線形方程式求解アルゴリズムに対する性能情報検索システムの開発

伊藤祥司, 長谷川秀彦 (筑波大学)

1. イントロダクション

自然現象や工学現象の解析では, 数値シミュレーションが行われることもしばしばであり, それらを記述する方程式は, 多くの場合, 大規模な線形方程式

$$Ax = b$$

の求解に帰着される.

シミュレーションに要する計算時間の大半が, この計算に費やされるため, 速く, 正確に解くことが重要である.

2. 求解アルゴリズムは数多く存在する

直接解法

Gaussian Eliminationに基づく解法
LU , Cholesky, 他

更には :

前処理も !

反復解法

非定常反復法

Conjugate Gradient
BiCG , CGS, Bi-CGSTAB,
BiCGstab(l), GCR , GMRES
他

定常反復法

Jacobi
Gauss-Seidel
SOR
他

3.現状と問題点

係数行列Aが対称正定値であれば, 迷わずCG法やCholesky法を選択できるが, 非対称のような場合には,

どのアルゴリズムを選択すれば良いのだろうか？十分な指針が無い.

特に, Krylov subspace method においては:

There is no clear best Krylov subspace method at this time,
and there will never be a best overall Krylov subspace method.

Templates for the solution of linear systems: building blocks for iterative methods,
R. Barrett, et. al, SIAM, 1994.

4.ｱﾙｺﾞﾘｽﾞﾑ開発者の観点とｱﾙｺﾞﾘｽﾞﾑﾕｰｻﾞの観点

数値ｱﾙｺﾞﾘｽﾞﾑの研究者
(ｱﾙｺﾞﾘｽﾞﾑ開発者)

- 数学的な観点から
新しいｱﾙｺﾞﾘｽﾞﾑを提案

収束特性
高精度

誰が, これらｱﾙｺﾞﾘｽﾞﾑの特性や適用範囲などを
体系的に
評価するのか？

数値ｼﾐｭﾚｰｼｮﾝの研究者
(ｱﾙｺﾞﾘｽﾞﾑﾕｰｻﾞ)

- 数値ｼﾐｭﾚｰｼｮﾝを行う
-解くべき問題に応じて
ｵﾘｼﾞﾅﾙのﾌﾟﾛｸﾞﾗﾑや
ｱﾙｺﾞﾘｽﾞﾑを作成する

いかにして問題を解くか.
速い方が良い.
許容精度内であれば十分.

コンセプト･研究目的

数値計算ｱﾙｺﾞﾘｽﾞﾑ自体を分析対象とする, 新しいテーマの研究

a survey and evaluation system
for numerical algorithms

- **サーベイ, 評価するための情報システムを開発する**
- **数値計算アルゴリズムの特性をシステマティックに分析する**

性能評価のための情報システム (概念図)

どのファクターに着目すべきか？
(係数行列の持つ様々な情報)

どのファクターに着目すべきか？
(求解アルゴリズムから得られる情報)

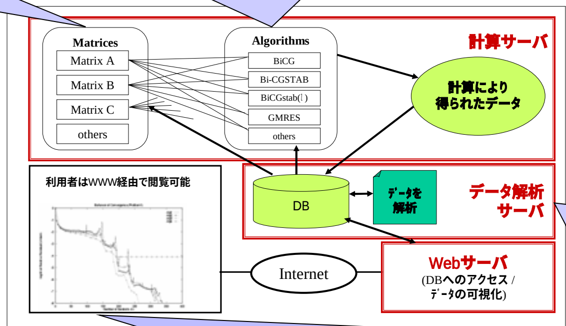
現行のシステム:

･テスト問題の行列 – Matrix Market –
http://math.nist.gov/MatrixMarket/

･求解アルゴリズムのライブラリ – Lis – (小武守, 長谷川, 西田)
Lis: Library of Iterative Solvers for Linear Systems
http://ssi.is.s.u-tokyo.ac.jp/lis/index_en.html

を利用して構築しているので, Lisの性能情報とMatrixMarketの問題の特徴も, 性能情報検索システムを用いて確認できる.

