GCR 法に対する可変的前処理法の性能評価

阿部邦美* 張 紹良† 長谷川秀彦‡ 姫野龍太郎*

Kuniyoshi Abe Shao-Liang Zhang Hidehiko Hasegawa Ryutaro Himeno

* 理化学研究所 The Institute of Physical and Chemical Research

†東京大学大学院工学系研究科 Department of Applied Physics, University of Tokyo

‡図書館情報大学 University of Library and Information Science

1 はじめに

$n \times n$ の正則な大規模疎行列 A を係数行列，n 次元ベクトル$\boldsymbol{b}$を右辺項とする連立一次方程式

$$A\boldsymbol{x} = \boldsymbol{b} \tag{1.1}$$

を Krylov 部分空間解法によって近似的に解く．

問題（1.1）に数学的同値性が保たれるような変換を行ない，Krylov 部分空間解法（アルゴリズム）に都合の良いように変形し，大幅に収束性を改善するのが前処理である．一般の非対称行列に対する前処理付き Krylov 部分空間解法のアルゴリズムでは，まず係数行列 A に近似的に等しく，$K^{-1}\boldsymbol{r}$ の計算が容易にできるような前処理行列 K を構築する．前処理行列 K について，これまでに多くの構築方法が提案されてきたが，代表的な方法として，不完全 LU 分解法 (Incomplete LU factorization, ILU)[2, 6] が知られている．このとき，反復過程では $K^{-1}\boldsymbol{r}$ を計算するために，連立一次方程式 $K\boldsymbol{z} = \boldsymbol{r}$ が直接法で解かれる．近年では，Generalized Minimal Residual Method（GMRES 法）[7] の変形として，GMRES 法の各反復で前処理行列を変えることを可能にした FGMRES 法 [8]，および GMRES 法を導出する過程において行列分離を利用して前処理行列の可変性を述べた GMRESR 法 [10] が開発され，可変的に前処理する方法が提案された．

一方で，われわれは前処理行列が満たす基本的性質に着眼し，FGMRES 法，GMRESR 法とは異なったアプローチで可変的に前処理する方法を提案した [1]．その方法は，前処理行列 K が係数行列 A の近似であるという性質，および反復過程で現れる $K^{-1}\boldsymbol{r}$ の計算に着目する．このとき，前処理の効果という観点から，$K^{-1}\boldsymbol{r}$ は $A^{-1}\boldsymbol{r}$ の良い近似であることが望ましい．そこで，$K^{-1}\boldsymbol{r}$ を求める代わりに $A^{-1}\boldsymbol{r}$ の近似を求める．言い換えれば，連立一次方程式 $K\boldsymbol{z} = \boldsymbol{r}$ の代わりに，方程式 $A\boldsymbol{z} = \boldsymbol{r}$ を解く．一般に $A\boldsymbol{z} = \boldsymbol{r}$ を正確に解くことは計算コストの面で現実的ではないが，前処理の概念を考えれば十分な精度で解く必要はないので，反復解法を用いて近似的に解く．さらに，FGMRES 法，GMRESR 法では前処理としての方程式に適用する解法の反復回数は固定されており，残差ノルムの減少とともに収束性を改善することが難しくなる．そのため，前処理の効果を十分に得るためには

反復回数を変えることが望ましいと考える．そこで，われわれの方法では $A\boldsymbol{z}=\boldsymbol{r}$ に適用する反復解法にある停止条件を与え，各反復で反復回数を変える．そのとき，結果的に各反復で異なる前処理を適用することができる．既に，この方法を Generalized Conjugate Residual Method（一般化共役残差法，GCR 法)[3] に適用し，方程式 $A\boldsymbol{z}=\boldsymbol{r}$ の解法に Successive Over-Relaxation Method（SOR 法）[4] を用いた方法を提案した．数値実験では，方程式 $A\boldsymbol{z}=\boldsymbol{r}$ を SOR 法で解くことによって前処理する方法が不完全 LU 分解を用いた前処理より効果的であることを示した [1].

