1K-2

マルチパラメータによる修正不完全コレスキー分解の高速化

中村 貴稔，　野寺 隆
慶應義塾大学理工学部

概 要

本発表は，修正不完全コレスキー分解とマルチパラメータ修正不完全コレスキー分解との比較を行い，数値実験によりその有効性を示す．

1　はじめに

不完全コレスキー分解 (IC 分解)[1] は，共役勾配法 (CG 法) に対する前処理として広く使用されており，大規模な正定値対称行列を係数行列とする連立 1 次方程式を解く際の重要な前処理と考えられている．前処理行列は，係数行列と似た性質のものが適しており，係数行列の固有値分布を改善し，CG 法の収束を改善する手法である．しかし，完全なコレスキー分解を前処理として用いると，fill-in が起こることで，分解後の行列が密行列となり，計算量が増える．そのため，fill-in を棄却し，計算量を節約するために IC 分解が用いられている．

本稿では，最初に IC 分解について報告し，次に，従来の Huang ら [2] による MIC 分解と Yong ら [3] によるマルチパラメータ MIC 分解について述べる．最後に，数値実験の結果について述べ，マルチパラメータ MIC 分解の有効性を示す．

2　不完全コレスキー分解

最初に，コレスキー分解について簡単に述べる．コレスキー分解は，$n \times n$ の正定値対称行列 A を，下三角行列 L とその転置行列 L^T の積に分解することである．

$$A = LL^T \tag{1}$$

よって，コレスキー分解を行うと，分解後の行列において，元の行列 A で要素が 0 であった所に，非ゼロ要素が入ることがある．これを fill-in が起こるという．fill-in が起こることで，行列 L は密行列となることがある．これを避けるために，コレスキー分解に fill-in の棄却についての条件を加えた IC 分解について考える．IC 分解において，行列 A は

$$A = LL^T + R \tag{2}$$

と分解される．ただし，R は A と IC 分解の差を表す行列である．基本的な IC 分解では，$a_{ij} = 0 \Rightarrow l_{ij} = 0$ という条件下でコレスキー分解を行う．この条件下では，fill-in は全て棄却され，行列 A, L は同じ疎なパターンを持つ．しかしこの IC 分解では，A と LL^T が大きく異なり，前処理行列として機能しないことがある．

3　修正不完全コレスキー分解

3.1　従来の修正不完全コレスキー分解

MIC 分解では，fill-in の棄却を二段階で行うことになる．まず，dropping による棄却を行い，次に，現在計算している列の各要素の絶対値を取り，値の大きな要素から順に指定した要素数を残し，残りの要素を棄却することで fill-in のコントロールを行う．MIC 分解のアルゴリズムは以下のように表せる．

[修正不完全コレスキー分解 MIC(p, τ)**]**

1. **for** $j = 1, \cdots, n$
2. 　$l_{jj} = \sqrt{a_{jj}}$
3. 　$w_{1:j} = 0, w_{j+1:n} = a_{j+1:n,j}$
4. 　**for** $k = 1, \cdots, j-1$
5. 　　**for** $i = j+1, \cdots, n$
6. 　　　$w_i = w_i - l_{ik} l_{jk}$
7. 　　**end for**
8. 　**end for**
9. 　**for** $i = j+1, \cdots, n$
10. 　　$w_i = w_i / l_{jj}$
11. 　**end for**
12. 　$\tau_j = \tau \|w\|_2$
13. 　**for** $i = j+1, \cdots, n$

14. $w_i = 0$ when $|w_i| < \tau_j$
15. **end for**
16. An integer array $I = (i_k)_{k=1,\cdots,p}$contains indices of the first largest p entries of $|w_i|, i = j+1, \cdots, n$
17. **for** $k = 1, \cdots, p$
18. $l_{i_k j} = w_{ik}$
19. **end for**
20. **for** $i = j+1, \cdots, n$
21. $a_{ii} = a_{ii} - l_{ij}^2$
22. **end for**
23.**end for**

