

# 大規模固有値問題への並列 AMG 前処理付共役勾配法の適用と評価

西 田 晃<sup>†,††</sup>

大規模疎行列の固有値を数値的に求める場合、従来は Lanczos 法やその非対称問題への拡張である Arnoldi 法、あるいは量子化学分野由来の Davidson 法やその一種である Jacobi-Davidson 法などが用いられてきた。しかしながら、近年の研究により、少数の固有値・固有ベクトルの計算が必要となる大規模固有値問題に対して、共役勾配法を適切な前処理と組み合わせることによって高速に固有値を計算できることが明らかになってきた。そこで本研究では、固有値問題における前処理付共役勾配法の有効性を検証するとともに、AMG をはじめとする並列前処理手法の効果について、前処理付線形解法のためのアルゴリズムライブラリ Hypre を用いて並列環境上で予備的な評価を行った。その結果、AMG 前処理の効果及びスケーラビリティに関して十分な結果が得られることを確認した。

## Performance Evaluation of Parallel AMG Preconditioned Conjugate Gradient Methods for Large Scale Eigenproblems

AKIRA NISHIDA<sup>†,††</sup>

When we need to compute the eigenvalues of a large sparse matrix numerically, the projection method such as the Lanczos/Arnoldi methods or the Davidson type methods from quantum chemistry is the most orthodox choice. However, recent studies revealed that the conjugate gradient type method combined with appropriate preconditioners can compute a few eigenpairs of such problems quite efficiently. In this preliminary study, we evaluate the performance of the conjugate gradient algorithm for large scale sparse eigenproblems, and its preconditioners such as the algebraic multigrid, using an algorithm library of preconditioned iterative solvers Hypre on parallel environment. From the numerical experiments, the performance and scalability of AMG preconditioner have been confirmed.

### 1. 背景

大規模疎行列の固有値を数値的に求める場合、いくつかの解法を考慮することができる。主なものとしては、Lanczos 法やその非対称問題への拡張である Arnoldi 法、あるいは量子化学計算で利用されることの多い Davidson 法や、その一種である Jacobi-Davidson 法などの解法を挙げることができる。一般に、大規模疎行列の固有値問題では、最大または最小のものから数個までの固有値及び固有ベクトルを求めればよい場合が多く、疎行列性を保存する Lanczos 法や Davidson 法は、このような問題に対して有効であると考えられてきた。以下ではまず、これらの解法について簡単にまとめておく。

#### Lanczos 法

サイズ  $n$  の大規模行列  $A$  の固有値を実部の大きなも

のからいくつか求めるため、次元  $\nu \ll n$  のベクトル部分空間  $G_l$  上への直交射影を考える。射影を表す行列を  $\pi_l$  とすれば、この問題は  $G_l$  において

$$\pi_l(Ax_l - \lambda_l x_l) = 0 \quad (1)$$

を満たす近似固有対

$$\lambda_l \in \mathbb{C}, \quad 0 \neq x_l \in G_l \quad (2)$$

の計算に帰着することができる。

部分空間  $S$  を生成する  $r$  個の独立なベクトルを

$$U = [u_1, \dots, u_r], \quad 1 \leq r < n \quad (3)$$

とすると、 $G_l$  内の正規直交基底の選び方によって解法は主に 2 種に分けることができ、

$$S_l = A^l S, \quad l = 1, 2, \dots \quad (4)$$

とすれば、 $r = 1$  の場合は巾乗法、また  $r > 1$  ならば部分空間反復法となる。また、 $\{u_1, \dots, u_r\}$  によって生成される Krylov 部分空間を

$$\mathcal{K}_l = \text{lin}(S, AS, \dots, A^{l-1}S) \quad (5)$$

とすれば、 $A$  が Hermite 行列ならば Lanczos 法

<sup>†</sup> 東京大学大学院情報理工学系研究科コンピュータ科学専攻  
Department of Computer Science, the University of Tokyo