本論文では，可変的前処理付き GCR 法 [1] における各反復で解かなければならない方程式 $A\boldsymbol{z}=\boldsymbol{r}$ に適用する解法の違いによる効果を調べる．定常反復解法を代表して Successive Over-Relaxation Method（SOR 法）[4]，また非対称行列のための Krylov 部分空間解法として Petrov-Galerkin アプローチ [5] に属する ILU(0) 付き Bi-Conjugate Gradient STABilized Method (Bi-CGSTAB) 法 [9]，Minimum Residual アプローチ [5] に属する ILU(0) 付き GCR 法を用いる．最後に，方程式 $A\boldsymbol{z}=\boldsymbol{r}$ に適用する解法を決定するためにわれわれが考慮した点が適切であったかを検証するために，これらの解法の収束性を考察する．

2　可変的前処理付き GCR 法

本節では，可変的前処理法の基本的概念，およびその実装として可変的前処理法付き GCR(m) 法のアルゴリズムを示す．

2.1　可変的前処理法の概念

前処理行列 K は係数行列 A の近似となるように構築される．すなわち，前処理行列 K は次のような性質を満たす．

$$K \approx A.$$

この性質に着目すれば，$K^{-1}\boldsymbol{r}$ は次のように近似される．

$$K^{-1}\boldsymbol{r} \approx A^{-1}\boldsymbol{r}.$$

このとき，K が A を十分に良く近似すると，言い換えれば $K^{-1}\boldsymbol{r}$ が $A^{-1}\boldsymbol{r}$ を十分に良く近似すると，前処理の効果は大きくなることが期待される．それゆえ，$K^{-1}\boldsymbol{r}$ を求めるのではなく $A^{-1}\boldsymbol{r}$ を求めることが理想的であるが，一般には計算コストの面で困難である．したがって，計算コストが少ない方法である所要精度を満たすように $A^{-1}\boldsymbol{r}$ の近似を求めることを考える．

そこで，方程式 $K\boldsymbol{z}=\boldsymbol{r}$ の代わりに，式（2.1）を反復解法で適当な所要精度を満たすように解くことによって $A^{-1}\boldsymbol{r}$ の近似を求める．ここでの反復解法は任意の方法（定常反復解法，あるいは Krylov 部分空間解法）が利用できる．直接 $A^{-1}\boldsymbol{r}$ の近似を求めることによって前処理行列 K の構築も不要になる．

$$Az = r. \tag{2.1}$$

さらに，式（2.1）を解く場合，ある停止条件を設定することによって反復回数を変化させる.

2.2 実装

2.1小節で述べた前処理を施した GCR (m) 法のアルゴリズムは，従来の前処理付き GCR(m) 法のアルゴリズム [3] における $K^{-1}\boldsymbol{r}$ の計算を $A^{-1}\boldsymbol{r}$ の近似を求めるアルゴリズムに書き直せばよい．このアルゴリズムを Variable Preconditioned GCR(m) method(可変的前処理付き GCR(m) 法，略して VPGCR(m) 法) と呼ぶ.

可変的前処理付き GCR(m) 法のアルゴリズム：

Let $\boldsymbol{x}_0$ be an initial guess

Repeat

Put $\boldsymbol{r}_0 = b - A\boldsymbol{x}_0$.

Solve $A\boldsymbol{p}_0 = \boldsymbol{r}_0$ using some iterative method.

Set $\boldsymbol{q}_0 = A\boldsymbol{p}_0$.

