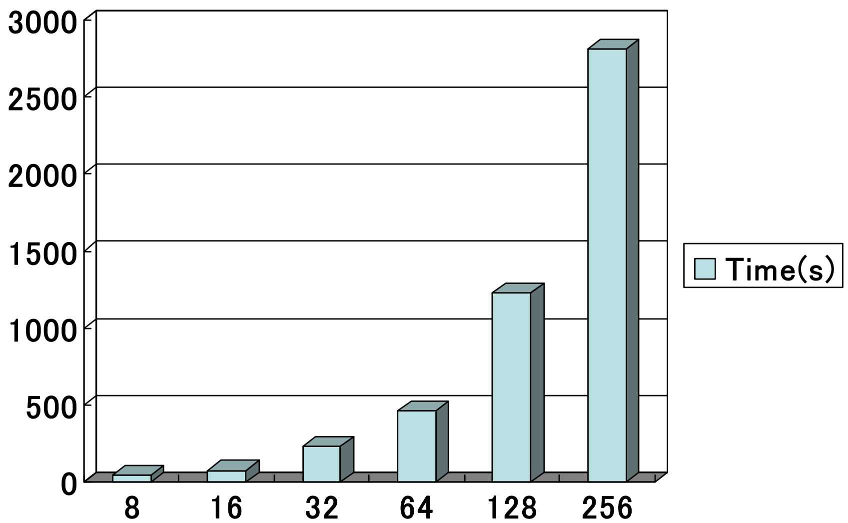
Problem Size	500,000	1,000,000	2,000,000	4,000,000	8,000,000	16,000,000
#cores	8	16	32	64	128	256
Time(s)	29.1	29.5	31.7	38.2	45.0	68.4



性能評価(3)

Lanczos 法（最小固有値）

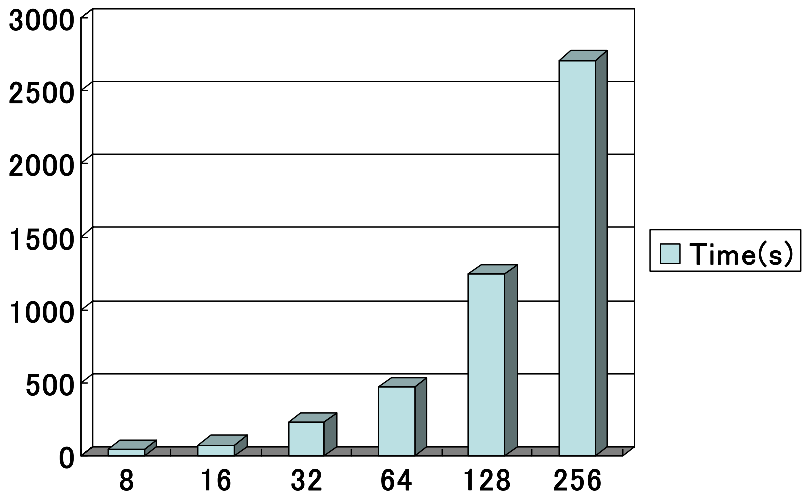
Problem Size	500,000	1,000,000	2,000,000	4,000,000	8,000,000	16,000,000
#cores	8	16	32	64	128	256
Time(s)	43.4	77.6	232	467	1230	2810



性能評価（4）

逆反復法（最小固有値）

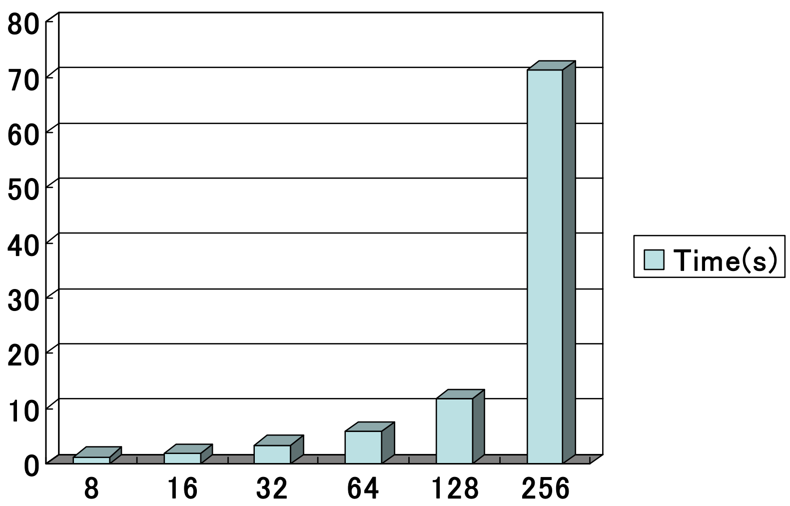
Problem Size	500,000	1,000,000	2,000,000	4,000,000	8,000,000	16,000,000
#cores	8	16	32	64	128	256
Time(s)	43.6	77.7	230	470	1245	2710



性能評価(5)

