

2P01 ブロック化ヤコビ法による固有値計算の実験

○村上 弘

首都大学東京 数理情報科学専攻 (〒192-0397 八王子市南大沢1-1)

概要： Jacobi 法は対称行列の固有値問題の全固有対を求める対角化法である。そのブロック化算法であるブロック化 Jacobi 法により大規模問題を小規模な並列計算機上で解いた実験の例を示す。

はじめに： 対称密行列の固有値問題の全固有対を求める Jacobi 法 [3, 4] は行列の行方向と列方向への交互の参照パターンを含み、仮想記憶方式やキャッシュ方式の計算機では記憶転送の効率が悪く、また最初から最後まで行列全体を走査して処理するので、Householder 法などの3重対角形を経由する方法に比べて、記憶参照の局所性が低く、記憶参照量も多いので今日では数十次程度の小さい問題にのみ適するとされる。

しかし近似解の精度や安定性に関して、固有値に縮重や近接があっても固有ベクトルの直交精度が高く保たれること、絶対値の小さい固有値を持つ固有対の精度が良いこと、対角行列から微小にずれた行列に対しては、固有対が比較的速く高精度に求まるなどの長所もある [1]。また Jacobi 法に内在する並列性を引き出した並列 Jacobi 法 [2] は N 次行列に対して最大 $N/2$ 同時の並列処理が可能で昔から注目されてきた (Jacobi 法の並列化は原理が比較的単純でハードウェア実装にも適している)。Jacobi 法はブロック化 [2] することで記憶参照の局所性を高めれば欠点が減り、分散記憶方式の計算機上での並列計算も容易になる。

通常の Jacobi 法： ブロック化や並列化を行わない通常の Jacobi 法による対角化では行列 A の非対角要素 $a_{p,q}$ ($p < q$) をとり、 A の左右から行と列の添字がそれぞれ p と q だけに対する2次の直交回転行列 J (Jacobi 回転行列) により、 $B \leftarrow \tilde{J}^T A \tilde{J}$ と変換後の行列 B が対角行列に近づくように J を定める

B の第 (p, q) 要素が消去されるように J を選ぶとき、 B の非対角項の2乗和が最小になるので、 J をそのように選ぶ。そのとき非対角項の2乗和の減少量は $2a_{p,q}^2$ となる。 J には本質的に異なる2通りの選択がある。**注記：** 対称行列 A の Jacobi 法による対角化では、対称性から A の上半分だけを操作対象にして A への演算量と記憶参照量を半減する手法が有効で、必要記憶量も半減できる。但し固有ベクトルへの累積では対称性は利用できない。

対称行列の対角化に用いる Jacobi 法は通常、巡回 Jacobi 法 (Serial-Jacobi) である。巡回 Jacobi 法の走査回数についての収束は、最初は線形でほとんど対角に近づく終盤では2次収束となることが知られている [2]。非対角要素の大きさが閾値以上の場合についてのみ Jacobi 回転を行い、走査の段数で閾値を変える閾 Jacobi 法 (Threshold Jacobi) が特に効率的である。絶対値の小さい固有値に対する精度のよい固有解を得るには、非対角要素 $a_{p,q}$ の大きさの閾値を一樣にせず、対角要素 $a_{p,p}$, $a_{q,q}$ との関係で判断する。

ブロック Jacobi 法： N 次行列の行と列をブロック分割し、ブロック行列として扱う。簡単化のためブロックサイズ b は一様とする。また行と列の最後の半端なサイズのブロックは適切に対応する (簡単化のため実験では N が b の倍数の場合だけを扱った)。

P, Q をブロックの添字として非対角ブロック要素 $a_{P,Q}$ を順番に走査し、全体の非対角要素の2乗和のノルムを減少させるようにブロックの添字 P, Q を行あるいは列に持つ2次のブロック直交回転行列 J を決めて $A' \leftarrow \hat{J}^T A \hat{J}$ とする。ここで行列 \hat{J} はブロックの添字が P または Q では J と一致し、それ以外では単位行列と同じとする。