For $k = 0, 1, \ldots, m-1$ until the condition

$\| \boldsymbol{r}_{k+1} \|_2 \leq \varepsilon_{\text{TOL}} \| \boldsymbol{r}_0 \|_2$ holds, iterate:

$$\alpha_k = \frac{(\boldsymbol{r}_k, \boldsymbol{q}_k)}{(\boldsymbol{q}_k, \boldsymbol{q}_k)},$$

$$\boldsymbol{x}_{k+1} = \boldsymbol{x}_k + \alpha_k \boldsymbol{p}_k,$$

$$\boldsymbol{r}_{k+1} = \boldsymbol{r}_k - \alpha_k \boldsymbol{q}_k,$$

solve $A\boldsymbol{z}_{k+1} = \boldsymbol{r}_{k+1}$ using some iterative method,

$$\beta_{k,i} = -\frac{(A\boldsymbol{z}_{k+1}, \boldsymbol{q}_i)}{(\boldsymbol{q}_i, \boldsymbol{q}_i)}, \qquad i \leq k,$$

$$\boldsymbol{p}_{k+1} = \boldsymbol{z}_{k+1} + \sum_{i=0}^{k} \beta_{k,i} \boldsymbol{p}_i,$$

$$\boldsymbol{q}_{k+1} = A\boldsymbol{z}_{k+1} + \sum_{i=0}^{k} \beta_{k,i} \boldsymbol{q}_i,$$

end for

$\boldsymbol{x}_0 = \boldsymbol{x}_m$,

end repeat

われわれは，式（1.1）を解く際の反復を外部反復，方程式 $A\boldsymbol{z}_{k+1} = \boldsymbol{r}_{k+1}$ を反復解法で解く際の反復を内部反復と呼ぶ.

次に，内部反復で用いる解法の決定ために次のような点を考慮する必要がある．

- 外部反復 GCR(m) 法の各反復において式（2.1）が解かれるため，内部反復の総反復回数は多くなると予想される．したがって，計算時間，計算量を考慮して，演算量の少ない反復解法を選ぶ必要がある．
- 式（2.1）の解は十分な精度を要求されないため，頑健な解法を用いる必要性は低い．
- 式（2.1）を解くとき，少ない反復回数である所要精度を満たす解を求められることが望まれるので，残差ノルムが振動したり，停滞するような解法ではなく，反復の初期の段階に単調減少する解法が望ましい．

このような点を考慮して，はじめに SOR 法を適用した [1]．本論文では，内部反復に Krylov 部分空間解法を用いることを考え，Petrov-Galerkin アプローチに属する ILU(0) 付き Bi-CGSTAB 法，Minimum Residual アプローチに属する ILU(0) 付き GCR(m) 法を適用し，これらの収束性を比較する．

さらに，内部反復の停止条件として，次のような条件を設定する．ただし，$k+1$ 回目の外部反復において実行される内部反復の l 回目に求められた近似解を $\boldsymbol{z}_{k+1}^{(l)}$ と表す．また，内部反復に Krylov 部分空間を適用する場合は停止条件 1(1)，定常反復解法を用いる場合は停止条件 1(2) を使用する．

内部反復に使用する解法の停止条件：

1. (1) $\|\boldsymbol{r}_{k+1} - A\boldsymbol{z}_{k+1}^{(l)}\| / \|\boldsymbol{r}_{k+1}\| \leq \delta.$

   (2) $\|\boldsymbol{z}_{k+1}^{(l)} - \boldsymbol{z}_{k+1}^{(l-1)}\|_\infty / \|\boldsymbol{z}_{k+1}^{(l)}\|_\infty \leq \delta.$
2. （内部反復の反復回数 l） $= N_{\max}.$

適当な δ，$N_{\max}$ の値を与え，条件 1，2 のいずれか一方の条件を満たした場合に 内部反復を停止する．

外部反復の残差，すなわち内部反復の右辺項のノルムが小さくなるとき，内部反復に適用する解法の収束性の改善は鈍くなる．したがって，反復回数を変えることが前処理の効果を得るために望ましいと考えられるため，われわれは上記の条件を与え内部反復に用いる解法の反復回数を変化させる．そのとき，各反復で異なる前処理を適用することができる．

3 数値実験

本節では，fill-in 無しの不完全 LU 分解（ILU(0)），単純な fill-in 有りの不完全 LU 分解（ILU(1)）による前処理，内部反復に SOR 法，ILU(0) 付き Bi-CGSTAB 法，ILU(0) 付き GCR(m) 法を用いて可変的前処理を行なった場合の収束性，計算時間の比較を行なう．