共役勾配法（局所 ILU 前処理）

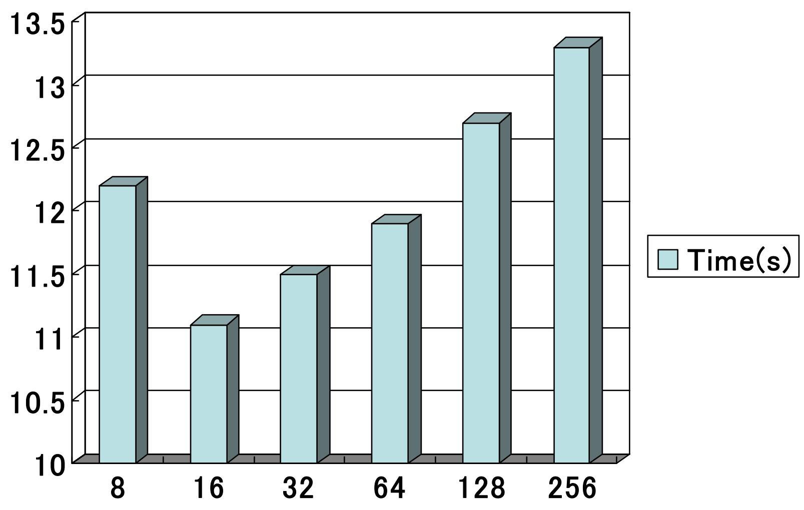
Problem Size	500,000	1,000,000	2,000,000	4,000,000	8,000,000	16,000,000
#cores	8	16	32	64	128	256
Time(s)	1.27	1.89	3.39	5.79	11.7	71.3



性能評価（6）

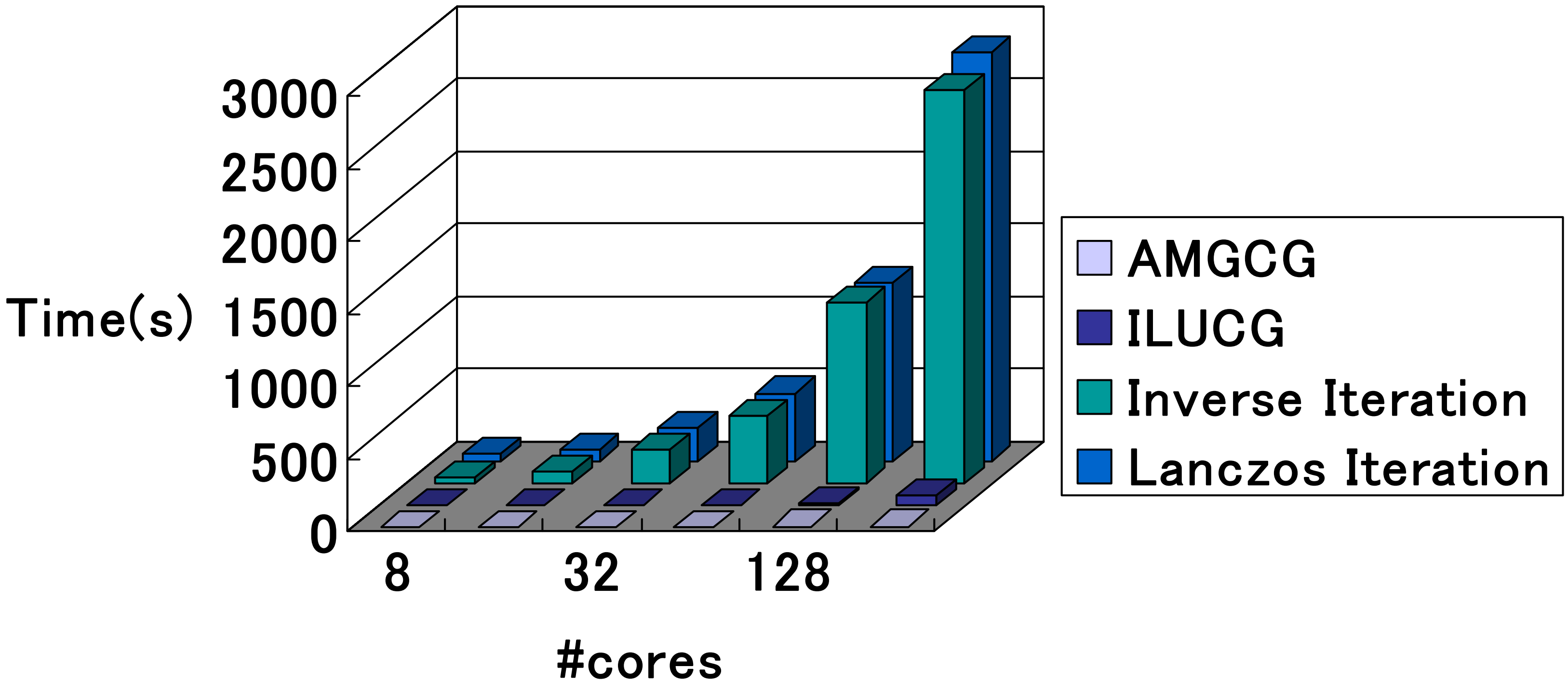
共役勾配法（AMG 前処理）

Problem Size	500,000	1,000,000	2,000,000	4,000,000	8,000,000	16,000,000
#cores	8	16	32	64	128	256
Time(s)	12.2	11.1	11.5	11.9	12.7	13.3



性能評価(7)

各解法による最小固有値の計算



まとめ

- 逆反復法，共役勾配法の計算時間の多くは連立一次方程式解法（$A^{-1}x$の計算），特に前処理（今回の場合は局所ILU）．ただし収束特性は問題（固有値分布，要求精度にも）依存.
- 共役勾配法は精度に問題ある場合あり.
- Lanczos 法は内部で逆反復法を使用.
- スケーラビリティはAMG 前処理が最も良い.

今後のスケジュール

- 解法の拡充・アップデート
  - 1.2.0を2008年11月12日に公開済み
  - 公開ページ http://www.ssisc.org/
  - 非対称問題への対応
    - 安定な収束を保証する必要
      - 末富英一, 関本博. 多群中性子拡散方程式に現れる非対称行列系の一般固有値問題に対するORTHOMIN(1)法の適用, 情報処理学会論文誌, Vol.30 No.05 – 012. (ILUCR)
- 大規模アプリケーションでのテスト
- 大規模環境でのテスト