<sup>††</sup> 科学技術振興機構 CREST  
Japan Science and Technology Agency

以下単に最大固有値と書く。

( $r = 1$ ), ブロック Lanczos 法 ( $r > 1$ ) が, 同様に  $A$  が非 Hermitic 行列ならば Arnoldi 法, ブロック Arnoldi 法が得られる. すなわち,  $u \neq 0$  によって生成される Krylov 部分空間を

$$\mathcal{K}_l = \text{lin}(u, Au, \dots, A^{l-1}u) \quad (6)$$

とすると, Lanczos 法 (または Arnoldi 法) では写像が三重対角行列 (または Hessenberg 行列)  $H_l$  で表される  $\mathcal{K}_l$  の正規直交基底  $\{v_i\}_1^l$  を計算する. 具体的には,

$$v_1 = u/\|u\|_2, \quad h_{11} = v_1^* A v_1 \quad (7)$$

とし,  $j = 1, \dots, l-1$  に対して  $x_j = 0$  となるまで

$$x_{j+1} = A v_j - \sum_{i=1}^j h_{ij} v_i, \quad h_{j+1,j} = \|x_{j+1}\|_2, \quad (8)$$

$$v_{j+1} = h_{j+1,j}^{-1} x_{j+1}, \quad h_{i,j+1} = v_i^* A v_{j+1} \quad (i \leq j+1) \quad (9)$$

を計算する.

### Davidson 法

これに対して, Davidson 法は以下のような手続きで最大固有値を求める.

正規直交基底  $\{v_i\}_1^k$  で張られる部分空間  $\mathcal{K} = \text{span}\{v_1, \dots, v_k\}$  上で, 行列  $A$  の近似固有対, すなわち Ritz 値  $\theta_k$  及び Ritz ベクトル  $u_k$  を計算することを考える.  $u_k$  を更新するためには  $\mathcal{K}$  の次元を拡張する必要があるが, Davidson 法では残差  $r = Au_k - \theta_k u_k$  について, 修正方程式と呼ばれる以下のような方程式を解く.

$$M_k t = r, \quad M_k = D_A - \theta_k I \quad (10)$$

$D_A$  は  $A$  の対角成分である. さらに  $t$  を  $\mathcal{K}$  と直交化して  $v_{k+1}$  を得る.  $V_{k+1} = [v_1, \dots, v_{k+1}]$  と置けば, 新しい Ritz 対  $(\theta_{k+1}, u_{k+1})$  は行列

$$H_{k+1} = V_{k+1}^* A V_{k+1} \quad (11)$$

の固有対として計算されることになるが, このことから,  $M_k = I$  の場合に Lanczos/Arnoldi 法と同一になることが分かる.

なお, ここで

$$M_k^{-1} \approx (A - \theta_k I)^{-1} \quad (12)$$

を残差ベクトル  $r$  に対する前処理行列と考えると, この方法では  $\theta_k$  に対応する近似固有ベクトル  $u_k$  の方向の成分を増幅させる結果となり, 特に  $A$  が対角行列である場合には新しい固有ベクトル成分を得ることができないが, Davidson 法の一種である Jacobi-Davidson 法では,  $u_k$  の直交補空間から更新のための成分を取り出すことによってこの問題点を解消している<sup>10)</sup>.

実際には, 反復の途中で得られた固有ベクトルの線形結合を初期ベクトルとしてリスタートを行なうことが多い.

Davidson 法は一種の加速付 Lanczos/Arnoldi 法と考えることができる.

## 2. 共役勾配法の導入

ここで, 実対称行列  $A, B$  に関する一般化固有値問題

$$Ax = \lambda Bx \quad (13)$$

の最小固有値, またはこれと同値な問題

$$Bx = \mu Ax, \quad \mu = 1/\lambda \quad (14)$$

の最大固有値 1 個を求めることを考える. この問題は Rayleigh 商

$$\mu(x) = \frac{x^T Bx}{x^T Ax} \quad (15)$$

の極値問題に帰着することができ, 最急勾配方向が

$$\nabla \mu(x) \equiv g(x) = \frac{2(Bx - \mu Ax)}{x^T Ax} \quad (16)$$

であることから, これを係数  $\alpha_i$  として用いた共役勾配法

$$x_{i+1} = x_i + \alpha_i p_i, \quad (17)$$

$$p_i = -g_i + \beta_{i-1} p_{i-1}, \quad \beta_{i-1} = \frac{g_i^T g_i}{g_{i-1}^T g_{i-1}} \quad (18)$$