3.1 モデル問題

2 次元正方領域 $\Omega = (0,1) \times (0,1)$ において，次の移流拡散方程式 [8] の離散近似解を求める．

$$-u_{xx} - u_{yy} + \gamma(xu_x + yu_y) + \beta u = f, \qquad 0 < x, y < 1. \tag{3.1}$$

境界条件は Dirichlet ($u \mid_{\partial\Omega} = 0$) 条件とする．この境界値問題に対して，$\Omega$ を x, y 両方向ともに $M+1$ 等分した正方格子を考え，5 点中心差分で離散化すると係数行列 A は $n \times n$ ($n = M \times M$) の非対称行列となる．また，右辺項は解を $u = (1, \ldots, 1)$ と与えて，$f = Au$ によって計算する．

以下の数値実験では，定数 $\gamma = 10$, $\beta = -100$，$M = 100$ にとり，10^4 個の未知数をもつ連立一次方程式（1.1）を 15 回ごとにリスタートする GCR(m) 法 ($m = 15$) によって解く．また，計算は Pentium III 800MHz において倍精度演算によって実行された．外部反復において，初期ベクトルは $\boldsymbol{x}_0 = \boldsymbol{0}$，収束判定条件は $\epsilon_{\mathrm{TOL}} = 10^{-12}$ とした．

さらに，内部反復の定数は

- $N_{\max} = 50$
- $\delta = 10^{-1.5}$

と設定した．内部反復の初期ベクトルは $\boldsymbol{z}_{k+1}^{(0)} = \boldsymbol{0}$，SOR 法の加速係数は $\omega = 1.80$ を採用した．

3.2 結果および考察

まず，それぞれの前処理法を用いたときの GCR(15) 法の残差の収束特性を Fig. 1に示す．Fig. 1における “Variable(SOR)”, “Variable(ILU-STAB)”, “Variable(ILU-GCR)” は，式 (2.1) を解くときにそれぞれ SOR 法，ILU(0) 付き Bi-CGSTAB 法，ILU(0) 付き GCR(15) 法を用いて可変的前処理を行なった場合である．また，“ILU(0)”, “ILU(1)” は，ILU(0) 付き GCR(15) 法，ILU(1) 付き GCR(15) 法である．グラフの横軸は反復回数，縦軸は算法によって漸化的に計算された相対残差ノルム ($\log_{10}(\| \boldsymbol{r}_k \|_2 / \| \boldsymbol{r}_0 \|_2)$) を表す．

それぞれの外部反復の反復回数及び計算時間を Table 1に示す．Table 1における “Stagnation” は，5000 回まで反復したときに，残差ノルムが 10^{-12} に達しなかったことを意味する．

可変的前処理付き GCR(15) 法の各反復において内部反復の反復回数が変化していること，すなわち異なる前処理が適用されていることを Fig. 2に示す．ここでは，特に効果があった SOR 法の場合をとりあげる．横軸は外部反復の回数，縦軸は内部反復での SOR 法の反復回数を表す．

次に，内部反復で用いた SOR 法，ILU(0) 付き Bi-CGSTAB 法，ILU(0) 付き GCR(15) 法の収束振舞いを Fig. 3に示す．ただし，SOR 法の場合は外部反復が 10 回目，ILU(0) 付き Bi-CGSTAB 法，ILU(0) 付き GCR(15) 法の場合は外部反復が 30 回目である．横軸は内部反復の反復回数，縦軸は Bi-CGSTAB 法，GCR(15) 法の場合は相対残差ノルム