WebのURL (暫定)
http://mma.cs.tsukuba.ac.jp/~itosho/sesna/



テスト問題の計算から得られる多変量データに対して

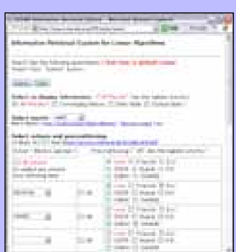
データマイニング
や
統計分析

などを用いて線形方程式の特性とアルゴリズムの特性とを分析する.
線形方程式が持つ特性と求解アルゴリズムの特性との間の相関は見出せるだろうか？

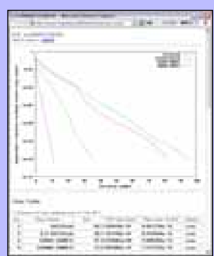
まずは, 得られたデータを簡単にビジュアルに表示するシステムの開発から:
性能情報検索システム (実行例)

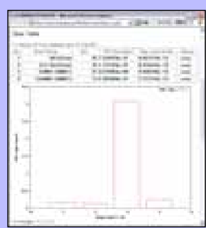
デモ実施

Webの入力画面から
･係数行列
･解法
･前処理
･表示形態
を指定する



Submit





線形方程式求解に関するパラメタを設定する

DBにアクセスして選択された求解アルゴリズムの性能情報を表示

自分の手持ちの問題を解かせてみたいときには :

TIS: Test of Iterative Solvers
http://amazon.slis.tsukuba.ac.jp/TiS
(福井, 長谷川)

(特許出願中:特願 2006-102171)

理論的なバックグラウンドの一例(CG法の例)

前処理付き共役勾配法(PCG法)

前処理行列 K : $K \approx A$ と $K = LL^T$ コレスキー分解
(Lは下三角行列)

前処理の演算:
$q = K^{-1}r$ ($=L^{-T}L^{-1}r$) に対して,
$y=L^{-1}r$ (前進代入) , および,
$q=L^{-T}y$ (後退代入) を計算する

K が, どれくらい A を近似しているかが収束性向上のポイント

PCG法のアルゴリズム

･ x_0:適当な初期値を与える.
･ $r_0 = b - Ax_0$, $p_0 = \boxed{K^{-1}r_0}$
for $k = 0, 1, \ldots,$ until $\|r_k\| \le \varepsilon\|b\|$ do
begin

$$\alpha_k = \frac{(\boxed{K^{-1}r_k}, r_k)}{(p_k, Ap_k)}$$
$$x_{k+1} = x_k + \alpha_k p_k$$
$$r_{k+1} = r_k - \alpha_k Ap_k$$
$$\beta_k = \frac{(\boxed{K^{-1}r_{k+1}}, r_{k+1})}{(\boxed{K^{-1}r_k}, r_k)}$$
$$p_{k+1} = \boxed{K^{-1}r_{k+1}} + \beta_k p_k$$

end

CG法の収束と係数行列の条件数, 固有値との関係

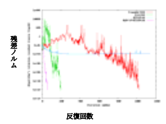
$$r_{k+1} = r_k - \alpha_k Ap_k \quad (1)$$
$$p_{k+1} = r_{k+1} + \beta_k p_k \quad (2)$$
$r_0 = b - Ax_0$, x_0 : 初期ベクトル
$p_0 = r_0$
$$r_k = r_0 + \sum_{i=1}^{k} a_i^{(k)} A^i r_0 \equiv R_k(A) r_0. \quad (3)$$
$R_k(A)$: Aに関するk次の残差多項式

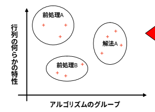
λ_i : $A(\in R^{N\times N})$ の固有値
v_i : 固有値に対応する固有ベクトル
$$r_0 = \sum_{i=1}^{N} c_i v_i \quad (4)$$
$$\boxed{r_k = R_k(A) r_0 = \sum_{i=1}^{N} c_i R_k(\lambda_i) v_i.}$$
$\lambda_p, \lambda_{p+1}, \cdots, \lambda_{p+q}$ が重複しているならば,
$$R_k(\lambda_p) = R_k(\lambda_{p+1}) = \cdots = R_k(\lambda_{p+q}).$$
→ 高々$N-q$回の反復で収束する.
固有値が密集しているときにも近似的に成立

定理:
正定値対称行列 $A \in R^{N\times N}$, $b \in R^N$ に対するCG法においてk回目の反復でx_kが得られるならば,
$$\|x - x_k\|_A \le 2\|x - x_0\|_A \left(\frac{\sqrt{\kappa}-1}{\sqrt{\kappa}+1}\right)^k \quad (1)$$
が成り立つ. ここで, Aの条件数 κ は,
$$\boxed{\kappa = \kappa_2(A) = |\lambda_{max}|/|\lambda_{min}|,} \quad (2)$$
λ_{max} : 行列Aの最大固有値,
λ_{min} : 行列Aの最小固有値
であり, $x = A^{-1}b$ (厳密解) である. ■

前処理された行列 $L^{-1}AL^{-T}$ については？

実際の評価方法の検討(本研究の一環)





デモ実施

従来:

1つの問題 (係数行列) に対して, 複数のアルゴリズムの収束の様子を評価してきた.

例えば:

複数の問題の, とある特性と, アルゴリズムとの間にはこのような関係が存在するだろうか？

SACSIS2006 2006.5.22-24