4J-5

ブロックグラムシュミット法を用いたQR分解の高速化

松尾 洋一,　野寺 隆
慶應義塾大学理工学部

概 要

本発表は，グラムシュミットのブロック化によるQR分解を提案し，数値実験により大規模問題に対して有効であることを示す．

1　はじめに

グラムシュミット法は，正規直交基底を作るアルゴリズムである．ここで，x を n 次元ベクトルとして，与えられた直交行列 Q に対して，グラムシュミット法の各ステップのアルゴリズムは，以下のようになる．

$$\widehat{y}=\left(I-QQ^T\right)x=x-Q\left(Q^Tx\right)\equiv x-Qr$$

これを使って行列 X の各列を順次直交化すると，次のようになる．

$$X=QR \tag{1}$$

ただし，R は上三角行列である．この分解を使うことによって，固有値問題や最小二乗問題を解くことができることはよく知られている．

近年，ブロックグラムシュミット法に関する様々な研究が行われてきた．Stewart[1] は，ブロックグラムシュミット法と通常のグラムシュミット法を組み合わせた再直交化を提案した．さらに，Stewart は行列 X が悪条件である場合には，列の値をランダムな値に置き換える手法を用いて，QR分解を安定に行う手法を提案している．Silva[2] は，ブロックグラムシュミット法に関して，修正グラムシュミット法とハウスホルダー変換との比較を行っている．また，Vanderstraeten [3] は，ブロックグラムシュミット法の並列化について提案している．

本稿では，最初に通常のグラムシュミット法について述べ，次に Stewart[1] に基づくブロックグラムシュミット法を提案する．最後に，数値実験について述べ，ブロックグラムシュミット法の有効性を示す．

2　グラムシュミット法

再直交化を含むグラムシュミット法は，行列が大規模な場合や条件が悪い場合でも直交行列を生成できることが多い．まず，x を以下のように分解する．

$$x=x_Q+x_\perp$$

ただし，x_Q は x の Q 方向の成分，$x_\perp$ は Q に直交する成分である．さらに

$$\sigma=\frac{\|x_Q\|}{\|x\|},\quad \gamma=\frac{\|x_\perp\|}{\|x\|}$$

とすると，$\widehat{y}$ は以下のようになる．

$$\widehat{y}=x_\perp+e,\quad \frac{\|e\|}{\|x\|}\equiv\epsilon$$

ただし，ϵ は十分小さい数である．この式より

$$\|\widehat{y}\|\leq\|x_\perp\|-\|e\|,\|\widehat{y}_Q\|\leq\|e\|$$

となるので，$\widehat{\sigma},\hat{\gamma}$ を $\widehat{y}$ に対して同様に定義すると，次式が成立する．

$$\widehat{\sigma}\leq\frac{\|e\|}{\|x_\perp\|-\|e\|}\leq\frac{\epsilon}{\gamma-\epsilon}=\frac{\epsilon}{\sqrt{1-\sigma^2}-\epsilon} \tag{2}$$

例えば，$\gamma\leq 3\epsilon$ の時，2回グラムシュミット法を適用したあとの Q 方向の成分 $\tilde{\sigma}$ は，式（2）より

$$\tilde{\sigma}\leq\sqrt{\frac{4}{3}}\epsilon\simeq 1.2\epsilon$$

となる．これより再直交化の有効性がわかる．よって，この再直交化をブロック化したアルゴリズムに適用することができる．

3　ブロックグラムシュミット法

通常のグラムシュミット法は，行列 X の列を順々に直交化するものである．ブロック化は，X を列方向に何分割かし，分割してできたブロック行列 X_{block} ごとに直交化することである．ブロッ

クグラムシュミット法は次のようになる．

[ブロックグラムシュミット法]

1. block gram-schmidt step
2. $R_{12} = Q^T * X_{\mathrm{block}}$;
3. $\widehat{Y} = X_{\mathrm{block}} - Q * R_{12}$;
4. orthogonalize $\widehat{Y}$ by using gram-schmidt algorithm. ($\widehat{Y} = YR_{22}$);
reorthogonalize, if necessary.
5. $Q = (Q \;\; Y)$;
6. combine R_{12} andR_{22} into R.

ただし，4. において$\widehat{Y}$を直交化しているのは，一般に2，3行目だけで，Qに対しては直交化されても$\widehat{Y}$の列どうしは互いに直交化されないためである．

次に，ブロック化によってどの程度計算コストを削減できるのか，1回の掛け算を1ユニットとして計算して考える．$X : n \times p$とし，ブロックサイズをm（簡単のためpを割り切る数とする）とする．また全ての列に対し再直交化すると仮定する．グラムシュミット法は，$k+1$ステップ目の計算量が$(nk+kn) \times 4$なので，$k = 1, \cdots, p-1$であることを考えると，次のようになる．

$$S_{gs} = \sum_{k=1}^{p-1} (nk+kn) \times 4 = 2np\,(p-1) \tag{3}$$

同様に，ブロックグラムシュミット法の計算量は，直交化の部分が次のようになる．

$$\sum_{h=1}^{\frac{p}{m}-1} ((hm)mn + (hm)mn) \times 4 = 2np\,(p-m)$$

次に，$\widehat{Y}$を直交化する部分が，以下のようになる．

$$\sum_{k=1}^{m-1} (nk+kn) \times 4 = 2nm\,(m-1)$$

さらに，R_{12}とR_{22}からRを作るのにかかる計算量が$m^3 + \frac{1}{2}mp\,(p-m)$なので，計算量の合計は次のようになる．

$$\begin{aligned} S_{bgs} &= 2np^2 + \left(\frac{1}{2}p^2 - 2np - 2n\right)m \\ &\quad + \left(2n - \frac{1}{2}p\right)m^2 + m^3 \end{aligned} \tag{4}$$

よって式（3）と式（4）より，ブロック化することによって計算量を減らすことができる．

表 1: ブロックサイズmとQR分解の所要時間

m	10	20	30	40	50
time(sec)	36.44	34.84	35.27	34.4	34.46

4 数値実験

数値実験として，Xを10000×500の密な長方行列で，要素の値をランダムに決めた行列を考える．この行列をグラムシュミット法を使ってQR分解した結果，計算時間は60.84sec必要であった．一方ブロックグラムシュミット法を使ってmを変えてQR分解を行った結果を表1に示した．

これらの結果から，$m = 40$のとき約1.76倍高速化できることがわかる．

5 おわりに

本発表では，新しいブロックグラムシュミット法を提案し，その有効性について考察した．特に，最適なブロックサイズmの決定は，問題に依存している．理論的にはmを大きくした方がよいが，実際に問題を解いてみると最適なmは異なった値となる．これはmを大きくするとQのデータを使う回数は減っても，行列$\times$行列の計算がコスト高になるためと考えられる．ブロックグラムシュミット法による高速化をよくするために，今後の課題は，最適なブロックサイズを見つける手法を考案することある．

参考文献

[1] Stewart, G. W., “Block Gram-Schmidt Orthogonalization,” SIAM J. SCI. COMPUT., Vol.31,pp. 761–775,2008.

[2] Silva, J. D.,“Numerices of Gram-Schmidt Ortogonalization,” Lin. Alg. and Its Appl. Vol. 197, 198, pp. 297–316,1994.

[3] Vanderstraeten, D., “An Accurae Parallel Block Gram-Schmidt Algorithm without Reorthogonalization,” Numer. Lin. Alg. Appl., Vol. 7, pp. 219–236, 2000.