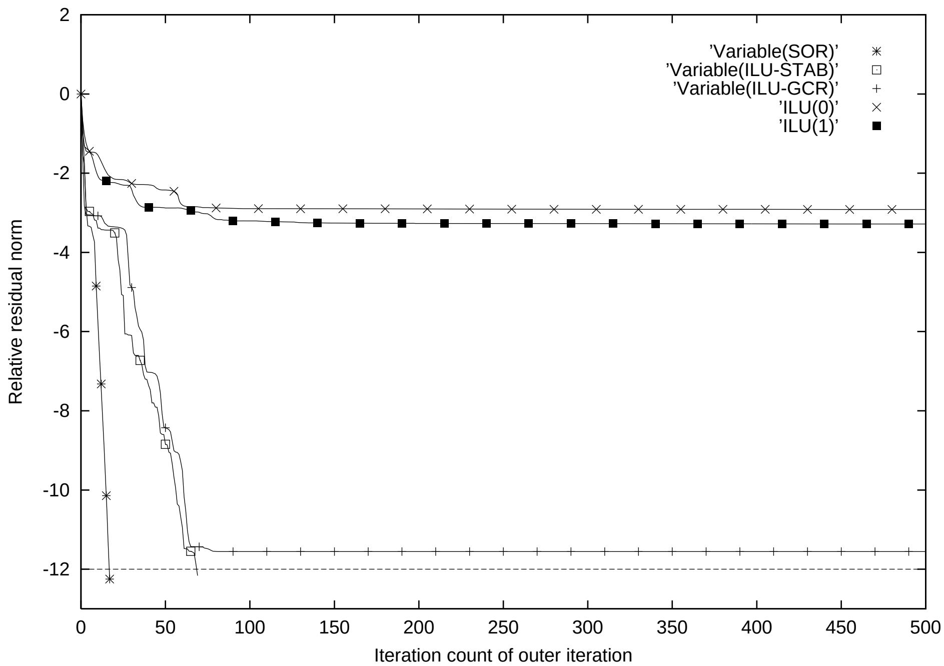

Fig. 1. Convergence history of preconditioned GCR(15).

($\log_{10}(\| \boldsymbol{r}_k \|_2 / \| \boldsymbol{r}_0 \|_2)$)，また SOR 法の場合は相対誤差（$\log_{10}(\|\boldsymbol{x}_k - \boldsymbol{x}_{k-1}\|_\infty / \|\boldsymbol{x}_k\|_\infty)$）を表す．

[結果および考察]

ILU(0)，ILU(1) を用いた前処理の場合，ともに残差ノルムは停滞して収束しなかった．一方で，SOR 法，ILU(0) 付き Bi-CGSTAB 法を用いて可変的前処理を行なった場合，残差ノルムは急速に減少し収束した．特に，SOR 法を用いた場合は ILU(0) 付き Bi-CGSTAB 法を用いた場合と比較して，反復回数は 24.5%，計算時間は 6.5%であった．また，内部反復に外部反復と同種の解法を用いた場合，すなわち ILU(0) 付き GCR(m) 法を用いた場合，残差ノルムは減少したが収束判定条件の直前に停滞し，10^{-12} に到達しなかった（$N_{\max} = 30, 80$ と変化させ実験を試みたが収束しなかった）．これらの結果から，従来の

Table 1. Iteration counts and computation time of outer iteration.

Precondition	Iteration counts	Computation time
Variable(SOR)	17	2.49 sec.
Variable(ILU-STAB)	69	38.6 sec.
Variable(ILU-GCR)	Stagnation	∞
ILU(0)	Stagnation	∞
ILU(1)	Stagnation	∞

