平成12年度石田(實)財団研究研究成果報告書

大規模系の並列計算に関する研究

平成13年11月2日

小澤一文（秋田県立大学システム科学技術学部）

概 要

大規模疎行列を係数行列として持つ連立一次方程式の解法として，Jacobi 法，SOR 法，CG 法など数多くのものが存在する。しかし，そのほとんどの収束性は係数行列に強く依存している。この制限がない解法のクラスとして，行射影法がある。この解法は，行列が非対称な場合でもあるいはランク落ちであったとしても適用可能であるという点で極めて頑健である。また行射影法については，[1, 2] などで様々な加速スキームが提案されている。ここでは，この行射影法の並列化の手法について提案しその性能評価を行う。

1 はじめに

連立一次方程式

$$A\boldsymbol{x} = \boldsymbol{b} \tag{1}$$

を解くことを考える。このとき，A は特異であってもよいが，$\boldsymbol{b}$ は A の列空間に含まれるものとする。以下，$A, \boldsymbol{b}$ を

$$A = \begin{pmatrix} A_1 \\ A_2 \\ \vdots \\ A_m \end{pmatrix}, \quad \boldsymbol{b} = \begin{pmatrix} \boldsymbol{b}_1 \\ \boldsymbol{b}_2 \\ \vdots \\ \boldsymbol{b}_m \end{pmatrix},$$

のように m 個のブロックに分割する。ただし，同じブロックに含まれる行は互いに線形独立であるとする。

1.1 行射影法について

行射影法には，Kaczmarz 射影法と Cimmino 射影法の 2 つのクラスがあり，そのアルゴリズムは以下のように表される。

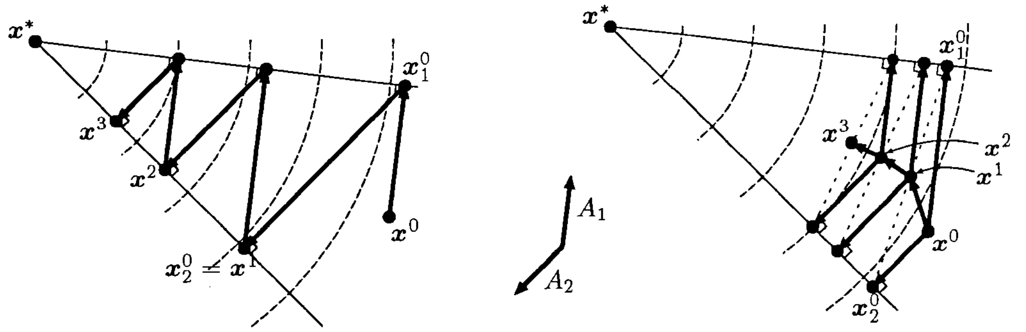
Algorithm 1. Kaczmarz 射影法 $(0 < \omega_i < 2)$

```
初期x^0を設定
do k = 0, 1, ...
   x_0^k = x^k
   do i = 1, 2, ..., m
      x_i^k = x_{i-1}^k + ω_i A_i^T (A_i A_i^T)^{-1} (b_i - A_i x_{i-1}^k)
   end do
   x^{k+1} = x_m^k
end do
```

Algorithm 2. Cimmino 射影法 $(0 < \omega_i < 2, \sum_{i=1}^{m} \lambda_i = 1)$

初期$\boldsymbol{x}^0$を設定
do $k = 0, 1, \cdots$
  do $i = 1, 2, \cdots, m$
    $\boldsymbol{x}_i^k = \boldsymbol{x}^k + \omega_i A_i^T (A_i A_i^T)^{-1} (\boldsymbol{b}_i - A_i \boldsymbol{x}^k)$
  end do
  $\boldsymbol{x}^{k+1} = \sum_{i=1}^{m} \lambda_i \boldsymbol{x}_i^k$
end do

収束の様子は，それぞれ図 1(a),(b) のように表すことができる。



(a)Kaczmarz 射影法 $(\omega_i = 1)$　　(b)Cimmino 射影法 $(\omega_i = 1, \lambda_i = 0.5)$

図 1: 収束の様子 $(n = m = 2)$

反復式は，A_i の行空間に対する直交射影子を $P_i = A_i^T (A_i A_i^T) A_i$ と定義すると，それぞれ

(Kaczmarz)

$$Q = (I - \omega_m P_m) \cdots (I - \omega_1 P_1),$$
$$R_i = (I - \omega_m P_m) \cdots (I - \omega_{i+1} P_{i+1}) \omega_i A_i^T (A_i A_i^T)^{-1},$$
$$R = [R_1, \ldots, R_m],$$

(Cimmino)

$$Q = I - \sum_{i=1}^{m} \lambda_i \omega_i P_i,$$
$$R = \{\lambda_i \omega_i A_i^T (A_i A_i^T)^{-1}\},$$

$$\boldsymbol{x}^{k+1} = Q\boldsymbol{x}^k + R\boldsymbol{b} \tag{2}$$

と表すことができる。

1.2 CG 加速

行射影法はその他の反復解法と比べて収束が遅いため，反復式 (2) の収束値が満たす方程式

$$(I - Q)\boldsymbol{x} = R\boldsymbol{b} \tag{3}$$

に CG 法を適用する CG 加速が一般的に用いられる。このとき，$I - Q$ を正値対称（A が特異ならば半正定値）にするために Kaczmarz 射影法の i のループを do $i = 1, 2, \ldots, m$ から do $i = 1, \ldots, m, \ldots, 1$ とする必要がある。

