

Chebyshev 基底共役勾配法の性能評価

日大生産工 (学部) ○石坂 旭克 日大生産工 伊東 拓

1 はじめに

対称疎行列を係数行列に持つ大規模連立 1 次方程式,

$$Ax = b \quad (1)$$

を解く際には CG 法が広く用いられている. 大規模問題では並列計算が前提となっているが, 並列計算では内積計算などで生じる通信時間が全計算時間の大半を占めている. そのため, CG 法を並列化する際に 1 回の反復で 2 回行われる内積計算が通信遅延の要因となっている. これを解消するために, k 回分の反復で必要な内積計算の通信を 1 回済ませる, k 段飛ばし共役勾配法が提案された¹⁾. ただし, k 段飛ばし共役勾配法では収束性が悪化する問題があるため, Chebyshev 多項式に基づいた Chebyshev 基底共役勾配法 (Chebyshev Basis Conjugate Gradient Method, 以下 CBCG 法) が提案された²⁾.

本稿では, CBCG 法の性質を調べる第 1 段階として, 並列計算なしでスキップ数 k の値を変化させたときの収束性について性能評価をすることが目的である.

2 Chebyshev 基底共役勾配法

$T_j(x)$ を j 次の Chebyshev 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. ただし, $\lambda_{\min}, \lambda_{\max}$ はそれぞれ最小, 最大固有値である.

CBCG 法では, Krylov 部分空間を

$$\mathcal{K}_{CB} = \text{span}\{T_0(A)r, T_1(A)r, \dots, T_{k-1}(A)r\} \quad (2)$$

として作る. 実際の計算に用いる三項漸化式は,

$$s_{i0} = r \quad (3)$$

$$s_{i1} = \eta Ar + \zeta r \quad (4)$$

$$s_{ij+1} = 2\eta As_{ij} + 2\zeta s_{ij} - s_{ij-1} \quad (5)$$

Algorithm 1 CBCG 法

```

Start: Choose  $x_0$  and compute  $r_0 = b - Ax_0$ 
for  $i = 1, 2, \dots$ 
   $S = (T_0(A)r, \dots, T_{k-1}(A)r)$ 
  if  $i = 1$  then
     $Q = S$ 
  else
     $B = (Q^T A Q)^{-1} Q^T A S$ 
     $Q = S - QB$ 
  end if
   $\alpha = (Q^T A Q)^{-1} Q^T r$ 
   $x = x + Q\alpha$ 
   $r = r - A Q\alpha$ 
  if  $\frac{\|r\|}{\|b\|} < \epsilon$  break
end for

```

である. ただし,

$$\eta = \frac{2}{\lambda_{\max} - \lambda_{\min}}, \quad \zeta = \frac{\lambda_{\max} + \lambda_{\min}}{\lambda_{\max} - \lambda_{\min}} \quad (6)$$

である.

Krylov 部分空間の性質により $\mathcal{K} = \mathcal{K}_{CB}$ であり, 数学的には CG 法と同じ Krylov 部分空間を張る. この Krylov 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²⁾. このアルゴリズムを Algorithm 1 に示す. Algorithm 1 では, スキップ数 k 本分の列を持つ行列 S を生成することで内積計算を減らし, 通信を削減している.

3 数値実験

対角成分の異なる三重対角行列を用いて性能評価を行う. ただし, 非対角成分はすべて -1 である. 各サンプル行列¹⁾について表 1 に示す. 今回は表 1 に示した最大固有値を λ_{\max} として与え, λ_{\min} には最小固有値の代わりに 0 を与えた.

Performance Evaluation of Chebyshev Basis Conjugate Gradient Method

Akiyoshi ISHIZAKA and Taku ITOH

表1 サンプルの三重対角行列.

	対角成分	行列サイズ	最大固有値
T_0	25.0	100	26.93
T_1	2.5	100	4.49
T_2	2.05	100	4.04
T_3	2.005	100	3.99
T_4	2.0005	100	3.99
T_5	2.0	100	3.99

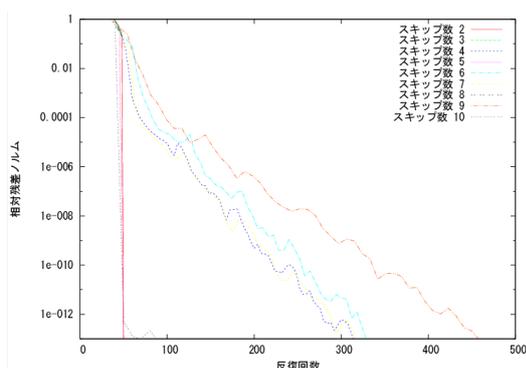


図1 サンプル行列 T_4 の場合における相対残差ノルムの変化.

連立1次方程式の初期解 \mathbf{x}_0 は全て0ベクトル, 右辺ベクトル \mathbf{b} は全て1, 収束判定子 $\epsilon = 10^{-13}$ とした. また, いずれも反復回数の上限を1000回とし, それ以上の反復を要する場合は, 発散とみなすことにする.

スキップ数 k の値を変化させたときの収束までに要した反復回数を表2に示す. 数値は収束した場合の反復回数である. ただし, この反復回数にはスキップされた分も含めている. 例えば, サンプル行列 T_0 でスキップ数が $k = 4$ のとき, 反復回数は3回だが各反復で4回スキップしているため, 表2では12と記載している.

図1はサンプル行列 T_4 のスキップ数が2から10の各反復のノルムの値の変化をグラフにしたものである.

図1の各スキップ数での相対残差ノルムの変化を見ると, スキップ数を大きくしても収束性が良くなる場合が確認できた. また, 表2から発散することがあまり多くはなかったため, 比較的多くの場合で収束することがわかった. ただし, 今回実験で用いた行列はどれもサイズが小さいため, より大規模な行列を用いて実験する必要がある.

表2 スキップ数 k と反復回数の関係.

k	T_0	T_1	T_2	T_3	T_4	T_5
2	10	42	50	50	50	50
3	9	42	117	231	306	発散
4	12	44	120	212	300	発散
5	25	45	50	50	50	50
6	30	42	120	発散	366	342
7	49	42	105	231	発散	発散
8	56	48	120	発散	416	発散
9	54	45	発散	270	発散	387
10	80	50	50	50	100	50
11	66	44	143	297	396	発散
12	72	48	120	252	384	336
13	104	52	143	286	429	発散
14	98	56	154	308	434	420
15	135	45	150	300	発散	発散
16	144	48	128	272	464	発散
17	153	51	153	323	459	697
18	144	90	144	342	612	発散
19	171	95	152	304	475	570
20	220	100	160	280	540	500
21	252	147	168	315	504	発散
22	286	154	154	発散	462	528
23	276	161	161	230	460	483
24	360	216	144	240	発散	発散
25	600	350	75	75	100	100
26	390	494	260	364	416	442
27	405	945	270	378	432	567
28	644	発散	252	504	発散	532
29	464	435	290	発散	発散	493
30	810	発散	300	発散	発散	540

「参考文献」

- 1) 本谷徹, 須田礼二, 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) p.1-8.
- 2) 須田礼二, 本谷徹, チェビシェフ基底共役勾配法, ハイパフォーマンスコンピューティングと計算科学シンポジウム論文集, No.19, (2013) p.72.