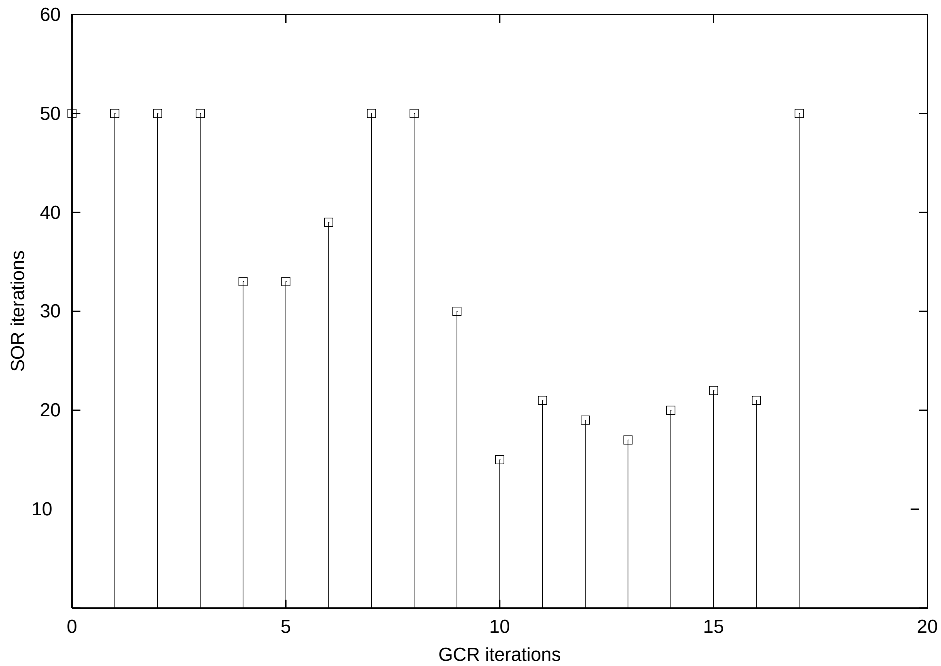

Fig. 2. The iteration counts of SOR at each outer iteration.

不完全 LU 分解を用いる前処理法と比べ，可変的前処理法は収束性，および計算時間の点で優れていると言える．また，内部反復に用いる解法として，Bi-CGSTAB 法より SOR 法を用いた方が効果的であること，また同種の解法（GCR 法）は有効ではないと言える．

Fig. 2から，内部反復で用いた SOR 法の反復回数は異なっているので，外部反復において異なった前処理が適用されたことになる．すなわち，可変的に前処理することができた．

また，内部反復で SOR 法を適用した場合，相対誤差は単調減少し，少ない反復回数で収束判定条件を満たした．その一方で，ILU(0) 付き Bi-CGSTAB 法の残差ノルムは上下に振動し，反復回数 50 回では収束判定条件を満たさなかった．さらに，ILU(0) 付き GCR(m) 法の残差ノルムはまったく減少しなかった．したがって，SOR 法だけが 2.2小節で述べた内部反復に望まれる収束特性を満たしていることがわかる．

4 まとめ

われわれが提案した可変的前処理法を GCR(m) 法に施し，その外部反復の各反復で解かなければならない方程式 $A\boldsymbol{z} = \boldsymbol{r}$ に対して SOR 法，ILU(0) 付き Bi-CGSTAB 法，ILU(0) 付き GCR(m) 法を適用して前処理した．そして，これらの解法の違いによる効果を比較した．数値実験では，不完全 LU 分解を用いた前処理（ILU(0)，ILU(1)）より可変的前処理を行なった場合の方が，収束性，計算時間の点で有効であった．さらに，内部反復に適用する解法として，SOR 法，ILU(0) 付き Bi-CGSTAB 法の順に効果が大きかった．ま

