非対称行列のパターンと共役勾配法の収束の関係

太田　凌

数値シミュレーションには、大規模な疎行列を係数に持つ線形方程式が現れ、求解には主に反復解法が用いられる。中でも共役勾配法(CG 法)は計算量が少なく、高速で数値的安定性を持ったアルゴリズムである。しかし、CG 法は対称正定値行列の場合にしか使えない。A^TAやAA^Tを作ることで非対称行列を対称化すると、条件数が 2 乗となるため、丸め誤差が増幅され、収束性が悪化してしまうという問題点がある。収束性を改善する手法の 1 つに高精度演算があり、本研究では double 型の変数を 2 つ使用した double-double 精度を用いた。double-double 精度を用いて、非対称行列に対する CG 法を安定かつ高速に解くことが研究の目的である。

SuiteSparse Matrix collection に格納されている非対称行列 609 個に対し、非対称行列Aに対する BiCG 法、A^TAに対する CG 法である CGNR 法、AA^Tに対する CG 法である CGNE 法の 3 つを実行した。その際、double 精度と double-double 精度で比較実験を行った。

実験の結果、double 型の場合、BiCG 法では 109 個、CGNE 法では 37 個、CGNR 法では 45 個の行列が収束し、double-double 型の場合、BiCG 法では 114 個、CGNE 法では 41 個、CGNR 法では 49 個の行列が収束した。このことから、double-double 精度を用いても double 型の時と同様に BiCG 法が最も優れた収束性を持つことが明らかになった。また、double-double 型を用いた場合の収束履歴の振動が小さく、収束を安定化させていることが確認された。しかし、CG 法、CGNE 法、CGNR 法と違い、BiCG 法は収束履歴が減少しない場合があり、数値的安定性を持たないことが確認された。

そこで、CG 法により収束するのはどのような対称行列かを知るため、畳み込みニューラルネットワーク(CNN)を用いて、係数行列である疎行列の非零要素パターンと収束可否の 2 分類を行った。疎行列の非零要素の値と分布パターンを 224×224(pixel)の JPEG 形式のグレースケール画像とした。実験には SuiteSparse Matrix collection の非対称行列 609 個をA^TA、AA^Tとして対称化した行列と対称行列 663 個を用いた、収束条件を10^{-6}から10^{-10}まで10^{-1}刻みで小さくし、各収束条件ごとのデータセットを構築した。分類実験の結果、正答率は収束条件が10^{-6}のときに最大で 77.8%となり、収束条件を10^{-10}まで小さくしても正答率は上がらなかった。

今後の課題として疎行列の画像の生成方法を変更することや、使用する画像データ数を増やすことで、正答率を向上させ、適切な行列に対して CG 法を適用できるようにすることである。それにより求解にかかる時間を短縮できると考察される。

（指導教員　長谷川　秀彦）