を適用することができる<sup>4)</sup>. これは 1951 年に Hestenes らにより提案され, Fletcher らが発展させた手法である<sup>2),6)</sup>, 1980 年代以降の Knyazev らの研究<sup>8),9)</sup> により, 適切な前処理と組み合わせることによって高速に固有値を計算できることが明らかになってきた<sup>1)</sup>.

一般に, 前処理付固有値解法のアigorithm は, 前処理行列  $T \approx A^{-1}$ ,  $TA, TB$  に関する  $m_k$  次多項式  $P_{m_k}(TA, TB)$  を用いて以下のように書くことができる.

- (1) 初期ベクトル  $x^{(0)}$  を選択する
- (2)  $m_k$  回の反復により  $x^{(k)} = P_{m_k}(TA, TB)x^{(0)}$  を計算する
- (3)  $\mu^{(k)} = (x^{(k)}, Bx^{(k)})/(x^{(k)}, Ax^{(k)})$  を計算する

Rayleigh 商の計算には様々な方法を用いることができるが, ここでは共役勾配法の場合について説明する. 前処理付共役勾配法の反復は, 適当な初期ベクトル  $x^{(0)}$  と対応する修正ベクトル  $p^{(0)} = 0$  を用いて,

$$\mu^{(i)} = (x^{(i)}, Bx^{(i)})/(x^{(i)}, Ax^{(i)}) \quad (19)$$

$$r = Bx^{(i)} - \mu^{(i)} Ax^{(i)} \quad (20)$$

$$w^{(i)} = Tr \quad (21)$$

$$x^{(i+1)} = w^{(i)} + \tau^{(i)} x^{(i)} + \gamma^{(i)} p^{(i)} \quad (22)$$

$$p^{(i+1)} = w^{(i)} + \gamma^{(i)} p^{(i)} \quad (23)$$

と書くことができる. Knyazev の手法では, ここで行列束  $Bx^{(i)} - \mu^{(i)} Ax^{(i)}$  に関する  $\text{span}\{w, x^{(i)}, p^{(i)}\}$  上の Ritz 値, Ritz ベクトルを Rayleigh-Ritz 法を用いて計算し, 最大 Ritz 値に対応する Ritz ベクトルを  $x^{(i+1)}$  とする. すなわち, 係数  $\tau^{(i)}, \gamma^{(i)}$  の値は,  $\text{span}\{w, x^{(i)}, p^{(i)}\}$  上での局所的な最適解をもとに決められる. これによって, ベクトル間の直交性をもとに各係数を明に計算する必要のある従来の方法と比較して,

容易に更新値を求めることができる。

この解法は容易にブロック化することができ、初期ベクトルとして  $x_1^{(0)}, \dots, x_m^{(0)}$  と対応する修正ベクトル  $p_1^{(0)} = \dots = p_m^{(0)} = 0$  を取ることにより、 $j = 1, \dots, m$  について

$$\mu_j^{(i)} = (x_j^{(i)}, Bx_j^{(i)}) / (x_j^{(i)}, Ax_j^{(i)}) \quad (24)$$

$$r_j = Bx_j^{(i)} - \mu_j^{(i)} Ax_j^{(i)} \quad (25)$$

$$w_j^{(i)} = Tr_j \quad (26)$$

より、適当な係数  $\alpha^{(i)}$  を用いて

$$\text{span}\{w_1^{(i)}, \dots, w_m^{(i)}, x_1^{(i)}, \dots, x_m^{(i)}, p_1^{(i)}, \dots, p_m^{(i)}\} \quad (27)$$

