

チェビシェフ基底共役勾配法 Chebyshev Basis Conjugate Gradient Method

須田礼仁, 本谷徹
東京大学 情報理工学系研究科

はじめに

正定値対称な大規模疎行列を係数に持つ連立一次方程式 $Ax = b$ を解くには, CG 法が広く用いられている. CG 法は並列化がしやすく並列計算機で広く用いられている. CG 法に含まれる主な計算のうち, ベクトルの内積は並列化は難しくないが, 全ノードでの同期が必要となるため, 今後並列計算機が数万ノード以上になったときにボトルネックになる可能性がある.

そこで, 内積の回数を削減したクリロフ部分空間法の研究がされてきた ([1] とその参考文献参照). これらの手法では, 残差 $r = b - Ax$ に対して, これから先 k 反復分のクリロフ部分空間

$$K = \text{span}\{r, Ar, A^2r, \dots, A^{k-1}r\}$$

を陽的に構築し, 内積を一度に計算する. しかし $A^j r$ の計算で丸め誤差の影響を強く受け, 内積の回数が減る代償として, 解ける問題の条件数が強く制限されるという問題があった.

本稿では, チェビシェフ多項式を用いてこの問題が解消できることを示す. 提案手法を **チェビシェフ基底共役勾配法 (Chebyshev Basis Conjugate Gradient Method: CBCG 法)** と呼ぶ.

方法

$T_j(x)$ を j 次のチェビシェフ多項式で, A の固有値の範囲 $I = [\lambda_{\min}, \lambda_{\max}]$ にシフト・スケールしてあるものとする. すなわち任意の $x \in I$ に対し $|T_j(x)| \leq 1$.

CBCG 法では, クリロフ部分空間を

$$K_{CB} = \text{span}\{T_0(A)r, T_1(A)r, \dots, T_{k-1}(A)r\}$$

として作る. 計算には三項漸化式を用いる. クリロフ部分空間のよく知られた性質により $K = K_{CB}$ であり, 数学的には CG 法と同じクリロフ部分空間を張る.

このクリロフ部分空間から, CG 法に類似したアルゴリズムが生成できる. 本稿では, ブロック CG 法に相当するアルゴリズムを Alg. 1 に示す.

Alg. 1 において, ベクトル a を最小二乗法により求めているのは, CG 法が収束するときにクリロフ部分空間が尽きて, Q のランクが落ちるためである.

実験

提案手法を Scilab で実装し, 丸め誤差への耐性を確認する. 行列 A は $-1, 2, -1$ からなる三重対角要素でサイズは 500 である. 右辺 b は乱数で与えた. このとき CG 法は行列サイズに同じ 500 回で収束する. チェビシェフ

Alg. 1. CBCG 法 (ブロック CG 版)

$x = 0; r = b$

for $i = 1, 2, \dots$

$S = (T_0(A)r, T_1(A)r, \dots, T_{k-1}(A)r)$

if $i = 1$ **then**

$Q = S$

else

$B = (Q^T A Q)^{-1} Q^T A S$

$Q = S - Q B$

endif

$a = \text{argmin} \|Q^T A Q a - Q^T r\|$

$r = r - A Q a$

$x = x + Q a$

if $\|r\|/\|b\| \leq \epsilon$ **break**

endfor

多項式はゲルシュゴリンの定理から得られる固有値範囲に基づき $[0, 2]$ にシフト・スケールした.

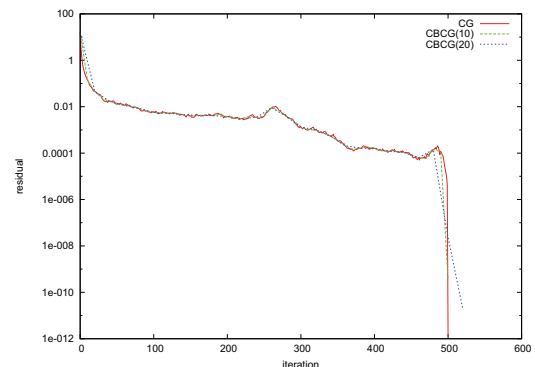


図1. CBCG 法の収束 (赤 CG 法, 青 $k = 10$, 緑 $k = 20$)

図1にCBCG法の収束履歴をCG法と比較して示す. CBCG法の反復回数はCG法の反復回数に換算している. $k = 10$ では50反復, $k = 20$ では26反復を要した. 近似解の真の相対残差は, CG法で 7.9×10^{-14} , $k = 10$ で 2.0×10^{-11} , $k = 20$ で 1.2×10^{-12} であった. これより, CG法とほぼ同じ反復回数で, 安定して計算できていることがわかる.

今後, 様々な行列に対して本手法を適用して有効性を検証する. また, ブロックCG以外の構成法による手法, 固有値範囲の推定, 並列実装を計画している.

参考文献

[1] 本谷徹, 須田礼仁: k 段飛ばし共役勾配法: 通信を回避することで大規模並列計算で有効な対称正定値疎行列連立1次方程式の反復解法, 情報処理学会研究報告 2012-HPC-133, No. 30, 2012.