アルゴリズム中のパラメータ p,τ はそれぞれ，各列の最大の非ゼロ要素数，dropping の閾値を決定している．

3.2 マルチパラメータ MIC 分解

MIC 分解では各列の要素数を決定するパラメータ p は一定であったが，パラメータ p を列ごとに変更する手法について述べる．この手法では，計算中の列の要素のノルムと計算済みの列の要素のノルムの平均を比較し，各列の要素数を決定する．行列 L の j 列目の非ゼロ要素数を q とすると，q を以下のように定める．

$$q = \begin{cases} \max(p_{\min}, p + \left[c \log_{10} \frac{\|l_j\|}{g_j}\right]) & (\|l_j\| < g_j) \\ \min(p_{\max}, p + \left[c \log_{10} \frac{\|l_j\|}{g_j}\right]) & (\|l_j\| \geq g_j) \end{cases}$$

ただし，c は q の変化の割合に関するパラメータで，$p_{\min}, p_{\max}$ もパラメータで，$p_{\min} \leq q \leq p_{\max}$ を満たす．さらに，次式が成立する．

$$g_j = \left(\sum_{k=1}^{j} \|l_k\|_2 \right) / j \qquad (j = 1, \cdots, n)$$

上記のステップを追加し，各列毎に非ゼロ要素数を決定する MIC 分解をマルチパラメータ MIC 分解という．マルチパラメータ MIC 分解の利点は，MIC 分解よりも非ゼロ要素数を少なくし，PCG 法での計算を高速化出来る点である．MIC 分解とマルチパラメータ MIC 分解による下三角行列をそれぞれ L，$\tilde{L}$ とする．この時，L，$\tilde{L}$ の非ゼロ要素数はそれぞれ

$$nnz(L) \approx np$$

$$nnz(\tilde{L}) \approx np + \sum_{j=1}^{n} \left[c \log_{10} \frac{\|l_j\|}{g_j} \right]$$

となる．ここで，関数 $f(x) = \log_{10} x$ について考える．この関数の傾きは，x が増加するにつれ減少する．よって，$\|l_j\|/g_j (j = 1, \cdots, n)$ が 1 に関して対称な分布であると仮定すると，$\sum \left[c \log_{10} \frac{\|l_j\|}{g_j}\right] < 0$ となり，$nnz(L) > nnz(\tilde{L})$ となる．

表 1: 非ゼロ要素数の比較

行列名	p	MIC	マルチパラメータ
bcsstk14	80	126276	124231
s2rmt3m1r	160	603696	602640

4 数値実験

数値実験として，MIC 分解とマルチパラメータ MIC 分解を行い，それぞれの行列 L の非ゼロ要素数を比較した結果を表 1 に示した．ただし，パラメータは以下のように設定した．$p_{\min} = p - 30$, $p_{\max} = p + 30$，$c = 6$，$\tau = 10^{-6}$．これらの結果から，確かに非ゼロ要素数を減少出来ていることが分かる．分解時間，PCG 法の反復回数，実行時間については当日の発表で報告する．

5 おわりに

本発表では，マルチパラメータ MIC 分解を提案し，その有効性について考察した．適切なパラメータは，係数行列の性質に依存しており，一般性の高いパラメータの設定法を考案するのが今後の課題である．また，異なる非ゼロ要素数の変化方法，非対称行列に対する応用などについても検討する．

参考文献

[1] J. A. Meijerink and H. A. van der Vorst,“*An iterative solution method for linear systems of which the coefficient matrix is a symmetric M-matrix*,” Math. Comp., 31:148-162, 1977.

[2] T.-Z. Huang, Y. Zhang, L. Li W. Shao and S. Lai,“*Modified incomplete cholesky factorization for solving electromagnetic scattering problems*,” Progress in Electromagnetics Research B, Vol. 13 pp. 41-58, 2009.

[3] Yong Zhang, Ting-Zhu Huang, Yan-Fei Jing and Liang Li, “*Flexible incomplete Cholesky factorization with multi-parameters to control the number of nonzero elements in preconditioners*,” Numerical Linear Algebra With Applications, DOI: 10.1002/nla.784, 2011