上で  $j$  番目に大きな Ritz 値と対応する  $j$  番目の Ritz ベクトルとその修正ベクトル

$$x_j^{(i+1)} = \sum_{k=1, \dots, m} \alpha_k^{(i)} w_k^{(i)} + \tau_k^{(i)} x_k^{(i)} + \gamma_k^{(i)} p_k^{(i)} \quad (28)$$

$$p_j^{(i+1)} = \sum_{k=1, \dots, m} \alpha_k^{(i)} w_k^{(i)} + \gamma_k^{(i)} p_k^{(i)} \quad (29)$$

を計算する。出力として、最大固有値  $\mu_j$  と対応する固有ベクトルに関する近似  $\mu_j^{(k)}$  と固有ベクトル  $x_j^{(k)}$  を  $j = 1, \dots, m$  について得る。

なお、最急上昇法の収束率については、冪乗法との類似性から、条件

$$\delta_0(T^{-1}x, x) \leq (Ax, x) \leq \delta_1(T^{-1}x, x) \quad (30)$$

のもとで

$$\frac{\mu_1 - \mu^{(n)}}{\mu^{(n)} - \mu_2} \leq (1 - \xi)^n \frac{\mu_1 - \mu^{(0)}}{\mu^{(0)} - \mu_2}, \quad \xi = \delta_0 / \delta_1 \cdot (\mu_1 - \mu_2) / (\mu_1 - \mu_{\min}) \quad (31)$$

の関係が成り立つ<sup>8)</sup>。したがって、共役勾配法についてもこの評価を適用することができる。

### 3. 前処理の適用

一般化固有値問題

$$Ax = \lambda Bx \quad (32)$$

において、固有値  $\lambda$  が既知であると仮定すると、これに対応する固有ベクトルは

$$(A - \lambda B)x = 0, \quad x \neq 0 \quad (33)$$

を解くことにより求めることができる。すなわち、固有値解法における理想的な前処理行列  $T$  は  $A - \lambda B$  の逆行列であり、実際には未知の  $\lambda$  を Ritz 値で置き換えた前処理行列を考えることもできる。しかしながら、一般にこのように前処理行列を取ると不定値となることが多く、 $T$  が対称正定値でなければならない場合には

$$T \approx A^{-1} \quad (34)$$

と取るのが自然であり、特に連立一次方程式  $Ax = f$  の解法が与えられている場合には、前処理の計算も容易である。このように定めた  $T$  に関して、

$$w^{(i)} = Tr \quad (35)$$

すなわち

$$T^{-1}w^{(i)} = r \quad (36)$$

を解く。

解くべき固有値問題における行列の性質が分かっている場合には、これを利用して適切な前処理手法を選択することができる。

### 4. 前処理手法とその実装

以下では、米 Lawrence Berkeley 国立研究所により開発された疎行列向け並列前処理付線形解法のためのアルゴリズムライブラリ Hypre を用いて評価を行った。Hypre では、図 1<sup>3)</sup> に示すように問題の性質に応じて Structured-Grid (Struct), Semi-Structured-Grid (SStruct), Finite Element (FEI), Linear-Algebraic (IJ) の 4 種類のシステムインタフェースが用意されており、これらのインタフェースに対して表 1 の各解法を組み合わせることができる。

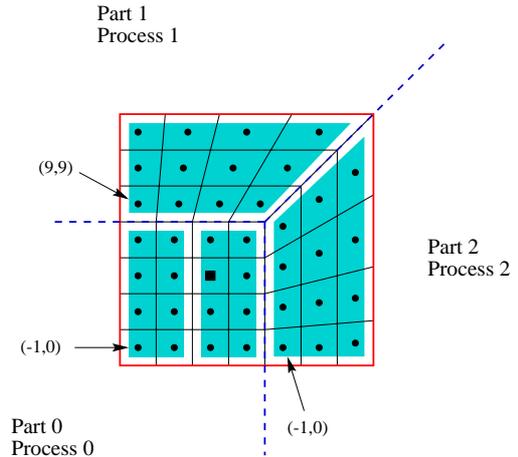


図 2 2次元 Semi-Structured-Grid とその分割例<sup>3)</sup>

また、Hypre ではオブジェクト指向に基づいた設計を行っており、すべての処理は関数を用いて定義されている。すなわち、行列、ベクトルデータ等の生成・廃棄、及びこれらのオブジェクトに対する操作は、それぞれの操作を記述する関数を呼び出すことにより処理される。各前処理手法はそれぞれ線形解法として実装され、必要に応じて前処理として利用することができるようになっており、柔軟に組み合わせる評価することができる。

