

5N-3 並列クリロフ部分空間の基本計算の代替法

五条方昇 野寺隆
慶應義塾大学理工学部

1 はじめに

大型で疎な非対称正則行列を係数とする連立1次方程式 $Ax = b$ をクリロフ部分空間反復解法を使って解くことを考える。クリロフ部分空間:

$$\mathcal{K}_m = \text{Span}\{v, Av, \dots, A^{m-1}v\}, A \in R^{N \times N}, v \in R^N \quad (1)$$

を考える際、正規直交基底

$$V_m = [v_1, v_2, \dots, v_m]$$

をどのような手順で求めるかが問題となる。通常はアーノルディ過程がそのような基底を構成するための確実な方法として考えられているが、アーノルディ過程は実行中に以前の実行結果を必要とするので並列化が難しく、この方法は最適ではない。そこで、この欠点を改善するための代替の方法を考えることにする。

2 アーノルディ基底

ここでの目的は、アーノルディのアルゴリズムによって得られる

$$AV_m = V_m \bar{H}$$

の関係と同様の関係を導出することである。ただし、 $V_m \in R^{m \times m}$ は \mathcal{K}_m の直交基底行列で、 $\bar{H} \in R^{(m+1) \times m}$ は $\bar{H}(1:m, 1:m) = H_m = V_m^T AV_m$ が上ヘッセンベルグ行列となり、 $\bar{H}(m+1, 1:m) = (0, \dots, 0, h_{m+1,m})$ である。アーノルディ過程の並列化を行う部分は行列とベクトルの積、スカラーとベクトルの積、内積によって限定され、特に並列化しにくい時は内積部分が並列化される。特に、古典的なグラムシュミット (CGS) 法は並列化を可能にする。しかし、これは最も効率的な方法ではなく、CGS 法によるアーノルディ過程のアルゴリズムは V_m の計算の際に破綻しやすいので再直交化を適用しなければならず、このことが実行に影響を及ぼすため、算法の性能を悪くする。

3 階級多項式の基底

(1) 式を係数 $\sigma_0, \dots, \sigma_{m-1}$ を使用して次のように書き換える。

$$\mathcal{K}_m = \text{Span}\{\sigma_0 v, \sigma_1 Av, \dots, \sigma_{m-1} A^{m-1} v\} \quad (2)$$

Hindmarsh と Walker[1] はハウスホルダー法を使い、上式の A と σ の積のQR分解を利用した解法を提案した。彼らが提案したこの算法も前節の方法と同様、破綻しやすい。しかし、 \mathcal{K}_m は元の式と比べて急速に増加するので、 $A^m v$ は最大固有値の方に速く収束する。この式を使用した成功例は、Walker と Zhou の論文[2]にある。

4 Leja ポイントによるニュートン基底

Bai ら[3] は、良い V_m を得るため、次のような新しい近似の算法を提案した。

$$\mathcal{K}_m = \text{Span}\{\sigma_0 v, \sigma_1 (A - \lambda_1 I)v, \dots, \sigma_{m-1} \prod_{l=1}^{m-1} (A - \lambda_l I)v\} \quad (3)$$

この方法は、 $\sigma_0, \dots, \sigma_{m-1}$ と $\lambda_1, \dots, \lambda_{m-1}$ をうまく選ぶことで安定性を増加させることができる。Bai ら[3]の研究では、 $\{\lambda_l\}_{l=1}^{m-1}$ を A のスペクトルの外周の点に置くことを提案した。このとき、 $\{\lambda_l\}_{l=1}^{m-1}$ は次のような Leja ポイントによる順序付け (Leja ordering) を行った A の固有値となる。

$$|\lambda_1| = \max_{l=1, m} |\lambda_j|$$

$$\prod_{k=1}^j |\lambda_{j+1} - \lambda_k| = \max_{l=1, m} \prod_{k=1}^j |\lambda_l - \lambda_k|, \quad j = 1, \dots, m-1$$

ただし、行列 A のスペクトルが未知なら、アーノルディのアルゴリズムの最初の反復から得られた上ヘッセンベルグ行列 H_m の固有値を使用する。Leja ordering は、複素計算を避けるために、 $\lambda_1, \dots, \lambda_l, \lambda_{l+1}, \dots, \lambda_{m-1}$ は、実数の場合と複素数の場合で場合分けされる。この方法

を用いると、並列環境において、大規模疎行列を係数とする連立1次方程式をクリロフ部分空間を利用して計算するアプリケーションの実装が可能となる。今、初期ベクトル v だけが異なるクリロフ基底も存在するが、近似Lejaポイントの計算は可能なので、今後は $\{\lambda_i\}_{i=1}^{m-1}$ は既知であると仮定する。