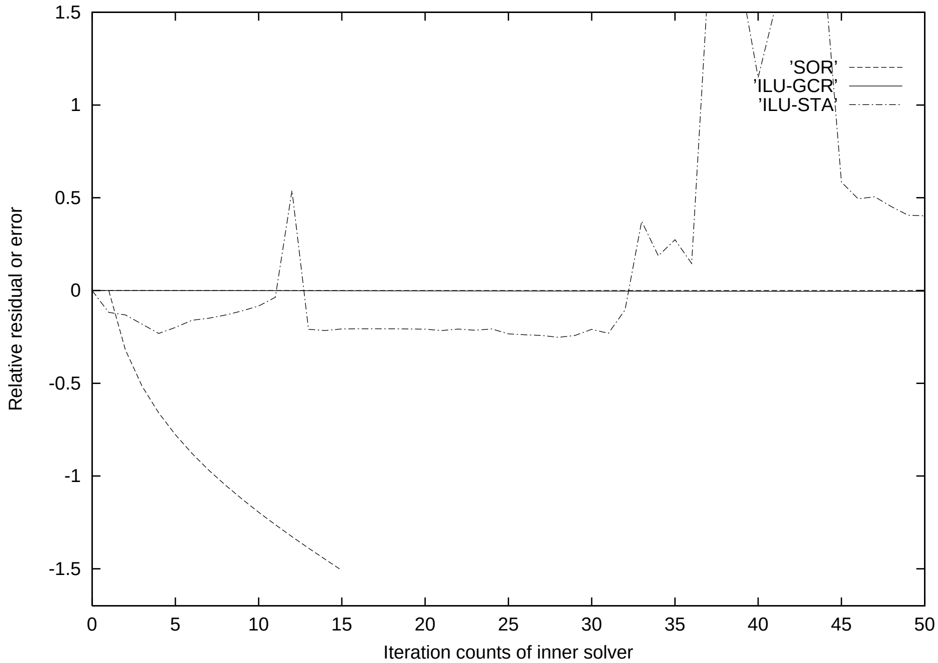

Fig. 3. Convergence history of each inner solver.

た，ILU(0) 付き GCR(m) 法は有効に働かなかった．

次に，内部反復に用いる解法として，Krylov 部分空間解法のように残差ノルムが振動したり，一時的に残差ノルムが改善されないという収束性を持つのではなく，定常反復解法のように少ない反復回数である程度の残差ノルムの減少を期待できる解法が望ましいことがわかった．

さらに，FGMRES 法や GMRESR 法では内部反復の反復回数が固定されており，残差ノルムの減少とともに前処理の効果を十分に得ることができない．そのため，われわれは内部反復に適用する解法にある停止条件を設定し，内部反復の反復回数を変えた．また，不完全 LU 分解を用いる前処理では各反復において前処理行列が一定であるのに対し，提案する前処理では各反復で異なった前処理を適用することができた．

外部反復，内部反復に適用する他の解法の組合せ，内部反復における停止条件が収束性に与える影響，また外部反復の各反復において停止条件を変えた場合の効果などについては，今後の課題としたい．

参考文献

[1] 阿部邦美, 張紹良, SOR 法を用いる可変的な前処理法, 日本応用数理学会年会講演予稿集, (1999), 184-185.

[2] Bruaset, A. M., *A Survey of Preconditioned Iterative Methods*, Frontiers in Applied Mathematics 17, Longman Scientific and Technical, London, 1995.

[3] Eisenstat, S. C., Elman, H. C. and Schultz, M. H., Variational iterative methods for nonsymmetric systems of linear equations, *SIAM J. Numer. Anal.*, **20**(1983), 345-357.

[4] Golub, H. G. and van Loan, F. C., *Matrix Computations*, Third ed., The Johns Hopkins University Press, Baltimore and London, 1996.

[5] Golub, H. G. and van der Vorst, H. A., *Closer to the Solution: Iterative Linear Solvers*, The State of the Art in Numerical Analysis, Duff, I. S. and Watson, G. A. (eds), Clarendon Press, Oxford, 1997, 63-92.

[6] Meijerink, J. A. and van der Vorst, H. A., An Iterative Solution Method for Linear Systems of which the Coefficient Matrix is a Symmetric M-matrix, *Mathematics of Computation*, **31** (1977), 148-162.

[7] Saad, Y. and Schultz, M. H., GMRES: A Generalized Minimal Residual Algorithm for Solving Nonsymmetric Linear Systems, *SIAM J. Sci. Stat. Comput.*, **7** (1986), 856-869.

[8] Saad, Y., A Flexible Inner-outer Preconditioned GMRES Algorithm, *SIAM J. Sci. Stat. Comput.*, **14** (1993), 461-469.

[9] van der Vorst, H. A., Bi-CGSTAB:A Fast and Smoothly Converging Variant of Bi-CG for the Solution of Nonsymmetric Linear Systems, *SIAM J. Sci. Stat. Comput.*, **13** (1992), 631-644.

[10] van der Vorst, H. A. and Vuik, C., GMRESR: A family of Nested GMRES Methods, *Numer. Linear Algebra with Applics.*, **1** (1994), 369-386.