2 行射影法の並列化

プロセッサ数を N_p とし，個々のプロセッサを $p=1,\dots,N_p$ で表す。$\bar{m}=\frac{m}{N_p}$ として，p 番目のプロセッサの担当ブロックを $i=\bar{m}(p-1)+1,\dots,\bar{m}p$ とする。
Cimmino 射影法は並列化には向いているが，収束は Kaczmarz 射影法と比べて著しく遅くなる。これを改善する手法として，部分的に Kaczmarz 射影法を用いる以下のようなアルゴリズムを提案する [3]。

Algorithm 3. 分割 Kaczmarz 射影法 $(0<\omega_i<2, \sum_{p=1}^{N_p}\lambda_p=1)$

初期$\boldsymbol{x}^0$を決定。
do $k=0,1,\cdots$
すべてのプロセッサ $p=1,\cdots,N_p$において
$\boldsymbol{x}_{p,\bar{m}(p-1)}^{k+1}=\boldsymbol{x}^k$
do $i=\bar{m}(p-1)+1,\dots,\bar{m}p$
$\boldsymbol{x}_{p,i}^{k+1}=\boldsymbol{x}_{p,i-1}^{k+1}+\omega_i A_i^T(A_iA_i^T)^{-1}(b_i-A_i\boldsymbol{x}_{p,j-1}^{k+1})$
end do
$\boldsymbol{x}^{k+1}=\sum_{p=1}^{N_p}\lambda_p\boldsymbol{x}_{p,\bar{m}p}^{k+1}$
end do

分割 Kaczmarz 射影法の反復式は，以下のように表される。

$$\begin{aligned}
\tilde{Q}_p &= (I-\omega_{\bar{m}p}P_{\bar{m}p})\cdots(I-\omega_{\bar{m}(p-1)+1}P_{\bar{m}(p-1)+1}),\\
R_i &= (I-\omega_{\bar{m}p}P_{\bar{m}p})\cdots(I-\omega_{i+1}P_{i+1})\omega_i A_i^T(A_iA_i^T)^{-1} \quad (\bar{m}(p-1)+1\le i\le \bar{m}p)\\
\tilde{R}_p &= [R_{\bar{m}(p-1)+1},\dots,R_{\bar{m}p}], \quad R=[\lambda_1\tilde{R}_1,\dots,\lambda_{N_p}\tilde{R}_{N_p}],\\
\tilde{\boldsymbol{b}}_p^T &= (\boldsymbol{b}_{\bar{m}(p-1)+1}^T,\dots,\boldsymbol{b}_{\bar{m}p}^T),
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\boldsymbol{x}_p^{k+1} &= \tilde{Q}_p\boldsymbol{x}^k+\tilde{R}_p\tilde{\boldsymbol{b}}_p,\\
\boldsymbol{x}^{k+1} &= \sum_{p=1}^{N_p}\lambda_p\boldsymbol{x}_p^{k+1}\\
&= \sum_{p=1}^{N_p}\lambda_p\tilde{Q}_p\boldsymbol{x}^k+R\boldsymbol{b} \qquad (4)
\end{aligned}$$

式 (4) より，分割 Kaczmarz 射影法の反復行列は

$$Q=\sum_{p=1}^{N_p}\lambda_p\tilde{Q}_p$$

となり，収束値 $\boldsymbol{x}^*$ は方程式 (3) を満たす。ここでも，i のループを
do $i=\bar{m}(p-1)+1,\dots,\bar{m}p$ から do $i=\bar{m}(p-1)+1,\dots,\bar{m}p,\dots,\bar{m}(p-1)+1$ とすれば，A が正則ならば $I-Q$ の係数行列は正値対称になるので，CG 加速を適用できる。

3 数値実験

偏微分方程式

$$\nabla\{e^{(x-0.5)\times(y-0.5)}\nabla u\} + 1000u = \sin\{(x+y)\pi\},$$
$$(x,y) \in \Omega \equiv (0,1)\times(0,1), \quad u = 0 \text{ on } \partial\Omega$$

の境界値問題を解く。ここでは，空間を 200×200 のメッシュに分割し離散化して，微分を差分に置き換えて得られる 40,000 元連立一次方程式を解く。各解法に CG 加速を施す。

- 並列化を行う解法は Cimmino 射影法と分割 Kaczmarz 射影法
- すべての解法で $m=n$, $\omega_i = 1$
- 係数行列の各行はあらかじめ正規化しておく
- 使用する並列計算機

	分類	N_p
Exemplar X クラス	共有メモリ型	4, 8, 16
PC クラスタ	分散メモリ型	4

- 反復停止条件

$$\frac{\|\boldsymbol{b} - A\boldsymbol{x}\|_2}{\|\boldsymbol{b}\|_2} \le 10^{-10}$$

以上の条件のもとで，反復回数，計算時間，効率 (逐次の Kaczmarz 射影法と比較) をとる。
実験結果は当日発表する。

謝辞
最後に，本研究を対して多大なご支援を頂いた石田 (實) 財団にこころより感謝を申し上げます。また，本研究を遂行するにあたり共同研究者である東北大学情報科学研究科大学院前期課程 2 年の中村真輔君に多大な協力を得ました。ここに同様に謝意を表します。

参考文献

[1] C. Liu, An acceleration scheme for row projection methods, J. Comput. Appl. Math. **57**(1995), pp.363-391

[2] R. Bramley, A. Sameh, Row projection methods for large nonsymmetric linear systems, SIAM J. Sci. Statist. Comput. **13**(1992), pp.168-193.

[3] 中村, 福岡, 小澤, 行射影法の並列化，電気関係学会東北支部連合大会講演論文集，p.261， 2001-8