行列 $\hat{A}_{m+1} \in R^{N \times (n+1)}$ を次のように定義する。

$$\hat{A}_{m+1} \equiv [v, (A - \lambda_1 I)v, (A - \lambda_1 I)(A - \lambda_2 I)v, \dots, \prod_{l=1}^m (A - \lambda_l I)v]$$

以下の性質を満たす実行列 $\tilde{A}_{m+1} \in R^{N \times (n+1)}$ と $\tilde{D}_{m+1} = \text{diag}(\tilde{d}_1, \dots, \tilde{d}_{m+1})$ を考える。

$$\hat{A}_{m+1} = \tilde{A}_{m+1} \tilde{D}_{m+1} \quad (4)$$

以下の計算は、複素計算を避けるために行われる。修正Leja orderingでは、 j 番目のステップは以下のようになる。

λ_j が実数なら

$$\tilde{a}_{j+1} = \tilde{d}_j (A - \lambda_j I) \tilde{a}_j$$

$\text{Im}(\lambda_j) > 0$ なら

$$\begin{aligned} \tilde{a}_{j+1} &= \tilde{d}_j (A - \text{Re}(\lambda_j)I) \tilde{a}_j \\ \tilde{a}_{j+2} &= \tilde{d}_j (A - \lambda_j I)(A - \bar{\lambda}_j I) \tilde{a}_j \\ &= (A - \text{Re}(\lambda_j)I) \tilde{a}_{j+1} + \tilde{d}_j \text{Im}(\lambda_j)^2 \tilde{a}_j \end{aligned}$$

もし、 \tilde{A}_{m+1} のQR分解

$$\tilde{A}_{m+1} = \tilde{Q}_{m+1} \tilde{R}_{m+1} \quad (5)$$

が計算されると、求める直交基底は単純に

$$V_{m+1} = \tilde{Q}_{m+1} \quad (6)$$

となる。

5 上ヘッセンベルグ行列 \hat{H} の計算

アーノルディ過程の関係を求めるに当たり、(6)式により V_{m+1} は既知であるので、 \hat{H} の決定問題が残っている。(5)式の R 要素は以下のような上ヘッセンベルグ行列 $\hat{H} \in R^{(m+1) \times m}$ になる。

$$A \hat{A}_m = \tilde{Q}_{m+1} \hat{H} = V_{m+1} \hat{H} \quad (7)$$

(7)式を(4)式に代入し、(5)、(6)式の関係を使うことで

$$\hat{H} = \hat{H} (\tilde{R}_m \tilde{D}_m)^{-1}$$

の関係が得られる。

この条件は(3)式の条件と同じ、すなわち $\kappa_2(\hat{A}_m) = \kappa_2(\tilde{R}_m \tilde{D}_m)$ である。そこで、(3)式を不変部分空間に発展させることを考える。例えば $\lambda_1 = \dots = \lambda_m = 0$ とすると、(3)式は(2)式と同一になってしまい、安定性が悪くなる。

6 計算過程

それぞれの要素の計算は、以下の過程で行うことになる。

1. $\tilde{A}_{m+1} = \sigma(A - \lambda I)v$ の計算
2. QR分解 $\tilde{A}_{m+1} = \tilde{Q}_{m+1} \tilde{R}_{m+1}$
3. 積 Qy の計算 $y = \sigma(A - \lambda I)x$

こうすることで行列 A を直接QR分解するよりも破綻が起りにくい。また、 A をブロック分割し、ブロック毎にアーノルディ過程を行うことで並列計算が可能になる。そのときも、行列 \tilde{A} を計算するこの方法は A を直接分解するよりもアーノルディ過程で破綻が起りにくい。

QR分解はそれ自身重要な問題であり、多くのアルゴリズムはハウスホルダー反射やギブズ回転といった既に提唱されたアルゴリズムの組み合わせである。実際には、アルゴリズム全体を通して、データの初期分配の際に別の仮定を使って \hat{H} を計算する必要がある。ここでは積 Qy を加えるというところが他のアルゴリズムと異なっている。

7 おわりに

以上のような計算を組み合わせることによりクリロフ部分空間による並列計算を行うことができる。当日は実際のアルゴリズムと全体の並列過程を、数値実験の結果と共に報告する。

参考文献

- [1] A. C. Hindmarsh and H. F. Walker: Note on a Householder implementation of the GMRES method. Technical Report UCID-20899, Lawrence Livermore National Laboratory, 1986.
- [2] H. Walker and L. Zhou: A simpler GMRES. *Num. Lin. Alg. Appl.*, 1(16), 571-581, 1994.
- [3] Z. Bai, D. Hu and L. Reichel: An implementation of the GMRES method using QR factorization, in *Fifth SIAM Conference on Parallel Processing for Scientific Computing*, J. Dongarra, K. Kenedy, P. Messina, D. C. Sorensen and R. G. Voigt, editors, Philadelphia, 1992.