Knyazev らによる共役勾配法の実装であるブロック版アルゴリズム LOBPCG は、Hypre の固有値計算アルゴリズムとして収録されているものの、基本的に独立した

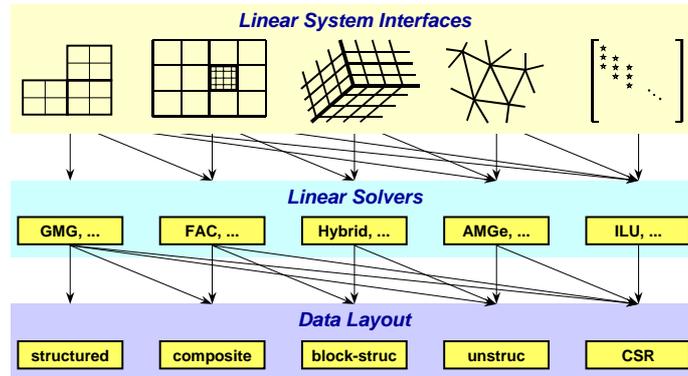


図1 Hypra のソフトウェア階層

表1 各インタフェースへの解法の対応状況

Solvers	System Interfaces			
	Struct	SStruct	FEI	IJ
Jacobi	X			
SMG	X			
PFMG	X			
BoomerAMG		X	X	X
ParaSails		X	X	X
Euclid		X	X	X
PILUT		X	X	X
PCG		X	X	X
GMRES		X	X	X

プログラムであり、前処理に関する Hypra のライブラリのみを必要に応じて使用している。現時点では IJ インタフェースのみに対応しており、対称正定値な疎行列の固有値問題を解くことができる。図3にその構成を示す<sup>7)</sup>。反復解法部は行列等のデータに関する基本的な処理を記述した `lobpcg_matrix.c`, `lobpcg_utilities.c` で定義された関数を用いて記述されており、MPI を用いた並列化はこのレベルで行われている。

Hypra に実装されている前処理手法について、主なものを簡単に述べる。

#### Jacobi, SMG, PFMG 前処理

これらはいずれも Structured-Grid インタフェースにのみ対応した並列前処理手法で、幾何的構造が与えられている問題に対して、Jacobi 前処理またはセミコースニングを伴う幾何的マルチグリッド前処理を行う。

#### 対角スケール前処理

対角スケール前処理としては最も単純な手法であり、効果は限定されているが、スケラビリティに関しては良好な性能を示す。

#### 近似逆行列前処理

ParaSails は近似逆行列前処理の並列実装であり、一般行列に対して適用することができる。

#### 不完全 LU 分解前処理

Euclid は不完全 LU 分解前処理のスケラブルな実

装であって、問題サイズがプロセッサ数に比例する場合に、ほぼ一定の計算時間で処理することができる。

#### BoomerAMG 前処理

BoomerAMG<sup>5)</sup> は代数的マルチグリッド法<sup>11)</sup> の並列実装であり、ソルバ、前処理のいずれにも用いることができる。IJ インタフェースにも対応しており、一般の行列に対するクリロフ部分空間法の前処理として用いることができる。Cleary-Luby-Jones-Plassman (CJLP), Ruge-Stuben (RS), Falgout 等の各縮約手法を実装しており、Jacobi, Gauss-Seidel 等の緩和法と組み合わせることができる。

図4-9に7点3次元 Laplace 問題の係数行列 ( $100^3$  元, 非零要素数 6,940,000) について、LOBPCG を用いて10個の固有値を計算した場合の各手法の収束特性を示す<sup>7)</sup>。相対残差ノルムの閾値は  $10^{-6}$  とし、最も収束の遅い固有対が求まるまで反復を行なっている。一般にマルチグリッド前処理は反復回数が行列サイズに依存しないため、大規模な問題ほど他の手法と比較して有利となるが、この例でも他の前処理手法と比較して少ない反復回数で収束していることが分かる。