2次のブロック対称行列 $G = \begin{pmatrix} a_{P,P} & a_{P,Q} \\ a_{P,Q}^T & a_{Q,Q} \end{pmatrix}$ を定義すると、直交変換 \hat{J} による全体行列 A' の非対角項のノルムの減少量は直交変換 J による $G' \leftarrow J^T G J$ の非対角項のノルムの減少量と等しいので、 J が G を対角化するようにとれば、 A' の非対角項のノルムが最小になることが分かる。しかし特に終盤以外では J が G を完璧に対角化しなくても、非対角項のノルムが十分に減れば良いだけであるので、例えば J を G の

「巡回 Jacobi 法の走査 1 回」と対応する直交行列にとれる。また全体行列の走査が進んで終盤になると、 G が既にほとんど対角なので、(Jacobi 法の収束性の性質から)「巡回 Jacobi 法の走査 1 回」に対応する J が G を精度良く対角化する。

ブロック Jacobi 法の実験例： 次数 N の対称な乱数行列をブロック Jacobi 法で対角化した実験例を示す。ブロックサイズ $b = 40$ を用いた。係数行列はサイズ b の小行列のタイル張りの形で保持した。行列 A の上半分だけを用いる最適化は施していない。実験に使用した計算機システムは：

1. CPU : intel Corei7-2600K (3.4GHz, 4core, shared 8MB cache) ; ピーク演算速度 : 108.8GFlops ; コンパイラ : intel fortran v12.0 で OpenMP 並列化 ; BLAS3 : 小行列の乗算に intel MKL を使用。
2. 東大 T2K 1 ノード (=4cpu=16core) ; ピーク演算速度 : 147.2GFlops ; CPU: AMD Opteron 8356 (2.3GHz, 4core, 512KB L2, shared 2MB L3) ; コンパイラ : intel fortran v11.0 で OpenMP 並列化 ; BLAS3 : 小行列の乗算に intel MKL(v10.1.0.015) を使用。

実験で得られた値をそれぞれ表 1, 表 2 に示す。換算速度は走査 1 回あたりの演算量を $9N^2(N-1)$ とみなした場合の演算速度であり、性能発揮率は換算速度のピーク演算速度に対する比である。

表 1: intel Core i7-2600K (1cpu=4core)

N	経過時間 (秒)	換算速度 (Gflops)	性能発揮率
2000	19.2	26.25	24.1%
4000	124.0	32.50	29.9%
6000	388.1	35.05	32.2%
8000	991.3	37.18	34.2%
10000	1894.2	38.01	34.9%

表 2: 東大 T2K, 1 ノード (4cpu=16core)

N	経過時間 (秒)	換算速度 (GFlops)	性能発揮率
5000	290.8	27.07	18.4%
10000	2098.3	34.31	23.3%
15000	6324.5	38.42	26.1%
20000	14210.1	40.53	27.5%
25000	26788.6	41.99	28.5%
30000	44847.6	43.35	29.4%

参 考 文 献

- [1] Demmel, J. and Vesselić, K.: Jacobi's Method is More Accurate than QR , *SIAM J. Matrix Anal. & Appl.*, Vol.13, No.4, pp.1204-1245 (1992).
- [2] Golub, G.H. and van Loan, C.F.: *Matrix Computations*, 3rd Ed., John Hopkins Univ. Press., Baltimore, London, 1996.
- [3] Rutishauser, H.: The Jacobi Method for Real Symmetric Matrices, *Numer. Math.*, Vol.9, pp.1-10, 1966.
- [4] Wilkinson, J.H. and Reinsch, C.: *Linear Algebra, Vol.II of Handbook for Automatic Computation*, Springer-Verlag, New York, pp.202-211, 1971.