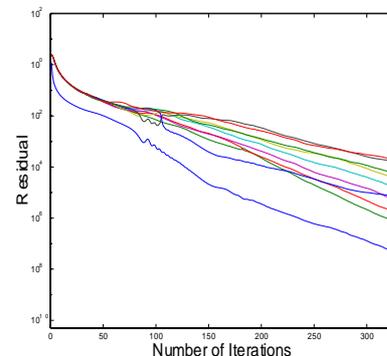


図4 固有値法における共役勾配法の前処理と収束率の関係 (前処理を用いない場合)

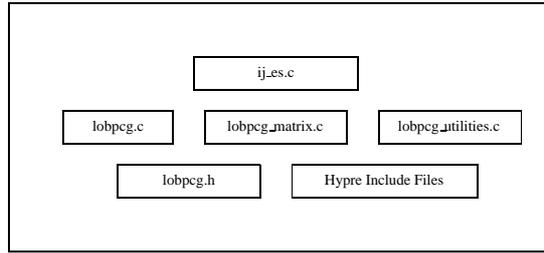


図 3 LOBPCG の構成

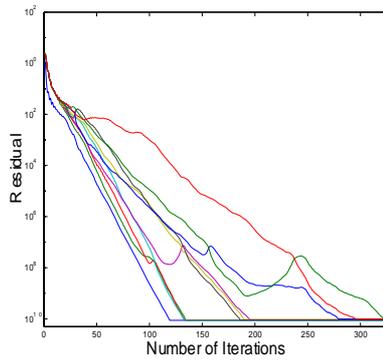


図 5 対角スケーリング前処理を用いた場合

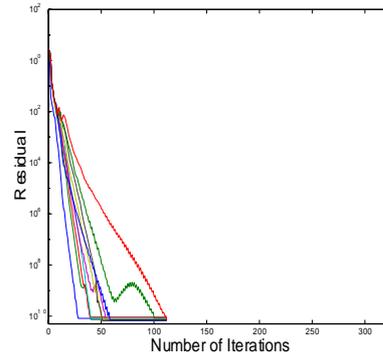


図 7 additive Schwarz 前処理を用いた場合

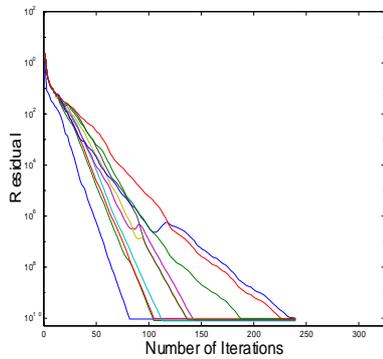


図 6 近似逆行列前処理を用いた場合

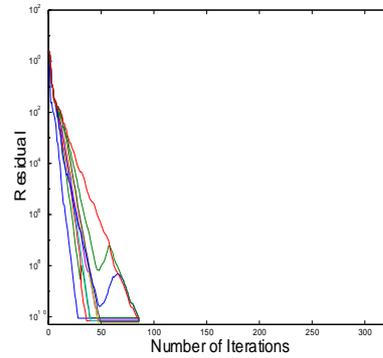


図 8 不完全 LU 分解前処理を用いた場合

## 5. 性能評価

ここでは、AMG 前処理の並列化手法とその性質について調べるため、SGI Altix 3700 (1.3GHz Intel Itanium 2 processor × 32) を用いて予備的な評価を行った。Altix では、オペレーティングシステムとして Linux が採用されており、独自のハードウェアとこれに対応するソフトウェアのサポートにより、スケーラビリティを確保している。コンパイラには Intel Compiler 8.0 for Linux を使用した。

Hypr において、AMG は BoomerAMG ライブラ

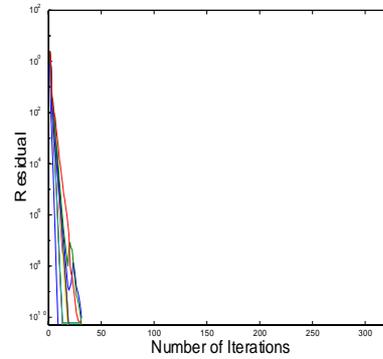


図 9 AMG 前処理を用いた場合

リとして実装されている。BoomerAMG は代数的マルチグリッド法に関してさまざまなアルゴリズムを選択することができるが、ここでは縮約を CLJP, 緩和法を weighted Jacobi とし, 非零要素数がプロセッサ数に比例するよう問題サイズを取って, 反復解法部の実行時間を測定した。結果を表 2 に示す。

表 2 AMG 前処理付共役勾配法の計算時間

Problem Size	20 <sup>3</sup>	26 <sup>3</sup>	32 <sup>3</sup>	40 <sup>3</sup>	50 <sup>3</sup>
# CPUs	2	4	8	16	32
time (s)	0.45	0.34	0.28	1.1	3.0

すなわち, AMG 前処理を用いた場合, スケーラビリティに関しても一定のプロセッサ数までは充分な性能が得られていることが分かる。

## 6. む す び

本稿では, 固有値解法への前処理付共役勾配法の適用手法について述べるとともに, 数値特性について予備的な評価を行った。本手法は比較的新しい解法であり, 収束条件などに関して未解明な部分も残っている。今後とも特性を明らかにしていくとともに, 大規模固有値解法に対する有力な解法の一つとして, 効果的な実装手法についても検討を進めていきたい。

謝辞 本研究の一部は, 科学技術振興機構戦略的創造研究推進事業 (CREST) 「大規模シミュレーション向け基盤ソフトウェアの開発」及び科学研究費基盤研究 (C) 15607005 「非構造多重格子を用いた離散化手法とその効率的な並列実装技術に関する研究」によるものである。

## 参 考 文 献

- 1) P. ARBENZ AND R. LEHOUCQ, *A comparison of algorithms for modal analysis in the absence of a sparse direct method*, Tech. Rep. SAND2003-1028J, Sandia National Laboratories, 2003.
- 2) W. W. BRADBURY AND R. FLETCHER, *New Iterative Method for Solution of the Eigenproblem*, Numer. Math., 9 (1966), pp. 259–267.
- 3) CENTER FOR APPLIED SCIENTIFIC COMPUTING, *Hypr User's Manual*, Lawrence Livermore National Laboratory, 2003.
- 4) R. FLETCHER AND C. M. REEVES, *Function minimization by conjugate gradients*, Comp. J., 7 (1964), pp. 149–154.
- 5) V. E. HENSON AND U. M. YANG, *Boomer-AMG: A parallel algebraic multigrid solver and preconditioner*, Applied Numerical Mathematics: Transactions of IMACS, 41 (2002), pp. 155–177.
- 6) M. R. HESTENES AND W. KARUSH, *A method*

*of gradients for the calculation of the characteristic roots and vectors of a real symmetric matrix*, J. Res. Natl. Inst. Stand. Technol., 47 (1951), pp. 45–61.

- 7) A. KNYAZEV, *Scalable Preconditioned Eigenvalue Solver in Hypr*, in Eleventh SIAM Conference on Parallel Processing for Scientific Computing, 2004.
- 8) A. V. KNYAZEV, *Preconditioned eigensolvers— an oxymoron?*, Electron. Trans. Numer. Anal., 7 (1998), pp. 104–123 (electronic). Large scale eigenvalue problems (Argonne, IL, 1997).
- 9) ———, *Toward the optimal preconditioned eigensolver: Locally optimal block preconditioned conjugate gradient method*, SIAM J. Sci. Comput., 23 (2001), pp. 517–541.
- 10) 西田晃, 小柳義夫, 大規模固有値問題のための *Jacobi-Davidson* 法とその特性について, 情報処理学会論文誌: ハイパフォーマンスコンピューティングシステム, 41 (2000), pp. 101–106.
- 11) 藤井昭宏, 西田晃, 小柳義夫, *Smoothed Aggregation MG* 法の異方性問題への対応と評価, 2003 年先進的計算基盤システムシンポジウム論文集, pp. 137–144.